

# 科学数据管理系统在检验检疫实验室 可追溯方面的应用

程 甲, 畅晓晖\*, 韩 深, 孙晓东

(北京出入境检验检疫局, 北京 100026)

**摘 要:** 检验检疫实验室日常检测工作中, 每天都会产生大量的实验数据。这些数据纷繁复杂不便于实验人员进行管理, 因此对相关数据进行追溯更为困难。本文严格按照 ISO/IEC 17025《检测和校准实验室能力的通用要求》中相关可追溯条款的要求, 通过建立科学数据管理系统实现对实验室的人员、设备、样品、方法和环境的实时可追溯, 满足了实验室对实验产生及日常管理所有涉及到数据的有效管理。同时通过搭建科学数据管理系统进行实验室相关的数据包括大型仪器设备产生的实验数据的收集、整理、管理和应用, 建立起适合具体实验室实际操作的严格的数据管理机制, 实现了科学数据管理系统的本土化; 最终严格按照 ISO/IEC 17025 的要求, 实现了实验室数据的可追溯及实验室数据方便、快捷、可靠的管理。

**关键词:** 科学数据管理系统; 数据管理; 可追溯性

## Application of scientific data management system in the traceability in inspection and quarantine laboratories

CHENG Jia, CHANG Xiao-Hui\*, HAN Shen, SUN Xiao-Dong

(Beijing Entry-Exit Inspection and Quarantine Bureau, Beijing 100026, China)

**ABSTRACT:** Daily work of inspection and quarantine laboratories will produce a large amount of data every day. These data are various and complex, and not convenient for experimental personnel management, thus the relevant data tracing appears much difficult. According to the requirements of ISO/IEC 17025, this paper could be traced back to the laboratory personnel, equipment, samples, methods and environment by establishing scientific data management system, which met the laboratory test generation and daily management. At the same time, through the construction of scientific data management system to carry out the laboratory related data including large-scale instruments and equipment, the experimental data collection, collation, management and application, a strict data management mechanism for specific laboratory practice was established to achieve the localization of scientific data management system. In the end, according to the requirement of ISO/IEC 17025, the laboratory data could be traced back, and achieve convenient, fast and reliable management of laboratory data.

**KEY WORDS:** scientific data management system; data management; traceability

基金项目: 北京出入境检验检疫局科研项目(2013BK021)

**Fund:** Supported by Research Foundation of Beijing Entry-Exit Inspection and Quarantine Bureau (2013BK021)

\*通讯作者: 畅晓晖, 硕士, 工程师, 主要研究方向为食品安全检测。E-mail: changxh@bjciq.gov.cn

\*Corresponding author: CHANG Xiao-Hui, Engineer, Beijing Entry-Exit Inspection and Quarantine Bureau, No. 6, Tianshuiyuan Street, Chaoyang District, Beijing 100026, China. E-mail: changxh@bjciq.gov.cn

## 1 引言

科学数据管理系统(science data management system, SDMS)是一种功能强大的实验室数据管理软件,可以实现实验数据的采集、存储、分类和管理,不仅简化了程序,方便了管理,而且节省了大量人力、物力成本。目前,科学数据管理系统在国内外应用比较普遍,医院、制药公司、科研院所、食品企业及检测实验室都有使用该系统。在检验检疫实验室日常检测中,每天产生大量的数据,对这些数据的管理要符合相关标准、法规的要求。出具具有法律效力检测报告的实验室检测流程中的数据还有可追溯的要求,要经得起审查,数据的调取和使用要求及时、准确。实验室数据管理可以通过缜密的流程设计,通过搭建实验室科学数据管理系统来实现对所有涉及数据的有效管理、满足实验室工作可追溯的要求。

## 2 实验室工作可追溯性及其重要意义

### 2.1 实验室检测工作的可追溯性

实验室检测工作的可追溯性是指建立和保留涉及检测全过程的、并且能够尽可能追溯到检测原始状态的有效的、系统的证明文件<sup>[1]</sup>。按照 ISO/IEC17025《检测和校准实验室能力的通用要求》<sup>[2]</sup>(以下简称《通用要求》),将实验室日常检测划分为五个环节:人、机、料、法、环,即检测实验室的人员、设备、样品、方法和相关实验室环境<sup>[3]</sup>,这五个环节贯穿了整个检测过程。

一般检测实验室都会按照《通用要求》的要求对实验室的各个环节进行管理,同时,进行检测的实验室本身就是一个质量保证体系<sup>[4]</sup>。随着检测实验室日益市场化,对实验室的要求越来越高,许多实验室都在努力做到检测的每个环节都能可追溯,即检测人员的可追溯性、样品的可追溯性、检测过程及方法的可追溯性和检测环境的可追溯性。

### 2.2 实验室检测工作可追溯的重要意义

在《通用要求》中,有许多条款明确提到检测过程和检测结果的可追溯性要求。对检验检疫实验室来说,检测工作的可追溯性贯穿于实验室从取样(或接样)到出具具有法律效力结果报告的所有工作环节<sup>[5]</sup>,通过建立实验室检测工作的追溯体系,从上述五个环节保证其可追溯性。一方面,实验室管理者可以有效保证检测结果的质量;另一方面,这也是实验室向外部机构证明自身检测结果准确的有效方式<sup>[6]</sup>。

目前检测实验室大多承担第三方公正检测任务,检测实验室只有对所有的因素进行全面控制,才能保证检测报告的质量<sup>[7]</sup>,进而向社会提供准确的检测报告。这些因素中针对检测的可追溯性的控制往往被实验室管理者忽视

<sup>[8]</sup>。随着我国经济贸易的不断发展和法制的不断健全,实验室建立和完善检测全面可追溯性已迫在眉睫,各实验室应加强对可追溯性的认识,在允许的条件下,应尽可能地保留相关技术记录及资料,作为本实验室检测结果准确有效的可靠证据。

## 3 实验室检测可追溯性的传统方法及存在的问题

实验室检测的可追溯性是实验室质量管理体系的重要环节。在引进 SMDS 系统之前,要做到检测工作的可追溯是一项非常复杂的工作。主要体现在以下几个方面。

### 3.1 样品检测流程环节众多,数据不易收集保存

在检验检疫样品检测过程中,需要经过一线执法人员采样、送样,实验室工作人员接样、制样,多台实验设备检测样品,打印报告,登记结果,审核结果,拟证、出证等各个环节。每个环节由不同人员操作完成,各种环节都会产生大量的数据文件。而这些数据文件没有统一管理,或者以纸质储存在资料室里,或者分别存储在不同的电脑中,因各种原因极易丢失,尤其是纸质报告,存在消耗大量纸张资源、传递成本和周期高、不便保管、容易篡改、复印件字迹模糊等弊端<sup>[9]</sup>。

### 3.2 检测记录难以追溯

传统的实验室相关技术记录包括委托协议书、工作流程单、内部分包单、检测原始记录、设备使用记录、实验环境监控记录、标准品领用(配置)记录、试剂配制记录、检测报告以及必要时反映检测状态、过程和仪器设备使用情况的照片等。各种记录种类繁多,条目复杂,有时候随着检测手段的更新,相应的记录也会随之变化,而且纸质记录的保存也占据了大量空间,纸张本身的费用也很大。偶尔发生的设备故障引起的检测设备数据被不得不“擦去”,导致该设备所有数据的丢失。这些都是检测记录难以追溯的常见情形。

### 3.3 检测原始数据难以追溯

原始数据对于追溯过程意义重大,它可以还原检测的过程,说明检测结果形成的步骤,让检测结果更具有说服力。在样品检测过程中,会产生大量原始数据,这些数据是产生检测结果的基础,但并不会被系统地保存。有些记录会在检测仪器自带的电脑上保存一定时间,有的会在检测结束后立刻丢失。例如,在理化指标检测过程中生成的图谱,这是生成检测结果的直接依据,但只能在电脑中保存一段时间,在打印的检测报告中也不会体现。这导致在追溯原始数据时产生了巨大的困难。

### 3.4 检测责任难以追溯

在实验室质量管理体系文件中应明确规定报告拟制、更改、审核、签发人员的具体责任范围。这些相关人员应

具备所承担职责的上岗资质,确保主检、审核、签发人员能正确、有效地履行职责,确保这些人员的技术能力持续满足规定的要求。检测报告应由授权签字人签发,需要时还应有主检、复核人的签字。检测结果应按检测标准进行描述,描述的内容应完整、充分并与标准要求相对应,应使报告的复核、审核者通过检测结果的描述能够判断试验是否按标准规定完成、检测结果的合理性和判定的准确性。必要时,应附有照片及数据的支持。

### 3.5 流程管理软件中间环节的数据无法追溯

20世纪80年代,在SDMS产生之前,随着计算机软件在实验室管理领域的应用,相继开发了一些实验室应用程序软件,这些软件统称为实验室信息管理系统(laboratory information management system, LIMS)。可以说LIMS系统的产生对于实验室发展是一件具有非常重大意义的事件,实验室的各项数据都可以通过手工或自动获取的方式采集到信息系统中,可以通过网络方便地查询到相关的结果数据。然而,绝大部分LIMS系统的作用在于进行流程管理,往往对实验室中间环节产生的数据不予关注,实验室的样品分发后,经过检测的检测结果由检验员录入LIMS系统,或者按照一定的规则由LIMS系统自动把结果数据采集到系统中。后者由于实验过程或实验仪器设备操作的复杂性使得很多检测设备的结果数据不宜直接采集或无法采集,经过努力尝试绝大部分的LIMS系统只能放弃采集中间环节的数据,改用通过检测员把经过分析处理的结果输入LIMS系统。这显然造成检测中间环节数据如检测图谱等的缺失,需要查阅图谱时也就只能到相应检测仪器的附属电脑中查询。显然这种查询很不方便,不仅要搞清楚是哪台仪器做出的检测结果还要找到相应的附属电脑,如果遇到仪器故障需要重装计算机系统以及计算机病毒感染等情况很有可能造成相关数据永远的丢失。

在众多的检测环节中,每一个步骤都有出错的可能,而并非每一个步骤都有严格的签字记录,即使实验人员认真负责,在每个环节都严格记录,当发生问题时,要从成千上万份文件中找到当时的实验人员绝非容易的事情。

综上所述,在传统的实验室数据管理体系中,实现数据的可追溯是一项复杂而繁琐的工程,这影响了实验室质量安全体系的完整性。

## 4 SDMS在实验室检测工作可追溯性方面的应用

SDMS在实验室检测工作可追溯性方面的应用可以贯穿在检测过程的各个环节中,可以有效解决在传统实验室模式下可追溯手续繁琐,难以操作等问题<sup>[10]</sup>。

### 4.1 SDMS工作原理及其优点

#### 4.1.1 SDMS工作原理

SDMS软件是基于Oracle数据库的数据管理系统软

件。该软件内置的数据接口,可以兼容全球主流仪器设备厂商的设备和软件,通过简单的设置,即可按计划自动从不同设备和软件采集实验原始数据<sup>[11,12]</sup>。采集到的原始数据,在Oracle数据库内存储,并建立索引。通过索引关键词,可以非常方便、快捷的进行查询、归档等操作。通过SDMS软件客户端的UNIFY虚拟打印机,还可以将实验报告输出为电子格式,并自动存储在Oracle数据库内。授权人员可以通过Web方式浏览、查询、审批实验报告,加快报告流转和审批流程,减少纸质报告使用。SDMS软件还预留了ELN、LIMS和ERP等软件接口,可以随着实验室业务扩展和管理需求的扩大,将实验数据和实验报告用于更加广泛的业务和管理领域。

#### 4.1.2 SDMS优点

(1)数据采集方面:SDMS通过特有的专利技术可以采集任何厂家、任何型号的仪器及任何软件的数据包括高效液相色谱(high performance liquid chromatography, HPLC)、气相色谱(gas chromatography, GC)、液相色谱串联质谱(liquid chromatography-mass spectrum, LC/MS)等<sup>[11,12]</sup>。数据采集过程不需要分析人员的干预,完全自动化。若设定采集频率后,系统将数据直接采集进入SDMS中,充分保证了数据的安全性和溯源性,有效的防止了数据的丢失。

(2)数据分类、再利用方面:SDMS会根据预先设定的要求(采集模板)对数据建立索引,索引最多可达75个<sup>[11]</sup>。SDMS对不同的数据进行分类,通过这些丰富的索引可以非常方便、迅速的查找到数据。

(3)数据储存和分享方面:各实验室的相关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。同时SDMS严格的权限管理功能保证只有经授权的人才能浏览相关的数据。数据储存使用专门的机房,同时安置SDMS硬件系统,使用移动硬盘作为整个系统的备份方案。

## 4.2 SDMS在实现《通用要求》过程中的实际操作

### 4.2.1 检测人员的可追溯性

SDMS系统根据不同的实验室人员,分别给予了不同的用户权限,设备开机进行检测之前需要输入用户名和密码,这样在检测前就确认了上机操作的检测人员的分类,确定操作者是具有实验室仪器操作资格的检测员。经过培训的具有上机资格的检测人员才能给予用户名及密码。在整个实验过程中,某一实验仪器可能会更改操作人员,在其操作完成进行报告打印时,需要再次输入操作者的用户名和密码,以确保每个数据的输出有人对之负责。通过这种途径,实验操作过程中,在确认实验人员上实现了“全程监控”。

### 4.2.2 样品检测过程的可追溯

检测过程的可追溯包括样品的可追溯和检测责任的可追溯。

样品可追溯是指能追溯到样品接收时间、制样时间、检测时间、完成时间;并能追溯到对哪个样品进行了何种项目的检测以及检测的原始记录。在农药登记试验中经常用到样品可追溯过程<sup>[13]</sup>。

在应用 SDMS 后,所有样品都会有唯一识别码,所经过的每一个环节的所有信息都会被采集到数据库中。在追溯数据时,只要知道该样品的识别码,就能查询到从接样、送样、制样、各种检测程序、结果登记、拟证、出证等各个环节的原始数据。在 SDMS 系统终端电脑中输入任何一个识别码就可以调取每一步检测过程的数据,大大提高了追溯的效率和可靠性。SDMS 实现样品检测过程可追溯的核心环节就是该系统具有广泛的数据接口识别能力,所能识别的数据接口(见表 1)基本涵盖了实验室所有的大中型设备。

同样,检测责任也实现了可追溯。检测责任的可追溯性是指实验室在明确相关岗位的职责基础上,明确与检测结果和相关过程相关人员的责任。SDMS 通过记录每个检测样品唯一识别码,在追溯过程中,可以清晰地看到每个

操作步骤的流程,同时可以找到对应的操作人员。任何实验流程出现的责任事故都可以迅速查到,既方便问责,又方便进行相关“纠正”。

#### 4.2.3 实验材料的可追溯

实验室所用的试剂耗材在检验检疫实验室管理中由另一个软件来完成申报、订购、发放和使用,SDMS 系统所做的就是把该系统中的相关数据采集到自己的数据库中,这一过程看似简单,其实它把实验室实验材料的相关数据贯穿了起来,并和上述人员、实验过程的数据一并构成了实验室实验材料可追溯的基础。随着检测技术的完备,实验试剂耗材趋于专业化,专一性也越来越强,根据实验室往年积累下来的数据,可以通过数据统计进行相关预测,确定实验室试剂耗材消耗的趋势,建立完备的实验室耗材申领使用机制。建立相关预测、申领机制后,实验室每一种实验材料的去向就会在试剂耗材软件中得到记录,时间点会与 SDMS 采集到的数据点相吻合,从而使得实验进行中的实验材料来源得以追溯。

表 1 SDMS 包括的数据接口<sup>[14]</sup>  
Table 1 SDMS included data interface

编号	数据接口名称
1	Adv. Chemistry Dev. SpecManager / ChromManager
2	ABI SCIEX Analyst®
3	Acrobat PDF format
4	Agilent ChemStation / ChemStore / EZChrom / OpenLab
5	BD Biosciences CellQuest Pro
6	BD Biosciences FACSDiVa & FACSArray™
7	Brinkmann Inst. Workcell™
8	Bruker XWIN-NMR
9	Dionex Chromeleon®
10	MDL Information Systems, Inc. (Elsevier MDL) MDL® & ISIS/Draw
11	Microsoft® Office Microsoft® Word / Excel / PowerPoint
12	PerkinElmer Turbochrom™ CS/WS / TotalChrom® CS/WS
13	Scientific Software EZChrom Elite™
14	Shimadzu Class-VP™ / LC Solution / GC Solution
15	Thermo Finnigan™ (ThermoQuest) ChromQuest™
16	Thermo Fisher Scientific Atlas WorkBook
17	Thermo Finnigan Xcalibur™
18	Thermo LabSystems Atlas™ Workbook
19	Waters Corp. MassLynx™
20	Waters Corp. Millennium®32 Empower™ Empower 2 & Empower3

#### 4.2.4 检测方法的可追溯

在 SDMS 系统中, 仪器设备完成检测后, 有一步“打印”检测图谱和检测报告的环节, 安装 SDMS 系统的仪器设备可以使用 SDMS 软件的 UNIFY 虚拟打印机, 把实验报告输出为电子格式, SDMS 将电子实验报告存储在数据库时, 同样会对报告进行索引操作。报告索引也按照设备工作站名称分组, 索引内容包括: 报告名称、实验员名称、打印时间、工作站名称、页数等信息, 同时包括报告中所有可识别文字的全文索引。报告查看是所见即所得形式, 与原始工作站打印的纸质报告完全相同(图 1)。授权人员可以利用这些信息, 很方便地对报告进行查询、转发、审批、归档等操作。这一步实现了原始记录的“无纸化”和“电子化”<sup>[15]</sup>。

#### 4.2.5 实验环境的可追溯性

实验室每天的日常检测都会对环境相关数据进行记录; 一些大型设备也会随时记录仪器设备的操作因素, 这些因素又可能在检测报告中体现出来。SDMS 系统对这些数据都进行了采集, 实验流程中数据的采集实现了对环境因素的全程记录。实际操作时, 在 SDMS 系统中输入所需查询的环境指标, 只要有一处

记录, 在整个系统中就能查询出来, 实现了实验室环境因素的可追溯。

## 5 结 论

在检验检疫实验室日常检测中, 传统数据管理方式不易保全各种实验数据, 也不能很好地将各种类型数据的进行分类整理以及进一步地进行数据再利用。应用科学数据管理系统, 可以方便地实现实验室相关数据的“全记录”, 通过制定实验室与数据相关的程序性文件可以辅助 SDMS 更好的管理数据。SDMS 与实验室其他软件如 ELN、LIMS 和 ERP 等进行对接, 进而可以对实验室产生的海量数据集中储存、集中管理, 更好地实现《检测和校准实验室能力的通用要求》中相关可追溯性条款的要求。当然, 要实现适合于每一个实验室的真正科学的数据管理必须是建立起以本实验室具体情况的一整套数据解决方案, 同时需要指出的是 SDMS 只有与实验室具体实际进行有效融合, 使 SDMS“本地化”, 实验数据的采集管理工作才能更好地进行。SDMS 的本地化工作可以说是实现数据可追溯的重要一环。

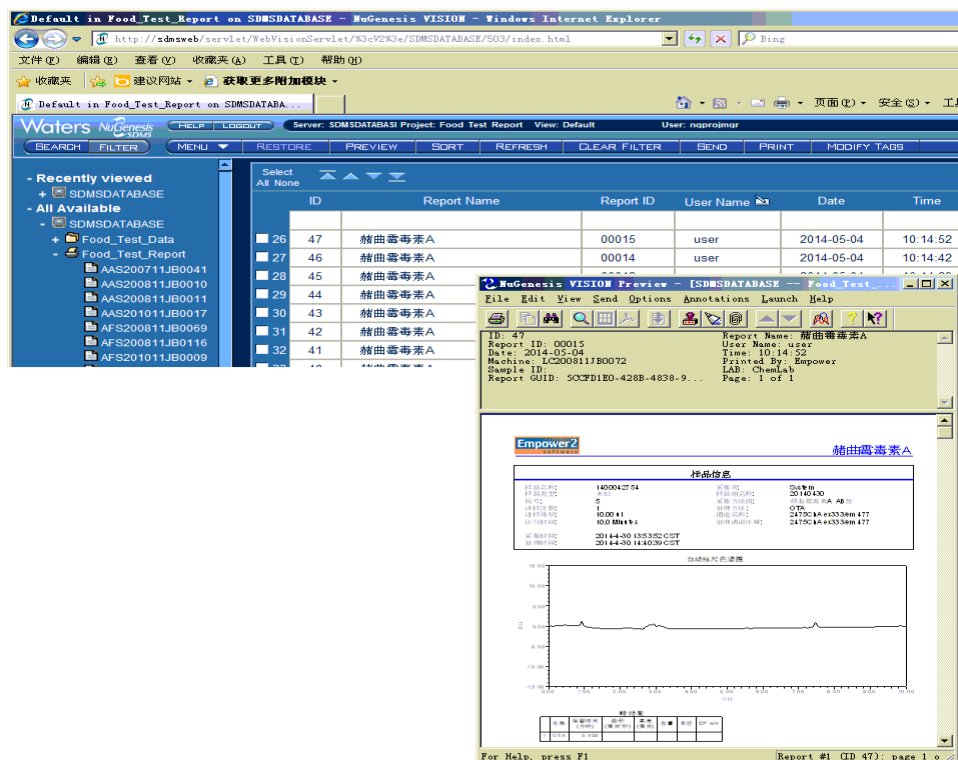


图1 实验报告分组索引和查看

Fig. 1 Lab report grouping index and view

## 参考文献

- [1] 程立军, 柯家骥, 林森, 等. 如何确保实验室检测工作的可追溯性[J]. 检验检疫科学, 2008, 5: 61-62.  
Cheng LJ, Ke JJ, Lin M, *et al.* How to ensure traceability of laboratory testing work [J]. *Inspect Quarant Sci*, 2008, 5: 61-62.
- [2] ISO/IEC 17025:2005 检测和校准实验室能力的通用要求[S].  
ISO/IEC 17026:2005 General requirements for the competence of testing and calibration laboratories [S].
- [3] 虞精明. 论技术负责人在实验室资质认定管理体系运行中的作用[J]. 中国卫生检验杂志. 2013, 4: 1035-1037.  
Yu JM. Study on the function of the technical person in the management system of laboratory qualification [J]. *Chin J Health Inspect*, 2013, 4: 1035-1037.
- [4] 薛江, 梁玉兰. 浅析实验室测试中的质量保证[J]. 中国纤检. 2015, 13: 67.  
Xue J, Liang YL. Analysis on the quality assurance in lab test [J]. *China Fiber Inspect*, 2015, 13: 67.
- [5] 陈敏, 陆耀良. 疾控系统检测报告常见问题分析与探讨[J]. 江苏卫生保健. 2014, 4: 39-40  
Chen M, Lu YL. Analysis and discussion on the common problems in the detection report of disease control system [J]. *Jiangsu Health Care*, 2014, 4: 39-40.
- [6] 侯学文. 卫生检验机构资质认定管理体系运行现状及量化自评方法研究[D]. 济南: 山东大学, 2013.  
Hou XW. Research on current operation and qualification self-assessment of health inspection agency [D]. Jinan: Shandong University, 2013.
- [7] 顾龙权. 检测实验室质量管理体系的建立及其运行[D]. 南京: 南京理工大学, 2008.  
Gu LQ. Establishment and operation of quality management system in laboratory [D]. Nanjing: Nanjing University of Science and Technology, 2008.
- [8] 郑亚玲. 浅谈实验室内的质量控制[J]. 现代测量与实验室管理. 2010, 4: 54-56.  
Zheng YL. Quality control in laboratory [J]. *Adv Meas Lab Manag*, 2010, 4: 54-56.
- [9] 张明瑶, 李雅丽. 检测报告迈向“E 时代”[N]. 中国国门时报, 2013-9-24.  
Zhang MY, Li YL. Detection report towards the E era [N]. *China Int Times*, 2013-9-24.
- [10] 韩深, 刘岩, 冯骞, 等. 科学数据管理系统在进出境检验检疫中的应用[J]. 检验检疫学刊. 2012, 22(2): 51-54.  
Han S, Liu Y, Feng Q, *et al.* Application of scientific data management system in the inspection and Quarantine of entry and exit inspection and quarantine [J]. *J Inspect Quarant*, 2012, 22(2): 51-54.
- [11] 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.  
Wu ZF, Zeng X. Application of scientific data management system in experimental data management [J]. *Mod Hosp*, 2010, 10(6): 147-148.
- [12] 巫志峰. 应用科学数据管理系统(SDMS)进行 I 期临床试验数据管理[C]. 第十一次全国药理学学术大会, 2008: 292-293.  
Wu ZF. Application of scientific data management system (SDMS) for phase I clinical trial data management [C]. The Eleventh National pharmacology academic conference, 2008: 292-293.
- [13] 董卉, 陆剑飞, 徐永, 等. 浅谈农药登记试验样品可追溯管理[J]. 农药科学与管理, 2012, 33(1): 16-17.  
Dong H, Lu JF, Xu Y *et al.* Study on the traceability management of pesticide registration test sample [J]. *Pest Sci Admin*, 2012, 33(1): 16-17.
- [14] Waters Corporation. NuGenesis SDMS 7.0 System Administration Course Manual [J/OL]. 2007, 12.
- [15] 虞飞华, 华冠萍, 朱锡瑞, 等. 实验报告无纸化管理平台初探[J]. 中国教育信息化, 2014, (1): 80-82.  
Yu FH, Hua GP, Zhu XR, *et al.* Preliminary study on the management platform of the paperless experiment report [J]. *China Edu Infor*, 2014, (1): 80-82.

(责任编辑: 杨翠娜)

## 作者简介



程 甲, 硕士, 工程师, 主要研究方向为食品安全检测及信息化。  
E-mail: chengjia@shciq.gov.cn



畅晓晖, 硕士, 工程师, 主要研究方向为食品安全检测。  
E-mail: changxh@bjciq.gov.cn