

Het slimme waterlaboratorium

Werken met data, AI en automatisering in de praktijk

Carlo van Buiten | Data scientist WLN

Inspiratiedag Fenelab

Lab van de Toekomst

Waar we naar toe willen

MEER METEN / WETEN

Meer relevante waarnemingen / conclusies

SNEL SIGNALEREN

Minder tijd tussen meten en weten

SLIM AUTOMATISEREN

Routine naar systemen, zonder controle te verliezen

BETROUWBARE INFORMATIE

Zowel intern als extern

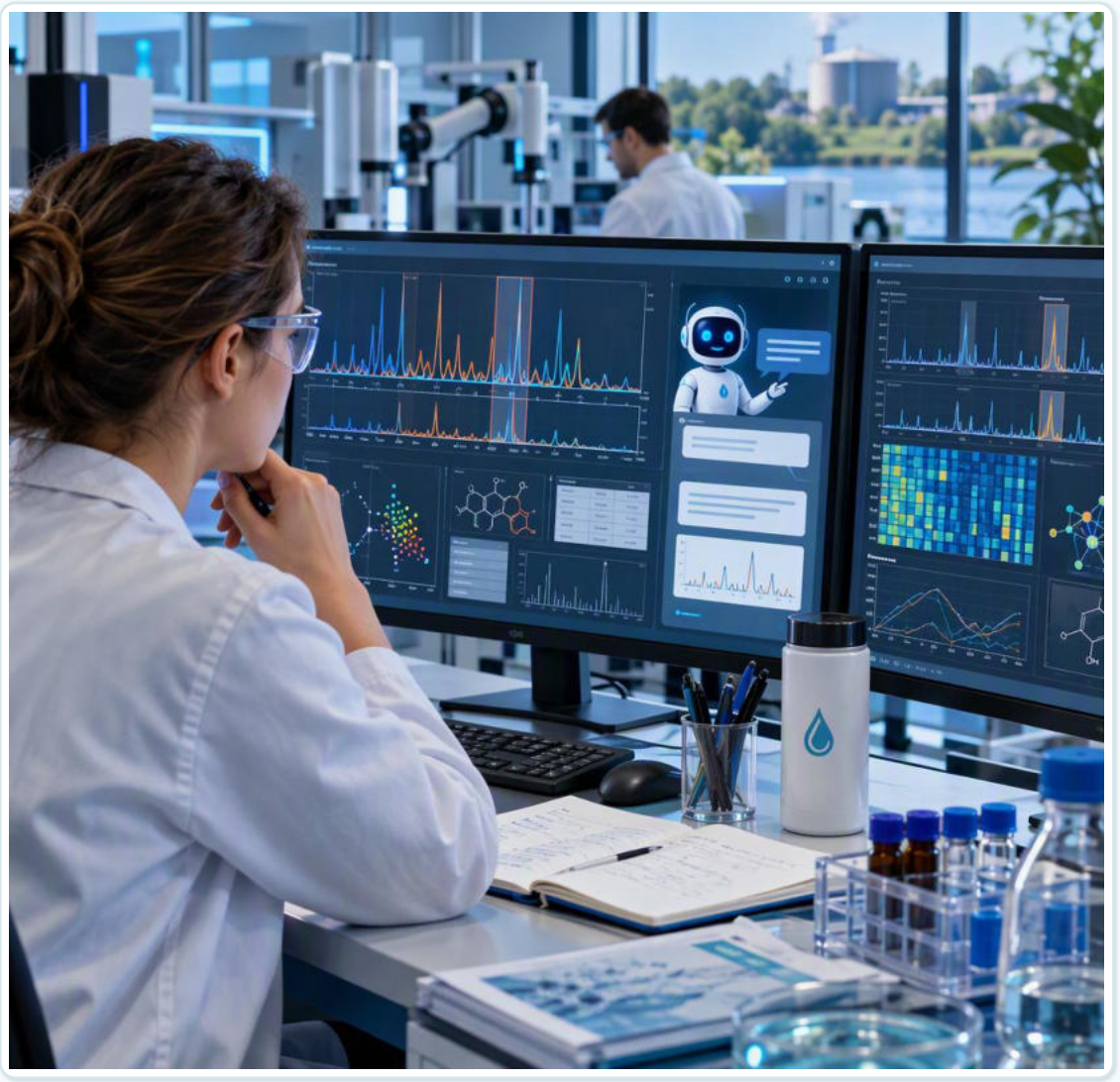
Twee soorten AI

AI ín het proces

- Handwerk overnemen
- Patronen herkennen
- Afwijkingen prioriteren
- Voorspellen

AI náást de medewerker

- Rekenen en vergelijken
- Code en tools ontwikkelen
- Resultaten duiden
- Documenteren en rapporteren



Wat WLN nu al doet

AI nu en in de nabije toekomst

1

Geautomatiseerde verwerking

Een app/workflow als reproduceerbare route van ruwe data naar resultaat.

2

Machine learning in de workflow

Een neuraal netwerk ondersteunt de beoordeling van features.

3

Historische data voor je laten werken

Resultaten opslaan, vergelijken en opnieuw benutten.

4

Tools voor analisten

Makkelijk filteren, controleren, visualiseren en rapporteren.

Human in the Loop

Non Target Screening: één meting, heel veel data

Voor het lab is de meting pas het begin. Daarna moeten duizenden signalen worden verwerkt en geïnterpreteerd.



1. Watermonster
2. LC-MS / HRMS
3. Dataverwerking
4. Features & spectra
5. Database & historie
6. **Interpretatie**

Hoe werkt LC-MS?

Alle molecuulmasses uit je monster halen

1 Injectie

Een watermonster wordt door de LC-MS kolom gestuurd.

2 LC-scheiding

Stoffen bewegen verschillend door de kolom en komen op verschillende retentietijden vrij.

3 Ionisatie

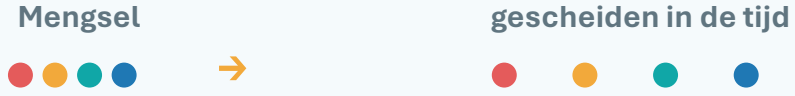
De uitkomende moleculen worden omgezet in geladen deeltjes.

4 Massaspectrometer

Ionen worden onderscheiden op hun massa-ladingsverhouding, m/z.

5 Data

Per moment ontstaat een spectrum met m/z en intensiteit.

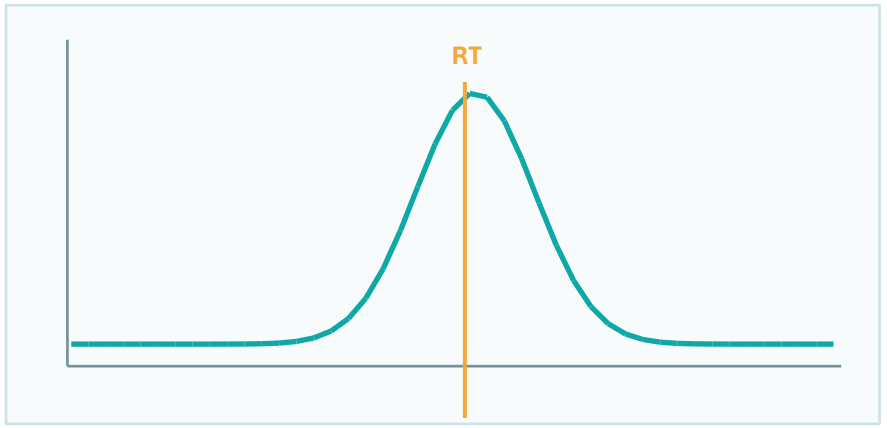


LC vertelt wanneer iets langskomt. MS vertelt welke massa daarbij hoort.

Van ruwe signalen naar features

Een feature combineert retentietijd, exacte m/z en intensiteit. De chromatogramvorm helpt bepalen of het signaal betrouwbaar is.

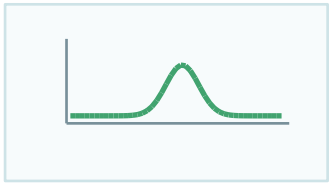
ÉÉN FEATURE



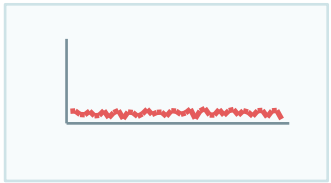
m/z + retentietijd + intensiteit

De piekvorm zegt iets over de kwaliteit van het signaal.

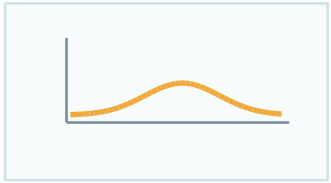
Het netwerk beoordeelt de kwaliteit



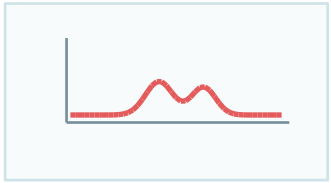
duidelijke piek



ruis



brede piek



gesplitste piek

Het apparaat en de workflow genereren de data. Machine Learning helpt met interpreteren.

NTS is een lerend systeem

De historie onderdeel van iedere nieuwe meting.

Wat zit er in dit monster?

↓

Hebben we dit eerder gezien?

↓

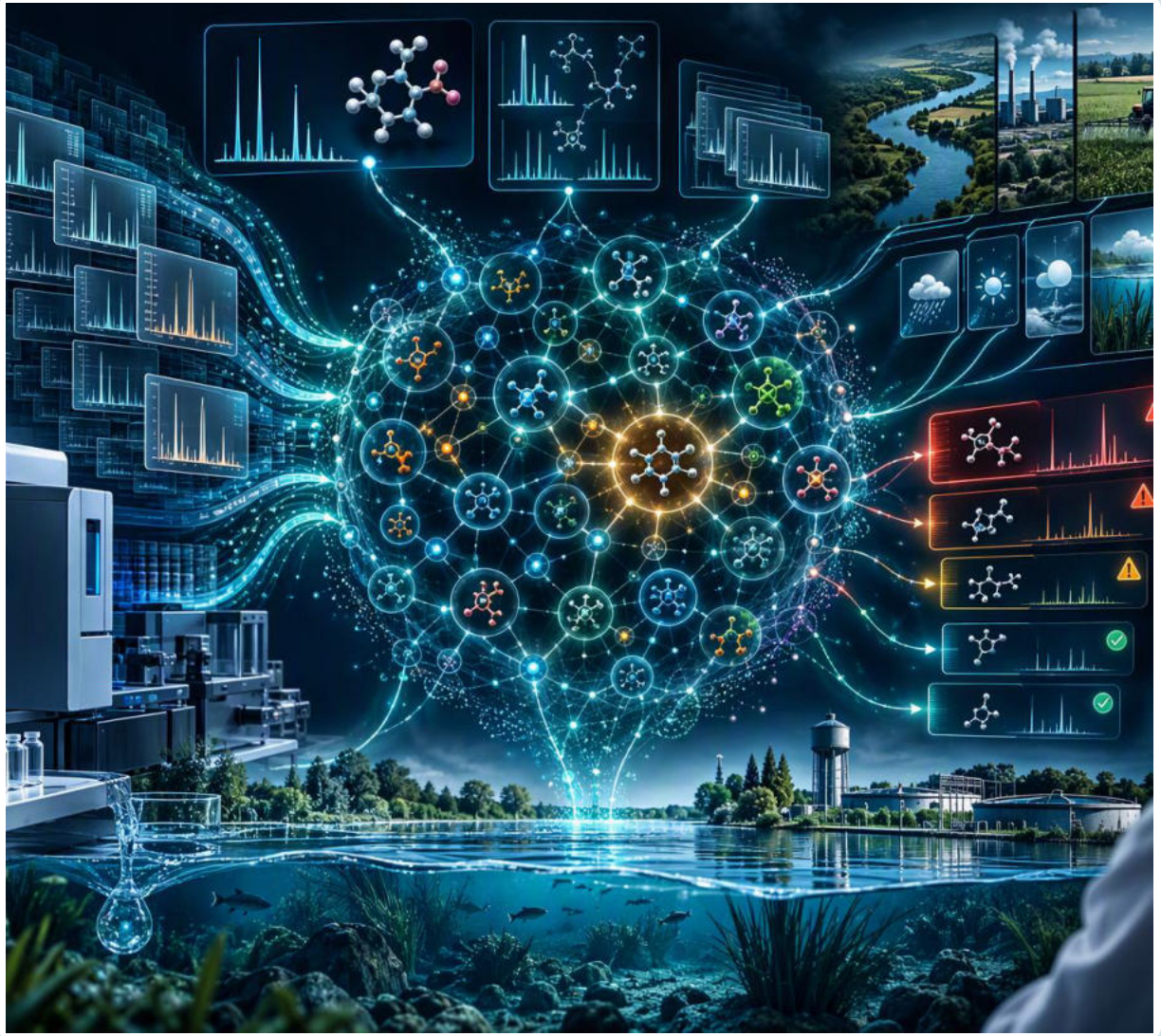
Waar en wanneer kwam het voor?

↓

Wat kan de bron zijn?

↓

Welke onbekenden verdienen aandacht?



De Bottleneck wordt Data

Goede modellen kunnen weinig leren van zeldzame, dure en ver uit elkaar liggende metingen.



Zonder Data geen AI.

- voldoende waarnemingen
- representatieve variatie
- betrouwbare labels
- context bij de meting
- continuïteit

Meetstrategie wordt AI-strategie

Geavanceerde analyses en continue informatiestromen



SENSORING continu

↓

AI normaal patroon leren

↓

ALARM afwijking herkennen

↓

LAB gericht verdiepen

Sensoren vervangen het lab niet.
Ze vertellen het lab waar het moet kijken.

Automatisering en AI verschuiven de benodigde Expertise



VAN

Hands-on Uitvoerder

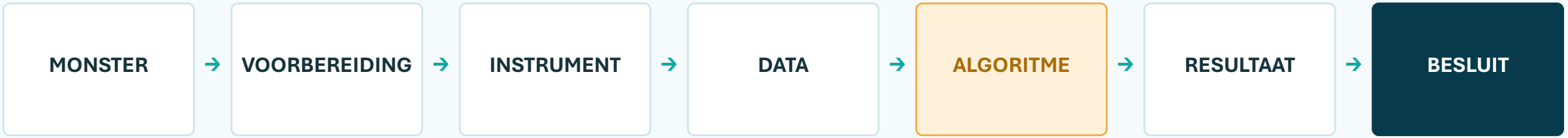
NAAR

Procesregisseur

- proces bewaken
- uitzonderingen herkennen
- kwaliteit beoordelen
- ingrijpen bij afwijkingen
- verantwoordelijkheid nemen

Niet minder vakmanschap, maar ander vakmanschap.

Hoe meer automatisering, hoe belangrijker ketenkennis



De toekomstige analist hoeft niet elke stap zelf uit te voeren,
maar moet in de breedste zin de context rond het proces begrijpen.

Chemie | Instrumentkennis | Proceskennis | Data literacy | AI literacy

AI

- rekent snel
- vergelijkt veel
- herkent patronen
- genereert voorstellen

×

VAKMENS

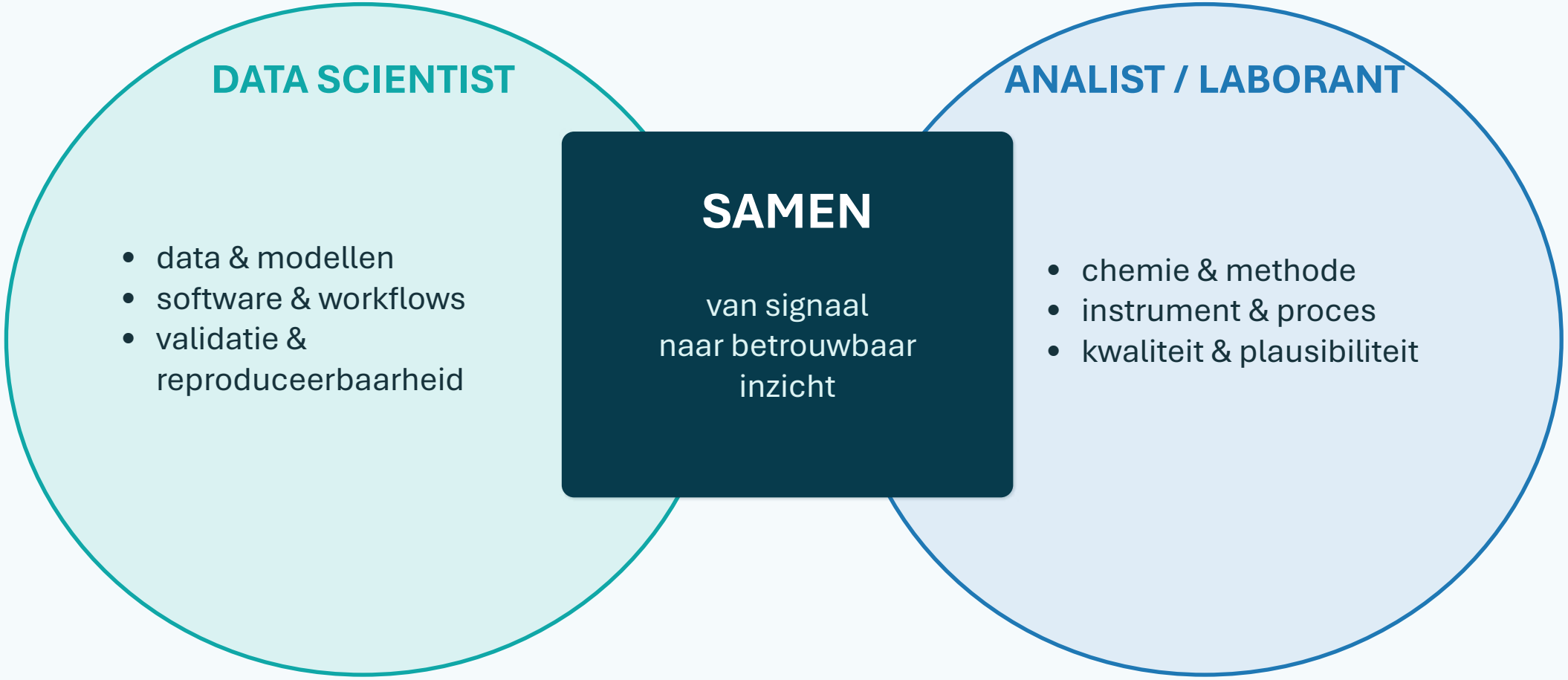
- begrijpt context
- ziet uitzonderingen
- toetst plausibiliteit
- neemt verantwoordelijkheid

=

BETROUWBAAR INZICHT

Grip op de Data

Data scientist en analist groeien naar elkaar toe



De data scientist begrijpt het lab beter. De analist begrijpt data beter.

Het slimme laboratorium

↓ meet meer

↓ automatiseert meer

↓ haalt meer uit de data

→ vraagt méér kennis van de mens

Het slimme lab is niet het lab zonder mensen. Het is het lab waarin mens, data en AI ieder in hun kracht staan.