

digitales lab

viel luft nach oben — Karin Hollricher

Digitale Technologien können die Produktivität steigern und somit zur Nachhaltigkeit beitragen, auch im Labor. Die Zeit ist reif für intelligentes Labormanagement – in der Theorie. Wie sieht die Realität aus?

Ist das nicht eigenartig? Man bedient das Laborradio über Bluetooth mit dem Smartphone, aber die Feinwaage, die Zentrifuge oder die PCR-Maschine muss man händisch einstellen. Obwohl die Digitalisierung fast jeden Lebensbereich erreicht und verändert, scheint das Internet of Things (IoT) in vielen Laboren noch nicht angekommen zu sein. Da notiert man Angaben zu Experimenten gerne auf einem Schmierzettel, Ergebnisse schreibt man ins Laborbuch. Lediglich prozessindustrielle Anwendungen und F&E-Hochdurchsatzlabore sind weitgehend digitalisiert. Warum eigentlich?

Letzten Endes hat das mit Fördermitteln, Personalpolitik und den Aufgaben, die das Labor erfüllen soll, zu tun. Richtet man ein Forschungslabor neu ein, kann man, die finanziellen Mittel dafür vorausgesetzt, eine Digitalisierung der experimentellen Daten und die Vernetzung der Geräte mit einplanen. Das wäre ein Greenfield-Projekt. Dieser Begriff stammt aus der Software-Entwicklung und steht für „Neustart“. Forschungslabore und Serviceeinrichtungen, die Genom-, Transkriptom-, Proteom- oder Metabolom-Daten in großen Mengen generieren, sind typische Greenfield-Projekte. Die Realität der meisten universitären Forschungslabore heißt allerdings Brownfield – bei solchen Projekten werden Änderungen im Bestand vorgenommen. Als diese Labore eingerichtet wurden, waren das Internet of Things und ein Labor 4.0 noch keine Themen; die Geräte sind in der Regel zu

alt, als dass sie zur digitalen Kommunikation befähigt wären. Das zu ändern, ist nicht trivial, wie hier später im Text noch zu lesen sein wird.

Auf lange Sicht kommt man an einer Digitalisierung nicht vorbei, denn Labore sind Datenfabriken, auch wenn die Doktorandin nur 96 PCRs am Tag macht, der Masterand nur zwei DNA-Elektrophoresen laufen lässt. Aber wie soll man einsteigen? Dafür gibt es kein Patentrezept. Wichtig ist auf jeden Fall, sich darüber klar zu werden, welche Daten man speichern will, welche Geräte und Werkzeuge man benutzt, inwieweit diese bereits digital vernetzbar sind, in welchem Zeitrahmen man die Digitalisierung umsetzen will und – natürlich! – wie viel Geld zur Verfügung steht.

Zum Einstieg ein ELN

Ein vergleichsweise einfacher und preiswerter Start ist mit einem Electronic Lab Notebook (ELN) möglich. Jedenfalls theoretisch. In der Praxis gestaltet sich auch das nicht unbedingt als einfach, wie Michael Franke, Bereichsleiter Collections der Max Planck Digital Library, berichtet. „Die Max-Planck-Gesellschaft hat vor sechs Jahren ein elektronisches Laborbuch lizenziert. Aktuell arbeiten 30 unserer 86 Institute damit.“ Warum sind es nicht mehr Institute? „Unsere Forschenden haben sehr unterschiedliche Arbeitsabläufe, die sich mit einem Typ ELN nicht alle abbilden lassen. An der Software, die wir lizenziert haben, bemängeln etwa die Chemiker, sie könn-

ten nicht ausreichend Zusatzinformationen ablegen. Die Physiker wollen mehr und komplexe Geräte ansteuern, als mit diesem ELN machbar ist. Manche Forschende sehen auch rechtliche Probleme hinsichtlich der Dokumentation; sie drucken die digital gespeicherte Information nochmals aus. Das ist natürlich unsinnig.“

Die Durchführung und das Ergebnis eines Experiments digital zu dokumentieren, ist ein Gebot der Stunde. Denn: „Das Kladdenwesen ist einfach grotten-schlecht“, stellte Ulrich Dirnagl, Leiter der Abteilung Experimentelle Neurologie an der Berliner Charité, schon vor Jahren fest [1]. „Die Daten sind nicht recherchierbar, Dokumentationssicherheit ist nicht gewährleistet und nach zehn Jahren weiß doch keiner mehr, wo erstens die Dinger liegen und zweitens, wie man die Aufzeichnungen interpretieren soll.“ Manuelle Aufzeichnungen sind hochgradig fehleranfällig. Mitunter lassen sich im analogen Laborbuch die handschriftlichen Notizen nicht einmal zweifelsfrei entziffern. In einem ELN dagegen kann man Daten mit Bildern verknüpfen, nach Stichwort und Datum suchen. Allerdings ist dafür etwas Selbstdisziplin nötig: Für Ordnung muss man auch in einer digitalen Kladder selber sorgen.

Elektronisch gespeicherte Forschungsdaten könnten nicht nur der Arbeitsgruppe, sondern der gesamten Wissenschaftlergemeinschaft zur Verfügung gestellt werden. Das würde eine Überprüfung von Ergebnissen erleichtern

or?

01

Laborgeräte müssen standardisiert werden, damit sie miteinander kommunizieren können.

02

Das elektronische Laborbuch hilft, Experimente übersichtlicher zu dokumentieren, zu standardisieren und im Sinne der FAIR-Prinzipien zu speichern.

03

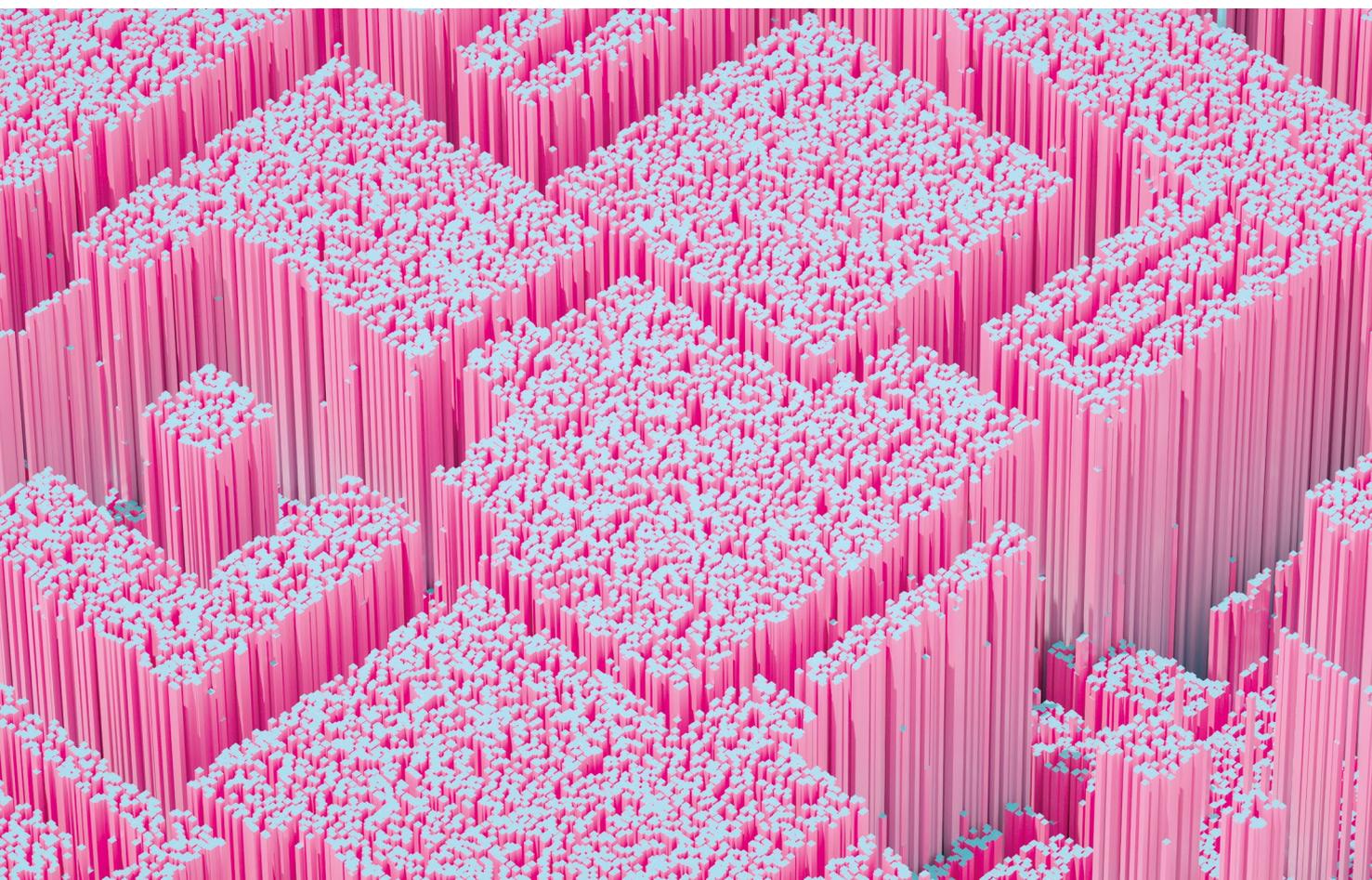
Labor-Informations-Management-Systeme können wiederkehrende Aufgaben im Laboralltag automatisiert abwickeln.

und die Standardisierung der Versuchsdurchführung unterstützen. „Es ist dringend notwendig, die Infrastruktur zur Verwaltung und Bereitstellung wissenschaftlicher Daten zu verbessern“, postulierten Forschende vom Zentrum für Pflanzenbiotechnologie und Genomik der Universität Madrid und 52 Gleichgesinnte [2]. Sie entwickelten deshalb die **FAIR-**

Prinzipien, wonach Daten **F**indable, **A**ccessible, **I**nteroperable und **R**eusable gespeichert werden sollten. Mit der digitalen Archivierung kann man diese Vorgaben erfüllen.

Größere Plattformen mit mehr Optionen als ELNs sind Labor-Informations-Management-Systeme (LIMS). Ein LIMS ist eine Software, die sämtliche Prozesse

im Labor in einer zentralen Datenbank abbildet, die Steuerung von Routineaufgaben automatisiert und den Arbeitsablauf insgesamt effizienter macht. Dies ist natürlich in erster Linie für Labore mit hohem Durchsatz und strukturierten Arbeitsabläufen interessant. Zahlreiche Firmen bieten solche Software-Systeme an. Ein LIMS sollte allerdings nicht nur die





... Pumpen,
Thermostate,
Sensoren,
Pipettierroboter,
Rührgeräte,
pH-Meter und
Plattenleser
**kommunizieren
miteinander ...**

bestehenden Prozesse abbilden, sondern auch zukünftige Aufgaben integrieren können. „Die Weiterentwicklung eines LIMS ist selbst eine Wissenschaft, die sehr stark vom Austausch zwischen den Kunden und den LIMS-Projektleitern lebt“, meint Mark Schneider von der Firma ACC Infotray AG in Winterthur (Schweiz): Ein solcher Firmenkunde ist beispielsweise ein medizinisches Labor, das wegen Corona seine PCR-Aufträge innerhalb kurzer Zeit von 500 auf 100.000 pro Woche hochschrauben musste. „Das war ein gigantischer logistischer Aufwand, der ohne ein LIMS, das die gesamte Auftragsabwicklung begleitet, nicht möglich gewesen wäre. Manpower alleine hätte nicht ausgereicht“, so Schneider.

Skripten statt klonieren

Wie es läuft, wenn der Markt keine passende und erschwingliche Software bietet, darüber kann Lukas Bromig von der Technischen Universität München

berichten. Vor knapp drei Jahren begann er im Rahmen des BMBF-Projekts „Digitalisierung in der Industriellen Biotechnologie“ [3] seine Promotion am Lehrstuhl für Bioverfahrenstechnik. Ziel des Projekts ist es, Entwicklungszyklen neuer Bioprozesse durch Digitalisierung und Automatisierung zu beschleunigen. Dafür braucht man Geräte, die sich digital in Echtzeit steuern lassen. Bromig: „Aber am Institut gab es nur Goldene Käfige.“ Darunter versteht man, dass die Software vom Hersteller nur genau für ein Gerät geschrieben wurde und nicht direkt kompatibel mit der Software anderer Geräte ist. Also begann der Chemieingenieur seine Promotion nicht damit, Bakterien zu transformieren und Proteine zu isolieren, sondern Software zu entwickeln. Und zwar solche, die alle für den Bioprozess notwendigen Instrumente wie Pumpen, Thermostate, Sensoren, Pipettierroboter, Rührgeräte, pH-Meter und Plattenleser integrieren kann und sie miteinander kommunizieren lässt.

Bromig skriptete und programmierte mindestens eineinhalb Jahre lang. Dafür kann er nun seine Experimente in Echtzeit am Handy steuern. „Wir haben einen automatisierten Bioprozess vom Milliliter in den Litermaßstab hochskaliert“, so Bromig. „Außerdem haben wir ein Reaktorsystem mit eigener Software so umfunktioniert, dass man es über mehrere Tage mit anderen Geräten automatisch betreiben und die Daten der involvierten Geräte in Echtzeit über eine Webapplikation abrufen kann. Dank der standardisierten Schnittstellen können einzelne Teilgeräte schnell ausgetauscht und der ganze Aufbau neu konfiguriert werden.“

Doch wenn Bromig in Kürze das Institut verlässt, fehlt dort sein Knowhow. Bromig: „Stimmt, dann gibt es nur noch eine Person am Institut, die die Software kennt und gegebenenfalls auch anpassen kann. Software muss verstanden und gepflegt werden und es gibt in Ermangelung langfristiger Stellen derzeit keine guten Lösungen, womit man dieses Wissen an den Instituten halten könnte.“ Er plädiert für mehr Interdisziplinarität in der Lehre. „Man könnte IT in den Lehrplan der Biotechnologen und Chemieingenieure aufnehmen. Das würde den Einstieg in die Digitalisierung eines Labors vereinfachen. Ich kann heute in wenigen Stunden Laborgeräte integrieren, während ein Anfänger dafür viele Wochen braucht. Wenn es dann darum geht, einheitlich Daten aufzuzeichnen oder Experimente zu steuern, wird es richtig komplex. Die komplette digitale Infrastruktur muss erst einmal aufgebaut werden. Es wird sehr viel manuelle und zeitaufwendige Arbeit einfach akzeptiert, weil die wirtschaftliche Hürde, sie zu automatisieren, noch sehr hoch ist. Ich sehe hier großes Verbesserungspotenzial.“ Darum will sich Bromig nach seiner Promotion in dieser Nische selbstständig machen.

Keine Schnittstellen

Was der Computer- und Mobilgerätee Welt die USB-Stecker und Gerätetreiber sind, das fehlt im Labor. „Die meisten neuen Geräte sind zwar digitalisiert, aber wenig standardisiert. Man muss Informatiker oder IT-affine Spezialisten beschäftigen, wenn man diese Geräte miteinander vernetzen will. Denn die Hersteller verwenden proprietäre Software, die es nicht erlaubt, Analysen und Daten zentralisiert zu steuern und zu prozessieren,“ erklärt Daniel Juchli. Er ist Experte für die Digitalisierung von Laboren und Chief Technical Officer (CTO) bei der Non-Profit-Organisation SiLA, die Kommunikationsprotokolle entwickelt.

Die am weitesten entwickelten Standardschnittstellen für Laborgeräte sind SiLA (Standardization in Lab Automa-

tion) und AnIML (Analytical Information Markup Language). SiLA ist ein Protokoll für die Kommunikation zwischen Laborgeräten, AnIML ermöglicht die herstellerübergreifende Ablage von Analysedaten. Beide Schnittstellen stehen weltweit als Open-Source-Systeme zur Verfügung. Ein dritter Standard für Laborgeräte namens LADS (Laboratory and Analytical Device Standard) befindet sich auf Initiative des Deutschen Industrieverbands für Optik, Photonik, Analysen- und Medizintechnik Spectaris noch in der frühen Entstehungsphase.

Doch der Druck auf die Laborgeräteanbieter steigt. Juchli: „Ich sehe immer mehr Ausschreibungen, bei denen verlangt wird, dass das gesuchte Gerät eine Standard-Schnittstelle hat und Daten im FAIR-Format liefert.“ Außer-

dem sind etliche Smart-Lab-Projekte am Start, die dokumentieren, was möglich ist. Am Institut für Energie- und Umwelttechnik (IUTA) entsteht beispielsweise das FutureLab. NRW, ein digitalisiertes Modelllabor für miniaturisierte Analytik. Auf der Online-Veranstaltung smartLAB connects wurde letztes Jahr das Connectivity Space Berlin vorgestellt. Dessen Betreiber, die Firma Labforward, beschreibt das Projekt auf seiner Webseite so: „In der zweiten Jahreshälfte wollten wir ein voll funktionsfähiges Smart-Lab in unserem Büro aufbauen, in nur einer Woche!“ Es gelang.

Man kann also hoffen, dass sich in – hoffentlich nicht allzu ferner – Zukunft die Forschenden mittels Gerätevernetzung, Automatisierung und Datenverarbeitung die Alltagsarbeit erleichtern können. —

VACUUBRAND®

PC 3001 VARIO select

- Niedriger Energieverbrauch
- Effiziente Lösemittelrückgewinnung
- Kurze Prozesszeiten

www.vacuubrand.com



Energieeffizienter Chemie-Pumpstand