



# PAC

## Process Analytical Chemistry - Data Acquisition and Data Processing

Hauptstandort	Linz (Oberösterreich)
weitere Standorte	Lenzing (Oberösterreich), Wien
Thematische Schwerpunkte	Das PAC Konsortium hat sich zum Ziel gesetzt, valide chemische Informationen direkt aus den Prozessströmen in Echtzeit zu gewinnen. Diese Informationen sollen neue Optimierungspotentiale für chemische Prozesse in verschiedenen Branchen eröffnen.

### Success Story Kurzversion

Intelligente Prozesssteuerung durch selbstlernende Mathematik

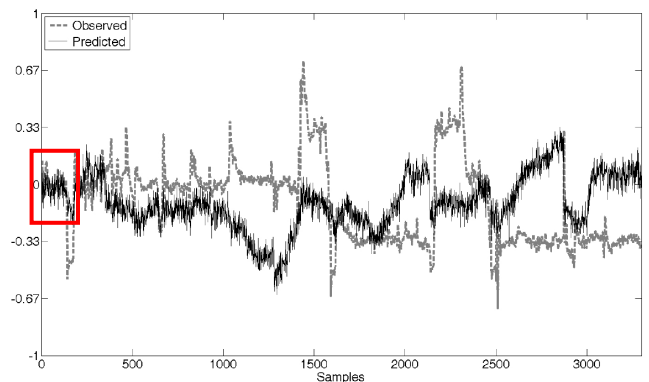
Um NIR-Spektroskopie (nahes Infrarot) für Konzentrationsmessungen in der Viskosefaserherstellung einsetzen zu können, werden mathematische Modelle benötigt, welche Prozessänderungen selbständig erkennen und sich automatisch aktualisieren. Den Forschern im PAC Projekt ist es nun gelungen, auf Basis von 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.

### Success Story Langversion

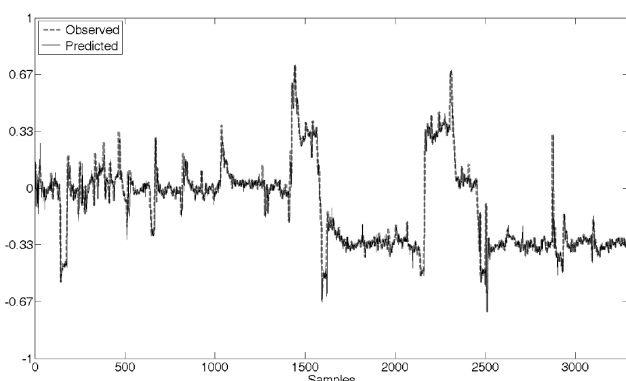
Die Viskosefaserherstellung ist von großer wirtschaftlicher Bedeutung, und die Produktionsmengen steigen stetig an. Mit den Produktionsmengen steigen auch die Anforderungen an die Prozessanalytik. Deshalb arbeiten Forscher im PAC Projekt daran, neue Prozessanalytik für die Viskosefaserherstellung zu entwickeln. Ein Thema ist dabei die chemische Untersuchung des Spinnbades, in das der Viskosefaden gesponnen wird. Die Hauptbestandteile,  $H_2SO_4$ ,  $Na_2SO_4$  und  $ZnSO_4$ , sollen in Echtzeit mittels NIR-Spektroskopie (nahes Infrarot) gemessen werden. 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 von diesem Wissen sollen dann weitere Messungen ausgewertet werden können. Wenn sich das Spinnbad nun aber in einer Art ändert, die in der Lernphase nicht vorgekommen ist, so ist das Modell „überfordert“ und liefert falsche Ergebnisse. Ein derartiges Beispiel wird in dem Diagramm rechts 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 zwischen den beiden Kurven.



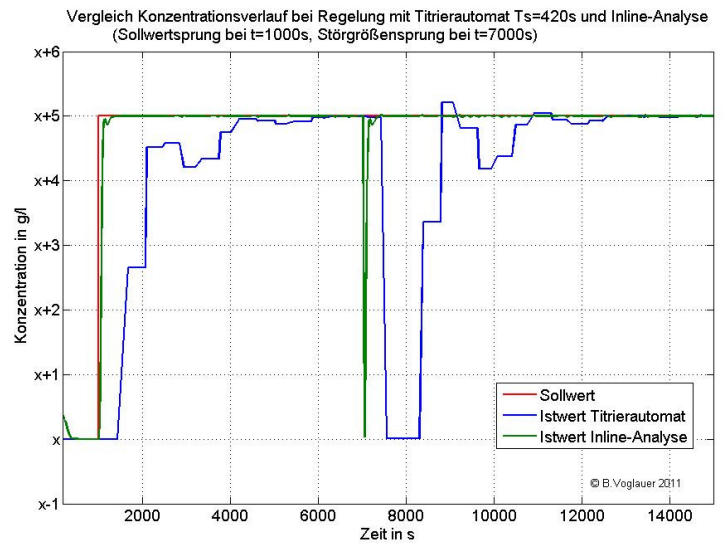
Das linke Diagramm zeigt dieselben Messdaten wie vorher, allerdings werden sie nun mit einem selbstlernenden Modell berechnet. Nach jedem Rechenschritt überprüft sich das Modell selbst auf Richtigkeit und aktualisiert sich automatisch. Die berechneten und die gemessenen Daten liegen genau übereinander.



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 Spinnbad sofort erkannt werden.



In der Abbildung rechts wird der Nutzen der NIR Messung für die Systemsteuerung verdeutlicht. In einer Simulation werden zwei in der Praxis häufig vorkommende Fälle dargestellt. Nach 1000 Sekunden wird der Sollwert der Konzentration (rote Linie) um 5 g/l geändert, und nach 7000 Sekunden gibt es eine Störung in der Eingangskonzentration, sie fällt kurzzeitig um 5 g/l. Die Ausregelung ist für die beiden Fälle bisherige Analytik (Messintervall etwa sieben Minuten, blaue Linie) und NIR-Spektroskopie (inline, grüne Linie) dargestellt. Durch die kontinuierliche Messung ist die Ausregelung deutlich schneller, und es kommt zu keinen Schwingungen. Die beschleunigte Systemsteuerung führt einerseits zu einer verringerten Ausschussproduktion und andererseits zu einer Chemikalieneinsparung, da die Zielkonzentrationen deutlich schneller eingestellt werden können.



Die gute Zusammenarbeit von FLLL, Lenzing AG, RECENDT und Wood K plus im PAC-Projekt hat die Entwicklung von diesen selbstlernenden mathematischen Modellen ermöglicht. Die Messungen in der Viskoseproduktion haben eine optimale und realistische Datenbasis geliefert. Und die langjährige Erfahrung der Mathematiker vom FLLL hat zu den hervorragenden neuen Modellen geführt. Diese Ergebnisse wären ohne die enge Zusammenarbeit unter den Projektpartnern nicht möglich gewesen.

**Kontakt:**

RECENDT GmbH  
Dipl.-Ing. Robert Holzer  
Altenberger Straße 69, A - 4040 Linz  
+43 (732) 2468 - 4602  
[robert.holzer@recendt.at](mailto:robert.holzer@recendt.at)   [www.recendt.at](http://www.recendt.at)