

DOI: 10.26896/1028-6861-2018-84-4-73-77

УДК (UDC) 542.2:004.42

## КОМПЬЮТЕРИЗАЦИЯ ЛАБОРАТОРИЙ. СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ И МЕТРОЛОГИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ<sup>1</sup>

© Владимир Ильич Дворкин

Институт нефтехимического синтеза им. А. В. Топчиева РАН, Москва, Россия; e-mail: dvorkin@ips.ac.ru

*Статья поступила 16 января 2018 г.*

Рассмотрены современное состояние и перспективы компьютеризации лабораторий. В силу экспоненциального роста быстродействия и объема памяти компьютеров, а также их удешевления. Их использование в лабораториях стало обыденным явлением. Помимо программ общего назначения типа Word или Excel широко используются специально разработанные программы. Основными их видами являются LIMS (Laboratory Information Management System, ЛИС) и специализированные компьютерные программы. Каждая LIMS представляет собой единую программу. Специализированных программ в лаборатории может быть несколько, и каждая из них ориентирована на определенный вид деятельности («компьютеризация блоками»); они используются чаще из-за простоты, удобства и низкой стоимости. В России шире всего распространены специализированные программы QControl и DControl. Все виды программ становятся более и более доступными. Компьютеризация затрагивает и метрологические аспекты деятельности лабораторий. Грамотно написанная программа позволяет лабораториям использовать современные подходы (включая сложные статистические расчеты, ведение контрольных карт и т.д.) почти без затрат времени и не имея в штате квалифицированных метрологов и статистиков. По результатам измерений программа рассчитывает результаты анализа (включая градуировку и проверку приемлемости), выполняет контроль стабильности измерений, а также валидацию и верификацию методики. В обозримом будущем компьютеризация охватит почти все лаборатории, причем будут преобладать специализированные программы и простые LIMS. Широкое внедрение метрологических и многих других новаций будет происходить через их включение в компьютерные программы.

**Ключевые слова:** компьютеризация лабораторий; LIMS; специализированные компьютерные программы.

## COMPUTERIZATION OF LABORATORIES. CURRENT STATE AND METROLOGICAL ASPECTS

© Vladimir I. Dvorkin

A. V. Topchiev Institute of Petrochemical Synthesis of the RAS, Moscow, Russia; e-mail: dvorkin@ips.ac.ru

*Submitted January 16, 2018.*

Current state and prospects of computerization of laboratories are considered. An exponential growth in the speed and storage space of computers, as well as their cheapening obey "Moore's law." The use of computers in laboratories has become commonplace, the corresponding programs are being improved and become more accessible. Programmers have ceased to think about computer speed and memory savings. Operations are executed instantly, and laboratory information gained throughout many years can be saved on a common hard disk. In addition to general-purpose programs such as Word or Excel a number of the software of special duty are developed and widely used: LIMS (Laboratory Information Management System) and special computer programs. Each LIMS is a consistent program. The laboratory may use several special programs, each of them being focused on a certain type of activity ("computerization by blocks"). Those types of programs are used most often because of their simplicity, convenience and low cost. QControl and DControl programs are most common in Russia. All kinds of programs become more and more accessible. Computerization also touches the metrological aspects of the laboratory activity. Correctly written program provides using modern approaches (including complex statistical calculations, Shewhart charts, etc.) almost without special staff training. By entering the results of measurements into the computer and pressing the desired key, the lab technician performs data processing (including calibration and acceptance testing) and control of the stability of measure-

<sup>1</sup> Материал должен на конференции «175 лет ВНИИМ им. Д. И. Менделеева и Национальной системе измерений», 14 – 15 июня 2017 г.

ments, and, if desired, validation and verification of the procedure. In the foreseeable future, computerization will cover almost all laboratories, with specialized programs and simple LIMSs prevailing. The widespread introduction of metrological and other innovations will occur through their incorporation into computer programs.

**Keywords:** computerization of laboratories, LIMS, specialized software.

Компьютеризация наряду с разработкой новых и совершенствованием имеющихся методов измерений является магистральным путем развития лабораторий. С развитием лабораторного дела, включая изменения в метрологических аспектах деятельности лабораторий, меняются и направления компьютеризации как в аппаратном ее оформлении, так и в программном обеспечении. Ранее [1] нами было оценено состояние в этой области на 2008 г. Ниже сделана попытка проанализировать современную ситуацию, а также изложена наша точка зрения на перспективы применения вычислительной техники в аналитических и испытательных лабораториях. При этом мы будем в основном рассматривать компьютерные программы, предназначенные для решения общелaborаторных задач, и не будем касаться специализированных метрологических лабораторий (таких, как лаборатории метрологических НИИ).

### **Для каких целей в лабораториях могут применяться (и применяются) компьютерные программы?**

Исходя из природы лабораторных исследований, а также с учетом современных требований к обеспечению их качества [2, 3] можно выделить основные виды лабораторной деятельности, подлежащие компьютеризации:

управление приборами и получение сигнала (аналитического сигнала в химическом анализе);

градуировка методик измерений (МИ);

расчет результатов измерений, включая проверку их приемлемости;

оценка метрологических характеристик методик при их постановке в лаборатории («верификация»);

контроль стабильности результатов и другие способы внутрилабораторного контроля;

регистрация поступающих в лабораторию проб и отслеживание их движения внутри лаборатории;

подготовка протоколов и передача их заказчикам исследований;

учет и хранение документов, изменений и дополнений к ним, архивных копий;

ведение списков заказчиков и субподрядчиков;

учет реактивов, материалов и стандартных образцов;

учет и контроль состояния оборудования (средств измерений, испытательного и вспомогательного оборудования), в том числе поверка средств измерений;

учет сотрудников и слежение за своевременностью повышения ими квалификации;

регистрация претензий и корректирующих действий, планирование и контроль результатов внутренних проверок и анализа со стороны руководства;

хранение и печать информации как для использования в самой лаборатории, так и для внешних организаций (например, при аккредитации).

Кроме того, использование компьютеров весьма полезно при расчетах, выполняемых при аттестации методик химического анализа (валидации).

Рассмотрим перечисленные задачи с позиций возможности и полезности их компьютеризации.

*Управление приборами и получение сигнала* — традиционная сфера применения вычислительной техники. Компьютеризация приборов, включающая в себя управление приборами, регистрацию аналитического сигнала (а также, во многих случаях, расчет результатов измерений) интенсивно развивается. Используются и специализированные чипы и компьютеры, являющиеся неотъемлемой частью приборов и устройств, и обычные персональные компьютеры. Мы не будем их рассматривать.

*Градуировка методик выполнения измерений и расчет их результатов, включая проверку приемлемости*, во многих случаях компьютеризируются вместе с аналитическим прибором (см. выше). Однако в большинстве лабораторий применяются (и будут применяться в обозримом будущем) методики, в которых по экономическим или другим причинам не используются компьютеризированные приборы. Так обстоит дело, например, с волюметрией. Вычислительная техника при этом нужна для упрощения работы, особенно для реализации различных вариантов используемого при градуировке метода наименьших квадратов. А при проверке приемлемости результатов измерений [3] без компьютера необходимо держать в памяти или рассчитывать стандартное отклонение повторяемости (сходимости) и связанные с ним величины для разных

поддиапазонов определяемых концентраций используемых методик (см. ниже).

*Верификацию МИ, контроль их стабильности* [3] и другие виды внутрилабораторного контроля [4] практически невозможно выполнять без использования компьютера в режиме реального времени. Помимо достаточно сложных статистических расчетов, при которых необходимо использовать табличные значения статистических функций и приписанные характеристики МИ, необходимо вести множество контрольных карт, при этом отслеживая состояние каждой из них и периодически уточняя контрольные пределы [5]. Попытки делать это вручную (а карты рисовать на миллиметровой бумаге) почти всегда заканчиваются неудачей.

*Регистрация поступающих в лабораторию проб, их кодирование, отслеживание движения пробы в лаборатории (особенно когда для ее исследования применяют много разных МИ), подготовка протоколов* — не слишком сложные процедуры при их выполнении вручную. Однако применение компьютеров позволяет повысить надежность этих операций (уменьшить число ошибок, происходящих на этапах поступления проб в лабораторию и выписки результатов) и дает огромный выигрыш для интенсивно работающих лабораторий.

*Ведение лабораторной документации, связанной с системой качества лаборатории, хранение и печать содержащейся в ней информации* также резко усложняются при увеличении размеров лаборатории. В отсутствие компьютеризации основную сложность представляет необходимость централизованного ведения большого числа журналов при децентрализации многих функций (работа с документами, учет реактивов и стандартных образцов, поверка приборов и т.д.). Отдельная проблема — контроль своевременности действий по закупке реактивов, поверке средств измерений, обучению сотрудников и пр. При выполнении современных требований [2, 6], обязательных для аккредитованных лабораторий, объем этой деятельности возрастает, и в крупных лабораториях в отсутствие компьютеризации для этого приходится выделять специальных сотрудников.

Таким образом, практически все виды деятельности современной лаборатории поддаются компьютеризации, и мы видим, что процесс оснащения лабораторий компьютерной техникой идет весьма активно.



Рис. 1. Классификация программ для компьютеризации лабораторий

### Каково современное состояние компьютеризации лабораторий?

Важнейшим фактором, определяющим современное положение дел в этой области, является продолжающееся действие «закона Мура» — эмпирического наблюдения, согласно которому число транзисторов на единице площади кремниевого кристалла удваивается каждые два года. Из-за этого происходит экспоненциальный рост быстродействия и объема памяти компьютеров с одновременным их удешевлением. В результате использование компьютеров в лабораториях стало обыденным явлением (стоимость обычного компьютера составляет несколько тысяч рублей, а лабораторную сеть, охватывающую все помещения типичной лаборатории, можно построить за 100 – 300 тыс. рублей, что соответствует цене среднего спектрофотометра).

С другой стороны, программисты перестали думать о быстродействии программ и об экономии памяти. Все операции (расчеты, построение изображений и т.д.) совершаются мгновенно, а лабораторная информация за многие годы работы легко умещается на обычном жестком диске. На первый план выходят используемые в лабораториях программы, практически полностью определяющие стоимость компьютеризации.

Используемые в лабораториях компьютерные программы общего назначения можно условно разделить на три группы (рис. 1):

*LIMS (Laboratory Information Management Systems)*<sup>2</sup> — программные (иногда — программно-аппаратные) комплексы, каждый из которых пытается охватить все стороны деятельности лаборатории;

*специализированные программы*, каждая из которых предназначена для решения тех или иных конкретных задач (*компьютеризация*

<sup>2</sup> В отечественной литературе используются аббревиатуры ЛИС (лабораторные информационные системы) и ЛИУС (лабораторные информационно-управляющие системы).

«блоками»<sup>3</sup>. Под блоками здесь понимаются виды деятельности в лаборатории: работа с образцами и генерация протоколов, проведение исследований, ведение документации и т.д.;

«офисные» программы, названные нами так потому, что они либо входят в состав пакета Microsoft Office (Microsoft Corporation, США), наиболее распространенного в России, либо аналогичны им. Так, программу Microsoft Word часто используют при подготовке протоколов исследований (предварительно создав соответствующие шаблоны), на основе приложений к Microsoft Excel создают мини-программу для ведения контрольных карт и т.д. Рассмотрим достоинства и недостатки каждого класса программ.

*LIMS*. Общее описание LIMS приведено в стандарте [7]. На рынке представлено несколько десятков подобных программ. В России используются как адаптированные зарубежные LIMS, так и программы отечественной разработки, причем появляются все новые, но все они претендуют на охват всех или большинства вышеперечисленных видов лабораторной деятельности. Поэтому при взаимодействии разных частей программы возникает огромное число связей между ними. Все это не только приводит к очень сложным системам, но даже заставляет использовать специальную терминологию, не используемую обычно в лабораториях [8]. Вследствие этого LIMS, несомненным преимуществом которых является полная или почти полная компьютеризация деятельности лаборатории, имеют существенные недостатки:

высокая начальная стоимость системы (от 2 млн рублей);

необходимость серьезного обучения сотрудников лаборатории, так как обычного владения компьютером на уровне пользователя для работы с программой недостаточно;

необходимость существенной перенастройки программы при изменениях в работе лаборатории, например, при реорганизации или появлении новых методов исследований. При этом необходимо участие специалистов фирмы-производителя, что ведет к дополнительным расходам.

По мнению разработчиков LIMS, высокие затраты на их установку и эксплуатацию могут окупаться (см., например, [9]) за счет следующих факторов:

сокращение персонала за счет более эффективного использования оставшихся сотрудников;

оптимизация использования оборудования.

Кроме того, часто полагают, что при использовании LIMS уменьшается количество ошибок при регистрации данных.

Однако ожидаемой экономии после внедрения LIMS не происходит. В стабильно работающей лаборатории не удается сократить штаты, так как все и так более или менее загружены (а имеющаяся специализация исполнителей не позволяет свободно перебрасывать их с одного вида исследований на другой), а эксплуатация LIMS еще и требует специального персонала. Даже если в результате внедрения LIMS в очень крупных лабораториях и удастся сократить рядового сотрудника, при существующем уровне оплаты труда это практически не влияет на окупаемость системы. Не удается и уменьшить количество приборов — есть LIMS или нет, измерения все равно надо проводить. Экстренные ситуации успешно разрешаются опытными руководителями без всяких компьютеров. Такая ситуация сохранится и в обозримом будущем.

Отдельно рассмотрим вопрос об ошибках при регистрации результатов измерений. Конечно, при непосредственном подключении всех приборов к LIMS вводить данные вручную не надо. Однако это дорого и не всегда возможно. Кроме того, во многих сферах (например, в фармакологических лабораториях) фиксация первичных результатов измерений на бумаге с «живой» подписью исполнителя обязательна. Поэтому результаты измерений чаще всего вводятся с клавиатуры. Количество ошибок при ручном вводе невелико, и они в большинстве случаев выявляются при проверке приемлемости результатов измерений либо при подготовке протоколов. Таким образом, внедрение LIMS мало влияет на число такого рода ошибок.

Из сказанного понятно, что внедрение LIMS обычно экономически неэффективно. Поэтому реально их использует небольшой процент лабораторий крупных предприятий, которые и оплачивают издержки.

Справедливости ради отметим, что в последнее время на рынке появились простые и недорогие LIMS (см. ниже).

*Специализированные программы (компьютеризация «блоками»)* наиболее распространены. Это либо самостоятельные программы, либо «усеченные» варианты LIMS. Как уже было сказано, эти программы предназначены для компьютеризации лишь части перечисленных выше видов деятельности лабораторий. Конечно, существуют простые программы, решающие узкие задачи (например, расчет градуировочной характеристики или ведение контрольных карт), но они постепенно исчезают. Современная специализи-

<sup>3</sup> Иногда специализированные программы этой группы называют также «mini-LIMS», программами типа «Лабораторный журнал» и т.д.

рованная компьютерная программа решает комплекс задач.

Как же устроены современные специализированные программы?

С учетом специфики разных видов деятельности в лаборатории, перечисленных выше, их можно объединить в группы («блоки»), каждая из которых «естественно» компьютеризируется в рамках одной программы (рис. 2). При этом важно удобство использования каждой программы, а не простота ее написания. Стоимость отечественной программы этого класса в настоящее время лежит в диапазоне 50 – 150 тыс. руб. (данные на конец 2017 г.). Рассмотрим программы для каждого блока в общем виде и на примере наиболее распространенных в России программ QControl и DControl.

*Блок работы с приборами* нет смысла детально обсуждать в данной статье, поскольку соответствующие программы являются составной частью приборов (см. выше).

*Блок задач расчета результатов и контроля качества* — это в основном работа лаборанта. Такие задачи решаются в программе QControl [10]. Основой ее является электронный лабораторный журнал (рис. 3), в который вводятся первичные данные (например, аналитический сигнал при химическом анализе). Предварительно в программу вводятся все нужные сведения о методиках измерений: способ расчета окончательно приводимого результата, стандартные отклонения повторяемости (сходимости) и воспроизводимости, методы проверки приемлемости результатов и контроля стабильности и т.д. Программа автоматически рассчитывает результаты измерений по формуле либо по градуировочной зависимости, проводит проверку приемлемости и рассчитывает окончательно приводимый результат по ГОСТ Р ИСО 5725 – 2002, выполняет контроль стабильности измерений и т.д. Кроме того, с помощью программы QControl можно проводить и другие расчеты, например, при валидации и верификации МИ.

*Задачи, связанные с регистрацией поступающих в лабораторию проб, отслеживанием их движения внутри лаборатории и генерацией протоколов*, в большинстве лабораторий решаются отдельной группой или, в маленьких лабораториях, специально выделенным сотрудником. В рамках идеологии специализированных программ для этих целей используется отдельная программа (блок) SControl, взаимодействующая с лабораторным журналом программы QControl. Вместе они представляют собой LIMS.

Отметим, что по цене и простоте использования такая LIMS значительно превосходит классические программы.

Управление аналитическими приборами и получение аналитического сигнала

#### РАБОТА С ПРИБОРАМИ

Градуировка  
Расчет результатов измерений  
Проверка приемлемости результатов  
Контроль стабильности результатов  
Другие способы контроля  
Валидация и верификация методик

#### РАСЧЕТ РЕЗУЛЬТАТОВ И КОНТРОЛЬ КАЧЕСТВА (работа лаборанта)

Учет и хранение документов  
Ведение области аккредитации  
Ведение списков заказчиков и субподрядчиков  
Учет реактивов, материалов, стандартных образцов  
Учет и контроль состояния оборудования  
Учет сотрудников и их обучения  
Регистрация претензий и корректирующих действий  
Внутренние проверки, анализ со стороны руководства  
Печать сведений (например, при аккредитации) и т.д.

#### ВЕДЕНИЕ ЛАБОРАТОРНОЙ ДОКУМЕНТАЦИИ

Регистрация и отслеживание проб  
Генерация протоколов, статистика

#### РЕГИСТРАЦИЯ ПРОБ И ГЕНЕРАЦИЯ ПРОТОКОЛОВ

Рис. 2. Блоки лабораторной деятельности (задачи, «естественно» решаемые в рамках одной специализированной программы)



Рис. 3. Принципиальная схема Лабораторного журнала программы QControl

*Задачи, связанные с ведением (обще-)лабораторной документации*, решаются с помощью программы DControl (Document Control). Поскольку эти задачи в основном соответствуют

ГОСТ Р ИСО/МЭК 17025 [1], программа имеет несколько разделов, каждый из которых соответствует одному из разделов этого документа. При этом с помощью программы DControl удается решить следующие основные задачи, связанные с документацией:

хранение информации по всем разделам;

контроль своевременности закупок, покупок и профилактики средств измерений, заключения договоров, обучения сотрудников, проверок и т.д.;

печать сведений по всем разделам программы и соответствующие требования вышестоящих и контролирующих организаций и органов по аккредитации и т.д.

Другими словами, на основе программы DControl можно построить систему управления качеством лаборатории. При этом при наличии лабораторной сети работа по различным видам учета легко распределяется среди большинства сотрудников лаборатории, а за руководством остаются организационно-контрольные функции. Нам неизвестны другие программы, специально предназначенные для решения этого блока задач.

«Офисные» программы. Это программы общего назначения. Конечно, они используются в лабораториях для создания текстов, отчетности и т.д., но их применение в значительной степени ограничено наличием программ, специально разработанных для лабораторий.

### Компьютеризация и метрологические аспекты деятельности лабораторий

Конечно, компьютеризация затрагивает и метрологические аспекты деятельности лабораторий. Расчет результатов (градуировка и проверка приемлемости с получением окончательно приводимого результата), валидация и верификация МИ, контроль стабильности и другие способы контроля качества измерений намного упрощаются при использовании компьютерных программ. При этом происходит качественный скачок: грамотно написанная программа позволяет лабораториям использовать современные подходы (включая сложные статистические расчеты, ведение контрольных карт и т.д.) почти без затрат времени и не имея в штате квалифицированных метрологов и статистиков. Введя в компьютер результаты измерений и нажав нужную клавишу, лаборант выполняет расчет результатов (включая градуировку и проверку приемлемости) и контроль стабильности измерений, а при желании — валидацию и верификацию методики. Компьютеры также позволяют упростить

слежение за своевременностью поверки средств измерений и их технического обслуживания

*Градуировка.* Компьютерные программы давно используются для построения градуировочной характеристики. Основным преимуществом при этом является снижение трудоемкости вычислений, объем которых достаточно велик даже в классическом линейном регрессионном анализе с использованием МНК в варианте Гаусса и резко возрастает при использовании взвешенного МНК или при нелинейной градуировке. Использование описанных выше программ в рутинном анализе позволяет легко строить и использовать практически любую описанную в методике градуировочную характеристику.

*Расчет результатов измерений, включая проверку их приемлемости.* Если методика предусматривает одно измерение, трудоемкость расчета результатов невелика (хотя и в этом случае использование компьютеров весьма полезно). Однако все намного усложняется, когда МИ предусматривает два и более измерения для каждой рутинной пробы: таково большинство современных методик. Современные рекомендации [3] требуют в таких случаях проводить проверку приемлемости, позволяющую избежать влияния грубых промахов на окончательно приводимый результат. Процедура предусматривает на первом этапе сравнение размаха полученной для образца выборки (разности наибольшего  $X_{\max}$  и наименьшего  $X_{\min}$  результатов измерений) с пределом сходимости методики измерений:

$$X_{\max} - X_{\min} \leq CR_{0,95}(n), \quad (1)$$

где  $n$  — объем выборки (число измерений),  $CR_{0,95}(n) = f_n \sigma_r$ ,  $f_n$  — «коэффициенты критического диапазона» [2],  $\sigma_r$  — стандартное отклонение повторяемости (сходимости) методики (норматив). Для двух измерений (наиболее частый случай) это неравенство имеет вид:

$$|X_1 - X_2| \leq r, \quad (2)$$

где  $r = CR_{0,95}(2) = 2,77\sigma_r$ .

В случае невыполнения неравенств (1, 2) чаще всего выполняются дополнительные измерения, размах получившейся выборки сравнивается с новым  $CR_{0,95}(n)$ , и в зависимости от результатов сравнения за окончательно приводимый результат принимается либо среднее, либо медиана выборки. Зависимость  $\sigma_r$  (а следовательно, и  $r$ ) от измеряемой величины почти всегда известна (и приведена в тексте методики). В отечественной практике абсолютное или относительное стандартное отклонение сходимости задается во всем диапазоне значений измеряемой

величины, или в каждом из нескольких поддиапазонов — либо постоянным, либо в виде функции  $\sigma_r(X)$ .

Однако при практической реализации этих алгоритмов возникает ряд проблем. Лаборант должен помнить или иметь перед глазами значения  $CR_{0,95}(n)$ , что непросто. Кроме того, когда измеренные значения  $X$  оказываются в разных поддиапазонах, нужны дополнительные вычисления [11]. Практика показывает, что без компьютеризации корректная проверка приемлемости (а значит, и расчет окончательно приводимого результата измерений) не выполняется, а с использованием компьютерных программ происходит автоматически и мгновенно (хотя, конечно, дополнительные измерения проводить приходится).

*Оценка метрологических характеристик методик при их постановке в лаборатории* («верификация» методик), так же как их валидация в ходе аттестации МИ, требуют громоздких вычислений. Эти процедуры легко выполняются с помощью компьютерных программ, особенно верификация в ходе контроля стабильности [5].

*Контроль стабильности измерений* с ведением контрольных карт практически невозможен без использования компьютеров. Неудачные попытки заставить лаборатории делать это предпринимались в медицине еще в 1980-е годы, однако реально внедрение этой процедуры стало происходить лишь по мере появления в лабораториях компьютерных программ. При их использовании все происходит автоматически (хотя, конечно, контрольные материалы исследовать надо), и только в случае сбоев решение должен принимать более или менее компетентный сотрудник. Другие способы внутрилабораторного контроля [4] также легко реализуются с помощью компьютерных программ.

*Учет и контроль состояния средств измерений* значительно облегчается при ведении компьютерного учета: фактически исчезают ситуации с использованием не поверенных по невнимательности средств измерений. При использовании специализированных программ это делается в программах для ведения документации, например, DControl [12].

Таким образом, сложные метрологические процедуры легко и просто реализуются в реальных лабораториях с помощью современных компьютерных программ. При этом от тех, кто их выполняет, не требуется глубоких знаний метрологии и математической статистики: соответствующие алгоритмы и нужные сведения уже заложены в компьютер, и все происходит более или менее автоматически. Конечно, желательно, чтобы в каждой лаборатории был кто-то более

или менее компетентный в этой области, но не более того.

Не все виды метрологической деятельности легко компьютеризировать. Так, оценка неопределенности результатов измерений с использованием «бюджета неопределенностей» плохо поддается компьютеризации. Мы анализировали такую возможность и пришли к выводу, что реально можно компьютеризировать, да и то частично, лишь сложение погрешностей (стандартных неопределенностей) и рисование диаграмм Исикавы — самые простые этапы такой оценки. Все остальное — выявление этапов измерения, вносящих существенный вклад в общую неопределенность, и оценки этого вклада — компьютеризации поддается плохо. Здесь все определяют не сложные расчеты и работа с изображениями, а знания и квалификация специалиста.

Подводя итог, можно сделать вывод, что в обозримом будущем компьютеризация охватит практически все лаборатории. Будут преобладать специализированные программы и недорогие LIMS. Дорогие программы, как и сейчас, будут иметь весьма ограниченное применение.

При этом высокие требования к метрологическому обеспечению выполняемых измерений и ведению лабораторной документации будут выполняться легко и просто. Узкие специалисты по метрологии и обеспечению качества будут исчезать, а широкое внедрение метрологических и других новаций будет происходить через их включение в распространенные компьютерные программы: ведь известно, что легко осваивается то, что просто сделать.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Дворкин В. И. Компьютеризация при построении системы обеспечения качества аналитических лабораторий: современное состояние и перспективы / Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2008. Т. 74. № 12. С. 58 – 63.
2. ГОСТ Р ИСО/МЭК 17025–2009. Общие требования к компетентности испытательных и калибровочных лабораторий. — М.: Стандартинформ, 2012. — 28 с.
3. ISO/IEC 17025:2017. General requirements for the competence of testing and calibration laboratories.
4. РМГ 76–2014 ГСИ. Внутренний контроль качества результатов количественного химического анализа. — М.: Стандартинформ, 2015. — 110 с.
5. Дворкин В. И. Метрология и обеспечение качества химического анализа. — М.: Изд-во МИТХТ, 2014. — 423 с.
6. Приказ Министерства экономического развития РФ от 30 мая 2014 г. N 326 «Об утверждении Критериев аккредитации ...».
7. ГОСТ Р 53798–2010. Стандартное руководство по лабораторным информационным менеджмент-системам (ЛИМС). — М.: Стандартинформ, 2010. — 72 с.
8. Куцевич И. В. Введение в LIMS / Мир компьютерной автоматизации. 2002. № 4. С. 32 – 40.
9. Меркуленко Н. Н. Лабораторные информационные системы LIMS: сб. статей. — М.: ООО «Маркетинг. Информационные технологии», 2006. С. 215 – 219.

10. Р 50.2.003–2002. Рекомендации по метрологии. ГСОЕИ. Внутренний контроль качества результатов измерений. Пакет программ QControl. — М.: ИПК Изд-во стандартов, 2000 (с поправкой, опублик. в ИУС № 2, 2003). — 3 с.
11. **Дворкин В. И.** Учет зависимости повторяемости (сходимости) от измеряемой величины при проверке приемлемости / Завод. лабор. Диагн. матер. 2016. Т. 82. № 12. С. 71 – 72.
12. [www.qcontrol.ru](http://www.qcontrol.ru) (дата обращения 15.02.2018).

## REFERENCES

1. **Dvorkin V. I.** Computerization in the System of Quality Control of Analytical laboratories: Current State and Prospects / Zavod. labor. Diagn. mater. 2008. Vol. 74. N 12. P. 58 – 63 [in Russian].
2. ISO/IEC 17025:2005. General requirements for the competence of testing and calibration laboratories.
3. ISO/IEC 17025:2017. General requirements for the competence of testing and calibration laboratories.
4. RMG 76–2014. State system for ensuring the uniformity of measurement. Internal control of quantitative chemical analysis result's accuracy. — Moscow: Standartinform, 2015. — 110 p. [in Russian].

5. **Dvorkin V. I.** Metrology and quality assurance of chemical analysis. — Moscow: MITHT, 2014. — 423 p. [in Russian].
6. Order of the Ministry of economic development of FR N 326 [in Russian].
7. ASTM E 1578:2006. Standard guide for laboratory information management systems (LIMS).
8. **Kutsevich I. V.** Introduction to LIMS / Mir Komput. Avtomatiz. 2002. N 4. P. 32 – 40 [in Russian].
9. **Merkulenko N. N.** Laboratory information systems LIMS: collection of articles. — Moscow: OOO “Marketing. Informatisionnye tekhnologii”, 2006. P. 215 – 219 [in Russian].
10. Р 50.2.003–2002. Recommendations on metrology. Statistical system for ensuring the uniformity measurements. Internal quality control of measurement result. Software package “QControl”. — Moscow: Iz-vo standartov, 2000. — 3 p. [in Russian].
11. **Dvorkin V. I.** Consideration for Dependence of the Repeatability (convergence) of the Measured Value in Checking the Acceptability / Zavod. Labor. Diagn. Mater. 2016. Vol. 82. N 12. P. 71 – 72 [in Russian].
12. [www.qcontrol.ru](http://www.qcontrol.ru) (accessed February 15, 2018).