

**В.И. Дворкин,**

главный научный сотрудник Института нефтехимического синтеза РАН, вице-президент и главный арбитр ААЦ «Аналитика», председатель ТК 325 «Аналитический контроль», профессор, д-р хим. наук

УДК 542.2:004.42

# Компьютеризация лабораторий и ЛИМС *QControl*<sup>1</sup>

Компьютеризация наряду с разработкой и совершенствованием методов исследований является магистральным путем развития аналитических, испытательных и других лабораторий<sup>2</sup>. Она повышает эффективность, уменьшает число допускаемых ошибок и позволяет легко выполнять современные требования к системе менеджмента, включая требования органов по аккредитации. Конкретные пути использования информационных технологий в лабораториях могут сильно отличаться, и вопросы выбора того или иного из них становятся весьма актуальными. Ниже рассмотрены общие подходы к компьютеризации лабораторий и вариант, используемый в ЛИМС *QControl*.

**Ключевые слова:** компьютеризация лабораторий, *QControl*, ЛИМС

## Задачи, для решения которых применяются компьютерные программы

Исходя из природы лабораторных исследований, а также учитывая современные требования к обеспечению их качества, сформулированные в ГОСТ *ISO/IEC 17025–2019*<sup>3</sup>, ГОСТ Р ИСО 5725–2002<sup>4</sup>, можно выделить следующие основные виды лабораторной деятельности, подлежащие компьютеризации (ГОСТ Р 53798–2010<sup>5</sup>):

1. расчет результатов измерений (включая градуировку методик измерений (МИ), использование табличных данных и т. д.);
2. контроль качества измерений (проверка приемлемости, контроль стабильности с помощью

контрольных карт, другие способы внутрилабораторного контроля);

3. валидация и верификация МИ;
4. регистрация и контроль движения внутри лаборатории поступающих проб;
5. подготовка и передача заказчикам протоколов исследований;
6. учет реактивов, материалов и стандартных образцов;
7. учет и контроль состояния оборудования (средств измерений, испытательного и вспомогательного оборудования);
8. кадровый учет и отслеживание регламентированной периодичности повышения квалификации сотрудников;

1 Материал был представлен на VI Международной конференции «Аккредитация. Компетентность» (Самара, 23–27.06.2025).

2 Сфера интересов авторов — компьютерные программы для решения общелабораторных задач. Компьютеризация конкретных измерительных приборов не рассматривается.

3 ГОСТ *ISO/IEC 17025–2019* «Общие требования к компетентности испытательных и калибровочных лабораторий» приказом Росстандарта от 15.07.2019 № 385-ст введен в действие в качестве национального стандарта с 01.09.2019.

4 ГОСТ Р ИСО 5725–6–2002 «Точность (правильность и прецизионность) методов и результатов измерений. Ч. 6. Использование значений точности на практике» введен в действие постановлением Госстандарта России от 23.04.2002 № 161-ст.

5 ГОСТ Р 53798–2010 «Стандартное руководство по лабораторным информационным менеджмент-системам (ЛИМС)» введен в действие приказом Росстандарта от 24.06.2010 № 116-ст.

9. учет и хранение документов (включая методики выполнения измерений), изменений и дополнений к ним, архивных копий;
10. хранение и использование перечней определяемых показателей и объектов исследований;
11. работа с заказчиками и субподрядчиками;
12. регистрация претензий и корректирующих действий, планирование и контроль результатов внутреннего аудита и анализа со стороны руководства.

Это неполный список (в него не включены, например, планирование в тех или иных формах, статистика исследований, хранение информации и т. д.), однако он вполне достаточен для достижения указанных целей.

## Задачи с позиций возможности и необходимости их компьютеризации

**Расчет результатов измерений** (1) во многих случаях компьютеризируется вместе с аналитическим прибором. Однако в большинстве лабораторий применяются (и будут применяться в обозримом будущем) методики, в которых не используются компьютеризированные приборы. Использование вычислительной техники в этих случаях желательно из-за особенностей обычно применяемого при градуировке метода наименьших квадратов Гаусса [1], необходимости использования табличных данных и т. д.

**Контроль качества измерений** (2), в частности рекомендованные в ГОСТ 5725-6-2002<sup>6</sup> проверку приемлемости и контроль стабильности, *практически невозможно осуществлять без использования компьютера*. Помимо достаточно сложных статистических расчетов, при которых используются табличные значения статистических функций и приписанных характеристик методик, необходимо вести множество контрольных карт, при этом отслеживая состояние каждой из них, и периодически уточнять нанесенные на карты контрольные пределы (ГОСТ Р ИСО 7870-2015<sup>7</sup>, [2]). Многочисленные попытки делать это с помощью самостоятельно разработанных программ — обычно несовершенных и, кроме того,

требующих валидации, почти всегда дают неудовлетворительные результаты. При проверке приемлемости результатов без компьютера необходимо постоянно использовать калькулятор, держа перед глазами или в памяти показатели повторяемости (сходимости) для разных поддиапазонов определяемых величин. Также сложно использование без компьютера и *других способов внутрилабораторного контроля* по РМГ 76-2014<sup>8</sup> («оперативного», «статистического», с применением метода добавок и т. д.).

**Валидация и верификация МИ** (3) также требуют статистических расчетов, которые удобно выполнять с помощью компьютера.

Процедуры **регистрации поступающих в лабораторию проб, их кодирования, отслеживания движения по лаборатории** (4), **подготовки протоколов** (5) в принципе не слишком сложны для выполнения вручную. Однако, как показывает практика, количество ошибок, происходящих на этапах поступления проб в лабораторию и выписки результатов, при использовании бумажных форм ведения этой документации быстро растет вместе с объемом исследований. А компьютерная регистрация проб с использованием шаблонов для задания перечня исследований и автоматическая генерация протоколов, когда результаты исследований и другие нужные сведения вставляются в заранее подготовленные шаблоны буквально нажатием одной клавиши, резко ускоряет эту работу и почти исключает ошибки. Кроме того, передача во ФГИС Росаккредитации (а именно там аккредитовано большинство отечественных лабораторий) сведений о выданных протоколах без ЛИМС очень трудоемка.

**Учет реактивов, материалов и стандартных образцов, а также учет и контроль состояния оборудования** (6, 7). Здесь основная задача — своевременная закупка реактивов, поверка и техническое обслуживание средств измерений и т. д. Фактически в отсутствие компьютеризации для выполнения этих функций приходится выделять специальных сотрудников.

Основную сложность **ведения лабораторной документации, связанной с системой качества лаборатории** (8-12), при отсутствии

6 ГОСТ 5725-6-2002 «Точность (правильность и прецизионность) методов и результатов измерений. Ч. 6. Использование значений точности на практике» введен в действие постановлением Госстандарта России от 23.04.2002 № 161-ст.

7 ГОСТ Р ИСО 7870-2-2015 «Статистические методы. Контрольные карты. Ч. 2. Контрольные карты Шухарта» введен в действие приказом Росстандарта от 06.10.2015 № 1469-ст.

8 РМГ 76-2014 «Внутренний контроль качества результатов количественного химического анализа» приказом Росстандарта от 09.07.2014 № 778-ст введены в действие в качестве рекомендаций по метрологии с 01.01.2016.

компьютеризации представляет необходимость централизованного заполнения большого числа журналов. Трудоемкость этой работы возрастает при увеличении размеров лаборатории. Да и выполнение постоянно усложняющихся требований органов по аккредитации упрощается, когда за ними следит разработчик компьютерной программы.

Таким образом, практически все виды деятельности современной лаборатории, выполняющей рутинные исследования, в той или иной степени поддаются компьютеризации, которая дает много преимуществ. Поэтому процесс оснащения лабораторий компьютерной техникой и соответствующими программами идет весьма активно.

## Современная картина компьютеризации лабораторий

Ранее [3] нами была предложена классификация лабораторных компьютерных программ, включающая:

- **ЛИМС, LIMS (Laboratory Information Management System)**<sup>9</sup> — программные или программно-аппаратные комплексы, при разработке которых ставится задача охватить все стороны деятельности лабораторий;
- **компьютеризацию «блоками»**<sup>10</sup>, которая предполагает наличие в лаборатории *специализированных профессиональных* программ, каждая из которых предназначена для решения тех или иных конкретных задач;
- **«офисные» программы** — либо общего назначения, либо разработанные самими лабораториями.

Классификация по-прежнему актуальна, однако акценты заметно сместились. В частности, «самодельные» программы постепенно «вымываются» из оборота, и в данной статье мы их рассматривать не будем. Компьютеризация «блоками» также распространена — такие программы дешевле и проще в освоении, чем ЛИМС. На рынке появилось множество конкурирующих ЛИМС, вследствие чего стало возможно компьютеризировать большинство процессов в лабораториях, а стоимость программ существенно снизилась. Фактически, сейчас на первый план выходит удобство использования программ и простота их освоения, хотя,

конечно, остаются актуальными и материальные вопросы, особенно для небольших лабораторий.

Обычно ЛИМС состоят из множества мелких блоков, каждый из которых отвечает за выполнение конкретных функций. Это удобно с точки зрения программирования — дает большую гибкость и делает программы более универсальными. С другой стороны, подобная структура требует настройки с учетом специфики конкретной лаборатории, требующей масштабного участия разработчиков программ.

## ЛИМС QControl — сочетание ЛИМС и компьютеризации «блоками»

В отличие от других ЛИМС, данная имеет «крупноблочную» структуру и состоит из трех частей: программы *QControl*, блока *SControl* и программы *DControl*. Каждая из них может приобретаться и работать как независимая программа. Основные возможности ЛИМС *QControl* и отдельных программ представлены в *таблице*. При этом компьютеризируются следующие виды деятельности лабораторий:

- собственно измерения и контроль их качества (программа *QControl*);
- регистрация образцов, отслеживание их прохождения по лаборатории, генерация протоколов (блок *SControl*);
- ведение общелабораторной документации, различных видов учета и т. д. (программа *DControl*).

Если блок *SControl* приобретается и используется отдельно, он дает возможность создавать образцы, работать с результатами прямых измерений и генерировать протоколы.

Такая структура оптимальна по следующим причинам:

- охватываются все основные виды деятельности лабораторий;
- деление на три программы полностью соответствует структуре большинства лабораторий, которая, в свою очередь, определяется необходимостью выполнения их основных функций.

Соответственно, сотрудники работают в основном с программой (частью ЛИМС), компьютеризирующей их основную деятельность.

9 Встречаются аббревиатуры ЛИС (лабораторные информационные системы) и, реже, ЛИУС (лабораторные информационно-управляющие системы).

10 Иногда специализированные программы этой группы называют также «mini-LIMS», программами типа «Лабораторный журнал» и т. д.

**Таблица.** Возможности ЛИМС QControl в целом и отдельных программ

ФУНКЦИЯ	ЛИМС QControl	QControl + SControl	SControl	QControl	QControl Lite	DControl	DControl Lite
Лабораторный журнал, расчет результатов измерений для любых методик	+	+	-	+	-	-	-
Контроль стабильности по контрольным картам Шухарта, по правилам Вестгарда	+	+	-	+	+	-	-
Проверка приемлемости результатов	+	+	-	+	+	-	-
Оперативный и статистический контроль по РМГ 76–2014	+	+	-	+	+	-	-
Контроль стабильности градуировочной характеристики	+	+	-	+	-	-	-
Задание исследований образцов и партий, система статусов для слежения за ними, штрихкодирование	+	+	+	-	-	-	-
Работа с качественными методами (микробио- и вирусология, тест-методы и пр.)	+	+	+	+	-	-	-
Генерация протоколов с расчетом неопределенности, автоматическая вставка нормальных диапазонов, выгрузка во ФГИС РА	+	+	+	-	-	-	-
Вывод статистики исследований	+	+	+	-	-	-	-
Верификация и валидация методик	+	+	-	+	+	-	-
Ведение области аккредитации	+	-	-	-	-	+	-
Учет и хранение документов	+	-	-	-	-	+	+
Учет и контроль состояния оборудования	+	-	-	-	-	+	+
Сведения о персонале (учет, обучение)	+	-	-	-	-	+	+
Учет реактивов и материалов	+	-	-	-	-	+	+
Учет стандартных образцов и аттестованных смесей	+	-	-	-	-	+	+
Работа с поставщиками	+	-	-	-	-	+	+
Работа с заказчиками и субподрядчиками	+	-	-	-	-	+	+
Учет и контроль несоответствующих работ, корректирующих действий, претензий, внутренних проверок, предупреждающих действий, анализа со стороны руководства	+	-	-	-	-	+	-
Сведения о помещениях лаборатории	+	-	-	-	-	+	-
Контроль качества воды	+	-	-	-	-	+	-
Напоминание о необходимости тех или иных действий в рамках системы качества	+	-	-	-	-	+	+
Сетевые и локальные модификации	+	+	+	+	+	+	+

## Заключение

Подход, избранный при разработке описанной в данной статье ЛИМС, оказался весьма эффективным. Выбирая либо ЛИМС *QControl* в целом, либо одну из входящих в нее специализированных программ (*QControl*, *SControl*, *DControl* и т. д.), лаборатории могут решать задачи компьютеризации в необходимых им

объемах без индивидуальной донастройки программ, максимально экономно. В то же время они имеют возможность при желании приобрести дополнительные программы вплоть до перехода к ЛИМС, не теряя накопленную информацию и приобретенные навыки. В сочетании с рядом удачных решений в рамках конкретных программ это обусловило их широкое распространение.

### Литература

1. Дворкин В.И. Метрология и обеспечение качества химического анализа. — М.: Техносфера, 2020. — 317 с.
2. Дворкин В.И. Ведение контроля стабильности измерений // Контроль качества продукции. 2022, № 2. — С. 13–22.
3. Дворкин В.И. Компьютеризация лабораторий. Современное состояние и метрологические аспекты // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2018. Т. 84, № 4. — С. 73–80.

### Computerization of laboratories and LIMS QControl

**V.L. Dvorkin, PhD, A.V. Topchiev Institute of Petrochemical Synthesis RAS (TIPS RAS)**

Computerization, along with the development and improvement of research methods, is the main way of development of analytical, testing and other laboratories. The use of computers increases efficiency, reduces the number of errors made and makes it easy to meet modern requirements for the management system, including those of accreditation bodies. The specific ways in which computers are used in laboratories can vary greatly, and the choice of one or the other becomes very relevant. The general approaches to computerization of laboratories and the option used in QControl LIMS are discussed below.

**Keywords:** computerization of laboratories, QControl, LIMS

#### References:

1. Dvorkin V.I. Metrology and Quality Assurance of Chemical Analysis. Moscow: Tekhnosfera, 2020. 317 p.
2. Dvorkin V.I. Maintaining Measurement Stability Control // Product Quality Control. 2022, No. 2. Pp. 13–22.
3. Dvorkin V.I. Laboratory Computerization. Current State and Metrological Aspects // Factory Laboratory. Material Diagnostics. 2018. Vol. 84, No. 4. Pp. 73–80.