

Strukturierte Daten im Labor

Nachhaltige Ablage von Versuchs- und Gerätedaten

Mit jeder Aktivität entstehen im Labor Daten, die es angemessen zu verwalten gilt. Die Strukturierung dieser hat große Auswirkungen auf deren Nutzbarkeit und Wiederverwendbarkeit. Dieser Artikel zeigt Möglichkeiten, mit wenig Aufwand von strukturierten Daten zu profitieren. Er beleuchtet ebenfalls die Nutzung standardisierter Datenformate wie AnIML und Kommunikationsprotokolle wie SiLA.

Im Labor geht es darum, durchgeführte Versuche und Prozesse nachvollziehbar zu dokumentieren. Hierzu kommen sowohl manuelle als auch digitale Werkzeuge zum Einsatz. Alles begann mit einem Laborjournal in Papierform, in dem die Planung und Durchführung eines Versuchs handschriftlich festgehalten wurde. Diese Aufzeichnungen wurden durch eingeklebtes weiterführendes Material ergänzt. So fanden auch die Ergebnisse von Messgeräten, Chromatogramme, Spektren, Fotos, etc. ihren Weg in die Dokumentation. Nach Abschluss eines Versuchs wurde der Eintrag im Laborbuch unterschrieben, evtl. unter Hinzunahme von Zeugen.

Inzwischen gibt es digitale Werkzeuge, die diese Arbeit vereinfachen. Elektronische Laborbücher (ELN) ermöglichen die papierlose Dokumentation. Labor-Informations- und Management-Systeme (LIMS) unterstützen die Planung der Abläufe und das Berichtswesen. Auch Messgeräte stellen ihre Daten nun digital zur Verfügung.

Strukturierte vs. unstrukturierte Daten

Ein Problem hingegen bleibt: Wie organisiert man seine Daten am besten? Bei der Einführung solcher Systeme muss man bereits be-

denken, wie man die darin erfassten Daten später weiter nutzen möchte. Hierzu sollte man darauf achten, eine geeignete Datenstruktur zu wählen, um die Daten später möglichst leicht konsumieren zu können. Man unterscheidet hier zwischen strukturierten und unstrukturierten Daten.

Elektronische Laborbücher

Am Beispiel eines ELN ist dies leicht nachvollziehbar. Manche ELNs arbeiten dokumentenorientiert. Die Beschreibung von Versuchen erfolgt als Freitext; Daten werden jedoch nicht strukturiert in Feldern erfasst. Im Prinzip erhält man hier eine versionierte Textverarbeitung oder Tabellenkalkulation. Möchte man nun bestimmte Daten (z. B. Proben-ID, einen Messwert, etc.) anderweitig nutzen, müssen diese aufwändig per Hand extrahiert werden. Dies zeigt ein interessantes Problem: Eigentlich hat man die Daten ja zur Verfügung, kommt aber nur mit großem Aufwand heran und kann sie nicht so einfach weiter nutzen. Zum Auffinden von Daten bleibt nur eine Volltextsuche.

Es geht aber auch anders. Macht man sich vorher Gedanken über die Informationen, die man später wiederverwenden möchte, kann man die Datensätze gleich strukturiert erfassen. Einige ELNs erlauben hierzu die Definition von Feldern und Formularen, die gewünschte Daten aufnehmen können. Diese Felder können leicht von außen ausgelesen werden. Eine strukturierte Eingabemaske kann auch die Datenerfassung einfacher gestalten.

Daten wiederfinden und weiter nutzen

Sind Daten sauber strukturiert erfasst, wird auch eine strukturierte Suche möglich. So

findet man schnell alle Versuche zu einer bestimmten Probe, oder alle Prozesse, bei denen das Produkt eine gewisse Reinheit unterschreitet, oder alle Daten zu einer bestimmten Charge eines Rohstoffs.

LIMS-Anwendungen sind von Haus aus deutlich strukturierter. Sie erfassen Daten zu Proben und Tests in einer gut strukturierten Datenbank und erlauben Suchen und Auswertungen.

Strukturierte Daten lassen sich gut für andere Zwecke nutzen. Man denke hierbei an die automatisierte Erzeugung von Berichten durch Reportgeneratoren. Auch eine grafische Aufbereitung mittels eines Visualisierungswerkzeugs ist möglich.

Gerätedaten und Standardformate

Mit Gerätedaten ist es nicht anders. Die meisten aktuellen Messgeräte stellen ihre Daten digital zur Verfügung. Oft kommen dabei jedoch herstellerspezifische Datenformate zum Einsatz, sodass die Daten nicht strukturiert ausgelesen werden können. Dies bereitet Probleme bei der Übertragung von Messwerten aus dem Gerät in LIMS- und ELN-Systeme. Man behilft sich häufig mit aus der Gerätesoftware erzeugten PDF-Berichten oder CSV-Dateien, die an LIMS und ELN-Systeme angehängt werden. Aus solchen Dateien können einzelne Werte jedoch nur schwer entnommen werden.

Hier können standardisierte herstellernerneutrale Dateiformate wie AnIML [1] und Kommunikationsprotokolle wie SiLA [2] helfen. Das AnIML-Dateiformat bietet eine einheitliche Struktur für Gerätedaten zahlreicher Messtechniken. Es eignet sich für Geräte unterschiedlicher Hersteller. Als Basis dient XML. Damit sind Daten leicht zugänglich und können gut in andere Systeme übernommen werden. AnIML bietet so einen eleganter Weg der Daten vom Gerät in eine Zielsoftware.

Interessant ist, dass AnIML neben Ergebnissen auch Rohdaten, Methodeninformation und

Metadaten transportieren kann. All diese Daten stehen damit für spätere Auswertungen zur Verfügung. AnIML wird inzwischen von zahlreichen LIMS- und ELN-Herstellern unterstützt.

Möchte man die Integration weitertreiben, kommt oft der Wunsch auf, Geräte aus einem LIMS oder ELN heraus anzusteuern. Dies kann durch das neue SiLA 2-Kommunikationsprotokoll erfolgen. Damit lassen sich Befehle über eine standardisierte Schnittstelle direkt ans Gerät schicken. Auch SiLA ist herstellernerneutral und für viele Messtechniken geeignet. Verwendet man SiLA und AnIML zusammen, lässt sich eine strukturierte und skalierbare Geräteintegration realisieren. [3]

Zusammenfassung

Wer seine Daten strukturiert erfasst und gut zugänglich abspeichert, hat später mehr Möglichkeiten. Daten lassen sich besser auffinden und nutzen. Eine Übernahme von Daten zwischen Systemen wird einfacher. Gerade bei Gerätedaten kann ein offener und strukturierter Ansatz die Nachhaltigkeit fördern. Es lohnt sich also, sich bereits beim Erzeugen der Daten Gedanken über Wiederverwendbarkeit zu machen und seine Systeme entsprechend zu nutzen. Setzt man heute auf Standards wie AnIML und eine gute Struktur, ist man zukunftssicher aufgestellt.

Literatur

- [1] Analytical Information Markup Language, www.animl.org.
- [2] Standardization in Lab Automation, www.sila-standard.org.
- [3] Datenaustausch im Labor der Zukunft: Ein Blick auf AnIML und SiLA (Burkhard Schäfer), GIT Labor-Fachzeitschrift 10/2018.

Kontakt

Burkhard Schäfer

BSSN Software GmbH

Darmstadt

b.schaefer@bssn-software.de