

报告编号: 20211100100447

# 科技查新报告

项目名称: Chromloong 色谱信息管理系统

委托人: 华谱科仪(大连)科技有限公司

委托日期: 2021年7月12日

查新机构(盖章): 中国科学技术信息研究所

查新完成日期: 2021年7月15日

中华人民共和国科学技术部

二〇〇〇年制



查新项目 名称	中文: Chromloong 色谱信息管理系统					
	英文:					
查新机构	名称	中国科学技术信息研究所				
	通信地址	北京复兴路 15 号			邮政编码	100038
	负责人	朱礼军	电话	010-58882106	传真	58882050
	联系人	曹燕	电话	010-58882079		
	电子信箱	chaxin@istic.ac.cn				
<p><b>一、查新目的</b></p> <p>成果鉴定</p>						
<p><b>二、查新项目的科学技术要点</b></p> <p>色谱分析行业主流色谱操作系统主要由美国、日本的产品占主导地位。主流软件的架构主要是基于数据库存储的 C/S 架构来实现局域网内的系统管理、数据采集、存储、处理等应用。这些色谱信息管理系统具有性能相对稳定、响应时间快、功能完善及完整的合规性等特点。局域网内部署成网络版，可支持大型企业的生产检测任务。此类系统多为外资公司独立开发，可实现按需更新迭代。目前，国内尚无一款自主研发的完整功能且符合行业法规的色谱操作系统。国内仪器厂商采用的系统，都是委托国外系统供应商进行简单改造界面（如 Clarity）。这类系统因无核心技术源码，也无算法设计开发且设计思路陈旧无法支持网络版的部署及数据库存储的架构，完全无法满足企业的数据安全性及生产管理需求。</p> <p>解决技术问题及主要技术方案：</p> <p>1、Chromloong 色谱信息管理系统对软件底层进行重新设计、开发，采用先进的双数据库、C/S 与 B/S 相结合的架构模式，运用当前较为成熟的互联网跨网络技术。在实现网络版部署的同时，分别将数据库技术和多架构的设计融入其中，全新的架构设计为软件功能的设计的多样性和系统的智能化打下基础。因此该系统在满足当前行业标准的基础之上，为实现万物互联的智能制造奠定了基础。由于架构设计和底层开发都是自主完成，因此后期的维护更新升级的可塑性、可靠性以及时效性都将大大提高。</p>						

2、Chromloong 色谱信息管理系统的算法部分，是国内一线色谱工作者与相关算法技术人员共同参与设计开发的一套自主研发的算法。该算法采用一阶和多阶函数相结合，分段与全局互补的方式进行设计开发。该算法除了满足基本的功能需求外，对算法的准确性验证，还专门开发了一套色谱积分评价系统，来验证算法的准确性与功能的完整性。根据算法评价系统的评测结果，该算法的准确性与国际主流色谱信息管理系统的计算结果几乎一致，从而也保证了基础算法的计算准确性。

3、Chromloong 色谱信息管理系统在满足完善的基础功能同时，对目前国内以三方检测机构，QC 实验室为主导的特殊应用场景也做了调研，并在设计阶段就针对“一键式检测”这种高自动化功能进行考虑，在开发过程中，增加了一键式向导，自动序列定量等功能，来满足企业的相关需求。

4、在对传统植入项目的功能研究后，Chromloong 色谱信息管理系统设计团队对该模块进行重新设计，使之拥有了定制化的“典型方法库”功能，不仅可以将开发提供的项目植入，同时用户可以根据自已的需求，将自已开发的方法、项目实现企业内共享，实现了真正意义上的企业知识累计复用。

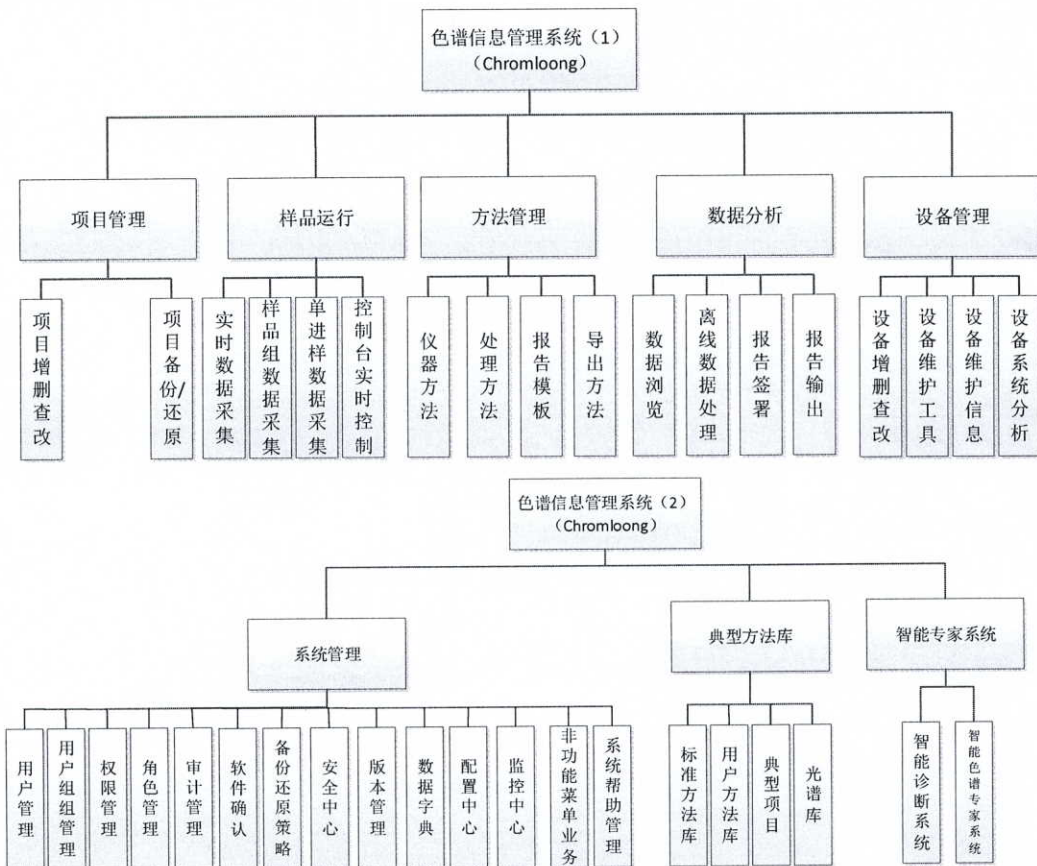


图 1：系统功能图

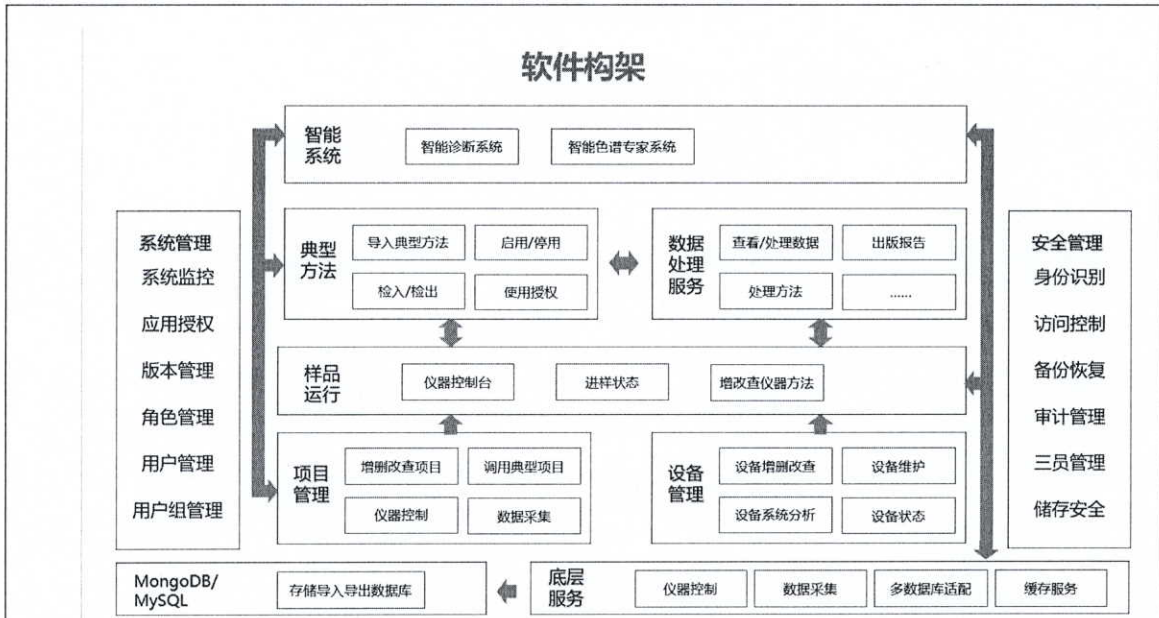


图 2: 系统总体架构图

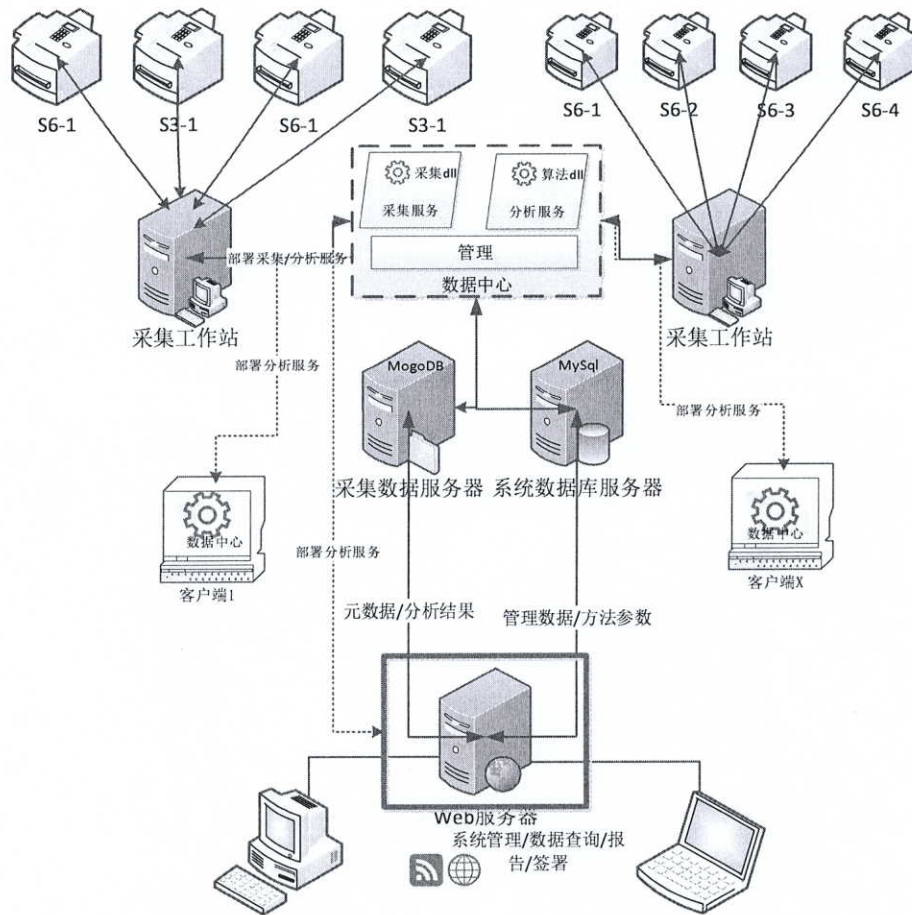


图 3: 系统部署架构图

### 三、查新点与查新要求

1. Chromloong 色谱信息管理系统（架构如图 2 所示）基于 MySQL 与 MongoDB 双数据库结构，采用 C/S 与 B/S 相结合的架构模式。

查找国内有否以上查新点技术特征的公开文献报道。

### 四、文献检索范围及检索策略

#### 文献检索范围：

（一） 检索国内下列有关中文数据库：

1. 中文科技期刊数据库 (PSTP)	1989—2021
2. 中国科技成果数据库 (CSTAD)	1983—2021
3. 中国专利数据库 (PATENT)	1985—2021
4. 中国学术会议论文数据库 (CACP)	1986—2021
5. 中国学位论文数据库 (CDDDB)	1980—2021
6. 万方数字化期刊数据库	1998—2021
7. 中文科技报告	1966—2021
8. 中外标准数据库	
9. 中国学术辑刊全文数据库（知网版）	1975—2021
10. 中国学术期刊（网络版）（知网版）	1915—2021
11. 世纪期刊（知网版）	1915—1993
12. 中国博士学位论文全文数据库（知网版）	1999—2021
13. 中国优秀硕士学位论文全文数据库（知网版）	1999—2021
14. 中国重要报纸全文数据库（知网版）	2000—2021
15. 中国重要会议论文全文数据库（知网版）	2000—2021
16. 中国专利全文数据库（知网版）	1985—2021
17. 中国科技项目创新成果鉴定意见数据库（知网版）	1978—2021
18. 中国年鉴网络出版总库（知网版）	1949—2021
19. 国家标准全文数据库（知网版）	1950—2021
20. 国内外标准题录数据库（知网版）	1919—2021
21. 中国行业标准全文数据库（知网版）	1950—2021

## (二) 部分互联网资源检索

- |  |           |
|--|-----------|
| 22. 中华人民共和国国家知识产权局 ( <a href="http://www.sipo.gov.cn">http://www.sipo.gov.cn</a> ) | 1985—2021 |
| 23. 佰腾网 ( <a href="https://www.patexplorer.com">https://www.patexplorer.com</a> )  | 1985—2021 |
| 24. 百度搜索引擎 ( <a href="http://www.baidu.com">http://www.baidu.com</a> )             |           |
| 25. 中国学术搜索网 ( <a href="http://www.sciinfo.cn">http://www.sciinfo.cn</a> )          |           |
| 26. 中国机械信息网 ( <a href="http://www.jx.cn">http://www.jx.cn</a> )                    |           |
| 27. 国家科技图书文献中心 ( <a href="https://www.nstl.gov.cn">https://www.nstl.gov.cn</a> )   |           |

## 检索策略

### (一) 检索词

色谱

管理

分析

系统; 平台; 软件

C/S; Client/Server; 客户端/服务器; 客户端/服务端; 客户机/服务器; 客户机/服务端

B/S; Browser/Server; 浏览器/服务器; 浏览器/服务端

MongoDB

MySQL

### (二) 检索式

1. 色谱\*(管理+分析)\*(系统+平台+软件)\*(MongoDB+MySQL+"C/S"+"Client/Server"+"客户端/服务器"+"客户端/服务端"+"客户机/服务器"+"客户机/服务端+(客户端+客户机)\*(服务器+服务端)+"B/S"+"Browser/Server"+"浏览器/服务器"+"浏览器/服务端"+浏览器\*(服务器+服务端))
2. TI=色谱\*(管理+分析)\*(系统+平台+软件)
3. 色谱\*(管理+分析)\*(系统+平台+软件) AND FT=(MongoDB+MySQL)
4. FT=色谱\*MongoDB\*MySQL\*(("C/S"+"Client/Server"+"客户端/服务器"+"客户端/服务端"+"客户机/服务器"+"客户机/服务端"+(客户端+客户机)\*(服务器+服务端))\*("B/S"+"Browser/Server"+"浏览器/服务器"+"浏览器/服务端"+浏览器\*(服务器+服务端))+(客户端+客户机)\*(服务器+服务端)\*浏览器)

注: 以上检索式未注明检索字段的默认在主题中检索, 全文、题名字段仅用于 CNKI 平台。

## 五、检索结果

参照用户提供的检索词及相关数据库词表的规范词,按上述检索式查找了国内 21 个有关数据库,并进行互联网补充检索,查出国内文献 36 篇(详见国内查新附件,共 12 页)。本报告选列相关文献 7 篇,其篇名及简要内容如下:

1. 华谱科仪(大连)科技有限公司.王东强,冀禹璋,张婧.基于双数据库架构的色谱分析系统 [P].CN112863615A,2021-05-28.

该申请基于双数据库架构的色谱分析系统,属于色谱分析技术领域,该申请的系统包括,数据采集单元,其用于采集色谱分析仪器生成的原始数据;分析处理单元,其用于基于用户配置的分析操作对所述原始数据进行分析得出分析数据;存储管理单元,其用于存储原始数据和分析数据,以及存储分析系统的方法参数及管理数据;客户端单元,其用于向用户提供系统的交互界面;其中,存储管理单元中包括第一数据库和第二数据库,第一数据库用于存储原始数据和分析数据,第二数据库用于存储分析系统的方法参数及管理数据。该申请有利于保证原始采集数据的完全性和安全性,满足行业实际中的新需求。

以下内容摘自全文:

根据权利要求 1 所述的色谱分析系统,其特征在于,还包括 Web 服务器单元,其用于向用户以浏览器页面形式提供系统的交互界面。

根据权利要求 1 所述的色谱分析系统,其特征在于,所述第一数据库采用 MongoDB 数据库系统,所述第二数据库采用 Mysql 数据库系统。

2. 迪森德克斯公司.布鲁斯·威尔考克斯,莉萨·克罗纳,约翰·布卢姆,瑞恩·本茨,杰弗里·琼斯,斯科特·施雷肯高斯特,威廉姆·史密斯,阿提特·卡欧,尤佳.自动化样品工作流程门控和数据分析[P].CN111316106A,2020-06-19.

该文公开了许多与质谱数据分析有关的方法和计算机系统。采用该文的公开内容有助于复杂数据集(如通过质谱分析生成的数据集)的自动化、高通量、快速分析,从而减少或消除分析过程中监督的需要,同时快速产生准确的结果。在一些情况下,基于关于输入参数与健康状况指示物之间的预定关联的信息来进行健康状况指示物的鉴别。

以下内容摘自全文:

一种用于自动化质谱分析的系统,其包含:串联定位的多个蛋白质处理模块;以及多个质谱样品分析模块。

所述蛋白质处理模块之一利用气相色谱法、液相色谱法、毛细管电泳或离子迁移来分级分离

样品，并且其中所述系统被配置为分析由所述检测器生成的数据，并且标示出不满足一组色谱 QC 指标的样品，这组色谱 QC 指标包括在生物样品中检测的峰位移、峰面积、峰形状、峰高、波长吸收或荧光波长中的至少一项。

中所鉴别的特征包括电荷态、色谱时间、整体峰形、分析物信号强度、已知污染物的存在或其任意组合。

服务器包含至少一个存储质谱数据和/或肽序列信息的数据库，例如 MySQL 数据库。有时，服务器包含肽序列数据库，例如 MongoDB。

计算机程序包括一个或多个软件模块。计算机程序任选地部分或全部包括一个或多个 web 应用程序、一个或多个移动应用程序、一个或多个独立应用程序、一个或多个 web 浏览器插件、扩展项、加载项或附加项或其组合。

数据采集模块采集数据，并为每个样品孔生成一个 LCMS 数据文件以用于注册的研究。数据采集过程包括启动由注册的仪器排队的工作流程，并验证每个 LCMS 数据文件是否已复制到共享的主数据存储中。工作流程确定模块读取该研究的关联工作清单，并设置工作流程的参数。数据准备模块数据提取模块从每个 LCMS 数据文件提取数据以用于下游处理。这包括使用由色谱组确定的计算来提取总离子色谱图。该数据提取过程包括使用 API 将 LCMS 仪器色谱图提取到“实际”文件中以供下游使用，然后提取光谱数据并将其转换为 APIMS1 格式，以获取时间范围、装置名称和类型、片段电压、电离模式、离子极性、质量单位、扫描类型、光谱类型、阈值、采样周期、总数据点和总扫描计数。将 APIMS1 文件转换为 Java 序列化格式，以备进行下游处理。特征提取模块使用用于峰检测的算法来进行对初始分子特征的提取，其以并行部分的形式存储在 java 序列化文件中，以进行下游处理。蛋白质组学处理模块为 MS2 数据提出肽序列和可能的蛋白质匹配。质量控制模块通过 TIC 比较、蛋白质图谱、分子特征容差验证、肽聚类和其他用于进行 LCMS 质量控制分析的方法来进行质量控制分析。可视化模块创建视觉呈现，如星空缩略图。应用模块为数据探索、可视化和监测提供了各种辅助应用。监测模块提供对系统和/或仪器的监测。

3. 徐龙.基于网络服务器在线色谱控制与分析系统的开发[D].导师：王爱民.东南大学,2017.

色谱处理系统是色谱信号的一种收集，处理和传输装置，实现采集，处理实验数据和操控仪器的功能。根据国内外已知色谱软件的使用缺陷，依赖互联网技术和计算机的发展，该文设计及开发了一个基于网络服务器在线色谱控制与分析系统，集仪器控制与实验室分析一体化平台。色谱工作站基于 B/S 架构设计，使用了目前十分流行的 Django 服务器应用框架，按照分布式系统实现架构，完成了数据存储、权限管理、系统监控和分析等核心功能。该文



色谱工作站实现了色谱数据动态采集分析功能，即高效动态并发处理模型与基础算法的结合。应用消费者-生产者模式，使得数据在采集阶段可以动态测定峰的保留时间。应用分布式任务调用模块执行算法任务调动，将服务器应用与色谱算法耦合。并且通过守护进程方案解决 WEB 网站短链接与软硬件通信长连接之间的矛盾。在色谱分析中，重叠峰对色谱的定性定量分析具有很大的影响，双树复小波变换的时域多分辨率分析可以对重叠峰做出分离，并且克服了实数小波变换因间隔取样，产生的震荡性、抗混叠性差、平移敏感等缺陷。该文采用双树复小波变换对色谱进行分解，使用了模拟色谱信号和实验所测得的色谱信号来验证。通过计算比较分离程度、峰位和峰面积得出其比一般的实数小波准确，能够有效的分离重叠峰，适合色谱定性定量分析。

以下内容摘自全文：

服务器的长期储存数据使用到了 MySQL 作数据库管理。

4. 郑波.基于 Web 的色谱分析软件平台研究与设计[D].导师：王爱民.东南大学,2016.

该文的重点主要在于将 Web 技术应用到色谱分析领域，即采用浏览器 / 服务器技术。借助浏览器的平台无关性，易维护性等优势，使客户通过电脑上的浏览器对色谱设备进行操作，包括设备管理、设备配置、数据采集、数据处理等，此外，通过因特网用户可以实现局域网和广域网上对色谱设备进行远程操作和远程监控，以及远程维护。该文首先阐述了该课题的研究背景以及色谱技术在国内外的研究现状，在深入研究了色谱分析工作原理的基础上，通过对系统的需求进行仔细分析，设计完成了一套色谱分析平台系统，该系统主要有以下功能：用户模块、系统日志模块、色谱设备控制模块、数据采集与谱图显示模块、谱图数据处理模块等。该文的工作包括：搭建一个功能完善的 Web 服务器，包括 Web 网页设计(提供友好的界面，方便用户操作)，Web 后台开发(负责数据采集、数据处理等)，并对其进行前后端的优化，在该服务器上完成系统核心功能模块开发；设计色谱数据处理算法，通过比较各种滤波算法、谱峰识别算法等，再结合该研究的实际情况，最终确定适合该系统的算法；根据特定下位机(色谱设备，输液泵和检测器)提供的通信协议，在该协议的基础上，完成对下位机的二次开发，包括对下位机的有效控制，监控和维护等。最后，需要对该研究设计完成的色谱分析平台进行测试，包括对软件各个功能模块的测试，对色谱定性定量分析结果准确性的测试，以及对软件稳定性和可靠性的测试，以验证系统的可行性。

以下内容摘自全文：

该研究采用基于 Python 的 Django Web 应用框架进行开发。网站前端程序用 HTML、JavaScript、CSS 编写，后端程序使用 Python 编写，选择 Apache 作为 Web 服务器，并把 njango

与 Apache 连接起来, 利 Linux 发行版中的 CentOS 操作系统作为服务器运行环境, 数据库采用 MySQL。

5. 陈安然.色谱工作平台的研究与开发[D].导师: 王爱民.东南大学,2018.

色谱工作平台是利用计算机进行色谱仪器控制、数据采集运算的软件系统。现有的色谱工作平台普遍为单机版本, 该文引入了 Web 技术, 以使用户通过网络实时获得色谱软件服务。该文选择 Django 作为色谱工作平台的服务器软件框架, 实现了浏览器-服务器架构方式。服务器的各个功能模块采用分布式任务队列 Celery 统一调度, 这种调度方式能充分利用服务器资源, 保证任务以异步、并行的方式高效执行。色谱工作平台通过串口对设备仪器进行有效控制, 在此基础上实现了设备监控、动态采集等功能。服务器的数据存储采用静态与动态相结合的方式, 静态数据存放在 MySQL 数据库, 动态数据以生产者-消费者模式用 Redis 消息队列高效存取。该文还实现了用户权限管理、日志记录等功能。该文设计了一套完整的色谱数据处理算法, 包括滤波去噪、谱峰识别、重叠峰分解, 最终完成定量计算。其中, 滤波和重叠峰分解对定量计算具有较大影响, 该文使用小波变换的方法, 重点对滤波和重叠峰分解进行研究, 用模拟数据和采集数据分别进行了实验, 取得了较好的效果。最后, 该文对色谱工作平台进行了全面测试。包括色谱采集模块的同步性测试, 色谱分析算法的稳定性和准确性测试, 以及其它功能模块测试。测试结果表明色谱工作平台具有较好的实用性。

6. 李一波,吴志红,孙卫国(沈阳航空工业学院).基于 C/S 模式的中药材色谱分析管理系统[J].计算机工程与应用,2001,(08):125-126+129.

中药材定量分析一直是一个难题。色谱技术是中药材定量分析的主要手段。文章介绍了一个集中药材色谱数据分析鉴别、管理、彩色图谱管理和属性管理于一体的基于客户机 / 服务器模式的色谱分析管理系统的平台选择和设计。

以下内容摘自全文:

该软件主要有 4 个主要功能: 中药材色谱存储和管理、中药材彩色图谱管理、中药材属性管理、中药材色谱识别/鉴别。

服务器端选择 NT server 4.0+MS SQL Server 7.0。

7. 祝玉芳.色谱峰分析与计算系统的设计与实现[D].导师: 李锋.东华大学,2015.

该文设计了基于计算机的色谱峰分析与计算系统, 并针对主要技术展开研究工作。该文在对色谱仪器现状和色谱信号特征进行综合分析的基础上, 提出了色谱峰分析与计算系统的总体框架, 设计了色谱信号去噪、色谱峰特征点识别和色谱峰面积积分等算法, 实现了对

于色谱峰的定性与定量分析。针对色谱信号的去噪问题，该文通过分析色谱信号中噪声信号的特征，综合采用蛇形（Snake）均值滤波算法和改进的一阶滤波算法，实现了色谱信号的去噪处理。色谱峰特征点识别就是确定每个峰的起点、顶点和终点的位置。该文在对色谱峰的几何特征抽取的基础上，完成了色谱峰各信号点的运动趋势（上升、平缓、下降）判定。结合每个点的运动趋势、斜率、峰宽和半峰宽等参数，根据色谱信号特点，提出了色谱峰特征点识别算法，实现了特征点识别。为计算色谱峰的面积，该文在完成基线校正的基础上，利用每个峰的特征点和其基线对峰进行分割，采用面积积分法实现了峰面积计算，并根据最小峰面积和最小峰强度阈值等参数滤除一噪声峰。该文采用时间窗法和时间带法，结合峰的保留时间，对色谱峰进行定性地分析，识别出混合物各组成成分。为方便地计算各组成成分的浓度，该文设计并实现了归一法、内标法和外标法等方法，从而完成了整个系统的定性与定量分析。对标准样品进行的测试，以及对结果进行的详细分析说明该文所开发的色谱分析系统已达到了预期要求，具有较高的可靠性和实用性。

以下内容摘自全文：

该系统主要由数据层、逻辑层和显示层三层组成。数据层主要是用来保存样品和分析参数等数据，并提供数据访问接口；逻辑层主要是实现色谱信号去噪模块、色谱峰特征点识别模块、色谱峰面积计算模块和定性与定量分析模块；显示层主要实现色谱信号采集界面、分析界面和打印界面。

该系统主要实现的功能包括：样品查看、方案选择、数据采集、谱图分析、数据导出与图表打印和比较功能。

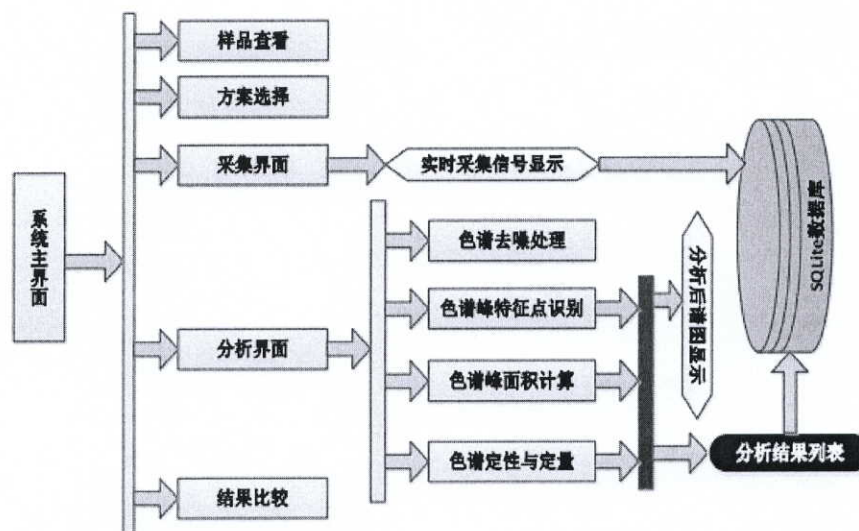


图 7-3 系统界面功能模块

## 六、查新结论

该查新项目为 Chromloong 色谱信息管理系统

根据该项目查新点所述的技术特征，经对上述数据库中的国内公开文献进行检索，结果表明：

查新点所述：Chromloong 色谱信息管理系统基于 MySQL 与 MongoDB 双数据库结构，采用 C/S 与 B/S 相结合的架构模式。

所查相关文献中，文献 1 是委托方申请的发明专利（审中），公开了一种基于双数据库架构的色谱分析系统，包括数据采集单元、分析处理单元、存储管理单元、客户端单元等模块。该系统还包括 Web 服务器单元，用于向用户以浏览器页面形式提供系统的交互界面。双数据库采用了 MongoDB 与 Mysql 的组合，包括了查新点中基于 MySQL 与 MongoDB 双数据库结构、采用 C/S 与 B/S 相结合的架构模式等系统架构技术特征。

文献 2 中的发明公开了一种用于自动化质谱分析的系统，该系统服务器至少包含了 MySQL 数据库，也可同时采用 MongoDB 数据库。计算机程序包括一个或多个软件模块。计算机程序任选地部分或全部包括一个或多个 web 应用程序、一个或多个移动应用程序、一个或多个独立应用程序、一个或多个 web 浏览器插件、扩展项、加载项或附加项或其组合。该系统包括了数据采集模块、工作流程确定模块、数据准备模块、特征提取模块、蛋白质组学处理模块、质量控制模块及可视化模块等，未涉及查新点系统中的样品运行模块，与查新点中色谱信息管理系统功能及模块组成不完全相同。

文献 3 报道了一种基于网络服务器在线色谱控制与分析系统，集仪器控制与实验室分析，成了数据存储、权限管理、系统监控和分析等核心功能；文献 4 报道了一种基于 Web 的色谱分析软件平台，包括用户模块、系统日志模块、色谱设备控制模块、数据采集与谱图显示模块、谱图数据处理模块等；文献 5 报道了一种色谱工作平台，该平台通过串口对设备仪器进行有效控制，在此基础上实现了设备监控、动态采集等功能，上述三种色谱分析平台均采用了 B/S 架构，与查新点中 C/S 与 B/S 相结合的架构模式不同；上述三种平台均采用了 MySQL 数据库，未采用 MongoDB。

文献 6 报道了一种基于 C/S 模式的中药材色谱分析管理系统，主要有中药材色谱存储和管理、中药材彩色图谱管理、中药材属性管理、中药材色谱识别/鉴别 4 个主要功能，与查新点中 C/S 与 B/S 相结合的架构模式不同，且未采用查新点中的 MySQL 及 MongoDB 数据库。

文献 7 报道了一种色谱峰分析与计算系统，主要实现的功能包括：样品查看、方案选择、数据采集、谱图分析、数据导出与图表打印和比较功能，未采用查新点中的 C/S 与 B/S 相结合

的架构模式，未采用查新点中的 MySQL 及 MongoDB 数据库。

综上，在以上国内文献检索中，已见委托方申请的发明专利提及了基于 MySQL 与 MongoDB 双数据库结构、C/S 与 B/S 相结合架构模式的色谱分析系统，未见基于 MySQL 与 MongoDB 双数据库结构、C/S 与 B/S 相结合架构模式，且与查新点中功能及模块完全相同的色谱管理系统。即，本次检索未见有与该项目查新点所述技术特征完全相同的国内公开文献报道。

查新员（签字）：于英端 查新员职称：工程师

审核员（签字）：Jatutu 审核员职称：



2021年7月15日

### 七、查新员、审核员声明

1. 报告中陈述的事实是真实和准确的。
2. 我们按照科技查新规范进行查新、文献分析和审核，并作出上述查新结论。
3. 我们获取的报酬与本报告的分析、意见和结论无关，也与本报告的使用无关。

查新员（签字）：于英端 审核员（签字）：Jatutu

2021年7月15日

2021年7月15日

### 八、附件清单

国内查新附件 12 页

## 九、备注

1. 中国科学技术信息研究所是国家一级科技查新单位。
2. 本查新报告无“查新专用章”和骑缝章无效。
3. 本查新报告涂改、部分复印无效。
4. 本查新报告检索结论仅供参考。