

现代实验室技术  管理丛书



实验室 信息管理系统

◎ 杨海鹰 潘 华 编著



化学工业出版社



现代实验室技术(与)管理丛书

实验室 信息管理系统

杨海鹰 潘 华 编著



化学工业出版社

· 北 京 ·

本书是一本从原理上对实验室信息管理系统 (LIMS) 技术及其应用进行介绍的专著。全书共分八章, 从基本概念开始, 对 LIMS 技术的原理、实施、应用以及与实验室管理的关系进行了介绍; 同时还探讨了以 LIMS 技术为平台的其他潜在应用。全书各个章节的内容既有一定的相关性, 也具有一定的独立性, 读者可以结合自己的需要选择不同的阅读方式。

本书与一般的实验室信息管理丛书相比, 更强调对 LIMS 原理和设计思想的理解, 以及对应用实施过程重要环节的把握, 对基于 LIMS 平台的其他潜在应用技术的探讨更是本书的一个特色。

本书适合于 LIMS 开发、应用领域的研究人员、实验室管理人员、分析化学和信息管理专业的研究生及其他对 LIMS 技术有兴趣的人员使用。

图书在版编目 (CIP) 数据

实验室信息管理系统/杨海鹰, 潘华编著. —北京:
化学工业出版社, 2006.12
(现代实验室技术与管理丛书)

ISBN 978-7-5025-9749-8

I. 实… II. ①杨… ②潘… III. 实验室-信息管
理系统 IV. N33

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2006) 第 150948 号

责任编辑: 杜进祥

文字编辑: 朱磊

责任校对: 李林

装帧设计: 于兵

出版发行: 化学工业出版社 (北京市东城区青年湖南街 13 号 邮政编码 100011)

印装: 北京云浩印刷有限责任公司

720mm×1000mm 1/16 印张 14 1/4 字数 256 千字 2007 年 1 月北京第 1 版第 1 次印刷

购书咨询: 010-64518888 (传真: 010-64519686)

售后服务: 010 64518899

网 址: <http://www.cip.com.cn>

凡购买本书, 如有缺损质量问题, 本社销售中心负责调换。

定 价: 35.00 元

版权所有 违者必究

出版者的话

现代实验室应是在建筑设计、质量控制、安全管理、环境保护、装备水平、信息系统等方面符合国际或国家相关规范或通过相关标准认可评审的实验与检测/校准机构。面对快速发展变化的 21 世纪，各类实验室人员渴望全面的规范化、信息化管理。为搭建实验室运行管理新的平台，根据实验室规范管理要求，结合各类实验室管理人员及广大实验室科技人员的工作需求，化学工业出版社特组织专家学者编写《现代实验室技术与管理丛书》，其中包括《标准物质及其应用》、《实验室安全管理》、《实验室信息管理系统》、《实验室质量管理》、《实验室污染与防治》等。这套丛书力图反映现代实验室的新技术与新规范，希望能给实验室管理人员和实验室科技人员提供较完整的学习参考资料。

化学工业出版社

2007 年 1 月

序

人们对于微观世界的认识在不断提升，如各类物质的化学组成、物理性质等以及它们的形态。与此同时，对各类商品以及工业流程中物质流的性质，我们也需要随时了解它们的各种化学或物理或形态的变化。因此出现了各种新型仪器，它们可以配合上述需求，快速且大流量地输出化学或物理或形态的变化信息。20 世纪以来又出现了各类专门以测试物流的各种性质为目的的实验室。它们拥有庞大的资源：包括人员、仪器、试剂、标准物质以及其他支撑条件，以满足项目繁多、实时和大流量的信息需求。它们的运作方式有很多独特的地方，需要不同的管理模式。开始时，人们大都仅仅注意到了产出信息（或称数据）的管理，因为这些信息有可能出错，需要纠正，也有可能是相互关联的或是矛盾的，甚至是不必要的。以后，又发现各种复杂仪器输出的信号经常需要进行换算后才能得到有用的信息。而所用的换算方法常较复杂且相似，因此，人们开始考虑利用现代计算机的强大功能，形成一个平台，从而可以在短时间内完成上述功能。实验室信息管理系统也许就是这样逐渐出现的。

石油化工科学研究院（RIPP）杨海鹰等同志于 1994 年开始着手这项工作。他们针对 RIPP 分析实验室的实际情况，于 1996 年完成了第一版商品化 RIPP-LIMS 的基础版。经过初步应用，认识到这类管理系统的确对实验室的管理十分有用，它不但节省了大量人力、物力，而且使实验室的各项工作更规范化了。检测的质量也有所提高。之后，他们在最初版本的基础上与软件开发商合作，采用了网络操作系统及数据库技术，边开发边应用，形成了真正意义上可商品化的管理系统。

本书是作者十多年工作经验的总结；书中同时对四个以不同方式采用实验室管理系统的炼油厂化验室的应用经验进行了介绍。从长远看，LIMS 必将与其他新型仪器一样成为实验室中必不可少的内容。与此同时 LIMS 的应用也必将带来实验室管理理念上的全面提升。因此，新旧理念的撞击也将不可避免。本书的出版会让更多对 LIMS 感兴趣的读者对这一新技术多一份了解，并减少一些新旧理念的撞击。

中国科学院院士

2006 年 10 月

陆婉珍

前 言

实验室信息管理系统 (LIMS) 是一个多学科交叉的综合应用技术。与所有技术和学科的发展一样, LIMS 技术的出现也是技术发展与现实需求完美结合的结果。现代管理的理念、网络技术的平台和实验室本身的工作性质, 催生了这一技术; 而不同实验室管理功能上的相似性以及实验室认证活动的开展, 又使其具备了商品化的潜在特质, 从而使它有了持续发展的动力。因此, 可以相信 LIMS 技术在未来的应用和发展前景是相当乐观的。

本书是一本从原理上对 LIMS 技术及其应用进行介绍的专著。全书共分八章, 从基本概念开始, 对 LIMS 技术的原理、实施、应用以及与实验室管理的关系进行了介绍; 同时还探讨了以 LIMS 技术为平台的其他潜在应用。本书第一章、第二章主要介绍了与 LIMS 相关的基本概念、标准和信息资源; 第三章对 LIMS 技术的软硬件运行平台进行了描述; 第四章讨论了 LIMS 技术与实验室管理的关系; 第五章则对 LIMS 的主要功能模块和基本需求进行了较为详细的说明; 第六章围绕 LIMS 项目的实施与应用从实用的角度提出了一些建议; 第七章是对 LIMS 技术未来可能的潜在应用和发展方向进行的一些探讨; 第八章则以中石化股份有限公司下属几个检验中心的 LIMS 项目为例, 讨论了不同应用基础和条件下, LIMS 项目成功实施和应用的经验。全书各个章节的内容既有一定的相关性, 也具有一定的独立性, 读者可以结合自己的需要选择不同的阅读方式。

陆婉珍院士是作者的授业恩师, 也是最初唯一支持作者进行 LIMS 技术研究和应用的学者, 正是由于她的支持, 我们实验室才能在 20 世纪 90 年代中期就建起了 LIMS 运行所需要的网络平台, 有条件开始进行国产 LIMS 技术的开发、应用和商品化探索。她也是第一个意识到 LIMS 技术潜在价值的老一辈分析化学家, 在她的积极倡导和鼓励下, 我们实验室及时进行了 LIMS 技术的宣传和商品化工作, 培养了国内第一批 LIMS 开发商, 为 LIMS 技术在国内的应用做了一些先导性的工作。可以说, 如果没有她的支持和影响, 我国 LIMS 技术的应用也许将是另一种格局, 这本书的出现也将是不可能的。在此, 作者谨向陆婉珍院士表示崇高的敬意。

本书第三章的内容是由潘华同志编写的, 杨海鹰负责其余章节的写作和全书的定稿审核工作。中石化股份有限公司镇海石化检验中心邵柯迪总工、燕山石化炼油厂检验中心马永旭主任、金陵分公司质检中心方虹主任为作者

提供了他们各自实施和应用 LIMS 的经验和相关资料。化学工业出版社编辑对本书的顺利出版功不可没。在此，谨对上述同志的帮助表示深深的谢意。

由于作者水平有限，书中不妥之处，敬请读者批评指正！

最后，我们也衷心地希望有缘阅读此书的所有读者都能有所收获。

杨海鹰

2006 年 10 月 18 日

目 录

第一章 绪论	1
第一节 LIMS 的定义	3
一、LIMS 是用于管理实验室内各类信息的	3
二、LIMS 是一个在网络平台上运行的软件系统	3
三、LIMS 技术涉及了计算机网络、实验室管理和分析测试 三个不同领域	3
四、LIMS 提供了一个基于网络平台的实验室管理模式	4
五、LIMS 是一个现代化的实验室管理工具	4
第二节 LIMS 的作用	4
一、提高样品测试效率	4
二、提高分析结果可靠性	5
三、提高对复杂分析问题的处理能力	5
四、协调实验室各类资源	6
五、实现量化管理	6
第三节 LIMS 的发展	6
第四节 学术组织、网站与专刊	8
小结	9
第二章 LIMS 的主要技术标准	11
第一节 ASTM E1578—93	13
一、为 LIMS 定义一个讨论平台	13
二、界定 LIMS 的基本功能	13
三、针对 LIMS 技术自身和应用特点的一些特殊考虑与建议	15
四、提出实施 LIMS 的工作流程建议	19
第二节 ASTM E2066—00	35
一、对 LIMS 开发商的评估 (LIMS vendor assessment/audit)	35
二、对安装在用户环境下 LIMS 的现场验证 (validation of LIMS installed at customer site)	35
三、制定验证计划 (validation plan design)	39
四、测试协议设计 (test protocol design)	39
五、运行期间的认证问题 (LIMS operation)	40

六、资料 (documentation)	40
小结	40
第三章 LIMS 的运行平台	41
第一节 运行平台概述	43
第二节 网络环境	44
一、按网络的覆盖范围分类	44
二、按网络的拓扑结构分类	45
三、按传输介质分类	45
四、按服务方式分类	46
第三节 硬件环境	46
一、网络设备	46
二、终端设备	48
三、服务器	48
四、其他设备	50
第四节 软件环境	51
一、操作系统	51
二、数据库	52
三、LIMS 运行环境	53
第五节 运行平台的维护	55
小结	57
第四章 LIMS 与实验室管理	59
第一节 实验室主要管理内容	61
第二节 实验室认可工作的主要内容	64
第三节 LIMS 与实验室管理	66
第四节 如何正确认识 LIMS 及其在实验室管理中的作用	68
小结	71
第五章 LIMS 的主要功能模块	73
第一节 样品分析管理	75
第二节 争议 (投诉) 样品处置	100
第三节 辅助业务管理	107
一、资源管理	108
二、计划管理	115
三、人员管理	122
四、经费管理	126
五、科研管理	127

第四节	仪器接口管理	131
第五节	质量控制	133
第六节	在线服务	136
第七节	高层业务	139
第八节	系统管理	148
一、	系统初始化	148
二、	用户管理	149
三、	系统设定	150
四、	数据库管理	156
五、	日志管理	156
小结		157
第六章	LIMS 实施与应用	159
第一节	LIMS 产品选择	161
一、	实验室现状	161
二、	应用期求	162
三、	实施成本	162
四、	市场现有 LIMS 产品情况	163
五、	LIMS 产品选择	163
第二节	LIMS 的应用实施	164
一、	成立 LIMS 项目领导和实施工作组	164
二、	制订项目实施计划和进度	165
三、	对全体工作人员进行 LIMS 应用的培训	165
四、	准备 LIMS 初始化信息资料	166
五、	系统安装及信息预置	166
六、	结合人员培训课程分阶段投用 LIMS 的各功能模块	167
七、	全流程模拟运行及试运行	167
八、	项目验收并转入正常运行	168
第三节	日常使用与维护	169
一、	系统使用权限设定或变更的程序	169
二、	分析数据备份或下载的规定	170
三、	系统日常维护规程	170
四、	系统使用人员应用培训规程	170
五、	各类原始 LIMS 资料与维护档案的管理与使用规则	170
六、	系统数据资源管理与使用规则	171
第四节	现有 LIMS 的后续支持与升级服务	171

第五节 其他·····	172
第七章 基于 LIMS 平台的应用技术 ·····	175
第一节 管理信息的开发与应用·····	177
一、业务量信息的应用·····	177
二、费用收支信息的应用·····	178
三、样品状态信息的应用·····	178
四、设备运行信息的应用·····	179
五、工作人员状态信息的应用·····	179
六、分析数据质量信息的应用·····	179
七、委托样品与测试项目信息的应用·····	180
第二节 服务信息的开发与应用·····	180
一、分析数据相关性研究·····	181
二、历史数据资源查询·····	181
三、数据资源·····	181
第三节 行业（产业）和区域信息的开发与应用·····	182
第四节 组合分析技术的开发与应用·····	183
第五节 虚拟共享实验室建设·····	186
第八章 LIMS 应用实例 ·····	189
第一节 RIPP 分析研究室 LIMS 应用项目·····	191
一、实验室基本情况·····	191
二、项目背景说明·····	191
三、主要实施内容与结果·····	192
四、应用效果讨论·····	194
五、经验与教训·····	195
第二节 镇海石化检验中心 LIMS 项目·····	196
一、实验室基本情况·····	196
二、项目背景说明·····	196
三、主要实施内容与结果·····	197
四、应用效果讨论·····	197
五、经验与教训·····	198
第三节 燕山石化炼油厂 LIMS 项目·····	201
一、项目背景说明·····	201
二、主要实施内容与结果·····	202
三、应用效果讨论·····	203
四、经验与教训·····	206

第四节 中石化金陵分公司质检中心 LIMS 项目 207

 一、项目背景说明 207

 二、主要实施内容与结果 207

 三、应用效果讨论 209

 四、经验与教训 210

第五节 几点启示 211

 一、LIMS 技术来源的选择 211

 二、影响应用效果的因素探讨 212

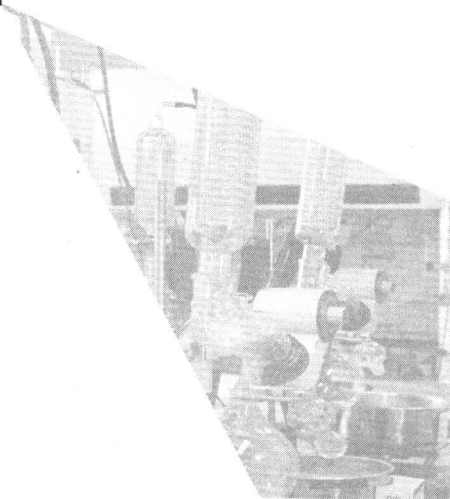
 三、最后的建议与愿望 213

附录 国内外主要 LIMS 开发商及其产品 215

参考文献 222

第一章

绪论



本章将对实验室信息管理系统及相关资料为大家作一个素描,帮助读者建立起对 LIMS 技术的总体概念和基本认识,以期为本书后续的内容做一个铺垫。

第一节 LIMS 的定义

从名称形式上来看,实验室信息管理系统最常用的表达形式或简称就是 LIMS,它源自英文 laboratory information management system。“LIMS 是一个用于实验室信息管理的应用系统或工具”可作为对它最简单的定义;如果展开来讨论,则如下的定义或描述可能更为确切。

LIMS 是专门应用于分析测试实验室各类信息(尤其是样品分析信息)管理的网络化系统,它可以为实验室的高效和科学运作以及信息的保存、交流和加工提供平台,并可对实验室工作的各个环节进行定量化的质量管理,它是计算机技术、管理科学与分析技术结合的产物。它把分析实验室整体环境作为管理对象,借助计算机网络技术来完善对实验室工作的全面管理,以达到提高实验室的工作效率、工作水平、分析数据质量和降低成本的目的。从 LIMS 的定义或描述中,可以得到如下一些基本的认识或概念。

一、LIMS 是用于管理实验室内各类信息的

这里强调的是 LIMS 的管理对象和内容范围,它们必须与实验室工作相关并属于实验室内部运行过程产生的各类信息,理论上来说应该覆盖实验室方方面面的全部信息。如果我们对实验室内涉及的各种信息有概念的话,那么对 LIMS 的管理对象和内容也就应该能有一个大致的认识了。通常,对一个分析测试实验室而言,样品的分析测试是其最基本也是最重要的业务,因此,以此过程为纽带可以将整个实验室的所有信息串接起来,这也是我们认识 LIMS 内部关系和功能的有效方式。

二、LIMS 是一个在网络平台上运行的软件系统

这里想要传递的是 LIMS 作为一个网络软件的概念。正是这一特点,决定了应用 LIMS 所需的一些基本条件,如:一个能覆盖整个实验室的网络环境、维持网络正常运行所必需的软硬件系统和系统管理人员等,同时,它也意味着实施 LIMS 与其他实验室应用系统的差异,其中最显著的差异就是涉及的人员和场所范围大。另外,网络系统的虚拟性和开放性,则从另一个角度也为 LIMS 功能的应用和扩展提供了极大的空间,很多从前不可能的想法在有了这一平台后都变得现实可行,从而为管理者和研究人员提供了一个全新的舞台。

三、LIMS 技术涉及了计算机网络、实验室管理和分析测试三个不同领域

这是对 LIMS 所依托的技术基础的界定,读者可以从这三个方面去把握





和理解 LIMS 的发展脉络。一个理想的 LIMS 系统，一定是三方面良好协调的结果。由于实验室管理模式的相对稳定性，所以 LIMS 系统的持续升级，主要就体现在分析测试环节涉及的各类仪器直接与 LIMS 的网络连接及数据交换能力的提高、网络化软硬件支持系统更新和开发平台及 LIMS 功能实现方式的变化。

四、LIMS 提供了一个基于网络平台的实验室管理模式

这是从管理模式的角度对 LIMS 的定义，也是 LIMS 技术的一个重要特点。读者应当明确意识到 LIMS 的应用不仅仅是改变了实验室信息的管理方式，实际上它在实验室还悄然引入了管理模式上的变革，并进一步衍生出了一些新的服务内容。基于网络平台的实验室管理模式与传统的人工管理模式是两种完全不同的管理方式，借助网络平台，管理者可以实时了解整个实验室的所有信息，并可据此做出相应的决策，从而实现真正意义上的定量管理，使实验室的管理和运行进入一个新的层次。同时，围绕 LIMS 数据库资源的利用可以展开一系列相关的研究工作，增加实验室信息的附加值，拓宽服务领域。

五、LIMS 是一个现代化的实验室管理工具

这是在应用中很容易被忽视的一个特点。明确指出 LIMS 仅仅是一个管理工具的现实，是想避免人们由于误解而对 LIMS 技术的应用产生诸多不切实际的要求。作为一个工具，它的应用效能与使用它的人及应用环境就有很大的关系。同样的 LIMS 产品在不同的实验室和不同的应用人员手中，其效果可以完全不同。因此，如何正确认识 LIMS 的功用并使其得以充分发挥，是每一个应用 LIMS 的实验室管理者应该认真考虑的问题。

第二节 LIMS 的作用

众所周知，分析测试的周期、分析结果可靠性及解决复杂分析问题的能力，是衡量一个分析实验室优劣的基本标准，而能否达到上述要求，则取决于该实验室在人员、仪器、方法配置及管理模式等诸方面的综合水平。LIMS 技术就是通过提供合理、规范和高效的管理模式，来帮助管理人员在现有软硬件基础上，优化并提高实验室整体水平的一个工具。其具体作用，可以从以下几个方面来理解。

一、提高样品测试效率

传统的人工管理模式下，样品及其相关信息在实验室内部的传递是靠人及相应的纸件来实现的，对于一个测试项目分布在不同测试场所的样品，因信息传递不及时而增加样品分析周期的事件是极易发生的。同时，无法实时传递信息的结果，客观上也使得样品分析数据的汇总需要更多的时间，委托

方想了解样品测试的状态也很不方便。如果应用了 LIMS, 则上述现象将得以彻底改观。实验室内与样品相关的所有信息都可以实时地反映在 LIMS 的应用终端上, 各类用户凭授权均能很便利地查到自己所关心的信息。对于涉及不同测试点项目的样品, 由于 LIMS 具有信息实时反映的特点, 相关工作人员可以及时得到所需的信息, 从而可加快一些关联项目的分析过程。而分析结果一旦输入 LIMS 后, 就会自动汇总生成最终的分析报告, 因此又减少了人工汇总数据的时间。对于一些能与分析仪器直接进行数据交换的 LIMS 系统, 还可实现分析结果的实时上传, 既提高了分析效率, 同时还避免了数据传递过程出错的可能性。总之, LIMS 平台可以从多方面为提高分析实验室的数据产出率和工作效率提供支持。

二、提高分析结果可靠性

这可以从几个方面来认识, 首先是 LIMS 提供的信息平台可以使分析人员及时了解与样品相关的全面信息, 因此最大限度地减少了不同测试项目分析数据相互矛盾的情况。这方面最典型的例子就是常量元素分析。由于不同元素含量的分析方法不一样, 所以经常会碰到这样的事件: 来自不同方法的元素分析结果, 虽然符合各自方法的允许测量误差, 但汇总后超出理论值。这种现象过去都是到最后审核时才可能发现, 如果审核人不注意极易出错。应用 LIMS 后情况就不同了, 相关分析人员通过 LIMS 平台可以及时了解测试结果, 并交流处理意见, 系统也可内置一些自检功能实时提醒相关项目的工作人员, 从而降低出错的概率。其次是 LIMS 提供的数据自动上传功能, 由于消除了人为的因素, 也可提高分析结果的可靠性。另外, LIMS 还可提供特定的计算和自检功能, 这也间接地保证了分析结果的可靠性。最后还可看到, 基于 LIMS 平台的质量保证体系, 通过对分析过程涉及的人员、设备、分析方法、标准物质等因素的全面质量管理, 将保证实验室分析数据可靠性的各种措施落到了实处, 从而从另一个层面提供了对实验室分析数据可靠性的制度性保证。

三、提高对复杂分析问题的处理能力

LIMS 的信息平台可以方便地对实验室曾经做过的全部分析样品和结果进行查询, 因此, 通过对 LIMS 系统存有的历史数据的检索, 有可能可以得到一些对实际问题处理的有价值的信息。这对一些行业性实验室更有意义。例如判断某一样品来源的问题, 工作人员通过比对 LIMS 库存样品与待测样本的测试信息, 可以较便利地得到相应的结论。此外, LIMS 将整个实验室的各类资源有机地整合在一起, 从而为研究人员更有效地利用实验室资源解决各自的实际问题创造了条件, 也间接提高了整个实验室在处理复杂分析问题方面的能力。

