

Schlussbericht – Teil I: Kurzbericht

ZE: LUM GmbH KIT - MVM	Förderkennzeichen: 01 S22033A 01 S22033B
Vorhabenbezeichnung: Entwicklung von Methoden des Maschinellen Lernens für eine flexible, innovative in-line Analyse (Akronym: EMMA)	
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2022 – 31.03.2025	
Berichtszeitraum: 01.10.2022 – 31.03.2025	

1 Aufgabenstellung

In der Prozessindustrie ist die Analytik von Dispersionen entscheidend, da ihre physikalischen und chemischen Eigenschaften eng mit der Produktqualität verknüpft sind. Parameter wie Feststoffkonzentration oder Partikel- und Tropfengrößenverteilung müssen insbesondere in der Pharma- und Lebensmittelindustrie sowie zunehmend in der Elektromobilität präzise überwacht werden. Dafür sind in-line fähige Analysegeräte erforderlich, die eine schnelle und verlässliche Quantifizierung ermöglichen.

Das Vorhaben zielt auf die softwareseitige Weiterentwicklung eines solchen Messgerätes. Im ersten Schritt werden Methoden des Maschinellen Lernens entwickelt und eingesetzt, um komplexe Zusammenhänge zwischen Messdaten und Produktparametern mit höherer Genauigkeit und Zeitersparnis zu erfassen. Ergänzend wird ein Simulationsworkflow aufgebaut. Weitere ML-Ansätze, etwa zur Cluster-Erkennung und Merkmalsextraktion, dienen der effizienten Datenaufbereitung für Kalibrierungen. Beginnend mit Modellsystemen werden die Verfahren systematisch untersucht und anschließend auf ein industrierelevantes Beispiel (Batteriesuspensionen) übertragen.

2 Voraussetzungen

Das Vorhaben wurde im Rahmen der Bekanntmachung der Richtlinie zur Fördermaßnahme "KMU-innovativ: Informations- und Kommunikationstechnologie (IKT)". Bundesanzeiger vom 22.05.2017 bearbeitet. Für die analytischen Aufgaben des Projekts wird ein bereits vorhandenes Messinstrument eingesetzt. Die softwareseitigen Entwicklungen basieren auf Open-Source-Bibliotheken in Python. LUM verfügt über langjährige Erfahrung in bi- und multilateralen Entwicklungsprojekten. Das Team bringt umfassendes Know-how ein, um die Aufgaben mit hoher Qualität zu bearbeiten und einen positiven Projektverlauf sicherzustellen. Das Institut MVM am KIT verfügt über jahrelange Expertise in Partikeltechnik, Verfahrenstechnik und Maschinen. Das Unternehmen treibt die Forschung im Bereich Digitalisierung voran und legt einen Schwerpunkt auf Batterietechnologien, insbesondere Batterierecycling. Das Projekt wurde im Zeitraum vom 01.10.2022 – 31.03.2025 bearbeitet.

3 Ablauf

Es fanden regelmäßige Projekttreffen zwischen den beiden Partnern statt, die einen kontinuierlichen Austausch sicherstellten. Da es sich um ein Projekt mit nur zwei Partnern handelte, konnten die Aufgaben besonders effizient bearbeitet und entsprechend dem Projektantrag vollständig umgesetzt werden.

4 Wissenschaftlicher und technischer Stand

In der Prozessindustrie sind Methoden des Maschinellen Lernens zur quantitativen Auswertung heterogener und kolloidaler Stoffgemische bisher wenig verbreitet. Aktuell genutzte optische Verfahren eignen sich vor allem für Produkte mit klaren optischen Qualitätsmerkmalen und sind aufgrund kurzer Messzeiten sowie direkter Anwendbarkeit im Prozess weit verbreitet. Die eingesetzte Messtechnik misst die Reflektanz über ein breites Wellenlängenspektrum (UV bis Nah-Infrarot) und ist sowohl als Laborausführung als auch als in-line Sonde verfügbar, sodass Labor-Kalibrierungen direkt auf den Prozess übertragbar sind. Bisher erfolgen Kalibrierungen über zeitaufwendige multivariate statistische Methoden wie Multi-Lineare Regression, die hohen personellen Aufwand und geschultes Personal erfordern. Der Einsatzbereich des Messgeräts beschränkt sich derzeit hauptsächlich auf Milchanwendungen. Der Trend geht jedoch zu in-line Messungen mit hoher Messfrequenz, um dispersionsbasierte Produkte kontinuierlich zu überwachen und schnelle Prozessanpassungen zu ermöglichen. Ziel ist die Entwicklung einfacher, produkt- und prozessspezifischer Kalibrierverfahren, die hohe Prädiktionsgenauigkeit ohne Expertenwissen erlauben. Darüber hinaus soll die Messtechnik zur Bestimmung der Partikelgrößenverteilung erweitert werden, um den Anwendungsbereich zu vergrößern und den Personalaufwand zur Bedienung und Wartung zu reduzieren.

5 Zusammenarbeit

Das Konsortium bestand aus einem wissenschaftlichen und einem industriellen Partner, wodurch die Zusammenarbeit effizient organisiert werden konnte. Durch die enge interdisziplinäre Kooperation in den Bereichen Partikeltechnologie, Datenwissenschaften und Messtechnik konnten zusätzliche Expertise aufgebaut, das wissenschaftliche Netzwerk erweitert und die fachliche Kompetenz der Mitarbeitenden gestärkt werden. Die entstandenen Synergieeffekte erwiesen sich sowohl wissenschaftlich als auch wirtschaftlich als äußerst vorteilhaft und trugen maßgeblich zum erfolgreichen Projektabschluss bei.

6 Wesentliche Ergebnisse

Im Projekt wurde erfolgreich ein Algorithmus entwickelt und getestet, der auf Methoden des Maschinellen Lernens basiert und die inline-Vorhersage partikelspezifischer Eigenschaften ermöglicht. Damit konnte ein wesentlicher Beitrag zur Prozessanalytik geleistet werden, da nun eine kontinuierliche und automatisierte Auswertung großer Datenmengen in Echtzeit möglich ist.

Ein zentrales Ergebnis des Vorhabens ist die Entwicklung eines Verfahrensprototyps, der die Bestimmung von Partikelgrößenverteilungen und Massenkonzentrationen aus multimodalen Sensordaten erlaubt. Ergänzt wird dieser durch ein modular aufgebautes Softwaresystem, das verschiedene Funktionen entlang der gesamten Prozesskette integriert. Hierzu zählen Verfahren zur Normierung und Aufbereitung von Rohdaten, sowie Simulations- und Ersatzmodelle, die eine schnelle und ressourcenschonende Machbarkeitsanalyse ermöglichen. Darüber hinaus umfasst das System leistungsfähige Filteralgorithmen, Methoden zur Produkterkennung und zur automatisierten Ausreißerererkennung, die entscheidend für eine robuste Datenqualität sind. Für die eigentliche Vorhersage kommen unterschiedliche Regressions- und Klassifikationsansätze wie MLR, PLS, SVR und MLP zum Einsatz. Besonders hervorzuheben ist die Weiterentwicklung des MLP-Ansatzes, durch die Kombination experimenteller Messdaten mit simulativen Daten realisiert werden konnte. Dies führte zu einer Steigerung der Vorhersagegenauigkeit. Damit konnte gezeigt werden, dass eine enge Verzahnung von experimenteller Datenerfassung und modellgestützter Simulation eine Rolle für die Qualität datenbasierter Prognosen spielt.