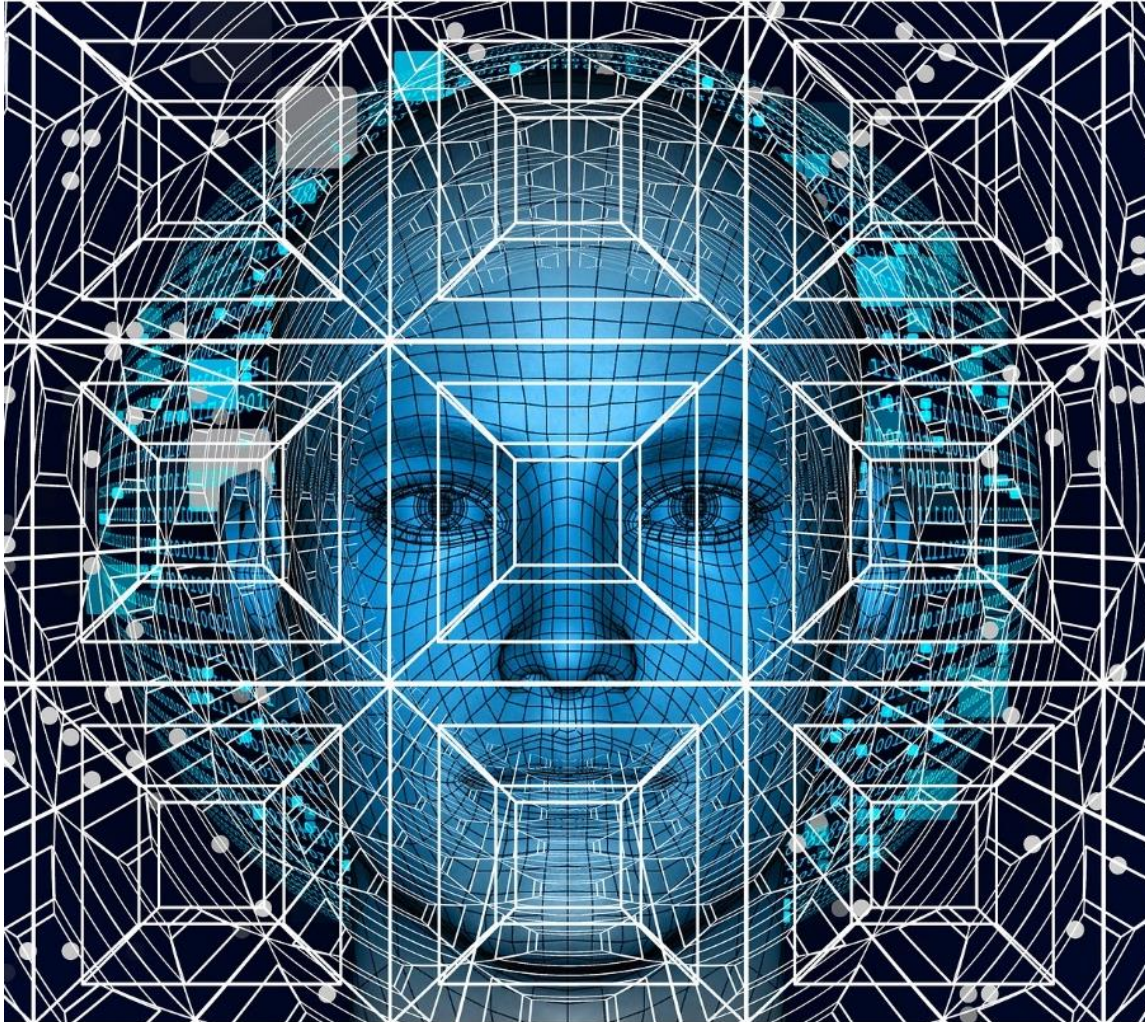


# Generative Künstliche Intelligenz in der Chemie-Industrie

VCI Webinar "Generative KI"  
17.01.2024

Inhalt: Cognitive Solutions Agenda  
Vortragender: Yves Gorat Stommel, Evonik  
Industries AG

# Die Begrifflichkeit *Künstliche Intelligenz* verweist auf die *in silico* Abbildung von kognitiven Prozessen



Picture source: [www.pixabay.com](http://www.pixabay.com)

**Kognitive Lösungen** (Cognitive Solutions, CS) liefern datenbasierte Einsichten, Vorhersagen und Entscheidungsunterstützungssysteme und ermöglichen so intelligente Prozesse und Produkte.

Eine Reihe verschiedener Technologien ermöglichen kognitive Lösungen, insbesondere im Bereich der **künstlichen Intelligenz** (KI).

*“An AI system is a machine-based system that is capable of influencing the environment by producing an output (predictions, recommendations or decisions) for a given set of objectives. It uses machine and/or human-based data and inputs to (i) perceive real and/or virtual environments; (ii) abstract these perceptions into models through analysis in an automated manner (e.g., with **machine learning**), or manually; and (iii) use model inference to formulate options for outcomes. AI systems are designed to operate with varying levels of autonomy.”* (OECD Definition, [oecd.ai/en/ai-principles](http://oecd.ai/en/ai-principles))

# Was fällt eigentlich alles in die Rubrik „KI“?

## Techniken und Konzepte der Künstlichen Intelligenz

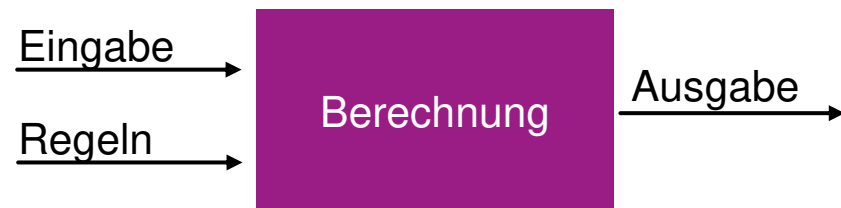
- a) **Konzepte des maschinellen Lernens**, mit beaufsichtigtem, unbeaufsichtigtem und bestärkendem Lernen unter Verwendung einer breiten Palette von Methoden, einschließlich des tiefen Lernens (Deep Learning);
- b) Logik- und wissensgestützte Konzepte, einschließlich Wissensrepräsentation, induktiver (logischer) Programmierung, Wissensgrundlagen, Inferenz- und Deduktionsmaschinen, (symbolischer) Schlussfolgerungs- und Expertensysteme;
- c) Statistische Ansätze, Bayessche Schätz-, Such- und Optimierungsmethoden.



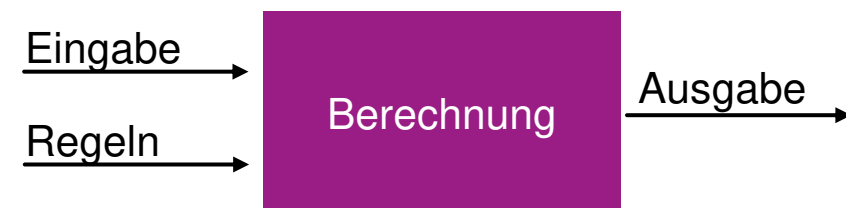
Quelle: EU Verordnung COM(2021) 206 final 2021/0106(COD)

# Ein wesentlicher Unterschied zwischen traditionellem Programmieren und Maschinellen Lernen liegt in dem Prozess der Modellerstellung

In der traditionellen **Programmierung** gibt ein Programmierer Instruktionen („Regeln“) vor

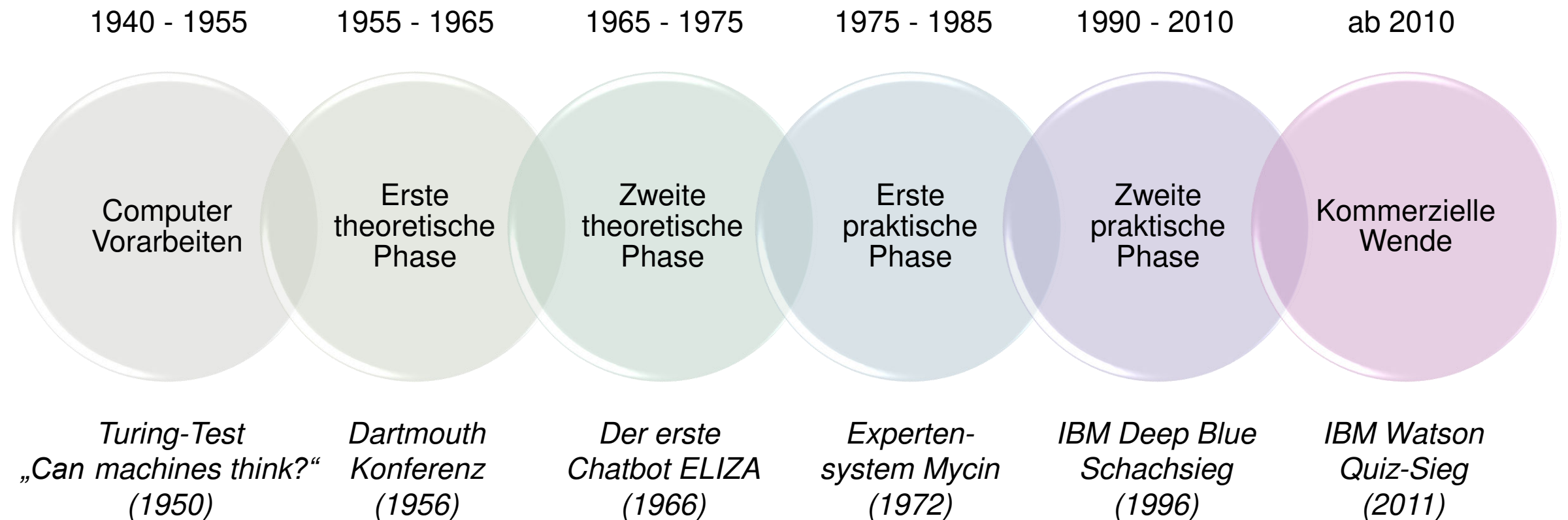


Im **Maschinellen Lernen** bildet der Algorithmus aus historischen Daten das Modell („Regeln“)



# Künstliche Intelligenz ist nicht neu, sondern unterstützt den Menschen bereits seit Jahrzehnten

## Eine kleine Geschichte der Künstlichen Intelligenz



# KI ist auch eine Vertrauensfrage – für die Nutzung kognitiver Lösungen ist daher eine adäquate Risikoabschätzung essentiell

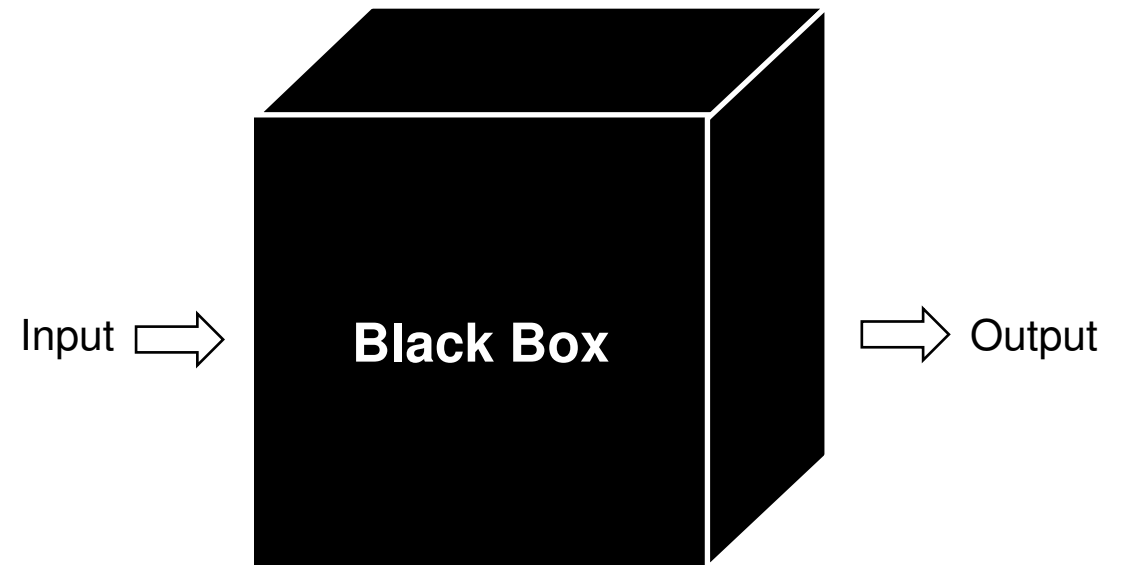
---

Einige Methodiken des maschinellen Lernens (z.B. neuronale Netze) werden als „Black Box“ Ansätze bezeichnet, da die Prozesse zwischen Input und Output für den Nutzer nicht ohne Weiteres nachvollziehbar sind.

Potenziell resultierende Schäden oder negative soziale Auswirkungen aufgrund der algorithmischen Entscheidungsfindung müssen betrachtet werden.

Dabei darf nicht außer Acht gelassen werden, dass jegliche Entscheidung – sei sie menschlich oder maschinell herbeigeführt – mit einer gewissen Unsicherheit behaftet ist.

Besonders bei generativen Modellen, kann neuer Output entstehen, der nicht (direkt) in den Trainingsdaten vorhanden war.



# Die europäische Regulierung durch den AI Act wird die weitere Entwicklung und Nutzung von KI im betrieblichen Kontext maßgeblich beeinflussen

Die EU-Kommission veröffentlichte ihr KI-Paket im April 2021 und schlug neue Regeln und Maßnahmen vor, um Europa zur globalen Drehscheibe für vertrauenswürdige KI zu machen.

Der Ansatz der EU für künstliche Intelligenz (EU AI Act) konzentriert sich auf Exzellenz und Vertrauen, um die Forschungs- und Industriekapazitäten zu stärken und die Grundrechte zu gewährleisten.

Im Dezember 2023 erfolgte die grundsätzliche Einigung; die Zustimmungen (u.a. im Parlament) stehen noch aus.

Nun wird es auch für Anwender Zeit, sich mit den zu erwartenden Anforderungen auseinanderzusetzen.

## Risikobasierter Ansatz (Stand November 2023)

**KI mit inakzeptablem Risiko:** Verboten sind KI-Systeme, die menschliches Verhalten manipulieren oder Social Scoring betreiben.

**KI mit hohem Risiko:** Hierunter fallen insbesondere KI-Systeme, mit denen ein Produktsicherheitsrisiko verbunden ist. Beispiele sind autonome Fahrzeuge, Drohnen, Medizintechnik und biometrische Fernidentifizierung. Eine dynamische Risikoliste der KI Systeme ist im Gesetzesentwurf enthalten.

**KI mit geringem Risiko:** Transparenzverpflichtungen erforderlich; Nutzer müssen über Interaktion mit KI informiert werden..

**KI mit minimalem Risiko:** Keine zusätzlichen regulatorischen Vorgaben im Verordnungsentwurf.



Dezember 2023

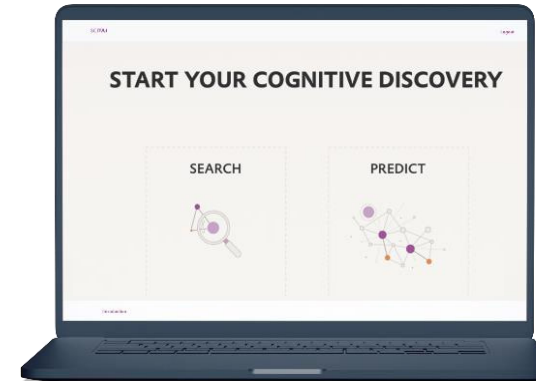


**KI mit systemischen Risiko**  
incl.  
**Foundation Models**

# Nutzung von KI: “Wie klassische Programmierung, ist Künstliche Intelligenz eine Basistechnologie für verschiedene Anwendungsbereiche”<sup>1</sup>

## Discovery vs. Accuracy

- **Discoveries** sind Entdeckungen durch KI<sup>2</sup>
- **Accuracy** bezieht sich auf bestehende, wiederholende Entscheidungen oder Arbeitsschritte, die mit KI optimiert werden können<sup>2</sup>



## Process vs. Offering vs. Business Model

- KI als Teil eines Arbeitsschrittes
- KI als ein integraler und wertgenerierender Teil eines Evonik Angebots
- KI als Enabler für neue Geschäftsmodelle



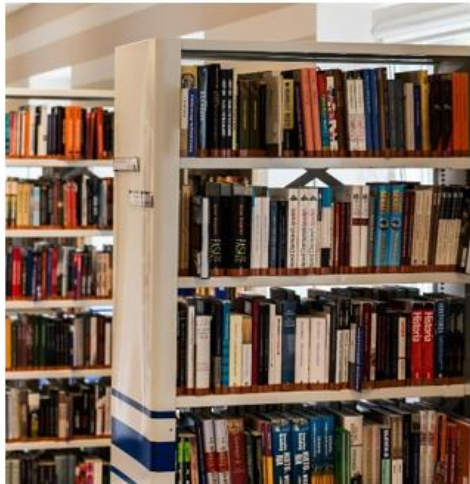
- Domänenexpertise
- Technologie
- Chemikalien
- Software

<sup>1</sup> Agrawal, A., Gans, J., Goldfarb, A., Prediction Machines, Harvard Business Review Press, p. 125.; <sup>2</sup>F. Provost, T. Fawcett; Data Science for Business, p. 6.



# Aktuelle Projekte bei Evonik greifen auf unterschiedliche methodische und technologische Ansätze Kognitiver Lösungen zurück

**Forschung**



*Wissensentdeckung  
und -vernetzung*

**Anwendungstechnik**



*Entwicklung und  
Markteinführung  
von neuen Kunden-  
angeboten*

**Einkauf**



*Verbesserung der  
Entscheidungsqualität  
im Lieferanten- und  
Einkaufsmanagement*

**Produktion**



*Nutzung prädiktiver  
Modelle zur Aus-  
beuteverbesserung*

**Vertrieb**



*Erste Anlaufstelle  
für Unterstützungs-  
fragen im  
Kundenservice*

# Nachdem KI in den 2010ern vor allem für das Auffinden von Strukturen in Daten verwendet wurde, rückt nun das Generieren von Inhalten in den Fokus

Microsoft Bing | SUCHEN | CHAT | Anmelden | 75

Erkläre mir generative KI in maximal drei Sätzen

✓ Suchen nach: „generative KI“  
✓ Antworten für Sie werden generiert...

Generative KI ist eine Art von KI, die Inhalte wie Texte, Bilder, Audios erzeugen kann, die den Trainingsdaten ähneln. Generative KI verwendet Algorithmen wie Generative Adversarial Networks (GANs) oder Variational Autoencoders (VAEs), um die Inhalte zu erzeugen. Generative KI kann für kreative oder praktische Zwecke eingesetzt werden <sup>1</sup> <sup>2</sup>.

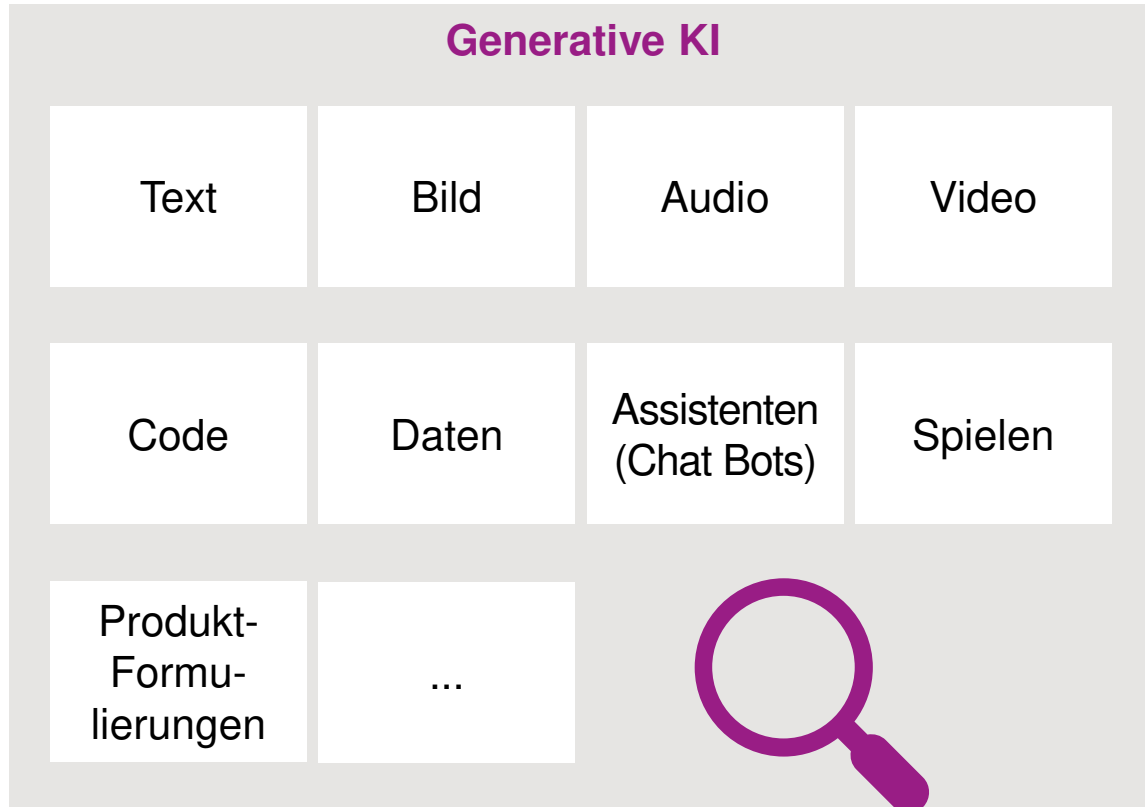
**z.B. Bildgenerierung**  
**z.B. Generierung chemischer Formulierungen**  
**Doch was ist mit Transformern und Diffusion-Modellen?**

<sup>1</sup>: Was ist Generative KI? - Techopedia Deutschland  
<https://www.techopedia.com/de/definition/generative-ki> <sup>2</sup>: Die generative KI für Kreative: Adobe Firefly  
<https://www.adobe.com/de/sensei/generative-ai/firefly.html>

Weitere Informationen: [1. techopedia.com](https://www.techopedia.com) [2. adobe.com](https://www.adobe.com) +3 mehr | 1 von 5

Quelle: Bing-Oberfläche, Abruf vom 23.08.2023

# Generative KI und vor allem große Sprachmodelle (LLMs) sind im Geschäftskontext hochrelevant



## Was ist generative KI?

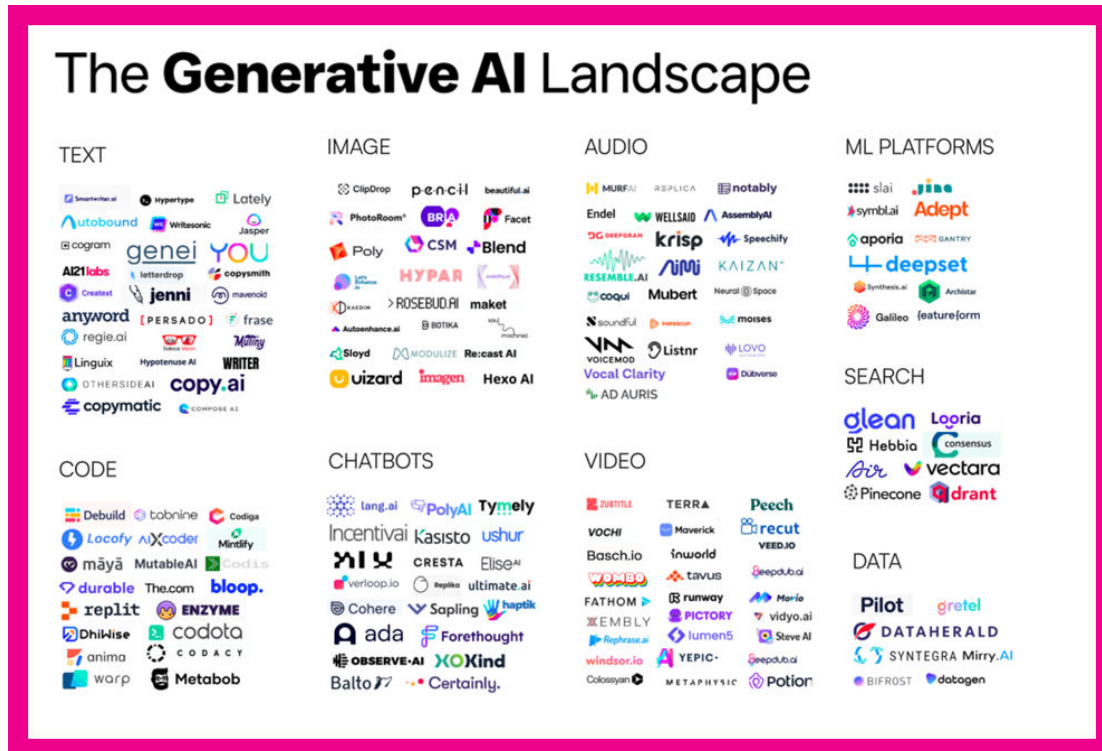
- KI, die neue Inhalte generiert
- Algorithmen und Modelle werden auf bestehenden Datensätzen trainiert
- Eingabe: Eingabeaufforderungen und andere Formen von Daten (Bilder, Videos usw.)
- Ausgabe: Text, Bilder, Video, Musik, Produkt-Formulierungen, ...
- Kann originelle Ergebnisse produzieren, die die menschliche Kreativität simulieren

## Was sind große Sprachmodelle?

- Spezifische Art der generativen KI
- Schwerpunkt: Verstehen und Generieren von Menschen-ähnlichem Text (und anderer Formen schriftlicher Daten)
- Auf der Grundlage von Mustern und Informationen, die aus großen Mengen von (Text-)Daten gelernt wurden

Quelle: Adaptiert von <https://dataphoenix.info/content/images/2022/10/Gen-AI-Market-Map.png> (August 2023)

# Generative KI und vor allem große Sprachmodelle (LLMs) sind im Geschäftskontext hochrelevant



## Was ist generative KI?

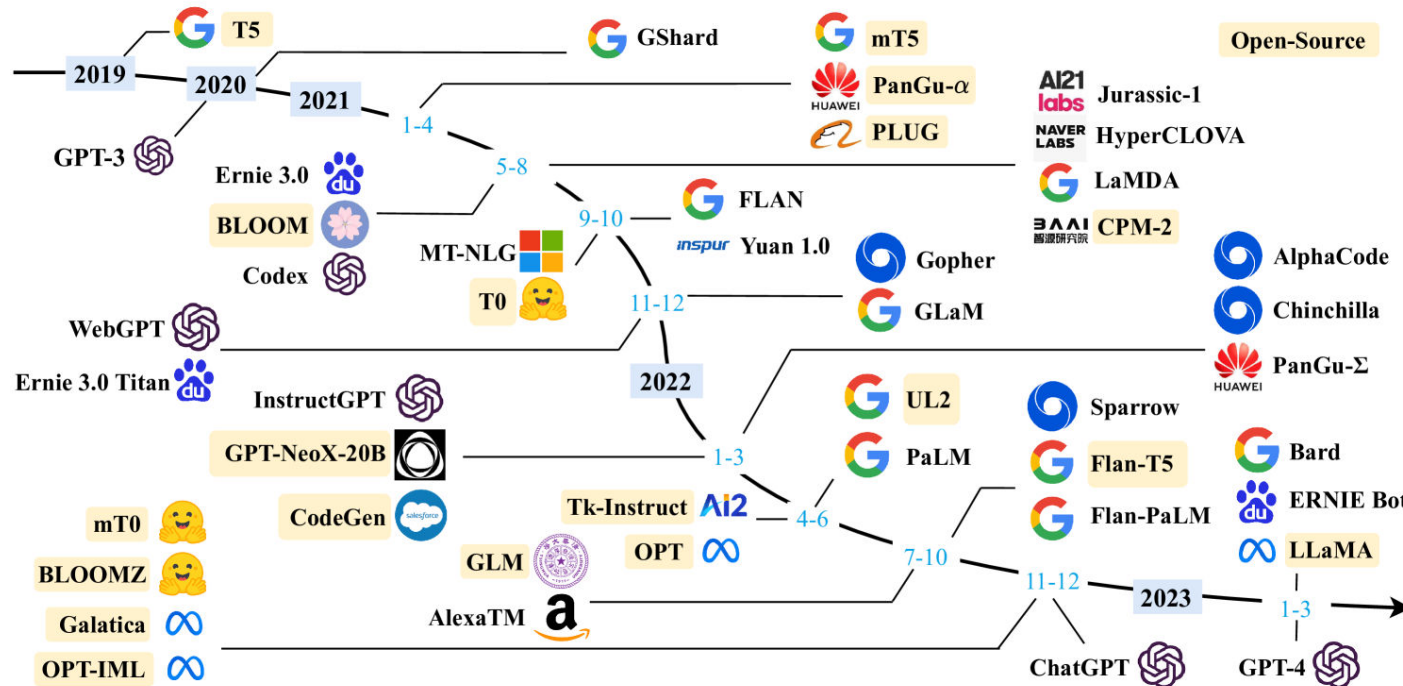
- KI, die neue Inhalte generiert
- Algorithmen und Modelle werden auf bestehenden Datensätzen trainiert
- Eingabe: Eingabeaufforderungen und andere Formen von Daten (Bilder, Videos usw.)
- Ausgabe: Text, Bilder, Video, Musik, Produkt-Formulierungen, ...
- Kann originelle Ergebnisse produzieren, die die menschliche Kreativität simulieren

## Was sind große Sprachmodelle?

- Spezifische Art der generativen KI
- Schwerpunkt: Verstehen und Generieren von Menschen-ähnlichem Text (und anderer Formen schriftlicher Daten)
- Auf der Grundlage von Mustern und Informationen, die aus großen Mengen von (Text-)Daten gelernt wurden

Quelle: Adaptiert von <https://dataphoenix.info/content/images/2022/10/Gen-AI-Market-Map.png> (August 2023)

# Die Geschichte von LLM (Transformer-Sprachmodellen) reicht in etwa 5 Jahre zurück – und wird von US-Anbietern dominiert



- Es gibt nicht nur ein Modell und es ist zu unterscheiden in kostenpflichtigen (wie z.B. ChatGPT) und frei verfügbaren Open-Source Modellen (manchmal nur für Forschung!)
- Manche Modelle sind für gewisse Domänen besser geeignet/spezialisiert
- Ein größeres Modell bedeutet nicht zwingend ein besseres Ergebnis
- Die Wahl ist abhängig vom Anwendungsfall

Zur Begrifflichkeit:

Firma	Anwendung	Modell
OpenAI	ChatGPT	GPT-3.5 / 4
Microsoft	Bing / Copilot	GPT-4
Google	Bard	LaMDA
Meta		LLaMA

Quelle: <https://ar5iv.labs.arxiv.org/html/2303.18223>, Abruf vom 25.08.2023

# ChatGPT ist eine generative KI, die auf einem Large Language Model (LLM) basiert.

- **Großes Sprachmodell:**  
Spezifische Art der **generativen KI**
- Versteht und erzeugt menschenähnlichen Text
- GPT = "Generative Pretrained Transformer"
- Große Sprachmodelle sind gekennzeichnet durch **Daten, Architektur und Training** (IBM)

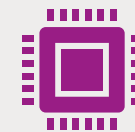
## Daten

Trainiert mit großen Datenmengen aus verschiedenen Quellen  
*(GPT3 wurde vortrainiert auf 45TB Textdaten trainiert)*



## Architektur

Transformer-Modell: Neuronales Netz mit 175 Milliarden Parametern



## Training

Vortrainiertes Modell das die Vorhersagen während des Trainings schrittweise verbessert



# Text wird in eine numerische Darstellung umgewandelt und läuft durch eine Kodierungsschicht, um die Ausgabe vorherzusagen



- VEREINFACHT -

Vektor der "Katze":  
[0.2, 0.5, -0.1, 0.8,  
-0.4, 0.6, 0.3, ...]

Wie nah oder entfernt  
sind Vektoren in einem  
*n*-dimensionalen Raum?

# Die wesentlichen Aufgaben, die sich mit Sprachmodellen lösen lassen, sind Text erzeugen, zusammenfassen, extrahieren, umschreiben, clustern und klassifizieren



**Erzeugen** von Entwürfen

Anwendungen:  
Produktbeschreibungen,  
Marketingkampagnen,  
technische Dokumentationen,  
Geschäftsberichte



**Zusammenfassen** eines langen Textes zu einem kurzen und prägnanten Überblick

Anwendungen: Nachrichtenartikel,  
wissenschaftliche Publikatione,  
Kundenfeedback



**Extrahieren** von relevanten Informationen aus Texten

Anwendung: Erkennung von Entitäten (Personen, Orte, Firmen, ...) oder Ereignissen



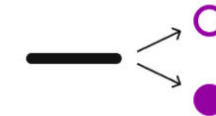
**Umschreiben** von Texten

Anwendungen: Umschreiben in andere Formate und Stile (z.B. formal/nicht formal), Übersetzung in andere Sprachen



**Clustern** von Texten nach Ähnlichkeit oder Themen

Anwendungen: Trendanalyse,  
Kundenprofilierung

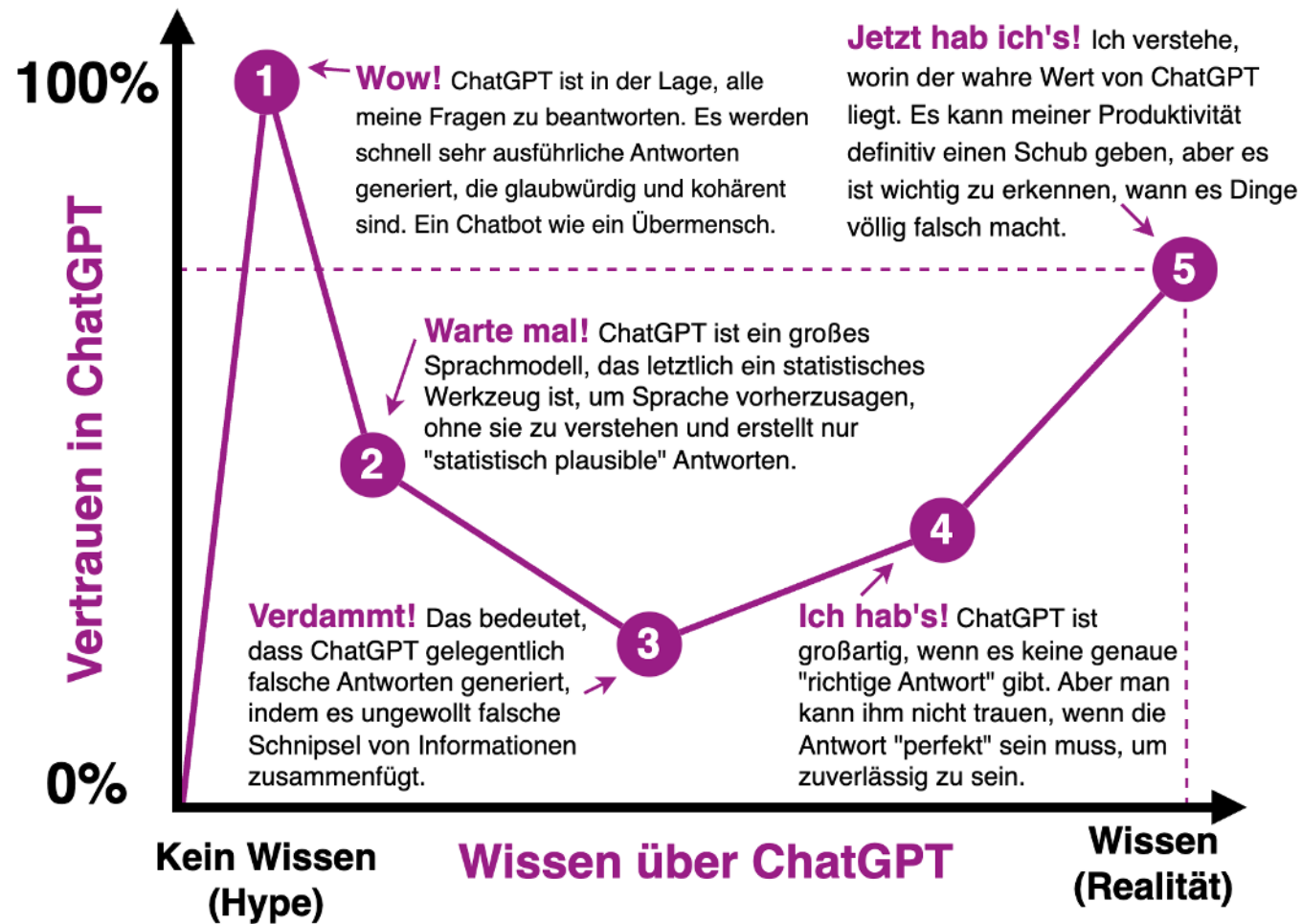


**Klassifizieren** von Texten nach vordefinierten Kategorien

Anwendungen: Spamfilter,  
Empfehlungssysteme

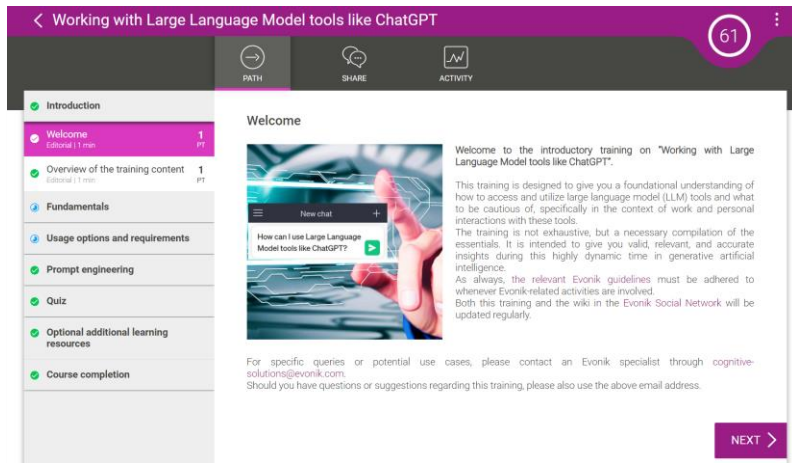


# Es wird ChatGPT und Co. gerade viel Aufmerksamkeit – und teilweise Vertrauen – geschenkt, doch das Wissen über die Technik ist i.d.R. gering

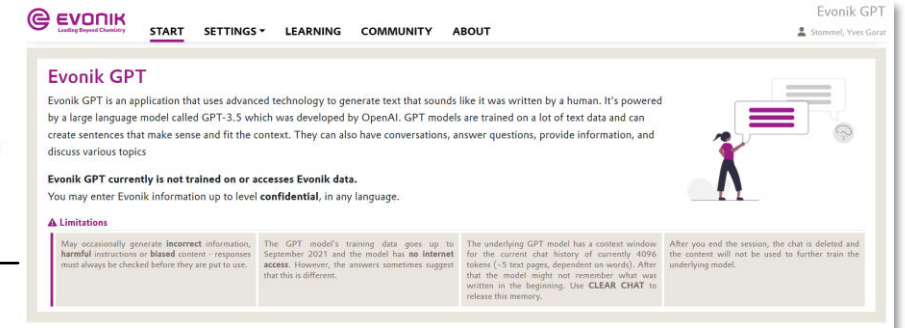


Abgewandelt von:  
<https://www.linkedin.com/posts/ralp-h-aboujaoude-diaz-40838313-technology-tech-chatgpt-activity-7026269749713981441-EDt4>

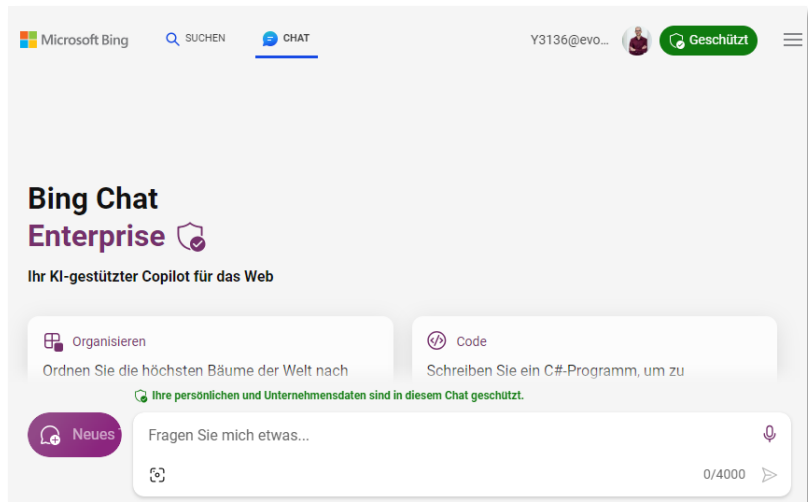
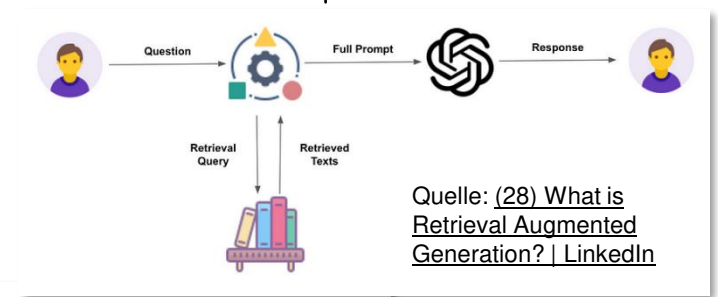
# Die Evonik Lernkurve zu LLM fing vor fünf Jahren an, beschleunigte sich ab Dezember 2022 ...



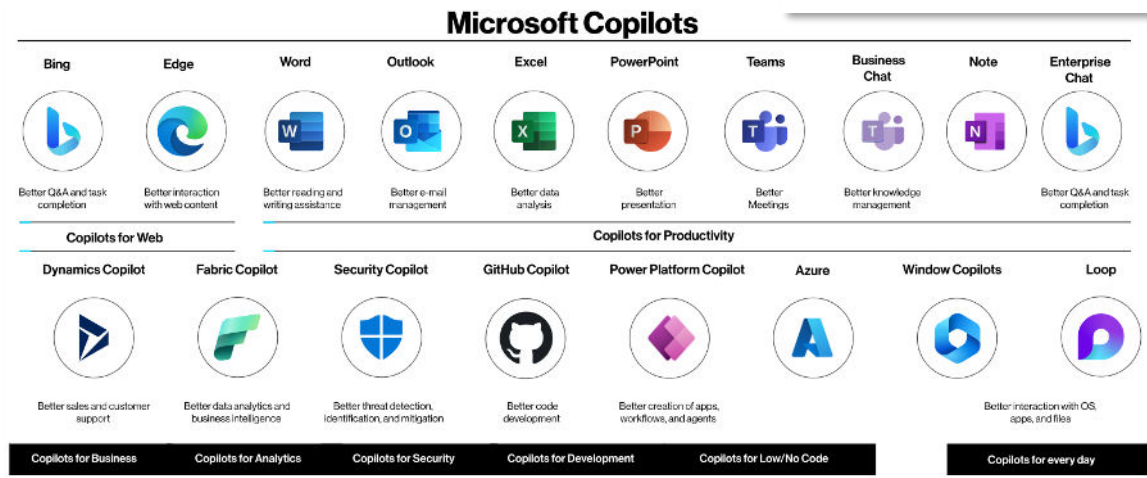
Finden Sie hier, mehr Informationen zum Highlight Topic: Chat GPT/Evonik GPT



# ... und scheint seitdem nicht abzuflachen



Quelle: <https://www.bing.com>



Quelle: <https://www.softwareone.com/bg-bg/now/microsoft-copilot>



# Deep Dive 1: Mit „Prompt Engineering“ werden die Ausgaben des Modells gesteuert, ohne dabei das Modell selbst zu ändern

- Durch Erfahrung in den Interaktionen mit dem Modell, können Prompts nach einem Schema optimiert werden
- Das Schema ist meist nur für ein Modell gültig
- Es hat sich sogar schon ein Markt für “Prompt Engineers” entwickelt; Quellen zum Lernen häufen sich<sup>1</sup>
- Es gibt schon Services, die diesen Optimierungsprozess teilweise automatisieren wollen<sup>2</sup>

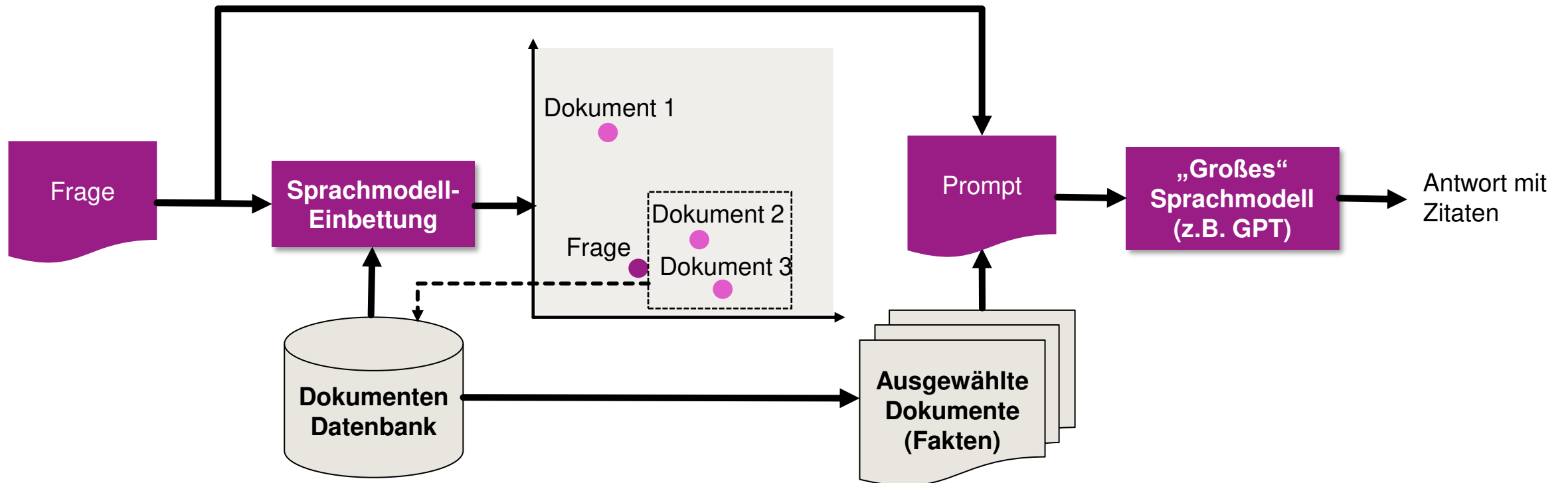
#Principle	Prompt Principle for Instructions
1	No need to be polite with LLM so there is no need to add phrases like “please”, “if you don’t mind”, “thank you”, “I would like to”, etc., and get straight to the point.
2	Integrate the intended audience in the prompt, e.g., the audience is an expert in the field.
3	Break down complex tasks into a sequence of simpler prompts in an interactive conversation.
4	Employ affirmative directives such as ‘do,’ while steering clear of negative language like ‘don’t’.
5	When you need clarity or a deeper understanding of a topic, idea, or any piece of information, utilize the following prompts: <ul style="list-style-type: none"><li>o Explain [insert specific topic] in simple terms.</li><li>o Explain to me like I’m 11 years old.</li><li>o Explain to me as if I’m a beginner in [field].</li><li>o Write the [essay/text/paragraph] using simple English like you’re explaining something to a 5-year-old.</li></ul>
6	Add “I’m going to tip \$xxx for a better solution!”
7	Implement example-driven prompting (Use few-shot prompting).
8	When formatting your prompt, start with ‘###Instruction###’, followed by either ‘###Example###’ or ‘###Question###’ if relevant. Subsequently, present your content. Use one or more line breaks to separate instructions, examples, questions, context, and input data.
9	Incorporate the following phrases: “Your task is” and “You MUST”.
10	Incorporate the following phrases: “You will be penalized”.

Tabelle: Screenshot aus <https://arxiv.org/pdf/2312.16171v1.pdf>

<sup>1</sup> <https://help.openai.com/en/articles/6654000-best-practices-for-prompt-engineering-with-openai-api>,  
<https://learnprompting.org/docs/intro>,  
<https://github.com/dair-ai/Prompt-Engineering-Guide>

<sup>2</sup> <https://promptperfect.jina.ai/#how-does-it-work>

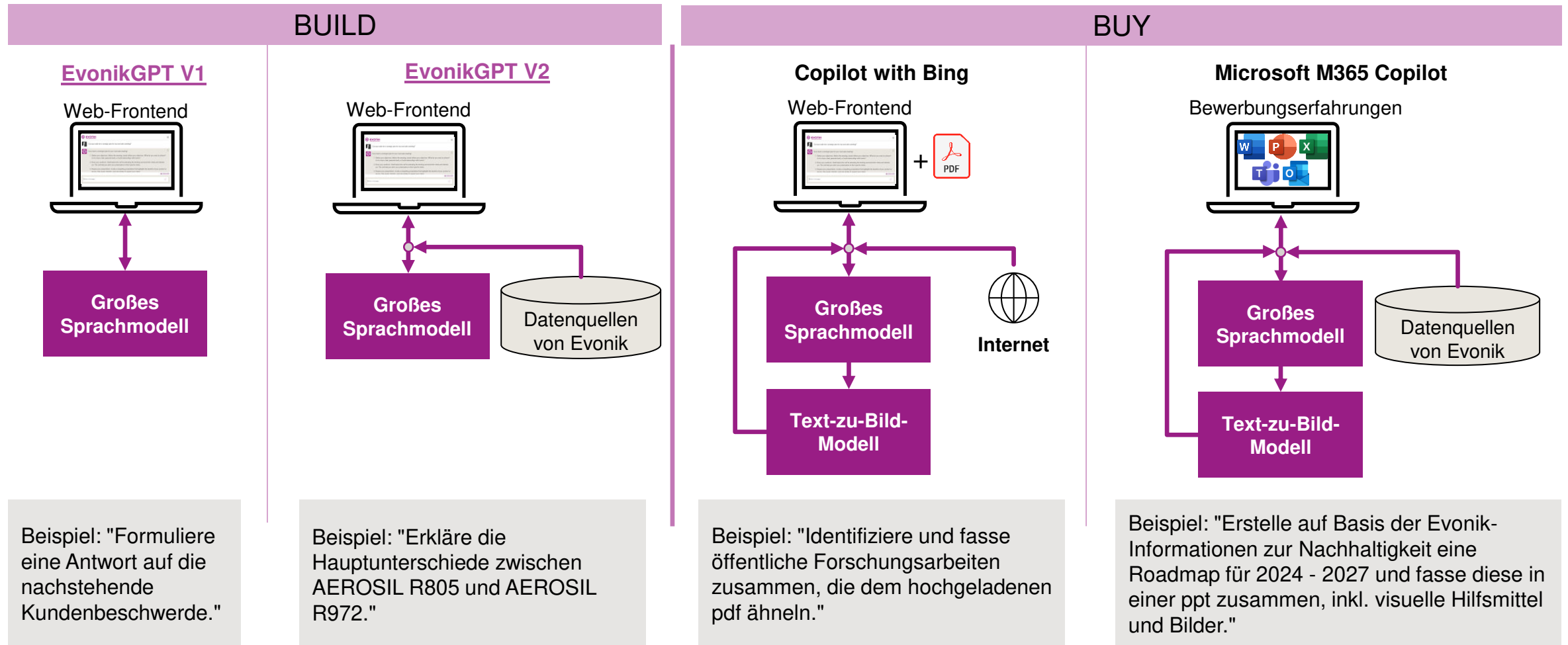
## Deep Dive 2: Aktuelle Fakten können durch eine Suchmaschine mit großen Sprachmodellen verbunden werden – das reduziert auch Halluzinationen



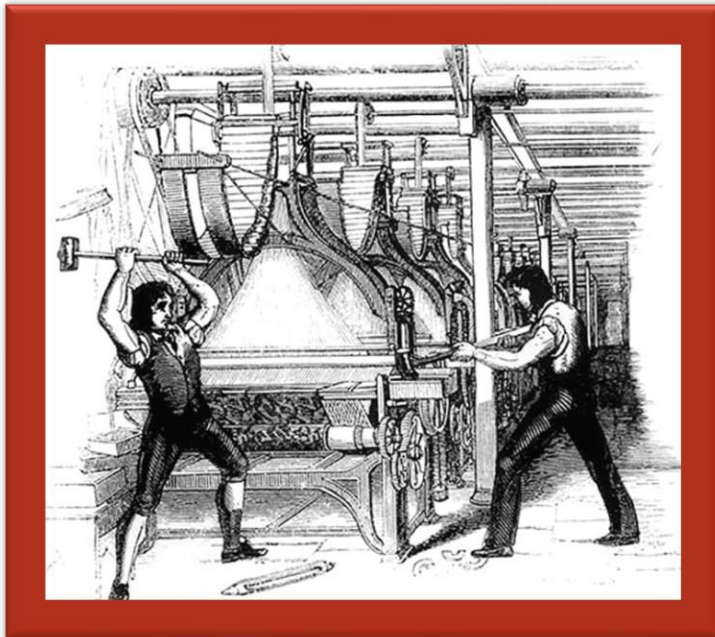
# One-size-fits-all? Je nach Benutzeranforderung braucht nicht jede(r) Mitarbeitende bei Evonik alle Werkzeuge

	Evonik GPT	Evonik GPT 2.0	Copilot w Bing	M365 Copilot
Textgenerierung	✓	✓	✓	✓
Internetzugang (Referenz)			✓	✓
Dateien hochladen (Ref.)		✓		✓
Interne Daten (Referenz)		✓		✓
Bilderzeugung			✓	✓
Text-zu-Anwendung (xls, ppt, ...)				✓
Zielgruppe bei Evonik	Alle	Alle	Alle	Top MS365-Nutzer

# Für die meisten Aufgabenbereiche des Büroarbeitsplatzes reicht zum heutigen Zeitpunkt eine übersichtliche Anzahl von Werkzeugen



# Bei alledem: Eine reine Technik-Betrachtung limitiert das Potenzial von KI – Begleitung & Einbindung aller Mitarbeiter\*innen entscheidet über den Erfolg



Source: <https://www.realcap.co.za/saboteurs-luddites-automation/>



DER SPIEGEL Heft 14/1964

Source: <https://www.spiegel.de>



DER SPIEGEL Heft 16/1978



DER SPIEGEL Heft 36/2016



# Mit der Cognitive Solutions Agenda bringen wir funktionsübergreifend Teams und Kompetenzen zusammen ...

## Evonik Digital

Digital Envisioning; Orchestrierung digitaler Initiativen; Scouting des digitalen Ökosystems

## IT

Data Governance, Sicherheit und Infrastruktur; IT Technologiescouting; PoC und Operationalisierung

## Technology & Infrastructure

Data Engineering; Data Science; OT; Operationalisierung; Domänenwissen

## Marketing & Sales

Data Engineering; Data Science; Domänenwissen

## Accounting

Technologiescouting; Data Engineering; Business-Analysen; Domänenwissen

## Research, Development & Innovation

F&E Technologiescouting; Corporate Venturing; Domänenwissen



## Chemiedivisionen

**(Performance Materials, Smart Materials, Specialty Additives, Nutrition & Care)**

Operationalisierung und Implementierung; Technologiescouting; Domänenwissen; Data science

Bildquelle: [www.master-computing.com/2017/10/11/diverse-team-productive/](http://www.master-computing.com/2017/10/11/diverse-team-productive/)

# ... um den Weg zu einer Daten- und KI-befähigten Organisation gemeinsam und holistisch zu gestalten

---

## Learn & Understand

Data Analytics -Trainings  
Experience CS - playgrounds  
CS Ecosystem

## Apply

CS activities at Evonik  
Implementation support for CS  
Tool-Landscape for Data Analytics  
AI InMotion

## Drive

Data Science Expert Corner  
The Evonik framework for CS  
Events

## Inform

Terms (CS, AI, ML, QC..) explained  
Roles and tasks for implementing CS  
Video Channel  
Bi-monthly updates



**EVONIK**

**Leading Beyond Chemistry**