



## Schlussbericht

Verbund: 05M2020 - OptProDat

Zuwendungsempfänger:	Fraunhofer-Gesellschaft zur Förderung der angewandten Forschung eingetragener Verein
Projektleitung:	Dr. rer. nat. Ullrich Hartung
E-Mail:	ullrich.hartung@fep.fraunhofer.de
Förderkennzeichen:	05M20AOA
Förderzeitraum:	01.04.2020 - 30.11.2023
Zuwendung:	384.167,34 €
Projektträger:	Projektträger DESY
Zusätzlicher Kontakt:	daniel.gloess@fep.fraunhofer.de
Zusätzlicher Name:	Glöß, Daniel

Genutzte Großgeräte:	Labor	Gerät	Experiment
Diplomarbeiten:	0		
Dissertationen:	0		
Habilitationen:	0		
Referierte Publikationen:	0		
Andere Veröffentlichungen:	0		
Patente:	0		
Bachelorarbeiten:	0		
Masterarbeiten:	0		
Staatsexamen:	0		

Dieser Bericht wurde beim Projektträger über einen individuellen Online-Zugang vom Projektleiter eingereicht und am 03.06.2024 11:58 für eine Veröffentlichung freigegeben.

# Schlussbericht

Zuwendungsempfänger:	Fraunhofer-Gesellschaft zur Förderung der angewandten Forschung e.V.
Projektleitung:	Dr. Ullrich Hartung
Verbund:	05M2020 – OptProDat Optimierung von Produktionsprozessen durch automatisierte Modellierung auf der Basis von Prozessdaten.
Thema:	05M20AOA – Teilvorhaben 2 Datengewinnung zur automatisierten Modellierung von Produktionsprozessen und Bewertung von ermittelten Zusammenhängen.

## Zusammenfassung

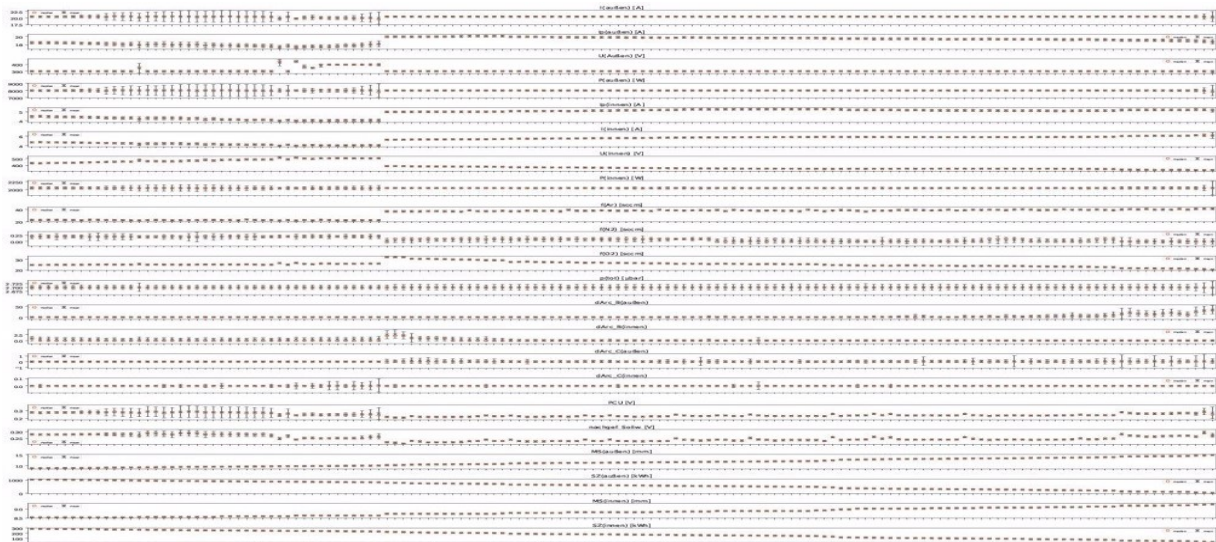
Eine mathematische Modellierung einer Produkteigenschaft (Qualitätskriterium), als Resultat einer Abfolge mehrerer, komplexer Beschichtungsprozesse, wurde auf der Basis von umfangreichen Prozessdaten (d.h. mit einem datenbasierten Ansatz) etabliert.

Die dazu erforderlichen Eingangsdaten wurden effizient (hochgradig automatisiert) aus der Anlagensteuerung extrahiert (in-situ Prozessdaten) oder vom Anlagenbetreiber separat bereitgestellt (ex-situ Qualitätsdaten).

Es mussten Methoden zur automatisierten Aufbereitung der großen Primärdatenmenge entwickelt werden, weil die primären Daten für den angestrebten (vorwiegend automatisierten) Modellierungsansatz nicht ausreichend spezifisch sind.

Eine aus physikalisch-technischen Gesichtspunkten begründbare Beschränkung des Beobachtungszeitraums auf die unmittelbare Wirkung des Prozesses auf das Produkt war allein nicht ausreichend. Zusätzlich war eine komprimierende Vorabaufbereitung notwendig, da die Nutzung von Autoencodern zur Merkmalsextraktion nicht erfolgreich war: die bei der Modellierung verwendeten Kenngrößen sind statistische Größen der Prozessdaten (Quantile etc.) oder Parameter polynomialer Anpassungen der zeitlichen Verläufe dieser.

Besonders wichtige / interessante statistische Größen wurden für prozess- bzw. anlagentechnisch relevante Zeiträume (beispielsweise einer kompletten Targetlebensdauer – s. Abbildung 1) derart aufbereitet, dass dem Anwendungspartner wertvolle Hinweise und Empfehlungen zur Verbesserung / Stabilisierung der Prozessführung gegeben werden konnten.



**Abbildung 1: Verlauf statistischer Größen des Prozesses P4 innerhalb einer kompletten Targetlebensdauer (letzte Zeile)**

Die Modellierung liefert als Ergebnis für jedes Eingangsdatum (Kenngröße) deren Beitrag zur Modellverbesserung „Güte“ (*med\_red*) sowie deren „Einfluss“ (*coeff*) bei Änderungen auf die Zielgröße (Qualitätskriterium = Anzahl fehlerhafter Produkte in der Charge).

Tabelle 1 zeigt eine Zusammenstellung der Kenngrößen mit dem stärksten Beitrag zur Modellbildungsgüte. („Einfluss“ ist ein normierter Quotient: Änderung Zielgröße / Änderung Kenngröße)

Die Bewertung der modellierten Zusammenhänge wurde durchgeführt.

Diese hat ergeben, dass durch Modellierung gefundene (vermutete) Korrelationen nur teilweise physikalisch-technisch plausibel sind. Offensichtlich spielen systematische und zufällige Fehler bei der Messung doch eine größere Rolle als angenommen.

Eine weitere ‚Vorfilterung‘ der Eingangsdaten erscheint diesbezüglich sinnvoll, was aber eine (weitere) Entfernung vom primären Big Data-Ansatz bedeuten würde.

	Kenngröße			<i>med_red</i>	<i>coeff</i>
	<i>process</i>	<i>value</i>	<i>feature</i>		
#1	P4	P(innen) [W]	trend_quad	1,00	-4,6
#2	P4	P(innen) [W]	curve	0,94	4,8
#3	P4	SZ(innen) [kWh]	std	0,76	-4,4
#4	P5	Ip(außen) [A]	std_quad	0,60	2,7
#5	P4	SZ(innen) [kWh]	trend	0,59	4,8
#6	P4	nachgef. Sollw. [V]	q90	0,58	3,9
#7	P7	dArc_BC(innen)	q10	0,53	0,4
#8	P5	dArc_B(außen)	trend_quad	0,52	-2,5
#9	P4	nachgef. Sollw. [V]	trend	0,52	5,1
#10	P4	f(N2) [sccm]	q90	0,50	2,2
#11	P4	p(tot) [µbar]	max	0,48	4,3
#12	P6A	Ip(außen) [A]	max	0,47	4,2
#13	P8A	PCU [V]	q75	0,46	-1,9
#14	P7	Ip(außen) [A]	std_quad	0,44	3,0
#15	P4	nachgef. Sollw. [V]	median_c	0,43	4,7

**Tabelle 1: Zusammenstellung der Kenngrößen mit dem stärksten Beitrag zur Modellbildungsgüte inkl. Bewertung aus technischer und physikalischer Sicht (Farbe der linken Spalte)**

Als Beispiel einige detaillierte, wertende Aussagen zu Zusammenhängen für den Beschichtungsprozess (*process*) P4, bei dem die primäre, oxidische Funktionsschicht aufgebracht wird.

<p>#6 / #15 (plausibel)</p>	<p>Änderungen der reaktiven Prozessbedingungen (Nachführung des Arbeitspunkts <i>nachgef. Sollw.</i>) können Einfluss auf die Funktion haben. da sie sich sowohl auf die Stöchiometrie als auch die die Abscheiderate der Schicht auswirken.</p> <p>Es ist plausibel, dass stabilere (möglichst stationäre) Prozesse, zu weniger Schwankungen in den Schichteigenschaften führen und damit zu einer gleichbleibende Ausgangsqualität beitragen.</p> <p>Eine Verringerung des 90%-Dezils (<i>q90</i>) aller bzw. des Medians der letzten 20 Werte (<i>median_c</i>) im Sinne einer Annäherung an den Median aller Werte innerhalb einer Beschichtung wäre in diesem Sinne natürlich hilfreich.</p>
<p>#1 / #2 (bedingt plausibel)</p>	<p>Änderungen der Sputterleistung <i>P(innen)</i> ändern bei hier vorliegender fixer Prozessdauer – konstante reaktive Prozessbedingungen vorausgesetzt – die abgeschiedene Schichtdicke.</p> <p>Ein Einfluss auf die Funktion wäre plausibel.</p> <p>Allerdings liegt der Fitfehler bei der Bestimmung der Kenngrößen (Koeffizienten des Polynom 2. Grades: <i>curve</i>, <i>trend_gaud</i> und <i>offset_quad</i>) aber in der gleichen Größenordnung wie die Regelgenauigkeit der Sputterstromversorgung.</p> <p>Insofern erscheinen diese Zusammenhänge wenig aussagekräftig bzw. sind kaum interpretierbar.</p>
<p>#10 (nicht plausibel)</p>	<p>(Teil)Nitridische Schichtanteile würden die Funktion erheblich beeinträchtigen.</p> <p>Allerdings kann Stickstoff nur dann in den Prozess gelangen (Gasfluss <i>f(N2)</i>), wenn ein Sperrventil defekt ist – also ein Hardware-Defekt vorliegt, was (noch) nicht verifiziert werden konnte.</p>

Unabhängig von der Problematik bei der Modellbewertung (vgl. AP 2.3) scheint ein gesichertes Ergebnis der Modellbildung zu sein, dass bei der „Güte“ die Merkmale der dicksten Funktionsschicht im Schichtsystem (abgeschieden im Prozess P4) am häufigsten eine Rolle spielen. Auch beim „Einfluss“ spielen diese eine wichtige Rolle. Das ist unter physikalischen Aspekten wohl begründbar und bestätigt das grundsätzliche Funktionieren der (vorrangig) datengetriebenen Modellbildung.

# Bericht

## 1 Aufgabenstellung und Voraussetzungen, unter denen das Vorhaben durchgeführt wurde

In Produktionsprozessen sind wertvolle Ressourcen, wie z.B. Rohstoffe, Energie und Arbeitskraft, erforderlich, um ein Produkt mit der erforderlichen Qualität herzustellen. Aufgrund von nicht vermeidbaren technischen Beschränkungen (z.B. Werkzeugtoleranzen) werden diese Ressourcen in der Praxis sehr häufig nicht optimal genutzt. Werden nun durch die im Prozess (meistens ohnehin) anfallenden Daten mittels eines im Wesentlichen datengetriebenen Modells automatisiert ausgewertet bzw. bewertet, ist eine genauere Steuerung des Prozesses möglich.

Das Gesamtziel des Vorhabens ist es, eine Methode für die Erzeugung eines Modells zu entwickeln, das den Zusammenhang zwischen Prozess-Steuerungsdaten (Prozess-Messgrößen, Eingabedaten) und Eigenschaften des Produktes (Produkt-Messgrößen, Zielgrößen) abbildet. Dabei sollen möglichst wenige Informationen über die konkrete Struktur und möglichst wenige Informationen über die physikalische Interpretation oder technische Bedeutung der Daten vorausgesetzt werden, um eine allgemeine Herangehensweise an die Problemstellung zu entwickeln.

Im gegenständlichen Teilvorhaben wird an einer ausgewählten Produktionsanlage des industriellen Anwendungspartners eine effiziente Datengenerierung und -speicherung etabliert, welche die Grundlage für die zuvor beschriebene, datengetriebene Modellierung bildet, die Hauptgegenstand des anderen Teilvorhabens ist. Nach dem Vorliegen von solchen Modellen ist es Aufgabe des gegenständlichen Teilvorhabens, diese in der Praxis zu validieren und im Anschluss daran in die industrielle Nutzung beim Anwendungspartner zu überführen.

Die konkreten Arbeitsziele des Vorhabens sind im Abschnitt 5 ausführlich ausgeführt.

## 2 Wissenschaftlicher und technischer Stand, an den angeknüpft wurde

In der industriellen Produktion werden Prozess- und Produktdaten mehr oder weniger vollständig erfasst – hauptsächlich aus Gründen der Produktivitätsüberwachung und des Qualitätsmanagements (Fehlerverfolgung). Dafür gibt es aber keine universellen Standards – es wurden vielmehr branchenspezifische Lösungen geschaffen (z.B. SEMI-Standards für die Elektronikindustrie). Folglich sind bei vielen Geräten und Anlagen unterschiedliche, uneinheitliche Schnittstellen zur Datenerfassung vorhanden. Damit müssen im Allgemeinen immer anlagenspezifische zu diesem Zweck geschaffen und im Allgemeinen fortlaufend optimiert werden.

Auch für die Speicherung großer, heterogener Datenmengen gibt es keine universellen Standards. Und die effiziente die Verarbeitung der so erzeugten großen, heterogenen Datenmengen ist immer noch eine Herausforderung [ScaDS2019].

Die Nutzung / Auswertung der Daten zur Prozessoptimierung oder prädiktive Vorhersagen ist ein aktueller Gegenstand der Forschung und Entwicklung sowohl im universitären als auch im industriellen Umfeld [Lütticke2019].

Die Validierung und Optimierung gefundener Zusammenhänge zwischen Prozessdaten und Produkteigenschaften ist ohnehin nicht oder kaum in automatisierter Form möglich, sondern bedarf immer einer besonderen Expertise der grundlegenden physikalisch-technischen Zusammenhänge.

[ScaDs2019] Big-Data-Kompetenzzentrum Dresden/Leipzig – Competence Center for Scalable Data Services and Solutions: Homepage ([www.scads.de](http://www.scads.de)) – Projektüberblick (Stand 2019).

[Lütticke2019] Lütticke, D.: „Industrial Big Data ... von Schnittstellen und künstlicher Intelligenz“, 19. AIS User Conference, Dresden (2019)

### 3 Planung und Ablauf des Vorhabens sowie Kooperation mit Dritten

Das Projekt wurde in drei Arbeitspakete(n) unterteilt / durchgeführt:

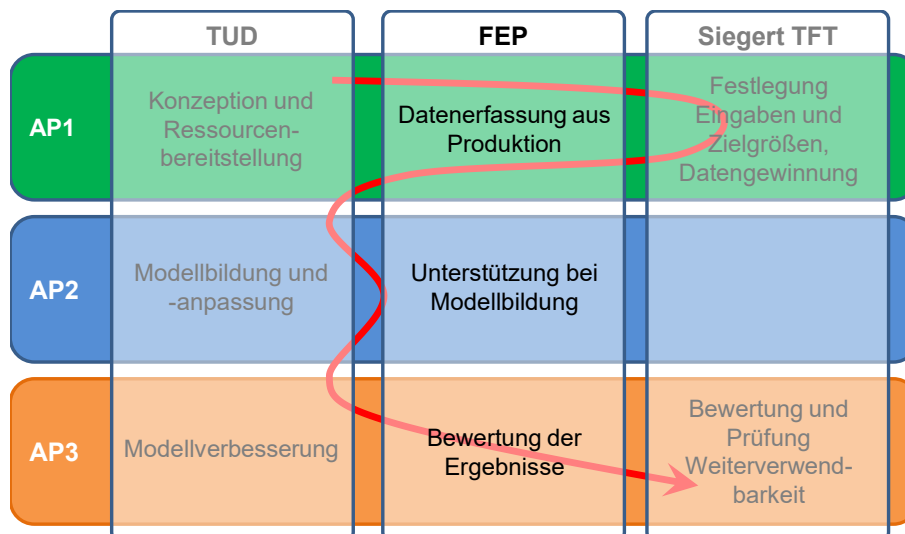
- AP1: Datengewinnung und -import
- AP2: Modellbildung
- AP3: Modellverbesserung und Ergebnisbewertung

Keiner der in Tabelle 2 erfassten Projektpartner kann das Vorhaben allein durchführen, da es ein Zusammenwirken von mathematischer Grundlagenforschung und produzierender Wirtschaft mit jeweils hochspezialisierten Expertisen aus sehr unterschiedlichen Bereichen der Wissenschaft und Technik erfordert.

Einrichtung	Status	Kooperation
Technische Universität Dresden (TUD) Institut für Numerische Mathematik, Professur für Numerik der Optimierung	Universität, Koordinator	Anforderungsspezifikation in AP1. Diskussion Ergebnisse AP2 mit FEP. Abstimmung Vorgehen in AP3 mit FEP.
Fraunhofer-Institut für Organische Elektronik, Elektronenstrahl- und Plasmatechnik (FEP)	Forschungs- einrichtung	Koordination (Zu)Arbeiten in AP1. Iterative Beratung von TUD in AP2. Iterative Unterstützung von TUD in AP3.
Siegert Thinfilm Technology GmbH (S-TFT)	Industrie (assoziiert)	Zuarbeit in AP1 (Eigentümer der untersuchten Beschichtungsanlage!). Unterstützung in AP3.

**Tabelle 2: Verbundpartner – Status und Umfang der Kooperation**

Die Einordnung des Teilvorhabens sowie die Arbeitsteilung zwischen den Projektpartnern und die inhaltliche Abfolge der wichtigsten Arbeiten ist in Abbildung 2 dargestellt.



**Abbildung 2: Arbeitsteilung der Projektpartner in den Arbeitspaketen (Zuwendungsempfänger hervorgehoben) - die rote Pfeillinie symbolisiert die inhaltliche Abfolge der wichtigsten Arbeiten.**

Der Zuwendungsempfänger ist in allen Arbeitspaketen hauptverantwortlich oder mitarbeitend tätig.

### 4 Verwendung der Zuwendung (wichtigste Positionen des zahlenmäßigen Nachweises, z. B. Investitionen, Personalmittel)

Die Zuwendungen wurden fast ausschließlich für Personalmittel verwendet. An Sachkosten fielen nur eine Konferenzteilnahme (V2021 - Vakuum & Plasma) und eine Online-Schulung (Datenanalyse / Maschinelles Lernen mit Python) an.

Die ursprünglich geplanten Dienstreisen zum assoziierten Partner zwecks Begutachtung der Beschichtungsanlage wurden aufgrund der Corona-Pandemie nicht durchgeführt.

## 5 Erzielte Ergebnisse mit Gegenüberstellung der vereinbarten Ziele

Das Ziel des Verbundprojektes ist es, eine Methode für die Erzeugung eines Modells zu entwickeln, das den Zusammenhang zwischen den Prozessdaten (Steuerungs- und Messgrößen) eines industriellen Produktionsprozesses und den Eigenschaften des Produktes (Produkt-Messgrößen, Zielgrößen) abbildet. Dabei sollen möglichst wenige Informationen über die konkrete Struktur und die physikalische Interpretation oder technische Bedeutung der Daten vorausgesetzt werden, um eine allgemeine Herangehensweise an die Problemstellung zu entwickeln.

Im gegenständlichen Teilvorhaben wird an einer ausgewählten Produktionsanlage des industriellen Anwendungspartners eine effiziente Datengenerierung und -speicherung etabliert, welche die Grundlage für die zuvor beschriebene, datengetriebene Modellierung bildet, die Hauptgegenstand des anderen Teilvorhabens ist. Nach dem Vorliegen von solchen Modellen ist es Aufgabe des gegenständlichen Teilvorhabens, diese in der Praxis zu validieren und im Anschluss daran in die industrielle Nutzung beim Anwendungspartner zu überführen.

Für die einzelnen Arbeitspaketen wurden folgende *wesentliche Ziele* aufgestellt bzw. essenzielle Ergebnisse in diesen erzielt.

### AP 1.1 Datengewinnung und –import: Vorbereitung und Konzeption

*Konzeption der Datengewinnung und des Datenimports (physische & logische) ohne (längerfristige) Beeinträchtigung der Funktionalität der Produktionsanlage.  
Aufteilung der konkretisierten Arbeitsaufgaben.*

Es wurde ermittelt, welche Daten beim industriellen Anwendungspartner aus welchen Quellen (automatisierte / manuelle Erfassung) und welcher Form (Tabellen, Datenbanken etc.) vorliegen. Anschließend wurde unter Einbeziehung des Projektpartners TUD abgeklärt, wie der Datentransfer zu ihm hinreichend effektiv gestaltet werden kann und ob eine 1:1-Übernahme prinzipiell möglich ist oder ob Anpassungen nötig sind.  
Es wurden die konkreten Aufgaben, welche sich aus o.g. Arbeiten ergaben, dem jeweils effektivsten Bearbeiter zugewiesen.

### AP 1.2 Datengewinnung und –import: Festlegung der Eingabe und Zielgrößen

*Ermittlung der Präferenzen zur Anlagenoptimierung des (assoziierten) Industriepartners S-TFT mit Prüfung auf Umsetzbarkeit aus prozesstechnischer bzw. physikalischer Sicht.  
Ableitung von Umfang und Häufigkeit der Datenerfassung- bzw. eingaben.*

Der Anwendungspartner wünscht sich für den ersten Schritt Vorschläge zur Verringerung von ‚Produktausfällen‘ (Nichterfüllung von Qualitätskriterien) bzw. eine ‚Früherkennung‘ solcher anhand von Prozessdaten aus der laufenden Produktion.  
Da die aktuell vorliegende dateibasierte Datenablage durch den Projektpartner mit vertretbarem Aufwand als Grundlage für die Modellsuche / -bildung genutzt werden konnte, waren zu diesem Zeitpunkt weder Änderungen an noch Erweiterungen der Datenerfassung der Produktionsanlage erforderlich.  
Es wurde aber die Notwendigkeit der deutlichen Ausweitung der Eingangsdaten in Quantität (z.B. Einbeziehung von den eigentlichen Herstellungsprozessen vor- bzw. nachgelagerten Informationen wie Wartezeiten zwischen den Prozessen) als auch Qualität (insbesondere werteaufgelöste Qualitätsergebnisse statt der nur binären OK-/NichtOK-Bewertung) erkannt und beim Anwendungspartner angefordert.

**AP 1.3 Datengewinnung und –import: Datenerfassung (automatisiert)**

*Prüfung, wie (Prozess)Daten aus bestehender Anlagensteuerung ausgeleitet werden können. Erweiterung der bestehenden Anlagensteuerung um Softwaremodule zur Datenausleitung oder Finden von Lösungen, falls dies (partiell) nicht möglich ist. (Fortlaufende) Adaption der Datenerfassung an Anforderungen aus AP 2.*

Die Ausgabe der in situ (während des Herstellungsprozesses) aufgezeichneten Daten erfolgt in Textdateien - größtenteils schon in tabellarischer Form. Da der Projektpartner keine Notwendigkeit sah, diese Eingangsdaten einer weiteren Strukturierung zu unterziehen, wurden lediglich Untersuchungen durchgeführt, welche Möglichkeiten zur Erfassung (inkl. Aufzeichnung) neuer / zusätzlicher Dateninhalte bestehen und welche Änderungen an der Steuerungssoftware der Anlage dazu erforderlich wären.

Die aufgezeichneten Datenvarietät wurde erweitert. Insbesondere wurden mehr Sollwerte einbezogen, um bei der automatisierten Weiterbearbeitung der Daten Ausreißer, d.h. Mess- bzw. Prozessfehler, (besser) identifizieren zu können.

Durch geeignete Auswahl, Zusammenstellung und / oder Aufbereitung der anfallenden Eingangsdaten konnten zusätzliche Informationen über der Herstellung vor- bzw. nachgelagerte Abläufe gewonnen (s. AP 1.2) und zur Modellbildung herangezogen werden.

Eine detailliertere automatisierte Datenerfassung bei der Produktbewertung (dem Qualitätskriterium) ist vom Anwendungspartner weder finanziell noch zeitlich umsetzbar.

**AP 1.4 Datengewinnung und –import: Datengewinnung (manuell)**

*Unterstützung von S-TFT bei der Auswahl der zu erfassenden (Produkt)Daten aus prozesstechnischer bzw. physikalischer Sicht unter Beachtung der Ergebnisse aus AP 1.1. Realisierung der manuellen Dateneingabe bzw. des teilautomatisierten Datenimports. (Fortlaufende) Adaption der Datengewinnung an Anforderungen aus AP 2.*

Unterstützung bei der Datenbereitstellung, insbesondere für die Realisierung eines teilautomatisierten Datenimports, wurde vorbereitet.

Auf der Basis physikalischer Vorüberlegungen wurden dem Anwendungspartner ausgewählte (optimale) Messgrößen zur qualitativen Erweiterung des Datums „Qualitätskriterium“ konkret benannt sowie geeignete Messverfahren zu deren Gewinnung vorgeschlagen / erläutert.

**AP 1.5 Datengewinnung und –import: Ressourcenbereitstellung**

*Aufnahme der Randbedingungen beim Anwendungspartner bzgl. Nachrüstung von Informationsverarbeitung (Hard & Software).*

*Beschaffung von Hardware (Rechentechnik) und Software (Datenbank) unter Beachtung der Ergebnisse aus AP 1.1.*

*Etablierung einer Möglichkeit zur Datenübermittlung und zur Fernwartung.*

Die Randbedingungen des Anwendungspartners bzgl. der Nachrüstung von Informationsverarbeitung (Hard & Software) wurden – mit besonderem Augenmerk auf datenschutztechnische Belange sowie der Nichtbeeinflussung der Produktionsanlage - aufgenommen und diskutiert. Im Ergebnis dessen steht der Anwendungspartner solchen Erweiterungen in gewissem Rahmen aufgeschlossen gegenüber.

Der Projektpartner erachtet die Übermittlung der Daten vom Anwendungspartner in der vorgefundenen Form (d.h. auf Dateibasis) als ausreichend. Somit entfiel die Notwendigkeit der Beschaffung von zusätzlicher Hardware (Rechentechnik) oder Software (Datenbank). Vorsorglich wurden aber (externe) Angebote zur Etablierung einer SQL-Datenbank zum Zwecke der inhärent streng(er) strukturierten Zusammenführung und Haltung der Anwenderdaten eingeholt.

Eine Fernwartung wurde etabliert, d.h. Änderungen an bzw. Ergänzungen der zur automatisierten Datenerfassung eingesetzten Software können weitestgehend vom Standort der Projektpartner vorgenommen werden.

**AP 2.1 Modellbildung: Datenaufbereitung**

*Unterstützung von TUD bei der Datenaufbereitung aus prozesstechnischer bzw. physikalischer Sicht (z.B. Validierung inhärenter Abhängigkeiten von Eingangsdaten) insbesondere in der Zeit bis zum Vorliegen hinreichend gesicherter Modelle (s. AP 2.3).*

Unterstützung des Projektpartners erfolgte im Wesentlichen bei der Strukturierung und Interpretation der Datensätze – insbesondere von solchen mit inkludierten Prozessproblemen, welche die ‚Standardstruktur‘ der Eingangsdatensätze stören. Es wurden auch Empfehlungen bzgl. der Weiterverwendung solcher Datensätze für die Modellbildung gemacht.

**AP 2.2 Modellbildung: Modellanpassung**

*Unterstützung von TUD bei den Modellanpassungen aus prozesstechnischer bzw. physikalischer Sicht (z.B. Plausibilität) insbesondere in der Zeit bis zum Vorliegen hinreichend gesicherter Modelle (s. AP 2.3).*

Es konnte fortlaufend für den vorliegenden Bearbeitungsstand der Modellbildung geprüft / bestätigt werden, dass keine (offensichtlichen) Diskrepanzen aus prozesstechnischer bzw. physikalischer Sicht vorliegen.

Es mussten erhebliche Maßnahmen zur Datenreduktion evaluiert und ergriffen werden (Details s. AP 2.4).

**AP 2.3 Modellbildung: Bewertung der Modellgüte**

*Unterstützung von TUD bei den Bewertungen aus prozesstechnischer bzw. physikalischer Sicht (insbesondere Kausalität) insbesondere in der Zeit bis zum Vorliegen hinreichend gesicherter Modelle.*

Im Rahmen der extensiven Maßnahmen zur Datenreduktion (s. AP 2.4) wurde speziell darauf geachtet, dass die Kausalität zwischen dem Prozess und den Daten erhalten bleibt.

Die Modellbildung liefert zwei ‚gleichberechtigte‘ (mathematische) Kriterien zur Bewertung der Eingangsgrößen hinsichtlich der Modellgüte:

- a) „Güte“ (Beitrag des Merkmals zur Verbesserung der Modellgüte) und
- b) „Einfluss“ (Auswirkung des Merkmals auf das Qualitätskriterium)

Die Abwägung, wie diese beiden koexistierenden Kriterien bei der Bewertung der Modellgüte zu wichten sind, ist problematisch. In Kooperation mit dem Projektpartner TUD wurde versucht herauszufinden, ob einem Kriterium eine (zumindest gewisse) Dominanz zugeordnet werden kann.

**AP 2.4 Modellbildung: Daten- und Modellreduktion**

*Unterstützung von TUD bei der Datenreduktion aus prozesstechnischer bzw. physikalischer Sicht.*

Durch den Projektpartner wurde bei der Modellbildung festgestellt, dass die bisher vorhandene Datenmenge für den angestrebten (vorwiegend automatisierten) Modellierungsansatz nicht ausreichend spezifisch ist. Daher wurden auf Grundlage der im FEP vorhandenen prozessspezifischen Kenntnisse Empfehlungen zur Datenreduktion erarbeitet. Das betrifft einerseits das Weglassen von Messdaten, die erfahrungsgemäß keine oder kaum eine technische Relevanz für den Prozess haben oder deren Wichtung im Modellierungsprozess.

Andererseits wurden Empfehlungen zur Verringerung der Anzahl der Datensätze (Bestimmung / Begrenzung des maximal nutzbaren zeitlichen Datenintervalls) und zur Aufbereitung der Primärdaten mit statistischen Methoden (Glättung o.ä.) erarbeitet und die sachgerechte Umsetzung gemeinsam mit den Projektpartner fortlaufend evaluiert.

Der Gesamtumfang dieser Arbeiten überstieg den ursprünglich eingeplanten Arbeitsumfang deutlich, weshalb die anderen Tätigkeiten zum AP 2 „Modellbildung“ anteilig reduziert werden mussten.

**AP 3.1 Modellverbesserung und Ergebnisbewertung:  
Bewertung Ergebnisse aus prozesstechnischer Sicht**

*Prüfen der Möglichkeiten die Notwendigkeiten zur Durchführung anlagenbezogener Arbeiten (Wartungen, Targetwechsel) genauer zu monitorieren, damit aus der (testweisen) Umsetzung der Modellergebnisse (z.B. Verlängerung des Durchführungszyklus) möglichst keine Produktionsdefizite entstehen.*

*Praxisorientierte / empirische Validierung bzw. Nutzung der Modellergebnisse durch testweise Umsetzung an der untersuchten Anwenderanlage zwecks Optimierung der Arbeiten in AP 3.3 – dazu ggf. Modifikationen der Anlage sowie Anleitung des Anwendungspartners S-TFT.*

Mit dem Anwendungspartner wurden Diskussionen prinzipieller Natur über seine Möglichkeiten, die anlagenbezogenen Arbeiten genauer zu monitorieren, geführt. Die unterbreiteten Empfehlungen betreffen insbesondere genauere bzw. zusätzliche Informationen zu den verwendeten Halbzeugen (Träger des Schichtsystems) sowie zu den Hilfsprozessen (wie z.B. Details zu Wartungen). Eine Umsetzung und damit Wirksamwerden im Rahmen der Modellierungen erfolgte jedoch nur teilweise. Durch Anregungen bzw. Hinweise des FEP konnte der Projektpartner TUD die prozessrelevante Aussagekraft der graphischen Vergleiche der Einzelprozesse sowie der Zeitreihen (s. Abbildung 1 in der Zusammenfassung), welche beide aus den Eingangsdaten automatisiert generiert werden, noch einmal deutlich steigern. Darauf basierend konnten dem Anwendungspartner wertvolle Hinweise und Empfehlungen zur Verbesserung / Stabilisierung der Prozessführung gegeben werden. Aus prozesstechnischer Sicht hinreichend valide Modellaussagen ergaben sich erst kurz vor Projektende, so dass deren Überprüfung / Anwendung beim Anwendungspartner nicht mehr innerhalb der Projektlaufzeit erfolgen konnte. Eine fundierte Bewertung der Aussagen wurde durchgeführt (s. Zusammenfassung).

**AP 3.2 Modellverbesserung und Ergebnisbewertung:  
Bewertung Ergebnisse aus physikalischer Sicht**

*Prüfen der Möglichkeiten die Prozessführung an der untersuchten Anwenderanlage zu ändern. Versuch des physikalischen Verständnisses der postulierten bzw. validierten Modelle als Basis für eine Optimierung der Prozessführung.*

*Testweise Umsetzung alternativer, optimierter Prozessführungen an der untersuchten Anwenderanlage zwecks Optimierung der Arbeiten in AP 3.3 – dazu ggf. Modifikationen der Anlage*

Eine Änderung der Prozessführung an der untersuchten Anwenderanlage kommt für den Anwendungspartner nur dann in Betracht, wenn dies zwecks Gewinnung zusätzlicher Informationen für einen eng begrenzten Zeitraum passiert. Die für weitergehende Untersuchungen und Entscheidungen hinreichend gesicherten Modellaussagen lagen aber erst zu einem so späten Zeitpunkt vor, dass eine derartige Validierung nicht mehr innerhalb der Projektlaufzeit vorgenommen werden konnte.

Die im vorangegangenen AP beschriebenen Zusammenstellungen (Vergleiche, Zeitreihen) wurden für verschieden lange Zeiträumen (Fertigung Los, Targetstandzeit) auch aus physikalischer Sicht bewertet. Prinzipiell entsprachen diese den bekannten Verläufen. Es deutete sich aber auch eine gewisse Häufung von Ausfällen (d.h. Nichterfüllung des Qualitätskriteriums) z.B. bei den ersten Produktchargen nach einer längeren Produktionspause an. Auf der Suche nach den möglichen Ursachen wurde die Ausweitung der Eingangsdaten forciert.

Nach dem Vorliegen hinreichend valider Modellaussagen, wurden die Kenngrößen mit dem stärksten modellierten Einfluss auf die Zielgröße aus physikalischer Sicht eingehend bewertet (s. Tabelle 1 in der Zusammenfassung). Diese hat ergeben, dass durch Modellierung gefundene (vermutete) Korrelationen nur teilweise physikalisch-technisch plausibel sind (Details s. Zusammenfassung).

**AP 3.3 Modellverbesserung und Ergebnisbewertung: Modellverbesserung**

*Kontinuierliche, iterative Mitarbeit bei der Verbesserung der Modelle durch Auswertung / Interpretation der Tests aus AP 3.1 und AP 3.2.*

Der Beitrag des FEP zur Weiterentwicklung der Modellbildungsansätze bestand primär in der Bewertung der Ergebnisse aus prozesstechnischer sowie physikalischer Sicht (s. oben), was besonders bei grundlegenden Änderungen in der Modellbildung (z.B. Umstellung von „Kleinste-Quadrate-Fit“ auf „Poisson-Regression“) notwendig erschien. Auf der Agenda stand auch die passende Wichtung der beiden Ergebniskriterien für die Merkmale (Mess- / Kenngrößen). Darüber hinaus wurde ein alternativer, mehr modellbehafteter Ansatz bei der Modellierung vorgeschlagen. So sollten nicht alle Eingangsgrößen als unabhängig voneinander betrachtet, sondern in ausgewählten Fällen Korrelationen vorgesehen werden - immer dann, wenn solche aus technologischer Sicht zu erwarten sind.

**AP 3.4 Modellverbesserung und Ergebnisbewertung: Prüfung der Ansätze bzgl. Weiterverwendung**

*Unterstützung der anderen Projektpartner beim Finden von Weiterverwendungsmöglichkeiten. Suche nach eigenen Weiterverwendungsmöglichkeiten – dazu auch testweise Überführung der Ergebnisse auf geeignete Forschungsanlagen des FEP.*

Die vom Projektpartner geschaffene automatisierte Erstellung zeitaufgelöster Vergleiche der Einzelprozesse und die Zusammenstellungen von Zeitreihen, welche sich bereits als sehr nützlich erwiesen haben (s. Ausführungen zu AP 3.1 bzw. AP 3.2), ist mit Sicherheit auch bei andere Anwendungsfällen nutzbringend verwendbar. Auch die im Projektverlauf entwickelten und sukzessiven optimierten Herangehensweisen zur Datenreduktion, d.h. die zeitliche Begrenzung, Auswahl geeigneter statistischer Kenngrößen etc., können für vergleichbare PVD<sup>1</sup>-Herstellungsprozesse übernommen werden. Zu den Verwertungsmöglichkeiten der Modellbildung selbst können (noch) keine Aussagen getroffen werden, werden weil hinreichend valide Modellaussagen erst kurz vor dem Projektende zur Verfügung standen. Aussagen zur (weiteren) Verwendung und Verwertbarkeit der Ergebnisse werden unter Punkt 7 getroffen.

**6 Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Arbeit**

Alle durchgeführten Arbeiten waren zur Erreichung der vereinbarten Ziele notwendig und erfolgten (nur) im angemessenen Rahmen.

Wurde einerseits bei der Bearbeitung des Vorhabens erkannt, dass geplante Tätigkeiten bzw. Kooperationen nicht notwendig sind (z.B. AP 1.5: Beschaffung von zusätzlicher Hardware oder Software), wurden diese nicht (mehr / weiter) durchgeführt – siehe auch Tabelle 2.

Überstieg andererseits der Arbeitsaufwand eines Teilprojekts den ursprünglich vorgesehenen Rahmen – wie bei AP2.4 – wurden andere Tätigkeiten im übergeordneten AP anteilig reduziert.

**7 Voraussichtlicher Nutzen, insbesondere Verwertbarkeit der Ergebnisse**

Es werden im folgenden Aussagen nicht nur aus der Sicht des Zuwendungsempfängers getroffen, sondern auch aus der der aktiv beteiligten (assoziierten) Anwendungspartner (nur wirtschaftlicher Nutzen), da diese keine Berichte vorlegen.

<sup>1</sup> Physical Vapor Deposition: physikalische Gasphasenabscheidung

FEP (Zuwendungsempfänger)

## a) Wissenschaftlicher Nutzen

- Fähigkeiten im Umgang mit / der Nutzung von großen, heterogenen Datenmengen wurden vertieft.
- Sachkenntnis bei der Verknüpfung von Daten zur effektiven Auswertung wurde erweitert.
- Neue Ansätze zur Prozessoptimierung auf Grundlage der automatisierten Zusammenstellung und Visualisierung der Prozessdaten wurden erkannt.
- Neue Informationen über (teilweise verdeckte) Zusammenhänge in Sputterprozessen wurden gewonnen.
- Optimierung artverwandter Beschichtungsprozesse auf Grundlage der gefundenen Korrelationen (Modellaussagen) sind möglich.

## b) Wirtschaftlicher Nutzen

Ist nur mittelbar möglich, nämlich bei Verkauf oder Retrofit einer mit den neuen Erkenntnissen optimierten reaktiven Prozessführung.

S-TFT (assoziiierter Partner)

- Prozessoptimierung auf Grundlage der automatisierten Zusammenstellung und Visualisierung der Prozessdaten wurde begonnen.
- Steigerung der Effizienz der Produktionsanlage auf Grundlage der gefundenen Korrelationen (Modellaussagen) ist möglich.

**8 Während der Durchführung des Vorhabens dem Zuwendungsempfänger bekannt gewordenen Fortschritt auf dem Gebiet des Vorhabens bei anderen Stellen**

Dem Zuwendungsempfänger ist kein sein Teilvorhaben betreffender veröffentlichter Fortschritt bekannt.

**9 Erfolgte und geplante Veröffentlichungen der Ergebnisse****9.1 Referierte Publikationen (z. B. in Fachzeitschriften oder -büchern und referierte Konferenzproceedings)**

Keine.

**9.2 Andere Veröffentlichungen (z. B. Konferenzbeiträge wie Vorträge und Poster, unreferierte Proceedings, Conference Notes)**

Für die Nachwuchsförderung werden die Ergebnisse in der FEP-Vorlesung „Modul Plasmatechnik“ an der Elektrotechnischen Fakultät der TU Dresden integriert.

Für zukünftige Übersichtsvorträgen des FEP (insbesondere zum Thema Magnetronensputtern) wird fortlaufend geprüft, ob sich die Ergebnisse als fachlich passender Teilaspekt präsentieren lassen.

Weitere Veröffentlichungen (z.B. im FEP-Jahresbericht 2024) werden angestrebt.

**9.3 Abschlussarbeiten (Bachelor, Master, Diplom, Staatsexamen, Promotion, Habilitation)**

Keine.

## Kurzbericht

- öffentlich -

Zuwendungsempfänger:	Fraunhofer-Gesellschaft zur Förderung der angewandten Forschung e.V.
Projektleitung:	Dr. Ullrich Hartung
Verbund:	05M2020 – OptProDat Optimierung von Produktionsprozessen durch automatisierte Modellierung auf der Basis von Prozessdaten.
Thema:	05M20AOA – Teilvorhaben 2 Datengewinnung zur automatisierten Modellierung von Produktionsprozessen und Be-wertung von ermittelten Zusammenhängen.

### 1. Ziel und Inhalt des Projektes

Das Ziel des Verbundprojektes ist es, eine Methode für die Erzeugung eines Modells zu entwickeln, das den Zusammenhang zwischen den Prozessdaten (Steuerungs- und Messgrößen) eines industriellen Produktionsprozesses und den Eigenschaften des Produktes (Produkt-Messgrößen, Zielgrößen) abbildet. Dabei sollen möglichst wenige Informationen über die konkrete Struktur und die physikalische Interpretation oder technische Bedeutung der Daten vorausgesetzt werden, um eine allgemeine Herangehensweise an die Problemstellung zu entwickeln.

Das erzeugte Modell soll den Zusammenhang zwischen den heterogenen Steuer- und Messgrößen (Eingabedaten) und den Zielgrößen möglichst genau wiedergeben. Dies ist insbesondere für die Vorhersage von Wartungsintervallen wichtig. Außerdem soll das Modell eine Sensitivitätsanalyse zulassen, mit deren Hilfe Rückschlüsse auf den Einfluss der Steuerungsgrößen gezogen werden können. Mit diesem Ansatz ist es möglich, den Produktionsprozess vorausschauend zu optimieren.

Am Gesamtprojekt beteiligen sich folgende Partner:

- Technische Universität Dresden (TUD),  
Institut für Numerische Mathematik, Professur für Numerik der Optimierung  
*Universität, Koordinator*
- Fraunhofer-Institut für Organische Elektronik, Elektronenstrahl- und Plasmatechnik (FEP)  
*Forschungseinrichtung*
- Siegert Thinfilm Technology GmbH (S-TFT)  
*Industrie (assoziiert)*

### 2. Ablauf und Ergebnisse des Vorhabens

Das Projekt wurde in drei Arbeitspakete(n) unterteilt / durchgeführt:

- AP1: Datengewinnung und -import  
 AP2: Modellbildung  
 AP3: Modellverbesserung und Ergebnisbewertung

Die Einordnung des Teilvorhabens sowie die Arbeitsteilung zwischen den Projektpartnern und die inhaltliche Abfolge der wichtigsten Arbeiten ist in Abbildung 1 dargestellt.

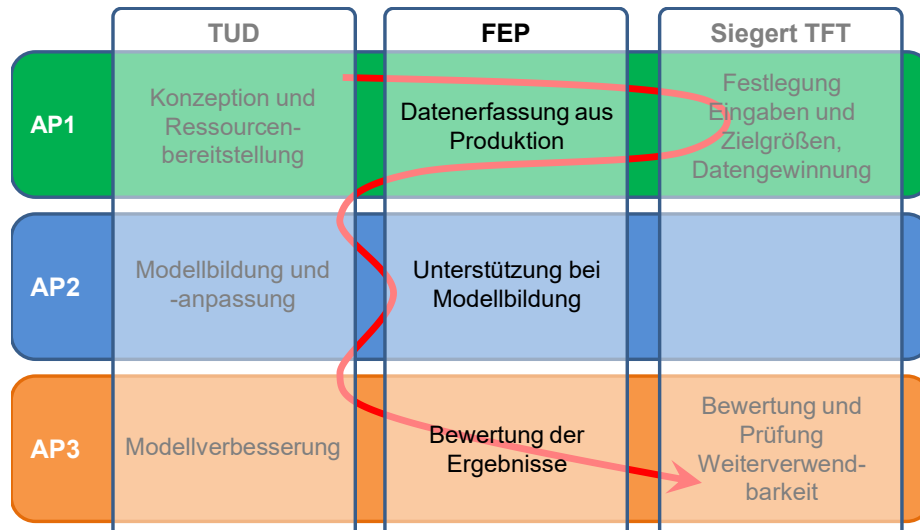


Abbildung 1: Arbeitsteilung der Projektpartner in den Arbeitspaketen (Zuwendungsempfänger hervorgehoben) - die rote Pfeillinie symbolisiert die inhaltliche Abfolge der wichtigsten Arbeiten.

Im Rahmen des AP1 wurden hauptverantwortlich die Teilpakete bearbeitet:

- „Datenerfassung (automatisiert)“ und
- „Ressourcenbereitstellung und Datentransfer“

Es erfolgte zudem eine enge Unterstützung der Projektpartnern bei der Abarbeitung derer Teilpakete.

Der gesamte AP2 wurde hauptverantwortlich durch die TUD bearbeitet.

Dafür wurde Unterstützung insbesondere geleistet bei:

- der Gestaltung der Modellbildung aus physikalisch / prozesstechnischer Sicht zur Vermeidung von Fehlansätzen.
- den Arbeiten zur Daten- und Modellreduktion.

Die Ergebnisse der Modellierung wurden hauptverantwortlich in den Teilpaketen:

- „Bewertung der Ergebnisse aus prozesstechnischer Sicht“ und
- „Bewertung der Ergebnisse aus physikalischer Sicht“

evaluiert und die Resultate in die (iterative) „Modellverbesserung“ eingespeist.

Die Projektpartner wurden darüber hinaus bei der „Prüfung der Ansätze bzgl. Weiterverwendung“ unterstützt.

### **3. Darstellung der wesentlichen Ergebnisse und deren konkreter Nutzen sowie ggf. die Zusammenarbeit mit anderen Forschungseinrichtungen**

Eine mathematische Modellierung einer Produkteigenschaft (Qualitätskriterium), als Resultat einer Abfolge mehrerer, komplexer Beschichtungsprozesse, wurde auf der Basis von umfangreichen Prozessdaten (d.h. mit einem datenbasierten Ansatz) etabliert.

*TUD entwickelte entsprechende mathematische Kompetenzen.*

Die dazu erforderlichen Eingangsdaten wurden effizient (hochgradig automatisiert) aus der Anlagensteuerung extrahiert (in-situ Prozessdaten) oder vom Anlagenbetreiber separat bereitgestellt (ex-situ Qualitätsdaten).

*FEP und TUD vertieften ihre Fähigkeiten im Umgang mit großen, heterogenen Datenmengen – insbesondere deren Zusammenführung und Speicherung.*

Es mussten Methoden zur automatisierten Aufbereitung der großen Primärdatenmenge entwickelt werden, weil die primären Daten für den angestrebten (vorwiegend automatisierten) Modellierungsansatz nicht ausreichend spezifisch sind. Eine aus physikalisch-technischen Gesichtspunkten begründbare Beschränkung des Beobachtungszeitraum auf die unmittelbare Wirkung des Prozesses auf das Produkt war allein nicht ausreichend.

Zusätzlich war eine komprimierende Vorabauaufbereitung notwendig: die bei der Modellierung verwendeten Kenngrößen sind statistische Größen der Prozessdaten (Quantile etc.) oder Parameter polynomialer Anpassungen der zeitlichen Verläufe dieser.

*FEP und TUD erweiterten ihre Sachkenntnis bei der Aufbereitung sowie Verknüpfung von Daten zur effektiven Auswertung / Modellbildung.*

*Die automatisierte Zusammenstellung und Visualisierung ergaben für FEP und S-TFT neue Ansätze zur Prozessoptimierung.*

Die Bewertung von ermittelten Zusammenhängen aus technischer und physikalischer Sicht wurde durchgeführt.

Diese hat ergeben, dass durch Modellierung gefundene (vermutete) Korrelationen nur teilweise physikalisch-technisch plausibel sind.

*FEP erhielt neue Informationen über (teilweise verdeckte) Zusammenhänge in Sputterprozessen.*

*Gefundene Korrelationen können von S-TFT zur Steigerung der Effizienz der Produktionsanlage und vom FEP zur Optimierung ähnlicher Beschichtungsprozesse genutzt werden.*