

## 亚申高通量信息管理系统 HTDMS 介绍

**高通量信息管理系统 HTDMS** 是亚申拥有完全自主知识产权的，为高通量平行反应器系统及应用而专门定制的高通量数据处理和信息管理软件系统。它将实验设计软件和全自动运行控制软件、数据采集和集成软件、数据处理和报告软件、数据库和数据搜索软件、数据同步和回放软件等一系列软件工具集成为一体化的高通量实验信息管理平台，其功能涵盖实验设计、准备、运行、分析（在线和离线）、数据计算、结果处理、实验报告、信息存取等高通量实验的全过程，可实现 24 小时无人值守操作。HTDMS 的应用将会进一步提高科研人员运用高通量技术进行科学研究和工业开发的速度和效率。

### ◆ workflow 软件

workflow 软件主要用于为平行反应器系统设计和制定高通量实验和运行方案。借助于科研人员友好的、图形化界面的软件工具，用户可设计、修改、根据实验进程修正和重新布局实验运行方案。

用户通过 workflow 软件可实现离线设计实验过程、根据分析数据和进程反馈修改实验参数并产生新的 workflow。workflow 的执行过程同时也是实验的自动记录过程，因此免除了实验员繁琐的手工记录。workflow 可重复执行、无限复用。对已建立的工作流修改产生新 workflow，可大大缩短实验设计过程。

workflow 软件分 workflow 设计软件和 workflow 执行组件两部分。

#### 1) workflow 设计软件

在 workflow 设计软件图形化界面下，用户从 Activity 库将所需要的 Activity 拖拽到设计工作区，并将各个 Activity 按实验需要排序与组合，由此构成一个 workflow，完成实验设计。workflow 可发布给 workflow 执行组件，由实验员加载后自动按既定步骤和参数执行。

workflow 设计软件里的 Activity 库是按照高通量平行反应器系统的配置开发定制的（软件）部件。通过对这些部件（或操作）的不同组合可实现对系统设备的不同控制，以达到用户自定义的实验控制需求。

workflow 支持全局变量、IF-ELSE 判断分支、WHILE 循环、并行操作等，能让熟悉 workflow 设计的人员在设计过程中充分展现其设计理念。

workflow设计软件主界面如下图，包含 workflow浏览区、设计工作区、Activity 库、属性设置和消息输出等区域：

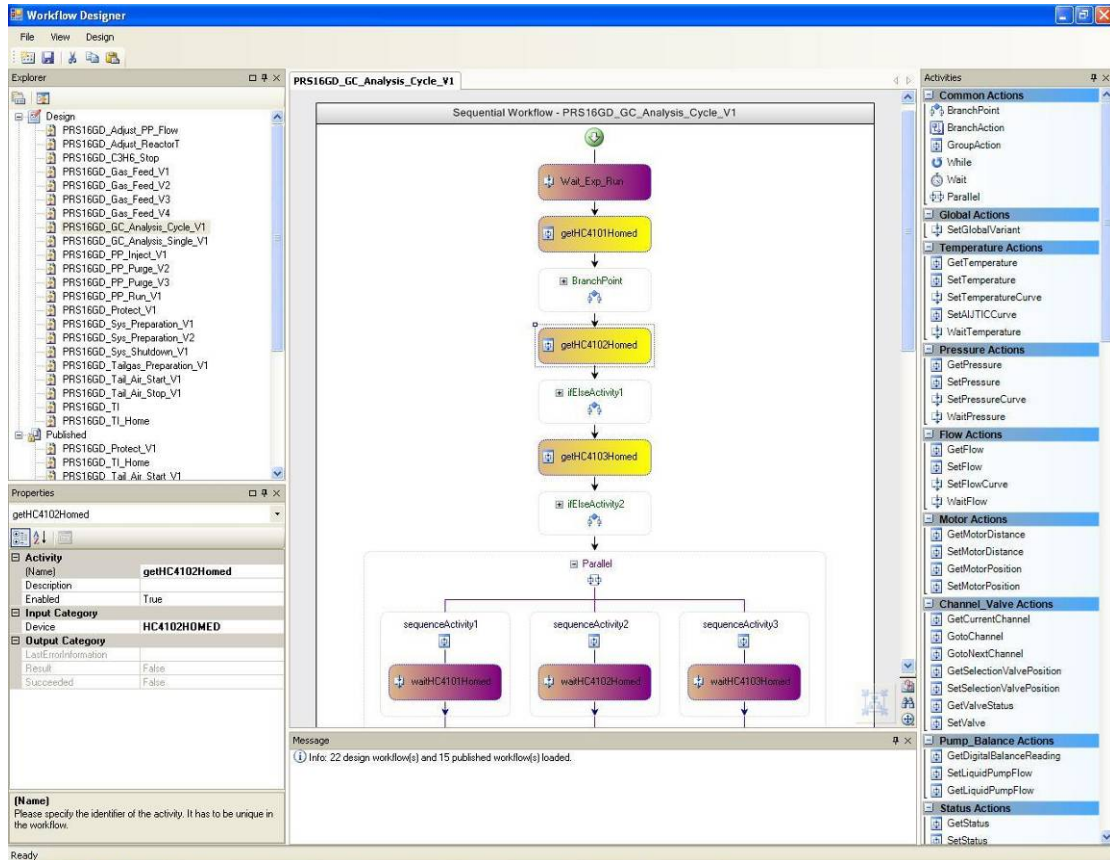


图 workflow设计界面

## 2) workflow执行组件

workflow执行组件在安装时会自动嵌入到运行控制软件中（前提条件：先安装运行控制软件）。用户可根据需要，选择并执行已发布的工作流。在工作流执行过程中，操作人员可选择暂停、恢复或中止工作流的执行。

HTDMS 系统支持同时执行多个工作流（前提条件：同时运行的工作流对同一设备或执行单元的操作无指令冲突）。

workflow执行组件嵌入运行控制软件的界面如下图：

亚申科技研发中心（上海）有限公司

上海 浦东新区 张江高科技园区 龙东大道 3000 号 5 号楼 邮编 201203

电话: 6100 5881 传真: 6100 5800 网址: [www.yashentech.com](http://www.yashentech.com)

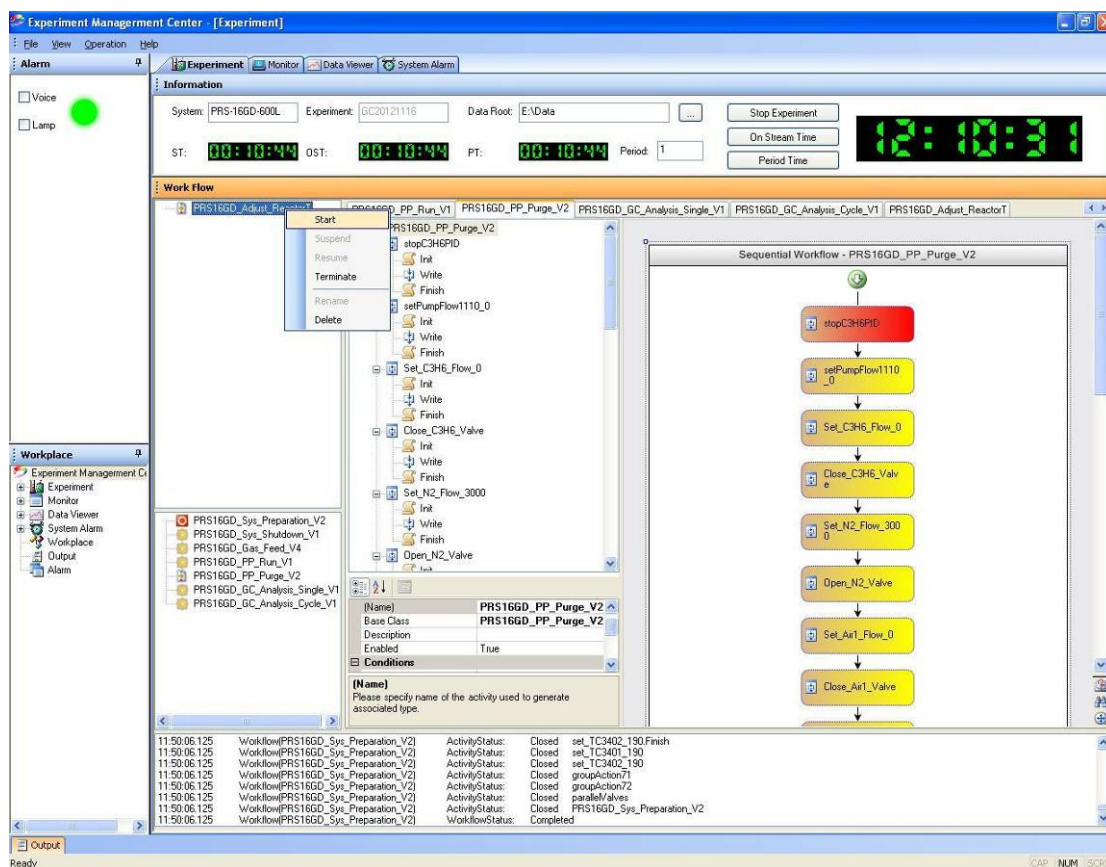


图 workflow执行界面

## ◆ 运行控制软件

运行控制软件以图形化的界面实现对高通量平行反应器系统的底层设备以及界区外辅助设备（包括在线分析设备）的操作，同时记录实验过程中的设备状态和过程数据，方便用户对全系统进行控制和对实验数据进行分析。

运行控制软件包括数据服务软件、系统诊断软件和实验控制软件三个部分。

### 1) 数据服务

数据服务软件实现对底层设备的控制，并给上位机软件提供控制设备和采集数据的接口。

数据服务软件的一个子集-日志服务在服务启动后实时记录各个设备的运行状态和过程数据，不依赖于上位机软件即可独立完成工作。

亚申科技研发中心（上海）有限公司

上海 浦东新区 张江高科技园区 龙东大道 3000 号 5 号楼 邮编 201203

电话: 6100 5881 传真: 6100 5800 网址: [www.yashentech.com](http://www.yashentech.com)

## 2) 系统诊断

系统诊断软件可实现对全系统各个控制单元进行的单独控制，其控制界面是全图形化的。熟悉硬件系统的工程师可通过系统诊断软件实现对全系统的控制、诊断、检查、实验运行等操作。

下图是系统诊断软件的供气界面，操作人员可直接点击界面上对应的设备图像实现对设备的控制：

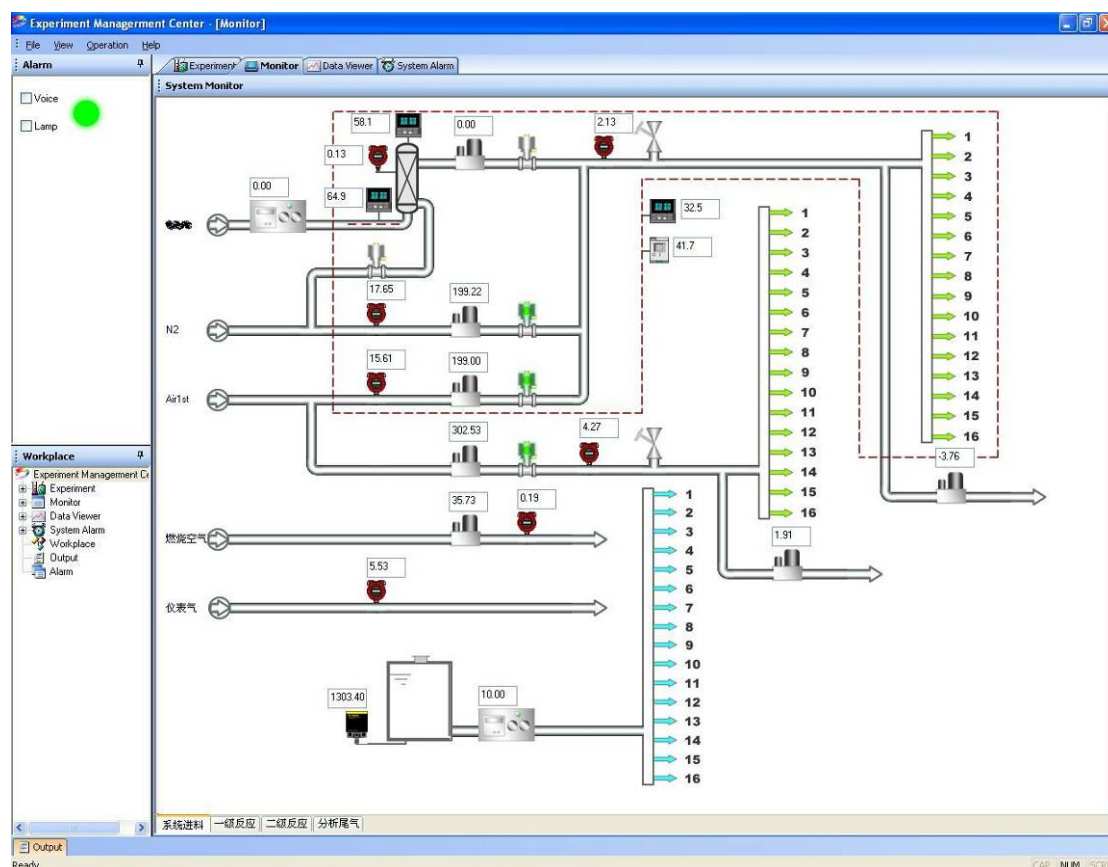


图 试验诊断界面

## 3) 实验控制

实验控制软件与系统诊断软件相似，但注重于实验操作过程，有针对性地限制了对绝大部分设备的直接操作，其目的是防止实验员误操作而导致实验过程中止或设备损毁等情况发生。

此外，实验控制软件包含实验过程的数据展示界面，以曲线图方式展示实验进程数据，以及报警显示和控制界面、 workflow 控制界面等。

亚申科技研发中心（上海）有限公司

上海 浦东新区 张江高科技园区 龙东大道 3000 号 5 号楼 邮编 201203

电话: 6100 5881 传真: 6100 5800 网址: [www.yashentech.com](http://www.yashentech.com)

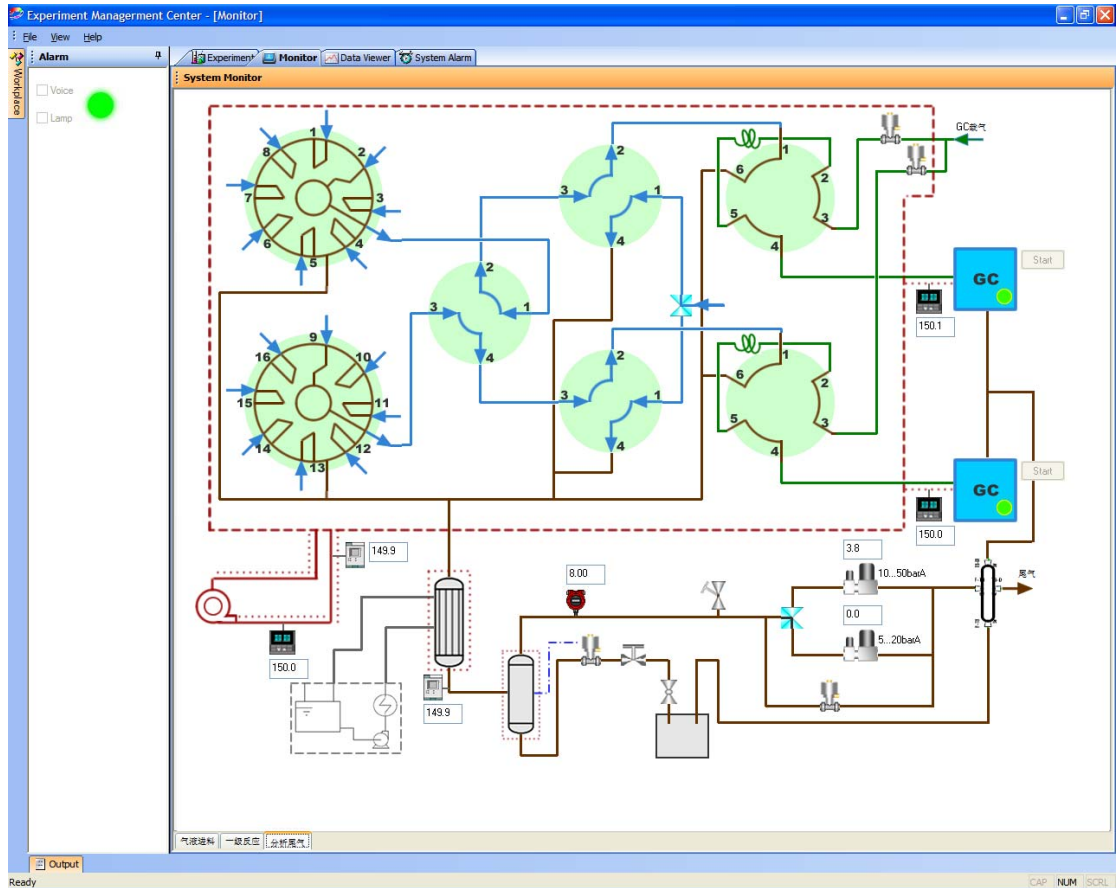


图 试验控制界面

## ◆ 数据处理软件

数据处理软件基于 workflow 软件、运行控制软件、以及界区外各分析设备控制软件的输出数据而运行。HTDMS 系统支持的外围分析设备包括在线 GC、在线 QMS、离线 GC 等。

下图是某在线 GC 分析软件的界面，数据处理软件能与其无缝衔接：

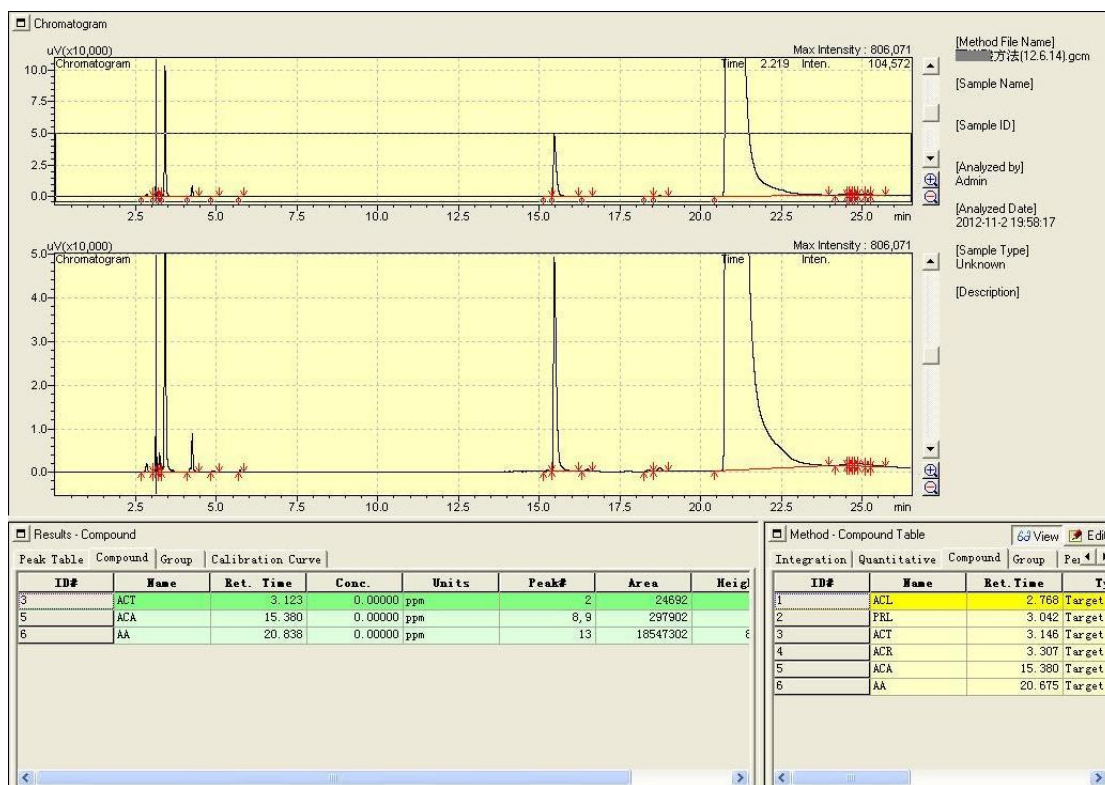


图 GC 分析数据自动集成

数据处理软件自动收集分散在各个系统下的数据并对其进行预处理，然后按照用户给定的数据整合方案将数据组合在一起。用户可随时执行数据处理过程，实时获得实验数据和分析结果。

数据处理软件包含数据同步服务、数据分析系统（DAS）、数据管理系统（DMS）和数据回放系统（Replay）等 4 部分。其中，数据回放不依赖于实验过程，仅与数据服务相关，因此也可用于回放符合特定格式的任意数据。

下图是数据处理软件的整体数据流程：

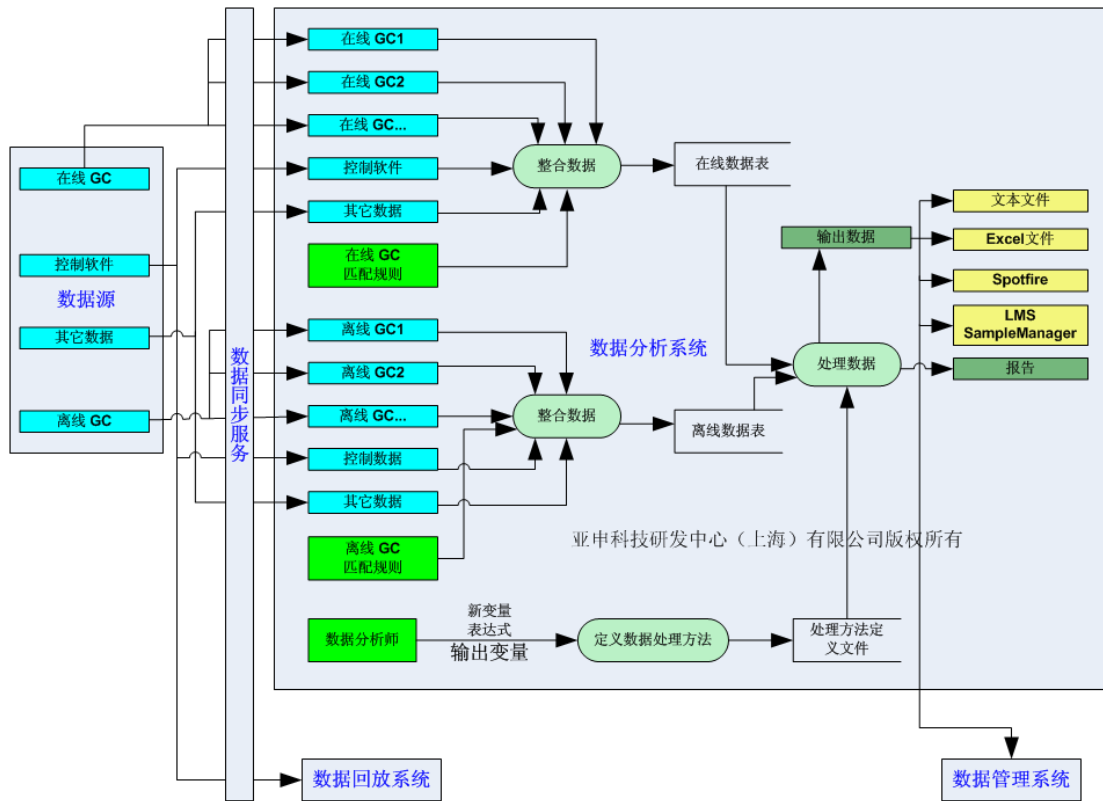


图 数据处理流程

### 1) 数据同步服务

数据同步服务在上图中标注的名称是 Data Sync Service，它提供一个配置界面让用户选择任一实验的数据源（Data Source）。

数据同步服务启动后，该服务会每经过特定时间间隔就去指定的数据源抓取更新数据到本地实验目录下。用户经过一段时间后，在数据分析系统中执行该实验的处理过程，即可得到最新实验分析结果，以供后续分析。

### 2) 数据分析系统

数据分析系统（DAS-Data Analysis Studio）将数据同步服务抓取到的数据按设定的整合方案将所有数据组合成三维的数据表：

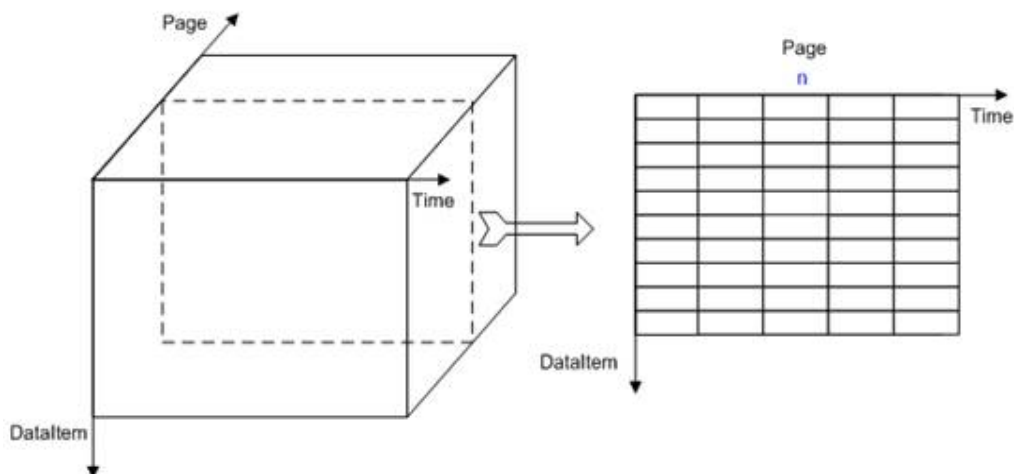


图 高通量数据分析模型

用户在数据分析系统中设计和创建数据处理过程。在设计处理过程时，用户可新建变量并使用表达式编辑器对三维数据表中的数据进行编程运算。这个过程与熟知的 Excel 编辑过程相似，且无需专业编程人员即可实施。所编辑的数据处理过程均存档并可复用。创建数据处理过程的界面如下图所示：

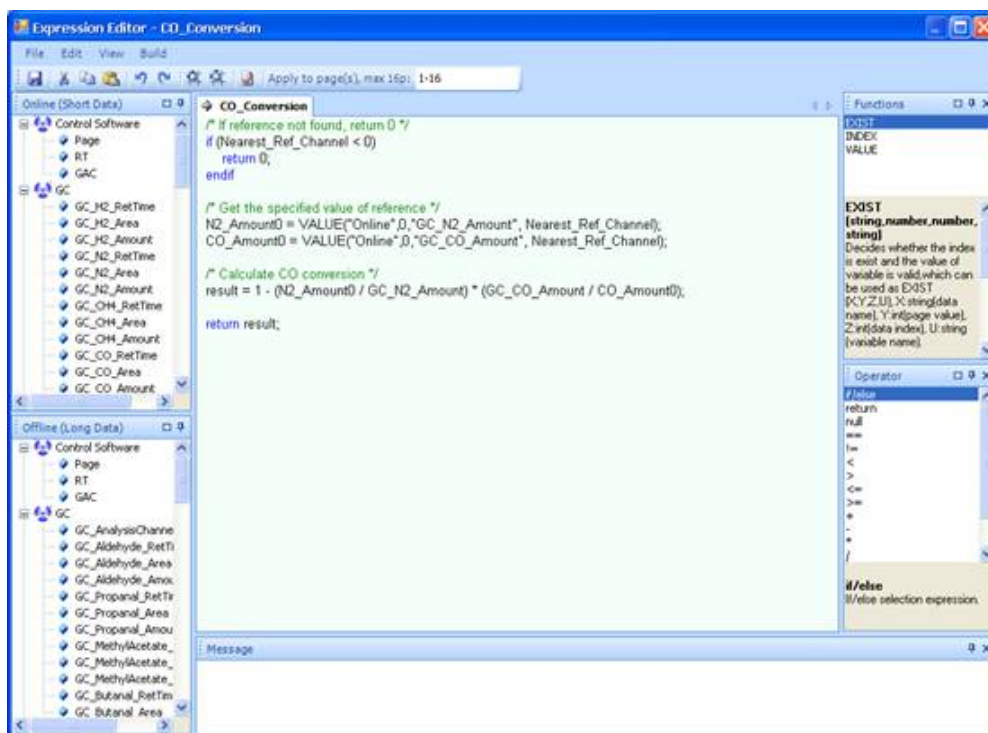


图 数据处理公式编辑



用户可根据特定实验的特定需求和特点,将一些关键的算法以行的方式追加到上述三维数据表中(即添加新的 DataItem 项)。新添加的数据可用于后续的运算。离线分析的数据处理方法可使用在线分析数据处理方法中的运算结果并进行再运算。

每个处理方法都可导出或复制到另一个实验中使用,并可通过局部修改算法生成新的数据处理过程。

下图是执行完一个处理过程后得到的数据表,这些数据包含用户自定义算法产生的新行:

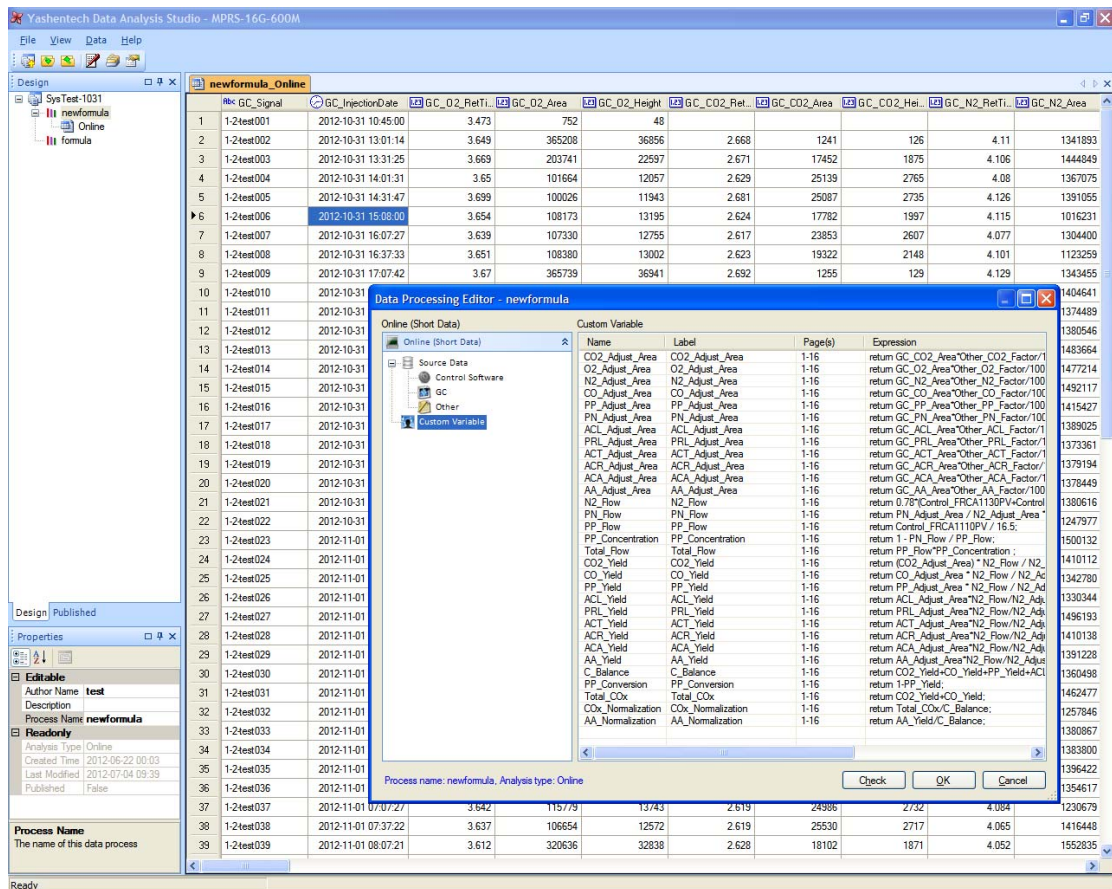


图 数据处理运行界面

用户可选择数据表中所有或部分的行和列,将所选择的数据输出到 Excel 或 Spotfile 等熟知的软件中进行二次分析,也可直接生成实验报告或报表。

数据分析系统只能同时处理一个实验。需要处理另一个实验的数据时,需要关闭当前实验并打开欲处理的实验。

亚申科技研发中心(上海)有限公司

上海 浦东新区 张江高科技园区 龙东大道 3000 号 5 号楼 邮编 201203

电话: 6100 5881 传真: 6100 5800 网址: [www.yashentech.com](http://www.yashentech.com)

如果需要对不同实验进行比较,用户可从各个实验的数据表中选择所需要的行和列数据,并将其导出到数据管理系统。

### 3) 数据管理系统

对于不同的实验,用户可通过数据分析系统导出所需数据,通过数据管理系统导入到数据库,然后对这些数据进行管理,包含查找、修改、删除等操作。

下图是数据管理系统的主界面:

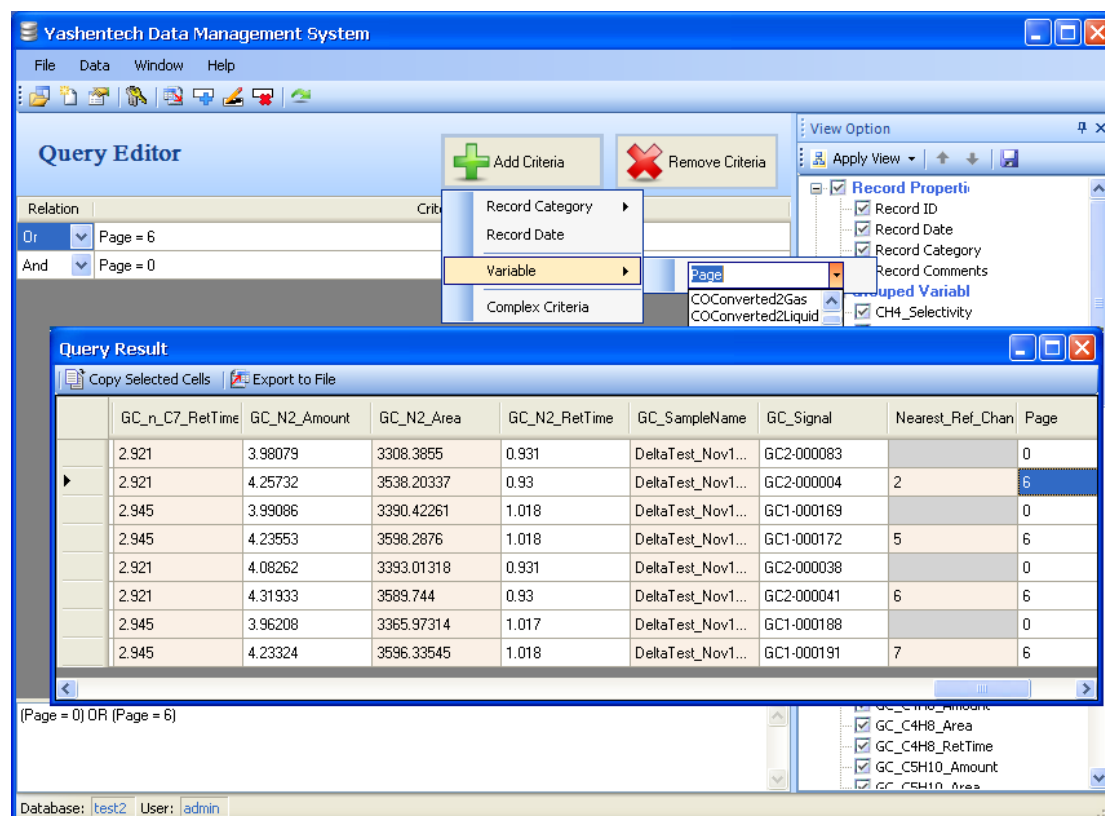


图 数据管理

用户输入特定的查询条件后即可执行查询,查询结果可导出到 Excel 或 Spotfile 中进行再分析,并支持与主流 LIMS (如 Sample Manager) 系统集成。

数据分析系统的重点在于分析,且只能处理单个实验;数据管理系统的重点在于管理数据,其可导入任意多个实验的数据,并能支持多个数据库。两个系统的有机结合,可以很方便地对高通量实验的全过程数据进行高效分析,加速研发进程。

亚申科技研发中心(上海)有限公司

上海 浦东新区 张江高科技园区 龙东大道 3000 号 5 号楼 邮编 201203

电话: 6100 5881 传真: 6100 5800 网址: [www.yashentech.com](http://www.yashentech.com)

#### 4) 数据回放系统

数据回放系统直接采用数据服务产生的数据，以曲线图方式显示从实验开始到当前时刻的系统状态和历史，并可通过局部放大，方便地了解任意时刻系统状况的细节。

在实验数据分析和处理过程中，经常会遇到异常数据。可通过对实验过程的数据回放，特别是异常数据出现的时间段系统状态的检查，寻找数据异常的原因以及影响系统或实验的因素等。

系统状态图也可输出作为实验报告的一部分，使得报告更直观。下图是数据回放的一个实例图：

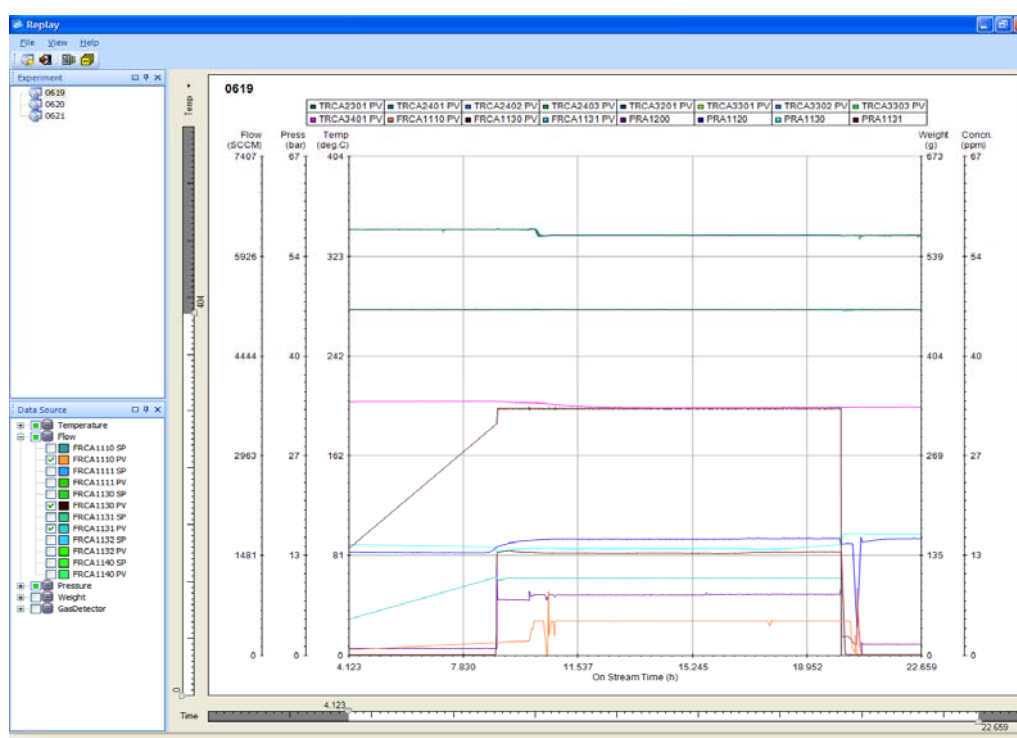


图 数据回放

更加详细的界面和操作说明请参见 HTDMS 软件系统安装说明书、用户手册、维护手册等软件系统文件。

亚申负责 HTDMS 软件系统的安装、实施、调试、测试和操作人员培训，并提供相关技术支持以保证高通量数据处理系统 HTDMS 安全、稳定、可靠地长期高效运行。

亚申科技研发中心（上海）有限公司

上海 浦东新区 张江高科技园区 龙东大道 3000 号 5 号楼 邮编 201203

电话: 6100 5881 传真: 6100 5800 网址: [www.yashentech.com](http://www.yashentech.com)