

ЭЛЕКТРОННЫЙ ЛАБОРАТОРНЫЙ ЖУРНАЛ (ПРОГРАММА NG8) КОМПАНИИ WATERS КАК СРЕДСТВО АВТОМАТИЗАЦИИ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ ЛАБОРАТОРИЙ

В.Ронжин, компания Waters
waters@co.ru

Компания Waters – крупнейший в мире производитель оборудования для высокоэффективной жидкостной хроматографии, ультраскоростной хроматографии, масс-спектрометрии и программного обеспечения для лабораторий (рис.1). Созданная в 1958 году, сегодня – это независимая, динамично развивающаяся корпорация, насчитывающая около 5000 сотрудников в 52 странах мира. В нашей стране представительство фирмы Waters работает уже 30 лет. Оборудование и программное обеспечение установлено на многих предприятиях различных отраслей промышленности. В статье изложена программа автоматизации деятельности аналитической лаборатории – электронный лабораторный журнал, описаны ее функции, характеристики и преимущества.

Задачи максимальной автоматизации рабочих процессов одинаково актуальны как для крупных лабораторий с большой численностью персонала, круглосуточной занятостью, длинным перечнем самых разнообразных видов и методов анализа, обширным парком оборудования, так и для небольших, где количество сотрудников составляет 2-3 человека, всего несколько типов приборов и достаточно короткий список анализируемых веществ. И там и там ведется и ежесуточно заполняется большое количество различных бумажных форм. Одни и те же лабораторные данные переписываются и переходят из одного журнала в другой, собираются воедино для каких-либо статистических отчетов или, наоборот, выполняются разнообразные выборки для предоставления тем или иным заинтересованным службам. Таким образом, на

эти процессы любая лаборатория тратит большую часть рабочего времени. Эту область деятельности химико-аналитических лабораторий можно максимально автоматизировать, чтобы значительно сэкономить необходимое для данной работы время, избежать элементарных ошибок при неоднократном переписывании и передаче данных, обеспечить максимальную сохранность полученных аналитических данных, сделать возможным их автоматический обсчет и обработку, упорядочить хранение, что максимально облегчит их последующий поиск, централизует и регламентирует доступ к полученной лабораторной информации и даст возможность ее использования в режиме реального времени. А также сведет до минимума необходимость использования любых бумажных форм в лаборатории.



Рис.1. Один из приборов компании Waters для ультраскоростного хроматографического анализа – Acquity UPLC H class.

Какие же конкретно лабораторные процессы можно автоматизировать с помощью программного обеспечения?

Начнем с того, что большинство современных лабораторий имеют многочисленные источники получения аналитической информации. Это самые разнообразные приборы различных фирм производителей, каждый из которых зачастую имеет свое собственное программное обеспечение, и персональные компьютеры с рабочих мест сотрудников лаборатории, где происходит всевозможная обработка полученных данных, их сведение в различные протоколы, отчетные формы, сертификаты качества и т.д. При этом вся полученная информация хранится на бумажных носителях и на компьютерах, непосредственно связанных с приборами, и на ПК сотрудников. Причем эта информация находится в виде многообразнейших типов полученных файлов хроматограмм, спектров и т.п., различных офисных приложений, как-то Word, Excel, PowerPoint, MS Access.

И всю эту информацию необходимо хранить в течение длительного времени (определяется

в каждой лаборатории конкретными нормативами), каталогизировать ее для удобства и минимизации времени поиска и анализа, сделать доступной для всех заинтересованных лиц с любого клиентского места и при этом желательно обеспечить возможность просмотра и обработки искомого спектра, хроматограммы и т.п., полученных на каждом установленном в лаборатории приборе, также с этого же клиентского места, а не только непосредственно работая на компьютере самого прибора.

Кроме этого, при необходимости нужно иметь возможность автоматической передачи любых полученных данных в другие информационные системы (ERP, MES, PIMS, LIMS и т.д.), офисные приложения. По мере накопления полученной аналитической информации, расширения перечня проводимых анализов, увеличения количества проб и используемых приборов эта задача становится все более актуальной.

Электронный лабораторный журнал (ЭЛЖ) (программа NG8) обеспечит автоматическую архивацию всего цикла обработки исходных данных, обработанных и обчисленных значений и результатов, а также всех принятых решений и всех данных, посылаемых на печать.

Как это достигается?

В программе реализованы два принципа архивации данных.

File Capture – это функция автоматического захвата файлов (шаблоны извлечения), полученных на любых приборах любых фирм-производителей (ГХ, ВЭЖХ, МС и т.д.). По мере проведения анализа на каждом приборе и получения исходной информации на нем каждый файл с этого прибора при помощи шаблона извлечения архивируется в базу данных. При этом файл будет автоматически каталогизирован. Из самой структуры файла (также имени файла) считывается вся необходимая информация и разносится по различным поисковым полям (тэгам). Это может быть и название пробы, и ее шифр, прибор, где проводился анализ, время и дата, определяемые компоненты, идентификационный код лаборанта, формат данных и т.п., любая необходимая или желаемая информация, по которой необходимо проводить в дальнейшем поиск данных. Конфигурировать и настраивать эти шаблоны извлечения файловых данных может при желании сам заказчик и пользователь программы.

Кроме архивирования оригинальных исходных файлов, программа автоматически параллельно конвертирует их в формат JCAMP – международный, независимый от производителей приборов стандарт. Благодаря этому любой пользователь может со своего рабочего места с помощью встроенного в программу специального просмотрщика (визуализатора) данных (программа Inspector) просмотреть и обработать любую хроматограмму, любой спектр независимо от того, на каком приборе какой фирмы-производителя он получен. Он имеет возможность выполнить практически любую функцию, как, например, проинтегрировать хроматограмму, автоматически сравнить спектры, просмотреть полученные данные в формате 2D или 3D и т.д. Нет необходимости говорить, насколько удобно работать с данными любого прибора, не сходя со своего рабочего места и не устраивая очередь вокруг тех или иных приборов или программ.

Print Capture – это функция автоматического захвата любых документов, посылаемых на печать (в любом формате). Здесь по аналогии с захватом файлов создаются шаблоны извлечения, которые обеспечивают при архивации любых печатных документов их автоматическую архивацию и каталогизацию. Из структуры документа также извлекаются все необходимые данные и разносятся по соответ-



Рис.2. Внесение данных в электронный лабораторный журнал с прибора

ствующим полям (тэгам) для их последующего быстрого поиска, по любому заданному критерию. Архивация возможна для всех без исключения документов, независимо от того, распечаты-

НОВЫЕ КНИГИ ИЗДАТЕЛЬСТВА "ТЕХНОСФЕРА"



Цена: 475 р.

ПРАКТИЧЕСКОЕ РУКОВОДСТВО ПО ЖИДКОСТНОЙ ХРОМАТОГРАФИИ

Сычев К.С.

Техносфера, 2010. – 272 с., ISBN 978-5-94836-238-0

Книга написана как практическое руководство, основная задача которого состоит в поэтапном тренинге начинающего специалиста как в области конкретно жидкостной хроматографии, так и в областях аналитической и физической химии в целом. Автор надеется, что руководство поможет специалисту с любым стартовым уровнем специальной подготовки пройти путь до квалифицированного аналитика и исследователя, способного разрабатывать методики самой высокой сложности.

КАК ЗАКАЗАТЬ НАШИ КНИГИ?

✉ 125319 Москва, а/я 594; ☎ (495) 956-3346, 234-0110; knigi@technosphera.ru, sales@technosphera.ru

ваются они с компьютеров приборов (например, протоколы) или клиентских мест. Сами документы при этом совсем необязательно отправлять на печать. Функция Print Capture действует автономно. Как и при захвате файлов с приборов заказчик сам определяет, какую информацию программа должна извлечь из документа (шаблоны извлечения могут создаваться под любой тип документов, их количество не ограничено) и рассортировать по искомым полям. С таким архивированным документом затем можно выполнять любую операцию. Из любого документа можно извлекать текстовые содержания, графики, таблицы и экспортировать их в любые приложения. При этом, экспортируя, например, таблицу из заархивированного документа в Excel, сохраняется возможность повторно сделать любые расчеты с этой таблицей. Программа существенно облегчает сбор информации из любых документов или их частей, подготовку презентаций, отчетов или докладов. Кроме поиска по любым заданным полям, существует возможность полнотекстового поиска. Если вы хотите найти какой-либо документ и помните только какие-то слова, которые присутствуют в этом документе, то вам достаточно ввести такое слово или даже часть слова и нажать функцию поиска, и документ будет найден в течение нескольких секунд из всего массива данных.

Таким образом, эти две функции архивации данных позволят не думать об организации хранения аналитической информации, программа выполнит это самостоятельно. Можно не опасаться, что кто-то случайно или по ошибке переименует тот или иной файл, переместит его из одной папки в другую или случайно уничтожит. Программа полностью гарантирует сохранность всей информации, попавшей в систему.

Другая функциональная сторона программы дает возможность использования сотрудниками лабораторий наиболее приемлемых и удобных для них форм ввода, обработки и получения статистики результатов. Электронный лабораторный журнал позволяет вводить уже используемые на предприятии различные собственные программы в качестве шаблонов. То есть все существующие журналы в любых формах (например Excel, Word, и т.д.) на всех участках работы можно ввести в программу как шаблоны, чтобы пользователи работали с теми журналами и в том виде, к которым они привыкли и которые их устраивают. Такое

внедрение позволит значительно сэкономить время и средства, а также облегчит использование программы сотрудниками лабораторий.

Кроме этого, возможен автоматизированный ввод результатов измерений от лабораторных приборов напрямую в ЭЛЖ, что полностью исключит вероятность ошибок и искажений при вводе результатов (рис.2). С помощью программы можно управлять ходом измерений на достаточно простых приборах (весы, титраторы, рН-метры). Например, задавать количество взвешиваний на аналитических весах, автоматически рассчитывать среднее значение по результатам измерений, максимум, минимум, отклонение и прочие статистические функции. При этом все без исключения результаты автоматически заносятся в ЭЛЖ, а необходимый в конкретном случае результат, допустим, среднее по результатам параллельных взвешиваний, будет передано в другую информационную систему. В программе задаются все используемые в вычислениях расчетные формулы, связанные с ними таблицы, калибровочные графики.

Какие еще функции могут быть заданы в ЭЛЖ?
Перечислим их:

- планирование проведения анализов по графикам аналитического контроля;
- автоматическая (или ручная при необходимости) регистрация пробы в соответствии с графиками аналитического контроля;
- регистрация и управление стандартными образцами, используемыми для калибровок, градуировок и внутрилабораторного контроля качества проведения испытаний;
- регистрация и управление титрованными растворами, приготовленными для проведения испытаний;
- контроль правильности использования лабораторных приборов в проведении испытаний, своевременности их поверки и аттестации;
- контроль аттестации персонала лаборатории и допуск к проведению лабораторных работ;
- хранение и оперативное представление персоналу ОТК нормативной технической документации по продуктам и методикам проведения испытаний;
- формирование отчетной документации посредством web-приложений для всех пользователей;
- организация и проведение внутрилабораторного контроля качества выполнения ис-

пытаний. Система автоматически ведет все контрольные карты испытаний с выдачей сообщений и информированием о появлении всех отклонений.

Таким образом, программа NC8 – это аналитический электронный лабораторный журнал, который дает возможность химическим лабораториям документировать результаты наблюдений, контролировать процедуры, обмениваться данными с другими программными решениями, легко находить результаты и обеспечивать их взаимодействие в рамках любых аналитических анализов. Это решение для управления документацией и рабочими процессами, которое позволяет лаборантам-химикам работать с применением стандартных рабочих процедур (SOP, ГОСТ, НД и т.д.) и управлять обменом информацией между любыми информационными системами обработки данных. Как следствие, эта программа обеспечит автоматизацию процессов сбора, обработки, накопления, хранения и отображения информации, полученной в результате анализов в лабораториях, определяющих качество сырья, материалов и продуктов производства, санитарного состояния водной и воздушной сред.

Ключевые характеристики программы:

- создание предварительно заданных шаблонов (SOP, НД, методики и т.д.), включая поля ввода/вывода, критерии допустимости введенных данных и ссылки на внешние источники данных;
- прямой интерфейс к аналитическим весам, рН-метрам, хроматографическим системам (CDS), ERP-системам;
- данные/метаданные, полученные электронными методами, хранятся в безопасной среде, которая соответствует нормативным требованиям;
- отслеживание, назначение и управление образцами, тестами и результатами;
- инвентаризационный учет инструментов и расходных материалов;
- работа с Microsoft Excel и другими приложениями MS Office в среде, которая соответствует нормативным требованиям электронного документооборота;
- автоматизация стандартных вычислений;
- легкий ввод в программу любых документов в формате PDF или Microsoft Office путем простого перетаскивания;
- регистрация данных, полученных от различных инструментов и производителей;
- быстрый поиск и получение данных благодаря автоматической регистрации данных и индексации результатов;
- извлечение и повторное использование электронных данных в пользовательских сводных отчетах и автоматических расчетах;
- учет СО, ГСО и подготовка образцов, растворителей;
- обзор анализов;
- используемая и поставляемая в комплекте база данных ORACLE;
- подтверждение качества готовой продукции;
- сертифицированная поддержка стандарта цифровой идентификации и подписей.

Какие преимущества получит лаборатория при внедрении ЭЛЖ?

В лаборатории будут обеспечены: быстрое принятие решений по результатам анализов в рамках всего предприятия; эффективная организация повседневной работы; уменьшение на 100% ошибок при передаче данных; сокращение до 75% времени на анализ полученных данных; использование химиками-лаборантами только пригодных/калиброванных инструментов и расходных материалов; сокращение до 99% времени на обработку данных и создание отчетов; сокращение на 90% расхода бумаги; соблюдение нормативных требований.

При необходимости специалисты лаборатории могут передать результаты измерений в форме протокола, который автоматически создается при запросе соответствующего отчета. Можно параллельно сохранять и передавать всю необходимую информацию в виде отдельных файлов, при этом вся информация также сохраняется в базе данных самой программы.

Сроки внедрения программного продукта в небольших лабораториях составляют в среднем 2–3 месяца, в крупных лабораториях – 5–6 месяцев. Программа устанавливается полностью специалистами подрядчика, в ней заданы все используемые в лаборатории на текущий момент методики, точки отбора проб, расчетные формулы, таблицы, протоколы, журналы, отчеты, измерительные приборы и оборудование, калибровочные графики, функции внутрилабораторного контроля и прочая необходимая в деятельности лаборатории информация. В программе предусмотрена возможность внесения любых дополнений и изменений.

