

DAS DATA ANALYSIS SYSTEMS

OPTIMIERUNG VON CHEMISCHEN PROZESSEN

OPTIMIZATION OF CHEMICAL PROCESSES

DE

Das Know-how des Software Competence Center Hagenberg im Schwerpunkt Data Analysis Systems (DAS) ist methodenzentriert und kann daher in verschiedensten Branchen eingesetzt werden. Das zeigt auch die Anwendung im Bereich der chemischen Industrie: gemeinsam mit sechs anderen wissenschaftlichen Partnern (Institut für Wissensbasierte Mathematische Systeme der JKU, Institut für Mikroelektronik und Mikrosensorik der JKU, Kompetenzzentrum Holz GmbH - Wood K plus, RECENTD GmbH, Institut für Chemische Technologien und Analytik der TU Wien, Embedded Systems & Software Research Center der Universität Salzburg) und neun Unternehmenspartnern (Brau Union Österreich AG, Borealis AG, Dynea Austria GmbH, Kelheim Fibres GmbH, Kemira Chemie Ges. mbH, Krems Chemie Chemical Services AG, Lenzing AG, Nufarm GmbH & Co KG, OMV Aktiengesellschaft) ist das SCCH im Forschungsnetzwerk PAC – Process Analytical Chemistry tätig. Bis 2014 arbeitet das SCCH

EN

Know-how in Software Competence Center Hagenberg's research topic Data Analysis Systems (DAS) is method-oriented and thus can be applied in various branches. This is reflected in the following application in the chemical industry: Together with six scientific partners (Institute for Knowledge-Based Mathematical Systems at Johannes Kepler University, Institute for Microelectronics and Microsensorics at Johannes Kepler University, Kompetenzzentrum Holz GmbH (Wood K plus), RECENTD GmbH, Institute for Chemical Technologies and Analytics at Technical University of Vienna, Embedded Systems & Software Research Center at the University of Salzburg) and nine industrial partners (Brau Union Österreich AG, Borealis AG, Dynea Austria GmbH, Kelheim Fibres GmbH, Kemira Chemie Ges. mbH, Krems Chemie Chemical Services AG, Lenzing AG, Nufarm GmbH & Co KG, OMV Aktiengesellschaft), SCCH is active in the research network Process Analytical Chemistry (PAC). Until



an der Entwicklung von Methoden zur Verbesserung der Analytik, Optimierung und Steuerung chemischer Prozesse mit. So sind signifikante Kosten-, Energie- und Rohstoffeinsparungen bei steigender Ausbringung und höherer Produktqualität realisierbar.

Gegenwärtig wird die Infrarotspektroskopie als eine wesentliche Technologie angesehen, da diese in Kombination mit entsprechender Modellbildung die Entwicklung von virtuellen Sensoren für eine Vielzahl von chemisch relevanten Prozessgrößen erlaubt (Chemometrie). Dabei wird vor allem auf die für die Inline-Messung gut geeignete Nah-Infrarot-Spektroskopie gesetzt.

„Im Bereich Data Analysis Systems sind wir für Datenanalyse und Modellbildung verantwortlich. Das Ziel ist, verbesserte Verfahrensweisen im Bereich der Chemometrie zu entwickeln. Wir greifen dabei auf langjährige Erfahrung im Bereich der datengetriebenen Modellierung wie zum Beispiel maschinelles Lernen und Data Mining zurück“, sagt der Projektleiter am SCCH, Dr. Thomas Natschläger und nennt die zwei wichtigsten Fragestellungen an denen konkret gearbeitet wird, die automatische Auswahl des zu analysierenden Spektralbereichs, um einen robusten virtuellen Sensor zu bekommen und die Entwicklung von Methoden, die den effizienten Transfer von Modellen von einem Anwendungsszenario zu einem ähnlich gelagerten erlauben. Die Forschungsarbeiten im Rahmen von PAC sind durch die konkreten Aufgabenstellungen und Prozesse der beteiligten Unternehmenspartner motiviert, wodurch für diese ein unmittelbarer Nutzen sichergestellt ist. Die im Projekt bearbeiteten Anwendungen reichen von der Analyse und Optimierung der Produktion von Viskosefasern über die Erforschung der qualitätsbestimmenden Parameter von Kunststoffgranulat bis zur Qualitätssicherung in der Bierproduktion und zur Sicherstellung der absoluten Reinheit von Gasen.

2014 SCCH will be collaborating on the development of methods to improve analytics, optimization and control of chemical processes. This enables significant savings on costs, energy and raw materials with greater output and better product quality.

Presently infrared spectroscopy is seen as an important technology because, in combination with corresponding modeling, it enables the development of virtual sensors for many chemically relevant process parameters (chemometry). These sensors primarily use near infrared spectroscopy (NIRS), which is well suited for inline measurement.

“In Data Analysis Systems, we are responsible for data analysis and modeling. The goal is to develop improved methods in chemometry. Here we rely on our many years of experience in the field of data-driven modeling, e.g., machine learning and data mining,” says SCCH project manager Dr. Thomas Natschläger. He reports that important problems that are currently being studied include automatic selection of a spectral range to be analyzed so that a robust virtual sensor is achieved, and the development of methods for efficient transfer of models from one application scenario to another similar one.

Research work within PAC is motivated by specific problems and processes of the involved industrial partners. This ensures direct benefits for these partners. The applications involved in the project range from the analysis and optimization of the production of viscous fibers, to researching the quality-relevant parameters for plastic granulate, to quality assurance in beer production, and to ensuring absolute purity of gases.

DR. THOMAS NATSCHLÄGER
Key Researcher Data Analysis Systems
+43 7236 3343 868
thomas.natschlaeger@scch.at



skope und Rasterkraftmikroskope
nicht oder nur schwer zugänglich
sind. (PTB)
Seite 7

fair for quality
new QA produc
Continued on

High-Speed Industrial OCT
Die Lösung für Ihre Anforderungen
zur zerstörungsfreien Materialprüfung
und zur 100% Qualitätskontrolle



RECENTD
RESEARCH CENTER NON DESTRUCTIVE TESTING
Halle 1 / Stand 1602

Infrarot-Spektroskopie
Die Methode der Wahl zur Steigerung
der Effizienz ihrer chemischen Prozesse



PAC
Process Analytical Chemistry

T4
Halle 3, Stand 3011
www.IMTS.ch


messekompakt.de **NEWS zur Control 2012**

UAR Upper Austrian Research Linz + [Newsletter abonnieren...](#)

Forschung fördert Innovation!

Die Upper Austrian Research GmbH ist die Leitgesellschaft für außeruniversitäre, anwendungsorientierte Forschung in Oberösterreich und ein zentrales Element der Forschungs-, Technologie- und Innovations-Politik (FTI) des Landes OÖ. Mit ihren Beteiligungsgesellschaften fördert sie die Umsetzung innovativer Lösungen an der Schnittstelle von der Grundlagen- zur anwendungsorientierten Forschung.

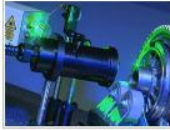
18.05.2012
Intelligente Prozesssteuerung durch selbstlernende Mathematik



Den Forschern im K-Projekt PAC ist es dank Kooperation gelungen, intelligente Modelle für schnelle und einfache Konzentrationsmessungen in der Viskosefaserherstellung zu entwickeln.

[Mehr...](#)


15.05.2012
F&E Pavillon auf der "Resources & Materials" in Wels



Von 19. bis 21. 6. 2012 präsentiert die Upper Austrian Research ihre Forschungskompetenzen für Energie- und Ressourceneffizienz, innovative Werkstoffe + intelligente Produktion in Wels.

[Mehr...](#)

14.05.2012
RECENTD bietet Prüftechnik für kohlefaserverstärkte Verbundwerkstoffe



Die Linzer RECENTD GmbH bietet der Industrie auch für die Werkstoffe der Zukunft modernste Prüftechnologien und fördert so auch die Weiterentwicklung dieser Technologien.

[Mehr...](#)

Intelligente Prozesssteuerung durch selbstlernende Mathematik

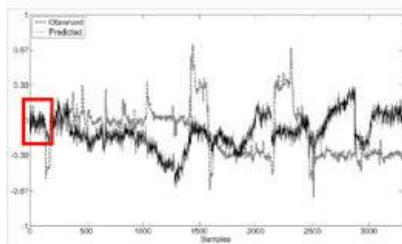


Die Viskosefaserherstellung ist von großer wirtschaftlicher Bedeutung. Mit den steigenden Produktionsmengen wachsen auch die Anforderungen an die Prozessanalytik. Deshalb arbeiten Forscher im PAC Projekt daran, neue Prozessanalytik für die Viskosefaser-Herstellung zu entwickeln. Ein Thema ist dabei die chemische Untersuchung des Spinnbades, in das der Viskosefaden gesponnen wird. Die Hauptbestandteile Schwefelsäure H_2SO_4 , Natriumsulfat Na_2SO_4 und Zinksulfat $ZnSO_4$, sollen in Echtzeit mittels NIR-Spektroskopie gemessen werden.

Um NIR-Spektroskopie (nahes Infrarot) für Konzentrationsmessungen in der Viskosefaserherstellung

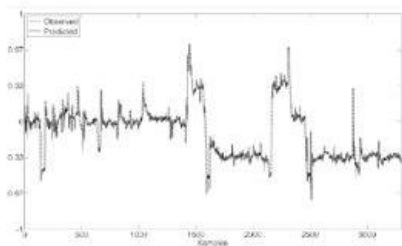
einsetzen zu können, werden mathematische Modelle benötigt, welche Prozessänderungen selbständig erkennen und sich automatisch aktualisieren. Die Herausforderung dabei ist nicht die NIR-Messung selbst, sondern die mathematische Verarbeitung der Messdaten. Denn das Spinnbad ist ständigen Änderungen durch die stark geschlossenen Kreisläufe unterworfen, und diese Änderungen haben direkte Auswirkungen auf die Messergebnisse. Daher werden intelligente mathematische Algorithmen benötigt, die die Änderungen „verstehen“ und die selbstständig aus den neuen Prozesszuständen lernen und sich automatisch aktualisieren.

Für gewöhnlich lernen die mathematischen Modelle anhand von bekannten Prozessdaten. Mit Hilfe dieses Wissens sollen dann weitere Messungen ausgewertet werden können. Wenn sich das Spinnbad nun aber in einer Art ändert, die in der Lernphase nicht vorgekommen ist, ist das Modell „überfordert“ und liefert falsche Ergebnisse.



Ein solches Beispiel wird im Diagramm links gezeigt. Die graue Linie ist die tatsächliche Konzentration, die schwarze Linie ist die mit dem mathematischen Modell berechnete Konzentration. Das rote Rechteck markiert die „Trainingsdaten“. Hier liegen Messung und Rechnung wie gewünscht übereinander. Sobald die Rechnung selbstständig den Prozess weiter verfolgen soll, kommt es zu sehr starken Abweichungen.

Den Forschern im PAC Projekt ist es nun gelungen, auf Basis von Messdaten aus der Viskosefaserherstellung derartige intelligente Modelle zu entwickeln. Dadurch steht mit der NIR-Spektroskopie eine schnelle und einfache Methode für die Prozessanalytik zur Verfügung.



Spinnbad sofort erkannt werden.

Das zweite Diagramm (links) zeigt dieselben Messdaten wie vorher, allerdings werden sie nun mit einem selbstlernenden Modell berechnet. Nach jedem Rechenschritt überprüft sich das Modell selbst auf Richtigkeit und aktualisiert sich automatisch. Die berechneten und die gemessenen Daten liegen genau übereinander. Nur durch diese intelligente Mathematik ist der Einsatz von NIR-Messungen in der Viskosefaserherstellung möglich. Der Vorteil der schnellen Messung liegt darin, dass Konzentrationsänderungen im

Die hervorragende Zusammenarbeit des JKU Instituts FLLL (Fuzzy Logic Laboratorium Linz) mit Lenzing AG, RECENTD, SCCH und Wood K plus im PAC-Projekt hat die Entwicklung dieser selbstlernenden mathematischen Modelle ermöglicht. Die Messungen in der Viskoseproduktion haben eine optimale und realistische Datenbasis geliefert. Und die langjährige Erfahrung der Hagenberger Mathematiker des FLLL hat zu den hervorragenden neuen Modellen geführt. Diese Ergebnisse wären ohne die enge Zusammenarbeit der Projektpartner nicht möglich gewesen.

Bericht Elisabeth Suppan, Kompetenzzentrum Holz GmbH (WOOD Nachrichten 142/2012)

Das Forschungsnetzwerk im K-Projekt "PAC - Process Analytical Chemistry - Data Acquisition and Data-processing" bündelt das Fachwissen der Industrie-Experten (9 Unternehmenspartner) und der Wissenschaftler (7 wissenschaftliche Partner) aus unterschiedlichen Fachbereichen zu einem schlagkräftigen Team.