

Pestiziddatenbank im LIMS nutzen

Durch die Integration der Daten aus der europäischen Pestiziddatenbank im LIMS kann der Abgleich von Analyseergebnissen automatisiert erfolgen, wie der Autor im Folgenden beschreibt.



Bild: gerasimov174/stock.adobe.com

Pflanzenschutzmittel sind in unserer Landwirtschaft nicht mehr wegzudenken. Doch übermäßiger oder falscher Einsatz dieser Mittel kann schwerwiegende Folgen nach sich ziehen kann für Mensch und Umwelt. Daher wurden Rückstandshöchstmengen in Lebensmitteln definiert, in welcher Menge ein Wirkstoff in einem Produkt noch vorhanden sein darf. Die Rückstandsanalytik ist daher ein wichtiger Markt für Servicelabore und immer mehr Dienstleister spezialisieren sich auf diese Untersuchungen, national und international. Die Rückstandshöchstmengen für Pestizide sind von der Europäischen Gemeinschaft festgelegt worden. Seit 2018 gelten die harmonisierten EG-Höchstgehalte auch in Deutschland. Für Erzeuger von Lebensmitteln und Futtermitteln, für Importeure, Händler und Überwachungsbehörden bringt diese Vereinheitlichung einen Gewinn an Übersichtlichkeit und Rechtssicherheit. Neben den Höchstmengen sind dort auch die aktiven, also in der EG aktuell zugelassenen Substanzen hinterlegt. Derzeit sind mehr als 500 Pflanzenschutzmittel in der EU zugelassen (Stand Juli 2021).

Produktgruppen und Datenbank

Die Höchstmengen unterscheiden sich dabei jedoch, abhängig davon, um welches Produkt es sich handelt. So hat zum Beispiel Safran einen

höheren oberen Grenzwert als Erdbeeren. Dafür werden alle Produkte unterteilt und hierarchisch in Gruppen einsortiert. Zitronen, Limetten, Mandarinen und Co. gehören zur Gruppe der Zitrusfrüchte, welche wiederum der Gruppe Früchte untergeordnet sind. Viele Höchstmengen gelten übergreifend für alle Produkte, so gilt also ein Grenzwert an der Gruppe „Früchte“ automatisch auch für Zitronen, es sei denn, dort ist ein individueller Wert hinterlegt.

Für die Überprüfung der gemessenen Laborwerte am Produkt hat die EG eine Online-Datenbank bereitgestellt, damit aktuell zugelassene Substanzen und die dazu gültigen Rückstandshöchstmengen im Produkt eingesehen werden können. Über ein Webportal kann der Anwender gezielt die Grenzwerte prüfen und gegen tatsächliche Werte abgleichen.

Labore deutschlandweit führen diese Untersuchungen durch, da auch der Bedarf dafür stetig wächst. Bei hohem Probenaufkommen ist der Laborant dann einen Großteil seiner Arbeitszeit damit beschäftigt, die gemessenen Werte mit der EU-Pestiziddatenbank abzugleichen. Eine manuelle Pflege der Höchstmengen als Grenzwerte im eigenen Labor-Informations- und Management System (LIMS), um die Überprüfung zu automatisieren, ist jedoch ein großer manueller Aufwand. Dazu müssen Anpassungen der Höchstmengen oder der aktiven Substanzen erkannt und eingepflegt werden. Sinnvoll wäre daher eine vollautomatische Synchronisation der EU-Datenbank mit dem lokalen LIMS.

Anbindung der Pestiziddatenbank an ein LIMS

In Zusammenarbeit mit Kunden haben wir daher eine Möglichkeit geschaffen, diese Daten automatisch abzugleichen. So ist es für den Anwender nur noch ein Knopfdruck, ob alle gemessenen Parameter den zugelassenen Rückstandshöchstmengen entsprechen. Damit ein Abgleich funktioniert, müssen die Daten jedoch maschinell ausgelesen werden können. Online stehen dafür zwei Formate

zur Verfügung. Zum einen eine Excel Tabelle mit den aktiven Substanzen und allen zugehörigen Informationen wie Zulassungsdatum, Kategorie und der Bezeichnung. Diese Liste wird regelmäßig aktualisiert um zugelassene Mittel oder Zulassungen werden zurückgenommen.

Allerdings werden nicht alle Pestizide im Labor nachgewiesen. Oftmals beschränken sich Labore auf die gängigsten Pestizide und bieten konkret dafür Untersuchungen an. Das Laborsystem gleicht nun die EU-Datenbank dagegen ab, ob die Mittel noch zugelassen sind. Diese Schnittstelle erleichtert auch das Anlegen von entsprechenden Stammdaten, da alle wichtigen Daten direkt aus der Datenbank gelesen werden können.

Die von der EG definierten Höchstmengen werden in mehreren, strukturierten XML-Dateien bereitgestellt. Aus diesen Dateien werden über den Abgleich zwei wichtige Informationen ausgelesen:

- Die Liste der Produktgruppen und der zugehörige, hierarchische Aufbau
- Die Rückstandshöchstmenge je Produkt bzw. Produktgruppe

Der Abgleich kann regelmäßig wiederholt werden, so dass die Datenbank auf dem aktuellen Stand bleibt. Ist die Grundstruktur aber erst einmal angelegt, können auch Änderungen manuell vorgenommen werden.

Grenzwerte und Grenzwertkataloge

Damit das richtige Verständnis bei den Anwendern entsteht, unterscheiden wir zwischen tatsächlichen Soll- und Grenzwerten und sogenannten Grenzwertkatalogen. Die EU-Pestiziddatenbank wird in einen Grenzwertkatalog gewandelt.

Soll- und Grenzwerte definieren kunden- oder produktspezifische Ober- bzw. Untergrenzen, diese sind unabhängig voneinander. Ist der Grenzwert eines Wertes überschritten, hat es keine Auswirkung auf andere Werte. Auch kann der Anwender selbst für seine Untersuchungszwecke andere Höchstgrenzen für bestimmte Mittel vorgeben, als es in der EU-Richtlinie vorgeschrieben ist.

Bei Grenzwertkatalogen ist es wichtig, dass alle enthaltenen Parameter, also nachgewiesene Wirkstoffe gegen den gesamten Katalog abgeglichen werden. Es geht um die Gesamtheit der Rückstände aller Pflanzenschutzmittel für eine entsprechende Einschätzung. Per Knopfdruck prüft eine Logik die Probe gegen alle in der EU-Datenbank definierten und zugelassenen Pflanzenschutzmittel und prüft auf Überschreitungen der Rückstandshöchstmengen.

Dabei ist es egal, ob nur einer oder gleich mehrere Parameter die Grenzen überschreiten. Dem Anwender wird visualisiert, ob die Probe dem Katalog entspricht, also ob keine Verletzungen vorliegen. Diese Information wird im Prüfbericht automatisiert mit ausgegeben.

Messunsicherheiten

Zusätzlich kann die Überprüfung auch Messunsicherheiten berücksichtigen, um die Entscheidung des Laborsystems noch genauer zu bestimmen.

Was wäre zum Beispiel, wenn der ermittelte Gehalt zwar



care

Produktsicherheit und Verbraucherschutz:
Die i-Series Food Safety Analyzer sorgen für die schnelle, empfindliche Untersuchung von Mykotoxinen und antimikrobiellen Substanzen in Rohstoffen und Nahrungsmitteln.

- **Effiziente Schadstoffanalyse mit Probenvorbereitung**
- **Hochsensitive Bestimmung von Mykotoxinen und antimikrobiellen Substanzen gemäß EU-Standards**
- **Schnelle Verarbeitung selbst von großen Datenmengen**
- **Ergebnisse und Berichte sofort verfügbar**

Abgleich einer Probe mit den Pestizid-Datenbank Grenzwerten (Screenshot aus dem LIM-System). Bild: dialog EDV Systementwicklung

Grenzwertkatalog	Ist Validierung aktuell	Validierungszeitpunkt	entspricht dem Katalog	Grenzwertkatalog vollständig	Ergebniserfassung vollständig
GWK_PEST_EU	✓	Mi., 21.04.2021 14:00	Nein		✓

1 Analyse	Ergebnis	Ergebnis Beschreibung	Grenz U	Grenz O	Ergebniswert	Grenzwerteinheit
Pestizide	1-methyl	1-methylcyclopropane		0,01	1,00↑	mg/kg
Pestizide	Imazalil	Imazalil		5	0,53✓	mg/kg
Pestizide	Acequinocyl	Acequinocyl		0,4	0,41↑	mg/kg
Pestizide	Azadirachtin	Azadirachtin		0,5	0,40✓	mg/kg
Pestizide	Amisulbrom	Amisulbrom		0,01	0,01↑	mg/kg

Hierarchische Struktur der Produktgruppen aus der Pestizid-Datenbank (Screenshot aus dem System „diaLIMS“). Bild: dialog EDV Systementwicklung

Name	Kataloghierarchiergruppen	Kataloggrenzwerte	Dokumente	Bemerkung	Status	Zusatz
	Kurzbezeichnung	Beschreibung				
0100000	FRUITS, FRUIT OR FRUITN, TREE FRUIT					
0110000	Citrus fruits					
0120000	Tree nuts					
0130000	Forest fruits					
0130010	Apples: (Crab apples/wild apples, Teguocoles)					
0130020	Pears (Nashi pears/Oriental pears, Wild pears, Ya pears/Chinese white pears.)					
0130030	Quinces (Chinese quinces, Japanese quinces.)					
0130040	Medlars					
0130050	Loquats/Japanese medlars					
0130060	Others					
0140000	Stone fruits					
0150000	Berries and small fruits					
0160000	Miscellaneous fruits with					
0200000	VEGETABLES, FRUIT OR FRUITN					
0200000	PLU SFS					
0400000	OILSEEDS AND OIL FRUITS					
0500000	CEREALS					
0600000	TEAS, COFFEES, HERBAL INFUSIONS, COCOA AND CAROBS					
0700000	HOPS					
0800000	SLICES					
0900000	SUGAR PLANTS					
1000000	PRODUCTS OF ANIMAL ORIGIN - TERRESTRIAL ANIMALS					

innerhalb der von der EU definierten Grenzen liegt, allerdings unter Berücksichtigung der Messunsicherheit der Wert doch außerhalb des erlaubten Bereichs liegen könnte? Das LIMS könnte das ebenfalls mitberücksichtigen und einen entsprechenden Warnhinweis ausgeben. Auch der umgekehrte Fall wird dabei berücksichtigt, dass der Wert zwar außerhalb des zulässigen Bereichs liegt, aber unter Berücksichtigung der Messunsicherheit eventuell gültig sein könnte.

Alles in allem automatisiert diese Funktion den Abgleich mit der Datenbank und nimmt dem Laboranten viel Arbeit ab. Die Beurteilung und Einstufung der Ergebnisse obliegen weiterhin der Fachkraft. Auf Basis der vorliegenden Daten kann das Verfahren jedoch wesentlich beschleunigt werden und entlastet die Anwender von überflüssiger Arbeit und schafft Kapazitäten für andere Aufgaben.

Weitere Anwendungsbereiche

Neben der einfachen Einstufung einer Probe, ob diese den von der EG festgelegten Kriterien entspricht, gibt es noch weitere Anwendungsfälle, die das Abgleichen von Proben gegen Grenzwertkataloge sinnvoll macht. So kann eine Probe gegen die Zuordnungsklassen der LAGA M 20 für die Verwertung von Bodenaushub in technischen Bauwerken abgeglichen werden oder auch gegen die Deponieklassen der Deponie-Verordnung (DepV). Im Unterschied zu den EG-Richtlinien geht

es hierbei um gleich mehrere Kataloge, gegen die validiert wird. Das LIMS kann in diesem Fall direkt eine konkrete Einordnung in eine Klasse vornehmen und visualisieren und strukturiert im Prüfbericht darstellen.

Fazit

Durch die Integration der europäischen Pestizid-datenbank in das LIMS wird das manuelle Nachprüfen in Onlinequellen hinfällig. Der automatische Abgleich ermöglicht Fachpersonal auf einen Blick zu erkennen, ob und wie hoch das untersuchte Produkt belastet ist, und wie es einzustufen ist. Änderungen werden zeitnah eingespielt, so dass das System immer auf dem aktuellen Stand ist und der Anwender mehr Zeit hat für andere Aufgaben.

Generell werden Automatisierungen im Labor immer wichtiger. Dabei geht es nicht darum, Mitarbeiter einzusparen, sondern viel mehr die Mitarbeiter ihren Kompetenzen nach gezielter für die Aufgaben einzusetzen, die nicht automatisiert werden können.

AUTOR

Björn Rudolph

dialog EDV Systementwicklung GmbH, Hannover
 Tel.: 0511/985940-10
 E-Mail: info@dialog-edv.de,
 www.dialog-edv.de