

# Modellierung von Eigenschaften einer 2K-PUR Lackrezeptur durch Machine-Learning

T. Borgert<sup>1\*</sup>, G. Zhang<sup>1</sup>, L. Wagner<sup>2</sup>, C. Stoffelen-Janßen<sup>2</sup>, D. Polke<sup>3</sup>, J. Göttert<sup>2,3</sup>, C. Schmitz<sup>1</sup>

<sup>1</sup>ILOC Institut, Hochschule Niederrhein, Adlerstraße 32, 47798 Krefeld, <sup>2</sup>HIT-Institut, Hochschule Niederrhein, Adlerstr. 32, 47798 Krefeld

<sup>3</sup>Fachbereich Elektrotechnik und Informatik, Hochschule Niederrhein, Reinarzstraße 49, 47805 Krefeld

\*E-Mail: tobias.borgert@stud.hn.de

## Einführung

- Modellierung eines 2K-PUR über vier Iterationen
- Vorhersage von vier Zielgrößen
- **Ziel:** Generierung von genauen Modellen über möglichst wenig Versuche

→ Beschleunigte Formulierung, Senkung von Ressourcenverbrauch und Kosten

## Parameter

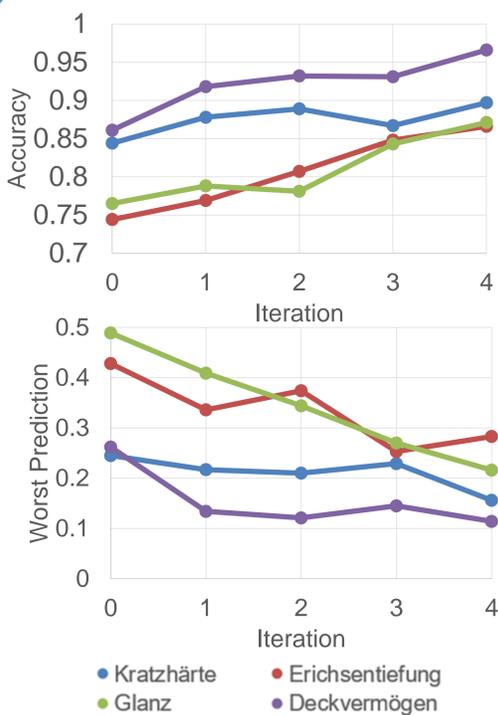
### Eingangsgrößen

- Vernetzung
- HDI:IPDI
- Mattierungsmittel
- TiO<sub>2</sub>-Pigmentpaste
- Schichtdicke

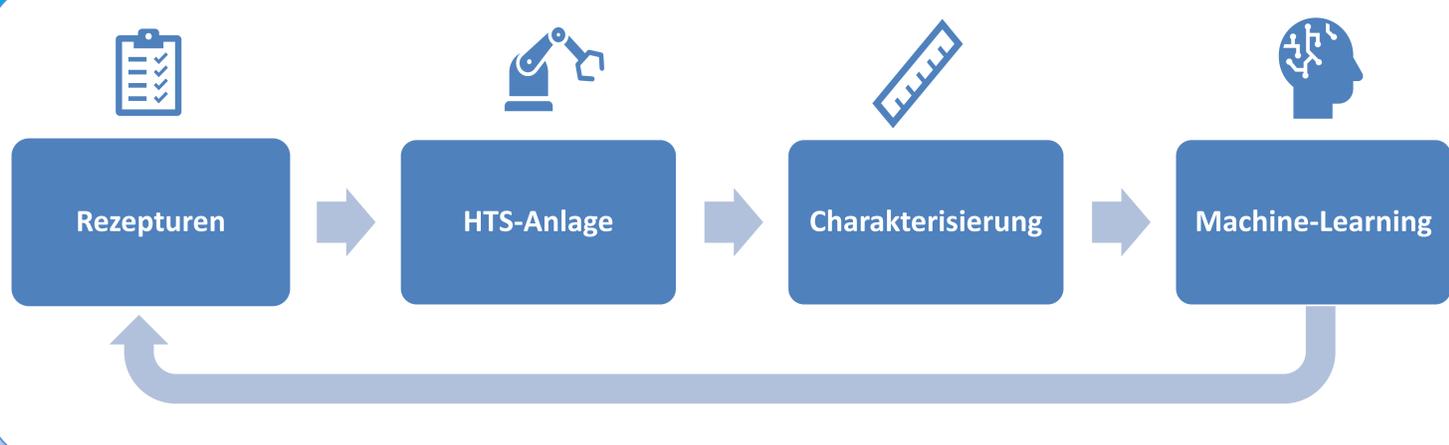
### Zielgrößen

- Kratzhärte
- Erichsentiefung
- Glanz 60°
- Deckvermögen

## Modellbildung

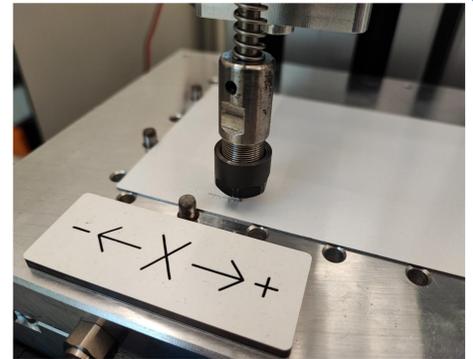


## Prozess



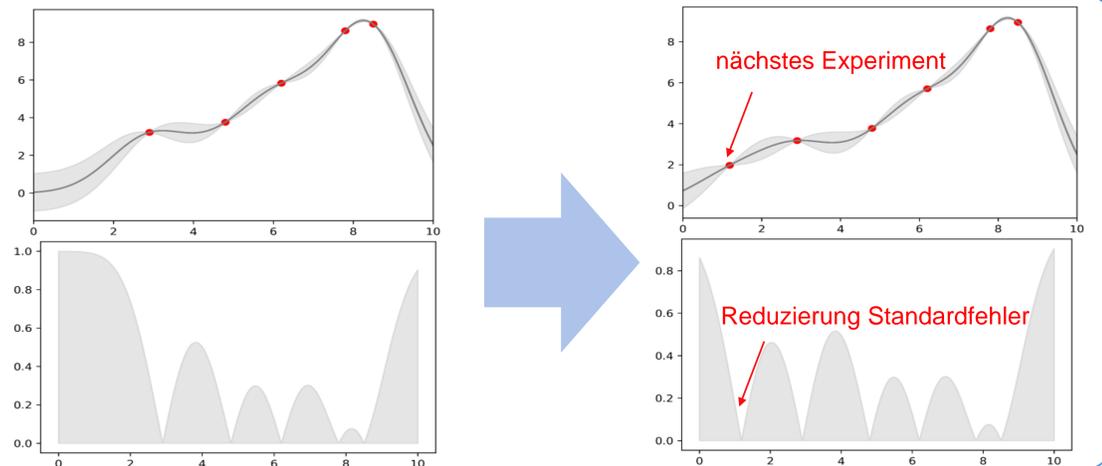
## Hochdurchsatzanlage

- Vollautomatische Formulierung und Applikation der Lacksysteme
- Bestimmung von Glanz und Deckvermögen
- Kratzhärte mittels eines selbstentwickelten automatisierten Gradientenverfahrens



## Machine-Learning

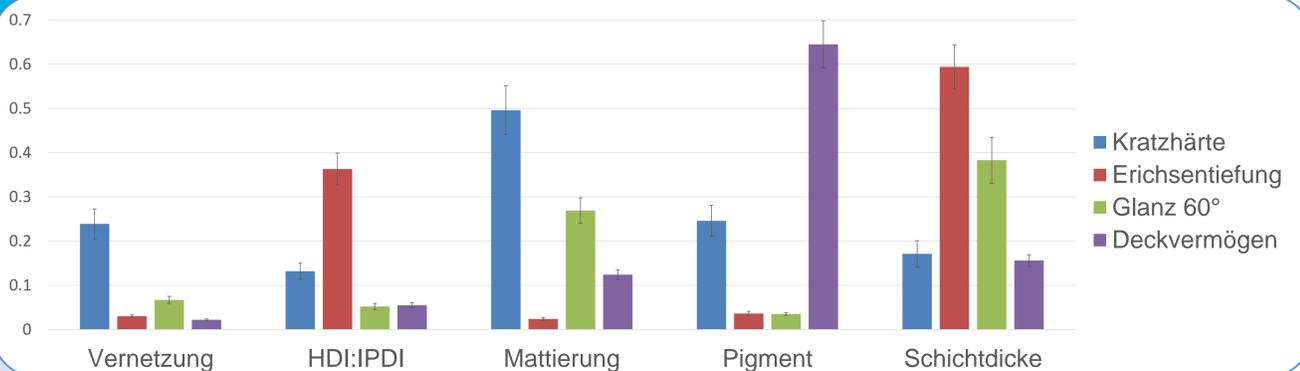
- Bestimmung der Experimente der nächsten Iteration über Machine-Learning
- Maximum under curve area difference method for Sampling (MARCUS)
- Experimentauswahl mittels Minimierung des Standardfehlers



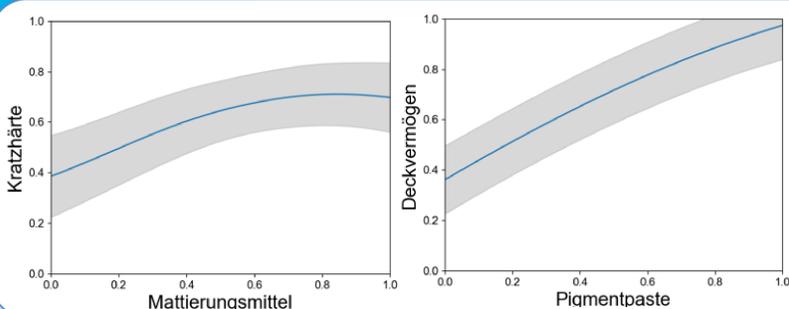
## Fazit

- Modellbildung mit max. 55 Datenpunkten
  - Verbesserung über jede Iteration
  - Bildung von vier Modellen aus einem Datensatz
  - Einflussanalyse erlaubt Interpretation der Ergebnisse
- Vorhersage von verschiedenen Eigenschaften über den gesamten Versuchsraum möglich

## Einflussanalyse



## Ausblick



- **Vorhersagen im gesamte Versuchsraum:** Aufwand für maßgeschneiderte Anforderungen werden reduziert
- Modelle werden durch weitere Experimente verbessert, die noch im Versuchsraum durchgeführt werden.
- Versuchsraum kann beliebig erweitert werden, falls der gewünschte Bereich nicht abgedeckt wird.
- **ML Algorithmus:** Nächste Datenpunkte unter Effizienzsteigerung der Modelle gewählt

## Danksagung

Gefördert durch FH Kooperativ

Intelligente Infrastruktur für das Daten-Management in Automatisierten Chemischen Hochdurchsatz-Prozessen



GEFÖRDERT VOM  
Bundesministerium für Bildung und Forschung



Projektpartner:

**ORONTEC**  
the measurement and process experts

**Hesse Lignal**  
inspiring you

Hochschule Niederrhein  
University of Applied Sciences

**Chemie**  
Faculty of Chemistry