

## Abstract

In tribology laboratories, the management of material samples and test specimens, the planning and execution of experiments, the evaluation of test data and the long-term storage of results are critical processes. However, despite their criticality, they are carried out manually and typically at a low level of computerization and standardization. Therefore, formats for primary data and aggregated results are wildly different between laboratories, and the interoperability of research data is low. Even within laboratories, low levels of standardization, in combination with ambiguous or non-unique identifiers for data files, test specimens and analysis results greatly reduce data integrity and quality. As a consequence, productivity is low, error rates are high, and the lack or low quality of metadata causes the value of produced data to deteriorate very quickly, which makes the re-use of data, e.g. for data mining and meta studies, practically impossible.

In other fields of science, these are mitigated by the use of Laboratory Information Management Systems (LIMS). However, at the moment, such systems do not exist in tribological research. The main challenge for the implementation of such a system is that it requires extensive interdisciplinary knowledge from otherwise very disparate fields: tribology, data and process modelling, quality management, databases and programming. So far, existing solutions are either proprietary, very limited in their scope or focused on merely storing aggregated results without any support for laboratory operations.

Therefore, this thesis describes fundamentals of information technology, data modelling and programming that are required to build a LIMS for tribology laboratories. Based on an analysis of a typical workflow of a tribology laboratory, a data model for all relevant entities and processes is designed using object-relational data modelling and object-oriented programming and a relational database is used to provide a reference implementation of such a LIMS. It provides critical functionalities like a materials database, test specimen management, the planning, execution and evaluation of friction and wear tests, automated procedures for tribometer parameterization and data transmission, storage and evaluation and for aggregating individual tests into test sets and projects. It improves the quality and long-term usability of data by replacing error-prone human processes by automated variants, e.g. automated collection of metadata and data file transmission, homogenization

and storage. The usefulness of the developed LIMS is demonstrated by applying it to Transfer Film Luminance Analysis (TLA), which is a newly developed advanced method for the analysis of the formation and stability of transfer films and their impact on friction and wear, but which produces so much data and requires such a large amount of metadata during evaluation that it can only be performed safely, quickly and reliably by integration into the presented LIMS.

## Kurzfassung

In tribologischen Laboren sind die Verwaltung von Materialproben und Prüfkörpern, die Planung und Durchführung von Experimenten, die Auswertung von Versuchsdaten und die Langzeitspeicherung von Ergebnissen kritische Prozesse. Ihre Durchführung erfolgt bis heute ganz überwiegend manuell und ist entsprechend fehleranfällig und wenig interoperabel. Eine besondere Herausforderung ist dabei die Erfassung und Speicherung von Metadaten und von semantischen Zusammenhängen zwischen den vielen verschiedenen Entitäten. Während vor allem im Gesundheitswesen Labor-Informationen-Management-Systeme (LIMS) eingesetzt werden, um die Durchführung von Prozessen zu unterstützen, sind solche Systeme in der tribologischen Forschung nur wenig verbreitet. Bestehende Lösungen und aktuelle Bestrebungen sind hauptsächlich reine Ergebnisdatenbanken, die als nachgelagerte Datenspeicher für Labore dienen und daher im eigentlichen Laborbetrieb praktisch keine Rolle spielen. Im Bereich der Prüfkörperverwaltung fehlt es an Informationssystemen, die kritische Laborprozesse wie die Vergabe von Identifikatoren für Werkstoffe und Prüfkörper, das Speichern von Prüfkörper-Merkmalen auf unterschiedlichen Aggregationsebenen (z.B. einzeln oder als Charge) oder die systematische Archivierung von Probekörpern unterstützen. Im Bereich der Versuchserstellung und Verwaltung gibt es aktuell kein einheitliches Informationssystem für die enorme Vielfalt von Versuchsarten, Prüfkörperanordnungen, Bewegungsarten und Versuchsabläufen. Im Bereich der Versuchsdurchführung bestehen die Hauptherausforderungen im Fehlen automatisierter Prozesse für die Parametrierung von Tribometern und der Verwaltung der primären Versuchsdaten. Entsprechend gering ist der Computerisierungsgrad bei Auswertung und Darstellung von Messdaten sowie bei deren Aggregation. Bestehende Lösungen sind deshalb häufig auf einzelne Arbeitsgruppen oder gar nur einzelne Personen beschränkt.

Diese Arbeit befasst sich daher mit dem Entwurf und der Implementierung eines exemplarischen Informationsmanagement-Systems für Tribologielabore, mit dem Ziel die genannten Lücken zu schließen. Die Basis hierfür ist eine ausführliche Analyse und Beschreibung der Konzepte, der physischen Entitäten und der Prozess in einem typischen Arbeitsablauf eines auf Versuche der Kategorien VI („Mo-

---

dellversuch mit einfachen Probekörpern“) bis IV („Versuch mit unverändertem Bauteil oder verkleinertem Aggregat“) spezialisierten Tribolabors. Zu den daraus abgeleiteten Anforderungen gehören insbesondere die Unterstützung des Werkstoff- und Prüfkörpermanagements, die Erstellung und Verwaltung tribologischer Versuche, deren Aggregation zu Versuchsreihen und Projekten, die Automatisierung von der Parametrierung von Tribometern, der Übertragung, Speicherung, Auftragung und Auswertung von Messdaten sowie die Projektverwaltung und Berichtserstellung. Zur Erfüllung dieser Anforderungen wird mit Hilfe der Objektrelationalen Datenmodellierung ein ausführliches logisches Datenmodell aller relevanten Entitäten erstellt, inklusive deren semantischer Relationen, und dieses dann mit Hilfe der objektorientierten Programmierung implementiert.

Für die Herausforderung des variablen Detaillierungsgrads bei der Identifikation und Beschreibung von Prüfkörpern (einzeln, als Charge oder als Klasse) wird hierbei ein Modell mit drei assoziierten Klassen entwickelt, die diese unterschiedlichen Aggregationsstufen repräsentieren. Die in einem Tribolabor verwendeten Arten von Prüfkörpern (Ring, Block, Scheibe usw.) werden dann mittels Spezialisierung einer allgemeinen Prüfkörperklasse dargestellt, und zwar auf jeder der drei Aggregationsebenen. Mittels atypischer Eigenschaftspropagierung erlaubt es dieses Modell, Attribute von Prüfkörpern auf jeder der drei Aggregationsebenen zu definieren, und zwar sowohl attributs- als auch prüfkörperspezifisch.

Für tribologische Versuche wird – ebenfalls mittels Spezialisierung, die auf Programmcode-Ebene hauptsächlich mittels Vererbung dargestellt wird – erstmalig ein Datenmodell entwickelt, das die große Vielfalt, die sich aus der unterschiedlichen Anzahl und Geometrie der beteiligten Prüfkörper, der variablen Versuchssegmentierung (Mehrstufenversuche) und der unterschiedlichen Arten und Versuchssegmenten (Gleiten, Stehen, Losbrechen, Oszillieren usw.) ergibt, einheitlich beschreibt. Diese Vereinheitlichung bildet die Grundlage für das vorgestellte allgemeine Verfahren zur automatisierten Parametrierung von Tribometern. Hierfür wird serverseitig eine maschinenlesbare Darstellung eines Versuchs erstellt und an einen Prüfstand übermittelt. Dieser interpretiert die erhaltenen Daten und konfiguriert den Versuchsablauf entsprechend. Durch die Automatisierung dieses bisher fast ausschließlich manuellen Prozesses wird die Häufigkeit von Fehlern in der Versuchsdurchführung stark reduziert.

Als natürliche Verlängerung dieser Maschine-zu-Maschine-Kommunikation wird die automatisierte Übermittlung der von einem Tribometer erstellten Messwertdatei(en), sowie die serverseitige automatisierte Speicherung unter Aufrechterhaltung der logischen Relation zwischen Messwertdatei(en), Versuch, Werkstoff und Projekt beschrieben. Die Grundlage hierfür bildet der Ersatz von benutzerdefinierten Identifikatoren für alle abgebildeten Entitäten durch die Vergabe von maschinenlesbaren Identifikatoren durch das System. Für das spezielle Problem der geringen Standardisierung von Messwertdateien und der daraus resultierenden Vielseitigkeit der zu verarbeitenden Dateiformate wird ein einheitliches Dateiformat vorgeschlagen. Die Umformatierung erfolgt hierbei mittels einer Spezialisierung von Importfiltern bis auf die Ebene der Instanzen des Tribometer-Modells. Hierfür wird erstmalig eine Lösung auf der Basis von dynamisch generierten Instanzmethoden vorgestellt, deren Programmcode die instanzspezifische Domänenlogik enthält und der nicht im Quellcode des Systems, sondern im Datenbankeintrag der jeweiligen Tribometerinstanz gespeichert ist. Auf der Basis dieser Harmonisierung der Messwertdateien werden Lösungen für die automatisierte und vereinheitlichte grafische Auftragung und für die Auswertung von Messwertdateien vorgestellt. Neben der Lösung zahlreicher „Bestandsprobleme“ des Informationsmanagements in Tribolaboren wird der Einsatz des Systems bei der praktischen Durchführung der Transferfilm-Luminanzanalyse demonstriert. Hierbei handelt es sich um ein im Rahmen dieser Arbeit ebenfalls neu entwickeltes Verfahren zur photo-optischen Quantifizierung von Transferfilmen, die sich vor allem im trockenen Gleiten von Kunststoffen und Kunststoffverbundwerkstoffen auf Stahl bilden. Anders als alle bisher in diesem Bereich bestehenden Verfahren ist dieses gleichzeitig quantitativ, zeitauflösend, vollflächig, materialunspezifisch und benötigt keine besonderen Versuchsumgebungen (z.B. Vakuum). Bei seiner Durchführung müssen jedoch nicht nur sehr große Mengen an Bilddaten bearbeitet werden, sondern auch Messdaten aus unterschiedlichen Quellen zusammengeführt und mit einer Vielzahl an Metadaten kombiniert werden. Manuell ist dieses Verfahren aufgrund seiner Komplexität nicht durchführbar. Durch die Integration in das neu entwickelte Laborinformationssystem gelingt sie jedoch sicher, schnell und - aufgrund der Speicherung aller zur Auswertung benötigten Primär- und Metadaten - auch langfristig zuverlässig nachvollziehbar.