

ARTICULOS TECNICOS

LA EVOLUCIÓN DE LOS SISTEMAS DE DATOS CROMATOGRÁFICOS (CDS) COMO SOPORTE ANALÍTICO

La evolución de los Sistemas Cromatográficos.

Esta nota ha sido desarrollada por Soluciones Analíticas

SA Soluciones Analíticas

Arias 2442 (C1429DXP)
CABA
Tel.: 011-4704-0865
info@sol-analiticas.com
www.sol-analiticas.com

Los avances tecnológicos en instrumental analítico no se detienen. Requerimientos cada vez más exigentes en hardware deben ser acompañados por un software capaz no únicamente de controlarlo, sino, y aún más importante, de ser una herramienta con la capacidad de asistir al usuario en los procesos de adquisición y análisis de datos, reportar resultados, interconectarse con otras herramientas informáticas, automatizar trabajos de rutina y cumplir con políticas de calidad. Si, además de tener todas esas características, las ejecuta en forma simple, veloz e intuitiva, pasa de ser una herramienta a convertirse en un aliado imprescindible.

CONTROL DE INSTRUMENTOS MEDIANTE SISTEMAS DE DATOS CROMATOGRÁFICOS

La historia del control de instrumentos mediante los sistemas de datos cromatográficos (CDS, por sus siglas en inglés: *chromatography data system*) se remonta al desarrollo de la computadora personal (PC) a principios de la década de 1980, que llevó a la introducción de CDS basados en PC (Figura 1). Operativamente, fueron similares a los integradores basados en microprocesadores creados en la década de 1970, pero la diferencia radicó en que, con la PC, los archivos de datos de todas las inyecciones de una secuencia estaban disponibles para su reprocesamiento. La adquisición de datos de cualquier ins-

trumento solo era posible a través de la conversión de la señal de salida analógica a una señal digital que podía ser leída por los CDS (conversión A/D). Esta conversión A/D permitía el registro de un solo canal de datos del instrumento y no cubría el control del instrumento en absoluto.

Con el aumento de rendimiento en las PC se hizo más asequible para los fabricantes incluir el control de instrumentos, además de herramientas de visualización de datos y procesamiento. Aun así, los CDS solo eran capaces del control digital de instrumentos que hubieran sido provistos por el mismo fabricante y estaban limitados a un cromatógrafo por PC. Con el tiempo se amplió el control a múltiples instrumentos por PC, aunque continuaban suscriptos a un único fabricante. Este tipo de instalación fue denominada Workstation (Figura 2).

Comúnmente los laboratorios han tenido siempre una gran variedad de cromatógrafos de diferentes fabricantes. Mediante el uso de Workstations con diferentes CDS se multiplicaban los problemas relacionados con las diferencias inherentes a cada marca para el manejo de datos, la capacitación, la validación y los cumplimientos regulatorios. La única manera de reducir el número de CDS diferentes era utilizar la conversión A/D para crear una señal digital que pudiera ser leída por el CDS elegido,

y ceder el control de los instrumentos para duplicar así la cantidad de procesos para una misma tarea, con los problemas, fundamentalmente, de fluctuación de los picos, exceso de ruido y una completa falta de trazabilidad.

Los avances de las PC en la década de 1990, combinados con mejores estándares de velocidad de transmisión de datos, permitieron el uso de CDS a través de redes. Con el uso de características en red de tipo cliente/servidor, se logró aislar físicamente el control de instrumentos del manejo de datos; esto brindó más seguridad al sistema y los datos adquiridos, y permitió cumplir directrices regulatorias, lo que facilitó la tarea de resguardo de datos (*backup*), control de permisos de usuarios, centralización de métodos y reportes. Todo lleva al aumento de productividad dependiente de los tiempos que se ahorra en la elección de un CDS eficiente.

DEMANDA ESTABLECIDA DE CONTROL DE INSTRUMENTOS MULTIVENDEDOR

Con la creciente adopción de configuraciones diferentes dentro de una misma compañía, la vinculación rígida entre instrumentos y CDS comenzó a erosionarse. Algunos proveedores empezaron a centrarse en el desarrollo de soluciones eficientes en CDS, mientras que otros solo atendían el desarrollo de sus instrumentos.



Distintos fabricantes de instrumentos, sin la capacidad de desarrollo de software, comenzaron a confiar el control de aquellos a un CDS que los contuviera. Algunos proveedores de CDS vieron sus productos como una real oportunidad por la importancia vital de estos para el óptimo desarrollo de los laboratorios de cromatografía, y dieron soporte a instrumentos de terceros (control de múltiples proveedores).

En un principio, los beneficios de la gestión de datos centrales, y su almacenamiento, daban una solución mediante conversores A/D para la adquisición de datos de instrumentos de terceros. Pero con el lanzamiento de la norma 21 CFR part 11 de la Food and Drug Administration de los Estados Unidos (FDA), en 1997, el control digital de los cromatógrafos pasó a ser imprescindible.

tecnoequipar

• Amoblamiento para laboratorios

• Campanas extractoras de gases

• Mesas antivibratorias

• Drogueros



www.tecnoequipar.com.ar • ventas@tecnoequipar.com.ar • Carlos Gardel 1865 • Olivos • (011) 4799-1883



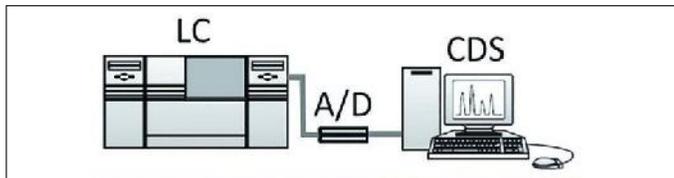


Figura 1: Los primeros CDS: recopilación de datos sin control instrumental.

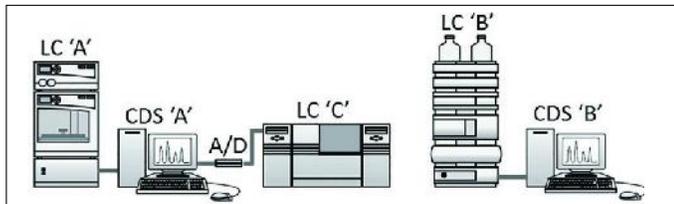


Figura 2: Workstation CDS para distintos cromatógrafos.

Mediante estos cambios, pocas compañías proveedoras de CDS apostaron al desarrollo de sus plataformas para cubrir los requerimientos de los laboratorios. Y solo unos pocos pudieron hacerlas, además, potentes, sencillas y de soporte continuo.

En 1993 se introdujo el primer sistema de datos de cromatografía disponible en el mercado mundial, GynkoSoft, ahora en venta bajo la marca Chromeleon CDS. Esta fue la primera solución CDS que proporcionó un control digital de todos los instrumentos de los principales proveedores de terceros.

Con la probada factibilidad para el control digital de instrumentos de terceros, Chromeleon CDS se estableció como el líder del mercado en el control de instrumentos de múltiples proveedores, capaz de controlar más de 540 módulos propios y de 25 fabricantes diferentes, como todo buen CDS "deber ser". Ver Figura 3.

Con el paso del tiempo, se desarrollaron controladores (drivers) con funciones simples para el control de equipos de terceros. Luego, acuerdos entre marcas lograron que los fabricantes de instrumentos utilizaran las herramientas de desarrollo cedidas por Chromeleon CDS, con paquetes de programación, para que pudieran ofrecer mejores

prestaciones a sus usuarios con control de instrumentos de terceros.

La calidad de todos los controladores está garantizada por los procedimientos de certificación y validación. Todos los nuevos controladores deben cumplir con los requisitos del proceso de certificación y pasar una serie de pruebas de validación antes de la aceptación y su inclusión en Chromeleon CDS.

EL CDS COMO HERRAMIENTA FUNDAMENTAL

Lo que uno esperaría de un sistema de datos de cromatografía, que pasó de ser una herramienta más a una fundamental, no debería ser más que pocas cuestiones sencillas: desde un mero sistema contenedor de datos hasta uno que debiera solucionar los requerimientos de control de equipos de diferentes proveedores, adquisición de datos, generación de cálculos y resultados, seguridad informática y trazabilidad.

El control instrumental

En la actualidad los laboratorios van en búsqueda de soluciones instrumentales modernas y acordes a sus demandas. En muchas oportunidades no se encuentran todas esas soluciones en un mismo proveedor, o el desarrollo de unos es inferior a otros. Esto último provoca que quede supeditada la toma de decisión al sistema

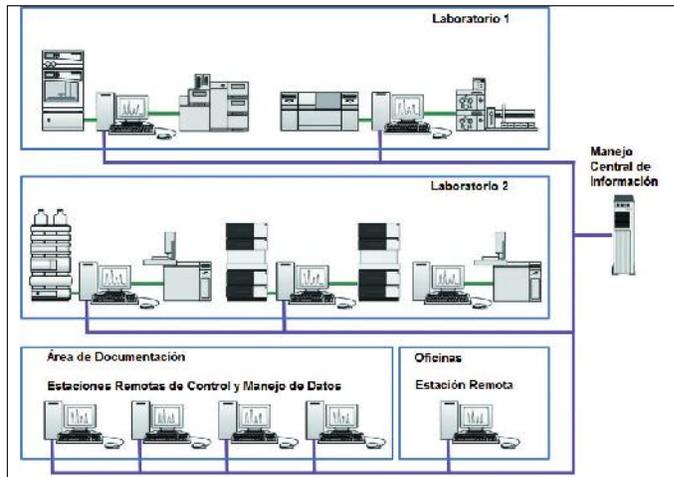


Figura 3: El CDS cliente/servidor con el control de instrumentos de múltiples proveedores.

CDS actual, que puede no ofrecer un control de instrumento de terceros, lo que lo deja cautivos de la adquisición de una única marca que puede no cumplir con todos los requisitos, o hacerlo en menor medida.

Un CDS no debería condicionar la futura búsqueda de nuevos sistemas cromatográficos, independientemente de la marca, y debería poder brindarse como solución de control y posterior manejo de datos.

Un sistema ideal para el control es aquel que brinde las condiciones, el ámbito de control, a través de configuraciones no estáticas, sino por el contrario, con posibilidades de personalizar la interface según la demanda del usuario final. Esta situación permitiría encontrarse, en el menor tiempo posible, con laboratorios funcionales en plazos muy breves de aprendizaje y administración.

Adquisición, procesamiento y reporte de datos: como un proceso y no un reproceso

En la mayoría de los análisis, se considera el procesamiento de los datos adquiridos como un proceso (y reproceso) tedioso, difícil, artesanal. Se toman estos como parte importante de la labor analítica, y se resta ese valioso tiempo a los verdaderos

procesos que se requiere abordar. Un CDS debe poder realizar esto como tareas simples, de pocos pasos, con posibilidad de adecuarlas fácilmente a situaciones especiales, y no en paquetes cerrados y rígidos. El punto central no es cuánto podamos hacer con nuestro CDS, sino lo que este puede hacer por nosotros sin intervenciones, y si puede llevarnos desde las muestras al resultado en forma simple. La posibilidad de personalizar libremente nuestro sistema facilita la comprensión del usuario final, y minimiza los costos en capacitación y puesta en uso del CDS en plazos cortos, sin afectar el funcionamiento del laboratorio.

Cuando la tendencia a la productividad es la meta, no solo se requieren de herramientas de verificación de adecuación (System Suitability Test – SST), sino funciones inteligentes para resolver las posibles desviaciones en forma certera y acciones dependientes a los resultados, no limitándose a un único caso, sino a la totalidad del sistema. La autonomía en la toma de estas acciones brindará la posibilidad de evitar incurrir en repeticiones de análisis, ocupando nuestros sistemas cromatográficos innecesariamente con su consecuente disminución productiva.

LAMPARAS ORIGINALES
Heraeus Cathodeon

CATODO HUECO
 AA Varian, Shimadzu, Perkin Elmer, etc.

DEUTERIO
 UV/VIS, HPLC todas las marcas.

MERCURIO
 Fotoquímica, Curado UV.

FLASH
 LASER Industrial.

novolab

Zabala 3195 (1426) C.A.B.A. - Argentina - Tel.: 011 4554-4648
 Fax: 011 4555-5255 - e-mail: lamparas@novolab.com.ar

Equipos de Flujo Laminar

Equipos de banco, horizontales y verticales.

De bajo nivel sonoro y ausencia de vibraciones.

También desarrollamos Equipos Modulares para instalaciones que requieran amplias superficies de Flujo Laminar.

casiba
 Somos aire óptimo.

Av. Bmé Mitre 3976 (B1678AUX) Caseros, Prov. de Buenos Aires, Argentina
 (+5411) 4750.0051
www.casiba.com.ar

Seguridad y cumplimiento

Un CDS es parte fundamental de la generación de resultados críticos para los laboratorios; como tal debe ser, en un todo, confiable, seguro y trazable. En muchos casos llegar a este grado de cumplimiento significa adquirir conocimientos para la administración del sistema, que podrían no ser nada sencillos, o permitir la intervención de proveedores en nuestros laboratorios, con un coste extra del planeado en su adquisición. Un CDS pensado para el ámbito de los laboratorios debe estar orientado a la simplicidad, incluso, para el cumplimiento de normas de seguridad informática y su administración, y no debe dejar posibilidad alguna de incumplirlas por tratarse de sistemas con tediosas aplicaciones simultáneas.

Un sistema confiable es aquel que nos confiere herramientas para su validación, de forma accesible, sin requerir intervenciones manuales ni operadores externos, de manera que podamos asegurar en cualquier momento el estado de nuestro CDS, tanto para el *software* como para el *hardware* instrumental asociado. Se trata de llevar adelante procesos documentables y trazables.

Universalidad

Una característica que avanza cada día más es la tendencia a eliminar procesos manuales, y la generación de reportes y datos "sin papeles", confiando la administración de nuestros datos a sistemas de manejo de información de laboratorios (*laboratory information management system-LIMS*). Al igual que en el control de sistemas cromatográficos, todo buen CDS debe permitir

el flujo desde y hacia sistemas LIMS con protocolos de comunicación universales, no dependientes de una compañía.

COSTOS. INVERSIÓN QUE PERDURE Y SE MANTENGA

En el momento de implementar un Sistema de Control Cromatográfico no puede pasarse por alto los costos. Una concepción errónea sería solo tomar el costo de la inversión en la adquisición del sistema. Hay costos de implementación, capacitación y puesta en marcha que pueden sobrepasar el valor supuesto en los planes iniciales, ya sea por complejidad para su instalación, validación y familiarización a los usuarios y administradores.

Un CDS será una herramienta que nos acompañará por largos años cuando este sea continuamente desarrollado y mantenido por sus fabricantes, a fin de poder absorber nuevos desafíos tecnológicos, sin perder vigencia y adoptando nuevas funcionalidades.

Mantener un sistema actualizado y validado no debería de ser un costo significativo. Acompañado por eficientes módulos de calificación, que cumplan con los requisitos de inviolabilidad normativa, el proceso de calificación periódica del software tiene que ser simple a fines que no requiera de intervención especializada de terceros, con sus respectivos costes. La actualización de los sistemas operativos hoy forma parte de una constante en la informática y se debe acompañar esta tendencia con un soporte del proveedor de CDS's tal que esto no implique su caducidad y una reinversión. Todo el costo de la inversión inicial será

prontamente amortizado por el sistema capaz de aumentar la productividad del laboratorio, sea por la facilidad de su uso en el control de equipos o por la posibilidad de generar resultados sin intervenciones excesivas (o el uso de herramientas externas como planillas de cálculos).

EL FUTURO DE LOS SISTEMAS DE DATOS CROMATOGRÁFICOS

Basado en funcionalidad inteligente con Simplicidad Operacional (Operational Simplicity™), Thermo Dionex Chromeleon CDS, con más de 20 años de desarrollo continuo, brinda un nuevo estándar de trabajo.

Potente y seguro, permite el control de instrumentos de terceros y propios, no limitando a los laboratorios la elección de las soluciones en equipamiento cromatográfico en una única marca, sino dando la libertad de optar por la más eficiente sabiendo que su actual sistema puede controlarla. Optimizando los recursos de los laboratorios el proceso de adecuación de los cromatógrafos pasa a manos de Chromeleon CDS (Smart Startup, Smart Standby, Smart Shutdown) facilitando el encendido, estabilización, apagado y cuidado de aquellos, sin la intervención o asistencia del usuario en forma inteligente.

Aumentando la productividad mediante la automatización en la generación de secuencias preestablecidas (eWorkflows) se elimina la recurrencia en operaciones cotidianas. Manejo de datos seguros y en forma veloz, con herramientas de integración dinámicas (Cobra Wizard, Smart Peak) y procesamiento inmediato. Una nueva concepción en la obtención de los resultados fuera de la tediosa tarea de <reprocesar> datos de forma innecesaria, Chromeleon CDS demuestra su potencial acercándole instantáneamente los valores en cada acción que se ingrese, pudiendo revertirla con la misma facilidad. Acceso a información en forma intuitiva y personalizable, permitiendo, en forma visual y gráfica, la obtención de resultados y sus reportes o envío a sistemas asociados (ej. LIMS). Robustas y validadas herramientas de análisis liberan las tareas de cuantificación para numerosas formas de cálculo, evitando el traspaso de datos,



Figura 5: Control de instrumentos y procesamiento de datos GCMS.

uso de planillas, revisiones y verificaciones extras. Ver Figura 4.

Administración intuitiva y simple permite gestionar usuarios, grupos, laboratorios, permisos y roles, dándole a cada usuario solo las herramientas que requiere y evitando tediosos procesos para quien no los necesita.

Seguridad para sus datos, bajo el control de bases de datos (SQL Server – Oracle) administra en forma segura y sin conocimientos avanzados el resguardo de su información tan valiosa. Escalando desde un sistema simple tipo Workstation a grandes redes. Asegura la mayor trazabilidad posible mediante múltiples accesos según lo requiera, "quién, cómo y cuándo" ha realizado una modificación en cualquier objeto de su sistema. Real cumplimiento de las normativas CFR 21 Part 11 y Section 508 (Electronic and Information Technology Accessibility Standards) aseguran la confiabilidad de los resultados de su laboratorio. Un software para sistemas analíticos y de concepto abierto para la amplia variedad de laboratorios que lo emplean, incluso el control y procesamiento de datos de espectrometría de masas. Ver Figura 5.

La visión de sistemas CDS como un desafío engorroso al control y manejo de nuestra principal herramienta analítica (cromatógrafos), es parte del pasado. Chromeleon CDS ha finalizado con el paradigma de softwares complejos y especializados para convertirse en un aliado en la obtención de resultados confiables y trazables, en forma intuitiva y como apoyo en los procesos de desarrollo y controles de procesos y calidad. ■

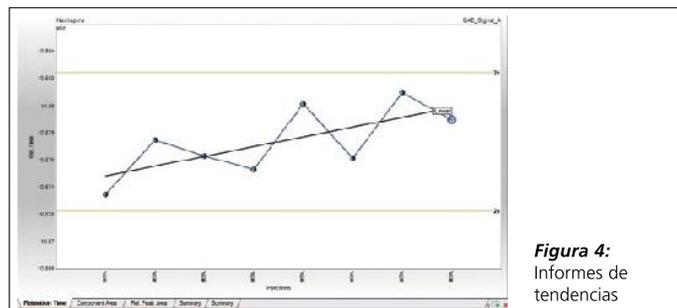


Figura 4: Informes de tendencias

Agujas dañadas
Inconsistencia de volumen
Evaporación
Pérdida de muestras
Contaminación

Use Viales, Tapas y Septa Agilent

Agilent Technologies
Distribuidor Autorizado

● **Gran variedad de Viales, Tapas y Septa**

- De Vidrio, Vidrio Silanizado y Polipropileno.
- Transparentes y Ámbar.
- Diferentes Capacidades y Formatos.
- Tapas multicolores a Rosca, a Presión y para Crimpar.

● **Viales Certificados Agilent**

- Controlados estrictamente en forma individual y automatizada.
- Monitoreados por video-imagen y tests opto-electrónicos de las dimensiones críticas.
- Testeo cromatográfico de la pureza de septa.

Le brindamos soluciones día a día

OmniLab srl
Sistemas, Instrumentos y Servicios para Laboratorios

DISTRIBUIDOR AUTORIZADO CONSUMIBLES AGILENT EN LA REPÚBLICA ARGENTINA

Virrey Arredondo 2850 (C1426EAB) Buenos Aires - Argentina /// Tel.: (54-11) 4553-1100 • Fax: (54-11) 4555-1584

e-mail: info@omnilab.com.ar /// www.omnilab.com.ar

soluciones
día a día