

# Agilent OpenLAB CDS： 强大又灵活的报告功能显著提高实 验室分析效率，专为满足您的业务 需求量身打造

## 技术简报

OpenLab CDS 报告能够为您的实验室节省多少时间？假设实验室一个月分析大约 500 个样品，每个样品耗时 10 分钟（包括数据审查），每年手动录入数据将花费 1000 小时，也就是 25 个星期（40 小时每星期），这相当于一名分析人员半年的时间。使用 OpenLAB CDS 软件替代传统的 Excel 手动处理，报告时间可缩减至每个样品 5 分钟，每年将节约 500 小时，也就是 12.5 个星期，足足节约了一半的时间。

### 挑战

色谱数据处理系统 (CDS) 用户坦言最头疼的是出报告。大多数实验室都希望报告能够满足特定的分析和业务需求，不仅包含 GC、LC、GC/MS 及 LC/MS 等多种分析手段获得的结果，还能包括自定义计算、特定布局、字体以及公司 logo 等内容。实验室通常只能将数据导出或人工抄录到其他软件来创建此类报告。然而，将数据转移到其他软件的过程不仅耗时，还会引入错误，影响实验室数据完整性。此外，由于创建报告模板、报告尺寸以及打印成本等相关挑战，报告过程可能会十分复杂。因此，亟需一款强大又灵活的 CDS 报告工具来解决这些问题。



Agilent Technologies

## OpenLAB CDS 解决方案

与其他 CDS 软件不同的是，OpenLAB CDS 可提供高级报告功能，让您更快速更高效地生成前所未有的高质量专业报告。图 1 展示了 OpenLAB CDS 生成的内容全面的报告。

您可以利用实际数据组预览报告，轻松找到关键数据，无需打印。生成的报告涵盖了详尽的必要信息，并且排版紧凑。因此，可有效减少不必要的打印导致的浪费和成本。

您可通过 OpenLAB CDS 完成整个流程：进行统计分析、标记不合格数据、绘制趋势图以缩短决策时间，以及生成简单的报告文件以导入 LIMS。由于大幅减少数据抄录和导出的需要，OpenLAB CDS 使数据更安全、结果更准确。

此外，您可对 OpenLAB CDS 的报告模板进行定制，设置公司 logo、所选字体、字号以及字体颜色，得到看起来更专业的报告。您可以根据需要随意设置要显示的信息以及版式。

我们来看看 OpenLAB CDS 能满足您所有报告需求的秘诀。

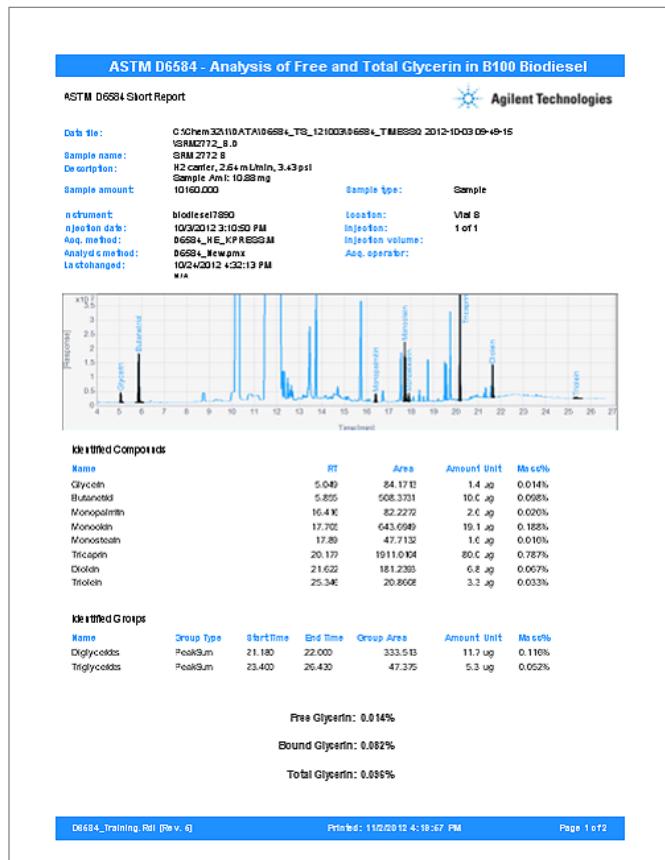


图 1. 随时根据您的需要报告您所需的信息，以简洁明了的格式展现您出色的分析工作。本示例显示的是自定义脂肪酸甲酯报告，其中色谱图进行了缩放以显示目标峰。采用自定义计算，依据 ASTM 要求通过重量和重量百分比以及归一化结果报告化合物和化合物种类

## 立即预览报告

要想提高实验室效率，OpenLAB CDS 可将实际数据组立即生成预览报告。若只想预览和报告鉴别出的色谱峰，选择“Identified peaks”（已鉴别的峰）复选框，报告预览就会自动更新并显示（图 2）。如果是使用其他 CDS 软件，您需要在电子表格中剪切、复制和粘贴，手动删除结果文件中不需要的峰。而现在，您可以直接从 OpenLAB CDS 中去掉未知峰，既节约时间，又能避免错误。

## 快速找到您需要的数据

目录概览可以让您在打印前或无需打印就能在信息量大的报告中快速找到和预览关键数据。如图 3 所示，您可以通过目录快速查看相对标准偏差 (RSD) 的值，确定是否需要重新运行样品。

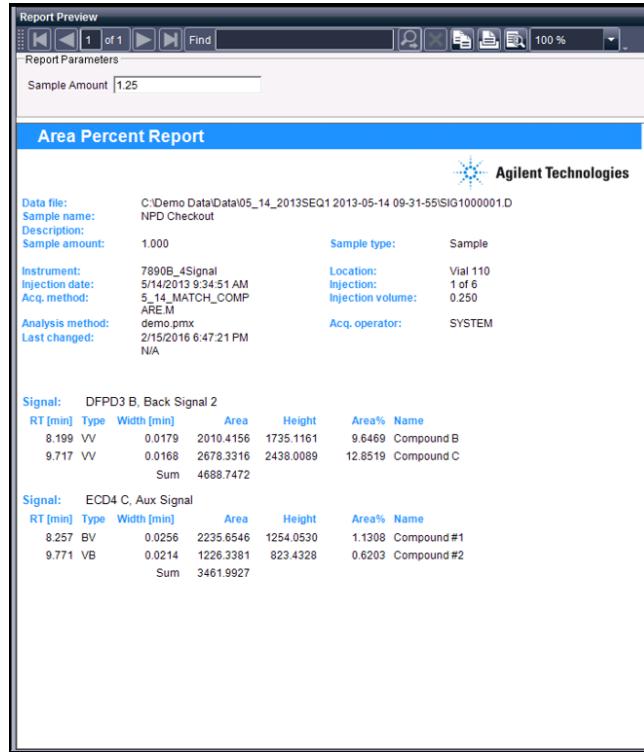


图 2. 自定义为仅显示已识别的峰的 Area Percent Report (面积百分比报告) 预览

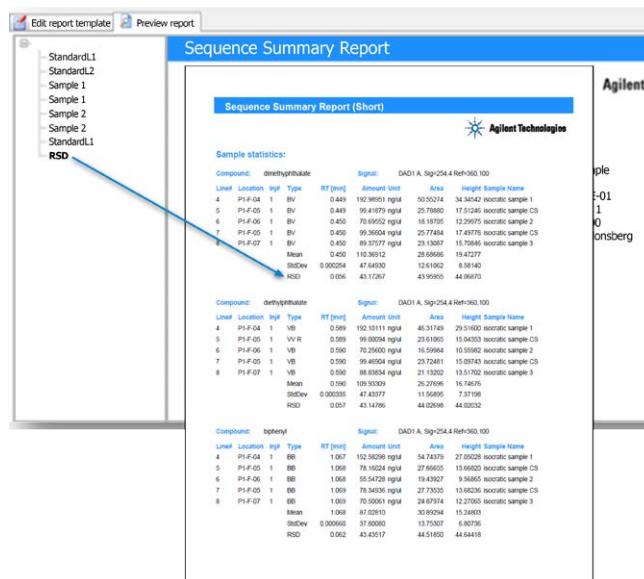


图 3. 利用目录概览快速查找和预览特定数据。单击目录中的 RSD 文件夹可快速跳转至含有 RSD 值的报告页面

## 快速决策：跨序列报告和趋势 图表绘制

实验室常需要报告多个序列的结果并绘制图表以及审查数据。OpenLAB CDS 交叉序列报告功能将这一过程化繁为简，无需使用其他电子表格或质量控制软件。一天内、几个星期、几个月以及单个或多个仪器得到的序列运行数据均可包含在一个交叉序列报告中。图 4 是 8 个序列中选定目标化合物分组的表格报告示例。图 5 中，交叉序列报告被用来绘制实验室整体趋势。可以交互地选择上限和下限，异常值会自动标记。

Name	Amount [ppm]	RT [min]	Area	Height
Compound A	591.552	3.963	591.5515	531.1581
Compound A	483.875	3.964	483.8753	443.0648
Compound A	213.240	3.966	213.2398	184.0030
Compound A	299.302	3.967	299.3024	270.5235
Compound B	7.57885	5.356	7.5789	6.3792
Compound B	4.69284	5.384	4.6928	3.9953
Compound B	5.81145	5.387	5.8114	3.8154
Compound B	7.16936	5.389	7.1694	4.7644
Compound C	673.854	5.950	673.8537	582.6578
Compound C	1884.54	5.951	1884.5417	1310.5732
Compound C	1544.83	5.951	1544.8344	1167.6635
Compound C	946.152	5.953	946.1524	806.9598
Compound D	2010.42	8.199	2010.4156	1735.1161

图 4. 快速进行跨序列报告。为便于查看，本例中已对目标化合物进行分组

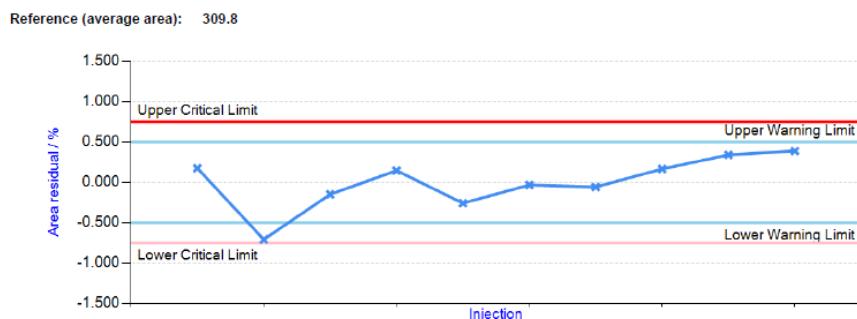


图 5. 跨序列趋势图。以交叉序列报告为例，标记了离群值以及上限和下限

## 节约时间，改善数据完整性： 在 OpenLAB CDS 中完成计算

实验室经常需要为生产、研发及其他部门提供数据和结果报告，包含统计分析和其他计算。这些部门通常只想尽快获取他们需要的信息，以回答诸如“该产品可否发运？”或“该产品是否含有杂质或其他非预期化合物？”等问题。OpenLAB CDS 带有内置总结计算功能，如 RSD、平均值、最小值和最大值计算，能够避免因导出数据至其他软件造成的错误和的时间浪费，免除手动抄录数据和手动计算。如图 6 所示，只需选中复选框即可将计算功能加到报告中。可以直接在 OpenLAB CDS 中创建复杂的报告，由于数据始终保存在 CDS 中，安全系数极高。

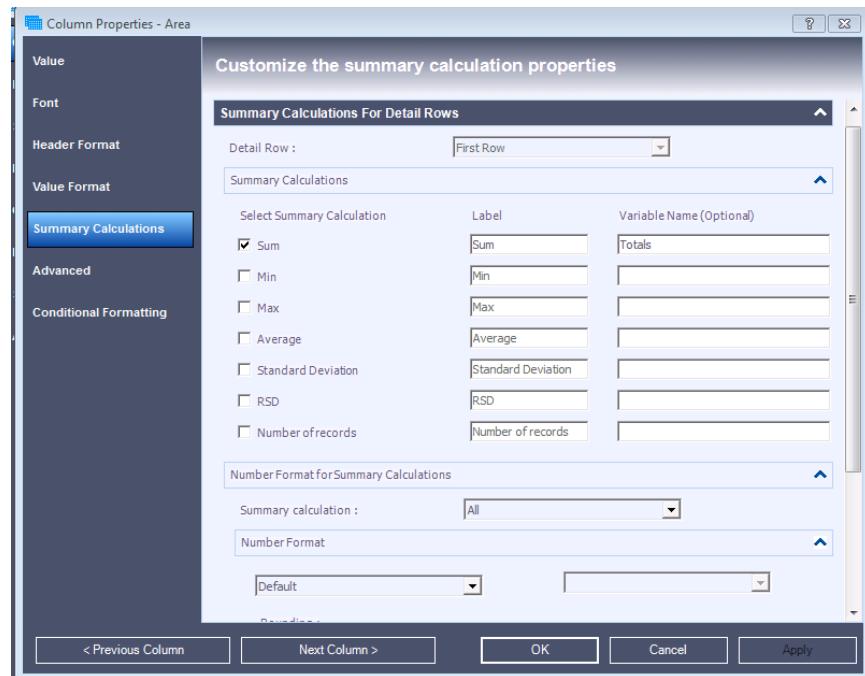


图 6. 通过复选框选择要应用的计算

## 减少不必要的报告导致的浪费和成本

实验室希望根据需要来报告或打印信息，将不需要的内容打印出来会造成浪费。这是可以节省开支的一个方面。此外，一些实验室希望运营更环保，节约自然资源。OpenLAB CDS 无疑是不二之选。过去，一份 169 页的序列总结报告可能只有两页的信息是实验室需要的。使用 OpenLAB CDS 可以删除序列总结报告模板中不需要的项，轻松创建只包含所需信息的两页报告。

此外，为使报告包含所需的全部信息，实验室常以横向模式打印报告。但部分实验室不想横向打印，因为不方便阅读和归档。结果，这些实验室采用纵向模式打印两页报告。OpenLAB CDS 支持双行报告版式，这样可以用最小的版面罗列所有的必要信息。选中复选框可轻松创建双行表格式。图 7 是双行报告示例，包含了峰面积、峰高、信号描述和响应因子。

## 避免抄录错误：直接将结果转至 LIMS

许多实验室需要将数据转移至 LIMS，通常是手动输入，非常容易出错。有了 OpenLAB CDS，您可以创建一个简单的文本格式报告文件，直接导入 LIMS（图 8）。创建报告模板后，只需选择含有所需信息的报告表。如果模板中没有包含某个所需字段，可轻松加上。最终报告可以保存为文本格式 (.txt)、Excel (.xls、.csv)、PDF (.pdf) 或 Word 格式 (.doc)。

Single Injection Report								
Name	RT [min]	Area	Height	Area %	Height %	Amount [ng/uL]	Signal Desc.	RF
c10	4.374	2269.9009	1367.9119	13.92	14.16	98.903	FID1 A,	0.04357
c11	4.935	2272.0645	1365.1278	13.94	14.13	98.416	FID1 A,	0.04332
c12	5.448	2376.7705	1464.0107	14.58	15.15	98.062	FID1 A,	0.04126
c13	5.924	2352.6052	1390.4696	14.43	14.39	98.184	FID1 A,	0.04173
c14	6.37	2346.7683	1383.3612	14.40	14.32	97.81	FID1 A,	0.04168
c15	6.792	2366.4912	1345.9601	14.52	13.93	97.659	FID1 A,	0.04127
c16	7.19	2317.2615	1345.5991	14.21	13.93	97.757	FID1 A,	0.04219

图 7. 在一页上显示更多信息。包含峰面积、峰高、数据描述和响应因子的双行表

Report Preview						
Name	RT [min]	Area	Height	RF	Amount [ppm]	
Compound A	3.963	591.5515	531.1581	1.00000	591.552	
Compound A	3.964	483.8753	443.0648	1.00000	483.875	
Compound A	3.966	213.2398	184.0030	1.00000	213.240	
Compound A	3.967	299.3024	270.5235	1.00000	299.302	
Compound B	5.356	7.5789	6.3792	1.00000	7.579	
Compound B	5.384	4.6928	3.9953	1.00000	4.693	
Compound B	5.387	5.8114	3.8154	1.00000	5.811	
Compound B	5.389	7.1694	4.7644	1.00000	7.169	
Compound C	5.950	673.8537	582.6578	1.00000	673.854	
Compound C	5.951	1884.5417	1310.5732	1.00000	1884.542	
Compound C	5.951	1544.8344	1167.6635	1.00000	1544.834	
Compound C	5.953	946.1524	806.9598	1.00000	946.152	

图 8. 创建简单的报告文件用于导入 LIMS。本例中的报告预览包括样品名称、化合物的量、保留时间、峰面积和峰高

## 满足报告需求：自定义 OpenLAB CDS 模板

实验室希望可以自主选择报告中显示的信息以及报告的版式。OpenLAB CDS 报告模板提取所选信息并以简洁的版式呈现报告，帮助您快速作出决策（图 10）。软件包括 20 多个预定义的模板，也可通过“拖放”轻松自定义满足特定需求的报告。您可以追踪报告模板上所做的任何更改，对结果准确性充满信心。

OpenLAB CDS 具有电子表格常用的所有报告功能，例如锁定条目以保护计算不被更改、使用业务逻辑公式实现通过/失败决策、报告创建期间使用插件执行自定义代码以及使用自定义计算和条件格式。例如，假设您想要报告结果并确认其在指标范围内。使用 OpenLAB CDS 报告参数、自定义计算和条件格式可在几分钟内快速实现以上要求（图 10）。

您还可以在报告中添加自定义 logo 和表头，设置字体、字号和颜色。还能缩放色谱图以方便查看。与电子表格的特定版式限制不同，您在 OpenLAB CDS 中可以随意创建报告版式。

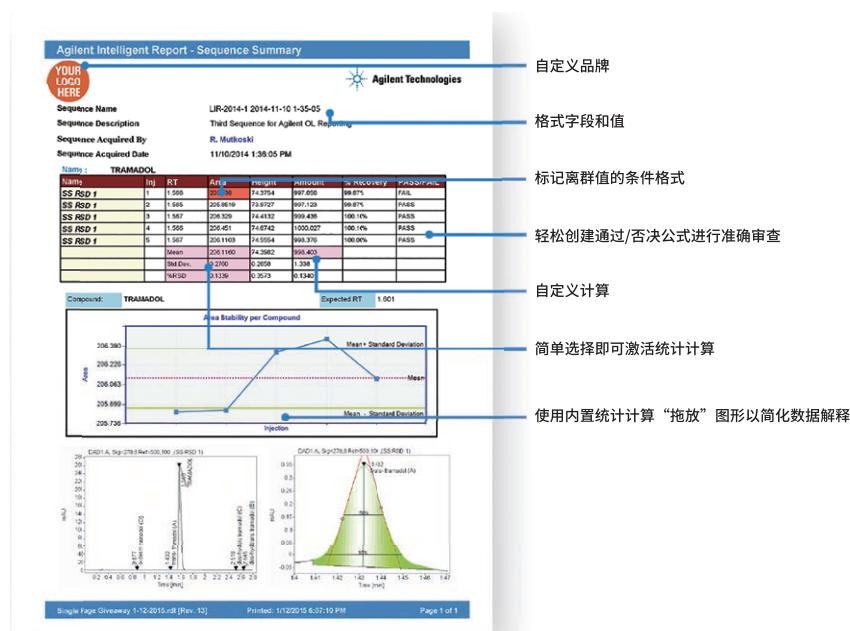


图 9. 创建专业报告以支持您的工作。在 OpenLAB CDS 中可以随意创建任何版式

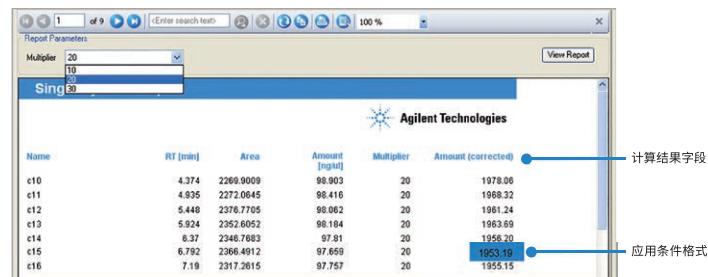


图 10. 使用乘数和条件格式计算校准后的样品量，标记离群值。  
本例中展示了样品量“Amount”计算，使用 OpenLAB CDS 表达编辑器将该计算设置为样品量乘以 2.5 再除以 100。乘数值用于计算校准后的样品量“Amount (corrected)”。采用条件格式设定了一个限值，将 Amount (corrected) 小于 1955 的值标记为蓝色

## 结论

使用 OpenLAB CDS 可以快速高效地生成精确满足需求的报告，无需将数据转移到其他软件。OpenLAB CDS 最新版软件支持 LC、GC、LC/MS 以及 GC/MS 单四极杆系统等多种仪器平台，因此您可以使用一款软件将所有系统获得的结果整合到一起生成报告。

自定义计算功能可将重要数据保留在系统中，有效消除了因手动抄录数据或导出至其他软件导致的错误以及数据完整性破坏等问题。此外，OpenLAB CDS 能够标记异常结果，还能绘制跨序列、跨时间的趋势图表，使数据审查和决策更加快速。通过减少浪费和不必要的打印，最终实现节约实验室时间，缩短运营开支和提高投资回报率。

在 OpenLAB CDS 中您可以随意创建任何版式。模板和直观的“拖放”报告创建功能可轻松生成哪怕是很复杂的报告，准确呈现出您出色的分析工作。

查找当地的安捷伦客户中心：

**[www.agilent.com/chem/contactus-cn](http://www.agilent.com/chem/contactus-cn)**

免费专线：

**800-820-3278, 400-820-3278 (手机用户)**

联系我们：

**[LSCA-China\\_800@agilent.com](mailto:LSCA-China_800@agilent.com)**

在线询价：

**[www.agilent.com/chem/erfq-cn](http://www.agilent.com/chem/erfq-cn)**

安捷伦科技大学：

**<http://www.lsca-china.com.cn/agilent>**

浏览和订阅 Access Agilent 电子期刊：

**[www.agilent.com/chem/accessagilent-cn](http://www.agilent.com/chem/accessagilent-cn)**

[www.agilent.com/OpenLAB](http://www.agilent.com/OpenLAB)

本文中的信息、说明和指标如有变更，恕不另行通知。

© 安捷伦科技（中国）有限公司，2017

2017 年 2 月 8 日，中国出版

5991-7057CHCN



**Agilent Technologies**