

Innovative Lösungen für nachhaltige Prozesse in Labor und Produktion

Joachim Richert

Competence Center Analytics, RAA/A – B007, BASF SE, 67056 Ludwigshafen/Rh, Deutschland
Kontakt: joachim.richert@basf.com

Einleitung

„Unsere Innovationszyklen werden nie wieder so langsam wie heute!“ - Das ist eines der Versprechen des digitalen Wandels.

Als Zentren der Innovationskraft der chemisch-pharmazeutischen Industrie stehen Labore im Fokus der digitalen Transformation. Entwicklungszeiten neuer Produkte werden verkürzt indem durch statistische Versuchsplanung, modellgestützte Simulation und digitale Prozess-Zwillinge weniger, aber viel zielführendere Experimente durchgeführt werden.

Der digitale Wandel in der Chemie rückt die Analytische Chemie und den Analytiker als zentrale Quelle von Daten, Information und korreliertem Wissen noch stärker in den Mittelpunkt der Innovationsprozesse und der Prozessinnovation. Für Analytiker bedeutet „Labor 4.0“ mit intelligenten, vernetzten Labor- und Analysengeräten und korrelierbaren Stoff-, Eigenschafts- und Prozessdaten Innovationszyklen zu beschleunigen. [1]

Status Quo - Labor vs. Produktion

In der Prozesswelt der Produktion fand über die letzten Jahrzehnte eine dramatische Erhöhung von Produktivität, Qualität und Prozesssicherheit über die Automatisierung der Prozessüberwachung und -steuerung unter Einsatz zumeist abgeschlossener Analogsteuerungen statt. In jüngster Zeit werden Anlagen und Prozesse durch eine zunehmende Digitalisierung, durch horizontale und vertikale Vernetzung von Prozessebenen zur integrierten, „smarten“ Produktion, dem sogenannten „Smart Manufacturing“. Echtzeitdaten aus Verfahrensentwicklung, Produktion und Supply-Chain erlauben dadurch eine ressourcenschonendere Steuerung von Stoffströmen, deren Qualität und Verfügbarkeit. Ein besonderer Innovationsschritt beim „Smart Manufacturing“ ist, dass erstmals aktuelle Produktionsparameter, Anlagenzustände und Produkteigenschaften miteinander korreliert, und Anlagen dadurch gesteuert und optimiert werden können. Mit dem Zugang zu chemischer Information aus on-line-, in-line- und at-line-Analytik basierend auf spektroskopischen Daten oder gekoppelten Systemen aus Chromatographie und Spektroskopie oder Massenspektrometrie werden Echtzeitsteuerung und Optimierung von Produktionsprozessen auf Basis chemischer Information möglich. Moderne Prozessanalytik und Sensoren unterstützen beispielsweise das Konzept der „eingebauten Qualitätskontrolle“ oder RTRT (real-time release testing) [3], was die Notwendigkeit einer engen Endkontrolle der Produktqualität und explizite Freigabeanalytik reduzieren oder ganz ersetzen kann. „Fit-for-purpose“ analytische Technologien und Sensoren, die nicht nur die

nötige Robustheit für den jeweiligen Einsatz, sondern auch die nötige Selbst-Diagnostik, Selbst-Kalibration und Selbst-Konfiguration sowie die Möglichkeit zur Selbst-Optimierung mitbringen, sind aktuell in Entwicklung. [2, 3]

Dominiert von Insellösungen verschiedener Hersteller hat die Automatisierung über die letzten 3 Jahrzehnte einen großen Schub in der Produktivität analytischer „Inseln“ wie Spektroskopie, Trenntechniken oder, ganz wichtig, der automatisierten Probenvorbereitung durch Robotersysteme und Liquid-Handling-Stationen, gebracht. Diese Produktivitätssteigerung blieb bis dato aber noch weit hinter ihren Möglichkeiten zurück, da sehr oft die gewonnenen analytischen Daten zwar spezifische stoffliche oder molekulare Information über den Analyten lieferten, aber eine Korrelation komplexer analytischer, spektroskopischer oder chromatographischer Daten mit Rohstoff-, Synthesedaten oder anwendungstechnischen Messwerten durch fehlende Metadaten oder inkompatible Datenformaten nicht möglich war.

Vertrauenswürdige analytische Daten und zugehörige Metadaten, die mit einfachen statistischen Methoden, „Machine-Learning“- oder anderen „Data-Mining“-Ansätzen nach Gesetzmäßigkeiten durchsucht werden, füttern Modelle, die erlauben schneller zu optimierten Prozessen oder neuen Stoffen mit maßgeschneiderten Eigenschaften zu kommen. Dabei werden die zugrundeliegenden Modelle und Simulationen durch neue analytische Daten und Erkenntnisse, kontinuierlich verbessert. Sollten wir also nicht eher von „Big Analytics“ anstatt von „Big Data“ sprechen? [1]

Aktuelle Ansätze

Die größte Herausforderung für die digitale Transformation eines Labors ist die Tatsache, dass wir es in der Regel mit gewachsenen Strukturen im Umfeld zu tun haben. Laborgeräteausrüstung hat im Regelfall eine mittlere Nutzungszeit von 5-10 Jahren, in nicht wenigen Fällen auch deutlich länger und Nutzungszeiten von typischen Laborgebäuden liegen bei 30-50 Jahren. Das bedeutet, dass neue Instrumente fast immer auf ein Laborumfeld stoßen, das sehr heterogene Infrastruktur-, Daten- und Kommunikationsstrukturen besitzt – oft auch die „Brownfield“-Herausforderung genannt. [5,10] An diesen Stellen müssen heutzutage neue und alte Hardware mit maßgeschneiderten Softwarelösungen und hohem Programmieraufwand mühsam miteinander verbunden werden. Der dazu notwendige einmalige und langfristige finanzielle (Pflege-)Aufwand übersteigt in einigen Fällen den Wert des eigentlichen Laborgerätes.

An Konzepten zum Labor der Zukunft wird seit Jahren gearbeitet. Bei deren Umsetzung stößt man aber allzu oft an Grenzen, wenn proprietäre Schnittstellen und Datenformate der Analysengeräte deren flexible Steuerung oder einen effizienten Datenaustausch erschweren. Es fehlt an gemeinsamen, offenen Kommunikationsprotokollen, die Analysen- und Laborgeräte untereinander und mit Robotersystemen „smart“ zusammenarbeiten lassen. Es ist wichtig zu bemerken, dass sich diese Herausforderung nicht nur hochintegrierten und automatisierten Laboren der Industrie stellt. Durch neue Anforderungen nationaler und internationaler Institutionen der Forschungsförderung an die langfristige Dokumentation wissenschaftlicher Daten ist auch die akademische Welt gefordert. In Deutschland müssen Daten vieler öffentlich geförderter Projekte in naher Zukunft nach dem FAIR-Prinzip (findable, accessible, interoperable & reusable) im Rahmen einer von Bund & Ländern geförderten nationalen Forschungsdateninfrastruktur (NFDI) öffentlich zugänglich gemacht werden. Das bedeutet, dass nicht nur analytische Daten, sondern auch zugehörige Metadaten aus Synthese (z.B. aus ELN) oder Probenvorbereitung und -manipulation (z.B. aus LIMS) möglichst effizient zusammengeführt, übermittelt und gespeichert werden. Für die Chemie wurde 2019 dazu die NFDI4Chem Initiative gegründet. [4]

Ausblick

Ohne eine rigorosere Standardisierung der Dateninfrastruktur, neuen Denkansätzen bei Softwareentwicklung und -implementierung, einer gesamtheitlichen Sicht auf Daten- und Prozessmodelle sowie neuer Ansätze zur Validierung flexibler Prozessmodelle ist die digitale Transformation unserer Labore nicht möglich. Zwei Standardisierungsansätze in der Sensor- und Laborgeräte-Kommunikation bieten aktuell eine zukunftsfähige Basis.[6]

Zum einen ist das Kommunikationsprotokoll OPC-UA (Open Platform Communications - Unified Architecture), das sich aus den auf Windows-basierten OPC-Standard entwickelt hat und sich zwischenzeitlich plattformunabhängig und Firewall-freundlich als zukünftiger Standard in der industriellen Automationstechnik und prozessanalytischen Anwendungen etabliert.[11] OPC-UA ist voll kompatibel mit den Anforderungen der für IoT-Anwendungen aus der Namur-Pyramide für Automationsnetzwerke weiterentwickelten Namur Open Architecture (NAO).[9]

Zum anderen ist das Kommunikationsprotokoll SiLA 2, das nicht nur das Ansteuern von Instrumenten über Webschnittstellen erlaubt, sondern auch Analytik- und Prozessdaten im AnIML-Format transportiert [7,8], ein zentraler Schlüssel zur Standardisierung der Geräte- und Softwarekommunikation (z.B. mit LIMS, CDS oder ELN) im Labor.

Diese Standards müssen wir als Entwickler, Gerätehersteller und Anwender in einer gemeinsamen Anstrengung weiterentwickeln und offen unserer globalen Labor-Community zur Verfügung stellen. Zu diesem Weiterent-

wicklungsprozess können wir von der Prozesstechnik-Community etwas lernen, die sich seit fast sieben Jahrzehnten im Rahmen der NAMUR-Organisation die Standardisierung der Automationstechnik in ihrem Bereich vorantreibt - gemeinsam und nutzbringend für alle.

Literatur

- [1a] RICHERT, J.: Big Data ist Big Analytics. In: *Nachr. Chem.*, Vol. 66, Issue 7-8, (2018), S. 704
- [1b] RICHERT, J.: Leitartikel. In: *Mitteilungsblatt - Fachgruppe Analytische Chemie in der GDCh*, II/2019
- [2] EISEN, K.; EIFERT, T.; HERWIG, C.; MAIWALD, M.: Current and Future Requirements to Industrial Analytical Infrastructure – Part 1: Process Analytical Laboratories. In: *Anal. Bio. Chem (2019)*, submitted. Thanks to the authors for access to the manuscript.
- [3] EIFERT, T.; EISEN, K.; MAIWALD, M.; HERWIG, C.: Current and Future Requirements to Industrial Analytical Infrastructure – Part 2: Smart Sensors. In: *Anal. Bio. Chem. (2019)*, submitted. Special thanks to the authors for access to the manuscript
- [4] HERRES-PAWLIS, S.; KOEPLER, O.; STEINBECK, C.: NFDI4Chem: Digitalen und kulturellen Wandel in der Chemie gestalten. In: *Angew. Chem. 131 (2019)*, S. 2-5.
- [5] WORTBERG, M.; KURZ, J.: Analytics 4.0: Online Wastewater Monitoring by GC and HPLC. In: *J. Anal Bioanal Chem (2019) 411*, S. 6783. <https://doi.org/10.1007/s00216-019-02065-w>.
- [6] GAUGLITZ, G.: Lab 4.0: SiLA or OPC UA. In: *Anal Bioanal Chem (2018) 410*, S. 5093. <https://doi.org/10.1007/s00216-018-1192-6>
- [7] DÖRR, M. SiLA 2 – The Emerging Standard for Lab Automation. In: *Laboratory Journal – Business Web for Users in Science and Industry*; <https://www.laboratory-journal.com>, Sept 3, 2019.
- [8] SCHÄFER, B.: <https://www.git-labor.de/forschung/informationstechnologie-it/datenaustausch-im-labor-der-zukunft>; Stand 15.11.2019:
- [9] KLETTNER, C.; TAUCHNITZ, T.; EPPEL, U.; NOTH-DURFT, L.; DIEDRICH, C.; SCHRÖDER, T.; GROSSMANN, D.; BANERJEE, S.; KRAUSS, M.; IATROU, C.; URBAS, L.: Namur Open Architecture In: *atp edition 1-2 (2017)*, S. 20-37.
- [10] MAYER, M.; BÄUMNER, A.J.: ABC Spotlight on Analytics 4.0. In: *Anal Bioanal Chem (2018) 410*: S. 5095. <https://doi.org/10.1007/s00216-018-1191-7>
- [11] MAYWALD, M.: Voll integrierte und vernetzte Systeme und Prozesse. In: *atp edition 10 (2018)*, S. 1-16.