

LIMS-ELN 系统在炼化科研领域的应用

张鑫^{1*}, 马文杰¹, 蒋蒙², 杨国明¹

(1. 中海油炼化化工科学研究院(北京)有限公司, 北京 102209;

2. 北京中智软创信息技术有限公司, 北京 100089)

摘要: 将 LIMS-ELN 系统在炼化科研领域应用, 可实现科研项目的全生命周期管理以及检验分析流程标准化管理、中试试验全方位管理、实验数据的全局透视处理等, 可有效推动炼化科研的数字化转型。

关键词: LIMS; ELN; 炼化科研; 中试; 数字化

中图分类号: TE68

文献标志码: A

文章编号: 0253-4320(2019)06-0215-04

DOI: 10.16606/j.cnki.issn.0253-4320.2019.06.046

Application of LIMS-ELN in field of refining and chemical research

ZHANG Xin^{1*}, MA Wen-jie¹, JIANG Meng², YANG Guo-ming¹

(1. CNOOC Research Institute of Refining and Petrochemicals (Beijing) Co., Ltd., Beijing 102209, China;

2. Beijing CIS Information Technology Co., Ltd., Beijing 100089, China)

Abstract: The application of LIMS-ELN in the field of refining and chemical research can realize the full-lifecycle management of scientific research projects, the standardized management of inspection and analysis process, the comprehensive management of pilot tests, the overall perspective processing of experimental data, etc., which can effectively promote the digital transformation of refining and chemical research.

Key words: LIMS; ELN; refining and chemical research; pilot base; digitization

2018 年 11 月份, 笔者所在的炼化研究院正式上线使用科研及实验分析数据管理系统, 系统由 LIMS(实验室信息管理系统)和 ELN(电子实验记录系统)组成, 是国内首次在炼化科研领域将 LIMS 与 ELN 同步集成实施, 可实现科研项目的全生命周期管理以及检验分析流程标准化管理、中试试验全方位管理、实验数据的全局透视处理等, 帮助科研人员在线协作, 为科研工作提供规范而又高效的管理模式。

1 系统实施的背景

笔者所在的研究院为集团公司下游炼化产业的新建研究机构, 采用北京、青岛“一院两地”运行模式, 秉承差异化、高起点、协同创新的发展理念, 建立了面向石油炼制、化工、特色产品研究方向的众多实验室以及中小试放大装置。为了保障科研业务的开展, 我院制定了独具特色的科研信息化蓝图, 即以科研项目为中心, 遵循项目由产生到结束的整个流程, 上承集团公司的科研管理系统, 在软件层面依靠实验室信息管理系统及电子实验记录系统进行管理, 硬件层面依托智慧实验室及集团公司数据中

心的虚拟云主机作为保障, 形成我院的科研数据及文档平台, 并随着数据的不断积累和挖掘, 建成知识资源管理平台, 并可对外提供技术支持和知识输出。

通过蓝图规划, 发现研究院在科研项目管理方面存在较多不足, 比如没有项目管理系统, 没有规范的实验管理平台, 没有方便、安全的实验记录工具, 没有有效的数据积累和挖掘等等。针对以上问题, 炼化研究院从 2017 年起开始高起点开展 LIMS-ELN 系统的建设工作, 并将其相互衔接, 通过 1 年多的精心部署, ELN 与 LIMS 无缝集成, 可直接从 ELN 中向 LIMS 发起申请, 也可直接从 LIMS 获取结果到 ELN。

2 LIMS-ELN 系统的部署

研究院 LIMS-ELN 系统服务端部署在集团公司的数据中心, 由集团公司分配虚拟机资源, 分为文件服务器、数据库服务器、应用服务器和实时数据库服务器等, 可以提供更安全、稳定的运行环境。

在数据库层分别以实时数据库、Oracle 12C、MySql 数据库存储各类实时数据和关系数据。

收稿日期: 2019-02-28; 修回日期: 2019-04-08

作者简介: 张鑫(1985-), 男, 硕士, 工程师, 研究方向为石油炼化、机械电子类信息系统, 通讯联系人, zxsail01@163.com。

在北京/青岛两地实验室利用现有仪器工作站,通过 RJ-45 或 USB 转 RJ-45 接口将数据传输到现场专用数据采集服务器,再将其处理完的数据发送至数据中心服务器,实现仪器实验数据的自动采集和相关实验数据的手动输入。既发挥了实验室现场数据采集高速、安全、可靠的优点,又有效降低了数据中心服务器的负载。

北京/青岛两地的中试基地控制室各部署 1 台数采 BUFFER 机用于数据采集缓存,通过安全隔离设备保障数据从控制系统向数采机的单向传输,通过对现有网络进行改造,添加交换机实现各中试装置分散控制系统的互连和数采缓存机与广域网的连接。

在各研究所样品实验室、物资仓库等部署条码打印机用于样品条码和物资材料条码的打印,在样品接收室、留样室、物资仓库等部署条码扫描枪用于条码扫描。

客户端采用以 CS 为主、BS 为辅的架构,用户登录采用集团公司 AD 域账户认证,并配备一定数量的 windows 系统平板,以方便现场进行系统操作及数据录入等。

3 LIMS-ELN 系统典型应用流程

为实现科研项目的全局分层清晰管理,在 LIMS-

ELN 系统里,将科研项目管理分解为 3 级,即项目-任务-实验,然后又将系统的典型应用流程分为 3 个步骤,称之为“三级三步”管理。

第一步,为了方便项目的管理,部署了一个项目管理系统作为配套系统。科管人员将项目信息在项目管理系统中创建或者导入,然后由项目负责人进行任务的分解和参与人员的指派,然后这些信息自动集成到 ELN 系统中。

第二步,科研人员在 ELN 系统中可以查看任务,选择合适的模板创建试验,在进行实验记录的过程中,如需进行样品的分析,则将分析请求发送到 LIMS 系统中。此处为方便实验设计,可以批量创建实验并发送到 LIMS 中。

第三步,在 LIMS 系统中,科研人员完善样品分析请求,经过一系列审批,便可打印标签并送样,随后,分析表征人员经过分析后,将结果在 LIMS 系统中录入,经过数据审核后,科研人员便可查看分析结果。而科研人员可在 ELN 中将来自 LIMS 的分析结果取回并进行记录。

随着试验的不断开展,科研人员可以随时维护项目的进度。当项目的所有实验完成后,可以进行实验归档,完成项目结题,而保存的所有实验记录经过系统的挖掘,可以形成知识库。上述流程步骤可用图 1 展示。

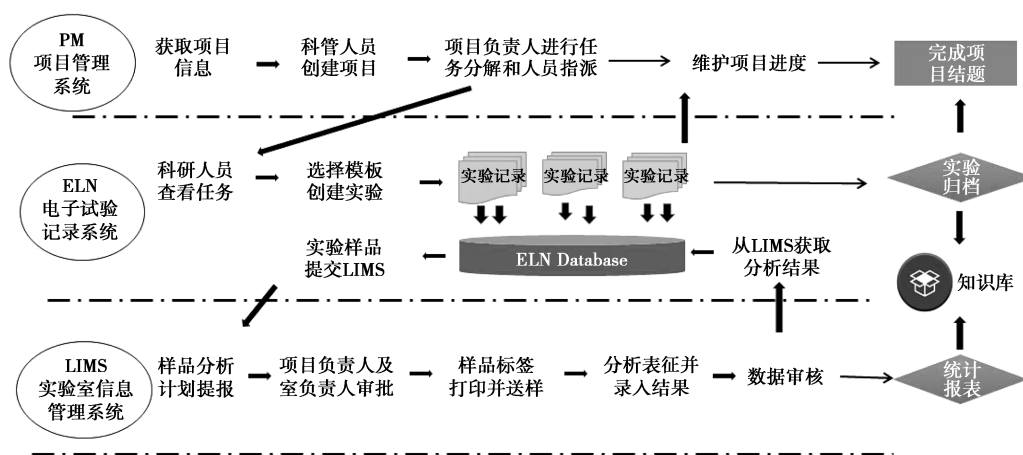


图 1 LIMS-ELN 系统典型应用流程

4 LIMS-ELN 系统的应用效果

研究院 LIMS-ELN 系统经过长达 1 年的实施,主要形成了以下 3 个方面的建设成果。

4.1 检验分析,精益求精

研究院成立之初,便在检测分析管理方面制定

了标准的流程,但因成立时间较短,部分试验分析未完全开展,部分仪器设备刚刚投用,试验流程管理依赖常规的邮件、电话、手抄等方式进行,在某些方面存在不足,比如人为的记录、计算和结果录入失误,往往会造成检测分析数据不准确;操作的效率比较低,结果通报等不能实时及时完成,原始记录、台帐、

报表的重复输入,浪费了人力和纸张,历史数据查询相当不便;传统的操作和管理模式不但不能满足实验室自动化、标准化、规范化、现代化的需要,也难以适应炼化院信息化的发展要求。

基于以上现状,到目前为止,通过系统应用基本上实现了样品管理的流程化、资源管理的全面化、数据采集的自动化、质量报告的电子化和数据共享的实时化。通过建立完善的实验过程管理和完备的质量保证体系,提供便捷的查询手段,将实验人员从繁重的简单重复劳动中解放出来,将精力集中到科学实验研究上。

4.1.1 规范样品管理流程,有机协调检验分析各个环节

通过业务梳理,炼化研究院规范和调整了4种样品流程,包括样品计划提报及分析审核流程、样品委托外部分析及结果上传流程、科研人员样品检测分析流程、实验员检测分析能力验证及培训流程。每种流程都有特有的工作流及权限设置,有机协调检验分析的各个环节。

4.1.2 场景划分鲜明,责任清晰明确

分别为科研人员、项目负责人、分析所室主任、分析所样品送样人员、接收人员、审核人员设置不同的系统应用场景,利用条码技术,结合试验样品特点设置不同的样品标签。按岗位、人员、角色等明确研究人员和试验人员以及数据审核人员的工作权限和职责,避免部门、数据之间责权不清,有效保障流程运转的流畅性和数据的准确性。

4.1.3 仪器自动采集,数据准确可靠

系统应用 LabWare LIMS 的 Labstation,根据样品检测分析需求,通过组态仪器语法分析脚本来实现仪器的自动数据采集、处理和统一存储^[1],大大减轻工作量的同时提高了数据准确性。

4.1.4 跟踪样品过程,进度一目了然

科研人员通过系统能实时跟踪样品的提报、接收、分析和审核流程,样品所处状态用不同色彩标记,每个环节待处理样品数量实时更新,样品进度一目了然。

4.1.5 管理实验基础数据,规范标准合规

通过系统对实验室样品、方法、检测、设备、物料等进行管理,组态配置3000多条静态数据,按照集团统一的编码规范对基础数据进行规范管理,严格遵循国标、行标等标准规范对实验方法进行管理,

根据北京、青岛两地不同的业务开展情况,灵活规范地对业务数据进行定义,保证基础数据的规范和合规。

4.2 中试试验,运筹帷幄

目前,研究院北京、青岛两地共31套中试装置,装置分属两地且属于不同部门管理,互相独立,数据割裂,因此,试验开展面临的问题主要有:信息孤岛、数据无法永久保存、数据无法在线分析以及无法为中试运行主管/班组提供数据支持。而该系统则实现了以下功能。

4.2.1 打破信息孤岛,实现安全、完备、实时获取试验装置准确数据

为打破信息孤岛,将中试试验的过程纳入到系统管理,系统完成了对北京、青岛两地中试装置的数据采集,应用实时数据库技术,采用安全隔离设备、数采缓存机等硬件设备,在保障中试装置控制系统安全的同时,保证数据采集的稳定性和连续性,对数据进行永久储存,以信息化的手段实现中试装置的在线管理。

4.2.2 规范中试试验开展流程,实现高效准确的结构化数据存储

系统规范了中试试验的开展流程,科研人员直接在线上提报方案、计划至运行主管;运行主管可以在线下达指令,指令可随试验进程随时变更,规范且灵活;班组可以在线接收方案、指令并在系统中执行交接班记录。

4.2.3 应用实时数据库助力中试试验开展,实现全方位管理

应用实时数据库助力中试试验开展,可以实现全方位的管理,比如实现工艺流程图在线实时查看、现场中小试装置在线管理、中试试验开展情况查询、数据/趋势分析、历史画面回放、交接班记录的电子化、工艺台账的电子化等。

4.2.4 准确统计分析,为决策支持提供有力的数据支撑

系统设计了数十个统计报表以及10余个图形化统计展示,报表的实现采用 LabWare LIMS 嵌入 Crystal(水晶)报告编写器。通过准确的统计分析报表和图形可直观便捷地了解样品提报情况、检测分析情况、中试试验情况以及装置启停情况等,可为领导提供准确可靠的决策支撑。

4.3 数据整合,兼收并蓄

LIMS-ELN 系统中的电子实验记录(ELN)功

能是伴随着实验室无纸化管理需求而发展起来的数字化技术的应用,可以结构化地记录实验过程和数据,还能够针对不同实验内容设计实验记录模板,并根据模板记录实验过程和数据,包括课题信息、实验条件及过程、仪器设备、实验结果和讨论等内容,对科研实验开展及数据整合分析实现多项改进^[2]。

原料名称	原料编号	原料类型	纯度	生产日期	原料来源	是否共享	备注
LAY	1	拟薄水铝石		2008/4/9	长岭	<input type="checkbox"/>	
OSY-S	6	拟薄水铝石		2008/4/9	长岭	<input type="checkbox"/>	
PB-90	2	化学试剂		2012/4/9	长岭	<input type="checkbox"/>	
SiAl-40	3	拟薄水铝石		2010/4/9	长岭	<input type="checkbox"/>	
田菁粉	4	硅铝材料		2010/4/9	河南兰考工业	<input type="checkbox"/>	
HNO3	5	化学试剂		2011/4/9	北京化学试剂公司	<input type="checkbox"/>	
碱式碳酸镍		化学试剂		2010/4/9	宜兴中生催化器...	<input type="checkbox"/>	
偏钨酸铋		化学试剂		2010/4/9	株洲钻石铇制品...	<input type="checkbox"/>	
柠檬酸		化学试剂		2013/4/9	山东莱轩化工有...	<input type="checkbox"/>	
聚乙二醇		化学试剂				<input type="checkbox"/>	

名称	催化剂编号	理论配方量	备注
RHC-220B	RHC-220B	1000 g	

考察变量	变量类型	设计水平	占配方比重 (%)	干基比例 (%)	加料顺序
LAY	配方组成	29.3 g	0.76	0.76	1
OSY-S	配方组成	26.2 g	0.85	0.85	2
干胶粉	配方组成	198.3 g			3
SiO2	配方组成	117.3 g			4
田菁粉	配方组成	9.7 g			5
HNO3	配方组成	6.45 mL			6
H2O	配方组成	784.4 mL			7

图 2 电子实验记录截图

4.3.2 建立科研数据的关联性与数据的完整性

根据项目创建实验,建立了实验和项目的关联性。实验中多种多样、功能不同的模块可以实现各种格式的数据记录,还可以实现结构化与非结构化数据的记录,确保了记录数据的完整性,为后期数据利用打下坚实的基础。

4.3.3 实现全流程实验数据的全局透视性

研究院作为炼化行业第一家打通全流程实验监控的单位,随着 LIMS-ELN 的应用,各阶段数据不再是相互独立。之前因为缺少全流程的实验记录管理,大家进行实验记录时很难把大量相关的数据关联起来,就像盲人摸象一样,科研人员只能在一个角度看到一个局部。当打通全流程后,科研人员就可以站在一定的高度上来看到全局,从而能够更加精准地发现问题所在,对于制备实验的原料来说,通过原料,就可以查找出这个原料产生了哪些中间体和产物,而通过产物的性能,就可以反过来有针对性地调整原料的配比或工艺的设计,来对产物性能进行

4.3.1 推进了实验记录的规范化与标准化

研究院之前的纸质实验记录具有保存风险大、保管成本高、查询不方便、共享难度大、规范难保证、交接较困难的缺点。通过系统应用,目前已逐步推广使用规范、标准的电子实验记录,记录详细准确,数据结构清晰,存储调用方便,进步一目了然,如图 2 所示。

进一步优化,极大地提高科研人员的研发效率,对于工艺实验也是如此。

4.3.4 保证数据完整、准确、真实

通过 ELN 的应用,确保了数据从头到尾记录的完整性;实验记录的访问控制、防止篡改,确保了数据的安全性;实验记录的审计追踪,自动记录了谁在什么时间记录了些什么数据,确保了数据的可追溯性;通过打通全流程的实验监控,保证了数据的真实性。

4.3.5 精细权限控制,确保数据安全

研究院将系统部署在集团公司数据中心的虚拟云主机,依靠专业的数据安全保障,确保数据不会丢失或者泄露。而且通过系统精细的权限控制,进一步确保数据的安全。项目参与人只能看到自己参与的任务及实验记录,项目负责人只能看到自己负责项目下的所有任务与实验记录,领导(院长、所长)可以查看权限内(院内、所内)的项目情况;为了

(下转第 220 页)

醇、乙腈、DMF、DMSO、NMP, 并利用 Aspen Plus 软件得到乙二醇作为萃取剂效果最好, 探究了萃取精馏分离乙酸乙酯和丁酮的最佳分离条件, 最后通过间歇精馏萃取实验进行了进一步验证。

1 Aspen 模拟

1.1 萃取剂的筛选

萃取剂的选择是萃取精馏的重要一步, 好的萃取剂能有效打破共沸。气液平衡相图能很好地反映平衡时气液两相组成, 且能发现溶液是否容易分离。图 1 是未加萃取剂时的乙酸乙酯和丁酮的气液平衡相图, x 轴和 y 轴分别代表液相和气相中乙酸乙酯的质量分数, 由图可以看出二者存在共沸, 极难分离。

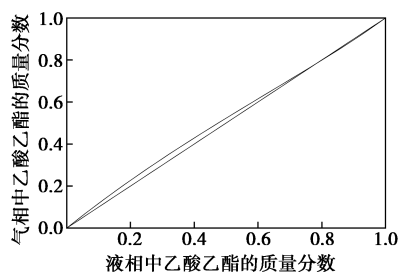
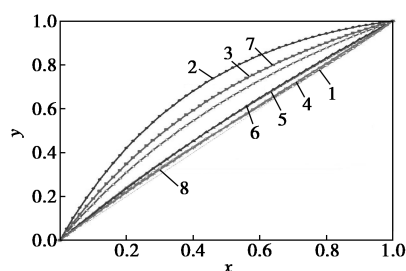


图 1 乙酸乙酯和丁酮的气液平衡相图

图 2 是加入各种萃取剂后溶剂比同为 1 时的乙酸乙酯和丁酮的气液平衡相图, 可以看出乙二醇能有效打破二者共沸, 平衡线偏离对角线最远, 萃取效果最好。且乙二醇沸点高达 197℃, 与丁酮沸点差大, 容易进行后续的回收工作, 因此选定乙二醇作为最终的萃取剂。



1—无萃取剂; 2—乙二醇; 3—1,2-丙二醇; 4—1,3-丙二醇;
5—乙腈; 6—DMF; 7—DMSO; 8—NMP

图 2 加入不同萃取剂后的乙酸乙酯和丁酮气液平衡相图

选定乙二醇作为萃取剂, 用 aspen 模拟得到的剩余曲线图如图 3, 可以看到该三元物系的剩余曲线都始于丁酮和乙酸乙酯的共沸物, 剩余曲线图很好地指导了精馏过程。

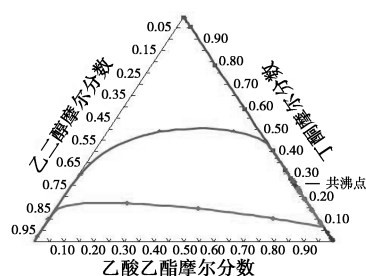


图 3 常压下乙酸乙酯-丁酮-乙二醇剩余曲线

1.2 萃取精馏流程的建立

丁酮和乙酸乙酯萃取精馏流程如图 4 所示, 丁酮和乙酸乙酯属于液相高度非理想体系, 所以选用活度系数模型 NRTL 方程。

(上接第 218 页)

方便某些特殊情形, 可以向实验记录人发出申请查看没有权限查看的实验记录, 而实验记录人可以自行控制同意或拒绝他人查看; 为方便审计追踪, 管理员可以查看系统的操作记录。

此外, 为了拓展移动应用, 打破办公室、实验室界限, 借助 windows 移动平板, 实现了多个功能在移动端的应用, 比如 LIMS 实现了流程审批、手动接收样品、查看项目进度、查看试验概要信息等多个功能的应用, 之后还将继续不断地研究推广移动应用。

5 结语

截至目前, 研究院 LIMS-ELN 系统已正式上线

运行数月, 系统的应用有效提高了炼化研究院科研工作的效率和准确性, 沉淀了科研数据和知识。同时, 也规范科研工作地开展, 推进了科研管理制度的落地, 还为管理层提供了科研决策支持。LIMS-ELN 系统不再仅仅是科研的工具或平台, 更重要的是带来了工作模式的转变, 让科研插上“数字化”的“翅膀”, 推动了炼化科研领域的数字化转型。

参考文献

- [1] 蒋曼芳, 李映忠, 赖欣. LabWare LIMS 系统在兰州石化的应用研究[J]. 数字石油和化工, 2008, (5): 16-19.
- [2] 陈超, 李阳, 李文乐, 等. 电子实验记录软件在炼化科研领域的应用与展望[J]. 当代石油化工, 2016, (9): 35-38. ■