

Abbildung von Rechtsgrundlagen in einem Laborinformationssystem

Umweltanalytik-Forum 2014, 24. September 2014

*Gerald Schuster, Advanced Technical Software,
Zippererstraße 15, 1110 Wien*
e-mail: office@ats-vienna.com Web: <http://www.ats-vienna.com>

Besonders in der Umweltanalytik sind die durchzuführenden Untersuchungen meistens durch Rechtsvorschriften vorgegeben. Typische Rechtsgrundlagen sind zum Beispiel:

- Allgemeine Abwasseremissionsverordnung
- Deponieverordnung
- Gewässerzustandsüberwachungsverordnung
- Trinkwasserverordnung

Diese Rechtsvorschriften haben – trotz unterschiedlichen Untersuchungsobjekten – recht viele Gemeinsamkeiten in Bezug auf das untersuchende Labor, so zum Beispiel:

- Hohe Probezahlen, damit verbunden ein stark kompetitiver Markt
- Oft Anwendung standardisierter (akkreditierter) Analysenverfahren
- Häufige Änderungen der Rechtsvorschriften, teilweise Unterschiede je nach Bundesland
- An sich globale Gültigkeit, oft aber individuelle Änderungen je Untersuchungsobjekt durch Bescheid

Diese Umstände lassen einen effizienten und kostendeckenden Laborbetrieb ohne geeignetes Informationssystem (LIMS = Laborinformationssystem) nur schwer zu. Dieser Vortrag beschäftigt sich daher mit den Voraussetzungen und der praktischen Umsetzung solcher Aufgaben in einem LIMS.

Beispiel Trinkwasserverordnung

Eine sehr häufige und zugleich recht anschauliche Anwendung sind Trinkwasseruntersuchungen nach der Trinkwasserverordnung. Wir wollen uns exemplarisch daher näher mit dieser Materie beschäftigen.

Wichtige Teilaspekte dieser Verordnung mit Relevanz für den Laborbetrieb bzw. die Umsetzung in einem Laborinformationssystem sind unter anderem:

Probenahmeplanung

Die Häufigkeit der Untersuchungen hängt einerseits von der Wassermenge ab, die die Wasserversorgungsanlage pro Tag liefert, andererseits aber auch von aktuellen Umständen (z.B. starke Regenfälle) oder den zuletzt gewonnenen Untersuchungsergebnissen (z.B. bei Nitrat). Zeitabstand bzw. die konkreten geplanten Probenahmeterminen müssen also je nach Anlage und zusätzlichen Faktoren individuell verwaltet werden können.

Analysenumfänge

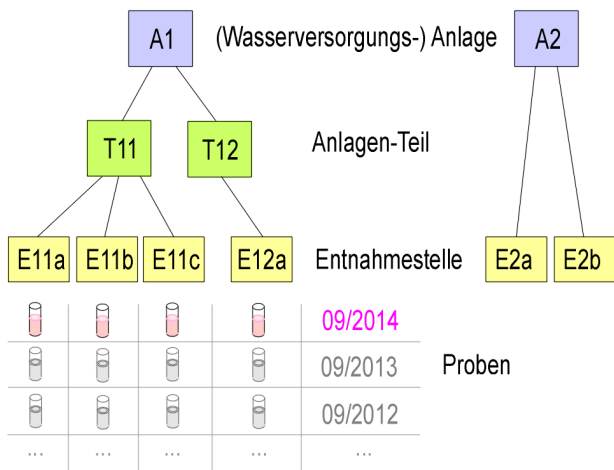
An sich legt die Trinkwasserverordnung fest, auf welche Parameter das Wasser untersucht werden muss. Konkret ergeben sich aber starke individuelle Unterschiede, abhängig von der pro Tag gelieferten Wassermenge, von der Behandlung (z.B. mit Chlor oder mit UV) und sonstigen lokalen Gegebenheiten. Wenn also nach Auffassung der Behörde bestimmte Parameter nicht in relevanten Konzentrationen zu erwarten sind, können sie aus dem Analysenumfang entfernt werden. Genauso gut aber kann ein erweiterter

Analysenumfang bei entsprechender Notwendigkeit vorgeschrieben werden, z.B. bei den zu untersuchenden Pestiziden.

Verwaltung von Anlagen und Probenahmestellen

Jede zu untersuchende Probe stammt aus einer definierten Entnahmestelle, deren konkrete Lage entweder vom Anlagenbetreiber selbst unter bestimmten Kriterien festgelegt oder aber von der Behörde vorgeschrieben wird.

Die Entnahmestellen selbst sind aber wiederum hierarchisch der Anlage bzw. definierten Teilen der Anlage zugeordnet, diese Zusammenhänge müssen auch im Laborinformationssystem verwaltet werden, um entsprechende Abfragen zu ermöglichen.



Vor-Ort-Messungen

Unmittelbar bei der Probenahme müssen bestimmte Parameter (z.B. Temperatur, pH-Wert oder Leitfähigkeit) bestimmt werden, der Großteil der Untersuchungen hingegen findet später im Labor statt. Für einen effizienten Betrieb müssen diese Messwerte daher mit möglichst geringem Aufwand zusammengeführt werden, das LIMS sollte daher die Möglichkeit bieten, die Messwerte vor Ort direkt zu erfassen und automatisch zu übertragen.

Ähnliches gilt natürlich für andere Informationen, die sich direkt vor Ort ergeben, insbesondere zum aktuellen Zustand der Anlage.

Messwert-Umrechnungen

Fast immer werden zusätzlich zu den direkt gemessenen Analysenparametern weitere Parameter benötigt, deren Werte sich durch Umrechnung aus den Analysenparametern ergeben. Diese Parameter können entweder für die Beurteilung selbst relevant sein (z.B. Gesamthärte als Summe von Calcium und Magnesium oder Summenparameter für polyzyklische Kohlenwasserstoffe oder Pestizide) oder nur als Kontrollgrößen zur schnellen Plausibilitätsprüfung (z.B. Ionenbilanzen).

Sowohl aus Effizienzgründen als auch aufgrund der späteren Nachvollziehbarkeit ist es ratsam, dass diese Berechnungen direkt im Laborinformationssystem stattfinden und nicht extern (z.B. Excel-Dateien) ausgelagert werden.

Spezifikationsprüfung

Für die meisten der erhaltenen Messwerte verlangt die Trinkwasserverordnung eine Prüfung, ob vorgegebene Spezifikationen eingehalten werden, also ob bestimmte Grenzwerte über- bzw. unterschritten werden. Dazu gibt es zusätzlich noch „Indikatorparameter“, die nicht direkt als Grenzwerte zu verstehen sind, sondern deren Überschreitung besondere Aufmerksamkeit und Erforschung der Ursache erfordern.

Die Grenzwerte sind an sich in der Verordnung vorgegeben, können aber in bestimmten Fällen von der Behörde individuell anders festgelegt werden, z.B. durch eine befristete Ausnahmegenehmigung. Das LIMS muss diesen Zusammenhängen Rechnung tragen können.

Behördenschnittstellen

In vielen Bereichen – so auch beim Trinkwasser – erwartet die zuständige Behörde nicht nur einen Untersuchungsbericht in frei definierbarem Format, sondern auch die Übermittlung der Messdaten und evtl. zusätzlicher Informationen in einem vorgegebenen elektronischen Format. Derzeit ist das in den meisten Fällen die Trinkwasserschnittstelle 2002 (eine einfache Textdatei nach Vorgabe der Behörde), demnächst soll die Einführung einer neueren XML-basierten Schnittstelle (WDV NÖ) erfolgen.

Natürlich sollte das LIMS die entsprechende(n) Schnittstellen direkt zur Verfügung stellen, um die Übermittlung der Daten an die Behörde ohne zusätzlichen Zeitaufwand zu ermöglichen.

Langjährige Aufbewahrung

Wie viele andere Rechtsvorschriften verpflichtet auch die Trinkwasserverordnung das Labor zur sicheren Aufbewahrung / Archivierung der Untersuchungsergebnisse für längere Zeit, im konkreten Fall bis zu 10 Jahre lang. Durch die zentrale Datenverwaltung mit entsprechenden Einrichtungen zur Datensicherheit und Zugriffsschutz bietet ein LIMS hier wesentlich bessere Voraussetzungen als andere Systeme zur Verwaltung der Messdaten.

Akkreditierung

Trinkwasseruntersuchungen dürfen in Österreich nur von akkreditierten Laboratorien durchgeführt werden. Konsequenzen daraus sind einerseits, dass nur akkreditierte Prüfverfahren eingesetzt werden dürfen. Andererseits hat die Akkreditierung auch Auswirkungen auf die Arbeitsabläufe im Laboratorium, verschiedene Maßnahmen im Bereich Qualitätsmanagement sind verpflichtend, beispielsweise Lenkung von Aufzeichnungen, Dokumenten, analytische Qualitätssicherung (z.B. Führung von Regelkarten) etc.

Diese Aufgaben lassen sich ebenfalls effizient und unter Einhaltung aller Dokumentationspflichten mit entsprechenden Funktionen in einem LIMS durchführen.

Umsetzung in einem LIMS

Zwei wichtige Kriterien für die optimale Unterstützung durch ein Laborinformationssystem sind eine möglichst lückenlose Abdeckung der notwendigen Arbeitsabläufe und die Flexibilität, auf die unterschiedlichen Analysenumfänge, Probenahmepläne, Spezifikationen je Anlage und natürlich die relativ häufigen Änderungen in den zugrunde liegenden Rechtsvorschriften zu reagieren.

Beim Laborinformationssystem „uniLIME“ der Advanced Technical Software sind diese Fragen folgendermaßen gelöst:

Alle notwendigen Funktionalitäten von der Probenahmeplanung über die Vor-Ort-Datenerfassung bis zur Berichterstellung und die Datenübertragung an die Behörde über die vorgeschriebene Schnittstelle sind direkt im LIMS vorhanden und müssen nicht an externe Werkzeuge (z.B. Microsoft Excel) ausgelagert werden.

Die meisten individuellen Anpassungen an die konkreten Anforderungen (z.B. Analysenumfang, Probenahmeplan oder Grenzwerte) können direkt durch den LIMS-Anwender bzw. den Systembetreuer im Labor vorgenommen werden, nur etwaige Änderungen in der Schnittstelle müssen vom LIMS-Hersteller programmiert werden. Also beispielsweise der Umstieg der alten Trinkwasser-Schnittstelle von 2002 auf die neue XML-basierte Schnittstelle.

Beispiele aus der Praxis

Im Folgenden werden noch einige dieser oben genannten Bereiche im Laborinformationssystem „uniLIME“ direkt am Gerät präsentiert.