



PAC

Process Analytical Chemistry - Data Acquisition and Data Processing

Hauptstandort	Linz (Oberösterreich)
Weitere Standorte	Kundl (Tirol), Salzburg, Lenzing (Oberösterreich), Krems (Niederösterreich), Wien
Thematische Schwerpunkte	Gewinnung valider chemischer Informationen direkt aus den Prozessströmen in der chemischen und biochemischen Industrie, inline und in Echtzeit.

Success Story Kurzversion

Mächtiges SW-Tool *ImageLab* für die chemische Bildanalyse

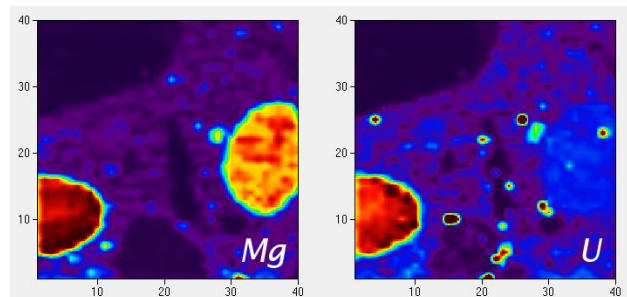
Ermöglicht durch das Projekt, wurde in einer externen Kooperation ein Software-Tool für die Forscher entwickelt, das – obwohl noch nicht einmal verkaufsfertig – unter den Benutzern bereits begeisterte Fans hat. Das künftige SW-Produkt profitiert von den Inputs und Anforderungen der Forscher aus der Praxis, die Arbeit im Projekt profitiert davon, ein optimal auf die Bedürfnisse zugeschnittenes Werkzeug einsetzen zu können.

Success Story Langversion

Ein Fokus des K-Projektes PAC ist die chemometrische Auswertung spektraler Daten. Das bedeutet, dass Rohdaten die von einem Spektrometer geliefert werden mittels mathematischer und statistischer Methoden bearbeitet und analysiert werden, um aus den Daten die gewünschten chemischen Informationen herauszufiltern. Forscherinnen und Forscher in PAC arbeiten dazu an neuartigen Methoden der Modellbildung für diese Aufgaben.

Ein anderer Fokus liegt auf der Bearbeitung und Interpretation von mehrdimensionalen spektralen Bildern (die Fachleute sprechen von Hyperspectral Imaging). Das wiederum bedeutet, dass von einem Objekt ein Foto gemacht wird, bei dem für jeden Bildpunkt nicht nur ein Farbpunkt registriert wird, sondern ein oder mehrere Spektren aufgenommen werden, deren Information durch multivariate Verfahren in Bilder umgewandelt werden, die die gewünschte chemische Information wiedergeben. Zur Bildanalyse kommen u.a. die oben erwähnten chemometrischen Modelle zum Einsatz.

Bei der spektralen Aufnahme der Fotos fallen sehr große Datenmengen an, die nur mit passender Softwareunterstützung bearbeitet werden können. Die verfügbaren Tools haben hier hohen Einfluss auf die Effizienz und Qualität der Ergebnisse. In einer für beide Partner optimalen Konstellation konnte dazu eine kommerzielle Softwareentwicklung mit dem K-Projekt verzahnt werden: Die Forscherinnen und Forscher in PAC haben zu einem sehr frühen Zeitpunkt vollen Zugriff auf ein maßgeschneidertes Computerprogramm. Dieses deckt exakt ihre praktischen Bedürfnisse ab, da von Anfang an die Praxisanforderungen gemeinsam diskutiert worden sind. Und ein Tool, das bei der spezifischen Gruppe von Testern und „Beta-Usern“ bereits zu einem so frühen Zeitpunkt echte Begeisterung auslöst, wird mit hoher Wahrscheinlichkeit später auch kommerziell erfolgreich sein können.



Schnittbild durch Beton, ICP/MS gekoppelt mit ImageLab. Links Magnesium, rechts Uran. Man sieht klar, dass das linke Dolomit-Korn mit Uran durchsetzt ist. Daten: M. Bonta/A. Limbeck, TU Wien

Wirkungen und Effekte

Im Rahmen von PAC ermöglicht erst das in Kooperation entwickelte SW-Tool die effiziente und hochqualitative Arbeit im Forschungsfeld der hyperspektralen Bildverarbeitung. Damit können Technologien zur Erzeugung spektraler Bilder wirkungsvoll weiterentwickelt und optimiert werden.

Kontakt:	K-Projekt PAC – Process Analytical Chemistry RECENDT GmbH, Dipl.-Ing. Robert Holzer Altenberger Straße 69, A – 4040 Linz +43 (732) 2468 - 4602 robert.holzer@recendt.at www.recendt.at
-----------------	--