

# Künstliche Intelligenz im Labor

Aktuelle Entwicklung, Anwendungsbeispiele,  
Potenziale und Ausblick

Eine Gemeinschaftspublikation von



Messe München



**SPECTARIS**

Deutscher Industrieverband für Optik,  
Photonik, Analysen- und Medizintechnik

Download der  
Publikation:



1. Auflage | Berlin/München | April 2024

### **Herausgeber**

SPECTARIS – Deutscher Industrieverband  
für Optik, Photonik, Analysen- und Medizintechnik e.V.  
Werderscher Markt 15  
10117 Berlin  
Fon +49 (0)30 41 40 21-0  
Fax +49 (0)30 41 40 21-33  
info@spectaris.de  
www.spectaris.de

Messe München GmbH  
Messegelände  
81823 München  
Fon +49 89 949-20720  
Fax +49 89 949-20729  
info@messe-muenchen.de  
www.messe-muenchen.de

### **Idee, Konzept, Redaktion**

Mike Bähren | SPECTARIS e. V.

### **Layout und Design**

GDE | Kommunikation gestalten | www.gde.de

### **Bildnachweis**

Adobe Stock: Titel, Seiten 15, 17, 19 (KI generiert),  
27, 43, Rückseite  
Seite 25 oben: Generiert mit DALL-E  
Seite 32: Generiert mit DALL-E und ergänzt mit SIRIUS  
Screenshot  
Seite 33 rechts oben: Franziska Hufsky  
Seite 33 Mitte: Rostichep auf Pixabay

Die Bilder der KI-Anwendungsbeispiele wurden, sofern nicht anders angegeben, von den jeweiligen Firmen zur Verfügung gestellt.

### **Haftungsausschluss**

Die Informationen, Daten und Berechnungen dieser Publikation wurden mit größter Sorgfalt erstellt. Sie basieren auf den Angaben der in der Studie genannten Institutionen, Firmen und weiteren Quellen. Für die Richtigkeit, Vollständigkeit und Aktualität dieser Angaben können die an der Erstellung der Studie beteiligten Herausgeber und Kooperationspartner, die Messe München GmbH und SPECTARIS e.V. (im folgenden „Projektpartner“ genannt), aber keine Gewähr übernehmen. Eine Überprüfung der tatsächlichen Rechteinhaberschaft und der damit verbundenen Verwertungsrechte der in der Studie genannten Institutionen und Firmen erfolgte durch die Projektpartner nicht. Eine Gewähr und eine hiermit möglicherweise verbundene Haftung werden durch die Projektpartner insoweit nicht übernommen. Sollten durch die Studie dennoch Rechte Dritter verletzt worden sein, so geschah dies ohne Kenntnis und ohne Absicht der Projektpartner. Im Falle der Kenntniserlangung solcher Verstöße werden diese durch die Projektpartner nach entsprechender Rücksprache mit der jeweiligen Firma oder dem jeweiligen Institut zukünftig aus der Studie entfernt. Für den Inhalt von Gastbeiträgen, Interviews und Firmenbeiträgen bzw. Produktbeispielen ist trotz sorgfältiger Prüfung der jeweilige Verfasser bzw. Interviewpartner verantwortlich. Die Inhalte von Gastbeiträgen, Interviews und Firmenbeiträgen bzw. Produktbeispielen spiegeln nicht zwangsläufig die Meinung der Projektpartner wider.

### **Unerlaubte Vervielfältigung der Studie**

Die Vervielfältigung der Studie (ganz oder in Auszügen) und die Verwendung der in der Studie enthaltenen Bilder ist nur mit ausdrücklicher Genehmigung der Herausgeber bzw. der Inhaber der jeweiligen Bildrechte erlaubt. Die Veröffentlichung von Ergebnissen mit Quellenangabe ist zulässig.

# Inhalt

---

## VORWORT DER HERAUSGEBER

### Das Labor der Zukunft wird zur Realität

Jörg Mayer // Geschäftsführer SPECTARIS

4

### Gemeinsam das Labor der Zukunft gestalten

Dr. Reinhard Pfeiffer // Geschäftsführer Messe München

5

---

## EXECUTIVE SUMMARY

6

## KÜNSTLICHE INTELLIGENZ IM LABOR: WO STEHEN WIR?

10

Interview mit Alexander Brendel, infoteam Software AG

10

---

## CRASHKURS KÜNSTLICHE INTELLIGENZ

14

## GASTBEITRAG

16

### Schnittstellen und vernetzte Geräte als Grundlage für Künstliche Intelligenz im Labor,

Kai Kress, 2mag AG

16

---

## ANWENDUNGSBEISPIELE KÜNSTLICHER INTELLIGENZ IM LABOR

18

### Smarte Hilfe bei der Zellkultur – KI in der Mikroskopie, ZEISS

20

### Mit künstlicher Intelligenz zur perfekten Temperatur, LAUDA /Hochschule Aalen

22

### Datenmanagement-Plattform mit KI-gestütztem Digitalen Assistenten,

LabV Intelligent Solutions GmbH

24

### KI-gestützte Qualitätskontrolle für DNA- und RNA-Oligonukleotidsynthese,

infoteam Software AG

26

### KI-Plattform für die integrierte Diagnostik – Order Entry und Diagnoseunterstützung der nächsten Generation, medicalvalues GmbH

28

### Smarte Roboterzelle für automatisiertes Probenhandling, robominds GmbH

30

### Verborgene Moleküle – mit maschinellem Lernen Schadstoffe und Wirkstoffe aufklären,

Bright Giant GmbH

32

### KI-Lösung zur Integration von Arzneimitteldesign, -synthese und -beschaffung, MERCK

34

### Vereinfachung des Laboralltags mit KI-Chats im LIMS, qualitype GmbH

36

---

## GASTBEITRAG

38

### Der AI-Act – der Rechtsrahmen für den Einsatz von KI in Europa, Oliver Böhle, SPECTARIS

38

---

## ÜBER UNS

40

### Profile der Herausgeber

40

# Digital, vernetzt und von Künstlicher Intelligenz unterstützt: Das Labor der Zukunft wird zur Realität

Jörg Mayer | Geschäftsführer des Deutschen Industrieverbandes SPECTARIS

Als vor fast 10 Jahren in unserem Fachverband Analysen-, Bio- und Labortechnik die Notwendigkeit einer standardisierten Datenschnittstelle erkannt wurde, um die Potenziale der zunehmenden Digitalisierung im Labor erschließen zu können, wurde auch schon über die Möglichkeiten Künstlicher Intelligenz (KI) diskutiert. Die rasante Entwicklung, die seit dieser Zeit stattgefunden hat, und der aktuelle KI-Hype, ausgelöst durch ChatGPT, waren seinerzeit aber nur schwer vorstellbar. Heute gibt es mit LADS eine ausgereifte Schnittstelle und aus der KI-Fiktion ist Realität geworden.

Diese Publikation zeigt anhand spannender Beispiele, welche KI-unterstützten Lösungen für das Labor es bereits gibt und an welchen Projekten geforscht wird. Dazu zählen etwa Lösungen zur KI-gestützten Diagnostik, Qualitätskontrolle und Arzneimittelsynthese, zur Zustandsüberwachung von Temperiergeräten, ein KI-gestütztes Datenmanagement oder Probenhandling oder die Vereinfachung des Laboralltags mittels einer KI-Chat-Funktion in einem Laborinformationssystem (LIMS).

Die Effizienz- und anderen Vorteile sind enorm: Forschende, Mitarbeitende und ärztliches Fachpersonal werden entlastet, Forschungsarbeiten und Innovationen beschleunigt, Qualitätskontrollen werden effizienter, Diagnosen genauer. Im Mittelpunkt steht dabei immer der Mensch, der von

Künstlicher Intelligenz unterstützt, aber nicht durch diese ersetzt wird. Gesellschaftliche, faktenbasierte und sachlich geführte Debatten über Künstliche Intelligenz sind in diesem Zusammenhang richtig und wichtig.

Immer noch stehen wir am Anfang einer Transformation, deren Ende nicht abzusehen ist. Die Hersteller von Analysen-, Bio- und Labortechnik stehen dieser Entwicklung positiv gegenüber: 82 Prozent der Befragten einer SPECTARIS-Umfrage sehen eher die Potenziale und Chancen als die Risiken und Nachteile Künstlicher Intelligenz.

Wir von SPECTARIS freuen uns darauf, den Unternehmen bei dieser Reise in die Zukunft mit Rat und Tat zur Seite zu stehen.



JÖRG MAYER

Geschäftsführer des Deutschen Industrieverbandes SPECTARIS



SPECTARIS

Deutscher Industrieverband für Optik, Photonik, Analysen- und Medizintechnik

# Gemeinsam das Labor der Zukunft gestalten

Dr. Reinhard Pfeiffer | CEO Messe München

Die Künstliche Intelligenz (KI) revolutioniert derzeit unseren Alltag und unsere Arbeitswelt in rasendem Tempo. Auch im Laborumfeld eröffnet die Integration von KI ein breites Spektrum an Möglichkeiten, um die Effizienz zu steigern, die Ergebnissenauigkeit zu verbessern und neue, innovative Lösungen zu schaffen. KI unterstützt schon heute Wissenschaftler und Labormitarbeiter dabei, komplexe Datenmengen automatisiert und schneller zu analysieren, Muster zu erkennen und genauere Vorhersagen zu treffen. Durch maschinelles Lernen können KI-gestützte Algorithmen auf der Datenbasis aus Experimenten und Simulationen komplexe Muster erkennen, Hypothesen bilden und so schneller neue Erkenntnisse gewinnen. Dies beschleunigt den Forschungsprozess und Analysemethoden erheblich und führt zu effizienteren Ergebnissen. Darüber hinaus ermöglicht KI eine präzisere Steuerung von Laborgeräten und Robotern bei Routineaufgaben, was den Arbeitsaufwand reduziert und den Forschenden mehr Zeit für kreative und strategische Aufgaben lässt.

So groß das Interesse und die Begeisterung für die Möglichkeiten der Digitalisierung und der KI sind, so groß ist auch das Bedürfnis, sich intensiv über die Chancen, aber auch die Herausforderungen zu informieren und mit Branchenexperten und anderen Anwendern darüber zu diskutieren. Für diesen Dialog sind Messen die idealen Plattformen, denn hier treffen wegweisende Ideen auf zukunftsweisende Technologien. Für die Laborbranche ist die *analytica* der

weltweit führende Branchentreffpunkt, der alle zwei Jahre internationale Experten aus Wissenschaft und Industrie in München zusammenbringt, um Wissen, Ideen und Erfahrungen auszutauschen. Künstliche Intelligenz spielt dabei eine wichtige Rolle, sowohl im Ausstellungsbereich als auch in Best-Practice-Vorträgen, im Konferenzprogramm und in einer Sonderschau, bei der Besucher live erleben können, wie die Arbeit im intelligenten Labor der Zukunft konkret aussieht. Eine solche Vernetzung aller Akteure – von Forschern über Technologieanbieter bis hin zu Entscheidern – wie auf der *analytica* ist essenziell, um die Potenziale, die KI für die Laborwelt bietet, voll auszuschöpfen, die Herausforderungen zu diskutieren und so gemeinsam eine zukunftsweisende Entwicklung zu gestalten und voranzubringen.



DR. REINHARD PFEIFFER

Geschäftsführer / CEO  
Messe München GmbH



Messe München

# Künstliche Intelligenz im Labor: Quo vadis?



MIKE BÄHREN

Leiter Betriebs-,  
Volkswirtschaft  
und Marktforschung  
bei SPECTARIS

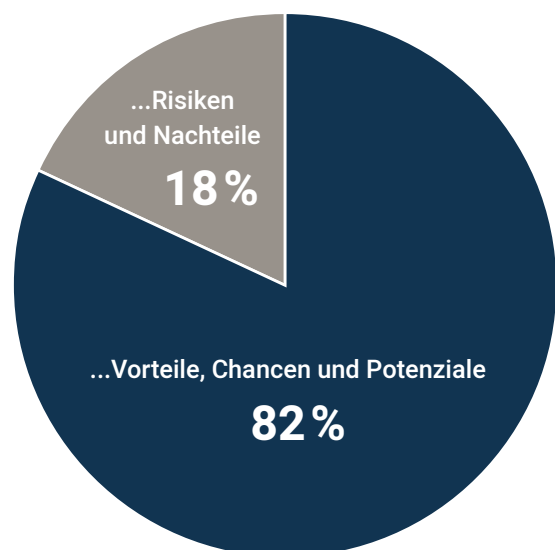
ChatGPT wird in der öffentlichen Debatte vielfach als „Weckruf“ für die Vorteile und Potenziale, aber auch für die Nachteile und Befürchtungen des durch Künstliche Intelligenz (KI) ausgelösten Wandels gesehen. Das Bild trägt etwas, zumindest in der Analysen-, Bio- und Labortechnik. Verschlafen wurde die Entwicklung von KI-Lösungen für den Laborbereich keineswegs. Viele Akteure, darunter Gerätehersteller, wissenschaftliche Institute, Softwareunternehmen und Anwender, haben sich in den letzten Jahren intensiv diesem spannenden Forschungsgebiet gewidmet und sind jetzt in der Lage, Ergebnisse zu präsentieren, die zeigen, wie tiefgreifend die transformative Kraft von KI im Labor bereits heute ist und welches Potenzial noch erwartet werden kann.

Ein kleiner Ausschnitt dieser Lösungen wird in dieser Publikation anhand von konkreten Beispielen ausführlicher dargestellt, so etwa Lösungen zur KI-gestützten Diagnostik, Qualitätskontrolle, Arzneimittelsynthese oder Zustandsüberwachung von Temperiergeräten sowie zum KI-gestützten Datenmanagement oder Probenhandling (siehe Seite 18 ff.). Die Lösungen zeigen, dass Künstliche Intelligenz ein Hebel sein kann, um Forschende oder ärztliches Personal zu entlasten, Effizienzgewinne zu realisieren, den medizinischen Nutzen zu erhöhen und den wissenschaftlichen Fortschritt zu beschleunigen. Und sie zeigen, dass sie unterstützen, nicht ersetzen – ohne den Menschen geht es nicht.

Dementsprechend bewerten die Hersteller von Analysen-, Bio-, Labortechnik das Thema Künstliche Intelligenz im Labor, ausgehend von einer aktuellen SPECTARIS-Umfrage, auch mehrheitlich positiv: 82 Prozent der Befragten sehen eher die Vorteile, Chancen und Potenziale dieser Technologie, 18 Prozent die Risiken und Nachteile. Eine nichtrepräsentative Kundenbefragung des Unternehmens Starlab zeigt bei den Anwendern im Labor eine ähnliche Tendenz: 67 Prozent sehen KI als Chance, 33 Prozent als Risiko.<sup>1</sup>

Die Herstellerbefragung von SPECTARIS zeigt: Vorteile und Chancen werden vor allem in einer verbesserten Datenanalyse und zusätzlichen Funktionalitäten sowie der Möglichkeit gesehen, neue Geschäftsmodelle zu entwickeln und sich vom Wettbewerb zu unterscheiden. Als mögliches Risiko wird eingestuft, dass größere Unternehmen beim Thema KI Wettbewerbsvorteile haben könnten. Daneben werden die Themen Datenschutz und fehlende IT-Fachkräfte oder Programmierer als bedeutsame Herausforderungen eingestuft.

**Bei der Künstlichen Intelligenz im Labor überwiegen die...**



Quelle: SPECTARIS-Umfrage bei den Herstellern von Analysen-, Bio- und Labortechnik 3/2024

<sup>1</sup> Quelle: KI im Labor: Aussichten und Ängste, Christian Lüttmann, LABOR PRAXIS, 3/2024

**Bewertung möglicher Chancen, Potenziale, Risiken und Nachteile von Künstlicher Intelligenz im Labor  
(Einschätzung der Hersteller von Analysen-, Bio- und Labortechnik SPECTARIS-Umfrage 3/2024)**

Chancen und Potenziale	Mittelwert auf einer Skala von 1 = keine Relevanz bis 5 = höchste Relevanz
Verbesserte Datenanalyse	3,9
Mehr Funktionalitäten	3,8
Neue Geschäftsmodelle	3,7
Differenzierung vom Wettbewerb	3,7
Verbesserte Gerätenutzung/-effizienz	3,6
Beschleunigung von Forschung und Innovationen in Biowissenschaften	3,5
Diagnostik: Höherer Patientennutzen	3,5
Verbesserter Service	3,4
Entlastung Forschende/Mitarbeitende im Labor	3,4
Größeres Kundenpotenzial	3,4
Qualitätskontrolle: Höhere Sicherheit in der Produktion/für Verbraucher	3,3
Erhöhung Kundenbindung	3,2

Risiken und Nachteile	Mittelwert auf einer Skala von 1 = keine Relevanz bis 5 = höchste Relevanz
Wettbewerbsvorteile für größere Unternehmen	3,9
Datenschutzrisiken	3,9
Fehlende IT-Fachkräfte/ Programmierende	3,8
Verschärfung der Wettbewerbsintensität	3,7
Herausforderung Datenschnittstelle	3,7
Software dominiert Gerätetechnik	3,6
Neue Player im Markt	3,6
Verfügbarkeit von/Zugang zu Entwicklungs-/Kooperationspartnern	3,4
KI-Wettrennen, auch dort, wo kein Mehrwert	3,4
Steigendes Sicherheitsrisiko durch Automatisierung ohne menschliche Kontrolle	3,1
Geräte werden austauschbarer	3,0
Verlust von Arbeitsplätzen/ KI ersetzt den Menschen	2,9

Die Herausforderungen beim Thema Datenschutz werden von den Herstellern als sehr hoch eingestuft. Das Thema ist komplex und viele rechtliche Fallstricke sind zu beachten. Auch auf der politischen EU-Ebene sieht man bei diesem

Thema großen Handlungsbedarf. Das zeigt das intensive Ringen um eine EU-einheitliche Regelung, die nun in Form des sogenannten AI-Acts in Kraft treten wird (siehe Gastbeitrag auf Seite 38 ff.).

Auch die Künstliche Intelligenz soll an dieser Stelle zu Wort kommen. Befragt man ChatGPT zu den Anwendungsbereichen Künstlicher Intelligenz im Labor, werden folgende Bereiche zutreffend beschrieben:

**Beschleunigung der Datenanalyse:** Einer der wichtigsten Beiträge der KI in der Laborforschung ist ihre Fähigkeit, die Datenanalyse zu beschleunigen. In Laboratorien fallen bei Experimenten riesige Datenmengen an, die von genomischen Sequenzen bis hin zu spektroskopischen Messwerten reichen. Herkömmliche Methoden der Datenanalyse können zeitaufwendig und anfällig für menschliche Fehler sein. KI-gestützte Algorithmen können jedoch komplexe Datensätze mit bisher unerreichter Geschwindigkeit und Genauigkeit analysieren. Algorithmen des maschinellen Lernens können zum Beispiel Muster, Korrelationen und Anomalien in Datensätzen erkennen, so dass Forscher effizienter aussagekräftige Erkenntnisse gewinnen können.

**Verbesserte Versuchsplanung:** Die KI verändert auch den Prozess der Versuchsplanung in den Labors. Die Planung von Experimenten, die aussagekräftige Ergebnisse liefern und dabei möglichst wenig Ressourcen und Zeit in Anspruch nehmen, ist eine anspruchsvolle Aufgabe. KI-Algorithmen können Versuchsparameter optimieren, indem sie vorhandene Daten analysieren, Ergebnisse vorhersagen und die vielversprechendsten Wege für die Forschung identifizieren. Diese Fähigkeit strafft nicht nur den Versuchsprozess, sondern erhöht auch die Erfolgswahrscheinlichkeit beim Erreichen der Forschungsziele.

**Prädiktive Modellierung und Arzneimittelentdeckung:** Im Bereich der pharmazeutischen Forschung revolutioniert die KI die Entdeckung von Medikamenten durch prädiktive Modellierung. Durch die Analyse umfangreicher Datenbanken mit chemischen Verbindungen können KI-Algorithmen die biologische Aktivität potenzieller Wirkstoffkandidaten vorhersagen und so den Prozess der Arzneimittelentdeckung erheblich beschleunigen. Darüber hinaus können KI-gesteuerte virtuelle Screening-Verfahren vielversprechende Arzneimittelkandidaten effizienter identifizieren als herkömmliche Methoden, wodurch sich der Zeit- und Kostenaufwand für die Markteinführung neuer Medikamente verringern lässt.

**Automatisierung und Robotik:** Automatisierung und Robotik sind seit langem ein fester Bestandteil der

Arbeitsabläufe im Labor, aber die KI hebt diese Fähigkeiten auf ein neues Niveau. KI-gesteuerte Robotersysteme können eine Vielzahl von Aufgaben im Labor übernehmen, von der Probenvorbereitung bis zum Hochdurchsatz-Screening. Diese Systeme steigern nicht nur die Effizienz und den Durchsatz, sondern verbessern auch die Reproduzierbarkeit und Genauigkeit, insbesondere bei sich wiederholenden Aufgaben, bei denen menschliche Fehler ein Problem darstellen.

**Personalisierte Medizin und Präzisionsdiagnostik:** Im Labor können KI-Algorithmen Patientendaten, einschließlich genomischer Sequenzen, Biomarker-Profile und klinischer Aufzeichnungen, analysieren, um optimale Behandlungsstrategien zu ermitteln und die Ergebnisse der Patienten vorherzusagen. Durch die Integration von KI-gestützter Diagnostik mit Labortestverfahren können Kliniker fundiertere Entscheidungen über die Patientenversorgung treffen, was zu besseren Behandlungsergebnissen und geringeren Kosten im Gesundheitswesen führt. KI-gestützte Diagnosetools können auch die Entwicklung neuer Biomarker und therapeutischer Ziele beschleunigen und so Innovationen in der Präzisionsmedizin vorantreiben.

Quelle: ChatGPT zu Künstlicher Intelligenz im Labor (Auszug), 3/2024

Damit diese Anwendungen Realität werden konnten oder noch werden – viele Entwicklungen stehen noch am Anfang – bedarf es allerdings etlicher Voraussetzungen, die in einem Interview in dieser Publikation anhand eines Fünf-Stufen-Modells beschrieben werden (siehe Seite 9 ff.).

Der erste Punkt, die Datenerfassung, also die Digitalisierung und Vernetzung, ist alles andere als banal und eine unabdingbare Basis für KI-Lösungen. Dabei spielen Schnittstellen eine sehr wichtige Rolle, denn ohne Datenschnittstellen gibt es keine Vernetzung. Mit dem von SPECTARIS initiierten und von vielen tatkräftigen Firmen entwickelten LADS-Standard ist nun eine solche geräteübergreifende Schnittstelle verfügbar (siehe Gastbeitrag auf S. 16).

In der nachfolgenden Liste werden beispielhaft KI-Lösungen für den Laborbereich genannt, die es bereits heute gibt oder an denen zurzeit geforscht wird. Schaut man sich das breite Spektrum an Lösungen und Anwendungsbereichen an, wird erkennbar, welches Potenzial diese Technologie mit sich bringt. Es wird aber auch deutlich, dass bei aller Goldgräberstimmung ein verantwortungsvoller Umgang mit Künstlicher Intelligenz unverzichtbar ist.



**KI-Lösungen im Labor: Anwendungsbeispiele und Forschungsprojekte** (Auswahl, ohne Anspruch auf Vollständigkeit)

Anbieter/Projektpartner	Beschreibung	Seite	Website
Agilent Technologies, Inc.	KI-gestützte Peakerkennung und -integration während des Datenanalyseprozesses für Phthalate und TDCPP bei der Verwendung von Single-Quadrupol-GC/MS		<a href="https://www.agilent.com/en/product/software-informatics/mass-spectrometry-software/data-analysis/ai-peak-integration-for-masshunter">https://www.agilent.com/en/product/software-informatics/mass-spectrometry-software/data-analysis/ai-peak-integration-for-masshunter</a>
<b>i</b> Bright Giant GmbH	Verborgene Moleküle – mit maschinellem Lernen Schadstoffe und Wirkstoffe aufklären	<b>32</b>	<a href="https://bright-giant.com/">https://bright-giant.com/</a>
Capgemini Invent/Boehringer Ingelheim	KI-basierte Analytik in der Pharmaindustrie		<a href="https://www.capgemini.com/de-de/news/kundenprojekte/ai-based-analytics-unlocks-data-driven-insights-for-boehringer-ingelheim/">https://www.capgemini.com/de-de/news/kundenprojekte/ai-based-analytics-unlocks-data-driven-insights-for-boehringer-ingelheim/</a>
elunic AG	KI-basierte Qualitätssicherung in der Pharmaindustrie		<a href="https://www.elunic.com/de/showcase/qualitaetskontrolle-pharmaindustrie/">https://www.elunic.com/de/showcase/qualitaetskontrolle-pharmaindustrie/</a>
<b>i</b> infoteam Software AG (Schweiz)	KI-gestützte Qualitätskontrolle für DNA- und RNA-Oligonukleotidsynthese	<b>26</b>	<a href="http://www.infoteam.de">www.infoteam.de</a>
KI-Lab des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz, nukleare Sicherheit und Verbraucherschutz (BMUV)	Entwicklung von Technologien und Methoden zur KI-gestützten Verwertung von Datenbeständen in der Umweltverwaltung		<a href="https://www.bmuv.de/pressemitteilung/labor-fuer-kuenstliche-intelligenz-und-big-data-am-umweltbundesamt-gestartet">https://www.bmuv.de/pressemitteilung/labor-fuer-kuenstliche-intelligenz-und-big-data-am-umweltbundesamt-gestartet</a>
<b>i</b> LabV Intelligent Solutions GmbH	Datenmanagement-Plattform mit KI-gestütztem Digitalen Assistenten	<b>24</b>	<a href="http://www.labv.io">www.labv.io</a>
Landeswasserversorgung BW, Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften, Technische Universität München/Lehrstuhl für Analytische Chemie, TZW/DVGW-Technologiezentrum Wasser	Künstliche und kollektive Intelligenz zum Spurenstoff-Tracking in Oberflächenwasser für eine nachhaltige Trinkwassergewinnung		<a href="https://www.k2i-tracker.de/">https://www.k2i-tracker.de/</a>
<b>i</b> LAUDA DR. R. WOBSEER GMBH & CO. KG/Institut für Antriebstechnik (IAA) der Hochschule Aalen (InvestBW-Projekt)	Mit künstlicher Intelligenz zur perfekten Temperatur	<b>22</b>	<a href="http://www.hs-aalen.de/de/news/5004">www.hs-aalen.de/de/news/5004</a>
Leistungszentrum »Sichere intelligente Systeme« (LZSiS)	Entwicklung einer KI-gestützten IR-Spektroskopie-Anwendung zur Untersuchung der Sicherheit und Authentizität von Hackfleisch		<a href="https://www.ivv.fraunhofer.de/de/produkt-wirkung/daten-und-modellgestuetzte-algorithmen.html">https://www.ivv.fraunhofer.de/de/produkt-wirkung/daten-und-modellgestuetzte-algorithmen.html</a>
<b>i</b> medicalvalues GmbH	KI-Plattform für die integrierte Diagnostik – Order Entry und Diagnoseunterstützung der nächsten Generation	<b>28</b>	<a href="http://www.medicalvalues.de">www.medicalvalues.de</a>
<b>i</b> MERCK	KI-gestützte Software für die Arzneimittelforschung	<b>34</b>	<a href="https://www.sigmaaldrich.com/DE/de/services/software-and-digital-platforms/aidison-ai-powered-drug-discovery">https://www.sigmaaldrich.com/DE/de/services/software-and-digital-platforms/aidison-ai-powered-drug-discovery</a>
Movi-Q (BMEL-Förderprojekt, Koordinator: DIL Deutsches Institut für Lebensmitteltechnik e. V.)	Mobile visuelle Qualitätserkennung durch künstliche Intelligenz für die Ernährungsindustrie		<a href="https://www.dil-ev.de/news/detailansicht/news/mobile-visuelle-qualitaetserkennung-durch-kuenstliche-intelligenz-fuer-die-ernaehrungsindustrie.html">https://www.dil-ev.de/news/detailansicht/news/mobile-visuelle-qualitaetserkennung-durch-kuenstliche-intelligenz-fuer-die-ernaehrungsindustrie.html</a>
MSAID GmbH	KI-unterstützte Massenspektrometrie/Software und Datenanalysedienste für die Proteomik unter Verwendung leistungsstarker Algorithmen für maschinelles Lernen		<a href="https://www.msaid.de/">https://www.msaid.de/</a>
<b>i</b> qualitype GmbH	Vereinfachung des Laboralltags mit KI-Chat im LIMS	<b>36</b>	<a href="http://www.qualitype.de">www.qualitype.de</a>
<b>i</b> robominds GmbH	Smarte Roboterzelle für automatisiertes Probenhandling	<b>30</b>	<a href="https://www.robominds.de/robominds/robominds-ki">https://www.robominds.de/robominds/robominds-ki</a>
Thermo Fisher Scientific Inc.	Künstliche Intelligenz für 3D-Visualisierungs- und Analysesoftware		<a href="https://www.thermofisher.com/de/de/home/electron-microscopy/products/software-em-3d-vis/3d-visualization-analysis-software/artificial-intelligence.html">https://www.thermofisher.com/de/de/home/electron-microscopy/products/software-em-3d-vis/3d-visualization-analysis-software/artificial-intelligence.html</a>
<b>i</b> ZEISS	KI in der Mikroskopie/Smarte Hilfe bei der Zellkultur	<b>20</b>	<a href="http://www.zeiss.com/axiovert-digital">www.zeiss.com/axiovert-digital</a>

# Künstliche Intelligenz im Labor: Wo stehen wir?

SPECTARIS im Gespräch mit...



ALEXANDER BRENDEL

Director Life Science bei der  
infoteam Software AG

**SPECTARIS: Es heißt, 2018/2019 habe es einen „AlphaGo-Moment“ in der pharmazeutischen Industrie gegeben, mit dem das Potenzial künstlicher Intelligenz im Labor erstmalig greifbar wurde. Seinerzeit soll eine künstliche Intelligenz innerhalb von 21 Tagen ein neues Medikament entwickelt haben<sup>(1)</sup>. Aktuell wird berichtet, dass ein von einem Team der Carnegie Mellon University entwickeltes KI-System komplexe, mit dem Nobelpreis ausgezeichnete chemische Reaktionen innerhalb weniger Minuten selbstständig erlernt und ausgeführt hat<sup>(2)</sup>. Eine Tätigkeit, für die normalerweise Expertenwissen und viel Zeit benötigt wird. Wo stehen wir heute beim Thema „Künstliche Intelligenz im Labor“?**

*Alexander Brendel:* Im Vergleich zu anderen Branchen überraschend weit hinten, denn künstliche Intelligenz ist branchenunabhängig seit Jahrzehnten etabliert – Stichwort „regelbasierte Systeme“. Aber auch maschinelles Lernen und neuronale Netze sind seit etwa 15 Jahren massiv auf dem Vormarsch und heute Stand der Technik. In den vergangenen zwei Jahren konnten wir zudem essenzielle Durchbrüche im Bereich generativer KI beobachten und die Weiterentwicklung von KI erfolgt weiter in rasantem Tempo. Trotzdem sind die zugrundeliegenden Technologien robust, bewährt, werden von vielen Industriezweigen genutzt und stünden auch der

Laborbranche längst zur Verfügung. Doch zum Einsatz kommen sie bislang kaum. Wir sehen sie derzeit vor allem in Forschungsprojekten und bei Pharmaunternehmen mit meist finanzstarken Investoren, zum Beispiel in der Lead-Generierung oder in der Auslegung von Screening-Kampagnen. KI wird dort vorwiegend als Werkzeug eingesetzt, das neues Wissen generieren und Fragen lösen soll, für deren Beantwortung menschliche Gehirne viele Jahre bräuchten oder gar nicht in der Lage sind. Es herrscht eine Art Goldgräberstimmung mit hoher Vorleistung bei unklarem Ausgang. Diese Form der KI-Nutzung ist für die breite Masse der Unternehmen im Laborumfeld nicht realisierbar und zudem kaum sinnvoll. Jedoch gibt es für deren Anforderungen und Alltagssituationen sehr wohl wirtschaftlich vernünftige KI-Einsatzmöglichkeiten. Dass sie bislang kaum bedient werden, liegt vor allem an der fehlenden Digitalisierung und Vernetzung von Systemen und daran, dass viele Unternehmen den Einsatz von KI noch nicht als möglichen Lösungsweg für ihre Anwendungsfälle erkennen.

**SPECTARIS: In welchen Anwendungsbereichen der Analysen-, Bio- und Labortechnik sehen Sie das größte Potenzial für KI-unterstützte Lösungen?**

*Alexander Brendel:* In der Kürze möchte ich mich auf drei Gedanken fokussieren: Das größte Potenzial sehe ich in den unterschiedlichen Routine- und Alltagsaufgaben, die in verschiedenen Laboren anfallen. Beispielsweise gibt es bestimmte Aufgaben in der Qualitätssicherung, die eine KI schneller und zuverlässiger als ein Mensch übernehmen kann. Solche Aufgaben, die für den Laborbetrieb wichtig sind und notgedrungen von hochqualifiziertem Fachpersonal miterledigt werden müssen, finden Sie quasi in jedem Labor. Mein zweiter Gedanke geht in Richtung Diagnostik. Hier sehe ich zwei Anwendungs-

<sup>(1)</sup> <https://analytics.dkv.global/data/pdf/Deep-Knowledge-Analytics-Press-Release-AI-Designs-New-Drug-From-Scratch-in-Just-21-Days.pdf>

<sup>(2)</sup> <https://ki-techlab.de/ki-news/ki-system-coscientist-macht-bahnbrechenden-sprung-in-der-chemischen-forschung/>

bereiche: Zum einen können Sie KI als Unterstützung bei der Befundung einsetzen, wobei der Einsatz im regulierten Umfeld herausfordernd ist. Aber es gibt heute schon Möglichkeiten und in den nächsten Jahren bewegt sich hier sicherlich noch einiges. Zum anderen werden wir KI dort im Einsatz sehen, wo Diagnostik heute aufgrund der Komplexität an Grenzen stößt. KI-Systeme können Zusammenhänge in Daten unterschiedlicher Herkunft erkennen, die für menschliche Experten nicht mehr zugänglich sind. Hier stehen wir an der Schwelle zu einem neuen Zeitalter und das ist auch die Überleitung zu meinem dritten Gedanken: Allgemein sehe ich in der Forschung enormes Potenzial für den Einsatz von KI. Denken Sie nur an Genom- und Materialforschung oder Medikamentenentwicklung. Hier erwarte ich, dass wir in den nächsten Jahren einige bahnbrechende Entdeckungen miterleben, die ohne KI nicht möglich wären. Etliche Big Player investieren heute schon entsprechend hohe Summen in KI-Systeme und erhöhen so die Erfolgswahrscheinlichkeit. Aber auch ein kleines Forschungsprojekt oder Startup mit geringem Budget kann mit Kreativität und etwas Glück einen Jackpot knacken.

**SPECTARIS: Die ersten Roboter haben bereits ihren Dienst im Labor aufgenommen, zumindest in Pilotprojekten. An intelligenten Laborrobotern wird geforscht. Heißt die Laborassistentin/der Laborassistent, heißen die Forschenden der Zukunft „KI“? Wird vielleicht der Mensch zur Assistenz von KI?**

*Alexander Brendel:* KI wird unser aller Leben verändern, auch die Arbeit im Laborumfeld. Ich bin aber überzeugt, dass KI immer den Menschen unterstützt und nicht umgekehrt. Automatisierung, Robotik und der Einsatz von KI vereinfachen uns heute schon den Alltag im Labor und werden es zukünftig noch viel stärker tun. Dadurch gewinnen wir Zeit für Aufgaben, in deren Bewältigung wir der KI überlegen sind. Wenn ich auf die letzten Jahrzehnte und Jahrhunderte zurückblicke, dann traf jede neue Technologie zunächst auf Ablehnung, weil wir als Menschheit befürchtet haben, dass sie uns die Daseinsberechtigung entzieht. Natürlich wird KI auch Aufgaben von uns Menschen übernehmen und die eine oder andere Tätigkeit überflüssig machen. Aber jede Technologie hat bislang immer mehr neue Möglichkeiten geschaffen,

als sie weggenommen hat. Ich wüsste nicht, warum sich das plötzlich ändern sollte. Ein Beispiel aus einer völlig anderen Branche zur Verdeutlichung: Bäckerinnen und Bäcker müssen täglich kalkulieren, wie viele Backwaren sie am nächsten Tag voraussichtlich verkaufen werden. Bislang mussten sie das nach der eigentlichen Arbeit selbst tun, mittlerweile gibt es speziell für diesen Anwendungsfall eine KI. Diese berücksichtigt nicht nur Feiertage und Wetter, sondern rund 150 dynamische Parameter. Entsprechend präziser ist die Kalkulation, die Überproduktion sinkt und die Planung erfolgt 90 Prozent schneller als bislang. Diese gewonnene Zeit steht nun beispielsweise für die Entwicklung neuer Backwaren und Rezepte zur Verfügung. Übertragen auf die Laborbranche heißt das für mich, dass wir mit KI nachhaltiger werden. Die Fähigkeit, aus weniger mehr zu machen, liegt nicht allein bei der KI, sondern es ist unsere Chance, mit KI aus begrenzten Ressourcen mehr zu generieren.

**SPECTARIS: An welchen Projekten im Bereich der künstlichen Intelligenz arbeiten Sie zurzeit in Ihrem Unternehmen?**

*Alexander Brendel:* Das möchte ich zweigeteilt beantworten, denn wir setzen KI sowohl intern für unsere eigenen Prozesse ein als auch extern in Kundenprojekten. Intern spielen wir aktuell viel mit generativen KI-Modellen und testen beispielsweise, ob sich solche Modelle zur Entwicklung von Softwarecode einsetzen lassen und was wir in diesem Zusammenhang beachten müssten. Zudem haben unsere Data Scientists in den letzten Wochen ein RAG-System aufgebaut. RAG steht für Retrieval Augmented Generation. Solch ein System verfügt über einen großen Pool an Dokumenten – in unserem Fall unsere Wissensdatenbank mit allen Prozessbeschreibungen. Wenn Sie dem System eine Frage stellen, sucht es aus dem Pool jene Dokumente heraus, die zum Thema passen, lässt die Dokumente detailliert von einer KI durchlesen und liefert Ihnen die Antwort inklusive Quelle auf Ihre Frage. Unser Ziel ist es, mit diesem System viel schneller belastbare Antworten auf die Fragen von externen und internen Auditoren geben zu können, als es uns mit manueller Suche derzeit möglich ist – und natürlich finden auch unsere Mitarbeitenden Informationen viel schneller als bisher. Extern hatten wir unser erstes KI-Projekt vor

über 15 Jahren, als wir ein System zur Ausfallvorhersage von Gerätekomponten aufgebaut haben. Das läuft bis heute sehr erfolgreich und meldet drohende Ausfälle bereits Wochen im Voraus. Unser jüngstes Kundenprojekt nutzt generative KI. Die KI liest Fehlermeldungen und kategorisiert sie nach Ursachen, die bereits bekannt und in Behebung sind, und solchen Meldungen, die ein bis dato unbekanntes Problem beschreiben. Bislang konnte sich ein Problem mit unbekannter Ursache etliche Tage und Wochen zwischen Tausenden von Meldungen mit bekannten Ursachen verstecken. Die KI dagegen entdeckt es mit hoher Treffsicherheit binnen Minuten.

### **SPECTARIS: Was sind die Voraussetzungen für den Einsatz von KI im Labor?**

*Alexander Brendel:* Wir bei infoteam verstehen KI im Labor als die letzte von fünf aufeinander folgenden Stufen. Stufe eins beschreibt die Digitalisierung und Vernetzung von Geräten und Systemen. Erstmals sind Geräte- und

Ist dieses Stufenmodell in Stein gemeißelt? Nein, denn es hat fließende Übergänge und Sie können auch mit entsprechend großem Aufwand in Stufe 1 oder 2 schon eine KI-Lösung implementieren. Dieser Aufwand ist aber nur gerechtfertigt, wenn die Lösung für Sie einen sehr großen Mehrwert schafft, wie zum Beispiel einen Wettbewerbsvorteil.

### **SPECTARIS: Welche Bedeutung hat das Thema Schnittstellen für den Einsatz von künstlicher Intelligenz im Labor?**

*Alexander Brendel:* Für KI-Entwicklung benötigen Sie Daten, um das KI-Modell zu trainieren. Einheitliche Schnittstellen vereinfachen die Vernetzung von digitalen Systemen und somit auch den Datenaustausch und die Datensammlung. Bedeutet: Die Entwicklung von KI ist ohne einheitliche Schnittstellen möglich, aber im Vorfeld fließt viel wertvolle Zeit und Arbeit in die Aufbereitung und Interpretation unterschiedlicher Datenquellen. Jede Art



Ergebnisdaten zentral zugänglich. Obwohl wir schon seit über zehn Jahren Mittel und Wege kennen, hapert es daran heute immer noch in vielen Laboren. Stufe zwei beginnt, diese Daten zu nutzen: Dashboards bereiten die Daten passend auf und eine Geräteüberwachung aus der Ferne ist möglich – also unidirektionale Kommunikation. In Stufe drei können Laborverantwortliche Geräte aus der Ferne steuern – also bidirektionale Kommunikation. Mit dem vierten Schritt wechselt der Fokus von Einzelkommunikation hin zu Prozessen und dem Aufbau von Prozessdaten. Es existieren nicht mehr nur einzelne, sondern zu jedem Zeitpunkt alle relevanten Datenpunkte – ein digitales Abbild der Realität bis hin zum digitalen Zwilling. Stufe fünf führt KI ins Labor ein, denn zu diesem Zeitpunkt liegen große und verfügbare Datenpools aus Stufe eins bis drei plus die Prozessdaten aus Stufe 4 vor – damit können Sie Ihre KI-Modelle trainieren.

standardisierter Schnittstellen ist deshalb eine Verbesserung. Den größten Mehrwert sehe ich tatsächlich im neuen herstellerunabhängigen und offenen Kommunikationsstandard LADS. Denn er liefert eine einheitliche Syntax, sodass Sie neue kompatible Geräte oder Datenquellen schnell in laufende KI-Systeme integrieren können. Wenn es uns gelingt, LADS branchenweit zu etablieren, wird das die gesamte Laborwelt einen wichtigen Schritt voranbringen – auch hinsichtlich KI.

**SPECTARIS: Einerseits wird die KI-Landschaft stark von innovativen Startups geprägt, andererseits präsentieren bereits viele der großen, internationalen Konzerne der Analysen-, Bio-, Labortechnik KI-unterstützte Lösungen. Bleibt der Mittelstand bei dieser Entwicklung zurück? Was ist Ihre Empfehlung, wie KMUs mit dem Thema Künstliche Intelligenz umgehen sollten?**

*Alexander Brendel:* Mein Eindruck ist, dass mittelständische Unternehmen sehr offen für den Einsatz von KI sind, aber es fehlt teilweise noch an Ideen für Einsatzmöglichkeiten und teilweise auch an notwendigen Voraussetzungen. Beides stellt aber keinen Hinderungsgrund dar. Meine Empfehlung ist, sich einen oder mehrere externe Dienstleister für Softwareentwicklung und KI-Modellierung ins Haus zu holen und sich zunächst beraten zu lassen. Die Investitionen für solche Consulting-Tätigkeiten sind überschaubar. Im Gegenzug gewinnen Sie wertvolle Ideen, wo KI überhaupt ein wirtschaftlich und technologisch sinnvolles Werkzeug für Sie darstellt. Die Einsatzmöglichkeiten sind nahezu unendlich. Besonders häufig ist KI wertvoll, um bekannte und auch bislang nicht bewusst wahrgenommene Zeitfresser zu eliminieren, so dem Fachkräftemangel zu begegnen und Wettbewerbsvorteile zu schaffen. Mich überrascht immer wieder, wie ähnlich die Herausforderungen, auch im Konkreten in völlig unterschiedlichen Branchen sind. So hat der Kosmetikhersteller oft ganz ähnliche Herausforderungen wie der Softwarelieferant oder der Maschinenbauer. Meine Empfehlung ist daher: Lassen Sie sich ergebnisoffen von Ideen aus anderen Bereichen inspirieren – denn die bereits etablierten Ansätze und zur Verfügung stehenden Technologien sind übergreifend einsetzbar und funktionieren in unterschiedlichsten Branchen.

**SPECTARIS: Abschließend vielleicht noch der Blick in die Glaskugel: Wo steht die künstliche Intelligenz im Labor in 10 oder 20 Jahren?**

*Alexander Brendel:* Ist das der große Moment, um in die Fußstapfen von Thomas Watson zu treten, der 1943 als Chef von IBM einen Weltmarkt für fünf Computer prognostizierte? Oder in die von Microsoft-Mitbegründer Bill Gates, der 2004 postulierte, dass in zwei Jahren das Spam-Problem gelöst wäre? Ich bin mir nicht sicher, ob ich da mithalten kann und möchte. Ich will mich aber auch nicht aus der Verantwortung stehlen. Die einfachste Antwort ist: Im Laborumfeld müssen wir für einen flächendeckenden Einsatz von KI noch ein paar Hausaufgaben erledigen und können beispielsweise bei der Fertigungsindustrie spicken, die bereits vor 15 bis 20 Jahren mit der Digitalisierung und Vernetzung von Systemen begonnen hat. Ich rechne damit, dass wir deshalb

schneller sind als die Pioniere damals und in zehn Jahren den Vorsprung aufgeholt haben. Mit unserem heutigen Wissen würde es mich auch nicht überraschen, wenn wir auf diesem Weg dank KI an Geschwindigkeit gewinnen, beispielsweise weil wir Softwarecode zukünftig mit KI-Unterstützung schneller produzieren können. Vielleicht spielt in zehn Jahren auch noch eine ganz andere Technologie mit ... Warten wir mal ab, was sich im Bereich Quantencomputing so tut ...

**SPECTARIS: Das war ein spannendes, sehr interessantes Gespräch. Vielen Dank dafür!**

**Über die infoteam Software Gruppe**

Die infoteam Software Gruppe realisiert seit über 40 Jahren spezifische Softwarelösungen, u. a. für ihre Kunden aus dem Bereich Life Science. infoteam ist nach ISO 9001, ISO 13485 sowie ISO 27001 zertifiziert und verfügt über einen eigenen Entwicklungsprozess, der IVDR-, MDR- und FDA-konforme Softwareentwicklung für Medizinprodukte der Klassen I bis III sowie der Sicherheitsklassen A bis C unterstützt und die relevanten Anforderungen der IEC 62304 erfüllt. Das Unternehmen engagiert sich für zukunftssichere, vernetzte Labore und ist Mitgestalter des offenen, herstellerunabhängigen Kommunikationsstandards LADS.

Die infoteam Software Gruppe beschäftigt mehr als 350 Mitarbeitende in Europa. Stammsitz ist in der Metropolregion Nürnberg. infoteam ist ausgezeichnet als eines der 50 wachstumsstärksten Unternehmen Bayerns und zählt zu den 100 innovativsten Unternehmen Deutschlands.

[www.infoteam.de](http://www.infoteam.de)  
[lifescience@infoteam.de](mailto:lifescience@infoteam.de)  
 +49 9131 78 00-280

Die infoteam Software AG auf der analytica:  
 Halle B2, Stand 415

# Crashkurs Künstliche Intelligenz

Eine Auswahl wichtiger Grundbegriffe erklärt Dr. Stefano Signoriello, Lead Data Scientist bei der infoteam Software AG

## KI

Vereinfacht ausgedrückt beschreibt künstliche Intelligenz (engl.: artificial intelligence – AI) die Fähigkeit eines Computers, Aufgaben zu lösen, deren Lösung von Menschen typischerweise Intelligenz erfordert. In diesem Sinne imitieren Computer menschliche Fähigkeiten wie beispielsweise logisches Denken, Kreativität und Verarbeitung von Sinneseindrücken.

## Maschinelles Lernen

Als Teilmenge von KI beschreibt maschinelles Lernen Methoden der statistischen Modellbildung, Optimierung und Mustererkennung, mit denen Computer anhand von Datenbeispielen scheinbar intelligente Fähigkeiten „erlernen“.

## Deep Learning

Als Teilmenge des maschinellen Lernens beschreibt Deep Learning Methoden, bei denen tiefschichtige und oftmals komplexe neuronale Netze zur Modellierung verwendet und mittels Datenbeispielen trainiert werden.

## Generative KI (u. a. ChatGPT)

KI, die künstliche Daten erzeugen kann. Dazu zählen beispielsweise Anwendungen wie ChatGPT, die auf menschliche Texteingaben mit eigenen Textformulierungen antworten und so ein Gespräch zwischen Menschen simulieren können. Die populären generativen KI-Modelle (wie z.B. GPT4 und Dall-E von OpenAI) stellen eine Teilmenge von Deep Learning dar und basieren auf Large Language Models (LLM). Generativen KI-Anwendungen liegt typischerweise ein Sampling-Mechanismus zugrunde, weshalb sich Ausgaben der KI bei gleicher Eingabe unterscheiden können.

## Modell

Jeder KI liegt ein (mathematisches) Modell zugrunde, das im Rahmen der KI-Entwicklung individuell auf die konkrete

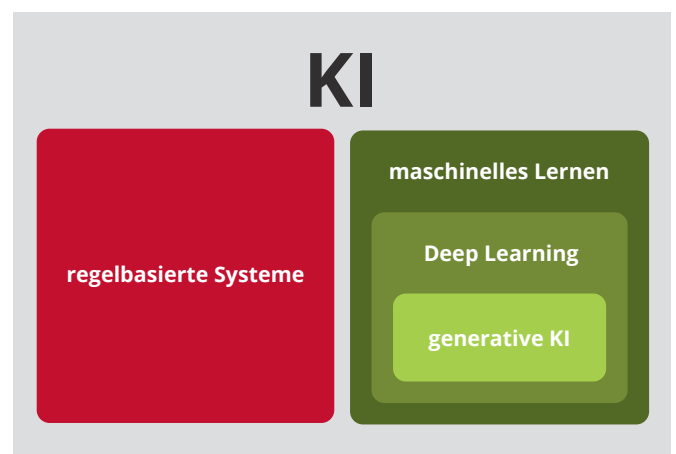
Aufgabe der KI zugeschnitten wird (Modellierung). Mitunter können mehrere Modelle oder die Kombination mehrerer Modelle für eine Aufgabe geeignet sein.

## Supervised Learning

Beim beaufsichtigten Lernen besteht das Ziel im Wesentlichen darin, eine Zuordnung von Eingabedaten zu Ausgabedaten zu lernen. Einfaches Beispiel: Eingabedaten könnten Bilder von Tieren sein, die menschliche Experten im Vorfeld bereits richtig zugeordnet haben. Die KI lernt so, beispielsweise Katzen von Hunden zu unterscheiden.

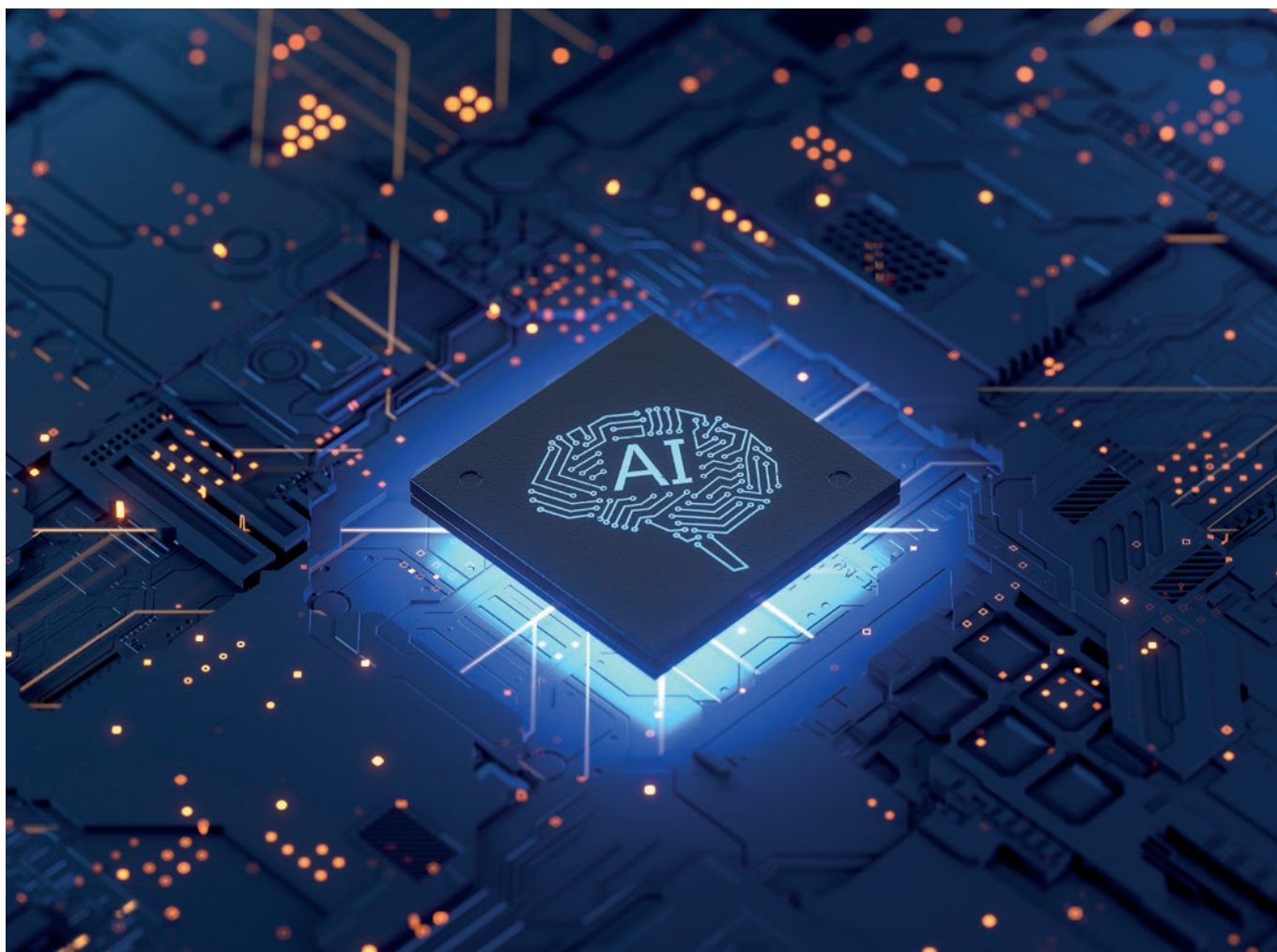
## Unsupervised Learning

Beim unbeaufsichtigten Lernen besteht das Ziel im Wesentlichen darin, ohne menschliche Beaufsichtigung Muster und Zusammenhänge in den Daten zu erkennen. Die Modelle können so ihnen bekannte und unbekannte Muster unterscheiden und sind deshalb besonders gut für das Erkennen von Anomalien geeignet.



Übersicht der Teilmengen von KI

© infoteam Software AG



### **Reinforcement Learning**

Der Bereich des bestärkenden Lernens beschäftigt sich mit Methoden, die es einem Computer ermöglichen, aus gewonnener Erfahrung bei der Interaktion mit einem Problem selbstständig und ohne menschliches Vorwissen zu lernen.

Ein prominentes Beispiel ist AlphaGo von Google DeepMind. Die KI brachte sich selbst das Spielen von Go bei und war die erste KI, die den besten menschlichen Spieler besiegte.

### **Python**

Programmiersprache u. a. für KI-Modellierung

### **R**

Programmiersprache für Statistik

### **tensorflow**

Open-Source-Software von Google für neuronale Netze

### **torch**

Open-Source-Software von Meta für neuronale Netze

### **HuggingFace**

AI-Community-Plattform mit zahlreichen Open-Source-Modellen und -Datensätzen



DR. STEFANO SIGNORIELLO

Lead Data Scientist bei der  
infoteam Software AG

# Schnittstellen und vernetzte Geräte als Grundlage für Künstliche Intelligenz im Labor



KAI KRESS

Mitgründer und Vorstand  
der 2mag AG

Die Analysen des im Jahr 2016 gegründeten SPECTARIS-Arbeitskreises „Vernetzte Laborgeräte“ zeigten den Bedarf nach einem digitalen Gerätestandard als notwendige Voraussetzung für eine konsequente Labordigitalisierung. Nach intensiver Recherche und Diskussion fiel der Beschluss, eine OPC UA-basierte Companion-Spezifikation zu erarbeiten. Diese ist inzwischen unter dem Namen LADS bekannt geworden und wurde im Dezember 2023 veröffentlicht. Jeder Laborgerätehersteller kann diese Spezifikation einsehen<sup>1</sup> und sie mittels der unter Open-Source-Lizenz stehenden, frei verfügbaren Software in seinen Produkten implementieren. Für die Wahl von OPC UA waren zunächst Aspekte für eine optimale Usability wichtig. Dennoch wurde bei der Spezifizierung der Anforderungsprofile der Einsatz künstlicher Intelligenz bereits seinerzeit mitbedacht. Im Fokus waren damals bereits neuronale Netze, das Gebiet der künstlichen Intelligenz ist jedoch insgesamt deutlich größer als gemeinhin angenommen.

Weil LADS „by design“ multidevice-fähig ist, verabschiedet sich die Laborwelt immer stärker vom klassischen Laborgerät, welches direkt mit einem PC verbunden ist und ausschließlich über diesen gesteuert wird. Stattdessen öffnet sich eine Welt, in der Tablets, Spracheingaben, alle denkbaren Gadgets, klassische On-Premise-Server oder

Clouds, LIMS-, ERP-, Middleware- und Archiv-Systeme betriebssystemunabhängig auf alle LADS-Geräte einer Laborumgebung zugreifen, monitoren und zuletzt natürlich die gewünschten Prozesse steuern.

Weil sich ein LADS-Gerät im internen Netzwerk selbstbeschreibend darstellt, also die Informationen über seine Fähigkeiten und Tätigkeiten, seine technischen Spezifikationen, seinen aktuellen Zustand den zugreifenden Geräten bzw. Clients zur Verfügung stellt, ist LADS zudem die ideale Basis, um flexibel zusätzliche Komponenten ins Netzwerk zu integrieren. Dies können auch KI-Lösungen sein, z.B. zur Prozesssteuerung in einem Sprachdialog zwischen Mensch und KI oder zur Unterstützung bei der Ausgabe eines Laborberichts auf Basis von sogenannten Large Language Modells (LLMs). Auch im Labor werden wir schon in Kürze die ersten LLMs antreffen, wo sie Menschen bei ihren Routineaufgaben unterstützen. Diese absehbare, womöglich sehr dynamisch verlaufende Integration setzt optimalerweise genau die digitale Schnittstelle voraus, die LADS zu bieten hat. Kein Softwareexperte wird sich dem umständlichen Programmieren von Gerätetreibern widmen wollen, die der umfangreiche Gerätepark eines typischen Labors heutzutage benötigen würde, wenn Plug-and-Play-Lösungen verfügbar sind. Vergleicht man den Aufwand, zeigt sich, dass die LADS inhärente Geräteselbstbeschreibung eine für den KI-Einsatz notwendige und alternativlose Voraussetzung ist.

Einen ausführlichen Beitrag zu diesem Thema finden Sie im SPECTARIS-Trendreport ABL 2024:



Ein weiterführendes White Paper zu LADS findet sich hier: Brendel A, Dorf-müller F, Liebscher A, Kraus P, Kress K, Oehme H, Arnold M, Koschitzki R (2022): Laboratory and Analytical Device Standard (LADS): A Communication Standard Based on OPC UA for Networked Laboratories. Adv Biochem Eng Biotechnol 182:175-194, [https://doi.org/10.1007/10\\_2022\\_209](https://doi.org/10.1007/10_2022_209).

<sup>1</sup>Siehe <https://opcfoundation.org/developer-tools/documents/view/208>





# Anwendungsbeispiele Künstlicher Intelligenz im Labor

Smarte Hilfe bei der Zellkultur – KI in der Mikroskopie	20
Mit künstlicher Intelligenz zur perfekten Temperatur	22
Datenmanagement-Plattform mit KI-gestütztem Digitalen Assistenten	24
KI-gestützte Qualitätskontrolle für DNA- und RNA-Oligonukleotidsynthese	26
KI-Plattform für die integrierte Diagnostik – Order Entry und Diagnoseunterstützung der nächsten Generation	28
Smarte Roboterzelle für automatisiertes Probenhandling	30
Verborgene Moleküle – mit maschinellem Lernen Schadstoffe und Wirkstoffe aufklären	32
KI-Lösung zur Integration von Arzneimitteldesign, -synthese und -beschaffung	34
Vereinfachung des Laboralltags mit KI-Chat im LIMS	36



# Smarte Hilfe bei der Zellkultur – KI in der Mikroskopie

Viele Arbeitsschritte in der Zellkultur sind zeitaufwendig und fehleranfällig. Die Automatisierung der Mikroskopie durch ZEISS Labscope AI Cell Counting und AI Cell Confluency spart Zeit, erleichtert die Reproduzierbarkeit und steigert die Experimentqualität.

## DIE KI-LÖSUNG UND IHR ANWENDUNGSBEREICH

Zellkultur ist die Grundlage eines Großteils der Experimente in der Zellbiologie und auch für viele industrielle Anwendungen wie Arzneimittelscreening oder die Herstellung verschiedener biologischer Produkte. Die Vorteile der Arbeit mit Zellkulturen gegenüber komplexeren Modellorganismen sind hierbei offensichtlich. In der Zellkultur sind die meisten Parameter des Experiments steuerbar und dadurch reproduzier- und kontrollierbar. Zellen müssen unter zell- und experimentspezifischen Bedingungen kultiviert werden.

Um normales physiologisches Wachstum zu gewährleisten, müssen Zellen täglich mikroskopisch hinsichtlich Wachstumsrate und Zelldichte im Kulturgefäß (Konfluenz) beurteilt werden. Eine bestimmte Anzahl der Zellen wird dann aus der Zellkultur entnommen und für Experimente verwendet.

Herkömmliche, manuelle Zellzählungen sind arbeitsintensiv, kosten viel Zeit und sind zudem fehleranfällig. Daher finden in der Praxis häufig nur grobe, subjektive

Abschätzungen statt. Zellkonfluenz und Zellzahl müssen unabhängig von Form, Größe und Typ der Zelle erfasst und ausgewertet werden können. Automatisierung und KI können hier helfen. Die Imaging- und Analysesoftware ZEISS Labscope unterstützt Arbeitsabläufe optimal mittels KI. Um die Anzahl der Zellen und die zellbedeckte Fläche automatisch direkt im Kulturgefäß zu analysieren, stehen die ZEISS Module AI Cell Confluency und AI Cell Counting zur Verfügung. Sie fügen sich nahtlos in den Arbeitsablauf ein. Mikroskopiebilder werden auf Knopfdruck automatisch analysiert. Das Ergebnis wird umgehend angezeigt – visuell und quantitativ.

Damit bietet Labscope eine Plattform, um die alltägliche Arbeitslast im Labor mit KI zu erleichtern. Denn auch in Zukunft werden Forschungsergebnisse maßgeblich durch die Güte der Experiment-Vorbereitung beeinflusst.

## EFFIZIENZGEWINN UND WEITERE VORTEILE

Durch den Einsatz von KI zur automatischen Zellanalyse direkt im Kulturgefäß wird die Wachstumsrate nicht durch unnötiges Handling beeinflusst. Das sorgt für ein

### Zellen in 10-facher Vergrößerung

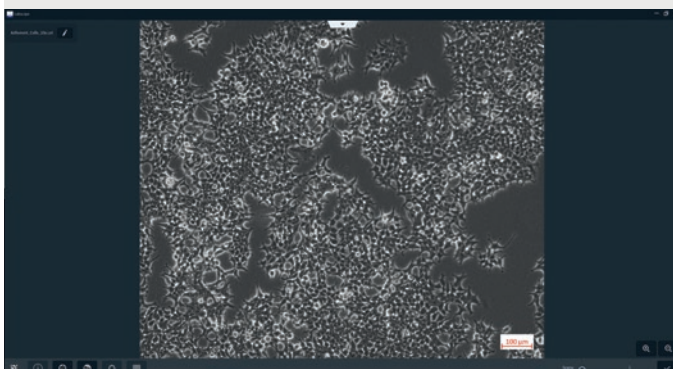
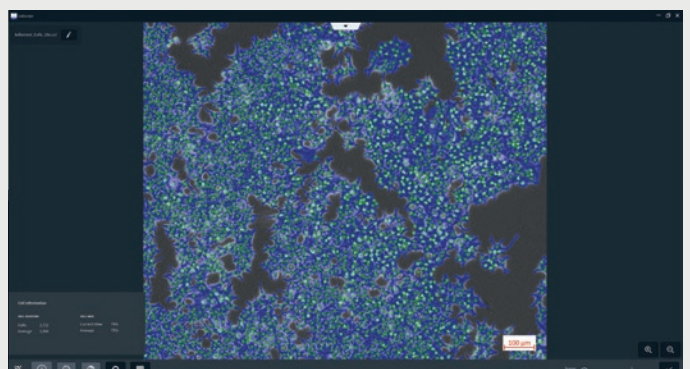


Bild in Phasenkontrast



Analysiertes Bild in ZEISS Labscope



Axiovert 5 digital – das All-in-One Cell Imaging Mikroskop

möglichst physiologisches Verhalten der Zellen und spart Zeit durch eine höhere Ausbeute. Da Labscope AI Cell Counting den Einsatz einer Zell-Zählkammer ersetzen kann, kann so viel Zeit für manuelles Zählen durch nur einen Klick ersetzt werden. Ebenso erleichtern die ZEISS Labscope AI Module auch das Training neuer User und gewährleisten eine standardisierte Bewertung der Zellkultur, egal welcher Mitarbeiter die Zellkultur durchführt.

### DIE TECHNOLOGIE IM DETAIL

Bei den Labscope AI Modulen handelt es sich nicht um einfache Machine Learning-Algorithmen, sondern es wird durch die Verwendung von Deep Learning eine sehr hohe Genauigkeit der Zellerkennung erreicht. Dem Algorithmus werden Datensätze mit Beispielbildern vorgegeben, welche die benötigte Information als Ground Truth enthalten. Diese spiegelt am Ende den Output der Module wider. Das neuronale Netz konfiguriert demnach frei Parameter, welche ihm helfen, Strukturen zu differenzieren oder anders ausgedrückt, Zellen als Zellen zu erkennen und von Hintergrund und unspezifischen Ablagerungen zu differenzieren.

Je größer der Datensatz und genauer diese Informationen sind, desto verlässlicher ist der Algorithmus. Die Trainingsdatensätze der Labscope AI Module bestehen aus über 100.000 annotierten Zellen, einer Vielzahl an verschiedenen



Mit einem Klick erhält man die Ergebnisse der Zellanalyse.

Zelltypen und werden laufend mit weiteren Zelltypen erweitert.

Die AI Module von Labscope sind No-Coding Module, die jeder User ohne Vorkenntnisse und Training durch einen simplen Knopfdruck erfolgreich verwenden kann.

i

**DR. BENJAMIN-MAXIMILIAN SCHWARZ**  
Carl Zeiss Microscopy GmbH, Jena

benjamin-maximilian.schwarz@zeiss.com  
[www.zeiss.com/labscope](http://www.zeiss.com/labscope)

# Mit künstlicher Intelligenz zur perfekten Temperatur – ein gemeinsames Forschungsprojekt von LAUDA und der Hochschule Aalen

2023 startete LAUDA in Zusammenarbeit mit dem Institut für Antriebstechnik der Hochschule Aalen ein KI-Forschungsprojekt, welches auf die Digitalisierung und Optimierung von Temperiergeräten in automobilen Prüfständen abzielt.

*Entwicklung eines PHM (Prognostics and Health Management-) Systems zur KI-basierten Zustandsüberwachung von Temperiergeräten in automobilen Prüfständen.*

## DIE KI-LÖSUNG UND IHR ANWENDBEREICH

LAUDA DR. R. WOBSE GMBH & CO. KG arbeitet mit dem Institut für Antriebstechnik (IAA) der Hochschule Aalen gemeinsam an diesem spannenden Projekt, das vom Ministerium für Wirtschaft, Arbeit und Tourismus Baden-Württemberg im Rahmen des InvestBW-Förderprogramms mit 424.000 Euro unterstützt wird. Das aus dem Netzwerk »DigiServ« entstandene Projekt läuft bis 2025. Dieses Innovationsnetzwerk ist ein Entwicklungsverbund, der sich zum Ziel gesetzt hat, Prozesse im Servicebereich zu strukturieren und zu automatisieren.

## AUSGANGSSITUATION UND LÖSUNG

Trotz umfangreicher Diagnosefunktionen in den Geräten können bestimmte technische Störungen mitunter nicht

frühzeitig bzw. im Vorfeld erkannt werden, sodass es beim Kunden möglicherweise zu unerwarteten Ausfällen kommt, die zu teuren Prozessunterbrechungen führen können. Außerdem können derartige Ausfälle auch durch ungeeignete Betriebsweisen der Geräte verursacht werden – hier besteht bislang keine Möglichkeit, diese zu erkennen.

Produktionsausfälle und Verzögerungen durch Stillstände lassen sich mithilfe von KI-gestützter, präventiver und vorausschauender Wartung (Predictive oder Preventive Maintenance) minimieren oder sogar verhindern. Dadurch bietet sich den Kunden eine innovative Lösung zur Erhöhung der Lebensdauer, Zuverlässigkeit und Performance der LAUDA Temperiergeräte, was ihnen damit einhergehend klare Wettbewerbsvorteile verschafft. Zudem können durch maschinelles Lernen effiziente Betriebsstrategien, etwa durch eine optimierte Durchflussförderung, je Anwendung entwickelt werden.

Aktuell wird keine KI oder maschinelles Lernen in LAUDA Thermostaten eingesetzt. Dies soll sich zukünftig ändern: Ungeplante Stillstände sollen verhindert und die Betriebsstrategien der LAUDA Thermostate als Kundenfunktion verbessert werden. Des Weiteren wird eine Verbesserung der Prozesse im Servicebereich angestrebt.

## TREIBER & HEMMNISSE

**Treiber:** Der rasante Fortschritt im Bereich der KI und des maschinellen Lernens, insbesondere auch hinsichtlich

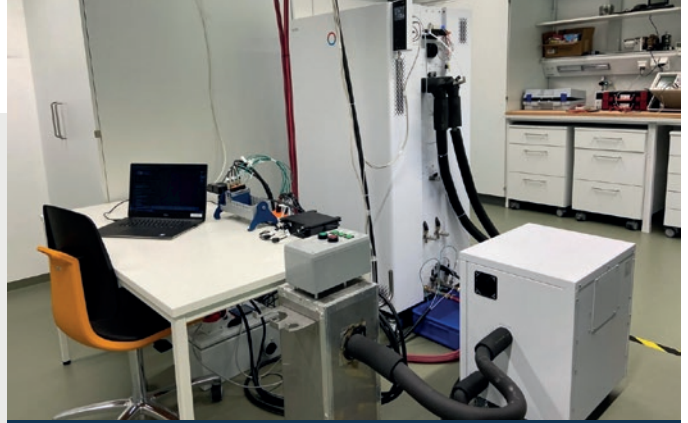


Anschlussleitungen der extern verbauten Sensorik am IN 1850 XTW Prototypen.

Bildquellen: LAUDA



ProTemp Projektteam von LAUDA und der HS Aalen.



ProTemp Prüfstand der Hochschule Aalen.

anwendbarer Toolboxes, eröffnet auch mittelständischen Unternehmen die Möglichkeit, KI-Lösungen zu entwickeln und zu vermarkten.

**Hemmnisse:** Die Maschinen-Datenakquise aus dem Feld (beim Kunden) gestaltet sich sehr schwierig, insbesondere hinsichtlich der kontinuierlichen Datenerfassung über die gesamte Lebensdauer. Hier verhindern vor allem die kundenseitigen IT-Richtlinien eine Verbindung der LAUDA Maschinen zu externen Kontaktpunkten. Aus diesem Grund bietet sich eine Edge-Lösung (lokale Implementierung) an, welche jedoch mit dem Nachteil einhergeht, keine zentrale Trainingsdaten aus diesen Geräten nutzen zu können.

Das IAA und LAUDA DR. R. WOBSE GMBH & CO. KG sind zuversichtlich, dass es die Zukunft der Temperiergeräte-Technologie nachhaltig verändern wird.

#### **EFFIZIENZGEWINNE UND ANDERE VORTEILE**

Das gemeinsame Ziel dieses Forschungsprojekts ist die Entwicklung eines KI-gestützten Prognostics and Health Management-Systems (kurz: PHM), welches die Zustandsüberwachung von LAUDA Temperiergeräten entscheidend verbessert. Dies führt zu einer verlängerten Einsatz- sowie Leistungsfähigkeit der dadurch zuverlässigeren Geräte – die Produktion muss deutlich weniger Ausfälle oder gar Stillstände hinnehmen, was erheblich Zeit und Kosten einspart. Darüber hinaus lassen sich mit Hilfe von maschinellem Lernen effiziente Betriebsstrategien generieren, wie beispielsweise die Optimierung der Durchflussförderung zeigt.

#### **DIE TECHNOLOGIE IM DETAIL**

Zur Einschränkung der Komplexität und zur Fokussierung auf relevante Ausfall-Szenarien wurde seitens LAUDA eine detaillierte Analyse für einen bestimmten Gerätetyp durchgeführt. Diese diente dann zum Aufbau eines Sensorkonzepts, welches neben den standardmäßig verbauten Gerätesensoren auch externe Sensorik umfasste. Außerdem wurden für die verschiedenen Ausfall-

ursachen/Thematiken spezielle Prüfversuche definiert, welche nach Einschätzung der Experten von LAUDA und der Hochschule Aalen geeignet sind, die jeweiligen Problematiken nachzustellen, und insbesondere für das Labeling der KI-Modelle genutzt werden können. Ein Hauptziel der Untersuchungen ist es auch, zu eruieren, ob zu den serienmäßig verbauten Sensoren die zusätzlichen Sensoren zwingend für ein Health Management-System benötigt werden oder aber nur innerhalb des KI-Modell-Trainings von Bedeutung sind. Aus kommerzieller Sicht wäre es ein Projekterfolg, wenn die priorisierten Ausfallursachen ohne zusätzliche, sondern nur mit der heutigen Geräte-Sensorik im Vorfeld erkannt werden können.

#### **Serien-Sensorik & Daten:**

- Nutzung von 88 aufgezeichneten Parametern, z. B. Temperaturen, Drücke, Leistungsaufnahme, Sollwertvorgaben
- Externe Sensorik (insgesamt 23 Sensoren): z. B. Vibrations-, Temperatur-, Drucksensoren
- Derzeit werden verschiedene KI-Methoden hinsichtlich ihrer Eignung und Genauigkeit untersucht. Neben neuronalen Netzen wird auch ein Random Forrest Classifier untersucht.

Zum jetzigen Projektstand lassen sich die Methoden nicht abschließend bewerten, da dies Ziel der jetzigen Projektphase ist. Erste Vorabergebnisse stimmen uns jedoch positiv, die Ziele erreichen zu können.

i

**CHRISTOPH MUHR**  
christoph.muhr@lauda.de

**LAUDA DR. R. WOBSE GMBH & CO. KG**  
Lauda-Königshofen  
www.lauda.de

**Institut für Antriebstechnik (IAA)**  
Hochschule Aalen  
www.hs-aalen.de/de/news/5004

# Datenmanagement-Plattform LabV mit KI-gestütztem Digitalen Assistenten

Der KI-gestützte digitale Assistent von LabV ermöglicht Prüflaboren, komplexe Datensätze einfach zu analysieren und tiefe Einblicke zu gewinnen, was die Produktivität in Qualitätssicherung und Entwicklung steigert.

## DIE KI-LÖSUNG UND IHR ANWENDUNGSBEREICH

Die integrierte Funktion der Künstlichen Intelligenz (KI) in der Datenmanagement-Plattform LabV ermöglicht es Laboren, komplexe Datensätze ohne spezielle Programmierkenntnisse zu analysieren. Die natürliche Sprachverarbeitung ist vergleichbar mit ChatGPT, sodass das Labor mit einfachen Befehlen neue Einblicke in seine Datenwelt gewinnt.

LabV schafft die notwendige Infrastruktur für Prüflabore, um KI-Technologie effektiv zu nutzen. Vor LabV waren Labore gezwungen, Daten manuell zu durchforsten – eine Aufgabe, die aufgrund komplexer Datenstrukturen oft unmöglich oder zumindest zeitaufwendig war. Mit der Einführung von LabV und dem digitalen Assistenten können Labore nun alle anfallenden Daten im Labor er-

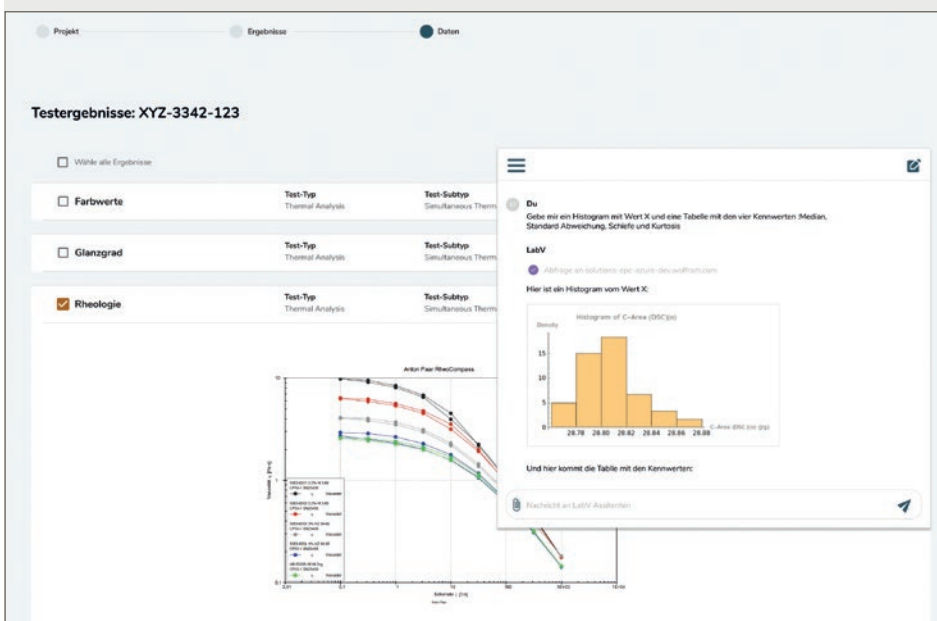
fassen und durch einfache Befehle versteckte Einsichten freilegen, was zu neuen Erkenntnissen und einer erheblichen Effizienzsteigerung führt. Doppelarbeit und aufwendige Datenaufbereitung werden vermieden und Produkte schneller entwickelt.

LabV findet seinen Einsatz in verschiedenen Branchen der verarbeitenden Industrie, unter anderem der chemischen Industrie, der Farben- und Lackindustrie sowie der Kunststoffverarbeitung. Die Zukunft sieht eine breitere Anwendung vor, da das Bewusstsein für die Vorteile der KI in der Datenanalyse von Prüflaboren wächst. Treiber für die Marktdurchdringung sind der steigende Bedarf an einer effizienteren Datenverwaltung und -nutzung sowie der Wunsch nach beschleunigter Erkennung von Trends, Anomalien und Zusammenhängen in Qualitätssicherung und Entwicklung.

Hemmnisse könnten Datenschutzbedenken und die Anfangsinvestition für kleinere Labore sein. LabV adressiert diese durch strenge Datenschutzmaßnahmen und eine skalierbare Plattform. LabV arbeitet kontinuierlich an Weiterentwicklungen, einschließlich verbesserter KI-Algorithmen für branchenspezifische Anwendungen.

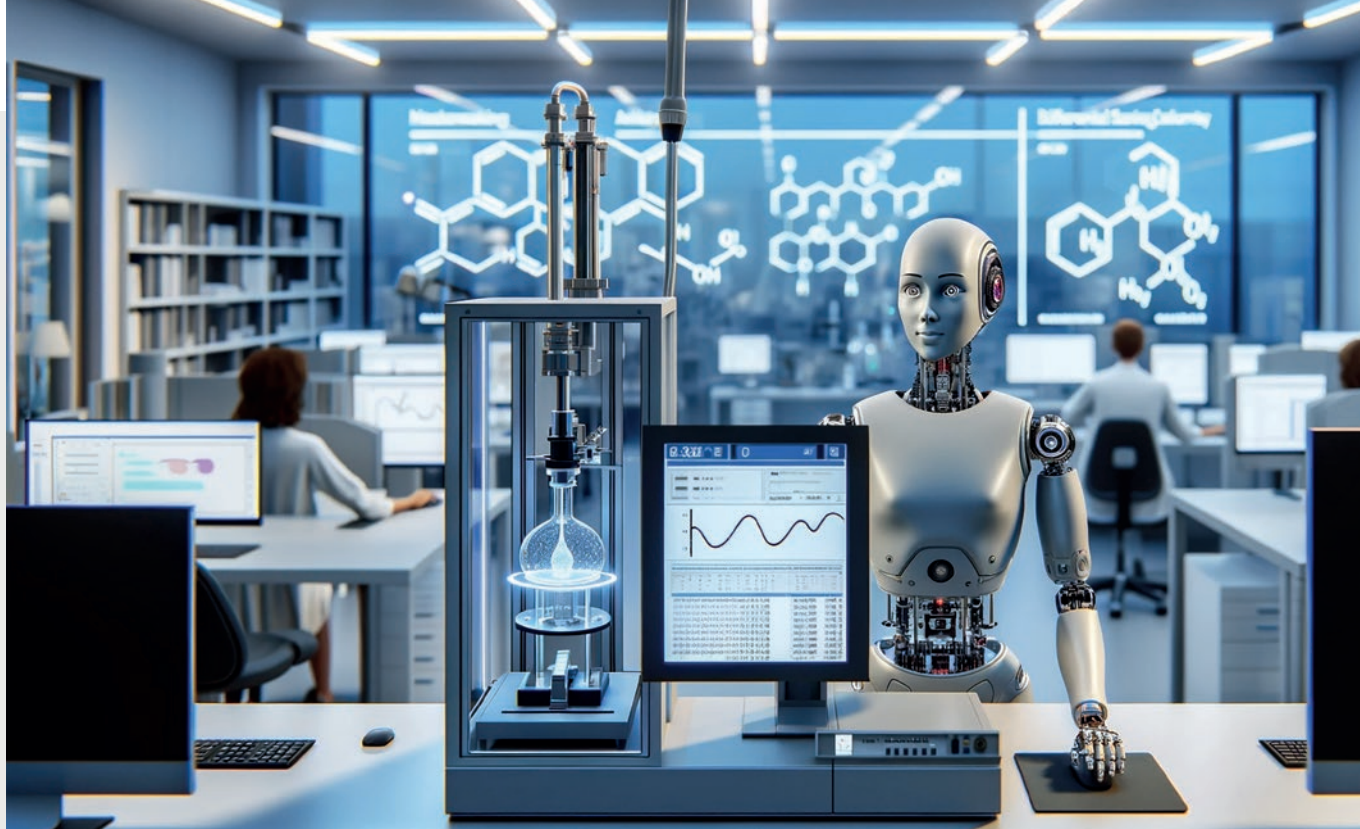
## EFFIZIENZGEWINNE UND ANDERE VORTEILE

LabVs Plattform nutzt die Künstliche Intelligenz, um Laboren durch einfache Text- und Sprachein-



LabVs Digitaler Assistent ermöglicht komplexe Analysen und Visualisierungen auf Knopfdruck.

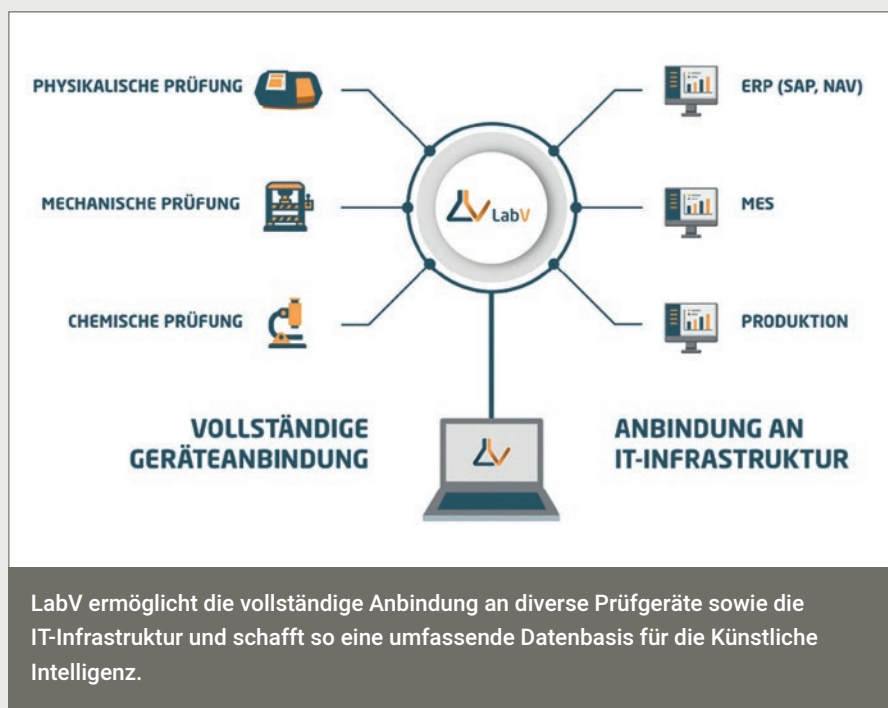




gaben bisher unerschlossene Datenanalysen zu ermöglichen, wodurch die Effizienz in Qualitätssicherung, Verfahrenstechnik und Materialentwicklung erheblich verbessert wird. LabV führt zu Zeitersparnissen von bis zu 30%, schnellerer Fehlererkennung und -vermeidung in der Qualitätssicherung sowie zu reduziertem Testaufwand dank datengestützter Entwicklung in der R&D und Verfahrenstechnik. Doppelparbeit wird eliminiert, und Produkte werden schneller entwickelt, was Material-, Personal- und Kosteneinsparungen mit sich bringt.

### DIE TECHNOLOGIE IM DETAIL

LabVs Plattform nutzt die Künstliche Intelligenz (KI) zur Automatisierung der Datenanalyse in Prüflaboren. Sie integriert Daten aus diversen Quellen, wie chemische, physikalische, mechanische Prüfgeräte, ERP, MES und bietet für die KI eine umfassende Datenbasis. So ermöglicht die KI dem Labor tiefgehende Einblicke ohne Programmierkenntnisse durch Analyse von Trends, Abweichungen und Korrelationen. Die Lösung, unterstützt durch eine cloudbasierte IT-Infrastruktur in Deutschland, gewährleistet Datenschutz und Sicherheit. Entwickelt für die schnelle Identifikation unerkannter Zusammenhänge, steigert sie Effizienz in Qualitätssicherung, Materialent-



wicklung und Verfahrenstechnik. Die Plattform adressiert branchenspezifische Bedürfnisse von Prüflaboren in Chemie und produzierenden Unternehmen.

i

**DR. STEFAN THOMAS**

LabV Intelligent Solutions GmbH, München

stefan.thomas@labv.io

www.labv.io

# KI-gestützte Qualitätskontrolle für DNA- und RNA-Oligonukleotidsynthese

Als Qualitätskontrolle überprüft die KI, ob die Massenspektren von kundenspezifisch produzierten Oligonukleotiden mit den erwarteten Spektren übereinstimmen, und zieht bei Abweichungen menschliche Unterstützung zu Rate.

## IN KÜRZE

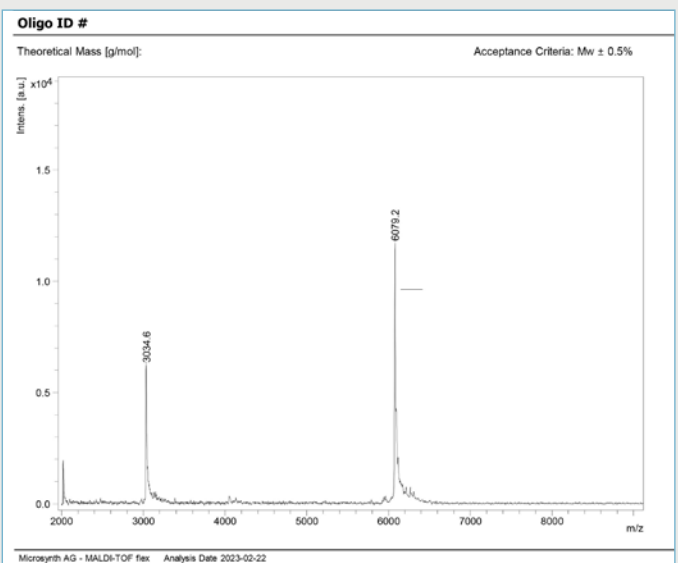
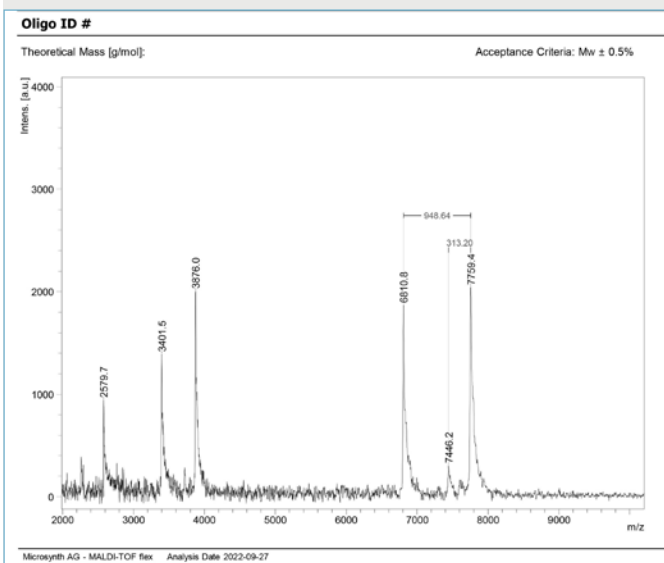
Eine speziell trainierte KI soll bei der Oligonukleotidsynthese im Rahmen der Qualitätskontrolle menschliche Expertinnen und Experten unterstützen, indem sie IST-Massenspektren mit SOLL-Massenspektren vergleicht und Abweichungen meldet. Die kundenspezifischen Oligonukleotide weisen eine hohe Variabilität auf, sodass die KI nicht alle SOLL-Massenspektren per se verfügbar hat, sondern teilweise ihr unbekannte Spektren korrekt vorhersagen muss.

## DIE KI-LÖSUNG UND IHR ANWENDUNGSBEREICH

Die KI-Lösung soll Bestandteil des Qualitätsmanagements bei der Microsynth AG mit Sitz in Balgach (CH)

sein. Die Evaluation der Machbarkeit und das Umsetzungskonzept stammen von der infoteam Software AG (D).

Bevor die produzierten Oligonukleotide an die Kunden gehen, durchlaufen sie eine strenge Qualitätskontrolle: Mittels Massenspektrometrie ermitteln Expertinnen und Experten, ob die produzierten Oligos in ihrer Zusammensetzung den strengen Kunden- und Qualitätsvorgaben entsprechen (Abb. 1 und 2). Hierfür sichtet eine Person jedes erzeugte Massenspektrum und beurteilt, ob die Spitzen (Peaks) in der Messung dem zu erwartenden Bild entsprechen oder ob es außergewöhnliche Peaks gibt. Bei der Microsynth AG fallen pro Tag bis zu 2.000 Messungen an, die innerhalb weniger Stunden und vor dem Versand der



Die Massenspektrometrie gibt Aufschluss über die Zusammensetzung der produzierten Oligonukleotidsynthesen. Abb. 1 zeigt das Massenspektrum eines sauberen Oligos, Abb. 2 zeigt ein Oligo mit Syntheseabbruch. Bislang bewerten menschliche Experten die Massenspektren, zukünftig soll eine KI in der Lage sein, die SOLL-Spektren vorherzusagen und anhand der IST-Bildern zu analysieren, welche Peaks zum Spektrum des Hauptprodukts gehören und welche nicht da sein sollten.



Beispielfoto DNA-Moleküle

Oligos begutachtet werden müssen – eine extrem wichtige Arbeit, aber auch ein enormer Zeit- und Kostenfaktor.

Die KI soll die Qualitätskontrolle unterstützen oder sogar automatisiert übernehmen: Hierfür erlernt sie anhand von Massespektren gängiger Oligonukleotide, auch ihr unbekannte SOLL-Spektren von Oligonukleotiden vorherzusagen. Diese Spektren vergleicht sie mit den IST-Spektren und holt menschliche Unterstützung zu Hilfe, wenn die Kontrolle nicht den Erwartungen entspricht.

Das Projekt hat die Machbarkeitsprüfung erfolgreich durchlaufen. Der nächste Schritt ist der Aufbau von Trainingsdaten für einen Proof of Concept und die Modellierung der KI. Der Aufbau einer digitalen Datenbank für das KI-Training erfordert Zeit- und Personalressourcen, wobei die Vernetzung von Laborgeräten und Laborsoftware diesen Prozess mittels Automatisierung vereinfachen könnte. Die enormen Vorteile einer unterstützenden KI bei der Qualitätssicherung stärken die Initiative.

Aktuell liegt der Fokus auf der Ausgestaltung der Basisidee.

#### **EFFIZIENZGEWINNE UND ANDERE VORTEILE**

Derzeit müssen die Laborexpertinnen und -experten täglich 2.000 Messungen innerhalb weniger Stunden und vor dem Versand der produzierten Oligonukleotide manuell prüfen. Die KI-Lösung beschleunigt das Verfahren um ein Vielfaches, da sie bestenfalls automatisiert arbeitet und menschliche Unterstützung nur bei Abweichungen hinzuzieht. Zugleich erhöht die KI die Zuverlässigkeit der Qualitätsprüfungen, da sie auch bei hohem Prüfungsaufkommen und engen Zeitfenstern Qualitätsabweichungen erkennt und meldet.

#### **DIE TECHNOLOGIE IM DETAIL**

Das Training des KI-Modells soll durch überwachtes Lernen (Supervised Learning) als Kategorie des maschinellen Lernens erfolgen. Als Daten kommen hierbei Paare von Beschreibungen der Oligonukleotide und den erwarteten Spektren in Betracht. Diese können wahlweise und ggf. frei kombinierbar aus dem Live-Betrieb der Microsynth AG oder aus verfügbaren offenen Datenbanken stammen. Forschungsergebnisse in diesem Bereich zeigen, dass eine robuste Modellierung mit einer geeigneten Modellarchitektur und geeigneten Trainingsdaten möglich ist – das heißt, dass zu erwartende Spektren von Oligonukleotiden auch dann richtig vorhergesagt werden können, wenn diese nicht Teil der Trainingsdaten waren. Dies ermöglicht eine datenbasierte Schätzung der SOLL-Spektren, mit deren Hilfe die IST-Spektren der variabel produzierten Oligos begutachtet werden können.



**THOMAS EICHMANN**  
infoteam Software AG (Schweiz)

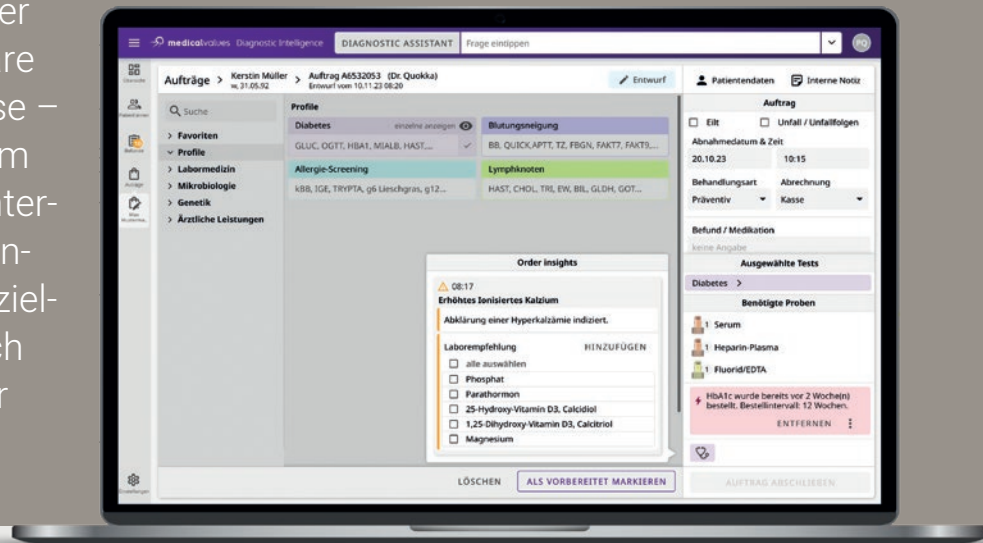
Tel. +41 79 42 07 094  
Thomas.Eichmann@infoteam-software.ch

**infoteam Software AG**

Tel. +49 9131 78 00-280  
lifescience@infoteam.de  
www.infoteam.de

# KI-Plattform für die integrierte Diagnostik – Order Entry und Diagnoseunterstützung der nächsten Generation

Verwandlung medizinischer Datenpunkte in anwendbare diagnostische Erkenntnisse – mit einer Softwareplattform für Labore und Kliniken unterstützt medicalvalues ÄrztInnen bei der frühen und gezielten Diagnosestellung durch die Verknüpfung klinischer Pfade und Daten.



Intelligentes Order Entry mit individuellen Testvorschlägen im Bestellprozess

**08:17 Max Mustermann**

**Erhöhtes Ionisiertes Kalzium**

Abklärung einer Hyperkalzämie indiziert.

**Laborempfehlung** **BESTELLEN**

- Phosphat
- Parathormon
- 25-Hydroxy-Vitamin D3, Calcidiol
- 1,25-Dihydroxy-Vitamin D3, Calcitriol
- Magnesium

**09:25 Jane Doe**

**Verdacht auf gestörte Gerinnung**

Chirurgische Eingriffe nur nach ausführlicher Evaluierung und gegebenenfalls Substitution von Gerinnungsfaktoren indiziert.

Diagnostische Insights mit konkreten Erkenntnissen und Handlungsempfehlungen

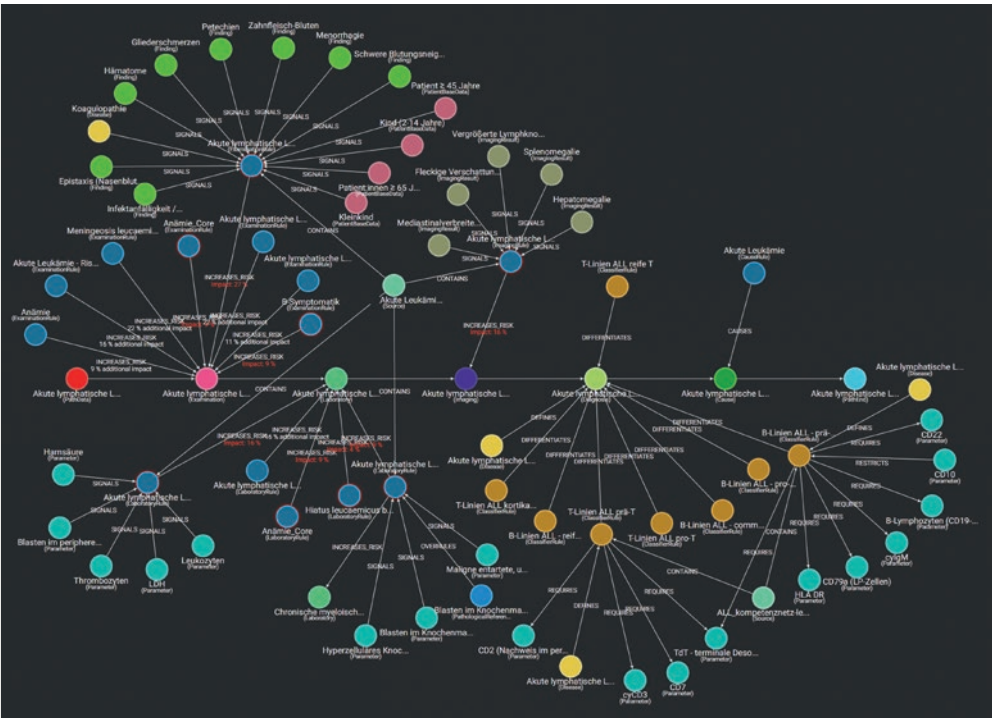
## DIE KI-LÖSUNG UND IHR ANWENDUNGSBEREICH

Mehrere tausend Laborparameter im Leistungsverzeichnis sowie eine Vielzahl an Zahlen, Trends und Wechselwirkungen – die Labormedizin ist leistungsstark, doch gleichzeitig wird die Diagnosefindung zunehmend komplexer. Unterschiedliche Studien belegen, dass das diagnostische Potenzial daher oftmals nicht optimal genutzt wird.

Gemeinsam mit Laborpartnern hat ein Team von medicalvalues bestehend aus MedizinerInnen, EntwicklerInnen und Software-ArchitektInnen ein zertifiziertes, KI-gestütztes System für die integrierte Labordiagnostik entwickelt, mit dem ÄrztInnen entlang dieses komplexen Diagnosefindungsprozesses begleitet werden.

Mit einem Order Entry der nächsten Generation unterstützt die Lösung einsendende ÄrztInnen mit intelligenten Testvorschlägen, einer modernen An- und Nachforderung von (Spezial-)Parametern und innovativer Befundaus-

kunft. Basierend auf den KBV-Regeln, eigenen SOPs und Echtzeitdaten der PatientInnen (aktuelle Laborwerte, Trends aus Vorwerten, Symptomen, Vorerkrankungen und Verdachtsdiagnosen), gibt das System Hinweise zu redundanten bzw. nicht sinnvollen ausgewählten Parametern sowie Empfehlungen zu zusätzlich potenziell relevanten Tests im Bestellprozess – verständlich aufbereitet und jederzeit nachvollziehbar.



**Exemplarischer Diagnosepfad (Akute Lymphatische Leukämie) im Knowledge Graph**

Zudem werden verschiedene Instrumente für ein zentrales Stammdatenmanagement, eine (semi-) automatisierte Validierung und Befundgenerierung sowie umfassende Analyse- und Reporting-Tools angeboten.

Die Module sind bereits bei großen Laborketten (u.a. amedes), mittelgroßen Privatlaboren und auch bei (Universitäts-)Kliniklaboren im Einsatz. Labore werden auch in Zukunft eine zentrale Rolle im Diagnostikprozess spielen. Die Lösung von medicalvalues soll dabei unterstützen, diese mithilfe von innovativen (KI-basierten) Lösungen wahrzunehmen und auch weitere Datenpunkte zu integrieren.

**EFFIZIENZGEWINNE UND ANDERE VORTEILE**

Der Ansatz fokussiert sich insbesondere auf einen nutzerfreundlichen Bestellfluss, die Reduktion von Fehlern in der Präanalytik sowie den effektiven Einsatz des gesamten diagnostischen Spektrums (inkl. Spezialparameter).

Die modulare Lösung bietet eine intelligente Infrastruktur für moderne Diagnostik und ermöglicht Nutzern die Differenzierung durch diagnostische Exzellenz. Gleichzeitig werden Mitarbeitende dank Automatisierung und Innovation in den operativen Prozessen entlastet.

**DIE TECHNOLOGIE IM DETAIL**

Genutzt wird ein hybrider Ansatz zur Verknüpfung von Forschungswissen mit diagnoserelevanten Echtzeit-

daten. Dafür wurden ca. 500 medizinisch-validierte Diagnosepfade aus unterschiedlichen Krankheitsgebieten (z. B. Rheumatologie, Infektiologie, Onkologie) in Knowledge Graphen modelliert, die mit Patienteninformationen abgeglichen werden. Eine Machine Learning-Komponente führt die Daten fachdisziplinübergreifend zusammen und gibt Empfehlungen zur Verdachtsdiagnose sowie zum bestmöglichen nächsten Diagnostikschritt (z. B. auch zur Kombination von Routinediagnostik mit Spezialparametern).

Für die Erklärbarkeit und Akzeptanz wird auf eine White-box-KI gesetzt. Somit ist jederzeit nachvollziehbar, wie das System zu den jeweiligen Empfehlungen gekommen ist.

Durch offene Schnittstellen (FHIR/HL7) und die Nutzung von Standards (z. B. LOINC, SNOMED CT) wird eine nahtlose Integration in bestehende IT-Landschaften ermöglicht. Dank der Kombination von zentraler und dezentraler Architektur wird der Schutz sensibler Patientendaten sichergestellt.



**CARMEN DIKER**  
 medicalvalues GmbH, Karlsruhe  
 Tel. +49 (0)152 5966 1724  
 carmen.diker@medicalvalues.de  
 www.medicalvalues.de/de/

# ASR – die smarte Roboterzelle für automatisiertes Probenhandling

Mit der ASR – der KI-basierten Plug & Play-Roboterzelle für automatisiertes Probenhandling – werden eingehende Probenröhrchen in Laboren effizient und zuverlässig identifiziert, sortiert und für die Folgeprozesse vorbereitet und übergeben.

## DIE KI-LÖSUNG UND IHR ANWENDUNGSBEREICH

Durch Integration der auf KI basierten robobrain® Technologie ist die smarte Roboterzelle ASR in der Lage, eingehende Probenröhrchen in Laboren zu erkennen, zu identifizieren, sortieren und anschließend für die folgenden Prozesse vorzubereiten und zu übergeben. Dank dem Einsatz smarter KI-Skills ist es möglich, verschiedenste Proben flexibel, unabhängig von ihrem Inhalt, Durchmesser und Kappenfarbe, zu sortieren und zu verarbeiten.

Manuelles Probenhandling ist heute der Standard in deutschen Laboren: Rund 4.500 Proben müssen pro Schicht von durchschnittlich 8 Mitarbeitenden mit hohem manu-

ellen Aufwand sortiert werden. (Quelle: Umfrage LABO Magazin (2022): Befragung von insgesamt 47 Beschäftigten in deutschen Laboren).

Durch die Automatisierung der Probensortierung können Labore den Bedarf an monotoner Arbeit reduzieren, sodass sich das Laborpersonal auf komplexere und spezialisierte Aufgaben konzentrieren kann.

Die Technologie wird bereits in ersten Krankenhäusern und Laboren zur automatisierten Probenannahme, Handhabung, Qualitätssicherung und zum Einbuchen in das Laborinformationssystem (LIS) verwendet.

Der größte Treiber ist der sich zuspitzende Fachkräftemangel. Labore haben längst erkannt, dass Mitarbeitende ihr höchstes Gut sind, und nun gilt es, diese in möglichst vielen Bereichen zu entlasten. Das größte Hemmnis ist dabei schlicht, dass viele Laborbetreiber gar nicht wissen, welchen Vorteil ein KI-gestütztes Robotik-System bieten kann.

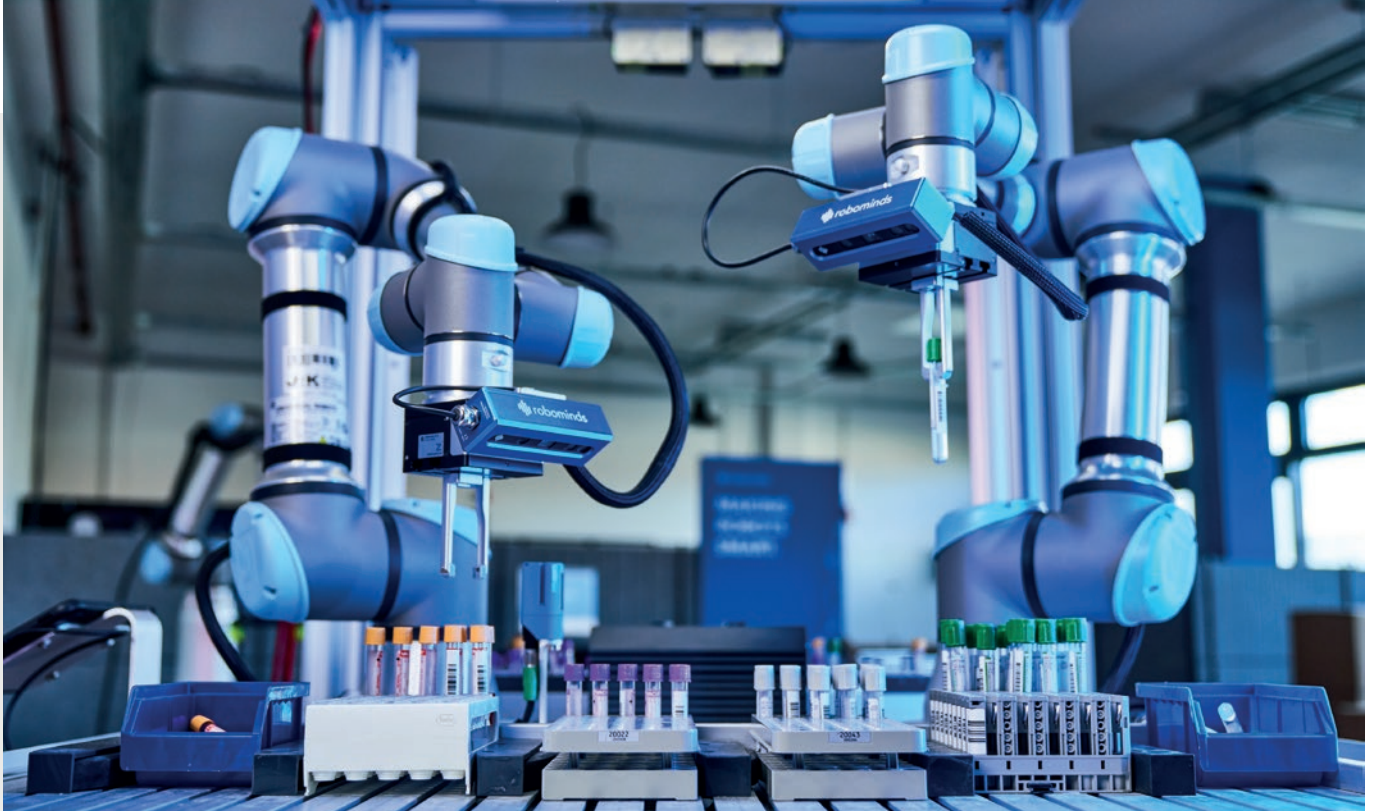
Automatisiertes Probenhandling stellt nur einen von vielen Bereichen im Ökosystem „Labor“ dar, in dem KI und Robotik einen Mehrwert liefern werden. Die Entwicklung weiterer Lösungen für mehr Effizienz ist bereits in vollem Gange.

## EFFIZIENZGEWINNE UND ANDERE VORTEILE

### Die Hauptvorteile der ASR:

- **Hoher Durchsatz:** Die ASR kann eine große Anzahl von Probenröhrchen schnell sortieren



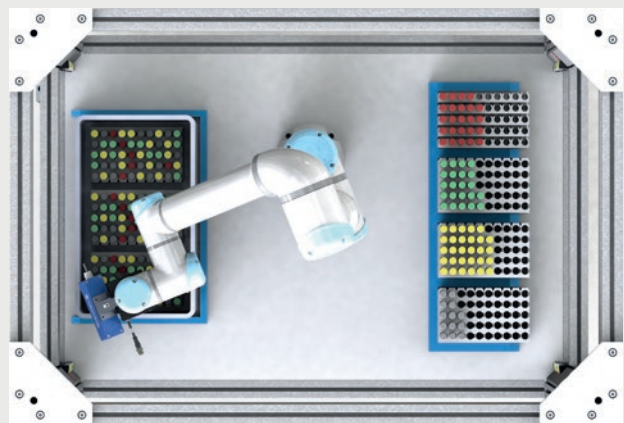


- **Benutzerfreundlich:** Einfache Bedienung durch Labormitarbeitende, keine Robotik-Vorkenntnisse nötig
- **Zeiteffizient:** durch 24/7 Betrieb und KI-Skills, effiziente Handhabung von Peakzeiten
- **Sicher:** Umfassendes Sicherheitskonzept und Prozessstabilität
- **Reduzierte Fehlerquote:** Automatisiertes Probenhandling minimiert Fehler, die bei manuellem Handling nicht zu vermeiden sind.

### DIE TECHNOLOGIE IM DETAIL

Das technologische Kernstück der ASR bildet das robo-brain® – das Gehirn, das Industrierobotern menschliche Intelligenz verleiht und Künstliche Intelligenz, Vision und smarte Skills vereint. Kombiniert mit den passenden Robotik-Komponenten, wie z.B. Roboterarm und Greifer, sowie der Verknüpfung mit weiteren Technologien – wie dem Laborinformationssystem (LIS) – entsteht so eine ganzheitliche Lösung für das effiziente Handling von Laborproben. Im Fokus der ASR steht dabei vor allem die Benutzerfreundlichkeit mit einer einfachen Handhabung: die gesamte Komplexität übernimmt die KI, sodass der Anwender sich auf die wesentlichen Dinge konzentrieren kann. Dabei umfasst sie folgende technologische Funktionen:

**Sortierung & Vorbereitung:** Sortieren von verschiedenen Arten von Probenröhrchen, unabhängig von Probeninhalt (Blut, Urin, Stuhl, Gewebe) und Form, sowie Vorbereitung für die Folgeprozesse.



**Farberkennung:** Erkennung und Sortierung von Röhrchen auf der Grundlage unterschiedlicher Verschlussfarben, Erkennung von Kollisionen: Die integrierte Kollisionsanalyse mit den entsprechenden Röhrchen stellt sicher, dass bei der Probenentnahme keine Beschädigung anderer Röhrchen erfolgt.

**Röhrchenkappen-Messung:** Durch die Messung des Durchmessers der Verschlüsse können Proben verschiedener Größen sortiert werden.

i

**CHRISTIAN FENK**  
robominds GmbH, München

Tel. +49 151 238 635 41

cf@robominds.de

<https://www.robominds.de/blog/ki-robotik-als-problemloeser-in-der-laborautomatisierung>

# Verborgene Moleküle – mit maschinellem Lernen Schadstoffe und Wirkstoffe aufklären

SIRIUS ist eine Softwarelösung zur automatischen Strukturaufklärung unbekannter Moleküle und leistet einen wertvollen Beitrag zur Entdeckung neuer Wirkstoffe und zur Identifizierung von Schadstoffen und Verunreinigungen.

## DIE KI-LÖSUNG UND IHR ANWENDUNGSBEREICH

Kleine Moleküle sind von entscheidender Bedeutung für eine Vielzahl von Branchen – von der Wirkstoffforschung und Diagnostik bis hin zur Nahrungsmittelindustrie und Umwelttoxikologie. Sie kommen in komplexen Gemischen aus Tausenden verschiedener Moleküle vor. Die Herausforderung besteht darin, die Moleküle zu identifizieren. Traditionell beruht die Identifizierung auf dem Vergleich von Massenspektren mit Referenzmessungen bekannter Verbindungen. Für mehr als 90% der Moleküle existieren jedoch keine solchen Referenzstandards.

Die Software SIRIUS ist eine Lösung für die automatische Identifizierung dieser kleinen Moleküle. SIRIUS revolutioniert die Analyse komplexer Stoffgemische durch die vollautomatische Strukturanalyse einer großen Anzahl unbekannter Moleküle im Hochdurchsatzverfahren, ohne dass Referenzsubstanzen erforderlich sind. Dabei werden Methoden des maschinellen Lernens verwendet, um Eigenschaften der Molekülstruktur aus Massen-

spektren vorherzusagen und damit in umfangreichen Strukturdatenbanken zu suchen. Ist ein Molekül nicht in der Datenbank vorhanden, liefert die Software wertvolle Informationen über mögliche Stoffklassen. Die zugrunde liegenden Algorithmen werden seit vielen Jahren in Zusammenarbeit mit der FSU Jena entwickelt.

Die Identifizierung kleiner Moleküle in komplexen Proben ist entscheidend für die Bewältigung vieler globaler Herausforderungen: von der Entdeckung neuer Medikamente und bioaktiver Verbindungen bis hin zur Verbesserung der Resistenz von Nutzpflanzen, der Wasseraufbereitung und der Kontrolle komplexer toxischer Verbindungen. Es ermöglicht die gezielte Analyse von extrahierbaren und auslaugbaren Stoffen aus beispielsweise Verpackungsmaterialien oder Verunreinigungen in Produkten. SIRIUS findet bereits Anwendung in der Pharma- und Lebensmittelindustrie, bei aufstrebenden Biotech-Unternehmen sowie bei Dienstleistern für analytische Messungen.

## EFFIZIENZGEWINNE UND WEITERE VORTEILE

Die KI-Lösung hebt die Funktionalitäten von Massenspektrometrie-Geräten auf ein neues Level. Statt Tausende von Strukturkandidaten manuell zu bewerten, können sich die Nutzer auf die von SIRIUS identifizierten Moleküle konzentrieren. Damit wird der Bedarf an kostspieligen und zeitaufwendigen Folgeexperimenten erheblich verringert. Der größte Gewinn ist aber der Übergang von der gezielten zur nicht zielgerichteten Analyse – weg von der Wiederentdeckung bekannter Moleküle hin zur umfassenden Erforschung all jener Moleküle, die derzeit unentdeckt bleiben.



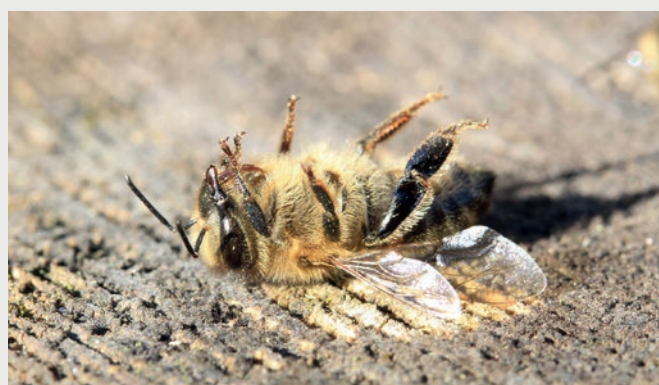




## DIE TECHNOLOGIE IM DETAIL

SIRIUS ermöglicht die Strukturaufklärung kleiner Moleküle in mehreren Schritten und mittels verschiedener Methoden zur umfassenden Analyse komplexer Stoffgemische. Zunächst wird die Summenformel des Moleküls ermittelt, indem alle möglichen Formeln generiert und anhand des Isotopen- und Fragmentierungsmusters bewertet werden. Für jede Formel wird ein Fragmentierungsbaum berechnet. Dieser Baum ist eine strukturierte Darstellung des Spektrums, dient zur Bewertung der Summenformel und als Grundlage für die nachfolgenden Methoden des maschinellen Lernens. Um das Massenspektrum mit einer Molekülstrukturdatenbank abzugleichen, wird ein molekularer Fingerabdruck mittels maschinellen Lernens vorhergesagt. Dieser Fingerabdruck enthält Informationen über Tausende von möglichen Teilstrukturen im Molekül und wird mit den Fingerabdrücken der Strukturen in der Datenbank verglichen. Jedem Treffer wird ein Konfidenzwert zugewiesen. Die Konfidenzwerte helfen bei der Priorisierung der vielversprechendsten Treffer.

Für vollkommen unbekannte Moleküle, die noch nicht einmal in Strukturdatenbanken enthalten sind, sagt die Lösung die Zugehörigkeit zu über 2.500 Stoffklassen vorher. Basierend auf den Informationen über Teilstrukturen des Moleküls, können außerdem Strukturkandidaten des Moleküls mittels maschinellen Lernens generiert werden.



Der weit verbreitete Einsatz von Insektiziden ist eine Bedrohung für bestäubende Insekten. Die Analyse derer Abbauprodukte ist von entscheidender Bedeutung für die Bewertung ihrer Umweltauswirkungen und potenziellen Risiken. SIRIUS kann verwendet werden, um eine Datenbank aus eigens generierten, potenziellen Strukturen zu durchsuchen. Dieser Ansatz erweist sich branchenübergreifend als besonders wertvoll für die Identifizierung unbekannter Transformationsprodukte, u.a. von Pestiziden oder Medikamenten, und bietet einen geeigneteren Suchraum für die Strukturaufklärung.

i

**Bright Giant GmbH**

Hans-Knöll-Str. 6  
07745 Jena

info@bright-giant.com

<https://bright-giant.com/>

# AI solution to integrate drug design, synthesis and sourcing: AIDDISON™ drug discovery software

AIDDISON™ software revolutionizes drug discovery by seamlessly integrating AI-powered molecule design, efficient synthesis planning and direct sourcing of chemical building blocks – accelerating the journey from concept to clinic.

## THE AI SOLUTION AND ITS AREA OF APPLICATION

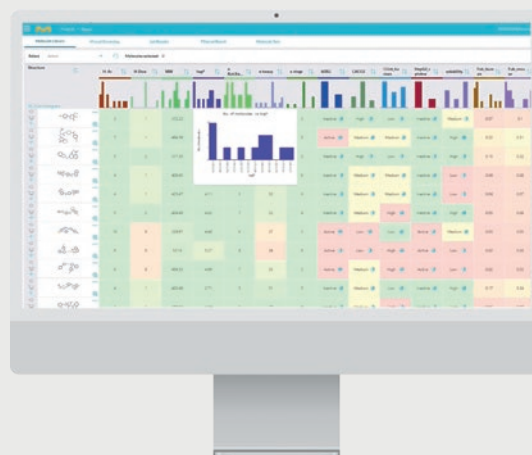
AIDDISON™ empowers medicinal chemists with early-stage prediction of both manufacturability and drug-like properties for novel molecules. This AI-powered platform integrates generative design with predictive synthesis planning, allowing rapid identification of promising candidates and reducing risk of late-stage failures.

AIDDISON™ is the result of a joint venture between the Healthcare and Life Science businesses of Merck, combining decades of validated R&D data with robust chemical catalogs and manufacturability insights.

In early lead discover, it can take months (or even years) to design molecule libraries, synthesize them in the lab, and perform high-throughput screening to identify a potential candidate out of millions. In contrast, AIDDISON™ enables researchers to design a library of molecules that are optimized for synthesis in a few hours, and use ligand- and structure-based screening methods to identify potential leads out of more than 64 billion virtual compounds.

As millions of people are waiting on the promise of new drugs and therapies to come to market, accelerating and reducing cost of drug discovery is one of the most exciting fields where AI and machine learning systems are utilized.

According to market research firm Bekryl, AI has the potential to offer over US\$70 billion in savings for the drug discovery process by 2028. According to Gartner



Research, by 2025, more than 30% of new drugs and materials will be systematically discovered using generative AI techniques, up from zero today.

## BARRIERS AND DRIVERS

The main driver is the need to bring new, life-saving therapeutics to patients faster. Barriers could include: obtaining and training on robust/diverse datasets, building trust in AI predictions, and better understanding how to efficiently synthesize novel, AI-designed molecules.

## EFFICIENCY GAINS AND OTHER BENEFITS

The lab of the future will integrate cutting-edge technologies and methodologies to revolutionize scientific research and development. Cloud computing and artificial intelligence (AI) algorithms will help extract insights from vast amounts of data – which includes enabling digital chemistry and drug discovery systems. Generative AI has



the potential to generate new content and even help us design new – small and large – molecules.

Integrating AI and automation technologies has the potential to save pharmaceutical companies up to 70% of the time and costs for drug discovery.\*

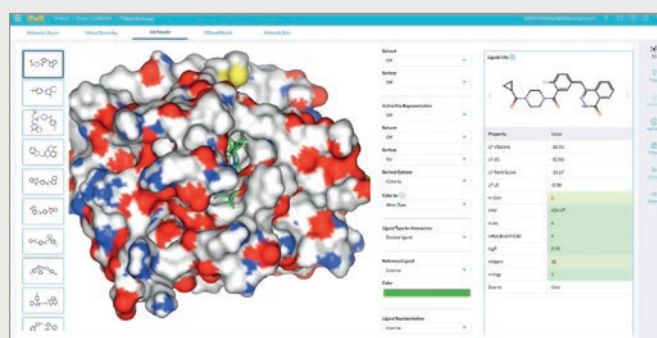
AI and automation systems will take on the more prosaic tasks, freeing up the scientists to conduct the experiments that require a human touch, and to innovate at a quicker pace.

Merck is invested in digitizing life science workflows through multiple solutions, supporting scientists at all stages with tools that can increase efficiency, safety and success rate of delivering new, safe therapies for patients.

## THE TECHNOLOGY IN DETAIL

AIDDISON™ combines the power of artificial intelligence (AI) and computer-aided drug design (CADD) tools into a single integrated platform for virtual screening, scaffold hopping, hit identification, and lead optimization in medicinal chemistry. AIDDISON™ uses generative methods and ML models trained on experimentally validated ADMET data to guide search in ultra-large chemical spaces and de novo design of “drug-like” and synthetically viable compounds. AIDDISON™ also encompasses SA-space™, a synthetically accessible chemical space of approximately 25 billion virtual compounds built on the Sigma-Aldrich® catalog of molecules, that are readily available for purchase, and well-known, robust chemical transformation rules.

\*<https://bekryl.com/industry-trends/ai-artificial-intelligence-in-drug-discoverymarket-size-analysis>



i

**TODD MCKENZIE**  
MERCK

Tel. +1 339 999 1101

[todd.mckenzie@milliporesigma.com](mailto:todd.mckenzie@milliporesigma.com)

[www.sigmaaldrich.com/aiddison](http://www.sigmaaldrich.com/aiddison)

# Mit ChatGPT effizient den Laboralltag vereinfachen

Einfacher, schneller, effizienter: Die Integration eines KI-Chats in ein Laborinformationssystem (LIMS) vereinfacht die Interaktion, beschleunigt das Auffinden gesuchter Inhalte und erhöht insgesamt die Effizienz spürbar.

## DIE KI-LÖSUNG UND IHR ANWENDUNGSBEREICH

Traditionelle Laborinformationssysteme (LIMS) sind zu meist hochkomplex und erfordern spezifisches technisches Wissen sowie umfangreiche Schulungen für eine effektive Nutzung. Ebenso stellt die Akzeptanz bei den Mitarbeitenden sowie die Einarbeitung von Neueinstellungen einen nicht zu unterschätzenden Erfolgsfaktor dar. Die Antwort auf diese typischen Herausforderungen im Laboralltag kann die Integration eines KI-Chats, wie bspw. ChatGPT, sein. Dieser ermöglicht es den Nutzerinnen und Nutzern eines LIMS, einfach und direkt auf die komplexen Datenstrukturen zuzugreifen, Analysen für Proben per natürlicher Sprachinteraktion durchzuführen und mit Hilfe mobiler Geräte überall im Labor mit dem LIMS zu interagieren. Diese Innovation ist damit für die Labore von besonderem Interesse, die sich einer steigenden Nach-

frage nach Effizienz und Digitalisierung gegenübersehen, sowie solche, für die der Fachkräftemangel absehbar eine zentrale Herausforderung darstellen wird.

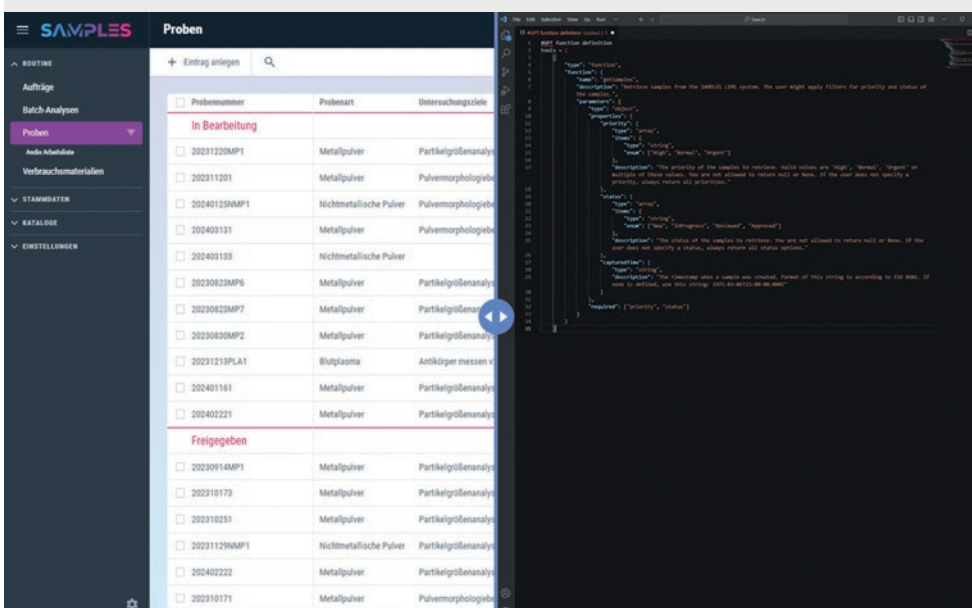
## EFFIZIENZGEWINNE UND WEITERE VORTEILE

Die Integration einer KI-Chat-Funktionalität verbessert die Zugänglichkeit, Nutzerfreundlichkeit und Akzeptanz eines LIMS, da dies eine intuitive Kommunikationsbrücke zwischen dem Nutzer und dem System schafft. Darüber hinaus werden Fehlerquellen minimiert, die Einarbeitungszeit für die Mitarbeitenden optimiert und die allgemeine Laborproduktivität gesteigert. Hinzu kommt, dass aktuell ohnehin eine zunehmende Nutzung von KI-Chats wie ChatGPT in ganz verschiedenen Anwendungsfällen des Arbeitsalltags zu verzeichnen ist. Die spürbaren Vorteile in Bezug auf die Zeitersparnis bei Recherche, Wissens-

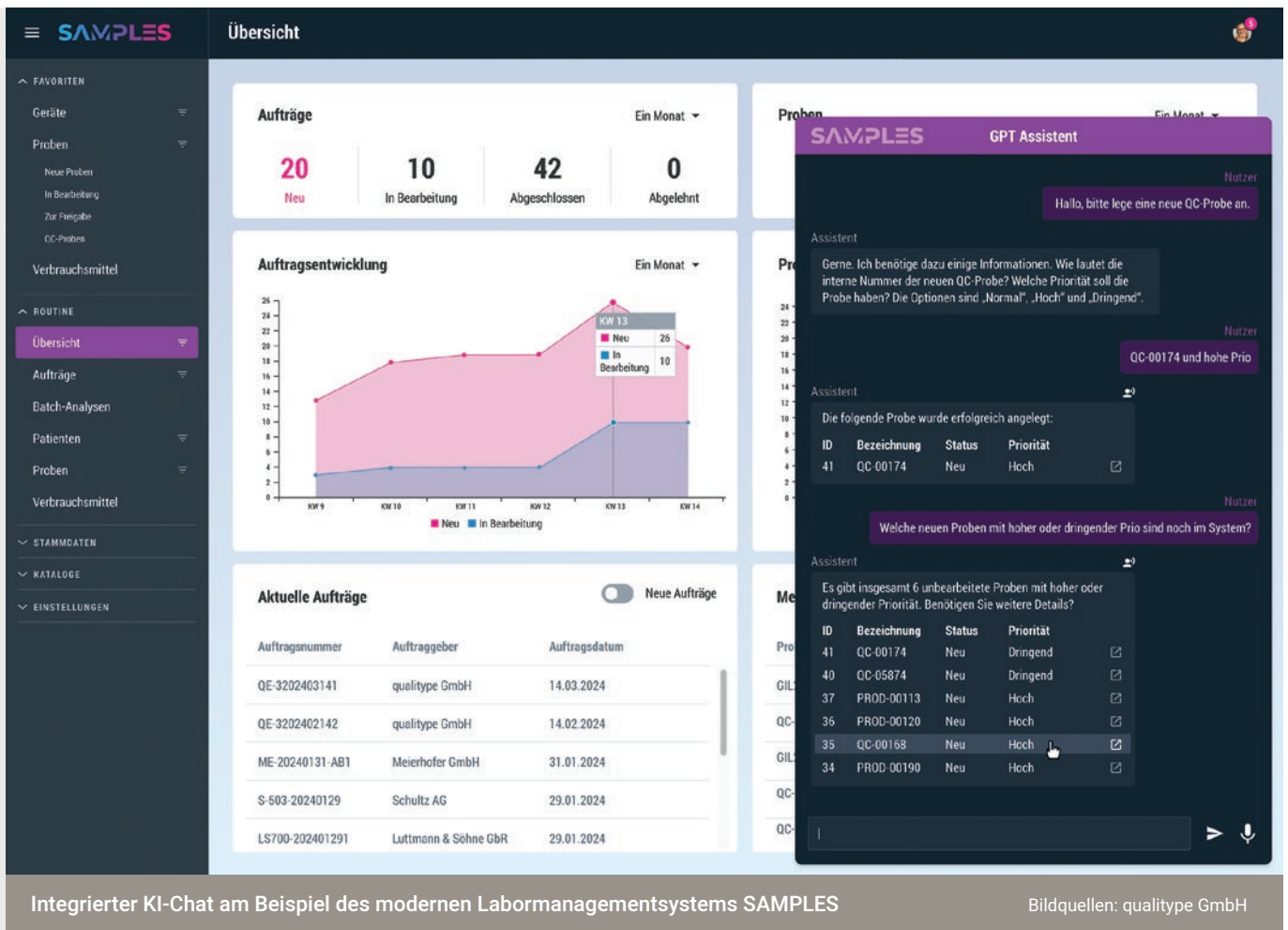
transfer und Entscheidungsfindung kommen so auch bei der Arbeit mit einem Laborinformationssystem zum Tragen – ein Gewinn für die Effektivität im Labor und die Attraktivität als Arbeitgeber.

## DIE TECHNOLOGIE IM DETAIL

Für die Integration eines KI-Chats bedarf es eines LIMS mit einer entsprechend modernen Softwarearchitektur. Essenziell ist eine offene Web-Schnittstelle, die sowohl das Abfragen als auch das Anlegen und Ändern von Daten erlaubt. Ein solch modernes



Für die einfache Integration verfügen moderne LIMS wie SAMPLES über offene Web-Schnittstellen



Integrierter KI-Chat am Beispiel des modernen Labormanagementsystems SAMPLES

Bildquellen: qualitype GmbH

und hochflexibles LIMS ist beispielsweise das von der qualitype GmbH entwickelte SAMPLES. Es verfügt unter anderem über eine innovative GraphQL-Schnittstelle, die den sicheren Datenaustausch ermöglicht.

Für die hier beschriebene Lösung wurde das Large Language Model ChatGPT über ein intuitives Chat-Interface direkt ins Laborinformationssystem SAMPLES integriert. Die Chat-Anwendung hat dabei zwei Schnittstellen: Eine zum LLM und eine zum LIMS. Das LLM kann grundsätzlich wie das gewohnte ChatGPT verwendet werden. Zusätzlich erkennt die Anwendung aber während der Konversation spezielle Anfragen des Nutzers, die sich auf das LIMS beziehen. Hierfür sind entsprechende Funktionen in der Anwendung hinterlegt, die dann ausgeführt werden. Je nachdem wie diese definiert sind, erhalten die Nutzerinnen und Nutzer die gewünschten Informationen über die Schnittstelle aus dem LIMS, wie bspw. durch das Abrufen von Proben oder Ergebnissen mit gewissen Filterkriterien („in welchen Proben wurde Charge-XY verwendet?“). Ebenso können aber auch Aktionen direkt über die Anwendung ausgeführt werden, wie bspw. das

Anlegen neuer Proben im LIMS (siehe Abbildung). In aller Konsequenz kann die Anwendung als gleichwertiges zusätzliches Interface genutzt werden – mit einer Vielzahl weiterer Vorteile und Anwendungsmöglichkeiten.

Die Lösung befindet sich derzeit im Status prototypischer Umsetzung. Die Entwicklung als Feature ist geplant. Perspektivisch sind zudem erweiterte KI-Funktionen angedacht, um im Sinne von Data Mining und Business Intelligence (BI) Vorhersagen und Entscheidungsfindungen anhand der im LIMS vorhandenen Daten und der bisherigen Interaktionen mit der KI zu unterstützen.

i

**DR. TIMM ZÖRGIEBEL**  
qualitype GmbH, Dresden

Tel. +49 351 8838 2881  
t.zoergiebel@qualitype.de  
<https://samples.app>

# Der AI-Act – der Rechtsrahmen für den Einsatz von KI in Europa

Als die Europäische Kommission vor drei Jahren das Gesetzgebungsverfahren zur KI-Verordnung (AI-Act) angestoßen hat, wollte sie einen Rahmen für das rechtssichere Inverkehrbringen und ein internationales Vorbild für KI-Regulierung schaffen. Nach kontroversen Diskussionen und einem rapiden Wandel in der alltäglichen Bedeutung von Künstlicher Intelligenz wird der AI-Act voraussichtlich im Frühjahr 2024 in Kraft treten.

Betroffene Produkte • Anforderungen an Hersteller • Empfehlungen



## SCOPE UND ANWENDBARKEIT

Beim AI-Act handelt es sich um eine sog. „Horizontalverordnung“. Diese betrifft KI-Modelle, KI-Systeme und Produkte, die KI-Systeme oder KI-Sicherheitskomponenten verwenden und in Europa vermarktet werden. Auch Arbeitsprodukte aus KI, die außerhalb von Europa generiert werden und in der Union angewendet werden, fallen unter die Verordnung. Anforderungen bestehen an Hersteller, Lieferanten, bevollmächtigte Vertreter, Distributoren und Importeure. Die Verordnung wird direkt in den Mitgliedstaaten anwendbar, ohne dass es einer Umsetzung bedarf, und soll über alle Sektoren hinweg, unabhängig von der spezifischen Produktverordnung, Gültigkeit finden.

## RISIKOKATEGORISIERUNG UND PFLICHTEN

Die Auflagen der KI-Verordnung sind in einem risikobasierten Ansatz gestuft. Das Risiko wird zum einen anhand des Einsatzgebietes/der Methodik und zum anderen

anhand von produktbezogenen Verordnungen festgelegt. Dabei können die Auflagen von geringeren Transparenzverpflichtungen bis hin zu strengen Überwachungsauflagen, wie bspw. der Konformitätsbewertung durch Dritte oder gänzliches Verbot, variieren.

Als verboten eingestuft werden Systeme, die unerschwerliche und manipulative Zwecke verfolgen, ungeschützte Personengruppen ausnutzen und bestimmte Arten der biometrischen Kategorisierung so wie Profiling oder Social Scoring vornehmen.

Als hochriskant werden solche KI-Systeme eingestuft, die entweder selbst Produkt oder Sicherheitskomponente in einem Produkt sind, welches ein inhärentes Risiko in sich trägt. Dieser Umstand wird dadurch festgelegt, ob das Produkt nach Auflagen der jeweiligen produktbezogenen Verordnung einer Konformitätsbewertung durch Dritte unterzogen wird. Zu den von dem AI-Act genannten produktbezogenen Verordnungen zählen solche, die Funkanlagen, Maschinen, Medizinprodukte, in-vitro-Diagnostika, Schutzausrüstung, explosive Stoffe, Gasgeräte, Spielzeug, Fahrstühle, Seilbahnen oder persönliche Wasserfahrzeuge regulieren.

Als hochriskant werden zudem AI-Systeme eingestuft, die in der Biometrie zur Fernidentifikation, Kategorisierung und Emotionserkennung eingesetzt werden, sowie solche, die digitale kritische Infrastruktur (Strom, Wasser, Gas), Ausbildung (Zulassung, Benotung, Prüfung),

Anforderungen an Hochrisiko-KI-Systeme (Titel III Kapitel 2)	Anforderungen an Hersteller von Hochrisiko-KI (Titel III Kapitel 3)	Anforderungen an Hersteller von Hochrisiko-KI (Titel III Kapitel 5, Titel IV, Titel VIII)
• Risikomanagementsystem	• Allgemeine Anforderungen (Kontaktinformationen, Anforderungen aus dieser Tabelle)	• Konformitätsbewertung durch Dritte
• Datenverwaltung (relevant, repräsentativ, fehlerbereinigt)	• Qualitätsmanagementsystem	• EU Konformitätserklärung
• Technische Dokumentation	• Dokumentationspflichten	• CE-Markierung
• Automatische Aufzeichnungen	• Berichterstattung und Korrekturmaßnahmen	• Registrierung
• Transparenz (Interpretierbarkeit, Bedienungsanleitungen)	• Kooperation mit Behörden	• Nachmarktbeobachtung
• Menschliche Überwachbarkeit (Möglichkeit der Intervention)	• Verantwortung entlang der Lieferkette	• Transparenzanforderungen (für besonders einflussreiche KI-Systeme und GPAI Modelle)
• Cybersicherheit (Verfügbarkeit, Robustheit und Genauigkeit nach Stand der Technik)	• Anforderungen an andere Wirtschaftsakteure (AR, Importeur, Distributor, Betreiber, Grundrecht-Assessment)	

Arbeitsrecht (Einstellung, Beförderung), Verwaltung (Sozialleistungen, Kreditwürdigkeit, Versicherungen, Notrufe), Polizeiarbeit, Migration, Justiz und Wahlen berühren. Ausgenommen von diesen werden Systeme, die lediglich eingegrenzte Verfahrensschritte durchführen oder ausschließlich unterstützend zu menschlichen Entscheidungsprozessen sind. Die Pflichten für Hersteller von Hochrisiko-KI können der beigefügten Tabelle entnommen werden.

Zudem sollen General-Purpose-AI (GPAI) Modelle und Systeme unter die Verordnung fallen. Dabei handelt es sich um Grundlagenmodelle, die anhand besonders großer Datensätze für ein weites Spektrum an Aufgaben angepasst werden können. Unter anderem zählen dazu Large Language Models (LLMs) wie ChatGPT oder Bard. Diese tragen teils aufgrund ihrer weiten Verbreitung inhärente Systemrisiken und unterliegen bestimmten Transparenzaufgaben und teilweise einem Code of Practice. Es soll sichergestellt werden, dass darauf aufbauende Modelle die als Hochrisiko eingestuft werden, ihren Auflagen gerecht werden können. Nicht unter den AI-Act fallen KI-Systeme, die in der Forschung verwendet, unter Auflagen getestet oder als Open-Source-Modelle entwickelt werden.

### INKRAFTTRETEN

Stand März 2024 wurde eine Veröffentlichung im Amtsblatt im Mai/Juni 2024 erwartet. Zwanzig Tage nach Veröffentlichung tritt die Verordnung in Kraft, ohne dass es einer separaten Umsetzung durch die Mitgliedstaaten bedarf.

Die Übergangsfristen bezüglich der Pflichten unterscheiden sich nach der Art des eingesetzten KI-Systems. Für von der Regulierung verbotene KI-Systeme treten die Bestimmungen bereits nach sechs Monaten in Kraft. Für Verwaltungsaufgaben, Benannte Stellen, Grundlagenmodelle und Strafgehalte gilt eine 12-monatige Übergangsfrist. Für Produkte, die aufgrund einer Produktverordnung als Hochrisiko eingestuft werden, gilt eine 36-monatige Übergangsfrist. Ansonsten werden 24 Monate bemessen.

### HANDLUNGSEMPFEHLUNGEN

Für Hersteller gilt es zunächst, die Betroffenheit zu prüfen und die Risikoklasse für eigene KI-Anwendungen zu ermitteln. Im Falle von parallel anwendbaren Rechtsvorschriften, kann sich die vom Gesetzgeber vorgesehene Integration der Anforderungen für Hochrisiko-KI in bestehende Systeme schwierig gestalten. Abweichende Anforderungen lassen sich beispielsweise im Risikomanagementsystem für das Medizinproduktrecht finden. Wenn eine Konformitätsbewertung durch Dritte durchlaufen werden muss, sollten frühzeitig Verfügbarkeiten und Benennung der bisherigen Konformitätsbewertungsstelle geprüft oder frühzeitig eine neue gesucht werden. Verpflichtungen und Verträge entlang der Lieferkette sollten in Betracht gezogen werden, um relevante Dokumentation rechtssicher heranziehen zu können. Engpässe im Fachpersonal werden die größte Herausforderung sowohl für die bürokratische Umsetzung als auch für die im Unternehmen darstellen. Schulungsmaßnahmen für bestehendes Personal sollten daher als unabdingbar angesehen werden.

# Profile der Herausgeber

## Messe München GmbH

**analytica** – Weltleitmesse für Analytik, Labortechnik und Biotechnologie, 9. bis 12. April 2024



**Kontakt:**

SUSANNE GRÖDL

Deputy Exhibition Director analytica  
Tel.: +49 89 949-11488  
info@analytica.de

Die analytica ist die Weltleitmesse für Labortechnik, Analytik und Biotechnologie. In fünf Hallen auf dem Münchner Messegelände präsentieren mehr als 1.050 Aussteller – vom Marktführer bis zum jungen Start-up – innovative Produkte, Systeme, Komponenten und

Anwendungen, die die gesamte Wertschöpfungskette für das Labor abdecken. Ein umfangreiches Rahmenprogramm mit Forenvorträgen, Live-Demonstrationen, Roundtables, Sonderschauen und Events begleitet die Messe. Seit ihrer ersten Ausgabe im Jahr 1968 hat sich die analytica zur wichtigsten Plattform der Branche entwickelt. Alle zwei Jahre bringt sie Unternehmen, Anwender und Wissenschaftler aus aller Welt zusammen, um sich zu vernetzen, neue Geschäftskontakte zu knüpfen und Fachwissen auszutauschen. Ergänzt wird die Messe durch die renommierte analytica conference, die tiefe Einblicke in Wissenschaft und Forschung bietet. Hier trifft sich die internationale Wissenschaftselite, um aktuelle Themen und neueste





Erkenntnisse aus der Chemie, Biochemie, Labormedizin und verwandten Bereichen zu diskutieren.

Die analytica zeigt die Laborwelt von morgen und deckt ein breites Spektrum an aktuellen Themen ab, die die Branche bewegen. Ein starker Fokus liegt seit einigen Jahren auf der Digitalisierung des Labors. Auch 2024 wird es wieder eine Sonderschau zur Digitalen Transformation geben, in der die Besucher anhand ausgewählter Use Cases das Arbeiten in einem vernetzten und digitalisierten Labor ausprobieren können. Ein ebenso wichtiges Thema ist die Nachhaltigkeit im Laborumfeld. Auf der analytica werden entsprechende Lösungen vorgestellt und diskutiert, z.B. wie der Energiebedarf gesenkt werden kann, welche umweltfreundlicheren Chemikalien als Alternative zur Verfügung stehen oder wie Materialien wiederverwendet werden können. Ein weiteres Schwerpunktthema ist die Analyse von Lebensmitteln zur Verbesserung ihrer Sicherheit und Qualität.

Darüber hinaus hat die analytica das führende Messenetzwerk für die globale Laborbranche etabliert.

Zusätzlich zur Leitmesse in München wurden weltweit fünf lokale Ableger gegründet – in China, Vietnam, Südafrika und an zwei Standorten in Indien. Diese Messen verzeichneten 2023 einen deutlichen Anstieg der Besucher- und Ausstellerzahlen und spiegeln damit den globalen Aufschwung in der Laborindustrie wider: Auf allen analytica Veranstaltungen weltweit präsentierten insgesamt fast 3.000 Aussteller ihre Produkte und Lösungen vor rund 110.000 Laboranwendern und Entscheidern. Je nach den spezifischen Herausforderungen des Landes und der Region setzt jede lokale Messe unterschiedliche Schwerpunkte – von Wasserqualität, Lebensmittelkontrolle und -sicherheit über den Pharmabereich bis hin zum digitalen, intelligenten Labor der Zukunft.

Die nächste analytica findet vom 9. bis 12. April 2024 in München statt. Mehr Informationen erhalten Sie auf [analytica.de](https://analytica.de)



Messe München

# Deutscher Industrieverband SPECTARIS

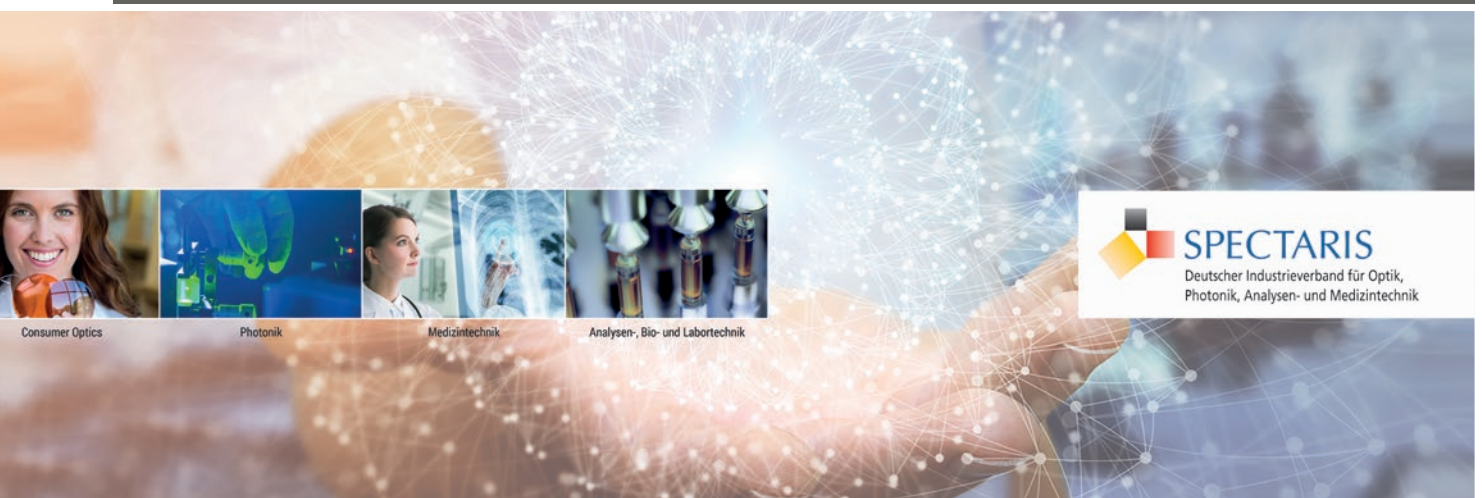
SPECTARIS ist der deutsche Industrieverband für Optik, Photonik, Analysen- und Medizintechnik

Der Verband vertritt rund 400 innovative Unternehmen. Größere Vertreter sind etwa Agilent, Dräger, Eppendorf, Jenoptik, Karl Storz, Leica Microsystems, Otto Bock, Rodenstock, Sartorius, Shimadzu, ThermoFisher und Zeiss. Die Mehrzahl der Mitgliedsfirmen sind jedoch mittelständische Hersteller, die in ihren Segmenten als „Hidden-Champions“ am Weltmarkt agieren.

SPECTARIS vereint dabei faszinierende, zukunftsfähige und innovative Branchen: Consumer Optics (Augenoptik, Fernoptik, Fototechnik), Photonik, Medizintechnik sowie Analysen-, Bio- und Labortechnik. Zusammen erzielten sie im Jahr 2023 einen Gesamtumsatz von über 90 Milliarden Euro und beschäftigten rund 353.000 Menschen. Die mittelständische Struktur, das enorme Innovationspotenzial und die ausgeprägte Exportorientierung bilden den gemeinsamen Rahmen

der Industrien, deren Produktlösungen in vielen Wirtschaftszweigen zur Anwendung kommen, oftmals Schlüsseltechnologien sind und den Menschen ein hohes Maß an Lebensqualität bescheren.

SPECTARIS bildet ein leistungsfähiges Netzwerk, organisiert einen permanenten Austausch seiner Mitglieder untereinander und bietet eine Plattform für den Dialog mit der Politik, anderen Verbänden, wichtigen Anwendern und Absatzmittlern. Als Dienstleister verschafft SPECTARIS seinen Mitgliedern nicht nur Zugang zu wertvollen Markt- und Branchendaten, sondern bietet auch gezielte Unterstützung für den Außenhandel oder Informationen zu Zulassungsfragen, wichtigen Gesetzesänderungen sowie betriebswirtschaftlichen Themen.



**i** SPECTARIS Deutscher Industrieverband für Optik, Photonik, Analysen- und Medizintechnik e.V.  
 Werderscher Markt 15 | 10117 Berlin | Germany  
 Phone: +49 (0)30 41 40 21-10  
 info@spectaris.de | www.spectaris.de

**SPECTARIS**  
 Deutscher Industrieverband für Optik,  
 Photonik, Analysen- und Medizintechnik



