

文章编号: 0254-5357(2009)01-0032-05

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

张培新^{1,2}, 周康民¹, 高考礼¹, 胡英泉¹, 王冰¹

(1. 国土资源部南京矿产资源监督检测中心, 江苏 南京 210018;

2. 东南大学化学化工学院, 江苏 南京 210018)

摘要: 简述了实验室信息管理系统(LIMS)的概念, 回顾了LIMS开发现状, 介绍了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的构架和实现方式, 具体陈述了系统的功能与特点。

关键词: 实验室信息管理系统; 计算机应用

中图分类号: G202; O213.1

文献标识码: B

A Brief Introduction of Laboratory Information Management System Used in Geoanalytical Laboratory

ZHANG Pei-xin^{1,2}, ZHOU Kang-min¹, GAO Xiao-li¹, HU Ying-quan¹, WANG Bing¹

(1. Nanjing Testing and Quality Supervision Center for Geological and Mineral Products,

The Ministry of Land and Resource, Nanjing 210018, China;

2. School of Chemistry and Chemical Engineering, Southeast University, Nanjing 210018, China)

Abstract: This article presented the concept of laboratory information management system (LIMS) and its development briefly. The emphasis was put on the introduction of the LIMS used in Nanjing Testing and Quality Supervision Center for Geological and Mineral Products, the Ministry of Land and Resource, including its frame construction, main functions and features, and its applications in the laboratory information management.

Key words: laboratory information management system (LIMS); computer application

实验室信息管理系统 LIMS (Laboratory Information Management System) 是根据实验室管理要求, 按照管理流程设计, 采用数据库技术, 通过计算机网络将实验室的分析仪器和计算机联接起来, 建立集分析测试、质量控制及实验室综合管理一体化、模块化的开放和柔性信息平台, 提供完善的质量保证体系, 实现检测数据的网络化共享、无纸化记录与办公、资源与成本管理和人员量化考核, 为实验室管理水平的整体提高和实验室全面管理提供先进的技术支持。简言之, LIMS 就是通过计算机对实验室的各种信息进行管理的计算机软、硬件系统^[1]。

国内其他系统的实验室信息系统应用较

多^[2-4], 对地矿系统实验室信息系统的开发有很好的借鉴作用。关于地矿实验室信息管理系统设计和开发的例子也有不少, 作用和功能各有千秋。甘露等^[5]建立了地质调查通用标准物质及标准方法信息系统; 李华等^[6]研究了地质调查实验室信息管理系统基本要素和功能; 李春雷^[7]通过油田分析化验流程及数据在计算机网络环境下的综合管理和应用, 进而达到分析化验资料的信息共享, 为油田勘探开发生产提供信息支持。由于地矿系统样品数量大、分析方法和质量监控的复杂性造成地矿实验室信息系统的研究难以达到实质性的应用。

国土资源部南京矿产资源监督检测中心(以下

收稿日期: 2008-03-01; 修订日期: 2008-06-20

作者简介: 张培新(1966-), 男, 江苏海门人, 高级工程师, 长期从事实验室信息管理系统开发应用及原子荧光光谱、等离子体质谱、X射线荧光光谱分析方法研究。E-mail: zpx198808@126.com。

简称检测中心)是集物理力学性能测试、化学测试和相关科研为一体的综合性实验室,目前已通过国家实验室认可、计量认证,也是江苏省无机新材料专业检测中心,为部级质检机构和省级重点检测实验室。近年来,本所承担了大量的实验测试工作,参加了多次国际能力验证,参与了许多国家标准物质的定值测定,完成了地质大调查中部分测试技术研究,同时也引进装备了具国际同步一流水平的分析仪器。工作内容极为繁杂,数据种类和数据量巨大,质量要求种类较多且规范各异,对质量监控提出的要求很高且极为严格,在同类实验室中很有代表性。

为适应新形势的要求,促进资源合理利用、质量体系的高效运行,检测中心根据地质实验特点,由长期从事分析测试工作专业人员与软件开发公司合作共同开发,更科学、更人性化地建立了以总工程师办公室为中心的行政、技术管理,涵盖岩矿鉴定、室内环境、岩土建材、化学光谱四大专业研究室,集行政管理、数据信息管理为一体、符合检测中心现行质量保证体系运行的 LIMS,实现资源的最优配置和质量体系的有效监控。目前化学部分经过运行验证能较好地满足实验室日常工作需要。

1 系统特点

本系统根据实验室认可要求,严格遵循 1999 年国际标准化组织和国际电工委员会发布的 ISO/IEC 17025—1999《实验室检测和校准能力的通用要求》^[8] 标准,以《质量手册》、《程序文件》、《地质矿产实验室测试质量管理规范》^[9] 为依据,实现了以质量管理为核心的实验室业务过程控制操作流程的全方位管理,有助于减少具体分析人员出错几率,帮助实验室质量管理人员从繁重而枯燥的数据处理中解脱出来,从而提高工作效率,促进实验室的发展。

系统可在 Windows 98 以上版本操作系统平台上运行,可以使用任何遵守 ODBC (Open DataBase Connectivity, 开放数据库互连) 标准的数据库,同时能与各种各样的第三方的设备、软件连接,使其能够与各种信息系统集成,使信息管理系统成为各级管理信息系统的一个组成部分。

采用图形用户界面 (GUI) 设计原则,界面直观,对用户透明,用户接触软件后对界面上对应的功能一目了然。该系统将不同分析仪器获得的分析测试数据根据客户规定的要求自动输入到信息管理系统中,当仪器本身带 PC 工作站或能够互联时,可采用开放式的数据接口技术与信息管理系统进行数据通信,尤其是天平的联机,大大减轻了分析人员的工作量和出错几率。

客户端登录时,系统能自动检查本地程序是否过期,自动更新应用程序,通过登录密码、权限分配实现数据的安全可靠,系统日志提供数据库运行状况,支持完善的电子签名功能。

2 系统的实现

2.1 硬件体系实现

系统运行的硬件基础平台是单位的计算机局域网,采用快速以太网结构,遵从 CSMA/CD 总线传输方式,帧格式采用 IEEE 802.3 协议,工作站计算机及其他网络设备的连接采用星型拓扑结构,传输介质为双绞线,一楼层一交换机,实现千兆到楼层,百兆到桌面,将所有的计算机、服务器、网络打印机等设备都连接到交换机上。通过子网划分及交换机程序设计实现点对点的连接,有效地减少网络故障的几率,提高了故障检测和网络维护能力。

2.2 软件体系结构设计

本系统是一个多层分布式应用系统,包括三层:数据层、业务逻辑层(中间层)、表示层。数据层存储系统核心数据;业务逻辑层(中间层)作为系统软件结构的核心层,处理各类接入的业务逻辑处理请求,实现复杂的逻辑计算;表示层通过客户的界面、会话或逻辑的表述,依靠于业务逻辑层的业务逻辑访问后台数据层的服务。表示层的实现是驻留在工作站上的客户端应用程序,其实现的功能是获取用户的交互数据,并显示处理数据结果和实现部分业务逻辑。系统的数据层实现采用 Windows Server 2003、Sql Server 2000、C/S 体系结构。

2.3 后台数据库结构设计

数据库建设是硬件、软件和技术与管理的结合,三分技术,七分管理,十二分基础数据。由于地矿实验室信息管理系统要存储的数据量巨大,因此对数据的存储和检索速度要求较高。

本系统采用规范、简洁、结构明晰的数据库结构设计模型,较大限度地减少数据冗余,提高数据库存储效率,保证数据的完整性和可扩展性;通过优化数据查询技术,显著提高数据查询速度。

3 系统功能描述

下面通过介绍系统基础库和管理办、科室、个人实际功能,说明系统特点。

3.1 系统管理

为实现实验室人、机、料、法、环要素有机管理,本系统主要设立以下基础库。

角色及权限分配:建立详细的人事档案。根据程序文件设立岗位角色,根据角色设定个人使用权限。

限,登录必须使用个人设定密码确保数据安全性。

流水号设定:设定委托单编号、分析编号、原始记录编号等约定规则,可方便地进行编号设定。编号规则是否科学直接关系到系统运行的质量。本系统采用身份验证方法进行编号,看到编号就可知样品的大体情况,批与批之间相互独立,可随时补充样品和增加分析项目。

分析项目信息:包括项目编号、项目名称、英文名称、质量数、价态等参数设定。

标准物质信息:系统现有包括土壤、水系沉积物、岩石、非金属矿、金属矿、合金等常用国家、行业标准物质的项目、含量信息、标准偏差,使用中不断增加,可在库里进行增删,也可通过其他格式文件导入方式进行更新。

客户登记:记录单位名称、联系人、电话、传真、地址、邮编、EMAIL等信息。在客户首次办理委托时登记,下次委托任务时可直接调出客户信息,减少重复输入。可定期进行筛选统计、查询。

设备台账:对实验室设备进行分类登记,对要鉴定仪器进行适时提醒。

标准溶液配制记录:供配制标准溶液时登记,提供标准溶液配制台账。

质量统计参数:为分析质量报告生成提供计算参数;设定数据修约规则。

报表格式设定:对委托报告、任务通知单、样品加工单、原始记录报告、编号标签、发送报告等进行在线编辑,方便定制开发,便于推广。系统的质量报告已涵盖了目前中国地质调查局相关的技术质量规范及原地矿实验室的质量管理规范,可快速、准确地进行相关质量控制的判别。系统原始记录包括了比色法、容量法、重量法、原子吸收光谱法、原子发射光谱法、极谱法、原子荧光光谱法等单元素模板,等离子体发射光谱法(ICP-AES)、等离子体质谱法(ICP-MS)、X射线荧光光谱法(XRF)等多元素模板及气相色谱/质谱法(GC/MS)、液相色谱法(LC)、高压液相色谱法(HPLC)等有机分析原始记录报告。报告实现了上下角标等特殊符号显示。系统管理员可根据需要随时添加各种报告格式(见图1)。

方法标准建立:通过方法编号、方法和规程名称、检测项目、适用样品类型、检测含量范围、检出限、发布日期、使用的原始记录格式、标准电子文档链接等字段,建立了水质、土壤、岩石、矿产、煤、合金、有机污染物等几千个日常分析使用的绝大多数标准方法。可在标准库中进行修改,也可通过其他格式文件导入方式进行更新。标准方法库见图2。

培训管理:对员工参与的岗位培训记录,提供上岗证。

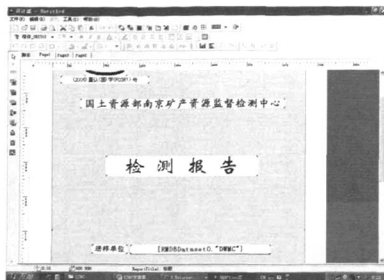


图1 报告格式的编制

Fig. 1 Compilation of the report format



图2 标准方法库的建立

Fig. 2 Database of standard methods

3.2 质量管理办公室的管理

委托任务管理:包括预约与委托,完整记录委托样品信息和客户的要求。

样品编号设定:根据来样要求和质量管理办法插入内部监控样、外部监控样、内检样,实行总体规律和局部微调方式便捷完成编号工作(见图3)。由于不同分析项目可能采用不同标样,本系统实现了同一编号表示多个标样,生成质量报告时进行自动识别后统计质量参数;对有机分析样品根据要求进行现场空白、现场加标等标记,以便生成质量报告。

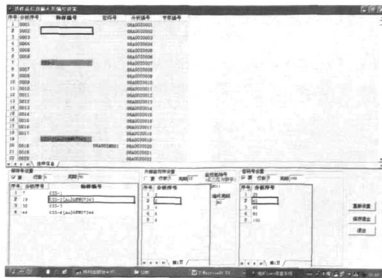


图3 样品编号设定

Fig. 3 Enactting of sample symbol number

分析方法设定:可通过样品名称、分析项目、标准方法等标准方法字段方便地找到合适的分析方法(见图4),实现原始记录与标准方法的一一对应;对常用的分析方法打包成配套方案,在设定分析方法时只需选定配套方案即可,大大减少方法设定时间。



图4 分析方法选取

Fig. 4 Employing of analytical methods

科室任务下达:对科室任务进行未下达、部分下达、全部下达、已完成等状态分类;对第二天前需完成的任务在系统中所有环节都用红色警示。

分析数据质量报告:对科室提交数据进行单批次或多批次质量数据统计;对不符合质量要求的统计数据用特殊颜色显示,质量监控数据可以以表格或图表显示(见图5)打印,也可输出到 Excel 中发送至客户电子信箱;将分析数据按一定规则筛选出异常数据;同时生成不符合项复验单和数据异常单后直接进行任务下达。

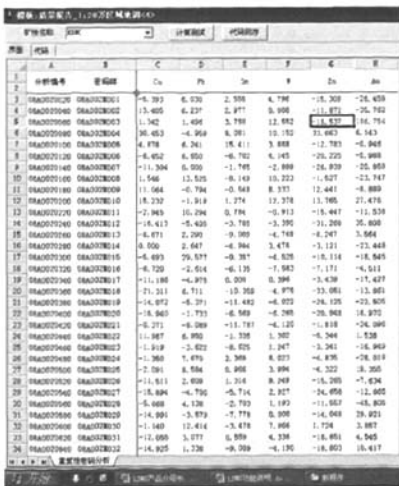


图5 分析数据质量报告生成

Fig. 5 Creation of analytical data quality control report

分析报告打印:对已完成的报告通过设定每页打印样品数和项目数,智能实现报告打印(见图6)。可根据样品数和项目数的多少自动折行、折列、页眉、页脚等设定。

委托信息查询:便于进行收费状况、任务下达状况、完成状况等信息查询。



图6 检测报告打印

Fig. 6 Printing of analytical report

3.3 科室的管理

任务信息:对管理办公室下达任务通过已下达、未下达、部分下达等信息提示对任务一目了然。

个人任务下达:可进行单批次或多批次任务安排(见图7);可根据样品情况重新选择合适的方法,尤其是对第一次分析后发现原先分析方法不适用必须重新安排分析时更方便;可自由地进行项目和样品的选取以下达至个人;对分析人员相对固定的分析方法建立任务下达模板,只需选取模板就可进行任务下达。



图7 个人工作任务的下达

Fig. 7 Assignment of individual work

原始记录审核:对个人提交的原始记录进行质量审核,不通过的予以退回并说明原因,通过的才能提交给质量管理办公室。

个人工作量统计:进行提交未审核、提交审核通过、提交审核未通过状态设定,便于新工作任务的下达和定期进行个人工作量统计。

数据审核:对同一样品同一项目两个以上分析结果进行取舍,清楚地显示不同分析方法差异。

科室质量报告:对分析结果进行权限范围内的质量报告生成。

3.4 个人的管理

个人工作安排:通过样品数量和分析项目设定,实现单批或多批空白原始记录生成(见图8)。



图8 个人原始记录生成

Fig. 8 Creation of individual original records

原始记录完成:可通过已提交、未提交、批号、项目名等属性查询原始记录;设置重新计算、数据保存、报告提交等功能,一旦提交将不能修改;第二天前需完成的报告和退回报告用特殊颜色警示;可插入自带管理样且进行自带管理样和双份分析质量统计;实现测定形式到目标形式、测定单位到目标单位的自动转化;实现有效数字的自动修约;称样可以采用天平连机读取,仪器等信息尽量采用数据库读取选用方式;曲线拟合图形化(最多拟合6次方);对仪器分析通过约定的规则进行数据导入,可以存储图形信息;有机物分析报告不但体现多样品多项目多参数结果,而且可导入谱图。

3.5 常用工具

为了方便使用人员,本软件提供了一些常用工具,包括标准样品查询,分析项目价态、质量数及转换系数查询,分析方法查询,实验室通告,任务安排警示等功能,还可以根据要求进行添加。

4 运行效果

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由专业测试人员与南京本地软件公司共同开发,其特点是在严格遵循 ISO/IEC 17025—1999^[8]的准则下完全符合地矿实验室的传统运行,历经三年的开发在运行过程中不断完善,以使功能更全面,操作更人性化。由于软件框架如积木型,可根据单位要求进行定制。从国土资源部南京矿产资源监督检测中心运行本软件后的工作情况来看,程序文件执行更规范化,质量管理高效、严格,数据处理传输更安全,报告生成更快、更准确,真正提高了实验室日常行政和质量技术管理水平。

5 参考文献

- [1] 田中琳. 浅谈实验室信息管理[J]. 科技情报开发与经济, 2003, 13(5): 37-38.
- [2] 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.
- [3] 化验室信息管理 LIMS 系统[J]. 有色金属分析通讯, 2003(2): 34-37.
- [4] 曾曦梅, 何丽梅, 施国君. 实验室信息管理系统(LIMS)的设计思路及特点[J]. 沈阳医学院学报, 2004, 6(2): 105-106.
- [5] 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.
- [6] 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.
- [7] 李春雷. 地质实验信息系统建设[J]. 综合管理, 2007(6): 78-81.
- [8] ISO/IEC 17025—1999, 实验室测试或校准能力通用要求[S].
- [9] DZ/T 0130—2006, 地质矿产实验室测试质量管理规范[S].