

文章编号: 0254 - 5357(2011)01 - 0110 - 06

国家地质实验测试中心实验室管理信息系统

罗代洪, 吴淑琪, 吴晓军, 甘 露, 邓月金, 温宏利, 韩慧明, 吕彩芬
(国家地质实验测试中心, 北京 100037)

摘要: 国家地质实验测试中心实验室管理信息系统(LIMS)实现了对实验室核心业务全流程及客户、仪器设备、标准物质、标准方法、样品、数据、人员、货币工作量、数据质量、客户抱怨等要素进行全方位规范化综合管理。该系统在国家地质实验测试中心成功实施以来,对于提高工作效率、优化工作流程、减少重复劳动、降低生产成本、缩短检测周期、提高数据质量、提高检测能力和效益发挥了重要作用,在国土资源管理和地质调查工作中得到了重要应用。

关键词: 实验室管理信息系统; 数据库设计; 软件开发; 实验室管理; 计算机应用

中图分类号: G202; O213.1 文献标识码: A

Laboratory Information Management System in National Research Center for Geoanalysis

LUO Dai-hong, WU Shu-qi, WU Xiao-jun, GAN Lu, DENG Yue-jin, WEN Hong-li,
HANG Hui-ming, Lü Cai-fen
(National Research Center for Geoanalysis, Beijing 100037, China)

Abstract: The LIMS developed in National Research Center for Geoanalysis realized a comprehensive management for the kernel work in the whole analytical processes and also overall regularized management of customers, instruments, reference materials, standard methods, samples, analysts, work load, data quality, and customers' complain. The successful implement of LIMS in National Research Center for Geoanalysis promotes analysis efficiency and capability, improves and optimizes the process and data quality, reduces the costs, avoid unnecessary repetition, shortens data report time. LIMS has played an important role in the center especially for the sample analysis in national land and resource management and China Geological Survey projects.

Key words: laboratory information management system (LIMS); database design; software development; laboratory management; computer application

随着实验室对信息化管理认识的深入以及信息技术的发展,近年来国内各行业越来越多的分析实验室开展了实验室管理信息系统(LIMS)的建设,并取得了一定的应用成果^[1-7]。地矿行业的实验室在LIMS的使用方面也取得了长足的进步,通过LIMS的实施,对于提高

分析服务质量,提高工作效率起到了积极的作用^[8-10]。

国家地质实验测试中心LIMS是根据实验室认证认可的要求,遵循国际标准化组织和国际电工委员会发布的ISO/IEC 17025—1999《实验室测试或校准能力的通用要求》^[11],以《质量手册》、《程序文件》、《地质

收稿日期: 2010-02-20; 修订日期: 2010-06-20

基金项目: 国土资源地质大调查项目资助(200220190014,1212010916020)

作者简介: 罗代洪(1963-),重庆市人,研究员,从事地球化学与计算机应用研究。E-mail: dluo@cags.ac.cn。

矿产实验室测试质量管理规范》^[12]为依据,自主开发的管理信息系统。该系统可实现对实验室核心业务全流程以及实验室的客户、仪器设备、标准物质、标准方法、样品、数据、人员、货币工作量、数据质量、客户抱怨等要素进行全方位的规范化综合管理,以提高工作效率,优化工作流程,减少重复劳动,降低生产成本,缩短检测周期,提高数据质量,提高检测能力和效益。目前实施运行的 LIMS 是在 2003 年 5 月中心开发的系统进行综合评估的基础上,对中心业务流程进行全面分析,提出全新的体系结构和数据库设计方案,自主开发的模块化的、开放的综合性信息管理平台。新开发的 LIMS 将标准物质数据库、标准方法数据库^[13]与 LIMS 系统进行全面整合,为贯彻质量管理规范提供了丰富的标准物质和标准方法信息,提高了工作效率,优化了资源配置,可有效地对检测业务全过程质量管理策略的实施情况进行跟踪与监控。本系统除了实现了 LIMS 的功能外,还特别注重了对 LIMS 数据的挖掘,可为单位领导与各级管理部门提供多种统计数据信息和决策支持。

国家地质实验测试中心开发实施的 LIMS 适合于在岩矿分析、水质分析、化探分析、煤分析、环境样品分析等实验室使用。系统实现了与天平设备的联接,可以直接采集称取的样品质量等原始记录并保存在数据库中。样品分析过程中由大型分析仪器取得的分析结果等原始数据以数据文件的方式经过压缩后直接保存在数据库中,以保证其原始性,并可以在事后随时查询。在对原始分析结果进行存储的同时还要对这些数据进行处理,并将计算的结果与作业信息进行匹配后记录在数据库表中。质量管理的种类分为密码标样、密码重份、明码标样、明码重份、空白样品等层次,由相应的人员进行管理和实施。具体的质量管理数据的处理过程按照 DZ/T 0130—2006《地质矿产实验室测试质量管理规范》的要求进行。

1 系统架构

国家地质实验测试中心实施的 LIMS 是基于客户端/服务器(C/S)架构开发的管理信息系统。本系统的后台数据库采用 Microsoft SQL Server 2000 数据库管理系统,同时支持任何符合 ODBC 规范的关系型数据库,客户端应用程序在 Sybase PowerBuilder 9 环境中开发。目前,系统全面实施后客户端主机的装机数量为 40 多台,这为系统升级和软件维护带来不便,这也是倡导浏览器/服务器(B/S)架构的 LIMS 厂商认为

C/S 架构系统的信息系统将被 B/S 系统取代的主要理由。但是,C/S 架构的信息系统可以为用户提供丰富的用户界面,可以更好地发挥客户端主机强大的处理能力,减轻服务器的负担。在这一点上 C/S 架构的系统比 B/S 架构的系统具有很大的优势。目前在银行、航空、铁路等系统的主流信息系统仍然采用以 C/S 架构为主、B/S 架构为辅的信息系统,足以证明 C/S 架构信息系统的强大生命力。

为了克服系统维护和软件升级的不便,减少系统维护工作量,本研究开发了专门的系统软件升级程序,解决了客户端软件升级的问题。目前系统提供了两种系统软件升级方式。一种是由系统管理员事先将需要升级的程序打包为一个压缩文件,用户自行将打包后的软件下载后,再解压安装到指定的 LIMS 工作文件夹。另一种方式是在程序设计时由系统在每次启动程序时探测是否需要部分程序或全部程序进行更新,然后自动将最新程序下载到 LIMS 工作目录。本系统目前采用的方式是由系统在每次启动时自动探测是否有需要更新的程序,提示用户下载更新。

2 软件运行环境

本系统在国家地质实验测试中心局域网环境中运行,目前系统实施后安装的客户端主机的装机数量为 40 多台,基本上包括了质量体系的全部人员和计算机。为保证数据和系统安全,在局域网中划分了专用的 V-LAN 网段,使 LIMS 的运行环境与广域网隔离。

服务器硬软件配置:服务器采用 IBM xSeries 260 m,主频 3.0 GHz 的 Pentium 4 CPU,内存 2.0 GB,操作系统 Microsoft Windows 2003 Enterprise,数据库 Microsoft SQL Server 2000 标准版 + SP4。

客户端主机要求:操作系统必须是 Microsoft Windows XP + SP2 及以上任何版本,内存 256 MB 以上,MS Office 97。对其他软硬件指标没有特殊的要求。

3 数据库设计

底层数据库的设计是 LIMS 系统能够高效运行和灵活扩展的关键。本系统的底层数据库由“委托客户”、“合同”、“样品”、“检测项目”、“编码”、“人员”、“检测方案”、“任务”、“作业”、“标准物质”、“标准方法”、“检测报告”等多个实体和与之相关联的“主键”、“外键”、“逻辑关系”、“约束”等构成。在数据库设计和软件开发中,广泛使用数据库存储过程提高系统的运行效率和响应速度,并减少客户端与服务器的数据传送。本系统

数据库的设计符合第三范式(3NF)的要求。关系数据库有 3 个基本的范式:第一范式(1NF),第二范式(2NF),第三范式(3NF)。第一范式强调列的原子性,即列不能够再分成其他几列。第二范式首先是第一范式,另外包含两部分内容,一是表必须有一个主键;二是没有包含在主键中的列必须完全依赖于主键,而不能只依赖于主键的一部分。第三范式(3NF),是指所设计的关系首先是第二范式(2NF),另外非主键列必须直接依赖于主键,不能存在传递依赖。符合第三范式要求的关系可以在一定程度上解决第二范式关系中存在的插入异常、删除异常、数据冗余度大、修改复杂等问题。图 1 为底层数据库设计 E-R 图的一个局部。

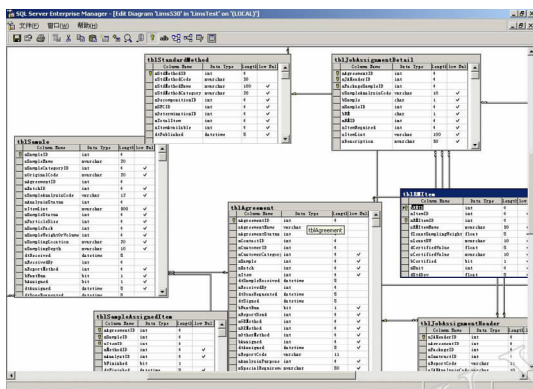


图 1 数据库 E-R 图(局部)

Fig. 1 A part of LIMS database E-R graph

4 软件开发与功能实现

4.1 软件开发

本信息系统设计、开发与实施过程中采取了分级开发、分步实施、逐步整合的开发策略。在系统开发的最初阶段,首先根据中心对信息系统的总体要求和全局设计,确定了底层数据库的结构。底层数据库主体结构设计冻结后,再开始各个功能模块的软件开发过程,可避免因数据库结构变化对整体开发的影响。

4.2 系统功能模块

本系统功能实现了对整个检测业务流程的管理外,还对 LIMS 系统中积累的数据提供了多种数据挖掘的工具,可为领导层决策提供信息支撑。

系统实现的各项功能简介如下。

4.2.1 客户管理

建立了以委托送样单位为核心的客户关系管理系统。对客户单位进行分类管理,客户之间可以存在多级隶属与上下级关系,能够很好地管理客户单位与下

属部门、客户单位内部多个人员的信息。

4.2.2 合同管理与样品登记

客户委托国家地质实验测试中心检测样品的事件定义为一项样品检测合同。检测合同的基本内容由委托单位、送样人、样品信息、检测元素(项目)、检测要求、送样日期、合同金额、约定完成日期等要素组成(图 2)。本管理信息系统的所有事务处理过程都围绕着对合同的登记、修改、批准、编码、审核、分配、作业管理、检测、数据处理、质量控制、结果报告、抱怨处理等一系列事务处理过程来展开。不同角色的人员负责处理上述事务链中的特定事务,在各方的协作下完成整个事务处理过程。根据事务处理进展的不同阶段,赋予合同不同的状态,据此可对合同执行的过程及关键节点进行查询、跟踪与监控。

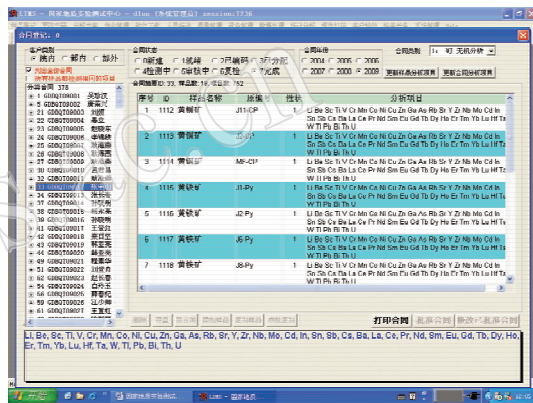


图 2 合同样品管理

Fig. 2 Contract and sample management

4.2.3 合同样品编码

是对用户委托的待检测样品实施质量控制措施的处理过程,编码表的内容是在客户原样品序列的基础上随机插入一定比例的余份样品和与送检样品基体相似的标准物质样品,以便对检测数据的质量进行监控,保障检测结果准确可靠(图 3)。

4.2.4 制定样品分析方案

针对客户的样品和检测项目,根据实验室的检测能力、仪器设备及人员技术情况,按照一定的技术规范要求,对检测项目进行合理划分,制定科学合理的分析方案。分析人员按照制定的方案进行样品检测,提供检测数据。检测方案的制定过程由技术负责人从标准方法数据库中选择合适的方法自动匹配客户要求的检测元素。因此制定完成检测方案的同时也确定了检测人员应采取的技术规范和质量要求(图 4)。



图 3 样品编码的处理

Fig. 3 Interface for inserting quality control samples



图 4 制定检测方案

Fig. 4 Interface for analysis plan

4.2.5 任务分配与作业管理

任务分配:是根据样品分析方案的要求,结合分析人员技术水平和工作量负荷的情况合理分配任务,保障检测任务在规定的时限内完成。

作业管理:是分析人员对分配给自己的检测任务进行作业准备、作业称样、仪器预约、查询、统计、数据处理、提交数据等工作进行合理分配与管理,在规定的时限内完成分配的任务(图 5)。

货币工作量:是分析人员完成的检测任务以货币工作量形式的统计数据。例如,一个 10 万元的合同由 5 个检测人员合作完成,则根据每个检测人员所完成检测项目的数量及难易程度将 10 万元货币工作量在 5 个检测人员之间进行分配,5 个检测人员货币工作量之和为 10 万元。

指数与绩效:综合考虑了单位的绩效工资分配政

策,所完成检测任务的技术难度、数据质量以及提交数据的及时率等因素对分析人员完成的检测任务以指数及绩效形式的统计数据。一旦确定了相应的政策,可按月或季度落实各项绩效的统计与分配(图 6)。

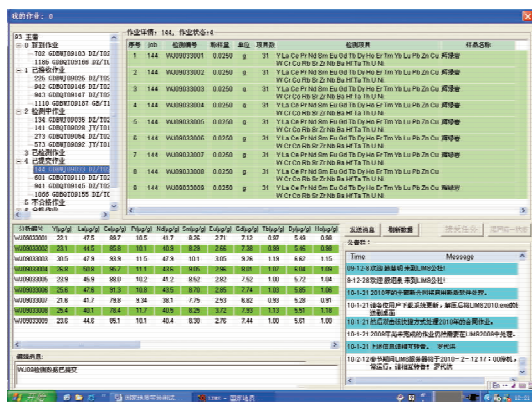


图 5 我的作业管理

Fig. 5 MyJob interface



图 6 检测人员工作量统计

Fig. 6 Statistics for analyst work load

4.2.6 数据质量管理

质量管理:对分析人员提交的检测结果,根据当初插入的重份样品和标准物质样品信息并对相应检测的结果进行比较后,对检测数据的质量进行科学评估的过程。满足质量控制要求的检测结果作为正式报告提交合同委托人(图 7)。

标准物质数据研究:对系统中自动采集的全部标准物质及分析项目(元素)数据进行挖掘与分析,可以获得标准物质实际检测数据的分布模式与偏差,对数据质量进行管理(图 8)。这些数据还值得进一步深入研究。



图 7 质量管理

Fig. 7 Data quality management

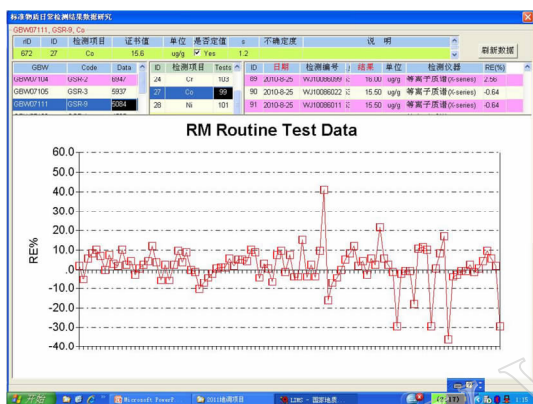


图 8 标准物质数据统计

Fig. 8 Statistics of routine analysis results of reference materials

4.2.7 报表生成与文档管理

系统针对性地开发了处理程序对检测过程中产生的各类原始数据或经过处理的文件资源进行系统化的数据库管理。这些文件包括从检测仪器得到的原始数据、标准曲线、检测结果质量控制数据、正式检测报告等(图 9)。

4.2.8 数据统计与市场分析工具

开发了丰富的数据统计与分析工具,对 LIMS 系统中保存的各类数据进行统计与分析。使用这些工具可以对合同的执行过程与进度、检测人员完成的工作量、中心重要客户、合同执行的及时率、完成合同金额等情况及时掌握,为领导决策提供数据支持。如客户送样统计见图 10。

4.2.9 运行日志与系统管理

日志管理:系统对所有用户每次登录进行的操作都进行了日志管理。日志信息对于系统管理员分析用户使用习惯,进行数据库维护非常重要。当发现危害

系统安全的问题后可以根据需要锁定相应的用户以及特定的客户端主机。

客户端软件更新:本系统专门开发了处理程序可以自动监测客户端主机所运行 LIMS 软件的版本,并提醒用户及时更新系统。

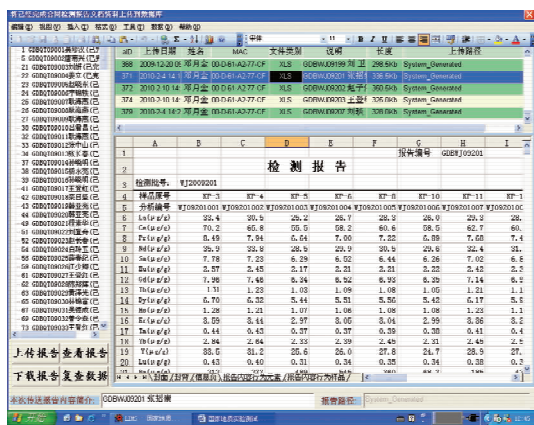


图 9 检测报告等文件管理

Fig. 9 Document management

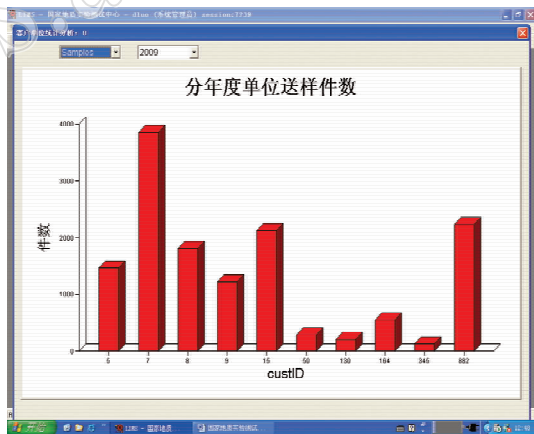


图 10 客户送样统计

Fig. 10 Statistics for customer samples

5 用户培训

用户培训是 LIMS 系统实施成功的关键,随着系统开发过程的逐步完成,开发人员编辑了近 200 页的用户手册^[14]。在 LIMS 系统的开发实施过程中对各级用户进行系统培训,收集用户在使用过程中遇到的问题,根据用户提出的合理建议对系统进行适当的调整和修改,满足多数用户的使用习惯,提升系统对用户的亲和力。

6 结语

国家地质实验测试中心在 LIMS 研究、开发及应用领域多年的实践经验表明,LIMS 系统的部署实施是一项非常复杂的系统工程。早期 LIMS 的开发与探索对系统的复杂程度估计不足,与实验室管理部门和分析测试人员沟通协调不够,没有重视用户培训工作。LIMS 系统的实施不只是简单的网络硬件设施的部署与软件安装,通过 LIMS 系统的实施过程,清理、规范以前不严密的编码规则与不合理的工作流程也是十分重要的。LIMS 的实施过程也应该是实验室管理工作从粗放的管理走向科学化、信息化、合理化、规范化管理的过程。

在地质分析的质量保障过程中,选择合适的标准物质与检测方法是关键的步骤,国家地质实验测试中心开发的 LIMS 系统中丰富的标准物质数据库与标准方法数据库为这一关键步骤提供了重要信息支撑。使用 LIMS 管理检测流程可以强化所有上述关注的问题并在系统中设置检查节点,对质量控制的内容和实施过程进行审核,以规范检测实验室中的日常工作。

在底层数据库设计时应充分考虑实验室将来的发展以及对 LIMS 数据的长远需求,合理的底层数据库设计可以为日后对数据的深度挖掘提供便利,为各级管理部门提供决策信息和多种统计数据的支持。

LIMS 的实施是一个长期复杂的过程,建议应给予实质性的重视,需要专业人员长期对系统进行日常维护和功能开发。

致谢:国家地质实验测试中心 LIMS 的成功实施凝聚了中心计算机应用开发人员、管理人员、分析测试人员和质量体系人员的辛勤劳动,是各部门协作的成果。作者向关心 LIMS 开发应用并在开发实施过程中提出宝贵意见的全体人员表示衷心的感谢。

7 参考文献

- [1] 夏梁. LIMS 在产品质量分析化验领域的应用[J]. 现代仪器,2002(2):49-51.
- [2] 武敬,杨建华. 实验室信息管理系统初探[J]. 资源环境与工程,2004,18(3):68-73.
- [3] 张宏鹤,陶美娟,徐胜祥,鄢国强. LIMS 系统在实验室规范运作中的应用[J]. 理化检验:化学分册,2006,42(6):493-498.
- [4] 杨海鹰. 基于 LIMS 平台的应用技术探讨[J]. 现代科学仪器,2006,6(12):12-16.
- [5] 沈艺. 环境监测实验室信息管理系统的构建与实施[J]. 环境监测管理和技术,2006,18(4):4-6.
- [6] 王合生. 环境监测信息化建设分析——走中国式环境监测信息化建设道路[J]. 环境监测管理和技术,2006,18(5):1-31.
- [7] 王向明,伏晴艳,刘红,谢争. 环境监测实验室信息管理系统建设——以上海市环境监测中心为例[J]. 环境监测管理和技术,2007,19(4):4-8.
- [8] 李华,冉云成. 地质调查实验室信息管理系统研究[J]. 资源环境与工程,2005,19(2):127-132.
- [9] 李春雷. 地质实验信息系统建设[J]. 综合管理,2007(6):78-81.
- [10] 张培新,周康民,高孝礼,胡英泉,王冰. 国土资源部南京矿产资源监督检测中心实验室信息管理系统简介[J]. 岩矿测试,2009,28(1):32-36.
- [11] ISO/IEC 17025—1999,实验室测试或校准能力通用要求[S].
- [12] DZ/T 0130—2006,地质矿产实验室测试质量管理规范[S].
- [13] 甘露,吴晓军,吴淑琪,罗代洪. 地质调查通用标准物质及标准方法信息系统[J]. 岩矿测试,2004,23(3):216-220.
- [14] 罗代洪. 国家地质实验测试中心实验室管理信息系统用户手册[Z]. 2009.