ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

ХРОМАТЭК АНАЛИТИК

ЭКСПОРТ ДАННЫХ В LIMS (ЛИУС)

Редакция 07.08.2023

1 ВВЕДЕНИЕ

1.1 Что такое LIMS (ЛИУС)?

LIMS – Laboratory Information Management System – Лабораторная информационно-управляющая система (ЛИУС).

LIMS – это специальное программное обеспечение, предназначенное для управления лабораторными потоками работ и документов. Оно оптимизирует сбор, анализ, возврат и отчетность лабораторных данных. Часто применяется в фармацевтической и пищевой промышленности.

Назначением LIMS является получение достоверной информации по результатам испытаний и оптимизации управления этой информацией с целью её использования для принятия корректных своевременных управленческих решений.

Русскоязычный аналог термина – ЛИС, ЛИУС.

1.2 Как соотносятся LIMS и "Хроматэк Аналитик"?

Хроматограф служит одним из источников информации о производимых продуктах или протекающих на производстве процессах, наряду с другим аналитическим оборудованием и прочими поставщиками информации, необходимой для управления качеством продукции.

"Хроматэк Аналитик" передает в LIMS результаты хроматографического анализа, а также специальных расчётов по некоторым нормативным документам.

1.3 Какие LIMS поддерживает "Хроматэк Аналитик"?

"Хроматэк Аналитик" не поддерживает какие-то конкретные виды LIMS. Более правильно утверждение, что он поддерживает любые виды LIMS, поскольку практически все они обладают гибкими настройками, позволяющими получать данные из внешних источников.

"Хроматэк Аналитик" позволяет экспортировать данные в нескольких форматах.

2 ЭКСПОРТ ДАННЫХ В LIMS

В настоящее время возможны два способа предоставления данных:

- Экспорт данных в файл.
- Передача данных по промышленному протоколу ModBus

Преимущество использования ModBus заключается в наличии обратной связи. Т.е. "Хроматэк Аналитик" не только передает данные в LIMS, но и может получать в ответ управляющие команды, например – команду загрузить в хроматограф определенный режим.

Описание Modbus данных приведено в соответствующем руководстве.

2.1 Экспорт данных в файл

В "Хроматэк Аналитик" штатными средствами обеспечивается экспорт данных в файл определенного формата, сохраняемый в определенной папке. В LIMS создается настройка, обеспечивающая периодическое чтение данного файла и передачу данных далее к потребителю. Поскольку данные специфичны для конкретной аналитической задачи, то некоего универсального формата и структуры данных нет. Формат выбирается и настраивается индивидуально, причем в этом процессе участвуют специалисты заказчика и производителя LIMS.

Разработчики "Хроматэк" могут обеспечить экспорт данных в наиболее удобном для конкретной LIMS виде. Настройка "Хроматэк Аналитик" сводится к подготовке шаблона отчета в форме, согласованной с разработчиком LIMS и конечным пользователем.

Поддерживаемые форматы файлов: TXT, CSV, HTML, XLSX, XML, JSON.

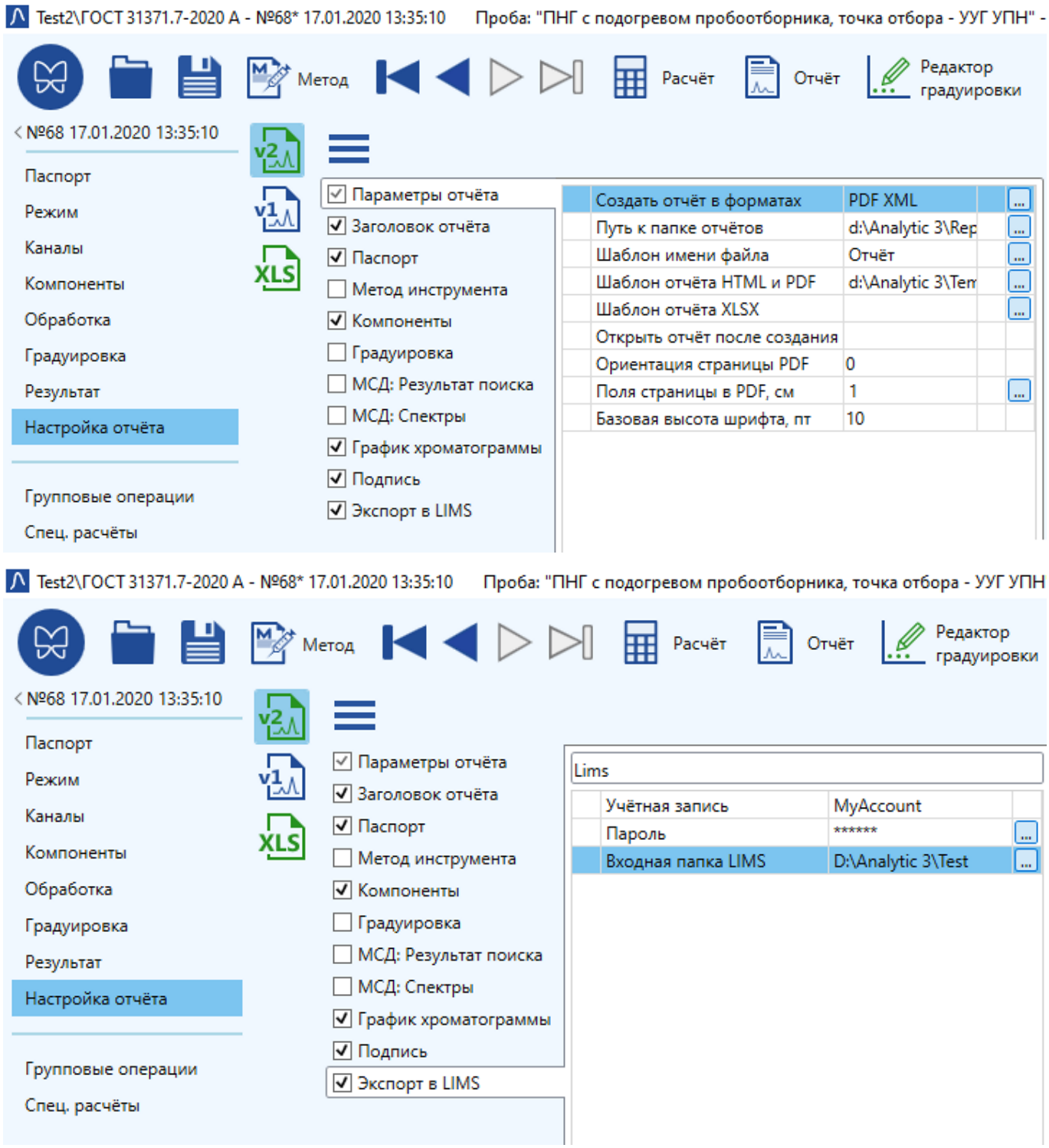
Настройки экспорта в LIMS имеет отчёт (v2) и расширение "Специальные расчёты".

Экспорт в форматы DOC, DOCX, RTF, XLS поддерживается с помощью модуля "Отчёт v1" в ручном режиме, т.е. по команде оператора. Модуль "Отчёт v1" присутствует в ПО "Хроматэк Аналитик" для совместимости с ранее созданными шаблонами.

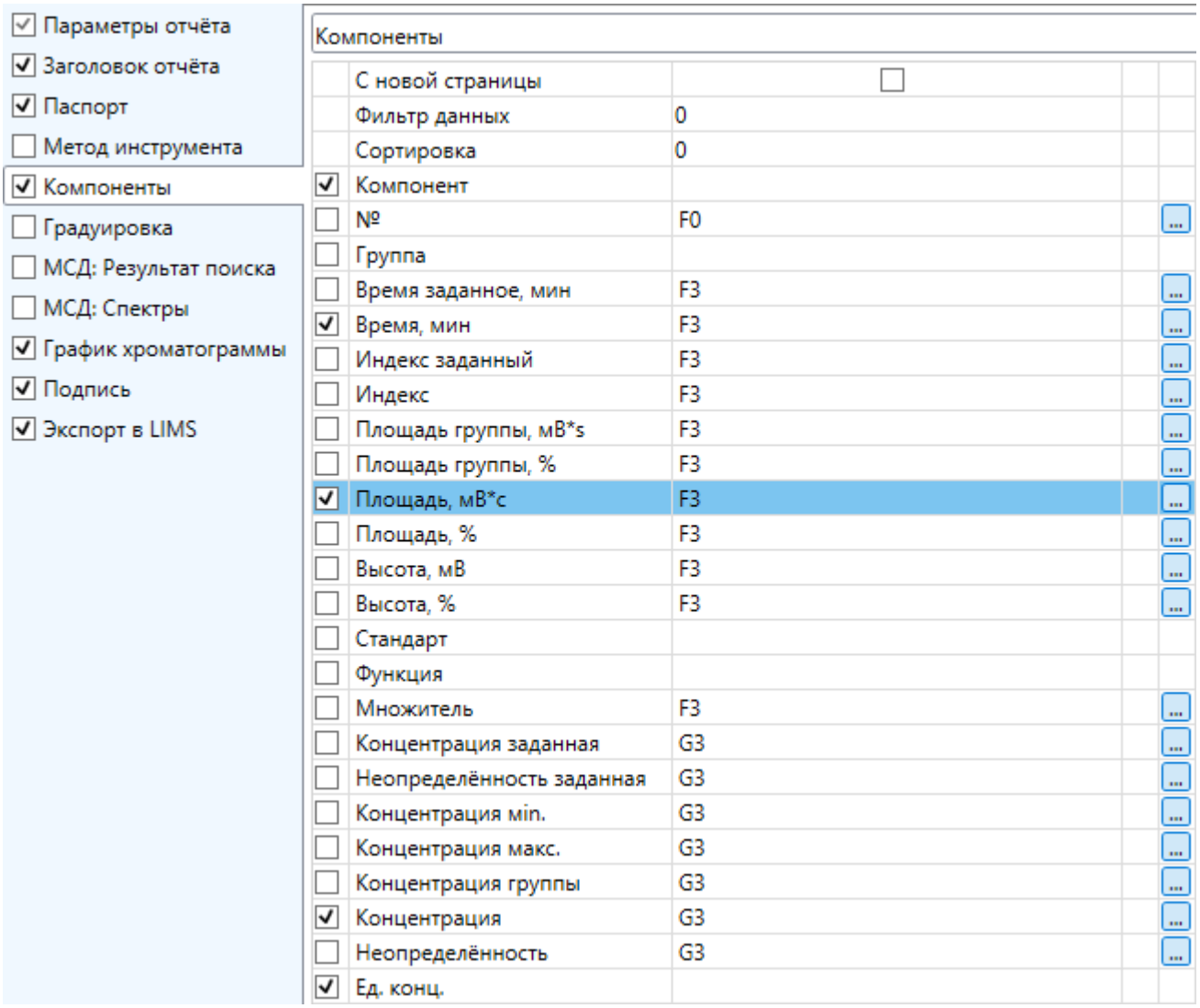
2.1.1 Отчёт v2

Отчёт v2 реализован в "Хроматэк Аналитик", начиная со сборки 3.1.2201.28.

- Перейдите за закладку **Настройки отчёта**.
- В секции **Параметры отчёта** настройте соответствующие параметры. Укажите формат выходного файла (рекомендуется – XML, JSON, CSV, TXT);
- Включите необходимые секции отчёта.
- Включите секцию **Экспорт в LIMS**.
- В её настройках укажите входную папку LIMS. Она может быть сетевой. В эту папку будут скопированы файлы отчётов, в заданных форматах.
- Если доступ к входной папке LIMS ограничен, укажите имя учётной записи, имеющей права на запись в данную папку и пароль.



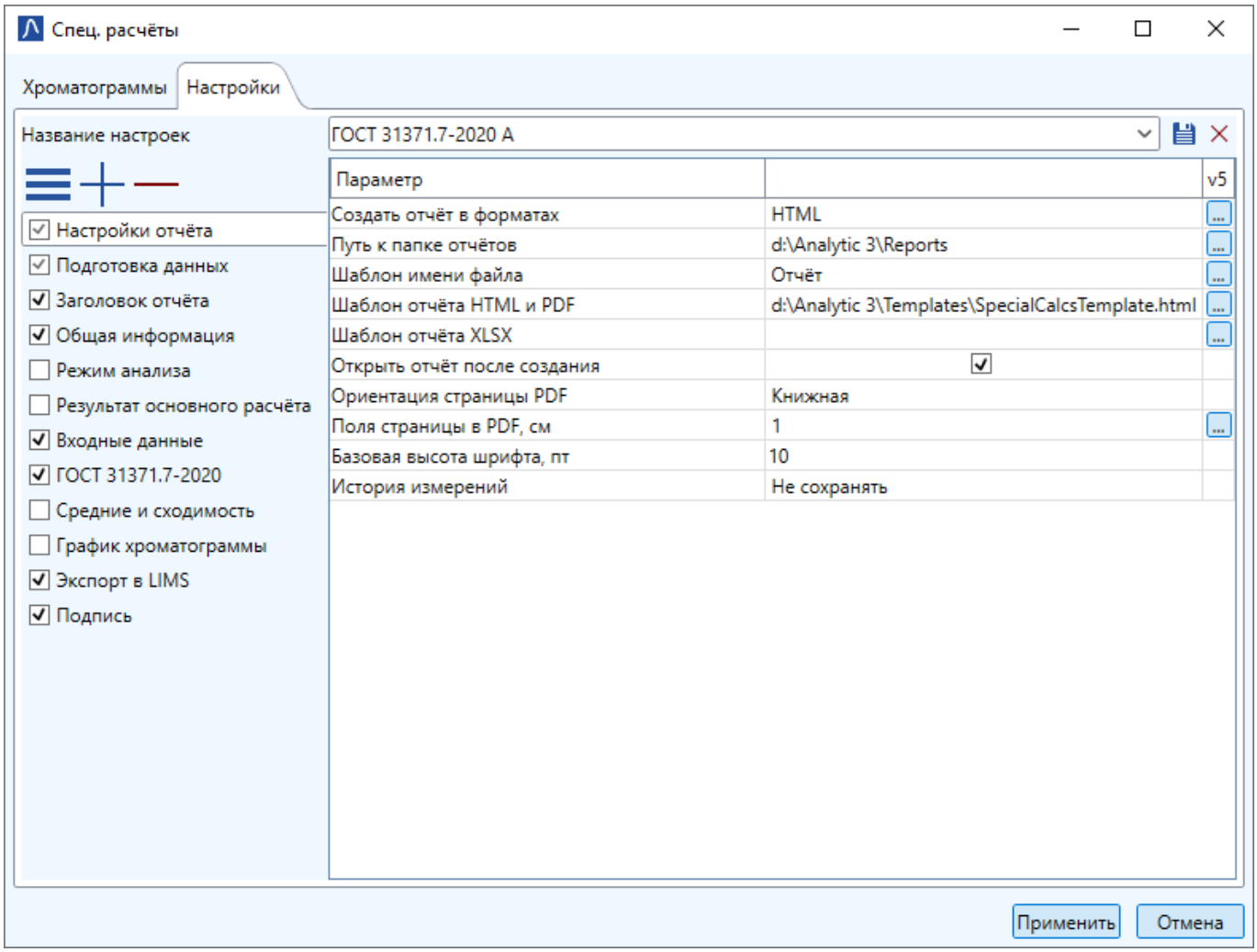
В секции Компоненты и МСД: Результаты поиска вы можете включить в отчёт и экспортируемый файл любые предусмотренные параметры, задать формат округления и порядок столбцов (перетаскиванием с помощью мыши).


Параметры отчёта
Заголовок отчёта
Паспорт
Метод инструмента
Компоненты
Градуировка
МСД: Результат поиска
МСД: Спектры
График хроматограммы
Подпись
Экспорт в LIMS
Компоненты
С новой страницы
Фильтр данных 0
Сортировка 0
Компонент
№ F0
Группа
Время заданное, мин F3
Время, мин F3
Индекс заданный F3
Индекс F3
Площадь группы, мВ*s F3
Площадь группы, % F3
Площадь, мВ*с F3
Площадь, % F3
Высота, мВ F3
Высота, % F3
Стандарт
Функция
Множитель F3
Концентрация заданная G3
Неопределённость заданная G3
Концентрация min. G3
Концентрация макс. G3
Концентрация группы G3
Концентрация G3
Неопределённость G3
Ед. конц.

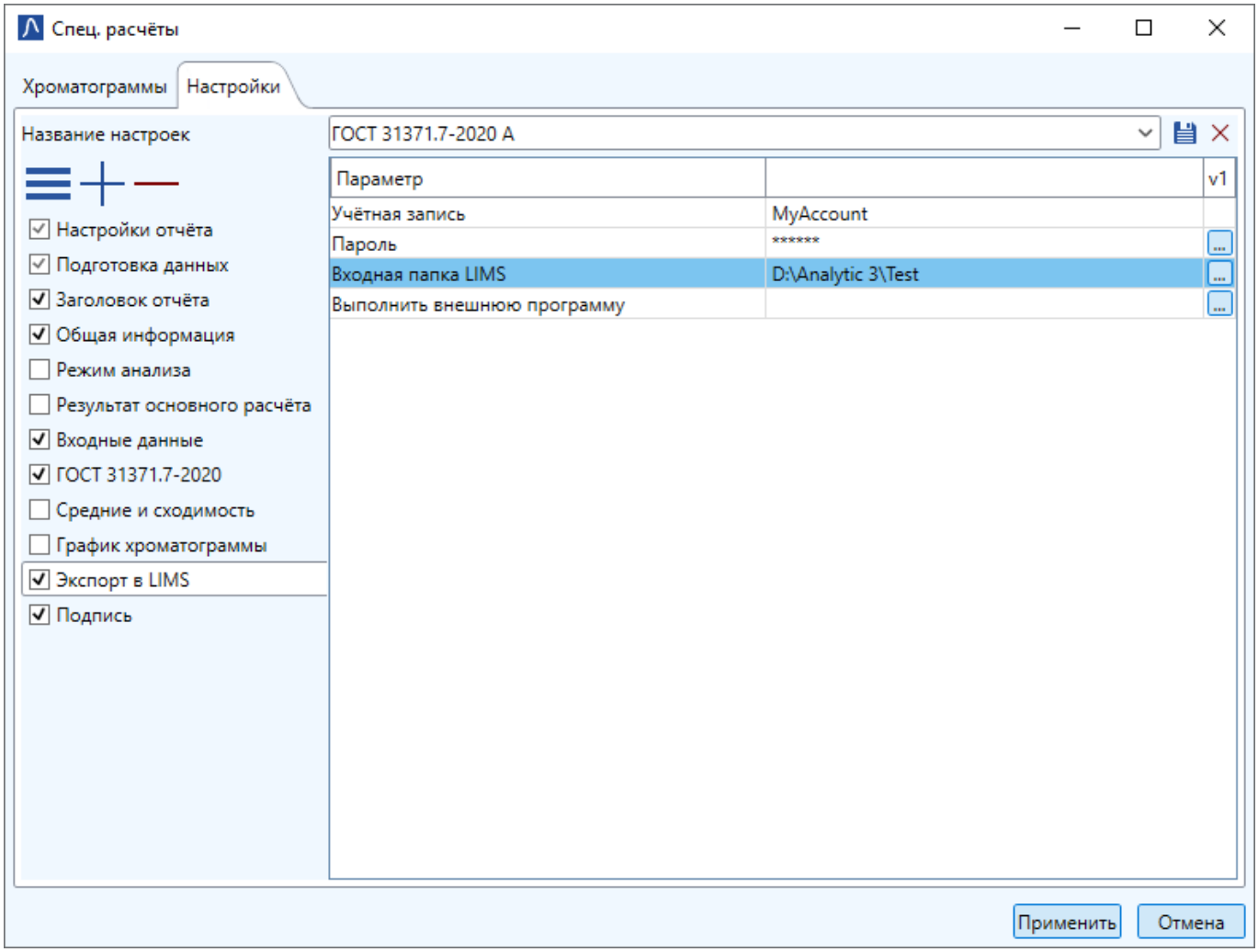
2.1.2 Специальные расчёты

- Запустите расширение "Спец. расчёты".
- Перейдите на закладку **Настройка**.
- Включите необходимые секции отчёта.

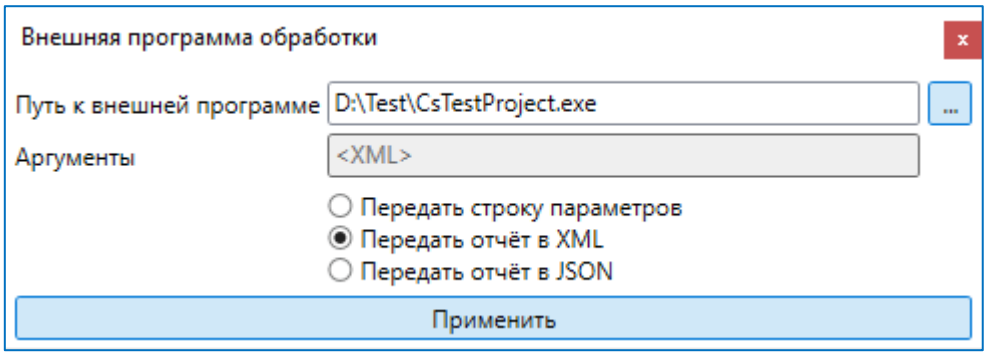
Добавьте необходимые расчёты по нормативным документам. Добавьте в список секций **Экспорт в LIMS**.

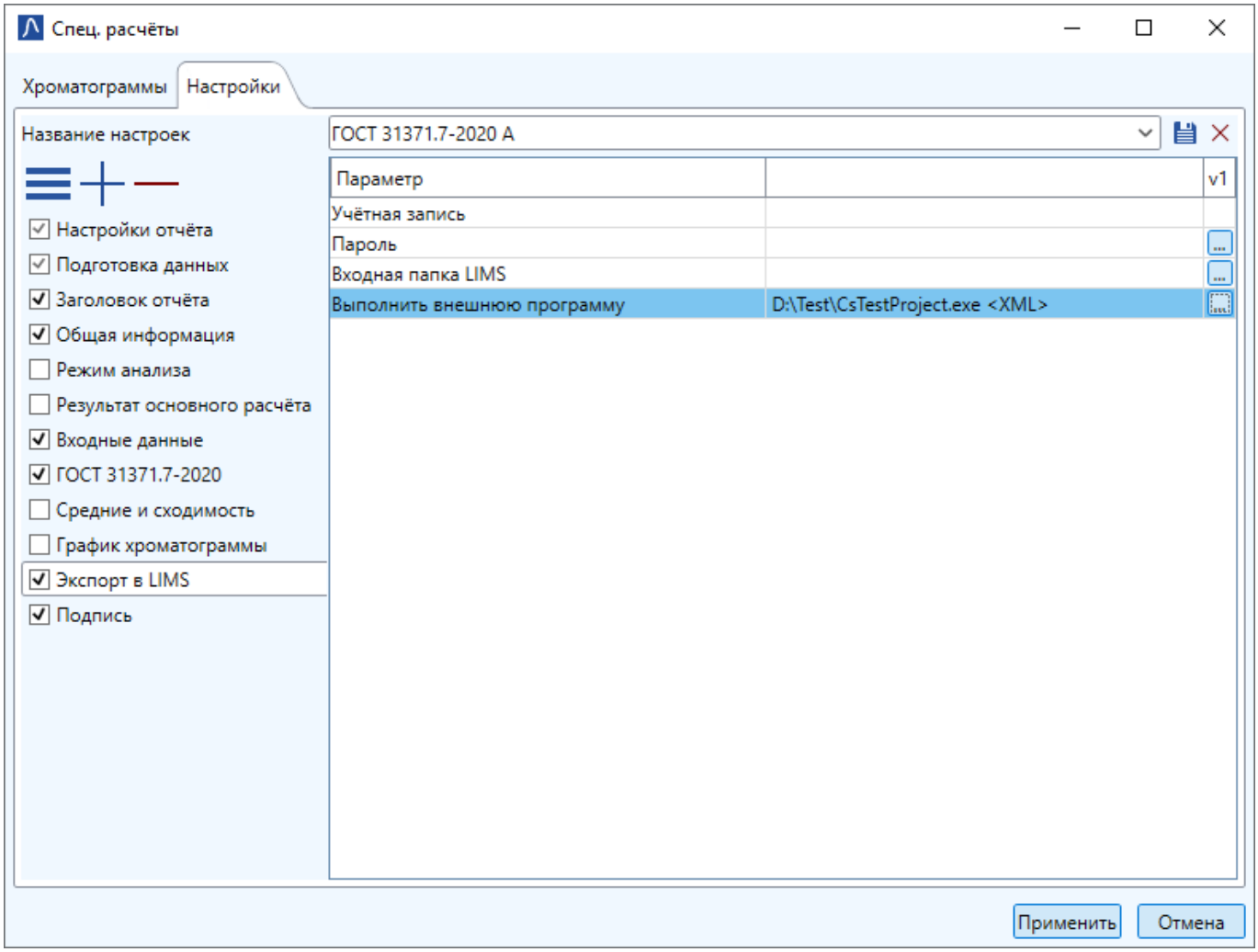


- В настройках секции **Экспорт в LIMS** укажите входную папку LIMS, если система настроена на чтение данных из этой папки. Папка может быть сетевой. В эту папку будут скопированы файлы отчётов, в заданных форматах.
- Если доступ к входной папке LIMS ограничен, укажите имя учётной записи, имеющей права на запись в данную папку и пароль.



- Если данные в LIMS передаются путём передачи выходного файла XML или JSON в качестве аргумента сторонней утилиты (приложения), настройте параметр **Выполнить внешнюю программу**.





2.2 Сканер штрих-кодов

При работе с LIMS для автоматизации заполнения информации об образце может использоваться считыватель (сканер) штрих-кодов. Данное устройство подключается к компьютеру по интерфейсу USB или PS/2. Распознаётся Windows автоматически. Настройка не требуется.

Для считывания информации со штрих-кода при старте нового анализа (или при заполнении паспорта до анализа) необходимо поставить курсор в поле **Название пробы** паспорта хроматограммы и поднести считыватель к штрих-коду. Идентификатор пробы будет автоматически внесён в это поле и при выполнении экспорта будет включен в выгружаемый файл.

3 ФОРМАТ ЭКСПОРТА

3.1 Экспорт в TXT и CSV

Данные экспортируются в текстовый файл.

Для TXT разделитель столбцов таблиц – символ табуляции "\t".

Для CSV разделитель столбцов таблиц – точка с запятой ";".

Пример экспорта в CSV:

```
ПАСПОРТ
ID оборудования;Хроматэк-Кристалл 9000 1991503;
Номер хроматограммы;68;
Дата и время анализа;2020-01-17 13:35:10;
Метод;D:\Analytic 3\Projects\Combine\ГОСТ 31371\ГОСТ 31371.7-2020 А\.methods\Метод.mthx;
Название пробы;ПНГ с подогревом пробоотборника, точка отбора – УУГ УПН;
Объём пробы;1.000;


КОМПОНЕНТЫ
Компонент;Время, мин;Площадь, мВ*с;Концентрация;Ед. конц.;Детектор;
Метан;1.147;182440.215;63.8;мол.%;ДТП-1;
этан;5.431;32136.600;7.02;мол.%;ДТП-1;
пропан;7.581;95554.355;14;мол.%;ПИД-1;
и-бутан;7.946;20230.879;2.18;мол.%;ПИД-1;
н-бутан;8.199;55698.275;6.05;мол.%;ПИД-1;
неопентан;15.877;24.695;0.00344;мол.%;ДТП-1;
и-пентан;9.062;13243.524;1.13;мол.%;ПИД-1;
н-пентан;9.435;15850.653;1.35;мол.%;ПИД-1;
Циклопентан;9.500;0.000;0;;ПИД-1;
гексан;11.493;3408.844;0.239;мол.%;ПИД-1;
гептан;14.163;705.826;0.0431;мол.%;ПИД-1;
октан;16.974;198.931;0.011;мол.%;ПИД-1;
нонан;19.539;60.757;0.00304;мол.%;ПИД-1;
декан;21.709;22.468;0.00101;мол.%;ПИД-1;
диоксид углерода;2.346;8576.969;2.03;мол.%;ДТП-1;
гелий;0.751;15.830;0.0112;мол.%;ДТП-3;
водород;1.003;24.187;0.00998;мол.%;ДТП-3;
кислород;1.935;19.878;0.00437;мол.%;ДТП-2;
азот;4.105;4481.431;1.14;мол.%;ДТП-2;
Сероводород;9.000;0.000;0;;ДТП-1;
метанол;12.557;0.805;0.000499;мол.%;ДТП-1;
```

3.2 Экспорт в XML и JSON

В этих форматах сохраняется древовидная структура. Ниже приведён код на языке **C#**, который её описывает.

```
public class ExportData
{
   public string Id { get; set; }
   public string Name { get; set; }
   public List<ExportDataTable> Tables { get; set; }
}

public class ExportDataTable
{
   public string Id { get; set; }
   public string Name { get; set; }
   public List<ExportParam> Params { get; set; }
}

public class ExportParam
{
   public string Key { get; set; }
   public string Name { get; set; }
   public object Value { get; set; }
}
```

В **ExportParam.Name** содержится или название компонента, или локализованное название параметра.

Пример экспорта в XML отчёта по ГОСТ 31369-2021, созданного расширением "Специальные расчёты":

```
<?xml version="1.0"?>
<ArrayOfExportData>
 <ExportData>
  <Id>Gost31371_7_2020</Id>
  <Name>ГОСТ 31371.7-2020</Name>
  <Tables>
   <ExportDataTable>
    <Id>GasComposition</Id>
    <Name>Состав пробы</Name>
    <Params>
     <ExportParam>
      <Key>Conc</Key>
      <Name>Метан</Name>
      <Value xmlns:q207="http://www.w3.org/2001/XMLSchema" d7p1:type="q207:double"
xmlns:d7p1="http://www.w3.org/2001/XMLSchema-instance">62.76</Value>
     </ExportParam>
     <ExportParam>
      <Key>Uncert</Key>
      <Name>Метан</Name>
      <Value xmlns:q208="http://www.w3.org/2001/XMLSchema" d7p1:type="q208:double"
xmlns:d7p1="http://www.w3.org/2001/XMLSchema-instance">0.15</Value>
     </ExportParam>
     <ExportParam>
      <Key>Method</Key>
      <Name>Метан</Name>
      <Value xmlns:q209="http://www.w3.org/2001/XMLSchema" d7p1:type="q209:string"
xmlns:d7p1="http://www.w3.org/2001/XMLSchema-instance">A (индивидуально)</Value>
     </ExportParam>
     <ExportParam>
      <Key>RangeMol</Key>
      <Name>Метан</Name>
      <Value xmlns:q210="http://www.w3.org/2001/XMLSchema" d7p1:type="q210:double"
xmlns:d7p1="http://www.w3.org/2001/XMLSchema-instance">2.66</Value>
     </ExportParam>
```

```
     <ExportParam>
      <Key>RangeMolNorm</Key>
      <Name>Метан</Name>
      <Value xmlns:q211="http://www.w3.org/2001/XMLSchema" d7p1:type="q211:double"
xmlns:d7p1="http://www.w3.org/2001/XMLSchema-instance">0.2</Value>
     </ExportParam>
     <ExportParam>
      <Key>Acceptability</Key>
      <Name>Метан</Name>
      <Value xmlns:q212="http://www.w3.org/2001/XMLSchema" d7p1:type="q212:boolean"
xmlns:d7p1="http://www.w3.org/2001/XMLSchema-instance">false</Value>
     </ExportParam>
     <ExportParam>
      <Key>Conc</Key>
      <Name>этан</Name>
      <Value xmlns:q213="http://www.w3.org/2001/XMLSchema" d7p1:type="q213:double"
xmlns:d7p1="http://www.w3.org/2001/XMLSchema-instance">7.4</Value>
     </ExportParam>
     <ExportParam>
      <Key>Uncert</Key>
      <Name>этан</Name>
      <Value xmlns:q214="http://www.w3.org/2001/XMLSchema" d7p1:type="q214:double"
xmlns:d7p1="http://www.w3.org/2001/XMLSchema-instance">0.3</Value>
     </ExportParam>
     <ExportParam>
      <Key>Method</Key>
      <Name>этан</Name>
      <Value xmlns:q215="http://www.w3.org/2001/XMLSchema" d7p1:type="q215:string"
xmlns:d7p1="http://www.w3.org/2001/XMLSchema-instance">A (индивидуально)</Value>
     </ExportParam>
     <ExportParam>
      <Key>RangeMol</Key>
      <Name>этан</Name>
      <Value xmlns:q216="http://www.w3.org/2001/XMLSchema" d7p1:type="q216:double"
xmlns:d7p1="http://www.w3.org/2001/XMLSchema-instance">0.51</Value>
     </ExportParam>
     <ExportParam>
      <Key>RangeMolNorm</Key>
      <Name>этан</Name>
      <Value xmlns:q217="http://www.w3.org/2001/XMLSchema" d7p1:type="q217:double"
xmlns:d7p1="http://www.w3.org/2001/XMLSchema-instance">0.41</Value>
     </ExportParam>
     <ExportParam>
      <Key>Acceptability</Key>
      <Name>этан</Name>
      <Value xmlns:q218="http://www.w3.org/2001/XMLSchema" d7p1:type="q218:boolean"
xmlns:d7p1="http://www.w3.org/2001/XMLSchema-instance">false</Value>
     </ExportParam>

.....................................................................................

    </Params>
   </ExportDataTable>
  </Tables>
 </ExportData>
</ArrayOfExportData>
```

Например, чтобы из массива **GasComposition** получить концентрации всех компонентов, нужно выбрать все элементы, у которых **Key == Conc**.

Чтобы найти все параметры метана, нужно из массива **GasComposition** получить все элементы, у которых **Name == метан**.

И т.п.

4 ПАРАМЕТРЫ ЭКСПОРТА

4.1 Расчёт по ГОСТ 31369-2021

ExportData.Id – Gost31369_2021

4.1.1 Входные нормализованные доли

ExportDataTable.Id: NormalizedConc

ExportDataTable.Params:

Key	Name	Тип значения	Описание
MolarConc	Название компонента	Double	Молярная нормализованная доля
MassConc		Double	Массовая нормализованная доля
VolumeConc		Double	Объёмная нормализованная доля

4.1.2 Физико-химические показатели идеального газа

ExportDataTable.Id: IdealGas

ExportDataTable.Params:

PhysicalParameterValue – Значение параметра.

PhysicalParameterUncert – Неопределённость параметра.

Key	Name	Тип значения	Описание
MolarConc	Название компонента	Double	Молярная нормализованная доля
MassConc		Double	Массовая нормализованная доля
VolumeConc		Double	Объёмная нормализованная доля
PhysicalParameterValue PhysicalParameterUncert	MolarMass	Double	Молярная масса, г/моль
PhysicalParameterValue PhysicalParameterUncert	CompressFactor	Double	Фактор сжимаемости
PhysicalParameterValue PhysicalParameterUncert	HighCombustionHeatMolar	Double	Молярная теплота сгорания высшая, кДж/моль
PhysicalParameterValue PhysicalParameterUncert	LowCombustionHeatMolar	Double	Молярная теплота сгорания низшая, кДж/моль
PhysicalParameterValue PhysicalParameterUncert	HighCombustionHeatMass	Double	Массовая теплота сгорания высшая, МДж/кг
PhysicalParameterValue PhysicalParameterUncert	LowCombustionHeatMass	Double	Массовая теплота сгорания низшая, МДж/кг

PhysicalParameterValue PhysicalParameterUncert	HighCombustionHeatVolume	Double	Объёмная теплота сгорания высшая, МДж/м³
PhysicalParameterValue PhysicalParameterUncert	LowCombustionHeatVolume	Double	Объёмная теплота сгорания низшая, МДж/м³
PhysicalParameterValue PhysicalParameterUncert	DensityAbs	Double	Плотность, кг/м³
PhysicalParameterValue PhysicalParameterUncert	DensityRel	Double	Плотность относительная
PhysicalParameterValue PhysicalParameterUncert	HighWobbe	Double	Число Воббе высшее, МДж/м³
PhysicalParameterValue PhysicalParameterUncert	LowWobbe	Double	Число Воббе низшее, МДж/м³

4.1.3 Физико-химические показатели реального газа

ExportDataTable.Id: RealGas

Параметры аналогично описанным в п.4.1.2.

4.2 Расчёт по ГОСТ 31371.7-2020

ExportData.Id – Gost31371_7_2020

4.2.1 Входные ненормализованные доли, мол.%

ExportDataTable.Id: AllConcentrations

ExportDataTable.Params:

Key	Name	Тип значения	Описание
Номер хроматограммы	Название компонента	Double	Входная ненормализованная доля

4.2.2 Таблица градуировочных зависимостей

ExportDataTable.Id: CalibrationFunctions

ExportDataTable.Params:

Key	Name	Тип значения	Описание
CalibrationFunction	Название компонента	String	Градуировочная функция

4.2.3 Приемлемость градуировочных коэффициентов (методы А и Б)

ExportDataTable.Id: CalibrationFactorsAcceptability

ExportDataTable.Params:

Key	Name	Тип значения	Описание
K#<Номер хроматограммы>	Название компонента	Double	Градуировочный коэффициент компонента в данной хроматограмме
Kavg		Double	Средний градуировочный коэффициент
CalibrationFactorRangeValue		Double	Значение относительного размаха
CalibrationFactorRangeNormative		Double	Норматив относительного размаха
Acceptability		Boolean	Приемлемость

4.2.4 Приемлемость градуировочных коэффициентов (метод В)

ExportDataTable.Id: CalibrationFactorsAcceptability

ExportDataTable.Params:

Key	Name	Тип значения	Описание
StandardMolarPercent	Название компонента	Double	Паспортная мол. доля, %
MeasuredMolarPercent		Double	Измеренная мол. доля, %
MolarRelRange		Double	Относительный размах мол. долей, %
RangeMolNorm		Double	Норматив размаха, мол.%
RelResponseRange		Double	ОСКО откликов, %
RangeNormRel		Double	Норматив ОСКО, %
Acceptability		Boolean	Приемлемость

4.2.5 Контроль градуировочной характеристики

ExportDataTable.Id: CalibrationControl

ExportDataTable.Params:

Key	Name	Тип значения	Описание
Conc	Название компонента	Double	Измеренная мол. доля, %
ConcStandard			Паспортная мол. доля, %
ResponseRange		Double	Размах откликов, отн. %
ResponseRangeNorm		Double	Норматив размаха, отн. %
Accuracy		Double	Точность, отн. %
AccuracyNorm		Double	Норматив точности, отн. %
Acceptability		Boolean	Приемлемость

4.2.6 Состав пробы

ExportDataTable.Id: GasComposition

ExportDataTable.Params:

Key	Name	Тип значения	Описание
Conc	Название компонента	Double	Нормализованная доля, мол. %
Uncert		Double	Неопределённость, мол. %
Method		Double	Метод анализа

4.2.7 Проверка соответствия ГСО и пробы

ExportDataTable.Id: StandardAndSampleCompliance

ExportDataTable.Params:

Key	Name	Тип значения	Описание
Conc	Название компонента	Double	Нормализованная доля, мол. %
Min		Double	Мин. допустимого диапазона градуировочного стандартного образца, мол. %
Max		Double	Макс. допустимого диапазона градуировочного стандартного образца, мол. %
StandardConc		Double	Паспортное значение молярной доли стандартного образца, %
Acceptability		Boolean	Приемлемость

4.2.8 Контроль правильности результатов измерений

ExportDataTable.Id: AccuracyControl

ExportDataTable.Params:

Key	Name	Тип значения	Описание
MeasuredMolarPercent	Название компонента	Double	Измеренная мол. доля, %
StandardMolarPercent		Double	Паспортная мол. доля, %
RangeMol		Double	Размах, мол.%
RangeMolNorm		Double	Норматив размаха, мол.%
Acceptability		Boolean	Приемлемость

4.3 Расчёт по ГОСТ Р 53367-2009 и ГОСТ 34723-2021

Для ГОСТ Р 53367-2009: ExportData.Id – Gost53367_2009

Для ГОСТ 34723-2021: ExportData.Id – Gost34723_2021

4.3.1 Сигнал/Шум

ExportDataTable.Id: SignalNoise

ExportDataTable.Params:

Key	Name	Тип значения	Описание
NoiseMv	Название компонента	Double	Шум, мВ
NoiseInterval		String	Интервал, мин - мин
SignalMv		Double	Сигнал, мВ
CmgM3		Double	Концентрация С, мг/м³
Sn1MgM3		Double	Сигнал/шум для 1 мг/м³
Normative		Double	Норматив
CminRdiMgM		Double	Смин РДИ, мг/м³

4.3.2 Градуировочные зависимости

ExportDataTable.Id: CalibrationDependencies

ExportDataTable.Params:

Key	Name	Тип значения	Описание
CalibrationFunction	Название компонента	String	Вид градуировочной функции

4.3.3 Проверка приемлемости градуировки

ExportDataTable.Id: CalibrationAcceptability

ExportDataTable.Params:

Key	Name	Тип значения	Описание
Concentration	Название компонента	Double	Концентрация, мг/м³
Chromatogram		String	Номер хроматограммы
Volume		Double	Объём
Value		Double	Значение отклика в данной хроматограмме

Average		Double	Среднее значение отклика
RealValue		Double	Фактическое значение относительного расхождения
NormValue		Double	Норматив относительного расхождения

4.3.4 Паспорт градуировочного образца

ExportDataTable.Id: CalibrationSampleInfo

ExportDataTable.Params:

Key	**Name**	**Тип значения**	**Описание**
Concentration	Название компонента	Double	Концентрация, мг/м³
UncertaintyRel		Double	Неопределённость относительная
UncertaintyNorm		Double	Норматив неопределённости
UncertaintyAbs		Double	Неопределённость абсолютная
Acceptability		Boolean	Приемлемость

4.3.5 Оперативный контроль точности результатов измерений

ExportDataTable.Id: AccuracyControl

ExportDataTable.Params:

Key	**Name**	**Тип значения**	**Описание**
ConcMeasured	Название компонента	Double	Измеренная концентрация контрольного образца, мг/м³
ConcSetted		Double	Заданная концентрация контрольного образца, мг/м³
Deviation		Double	Отклонение, отн.%
Normative		Double	Норматив, отн.%
Acceptability		Boolean	Приемлемость

4.3.6 Состав в дополнительных единицах измерения

ExportDataTable.Id: CompositionAdditional

ExportDataTable.Params:

Key	Name	Тип значения	Описание
Concentration	Название компонента	Double	Измеренная концентрация контрольного образца, мг/м³
UncertaintyGm		Double	Заданная концентрация контрольного образца, мг/м³
MolarPerc		Double	Молярная доля, %
UncertaintyMolPerc		Double	Расширенная неопределённость, мол. %

4.3.7 Серосодержащие компоненты

ExportDataTable.Id: SulfurComponents

ExportDataTable.Params:

Key	Name	Тип значения	Описание
Concentration	Название компонента	Double	Концентрация
UncertaintyRel		Double	Неопределённость относительная
UncertaintyAbs		Double	Неопределённость абсолютная
Range		Double	Размах относительный
RangeNorm		Double	Норматив размаха относительного
Acceptability		Boolean	Приемлемость

4.3.8 Разрешение пиков

ExportDataTable.Id: PeakResolution

ExportDataTable.Params:

Key	Name	Тип значения	Описание
Resolution	Название компонента	Double	разрешение

5 ЧТО НУЖНО ДЛЯ ИНТЕГРАЦИИ "ХРОМАТЭК АНАЛИТИК" И LIMS?

На адрес soft@chromatec.ru нужно прислать максимально подробное описание задачи. Желательно предоставить контакты разработчиков LIMS, которая устанавливается у конечного пользователя, для согласования форматов передачи данных.