



Лабораторно-информационные менеджмент-системы для повышения эффективности работы аналитических лабораторий

Алексей Кропанев, Надежда Лаврова

В соответствии с ГОСТ ИСО/МЭК 17025-2009 «Общие требования к компетентности испытательных и калибровочных лабораторий» и критериями аккредитации обеспечение компетентности лаборатории требует надежного управления информацией, получаемой и накапливаемой в лаборатории в процессе ее деятельности при реализации технических требований, обеспечивающих проведение испытаний, а также требований управления, обеспечивающих стабильность функционирования лаборатории в закрепленной области деятельности.

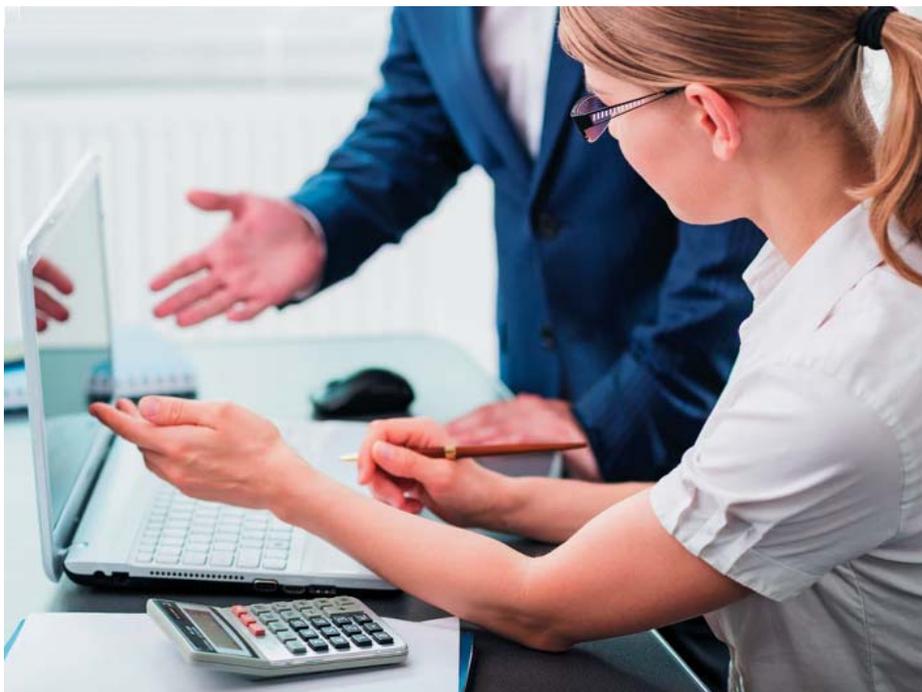
Перед лабораториями стоят задачи полной и всесторонней регламентации всех процедур, обеспечивающих эффективную деятельность лаборатории. Объем информации, подлежащей регламентации и последующей актуализации, а также информации, получаемой в ходе обработки и протоколирования результатов анализа, используемых для принятия управленческих решений, например, о качестве воды, достаточно велик и сложен для ручной обработки, анализа и контроля.

Специалистами ФГУП «УНИИМ» долгие годы уделяется пристальное внимание метрологическому обеспечению аналитического контроля, разрабатываются нормативные документы в помощь специалистам аналитических лабораторий, касающиеся установления метрологических характеристик, внедрения методик измерений, проверки приемлемости, контроля качества результатов анализа.

Одним из основных документов, регламентирующих организацию контроля качества результатов анализа, является документ РМГ 76 - 2014 «ГСИ. Внутренний контроль качества результатов количественного химического анализа». В связи с необходимостью обрабатывать большие массивы данных, например, при построении контрольных карт Шухарта, в других вариантах контроля стабильности результатов количественного анализа необходимость ис-

В статье рассмотрены возможности современных лабораторно-информационных менеджмент-систем (ЛИМС) для решения задач автоматизации работы аналитических лабораторий. Описаны реализованные функции лабораторно-информационных систем на примере ЛИМС «Электронный метролог» и «I-LDS» при рутинной работе аналитических лабораторий. Показана возможность автоматизации процедур оперативного контроля, контроля стабильности при построении контрольных карт Шухарта, выборочного статистического контроля и периодической проверки подконтрольности, построения градуировочных графиков, расчет аттестованных смесей, ведение различных лабораторных журналов, картотек, составление отчетов об испытаниях и других документов аккредитованной лаборатории. Показаны преимущества использования ЛИМС, прошедших тестирование и метрологическую экспертизу.

Ключевые слова: лабораторно-информационная система, лабораторно-информационная менеджмент-система, лабораторные журналы, протоколы, оперативный контроль, контроль стабильности, градуировочные характеристики, аттестованные смеси, метрологическая экспертиза.



пользования компьютерных лабораторно-информационных системы для обработки этих данных становится все более очевидной.

Однако не все руководители и сотрудники лабораторий представляют реальные возможности лабораторной информационной-менедж-

мент системы (ЛИМС) для целей автоматизации работы лаборатории, перехода на электронный документооборот.

Разработчики ЛИМС (ЛИС) могут использовать различные способы, методы и подходы для автоматизации решения задач в области управ-

Кропанев Алексей Юрьевич, старший научный сотрудник, кандидат химических наук, ФГУП «Уральский научно-исследовательский институт метрологии» (г. Екатеринбург). E-mail: metod224@uniim.ru

Лаврова Надежда Николаевна, функциональный аналитик НИОКР, ООО «Индасофт» (г. Москва). E-mail: nadezhda.lavrova@indusoft.ru



ления качеством, предъявляемых к испытательным лабораториям.

Основные направления деятельности аналитической (испытательной) лаборатории, которые возможно автоматизировать с высокой эффективностью, применяя ЛИМС, следующие¹:

Ведение электронных журналов, предусмотренных руководством по качеству лаборатории (журналов регистрации проб, рабочих журналов исполнителей, сводных журналов и т.д.).

Универсальный журнал

В рамках ЛИМС (ЛИС) исполнитель может создать практически любой журнал с любым количеством столбцов и их конфигурацией. Универсальный журнал - это матрица (заготовка) для создания журнала с нужной конфигурацией и заголовками столбцов. Ячейки заголовков столбцов могут объединяться друг с другом (и разбиваться) в разных направлениях. Текст заголовков столбцов экспортируется из соответствующих объектов ЛИМС (ЛИС) или редактируется при создании журнала. Уже созданный журнал можно дублировать сколь угодно раз, при этом обеспечивать разграничение прав доступа для различных форм журналов.

Рабочий журнал исполнителя

Формирование журналов возможно организовать для каждого анализируемого продукта, каждой методики (или для каждого показателя). В рабочем журнале исполнителя реализованы разработчиками ЛИМС (ЛИС) формулы для расчета результатов единичных определений по расчетной формуле методики анализа. Исполнитель вводит в журнал результаты измерений аналитических сигналов и по расчетной формуле методики анализа рассчитываются результаты единичных (параллельных) определений. Расчетной формулой может являться и уравнение градуировочной характеристики. Расчетную формулу при открытии журнала один раз вводит исполнитель, руководствуясь пошаговой инструкцией ЛИМС (ЛИС), или эта формула может быть предустановлена разработчиками ЛИМС (ЛИС). После получения всех необходимых результатов единичных (параллельных) определений в рамках журнала проводится проверка приемлемости результатов. Разность между максимальным и минимальным результатами сравнивается с пределом по-

вторяемости. В случае подтверждения сходимости результатов параллельных определений рассчитывается среднее значение и ему приписывается средняя погрешность, установленная в лаборатории для этого показателя. В случае неподтверждения сходимости результатов параллельных определений автоматически обрабатываются дополнительные результаты параллельных определений, вплоть до расчета результата анализа по медиане в соответствии с положениями ГОСТ Р ИСО 5725-1-2002 и МИ 2881-2004.

Сводный журнал

В некоторых лабораториях ведутся сводные журналы, например, по анализу питьевой воды, очищенной сточной воды и поверхностной воды и т.д., в которые исполнители заносят результаты анализа пробы на разные показатели. При составлении в последующем протокола с результатами анализа (отчета об испытаниях) удобно использовать информацию, сведенную от разных исполнителей в одной строке сводного журнала.

Ведение электронных картотек

по средствам измерений, испытательному и вспомогательному оборудованию, стандартным образцам, реактивам, помещениям, сотрудникам, методикам, объектам анализа, нормативным документам и т.д.

В электронные картотеки (карточки) исполнитель вносит всю необходимую информацию, например, о средстве измерений: наименование, марка, фирма изготовитель, заводской и инвентарный номера, технические и метрологические характеристики, номер по Федеральному информационному фонду, межповерочный интервал, даты прошедших поверок, сведения о ремонтах, месте хранения, консервации и т.д. В карточки методик могут быть внесены: наименование документа на методику и его номер, название методики, показатели, диапазоны измерений по каждому показателю, описанные характеристики погрешности, характеристики погрешности, установленные в лаборатории, и нормативы контроля.

Кроме этого, карточки могут обладать функцией напоминания, например, о том, что до очередной поверки остался один месяц, сколько времени осталось до окончания срока хранения стандартного образца, сколько стандартных образцов в наличии и т.д.

В карточки можно помещать и хранить любые файлы. Например, в карточку методики можно поместить текст самой методики в виде сканкопии, в карточку объекта анализа можно поместить рабочие копии соответствующего СанПиН или гигиенических нормативов.

Информацию из карточек можно автоматически преобразовывать в строки соответствующей формы паспорта аккредитованной лаборатории, тем самым лаборатория в любой момент имеет актуализированные формы паспорта аккредитованной лаборатории.

Формирование отчетных документов

(сертификатов, паспортов, актов отбора проб, протоколов испытаний и т.п.) по результатам анализа с выбором необходимых результатов из рабочих журналов исполнителей или из сводных журналов. Разработаны в составе ЛИМС (ЛИС) гибкие формы отчетных документов. Например, в протоколе можно поместить результаты по нескольким показателям для большого количества проб или результаты для одной или нескольких проб по большому количеству показателей, автоматический выбор наименований показателей, возможность выноса за рамки таблицы с результатами размерности, если размерность одинаковая для всех результатов, или выноса за пределы этой таблицы ссылок на методику измерений, возможность дублирования любого из предыдущих протоколов, возможность привести в протоколе мнения и комментарии лаборатории и т.д.

Преимуществом является и актуализация форм протоколов за счет единожды введенного изменения в классификаторы ЛИМС (ЛИС) и их автоматического отражения в форме бланка (наименование показателей, нормы, метрологические характеристики и т.п.).

Организация и проведение

внутрилабораторного оперативного контроля качества получаемых в лаборатории результатов анализа, в том числе расчет и регистрация результатов при проведении оперативного контроля процедуры анализа.

Ведение оперативного контроля с использованием ЛИМС (ЛИС) организовано в форме электронных журналов оперативного контроля. В этих журналах реализованы все алгоритмы оперативного контроля. Оперативный контроль повторяемости, оперативный контроль внутрилабораторной прецизионности, оперативный контроль точности с образцом для контроля методом добавок, методом разбавления, методом добавок совместно с методом разбав-

¹ Примеры реализации функций ЛИМС в данном материале составлены по Руководству пользователя ЛИС «Электронный метролог», разработанному ФГУП «УНИИМ», и Руководству пользователя ЛИМС I-LDS, разработанному компанией «Индасофт».



ления, сравнением с контрольной методикой и методом «варьирования навесок». Для каждого алгоритма разработан свой журнал. В подобный журнал достаточно внести характеристики погрешности, установленные в лаборатории для данного показателя, и результат контрольного измерения, результат контрольной процедуры и норматив контроля рассчитываются автоматически, причем предварительно проводится проверка условий применимости данного алгоритма контроля, например, соответствие величины добавки условию применимости добавки, и проводится сравнение результата контрольной процедуры и норматива контроля. Делается вывод о подконтрольности методики измерений. Листы этих журналов ЛИМС (ЛИС) может переносить в редактор Word, где можно форматировать таблицы и, если нужно, распечатывать.

Проведение контроля стабильности результатов анализа (испытаний) с использованием всех видов контрольных карт Шухарта (более 30 видов).

Все алгоритмы расчета и построения контрольных карт Шухарта всех видов внесены в ЛИМС (ЛИС). Рассчитываются следующие параметры: границы регулирования - средняя линия, пределы предупреждения и действия, число результатов контрольных процедур, необходимых для достоверной оценки новых значений характеристик погрешности, новые значения характеристик погрешности, результаты контрольных процедур. Строится контрольная карта с любым количеством результатов контрольных процедур, количество результатов контрольных процедур на контрольной карте можно регулировать, а карту разбивать на несколько частей. Контрольные карты можно строить в единицах измеряемых содержаний, в относительных величинах и в приведенных величинах, причем характеристики погрешности методик могут быть заданы как в единицах измеряемых содержаний, так и в относительных процентах в виде постоянного числа и в виде зависимости (прямая, парабола, экспонента и т.д.). При выходе результатов контрольных процедур за границы регулирования, реализации тревожной ситуации на контрольной карте программа сообщает об этом. В процессе построения контрольной карты рассчитываются новые значения характеристик погрешности, и пользователь решает, принимать их или не принимать для использования в своей лаборатории. Контрольные карты, их фрагменты, таблицы с исходными данными и результатами

контрольных процедур можно перевести в Word или Excel и распечатать на бумаге.

Проведение контроля стабильности результатов анализа (испытаний) с использованием алгоритмов периодической проверки подконтрольности процедуры выполнения анализа. Как правило эти алгоритмы реализованы в форме журналов периодической проверки подконтрольности (ППП), журнал периодической проверки подконтрольности процедуры выполнения анализа с применением ОК, с применением метода добавок с использованием одной рабочей пробы, с применением метода добавок с использованием нескольких рабочих проб (показатели качества результатов анализа заданы в единицах измеряемых содержаний), с применением метода добавок с использованием нескольких рабочих проб (показатели качества результатов анализа заданы в относительных единицах для всего диапазона измерений), с применением метода разбавления с использованием нескольких рабочих проб (показатели качества результатов анализа заданы в относительных единицах для всего диапазона измерений) и с применением метода разбавления с использованием нескольких рабочих проб (показатели качества результатов анализа заданы в относительных единицах для всего диапазона измерений). Пользователь вводит исходные данные (характеристики погрешности и результаты контрольных измерений) и далее весь расчет происходит автоматически, справочные таблицы с соответствующими коэффициентами уже введены в ЛИМС (ЛИС). Листы этих журналов ЛИМС (ЛИС) может переносить в редактор Word, где можно форматировать таблицы, и если нужно, распечатывать.

Проведение контроля стабильности результатов анализа (испытаний) с использованием алгоритмов выборочного статистического контроля (ВСК) внутрилабораторной прецизионности и точности результатов анализа реализованы в виде журналов ВСК.

При проведении ВСК используют одноступенчатый корректируемый план статистического контроля по альтернативному признаку для приемлемого уровня качества 10 % или 6,5 %. Таблицы для определения нормативов ВСК - приемочных и браковочных чисел для нормального, усиленного или ослабленного контроля уже введены с ЛИМС (ЛИС). Листы этих журналов ЛИМС (ЛИС) может переносить в редактор Word, где можно форматировать таблицы, и если нужно, распечатывать.

Лабораторно-информационные системы могут быть интегрированы с программным обеспечением средств измерений для считывания результатов измерений, их обработки и внесения их в соответствующие электронные журналы ЛИМС (ЛИС) (в сводные журналы, протоколы и т.д.).

В ЛИМС (ЛИС) реализованы следующие алгоритмы расчета градуировочных характеристик:

- метод однотоочечной градуировки по ГОСТ Р ИСО 11095-2007 «Статистические методы. Линейная калибровка с использованием образцов сравнения»;

- метод «вилки» (двухточечная градуировка) по ГОСТ Р ИСО 11095-2007;

- основной метод (трех и более точечная градуировка) по ГОСТ Р ИСО 11095-2007;

- классический метод Гаусса (метод наименьших квадратов);

- метод «усреднения оценок» по РМГ 54 - 2002 «ГСИ. Характеристики градуировочных средств измерений состава и свойств веществ и материалов. Методика выполнения измерений с использованием стандартных образцов».

Градуировочные характеристики рассчитываются в виде уравнений

$$Y = a + b \cdot x,$$

где x - аргумент;

Y - функция;

a, b - градуировочные коэффициенты.

Производится расчет характеристик погрешности градуировочной характеристики в соответствии с нормативным документом, в котором опубликован алгоритм расчета градуировочной характеристики.

В ЛИМС (ЛИС) реализованы алгоритмы контроля стабильности градуировочных характеристик для классического метода Гаусса и основного метода по ГОСТ Р ИСО 11095 в виде контрольных карт. На одну карту можно наносить и результаты следующих циклов контроля стабильности этой градуировочной характеристики.

Для всех методов реализован расчет результатов анализа рабочих проб. Для всех методов рассчитываются вспомогательные таблицы с вычисленными значениями « x » как функции от значения « y ». Имеется возможность распечатывать как градуировочные графики отдельно, так и совместно со всей информацией, введенной и полученной в результате расчета градуировочной характеристики и контроля стабильности.

В ЛИМС (ЛИС) имеется возможность для расчета метрологических характеристик аттестованных смесей, приготовленных из стандартных образцов, аттестованных смесей,



реактивов в твердом и жидком агрегатных состояниях.

Метрологические характеристики аттестованных смесей рассчитываются пооперационно в процессе «приготовления» аттестованной смеси с использованием имеющихся в распоряжении лаборатории исходных веществ и средств измерений. Также учитываются погрешности аттестованных значений исходных СО (АС) и/или погрешности определения содержания основного вещества в реактиве. Все метрологические характеристики мерной посуды введены в ЛИМС (ЛИС) предварительно и используются для расчета.

Реализованы следующие алгоритмы расчета метрологических характеристик аттестованных смесей в соответствии с РМГ 60 - 2003 «ГСИ. Смеси аттестованные. Общие требования к разработке»:

- расчет аттестованных значений АС для одно- и многокомпонентных АС для каждого компонента;
- расчет погрешностей аттестованных значений АС для одно- и многокомпонентных АС, для каждого компонента;
- алгоритмы установления лабораторных значений характеристик погрешности по Приложению Б РМГ 76-2014.

При организации специального эксперимента для нахождения лабораторных значений характеристик погрешности производится расчет показателя повторяемости, внутрилабораторной прецизионности, показателя правильности и показателя точности результатов анализа, с использованием образцов для оценивания, которыми могут являться стандартные образцы, аттестованные смеси и рабочие пробы, а также методом добавок.

Внедрение методик в лаборатории. Алгоритмы внедрения мето-

дик в лаборатории по Р 50.2.060 - 2008 «ГСИ. Внедрение стандартизованных методик количественного химического анализа в лаборатории. Подтверждение соответствия установленным требованиям» реализованы в ЛИМС в различных сочетаниях алгоритмов проверки повторяемости и проверки смещения.

Как правило, ЛИМС (ЛИС) имеют систему допуска и защиты информации. Системы допуска к информации могут быть организованы, например, по функциям, к которым допущен соответствующий сотрудник, и которые перечислены у него в карточке допуска, могут быть реализованы по определенным наборам функций (уровням допуска).

Ряд организаций - разработчиков лабораторно-информационных систем ставят своей целью метрологическую экспертизу своих программных продуктов и обращаются в ФГУП «УНИИМ» для проведения такой экспертизы.

Метрологическая экспертиза ЛИМС (ЛИС) (по опыту ФГУП «УНИИМ») повышает уровень доверия к данным программным продуктам и способствует их внедрению в испытательных лабораториях, что позволяет существенно повышать эффективность и качество работы испытательных лабораторий.

Метрологическая экспертиза ЛИМС (ЛИС) осуществляется по МИ 2174-91 «Аттестация алгоритмов и программ обработки данных при измерениях. Основные положения» на соответствие алгоритмам ГОСТ Р ИСО 5725-2002, РМГ 76-2014 и других нормативных документов. При проведении тестирования программного продукта и метрологической экспертизы проверяется работа расчетных алгоритмов, включенных в программу и подтверждается пригодность к применению в лаборато-

риях данного программного продукта, в соответствии с п. 5.4.7.2 ГОСТ ИСО /МЭК 17025-2009.

Следует отметить, что разработанной сотрудниками ФГУП «УНИИМ» ЛИМС (ЛИС) «Электронный метролог» и разработанной компанией «Индасофт» ЛИМС (ЛИС) I-LDS прошли тестирование (проверку) и метрологическую экспертизу, о чем соответствуют экспертные заключения от ФГУП «УНИИМ».

Именно использование ЛИМС (ЛИС), прошедшей тестирование и метрологическую экспертизу, позволяет лабораториям организовать на принципиально новом уровне не только систему качества, но и всю деятельность лаборатории с существенным увеличением эффективности работы всех ее звеньев. Аттестованная ЛИМС (ЛИС) также является эффективным помощником лаборатории на стадии ее подготовки к аккредитации и подтверждению компетентности, т.к. информация, содержащаяся в лабораторной базе данных, сформированной на основе ЛИМС (ЛИС), позволяет достаточно быстро и без особых усилий сформировать (актуализировать) паспорт и другие документы аккредитованной лаборатории.

В данной статье авторы не стремятся изложить весь спектр функциональных возможностей ЛИМС «I-LDS» и «Электронный метролог». Приведенный в данной статье комплекс решений ЛИМС (ЛИС) является существенным, так как он представляет первоначальную конфигурацию ЛИМС (ЛИС), ориентирован на потребности лабораторий и позволяет удовлетворить требования, которые предъявляются к компетентности испытательной лаборатории. Детальный перечень возможностей ЛИМС (ЛИС) изложен в документации к каждому программному продукту.

The laboratorial information management systems as an instrument of efficiency increase for analytical laboratories

The article is devoted to possibilities of contemporary laboratorial information management systems (LIMS) for resolving automation tasks in the operation of analytical laboratories. The implemented functions of laboratorial information management systems are examined on the particular examples of LIMS such as «Electrical metrologist» and «I-LDS» for the routine tasks of analytical laboratories. The number of possibilities is demonstrated: automation of the procedures of automatic control, stability control during the formation of Shuhart control charts, selective statistic control, periodical verification of accountability, creation of calibrating charts, calculation of certified mixtures, logging different laboratory registers and card-indexes, creating reports about testing and other documents of an accredited laboratory. The advantages of successfully tested and passed metrological expertise LIMS are demonstrated in the article.

Key words: laboratorial information systems, laboratorial information management systems, laboratorial log, laboratorial journal, protocols, operational control, control of stability, calibration characteristics, certified mixtures, metrological expertise, metrological examination.

Kropanev Alexey Yurievich, senior researcher, PhD in chemistry. Federal State Unitarian enterprise «Ural scientific research institute of metrology», Ekaterinburg. E-mail: metod224@uniim.ru

Lavrova Nadezhda Nikolaevna, User requirements analyst at Ltd «Indusoft. Limited liability company «Indusoft», Moscow. E-mail: nadezhda.lavrova@indusoft.ru