

科学数据管理系统在进出境检验检疫工作中的应用

韩深¹ 刘岩¹ 冯骞¹ 刘博亚² 刘萤^{1*}

(¹北京出入境检验检疫局 北京 100026; ²沃特世(科技)上海有限公司 上海 201203)

摘要

本文重点阐述了SDMS科学数据管理系统在出入境检验检疫工作中的应用，以实验室数据管理过程中的重要结点为研究对象，比较了传统数据管理方式和SDMS科学数据管理系统各自的特点及优势，并通过研究和引进对接，建立了适用于实验室检验检疫的数据管理系统。该系统将实验室分析仪器与数据库对接，使仪器生成的原始数据能够在线的上传到服务器中并保存，避免了原始数据的丢失和被修改，同时，通过数据管理系统可以方便地对检测报告进行调阅，大大提高了各级审核的效率。利用SDMS科学数据管理系统与实验室LIMS系统、财务预算管理系统、试剂耗材管理系统、CIQ2000等系统进行对接，搭建了实验室数据交互平台，实现了现代实验室数据科学、高效、安全、便捷的管理模式。

关键词

检验检疫
科学数据管理
信息交互平台

引言

近年来，随着我国综合国力的日渐增强，我国进出口贸易量剧增，以2008年为例，只北京检验检疫局全年就接受23万余批次出入境货物的检验检疫，货值达到约192万美元，并且这两年以每年以6%-10%的速度递增。这些受检样品被送到技术中心的各个实验室进行检验，经过前处理后由色谱、光谱、质谱等大型仪器进行检测。这些大型设备每时每刻都在生成数据，如何能够科学高效的将这些海量原始数据及检测报告进行收集、处理、分析、整理、分类归档、查阅，并符合ISO17025《检测和校准实验室能力的通用要求》中的相关规定，不使其成为实验工作的新瓶颈，成为了现代大型综合实验室值得研究和关注的问题。

实验室科学数据管理系统（SDMS） 在实验室数据管理中的意义

科学高效的管理数据对于出入境检验检疫系统的实验室尤为重要，作为具有法定检验仲裁权利的官方实验室，出具的检测报告为国家和政府决策提供了直接或间接的依据，为了保证准确无误，就要求每一个原始数据都必须经过严格的判定，每一份检测报告都必须经过严格的审核，它们的安全性、可靠性和真实性必须得到保证，不同级别的审核人员根据权限能够随时调阅查看任意一份报告和它所对应的原始数据，对检测结果进行把握。

采用传统的数据管理方式存在很多弊端，如数据处理受仪器场地的限制、人工数据传递方式效率和安全性较低、数据查询统计困难等。采用SDMS数据管理系统能有效地解决这些问题，从根本上提高这些重要数据的安全性和可追溯性，保证了判定结果的有效性和真实性。因此，建立科学、高效、安全、便捷的实验室数据管理系统是十分必要的，这也是现代实验室数据管理发展的必然趋势。

科学数据管理系统的主要功能及 在检验检疫工作中的主要用途

Waters NuGenesis SDMS是一套由沃特世(Waters[®])公司开发研制的实验室科学数据管理系统，是进行实验室数据管理的信息系统，它为科学信息的管理提供了一个平台。SDMS作为一个数据管理平台，可以时时的将各种不同厂家、不同型号的仪器、研究人员以及任何其它来源的数据自动地采集到这个平台中，同时对这些数据进行索引信息的采集和分类。按照权限的划分，采集到平台中的信息可以在实验室工作人员以及合作伙伴间进行共享和交流，在较低费用和风险的情况下极大的提高工作效率。

目前,该系统在国内外应用比较普遍,一些医院、食品企业、制药公司、科研院所等研发机构或实验室均已采用该系统,如包括美国梅奥医学中心等相关检验室、美国药典医药标准物质研发公司、可口可乐公司、江苏省中医院、中科院大连化物所、罗氏制药研发部门等相关实验室。北京出入境检验检疫局技术中心食品检测实验室已安装了该套系统,结合本实验室自身特点,将该套系统进行了本地化,建立了适用于出入境检验检疫工作模式的实验室科学数据管理系统及规范。Waters NuGenesis SDMS科学数据管理系统为实验室提供了对所有数据和文件进行管理的平台,是其它信息系统运行的基础和核心,保证了数据和文件的管理完全符合国际上最严格的法规要求。整套系统中最关键的部分就是数据管理部分,它包括数据采集、数据分类、数据存储、数据审阅、数据再利用、数据分享等部分,下面将一一阐述。

2.1 数据采集

现代大型综合实验室中最常用到的分析技术通常由光谱分析、色谱分析、质谱分析、生化分析和常规化学分析几大类,所用到的大型仪器包括气相色谱、液相色谱、离子色谱、红外光谱、紫外光谱、原子吸收、原子荧光、荧光PCR、ICP、ICP-MS、气液质联用仪、电子显微镜、全自动生化分析仪等,由于这些仪器分散在不同实验室内,实验人员进行操作和数据采集就比较麻烦,且这些软件往往独立工作,互相之间只能通过人工的方式进行信息交流,费时费力,同时差错率也比较高。这时,就需要一个统一的能够进行数据信息交流的平台。采用SDMS系统可以很好地解决这个问题,通过网络传输的形式,将不同种类仪器产生的数据全自动时时采集到专门服务器上,无需分析人员的干预,充分保证了数据的安全性和溯源性,不再有数据丢失和转移时产生错误的情况发生。此外,系统对不同厂家和型号的仪器都具有良好的兼容性,能够轻松与化学工作站进行对接和访问,保证了数据采集的畅通。

2.2 数据分类、存储和审阅

进出境商品在得到合格的检验报告后才能通行,但这并不意味着该动作的终结,入境商品还要接受后市场的监管,而出境商品将准备接受进口国的检验,这就要求我们对检验报告和检测的原始数据进行严格的管理,如何将大量的数据进行合理的分类,保证存储数据的安全,并做到方便快捷的调用数据,成为了官方实验室越来越关注的问题。

SDMS将数据采集到服务器上以后,首先由Oracle数据库进行拆分和整合,同时会根据预先设定的要求对数据建立索引,索引关键词最多可达75个。通过这些丰富的索引条件,可以非常方便、迅速的查找到所需要数据,彻底杜绝数据难以查找等问题。即使是多年以前的数据也可以轻松找到,大大提升了实验室数据索引的效率和准确性。

当检测结果接近临界值的时候,有时需要对数据谱图进行对比,如果是不同仪器产生的数据,对比起来就比较麻烦了,只有把谱图打印出来进行对比,但如这样操作,纸张的大小、排版的不同等都有可能会影响最终的判断产生影响。SDMS的数据审阅功能帮我们解决了这一问题,数据一旦采集进入系统,就可以在SDMS中独立于产生数据的源程序进行数据的审阅和处理,不再需要源程序的支持,所有收集到数据都是矢量数据。同时在系统内还可以同时审阅不同来源的数据,对数据进行横向比较。

2.3 数据分享和再利用

通过方便的数据查找和定位功能,我们可以充分利用这些数据,对一组相关数据进行统计分析,或者和其它系统进行整合利用这些数据。我实验室定期将检测结果和报告进行梳理,对不合格报告和数据进行汇综合分析,有了SDMS的帮助,就可以在很短的时间内处理好花了几个月,甚至几年才能完成的汇总工作。此外,由于是用一个系统来完成所有数据的整合和管理工作,所以通过设置不同的权限,各个实验室之间也可以进行数据共享,有权限的人员可以即时浏览到分析人员产生的数据,对这些数据进行审阅。

信息交互平台的建立和SDMS 系统与实验室的对接

信息的互通与快速传递在实施检验检疫工作中具有非常重要的地位,SDMS作为连接各种仪器(数据源)与LIMS、ELN和各种分析软件、数据等系统(数据消费者)之间的交互的平台,可以独立于原程序进行数据的审阅和信息的提取。

我实验室应用局域网互联方式,在仪器—数据源服务器—用户终端之间建立了一条信息传递通道,如图1所示。仪器设备安装在指定的实验室内,当生成数据以

后，每两小时系统会对这些数据进行扫描和标记，将系统标记的“新数据”传输到数据源服务器上，由数据库软件进行拆分和整理，存储在指定路径下。实验人员可在装有软件的终端上浏览和处理原始数据并生成结果报告，同时将结果报告输出或上传到数据源服务器上。与此同时，各级审核人员、授权签字人员及实验室主任可以在线审阅报告，并以电子签名的方式进行审核确认。信息交互平台的建立不但解决了多人不能同时使用同一仪器进行处理数据的问题，而且也为直观、方便、准确、高效的报告审核提供了基础。

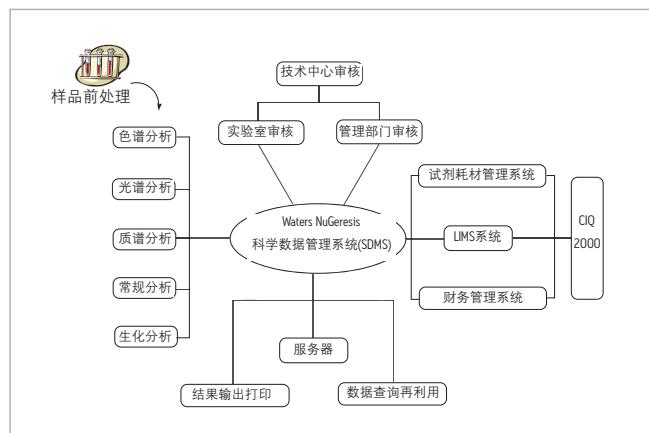


图1 实验室信息交互平台。

与传统方式相比科学数据管理系统所带来的突破

在日常检验工作中，每天都需要对产生的大量数据进行管理，传统的数据管理方式存在很多弊端，如数据处理受仪器场地的限制、人工数据传递方式效率和安全性较低、数据查询统计困难等，采用SDMS系统可有效的解决上述问题，提高工作效率和数据的安全性。下表列举了在一些实验室数据管理的关键点上，传统方式与SDMS的操作特点和优势比较。

数据管理关键点	传统数据管理	SDMS系统	优势比较
数据生成和存储	数据源由各个仪器独立生成并保存在仪器内	服务器提取所有仪器的数据并进行拆分、整合	数据更安全、可靠，且为后续的查询提供了基础
数据处理	同一时间内只允许一名实验员进行数据处理	同一时间内所有实验员在各自终端上处理数据，互不影响	大大提高了数据处理的效率
结果审核	调用纸质原始谱图进行结果审核，无法方便的浏览原始数据	在终端上直接调用原始谱图，进行多谱图对照，可以调用原始数据	可清晰的对谱图进行对照，并且可以调用原始数据重新进行计算，确保了结果的准确性
查询	档案室调阅纸质原始记录	利用搜索引擎，输入关键词进行检索，可直接将带有关键词的报告和数据调出	检索效率数倍提高，特别是间隔时间较长的报告和数据，查询方便
与其他系统的对接	人工传递方式	实现了与LIMS、财务管理、试剂耗材管理等多个系统的对接	与LIMS系统派发的任务建立连接，以样品编号为整个流程的唯一关键词，减少了人为错误的发生，在一定程度上节省了传递时间
			与试剂耗材管理系统的对接，可将每个数据与其所需要的实验室资源建立连接，为更科学更系统的控制实验成本提供了直接的数据基础 与财务管理系统的连接为整个技术中心的预算和支出提供了数字依据
数据安全性	人工存档、调用和审批签字	权限管理和电子签名审批	通过设置不同权限来控制对数据的调用，增强了数据的安全性和调用数据的可追溯性。此外电子签名功能实现了电子化批准流程

表1 传统方式与SDMS操作特点及对比。

通过比较我们不难看出，采用科学的数据管理方式不仅从各个环节都降低了数据管理中出错的几率，同时也使得工作效率有了提高，不仅如此，科学的数据管理还增加了数据资源的可利用性，提高了基础数据的价值，同时也进一步为实验室的信息化建设奠定了基础。

结论

随着经济的飞速发展，进出口商品量逐年上升，为了更好地满足进出口产品的检验检疫需求，除装备必要的大型设备外，为保证检验结果的准确性，必须建立起科学完备的实验室数据管理体系，以应对大量样品数据的综合统计分析、数据审核和超标数据监测等工作，同时也要对实验室成本进行科学的把控，从根本上提高实验室的现代化管理水平，使检验检疫实验室信息化建设与国际接轨，为进出口产品质量提供更科学、更可靠的保障。

参考文献

- [1] 田立军,丁楠.实验室信息管理数据库备份与恢复策略[J] 信息化研究,2010,36(11):8-11.
- [2] 王雪,王惟远.实验室信息管理系统的研究与应用[J] 实验室科,2010.13(4):143-145
- [3] 巫志峰,曾星. 科学数据管理系统在实验数据管理中的应用[J] 现代医院, 2010.10(6):147-148
- [4] 岳剑波.信息管理基础[M] 北京:清华大学出版社,1999.