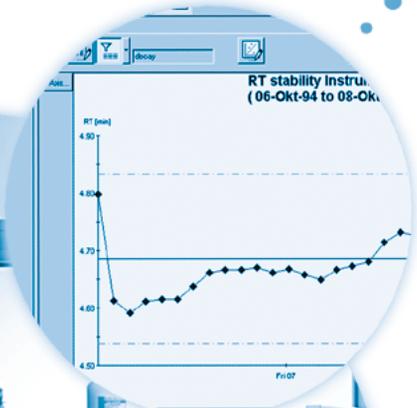
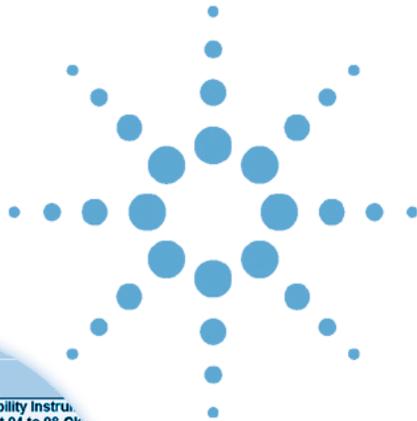


# Agilent ChemStore C/S



## コンセプトガイド



Agilent Technologies

## 注意

© Agilent Technologies, Inc. 2002, 2004

本マニュアルは米国著作権法および国際著作権法によって保護されており、Agilent Technologies, Inc. の書面による事前の許可なく、本書の一部または全部を複製することはいかなる形式や方法（電子媒体による保存や読み出し、外国語への翻訳なども含む）においても、禁止されています。

## マニュアル番号

G2181-96010

## エディション

03/04

Printed in Germany

Agilent Technologies  
Hewlett-Packard-Strasse 8  
76337 Waldbronn, Germany

Microsoft® - Microsoft は米国 Microsoft Corporation の登録商標です。

## ソフトウェアリビジョン

本書は、Agilent ケミステーション Plus ソフトウェアのモジュールの一つです。3 ページの「本書について」セクションに、本書が使用を意図するモジュールおよびモジュールのリビジョンの詳細について記載しています。

## 保証

本 マニュアルに含まれる内容は「現状のまま」提供されるもので、将来のエディションにおいて予告なく変更されることがあります。また、Agilent は、適用される法律によって最大限に許可される範囲において、本マニュアルおよびそれに含まれる情報の商品性および特定の目的に対する適合性に関する黙示の保証を含めて（ただしそれだけには限定されない）、いかなる明示または黙示の保障も行いません。Agilent は、本マニュアルまたはそれに含まれる情報の所有、使用、または実行に付随する過誤、または偶然的または間接的な損害に対する責任を一切負わないものとし、Agilent とお客様の間に書面による別の契約があり、本マニュアルの内容に対する保証条項が同文書の条項と矛盾する場合は、別の契約の保証条項が適用されます。

## 技術ライセンス

このマニュアルで説明されているハードウェアおよびソフトウェアはライセンスに基づいて提供され、そのライセンスの条項に従って使用またはコピーできます。

## 安全に関する注意

### 注意

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

### 警告

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

# 本書の内容

本書では、Agilent ChemStore C/S リビジョン *B0.030.01* の中核となるコンセプトについて紹介します。ここでは、本製品の主な特徴に焦点を当て、スタディのセットアップやデータの管理について説明します。本書は、以下のような構成になっています。

## 1 ChemStore C/S の概要

本章では、ChemStore C/S を初めて使う方のために、その機能の概要を紹介します。

### オペレータのための情報

第2章、第3章および第4章は、Agilent ChemStore C/S の操作を詳しく学びたい Agilent ChemStore C/S のオペレータ向けの内容になっています。

## 2 ChemStore C/S のコンセプト

この章では、ChemStore C/S データベースの中核コンセプトと、これを分析ラボで用いることにより得られる主な利益について説明します。

## 3 カスタム計算の使用

この章では、計算テンプレートの作成と使用についての概要を説明します。

## 4 レポートテンプレートエディタの使用

この章では、レポートテンプレートの作成と使用についての概要を説明します。

### 管理者のための情報

第5章および第6章は、異なるラボやユーザーのニーズに合うように、Agilent ChemStore C/S をセットアップする必要がある管理者向けの内容になっています。

## 5 データセキュリティ

この章では、ChemStore C/S で利用できるデータベースにおけるデータセキュリティ保証機能について説明します。

## 6 データ管理

この章では、バックアップ、復元、アーカイブを用いて、データベース内のデータを管理する方法について説明します。

## 7 ChemStore C/S での計算

Agilent ChemStore C/S には統計計算用の総合的スイートが含まれています。この章を読めば、どのようにしてこれらの計算を行うかの全詳細がわかるようになっています。ChemStore C/S を使った統計計算、カスタム計算のコマンドやエラーコード、カスタムフィールドを使った計算や時間計算などについて説明します。

# 目次

<b>1</b>	<b>ChemStore C/S の概要</b>	<b>11</b>
	ChemStation と ChemStore C/S	12
	ChemStore C/S ミニツアー	13
<b>2</b>	<b>ChemStore C/S のコンセプト</b>	<b>17</b>
	ChemStore C/S のワークフロー	18
	ChemStore C/S のデータフロー	19
	結果の整理	20
	スタディに結果をまとめる	20
	カスタムフィールドの使用	21
	ChemStation からのデータ転送	24
	データベースからのデータ取得	25
	クエリーの設定	25
	データセットのフィルタ処理	28
	結果のレビューと承認	31
	ランの承認ステータス	31
	グラフィカルユーザーインターフェイス	35
	サンプルビュー	38
	化合物ビュー	43
	テーブルの構成	47
	サンプル内計算	48
	統計	48
	コントロールチャートの作成	49
	ユーザーインターフェイス設定	50
	ChemStation へのデータ転送	52
	バージョン化	53
	データベースからのランの削除	55

## 目次

<b>3</b>	<b>カスタム計算の使用</b>	<b>57</b>
	カスタム計算とは？	58
	カスタム計算スクリプトエディタの使用準備	59
	計算データセットの取得	59
	カスタム計算スクリプトエディタビューの理解	59
	カスタム計算スクリプトエディタ	62
	カスタム計算スクリプトウィザードの理解	62
	例：レポート計算スクリプトの作成	70
	カスタム計算スクリプトエディタの使用	81
<b>4</b>	<b>レポートテンプレートエディタの使用</b>	<b>89</b>
	レポートテンプレートエディタとは？	90
	レポートテンプレートエディタの使用準備	92
	レポートデータセットの取得	92
	レポートテンプレートエディタのツリービューの理解	93
	レポートテンプレートエディタの使用	95
	レポートセクション作成のためのダイアログボックスの使用	95
	テーブルやチャート用のツリービューの使用	98
	レポートテンプレートコンポーネントの理解	99
	ページヘッダーとページフッター	99
	データセクション	100
	セクションヘッダー	103
	セクション要素	103
	テーブルの理解	110
	テーブルのグループ化とサマリ	110
	テーブルの種類の理解	112
	テンプレートを使ったレポートの生成	126
	自動レポート機能の使用	126

<b>5</b>	<b>データセキュリティ</b>	<b>127</b>
	はじめに	128
	セキュリティ	129
	ユーザーの設定と管理	131
	組織情報の設定	135
	スタディの設定と管理	135
	カスタムフィールドの設定と管理	136
	ChemStore C/S 要素の設定と管理	138
	アーカイブとデアーカイブ	139
	自動アーカイブ	139
	対話形式によるアーカイブ	143
	アーカイブユニット	145
	ランの削除	146
	ランのリオープン	147
	ランのデアーカイブ	147
	汎用 XML アーカイブインターフェイス	148
	アーカイブステータスの理解	150
	アーカイブステータスのレビューとレポート	152
	アーカイブ / デアーカイブプロセスの詳細例	152
	アドミンクライアント上でのアーカイブとデアーカイブの管理	155
	アーカイブ / 削除プロセスの概要	156
	アドミンクライアントでのアーカイブ / デアーカイブタスクの実行	157
	監査証跡	159
	電子メール通知	161
	データベースログブック	164
	印刷ファイルのバリデーションとセキュリティ	165
	ファイルバリデーションの動作	165
	ファイルバリデーション関数	166

## 目次

組み込みのセキュリティ方式をカスタムソリューションに取り替える 166

### 6 データ管理 169

データベースのバックアップ 170

バックアップかアーカイブか? 171

スタンドアロンバージョンのバックアップ 172

Windows 2000/XP のバックアップ 173

Windows 2000/XP バックアップの自動化とスケジュール化 173

テープドライブ 174

CD-ROM 174

クライアント / サーバーバージョンのバックアップ 176

Oracle のバックアップの種類 176

ChemStation コンピュータのメンテナンス 178

不要になった一時ファイルのクリーンアップ 178

PC のファイルシステムのメンテナンス 178

連続稼動 179

障害復旧計画 181

ディスクドライブの故障 181

停電 181

データベースの損傷 181

### 7 ChemStore C/S での計算 183

統計計算 184

シングル値計算 184

回帰計算 185

直線回帰モデル 185

回帰の行列解 186

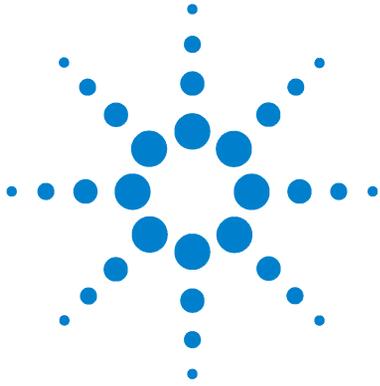
統計値および関連する値 187

重み付け直線回帰の変形 188

非線形関数の変形 189

カスタム計算コマンド	191
エラーコードとその説明	200
カスタムフィールドによる計算	204
オリジナルレスポンスファクタ	204
組み込み関数のリスト	205
時間の計算	207
時間の同期化	207
タイムスタンプ	207
タイムゾーン	208
PCのタイムゾーン設定	209
索引	211

## 目次



Agilent ChemStore C/S  
コンセプトガイド

# 1 ChemStore C/S の概要

ChemStation と ChemStore C/S 12  
ChemStore C/S ミニツアー 13



## ChemStation と ChemStore C/S

ChemStore C/S は、LC、LC/MS、GC、CE、CE/MS、A/D などのシステムで使われる、ChemStation のデータ評価、保存用モジュールです。ChemStore C/S は、標準的なデータベース機能を基に、リレーショナルデータベースへのデータ保存やそこからのデータ取得、サンプル間、装置間のレビュー計算やレポートの機能を加えたものです。

ChemStore C/S のインストール後に [Connection to Database (データベースに接続)] チェックボックスを選択すると、ChemStation に ChemStore C/S の機能が追加されます。ChemStore C/S は、ChemStation への特定のユーザーログインのプロンプトを行ったり、ユーザーインターフェイスに機能を追加し、分析結果のデータベースへの転送、データのレビュー、さらにそれを ChemStation へ再転送してバッチレビューや再解析を行うなどの処理ができるようにします。

ChemStore C/S クライアントソフトウェアのユーザーインターフェイスは、別のアプリケーションとしてインストールされます。これを使うと、クエリーを用いた ChemStore C/S データベースからの情報抽出や、サンプル間の計算、レポートやチャートの作成などを行うことができます。

ChemStore C/S は、単独の ChemStation で動作するスタンドアロン製品としても、クライアント / サーバー製品としても利用できます。スタンドアロンバージョンは、単独の ChemStation にインストールされている MS Access データベースを使用します。クライアント / サーバーバージョンでは、MS Windows や Unix のサーバーにインストールされた Oracle のデータベースを利用します。どちらのバージョンでも、生データや結果を、結果を作成するために用いられたメタデータ (メソッドファイルおよびシーケンスファイル) と一緒に、一箇所にまとめて保管することができます。

いずれの場合でも、ChemStore C/S クライアントソフトウェアとデータベースは、標準の ODBC ドライバを介して通信を行います。どちらの構成も、ChemStore C/S クライアントソフトウェア自体は同じですが、クライアント / サーバーバージョンには、さらに、アーカイブ / デアーカイブの機能が追加されています。両バージョンとも、現在のバージョンおよび過去の全バージョンの時系列を厳密に維持しながら再解析ランの追跡を行い、生データをメソッドとシーケンスの情報にリンクしてデータインテグリティを維持するための機能が含まれています。

## ChemStore C/S ミニツアー

ChemStore C/S は、LC、LC/MS、GC、CE、CE/MS および A/D システムに使用される ChemStations 用のアドオンモジュールです。

ChemStore C/S は、次のような機能を提供します。

### データの整理

ChemStore C/S は、データベース内で結果を柔軟かつ効率的に整理するのに役立つように設計されています。スタディを設定して、特定プロジェクトに関連するランのすべてを収集することができます。スタディを特定のユーザーだけに制限することで、データセキュリティや使いやすさを向上させることもできます。さらに、ChemStore C/S には、カスタムフィールドを設定する機能が用意されているので、ランやスタディに関連する追加データや組織内の情報などを入力することができます。

### 結果の転送

ChemStore C/S ソフトウェアは、ご利用になっている ChemStation ソフトウェアと緊密に統合されています。ChemStation で解析した結果の情報は、単一のラン、シーケンス、バッチを問わず、自動、または対話形式で、簡単に ChemStore C/S に転送することができます。さらに、この転送情報には、結果ばかりでなく、クロマトグラムやスペクトル、実際の生データ、メソッド情報やシーケンス情報などを含めることもできます。

### データセットの取得

データベース内へのデータ収集が終われば、Query Builder を使って検索条件を指定することにより、必要なデータセットを取得することができます。Query Builder では、複雑な SQL（構造化クエリー言語）ステートメントを使わなくても、グラフィカルインターフェイスを利用して簡単にクエリーを設定することができます。

また、クエリーを保存して後で再利用することもできるので、作業が楽になります。

## 1 ChemStore C/S の概要

### ChemStore C/S ミニツアー

必要なサブセット（「クエリー」）の指定が済めば、そのサブセットに対してさらに、レビューや承認、サンプル間の計算、コントロールチャートの作成、追加のバッチ処理のための ChemStation へのデータ転送、レポート作成など、さまざまな作業を行うことができます。また、このデータは、MS Excel などの他のアプリケーションや、LIMSsystem にエクスポートすることもできます。

### データのレビューと承認

クエリーを使って取得したデータに対しては、オンラインレビューを行うことにより、一連の分析結果を状況に照らして検査することができます。取得した情報に基づいて、システムに統合された承認・却下機能を利用したり、ChemStation バッチレビューに再提示するランをマークして、より詳しい検査や再解析を行ったりすることができます。承認機能では、結果のバージョンごとに、3 つまでの電子署名を利用することができます。

### 変更の追跡

監査証跡は、ランデータとは独立して管理され、ランに対して行われたあらゆる変更の追跡を行います。ランに対して行われた変更の監査証跡や詳細情報を表示したり、印刷したりすることができます。

### コントロールチャートの生成

ソフトウェアに付属したコントロールチャートを利用すると、選択した結果データのトレンドを視覚化することができます。結果を好きなように組み合わせ、（必要ならば重ね合わせて）表示することができます。また、ニーズに応じて、チャートをカスタマイズすることも可能です。

### カスタム計算の実行

組み込みのカスタム計算機能を使うと、ユーザー独自のサンプル間計算や統計を定義することができます。同機能による計算は、計算スクリプトに基づいて行われます。計算スクリプトは、計算スクリプトウィザードを使って、容易に作成することができます。

計算スクリプトの保存の際には、バージョン化が行われます。保存した計算スクリプトは、同じようなデータセットに対して再利用することができます。また、計算結果やグラフは、レポートに挿入することもできます。

## レポートの生成

データのレビューと承認が済んだら、レポートを作成することができます。メインツールバーのあるボタンをクリックすれば、任意の標準レポートテンプレートを利用して、迅速なレポート作成が行えます。作成したレポートは、印刷したり、さまざまな形式でファイルに保存したりすることもできます。

## レポートのカスタマイズ

ChemStore C/S に添付する標準レポートテンプレートの中に、ニーズと完全に一致するものがない場合には、レポートテンプレートエディタを使ってテンプレートを簡単に修正することができます。レポートテンプレートエディタは、ユーザー独自のテンプレートデザインの作成にも利用することができます。レポートには、ChemStore で表示可能なあらゆるデータと、ユーザー定義の計算によって指定された追加データを表示することができます。

## 他のアプリケーションへのエクスポート

ChemStore C/S では、データをさらに加工して、情報を MS Excel にエクスポートしたり、html、xml、csv などの形式のファイルにレポートを印刷したりすることができます。また、データを Windows のクリップボードにエクスポートして、他の Windows アプリケーションで利用することもできます。

## ランのアーカイブとデアークाइブ

クライアント / サーバーバージョンでは、必要に応じてアーカイブにデータをコピーして、アーカイブ済みのランをデータベースから削除することができます。アーカイブ済みでデータベースから削除されていないランは、ロックされるため、リオープンしない限り、変更は行えません。アーカイブ済みでデータベースからも削除されたランは、デアークाइブしたり、リオープンすることも可能です。

アーカイブ機能を利用すると、サーバーのデータベースとは別に、データを長期保存することができます。データベースのサイズやパフォーマンスを維持するためには、データベース中のアクティブなランの数を制限することが重要です。

アーカイブは、必要に応じて対話形式で行うことも、定期的な自動で行うように設定することも可能です。アーカイブには、ChemStore 内のアーカイブユーティリティを使うことも、XML テクノロジーを利用したサードパーティ製のアーカイブツールを使うこともできます。インストール CD には、汎用的な XML アーカイブユーティリティが収められています。詳細に関しては、Agilent Technologies の担当者までご連絡ください。

## データ保護とインテグリティ

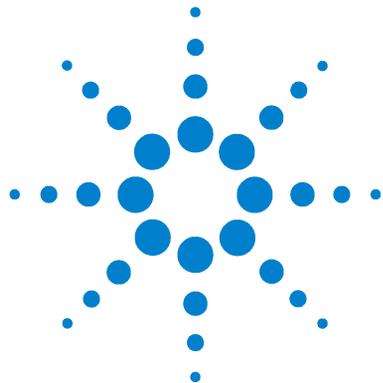
権限のないデータベースへのアクセスや結果の改竄を防ぐために、ChemStore C/S 各ユーザーにアクセス用のパスワードと、そのユーザーが利用できる機能を定義した権限セットを発行するようになっています。ユーザーの権限を変更できるのは、管理者と必要な権限を有するユーザーだけです。不正アクセスによって、アカウントのロックが発生した場合は、その影響を受けるユーザーのすべてに電子メールで通知が届くように ChemStore を設定することができます。

データベース中の各ランには、関連する監査証跡があり、ランに対する変更のすべてを記録しています。さらに、組み込みのバージョン化機能は、何度も再解析された注入を ChemStore C/S でまとめて管理し、厳密な時系列で取得できるようにします。全バージョン（つまり、再解析結果の完全なセット）を取得することも、最新バージョンのみを取得することもできます。全バージョンを取得する場合は、最新バージョンだけを表示するように表示を限定することもできます。データベース中のランに複数のバージョンがある場合には、ランテーブルにアスタリスクで表示されます。

さらに、セキュリティに影響を与えるようなデータベースとのやりとりは、すべてデータベースログブックに記録され、相応のアクセスレベルを持つユーザーは、このログを表示することができます。

## スケーラビリティ

データベースは、ユーザーのニーズが拡大するにつれ、大きくなります。まず、MS Access ベースのスタンドアロンシステムから始めて、必要なシステムを追加しながら、Oracle ベースのクライアント/サーバーバージョンにまで、アップグレードしていくことができます。スタンドアロンデータベースからクライアント/サーバーバージョンへの移行管理を可能にするユーティリティのセットが備わっているため、これを使って、データのアーカイブやアーカイブ解除、データベースサイズの拡大などを行うことができます。組織内のニーズやレポート作成時の必要性などに応じて、ChemStore システムを拡張したとしても、基本的なユーザーインターフェイスは変わらないため、その過程で行ったデータやトレーニングへの投資が無駄になることはありません。



## 2 ChemStore C/S のコンセプト

ChemStore C/S のワークフロー	18
ChemStore C/S のデータフロー	19
結果の整理	20
ChemStation からのデータ転送	24
データベースからのデータ取得	25
結果のレビューと承認	31
グラフィカルユーザーインターフェイス	35
ChemStation へのデータ転送	52
バージョン化	53
データベースからのランの削除	55



## ChemStore C/S のワークフロー

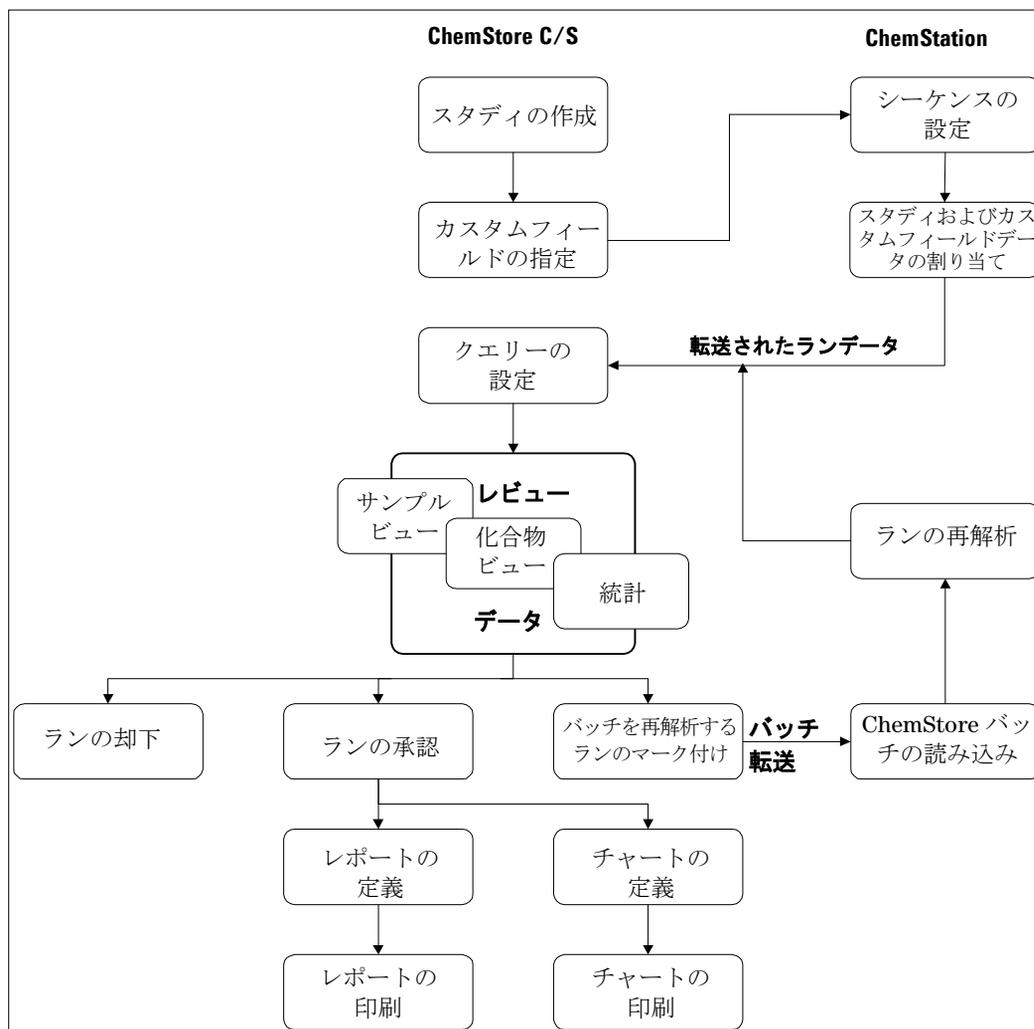


図 1 ChemStore C/S の操作における標準的なワークフロー

## ChemStore C/S のデータフロー

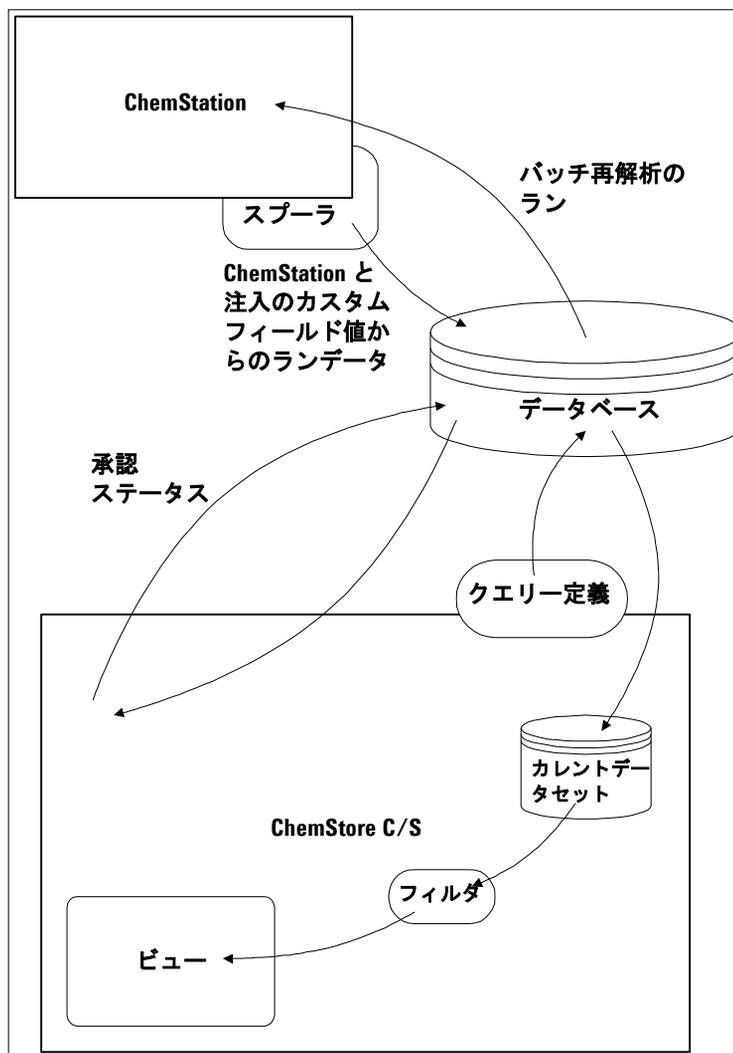


図2 ChemStore C/S におけるデータフロー

## 結果の整理

ChemStore C/S でデータをまとめる中心的な存在はランです。ランは、一度の注入で得られた生データに、データ解析メソッドを適用することによって得られる結果セットとして定義されます。ChemStore C/S のデータベースにランを挿入すると、そのランの注入やサンプルに関する利用可能な情報のすべても、同時に挿入されます。これ以外の方法でデータベースにデータを挿入することはできません。

### スタディに結果をまとめる

ChemStore C/S データベース中のランは、目的に応じて、論理的なグループ化を行うことができます。たとえば、特定の臨床試験や安定性試験に関連するすべての分析結果を、一つにまとめたいときなどに便利です。このようなランのグループをスタディと呼びます。スタディは、アクセス許可のあるユーザー（129 ページの「セキュリティ」を参照）なら、好きな数だけ定義することができますが、各スタディには固有の名前を付ける必要があります。ChemStation から ChemStore C/S に結果が転送される際には、各ラン（もしくはランのグループ）は 1 つのスタディに割り当てられ、同一のスタディに割り当てられた以前のランと一緒に、1 個の論理的な単位として利用できるようになります。

また、スタディには、結果データに加えて、クロマトグラムやスペクトルなどのデータを保存することもできます。スタディには、未処理の生データ、メソッドファイル、シーケンスファイルなども保存できるので、データインテグリティが完全に維持されます。

結果の整理やレポート作成を容易にするために、スタディにカスタムフィールド（21 ページの「カスタムフィールドの使用」を参照）を関連付けることもできます。スタディに関連付けられたカスタムフィールドは、そのスタディ専用にすることも、他のスタディと共用することもできます。スタディのセットアップ時に指定したカスタムフィールドは、すべて自動的に、他のスタディでも利用できるようになります。

カスタムフィールドを使ったスタディを設定する際には、そのカスタムフィールドへのデータ入力方法を指定する必要があります。データ入力は、自動（ChemStation のマクロによる）、または手動で行うことができます。手動によるデータ入力を選んだ場合、値の入力を必須とすることが指定することが

できます。入力が必要でない場合には、デフォルト値を指定することができます。値の入力を必須に指定した場合には、そのフィールドに有効な値が入力されるまで、分析結果を ChemStore C/S に転送することはできません。また、フィールドの種類によっては、何らかの属性（数値フィールドなら最大値と最小値、テキストフィールドなら最長文字列）を指定できるものもあります。このようなデータ入力時の属性は、スタディ側で設定されているので、他のスタディでそのカスタムフィールドを使っている場合、そこでは別のデータ入力属性が設定されている可能性もあります。

スタディの利用は、割り当てられたユーザーのみに制限されています。つまりそのスタディの作業に割り当てられたユーザーだけが、スタディへアクセスしたり、データを追加できます。これにより、スタディのデータを使用権限のないユーザーから保護し、同じデータベースを複数のチームが使用することが可能となります。また、ユーザーにはアクセスできるように割り当てられたスタディのデータだけが表示されるため、製品の使い勝手も高まります。スタディの割り当ては、管理者などの適切な ChemStore の許可を持ったユーザーだけが行えます。

## カスタムフィールドの使用

データベースのレコードには、一般的に分析結果に関連付けられたデータや、ChemStation が提供するデータだけでなく、外部のデータを追加することもできます。外部データは、カスタムフィールドの形式で追加されます。カスタムフィールドはユーザー定義フィールドで、任意の種類の情報を保持することができます。カスタムフィールドを、よく行う分析の種類に合わせて定義しておけば、結果データの整理に利用することができます。

たとえば、前臨床試験などの場合、カスタムフィールドを設定して、各結果セットに以下のような情報を追加することができます。

- pH 値
- 患者名
- 患者の年齢
- 非喫煙者
- 検査日
- 患者の性別
- 投与量
- その他

## 2 ChemStore C/S のコンセプト 結果の整理

このデータは、たとえば、ある患者の全分析結果など、特定の分析結果セットを取得するために利用することができます。

カスタムフィールドには、6つの種類があります。

<b>True/False (真偽値)</b>	このフィールドに入力できるのは、真もしくは偽の値だけです。たとえば、「非喫煙者」フィールドの値には、真偽値が適しています。
<b>選択リスト</b>	このフィールドの値は、ユーザー定義リストからの値に限定されません。たとえば、「患者の性別」フィールドなら、「男」か「女」のどちらかから選ぶことになります。
<b>整数</b>	このフィールドに入力できるのは、整数だけです。たとえば、「患者の年齢」フィールドなら、通常は、整数になります。
<b>実数</b>	このフィールドには、任意の数値を入力することができます。たとえば、「投与量」フィールドの値などは、整数でないこともあるかもしれません。
<b>テキスト</b>	このフィールドに入力できるのは、テキストだけです。たとえば、「患者名」フィールドなどが相当します。
<b>日時</b>	このフィールドに入力できるのは、日時の情報だけです。たとえば、「検査日」フィールドなどが相当します。

データベースの情報を整理すると、分析結果を一箇所で管理できるだけでなく、結果セットに対するサンプル間や装置間でのレポートや計算、トレンド分析の作成などを行う上でも柔軟性が高まります。

上記のような構造を作成したら、引き続き、ある投与の結果を比較して、検出された活性成分の濃度を表示するコントロールチャートを生成したりすることもできます。

カスタムフィールドは、そのデータベース全体で利用できるもので、スタディには、任意の定義済みのカスタムフィールドを追加することができます。カスタムフィールドには、「アクティブ」と「非アクティブ」という2つのステータスがあります。カスタムフィールドのステータスを「非アクティブ」に設定しても、すでにそのフィールドを使用するように設定されたスタディには影響しませんが、そのフィールドを新たに別のスタディで使用することはできなくなります。

スタディで使用するカスタムフィールドは、必要に応じて設定することができます。カスタムフィールドに有効な値を入力しないと、分析結果を ChemStore C/S に転送することはできません。

カスタムフィールドは、ユーザー許可とパスワードによって保護されています (129 ページの「セキュリティ」を参照)。カスタムフィールドの作成や変更が可能なのは、必要なアクセス許可のあるユーザーだけであり、行われた変更は電子署名によって承認される必要があります。

## ChemStation からのデータ転送

分析結果は、バッチシーケンスの一部として、もしくは、単一サンプルとして、対話形式もしくは自動形式で、ChemStation から ChemStore C/S に転送することができます。転送データは、ランの終了後に、スプーラを介してデータベース送られます。このスプーラは、バックグラウンドプロセスとして動作するので、転送中に ChemStation の実行を中断する必要はありません。これにより、転送プロセスが ChemStation の実行速度を低下させないことが保証されると同時に、データベースへのデータ書き込みが失敗した場合のデータ損失も避けることができます。

対話形式でのデータ転送は、ChemStation のデータ解析ビューでシングルデータファイルモード中か、シーケンス再解析中、またはバッチレビューの中で実行します。現在のデータファイルは、ユーザーに割り当てられた、アクティブな任意のスタディに転送することができます。データ転送時には、必要なカスタムフィールド値を入力する必要があります。この時、カスタムフィールド設定時に指定されたデフォルト値を、変更することも可能です。

自動によるデータ転送は、シーケンスかバッチのいずれかで実行します。この場合、シーケンスやバッチ中のランのそれぞれを、特定のスタディに割り当て（複数のスタディを使用して各ランを異なるスタディに割り当てることもできます）、そのスタディに関連付けられたカスタムフィールドの値は、シーケンスの設定中か、バッチ処理中に入力します。

### 注

対話形式と自動形式のいずれの場合も、「*always required*」（必須）として指定されたカスタムフィールドの値は、データの転送が行われる前に入力する必要があります。このような必須のフィールドの見出しには、アスタリスク記号が表示されます。

結果と一緒に保存するように選択されたデータ（クロマトグラムやスペクトル、生データ、メソッド、シーケンスなどのファイル）は、すべて、分析結果と一緒に転送されます。

## データベースからのデータ取得

ChemStore C/S データベースからランを取得するには、クエリー (25 ページの「クエリーの設定」を参照) を使います。クエリーというのは、ある種のリクエストで、データベースを構成する数千のランから、たとえば、「プロカインを含むサンプルは？」というような質問をすることにより、特定の条件に一致するランのセットを取得します。この条件をより精密に指定すればするほど、取得されるランの数は少なくなります。現在のクエリー条件によって取得されるランの数は、実際に取得を行う前に、確認することができます。

クエリーで指定された条件に一致するデータは、データセット、すなわち、レビューしたいデータのスナップショット (19 ページの図 2 を参照) としてまとめられ、ローカルの ChemStore C/S にコピーされます。

データ検索の効率は、データベース中でのランの整理方法や、各ランに保存されている付随情報によって、かなり変わってきます。たとえば、スタディをラボの作業パターンに合わせて設計してランを割り当てておくと、分析結果の検索を最適化できる可能性があります。そのためには、ラボでよく使うデータ検索条件に合わせて、うまくカスタムフィールドのセットを定義しておくことが役立ちます。

たとえば、通常、被験者による結果をグループ化している場合は、カスタムフィールドとして「被験者」を定義できます。そうすれば、データベースにデフォルトで保存されているオペレータ名や装置名などの標準的な検索条件と一緒に、このカスタムフィールドを検索対象にすることができます。

## クエリーの設定

ChemStore C/S では、シンプルとアドバンスという 2 つのレベルのクエリーを提供しています。どちらのクエリーの設定にも、リレーショナルデータベースで検索条件を指定するのに使われている SQL (構造化クエリー言語) を習得しなくても、簡単に検索条件を指定することのできる、グラフィカルコンストラクタが使われます。このグラフィカルコンストラクタを使うと、視覚的なエディタを使って必要なデータカテゴリを選択することができ、既存のデータ項目を選ぶことも、値を手動で入力することも可能です。スタディ選択では、ダイアログボックスに表示される既存のデータ項目の数を限定することができます。最も簡単なクエリーでは、特定の情報カテゴリの項目を 1 つだけ使いま

## 2 ChemStore C/S のコンセプト データベースからのデータ取得

す。たとえば、「Find the samples from the Study called Beta1 (Beta1 という名のスタディからサンプルを探しなさい)」の場合、データカテゴリが「Study」で、項目が「Beta1」です。このような簡単なクエリーで必要なランを取得できない場合には、データカテゴリを増やしたり、項目を増やしたりして、クエリー条件を拡張することができます。1つのデータカテゴリで複数の項目を選択する場合、シンプルクエリーでは、選択項目が、「Find the samples from Study Beta1 OR Beta2」(「Beta1」もしくは「Beta2」という名前のスタディからサンプルを探しなさい)のように、ORで結合されます。複数のデータカテゴリを選択する場合、シンプルクエリーでは、選択カテゴリが、「Find the samples which contain Procaine AND which are control samples」(プロカインを含みかつコントロールであるサンプルを探しなさい)というようにANDで結合されます。アドバンスクエリーでは、クエリーの指定を拡張して、これ以外の論理演算子 (OR, NOT) を使ったり、値の範囲指定を行ったりすることができます。たとえば、「Find the samples which contain Procaine AND which are NOT control samples」(プロカインを含みかつコントロールでないサンプルを探しなさい)のようになります。

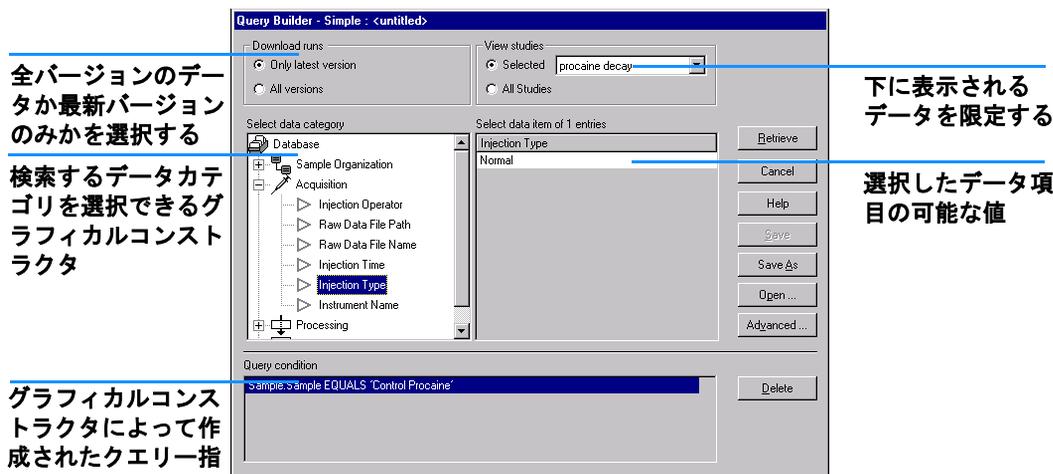


図 3 Query Builder

ChemStore C/S には、2種類の Query Builder が用意されています。

- ・ シンプル形式 (図 3 を参照) では、データ項目と値を、グラフィカルインターフェイスを使って選択し、クエリーを作成することができます。複数の条件を AND で結ぶと、すべての条件に一致するランが取得されます。

- ・ アドバンス形式でも、使用するグラフィカルインターフェイスはシンプル形式と同じですが、絶対および相対 WHERE 節、OR 演算子、否定演算子などを使って条件を拡張する機能が追加されています。ここで利用できる WHERE 節は、18 ページの図 1 に示すように、データの種類によって異なります。

表 1 アドバンス Query Builder での WHERE 節

	数値	日時	テキスト	選択リスト
is equal (等しい)	可	可	可	可
is greater than (より大きい)	可	可		
is less than (より小さい)	可	可		
is between (範囲内)	可	可		
contains (含む)			可	
相対節		not older than (より以降)		現在ログオンしているユーザー、現在のコンピュータ、

NOT 演算子は、条件を否定することにより、等しくない、大きくない、小さくない、範囲内にない、含まない、などを表すことができます。

クエリーを指定して取得したデータセットは、以下のタスクのすべてで利用することができます。

- ・ 画面上でのレビューと承認
- ・ カスタム計算
- ・ コントロールチャートの生成
- ・ レポートの生成

同じデータセットを検索するために何度もクエリーを使用するので、クエリーを保存して後から再実行できるようにあっています。

## 2 ChemStore C/S のコンセプト データベースからのデータ取得

クエリーは、ChemStore C/S 設定の一部で、特定ユーザー間で共有することが可能です。指定、保存されたクエリーは、所有者以外のユーザーに割り当てることができます。クエリーはまた、ユーザー許可（129 ページの「セキュリティ」を参照）によって誤用から保護されています。クエリーを保存し、他のユーザーに割り当てることができるのは、必要なアクセス許可のあるユーザーだけです。

### データセットのフィルタ処理

クエリーによって取得したデータセットに、特定のコントロールチャートやレポートの作成には必要としないランが含まれていることがよくあります。このような場合、フィルタを利用すると、必要なランだけを抽出して、不必要な情報は表示しないようにすることができます。たとえば、2 人の異なるオペレータが実行した 50 個のサンプルを返すクエリーがあったとすると、これにフィルタを適用することにより、1 人のオペレータによる結果だけを表示することができます。フィルタは、データベース全体ではなく、カレントデータセットにのみ作用しますが、データセットの内容を変更することはありません。また、フィルタを適用すれば、作業もスピードアップされます。

フィルタには、次の 2 種類があります。

- **カスタムフィルタ**：このフィルタを使うと、クエリーと同じように、グラフィカルコンストラクタを使って指定を行うことができ（図 4 を参照）、クエリー型の検索条件を使ってデータセットをフィルタすることができます。検索対象として利用できるのは、結果テーブルに設定された列です。
- **標準フィルタ**：このフィルタには、もっとも頻繁に使われる検索条件を反映して選ばれた、定義済みのフィルタのセットが含まれています。標準フィルタで利用できる検索対象は、承認ステータス、アーカイブステータス、およびランのバージョンです（29 ページの図 5 を参照）。ランバージョンに対するフィルタは、取得したランは全バージョンだが、レビューは最新バージョンに対してのみ行いたいというような場合に便利です。

標準フィルタとカスタムフィルタを同時に適用すると、両方の検索条件が AND 演算子で結ばれたのと同じことになります。

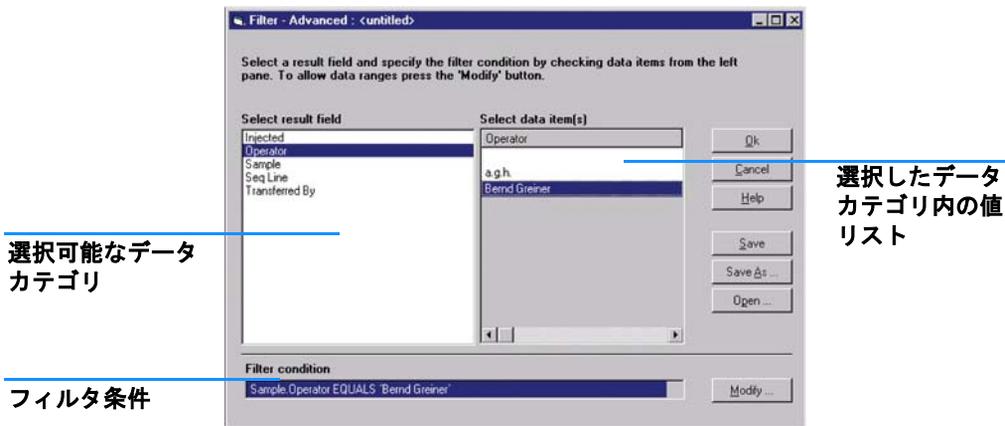


図 4 カスタムフィルタのグラフィカルコンストラクタ

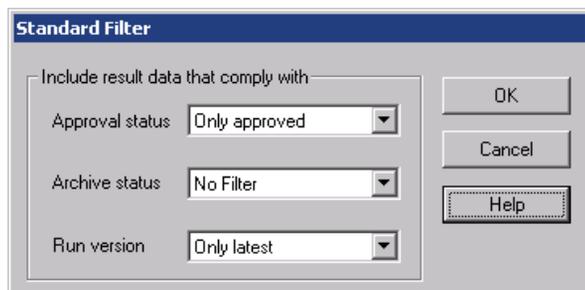


図 5 標準フィルタの選択項目

フィルタには、次の 2 種類の状態があります。

- フィルタ状態では、フィルタ条件に一致するランだけが表示され、一致しないランは表示されません。
- 相補フィルタ状態では、フィルタ条件に一致しないランだけが表示され、一致するランは表示されません。

どちらのフィルタ状態も、設定方法はまったく同じで、オンとオフを切り替えることができます。フィルタと相補フィルタを交互に切り替えれば、データセットを構成するランの 2 つの相補セットを、交互に表示することができます。

## 2 ChemStore C/S のコンセプト

### データベースからのデータ取得

カスタムフィルタは、クエリー同様、ChemStore C/S 設定の一部で、特定ユーザー間で共有することができます。指定、保存されたカスタムフィルタは、所有者以外のユーザーに割り当てることができます。また、カスタムフィルタはユーザー許可により誤用から保護されています (129 ページの「セキュリティ」を参照)。必要なアクセス許可のあるユーザーのみがカスタムフィルタの指定を保存でき、他のユーザーにカスタムフィルタを割り当てることができます。

## 結果のレビューと承認

ChemStore C/S は、分析結果を状況に照らしてレビューできるようになっています。ChemStation のバッチレビュー機能は、レビューや、ChemStation から ChemStore C/S データベースへのデータ転送に理想的な手段です。

データベースに取り込まれた結果は、統合して、状況に照らしてレビューすることができます。クエリーを使って取得したデータから、必要に応じて特定のサブセットを抽出すれば、サンプル別（サンプルレビュー）や化合物別（化合物レビュー）に分類された結果を表示することができます。

## ランの承認ステータス

ChemStation から ChemStoreC/S に転送されたランには、承認の保留という承認ステータスが与えられます。スタディの設定によって異なりますが、該当スタディのランはすべて、1人または複数の第一レベルレビューアと、1人もしくは2人の第二レベルレビューアの電子的な承認と署名を受けるように設定できます。また、承認は「却下」オプションによって拒否されることもあります。却下するユーザーが1人でもいれば、他のレビューアの承認はすべて打ち消されます。

第一および第二承認レベルのユーザー許可（129 ページの「セキュリティ」を参照）は、個々に割り当てることができます。第二レベルの承認は、実行順に関しては、同等に扱います。第二レベルの承認は、第一レベルの承認のないランに適用することもできます。

必要なアクセス許可のあるユーザーは、個々のランやランセット全体に対して、承認もしくは却下を行うことができます。承認や却下のプロセスは、32 ページの図 6 に概要を示すように、2つの段階に分かれています。

## 2 ChemStore C/S のコンセプト 結果のレビューと承認

Run	Mark run for	Sample name	Audit	Status
69		Procaine decay		Approval Pending
70		Procaine decay		Approval Pending
71		Control PABS		Approval Pending
72		Control Procaine		Approval Pending
73		Procaine decay		Approval Pending
74		Procaine decay		Approval Pending
75		Procaine decay		Approval Pending
76		Procaine decay		Approval Pending
77		Procaine decay		Approval Pending
78		Control PABS		Approval Pending
79		Control Procaine		Approval Pending
80		Procaine decay		Approval Pending
81		Procaine decay		Approval Pending
82		Procaine decay		Approval Pending
83		Procaine decay		Approval Pending
84		Procaine decay		Approval Pending
85		Control PABS		Approval Pending
86		Control Procaine		Approval Pending
87		Procaine decay		Approval Pending
88		Procaine decay		Approval Pending
89		Procaine decay		Approval Pending
90		Procaine decay		Approval Pending
91		Procaine decay		Approval Pending
92		Control PABS		Approval Pending
93		Control Procaine		Approval Pending
94		Procaine decay		Approval Pending
95		Procaine decay		Approval Pending
96		Procaine decay		Approval Pending
97	P	Procaine decay		Approval Pending
98	RB	Procaine decay		Approval Pending

Approve  
  Reject  
  Batch

図 6 承認するランのマーク付け

- 手順 1:** 結果レビューの間に、承認もしくは却下対象のランにマークを付ける。
- 手順 2:** ステップ 1 でマークした個々、もしくはすべてのランに対して、電子署名および承認・却下のコメントを実際に適用する。管理者は、**Approval configuration** (承認設定) メニュー (33 ページの図 7) で標準コメントを定義することにより、承認コメントを統一することができます。ただし、その場合でも、承認プロセスの間に新たにコメントを追加したり、定義済みのコメントを変更したりすることは可能です。

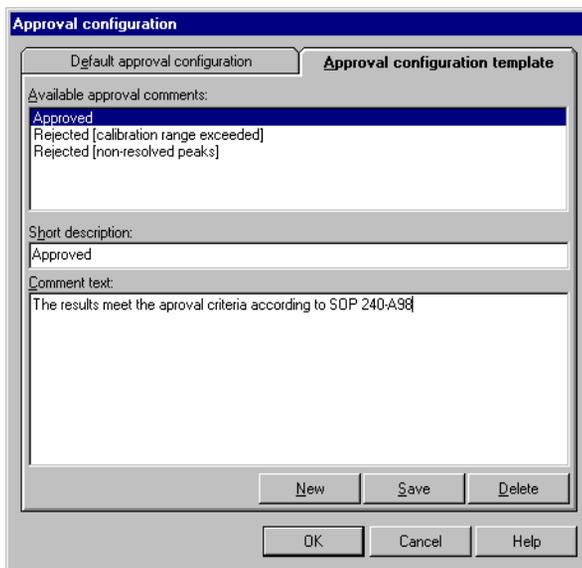


図 7 承認コメント設定のダイアログ

手順 2 で行われた各アクションは、アクションの時間、ランのステータス、オペレータ名、オペレータが入力したコメントと共に、監査証跡（160 ページの「監査証跡」を参照）に記録されます。承認ステータスに対する変更は、「第一レベル承認」、「第二レベル承認」または「却下」として確認されます。

承認されたランを、後で却下することもできます（逆も可能）。この承認と却下のアクションそれぞれについて、ステータス変更の理由を入力することが求められます。そのステータスの変更も、監査証跡に記録されます。

特定の承認ステータスになったランを、自動的にロックすることも可能です。ランをロックすると、そのランがさらにバッチ再解析されることを防ぐことができます。ロックを元に戻すには、そのランに対する承認を却下する必要があります。

## 2 ChemStore C/S のコンセプト 結果のレビューと承認

承認されたランのカスタムフィールド値に変更が行われた場合、そのランの承認のステータスは承認の保留に戻されます。クライアント / サーバーバージョンでは、リオープンされたランには自動的にこの保留のステータスが与えられます。

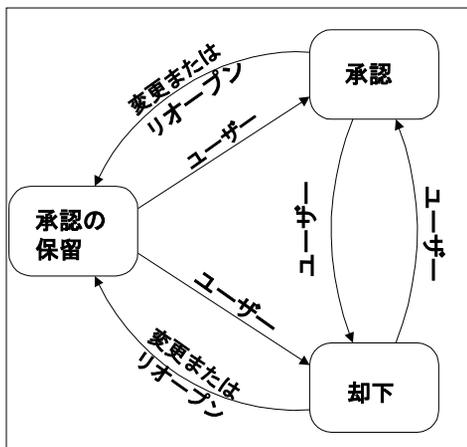


図 8 ラン承認ステータスの移行

## グラフィカルユーザーインターフェイス

ChemStore C/S のウィンドウは、以下の 4 つの領域に分かれています (38 ページの  9 および 43 ページの  10 を参照)。

- メインツールバー
- セカンドツールバー
- 画面左側のパネル
- 画面右側のパネル

ユーザーインターフェイス設定には、ユーザー設定可能な要素すべての設定が含まれており、保存した上で後から呼び出すことができます (50 ページの「ユーザーインターフェイス設定」を参照)。

### メインツールバー

メインツールバーは、ChemStore C/S ウィンドウの最上部の、メニューバーの下にあります。メインツールバーには、クエリーやフィルタの設定、ビューやレイアウトの切り換え、レポートの設定や印刷に使うツールが含まれています。ツールバーのツールがサポートする作業はすべて、メニュー項目からも利用することができます。

以下のツールは、すべてのモードで利用できます。



サンプルビュー、化合物ビューへの切り換えを行います。これらの表示は、レビュー、承認や却下、バッチ再解析対象のランのマーク付けなどに使います。



スタンドアロンバージョンでは削除ビューに、クライアント / サーバーバージョンではアーカイブ / 削除ビューへの切り換えを行います。これらのビューは、アーカイブや削除を行うランのマーク付けに使います。このボタンは、現在のユーザーにアーカイブ / 削除の許可がない場合には表示されません。

## 2 ChemStore C/S のコンセプト グラフィカルユーザーインターフェイス



このツールは、カスタム計算とレポートの両方で表示されます。このツールにより表示されるポップアップメニューからは、計算テンプレートやレポートテンプレートの作成、編集、管理などを選択することができます。



現在選択中の計算テンプレートを使って、現在の計算レポートのプレビューを表示します。



現在選択中のレポートテンプレートを使って、現在のレポートのプレビューを表示します。



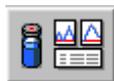
現在選択中のレポートテンプレートを使って、現在選択中のプリンタに現在の結果のレポートを印刷します。



このツールにより表示されるポップアップメニューからは、現在のユーザーインターフェイス設定を後で呼び出すために保存したり、以前に保存したユーザーインターフェイス設定を管理したり、ユーザーインターフェイス設定を選択したりすることができます。

[Sample (サンプル)] と [Compound (化合物)] の2つのタブは、サンプルビューと化合物ビューの切り替えに使用します。これらのレイアウトにはセカンドツールバーが含まれますが、その形式は、選択したレイアウトによって異なります (38 ページの「サンプルビュー」および 43 ページの「化合物ビュー」を参照)。

サンプルビューでは、以下のツールを利用することができます。



サンプルレビューレイアウトへの切り換えを行います。

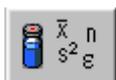


サンプルテーブルレイアウトへの切り換えを行います。



サンプルチャートレイアウトへの切り換えを行います。

サンプルビューで回帰統計が選択されている場合には、さらに、次の 2 つツールを利用することができます。



回帰結果テーブル、および統計計算の結果を表示します。



回帰残差チャートを表示します。

化合物ビューでは、以下のツールを利用することができます。



化合物レビューレイアウトへの切り替えを行います。

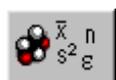


化合物テーブルレイアウトへの切り替えを行います。

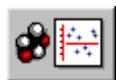


化合物チャートレイアウトへの切り替えを行います。

化合物ビューで回帰統計が選択されている場合には、さらに、次の 2 つのツールを利用することができます。



回帰結果テーブル、および統計計算の結果を表示します。



回帰残差チャートを表示します。

## サンプルビュー

メインツールバー

セカンドツールバー

ランリスト

選択したランのクロマトグラム

サマリサンプルテーブル

図 9 サンプルレビューレイアウト

サンプルビューには、取得したランが、サンプル情報に基づいて表示されます。サンプルビューには、以下の3つのレイアウトがあり、それぞれ、カレントデータセットについての異なる情報を表示します。

- サンプルレビューレイアウトは、パネル左側のランリスト、パネル右側上部のクロマトグラムウィンドウ、パネル右側下部のサマリサンプルテーブルの3つのパネルから構成されます (38 ページの図 9 を参照)。
- サンプルテーブルレイアウトは、パネル左側のランリストと、パネル右側のサンプルテーブルの2つのパネルから構成されます。
- サンプルチャートレイアウトは、パネル左側のランリストと、パネル右側のサンプルチャートの2つのパネルから構成されます。

さらに、サンプルビューには、2つの異なる統計結果セットを表示することができます。

- サマリ統計では、サンプルテーブルレイアウトのパネル右側が上下に分割されて、パネル上部にはサンプルテーブル、パネル下部にはサマリ統計結果が表示されます。
- 回帰統計では、2種類のレイアウトを利用することができます。

回帰結果レイアウトは、パネル左側のランリスト、パネル右側上部の回帰結果テーブル、パネル右側下部の計算された回帰統計の 3 つのパネルから構成されます。

回帰残差レイアウトは、パネル左側のランリストと、パネル右側の残差チャートの、2 つのパネルから構成されます。

## サンプルビューのセカンドツールバー

サンプルビューのセカンドツールバーで利用できるツールは、選択したレイアウトによって異なります。

以下のツールは、すべてのサンプルビューレイアウトで利用できます。



承認対象としてマークされたランすべての承認ステータスを、承認に設定します。



却下対象としてマークされたすべてのランの承認ステータスを却下に設定します。



バッチ再解析の対象としてマークしたランに、1 つまたは複数のバッチを設定します。



現在のランに関するサンプル関連情報を、サンプル関連処理パラメータを含めて表示します。



現在のランに関するラン関連情報およびデータ解析関連情報を表示します。



現在の注入の全バージョンの監査証跡を表示します。



選択されたランに対する、ChemStation メソッドのパラメータを表示します。このツールは、ChemStore のリビジョン B.02.02 以降に対して転送されたランに対してのみ有効です。



サンプルテーブルに追加する列を選択するための、テーブル列選択ダイアログボックスを表示します。



通常のカスタムフィルタと相補フィルタを切り換えるためのメニューを表示します。

## 2 ChemStore C/S のコンセプト グラフィカルユーザーインターフェイス



現在の標準カスタムフィルタのオンとオフを切り換えます。



現在の相補フィルタのオンとオフを切り換えます。



このツールを使うと、**Windows** のクリップボード、または **Microsoft Excel** 形式のファイルに、データをエクスポートすることができます。



このツールを使うと、現在のビューの 1 つまたは複数のセクションを、現在選択中のプリンタに印刷することができます。

サンプルレビューレイアウトでは、通常のツールセットに、次のツールが追加されます。



ラン間の自動ステップングを開始します。[Start (開始)] ボタンに置き換わる [Stop (停止)] ボタン選べば、自動ステップングを停止することができます。自動ステップングの時間間隔を設定することができます。

サンプルテーブルレイアウトでは、通常のツールセットに、次の 2 つのツールが追加されます。



結果を、サンプルテーブルの選択列について、アルファベット順、または日付 / 時間順で並べ替えます。



結果を、サンプルテーブルの選択列について、アルファベット、または日付 / 時間の逆順で並べ替えます。

サンプルチャートレイアウトでは、通常のツールセットに、次のツールが追加されます。



このツールを使うと、チャートオプションを指定することができます。

回帰統計では、上記のツールセットに、次のツールが追加されます。



このツールを使うと、回帰統計と残差の計算に使うパラメータを設定することができます。

## ランリスト

ランリスト (38 ページの [図 9](#) を参照) はカレントデータセット中のあらゆるランの情報を含むテーブルです。ランリストのテーブルは、5 つの列から構成されます。

- **Run** (ラン) は、データセットのラン番号を示します。
- **Mark run for** (ランにマーク) は、そのランにどのようなマークがついているかを表示します。
  - 「P」は、そのランが承認対象としてマークされていることを表します。
  - 「R」は、そのランが却下対象としてマークされていることを表します。
  - 「B」は、そのランが、ChemStation での再解析用のバッチに含まれる対象としてマークされていることを表します。
  - 「EXC」は、そのランが、レポートや統計計算の対象から除外されていることを表します。
- **Sample name** (サンプル名) には、サンプル名が表示されます。
- **Audit** (監査) には、そのランの再解析が済んでいるかどうかが表示されます。
  - 取得されたのが最新バージョンのランだけである場合、複数のバージョンが存在するとアスタリスクが表示されます。
  - 取得されたのが全バージョンのランである場合、1 (最初のバージョン) から始まる続き番号が付きます。最新バージョンには + が表示されます。
  - 選択中のランに対する、ChemStation メソッドのパラメータも表示されます。この機能は、ChemStore のリビジョン B.02.02 以降に対して転送されたランに対してのみ有効です。
- **Status** (ステータス) には、そのランの現在のステータスが表示されます (データレビューでは承認ステータス、アーカイブ / 削除ビューではアーカイブステータス)。

## 2 ChemStore C/S のコンセプト グラフィカルユーザーインターフェイス

承認、却下、バッチ再解析などの対象としてランをマークするには、パネル下部のチェックボックスを使用するか、マウスの右ボタンをクリックして、ポップアップメニューから処理を選択します。ランにマーク付けを行っても、そのランの承認ステータス（31 ページの「ランの承認ステータス」を参照）が変更されたり、バッチにランが転送されたりすることはありません。ランの承認ステータスが変更されるのは、適切なツールを使用したときだけです（承認ツールは承認対象としてマークされたランの承認ステータスを「承認」に設定し、却下ツールは却下対象としてマークされたランの承認ステータスを「却下」に設定します）。バッチが設定されるのも、バッチ処理ツールを使用したときだけです。ランの承認や却下を行う際には、ステータス変更の理由を記入する必要があります。ここで入力された情報は、ステータスの変更と一緒に、ランの監査証跡に記録されます。

### サマリサンプルテーブル

サマリサンプルテーブルには、ランリストで選択中のランの各ピークに関する情報が表示されます。サマリサンプルテーブルに表示する情報は、設定の変更により選択することができます（47 ページの「テーブルの構成」を参照）。テーブル上のランの間を移動するには、テーブルの下の [Next（次へ）] ボタンと [Previous（前へ）] ボタンを使います。[Exclude（除外）] ボタンは、ランを除外対象としてマークし、そのランをサンプルレビューの右側のパネルから削除します。この除外マークは、[Include（包める）] ボタンを使って消去することができます。

### サンプルテーブル

テーブルレイアウトビューのサンプルテーブルには、ランリストの各ランについての情報が表示されます。サンプルテーブルに表示する情報は、設定の変更により選択することができます（47 ページの「テーブルの構成」を参照）。このビューは、通常、シーケンス中心のワークフローにおいて、シーケンステーブルなどを表示するのに使われます。

## 化合物ビュー

セカンドツールバー

化合物リスト

選択したランのクロマトグラム

メインツールバー

選択したランのスペクトル

サマリ結果テーブル

Mark	Run	Injected	Sample	Volume	Compound	Amount	RF	RT	Area	Height	Channel
P	6	1994-10-01 2:40:56	Pocaine level1	3.0	Pocaine	136.20	1.362e1	4.700	279.937	50.742	DA01.B, Sig=295.8 Ret=590.100
P	7	1994-10-01 2:51:31	Pocaine level2	3.0	Pocaine	210.89	1.362e1	4.670	1560.017	97.187	DA01.B, Sig=295.8 Ret=590.100
P	8	1994-10-01 4:02:00	Pocaine level3	3.0	Pocaine	214.76	1.349e1	4.634	2324.046	140.216	DA01.B, Sig=295.8 Ret=590.100
P	9	1994-10-01 4:12:31	Pocaine level4	3.0	Pocaine	418.61	1.347e1	4.605	3107.673	189.276	DA01.B, Sig=295.8 Ret=590.100
10	1994-10-01 4:23:03	Pocaine level5	3.0	Pocaine	529.74	1.346e1	4.561	3928.518	221.241	DA01.B, Sig=295.8 Ret=590.100	
11	1994-10-01 4:34:05	Pocaine decay	3.0	Pocaine	530.00	1.347e1	4.572	4225.243	227.900	DA01.B, Sig=295.8 Ret=590.100	
12	1994-10-01 4:44:10	Control PMA5	3.0	Pocaine	0.00	0.000e+0					DA01.B, Sig=295.8 Ret=590.100
13	1994-10-01 4:54:21	Control	3.0	Pocaine	526.58	1.346e1	4.575	3912.393	221.145	DA01.B, Sig=295.8 Ret=590.100	
14	1994-10-01 7:34:05	Pocaine decay	3.0	Pocaine	534.04	1.346e1	4.577	3971.945	224.427	DA01.B, Sig=295.8 Ret=590.100	
15	1994-10-01 10:34:13	Pocaine decay	3.0	Pocaine	497.36	1.346e1	4.590	3654.689	210.779	DA01.B, Sig=295.8 Ret=590.100	
16	1994-10-01 11:34:04	Pocaine decay	3.0	Pocaine	464.97	1.346e1	4.600	3448.847	198.001	DA01.B, Sig=295.8 Ret=590.100	
17	1994-10-01 16:34:05	Pocaine decay	3.0	Pocaine	496.77	1.347e1	4.602	3226.766	187.626	DA01.B, Sig=295.8 Ret=590.100	
18	1994-10-01 19:34:13	Pocaine decay	3.0	Pocaine	498.05	1.347e1	4.610	3029.222	177.486	DA01.B, Sig=295.8 Ret=590.100	
19	1994-10-01 19:44:22	Control PMA5	3.0	Pocaine	0.00	0.000e+0					DA01.B, Sig=295.8 Ret=590.100
20	1994-10-01 19:54:34	Control	3.0	Pocaine	530.90	1.346e1	4.574	3945.215	221.303	DA01.B, Sig=295.8 Ret=590.100	

図 10 化合物レビューレイアウト

化合物ビューには、取得されたランが、化合物情報に基づいて表示されます。化合物ビューにも、サンプルビューと同様に、3種類のレイアウトがあり、それぞれ、カレントデータセットについての異なる情報が表示されます。

- 化合物レビューレイアウトは、左パネルの化合物リスト、右パネル上部左側のクロマトグラムウィンドウ、右パネル上部右側のスペクトルウィンドウ、右パネル下部のサマリ結果テーブルの、4つのパネルから構成されます (43 ページの図 10 を参照)。
- 化合物テーブルレイアウトは、左パネルの化合物リストと、右パネルの結果テーブルの、2つのパネルから構成されます。
- 化合物チャートレイアウトは、左パネルの化合物リストと、右パネルの化合物チャートの、2つのパネルから構成されます。

さらに、化合物ビューでは、2種類の異なる統計結果セットを表示することができます。

- サマリ統計では、化合物テーブルレイアウトの右パネルが分割され、パネル上部に結果テーブルが、パネル下部にサマリ統計結果が表示されます。

## 2 ChemStore C/S のコンセプト グラフィカルユーザーインターフェイス

- ・ 回帰統計では、2 種類のレイアウトを利用することができます。
  - ・ 回帰結果レイアウトは、パネル左側の化合物リスト、パネル右側上部の回帰結果テーブル、パネル右側下部の計算された回帰結果統計の、3 つのパネルから構成されます。
  - ・ 回帰残差レイアウトは、左パネルの化合物リストと、右パネルの残差チャートの、2 つのパネルから構成されます。

### 化合物ビューのセカンドツールバー

化合物ビューのセカンドツールバーで利用できるツールは、選択したレイアウトによって異なります。

以下のツールは、すべての化合物ビューレイアウトで利用できます。



結果テーブルに表示する列を選択するための、テーブル列選択ダイアログボックスを表示します。



通常のカスタムフィルタと相補フィルタを切り換えるためのメニューを表示します。



現在のカスタムフィルタのオンとオフを切り換えます。



現在の相補フィルタのオンとオフを切り換えます。

#### 注

フィルタで利用できるデータは、サンプル関連データのみです。



このツールを使うと、Windows のクリップボード、または Microsoft Excel 形式のファイルに、データをエクスポートすることができます。



このツールを使うと、現在のビューの 1 つまたは複数のセクションを、現在選択中のプリンタに印刷することができます。

化合物レビューレイアウトでは、通常ツールセットに、次の 5 つのツールが追加されます。



承認対象としてマークされたランすべての承認ステータスを、承認に設定します。



却下対象としてマークされたすべてのランの承認ステータスを却下に設定します。



バッチ再解析の対象としてマークしたランに、1 つまたは複数のバッチを設定します。



現在の化合物に関するピーク関連情報を表示します。



ラン間の自動ステップングを開始します。[Start (開始)] ボタンに置き換わる [Stop (停止)] ボタン選べば、自動ステップングを停止することができます。自動ステップングの時間間隔を設定することができます。

化合物テーブルレイアウトでは、通常ツールセットに、次の 2 つのツールが追加されます。



結果を、結果テーブルの選択列について、アルファベット順、または日付 / 時間順で並べ替えます。



結果を、結果テーブルの選択列について、アルファベット、または日付 / 時間の逆順で並べ替えます。

化合物チャートレイアウトでは、通常一般ツールセットに、次のツールが追加されます。



このツールを使うと、チャートオプションを指定することができます。

回帰統計では、上記のツールセットに、次のツールが追加されます。



このツールを使うと、回帰統計と残差の計算に使うパラメータを設定することができます。

### 化合物リスト

化合物リスト (43 ページの [図 10](#) を参照) には、カレントデータセットの全化合物 (分析対象化合物) の一覧が表示されます。キャリブレーション済みの化合物については、化合物名が表示され、キャリブレーションされていない化合物については、「**Uncalibrated Compounds**」(キャリブレーションされていない化合物) と表示されます。化合物リストでは、表示する化合物を選択することができます。化合物レビューレイアウトの場合、選択できる化合物は 1 種類ですが、化合物テーブルレイアウトの場合、複数の化合物を選択することができます。化合物チャートレイアウトでは、単一の化合物について複数のパラメータをチャート化したり、逆に、単一のパラメータについて複数の化合物をチャート化したりすることができます。単一の化合物について複数のパラメータをチャート化する場合、そのプロットは、データセット中の最大値に対して標準化されます。

### サマリ結果テーブル

サマリ結果テーブルでは、各ラン中の選択された化合物についての情報が表示されます。サマリ結果テーブルに表示する情報は、設定を変更することにより選択できます (47 ページの「[テーブルの構成](#)」を参照)。承認、却下、バッチ再解析などの対象としてランをマークするには、テーブルの下のチェックボックスを使います。ランにマーク付けを行っても、そのランの承認ステータス (31 ページの「[ランの承認ステータス](#)」を参照) が変更されたり、バッチにランが転送されたりすることはありません。ランの承認ステータスが変更されるのは、適切なツールを使用したときだけです (承認ツールは承認対象としてマークされたランの承認ステータスを「承認」に設定し、却下ツールは却下対象としてマークされたランの承認ステータスを「却下」に設定します)。バッチが設定されるのも、バッチ処理ツールを使用したときだけです。

### 結果テーブル

結果テーブルには、各ラン中の選択された化合物すべてについての情報が表示されます。結果テーブルに表示される情報は、設定を変更することにより選択できます (47 ページの「[テーブルの構成](#)」を参照)。結果テーブルを使うと、チャートの X 軸や Y 軸の値を選択することができます (47 ページの [図 11](#) を参照)。

## テーブルの構成

ChemStore C/S ウィンドウの右パネルに表示されるテーブルは、すべて構成変更が可能です。これらのテーブルを構成する列や、その並び順は、ダイアログボックスを使って選択することができます。統計結果中の数値の行や列に対しては、数値の書式と精度を、また、日付の列に対しては、表示形式を選択することができます。この設定ダイアログボックスには、構成中のテーブルで有効な列だけが表示されます。

列の設定時には、列設定ダイアログボックスのチェックボックスを使って、チャートの X 軸および Y 軸の値を選択することもできます。X 軸や Y 軸の値として選択できるのは、テーブルに含まれる列だけです。また、X 軸の値は 1 つしか選べませんが、Y 軸の値は好きなだけ選択することができます。

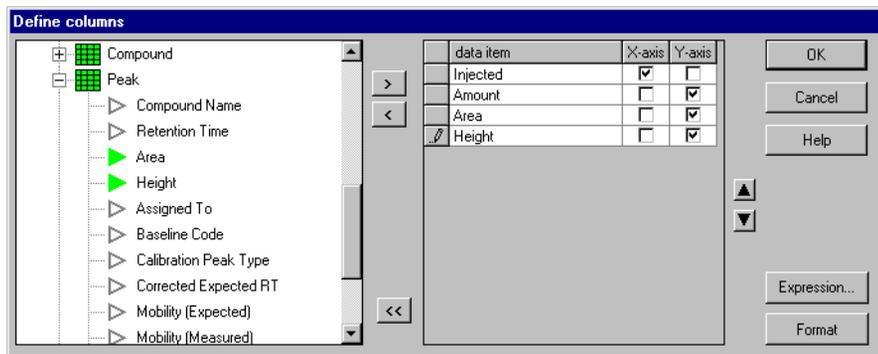


図 11 列構成のダイアログ

ChemStation で利用できる標準的な結果に加え、構成中のテーブルで利用できるデータを使った算術計算の結果を表示する列を定義することもできます。

## サンプル内計算

結果テーブルでは、数式を含む列を設定して、各ランや化合物の結果に対して、合計や比などの簡単なサンプル内計算を行うことができます。

このようなサンプル内計算は、テーブル中のランやピークの行に結びついています。(テーブルの列に関する) サンプル間もしくはサンプル内の拡張計算については、[48 ページの「統計」](#)や [59 ページの「カスタム計算スクリプトエディタの使用準備」](#)を参照してください。

カスタム計算の場合、テーブル中の任意のデータ項目を利用することができ、またその数式の中では、算術演算子、関数、および定数を使うことができます。

## 統計

ChemStore C/S には、3 レベルの統計計算が用意されています。

- サマリ統計は、サンプルレビューのサンプルテーブル、または、化合物レビューの結果テーブルの下に表示されます。
- 回帰統計は、回帰結果テーブルレイアウト、および残差チャートレイアウトの 2 種類のレイアウトで表示されます。
- 統計計算の結果に対してさらに計算を行う必要がある場合、サマリ統計や回帰統計は、カスタム計算を使って計算することもできます。[70 ページの「例: レポート計算スクリプトの作成」](#)を参照してください。

### サマリ統計

サマリ統計は、サンプルテーブル、または結果テーブルの列のそれぞれについて計算され、表示されます。サマリ統計で表示される統計値は、以下のとおりです。

<b>個数</b>	データセット内の値の個数
<b>最大値</b>	データセット内の最大値
<b>平均</b>	データセットの平均値
<b>最小値</b>	データセット内の最小値
<b>RSD (相対標準偏差)</b>	データセット内の値の相対標準偏差
<b>標準偏差</b>	データセット内の値の標準偏差

合計	データセット内の値の合計
分散	データセット内の値の分散

サマリ統計で用いられる計算の詳細については、[184 ページ](#)の「統計計算」を参照してください。

### 回帰統計

回帰統計で使われる計算の詳細については、[185 ページ](#)の「回帰計算」を参照してください。

## コントロールチャートの作成

サンプルテーブル（サンプルレビュー）や結果テーブル（化合物ビュー）に追加した結果から、チャートを生成することができます。テーブルの設定時に選択した X 軸と Y 軸の値は、そのままチャートに移行されます。ただし、チャートを単純化したい場合などには、X 軸や Y 軸の上にあるボタンを使えば、選択を変更することも可能です。

オプションメニューやツールバーからは、[Chart Options（チャートオプション）] ダイアログボックスを利用することができ、これを使うと、チャート上の各線について、線およびポイントの色、スタイル、形状などのフォーマットを指定することができます。同様に、タイトル、軸ラベル、チャート凡例などについても、スタイル、サイズ、位置などのフォーマットを指定することができます。

デフォルトでは、チャートの軸は、自動的にスケーリングされて表示されます。この自動スケーリングでは、X 軸には、X 軸の値範囲の最小値から最大値までの目盛りがとられ、Y 軸には、Y 軸の値セットの最小値から最大値までの目盛りがとられます。スケーリングは、最大値や最小値を設定することにより変更が可能であり、これらのスケーリング値に対しては、精度を指定することもできます。データは対数軸で表示することもできますが、この場合、精度の設定は無効になります。対数形式では、時間値を表示することはできません。対数プロットでは、ゼロ以下のデータ点は表示されません。

### 限界線の追加

チャートには、結果のプロット以外にも、中心線、警戒上限、警戒下限、危険上限、危険下限の最高 5 本までの限界線を追加することができます。この限界線の Y 軸上での位置は、計算した値（平均と標準偏差）と指定した値の、どちらかで指定することもできます。

中心線	中心線は、Y 軸の値のどれかの平均値を基に設定することも、特定の値を指定することもできます。
限界線	限界線には、特定値を指定することも、または中心線からの差を指定することもできます。差の指定は、絶対値で行うことも、選択した Y 軸の値の標準偏差を基にして行うこともできます。

## ユーザーインターフェイス設定

データをレビューして、テーブル、コントロールチャート、統計オプションなどを設定したら、そのユーザーインターフェイス設定を保存することができます。保存した設定は、後で呼び出して再利用することができます（[図 12](#)を参照）。ここで保存される情報には、編集可能なテーブルやチャートの構成や書式ばかりでなく、編集不可能なテーブル（たとえば、ランリストや化合物リスト）の列幅や、各レイアウトのパネルサイズなども含まれています。ユーザーインターフェイス設定は、名前を付けて保存し、後で再利用することができます。また、ユーザーインターフェイス設定管理ができる許可のあるユーザーは、保存した設定を他のユーザーに割り当てて使わせることもできます。

全レイアウトのすべてのテーブルの列幅

全チャートの線やポイントのスタイルや色、軸ラベル、凡例、タイトル

全レイアウトのパネルサイズ

結果テーブルの数値書式と精度

Sample	Injected	RT	Area
Control Procaine	10/01/1994 04:54:21	4.575	3912.261
Control Procaine	10/01/1994 19:54:34	4.574	3945.215
Control Procaine	10/02/1994 10:54:24	4.564	3970.987
Control Procaine	10/03/1994 01:54:23	4.509	3965.442
Control Procaine	10/03/1994 16:54:03	4.564	3991.875
Control Procaine	10/04/1994 07:54:13	4.579	4017.843
Control Procaine	10/04/1994 22:54:40	4.582	3987.307
Control Procaine	10/05/1994 00:38:33	4.596	4004.969
Control Procaine	10/06/1994 10:38:13	4.572	4018.763
Control Procaine	10/06/1994 20:38:07	4.589	4013.194
Control Procaine	10/07/1994 06:38:04	4.550	3990.045
Control Procaine	10/07/1994 16:38:14	4.606	3953.732
Control Procaine	10/08/1994 02:38:10	4.594	4004.635
Control Procaine	10/08/1994 12:38:16	4.596	4022.243

Statistics		RT	Area
Count		14	14
Sum		64.06	55888.20
Minimum		4.51	3912.39
Maximum		4.61	4024.64
Mean		4.58	3992.02
Standard Deviation		0.02481	31.6267
Rel. Stds. Dev. (%)		0.5412	0.7839
Variance		0.0006	1003.4113

図 12 構成可能なユーザーインターフェイスの設定

## ChemStation へのデータ転送

ChemStore C/S から ChemStation へのデータ転送は、二段階で実行されます。

第一段階は、ChemStore C/S でのレビュー処理中に、再解析や再分析のために、ChemStation に逆転送するランを選択したときに起こります。ランがバッチリクエストに追加されると、監査証跡には、そのランのエントリが生成されます。関連するランすべての選択が終わると、選択されたランは、あらゆる関連情報（スタディ名、カスタムフィールド値、属性）と一緒に、複数のバッチに転送されます。この場合、システムは、ランを転送する前に、元々ランのあった場所に同一のファイルが存在しないかどうか調べます。もし同一のファイルが存在すれば、転送は行われません。また、元の場所には存在しないものの、データベースで利用できる場合には、そのファイルは、ChemStation 内の一時保存領域に転送されます。

第二段階は、ChemStation のバッチレビュー機能で、ChemStore C/S のバッチを読み込むことを選択したときに、ChemStation で起こります。ChemStore C/S に、複数のバッチが設定されている場合には、保留中のバッチの一覧から読み込むバッチを選択します。この一覧に表示されるのは、現在の ChemStation ユーザー、またはすべてのユーザーに割り当てられているバッチだけです。

ラン情報のインターフェイスを使って、対話形式で、ランと一緒に保存されている任意、またはすべてのファイル（生データ、メソッドファイル、シーケンスファイル）、もしくは、シーケンス全体を選択し、再読み込みすることもできます。この場合、そのファイルがすでに ChemStation 内に存在していると、書き込み先のパスを変更するか、転送をキャンセルするかを、指定するように求められます。

ChemStore C/S に転送された再解析後のランは、元の結果には上書きされず、新しいランとしてデータベースに保存されます。元の結果はデータベースに保存されたままで、（検索条件に一致すれば）必要に応じて取得することができます。標準フィルタを使えば、全バージョン（最新バージョンおよびそれ以前の全バージョン）を表示したり、最新バージョンだけを表示したりすることもできます。

## バージョン化

ChemStore C/S は、ChemStation によって再解析されたファイルの旧バージョンのすべてを保持しています。データと一緒に生データ、メソッド、シーケンスなどのファイルを保存することを選択した場合、新バージョンに保存されるのは、このうちの変更されたファイルだけです。したがって、生データファイルが保存されるのは一度だけ、メソッドファイルが保存されるのはメソッドが変更された場合だけ、シーケンスファイルが保存されるのは、ランがシーケンスに転送された場合だけとなり、バッチへの転送や手動転送では保存されません。

クエリーを設定する際には、ランの全バージョンを取得するか、最新バージョンだけを取得するかを、選択することができます。全バージョンのランを取得することを選ぶと、標準フィルタを適用することにより、最新バージョンだけを表示することができます。

全バージョンのランが表示されると、ランリストの [Audit (監査)] 列には、ランのバージョン番号が表示されます。この場合、最も古いバージョンには「1」が、その次に古いバージョンには「2」が、最新バージョンには「+」が表示されます。

最新バージョンのランだけが表示されている場合、ランリストの [Audit (監査)] 列の「\*」は、データベース内にそのランの複数のバージョンが存在することを示しています。

[Audit (監査)] 列の <A> は、通常、該当するランには、このバージョンでデータベースに追加された情報以外にも、より詳細な情報があるということを示しています (イベント: NEW)。<A> が表示されるのは、以下のようなイベントです。

- ランを新しいバッチに追加した
- ラン承認ステータスが変更になった、または承認が却下された
- ランがリオープンされた
- カスタムフィールド値が変更された
- サンプル名が変更された

## 2 ChemStore C/S のコンセプト バージョン化

### 最新バージョンのみ取得

Run	Mark run for	Sample name	Audit	Status
1		PABS level 1	<A>	Approved
2		PABS level 2	* <A>	Approved
3		PABS level 3	* <A>	Approved

データベースに複数のバージョンが存在することを示す

最新バージョンが監査証跡に登録されていることを示す

### 全バージョンを取得

最新バージョンであることを示す

Run	Mark run for	Sample name	Audit	Status
8		PABS level 3	+ <A>	Approved
9		PABS level 3	+2 <A>	Rejected
10		PABS level 3	+1 <A>	Rejected
11		PABS level 4	+	Approval Pending

以前のバージョン

このバージョンで監査証跡の登録が拡張されたことを示す

図 13 バージョンの取得と表示

## データベースからのランの削除

ChemStore C/S データベースからのランの削除は、スタンドアロンバージョンでは削除ビューで、クライアント / サーバーバージョンでは、アーカイブ / 削除ビューで行うことができます。クライアント / サーバーバージョンでは、削除前にランをアーカイブするか、アーカイブしないでランを削除するかを選ぶことができます。スタンドアロンバージョンでデータをアーカイブするには、アーカイブ媒体に、\*.mdb データベースファイルをコピーします。

### 注意

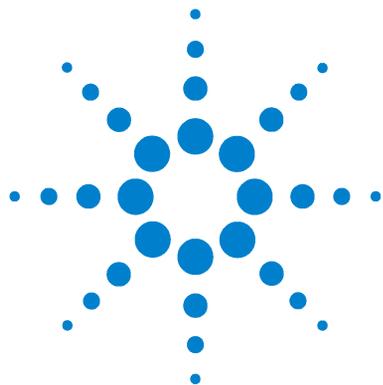
削除したランは、データベースから取り除かれ、復元することができなくなります。したがって、削除するのは、アーカイブしたラン、別の媒体にコピーしたラン、または不要なランだけにしてください。

削除するランは、削除ビュー（スタンドアロンバージョン）、または、アーカイブ / 削除ビュー（クライアント / サーバーバージョン）の、左パネルにあるランリストから選択します。ツールバーから [Delete（削除）] ボタンを選択すれば、そのランは削除されます。

削除は、ユーザー許可とパスワードによって保護されています。アーカイブ / 削除ビューや削除ビューを利用できるのは、必要なアクセス許可があるユーザーだけであり、ラン削除を開始する際はパスワードを入力する必要があります。

## 2 ChemStore C/S のコンセプト

### データベースからのランの削除



### 3

## カスタム計算の使用

カスタム計算とは？	58
カスタム計算スクリプトエディタの使用準備	59
カスタム計算スクリプトエディタ	62

この章では、カスタム計算の使い方について説明します。ChemStore データベースのデータセットでカスタム計算を作成する方法、および、その計算結果を ChemStore レポートに出力する方法を示します。



## カスタム計算とは？

カスタム計算というのは、ChemStore に組み込まれた、計算機能を拡張するためのコンポーネントです。

この計算は、SQL に似た簡単な言語を使った、計算テンプレート（スクリプト）によって記述されます。また、計算テンプレートを正しい構文で作成するのに役立つ、さまざまなウィザードも用意されています。これらのウィザードは、計算の作成手順を、段階を追って案内してくれます。熟練ユーザー用には、計算スクリプトを直接プログラムすることを可能にする、スクリプトエディタも用意されています。

カスタム計算用のプログラミング言語には、簡単な演算や関数から、複雑なサマリ計算に至るまでの、幅広い構成要素が用意されています。また、一般的な計算用計算テンプレートのセットも組み込まれているので、これを基にして、カスタム計算テンプレートの開発を行うこともできます。

作成した計算テンプレートに対しては、ステップ実行やブレークポイントなどの強力なデバッグツールを使って、テストやデバッグを行うことができます。計算テンプレートは、保存した上で、特定ユーザーに対して、実行専用で割り当てることもできます。変更した計算テンプレートは、別バージョンとして保存することも、新規の計算テンプレートとして保存することもできます。この操作は、ChemStore C/S のログブックに記録されます。

計算テンプレートの結果に対しては、プレビュー、フォーマット、レポートへの挿入などを行うことができます。レポートに挿入された計算テンプレートは、レポートが生成されるたびに、自動的に実行されます。その計算の結果は、表やグラフとして印刷することができます。

計算機能へのアクセスは、特別なユーザー権限、計算テンプレートのユーザー割り当て、計算テンプレートの所有者管理などによって制限されています。

## カスタム計算スクリプトエディタの使用準備

### 計算データセットの取得

計算テンプレートは、データベースクエリーによってダウンロードされたカレントデータセットに対して機能します。カレントデータセットというのは、レビューテーブルに表示されるテーブルです。ただし、レビューテーブルには、計算に使う列のすべてを表示する必要はありません。カスタム計算のテーブルウィザードでは、カレントデータセット中の任意の列を、ユーザーインターフェイスの設定とは別に設定することができます。

新しい計算テンプレートの開発を始める際には、そのテンプレートの使用対象となるデータを表すデータセットに対して、クエリーを行うことが重要です。

### カスタム計算スクリプトエディタビューの理解

#### Windows 選択ツリー

ウィンドウナビゲータでは、ツリービューの中に、カスタム計算のウィンドウが「リーフ」として表示されるので、ウィンドウ間を移動するのに便利です。このツリービューの中の特定のリーフノードをダブルクリックすると、選択したウィンドウを探して表示し、さらに他のウィンドウの下に部分的もしくは完全に隠れていたウィンドウが一番上に移動します。1番上の2つのリーフノード (Calculation、Errors) は、常に表示されます。これらのノードをダブルクリックすると、計算エディタやエラーウィンドウが、一番上に移動します。テーブルノードの下には、現在利用可能な計算テーブルウィンドウのすべてが一覧表示されます。これらのノードをダブルクリックすると、選択したカスタム計算テーブルが、一番上に移動します。

### 3 カスタム計算の使用

カスタム計算スクリプトエディタの使用準備

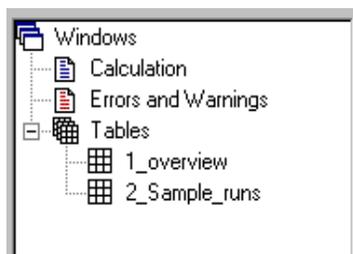


図 14 Windows 選択ツリー

#### 計算ウィンドウ

このウィンドウは、計算スクリプトの編集やデバッグに使われます。このウィンドウのタイトルバーには、読み込まれた計算テンプレートの名前とバージョン（該当する場合）が表示されます。ウィンドウの左の縁には、現在の実行行とブレークポイントのマーカーが表示されます。ウィンドウの下の縁には、カーソルの位置（行と列）、および実行プログレスバーが表示されます。ウィンドウのクライアント領域は、計算スクリプトの編集に使われます。計算スクリプトの行は、エラーが検出されたり、警告が発生したりする場合を除けば、黒で表示されます。エラー行は赤、警告行は青で表示されます。

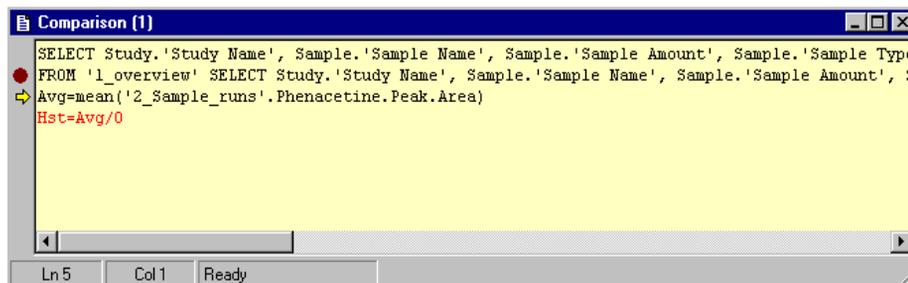


図 15 計算ウィンドウ

## 変数リスト

変数リストは、計算中の現在利用可能な変数の名前と値のリストです。変数リスト中の変数をダブルクリックすると、変数名と値の読み取り専用のコピーを含む、ダイアログがポップアップ表示されます。このダイアログは、長い変数名や値を表示するのに利用できます。また、このダイアログに表示された値は、クリップボードにコピーすることもできます。

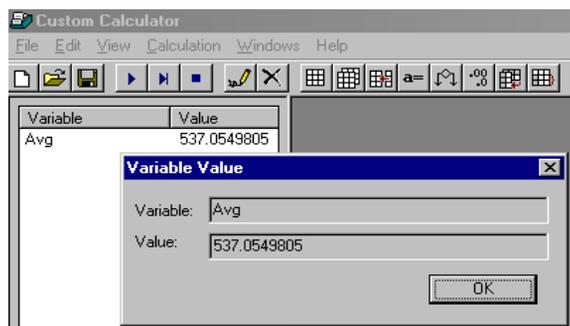


図 16 変数リスト

## エラーおよび警告ウィンドウ

エラーおよび警告ウィンドウは、計算スクリプトの実行によって生じたエラーや警告のすべてに関する詳しい情報を一覧表示します。不具合の発生したスクリプトの行や場所を示す視覚的情報などを表示することにより、エラーの解決に役立ちます。

## カスタム計算スクリプトエディタ

カスタム計算スクリプトエディタは、黄色い計算ウィンドウで、ここで、カスタム計算テンプレートのスクリプト作成が行われます。スクリプトの作成は、カスタム計算ウィザードを使って適切なスクリプトコードを生成するか、もしくは、マクロを作成するときのように、プログラムのコードを直接書くことによって行われます。

### カスタム計算スクリプトウィザードの理解

ウィザードは、必要な計算のためのスクリプトコードの生成を補助するために使われます。計算操作作業のそれぞれに対応するウィザードが存在し、スクリプトの一部を作成するのに使われます。

ウィザードの呼び出しは、ツールバーから、またはテンプレートの行をクリック（マウスを右クリックして、ポップアップメニューから *[Edit Åi 編集 Åj]* を選択する）することにより、行うことができます。この場合、行の内容に応じて対応するウィザードが表示され、この行の内容がウィザードの適切なフィールドに入力されます。

ウィザードは、新しく行を作成したり、テンプレート中の特定の行を編集したりするのに使えます。

#### ウィザードの共通特性

図 17 に示すのは、簡単なテーブルウィザードの例です。ウィザードの左側の部分には、そのウィザードの計算ステートメントの目的を表すシンボルが表示されます。たとえば、このテーブルウィザードの場合、カレントデータセットのデータをテーブルに出力するために使われるということが表現されています。

ウィザードの中央には、生成されるコマンド行の各部分を定義する構文要素が表示されます。これらの構文要素が表示される順序は、後で計算ステートメントに表示される際の順序と同じです。これらの構文要素には、それぞれ、終端名（大きな青字）、説明（小さな黒字）、および、各ステートメントに固有の情報を選択・入力するためのコントロールが含まれています。

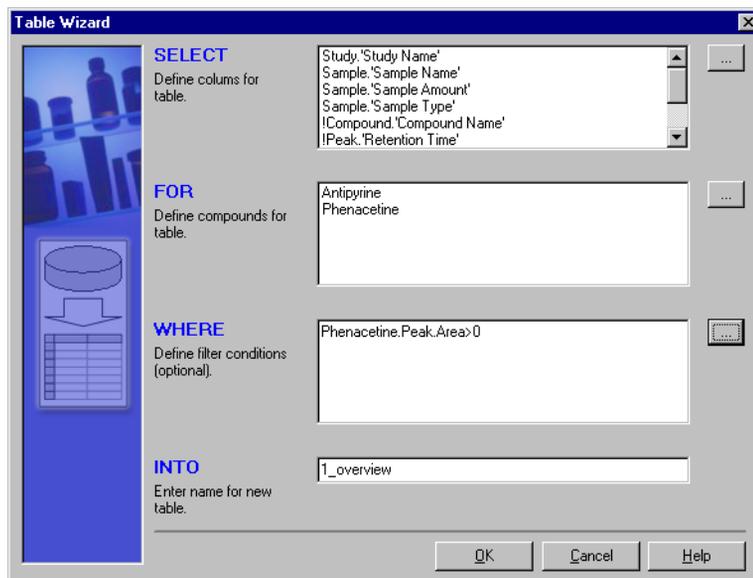


図 17 テーブルウィザード

## 共通のサブウィザード

### 列の選択

図 18 に示すのは、たとえば、テーブルウィザードの「SELECT」関数を参照する際などに、テーブルの列を選択するのに使われるダイアログです。左側のツリービューには、利用可能なテーブルおよびその列のすべてが表示されます。ここから項目を右に移動すると、新しいテーブルが定義されます。選択した列のリストは、ダイアログの右側に配置されます。選択したツリーノードの先頭のアイコンは緑で、選択されていないツリーノードのアイコンは白で表示されます。

### 3 カスタム計算の使用

#### カスタム計算スクリプトエディタ

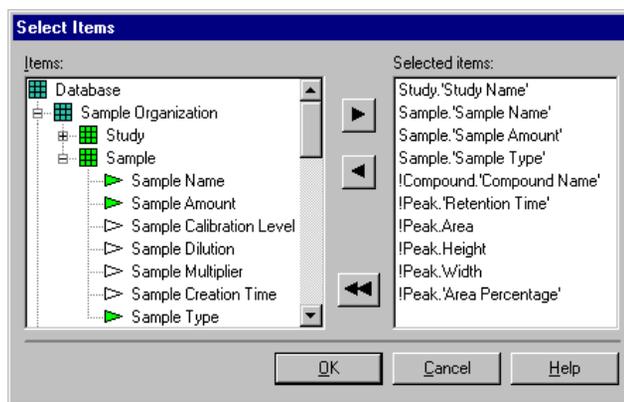


図 18 列選択画面（カスタム計算）

## 式

図 19 に示す式ダイアログは、カスタム計算の中核をなす部分です。式ダイアログを使うと、式や条件の作成や編集を行うことができます。式ダイアログ最上部の編集ボックスには、現在作成中の式が表示されます。このボックスの内容は、[Data Items（データ項目）]や[Functions（関数）]のフレームから項目を選択して、[Add to Expression（式の追加）]ボタンをクリックすることにより、編集できます。また、この編集ボックスには、直接データをキー入力することもできます。右上のチェックマークのアイコン、および、[Info（情報）]の行には、現在作成中の式が、構文的に正しいかが示されます。[Continuous check（継続チェック）]のチェックボックスが選択されていると、これらの表示は、自動的に更新されます。

現在作成中の式が、構文的に正しくない場合、このチェックマークのアイコンは、疑問符に変わります。チェック情報は、編集ボックスの式中の問題の箇所を赤で表示し、問題があることを示唆します。

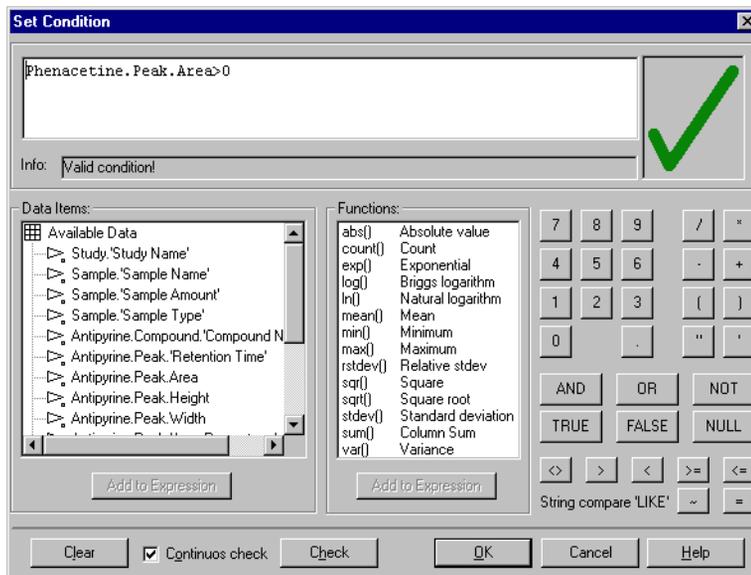


図 19 条件ダイアログの設定

## テーブルウィザード

図 17 に示したテーブルウィザードには、カレントデータセットから列のセットを選択して、それを新しい計算テーブルに保存する機能があります。この機能は、新しい計算テンプレートを作成する第一段階です。まず手始めに、サンプル識別や必要な計算手順に使う列のすべてを 1 つのテーブルにまとめることをお勧めします。

このウィザードは、ユーザーの選択した結果を、以下の例のように、スクリプトウィンドウに書き出します。

```
SELECT Study,'StudyName',Sample.'Sample Name', etc.
FOR "Antipyrine","Phenacteine"
WHERE (Phenacetine.PeakArea>0
INTO "1_overview"
```

### 3 カスタム計算の使用

#### カスタム計算スクリプトエディタ

この例では、「*study*」テーブルからは「*Study name*」列が、「*sample*」テーブルからは「*Sample*」列が選択されています。選択は、「*Antipyrine*」および「*Phenacetine*」という 2 種類の化合物に基づいて行われ、「*Phenacetine*」のピークが検出されたサンプルだけに限定されています。そして、選択の結果は「*1\_overview*」という新しいテーブルに書き込まれます。

#### 列ウィザード

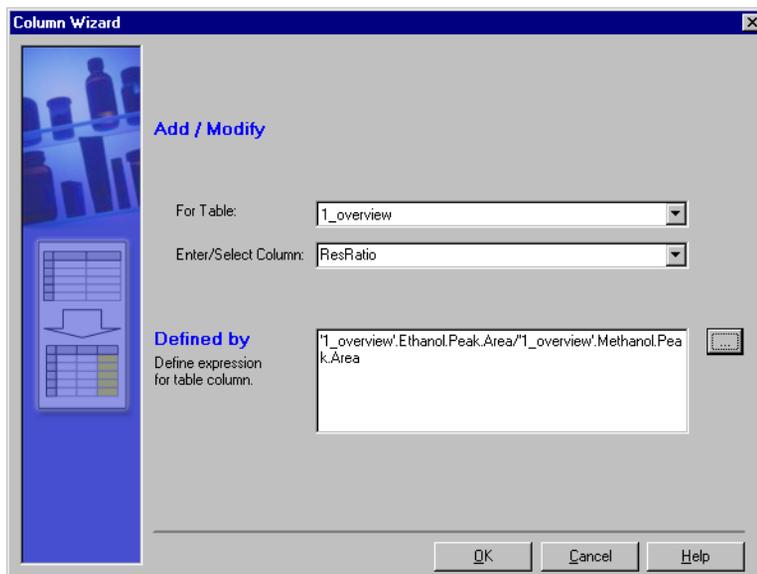


図 20 列ウィザード

列ウィザードを使うと、与えられたテーブルに新しい列を追加して拡張することができます。拡張された列には、図 19 と同じような式ウィザードを使って定義した式に基づく値が含まれます。

図 20 に示す例では、テーブル「*1\_overview*」に、新たに「*ResRatio*」という列が追加されています。この場合、新しい列の内容は、「*Ethanol*」および「*Methanol*」という化合物の面積比によって決まります。

## 変数ウィザード

変数ウィザードは、列ウィザードに似ています。変数ウィザードでは、複数の列の値から数式によって計算した結果を、変数に保存することができます。このような場合、通常、結果は一連の値の評価によって構成されます。

## IF ウィザード

先の例では、与えられた列の値に基づいて新しい値を計算し、それを別の列の新しい値、または単一の変数に代入する方法を示しました。

このような代入を、特定の条件に応じて行う場合には、**IF** ウィザードを利用することができます。

## FORMAT ウィザード

カスタム計算では、数値を表示する際に、小数点以下の桁数をできるだけ使って、もとの値をそのまま表示します。**FORMAT** ウィザードは、単一の値（変数）、特定のテーブルの列、あるいは、複数テーブルの複数の列の書式を設定して、この数値をより見やすくしたり、有効数字だけを表示したりします。数値の書式は、計算自体の精度には影響を与えません。

**FORMAT** ウィザードでは、数値ばかりでなく、文字列、日時、空白セルなどの書式指定も可能です。**FORMAT** ウィザードのオンラインヘルプには、このような拡張書式オプションの例も含まれています。

## TRANSPOSE ウィザード

**TRANSPOSE** ウィザードを使うと、列を行、行を列に変換することによって、既存のテーブルを転置することができます。**TRANSPOSE** ウィザードは、行として与えられた値の統計値を計算する際に便利です。以前の計算結果を利用して、統計値を計算するような場合もあります。ただし、統計計算は列についてのみ可能なので、その前の手順として、転置を行っておく必要があります。

**TRANSPOSE** ウィザードダイアログ（68 ページの [図 21](#)）には、以下のような構文要素が含まれています。

- **[TRANSPOSE]** コンボボックス：転置するテーブルの名前を指定します。注意：選択可能なのは、与えられた計算行で利用可能なテーブル、つまり、すでに生成済みのテーブルに限られます。
- **[BY]** コンボボックス：転置後のテーブルで見出し行として使うテーブルの列を指定します。通常、ここでは、元のテーブルで行を定義している、サンプル名やラン ID の列を指定します。

### 3 カスタム計算の使用 カスタム計算スクリプトエディタ

- ・ [INTO] 編集ボックス：転置後のテーブルの名前を指定します。

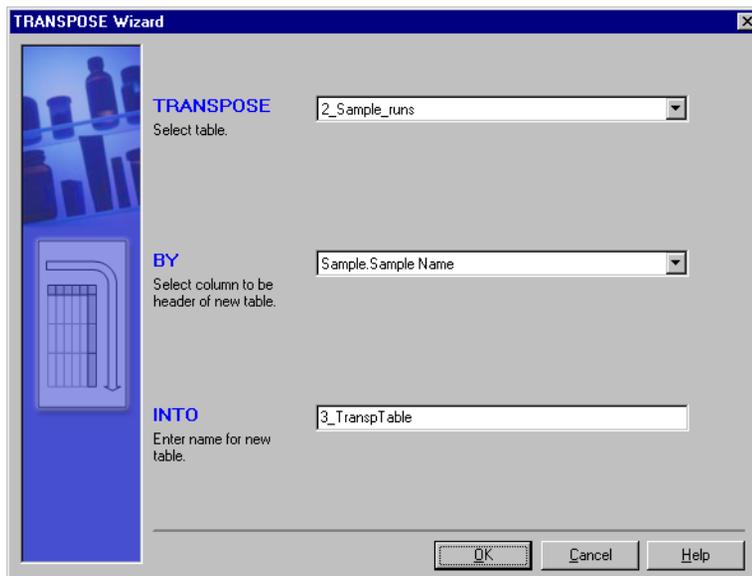


図 21 TRANSPOSE ウィザード

### GROUP ウィザード

テーブルのグループ化は、サンプル全体ではなく、特定のサンプル集合について統計を計算するような場合に便利です。同じ結果は、複数のサブテーブルを定義することによっても実現できますが、GROUP ウィザードを使うと、これをひとつの手順にまとめて実行することができます。

GROUP ウィザードダイアログ（69 ページの式 22）には、以下のような構文要素が含まれています。

- ・ [GROUP] コンボボックス：グループ化したいテーブルの名前を指定します。
- ・ [BY] コンボボックス：グループの識別子を指定します。たとえば、「Sample calibration level」と指定してグループ化すると、異なるグループのサンプルとキャリブレーションを組み合わせることができます。キャリブレーションランも、キャリブレーションレベルでのグループ化が可能です。
- ・ [DO] コンポーネント：与えられたテーブルの列に適用して、新しい名前の列を計算するための、(統計) 関数を指定します。

結果テーブルの名前は、[INTO] ボックスに入力する必要があります。

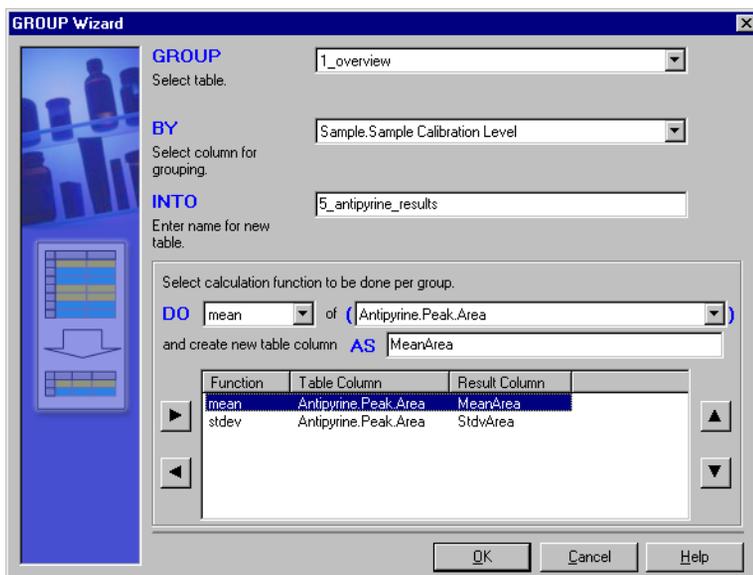


図 22 GROUP ウィザード

## 例：レポート計算スクリプトの作成

以下の章では、簡単なテンプレートの開発方法の例を示します。この例では、ChemStore C/S に付属の「ChemStoredemo.mdb」データベースに対して、「*SSR for quality control*」というクエリーを実行することによって得られるデータを利用しています。計算ウィザードの機能や用法に慣れるために、この章の手順を実行してみることをお勧めします。これは、データセットに対する承認基準の評価の方法の推奨例ではありませんので、ご注意ください。

### 注

ここで説明したスクリプトがうまく機能しない場合には、ChemStation Plus のインストール CD に収録されたサンプルスクリプトのコピーを使用してください。コピーは、サポートフォルダの「**simple\_example.cct**」にあります。サンプルスクリプトをデモデータベースにインポートするには、カスタム計算のインポート機能を使います。

ここで、以下のタスクが与えられたと仮定します。

キャリブレーションランとサンプルランについて、与えられた化合物の面積の相対標準偏差 (RSD) を計算するテンプレートを開発します。計算したサンプルランの相対標準偏差がキャリブレーションランの相対標準偏差より小さい場合には、そのサンプルランに「pass」とマークします。そして、結果をレポートにまとめます。

このタスクを達成するには、以下の 4 段階を経る必要があります。

- 1 タスクに必要な手順を含む計画を設定する。
- 2 その計画にしたがってテンプレートを開発する。これには、各開発手順のテストや修正も含まれます。
- 3 テンプレートを修正する。
- 4 テンプレートをレポートに取り込む。

### 計画の設定

計画を設定するためには、まず、タスクを完全に理解する必要があります。以下のように、タスクを手順に分解して、各手順で達成すべき目標を書き出してみます。

- 1 計算に必要なパラメータ、およびサンプルの同定やレポートに必要なサンプルパラメータのすべてを含むテーブルを作成します。計算には、以下のパラメータが必要です。

- ピーク面積
- キャリブレーションランとサンプルランを識別するためのサンプルタイプ

サンプル識別には、以下のパラメータが必要です。

- サンプル名
- 生データのファイル名

- 2 キャリブレーションレベルごとに相対標準偏差を計算して、新しいテーブルに保存します。
- 3 相対標準偏差の平均を計算して、変数に保存します。
- 4 全サンプルランの面積の平均と、その平均値からの絶対偏差および相対偏差を計算します。この計算は、ランごとに行う必要があります。
- 5 各サンプルの相対偏差が、キャリブレーションランの相対標準偏差の平均より小さいかどうかをチェックして、その結果に応じてサンプルをマークします。

各手順が終わったら、すぐに結果をチェックして、手違いがないかどうか確認してください。結果が予想と異なる場合には、補正処置をとる必要があります。

## テンプレートの開発

### 概要テーブルの作成

最初のテーブルを作成するには、72 ページの [図 23](#) に示すように、テーブルウィザードを使います。「Antipyrine」という化合物の、[Sample Name]、[Sample Calibration level]、[Sample type]、[Acq. Sequence name]、[Raw data file name]、[Peak area] の各列を選んで、「1\_overview」というテーブルに保存します。このように、スクリプトで作成したテーブル名の頭には番号を付けて、スクリプトと結果の対応をわかりやすくしておいた方が良いでしょう。

### 3 カスタム計算の使用 カスタム計算スクリプトエディタ

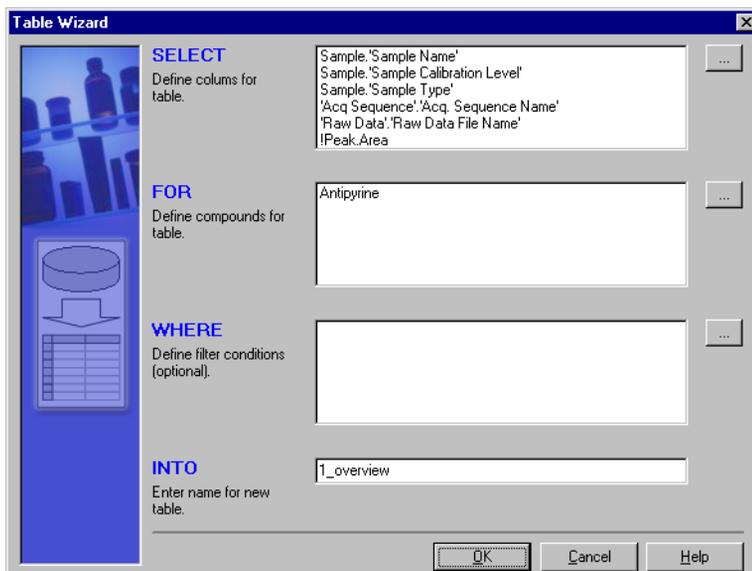


図 23 テーブルウィザード

1_overview					
Sample Name	Calibrator	Sample Type	Acq Sequence Name	Raw Data File Name	Antipyrine Peak Area
calib1	1	Calibration	LINSEQ.S	NEW\00045.D	153.110489
calib1	1	Calibration	LINSEQ.S	NEW\00046.D	151.006012
calib1	1	Calibration	LINSEQ.S	NEW\00047.D	151.757874
calib2	2	Calibration	LINSEQ.S	NEW\00055.D	497.751862
calib2	2	Calibration	LINSEQ.S	NEW\00056.D	496.648102
calib2	2	Calibration	LINSEQ.S	NEW\00057.D	496.732056
calib3	3	Calibration	LINSEQ.S	NEW\00065.D	839.842834
calib3	3	Calibration	LINSEQ.S	NEW\00066.D	838.583191
calib3	3	Calibration	LINSEQ.S	NEW\00067.D	841.310486
sam1	0	Sample	LINSEQ.S	NEW\00081.D	374.544006
sam2	0	Sample	LINSEQ.S	NEW\00082.D	374.5289
sam3	0	Sample	LINSEQ.S	NEW\00083.D	374.48291
sam4	0	Sample	LINSEQ.S	NEW\00084.D	374.128235
sam5	0	Sample	LINSEQ.S	NEW\00085.D	374.773499
sam6	0	Sample	LINSEQ.S	NEW\00086.D	374.385742
sam7	0	Sample	LINSEQ.S	NEW\00087.D	374.245667
sam8	0	Sample	LINSEQ.S	NEW\00088.D	374.140045
sam9	0	Sample	LINSEQ.S	NEW\00089.D	374.328796
sam10	0	Sample	LINSEQ.S	NEW\00090.D	374.229187

図 24 概要テーブル

この手順をテストするには、スクリプトを実行してみて、「Antipyrine」という化合物を含む、サンプル名、キャリブレーションレベル、サンプルタイプ、取込シーケンス名、生データファイル名、および、ピーク面積を、「SSR for quality control」というクエリで取得された全サンプルについて一覧表示されたテーブルが得られることを確かめます（72 ページの図 24 を参照）。

## サブテーブルの作成

次の手順は、サンプルランからキャリブレーションランを分離するための、サブテーブルの作成です。この手順は、サブテーブルウィザードによって行います。サンプルタイプを分離する鍵は、73 ページの図 25 に示すように、サンプルに完全にマッチする WHERE 条件を設定することです。この場合、WHERE 条件の設定ダイアログには、「Calibration」と入力します。この入力は、二重引用符で囲う必要があります。

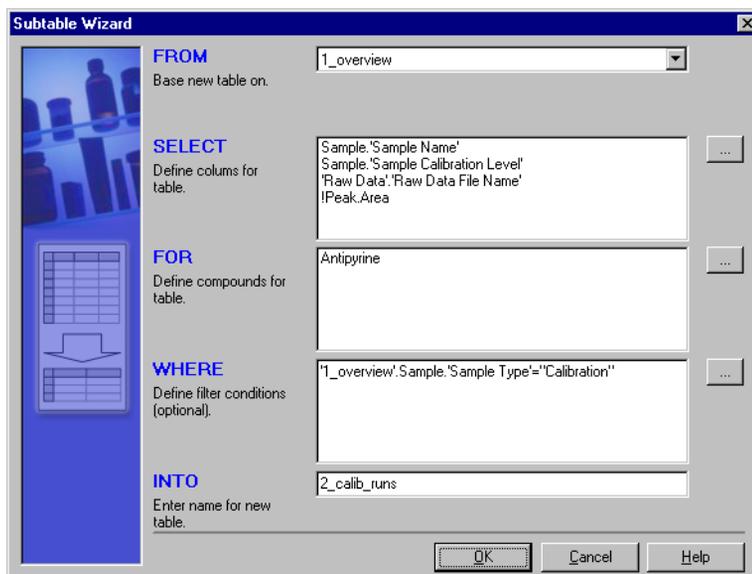
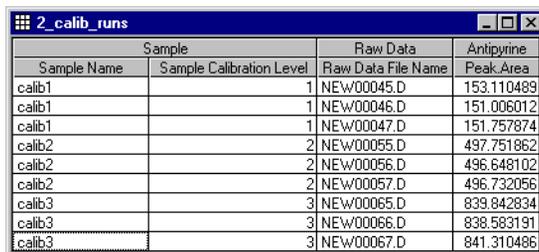


図 25 キャリブレーションランを分離するためのサブテーブルウィザード

このスクリプトを実行すると、キャリブレーションサンプルのすべてが、「Antipyrine」という化合物のキャリブレーションレベルやピーク面積と共に表示されます（74 ページの図 26 を参照）。

### 3 カスタム計算の使用 カスタム計算スクリプトエディタ



Sample		Raw Data	Antipyrine
Sample Name	Sample Calibration Level	Raw Data File Name	Peak Area
calib1	1	NEW00045.D	153.110489
calib1	1	NEW00046.D	151.006012
calib1	1	NEW00047.D	151.757874
calib2	2	NEW00055.D	497.751862
calib2	2	NEW00056.D	496.648102
calib2	2	NEW00057.D	496.732056
calib3	3	NEW00065.D	839.842834
calib3	3	NEW00066.D	838.583191
calib3	3	NEW00067.D	841.310486

図 26 キャリブレーションランのサブテーブル

各キャリブレーションレベルについて、ピーク面積の相対標準偏差を計算します。

相対標準偏差をキャリブレーションレベルごとに計算するには、GROUP ウィザードを使います。「2\_calib\_runs」というテーブルを、キャリブレーションレベルごとにグループ化します。

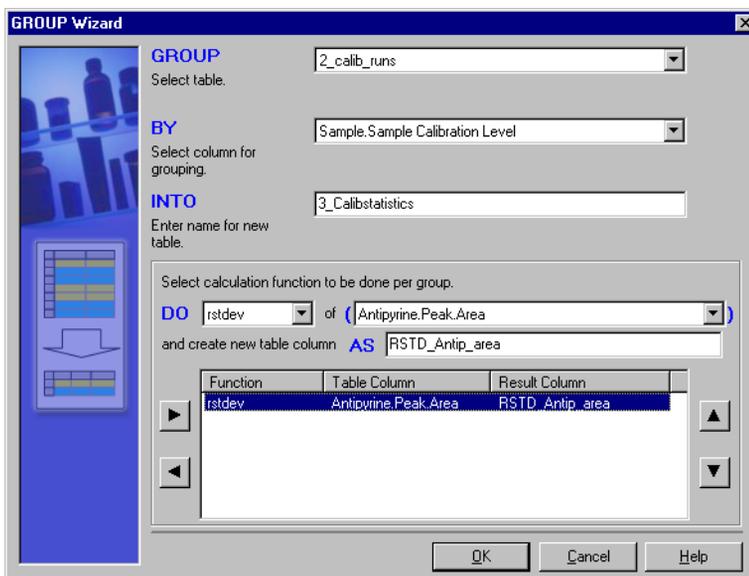


図 27 GROUP ウィザード

レベルごとに結果を生成し、それを新しい「3\_calibstatistics」というテーブルに保存します。グループごとに実行する計算は、[DO/AS]のセクションで指定します（74 ページの図 27）。GROUP ウィザードでは、複数の計算を、複数の化合物に対して同時に指定することができますが、この例では、単純化するため、計算は 1 つだけに限定しています。

このスクリプトを実行すると、キャリブレーションごとの相対標準偏差を含む小さなテーブルが生成されます。

Sample	Sample Calibration Level	RSTD_Antip_area
1	0.701794572842738	
2	0.123622096505617	
3	0.16251329211458	

図 28 「Antipyrine」のピーク面積の相対標準偏差

相対標準偏差の平均を計算するには、変数ウィザードを使って、次の定義ステートメントを指定します。

`Avg(RSTD_Antipyrine)=mean('3_Calibstatistics'.STD_Antip_area')`

この手順をテストするには、計算を実行してから、変数リストの該当する変数に適切な結果が入っていることを確かめます。これで、キャリブレーションランに対する計算は済んだので、次の手順として、サンプルランの結果に対する計算を実行し、最後に、必要な比較を実行します。

### サンプルランに対する相対面積偏差の計算

73 ページの図 25 の「Calibration」というサンプルタイプを「Sample」に、ターゲットテーブル名を「4\_sample\_runs」に置き換えることにより、サンプルランを別のテーブルにリストアップして、サブテーブルを生成します。

次の 2 つの手順では、サンプルテーブルに、全サンプルの平均レスポンスを計算する列（図 29 を参照）と、各レスポンスの平均からの絶対偏差を計算する列の、2 つの列を追加します。これを実現するには、「列の追加」ウィザードを 2 回使います。図 30 に、絶対偏差を計算する「条件設定」ダイアログを示します。

### 3 カスタム計算の使用 カスタム計算スクリプトエディタ

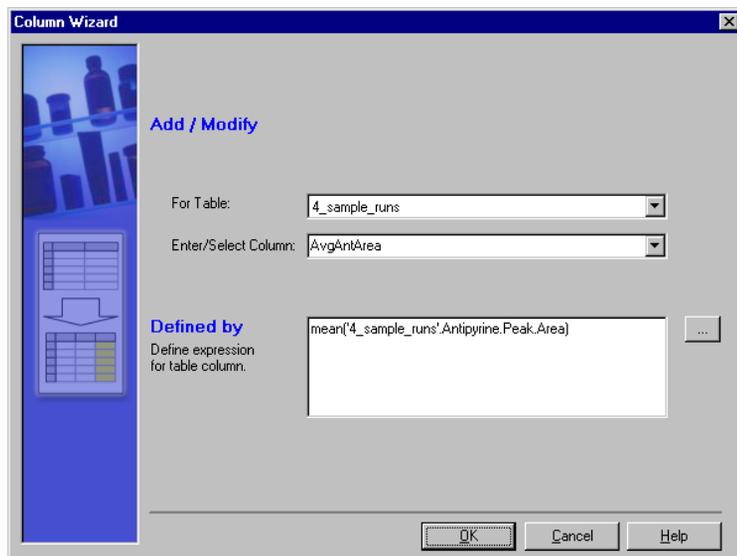


図 29 サンプルランの Antipyrine レスポンス平均化



図 30 Antipyrine 面積の平均値からの絶対偏差

スクリプトを実行した結果は、次のようなサンプルテーブルになります。

Sample	Raw Data	Antipyrine		
Sample Name	Raw Data File Name	Peak Area	AvgAntArea	delta_Ant
sam1	NEW00081.D	374.544006	374.3786987	0.1653
sam2	NEW00082.D	374.5289	374.3786987	0.1502
sam3	NEW00083.D	374.48291	374.3786987	0.1042
sam4	NEW00084.D	374.128235	374.3786987	0.2505
sam5	NEW00085.D	374.773499	374.3786987	0.3948
sam6	NEW00086.D	374.385742	374.3786987	0.0070
sam7	NEW00087.D	374.245667	374.3786987	0.1330
sam8	NEW00088.D	374.140045	374.3786987	0.2387
sam9	NEW00089.D	374.328796	374.3786987	0.0499
sam10	NEW00090.D	374.229187	374.3786987	0.1495

図 31 偏差計算の結果

## チェックとマーク

これで、比較を行う最終結果のテーブルを作成するのに必要な結果が揃いました。そこで、サブテーブルウィザードを使って「4\_sample\_runs」の抜粋を生成し、それを最終的な結果テーブルに保存します。

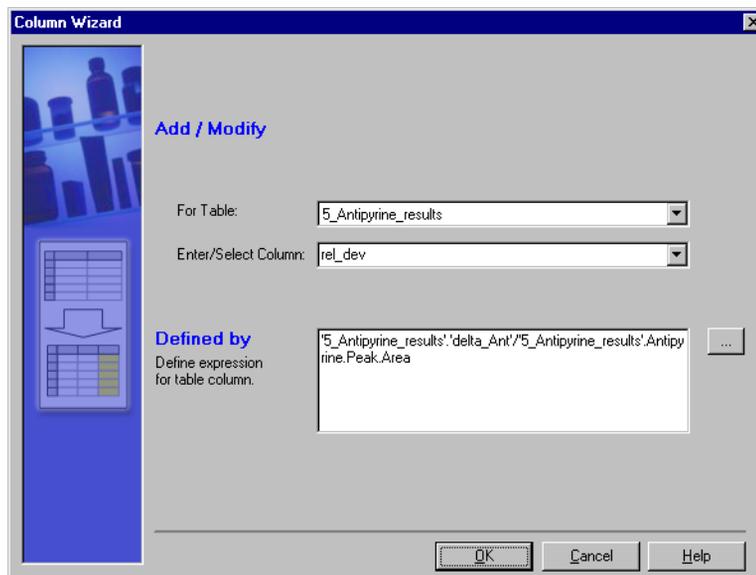


図 32 相対面積偏差の計算

### 3 カスタム計算の使用 カスタム計算スクリプトエディタ

'5\_Antipyrene\_results'. この例では、サンプル名、生データファイル名、ピーク面積、delta\_ant などの列を使います。最終的なレポートに、他のサンプル識別用の列を表示したい場合には、その列もこの結果テーブルに追加する必要があります。

サンプルランとキャリブレーションランを比較する前に、サンプルランの絶対面積偏差を面積で割って、相対偏差を求める必要があります。77 ページの [図 32](#) に示すのは、この計算用の列追加ウィザードです。

相対面積偏差がキャリブレーションランの平均値より小さいランには、「PASS」とマークし、それ以外のランには「FAIL」とマークする必要があります。これは、IF ウィザードで行います。78 ページの [図 33](#) は、この比較を示しています。THEN、ELSE ステートメントは、IF ウィザードの参照ボタンからアクセスできる列ウィザードを使って指定します。79 ページの [図 34](#) は、この手順を示したもので、これにより、結果テーブルに「status」列が追加されます。

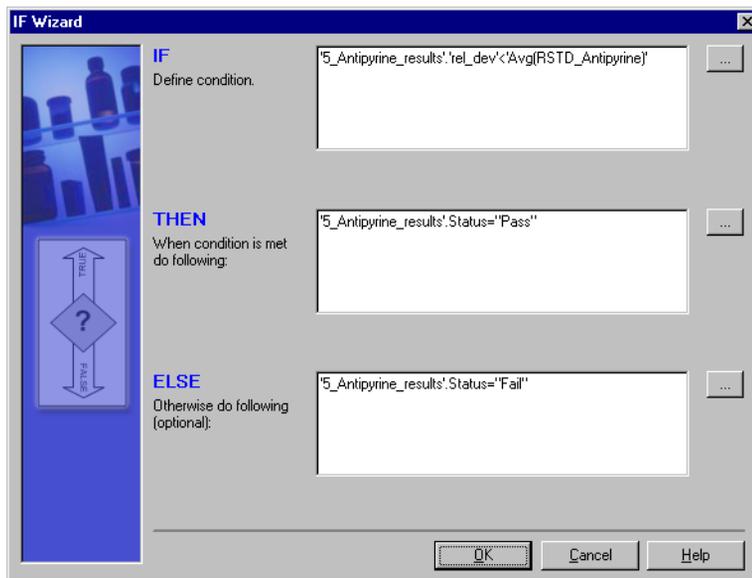


図 33 結果評価用の IF ウィザード

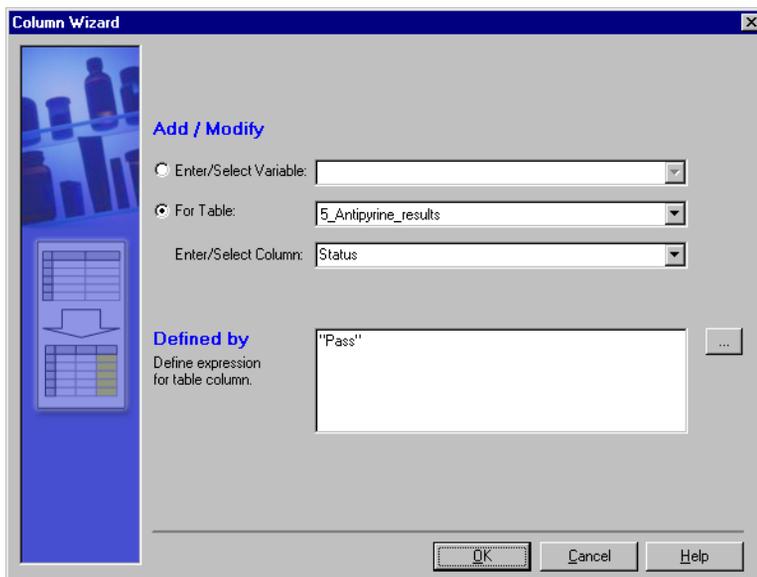


図 34 列ウィザードを利用した THEN ステートメントの定義

この最終ステップをテストするには、スクリプトを実行して、結果テーブルの相対偏差の列のとなりに「PASS」や「FAIL」という新しい列が追加されるか確認します（79 ページの図 35）。

Sample	Raw Data	Antipyrine			
Sample Name	Raw Data File Name	Peak Area	delta_Ant	rel_dev	Status
sam1	NEW/00081.D	374.5440	0.1653	0.0441	Pass
sam2	NEW/00082.D	374.5289	0.1502	0.0401	Pass
sam3	NEW/00083.D	374.4829	0.1042	0.0278	Pass
sam4	NEW/00084.D	374.1282	0.2505	0.0669	Pass
sam5	NEW/00085.D	374.7735	0.3948	0.1053	Pass
sam6	NEW/00086.D	374.3857	0.0070	0.0019	Pass
sam7	NEW/00087.D	374.2457	0.1330	0.0355	Pass
sam8	NEW/00088.D	374.1400	0.2387	0.0638	Pass
sam9	NEW/00089.D	374.3288	0.0499	0.0133	Pass
sam10	NEW/00090.D	374.2292	0.1495	0.0400	Pass

図 35 最終結果テーブル

### 3 カスタム計算の使用 カスタム計算スクリプトエディタ

## テンプレートの修正

### 列の書式設定

最後に列の書式設定を行うこともできます。図 36 に示すように、「4\_sample\_runs」テーブルの「delta\_Ant」列や、「5\_Antipyrine\_results」テーブルの「rel\_dev」列および「Antipyrine.Peak.Area」列などを、FORMAT ウィザードを使って書式設定してみてください。

同じ数値書式で表示したいテーブルの列や変数は、すべて、1 回のテーブルウィザードで設定できます。

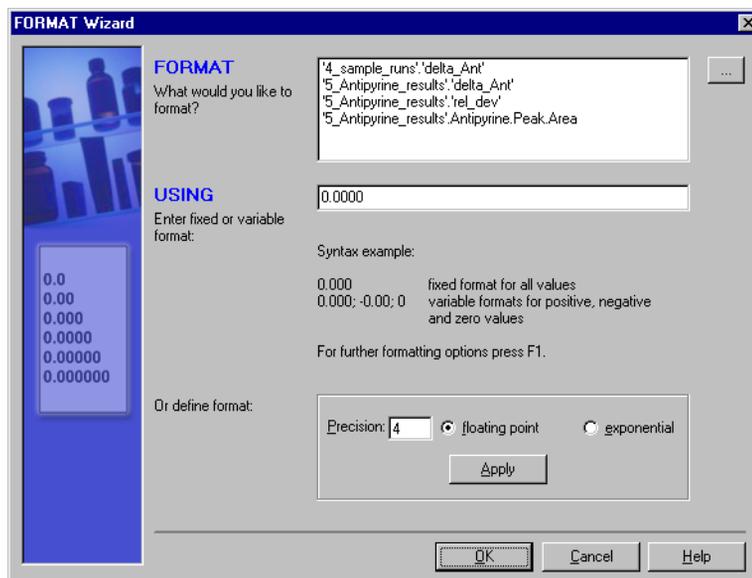


図 36 最終結果テーブルの書式設定

### レポートへのテンプレート埋め込み

計算結果をレポートに埋め込む方法については、106 ページの「計算」のセクションで説明します。

## カスタム計算スクリプトエディタの使用

スクリプトエディタというのは、カスタム計算スクリプト用のテキストエディタのようなものです。熟練したユーザーであれば、ウィザードの助けを借りずに、スクリプトを書くことができます。また、スクリプトエディタでは、ウィザードではできないような構文のスクリプトを作成することもできます。そのようなスクリプト構文を利用すると、スクリプトコードをより簡潔かつ明解にすることができます。

### コマンド

テンプレートのスクリプト作成に使われる最も重要なコマンドについて、以下で簡単に説明します。全コマンドの詳細な説明については、[191 ページの「カスタム計算コマンド」](#)のリファレンスセクションを参照してください。

### データベース列の選択

データベースの列を選択するには、**SELECT** コマンドを使って、必要に応じて結果データセットを小さくするような条件を指定します。

```
SELECT <column(s)> FOR <compound(s)> WHERE <aCondition> INTO
<aTable>
```

<column(s)> には、データベース中の利用可能な任意のテーブルから、1 つまたは複数の列を、名前指定します。

<compound(s)> には、その列の選択対象となる、1 つまたは複数の化合物を、名前指定します。ここでは、ワイルドカードを使うこともできます。詳細については、[191 ページの「カスタム計算コマンド」](#)のリファレンスを参照してください。

<aCondition> はオプションです。選択の条件を指定します。

<aTable> は、選択結果を書き込むテーブルの名前です。

### テーブル列の選択

カスタム計算テーブルから列を選択するには、**FROM** コマンドを使います。

```
FROM <aTable> SELECT <column(s)> FOR <compound(s)> WHERE
<aCondition> INTO <anotherTable>
```

このコマンドは、**SELECT** もしくは **FOR** コマンドで取得した <aTable> からのみ列を取得することを除けば、**SELECT** コマンドと同じです。

### 3 カスタム計算の使用 カスタム計算スクリプトエディタ

#### 意思決定

意思決定は、条件ステートメントを使って行うことができます。この操作には、**IF THEN ELSE** コマンドが使われます。

```
IF <aCondition> THEN <doThis> ELSE <doThat>
```

条件が満たされれば、**THEN** の部分が評価され、満たされなければ、**ELSE** の部分が評価されます。**ELSE** の部分はオプションなので、省略可能です。

#### 注

条件ステートメントは、変数やテーブル列の操作に対してのみ、割り当てることができます。条件ステートメントを、テンプレートスクリプトの条件評価に利用することはできません。

#### テーブル結果の書式設定

カスタム計算テーブルや変数の結果値の書式は、**FORMAT** コマンドを使って設定することができます。

```
FORMAT <column(s)/variable(s)> USING <aFormat>
```

<aFormat> は、書式指定を含む文字列（引用符で囲む）です。詳細については、[191 ページの「カスタム計算コマンド」](#)のリファレンスを参照してください。

#### テーブルの転置

選択した列の各行に対して計算が行われます。結果は新しい列に書き込まれます。列の各行に対して行う必要のある計算（統計計算）もあります。このような計算は、直接行うことはできないので、その行を列に変換する必要があります。そのために使われるのが、**TRANSPOSE** コマンドです。

```
TRANSPOSE <aTable> BY <aColumn> INTO <destinationTable>
```

<aColumn> は、転置操作のキーとして使われます。この列の入力は、<destinationTable> の列見出しとして使われます。列の名前は、一意である必要があるため、<destinationTable> に複数回登場する名前のある列は含まれません。

#### テーブルのグループ化

テーブルのグループ化は、テーブルの内容をまとめて、ある種の統計計算を可能にするための方法の 1 つです。テーブルのグループ化には、**GROUP** コマンドを使います。

GROUP <aTable> BY <aColumn> DO <operation(s)> INTO <destinationTable>

<aTable> がどのようにグループ化されるかは、<aColumn> の値によって決まります。各行グループには、列の値が同一である行が含まれることとなります。各行グループに対して行う操作は、<operation(s)> で指定します。

### コメントの追加

コメント行の先頭には、「#」記号を使います。「#」記号の後に書かれたテキストは、評価されません。

```
# This is a comment!
```

スクリプトの宣言部を処理する後のウィザードとは別に、変数定義に関連するコメントは、変数定義の後に追加されます。

```
strCompound = "Barbital"
# This is the definition for the compound
```

スクリプトの宣言部は、

```
# DECLARATION
```

というコメントで始まり、

```
# IMPLEMENTATION
```

というコメントで終わります。

### 構文

全コマンドやスクリプト各部の詳しい説明については、[191 ページの「カスタム計算コマンド」](#)のリファレンスセクションを参照してください。

以下では、スクリプト中の不要なエラーを避けるため注意事項について説明します。

### 引用符の使用

文字列は、必ず引用符で囲う必要があります。化合物名、サンプル名、列の名前などが文字列になります。また、次のセクションで説明するように、文字列にコマンドを含めることもできます。

文字列の中に引用符を書く場合には、その引用符は二重引用符に変える必要があります。

### 3 カスタム計算の使用 カスタム計算スクリプトエディタ

列の名前の周囲のアポストロフィは、引用符で囲った場合にも、そのまま残す必要があります。

#### 括弧の使用

式中の複数の演算を階層的に並べる際には、括弧を使う必要があります。この場合、括弧内の式が、最初に評価されます。したがって、式中の他の部分より先に評価される必要のある部分は、括弧で囲う必要があります。

#### 大文字小文字の区別

スクリプト（コマンド、列の名前、式）には、通常、大文字小文字の区別はありません。ただし、2 つだけ例外があります。

- 文字列が同一かどうかを比較する演算 (`string1=string2`) は、大文字小文字を区別して比較します。
- スクリプト中の変数名は、最初に定義した通りに（大文字小文字を区別して）書く必要があります。

#### 文字列変数の用法

スクリプトエディタの主な機能は、文字列変数を作成することです。以下では、文字列変数の名前に「*str*」という接頭辞をつけます。文字列変数というのは、引用符で囲まれたテキストの断片です。文字列変数の内容は、以下のようになり、化合物名のような簡単な名前でもよいし、サンプル名の列指定などでもかまいません。

```
strCompound = "Barbital"
```

```
strSmplName = "Sample.'Sample Name'"
```

また、次のように、データベースからの列選択命令のような、スクリプトコード自体の一部を入れることもできます。

```
strSelect = "SELECT Sample.'Sample Name' FOR Barbital INTO aTable"
```

たとえば、次のような、空白を使った列名や、

```
Sample.'Sample Name'
```

特殊文字を使った列名（「`1_overview`」のような）は、

「`'`」（アポストロフィ）で囲む必要があります。

文字列変数を使う目的は、変数を 1 度だけ定義して、スクリプトの残りの部分で何度も繰り返し再利用することにあります。

文字列変数を再利用する際には、接頭辞として「\$」記号を付ける必要があります。

`$strCompound`

`$strSelect`

「\$」記号は、スクリプトインタプリタに対して、この変数の内容を解釈するように指示する働きをします。たとえば、

`SELECT Sample.SampleName FOR Barbital INTO aTable`

のように書くかわりに、次のように書くことができます。

`SELECT Sample.SampleName FOR $strCompound INTO aTable`

インタプリタは、「*\$strCompound*」を「*Barbital*」に置き換えてから `SELECT` コマンドを評価し、データベースの選択を行います。

この方法には、スクリプトの最初で一度だけ化合物名を指定しておけば、後のスクリプトでは、それを参照すればよいという利点があります。こうしておけば、化合物名を変更する必要がある場合にも、スクリプトの最初の変数を変更するだけですみます。

上の例では、さらに、スクリプトのコード用の変数を定義することもできます。

`strSelect = "SELECT Sample.SampleName FOR Barbital INTO aTable"`

あるいは、さらに名前を変数に置き換えることもできます。

`strSelect = "SELECT $strSmplName FOR $strCompound INTO aTable"`

この種の構文を利用する際には、次のように、スクリプトエディタの中に、接頭辞として「\$」記号をつけた文字列変数を書くだけです。

`$strSelect`

スクリプトインタプリタは、まず、サンプル名と化合物名の文字列変数をその内容に置き換え、それから選択自体を実行します。つまり、この場合なら、「*Barbital*」という化合物を含む全サンプルが選ばれます。

すでに見たように、文字列変数には、別の文字列変数（接頭辞として「\$」記号をつけて）を含めることができます。このような文字列は、スクリプトインタプリタがコマンドを評価・実行する際に、文字列の内容と置き換えられます。これは、最後の例のように、コマンドが文字列に含まれていても、

`$strSelect`

### 3 カスタム計算の使用 カスタム計算スクリプトエディタ

あるいは、先の例のように、コマンド自体が入力された場合でも変わりません。

```
SELECT $strSmpName FOR $strCompound INTO aTable
```

もう 1 つ置換の指定に使う特殊な記号があります。面積、高さ、テーリングファクタ、分離能などのピークパラメータは、選択した化合物によって異なります。これらのパラメータは、通常、特定の化合物を指定して選択されます。このように、現在使用中の化合物を表すピークパラメータを選択するために、スクリプトエディタでは、「!」（感嘆符）を使うことができます。

```
SELECT !Peak.Area FOR $strCompound INTO aTable
```

このコマンドを実行すると、「strCompound」で指定された化合物（「Barbital」）のピーク面積だけが選択されます。「!」は、「strCompound」文字列変数で指定された任意の化合物名を表します。

このコマンドは、次のように書くこともできます。

```
SELECT Barbital.Peak.Area FOR $strCompound INTO aTable
```

ただし、これは「Barbital」だけにしか使えません。あるいは、次のように書くこともできます。

```
SELECT $strCompound.Peak.Area FOR $strCompound INTO aTable
```

しかし、「!」の方が簡単です。

#### 例：レポート計算スクリプトの作成

前のセクションで開発した例を思い出してください。この章では、この例を使って、文字列変数を使う利点を示します。これにより、スクリプトを他のデータセットに適用する際の柔軟性を増すことができます。

#### 注

ここで説明したスクリプトがうまく機能しない場合には、ChemStation Plus のインストール CD に収録されたサンプルスクリプトのコピーを使用してください。コピーは、サポートフォルダの「refined\_example.cct」にあります。サンプルスクリプトをデモデータベースにインポートするには、カスタム計算のインポート機能を使います。

まず、文字列変数をいくつか定義します。これは、スクリプトの定義部分の一部になります。そして、この変数で、スクリプトの該当する部分を置き換えます。これは、スクリプトの実装部の一部になります。最後に、スクリプトにコメントを追加します。

## 文字列変数の定義

化合物名用の文字列変数を定義します。これにより、このスクリプトを他の化合物に対して使う必要がある場合に、化合物名を置き換えるのが容易になります。

```
strCompound = "Antipyrine"
```

レスポンス列名用の文字列変数を定義します。これにより、レスポンスインジケータを、面積と高さの間で切り替えることが容易になります。

```
strResponse = "Peak.Area"
```

スクリプトを読み易くするために、選択用の文字列変数も定義します。これにより、選択全体を変更するのが容易になります。接頭辞として「\$」記号をつければ、上で定義した文字列を、この選択用の文字列の一部として使うことも可能です。

```
strSelection="Sample.'Sample Name', Sample.'Sample Calibration Level',  
Sample.'Sample Type', 'Acq Sequence'.!Acq. Sequence Name', 'Raw  
Data'.!Raw Data File Name', !$strResponse"
```

## 文字列変数の適用

最初の SELECT ステートメントは、次のようになります。

```
SELECT $strSelection FOR $strCompound INTO '1_overview'
```

その次の SELECT ステートメントは、次のように短縮されます。

```
FROM '1_overview' SELECT $strSelection FOR $strCompound WHERE  
'1_overview'.Sample.'Sample Type'="Calibration" INTO '2_calib_runs'
```

3つの計算ステートメントは、次のように簡略化されます。

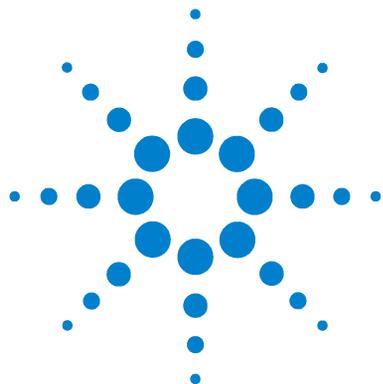
```
GROUP '2_calib_runs' BY 'Sample.Sample Calibration Level' DO rstdev  
($strCompound.$strResponse) AS 'RSTD_Antip_area' INTO '3_Calibstatistics'  
'5_compound_results'.!rel_dev='5_compound_results'.!delta_Ant/'5_compoun  
d_results'.!$strCompound.$strResponse
```

## スクリプトにコメントを付ける

最後の仕上げは、定義部分と実装部分を分離し、定義部のカスタマイズを容易にするような、わかりやすいコメントを追加することです。インストール CD-ROM の「refined\_example.cct」というテンプレートも参照してください。

### 3 カスタム計算の使用

#### カスタム計算スクリプトエディタ



## 4

# レポートテンプレートエディタの使用

レポートテンプレートエディタとは？	90
レポートテンプレートエディタの使用準備	92
レポートテンプレートエディタの使用	95
レポートテンプレートコンポーネントの理解	98
テーブルの理解	109
テンプレートを使ったレポートの生成	125
自動レポート機能の使用	125



#### 4 レポートテンプレートエディタの使用 レポートテンプレートエディタとは？

## レポートテンプレートエディタとは？

レポートテンプレートエディタは、ChemStore C/S のメインダイアログボックスで、レポート名（下図では、「Compound Amounts [(built-in)]」）の左下にあるアイコンをクリックするか、Report（レポート）メニューからメニュー項目を選択することにより、利用することのできるアプリケーションです。

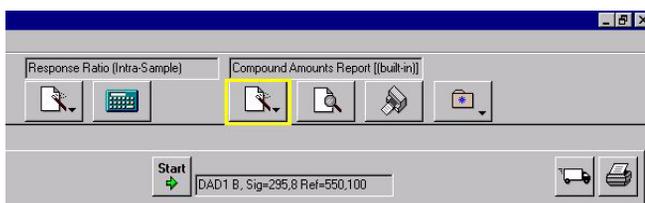


図 37 レポートテンプレートエディタ

レポートテンプレートエディタは、レポートテンプレートの作成や編集に使用します。作成したレポートテンプレートは、レポートの生成に使われます。レポートは、設定やデータが微妙に異なるだけで、同じようなものを何度も使うことが多いので、レポートテンプレートエディタは、簡単に変更できるレポートの雛形を作成できるように、設計されています。

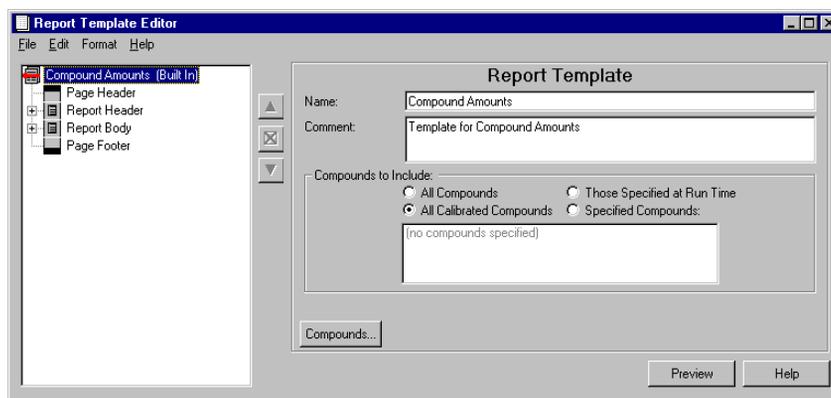


図 38 レポートテンプレートエディタ

レポートテンプレートを作成する際には、レポート各部分の内容、ヘッダーやフッターの位置、使用するテーブルやチャート、使用するフォントなどを指定します。レポートのレイアウトと内容についての決まったデザインを作成して、次に同じようなレポートを作成するときに再利用できるように、保存しておくということです。また、任意のレポートテンプレートのデザインを変更して、別の名前で保存することもできます。

## レポートテンプレートエディタの使用準備

### レポートデータセットの取得

ChemStore C/S では、選択したデータフィールドに対して値を指定したクエリーを作成し、それに基づいてデータベースの問合せを行います。このクエリーで取得したデータレコードのグループのことを、カレントデータセット（または、スナップショット）と呼びます。それから、レポートテンプレートを選択し、それを使ってレポートを生成します。ここで生成したレポートは、テンプレートの構造にしたがって、カレントデータセットに含まれる情報を印刷します。レポートに表示するデータは、さらに限定することもできますが、カレントデータセットに存在しないデータを、カレントデータセットを使って生成したレポートに表示することはできません。

## レポートテンプレートエディタのツリービューの理解

レポートテンプレートエディタでは、種々のオブジェクトを表示するために、ツリービューが使われます。

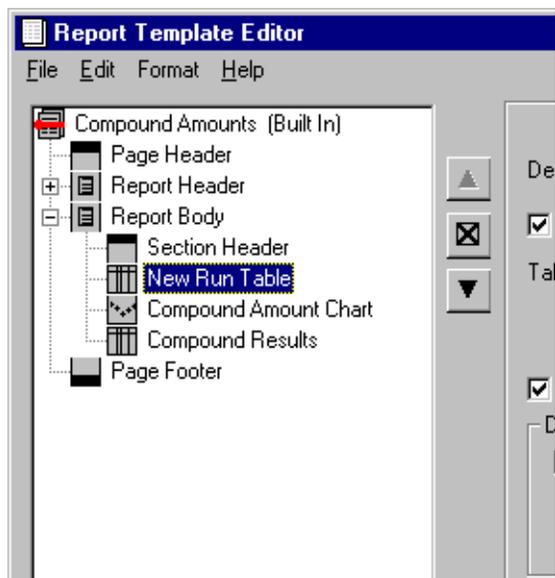


図 39 レポートテンプレートエディタ中のレポートテンプレートのツリービュー

テンプレートを開いたときにツリービューに表示される最初のオブジェクトは、レポートテンプレートそのものです（メインダイアログボックスの左側）。既存のレポートテンプレートを編集しているときは、レポートテンプレートエディタのメインダイアログボックスには、編集中のテンプレートの構造を示すツリービューが表示されます。ツリーの最上部に表示されるのは、そのレポートテンプレートの名前です。テンプレート名のすぐ下には、以下のような、レポートテンプレートのコンポーネントが表示されます。

- ページヘッダーとページフッター
- データセクション
- セクションヘッダー
- テーブル、チャート、計算、クロマトグラム、スペクトルなどのセクション要素

## 4 レポートテンプレートエディタの使用

### レポートテンプレートエディタの使用準備

ツリービュー中で（Windows Explorer のディレクトリ構造のように）展開可能なノードの横には、四角に入ったプラス記号が表示されます。ページヘッダーは、いかなる場合でも展開できないので、プラス記号が表示されることはありません。しかし、データセクションにはテーブルとチャートが含まれているので、データセクション名の横にあるプラス記号をクリックすれば、そのデータセクションを構成する要素を表示することができます。

レポートテンプレートを構成するセクションや要素についての詳細については、98 ページの「レポートテンプレートコンポーネントの理解」を参照してください。

## レポートテンプレートエディタの使用

### レポートセクション作成のためのダイアログボックスの使用

レポートテンプレートエディタのメインダイアログボックスでは、メニュー項目やマウスの右クリックを使うことにより、レポートに表示するセクションや要素を作成することができます。

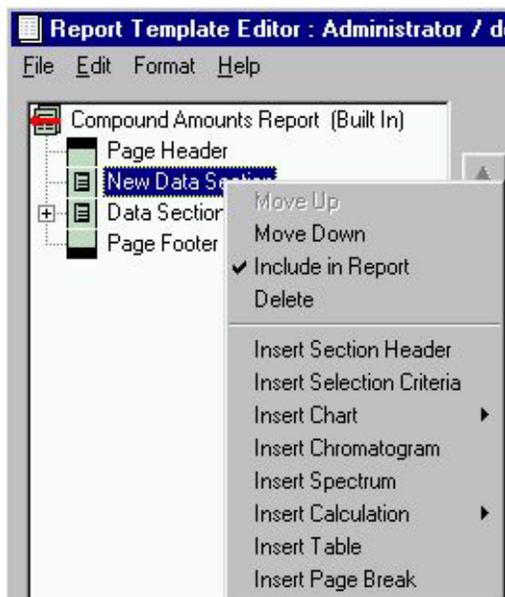


図 40 データセクションの要素作成用メニュー

このダイアログボックスの右側には、編集集中のセクションや要素に関連するパラメータが表示されます。たとえば、ページヘッダーの追加を行う際には、そのヘッダーを各ページに印刷するかどうか、そのヘッダーの周囲に境界線を印刷するかどうか、などを指定するパラメータが、このダイアログボックスの右側に表示されます。

## 4 レポートテンプレートエディタの使用

### レポートテンプレートエディタの使用

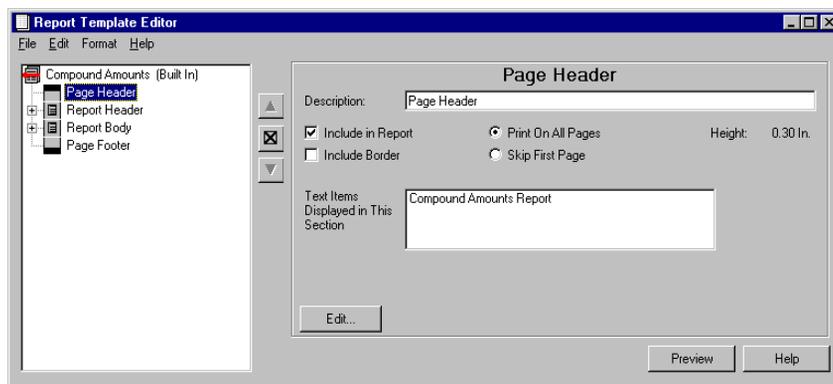


図 41 レポートテンプレートエディタのページヘッダーダイアログボックス

さらに、このダイアログボックスの下部には、各パラメータの編集に使うダイアログボックスを開くためのボタンがあります。ページヘッダーの編集を行う際に、レポートテンプレートエディタのメインダイアログボックスにあるのは、[Edit (編集)] というラベルのボタンだけです。このボタンをクリックすると、ヘッダーの列数・行数、ヘッダーの列・行に印刷するテキストやデータ項目など、ヘッダーに関連するさまざまなパラメータを編集することができます。

テーブルについて設定できるパラメータは、ヘッダーのそれよりも多いので、テーブルの編集を行う際には、レポートテンプレートエディタのメインダイアログボックスの下部には、さらに多くのボタンが表示されます。

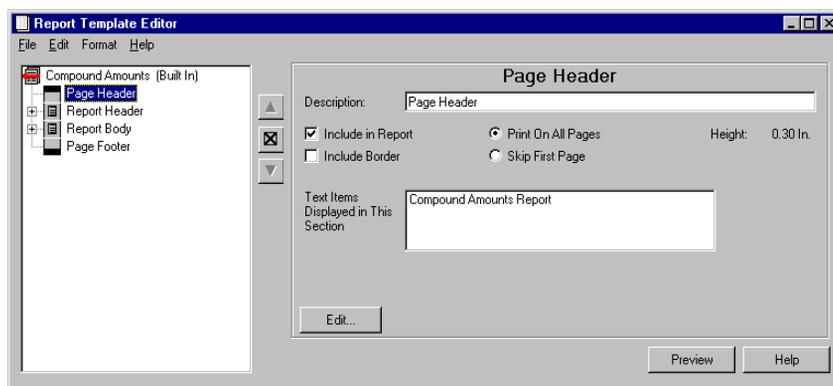


図 42 レポートテンプレートエディタのテーブルダイアログボックス

## テーブルやチャート用のツリービューの使用

ツリービューは、テーブルの列やチャートの軸などの、データフィールドを選択する際にも使われます。データベースのフィールドはレコードの要素であり、そのレコードはデータセットの要素なので、フィールドを選択する際に、ツリービューを利用すると便利です。たとえば、サンプルテーブル用の列を選択する際には、サンプルの構成に関する情報を含むデータセットのツリービューを展開して、そのサンプルに関連するフィールドのすべてを表示します。

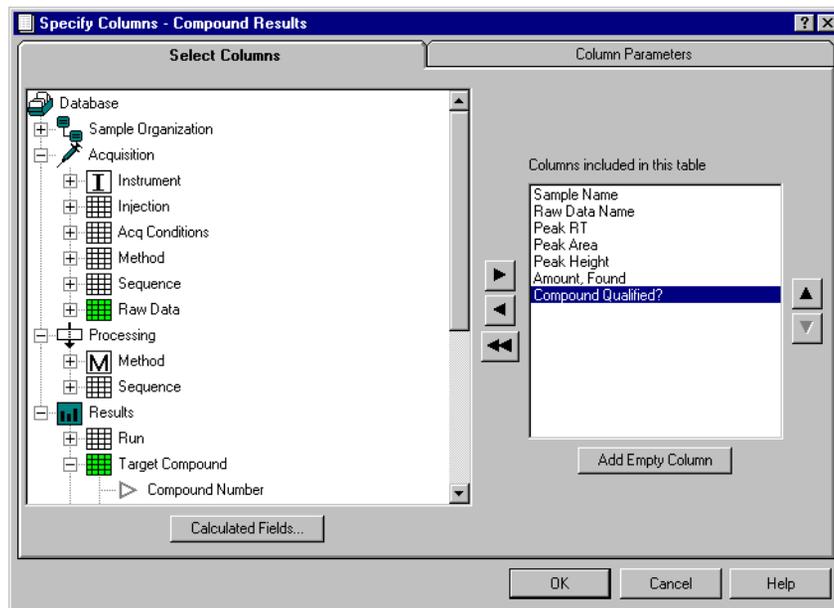


図 43 テーブル設計用のツリービュー

## レポートテンプレートコンポーネントの理解

レポートテンプレートは、次のようなオブジェクトから構成されます。ヘッダー（単数）、フッター（単数）、ページ区切り（複数）、データセクション（複数）。データセクションには、テーブル、計算、クロマトグラム、スペクトル、チャートなどのレポート要素が含まれます。これらのセクションや要素は、わざわざレポートテンプレートから削除しなくても、チェックボックスを使うだけで、生成されるレポートに出力しないようにすることができます。レポートテンプレートの各コンポーネントは、個別に編集することができ、テンプレートで選択した他のコンポーネントに依存しないので、オブジェクトと呼ばれます。

### ページヘッダーとページフッター

レポートテンプレートには、ページヘッダーやページフッターを設定して、レポート名、レポートコメント、ユーザー、時間、ページ、レポート変更日付、レポート変更者などを表示することができます。これらの項目は、それぞれ、ヘッダーの中にある3つの列の1つに配置され、使用中のコンピュータがサポートする任意のフォントやサイズでフォーマットすることができます。また、これらの項目は、それぞれラベルを付けたり、列内で揃えたりすることができます。ヘッダーやフッターには、会社ロゴなどのグラフィックスを配置することもできます。

ヘッダーやフッターの編集は、各項目が、ヘッダー・フッター自体や他の項目と、どういう位置関係にあるかがわかるようなダイアログボックスを使って行います。このダイアログは、ヘッダー・フッターがどのように表示されるかを、編集しながら確認できるように設計されています。

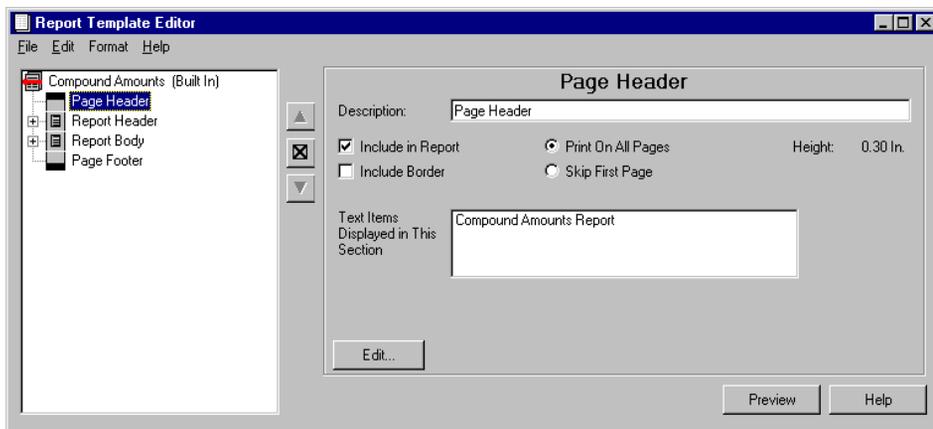


図 44 ヘッダーとフッターの編集

## データセクション

データセクションには、テーブル、計算、チャート、クロマトグラム、スペクトルなどのレポート要素が、単数もしくは複数個含まれています。レポートテンプレートのツリービューでデータセクション名をクリックするとわかるように、データセクションに、直接関連付けられたパラメータはごくわずかです。その中には、(ツリービューに表示される)説明のフィールドや、そのデータセクションをレポートに含むかどうかを指定するチェックボックスなどがあります。このダイアログボックスに表示される **[Repeat (繰り返し)]** というボタンは、繰り返しフィールドの選択に使います。このリピート機能は、主に、生成されたレポートの内部的な構成に影響を与えます。この機能は、さまざまな種類のレポート作成に重要な役割を果たします。

## 4 レポートテンプレートエディタの使用

### レポートテンプレートコンポーネントの理解

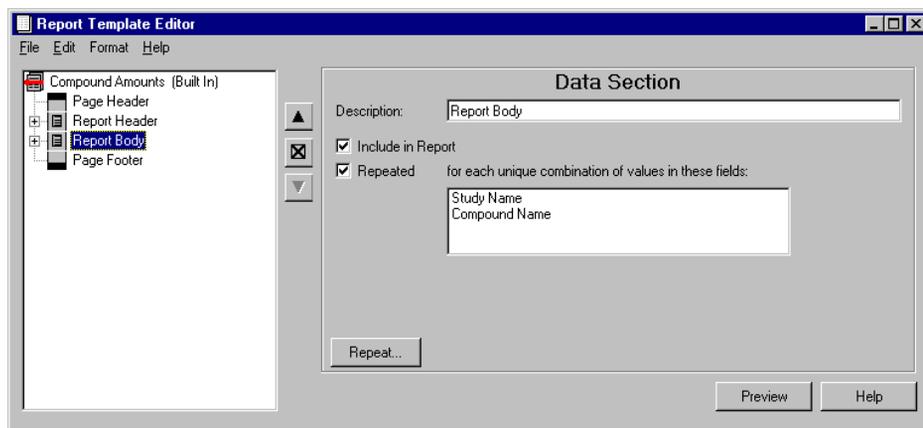


図 45 データセクション

### セクションの繰り返し

データセクションは、選択した複数のフィールドの任意の組み合わせについて、繰り返し出力することができます。たとえば、統計計算を含んだ、シーケンスのサマリレポートを作成したいとします。ただし、このレポートでは、キャリブレーションレベルやサンプルラン全体についての統計値だけでは不十分だとします。このような場合に、各キャリブレーションレベルやサンプルタイプごとにレポートを作成するには、図 45 に示すように、繰り返しのセクションに「Sample calibration level」や「Sample type」の項目を追加する必要があります。

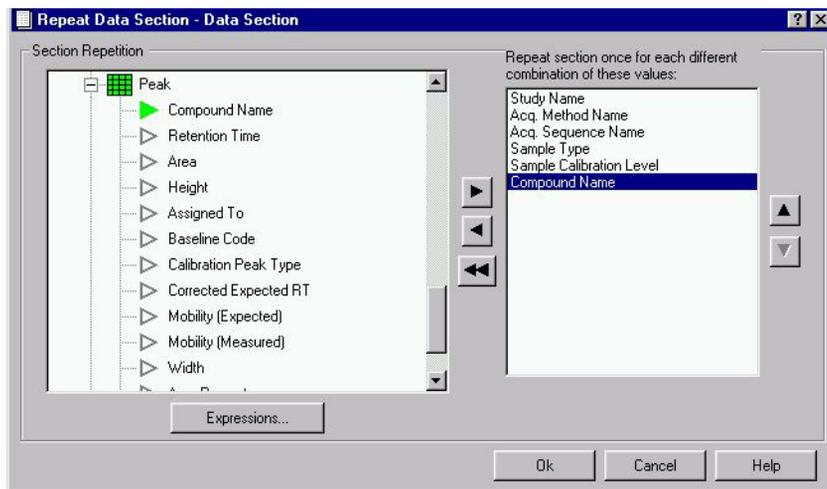


図 46 繰り返し

この例では、シーケンス間やスタディ間の統計値も必要なので、これらの項目も分類項目に追加します。

また、統計値を含むシーケンスの結果を、化合物ごとに別々のテーブルに表したのも必要です。したがって、最後に「Compound name」という項目を追加します。

繰り返しの設定にとっては、各フィールド項目のデータセクション中での順序も重要です。この中で、最も下にある項目が、最初に繰り返しの対象になります。この例の場合、レポートのページは、次のような順序で表示されます。

**Compound A (Cal.level 1)、Compound B (Cal.level 1)、Compound A (Cal.level 2)、Compound B (Cal.level 2)、Compound A (samples)、Compound B (samples)**

Compound A のレポートすべてを連続したページに出力するには、「Compound Name」の項目を、「sample type」の上に移動する必要があります。これにより、印刷の順序は以下のようになります。

**Compound A (Cal.level 1)、Compound A (Cal.level 2)、Compound A (samples)、Compound B (Cal.level 1)、Compound B (Cal.level 2)、Compound B (samples)**

## 4 レポートテンプレートエディタの使用

### レポートテンプレートコンポーネントの理解

#### 計算フィールド

計算フィールドの作成には、カレントデータセットの任意のフィールドを使用することができます。作成した計算フィールドは、テーブルの列やチャート軸としてだけでなく、どのセクションを繰り返すかを決めるのにも使用できます。計算フィールドは、データセットのツリービューの「**Calculated Fields**」という見出しの下にすべてまとめて表示されることを除けば、他のデータフィールドと同じように選択できます。

#### セクションヘッダー

セクションヘッダーは、レポートセクションを識別するために使用されます。セクションヘッダーには、ページヘッダー・フッター項目として挙げた項目（レポート名、レポートコメント、ページなど）に加えて、繰り返しデータ項目として選択したデータを表示することもできます。たとえば、**Sample Type**（サンプルの種類）と **Study Name**（スタディ名）の任意の組み合わせについてセクションを繰り返している場合には、セクションヘッダーに配置できるデータ項目のリストには、この2つのデータ項目も表示されます。データ項目の繰り返しを選択していない場合、セクションヘッダーに配置できるのは、標準ページヘッダーで利用できる項目だけです。

#### セクション要素

##### テーブル

ここでは、8種類のテーブルを作成することができ、選択したテーブルの種類によって、使用できるデータセットのフィールドが決まります。作成できるテーブルの種類には、注入、ラン、シグナル、化合物、ピーク、カラムコンフィギュレーション、装置コンポーネント、監査証跡があります。これらのテーブルの働きについての詳細は、本章の「**テーブルの理解**」を参照してください。

各テーブルについては、以下の設定を行います。

- テーブルの列として使うデータフィールド
- テーブルのデータをグループ化するために使うデータフィールド
- ソートする列（最大3列）

- ・ 各グループもしくはレポート全体に対して生成するサマリ
- ・ 印刷する情報のフォントとサイズ

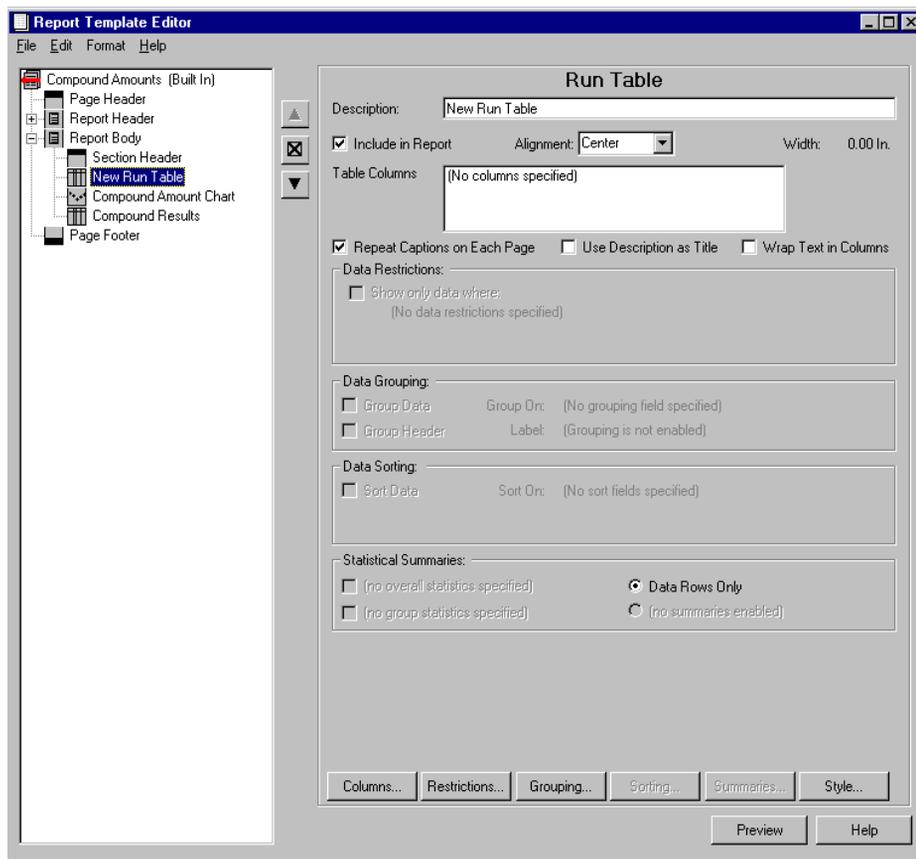


図 47 ランテーブル

テーブルの中に名前や文字列だけで数値を含まない列があると、同一の内容を持つ行が 1 行にまとめられます。

下のピークテーブルの 1 行目と 3 行目のように、テーブルの中に数値を含む列があると、行の内容が同じであっても、テーブルの行がまとめられることはありません。

## 4 レポートテンプレートエディタの使用

### レポートテンプレートコンポーネントの理解

表2 ピークテーブル

スタディ名	サンプル名	注入量	化合物名	予想リテンションタイム
Procaine	Procaine decay	3.0	Amino-Benzoic Acid	1.734
Procaine	Control Procaine	3.0	Amino-Benzoic Acid	1.734
Procaine	Procaine decay	3.0	Amino-Benzoic Acid	1.734

### チャート

レポートで作成できるチャートには、化合物チャートとサンプルチャートの2種類があります。どちらのチャートにも共通な設定として、以下のものがあります。

- X 軸 Y 軸の作成に使うデータフィールド
- チャートの作成に使う実際のデータの範囲、および化合物チャートに含める化合物
- チャートのグループ化に使うデータフィールド
- 曲線の種類、重み付け、原点の扱い、限界、タイトル、スケーリングなどの、付随的なチャートオプション

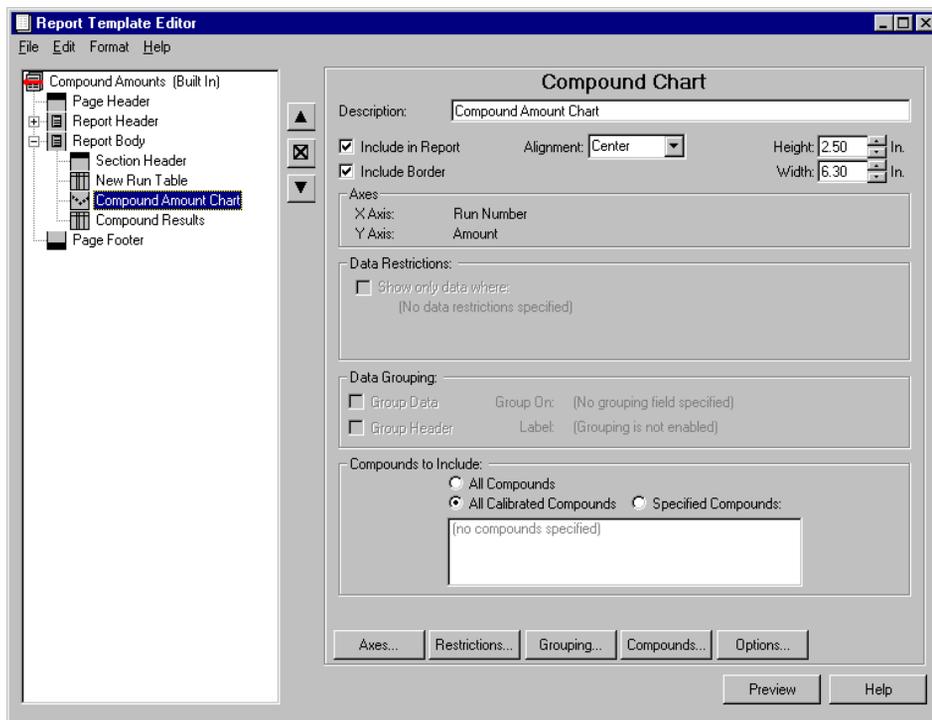


図 48 化合物チャート

サンプルチャートを作成する場合、Y 軸の値は各ランのフィールドから選ぶことができます。この場合、選択された Y 軸フィールドには、ランごとに 1 つのポイントがあるので、これが他のさまざまなランの値と、チャートの X 軸に沿ってプロットされます。

化合物チャートを作成する場合、Y 軸の値は各化合物のフィールドから選ぶことができます。セクションの中に複数の化合物のデータがある場合には、(化合物ごとに 1 つの曲線がある) 単一のチャートに表示することも、複数のチャートと重ねて表示することもできます。

チャートでは、データをグループ化することもできます。データをグループ化すると、チャートには、特定のグループのデータのみが表示されます。したがって、データのグループごとに、チャートが 1 つ印刷されます。

## 4 レポートテンプレートエディタの使用

### レポートテンプレートコンポーネントの理解

#### 計算

レポートには、カスタム計算スクリプトによって生成された結果を表示することもできます。

表示できる結果には、計算テーブル、計算に使われた変数の一覧、計算結果を視覚化した計算チャートなどがあります。

さらに、計算スクリプトそれ自体や、計算エラーや警告の一覧をレポートに追加することもできます。

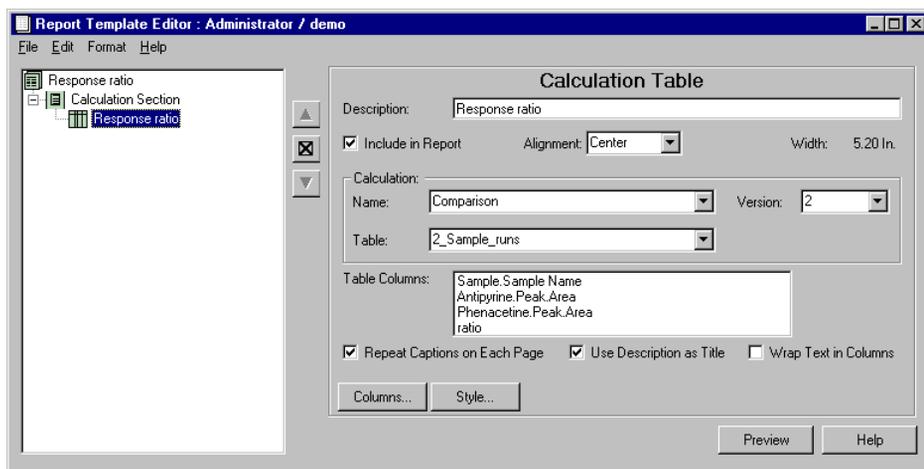


図 49 計算テーブル

各項目について、以下の事項を指定します。

- 計算テンプレートの名前
- 計算テンプレートのバージョン
- 印刷する情報のフォントとサイズ

- ・ 計算テーブルやチャートに対しては、さらに、計算テンプレートによって生成される結果テーブルの名前を選択する必要があります。その計算テーブルは、計算テンプレートやバージョンの選択が済んだ時点で選択可能になります。「**data series** (連続データ)」のダイアログボックスから、表示もしくはプロットする列を選択できるようになります。

## 注意

カスタム計算を含むレポートテンプレートを作成するためには、カレントデータセット上で問題なく実行可能な計算テンプレートが存在することが重要です。

レポートテンプレートと計算テンプレートは、ファイルシステム上にエクスポートされた状態では、ハードリンクしていません。したがって、インポートやエクスポートは、両方のテンプレートに対して個別に行う必要があります。

## クロマトグラム

データベースにクロマトグラムが保存されている場合には、そのクロマトグラムをレポートに追加することができます。クロマトグラムを保存するかどうかは、スタディ転送の設定を行う際に選択することができます。レポートに表示されるクロマトグラムは、単に、**ChemStation** ソフトウェアで生成されたクロマトグラムプロットを、画像メタファイルにしたものすぎません。したがって、**ChemStore** 側でさらにカスタマイズすることはできません。

**ChemStation** システムで、カラーないしグレースケールのプリンタドライバが使われている場合には、**ChemStore** に保存されるクロマトグラムもカラー画像になります。それ以外の場合には、クロマトグラムは白黒画像になります。

一方、クロマトグラムのサイズ、配置、グループ化などは、すべて、レポートテンプレートデザイナーで指定することができます。

## 4 レポートテンプレートエディタの使用

### レポートテンプレートコンポーネントの理解

#### スペクトルプロット

データと一緒にスペクトルが保存されている場合には、そのスペクトルをレポートに追加することができます。スペクトルの保存も、スタディ転送での設定値によって制御されます。スペクトルに対しては、テーブルや一部のチャートと同様に、特定の化合物ないし化合物グループのスペクトルだけを印刷する、というような設定を行うことができます。

ChemStation システムがカラーないしグレースケールのプリンタドライバを使用している場合は、ChemStore に保存されているスペクトルプロットもカラーになります。それ以外の場合には、スペクトルは白黒画像になります。

一方、スペクトルのサイズ、配置、グループ化などは、すべて、レポートテンプレートデザイナーで指定することができます。

## テーブルの理解

ChemStore レポートテンプレートエディタでテーブル構築作業の基礎となるコンセプトは、本ソフトウェアの中でも最も複雑なものです。このセクションでは、ユーザーが自分の選択と表示されるテーブルとの関係を理解できるように、これらのコンセプトについて説明します。

### テーブルのグループ化とサマリ

#### グループ化

テーブル内のデータは、グループ化を行うことにより、特定のフィールドの値が同一の行を、まとめて配置することができます。この場合、グループ自体は、グループ化を制御するフィールドについて並び替えられるのに対し、グループの各行は、ユーザーの選択したソート順にしたがって並び替えられます。テーブルをグループ化すると、そのグループ項目は、列としてテーブル追加しなくても、保存することができます。テーブル列を設定してから、すでに列として設定されたフィールドを使ってグループ化を設定しようとすると、データの重複を知らせるメッセージボックスが表示されます。

たとえば、スタディ名についてテーブルの行をグループ化すれば、同一のスタディのデータがすべてまとめて表示されるようにすることができます。この場合、スタディ名はグループ項目なので各グループの先頭に表示され、グループの各データはユーザーが指定した順で並び替えられます。スタディ名を列として設定して、一番目の並び替え項目に指定しても、これと同じようになりますが、スタディ名でグループ化すると、テーブルにさらに列を追加するスペースを作ることができます。

## 4 レポートテンプレートエディタの使用 テーブルの理解

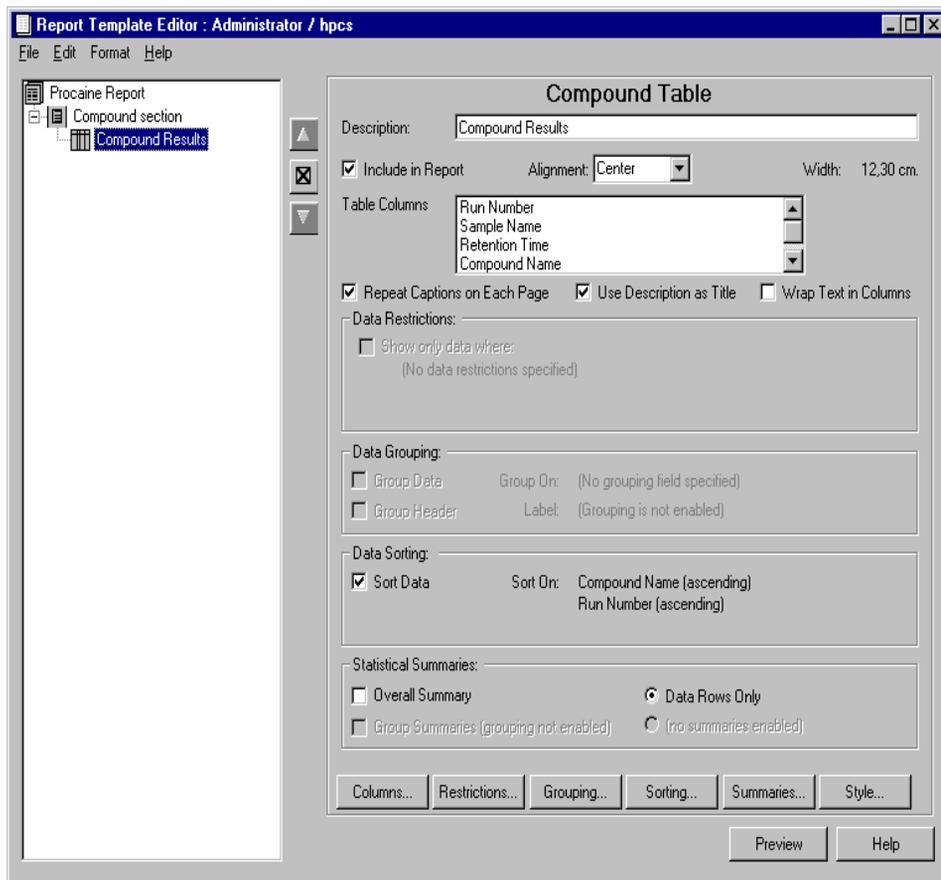


図 50 化合物テーブル

### 統計値

テーブルサマリを使うと、統計値を印刷することができます。テーブルサマリとしては、全体のサマリやグループサマリ（グループ化のデータ項目が指定されている場合）を指定することができます。テーブルサマリは、平均値、標準偏差、最小値、最大値など、最高 7 行までの統計情報から構成されます。全体のサマリやグループサマリに追加する列は、個々に指定することができます。

## テーブルの種類を理解

### テーブル要素間の関係

テーブル要素間の関係は、たとえ小さなデータベースであっても、大変複雑です。下図は、ある小さなデータベース内のテーブル要素の、相関関係の例を示したものです。

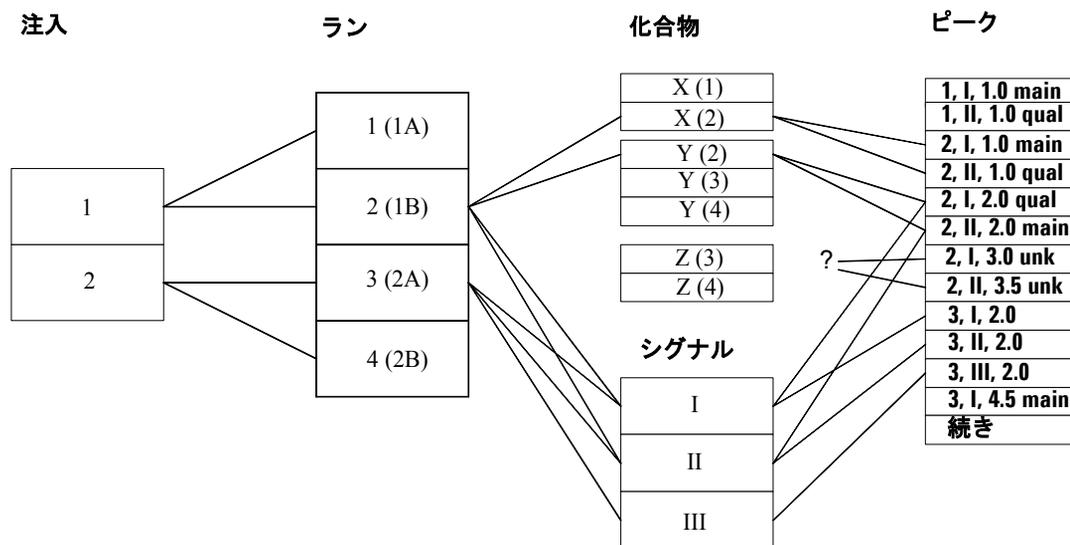


図 51 テーブル要素間の関係

上図の、注入、ラン、化合物、シグナル、およびピークの関係は、以下の通りです。

- このデータベースには、2つの異なる注入データが保存されています。この2つの注入は、それぞれ2回ずつ分析されたので、ランは合計で4つあります。
- 1回目の注入で取り込まれたシグナル（クロマトグラム）は、IおよびIIです（たとえば、2つの異なる検出器、または複数チャンネル検出器の2つの異なるチャンネルからのシグナル）。2回目の注入で取り込まれたシグナルは、3つ（I、II、III）です。

## 4 レポートテンプレートエディタの使用

### テーブルの理解

- ラン 1 で検出されたのは、化合物 X だけですが、ラン 2 では、化合物 X および Y が検出されました。ラン 3 と 4 では、ともに、化合物 Y および Z が検出されました。
- ラン 2 のシグナル I の結果には、1.0 分、2.0 分、および、3.0 分のところにピークがあります。ラン 2 のシグナル II には、1.0 分、2.0 分、および、3.5 分のところにピークがあります。
- シグナル I は、化合物 X を定量するために使われたので、ピーク (2,I,1.0) は「メイン」ピークとして同定されます。シグナル II にも、化合物 X と関連付けられた同じ時間のピークがありますが、こちらはメインピークではありません。
- ラン 2 にも、化合物 Y に関連付けられたピークが 2 つあり、ここでは、シグナル II がメインピークに指定されています。

ラン 2 の 3.0 分と 3.5 分のところにあるピークは、どの化合物にも関連付けられていないことに注意してください。

次に、この例を使って、注入、ラン、シグナル、化合物、およびピークの各テーブルについて説明します。

### 注入テーブル

注入テーブルに含めることができるのは、注入ごとに 1 つの値を持つフィールド (列) だけです (注入日時、使用装置名、バイアル番号、データファイル名など)。111 ページの [図 51](#) に示す注入のデータモデルは、実際には、[図 52](#) のように単純化することができます。

### Injections

1
2

図 52 注入テーブルのデータモデル

通常、レポートの注入テーブルの行数は、たとえば、113 ページの表 3 のように、スナップショットデータベースの 1 注入につき 1 行（この例では、全部で 2 行）だけになります。

表 3 レポートのテーブル例

注入日時	装置	オペレータ	バイアル番号
1977 年 4 月 1 日 08:00	LC System A	Fred	10
1977 年 4 月 1 日 08:20	LC System A	Fred	33

以下のような場合には、これより行数が少なくなることもあります。

- 繰り返しのセクションにある注入テーブルでは、繰り返しに該当する繰り返しフィールドの値に関連する行のみが表示されます。たとえば、上の例で化合物名について繰り返すセクションを設定した場合、その繰り返しは 3 回 (X、Y、Z) になります。1 回目の繰り返しでは、注入テーブルには、注入 I だけが表示されます（化合物は X が検出されるのは、最初の注入に基づくランであるため）。「Y」についての繰り返しでは、注入 I と II が、「Z」についての繰り返しでは、注入 II の行だけが、注入テーブルに表示されます。
- テーブル要素のデータに対して、何らかの制限が指定されている場合、その規準に一致しない行はテーブルから除外されます。
- テーブルの中に、数値や日時の列がない場合、他と重複しない行だけがテーブルに表示されます。たとえば、上の例で、「装置」および「オペレータ」以外の列がなかったとすると、2 つの行は同じ内容になるので、1 つの行として表示されます。

## 4 レポートテンプレートエディタの使用

### テーブルの理解

#### ランテーブル

ランテーブルに含めることができるのは、注入ごともしくはランごとに 1 つの値を持つフィールドだけです（スタディ名、カスタムフィールド値、処理メソッド名など）。111 ページの図 51 のランテーブルのデータモデルを単純化すると、図 53 のようになります。

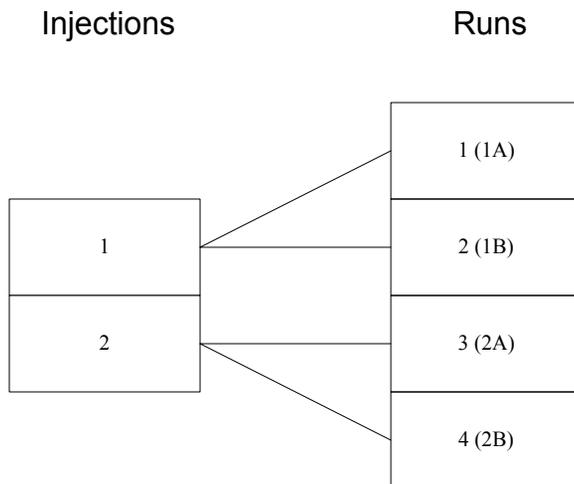


図 53 ランテーブルのフィールド

通常、レポートのランテーブルの行数は、表 4 のように、スナップショットデータベースのラン 1 つにつき 1 行（この場合は、全部で 4 行）だけになります。

表 4 レポートのテーブル例

ラン番号	注入日時	バイアル	ランバージョン	承認	患者コード
1	1977 年 4 月 1 日 08:00	10	2	保留	PKH9653
2	1977 年 4 月 1 日 08:00	10	1	承認	PKH9653

表 4 レポートのテーブル例 (続き)

3	1977年4月1日 08:20	33	2	保留	PKH9004
4	1977年4月1日 08:20	33	1	承認	PKH9004

注入テーブルと同様、以下のような場合には、行数が少なくなることもあります。

- テーブルが繰り返しセクションにある場合
- テーブル要素に対して、データ制限を指定した場合
- 数値や日時の列が存在せず、同一の行が存在する場合。たとえば、上の例で、「承認」もしくは「患者コード」のどちらか片方の列だけしかなかったとすると、このランテーブルの行は、2行だけになります。けれども、「承認」および「患者コード」の両方の列を含んでいるとすると、この2つの列について一意なデータの組み合わせは4つあるので、このランテーブルの行は4行のままです。

### シグナルテーブル

シグナルテーブルに含めることができるのは、注入、ラン、シグナルごとに1つの値を持つフィールドだけです (シグナルの説明、開始時間、終了時間、種類など)。シグナルテーブルからアクセスすることのできるデータのモデルは、[図 54](#) のようになります。

## 4 レポートテンプレートエディタの使用 テーブルの理解

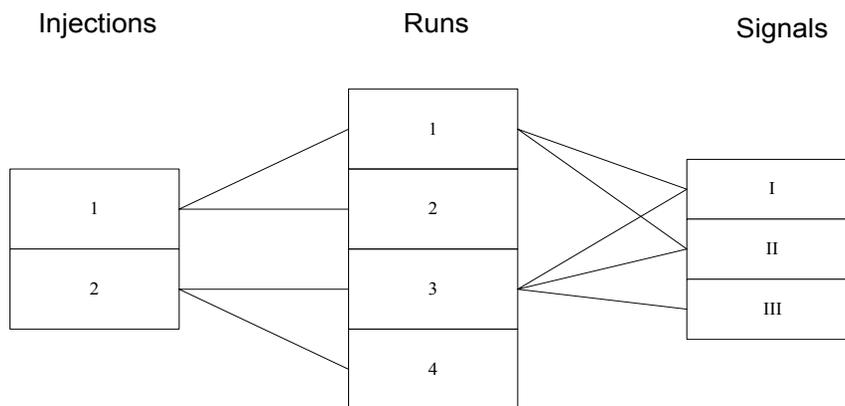


図 54 シグナルテーブルのデータモデル

通常、レポートのシグナルテーブルの行数は、ランとシグナルの組み合わせのそれぞれにつき 1 行だけです。上の例の場合には、ラン 1 およびラン 2 に関連付けられたシグナルが 2 つ、ラン 3 およびラン 4 に関連付けられたシグナルが 3 つあるので、シグナルテーブルの行数は、117 ページの表 5 のように、全部で 10 行にもなります。

表 5 レポートのテーブル例

ラン番号	バージョン	バイアル	チャンネル
1	1	10	DAD1 A, Sig=282,8 Ref=550,100
1	1	10	DAD1 B, Sig=295,8 Ref=550,100
2	2	10	DAD1 A, Sig=282,8 Ref=550,100
2	2	10	DAD1 B, Sig=295,8 Ref=550,100
3	1	33	DAD1 A, Sig=282,8 Ref=550,100
3	1	33	DAD1 B, Sig=295,8 Ref=550,100
3	1	33	DAD1 C, Sig=320,8 Ref=550,100
4	2	33	DAD1 A, Sig=282,8 Ref=550,100
4	2	33	DAD1 B, Sig=295,8 Ref=550,100
4	2	33	DAD1 C, Sig=320,8 Ref=550,100

注入テーブルやランテーブルと同様、以下のような場合には、行数が少なくなることもあります。

- テーブルが繰り返しセクションにある場合
- テーブル要素に対して、データ制限を指定した場合
- 数値や日時の列が存在せず、同一の行が存在する場合。たとえば、上の例で、「チャンネル」以外の列がなかったとすると、このシグナルテーブルに含まれる行は、3 行だけになります（3 つのシグナルのそれぞれにつき 1 行）。

## 4 レポートテンプレートエディタの使用 テーブルの理解

### 化合物テーブル

化合物には、注入、ラン、化合物ごとに 1 つの値を持つフィールドを含めることができます。また、ピークフィールドやシグナルフィールドを追加することもできます。ただし、化合物テーブルに追加できるピーク値は、各化合物の結果のメインピークのものだけです。つまり、上の例で言えば、ラン 1 の化合物 X には、ピーク値（たとえば面積）を 1 つしか関連付けられないこととなります。同様に、化合物テーブルに追加できるシグナルの情報も、その化合物のメインピークに関するシグナルのものだけです。

この例のデータモデルは、[図 55](#) のようになります。図に表示されているピークはメインピークだけであり、そのメインピークと化合物およびシグナルの間には、一対一の対応があることに注意してください。

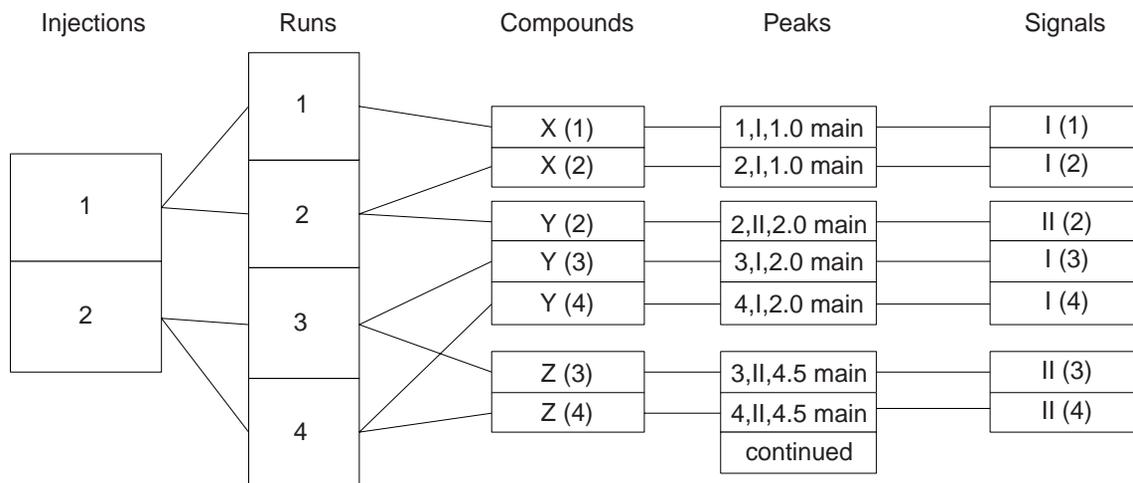


図 55 化合物テーブルのデータモデル

この例では、化合物は 3 種類です。3 つの異なる化合物がありますが、4 回のランについて得られた化合物の結果は（複数のランで検出された化合物もあるため）7 セットあるので、化合物テーブルは、119 ページの表 6 のように、最高 7 行のテーブルになります。

表 6 化合物結果テーブルの例

ラン番号	バイアル	化合物名	化合物量	リテンションタイム	チャンネル
1	10	X	n.nnn	1.000	DAD1 A, ...
2	10	X	n.nnn	1.000	DAD1 A, ...
2	10	Y	n.nnn	2.000	DAD1 B, ...
3	33	Y	n.nnn	2.000	DAD1 A, ...
3	33	Z	n.nnn	4.500	DAD1 B, ...
4	33	Y	n.nnn	2.000	DAD1A, ...
4	33	Z	n.nnn	4.500	DAD1 B, ...

他のテーブルと同様に、以下のような場合には、行数が少なくなることもあります。

- テーブルが繰り返しセクションにある場合
- テーブル要素に対して、データ制限を指定した場合
- 数値や日時の列が存在せず、同一の行が存在する場合。たとえば、化合物名の列のみを含めた場合、テーブルは 3 行のみになります (3 つの化合物のそれぞれにつき 1 行)。

### ピークテーブル

ピークテーブルに含めることができるフィールドも、化合物テーブルと同様、注入、ラン、化合物、シグナル、ピークのそれぞれについて 1 つの値を持つフィールドだけです。化合物テーブルと違って、ピークテーブルのピークは、各化合物のメインピークだけには制限されません。つまり、ピークテーブルには、どの化合物にも関連付けられていないピークも含めた、あらゆるピークの情報を表示することができます。この例のピークテーブルのデータモデルは、120 ページの [図 56](#) のようになります。

#### 4 レポートテンプレートエディタの使用 テーブルの理解

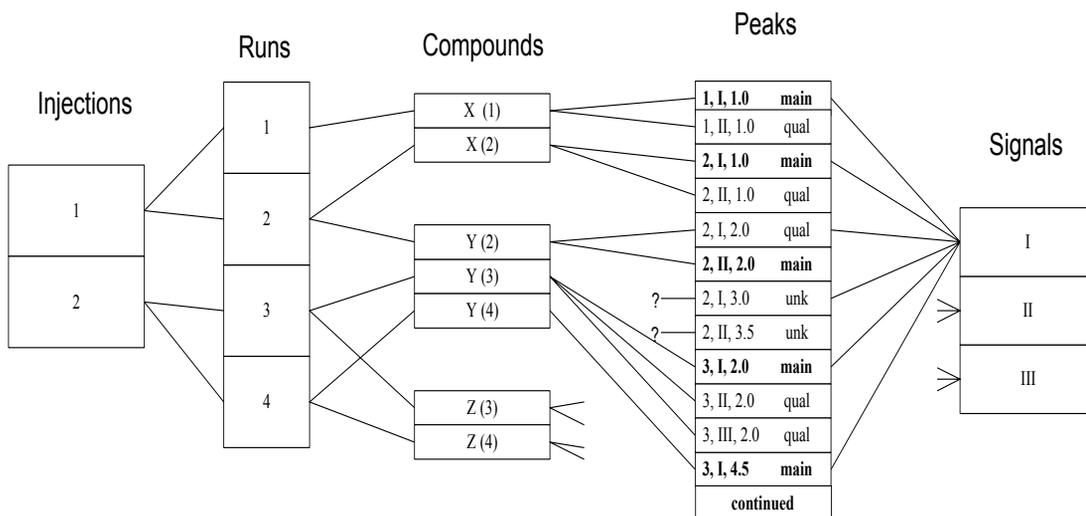


図 56 ピークテーブルのデータモデル

この例の場合、最初の 2 つのランについてだけでも、8 つのピークエントリがあります。

ここで、先の化合物テーブルの例と同一の列を持つピークテーブルを作成したとすると、そのピークテーブルは、下の表のように、さらに多くの行を持つこととなります。この表では、化合物に関連付けられていないピークについては、化合物量が表示されず、化合物名に「Unknown n」と表示されていることに注意してください。

表 7 レポートのピークテーブル例

ラン番号	バイアル	化合物名	化合物量	リテンション タイム	チャンネル
1	10	X	n.nnn	1.000	DAD1 A, ...
1	10	X	n.nnn	1.000	DAD1 B, ...
2	10	X	n.nnn	1.000	DAD1 A, ...
2	10	X	n.nnn	1.000	DAD1 B, ...
2	10	Y	n.nnn	2.000	DAD1 A, ...
2	10	Y	n.nnn	2.000	DAD1 B, ...
2	10	<Unknown 1>		3.000	DAD1 A, ...
2	10	<Unknown 2>		3.500	DAD1 B, ...
3	33	Y	n.nnn	2.000	DAD1 A, ...
3	33	Y	n.nnn	2.000	DAD1 B, ...
3	33	Y	n.nnn	2.000	DAD1 C, ...

他のテーブルと同様に、以下のような場合には、行数が少なくなることもあります。

- テーブルが繰り返しセクションにある場合
- テーブル要素に対して、データ制限を指定した場合
- 数値や日時の列が存在せず、同一の行が存在する場合。たとえば、上の例で、「化合物名」の列だけしかなかったとすると、ピークテーブルは（化合物 X、Y、Z、Unknown 1、Unknown 2 の）5 行になります。

**注意**

データが複数チャンネルから収集されている場合、ピークテーブルは、データベース中の他のテーブルよりも多くのエントリを持つ可能性があります。このため、かなりの量のリソース（コンピュータの処理時間やプリンタ用紙！）を消費する可能性があります。

## 4 レポートテンプレートエディタの使用

### テーブルの理解

#### 装置コンポーネントテーブル

装置コンポーネントテーブルには、ラン、注入、装置コンポーネントごとに 1 つの値を持つ列を含めることができます。ランは、それぞれ特定の装置に関連付けられており、各装置は、複数のコンポーネントに関連付けられている可能性があります。

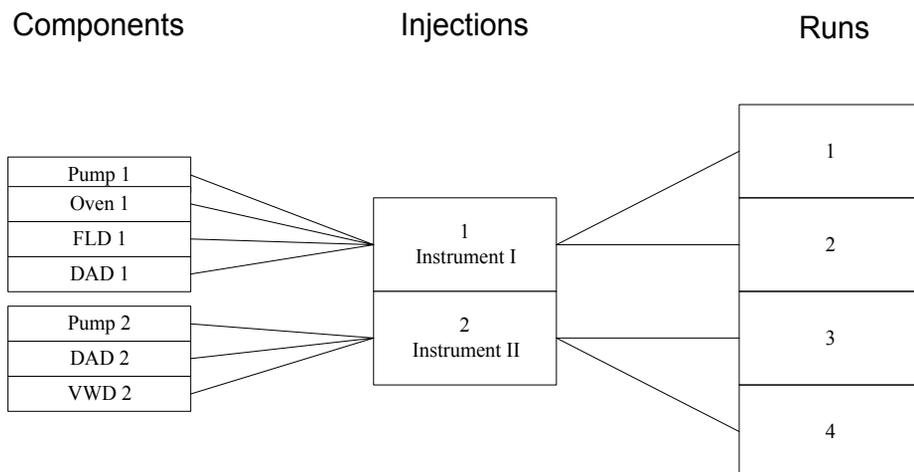


図 57 装置コンポーネントテーブルのデータモデル

ここまで扱ってきた例のデータが、上のようなダイアグラムで表されるとすると、装置コンポーネントテーブルは、123 ページの表 8 のように、最高 14 行になります（注入 1 のラン 1 と 2 では、装置 I の 4 つのコンポーネントが使われ、ラン 3 と 4 には、装置 II の 3 つのコンポーネントが使われているため）。

表 8 装置コンポーネントテーブルの例

コンポーネント名	注入番号	ラン番号
ポンプ 1	1	1
オープン 1	1	1
FLD 1	1	1
DAD1	1	1
ポンプ 1	1	2
オープン 1	1	2
FLD 1	1	2
DAD 1	1	2
ポンプ 2	2	3
DAD 2	2	3
VWD 2	2	3
ポンプ 2	2	4
DAD 2	2	4
VWD 2	2	4

他のテーブルと同様、装置コンポーネントテーブルの行数も、先に述べた 3 つの要因のいずれかによって少なくなることがあります。

### カラムコンフィグレーションテーブル

カラムコンフィグレーションテーブルは、装置コンポーネント情報がカラムコンフィグレーション情報に置き換わった以外は、装置コンポーネントテーブルとまったく同じように機能します（各注入が複数のカラムコンフィグレーションのエントリに関連付けられます）。したがって、このテーブルに含めることができる列は、注入、ラン、カラムコンフィグレーションフィールドだけです。

## 4 レポートテンプレートエディタの使用 テーブルの理解

### 監査証跡テーブル

監査証跡テーブルには、注入、ラン、監査証跡エントリごとに 1 つの値を持つ列を含めることができます。監査証跡テーブルのランエントリは、それぞれ、複数の監査証跡エントリ（承認ステータスやカスタムフィールド値の変更ごとに 1 エントリ）に関連付けられています。

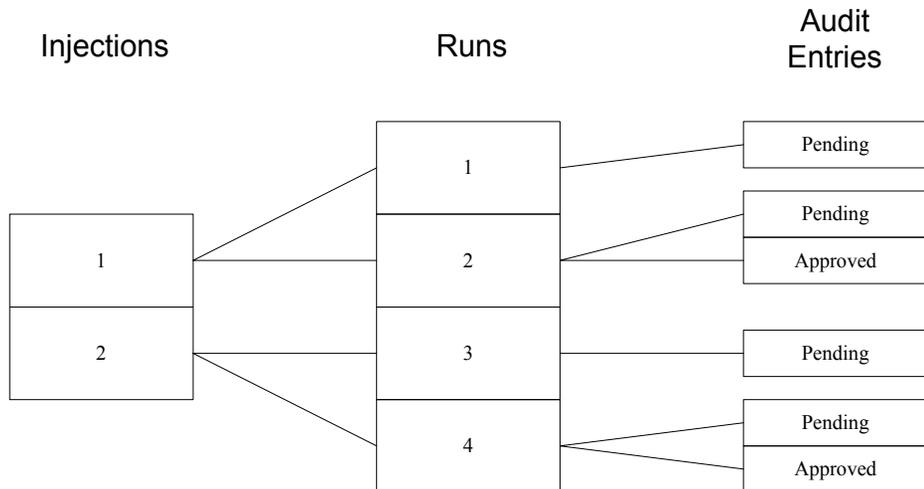


図 58 監査証跡テーブルのデータモデル

表 9 監査証跡テーブルの例

注入番号	ラン番号	承認ステータス	監査時刻
1	1	保留	1977 年 4 月 1 日 08:10
1	2	保留	1977 年 4 月 2 日 10:15:00
1	2	承認	1977 年 4 月 2 日 14:30
2	3	保留	1977 年 4 月 1 日 08:30
2	4	保留	1977 年 4 月 2 日 10:20
2	4	承認	1977 年 4 月 2 日 14:30

## テンプレートを使ったレポートの生成

レポートテンプレートの編集が一通り済んだら、テンプレートによって作成されるレポートのプレビューを行うことができます。テンプレートを変更する必要がある場合は、レポートテンプレートエディタを終了させることなく、変更を行うことができます。テンプレートに問題がないことを確認したら、レポートの印刷に移ることができます。

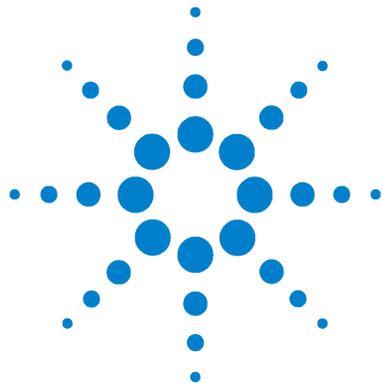
印刷の際には、ChemStore C/S アプリケーションでクエリーを指定することにより、レポートに含める分析結果セットを選択し、さらに使用するレポートテンプレートを選択します。

## 自動レポート機能の使用

ChemStore C/S では、シーケンス終了時に、自動的にレポートを出力することができます。シーケンスの終了時に、現在のシーケンスの結果をもとにして、シーケンスサマリレポートを生成することができます。このレポートは、ChemStore C/S への DDE (Microsoft dynamic data exchange) リンクを経由して初期化されます。このポストシーケンスレポートの名前と種類は、ChemStation の [Method and Run Control View (メソッド & ランコントロールビュー)] の ChemStore メニューにある、[Preferences (設定)] ダイアログボックスを使って設定することができます。ポストシーケンスレポートについては、利用可能な ChemStore C/S レポート (標準テンプレートおよびカスタマイズしたテンプレート) から選択することができます。

## 4 レポートテンプレートエディタの使用

### テーブルの理解



## 5 データセキュリティ

はじめに	128
ユーザーの設定と管理	131
組織情報の設定	135
ChemStore C/S 要素の設定と管理	138
アドミンクライアント上でのアーカイブとデアーカイブの管理	155
監査証跡	159
電子メール通知	161
印刷ファイルのバリデーションとセキュリティ	165



## はじめに

データのセキュリティとインテグリティは、GLP (Good Laboratory Practice) や cGMP (current Good Manufacturing Practice) などの規制の下で作業を行なう分析ラボでは、重要な関心事の 1 つです。

### 注

GLP/GMP 規則に明示的に準拠するソフトウェアが必要な場合は、お近くの Agilent Technologies の販売店で Security Pack G2183AA を入手し、ChemStore C/S に、追加してください。

このようなニーズを満たすため、ChemStore C/S では、以下のような機能を提供しています。

- ChemStore C/S へのログオンはパスワードで保護されており、ChemStore C/S の起動時には、有効なパスワードを入力する必要があります。データベースに変更を及ぼすような作業の多くでも、ユーザー ID とパスワードの入力を必要とします。
- ChemStore C/S では、権限のないユーザーに、レポートレイアウトの定義やデータベースからのランの削除などの管理機能を実行させないようにするために、ユーザー許可システムを採用しています。これは、ユーザープロファイルによって特定されます。ユーザープロファイルは、あらかじめ定義されたものをそのまま使ってもよいし、ユーザーごとにカスタマイズすることもできます。
- ChemStore C/S では、保存された分析結果は保護されており、変更することはできません。ユーザーが変更できるのは、カスタムフィールド、またはレコードの承認ステータスだけです。行った変更は、すべて監査証跡に記録されます。
- ChemStore C/S のクライアント / サーバーバージョンには、プロジェクト完了時にデータをアーカイブし、後でレビューの必要があるときに復元できる、アーカイブ機能が用意されています。
- ChemStore C/S では、データの転送状況を追跡するために、以下のイベントを監査証跡に記録しています。
  - データベースへの追加 (分析のラン)
  - カスタムフィールドの変更
  - ランの承認ステータスの変更

- バッチへの追加もしくはバッチからの削除
- ランのアーカイブステータスの変更
- ChemStation および ChemStore では、権限のないユーザーによる改竄を防ぐために、動作中のセッションをロックできるようになっています。セッションのロックには、現在のユーザーもしくは管理者のユーザー ID とパスワードを入力してセッションを解除するプライベートロックと、任意の有効なユーザー ID とパスワードの組み合わせで解除できるノンプライベートロックがあります。

## セキュリティ

ChemStore C/S では、不正なアクセスやデータベースの使用を防ぐために、2レベルのセキュリティを用意しています。一番目のセキュリティレベルはパスワード保護で、権限のない不正なアクセスを防ぎます。二番目のセキュリティレベルはユーザー許可によるもので、利用できる機能を権限のあるユーザーに限定します。パスワードやユーザー許可は、全システム共通ではなく、ChemStore C/S の各データベースに対して個別に設定されます。

### パスワード保護

ChemStore C/S はパスワードで保護されています。ChemStore C/S を起動するには、有効なパスワードを入力する必要があります。ChemStore C/S 内で、ユーザー許可に加えてパスワードの認証が必要な作業は、これ以外にも以下のようなものがあります。

- 別のユーザーへの変更
- パスワードの変更
- カスタムフィールドの編集
- アーカイブ済みランのリオープン
- ランの削除
- ランのアーカイブとデアーカイブ
- ランの承認と却下

#### 注

セキュリティ上の理由から、ChemStore C/S のインストールが済んだら、デフォルトのユーザーパスワードを変更することをお勧めします。詳細については、『ChemStore C/S インストールガイド』の「サーバー - デフォルトパスワードの変更」を参照してください。

## パスワードの設定

パスワードの有効性と寿命について、さまざまな条件を設定することができます。これらの条件値は、管理者が設定できます。

<b>最小文字数</b>	これは、パスワードとして認められる最小の長さ（文字数）を表します。最小文字数より短いパスワードは無効であり、ChemStore C/S に入力を拒否されます。最小文字数のデフォルトは、8 文字です。
<b>パスワードの有効期限</b>	パスワードの有効期限は、パスワードが効力を維持する期間（日数）を表します。指定された期限を過ぎると、そのパスワードは無効になるので、新しいパスワードを用意する必要があります。有効期限のデフォルトは 90 日間です。
<b>パスワード再利用周期</b>	パスワード再利用周期は、何回違うパスワードを使ったら、元のパスワードを再利用できるかという、その最小回数を表します。デフォルト値は 12 で、この場合、ユーザーは、最低でも 12 回はパスワードを変更しないと、元のパスワードを再利用できないということを意味します。
<b>許容再試行回数</b>	許容再試行回数は、ユーザーが何回続けて入力に失敗すると、ChemStore C/S から入力を拒否されるかという回数を表します。デフォルト値は 3 です。この最高再試行回数を越えると、入力したパスワードは無効になります。

## ユーザーの設定と管理

ChemStore C/S の機能の多くは、ユーザー許可セットを適用することによって、権限のないユーザーが変更できないようにします。ChemStore C/S では、特定のタスクを実行するための許可が、ユーザー単位で与えられます。各ユーザーには、ラボやユーザーの業務上の必要性に応じて、それぞれ異なる許可セットを割り当てることができます。

ChemStore C/S のユーザーは、ChemStore C/S に、ユーザーログオン名、ユーザー表示名（監査証跡やレポートなどに表示される）、パスワード、および許可セットが登録されています。許可セットは、そのユーザーが利用できる ChemStore C/S の機能を特定します。

新たに ChemStore C/S ユーザーを設定できるのは、管理者などの適切な許可を持つユーザーだけです。新規ユーザーが簡単にユーザー許可設定を行えるように、以下の 4 種類の標準ユーザープロファイルが用意されています。

**オペレータ** オペレータというのは、最も基本的な権限だけを持つユーザーです。オペレータは、データベースからデータを取得することはできますが、ChemStore C/S の設定を変更する許可はありません。

**許可**：バッチの作成のみ

**ケミスト** ケミストは、取得したデータの承認ステータスを変更したり、カスタムフィールドの値を変更したりすることができます。さらに、ケミストは、ユーザーインターフェイスの設定を保存することができ、クライアント / サーバーバージョンでは、ファイルのアーカイブ / デアーカイブや取得を行うことができます。

**許可**：ランのアーカイブ / デアーカイブ、第一レベルの承認、バッチの作成、クエリー、アドバンスフィルタ、計算テンプレート、レポートテンプレートなどの作成 / 編集、列 / 式の定義、設定の編集 / 保存

## 5 データセキュリティ ユーザーの設定と管理

**ラボマネージャ** ラボマネージャは、ケミストの全権限に加えて、スタディおよびカスタムフィールドの作成や変更を行うことができます。ラボマネージャは、ランに対して第二レベルの承認を行ったり、データ再読み込み設定を変更したりすることもできます。さらに、ラボマネージャは、自分以外のユーザーに対して ChemStore C/S 設定を割り当てたり、ランを削除したりする権限も持っています。

**許可**：次を除くあらゆる権限。すなわち、アドミンクライアントテストモード（診断やメンテナンスのための特殊なモード）、データベースサーバーの管理、ユーザーの管理（132 ページの表 10 を参照）、ユーザーへのスタディ割り当て、承認設定の指定、データベースの移行、スタンドアロンデータベースの圧縮。

**管理者** 管理者は、ラボマネージャの全権限に加えて、ユーザー管理、ユーザーへのスタディ割り当て、さらにクライアント/サーバーバージョンでは、ChemStore C/S サーバーの管理、データベースの移行権限も有します。

**許可**：すべて（132 ページの表 10 を参照）。

ユーザー設定では、この 4 種類の標準ユーザープロファイルのどれかを使って行ってもよいし、許可を個々に追加・削除することによって、各ユーザーの許可セットをカスタマイズすることもできます。表 10 に示すのは、これらのテンプレートに含まれる許可の一覧です。

### 注

Security Pack がインストールされている場合、スプーラの一時停止、スプールジョブの削除、データベース選択設定などのタスクに対する許可は、OS レベルで処理されます。Security Pack の基本的な操作を行うには、Windows ユーザーグループのメンバーである必要があります。『*ChemStation Plus Security Pack ユーザーガイド*』も参照してください。

表 10 ユーザー許可テンプレート

許可	オペレータ	ケミスト	ラボマネージャ	管理者
アドミンクライアントテストモード				可
データベースサーバー管理				可
カスタムフィールド管理			可	可
ユーザー管理				可

表 10 ユーザー許可テンプレート (続き)

許可	オペ レータ	ケミス ト	ラボマネー ジャ	管理者
ユーザー設定管理			可	可
ユーザーへのスタディ割り当て				可
ランのアーカイブ / デアーカイブ		可	可	可
第一レベルの承認		可	可	可
第二レベルの承認			可	可
クエリーの作成 / 編集		可	可	可
アドバンスフィルタの作成 / 編集		可	可	可
レポートテンプレートの作成 / 編集		可	可	可
計算テンプレートの作成 / 編集		可	可	可
スタディの作成 / 変更			可	可
列 / 式の定義		可	可	可
ランの削除			可	可
カスタムフィールド値の編集		可	可	可
ランのリオープン			可	可
バッチの作成	可	可	可	可
データベースの圧縮 (スタンドアロンのみ)				可
設定の編集 / 保存		可	可	可
データベースの移行				可

以下のタスクには、許可は不要です。

- データベースでの結果の保存
- ユーザーがアクセス権限を持つ保存済みのクエリーを使ったデータの検索とレビュー
- セキュリティ許可で管理されていないか、ユーザー自身が所有する、またはユーザーがアクセス権限を有するユーザー設定 (クエリー、フィルタ、レポートテンプレート、ユーザーインターフェイス設定など) へのアクセス

## 5 データセキュリティ

### ユーザーの設定と管理

- ChemStation への生データファイル、メソッドファイル、シーケンスファイルの再読み込みは、バッチの作成許可が必要です。

#### ユーザーの無効化

管理者（またはユーザー管理許可のあるユーザー）は、任意の ChemStore C/S 登録ユーザーを無効化することができます。無効化されたユーザーは、ChemStore C/S にログオンできなくなります。

## 組織情報の設定

スタディやカスタムフィールドの設定・管理が行えるのは、必要な許可があるユーザーだけです。標準ユーザープロファイルの中でこの許可を有するのは、ラボマネージャと管理者だけです。

### スタディの設定と管理

スタディの作成や変更を行うことができるのは、管理者、ラボマネージャなどの必要な許可のあるユーザーだけです。新しいスタディは、何もないところから作成することも、既存のスタディを基にして作成することもできます。スタディ作成の際には、**ChemStore C/S** が結果と共に保存する項目（クロマトグラム、スペクトル、生データ、メソッドとシーケンス情報）や、スタディに関連付けられるカスタムフィールドを指定します。新しいスタディでは、他のスタディ用に作成されたカスタムフィールドで、まだ無効になっていないものすべてを利用することができます。スタディ作成の時点で、そのスタディ用に新しいカスタムフィールドを指定することもできます（[136 ページの「カスタムフィールドの設定と管理」](#)を参照）。スタディに含まれるカスタムフィールドの値は、それが新規か既存かに関わらず、スタディ内のランごとに割り当てられます。

スタディの設定がすむと、そのスタディにアクセスできるユーザーとできないユーザーが、スタディの割り当て（[137 ページの「スタディの割り当て」](#)を参照）に従って決まります。スタディに割り当てられたユーザーは、スタディ名を検索条件として使うことにより、スタディにデータを追加したり、ランを取得したりすることができます。

必要な権限を持ったユーザーは、新しいスタディを作成する際に、承認モードを変更したり、ロックモードや **LIMS** 通知モードを実行したりすることもできます。

必要な許可のあるユーザーは、スタディのステータスを **Active**（有効）または **Inactive**（無効）に設定することができます。有効なスタディは、**ChemStation** や **ChemStore C/S** のすべての作業に利用できます。無効なスタディに対しては、**ChemStation** からデータを追加することができなくなりま

す。無効なスタディは、ChemStore C/S からのデータ取得には利用できますが、新しいスタディのテンプレートとして使ったり、変更したりすることはできません。

### カスタムフィールドの設定と管理

カスタムフィールドの作成や変更を行うことができるのは、管理者、ラボマネージャなど必要な許可のあるユーザーだけです。カスタムフィールドを作成するには、フィールド名の入力とデータタイプの指定が必要です（[21 ページの「カスタムフィールドの使用」](#)を参照）。また、データタイプによっては、さらに追加情報（単位、可能な値のリストなど）が必要になります。新しく作成されたカスタムフィールドは、任意のスタディで利用することができます。

#### カスタムフィールドのデータ入力

カスタムフィールド設定の一部として、データ入力方法の指定があります。カスタムフィールド値の入力方法には、自動（ChemStation マクロによる）と手動があります。手動データ入力の指定は、「always required」（必須）として行うことができます。その場合、ChemStore C/S への分析結果転送が許可される前に有効値をフィールドに入力する必要があります。値の入力が必ずしも必要でない場合には、デフォルト値を指定することもできます。指定されたデフォルト値は、データ転送の前に上書きすることができます。また、フィールドタイプによっては、データマスクを指定できるものもあります。たとえば、数値フィールドなら最大値と最小値、テキストフィールドなら最大文字列長などを指定することができます。これらのデータマスクはスタディごとに設定されるので、他のスタディで同じカスタムフィールドが使われている場合、そのデータマスクはまた別の値にすることができます。

カスタムフィールドのデータを、ChemStation のマクロを使って自動入力したい場合には、以下の事項を確認する必要があります。

- ・ マクロが（カスタムフィールドの設定通りの）正しいデータタイプを返すこと
- ・ マクロが ChemStation に読み込まれていること

マクロの詳細については、ChemStation オンラインヘルプのコマンドの項を参照してください。

必要な許可のあるユーザーは、カスタムフィールドを **Active**（有効）または **Inactive**（無効）に設定できます。ステータスを無効に変更されたカスタムフィールドは、検索条件としての利用を除き、いかなる **ChemStation** や **ChemStore C/S** の作業でも利用できなくなります。

## スタディの割り当て

スタディにアクセスできるのは、スタディに割り当てられているユーザーだけです。ユーザーへのスタディ割り当ては、スタディの作成時や変更時に行うことも、スタディ割り当てのすべてを編集することのできる別のインターフェイスを通じて行うことも可能です。

ユーザーがアクセスできるのは、そのユーザーに対して、**ChemStore** および **ChemStation** ソフトウェアのインターフェイス内で割り当てられたスタディだけです。これにより、権限のないユーザーによる変更、アクセス、不適切なデータの追加などからスタディを保護することができます。また、各ユーザーに割り当てるスタディ数を限定することは、ユーザーに表示されるスタディや選択肢の数が少なくなることにつながるため、ソフトウェアが使いやすくなるという利点もあります。

スタディ割り当てには、「ユーザーへのスタディ割り当て」という特別なユーザー許可が必要です。

## ChemStore C/S 要素の設定と管理

ChemStore C/S 構成の主要 5 要素は、保存しておいて、後で再利用することができます。また、これらの要素は、作成や保存の許可を持たない他の ChemStore C/S ユーザーでも使用できるように設定することができます。この設定は、データの決められたサブセットに対するアクセスを制限します。要素の所有者としては、作成者が割り当てられますが、この所有権は、必要な許可のあるユーザーによって、別のユーザーに移し変えることができます。

- |                       |   |
|-----------------------|---|
| <b>クエリー</b>           | クエリーは、後で再利用できるように、名前を付けて保存しておくことができます。保存したクエリーは、他のユーザーが使えるように割り当てることができます。  |
| <b>フィルタ</b>           | カスタムフィルタは、後で再利用できるように、名前を付けて保存しておくことができます。保存したカスタムフィルタは、他のユーザーが使えるように割り当てることが可能です。  |
| <b>レポートテンプレート</b>     | レポートテンプレートは、後で再利用できるように、名前を付けて保存しておくことができます。保存したレポートテンプレートは、他のユーザーが使えるように割り当てることが可能です。  |
| <b>ユーザーインターフェイス設定</b> | ユーザーインターフェイス設定には、ウィンドウ、テーブル、およびチャートすべての現在の設定が含まれています。この設定は、後で再利用できるように、名前を付けて保存しておくことができます。保存したユーザーインターフェイスは、他のユーザーが使えるように割り当てることが可能です。 |
| <b>計算テンプレート</b>       | 計算テンプレートは、後で再利用できるように、名前を付けて保存しておくことができます。保存した計算テンプレートは、他のユーザーが使えるように割り当てることが可能です。計算テンプレートの割り当ては、同じ名前のテンプレートの全バージョンに対して有効です。            |

必要な許可のあるユーザーは、ChemStore C/S 要素を他のユーザーが使えるように割り当てたり、所有権を他のユーザーに移し変えたりすることに加えて、保存した要素の名前を変更することもできます。また、要素を変更して、新しい要素名で保存したり、元の要素名で上書き保存したりすることもできます。

## アーカイブとデアークाइブ

ChemStore のクライアント / サーバーバージョンでは、データベース中のランを、ディスクやテープ上の別ファイルに、アーカイブ（コピーして保存）することができます。アーカイブが済んだランは、ChemStore C/S データベースから自動的に削除して、データベース中の領域を解放することができます。

ファイルのアーカイブ、デアークाइブ、リオープンなどを行うには、管理者からこれらの実行許可を得る必要があります。管理者はまた、ChemStore C/S アドミンクライアントを使って、特定のアーカイブ機能の設定や管理を行います。詳細については、155 ページの「アドミンクライアント上でのアーカイブとデアークाइブの管理」を参照してください。

アーカイブした後も、データベースからランを削除していなければ、そのランへのアクセス自体は可能ですが、変更（承認など）を行うには、ランをリオープンする必要があります。削除したランをリオープンするには、そのランをデアークाइブして、データベースに復元する必要があります。

アーカイブ、削除、デアークाइブ、およびリオープンは、ランの全バージョンに対して動作します。ランに複数のバージョンが存在する場合、それらが異なったスタディに共有されている場合でも、全のバージョンがアーカイブされます。同様に、ランをアーカイブ後に自動的に削除するように指定した場合にも、全バージョンのランが削除されます。

ChemStore C/S には、自動と対話形式の 2 種類のアーカイブモードがあります。

### 自動アーカイブ

管理者許可のあるユーザーは、指定されたランを定期的にアーカイブするように設定することができます。自動アーカイブの対象となるランは、クエリーを使って選択します。新しいアーカイブクエリーを設定するには、レビュークライアントの [administration (管理)] メニューから、[Automated Archiver (自動アーカイバ)] を選択します。

アーカイブクエリーセクションには、手動アーカイブで使用する [Create Archive Unit (アーカイブユニットの作成)] ダイアログと同じように情報を入力することができます。ここでは、アーカイブクエリーの名前（必須、他と

## 5 データセキュリティ

### アーカイブとデアーカイブ

重複しないもの)、アーカイブユニット名、およびパス名を指定する必要があります。ここで入力したアーカイブユニット名には、「<ファイル名>-yyyy-mm-dd」のように、作成日が付加されます。

**[Active (有効)]** というチェックボックスは、このアーカイブクエリーを有効にします。有効になったアーカイブクエリーは、自動アーカイブクエリー一覧の中に、「active」として表示されます。このチェックマークを外すと、そのクエリーは使用不可になり、クエリーのステータスは **[inactive (無効)]** と表示されます。

また、このセクションには、アーカイブに成功したランを、データベースから削除するというオプションもあります。

クエリー条件としては、注入時刻、装置名、オペレータ名、データ取込シーケンス名、メソッド名、サンプル名、スタディ名、カスタムフィールド、注入オペレータ、承認ステータスなどの項目を指定することができます。クエリー条件のオペランドは、データのカテゴリによって異なり、「**NOT**」を使えば、否定演算を行うこともできます。

図 59 自動アーカイブダイアログボックス

- テキストベースのデータ : is equal (等しい)、contains (含む) (ワイルドカード)
- 数値データ : is equal (等しい)、is greater than (より大きい)、is lower than (より小さい)、is between (範囲内)
- 日付 : is older than X days/months (X 日 / 月より以前)

## 5 データセキュリティ

### アーカイブとデアーカイブ

自動アーカイブ用に定義できる条件節の数は、最適なパフォーマンスを維持するために、10 個までに制限されています。

アーカイブの頻度は、アーカイブクエリーごとに設定できます。頻度は、毎日、毎週、毎月、あるいは数値と組み合わせて、何日ごと、何週ごとというふうに、時間間隔で設定することができます。[**First starting date (開始日)**]には、サーバー上でクエリーの実行を開始する日を入力する必要があります。ユーザーは、アーカイブクエリーの作成や編集を行う際に、マニュアルのアーカイブを作成する際の [**create archive unit (アーカイブユニットの作成)**] ダイアログと同じように、ユーザー ID とパスワードによって認証・確認を行う必要があります。[**Test Query (クエリーのテスト)**] ボタンをクリックすると、そのクエリーが、指定したクエリー条件のもとで返すランの数に関する情報が表示されます。

有効なアーカイブクエリーは、[**First starting date (開始日)**] で指定された日時から自動的に実行されます。それ以降のアーカイブは、頻度で指定した時間間隔で作成されます。

## 対話形式によるアーカイブ

アーカイブの方法としては、ChemStore メインパネルのアーカイブ / 削除ビューやグラフィックレイアウトから、アーカイブ対象のランを選択するという方法もあります。

The screenshot displays the ChemStore software interface. At the top, there is a menu bar with options: File, View, Options, Review, Report, Administration, Help. Below the menu bar is a toolbar with icons for search, archive, delete, and other actions. The main area is divided into two sections: a table on the left and a chromatogram on the right.

The table has the following columns: Run, Mark run, Sample name, Audit, Status. The rows show various runs, including 'Procaine level 2-5', 'Procaine decay', and 'Control PABS'. Run 12 is highlighted in blue.

The chromatogram on the right shows a single sharp peak at approximately 1.8 minutes, labeled 'Amphetamine Acid'. The y-axis is labeled 'mAU' and ranges from 0 to 175. The x-axis is labeled 'min' and ranges from 0 to 3. The plot title is 'DAD1 A, Sig=282,8 Ref=550,100 (PROCAINE)'. Below the chromatogram is a smaller table with columns: Run, Sample, Data File, Amount, Cl.

Run	Sample	Data File	Amount	Cl
12	Control PABS	PH9_0011.D	85.47	DAD1 A, Sig=2
12	Control PABS	PH9_0011.D	0.00	DAD1 B, Sig=2
12	Control PABS	PH9_0011.D	85.47	DAD1 B, Sig=2
12	Control PABS	PH9_0011.D	0.00	DAD1 C, Sig=3
12	Control PABS	PH9_0011.D	85.47	DAD1 C, Sig=3

図 60 ChemStore メインパネルのアーカイブ / 削除ビュー

## 5 データセキュリティ アーカイブとデアークाइブ

サンプルレビューアイコンではなく、アーカイブアイコンが押された状態であることを注意してください。

アーカイブ / 削除ビューには、以下の 3 つのアイコンを除けば、サンプルレビューのグラフィックレイアウトと同一のツールセットが備わっています。



このツールを使うと、アーカイブユニットが保存される場所と時間を指定することができます。



このツールは、ランリスト中の削除マークの付いたランをすべて削除します。このボタンは、スタンドアロンバージョンの削除ビューにも表示されます。



このツールは、ランリスト中のリオープンマークの付いたランすべてをリオープンし、承認ステータスを「承認の保留」(31 ページの「ランの承認ステータス」を参照) に設定します。

サンプルレビューグラフィックレイアウトに関する詳細については、38 ページの「サンプルレビュー」を参照してください。

アーカイブ対象のランは、レビュー用ビューでレビューやレポートの対象となるデータを検索するときと同じように、**アーカイブ / 削除** ビューの左パネルのランリストから選択します。アーカイブ対象としてマークされたランは、以後、承認ステータスやカスタムフィールド値を変更することができなくなります。アーカイブの実行は、それにふさわしい時間（勤務時間外など）まで延期される可能性があるため、アーカイブ対象としてマークされたランは、アーカイブが完了するまでデータセットに保存されます。

手動形式のアーカイブは、原則として、自動形式のアーカイブを妨害することはありません。アーカイブは、基本的に「先着順」で動作します。特定のランが、2 つの異なる「ジョブ」の中でアーカイブするようにスケジュールされている場合、そのランは、キューの中の最初のジョブによってアーカイブされることとなります。

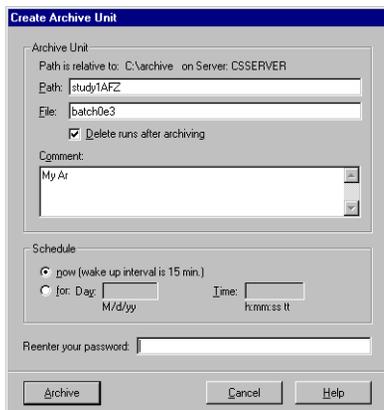


図 61 アーカイブユニットの作成パネル

## アーカイブユニット

アーカイブされたランは、アーカイブユニットとして保存されます。アーカイブユニットには、指定したランの全バージョンが含まれています。アーカイブユニットは、上で説明したように、自動形式か手動形式のどちらかで作成されます。アーカイブユニットの設定時には、ファイル名とパス名に加えて、そのアーカイブユニットについての説明を入力することもできます。これらの項目は、後で特定のアーカイブユニットを検索する際に、利用することができます。作成されたアーカイブユニットには、システムによって生成されたアーカイブ ID と、バイナリアーカイブユニットの内容を記述した XML 形式のカタログファイルが付加されます。このカタログファイルのファイル名は、アーカイブユニットの名前に、拡張子 XML が付いたものになります。146 ページの [図 62](#) に示すのは、XML カタログファイルの例です。

## 5 データセキュリティ アーカイブとデアークाइブ

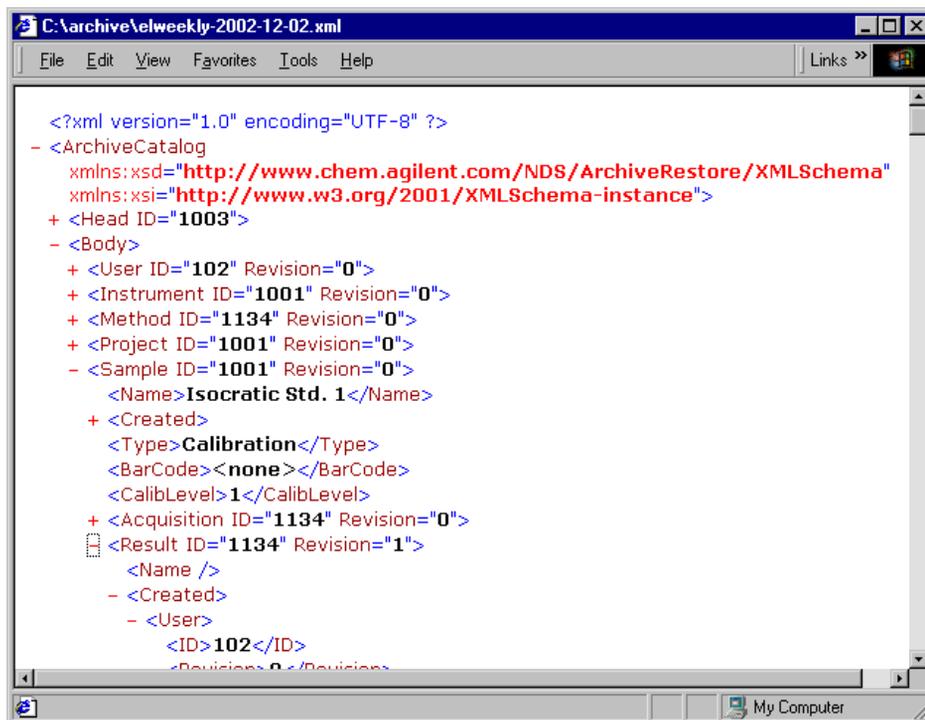


図 62 XML カタログファイルの例

このカタログファイルは、外部の文書管理システム（DMS）での索引付けなど、より高度なアーカイブ管理で利用することができます。

アーカイブは、ユーザー許可とパスワードによって保護されています。アーカイブ / 削除ビューや [Automated archives（自動アーカイブ）] メニューの項目は、該当する許可のあるユーザーのみが利用可能です。アーカイブジョブを行うには、ユーザー ID とパスワードを入力する必要があります。

## ランの削除

ChemStore C/S に Security Pack をインストールしていない場合、ランをアーカイブせず削除することができます。削除するランは、スタンドアロンバージョンなら削除ビュー、クライアント / サーバーバージョンならアーカイブ /

削除ビューで、削除対象としてマークすることができます。データのセキュリティを保証するため、このタスクを実行できるのは必要な許可のあるユーザー（131 ページの「ユーザーの設定と管理」を参照）だけになっており、実際の削除時にも、パスワード認証による確認が必要になっています。

クライアント / サーバーバージョンでは、アーカイブ後のランを、データベースから自動的に削除することも可能です。

### 注意

削除されたランは、データベースから取り除かれ、復元することができなくなります。したがって、アーカイブ済み、または必要でなくなったランのみを削除するようにしてください。

## ランのリオープン

アーカイブ済みであるが、まだ削除されていないランは、データベースには存在していますが、ロックされていて変更することはできません。アーカイブされたランをリオープンしてアクセスするには、アーカイブ / 削除ビューの左パネルのランリストから該当ランを選択後、前のページで説明したリオープンアイコンをクリックします。

リオープンは、アーカイブと同様、正しい許可のあるユーザーだけが利用できます。

## ランのデアーカイブ

アーカイブされ、削除されたランは、データベース中に存在しなくなります。このようなランにアクセスするには、該当するランをデアーカイブ（ランをデータベースに再コピー）してからリオープンする必要があります。

デアーカイブは、アーカイブユニット全体に対して行うことも、アーカイブユニットの中から特定のランだけを選んで行うこともできます。デアーカイブ対象のアーカイブユニットを選択するには、アーカイブ履歴を利用して、アーカイブユニットを作成した日時順に表示します。データベース中のアーカイブユニットが多すぎて、必要なランを含むユニットを見つけるのが難しい場合には、アーカイブユニットの一覧から、必要なランを検索する検索機能を利用することができます。

## 5 データセキュリティ アーカイブとデアークाइブ

デアークाइブは、アーカイブ同様、(サーバーのウェイクアップインターバル内で) ただちに開始するように指定することもできるし、開始時間を後に延期することもできます。デアークाइブでは、アーカイブユニット内の選択したランの全バージョンが、データベースにコピーされます。

デアークाइブは、ユーザー権限、ユーザー ID、およびパスワードによって保護されています。アーカイブ / 削除ビューにアクセスできるのは、必要な許可のあるユーザーだけであり、デアークाइブを開始する際には、ユーザー ID とパスワードを入力する必要があります。

### 汎用 XML アークाइブインターフェイス

ChemStore C/S サーバーには、さらに、汎用の XML ベースのアーカイブインターフェイスを追加することもできます。このアーカイブインターフェイスを使うと、外部のアーカイブ管理システム (DMS、HSM など) との連携が可能になります。汎用 XML アークाइブインターフェイスは、ChemStation Plus 用 CD-ROM の、\G1410a\archiver\_interface ディレクトリからインストールします。インストールの詳細については、「readme.txt」を参照してください。

インストールされた汎用 XML アークाइブインターフェイスに対しては、アーカイブユニットが作成されるたびに、通知が送られます。アーカイブユニット、および対応する XML ファイルの名前と場所が、デフォルトのプラグインに渡されます。このプラグインの性質によっては、アーカイブユニットを DMS に転送してからローカルデータを削除するというような、別の動作が開始されることもあります。アーカイブユニットの処理が済むと、その保存場所に関する外部 ID を含む通知メッセージなどがアーカイブインターフェイスに送り返されてきます。この情報は ChemStore C/S に送られます。

汎用 XML ベースのアーカイブインターフェイスを利用するためには、プラグインの開発が前提となります。Agilent では、プラグインをプログラムするために必要な情報を含む開発者用キットを、リクエストに応じて提供していません。

XML アークाइブインターフェイスをインストールすると、簡単なプラグインのサンプルもインストールされます。このサンプルは、特に設定を行わなくてもそのまま利用できます。この「シンプルプラグイン」は、新たにアーカイブファイルが作成されるたびに、サーバー PC 上にダイアログボックスをポップアップ表示します。



図 63 汎用 XML ベースのアーカイブインターフェイスのシンプルプラグインによって生成されたメッセージ

シンプルプラグインのメッセージと機能は、シンプルプラグイン専用のフォルダ (C:\Program Files\Agilent Technologies\XML-based Archive Restore\Examples\Simple Plugin) 内の「AddArchive.cmd」というファイルを修正することによって、変更できます。

図 64 は、シンプルプラグインのデータフロー、およびカスタムプラグインによる拡張を表した概略図です。

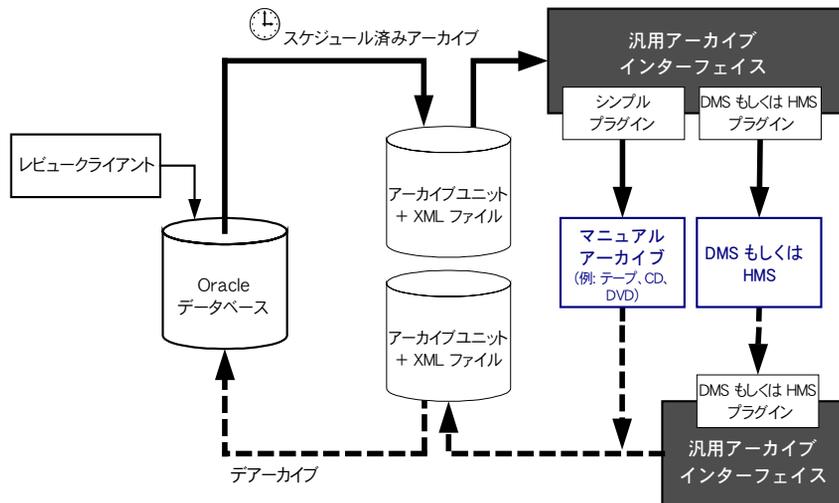


図 64 汎用 XML ベースのアーカイブインターフェイス

復元は手作業で行う必要があります。まずバイナリのアーカイブファイルを元の場所に戻し、次に、ChemStore を使って、ChemStore の以前のバージョンと同じように復元を実行します。

## アーカイブステータスの理解

ChemStation から ChemStore C/S に転送されたランのアーカイブステータスは、「未アーカイブ」に設定されます。アーカイブ対象として選択されたランのアーカイブステータスは、「アーカイブ保留」に設定され、それ以上の変更に対してロックされます。アーカイブ後の削除を指定されたランのステータスは、「アーカイブ削除保留」に設定されます。このステータスのランは、クエリーから取得できなくなります。「アーカイブ保留」や「アーカイブ削除保留」のステータスは、ランのアーカイブが済んで、アーカイブステータスが「アーカイブ済み」に変わるまで有効です。アーカイブ削除の操作で、アーカイブや削除の情報を利用できるのは、アドミンクライアントアプリケーションのアーカイブユニットインターフェイスからのみです。

### 注

アーカイブのステータスは、自動的に更新されません。アーカイブステータスを更新するには、対象となるランに別のクエリーを実行して、ステータスをリフレッシュする必要があります。

たとえば、アーカイブが完了する前に記憶媒体が一杯になり、アーカイブに失敗すると、ランに「**アーカイブ失敗**」というステータスが設定されます。この場合、管理者は、アドミンクライアントを使って問題を解決してから、アーカイブを再スケジュールする必要があります。

アーカイブは済んでいるが、削除されていない（つまり、データベースに残っている）ランは、明示的にリオープンされるまで、承認ステータスやカスタムフィールド値などを含むあらゆる変更に対してロックされます。リオープンされたランには、「リオープン済み」というステータスが設定されます。リオープンされたランは、通常の方法で、再度アーカイブすることができます。

データベースに対してランをデアーカイブする際のステータスの決まり方については、以下のようなルールがあります。

ランがデータベースに存在しない場合には、次のルールが適用されます。

- 最後に作成したアーカイブをデアーカイブしようとした場合、そのランはデータベースに転送されて、「デアーカイブ済み」とマークされます。

- 複数回アーカイブされているランについて、最新のものでないアーカイブをデアークイブしようとした場合、そのランはデータベースに転送されて、「読み取り専用」とマークされます。

いったんデータベースから削除されてからデアークイブされたランが存在する場合には、次のルールが適用されます。

- 最新のアーカイブをデアークイブしようとした場合、そのランはデータベースに転送されて、「デアークイブ済み」というステータスに設定されます。
- 最新の日付でないアーカイブをデアークイブしようとした場合、そのランはデアークイブされて、「読み取り専用」とマークされます。その次のステップとして、前回よりは新しいが、最新バージョンではないランをデアークイブしようとした場合、前回デアークイブされた古いランは上書きされて、すべてのランが「読み取り専用」というステータスに設定されます。すでにデアークイブされたものより古いバージョンのランをデアークイブしようとする場合には、そのランをデアークイブしてデータベースのランを上書きすることは認められません。

アーカイブユニットから復元されたのではないランがデータベースに存在している場合には、デアークイブを行ってデータベース中の既存のランを上書きすることはできません。

特定のアーカイブユニットに対する最新のデアークイブ操作によってどのランが上書きされたかの一覧は、アドミンクライアントの **Archive Reports/View** (アーカイブレポート / 表示) で表示することができます。この情報は、サーバーのログファイルにも書き込まれています。

図 65 に示すのは、アーカイブステータス間の相互関係です。アーカイブやデアークイブ処理が、ランのステータスに与える影響に関する具体例については、本セクションの「アーカイブ / デアークイブプロセスの詳細例」を参照してください。

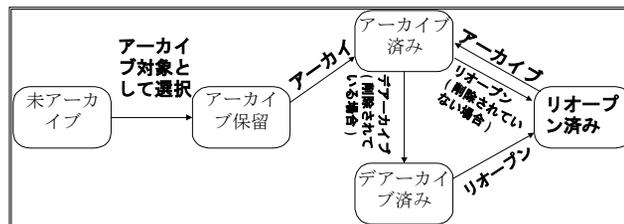


図 65 アーカイブステータスの相互関係

## アーカイブステータスのレビューとレポート

保留中のアーカイブやデアーカイブのスケジュールをチェックするには、アーカイブ / 削除ビュー（143 ページの図 60 を参照）のメインパネル最上部にある [Review（レビュー）] メニューの下を見ます。このメニューでは、アーカイブの履歴をレビューして、アーカイブやデアーカイブが失敗した原因を調べることができます。

自動アーカイブは、自動アーカイブクエリーで指定した日時に直接実行されるので、保留アーカイブのスケジュールには表示されません。

アーカイブのスケジュールや履歴は、アドミンクライアントパネルからも表示することができます。アドミンクライアントでは、どのユーザーも、パスワードを入力することなく、これらのレポートを表示することができます。アドミンクライアントでは、以下のようなレポートを表示することもできます。

- アーカイブユニット
- アーカイブユニット中のラン
- 削除されるラン
- 監査証跡
- オブジェクトに関する情報
- ベースパス、ウェイクアップインターバル、タイムアウトインターバル
- 動作中のスプール / ダウンロードテーブル

## アーカイブ / デアーカイブプロセスの詳細例

以下では、アーカイブ / デアーカイブプロセスについての理解を深める例を示します。

- 例** 以下の例は、2 つの図によって表現されています。153 ページの図 66 は、特定のランを複数のアーカイブユニットにアーカイブする手順を表しています。154 ページの図 67 は、図 66 のようなデータベースにランが存在しない場合の、デアーカイブプロセスの例です。

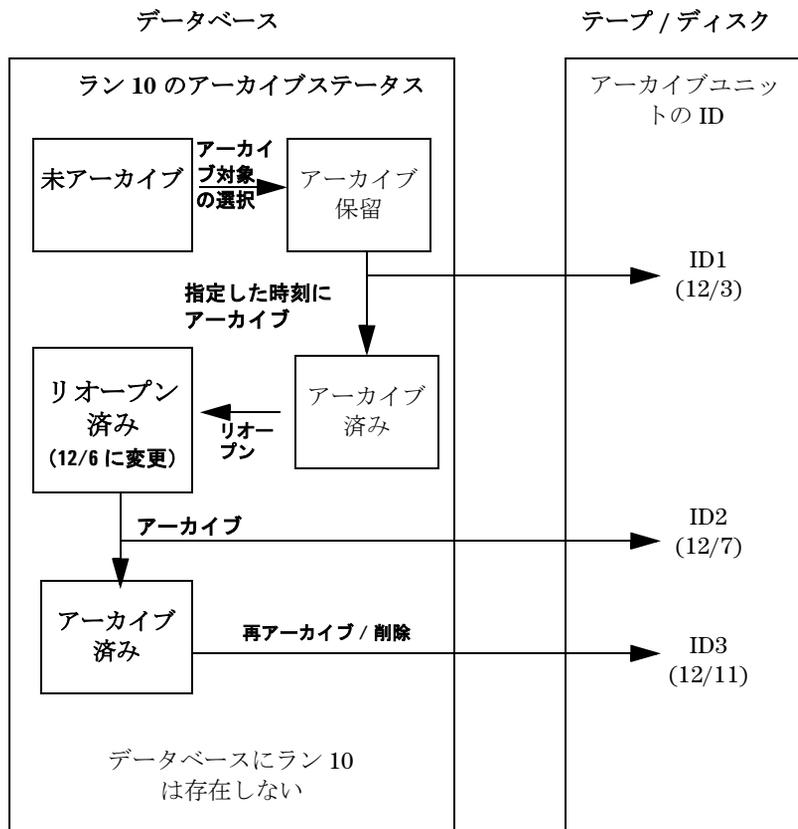


図 66 アーカイブプロセスの例

5 データセキュリティ  
アーカイブとデアーカイブ

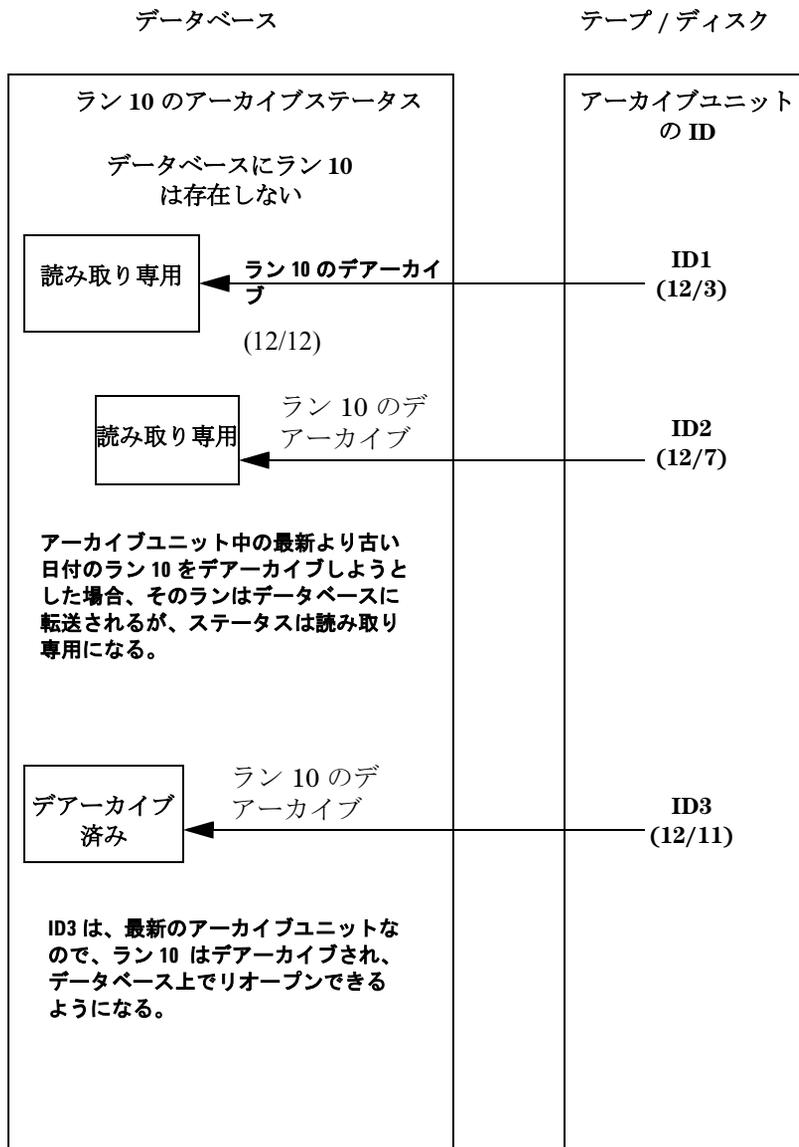


図 67 デアーカイブプロセスの例—ラン 10 はデータベースに存在しない

## アドミンクライアント上でのアーカイブとデアーカイブの管理

ChemStore C/S アドミンクライアントでは、正しい許可のあるユーザーがランのアーカイブやデアーカイブを行う前に、管理者が一定の設定タスクを行うことができます。ChemStore C/S アドミンクライアントは、ネットワーク上の任意の PC から使うことのできるウェブベースのアプリケーションで、アーカイブおよびデアーカイブ機能やその他のサーバープロセスを、容易に管理することができます。アドミンクライアントは、サーバーコンピュータで NT サービスとして動作する、アーカイブサーバーと通信を行います。アドミンクライアントには、ウェブブラウザを使ってアクセスします。アドミンクライアントを使って行うことのできるタスクは、以下のとおりです。

- アーカイブ、デアーカイブ、および削除操作のスケジュール
- スケジュールされた操作の変更
- 保留中の操作に関する詳細レポートの表示
- アーカイブおよびデアーカイブ履歴の表示
- アーカイブ、ランなどのオブジェクトに関する情報の表示
- アーカイブ、デアーカイブ、および削除操作の即時実行
- ウェイクアップインターバルなどのサーバー操作パラメータの設定
- Oracle へのアーカイブサーバーの接続
- データベース接続情報の追加や変更

これらの管理機能の使い方に関する詳しい情報については、アドミンクライアントのオンラインヘルプを参照してください。

ChemStore C/S ソフトウェアによるアーカイブとデアーカイブの背後にあるコンセプトの詳細については、[139 ページ](#)の「[アーカイブとデアーカイブ](#)」を参照してください。

## アーカイブ / 削除プロセスの概要

アドミンクライアントは、アーカイブサーバーで実行されるアーカイブプロセスの管理を助けるものです。以下に挙げるのは、ランのアーカイブと削除に関する手順です。

- 1 ChemStore C/S 自体の機能を利用して、データベース内のどのランをアーカイブするかを指定し、アーカイブを実行する時刻を設定します。指定されたランは、アーカイブサーバーが排他的に使用するアーカイブテーブルに配置されます。また、アーカイブ操作と実行時刻は、スケジュールテーブルに配置されます。
- 2 サーバーは、次に起動したときに、スケジュールテーブルをチェックして、保留中のアーカイブ要求があるかどうかを判断します。要求がある場合には、たとえば、アーカイブを実行できるのは、ランが特定のステータスにあるときだけというような、要求の整合性をチェックします。
- 3 ランのアーカイブが可能であると判断されると、ランのデータは（ベースパス変数で指定されたディレクトリの）バイナリファイルに書き込まれます。ここでは、アーカイブファイルのランからのデータばかりでなく、メソッドや生データなどの関連するオブジェクトに関するデータも、すべてバイナリファイルに書き込みます。このプロセスで障害が発生した場合、そのアーカイブは、アーカイブテーブルの中では「失敗」とマークされ、スケジュールタスクからは削除されます。
- 4 アーカイブの「AutoDel（自動削除）」フラグが「TRUE」に設定されている場合には、サーバーによるバイナリファイルへのデータ書き込みが終わると、データベース中のアーカイブ済みのランに「削除」マークがつけられます。
- 5 設定された削除操作は、アーカイブに成功すると、自動的に実行されます。また、ChemStore C/S アドミンクライアントを使うと、管理者が手動により、ラン削除操作を任意の時刻にスケジュールすることができます。
- 6 削除操作が実行されると、アーカイブ時に削除マークを付けたラン、または ChemStore C/S から手動で削除マークを付けたランは、すべて削除されます。

## アドミンクライアントでのアーカイブ / デアーカイブタスクの実行

本セクションの冒頭に上げたタスクは、アーカイブレポート、アーカイブタスク、サーバー管理、グローバル設定オプション、およびテスト機能の5つのグループに分類されます。管理者が、アーカイブ、サーバー管理、またはテストのタスクを行う場合、ユーザー名とパスワードを入力して、アドミンクライアントにログオンする必要があります。アーカイブレポートは、ネットワークにアクセス可能なユーザーなら、アドミンクライアントにログオンしなくても、表示することができます。

各タスクグループには、アドミンクライアントのメインウェブページからアクセスします。

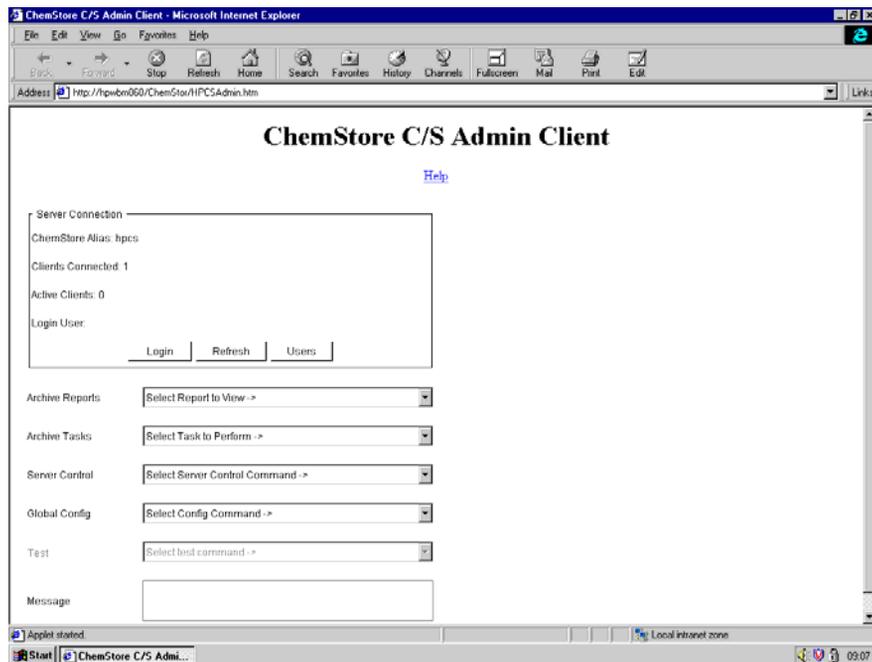
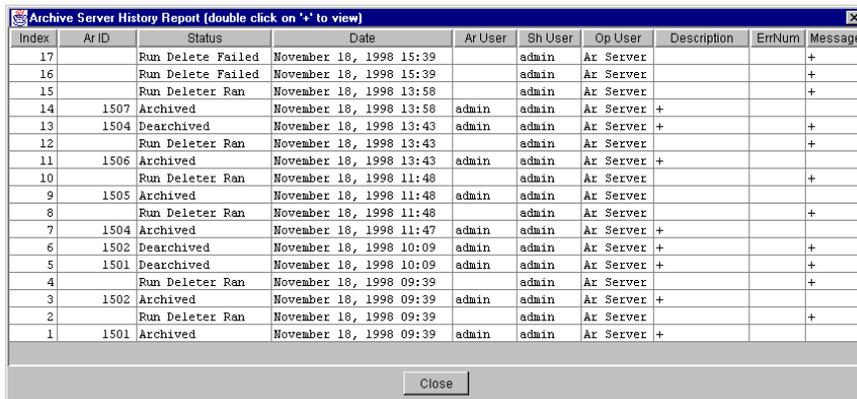


図 68 アドミンクライアントのメインウェブページ

## 5 データセキュリティ

### アドミンクライアント上でのアーカイブとデアーカイブの管理

アドミンクライアントのメインウェブページにアクセスしたユーザーは、自分の許可レベルに応じてタスクにアクセスすることができます。一般には、次のような形式の画面やレポートが表示されます。



Index	Ar ID	Status	Date	Ar User	Sh User	Op User	Description	ErrNum	Message
17		Run Delete Failed	November 18, 1998 15:39		admin	Ar Server			+
16		Run Delete Failed	November 18, 1998 15:39		admin	Ar Server			+
15		Run Deleter Ran	November 18, 1998 13:58		admin	Ar Server			+
14	1507	Archived	November 18, 1998 13:58	admin	admin	Ar Server	+		
13	1504	Dearchived	November 18, 1998 13:43	admin	admin	Ar Server	+		+
12		Run Deleter Ran	November 18, 1998 13:43		admin	Ar Server			+
11	1506	Archived	November 18, 1998 13:43	admin	admin	Ar Server	+		
10		Run Deleter Ran	November 18, 1998 11:48		admin	Ar Server			+
9	1505	Archived	November 18, 1998 11:48	admin	admin	Ar Server			
8		Run Deleter Ran	November 18, 1998 11:48		admin	Ar Server			+
7	1504	Archived	November 18, 1998 11:47	admin	admin	Ar Server	+		
6	1502	Dearchived	November 18, 1998 10:09	admin	admin	Ar Server	+		+
5	1501	Dearchived	November 18, 1998 10:09	admin	admin	Ar Server	+		+
4		Run Deleter Ran	November 18, 1998 09:39		admin	Ar Server			+
3	1502	Archived	November 18, 1998 09:39	admin	admin	Ar Server	+		
2		Run Deleter Ran	November 18, 1998 09:39		admin	Ar Server			+
1	1501	Archived	November 18, 1998 09:39	admin	admin	Ar Server	+		

図 69 アーカイブサーバーの履歴レポート

## 監査証跡

監査証跡は、ランに加えられたあらゆる変更を追跡します。各サンプルの監査証跡は、サンプルデータとは独立して管理されています。監査証跡は、アーカイブやデアrchiveの作業を追跡できるように、ランと一緒にアーカイブされないようになっています。ランがアーカイブされたときでも、監査証跡へのリンクは維持されています。監査証跡への入力が発生する作業は、以下のとおりです。

- カスタムフィールド値の変更
- 承認ステータスの変更
- サンプル名の変更
- 再処理ステータスの変更
- バッチへの追加もしくはバッチからの削除
- アーカイブステータスの変更

監査証跡は、任意のランについて表示することができ、その中には、ランに対して行われた変更すべてのサマリと、誰がいつどんな理由で変更を加えたかを示すテーブル（160 ページの [図 70](#) を参照）が含まれています。また、監査証跡の画面には、カスタムフィールド値やアーカイブステータスに対する変更に関する追加情報を表示するためのボタンがあります。

## 5 データセキュリティ 監査証跡

Version	Reason for entry	Status	Modified by	Modified at	Processed
+	New	Approval Pending	Administrator	11/22/1999 20:02:34	11/22/1999 20:02:34
6	New	Approval Pending	coik group	11/17/1999 17:47:32	11/17/1999 17:47:32
5	New	Approval Pending	christoph	11/17/1999 17:25:22	11/17/1999 17:25:22
4	Status Changed	Approved	W\WINTER ora	09/20/1999 16:59:29	08/23/1999 18:08:17
4	New	Approval Pending	christoph	08/23/1999 18:08:17	08/23/1999 18:08:17
3	Status Changed	Approved	W\WINTER ora	09/20/1999 16:58:11	07/28/1999 11:22:17
3	Edit Custom Field	Approval Pending	christoph	09/20/1999 16:53:02	07/28/1999 11:22:17
3	New	Approval Pending	christoph	07/28/1999 11:22:17	07/28/1999 11:22:17
2	Status Changed	Rejected	W\WINTER ora	09/20/1999 17:00:16	07/16/1999 16:14:32
2	New	Approval Pending	christoph	07/16/1999 16:14:32	07/16/1999 16:14:32
1	Status Changed	Rejected	W\WINTER ora	09/20/1999 17:00:20	07/14/1999 16:49:37
1	New	Approval Pending	Administrator	07/14/1999 16:49:37	07/14/1999 16:49:37

Comment for selected entry:

Processed on Instrument 1, HPwBM187

Modified Custom field values    Archive details    Print    Close    Help

図 70 監査証跡

## 電子メール通知

以下は、クライアント / サーバーシステムでのみ利用できる機能です。これは、特定のイベント発生時に、自動的に電子メール通知を送信する機能で、管理者（または管理者と同等の許可を持つユーザー）によるセットアップが必要です。自動電子メール通知を発生させるイベントは、以下の通りです。

- ログオン失敗の回数が多すぎることによるユーザーアカウントのロック
- レビュー用バッチの登録
- パスワードのクリア
- 新規ユーザーの作成
- 許可の変更

「バッチ登録の通知」を除けば、電子メール通知の送信を行うのは、管理者に対してセキュリティ侵害を警告するときだけにしたほうがよいでしょう。電子メール通知が動作するためには、作業用の電子メールサーバーが必要です。通知メールは、次の 2 通りの方法で送信されます。

- メールサーバーに対する匿名 SMTP

この場合、匿名 SMTP が認められるように、メールサーバーを設定しておく必要があります。安全性を高くするために、メールサーバーの信頼リストに ChemStore データベースサーバーの IP アドレスを追加して、信頼できるサーバーからの匿名 SMTP のみが許可されるようにすることもできます。

- LDAP の使用

LDAP を利用するには、LDAP ルーティング機能を持つ Windows 2000 サーバーの SMTP 仮想サーバーを使います。この場合、電子メール通知は、LDAP を経由してメールサーバーに送られます。このためには、メールサーバーにメール送信に使うアカウントが存在することが必要で、このアカウントがメールの発信者になります。

## 5 データセキュリティ 電子メール通知

**E-Mail Notification Setup**

[ Mail server setup ]

Mailhost:  Port:

Sender:

Account Locked | Created batch | Cleared password | Created new user | Modified permissions

Enable

To:

Cc:

Subject:

User Text:

図 71 電子メール通知のダイアログボックス

図 71 に示す電子メール通知設定ダイアログボックスの中には、電子メールサーバーの接続設定や、電子メール通知の宛先アドレスが含まれています。ここでは、デフォルトの件名（「Account Locked」など）を編集したり、メッセージに付加される文章を追加したりすることができます。

電子メール通知のメッセージには、メッセージ送信の日時、対象ユーザーのユーザー ID、ChemStore クライアントの詳細、および設定時に指定した追加テキストが含まれます。

この機能が正しく設定されたかどうかは、テストメール機能を使って確認することができます。

注

有効な電子メールアドレスの書式は以下のようになります。

a) someone@name.domain

例 : jim.sample@company.com

b) 文字列 <someone@name.domain>

例 : Jim Sample<jim.sample@company.com>

c) 文字列 " <someone@name.domain>

例 : Jim Sample-<jim.sample@company.com>

電子メールアドレスが複数ある場合には、「;」（セミコロン）で区切ります。

---

## データベースログブック

ログブックには、データベースやとアプリケーションのセキュリティに影響を及ぼす相互作用のすべてが入力されます。ログブックのエントリはテーブルの形で表示され、クエリーを使うと、選択した条件に一致するエントリだけを表示することもできます。ログブックの入力を引き起こす作業は、以下のとおりです。

- ユーザー設定（新規ユーザーの作成、許可の変更、パスワードの変更、パスワードのクリア、ユーザーの無効化、ユーザーの再有効化、ユーザー表示名の変更）
- ランステータスの変更（ランの承認、ランの却下、ランのリオープン、バッチリクエストからの削除、
- スプールジョブの削除、カスタムフィールドの編集）
- アーカイブおよびデータベースのメンテナンス（ランのアーカイブ、ランのデアーカイブ、ランのアーカイブと削除、アーカイブの変更、アーカイブの変更と削除、ランの削除、データの移行、データスキーマの更新）
- 計算（計算テンプレートの作成、計算テンプレートの新バージョンの作成）

ログブックのテーブルは、最新のエントリから順に表示され、印刷することも可能です。

## 印刷ファイルのバリデーションとセキュリティ

LIMS システムベースのファイルに結果をエクスポートできるようにするために、ChemStore C/S では、レポートを xml や csv 形式のファイルに出力できるようになっています。これらの形式は単純なテキストファイルなので、容易に改竄される可能性があります。この問題を解決するために、ChemStore C/S には、レポートファイルに変更がないことを確認するためのバリデーション用のフックが用意されています。

### ファイルバリデーションの動作

レポート生成機能は、テキストファイルへの書き出しを完了すると、ただちに「セキュアファイル」機能呼び出します。ChemStore C/S の「セキュアファイル」機能は、ファイルの数値署名を計算して、その署名をファイル保存します。このファイルの数値署名は、必要に応じて再計算し、保存してある値と比較することができます。つまり、この 2 つの署名が異なっていれば、そのファイルは変更されたということです。

エクスポートされたレポートファイルと元のデータとの同一性を、自動的に検証したい場合には、バリデーションバッチファイルを使ってチェックサムを計算することができます。この `c:\hpchem\chemstor\validatefile.bat` というバッチファイルは、`hpexfs.exe` を呼び出し、セキュリティコードが一致しない場合は、エラーメッセージを表示します。

#### 注

`hpexfs00.exe` を ChemStore C/S をインストールしていないコンピュータにインストールする場合には、ファイル `hpcsf00.dll` と `msvbwm50.dll` を手動でインストールして登録する必要があります。`hpcsf00.dll` と `hpexfs00.exe` は、Microsoft Windows OS 上では動作しますが、UNIX 環境では動作しません。

## ファイルバリデーション関数

hpcsfs00.dll という DLL は、以下の 3 つの関数を実行します。

**SecureFile(filepath)** この関数は、指定したファイルの安全性を確保するためのタスクを行います。そのために、ファイルの「署名」を計算してファイルに付加します。この関数によって計算される署名は、RSA Data Security, Inc. の MD5 メッセージダイジェストアルゴリズムに基づく、24 桁のハッシュ値です。

**ValidateFile(filepath, key)** この関数は、ファイルの署名を再計算して、SecureFile() が保存した署名と照合します。署名が一致しない場合、またはファイルに署名がない場合には、ファイルに変更があるので、ValidateFile() はエラーコードを返します。なお、「key」というパラメータは、現在の実装では使われていません。

**UnsecureFile(filepath, key, newpath)** この関数は、ファイルから署名を削除して、削除後のファイルを「newpath」に書き込みます。なお、「key」というパラメータは、現在の実装では使われていません。

## 組み込みのセキュリティ方式をカスタムソリューションに取り替える

ChemStore C/S に装備されたセキュリティより、高度なセキュリティを必要とする場合には、hpcsfs00.dll を独自のファイルと交換することができます。

### 注

まず、regsvr32 を使って、Agilent 製の hpcsfs00.dll の登録を解除してから、新しい独自の hpcsfs00.dll を登録する必要があります。

新しい hpcsfs00.dll は、必ず、本セクションで説明するような 3 つの関数を装備している必要があります。

### Public Function SecureFile (strFilePath As String, strKey As String) As Long

この関数は、動作に成功したらゼロを返し、それ以外の場合にはエラーコードを返します。レポート生成機能は、テキストファイルへの書き出しが終わると、この関数を呼び出します。

**Public Function ValidateFile (strFilePath As String, strKey As String) As Long**

指定されたパスのファイルが安全であり、セキュリティ確保の作業後に改竄されていないかどうかをチェックします。

この関数は、ファイルが安全で署名が一致する場合にはゼロを返し、それ以外の場合にはエラーコードを返します。

実装によっては、「strKey」が使われない場合もあるので、注意してください。デフォルト実装では、この文字列を使わずに、ファイルに内容と一致する署名があることを確認することによって、ファイルを検証しています。ただし、暗号化によってファイルの安全性を確保するような実装においては、「strKey」が使われる可能性もあります。

**Public Function UnsecureFile (strFilePath As String, strKey As String) As Long**

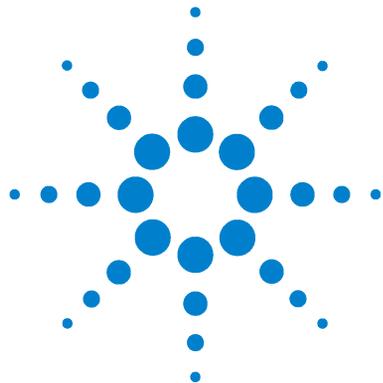
指定されたパスのファイルのセキュリティを解除します。

この関数は、動作に成功したらゼロを返し、それ以外の場合にはエラーコードを返します。

実装によっては、「strKey」が使われない場合もあるので、注意してください。デフォルト実装では、この引数を使わず、ファイル中の署名開始タグと終了タグの間に埋め込まれた署名を削除することによって（タグ自体はそのままファイルに残す）、セキュリティを解除します。ただし、暗号化によってファイルの安全性を確保するような実装においては、「strKey」が使われる可能性もあります。

## 5 データセキュリティ

### 印刷ファイルのバリデーションとセキュリティ



## 6 データ管理

データベースのバックアップ	170	
スタンドアロンバージョンのバックアップ	172	
クライアント / サーバーバージョンのバックアップ		176
ChemStation コンピュータのメンテナンス	178	
障害復旧計画	181	



## データベースのバックアップ

貴重なデータを保護するためには、適切なバックアップ戦略が欠かせません。定期的にデータファイルのバックアップをとるようにしてください。また、オンラインに配置する必要のなくなったデータも、アーカイブしてハードディスクから消去しておくとい良いでしょう。そうすることで、コンピュータのハードディスクの貴重な保管スペースを増やすことができます。

バックアップというのは、データベースのファイル（およびユーザーがバックアップすることを選んだ任意のファイル）を、コンピュータのハードディスクから、書き込み可能な CD-ROM や磁気テープなどの媒体にコピーする作業です。バックアップは、任意のコンピュータシステムに保存されている、あらゆる重要情報に対して行うことをお勧めします。バックアップを行う間隔は、バックアップデータの中で最も重要なデータを保護するために必要な頻度を基準に設定すると良いでしょう。データベース全体のバックアップを毎週行うのが一般的な方式ですが、サンプルの処理量が多い場合には、バックアップを毎日行わなければならないこともあります。

スタンドアロンバージョンのデータベースは MS Access ファイルであるため、「hpchem/database」フォルダの内容は、通常のバックアッププログラムを使って、他の媒体にコピーすることができます。

クライアント / サーバーのデータベースは Oracle データベースであるため、完全バックアップを行うためには、データベースインスタンスを停止する必要があります。

### 注

スタンドアロンバージョンとクライアント / サーバーバージョンのいずれの場合でも、バックアップ実行中はデータベースにアクセスできないので、定期的にダウンタイムを確保して、この重要なメンテナンス作業を行うようにしてください。

## バックアップかアーカイブか？

バックアップは、アーカイブとは違って（第5章「データセキュリティ」を参照）、常にデータセット全体に対して作用します。したがって、システム障害の際にも、システムの修復を終われば、データベース全体を復元することができます。

アーカイブを使うと、データベースのレコードを、データベースとは別のアーカイブユニットに、個別に転送することができます。アーカイブが済めば、転送されたレコードをデータベースから削除することも可能です。アーカイブを利用できるのは、クライアント/サーバーバージョンの ChemStore C/S だけであることに注意してください。

### 注意

ChemStore C/S で作成したアーカイブからレコードを復元できるのは、アーカイブ作成元のデータベースに対してだけであって、アーカイブを行っている場合でも、データベース全体のバックアップが重要である点を忘れないでください。

データベースをバックアップしておく、と、コンピュータシステムが障害を起こした際に、データベース全体を（アーカイブユニットも含めて）復元することができます。その反対に、アーカイブユニットからは、データベースを復元することはできません。データベースの定期的なバックアップが不可欠なのは、このためです。

## スタンドアロンバージョンのバックアップ

スタンドアロンバージョンのデータベースは MS Access ファイルであるため、データベースフォルダの内容を他の媒体にコピーする通常のバックアッププログラムを利用できます。バックアップ・復元ソフトウェアには、ほとんどの場合、書き込み可能 CD-ROM ドライブや磁気テープドライブなどのバックアップデバイスが付属しています。

### 注意

バックアップを行うためには、ファイルに対する排他的なアクセスが必要なので、バックアップ処理中は、ChemStore C/S クライアントや ChemStation ソフトウェアを停止するようにしてください。

### 注

データベースの復元元が CD-ROM 媒体である場合には、ファイルをディスクにコピーする際に、CD-ROM 媒体から一緒にコピーされる、読み取り専用のファイル属性を解除することを忘れないでください。読み取り専用属性を解除するには、復元後のファイルを右クリックして、コンテキストメニューから「プロパティ」を選択し、読み取り専用チェックボックスのチェックを外します。

MS Access データベースが損傷している場合には、修復するためのユーティリティが利用できます。このユーティリティは、スタンドアロンのアプリケーションで、[プログラム]メニューの [ChemStore C/S] グループから実行します。このユーティリティには、MS Access データベースを圧縮するための機能も用意されています。特に、データベースのランに対して、変更や削除を行っている場合には、データベースを定期的に圧縮しておくといでしょう。また、このユーティリティは、新たに空のデータベースを作成するのにも使用できます。新たに作成されたデータベースには、必要に応じて、既存データベースからの設定（クエリー、フィルタ、ユーザー設定、レポートテンプレートなど）を引き継ぐことができます。

データベースに修復不能な損傷が発生した場合には、損傷したファイルをコンピュータのハードディスクから削除してから、最新のバックアップセットからデータベースファイルを復元してください。損傷したファイルを削除したら、データベースの復元を行う前に、OS のソフトウェアに付属するディスクデフラグツールなどを使って、ハードディスクを最適化しておくことをお勧めしま

す。これにより、ハードディスク表面の物理的損傷が特定され、記憶領域から除外されることが保証されます。また、これにより、ディスクが、記憶領域および速度の両面で、最適な状態になることも保証されます。

## Windows 2000/XP のバックアップ

Windows 2000 と Windows XP には、相互に互換性のあるバックアッププログラムが用意されており、標準的なテープデバイスの多くに対応しています。また、OS 付属のバックアップユーティリティを使うと、バックアップしたデータを単一のファイルに格納し、そのファイルをオフライン媒体に保存することができます。これらのバックアップユーティリティは、データばかりでなく、Windows レジストリのバックアップを行うこともできます。

## Windows 2000/XP バックアップの自動化とスケジュール化

Windows では、バッチファイルやスケジューラサービスを利用することにより、バックアップジョブの自動化とスケジュール化を行うことができます。

スケジューラサービスが自動的に起動するように設定するには、[スタート] をクリックし、さらに、[ファイル名を指定して実行] をクリックします。そして、コマンドラインに「ntbackup」と入力します。

バックアップウィザードを使って、定期的にバックアップを行うジョブと、バックアップ対象のデータを定義します。詳細については、バックアップツールのオンラインヘルプを参照してください。

### 注意

スタンドアロンシステムの場合、レビュークライアントを開いた状態でバックアップを実行することは避けてください。このバックアップファイルは、データベースの復元には適していません。

バックアップをデータ取込中に行うことは避けてください。ハードディスクのパフォーマンスが悪化して、取り込まれるデータがハードディスクに十分な速度で書き込まれない可能性があり、これにより、装置のログブックに停電やバッファオーバーランのメッセージが記録されたり、データの損失を引き起こしたりすることがあります。

## テープドライブ

テープドライブは、現在利用できる、最も標準的なバックアップデバイスです。最も単純なテープドライブは、Travan テープ（以前の QIC-3020、QIC-3010、QIC-80、TR-3、TR-1 などのカートリッジの規格）の読み書きができるもので、最も安価なハードウェアの初期コストと、実用に耐えるパフォーマンス（最高 70 MB/min.）を両立させています。Travan テープでは、テープ一本あたり 2 GB 以上のデータを保存することができるので、MS Access データベースのバックアップに十分な容量があります。Travan テープのドライブは、内蔵の IDE ポートと外部パラレルポートのどちらにも接続することができ、テープ自体とドライブ以外の追加ハードウェアを必要としません。ただし、性能面の制約からして、サーバーのバックアップに Travan ドライブを使用することはお勧めできません。

DAT テープは、通常 SCSI ポートに接続され、Travan テープよりも大きな記憶容量とより高速のデータ転送速度を提供します。DAT テープは、繰り返し使用に対する信頼性においても、Travan テープを上回ります。DAT テープを利用するためには、SCSI アダプタのインストールが必要で、通常は内蔵と外付けの両方のデバイスを利用することができます。DAT テープは、低コストのバックアップ媒体として、小規模のサーバーシステム、大規模なスタンドアロンデータベースの両方で利用することができます。

DLT テープドライブも、バックアップによく使われる SCSI デバイスで、DAT テープドライブの 2～4 倍のバックアップ速度とデータ記憶容量を提供します。DLT ドライブは、クライアント/サーバー製品における Oracle データベースのバックアップに特に推奨します。

## CD-ROM

CD-R (CD-Recordable) システムでは、CD-R ディスク 1 枚当たり、最大 700MB のデータを記録することができます。CD リーダ/レコーダは、通常、PC の IDE インターフェイスに接続します。CD-R 媒体は、非常に寿命が長いので、アーカイブには最適です。アーカイブを記録した CD-R ディスクは、CD-ROM ドライブと必要なアプリケーションさえあれば、アーカイブを行ったコンピュータ以外のコンピュータからも読み取ることができます。

CD-R を使ってスタンドアロンの MS Access データベースのバックアップを行う場合は、各データベースのサイズを 700 MB 以下に制限する必要があります。

インストール CD の「G2181A」というフォルダには、データベースのサイズを自動的に監視するための NT サービスをインストールする、セットアッププログラムが収録されています。

**注意**

ChemStation がデータ取込を行っている場合、レビュークライアントが開いている場合は、Windows ベースのバックアップユーティリティによるバックアップを行うことは避けてください。これにより、バックアップ媒体に保存されたファイルの構造の整合性に矛盾が発生する可能性があります。

---

## クライアント / サーバーバージョンのバックアップ

ChemStore C/S サーバーの場合、データベースのバックアップと復元は、Oracle のツールで行います。詳細については、関連する Oracle のマニュアルを参照してください。

### 注

この作業は、Oracle の訓練を受けた専門家の監視下で実行することをお勧めします。

## Oracle のバックアップの種類

Oracle データベースで行われるバックアップには、一般に、コールドバックアップとホットバックアップの 2 種類があります。コールドバックアップが行われるのは、データベースインスタンスが動作していない時ですが、ホットバックアップは、データベースの使用中に行うこともできます。コールドバックアップと復元処理の例は、『ChemStore インストールガイド』の「管理タスクと参照情報」に記載されています。

### コールドバックアップ

コールドバックアップというのは、Oracle データベースを構成する全必要ファイルに対して行う、簡単なバックアップです。コールドバックアップを行うには、まず、データベースインスタンスを停止して、全ユーザーをデータベースから切断し、バックアッププロセスが、データベースファイルを排他的にロックできるようにする必要があります。バックアップの前にデータベースインスタンスを停止することを忘れると、バックアップセットからのファイルの損失や、データベース整合性の矛盾などを引き起こします。このような状態は、いずれも、バックアップセットから復元したデータベースが正常に動作しなくなるという結果を招きます。

### ホットバックアップ

ホットバックアップは、アーカイブログモードのデータベースに対して実行されるので、データベースインスタンスを停止することなく、バックアップを行うことができます。ただし、ChemStore C/S アプリケーションでは、サイズの大きいバイナリデータのレコードが使われているので、データベースをアーカ

## クライアント / サーバーバージョンのバックアップ

イブログモードで動作させると、パフォーマンスが著しく悪化します。したがって、アーカイブログモードでの動作はお勧めできません。ご利用になっているシステムが、アーカイブログモードでの連続動作を想定して最適化されていない限り、コールドバックアップだけを使用することにご覧ください。

## ChemStation コンピュータのメンテナンス

システムの正常な動作を確実にするためには、どのようなシステムにおいても、定期的なメンテナンスが不可欠です。

このセクションでは、定期的に行うべきメンテナンスの手順について説明します。この中には、不要になった一時ファイルのクリーンアップ、ファイルシステムの論理的・物理的構造についての整合性の検査、ウイルス検査、定期的なバックアップなどが含まれます。

### 不要になった一時ファイルのクリーンアップ

TEMP 環境変数によって指定されたディレクトリには、たまに、一時ファイルが溜まっていることがあります。この一時ファイルが残ってしまうのは、Windows を終了しないでコンピュータの電源を切った場合など、Windows が異常終了したときです。Windows 一時ファイルの名前は、「~XXXXXXXX.TMP」という形式になっています。この、XXXXXXXX は、その一時ファイルを作成したプログラムによって生成された文字や数字です。この一時ファイル用の領域を回復するためには、現在動作中のアプリケーションをすべて閉じてから、一時ファイルを削除する必要があります。

現在、一時ファイル用に使われているディレクトリを調べるには、コマンドプロンプトで「SET」と入力します。これにより、ユーザー環境変数とシステム環境変数すべての設定が表示されます。

### PC のファイルシステムのメンテナンス

#### NTFS ボリュームのスキャンと修復

NTFS ボリュームのスキャンや修復を行うには、コマンドプロンプトで CHKDSK という Windows のユーティリティを実行します。このプログラムには、MS DOS ベースの Chkdsk ユーティリティおよび Scandisk ユーティリティの機能が、ディスク表面のスキャンまで含めて、すべて備わっています。

表面スキャンを実行するには、「CHKDSK /R」と入力します。ディスク検査は、ディスクドライブの [プロパティ] ウィンドウで [ツール] タブを選択しても実行できます。

Windows 2000/XP では、ブートするたびに、自動検査ルーチンが実行されます。この自動検査ルーチンで、ボリュームに整合性エラーが検出されると、その修復のため、CHKDSK /F コマンドが自動的に実行されます。この CHKDSK /F コマンドが実行できない場合（たとえば、実行対象がブートパーティションである場合とか、実行対象パーティションにネットワークから誰かがアクセスしている場合など）には、このタスクは、次にシステムが再起動されるときまで延期されます。

### NTFS パーティションでの圧縮の使用

Windows の圧縮機能を使うとパフォーマンスが悪化するため、ChemStation Plus システムでこれを利用することは勧められません。ChemStation のデータ形式には、もともとかなりの圧縮データが含まれているので、普通は、ディスク自体に圧縮をかけても、あまり領域節約効果はありません。

### Windows 2000/XP による暗号化の使用

Windows の暗号化機能を使うと、パフォーマンスが悪化したり、データにアクセスできなくなったりする危険があるため、ChemStation Plus システムで暗号化機能を利用することは勧められません。ChemStation のデータはサイズの大きいものが多く、チェックサムで保護されたバイナリファイルに保存されているので、暗号化は不要であり、システムのパフォーマンスを悪化させるだけです。

## 連続稼働

数日もしくは数週間にわたって、クライアントシステムを再起動せずに、ChemStation Plus システムを連続的に稼働しなければならないような環境では、メモリやリソースのリークによって、時間とともにシステムのパフォーマンスが悪化することがあります。このような問題を解決するために、最新の Service Pack が公開され、Agilent でそれをサポートするようになったら、ただちにインストールを行うことをお勧めします。OS の Service Pack は、Microsoft のホームページから入手できます。

さらに、ハードディスクを、最低週 1 回、定期的にデフラグすることもお勧めします。

#### NTFS ボリュームのデフラグ

NTFS ボリュームでのファイルの断片化は、FAT ファイルシステムと比べると、かなり低減しています。NTFS ボリュームで断片化が発生するのは、設計上は、ファイルのサイズが、ドライブ上にあった時よりも大きくなったときだけです。つまり、ボリュームをテープにバックアップしてから、そのテープからボリュームを復元すると、断片化のないボリュームができるということです。

Windows 2000 Professional や XP には、この作業のための簡単なユーティリティが用意されています。また、Windows 2000 や XP のボリュームをデフラグすることのできる、サードパーティのプログラムもあります。このようなプログラムとして、Agilent では、Executive Software 社 (<http://www.execsoft.com/>) の Diskkeeper を推奨しています。

#### 注意

ハードディスクのデフラグを、データ取込中に行うことは避けてください。

システムのメンテナンスや管理に関する詳しい情報については、『ChemStore インストールガイド』の「管理タスクと参照情報」を参照してください。

## 障害復旧計画

ハードディスク障害のようなコンピュータシステムの障害から身を守るためには、データベース全体のコピーを含めた、障害復旧計画を定めておくといでしょう。障害復旧計画の目標は、さまざまな障害シナリオを想定した上で、どのような障害に対しても復旧が可能な手順を策定し実施することにあります。以下に、よく発生する障害をまとめます。

### ディスクドライブの故障

ディスクドライブが故障した場合には、システムを修復して、あらゆる機能をバックアップから復元する必要があります。

サーバーシステムの場合には、冗長なディスク構成を備えたハードウェア RAID コントローラを使って、単一ディスクドライブの故障が、故障時間やデータの損失に結びつかないようにすることをお勧めします。

### 停電

データベースシステムに停電が起き、システムが正常にシャットダウンされないと、データの損傷が発生する可能性があります。Oracle サーバーシステムでは、停電によるデータの損傷はさらに致命的なので、無停電電源装置が必要となります。

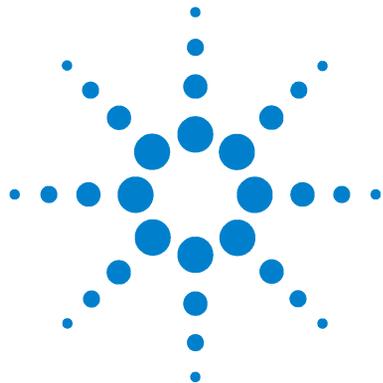
### データベースの損傷

データベースに損傷が発生してもデータを復旧できるようにするために、障害復旧計画には、定期的なバックアップの頻度や方法についても、定めておいたほうがよいでしょう。そうしておけば、データベースが損傷しても、最新のバックアップから復旧することができます。

## 6 データ管理

### 障害復旧計画

- 1 損傷の影響を受け、最新バックアップから復旧する必要があるファイルとディレクトリを、すべて削除します。
- 2 適切なデフラグユーティリティを使って、ディスクを最適化します。
- 3 バックアップからデータを取得して、復元を行います。



## 7 ChemStore C/S での計算

統計計算	184
カスタムフィールドによる計算	204
時間の計算	207



## 統計計算

### シングル値計算

以下の計算は、値の対を必要としません。

いずれの場合も、計算は ChemStore C/S ウィンドウまたはレポートに表示された現在のデータセットに基づいて行われます（「除外」としてマークされたランは除く）。

**数** 値の数を表示します。

$$\text{Number} = (n)$$

**合計** 値の合計を表示します。

$$\text{Sum} = (\sum X_i)$$

**最小値** 最も小さい値を表示します。

**最大値** 最も大きい値を表示します。

**平均** すべての値の算術平均（合計 / 数）を表示します。

$$\text{Mean} = \langle x \rangle = \frac{(\sum X_i)}{n}$$

**分散** 標準偏差の二乗（分散）を表示します。

$$\text{Variance} = s^2 = \frac{[\sum (x - \langle x \rangle)^2]}{(n - 1)}$$

**標準偏差** 値の標準偏差を表示します。

$$\text{Std. Dev.} = s = \sqrt{(\text{Variance})}$$

**相対標準偏差** 標準偏差を平均値で割って求めた相対標準偏差 (RSD) を表示します。パーセント値で表示する際には、RSD は 100 倍されます。

$$\frac{\text{RSD}}{\%} = \left( \frac{s}{\langle x \rangle} \right) 100$$

## 回帰計算

値の対に対応した計算は、加重直線回帰をベースにしています。この計算には、追加パラメータの指定が必要です。

このパラメータの指定は、統計計算の要求があった時点で行います。回帰計算のパラメータには、以下のものがあります。

曲線の種類	データを適合させる関数の種類を決めます。次の種類の関数をサポートしています。 <b>線形タイプ</b> : ゼロ次 (平均)、一次 (線形)、二次、三次 <b>非線形タイプ</b> : 指数、対数、べき乗
原点の扱い	原点 (0,0) をどのように扱うかを決めます。次の種類をサポートしています。 <b>無視</b> : データセットを「そのまま」使用します。特別な処理はしません。 <b>含む</b> : 実際のデータセットに原点 (0,0) を追加します。 <b>強制</b> : 曲線が必ず原点 (0,0) を通るように強制します。
重み付け	計算で値に重み付けする方法を、次の中から決めます。 1, $x$ , $x^2$ , $y$ , $y^2$

## 直線回帰モデル

ゼロ次、一次、二次、および、三次の曲線で使われる回帰モデルは、強制的に原点を通る曲線にするかどうかによって、次のどちらかになります。

$$y_i = a_0 + a_1x_1 + \dots + a_mx_i^m \quad (\text{I}) \text{ 原点を強制しない}$$

$$y_i = a_1x_1 + \dots + a_mx_i^m \quad (\text{II}) \text{ 原点を強制}$$

ここで、

$x_i$  は独立変数  $x$  の値

$y_i$  は従属変数 (測定値)  $y$  の値

$n$  はデータ点の数

$m$  は回帰の次数

$a_0 \dots a_m$  は計算される回帰係数

$y'_i$  は、この係数を用いて関数から計算された  $y$  の値  $a_0 \dots a_m$

注

$m = 0$  の場合には、(I) を使うべきで、この場合、求められた  $y'_i$  は、単なる  $y_i$  の平均値になります。

## 回帰の行列解

同じ回帰モデルは、以下のように、行列記数法で表すこともできます。

$$y' = Fa$$

ここで、

$y' = (y'_1 \dots y'_n)^T$  計算値の列ベクトル

$a = (a_1 \dots a_m)^T$  係数の列ベクトル  $F$  は、次の長方形列のどちらか（強制的に原点を通る曲線にするかどうかで決まる）

$$F = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^m \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^m \end{bmatrix} \text{ (I) の場合は、} [n \times (m+1)] \text{ 独立した値の行列になります。}$$

$$F = \begin{bmatrix} x_1 & x_1^m \\ \vdots & \vdots \\ x_n & x_n^m \end{bmatrix} \text{ (II) の場合は、} [n \times m] \text{ 独立した値の行列になります。}$$

係数ベクトル  $a$  の値は、次の式で求められます

$$a = F^\# y$$

ここで、

$y$  は従属変数のベクトル

$F^\# = V\Lambda^{-1}U^T$  は、特異値分解 ( $F = U\Lambda V^T$ ) によって求められた  $F$  の逆行列です。特異値分解は、丸め誤差や、非正則に近い行列において生じるさまざまな問題を最小限に抑えるのに役立つ、安定性の高い計算方法です。

## 統計値および関連する値

回帰係数が求められれば、以下の統計値や関連する値を計算することができます。

### 残差

測定された各  $y_i$  について、次のように計算されます。

$$e_i = y'_i - y_i$$

### サンプル標準偏差

この値は、データ全体に対して求められます。「残差標準偏差」とも呼ばれます。

$$s = \sqrt{\frac{\sum (y'_i - y_i)^2}{q}}$$

ここで、

$q = n - m - 1$  自由度の数、(I) の場合

$q = n - m$  自由度の数、(II) の場合

### 係数の標準偏差

この値は、 $(m+1)$  個の係数のそれぞれに対して求められます。係数の標準偏差  $s_{a_i}$ :

$$s_{a_i} = s \sqrt{(V \Lambda^{-2} V^T)_{ii}}$$

ここで、 $V, \Lambda$  は特異値分解で求めたものです。

### 相関係数（決定係数として表された）

この値は、データ全体に対して求められます。

$$R^2 = \frac{\sum (y'_i - y_{avg})^2}{\sum (y_i - y_{avg})^2}$$

ここで、

$y_{avg} = \sum y_i / n$  (I) の場合

$y_{\text{avg}} = 0$  (II) の場合

## 重み付け直線回帰の変形

重み付けを行う場合には、重みは行列  $W$  の対角線要素として保存されます。

$W = (w_{ii})$  重みの対角行列

$w_i$  重み  $(1 \text{ } \& x_i), (1 \text{ } \& x_i^2), (1 \text{ } \& y_i), (1 \text{ } \& y_i^2)$  のどれか)。

$x_i$ 、または、 $y_i$  がゼロに等しい場合、 $w_i$  は、他のゼロ以外の値の平均値として計算されます。

設定

$$\Phi = W^{-\frac{1}{2}} = \text{diag}((\sqrt{w_1}) \dots (\sqrt{w_n}))$$

回帰方程式の解は、以下のようになります。

$$a = (\Phi F)^{\#} \Phi y$$

ここで、

$(\Phi F)^{\#} = V \Lambda^{-1} U^T$  は、特異値分解によって計算された  $\Phi F$  の逆関数を表わします。

係数の標準偏差と相関係数の計算を変形すると、以下のようになります。

### 相対フィット誤差

$$s_w = \sqrt{\sum (w_{ii} (y'_i - y_i)^2) \text{ } \& q}$$

### 係数の標準偏差

$$s_{a_i} = s_w \sqrt{(V \Lambda^{-2} V^T)_{ii}}$$

### 相関係数（決定係数として表された）

$$R^2 = \frac{\sum (w_{ii}(y'_i - y_{\text{avg}})^2)}{\sum (w_{ii}(y_i - y_{\text{avg}})^2)}$$

ここで、

$$y_{\text{avg}} = \sum (w_{ii}y_i) / \sum (w_{ii}) \text{ (I) の場合}$$

$$y_{\text{avg}} = 0 \text{ (II) の場合}$$

## 非線形関数の変形

非線形関数の場合も、「線形化」が可能であれば、線形関数の場合と同一の直線回帰行列方程式を使ってデータへのフィッティングが行われます。

### 指数関数

「真の」方程式は、

$$y_i = a \cdot \exp(bx_i)$$

この方程式は、次のような、係数について線形な「フィッティング関数」として表わすことができます。

$$\ln(y_i) = \ln(a) + bx_i$$

実際には、変形された  $y$  の値は次式で計算されます。

$$Y_i = \ln(y_i)$$

この結果、回帰には次の式が使われます。

$$Y_i = a_0 + a_1x_i$$

### べき乗

$$y_i = ax_i^b \text{ 「真の」方程式}$$

$$\ln(y_i) = \ln(a) + b \ln(x_i) \text{ 係数での線形関数}$$

$$Y_i = \ln(y_i), X_i = \ln(x_i) \text{ x の値と y の値の変形}$$

## 7 ChemStore C/S での計算 統計計算

$Y_i = a_0 + a_1 X_i$  回帰で使用される関数

### 対数関数

$y_i = a + b \ln(x_i)$  真の式（係数で既に線形）

$X_i = \ln(x_i)$   $x$  の値の変形

$y_i = a_0 + a_1 X_i$  回帰で使用される関数

## カスタム計算コマンド

### SELECT

#### 構文：

```
SELECT <column list> FOR< compound list> WHERE <condition> INTO  
<table>
```

#### 説明：

このステートメントは、データベースの複数のテーブル中の選択した行から、データを取得して、カスタム計算テーブルに出力するために使います。予約語 **SELECT** の後には、<column list> として、データベーステーブルの列のリストを指定する必要があります。列リスト中の列は、普通の列でもサブ列でもかまいません。

サブ列は、<compound list> の **FOR** 節で指定された化合物のそれぞれについて利用できます。サブ列の先頭には、感嘆符「!」をつける必要があります。<column list> の中に 1 列でもサブ列が指定されると、**FOR** 節の指定は必須となります。**FOR** 節の化合物は、ワイルドカード「\*」を使って指定することもできます。単独のワイルドカードは、化合物のすべてを表します。ワイルドカードを化合物プレフィックスの後に付加すると、そのプレフィックスで始まるすべての化合物を表します。次の **FOR** 節は、「Bar」で始まる化合物、および「C」で始まる化合物のすべてを表します。

```
For Bar*,C*
```

**WHERE** 節はオプションで、<condition> 式を使うことにより、取得したテーブルのサブセットを指定します。結果のテーブルは、**INTO** 節の <table> で指定します。

### FROM

#### 構文：

```
FROM <table> SELECT<column list> FOR <compound list> WHERE  
<condition> INTO <table>
```

**説明：**

このステートメントは、特定のカスタム計算テーブル（ソーステーブル）からデータを取得して、他のテーブル（ターゲットテーブル）に出力するのに使います。ソーステーブルは、予約語 **FROM** の後に指定します。このステートメントの他の部分は、<column list> と <compound list> の部分を除いて、上記の **SELECT** 文と同じです。

**IF**

**構文：**

IF <condition> THEN <first assignment> ELSE <second assignment>

**説明：**

このステートメントは、条件代入に使われます。このステートメントの **ELSE** の部分はオプションです。条件が単一の値として評価され、かつ、<condition> 式が満たされた場合、<first assignment> が実行され、それ以外の場合には、<second assignment> が実行されます。条件が列として評価されても、代入が列の代入ではない場合、条件は、さらに列の各行に対する論理積として評価され、代入が行われます。条件と代入の両方が列として評価された場合、条件列の各行の値が条件を満たすかによって、行単位で代入が行われます。条件列の長さ (**m**) が、代入列の長さ (**n**) より大きい場合には、最初の **n** 行に対してだけ条件代入が行われます。条件列の残りの行は無視されます。条件列の長さ (**m**) が、代入列の長さ (**n**) より小さい場合には、最初の **m** 行に対してだけ条件代入が行われます。代入列の残りの行に対しては、何も行われません。

**FORMAT**

**構文：**

FORMAT <operand list> USING <format specification>

**説明：**

このステートメントは、列や変数データの書式指定に使います。<operand list> には、カンマで区切った列や変数のリストを指定し、<format specification> の文字列でその書式を指定します。ここで指定した書式が反映されるのは、出力データ（画面、印刷）だけで、実際のデータには影響はありません。

## 書式指定

書式指定は、オペランドの書式に対する指定を含む文字列です。書式指定中の書式に対する指定は、以下のサブセクションで説明する、書式指定文字によって行われます。特別な意味を持たない書式指定文字以外の文字は、そのまま表示されます。書式指定文字をそのまま表示したい場合には、その文字の前に円記号 (\) を付加するか、または、その文字の周囲を二重引用符 (") で囲みます。この場合、円記号や二重引用符そのものは表示されません。円記号を表示したい場合には、円記号を 2 つ続けて (\\) 入力します。

## 数値オペランドの書式指定

数値オペランドの書式指定は、セミコロンで区切られた 1 ~ 4 のセクションによって表現されます。

使用するセクション	結果
1 セクションのみ	その書式指定がすべての値に適用されます。
2 セクション	一番目のセクションは、ゼロおよび正の値に対して適用され、二番目のセクションは負の値に対して適用されます。
3 セクション	一番目のセクションは正の値、二番目のセクションは負の値、三番目のセクションはゼロに対して適用されます。
4 セクション	一番目のセクションは正の値、二番目のセクションは負の値、三番目のセクションはゼロ、四番目のセクションは NULL 値に対して適用されます。

次の書式指定には 2 つのセクションがあります。一番目のセクションは、ゼロおよび正の値の書式を指定し、二番目のセクションは負の値の書式を指定しています。

```
"$#,##0;($#,##0)"
```

間に何も置かずにセミコロンだけを続けて指定すると、そのセクションは正の値に対する書式を使って出力されます。たとえば、次の書式指定は、正負の値は一番目のセクションの書式を使って表示し、値がゼロの場合には「Zero」と表示します。

```
"$#,##0; \Z\e\r\o"
```

数値の書式指定には、以下の書式指定文字を使用することができます。

書式指定文字	説明
なし	数値を書式なしで表示します。
0	<b>数字用のプレースホルダー。</b> このプレースホルダーは、数字1文字、またはゼロを表示します。書式指定中の「0」の位置に対応するオペランドの桁に数字がある場合には、その位置にその数字が表示され、それ以外の場合にはゼロが表示されます。書式指定中の（小数点の前または後の）ゼロの数よりも、オペランドの桁数が少ない場合には、数値の前後にゼロが表示されることとなります。書式指定中の小数点区切りの右側にあるゼロの数よりも、オペランド中の小数点以下桁数の方が多い場合、オペランドの数値は、書式指定中のゼロの数に合わせて丸められます。書式指定中の小数点区切りの左側にあるゼロの数よりも、オペランド中の小数点以上の桁数の方が多い場合には、はみだした桁はそのまま表示されます。
#	<b>数字用のプレースホルダー。</b> このプレースホルダーは、数字1文字を表示するか、何も表示しないかのどちらかです。書式指定中の「#」の位置に対応するオペランドの桁に数字がある場合には、その位置にその数字が表示され、それ以外の場合にはその位置には何も表示されません。この記号は、書式指定中の小数点区切り前後の「#」文字の数より、オペランドの小数点前後の桁数が少ない場合に、前後にゼロが表示されない点を除けば、数字用のプレースホルダー「0」と同じように働きます。
.	<b>小数点用のプレースホルダー。</b> 小数点用のプレースホルダーは、小数点区切り文字の左右に表示される数字の数を決めます。書式指定中のこの記号の左側に「#」記号しかない場合、1未満の数の先頭は小数点だけになります。小数の先頭にゼロを表示したい場合には、小数点用プレースホルダーの左側の最初の数字用プレースホルダーを「0」にしてください。
%	<b>パーセント用のプレースホルダー。</b> この指定があると、オペランドは100倍されます。書式文字列中のパーセントのある位置に、パーセント文字(%)が挿入されます。

- 千桁区切りの文字。千桁区切りの文字は、数値の小数点区切りの左側に4つ以上の桁がある場合に、百の桁と千の桁の間を区切るのに使われます。千桁区切り文字を、通常の用法で使う場合には、書式指定中の数字用のプレースホルダー (0 または #) 同士の間指定します。また、千桁区切りを2つ並べて指定するか、小数点区切りのすぐ左に (小数点以下指定の有無は無関係) 指定すると、「オペランドを1000倍して、必要に応じて丸めることにより、単位を変更する」という意味になります。たとえば、「##0,」のような書式指定を使うと、100万を「100」と表示することができません。この場合、100万未満のオペランドは「0」と表示されます。小数点区切りのすぐ左以外の位置に、千桁区切りを2つ並べて指定した場合には、単なる千桁区切りとして扱われます。
- E- E+ e- e+ 科学的記数法数。書式指定中の、「E-」「E+」「e-」「e+」の右側に、少なくとも1個の数字用プレースホルダーがある場合、オペランドが科学的記数法で表示され、数値と指数との間には「E」または「e」が挿入されます。指数の桁数は、この左側の数字用プレースホルダーの数によって決まります。「E-」または「e-」は、指数が負の場合に、指数の左にマイナス記号を表示したいときに使います。「E+」または「e+」は、指数が負の場合には指数の左にマイナス記号を、指数が正の場合には指数の左にプラス記号を表示したいときに使います。

## 日時オペランドの書式指定

日時の書式指定には、以下の書式指定文字を使用することができます。

書式指定文字	説明
:	時間区切りの文字。時間区切りの文字は、時間値の書式指定を行う際に、時、分、秒を区切るのに使われます。
/	日付区切りの文字。日付区切りの文字は、日付値の書式指定を行う際に、年、月、日を区切るのに使われます。
C	日付は「dddd」時間は「ttttt」という形式で、日時の順で表示します。日時のシリアル値に小数部がない場合には日付情報のみ、整数部がない場合には時間情報のみが表示されます。
D	日を、頭のゼロなしで数値 (1 31) として表示します。
Dd	日を、頭にゼロを付けた数値 (01 31) として表示します。

## 7 ChemStore C/S での計算 カスタム計算コマンド

Ddd	曜日を、省略記法 (Sun Sat) で表示します。
Dddd	曜日を、フルスペル (Sunday Saturday) で表示します。
Ddddd	日付を、完全な年月日で表示します。日付を短く表示する際のデフォルトの書式は「m/d/yy」です。
Dddddd	日付のシリアル値を、完全な年月日として表示します。日付を長く表示する際のデフォルトの書式は「mmmm dd, yyyy」です。
W	曜日を数 (1 = 日曜 ~ 7 = 土曜) で表示します。
Ww	一年のうちの第何週目かを数 (1 54) で表示します。
M	月を、頭のゼロなしで数値 (1 12) として表示します。「m」の直後に「h」または「hh」がくる場合には、月ではなく分が表示されます。
Mm	月を、頭にゼロを付けた数値 (01 12) として表示します。「m」の直後に「h」または「hh」がくる場合には、月ではなく分が表示されます。
Mmm	月を、省略記法 (Jan Dec) で表示します。
Mmmm	月を、フルスペル (January December) で表示します。
Q	一年の中の第何四半期かを数 (1 4) で表示します。
Y	一年のうちの第何日目かを数 (1 366) で表示します。
Yy	年を 2 桁の数 (00 99) で表示します。
Yyyy	年を 4 桁の数 (100 9999) で表示します。
H	時を、頭のゼロなしで数値 (0 23) として表示します。
Hh	時を、頭にゼロの付いた数値 (00 23) として表示します。
N	分を、頭のゼロなしで数値 (0 59) として表示します。
Nn	分を、頭にゼロの付いた数値 (00 59) として表示します。
S	秒を、頭のゼロなしで数値 (0 59) として表示します。
Ss	秒を、頭にゼロの付いた数値 (00 59) として表示します。

ttttt	時間を、完全な時分秒で表示します。時間が午前または午後の 10 時より前で、頭にゼロを付けるオプションが選択されている場合には、頭にゼロを付けて表示されます。デフォルトの時間書式は「h:mm:ss」です。
AM/PM	12 時間表示を使い、正午より前の時間には大文字の「AM」を、正午から午後 11:59 までの間の時間には大文字の「PM」を付けて表示します。
am/pm	12 時間表示を使い、正午より前の時間には小文字の「am」を、正午から午後 11:59 までの間の時間には小文字の「pm」を付けて表示します。
A/P	12 時間表示を使い、正午より前の時間には大文字の「A」を、正午から午後 11:59 までの間の時間には大文字の「P」を付けて表示します。
a/p	12 時間表示を使い、正午より前の時間には小文字の「a」を、正午から午後 11:59 までの間の時間には小文字の「p」を付けて表示します。
AMPM	12 時間表示を使い、正午より前の時間には「AM」という文字列を、正午から午後 11:59 までの間の時間には「PM」という文字列を付けて表示します。

### 文字列オペランドの書式指定

文字列オペランドの書式指定は、セミコロン (;) 区切られた 1 ~ 2 のセクションによって表現されます。

使用するセクション	結果
-----------	----

1 セクションのみ

その書式指定がすべての文字列データに適用されます。

2 セクション

一番目のセクションは文字列データ、二番目のセクションは NULL 値、および、長さゼロの文字列 ("") に対して適用されます。

文字列の書式指定には、以下の書式指定文字を使用することができます。

書式指定文字	説明
@	<b>文字用のプレースホルダー。</b> このプレースホルダーは、文字 1 文字、またはスペースを表示します。書式指定中の「@」の位置に対応する文字列中の位置に文字がある場合には、その位置にはその文字が表示され、それ以外の場合にはスペースが表示されません。プレースホルダーは、書式指定文字列中に感嘆符文字 (!) がない限り、右から左の順に埋められます。
&	<b>文字用のプレースホルダー。</b> このプレースホルダーは、1 文字を表示するか、何も表示しないかのどちらかです。書式指定中の「&」の位置に対応する文字列中の位置に文字がある場合には、その位置にはその文字が表示され、それ以外の場合にはその位置には何も表示されません。プレースホルダーは、書式指定文字列中に感嘆符文字 (!) がない限り、右から左の順に埋められます。
<	<b>小文字の強制。</b> 文字をすべて小文字で表示します。
>	<b>大文字の強制。</b> 文字をすべて大文字で表示します。
!	<b>プレースホルダーを左から右へ埋めることの強制。</b> デフォルトでは、プレースホルダーは右から左へと埋められます。

## TRANSPOSE

### 構文:

Transpose <source table> by <column> into <destination table>

### 説明:

このステートメントは、カスタム計算テーブルの転置を行うのに使います。<source table> には転置するテーブルを、<destination table> には結果を出力するテーブルを指定します。<column> には、ターゲットテーブル中で列の名前（列見出し）として使う、ソーステーブル中の列を指定します。列の名前は、ターゲットテーブル中で一意でなくてはならないので、BY <column> で指定された列の中に複数回登場する名前を持つ列は、ターゲットテーブルに出力されません。結果のテーブルは、INTO 節の <destination table> で指定します。

## GROUP

### 構文 :

```
Group <source table> by <column> do <operation list> into <destination table>
```

### 説明 :

このステートメントは、複数の行に対して一連の操作を行う際に使います。<source table> には操作対象のテーブルを、<destination table> には結果を出力するテーブルを指定します。<source table> 中の行のグループは、BY <column> によって指定します。つまり、行のグループには、BY <column> で指定したのと同じ値を持つ行が含まれることになります。行のグループに対して行う操作は、<operation list> の中に、カンマで区切って指定します。操作リストの各要素に対しては、次の構文を使います。

```
<aggregate> ( <column> ) as <alias>
```

集計関数 <aggregate> は、<column> の各行グループに適用されます。この操作の結果が、ターゲットテーブル中の <alias> 列になります。結果のテーブルは、INTO 節の <destination table> で指定します。

## エラーコードとその説明

このセクションでは、カスタム計算によって発生するすべてのエラーについて説明します。このエラーの中には、構文エラーと実行時エラーの両方が含まれます。構文エラーは、計算式の構文チェック中に検出されるエラーです。構文エラーを含む計算式は、カスタム計算機能によって解釈できないので、評価されません。計算式中の構文エラーの位置は、カスタム計算により、赤い文字と (^) という位置マーカで示されます。このエラー位置マーカは、解釈不能な構文要素の直前を指しています。

評価されるのは、構文的に正しい計算式だけです。ただ、構文的に正しい計算式であっても、必要なデータが利用できなかったり、データ型や値が予定と異なっていたりすると、実行時エラーを起こすことがあります。実行時エラーの位置は、カスタム計算から追跡することはできません。

### 構文エラー

構文エラーは、構文チェックにより検出されます。構文エラーが発生すると、構文チェックはただちに中断され、対応するエラーメッセージが表示されます。計算式に複数の構文エラーが含まれている場合には、最初に検出されたエラーだけが表示されます。

コード	説明	原因
2	BY が予想されます	<b>by</b> がありません ( <b>transpose</b> ステートメント、および <b>group</b> ステートメント)。
4	DO が予想されます	<b>Do</b> がありません ( <b>group</b> ステートメント)。
5	行末が予想されます	ステートメントが、不必要で予想外の構文要素で終わっています。
6	'=' が予想されます	等号がありません (ステートメントの最初の語の綴りが間違っていて、変数名として認識されてしまった場合など)。
7	式が予想されます	式がありません (関係演算子を含んだ式の右辺がない場合など)。
8	係数が予想されます	係数がありません (*、/、または <b>and</b> 演算子の後の式で)。
9	FOR が予想されます	サブ列を含む文に <b>for</b> がありません。(select ステートメント、または <b>from</b> ステートメント)。
11	INTO が予想されます	<b>into</b> がありません (select ステートメント、 <b>from</b> ステートメント、 <b>transpose</b> ステートメント、および <b>group</b> ステートメント)。
12	'(' が予想されます	左括弧がありません (関数呼び出しで)。

14	名前が予想されます	名前が正しくありません（名前が文字で始まっていない）。
15	数字が予想されます	数字が正しくありません（数値の小数点の後に文字がある）。
17	')' が予想されます	右括弧がありません（関数呼び出しなどで、左括弧の数と右括弧の数が一致しない）。
18	SELECT が予想されます	<b>select</b> がありません（ <b>from</b> ステートメント）。
19	文字列が予想されます	文字列がありません（ <b>format</b> ステートメントの書式指定など）
20	項が予想されます	項がありません（+、-、または、 <b>or</b> 演算子の後の式で）。
21	THEN が予想されます	<b>then</b> がありません（ <b>if</b> ステートメント）。
22	USING が予想されます	<b>using</b> がありません（ <b>format</b> ステートメント）。
24	列タイプが無効です	サブ列としてサブ列でない列が指定されたか、またはサブ列としてサブ列が指定されていません（ <b>select</b> ステートメント、または <b>from</b> ステートメント）。
25	DB 列が予想されます	指定された列は、指定されたデータベーステーブルの列ではありません（ <b>select</b> ステートメント）。
26	DB テーブルが予想されます	指定されたテーブルがデータベースに存在しません（ <b>select</b> ステートメント）。
27	化合物が予想されます	指定された化合物がデータベースに存在しません（ <b>select</b> ステートメント、または <b>from</b> ステートメント）。
28	変数がありません	指定された変数が存在しません（ <b>format</b> ステートメント）。
29	テーブルがありません	指定されたテーブルが存在しません（ <b>format</b> ステートメント）。
30	列がありません	指定された列が指定されたテーブルに存在しません（ <b>format</b> ステートメント）。
32	テーブルはすでに存在します	INTO 節に指定したテーブルが既存のテーブルです（ <b>select</b> ステートメント、 <b>from</b> ステートメント、 <b>transpose</b> ステートメント、または <b>group</b> ステートメント）。
41	列名が重複しています	同じ化合物が複数回指定されています（ <b>select</b> ステートメント、または <b>from</b> ステートメント）。
42	列は読み取り専用です	データベースから直接または間接に取得したテーブルの列に、式を代入しました（列代入ステートメント）。

### 計算エラー

計算エラーのメッセージを、最終的なレポートに出力したいことがあります。これは、計算が行われるのはレポートが生成される瞬間であり、計算の結果はレポートに埋め込まれるので、このレポート生成時が、計算エラーのメッセージを見る唯一の方法だからです。

### 実行時エラー

実行時エラーは、実行時に検出されます。特定の計算行で発生した複数の実行時エラーは、1回のエラーとしてレポートされます。

コード	説明	原因
37	不正な引数	関数が不正な引数値で呼び出されました。
38	オーバーフロー	演算の結果が大きすぎます。
39	ゼロ除算	ゼロによる除算が行われました。
40	型の不一致	演算中のオペランドの型が一致しません。

### 不正な引数

この実行時エラーは、算術関数が不正な引数で呼び出された際に発生します。このエラーの原因となるのは、以下のような演算です。

- 算術関数 (**log**, **ln**) に、ゼロまたは負の引数を渡した場合。引数は定数、変数、または列です。
- 算術関数 (**sqrt**) に負の引数を渡した場合。引数は定数、変数、または列です。

### オーバーフロー

この実行時エラーは、演算の結果の数値が大きすぎたり小さすぎたりした場合に発生します。このエラーの原因となるのは、以下のような演算です。

- 加算 (+)、減算 (-)、乗算 (\*) を大きな数値オペランドに対して行った場合。オペランドは定数、変数、または列です。
- 除算 (/) をゼロまたはゼロに近い数値によって行った場合。オペランドは定数、変数、または列です。
- 算術関数 (**exp**, **sqr**)、または、集計関数 (**mean**, **rstdev**, **stdev**, **sum**, **var**) を大きなオペランドに適用した場合。引数は定数、変数、または列です。

- 否定 (not) を 2147483646 より大きな数値に対して行った場合。

### ゼロ除算

この実行時エラーは、ゼロでない値をゼロで除算した際に起こります。このエラーの原因となるのは、以下のような演算です。

- ゼロ以外のオペランドをゼロで除算 (/) した場合。オペランドは定数、変数、または列です。

### 型の不一致

この実行時エラーは、関数の引数や、演算子のオペランドの型が適切でない場合に起こります。このエラーの原因となるのは、以下のような演算です。

- 加算 (+)、減算 (-)、乗算 (\*)、除算 (/)、論理積 (and)、論理和 (or) を文字列や数値のオペランドに対して行った場合。オペランドは定数、変数、または列です。この場合、2つのオペランドのどちらが文字列でどちらが数値かは問題ではありません。
- 否定 (not)、符号の反転 (-) を文字列オペランドに対して行った場合。オペランドは定数、変数、または列です。
- 減算 (-)、乗算 (\*)、除算 (/)、論理積 (and)、論理和 (or) を文字列オペランド同士に対して行った場合。オペランドは定数、変数、または列です。
- 算術関数 (abs、exp、ln、log、sqr、sqrt)、または、集計関数 (mean、rstdev、stdev、sum、var) を文字列オペランドに適用した場合。引数は定数、変数、または列です。

## カスタムフィールドによる計算

21 ページの「カスタムフィールドの使用」で説明したように、カスタムフィールドを使用すると、スタンドアロンデータベースモデルには含まれていないサンプルに関連するデータを ChemStore C/S データベースに転送することができます。このデータは、62 ページの「カスタム計算スクリプトウィザードの理解」で説明したように、カスタム計算を用いて化合物に関連するデータを計算するために利用できます。

このセクションでは、組み込みマクロ関数を用いて、必要なデータを計算する一般的な方法を説明します。

### オリジナルレスポンスファクタ

オリジナルレスポンスファクタは、キャリブレーションテーブルの量を特定化合物のピーク面積で除して計算されるレスポンスファクタです。データベースのレスポンスファクタは、ChemStation のキャリブレーションテーブルに表示されるように、平均した後に計算されたレスポンスファクタのみを保存します。特定化合物のキャリブレーションランで各化合物のオリジナルレスポンスファクタを求めるには、ChemStoreCompoundVal 関数を使用します。

- 1 オリジナルレスポンスファクタを必要とする各化合物のカスタムフィールドを作成します。識別し易くするために、化合物名を含む命名規則を使用します。
- 2 スタディにカスタムフィールドを追加し、**[field details (フィールド詳細)]** ボタンを選択します。
- 3 データ入力セクションで、**[by ChemStation function]** を選択し、関数には「ChemStoreCompoundVal ("AmtPerRespOrg", "CompoundName")」と入力します。「CompoundName」には適切な化合物名を入れます。

## 組み込み関数のリスト

### ChemStoreAreaSum(signal\$)

関数 ChemStoreAreaSum は、指定したシグナルまたは全シグナルのクロマトグラムにある全ピーク面積の合計を計算します。シグナルを指定すると、そのシグナルのピークのみが合計されます。パラメータを省略すると、クロマトグラムの全ピークが合計されます。

パラメータ :

[signal\$]

シグナルの数値、シグナル全部の説明、あるいはシグナルを説明する最初の n 文字のいずれかを指定できます。パラメータは文字列なので、二重引用符「"」で括る必要があります。

#### 例 ChemStoreAreaSum ("2")

ChromRes[1].Signal の 2 番目のシグナルの全ピークを合計

ChemStoreAreaSum (1)

エラー - ChemStoreAreaSum ("1") が正しい

ChemStoreAreaSum ("")

読み込まれた全シグナルの全ピークを合計

ChemStoreAreaSum ("DAD1 B, Sig=305,190 Ref=550,100")

シグナル "DAD1 B, Sig=305,190 Ref=550,100" の全ピークを合計

ChemStoreAreaSum ("DAD1 B")

DAD1 のチャンネル B の全ピークを合計

## 7 ChemStore C/S での計算

### カスタムフィールドによる計算

#### **ChemStoreCompoundVal(expression\$,compound\$)**

関数 ChemStoreCompoundVal は、化合物 compound\$ の expression\$ で示される化合物ごとの値を返します。

パラメータ :

[expression\$] : 返す情報を指定

[compound\$] : ChemStation のキャリブレーションテーブルに表示される化合物名。化合物名に大文字と小文字の区別はない。

例 ChemStoreCompoundVal ("FirstPeak~MeasRetTime", "Biphenyl")

成分 "Biphenyl" として同定されたピークの保持時間を返す。

ChemStoreCompoundVal ("AmtPerRespOrg", "Biphenyl")

成分 "Biphenyl" のオリジナルレスポンスファクタを返す。

#### **ChemStoreCompoundText(expression\$,compound\$)**

関数 ChemStoreCompoundText は、化合物 compound\$ の expression\$ で示される化合物ごとのテキストを返します。

パラメータ :

[expression\$] : 返す情報を指定

[compound\$] : ChemStation のキャリブレーションテーブルに表示される化合物名。化合物名に大文字と小文字の区別はない。

例 ChemStoreCompoundText\$ ("FirstPeak~IntPeakType", "Biphenyl")

成分 "Biphenyl" のピークタイプを "BV" のように返す。ベースラインコードの詳細については、ChemStation のオンラインヘルプを参照してください。

# 時間の計算

## 時間の同期化

ChemStation Plus システムは複数のコンポーネントから構成されているので、システム全体が同一の時刻を示すように、個々の時計を同期させる必要があります。

クライアント PC およびサーバーの時計は、ネットワークの時刻を同期させる標準ネットワークツールを用いて同期させる必要があります。

Agilent 1100 LC システムのように、タイムスタンプ生成に使用されるリアルタイム時計を特色とする分析装置は、ChemStation のスタートアップ時に同期されます。

個々の Agilent 1100 シリーズ LC モジュールは、注入のたびにシステム内で新しいシステム時刻に同期されます。

## タイムスタンプ

ChemStation Plus システムのタイムスタンプは、イベントが発生するたびに生成されます。イベントには、サンプル注入、ディスクへのメソッド保存、データベースへのデータ転送終了、ランの承認などが相当します。一般に、タイムスタンプは次の 2 つの方法で保存します。

- ・ タイムゾーン設定を使うタイムスタンプ
- ・ タイムゾーン設定を無視するタイムスタンプ

ChemStore C/S データベース (Oracle または Access) におけるすべてのタイムスタンプは、サーバーやレビュークライアント PC の現在のタイムゾーン設定に関係なく保存されます。このことから、いずれか一方のコンピュータのタイムゾーン設定を変更しても、ChemStore C/S がレポートするタイムスタンプは一切変更されません。

ChemStation ログファイルでのタイムスタンプも、コンピュータのタイムゾーン設定に関係ありません。メソッドとシーケンスの開始 / 終了時刻、エラーメッセージおよび警告などがこれに該当します。

ただし、ChemStation データファイルとメソッドに関連するタイムスタンプには、これらが作成された PC のタイムゾーン設定が反映されます。注入時刻、キャリブレーション時刻、メソッド保存時刻などがこれに該当します。

このタイムゾーン設定への依存がはっきりするのは、データファイルがタイムゾーンを通過して送られた場合、あるいはレポートする PC のタイムゾーンがデータ取込後に変更された場合のみです。

### タイムゾーン

異なったタイムゾーンで発生したイベントを比較できるように、ChemStation では、常に協定世界時 (UTC) のタイムスタンプに依存するタイムゾーンを保存しています。UTC は基本的にはグリニッジ標準時 (GMT) と同じで、他のすべてのタイムゾーンのローカル時間は UTC を基にして計算されます。

注入時刻などのタイムスタンプに依存するタイムゾーンの保存は、ChemStation では次の方法で実行します。

- 1 イベントが発生します。
- 2 ローカル時刻をシステムから読み込みます。
- 3 コンピュータが置かれているタイムゾーンを表わすシステム変数 TZ が読み込まれます。
- 4 TZ とローカル時刻を基に、UTC が計算されます。
- 5 UTC が、1970 年 1 月 1 日 00:00:00 以降の秒数で保存されます。

注入時刻などのタイムスタンプに依存するタイムゾーンのレポートは、ChemStation では次の方法で実行します。

- 1 コンピュータが置かれているタイムゾーンを表わすシステム変数 TZ が読み込まれます。
- 2 ファイルから、UTC が 1970 年 1 月 1 日 00:00:00 以降の秒数として読み込まれます。
- 3 システム変数 TZ は、イベントが発生したとき、この PC のローカル時刻を計算するために使用されます。
- 4 1970 年 1 月 1 日 00:00:00 以降の秒数によるローカルイベント時刻は、選択した書式に従って変換されます。

これらの時刻 (時間) の保管とレポートは異なった時刻のコンピュータで発生することもあるため、タイムスタンプに依存するタイムゾーンはシステム変数 TZ の設定によって変化します。

## PC のタイムゾーン設定

Windows 2000 や Windows XP では、PC のタイムゾーンは、コントロールパネルのアプレット [日付と時刻] にある [タイムゾーン] タブによって設定できます。残念ながら、ChemStation はこの設定を読み込むことができないので、システム変数 TZ を正しい値に設定する必要があります。

ChemStore C/S クライアントインストールプログラムは、Windows のレジストリにシステム変数 TZ を設定します。PC のタイムゾーン設定がインストール後に変更された場合は、「マイコンピュータ」のプロパティパネルでシステム変数 TZ を手作業で更新する必要があります。

システム変数 TZ の修正についての説明は、『ChemStore インストールガイド』の「参照情報」セクションを参照してください。

### 注

コントロールパネルのタイムゾーンが (GMT+01:00) ブリュッセル、ベルリン、ベルン、ローマ、ストックホルム、ウィーンのように正の値に設定されている場合、TZ 変数は WES-01WED01 のように負に設定する必要がある点に注意してください。

## 7 ChemStore C/S での計算 時間の計算

# 索引

## C

cGMP 128  
ChemStation 12, 24, 52  
ChemStore と ChemStation のロ  
ック 129  
ChemStoreAreaSum 205  
ChemStoreCompoundText 206  
ChemStoreCompoundVal 206  
CHKDSK 179

## G

GLP 128  
GMT 208

## N

NT Service Pack 179

## O

ODBC 12

## Q

query  
builder 25

## R

RSD 48, 184

## S

Service Pack 179  
SQL 25

## T

TZ 208

## U

UTC 208

## W

WHERE 節 26

## X

XML 145

## あ

アーカイブ 15, 139, 171  
自動 139  
対話形式 143  
アップグレード 16

## い

インストール 12  
インテグリティ  
データ 128

## お

オペレータ 131  
重み付け 185

## か

回帰統計 37, 49, 185  
外部データ 21  
化合物リスト 46

化合物レビュー 37

数 184

カスタマイズしたレポート 15  
カスタムフィールド 20, 21, 25,  
34

カスタムフィールドステータス  
22

監査証跡 14, 31, 128

管理者 132

## き

危険限界 50

許可 128

曲線の種類 185

## く

クエリー 25, 136

クライアント / サーバーバージョ  
ン 12

グループ化 109

クロマトグラム 20, 98

## け

警戒限界 50

計算 98

シングル値 184

計算フィールド 102

係数

相関 187, 189

標準偏差 187, 188

結果

転送 13

結果テーブル 46

## 索引

結果の転送 13  
ケミスト 131  
限界線 50  
検索条件 25  
原点 185

## こ

合計 49, 184  
個数 48  
コントロールチャート 14, 22, 49

## さ

再解析 52  
再解析ラン 52  
最小値 48, 184  
最大値 48, 184  
サマリ結果テーブル 46  
サマリサンプルテーブル 42  
サマリ統計 48, 184  
残差 187  
残差標準偏差 187  
サンプル間レポート 22  
サンプルテーブル 42  
サンプル標準偏差 187  
サンプルレビュー 36, 38

## し

軸  
    チャート 42, 46  
シーケンス 20, 125  
シーケンスサマリレポート 125  
シーケンスファイル 24  
指数関数 189  
実数 22  
自動アーカイブ 139  
障害復旧計画 181  
条件  
    検索 25

承認ステータス 28, 42, 46  
情報の取得 25  
書式  
    数値 47  
真偽値 22  
シングル値計算 184

## す

数値の書式 47  
数値の精度 47  
スケラビリティ 16  
スタディ 20, 25, 135  
スタンドアロンバージョン 12  
ステータス  
    カスタムフィールド 22  
    承認 28, 42, 46  
スペクトル 20, 98

## せ

整数 22  
精度  
    数値 47  
セカンドツールバー 39, 44  
セキュリティ 129  
    データ 128  
セクションヘッダー 102  
セクション 95  
セッションのロック 129  
設定  
    ユーザーインターフェイス 50  
設定ダイアログボックス 125  
線  
    限界 50  
選択リスト 22

## そ

相関係数 187, 189  
相対標準偏差 48, 184  
相対フィット誤差 188

装置間レポート 22  
相補フィルタ 28  
損傷したデータベース 172, 181

## た

対数関数 190  
タイムスタンプ 207  
タイムゾーン 208  
対話形式アーカイブ 143  
タグ  
    段落 58  
段落タグ 58

## ち

チャート 98, 104  
    コントロール 49  
チャート軸 42, 46, 97  
中心線 50  
直線回帰 185

## つ

通知  
    電子メール 161  
ツリービュー 93  
ツールバー  
    セカンド 39, 44  
    メイン 33

## て

デアーカイブ 15, 139  
ディスクの最適化 173  
データインテグリティ 128  
テキスト 22

## データ

- エクスポート 15
- 外部 21
- 取得 13
- 整理 13
- 転送 24
- レビュー 14
- データセキュリティ 128
- データセクション 93, 98, 99
- データセット 92
- データタイプ 136
- データ入力 136
- データのエクスポート 15
- データの取得 13
- データの種類 22
- データの整理 13
- データのレビュー 14
- データフロー 19
- データベース
  - 損傷した 172
- テーブル 96, 98, 102
  - 結果 46
  - 構成 47
  - サマリ結果 46
  - サンプル 42
  - サマリサンプル 42
- テーブルの構成 47
- 電子メール通知 161

## と

- 統計 38, 43, 48
  - 復帰 37, 185
  - サマリ 48, 184
- 統計値 110
- トランザクションログ 128
- トレンドチャート 14
- トレンド分析 22

## な

- 生データ 20, 52
- 生データファイル 24

## に

- 日時 22

## は

- バージョン 28, 53
  - 番号 53
- パスワード 128, 129
- バックアップ 170
  - 戦略 170
- ハッシュ値 166
- バッチ 42, 46, 52
- バッチレビュー 29
- バリデーション、ファイル 165

## ひ

- 日付表示形式 47
- 標準偏差 48, 184
  - 係数 187, 188
  - 残差 187
  - サンプル 187
  - 相対 48

## ふ

- ファイル
  - 再読み込み 52
  - 損傷した 172
- ファイルの再読み込み 52
- ファイルのバリデーション 165
- フィルタ 27, 138
  - 相補 28
- フッター 98
- プレビュー 125
- 分散 48, 184
- 分析対象化合物 46

## へ

- 平均 184
- 平均値 48
- べき乗 189
- ページ区切り 98
- ページフッター 98
- ページヘッダー 93, 98
- ヘッダー 98

## ほ

- ポストシーケンスレポート 125

## ま

- マクロ 136
- マネージャ 132

## め

- メインツールバー 33
- メソッド 20
- メソッドファイル 24
- メニュー 35

## ゆ

- ユーザーインターフェイス設定 50, 138
- ユーザー許可 128, 131
- ユーザープロファイル 128, 132

## よ

- 要素 94, 98

## ら

- ラボマネージャ 132

## 索引

ラン 20, 147  
 却下 46, 42, 52  
 再解析 52  
 承認 14, 42, 46, 52  
 マーク付け 42, 46, 52  
ランの却下 46, 42, 52  
ランの削除 55  
ランの承認 14, 42, 46, 52  
ランの除外 42  
ランのデアーカイブ 147  
ランのマーク付け 42, 46, 52  
ランリスト 41

## れ

列 97  
レビュー  
 化合物 37  
 サンプル 36, 38  
レポートテンプレート 138  
レポート 15, 90  
 カスタマイズ 15  
 サンプル間 22  
 装置間 22  
レポートテンプレートエディタ  
 90

## ろ

ログブック 164

## わ

ワークフロー 18



## 本書の内容

本書では、Agilent ChemStore C/S の中核となるコンセプトについて紹介します。ここでは、本製品の主な特徴に焦点を当て、スタディのセットアップやデータの管理について説明します。

以下のような説明が含まれます。

- Agilent ChemStore C/S の特徴や機能の概要。
- Agilent ChemStore C/S の操作についての詳細。
- さまざまなラボやユーザーのニーズに応じた Agilent ChemStore C/S セットアップの詳細。
- Agilent ChemStore C/S が提供する総合的な統計計算スイートを使った計算方法の詳細。

© Agilent Technologies 2002, 2004

Printed in Germany  
03/04



G2181-96010



**Agilent Technologies**