

用于 OpenLab CDS 的 ADFExport



前言

Allotrope 数据格式由 Allotrope Foundation 开发，Allotrope Foundation 是一个由制药、生物制药以及其他科研密集型行业组成的国际联盟，他们共同肩负着开发单一、通用的数据格式的使命：“Allotrope 致力于让智能分析实验室成为现实，在这个自动化的实验室中，数据、方法和硬件组件可以在不同的平台之间无缝共享，还可以根据任何设计满足数据可靠性要求的分析仪器所生成的数据，一键生成报告。” — Allotrope Foundation。如需了解更多详细信息，请访问网站 <https://www.allotrope.org>。

将数据保存为 Allotrope 数据格式

用于 OpenLab CDS 修订版 1.1 的 ADFExport 能够将 OpenLab CDS 的单个样品数据或样品序列数据导出为 ADF。它适用于 OpenLab CDS 修订版 2.4 的工作站和客户端/服务器系统，并支持以不同的方式导出 LC 和 LC-UV OpenLab CDS 的原始数据。用户可以在“数据采集”中或“数据分析”的重新处理期间，使用合适的处理方法进行自动 ADF 导出。结果集中的每一次进样均会生成一个 ADF 文件。如果为多次进样序列，其数据将导出为多个 ADF 文件，而不存储序列背景信息。

此外，通过使用“数据分析”应用中的功能区命令“导出 ADF”，可以将单个样品或序列结果集手动导出为 ADF。整个结果集将只生成一个 ADF 文件。多次进样序列将导出为一个 ADF 文件，并保留序列背景信息。

Allotrope 数据格式基于 HDF5，它是一种适用于所有平台的文件格式，分为以下三个部分：数据描述、数据立方体和数据包。

数据描述基于语义网技术和关联数据概念，使用 W3C 标准化 RDF 格式（请参见 <https://www.w3.org/RDF>），以标准化和结构化的方式将分析元数据存储为数据图。在当前的基本导出选项中，数据描述包含与存储在 ADF 数据立方体中的 LC-UV 原始数据相关的元数据。

数据立方体包含分析原始数据：OpenLab CDS LC-UV 色谱图和相应的紫外光谱图。

数据包是一种通用数据容器，其中充满了原始 OpenLab CDS 文件，包括 *.dx、*.acaml、*.amx、*.pmx（如有）和 *.sqx 文件（如有）。

1. 通过后处理插件自动导出

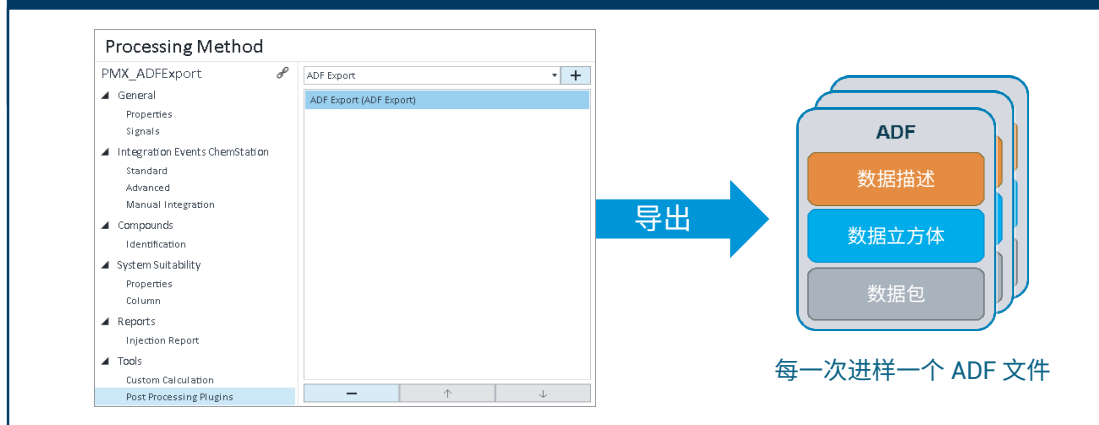


图 2. 工作流程 1：在“数据采集”或“数据分析”任一过程中，使用定义了后处理插件的处理方法自动导出为 ADF

2. 通过功能区命令手动导出

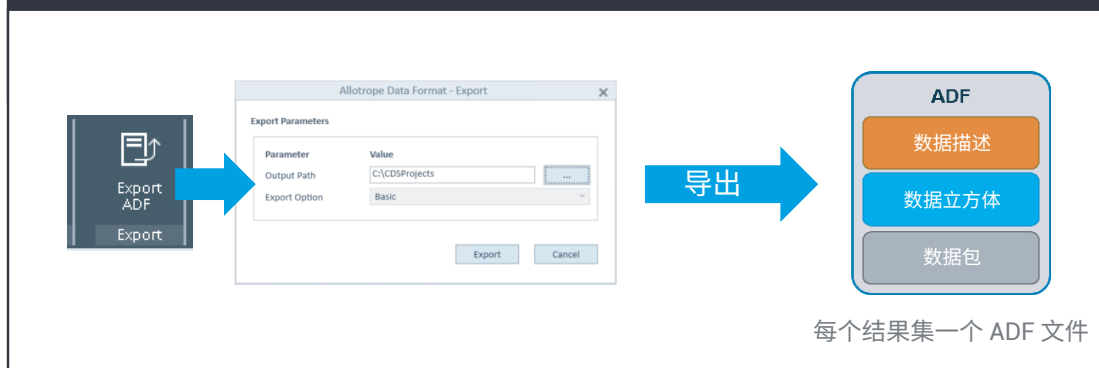


图 3. 工作流程 2：使用“数据分析”中的功能区命令手动导出为 ADF

使用 ADFexplorer 审查数据

如需浏览创建的 ADF 文件内容，您可以使用 Allotrope Foundation (<https://www.allotrope.org>) 发布的 ADFexplorer。可以使用不同的视图（表格或图形）更详细地显示每个部分的内容。

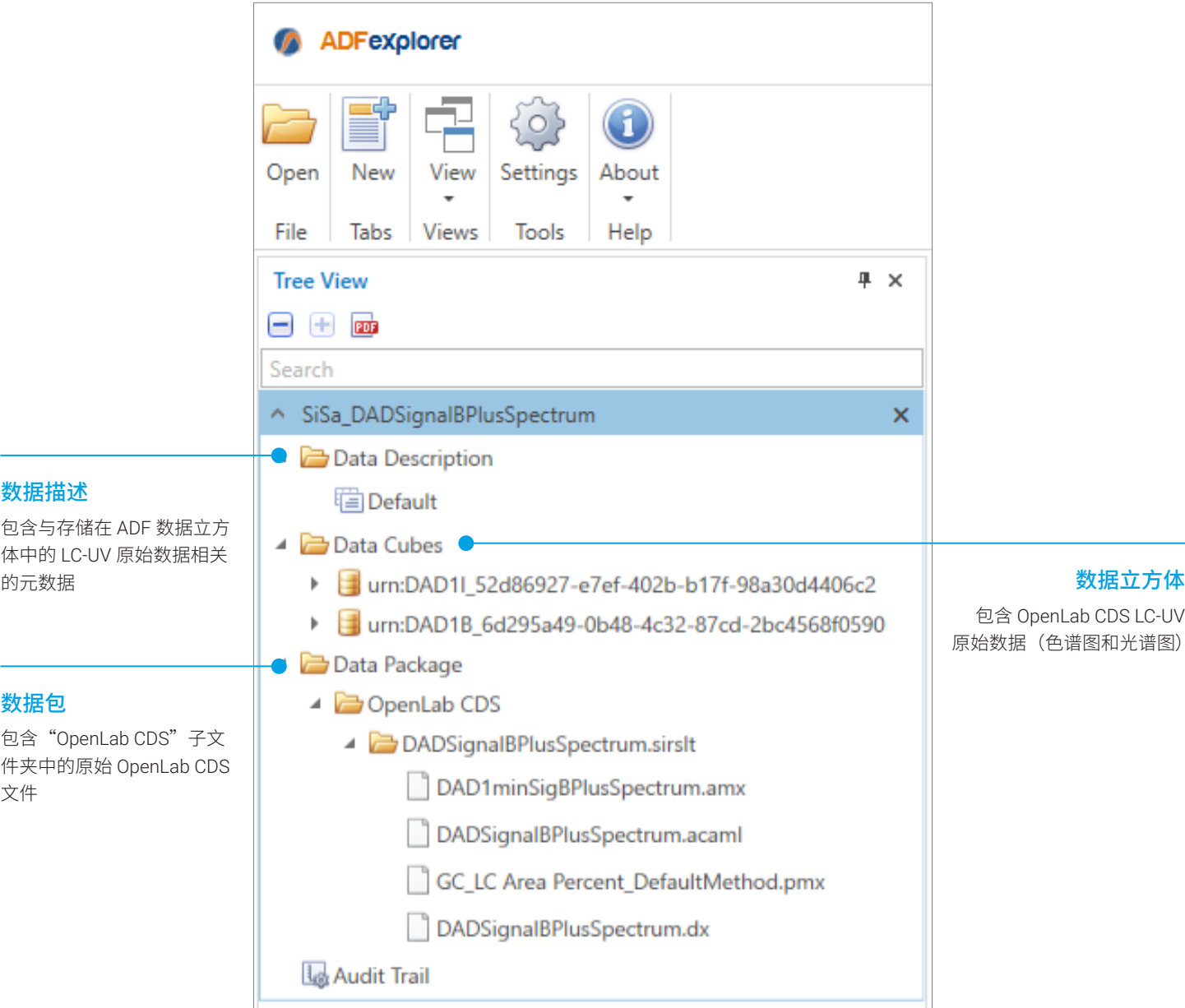


图 4. 示例 ADF 文件 SiSa_DADSignalBPlusSpectrum 的内容显示在 ADFexplorer 的树形视图中

结论

在制药行业的推动下，Allotrope Foundation 致力于为所有分析技术开发一种通用的数据格式。其目标是促进实验室数据的收集、交换和存储。用于 OpenLab CDS 的 ADFExport 为色谱数据提供 ADF 导出功能。目前，LC-UV OpenLab CDS 原始数据可以存储为 Allotrope 数据格式。该计划正在进行中，在未来的软件版本中将支持更多的技术和上下文元数据。

查找当地的安捷伦客户中心：

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

在线询价：

www.agilent.com/chem/erfq-cn

如需了解关于 OpenLab CDS 的更多信息，请访问：

www.agilent.com/chem/openlab-cds

如需了解关于 Allotrope Foundation 的更多信息，

请访问：**<https://www.allotrope.org>**

本文中的信息、说明和指标如有变更，恕不另行通知。