

# 药物分析检验方法及数据自动处理系统

广州军区药检所 刘夕海 陈兆和 林火然 俞承明 李爱红

**摘要:** 本文从信息科学出发,提出并实现了药品标准知识库的环形联想式高信息密集性设计,从而实现药物分析、检验全过程数据处理自动化和药品质量咨询管理现代化。

笔者设计完成了环形联想式信息高密度储存的、具有在使用中自动版本更新能力的药品标准知识库。实现了药物分析检验的化学、物理学、生物学诸方法的自动选定和数据自动处理。经查阅国内外有关资料文献,在该领域上述水平上研究未见报道。我们认为其主要难点有:

(1) 完成此项研究(实用而不是理论上),一般行业协作难以达到药学与计算机等多学科的融合;

(2) 信息高度密集要求:一部国家药品标准仅用一张软盘就应该放下,这是普通数据库处理所需容量的二十分之一,能为普通计算机所接受,具有实用意义;

(3) 知识库的结构设计:知识库是一个具有独特内部结构的知识代码系统,这一结构是笔者对知识本身的结构深入分析和结合药检工作实践,经反复实验研究完成的。

## 一、总体构思与原理

系统设计分为程序系统和知识库系统两部分。采用通用性程序设计,便于功能扩展。知识库的设计,根据笔者对知识本身结构的研究和认识,将知识分为两大类,一是框架性知识,由科学原理构成,是现代化科学的柱和梁;二是填充性知识,由框架知识推导引伸而来的低一级别的、具体的、说明性的量、界、概念和基本逻辑。后者可以分为许多级别,各级别循环连接组成环。按此思路设计数据库,构成知识库。知识库不同于普通数据库,它反映了知识本身的结构特点,因而没有空记录和空字段,大大节省了存储空间。由知识库内部的联络代码、指令码、路径码、数据上、中、下界符号及注解中文,组成复杂有序的代码系统,指挥药物分析、检验全过程,实现过程自动化。

## 二、功能的实现与扩展

该系统以药物分析、检验为主,以我国各级药品检定所、检验所、工厂、医院药检室和与此有关的科研、教学单位为主要用户。由选择参数确定工作模式。对大型专业药检机构,该系统工作过程如下:检品登记,打印各检验室分项任务书,各检验室在终端进行药检过程自动处理,同步追踪打印操作说明及原始记录,输出结果报告,送室主任和所长审查(只审查原始记录和结论,不用审查难审、难看、费时和容易出错的数据处理部分),各检验室数据在主机合成,检验报告的评语自动生成,报告发放生效。数据通信采用网络或软盘方式。对小型药检机构可以选择上述任一过程段作为工作模式,选择灵活。功能的扩展取决于知识库的内容扩充。

系统由9个主功能模块构成:(1)数据处理;(2)查询、修改;(3)报告打印发放;(4)检品统计报表;(5)数据清理、删除;(6)药品质量分析;(7)68项咨询;(8)《药品标准》知识库管理;(9)系统服务。整个系统共有50多个选择主菜单,数百个功能选择,设计有统计分析的图形功能并可打印图象报告。

### 1. 数据处理

该模块为系统的重要组成部分之一,功能选择为:①检品登记、打印检验任务书;②药检过程自动处理(配备知识库);③单纯药物分析、含量测定(不配备知识库,为非法定药物分析检验系统);④纯文字处理方式(打字机方式);⑤各检验室数据在主机合成完整的药检报告书。

数据处理按数学模型性质分为下列类别:化学分析法、化学重量法、旋光分析、单波长分光光度法、双波长分光光度法、生物检定、气相色谱、高效液相、荧光分析、pH

值测定、吸收度、吸收系数、折光分析、相对密度、粘度、重量差异、干燥失重、灼烧残渣、灰份、崩解时限、水份测定、酸值、皂化值、羟值、碘值、比旋度、特殊物质分析等。

药检过程自动处理是由知识库中六位指令码逐位解码有序进行的。备有记忆库,特殊情况下,一天不能作完某检品时,第二天可接着操作和处理数据。数据模型、数据单位、输出排版格式、实验原始数据的书写排版方式,都是由指令码自动控制。生物学方法中统计学处理以及显著性分析等突破了必须人工查阅各种分布表如T值、F值、正并系数矩阵表等难题。采用区间检索法在零至无穷大范围内,对不连续数字检索定位,找不到时自动调整检索区逐步逼近,实现全过程处理自动化。单纯药物分析、含量测定,不须配备知识库也能基本达到同样效果。其原理是用人机对话方式现场合成并使用六位指令码和其它编码,以解决一时找不到该药品的相应标准时,特别是国外较新药品的分析检验和普通化学品分析。

纯文字处理方式是解决特殊情况下打印发放药检报告而设计的,药检报告的内容可以依操作者的意愿任意输入。也为初装系统不熟悉自动功能者应急使用。

### 2.药检报告的打印、发放

可在铅印的规定格式的报告表上填报式打印,也可用空纸全信息打印。

### 3.统计报表

设计有多功能报表生成系统、条件生成系统。可以自由拟定一组条件进行检索,打印各式自由定义表宽、表长和任选内容的全封闭实线报表。

### 4.药品质量分析

以药检报告书数据库为数据源,进行年度、月度或任意条件合格率分析,可显示、打印统计图象报告。

### 5.六十八项咨询

该功能直接回答与药品质量有关的六十八个提问。如什么厂家生产的药品合格率最高、最低及其排序。还有品种、规格、厂地、批号、剂型等类似问题。

### 6.知识库管理

该功能可对国家各级几十部药品标准,国外药品标准、自定标准等《知识库》进行建立、输入数据、查询、修改、版本更新、打印和软件“出版”等管理。

药物分析检验涉及化学、物理学、生物学等多门学科,精度要求高,具有一定深度和广度。系统功能的扩展

与移植由程序系统和知识库的组合关系确定:程序部分满足通用要求,根据配备不同内容的知识库而成为不同的系统。如药物分析检验系统、普通化学品分析检验系统、饮料及食品分析检验系统等。也可作为相应专业的教学软件。

## 三、应用、效益与前景

知识库的设计达到了实用水平,使药物分析检验的实际工作模式产生了突破,实现了规范化、自动化和科学化,改变了传统的手工方式,大大提高了工作效率。以生物检定结果处理为例:一个熟练者,过去手工计算并进行统计学处理约需2~3天,若采用计算器辅助处理也要2~3小时,而且易出错,查错困难;采用该系统只需数分钟,可反复循环复算,容易查错,修改数据方便,结果可靠。该系统还使检验过程操作说明、计算原理、原始记录的书写排版打印等这些难以同步统筹处理的问题纳入了处理范围。

解决了国家药品标准因无法对数学模型及其处理方式进行具体规定而引起的不同处理方法的数据精度的差异问题。有一个显而易见的误差现象:不论是手工计算还是计算器计算,对一复杂数学模型采取多级分步计算时,由于小数取位引起的低位误差会随着分步次数、取舍次数的增加而急剧同高位扩散,甚至失真。从科学的意义上说,特别是作为法定《标准》,对此,应该给予重视和控制。该系统采用总模型一步计算法,只存在最后一次数据取位问题,而且小数点后的取位可根据实际需要现场选择。

该系统能对历检的药品质量结果,进行动态的全方位统计分析,并与药品质量监督、信息咨询相联系。既是一个完整的技术系统又是一个现代化的咨询管理系统。

该系统的研制成功,为我国《药品标准》信息载体现代化、药的分析检验数据处理以及药品质量监督“规范化、自动化和科学化”、特别是法定《药品标准软件版》的提出及进一步研究,提供了一个思路、实例和现实结构,具有重要意义。

鸣谢 上海第二军医大学药学院 龙琨教授、广州第一军医大学计算机系 郭德纨教授、总后药检所 马剑文主任药师等导师对该项研究的热情指导和帮助!