

## Präambel

Das Jahr 2024 war geprägt von einer Vielzahl an Veranstaltungen, die den Transfer wissenschaftlicher Erkenntnisse in die Industrie maßgeblich vorangetrieben haben. Workshops, Konferenzen und Netzwerktreffen boten Plattformen für den intensiven Austausch zwischen Forschung und Praxis. Sie förderten nicht nur die Verbreitung innovativer Lösungen, sondern auch die direkte Anwendung von Forschungsergebnissen in industriellen Prozessen. Diese enge Verzahnung von Wissenschaft und Wirtschaft unterstrich die Bedeutung des am IUTA gelebten Wissenstransfers als Treiber für technologische Fortschritte und wirtschaftliches Wachstum.

### Feierliche Eröffnung des FutureLab.NRW durch Ministerin Ina Brandes

Besonders hervorzuheben war die feierliche Eröffnung des digitalen Modelllabors FutureLab.NRW am 19. Februar 2024. Die NRW-Ministerin für Kultur und Wissenschaft Ina Brandes durchschnitt gemeinsam mit UDE-Rektorin Barbara Albert vor über 100 Gästen aus Wirtschaft und Wissenschaft das rote Band. Damit stärkt das Mitglied der Johannes-Rau-Forschungsgemeinschaft seine Expertise im Bereich chemische Analytik, Automation und Digitalisierung.



Abb. 1: Ministerin Ina Brandes und UDE-Rektorin Barbara Albert durchschneiden das Band; Personen auf dem Bild: IUTA-Geschäftsführer Dr. Stefan Haep (l.), Dr. Linda Gehrmann (2.v.l.), Projektleiter Dr. Thorsten Teutenberg (Mitte), IUTA-Vorstand Prof. Dieter Bathen (2.v.r.) und IUTA-Vorstand Jochen Schiemann (r.)

Das Real- und Demonstrationslabor FutureLab.NRW des Instituts für Umwelt und Energie, Technik und Analytik (IUTA) an der Universität Duisburg-Essen (UDE) steht seitdem Technologie-Entwickler:innen und Anwender:innen offen, um Laborsysteme stärker zu automatisieren: „Unser Ziel ist es, isolierte Laborsysteme, die für sich genommen bereits stark automatisiert sind, zu einem kommunizierenden und interagierenden Gesamtsystem zu verbinden und gleichzeitig mit der Gebäudeperipherie und Haustechnik zu verknüpfen“, erklärte Dr. Thorsten Teutenberg, Abteilungsleiter am IUTA und Hauptverantwortlicher für die Umsetzung des Projekts.

Das umfasst beispielsweise die Entwicklung miniaturisierter Trenn- und Analyseverfahren, die Kopplung von Geräten verschiedener Hersteller sowie die Standardisierung von Daten und Kommunikationsschnittstellen. Das FutureLab.NRW bietet Anwender:innen die Möglichkeit, neue Konzepte zu erproben, bevor diese den Weg in Routinelabore und die industrielle Praxis finden. So lassen sich neue und innovative Produkte innerhalb einer echten Laborumgebung evaluieren, um mögliche Schwachstellen bei der Entwicklung von Software und Hardware zu identifizieren. Dies umfasst auch mobile Robotersysteme, die autonom mit Analysenstationen interagieren, sowie

KI-Lösungen, die eine vorausschauende Wartung und Qualitätssicherung unter Nutzung von Metadaten erlauben.

Die Rektorin der UDE, Prof. Dr. Barbara Albert, betonte: „Das FutureLab.NRW eröffnet neue Kooperationsmöglichkeiten zwischen IUTA und der Universität Duisburg-Essen zum Thema chemische Analytik. Das IUTA ist als An-Institut ein wichtiger Partner unserer Universität, insbesondere beim Transfer von Forschungsergebnissen in die Anwendung.“

Bei der Eröffnung wurde deutlich: Das FutureLab.NRW stärkt die Potenziale des Landes NRW. Ministerin Ina Brandes bekräftigte: „Spitzenforschung made in NRW‘ leistet einen wichtigen Beitrag, die großen Herausforderungen unserer Zeit zu bewältigen. Kluge Köpfe arbeiten an unseren Hochschulen und Forschungseinrichtungen daran, das Leben der Menschen besser zu machen. Mit dem FutureLab.NRW bauen wir eine Brücke zu Unternehmen in der Region und machen so den Transfer von Wissenschaft in die Anwendung leichter und schneller. Damit stärken wir den Wissenschafts- und Wirtschaftsstandort Nordrhein-Westfalen.“

Prof. Dr. Dieter Bathen von der UDE unterstrich als Vorstandsmitglied des IUTA und der Johannes-Rau-Forschungsgemeinschaft die Bedeutung des Projekts: „FutureLab.NRW schärft das Profil des IUTA als Transferinstitut, wir leisten einen wichtigen Beitrag zur Innovationsfähigkeit der deutschen Wirtschaft. Die Zusammenarbeit mit insbesondere mittelständischen Unternehmen und die Verwertung der Forschungsergebnisse stehen oben auf der Agenda.“

### **Workshops zu den Themen Datenstandards, Schnittstellen und Konnektivität**

Einen Tag nach der feierlichen Eröffnung des FutureLab.NRW startete bereits der erste Workshop mit knapp 40 Teilnehmenden aus Industrie und Wissenschaft. Im Rahmen des Workshops wurden Lösungsansätze diskutiert, um die Anforderungen der Anwendergemeinde zu bündeln. Konkret ging es um die Frage nach den herstellerübergreifenden Schnittstellen und Datenformaten wie LADS OPC UA als Beispiel für ein nicht proprietäres Kommunikationsprotokoll für die Vernetzung von Hardware und Software als auch AnIML und Allotrope als Beispiele für nicht-proprietäre Datenstandards.



**Abb. 2:** Die knapp 40 Teilnehmenden des Workshops zu Kommunikationsprotokollen und Datenstandards

Am 15. Mai wurde der zweite Workshop zum Thema „Schnittstellen, Konnektivität und flexible Konzepte der Laborautomatisierung“ ausgerichtet, der gemeinsam mit dem Branchenverband SPECTARIS organisiert wurde. Neben Impulsvorträgen, die die technische Implementierung dieser Konzepte in die Industrie im Fokus hatten, wurde auch intensiv über den „Business Value“ der LADS-OPC-UA-Schnittstelle diskutiert.

Am 16. und 17. Mai fand dann im direkten Anschluss der mittlerweile 6. LADS-Hackathon statt, der diesmal von IUTA und der Firma Gerstel in den Räumlichkeiten des IUTA ausgerichtet wurde. Über 30 Teilnehmende aus ca. 20 Unternehmen und auch Forschungseinrichtungen konnten unter der fachkundigen Anleitung von Dr. Matthias Arnold (AiXEngineers) und Matthias Schuh (essentim GmbH) die für ihre jeweilige Software oder Hardware notwendigen LADS-spezifischen Treiber entwickeln. Auch die IUTA-Kollegen Max Jochums und Dr. Ricardo Cunha der Abteilung F9 nahmen aktiv am Hackathon teil. Am Ende der zweitägigen Veranstaltung konnten die beiden IUTA-Kollegen einen voll funktionsfähigen LADS OPC UA Server präsentieren, der auf kostengünstigen Einplatinencomputern wie einem Raspberry Pi installiert werden kann. Dieser Erfolg demonstriert eindrucksvoll die Praktikabilität und Flexibilität des LADS-Standards in Verbindung mit OPC UA.



Abb. 3 + 4: 6. LADS OPC UA Hackathon am IUTA in Kooperation mit der Firma Gerstel

## Entwicklung einer innovativen Softwarelösung für die Fusion und automatisierte Datenprozessierung von chromatografischen, spektroskopischen und massenspektrometrischen Daten (iSoft)

Das Ziel des ZIM-Projektes iSoft ist die Entwicklung einer Softwarelösung zur automatisierten Datenprozessierung chromatografischer, spektroskopischer und massenspektrometrischer Daten für die umfassende Charakterisierung komplexer pharmazeutischer Proben. Die Herausforderung besteht in der integrativen „Fusion“ aller Analysedaten der drei genannten Methoden. Dies betrifft die Rohdatenübertragung und Konvertierung der herstellerspezifischen Datenformate zusammengefasst in einer Software, sowie die umfassende Auswertung der fusionierten Datensätze. Erstmals wird die arbeitsintensive manuelle Datenfusion und Ergebnisübertragung durch einen automatischen Prozess ersetzt. Dies gewährleistet ein reproduzierbares, akkurates, schnelles und detailliertes Mittel zur Qualitätskontrolle von Arzneimitteln. Des Weiteren wird über diesen Ansatz die Datenintegrität sichergestellt und dokumentiert. Abbildung 1 zeigt das Konzept der multidimensionalen Kopplungssysteme zur umfangreichen Charakterisierung von Arzneimitteln.

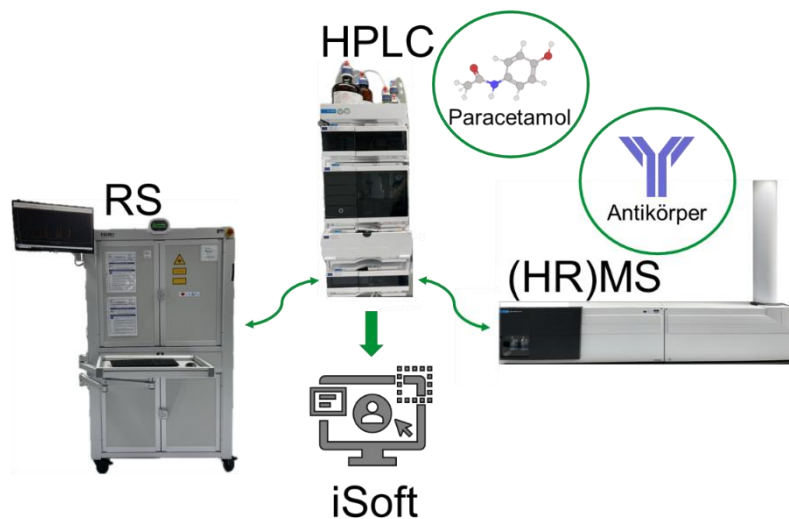


Abb. 1: Konzept der multidimensionalen Kopplungssysteme zur umfangreichen Charakterisierung von Arzneimitteln. Die im Rahmen des ZIM-Projekts iSoft entwickelten Softwaretools ermöglichen die fusionierte Prozessierung und Evaluierung der generierten Probandaten beider gekoppelten Ansätze aus Hochleistungsflüssigkeitschromatographie (HPLC) und Raman-Spektroskopie (RS), sowie HPLC und (hochauflösender) Massenspektrometrie ((HR)MS)

Zusammenfassend konnten im Rahmen des Projekts umfassende Datensätze zu pharmazeutischen Proben erzeugt werden, die verschiedene bekannte Varianzen wie unterschiedliche Lagerungsdauer, Chargen, sowie verschiedene dotierte Verunreinigungen in den Produkten berücksichtigen. Auf Basis dieser Daten wurden zunächst die Abläufe zur Prozessierung der spektralen Daten (Raman-Spektroskopie) und der spektrometrischen Daten (Massenspektrometrie) zur Vorbehandlung der Rohdaten softwareseitig etabliert. Anschließend erfolgte die Fusion der beiden Analysedatentypen durch Gewichtung der Datensätze, Mittelwertzentrierung und Skalierung, um eine gemeinsame, statistische Datenanalyse zu ermöglichen. Der K-Nächste-Nachbarn-Algorithmus und eine Hauptkomponentenanalyse konnten erfolgreich als statistische Werkzeuge zur Identifikation von Varianzen und Abweichungen etabliert werden. Zusätzlich konnten verschiedene Möglichkeiten zur Quantifizierung durch lineare Regression (univariat), sowie mittels MCR-ALS (multivariat) ausgearbeitet werden, die ebenfalls wichtiger Bestandteil in der Qualitätskontrolle von Arzneimitteln sind.

ZIM KK5312603KA1