

Laborbuch
ersetzen?

GLP-Konformität
erreichen?

Datensicherheit
herstellen?



Daten im Labor der Zukunft

LABORDATEN GxP-GERECHT VERARBEITEN

Sonderdruck aus der



a xylem brand

1 Messung des pH-Wertes mit WTW IDS-Funksensoren bei einer Kartoffelpflanze

Ein Projekt von



xylem
Let's Solve Water



Bild: Bayer AG

Labordaten

GxP-gerecht verarbeiten

Daten: zuordenbar, zeitnah, lesbar, original und korrekt // Messparameter

entscheiden nicht selten über Gesundheit und Unversehrtheit der Umwelt. Wie ein offenes Datenübertragungssystem bei der Durchführung von Umweltstudien unterstützt, erläutert Bayer-Mitarbeiter Maximilian Küppers im Interview.

LP: Herr Küppers, Sie arbeiten bei der Bayer AG im Bereich des chemischen Pflanzenschutzes. Wie genau sieht Ihr Arbeitsalltag aus?

Maximilian Küppers: Im Rahmen von Umweltstudien stellen meine Kollegen und ich sicher, dass Pflanzenschutzmittel und deren Abbauprodukte unbedenklich für Mensch, Tier und Umwelt sind. Bei dieser Arbeit habe ich mit den unterschiedlichsten Umweltmedien zu tun. Unter anderem arbeite ich regelmäßig mit Böden unter aeroben und anaeroben Bedingungen, Wasser-/Sedimentsystemen sowie gepufferten Nährlösungen für die Pflanzenanzucht in Hydrokultur.

LP: Welche Messparameter sind für Sie relevant?

Küppers: Im Kontext der gerade aufgezählten Umweltmedien, sind vor allem der pH-Wert, der Sauerstoffgehalt und das Redoxpotential inte-

ressant. Eine gängige Fragestellung, die mit diesen physikalischen Messungen beantwortet werden kann wäre zum Beispiel: „Ist die Belüftung unserer hydroponischen Testsysteme ausreichend hoch eingestellt und bietet die Nährlösung den optimalen pH-Wert für die Pflanzen?“ oder auch – bei Simulation der Bedingungen überschwemmter Felder, zum Beispiel beim Reisanbau: „Ist ein mit Wasser überschichteter Boden bereits anaerob?“

LP: Xylem Analytics bietet seit Jahrzehnten Messgeräte für solche elektrochemischen Parameter an. Neben den kabelgebunden IDS-Sensoren verwenden Sie die digitalen IDS-Sensoren mit Funkübertragung. Welche Gründe haben Sie zu dieser Entscheidung bewogen?

Küppers: Als ich mit den IDS-Sensoren erstmals in Kontakt kam, war ich sofort überzeugt. Obgleich das „In-

ternet of Things“ in Form von diversen Smart-Home-Applikationen wie Staubsaugerrobotern und Licht- und Heizungssteuerung Einzug in unsere Privathaushalte gehalten hat, stehen wir im Labor sicher noch am Anfang der Digitalisierung. In meinem Arbeitsalltag kommt es häufig vor, dass in einem Testsystem mehrere physikalische Messungen durchgeführt werden sollen. Das führte früher dazu, dass zum Beginn des Arbeitstages erst einmal alle Verbindungskabel auseinander sortiert werden mussten – ein zeitaufwändiger und unbeliebter Arbeitsschritt. Die neuen drahtlosen Funksensoren erlauben ein deutlich komfortableres Vorgehen bei diesem Schritt. Weiterhin ist das System im Vergleich zu anderen äußerst platzsparend. Auch bei Messungen im Freiland haben meine Kollegen und ich damit gute Erfah-

Zur Person MAXIMILIAN KÜPPERS



Maximilian Küppers ist gelernter **Chemielaborant** und beschäftigt sich seit 2016 mit der Durchführung registrierrelevanter GLP-Studien zur Charakterisierung des Umweltverhaltens von Pflanzenschutzmitteln. Seit 2018 ist er zudem Teil eines Projektteams, welches die Modernisierung der IT-Systemlandschaft der Labore in den Umweltsicherheitsfunktionen bei **Bayer AG Division Crop Science** zum Ziel hat. Daneben studiert Maximilian Küppers **Chemie** an der Zuyd University of Applied Science in Heerlen, NL.

rungen gemacht. Die pH-Wert-Messung des Sediments eines Sees kann von einem Kollegen direkt im Wasser vorgenommen werden, während ein weiterer am Ufer steht und die Messwerte notiert.

LP: Xylem Analytics bietet zur LIMS-konformen Datenübertragung das „IDS Gate“, ein Gateway mit einer offenen Schnittstelle (REST API) an. Damit lassen sich die Messdaten vom Sensor ohne den Umweg über ein Messgerät direkt in ein Datenerfassungssystem übertragen. Welche Anforderungen stellen Sie von Seite der Datensicherheit an das gesamte Messsystem?

Küppers: Um die Datensicherheit zu gewährleisten, sollten die erhobenen Messdaten zuordenbar, lesbar, zeitnah, original und korrekt abgelegt werden, auch bekannt als ALCOA-Prinzip. Zuordenbar bedeutet, dass das Messdatum Informationen über den Zeitpunkt der Erhe-

bung und die Person des Ausführenden enthält. Korrekt heißt, dass die Messdaten nach der Erhebung nicht mehr verändert oder gelöscht werden können. Mit dem IDS-System ist das Löschen einmal erfasster Messwerte für den Anwender nicht mehr möglich. Die Daten stehen über einen bestimmten Zeitraum – bei uns sieben Tage – zur Abholung durch unser LIMS zur Verfügung. Dadurch, dass die erfassten Messwerte direkt in das LIMS übernommen werden, entfällt der Umweg über den Import oder Export von CSV-Dateien auf einen Arbeitsplatzrechner. Damit ist auch eine Manipulation der Werte bevor sie das LIMS erreichen nicht mehr möglich.

LP: Und wie werden die anderen ALCOA-Kriterien zeitnah, original und lesbar eingehalten?

Küppers: Eine zeitnahe Dokumentation der Daten liegt in der Natur des Systems, da wenige Sekunden nach der Messung ein gültiges Messdatum angedruckt werden kann. Dieses Messdatum wird durch handschriftliche oder elektronische Signatur als original anerkannt. Da die Daten im herstellerunabhängigen JSON (JavaScript Object Notation)-Format vorliegen, ist deren Lesbarkeit auch Jahrzehnte später sichergestellt. Vor allem bei der Weiterverarbeitung der Daten in Drittsystemen (LIMS, Excel), müssen die jeweils durchgeführten Weiterverarbeitungsschritte nachvollziehbar dokumentiert und validiert sein. Dafür bietet das System durch die Möglichkeit zum Einlesen einer frei wählbaren Probenidentifikationsnummer mittels Barcodescanner einen guten Ansatz, denn diese Nummer kann auch als Referenz im weiterverarbeitenden System verwendet werden.

LP: Das Messsystem besteht aus Funksensoren und IDS Gate. Wie können Sie GLP-Konformität sicherstellen?

Küppers: An der API vom IDS Gate steht ein vollständiger Messdatensatz im JSON-Format, bestehend aus Zeitstempel, Messwert, Benutzer sowie der Seriennummer des verwendeten Sensors und einer Verknüpfung zum aktuellen Kalibrierdatum desselben zur Verfügung. Dieser Messdatensatz kann mit geringem Aufwand in ein LIMS eingespeist und dort weiterverarbeitet

werden. Bei dieser Vorgehensweise ist der Hauptvorteil der Audit Trail des LIMS, welcher alle Weiterverarbeitungen mit Zeitstempel und Nutzer eindeutig dokumentiert. Daneben besteht auch die Möglichkeit, mittels einer Standardfunktion der gängigen Tabellenkalkulationsprogramme, die Messwerte vom IDS-Gate abzurufen.

Neben der erwähnten JSON-Datei wird auf dem IDS Gate zudem eine PDF-A-Datei erzeugt, die den gleichen Messdatensatz enthält. Somit ist auch ein direkter Ausdruck des PDF-Dokumentes als Analysenzertifikat (CoA) als eine Variante denkbar. Die vielfältigen Möglichkeiten der Messwertausgabe erlauben somit den Einsatz des Systems in Umgebungen mit verschiedenen Dokumentationsanforderungen bis hin zur GxP-Umgebung. Die GxP-Konformität ist gegeben, wenn den Anforderungen an die Datensicherheit entsprochen wird.

LP: Warum ist das Datenformat von Bedeutung?

Küppers: Neben meiner Labortätigkeit bin ich auch in ein IT-Projekt bei Bayer involviert. Ziel des Projektes



ist es, Messergebnisse aus dem Labor in strukturierter Form abzulegen, um somit den Weg für eingehende Auswertungen mittels Data Science zu ebnet. Grundlage dafür ist, dass die von den Messgeräten gelieferten Werte in einem Dateiformat vorliegen, welches eine Lesbarkeit dieser Werte über einen großen Zeitraum und möglichst ohne zusätzliche Software ermöglicht. Das von Xylem Analytics entwickelte System liefert die Messwerte im JSON-Format, welches mehrere Vor-

teile bietet. Zunächst hat es eine einfache Datenstruktur und Formatdefinition, sodass es sogar ohne IT-Kenntnisse menschenlesbar ist. Weiterhin stellt dieses Format eine gute Vorstufe für das Allotrope-Format, den Industriestandard für die



Erfassung, den Austausch und die Verwaltung von Labordaten, dar.

LP: Wie würden Sie die Vorteile des Systems für Ihren Zweck zusammenfassen?

Küppers: Ein bedeutender Vorteil des IDS-Systems ist die Möglichkeit, kabellos zu arbeiten. Dies führt zu einem aufgeräumten und sicheren Arbeitsplatz. Verwendet man die Sensoren zusammen mit dem IDS Gate, ergibt sich durch die elektronische Messwerterfassung ein weiterer Vorteil. Der IDS-Statusviewer erlaubt eine Vorschau der Messwerte an einem beliebigen Gerät im Netzwerk. Dort erkennt man auch den Verlauf des entsprechenden Messwertes, was beispielsweise beim Einstellen eines pH-Wertes eine große Hilfe ist. Mit dem System kann man die Messergebnisse beliebig weiterverarbeiten: Es gibt die Möglichkeit, die Daten durch die Erstellung eines PDFs als CoA (Certificate of Analysis) in Papierform abzulegen. Diese Option erlaubt auch das Arbeiten in einer Umgebung mit hybrider Rohdatendefinition. Daneben kann man natürlich vollständig digital arbeiten und die Messwerte – wie im Beispiel gezeigt – direkt und unkompliziert in einem LIMS oder in einer Tabellenkalkulationssoftware speichern. Dabei bietet sich der zusätzliche Vorteil, dass die Messdaten direkt mit dem Kali-

brierprotokoll verbunden sind. Auch Kalibrier- und Wartungsintervalle können mittels LIMS gepflegt werden. Die Nutzung dieser Funktion erlaubt weiterhin die Einstellung, dass nur Sensoren, welche über eine gültige Kalibrierung verfügen, für die Messwerterstellung verwendet werden können. Das IDS Gate ist hervorragend dazu geeignet, mit der Digitalisierung eines Labors zu beginnen, da es sehr einfach und schrittweise eingebunden werden kann.

Herr Küppers, vielen Dank für das Gespräch. ■



Xylem Analytics Germany Sales GmbH & Co. KG
 Am Achalaich 11
 82362 Weilheim
 Germany
 Tel +49 881 183-0
 Fax +49 881 183-420
 Info.WTW@Xyleminc.com
 www.XylemAnalytics.com