

Ziel:

- Integrierter unterbrechungsfreier Betrieb eines automatisierten Labortisches im verteilten System

Teilprojekte:

- Grafische Erstellung beliebiger Laborabläufe inkl. Datenbearbeitung und Datenspeicherung, Proben-, Reagenzien- und Gefäßhandling sowie Geräteansteuerung
- Scheduling für unterschiedliche parallele Proben mit unterschiedlichen Arbeitsabläufen
- Unterstützung von Ad-Hoc-Analysen und Labortischinteraktionen durch dynamisches Re-Scheduling
- Optimierung des gesamten Analysendurchsatzes oder prioritätsgesteuerte Optimierung der Durchlaufzeiten einzelner Analysen
- Optimierung der Bahnplanung von Robotern und beweglichen Geräten mit Kollisionserkennung und -verhinderung
- Laborleitstand für Monitoring und Simulation mit generischen Geräten
- Unterstützung des unterbrechungsfreien 24-Stundenbetriebes inkl. dynamischem Hinzufügen und Suspendieren von Geräten über das „System Capability Dataset (SCD)“
- Regelbasierte Ereignis- und Fehlerbehandlung mit grafischer Regeldefinition, Faktenkonditionierung und Simulation



Hochschultage
31.03.-01.04.2000

Fachhochschule
Wiesbaden

Studierende aus dem Projektbereich „Wiesbadener Computerintegriertes Labor (WICIL)“:
Markus Anders, Oliver Borchert, Sven Gohmann, Arne Marschall, Andreas Necknig, Christian Piotrowski, Thorsten Richter, Thomas Tauber, Eva-Lane Teig

Projektbetreuer: Prof. Dr. Reinhold Schäfer

Wiesbadener Computer- integriertes Labor WICIL

Das Wiesbadener Computerintegrierte Labor (WICIL) wurde 1989 zur Entwicklung von Methoden zur Steuerung eines vollautomatischen chemisch-analytischen Labors eingerichtet. Zwischenzeitlich wurde die Software in 24 Diplom- und ca. 30 Projektarbeiten in den unterschiedlichsten Disziplinen entwick-

kelt (Datenbanken, Künstl. Intelligenz, Laborautomation, Prozesssteuerung, Grafische Datenverarbeitung, verteilte Systeme, Robotic usw). Hier soll ein knapper Überblick über das Gesamtsystem und dessen Funktionalitäten gegeben werden. Detailliertere Flyer liegen zu den meisten Komponenten vor.

Grafische Erstellung von Arbeitsabläufen mit REGULUS

Arbeitsabläufe dienen im Labor dazu, einem Mitarbeiter - insbesondere im Routinefall -, Anweisungen für die exakte Schrittfolge einer Serie von Arbeitsschritten zu geben. Auch im hier vorliegenden Fall eines automatisierten Labors setzen sie sich aus Aktionen auf Geräten inkl. Steuerung der Gerätefunktionen und dem Übertragen von Ergebnisdaten zusammen. Ausserdem können Sensoren innerhalb eines Arbeitsablaufs ausgelesen und Aktoren bedient werden. Ergebnisdaten müssen verrechnet und gespeichert werden. Als Operatoren stehen Abfragen und Schleifen zur Verfügung.

Während der Erstellung des Arbeitsablaufs als Ablaufplan, können von Regulus mit speziellen Dialogen gezielt Parameter vom Benutzer erfragt werden. Die mit Bildern versehenen Rechtecksymbole (Service Units) repräsentieren Geräte, Sensoren, Aktoren, Formelprozessoren, Speicheroperatoren sowie Quellen und Senken von Proben, Material

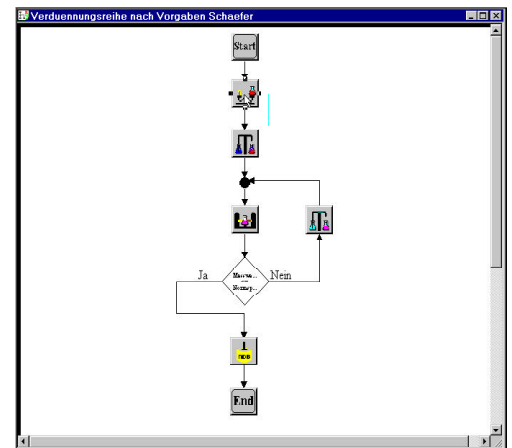


Abbildung 1: REGULUS Oberfläche

und Behältern. In Service Units können Variablen definiert und verarbeitet werden. Schließlich vervollständigen diverse Konfigurationsdialoge, die mit einem Maskeneditor erstellt und eingebunden werden, die Palette der Regulus-Funktionalitäten.

Optimierendes Scheduling und Re-Scheduling

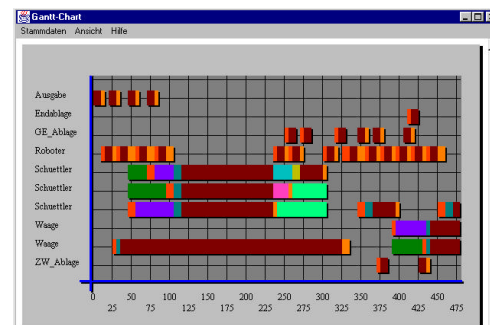


Abbildung 2: Scheduler Gantt Chart

In der Vorschriftenverwaltung werden neben den Abläufen auch die Steuerparameter für der einzelnen Aktivitäten erfasst. Hierzu gehören u.a. deren Rüstzeit, Dauer und der zeitliche Randbedingungen zur Folgeaktivität (Abbildung 3).

Der Schedulingsoftware fällt nun die Aufgabe zu - je nach vorgewählter Optimierungsart -, die einzelnen Aktivitäten so auf die benötigten Ressourcen zu verteilen, dass entweder der Durchsatz der Analysen möglichst hoch wird oder die Einzelanalysen möglichst schnell bearbeitet werden.

Beim Scheduling müssen diverse chemische Randbedingungen beachtet werden. So dürfen insbesondere Aktivitäten mit wohldefiniertem Zeitverhalten, z.B. Inkubationen, nicht unterbrochen werden, da sonst die Analysenergebnisse verfälscht oder gar die Proben unbrauchbar werden.

Abbildung 3: Regulus Scheduling Parametereingabe

Wesentliche Zeitersparnisse können erreicht werden, wenn die Eigenschaft von Mehrpositionsinstrumenten genutzt werden kann. So wird es z.B. möglich, Proben mit unterschiedlichen Bearbeitungszeiten gleichzeitig auf einem Schüttler zu bearbeiten.

Im Falle eines Fehlers auf dem Labortisch - u.a. durch Ausfall eines Instrumentes - oder der Einschubes einer Ad-Hoc-Probe in den Arbeitsablauf, errechnet der Scheduler einen neuen optimalen Plan unter Berücksichti-



gung der noch in Bearbeitung befindlichen Proben sowie der Rechenzeit für den Plan. Dabei muss ausserdem sichergestellt werden, dass aktuell auf einem Gerät befindliche Proben möglichst problemlos weiterbearbeitet werden.

Zur Kontrolle können die Plandaten des Scheduler mittels Gantt-Chart visualisiert werden (Abbildung 2). Im Normalfall werden die errechneten Pläne an den Executor weitergereicht, der sie gerätespezifisch im verteilten System ausführt.

Der Scheduler greift auf die Beschreibung der Geräte und weiterer Ressourcen auf das

System Capability Dataset (SCD) zu. Weiterhin muss er notwendige vorbeugende Wartungszeiten mit einplanen, um einem Systemausfall vorzubeugen. In diesem Fall muss auf gleichartige Geräte ausgewichen werden oder entsprechende Proben werden geparkt. Die Wartungsproblematik ist allerdings heute noch nicht verfügbar.

Der Scheduler steht mit einem noch zu realisierenden Bahnplanungsmodul in Verbindung, das Kollisionen mit stationären und beweglichen Hindernissen im voraus erkennen und einen alternativen Polygonzug für den eingesetzten Roboter errechnen soll.

**Einblick
Durchblick
Weitblick**

Geräteansteuerung, Rohdaten- und Ergebnisbearbeitung

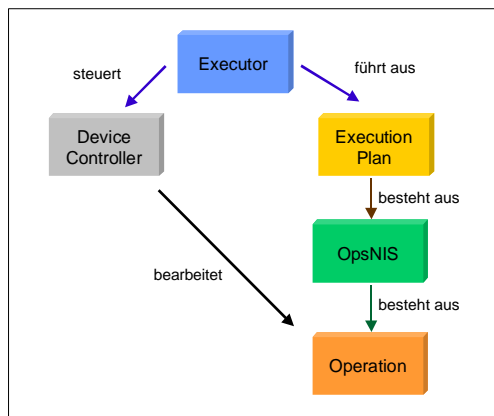


Abbildung 4: Geräteansteuerung

Die Ansteuerung der Geräte wird durch den Executor vorgenommen, der als Eingabe vom Scheduler den Execution Plan erhält (Abbildung 4). Dieser fasst zeitbezogen die auf den einzelnen Geräten durchzuführenden nicht-unterbrechbaren Sequenzen (OpsNIS) und Aktivitäten zusammen. Als wichtige Funktion fällt dem Executor die exakte Terminierung der Aktivitäten und die gerätebezogene Überwachung der Zeitvorgaben zu. Wird eine Zeitvorgabe nicht eingehalten, muss der Executor dies dem System mitteilen, so dass jede betroffene Komponente entsprechend reagieren kann.

Prinzipiell ist die WICIL Controlling Architecture (WCA) so ausgelegt, dass nur im äussersten Notfall das System angehalten werden muss. Vorhersehbare Ausnahmezustände sollen automatisiert behoben werden, mit dem Ziel möglichst keine Proben unbrauchbar zu machen oder Rohdaten oder Ergebnisse zu verlieren (siehe dazu das Modul GENIUS).

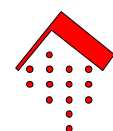
Die Ansteuerung der Geräte erfolgt über CORBA. Dadurch kann u.a. erreicht werden, dass auch Geräte an anderen Rechnern als

dem Executor-Rechner zum Betrieb des Labortisches einbezogen werden können.

Die Geräte werden nach einem einheitlichen Mechanismus angesteuert, der weitgehend an den ASTM-Standard LECIS (Laboratory Equipment Communication Interface Standard, ASTM E1989-98) angelehnt ist. Zu jedem Zeitpunkt befindet sich ein Gerät in einem wohl definierten Zustand (Abbildung 5), von dem aus nur bestimmte Übergänge in andere Zustände erlaubt sind (Pfeile in der Abbildung).

Nach dem Einschalten und Initialisieren läuft das Gerät in einen Wartezustand (IDLE), aus dem heraus der nächste Befehl im Execution Plan ausgeführt werden kann. Die für ein bestimmtes Gerät verfügbaren Befehle wurden bereits bei der Erstellung der Vorschrift für den aktuellen Probenotyp aus dem System Capability Dataset (SCD) entnommen und in den Workflow eingefügt. Jetzt werden sie zur Ausführung gebracht.

Neben den „normalen“ Befehlen gibt es Ausnahmebehandlungen. So können aus allen grün unterlegten Zuständen das Pausieren und ein Shutdown eingeleitet werden. Aus allen Zuständen (gelb unterlegt und ERROR) kann ein Nothalt (ESTOP) erfolgen, aus dem jedoch nur manuell wieder angefahren werden kann.



**Hochschultage
31.03.-01.04.2000
Fachhochschule
Wiesbaden**

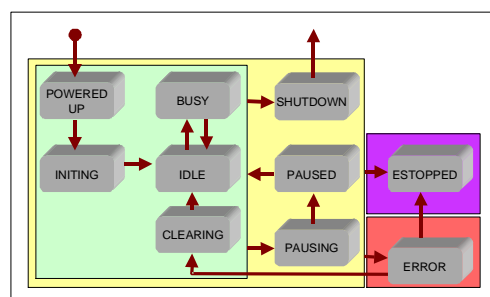


Abbildung 5: Zustandsmodell eines Gerätes

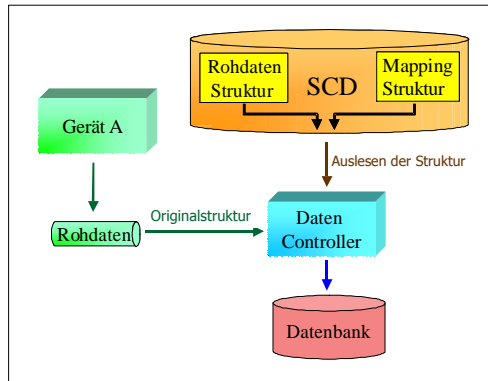


Abbildung 6: Datenhandling

Eine wichtige Funktion nimmt das Bearbeiten der Roh- und Ergebnisdaten ein. Da in der WCA beliebige Geräte unterstützt werden, muss sichergestellt sein, dass auch beliebige Datenströme aus Analyseautomaten gelesen, verarbeitet und gespeichert werden können. Während für Speicherung und den Austausch spektroskopischer Daten die Standards ANDI und JCAMP-DX vorliegen,

sind die Ausgabeprotokolle der Geräte nicht standardisiert. Analyseautomaten mit komplexer Funktionalität produzieren u. U. viele Ergebnisse in einer sehr vielfältigen, teilweise hierarchischen Struktur. Hierfür werden Metadaten für die Struktur und Konvertierung der Roh- und Ergebnisdaten sowie deren Datenbank-Zieladressen in einem Konfigurationsschritt im System Capability Dataset hinterlegt. Der zugehörige Konfigurationsschritt muss natürlich ohne Systemunterbrechung und möglichst automatisiert vollzogen werden.

Im Messbetrieb (Abbildung 6) wird die Originalstruktur der Daten übernommen und im Daten-Controller unter zu Hilfenahme der Rohdaten und Mappingstrukturen aus dem SCD verarbeitet und in der Roh-/Ergebnisdatenbank gespeichert. Dort greifen alle weiteren Prüfungen und Auswertungen an. Fehlerhafte Datenströme müssen vor der Speicherung möglichst korrigiert oder wiederholt werden.

Automatisierte Behandlung von Ereignissen und Ausnahmeständen (GENIUS)

Ausnahmestände werden normalerweise hart kodiert im Programmcode hinterlegt werden. Geräte können bei mitgelieferten Steuer- und Auswerteprogrammen die Fehlerbehandlung „mitbringen“. Ausnahmebehandlungen, die von der Interaktion zwischen Labortischkomponenten veranlasst werden, sind nicht fest programmierbar, weil die vorliegende Controlling Architecture dynamisch konfigurierbare Systeme erlaubt. Die Ausnahmesituationen werden durch Events repräsentiert, die allen registrierten Systemkomponenten zur Verfügung stehen. Kombinationen von Events bilden Regeln, die „feuern“, so fern alle notwendigen Fakten am Eingang erfüllt sind. Beliebige Systemfunktionalitäten, die Events produzieren, können mit dem WICIL-Paket GENIUS bearbeitet werden.

Die Regeln werden grafisch erstellt (Abbildung 7). Mehrere Events können zu Fakten zusammen gefasst, mit Zeitbedingungen ver-

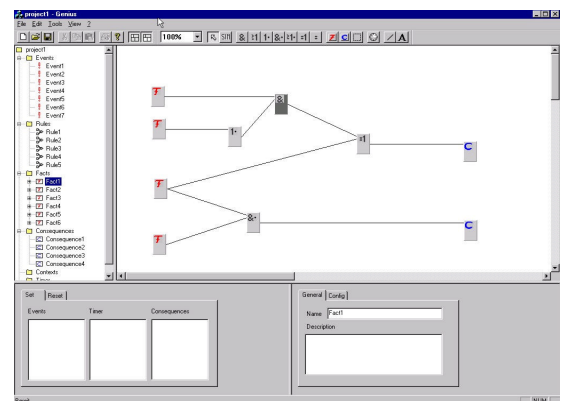


Abbildung 7: Grafische Definition von Regeln in GENIUS

sehen und über boolesche Operatoren verknüpft werden. Die Fakten können durch Events oder Konsequenzen zurück gesetzt werden. Die Konsequenzen sind ebenfalls Events, mit denen u.a. Funktionen gestartet, Dialoge angestoßen werden können. Somit können z.B. im Fehlerfall geeignete Maßnahmen angestoßen werden.

Kontakt:



Prof. Dr. Reinhold Schäfer
Fachhochschule Wiesbaden, Fachbereich 06 - Informatik, WICIL
Kurt-Schumacher-Ring 18, 65197 Wiesbaden
Tel. 0611-9495-201, Fax 0611-9495-210
Email: schaefer@informatik.fh-wiesbaden.de