INSTITUT FÜR KUNSTSTOFF VERARBEITUNG

#WHITEPAPER

Softsensoren in der Compoundierung

Ein Leitfaden für Entwicklung und Nutzung

Zur prozessnahen Überwachung der Materialqualität in der Compoundierung können datenbasierte Softsensoren eingesetzt werden, um beispielsweise die Scherviskosität aus bereits vorhandenen Maschinen- und Prozessdaten vorherzusagen. Hierfür werden Prozessgrößen und zugehörige Referenzmessungen erfasst und zum Training eines künstlichen neuronalen Netzes (KNN) genutzt.

IGF-Vorhaben 01|F23179N ViscAssist— Projektlaufzeit 04/2024 – 03/2026

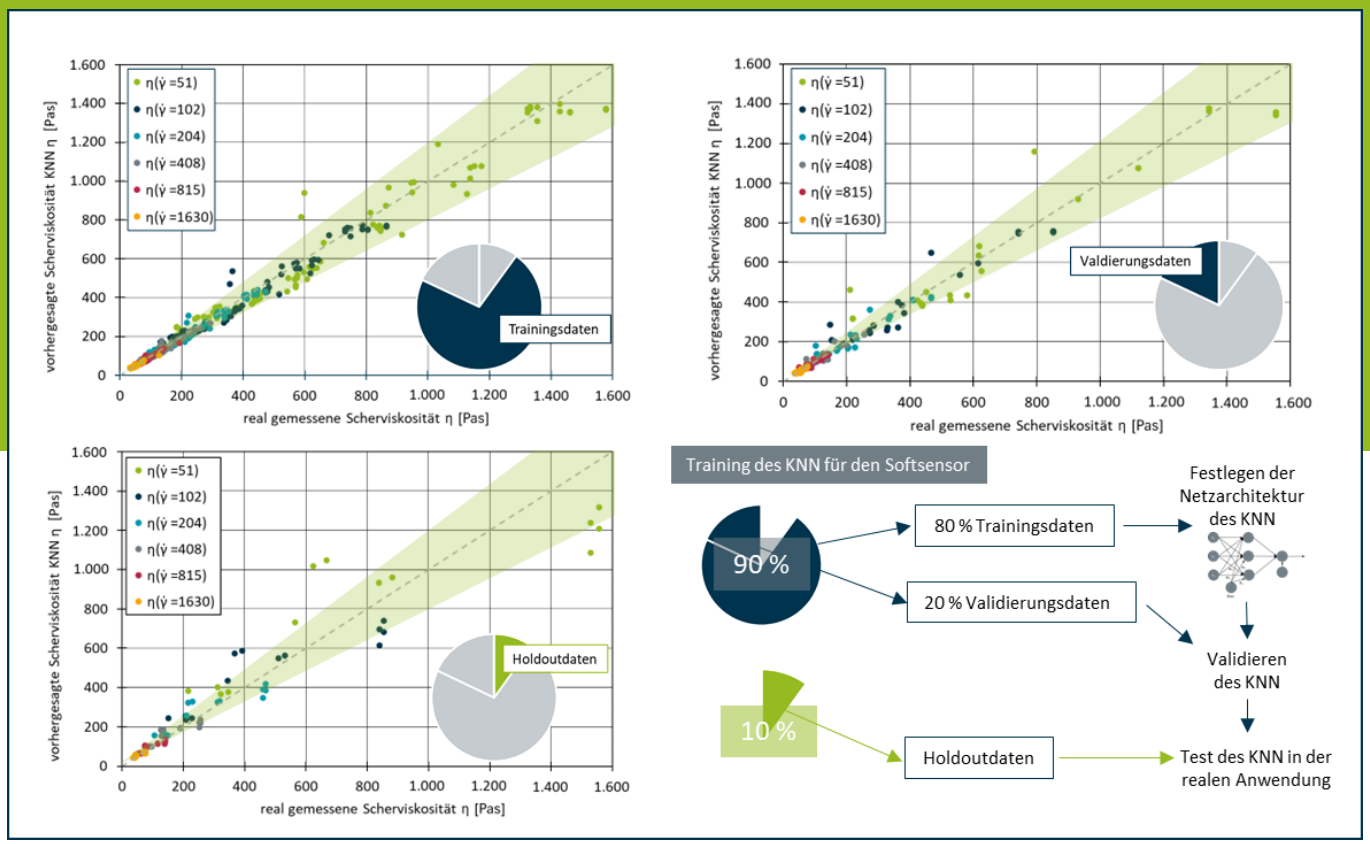


Abb 1 Softsensorentwicklung mittels KNN

Abstract

Zur kontinuierlichen Überwachung der Materialqualität in der Compoundierung können Softsensoren auf Basis künstlicher neuronaler Netzte (KNN) eingesetzt werden, um schwer messbare Größen wie beispielsweise die Scherviskosität der Schmelze modellbasiert ohne zusätzliche Messhardware aus bereits vorhandenen Maschinen- und Prozessdaten vorherzusagen. Hierfür wird zunächst ein Datensatz aus Prozessgrößen und zugehörigen Referenzmessungen der Zielgröße erzeugt, der als Grundlage für die Entwicklung des Modells diente. Nach der Modellbildung und unabhängiger Validierung liefert der Softsensor eine kontinuierliche Einschätzung des aktuellen Materialzustands hinsichtlich der Scherviskosität und bietet damit eine kostengünstige, prozessnahe alternative zu Labormessungen. Im Folgenden wird Anhand eines Use-Case ein Leitfaden zur Softsensorentwicklung vorgestellt.

Problem

Der Einsatz von Post-Consumer-Rezyklaten (PCR) gewinnt angesichts der Ziele eines geschlossenen Stoffkreislaufs zunehmend an Bedeutung. Im Vergleich zu Neuware schwanken die Materialeigenschaften von Rezyklaten stärker, bedingt durch heterogene Stoffströme, Verunreinigungen und thermo-mechanische Vorbelastung. Diese Inhomogenitäten wirken sich direkt auf das rheologische Verhalten der Schmelze aus und gefährden Prozessstabilität und Produktqualität in Spritzguss und Extrusion.

Um Materialschwankungen zu erfassen, können rheologische Eigenschaften mithilfe von Labor- oder Inline-Rheometern bestimmt werden. Während Laborrheometer eine Probenahme und nachgelagerte Analyse erfordern, ermöglichen Inline-Rheometer die Bestimmung des Fließverhaltens unmittelbar im laufenden Prozess. Hierzu wird die Schmelze durch eine definierte Messgeometrie geführt und das rheologische Verhalten anhand erfasster Messgrößen u. a. Druckverluste bestimmt. Laborrheometer liefern zeitversetzte Ergebnisse, während Inline-Rheometer eine prozessnahe bzw. kontinuierliche Erfassung ermöglichen. Letztere erfordern jedoch zusätzliche Messhardware und einen Eingriff in die Anlagentechnik. Gerade die Investitions-, Integrations- und Wartungskosten der Inline-Messtechnik stellen insbesondere für KMU eine Zugangshürde dar.

Lösung

Eine Alternative zur zusätzlichen physikalischen Messtechnik bieten Softsensoren. Sie ermöglichen die indirekte Bestimmung von Größen, die im laufenden Prozess nicht oder nur mit erhöhtem messtechnischem Aufwand erfasst werden

können. Hierzu werden kontinuierlich verfügbare Maschinen- und Prozessgrößen genutzt und mithilfe eines geeigneten Modells mit der gesuchten Zielgröße verknüpft.

Der hierfür erforderliche Zusammenhang wird auf Grundlage zuvor erhobener Prozess- und Referenzdaten abgebildet. Im laufenden Betrieb kann die Zielgröße anschließend aus den aktuell erfassten Prozessdaten abgeschätzt werden. Auf diese Weise erweitert ein Softsensor die vorhandene physikalische Sensorik um zusätzliche, virtuell bestimmte Informationen, die beispielsweise zur Prozessüberwachung und perspektivisch auch zur Prozessregelung genutzt werden können.

Die Aussagefähigkeit eines Softsensors hängt dabei wesentlich von der verwendeten Datenbasis und dem eingesetzten Modell ab. Zuverlässige Vorhersagen sind insbesondere für diejenigen Material- und Prozesszustände zu erwarten, die durch die zugrunde liegenden Daten ausreichend repräsentiert werden. Bei der Übertragung auf neue Materialien, Rezepturen oder deutlich veränderte Prozessbedingungen ist daher zu prüfen, ob der bestehende Gültigkeitsbereich weiterhin abgedeckt ist oder eine erneute Validierung beziehungsweise Erweiterung der Datenbasis erforderlich wird.

Use-Case am IKV

Im Rahmen des Forschungsprojekts ViscAssist wurde am IKV ein Softsensor zur prozessnahen Vorhersage der Viskositätskurve während der Compoundierung entwickelt. Als Eingangsgrößen dienten kontinuierlich erfasste Maschinen- und Prozessdaten wie Schneckendrehmoment, Massedruck, Massetemperatur, Schneckendrehzahl und Durchsatz. Parallel wurden für unterschiedliche Material- und Prozesszustände rheologische Referenzmessungen durchgeführt und den jeweiligen Prozessdaten zugeordnet.

Auf Grundlage dieser Daten wurde ein KNN trainiert, das die Scherviskosität für unterschiedliche Scherraten vorhersagt und damit das Fließverhalten der Schmelze während des laufenden Compoundierprozesses beschrieben.

Die Untersuchungen zeigen, dass sich die Viskositätskurve der betrachteten Polyolefine mit einer Prognosegüte von $R^2 \approx 0{,}8$ aus den erfassten Prozessdaten bestimmen lässt. Damit können Veränderungen des rheologischen Materialzustands bereits während der Verarbeitung erkannt und für weiterführende Anwendungen genutzt werden. Im Rahmen von ViscAssist dienten die vorhergesagten Viskositätsdaten beispielsweise als Grundlage für ein Assistenzsystem, das Abweichungen von einer vorgegebenen Zielscherviskosität bewertet und geeignete Anpassungen der Rezeptur ableitet.

Softsensorentwicklung

Auf Grundlage der am IKV gewonnenen Erkenntnisse lässt sich ein systematisches, zehnstufiges Vorgehen zur Entwicklung datenbasierter Softsensoren für Compoundierprozesse ableiten. Der Entwicklungsprozess reicht von der Definition der Zielgröße und der Versuchsplanung über die Datenerfassung und Modellbildung bis zur abschließenden Validierung.

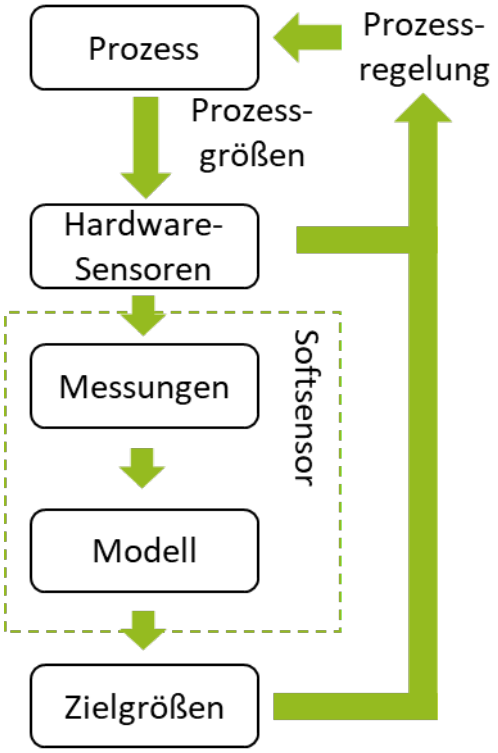


Abb. 2 Schematische Darstellung eines Softsensors integriert in einen Kunststoffverarbeitungsprozess

1. Definition von Anwendungsfall und Zielgröße

Zu Beginn der Softsensorentwicklung ist die Zielgröße eindeutig zu definieren und festzulegen, für welchen Anwendungszweck die Modellvorhersage eingesetzt werden soll. Dabei ist insbesondere zu prüfen, in welcher Auflösung die Zielgröße für die spätere Anwendung benötigt wird. Hier gilt jedoch der Grundsatz: Lieber zu viele Daten und zu feinteilig aufnehmen als zu wenige, da eine nachträgliche Aggregation der Daten auf eine gröbere Auflösung jederzeit möglich ist, eine nachträgliche Erhöhung der Auflösung hingegen nicht.

2. Prozessverständnis aufbauen

Vor der Entwicklung des Softsensors sind die wesentlichen physikalischen Zusammenhänge des betrachteten Prozesses zu analysieren. Dabei ist insbesondere zu untersuchen, durch welche Materialeigenschaften und Prozessbedingungen die zu prognostizierende Zielgröße beeinflusst wird und welche Wechselwirkungen zwischen diesen Größen bestehen. Dieses Verständnis bildet die fachliche Grundlage für die weitere Softsensorentwicklung.

3. Sensoren und Eingangsgrößen auswählen

Ausgehend von den identifizierten Wirkzusammenhängen werden geeignete messbare Prozess- und Maschinenparameter als potenzielle Eingangsgrößen ausgewählt. Neben ihrer physikalischen Relevanz sind dabei auch die Verfügbarkeit, Messqualität und zeitliche Auflösung der Signale zu berücksichtigen. Im Compoundierprozess können beispielsweise Schneckendrehmoment, Massedruck, Massetemperatur, Schneckendrehzahl und Durchsatz als Eingangsgrößen dienen.

4. Versuchsplanung und Datenerfassung

Bei der Datenerhebung sind Material- und Prozessvariation sowie die zugehörige Referenzmessung zu berücksichtigen. Die Materialvariation umfasst beispielsweise unterschiedliche Polymertypen, Rezyklatanteile oder Additivkonzentrationen, während die Prozessvariation relevante Betriebsbedingungen wie Schneckendrehzahl, Durchsatz und Verarbeitungstemperatur abbildet. Für jeden untersuchten Material- und Prozesszustand ist zudem eine geeignete Referenzmessung der Zielgröße erforderlich, die den aufgezeichneten Prozessdaten eindeutig zugeordnet werden kann.

5. Datenqualität sichern und Vorverarbeitung

Vor der Modellbildung müssen die Qualität und Konsistenz der erhobenen Daten sichergestellt werden. Hierzu müssen die Sensorsignale auf Plausibilität geprüft und insbesondere Messfehler, Ausreißer sowie ungeeignete Prozesszustände identifiziert werden. Von besonderer Bedeutung ist die korrekte zeitliche Zuordnung von Prozessdaten und Referenzmessungen. Insbesondere bei kontinuierlichen Prozessen müssen dabei Verweil- und Transportzeiten zwischen Mess- und Probenahmepositionen berücksichtigt werden.

Anschließend werden die qualitätsgesicherten Rohdaten für die Modellbildung aufbereitet. Hierzu werden relevante, möglichst stationäre Zeitbereiche ausgewählt und die Prozesssignale durch geeignete Kennwerte, beispielsweise Mittelwert und Standardabweichung, beschrieben. Da der Extrusionsprozess als kontinuierlicher Prozess im eingeschwungenen Betriebszustand grundsätzlich eine hohe Prozesskonstanz aufweist, liefert diese Beschreibung durch statische Kennwerte in vielen Fällen bereits eine gute Grundlage für die Modellbildung.

6. Featurebewertung: Korrelations- und Sensitivitätsanalyse

Die potenziellen Eingangsgrößen müssen hinsichtlich ihrer Relevanz für die Modellierung bewertet werden. Dabei sind sowohl die Zusammenhänge zwischen den Prozess- und Zielgrößen als auch Abhängigkeiten der Eingangsgrößen untereinander zu untersuchen, um relevante Einflussgrößen sowie redundante Informationen zu identifizieren. Die statistische Bewertung sollte dabei stets mit der physikalischen Plausibilität der identifizierten Zusammenhänge abgeglichen werden.

Nach der Modellbildung kann eine Sensitivitäts- und Einflussanalyse zusätzlich zeigen, welchen Beitrag einzelne Eingangsgrößen zur Modellvorhersage leisten.

7. Modellbildung und Hyperparameteroptimierung

Nach der Auswahl und Aufbereitung der Eingangsgrößen erfolgt die Modellentwicklung. Hierzu werden ein geeigneter Modelltyp und dessen grundlegende Struktur festgelegt. Bei KNN

zählen hierzu beispielsweise die Netzarchitektur, Anzahl und Größe der verdeckten Schichten sowie die verwendeten Aktivierungsfunktionen.

Für das Training und die Hyperparameteroptimierung wird der verfügbare Entwicklungsdatensatz in geeignete Trainings- und Validierungsdaten unterteilt. Während die Modellparameter anhand der Trainingsdaten bestimmt werden, dienen die Validierungsdaten zur Auswahl geeigneter Hyperparameter, beispielsweise Netzwerkarchitektur, Lernrate oder Batchgröße. Dabei ist insbesondere eine Überanpassung an die für die Modellentwicklung verwendeten Daten zu vermeiden.

8. Unabhängige Validierung

Die unabhängige Validierung des Softsensors ist klar von der Modellentwicklung und Hyperparameteroptimierung zu trennen.

Für eine belastbare Bewertung der Generalisierungsfähigkeit sollten daher vollständige Material- oder Prozesszustände als Holdout von der Modellentwicklung ausgeschlossen und erst anschließend zur unabhängigen Bewertung herangezogen werden. Dadurch lässt sich untersuchen, ob der Softsensor auch bislang unbekannte Zustände innerhalb seines vorgesehenen Anwendungsbereichs zuverlässig vorhersagen kann.

9. Prozessintegration

Für den praktischen Einsatz wird der entwickelte Softsensor in den laufenden Prozess integriert. Die kontinuierlich erfassten Prozess- und Maschinendaten werden entsprechend der zuvor festgelegten Datenaufbereitung verarbeitet und dem trainierten Modell zur Vorhersage der Zielgröße übergeben.

Für einen zuverlässigen Betrieb müssen insbesondere der Gültigkeitsbereich des Modells sowie der Umgang mit fehlenden oder fehlerhaften Sensorsignalen und Zuständen außerhalb des abgedeckten Datenraums definiert werden. Darüber hinaus sind Berechnungszeit und Aktualisierungsrate an die Dynamik des Prozesses und den jeweiligen Anwendungsfall anzupassen. Auf dieser Grundlage kann der Softsensor in eine kontinuierliche Prozessüberwachung oder ein übergeordnetes Assistenz- bzw. Regelungssystem eingebunden werden.

10. Kontinuierliche Validierung & Wartung

Ein Softsensor ist nicht als statisches System zu betrachten, da sich Material-, Prozess- und Messbedingungen im industriellen Betrieb über die Zeit verändern können. Ursachen hierfür sind beispielsweise schwankende Rohstoff- und Rezyklatqualitäten, Veränderungen der Sensorcharakteristik, Anlagenverschleiß oder Anpassungen des Prozessfensters. Dadurch können sich die ursprünglich erlernten Zusammenhänge zwischen Eingangs- und Zielgrößen verändern.

Die Vorhersagegüte sollte daher regelmäßig punktuell anhand experimentell bestimmter Referenzwerte überprüft werden. Systematische Abweichungen zwischen Modellvorhersage und

Referenzmessung können auf Daten- oder Modelldrift hinweisen. In diesem Fall sind zunächst mögliche Ursachen in Material, Prozess und Sensorik zu untersuchen. Anschließend kann die Datenbasis um neue Zustände erweitert und das Modell bei Bedarf aktualisiert oder erneut trainiert werden.

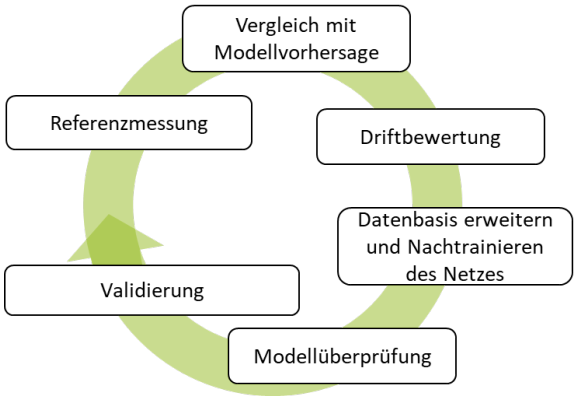


Abb. 3 Schematische Darstellung der kontinuierlichen Validierung und Wartung

Der langfristige Betrieb eines Softsensors lässt sich damit als kontinuierlicher Kreislauf beschreiben.

Fazit und Ausblick

Softsensoren ermöglichen es, schwer zugängliche Materialgrößen kontinuierlich aus verfügbaren Maschinen- und Prozessdaten abzuleiten und damit zusätzliche Informationen über den laufenden Compoundierprozess bereitzustellen. Der am IKV entwickelte Anwendungsfall zeigt am Beispiel der Scherviskosität, dass auch komplexe Materialeigenschaften datenbasiert prozessnah abgeschätzt werden können. Entscheidend für einen zuverlässigen Einsatz sind neben der Modellgüte insbesondere eine repräsentative Datenbasis, eine unabhängige Validierung und die Berücksichtigung des definierten Gültigkeitsbereichs.

Mit zunehmender Verfügbarkeit von Prozess- und Materialdaten können der Gültigkeitsbereich und die Übertragbarkeit solcher Modelle schrittweise erweitert werden.

Weiteres Potenzial bietet die Verknüpfung von Softsensoren mit Assistenz- und Regelungssystemen.
Materialschwankungen können dadurch nicht nur erkannt, sondern durch gezielte Anpassungen von Prozessparametern oder Rezepturen kompensiert werden. Softsensoren bilden damit eine Grundlage für eine zunehmend datenbasierte und adaptive Prozessführung in der Kunststoffverarbeitung.

#WHITEPAPER



Katharina Baum
Wissenschaftliche Mitarbeiterin
Thermoformen

+49 241 80-93812
katharina.baum@ikv.rwth-aachen.de

Institut für Kunststoffverarbeitung (IKV)
in Industrie und Handwerk an der RWTH Aachen
Seffenter Weg 201 | 52074 Aachen