

Предложен пакет программного обеспечения UniChrom для унификации работ с любым хроматографическим оборудованием

АВТОРЫ

С.В. Черепица — заведующий лабораторией аналитических исследований Белорусского государственного университета (Белгосуниверситет), канд. физ.-мат. наук

С.М. Бычков — младший научный сотрудник Белгосуниверситета

А.Н. Коваленко — научный сотрудник Белгосуниверситета

А.Л. Мазаник — старший научный сотрудник Белгосуниверситета

UniChrom — ЕДИНЫЙ СТИЛЬ РАБОТЫ С ХРОМАТОГРАФИЧЕСКИМ ОБОРУДОВАНИЕМ

Введение

На сегодняшний день производители аналитического оборудования предлагают несколько десятков моделей хроматографов. Программное обеспечение (ПО), прилагаемое к хроматографу, упрощает понимание этого прибора и максимально облегчает работу с ним в плане управления и регистрации, отображения и обработки полученных хроматограмм, создания итоговых отчетов. Производители хроматографического оборудования разрабатывают ПО с целью скрыть от пользователя всю сложность хроматографического комплекса.

При выборе той или иной хроматографической программы пользователи обычно обращают внимание на следующее:

- способность выполнения трудоемких расчетов;
- наличие большого числа сервисных служб и возможностей для обработки и отображения большого объема информации;
- устойчивость работы (без сбоев и зависаний);
- простоту в освоении;
- приспособленность к заводским условиям и отдельным лабораториям;
- возможность обмена с коллегами наработками и достижениями по электронной почте, совместного решения научных и практических задач, используя единую систему хранения, обработки и анализа хроматографических данных;
- возможность обмена файлами, в которых одновременно представлены параметры работы

хроматографа, оптимизированные для конкретной методики выполнения измерений (МВИ) (паспорт каждой хроматограммы, градуировки, результаты валидации, автоматические алгоритмы измерения проб, обработки данных, описание МВИ в формате RTF);

- сравнительную стоимость;
- наличие постоянного сервисного обслуживания и сопровождение в едином формате для всех пользователей, в любой точке Земли.

Во времена становления компьютерной хроматографии, когда еще не было сильных производителей специализированного хроматографического ПО, каждый производитель был вынужден предлагать оборудование со своим ПО. Эта тенденция сохранилась и в наши дни. В табл. 1 приведены наиболее распространенные модели хроматографов и поставляемое к ним ПО.

Для пользователей аналитического оборудования данная ситуация связана с определенными неудобствами. При наличии в лаборатории различных моделей хроматографов они вынуждены изучать и работать с несколькими пакетами ПО. При этом трудно сравнивать: хроматограммы, записанные на различных приборах; отработанный шаблон МВИ с библиотекой градуировочных кривых, таблицами параметров удерживания компонентов для построения автоматической идентификации. Нельзя простым копированием файла перенести на другой хроматограф шаблон формирования

итогового отчета. Для предоставления данных в заводскую сеть, оператору придется самому составлять сводную таблицу результатов, так как структуры, формы протоколов измерений и форматы представления данных для всех хроматографических программ свои.

Здесь стоит привести для наглядности довольно схожую ситуацию. Печать документа на пишущей машинке. С повсеместным распространением компьютеров появилась возможность автоматизировать этот процесс. Принтер, как печатающая машинка, под управлением персонального компьютера. Для автоматизации подготовки и печати документов сразу было предложено несколько текстовых редакторов: «FrameWork», «ChiWriter», «Слово и дело», «Лексикон» и т.д. Это привело к тому, что продолжение работы с копией документа, подготовленного в одном редакторе, на компьютере с другой программой стало невозможным. Требованию универсальности было предложено решение в виде MS Word.

Анализ этой ситуации показывает, что объективно имеется спрос на предложение универсального пакета ПО, по крайней мере, для наиболее распространенных хроматографов. Но среди отмеченных выше «за», есть и одно «против».

Партнеры и Конкуренты

Непосредственные пользователи хроматографов, руководители исследовательских и испытательных лабораторий в соответствии с рыночными условиями объективно заинтересованы в снижении издержек своей работы. Таким образом, они объективно и субъективно заинтересованы в наличии на рынке пакета универсального ПО. Можно сказать, что пользователи хроматографов являются *Партнерами* в разработке и продвижении на рынке такой продукции.

Объективно каждый из устояв-

Перечень наиболее распространенных в СНГ моделей хроматографов и соответствующего к нему ПО

Модель хроматографа	Название фирмы-производителя	Наименование ПО
Agilent (HP)	Agilent (Hewlett-Packard)	ChemStation
Varian	Varian	Star WorkStation
Perkin-Elmer	Perkin-Elmer	TurboChrom / TotalChrom
Shimadzu GC17/2010	Shimadzu	Class VP
Кристалл 2000М/5000	ЗАО «Хроматэк»	Хроматэк Аналитик
КристалЛюкс 4000	ЗАО «Метахром»	NetChrom
Цвет-800	ОАО «Цвет»	Цвет-Хром
Миличром-5	ЗАО «Научприбор»	E-Chrom
Миличром А-02	ЗАО «ЭкоНова»	M-Chrom
Trace2000/Focus	Scientific Software	EZChrom

шихся на рынке производителей хроматографического оборудования уже имеет свой пакет ПО, который включен в комплект поставки. Срок эксплуатации хроматографа составляет от 10 до 30 лет, в то время как ПО претерпевает моральное старение уже через 3—4 года. Как следствие, каждый производитель вынужден содержать штат программистов, дизайнеров и методистов для непрерывного совершенствования своего ПО. Они должны все время вносить в ПО все новые требования валидации и фармакопейных статей, поддерживать работу с новыми версиями операционной системы, согласовывать передачу данных в лабораторно-информационную менеджмент-систему (ЛИМС) и т.д. Отказ от своего ПО для производителей сопряжен не только с большими финансовыми потерями, но и с потерей своего престижа на рынке, сокращением рабочих мест, появлением зависимости от внешнего поставщика ПО. Производители объективно и субъективно не заинтересованы в появлении на рынке такого универсального пакета ПО. В этом смысле производители хроматографов являются *Конкурентами* предлагаемого решения.

Предмет для обсуждения

Для унификации работ с хроматографическим оборудованием различных фирм-производителей был осуществлен проект по разработке универсальной системы автоматизации хроматографических исследований UniChrom — Universal Chromatography.

Изначально в основу построения системы UniChrom был заложен принцип модульности и универсализации пользовательского интерфейса для различных приборов, который позволяет:

- работать с приборами, поддерживающими электронное управление и сбор данных в едином стиле для разнородных приборов;
- поддерживать работу с цифровыми приборами как локально, так и по протоколу TCP/IP через локальную сеть или Internet, даже с приборами, не имеющими штатно таких возможностей;
- работать с любым типом хроматографического оборудования (газовые и жидкостные хроматографы, системы капиллярного электрофореза с автоматическим дозатором газовых или жидких проб);
- хранить в одном файле данные GLP (Good Laboratory Practice), метод обработки, ре-

зультаты, калибровки, градуировки, audit trail log;

- поддерживать работу приборов, имеющих автоматические дозаторы;

- автоматизировать работу с устаревшими моделями хроматографов и одновременно работать в едином стиле с современными;

- свободно обмениваться файлами с результатами измерений, полученных на различных хроматографах;

- самостоятельно создавать любые сценарии выполнения измерений и экспертной обработки данных;

- автоматически проводить тестирование и поверку хроматографа.

Наиболее наглядно перечисленные выше возможности

UniChrom оказываются востребованными при работе ОТК крупного химического предприятия, например, нефтеперерабатывающего завода.

Как было раньше. В ЦЗЛ для требуемых видов испытаний по государственным стандартам, техническим условиям или другой нормативной документации выполнялась адаптация МВИ к имеющемуся парку аналитического оборудования. Подбирались оптимальные режимы хроматографа, распечатывалась хроматограмма с идентифицированными пиками, расписывались: последовательность обработки хроматограмм, алгоритм расчета концентраций, оценки неопределенности. Утвержденный много-

страничный отчет передавался в цеховые испытательные лаборатории, в которых переданную вместе с отчетом МВИ необходимо было адаптировать к имеющемуся хроматографу.

Теперь в ЦЗЛ копируют всего только один файл с отлаженным шаблоном МВИ. Он содержит заданные параметры температурных режимов и газовых потоков хроматографа, с наработанными библиотеками для автоматической идентификации индивидуальных компонентов (входящих в состав испытуемых веществ), с базами данных их физико-химических свойств, условиями валидации. Используя копию файла можно продолжить работу с шаблоном в любой лаборатории.

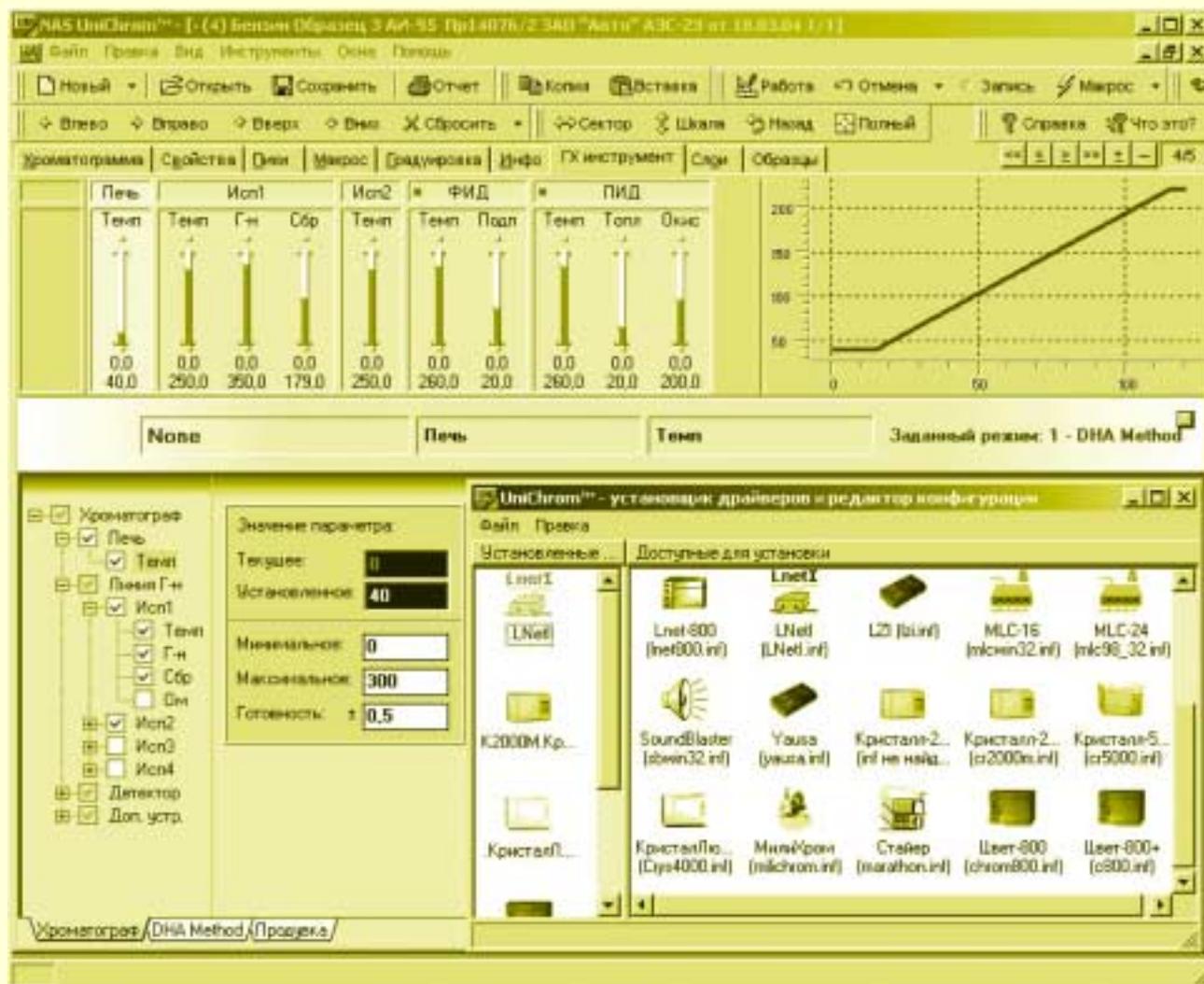


Рис. 1. Изображение настроек хроматографа Кристалл 2000М.

Здесь имеется некий аналог с шаблонами в формате MS Word или MS Excel. Начать работать с ними можно на любом компьютере, независимо от фирмы-производителя, поскольку операционная система на персональных компьютерах во всех странах уже одна и та же — Windows. Более того, шаблонами МВИ можно моментально обмениваться через Интернет с коллегами других предприятий, даже если они находятся на другом континенте.

Приведенное на рис. 1 изображение настроек хроматографа Кристалл 2000М будет выглядеть так же, как и в случае работы на приборе HP 5890/6890 или, например, Shimadzu GC-17/2010. На сегодняшний день пакет ПО UniChrom поддерживает полный контроль и управление следующими хроматографами: газовыми (Agilent HP 6890N/6890Plus/5890Series II/5890A/4890D; Shimadzu GC-17A/2010; ThermoFinnigan Trace2000/Focus; Кристалл 2000М/5000; Кристаллюкс-4000М; Цвет-800), жидкостными (Милихром-5, Милихром-А-02, Стайер) [1].

Любые ГХ/ЖХ системы поддерживаются с помощью АЦП: LabNET, E-24, Aquilon, LZI.

Принципиальное отличие ПО UniChrom от других пакетов

Сравнение разных пакетов ПО для хроматографии на первый взгляд показывает их общую схожесть, но есть небольшие внешние различия. Где-то используется меню, где-то панель инструментов, где-то стартовый экран. Все это внешние детали, которые не скрывают главного. Есть некая логическая структура, через которую проходят полученные данные, на пути к последней визуальной форме — отчету о выполненном анализе. В табл. 2 приведена структура и последовательность действий любой компьютерной хроматографической системы.

Практически все системы обработки данных, существующие на

Таблица 2

Последовательность работы ПО хроматографической системы

Этап	Назначение
1. Загрузка МВИ в измерительный прибор	Установка режимов прибора для проведения анализа. Режимы содержатся в файле метода
2. Измерение аналитического сигнала	Получение сигнала с детекторов и отображение его визуально для наблюдения. Получается файл данных или сигнал соответствующего детектора
3. Обработка аналитического сигнала	Обработка сигнала, например, фильтрация с целью обеспечения наилучших шумовых характеристик и устранение случайных выбросов, возникающих во время измерения. Получается фильтрованный сигнал
4. Интегрирование сигнала	Поиск пиков и вычисление их аналитических параметров. Получается таблица пиков, найденных по условиям, описанным в файле метода
5. Идентификация пиков	Сопоставление таблицы пиков, получившейся после интегрирования и библиотечной, калибровочной таблицы, содержащейся в файле калибровки. Получается таблица идентифицированных пиков
6. Расчет результатов	Расчет результатов по найденным площадям или высотам пиков, которые пропорциональны количеству вещества в пробе. Если количественный расчет выполняется с использованием градуировки, то необходимы градуировочные файлы, содержащие таблицы компонентов градуировки с указанными значениями стандартных концентраций. Такие файлы называются градуировочными уровнями
7. Выдача итогового отчета	В соответствии с выбранным пользователем форматом отчета создается файл отчета с результатами количественного и/или качественного анализа

рынке, имеют описанную выше структуру. Впервые представленная компанией Hewlett Packard эта структура всем хорошо знакома. В настоящее время она легла в основу продукта HP ChemStation фирмы Agilent Technologies. Эта схема настолько проста и очевидна, что реализована практически всеми производителями хроматографического ПО.

Если взглянуть на эту схему, то видно, что двигаться по ней можно только в одну сторону, от пункта 1 к пункту 7. Но возможно перемещение по схеме и снизу вверх. Например, переход от пункта 5 к пункту 4. Такой переход возможен, если, например, исследователь не устроили результаты пункта 6 из-за неправильно

выполненного пункта 5. Есть только два варианта, чтобы пункты 1—7 сработали безупречно:

- сделать прибор, который бы идеально воспроизводил анализы данных;

- подбирать пробы, которые не сильно отличаются друг от друга.

Если первый вариант возможен и теоретически и практически, то второй — это нонсенс как для исследователя, так и для сотрудника лаборатории качества, потому что исследователю необходимо видеть и норму, и отклонения от нормы.

Если продолжать далее аналогию с офисными пакетами, то давайте представим вместо этого множества файлов, пусть даже и лежащих в одной папке — один,

документ как в MS Word, рабочую книгу как в MS Excel, базу данных как MS Access.

Есть документ — сложный, многоуровневый, со страницами, оглавлением, указателями, закладками. В нем находятся объекты — параграфы, картинки, графики, таблицы. Это офисный пакет, наличие которого всем уже привычно и очевидно. А теперь представим вместо:

- текста — сигналы с детекторов;
- параграфов — пики;
- таблиц — таблицы пиков;
- градуировочных файлов — градуировочные графики;
- страниц — страницы хроматограммы, пиков, метода, управления прибором.

И все это — один файл — ваш документ.

Файл системы UniChrom — GC / LC Office document — содержит:

- полученные данные, представленные хроматограммами;
- паспорт (или свойства) хроматограмм;
- автоматические алгоритмы обработки для каждой хроматограммы;
- таблицы пиков со всеми необходимыми полями (имя пика, высота, площадь, время удерживания, полуширина, концентрация и т.д.);
- методы измерений, представленные набором параметров хроматографа;
- градуировки;
- вспомогательную информацию в формате RTF;
- структуру документа в виде таблицы слоев хроматограмм;

— журнал отладочной информации;

— журнал событий: GLP-log.

Итоговый отчет установленного образца генерируется шаблоном в MS Excel. Важно отметить, что все полученные данные и условия испытаний передаются в соответствующие ячейки заготовленного шаблона непосредственно из UniChrom по технологии OLE Automation. Вследствие динамической связи между UniChrom и шаблоном в MS Excel все изменения параметров в UniChrom сразу же отражаются в ячейках шаблона.

Именно такой подход формирования итогового отчета реально позволил провести автоматизацию обработки хроматографических данных по нескольким де-

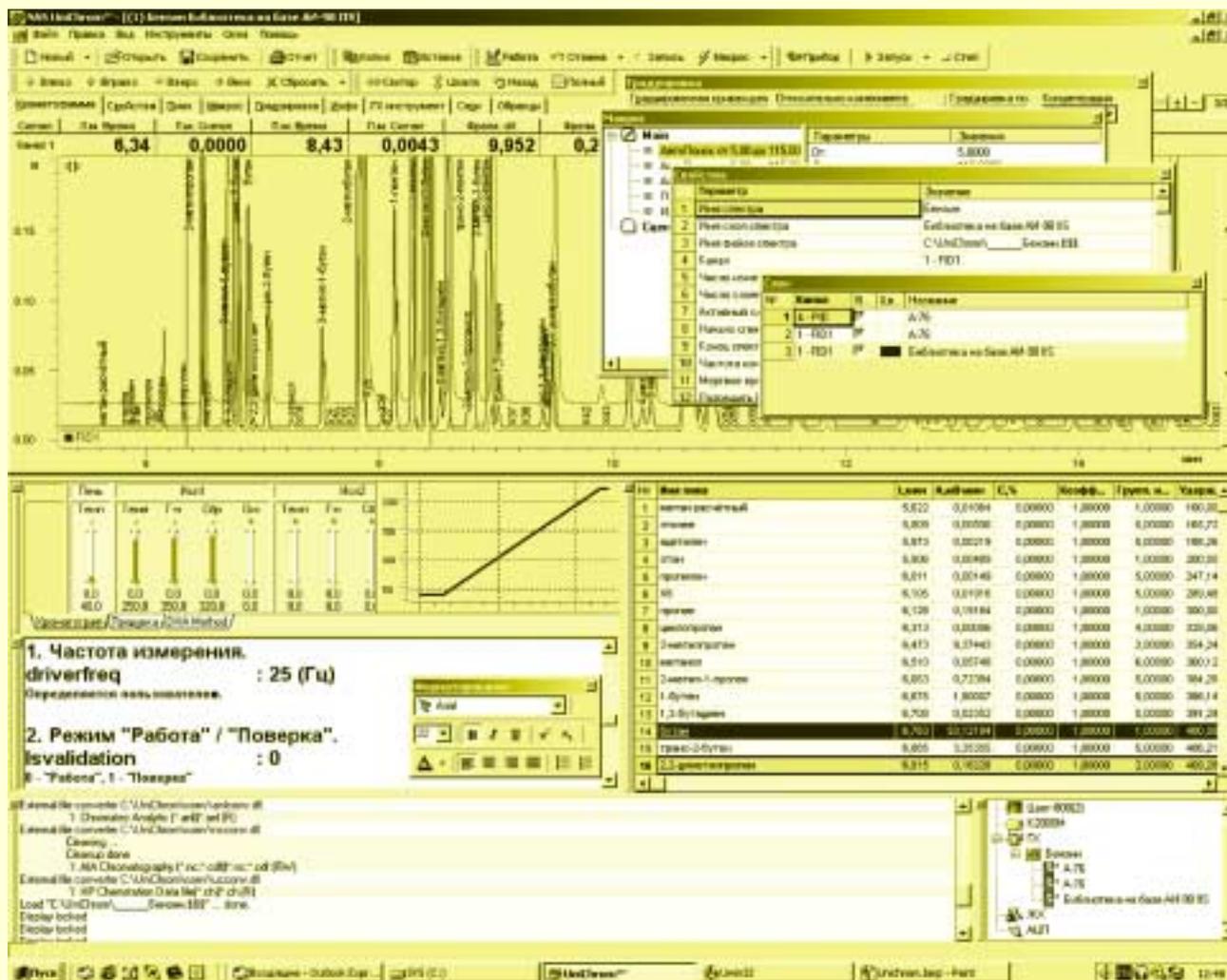


Рис. 2. Файл системы UniChrom — GC / LC Office document.

должен сразу же появиться в градуировочном графике? Если вы исправили ошибочно введенную стандартную концентрацию, то почему градуировка не меняется сразу? Это подразумевается, это должно быть. Так работает концепция Document-View, предложенная около 15 лет назад известными производителями средств разработки ПО.

Просто представьте — система обработки хроматографической информации, построенная по принципам, применяемым в тысячах программ. Вы работаете с вашими данными также, как в Corel Draw, MS Office, Adobe Photoshop и т.д.

Есть документ, в нем живут объекты, изменения свойств которых сразу отображается в самом документе. Ничего нового. Система UniChrom построена именно по таким принципам со второй версии, написанной в 1992 году.

Заключение

Рассмотрим для наглядности те области применения универсального ПО для работы с аналитическим оборудованием, где экономическая и социальная эффективность его применения наиболее очевидна. Например, анализ остаточного содержания пестицидов проводится в:

- центрах стандартизации, метрологии и сертификации (Госстандарт России);
- центрах гигиены, эпидемиологии и здоровья (Минздрав России);
- отделах аналитического контроля (Минприроды России);
- ветлабораториях;
- контрольно-токсикологических лабораториях;
- лабораториях крупных хлебозаводов, молокозаводов, заводов по производству комбикормов, плодоовощных комбинатов (Минсельхозпрод России);
- в лабораториях предприятий по снабжению питьевой водой крупных населенных

пунктов (Минжилкомхоз России);

— учебных и исследовательских лабораториях вузов, в которых проходят обучение будущие специалисты (Минобразования России и Минздрав России).

Возможность применения единого ПО при работе с аналитическим оборудованием позволит оперативно разрабатывать и внедрять в повседневную практику новые МВИ практически сразу во все перечисленные выше лаборатории, эффективно проводить межлабораторные сравнительные испытания, существенно упростить подготовку методического материала для учебного процесса.

ИСПОЛЬЗОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Cherepitsa S.V., Bychkov S.M., Kovalenko A.N., Mazanik A.L. The Universal Chromatographic Data System — UniChrom. — Abstracts of Pittsburgh Conference on Analytical Chemistry and Applied Spectroscopy, 9–14 March 2003. — Orlando, Florida, 2003. — № 90. — P. 49.

UniChrom

единый стиль работы с хроматографическим оборудованием



Сертификат
Госстандарта России



Сертификат
Госстандарта Украины



Сертификат
Госстандарта Беларуси

Поддержка языков:



RUS



ENG



DEU



FRA



Сценарии выполнения измерений и обработки данных.

Построение итоговых отчетов произвольной формы.

Полный контроль и управление:

- температурными зонами и газовыми потоками;
- газовыми и жидкостными автодозаторами;
- плунжерными и шприцевыми насосами.

Тел./факс: +375 172 262517, www.unichrom.com