

KfK 4712
Mai 1990

ELAN

Expertensystemgestütztes Informationssystem für die Laboranalytik

H. Orth, G. Zilly
Institut für Datenverarbeitung in der Technik
Projekt Schadstoffbeherrschung in der Umwelt

Kernforschungszentrum Karlsruhe

KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE
Institut für Datenverarbeitung in der Technik
Projekt Schadstoffbeherrschung in der Umwelt

KfK 4712

ELAN
Expertensystemgestütztes Informationssystem für die Laboranalytik

Helmut Orth, Gerd Zilly

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe

Als Manuskript vervielfältigt
Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH
Postfach 3640, 7500 Karlsruhe 1

ISSN 0303-4003

EXPERT SYSTEM SUPPORTED INFORMATION AND MANAGEMENT SYSTEM FOR ANALYTICAL LABORATORIES

Abstract

The demand for high efficiency and short response time calls for the use of computer support in chemico-analytical laboratories.

This is usually achieved by laboratory information and management systems covering the three levels of analytical instrument automation, laboratory operation support and laboratory management.

The management component of the systems implemented up to now suffers from a lack of flexibility as far as unforeseen analytical investigations outside the laboratory routine work are concerned. Another drawback is the lack of adaptability with respect to structural changes in laboratory organization.

It can be eliminated by the application of expert system structures and methods for the implementation of this system level.

The ELAN laboratory information and management system has been developed on the basis of this concept.

Zusammenfassung

Die Forderung nach hoher Effizienz und kurzen Antwortzeiten verlangt die Unterstützung von Computern in chemisch-analytischen Labors.

Dies wird gewöhnlich erreicht durch ein Laborinformations- und Managementsystem, das die Bereiche Laborautomation, Laborbetrieb und Labormanagement abdeckt.

Bei den bisher realisierten Systemen verfügt die Managementkomponente nur über eine eingeschränkte Flexibilität gegenüber Änderungen der Routineanalytik. Ein weiterer Nachteil ist die mangelhafte Adaptierbarkeit in bezug auf Änderungen in der Labororganisation.

Diese Einschränkungen können durch den Einsatz eines Expertensystems weitgehend umgangen werden.

Auf der Basis dieses Konzepts wurde das ELAN-System entwickelt.

ELAN

Expertensystemgestütztes Informationssystem für die Laboranalytik.

ELAN ist ein wissensbasiertes Labor-Steuerungs- und Informationssystem, das alle in einem analytischen Labor anfallenden Probleme planen, steuern und auswerten hilft.

1. Was unterscheidet ELAN von anderen Laborinformationssystemen:

1.1 Herkömmliche Systeme:

In der Regel sind die bisher realisierten Laborinformationssysteme in der Laborbetriebsebene funktional umfassend aufgebaut, verfügen aber nur über eine mehr oder weniger eingeschränkt ausgebildete Labormanagementebene. Systeme ohne diese Dispositionsebene agieren als reine Datenerfassungs- und -verwaltungssysteme und nutzen die Möglichkeiten einer Rechnerunterstützung im Labor nicht voll aus.

1.2 System mit Managementfunktion:

Die Integration einer Managementebene bringt jedoch Probleme mit sich, die bisher nicht zufriedenstellend gelöst werden konnten:

- Labormanagementstrategien sind in der Regel laborspezifisch. Sie sind abhängig von der speziellen Zielsetzung des Labors, von der Laborstruktur und -ausrüstung. Daher lassen sich Labormanagementkomponenten nur mit entsprechend hohem Aufwand laborspezifisch konzipieren und realisieren. Hier besteht ein deutlicher Gegensatz zur Laborbetriebsebene, deren Module sich mit Einschränkungen laborspezifisch modular realisieren lassen und nur laborspezifisch zu strukturieren und zu parametrisieren sind.
- Labormanagement ist, außer bei den wenigen Labors, die wirklich nur Routineanalytik betreiben, stark dynamisch. Durch ein sich wandelndes Auftragspektrum, durch den Einsatz neuer Analyseinstrumente und -methoden und die Einführung neuer Durchführungs- und Sicherheitsrichtlinien ändern sich die Randbedingungen für die Disposition im Labor permanent. Die Strategien der Labormanagementebene müssen daher kontinuierlich angepaßt werden, um neue Anforderungen erfüllen und gewonnene Erfahrungen nutzen zu können.

Dies bedeutet aber in der Praxis permanente Adaption und Änderung der Anwendungsprogramme dieser Ebene und zwingt die Bereitstellung von anwendungsspezifischem Know-How und entsprechender Programmierkapazität während des gesamten Lebenszyklus des Systems. Weiter haben die laufenden Änderungen negative Auswirkungen auf die Qualität der Anwendungssoftware. Diese verliert durch dauernde Modifikation und Erweiterung ihre ursprüngliche Struktur und wird zwangsläufig zunehmend unzuverlässig und unwartbar.

Um die vorgenannten Probleme zu lösen, können die Entscheidungs- und Planungsfunktionen der Labormanagementebene nicht mehr in konventionellen Programmsystemkomponenten abgehandelt werden, sondern sie sind vielmehr als ein Expertensystem in das Laborinformationssystem zu integrieren. In diesem wird das dem Management zugrundeliegende Wissen in einer Wissensbasis gespeichert und verwaltet (siehe Abb. 1).

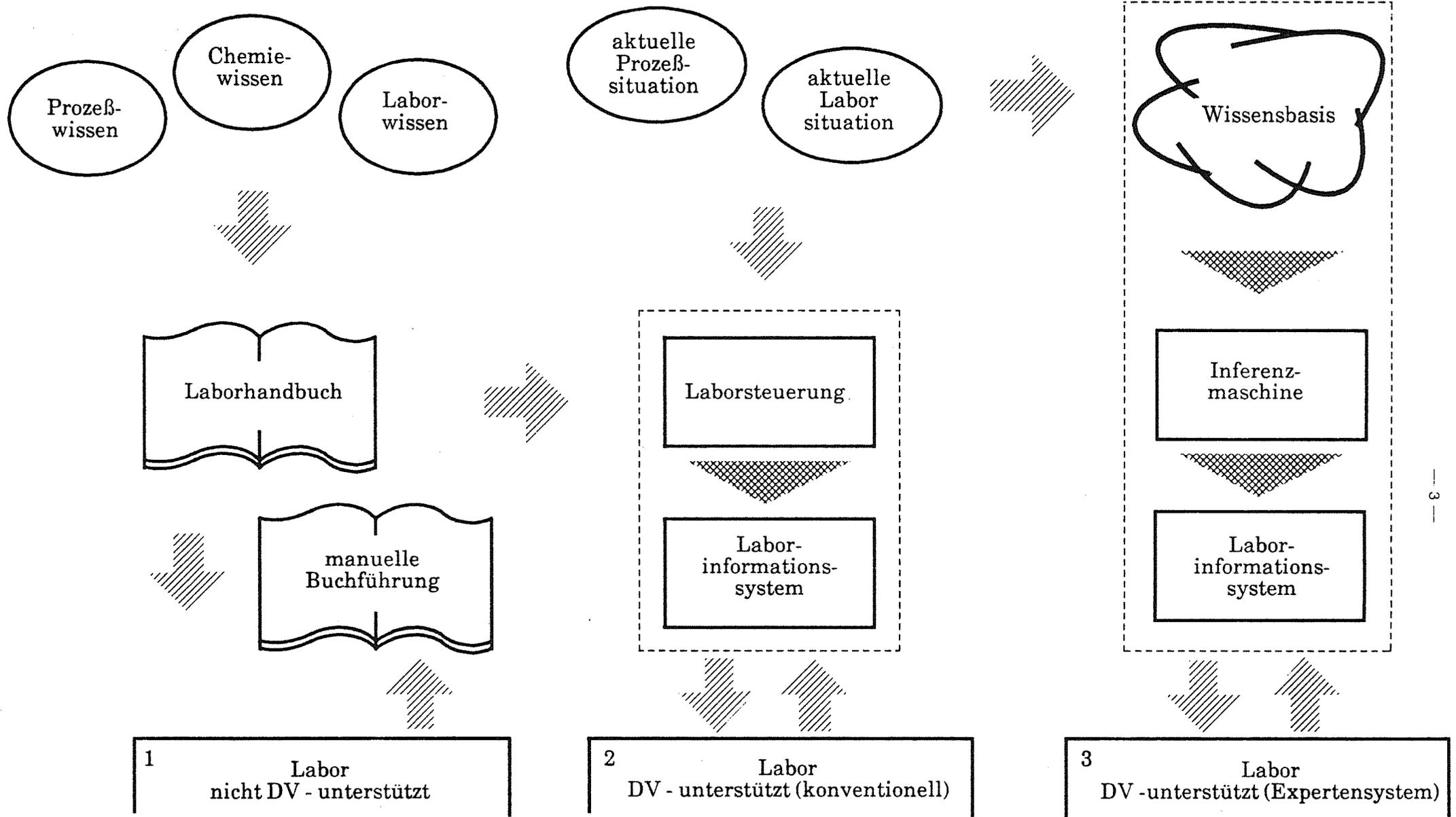


Abb 1: Gegenüberstellung der Organisationsformen

1: Labor nicht DV-unterstützt:

Im nicht-computer-unterstützten Labor basiert die Organisation auf einem standardisierten Schema (oft als Laborhandbuch dokumentiert), das die gesamten Abläufe in der Analytik regelt. Es wurde einmal durch einen Labor/Chemieexperten auf der Basis seines Wissens und seiner Erfahrungen bzgl. Chemie, Labor und Prozeß festgelegt. Standardisierung beinhaltet zwar Vereinfachung, jedoch verbunden mit dem Verlust an Flexibilität und Effizienz. So deckt das Standardschema nur noch die Routinearbeit im Labor ab und alle Ausnahmesituationen erfordern den erneuten Eingriff des Laborexperthen und eine Bearbeitung außerhalb des Standardschemas.

2: Labor DV-unterstützt (konventionell):

In allen bisher konventionell realisierten Laborinformationssystemen ist das Standardschema modelliert und wird als Basis für die Dispositionsfunktionen verwendet. Eine erhöhte Flexibilität können diese Systeme daher nicht bieten.

3: Labor DV-unterstützt (Expertensystem):

Anders verhält es sich bei Expertensystem-unterstützten Systemen. Anstelle des Standardschemas mit seinen inhärenten Nachteilen kann hier das Grundwissen selbst, das ursprünglich zur Erstellung des Schemas herangezogen wurde, als Modell von Labor und Prozeß in das System integriert werden. Dieser Schritt vom „abgeleiteten“ (Oberflächen-) Wissen zurück zum „primären“ (Grund-) Wissen befähigt das System Dispositionsentscheidungen auf derselben WissensEbene wie der Labor/Prozeßexperte zu treffen und das heißt mit derselben Flexibilität gegenüber Nicht-Routineanforderungen.

1.3 Problemlösung für LIMS mit Managementebene:

Die Lösung ergab folgende Programmsystemkomponenten:

- System:

Einbettung des Softwaresystems in die Hardware- und Softwareumgebung, dazu gehören z.B.: Zugriffsmechanismen, Schnittstellen zu anderen Softwaresystemen wie: Prozessinformationssystem oder Laborqualitätskontrolle und Schnittstellen zu Laborautomaten.

- Laborbetrieb

Erfüllt die Analysendurchführung mit der Probenahme, sowie die Ermittlung von Analyseergebnissen und Zwischenergebnissen und meldet Störungen

- Problemlösung

Führt die gesamte Labordisposition und Ergebnisprüfung durch und erzeugt die Steuerungsvorgaben für die Module der Laborbetriebskomponente.

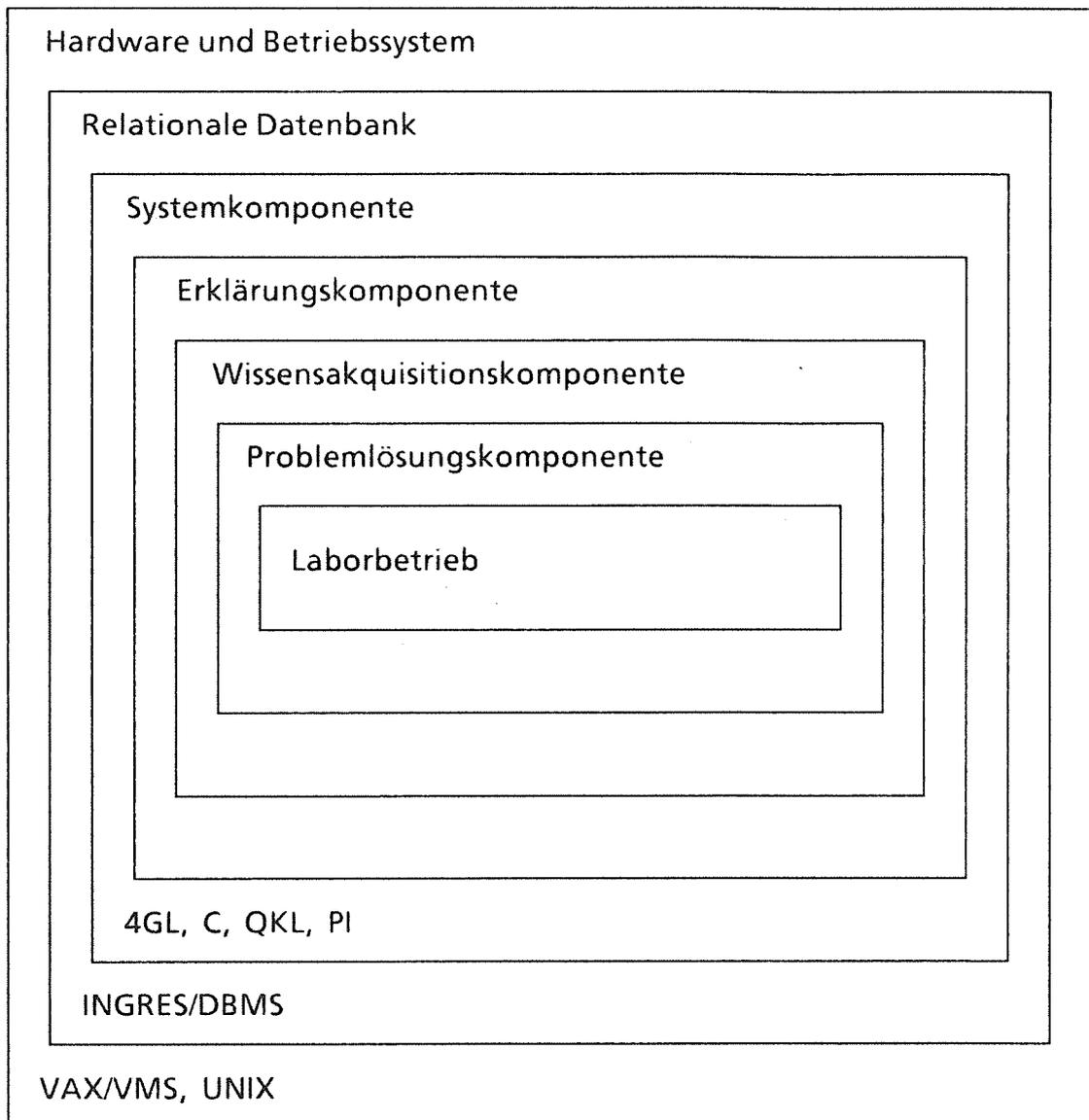
- Wissensakquisition

Aktualisiert und modifiziert Wissen in der Wissensbasis, ohne daß bei dem Systemaufbau oder der Systempflege Modifikationen der sonstigen Komponenten notwendig werden.

- Erklärung

Ermöglicht dem Anwender die Schritte des jeweiligen Problemlösungsprozesses nachzuvollziehen und zu kontrollieren.

Das ELAN-Modell



4GL = Programmiersprache der vierten Generation,

QKL = Qualitätskontrolle des Labors,

PI = Prozessinformationssystem

2. Aufbau von ELAN:

Im rechnergestützten Laborinformationssystem lassen sich drei Schichten abgrenzen:

- Laborautomatisierungsebene

umfaßt vorrangig gerätebezogene Funktionen, die im allgemeinen mikroprozessorgesteuert und für die Schnittstellen vom System bereitgestellt sind.

Dieses Tätigkeitsfeld ist dem Systemmanager zugeordnet.

- Laborbetriebsebene

umfaßt die Funktionen:

- Auftragserteilung,
- Probenahme,
- Arbeitsplatzverwaltung,
- Ergebniserfassung, -ermittlung, -quittierung,
- Störungsanzeige u.ä.

Diese Tätigkeit ist in der Regel dem Laboranten zugeordnet. Es sind prozedurale Funktionen, die sich an den Abläufen im Labor orientieren.

- Labormanagementebene

umfaßt die Funktionen:

- Methodenauswahl,
- Personal- und Gerätedisposition,
- Arbeitsplatzdisposition,
- Ergebnisprüfung u.ä.

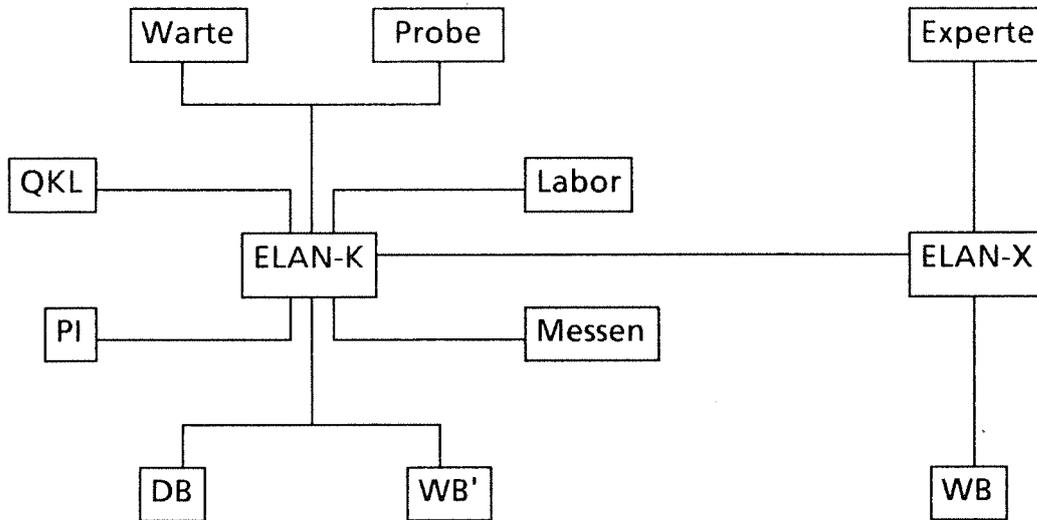
Es sind dies die Entscheidungs- und Dispositionsfunktionen, die im Labor normalerweise in den Kompetenzbereich des Schichtleiters fallen.

Der Aufbau von ELAN ist in einem Hybridsystem realisiert und besteht aus folgenden Modulen:

- ELAN-K, konventionelles System mit Managementkomponente, die sich auf Routineanalytik beschränkt
Laborautomatisierungsebene und Laborbetriebsebene
- ELAN-X, Expertensystem
Labormanagementsystem

Diese Organisationsform erlaubt, daß beide Systeme unabhängig voneinander arbeiten können, d.h.: in der Einführungsphase kann zuerst das konventionelle

System aufgebaut und betrieben werden. Ist die erste Phase abgeschlossen, übernimmt in einer zweiten Phase das Expertensystem die Managementebene.



DB = Datenbank,

QKL = Qualitätskontrolle,

WB, WB' = Wissensbasis,

PI = Prozessinformationssystem

3. Die wichtigsten Eigenschaften von ELAN

Die wichtigsten Eigenschaften von ELAN lassen sich wie folgt beschreiben:

- Flexible Anpassung von ELAN an ein bestehendes Labor und eine bestehende Labororganisation.
- Anpassungsfähigkeit an strukturelle Änderungen der Labororganisation bei Einführung neuer analytischer Instrumente und Methoden.
- Flexibilität gegenüber unvorhergesehenen analytischen Aufträgen außerhalb der Routineanalytik.
- Einfache Bedieneroberfläche, die in Abhängigkeit von Systemzugangsberechtigungen, Analysenvorschriften, Gerätebestückung des Arbeitsplatzes, der aktuellen Situation des Arbeitsplatzes, dem Gefahrengrad des zu untersuchenden Materials, gesteuert wird.
- Weitestgehende Rechner- und Betriebssystemunabhängigkeit des Systems, da das Gesamtsystem auf der relational verteilten Datenbank INGRES unter Einsatz der 4GL OSL/SQL realisiert ist. Module, die nicht unter SQL realisierbar waren, sind in 3GL PASCAL oder C verfügbar. INGRES ist auf allen gängigen Rechnermodellen verfügbar.
- Einsatz eines Expertensystems in der Managementkomponente.

4. Die Auftragsabwicklung

Die gesamte Auftragsabwicklung läßt sich in die Phasen:

- Auftragserteilung

die Warte erteilt den Auftrag und enthält Angaben über:

- Probenahmeort,
- gewünschte Analysenart,
- gewünschte Bestimmungsgrößen,
- die Priorität des Auftrages

- Ableitung der Analysenmethoden,

die Ableitung erfolgt aus:

- der Kenntnis über den chemischen Prozess des Probenahmeortes,
- der Kenntnis des aktuellen Prozesszustandes,
- den angeforderten Bestimmungsgrößen,
- den zu erwartenden Konzentrationen und Meßbereichen

- Ermittlung von Probenvolumina und Probenahme,

das Volumen ergibt sich aus dem Wissen der abgeleiteten Analysenmethoden

- Arbeitsplatzdisposition mit der Steuerung des Analysenablaufes auf den jeweiligen Arbeitsplätzen,

der Bestimmungsauftrag wird in Abhängigkeit von:

- Analysevorschriften,
- Gerätebestückung des Arbeitsplatzes,
- der aktuellen Situation des Arbeitsplatzes,
- dem Gefahrengrad des zu untersuchenden Materials

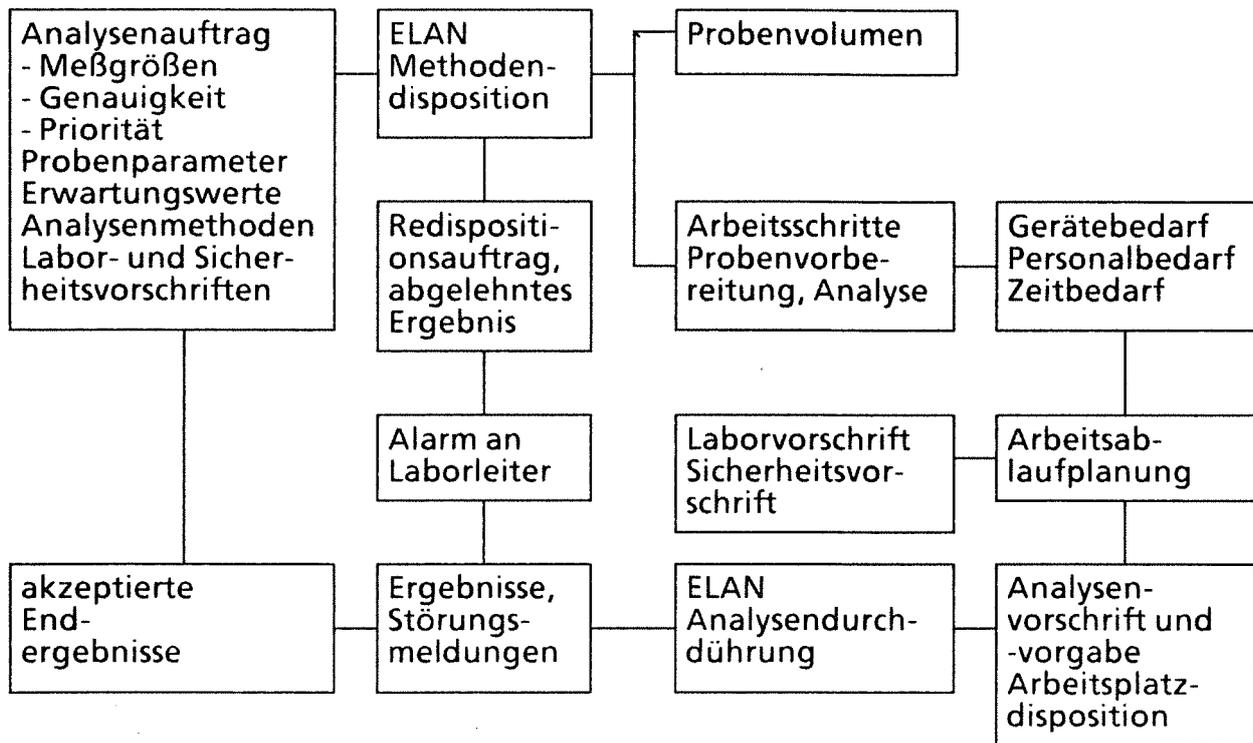
gemäß der Auftragspriorität in die jeweilige Warteschlange des ermittelten Arbeitsplatzes eingereiht.

- Ergebnisermittlung, Verdichtung und Rückführung der Ergebnisse in die Wissensbasis

die einzelnen Ergebnisse je Arbeitsplatz werden gemäß den Analysevorschriften ermittelt, entsprechend dem zugrunde liegenden Auftrag zusammengestellt und an die Laborleitung weitergeleitet. Die Laborleitung prüft den Auftrag, leitet den Auftrag an den Auftraggeber weiter, bei Fehlern oder Steuerungen Neudispositionen von Arbeitsschritten einleiten oder den gesamten Auftrag stornieren.

unterteilen.

Disposition im ELAN - System:



Das System ELAN wurde in Zusammenarbeit mit dem Kernforschungszentrum Karlsruhe, Abteilung IDT und der Firma EPOS GmbH für die Wiederaufarbeitungsanlage (WAK) in Karlsruhe konzipiert und entwickelt (Abb. 2).

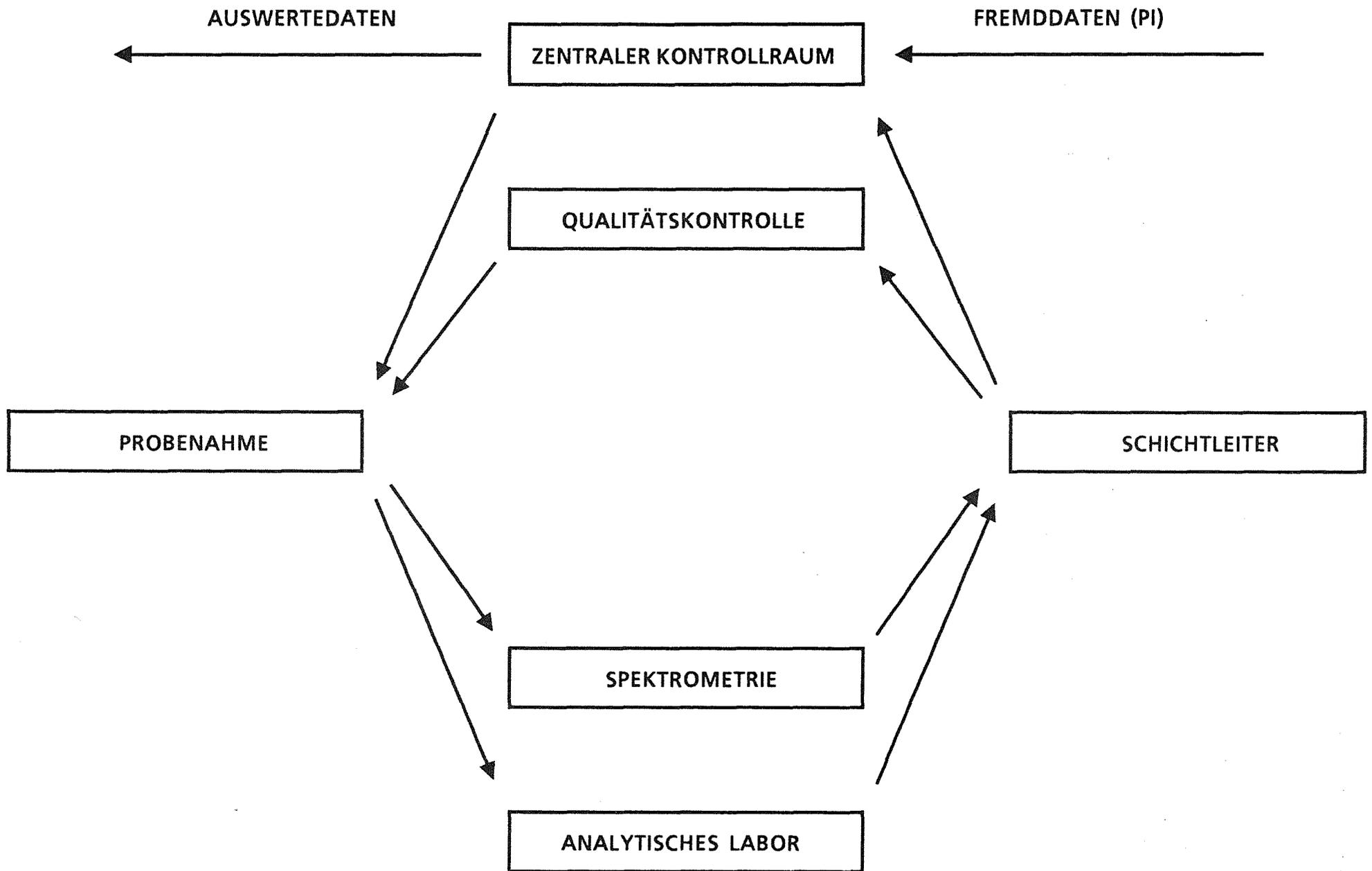


Abb. 2: Laborschema WAK