ChemStation Agilent



Informazioni legali

© Agilent Technologies, Inc. 2006, 2007-2009

Nessuna parte di questo manuale può essere riprodotta in alcun formato o con alcun mezzo (inclusa l'archiviazione e la scansione elettroniche o la traduzione in una lingua straniera) senza previo consenso scritto di Agilent Technologies, Inc. secondo le disposizioni di legge sul diritto d'autore degli Stati Uniti, internazionali e locali applicabili.

Codice del manuale

G2170-94043

Edizione

2/2009

Stampato in Germania

Agilent Technologies Hewlett-Packard-Strasse 8 76337 Waldbronn

Solo per ricerca.

Non utilizzabile nelle procedure diagnostiche.

Revisioni software

Questo manuale è valido per le revisioni B.04.xx del software della ChemStation Agilent, dove xx identifica le revisioni secondarie del software che non influiscono sull'accuratezza di questo manuale.

Garanzia

Le informazioni contenute in questo documento sono for-nite allo stato corrente e sono soggette a modifiche senza preavviso nelle edizioni future. Agilent non rilascia alcuna altra garanzia, esplicita o implicita, comprese le garanzie implicite di commerciabilità ed idoneità ad uno uso speci-fico, relativamente al presente manuale e alle informazioni in esso contenute. Salvo il caso di dolo o colpa grave, Agilent non sarà responsabile di errori o danni diretti o indi-retti relativi alla fornitura o all'uso di questo documento o delle informazioni in esso contenute. In caso di separato accordo scritto tra Agilent e l'utente con diverse condizioni di garanzia relativamente al contenuto di auesto documento in conflitto con le condizioni qui riportate prevarranno le condizioni dell'accordo separato.

Licenze tecnologia

I componenti hardware e o software descritti in questo documento vengono forniti con licenza e possono essere utilizzati o copiati solo in conformità ai termini di tale licenza.

Indicazioni di sicurezza

AVVERTENZA

L'indicazione **AVVERTENZA** segnala un rischio. Richiama l'attenzione su una procedura operativa o analoga operazione che, se non eseguita correttamente o non rispettata, può provocare danni al prodotto o la perdita di dati importanti. Non eseguite mai alcuna operazione ignorando l'**AVVERTENZA**, fatelo solo dopo aver compreso e applicato completamente le indicazioni di Agilent.

ATTENZIONE

L'indicazione ATTENZIONE segnala un rischio serio. Richiama l'attenzione su una procedura operativa o analoga operazione che, se non eseguita correttamente o non rispettata, può provocare lesioni personali o morte. Non eseguite mai alcuna operazione ignorando l'indicazione ATTENZIONE, fatelo solo dopo aver compreso e applicato completamente le indicazioni di Agilent.

Contenuto del manuale

Nei laboratori analitici, i dati cromatografici devono essere acquisiti rapidamente e in modo efficiente. L'interpretazione di risultati ambigui può causare perdite di tempo ed elevati costi amministrativi. A partire dalla versione B.02.01 della ChemStation, le funzioni di memorizzazione e di selezione dei dati sono state notevolmente migliorate per consentire una rapida revisione e rielaborazione dei risultati.

In questo manuale viene descritto come utilizzare al meglio le nuove funzioni di memorizzazione e recupero dei dati disponibili nella ChemStation B.04.01 per aumentare la produttività del proprio laboratorio.

1 Struttura di dati della ChemStation

In questo capitolo viene fornita una panoramica sulle differenze tra la struttura di dati utilizzata nelle versioni della ChemStation precedenti alla B.02.01 e la nuova struttura di dati nella versione B.02.01 e successive.

2 Acquisizione dei dati

In questo capitolo viene descritto in che modo la nuova struttura di dati influenza il flusso di lavoro dell'acquisizione dei dati per le sequenze e le singole analisi.

3 Analisi dei dati

In questo capitolo vengono descritte le opzioni di analisi e revisione dei dati disponibili e viene illustrato in che modo la struttura dei dati incide sulla scelta delle opzioni da parte dell'utente.

4 Flusso di lavoro con la funzione Unique Folder Creation disattivata

In questo capitolo vengono fornite informazioni su come memorizzare i dati in modo simile alla ChemStation versione B.01.03 o precedenti disattivando la funzione **Unique Folder Creation**. Questa modalità non offre tutti i vantaggi della funzionalità di revisione e di rielaborazione dei dati disponibile nelle ultime versioni della ChemStation.

Sommario

1 Struttura di dati della ChemStation 5

Versione della ChemStation precedente alla B.02.01 6 ChemStation B.02.01 e superiori 7

2 Acquisizione dei dati 11

Acquisizione dei dati 12

3 Analisi dei dati 19

Analisi dei dati 20 Analisi dei dati: Revisione dei dati 23 Interfaccia utente della ChemStation durante la revisione dei dati 30 Analisi dei dati: rielaborazione dei dati 33

4 Flusso di lavoro con la funzione Unique Folder Creation disattivata 37

Attivazione/disattivazione della funzione Unique Folder Creation 38 Flusso di lavoro con la funzione Unique Folder Creation disattivata 40 Migrazione del contenitore della sequenza 44



Flusso di lavoro della ChemStation

Struttura di dati della ChemStation

Versione della ChemStation precedente alla B.02.01 6 ChemStation B.02.01 e superiori 7

In questo capitolo viene fornita una panoramica sulle differenze tra la struttura di dati utilizzata nelle versioni della ChemStation precedenti alla B.02.01 e la nuova struttura di dati nella versione B.02.01 e successive.



Versione della ChemStation precedente alla B.02.01

Nelle versioni della ChemStation precedenti alla B.02.01, le sequenze, i metodi, i file di dati e i risultati generati venivano memorizzati in posizioni fisse, specifiche e separate. Ad esempio, ai metodi veniva fatto riferimento per nome nelle sequenze ed era responsabilità dell'utente gestire l'integrità dei metodi, delle sequenze e dei file di dati. Ciò rendeva particolarmente noiose le operazioni di archiviazione a lungo termine dei dati e di riproduzione dei risultati. Gli utenti erano tenuti a documentare il cromatogramma, i risultati e il metodo associato, non solo nel caso dei laboratori regolamentati ma anche in alcune aree dei laboratori non regolamentati, come i laboratori ambientali. Nelle versioni della ChemStation precedenti alla B.02.01, tale risultato si poteva ottenere solo mediante la stampa di tutti i dati in un report.

ChemStation B.02.01 e superiori

Per rafforzare l'associazione tra i file dei dati e i metodi, nella ChemStation B.02.01 e superiori è stato implementato il nuovo schema di organizzazione dei dati illustrato di seguito. Se usato con la ChemStation, il sistema *OpenLAB Enterprise Content Manager (ECM) Agilent* utilizza anche il nuovo concetto di dati, grazie al fatto che l'intero set di dati (sequenza/metodi/file di dati) può essere ora trasferito (archiviato) all'ECM come singola entità.



Figura 1 Acquisizione della sequenza B.02.01 e superiori

I metodi nella cartella Chem32\1\methods servono come metodi master e rimangono invariati durante l'acquisizione e l'analisi dei dati.

In modo simile, le sequenze nella cartella Chem32\1\sequence servono come modelli di sequenza, che possono essere utilizzati per rieseguire (ma non rielaborare) diverse volte una sequenza. Il pattern di memorizzazione dei dati varia a seconda che vengano acquisiti i dati di una singola analisi o i dati di una sequenza:

- 1 Se viene eseguita una sequenza, nella sottodirectory specificata viene creata automaticamente una nuova cartella (**sequence container**) a cui viene assegnato un nome esclusivo. Quando viene analizzato un singolo campione, il file di dati (*.d) viene scritto nella sottodirectory specificata.
- **2** Per i dati di sequenza, nel contenitore della sequenza vengono copiati il modello di sequenza eseguito (*.s) e tutti i metodi (*.m) coinvolti. Le copie dei metodi sono denominate **sequence methods** per distinguerle dai metodi master originali.

Tutte le attività correlate alla sequenza (come l'acquisizione e l'analisi dei dati) vengono eseguite sulle copie delle sequenze e dei metodi. Pertanto, il modello di sequenza e i metodi master rimangono inalterati per l'esecuzione di sequenze future.

Qualsiasi modifica apportata alla sequenza durante l'acquisizione, come l'aggiunta di righe alla tavola di sequenza, viene eseguita sulla copia del file della sequenza nel contenitore della sequenza. Il modello di sequenza rimane invariato.

In modo analogo, qualsiasi modifica apportata al metodo, ad esempio, aggiornamenti alla tavola di calibrazione in caso di calibrazioni, viene riportata nei metodi di sequenza ma non nei metodi master.

Nell'esecuzione della sequenza, tutti i file di dati generati (*.d) vengono memorizzati nella cartella di dati della sequenza, insieme al file batch corrispondente (*.b) e al file di log della sequenza (*.log).

- 3 Ciascun file di dati contiene due copie del metodo usato per creare l'analisi.
 - La prima copia, denominata ACQ.M, viene salvata direttamente al completamento della parte di acquisizione del metodo.
 - La seconda copia, denominata DA.M, viene salvata dopo il completamento della parte di analisi dei dati.

Entrambi questi metodi contengono parametri di metodo completi, inclusi parametri di acquisizione e di analisi dei dati.

ACQ.M garantisce la conservazione dei parametri di metodo originali per ogni specifico file di dati. È possibile visualizzare e stampare i parametri di acquisizione nella finestra Data Analysis (Analisi dei dati). Il file DA.M può essere modificato durante l'analisi dei dati per memorizzare i parametri di analisi dei dati che non si applicano a tutte le analisi di una sequenza ma che sono specifici di un determinato file di dati, ad esempio, gli eventi di integrazione tempificati.

I capitoli seguenti descrivono in maggiore dettaglio l'impatto di questa struttura su flussi di lavoro tipici. Vengono anche mostrate le impostazioni corrispondenti nelle finestre di dialogo della ChemStation. **1** Struttura di dati della ChemStation

ChemStation B.02.01 e superiori



In questo capitolo viene descritto in che modo la nuova struttura di dati influenza il flusso di lavoro dell'acquisizione dei dati per le sequenze e le singole analisi.

13

15



Acquisizione dei dati

A partire dalla versione B.02.01 della ChemStation, la memorizzazione flessibile dei dati per le singole analisi e le sequenze consente di specificare diverse posizioni di salvataggio senza dover rieseguire la configurazione. La scheda **Paths** nella finestra di dialogo **Preferences** del menu **View** consente di aggiungere più percorsi oltre a quello predefinito C:\chem32\x\DATA (dove x è il numero dello strumento). Mediante i pulsanti **Add** e **Remove**, è possibile eliminare semplicemente i percorsi esistenti o passare a una posizione selezionata e aggiungere il percorso della nuova posizione in **Preferences**. Non è possibile rimuovere il percorso predefinito dall'elenco ma è possibile modificarlo in **Configuration Editor**.

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

Figura 2 Scheda Paths della finestra di dialogo Preferences

Tutti i nuovi percorsi di dati specificati sono disponibili per la selezione nelle finestre di dialogo **Sample Info/Sequence Parameters** quando si eseguono le analisi.

Sequence Parameters: Instrument 1	×
Operator Name: Joe Smith	
Data File Path: E:\My ChemStation Files\Data\ Subdirectory: SUBDIRECTORY C:\Chem32\1\DATA\	-
<u>Aut E:\My ChemStation Files\Data\</u> <u>Prefix: Counter:</u> <u>Prefix/Counter SIG1 000001</u>	
Part of <u>m</u> ethods to run	
According to Runtime Checklist	_
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 Path: E:\My ChemStation Files\Data\ Subdirectory: SUBDIRECTORY	
Manual Prefix Counter: SIG1 0001	

Figura 3 Selezione del percorso dei dati

Acquisizione dei dati in una sequenza

Per analizzare una sequenza, è necessario che siano disponibili metodi predefiniti. Si tratta dei metodi master descritti in precedenza. Solitamente, i metodi master e i modelli di sequenza vengono utilizzati nella finestra **Method and Run Control** della ChemStation. Per tale motivo, nella finestra **Method and Run Control** è disponibile ChemStation Explorer, che consente di accedere ai metodi master e ai modelli di sequenza.

Il modello di sequenza fa riferimento a tali metodi nella tavola di sequenza.

Come descritto in precedenza, quando viene eseguita una sequenza con il modello di sequenza <nome_sequenza>.S e viene utilizzato il metodo master <nome_metodo>.M, viene creata una nuova cartella contenente tutti i file risultanti dall'analisi della sequenza ("contenitore della sequenza").

La posizione di tale cartella è determinata dalle impostazioni della finestra di dialogo **Sequence Parameters** mentre il nome della cartella è determinato dalla scheda **Sequence** della finestra di dialogo **Preferences**. Per impostazione predefinita, il nome è <nome_sequenza> <data_acquisizione> <ora_acquisizione> ma può essere configurato utilizzando le opzioni Operatore, Strumento, Contatore e Nome PC. Altrimenti, è possibile immettere manualmente qualsiasi nome. Se **Name Pattern** non produce nomi esclusivi per i contenitori della sequenza, la ChemStation aggiunge un contatore per garantirne l'univocità.

Preferen	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 d	etails.	
	C Unique Folder Creation OFF		
	Stores data as in ChemStation B.01.03 or earlier. This mode does not take data review and reprocessing functionality in ChemStation.	e advantage 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> <seqn> <num#> <comp></comp></num#></seqn></seqn>	Sequence Name Counter Computer Name

Figura 4 Scheda Preferences della finestra di dialogo Sequence

All'inizio di una sequenza di acquisizione, il metodo specificato nella tavola di sequenza viene copiato dalla cartella dei metodi master nel contenitore della sequenza. Inoltre, viene creata una copia della sequenza, che viene inserita insieme al file di log della sequenza e al file batch (*.b) nel contenitore della sequenza. Tutti gli aggiornamenti del metodo, come gli aggiornamenti della tavola di calibrazione, vengono scritti in questo metodo della sequenza nel contenitore. Tutti i file necessari sono così disponibili per future revisioni e rielaborazioni dei dati, senza le modifiche applicate al metodo master o al modello di sequenza per altre analisi di sequenze.

Durante l'acquisizione, i file di dati vengono memorizzati nel contenitore della sequenza. All'interno di ciascun file di dati (*.D), vengono salvati due metodi aggiuntivi, ACQ.M e DA.M, per l'analisi specifica. Si tratta di copie del metodo di sequenza create per conservare lo stato del metodo al momento dell'acquisizione del file di dati specifico. Ad esempio, nel caso di aggiornamenti della tavola di calibrazione, i metodi DA.M sono diversi per ogni analisi.

Lo specifico metodo di acquisizione ACQ.M è destinato a conservare i parametri di acquisizione, quindi si consiglia di non modificarlo durante le successive attività di revisione dei dati. È possibile visualizzare e stampare i parametri di acquisizione di questo metodo nella finestra **Data Analysis**.

Con questi file salvati nella cartella della sequenza, tutte le attività di revisione e rielaborazione dei dati possono essere eseguite senza alterare il metodo master o il modello di sequenza. Se necessario, è possibile salvare nel metodo master anche le modifiche apportate al metodo.

Acquisizione della sequenza parziale

In caso di acquisizione della sequenza parziale, l'utente può scegliere tra due opzioni:

· acquisire la sequenza parziale in un nuovo contenitore della sequenza

oppure

• acquisire la sequenza parziale in un contenitore di sequenza già esistente.

L'acquisizione dei file di dati dall'esecuzione di una sequenza parziale in un contenitore di sequenza già esistente può risultare utile nei seguenti casi:

- È necessario sovrascrivere uno o più file di dati, ad esempio, a causa dell'uso di un vial errato in precedenza.
- Solo la prima parte della sequenza è stata eseguita in precedenza e i campioni mancanti devono essere aggiunti eseguendo la sequenza parziale. Ciò si può verificare nel caso di un guasto dello strumento durante l'acquisizione della sequenza.

• Al modello di sequenza sono state aggiunte altre righe dopo l'acquisizione delle righe già esistenti. Le ulteriori analisi devono essere aggiunte ai dati già esistenti.

Pertanto, quando l'utente seleziona l'opzione **Partial Sequence** dal menu **Sequence**, viene visualizzata una finestra di dialogo che consente di selezionare un contenitore di sequenza esistente da un elenco o di crearne uno nuovo.

Directory		Date	Number of data files
:\My ChemStation Files\Data\S	UBDIRECTORY\SEQUENCE_NAME 2008-04	4/22/2008 9:41:09 AM	6
:\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
I. May chemotation miles to ata to	OBDINECTONT SEQUENCE_NAME 2000/04	472272000 0.33.47 AM	6

Figura 5 Finestra di dialogo Partial Sequence

Tuttavia, per assicurare la congruenza del contenitore della sequenza, in modo che possa essere rielaborato completamente in **Data Analysis**, vengono proposti per l'acquisizione solo i contenitori di sequenza che soddisfano determinate condizioni:

- Il nome del modello di sequenza (sequenza di origine) e il nome della sequenza nel file .S del contenitore di sequenza (sequenza di destinazione) sono identici.
- Entrambi il percorso dei dati e la sottodirectory devono essere identici per i file di sequenza.
- Il numero di righe della sequenza di origine deve essere uguale o maggiore del numero di righe della sequenza di destinazione.

- Per ogni riga nella sequenza di destinazione, il tipo di campione e il numero di iniezioni devono essere identici ai valori nelle righe corrispondenti della sequenza di origine.
- Lo schema di denominazione del file di dati deve essere identico per i due file delle sequenze.

Una volta chiusa questa finestra di dialogo facendo clic su **Ok** (per la selezione di uno dei contenitori di dati della sequenza esistenti) o **New** (per la creazione di un nuovo contenitore di sequenza), l'utente può selezionare le righe della sequenza da eseguire durante la sequenza parziale.

Acquisizione di dati per singole analisi

Il nuovo concetto di dati è applicabile anche per le singole analisi. In tal caso, il file di dati viene salvato direttamente nella relativa sottodirectory. Poiché viene impiegato un solo metodo per una singola analisi, non è necessario copiare tale metodo nella sottodirectory in quanto tutte le azioni vengono eseguite direttamente con il metodo master. Al termine della parte di acquisizione del metodo, una copia del metodo master viene salvata nella directory del file di dati (ACQ.M). Un'altra copia (DA.M) viene salvata dopo l'esecuzione della parte di analisi dei dati del metodo master.

2 Acquisizione dei dati

Acquisizione dei dati



Flusso di lavoro della ChemStation

Analisi dei dati

3

Analisi dei dati 20 Analisi dei dati: Revisione dei dati 23 Interfaccia utente della ChemStation durante la revisione dei dati 30 Analisi dei dati: rielaborazione dei dati 33

In questo capitolo vengono descritte le opzioni di analisi e revisione dei dati disponibili e viene illustrato in che modo la struttura dei dati incide sulla scelta delle opzioni da parte dell'utente.



Una volta acquisiti i dati, è possibile analizzarli nella finestra **ChemStation Data Analysis**. Selezionando la scheda **Data** di ChemStation Explorer, è possibile caricare tutte le analisi di una sequenza o tutte le singole analisi in una determinata cartella facendo doppio clic sul simbolo corrispondente. Il set di dati corrispondente diventa disponibile nella tavola di navigazione.

🍓 Instrument 1 (online): Data Analysis										
File Method Sequence Graphics Integration Calibration	Repo	ort <u>S</u> p	ectra <u>B</u> at	ch ⊻iew	<u>A</u> bort <u>H</u> elp					
Signals 🦾 🔤 Methods 🖓 🖶 🏠 🔱 LC_DEMO.M (from data file)										
Data Analysis 🛛 🔍	Sequ	ence: S	EQUENCE	NAME 200	8-04-22 08-55-	47				
Δ	Us	e meth	od from dat	a file 💌			Seq 🏭 🖳 📴 😼	Pa 🛃 🏭 🛃	💄 🎓 (\ominus (
= C:\CHEM32\1\DATA		1	Line	Ini	Vial	Eample Name	Method Name	Eample Type	Man	
III III DEMO			LINE	111	TIGI	isosratis sample		Sample Type		Lart
📄 🐨 E:\MY CHEMSTATION FILES\Data			1	1	P1-F-01	isocratic sample	LC_DEMO.M	Calibration	-	1
BUBDIRECTORY		ΗU	2	1	P1-F-02	isocratic sample STD	LC_DEMO.M	Calibration	-	2
		+ 🗆	3	1	P1-F-03	isocratic sample STD	LC_DEMO.M	Calibration	-	3
		± 🗆	4	1	P1-F-04	isocratic sample 1	LC_DEMO.M	Sample	-	
🗞 SEQUENCE_NAME 2008-04-22 09-28-55		+	5	1	P1-F-05	isocratic sample CS	LC_DEMO.M	Sample	-	
		+	6	1	P1-F-06	isocratic sample 2	LC_DEMO.M	Sample	-	
			7	1	D1 E OE	isoscotis comolo CC	LC DEMO M	Comolo	_	
		Integr	ation 🤨	Salibra	ation <u>M</u> Sig	gnal 🛄 Purify 🍇	💩 Spectrum			



a 6 Caricamento di una sequenza da ChemStation Explorer nella tavola di navigazione

Il corpo principale della Tavola di navigazione è costituito da un elenco di tutte le analisi del set. Anziché caricare un'analisi attraverso il menu **File > load signal** è ora possibile caricare un'analisi nella memoria della ChemStation facendo doppio clic sulla relativa riga nella Tavola di navigazione. Inoltre, facendo clic con il pulsante destro del mouse vengono visualizzate diverse opzioni, ad esempio, per caricare o sovrapporre determinati segnali provenienti dal file, esportare i dati o visualizzare i parametri del metodo di acquisizione.

Una volta caricata l'analisi, è possibile esaminarla per regolare i parametri di analisi dei dati, integrare i segnali e infine stampare un report. In tal caso, l'analisi viene esaminata singolarmente senza prendere in considerazione il contesto della sequenza o senza utilizzare le funzioni della tavola di sequenza. Questo metodo di analisi dei dati è denominato **Data Review**. La Tavola di navigazione fornisce il set di strumenti riportati nella Figure 7, pagina 21, che semplificano la revisione dei dati.



Figura 7 Set di strumenti per la revisione dei dati della tavola di navigazione

Con questo set di strumenti, è possibile passare all'inizio o alla fine della Tavola di navigazione, passare all'analisi successiva o precedente, passare automaticamente da un'analisi all'altra e interrompere il passaggio automatico.

Un modo diverso di analizzare i dati consiste nel **Reprocess** una sequenza completa. Durante questo procedimento, tutte le analisi vengono riesaminate nel contesto della sequenza, ossia le tavole di calibrazione dei metodi di sequenza vengono aggiornate in caso di calibrazioni; moltiplicatori, quantità e altri elementi possono essere modificati nella tavola di sequenza, nuovi metodi possono essere aggiunti al contenitore della sequenza, eccetera. Per la rielaborazione la Tavola di navigazione fornisce il set di strumenti seguente:



Figura 8 Set di strumenti per la rielaborazione della sequenza della tavola di navigazione

Tenere presente che le icone per la rielaborazione nella Tavola di navigazione sono disponibili solo per dati di sequenza generati con la ChemStation versione B.02.01 e superiori. Per i dati di singola analisi, i dati generati con versioni precedenti alla B.02.01 e i dati acquisiti quando è disattivata la funzione **Unique Folder Creation** (vedere il "Flusso di lavoro con la funzione Unique Folder Creation disattivata", pagina 40), non è possibile eseguire la rielaborazione nella finestra **Data Analysis**. Tali sequenze devono essere rielaborate nella finestra **Method and Run Control**, definendo il parametro della sequenza **Parts of method to run** come **Reprocess Only**. Per le sequenze generate con la ChemStation versione B.02.01 e superiori, l'opzione di rielaborazione nella finestra **Method and Run Control** è stata rimossa (vedere la Figure 9, pagina 22) e la rielaborazione è disponibile nella Tavola di navigazione come **Data Analysis Task**.

Sequence Parameters: Instrument 1	×
Operator Name: Joe Smith	
Data File	
Pat <u>h</u> : E:\My ChemStation Files\Data\	Subdirectory: SUBDIRECTORY
Prefix: Counter: O Prefix/Counter SIG1 O00001	
Part of <u>m</u> ethods to run	Shutdown
According to Runtime Checklist	Post-Sequence Command/Macro
According to Huntime Checklist Acquisition Only	
Wait 0 minutes after loading a new method	Not Ready Timeout: 0 minutes

Figura 9 Parametri della sequenza nella finestra Method and Run Control della Chem-Station versione B.02.01 e superiori

Analisi dei dati: Revisione dei dati

Per **Data Review** si intende un esame di ogni singola analisi. La ChemStation consente di specificare le azioni predefinite che vengono eseguite automaticamente quando un file di dati viene caricato dalla Tavola di navigazione. Tali azioni includono attività di analisi dei dati come l'integrazione del cromatogramma direttamente dopo il caricamento nonché la specifica del metodo da caricare.

Le opzioni corrispondenti per la revisione (non utilizzate per la rielaborazione) vengono impostate nella scheda **Signal/Review Options** della finestra di dialogo **Preferences**.

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	
C Sequence Method	Individual Method from Data File (DA.M)	
Individual Method from Data File (DA.M)		

Figura 10 Scheda Signal/Review Options della finestra di dialogo Preferences

La prima sezione, **Load Signal Options**, indica quali segnali di un'analisi vengono caricati e se è necessario integrare i cromatogrammi e riportare i risultati direttamente dopo il caricamento.

Nella seconda sezione, **Data Review Options**, è possibile configurare l'intervallo per il passaggio automatico tra le analisi nella Tavola di navigazione.

Analisi dei dati: Revisione dei dati

Il resto di questa sezione specifica il metodo da caricare durante la revisione dei dati, quando un'analisi viene caricata dalla Tavola di navigazione. Ciò si applica solo alla revisione dei dati e non alla rielaborazione. I seguenti gruppi separati di opzioni sono disponibili per le analisi di sequenze e singole analisi:

 Tabella 1
 Opzioni di revisione dei dati di analisi di sequenze e singole analisi

Metodo usato per la revisione dei dati della sequenza	Metodo usato per la revisione dei dati della singola analisi				
Metodo corrente	Metodo corrente				
Metodo di sequenza	Metodo singolo dal file di dati (DA.M)				
Metodo singolo dal file di dati (DA.M)					

NOTA

Le opzioni della scheda **Signal/Review Options** della finestra di dialogo **Preferences** vengono applicate solo per il caricamento di un file di dati dalla Tavola di navigazione. Se si utilizza l'opzione **Load Signal** del menu **File** o l'icona corrispondente nella barra degli strumenti principale, le impostazioni non vengono applicate, ossia non viene caricato alcun metodo.

Mantenimento di "Metodo corrente"

L'impostazione di revisione **Current Method** deve essere utilizzata ogni volta che si desidera utilizzare il metodo attualmente caricato. Nella revisione dei dati il metodo corrente rimane invariato sia che venga caricato il file di dati della singola analisi che il file del contenitore della sequenza. È possibile abilitare questa opzione selezionando **Current Method** nella finestra di dialogo **Preferences**; vedere Figure 11, pagina 25. Ciò assicura che per ciascuna analisi caricata venga mantenuto in memoria sempre lo stesso metodo.

Analisi dei dati: Revisione dei dati

and the second
Bun Data
- Harr D did
a File (DA.M)

Figura 11 Mantenimento del metodo corrente per la revisione dei dati

È possibile utilizzare questa opzione nei seguenti flussi di lavoro:

- Si desidera esaminare i file di dati del contenitore della sequenza con un metodo diverso attualmente non presente nel contenitore; ad esempio, un metodo master non utilizzato per l'acquisizione poiché il proprio flusso di lavoro prevede metodi di acquisizione e analisi dei dati separati. All'inizio della revisione, questo diverso metodo master viene caricato più facilmente dalla scheda **Method** di ChemStation Explorer.
- Nella sessione online, si desidera modificare il metodo master utilizzato per l'acquisizione del contenitore dei dati. Si desidera modificare entrambi i parametri dello strumento e di analisi dei dati come punto di inizio immediato per l'acquisizione della seguenza successiva.
- I parametri di analisi dei dati del singolo metodo DA.M sono stati modificati per una delle analisi nei contenitori di sequenza. Con l'opzione **Current Method**, è possibile revisionare tutte le analisi con questo metodo e verificare se questi parametri possono essere applicati ad altre analisi.

Analisi dei dati: Revisione dei dati

Caricamento di "Metodo sequenza"

Ogni volta che si carica un'analisi dalla Tavola di navigazione usando l'opzione **Sequence Method** (vedere Figure 12, pagina 26) per verificare i dati, viene caricato il metodo della sequenza corrispondente alla riga della sequenza dell'analisi. Come suggerisce il nome stesso, questa opzione è disponibile esclusivamente per la revisione di set di dati della sequenza e non per le singole analisi.

ferences	
Paths Sequence Signal/Review Options	
Load Signal Options	
📕 Load using signal details	
☑ Integrate after load	
L 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
Sequence Method	Individual Method from Data File (DA.M)

Figura 12 Caricamento del metodo della sequenza per la revisione dei dati

Un'applicazione tipica di questa opzione è l'ottimizzazione dei parametri di analisi dei dati specifica per la sequenza, in particolare per quanto riguarda la preparazione alla rielaborazione (vedere "Analisi dei dati: rielaborazione dei dati", pagina 33). Una volta esaminata ogni analisi e migliorati i metodi della sequenza, è possibile rielaborare la sequenza completa con i metodi aggiornati.

È necessario propagare le modifiche apportate nel metodo di sequenza al metodo master corrispondente come input per tutte le successive acquisizioni. È possibile eseguire correttamente questa operazione utilizzando la funzionalità **Update Master Method** (vedere Table 3, pagina 32).

Caricamento di "Singolo metodo dal file di dati (DA.M)"

L'impostazione di revisione **Individual Method from Data File (DA.M)** (vedere la Figure 13, pagina 27) deve essere utilizzata se si desidera caricare automaticamente il singolo file DA.M insieme al file di dati corrispondente, quando quest'ultimo viene caricato mediante la tavola di navigazione. Se si modifica un metodo e si procede al caricamento dell'analisi successiva, viene richiesto di salvare le modifiche apportate al metodo, poiché si sta caricando un nuovo metodo: il file DA.M dell'analisi successiva.

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

Figura 13 Caricamento del singolo metodo dal file di dati per la revisione dei dati

Attraverso il singolo metodo di analisi dei dati (DA.M), è possibile eseguire modifiche specifiche dell'analisi e salvarle nel singolo metodo di analisi dei dati relativo. Questo può essere utile in caso di cromatogrammi complessi che necessitano di singoli eventi di integrazione tempificati per varie analisi di una sequenza.

NOTA

Quando viene rielaborata una sequenza, tutte le azioni vengono eseguite sui metodi della sequenza e il file DA.M di ciascun file di dati viene sovrascritto, incluse le modifiche salvate in tali metodi. L'ottimizzazione del file DA.M deve essere l'ultimo passaggio dell'analisi dei dati dopo la rielaborazione finale dei dati.

Analisi dei dati: Revisione dei dati

Gestione degli eventi manuali di integrazione

Gli eventi manuali di integrazione, come una linea di base disegnata a mano, sono file di dati ancora più specifici rispetto agli eventi di integrazione tempificati. In caso di cromatogrammi complessi, è preferibile utilizzare questo tipo di eventi per la rielaborazione.

Pertanto nella ChemStation B.04.01 e versioni superiori, gli eventi manuali di integrazione possono essere memorizzati direttamente nel file dei dati anziché con il metodo. Ogni volta che il file dei dati viene esaminato o rielaborato, gli eventi manuali di integrazione nel file dei dati vengono applicati automaticamente. Un'analisi contenente eventi manuali di integrazione viene segnalata nella relativa colonna della Tavola di navigazione.

Oltre agli strumenti per tracciare una linea di base ed eliminare manualmente un picco, l'interfaccia utente fornisce anche strumenti che consentono di:

- Salvare gli eventi manuali dei cromatogrammi attualmente visualizzati nel file di dati
- Rimuovere tutti gli eventi dai cromatogrammi attualmente visualizzati
- Annullare gli ultimi eventi manuali di integrazione (disponibili fino al salvataggio dell'evento)

Quando si passa al file di dati successivo durante la revisione nella Tavola di navigazione, la ChemStation controlla se ci sono eventi manuali di integrazione non salvati e chiede all'utente se desidera salvarli.

Gli eventi manuali memorizzati nel file dei dati durante la revisione nella Tavola di navigazione non interferiscono con gli eventi manuali di integrazione memorizzati durante la revisione in modalità **Batch**. Queste due modalità di revisione sono completamente diverse rispetto agli eventi manuali di un file dei dati.

Nelle versioni della ChemStation precedenti alla B.04.01, gli eventi manuali di integrazione potevano essere memorizzati solo nel metodo. Nella versione B.04.01, è ancora possibile utilizzare questo flusso di lavoro. Il menu **Integrazione** nella finestra **Data Analysis** fornisce le seguenti opzioni per la gestione degli eventi manuali di integrazione con il metodo:

Update Manual Events of Method: salva i nuovi eventi manuali tracciati nel metodo.

Apply Manual Events from Method: applica gli eventi manuali correntemente salvati nel metodo al file dei dati attualmente caricato.

Remove Manual Events from Method: elimina gli eventi manuali dal metodo.

Per convertire gli eventi manuali memorizzati in un metodo e memorizzarli nel file dei dati, applicare gli eventi dal metodo e memorizzare i risultati nel file dei dati. Se necessario, rimuovere gli eventi dal metodo.

Se la casella di controllo **Manual Events** della **Integration Events Table** è selezionata, gli eventi manuali del metodo vengono sempre applicati quando si carica un file dei dati con questo metodo. Se il file dei dati contiene eventi manuali aggiuntivi, vengono utilizzati gli eventi nel file dei dati. Se la casella di controllo **Manual Events** è selezionata, all'utente non viene mai richiesto di salvare gli eventi nel file dei dati.

Interfaccia utente della ChemStation durante la revisione dei dati

Interfaccia utente della ChemStation durante la revisione dei dati

L'interfaccia utente della ChemStation fornisce diverse funzioni per semplificare l'uso dei diversi metodi disponibili per l'analisi dei dati (vedere la Figure 14, pagina 30).

🍇 Instrument 1 (online): Data Analysis					
File Method Sequence Graphics Integration Calibration	Report Spectra Batch View	Abort Help			
🛛 Signals 🦾 🔤 Methods 🖓 🛃 🏠 💭 LC_DE	MD.M (sequence)		الله الله الله الله الله الله الله الله		
Data Analysis 🗣	Sequence: SEQUENCE_NAME 200	8-0 E:\MY CHEN	1STATION		
	Use sequence method 💌	FILES\DATA	A\SUBDIRECTORY\SEQ C_DEMO.M	UENCE_NAME 2008-04-22	😼 🖶 🗂 🔜
	Use current method	Vial	Sample Name	Method Name	Sample Type
= + = E:\MY CHEMSTATION FILES\Data	Use method from data file	P1-F-01	isocratic sample	LC_DEMO.M	Calibration
	Use sequence method	P1-F-02	isocratic sample STD	LC_DEMO.M	Calibration
SEQUENCE_NAME 2008-04-22 08-55-47	+ 3 1	P1-F-03	isocratic sample STD	LC_DEMO.M	Calibration
	+ 4 1	P1-E-04	isocratic sample 1	LC DEMO M	Sample

Figura 14 Interfaccia utente nell'analisi dei dati

- Lo stato di modifica del metodo viene visualizzato nella finestra **Data Analysis**, permettendo di identificare facilmente le modifiche del metodo non salvate. L'interfaccia utente visualizza sempre il nome del metodo attualmente caricato (insieme a un'indicazione se si tratta di un singolo metodo di analisi di un file di dati o di un metodo di sequenza).
- Quando si sposta il puntatore del mouse su questo campo, la descrizione dei comandi visualizza anche il percorso completo e il nome del metodo.
- Una casella a discesa consente di accedere rapidamente alle opzioni relative al metodo nella finestra di dialogo **Preferences**. È possibile abilitare direttamente una delle opzioni disponibili in modo da applicarla al successivo caricamento di un'analisi dalla tavola di navigazione. Inoltre, risulta molto semplice verificare quale opzione sia attualmente attiva. Tenere presente che tali opzioni si applicano solo alla revisione dei dati e non alla rielaborazione.

Interfaccia utente della ChemStation durante la revisione dei dati

Salvataggio dei metodi nella finestra Analisi dei dati

Durante l'uso della finestra **Data Analysis**, l'utente ottimizza i parametri dell'analisi dei dati del suo metodo. Oltre al salvataggio di un metodo, è possibile che il flusso di lavoro richieda, ad esempio, di salvare un metodo di sequenza con un nome differente o come metodo master nella directory del metodo master.

Il menu **Method** nell'analisi dei dati fornisce diverse opzioni per salvare il metodo:

Preferenza di caricamento del metodo	Opzioni di salvataggio disponibili
Metodo corrente	Salva metodo
	Salva metodo come
Metodo di sequenza	Salva metodo sequenza
	Salva come nuovo metodo master
Singolo metodo del file di dati (DA.M)	Salva metodo file dati
	Salva come nuovo metodo master

 Tabella 2
 Opzioni di salvataggio per menu Metodo nella finestra Analisi dei dati

Nell'opzione **Save as new Master Method** per i metodi di sequenza e per i singoli metodi DA.M, come directory di destinazione è preselezionata per impostazione predefinita la directory del metodo master.

Funzione di aggiornamento del metodo master

Inoltre il menu **Method** consente di rendere disponibili per il metodo della sequenza o il metodo master solo i parametri dell'analisi dei dati sviluppati dall'utente per il singolo metodo. Questa opzione, **Update Master Method** o **Update Sequence Method** è disponibile nel menu **Method** o facendo clic con il pulsante destro del mouse nella Tavola di navigazione della corrispondente analisi.

Questa funzione è disponibile nelle seguenti situazioni:

Interfaccia utente della ChemStation durante la revisione dei dati

Metodo caricato	Opzioni disponibili			
Singolo metodo di analisi dei dati (DA.M)	Aggiornamento metodo master			
	Aggiornamento metodo sequenza			
Metodo sequenza	Aggiornamento metodo master			
Metodo master				

Tabella 3 Disponibilità dell'aggiornamento ... Funzionalità del metodo

È importante notare che questa funzione aggiorna solo i parametri di analisi dei dati del metodo target e sovrascrive tutti i parametri di analisi dei dati.

NOTA

Per motivi tecnici, oltre ai parametri di analisi dei dati, anche l'audit trail del metodo target viene sovrascritto con l'audit trail del metodo origine.

3

Analisi dei dati: rielaborazione dei dati

Contrariamente alla revisione dei dati, la rielaborazione della sequenza implica il riesame nel contesto della sequenza di tutte le analisi di una sequenza, inclusi gli aggiornamenti alla tavola di calibrazione, le modifiche dei parametri nella tavola della sequenza, le aggiunte di nuovi metodi alla sequenza e così via.

Con il nuovo concetto di organizzazione dei dati, il contenitore della sequenza include tutti i file necessari per la rielaborazione: i file di dati, una copia del file della sequenza e tutti i metodi della sequenza originariamente impiegati nell'acquisizione. Pertanto, per rielaborare una sequenza sarà sufficiente caricarla nella tavola di navigazione ed avere a disposizione il set di strumenti necessari.



Figura 15 Set di strumenti per la rielaborazione della sequenza

Tenere presenti le seguenti regole relative alla rielaborazione:

- Quando si carica un contenitore di sequenza nella Tavola di navigazione, ChemStation carica automaticamente anche il file della sequenza .S all'interno di questo contenitore. Il file della sequenza contiene tutte le righe della sequenza che si riferiscono a qualsiasi file di dati appartenente a questo contenitore.
- Tutte le azioni vengono eseguite sui metodi della sequenza. Se devono essere applicati i parametri di analisi modificati, sarà necessario modificare i metodi della sequenza.
- Le impostazioni di caricamento del metodo della finestra di dialogo **Preferences** non hanno alcuna influenza sulla rielaborazione poiché agiscono sempre sui metodi della sequenza o sui metodi della sequenza aggiornati. Questo set di funzioni è valido solo per la revisione.
- Durante la rielaborazione, vengono aggiornati il file Batch (*.b), il file log della singola analisi/sequenza (*.log) e la tavola di navigazione. Il singolo metodo di analisi dei dati (DA.M) di ciascun file di dati elaborato viene sovrascritto con il metodo di sequenza corrente.

Analisi dei dati: rielaborazione dei dati

NOTA

Quando viene rielaborata una sequenza, tutte le azioni vengono eseguite sui metodi della sequenza e il file DA.M di ciascun file di dati viene sovrascritto, incluse le modifiche salvate in tali metodi. L'ottimizzazione del file DA.M durante la revisione dei dati deve essere l'ultimo passaggio dell'analisi dei dati dopo la rielaborazione finale dei dati.

• Se si desidera aggiungere alla tavola di sequenza uno o più metodi nuovi da una delle directory dei metodi master, sarà necessario utilizzare l'opzione **Browse** nell'elenco dei metodi per passare a una delle directory dei metodi specificata (solo i metodi già presenti nel contenitore della sequenza sono disponibili senza che sia necessario selezionarli). Il nuovo metodo viene anche copiato nel contenitore della sequenza durante la rielaborazione. Ciò implica che non è possibile selezionare un metodo con lo stesso nome di un metodo già presente nel contenitore.

Seq	uence Ta	ble: Inst	rument 1						
	Currently F Line:	Running Meth	od:						V
S	ample Info	for P1-F-0	1:						
i	socratic ch	eck out sa	ample, calibration mix	ture 1					
	Line	Vial	Sample Name	h	ethod 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		
	1	D1 E 0E	le le leel		10 0540			1	

Figura 16 Passaggio alla directory dei metodi master nella tavola di sequenza

- Non è possibile aggiungere o rimuovere righe dalla tavola di sequenza.
- Nella finestra di dialogo **Sequence Parameters**, è possibile modificare solo il nome dell'operatore, il commento della sequenza e l'uso delle informazioni della tavola di sequenza. Tutti gli altri campi devono essere impostati durante l'acquisizione dei dati o non vengono applicati alla rielaborazione.

Analisi dei dati: rielaborazione dei dati

Data File	
Path: E:\My ChemStation Files\Data\	Subdirectory:
Auto Prefix: Counter: Prefix: Counter:	
Part of methods to num	- Shutdawa-
Beprocessing Only	Post-Sequence Command/Macro
Wait minutes after loading a new method	Not Ready Timeout:
3ar Code Reader	
Use In Sequence On a bar code mismatch	C Inject anyway C Don't inject
Fraction Information	- ChemStore-
Eraction Start Location:	Iransfer Settings
quence Commen <u>t</u> :	

Figura 17 Parametri della sequenza nell'analisi dei dati

Salvataggio delle sequenze nella finestra Analisi dei dati

Il menu **Sequence** non solo consente di salvare la sequenza dopo aver modificato la tavola e i parametri della sequenza, o i parametri di output della sequenza, ma permette anche di salvare una sequenza di analisi dei dati (memorizzata nel contenitore della sequenza) come modello di sequenza.

Questa funzionalità è utile se si aggiungono righe della sequenza alla relativa tavola direttamente durante l'acquisizione. Le righe aggiuntive sono disponibili solo in quello specifico contenitore della sequenza, e non nel modello di sequenza originale.

Analisi dei dati: rielaborazione dei dati

Il salvataggio di una sequenza come nuovo modello di sequenza provvede automaticamente alla conversione del file della sequenza, in modo che tutti i campi siano nuovamente modificabili.



Flusso di lavoro della ChemStation

4

Flusso di lavoro con la funzione Unique Folder Creation disattivata

Attivazione/disattivazione della funzione Unique Folder Creation38Flusso di lavoro con la funzione Unique Folder Creation disattivata40Migrazione del contenitore della sequenza44

In questo capitolo vengono fornite informazioni su come memorizzare i dati in modo simile alla ChemStation versione B.01.03 o precedenti disattivando la funzione **Unique Folder Creation**. Questa modalità non offre tutti i vantaggi della funzionalità di revisione e di rielaborazione dei dati disponibile nelle ultime versioni della ChemStation.



Attivazione/disattivazione della funzione Unique Folder Creation

Il nuovo concetto di dati descritto nei capitoli precedenti offre una serie di vantaggi:

- I dati della sequenza non vengono sovrascritti. I file di dati risultanti da ogni acquisizione della sequenza vengono memorizzati con un nome esclusivo nel relativo contenitore della sequenza.
- Con il concetto di contenitore della sequenza, i dati vengono memorizzati con tutte le informazioni necessarie per l'analisi dei dati, ossia, le copie dei file della sequenza e di tutti i metodi impiegati con la sequenza. È possibile modificare tali metodi mediante l'inserimento specifico della sequenza e senza influenzare il metodo master originale. Il concetto di contenitore rafforza il significato di sequenza come set di file di dati e di metodi correlati per la creazione del risultato.
- La revisione e la rielaborazione dei dati sono entrambe disponibili nella finestra **Data Analysis** attraverso la Tavola di navigazione.
- Il concetto di contenitore di dati offre le condizioni ottimali per l'opzione OpenLAB ChemStation consentendo lo scambio di dati con il sistema Open-LAB Enterprise Content Manager (ECM) Agilent.

Tuttavia, in alcune situazioni si potrebbe voler memorizzare i dati in modo simile alla ChemStation versione B.01.03 o precedenti ed operare in base ai flussi di lavoro corrispondenti:

- Durante lo sviluppo del metodo potrebbe essere più comodo utilizzare un solo metodo sia per l'acquisizione che per l'analisi dei dati, in modo da rendere automaticamente disponibili le modifiche per future acquisizioni e rianalisi di dati già acquisiti.
- I dati delle diverse acquisizioni devono trovarsi in una cartella, ad esempio, nel caso di acquisizione parziale.
- Eventuali soluzioni macro personalizzate progettate per versioni meno recenti di un sistema ChemStation potrebbero richiedere la memorizzazione di dati, metodi o sequenza in base allo schema di organizzazione di dati precedente.

• Se la ChemStation versione B0.04.01 viene utilizzata in un laboratorio in cui sono ancora presenti sistemi con la ChemStation versione B.01.03 o precedenti, potrebbe risultare più comodo utilizzare la stessa modalità di organizzazione dei dati su tutti i sistemi.

Flusso di lavoro con la funzione Unique Folder Creation disattivata

Per consentire l'adozione del concetto di memorizzazione dei dati delle versioni della ChemStation precedenti alla B.02.01, nella scheda **Sequence** della finestra di dialogo **Preferences** è disponibile la sezione Memorizzazione dati. In tale sezione è possibile scegliere **Unique Folder Creation ON** e **Unique Folder Creation OFF** (Figure 18, pagina 40). Per impostazione predefinita, l'opzione **Unique Folder Creation ON** è selezionata. L'opzione **Unique Folder Creation ON** consente l'applicazione del concetto di memorizzazione dei dati descritto nei tre capitoli precedenti.

referen	nces	-02
Paths	Sequence Signal/Review Options	
Dat	a Storage	
	O Unique Folder Creation ON	
	Creates a unique data folder for each sequence run. See Help fo	or more details.
	Unique Folder Creation OFF	
	Stores data as in ChemStation B.01.03 or earlier. This mode doe: data review and reprocessing functionality in ChemStation.	s not take advantage of the latest
Nan	ne Pattern	
	<seqn> <date> <time></time></date></seqn>	1.1.1
	SEQUENCE_NAME 2008-04-24 09-14-34	
-	······································	
	OK Cancel	Help

Figura 18 Scheda Sequence della finestra di dialogo Preferences

NOTA

L'attivazione o la disattivazione della creazione di cartelle esclusive incide solo sulle future acquisizioni e non modifica l'organizzazione dei dati già acquisiti.

NOTA Si consiglia di scegliere tra le due modalità all'inizio del lavoro e di non cambiare tale impostazione successivamente.

La disattivazione della creazione di cartelle esclusive non è supportata dall'opzione OpenLAB della ChemStation o dal ChemStore/Security Pack installato.

La selezione dell'opzione **Unique Folder Creation Off** ha il seguente impatto sulla memorizzazione dei dati:

- I dati della sequenza non vengono acquisiti in un contenitore della sequenza ma direttamente nella sottodirectory specificata nei **Sequence Parameters** (Figure 4, pagina 14). Pertanto, il modello del nome della sequenza è inattivo nella scheda **Sequence** della finestra di dialogo **Preferences** (Figure 18, pagina 40).
- Ciò significa che è possibile acquisire nella stessa sottodirectory due o più acquisizioni di sequenze di dati. Di conseguenza, sussiste il rischio di sovrascrivere i dati esistenti, ma al contempo è possibile suddividere le sequenze mediante l'esecuzione di sequenze parziali e combinare i risultati in una cartella (operazione non consentita con la funzione di creazione di cartelle esclusive attivata).
- Con i dati non vengono memorizzati metodi di sequenza (.M) o copie del file di sequenza (.S) ma solo il file di log della sequenza e il file batch (.B). Pertanto risultano disponibili solo i metodi e le sequenze nei percorsi specificati nella finestra di dialogo **Preferences** (Figure 2, pagina 12). Tali metodi e sequenze devono essere utilizzati per l'acquisizione nonché per la revisione e la rielaborazione dei dati. Le modifiche apportate ai metodi specifici della sequenza o del file di dati possono essere memorizzate solo salvando il metodo con un nome diverso. Altrimenti, tali modifiche vengono applicate anche al metodo di acquisizione. Tuttavia, si potrebbe desiderare di applicare le modifiche durante lo sviluppo del metodo.
- Non esistono metodi specifici dei file di dati (ACQ.M e DA.M) memorizzati. Il salvataggio delle informazioni sull'acquisizione originale è possibile solo includendo tali informazioni nel report o selezionando **Save Method with Data** dalla lista di controllo del periodo di funzionamento del metodo (Figure 19, pagina 42). Con questa opzione, il metodo di acquisizione viene memorizzato come RUN.M in ciascun file di dati.

4 Flusso di lavoro con la funzione Unique Folder Creation disattivata

Flusso di lavoro con la funzione Unique Folder Creation disattivata

Run Time Checklist: Instrument 1		×
Check Method Sections to Run Pre-Run Command / Macro Data <u>A</u> cquisition Standard <u>D</u> ata Analysis		
<u>C</u> ustomized Data Analysis Macro <u>S</u> ave GLP Data Post- <u>R</u> un Command / Macro		
Save Method with Data	Cancel Help	

Figura 19 Lista di controllo del periodo di funzionamento: Salvataggio del metodo con i dati

L'interfaccia utente avanzata della ChemStation introdotta a partire dalla versione B.02.01 è disponibile anche quando è disattivata la funzione di creazione di cartelle esclusive. Tuttavia, alcune funzioni potrebbero non essere disponibili in questa modalità. Le stesse limitazioni si applicano anche a qualsiasi analisi acquisita con una versione della ChemStation precedente alla B.02.01.

• Quando una sequenza viene caricata nella tavola di navigazione, il set di strumenti di rielaborazione non è disponibile (Figure 20, pagina 42). Le sequenze acquisite in questa modalità di memorizzazione dei dati possono essere rielaborate solo nella finestra **Method and Run Control** mediante l'opzione **Reprocessing only** nei parametri della sequenza (Figure 21, pagina 43).

nstrument 1 (online): Data Analysis											
ile <u>M</u> ethod Sequence Graphics Integration <u>C</u> alibration Report Spectra Batch View Abort <u>H</u> elp											
Signals 🏠 🍇 Methods 🗞 🖶 🎧 🛈 LC_DEMO.M (sequence)											
Data Analysis 🛛 🖗	Sec	quence:	BATCH								
		Use curi	ent method	•	M N 4		Seq 🟭 🖫 🖷 🕎	8430) 🕕 📒	
			Line	Inj	Vial	Sample Name	Method Name	Sample Type	Man	Cal Level	Sa
BATCH	Þ	+ [1	1	5	Isocratic Std. 1	BATCH.M	Calibration	-	1	
		+	2 2	1	5	Isocratic Std. 1	BATCH.M	Calibration	-	1	
Single Runs		+	3	1	5	Isocratic Std. 1	BATCH.M	Control Sample	-		
ESTD DAD		+ (4	1	6	Isocratic Std. 2	BATCH.M	Sample	-		Γ
FRACTION_COLLECTION		, im r		1	7	Tenerable Chill D	DATCH M	Comolo	- 1	1	
Ha ISTD DAD	Ľ										



Flusso di lavoro con la funzione Unique Folder Creation disattivata 4

Flusso di lavoro con la funzione Unique Folder Creation disattivata

Subdirectory: SUBDIRECTORY
Shutdown
Post-Sequence Command/Macro
<u>S</u>

Figura 21 Rielaborazione dei dati della sequenza acquisiti con la funzione di creazione di cartelle esclusive disattivata

• Con le opzioni di utilizzo del metodo **Individual Method from Data File** e **Sequence Method** (vedere Figure 10, pagina 23), ogni volta che si fa doppio clic su un'analisi nella tavola di navigazione viene visualizzato un messaggio di segnalazione ad indicare che il singolo metodo/metodo della sequenza non esiste. Come descritto in precedenza, tali metodi non vengono memo-rizzati con i dati. In tal caso, l'unica opzione valida per la revisione dei dati è **Current Method**.

Migrazione del contenitore della sequenza

La ChemStation fornisce uno strumento che consente di migrare dati diversi da un contenitore in un formato di contenitore della sequenza. Per eseguire correttamente questa operazione, è necessario che sia ancora disponibile il file della sequenza originale. Tale file deve contenere tutte le righe della sequenza necessarie e seguire lo schema di denominazione del file di dati originale per permettere la rielaborazione di tutti i file di dati della sequenza. Inoltre, devono essere disponibili tutti i metodi riportati nella colonna Metodo della tavola di sequenza.

Per eseguire la migrazione,

avviare **Sequence Container Migration** dal menu Sequenza nella finestra Analisi dei dati.

🖕 Sequence Container Migration		×
To migrate non-container data to a se	equence container, select sequence template, method path, data source and destination directories. C:\Chem32\1\SEQUENCE\BATCH.S	
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:]
	Start Close Help	

Figura 22 Migrazione del contenitore della sequenza

Specificare le informazioni nei seguenti campi obbligatori (vedere Figure 22, pagina 44):

Select Sequence Template: selezionare il file di sequenza .S contenente la tavola di sequenza corrispondente al set di dati da migrare.

Select Method Patch: selezionare la directory in cui si trovano i metodi a cui si fa riferimento nella tavola di sequenza.

Select Source: selezionare la directory contenente i file di dati da migrare.

Select Destination: specificare il percorso e il nome del contenitore della sequenza da creare. È possibile selezionare una cartella esistente o crearne una nuova.

Una volta specificate le informazioni in tutti i campi, è possibile avviare la migrazione.

Vengono effettuate le seguenti operazioni:

- Viene creata la directory del contenitore della sequenza.
- Il modello della sequenza viene copiato nel contenitore e convertito in uno stato che consenta la rielaborazione dei file di dati nella finestra **Data Analysis** (vedere "Analisi dei dati: rielaborazione dei dati", pagina 33).
- I metodi a cui si fa riferimento nella tavola di sequenza vengono copiati dal percorso del metodo specificato alla cartella del contenitore.
- I file di dati, il registro della sequenza e il file batch vengono copiati dalla directory di origine dei dati alla directory di destinazione.
- In base alle informazioni nella tavola di sequenza, una copia del metodo corrispondente viene copiato in ciascun file di dati come DA.M.

Al termine della migrazione del contenitore, viene visualizzato un messaggio che ne indica la corretta esecuzione nel campo **Messages and Warnings**. In caso contrario, un messaggio di avvertenza indicherà eventuali problemi che si sono verificati durante la migrazione.

Glossario-IU

A

Add Aggiungi Apply Manual Events from Method Applica eventi manuali dal metodo

B

Browse Sfoglia

C

ChemStation Data Analysis Analisi dei dati della ChemStation Current Method Metodo corrente

D

Data Dati Data Analysis Analisi dei dati Data Analysis Task Attività di analisi dei dati Data Review Revisione dei dati Data Review Options Opzioni di revisione dei dati

Individual Method from Data File Usa metodo del file di dati Individual Method from Data File (DA.M) Singolo metodo dal file di dati (DA.M) Integration Events Table Tavola degli eventi di integrazione

L

Load Signal Carica segnale Load Signal Options Opzioni di caricamento dei segnali

Μ

Manual Events Eventi manuali Messages and Warnings Messaggi e avvertenze Method Metodo Method and Run Control Controllo del metodo e delle analisi

Ν

Name Pattern Modello nome New Nuovo

Ρ

Partial Sequence Sequenza parziale Parts of method to run Parti del metodo da analizzare Paths Percorsi Preferences Preferenze

R

Remove Rimuovi Remove Manual Events from Method Rimuovi eventi manuali dal metodo Reprocess Rielaborare Reprocess Only Solo rielaborazione Reprocessing only Solo rielaborazione

S

Sample Info Info campione Save as new Master Method Salva come nuovo metodo master Save Method with Data Salva metodo con i dati Select Destination Seleziona destinazione Select Method Patch Seleziona patch metodo Select Sequence Template Seleziona modello sequenza Select Source Seleziona origine Sequence Seguenza sequence container contenitore della seguenza Sequence Container Migration Migrazione contenitore sequenza

Glossario-IU

Sequence Method Metodo sequenza sequence methods metodi della sequenza Sequence Parameters Parametri sequenza Signal/Review Options Segnale/Opzioni revisione

U

Unique Folder Creation Creazione cartelle esclusive Unique Folder Creation Off Creazione cartelle esclusive inattiva Unique Folder Creation OFF Creazione cartelle esclusive inattiva Unique Folder Creation ON Creazione cartelle esclusive attiva Update Manual Events of Method Aggiorna eventi manuali del metodo Update Master Method Aggiorna metodo master Update Sequence Method Aggiorna metodo della sequenza www.agilent.com

In questo volume

Con la versione B.020.01 e superiori della ChemStation, le funzioni di revisione e rielaborazione dei dati sono state notevolmente migliorate per consentire una rapida revisione dei risultati.

Le nuove funzioni di memorizzazione dei dati della ChemStation consentono di organizzare in modo efficiente dati e metodi di sequenza.

© Agilent Technologies 2006, 2007-2009

Printed in Germany 2/2009



G2170-94043

