

УДК 004.021

**ОСОБЕННОСТИ ПРАКТИЧЕСКОГО
ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ИНФОРМАЦИОННОЙ
СИСТЕМЫ СИНТЕЗА И АВТОМАТИЗАЦИИ
ПРОЦЕДУР ВНУТРИЛАБОРАТОРНОГО
КОНТРОЛЯ КАЧЕСТВА**В.П. Григорьев*, А.Г. Терещенко**,
С.В. Щелканов**

*Томский политехнический университет

**Институт физики высоких технологий Томского
политехнического университета

Григорьев Владимир Петрович,
д-р физ.-мат. наук, проф.,
заведующий кафедрой
прикладной математики
факультета автоматики и
вычислительной техники ТПУ.
E-mail: grig@am.tpu.ru

Область научных интересов:
математическое моделирование
динамических систем –
плазмохимии, сильноточной
электроники.

**Терещенко Анатолий
Георгиевич**, канд. техн. наук,
заведующий лабораторией
информационных технологий
ТПУ.

E-mail: git@hvd.tpu.ru.

Область научных интересов:
аналитическая химия в
информационных технологиях.

**Щелканов Сергей Владими-
рович**, канд. техн. наук,
инженер лаборатории инфор-
мационных технологий ТПУ.

E-mail: shchelkanov@sibmail.com

Область научных интересов:
проектирование и разработка
корпоративных
информационных систем.

Продemonстрировано практическое применение
разработанной ранее информационной системы синтеза и
автоматизации процедур внутрилабораторного контроля
качества на примере аналитических алгоритмов из
соответствующей российской нормативной документации.

Ключевые слова:

Лабораторные информационно-управляющие системы,
внутрилабораторный контроль, конструктор
алгоритмов.

Key words:

Laboratory information management systems, internal
laboratory verification, algorithm constructor.

Введение

Ранее отмечалось [1], что назрела
необходимость создания подхода к разработке
информационных систем автоматизации процедур
внутрилабораторного контроля качества результатов

количественного химического анализа (ВЛК), позволяющих адаптировать автоматизируемые
вычислительные последовательности под меняющиеся требования нормативной документации.

В результате применения методов инженерии знаний [2] были выявлены направления, в
соответствии с которыми необходимо разрабатывать новые или модернизировать
существующие информационные системы автоматизации процедур ВЛК.

Итогом реализации выявленных требований стала разработка нового функционального
блока автоматизации процедур ВЛК (далее ВЛК-2) в структуре лабораторной информационно-
управляющей системы (ЛИУС) «Химик-аналитик».

В статье демонстрируется практическое применение ВЛК-2 в части конфигурирования
и расчета вычислительной последовательности одного из алгоритмов, приведенного в
соответствующей нормативной документации.

**1. Алгоритм контроля погрешности с использованием контрольных карт на основе
применения контрольных проб**

Данный алгоритм впервые предложен в РМГ 76-2004 [3] и не автоматизирован ни в
одной из известных авторам информационных систем. Алгоритм отличается достаточно

сложными расчетами, поскольку до расчета результатов серии (ряда вычислительных экспериментов) предполагает нахождение оценки показателя правильности, как если бы это был алгоритм типа «Специальный эксперимент». Далее, по результатам расчета серии, осуществляется оценка показателя погрешности лаборатории.

Ниже продемонстрирована реализация фрагмента этого алгоритма средствами ВЛК-2.

Согласно пункту 6.3.5.4 и далее В.3.2.3 в РМГ 76-2004, оценка показателя повторяемости результата анализа (случайной составляющей погрешности) осуществляется по следующему алгоритму:

1. Рассчитывается среднее арифметическое значение \bar{X}_{ml} и выборочную дисперсию S_{ml}^2 результатов единичного анализа содержания компонента в m -ом образце для оценивания (ОО) по формулам:

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

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

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

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

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

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 $(S_{ml}^2)_{\max}$ из дальнейших расчетов исключается, а расчет повторяется для следующего максимального по значению S_{ml}^2 и т. д. до тех пор, пока не выполнится $G_{m(\max)} \leq G_{табл}$ (4).

2. Конфигурирование вычислительной последовательности

На рис. 1 показана настройка алгоритма по формулам (1) – (2) и условиям исключения. Видно, что задаются выражения для расчета $S/2$. В условиях исключения также применяется флаг, который в исходном состоянии деактивирует проверку.

3. Результаты расчета вычислительной последовательности

По результатам расчета контрольной процедуры № 18 видно, что процедура была исключена на третьей формуле для процедур «Процедура 3», поскольку для данной процедуры было рассчитано максимальное значение дисперсии: $SI2_{max} = 0.0002$ (рис. 3).

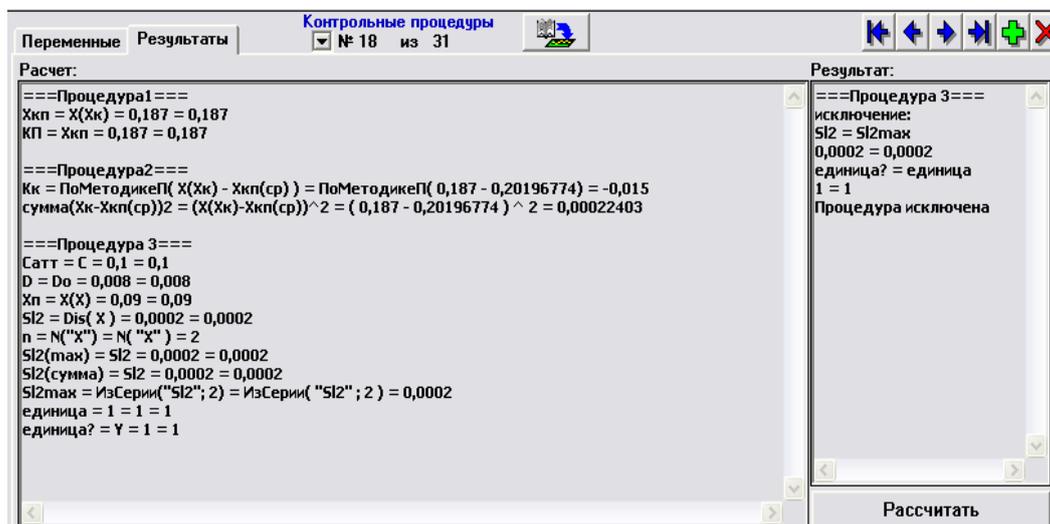


Рис. 3. Результат расчета контрольной процедуры для алгоритма с контрольными пробами

Фрагмент результата расчета по данному алгоритму представлен на рис. 4. Видно, что алгоритм совершил две итерации, прежде чем условие (4) было выполнено.

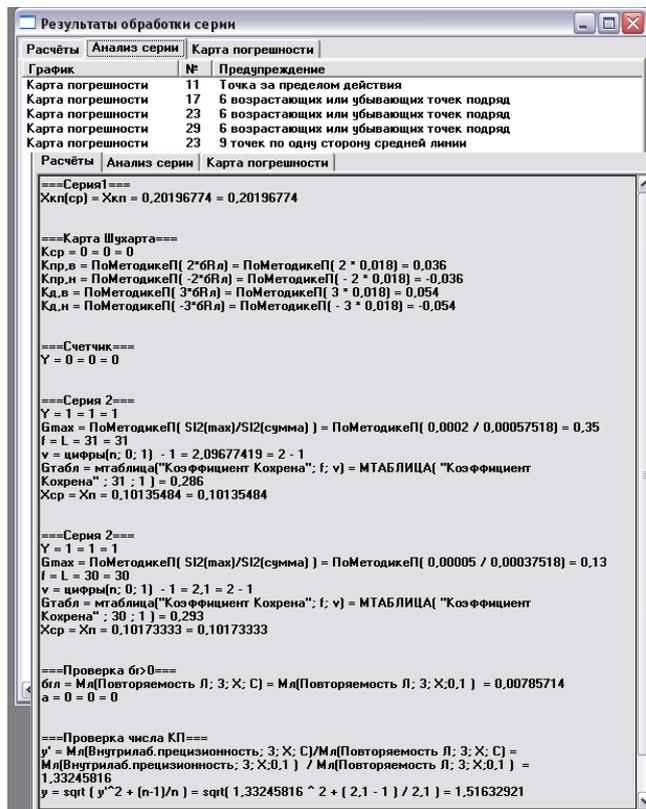


Рис. 4. Результат расчета серии для алгоритма с контрольными пробами

Анализируя рассмотренный выше пример можно заключить, что разработанный функциональный блок ВЛК-2 позволяет автоматизировать процедуры ВЛК результатов количественного химического анализа по сложным аналитическим алгоритмам, подразумевающим как циклический пересчет любых участков алгоритма, так и выбор дальнейшей последовательности вычислений в зависимости от промежуточных результатов.

Заключение

Разработанный функциональный блок автоматизации ВЛК обеспечивает условия для автоматизации всех основных бизнес-процессов ВЛК в аналитических лабораториях с учетом требований современных нормативных документов. Кроме того, заложены возможности автоматизации будущих модификаций алгоритмов аналитического контроля.

Функциональный блок прошел аттестацию в ВНИИ НМ им. А.А. Бочвара на соответствие требованиям ГОСТ 10289-2005 «Отраслевая система обеспечения единства измерений. Внутренний контроль качества результатов измерений» и эксплуатируется в АЛ предприятий Госкорпорации «Росатом», ООО «Спецморнефтепорт Козьмино» ОАО «АК «Транснефть», ООО «Газпромнефть-Хантос», Бийский водоканал, ОАО «Салым Петролиум Девелопмент (Shell)».

Помимо этого, разработанный блок прошел аттестацию в Уральском научно-исследовательском институте метрологии, являющимся разработчиком основных нормативных документов по ВЛК, на соответствие требованиям ГОСТ Р ИСО 5725-6-2000, РМГ 76-2004, Р 60.2.060-2008, РМГ 59-2003, ПНД Ф 12.10.1-2000, РМГ 58-2003 и ГОСТ 8.532-2002, что является официальным подтверждением достоверности получаемых блоком результатов и дает возможность применять разработку в любых аналитических лабораториях, проводящих процедуры ВЛК по указанным нормативным документам.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Щелканов С.В., Терещенко А.Г., Юнак А.Л., Григорьев В.П., Вылегжанин О.Н. Концептуальная модель конструктора алгоритмов внутрилабораторного контроля качества результатов анализа // Автоматизация в промышленности. – 2010. – № 5. – С. 63–65.
2. Щелканов С.В., Терещенко А.Г., Вылегжанин О.Н. Применение методов кластеризации для анализа базы претензий ЛИУС «Химик-аналитик» // Технологии Microsoft в теории и практике программирования: Сб. трудов VI Всерос. научно-практ. конф. студентов, аспирантов и молодых ученых. – Томск, 17-18 марта 2009. – Томск, 2009. – С. 79–81.
3. РМГ 76-2004. Государственная система обеспечения единства измерений. Внутренний контроль качества результатов количественного химического анализа. – Екатеринбург: УНИИМ, 2006.

Поступила 18.10.2011 г.