

ADQUISICIÓN DE DATOS EN UN LABORATORIO GEOQUÍMICO

Por Ricardo Timmermann, (Minería Latinoamericana, 1994)

Introducción

La información analítica es el producto esencial de un laboratorio químico. En los últimos tiempos, se han desarrollado una gran variedad de instrumentos químicos, la mayoría de los cuales son controlados por un microprocesador que ayuda a convertir muestras físicas en datos analíticos contribuyendo así a la automatización del análisis químico en los laboratorios. El resultado es realizar grandes cantidades de análisis en el mismo período de tiempo que hace unas décadas hubiera parecido utópico.

Uno de los grandes problemas que suscitó este automatismo, es la administración de los datos acumulados. No es raro encontrar laboratorios que realizan 50 mil o más análisis mensuales. Se puede suponer entonces, lo complejo que sería administrar todos estos datos, sin cometer errores, alteraciones, pérdidas de datos por digitación, faltas en los informes, etc. La importancia de la integridad de los datos en laboratorios clínicos puede ser vital para una vida humana. De la misma forma lo puede ser en un laboratorio geoquímico para los estudios geológicos de una empresa minera.

Por otro lado, los microcomputadores en los últimos años han alcanzado un gran desarrollo, lo que ha permitido introducirlos en la automatización a nivel industrial, obteniendo procesos más eficientes, con capacidad gráfica para monitoreos, menores costos de implementación y manutención, seguridad en el manejo de datos, etc. Es, por lo tanto, una red de área local de microcomputadores la solución óptima para sistemas de automatización en laboratorios.

Un sistema de automatización de laboratorio es conocido como LIMS, siglas del inglés "Laboratory Information Management System".

Características generales de un LIMS

El LIMS debe administrar una gran cantidad de información generando informes de manera rápida y sencilla con los datos obtenidos en el laboratorio. También debe extraer la mayor cantidad de información de los datos para llevar un adecuado control de calidad del laboratorio, permitiendo investigar cómo los resultados difieren entre los distintos métodos analíticos, y permitiendo comparar resultados entre diferentes muestras. Es decir, los sistemas de control y la generación de informes con detalles precisos en forma rápida y sencilla, deben ser la característica clave de un Sistema de Automatización para Laboratorios Químicos.

Es importante, que el LIMS sea desarrollado en un ambiente de Químicos y para ellos. Que incorpore una sofisticada tecnología y sea sencillo de usar, para que no requiera expertos en computación para su uso. Que las funciones sean manejadas con menús llamados simplemente al pulsar una tecla. Que sea muy rápido puesto que el LIMS es usado para comparar datos de análisis. Que los diferentes programas no excedan los tres segundos para mostrar su información en la pantalla reduciendo enormemente el tiempo

empleado por los químicos en la revisión y generación de informes. Que sea modular para expandirlo a voluntad, esto es, que un sistema básico inicial pueda aceptar nuevos módulos compatibles de acuerdo a las necesidades futuras del laboratorio.

Automatización sin digitación de datos

La función principal de cualquier LIMS es evitar la manipulación innecesaria de lecturas de análisis. Toda la generación o manipulación de la información deberá ser auditada electrónicamente.

Algunas técnicas son:

Comunicación con los instrumentos:

La mayoría de los instrumentos usados en el análisis químico tienen una conexión a un computador que debe ser utilizada por el sistema de automatización. Esta conexión puede ser serial (RS 232) o de algún otro tipo. Con esta opción se transfieren las lecturas de los instrumentos al computador sin necesidad de digitar.

Programación de fórmulas:

Un factor importante es el diseño de una planilla electrónica que permita el ingreso de fórmulas para el cálculo de la columna de resultados. También deberá incluir otras funciones como límites de detección, decimales o precisión a informar.

Librería de métodos de análisis (SOP):

Los métodos de análisis deberán mantenerse en una base de datos electrónica. Así se almacena, en forma ordenada y visible, una librería con todos los análisis realizados. Esta librería incluye por cada análisis diferentes registros como la metodología del análisis, unidades de conversión, formato de resultados, etc.

Seguridad en la adquisición de Datos

La mayor concentración se debe dedicar a la seguridad de los datos. No es improbable la caída de un computador y con ello la pérdida de los datos de análisis. Si se considera una semana de trabajo con diez mil muestras que se pierden, se puede calcular los enormes costos generados por la pérdida de materiales en solubles y horas de análisis. Por esta razón, el sistema debe generar una hoja de trabajo que sea respaldada. Este proceso permite reconstruir informes meses después de realizadas las lecturas. También un control del analista, en el caso de generarse informes dudosos, ya que en estas hojas de trabajo se incluye toda la información relacionada con el químico.

Para mayor seguridad y evitar la alteración de datos por terceros, se debe poder cerrar los informes con una clave (password).

Generación automática de Hojas de Trabajo (ELN - Worksheet)

Una de las características más esenciales de un LIMS es la generación automática de hojas de trabajo del químico. Se trata simplemente de reproducir, la antigua la hoja de trabajo manual, esta vez con el computador. Esta hoja incluirá además de las lecturas de análisis, la calibración del instrumento, el nombre del instrumento usado y del químico, la fecha y hora del análisis, así como los datos estadísticos de estos. Esta hoja deberá ser conservada con el informe de análisis, y así, siempre habrá una copia fiel como testigo de un análisis.

Informes electrónicos

La transcripción de datos en un análisis es una fuente alta de error. Normalmente, la última transcripción ocurre cuando el usuario final (destinatario) copia estos datos para ingresarlos a una base de datos propia que es usada por otro programa, por ejemplo, un programa de estadística para geólogos, producción minera, etc.

Para evitar errores, el sistema deberá ser capaz de proporcionar estos datos en un medio magnético, tal como un disquette o una transmisión por Internet. El formato más común para esta transmisión es un archivo ASCII. Un segundo formato sería un archivo EXCEL (planilla de cálculo). Este formato es muy difundido y usado por otros programas estadísticos permitiendo la generación de informes especiales con gráficos.

Base de Dato

Existen muchas bases de datos en el mercado, y su tecnología esta mejorando diariamente. Puesto que la base de datos a elegir va a ser el corazón del LIMS, su elección deberá ser bien informada. Los mayores parámetros para esta elección son la velocidad de respuesta y seguridad.

El modelo de datos de un LIMS es la parte más compleja. El mayor error que realizan informáticos es considerar solamente los resultados finales de cada análisis. Pero cada análisis esta compuesto de varios parámetros, calibraciones de instrumentos, estándares de control, auditoria, etc. Cualquier modelo usado deberá almacenar cifras significativas, lo cual hace un sistema muy lento para una gran cantidad de análisis. Normalmente, su quiebre se alcanza en seis meses.

La solución mas probada es distribuir los datos o agruparlos en resultados de análisis finales (LIMS) y los datos propios del laboratorio (ELN – Electronic Lab Notebook).

Control de Calidad

Una realidad actual es que los laboratorios modernos estén ante una constante presión competitiva. Estas organizaciones deben continuamente improvisar para demostrar su competitividad y así poder cumplir con los requerimientos de sus clientes. La base de este 'logro' es obtener resultados de análisis fieles y limpios, lo cual es logrado únicamente con un eficiente sistema de control de calidad.

El LIMS deberá proveer un módulo de control de calidad que extraiga automáticamente los resultados de muestras estándares de los análisis . Estos datos, junto a otros que muestren su procedencia y su ligación a los reportes, deberán generar gráficos y estadísticas en forma simple y fácil. Los resultados que excedan las normas patrones predefinidas, deberán resaltar, para llegar rápidamente al origen de esta falla.

Monitoreo y Control del Laboratorio

Para un mayor control de la información, el LIMS deberá entregar una estadística general de laboratorio. La generación de esta estadística deberá ser automática, es decir, el computador proporciona y agrupa los datos estadísticos mostrando con gráfica el estado actual del laboratorio. Esta estadística debe estar enfocada a producción, análisis y facturación.

Monitoreo de producción

Mostrar cuantitativa y comparativamente el estado del laboratorio: análisis pendientes, informes terminados, tiempo medio de preparación de la muestra, tiempo medio de análisis, cuántas muestras / análisis van por mes, etc. Con esta característica se evitará el dilatamiento excesivo en la entrega de un resultado. Así el supervisor sabrá cuantos días permanece una muestra en cada sección del laboratorio, o determinar cuales son las secciones más lentas.

Estadística de Análisis

Cantidad de muestras / análisis por mes. Cantidad de análisis por cada elemento (para ser transferido al sistema de facturación). Esta estadística genera una planilla anual con cantidades por cada análisis que se realice en el laboratorio. Comparativamente se puede estudiar cuales son los elementos más analizados y cuales tienen una tendencia descendente.

Es interesante notar que la economía de un país se refleja en los elementos analizados en un gran laboratorio. Cuando la economía es sólida, un laboratorio recibe muchos análisis de elementos bases como C, S, Fe, Ca, Ni, Cu, etc. provenientes de siderúrgicas, compañías de cemento o cerámica, etc. Por otra parte, minerales como oro y plata siempre mantienen una relativa constante, dado que no son usados en la industria.

Facturamiento de Análisis.

La contabilización y clasificación de 50 mil análisis por mes es un arduo trabajo llegado el momento de facturar. Por eso, se deberá disponer de un completo sistema de facturación que genere automáticamente una clasificación de los análisis. La generación automática de una factura, así como su posterior alteración manual (editar), son parte del proceso de facturación.

El sistema de facturación deberá hacer referencia a una o más listas de precios, con lo cual se podrá generar facturas según contratos especiales.

Estadística de Facturación

Es la estadística general del laboratorio que incluye totales facturados, separados por departamento, servicio o cliente. Dado que las posibilidades de esta estadística así como sus reportes son muy amplios, el LIMS deberá generar en forma automática una planilla del tipo EXCEL. Así, usando esta planilla se podrán generar los más diversos gráficos requeridos.

Por ejemplo, se podría determinar cuantas lecturas de Ag (Plata) se realizaron de tal mes a la fecha y su porcentaje con respecto a otros elementos o determinar cuantas lecturas a hecho un instrumento para evaluar su productividad.

Comprar o desarrollar un LIMS

Puesto que cada laboratorio es muy personalizado, es muy difícil la elección de un LIMS comercial. También está la alternativa de desarrollar un sistema propio. Para ello se deberá disponer de un equipo multidisciplinario involucrando naturalmente un alto costo y un alto grado de inseguridad de funcionamiento. La alternativa más viable es la adquisición de un LIMS existente en el mercado.

Adquisición de un LIMS

Puesto que la adquisición de un LIMS tiene un costo inicial relativamente alto, es muy importante una correcta asesoría. La instalación de un LIMS toma aproximadamente entre dos y tres meses. El plazo normal para que un LIMS esté totalmente operable es un año.

Estudios necesarios para comprar un LIMS:

- Visitar un par de laboratorios que trabajen con un LIMS
- Evaluar el equipo computacional necesario
- Definir los instrumentos para que estén Online al LIMS
- Modificación del Lims para una personalización del laboratorio (Reportes).
- Estudiar el sistema de Facturación requerido
- Posteriores Updates y conexión de nuevos instrumentos.

Costos a considerar en la adquisición de un LIMS :

- Capacitación del personal de laboratorio, manejo básico de computadoras.
- Compra de computadores y su instalación como RED
- Compra del LIMS, instalación y capacitación
- Costos de mantención del SW
- Costos de mantención de los computadores

Es importante que una vez instalado y funcionando no requiera un especialista de computación de planta. Esto se logra con una configuración óptima del Hardware y del LIMS, y con un entrenamiento previo de algunos químicos. Así, un laboratorio sin

experiencia en computación no necesitará un especialista de planta y podrá mantenerse perfectamente con servicios de mantenimiento periódicos.

Desarrollo del Sistema LIMS

El tiempo a invertir para desarrollar un LIMS con estas características supera los 3 años hombre de investigación y desarrollo. Se aconseja que el desarrollo sea en el mismo laboratorio (en terreno), obteniendo un concepto real del funcionamiento de un laboratorio químico. De esta forma, se implementan todas las peticiones requeridas por los químicos y analistas, obteniendo como resultado un sistema poderoso y a su vez amigable en su uso.

Hardware del LIMS - Computadores

Puesto que el trabajo en laboratorio es un trabajo en grupo, donde los datos son compartidos entre distintos usuarios, la estructura computacional más óptima es una red de computación.

Medio ambiente de trabajo

Las principales variables que afectan el funcionamiento de los computadores en el medio ambiente de un laboratorio químico son los gases corrosivos que emanan de las soluciones que son usadas para atacar las diferentes muestras. Esto obliga muchas veces a instalar computadores que tengan el mínimo de piezas mecánicas posibles. Los teclados pueden ser reemplazados por teclados de folio industriales. El computador de instrumento no debería tener disquetera ni disco duro, de modo que obtenga su programa del computador central cargándolo en memoria.

La RED deberá cumplir las normas de redes industriales, dada la gran cantidad de ruidos electromagnéticos que puedan ser generados por otros equipos del laboratorio.

Dada la mala alimentación de la red eléctrica, es conveniente que los computadores estén conectados a una UPS.

rt/OnLabS