

Opinnäytetyö (AMK)

Bio- ja elintarviketekniikan koulutusohjelma

Biotekniikka

2012

Tomi Gröning

# LIMS-JÄRJESTELMÄN ASENTAMINEN JA KÄYNNISTÄMINEN TURUN AMK:N BIOALOJEN LABORATORIOSSA



TURUN AMMATTIKORKEAKOULU  
TURKU UNIVERSITY OF APPLIED SCIENCES

OPINNÄYTETYÖ (AMK) | TIIVISTELMÄ

Turun ammattikorkeakoulu

Bio- ja elintarviketekniikka | Biotekniikka

Syksy 2012 | Sivumäärä: 79

Juhani Soini, Kari Haajanen

Tomi Gröning

# LIMS-JÄRJESTELMÄN ASENTAMINEN JA KÄYNNISTÄMINEN TURUN AMK:N BIOALOJEN LABORATORIOSSA

Opinnäytetyön tavoitteena oli asentaa ja käynnistää laboratorion tiedonhallintajärjestelmä (LIMS) Turun ammattikorkeakoulun bioalojen laboratorioon, sekä ohjelmoida järjestelmään pipetinkalibrointiohjelma ja ottaa se opetuskäyttöön. Opinnäytetyö tehtiin pääasiassa Turun ammattikorkeakoululla Lemminkäisenkadun toimipisteessä ja siihen sisältyi koulutuksia Software Point Oy:llä.

Käytettäväksi LIMS-järjestelmäksi valittiin Software Point Oy:n tarjoama Sapphire LIMS. Järjestelmä asennettiin ja siihen ohjelmoitiin pipetinkalibrointiohjelma. Tämän jälkeen järjestelmään lisättiin kaikki laboratorion pipetit. Seuraavaksi hankittiin sarjaporttipalvelin ja se asennettiin AMK:n verkkoon toimimaan tiedonvälittäjänä vaa'an ja LIMS-järjestelmän välillä. Pipettien kalibroinnissa tarvitaan vaakaa. Lopuksi testattiin ohjelman toimivuus ja tehtiin käyttöohje.

Ohjelman käyttö koulutettiin kaikille laboratoriotöiden opettajille, minkä jälkeen kalibrointiohjelmaa ja käyttöohjetta testattiin opiskelijaryhmällä. Ohjelmasta ja käyttöohjeesta kerättiin palautetta, jonka perusteella hiottiin käyttöohje lopulliseen muotoon. Ohjelma todettiin hyväksi ja se otettiin opetuskäyttöön laboratorioskursseilla.

Luodun järjestelmän avulla koko kalibrointiprosessi nopeutuu ja tämän lisäksi tulokset arkistoituvat automaattisesti LIMSiin. Ohjelmaa käyttäneiltä opiskelijaryhmiltä on saatu positiivista palautetta kalibrointien helpottumisen ja nopeutumisen johdosta.

Pipetinkalibrointiohjelman ohjelmointi ja vaa'an asentaminen kommunikoiamaan LIMSin kanssa oli huomattavasti ennakoitua haastavampaa ja vaati odotettua enemmän konsultointia Software Pointilta. Järjestelmä on kuitenkin ollut toimiva ja saanut positiivista palautetta. Tämän johdosta järjestelmään on tulevaisuudessa tarkoitus lisätä resurssien puitteissa muitakin laboratoriolaitteita.

ASIASANAT: LIMS, pipetti, kalibrointi, laboratorio

BACHELOR'S THESIS | ABSTRACT  
TURKU UNIVERSITY OF APPLIED SCIENCES

Biotechnology and Food Technology | Biotechnology

2012 | 79 pages

Juhani Soini, Kari Haajanen

Tomi Gröning

# INSTALLATION AND IMPLEMENTATION OF LIMS IN TUAS BIOTECHNOLOGY LABORATORY

The objective of this thesis was to install and implement a Laboratory Information Management System (LIMS) in the biotechnology laboratory of Turku University of Applied Sciences and to program a pipette calibration program into the LIMS and implement it for educational use. The thesis project was primarily carried out at TUAS, Lemminkäisenkatu unit and it included training periods at Software Point Oy.

Sapphire LIMS, provided by Software Point, was selected as the LIMS. The system was installed and a pipette calibration program was programmed into it. The paper pipette register was transferred into the LIMS. Serial to Ethernet converter was purchased and installed to serve as a communicator between the balance, used to execute the pipette calibrations, and the LIMS. The pipette calibration program was tested and operating instructions were compiled.

The pipette calibration program and the instructions were tested by a student group and feedback was collected. The instructions were improved according to the feedback. Laboratory teachers were instructed in the use of the pipette calibration program. The program was found beneficial and introduced for use in the laboratory teaching.

The pipette calibration program shortens the over 30 minute pipette calibration procedure to less than 10 minutes. In addition the results of calibrations are automatically archived in the LIMS, thus replacing the need for a paper pipette register. Positive feedback has been received from the student groups that have been using the calibration program as it speeds up and facilitates the calibration procedure.

The programming of the pipette calibration program and the installation of the balance to communicate with the LIMS was more challenging and required more consultation by Software Point than estimated. Still, as the program has been functional and has received positive feedback, there are - within the limits of resources - future plans to connect other laboratory devices to the system.

KEYWORDS: LIMS, pipette, calibration, laboratory

|   |           |
|---|-----------|
| <b>SISÄLTÖ</b>  |           |
| <b>SANASTO JA LYHENTEET</b> .....   | <b>8</b>  |
| <b>1 JOHDANTO</b> .....   | <b>10</b> |
| <b>2 LIMS</b> .....   | <b>13</b> |
| 2.1 Käyttökohteet.....  | 13        |
| 2.2 LIMSin edut .....   | 14        |
| 2.3 LIMS ja laatu järjestelmät.....   | 14        |
| 2.4 LIMS-liiketoiminta .....  | 15        |
| 2.4.1 Sovellusalat .....  | 15        |
| 2.4.2 Järjestelmän valinta .....  | 15        |
| 2.4.3 Liiketoimintamallit.....  | 16        |
| 2.4.4 Relaatiotietokannat .....   | 17        |
| 2.5 Tietojärjestelmä ja datansiirron toteutukset .....                        | 18        |
| <b>3 TURUN AMK:N LIMS-PROJEKTI</b> .....                                      | <b>21</b> |
| 3.1 Agricola-ohjelma .....  | 21        |
| 3.2 LIMSin valinta .....  | 21        |
| 3.3 Pipetinkalibrointiohjelma .....   | 22        |
| 3.3.1 Pipettikortisto mallitietokanta.....                                    | 25        |
| 3.3.2 Pipetinkalibrointiohjelman ohjelmointi LIMSiin.....                     | 25        |
| 3.3.3 Pipettikortiston siirtäminen LIMS-järjestelmään.....                    | 43        |
| 3.3.4 Vaa'an asentaminen LIMSiin .....  | 47        |
| 3.3.5 Tiedonkulku pipetinkalibrointiohjelman käytössä .....                   | 49        |
| 3.3.6 Pipetinkalibrointiohjelman testaaminen .....                            | 51        |
| 3.3.7 Ohjelman testaaminen opiskelijaryhmällä, koulutus ja käyttöönotto ..... | 57        |
| 3.4 LIMS-järjestelmän käytön laajentaminen.....                               | 57        |
| 3.4.1 Uuden vaa'an lisääminen LIMSiin .....                                   | 57        |
| 3.4.2 HPLC-pumpun toimintatestaus .....                                       | 58        |
| 3.4.3 Muiden laitteiden lisääminen LIMSiin .....                              | 66        |
| 3.5 Tulevaisuus .....   | 66        |
| <b>4 YHTEENVETO JA PÄÄTELMÄT</b> .....  | <b>69</b> |
| <b>LÄHTEET</b> .....  | <b>71</b> |

## LIITTEET

- Liite 1. LIMS-tavoitteet
- Liite 2. Pipetinkalibrointi-työohje laskukaavoineen
- Liite 3. Serial-to-Ethernet -konvertterien hintavertailu
- Liite 4. Vaa'an MT-SICS -kommunikaatioprotokolla
- Liite 5. Lyhyt LIMS-kalibrointiohje
- Liite 6. Roope Kanniston LIMS-kalibrointiohje (Sensuroitu julkisesta versiosta)
- Liite 7. EKI-1521 -konvertterin asetukset (sensuroitu julkisesta versiosta)

## KUVAT

|  |    |
|--|----|
| Kuva 1. Pipetinkalibroinneissa käytettävä vaaka, Mettler Toledo AB204-s..... | 22 |
| Kuva 2. Näkymävalikko.....   | 26 |
| Kuva 3. Lab Admin -näkyvä.....   | 26 |
| Kuva 4. Units List -sivu. ....   | 27 |
| kuva 5. Add Unit –sivu. ....   | 27 |
| kuva 6. Parameter List -sivu. ....   | 28 |
| kuva 7. Add Parameter -sivu.....   | 28 |
| Kuva 8. Parameter Lists -sivu. ....  | 30 |
| Kuva 9. Add Parameter List -sivu.....  | 30 |
| Kuva 10. Add Parameter List -sivu tallentamisen jälkeen.....                 | 31 |
| Kuva 11. Select Parameter -sivu.....   | 32 |
| Kuva 12. Add Parameter List -sivun Data -välilehti. ....                     | 32 |
| Kuva 13. Add Parameter List -sivun Display -välilehti. ....                  | 33 |
| Kuva 14. Add Parameter List -sivun Reference –välilehti.....                 | 33 |
| Kuva 15. Specification List -sivu. ....                                      | 34 |
| Kuva 16. Add Specification -sivu.....  | 34 |
| Kuva 17. Add Specification -sivu tallentamisen jälkeen.....                  | 35 |
| Kuva 18. Limit Type -lista.....  | 35 |

|   |    |
|---|----|
| Kuva 19. Parametrilistan valintasivu. ....  | 36 |
| Kuva 20. Ylimääräisten parametriviittausten poistaminen Add Specification -sivun Parameter Limits -kohdassa. ....       | 36 |
| Kuva 21. Raja-arvojen määrittely parametreille Add Specification -sivulla.....  | 37 |
| Kuva 22. Testimetodin nimeäminen Add Test Method -sivulla. ....   | 37 |
| Kuva 23. Add Test Method -sivu tallentamisen jälkeen. ....  | 38 |
| Kuva 24. Parametrilistan valintasivu ....   | 38 |
| Kuva 25. Add Test Method -sivu parametrilistan valitsemisen jälkeen. ....   | 39 |
| Kuva 26. Product List -sivu. ....   | 40 |
| Kuva 27. Add Product -sivu. ....  | 40 |
| Kuva 28. Add Product -sivu tallennuksen jälkeen.....  | 41 |
| Kuva 29. Testimetodin valinta-ikkuna.....   | 41 |
| Kuva 30. Add Product -sivu testimetodin valinnan jälkeen. ....  | 42 |
| Kuva 41. EKI-1521 -konvertteri, johon on kytketty vaaka RS232-sarjakaapelilla ja verkkoyhteys Ethernet-kaapelilla. .... | 48 |
| Kuva 42. Mettler Toledo AB204-s vaaka yhdistettynä RS232-sarjakaapelilla EKI-1521 -konvertteriin. ....                  | 49 |
| Kuva 43. Pipetinkalibrointityöpiste. ....   | 49 |
| Kuva 44. LIMSin kirjautumisikkuna. ....   | 52 |
| Kuva 45. Peruslaboratoriokäyttäjän Sapphire -näkymä.....  | 52 |
| Kuva 46. Mittauksen valintataulukko. ....   | 53 |
| Kuva 47. Pipetin kalibroinnin tiedot täytettynä mittauksenvalintataulukkoon.....  | 53 |
| Kuva 48. Sample List -sivu. ....  | 54 |
| Kuva 49. Kalibrointitaulukko ennen mittauksia. ....   | 54 |

|  |    |
|--|----|
| Kuva 50. Instrumenttilista.....  | 55 |
| Kuva 51. Kalibrointitaulukko, mittausten syötön ja tulosten laskennan jälkeen.....               | 56 |
| kuva 52. Peruslaboratoriokäyttäjän näkymä.....   | 62 |
| Kuva 53. Täytetty mittauksenvalintataulukko. ....  | 62 |
| Kuva 54. Select Product -sivu haun tekemisen jälkeen. ....                                       | 63 |
| Kuva 55. Instrumentinvalintasivu haun tekemisen jälkeen. ....                                    | 63 |
| Kuva 56. Sample List -sivu toimintatestin luomisen jälkeen. ....                                 | 64 |
| kuva 57. HPLC-pumpun toimintatestin taulukko lähtöarvojen ja mittaustulosten syötön jälkeen..... | 64 |
| Kuva 58. HPLC-pumpun toimintatestin taulukko tulosten laskennan jälkeen.....                     | 65 |
| kuva 59. Kuvaaja mitatuista pumpun virtausnopeuksien poikkeamista. ....                          | 65 |

## **KUVIOT**

|   |    |
|---|----|
| Kuvio 1. Laitekommunikaatio-ohjelman tiedonpyyntö toimilaitteelta. ....                       | 19 |
| Kuvio 2. Jatkuva tiedon lähetys toimilaitteelta laitekommunikaatio-ohjelmalle.....            | 19 |
| Kuvio 3. Tiedon tallentaminen yhteiselle kovalevyllä laitekommunikaatio-ohjelmaa varten. .... | 20 |
| Kuvio 4. Tiedon tallentaminen omalle kovalevyllä laitekommunikaatio-ohjelmaa varten. ....     | 20 |
| Kuvio 5. Pipetin kalibrointi ilman LIMS:iä. ....  | 24 |
| Kuvio 6. Pipetin kalibrointi LIMS:n avulla.....   | 24 |
| Kuvio 7. Sapphire LIMS:n hierarkia.....   | 25 |
| Kuvio 8. Tiedonkulku pipetinkalibrointiohjelmassa. ....                                       | 50 |
| Kuvio 9. Suunnitelma HPLC toimintatestiohjelmasta.....  | 60 |

## SANASTO JA LYHENTEET

|                   |   |
|-------------------|---|
| Client            | Asiakas; asiakkaalla voidaan tarkoittaa asiakasohjelmaa tai asiakasohjelmaa suorittavaa konetta; asiakasohjelma on sovellus, joka on yleensä käyttöliittymä ihmisiä varten, ja jolla yleensä otetaan verkon yli yhteys palvelimeen ja näin käytetään palvelimella olevia palveluita etäkäyttönä |
| ELN               | Electronic lab notebook; elektroninen laboratoripäiväkirja; ohjelma joka on tehty korvaamaan paperinen laboratoripäiväkirja   |
| ERP               | Enterprise resource planning; toiminnanohjausjärjestelmä; yrityksen tietojärjestelmä, joka integroi eri toimintoja esim. tuotantoa, jakelua, varastonhallintaa, laskutusta ja kirjanpitoa   |
| GLP               | Good laboratory practice; hyvä laboratorioskäytäntö; tutkimusta koskeva kokonaisvaltainen laatu- ja dokumentointijärjestelmä, jota viranomaiset edellyttävät kemikaalilainsäädännön mukaisilta terveyst ja ympäristöturvallisuustutkimuksilta   |
| GMP               | Good manufacturing practice; hyvä tuotantomenettely; elintarvike-, kosmetiikka- ja lääketeollisuuden laatu- ja dokumentointijärjestelmä   |
| HPLC              | High performance/pressure liquid chromatography; korkean erotuskyvyn nestekromatografia; kromatografinen menetelmä, jota käytetään yhdisteiden erottamiseen, tunnistamiseen ja kvantitatiiviseen analysointiin  |
| Keskisuuri yritys | Yritys, jonka henkilöstön määrä on alle 250 henkilöä ja jonka liikevaihto ei ylitä 50 miljoonaa euroa tai jonka taseen loppusumma ei ylitä 43 miljoonaa euroa   |
| LIMS              | Laboratory information management system; laboratorion tiedonhallintajärjestelmä  |
| LIS               | Laboratory information system; laboratorion tietojärjestelmä; käytetään sairaaloiden laboratorioissa potilaiden näytetietojen tallennukseen   |
| Mikroyritys       | Yritys, jonka henkilöstön määrä on alle 10 henkilöä ja jonka liikevaihto tai taseen loppusumma ei ylitä 2 miljoonaa euroa   |
| Minitietokone     | Minicomputer; 1960-1970 luvuilla suunniteltuja tietokoneita, joiden toteutuksessa kiinnitettiin erityistä huomiota pieneen kokoon ja yksinkertaisuuteen, kutsuttiin minitietokoneiksi;  |



|              |  |
|--------------|--|
|              | minitietokoneet olivat nykypäivän mikrotietokoneisiin verrattuna kooltansa moninkertaisia  |
| SAP          | Systeme, Anwendungen und Produkte in der Datenverarbeitung Aktiengesellschaft; Euroopan suurin ohjelmistovalmistaja  |
| SAP ERP      | SAP-yrityksen valmistama ERP-järjestelmä   |
| Server       | Palvelin; palvelimella voidaan tarkoittaa palvelinohjelmistoa tai tällaista ohjelmistoa suorittavaa tietokonetta; palvelinohjelmisto tarjoaa erilaisia palveluja muille ohjelmille joko tietokoneverkon välityksellä tai paikallisesti samassa tietokoneessa |
| Pieni yritys | Yritys, jonka henkilöstön määrä on alle 50 henkilöä ja jonka liikevaihto tai taseen loppusumma ei ylitä 10 miljoonaa euroa   |
| VLAN         | Virtual local area network; virtuaalinen lähiverkko; VLAN on tekniikka, jolla fyysinen tietoliikenneverkko voidaan jakaa loogisiin osiin riippumatta siitä, missä kohdassa verkkoa sen asiakas- ja palvelinkoneet sijaitsevat fyysisesti                     |

## 1 JOHDANTO

Elintarvike-, kosmetiikka- ja lääketeollisuuden laboratorioissa täytyy dokumentoinnin olla GMP:n mukaista, tutkimustyössä GLP:n mukaista. Kaikki tapahtumat ja työvaiheet tulisi näiden laatujärjestelmien mukaan dokumentoida systemaattisesti. Kun dokumentoitava tietomäärä laboratoriotoinnoissa on suuri manuaalisesti käsiteltäväksi, tulee kyseeseen tiedonkeruun ja –hallinnan automatisointi. Tämä yleensä tapahtuu laboratorion tiedonhallintajärjestelmän eli LIMS:n avulla.

Tämän työn tarkoituksena oli selvittää LIMS-järjestelmän mahdollisuuksia, etuja, haittoja ja kustannuksia pystyttämällä LIMS-järjestelmä koulun laboratorioon ja liittämällä siihen laboratoriolaitteita. Pelkkä järjestelmän pystytys oli jo tärkeä tavoite, sillä haluttiin luoda LIMS opetus-/oppimisympäristö, koska teollisuudessa on tarvetta LIMS-osaajille. Jatkotavoitteena oli lisätä LIMS-osaamista niin että voitaisiin itse muokata ohjelmaa tuleviin tarpeisiin ja mahdollisesti – ensimmäisenä korkeakouluna Turussa – kouluttaa opiskelijoille LIMS:n ohjelmointia.

Työ tehtiin Turun AMK:lle ja yhteistyökumppanina toimi Software Point, jonka LIMS-järjestelmää, Sapphire LIMS:ää, käytimme työssä. Työhön kuului kaksi kahden päivän koulutusta Espoossa Software Pointilla. Muuten työ tehtiin Turun ammattikorkeakoululla Lemminkäisenkadun toimipisteessä.

Ensimmäiset tiedonhallintajärjestelmät olivat niitä käyttävien yritysten itse kehittämiä. Niiden kehittäminen vei yleensä paljon aikaa ja resursseja. 1970-luvulla alkoi räätälöityjä järjestelmiä olla saatavilla. Ne olivat yksittäistuotantoja jotka tilattiin palveluntarjoajalta tiettyyn laboratorioon.

Kaupallisia ratkaisuja kehitettiin räätälöityjen rinnalle ja 1980-luvulla tulivat ensimmäiset kaupalliset järjestelmät. Nämä olivat sovelluskohtaisia, yleensä analyysilaitteiden valmistajien suunnitteleamia tiettyjen analyysilaitteen käyttöön.

Kaupalliset ratkaisut vaativat paljon kallista muokkaamista vastatakseen yksittäisen laboratorion tarpeita.

PC-koneiden tehokkuuden lisääntymisen myötä alkoi sovelluskohtaisten kaupallisten järjestelmien rinnalle nousta avoimempia järjestelmiä ja 1990-luvulla alettiin suosia järjestelmiä, jotka antoivat käyttäjälle enemmän säätömahdollisuuksia ja alettiin siirtyä pois sovelluskohtaisesti sovitetuista järjestelmistä.

2000-luvun järjestelmät olivat hyvin joustavia ja useat kaupalliset LIMSit hyödynsivät avointa arkkitehtuuria. Useat järjestelmät olivat web-pohjaisia tai tarjosivat webin kautta järjestelmän asennuksen, ylläpidon ja käytön. (1)

### **Merkittäviä vuosilukuja LIMS-kehityksessä**

**1973** Pittsburghin konferenssissa pidettiin luento: *Guidelines for Defining and Implementing the Computerized Laboratory System*. Tätä luentoa pidetään ensimmäisenä merkinä LIMS-järjestelmien kehityksestä. Luennolla käsiteltiin mm. laboratorio-automaatiota ja automaattista tietojenkäsittelyä ja mukana oli esittelemässä tuotteitansa mm. Perkin-Elmer, Hewlett-Packard ja IBM Instruments.

**1980-1981** Ensimmäiset laboratoriotietojärjestelmät kehitettiin Varianin, Purvisin, Hewlett Packardin ja Perkin Elmerin toimesta. Ne olivat ns. LIS-järjestelmiä (Laboratory Information System).

**1982** Tulivat käyttöön ensimmäiset viralliset LIMS-järjestelmät: Perkin Elmerin "LIMS 2000", Purvis Systemsin "Turnkey LIMS" ja Spectrogram Corporationin "LMIS". Näitä kutsuttiin jälkeempään ensimmäisen sukupolven LIMS-järjestelmiksi. Ensimmäisen sukupolven LIMS-järjestelmät keskittivät laboratoriotoinnint yhdelle minitietokoneelle parantaen laboratorion tuottavuutta ja toimintaa. Nämä järjestelmät sisälsivät ensimmäiset automatisoidut raportointiominaisuudet.

**1983** Termi "LIMS" yleistyi kuvaamaan laboratorion tiedonhallintajärjestelmiä.

**1987** Pidettiin ensimmäinen kansainvälinen LIMS-konferenssi Pittsburghissa. Paikalla oli yli 400 osanottajaa. Konferenssi oli onnistunut ja siitä lähtien alettiin järjestää vuosittain kansainvälisiä LIMS-konferensseja.

**1988** Toisen sukupolven LIMS-järjestelmät tulivat markkinoille. Suurin osa niistä toimi minitietokoneilla, mutta myös PC-pohjaisia ratkaisuja alkoi ilmaantua.

**1991** Kolmannen sukupolven LIMS järjestelmät syntyivät. Niissä yhdistyi PC:n selkeä käyttöliittymä ja standardisoidut työkalut sekä minitietokoneiden tehokkuus ja turvallisuus palvelimena. Client/Server-arkkitehtuuri jakoi tiedon prosessoinnin niin että useampi asiakaskone saattoi liittyä tietokantapalvelimeen, jossa varsinainen tiedon prosessointi tapahtui.

**1995** Neljännen sukupolven LIMS järjestelmissä resurssienkäyttöä optimoitiin. Tiedon prosessointi mahdollistettiin sekä asiakas-, että palvelinkoneilla, jolloin prosessointityö voitiin jakaa niiden kesken.

**1996** Web-pohjaiset LIMS-järjestelmät ilmestyivät. LIMS:iin oli saatavilla langaton tiedonsiirtojärjestelmä.

**1997** US FDA teki säädöksen elektronisista nimikirjoituksista LIMS-järjestelmissä.

**1999** Ensimmäinen kuukausimaksullinen LIMS-palvelu perustettiin. LIMS-palvelin sijaitsi palveluntarjoajalla ja käyttäjät kirjautuivat sinne Internetin kautta.  
(1, 2)

## 2 LIMS

LIMS (Laboratory Information Management System) on laaja ohjelmistoa kuvaava käsite, jota on vaikea selittää lyhyesti. Yhdysvaltalaisen LIMS-palveluntarjoajan, Sapio Sciencesin mukaan LIMS on ohjelmisto joka tukee nykyaikaista laboratoriotyöskentelyä. Se on joustava järjestelmä, jolla voi seurata ja hallita suuria tietomääriä kerrallaan monivaiheisista töistä. Siinä on helppokäyttöinen käyttöliittymä tietojen syöttämiseen ja lukemiseen (3). LIMS toimii tuotanto- tai mittausprosessissa syntyvien tietojen integroinnin ja jäljitettävyyden apuvälineenä. LIMS myös varmistaa että tuotteen tai näytteen eri työvaiheet ja analyysit käydään läpi ja ilmoittaa jos jossain työvaiheessa tulee virhe, tai mittaukset ovat raja-arvojen ulkopuolella.

### 2.1 Käyttökohteet

LIMS-järjestelmiä on kehitetty moniin eri tarkoituksiin. Ensimmäisten kaupallisten LIMS-järjestelmien käyttökohteena olivat lähinnä kromatografialaitteet ja järjestelmät olivat laitevalmistajien kehittämiä. Sen jälkeen LIMS-järjestelmiä on käytetty elintarvike- ja panimoteollisuuden tehostamiseen ja laadun parannukseen, Suomen ympäristöhallinnon vesianalyseissä, Havaijin saariston levien kartoitukseen tarkoitettuna tietokantana, Leibniz Instituutissa kasvigenomiikan tutkimuksessa ensisijaisen raakadatan varastointi ja hallintajärjestelmänä (1, 4, 5, 6, 7). Akateemisten laitosten yhteistyönä on kehitetty erityisesti biologisten proteiinien rakenteiden tutkimukseen soveltuva PiMS, eli Protein information Management System (8). Genotyyppaukseen on erityisesti kehitetty järjestelmiä mm. SLIMS ja AGI-LIMS (9, 10). Muita LIMS-järjestelmien sovelluksia ovat mm. micro-array analyysit, lääketeollisuuden tuotanto ja seulonta (11, 12, 13).

## 2.2 LIMS:n edut

Siirryttäessä yksittäisistä laboratoriokokeista toistettaviin kokeisiin, alkaa kerättävän datan määrä olla niin suuri, että perinteisin ”paperimetodein” sen kerääminen ja hallitseminen ei ole mahdollista riittävän tarkasti järkevällä nopeudella. Tällöin tulee kyseeseen datankeruun automatisointi. Ison kapasiteetin (high throughput) projektit vaativat tiedon käsittelyyn siihen erikoistuneen ohjelmiston (13).

Yksittäisiäkin kokeita tehtäessä LIMS voi nopeuttaa prosessia poistamalla siitä ylimääräisiä vaiheita, joissa tuloksia luetaan mittalaitteelta ja kirjoitetaan manuaalisesti paperille, ja mahdollisesti sen jälkeen vielä syötetään tietokoneelle. Monet kokeet voidaan automatisoida kytkemällä mittalaitteet suoraan verkkoon, niin että niitä ohjataan LIMS:in kautta ja että ne syöttävät mittaustulokset suoraan LIMS:iin, joka tekee tuloksille tarvittavat laskutoimitukset ja haluttaessa esittää ne kuvaajina.

## 2.3 LIMS ja laatu järjestelmät

Tutkimuksissa pyritään noudattamaan GLP-laatu järjestelmää. GLP:n mukaan tutkimuksessa syntyvä raakadata täytyy kerätä heti ja tarkasti. Tutkimusmenetelmien tulee olla vakioituja ja tutkimuksia koskevat tiedot ja tulokset tulee säilyttää arkistoissa asiasta vastaavien viranomaisten määräämän ajan. (13) Tiedonkeruun automatisointi auttaa vähentämään inhimillisiä virheitä tulosten keräämisessä ja käsittelyssä. Tutkimustulokset pysyvät tallessa LIMS-järjestelmän elektronisessa arkistossa ja ne voidaan tarvittaessa tulostaa näytölle tai paperille.

Lääke- ja elintarviketeollisuudessa käytetään tuotannossa GMP-laatu järjestelmää. GMP:n mukaan tuotteiden tulee olla jäljitettävissä aina tuotannon alkuvaiheisiin saakka. LIMS-järjestelmä auttaa keräämään valmistettavan tuotteen tiedot eri tuotantovaiheissa päivämäärineen. (14)

LIMS siis kokoaa tulokset eri mittalaitteilta, vähentää manuaalisen kirjaamisen määrää ja siinä mahdollisesti syntyviä virheitä. Näin LIMS tehostaa prosessia ja lisää mittaus-/tuotantokapasiteettia. LIMS tallentaa kaikki tapahtumat muistiin, eli automatisoi raportoinnin. Tämä sekä helpottaa että parantaa mittausten dokumentointia ja sitä kautta jäljitettävyyttä. (15)

## 2.4 LIMS-liiketoiminta

Nykyjään on tarjolla lukemattomia LIMS-palveluntarjoajia ja LIMS-järjestelmiä. LIMS-palveluntarjoaja ei välttämättä ole järjestelmän valmistaja, mutta LIMSiä hankittaessa palveluntarjoaja on valmistajaa olennaisempi. Tässä luvussa käydään muutamien esimerkkien kautta läpi eri LIMSien yhteneväisyyksiä ja eroja liiketoiminta-strategioissa, siinä mihin järjestelmät keskittyvät, muokattavuudessa ja tietokannoissa. Vertailu perustuu tietoihin joita LIMS-palveluntarjoajat ilmoittavat verkkosivuillaan (16, 17, 18, 19, 20, 21).

### 2.4.1 Sovellusalat

LIMS-palveluntarjoajat eivät mainosta järjestelmiään ainoastaan yhdelle alalle soveltuviksi. Useimmat palveluntarjoajat luettelevat järjestelmänsä soveltuvan lääketeollisuuteen, elintarvike- ja panimoteollisuuteen, ympäristölaboratorioihin, petrokemialliseen teollisuuteen, vesilaboratorioihin, kaivosteollisuuteen ja bioteknologiaan. Joidenkin järjestelmien mainitaan myös soveltuvan rikostutkimuslaboratorioihin. Osa palveluntarjoajista ei edes listaa järjestelmänsä käyttötarkoituksia ja teollisuudenaloja, joille se soveltuu, vaan ilmoittaa ylimalkaisesti että "järjestelmä soveltuu ammattimaisiin laboratorioihin", tai että "järjestelmän saa muokattua mihin tahansa käyttöön".

### 2.4.2 Järjestelmän valinta

Osalla LIMS-palveluntarjoajista on tarjolla valmiita paketteja eri alojen laboratorioihin, esim. öljynjalostus-, elintarvike- tai vesilaboratorioihin. Näissä paketeissa on valmiina tuki alan mittalaitteisiin ja loogiset mittaus- ja

tiedonhallintamenetelmät alan perusmittauksille. Parhaassa tapauksessa pienellä asetusten säätämällä saadaan valmis paketti toimimaan asiakkaan laboratoriossa.

Jos asiakkaan laboratorio ei kuitenkaan sovi mihinkään valmiiseen muottiin, vaan on esimerkiksi tutkimuslaboratorio tai välimuoto eri alojen laboratorioista, tulee kyseeseen räätälöitävä järjestelmä. Selvitetään siis ensin mitä ominaisuuksia järjestelmällä tulisi olla ja tehdään sen jälkeen palveluntarjoajalle mittatilaus, jonka perusteella järjestelmä rakennetaan. Joissain tapauksissa parhaiten toivomuksia vastaavan järjestelmän aikaansaamiseksi asiakas lähtee yhdessä palveluntarjoajan kanssa suunnittelemaan järjestelmää yhteisissä suunnittelusessioissa.

Jotkut LIMS-palveluntarjoajat antavat asiakkaalle oikeudet ja työkalut muokata järjestelmää ja ohjelmoida itse siihen tarvittavia ominaisuuksia. Muokattavana runkona voi olla valmis paketti tai räätälöity järjestelmä. Joskus voidaan myös lähteä ohjelmoimaan ominaisuuksia "puhtaalta pöydältä". Tällöin pohjana on LIMS-järjestelmä, jota ei ole vielä valmisteltu minkään tietyn alan tai laboratorion käyttöön.

#### 2.4.3 Liiketoimintamallit

LIMS-palveluntarjoajilla on erilaisia tapoja saada tuottoa järjestelmästä. Software Pointin toimialajohtaja Marjut Pokkisen mukaan suurin osa palveluntarjoajista saa tuottoa järjestelmän asentamisesta, räätälöinnistä ja lisenssistä. Usein LIMS:n käytöllä on myös vuosittainen ylläpitomaksu, johon sisältyy järjestelmän päivittäminen ja tekninen tuki ongelmatilanteissa. Maksullisia lisäpalveluja ovat mm. konsultointi ennen järjestelmän hankintaa, koulutukset järjestelmän käyttämiseen ja mahdollisesti muokkaamiseen, lisämoduulien asennus ja muu asennuksen jälkeinen muokkaus.

On myös olemassa avoimen lähdekoodin LIMS-ratkaisuja - kuten bikalims - joiden asennus, käyttö ja muokkaus on ilmaista niin kauan kuin sen tekee itse. Lisenssimaksuja ei myöskään tällaisista järjestelmistä peritä. Näiden ratkaisujen



palveluntarjoajat myyvät yleensä räätälöinti, asennus, koulutus, muokkaus ja tukipalveluja niitä tarvitseville.

#### 2.4.4 Relaatiotietokannat

LIMS-järjestelmän pohjana on aina jokin relaatiotietokanta, johon kaikki käsiteltävä tieto tallentuu. Nykyjään monet LIMS-järjestelmät osaavat käyttää muitakin kuin yhtä tiettyä tietokantaa. Yleisiä LIMS-relaatiotietokantoja ovat MS-SQL- ja Oraclen tietokannat. Jotkut palveluntarjoajista ilmoittavat kotisivuillaan ylimalkaisesti tukevansa "useita tietokantoja" tai "kaikkia yleisimpiä tietokantoja". Jotkut LIMS-järjestelmät, kuten LABWORKS LIMS, voivat toimia yhteistyössä muiden ERP-järjestelmien, kuten SAP ERP:n kanssa, käyttäen samaa tietokantaa.

## 2.5 Tietojärjestelmä ja datansiirron toteutukset

LIMSin ja toimilaitteen välillä on mahdollista käyttää erilaisia kommunikaatiotapoja, joista valitaan tarpeeseen sopivin vaihtoehto.

A1. Laitekommunikaatio-ohjelma tekee toimilaitteelle yksittäisen tiedonlähetyspyynnön käyttäjän käskystä. Toimilaite palauttaa tiedon laitekommunikaatio-ohjelmalle, joka purkaa tiedon LIMSin ymmärtämään muotoon ja tallentaa sen tietokantaan (kuvio 1).

A2. Laitekommunikaatio-ohjelma hakee jatkuvasti tietoa toimilaitteelta, eli tekee jatkuvasti tiedonlähetyspyyntöjä. Toimilaite palauttaa tiedon laitekommunikaatio-ohjelmalle, joka purkaa tiedon LIMSin ymmärtämään muotoon ja tallentaa sen tietokantaan.

B. Toimilaite lähettää tietoa jatkuvasti laitekommunikaatio-ohjelmalle ilman pyyntöjä. Laitekommunikaatio-ohjelma purkaa ja tallentaa tiedon tietokantaan (kuvio 2).

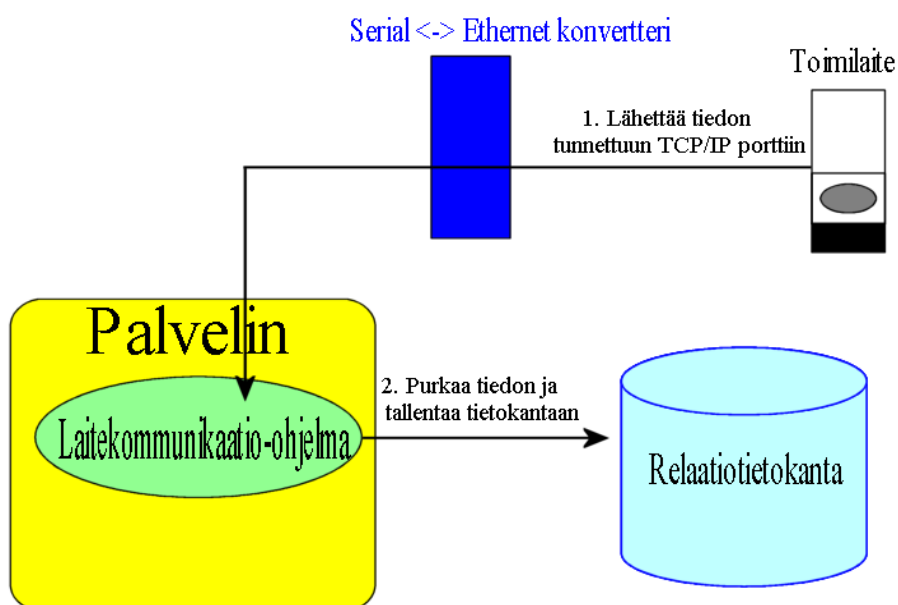
C1. Toimilaite tallentaa tietoa jatkuvasti yhteiselle kovalevylle ja laitekommunikaatio-ohjelma hakee tiedon levyltä, purkaa tiedon ja tallentaa sen tietokantaan.

C2. Käyttöpääte tekee käyttäjän käskystä tiedonlähetyspyynnön toimilaitteelle ja tallentaa tiedon yhteiselle kovalevylle. Laitekommunikaatio hakee tiedon levyltä, purkaa sen ja tallentaa tietokantaan (kuvio 3).

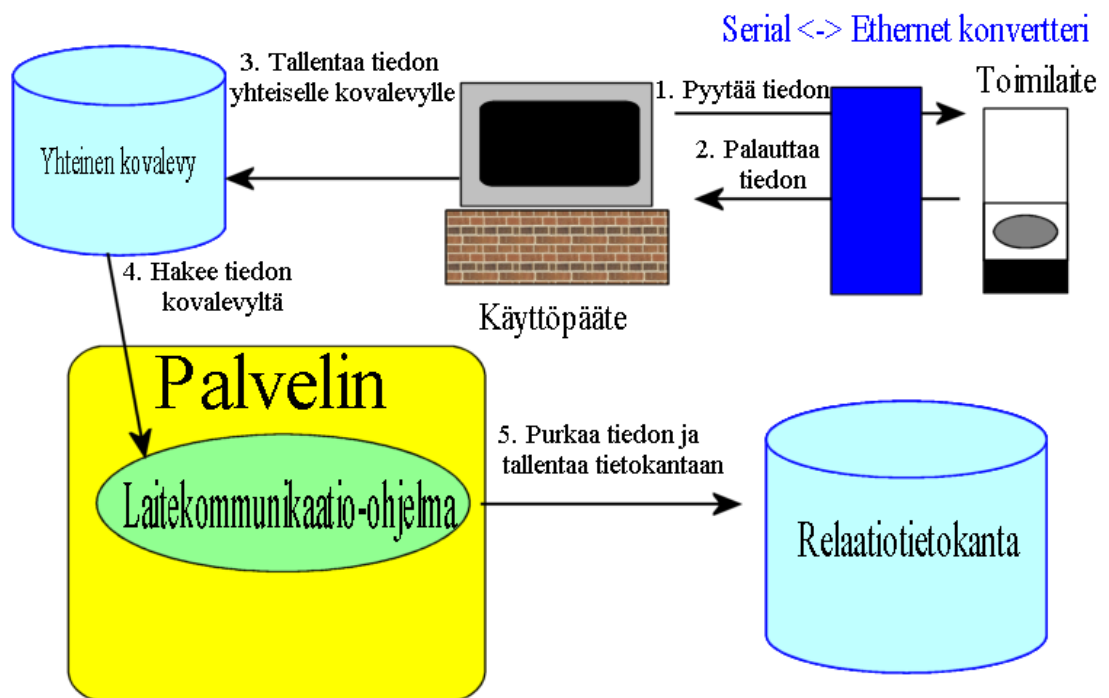
C3. Käyttöpääte tekee käyttäjän käskystä tiedonlähetyspyynnön toimilaitteelle ja tallentaa tiedon omalle kovalevylle. Laitekommunikaatio hakee tiedon levyltä, purkaa sen ja tallentaa tietokantaan (kuvio 4).



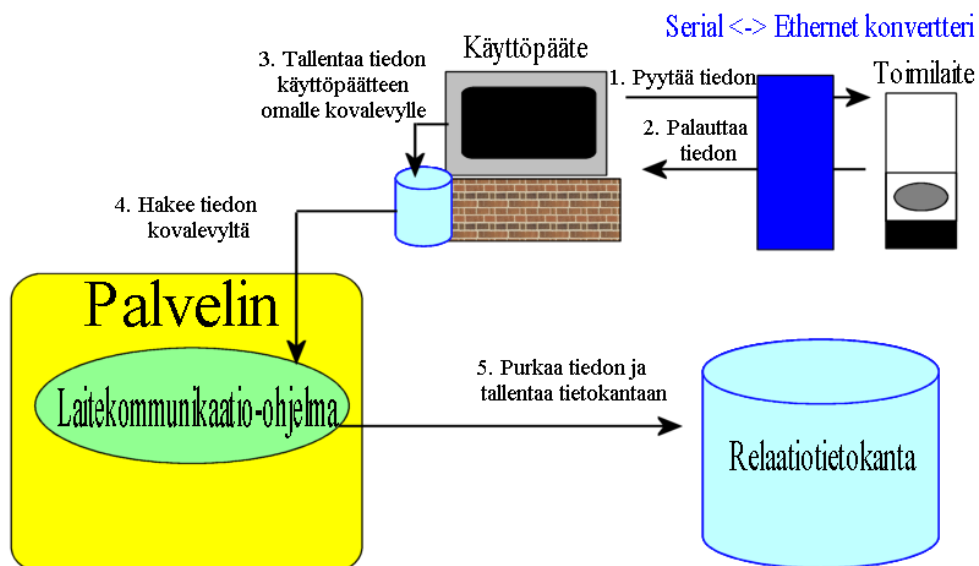
Kuvio 1. Laitetkommunikaatio-ohjelman tiedonpyyntö toimilaitteelta.



Kuvio 2. Jatkuva tiedon lähetys toimilaitteelta laitetkommunikaatio-ohjelmalle.



Kuvio 3. Tiedon tallentaminen yhteiselle kovalevylle laitekommunikaatio-ohjelmaa varten.



Kuvio 4. Tiedon tallentaminen omalle kovalevylle laitekommunikaatio-ohjelmaa varten.

### 3 TURUN AMK:N LIMS-PROJEKTI

Turun AMK:n LIMS-projekti käynnistettiin Turun AMK:n opetuksen kehittämiseen tähtäävän Agricola-ohjelman yhteydessä. Turun korkeakouluissa tehdään biologista, biolääketieteellistä ja bioteknistä tutkimusta. Näissä tutkimuksissa yhteinen LIMS-järjestelmä helpottaisi mittaustulosten arkistointia ja hallintaa, lisäisi synergiaa eri alojen tutkimusryhmien välillä, auttaisi yhtenäistämään tiedon analysoinnissa käytettävät työkalut ja menetelmät, sekä tuottaisi kustannussäästöjä automatisoimalla analyysejä ja tiedonhallintaa. Lisäksi järjestelmä mahdollistaisi laboratorio-, lääketieteen ja luonnontieteiden opiskelijoiden kouluttamisen käyttämään ja kehittämään moderneja LIMS-järjestelmiä (liite 1).

#### 3.1 Agricola-ohjelma

Turun AMK:lla käynnistettiin 2009 Agricola-ohjelma jonka tarkoituksena oli laajavaikutteinen opetuksen kehittäminen. Ohjelman yhtenä osa-alueena oli liiketoiminnan ja teollisuuden ohjausjärjestelmät. Tähän osa-alueeseen kuului SAP ERP-järjestelmän koulutus, sekä muiden ERP ja LIMS-järjestelmien pystytys ja käyttöönotto oppimisympäristöinä (22).

#### 3.2 LIMS:n valinta

Ensimmäinen askel LIMS-projektissa oli LIMS-järjestelmän valinta. Turun AMK:n T&K-päällikkö, PhD. Tony Wahlroosin mukaan tarjouspyyntöjä tehtiin eri IT-yrityksille LIMS-järjestelmän asennuksesta ja käytöstä. Parhaimmat tarjoukset tulivat Blomesystemiltä (LABbase), Innovaticsilta (InnoLIMS), StarLIMSiltä, Labwarelta ja Software Pointilta (Sapphire LIMS). Software Pointin tarjous oli näistä paras: Järjestelmään saatiin muokkausoikeudet, hinta oli sopiva, Software point sijaitsee Suomessa eli ongelmatilanteissa tuki on lähellä ja neuvoja saa suomen kielellä, Sapphire LIMS:n käytön ja muokkaamisen

kouluttaminen on riittävän helppoa, Turun AMK:n käytössä oli jo ennestään Software Pointin ohjelmistoa, eli yhtiö oli entuudestaan tuttu.

### 3.3 Pipetinkalibrointiohjelma

Ensimmäiseksi sovellukseksi, joka ohjelmoitiin AMK:n laboratorion LIMSiin, valittiin pipetinkalibrointiohjelma. Tähän valintaan päädyttiin, koska prosessi on yksinkertainen. Passiivisena toimilaitteena toimiva Mettler Toledo AB204-s vaaka (kuva 1) lähettää pienen määrän yksinkertaista dataa. Tällainen ohjelma oli nopea toteuttaa ja sille oli välitön käyttötarve. Nopeasti toteutettavalla ohjelmalla päästiin näkemään pian käytännössä, kuinka EKI-1521 –konvertterin välityksellä tehtävä RS-232 –Ethernet muunnos toimii.



Kuva 1. Pipetinkalibroinneissa käytettävä vaaka, Mettler Toledo AB204-s.

Jos halutaan saada luotettavia tuloksia ja tehdä toistettavia kokeita, tulee mittalaitteiden olla kalibroituja. Pipetti on perustyöväline kaikissa biotekniikan töissä ja näin ollen pipetin tarkkuus vaikuttaa kaikkiin tuloksiin.

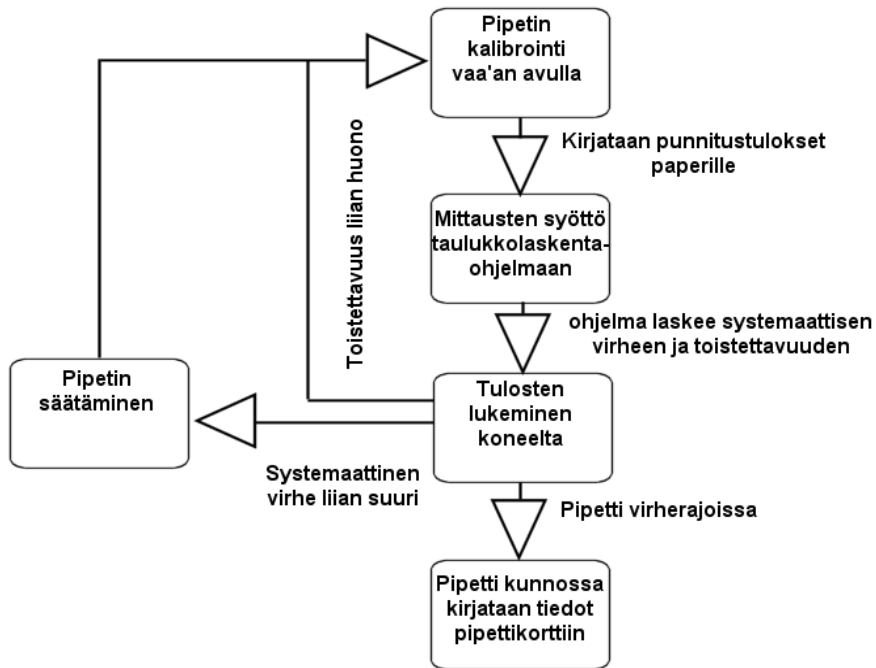
Pipettiä kalibroitaessa valitaan testitilavuus pipetin alueelta ja vaa'alla olevaan astiaan pipetoidaan testitilavuuden verran ionivapaata vettä. Punnitaan vesi ja kirjataan tulos. Toistetaan punnitseminen 10 kertaa ja kirjataan tulokset. Muunnetaan saadut massat tilavuuksiksi käyttäen Z-arvotaulukkoa. Lasketaan mittauksista tilavuuksien keskiarvo, systemaattinen virhe sekä toistettavuus. Lopuksi verrataan systemaattista virhettä (tarkkuus) ja satunnaisvirhettä

(toistettavuus) annettuihin spesifikaatioihin. Jos tulokset eivät ole virherajojen sisällä, korjataan pipetin säätöä ja tehdään punnitukset uudelleen. (ks. liite 2, Kalibrointi ja viritys)

Systemaattisen virheen ja toistettavuuden laskeminen punnitustuloksista on laskimen avulla paperille tehtynä aikaa vievää. Vaihtoehtona on kirjata punnitustulokset paperille ja käydä ATK-luokassa laskemassa tulokset taulukkolaskentaohjelmassa ja sitten palata laboratorioon tekemään mahdolliset korjaavat säädöt pipettiin. Jopa taulukkolaskentaohjelmaa käyttäen, voi pipetin kalibrointiin kulua kokonaisuudessaan yli puoli tuntia aikaa. Kalibrointien ulkoistaminen tulisi maksamaan noin 50 € pipettiä kohden. (kuvio 5)

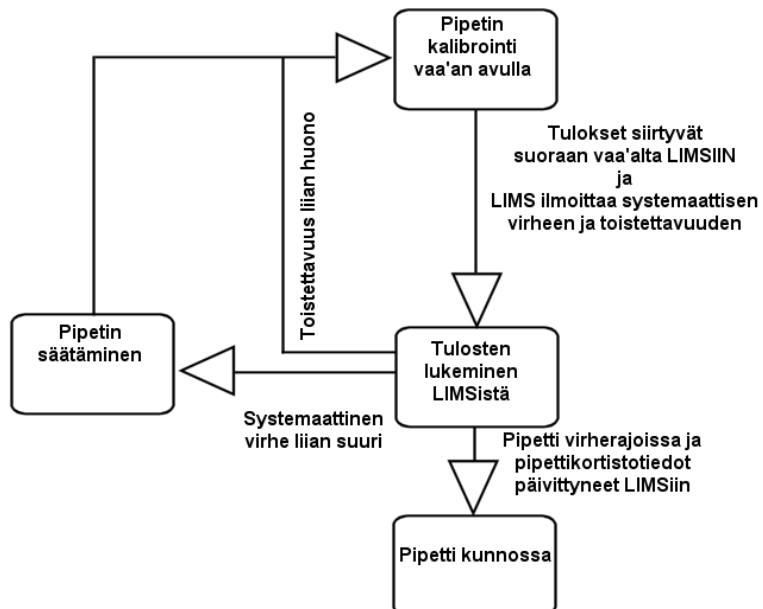
Pipetin kalibrointiohjelman tarkoituksena on nopeuttaa kalibrointeja. Kun vaaka on liitetty LIMS-järjestelmään, menevät punnitustulokset suoraan tietokoneelle, ilman että tarvitsee kirjata tai syöttää lukuja tietokoneelle käsin. Lisäksi ohjelma laskee tulosten perusteella pipetoinnin tarkkuuden ja toistettavuuden ja vertaa niitä etukäteen asetettuihin virherajoihin. Käyttäjä saa välittömästi tiedon siitä, onko pipetin kalibrointi virherajojen sisällä ja voi alkaa saman tien tekemään mahdollisia korjauksia. Parhaimmillaan LIMS:n avulla kalibrointi tapahtuu alle 10 minuutissa ja lisäksi LIMS arkistoi mittaustulokset myöhempää tarkkailua varten. Perinteisesti kalibroinnin yhteydessä on merkitty pipetin kunto ja virheen suuruus fyysiseen pipetikortistoon, jossa jokaisella pipetillä on oma pahvinen korttinsa. LIMS kuitenkin kerää automaattisesti tiedot kalibroinnista ja näin ollen toimii elektronisena versiona pipetikortistosta. (kuvio 6)

### Pipetin kalibrointi ilman LIMS:ä



Kuvio 5. Pipetin kalibrointi ilman LIMS:ä.

### Pipetin kalibrointi LIMS:n avulla



Kuvio 6. Pipetin kalibrointi LIMS:n avulla.



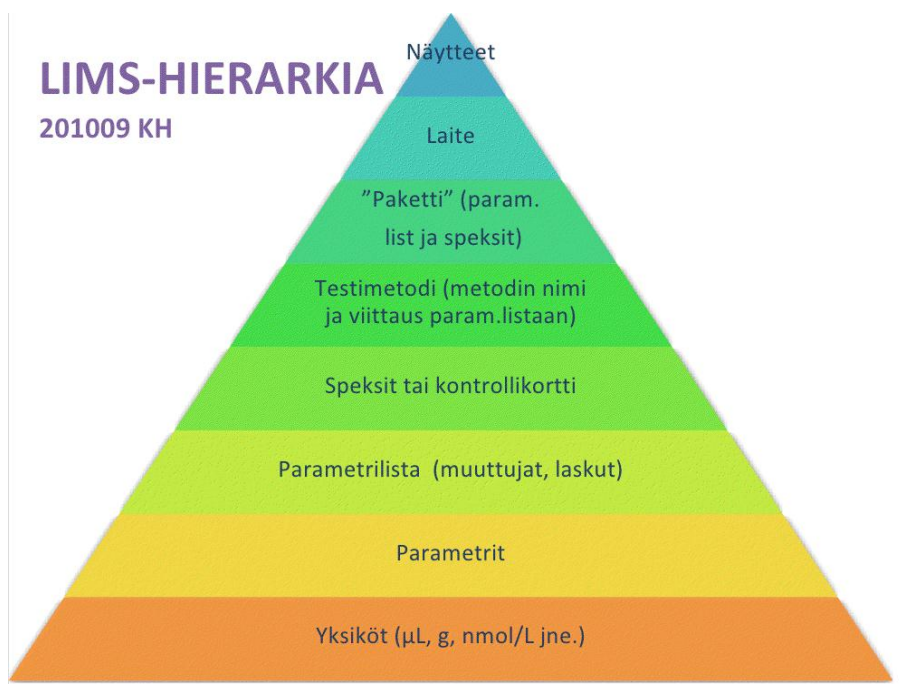
### 3.3.1 Pipettikortisto mallitietokanta

Ensimmäisen LIMS-koulutuksen jälkeen LIMS-työryhmällä ei vielä ollut riittäviä tietoja pipetinkalibrointiohjelman ohjelmointiin. Ohjelman tavoitteet olivat kuitenkin selvät ja päätimme lähteä rakentamaan Access-tietokantaan pipettikortistoa, joka toimisi mallina LIMSiin tulevalle pipettikortistolle tai jonka parhaassa tapauksessa voisi suoraan liittää LIMSin pipetinkalibrointiohjelmaan.

### 3.3.2 Pipetinkalibrointiohjelman ohjelmointi LIMSiin

Access-pipettikortisto esiteltiin koulutussessiossa Software Pointilla. Yhdessä Software Pointin kanssa pipetinkalibrointiohjelma ohjelmoitiin pipettikortiston ja kalibrointiohjeen (liite 2) perusteella.

Ohjelmoitaessa uusia toimintoja Sapphire LIMSiin, täytyy niitä lähteä rakentamaan hierarkian mukaisessa järjestyksessä alhaalta ylöspäin, eli rakennetaan aina edellisellä tasolla perusta seuraavaa tasoa varten. (kuvio 7)



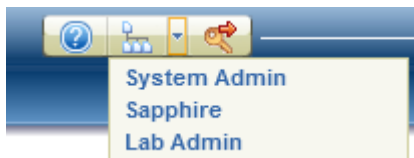
Kuvio 7. Sapphire LIMSin hierarkia.

## Järjestelmän rakentaminen

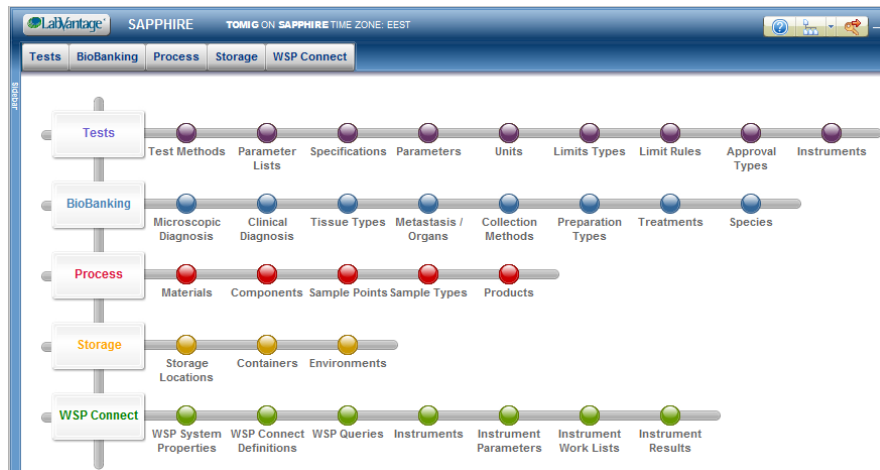
### 1. Määritetään käytettävät yksiköt LIMSiin.

LIMSiin kirjaudutaan sisään tunnuksilla joilla on oikeudet muokata järjestelmää. Oikealta ylävalikosta valitaan näkymävalitsimesta Lab Admin -näkyvä (kuva 2). Lab Admin -näkyvässä valitaan Tests -linjasta kohta Units (kuva 3), jolloin aukeaa Units List- sivu. Valitaan sivulta Add (kuva 4).

Units -kenttään määritetään yksikön lyhenne ja Description -kenttään yksikkö (kuva 5). Yksikkö tallennetaan save -painikkeesta. Jos yksiköitä tarvitsee vielä lisätä, painetaan Add another -painiketta ja lisätään samaan tapaan muut yksiköt. Kun kaikki yksiköt on määritetty, voidaan taas siirtyä näkymävalitsimesta (kuva 2) takaisin Lab Admin -näkyvä.



Kuva 2. Näkymävalikko.



Kuva 3. Lab Admin -näkyvä.

LabVantage SAPHIRE TOMIG ON SAPHIRE TIME ZONE: EEST

Tests BioBanking Process Storage WSP Connect

Test Methods Parameter Lists Specifications Parameters Units Limits Types Limit Rules Approval Types Instruments

Unit List + Add Edit Copy View Delete

Search Bar 1 - 24 of 24 ( page 1 of 1)

Search: OK

Search By Query: All Units

Search By Category:

Search By Folder: ADD ...to a new Folder

| Unit                     | Description                                     |
|--------------------------|---|
| <input type="checkbox"/> | <a href="#">Unit</a>                            |
| <input type="checkbox"/> | <a href="#">%</a> percent                       |
| <input type="checkbox"/> | <a href="#">µg</a> microgram                    |
| <input type="checkbox"/> | <a href="#">µl</a> microliter                   |
| <input type="checkbox"/> | <a href="#">µl/mg</a> microliter per milligram  |
| <input type="checkbox"/> | <a href="#">µmol/L</a> micromol per liter       |
| <input type="checkbox"/> | <a href="#">°C</a>                              |
| <input type="checkbox"/> | <a href="#">Celsius</a> celsius                 |
| <input type="checkbox"/> | <a href="#">Days</a> days                       |
| <input type="checkbox"/> | <a href="#">g</a> grams                         |
| <input type="checkbox"/> | <a href="#">IU/L</a>                            |
| <input type="checkbox"/> | <a href="#">mg</a> milligrams                   |
| <input type="checkbox"/> | <a href="#">mg/ml</a> milligrams per milliliter |
| <input type="checkbox"/> | <a href="#">min</a> minute                      |
| <input type="checkbox"/> | <a href="#">ml</a> milliliter                   |
| <input type="checkbox"/> | <a href="#">ml/min</a> volume flow              |
| <input type="checkbox"/> | <a href="#">mLU/L</a>                           |
| <input type="checkbox"/> | <a href="#">Months</a> months                   |
| <input type="checkbox"/> | <a href="#">nmol/L</a> nanomoles per liter      |
| <input type="checkbox"/> | <a href="#">pmol/L</a> pikomol per liter        |
| <input type="checkbox"/> | <a href="#">ppb</a> parts per billion           |
| <input type="checkbox"/> | <a href="#">ppm</a>                             |
| <input type="checkbox"/> | <a href="#">s</a> seconds                       |
| <input type="checkbox"/> | <a href="#">Weeks</a> weeks                     |
| <input type="checkbox"/> | <a href="#">Years</a> years                     |

Kuva 4. Units List -sivu.

LabVantage SAPHIRE TOMIG ON SAPHIRE TIME ZONE: EEST

Tests BioBanking Process Storage WSP Connect

Test Methods Parameter Lists Specifications Parameters Units Limits Types Limit Rules Approval Types Instruments

Add Unit Save Add Another Return To List Reset

Unit

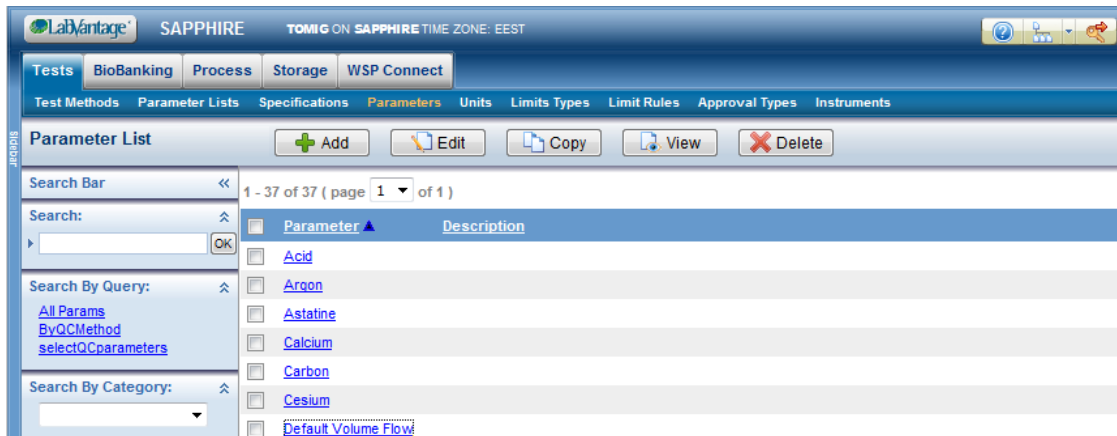
Units

Description

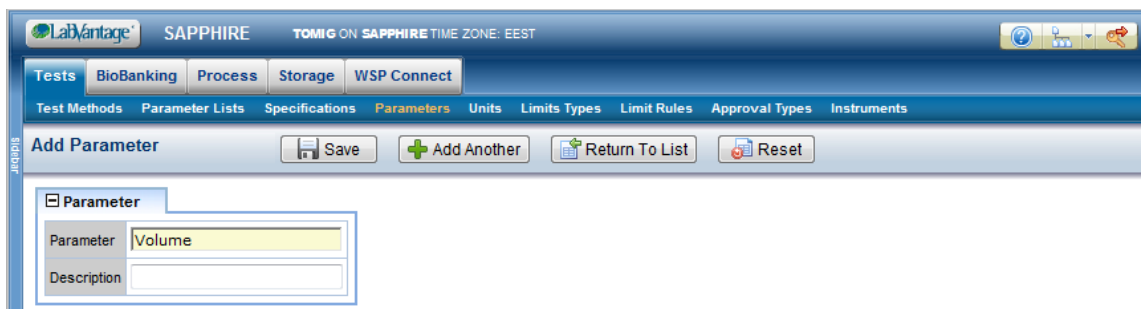
kuva 5. Add Unit –sivu.

2. Yksiköitä käytetään parametrien määrittämiseen. Parametri sisältää muuttujan nimen ja kuvauksen.

Lab Admin -näkyvässä valitaan Tests -linjasta Parameters ja siitä aukeavassa ikkunassa Add (kuva 6). Kirjoitetaan parametrin nimi ja mahdollinen kuvaus ja tallennetaan parametri Save -painikkeesta (kuva 7). Kuten yksiköidenkin kohdalla, voidaan uusia parametreja määrittää Add another -painikkeesta. Kun kaikki tarvittavat parametrit on määritetty, voidaan siirtyä Lab Admin -näky-  
mään.



kuva 6. Parameter List -sivu.



kuva 7. Add Parameter -sivu.

3. Parametreista tehdään parametrilistoja. Parametrilistassa määritetään mitä laskutoimituksia LIMS tekee parametrien kesken ja valitaan parametreille yksiköt.

Lab Admin -näkymän Tests -linjasta valitaan kohta Parameter Lists, jolloin aukeaa Parameter List List -sivu (kuva 8) ja painetaan Add -painiketta. Nimetään parametrilista, merkitään variant -kenttään 1 ja painetaan Save -painiketta (kuva 9). Tallentamisen jälkeen sivulle aukeaa parametrien syöttövalikko (kuva 10). Valikon Add -painike avaa listan olemassa olevista parametreista (kuva 11). Listasta valitaan halutut parametrit ja painetaan Select & Return. Data -välilehdessä parametreille valitaan tietotyypit (kuva 12). Validated Reference tarkoittaa, että parametrin arvo valitaan pudotusvalikosta. "Numeric" tarkoittaa, että kyseessä on syötettävä numeroarvo ja "Numeric (Calc)" tarkoittaa, että parametrin numeroarvo lasketaan Reference -välilehdellä määritettävällä laskukaavalla. Replicates -kohtaan merkitään, montako kopiota kyseisestä parametrissa tehdään lopulliseen näytesivuun. Yhdessä pipetinkalibroinnissa tehdään 10 punnitusta, joten valitaan Weight -parametrille 10 kopiota samoin kuin painosta laskettavalle tilavuudelle. Display -välilehdessä määritetään parametrien yksiköt ja näytettävien desimaalien määrä (kuva 13).

Reference -välilehdessä määritetään Reference -kohtaan mistä pudotusvalikosta otetaan arvoja, jos parametri hakee arvoja pudotusvalikosta (kuva 14). Calculation Rule -kohtaan kirjoitetaan laskukaava niille parametreille joiden Data Type on "Numeric (calc)". Kun kaikki arvot on asetettu parametrilistaan, voidaan siirtyä Lab Admin -näkymään.

LabVantage SAPHIRE TOMIG ON SAPHIRE TIME ZONE: EEST

Tests BioBanking Process Storage WSP Connect

Test Methods Parameter Lists Specifications Parameters Units Limits Types Limit Rules Approval Types Instruments

Parameter List List

Search Bar << 1 - 19 of 19 ( page 1 of 1 )

Search:

Search By Query:

Search By Folder:   ...to a new Folder

| Parameter List                             | Description                               | Version | Variant | Status      |
|--|---|---------|---------|-------------|
| <input type="checkbox"/> Alkali Metals     | Some Alkali Metals                        | 1       | 1       | Active      |
| <input type="checkbox"/> Alkali Metals     | Alkali Metals Test                        | 1       | Prep    | Active      |
| <input type="checkbox"/> Appearance        | Physical Appearance Test                  | 1       | 1       | Active      |
| <input type="checkbox"/> Appearance        |   | 1       | Prep    | Active      |
| <input type="checkbox"/> Assav             | Assay Test                                | 1       | 1       | Active      |
| <input type="checkbox"/> Assav             | Assay Preparation                         | 1       | Prep    | Active      |
| <input type="checkbox"/> Estradiol         |   | 1       | 1       | Provisional |
| <input type="checkbox"/> Estradiol(2)      |   | 1       | 1       | Provisional |
| <input type="checkbox"/> FSH               |   | 1       | 1       | Provisional |
| <input type="checkbox"/> LH                |   | 1       | 1       | Provisional |
| <input type="checkbox"/> Paing             |   | 1       | 1       | Provisional |
| <input type="checkbox"/> Pipet calibration | Pipet calibration                         | 1       | 1       | Provisional |
| <input type="checkbox"/> PumpunVirtNopeus  | HPLC Pumpun virtausnopeustesti            | 1       | 1       | Provisional |
| <input type="checkbox"/> QCParams          | Parameter List for managing QC Parameters | 1       | 1       | Active      |
| <input type="checkbox"/> T4Free            |   | 1       | 1       | Provisional |
| <input type="checkbox"/> T4Total           |   | 1       | 1       | Provisional |
| <input type="checkbox"/> TestiAssav        |   | 1       | 0       | Provisional |
| <input type="checkbox"/> TSH               |   | 1       | 1       | Provisional |
| <input type="checkbox"/> Ue3               |   | 1       | 1       | Provisional |

Kuva 8. Parameter Lists -sivu.

LabVantage SAPHIRE TOMIG ON SAPHIRE TIME ZONE: EEST

Tests BioBanking Process Storage WSP Connect

Test Methods Parameter Lists Specifications Parameters Units Limits Types Limit Rules Approval Types Instruments

Add Parameter List

Parameter list

|                           |   |                            |                                |
|---------------------------|---|----------------------------|--------------------------------|
| Parameter List            | <input type="text" value="Pipet calibration"/>                                | Variant                    | <input type="text" value="1"/> |
| Version                   | <input type="text" value="1"/>  | Version Status             | Provisional                    |
| Description               | <input type="text"/>  |                            |                                |
| Modifiable                | <input type="checkbox"/>  | Approval Type              | <input type="text"/>           |
| Limit Rule                | <input type="text"/>  | Limit Rule Version         | <input type="text"/>           |
| Paramlist Type            | <input checked="" type="radio"/> Procedural <input type="radio"/> Preparation |                            |                                |
| Analyst Training Required | <input type="checkbox"/>  | Analyst Training Overrides | <input type="checkbox"/>       |
| Instrument Type           | <input type="text"/>  |                            |                                |

Kuva 9. Add Parameter List -sivu.

LabVantage SAPHIRE TOMIG ON SAPHIRE TIME ZONE: EEST

Tests BioBanking Process Storage WSP Connect

Test Methods Parameter Lists Specifications Parameters Units Limits Types Limit Rules Approval Types Instruments

Add Parameter List Save Add Another Return To List Reset Approve Version

Message

Information

1) Save Operation Successful

Parameter list Notes

|                           |   |                            |                          |
|---------------------------|---|----------------------------|--------------------------|
| Parameter List            | jee   | Variant                    | 1                        |
| Version                   | 1   | Version Status             | Provisional              |
| Description               |   |                            |                          |
| Modifiable                | <input type="checkbox"/>  | Approval Type              | <input type="text"/>     |
| Limit Rule                | <input type="text"/>  | Limit Rule Version         | <input type="text"/>     |
| Paramlist Type            | <input checked="" type="radio"/> Procedural <input type="radio"/> Preparation |                            |                          |
| Analyst Training Required | <input type="checkbox"/>  | Analyst Training Overrides | <input type="checkbox"/> |
| Instrument Type           | <input type="text"/>  |                            |                          |

Data Display Reference Limits

Parameter Type Data Type Replicates Mandatory Defer Transform Default Value

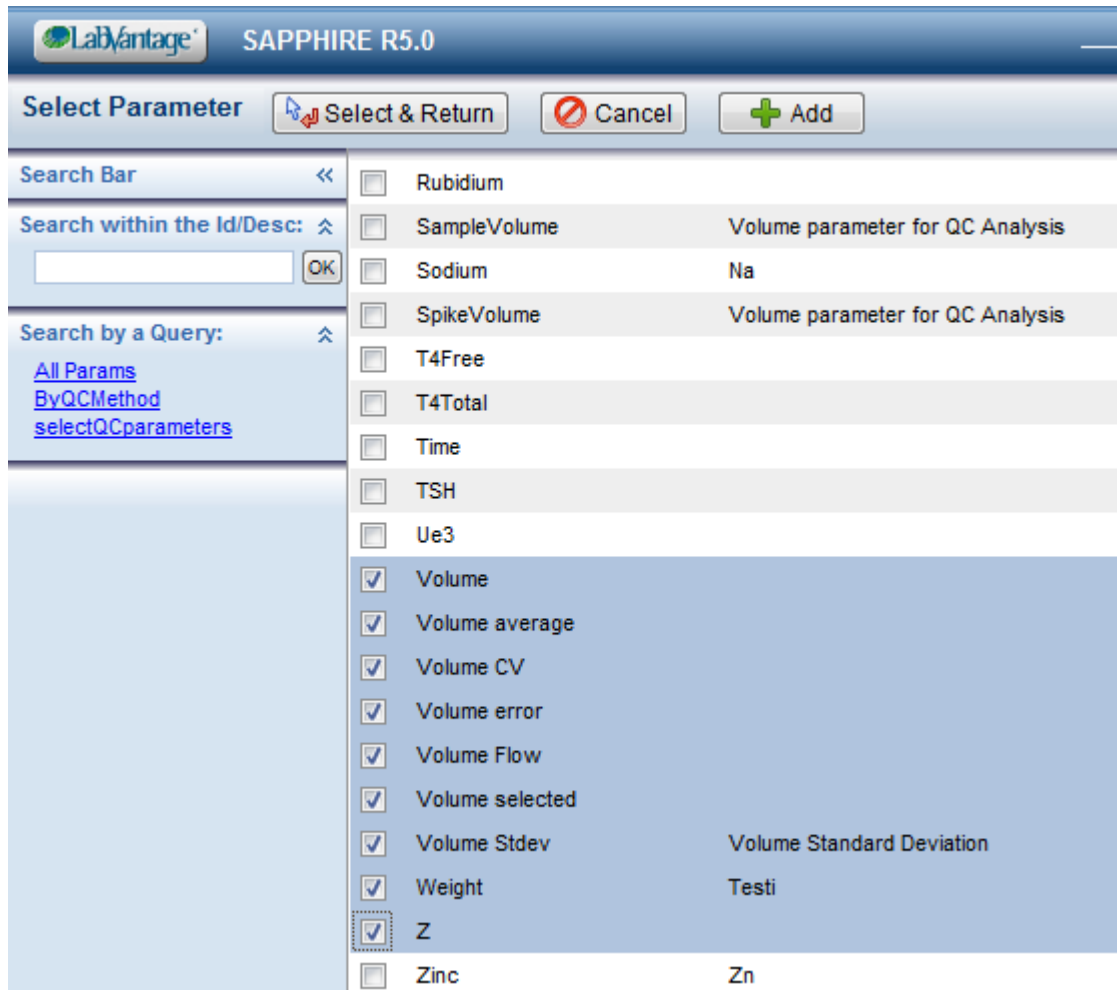
Add Remove ↑ ↓

Limits

Parameter Id Parameter Type Limit Type Id Operator Value 1 Value 2 Units Id Failure Action

Add Remove ↑ ↓

Kuva 10. Add Parameter List -sivu tallentamisen jälkeen.



Kuva 11. Select Parameter -sivu.

| Parameter                                | Type     | Data Type           | Replicates | Mandatory                           | Defer                    | Transform | Default Value |
|--|----------|---------------------|------------|-------------------------------------|--------------------------|-----------|---------------|
| <input type="checkbox"/> Volume selected | Standard | Validated Reference | 1          | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |           |               |
| <input type="checkbox"/> Weight          | Standard | Numeric             | 10         | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |           |               |
| <input type="checkbox"/> Z               | Standard | Numeric             | 1          | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |           |               |
| <input type="checkbox"/> Volume          | Standard | Numeric (Calc)      | 10         | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |           |               |
| <input type="checkbox"/> Volume average  | Standard | Numeric (Calc)      | 1          | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |           |               |
| <input type="checkbox"/> Volume Stdev    | Standard | Numeric (Calc)      | 1          | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |           |               |
| <input type="checkbox"/> Volume error    | Standard | Numeric (Calc)      | 1          | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |           |               |
| <input type="checkbox"/> Volume CV       | Standard | Numeric (Calc)      | 1          | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |           |               |

Kuva 12. Add Parameter List -sivun Data -välilehti.



| Parameter                                | Type     | Display Format | Display Units |
|--|----------|----------------|---------------|
| <input type="checkbox"/> Volume selected | Standard | 0              | µl            |
| <input type="checkbox"/> Weight          | Standard | 0.00           | g             |
| <input type="checkbox"/> Z               | Standard | 0.0000         | µl/mg         |
| <input type="checkbox"/> Volume          | Standard | 0.00           | µl            |
| <input type="checkbox"/> Volume average  | Standard | 0.00           | µl            |
| <input type="checkbox"/> Volume Stdev    | Standard | 0.00           |               |
| <input type="checkbox"/> Volume error    | Standard | 0.00           | %             |
| <input type="checkbox"/> Volume CV       | Standard | 0.00           | %             |

Kuva 13. Add Parameter List -sivun Display -välilehti.

| Parameter                                | Type     | SDC | Reference   | Calculation Rule                |
|--|----------|-----|-------------|---------------------------------|
| <input type="checkbox"/> Volume selected | Standard |     | PipetVolume |                                 |
| <input type="checkbox"/> Weight          | Standard |     |             |                                 |
| <input type="checkbox"/> Z               | Standard |     |             |                                 |
| <input type="checkbox"/> Volume          | Standard |     |             | [Weight;Standard;#]*[Z;Standard |
| <input type="checkbox"/> Volume average  | Standard |     |             | avg([Volume;Standard;*])        |
| <input type="checkbox"/> Volume Stdev    | Standard |     |             | stdev([Volume;Standard;*])      |
| <input type="checkbox"/> Volume error    | Standard |     |             | 100*(((Volume average;Standard] |
| <input type="checkbox"/> Volume CV       | Standard |     |             | (100*[Volume Stdev;Standard])/[ |

Kuva 14. Add Parameter List -sivun Reference -välilehti

4. Parametristaan syötettäville tai laskettaville arvoille määritetään spesifikaatiot joiden perusteella LIMS kertoo, onko arvo virherajoissa.

Lab admin -näköymästä Test -linjasta valitaan Specifications, jolloin aukeaa Specifications List (kuva 15). Lisätään Add -painikkeesta spesifikaatio. Spesifikaatiolle määritetään nimi ja tallennetaan se (kuva 16). Tallennuksen jälkeen sivulle aukeaa uusia valikoita (kuva 17). Lisätään mitattavat rajatyypit: Ensin valitaan Limit Types -valikosta Add. Limit Typeiksi valitaan InSpec eli "rajojen sisällä", sekä ylä- ja alarajojen ylitykset (kuva 18). Parameter Lists -kohdassa valitaan Add, ruksitaan Pipet calibration ja painetaan Select & Return (kuva 19). Ainoastaan ne parametrit jätetään joille halutaan määrittää raja-arvot, valitaan muut ja poistetaan ne Remove -painikkeella (kuva 20). Parametreille systemaattinen virhe (Volume error) ja keskimääräinen poikkeama (Volume CV) (kuva 21) määritetään raja-arvot.

Specification List

1 - 14 of 14 ( page 1 of 1 )

| Specification       | Description     | Version | Status      |
|---------------------|-----------------|---------|-------------|
| HPLCpump            | HPLC pump specs | 1       | Provisional |
| Pipet volume 1000ul |                 | 1       | Provisional |
| Pipet volume 100ul  |                 | 1       | Provisional |
| Pipet volume 10ul   |                 | 1       | Provisional |
| Pipet volume 1ul    |                 | 1       | Provisional |
| Pipet volume 200ul  |                 | 1       | Provisional |
| Pipet volume 20ul   |                 | 1       | Provisional |
| Pipet volume 2500ul |                 | 1       | Provisional |
| Pipet volume 2ul    |                 | 1       | Provisional |
| Pipet volume 5000ul |                 | 1       | Provisional |
| Pipet volume 500ul  |                 | 1       | Provisional |
| Pipet volume 50ul   |                 | 1       | Provisional |
| Pipet volume 5ul    |                 | 1       | Provisional |
| PunnitusSpecs       |                 | 1       | Provisional |

Kuva 15. Specification List -sivu.

Add Specification

Specification: Pipet volume 100ul

Description:

Version: 1

Version Status:

Rule Type: Banded

Kuva 16. Add Specification -sivu.

LabVantage SAPHIRE TOMIG ON SAPHIRE TIME ZONE: EEST

Tests BioBanking Process Storage WSP Connect

Test Methods Parameter Lists Specifications Parameters Units Limits Types Limit Rules Approval Types Instruments

Edit Specification Pipet volume 100ul Save Add Another Return To List Reset Approve Version

Specification Notes

Specification Pipet volume 100ul

Description

Version 1 Version Status Provisional

Rule Type Banded

Limit Types

Limit Type Condition

Add Remove

Parameter Limits Parameter Details

Param List (Ver) Variant Param (Param Type)

Add Remove

Rules

Add Remove

Required Parameter Lists Required Workflows Categories

Parameter List Version Variant

Add Remove

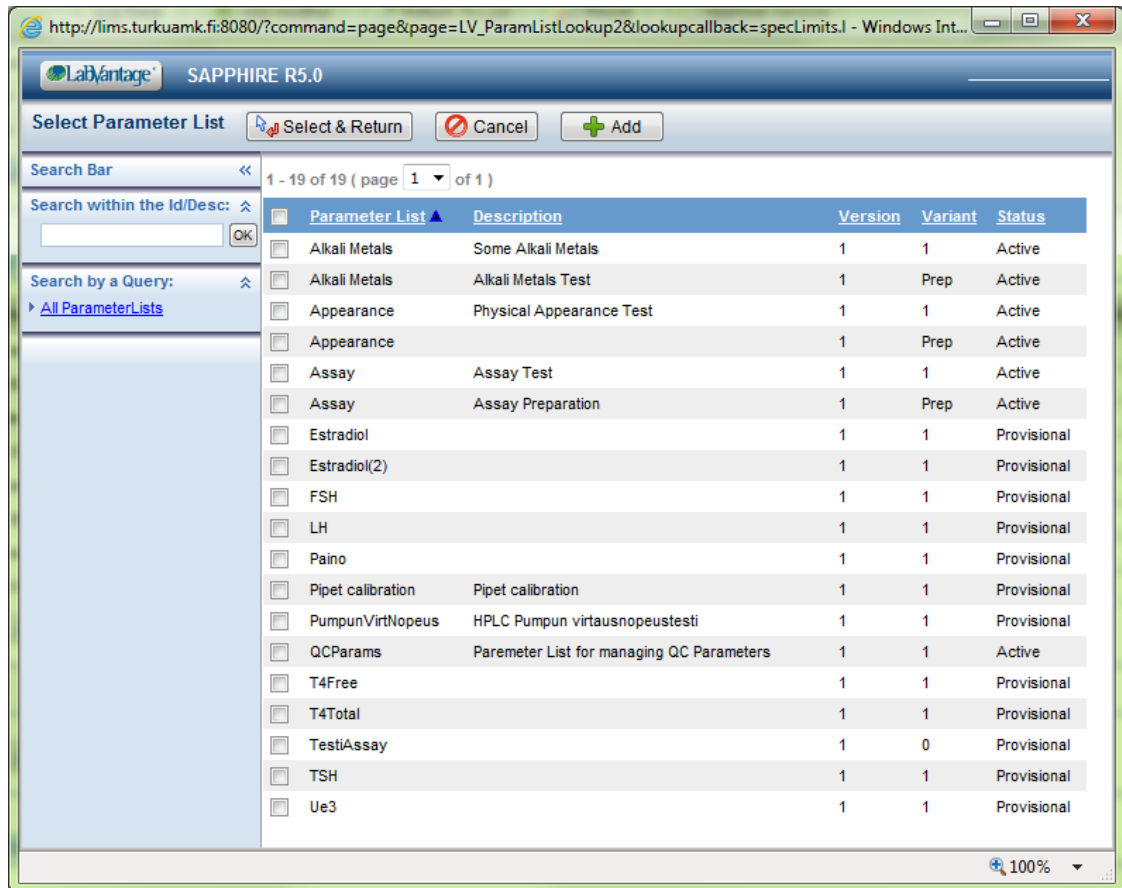
Kuva 17. Add Specification -sivu tallentamisen jälkeen.

LabVantage Sapphire Lookup

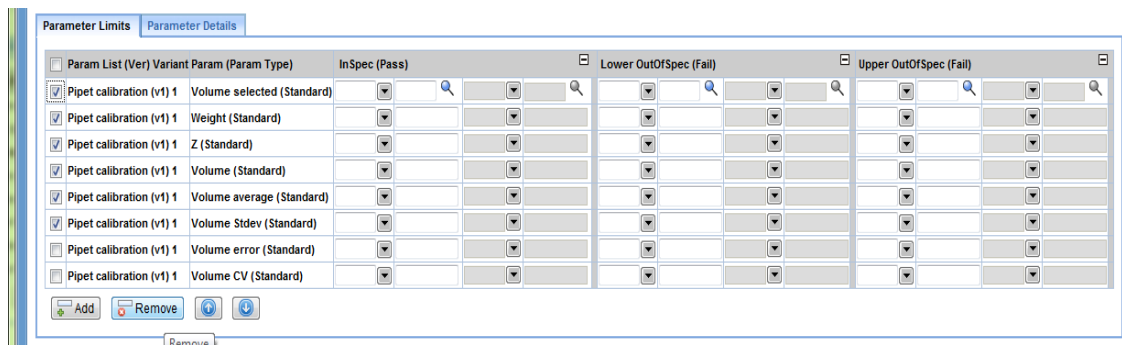
Select Cancel

| Limit Type Id                               | Condition |
|---|-----------|
| <input type="checkbox"/> Limit Type Id      | Condition |
| <input checked="" type="checkbox"/> InSpec  | Pass      |
| <input type="checkbox"/> Lower OutOfSpec    | Fail      |
| <input type="checkbox"/> Upper OutOfSpec    | Fail      |
| <input type="checkbox"/> Warning            | Warning   |
| <input type="checkbox"/> WeightLimit        | Warning   |
| <input checked="" type="checkbox"/> Failmin | Fail      |
| <input checked="" type="checkbox"/> Failmax | Fail      |
| <input type="checkbox"/> Fail               | Fail      |

Kuva 18. Limit Type -lista.



Kuva 19. Parametristan valintasivu.



Kuva 20. Ylimääräisten parametriveriittausten poistaminen Add Specification - sivun Parameter Limits -kohdassa.

| Param List (Ver)         | Variant Param (Param Type) | Failmin (Fail) | InSpec (Pass)  | Failmax (Fail) |
|--------------------------|----------------------------|----------------|----------------|----------------|
| Pipet calibration (v1) 1 | Volume error (Standard)    | < -0.8         | >= -0.8 <= 0.8 | > 0.8          |
| Pipet calibration (v1) 1 | Volume CV (Standard)       |                | <= 0.3         | > 0.3          |

Kuva 21. Raja-arvojen määrittely parametreille Add Specification -sivulla.

5. Määritetään testimetodi, jolle annetaan nimi ja jossa viitataan parametrilistaan.

Ylävalikosta siirrytään Lab Admin -näkömään, valitaan Tests -kohdasta Test Methods ja sieltä Add. Nimetään testimetodi ja valitaan Save (kuva 22). Valikosta Parameter list valitaan Add Param List (kuva 23) ja auenneesta ikkunasta ruksitaan Pipet Calibration ja painetaan Select & Return (kuva 24). Lopuksi painetaan Save (kuva 25).

| Workitem               | Inventory  | Notes |
|------------------------|--|-------|
| Test Method            | Pipet Calibration  |       |
| Description            |  |       |
| Type                   | <input type="radio"/> Group<br><input checked="" type="radio"/> Standard |       |
| Due Date Offset        |  |       |
| Due Date Offset Units  |  |       |
| Responsible Laboratory |  |       |

Kuva 22. Testimetodin nimeäminen Add Test Method -sivulla.

**Edit Test Method(s)**  
Pipet calibration

Save Add Another Return To List Reset

Workitem Inventory Notes

Test Method Pipet calibration

Description

Type
  Group
  Standard

Due Date Offset

Due Date Offset Units

Responsible Laboratory

Parameter List Work Flow Specification Work Item

Parameter List Id Description Force New Mandatory

Remove Add Param List Add Workflow Add Spec Use Current Edit

Kuva 23. Add Test Method -sivu tallentamisen jälkeen.

http://lms.turkuamk.fi:8080/?command=page&page=LV\_ParamListLookup&sdcid=ParamList&lookupcallba - W...

LabVantage SAPHIRE R5.0

Select Parameter List Select & Return Cancel Select Current & Return Add

Search Bar 1 - 19 of 19 (page 1 of 1)

Search within the Id/Desc: OK

Search by a Query: All ParameterLists

| <input type="checkbox"/>            | Parameter List    | Description                               | Version | Variant | Status      |
|-------------------------------------|-------------------|---|---------|---------|-------------|
| <input type="checkbox"/>            | Alkali Metals     | Some Alkali Metals                        | 1       | 1       | Active      |
| <input type="checkbox"/>            | Alkali Metals     | Alkali Metals Test                        | 1       | Prep    | Active      |
| <input type="checkbox"/>            | Appearance        | Physical Appearance Test                  | 1       | 1       | Active      |
| <input type="checkbox"/>            | Appearance        |   | 1       | Prep    | Active      |
| <input type="checkbox"/>            | Assay             | Assay Test                                | 1       | 1       | Active      |
| <input type="checkbox"/>            | Assay             | Assay Preparation                         | 1       | Prep    | Active      |
| <input type="checkbox"/>            | Estradiol         |   | 1       | 1       | Provisional |
| <input type="checkbox"/>            | Estradiol(2)      |   | 1       | 1       | Provisional |
| <input type="checkbox"/>            | FSH               |   | 1       | 1       | Provisional |
| <input type="checkbox"/>            | LH                |   | 1       | 1       | Provisional |
| <input type="checkbox"/>            | Paino             |   | 1       | 1       | Provisional |
| <input checked="" type="checkbox"/> | Pipet calibration | Pipet calibration                         | 1       | 1       | Provisional |
| <input type="checkbox"/>            | PumpunVirtNopeus  | HPLC Pumpun virtausnopeustesti            | 1       | 1       | Provisional |
| <input type="checkbox"/>            | QCParams          | Parameter List for managing QC Parameters | 1       | 1       | Active      |
| <input type="checkbox"/>            | T4Free            |   | 1       | 1       | Provisional |
| <input type="checkbox"/>            | T4Total           |   | 1       | 1       | Provisional |
| <input type="checkbox"/>            | TestiAssay        |   | 1       | 0       | Provisional |
| <input type="checkbox"/>            | TSH               |   | 1       | 1       | Provisional |
| <input type="checkbox"/>            | Ue3               |   | 1       | 1       | Provisional |

100%

Kuva 24. Parametrilistan valintasivu

The screenshot shows a web application interface for editing test methods. The title is "Edit Test Method(s) Pipet calibration". At the top, there are four buttons: "Save", "Add Another", "Return To List", and "Reset". Below this is a navigation bar with three tabs: "Workitem", "Inventory", and "Notes". The main content area is a form with several fields: "Test Method" (filled with "Pipet calibration"), "Description" (empty), "Type" (radio buttons for "Group" and "Standard", with "Standard" selected), "Due Date Offset" (empty), "Due Date Offset Units" (dropdown menu), and "Responsible Laboratory" (text input with a search icon). Below the form is another navigation bar with four tabs: "Parameter List", "Work Flow", "Specification", and "Work Item". The "Parameter List" tab is active, showing a table with two columns: "Parameter List Id" and "Description". The table contains one row: "Pipet calibration (Ver: 1) 1" with description "Pipet calibration". Below the table are several buttons: "Remove", "Add Param List", "Add Workflow", "Add Spec", and "Use Curr".

Kuva 25. Add Test Method -sivu parametrilistan valitsemisen jälkeen.

6. Viimeiseksi määritetään Product joka sisältää testimetodin ja sen parametrilistaan liittyvät spesifikaatiot.

Ylävalikosta siirrytään Lab Admin -näkömään, valitaan Reference -kohdasta Products ja sieltä Add (kuva 26). Nimetään Product ja valitaan Save (kuva 27). Tallennuksen jälkeen tulevassa Tests -kohdassa painetaan Add (kuva 28). Auenneesta ikkunasta valitaan Pipet Calibration ja painetaan Select & Return (kuva 29). Specifications -kohdassa valitaan Add (kuva 30). Auenneesta listasta valitaan 100 µl tilavuus ja painetaan Select & Return (kuva 31). Lopuksi valmis Product tallennetaan painamalla Save. Samalla tavalla tehdään Productit kaikille kalibroinneille eri pipetointi-testitilavuuksilla erikseen, koska niissä on eri raja-arvot.

**Product List** + Add Edit View X

Search Bar << 1 - 12 of 12 ( page 1 of 1 )

Search:  OK

Search By Query:   
[All Products](#)  
[ProductsByType](#)

Search By Folder:   
  
 ...to a new Folder  
  ...

| <input type="checkbox"/> | Product ▲                           | Description | Type | Mate |
|--------------------------|-------------------------------------|-------------|------|------|
| <input type="checkbox"/> | <a href="#">Pipet volume 1000ul</a> |             | QC   |      |
| <input type="checkbox"/> | <a href="#">Pipet volume 100ul</a>  |             | QC   |      |
| <input type="checkbox"/> | <a href="#">Pipet volume 10ul</a>   |             | QC   |      |
| <input type="checkbox"/> | <a href="#">Pipet volume 1ul</a>    |             | QC   |      |
| <input type="checkbox"/> | <a href="#">Pipet volume 200ul</a>  |             | QC   |      |
| <input type="checkbox"/> | <a href="#">Pipet volume 20ul</a>   |             | QC   |      |
| <input type="checkbox"/> | <a href="#">Pipet volume 2500ul</a> |             | QC   |      |
| <input type="checkbox"/> | <a href="#">Pipet volume 2ul</a>    |             | QC   |      |
| <input type="checkbox"/> | <a href="#">Pipet volume 5000ul</a> |             | QC   |      |
| <input type="checkbox"/> | <a href="#">Pipet volume 500ul</a>  |             | QC   |      |
| <input type="checkbox"/> | <a href="#">Pipet volume 50ul</a>   |             | QC   |      |
| <input type="checkbox"/> | <a href="#">Pipet volume 5ul</a>    |             | QC   |      |

Kuva 26. Product List -sivu.

**Add Product** Save + Add Another Return To List Reset

Product

|                      |  |                |  |
|----------------------|--|----------------|--|
| Product              | <input type="text" value="Pipet volume 100ul"/>    | Product Type   | <input type="text"/>                               |
| Description          | <input type="text"/>                               |                |  |
| Material             | <input type="text"/>                               | Strength       | <input type="text"/>                               |
| Formulation          | <input type="text"/>                               | Stage          | <input type="text"/>                               |
| Control Substance    | <input type="radio"/> Yes <input type="radio"/> No | CoC Required   | <input type="radio"/> Yes <input type="radio"/> No |
| Container            | <input type="text"/>                               | Container Size | <input type="text"/>                               |
| Container Size Units | <input type="text"/>                               |                |  |

Kuva 27. Add Product -sivu.



**Edit Product**  
Pipet volume 100ul

Save Add Another Return To List Reset

**Product**

|                      |  |                |  |
|----------------------|--|----------------|--|
| Product              | Pipet volume 100ul                                 | Product Type   | QC   |
| Description          |  |                |  |
| Material             |  | Strength       |  |
| Formulation          |  | Stage          |  |
| Control Substance    | <input type="radio"/> Yes <input type="radio"/> No | CoC Required   | <input type="radio"/> Yes <input type="radio"/> No |
| Container            |  | Container Size |  |
| Container Size Units |  |                |  |

**Tests**

| <input type="checkbox"/> | Test Method | Instance | Description | Applied | Retested | Completed |
|--------------------------|-------------|----------|-------------|---------|----------|-----------|
| No records found         |             |          |             |         |          |           |

↑ ↓ Add Remove Reset

**Specifications**

| <input type="checkbox"/> | View Results | Specification | Version | Description | Check on Data Entry | Condition | Waived |
|--------------------------|--------------|---------------|---------|-------------|---------------------|-----------|--------|
| No records found         |              |               |         |             |                     |           |        |

↑ ↓ Add Remove Reset

Kuva 28. Add Product -sivu tallennuksen jälkeen.

**Select Test Method** Cancel Select & Return

Search Bar << 1 - 16 of 16 ( page 1 of 1 )

Search within the Id/Desc:  OK

Search by a Query: [All Test Methods](#)

| <input type="checkbox"/>            | Test Method        | Description     |
|-------------------------------------|--------------------|-----------------|
| <input type="checkbox"/>            | Alkali Metals      | Metals Test     |
| <input type="checkbox"/>            | Appearance         | Appearance Test |
| <input type="checkbox"/>            | Assay              | Assay Test      |
| <input type="checkbox"/>            | Estradiol          |                 |
| <input type="checkbox"/>            | Estradiol(2)       |                 |
| <input type="checkbox"/>            | FSH                |                 |
| <input type="checkbox"/>            | HPLCpumppu         |                 |
| <input type="checkbox"/>            | LH                 |                 |
| <input checked="" type="checkbox"/> | Pipet calibration  |                 |
| <input type="checkbox"/>            | PipetinKalibrointi | Testi           |
| <input type="checkbox"/>            | Punnitus           |                 |
| <input type="checkbox"/>            | RE-Water           | testi, RE-Water |
| <input type="checkbox"/>            | T4Free             |                 |
| <input type="checkbox"/>            | T4Total            |                 |
| <input type="checkbox"/>            | TSH                |                 |
| <input type="checkbox"/>            | Ue3                |                 |

Kuva 29. Testimetodin valinta-ikkuna.

LabVantage SAPHIRE TOMIG ON SAPHIRE TIME ZONE: EEST

Samples AQC Tests Others Certifications & Resources Storage Reference Reports

Components Instruments Materials Products Sample Points Sample Types

Edit Product  
Pipet volume 100ul

Save Add Another Return To List Reset

**Product**

|                      |  |                |  |
|----------------------|--|----------------|--|
| Product              | Pipet volume 100ul                                 | Product Type   | QC   |
| Description          |  |                |  |
| Material             |  | Strength       |  |
| Formulation          |  | Stage          |  |
| Control Substance    | <input type="radio"/> Yes <input type="radio"/> No | CoC Required   | <input type="radio"/> Yes <input type="radio"/> No |
| Container            |  | Container Size |  |
| Container Size Units |  |                |  |

**Tests**

| <input type="checkbox"/> | Test Method       | Instance | Description | Applied | Retested | Completed |
|--------------------------|-------------------|----------|-------------|---------|----------|-----------|
| <input type="checkbox"/> | Pipet calibration | 1        |             | No      |          | No        |

↑ ↓ Add Remove Reset

**Specifications**

| <input type="checkbox"/> | View Results | Specification | Version | Description | Check on Data Entry | Condition | Waived |
|--------------------------|--------------|---------------|---------|-------------|---------------------|-----------|--------|
| No records found         |              |               |         |             |                     |           |        |

↑ ↓ Add Remove Reset

Kuva 30. Add Product -sivu testimetodin valinnan jälkeen.

Select Specification

Select & Return Cancel

Search Bar << 1 - 12 of 12 ( page 1 of 1 )

Search within the Id/Desc: ↑ pipet OK

Search by a Query: ↑ All Specifications

Adhoc Search ↑ (New Adhoc Query)

| <input type="checkbox"/>            | Specification       | Description | Version | Status      |
|-------------------------------------|---------------------|-------------|---------|-------------|
| <input type="checkbox"/>            | Pipet volume 1000ul |             | 1       | Provisional |
| <input checked="" type="checkbox"/> | Pipet volume 100ul  |             | 1       | Provisional |
| <input type="checkbox"/>            | Pipet volume 10ul   |             | 1       | Provisional |
| <input type="checkbox"/>            | Pipet volume 1ul    |             | 1       | Provisional |
| <input type="checkbox"/>            | Pipet volume 200ul  |             | 1       | Provisional |
| <input type="checkbox"/>            | Pipet volume 20ul   |             | 1       | Provisional |
| <input type="checkbox"/>            | Pipet volume 2500ul |             | 1       | Provisional |
| <input type="checkbox"/>            | Pipet volume 2ul    |             | 1       | Provisional |
| <input type="checkbox"/>            | Pipet volume 5000ul |             | 1       | Provisional |
| <input type="checkbox"/>            | Pipet volume 500ul  |             | 1       | Provisional |
| <input type="checkbox"/>            | Pipet volume 50ul   |             | 1       | Provisional |
| <input type="checkbox"/>            | Pipet volume 5ul    |             | 1       | Provisional |

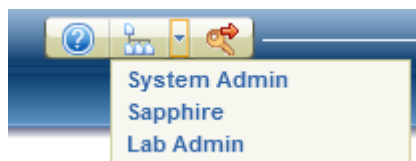
Kuva 31. Spesifikaation valintasivu.

### 3.3.3 Pipettikortiston siirtäminen LIMS-järjestelmään

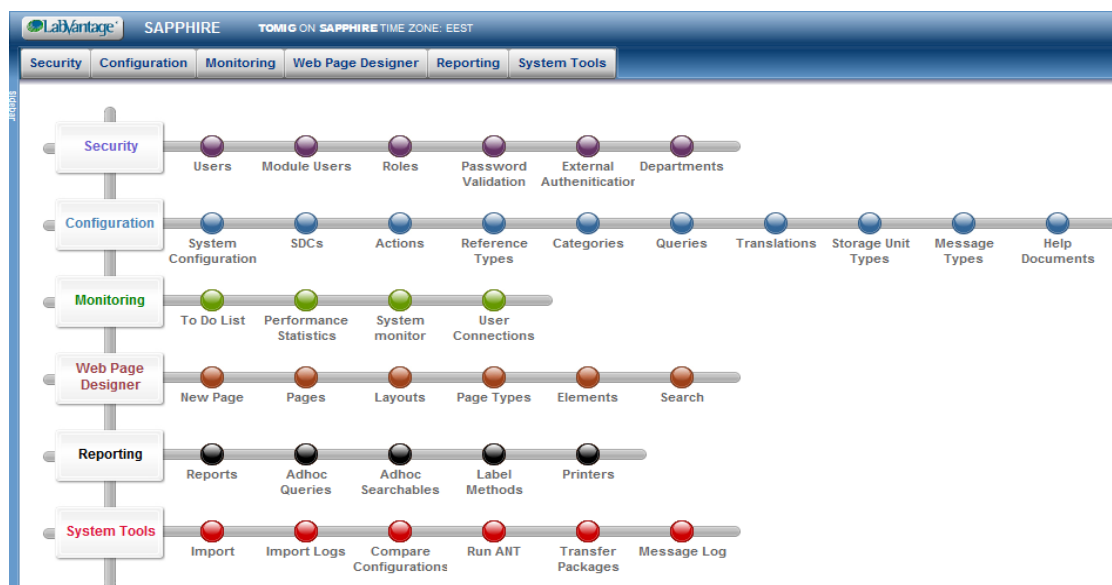
Kun pipetinkalibrointiohjelma oli valmis, piti pipettikortisto siirtää LIMSiin, jotta fyysiset pipetit olisivat valittavissa instrumentteina pipetinkalibrointiohjelmaa käytettäessä. Kaikki noin 200 koulun pipettiä kirjattiin tietoineen käsityönä yksi kerrallaan LIMSiin.

#### 1. Ennen pipettien kirjaamista, tehtiin instrumenttityyppi nimeltä "Pipet"

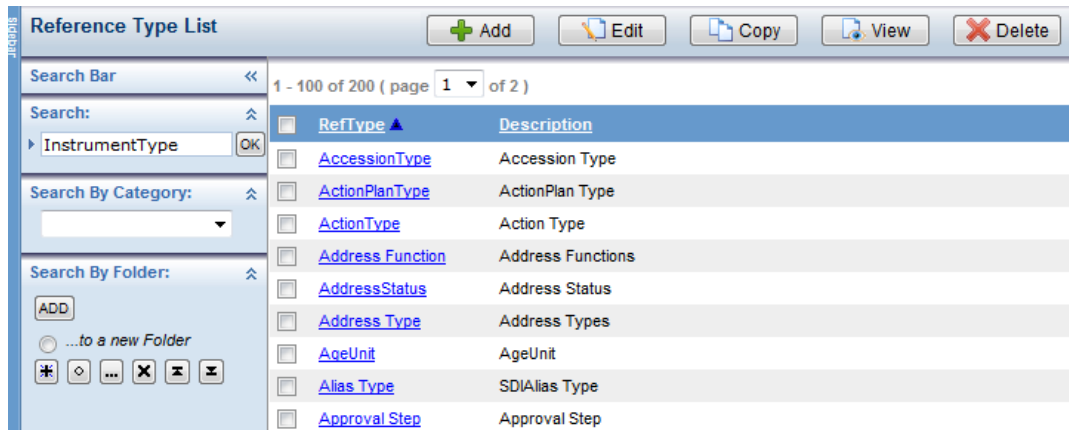
Ylävalikosta (kuva 32) valitaan System Admin -näkyvä ja valitaan sieltä Configuration -kohdasta Reference Types (kuva 33). Vasemman reunan Search -laatikkoon kirjoitetaan "InstrumentType" ja painetaan OK (kuva 34). Ruksitaan kohta InstrumentType ja painetaan Edit (kuva 35). Reference Values kohdassa painetaan Add ja kirjoitetaan ilmestyneeseen ruutuun uusi instrumenttityyppi, tässä tapauksessa "Pipet" (kuva 36). Muutokset tallennetaan painamalla Save.



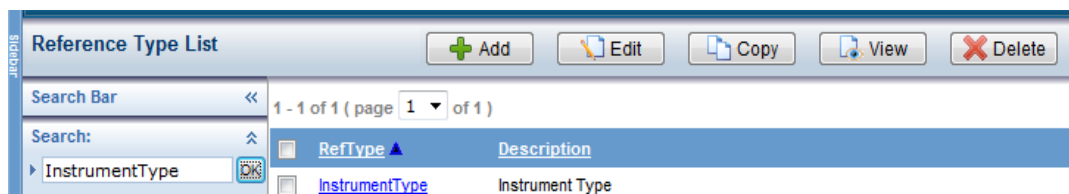
Kuva 32. Näkymän valintasivu.



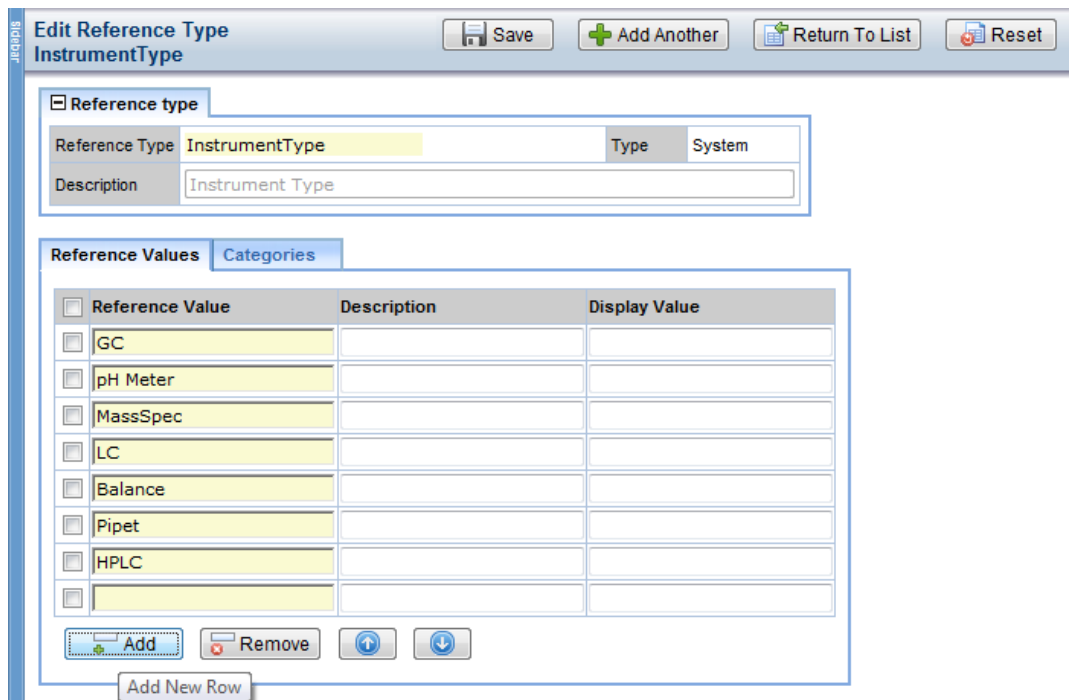
Kuva 33. System Admin -näkyvä.



Kuva 34. Referenssityyppilista.



Kuva 35. Referenssityyppilista haun jälkeen.



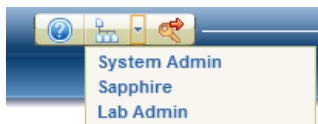
Kuva 36. InstrumentType referenssityypin muokkaaminen.

2. Kun pipetille oli saatu oma instrumenttityyppi, voitiin alkaa lisäämään pipettejä tietokantaan

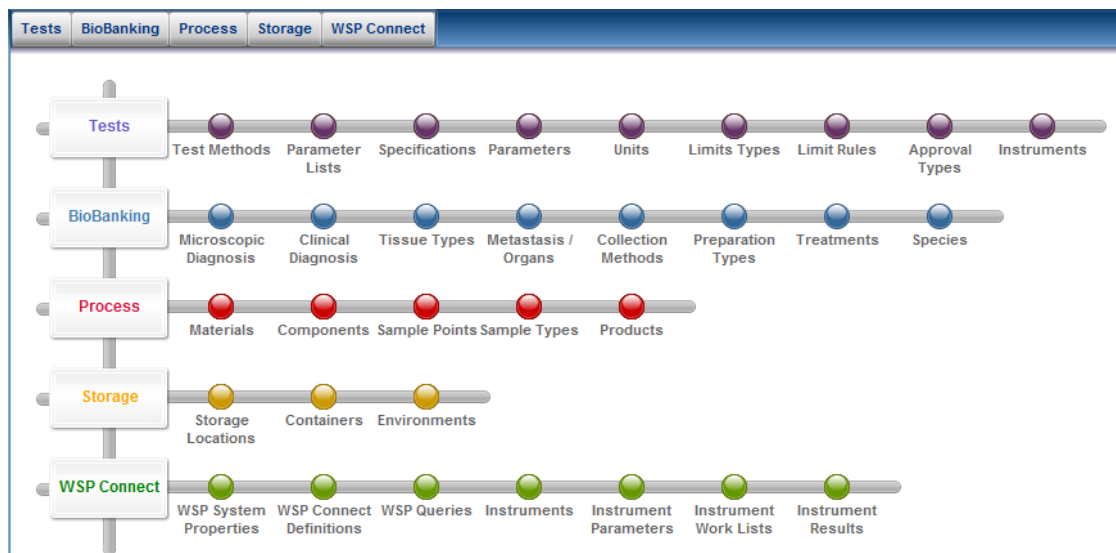
Ylävalikosta (kuva 37) valitaan Lab Admin. Tests -kohdasta valitaan Instruments (kuva 38) ja auenneesta ikkunasta Add (kuva 39). Auenneeseen Instrumentinlisäysikkunaan (kuva 40) lisätään seuraavat tiedot pipetistä:

- \* Instrument - "Pipet" ja pipetin numero (koulun oma numerointi)
- \* Description - Käyttötilavuudet
- \* Model - Pipetin merkki ja malli
- \* Serial Number - Sarjanumero

Lopuksi tallennetaan pipetin tiedot painamalla Save.



Kuva 37. Näkymävalikko



Kuva 38. Lab Admin -näkyvä.

| Instrument List                     |    | Add   | Edit                                 | Copy | View | Delete |
|-------------------------------------|----|---|--------------------------------------|------|------|--------|
| Search Bar                          | << | 1 - 100 of 213 ( page 1 of 3 )                                |                                      |      |      |        |
| Search:                             | >  | <input type="checkbox"/> <b>Instrument</b> <b>Description</b> |                                      |      |      |        |
| <input type="text"/>                | OK | <input type="checkbox"/>                                      | <a href="#">Balance Dummy 1</a>      |      |      |        |
| Search By Query:                    | >  | <input type="checkbox"/>                                      | <a href="#">BIO1666</a> 100-5000     |      |      |        |
| <a href="#">All Instruments</a>     |    | <input type="checkbox"/>                                      | <a href="#">BIO1762</a> 50-1000      |      |      |        |
| <a href="#">AllInstrumentsForPL</a> |    | <input type="checkbox"/>                                      | <a href="#">BIO1763</a> 20-300       |      |      |        |
| <a href="#">ByInstrumentType</a>    |    | <input type="checkbox"/>                                      | <a href="#">BIO1764</a> 0,2-10       |      |      |        |
| <a href="#">CertifiedInstrument</a> |    | <input type="checkbox"/>                                      | <a href="#">BIO1765</a> 50-1000      |      |      |        |
| <a href="#">ReagentInstrument</a>   |    | <input type="checkbox"/>                                      | <a href="#">BIO5048</a> Urho Kaleva  |      |      |        |
| Search By Category:                 | >  | <input type="checkbox"/>                                      | <a href="#">Mettler Toledo AG204</a> |      |      |        |
| <input type="text"/>                |    |   |                                      |      |      |        |

Kuva 39. Instrument List -sivu.

| Edit Instrument<br>Pipet100 |  |                                   |   | Save          | Add Another          | Return To List | Reset       |   |
|-----------------------------|--|-----------------------------------|---|---------------|----------------------|----------------|-------------|---|
| <b>Instrument</b>           |  |                                   |   |               |                      |                |             |   |
| Instrument                  | Pipet100   | Description                       | 50-200  |               |                      |                |             |   |
| Model                       | Biohit Proline   |                                   |   | Serial Number | AS39746              |                |             |   |
| WSP Connect Id              | <input type="text"/>   | Purchase Date                     | 2/17/98 12:00 AM                                      | Cost          | <input type="text"/> |                |             |   |
| In Service?                 | <input checked="" type="radio"/> Yes<br><input type="radio"/> No | Service Contract?                 | <input type="radio"/> Yes<br><input type="radio"/> No |               |                      |                |             |   |
| Certification Required?     | <input type="radio"/> Yes<br><input type="radio"/> No            | Certification Overrides Permitted | <input type="radio"/> Yes<br><input type="radio"/> No |               |                      |                |             |   |
| Location                    | A206   |                                   |   |               |                      |                |             |   |
| Type                        | Pipet  |                                   |   |               |                      |                |             |   |
| Notes                       | <input type="text"/>   |                                   |   |               |                      |                |             |   |
| (UNDEFINED)                 | <input type="text"/>   | Autovalidate                      | <input type="radio"/> Yes<br><input type="radio"/> No |               |                      |                | Autorelease | <input type="radio"/> Yes<br><input type="radio"/> No |

Kuva 40. Add Instrument -sivu.

### 3.3.4 Vaa'an asentaminen LIMSiin

1. Tarvittiin sarjaporttipalvelin eli konvertteri, joka muuntaa vaa'alta tulevan RS232-sarjaporttidatan Ethernet-muotoon. Sarjaporttipalvelimista tehtiin hintavertailu (liite 3).
2. Elkome.fi -nettikaupasta tilattiin konvertteri, mallia 'Advantech EKI-1521' (kuva 41). Tähän vaihtoehtoon päädyttiin, koska se oli ainoa suomalainen jälleenmyyjä ko. laitteelle.
3. Vaaka Mettler Toledo AB204-s (kuva 42) liitettiin verkkoon EKI-1521 -konvertterin kautta.
4. Laitetilan Ethernet-rasia liitettiin laboratorioverkon kytkimeen.
5. EKI-1521 -konvertteriin säädettiin IP-osoite laboratorioverkkoon 192. [REDACTED] [REDACTED]
6. WSP Connectiin, ohjelmaan, joka tulkaa laitteiden datan LIMSiin, asetettiin vaa'an tyyppi AG204 eli asetettiin ajurit vastaamaan fyysisen vaa'an tyyppiä.
7. LIMS-järjestelmään laitteelle lisättiin Instrument ID, joka vastaa WSP Connectissa olevaa INSTANCE-ID:tä.
8. LIMSiin tehtiin testimittausmenetelmä vaakaa varten ja kokeiltiin sen toimivuus. LIMS ei saanut yhteyttä vaakaan, koska LIMS-palvelin oli opetusverkossa, johon pääsee kirjautumaan julkisesta verkosta ja EKI-1521 taas oli sisäisessä laboratorioverkossa.



Kuva 41. EKI-1521 -konvertteri, johon on kytketty vaaka RS232-sarjakaapelilla ja verkkoyhteys Ethernet-kaapelilla.

9. Vaakaan liitetyn kytkimen porttiin asetettiin (Eth 1) VLAN 5, eli virtuaalinen lähiverkko, jolla on 192.██████████ verkon osoite.
10. Vaa'an IP-osoite vaihdettiin 192.██████████ laboratorioverkkoon.
11. Laboratorioverkon reunapalomuuri säädettiin hyväksymään liikenne portteihin ██████ (laitteen portti) ja ██████ (http-netin portti) -molempiin suuntiin (FORWARD-lista) Sapphireelta EKI-1521:lle. 193.██████████ <-> 192.██████████ ██████
12. Huomattiin, että liikenne ei voi kulkea opetusverkosta sisäverkon osoitteeseen ilman reititystä, jolloin tehtiin päätös koulun tiloissa sijaitsevalle LIMS-palvelimelle asennettavasta ylimääräisestä verkkokortti-interfacesta. Tämä tulisi samaan verkkoon EKI-1521 -konvertterin kanssa.
13. LIMS-virtuaalipalvelimen fyysisen palvelinkoneen ensimmäiseen verkkokorttiin liitettiin myös VLAN 5.
14. LIMS-palvelimelle luotiin Eth 2 -interface 192.██████████ -laboratorioverkkoon, jotta se sai yhteyden samassa verkossa olevaan vaakaan.
15. Varmistettiin, että LIMS-palvelin näkee vaa'an (PING).
16. Huomattiin, että vaaka oli tuloste-moodissa ja asetettiin se HOST-moodiin manuaalin mukaisesti, jotta vaaka voi kommunikoida WSP Connectin kanssa.
17. LIMSissä tehtiin Get Result -kokeilu ja saatiin vaa'alta tuloksia LIMSiin.
18. Vaa'an viereen asennettiin tietokone (kuva 43) ja liitettiin se opetusverkkoon. Tällä koneella käytetään netin kautta LIMSin pipetinkalibrointiohjelmaa. Näin pipettiä kalibroitaessa vaa'an tulokset saadaan automaattisesti LIMSiin.





Kuva 42. Mettler Toledo AB204-s vaaka yhdistettynä RS232-sarjakaapelilla EKI-1521 -konvertteriin.



Kuva 43. Pipetinkalibroitustyöpiste.

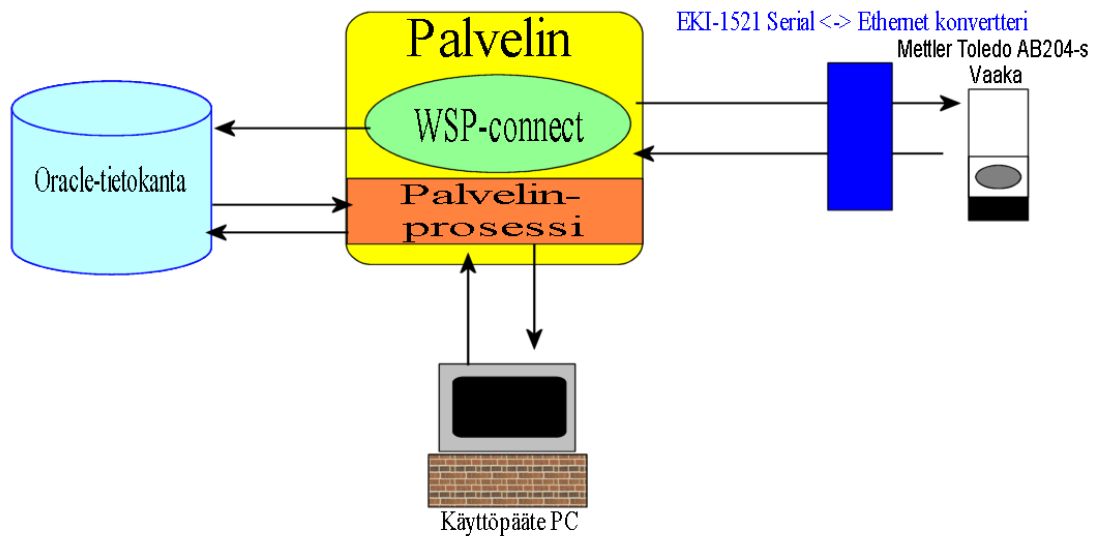
### 3.3.5 Tiedonkulku pipetinkalibroitiohjelman käytössä

Palvelimella olevaa LIMSiin ohjelmoitua pipetinkalibroitiohjelmia ohjataan käyttöpääteeltä. Käyttöpääteeltä myös nähdään saadut mittausten ja kalibroinnin tulokset.

WSP Connect on laitekommunikaatio-ohjelma jonka avulla LIMS pystyy lähettämään tietoa toimilaitteille ja vastaanottamaan tietoa toimilaitteilta. Tässä tapauksessa toimilaitteena on Mettler Toledo AB204-s -vaaka. Vaaka käyttää MT-SICS -kommunikaatioprotokollaa (liite 4).

EKI-1521 konvertteri muuttaa WSP Connectilta tulevat pyynnöt vaa'an tukemaan RS232-muotoon, sekä vaa'alta tulevat RS232-muodossa olevat tiedot Ethernet-muotoon, jotta ne voivat kulkea verkon kautta WSP Connectille.

Pipetinkalibrintiohjelma lähettää WSP Connectin avulla vaa'alle tiedonhakupyynnön. Vaaka lähettää pyynnöstä tulokset WSP Connectille, joka purkaa saadut mittaustulokset LIMS:ille tulkittavaan muotoon ja tallentaa ne Oracle-tietokantaan. Pipetinkalibrintiohjelma ottaa mittaustulokset Oracle-tietokannasta, laskee niiden perusteella kalibrintituloksen ja tallentaa sen taas Oracle-tietokantaan (kuvio 8).



Kuvio 8. Tiedonkulku pipetinkalibrintiohjelmassa.

### 3.3.6 Pipetinkalibrointiohjelman testaaminen

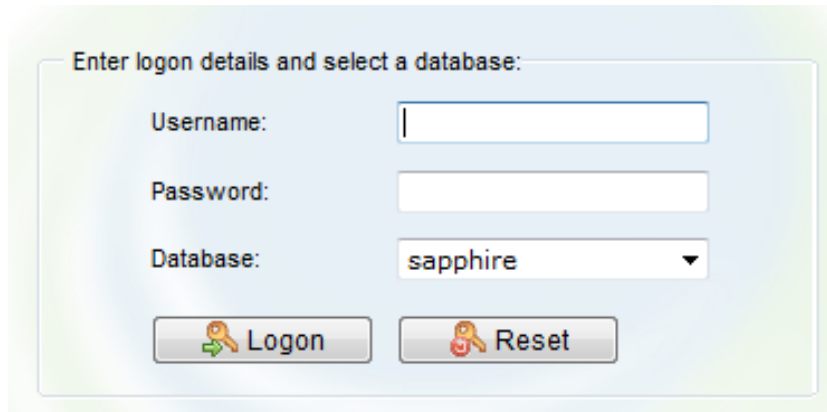
Lähdetään kalibroimaan pipettiä nro 100, Biohit Proline 50-200 µl pipetti, tilavuudella 200 µl. Ensin kirjaututaan sisään LIMSiin annetulla käyttäjätunnuksella ja salasanalla (kuva 44). Päävalikossa valitaan Quick Login, josta päästään mittauksen valintataulukkoon (kuva 45). Valintataulukkoon (kuva 46) määritellään mitä ollaan mittaamassa. Mittauksen tyyppiä valitaan QC eli quality control ja mittaukseksi pipetin kalibrointi 200 µl tilavuudella. Mitattavaksi instrumentiksi valitaan pipetti 100 ja Notes-kenttään mittaajan nimi ja ryhmä (kuva 47).

Sivun alalaidassa painetaan Next -painiketta, jolloin aukeaa Sample List (kuva 48). Listalta valitaan juuri luotu näyte ja valitaan ylhäältä Data Entry, jolloin aukeaa kalibrointitaulukko. Kalibrointitaulukossa valitaan ensimmäisenä mittalaite, eli vaaka, klikkaamalla instrument-kentän vieressä olevaa suurennuslasia (kuva 49). Instrumenttilistasta valitaan Mettler Toledo -vaaka muiden mittalaitteiden joukosta (kuva 50). Kun vaaka on valittu mittalaitteeksi, asetetaan lähtöarvot (mitattava tilavuus sekä Z-muuntokerroin mitattavan veden lämpötilan ja ilmanpaineen perusteella Z-taulukosta) ja aletaan kalibroida pipettiä.

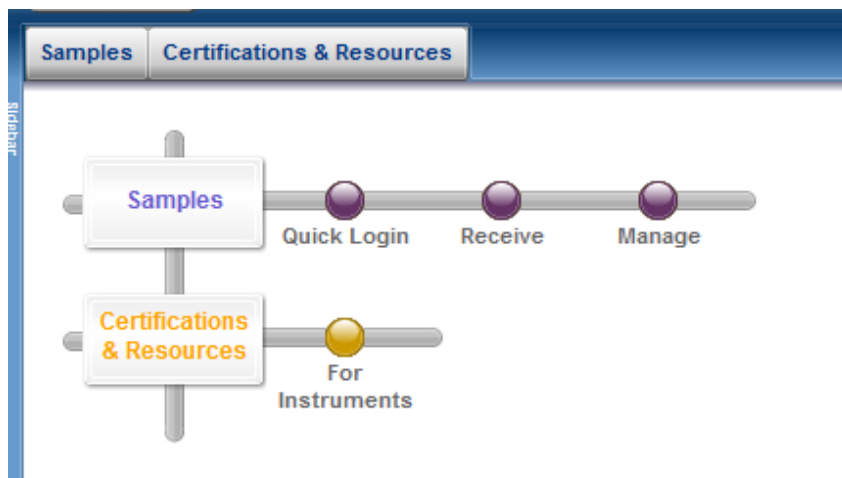
Joka pipetoinnin jälkeen painetaan LIMS käyttöasteeltä Get Result, jolloin vaaka lähettää tiedot automaattisesti LIMSiin. Kun punnitukset on tehty, klikataan save-nappulaa, jolloin LIMS laskee painojen perusteella pipetointitilavuudet ja niiden perusteella systemaattisen virheen (Volume error), sekä toistettavuuden (Volume CV). LIMS näyttää arvot vihreällä värillä, kun ne ovat pipetille määritettyjen virherajojen sisällä (kuva 50). Jos Volume error näyttää punaista, säädetään pipettiä ja tehdään punnitukset uudelleen. Jos toistettavuus, eli Volume CV näyttää punaista, ei pipetointi ole ollut riittävän tasalaatuista ja punnitukset tehdään uudestaan. Jos pipetillä ei saa millään aikaan tasalaatuisia mittauksia, se täytyy poistaa käytöstä ja viedä huoltoon.

Valmis kalibrointi näkyy näytelistalla. Spec condition -kohdassa näkyy vihreä "Pass" -teksti jos kalibrointi on virherajoissa. Jos kalibrointi on virherajojen

ulkopuolella, tulee kenttään punainen "Fail" -teksti. Myös epäonnistuneet kalibroinnit tulee jättää tietokantaan, jotta pipetin kalibrointihistoriaa seuraamalla voidaan arvioida pipetin huoltotarvetta. Koekalibrointi onnistui ja tehtiin ensimmäinen versio käyttöohjeesta menetelmän mukaisesti (liite 5).



Kuva 44. LIMS:n kirjautumisikkuna.



Kuva 45. Peruslaboratoriokäyttäjän Sapphire -näkökulma.

**Login Samples. Enter the Sample login details..**

Copies Sample Template

1 -- None --

Enter Sample details without using a template

|                     |  |            |
|---------------------|--|------------|
| Description         |  |            |
| Type                |  |            |
| Product             |  | Instrument |
| Project             |  |            |
| Collected By        |  |            |
| Collection Date     |  |            |
| Due Date            | May 17, 2012                                       |            |
| Auto Receive Sample | <input type="radio"/> Yes <input type="radio"/> No |            |
| Notes               |  |            |

Kuva 46. Mittauksen valintataulukko.

**Login Samples. Enter the Sample login details..**

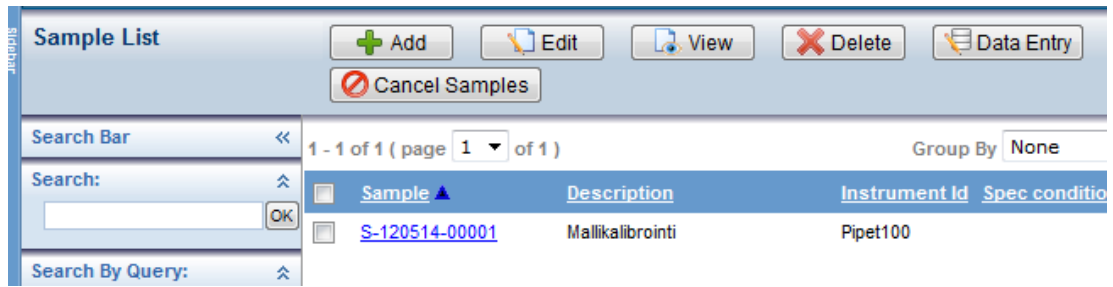
Copies Sample Template

1 -- None --

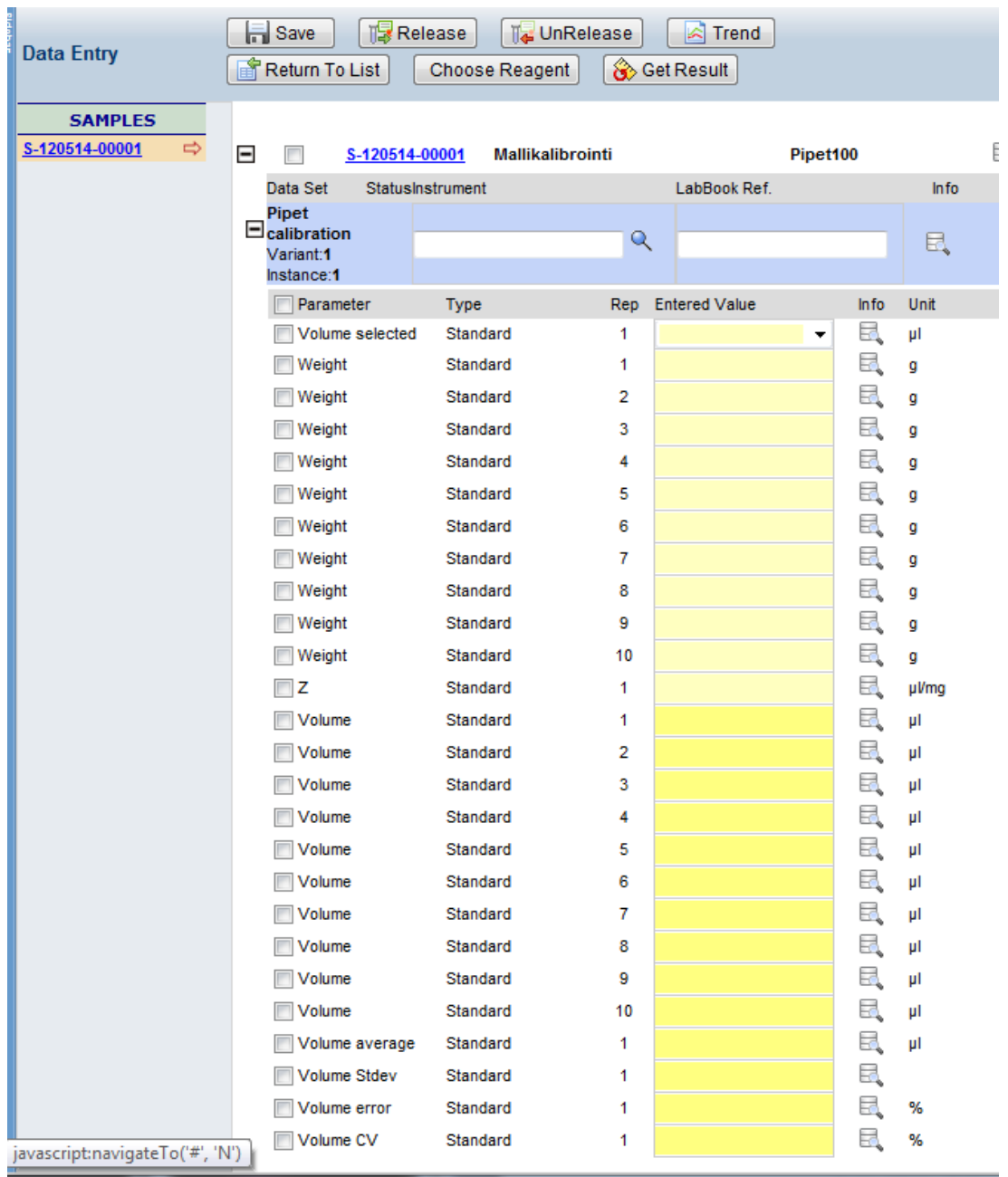
Enter Sample details without using a template

|                     |  |                     |
|---------------------|--|---------------------|
| Description         | Mallikalibrointi                                   |                     |
| Type                | QC   |                     |
| Product             | Pipet volume 200ul                                 | Instrument Pipet100 |
| Project             | Kalibrointi Projekti                               |                     |
| Collected By        |  |                     |
| Collection Date     |  |                     |
| Due Date            | May 17, 2012                                       |                     |
| Auto Receive Sample | <input type="radio"/> Yes <input type="radio"/> No |                     |
| Notes               | Matti Meikäläinen Biots09Z                         |                     |

Kuva 47. Pipetin kalibroinnin tiedot täytettynä mittauksenvalintataulukkoon.



Kuva 48. Sample List -sivu.



Kuva 49. Kalibrointitaulukko ennen mittauksia.

Select Instrument

1 - 210 of 210 ( page 1 of 1 )

| Instrument ▲                         | Description | Model          | In Service? | Certification Required? |
|--------------------------------------|-------------|----------------|-------------|-------------------------|
| <a href="#">BIO1666</a>              | 100-5000    | Biohit BPE     | Yes         |                         |
| <a href="#">BIO1762</a>              | 50-1000     | Biohit e-line  | Yes         |                         |
| <a href="#">BIO1763</a>              | 20-300      | Biohit e-line  | Yes         |                         |
| <a href="#">BIO1764</a>              | 0,2-10      | Biohit e-line  | Yes         |                         |
| <a href="#">BIO1765</a>              | 50-1000     | Biohit e-line  | Yes         |                         |
| <a href="#">Mettler Toledo AG204</a> |             |                |             |                         |
| <a href="#">Pipet100</a>             | 50-200      | Biohit Proline | Yes         |                         |
| <a href="#">Pipet101</a>             | 200-1000    | Biohit Proline | Yes         |                         |
| <a href="#">Pipet102</a>             | 200-1000    | Biohit Proline | Yes         |                         |
| <a href="#">Pipet103</a>             | 1000-5000   | Biohit Proline | Yes         |                         |
| <a href="#">Pipet104</a>             | 1000-5000   | Biohit Proline | Yes         |                         |
| <a href="#">Pipet105</a>             | 50-200      | Biohit Proline | Yes         |                         |
| <a href="#">Pipet106</a>             | 200-1000    | Biohit Proline | Yes         |                         |
| <a href="#">Pipet107</a>             | 200-1000    | Biohit Proline | Yes         |                         |
| <a href="#">Pipet108</a>             | 1000-5000   | Biohit Proline | Yes         |                         |
| <a href="#">Pipet109</a>             | 1000-5000   | Biohit Proline | Yes         |                         |
| <a href="#">Pipet110</a>             | 50-200      | Biohit Proline | Yes         |                         |
| <a href="#">Pipet111</a>             | 200-1000    | Biohit Proline | Yes         |                         |
| <a href="#">Pipet112</a>             | 200-1000    | Biohit Proline | Yes         |                         |

Kuva 50. Instrumenttilista.

**Data Entry**

Save Release UnRelease Trend  
Return To List Choose Reagent Get Result

**SAMPLES**  
S-120514-00001

S-120514-00001 Mallikalibrointi Pipet100 InPro

Data Set Status Instrument LabBook Ref.  
Pipet calibration DataEntered Mettler Toledo AG204  
Variant:1  
Instance:1

| Parameter                                | Type     | Rep | Entered Value | Info | Unit  |
|--|----------|-----|---------------|------|-------|
| <input type="checkbox"/> Volume selected | Standard | 1   | 200           |      | µl    |
| <input type="checkbox"/> Weight          | Standard | 1   | 0.2001        |      | g     |
| <input type="checkbox"/> Weight          | Standard | 2   | 0.2005        |      | g     |
| <input type="checkbox"/> Weight          | Standard | 3   | 0.2003        |      | g     |
| <input type="checkbox"/> Weight          | Standard | 4   | 0.2001        |      | g     |
| <input type="checkbox"/> Weight          | Standard | 5   | 0.1998        |      | g     |
| <input type="checkbox"/> Weight          | Standard | 6   | 0.1996        |      | g     |
| <input type="checkbox"/> Weight          | Standard | 7   | 0.1999        |      | g     |
| <input type="checkbox"/> Weight          | Standard | 8   | 0.1996        |      | g     |
| <input type="checkbox"/> Weight          | Standard | 9   | 0.2002        |      | g     |
| <input type="checkbox"/> Weight          | Standard | 10  | 0.2010        |      | g     |
| <input type="checkbox"/> Z               | Standard | 1   | 1.0000        |      | µl/mg |
| <input type="checkbox"/> Volume          | Standard | 1   | 200.10        |      | µl    |
| <input type="checkbox"/> Volume          | Standard | 2   | 200.50        |      | µl    |
| <input type="checkbox"/> Volume          | Standard | 3   | 200.30        |      | µl    |
| <input type="checkbox"/> Volume          | Standard | 4   | 200.10        |      | µl    |
| <input type="checkbox"/> Volume          | Standard | 5   | 199.80        |      | µl    |
| <input type="checkbox"/> Volume          | Standard | 6   | 199.60        |      | µl    |
| <input type="checkbox"/> Volume          | Standard | 7   | 199.90        |      | µl    |
| <input type="checkbox"/> Volume          | Standard | 8   | 199.60        |      | µl    |
| <input type="checkbox"/> Volume          | Standard | 9   | 200.20        |      | µl    |
| <input type="checkbox"/> Volume          | Standard | 10  | 201.00        |      | µl    |
| <input type="checkbox"/> Volume average  | Standard | 1   | 200.11        |      | µl    |
| <input type="checkbox"/> Volume Stdev    | Standard | 1   | 0.43          |      |       |
| <input type="checkbox"/> Volume error    | Standard | 1   | 0.06          |      | %     |
| <input type="checkbox"/> Volume CV       | Standard | 1   | 0.21          |      | %     |

Kuva 51. Kalibrointitaulukko, mittausten syötön ja tulosten laskennan jälkeen.



### 3.3.7 Ohjelman testaaminen opiskelijaryhmällä, koulutus ja käyttöönotto

Kalibrintiohjelmaa ja käyttöohjetta testattiin Biots08z -opiskelijaryhmällä niin että seurattiin vierestä kun opiskelijat kalibroivat pipettejä käyttöohjeen perusteella. Samalla kerättiin palautetta ohjelmasta ja käyttöohjeista. Palautteen perusteella hiottiin käyttöohjetta vielä selkeämmäksi (liite 6).

Pidettiin koulutustilaisuus, johon kutsuttiin kaikki laboratoriotöiden opettajat. Koulutettiin ohjelman käyttö niin että vapaaehtoinen opettaja tuli tekemään kalibroinnin, käyttöohjetta seuraten, ja muut opettajat tarkkailivat vieressä. Koulutustilaisuuden jälkeen opettajat ottivat pipetinkalibrintiohjelman käyttöön opiskelijaryhmille omilla laboriokursseilla.

### 3.4 LIMS-järjestelmän käytön laajentaminen

Arvokasta laboratoriotietojärjestelmää kannattaa käyttää useampaan kuin yhteen sovellukseen. Kun oltiin saatu pipetinkalibrintiohjelma käyttöön, alettiinkin suunnitella LIMS-järjestelmän käytön laajentamista. Päätettiin lisätä toinenkin vaaka LIMS:iin pipettien kalibrointia varten. Lisäksi tehtiin HPLC:n pumpun toiminnan testausohjelma.

#### 3.4.1 Uuden vaakan lisääminen LIMSiin

1. Hankittiin uusi EKI-1521 -konvertteri. Konvertteri asennettiin vaakahuoneeseen, niin että vaaka on kiinni konvertterissa ja konvertteri laboratorioverkon Ethernet -portissa.
2. Vaaka laitettiin Host-moodiin ja annettiin konvertterille oma IP-osoite laboratorioverkkoon.
3. Sisäiset asetukset kopiottiin edellisestä EKI-1521 -konvertterista uuteen konvertteriin laitteen asennuslevyllä olevalla ohjelmalla.

4. LIMS-palvelimen WSP Connectiin kirjaututtiin client-ohjelmalla. WSP Connectiin tehtiin uusi Instance uudelle vaa'alle ja kopioitiin vanhan vaa'an Instancen asetukset uuteen.
5. Vaa'alle lähetettiin viesti WSP Connectilla, jolloin tuli sarja virheilmoituksia joista saatettiin päätellä että WSP Connect ei saa yhteyttä vaakaan.
6. Vaakaan kokeiltiin ottaa ssh-yhteys LIMS-palvelimelta. Saatiin viesti: "Connection refused"
7. Vaakaa pingattiin Putty-ohjelmalla ja ping meni perille. Tämän perusteella epäiltiin että porttiasetuksissa on jotakin vikaa.
8. Konvertterin sisäiset asetukset tarkastettiin uudelleen ja verrattiin niitä vanhan konvertterin asetuksiin, jolloin huomattiin että uudesta oli unohtunut määrittää mihin IP-osoitteisiin ja portteihin konvertteri ottaa yhteyttä. Kopioitiin nekin asetukset edellisestä konvertterista (liite 7).
9. Tehtiin uusi yhteyskokeilu WSP Connectissa. Tällä kertaa viesti meni läpi, eli yhteys toimii WSP-Connectin ja konvertterin välillä.
10. Pipetinkalibrointiohjelmalla kokeiltiin, saako LIMS tuloksia vaa'alta. Pipetinkalibrointiohjelma toimi moitteettomasti uuden vaa'an kanssa.
11. Lopuksi asennettiin vaa'an viereen käyttöpääte-PC, joka on yhteydessä opetusverkkoon.

#### 3.4.2 HPLC-pumpun toimintatestaus

Ennen toista koulutusta Software Pointilla otettiin selvää olisiko koululla tarpeita muille LIMS-sovelluksille, kuin pipetinkalibrointiohjelmalle. Haettiin yksinkertaisia sovelluksia jotka eivät tarvitsisi laiteliitäntöjä ja jotka voisi ottaa nopeasti käyttöön. Yksi esille nousseista ideoista oli HPLC:n pumpun toiminnantestausten helpompi tilastointi.

Nestepumput ovat HPLC-kromatografialaitteen toiminnan kannalta olennaisia. Jos pumppu pumppaa huonosti, se vaikuttaa analyysiin. Pumppujen todellista pumppausnopeutta tulisi mitata säännöllisesti jotta nähdään toimiiko pumppu niin kuin sen kuuluu. Mittauksia taulukoimalla voidaan myös nähdä trendi pumppausnopeudessa ja näin huomata jo ajoissa jos pumppu on menossa epäkuuntoon. Kun tiedetään etukäteen pumpun toiminnan heikentymisestä, voidaan se viedä ennakoivasti huoltoon.

Pumpun toiminnan testaus: Pumpulle asetetaan tietty pumppausnopeus ja mitataan jonkin tunnetun tilavuuden täyteen pumppaamiseen kuluva aika. Tämän jälkeen lasketaan ajan ja täytetyn tilavuuden perusteella pumppausnopeus. Tiedoista lasketaan paljonko se poikkeaa (prosentteina) asetetusta pumppausnopeudesta. Testi suoritetaan kolmella eri oletusvirtauksella.

HPLC pumpun toimintatesti-ohjelmasta tehtiin suunnitelma lehtori Taina Hovisen haastattelun perusteella. Suunnitelma esiteltiin Hoviselle ja hiottiin vielä yhdessä sitä halutunlaiseksi. Suunnitelmasta tehtiin elektroninen malli (kuvio 9). Malli lähetettiin Software Pointille ennen koulutusta, jotta kouluttaja osaisi etukäteen valmistautua kertomaan kuinka haluttu ohjelma rakennettaisiin.

Pumpun toimintatesti-ohjelman tarkoituksena on arkistoida ja tilastoida käyttäjien tekemät pumppausnopeuden mittaukset. Ohjelmaan syötetään oletusvirtausnopeus, sekä pumpun testauksen testitilavuus ja sen täyttämiseen kulunut aika. Ohjelma laskee näistä todellisen pumppausnopeuden, vertaa sitä oletusvirtaukseen ja kertoo onko pumppausnopeus virherajoissa. Ohjelman tulee näyttää käyränä virtausnopeuden poikkeamat.

|                  |  |        |  |     |
|------------------|--|--------|--|-----|
| Syötä uusi tulos |  |        |  |     |
| V=               |  | ml     |  |     |
| T=               |  | sek=   |  | min |
| til.virta        |  | ml/min |  |     |
| Oletus til.virta |  |        |  |     |
| ryhmä            |  |        |  |     |
| peruuta          |  |        |  | ok  |

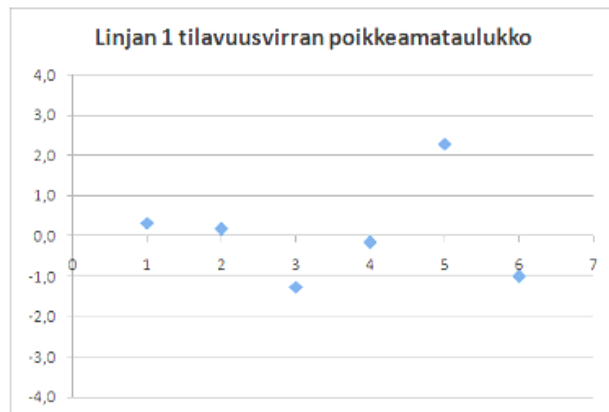
| HPLC Pumpun virtausnopeustesti Linja 1 |        |        |                       |                              |             |         |           |
|--|--------|--------|-----------------------|------------------------------|-------------|---------|-----------|
| Mittaus #                              | V (ml) | t(sek) | tilavuusvirta(ml/min) | oletus tilavuusvirta(ml/min) | poikkeama % | ryhmä   | pvm       |
| 1                                      | 5      | 602    | 0,498                 | 0,500                        | 0,3         | gdh     | 12.6.2009 |
| 2                                      | 10     | 601    | 0,998                 | 1,000                        | 0,2         | sdf     | 13.6.2009 |
| 3                                      | 10     | 395    | 1,519                 | 1,500                        | -1,3        | dg      | 14.6.2009 |
| 4                                      | 5      | 599    | 0,501                 | 0,500                        | -0,2        | rw      | 15.6.2009 |
| 5                                      | 5      | 307    | 0,977                 | 1,000                        | 2,3         | gdh     | 16.6.2009 |
| 6                                      | 5      | 198    | 1,515                 | 1,500                        | -1,0        | df      | 17.6.2009 |
| Syötä uusi                             |        |        |                       |                              |             | Tilasto |           |

$poikkeama = (oletettu\ til.virta - til.virta) / oletettu\ til.virta * 100\%$

admin asettaa poikkeaman rajat (normaalisti +/-2%)

Oletusvirtaukset 0,5ml/min ; 1,0ml/min ; 1,5ml/min

Joka linja testataan kaikilla oletusvirtauksilla.



Kuvio 9. Suunnitelma HPLC toimintatestiohjelmasta.

Software Pointin koulutuksessa ohjelmoitiin mallin perusteella HPLC-pumpun toimintatesti-ohjelma.

Valmis ohjelma esiteltiin Taina Hoviselle ja samalla opetettiin ohjelman käyttö.

### **HPLC-pumpun toimintatestin tekeminen**

LIMSiin kirjaudutaan sisään peruskäyttäjänä, jolloin aukeaa supistettu Sapphire -näkyvä (kuva 52). Samples -kohdasta valitaan Quick Login.

Type -kohdan alavetovalikosta valitaan FuncTest (kuva 53). Description -kenttään kirjoitetaan mittauksen kuvaus.

Product -kohdan suurennuslasista avataan valikko jonka Search within the Id/Desc -hakuruutuun kirjoitetaan "hplc" ja painetaan OK. Sen jälkeen valitaan haluttu pumppu, tässä tapauksessa "HPLC Pump Line A" (kuva 54).

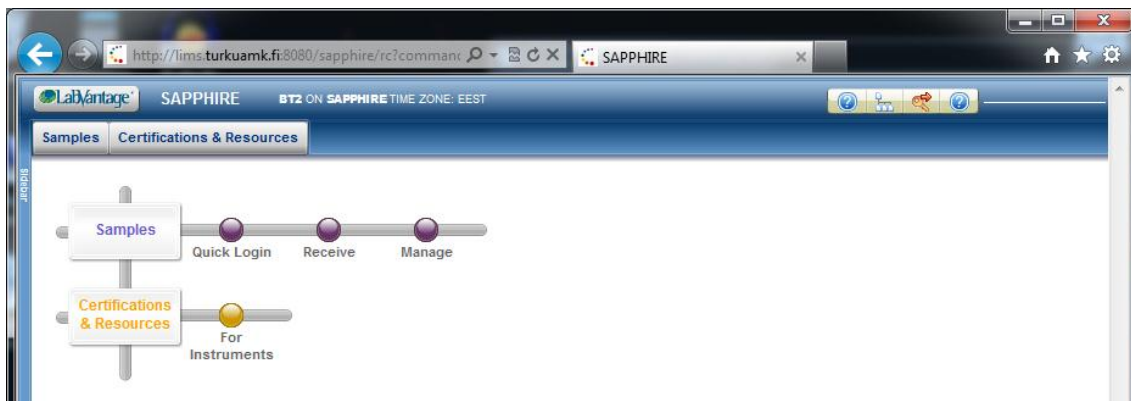
Seuraavaksi avataan Instrument -kohdan suurennuslasista valikko (kuva 55) ja etsitään ByInstrumentType -hakukentästä HPLC ja valitaan käytettävä HPLC-laitte, tässä tapauksessa "Bio5048", kutsumanimeltään "Urho Kaleva".

Notes -kenttään täytetään vielä mittajaan nimi, niin tiedetään jälkeinpäin kuka on ollut tekemässä mittausta. Lopuksi painetaan ruudun alareunasta Next -nappulaa.

Sample List -ruudussa (kuva 56) näkyy nyt äsken tehty Sample. Rastitaan sen vieressä oleva ruutu ja valitaan Data Entry. Auenneessa tietojensyöttöikkunassa (kuva 57) valitaan testattava pumpun pumppausnopeus Default Volume Flow -kohtaan.

Pumpulla pumpataan tunnettu tilavuus vettä valitulla pumppausnopeudella ja otetaan muistiin pumppaukseen kulunut aika. Sitten syötetään tilavuus Volume -kohtaan ja sen täyttämiseen kulunut aika Time -kohtaan ja painetaan Save.

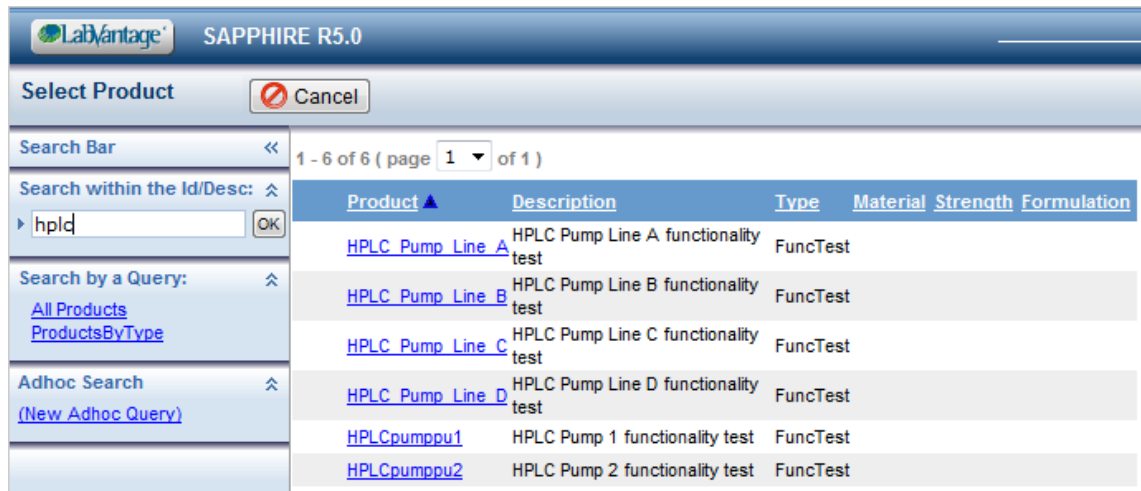
Ohjelma laskee todellisen virtausnopeuden ja poikkeaman oletusvirtausnopeudesta (kuva 58). Painamalla Trend -nappulaa, voidaan nähdä kaikkien saman pumpun toimintatestien poikkeamat kuvaajana (kuva 59).



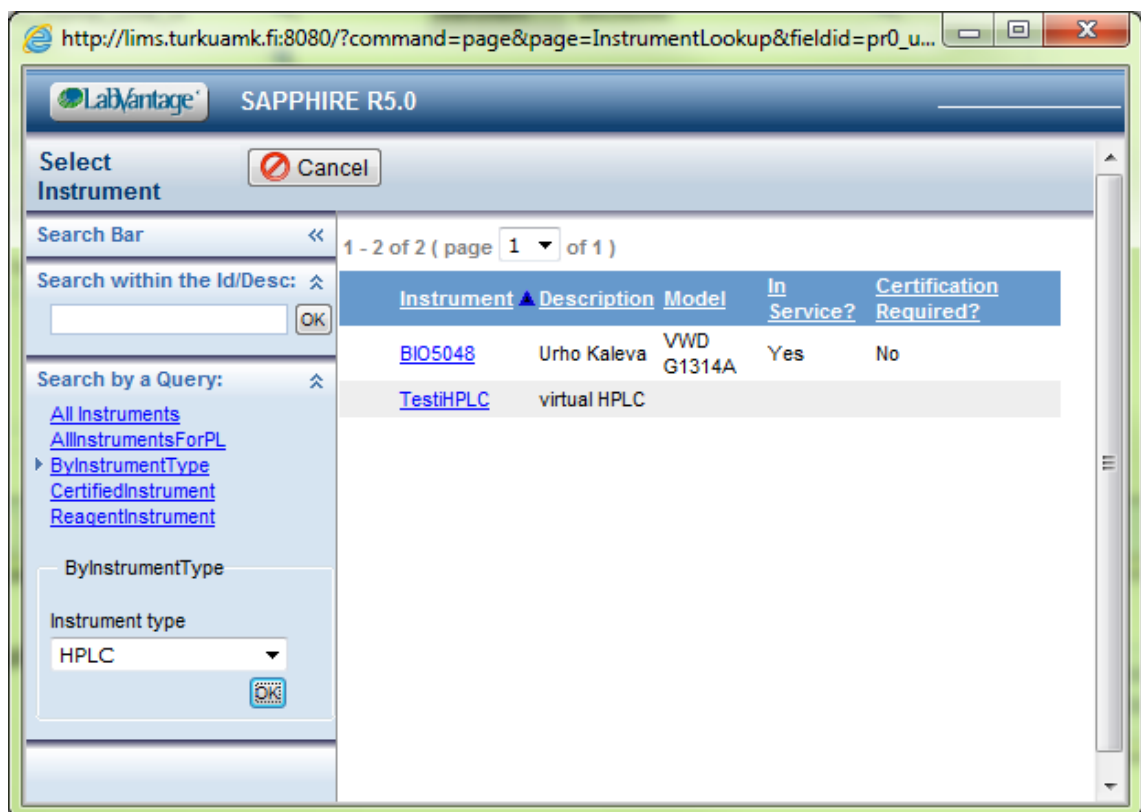
kuva 52. Peruslaboratoriokäyttäjän näkymä.

|                     |  |            |         |
|---------------------|--|------------|---------|
| Description         | HPLC Pump Line A functionality test                |            |         |
| Type                | FuncTest   |            |         |
| Product             | HPLC_Pump_Line_A                                   | Instrument | BIO5048 |
| Project             | Tainan HPLC-analyysi                               |            |         |
| Collected By        | [Dropdown menu]                                    |            |         |
| Collection Date     | [Date field]                                       |            |         |
| Due Date            | Jun 24, 2012                                       |            |         |
| Auto Receive Sample | <input type="radio"/> Yes <input type="radio"/> No |            |         |
| Notes               | [Text area]  |            |         |

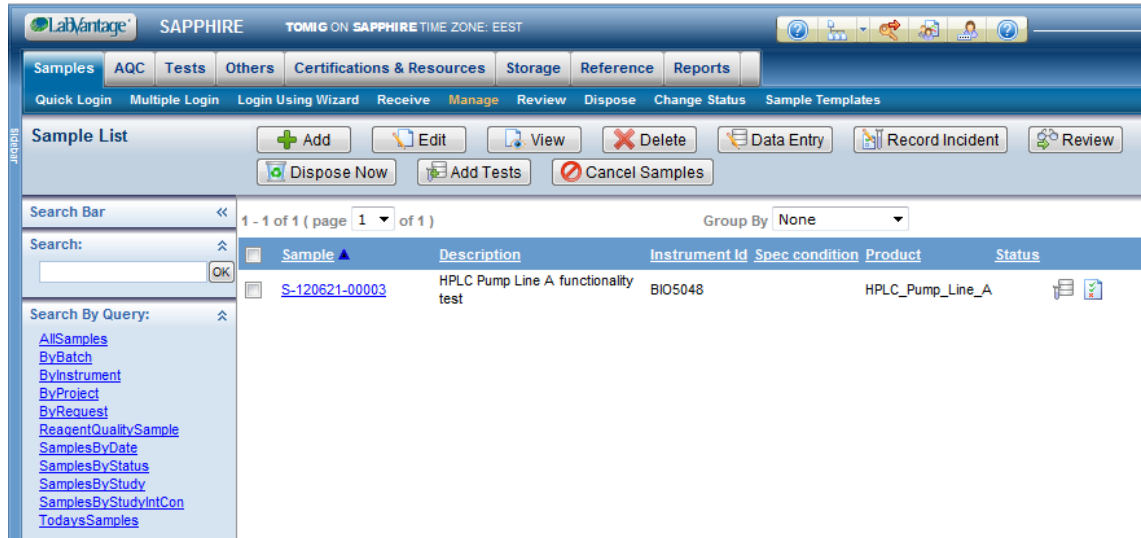
Kuva 53. Täytetty mittauksenvalintataulukko.



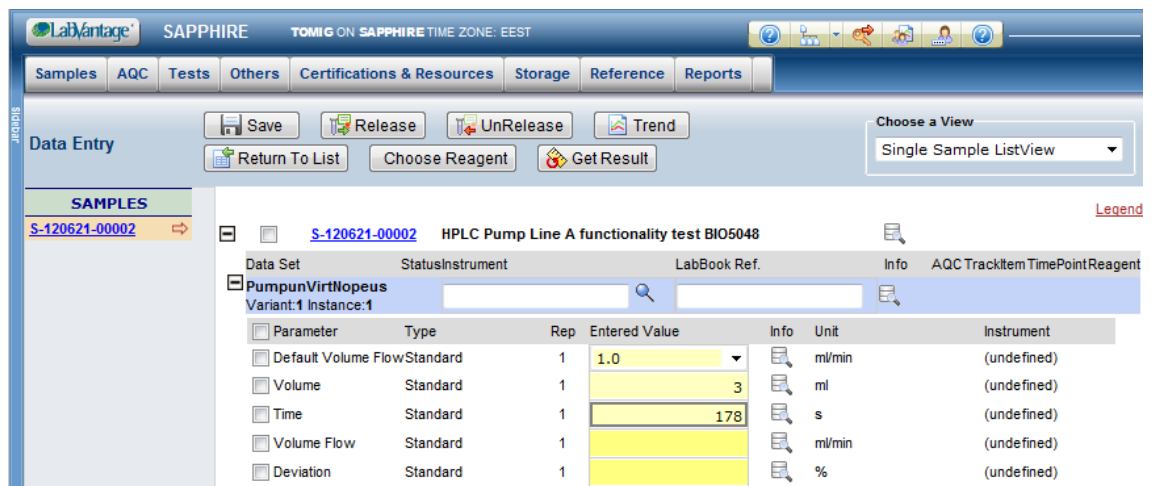
Kuva 54. Select Product -sivu haun tekemisen jälkeen.



Kuva 55. Instrumentinvalintasivu haun tekemisen jälkeen.



Kuva 56. Sample List -sivu toimintatestin luomisen jälkeen.



kuva 57. HPLC-pumpun toimintatestin taulukko lähtöarvojen ja mittaustulosten syötön jälkeen.



**Message**

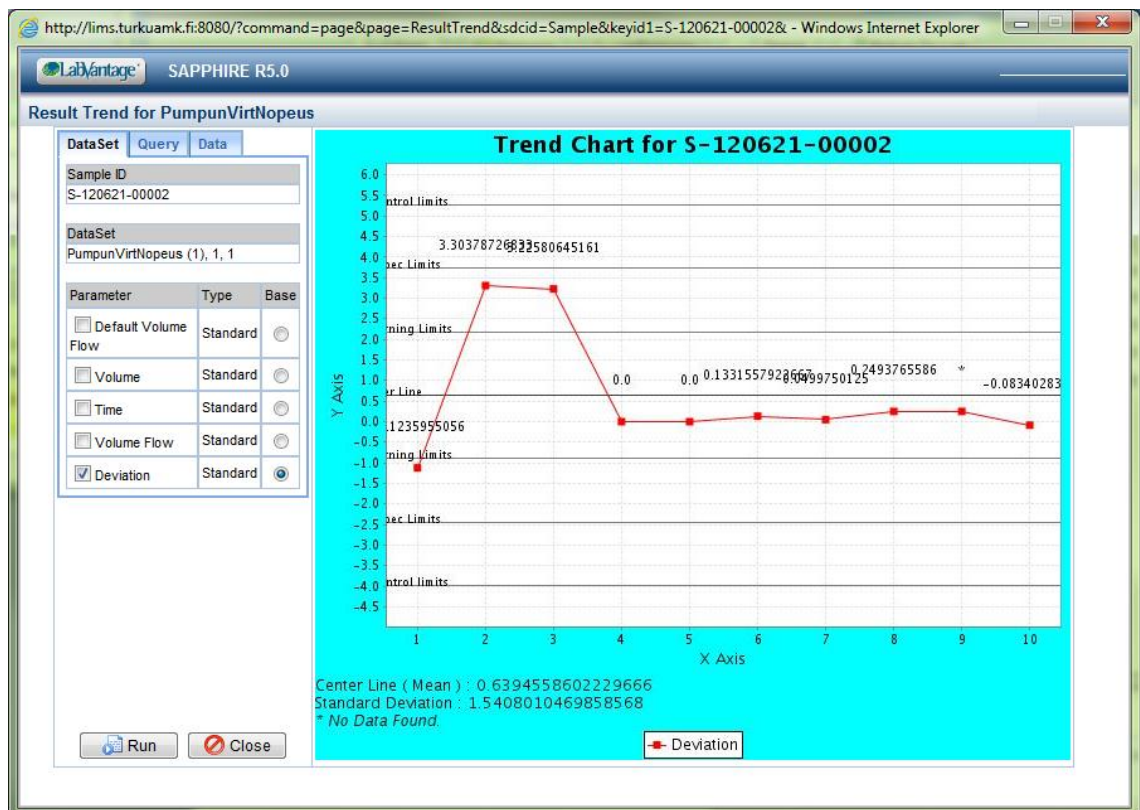
Information

1) Save Operation Successful

**S-120621-00002 HPLC Pump Line A functionality test BIO5048 Initial**

| Parameter           | Type     | Rep | Entered Value | Info | Unit   | Instrument  |
|---------------------|----------|-----|---------------|------|--------|-------------|
| Default Volume Flow | Standard | 1   | 1.0           |      | ml/min | (undefined) |
| Volume              | Standard | 1   | 3.00          |      | ml     | (undefined) |
| Time                | Standard | 1   | 178.0         |      | s      | (undefined) |
| Volume Flow         | Standard | 1   | 1.011         |      | ml/min | (undefined) |
| Deviation           | Standard | 1   | -1.12         |      | %      | (undefined) |

Kuva 58. HPLC-pumpun toimintatestin taulukko tulosten laskennan jälkeen.



kuva 59. Kuvaaja mitatuista pumpun virtausnopeuksien poikkeamista.

### 3.4.3 Muiden laitteiden lisääminen LIMSiin

Alkuperäisissä suunnitelmissa oli lisätä muitakin mittalaitteita LIMS-järjestelmään sen jälkeen kun on saatu pipetinkalibrointiohjelma toimimaan. Tarkoituksena oli että aloitetaan helpposta laitteesta, joka lähettää tietoa yhteen suuntaan, yhden näytteen kerrallaan (esim. vaaka). Seuraavaksi asennettaisiin laite joka lähettää yhteen suuntaan tietoa, joka sisältää näytteen tunnusteen, testin tunnusteen ja tulokset (esim. spektrofotometri). Viimeisenä oli tarkoitus lisätä monimutkaisempi laite, jossa tietoa liikkuu molempiin suuntiin ja tulee eri antureilta useampi mittaustulos kerrallaan (esim. fermentori).

### 3.5 Tulevaisuus

AMK:n LIMS-järjestelmään on tulevaisuudessa tarkoitus liittää muita laboratoriolaitteita suunnitelman mukaisesti resurssien puitteissa. Laitteiden lisäys vaatii ainakin seuraavia resursseja:

1. Henkilöt. Määrätty henkilö/henkilöt suunnittelemaan laitteen lisäyksen ja ohjelmoimaan sitä varten LIMS:iin ohjelman.
2. Laitteet. Konvertteri joka muuntaa laitteesta tulevan datan Ethernet-muotoon, sekä tarvittavat kaapelit ja käyttöpääte PC.
3. Raha. Laitekommunikaatio-ohjelman protokollien ostaminen Software Pointilta uusia liitettäviä laitteita varten. LIMS-lisenssin laajentaminen, eli käyttäjämäärän ja laiteliitäntäpaikkojen lisääminen suurentaa lisenssimaksua

## LIMS-järjestelmän kustannusarvio

### 1. LIMS-järjestelmän pystytyksen kustannukset minimiarvion mukaan

|   |                  |
|---|------------------|
| - LIMS lisenssi + asennus                                   | alkaen 10 000 €  |
| - Koulutukset   | alkaen 10 000 €  |
| • Kustannukset ovat yleensä samansuuruiset lisenssin kanssa |                  |
| - Vuosittainen tuki-/päivitysmaksu                          | alkaen 1 500 €   |
| • Yleensä n. 15-20% lisenssistä                             |                  |
| - RS232 <-> Ethernet muunnin                                | ~160 €           |
| - Verkko-toimilaitteet                                      | ~500 €           |
| - Palvelin  | ~1 500 €         |
| - Käyttötietokone   | ~500 €           |
| <b>Yhteensä:</b>  | <b>~24 160 €</b> |

### 2. Vuosittaiset kustannukset

- Vuosittainen tuki/päivitysmaksu **alkaen 1500 €** (n. 15-20% lisenssistä)

### 3. Lisäkustannukset laajennettaessa käyttöä

- Lisäominaisuudet ja lisäkäyttäjät tuovat lisähintaa lisenssiin ja täten myös vuosittaiseen tuki/päivitysmaksuun
- Lisäominaisuuksien käytön kouluttaminen
- Ethernet muuntimet uusia LIMS:iin kytkettäviä toimilaitteita varten
- Uusien tietokoneiden hankinta, kun lisätään LIMS-käyttöpäätteiden määrää
- Uusille toimilaitteille mittausten ohjelmointi LIMS:iin

Lisäkustannusten määrä riippuu laajennusten suuruudesta ja vaihtelee eri palveluntarjoajien välillä.

Kustannusarvio perustuu Software Pointin toimialajohtaja Marjut Pokkisen ja Turun AMK:n projektisuunnittelija Tero Mäkelän antamiin arvioihin.

## 4 YHTEENVETO JA PÄÄTELMÄT

Työn päätavoitteena oli pystyttää LIMS-järjestelmä ja ohjelmoida siihen toimiva pipetinkalibrointiohjelma. Arviot projektin vaikeustasosta olivat optimistisia. Odotuksena oli että saataisiin koulutuksesta helpot ohjeet järjestelmän muokkaamiseen ja sen jälkeen tehtäisiin AMK:lla pipetinkalibrointiohjelma ja liitettäisiin siihen vaaka. Todellisuudessa työ ei ollut niin yksinkertainen.

Kun lähdettiin ensimmäiseen LIMS-koulutukseen Software Pointille, ei vielä ollut tarkkaa kuvaa mitä Sapphire LIMSillä pystyy tekemään ja koulutus meni lähinnä tutustuessa pintapuolisesti Sapphire-LIMSiin. Järjestelmä asennettiin koulun palvelimelle Software Pointin toimesta. Koulutuksen jälkeen yritettiin alkaa ohjelmoida järjestelmään ohjelmia, mutta huomattiin että ei osattu tehdä LIMSin kanssa juuri mitään. Myöhemmin selvisi ettei järjestelmään myöskään oltu asennettu kaikkia tarvittavia moduleja.

Toista koulutusta varten oltiin valmistauduttu paremmin. Oltiin tehty valmiiksi erilaisia malleja (kuvia, taulukoita, selostuksia) ohjelmista joita haluttaisiin ohjelmoida LIMSiin ja lähetetty ne etukäteen Software Pointille. Koulutus antoi selkeämmän kuvan Sapphire-LIMSin rakenteesta ja samalla riittävästi tietoa jotta voitaisiin itse rakentaa ohjelmia siihen. Koulutuksen aikana asennettiin myös LIMSiin tarvittavat modulit ohjelmien rakentamiseen. Koulutuksessa rakennettiin yhdessä Software Pointin kanssa sekä pipetinkalibrointiohjelma, että HPLC-pumpun toimintatestiohjelma hiomista vaille valmiiksi.

Kun oltiin saatu pipetinkalibrointiohjelma valmiiksi, oli seuraavana haasteena saada vaaka toimimaan yhteistyössä sen kanssa. Hankittiin Software Pointin ohjeistuksen mukainen Serial-to-Ethernet -konverterteri ja asennettiin se käyttöohjeiden mukaisesti. Ei kuitenkaan saatu heti LIMSia ja vaakaa kommunikoimaan keskenään ja ongelmaa selvittäessä otettiin useaan otteeseen yhteyttä Software Pointiin ja kysyttiin neuvoja.

Vaikka asennus ja ohjelmointityöhön kuluikin odotettua enemmän aikaa, oli odotettua haastavampaa ja vaati odotettua enemmän konsultointia Software Pointilta, olivat järjestelmän edut lopulta näkyviä. Pipettien kalibrointi nopeutui ja helpottui huomattavasti ja virhealtis paperillekirjaamisvaihe jäi pois välistä. Pipetinkalibrointiohjelmaa testanneilta opiskelijoilta tuli positiivista palautetta ja opettajat olivat kohtuullisen tyytyväisiä siihen, että kalibroinnit nopeutuivat ja näin voitiin jopa kalibroida käytettävät pipetit joka laboratorioharjoituksen aluksi. Toiminnassa pipetinkalibrointiohjelma siis vastasi odotuksia.

Turun AMK:lle asennettu LIMS on saanut myös kritiikkiä: Pelkästään pipetinkalibrointiin tuon skaalan ja hintaluokan järjestelmä on turhan järeä, siihen pitäisi liittää useampia laitteita ja toimintoja, jotta sitä olisi kannattavaa pitää. Järjestelmän jäykkyys on myös saanut huomiota: Tarvitaan monta hiiren napsautusta päävalikosta lähtien ennenkuin päästään tekemään itse mittauksia ja käyttöliittymän hahmottaminen on alkuun vaikeaa.

Yhtenä työn tavoitteista oli arvioida kenen kannattaa harkita LIMS-järjestelmän hankintaa. Haastattelujen perusteella tekemäni kustannusarvion mukaan lisenssillä toimivan LIMS-järjestelmän asentaminen ja saattaminen käyttökuntoon (lisensseineen, koulutuksineen ja laitteineen) tulee maksamaan minimissään noin 25 000 euroa. Sen lisäksi vuosittaisia kustannuksia tulee vähintään n. 1500 euroa. Minimihintaan saa järjestelmän johon saa pari käyttäjää ja laitetta. Jos halutaan liittää järjestelmään enemmän laitteita ja käyttäjiä, suurenevat lisenssimaksu ja vuosittaiset kulut suhteessa järjestelmän kapasiteettiin ja voivat moninkertaistua. Tämän perusteella LIMS-järjestelmän hankkiminen ei todennäköisesti tule kyseeseen vielä mikroyrityksille. Pienille yrityksille ja keskikokoisillekin yrityksille järjestelmän hankinta on huomattava sijoitus, jonka tekemistä kannattaa harkita huolellisesti.

## LÄHTEET

1. Çağındı, Ö. & Ötleş, S. 2004. Importance of laboratory information management systems (LIMS) software for food processing factories. *Journal of Food Engineering* 65 (2004) 565–568
2. Gibbon, G. 1995. A brief history of LIMS. *Laboratory Automation and Information Management* 32 (1 996) 1-5
3. Sapio Sciences. 2010. viitattu 10.11.2011.  
<http://sapiosciences.blogspot.com/2010/07/so-what-is-lims.html>
4. Pehkonen, R., Järvinen, O., Örn, M., Paukku, R. & Sarkkinen, M. 2003. LIMS Laboratorion ja näytteenoton tiedonhallintajärjestelmä ympäristöhallinnossa. Suomen ympäristökeskus ISBN 952-11-1446-0 (nid.), 952-11-1447-9
5. Wang, N., Sherwood, A.R., Kurihara, A., Conklin, K.Y., Sauvage, T. & Presting, G.G. 2009. The Hawaiian Algal Database: a laboratory LIMS and online resource for biodiversity data. *BMC Plant Biology* 2009, 9:117 doi:10.1186/1471-2229-9-117
6. Colmsee, C., Flemming, S., Klapperstück, M., Lange, M. & Scholz, U. 2011. A case study for efficient management of high throughput primary lab data. *BMC Research Notes* 4:413.
7. Lu, Y., Savage, L.J., Larson, M.D., Wilkerson, C.G. & Last, R.L. 2011. Chloroplast 2010: A Database for Large-Scale Phenotypic Screening of Arabidopsis Mutants. *Plant Physiol.* Vol. 155, 2011
8. Morris, C., Pajon, A., Griffiths, S.L., Daniel, E., Savitsky, M., Lin, B., Diprose, J.M., da Silva, A.W., Pilicheva, K., Troshin, P., van Niekerk, J., Isaacs, N., Naismith, N., Nave, C., Blake, R., Wilson, K.S., Stuart, D.I., Henrick, K. & Esnout R.M. 2010. The Protein Information Management System (PiMS): a generic tool for any structural biology research laboratory. *Research papers, Acta Crystallographica section D, Biological chrystallography* ISSN 0907-4449.
9. van Rossum, T., Tripp, B. & Daley, D. 2010. SLIMS—a user-friendly sample operations and inventory management system for genotyping labs. *BIOINFORMATICS APPLICATIONS NOTE* Vol. 26 no. 14 2010, pages 1808–1810 doi:10.1093/bioinformatics/btq271
10. Jayashree, B., Reddy, P.T., Leeladevi, Y., Crouch, J.H., Mahalakshmi, V., Buhariwalla, H.K., Eshwar, K.E., Mace, E., Folksterna, R., Senthilvel, S., Varshney, R.K., Seetha, K., Rajalakshmi, R., Prasanth, V.P., Chandra, S., Swarupa, L., SriKalyani, P. & Hoisington, D.A. 2006. Laboratory Information Management Software for genotyping workflows: applications in high throughput crop genotyping. *BMC Bioinformatics* 2006, 7:383 doi:10.1186/1471-2105-7-383
11. Maurer, M., Molidor, R., Sturn, A., Hartler, J., Hackl, H., Stocker, G., Prokesch, A., Scheideler, M. & Trajanoski, Z. 2005. MARS: Microarray analysis, retrieval, and storage system. *BMC Bioinformatics* 2005, 6:101 doi:10.1186/1471-2105-6-101
12. Fransen, S., & Nyrup, A. 1998. Implementation of a 'standard' LIMS. *Laboratory Automation and Information Management* 33 (1998) 227-233
13. Rautalahti, K., & Räisänen, J. 2007. GLP Programme in Finland. National Product Control Agency for Welfare and Health.
14. European Commission Health and Directorate general. 2011. Good Manufacturing Practice Medicinal Products for Human and Veterinary Use. Brussels, SANCO/C8/AM/sl/ares(2010)1064587
15. Williams A.J. 2010. *Laboratory Information Management Systems (LIMS)*. Elsevier.

16. Labvantage. 2012. Viitattu 10.5.2012. <http://www.sqllims.com/core.php>
17. Starlims. 2012. Viitattu 10.5.2012. <http://www.starlims.com/>
18. AJ Blomesystem. 2012. Viitattu 10.5.2012. GmbH <http://www.aj-blomesystem.com>
19. Labware. 2012. Viitattu 10.5.2012. <http://www.labware.com>
20. Perkinelmer. 2012. Viitattu 10.5.2012.  
<http://www.perkinelmer.com/pages/010/labworks/platform.xhtml>
21. Bikalabs. 2012. Viitattu 10.5.2012. <http://www.bikalabs.com/>
22. Metsävuori, Leena. 2010. Agricola-ohjelma - yhteenveto toteutuksesta 2009. Turun AMK 10.3.2010.



## Liite1: Lims-tavoitteet

Juhani Soini ja Stephen Rudd  
 Turun biotekniikan keskus  
 Turun yliopisto ja Åbo Akademi  
 PL 123, 20521 Turku

### Laboratorioiden tiedonhallintajärjestelmän rakentaminen Turun kampusalueelle

Biolääketieteellisessä ja biologisessa tutkimuksessa käytetään useita suuria tietomääriä tuottavia mittausjärjestelmiä. Tietojen kokonaisvaltainen hallinta on useissa tutkimusprojekteissa tutkimusta hidastava tekijä. Turun korkeakouluilta puuttuu laboratoriotiedon hallintajärjestelmä, ja erityisesti biologista ja biolääketieteellistä tutkimusta ja kysymyksenasettelua tutkeva tiedonhallinta-järjestelmä.

Hankkeeksi ehdotamme Turun korkeakoulujen käyttöön suunniteltavan laboratoriotiedon-hallintajärjestelmän asteittaista mutta määrätietoista rakentamista.

Järjestelmä ydin rakennetaan kaupallisen LIMS järjestelmän varaan, jonka ympärille liitetään OpenSource ratkaisuisia koostuvia applikaatiospesifisiä tietokantaratkaisuja. Kaavio järjestelmästä ohessa. Järjestelmän rakentaminen ja käynnistäminen edellyttää seuraavia toimia:

- 1) LIMS:n ja sovellusspesifisten tietokantaratkaisuiden asentaminen ja käynnistäminen
- 2) Tieto-oliomallien ja ohjelmointirajapintojen luominen
- 3) Laitteistojen liittäminen tietokantaan
- 4) Analyysityökalujen kehittäminen
- 5) Yhteisen integroidun käyttöliittymän luominen

**Järjestelmästä saadaan pitkällä aikavälillä seuraavia hyötyjä.**

Laatu:

- 1) Mittaustulosten keskitetty arkistointi ja helpompi hallinta
- 2) Käytettävien mittausjärjestelmien toiminnan ja mittaustulosten laadun säännöllinen ja automaattinen seuranta perustettavien laatujärjestelmien mukaisesti

Synergia tieteenalojen välillä:

- 3) Kasvava synergia bioalan sekä tietojenkäsittelytieteiden ja matematiikan tutkimusryhmien välillä
- 4) Tietojen analysoinnissa käytettävien työkalujen ja menetelmien yhtenäistyminen
- 5) Tiedon jalostamisen nopeutuminen eri tieteenalojen synergiaa ja yhteistyötä lisäämällä bio/IT-alat

Kustannussäästöt ja kustannusten seuranta:

- 6) Järjestelmä mahdollistaa monien rutiinitehtävien sekä tiedon analysoinnin automatisoinnin
- 7) Kustannussäästöt syntyvät tiedon hallintaan tarvittavan kokonaisuuden vähentymisenä, sekä, mitatun tiedon paremman arkistoinnin mahdollistaman

Koulutus:

- 8) Järjestelmä mahdollistaa sekä laboratorio- että lääketieteen ja luonnontieteiden alan opiskelijoiden kouluttamisen käyttämään ja kehittämään moderneja LIMS-järjestelmiä.

Tulevaisuus:

Useat koejärjestelyt, kuten mikrosiruanalyysi, proteiinien tunnistus jne. ovat hyvin kalliita operaatioita. Kerran mitattu tieto tulisi olla helposti uudelleen käytettävissä täydentämään uusia koeasetelmia ja kysymyksen asetteluja. Luokiteltu tietokantaan hierarkkisesti tallennettu mittaustieto mahdollistaa vanhempien mittaustulosten käytön uusissa tulevaisuudessa tehtävissä tutkimuksissa. Tietokantaan tallennetulle tiedolle voidaan tehdä uusia virtuaalisten koe-asetelmia, ilman laboratoriokustannuksia.

Järjestelmästä hyötyvät kaikki Turun kampusalueella biologisia ja biolääketieteellisiä tutkimuksia tekevät ryhmät.

## Työ 5 Mittalaitteiden kalibrointi ja viritys

**Kalibrointi** = Toimenpiteet, joiden avulla annetuissa olosuhteissa saadaan mittalaitteen, mittausjärjestelmän tai kiintomittan näyttämien arvojen ja mittasuureen vastaavien arvojen välinen yhteys. (SFS 5223)

Siis verrataan mittalaitteen näyttämää mitattavan suureen todelliseen arvoon.

**Viritys** = Mittalaitteen säätäminen näyttämään oikeaa arvoa.

### 1. Pipetti

Pipetin kalibrointi tulee suorittaa vedottomassa tilassa, jonka lämpötila on 15 - 30 °C ja suhteellinen kosteus yli 50 %. Ennen testausta on huolehdittava siitä, että testattavat pipetit, pipetinkärjet ja testauksessa käytettävä vesi ovat olleet testihuoneessa riittävän pitkän ajan saavuttaakseen saman lämpötilan kuin testihuone. Käytä tislattua tai ionivapaata vettä ja analyysivaakaa jonka lukematarkkuus on 0,01 mg. Tarkista vaa'an kalibrointi vihosta.

Punnitus

1. Säädä haluttu testitilavuus  $V_s$ .
2. Kiinnitä kärki huolellisesti pipetin kärkikartioon.
3. Esihuuhtelee kärki 5 kertaa tislattulla vedellä, jotta pipetin ilmatila saavuttaa kosteustasapainon.
4. Vaihda kärki. Esihuuhtelee yhden kerran tislattulla vedellä.
5. Ime kärkeen varovasti tislattua vettä upottaen kärki ainoastaan 2 - 3 mm nestepinnan alapuolelle. Pidä pipetti pystysuorassa.
6. Nosta pipetti pystysuorassa ja kosketa kärki vesiastian seinämään.
7. Pipetoi tislattua vettä punnitusastiaan niin että kärki koskettaa astian sisäseinämää aivan nestepinnan yläpuolella 30° - 40° kulmassa. Poista pipetti vetäen kärkeä 8 - 10 mm punnitusastian sisäseinää pitkin.
8. Lue punnitustulos mg:ina ( $m_i$ ). JOS punnitustulos on paljon pielessä (>>1%) säädä kalibrointiavaimella tilavuutta oikeaan suuntaan!
9. Toista 10 kertaa kohdat 5 - 8.
10. Muunna kirjatut massat ( $m_i$ ) tilavuuksiksi ( $V_i$ ):

$$V_i = m_i Z$$

$Z$  = korjauskertoimen (Taulukko 2)

11. Laske saatujen tilavuuksien keskiarvo

$$\bar{V} = (\sum V_i) / n$$

$n$  = pipetointien lukumäärä (10)

12. Laske mittausten systemaattinen virhe  $e_s$ :

mikrolitroina

$$e_s = \bar{V} - V_s$$

$V_s$  = valittu testivolyyymi

prosentteina

$$e_s = \frac{100(\bar{V} - V_s)}{V_s}$$

13. Laske mittausten

keskihajonta

tointien lukumäärä

$$s = \sqrt{\frac{\sum (V_i - \bar{V})^2}{n - 1}}$$

satunnaisvirhe:

$n$  = pipe-

tai toistettavuus

$$CV = \frac{100s}{\bar{V}}$$

14. Vertaa systemaattista virhettä (tarkkuus) ja satunnaisvirhettä (toistettavuus) taulukossa 1 annettuihin spesifikaatioihin tai laboratorion omiin spesifikaatioihin. Mikäli tulokset ovat rajojen sisällä on pipetti valmis käyttöön. Muussa tapauksessa säädä tilavuus ja toista testi.

Taulukko 1 Spesifikaatiot

| Pipetin tilavuus   | Testitilavuus | Tarkkuus | Toistettavuus |
|--------------------|---------------|----------|---------------|
| 0,5 - 10 $\mu$ l   | 10 $\mu$ l    | 1,00 %   | 0,60 %        |
|                    | 5 $\mu$ l     | 1,50 %   | 1,00 %        |
|                    | 1 $\mu$ l     | 2,50 %   | 1,50 %        |
|                    | 0,5 $\mu$ l   | 5,00 %   | 4,00 %        |
| 10 - 100 $\mu$ l   | 100 $\mu$ l   | 0,80%    | 0,15 %        |
|                    | 50 $\mu$ l    | 1,00 %   | 0,40 %        |
|                    | 10 $\mu$ l    | 2,00 %   | 1,00 %        |
| 20 - 200 $\mu$ l   | 200 $\mu$ l   | 0,60 %   | 0,15 %        |
|                    | 100 $\mu$ l   | 0,80 %   | 0,30 %        |
|                    | 20 $\mu$ l    | 2,00 %   | 0,80 %        |
| 100 - 1000 $\mu$ l | 1000 $\mu$ l  | 0,60 %   | 0,20 %        |
|                    | 500 $\mu$ l   | 0,70 %   | 0,25 %        |
|                    | 100 $\mu$ l   | 1,50 %   | 0,70 %        |
| 500 - 5000 $\mu$ l | 5000 $\mu$ l  | 0,50 %   | 0,15 %        |
|                    | 2500 $\mu$ l  | 0,60 %   | 0,30 %        |
|                    | 500 $\mu$ l   | 1,50 %   | 0,60 %        |

Huom: Systemaattinen virhe (tarkkuus) on annostellun tilavuuden ja valitun testitilavuuden ero. Satunnaisvirhe (toistettavuus) on annosteltujen tilavuuksien keskihajonta.

Taulukko 2

| Lämpötila<br>°C | Z-arvot (µl/mg) |        |        |        |
|-----------------|-----------------|--------|--------|--------|
|                 | Ilmanpaine kPa  |        |        |        |
|                 | 95              | 100    | 101,3  | 105    |
| 20,0            | 1,0028          | 1,0028 | 1,0029 | 1,0029 |
| 20,5            | 1,0029          | 1,0029 | 1,0030 | 1,0030 |
| 21,0            | 1,0030          | 1,0031 | 1,0031 | 1,0031 |
| 21,5            | 1,0031          | 1,0032 | 1,0032 | 1,0032 |
| 22,0            | 1,0032          | 1,0033 | 1,0033 | 1,0033 |
| 22,5            | 1,0033          | 1,0034 | 1,0034 | 1,0034 |
| 23,0            | 1,0034          | 1,0035 | 1,0035 | 1,0036 |
| 23,5            | 1,0036          | 1,0036 | 1,0036 | 1,0037 |

## 2. Lämpömittari

Kalibroi sauvalämpömittari ja/tai digitaalinen lämpömittari tarkkuuslämpömittaria vastaan lämpötila-alueella 0 - 100 °C kymmenen asteen välein. Käytä vesi-jääseosta nollapisteen saavuttamiseksi ja lämmitä vettä lämpölevyllä. Muista sekoitus ja huomioi sauvalämpömittarin lukematarkkuuden rajoitukset!

Laadi tuloksista kalibrointitaulukko, josta näkee millä arvoilla kalibroittujen lämpömittarien lukemat pitää korjata.

## 3. pH-mittari

Teoriassa pH-elektrodin lähdejännite on suoraan verrannollinen liuoksen pH-arvoon. Suora leikkaa x-akselin kohdassa pH 7 (isopotentialipiste) ja sen kulmakerroin on -59,16 (25 °C). Todellinen elektrodi kuitenkin harvoin käyttäytyy täysin teorian mukaan.

Kalibroi pH-mittari laitteelta löytyvien ohjeiden mukaan. Käytä kahden pisteen käsin kalibrointia. Huomaa: itse asiassa kyse on sekä mittarin kalibroinnista että virittämisestä, mutta arkikielessä toimenpidettä sanotaan vain kalibroinniksi.

Suorita kalibrointi ensin puskureilla 7 ja 4. Mittaa sen jälkeen eri puskuriliuoksia niin monta kuin löydät valmiina (ainakin 2, 4, 5, 7, 9 ja 12). Kirjaa taulukkoon ylös pH-lukeman lisäksi elektrodin lähdejännite  $E_s$ . Tämän jälkeen kalibroi mittari puskureilla 7 ja 9 ja mittaa samat liuokset uudestaan.

Piirrä saamistasi tuloksista samaan kuvaan kalibrointisuorat, joissa x-akselilla pH-arvo ja y-akselilla jännite millivolteina. Poikkeavatko kalibrointisuorat toisistaan? Osuvatko mittausarvot suoralle/suorille? Missä kohtaa suorat leikkaavat x-akselin?

**Käsittele selostuksessa myös:** Työssä käytettiin kalibrointiin vertailumittaria sekä standardia (vertailuaine; standardiliuos), eli näytettä josta mitattavan suureen tarkka arvo tunnetaan. Vertaa menetelmiä keskenään, edut, haitat ja virhelähteet.

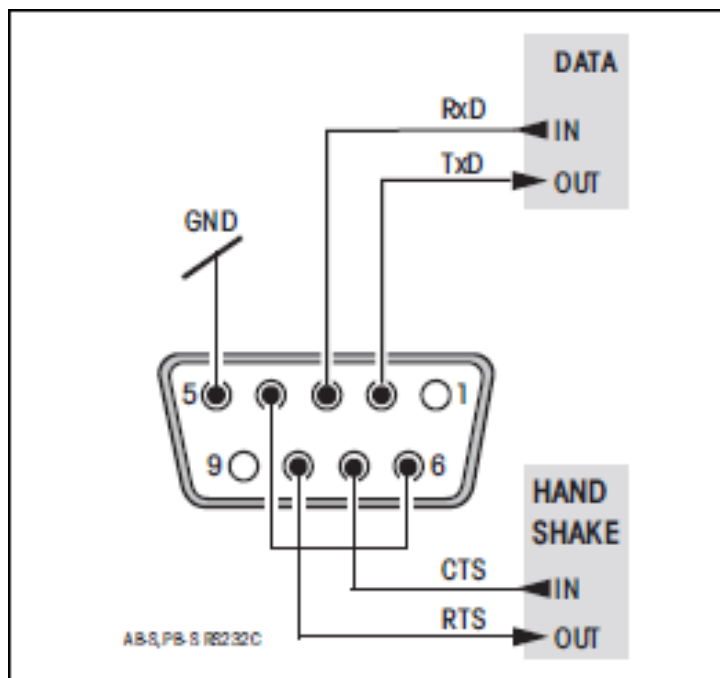
### Liite3: Serial-to-Ethernet -konvertterien hintavertailu

Etsittiin nettikauppoja jotka myyvät Serial-to-Ethernet -konvertteria ja tehtiin niistä hintavertailu:

| Valmistaja | Laite           |   | Hinta | Kauppa              |
|------------|-----------------|---|-------|---------------------|
| Lantronix: | UDS2100         | External Device Server                        | 189\$ | (cdv shop)          |
| Moxa:      | NPort 5130      | 1-port RS-422/485 serial device servers       | 125\$ | (nextwarehouse.com) |
| Sena:      | LS100           | Serial Server                                 | 75\$  | (pcmicro.com)       |
| Tysso:     | eCOV-132-X SPEC | RS-232/422/485 - Serial to Ethernet Converter | 109\$ | (tysso.com)         |
| Advantech: | EKI-1521-AE     | EKI -sarjaporttipalvelin                      | 158 € | (elkome.fi)         |

Päädyttiin lopulta hinnasta huolimatta valitsemaan Elkome.fi-nettikaupasta Advantechin konvertteri, koska ei löydetty muita suomalaisia nettikauppoja jotka myyvät konverttereita. Valinta perustui siihen että suomalaisen kaupan asiakaspalvelussa on helpompi asioida mahdollisissa ongelmatilanteissa ja postikulut ovat pienemmät maan sisällä.

## Liite4: Vaa'an MT-SICS -kommunikaatioprotokolla



Tiedonkulku RS232 portin kautta.

### SU – Send stable weight value with currently displayed unit

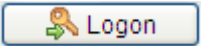
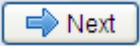
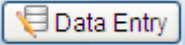

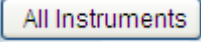
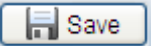
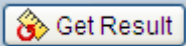
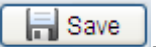

|          |                             |   |
|----------|-----------------------------|---|
| Command  | <b>SU</b>                   | As the "S" command, but with currently displayed unit.  |
| Response | <b>SLSLWeightValueLUnit</b> | Command executed.                                       |
|          | <b>S<sub>L</sub>+</b>       | Balance in overload range.                              |
|          | <b>S<sub>L</sub>-</b>       | Balance in underload range.                             |
|          | <b>S<sub>L</sub>I</b>       | Command not executable as balance is, e.g. being tared. |

#### Example

Command **SU**  
 Response **SLSLLLLLLL12.34Llb**

Vaa'alle lähetettävä tiedonhakupyynnö ja vastevaihtoehdot.

## Liite 5: Pipetin kalibrointi LIMS-järjestelmän avulla

1. Avaa työpöydältä Sapphire LIMS-pikakuvake (se avaa explorerilla osoitteen [http://\[redacted\]](http://[redacted])).
2. Kirjaudu sisään tunnuksella [redacted] ja salasana [redacted] ja paina .
3. Paina Quick Login.
4. Valitse type-kenttään "QC".
5. Valitse Instrument-kenttään listalta kalibroitavan pipetin numero (BIO#).
6. Valitse Product-kenttään pipetin maksimitilavuus.
7. Kirjoita Notes-kenttään oma nimi ja luokkatunnus.
8. Paina alareunasta .
9. Ruudulle ilmestyy juuri valmistelemasi kalibrointi-erä (S-[erän numerokoodi]). Laita ruksi erän vieressä olevaan ruutuun ja paina .
10. Paina Instrument-kentän vieressä olevaa  symbolia.
11. Valitse .
12. Valitse vaaka "Mettler Toledo AG204".
13. Paina , jolloin valittu vaaka hyväksytään.
14. Valitse kohtaan Volume Selected pipetoitava tilavuus.
15. Syötä kohtaan Z pipetoitavan veden tiheys, käytä pistettä desimaalierottimena!
16. Valitse ensimmäinen Weight-kenttä.
17. Taaraa vaaka haluamasi astian kanssa ja pipetoi valittu tilavuus astiaan.
18. Odota että vaaka tasaantuu ja paina  (jos vaa'an lukema ei ole tasaantunut, antaa virheilmoituksen).
19. Toista kohdat 17. ja 18. kaikkien kymmenen weight-kentän kohdalla.
20. Paina .
21. Ohjelma laskee alimmille riveille keskimääräisen tilavuuden, keskihajonnan, tilavuuspoikkeaman sekä suhteellisen keskihajonnan. Jos joku näistä tuloksista on ulkona specseistä, se näkyy punaisena. Tällöin pipetti ei mennyt kalibroinnista läpi.
22. Lopuksi paina  -kuvaketta oikeasta yläreunasta ja pääset takaisin pääikkunanäkymään