

Оценка соответствия. Аккредитация лабораторий

УДК 543.422.8,681.3.06

ТЕНДЕНЦИИ РАЗВИТИЯ И ТЕХНОЛОГИИ ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ОТЕЧЕСТВЕННЫХ АНАЛИТИЧЕСКИХ ЛАБОРАТОРИЙ

© Е. И. Молчанова¹, И. В. Щербаков², В. В. Федоров³, В. В. Кузьмин⁴*Статья поступила 21 января 2014 г.*

Рассмотрены информационные системы, соответствующие трем направлениям компьютеризации аналитических лабораторий в классификации В. И. Дворкина. Для каждого класса выделены тенденции развития и перспективные технологии, на которых они функционируют. Показано, что ЛИУС, несмотря на их высокую сложность и стоимость, все более широко используются для менеджмента качества производства и автоматизации аналитического контроля в АСУ ТП.

С точки зрения применения выделенных технологий АСАК рассмотрена как SCADA-система. Для интеллектуализации АСАК предложено использовать ЭС. В качестве наиболее перспективной рассматривается «рассеянная» («облачная») обработка данных — технология, в которой компьютерные ресурсы и мощности предоставляются пользователю как Интернет-сервис. Разработаны технологии и прототипы информационного и алгоритмического обеспечения интеллектуальной АСАК в контексте рассеянной обработки данных для повышения эффективности аналитического контроля состава технологических продуктов. Предложен подход к созданию гибридных экспертных систем как Web-приложений. Подход основан на разработке унифицированной модели базы знаний, не привязанной к онтологии предметной области. В качестве «решателя» используется система CLIPS, взаимодействие оболочки экспертной системы с пакетами прикладных программ осуществляется с помощью специально разработанной программы — демона.

Ключевые слова: лабораторное программное обеспечение; ЛИУС (LIMS); АСАК; Web-технологии; SCADA-система; гибридная экспертная система; база знаний; база данных; CLIPS; механизм логического вывода; пакеты прикладных программ; рентгенофлуоресцентный анализ.

Постановка задачи

Улучшение экономических показателей предприятия возможно за счет совершенствования как технологии, так и средств, а также систем контроля и управления. Усиление роли аналитических лабораторий в производственном процессе вызвано мировой тенденцией повышения требований к качеству выпускаемой продукции. Так как целью управления на предприятиях является получение определенного количества продукта при заданном качестве, возрастает роль аналитической информации о составе сырья и других производственных продуктов. Повышение значимости лаборатории в производственном процессе выдвигает задачу оптимизации ее деятельности путем внедрения специализированной информационной системы [1, 2]. На рынке представлен широкий спектр зарубежных и отечественных программных продуктов. Классифи-

кация лабораторного программного обеспечения позволяет сравнить возможности систем каждого класса при решении задач компьютеризации лабораторий, выделить тенденции в их развитии и использовать наиболее перспективные технологии, что и является целью настоящей работы.

Три направления компьютеризации аналитических лабораторий

Помимо использования компьютеров и программ, являющихся неотъемлемой частью аналитических приборов, В. И. Дворкин [3 – 5] выделяет три направления компьютеризации лабораторий: ЛИУС (LIMS); специализированные общелабораторные компьютерные программы; не специализированные «офисные» или кустарные программы.

По мнению В. И. Дворкина [3 – 5], «Офисные» и «Кустарные» программы не позволяют в полной мере решать задачи обеспечения качества аналитического контроля. Следствием этого является исчезновение самодельных программ из обихода лабораторий, пик использования которых пришелся на 1990-е годы.

¹ ИрГУПС, г. Иркутск, Россия; e-mail: moleli59@gmail.com

² Иркутский ИВЦ ГВЦ-филиала ОАО «РЖД», г. Иркутск, Россия; e-mail: anti1am3r@gmail.com

³ ИрГУПС, г. Иркутск, Россия; e-mail: spawn_f@mail.ru

⁴ ИрГУПС, г. Иркутск, Россия; e-mail: imbaskilll@gmail.com

Конечно, использование основных программ пакета Microsoft Office (Word, Excel и др.) в обозримом будущем будет носить все более ограниченный характер [3 – 5].

Применение ЛИУС сдерживается их высокой стоимостью, сложностью, необходимостью специального обучения персонала и привлечения фирмы-производителя при изменениях системы. В России их используют единичные лаборатории, число которых растет очень медленно. В. И. Дворкин [3 – 5] считает, что ЛИУС в обозримом будущем, как и сейчас, будут иметь весьма ограниченное применение — в лабораториях, имеющих богатого «спонсора» (главным образом в лабораториях крупных предприятий). Однако анализ литературных источников позволяет сделать вывод о растущем интересе отечественных крупных и средних предприятий к внедрению ЛИУС [6 – 10].

Специализированные программы (компьютеризация «блоками»)

Основным путем компьютеризации аналитических и других лабораторий В. И. Дворкин [3 – 5] считает использование специализированных программ (компьютеризация «блоками»), позволяющих полностью удовлетворять современным требованиям к системе обеспечения качества работы лабораторий при минимальных затратах финансовых и трудовых ресурсов. По данным этих работ, широкое распространение получили специализированные программы SControl (выполнение расчетов и контроль качества) и DControl (ведение документации): их используют более 1500 лабораторий страны. Разработан блок SControl для учета и контроля прохождения проб, генерации протоколов.

В работе [3] перечислены виды лабораторной деятельности, которые могут подлежать компьютеризации. Среди перечисленных задач, однако, нет управления и автоматизации аналитического контроля (кроме управления приборами), что ограничивает область внедрения разработанного программного обеспечения малыми и средними предприятиями.

Задачи менеджмента качества решает программный комплекс Lab5725X, разработанный Компанией «Аврора-ИТ» совместно с «Уральским НИИ Метрологии», позволяющий автоматизировать процесс трудоемких вычислений в соответствии с требованиями «РМГ 76–2004 ГСИ. Внутренний контроль качества результатов количественного химического анализа» (ранее МИ 2335–2003) и «ГОСТ Р ИСО 5725-1-6–2002. Точность (правильность и прецизионность) методов и результатов измерений» [8]. Подобными функциями обладает и ЛИС «Химик-аналитик» разработки НИИ высоких напряжений (г. Томск) — лабораторная информационно-управляющая система, специально спроектированная для управления информационными потоками в крупных и средних компаниях [9].

Рассмотренные выше системы объединяют функции только метрологии химического анализа и не учитывают специфику его конкретных методов. Для различных методов анализа, стадии которых легко поддаются автоматизации, крупные зарубежные и отечественные разработчики (Bruker, Rigaku, Thermo Scientific, Siemens, ЗАО «Научприбор», НПО «Спектрон» и др.) традиционно создают программные комплексы, управляющие работой аналитического оборудования и решающие задачи рутинного анализа. Общим для всех разработчиков является стремление к построению градуировочной характеристики, оптимальной для всей контролируемой цепи технологического процесса. Например, все зарубежные разработчики программного обеспечения для рентгенофлуоресцентного анализа заявляют о возможности «безэталонного» анализа рутинных проб способом фундаментальных параметров. В работе [11] предлагается новый алгоритм построения градуировочной характеристики на основе способа стандарта-фона с использованием модифицированного универсального уравнения, единого для всех анализируемых продуктов (многоэлементных руд, продуктов их переработки и обогащения), внедренный в АСАК в составе АСУ ТП Горно-металлургического комбината «Норильский никель». На наш взгляд, к этим утверждениям надо относиться осторожно. Например, в работе [12] подробно рассматривается и подвергается критике алгоритм, автор которого Руссо декларирует возможность рутинного анализа проб с произвольной матрицей по единой градуировочной функции.

Таким образом, можно выделить две группы задач, решаемых специализированными программами, — функции обеспечения метрологии химического анализа и функции управления работой аналитического оборудования в процессе рутинного анализа конкретными методами. Развитие специализированных программ и программных комплексов происходит в направлении совершенствования этих функций, включая управление информационными потоками предприятия. Однако следует отметить, что основное отличие этой группы программ от ЛИУС в том, что они не предназначены для решения всех задач, возникающих в лабораториях, в рамках одной программы или программного комплекса [5].

ЛИУС (LIMS)

Лабораторные информационно-управляющие системы (ЛИУС/ЛИС) — это специализированные программные комплексы, направленные на автоматизацию работы аналитической лаборатории. Системы этого класса предназначены не только для оперативного предоставления лабораторной информации по качеству, но и для управления самим бизнес-процессом контроля качества. Зарубежным аналогом термина является LIMS — Laboratory Information Manage-

ment System (система управления лабораторной информацией) [1, 2].

ЛИУС представляет собой сетевой программно-аппаратный комплекс, состоящий из объединенных в информационную компьютерную сеть АРМ пользователей, серверов ЛИУС (с функциями СУБД и сервера приложений) и серверов Единого Хранилища Данных (ЕХД). На АРМ пользователей осуществляются конечные манипуляции с лабораторной информацией (ввод/вывод, изменение и контроль), на серверах ЛИУС — обработка, накопление лабораторной информации, организация и разграничение доступа к данным для пользователей; на серверах ЕХД — архивирование, долговременное накопление и выдача итоговой и статистической информации потребителям. В качестве хранилища данных используется промышленная СУБД (например, Microsoft SQL Server или Oracle). Структура БД ЛИУС определяется архитектурой программного обеспечения и требованиями конкретного предприятия [13].

Разработчики. В настоящее время в мире насчитывается более полусотни разработчиков подобных систем [2, 8]. Последнее (четвертое) поколение начинает свой отсчет с 1995 г. [8]. В 1999 г. появилась первая Интернет-ЛИС, размещенная на сервере производителя с доступом пользователей к ней по безопасным каналам через Интернет [2].

Большинство из продуктов, представленных на Российском рынке, является результатом адаптации известных зарубежных ЛИС, имеющих большой опыт внедрения за границей, но внедряются и отечественные разработки [2, 8, 14 – 17]:

- 1) LabWare-ЛИМС (LabWare, США);
- 2) Q-DIS\QM ЛИМС (Waters, США, до 2003 г. Creon Lab Control AG);
- 3) StarLIMS (STARLIMS Corporation, США);
- 4) Labworks ES и SQL*ЛИМС (PerkinElmer, США);
- 5) PI-LDS (OSIsoft);
- 6) Модуль «Лабораторные анализы» ИУС Орбита (ООО «ПЛКСистемы»);
- 7) «Качество» (ОАО «ЦНИИКА»);
- 8) АРМ/ЛИС/ЛИУС «Химик-аналитик» (НИИ ВН);
- 9) LabExpert (Аналитический Центр Калининградского ТФГИ);
- 10) ЛИС ALTEY Laboratory (НПО «АЛТЭЙ»);
- 11) АСАК @LAST (ЗАО «Технолинк»);
- 12) АСАК процессов обогащения руд НПО «РИВС»;
- 13) АСАК промпродуктов ОАО «Союзцветметавтоматика» и др.

В работе [2] термины ЛИУС и АСАК (автоматизированные системы аналитического контроля) рассматриваются как аналоги и отмечается, что несмотря на то, что в СССР первые такие системы появились в то же время, что и на Западе, Россия с большим опозда-

нием вышла на рынок ЛИС. Эти системы ориентированы в основном на крупные и средние предприятия.

Однако можно заметить, что системы ЛИУС и АСАК отличаются тем, что ЛИУС предназначены для управления процессом контроля качества, а АСАК — для автоматизации управления процессом аналитического контроля технологического процесса и является частью автоматизированной системы управления технологическим процессом (АСУ ТП). Одна из отраслей промышленности, традиционно являющаяся объектом автоматизации, — металлургия.

АСАК в металлургии. На современных металлургических предприятиях аналитическая информация формируется в АСАК [15]. Главной функцией АСАК является получение аналитической информации по ходу протекания технологического процесса. АСАК представляет собой комплекс технических, методических и программных средств, предназначенных для экспрессного автоматического получения информации об элементном составе контролируемых продуктов на всех этапах технологического процесса, а также для ее обработки, хранения и передачи в АСУ ТП для дальнейшего использования [14 – 17]. Получили распространение два варианта АСАК: 1) с автоматизированным периодическим отбором проб и последующим их анализом в лаборатории; 2) без отбора проб, на принципах непосредственного определения интересующих компонентов в отбитой рудной массе (в вагонетках, на ленте транспортера) или в процессе обогащения (в пульповых потоках) [14].

На обогатительных фабриках цветной металлургии в обоих типах АСАК чаще всего используется рентгенофлуоресцентный анализ (РФА), позволяющий проводить измерения без сложной пробоподготовки. При этом обычно применяются спектрометры с волновой дисперсией, имеющей наиболее высокое разрешение и наилучшие пределы обнаружения. С точки зрения включения в АСУ ТП наиболее привлекательна вторая из возможных схем АСАК. Для ее эффективного функционирования необходима адекватная схема анализа и обработки результатов измерений [14].

Тенденции развития ЛИУС. Большинство ЛИУС можно условно разделить на две группы: глубокая автоматизация внутрилабораторных процессов и интеграция информационного пространства лаборатории в информационную систему (ИС) предприятия [1]. По мнению автора [1], низкий уровень автоматизации большинства отечественных лабораторий требует от ИС в первую очередь средств обработки результатов измерения и ведения внутрилабораторного контроля. Для зарубежных лабораторий более актуально провести сбор данных с приборов и организовать доступ к ним заинтересованных лиц [1]. В работе [18] отмечается, что дальнейшее развитие ЛИУС связано с двумя направлениями:

вхождением ее в корпоративную информационную систему (КИС);

интеграцией с приборами аналитического контроля.

Для каждого из этих направлений предложено межсистемные информационные потоки условно разделить на два уровня, автоматизация которых определяет взаимодополняющие подзадачи:

1) информационная интеграция с другими смежными системами (модулями) уровня MES и ERP;

2) импорт данных с измерительного оборудования и систем уровня АСУ ТП.

Такое разделение было выполнено в соответствии с характером передаваемых данных: фиксируемые значения измерений в первом случае и описание сущностей предметной области во втором, а также различия в правилах передачи (оперативность обновления) [18].

Второе направление развития ЛИУС [18] соответствует выделенному нами выше направлению автоматизации по типу АСАК.

Интеграция ЛИУС в структуру КИС предприятия. Корпоративная информационная система (КИС) любого предприятия состоит из нескольких систем: управления предприятием или ERP (Enterprise Resource Planning), оперативного управления производством или MES (Manufacturing Execution System), а также автоматизированных систем управления технологическими процессами (АСУ ТП) [19].

ЛИУС располагается в КИС на MES уровне и информационно взаимодействует практически со всеми подсистемами MES-системы, кроме, возможно, подсистемы «Текущий мониторинг и диспетчеризация производства» (DPU). ЛИУС является полноценной подсистемой MES-системы. В работе [19] отмечена информационная направленность ЛИУС на подсистемы «Качество продукции» (QM) и «Производство» (PM). Степень интеграции ЛИУС в информационное пространство предприятия определяет оперативность использования результатов анализов в технологическом процессе и их доступность другим отделам и руководству, возможность формирования заявки на анализ из производственных отделов, совместное использование единых данных. Интеграция осуществляется посредством автоматического обмена данными ЛИУС и систем КИС. Поэтому выработался следующий подход: разработка специализированных интерфейсных блоков для взаимодействия с определенной системой ERP, MES, АСУ ТП, документооборота. ЛИУС последнего поколения обладают клиент-серверной архитектурой и являются многоуровневыми. Можно выделить несколько уровней: интерфейс пользователя, бизнес-логика, СУБД. Чем больше уровней в системе, тем больше возможностей построить различные структуры [2].

Однако если учитывать второе направление развития ЛИУС, то необходимо рассматривать взаимодей-

ствие ЛИУС с подсистемой DPU, представленное в АСАК. По мнению автора работы [19], будущее автоматизации на металлургических предприятиях — это наряду с модернизацией специализированной инфраструктуры (КИП'а, контроллеров, специализированных серверов реального времени, различных АРМ с прикладным ПО) еще и алгоритмизация того, что до сих пор не было пока алгоритмизировано.

Ключевыми компонентами интегрированной системы в цепочке «проектирование — пуск производства — управление процессом» являются универсальные моделирующие программы (МП), которые, с одной стороны, понятны как обычному инженеру-технологу, так и высококвалифицированному инженеру-исследователю, а с другой — позволяют моделировать на компьютерах различные варианты стационарных и динамических режимов промышленных производств. Раньше МП работали со стационарными режимами. Однако необходимость учета при технологическом проектировании и разработке технологических регламентов производств возможностей управления различными параметрами процессов (с использованием регуляторов и контроллеров различных типов) потребовала включения в МП соответствующих модулей для расчета динамических режимов технологических процессов. Современные МП используют SCADA-системы для оперативного управления действующими производствами в режиме реального времени [20].

SCADA (от английского supervisory control and data acquisition, диспетчерское управление и сбор данных) — программный пакет, предназначенный для разработки или обеспечения работы в реальном времени систем сбора, обработки, отображения и архивирования информации об объекте мониторинга или управления [21]. SCADA может являться частью АСУ ТП и используются во всех отраслях хозяйства, где требуется обеспечивать операторский контроль за технологическими процессами в реальном времени. Данное программное обеспечение устанавливается на компьютеры и для связи с объектом использует драйверы ввода-вывода или OPC/DDE серверы. Таким образом, АСАК можно представить как разновидность SCADA-системы. Компоненты SCADA-систем являются гетерогенными, поэтому для их интеграции необходимо создавать SCADA-интерфейсы — интерфейсы обмена данными между SCADA и другими приложениями.

Разработкой SCADA-систем активно занимаются фирмы Chemstations Inc., Wonderware, Juniper Networks Inc., Communication Technologies Inc., в России МГТУ «СТАНКИН», НИИ Измерительных систем им. Ю. Е. Седакова, МГУПИ, ГУП «ИПТЭР», фирма AdAstra.

Примером использования SCADA-систем в области химических технологий является ChemCad разработки фирмы Chemstations Inc., США [20]. Система

позволяет моделировать на компьютерах различные варианты стационарных и динамических режимов промышленных производств. С целью управления с использованием МП был разработан интерфейс SCADA2CC, который совместно с распределенной системой управления DCS, системой визуализации информации SCADA и табличным редактором MS Excel позволяет проводить компьютерное моделирование химических производств с промышленными данными, получаемыми непосредственно от измерительных приборов.

Недостатком существующих SCADA-систем является то, что они поддерживают не все специфические протоколы, используемые в подсистемах АСАК.

Автор работы [18] отмечает, что иногда возникает необходимость в других способах взаимодействия, например, при разработке уникальных проектов по интеграции с внешним ПО, когда из внешней системы необходимо по различным правилам заполнять справочники ЛИУС. В ЛИУС «Химик-аналитик» доступ к БД ЛИУС осуществляется посредством ActiveX Data Objects (ADO). Задача, возложенная на данный блок, заключается в автоматическом заполнении лабораторных журналов (формировании новых записей).

Сетевые технологии в лабораторном программном обеспечении

Главная задача дальнейшего развития ПО аналитических лабораторий связана с путями оптимизации расходов на внедрение и эксплуатацию. В настоящее время широко распространенная стратегия по оптимизации расходов на внедрение информационных систем — объединение локальных БД под управление единой СУБД (в основном на базе MS SQL Server, Oracle и т.п.) и организация сетевого доступа в единое централизованное хранилище данных. Однако наиболее оптимальное решение — переход на виртуальные рабочие системы (терминалы или тонкие клиенты), который стал возможным с развитием программных и аппаратных средств [22]. Некоторые специализированные программы, например QControl, обеспечивают работу пользователей в сети с одной или несколькими базами данных в режиме разделения доступа [3 – 5].

Массовый доступ к данным лаборатории возможен также при использовании Web-технологий (LabWare-LIMS), что позволяет проводить регламентированный доступ к информации из любой точки глобальной сети. В данном направлении наибольший результат достигнут зарубежными разработчиками, где большее распространение получили различные коммерческие системы управления предприятием [23].

Сетевые технологии используются не только для организации доступа к хранилищам данных, но и для автоматизации считывания аналитических сигналов. В работе [24] предложена структурная схема для по-

строения высокоскоростных анализаторов МАЭС с параллельным считыванием сигналов линеек фотодиодов в сборке с использованием интерфейса Gigabit Ethernet.

В области автоматизации развивается направление WebScada-систем. Под термином WebSCADA, как правило, понимается реализация человеко-машинного интерфейса SCADA-систем на основе Web-технологий. Это позволяет осуществлять контроль и управление SCADA-системой через стандартный браузер, выступающий в этом случае в роли тонкого клиента. Архитектура таких систем включает WebSCADA-сервер и клиентские терминалы — персональные компьютеры с Web-браузером. Концепция построения WebSCADA-систем предполагает распределение процессов управления и контроля по нескольким компьютерам, что позволяет увеличить эффективность и скорость работы всей системы. В простой системе компьютер, соединенный с промышленным оборудованием, становится сервером, предназначенным для взаимодействия с контроллерами, в то время как компьютеры в локальной сети — клиентами. Когда компьютеру-клиенту требуются данные для отображения, он запрашивает их у сервера и затем обрабатывает локально.

Подключение клиентов к WebSCADA-серверу через Internet/Intranet позволяет им взаимодействовать с прикладной задачей как с простой Web-страницей. Однако на данном этапе развития WebSCADA еще не достигло уровня широкого промышленного внедрения, так как существуют сложности разработки интерфейсов обмена данными между аппаратным комплексом, SCADA, Web-приложениями и приложениями, выполняющими аналитические вычисления.

Возрастающая сложность современных программных комплексов и проблемы удаленного сопровождения одновременно с развитием компьютерных сетей привели к возникновению на рынке нового подхода реализации программных продуктов: «платформа как сервис» (Platform as a Service, PaaS) и «программное обеспечение как услуга» (Software as a Service, SaaS) [25]. Подходы SaaS и PaaS (технология облачных вычислений) имеют следующие преимущества для Заказчика:

большая часть работ по сопровождению программного продукта переносится на сервисы провайдера (при этом «сервисы» следует понимать достаточно широко: аппаратные ресурсы, хостинг пользовательских приложений и собственно программный продукт ЛИУС);

значительно снижаются текущие затраты на обслуживание прикладных и системных программных приложений (совокупная стоимость владения — ТСО);

затраты, связанные с приобретением программного продукта, заменяются арендой программного продукта, которая ниже затрат на их приобретение;

снижается нагрузка на ИТ — персонал Заказчика; в целом сокращаются расходы на ИТ — обеспечение инновационной деятельности, а высвобожденные средства можно использовать на другие направления и проекты;

минимизируются риски в инновационном бизнес-процессе.

По мнению автора [25], облачные вычисления позволяют создавать Web-ориентированные лаборатории в конкретных предметных областях (объединение современных концепций Web 2.0 с возможностью доступа к прикладным моделям): интерактивный доступ к инструментам моделирования; поддержка распределенной разработки (система контроля версий, инструмент управления проектами и отслеживания ошибок); механизмы добавления новых ресурсов; информационные ресурсы (wiki, презентации и др.); поддержка пользователей; визуализация результатов и др. Для организации доступа удаленных пользователей к информационным ресурсам используется VPN-подключение, что позволяет повысить безопасность передачи данных и использовать такие лаборатории не только в научных целях, но и для контроля технологий.

Интеллектуализация лабораторного программного обеспечения

В работе [26] подчеркивается, что трансформация накопленного за полтора века опыта в атомной спектроскопии, математике и кибернетике в информационные модели управления, включающие элементы искусственного интеллекта и адекватно описывающие процессы в дуговом разряде, а также последующая реализация таких моделей в коммерческих программных продуктах способны сегодня изменить положение в дуговой атомно-эмиссионной спектрометрии.

Человеческий фактор неизбежно вносит ошибки в рутинные операции [27, 28]. В связи с этим повышение автоматизации и интеллектуальной составляющей оборудования становится важной задачей, которую необходимо решать на фоне динамичного развития компьютерной техники.

Однако мечты о полной автоматизации гигантского технологического комплекса, например, металлургического производства, остались в прошлом. Человек (диспетчер) является незаменимым координатором для решения оперативных задач. Поэтому довольно популярной стала аббревиатура СППР — Система поддержки принятия решений. Сегодня с развитием SCADA-пакетов проблем с получением и визуализацией информации нет; проблема есть, скорее, с ее осмыслением [19].

Авторы работы [9] на основании опыта внедрения ЛИУС «Химик-Аналитик» отмечают, что пользователи программного обеспечения нуждаются в квалифицированной помощи. Поэтому в пакет поставки включена услуга обучения на территории Заказчика или Исполнителя. Немаловажным вопросом является вы-

бор между проведением обучения на рабочем месте либо с отрывом от производства. Оба варианта имеют свои положительные стороны, в частности, приезд специалиста позволяет обучить нескольких сотрудников, зачастую из нескольких лабораторий, что значительно повышает вероятность успешного внедрения. Выезд на территорию Исполнителя интересен тем, что сотрудник полностью сосредотачивается на освоении программного обеспечения. В связи с этим разработчики ЛИС «Химик-аналитик» для внутрилабораторного контроля решают задачу создания СППР для выбора варианта и плана контроля на определенный период времени. Реализация функций СППР в ЛИС позволит позиционировать ее как интеллектуальную систему, которая поможет специалисту принимать решение, базирующееся на глубоком понимании ситуации [9].

Кроме задач контроля качества измерений, предметом применения технологий искусственного интеллекта может служить построение градуировочной функции методик. Метод анализа, применяемый в АСАК, должен быть обеспечен унифицированными методическими и программными средствами. Весьма перспективным методом для использования в АСАК является рентгенофлуоресцентный анализ (РФА), который широко внедряется в аналитическую практику предприятий черной и цветной металлургии. РФА обладает развитой теорией и для решения задач традиционно привлекает аппарат математического моделирования, математическую статистику, теорию планирования эксперимента, что дает возможность использования его в структуре АСАК. Методологические основы для таких разработок заложены еще в 70-е годы в работах Иркутской школы РФА [29, 30].

Часто поставляемые на предприятия аналитические комплексы заранее сконфигурированы для решения конкретной аналитической задачи. Решение каждой новой аналитической задачи требует обращения в фирму-разработчика аналитического комплекса. Вместе с тем методические исследования в полном объеме можно выполнять на производстве, имея доступ к моделирующим (МП) и оптимизирующим программам (ОП). Характерной особенностью МП является то обстоятельство, что для решения одной и той же вычислительной (формализованной) задачи часто могут быть выбраны различные численные алгоритмы. Как правило, они отличаются спецификой численных методов, детализацией математического описания рассчитываемых процессов и нюансами постановки вычислительных задач.

Опыт внедрения такого программного обеспечения показал, что даже при открытом описании вычислительных алгоритмов их реализация на практике требует высокой квалификации методиста и не всегда обеспечивает желаемый результат. Целесообразно использовать методы искусственного интеллекта для поддержки принятия решений инженером-методистом

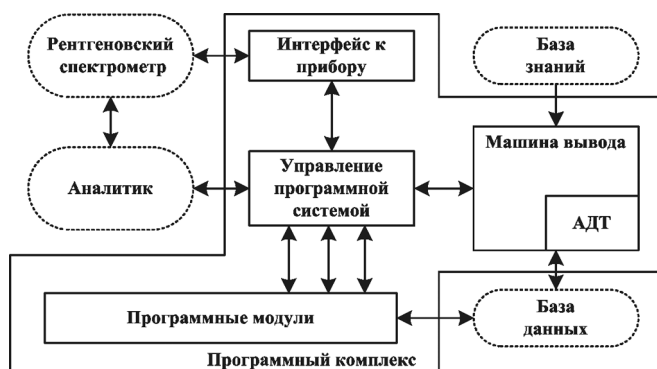


Рис. 1. Архитектура и схема взаимодействия модулей программного комплекса автоматизации планирования методики анализа вещества в РФА

в процессе разработки методик аналитического контроля. Можно предложить использовать экспертную систему (ЭС), позволяющую автоматически выполнить построение градуировочной функции методики анализа, основываясь на знаниях экспертов в области РФА. В работе [31] перечислены задачи РФА, подлежащие решению методами искусственного интеллекта: формализация трудноформализуемых приемов; автоматический контроль состояния прибора и действий аналитика; разработка обучающих программных систем. Авторами этой работы предложена архитектура локального программного комплекса автоматизации планирования методики РФА химического состава вещества (рис. 1).

Предполагается, что методика анализа включает:

- выбор СО;
- выбор условий съемки;
- регистрацию импульсов аналитических линий;
- учет взаимных влияний элементов;
- выбравку данных по образцам для построения калибровочного уравнения;
- построение калибровочного уравнения;
- оценку метрологических характеристик результатов анализа.

Здесь же приведен тестовый пример анализа неизвестного образца горных пород на спектрометре СРМ25. В базу знаний введено шесть правил, реализующих несколько неформальных аналитических приемов. Сложность таких проектов состоит в высокой трудоемкости наполнения базы знаний и требовании высокой квалификации экспертов, а также необходимости разработки технологии интеграции с моделирующими программами. ЭС остаются весьма сложными, дорогими, а главное, узкоспециализированными, что сдерживает их более широкое распространение.

Стоимость внедрения и эксплуатации в режиме консультации интегрированных ЭС можно существенно снизить за счет коллективного доступа конечных пользователей к базам знаний и данных посредством Web-технологий. Как отмечалось, наиболее перспек-

тивной является «рассеянная» («облачная») обработка данных — технология обработки данных, в которой компьютерные ресурсы и мощности предоставляются пользователю как Интернет-сервис. Пользователь имеет доступ к собственным данным, он не должен заботиться об операционной системе и программном обеспечении, с которым работает. Разрабатываемое для этих целей программное обеспечение и модели представления знаний не могут уже оставаться узкоспециализированными. В связи с этим актуальным становится поиск путей интеграции ЭС и МП [28]. Эта возможность реализуется с помощью интегрированных (гибридных) ЭС. Гибридизация — это создание новых информационных моделей за счет сочетания разнородных технологических элементов. Гибридные ЭС представляют программный комплекс, агрегирующий стандартные пакеты прикладных программ (ППП) и средства манипулирования знаниями.

В ИрГУПС разрабатывается оболочка для создания гибридной экспертной системы [32 – 36]. Экспертная система обучения основам применения математических моделей возбуждения интенсивности рентгеновской флуоресценции через сеть Интернет может быть использована сотнями специалистов на предприятиях промышленности при разработке методик анализа. При установке на корпоративный сервер ЭС интегрируется в архитектуру АСАК.

Архитектура интеллектуальной АСАК как WEBSCADA-системы

На рис. 2 представлена архитектура Web-ориентированной ЭС, интегрированной в подсистему контроля химического состава продукта АСАК в качестве облачного сервиса, доступного через сеть Internet/Intranet. Пользователями сервиса являются инженеры-методисты, работающие в режиме консультации и предоставляющие данные для инженеров-аналитиков. Основными компонентами интегрированной ЭС являются: подсистема интеллектуального Web-интерфейса с пользователем; база знаний (БЗ); база данных (БД); машина логического вывода CLIPS; интерфейс с ППП; Web-сервер; клиентское приложение (Web-браузер); ППП.

Подсистема интеллектуального Web-интерфейса с пользователем [34, 35] выполнена в виде унифицированной оболочки и имеет двухуровневую архитектуру, состоящую из следующих модулей:

- обозреватель базы знаний CLIPS (агрегирует подсистему активации БЗ, подсистему объяснений и подсистему для работы пользователя в режиме консультации);

- редактор базы знаний CLIPS (позволяет создавать и редактировать шаблоны концептов для отображения декларативных знаний и шаблоны для описания процедурных знаний о предметной области).

Каждая из подсистем имеет доступ к одной и той же БД, в которой хранятся шаблоны языка CLIPS,

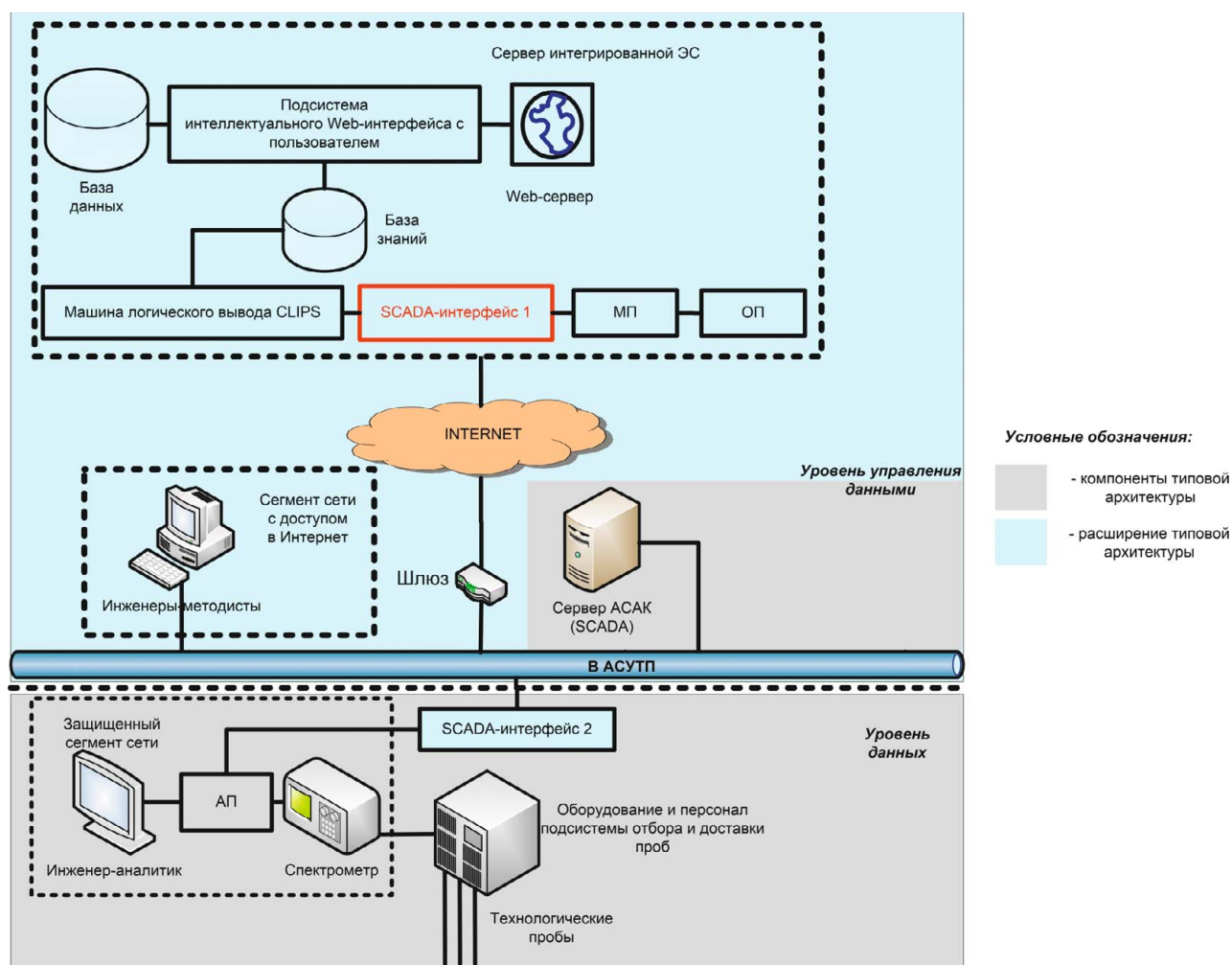


Рис. 2. Архитектура интеллектуальной АСАС как WebSCADA-системы

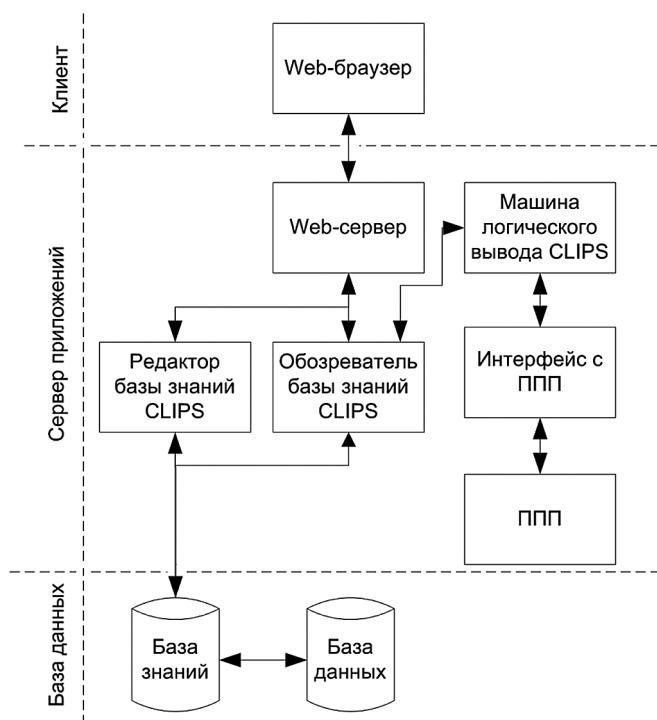


Рис. 3. Трехуровневая архитектура Web-ориентированной интегрированной ЭС

а также объекты, представляющие собой данные, введенные пользователем для активации конкретной ЭС (рис. 3).

Предложена технология интеграции ЭС и ППП на основе внешней программы-демона в контексте облачных вычислений [36], играющей роль SCADA-интерфейса.

В ЭС интегрирован ППП, выполняющий математическое моделирование процессов взаимодействия рентгеновского излучения с веществом, написанный на языке TurboPascal для операционной системы MS-DOS [37]. Данный ППП был внедрен в структуру АСАС Челябинского металлургического комбината ОАО «Мечел» и выполнял следующие функции: разработка методик, проведение анализа и оценка метрологических характеристик.

Для запуска на Web-сервере ППП, написанного под ОС MS-DOS, используется виртуальная машина DOSBox. Прикладной пакет позволяет моделировать теоретические интенсивности рентгеновской флуоресценции для гомогенных материалов по алгоритму [38] и использовать их для расчета α -коэффициентов, учета фона, оценки качества образцов сравнения [39 – 41]. В тестовом режиме технология проверена на

примере расчета теоретической интенсивности для CrK α -линии в образцах легированных сталей.

Разработанные технологии и программную систему можно использовать в различных естественно-научных областях.

Таким образом, рассмотрены примеры информационных систем, соответствующие трем направлениям компьютеризации аналитических лабораторий в классификации В. И. Дворкина. Выделены тенденции развития и перспективные технологии (интеграция в структуру КИС, использование сетевых технологий, применение методов искусственного интеллекта), общие для лабораторного программного обеспечения. Показано, что ЛИУС несмотря на их высокую сложность и стоимость все более широко используются для менеджмента качества производства и автоматизации аналитического контроля в АСУ ТП.

С точки зрения применения выделенных технологий АСАК рассмотрена как SCADA-система. Для интеллектуализации АСАК предложено использовать ЭС. В качестве наиболее перспективной отмечается «рассеянная» («облачная») обработка данных — технология обработки данных, в которой компьютерные ресурсы и мощности предоставляются пользователю как Интернет-сервис. Разработаны технологии и прототипы информационного и алгоритмического обеспечения интеллектуальной АСАК в контексте рассеянной обработки данных для повышения эффективности аналитического контроля состава технологических продуктов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Янин А. М. Обзор отечественного рынка ЛИУС. Школа-семинар «ЛИС, их роль в обеспечении контроля качества» / Тезисы докл. — Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2008. С. 48 – 55.
2. www.lib.tpu.ru/fulltext/m/2007/m8.pdf.
3. Дворкин В. И. Компьютеризация при построении системы обеспечения качества аналитических лабораторий: современное состояние и перспективы. XVIII Менделеевский съезд по общей и прикладной химии. Тезисы докл. 23 – 28 сентября 2007 г. — Москва. С. 23 – 28.
4. Дворкин В. И. Новое в метрологии и обеспечении качества химического анализа. XVIII Менделеевский съезд по общей и прикладной химии / Тезисы докл. 23 – 28 сентября 2007 г. — Москва. С. 19 – 22.
5. Дворкин В. И. Компьютеризация при построении системы обеспечения качества аналитических лабораторий: современное состояние и перспективы / Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2008. Т. 74. № 12. С. 17 – 18.
6. Замятин Н. В., Замятин Д. Н., Русановский А. С. Лабораторная информационно-управляющая система нефтехимического назначения. Школа-семинар «ЛИС, их роль в обеспечении контроля качества» / Тезисы докл. — Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2008. С. 28 – 32.
7. Русановский А. С., Русановская А. И. Лабораторная информационная система контроля сточных вод. Школа-семинар «ЛИС, их роль в обеспечении контроля качества» / Тезисы докл. — Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2008. С. 107 – 110.
8. <http://www.avrora-it.ru/content/articles/index.php?article=2628>
9. Терещенко В. А., Толстихина Т. В. ЛИС «Химик-аналитик» для внутрилабораторного контроля. Школа-семинар «ЛИС, их роль в обеспечении контроля качества» / Тезисы докл. — Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2008. С. 37 – 42.
10. <http://www.labware.ru/articles.html>
11. Зайцев В. А., Макарова Т. А., Барков А. В., Бахтияров Л. Н., Москвин Л. Н. Рентгенофлуоресцентный анализ полиметаллических руд и их переделов в системе автоматического контроля качества / Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2007. Т. 73. № 4. С. 3 – 11.
12. Молчанова Е. И., Смагунова А. Н., Щербаков И. В. Особенности матричной коррекции при рентгенофлуоресцентном анализе проб с широкими вариациями состава / Журнал аналитической химии. 2011. Т. 66. № 9. С. 940 – 946.
13. Проценко А. А., Потарин А. Е., Проценко И. А. Лабораторная информационная система SampleManager / Автоматизация в промышленности. № 10. 2009. С. 22.
14. Бондаренко А. В. Создание АСАК процессов обогащения руд — актуальное направление деятельности аналитического центра ЗАО «НПО «РИВС» / Научно-практическая конференция РИВС. — Изд-во ИД «Руда и металлы». 2010. С. 44.
15. Хмара В. В. Основы теории и практика создания автоматизированных систем аналитического контроля состава продуктов предприятий цветной металлургии: дисс. ... д-ра техн. наук. — Владикавказ, 2006. — 316 с.
16. <http://www.scma.ru/ru/products/5.html> — Автоматизированные комплексы и системы различного назначения ОАО «Союзцветметавтоматика».
17. Сафьянов А. С. Интеграция ЛИУС «Химик-аналитик» с приборами аналитического контроля и программно-техническими средствами. Школа-семинар «ЛИС, их роль в обеспечении контроля качества» / Тезисы докл. — Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2008. С. 55 – 59.
18. Сафьянов А. С., Щелканов С. В., Юнак А. Л., Янин А. М. Место, перспективы и роль ЛИУС в структуре КИС предприятия. Школа-семинар «ЛИС, их роль в обеспечении контроля качества» / Тезисы докл. — Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2008. С. 59 – 67.
19. Казанский Д. Л. Диспетчеризация и АСУ ТП на металлургических предприятиях / Рациональное управление предприятием. 2007. № 5. С. 28 – 30.
20. Гартман Т. Управление производством: моделирующая программа ChemCad / Chem. J. 2002. N 2. С. 44 – 46.
21. Андреев Е. Б., Куцевич Н. А., Синенко О. В. SCADA-системы: взгляд изнутри. — М.: РТСОфт, 2004. — 176 с.
22. Сафьянов А. С., Юнак А. Л. Состояние проблемы и тенденции развития ЛИУС как отражение эволюции технических и программных средств автоматизации информационных процессов. Школа-семинар «ЛИС, их роль в обеспечении контроля качества» / Тезисы докл. — Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2008. С. 19 – 22.
23. Сафьянов А. С., Терещенко В. А., Щелканов С. В., Юнак А. Л., Янин А. М. ЛИУС «Химик-аналитик» в облаках всемирной паутины. Школа-семинар «ЛИС, их роль в обеспечении контроля качества» / Тезисы докл. — Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2008. С. 161 – 167.
24. Селюнин Д. О., Бабин С. А., Лабузов В. А. Высокоскоростные анализаторы МАЭС с интерфейсом Gigabit Ethernet / Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2012. Т. 78. № 1. С. 39 – 43.
25. Иваницков В. П. Облачные вычисления в образовании, науке и госсекторе / «Пленарные доклады пятой международной конференции, параллельные вычисления и задачи управления». — Москва, Изд-во Института проблем управления им. В. А. Трапезникова, 2010.

26. **Васильева И. Е., Шабанова Е. В.** Дуговой атомно-эмиссионный анализ для исследования геохимических объектов / Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2012. Т. 78. № 1. С. 14 – 28.
27. **Семенов З. В., Неклюдов О. А., Строков И. И.** Автоматизация атомно-эмиссионного спектрального анализа с использованием видеоконтроля / Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2012. Т. 78. № 1. С. 78 – 81.
28. **Береза А. С., Прохоров В. П., Прохоров А. В.** Концепция развития функций SCADA-системы TRACE MODE на основе технологии экспертных систем принятия и исполнения решений / ИСУП. 2005. № 1(5). С. 30 – 39.
29. **Смагунова А. Н., Лосев Н. Ф., Ревенко А. Г., Межевич А. Н.** Обобщенная схема разработки методики рентгеноспектрального анализа / Заводская лаборатория. 1974. Т. 40. № 12. С. 1461 – 1465.
30. **Павлинский Г. В., Величко Ю. И., Ревенко А. Г.** Программа расчета интенсивностей аналитических линий рентгеновского спектра флуоресценции / Заводская лаборатория. 1977. Т. 43. № 4. С. 433 – 436.
31. **Черкашин Е. А., Черкашина Т. Ю., Худоногова Е. В.** Технология построения интеллектуального программного обеспечения автоматизации планирования методики рентгенофлуоресцентного анализа / Аналитика и контроль. 2002. Т. 6. № 4. С. 454 – 462.
32. **Молчанова Е. И., Носков С. И., Китов Б. И.** Проектирование и создание экспертной системы для описания процессов взаимодействия рентгеновского излучения с веществом / Компьютерное моделирование 2005: Труды VI Международной научно-технической конференции. — СПб.: Изд-во Политехнического университета, 2005. С. 310 – 314.
33. **Молчанова Е. И., Федоров В. В., Щербаков И. В.** Подход к проектированию Web-ориентированных гибридных экспертных систем / Системы управления и информационные технологии. 2011. Т. 45. № 3. С. 80 – 86.
34. **Федоров В. В., Молчанова Е. И.** Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ № 2010613396. Оболочка управления экспертной системой на базе Clips; правообладатель Иркутский государственный университет путей сообщения. — № 2010613396; заявлено 29.12.2009, зарегистрировано 23.02.2010.
35. **Федоров В. В., Молчанова Е. И.** Свидетельство об официальной регистрации базы данных SMCLIPS № 2010620140; правообладатель Иркутский государственный университет путей сообщения. — № 2010620140.
36. **Щербаков И. В., Молчанова Е. И.** Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ. № 2011615348. Объектно-ориентированное расширение языка экспертных систем CLIPS; правообладатель Иркутский государственный университет путей сообщения. — № 2011615348, заявл. 13.05.2011; опубл. 08.07.2011.
37. **Молчанова Е. И., Смагунова А. Н., Прекина И. М.** Программная оболочка для проведения РФА на аналитическом комплексе СРМ-25-IBM / Аналитика и контроль. 1999. № 2. С. 38 – 43.
38. **Финкельштейн А. Л.** Развитие моделей возбуждения рентгеновской флуоресценции для разработки методик рентгенофлуоресцентного анализа гомогенных и гетерогенных сред: автореферат дис. ... доктора техн. наук. — Иркутск. 2006. — 40 с.
39. **Смагунов А. В., Молчанова Е. И., Поспелов А. Л., Устинова В. И.** Изучение зависимости интенсивности линий рентгеновского спектра от микроструктуры сталей / Журнал аналитической химии. 1994. Т. 49. № 3. С. 623 – 626.
40. **Смагунова А. Н., Молчанова Е. И., Усова Е. Р.** Учет фона при рентгенофлуоресцентном определении малых содержаний элементов в сталях / Журнал аналитической химии. 1987. Т. 42. № 10. С. 1797 – 1807.
41. **Молчанова Е. И., Обольянинова В. Г., Берковиц Л. А., Смагунова А. Н.** Использование стандартных образцов для градуировки при рентгенофлуоресцентном анализе осадочных отложений / Журнал аналитической химии. 1995. Т. 50. № 3. С. 253 – 257.