

компьютерная автоматизация хроматографии



МультиХром

- Управление более чем 250 хроматографами и отдельными устройствами различных производителей: Agilent, Gilson, Knauer Metrohm, "Люмэкс", "Аквилон", "Хроматек", "ПортЛаб" и др.
- Оригинальные методы предельного подавления шумов, адаптивной аппроксимации пиков и разделения перекрывающихся пиков по форме.
- Спектральный анализ и многоканальная хроматография: идентификация и расчет количества компонента по спектру пика, разделение перекрывающихся пиков с помощью факторного анализа.
- Поддержка капиллярного электрофореза с дополнительными методами обработки данных.
- Специализированный модуль для гель-проникающей хроматографии.
- Обработка данных планарной хроматографии и гель-электрофореза.
- Создание документов заданного образца; выдача отчетов в форматах PDF, RTF, HTML; статистические отчеты для группы хроматограмм.
- Поддержка требований «Надлежащей лабораторной практики» (GLP, GMP) и электронного документооборота.

ООО Амперсанд

support@ampersand.ru

www.multichrom.ru

+7 (499) 322-99-61

ПО «МультиХром» для автоматизации хроматографии

Хроматографический анализ, позволяющий определить качественный состав сложных органических смесей, востребован в фармацевтической промышленности и медицине, на химических производствах, применяется для контроля загрязнений окружающей среды, пищевой продукции и выполнения многих других задач. Для него используется многочисленное оборудование: как измерительное – хроматографы, так и детекторы, насосы, автосемплеры, термостаты, коллекторы фракций и другие устройства, обеспечивающие процесс разделения компонентов. Компания «Амперсенд» разработала программное обеспечение «МультиХром», а также основанный на нем одноименный программно-аппаратный комплекс, который позволяет автоматизировать весь комплекс операций, входящих в хроматографию: сбор и обработку данных измерений, контроль оборудования и управление им. Система «МультиХром» умеет управлять более чем 250 устройствами, производимыми компаниями из разных стран. Решение оказалось настолько удачным, что к настоящему времени установлено уже более 14 тыс. систем в измерительных лабораториях и на промышленных объектах разных стран. Об особенностях программы «МультиХром» нам рассказал [Юрий Каламбет](#), генеральный директор ООО «Амперсенд».

ЦИТАТА: Главнейшая наша задача – сделать самую точную программу, обеспечивающую минимальную погрешность хроматографических измерений.

ИСУП: Юрий Анатольевич! В нашей стране компания «Амперсенд» фактически задает тенденции в области программно-аппаратного обеспечения для хроматографии. Многие ваши решения и методики расчетов копируют и перенимают производители оборудования. Есть ли решение, которое популярно и на данный момент остается только за вами, а также защищено патентом?

Ю. А. Каламбет: С патентованием алгоритмов всё довольно сложно. Сами по себе алгоритмы не патентуются, запатентовать можно только устройство, работающее с их помощью. Очень большие проблемы возникают и с защитой патентных прав. Так что основную часть результатов исследований мы публикуем в открытой научной печати, пусть люди пользуются.

ИСУП: Расскажите, пожалуйста, о применяемых в ПО «МультиХром» методах сглаживания, вычисления отношения сигнал/шум, оценки параметров пиков в случае быстрой хроматографии.

Ю. А. Каламбет: С самого начала разработки наших программ мы проверяли алгоритмы на устойчивость в крайних случаях их использования (очень много точек или очень

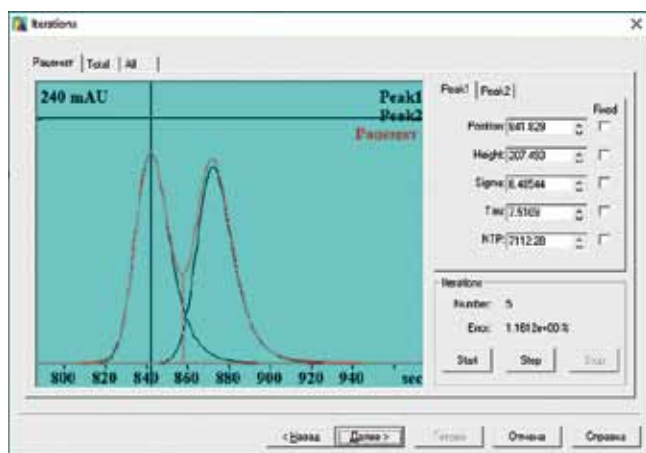


Рис. 1. Анализ перекрывающихся пиков с моделированием пика экспоненциально модифицированной гауссианой

мало точек на пик), а также на независимость расчетных параметров пика от темпа сбора данных и выяснили, что площадь измеряется достаточно точно даже при малом числе точек на пик. На одном из симпозиумов по хроматографии я обратил внимание на доклад аспиранта из МГУ Андрея Самохина, который поднял тему интегрирования узких пиков на основании своих данных. Объединенными усилиями мы написали хорошую статью, из которой следует, что для правильной оценки площади пика требуется 5–7 точек на ширину по его основанию, а не 40, как написано в учебниках. Там же написано, что для интегрирования узких пиков не следует использовать составные правила Симпсона, присутствующие во всех учебниках вычислительной математики, поскольку погрешность более простого правила трапеций в этом случае существенно меньше.

Из первого журнала, куда мы эту статью направили, пришли два отрицательных отзыва рецензентов примерно с таким смыслом: «В учебниках такого не написано, авторы плохо читали учебники». Для меня такая формулировка – почти медаль, лучшие статьи описывают то, чего нет в учебниках. Допустимость малого числа точек на пик – результат фундаментальный, не зависящий от хроматографической программы, зато влияющий на финансы аналитической лаборатории: иногда можно обойтись и более дешевым прибором.

При анализе узких пиков возникает еще ряд проблем, например, сложно подобрать параметры цифровой фильтрации шумов и может возникнуть

заметная погрешность при оценке отношения сигнал/шум. Фильтрация шумов – это вообще наш конек, которым мы занимаемся давно и успешно. Наш локально-оптимальный фильтр, предложенный десять лет назад, отлично подходит для узких пиков, поскольку в этом случае он не трогает пик и хорошо фильтрует базовую линию. Оценка шума по способу «пик к пику», принятая в хроматографии, с точки зрения фундаментальной статистики является смещенной и несостоятельной и для узких пиков может давать некорректную оценку шума базовой линии. Гораздо лучше ведет себя оценка погрешности по СКО, не прописанная в фармакопее.

В случае узких пиков некоторые привычные параметры, такие как время удерживания, высота пика, его ширина на половине высоты, коэффициент асимметрии, имеют очень большую погрешность, и их следует заменять

другими, такими как средневзвешенное время удерживания, дисперсия пика, коэффициент эксцесса.

ИСУП: Некоторые производители дают 32-битную (а то и более) характеристику своим АЦП. Можете это как-то прокомментировать? Есть ли, по вашему мнению, предел, который ограничивает максимальное эффективное значение битности в АЦП?

Ю. А. Каламбет: В середине девяностых мы совместно со Львом Михайловым из НИИ «Полус» разработали интегрирующий сигма-дельта АЦП, имевший динамический диапазон 24 бита, или в десятичных цифрах 10^7 . Совсем скоро после этого появилась американская микросхема фирмы Analog Devices, дававшая динамический диапазон 10^6 . Американская микросхема оказалась технологически удобнее, и наша разработка осталась штучной. Нынешние АЦП от Analog Devices и Texas Instruments преодолели планку 24 двоичных разрядов, и в маркетинговых целях следующее поколение декларируется 32-разрядным. На самом деле обычно разрядность, декларированная производителем, это просто число байт, требующихся для передачи числа. Как только число перестает помещаться в три байта (24 бит), АЦП сразу становится 32-разрядным, хотя значимых разрядов там не больше 26. Не следует ожидать АЦП с кардинально большей разрядностью, поскольку физические тепловые шумы электронных элементов устранить нельзя. Не так уж важно, какова погрешность АЦП, важно, чтобы она была меньше погрешности детектора хроматографического сиг-



Рис. 2. Некоторые АЦП, поставлявшиеся компанией «Амперсэнд» за 35 лет ее истории

нала и чтобы АЦП не «обрезал» сигнал сверху.

ИСУП: Можно ли сказать, что ваша система «МультиХром» позволяет упростить работу, связанную с подключением хроматографа или хроматографического прибора к ПК? Насколько легко сменить одно устройство на другое? Сейчас, в эпоху возможных санкционных турбулентностей, это может иметь большое значение для лабораторий.

Ю. А. Каламбет: Есть несколько возможностей подключения нашей программы. Самая простая – подключение к аналоговому выходу детектора через АЦП, при этом сам прибор работает «по старинке» с управлением от лицевой панели приборов, к таким приборам подключиться легко. Существует ряд устройств, у которых уже нет аналогового выхода, АЦП встроен в детектор и сигнал передается по цифровому интерфейсу. Мы умеем работать с некоторыми устройствами такого типа, но далеко не со всеми. Список поддерживаемого оборудования опубликован на нашем сайте, из популярных можно упомянуть приборы фирм Gilson и Knauer.

ИСУП: Расскажите об особенностях рынка хроматографических программ. Как у вас устанавливаются отношения с производителями хроматографов – как отечественными, так и иностранными?

Ю. А. Каламбет: Когда они используют нашу программу, хорошо складываются. Мы обеспечиваем поддержку и обучение персонала производителя и выдаем ему достаточное для работы число временных лицензий. Он, в свою очередь, включает программу в состав оборудования и поставляет ее конечному потребителю. На простые вопросы клиентов партнеры отвечают сами, ответы на сложные вопросы готовим совместно. Иногда на простые вопросы отвечаем и сами, чтобы избежать излишней бюрократии.

ИСУП: Если несложно, можете рассказать о различных версиях «МультиХрома» и описать их типичных и потенциальных потребителей?

Ю. А. Каламбет: Постараюсь кратко изложить в порядке популярности.

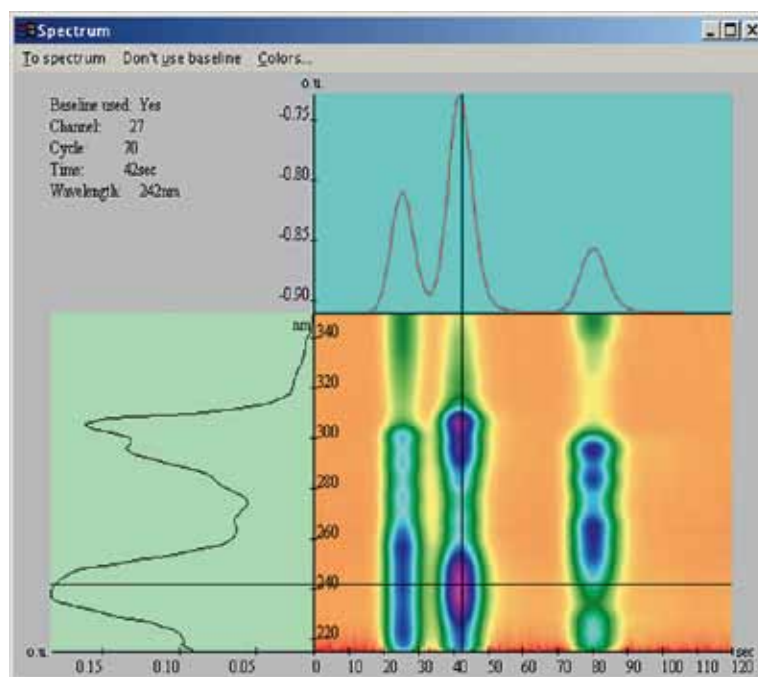


Рис. 3. ПО «МультиХром» способно работать со спектральными и 2D-хроматограммами

Программа, предполагающая цифровое управление оборудованием и цифровое получение сигнала детектора, называется просто «МультиХром», версия 3. У этой программы есть специальные исполнения для каждого производителя оборудования.

Программа «МультиХром ПК-интегратор» предназначена тем, кто пользуется только АЦП и не управляет оборудованием, а также привык к интерфейсу очень популярной программы «МультиХром для Windows» версии 1.5.

Программа «МультиХром ГПХ» создана для обработки данных геле-проникающей хроматографии и может работать с данными любой хроматографической программы, она не занимается регистрацией сигнала.

Еще одна программа, которая не занимается регистрацией сигнала, называется «МультиХром – Планар», она предназначена для обработки данных (двумерных изображений) планарной хроматографии и планарного электрофореза.

ИСУП: Почему ПО «МультиХром», по вашему мнению, удобнее и предпочтительней для конечных пользователей?

Ю. А. Каламбет: Самая удобная для пользователя программа – та, с кото-

рой он начинал свою работу. Человек привыкает к ее схемам и логике и потом с трудом переучивается на новую. С нашей программы «МультиХром» в России начинали очень многие. Функциональность у всех программ для хроматографии примерно одинаковая. Мы стараемся поддерживать максимально простые принципы организации данных и работы с ними, правда, с учетом требований законодательства о надлежащей лабораторной практике, которые не способствуют упрощению программы. Главнейшая наша задача – сделать самую точную программу, обеспечивающую минимальную погрешность хроматографических измерений.

Беседовал С. В. Бодрышев,
главный редактор журнала «ИСУП».



ООО «Амперсанд», г. Москва,
тел.: +7 (499) 322-9961,
e-mail: support@ampersand.ru,
сайт: multichrom.ru