

Analitikai mérések és a laboratóriumi munka adminisztrációja számítógépen (Laboratory Information Management System, LIMS)

Ritz Ferenc, Richter G. Rt Környezetvédelmi O. 1104 Budapest, Gyömrői út 19-21.
Kovács Zoltán, Labdata Informatikai és Szolgáltató Bt. 7633 Pécs, Dr. Dombay J. u. 4/A

1 Bevezetés

Az analitikai feladatok megoldása során sokféle műszert használunk. Vezérlésre, az eredmények számítására és közlésére a műszerszállítók által ajánlott és installált szoftverek szolgálnak. A mérés azonban nem ér véget a műszertől megkapott adat kiírásával. A számadatot (pl. csúcsterület) értelmezni kell, összehasonlítani az ismert standard eredményekkel. Ezt elvégezhetjük a műszerhez installált vezérlő program segítségével is, de mivel a körülmények változhatnak, sokkal gyakoribb az **UTÓLAGOS**, nem a kiértékelő szoftver segítségével történő számítás, értékelés. Ez azonban azt jelenti, hogy kiléptünk az ellenőrzött eredményszámítás köréből, vagyis teljesen mindegy, hogy a készülék szoftvere megfelel-e a 21CFR-11 előírásainak.

A készüléktől kapott adattömeg ugyanakkor még nem eredmény! El kell végeznünk az adatok csoportosítását, bizonyos fajta értékelését, és áttekinthető formában, értelmezve, meg kell adni a felhasználónak, a megrendelőnek, vagyis jegyzőkönyvet kell összeállítanunk.

Folyamatos gyártási eljárások (kőolajleparlás, -feldolgozás, olefintermelés, polimer gyártás, nyomdaipar stb.) során a folyamatból kikerülő késztermék minőségét rendszeresen ellenőrzik, és a kapott eredmények alapján úgy változtatják a berendezések paramétereit, hogy a késztermék minősége "egyforma" legyen. Ugyanezt látjuk a szakaszos gyártások (gyógyszer, élelmiszer, gépészeti termék, TV, híradástechnikai berendezés gyártása stb.) esetében is, legfeljebb az összefüggés illetve a visszacsatolás a gyártási folyamatba nem olyan szoros, mint a folyamatos technológiákban.

Egy termék előállításánál tehát sokszor és sokat mérünk egy-egy paraméter sort, de részletes adatfeldolgozást ezekből ritkán készítünk. A lényeg ugyanis az, hogy a mért értékek egy határértéken belül legyenek. Az adatokat meg is kell őrizni, időnként visszakeresni, jelentéseket, statisztikákat készíteni belőlük. De ha a gyártási folyamat egyéb adatait is figyelünk, rögzítenünk kell, mint ahogy azt a gyártási előírások rögzítik, jól használható következtetéseket vonhatnánk le, ha ezeket az adatokat összevethetjük egymással.

Fontos megjegyezni, hogy most nem a folyamatirányításban szerepet játszó "on-line", (folyamatosan mérő és beavatkozó) mérésekről van szó, hanem azokról, amelyek nem automatizálhatók, illeszthetők bele a gyártási folyamatba. Szükségképpen mintavétel-mérés jellegű, szakaszos analitikai mérésről.

Ezeknek a méréseknek az esetében a nyilvántartás (adatgyűjtés) integritását, helyességét és pontosságát a minőségbiztosítás, GLP vagy az akkreditálási követelmények egyértelműen meghatározzák, **de nem írják elő az elektronikus tárolást**. Nagymennyiségű adat feldolgozását azonban hatékonyan csak az elektronikus formában tárolt eredmények esetén lehet elvégezni. Ha nem rendelkezünk ilyen nyilvántartással, akkor az eredményeket egyenként kell előkeresni, beírni az EXCEL táblába, majd elvégezni az adatelemzést. Ugye, mennyire nem hatékony? Kinek van erre energiája, de legfőképpen ideje?

2 Mi az a LIMS?

A LIMS, mint az angol rövidítés alapján is kiderül, egy laboratóriumi információs rendszer, amely a laboratórium vezetése és a megrendelők számára nyújt információt. Megrendelőnek számítanak ebben az értelemben a vállalati szervezetbe ágyazott vizsgálólaborok felhasználói (üzemek, raktárak, technológiai folyamat ellenőrző egységek) és a vállalati csúcvezetők is.

3 A szabványok és a LIMS

A laboratóriumok működését egyrészt speciálisan a laboratóriumi munka szervezésére vonatkozó szabványok, másrészt nemzetközi egyesületek a hivatalos kormányzati szervek által lefektetett elvek szerint szabályozzák. A teljesség igénye nélkül ilyen előírásokat fogalmazznak meg az FDA (az amerikai élelmiszerhivatal), az EPA (az amerikai környezetvédelmi hivatal), a gyógyszer analitikát szabályozó GLP (a „jó

laboratóriumi gyakorlat”), illetve a nemzetközi akkreditáló testületek (pl. TÜV, NAT stb.). Ezeknek a testületeknek az elvárásait a legtöbb esetben írásban is rögzítik, sokszor nemzetközi szabványként jelennek meg. Ha olyan mérési eredményeket akarnak kiadni, amelyeket mindenütt a világon elfogadnak, akkor ezeket az előírásokat be kell tartani.

A hazai gyakorlatban a két legfontosabb előírást a laboratóriumok, illetve a minőségbiztosítás működésére, eredményeinek használatára az MSZ ISO 9000 szabványsorozat, a működésre az akkreditált laboratóriumokra vonatkozó MSZ EN 17025 számú szabvány fogalmazza meg. Mindkét szabványra jellemző a munkafolyamat szabályozásán túl a dokumentálás és a hibaszámítás, valamint a hibás mérések, eredmények javításának illetve a partnerekkel (megrendelők, alvállalkozók) való kapcsolattartás módjának előírása is. A laboratóriumi munkát nagyon részletesen taglalt követelmények szerint kell végezni.

Ha egy laboratórium valamilyen paramétermérést végez, azt rendszerint valamilyen szabvány követelményeinek betartása mellett teszi. Ha az adott paraméter, anyagösszetétel mérésére nincs általánosan elfogadott eljárás, akkor a módszert nagyon részletes dokumentáció rögzítésével kell elfogadtatni (validálás).

Ezek az előírások elsősorban a mérések előkészítésére, a méréshez szükséges eszközökre, és a mérési körülményekre vonatkoznak. Egy ilyen szabványban, validált eljárásban ezen kívül még az eredmény kiszámításának és megadásának módját is előírják. Más szabványok a mintavételre, a minta előkészítésére, a minta kezelésére, tartósítására vonatkoznak.

A mérési szabványok, a munkafolyamatot leíró eljárások, melyek a nemzetközi gyakorlatban általánosan elfogadottak, tehát meghatározzák egy laboratórium teljes működését.

A LIMS, mint információs rendszer, meg kell, hogy feleljen a fentiekben tárgyalt szabványelőírásoknak – vagyis a LIMS-nek hatékonyan támogatnia kell a gyors, pontos laboratóriumi gyakorlatot. Hogy ezt a támogatást milyen számítógépes eljárások segítségével végzi el, azt az adott laboratórium egyedi körülményei nagymértékben befolyásolják.

A szabványok közül az akkreditálásra vonatkozó, MSZ EN 17025 sz. szabálygyűjtemény részletes ajánlásokat ad a laboratóriumi munka szervezésére. A LIMS eljárásainak ismertetését e szabvány szerint foglaljuk össze. Ennek egyszerű oka, hogy a hazai laboratóriumok akkreditálását is e szerint vizsgálják, tehát nagyon jó modellt jelent a legfontosabb kérdések tárgyalására.

A szabvány egyes fejezetei az alábbi témákat foglalják össze:

Irányítási követelmények

Tevékenységi terület

Szervezeti séma

Irányító személyzet (minőségügyi megbízott kijelölése, munkaköri leírások, továbbképzések)

Minőségügyi Kézikönyv összeállítása

- Minőségpolitikai Nyilatkozat
- Mérő és vizsgáló eszközök, berendezések, vizsgálati módszerek és eljárások
- A dokumentáció rendje
- Műszaki irányítás és helyettesítések (személyi felelősség)

A dokumentumok kezelése, jóváhagyása, kibocsátása, módosítása

Ajánlatkérések, szerződések átvizsgálása, az ügyfél tájékoztatása (szerződéskötések rendje)

Az igénybe vett szolgáltatások és szállítások kiválasztása és nyilvántartása (vegyszerek, fogyóeszközök)

Panaszok, a nem megfelelő vizsgálatok ellenőrzése és kezelése

Helyesbítő tevékenységek

Megelőző tevékenységek

A feljegyzések kezelése

Belső auditok

Vezetőségi átvizsgálások

Műszaki követelmények

A laboratóriumi személyzet (szükséges szakképzettség, munkaköri leírások)

Elhelyezési és környezeti feltételek

Vizsgálati és kalibrálási módszerek és a módszerek érvényesítése

- A módszerek kiválasztása
- nem szabványos módszerek validálása
- a mérési bizonytalanság becslése
- az adatok ellenőrzése

A berendezések felsorolása, kezelésének leírása

Kalibrálás

Mintavétel

A vizsgálati és a kalibrálási tárgyak kezelése

A vizsgálati és a kalibrálási eredmények minőségének biztosítása

Az eredmények közlése

A LIMS –nek támogatnia kell a fenti eljárásokat ahhoz, hogy hatékony eszköz legyen a laboratórium dolgozói és a vezetők kezében.

4 A laboratórium és a LIMS

Az előző fejezetben röviden összefoglalva kitértünk arra, hogy ha egy LIMS rendszert akar a laboratórium alkalmazni, akkor annak meg kell felelnie a vonatkozó szabványok előírásainak. Ha a laboratórium információs rendszerét a laboratórium vezetése számítógéppel kívánja megoldani, az lényegesen többet jelent, mint a jelenlegi gyakorlat, amikor a számítógépet az adatok mechanikus feldolgozására mintegy elektronikus „kockás füzet”-ként használják.

A LIMS nemcsak egy a mostani információs társadalomban divatos számítógépesítési feladatok közül, hanem a munkát hatékonyan segítő, nélkülözhetetlen eszköz.

A laboratóriumi munka adminisztrációjának segítése természetesen több, mint a levelezés, a megrendelések, jegyzőkönyvek nyilvántartása. Ha csak erről lenne szó, akkor elegendő lenne egy dokumentumkezelő rendszer, ami lényegében az elektronikus könyvtár funkciójával rendelkezik.

Természetesen a LIMS-től nem csak ezt várjuk el. Pontosabban azt az adatfeldolgozási hiányt kell betöltenie, ami a műszerektől kapott adatok és a mérési eredmények között fennáll. Vagyis ellenőrzött módon kell kiszámolni az eredményt az adatokból, és a jegyzőkönyvet elkészíteni, ha lehet, automatikusan. Nézzük, hogyan néz ki egy ilyen laboratórium.

4.1 A laboratórium felépítése

Egy laboratórium lehet egy vállalat része, és lehet „a” vállalat (önálló laboratóriumok). Lehet egy telephelyen, lehet szétszórva az ország vagy a világ távoli részein, egységes irányítás alatt, vagy önállóan szervezi a munkáját. A mérések típusa, az eredmények alkalmazásának módja is különböző:

- **Üzemi labor**, ahol egy üzem termékének adott paramétereit (az egyes technológiai lépések után kilépő köztes termékek összetétele, üzemi higiénia, kristályok morfológiai jellemzői), késztermékeinek jellemzőit mérik, ráadásul, pl. **folyamatos műszakban**, műszerek (pl. GC, HPLC, spektrofotometria) segítségével, vagy csak egyszerű titrálással, adott esetben érzékszervi vizsgálattal (kóstolás), vagy mikroorganizmusok fejlődésének elemzésével (toxikológia, fertőzések vizsgálata).
- **Kutató labor**, ahol az új, fejlesztés alatt álló termékek technológiai, analitikai, minősítési módszereit kísérletezik ki, **új analitikai eljárások** kidolgozásával, alkalmazásával foglalkoznak (ide sorolható, pl. az egyetemi analitikai tanszékek laboratóriumai is). A mérések célja, eredménye a sorozatgyártás, a szabványosítás analitikai feltételének biztosítása.
- **Minőségvizsgáló labor**, ahol a termék, és/vagy a beszállított alapanyag adott paramétereit mérik, és a forgalomba hozatal, illetve a termelési folyamatban való felhasználhatóság függ az eredménytől.
- **Vizsgáló labor**, ahol **hatósági méréseket** végeznek, szintén műszerekkel, vagy egyszerűbb eszközökkel, és a forgalomba hozatal, vagy az engedély kiadása függ az eredménytől.
- **Kalibráló labor**, ahol a cél a mérőeszközök, mérési etalonok vizsgálata, az eredmény pedig az etalonok használatba vételének feltétele.

Mindezeket a feltételeket egy rövid összefoglalóban nem lehet részletesen tárgyalni, de ahogy ebből a vázlatos felsorolásból is kiderül, **nem létezik olyan LIMS, amely minden funkciót használatra készen tartalmaz**. Ezért az alábbiakban egy modell labor funkcióit elemezzük, kitérve azokra a specifikus folyamatokra, amelyeket támogatnia kell egy használható LIMS-nek.

Modell laboratóriumunk, melynek segítségével illusztráljuk a LIMS lényeges eljárási elemeit, a környezet és munkavédelem területén végez vizsgálatokat. Az ide sorolható mérések közül az alábbiakra vannak akkreditálva:

- **Mintavétel** (szilárd, folyékony anyagok, talajminták, kontrollminták, szennyvíz és talajvízminták vétele)
- A **pH** (szennyvizetek, hulladékok, ivóvíz), **vezetőképesség** (ivóvíz, kazántápvíz), **oldott oxigén** (szennyvíz, kazántápvíz) mérése.

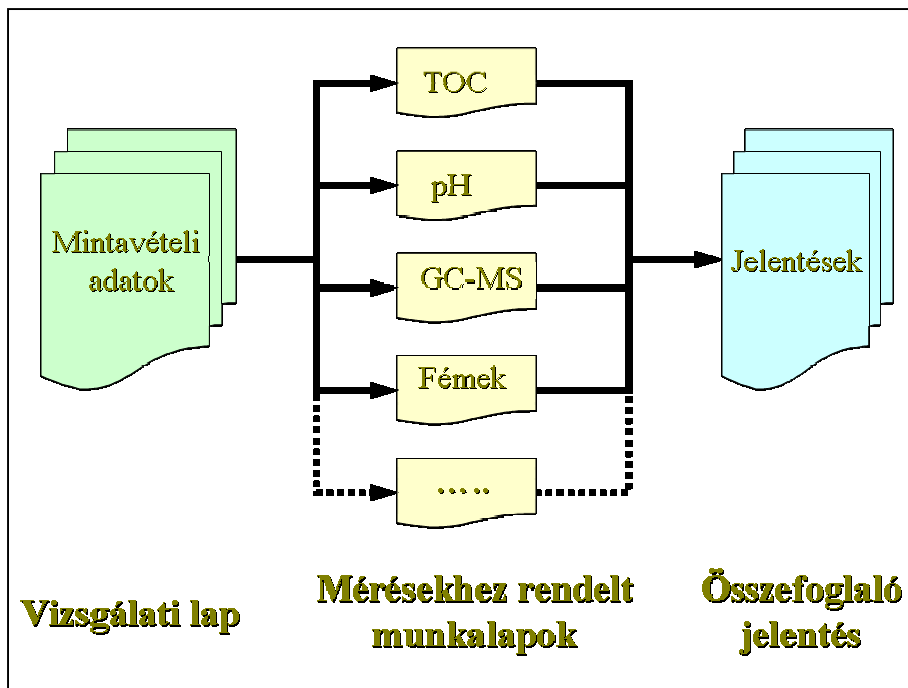
- **Hulladékok égéshője, halogéntartalom** (műszeres illetve titrálásos módszerrel is), hulladékokban, szennyvizekben. A hulladékoldószeresek illetve a visszaforgatott **oldószeres tisztaságának** vizsgálata (GC elemzések).
- **KOI (Kémiai Oxigén Igény), TOC (Total Organic Carbon), szerves oldószertartalom** (GC, HPLC), a szennyvizekben, talajvizekben.
- **Ammónia**, összes **nitrogén** tartalom (hagyományos és műszeres módszerrel is), a szennyvizekben, talajvizekben.
- **Nehézfémek** a szennyvizekben, talajvizekben (AAS módszerrel).
- **Toxicológiai** vizsgálatok a szennyvizekben, talajvizekben (Daphnia-teszt, csíranövény-teszt).
- Munkahelyi légtér (**szerves oldószeres, portartalom**), munkahelyek **megvilágításának, higiénijának, zajterhelésének** mérése. A higiénias mérések eredményeképpen hatósági jogkörrel is bír, vagyis szünetelteti a termelést, ha nem megfelelő az eredmény.
- A felhasznált anyagok, termékek fizikai-kémiai paramétereinek mérése a gyártás, szállítás, alkalmazás biztonságának növelése érdekében. Ezek a paraméterek: a **hőstabilitás, robbanási koncentrációk, reakcióhő**.
- **Szennyvízkezelő** üzemeltetéséhez szükséges analitikai mérések, **műszakonként** legalább egyszer a **KOI, TOC, szerves oldószertartalom**, illetve esetenként az iszap **víz-tartalmának, szerves anyag tartalmának, nehézfém-tartalmának** mérése az ártalmatlanításhoz szükséges előírások betartása miatt. A beérkező **segédanyagok minőségét** vizsgálnia kell, és az alkalmazás feltétele, hogy az anyagok paramétereik megfelelőjenek a szabványnak.
- **A termelő üzemek részéről igény szerinti vizsgálatok a gyártás anyagmérlegének összeállításához. Ez igen komplex vizsgálatot, esetenként egyedi módszer alkalmazását jelenti.**

A fenti laboratórium működése kapcsán a legtöbb LIMS eljárást alkalmazni kell, természetesen az ettől eltérő követelmények is követhetők. Fontos megemlíteni, hogy az egy szervezetbe tartozó modell labor vizsgálóhelyei több telephelyen vannak szétszórva, viszont egymás mérési eredményeit munkájukban fel kell használniuk. Természetesen, az irányító szervezet, vagyis a főnökség, egy sokadik helyen található, praktikusán a vállalat központjában. Az információ áramlása ilyen esetben mindig nehézkes, az eredmények sokszor nem jutnak el az érintett egységekhez. A felső vezetés tájékoztatása pedig szinte lehetetlen, mivel az összefoglaló eredmények elkészítése akár napokba kerül.

4.2 A laboratórium papíralapú adminisztrációja

Az adminisztrációt szűkítsük le a mintavételtől az eredmények kiadásáig, vagyis a jegyzőkönyv összeállításáig. Minőségbiztosítási szempontból természetesen a többi terület is fontos, azonban a dokumentálásnak az a része, ami ritkán változik (pl. a minőségügyi kézikönyv, a mérőkészülékek, megrendelők, stb. törzsadattára) statikus adatfeldolgozási feladatot jelent, vagyis lényegében dokumentum feldolgozás és nyilvántartást.

A dinamikus adatfeldolgozás az a terület, amivel az analitikával foglalkozók naponta találkoznak. Ez a mintavételtől a jelentés összeállításáig tartó munkafolyamat, ami magába foglalja a minta beérkezését, a mérési feladatok szétosztását, a mérés elvégzésének, az eredmény kiszámolásának és megadásának folyamatát egyaránt. A követelményeknek való megfelelés érdekében ennek a munkának minden fázisát hitelesen dokumentálni kell.



1. ábra a papír alapú adminisztráció tevékenységi sémája

Az előzőekben bemutatott labor alapú adminisztrációja a 2. ábrán látható mintavételi lap kitöltésével kezdődik.

Mintabeérkezés dátuma:										Minta jele:		
Vizsgálati lap												
Munka megrendelője:												
Mintavető neve:												
Mintavétel ideje:												
Minta típusa, mennyisége:												
Gyártás megnevezése:												
Gyártás száma:												
Mintavételi szabvány száma:												
Mintavételi hely pontos leírása:												
Amintavétel körülményei:												
A minta ismert jellemzői:												
Egyéb információk:												
A vizsgálat célja:												
A kért határidő:												
Agár	Élesztő	pH	Ózonszám	szén-dioxid tartalom	SDI	Oldóvíz (pA/n)	Disszert (BCE)	SiO ₂	Fe	Ca	P ₂ O ₅	Flu
Kérlek jelezd be a mérésiértelmezésről												
.....											
Adó (név, telefonszám)										Átvétő		

2. ábra egy lehetséges mintavételi lap formátum

A mintavételi lapon megjelölt vizsgálatok alapján a mérésekhez rendelt munkalapok kitöltésével dokumentálják az elvégzett feladatot. (3. ábra)

A minta a KVO-ba érkezett:	Üzenet jele	Iktatószáma a KVO-ban
V_0 : a meghatározáshoz használt vívminta térfogata: ³ cm
V_1 : a nagyobb áthalogatott vas(II)ammónium-sulfát oldat: ³ cm
V_2 : a vívminta áthalogatott vas(II)ammónium-sulfát oldat: ³ cm
V_3 : a kisebb áthalogatott vas(II)ammónium-sulfát oldat: ³ cm
c : a vas(II)ammónium-sulfát oldat koncentrációja ($c = 2 A/V$) ¹ mol/dm
8000: 1/2 O ²⁻ -nek megfelelő tömeg, mg/dl		
Az eredmény kiszámítása és megadása:		
$KOI = \frac{8000 \cdot c \cdot (V_1 - V_2)}{V_0} \text{ [mg/dm}^3\text{]}$		
A minta kémiai oxigén igénye: ³ mg/dm	
Dátum:	A mérést végezte:	Ellenőrizte:

A minta a KVO-ba érkezett:	Üzenet jele	Iktatószáma a KVO-ban
V_0 : a meghatározáshoz használt vívminta térfogata: ³ cm
V_1 : a nagyobb áthalogatott vas(II)ammónium-sulfát oldat: ³ cm
V_2 : a vívminta áthalogatott vas(II)ammónium-sulfát oldat: ³ cm
V_3 : a kisebb áthalogatott vas(II)ammónium-sulfát oldat: ³ cm
c : a vas(II)ammónium-sulfát oldat koncentrációja ($c = 2 A/V$) ¹ mol/dm
8000: 1/2 O ²⁻ -nek megfelelő tömeg, mg/dl		
Az eredmény kiszámítása és megadása:		
$KOI = \frac{8000 \cdot c \cdot (V_1 - V_2)}{V_0} \text{ [mg/dm}^3\text{]}$		
A minta kémiai oxigén igénye: ³ mg/dm	
Dátum:	A mérést végezte:	Ellenőrizte:

3. ábra egy lehetséges mérési munkalap formátuma

Majd végül a munkalapok adataiból összeszerkesztik a jelentést, az akkreditálási előírásokban lefektetett formátumnak megfelelően. (4. ábra)

Szennyvíz vizsgálati eredmények			
Vizsgált jellemző megnevezése	Me	Eredmény	Alkalmazotti szabvány száma
oldott és lebegőanyag tartalom	mg/dm ³		MHC 2003-1973
pH			MHC 2004-1974
Ammóniumion tartalom	mg/dm ³		MHC 2009-668 (Utolsó a 3. pont)
Vízal nem elegendő szerves oldószertartalom (Nárcisszon)	cm ³ /dm ³		MHC 2004-1985
Kémiai oxigénigény (KOI)	mg/dm ³		MHC 80-0200-661
Zár és olajtartalom (SZOE)	mg/dm ³		MHC 2002-191 + Utolsó a 3. pont MHC 148-12 Spont
Cink	mg/dm ³		MHC 148-2-1986 (6. pont szerinti)
Kadmium	mg/dm ³		
Vas-MS	mg/dm ³		
Összes króm	mg/dm ³		
Ólom	mg/dm ³		MHC 2002-191 + Akkreditálási előírás MHC 148-4-1986 MHC 148-6-1986
Nékönszénhidrogén tartalom (GOC)	µg/dm ³		

A laboratórium véleménye, javaslata:

A vizsgálati eredmények csak a megvizsgált mintákra vonatkoznak.

A jegyzőkönyv csak a laboratóriumvezető írásbeli engedélyével és csak teljes terjedelmében másolható.

Budapest,
Laboratóriumvezető

4. ábra egy lehetséges eredményközlő lap (vizsgálati jegyzőkönyv)

4.3 A LIMS feladatai

A LIMS lényegi feladatának az információszervezést és adattárolást tekinthetjük. Információ alatt bármilyen, a laboratóriumba érkező vagy ott keletkező adatot értünk, amely valamilyen szempontból fontos és szükséges lehet a labor szakmai és ügyviteli működése szempontjából. Ez lehet egy mintavételi hely azonosító, egy mérés eredménye és annak értékelése, egy műszer hitelesítési időintervalluma, egy feladatlap vagy akár egy postai feladó jegyzék is.

4.3.1 Főbb eljárások

Főbb eljárások alatt a laboratórium szakmai munkáját támogató LIMS folyamatokat értjük.

4.3.1.1 Adatgyűjtés és tárolás

A LIMS egyik fő feladata a keletkező adatok **begyűjtése** és az adatok **elektronikus adatbázisban tárolása**, a laboratórium folyamataival összhangban. Az adatgyűjtést most a **beviteli mód** szempontjából tekintjük át.

- **Manuális adatgyűjtés:** a rendszerbe billentyűzetten keresztül, kézzel bevitt adatok
- **Félautomatikus adatgyűjtés:** pl. vonalkódos adatbevitel, műszeres adatkapcsolat (pl.: AAS, GC) Ez a fajta adatkapcsolat költséghatékonyan leginkább a PC-vel rendelkező műszerrel valósítható meg. Az egyszerűbb felépítésű műszerek esetén (ahol nincs PC, mint pl.: mérleg, pH-mérő) szükség van egy interfészre (adat-átalakítóra) amely a műszer és a LIMS rendszer közötti párbeszédet valósítja meg. Ennek költsége mind gyári, mind más módszerrel elérheti magának a műszernek az árát is. Ezért ebben az esetben mindenféleképpen érdemes költséghatékonyági vizsgálatokat végezni.
- **Automatikus adatgyűjtés:** a LIMS rendszeren kívüli elektronikus adatbázison keresztüli adatkapcsolat (pl.: Vállalat Irányítási Rendszer, VIR) A LIMS-ek általában szabványos adatbázis átalakítóval rendelkeznek, így viszonylag egyszerűen megvalósítható, hogy pl. a raktárnyilvántartásból vagy a termékadatbázisból adatokat vegyünk át a rendszerbe, és azokat felhasználjuk a munkánk során.

Az adatok tárolása elektronikus adatbázisban történik, amelynek a struktúráját (felépítését) a laboratóriumi adatkapcsolatok határozzák meg. Ezt a fejlesztés folyamán nagyobb hangsúllyal kell kezelni, mert érdemi befolyása lehet a rendszer használatára.

Az adatok egy része a rendszer fejlesztése során töltjük be, ezek a törzsadatok; míg egy másik része a munka során keletkezik, és folyamatosan kerülnek rögzítésre a rendszerbe. Az adat konzisztencia végett érdemes az ésszerűség határain belül (pl. ha egy adatot többször is fel kívánunk használni) a lehető legtöbb adatot törzsadat formájában felvenni a rendszerbe. Így elkerülhető, hogy egy adat többféleképpen legyen tárolva az adatbázisban, és így a statisztikai eljárások is hatékonyak lesznek.

Törzsadatok tipikus köre:

- Partnerek
- Vizsgálatok
- Mintaeljárások vagy specifikációk
- Mértékegységek
- Mintavételi helyek

4.3.1.2 A munkafolyamatok támogatása

A LIMS következő nagyobb funkcionalitású feladata a munkafolyamatok támogatása, mint pl. a mintavétel, mintaszétosztás.

- **Mintavétel:** mintavételezések ütemének tervezése, valamint a mintavételt kísérő adminisztráció biztosítása a cél. A mintavételi ütemtervvel előre láthatóvá válik a laboratórium munkarendje, és így elkerülhetők az összecsúszások. A Mintavételi Lap segítségével rendszerezett formában van lehetőség a mintára vonatkozó információk összegyűjtésének. Vállalati laboratórium esetén a mintavételezést a termelő vagy a raktár szervezet is végezheti, és így a LIMS segítségével a laboratórium már a mintavételezési szándék jelzésével értesülhet az új feladatról, amit könnyen beilleszthet a napi munkarendbe.
- **Mintaadminisztráció:** mintaadminisztráció alatt a minta rendszerbe való iktatását, és a mintával való elvégzendő feladatok meghatározását értjük. Ha a mintához előre rögzített specifikációk, mintaeljárások kapcsolhatók, akkor a LIMS a mintaadminisztrációt követően automatikusan ki tudja osztani a feladatokat a laboratórium dolgozói között, valamint meg tudja határozni, hogy a minták melyik laborcsoportba kerüljenek beszállításra. A vizsgálatok elvégzése után az eredmények vagy rögtön a rendszerbe rögzíthetők vagy a Feladat kiosztó lapon keresztül kerülhetnek vissza a rendszeradminisztrátorhoz, aki rögzíti azokat a LIMS-be.
- **Eredményellenőrzés:** az eredményellenőrzés többféleképpen történhet. Például, lehetőség van dupla beíráásra, amikor ugyanazt az eredményesort két személy viszi be a rendszerbe, és ha az adatsorok nem konzisztensek (azonosíthatók) egymással, akkor hibajavításra szólítja fel a rendszer az adatbevitelőket, így biztosítva az elgépelésből származó hibákat. Természetesen fél-automatikus vagy automatikus adatgyűjtés esetén ez a módszer nem szükséges.

- **Jóváhagyás és eredményközlés:** a jóváhagyás több szinten is történhet, mint pl. jóváhagyja a laboratórium csoportvezetője, majd az adott osztály vezetője és legutoljára a főosztályvezető. Többszintes jóváhagyás esetén nagymértékben biztosítható, hogy helyes eredmények kerüljenek ki a laboratóriumból. Az eredményközlés történhet papír alapon (rendszerből nyomtatható jegyzőkönyv) vagy elektronikusan is. Az elektronikus eredményközlést jelenleg inkább csak tájékoztatásra használják (ami már egy adott laboratóriumnak óriási segítség lehet, hiszen egy végtermék minősítő laboratórium esetén – ahol 10 percenként csörög a telefon azonnali eredményszolgáltatás miatt – ezzel már egy ember harmad-fél munkaideje megtakarítható), mert itthon még nem teljesen alakult ki és terjedt el az elektronikus aláírás elterjedését segítő technológia.

4.3.1.3 Minőségbiztosítás

A minőségbiztosítás támogatása kiemelt feladata a LIMS-nek. Ez alatt egyrészt az adott laboratórium minőségbiztosítása alapján meghatározott folyamatok maximális támogatása, másrészt pedig egy adott minta visszavezethetősége és követhetősége értendő.

4.3.1.4 Statisztika, eredménykiértékelés

Statisztikánál kétfajta értékelésről beszélhetünk. Egyik a minták vizsgálati eredményéhez kapcsolódik a másik meg a munkához.

- **Eredménystatisztika:** a minták vizsgálati eredményeiből képzett statisztika, amely segítségével láthatóvá válhatnak mindenféle mért paraméterek trendjei.
- **Munkastatisztika:** az általános statisztika (pl.: minta darabszám adott időszak alatt) mellett itt elsősorban a laboratórium munkavégzésének hatékonysága mérhető, mint pl., egy adott vizsgálat elvégzéséhez szükséges valós időtartam összehasonlítása személyek szerint.

4.3.2 Egyéb eljárások

4.3.2.1 Ügyvitel

Egy LIMS feladatai közé a napi ügyvitel támogatása is hozzátartozik. Ez leginkább az önálló laboratóriumok esetén szükséges, ahol külsős megrendelők vannak.

4.3.2.2 Raktárnyilvántartás, műszernyilvántartás, oktatási napló

A mérések és az eredmények szervezésén túl, ahhoz nem közvetlenül csatlakozó adatok nyilvántartása is a LIMS feladata lehet. Ennek megléte esetén naprakészen figyelhetjük az analitikában használatos anyagok, tárgyi eszközök készleteit, illetve a műszerek validálási, kalibrálási állapotát. Előre tervezhetjük a kalibrálást, a karbantartást, a dolgozók oktatási kötelezettségeit.

4.4 A LIMS működése

4.4.1 Egy minta útja a LIMS-ben

Laboratórium általi mintavétel, mintaindítás

Laboratórium saját hatáskörébe tartozó rendszeres vagy eseti vizsgálatok esetén a mintaindítást és a mintavételezést is a labor végzi.

Megbízó által kért mérés

Cégen belüli vagy kívüli szervezeti egység megrendelésére kért vizsgálatok. Mintaindítást és mintavételt a laboratóriumok iránymutatása alapján a megbízó végzi.

Megbízói megrendelés:

Megbízói megrendelés esetén a rendszerből (melyet a rendszeren belüli intraneten keresztül a saját azonosítójával érhet el) tud tájékoztatást kapni:

- a megrendelhető vizsgálatokról,
- a vizsgálatok elvégzésének módszeréről,
- a vizsgálat várható időtartamáról (és áráról) illetve
- a laboratórium által kidolgozott mintavételi módszerekről.

Mintavételezési ütemterv:

A laboratóriumok a saját hatáskörbe tartozó vizsgálatoknál előre elkészítik a rendszeres vizsgálataik ütemezését (főbb ciklusok: éves, negyedéves, havi). Ütemezett vizsgálat előtt egy héttel (vagy meghatározott riasztási időponttal) a rendszer figyelmezteti laborvezetőt és a mintavetőt (amennyiben megadásra került) a közelgő mintavételi feladatról.

Mintaindítás: automatikus vagy kezelői segédlettel. Iktatószám, mintaazonosító generálása, mintavételi „kísérőlap” nyomtatása a mintavételre vonatkozó adatok azonnali, helyszíni dokumentálásának segítéséhez.

Mintavétel, vizsgálati lap elkészítése:

- **Ütemterv alapján:** Az ütemtervben meghatározott hely(ek)en és módszerrel elvégzett mintavétel egyedi adatainak (időpont, pontos hely, megjegyzések, esetleges tervtől való eltérések oka) rögzítése a rendszerben a „kísérőlap” alapján. Az adatok elmentése után előáll és nyomtatható a Vizsgálati lap.
- **A Megbízó kérése alapján:** a Megbízó tölti ki a mintaindításhoz szükség adatlapot, melyet az intraneten keresztül érhet el a saját azonosítójával.

Az adatlaphoz tartozó fontosabb adatok:

- mintára vonatkozó adatok,
- mintavételre vonatkozó adatok,
- kért vizsgálatok (választható listából illetve speciális vizsgálatoknál szövegesen).

A megadott adatokhoz a rendszer legenerálja az iktatószámot és a szükséges egyéb azonosítókat, melyekkel a Megbízó kinyomtathatja a Vizsgálati lapot.

Mintavétel után belső postával kell a mintát a hozzátartozó iktatószámmal elküldenie a vizsgáló laboratóriumnak, ahol az iktatószám alapján elérhető a Vizsgálati lap.

Amennyiben egy mintavételhez több minta tartozik, mindegyikhez új al-szám kerül kiosztásra.

Vizsgálati lap ellenőrzése

A laborvezető, vagy távolléte esetén a kijelölt személy (pl.: beosztott vegyész mérnök), saját hatáskörben a beérkezett mintát és adatait (mintavételi körülmények, elrendelt vizsgálatok) ellenőrzi, szükség esetén módosíthatja az elrendelt vizsgálatokat, illetve új mintavételt rendelhet el.

Vizsgálat

Felhasználónkénti eredményközlő lap nyomtatása után előáll a személyenkénti vizsgálati feladatlista. Vizsgálatok elvégzése után az eredményeket eltárolják, illetve ezekkel számolásokat végezhetnek, és szöveges véleményezéssel is elláthatják. Az eredmények típusa lehet szám, számsorozat, kép, szöveges jellemzés.

Jóváhagyás

A mintához tartozó összes vizsgálat beérkezése után a laborvezető átnézi az adatokat, és saját hatáskörben dönt a jóváhagyásról. Amennyiben valamely eredmény esetén probléma merül fel, (vagy egyéb hiba esetén) dönthet a mérés vagy a mintavétel megismétléséről.

Vizsgálati jegyzőkönyv nyomtatás (publikálás)

A jóváhagyási folyamat után a Vizsgálati jegyzőkönyvet ki kell nyomtatni. Új mintavétel elrendelése esetén a minta érvénytelenítéséről és okáról kell kiállítani jegyzőkönyvet, új mérésnél a laborvezető dönt a megjegyzésben való szerepeltetésről a hiba okától függően.

A rendszerben biztosítani kell a vizsgálatok elektronikus publikációját is, melynek két formája lehetséges:

- Védett: csak egy bizonyos kör férhet hozzá azonosítás után
- Nyitott: cégen belül bárki hozzáférhet azonosítás nélkül

Mindkét esetben külön jelölni kell ezeket; az alapértelmezés szerint elektronikusan nem férhet hozzá, csak a laboratórium kijelölt munkatársai illetve felettes szervezeteinek kijelölt dolgozói.

A Vizsgálati jegyzőkönyv kinyomtatásával tekinthető a minta lezártnak.

Reklamációkezelés

Reklamációkezelésnek csak a laboratórium oldali részét támogatja.

A laborvezető dönt új mintavételről vagy újramérésről. Mindkét esetben jelezni kell a rendszerben a jóváhagyás utáni intézkedést, azaz érvénytelenítésre kerül az eredeti jegyzőkönyv.

Új mintavétel:

Új iktatószámot kap a minta, de jelezni kell az eredet minta iktatószámát (egyéb azonosítóját) is. Innen a kezelése megegyezik a normál kezeléssel, azonban jegyzőkönyvnyomatásnál fel kell tüntetni az eredeti jegyzőkönyv azonosítóit is.

Minta újramérése:

Laborvezető döntése alapján ki kell jelölni a kifogásolt vizsgálatokat (akár az összes). Utána az eljárás a Vizsgálati résztől folytatódik, azonban jegyzőkönyv nyomtatásban fel kell tüntetni az újvizsgálat tényét (Módosított jegyzőkönyv) és annak okát, illetve eredménybeli eltérés esetén a hibának az okát is.

Selejtezés

A beérkezett mintáknál fel kell tüntetni a selejtezés szükségességét és ennek besorolását.

A rendszer egy riportfunkció segítségével előállít egy listát, melyből egyértelműen meghatározható a selejtehető illetve selejtezésre váró minták száma, típusa. Selejtezni a minta lezárását követően a besorolástól függő idő elteltével lehet.

4.4.2 Egyéb, a LIMS-sel támogatható adminisztráció

4.4.2.1 Műszerek nyilvántartása

A laboratóriumokban használt mérőműszerek fontosabb adatai is letárolhatók:

- Műszer pontos típusa, gyártója
- Nyilvántartási adatai (sorozatszám, cégen belüli azonosítók)
- Kezelési útmutatók
- Karbantartási, verifikálási és kalibrálási paraméterek (két esemény közti maximális időtartam, tényadatok)

A rendszer a karbantartási, verifikálási és kalibrálási adatok alapján ezekre ütemtervet készít, illetve riasztási funkcióval rendelkezik a szükséges feladatok elvégzésének, előkészítésének haladéktalan megkezdéséhez.

4.4.2.2 Iktatókönyv

A laboratóriumban minden minta, mintavétel egyedi iktatószámot kap, mely illeszkedik a laboratórium egyedi iktatási rendszeréhez, vagyis a levelezés nyilvántartásához (papír alapú).

Az iktatás alapszintű támogatásához az alábbi adatok kerülnek letárolásra:

- Iktatószám, melyet a rendszer generál
- Dátum, címzett, feladó, tárgy, iktandó anyag típusa (bejövő és kimenő anyagra egyaránt)
- Laboron belüli felelős

A rendszer biztosítja a bármely adatra való többszintű visszakeresést.

4.4.2.3 Oktatás nyilvántartás

A laboratóriumban minden év elején elkészítik az oktatási tervet, melyben a munkatársak oktatásai szerepelnek (téma és időpont). Belső oktatásoknál az esemény előtt a rendszer figyelmezteti a kijelölt oktatót, hogy szervezze meg az oktatást. Az oktató munkáját oktatási napló nyomtatással segíti a rendszer, illetve az oktatáson résztvevőkről a munkatársak (saját) vagy az oktató (összes résztvevőről) nyilatkozik, és ezzel lehetőség nyílik a képzésen résztvevők nyilvántartására, riportok készítésére.

5 Hogyan tehetünk szert egy LIMS-re?

Erre többféle válasz is létezik.

- **Vesünk egyet.** Ennek a legnagyobb hátránya, hogy a rendszer a legritkább esetben egyezik meg azzal a követelményrendszerrel, amit a cég munkája során megszokott, illetve csak jelentős ráfordítással módosítható. Elég csak utalni a SAP rendszerek különböző változataira. Itt tehát a beszerzési áron kívül számottevő költséggel kell egyedivé tenni. (egy elég merev programozási környezetben.)
- **Készítünk egyet.** Ha van olyan munkatárs, akinek van elegendő energiája és ideje, valamint affinitása is van az adatbázisokhoz, akkor igényelhetjük, hogy készítsen egy adatkezelő rendszert a laboratórium munkájának könnyítésére. Számolni kell viszont azzal, hogy a LIMS csak korlátozott funkcionalitással fog rendelkezni, és nem illeszkedik a cég egyéb rendszereihez. Viszont ingyen van.

- **Adaptálunk egyet.** Ennek előnye, hogy a máshol már jól bevált rendszer nagy hatékonysággal követi a laboratóriumi munka szervezését, de NEM A MI MUNKASTÍLUSUNKRA szabták. Ezért mindig van olyan funkció, amit soha nem értünk, miért így, vagy miért úgy kell tenni. Itt is kell számolni adaptációs költségekkel.
- **Elkészítettünk egyet.** A fejlesztésben jártas, analitikai tapasztalattal is rendelkező vállalkozást megbízunk a LIMS fejlesztésével. Ennek nagy előnye, hogy méretre szabott rendszert kapunk. A fejlesztés során újra kénytelenek leszünk áttekinteni az egyes funkciók működését, vagyis a labor munkáját, mintegy járulékosan, lényegesen hatékonyabbá tehetjük. Fontos, hogy a párbeszéd értelmes és célratoró legyen a fejlesztő és az alkalmazó között, különben csak egymás mellett elbeszélve, egy nem működő rendszert hozunk létre. Ez egyébként ennek a döntésnek a hátránya is. Költségoldalról ez a módszer a leghatékonyabb, vagyis csak azért fizetünk, amit használni is tudunk.

Bárhogyan is döntünk, a rendszer kiépítésének ára van. Ez a döntéstől függően lehet néhány százezer, vagy éppen több tízmillió forint.

6 A LIMS előnyei és hátrányai

6.1 LIMS előnyei:

- A bevezetés során újból átgondolható a laboratórium működése, és ahol szükséges, ott a LIMS bevezetésével párhuzamosan javíthatóak a folyamatok.
- Az adminisztráció csökkenésével jelentős humánerőforrás megtakarítás realizálható.
- Egy rendszerből elérhető az összes laboratóriumi információ. A minta útja real-time nyomon követhető.
- Lekérdezések, statisztikák pár perc alatt elvégezhetők.
- A laboratóriumi munka hatékonysága mérhetővé válik.
- Az adatokhoz való hozzáférés szabályozottá válik.
- A laboratóriumon és a vállalaton belül az információ-áramlás nagymértékben gyorsul és minősége javul.
- A minőségbiztosítási rendszer támogatása.

6.2 LIMS hátrányai:

- Viszonylag magas a rendszer kiépítésének költsége.
- Bevezetése során a laboratórium részéről nagy munkaerő ráfordítás szükséges.

7 A LIMS bevezetésének és fenntartásának költségei

A LIMS bevezetésének költségét elsősorban az adott laboratórium nagysága, folyamatainak bonyolultsága és adatkapcsolatainak milyensége határozza meg.

A bevezetés költsége az alábbi elemekből áll össze:

- Maga a LIMS rendszer fejlesztésének költsége
- LIMS rendszer futtató szerver szoftver (operációs rendszer és adatbázis-kezelő) és hardver költsége
- LIMS rendszert használó kliens

A fenntartás költsége a karbantartás és a támogatás díjából áll össze. Karbantartás alatt a rendszer működőképességének fenntartása értendő, mint pl. a futtató program vagy adatbázis-kezelő frissen tartása (verziókövetése). Támogatás pedig az adott laboratórium ügyvitelében történő változások miatt szükséges fejlesztéseket tartalmazza. Ez ott lehet fontos, ahol a vállalati folyamatok vagy a jogszabályi környezet sűrűn változik.

8 Összefoglalás

Ha a laboratórium információs rendszerét a laboratórium vezetése számítógéppel kívánja megoldani, az lényegesen többet jelent, mint a jelenlegi gyakorlat, amikor a számítógépet az adatok mechanikus feldolgozására mintegy elektronikus „kockás füzet”-ként használják.

A LIMS nemcsak egy a mostani információs társadalomban divatos számítógépesítési feladatok közül, hanem a munkát hatékonyan segítő, nélkülözhetetlen eszköz.

Dolgozatunkban áttekintettük az analitikai mérések és a laboratóriumi munka megszervezésének folyamatát. Véleményünk szerint mi, analitikusok, ezzel a feladattal nem foglalkozunk jelentőségének megfelelően, mivel csak a mérések kivitelezésének szigorú követését várjuk el az elemzést végzőktől. Magát a mérési eredmény feldolgozását, az adatok kiszámolását, a jegyzőkönyv elkészítését olyan rendszerben végezzük, ami már nem felel meg a szigorú akkreditálási, minőségbiztosítási követelményeknek.

A mérési eredmények feldolgozását, statisztikák készítését eseti megoldásokkal, újra és újra összeszedett adatok felhasználásával, nagyon sok időráfordítással tudjuk emiatt elkészíteni. Az eredmények hozzáférése nehézkes, azokból a döntés-előkészítéshez trendeket készíteni, a labor munkájának hatékonyságát mérő elemzéseket csak nagy erőfeszítéssel tudunk összeállítani, ami ráadásul soha nem pontos.

Ahhoz, hogy a mérés kivitelezése és az eredmények megadása között tatóngó űrt betöltsük, a LIMS alkalmazása ad megfelelő eszközt. A bevezetés során újból átgondolható a laboratórium működése, és ahol szükséges, ott a LIMS bevezetésével párhuzamosan javíthatók a folyamatok. Az adminisztráció csökkenésével jelentős humán erőforrás megtakarítással számolhatunk. Egy rendszerből elérhető az összes laboratóriumi információ. A minta útja real-time (valós időben) nyomon követhető. Lekérdezések, statisztikák pár perc alatt elvégezhetők. A laboratóriumi munka hatékonysága mérhetővé válik. Az adatokhoz való hozzáférés szabályozottá válik. A laboratóriumon és a vállalaton belül az információ-áramlás nagymértékben gyorsul és minősége javul. Hatékony eszközt kapunk a minőségbiztosítási rendszer támogatásához, ráadásul olyan módon, ami nem függ a közreműködők hozzáállásának és munkájának minőségétől.

A fentiekben nem említettük, mivel nem tartozik szorosan a tárgyhoz, de itt megemlítjük, hogy a felsőoktatás területén is szükség lenne egy olyan rendszerre, amivel a laborgyakorlatok elvégzése során a hallgatók alkalmazzák a minőségbiztosítás korszerű elveit. Vagyis, a kiadott analitikai feladatokat úgy végzik el, hogy annak minden munkafázisa, a mintavételtől a jelentés összeállításáig dokumentálva legyen.

Az egyes részfeladatok elvégzésekor beiktatott ellenőrző pontokon az oktató értékelheti a munkát, új mérést rendelhet el, vagy akár az osztályzatok, vizsgajegyek megadására tehet javaslatot. A hallgatók az egész dokumentációt a már ma is mindenütt működő egyetemi belső hálózati hozzáférés segítségével, akár otthonról is elkészíthetik. Ugyanakkor nincs lehetőség olyan jelentések készítésére, amivel az oktató csak egymásról másolt jegyzőkönyveket kap, vagy korábbi mérési eredményekről kap másolatot.

A példából látható, hogy egy úgymond speciálisan laboratóriumi információs rendszer mennyire rugalmasan alakítható az egyedi munkaszervezés szolgálatában.

Összefoglalás

Ritz Ferenc – Kovács Zoltán: **Analitikai mérések és a laboratóriumi munka adminisztrációja számítógépen (Laboratory Information Management System, LIMS)**

A közlemény a LIMS, vagyis a laboratóriumi információt szervező elektronikus rendszer elemeit, illetve a működésének egyes fázisait foglalja röviden össze. Bemutatja azt, hogy egy működő LIMS-nek milyen szabványelírásokat kell teljesítenie.

Elemezi a laboratóriumi munka fázisait, egy modell alapján pedig a keletkező adatok elektronikus feldolgozási lehetőségét.

Ismerteti a LIMS működését, egy minta útját végigkövetve. Összefoglalja a rendszer előnyeit, hátrányait, és a bevezetés feltételeit mind munkaszervezési, mind pénzügyi szempontból.

Summary

Ritz Ferenc – Kovács Zoltán: **Computerized administration of analytical measurements and laboratory tasks (Laboratory Information Management System, LIMS)**

The publication briefly summarizes the elements and operational stages of LIMS, and presents its relevant standard specifications.

It discusses the phases of laboratory tasks, analyses the possibilities of electronic data processing by modelling.

The article describes the function of LIMS tracing the course of a sample. It sums up the advantages/diasadvantages of the system from work organizational and financial aspects.