

рационных систем типа MS-DOS, а также Win16 и Win32: системы управления файлами и командную строку. Оба механизма взаимодействия программ и данных имеются практически во всех операционных системах, причем их использование не требует дополнительного анализа и структурирования потоков данных.

- Механизмы эффективного обмена данными в ППП реализованы в системной оболочке Bra-

inStorm v. 1.0 под MS Windows и проверены при создании двух пакетов прикладных программ.

- Данную системную оболочку можно применять на этапе начального формирования (прототипирования) ППП, для написания функциональных модулей которого применяются современные системы программирования, когда более важным является сам факт передачи данных между модулями ППП, а не эффективность коммуникаций модулей.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Самарский А.А. Пакеты прикладных программ как средство обеспечения сложных физических расчетов // Перспективы системного и теоретического программирования: Труды Всес. симп.; Под ред. И.В. Потосина. – Новосибирск, 1979. – С. 5–13.
2. Яненко Н.Н., Карначук В.И., Коновалов А.Н. Проблемы математической технологии // Численные методы механики сплошной среды. – Новосибирск, 1977. – Т. 8. – Вып. 3. – С. 129–157.
3. Ильин Н.П. Расширенное толкование закона Мура // Информационные технологии. – 2005. – № 5. – С. 70–71.
4. Массель Л.В., Горнов А.Ю., Подкаменный Д.В. Создание вычислительных ресурсов в Internet на основе унаследованного программного обеспечения // Совместный выпуск журналов «Вычислительные технологии». – Т. 7 и «Вестник КазНУ». – № 4 (32). – Матер. Междунар. конф. «Вычислительные технологии и математическое моделирование в науке, технике и образовании». – Ч. 3. – Новосибирск-Алматы. – 2002. – С. 247–252.
5. О технологии изготовления инженерно-физических ППП. Пакет «Аркан» / С.С. Бондарчук, А.Б. Ворожцов, А.С. Жуков и др. // Языки и параллельные ЭВМ. – М.: Наука, 1990. – С. 79–90.
6. Потапчук Г.А. Инструментальные средства поддержки процесса создания программных систем дискретной оптимизации // Кибернетика и системный анализ. – 1992. – № 4. – С. 125–133.
7. Парасюк И.Н. Принципы разработки современных программных систем анализа данных // Кибернетика и системный анализ. – 1993. – № 3. – С. 155–162.
8. Бабушкин Ю.В., Зимин В.П., Синявский В.В. Моделирующая система КОРТЕС для исследования тепловых и электрических процессов в термоэмиссионных системах преобразования энергии // Ракетно-космическая техника: Труды. Сер. XII. – Вып. 1–2. Расчет, проектирование, конструирование и испытания космических систем / Под ред. В.В. Синявского. – Калининград, Моск. обл.: РКК «Энергия», ОНТИ, 1998. – С. 60–78.
9. Бабушкин Ю.В., Зимин В.П., Хомяков Е.А. Программное обеспечение и результаты моделирования термоэмиссионных систем // Известия Томского политехнического университета. – 2006. – Т. 309. – № 3. – С. 53–57.

УДК 543:681.3.066

### РАЗРАБОТКА ЛАБОРАТОРНОЙ ИНФОРМАЦИОННО-УПРАВЛЯЮЩЕЙ СИСТЕМЫ

О.В. Терещенко, А.Г. Терещенко, В.А. Терещенко, А.М. Янин, Т.В. Толстихина

НИИ высоких напряжений Томского политехнического университета

E-mail: git@hvd.tpu.ru

*Представлены результаты актуального направления работы НИИ ВН по разработке программного комплекса ЛИС/ЛИУС «Химик-аналитик» для автоматизации деятельности аналитических лабораторий. Рассмотрены функции комплекса и методологические принципы его разработки, проведено сравнение с зарубежными аналогами. Описана модель производственного аналитического контроля с использованием понятий цикл жизни лаборатории, методики и пробы.*

В современной экономике ведущих стран мира важная роль принадлежит информационным технологиям (ИТ). В России это, пожалуй, одна из немногих отраслей, которая за последние 15 лет неуклонно развивается по восходящей. Однако в значительной степени отрасль развивается, основываясь на программном обеспечении (ПО), получаемом из-за рубежа. Круг задач, решаемых с помощью ИТ, постоянно растет. Для отражения российской производственной специфики и обеспечения информационной безопасности необходимо разрабатывать отечественное ПО.

Как известно, параметры качества продукции, выпускаемой любым предприятием, контролируются аналитическими лабораториями. В функциональные обязанности аналитических лабораторий входит всесторонний контроль качества на всех стадиях производства товара – от исходного сырья до поставляемого готового продукта. В связи с этим в своей деятельности лаборатории оперируют большим объемом разнородной информации. Многочисленные информационные потоки, охватывающие лабораторию, имеют, как правило, сложную структуру. Движение информации вы-

полняется зачастую при помощи ее ручного переписывания из одного бумажного документа в другой и последующей передачи документов заинтересованным подразделениям, лицам и организациям. Результатами действия подобной схемы являются: низкая оперативность использования данных, слабая управляемость аналитического процесса, затрудненный аудит, вероятность искажения полученных результатов и т.д. В итоге лаборатория не способна обеспечить стратегическую задачу повышения конкурентоспособности продукции через функционирование полноценной системы менеджмента качества.

В результате анализа сложившейся ситуации актуальность задач по разработке ПО для аналитических лабораторий различных предприятий не вызывает сомнений. Работа в этом направлении привела к созданию программного продукта, который прошел несколько стадий разработки: от автоматизированного рабочего места (АРМ) и лабораторно-информационной системы (ЛИС) до нынешнего состояния – лабораторной информационно-управляющей системы (ЛИУС) «Химик-аналитик» [1–9]. Развитие программы диктовалось потребителем по мере внедрения разработки. АРМ соответствовало целям локальной автоматизации работы лаборантов и инженеров. ЛИС позволила выйти на общелабораторный уровень, обеспечить единое информационное пространство лаборатории и реализовать внутрилабораторный контроль. ЛИУС решает комплексную задачу автоматизации деятельности лаборатории, включая управление лабораторией, и, соответственно, ориентирована не только на лаборантов и инженеров, но и на руководство лабораторией. ЛИС «Химик-аналитик» зарегистрирована в Реестре программ для ЭВМ Федеральной службой РФ по интеллектуальной собственности, патентам и товарным знакам (свидетельство № 2004612298 от 7 октября 2004 г.) [10].

Сегодня программный комплекс ЛИС/ЛИУС «Химик-аналитик» охватывает все основные функции аналитической лаборатории и обеспечивает выполнение следующих задач:

- управление работами и ресурсами, планирование работ в аналитической лаборатории (блок управления в составе ЛИУС);
- ведение различных электронных лабораторных журналов с метрологической обработкой результатов анализа;
- ведение вспомогательных журналов приготовления растворов, учета прихода и расхода реактивов, химпосуды и оборудования, инженерно-экологических расчетов;
- внутрилабораторный контроль в соответствии с ГОСТ Р ИСО 5725-2002 и МИ 2335-2003;
- автоматизированный документооборот аналитической лаборатории;
- статистическая обработка результатов измерений и представление их в виде выходных доку-

ментов лаборатории: отчетов, протоколов анализов, графиков и диаграмм;

- организация системы менеджмента качества лаборатории по ГОСТ Р ИСО 17025-2000.

Обзор рынка лабораторно-информационных систем, проведенный независимой аналитической компанией ЗАО «ЛИМС» по итогам 2003 г., показал, что разработка НИИ ВН «Химик-аналитик» занимает одно из ведущих мест по внедрению на территории России [11]. Несмотря на то, что на тот момент только 8 предприятий приобрели данный программный продукт, доля «Химик-аналитик» в объеме внедрений составляла 40 %. Сегодня на счету коллектива более 70 лабораторий, оснащенных программным продуктом «Химик-аналитик» в том или ином виде (рис. 1). В их числе – лаборатории наиболее успешных предприятий России, таких как ОАО «Магнитогорский металлургический комбинат» и «Нижнетагильский металлургический комбинат», ООО «Тюментрансгаз» (г. Югорск), ОАО «Красноярскэнерго», НК «ТНК» (г. Нижневартовск), ОАО «Кокс» (г. Кемерово), ООО «Ямбурггаздобыча» и др. Проведенный обзор выявил еще одну важную особенность, которая заключается в том, что программный продукт «Химик-аналитик» лидирует также по количеству отраслей внедрения: черная и цветная металлургия, нефтяная, газовая и химическая отрасли, энергетика и др. По данным [12] в рейтинге ИТ-компаний Сибири и Томска по объему продаж НИИ ВН занимает 25-е и 3-е место соответственно.

В ходе маркетинга выяснилось, что основными конкурентами при продвижении ЛИС/ЛИУС «Химик-аналитик» на рынке оказались крупнейшие зарубежные разработчики программного обеспечения. За рубежом это направление успешно развивается с 1985 г. [13, 14]. На начало века на мировом рынке LIMS (LIMS – Laboratory Information Management Systems) было представлено около 50 фирм – производителей LIMS-продуктов [11]. Некоторые из западных фирм («Creon Lab Control AG» («Waters») с Q-DIS\QM LIMS и «LabWare Inc» с LabWare-LIMS) активно действуют на российском рынке сами по себе или через российских посредников [11, 15, 16]. Отечественные разработки в этой области не составляют для ЛИС/ЛИУС «Химик-аналитик» серьезной конкуренции в силу того, что сегодня они не способны автоматизировать работу аналитических лабораторий в полном объеме [17–19].

Высокая коммерческая востребованность ЛИС/ЛИУС «Химик-аналитик» на отечественных предприятиях подтвердила правильность заложенной в основу ее разработки научной методологии. Более детальное знакомство с зарубежными LIMS и сравнение их с ЛИУС «Химик-аналитик», несмотря на общую цель – обслуживание испытательных химических лабораторий, выявило и методологическое различие. В основу методологии разработки западных программных продуктов положен взгляд на LIMS как на управленческие программы с точки

зрения бизнес-процессов предприятия в целом [20]. Эта методология реализуется через реинжиниринг деятельности лабораторий, адаптацию LIMS к шаблонным бизнес-процессам и типовой унифицированной отчетности, заложенной в приобретаемой компьютерной программе [21]. В западных программных продуктах хорошо выполнен верхний уровень управления лабораторией и цикл жизни пробы, отработана интеграция с другими корпоративными системами предприятия и автоматизированными аналитическими приборами, но практически не отражен нижний уровень – уровень самой лаборатории: методики анализа, ее внутрилабораторные нужды, например, внутрилабораторный контроль и приготовление растворов. Очень часто разработчики LIMS используют свои понятия, которые отсутствуют в российских и международных нормативных документах по аналитике, например, такие как «стандарт» в Q-DIS, «групповой показатель» в LabWare.

В основу методологии при разработке ЛИС/ЛИУС «Химик-аналитик» был положен принцип, суть которого заключается в том, чтобы отразить работу лаборатории через такие привычные понятия, как лабораторные журналы и внутрилабораторные функции лаборатории с учетом требований отечественных нормативных документов. В соответствии с этим в ЛИС/ЛИУС «Химик-аналитик» включены электронные лабораторные журналы, глубина проработки результатов измерений в которых, учитывающая историю получения параллельных определений и метрологическое

обеспечение результирующего значения, полностью удовлетворяет любым требованиям различных методик. В системе также реализованы требования отечественных нормативных документов, касающиеся условий осуществления внутрилабораторного контроля – определения показателей качества результатов анализа для обеспечения их необходимой точности. Эта часть ЛИС/ЛИУС «Химик-аналитик» аттестована Уральским НИИ метрологии в соответствии с требованиями МИ 2335-2003, ГОСТ Р ИСО 5725-2002, РМГ 54-2003, МУ 6/113-30-19-83 и РМГ 60-2003 (свидетельство № 2-2005 от 25 марта 2005 г.). Автоматизация внутрилабораторного контроля в рамках ЛИС/ЛИУС позволяет не только упростить работу и сократить время по его проведению, но и сделать процесс контроля прозрачным для проверок, наглядно и доступно для аналитиков отразить сложные алгоритмы, приведенные в нормативных документах. В программных продуктах зарубежного производства класса LIMS метрологические нужды лаборатории либо вообще не автоматизированы, либо сложны в использовании.

Одна из целей внедрения ЛИУС (кроме автоматизации информационного пространства лаборатории и функций обработки данных) – управление лабораторией. Качественное управление должно основываться на оперативных и достоверных данных как текущей ситуации, так и данных фактического прошлого и планируемого будущего лаборатории и ее внешней среды (обслуживаемого производства). Информационная система должна отражать динамику развития лаборатории во времени. Исследова-



Рис. 1. Карта внедрений ЛИС/ЛИУС «Химик-аналитик» в Урало-Сибирском регионе

ние предметной области для раскрытия особенностей объектов лабораторной среды в данном направлении проведено с использованием расширенного понятия жизненного цикла (ЖЦ). Наиболее значимыми и определяющими динамику лаборатории являются ЖЦ: лаборатории, методик анализа и пробы.

В связи с этим, вторым принципом методологии, заложенным при конструировании программы ЛИС/ЛИУС «Химик-аналитик», является 3-х ступенчатая модель производственного аналитического контроля (рис. 2), которая позволяет описать состояние лаборатории в целом. Первичным для получения результата анализа лаборатории является процесс обработки пробы (определяет ЖЦ пробы). Протекание данного процесса обеспечивает внутрилабораторная среда, содержащая необходимые ресурсы и инструменты. Важнейшим информационным инструментом обработки пробы являются методики, которые обеспечивают жизненный цикл каждой отдельной пробы. Методики играют одну из ключевых ролей в аналитическом контроле и также имеют свой ЖЦ. Внутренняя среда лаборатории, как и методики, напрямую зависят от обслуживаемого производства – внешней среды по отношению к лаборатории. Жизненный цикл лаборатории является главенствующим в модели и определяет функционирование всех остальных.

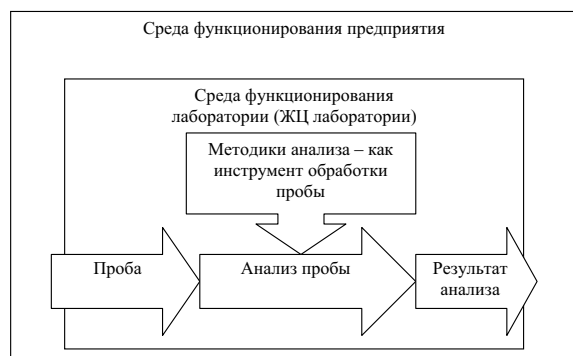


Рис. 2. Модель производственного аналитического контроля

**Цикл жизни лаборатории**, обслуживающей производство – это последовательность этапов, связанных с изменением структурных, функциональных, кадровых, нормативных и других аспектов внешней среды, определяющих деятельность лаборатории.

Цикл жизни лаборатории включает такие понятия как административно-технологическая структура предприятия (цеха, технологические установки, аппараты), объекты анализа и сама лаборатория с используемыми методиками анализа. Каждому понятию соответствует справочник или вкладка справочника ЛИУС. Информация в справочниках отражает текущее состояние административно-технологической структуры предприятия. Эти данные через контрольные точки (места отбора проб с привязкой к цехам, установкам, объектам) отражаются в лабораторных журналах лаборатории вместе с результа-

тами анализов. Если на предприятии несколько лабораторий (лабораторных групп) охвачены одной ЛИУС, то каждая лаборатория имеет свои журналы. Далее результаты анализа могут быть представлены в виде отчетных документов лаборатории за смену (неделю, месяц, год) с выделением данных по цехам, установкам, объектам и местам отбора проб.

Если лаборатория не обслуживает определенное производство (независимая лаборатория), то цикл жизни лаборатории сужается. Но в любом случае «цикл жизни лаборатории» – основной в ЛИУС, т.к. через объекты анализа и анализируемые компоненты (показатели) он задает тематическую направленность лаборатории.

Таким образом, цикл жизни лаборатории отражает состояние лаборатории с позиций структуры и потребностей предприятия.

**Цикл жизни методики** анализа в лаборатории – это последовательность стадий, связанных с систематическим материальным, кадровым и метрологическим обеспечением методики анализа, обеспечивающим ее поддержание в оперативной готовности к выполнению анализов.

После того, как сформулирована тематическая направленность лаборатории и выбраны методики определения компонентов в объектах анализа, они начинают жить своей жизнью. Цикл жизни каждой методики анализа индивидуален, но в общем случае он включает следующие стадии: первичное обеспечение методики, ввод ее в действие, рабочее состояние методики анализа, модернизация или отказ от данной методики.

В ЛИУС цикл жизни методики поддерживается такими формами как справочник методик анализа, хранящий калькулятор расчета результатов параллельных определений, сведения о метрологических характеристиках методики и результатов анализа; справочник химических веществ; журналы учета реактивов; приготовления растворов; регистрации оборудования, химической посуды; контрольных процедур; калибровочных графиков. Результаты жизненного цикла методики отражаются в соответствующих внутрилабораторных документах, а метрологические характеристики результатов анализа – в записях лабораторных журналов, тем самым обеспечивается прослеживаемость измерений.

Таким образом, совокупность текущих стадий жизненных циклов методик отражает состояние лаборатории с точки зрения ее внутренних работ и определяет степень оперативной готовности к обслуживанию производства.

**Цикл жизни пробы** – совокупность (последовательность) работ лаборатории по конкретной пробе, включающая такие стадии как планирование отбора пробы, её отбор, доставку, регистрацию, выполнение анализов, контроль за их выполнением, утверждение результатов анализов, передачу информации о выполненных анализах и представлении протокола анализа.

На предприятии годовой план работы лаборатории определяет график аналитических работ (режимные карты, рабочие программы). Цикл жизни пробы отражается в блоке управления ЛИУС и начинается с того, что сведения о контрольной точке из плана на год переносятся в план на смену и распределяются по конкретным исполнителям. Дается задание на отбор пробы, проба отбирается в контрольной точке (место отбора, цех, технологическая установка, объект анализа, список показателей), описываются условия отбора, отобранная проба доставляется в лабораторию, регистрируется в журнале регистрации проб и передается лаборанту для определения компонентов (показателей) объекта в соответствии с методикой анализа. По мере выполнения результаты анализа заносятся в лабораторный журнал, проверяется приемлемость результата, результат сравнивается с нормой. После утверждения результатов анализа создается протокол анализа пробы, который направляется в цех (заказчику), а проба направляется на утилизацию. В сравнении с зарубежными LIMS в блок управления ЛИУС «Химик-аналитик» заложена большая гибкость в настройках планов периодичности отбора проб.

Таким образом, жизненный цикл пробы в ЛИУС отражает взгляд на лабораторию и её функциональность с точки зрения оперативных планов предприятия и их выполнения.

Выше указанные подходы к конструированию информационной системы позволили создать программный продукт, обладающий универсальностью и возможностью внедрения на промышленных предприятиях, независимо от их отраслевой принадлежности, и содержащий в себе элементы системы менеджмента качества. На сегодня НИИ ВН имеет в своем арсенале динамично развивающийся программный продукт с отработанной методологической основой, который объединяет в себе функциональность лучших западных аналогов с простотой эксплуатации и удовлетворяет всем требованиям отечественной нормативной документации в области аналитической химии и метрологии. Опыт многочисленных внедрений ЛИС/ЛИУС «Химик-аналитик» и полученные положительные отзывы потребителей являются подтверждением правильности выбранного методологического подхода.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Терещенко А.Г., Терещенко О.В., Соколов В.В., Юнусов Р.Ш. АРМ «Химик-аналитик» в системе качества продукции // Качество-стратегия XXI века: Матер. Междунар. научно-практ. конф. – Томск, 11–12.11.99. – Томск, 1999. – С. 71–72.
2. Терещенко А.Г., Терещенко О.В., Соколов В.В., Замятин А.В. Программный продукт для экологических лабораторий промышленных предприятий // Экология и промышленность России. – 2001. – № 6. – С. 41–44.
3. Терещенко А.Г., Терещенко О.В., Соколов В.В., Юнусов Р.Ш., Замятин А.В., Пикула Н.П. Программный продукт для аналитических лабораторий промышленных предприятий // Партнеры и конкуренты. – 2001. – № 8. – С. 41–44.
4. Терещенко В.А., Янин А.М. Автоматизация работы экологических служб // Экология производства. – 2004. – № 2. – С. 58–63.
5. Терещенко А.Г., Толстихина Т.В., Соколов В.В., Терещенко О.В., Пикула Н.П. Организация внутрилабораторного контроля качества анализа на базе ЛИС «Химик-аналитик» // Партнеры и конкуренты. – 2004. – № 10. – С. 41–46.
6. Терещенко А.Г., Терещенко В.А., Толстихина Т.В., Янин А.М. ЛИУС «Химик-аналитик» – новый инструмент для автоматизации аналитических лабораторий // Партнеры и конкуренты. – 2005. – № 4. – С. 44–45.
7. Терещенко В.А., Янин А.М., Соколов В.В., Мизин П.А. Автоматизация работы химико-аналитического контроля с помощью лабораторной информационно-управляющей системы «Химик-аналитик» // Автоматизация в промышленности. – 2005. – № 8. – С. 56–60.
8. Терещенко А.Г., Баянова Т.В., Юшкеева Н.В., Терещенко О.В., Толстихина Т.В. Опыт внедрения лабораторно-информационной системы «Химик-аналитик» // Водоснабжение и санитарная техника. – 2005. – № 1. – С. 14–17.
9. Терещенко А.Г., Соколов В.В., Сафьянов А.С., Мизин П.А. Средство генерации выходных документов в системах управления аналитическими лабораториями // Автоматизация и современные технологии. – 2006. – № 8.
10. Программы для ЭВМ. Базы данных. Топологии интегральных микросхем. – 2005. – № 1. – С. 21.
11. Лабораторно-информационные системы. Обзор рынка. – М.: ЗАО «ЛИМС», 2003. – 66 с.
12. Ворыхалов А. Электронная вертикаль // Эксперт Сибирь. – 2006. – № 11(108). – С. 30–36.
13. Gibbon G. A Brief History of LIMS // Laboratory Automation and Information Management issue. – 1996. – V. 32. – P. 1–5.
14. Медицинские информационные системы. Теория и практика / Под ред. Г.И. Назаренко, Г.С. Осипова. – М.: Физматлит, 2005. – 320 с.
15. Нуцков В.Ю. Лабораторно-информационные системы (LIMS) // Промышленные АСУ и контроллеры. – 2003. – № 4. – С. 48–50.
16. Савельев Е.В. Лабораторно-информационные менеджмент-системы или автоматизация лабораторий в целом // Партнеры и конкуренты. – 2005. – № 4. – С. 41–43.
17. Самсонов А.В. Интеграция лабораторных и технологических данных – новый уровень в понимании производственных процессов // Промышленные АСУ и контроллеры. – 2004. – № 10. – С. 33–35.
18. Кубрик А.С., Потапова Т.Б., Шварцкопф В.Ф. Модуль «Лабораторные анализы» в информационно-управляющей системе «Орбита» // Промышленные АСУ и контроллеры. – 2003. – № 11. – С. 25–29.
19. Лосякова Л.И., Шелюмова Т.М., Шувалова В.И. Томин В.П., Шадрин О.К. Лабораторные системы в Ангарской нефтяной компании // Промышленные АСУ и контроллеры. – 2003. – № 9. – С. 20–22.
20. Куцевич И.В. Введение в LIMS // Мир компьютерной автоматизации. – 2002. – № 4. – С. 32–40.
21. Ойхман Е.Г., Попов Э.В. Реинжиниринг бизнеса: Реинжиниринг организаций и информационные технологии. – М.: Финансы и статистика, 1997. – 336 с.