Kein Nachdruck, keine Veröffentlichung im Internet oder einem Intranet ohne Genehmigung des Verlags und der GDNÄ

GDNÄ
Die Wissensgesellschaft
Gesellschaft Deutscher Naturforscher und Ärzte
German Association for the Advancement of Science and Medicine

Stephan Andreas Schunk, Chiara Boscagli, Patricia Löser, Heidelberg

Digitale Transformation als Wegbereiter für beschleunigte Forschung in der chemischen Industrie

Die Weiterentwicklung digitaler Technologien prägt im 21. Jahrhundert alle Lebensbereiche unserer Gesellschaft sowohl im privaten als auch im Arbeitsumfeld. Die aus der Digitalisierung entstehenden technischen Möglichkeiten beeinflussen, wie Menschen arbeiten, ihren Alltag gestalten und miteinander kommunizieren. Neue Geschäftsfelder und Möglichkeiten entstehen fortwährend und bringen Unternehmen dazu, altbewährte Prozesse und Geschäftsmodelle zu überdenken und durch digitale Ansätze abzulösen. Die sogenannte digitale Transformation beschreibt damit einen Wandel, der Alltagsleben, Wirtschaft und Gesellschaft erfasst. Die chemische Industrie führt beispielhaft vor, wie dieser Wandel unsere Welt verändert.

Die Digitalisierung hat viele Facetten, so dass es sinnvoll ist, begrifflich zu differenzieren, um die Bedeutung und die damit verbundenen Chancen und Herausforderung zu erkennen. Die heute gängigen Begriffe sind daher in einem Glossar zusammengestellt, wobei sich zeigt, dass im Englischen noch feiner unterschieden wird. Im Folgenden soll es um die *digitale Transformation* gehen, die „erhebliche Veränderungen des Alltagslebens, der Wirtschaft und der Gesellschaft“ zur Folge hat [1]. Im engeren Sinne werden damit vornehmlich die durch Digitalisierung möglichen unternehmensbasierten Veränderungen verstanden. Diese beruhen darauf, durch Integration digitaler Technologien, neue, kundenorientierte und zukunftsweisende Geschäftsmodelle zu realisieren und zu etablieren. Hierfür sind im Unternehmen oft weitreichende organisatorische und technologische Veränderungen notwendig. Der Begriff „digitale Transformation“ umfasst also weit mehr als der geläufigere der Digitalisierung. Letztere beschreibt, welche Anwendungen erforderlich sind, um digitale Informationen zu verarbeiten und zugänglich zu machen, um so bestehende Prozesse zu verbessern. Digitalisierung gilt damit als essentielles Element der digitalen Transformation [1, 2].

In der Branche der chemischen Industrie, die sich mit Funktionsmaterialien (wie beispielsweise Katalysatoren) und Prozessen beschäftigt, besteht die Aussicht, durch die vermehrte Implementierung digitaler Technologien Forschung und Entwicklung effizienter und zielgerichteter zu gestalten. Es geht darum, industrielle Prozesse schneller zu etablieren und neue Materialien in kürzerer Zeit auf den Markt zu bringen. In diesem Zusammenhang ist die Hochdurchsatzforschung ein entscheidender Schlüssel zur Verwirklichung beschleunigter Entwicklungszyklen. Die Kernkomponenten der Hochdurchsatzforschung sind Parallelisierung sowie die Realisierung einer schnellen kontinuierlichen Abfolge komplexer experimenteller Operationen. Um letztendlich die maximale Leistung und Datenintegrität der Technologie zu gewährleisten, müssen alle Elemente von Hard- und Software verbunden werden und in integrierter Weise zusammenarbeiten [3].

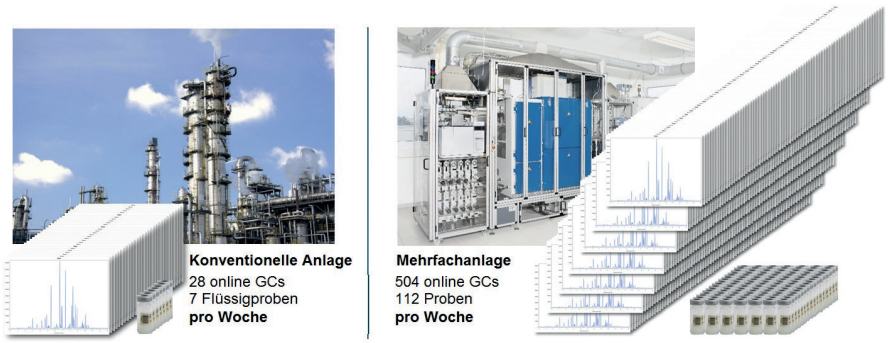

Abb. 1. Hochdurchsatzforschung führt in kürzester Zeit zu einer Fülle an Daten (hier Gaschromatogramme, GC), die ohne geeignete Software zur Speicherung und Analyse nicht mehr zu überblicken ist und damit nutzlos wäre.

©Wissenschaftliche Verlagsgesellschaft Stuttgart

Kein Nachdruck, keine Veröffentlichung im Internet oder einem Intranet ohne Genehmigung des Verlags und der GDNÄ

Durch den Einsatz digitaler Technologien im Labor und insbesondere durch die Hochdurchsatzforschung fallen im Laboralltag große Datenmengen an, die systematische Methoden des Datentransfers, des relationalen Speicherns sowie der zielgerichteten Interpretation erfordern (Abb. 1). Neben den rein technischen Herausforderungen stellen diese Prozesse Herausforderungen an Unternehmen, die von organisatorischen Aspekten der „Data-Governance“ bis hin zu der Entwicklung funktionaler Interfaces zur Bedienung spezifischer Software reichen; Unternehmen müssen sich diesen Herausforderungen im Zuge des digitalen Wandels stellen. Neben der Implementierung neuer Technologien innerhalb der Organisation ist es entscheidend, dass die Mitarbeiter in die Lage versetzt werden, den Umbruch zu unterstützen und mitzugestalten. Die digitale Transformation beschreibt damit nicht nur einen technologischen, sondern auch einen kulturellen Wandel.

Digitalisierung in der chemischen Industrie

Die Entwicklung neuer Materialien und Prozesse durch die chemische Industrie ist mit vielen Jahren intensiver Forschungsarbeit sowie mit enormen Kosten in Forschung und Entwicklung verbunden. Die technologischen und marktseitigen Unsicherheiten sind in der Regel gleichermaßen sehr hoch. Um neue Produkte schneller, effizienter und kostengünstiger bereitzustellen, wird die Digitalisierung von Forschung und Entwicklung gegenwärtig von vielen Unternehmen als Wegbereiter verstanden. Große Unternehmen gehen in diesem Zusammenhang Partnerschaften mit Giganten der Computerindustrie ein. So hat die BASF mit dem Apollo 6000 von Hewlett Packard Enterprise (HPE) einen der größten Supercomputer der Welt in Ludwigshafen installiert. Damit können komplexere Fragestellungen im Bereich Modellierung gelöst und Resultate in kürzerer Zeit erhalten werden. Methoden des Maschinellen Lernens und der Künstlichen Intelligenz (KI, Artificial Intelligence, AI) bekommen ebenfalls enorme Bedeutung. Greg Mulholland, CEO des KI-Unternehmens Citrine Informatics (Pittburgh, P/USA), provozierte in diesem Kontext mit der Aussage: *„We give the AI system an undergraduate degree in chemistry, and it earns a Ph.D. from the data it is exposed to.”*

Durch die Substitution konsekutiver Einzelexperimente durch digital gesteuerte und interaktive, parallele Experimentalabläufe können laut Mulholland im Entwicklungsprozess neuer Materialien 50 bis 70 Prozent an Zeit und Kosten gespart werden.

Der digitale Wandel stellt die chemische Industrie jedoch auch vor eine Reihe fundamentaler Herausforderungen. Spezialisiertes Fachpersonal zu rekrutieren ist dabei nur eine essentielle Voraussetzung. Zum anderen ist ein Umdenken erforderlich: Daten gilt es nicht mehr als Nebenprodukt, sondern als Hauptprodukt eines Prozesses zu verstehen. Damit diese Daten einen Mehrwert für das Unternehmen bieten (*Data2value*), müssen eine geeignete Infrastruktur zum Austausch und Nutzen bereitgestellt sowie intelligente Methoden der Analyse angewendet werden.

Digitalisierung in der Hochdurchsatzforschung: Das HTE-Konzept

High Throughput Experimentation (HTE) ist im Bereich Forschung und Entwicklung ein bedeutendes, bereits realisiertes Konzept, um Forschungs- und Entwicklungsarbeiten effizienter und kostengünstiger durchzuführen. Die Kernelemente stellen dabei (1) die Parallelisierung und (2) die schnelle konsekutive Durchführung experimenteller Operationen dar [4]. Statt einzelne Experimente in einer Einzelanlage nacheinander auszuführen, können verschiedene Untersuchungen gleichzeitig in einer einzigen Mehrfach-Anlage durchgeführt werden (Abb. 2). Eine Vielzahl an Reaktionsbedingungen und Katalysatoren können so in kurzer Zeit getestet werden, wobei durch die Verwendung kleiner Reaktoren geringe Mengen von Katalysatoren und chemischen Einsatzstoffen ausreichend sind. Dadurch werden Arbeitszeit und Materialkosten gespart und Resultate mit höherer Reproduzierbarkeit erhalten. Da alle zu testenden Materialien den exakt gleichen Bedingungen ausgesetzt werden, zeichnen sich die gewonnenen Daten durch eine hohe Genauigkeit sowie durch eine gute Vergleichbarkeit aus. Durch HTE wird somit die Zeit, um ein neues Produkt auf dem Markt einzuführen, erheblich verkürzt.

Die Digitalisierung spielt in der Hochdurchsatzforschung eine große Rolle, auch im Hinblick auf die gegenwärtige Entwicklung der *Industrie 4.0*. In relativ kurzer Zeit werden große Datenmengen generiert, deren Verarbeitung und Analyse geeignete Softwarelösungen erfordert. Die hte GmbH, *the high throughput experimentation company* in Heidelberg, nimmt diese Herausforderung mit dem Konzept *Lab 4.0* an. In dem von hte realisierten *Lab 4.0* wirken innovative Softwarelösungen zur Speicherung und Analyse von Daten sowie zur Steuerung von Hardwareelementen im Prozess der Hochdurchsatztestung synergistisch zusammen [5]. Die Software unterstützt den Anwender in dem integrierten Workflow in allen Phasen der Katalysatorsynthese, -testung und -analyse.

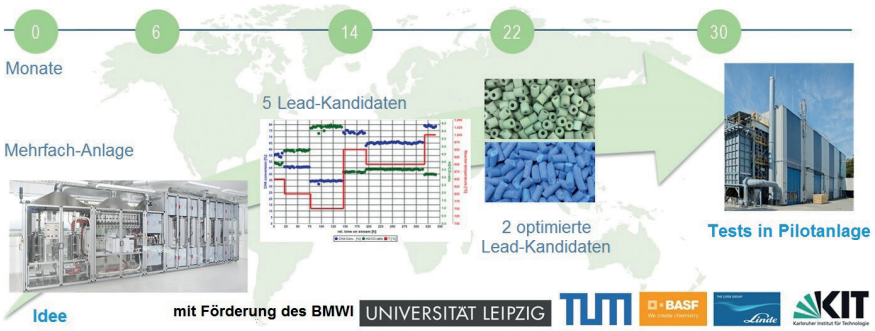

Abb. 2. Hochdurchsatzforschung zur katalytischen Trockenreformierung (Umsetzung von Methan mit Kohlendioxid zu einem Kohlenmonoxid-reichen Synthesegas). Links die Versuchsanlage der hte GmbH in Heidelberg. Mit dieser wurden parallel sechs Versuchsreihen unter unterschiedlicher Prozessführung durchgeführt. Die mit geringen Katalysator- und Stoffmengen betriebenen Experimente wurden von einer speziellen Software gesteuert und die Daten permanent erhoben, verwaltet und ausgewertet. Alle Daten standen allen Beteiligten zur Verfügung. In nur 30 Monaten wurden zwei geeignete Katalysator-Kandidaten gefunden (bei konventionell betriebenen Experimenten rechnet man mit einem Zeitraum von mindestens 10 Jahren!).

©Wissenschaftliche Verlagsgesellschaft Stuttgart

Kein Nachdruck, keine Veröffentlichung im Internet oder einem Intranet ohne Genehmigung des Verlags und der GDNÄ

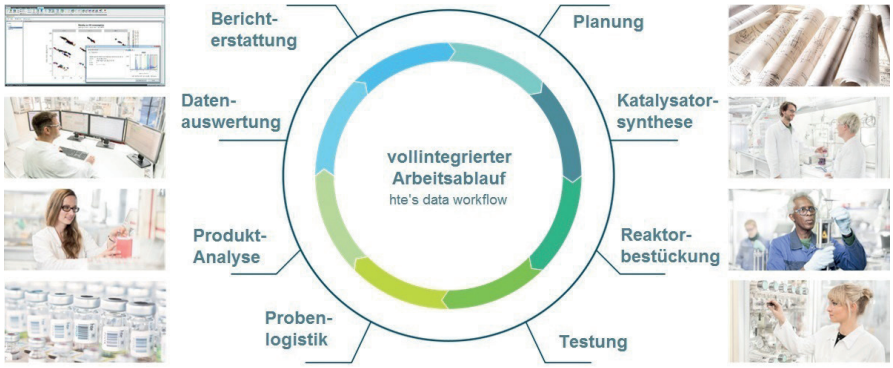

Abb. 3. Hauptprozessphasen im Lab. 4.0 für die heterogene Katalyse. Um geeignete Leitstrukturen für die Trockenreformierung zu finden, mussten etwa 20 solcher Zyklen durchlaufen werden.

Die Hauptprozessphasen von *Lab 4.0* bauen wie folgt aufeinander auf (Abb. 3): (1) Planung der Experimente, (2) Synthese der Katalysatoren, (3) Reaktorbestückung, (4) Testung, (5) Probenlogistik, (6) Produktanalytik, (7) Datenauswertung sowie (8) Berichterstellung. Die in jeder Phase anfallenden Daten werden gespeichert und sind für alle Nutzer zu jeder Zeit verfolg- und nachvollziehbar. Im Gegensatz zu vielen gängigen Konzepten, bei denen die Daten auf unterschiedliche Instanzen verteilt werden, nutzt die hte GmbH zentral integrierte Speicherung mittels Client-Server-Architektur. Dadurch werden synchronisierte Daten verschiedenen Anwendern direkt zugänglich, einfach austausch- und analysierbar.

Die hte GmbH hat in diesem Zusammenhang zwei Softwareprodukte [5] entwickelt:

- *hteControl™:* zum vollautomatisierten Experimentieren und zur Erzeugung von Daten
- *myhte™:* zum Management der erhaltenen Daten und zum Generieren von Wissen.

Die Software hteControl™ dient der Prozesskontrolle. Diese umfasst die Regulierung von Hardwareparametern, um gewünschte Reaktionsbedingungen einzustellen, sowie die Aufnahme von Analytikdaten (z. B. durch Gaschromatographie). Vollautomatisiertes Experimentieren wird durchgehend im 24-Stundenbetrieb ermöglicht, wobei eine benutzerfreundliche Oberfläche eine flexible Steuerung anhand graphisch ansprechender Flussdiagramme gewährleistet. Zudem bietet die Software eine schnelle und effiziente Fehlerdiagnose.

Die Software myhte™ wurde entwickelt, um die generierten Daten zu organisieren. Dies beinhaltet die Speicherung, die Analyse sowie die Visualisierung von Daten aus dem Bereich der Synthese, der Reaktorbefüllung, der Testung und der Analytik. Daten aus der externen und internen Analytik werden verbunden mit den Testbedingungen des entsprechenden Katalysators sowie mit dessen Synthese (z. B. Verfahren) und Charakterisierung (z. B. spezifischer Oberfläche, Beugungsmuster etc.). Die Korrelation der Eigenschaften und der Behandlung eines Katalysators mit dessen Leistungsprofil hilft, die Versuchsplanung für den sich anschließenden Workflow zu optimieren. Des Weiteren ermöglicht die Software die Durchführung einfacher Berechnungen (z. B. Ausbeute, Umsätze, Selektivitäten) sowie deren graphische Aufbereitung anhand einer kundenorientierten Oberfläche.

In dem *Lab 4.0* der hte GmbH werden alle Elemente eines typischen Workflows in der technischen Katalysatorentwicklung mittels der beiden beschriebenen Softwarelösungen organisiert [3].

Mit myhte™ and hteControl™ wurden zwei Softwarelösungen entwickelt, die auch dank integrierter cyber-physischer Interaktionen interagieren und reagieren können. So können Prozessbedingungen basierend auf den parallel erhaltenen Daten automatisch angepasst werden. In diesem Kontext wurden beispielhaft Materialien zur katalytischen Reformierung von Naphta getestet [6]. Während der Naphta-Reformierung werden Paraffine mit geringer Oktanzahl in Aromate und verzweigte Alkane mit höherer Oktanzahl konvertiert. Während der Laufzeit des Prozesses in der Raffinerie werden die eingesetzten Katalysatoren zunehmend deaktiviert, was unter isothermen Bedingungen zu einem stetigen Abfall der Oktanzahl (Research octane number, RON) führt. Um die Oktanzahl konstant zu halten, wird die Temperatur während des Prozesses typischerweise auf der Basis von Erfahrungswerten kontinuierlich in der Art erhöht, dass die verringerte katalytische Aktivität des Katalysators ausgeglichen wird.

Durch die integrierte cyber-physische Interaktion zwischen myhte™ und hteControl™ wurde dieser Iso-RON-Betrieb auf effizientere Weise im Laborumfeld realisiert (Abb. 4). Während der katalytischen Testung kontrollierte hteControl™ die Reaktionsbedingungen und erfasste die Gaschromatogramme, die dann zu myhte™ transferiert wurden. myhte™ analysierte die Produkte und berechnete die Oktanzahl. Abschließend wurden die Ergebnisse an hteControl™ übermittelt, so dass die Software die Temperatur des Prozesses entsprechend der gewünschten Oktanzahl anpassen konnte. So können im Forschungsbetrieb

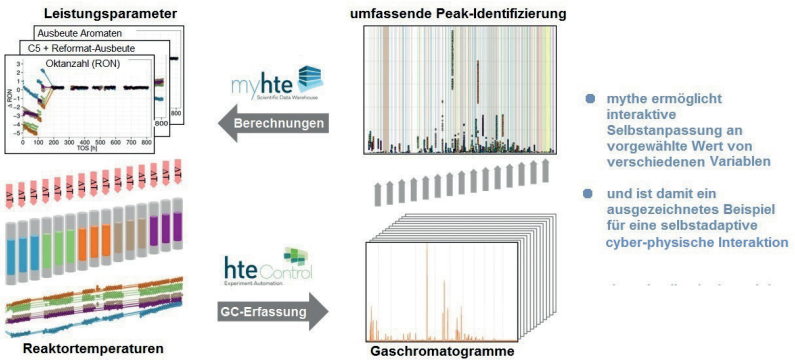

Abb. 4. Zusammenwirken des Softwaresystems *myhte* zur Datenverwaltung, -kontrolle und -analyse und von *hteControl* zur Prozesssteuerung und -überwachung. Auf diese Weise konnte der Iso-RON-Betrieb bei optimaler Prozesstemperatur hocheffizient realisiert werden. Es handelt sich um ein erfolgreiches Beispiel einer cyber-physischen Interaktion: Reale, ständig gemessene Daten werden mit den berechneten Idealwerten abgeglichen, und bei Bedarf wird die Prozessführung verändert.

©Wissenschaftliche Verlagsgesellschaft Stuttgart

Kein Nachdruck, keine Veröffentlichung im Internet oder einem Intranet ohne Genehmigung des Verlags und der GDNÄ

GLOSSAR DIGITALISISERUNG

Digitalisierung umfasst alle Prozesse, um Information in ein digitales Format zu überführen (engl. *digitization*) und alle Anwendungen, die nötig sind, um die digitale Information zu verarbeiten und zugänglich zu machen
Im unternehmerischen Bereich umfasst die Digitalisierung zudem alle Bestrebungen, ein auf digitalen Technologien aufbauendes neues, wertsteigerndes Geschäftsmodell zu entwickeln (engl. *digitalisation*).

Digitale Transformation bedeutet eine auf digitalen Technologien beruhende kunden- und nutzerorientierte strategische Ausrichtung von Unternehmen, aber auch von öffentlichen Organisationen. Die digitale Transformation wirkt damit in die Gesellschaft hinein und wird von jedem erlebbar, insbesondere im Gesundheits- und Bildungsbereich.

Digitalität bezeichnet die Lebensweise in einer von der Digitalisierung geprägten Welt, die damit auch das Bewusstsein verändert („Leben in einer Netzwerkgesellschaft").

DEFINITIONEN IM ENGLISCHEN

Digitization is the process of converting information into a digital format.
Margaret Rouse, whatis.techtarget.com

Digitalization is the use of digital technologies to change a business model and provide new revenue and value-producing opportunities; it is the process of moving to a digital business.
Garner IT Glossary, www.gartner.com

Digital Transformation: This broader term refers to the customer-driven strategic business transformation that requires cross-cutting organizational change as well as the implementation of digital technologies.
Jason Bloomberg, Forbes, Apr. 29, 2018

Digitality is the quality of being digital. … the condition of living in a digital culture.
Nicolas Negropotes, Being Digital (1995)

… Is the interconnectedness of ‚digital' and ‚analogue' reality/realities. … Digitality offers in contrast to Digitalization a perspective on the processes of change (societal, economical …) which is not solely fixated on technology or technicalities.
Manual Castells: The Rise of The Network Society. The Information Age (2000)

sehr effizient Kennzahlen für die untersuchten Katalysatoren und Reaktionsbedingungen aufgefunden werden, die in die Technik übertragbar sind.

Der hte GmbH ist es mit beiden Softwareprodukten gelungen, große Datenmengen zu organisieren, zu verarbeiten und damit den Grundstein für datenbasierte Hochdurchsatzforschung zu legen. Die hier vorgestellte Arbeit zeigt, wie wichtig es ist, vor allem im Kontext der gegenwärtigen Entwicklung *Industrie 4.0*, integrierte Softwarelösungen zur Prozesskontrolle, Analytik und Datenauswertung bereitzustellen.

Literatur

[1] K. Pousttchi: Enzyklopädie der Wirtschaftsinformatik, Online Lexikon, Digitale Transformation, **2017**, http://www.enzyklopaedie-der-wirtschaftsinformatik.de/lexikon/ technologien-methoden/Informatik-Grundlagen/digitalisierung/digitale-transformation, (letzter Zugriff am 27.11.18). – [2] A. Irniger: Difference between Digitization, Digitalization and Digital Transformation, **2017**, https://www.coresystems.net/blog/difference-between-digitization-digitalization-and-digital-transformation (letzter Zugriff am 27.11.18) – [3] C. Futter et al.: Modern Applications of High Throughput R&D in Heterogeneous Catalysis, 3-88, **2014**. – [4] High Throughput Experimentation, https://www.hte-company.com/en/company/high-throughput-experimentation.html (letzter Zugriff am 27.11.18). – [5] Softwarelösungen, https://www.hte-company.com/de/loesungen/technology-solutions-ts/softwareloesungen.html (letzter Zugriff am 27.11.18). – [6] M. Kirchmann et al., Petroleum Technology Quaterley (PTQ) **Q4 2015**, 119. http://www.eptq.com/view_edition.aspx?intContentID=21& intEID=125 (letzter Zugriff am 27.11.18).

Dr. **Stephan Andreas Schunk** studierte Chemie in Mainz und Frankfurt und ist heute Executive Expert innerhalb der BASF SE und der hte GmbH. Seit über 20 Jahren arbeitet er auf dem Gebiet der heterogenen und homogenen Katalyse, insbesondere im Umfeld der Hochdurchsatzforschung und gehörte 1999 zu den Mitbegründern der hte Gmbh. Stephan Schunk lehrt an der Universität Leipzig und ist Mitglied der Kommission der Deutschen Gesellschaft für Katalyse GeCatS. Für seine grundlegenden und originellen Arbeiten wurde er 2009 mit dem Jochen Block-Preis ausgezeichnet, den die Deutsche Gesellschaft für Katalyse zur Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses verleiht; 2001 erhielt er den Wissenschaftspreis der Max-Planck-Gesellschaft, 2005 wurde er in Sapporo vom WCOC (Word Congress on Oxidation Catalysis) für seine Arbeiten im Bereich der Gasphasenpartialoxidationen ausgezeichnet. Forschungsschwerpunkte sind die Oxidationskatalyse, Synthesegasherstellung und –umsetzung sowie der Einsatz nachwachsender Rohstoffe. Ein spezieller Fokus liegt auf der Entwicklung neuer Konzepte und Materialien im Bereich der heterogenen Katalyse. In seiner täglichen Arbeit spielen Hochdurchsatzforschung und Digitalisierung eine große Rolle.

Dr. **Patricia Löser** studierte am Institut für Chemie der Universität Kassel (Diplom in Nanostrukturwissenschaften, Dipl.-NanoSc.) und absolvierte einen Forschungsaufenthalt am Fraunhofer Institut für Angewandte Polymerforschung in Potsdam, bevor sie als Doktorandin zur Universität Kassel zurückkehrte. Für ihre 2017 abgeschlossene Doktorarbeit im Bereich der Photokatalyse und makromolekularen Chemie erhielt sie ein Promotionsstipendium der Deutschen Bundesstiftung Umwelt. Anschließend ging sie nach Heidelberg, um als Postdoktorandin in der hte GmbH an der Entwicklung und Hochdurchsatztestung neuer Materialien im Bereich der Oxidationskatalyse zu arbeiten. Ihre Forschungsinteressen liegen auf dem Gebiet nanostrukturierter Materialien, heterogener Katalyse und Big Data Analysis.

Dr. **Chiara Boscagli** studierte Chemie an der Universität Florenz und erhielt 2011 den Master of Science mit dem Fokus auf erneuerbaren Energien (Brennstoffzellen, Photovoltaik). Ihre Doktorarbeit (Hydrotreatment of pyrolysis oils over nickel-based catalysts) schloss sie 2017 am Karlsruher Institut für Technologie ab, anschließend wechselte sie nach Heidelberg, um als Postdoktorandin in der Gruppe von Stephan Schunk zu arbeiten. Gegenwärtig setzt sie ihre Tätigkeit in der hte GmbH als Projektleiterin fort. Sie besitzt Expertise im Bereich erneuerbare Energien, Umwandlung von Biomasse, heterogene Katalyse, Hochdurchsatzforschung und Testung industrieller Katalysatoren.
hte GmbH – the high throughput experimentation company, Kurzpfalzring 104, 69123 Heidelberg

©Wissenschaftliche Verlagsgesellschaft Stuttgart