

УДК 004.021

РАЗРАБОТКА КОНСТРУКТОРА И ИНТЕРПРЕТАТОРА АЛГОРИТМОВ ВНУТРИЛАБОРАТОРНОГО КОНТРОЛЯ КАЧЕСТВА РЕЗУЛЬТАТОВ АНАЛИЗА

С.В. Щелканов, А.Г. Терещенко, В.П. Григорьев*, О.Н. Вылегжанин*

ГОУ ВПО ТПУ ОСП НИИ высоких напряжений

*Томский политехнический университет

E-mail: git@hvd.tpu.ru

Показана реализация конструктора и интерпретатора алгоритмов внутрилабораторного контроля в структуре ЛИУС «Химик-аналитик» на основе предложенной концептуальной модели декомпозиции вычислительной последовательности на произвольное количество составляющих.

Ключевые слова:

Лабораторная информационно-управляющая система, внутрилабораторный контроль, конструктор алгоритмов.

Key words:

Laboratory Information Management System, internal laboratory verification, algorithm constructor.

Введение

Проведение внутрилабораторного контроля качества (ВЛК) результатов количественного химического анализа (КХА) является для аналитических (испытательных) лабораторий важнейшим критерием подтверждения качества получаемых результатов. Однако это сопряжено с рядом сложностей, связанных как с трудоемкостью расчетов по алгоритмам ВЛК, так и с интерпретацией полученных результатов.

Для автоматизации деятельности аналитических лабораторий (АЛ) применяется специальный класс информационных систем – лабораторные информационно-управляющие системы (ЛИУС) [1]. Кроме того, на российском рынке существуют специальные программы, автоматизирующие ВЛК. Среди информационных систем класса ЛИУС только в ЛИУС «Химик-аналитик» реализован функциональный блок автоматизации ВЛК, отвечающий требованиям российской нормативной документации (МИ 2335-2003, ГОСТ Р ИСО 5725-2002, РМГ 59-2003). Вместе с тем ряд АЛ применяет в своей деятельности по ВЛК алгоритмы, не представленные в указанной нормативной документации (НД), либо их модернизированные варианты; многие отрасли регламентируют процедуры ВЛК своими нормативными документами. Поэтому вопрос соответствия программных комплексов автоматизации ВЛК требованиям современных НД остается особо актуальным.

Обеспечение соответствия функционального блока ВЛК в структуре ЛИУС «Химик-аналитик» современным требованиям может быть достигнуто двумя принципиально разными подходами. Первый заключается в расширении существующих функциональных возможностей ВЛК за счет включения новых алгоритмов в программный код блока. Практика показала, что такой подход дает временный эффект, поскольку не избавляет от необходимости дополнительных модификаций программной части блока в случае последующего добавле-

ния новых или изменения прежних алгоритмов контроля.

Второй подход, который и был положен в основу содержания представленной статьи, заключается в разработке нового программного инструмента. Таким программным инструментом может быть конструктор и интерпретатор алгоритмов контроля, который с одной стороны даст возможность пользователю самостоятельно конфигурировать вычислительную последовательность алгоритмов контроля, с другой стороны автоматически проведет интерпретацию сформированной последовательности и выдачу результатов расчета. Таким образом, предлагаемый подход отличается гибкостью и позволит легко адаптировать функциональный блок ВЛК под меняющиеся задачи АЛ и требования НД.

Анализ структуры, алгоритма работы и схемы расчетной последовательности существующего функционального блока ВЛК

Функциональный блок ВЛК в структуре ЛИУС «Химик-аналитик» (далее, ВЛК-1) включает: алгоритмы контроля, контрольные процедуры и интерпретатор расчетов [2, 3]. Алгоритмы контроля и контрольные процедуры представлены отдельными формами пользовательского интерфейса (в терминологии ЛИУС «Химик-аналитик» – справочниками). Интерпретатор расчетов является частью ядра и не имеет графического представления, однако участвует в каждом расчете и заполнении документа. ВЛК-1 получает все необходимые сведения из справочников объектов анализа (показатели, нормативы), методик анализа (метрологические характеристики) и лабораторных журналов (результаты КХА).

Алгоритм работы ВЛК-1 содержит этапы:

- регистрация расчетной последовательности – серии контрольных процедур (путем указания объекта анализа, методики анализа, алгоритма контроля, результатов анализа и констант);

- расчет результатов либо выбранной контрольной процедуры, либо серии контрольных процедур по формулам используемого алгоритма контроля;
- последующий анализ и формирование выводов.

Расчет результатов осуществляется по определенному алгоритму контроля, регламентированному в НД. В ВЛК-1 алгоритм контроля задается двумя расчетными формулами – для расчета контрольных процедур и расчета серии. Поэтому последовательность расчета результатов контрольных процедур линейная – все процедуры выполняются только один раз, и далее следует расчет результатов серии (рис. 1).

Расчетная последовательность одной контрольной процедуры состоит из следующих стадий:

- получение входных переменных (ВП) из введенных с клавиатуры констант и результатов анализов из лабораторных журналов, хранящихся в базе данных;
- передача ВП и тела расчетной формулы процедуры (ФП) для выполнения в интерпретатор расчетов;
- выдача интерпретатором расчетов результатов вычислений процедуры, формируя таким образом результат процедуры (РП).

При расчете всей серии последовательность усложняется:

- вышеописанные стадии выполняются для всех L контрольных процедур;
- интерпретатору расчетов передается тело расчетной формулы серии (ФС) с перечнем всех результатов процедур (РП);
- интерпретатор расчетов выдает результат расчета серии, сформировав, таким образом, результат серии (РС).

Такая организация расчетной последовательности вносит следующие ограничения:

- возможность повторного пересчета контрольных процедур в случае неудовлетворительного результата серии (циклический пересчет);
- выбор нескольких последовательностей расчета в зависимости от полученных в серии результатов (ветвление);

- оперирование в формуле контрольной процедуры агрегированными данными по всем процедурам (например, среднееквадратичное отклонение, дисперсия).

В свою очередь:

- правила исключения контрольных процедур из серии и назначение процедурам статусов успешности – неуспешности (что регламентируется некоторыми нормативными документами по ВЛК) инкапсулированы в программный код и недоступны для редактирования пользователем;
- алгоритм оценки метрологических характеристик предполагает пересчет результатов всех контрольных процедур и получение по агрегированным данным результатов оценки, что схоже с получением результатов серии. Однако алгоритм оценки метрологических характеристик также инкапсулирован в программный код, что делает невозможным применение ВЛК-1 для ряда алгоритмов контроля с другими правилами оценки метрологических характеристик.

Таким образом, из анализа алгоритма работы и схемы расчетного потока ВЛК-1 следует:

- описание алгоритма контроля двумя формулами (для процедуры и серии) недостаточно для выбора нескольких последовательностей расчета;
- схема расчетной последовательности должна быть модернизирована для придания вычислениям большей гибкости (реализация циклического пересчета и ветвления);
- оценка метрологических характеристик, также как и серия контрольных процедур, подразумевает пересчет всех процедур в серии и расчет параметров оценки на основе агрегированных данных по всем процедурам. Поэтому настройку алгоритма оценки метрологических характеристик логично совместить с настройкой алгоритма серии, разграничив их по формулам расчета;
- динамическое изменение количества контрольных процедур в расчете (исключение) и изменение статуса процедуры (успешность) возможно при двунаправленных изменениях: добавление условий исключения и успешности процедуры в настройку алгоритмов контроля с последующей обработкой во время выполнения расчетов.

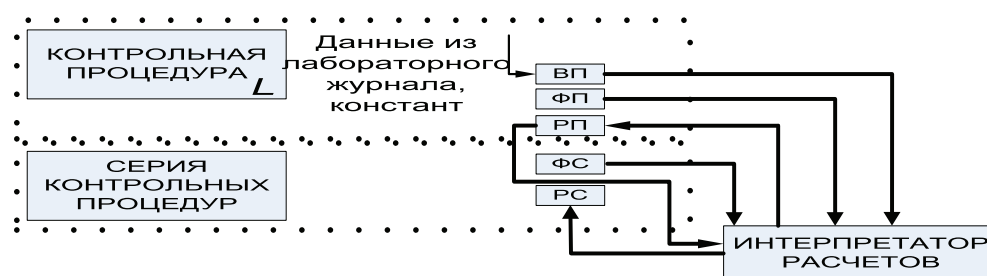


Рис. 1. Схема расчетной последовательности контрольной процедуры и серии в ВЛК-1

Концептуальная модель конструктора и интерпретатор алгоритмов ВЛК

На основе проведенного анализа была предложена новая концептуальная модель структурной организации алгоритма контроля и обработки последовательности его расчета. Модель заключается в декомпозиции единой вычислительной последовательности алгоритма на произвольное количество расчетных составляющих как по принципу функциональной принадлежности расчета (расчет одной контрольной процедуры, либо комплексный расчет всех процедур), так и по структуре самого алгоритма (выражение-оператор обычной последовательности вычислений, выражение-оператор цикла, выражение-оператор условия).

Применительно к структуре ВЛК-1 реализация модели заключалась в разработке новых форм справочника алгоритмов контроля и журнала контрольных процедур, а также модернизации интерпретатора расчетов (далее, ВЛК-2). Соответственно, реализация конструктора и интерпретатора алгоритмов контроля состояла из трех этапов по числу структурных элементов функционального блока ВЛК, подлежащих изменению.

Модернизация интерпретатора расчетов

Первый этап заключался в дополнении структуры интерпретатора расчетов блоком «Сохранение промежуточных расчетов» (рис. 2) и новым перечнем переменных «Расчитанные переменные» для сохранения временных значений в процессе расчета. Новый блок тесно связан с блоком «Выполне-

ние формулы» и участвует в расчете каждой строки формулы, сохраняя в новый перечень переменных промежуточные значения. Перечень «Расчитанные переменные» в процессе вычислений постепенно заполняется рассчитанными значениями. Таким образом, достигается объединение информационного пространства всех переменных в рамках расчета как одной контрольной процедуры, так и серии. Значительные дополнения внесены также в хранилище встроенных функций и встроенных констант для обеспечения потребностей ВЛК-2.

Справочник алгоритмов контроля

На втором этапе был создан новый справочник алгоритмов контроля, в котором нашла отражение идея разбиения расчетной последовательности на составляющие. В общем случае, каждая контрольная процедура состоит из нескольких расчетных формул. Структурная схема обновленного справочника алгоритмов представлена на рис. 3. Расчетная формула может быть трех типов – «Процедура», «Серия», «Оценка».

Формулы типа «Процедура» необходимы для описания расчетной формулы контрольной процедуры и выполняют следующие задачи:

- определение входных переменных из внешних источников (информация из базы данных в виде записей лабораторных журналов, константы);
- настройка условий исключения и успешности;
- настройка формата передачи переменных для агрегированных вычислений (среднее, сумма и т. д.).

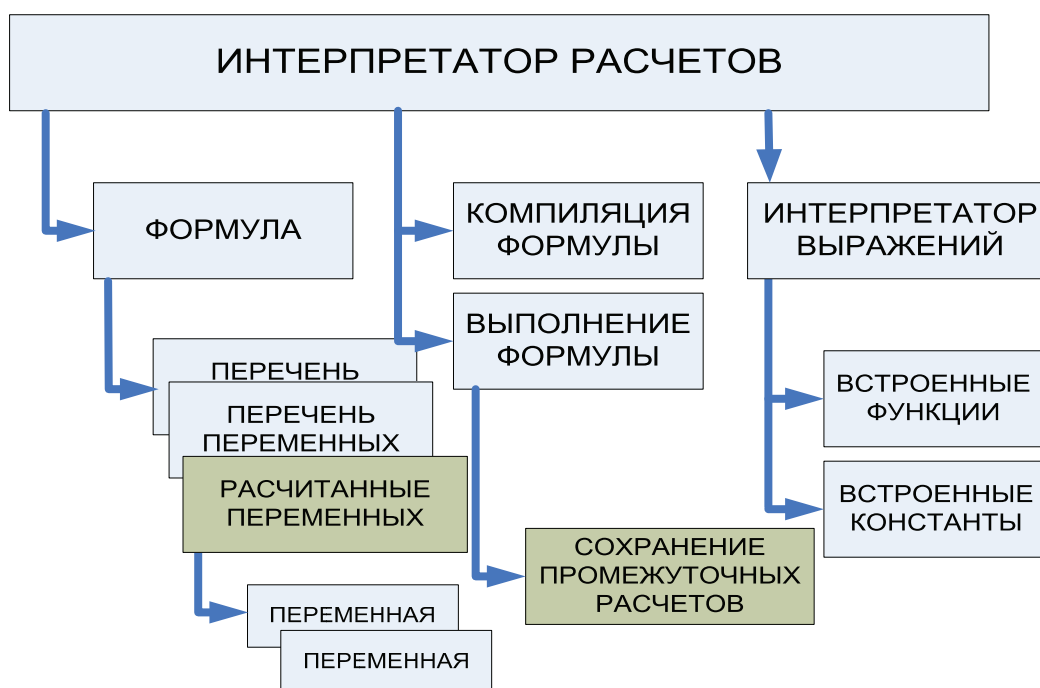


Рис. 2. Структурная схема модернизированного интерпретатора расчетов



Рис. 3. Структурная схема нового справочника алгоритмов контроля

Формулы типа «Серия» предназначены для описания последовательности расчета серии контрольных процедур и, как правило, оперируют данными, полученными в формуле типа «Процедура». Формулы типа «Оценка» предназначены для описания алгоритма оценки метрологических характеристик и, аналогично формуле типа «Серия», оперируют результатами формулы типа «Процедура».

Формулы типа «Серия» и «Оценка» функционально похожи и решают следующие задачи:

- выполнение агрегированных операций с результатами, полученными в формуле типа «Процедура»;
- настройка условия перехода на следующую формулу в общем цикле вычислений;
- настройка вывода промежуточных результатов и отладочной информации.

Таким образом, для любого алгоритма контроля определяется состав и количество формул, количество входных и выходных переменных, взаимосвязь между формулами, количество необходимых графиков и устанавливается соответствие между переменными и показателями качества лаборатории для автоматического их переназначения.

Новый справочник алгоритмов контроля позволяет:

- создавать произвольное количество расчетных формул типа «Процедура», «Серия» и «Оценка»,

которые в совокупности образуют расчет процедуры, серии процедур и оценки характеристик показателей качества результатов анализа, соответственно;

- для каждой формулы типа «Процедура» настраивать комплексные условия исключения и успешности для всей процедуры (либо только в рамках данной формулы) при расчете;
- задавать условия перехода с одной формулы на другую (включая переход на ранее использованные формулы), что предоставляет большую гибкость в поведении алгоритма контроля;
- настраивать переназначения показателей качества результатов количественного химического анализа в соответствии с расчетными формулами типа «Оценки» и настройками соответствия переменных и метрологических характеристик.

Журнал контрольных процедур

Третий этап является агрегированием всех нововведений предыдущих этапов в новом журнале контрольных процедур. В этом журнале происходит инициирование цикла по всем формулам процедур, серии и оценки, получение необходимых переменных из единого информационного пространства формул, переход между формулами в соответствии с настройками алгоритма, анализ графиков контрольных карт Шухарта и кумулятивных сумм и другие операции.

В ВЛК-2 была пересмотрена роль расчетной формулы как структурной единицы в процессе конфигурирования и интерпретации алгоритма. Поскольку каждый алгоритм контроля теперь может состоять из произвольного количества расчетных формул (а не из двух, как это было раньше), то целесообразно рассмотреть сначала схему расчетного потока в одной формуле (рис. 4).

Каждая формула иницируется расчетной последовательностью после перехода с предыдущей формулы и получает перечень входных переменных (ВП_і). ВП_і могут быть как из внешних источников, так из результатов предыдущих расчетов, которые сохраняются в едином информационном пространстве формул.

Далее ВП_і вместе с телом формулы (Φ_і) передаются интерпретатору расчетов, который выдает результат расчета по формуле (РФ_і) и параллельно сохраняет его в едином информационном пространстве формул.

Для формулы типа «Процедура» производится проверка условий исключения и успешности (УИ_і). Если оказалось, что процедура в текущей формуле исключена, то в зависимости от настроек алгоритма процедура не учитывается в расчетах по всем следующим формулам, либо только в расчетах в рамках следующей формулы типа «Серия» или «Оценка».

На последней стадии расчетного потока формулы проверяется условие перехода (УП_і), в соответствии с которым расчетная последовательность переходит на следующую формулу. Следует отметить, что следующая для расчета формула может располагаться как ниже (переход на *i*+*j*-ю формулу), так и выше текущей формулы в расчетной цепочке (переход на *i*-*j*-ю формулу), что обеспечивает реализацию циклического пересчета и ветвления.

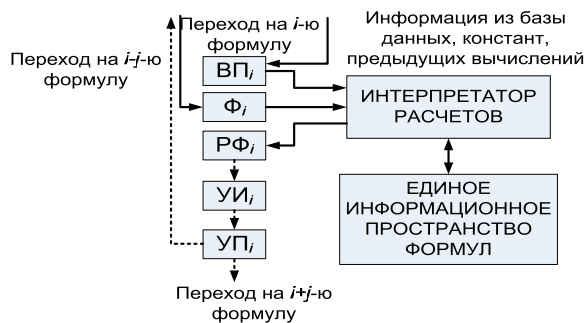


Рис. 4. Схема расчетного потока одной формулы в новом функциональном блоке ВЛК

Учитывая схему расчетного потока в рамках одной формулы, была составлена схема расчетной последовательности контрольных процедур, серии и оценки метрологических характеристик (рис. 5). Все *M* формул, задействованных в расчете *L* контрольных процедур, *N* формул для расчета серии и *R* формул для оценки метрологических характеристик, получают данные и сохраняют результаты в едином информационном пространстве формул.

Расчетная последовательность проходит по всем формулам согласно условиям перехода, указанным в настройке алгоритма, и на выходе формируется сводный результат по каждой процедуре, серии и оценке метрологических характеристик.

Пример работы конструктора и интерпретатора алгоритмов ВЛК

В качестве примера реализации циклического пересчета и ветвления показан фрагмент настройки в справочнике алгоритмов контроля одного из наиболее сложных алгоритмов в [4] «Контроль погрешности с использованием контрольных карт на основе применения контрольных проб» (пункт 6.3.5). Согласно пункту 6.3.5.4 и далее В 3.2.3 оценка показателя повторяемости результата анализа (случайной составляющей погрешности) осуществляется по следующему алгоритму:

1. Рассчитывается среднее арифметическое значение \bar{X}_{ml} и выборочная дисперсия S_{ml}^2 результатов единичного анализа содержания компонента в *m*-м образце для оценивания по формулам:

$$\bar{X}_{ml} = \frac{\sum_{i=1}^n X_{mli}}{n}; \tag{1}$$

$$S_{ml}^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (X_{mli} - \bar{X}_{ml})^2}{n-1},$$

$m = 1, \dots, M; l = 1, \dots, L.$ (2)

2. На основании полученных значений выборочных дисперсий $S_{m1}^2, \dots, S_{mL}^2$ в *m*-м образце для оценивания проверяется гипотеза о равенстве генеральных дисперсий, используя критерий Кохрена. Значение критерия Кохрена $G_{m(\max)}$ рассчитывается по формуле

$$G_{m(\max)} = \frac{(S_{ml}^2)_{\max}}{\sum_{i=1}^L S_{mi}^2} \tag{3}$$

и сравнивается с $G_{табл}$ для числа степеней свободы $\nu=n-1$, соответствующего максимальной дисперсии, и $f=L$, соответствующего числу суммируемых дисперсий и принятой доверительной вероятности $P=0,95$.

3. Если $G_{m(\max)} > G_{табл}$, то процедура с соответствующей $(S_{mi}^2)_{\max}$ из дальнейших расчетов исключается, а расчет повторяется для следующего максимального по значению S_{mi}^2 и т. д. до тех пор, пока не выполнится условие

$$G_{m(\max)} \leq G_{табл}. \tag{4}$$

На рис. 6, а, показана настройка алгоритма по формулам (1), (2) и условиям исключения, а на рис. 6, б – настройка по формуле (3). Фрагмент результата расчета по данному алгоритму представлен на рис. 7. Видно, что алгоритм совершил две итерации с исключением одной контрольной процедуры, прежде чем условие (4) выполнилось.

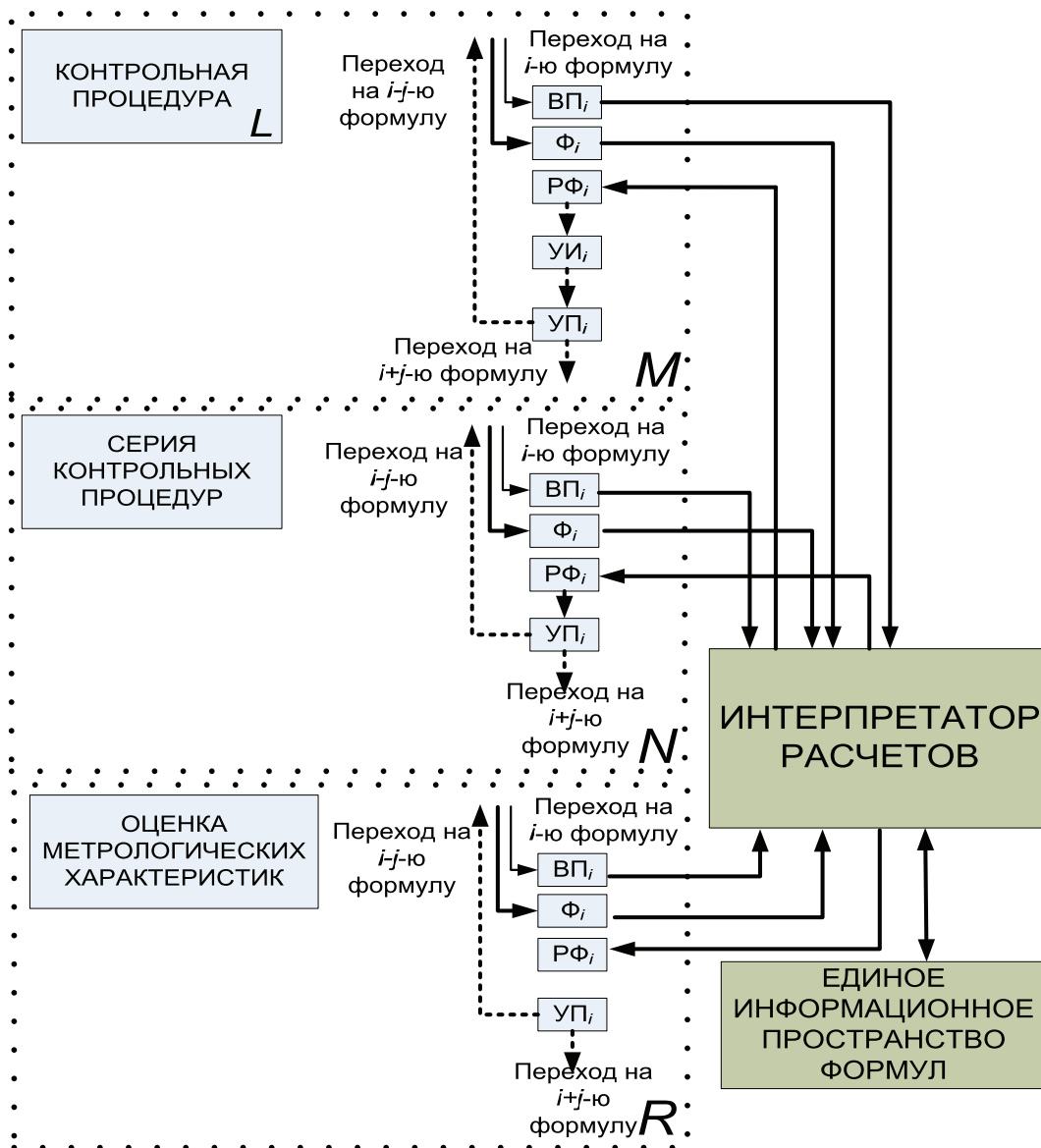


Рис. 5. Схема расчетной последовательности контрольных процедур, серии и оценки метрологических характеристик в ВЛК-2

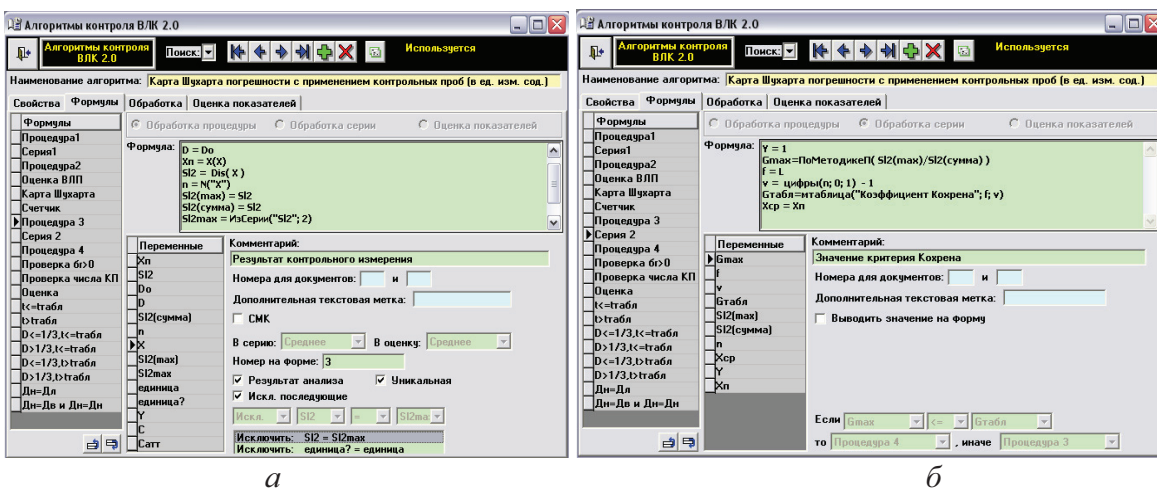


Рис. 6. Настройка алгоритма контроля. Формула: а) контрольной процедуры; б) серии

29 ; 1 } = 0,3
Xср = Xп = 0,10141379 = 0,10141379

====Серия 2====
Y = 1 = 1 = 1
Gmax = ПоМетодикеП(S12(max)/S12(сумма)) = ПоМетодикеП(0,00005 / 0,00039018) = 0,13
f = L = 28 = 28
v = цифры(п; 0; 1) - 1 = 2,10714286 - 2 - 1
Gтабл = mтаблица("Кoeffициент Кохрена"; f; v) = МТАБЛИЦА{ "Кoeffициент Кохрена" :
28 ; 1 } = 0,308
Xср = Xп = 0,10182143 = 0,10182143

====Проверка б>0====
бл = Мл(Повторяемость Л; З; X; С) = Мл(Повторяемость Л; З; X; 0,1) = 0,00785714
а = 0 = 0 = 0'"/>

Рис. 7. Результат расчета серии

Разработанный функциональный блок ВЛК-2 позволяет проводить процедуры ВЛК результатов КХА по сложным аналитическим алгоритмам, подразумевающим как циклический пересчет контрольных процедур, так и выбор дальнейшей последовательности вычислений в зависимости от промежуточных результатов.

Выводы

1. Предложена концепция декомпозиции вычислительной последовательности алгоритма аналитического контроля на произвольное количество расчетных составляющих, которая реализована в новом функциональном блоке внутрилабораторного контроля лабораторной информационно-управляющей системы «Химик-аналитик».
2. Разработанный функциональный блок обеспечивает условия для автоматизации всех бизнес-процессов внутрилабораторного контроля в аналитических лабораториях с учетом требований современных нормативных документов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Терещенко А.Г., Янин А.М. Лабораторные информационные системы на отечественном рынке // Промышленные АСУ и контроллеры. – 2006. – № 7. – С. 12–16.
2. 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.
3. Терещенко А.Г., Толстихина Т.В., Терещенко О.В. Автоматизация внутрилабораторного контроля на базе ЛИС «Химик-ана-

Заложены возможности автоматизации модификаций алгоритмов аналитического контроля.

3. Создано хранилище данных, содержащее более 120 алгоритмов контроля по МИ 2335-2003, ГОСТ Р ИСО 5725, РМГ 59-2003, РМГ 76-2004, ОСТ 95 10289-2005, которое аккумулирует опыт интерпретации результатов аналитического контроля более чем по 200 объектам анализа в 250 лабораториях России, обеспечивающих контроль качества в металлургической, коксохимической, нефтяной и газовой, химической, энергетической, горнодобывающей, атомной, природоохранительной и других отраслях и сферах деятельности.

Лабораторная информационно-управляющая система «Химик-Аналитик» с новым функциональным блоком внутрилабораторного контроля прошла аттестацию в ОАО «ВНИИ НМ им. академика А.А. Бочвара» на соответствие ОСТ 95 10289-2005 (свидетельство № 1961-2009 от 22 апреля 2009 г.), допущена для применения и успешно эксплуатируется на предприятиях Госкорпорации «Росатом».

литик» // Законодательная и прикладная метрология. – 2007. – № 2. – С. 34–41.

4. РМГ 76-2004. Государственная система обеспечения единства измерений. Внутренний контроль качества результатов количественного химического анализа. Екатеринбург: УНИИМ, 2006.

Поступила 18.02.2010 г.