

## ImPACts

### Industrial Methods for Process Analytical Chemistry - From Measurement Technologies to Information Systems

Programm: COMET – Competence Centers for Excellent Technologies

Programmlinie: K-Projekte

COMET-Einzelprojekt, Laufzeit und Projekttyp:

imPACts, 09/2014 – 08/2018, multi-firm

## Der chemische Computer blickt in die Zukunft!

Hätten auch Sie gerne die sprichwörtliche Kristallkugel um in die Zukunft zu sehen? Ein wenig davon haben ForscherInnen im K-Projekt imPACts möglich gemacht: FLLL, Metadynea Austria und RECENDT haben eine Methode entwickelt, mit der auf Abweichungen in Messsystemen vollautomatisch reagiert werden kann noch bevor die Auswirkungen sichtbar werden. Das System sieht den kommenden Fehler – und verhindert ihn durch selbständige Neukalibrierung!



### Das Problem

Bei der Herstellung von Melamin-Tränklarzen (die für viele technische Anwendungen genutzt werden, z.B. für Spanplatten und Beschichtungen) kommt es darauf an, die chemische Reaktion am optimalen Punkt zu stoppen. Nur so kann die höchstmögliche Produktqualität garantiert werden. Dafür ist ein Messwert ausschlaggebend: der sogenannte Trübungspunkt, der Auskunft über den chemischen Polymerisationsgrad gibt. Die Messung dieses Trübungspunktes wird manuell durchgeführt und ist relativ zeitaufwändig, da Proben aus dem Prozess entnommen werden und geschulte Fachkräfte deren Trübung beurteilen müssen.

Ein erstes Ziel im Projekt war es, den Zeitaufwand für die Arbeitskräfte zu reduzieren – gleichzeitig aber gleichbleibend gute Messwerte zu erhalten! Das konnte verhältnismäßig einfach erreicht werden indem ein infrarotspektroskopisches Messsystem und die dazu notwendigen chemometrischen Modelle entwickelt und im Unternehmen realisiert wurden.

Aber dann tauchten Probleme auf: obwohl die gemessenen Spektraldaten perfekt aussahen

begannen die Messwerte nach wenigen Wochen schlechter zu werden. Die Abweichungen zur begleitend noch immer durchgeführten herkömmlichen Referenzanalytik wurden immer größer. Auch regelmäßige Nachbesserungen der Modelle konnten diese sogenannte Drift nicht nachhaltig verhindern. Die Experten im Projektteam konnten die physikalisch / chemische Ursache dieser Abweichungen nicht eindeutig zuordnen.

Die Suche nach einer anderen Lösung begann.

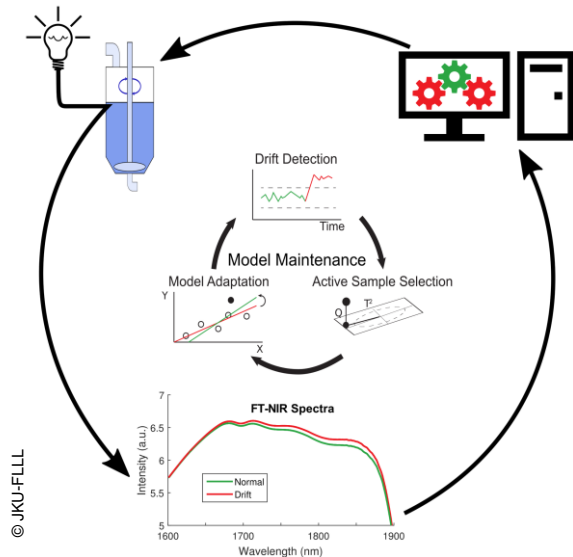


### Die Lösung

Im Rahmen der Kooperation im K-Projekt imPACts wurden Forscher vom Institut FLLL zugezogen. Diese entwickelten ein System zur vollautomatischen Modell-Neukalibrierung. Es wurden dabei drei Forschungsansätze kombiniert: statistische Drift-Erkennung, Strategien der künstlichen Intelligenz zur Modell-Adaptierung (wobei die Wissensbasis des Modells immer weiter ausgebaut wird) und Active Learning.

Dadurch konnten die Einschränkungen der manuellen Neukalibrierung überwunden und ein besseres und stabileres System geschaffen werden. Die entwickelte Software erkennt nun

Veränderungen in den Rohmessdaten, die vom Infrarot-Spektrometer geliefert werden, so frühzeitig und so exakt, dass sofort Gegenmaßnahmen eingeleitet werden können. Das System sieht zukünftige Fehler voraus – schon lange bevor diese für menschliche Prozess-Experten erkennbar würden. Der Blick in diese virtuelle Kristallkugel ermöglicht es also, vollautomatisch diese künftigen Abweichungen zu verhindern!



**Abb. 1: Wartungszyklus und die zugrundeliegenden Methoden. Abbildung erscheint als Titelbild der Juli-Ausgabe (Volume 1013) von *Analytica Chimica Acta*.**

Bei diesen Gegenmaßnahmen (der sogenannten Modell-Adaptierung) stehen zwei Möglichkeiten offen:

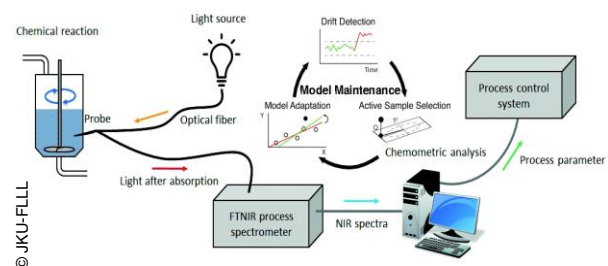
1. Überwachte Adaptierung: Bediener nehmen ein paar Proben und liefern dem System einzelne neue Referenzmesswerte.
2. Vollständige autonome Adaptierung: hier wird gar kein Bedienereingriff benötigt.

Es ist nicht überraschend, dass der Ansatz mit Expertenunterstützung die besten Ergebnisse liefert. Aber für die Anlagenbetreiber ist es wertvoll, auch auf vollautomatische Lösungen zurückgreifen zu können wenn beispielsweise einfach keine Zeit für manuelle Eingriffe ist.

## Wirkung und Effekte

Die Ergebnisse bei Testläufen, basierend auf realen Prozessdaten, zeigten eine bemerkenswerte Leistungsfähigkeit: beinahe 100% der Fälle von Abweichungen wurden frühzeitig erkannt und es gab keinen Fehlalarm!

Die entwickelte Modelladaptierung liefert chemometrische Modelle mit deutlich besserer Qualität. Die Qualitätsansprüche des Unternehmenspartners wurden am Ende optimal erfüllt wenn etwa 8 – 10% Referenzdaten noch händisch gemessen wurden. Aber auch bei einem kompletten Verzicht auf manuelle Tätigkeiten lagen die Modellfehler nur geringfügig höher.



**Abb. 2: Die Einbindung des Wartungszyklus der Modelladaptierung im Prozesskontrollsystem.**

Diese Ergebnisse und die dahinterliegenden methodischen Konzepte wurden in mehreren angesehenen wissenschaftlichen Journalen publiziert. In „Analytica Chimica Acta“ schaffte es das Thema sogar als „featured article“ auf die Titelseite (siehe Bild links).

Der Nutzen der erfolgreichen Forschungsarbeit für die Industrie ist außerordentlich hoch, da es einen großen Schritt hin zu einer vollautomatisch überwachten Prozessführung in der chemischen Industrie darstellt. Die unmittelbaren Nutznießer sind die Angestellten, die sich nicht mit immer wiederkehrenden lästigen Routine-messungen belasten müssen sondern sich spannenderen (und nützlicheren) Themen widmen können: z.B. der weiteren Optimierung von Prozess und Produkt!

### Kontakt und Informationen

K-Projekt imPACts

RECENDT – Research Center for Non Destructive Testing  
Altenberger Straße 69, 4040 Linz  
T 0732 / 2468 - 4602

E [robert.holzer@recendt.at](mailto:robert.holzer@recendt.at) [www.k-pac.at](http://www.k-pac.at) [www.recendt.at](http://www.recendt.at)

### Projektkoordination

Robert Holzer

### Projektpartner

Organisation	Land
MetaDynea GmbH, Krems (Thomas Reischer)	Österreich
JKU Linz - Fuzzy Logic Laboratory Linz-Hagenberg (Edwin Lughofer, Ramin-Nikzad Langerodi)	Österreich
RECENDT GmbH (Markus Brandstetter)	Österreich

**Weitere Informationen zu COMET – Competence Centers for Excellent Technologies:** [www.ffg.at/comet](http://www.ffg.at/comet)

Diese Success Story wurde von der Konsortialführung/der Zentrumsleitung zur Verfügung gestellt und zur Veröffentlichung auf der FFG-Website freigegeben. Für die Richtigkeit, Vollständigkeit und Aktualität der Inhalte übernimmt die FFG keine Haftung.