# **ChemStation Agilent**



# Avertissements

© Agilent Technologies, Inc. 2006, 2007-2009

Conformément aux lois nationales et internationales relatives à la propriété intellectuelle, toute reproduction totale ou partielle de ce manuel sous quelque forme que ce soit, par quelque moyen que ce soit, voie électronique ou traduction, est interdite sans le consentement écrit préalable de la société Agilent Technologies, Inc.

#### Référence du manuel

G2170-93043

#### **Edition**

2/2009

Imprimé en Allemagne

Agilent Technologies Hewlett-Packard-Strasse 8 76337 Waldbronn

# Utilisation à des fins de recherche uniquement.

Ne pas utiliser dans les procédures de diagnostic.

#### **Révision du logiciel**

Ce guide vaut pour les versions B.04.xx du logiciel ChemStation Agilent, xx se rapportant à des révisions mineures du logiciel qui n'affectent pas l'exactitude technique de ce guide.

#### Garantie

Les informations contenues dans ce document sont fournies "en l'état" et pourront faire l'objet de modifications sans préavis dans les éditions ultérieures. Dans les limites de la législation en vigueur, Agilent exclut en outre toute garantie, expresse ou implicite, quant à ce manuel et aux informations contenues dans ce dernier, notamment, mais sans s'y restreindre, toute garantie marchande et aptitude à un but particulier. En aucun cas, Agilent ne peut être tenu responsable des éventuelles erreurs contenues dans ce document, ni des dommages directs ou indirects pouvant découler des informations contenues dans ce document, de la fourniture, de l'usage ou de la qualité de ce document. Si Agilent et l'utilisateur ont souscrit un contrat écrit distinct dont les conditions de garantie relatives au produit couvert par ce document entrent en conflit avec les présentes conditions, les conditions de garantie du contrat distinct se substituent aux conditions stipulées dans le présent document.

### **Licences technologiques**

Le matériel et le logiciel décrits dans ce document sont protégés par un accord de licence et leur utilisation ou reproduction sont soumises aux termes et conditions de ladite licence.

#### Mentions de sécurité

#### ATTENTION

Une mention **ATTENTION** signale un danger. Si la procédure, le procédé ou les consignes ne sont pas exécutés correctement, le produit risque d'être endommagé ou les données d'être perdues. En présence d'une mention **ATTENTION**, vous devez continuer votre opération uniquement si vous avez totalement assimilé et respecté les conditions mentionnées.

#### AVERTISSEMENT

Une mention AVERTISSEMENT signale un danger. Si la procédure, le procédé ou les consignes ne sont pas exécutés correctement, les personnes risquent de s'exposer à des lésions graves. En présence d'une mention AVERTISSEMENT, vous devez continuer votre opération uniquement si vous avez.

### Dans ce guide...

Dans les laboratoires d'analyses, les données de chromatographie doivent être acquises efficacement en un minimum de temps. L'interprétation de résultats ambigus peut-être laborieuse et peut entraîner des coûts administratifs élevés. Depuis la version B.02.01 de ChemStation, les fonctionnalités d'enregistrement et de recherche de données se sont améliorées pour permettre une révision rapide et un retraitement des résultats.

Ce manuel décrit comment améliorer la productivité de votre laboratoire par l'utilisation efficace des nouvelles fonctions d'enregistrement et de récupération de données dans ChemStation B.04.01.

#### 1 Structure des données de ChemStation

Ce chapitre donne un aperçu des différences entre la structure de données utilisée dans les versions de ChemStation antérieures à B.02.01 et la nouvelle structure de données de la version B.02.01 et des versions ultérieures.

#### 2 Acquisition de données

Ce chapitre explique comment la nouvelle structure de données influence la procédure pour l'acquisition des données pour des séquences et des analyses uniques.

#### 3 Traitement des données

Ce chapitre décrit les options disponibles pour le traitement et la révision des données, et explique comment le facteur de la structure des données influence votre choix d'options.

#### 4 Procédure avec la fonction "Unique Folder Creation" désactivée

Ce chapitre vous explique comment utiliser la fonction **Unique Folder Creation** désactivée. Elle vous permet d'enregistrer des données comme dans la version B.01.03 de ChemStation ou les versions antérieures. Ce mode ne tire pas pleinement parti des dernières fonctionnalités de révision et de retraitement des données de ChemStation.

# Sommaire

#### 1 Structure des données de ChemStation 5

Version du logiciel ChemStation antérieure à B.02.01 6 ChemStation version B.02.01 et versions ultérieures 7

#### 2 Acquisition de données 11

Acquisition de données 12

#### 3 Traitement des données 19

Traitement des données20Traitement de données : Révision des données23Interface utilisateur de ChemStation durant la révision des données30Traitement de données : Retraitement des données33

#### 4 Procédure avec la fonction "Unique Folder Creation" désactivée 37

Utilisation de la fonction de "Unique Folder Creation" activée ou désactivée ? 38 Procédure avec la fonction "Unique Folder Creation" désactivée 40 Migration du conteneur de séquence 44



**Procédure ChemStation** 

1

# Structure des données de ChemStation

Version du logiciel ChemStation antérieure à B.02.01 6

ChemStation version B.02.01 et versions ultérieures 7

Ce chapitre donne un aperçu des différences entre la structure de données utilisée dans les versions de ChemStation antérieures à B.02.01 et la nouvelle structure de données de la version B.02.01 et des versions ultérieures.



# Version du logiciel ChemStation antérieure à B.02.01

Dans les versions de ChemStation antérieures à B.02.01, les séquences, les méthodes et les fichiers de données générés ainsi que les résultats étaient conservés à des emplacements fixes, spécifiés et séparés. Par exemple, les méthodes étaient référencées par nom dans une séquence et l'utilisateur était responsable de la maintenance de la totalité des méthodes, des séquences et des fichiers de données. C'est la raison pour laquelle l'archivage de données à long terme et la reproduction de résultats constituaient une tâche fastidieuse. Les utilisateurs devaient consigner le chromatogramme, les résultats, et la méthode associée ; c'était non seulement le cas pour les laboratoires réglementés, mais aussi pour certains domaines de laboratoires non réglementés (par exemple, des laboratoires environnementaux). Dans les versions de ChemStation antérieures à B.02.01, l'impression de toutes les données dans un rapport était la seule manière d'y parvenir.

# ChemStation version B.02.01 et versions ultérieures

Afin de renforcer l'association entre les fichiers de données et les méthodes, le nouveau schéma d'organisation de données qui suit a été mis en oeuvre avec la version B.02.01 de ChemStation et les versions ultérieures. Lorsqu'il est utilisé avec ChemStation, le *Gestionnaire des contenus d'entreprise (ECM) OpenLAB Agilent* utilise également le nouveau concept de données, l'ensemble complet des données (séquence/méthodes/fichiers de données) pouvant désormais être transféré (archivé) vers l'ECM en tant qu'entité unique.



Figure 1 Acquisition de séquence dans la version B.02.01 et dans les versions ultérieures

Les méthodes se trouvant dans le dossier Chem32\1\methods servent de méthodes de référence, c'est-à-dire que pendant l'acquisition et le traitement des données, elles demeurent inchangées.

1

De façon similaire, les séquences du dossier Chem32\1\sequence servent de modèles de séquence que l'on peut utiliser pour reprendre (mais pas retraiter) plusieurs fois une séquence.

Le schéma d'enregistrement des données varie selon que l'on acquiert des données d'analyse unique ou des données de séquence :

- 1 Lorsque l'on exécute une séquence, un nouveau dossier est automatiquement créé (**sequence container**) avec un nom unique dans le sous-répertoire spécifié. Lorsque l'on exécute un échantillon unique, le fichier de données (\*.d) est placé dans le sous-répertoire spécifié.
- 2 Pour les données de séquence, le modèle de séquence exécuté (\*.s) et toutes les méthodes (\*.m) concernées sont copiés dans le conteneur de séquence. Les copies des méthodes prennent le nom de sequence methods afin de les distinguer des méthodes de référence originales.

Toutes les tâches relatives à une séquence (par exemple, acquisition et traitement des données) sont effectuées sur les copies de la séquence et des méthodes. Par conséquent, le modèle de séquence et les méthodes de référence demeurent inchangés pour une exécution ultérieure de la séquence.

Toutes les modifications apportées à la séquence durant l'acquisition de séquence, par exemple, l'ajout de lignes à la table de séquence, sont effectuées sur la copie du fichier de séquence dans le conteneur de séquence. Le modèle de séquence reste inchangé.

De manière similaire, toute modification de la méthode, telle que des mises à jour de la table d'étalonnage dans le cas d'exécutions d'étalonnage, est répercutée sur les méthodes de séquence, mais pas sur les méthodes de référence.

Pendant l'exécution de la séquence, tous les fichiers de données générés (\*.d) sont enregistrés dans le dossier des données de séquence, avec le fichier batch (\*.b) et le fichier journal de séquence (\*.log) correspondants.

- **3** Chaque fichier de données contient deux copies de la méthode utilisée pour créer l'analyse.
  - La première, appelée ACQ.M, est sauvegardée directement lorsque la partie acquisition de la méthode est terminée.
  - La deuxième copie, appelée DA.M, est sauvegardée lorsque la partie analyse des données est terminée.

Les deux méthodes contiennent l'ensemble des paramètres de méthode, notamment les paramètres d'acquisition et de traitement des données. Le fichier ACQ.M a pour fonction d'assurer la conservation des paramètres d'origine de la méthode pour chaque fichier de données spécifique. Les paramètres d'acquisition peuvent être affichés et imprimés dans la vue Traitement des données.

Le fichier DA.M peut être modifié durant l'analyse des données afin de stocker les paramètres d'analyse des données qui ne s'appliquent pas à toutes les analyses d'une séquence, mais qui sont spécifiques à un certain fichier de données, par exemple, des événements d'intégration temporisés.

Les chapitres suivants expliquent de façon plus détaillée l'impact de cette structure sur les procédures typiques. Les paramètres correspondants dans les boîtes de dialogue de ChemStation sont également indiqués.

1

### **1** Structure des données de ChemStation

ChemStation version B.02.01 et versions ultérieures



**Procédure ChemStation** 

2

# Acquisition de données

Acquisition de données12Acquisition de données dans une séquence13Acquisition de séquence partielle15Acquisition de données d'analyses uniques17

Ce chapitre explique comment la nouvelle structure de données influence la procédure pour l'acquisition des données pour des séquences et des analyses uniques.



#### 2 Acquisition de données Acquisition de données

# Acquisition de données

Grâce à la version ChemStation B.02.01, une sauvegarde plus souple des données des analyses uniques et des séquences vous permet de spécifier divers emplacements de sauvegarde sans reconfiguration. L'onglet **Paths** de la boîte de dialogue **Preferences** du menu **View** vous donne la possibilité d'ajouter plusieurs chemins d'accès, en plus du chemin d'accès par défaut C:\chem32\x\ DATA (où x est le numéro d'instrument). Avec les boutons **Add** et **Remove**, il est possible de supprimer facilement des chemins d'accès vers ce nouvel emplacement choisi et d'ajouter le chemin d'accès vers ce nouvel emplacement dans **Preferences**. Il n'est pas possible de supprimer le chemin d'accès par défaut de la liste, mais on peut le modifier dans le **Configuration Editor**.

Preferences	
Paths Sequence Signal/Review Options	
C Sequence Paths	
C\Chem32\1\SEQUENCE\ E:\My ChemStation Files\Sequences\	<u>A</u> dd
Data Paths	
C:\Chem32\1\DATA\ E:\My ChemStation Files\Data\	<u>A</u> dd
	<u>R</u> emove
Method Paths	
C:\Chem32\1\METHODS\ E:\Mu ChemStation Files\Methods\	<u>A</u> dd
	<u>R</u> emove
OK Cancel Help	

Figure 2 Boîte de dialogue Preferences/Onglet Paths

Il est alors possible de sélectionner tous les nouveaux chemins d'accès de données spécifiés dans les boîtes de dialogue **Sample Info** /**Sequence Parameters** lorsque l'on effectue des analyses.

Sequence Parameters: Instrument 1	×
Operator Name: Joe Smith	
Data File Pate: E:\My ChemStation Files\Data\ C:\Chem32\1\DATA\ C:\ChemStation Files\Data\ Counter: Counter:	Subdirectory: SUBDIRECTORY
C Prefix/Counter SIG1 000001	
Part of <u>m</u> ethods to run	Shutdown
According to Runtime Checklist	Post-Sequence Command/Macro
Use Seguence Table Information	
Wait 0 minutes after loading a new method	Not Ready Timeout: 0 minutes
Sample Info: Instrument 1	
Operator Name: Joe Smith	
Data File Peth: E:\My ChemStation Files\Data\	SUBDIRECTORY
C <u>M</u> anual Prefix SIG1 ● <u>P</u> refix/Counter	Counter:

Figure 3 Sélection du chemin d'accès des données

### Acquisition de données dans une séquence

Pour exécuter une séquence, il faut que les méthodes prédéfinies appropriées soient disponibles. Il s'agit des méthodes de références décrites précédemment. Typiquement, on travaille sur les méthodes de référence et les modèles de séquence dans la vue **Method and Run Control** de ChemStation. Pour cette raison, dans la vue **Method and Run Control**, l'explorateur de ChemStation propose un accès aux méthodes de référence et aux modèles de séquence.

Le modèle de séquence référence ces méthodes dans la table de séquence.

Comme expliqué précédemment, lorsque l'on exécute une séquence en utilisant un modèle de séquence nom\_séquence.S, et la méthode de référence nom\_méthode.M, un nouveau dossier contenant tous les fichiers issus de l'analyse de séquence ("conteneur de séquence") est créé.

L'emplacement de ce dossier est déterminé par les paramètres de la boîte de dialogue **Sequence Parameters** ; l'attribution du nom de ce dossier est déterminée par l'onglet **Sequence** de la boîte de dialogue **Preferences**. Par défaut, le nom est <nom\_séquence> <date\_acquisition> <heure\_acquisition>, mais on peut le configurer en utilisant les paramètres Opérateur, Instrument, Compteur, et Nom du PC ; vous pouvez également saisir manuellement n'importe quel nom. Si le **Name Pattern** ne donne pas des noms uniques pour les conteneurs de séquence, ChemStation ajoutera un compteur pour garantir le caractère unique.

eferen	ces		
Paths	Sequence Signal/Review Options		
Data	a Storage		
	Unique Folder Creation ON		
	Creates a unique data folder for each sequence run. See Help for more deta	uls.	
	C Unique Folder Creation OFF		
	Stores data as in ChemStation B.01.03 or earlier. This mode does not take a data review and reprocessing functionality in ChemStation.	dvantage of I	he latest
Nam	e Pattern		
	<seqn> <date> <time></time></date></seqn>		
	DEF_LC 2008-04-22 08-48-42	<date> <time> <user> <inst></inst></user></time></date>	Date Time Operator Name Instrument Name
	OK Cancel Help	- <seqn> <num#> <comp></comp></num#></seqn>	Sequence Nam Counter Computer Nam

Figure 4 Boîte de dialogue Preferences/Onglet Sequence

Au début d'une séquence d'acquisition, la méthode spécifiée dans la table de séquence est copiée du dossier des méthodes de référence dans le conteneur de séquence. De plus, une copie de la séquence est créée et placée avec le journal de séquence et le fichier batch (\*.b) dans le conteneur de séquence. Toutes les mises à jour de la méthode (par exemple, les mises à jour de la table d'étalonnage) sont inscrites dans cette méthode de séquence se trouvant dans le conteneur. Tous les fichiers nécessaires sont à présent disponibles pour une révision et un retraitement ultérieurs des données, sans les modifications qui ont été appliquées à la méthode de référence ou au modèle de séquence pour d'autres analyses de séquence.

Durant l'acquisition, les fichiers de données sont stockés dans le conteneur de séquence. Dans chaque fichier de données (\*.D), deux méthodes supplémentaires, ACQ.M et DA.M, sont sauvegardées pour cette analyse spécifique. Ces deux méthodes sont des copies de la méthode de séquence, en conservant l'état initial de la méthode lors de l'acquisition du fichier de données spécifique. Par exemple, dans le cas de mises à jour de la table d'étalonnage, les méthodes DA.M diffèrent pour chacune des analyses.

La méthode d'acquisition individuelle ACQ.M est prévue pour conserver les paramètres d'acquisition ; il est par conséquent recommandé de ne pas changer cette méthode lors d'activités ultérieures de révision de données. Dans la vue **Data Analysis**, il est possible d'afficher et d'imprimer les paramètres d'acquisition de cette méthode.

Avec ces fichiers sauvegardés dans le dossier de séquence, il est possible d'effectuer toutes les activités de révision et de retraitement des données, sans modifier la méthode de référence ou le modèle de séquence. Si nécessaire, on peut également sauvegarder à nouveau des modifications de méthode dans la méthode de référence.

### Acquisition de séquence partielle

Dans le cas d'une acquisition de séquence partielle, l'utilisateur a le choix entre deux options :

• l'acquisition de la séquence partielle dans un nouveau conteneur de séquence,

ou

• l'acquisition de la séquence partielle dans un conteneur de séquence existant.

L'acquisition des fichiers de données à partir d'une exécution de séquence partielle dans un conteneur de séquence existant peut être utile dans les scénarios suivants :

### 2 Acquisition de données

Acquisition de données

- Un fichier de données unique ou plusieurs fichiers de données doivent être écrasés, par exemple parce qu'un flacon incorrect a été utilisé en premier lieu.
- Seule la première partie de la séquence a été exécutée en premier lieu, et les échantillons manquants doivent être ajoutés en exécutant une séquence partielle. Ceci peut se produire en cas de panne d'un instrument durant l'acquisition de séquence.
- Des lignes additionnelles doivent être ajoutées au modèle de séquence après l'acquisition des lignes existantes. Les analyses additionnelles doivent être ajoutées aux données existantes.

Par conséquent, lorsque l'utilisateur sélectionne **Partial Sequence** dans le menu **Sequence**, une boîte de dialogue apparaît, permettant de sélectionner un conteneur de séquence existant dans une liste ou de créer un nouveau conteneur de séquence.

Directory		Date	Number of data files
E:\My ChemStation Files\Data\S	UBDIRECTORY\SEQUENCE_NAME 2008-04	4/22/2008 9:41:09 AM	6
E:\My ChemStation Files\Data\S	UBDIRECTORY\SEQUENCE_NAME 2008-04	4/22/2008 9:28:55 AM	6
: \My ChemStation Files\Data\S	UBDIRECTURY\SEQUENCE_NAME 2008-04	4/22/2008 9:10:40 AM	6
2: My Chemstation Files/Data/S	UBDIRECTORY (SEQUENCE_NAME 2008-04+	4/22/2008 8:55:47 AM	ь

Figure 5 Boîte de dialogue Partial Sequence

Cependant, afin de maintenir la cohérence du conteneur de séquence (afin qu'il puisse être complètement retraité dans le module **Data Analysis**), seuls les conteneurs de séquence remplissant certaines conditions peuvent subir une acquisition partielle :

- Le nom du modèle de séquence (séquence source) et le nom du fichier de séquence .S dans le conteneur de séquence (séquence cible) sont identiques.
- Le chemin d'accès des données et le sous-répertoire doivent être identiques pour les fichiers de séquence.
- Le nombre de lignes de séquence dans la séquence source doit être supérieur ou égal au nombre de lignes de séquence dans la séquence cible.
- Pour chaque ligne dans la séquence cible, le type d'échantillon et le nombre d'injections doivent être identiques aux valeurs dans les lignes correspondantes de la séquence source.
- Le schéma d'attribution de nom de fichier de données doit être identique pour les deux fichiers de séquence.

Après avoir quitté cette boîte de dialogue en cliquant sur **Ok** (pour sélectionner un des conteneurs de données de séquence existants) ou sur **New** (pour créer un nouveau conteneur de séquence), l'utilisateur peut sélectionner les lignes de séquence à exécuter durant une séquence partielle.

### Acquisition de données d'analyses uniques

Le nouveau concept de données est également introduit pour des analyses uniques. Dans ce cas, le fichier de données est directement sauvegardé dans le sous-répertoire correspondant. Étant donné que l'on n'emploie qu'une seule méthode pour une analyse unique, il n'est pas nécessaire de copier cette méthode dans le sous-répertoire ; toutes les actions sont effectuées directement avec la méthode de référence. Une fois la partie acquisition de la méthode terminée, une copie de la méthode de référence est sauvegardée dans le répertoire du fichier de données (ACQ.M). Une autre copie (DA.M) est sauvegardée après exécution de la partie traitement de données de la méthode de référence.

### 2 Acquisition de données

Acquisition de données



Procédure ChemStation

3

# Traitement des données

Traitement des données 20 Traitement de données : Révision des données 23 Interface utilisateur de ChemStation durant la révision des données 30 Traitement de données : Retraitement des données 33

Ce chapitre décrit les options disponibles pour le traitement et la révision des données, et explique comment le facteur de la structure des données influence votre choix d'options.



#### 3 Traitement des données Traitement des données

# Traitement des données

Une fois que les données ont été acquises, elles peuvent être analysées dans la vue **ChemStation Data Analysis**. Lorsque l'on sélectionne l'onglet **Data** de l'explorateur de ChemStation, il est possible de charger toutes les analyses d'une séquence ou toutes les analyses uniques dans un dossier spécifique en cliquant deux fois sur le symbole correspondant. Le jeu de données correspondant est ensuite disponible dans la table de navigation.



Figure 6

6 Chargement d'une séquence de l'explorateur de ChemStation dans la table de navigation

La partie principale de la Table de navigation est constituée d'une liste de toutes les analyses du jeu. Au lieu de charger une analyse via le menu **File >** Load Signal on peut désormais charger l'analyse dans la mémoire de ChemStation en cliquant deux fois sur la ligne appropriée de la Table de navigation. En outre, un clic avec le bouton droit offre plusieurs options, par exemple, charger ou superposer des signaux spécifiques à partir du fichier, exporter les données, ou afficher les paramètres de la méthode d'acquisition.

Une fois l'analyse chargée, vous pouvez la réviser, c'est-à-dire, ajuster les paramètres de traitement de données, intégrer les signaux et enfin imprimer un rapport. Dans ce cas, vous traitez l'analyse comme une analyse unique, sans tenir compte du contexte de séquence ou sans utiliser les fonctions de la table de séquence. Cette façon de traiter les données est appelée **Data Review**. La Table de navigation intègre une barre d'outils illustrée sur la Figure 7, page 21, qui facilite la révision des données.



Figure 7 Barre d'outils de révision de données de la table de navigation

Grâce à cette barre d'outils, vous pouvez aller au début ou à la fin de la Table de navigation, passer à l'analyse suivante ou précédente, parcourir automatiquement les analyses, et arrêter la progression automatique.

Une façon différente de traiter vos données consiste à **Reprocess** une séquence complète. Pendant ce processus, toutes les analyses sont retraitées dans le contexte de la séquence, c'est-à-dire que les tables d'étalonnage des méthodes de la séquence sont mises à jour dans le cas d'analyses d'étalonnage, des multiplicateurs, des quantités etc. peuvent être changés dans la table de la séquence, de nouvelles méthodes peuvent être ajoutées au conteneur de séquence, etc. Pour le retraitement, la Table de navigation intègre la barre d'outils suivante :



Figure 8 Barre d'outils de retraitement de séquence de la table de navigation

Notez que les icônes de retraitement de la Table de navigation ne sont disponibles que pour des données de séquence créées avec la version ChemStation B.02.01 ou une version ultérieure. Pour des données d'une analyse unique créées avant la version B.02.01, et pour des données acquises lorsque la fonction **Unique Folder Creation** est désactivée (voir le « Procédure avec la fonction "Unique Folder Creation" désactivée », page 40), le retraitement n'est pas accessible dans le module de **Data Analysis**. Ces séquences doivent être retraitées dans **Method and Run Control**, en définissant le paramètre de séquence **Parts of method to run** à **Reprocess Only**. Pour des séquences créées avec une version ChemStation B.02.01 et une version ultérieure, l'option de retraitement de **Method and Run Control** a été supprimée (voir Figure 9, page 22), et la Table de navigation propose le retraitement en tant que **Data Analysis Task**.

Traitement des données

Sequence Parameters: Instrument 1	×
Operator Name: Joe Smith	
Data File	
Pat <u>h</u> : E:\My ChemStation Files\Data\ <u>S</u> ubdirectory: S	SUBDIRECTORY
<u>Auto</u> Prefix: Counter: <u>Prefix/Counter</u> SIG1     000001	
Part of methods to run	equence Command/Macro
According to Runtime Checklist	<u>_</u>
Wait 0 minutes after loading a new method Not Ready	Timeout: 0 minutes

**Figure 9** Paramètres de séquence dans la vue Méthode et contrôle de la version ChemStation B.02.01 et d'une version ultérieure

# Traitement de données : Révision des données

**Data Review** désigne un traitement analyse par analyse. ChemStation vous permet de spécifier des actions par défaut effectuées automatiquement lorsqu'un fichier de données est chargé à partir de la Table de navigation. Ces actions incluent des tâches de traitement de données, comme intégrer le chromatogramme directement après chargement, ainsi que spécifier la méthode à charger.

Les options correspondantes pour la révision (non utilisées pour le retraitement) sont configurées dans l'onglet **Signal/Review Options** de la boîte de dialogue **Preferences**.

and the second	
	-
Method used for Review of Single Run Data	
C Current Method	
Individual Method from Data File (DA.M)	
	1
	Method used for Review of Single Run Data © Current Method © Individual Method from Data File (DA.M)

Figure 10 Boîte de dialogue Preferences/Onglet Signal/Review Options

La première section, **Load Signal Options**, indique quels signaux d'une analyse sont chargés et si l'on doit intégrer les chromatogrammes et rapporter les résultats directement après chargement. Traitement de données : Révision des données

Dans la deuxième section, **Data Review Options**, vous pouvez configurer l'intervalle pour la progression automatique à travers les analyses de la Table de navigation.

La dernière partie de cette section indique la méthode qui est chargée durant la révision des données, lorsqu'une analyse est chargée à partir de la Table de navigation. Elle s'applique uniquement à la révision des données, mais pas au retraitement. Les jeux d'options séparés suivants sont disponibles pour des analyses de séquence et des analyses uniques :

 
 Tableau 1
 Options de révision des données pour des données de séquence et d'analyse unique

Méthode utilisée pour la révision de données de séquence	Méthode utilisée pour la révision de données d'analyse unique
Méthode actuelle	Méthode actuelle
Méthode de séquence	Méthode individuelle à partir d'un fichier de données (DA.M)
Méthode individuelle à partir d'un fichier de données (DA.M)	

#### REMARQUE

Les options de l'onglet **Signal/Review Options** de la boîte de dialogue **Preferences** ne sont appliquées que lors du chargement d'un fichier de données depuis la Table de navigation. Lorsque vous utilisez **Load Signal** depuis le menu **Fichier** ou l'icône correspondante dans la barre d'outils principale, les paramètres ne sont pas appliqués, par exemple, aucune méthode n'est chargée.

#### Conserver la "Méthode actuelle"

Le paramètre de révision **Current Method** doit toujours être activé si vous souhaitez utiliser la méthode qui est actuellement chargée. À cet égard, pour la révision des données, la méthode actuelle est conservée, quels que soient les fichiers de données chargés (analyse unique ou conteneur de séquence). Vous pouvez activer cette option en sélectionnant **Current Method** dans la boîte de dialogue **Preferences**, voir Figure 11, page 25. Ceci garantit que, pour chaque analyse chargée, la même méthode est toujours gardée en mémoire.

Traitement de données : Révision des données

rerences	<b>_</b>
Paths Sequence Signal/Review Options	
Load Signal Options	
🔲 Load using signal details	
✓ Integrate after load	
Integrate and print report after load	
-Data Review Options	
Auto Step Interval 10 sec	
Method used for Review of Sequence Data	Method used for Review of Single Run Data
a second s	
C Current Method	Current Method
Current Method C Sequence Method	C Individual Method from Data File (DA.M)

Figure 11 Conserver la méthode actuelle pour la révision des données

Vous pouvez utiliser cette option, par exemple, dans les procédures suivantes :

- Vous souhaitez réviser les fichiers de données d'un conteneur de séquence avec une méthode différente qui n'est pas actuellement dans le conteneur, par exemple, une méthode de référence non utilisée pour l'acquisition parce que votre procédure utilise des méthodes d'acquisition et de traitement des données séparées. Au début de la révision, vous chargez cette méthode de référence différente, le plus commodément depuis l'onglet **Method** de l'explorateur de ChemStation.
- Dans la session en ligne, vous souhaitez modifier la méthode de référence utilisée pour l'acquisition du conteneur de données. Vous souhaitez modifier les paramètres d'instrument et les paramètres de traitement des données en tant que point de départ immédiat pour exécuter la séquence d'acquisition suivante.
- Vous avez modifié les paramètres de traitement des données de la méthode individuelle DA.M pour une des analyses dans vos conteneurs de séquence. L'option **Current Method** vous permet de réviser toutes les analyses effectuées avec cette méthode, afin de vérifier si ces paramètres s'appliquent également à d'autres analyses.

Traitement de données : Révision des données

#### Charger la "Méthode de séquence"

Lorsque vous révisez les données à l'aide de l'option **Sequence Method** (voir Figure 12, page 26), chaque fois que vous chargez une analyse depuis la Table de navigation, la méthode de séquence correspondant à la ligne de séquence de l'analyse est chargée. Comme le nom de cette option l'indique, elle n'est disponible que pour réviser des jeux de données de séquence, mais pas des analyses uniques.

ferences	
Paths Sequence Signal/Review Options	
Load Signal Options	
Load using signal details	
🔽 Integrate after load	
Integrate and print report after load	
Data Review Options	
Auto Step Interval 10 sec	
Method used for Review of Sequence Data	Method used for Review of Single Run Data
C Current Method	C Current Method
Co Sequence Method	Individual Method from Data File (DA.M)

Figure 12 Charger la méthode de séquence pour la révision des données

Une application typique de cette option est l'optimisation des paramètres de traitement de données pour une séquence spécifique, en particulier comme préparation au retraitement (voir « Traitement de données : Retraitement des données », page 33). Une fois que chaque analyse a été révisée et que les méthodes de séquence ont été améliorées, la séquence complète peut être retraitée avec les méthodes mises à jour.

Il peut être nécessaire de propager les modifications dans la méthode de séquence à la méthode de référence correspondante pour les appliquer à toutes les acquisitions futures. Ceci peut être aisément effectué, par exemple, en utilisant la fonctionnalité **Update Master Method** (voir Tableau 3, page 32).

# Charger une "méthode individuelle à partir d'un fichier de données (DA.M)"

Le paramètre de révision **Individual Method from Data File (DA.M)** (voir Figure 13, page 27), doit être utilisé, si vous souhaitez charger automatiquement la DA.M individuelle en même temps que le fichier de données correspondant, lorsque ce fichier est chargé à l'aide de la table de navigation. Lorsque vous modifiez une méthode, puis que vous chargez l'analyse suivante, on vous demandera de sauvegarder les modifications de votre méthode, parce que vous chargez une nouvelle méthode : la DA.M de l'analyse suivante.

Load Signal Options	
Load using signal details	
☑ Integrate after load	
☐ Integrate and <u>p</u> rint report after load	
Data Review Options	
Auto Step Interval 10 sec	
Method used for Review of Sequence Data	Method used for Review of Single Run Data
C Current Method	C Current Method
C Sequence Method	Individual Method from Data File (DA.M)
Individual Method from Data File (DA.M)	

Figure 13 Charger la méthode individuelle à partir d'un fichier de données pour la révision des données

Avec la méthode de traitement des données individuelle (DA.M), il est possible d'effectuer des modifications spécifiques à l'analyse et de les sauvegarder dans la méthode de traitement de données individuelle de l'analyse. Ceci peut être utile dans le cas de chromatogrammes complexes qui requièrent des événements d'intégration temporisés individuels pour plusieurs analyses d'une séquence.

Traitement de données : Révision des données

#### REMARQUE

Lorsqu'une séquence est retraitée, toutes les actions sont effectuées sur les méthodes de la séquence et la DA.M de chaque fichier de données est écrasée, y compris les modifications que vous avez enregistrées dans ces méthodes. L'optimisation de la DA.M doit être la dernière étape de traitement de données une fois que le retraitement final a été effectué.

#### Traitement d'événements d'intégration manuels

Les événements d'intégration manuels, par exemple, une ligne de base dessinée manuellement, sont encore plus spécifiques d'un fichier de données que des événements d'intégration temporisés. Dans le cas de chromatogrammes complexes, il est particulièrement souhaitable de pouvoir utiliser ces événements pour le retraitement.

Par conséquent, dans la version de ChemStation B.04.01 et les versions ultérieures, des événements d'intégration manuels peuvent être enregistrés directement dans le fichier de données plutôt que dans la méthode. Chaque fois que le fichier de données est révisé ou retraité, les événements manuels du fichier de données s'appliquent automatiquement. Une analyse contenant des événements d'intégration manuels est marquée dans la Table de navigation dans la colonne correspondante.

Outre les outils pour dessiner une ligne de base et effacer un pic manuellement, trois outils supplémentaires sont disponibles dans l'interface utilisateur afin de

- sauvegarder les événements manuels des chromatogrammes actuellement indiqués dans le fichier de données,
- · effacer tous les événements des chromatogrammes actuellement indiqués,
- annuler les derniers événements d'intégration manuels (fonction disponible jusqu'à ce que l'événement soit sauvegardé).

Lorsque vous passez au fichier de données suivant pendant la révision dans la Table de navigation, ChemStation vérifiera les événements d'intégration manuels non sauvegardés et demandera à l'utilisateur s'il souhaite sauvegarder ces événements.

Les événements manuels enregistrés dans le fichier de données pendant la révision dans la Table de navigation n'interfèrent pas avec les événements d'intégration manuels enregistrés pendant la révision dans le mode **Batch**. Ces deux modes de révision sont totalement séparés des événements manuels d'un fichier de données.

Dans les versions de ChemStation antérieures à la version B.04.01, les événements d'intégration manuels ne pouvaient être enregistrés que dans la méthode. Dans la version B.04.01, cette procédure peut toujours être utilisée. Le menu **Intégration** de la vue **Data Analysis** fournit les points suivants qui permettent de gérer les événements d'intégration manuels par la méthode suivante :

**Update Manual Events of Method** : Sauvegarder les nouveaux événements manuels extraits dans la méthode.

Apply Manual Events from Method : Appliquer les événements manuels actuellement sauvegardés dans la méthode au fichier de données actuellement chargé.

**Remove Manual Events from Method** : Effacer les événements manuels de la méthode.

Afin de convertir les événements manuels enregistrés dans une méthode pour les stocker dans le fichier de données, il convient d'appliquer les événements de la méthode et d'enregistrer les résultats dans le fichier de données. Si vous le souhaitez, vous pouvez éliminer les événements de la méthode.

Si la case **Manual Events** de la **Integration Events Table** d'une méthode est cochée, les événements manuels de la méthode sont toujours appliqués lors du chargement d'un fichier de données utilisant cette méthode. Si le fichier de données contient des événements manuels supplémentaires, on utilise les événements dans le fichier de données. Quand la case **Manual Events** est cochée, l'utilisateur n'est jamais prié de sauvegarder les événements dans le fichier de données.

Interface utilisateur de ChemStation durant la révision des données

# Interface utilisateur de ChemStation durant la révision des données

L'interface utilisateur de ChemStation propose un certain nombre de fonctions pour faciliter le travail avec les différentes méthodes disponibles pour le traitement des données (Figure 14, page 30).



Figure 14 Interface utilisateur dans le traitement des données

- L'état de modification de la méthode est affiché dans la vue **Data Analysis**, afin que vous puissiez voir facilement si des modifications appliquées à la méthode n'ont pas été sauvegardées. L'interface utilisateur affiche toujours le nom de la méthode actuellement chargée (en même temps que l'information indiquant s'il s'agit d'une méthode de traitement de données individuelle d'un fichier de données ou d'une méthode de séquence).
- Lorsque vous déplacez le curseur de la souris sur ce champ, une infobulle affiche en outre le chemin d'accès complet et le nom de la méthode.
- Une liste déroulante offre un "raccourci" vers les options de méthode de la boîte de dialogue **Preferences**. Vous pouvez activer directement toute option disponible et elle sera appliquée la prochaine fois que vous chargerez une analyse à partir de la table de navigation. De plus, il est également très pratique de voir quelle option est actuellement active. Notez que ces options s'appliquent uniquement à la révision des données, et pas au retraitement.

### Enregistrement de méthodes dans la vue Traitement des données

Pendant le travail dans la vue **Data Analysis**, l'utilisateur optimise les paramètres de traitement des données de ses méthodes. Outre le simple enregistrement d'une méthode, la procédure peut également nécessiter, par exemple, l'enregistrement d'une méthode de séquence sous un nom différent ou en tant que méthode de référence dans le répertoire de méthode de référence.

Le menu **Method** dans le module de traitement des données comporte plusieurs options pour enregistrer la méthode :

Tableau 2
 Options d'enregistrement du menu Méthode dans la vue Traitement des données

Préférence de chargement de méthode	Options de sauvegarde disponibles
Méthode actuelle	Sauvegarder la méthode
	Sauvegarder la méthode sous
Méthode de séquence Sauvegarder la méthode d	Sauvegarder la méthode de séquence
	Sauvegarder en tant que nouvelle méthode de référence
Méthode individuelle à partir d'un fichier de données	Sauvegarder la méthode de fichier de données
	Sauvegarder en tant que nouvelle méthode de référence

L'option **Save as new Master Method** pour des méthodes de séquence et des méthodes individuelles DA.M ont par défaut le répertoire de méthode de référence présélectionné comme répertoire cible.

#### Mettre à jour une fonction de méthode de référence

De plus, le menu **Method** offre la possibilité de ne rendre disponible pour la méthode de séquence ou de référence que les paramètres de traitement de données que vous avez développés pour la méthode individuelle. Cette option, **Update Master Method** ou **Update Sequence Method**est disponible dans le menu **Method** en cliquant avec le bouton droit de la souris sur l'analyse correspondante dans la Table de navigation.

Cette fonction est disponible dans les situations suivantes :

Interface utilisateur de ChemStation durant la révision des données

Méthode chargée	Options disponibles
Méthode individuelle d'analyse de données Mettre à jour la méthode de référ (DA.M)	
	Mettre à jour la méthode de séquence
Méthode de séquence	Mettre à jour la méthode de référence
Méthode de référence	_

#### Tableau 3 Disponibilité de la mise à jour... Fonctionnalité de la méthode

Notez que cette fonction ne met à jour que les paramètres de traitement des données de la méthode cible et qu'elle écrase tous les paramètres de traitement des données.

#### REMARQUE

Pour des raisons techniques, en plus des paramètres de traitement des données, le journal d'audit de la méthode cible est également écrasé par le journal d'audit de la méthode source.

# Traitement de données : Retraitement des données

Par opposition à la révision des données, un retraitement de séquence signifie que toutes les analyses d'une séquence sont retraitées dans le contexte de la séquence, c'est-à-dire en incluant les mises à jour de table d'étalonnage, les modifications de paramètres dans la table de séquence, des additions de nouvelles méthodes à la séquence, etc.

Avec le nouveau concept d'organisation des données, le conteneur de séquence comprend tous les fichiers nécessaires au retraitement : les fichiers de données, une copie du fichier de séquence et toutes les méthodes de séquence initialement employées avec l'acquisition. Pour retraiter une séquence, il vous suffit donc de la charger dans la table de navigation et la barre d'outils nécessaire est disponible.



Figure 15 Barre d'outils pour le retraitement de séquence

Notez les règles suivantes concernant le retraitement :

- Lorsqu'un conteneur de séquence est chargé dans la Table de navigation, ChemStation charge automatiquement le fichier de séquence .S qui est situé dans ce conteneur. Ce fichier de séquence contient toutes les lignes de séquence qui sont liées à tout fichier de données appartenant à ce conteneur.
- Toutes les actions sont effectuées sur les méthodes de séquence. Si vous devez appliquer des paramètres de traitement modifiés, vous devez modifier les méthodes de séquence.
- Les paramètres de chargement de méthode de la boîte de dialogue **Preferences** n'ont aucune influence sur le retraitement ; ils agissent toujours sur les méthodes de séquence ou les méthodes de séquence mises à jour. Cet ensemble de fonctions n'est valable que pour la révision.
- Durant le retraitement, le fichier Batch (\*.b), le journal de séquence/analyse unique (\*.log) et la table de navigation sont mis à jour. La méthode individuelle de traitement de données (DA.M) de chaque fichier de données traité est écrasée par la méthode de séquence actuelle.

Traitement de données : Retraitement des données

#### REMARQUE

Lorsqu'une séquence est retraitée, toutes les actions sont effectuées sur les méthodes de séquence et la DA.M de chaque fichier de données est écrasée, y compris toute modification que vous avez enregistrée dans ces méthodes. L'optimisation de la DA.M durant la révision des données devrait être la dernière étape de traitement de données une fois que le retraitement final a été effectué.

• Si vous souhaitez ajouter de nouvelles méthodes à partir de l'un des répertoires de méthode de référence à la table de séquence, vous devez cliquer sur l'option **Browse** dans la liste des méthodes pour rechercher n'importe quel répertoire de méthode spécifié (seules les méthodes se trouvant déjà dans le conteneur de séquence sont disponibles sans utiliser la fonction parcourir). La nouvelle méthode est également copiée dans le conteneur de séquence pendant le retraitement. Cela veut dire que vous ne pouvez pas choisir une méthode possédant le même nom qu'une méthode se trouvant déjà dans le conteneur.

Seq	uence Ta	ble: Inst	rument 1						
	Currently F Line:	Running Meth	od:						V
S	ample Info	for P1-F-0	1:						
- Fi	socratic ch	eck out sa	ample, calibration mix	ture 1					
_									
	Line	Vial	Sample Name		Method Name	Inj/Vial	Sample Type	Cal Level	Update RF
	1	P1-F-01	isocratic sample ST	LC DEMO	•	1	Calibration	1	Replace
	2	P1-F-02	isocratic sample ST	Browse		1	Calibration	2	Replace
	3	P1-F-03	isocratic sample S'	LC_DEMO		1	Calibration	3	Replace
	4	P1-F-04	isocratic sample 1		LC_DEMO	1	Sample		
	-	D1 F OF			LO DEMO		10 1	1	



- Dans la table de séquence, il n'est pas possible d'ajouter ou de supprimer des lignes.
- Dans la boîte de dialogue **Sequence Parameters**, on ne peut modifier que le nom de l'opérateur, le commentaire de la séquence et l'usage des informations de table de séquence. Tous les autres champs doivent être définis pendant l'acquisition des données et ne s'appliquent pas au retraitement.

Traitement de données : Retraitement des données

Jata File	
Pat <u>h</u> : E:\My ChemStation Files\Data\	Subdirectory:
Auto     Prefix: Counter:     Prefix/Counter     SIG1     000001	
Part of methods to run	_ Shutdown
Reprocessing Only	Post-Sequence Command/Macro
✓ Use Sequence Table Information	
Wait 0 minutes after loading a new method	Not Ready Timeout:
Jar Code Reader	
Use In Sequence On a bar code mismatch	C Inject anyway
	C Don't inject
raction Information	ChemStore-
Eraction Start Location:	Iransfer Settings
quence Commen <u>t</u> :	

**Figure 17** Paramètres de séquence en traitement des données

#### Enregistrement de séquences dans la vue Traitement des données

Le menu **Sequence** ne permet pas uniquement d'enregistrer la séquence après avoir modifié la table de séquence, les paramètres de séquence ou les paramètres de sortie de séquence. Il permet également d'enregistrer une séquence de traitement de données (qui est enregistrée avec le conteneur de séquence) comme modèle de séquence.

Cette fonctionnalité peut être utile si vous avez ajouté des lignes de séquence à la table de séquence directement durant l'acquisition. Ces lignes additionnelles ne sont disponibles que dans ce conteneur de séquence spécifique, et pas dans le modèle de séquence d'origine.

Traitement de données : Retraitement des données

L'enregistrement d'une séquence comme nouveau modèle de séquence veille à convertir automatiquement le fichier de séquence de sorte que tous les champs puissent à nouveau être modifiés.



Procédure ChemStation

4

# Procédure avec la fonction "Unique Folder Creation" désactivée

Utilisation de la fonction de "Unique Folder Creation" activée ou désactivée ? 38

Procédure avec la fonction "Unique Folder Creation" désactivée 40

Migration du conteneur de séquence 44

Ce chapitre vous explique comment utiliser la fonction **Unique Folder Creation** désactivée. Elle vous permet d'enregistrer des données comme dans la version B.01.03 de ChemStation ou les versions antérieures. Ce mode ne tire pas pleinement parti des dernières fonctionnalités de révision et de retraitement des données de ChemStation.



# Utilisation de la fonction de "Unique Folder Creation" activée ou désactivée ?

Le nouveau concept de données décrit dans les chapitres précédents présente un certain nombre d'avantages :

- Les données de séquence ne sont pas écrasées. Chaque acquisition de séquence enregistre les fichiers de données obtenus dans son propre conteneur de séquence avec un nom unique.
- Avec le concept du conteneur de séquence, les données sont enregistrées avec toutes les informations nécessaires au traitement des données, c'est-à-dire, des copies du fichier de séquence et de toutes les méthodes employées avec la séquence. Ces méthodes peuvent être modifiées par des entrées spécifiques à la séquence et n'influencent pas la méthode de référence d'origine. Le concept de conteneur renforce donc le fait qu'une séquence est un ensemble de fichiers de données et de méthodes appartenant tous deux à la création du résultat.
- La révision et le retraitement des données sont l'un et l'autre disponibles dans la vue **Data Analysis**, via la Table de navigation.
- Le concept de conteneur de données offre les conditions préalables optimales pour l'option OpenLAB de ChemStation, qui permet d'échanger des données avec le *Gestionnaire des contenus d'entreprise (ECM) OpenLAB Agilent.*

Cependant, dans certaines situations, les utilisateurs peuvent être amenés à vouloir enregistrer leurs données comme dans la version de ChemStation B.01.03 ou dans une version antérieure et à travailler en fonction des procédures correspondantes :

- Pendant le développement d'une méthode, il peut être plus approprié de n'utiliser qu'une seule méthode à la fois pour l'acquisition et le traitement des données, afin que les modifications soient automatiquement disponibles pour l'acquisition et le retraitement ultérieurs des données déjà acquises.
- Les données de plusieurs acquisitions doivent se trouver dans un seul dossier, par exemple, dans le cas d'une acquisition partielle.

- Des solutions de macros personnalisées d'un système de ChemStation, qui ont été conçues pour des versions antérieures, peuvent exiger que les données, méthodes ou séquences soient enregistrés suivant l'ancien schéma d'organisation des données.
- Lorsque la version de ChemStation B.04.01 fonctionne dans un laboratoire où un autre système fonctionne toujours sur des versions B.01.03 ou sur des versions précédentes de ChemStation, il peut être plus approprié d'utiliser le même mode d'organisation des données sur tous les systèmes.

# Procédure avec la fonction "Unique Folder Creation" désactivée

Afin de pouvoir travailler avec un concept d'enregistrement des données comme dans les versions de ChemStation antérieures à la version B.02.01, l'onglet **Sequence** de la boîte de dialogue **Preferences** possède une section Enregistrement des données. Vous avez le choix entre l'option **Unique Folder Creation ON** et l'option **Unique Folder Creation OFF** (Figure 18, page 40). Par défaut, l'option **Unique Folder Creation ON** est sélectionnée. L'option **Unique Folder Creation ON** active le concept d'enregistrement de données tel que décrit dans les trois chapitres précédents.

Paths Sequence Signal/Review Options									
r Data Storage									
C Unique Folder Creation ON									
Creates a unique data folder for each sequence run. See Help for more details.									
Unique Folder Creation OFF									
Stores data as in ChemStation B.01.03 or earlier. This mode does not take advantage of the late: data review and reprocessing functionality in ChemStation.									
Name Pattern									
<seqn> <date> <time></time></date></seqn>									
SEQUENCE_NAME 2008-04-24 09-14-34									
OK Cancel Help									

Figure 18Boîte de dialogue Preferences/Onglet Sequence

REMARQUE

L'activation ou la désactivation de la création de dossier unique affecte uniquement les acquisitions futures, mais ne modifie pas l'organisation des données déjà acquises.

#### REMARQUE

Nous vous recommandons de choisir un des deux modes au début de votre travail et de ne pas alterner entre ceux-ci.

La désactivation de la création de dossier unique n'est pas prise en charge lorsque l'option OpenLAB ou ChemStore/Security Pack de ChemStation est installée.

Si vous avez choisi **Unique Folder Creation Off**, voici ce qui va se produire au niveau de l'enregistrement des données :

- Les données de séquence ne sont pas acquises dans un conteneur de séquence, mais directement dans le sous-répertoire spécifié dans Sequence
   Parameters (Figure 4, page 14). Par conséquent, le schéma de nom de séquence est grisé dans l'onglet Sequence de la boîte de dialogue Preferences (Figure 18, page 40).
- Cela signifie que pour deux séquences d'acquisition ou plus, les données peuvent être acquises dans le même sous-répertoire. Cela implique le risque d'écraser des données existantes, mais permet par ailleurs de scinder des séquences en utilisant une exécution partielle de séquence et de continuer à combiner les résultats dans un seul dossier (ce qui ne serait pas possible avec la fonction Création de dossier unique activée).
- Aucune méthode de séquence (.M) ou copie du fichier de séquence (.S) n'est stockée avec les données ; seuls le fichier journal de séquence et le fichier batch (.B) le sont. Cela signifie que seules sont disponibles les méthodes et séquences se trouvant dans les chemins d'accès spécifiés dans la boîte de dialogue **Preferences** (Figure 2, page 12). Elles doivent être utilisées pour l'acquisition ainsi que pour la révision et le retraitement des données. Des modifications de méthode spécifiques à une séquence ou à un fichier de données ne peuvent être enregistrées qu'en sauvegardant la méthode sous un autre nom. Dans le cas contraire, ces modifications seront également appliquées à la méthode d'acquisition. Toutefois, il peut s'agir d'un comportement souhaité pendant le développement d'une méthode.
- Aucune méthode spécifique à un fichier de données ACQ.M et DA.M n'est enregistrée. La sauvegarde d'informations concernant l'acquisition d'origine n'est possible qu'en incluant ces informations dans le rapport ou en sélectionnant **Save Method with Data** dans la liste de contrôle d'exécution de méthode (Figure 19, page 42). En cochant cette option, la méthode d'acquisition sera enregistrée au format RUN.M dans chaque fichier de données.

#### 4 Procédure avec la fonction "Unique Folder Creation" désactivée

Procédure avec la fonction "Unique Folder Creation" désactivée

Pre-Run Command / Macro	
Data Acquisition	
Standard Data Analysis	
<u>Customized Data Analysis Macro</u>	
Save GLP Data	
Post- <u>R</u> un Command / Macro	

Figure 19 Liste de contrôle d'exécution : Sauvegarder la méthode avec les données

L'interface utilisateur améliorée de ChemStation introduite avec la version ChemStation B.02.01 est également disponible lorsque l'option Création de dossier unique est désactivée. Cependant, certaines fonctions ne sont pas accessibles dans ce mode. Les mêmes limitations s'appliquent également à toute analyse acquise avec une version de ChemStation antérieure à B.02.01.

• Lorsqu'une séquence est chargée dans la table de navigation, la barre d'outils de retraitement est grisée (Figure 20, page 42). Des séquences qui ont été acquises dans ce mode d'enregistrement de données ne peuvent être retraitées que dans la vue Méthode et contrôle d'analyse à l'aide de l'option **Reprocessing only** dans les paramètres de séquence (Figure 21, page 43).

	🐐 Instrument 1 (online): Data Analysis														
	Eile Method Sequence Graphics Integration Calibration	on <u>P</u>	<u>R</u> eport	: Sp	ectra <u>B</u> at	ch <u>V</u> iew	Abor	t <u>H</u> elp							
	Signals 🦣 🙀 Methods 🍖 🛃 🏠 💟 LC_DI	EMO.M (sequence)													
	Data Analysis 📮	I S	Sequence: BATCH												
			Use	curre	nt method	t method 🔹		1			Seq 🏭 🛗 🦉 👻	8436	1 0	) 🛈 📘	
			-		Line	Inj	Vial		Sample Nam	e	Method Name	Sample Type	Man	Cal Level	Sa
	BATCH	D	• 8	+	1	1	5		Isocratic Sto	i. 1	BATCH.M	Calibration	-	1	
	LC DEMO1		E	+ 🗆	2	1	5		Isocratic Std.	1	BATCH.M	Calibration	-	1	
	- a Single Runs		E	+ 🗆	3	1	5		Isocratic Std.	1	BATCH.M	Control Sample	-		
	ESTD_DAD		E	+ 🗆	4	1	6		Isocratic Std. :	2	BATCH.M	Sample	-		
	FRACTION_COLLECTION		∢ I In			4 4	7		Toporable Chal	•	DAT/U M	Comple			
	H ISTD DAD		_												_

Figure 20 Table de navigation pour des séquences acquises avec la fonction Unique Folder Creation désactivée

#### Procédure avec la fonction "Unique Folder Creation" désactivée 4

Procédure avec la fonction "Unique Folder Creation" désactivée

directory: SUBDIRECTORY
Shutdown
Post-Sequence Command/Macro
<u> </u>
Not Ready Timeout: 0 minutes

Figure 21 Retraitement de données de séquence acquises avec la fonction "Unique Folder Creation" désactivée

• Avec les options d'utilisation de méthode **Individual Method from Data File** et **Sequence Method** (voir Figure 10, page 23), un message d'avertissement s'affichera chaque fois que vous effectuerez un double clic sur une analyse de la table de navigation, indiquant que la méthode individuelle/méthode de séquence n'existe pas. Comme indiqué précédemment, ces méthodes ne sont pas enregistrées avec les données. Dans ce cas, la seule option importante pour la révision des données est **Current Method**.

4 Procédure avec la fonction "Unique Folder Creation" désactivée Migration du conteneur de séquence

## Migration du conteneur de séquence

ChemStation fournit un outil pour convertir des données au format non-conteneur en données au format conteneur de séquence. Pour réussir cette tâche, il est nécessaire que ce fichier de séquence d'origine soit encore disponible. Il doit contenir toutes les lignes de séquence nécessaires et suivre le schéma d'attribution de nom de fichier de données d'origine pour retraiter tous les fichiers de données de la séquence. En plus, toutes les méthodes de la colonne Méthode de la table de séquence doivent être disponibles.

Pour effectuer la migration, démarrer la **Sequence Container Migration** dans le menu **Sequence** dans la vue Traitement de données.

💪 Sequence Container Migration		X
To migrate non-container data to a se	quence container, select sequence template, method path, data source and destination directories. [C:\Chem32\1\SEQUENCE\BATCH.S	_
U Select Method Path	C:\Chem32\1\METHODS	
Select Source	C:\Chem32\1\DATA\Demo	
Select Destination	C:\Chem32\1\DATA\demo_data	
Messages and warnings:	2	- -
	Start Close Help	

Figure 22 Migration du conteneur de séquence

Remplir les champs requis suivants (voir Figure 22, page 44) :

**Select Sequence Template** : Sélectionner le fichier de séquence .S qui contient la table de séquence qui correspond à l'ensemble de données à faire migrer.

**Select Method Patch** : Sélectionner le répertoire dans lequel se trouvent les méthodes référencées dans la table de séquence.

**Select Source** : Sélectionner le répertoire qui contient les fichiers de données à faire migrer.

**Select Destination** : Spécifier le chemin d'accès et le nom du conteneur de séquence à créer : Vous pouvez sélectionner un dossier existant ou en créer un nouveau.

Lorsque tous les champs sont remplis, on peut démarrer la migration.

Les étapes suivantes seront effectuées :

- Le répertoire de conteneur de séquence sera créé.
- Le modèle de séquence sera copié dans le conteneur. Il sera également converti dans un état dans lequel il est en mesure de retraiter des fichiers de données dans la vue **Data Analysis** (voir « Traitement de données : Retraitement des données », page 33).
- Les méthodes référencées dans la table de séquence sont copiées à partir du chemin d'accès à la méthode spécifié dans le dossier de conteneur.
- Les fichiers de données, le journal de séquence et le fichier batch sont copiés à partir du répertoire source de données vers le répertoire de destination.
- Selon les informations dans la table de séquence, une copie de la méthode correspondante est copiée vers chaque fichier de données sous forme de DA.M.

Lorsque la migration de conteneur est terminée, un message signalant le succès s'affiche dans le champ **Messages and Warnings**. Sinon, un message d'avertissement indique tout problème survenu lors de la migration.

# **Glossaire d'IU**

### A

Add Ajouter Apply Manual Events from Method Appliquer les événements manuels à partir de la méthode

### B

Browse Parcourir

#### C

ChemStation Data Analysis Traitement des données de ChemStation Configuration Editor éditeur de configuration Current Method Méthode actuelle

### D

Data Données Data Analysis Traitement des données Data Analysis Task tâche de traitement des données Data Review Révision des données Data Review Options Options de révision des données

### 

Individual Method from Data File Méthode individuelle à partir d'un fichier de données Individual Method from Data File (DA.M) Méthode individuelle à partir d'un fichier de données (DA.M) Integration Events Table Table des événements d'intégration

### L

Load Signal Charger signal Load Signal Options Charger options de signal

#### Μ

Manual Events Événements manuels Messages and Warnings Messages et avertissements Method Méthode Method and Run Control Méthode et Contrôle d'analyse

#### Ν

Name Pattern Schéma de nom New Nouveau

#### Ρ

Partial Sequence Séquence partielle Parts of method to run Parties de méthode à exécuter Paths Chemins d'accès Preferences Préférences

#### R

Remove Supprimer Remove Manual Events from Method Éliminer les événements manuels de la méthode Reprocess Retraiter Reprocess Only Retraiter uniquement Reprocessing only Retraitement uniquement

#### S

Sample Info Info échantillon Save as new Master Method Sauvegarder en tant que nouvelle méthode de référence Save Method with Data Sauvegarder la méthode avec les données Select Destination Sélectionner destination

#### **Glossaire d'IU**

Select Method Patch Sélectionner correctif de méthode Select Sequence Template Sélectionner modèle de séquence Select Source Sélectioner source Sequence Séquence sequence container conteneur de séquence Sequence Container Migration Migration de conteneur de séquence Sequence Method Méthode de séguence sequence methods méthodes de séquence Sequence Parameters Paramètres de séquence Signal/Review Options Signal/Options de retraitement

### U

**Unique Folder Creation** Création de dossier unique Unique Folder Creation Off Création de dossier unique - Désactivée Unique Folder Creation OFF Création de dossier unique - Désactivée Unique Folder Creation ON Création de dossier unique - Activée Update Manual Events of Method Mettre à jour les événements manuels de la méthode Update Master Method Mettre à jour la méthode de référence Update Sequence Method Mettre à jour la méthode de séquence

### V

View Affichage www.agilent.com

# Contenu de ce manuel

Depuis la version B.020.01 de ChemStation, les fonctionnalités de révision et de retraitement des données ont été significativement améliorées pour permettre une révision rapide des résultats.

Les nouvelles fonctions d'enregistrement de données dans ChemStation permettent d'organiser efficacement les données de séquence et les méthodes.

© Agilent Technologies 2006, 2007-2009

Printed in Germany 2/2009



G2170-93043

