

**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.

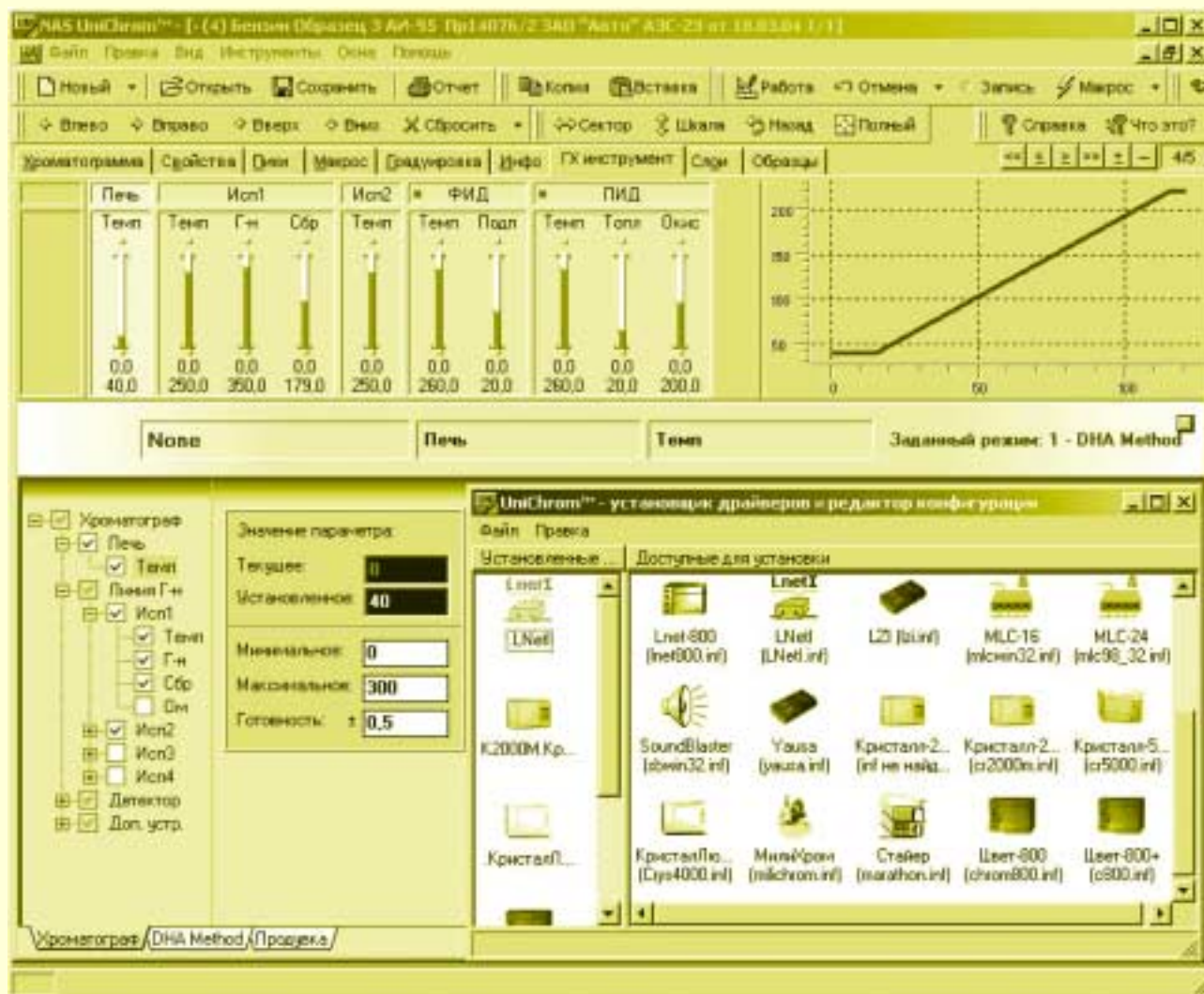


Рис. 1. Изображение настроек хроматографа Кристалл 2000М.



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-

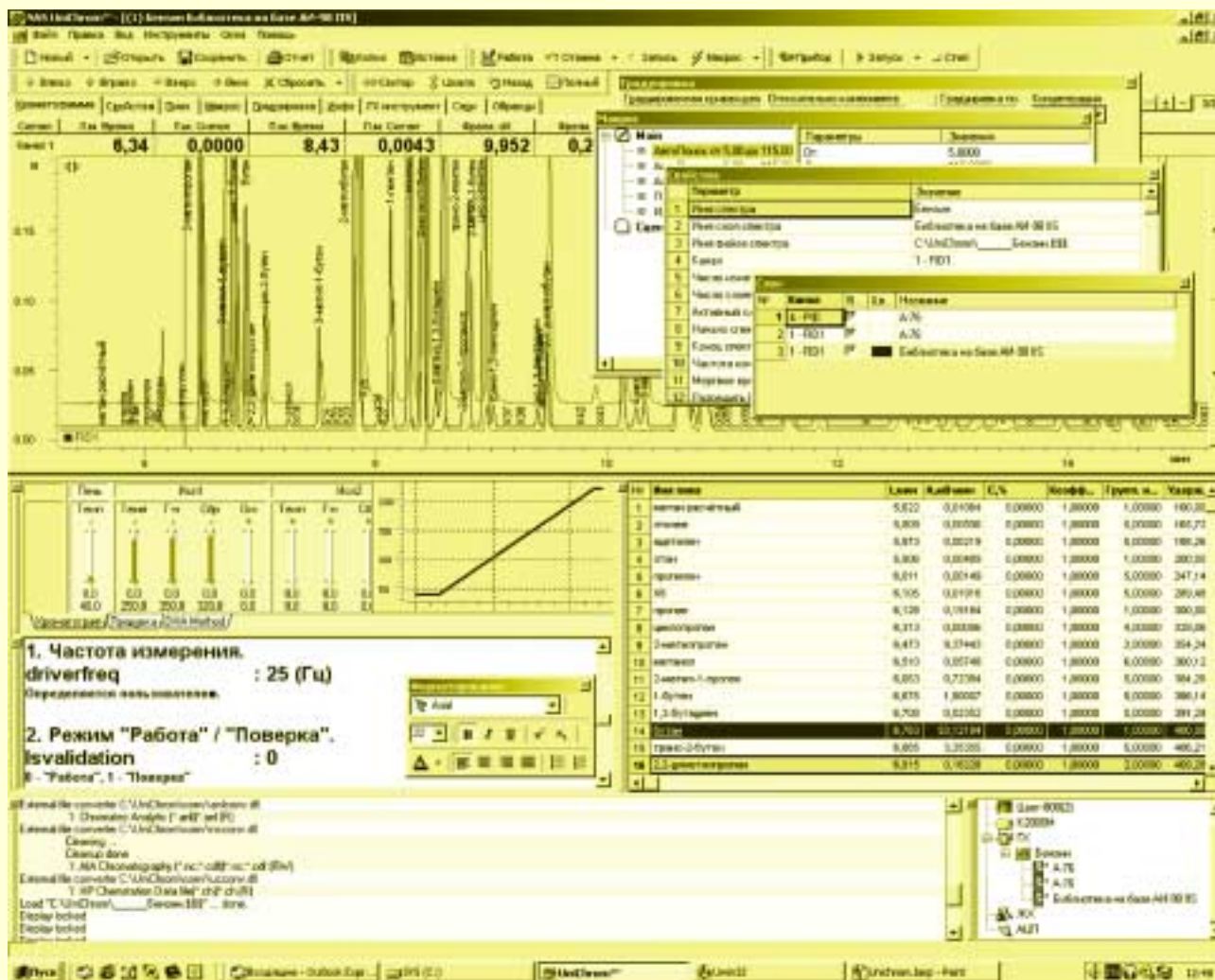


Рис. 2. Файл системы UniChrom — GC / LC Office document.



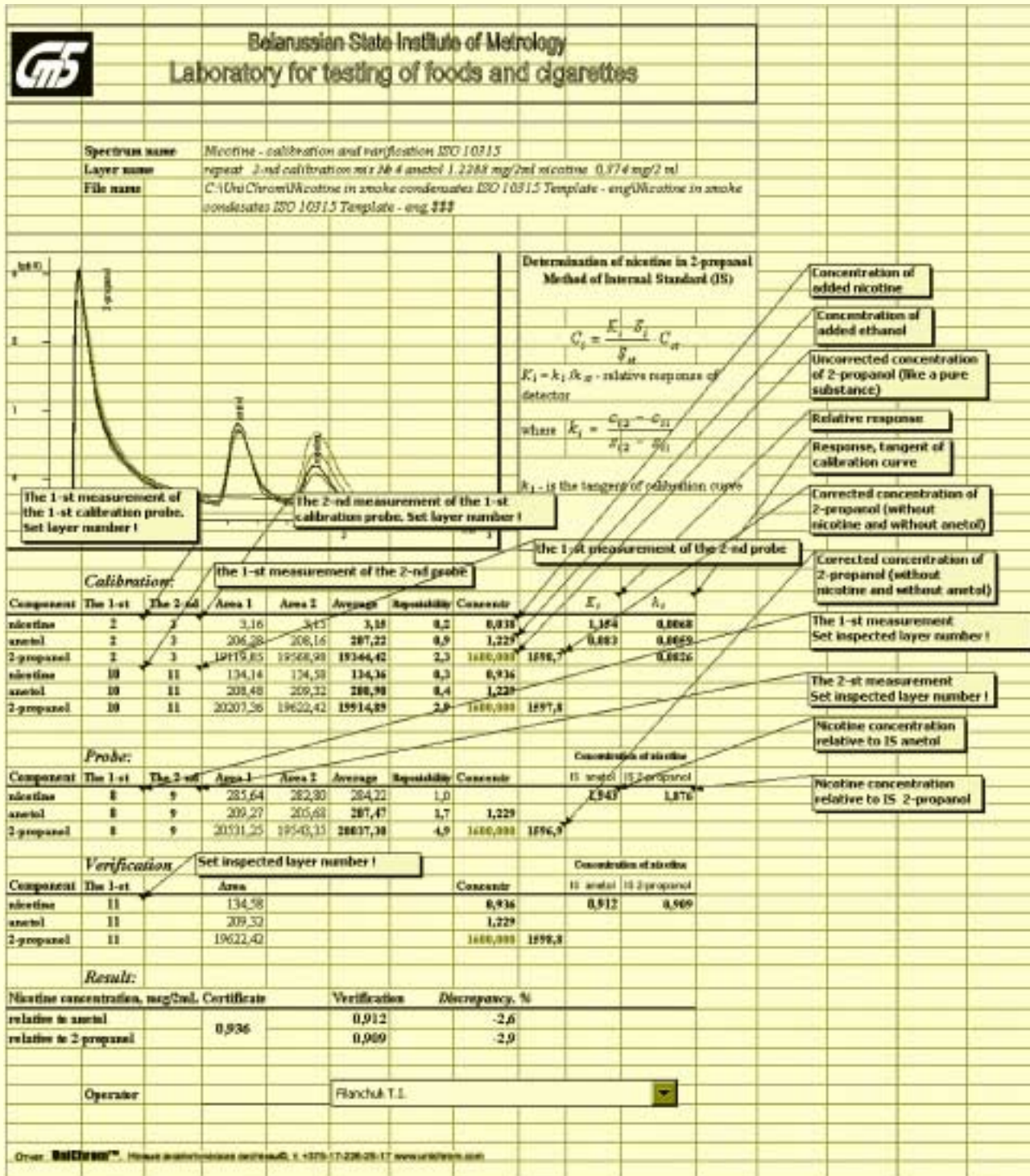


Рис. 3. Шаблон «Nicotine in smoke condensates ISO 10315 Template» — eng.xlt в MS Excel.

связкам МВИ в контрольных лабораториях крупных предприятий нефтехимического комплекса России, Украины и Беларуси. Так как теперь уже практически повсеместно в испытательных лабораториях специалисты ежедневно работают с MS Office, то переде-

лать шаблон (рис. 3), например в Индии, полученный от коллеги из Беларуси, не представляет никаких трудностей для рядового лаборанта.

Естественно, что на документ может быть несколько точек зрения: он сам, его структура, его ог-

лавления, указатели и т.д. Каждому представлению документа — отведено его собственное визуальное представление. Если вы добавили параграф, то почему он не должен появиться в оглавлении? Если вы добавили градуировочный уровень, то почему он не

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

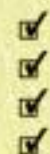


Сертификат  
Госстандарта Украины



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](http://www.unichrom.com)