

HF 3 Qualitätssicherung / Labordatenmanagement

Leis, A., Ebenbichler, R., Fronka, J., Schmölder, H., Schuster, G. & S. Wechner

Abstract

Im Zuge der ständig steigender Anforderungen an den Umweltschutz sowie zahlreicher neuer Normen und Vorschriften hat sich die Sicherstellung der Wasserqualität zu einer komplexen und vielschichtigen Aufgabe entwickelt. Dementsprechend ist auch das Leistungsspektrum von Wasser- und Umweltlabors heute deutlich umfangreicher und umfasst vielfältige Dienstleistungen die sich auf verschiedenste Bereiche der instrumentellen Analytik erstrecken. Steigendes Arbeitsvolumen, wachsende Spezialisierung und arbeitsteilige Auftragsabwicklung im Laborbetrieb konfrontieren die Laborverantwortlichen - neben der erforderlichen hohen Fachkompetenz - mit neuen Aufgaben und Herausforderungen in den Bereichen:

- Administration und Management
- Planung und Kontrolle
- Fachliche Beratung
- Informationsmanagement

Um diesen Anforderungen in Bezug auf Arbeitseffizienz und Qualität der analytischen Dienstleistungen, noch besser gerecht zu werden, wurde im Rahmen des horizontalen K-NET Programms Labor ein gemeinsames Konzept für ein Laborinformationssystem (LIMS, genauer: Laboratory Information Management System) erstellt, welches an die speziellen Anforderungen von Wasser- und Umweltlabors angepasst ist.

Abstract

Increasing requirements of environmental protection as well as many new standards and regulations have made water quality protection in our days to a complex and multifaceted task. Accordingly, the performance range of water and environmental laboratories became today more and more extensive and covers a wide range of services focusing on various areas of instrumental analysis. Rising workloads and increasing specialization in the laboratory confront the laboratory managers - in addition to the required high level of expertise - with new tasks and challenges in the areas of:

- Administration and Management
- Planning and control
- Technical Advice
- Information Management

To meet these requirements in terms of work efficiency and quality of the analytical services an existing laboratory information system (LIMS, specifically: Laboratory Information Management System) was adapted on the special requirements of water and environmental laboratories.

1. Problemstellung und Zielsetzung

So individuell wie die Aufgabengebiete verschiedener Labors sind, so unterschiedlich gestalten sich die Arbeitsabläufe in den einzelnen Labors. Allerdings ähneln die generellen Ablaufstrukturen, vom Probeneingang über die Probenbearbeitung bis zur Ergebnisübermittlung an den Kunden, einander. Um diese Strukturen EDV-technisch zu verwalten, haben sich in der Praxis sogenannte LIMS (Labor

Informations- und Management-Systeme) etabliert, mit denen es möglich ist, die generelle Ablaufstrukturen eines Labors von der Probenregistrierung über die Messdatenerfassung bis hin zum Berichtswesen und der Ergebnisübermittlung an den Kunden in standardisierter Form nachzuvollziehen. Verwenden mehrere Labors ein in seinen Grundzügen ähnliches LIMS, ist es möglich, den Datenaustausch zwischen diesen Labors wesentlich effizienter als zuvor durchzuführen. Allerdings weisen Standard LIMS-Programme für die breitgefächerten Anforderungen in der modernen Umweltanalytik eine zu geringe methodische Flexibilität auf. Dies umso mehr, als sich das analytische Methodenspektrum und die Arbeitsabläufe in den einzelnen Labors teilweise beträchtlich voneinander unterscheiden.

Ziel der Arbeiten im gegenständlichen Projekt war daher die Erarbeitung eines gemeinsamen Konzeptes für ein Labordateninformationssystem (LIMS) welches an die speziellen Anforderungen der im K-Net vertretenen Wasser- und Umweltlabors angepasst ist.

2. Hauptteil

Einführung

Im Zuge einer Vorevaluierung durch die Projektpartner JR und Hydroisotop die Firma ATS als der am Besten für die Fragestellung des Projektes geeignete LIMS – Anbieter identifiziert. Nach einer Präsentation des LIMS-Software Paketes uniLime 2006 durch die Fa. ATS und einer umfassende Diskussion der Adaptionmöglichkeiten des Systems an die Bedürfnisse moderner Umweltlaboratorien wurde von den Projektteilnehmern der Beschluss gefasst, dass die Erarbeitung des Labordateninformationssystem (LIMS) welches an die speziellen Anforderungen von Wasser- und Umweltlabors angepasst ist, auf der Grundlage des Softwarepaketes uniLime 2006 erfolgt. Das Programm uniLIME bietet standardmäßig die Möglichkeit, wichtige Tätigkeiten der Labororganisation wie z. B. die Auftragsverwaltung, die Erstellung von Arbeitslisten zu vereinfachen. Gleichzeitig ermöglicht das LIMS eine Vereinheitlichung und weitgehende Automatisierung des gesamten Datenhandlings angefangen von der Eingabe der Analysenergebnisse, der Umrechnung der Messwerte mit entsprechenden Kalibrierfunktionen bis hin zur Verwaltung und Freigabe der Analysenergebnisse. Zahlreiche laborspezifische Geschäftsprozesse wie die Dokumentenverwaltung, die Fakturierung der Analysenergebnisse, die analytische Qualitätssicherung und die Prüfmittelverwaltung können so wesentlich effizienter abgewickelt werden.

Programmbeschreibung

Die Benutzeroberfläche

Das Laborinformationssystem besteht aus der Benutzeroberfläche (dem "Frontend", also dem Programm, über das die Eingaben und Ausgaben stattfinden), dem Datenbanksystem im Hintergrund sowie diversen Standardprogrammen (z.B. Microsoft Word). Die Bedienung entspricht den üblichen Windows – Standards und geht davon aus, dass sowohl Maus als auch Tastatur verwendet werden. Die Bedienung ausschließlich über die Tastatur ist möglich, aber weniger effizient als in Kombination mit der Maus.

Client – Server – Anwendungen

Das Programm uniLIME ist grundsätzlich als Mehrbenutzer – Anwendung konzipiert, das heißt, dass mehrere Benutzer gleichzeitig (an verschiedenen Rechnern) mit denselben Daten arbeiten können. Hier ist die Mehrbenutzerfähigkeit in Form eines Client – Server – Systems implementiert. Unter Client–Server – Systemen versteht man, dass ein Teil der Aufgaben von einem zentralen Server erledigt wird, mit dem ein oder mehrere "Clients" in Verbindung treten, um bestimmte Dienste anzufordern. Im Fall des Laborinformationssystems ist der betreffende Dienst, den der Server anbietet, die Speicherung und Verwaltung der Daten (Datenbanksystem). Die Clients hingegen übernehmen die Eingabe, Vorbereitung und Ausgabe der relevanten Informationen und dienen damit als Schnittstelle zwischen dem Server und dem Benutzer. Zur Verbindung von Server und

Clients ist ein funktionsfähiges Netzwerk erforderlich. Damit ist klar, dass es im Allgemeinen egal ist, von welchem Rechner aus die Dateneingaben stattfinden, da ja die Daten zentral gespeichert bzw. verwaltet werden. Ebenfalls verständlich sollte sein, dass im Prinzip jeder beliebige Anwender auf alle Daten zugreifen könnte und daher eine individuelle Einschränkung der Berechtigungen sowie die Nachvollziehbarkeit der Verwendung des Laborinformationssystems eine erfolgreiche Identifizierung des jeweils mit dem System arbeitenden Anwenders erfordert.

Datenbanksysteme

Unter Datenbanksystemen versteht man im Allgemeinen eine Klasse von Programmen, die zur Verwaltung beliebiger Daten in der Lage ist, ohne vom Hersteller auf eine bestimmte Anwendung festgelegt zu sein. Das Datenbanksystem übernimmt die Speicherung der Anwenderdaten, deren Format und Zusammenhang zuvor festgelegt sein muss und liefert auf (elektronische) Anfrage gespeicherte Daten wieder zurück. Die derzeit am meisten verwendete Art von Datenbanksystemen sind "relationalen Datenbanksysteme" auf Basis der Sprache "SQL". SQL ist der englischen Sprache nachempfunden und dient zur Datendefinition (Festlegung von Format und Zusammenhang) und der Datenmanipulation (Eingabe und Abfrage). Die Anfragen des Laborinformationssystems an die Datenbank werden als SQL-Abfrage formuliert – dies betrifft aber im Allgemeinen den "normalen" Anwender nicht, da die Benutzeroberfläche selbst diese Abfragen erzeugt. Nur in einzelnen Sonderfällen (z.B. erweiterte Suche nach Proben / Untersuchungsergebnissen) und zur Systemadministration werden einzelne Teile der Sprache SQL benötigt.

LIMS Funktionalitäten:

- Auftragsverwaltung (Registrierung einlangender Aufträge, der zugehörigen Proben einschließlich der angeforderten Untersuchungen, der Kundendaten etc.)
- Erstellung von Arbeitslisten, Etikettendruck manuelle Eingabe der Analysenergebnisse (numerisch oder Texteingaben, z.B. Probenbeschreibungen)
- Import von Analysenergebnissen (z.B. automatische Übernahme von "intelligenten" Analysengeräten)
- Messwert – Umrechnungen einschließlich Rohdaten-Speicherung (z.B. Summenparameter über freidefinierbare Formeln, Umrechnung mit Kalibrierfunktionen etc.)
- Zusammenfassung der Ergebnisse, Freigabe Ausdruck der Analysenberichte über Microsoft Word (damit Berichtformat leicht durch Benutzer zu ändern)
- Fakturierung der Analysenleistungen über Microsoft Word (damit Rechnungsformat durch Benutzer änderbar) Dokumentenverwaltung (automatische bzw. manuelle Registrierung diverser Dokumente, Postein- und -ausgänge,
- Telefonate etc. einschließlich leistungsfähiger Abfragemöglichkeiten)
- Verwaltung von Analysenparametern, Methoden, Einheiten etc. Suchabfragen und Statistiken nach verschiedenen Kriterien
- Ausdruck und Export nach Microsoft Excel diverser Listen und Aufstellungen
- Erstellung von Kontrollkarten
- Analytische Qualitätssicherung (statistische Auswertung der Analysenqualität als Unterstützung der Methodenentwicklung bzw. im Routineeinsatz)
- Prüfmittelverwaltung (einschließlich automatische Benachrichtigung über einmalige oder periodische Tätigkeiten wie Wartung oder Re-Kalibrierung sowie Führung eines elektronischen Geräteprotokolls)
- Automatische Führung eines Audit Log (Aufzeichnung aller wichtigen Anwenderaktionen zwecks späterer Nachvollziehbarkeit).

3. Ergebnisse

Standard - LIMS Systeme sind nur eingeschränkt geeignet alle Prozesse im Labor abzubilden, da die meisten Labors, in Abhängigkeit von ihrer Aufgabenstellung, im Laufe der Zeit eigene, für sie optimierte Arbeitsabläufe entwickelt haben. Es ist daher notwendig ein bestehendes Laborinformationssystem an diese Abläufe individuell anzupassen. Dazu muss zunächst die Basisversion eines LIMS - Paketes einer kritische Evaluierung unterworfen werden. Im zweiten Schritt erfolgen dann die Überarbeitung der Basisfunktionalitäten und die Implementierung neuer anwenderbezogener Features. Hiefür wurde im Rahmen des gegenständlichen Projektes zunächst ein umfangreicher Aufgabenkatalog erarbeitet und dieser anschließend in die Software integriert. Die wesentlichsten softwaretechnischen Adaptionen sind nachfolgend aufgelistet:

- Einbindung einer Funktion zur Berechnung von Leitfähigkeit + Ionenbilanz als Tool zur Überprüfung der Analyseergebnisse.
- Erweiterung der Auswahlfunktionen die Implementierung einer Selektionsmöglichkeit mit Listen.
- Einbau einer automatisierten Rechnungsnummernvergabe mit eigenem Nummernkreis für Berichte, Rechnungen, Angebote sowie sonstige Dokumente.
- Verbesserung der Exportfunktion durch Einbau eines speziellen Export-Button damit Spezifikationen als Textdatei exportiert werden können.
- Integration der Möglichkeit Logos und Bilder in formatierter Form in einen Bericht einbinden zu können.
- Einbau einer Funktionalität für den Import externer Messwerte, als Textdatei zum Beispiel von einem FTP-Server.
- Implementierung einer Funktion zur eindeutigen Zuordnung von Analysen zu unterschiedlichen räumlichen Objekten.
- Erweiterung des Funktionsumfangs im Bereich der Planung und Durchführung von Probenahmen durch Einbau einer Erinnerungsfunktion an relevanten Probenahmen und Schaffung einer Möglichkeit zur automatisierten Export der gesamten Probenahmedaten (Grunddaten zum Auftrag und der einzelnen Proben sowie die Probenahmeparameter im Analysenumfang) als Textdatei via Microsoft Excel.
- Verbesserung der Prüfmittelverwaltung durch prüfmittelspezifische Statusanzeige über den aktuellen Zustand des Prüfmittels.
- Integration einer Druckvorschau beim Erstellen von Prüfberichten und Rechnungen.
- Import von Mehrfachmessungen mit einer Wahlmöglichkeit zwischen den Überschreiben oder Übergehen/Ignorieren eine dritte Option, nämlich den Wert als neuen Einzelwert einer Mehrfach-Messung hinzuzufügen. In diesem Fall berechnet dann UNILIME automatisch den Mittelwert aller vorhandenen Messwerte zu diesem Parameter. Gleichzeitig wurde eine ein "Logbuch" Funktion implementiert, die es ermöglicht einen kompletten Messwert-Import rückgängig zu machen. Die Änderungen werden aus Gründen der Nachvollziehbarkeit in einem sogenannten Audit-Log File gespeichert.
- Zur Entscheidungsfindung ob der neue Wert importiert werden soll oder nicht, können die Werte aus vorhergehenden Datenimporten in Form einer Voransicht angezeigt werden.
- Für die Eingabe größerer Probenanzahlen wurde eine Funktion geschaffen werden, die den direkten Import von Probenlisten aus Excel erlaubt.
- Zur Erleichterung des direkten Datenimportes von Rohdaten verschiedener Analysengeräte wie z. B. Ionenchromatographie, HPLC wurden gerätespezifische Excel-Eingabemasken erstellt.
- Für die Auswertung der Daten wurde ein Validierungstool erstellt, welches in der Lage ist wichtige statistische Verfahrenskennndaten wie Standardabweichung, Bestimmungsgrenze und Konfidenzintervall zu ermitteln.

- Für die Erstellung von Prüfberichten wurden entsprechende Vorlagen erstellt, die über vordefinierte Codes verfügen wie z.B. für die Akkreditierungsinformationen (akkreditiert ja/nein sowie ein eventueller Akkreditierungscode) und zusätzliche Kommentare (z.B. Informationen über Fremdvergabe).
- Zusätzlich zu den "normalen" Parameterbezeichnungen (in deutscher Sprache) ist bei der Definition der Prüfparameter die Angabe eines alternativen fremdsprachigen Namen möglich.
- Für die Optimierung der Laboreffizienz wurde eine Übersicht über die Analysendauer einzelner Parameter implementiert werden.

4. Diskussion und Schlussfolgerung

Labordateninformationssysteme gestatten prinzipiell die EDV gestützte Abbildung aller in einem Labor relevanten Prozesse. Allerdings haben die meisten Labors im Laufe der Zeit eigene, für sie optimierte Arbeitsabläufe entwickelt. Es daher sinnvoll, Laborinformationssystem an diese Abläufe individuell anzupassen. Gegenüber "konventioneller" Arbeit auf Papier oder Bürosoftware (z.B. Führung von Listen mit Microsoft Excel etc.) bietet das im Rahmen des Projektes entwickelte methodische und programmtechnische Konzept die Möglichkeit das Standard LIMS uniLIME an die speziellen Anforderungen von Wasser- und Umweltlabors anzupassen.

Für die am Projekt beteiligten Partner ergeben sich daher unter anderem folgenden Vorteile:

Produktivitätssteigerung

- Alle relevanten Daten müssen nur mehr einmal eingegeben werden,
- Verwendung von Standardvorlagen (z.B. für Untersuchungsumfang von Proben),
- Mehrere Benutzer können gleichzeitig von ihrem Arbeitsplatz auf die Daten zugreifen (je nach Berechtigung),
- Vollautomatischer Ausdruck der Analysenberichte und Rechnungen, Statistiken, Aufstellungen.

Qualitätsverbesserung

- Reduktion von Eingabefehlern (Plausibilitätsprüfungen, Wegfall der mehrfachen Eingabe derselben Daten),
- jederzeitige Nachvollziehbarkeit der Anwenderaktionen (Audit Log),
- automatische Sicherstellung, dass die Berechtigungen laut QS eingehalten werden,
- wesentlich höhere Sicherheit gegen Datenverlust (bei sachgemäßen Backup-Prozeduren).

Gleichzeitig diene das Work package als interdisziplinäre Plattform zum Erfahrungsaustausch und zur Vertiefung der Kooperation zwischen den umweltanalytischen Labors der am K-Net beteiligten Institutionen.