

Control de instrumentos de terceros con el Software del Sistema de Datos Cromatográficos Chromeleon

Autores

Darren Barrington-Light y
Patrick Kenny
Thermo Fisher Scientific

Palabras Clave

Sistema de Datos Cromatográficos, CDS, Chromeleon, múltiples proveedores, control de instrumento, GC-MS, LC-MS, LC, IC, GC, kit de desarrollo de controladores (DDK)

Resumen Ejecutivo

En las últimas décadas, la instrumentación cromatográfica y las técnicas separativas se han convertido en técnicas convencionales para la mayoría de los laboratorios. Las técnicas principales son Cromatografía Gaseosa (GC) y Cromatografía Líquida de Alta Resolución (HPLC). Todos estos instrumentos cromatográficos se ejecutan usando el software denominado Sistema de Datos Cromatográficos (CDS), para control de instrumentos y manejo de datos, los cuales han sido significativamente desarrollados en estas últimas tres décadas. El software del Sistema de Datos Cromatográficos Thermo Scientific™ Chromeleon™ fue un pionero en el control de instrumentos de terceros y ha continuado siendo líder en el mercado con un control múltiples proveedores.

Control de Instrumento en los Sistemas de Datos Cromatográficos

La historia del control de instrumentos en los sistemas de datos cromatográficos se remonta al desarrollo de la computadora personal (PC) a principios de la década de 1980, que condujo a la introducción del CDS basados en PC. La operatoria era similar a la de los integradores en base a microprocesadores introducidos en la década de 1970, pero los archivos de datos de todas las inyecciones de un ensayo estaban entonces disponibles para reprocesar. En ese momento, la recopilación de datos de cualquier instrumento solo era posible mediante la conversión de los datos del instrumento de la señal de salida analógica a una señal digital que pudiera ser leída por el CDS (conversión A / D). Esta conversión A/D solo permitía registrar un solo canal de datos del instrumento y no cubría nada del control de instrumento.

A medida que las PC de mayor rendimiento se volvieron más accesibles, los fabricantes pudieron agregar control de instrumentos además de sus herramientas de procesamiento de datos e informes existentes. Aun así, durante la próxima década, los CDS solo fueron capaces de realizar un control digital completo de los instrumentos que fueron suministrados por el mismo fabricante que los CDS, por lo que era común que un proveedor suministrara tanto el CDS como el equipo cromatográfico, y la mayoría tenía una conexión de un solo cromatógrafo por PC. A medida que los CDS se fueron desarrollando, la capacidad para controlar múltiples instrumentos desde una PC apareció pero con la misma restricción de "único fabricante". Este tipo de instalación puede describirse como un "CDS de estación de trabajo (Workstation)."

Por lo general, los laboratorios siempre contaron con una variedad de instrumentos cromatográficos de distintos fabricantes. Con el enfoque de CDS de estación de trabajo de un solo fabricante, esto llevó a la instalación de varios CDS diferentes en el laboratorio con eficiencia, manejo de datos, capacitación, validación inherentes y complicaciones regulatorias. La única forma de reducir el número de CDS fue usar una conversión A/D a fin de crear una señal digital que pudiera ser leída e importada por el/los CDS seleccionados, y renunciar al control de los instrumentos, con los problemas básicos de picos sobresaturados o "amesetados", exceso de ruido y una completa falta de trazabilidad.

A lo largo de la década de 1990, los avances en las PC, combinados con estándares de red mejorados, permitieron que el CDS se conectara en red. Cuando se trabaja en red, el manejo de los datos se hace más eficiente y la utilización del instrumento puede optimizarse. Además, es más fácil cumplir con las guías regulatorias ya que este permite el desacoplamiento físico del manejo de datos desde el almacenamiento de datos, incrementando de esta forma la seguridad de los datos adquiridos. Estos CDS de trabajo en red, con manejo y almacenamiento de datos descentralizados, a menudo se denominan sistemas "empresariales" (Enterprise) o "cliente / servidor".

Con un método, todos los datos de los instrumentos en el mismo formato y un informe común de resultados, independientemente del instrumento que se usó para generarlos, las mejoras de eficiencia y los aumentos de productividad fueron enormes al usar un CDS Enterprise escalable.

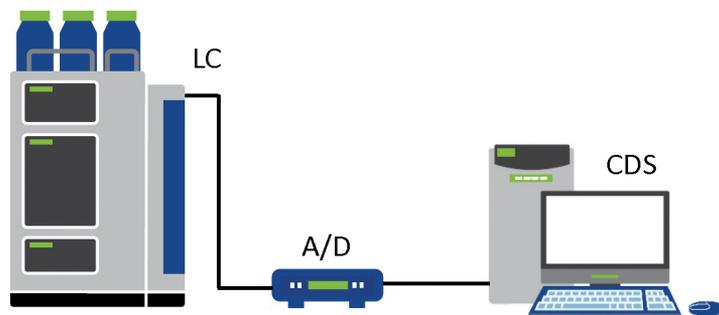


Figura 1: Primer CDS – Recopilación de datos sin control

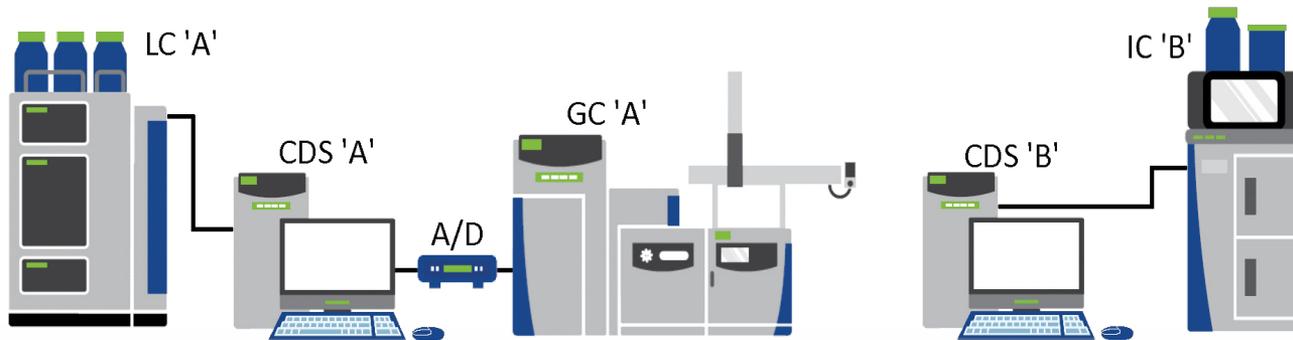


Figura 2: CDS en estación de Trabajo para varios instrumentos cromatográficos

Estableciendo la demanda de control de instrumentos de múltiples proveedores

Con la adopción cada vez mayor de configuraciones de CDS enterprise, la vinculación del instrumento en sí y el fabricante de CDS comenzaron a desaparecer. Algunos proveedores comenzaron a enfocarse en el desarrollo de soluciones en CDS mientras que otros se abocaron al desarrollo de instrumentos. Los proveedores de instrumentos cromatográficos con una participación de mercado más pequeña, y/o sin interés en desarrollar sus propios CDS, comenzaron a buscar proveedores de CDS sin competencia y que solo se dedicaran al software, y los apoyaron para lograr el control de sus instrumentos en el sistema de datos. Por el contrario, a medida que los proveedores de CDS vieron que sus productos se volvían cada vez más importantes para el funcionamiento eficiente de los laboratorios cromatográficos, el control de instrumentos de otros proveedores importantes (instrumentos de terceros) se convirtieron en una atractiva oportunidad de mercado. Así, surgió en CDS el deseo de control de instrumentos de terceros (control de múltiples proveedores).

Si bien, al principio, los beneficios de la administración y el almacenamiento centralizados de datos inicialmente superaron las limitaciones inherentes en la conversión A / D de datos de instrumentos de terceros, la autoridad de la Administración de Medicamentos y Alimentos de los Estados Unidos (FDA) en 1997 para registros electrónicos y firmas electrónicas (CFR 21 Parte 11) identificó el control del instrumento (o la falta de él) como no alineado con las pautas de cumplimiento.

La autoridad estableció la necesidad de un control de instrumentos de terceros en CDS, por lo que la demanda de un control totalmente digital de instrumentos patentados y de terceros se volvió urgente. La necesidad del mercado de sistemas de datos que respaldaran el cumplimiento de CFR 21 Parte 11 con control de instrumentos totalmente digital también

llevó a una fuerte consolidación en el mercado, lo que resultó en que solo tres proveedores globales de CDS tuvieran una participación significativa (> 10% de base instalada y venta de licencias anuales) en el mercado. Debido a que existen muchos más proveedores de instrumentos con una participación relevante en el mercado (>5%) que proveedores de CDS empresariales, la necesidad para un control de instrumentos de terceros se hizo obvia.

1993 observó la introducción del primer Sistema de datos cromatográfico en el mundo a nivel comercial – El CDS Thermo Scientific Chromeleon (en ese momento aún bajo el nombre comercial Gynkosoft). Esta fue la primera solución de CDS que brindaba control digital total de los instrumentos de los proveedores líderes.

A fines de la década de 1990, todavía era raro que un CDS tuviera un control significativo de terceros marcas, pero era común que controlara los instrumentos de sus propios fabricantes, siendo capaz de configurar métodos e información de corrida analítica, adquirir, procesar, informar y guardar los datos e incluso transmitirlos a otros sistemas de laboratorio, como un sistema de gestión de información de laboratorio (LIMS). En este momento, Chromeleon CDS ya brindaba soporte para más de 60 instrumentos de terceros, y se agregaron aún más instrumentos.

Con la viabilidad probada para el control de instrumentos digitales de terceros, el interés en CDS con control de instrumentos de múltiples proveedores creció rápidamente. Chromeleon CDS se estableció como líder de mercado en el control de instrumento de múltiples proveedores, capaz de controlar más de 525 módulos propios y de terceros de 22 fabricantes distintos, asegurando que hoy en día, el control de instrumento de múltiples proveedores sea una función estándar 'imprescindible' de cualquier CDS.

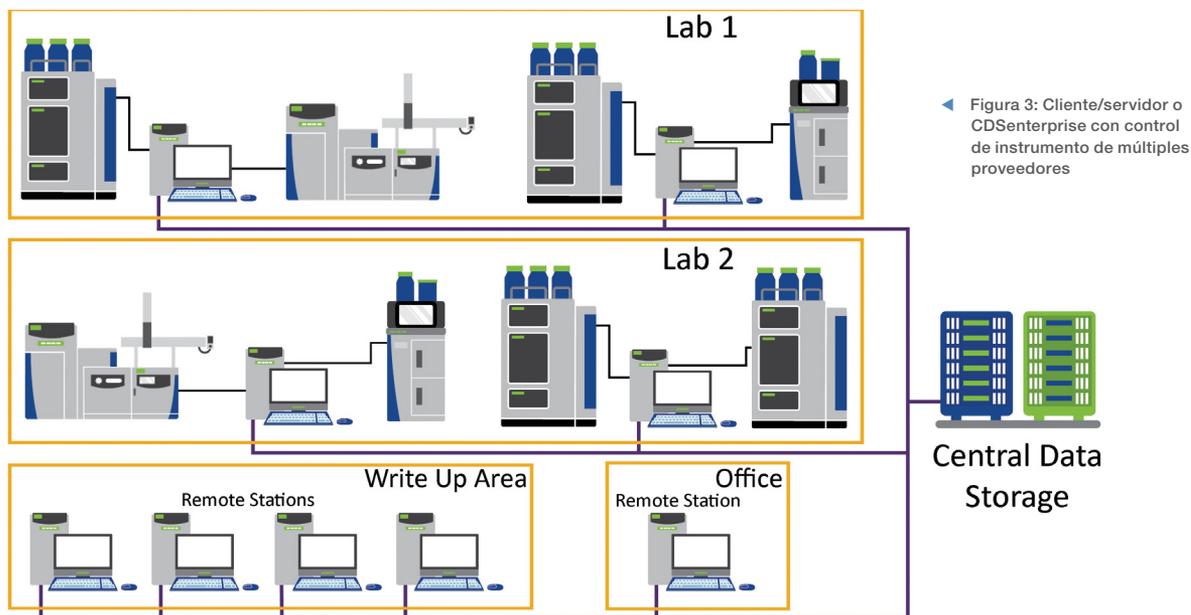


Figura 3: Cliente/servidor o CDSenterprise con control de instrumento de múltiples proveedores

Desde los primeros usuarios hasta el mercado principal: superando los desafíos

Mientras que algunos laboratorios rápidamente adoptaron el control de instrumentos de terceros con el CDS, fue necesario superar algunos desafíos antes de que el control de terceros estuviese lo suficientemente maduro como para ser ampliamente aceptado.

El primer desafío fue que los primeros controles de terceros fueron desarrollados por compañías de CDS con información limitada, y enfocados principalmente en cubrir únicamente los comandos generales para el control de instrumentos de terceros. Esto también requirió que los programadores escribieran un controlador para un instrumento sin un conocimiento más profundo del funcionamiento general del instrumento. Para Chromeleon CDS, el desarrollo inicial del control de instrumento de terceros se hizo analizando los protocolos de control del instrumento, y luego escribiendo un "controlador" de control de instrumentos en un lenguaje de control compatible con Chromeleon CDS: un "controlador (driver) nativo".

Incluso cuando se estableció una cooperación entre las partes, la comunicación entre los grupos de CDS que escribían el control de instrumentos y el tercero que proveía los códigos de control fue muchas veces lento y tedioso. Esto ocurrió porque la mayoría de los proveedores de CDS también eran competidores directos como fabricantes de instrumentos. Además, a menudo sería el mismo grupo de CDS el que desarrollaría controladores tanto para sus propios instrumentos internos como para instrumentos de terceros de proveedores competidores, lo que podía generar conflictos de prioridades y retrasar la disponibilidad de los códigos de control para la instrumentación de terceros.

El segundo desafío fue la mayor complejidad y el creciente número de configuraciones de instrumentos. Con cada introducción de un nuevo instrumento, aparecieron nuevas tecnologías y características junto con la demanda del mercado en tener la capacidad de controlar estos instrumentos y nuevas características para sus CDS seleccionados. Esto incrementó la complejidad, y por ende, el esfuerzo requerido para programar instrumentos de control de terceros.

A mediados del año 2000, con la introducción de la UHPLC (Cromatografía Líquida de Ultra Alta Resolución) como una extensión del tradicional HPLC, la demanda para control de instrumentos resultó ser aún más sofisticada. Una mayor funcionalidad, como la conversión de métodos tradicionales de HPLC a UHPLC, se incorporó al controlador de control del instrumento. Recrear esta compleja funcionalidad demandó tiempo y recursos, y pudo derivar en una demora significativa

entre la liberación del instrumento del fabricante de hardware tercerista y la disponibilidad del control de estos instrumentos en el CDS. Paralelamente, el número de instrumentos de terceros que debían controlarse creció significativamente: algunos grandes fabricantes con más de cien módulos (HPLC y UHPLC) en distribución activa.

Concepto "controlador de impresora" de instrumentos de terceros: desde controladores de instrumentos nativos hasta controladores de instrumentos complementarios

Abordar estos desafíos provocó un cambio en el concepto de control de instrumentos de terceros. Los principales proveedores de instrumentos comenzaron a explorar la manera de proporcionar sus instrumentos con controladores a la carta para conectarse fácil y rápidamente al CDS de terceros. Un concepto de "controlador de impresora" para control de instrumentos cromatográficos podría proporcionar los controladores de control de instrumentos directamente de los proveedores de instrumentos y los entregaría de una manera que permitiera una fácil integración con CDS de terceros.

Esto ofreció claros beneficios de un proceso de desarrollo más eficiente – en vez de que cada compañía de CDS escriba un controlador para el mismo instrumento de terceros, ahora solo debe escribirse un solo controlador (por el fabricante del instrumento) para todos los CDS, acelerando el control de nuevos instrumentos en los sistemas de datos de terceros. Para hacer que este enfoque funcione se requirió que el proveedor del instrumento desarrollara y mantuviera una arquitectura del controlador que no solo suministrara el control de instrumento actual, sino también un marco estandarizado que proporcione la conexión y adaptaciones necesarias para ser utilizadas en un sistema de datos de terceros.

Sin embargo, no todos los proveedores de instrumentos pueden o quieren proporcionar dicha infraestructura. Los proveedores más pequeños o centrados en hardware, a menudo solo necesitan una forma sencilla de llevar el control digital de sus instrumentos a un CDS de terceros.



Chromeleon CDS proporciona la mejor solución de controladores de terceros

Chromeleon CDS proporciona la mejor solución para control de instrumentos de terceros tanto con el concepto de conexión de “controlador de impresora” como con el enfoque de Kit de Desarrollo de Controladores (DDK) a fin de abordar las necesidades de los fabricantes más pequeños, o más enfocados en el hardware.

Integradas en Chromeleon CDS se encuentran las soluciones complemento de controladores wrapper proporcionadas por los fabricantes de instrumentos líderes, el Marco de Control de Instrumentos (ICF) Agilent y el Software de Control de Instrumento (ICS) de Waters. Esto garantiza un soporte rápido y completo para todos los controladores y funciones lanzados para estos complementos.

El DDK de Chromeleon brinda desarrolladores de controladores y proveedores de instrumentos con un enfoque directo para la implementación de controladores de instrumentos, configuración, y los complementos de editor para Chromeleon CDS. Todos los nuevos controladores incorporados por Thermo Fisher Scientific usan el DDK. Este fue diseñado para compatibilidad entre versiones: se redacta un controlador y este generalmente puede utilizarse con todas las versiones nuevas de Chromeleon CDS sin necesidad de un desarrollo adicional. Hay muy poco código ‘imprescindible’ para incluir, por lo que es muy rápido y fácil aprender a implementar controladores de instrumentos: el marco de controlador básico se puede crear en cuestión de horas, en lugar de los días o semanas que tomaría para un controlador nativo. Esto acelera de manera considerable el desarrollo de un controlador.

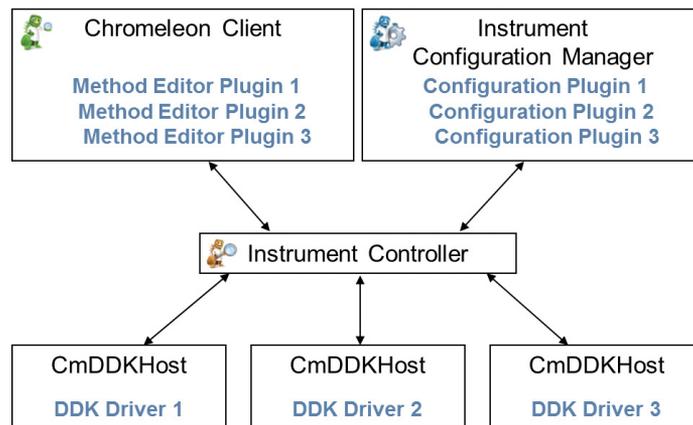


Figura 4: Los complementos del DDK de Chromeleon simplifican la creación de controladores

La calidad de todos los controladores está asegurada por procedimientos de certificación y validación. Todos los nuevos controladores deben cumplir con los requerimientos de proceso de certificación y cumplir con una serie de ensayos de validación antes de ser aceptados para su inclusión en Chromeleon CDS.

El DDK en Chromeleon se encuentra respaldado de manera activa con un set completo de documentos (que incluye una “guía de aplicaciones” del controlador con código de ejemplo y el proceso de certificación), cursos de capacitación de programador, y soporte con la programación para facilitar a las compañías terceristas desarrollar controladores directamente en un formato de software compatible con Chromeleon. Para los proveedores que no desean crear sus propios controladores, existen los socios de desarrollo de Chromeleon DDK certificados a fin de desarrollar de manera rápida los controladores de Chromeleon DDK.

Recientemente, Thermo Fisher y Agilent han colaborado para permitir que Agilent utilice el DDK para crear el kit de ‘Drivers Agilent para Chromeleon 7’, lo que le permite a Chromeleon CDS versiones 7.2 SR5, y más actuales a fin de tener un control avanzado de su hardware LC. Este control avanzado les permite que las características específicas de Chromeleon CDS se usen con el hardware de Agilent, algo que no era posible mientras se usaba ICF. Al usar el DDK de Chromeleon para desarrollar estos controladores, Agilent también pudo incluir una Herramienta de Verificación de Software (SVT) a fin de verificar la correcta instalación de los componentes del software. Aunque los ha desarrollado Agilent con DDK, los controladores son probados y certificados por Thermo Fisher antes de su inclusión en una versión del software Chromeleon.

¿Qué más se necesita para hacer que un control de instrumento de terceros sea exitoso?

Para mantener controladores de alta calidad que se lancen en los tiempos especificados, especialmente para instrumentos nuevos, es importante que el proveedor de instrumentos y el proveedor de CDS establezcan reuniones periódicas para compartir conocimientos técnicos, hojas de ruta para las próximas versiones y para discutir y resolver problemas técnicos. Esto requiere un compromiso de ambas partes para mantenimiento y mejoras regulares y continuas del paquete de envolturas [wrapped] del controlador y su integración en el CDS, junto con el mantenimiento y las mejoras, para el caso de Chromeleon CDS, del DDK.

El control del equipo de Espectrometría de Masa (MS) es el desafío más reciente para el control de instrumentos de terceros. A medida que la evaluación de datos de la MS comienza a ser frecuente en el software del CDS, algunos proveedores de CDS tienen la capacidad de controlar, y recopilar datos desde sus propios equipos de MS, pero no tienen la capacidad de hacer esto con un equipo de terceros. La situación es similar a la de la industria de instrumentos cromatográficos a finales de 1990 cuando no era común compartir controladores y códigos. Dado que los proveedores ya han trabajado juntos para proporcionar una solución de controlador para sus instrumentos de cromatografía, tendría sentido que el control de terceros para equipos de MS no se quede atrás.

Resumen

Chromeleon CDS fue pionero en el control de instrumentos de terceros, y continuó siendo líder en el mercado a tal punto que el software de Chromeleon es hoy sinónimo con controles de múltiples proveedores, y ha hecho de esto una característica 'imprescindible' de cualquier CDS. Con más de 25 años de experiencia en desarrollo, el software Chromeleon ofrece todas las herramientas a los proveedores de instrumentos que puedan estar interesados en el control de instrumentos de terceros. Chromeleon CDS es el sistema de múltiples proveedores más preparado para el futuro y para empresas del mercado.



¿Está interesado en nuestra solución completa de gestión de datos?
Conozca más sobre toda la cartera de productos de Informática Integrada de Thermo Scientific en thermofisher.com/OneCDS

¡Tilde Me gusta Charlie Chromeleon en Facebook para seguir sus viajes y obtenga actualizaciones importantes en el software de la cromatografía!
facebook.com/CharlieLovesChromatography

Visite AppsLab Library para un acceso en línea a las aplicaciones de for GC, IC, LC, MS y otras. thermofisher.com/AppsLab

Más información en thermofisher.com/chromeleon