

IT-Werkzeuge zur Unterstützung der analytischen Qualitätssicherung

Qualitätsmanagement in Labor und Prüfstelle, 27. März 2012

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

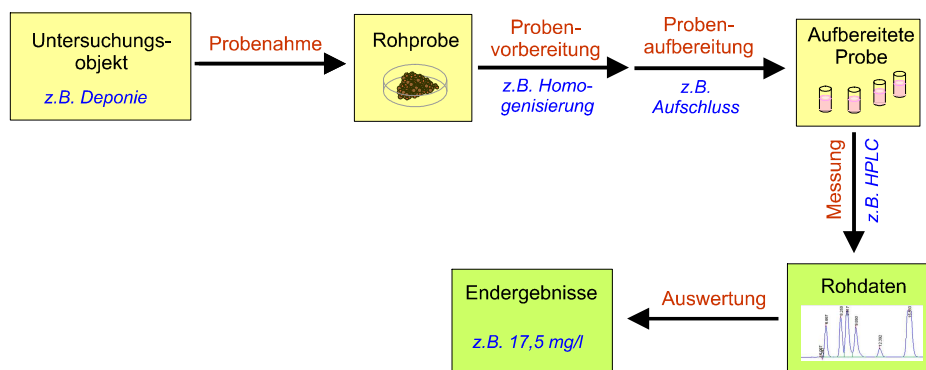
Was ist die Analytische Qualitätssicherung?

Schon seit vielen Jahren ist die Qualitätssicherung ein unverzichtbarer Teilbereich jedes Industrieunternehmens. Aber jedes Qualitätssicherungssystem steht und fällt mit der Möglichkeit, die Qualitätseigenschaften der Produkte überhaupt zuverlässig messen zu können. Bei einfachen physikalischen Messverfahren (z.B. Abmessungen oder Gewicht eines Werkstücks) mag das nicht so offensichtlich sein, aber besonders in der analytischen Chemie bringen komplexe Messverfahren oft eine Vielzahl an Fehlermöglichkeiten mit sich, so dass auch hier eine Art Qualitätssicherung unvermeidbar ist. Dieser Aufgabenbereich wird allgemein als AQS (analytische Qualitätssicherung) bezeichnet.

„Ziel der Analytischen Qualitätssicherung ist es, zuverlässige Analysenergebnisse zu gewinnen, deren Genauigkeit ermittelt, regelmäßig überprüft und dokumentiert ist“ (Funk, Dammann und Donnevert, *Qualitätssicherung in der Analytischen Chemie*, 2005).

Besonders im regulierten Umfeld bzw. in akkreditierten Laboratorien ist eine geeignete Analytische Qualitätssicherung schon aus rechtlichen Gründen eine absolute Notwendigkeit.

Fehlermöglichkeiten kann man allgemein in systematische Fehler (z.B. falsche Lagerung oder Konservierung) und zufällige Fehler (z.B. Detektorrauschen) klassifizieren. So gut wie jeder einzelne Schritt in der Analytik kann verschiedene Fehler mit sich bringen.



Zur Erreichung der Ziele der AQS (siehe oben) ist immer eine Kombination aus methodisch-planerischen und empirischen Verfahren notwendig. Durch geeignete Planung bzw. methodisches Vorgehen lassen sich viele Fehlerquellen bereits ausschalten. Diese erfordern Fachkenntnisse und zielgerichtetes Denken und bleiben daher Domäne entsprechend ausgebildeter Personen.

Statistisch-Mathematische Verfahren in der AQS

Demgegenüber nützen empirische Verfahren zur Überprüfung der Möglichkeiten einer analytischen Methode vor allem die mathematische Statistik und können sehr oft nach vorgegebenem Schema durchgeführt werden. Damit sind sie geradezu prädestiniert für den Einsatz moderner Werkzeuge der Informationstechnologie (IT). Aus diesem Grund wollen wir uns im Folgenden besonders mit diesem Teilbereich beschäftigen.

Zunächst muss man sich im Klaren sein, dass die Resultate statistischer Verfahren immer im Kontext mit einer vorgegebenen Irrtumswahrscheinlichkeit zu sehen sind. Es kann also mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit eine sachlich falsche Aussage getroffen werden. Aus diesem Grund ist neben der korrekten Durchführung eine lückenlose Dokumentation absolut unverzichtbar.

Für jedes angewendete Messverfahren kann man die einzelnen Aufgaben der Analytischen QS in etwa in vier verschiedene Phasen einteilen: Methodenentwicklung, die Vorbereitung für den Routineeinsatz, die Begleitung des Routineeinsatzes selbst sowie die externe Qualitätssicherung (z.B. Ringversuche).

In der Methodenentwicklung geht es vor allem um die Bestimmung der Verfahrenskennndaten, z.B.

- Linearität
- Varianzhomogenität
- Arbeitsbereich, Bestimmungs- und Nachweisgrenzen, Messunsicherheiten
- Einflüsse von Aufbereitungsschritten oder Matrixeffekte

Die Vorbereitung für den Routineeinsatz ermittelt Kennndaten und Fehlerquellen bei einem zukünftigen Routineeinsatz. Bei letzterem hingegen ist die regelmäßige Überprüfung der Analysenqualität im laufenden Betrieb die Hauptsache, dazu dient vor allem die automatische Führung von Regelkarten mit Warnung bei Überschreiten der Kontroll- bzw. Eingriffsgrenzen.

Zusätzlich sind Verfahren der externen QS meist vorgeschrieben, z.B. Ringversuche.

Wichtig ist jedenfalls, dass es immer wieder vorkommen kann (und wird), dass ein Teil oder alle Phasen von Zeit zu Zeit wiederholt werden müssen, beispielsweise nach Änderungen oder Reparaturen am Analysengerät.

Umsetzungsmöglichkeiten

Es ist leicht zu erkennen, dass die sachgerechte Erfüllung aller Anforderungen einen erheblichen Aufwand für jedes Labor darstellt. In Kombination mit dem teilweise hohen Konkurrenzdruck in manchen Bereichen (z.B. Umweltanalytik) ist eine möglichst effiziente und zeitsparende Durchführung eine absolute Notwendigkeit. Aus diesem Grund ist der Einsatz moderner Computertechnologie eigentlich fast unvermeidbar. Hier gibt es aber unterschiedliche Ansätze:

A. Bürosoftware

„Office-Pakete“ wie Microsoft Office oder die kostenlosen Alternativen OpenOffice bzw. LibreOffice bieten vor allem im Tabellenkalkulation-Modul (z.B. Microsoft Excel) von Haus aus eine Vielzahl von Werkzeugen im Bereich Statistik und Grafik, die sich gut für die analytische Qualitätssicherung einsetzen lassen. Viele Laboratorien entwickeln selbst Arbeitsblätter für diese Aufgaben, es gibt aber auch genügend vorgefertigte Lösungen, kommerziell angeboten wie auch kostenlos.

Ein gravierendes Grundproblem aller „Excel-Lösungen“ im Labor besteht aber auch hier, nämlich die Schwächen im Bereich Datensicherheit und Dokumentation. Durch die Speicherung als einzelne

Dateien und die eingeschränkten Möglichkeiten beim Zugriffsschutz ist die Sicherheit gegenüber späteren Veränderungen (unabsichtlich oder vorsätzlich) immer ein Thema. Dazu ist auch die automatische Dokumentation aller – zulässiger – Änderungen nicht immer leicht und zuverlässig realisierbar. Besonders bei Audits werden derartige Lösungen nicht selten in Frage gestellt.

„Aufzeichnungen müssen leserlich sein, leicht wieder auffindbar, datengesichert und datengeschützt über einen definierten Zeitraum aufbewahrt werden. Dies kann in geeigneter elektronischer Form oder in Papierform erfolgen.

Bei fehlerbedingten Änderungen von Aufzeichnungen muss sichergestellt werden, dass für jeden Fehler nachvollziehbar Korrekturen vorgenommen wurden.“

(Leitfaden Computer in Prüflaboratorien – L 18)

B. Spezialsoftware für AQS

Aufgrund dieser Schwächen der Office-Anwendungen werden von verschiedenen Softwarehäusern spezialisierte Softwarepakete für die AQS angeboten. Die Pakete bieten eine mehr oder weniger umfangreiche Ausstattung an statistischen Verfahren und Möglichkeiten zur Dokumentation an, dazu werden auch die Anforderungen an Zugriffsschutz und Nachvollziehbarkeit automatisch erfüllt. Häufig gibt es auch vorgefertigte Schnittstellen zu vorgelagerten Systemen (z.B. Analysengeräte mit Datenschnittstellen) und/oder übergeordneten Informationssystemen (z.B. LIMS).

C. Integration in LIMS

Noch nicht Standard hingegen ist die Integration der Analytischen Qualitätssicherung in ein bereits bestehendes Laborinformationssystem (LIMS). Technisch lässt sich das entweder durch ein direkt vom LIMS-Anbieter erstelltes Modul realisieren oder aber durch eine sehr enge Verzahnung mit externer AQS-Spezialsoftware (siehe oben).

In dieser Variante ergeben sich zusätzliche Vorteile, da die im LIMS verwalteten Daten (Untersuchungsergebnisse von Proben oder auch die eingesetzten Prüfmittel) direkt mit den Ergebnissen der AQS verknüpft werden können und damit sich sowohl Zeitersparnisse als auch Verbesserungen der Nachvollziehbarkeit aller Daten realisieren lassen. Beispiele dafür sind:

- Automatische Erfassung der AQS-Daten im Routineeinsatz zusammen mit den „echten“ Messdaten (z.B. Führung von Regelkarten aus Standardproben innerhalb der Untersuchungsproben)
- Direkter Zugriff aus Messergebnissen auf die dazu gehörigen AQS-Daten
- Automatische Setzung von Maßnahmen durch das LIMS (z.B. Blockierung weiterer Messwerteingaben, wenn die Regelkarte eine Außer-Kontroll-Situation meldet)
- Automatische Übertragung neuer Verfahrenskennndaten (z.B. Bestimmungs- und Nachweisgrenzen oder Messunsicherheit) in die Grunddaten des Parameters im LIMS
- Automatische Anforderung einer Neubestimmung der Verfahrenskennndaten, wenn im zugehörigen Prüfmittel Änderungen vorgenommen wurden (z.B. Austausch einer Komponente)