

基于数据驱动的实验室危化品管理系统

徐志鹏^{1,2}, 李静², 王立俊², 谢晖¹

(1. 复旦大学人类表型组研究院张江复旦国际创新中心, 上海 201203; 2. 上海国际人类表型组研究院, 上海 200433)

摘要: 近年来, 高校实验室危化品由于管理不当引发的危险事故高发, 其使用环节数据通过手工操作且缺乏有效数据监管。团队提出基于数据驱动的核心理念, 以物联网、移动互联网技术、人工智能等智能化技术为基础, 实现危化品数据自动采集, 通过微信小程序完成日常操作和身份鉴别, 兼容多型号仪器以满足实验室实际工作需求, 同时做到过程数据可溯源。系统在某实验室进行了有效性验证, 结果表明有效提高实验室的危化品管理水平, 具备可复制可推广的能力。

关键词: 数据驱动; 危化品; 数字化; 物联网; 身份鉴别

中图分类号: TP311

文献标识码: A

Data-driven laboratory hazardous chemical management system

Xu Zhipeng^{1,2}, Li Jing², Wang Lijun¹, Xie Hui¹

(1. State Key Laboratory of Genetic Engineering, Human Phenome Institute, Zhangjiang Fudan International Innovation Center, Fudan University, Shanghai 201203; 2. International Human Phenome Institutes (Shanghai), Shanghai 200433)

Abstract: In recent years, accidents involving hazardous chemicals in university laboratories have become prevalent due to improper management. The use of these chemicals involves manual data entry and lacks effective data oversight. Our team proposes a core concept based on data-driven principles. Utilizing technologies such as the Internet of Things (IoT), mobile internet, and artificial intelligence, we aim to automatically collect hazardous chemical data. Daily operations and identity verification are completed through WeChat Mini Programs, compatible with various instrument models to meet actual laboratory work requirements, ensuring that process data is traceable. The system's effectiveness was validated in a specific laboratory. Results indicated a significant improvement in the management level of hazardous chemicals in the laboratory, demonstrating the system's potential for replication and wider implementation.

Keywords: Data-driven; hazardous chemicals; digital; Internet of Things; identity identification

1 引言

高校实验室在危险化学品安全管理上有严格要求，但在实际危化品使用环节中，存在大量重点数据通过人工进行归集，此管理环节存在一定的安全隐患：一方面，缺乏信息化手段身份验证人员信息；另一方面，通过人工记录数据，前后环节无法实现自动校验，导致数据管理效率低，且运行风险高等问题。

在数字经济时代，数据已经成为实验室竞争的重要资源和生产要素^[1]。在数字化转型的大趋势下，需要对传统实验室管理进行升级改造，采用物联网、移动互联网、人工智能等先进技术^[2]，将实验室危化品管理数字化，实现危化品标化管理、物联网数据采集、服务全程可视化、微信小程序应用等功能，通过台账与实际使用数据互联互通，仪器称量的使用数据关联后通过物联网自动采集入库，建立基于数据驱动的闭环管理系统。

2 系统整体设计

2.1 架构设计

实验室危化品使用系统，采用了“一站式”设计理念，从底层的功能性服务，到溯源流程性服务，到顶层的整体业务流程服务衔接不同节点，从而达到适应不同场景目的，业务模式和流程可以通过服务的不同组合变得更加灵活，可根据危化品场景需求变化不断地进行流程优化。

2.2 关键技术

1) 危化品物联网数据标准化采集功能：

通过 RS232-WIFI 转换器将仪器的 RS-232 输出接口转换成 WIFI 接口，通过 HTTP 协议与管理系统进行通信^[3]，用户通过局域网或广域网，使用电脑访问管理系统上的数据信息，使用手机辅助数据采集流程。数据流程示意图如下：

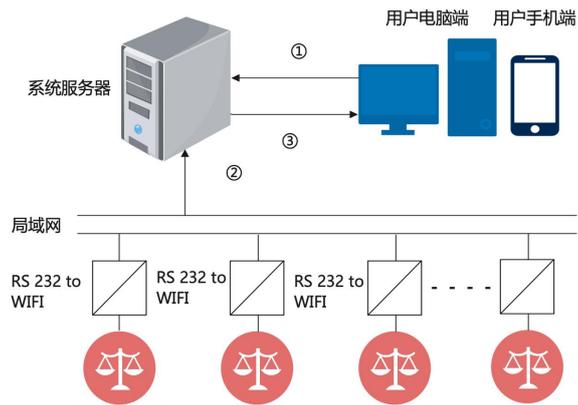


图 1 基于物联网的数据采集技术架构图

无线串口服务器 RS232 转 WIFI 采用了 HTTPD Client 模式，将数据直接传向 HTTP 服务器端，或者是从 HTTP 服务器端获取数据。按照格式向串口发送数据，数据将以 Http(GET/POST/PUT)方式直接提交给 web 服务。在传输阶段，为保证通讯过程数据的保密性和完整性，数据通过电脑端服务将 HTTP 转换成 HTTPS。

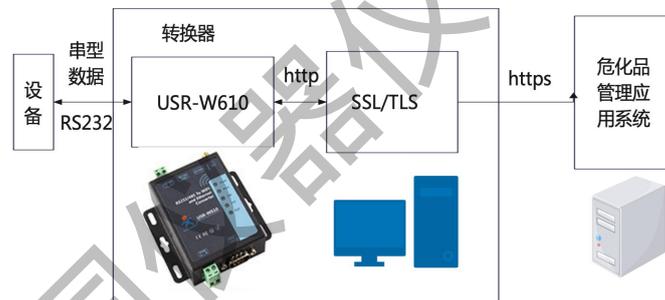


图 2 数据串口转 WIFI 及加密对接流程图

2) 微信小程序完成用户鉴权和双录

通过微信小程序将实验室人员+仪器+危化品信息进行了关联，不需要手工输入信息，即可完成全流程数据采集。具体流程如下，两位实验室人员使用手机分别打开微信小程序，

步骤 1：登录系统（第一次登录需要扫描系统内二维码进行用户绑定）

步骤 2：分别通过微信小程序扫描危化品样品二维码

步骤 3：分别通过微信小程序扫描仪器设备二维码，完成绑定关系

接下来选择危化品操作模式（本系统提供 3 种操作模式），结果数据通过物联网自动采集到管理系统中。

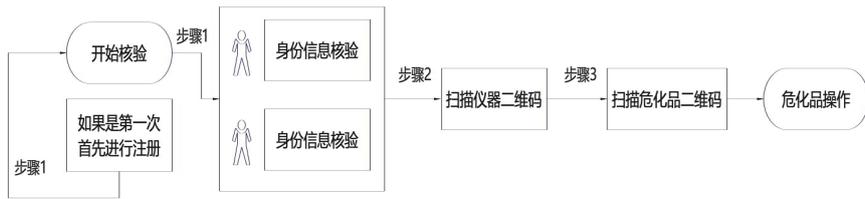


图 3 微信小程序端操作流程图

3 功能设计

3.1 用户管理

实验室危化品使用系统主要面向实验室用户和管理人员而开发,根据实验室仪器信息管理或服务范围的不同,可将该平台使用人员按权限不同依次分为实验室人员、管理员二个完全不同的角色等级,实现实验室管理的层次化、清晰化、分类化,具体为:

- 1) **实验室人员:** 利用仪器对危化品进行操作,可查询个人使用记录
- 2) **系统管理员:** 管理员主要负责开放用户的注册审核,查看统计数据,以及监督平台运行状态流等。



图 4 用户管理操作界面图

3.2 危化品信息管理

建立标准化信息数据库,对危化品标准编码、仪器标准编码进行管理,通过对标准信息编码的统一管理,实现危化品称量执行过程中,做到“危化品-设备-人”通过系统做到自动关联,无需人工二次录入,大幅提高执行效率,且降低差错率,确保检定数据的准确

- 1) 查询功能,通过危化品品名,别名,CAS号等信息进行搜索,支持模糊查询,通过列表方式展示查询结果;

品名	别名	CAS号	剧毒	易制毒	易制爆	一般危化品	备注
叠氮化钠	三氮化钠; 叠氮钠	26628-22-8	Y			Y	
2-(二苯基乙酰基)-2,3-二氢-1,3-茚二酮	2-(2,2-二苯基乙酰基)-1,3-茚满二酮; 敌鼠	82-66-6	Y			Y	
(E)-O,O-二甲基-O-[1-甲基-2-(二甲氨基羧基)乙烯基]磷酸酯[含量 > 25%]	3-二甲氧基磷氧基-N,N-二甲基异丁烯酰胺; 百治磷	141-66-2	Y			Y	
2,3-二氢-2,2-二甲基苯并咪唑-7-基-N-甲基氨基甲酸酯	克百威	1563-66-2	Y			Y	

图 5 危化品信息管理（查询）操作界面图

2) 添加功能，具体表现为新增入库，将新采购增加的危化品添加到数据库；场景上支持按单条增加，或者通过文件按批次进行添加。

品名	别名	CAS号	剧毒	易制毒	易制爆	一般危化品
5-氨基-3-苯基-1-双(N,N-二甲氨基氧磷基)-1,2,4-三唑[含量 > 20%]	威菌磷	1031-47-6	Y			Y

图 6 危化品信息管理（新增）操作界面图

3.3 全流程数据管理

贯通危化品台帐与危化品执行流程，通过危化品身份的识别、人员身份识别、使用过程记录、辅助库存盘点、过程追溯与安全监管，将入库、团队、库存盘点等场景实现基于全量数据的精细化管控。

*名称:	硝酸	别名:	Nitric acid
CAS:	7697-37-2	稳定同位素标记物CAS: [?]	
*标签编号:	0682-2		
MSDS号:	0682	HMDB号:	
*供应商:	CNW	订单号:	
*团队:		*入库时间:	2022.1.10
*负责人:		*位置:	101 II-D
纯度:	Tracemetalgrade	*规格大小:	2.5L
*型号:	CFEQ-4-110038-2500	是否为对照品: [?]	否
*化学品类别:	易制爆	备注:	

修改历史记录					
时间	操作人	操作	属性	原值	新值
2022-01-11 17:11:38	王	add	---	---	---

出入记录								
时间	类型/出入	初始量	差量	最终量	使用人1	使用人2	天平	状态
2023-06-25 12:25:20	使用 / 出库	3264.80000	438.80000	2826.00000	彭	王	天平02	complete
2023-04-25 11:04:04	使用 / 出库	3418.80000	154.60000	3264.20000	王	彭	天平02	complete
2023-02-14 16:19:48	使用 / 出库	3658.20000	239.20000	3419.00000	赵	彭	天平02	complete

图 7 危化品信息全流程数据展示图

3.4 标准接口 API 数据规范

提供满足具有通用性、可移植性、可组合性的技术架构，实现实验室仪器物联网通讯标准接口规范，系统通过 RS232 Convert To WIFI 接口，通过统一的数据采集模块获取后，加密存储到服务器中，在使用过程中自动化地采集使用数据。本流程设计了标准采集规范，可兼容多种称量仪器。

3.5 服务全程可视化

进入物料称量页面，目前提供了三种测量方式：标准(正向)测量、去皮(反向)测量、审计测量。根据称量的场景选择，具体测量方式操作如下：



图 8 危化品称量方式可视化展示图

4 系统设计特点

4.1 标准化——灵活对接其他平台

针对实验室管理,本系统提出的方案能够有效遵循统一的、标准化的应用架构进行开发。不同时期、不同场景开发的应用系统彼此之间能够很好整合对接^[5]

4.2 安全性——构建从数据到应用的安全体系

一方面,对接已有的危化品台账,减少手工登记的失误;另一方面,直接通过手机小程序端进行操作,利用微信提供的身份鉴别功能,实现了人员管理安全体系。

4.3 响应性---快速响应新的需求

具有高度的扩展性,通过示范,对各类仪器可以随时针对变化进行调整,对重要步骤进行全程监控和维护,并在场景验证中不断优化操作流程。

5 系统应用成效及总结

本系统自 2022 年 8 月在某实验室正式运行以来，管理危化品标准信息 38 项，适配 16 种不同型号的称量仪器，提供了 200+次数据服务，做到了 100%正确率，数据无差错，获得了良好的管理效益。

本文设计的基于数据驱动的实验室危化品管理系统，根据学校危化品管理的实际需求，搭建基于物联网的数据采集实时系统，结合实验室现有资源，通过微信小程序，优化现有采集流程，实现了闭环数据管理，并在实际工作中验证了系统的可行性和可靠性。

参考文献:

- [1]唐姣美,钟明容.新发展格局下企业数字化转型的机遇与路径[J].现代商业,2021,(26):82-84.
- [2]基于数据驱动的企业智慧计量数字化实验室构建[J].仪器仪表用户,2020,(6):105-109.
- [3]唐国圣,金丽琼. LIMS 仪器接口在实验室自动化管理中的应用[J].现代科学仪器,2007, (2): 44-48.
- [4]智勇. 基于 RFID 技术的危险化学品执行监管系统[J]. 电脑知识与技术: 学术版,2018,(10): 40-42.
- [5]冯兴智.SOA 应用平台 新一代的基础中间件[J].信息技术与标准化,2010,(004) :50-52