



КОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ И АНАЛИТИЧЕСКАЯ ХИМИЯ ВОЗМОЖНОСТИ И ПЕРСПЕКТИВЫ

В современных физико-химических исследованиях велико значение компьютерных технологий для получения, сбора, накопления и анализа экспериментальной информации. В химическом анализе применяются сложные методы обработки данных, реализация которых без помощи компьютеров была бы просто невозможна.

А какую роль будут играть компьютеры в лаборатории будущего? Какие инновационные решения могут появиться в результате интеграции аналитического приборостроения и компьютерных технологий? И какие задачи в этой области актуальны уже сегодня?



**Эдуард
Колованов**

директор по разработке программного обеспечения, ACD/Labs, Канада

Ценность аналитических данных самих по себе без какой-либо интерпретации или контекстного окружения невысока. Множество лабораторных экспериментов – это ничто иное, как дорогое, ресурсоемкое повторение предыдущих опытов – просто потому, что их результаты не удается найти, а если и удается, то не получается использовать вторично.

С 1980-х годов в научно-исследовательских разработках применяются новые информационные категории, такие как LIMS (Laboratory Information Management System, Лабораторная Информационно-Управляющая Система) и ELN (Electronic Laboratory Notebook, Электрон-

ный Лабораторный Журнал). Тем не менее, проведенный недавно опрос показал, что в 88% организаций нет надлежащих систем автоматического сбора данных, необходимых для составления отчетов, анализа и принятия решений. Очевидно, что в этой сфере все еще осталась большая брешь.

LIMS может управлять образцами, экспериментами и результатами, представленными в аналитической лаборатории в виде структурированных данных. С помощью ELN можно документировать ход исследования, описывать эксперименты и другие процедуры в неструктурированных форматах, таких как текстовые документы, электронные таблицы и изображения. Однако, ни LIMS, ни ELN не способны объединить и проанализировать структурированные данные с целью идентификации химических веществ, определения их характеристик и оптимизации.

ULI (Unified Laboratory Intelligence, Объединенный Лабораторный Интеллект) является новым направлением в сфере информатики научных исследований и разработок. Понятие ULI подразумевает сбор и унификацию химических, структурных и аналитических данных, формируя единое целое с накопленной информацией. Научно-исследовательские и производственные проекты в области химии опираются на огромный объем дорогостоящих экспериментальных данных, которые служат основой для практических решений, научных предположений и открытий. Благодаря ULI ученые могут многократно использовать "живые" данные в своих исследованиях, принимать обоснованные решения по идентификации химических веществ, определению их физико-химических свойств, оптимизации производственных процессов, ускоряя разработки и снижая затраты. Под живыми мы подразумеваем цельные, всесторонне обработанные и химически осмысленные данные, которые можно не только статически представлять в виде графиков и картинок, но и легко находить в результате компьютеризированного поиска, повторно обрабатывать, и использовать в комплексе с поступающим новым экспериментальным материалом для принятия решений и обнаружения новых тенденций не только сегодня, но и в будущем. В рамках корпоративной научно-исследовательской стратегии ULI способна улучшить производительность исследований и способствовать высокотехнологичному развитию в таких областях как фармацевтика, химическая промышленность и ряд других связанных отраслей.



Гулнара Шайдулина

к.х.н., менеджер по продажам
LECO Russia

Действительно, роль компьютерных технологий в современном аналитическом приборостроении трудно переоценить. Такие характеристики, как производительность оборудования и информативность метода напрямую зависят от быстродействия процессоров и возможностей программного обеспечения. Некоторые физико-химические методы удалось реализовать только благодаря сочетанию их с компьютерными технологиями. К примеру, в наименование хромато-масс-спектрометрического метода с полным основанием можно было бы внести компьютерный "слог", так как именно этот модуль обеспечивает необходимую скорость регистрации данных и их дальнейшую обработку.

Наше поколение еще застало гибкие пятидюймовые диски на 1,44 МБ, где помещалось несколько файлов с результатами хромато-масс-спектрометрического анализа. Сейчас для хранения таких архи-

вов уже требуются терабайтные диски, поскольку объем извлекаемой в процессе анализа информации увеличился во много раз. Быстрые алгоритмы регистрации и преобразования данных позволили перейти к работе в многомерных пространствах, что реализовано в некоторых наших приборах.

К примеру, сочетание двумерной газовой хроматографии с высокоскоростной времяпролетной масс-спектрометрией высокого разрешения позволяет получать объемную трехмерную хроматограмму, в каждой точке которой зарегистрированы полные масс-спектры с точными массами ионов, детектируемых в широком диапазоне масс. Только благодаря уникальному алгоритму стала возможной реализация этого метода.

В целом, можно отметить два принципиально различающихся подхода к интеграции компьютерных технологий и аналитического приборостроения. Во-первых, это переход к "однокнопочным" приборам, когда ничего не зависит от квалификации оператора, а в его задачу входит только обеспечить старт по заранее заданным протоколам. Здесь роль программного обеспечения оказывается ключевой. Потребность в таких

приборах растет с пугающей быстротой.

Но есть и другая категория пользователей, которых можно, пожалуй, назвать продвинутыми. Их раздражают ограничения, заложенные в программном обеспечении, и автоматизированные процедуры обработки данных. Для них предпочтительней свобода выбора параметров, гибкость всей системы, ее способность удовлетворить исследовательское любопытство при работе с новыми объектами и при решении нестандартных задач. Для такого пользователя всегда будет важнее отсутствие компьютерной диктатуры и широкие возможности по внедрению собственных алгоритмов.

Вообще, с развитием компьютерных технологий объемы генерируемых информационных потоков растут с высокой скоростью. Программные средства все больше ориентированы на то, чтобы помогать справляться с таким количеством информации. И хотя передать машинам огромные массивы данных для преобразования по определенным алгоритмам – вполне разумно, то осознать полученные результаты и делать на их основе выводы должен все-таки homo sapiens.



Юрий Каламбет

к.ф.-м.н.,
Генеральный директор ЗАО "АМПЕР-СЕНД"

Начнем с прошлого. Компьютеры кардинально изменили работу лаборатории по двум при-

чинам. Во-первых, автоматизирован сбор и обработка экспериментальных данных; во-вторых, появились методы диагностики, применение которых невозможно без компьютеров (например, томография или хромато-масс-спектрометрия). На данный момент мощности компьютеров достаточно для решения любых разумных задач; современный

компьютер с сопроцессором Xeon phi или с графической платой верхнего уровня эквивалентен суперкомпьютеру недавнего прошлого.

Перейдем к будущему. Я бы сказал – в лаборатории принципиально ничего не изменится, хотя изменится многое. Возникнут более быстрые методы анализа, лаборатория будет делать

больше исследований в пересчете на работника, будут автоматизированы рутинные операции и даже целые лаборатории. Станет проще организовывать связь между приборами и их синхронизацию с помощью Интернета вещей или другой подобной технологии. Главные изменения произойдут вне лабораторий. Наиболее радикально изменится ситуация с медицинской диагностикой. Уже сейчас фитнес-браслеты и сотовые телефоны предлагают невиданные ранее способы непрерывно отслеживать параметры человеческого организма. Датчики частоты сердечных сокращений и физической активности уже появились. Есть компактные приборы, измеряющие содержание кислорода в крови. Не за горами появление у браслетов функций кардиогра-

фов, датчиков температуры тела. Думаю, найдется способ оценить артериальное давление без надувания манжеты. Даже такие простейшие параметры организма, отслеживаемые во времени, способны предотвратить множество опасных ситуаций. Например, несложно представить себе приложение, вызывающее скорую помощь по результатам анализа показаний датчиков. На первых порах это может вызвать немало недоразумений (вроде приезда скорой в баню), но как отличить поход в баню от пребывания в помещении во время пожара? Простейший носимый набор датчиков должен дополняться недорогими портативными анализаторами биологических жидкостей, выдыхаемого воздуха, среды обитания, производящими регулярный монито-

ринг. Поначалу число контролируемых параметров может быть невелико, но правильный их выбор способен обеспечить раннюю диагностику наиболее опасных для жизни и здоровья человека заболеваний, а в идеале обнаружить тенденции на ранних этапах и предотвратить возникновение болезни. Набор контролируемых параметров можно индивидуализировать в зависимости от генетической предрасположенности. Такая комбинация носимой и экспрессной диагностики в режиме мониторинга призвана заметно поднять качество жизни, переключая усилия с лечения на профилактику болезней. Думаю, что большая часть этого прогресса пройдет не в России, хотя мы тоже можем внести свой посильный вклад.



**Игорь
Зенкевич**

*д.х.н., профессор
кафедры органической
химии Института химии
СПбГУ*

Рассматриваемая проблема настолько многогранна, что выбранные наугад десять участников опроса могут высказать двадцать (и больше) разных предложений, и все они окажутся правильными. Не все, возможно, будут реализованы, но предсказание будущего – непростая задача. Я бы отметил важный, но не совсем стандартный и не всегда принимаемый во внимание момент.

Приведу пример из области масс-спектрометрии, который можно считать почти "классическим". В течение 1980-х годов (не

столько с появлением, сколько с широким распространением компьютеров) пределы детектирования масс-спектрометров удалось существенно снизить (заметим, раз в сто), причем без принципиальных конструктивных изменений. Дело в том, что повышение точности вычислений траекторий ионов позволило избежать их потерь за счет столкновений со стенками. В результате не только появились удивительные по элегантности конструкции приборы, но их сборка стала существенно проще.

А теперь давайте попробуем уточнить, какие компьютеры ответственны за то, что называют "компьютерной" революцией. В том-то все дело, что не любые и отнюдь не самые мощные. Концепция "компьютеростроения" во времена СССР предполагала создание и использование боль-

ших ЭВМ, оснащенных многочисленными периферийными устройствами и охватывающих максимальное число пользователей. На первый взгляд это замечательно, но на деле неизбежно порождает проблему расстановки приоритетов между вольными или невольными конкурентами. Представьте, что к центральному процессору одновременно обращаются лаборант и академик. Чья задача будет рассмотрена в первую очередь? Да что там звания и должности, сравните возможности приятеля оператора такого компьютерного монстра и совершенно незнамого ему новичка. Вот то-то же.

В конечном счете прогресс человечества достигнут за счет использования устройств, которые одно время называли персональными компьютерами. Сейчас это словосочетание

встречается все реже и реже, но суть дела от этого не изменилась. Компьютеры по современным представлениям предназначены не только для сложных многостадийных вычислений, хранения справочных данных (базы) и извлечения информации из Интернета. Важнейшая научно-социальная функция

этого оборудования – уравнивать возможности пользователей (в том числе, что важно, научных сотрудников) и не допустить формирования приоритетов, последствия которого чаще всего оказываются негативными. Давайте сравнивать полученные результаты, а не возможности компьютеров или

"искусство" раздобыть более совершенные их модели.

Ну и, конечно же, важно не воспроизводить упомянутые компьютерные проблемы в других областях. Это касается любых централизованных структур, обслуживающих нескольких пользователей. Вам это ничего не напоминает? **α**

МЕЖДУНАРОДНАЯ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ "СОВРЕМЕННАЯ ХИМИКО-ТОКСИКОЛОГИЧЕСКАЯ ЭКСПЕРТИЗА"



Приветственное слово
академика М.П.Егорова

7 октября 2015 года в Институте органической химии им. Н.Д.Зелинского РАН завершилась Международная научно-практическая конференция "Современная химико-токсикологическая экспертиза", одно из самых ожидаемых событий уходящего года для токсикологов, наркологов и судебных химиков страны.

Генеральным спонсором конференции выступила компания "Интерлаб".

Организаторы конференции: Российский центр судебно-медицинской экспертизы Минздрава России, Институт органической химии им. Н.Д.Зелинского РАН, Первый Московский государственный медицинский университет (МГМУ) им. И.М.Сеченова, Институт аналитической токсикологии (Дубна).

Конференция объединила более 200 ученых, специалистов, а также студентов и аспирантов, занятых в области судебно-химического и химико-токсикологического анализа. Выступить с докладами в столицу приехали получившие высокое признание в научных кругах ученые из Германии, Швейцарии, Польши, и России. На протяжении двух дней ведущие



Выступление профессора Б.Н.Изотова
с пленарным докладом

специалисты в области токсикологии, наркологии и судебной экспертизы обсуждали вопросы современной наркологии, клинической и судебной токсикологии, допингового контроля.

Официальную часть встречи открыл директор Института органической химии им. Н.Д.Зелинского РАН академик М.П.Егоров. В своем приветственном слове он отметил, что токсикология во многом помогла развитию химии, в особенности – органической химии, и выразил надежду на то, что конференция, возможно, позволит установить новые контакты в этой сфере.

С пленарным докладом выступил заведующий Центральной химико-токсикологической лабораторией МГМУ им. И.М.Сеченова, главный внештатный специалист по аналитической и судебно-медицинской токсикологии Минздрава РФ профессор Б.Н.Изотов. Он с удовлетворением сообщил, что благодаря изменениям в российском законодательстве, вступившим в силу в 2015 году, вырос социальный заказ и, как следствие, появился большой спрос на проведение химико-токсикологических исследований.

Интересный доклад сделал доктор Михаэль Бёттчер (MVZ Labor Dessau, Германия). Он посвящен ряду аспектов химико-токсикологических исследований, например, анализу альтернативных матриц, таких как слюна, который набирает все большую популярность благодаря простоте отбора пробы и сложности фальсификации образцов. Еще одна тема, прозвучавшая в докладе, касается требований к хроматографическому оборудованию, на котором должны проводиться подобные анализы.

Профессор Томас Крамер, Швейцария (Prof. Dr. Thomas Kraemer, Institute of Forensic Medicine, Forensic Pharmacology and Toxicology, Univ. of Zurich) в своем докладе рассказал о том, как современные технологии MALDI-TOF и их возможности получения молекулярных образцов могут быть использованы в криминалистике.

Новостью для всех участников конференции стало объявление компании "Интерлаб" о подписании эксклюзивного дистрибуторского соглашения с компанией Waters на продажи в РФ масс-спектрометров для жидкостной хроматографии.

По мнению представителя "Интерлаб", компания Waters имеет высочайшую репутацию, предлагает ряд готовых решений для химиков-токсикологов и занимает достойное место в экспертных лабораториях всего мира, однако, недооценена в России. "Наша задача – донести до российских потребителей все достоинства технических решений компании Waters".

Подробнее со всеми докладами можно ознакомиться на сайте Генерального спонсора конференции – компании "Интерлаб"
www.interlab.ru