

Gut zu wissen - (fast) unbekannte Funktionen in uniLIME

Anwenderseminar/Workshop am 9. Oktober 2019, Wien

Zusammenfassung

Schwerpunkt des Workshops waren weniger bekannte Funktionen in uniLIME sowie solche, die noch nicht in allen Installationen verfügbar, aber leicht nachrüstbar sind.

Komplexe Berechnungen über Formelauswertung oder LIMEScript

Die meisten uniLIME-Anwender nutzen die Formelauswertung für die Umrechnung von Messwerten, beispielweise zur Umrechnung in andere Einheiten, Berücksichtigung von Einwaagen, Volumina oder Ergebnisse der Trockensubstanzbestimmung oder auch zur Berechnung von Summenparametern.

Dies betrifft das Feld „Formel (Anzeige)“, das zur Umrechnung des eigentlichen Messwertes dient. Weniger gebräuchlich, aber auch in vielen Fällen sehr nützlich sind die Formeln für die Bestimmungsgrenze, Nachweisgrenze, Obere Arbeitsbereichsgrenze sowie Messunsicherheit. Damit kann man beispielsweise für die Bestimmungsgrenze ebenfalls Umrechnungsfaktoren berücksichtigen.

Beispiel: die Messung von Arsen in der Lösung (Einheit mg/l) hat eine Bestimmungsgrenze von 0,1 mg/l für den Laborwert. Wenn man aber Arsen bezogen auf die feste Probe und unter Berücksichtigung der Trockensubstanzmessung im Bericht ausgibt, hängt die Bestimmungsgrenze des Berichtswertes ja auch von der Einwaage und der Trockensubstanz ab, dies lässt sich mit der „Formel für Bestimmungsgrenze“ leicht abbilden.

Die Formel für die Messunsicherheit kann auch genutzt werden, wenn die Messunsicherheit relativ angegeben ist (also z.B. 15 % vom Messwert). Hier kann statt der üblichen Formeln mit Angabe von Symbolen (z.B. „As“) auch direkt der Messwert verwendet werden („ $\$MW*0,15$ “), dann wird die Messunsicherheit sofort bei Eingabe/Import des Messwertes berechnet.

Die Formelauswertung kann aber auch zur Ausgabe von Texten genutzt werden, zum Beispiel für (sehr einfache) Beurteilungen. Eine Formel liefert zwar immer ein numerisches Ergebnis, dieses kann aber zum Abruf des zugehörigen Textes genutzt werden, indem uniLIME in den „Standardtexten“ (gleichnamiger Menüpunkt) beim „Code“ nachsieht und den zugehörigen Text ausgibt.

Sehr komplexe Berechnungen lassen sich aber möglicherweise nicht mehr oder nicht übersichtlich über die Formelauswertung durchführen. Für diese Aufgaben gibt es die „LIMEScripts“ (Definition unter dem gleichnamigen Menüpunkt). LIMEScript ist eine einfache Programmiersprache bzw. Scriptsprache. Zum erfolgreichen Einsatz sind natürlich gewisse Grundkenntnisse der Programmierung erforderlich. Mit LIMEScript lassen sich kompliziertere Berechnungen (auch mit Schleifen, was in der „normalen“ Formelauswertung nicht möglich ist) durchführen, es können aber

auch andere Aufgaben bewältigt werden wie z.B. die Vorbereitung von Dateien für den Messwert-Import.

Wer mit der (einfach gehaltenen) Scriptsprache LIMEScript noch nicht zufrieden ist, kann alternativ dazu auch seine persönliche Lieblingssprache verwenden, sofern sie als externes Programm aus uniLIME aufrufbar ist, beispielsweise PHP oder Python. Hierzu müsste man nur in uniLIME die Möglichkeit nachrüsten, statt Formelauswertung/LIMEScript ein solches externes Auswerteprogramm zu starten.

LIME-Grid – das integrierte „Mini-Excel“

Besonders bei physikalischen Messungen besteht ein Messwert oft genug nicht aus einer einzigen Zahl wie in der Chemie (z.B. 15 mg/l Cadmium), sondern aus Tabellen oder anderen komplexeren Sammlungen von Einzelwerten. Als Beispiel wurde eine Sieblinie genannt, wo mehrere Fraktionen mit unterschiedlichen Bereichen der Korngröße und die jeweiligen Anteile in der Probe bestimmt werden.

Diese Aufgabe ist im Prinzip eine „klassische“ Domäne von Microsoft Excel oder anderen Tabellenkalkulationsprogrammen. Diese haben nur den Nachteil, dass die Daten als einzelne Dateien gespeichert werden und spätere Änderungen schwer nachvollziehbar sind. Im Unterschied dazu ist bei Messwerten in uniLIME der Zugriff je nach Mitarbeiter einschränkbar und Änderungen – sofern überhaupt zulässig - werden im AuditTrail dokumentiert.

Die „LIME-Grids“ schließen hier eine Lücke, indem sie eine Art „Mini-Excel“ zur Verfügung stellen, wobei die Daten aber nicht als Datei, sondern in der uniLIME-Datenbank gespeichert werden und außerdem die Änderungen wie bei anderen Messwerten je nach Rechten eingeschränkt und/oder automatisch protokolliert werden können. Natürlich haben die LIME-Grids nicht den enormen Funktionsumfang von Microsoft Excel, für die wichtigsten Anwendungen im Labor sind aber ausreichende Möglichkeiten vorhanden, insbesondere die Berechnung von Zellinhalten über Formel, die Anzeige von anderen Daten (z.B. die Probennummer) und auch Grafikdarstellungen.

Für LIME-Grids kann man Vorlagen erstellen, diese werden dann bei jedem einzelnen Parameter getrennt gespeichert, wie man es bei „normalen“ Messwerten gewohnt ist.

Spezialfunktionen in der Berichterstellung

Im Unterschied zu vielen anderen Laborinformationssystemen (LIMS) verwendet uniLIME zur Bericht- und Rechnungserstellung nicht externe Programme („Reportgeneratoren“), sondern nützt die in den meisten Laboratorien ohnehin vorhandenen Komponenten „Word“ und „Excel“ aus Microsoft Office. Anders als beim typischen Reportgenerator sind die Anwender ohnehin mit Office gut vertraut und können daher die Vorlagen leicht selbst abändern/erweitern. Und wenn im fertigen Bericht beispielsweise der Seitenumbruch unschön aussieht, kann man das auch leicht selbst korrigieren.

Wie jedem uniLIME-Anwender bekannt ist, verwendet uniLIME eine „Vorlagedatei“ mit fixen (z.B. Briefkopf, allgemeine Texte) und variablen Teilen (z.B. die Probennummern, Adressat, Messwerte etc.). Die variablen Teile sind in der Vorlage durch ein „\$\$“ am Anfang und ein „#“ am Ende gekennzeichnet und werden von uniLIME durch die tatsächlichen Werte ersetzt.

Zur Zeit gibt es in uniLIME zwei unterschiedliche Verfahren zur Erstellung des Berichts / der Rechnung aus der jeweiligen Vorlage:

- a) uniLIME steuert Microsoft Word über die in Word integrierte Makrosprache (VBA = Visual Basic for Applications). Damit lassen sich sehr viele Gestaltungsmöglichkeiten umsetzen, allerdings ist die Ausführung teilweise recht langsam – besonders bei den neuesten Word-Versionen – und die Einrichtung der Rechte für die Makroausführung ist manchmal auch relativ mühsam, was dadurch verständlich ist, dass Makros leider auch von Schadsoftware gerne genützt werden
- b) uniLIME liest die Vorlagedatei (im Dateiformat „XML“) in den Speicher ein, setzt die variablen Teile selbst ein und speichert die fertige Datei dann wieder ab, sie wird von Word dann nur mehr geöffnet und angezeigt. Diese Variante ist meistens deutlich schneller als über Word-Makros, allerdings sind derzeit noch nicht alle Optionen der Word-Variante verfügbar (zum Beispiel die Einbettung von Bildern).

Bei der selbstständigen Anpassung/Erstellung von Vorlagedateien kann man auf folgende „Faustregel“ zurückgreifen: „\$\$“ gefolgt von einem Schrägstrich „/“ zeigt an, dass uniLIME diesen Platzhalter intern auswertet, zum Beispiel für eine Probenschleife (der Text zwischen \$\$/ProbenStart# und \$\$/ProbenEnde# wird so oft wiederholt, wie viele Proben im Bericht auszugeben sind). Platzhalter der Form „\$\$/...“ sind daher nur verfügbar, wenn sie in uniLIME ausdrücklich vorgesehen sind.

„\$\$“ ohne darauffolgenden Schrägstrich hingegen verweisen auf ein Zusatzfeld oder einen Messwert mit dem angegebenen Symbol. Hier gibt es keine Einschränkungen außer, dass das Symbol natürlich im Kontext bekannt sein muss – also dass das betreffende Zusatzfeld oder der Messwert in der Probe vorhanden ist.

Messwert-Tabellen, in denen ein Messwert je Zeile ausgegeben wird, können beliebig vom Anwender in Vorlagen definiert werden, egal welche Spalten in welcher Reihenfolge gewünscht sind. Für komplexere Darstellung – besonders „Kreuztabellen“ mit den Proben von links nach rechts und den Parametern von oben nach unten oder umgekehrt – gibt es vordefinierte Platzhalter. Wenn diese Darstellung nicht Ihren Wünschen entspricht, müsste man die gewünschte Variante extra programmieren.

Mehrstufige Objekthierarchien

Der Zusammenhang beispielsweise zwischen Aufträgen und Proben (ein Auftrag kann keine, eine oder mehrere Proben enthalten) ist jedem uniLIME-Anwender bekannt. Es gibt aber auch Fälle, in denen gleichartige bzw. ähnliche Objekte ebenfalls in einer solchen Beziehung stehen, also in der Art übergeordnetes Objekt <> untergeordnete Objekte.

In uniLIME sind zur Zeit solche Bezüge bei Kontakten/Kontaktpersonen sowie Anlagen/Anlageteile/Messstellen verfügbar. Wenn man also bei einem Kunden mehrere Ansprechpartner (jeweils mit unterschiedliche Telefonnummer und e-mail-Adresse) hat, legt man die gemeinsamen Daten (z.B. Firmenname, Adresse, Postleitzahl, Ort etc.) auf der obersten Ebene an und darunter als „Kontaktpersonen“ die jeweiligen Daten des Ansprechpartners (Vorname, Nachname, Telefonnummer, e-mail-Adresse). uniLIME erlaubt es dann, jedes Feld mit Bezug auf einen Kontakt (z.B. „Auftraggeber“ oder „Rechnungsempfänger“) individuell zu konfigurieren, so dass entweder nur der Hauptkontakt (z.B. „Mustermann AG“), eine Kontaktperson (z.B. „Alfred Adler“) oder wahlweise beide Varianten zur Verfügung stehen. Bei Auswahl einer Kontaktperson werden natürlich im Bericht automatisch die in der Kontaktperson nicht definierten Daten aus dem übergeordneten Kontakt (z.B. Firmenname oder Adresse) abgerufen und ausgegeben.

Ähnliches gibt es bei den Anlagen (1. Ebene), Anlageteilen (2. Ebene) und Messstellen (3. Ebene). Wenn man im Auftrag die Anlage (z.B. Wasserversorgungsanlage Musterstadt) auswählt, stehen bei den Proben für die Messstelle nur mehr die Messstellen dieser Anlage zur Auswahl und man muss sich nicht mühsam durch die Gesamtliste der Messstellen kämpfen.

Synchronisation von Zusatzfeldern aus Vorlagen

Viele uniLIME-Anwender kennen diese oder eine ähnliche Situation: man hat im Lauf der Zeit eine umfangreiche Kundendatenbank angelegt. Doch nun soll in allen Datensätzen ein neues Feld (z.B. „Berichtversand per e-mail ja/nein“) an einer genau definierten Stelle eingefügt werden.

Dies ist – wenn man mit der Datenbanksprache „SQL“ vertraut ist – mit wenigen Befehlen umgesetzt, andernfalls aber eine langwierige Arbeit. Daher gibt es in uniLIME auch spezielle Hilfsmittel, um diese Aufgabe schnell zu erledigen. Man fügt das neue Feld einfach in eine Kontaktvorlage an der richtigen Position ein und weist dann uniLIME an, die anderen Kontaktvorlagen bzw. die „richtigen“ Kontakte mit dieser Vorlage zu synchronisieren. uniLIME fügt dann automatisch das neue Feld an der richtigen Stelle ein.

Natürlich gilt es hier noch entsprechende Entscheidungen im Detail zu treffen: soll ein Feld in den echten Kontakten gelöscht werden, wenn es in der Vorlage nicht vorkommt? Wenn ja: immer oder nur wenn es leer ist? Und sollen Werte in der Vorlage auf bereits vorhandene Felder in den echten Kontakten immer übertragen werden? Oder nur, wenn das Feld bisher leer war?

Optionales Zusatzmodul QM gem. ISO 17025/20

Die wesentlichen Bestandteile des Modules sind:

Lenkung von Dokumenten

Die Dokumente werden jeweils aus der dokumentspezifischen Inhaltsdatei und der allgemeinen Deckblattdatei, die Platzhalter für wesentliche Informationen wie Titel des Dokumentes, Freigabedatum, Autoren und Ersterstellungsdatum etc. enthält, zusammengesetzt. Die Daten des

Deckblatts werden dabei jedoch vom Programm automatisch ausgefüllt, sodass die Dokumente stets aktuelle Autoren, Dokumentnummern und Daten enthalten. Für jedes verwaltete Dokument können Zielgruppen definiert werden. Diese werden mit einer Nachricht im Programm automatisch bei neuen Versionen des Dokumentes benachrichtigt. Die Kenntnisnahme von neu freigegebenen Versionen des jeweiligen Dokuments wird in der Datenbank automatisch protokolliert. Diese können jederzeit nachvollzogen werden. Säumige Benutzer werden regelmäßig erinnert.

Verfahrensverwaltung

Freigabe und Eingabeberechtigungen können separat verwaltet und sowohl auf Ebene der akkreditierten Prüfparameter als auch auf Ebene der befugten Personen abgebildet werden, eine Kompetenzmatrix lässt sich auf Knopfdruck automatisch erzeugen. Die Anzahl der durchgeführten Prüfungen pro Verfahren lässt sich durch das LIMS automatisch berechnen.

Qualifizierung

Schulungspläne und Schulungen lassen sich einfach aufzeichnen, Dokumente und Schulungsunterlagen hinterlegen und die Wirksamkeit der durchgeführten Maßnahmen dokumentieren. Eine entsprechende Aufstellung aller durchgeführten Weiterbildungen eines einzelnen Mitarbeiters lässt sich leicht anzeigen.

Meetings

Audits und Besprechungen können hiermit leicht dokumentiert werden. Protokolle können erzeugt und ausgedruckt werden und Teilnehmer, Themen und Ergebnisse lassen sich nachvollziehen.

KVP

Verbesserungsmaßnahmen, Vorbeugende Maßnahmen und Korrekturmaßnahmen sowie eine etwaige Lenkung fehlerhafter Produkte können leicht dokumentiert werden. Entsprechende Termine können festgelegt, überwacht und im Kalender aufgenommen werden. Automatische Erinnerungen an jeweils Verantwortliche verhindern das Vergessen von demnächst fälligen Maßnahmen. Die festgestellte Wirksamkeit der Maßnahmen lässt sich einfach dokumentieren.

uniLIME-Widgets

Standardmäßig verhalten sich fast alle Fenster in uniLIME „modal“. Das bedeutet, wenn ein neues Fenster aufgebaut wird, sind alle darunter liegenden uniLIME-Fenster (auch das Hauptfenster) nicht zugänglich, bis das neue Fenster wieder geschlossen wird. Diese Methodik hat einige Vorteile, kann aber in manchen Fällen den Anwender einschränken, wenn er beispielsweise schnell an einer anderen Stelle etwas nachsehen möchte, ohne die aktuellen Fenster zu schließen.

Hier können die neuen uniLIME „Widgets“ (Widget ist ein Kunstwort, zusammengesetzt aus „Windows“ und „Gadget“) Abhilfe schaffen. Die Widgets sind relativ kleine Fenster mit speziellen Funktionen, die parallel und zusätzlich zu den sonstigen gerade geöffneten Fenstern zugänglich sind.

Zum einen wurden die bereits bekannten Fenster „Wichtige Aktionen“ und „Kalender“ auf Widgets umgestellt, sind also jederzeit zugänglich, auch wenn man gerade an etwas ganz anderem arbeitet. Zum anderen gibt es mehrere neue Fenster im Widgets-Stil, zum Beispiel „Meine Kontakte“, „Meine Aufträge“ und „Meine Proben“. Hier kann man aktuelle Kontakte, Aufträge und Proben „anheften“ und jederzeit öffnen, die Datensätze werden manuell in diese Fenster hinzugefügt und bleiben erhalten, bis man sie wieder aus dem Fenster entfernt.

Alternativ kann man auch Abfragekriterien definieren, wodurch sich andere Widgets automatisch befüllen und aktualisieren, beispielsweise die Liste der freigegebenen Aufträge. Für alle Listen gibt es außerdem ein „Eigenschaften“-Widget, in dem die wichtigsten Daten des gerade angeklickten Elements (Kontakt, Auftrag oder Probe) angezeigt werden, ohne dass man ein Detailfenster öffnen und danach wieder schließen muss. Bei der schnellen Durchsicht einer Reihe von Aufträgen oder Proben spart dieses Fenster viel Zeit.

Barcodes im Labor

In vielen Laboratorien werden Barcodes verwendet oder die zukünftige Verwendung ist in Diskussion. Oft werden aber von Barcodes spektakuläre Möglichkeiten erwartet, die sie in der Realität nicht liefern können.

Eigentlich sind Barcodes nur andere, für Maschinen leicht lesbare Schriftarten, ein Barcodeleser verhält sich aus Sicht des PCs daher nicht viel anders als eine Tastatur. Alles, was ein Barcode leistet, könnte man auch durch Eintippen einer Zahl bzw. einer kurzen Ziffern/Buchstabenkombination erreichen, nur eben langsamer und fehleranfälliger.

Standardmäßig werden Barcodes in uniLIME als alternative Darstellung von Auftrags- oder Probennummern unterstützt. Man kann also z.B. Auftragsblätter oder Etiketten mit Barcodes drucken und dann die Auftrags- bzw. Probennummer mittels Barcode-Scanner in Sekundenbruchteilen einlesen. Damit kann man dann die Eingabemaske für die Auftrags/Probendefinition, die Messwert-Eingabeliste oder auch die Kontrolle/Freigabe-Ansicht öffnen.

Weitere Möglichkeiten wäre die schnelle Registrierung des aktuellen Ortes von Proben, beispielsweise bei der Probenlagerung oder auch bei der Probenentsorgung.

In letzter Zeit haben sich zweidimensionale Barcodes („QR-Codes“) stark verbreitet, wie sie jeder Smartphone-Anwender kennt. Ihr großer Vorteil ist, dass man viel mehr Informationen als auf den bisherigen eindimensionalen Barcodes unterbringen kann. Das ist aber im Labor – zumindest bei Auftrags- und Probennummer – gar nicht notwendig, daher ist ein Umstieg auf die zweidimensionalen Codes nicht unbedingt notwendig.

Performance-Überlegungen

Trotz fast exponentieller Zunahme der Leistungsfähigkeit der Computertechnik gibt es in vielen Bereichen immer noch Ärger der Anwender über langsame Abfragen. Das betrifft natürlich auch Laborinformationssysteme (LIMS) im Allgemeinen und uniLIME im Speziellen. Um hier Abhilfe zu schaffen, muss man zuerst die zugrundeliegende „Architektur“ verstehen.

uniLIME arbeitet nach dem „Client-Server-Modell“. Das bedeutet, ein (evtl. mehrere) Server bearbeitet und beantwortet die Anfragen der „Clients“ (Arbeitsplatz-Rechner). In der Praxis betrifft das vor allem den Datenbank-Server, der die Abfragen der Arbeitsplätze bearbeitet.

Längere Wartezeiten kommen daher überwiegend dadurch zustande, dass der Datenbank-Server für die Abfrage zu viel Rechenzeit und/oder Arbeitsspeicher benötigt. Ein schnellerer Server kann hier entsprechende Geschwindigkeitsvorteile bringen.

Eine Einschränkung kann sich aber aus dem verwendeten Datenbanksystem ergeben. Viele uniLIME-Installationen verwenden den kostenlosen Microsoft SQL Server Express als Datenbanksystem. Dieser bietet fast alle Möglichkeiten der größeren, kommerziellen Version. Allerdings nützt die Express Version höchstens 1 Gigabyte Arbeitsspeicher und nur einen Prozessorkern, was bei uniLIME-Anwendungen mit vielen Benutzern regelmäßig das System überlastet. Die naheliegendste Lösung ist daher der Umstieg auf die kommerzielle Version, wenn die damit verbundenen Kosten kein Hindernis darstellen.

Ansonsten kann man die Abfragen in uniLIME natürlich auch in gewissem Umfang vereinfachen und in manchen Fällen deutliche Performance-Steigerungen erzielen. Auch die ausgeklügelte Umprogrammierung von Funktionen (besonders betrifft das Statistiken) kann viel helfen.

Die Leistungsfähigkeit der Arbeitsplatz-Rechner hingegen spielt in den meisten Fällen keine große Rolle, da uniLIME auf den Arbeitsplatz-PCs kaum rechenaufwändige Operationen durchführt. Einzige Ausnahme ist die Erstellung von Berichten oder Rechnungen über XML (siehe oben), hier kann bei längeren Wartezeiten ein schnellerer Arbeitsplatz-Rechner durchaus Abhilfe schaffen.