Das Labor der Zukunft

Die Digitalisierung hält auch in der Forschung Einzug. Unser Kunde, das ZEA-3, ist eine Einrichtung des Forschungszentrums Jülich mit dem Schwerpunkt auf Analyse-Dienstleistungen im Bereich der Zusammensetzungsanalyse. Durch den Einsatz verschiedener Methoden, Verfahren und Technologien analysiert das ZEA-3 physische Proben aus der ganzen Welt.

Auf einen Blick

FAIR-Prinzipien

- Findable (Auffindbar)
- Accessible (Zugänglich)
- Interoperable (Interoperabel)
- Reusable (Wiederverwendbar)

Technologie Deep Dive

Das System besteht aus mehreren Docker Microservices. Diese wurden lokal im Forschungszentrum deployed. Die Daten werden in einer PostgreSQL Datenbank verwaltet. Der Großteil des Codes bildet ein Python Backend, während es sich bei der Benutzeranwendung um eine moderne VueJS Webanwendung handelt. Der gesamte Code ist dabei von einer hohen Testabdeckung geprüft. Mindestens 90 Prozent müssen an jeder Stelle des Codes erreicht werden. Das eliminiert frühzeitig potenzielle Fehler und ermöglicht eine Anwendung, welche wissenschaftlichen Standards gerecht wird.

Human-in-the-loop

Die Wissenschaftler führen nur noch wenige Expertenschritte aus und spielen die Endergebnisse wieder in das System ein.

DIE HERAUSFORDERUNG

Komplexe Prozesse und viele Daten

Diese wissenschaftlichen Laborprozesse sind aufwendig und komplex. Damit die Proben analysiert werden können, müssen diese zunächst für die angewandten Verfahren aufbereitet werden. Außerdem haben die Hersteller der einzelnen Laborgeräte spezifische Formatierungen von Datensätzen. Das bringt eine hohe Anzahl an Ergebnissen und Formaten mit sich. Zur einheitlichen Strukturierung werden die Daten daher in Excel-Tabellen übertragen.

DIE ANFORDERUNG

Schritt für Schritt zum vollautonomen Labor

Die aufwendige Verarbeitung und Aufbereitung der Messergebnisse ist zeitintensiv und fehleranfällig. Daher hat sich das ZEA-3 an SIDESTREAM gewandt, um eine automatisierte Lösung zu entwickeln. Das Ziel war, eine umfassende Software zu entwickeln, die es langfristig ermöglicht, den gesamten Untersuchungsablauf vollautonom durchzuführen. Dabei ist es von besonderer Relevanz, dass keine Fehler auftreten.

Komplexe Prozesse, einfache Lösung

Unser Ansatz war es dabei, den Gesamtprozess zu analysieren und wichtige grundlegende Prozessschritte zu identifizieren. Der Fokus unserer Arbeit lag dabei auf der Datenqualität und den FAIR-Prinzipien. Es galt:

- die einzelnen Formate der Analyse-Technologien und Verfahren fehlerfrei auszugeben,
- Messwerte korrekt zu berechnen,
- und wissenschaftliche Standards einzuhalten.

Uns ist es gelungen, die verschiedenen Formate und Ergebnisse übersichtlich in einer Webanwendung aufzubereiten. In Zukunft soll der gesamte Analysevorgang vollautomatisch ablaufen, damit die Wissenschaftler sich auf die Interpretation der Daten konzentrieren können.

„Der moderne Entwicklungsansatz von Sidestream hat mich neugierig gemacht. Nachhaltig überzeugt haben mich die souveräne Kommunikation mit den vielen Stakeholdern im Forschungszentrum und der flexible Umgang mit variierenden Anforderungen im Projektverlauf. Die Software von SIDESTREAM erfüllt unsere wissenschaftlichen Standards und erleichtert unseren Forschungsalltag sehr.“

Dr. Stephan Küppers · Institutsleiter, FZ Jülich