

# 云在实验室信息学领域的应用

## 趋势、机遇、考虑因素、实施建议

### 前言

从样品管理到复杂分析再到安全的数据存储，云已成为实验室中应对几乎所有计算工作量的切实可行的方案。形成这一局面的原因有很多：云具有弹性且高效；云无需一次性购置的大额资本支出 (CapEx)；云使团队能够专注于实验室的优先工作而不是 IT 基础架构。

然而，云并非“一体通用”的方案，而需要严格区分并慎重选择。实验室主管面临的问题是如何将工作量移至云端，同时最大程度减小干扰、复杂性和风险。幸运的是，采用云之前不再需要提供繁琐的理由说明。而与此相反的是，企业领导层现在要求分析实验室经理解释他们为什么尚未采用云优先的方法来满足其当前及未来的软件需求。

本文为实验室经理提供了有关云应用的多个方面的新见解，其中包括：

- 云如何为实验室信息学工作量和流程提供价值
- 采用云能够为实验室 IT、实验室技术人员和实验室经理带来的优势
- 解决关于迁移至云模式的担忧
- 云发展趋势和评估标准
- 如何开始使用云

## 云基础知识

下文对云部署和消费选项的快速概览有助于为本文中所述的关键概念和想法提供背景信息。由于现在许多利益相关者定义这些术语的目的是展示他们自己的产品或技术专长，因此下文采用美国国家标准技术研究院 (NIST) 的定义。

### 云部署模式

“云”只是服务提供商可以快速提供和发布的一个计算资源池（例如，网络、服务器、存储、应用和服务）。“云计算”是一种用于实现对云的随时随地、便捷、按需网络访问的模式。

- **私有云**是专为单个组织运营的云基础架构，可以在内部管理或由第三方进行管理，并且可托管在内部（本地部署）或外部
- **公共云**提供可供公众访问的云服务。众所周知的例子包括 Amazon Web Services (AWS)、Google Cloud、阿里巴巴和 Microsoft Azure
- **社区云**是指在拥有共同关注点的多个组织之间共享的云基础架构，可以内部管理或由第三方进行管理
- **混合云**是保留不同实体但绑定在一起的两种或两种以上的云（私有云、社区云或公共云），其具有多种部署模式的优势
- **多云**是采用多个云服务来减少对单个供应商的依赖，通过选择提高灵活性，并降低风险。多云与混合云的不同之处在于，它指的是多个云服务而不是多种部署模式

### 云消费选项

下面是与实验室信息学相关的三种主要服务模式。

- **基础架构即服务 (IaaS)** 通过网络向用户提供处理、存储和其他基本计算资源。消费者不管理或控制底层基础架构，但可以控制操作系统、存储、部署的应用程序和网络组件（如防火墙）。客户可以完全控制其应用和系统的虚拟化。主要的公共云提供商（AWS、Azure、Google Cloud）均通过这种服务模式提供资源

- **平台即服务 (PaaS)** 通过云来支持交付应用的整个生命周期。PaaS 将开发平台、计算资源、部署基础架构和托管服务相结合。它使客户能够降低开发、部署和管理其应用的各个环节的成本和复杂性。Google App Engine 和 Salesforce Heroku 是众所周知的例子。

- **软件即服务 (SaaS)** 通过网络提供软件解决方案。SaaS 无疑是采用并部署到生产中的最简单、最便捷的云解决方案。例子包括 Microsoft Office 365、Google Apps 和 Dropbox



## 云在实验室信息学领域的价值

虽然没有两个实验室的任务或信息学工作量的特点完全相同，但是大多数实验室都有一个共同的目标：其存在的目的是为关键问题提供有意义的、可执行的答案，使利益相关者能够制定更好的决策并不断改进实验室实践。云可以对实现该核心目标产生重大影响，因为它有助于提供实现有效的数据分析所需的最重要的元素：背景。

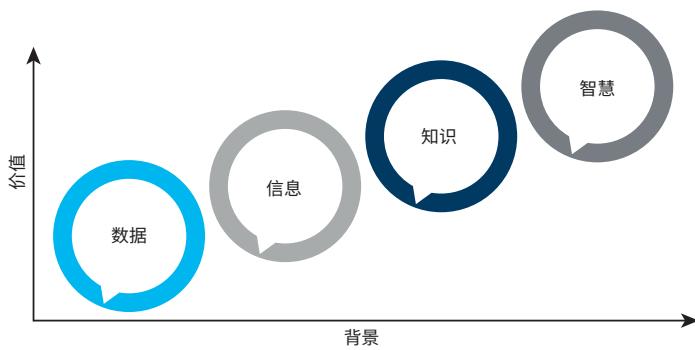
数据本身提供的背景极少。例如，孤立的各个数据元素（如重量或实验室技术人员的绩效指标）是无用的。信息通过整合、比较和对比多个数据元素得以创建。然而，它仍然无法回答诸如样品是否符合法规要求或一个实验室的服务程序是否优于另一个实验室等重要问题。

当前不基于云的实验室信息学系统往往是高度分层的，限制了它们提供将数据转化为信息的能力。这些系统有时不允许重复使用数据，导致得到“暗数据”。它们往往依赖于手动操作和人为决策，效率低下且容易出错。许多系统不易扩展，并依赖昂贵的基础架构。

云的核心价值在于它有利于添加背景。它使信息学实验室不仅能够将数据转化为信息，还能够创造**知识**甚至**智慧** — 能够在多个层面上指导做出更好的决策。将实验室信息学系统部署在云端，可帮助实验室主管挖掘数据以确定：

- 如何提高流程效率
- 如何使培训计划更加高效
- 哪些仪器需要尽早维修或更换
- 如何以更少的工作和更高的一致性实现合规性
- 可以改善实验室性能的许多其他特性

### 价值连续体：背景至关重要



云为实验室信息学系统和流程提供了更高层次的连通性和一致性，从而提供额外价值。它使实验室经理能够整合功能并将背景引入价值连续体的每个阶段，且不会增加成本或风险。云还提供特定的功能，有效推动IT、实验室技术人员和实验室主管的工作。

例如：

- **对于 IT**，采用云可以用更少的成本来完成更多的工作。云模式使实验室无需购买和维护基础架构。它确保组织仅为其实消耗的资源付费。只需少量员工即可满足实验室的计算和服务水平需求，从而节省招聘和聘用新IT员工的资金和时间
- **对于实验室技术人员**，云模式可实现更快速、更轻松、更灵活的数据和工具访问。云还有助于实现核心流程的自动化或简化。仅举一个例子，多云存储模型使团队能够根据需要在任何最有意义的地方轻松地移动数据。没有数据迁移费用，如果团队决定将数据从公共云移回内部私有云，他们可以轻松地完成这项工作而无需支付任何出向费用。可通过简单的门户网站对数据卷进行管理
- **对于实验室主管**，采用云可通过简化的自助式资源访问来降低成本，并提高团队士气。它还有助于更轻松地获得复杂分析、简化的数据迁移等功能。同样重要的是，云模式可以促进团队成员之间以及与其他实验室、部门和业务单位之间的合作。它提高了工作效率，同时实现了知识和技术专长的相互交流
- **从业务角度来看**，云还可以助力实验室数字化转型计划的推进。云提供了一个绝佳的机会，使实验室得以跨越至现代化数字基础架构，实现全新水平的运营效率。它可以极大地提高组织的灵活性，帮助其完成核心任务

## 厘清对云的担忧和误解

由于存在各种预判的风险及其他担忧，采用云仍然会让许多实验室经理十分焦虑。虽然在涉及实验室宝贵且敏感的数据时最好谨慎行事，但是最新一代云服务和解决方案已经解决了许多担忧的问题。一些更常见的顾虑包括：

- **云是否会增加数据泄露或数据丢失的风险？** 对于希望将工作量移至云端的实验室经理来说，安全性是他们最迫切关心的问题，并且理当如此。例如，将数据迁移到公共云或从公共云迁移出数据、将数据置于实验室直接控制之外以及公共云的“共同责任”安全模型，意味着保护实验室的数据和应用仍然主要是实验室的责任，而不是服务提供商的责任。

但是，云还可以提供创新方法来解决安全挑战。例如，多云服务使实验室能够针对大量数据集和用户群测试安全机制，以识别并防范复杂的攻击。此外，许多先进的数据可靠性和数据丢失防护技术已被证明在阻止传统安全技术甚至无法检测到的高级攻击方面非常有效

- **云能否提供企业级功能？** 一些实验室主管可能认为云产品不符合企业级可靠性、安全性和数据保护的要求。但是，与传统的本地部署选项相比，云可以提供更出色的数据持久性、数据管理功能和安全机制

- **数据备份是否更困难和昂贵？** 数据迁移和备份并非一定会增加实验室信息学工作量的成本和复杂性。例如，管理员可以通过即时快照在云端备份数据，这些操作只需几秒而不是几小时，从而能够更频繁地备份数据。此外，适当地追踪和监控云服务的使用，可以帮助解决对服务提供商“意外费用”或意外大额发票的担忧。这有助于将采用云的总成本保持在预期范围内

- **实验室是否会被锁定在一家供应商的解决方案中？** 建议仔细评估云服务提供商对数据迁移和数据出口如何收费。但是，许多服务提供商已经认识到，更符合其利益的做法是提高客户端的数据机动性，而不是试图锁定客户数据

## 实验室信息学和云

下图突出显示了实验室信息学的三个领域以及满足每个领域需求的常见产品。

### 传统信息学



### 1. 业务系统

过去，企业资源计划 (ERP) 和业务流程管理 (BPM) 等实验室信息学解决方案的选择标准仅包括与它们进行交互的能力。业务系统的运营支出 (OpEx) 由企业 IT 承担。但是，随着云的采用，OpEx 成为一个变量，其取决于所选择的云解决方案的类型。

IT 的这一扩展角色意味着移至云端时必须考虑业务系统的更多方面。例如，ERP 或 BPM 现代化计划的状态将有助于深入了解最符合总体 IT 战略的信息学解决方案类型。通过考察这些考虑因素，实验室管理层可以缩小其产品搜索范围。它还有助于使实验室与 IT 保持一致，以确保最终选择的云解决方案获得支持。

## 业务系统发展趋势和云建议

在技术层面，大多数业务系统已经严重依赖于云计算。如果组织还尚未在云端部署这些系统，则很可能已经制定了一套实施计划。虽然 SaaS 是大多数业务系统的理想服务模式，但部署方法将受架构偏好的影响。

例如，一旦确定了安全性和性能考虑因素，组织就可以选择具有私有云的 ERP 供应商。部署方法是实验室领导层要考虑的关键因素，因为私有、公共或混合部署的选择将影响解决方案在其他信息学层中的可行性。

## 2. 实验室管理和追踪系统

作为实验室运营的中心枢纽，云端实验室管理和追踪系统提供了许多吸引人的优势。

通常，实验室利用 LIMS、LES 或 ELN 来管理其样品通量和实时工作流程。将这些本地部署系统的维护转移到云端，可以释放 IT 资源，使其能够专注于改进从信息学系统中提取数据的实验室运营报告或分析面板。

将现有 IT 资源集中在高价值、高优先级项目上的能力可以显著提高实验室的总体效率。在将管理和追踪系统移至云端的成本效益分析中，这也是一个重要的考虑因素。

	实验室信息学 管理系统 (LIMS)	实验室执行系统 (LES)	电子实验室记录本 (ELN)
实验室类型	分析测试	分析测试	研发
重心	以样品/流程为中心	以样品/流程为中心	以实验为中心
目的	法规认证、实验室中心	工作流程、SOP、法规认证	IP、效率、记录保存

## LIMS、LES 和 ELN 发展趋势和云建议

在部署 LIMS 解决方案时，一个关键考虑因素是如何将系统与当前的实验室运营完全集成。实现这一目标的复杂性似乎令人畏惧，但是 LIMS 使用的和生成的是良好结构化的数据。简单的数据使 SaaS 成为分析实验室中理想的云服务模式。如果与业务系统或其他信息学软件存在重要的出站接口，则 PaaS 解决方案可提供更高的灵活性。

最重要的是，LIMS 解决方案应当与当前或计划的部署模式并行。如果明确要求使用私有或公共云模式，则实验室主管应当与供应商讨论他们利用公共云还是私有云基础架构。

用户与 LES 和 ELN 产品的交互程度使实验室人员的输入变得至关重要。除与工作流程的适应性以外，实验室主管还必须考虑云产品与旧系统或所计划的系统现代化的战略契合度。

实验室还需要确定他们的 ELN/LES 相对于其他系统是静态的还是动态的。例如，在研究和开发环境中，ELN 可以作为独立应用来部署，以整合实验数据并保持合规性需求。

另一方面，QC 实验室感兴趣的是能够动态触发下游软件应用事件的 LES 来优化工作流程。在选择云产品之前，实验室必须区分这种分类。动态系统的复杂程度可通过其在云端托管的不同方式得以大大降低或增加。

### 建议用于 LIMS/LES/ELN 的服务模式：SaaS

SaaS 模式通常最适合 LIMS/LES/ELN 部署，因为它将灵活性、成本效益和本机安全进行了结合，是适应各种工作量的可行的云选项。

## 3. 分析数据系统

分析数据系统涵盖实验室生成的仪器数据的采集、分析、存储和报告。这一领域提供的两类信息学解决方案包括数据库系统和科学数据管理系统。

### 数据系统概述

数据系统用于样品的数据采集、分析和结果集报告。实验室中最常见的数据系统是色谱数据库系统 (CDS) 和质谱数据库系统。数据系统具有各种拓扑结构，其中涵盖控制单台仪器的单机工作站部署以及管理多个实验室站点的数百台仪器的客户端/服务器模式。

## 数据系统发展趋势和云建议

仪器数据系统为移至云端的实验室带来了独特的数据可靠性挑战。从仪器采集的数据源很少占用本地存储，也从不提供长期存储解决方案。如果发生网络故障，SaaS 数据系统将使实验室失去对仪器的所有控制，同时在发生故障时也存在较高的数据丢失风险。

缺少对故障转移的支持，提高了基于 SaaS 的数据系统的复杂性。实验室中的冗余措施可提供故障转移支持，但是在 SaaS CDS 产品的成本效益分析中需要考虑这种配置。

正在设计能够机载存储原始数据的新型仪器。但是，这些系统还需要许多年才能完全构成实验室资源。缺乏处理网络故障转移的机载计算和存储资源凸显了仪器数据系统的技术缺陷。这一局限性阻碍了 SaaS 成为生产环境中实际可行的选择。

## 建议用于数据系统的部署模式

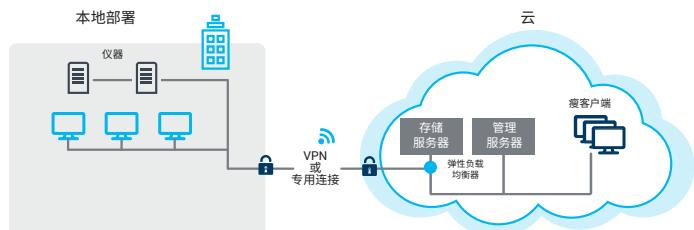
用于数据系统的最佳云服务模式是 IaaS。该模式使实验室能够将实验室中的 IT 占用空间精简为仅包括仪器控制和采集所需的资源。其余数据系统组件可以在云端虚拟化，从而利用云在动态扩展和可访问性方面的优势。

右上图是此类部署的一个示例，其中将 OpenLab CDS 部署为 IaaS 产品。该架构类似于利用 VMware/Citrix 虚拟化进行应用程序托管的本地部署系统。这两种部署类型之间的一些差异包括：

- **客户端可扩展性** — IaaS 具有优于其本地部署替代方案的动态可扩展性。IaaS 可根据需求实现无缝资源扩张或收缩
- **远程访问** — 使用 IaaS 模式能够极大提升从非现场位置访问数据系统的能力。如果利用公共云提供商，则可以轻松地将实验室 IT 环境复制到期望的地理位置
- **灾难恢复 (DR)** — 由于本地部署 DR 策略在系统发生故障时需要资源冗余，导致需要对大量未使用资产进行大笔资本支出。云避免了保留备用基础架构的资本支出

## 建议用于数据系统的部署模式

IaaS 具有足够的通用性，可部署在私有云、混合云和公共云模式中。此外，分析数据系统层通常独立于其他层，因此可以在战略规划中优先考虑这些系统，且不影响数据系统支持。对于全面了解其信息学产品组合的实验室来说，这为开发云战略提供了更加结构化的方式。

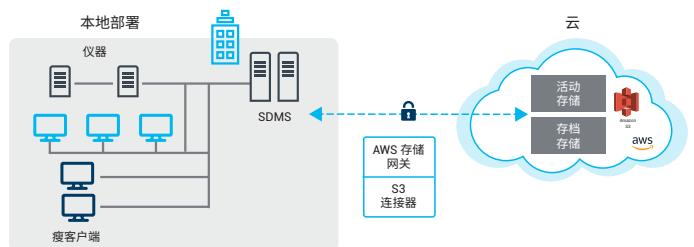


一个部署为 IaaS 产品的数据系统示例

## SDMS 概述

SDMS（科学数据管理系统）处理实验室内所有仪器的数据存储，并管理使用信息学数据进行的后处理任务。

SDMS 解决方案以数据为中心，对于考虑采用云来满足其信息学需求的早期阶段的实验室而言，这是一种理想的选择。在确定 SDMS 云战略之前要做出的一个关键区分是，从实用的角度来看，它以数据系统为中心还是以实验室为中心。如果实验室主要将 SDMS 用作其数据系统的后端存储解决方案，则应一起处理这两种系统。另一方面，如果将 SDMS 用作实验室范围的存储解决方案以满足任何/所有信息学需求，则可以选择将其作为单独的系统来处理。



一个部署为 IaaS 产品的 SDMS 示例

## **SDMS 发展趋势和云考虑因素**

在以实验室为中心的 SDMS 方案中，实验室可以选择许多云服务来满足他们的需求。新款 SDMS 产品可作为 IaaS/SaaS 解决方案和以任何部署模式提供。对于当前本地部署的 SDMS，通过连接到云存储位置来扩展数据存储容量是合乎逻辑的第一步。这种混合方法能够以被动/主动容量的方式使用云存储，同时还可以利用云提供的一站式存档解决方案。

## **如何开始**

云技术的进步极大地扩展了部署和管理实验室信息学工作量的选择范围。面对如此多的选择，很容易在调查阶段采取不必要的步骤，并可能受到疲乏或惰性的影响。安捷伦的首要目标是为每一位客户提供指导，并针对客户的不同需求简化寻找最佳解决方案的过程。

在考虑采用云时一个很好的出发点是提出几个基本问题：

- 具体而言，您希望通过移至云模式来实现什么目标？
- 实验室 IT 员工和实验室技术人员目前对云的熟练程度和技能水平如何？
- 您是否拥有能够争取到管理层支持的拥护者？
- 您是否有可信赖的合作伙伴来设计和实施该计划？

最后，值得注意的是，您有各种云提供商可供选择。您需要确保您有意向选择的云服务提供商能够支持您正在考虑的所有云模式、使您的组织获益的所有云部署选项以及您所有的特定目标。

如需了解安捷伦在云方面所开展工作的更多信息，请访问：

**[www.agilent.com/chem/openlab](http://www.agilent.com/chem/openlab)**

查找当地的安捷伦客户服务中心：

[www.agilent.com/chem/contactus-cn](http://www.agilent.com/chem/contactus-cn)

免费专线：

800-820-3278

400-820-3278 (手机用户)

联系我们：

[LSCA-China\\_800@agilent.com](mailto:LSCA-China_800@agilent.com)

在线询价：

[www.agilent.com/chem/erfq-cn](http://www.agilent.com/chem/erfq-cn)

**[www.agilent.com/chem/openlab](http://www.agilent.com/chem/openlab)**

本文中的信息、说明和指标如有变更，恕不另行通知。

© 安捷伦科技（中国）有限公司, 2019

2019年2月21日, 中国出版

5994-0718ZHCN

