

Titel**Validierung und Kalibrierung von Modellen zur Prognose von Stoffsuspensions- und Papiereigenschaften in Unternehmen der Papierindustrie**

T. Kuntzsch

Inhalt

1	Zusammenfassung	2
2	Abstract	3
3	Ausgangssituation und Zielstellung	4
4	Stand des Wissens und der Technik	7
4.1	Mathematische Modelle zur Prognose von Papiereigenschaften	7
4.2	Modellvalidierung	9
4.3	Prognose-Algorithmen der PTS	11
5	Durchführung der Untersuchungen	13
6	Ergebnisse	16
6.1	Stoff- und Prozessdaten / Anwendungsfälle	16
6.2	Beschreibung der Grundannahmen zu den durchgeführten Modellrechnungen	17
6.3	Vergleich der Messwerte mit den Modellergebnissen	18
6.4	Bewertung der Prognosegenauigkeit der Modellrechnungen sowie Ableitung von Kalibrierungsfaktoren	26
6.5	Fehlerrechnung und Sensitivitätsanalyse	31
6.6	Bewertung und Übertragbarkeit der Methodik für die Validierung und Kalibrierung	34
	Glossar	36
	Literatur	38

1 Zusammenfassung

Zielstellung

Die Ziele des Forschungsprojektes waren:

- Entwicklung einer generellen Methodik zur Übertragung numerischer Algorithmen zur Prognose von Stoffsuspensionseigenschaften sowie von mechanischen, optischen und strukturellen Papiereigenschaften auf Realprozesse in Papierfabriken
 - Nachweis der Gültigkeit der generellen Vorgehensweise bei der Modellbildung anhand der untersuchten Modelle Faserstoffmahlung, Mischung und Laborblattbildung (Rapid-Köthen) in der Praxis
-

Ergebnisse

Für die untersuchten Modelle der Faserstoffmahlung, Mischung und Blattbildung (RK) konnte deren Praxistauglichkeit nachgewiesen werden:

- Für viele Anwendungsfälle besteht unter Berücksichtigung der Messwertgenauigkeit der Praxisproben bereits ohne weitere Kalibrierung eine gute Übereinstimmung zwischen Messwerten und Modellergebnis. Die Modelle sind daher grundsätzlich als valide zu betrachten.
- Einflüsse, die nicht im Modell abgebildet werden, wie z.B. durch Abnutzung von Refinergarnituren und Feinstoffe bzw. Additive im Prozesswasser, müssen ggf. durch eine Kalibrierung berücksichtigt werden. Die Trendaussage des Modellergebnisses (vor Kalibrierung) stimmt aber gut mit der Realität überein.

Die dabei entwickelte Vorgehensweise zur Validierung und Kalibrierung ist auch auf gegenwärtig in Entwicklung befindliche bzw. künftige Modelle übertragbar und umfasst folgende Schritte:

- Datenaufnahme in Papierfabrik
- Erstellung Strukturmodell aus Modellbibliothek
- Überprüfung und ggf. Kalibrierung anhand des Ist-Zustandes

Damit kann die Anwendbarkeit der von PTS entwickelten Modelle nachhaltig sichergestellt werden und deren Vertrauenswürdigkeit und Akzeptanz in der Praxis wesentlich verbessert werden.

Danksagung

Die Ergebnisse wurden im Rahmen des Forschungsvorhabens IW061084 gewonnen, das im Programm zur "Förderung von Forschung, Entwicklung und Innovation in kleinen und mittleren Unternehmen und externen Industrie-forschungseinrichtungen in den neuen Bundesländern" mit finanziellen Mitteln des Bundesministeriums für Wirtschaft und Technologie (BMWi) über den Projektträger EuroNorm GmbH gefördert wurde. Dafür sei an dieser Stelle herzlich gedankt.

Unser Dank gilt außerdem den beteiligten Firmen der Papier- und Zulieferindustrie für die Unterstützung der Arbeiten.

2 Abstract

- Project objective** The research project was intended
- To build up a general validation procedure for models predicting pulp and paper properties under industrial scale conditions
 - And to prove the validity of the calculation modules developed at PTS for “refining”, “mixing” and “sheet forming/sheet properties” by means of practical investigation in paper mills
-

Results During a thorough validation of the existing models developed at PTS their applicability in paper mills could be proved:

- The results show that in many cases the relationships between input parameters and the resulting pulp and sheet properties are adequately reflected by the models currently available even without further calibration.
- Remaining differences between the real process and model calculations caused by effects not included in the models can be reduced using calibration functions. Nevertheless, the principal characteristics of the modelling result are in good agreement with reality.

The resulting continuous methodology for model validation covers all stages of module development:

- Determination of relevant stock and process parameters on site
- Drawing up the structural model of the stock preparation arrangement at the mill
- Model verification and calibration to improve model quality

The developed techniques for model validation and calibration can be applied as well to future models using a data structure identical to the existing models. Thus the implementation of new simulation models and their application in practice can be carried out very quickly. Furthermore the results of the research project will provide a high degree of model reliability which is a prerequisite for risk minimization and for the acceptance by customers.

Acknowledgement

The research project IW 061084 was funded by the German Federal Ministry of Economics and Technology BMWi in the programme for the "Promotion of Research, Development and Innovation in Small and Medium-sized Enterprises and External Industrial Research Institutions in the New German Countries" and carried out under the umbrella of EuroNorm in Berlin. We would like to express our warm gratitude for this support.

We would also like to express our thank to the involved German and Scandinavian companies for providing proper samples as well as for supporting project performance.

3 Ausgangssituation und Zielstellung

Hoher Bedarf an modellbasierten Werkzeugen

Die wachsenden und vielfältigen Anforderungen an Papierprodukte sowie die Gegebenheiten auf den Rohstoff- und Energiemärkten erfordern effektive Verbesserungs- bzw. Optimierungsmaßnahmen bei den Papierherstellern.

Modellbasierten Werkzeugen zur Prognose und Simulation von Papiereigenschaften kommt für diese Aufgaben eine große Bedeutung zu, da diese es ermöglichen:

- Papiereigenschaften anhand der Rohstoffe zu prognostizieren,
- Rohstoffkosten bei gleich bleibender Rohpapierqualität zu minimieren,
- Versuchsaufwände zu verringern,
- alternative Rohstoffe zu identifizieren und
- die Machbarkeit von Papieren mit vorgegebenen Eigenschaften zu beurteilen.

Solche Modelle und Softwarelösungen sind jedoch bislang kommerziell nicht verfügbar. Mit einer umfassenden Validierung anhand von Daten aus der Praxis und dem Nachweis der Gültigkeit von Modellen, wie sie an der PTS entwickelt werden, könnten die Beratungsdienstleistungen auf diesem Gebiet wesentlich ausgebaut und noch besser den Fragestellungen der Papierfabriken angepasst werden.

Modellentwicklung PTS

Bei den bisher von der PTS auf dem Gebiet der Prognose von Suspensions- und Papiereigenschaften (Computer Assisted Paper Design = CAPD) bearbeiteten Forschungsvorhaben erfolgte die Erstellung von Modellen zur Simulation des Mahlungsverhaltens [1], des Sortier- und Fraktionierungsverhaltens [2] sowie des Mischungsverhaltens [3] von Faserstoffen bzw. Faserstoffsuspensionen und insbesondere auch zur Berechnung von optischen, strukturellen und Festigkeitseigenschaften von Papieren [4,5].

Durch den modularen Aufbau und die sukzessive Erweiterung und Vervollständigung der bestehenden Modelle wird es künftig möglich sein, die Eigenschaftsentwicklung entlang der Prozesskette vom Faserstoffeinsatz über seine Aufbereitung bis hin zur Ausprägung der Papiereigenschaften auf der Papiermaschine zu verfolgen.

**Bessere
Anpassung an
Praxis
erforderlich**

Die systematische Entwicklung dieser Modelle erfolgte vorrangig auf der Grundlage einer Datenbasis, welche an der PTS im kleintechnischen Maßstab unter praxisnahen Bedingungen gewonnen wurde. Dabei konnten die Modelle bei einer demonstrativen Anwendung in der industriellen Praxis ihre grundsätzliche Eignungsfähigkeit nachweisen. Es zeigte sich jedoch, dass eine umfassende Anwendung der Modelle in Papierfabriken eine bessere Anpassung an die Struktur der realen Prozesse einschließlich der auftretenden Prozessverknüpfungen erfordert. Als schwierig erweist sich dabei die Tatsache, dass nur punktuell Einzelwerte des vorliegenden Ist-Zustandes für eine Validierung und Kalibrierung zur Verfügung stehen. Weiterhin sind die benötigten Daten nicht immer einfach verfügbar, zugänglich bzw. messbar. Die unter diesen Umständen für eine Modellvalidierung notwendigen Kenntnisse sind bislang unzureichend und die hierfür erforderlichen Werkzeuge und Methoden nicht vorhanden.

Zielstellung

Das Ziel des Forschungsvorhabens war die Entwicklung einer systematischen, allgemeingültigen Methodik zur Übertragung von mathematischen Modellen zur Prognose von Stoffsuspensions- und Papiereigenschaften auf Realprozesse in Unternehmen der Papierindustrie. Eine solche Methodik der Modellvalidierung und -kalibrierung trägt nachhaltig dazu bei, die Vertrauenswürdigkeit der an der PTS entwickelten Modelle in der Praxis nachzuweisen und deren Akzeptanz bei Papierherstellern zu sichern.

**Vorgehen
Modellvalidierung**

Die durchgeführten Untersuchungen für eine Validier-Methodik, d.h. den Nachweis, dass die Modellbildung der vorgegebenen Problemstellung angepasst ist und der reale Prozess hinreichend genau nachgebildet wurde, umfasste insbesondere die folgenden Punkte (s. Abb. 1):

- Entwicklung der Methodik zur Erfassung aller notwendigen Stoff- und Prozessparameter vor Ort und zur Generierung einer Prozessstruktur auf Basis bereits verfügbarer und zukünftig zu entwickelnder Prognose-Module (Strukturmodellierung),
 - Erarbeitung einer Kalibrierprozedur des Prozessmodells anhand von Differenzen zwischen Modell-Prognosen und Ist-Werten mittels geeigneter Übertragungsfunktionen,
 - Bewertung der Modellgüte anhand geeigneter Kenngrößen bzw. mittels geeigneter Visualisierungstechniken und
 - Aufbau einer nachnutzungsfähigen Methodik (Datenbasis) für die Validierung künftig zu entwickelnder Module bzw. Modelle.
-

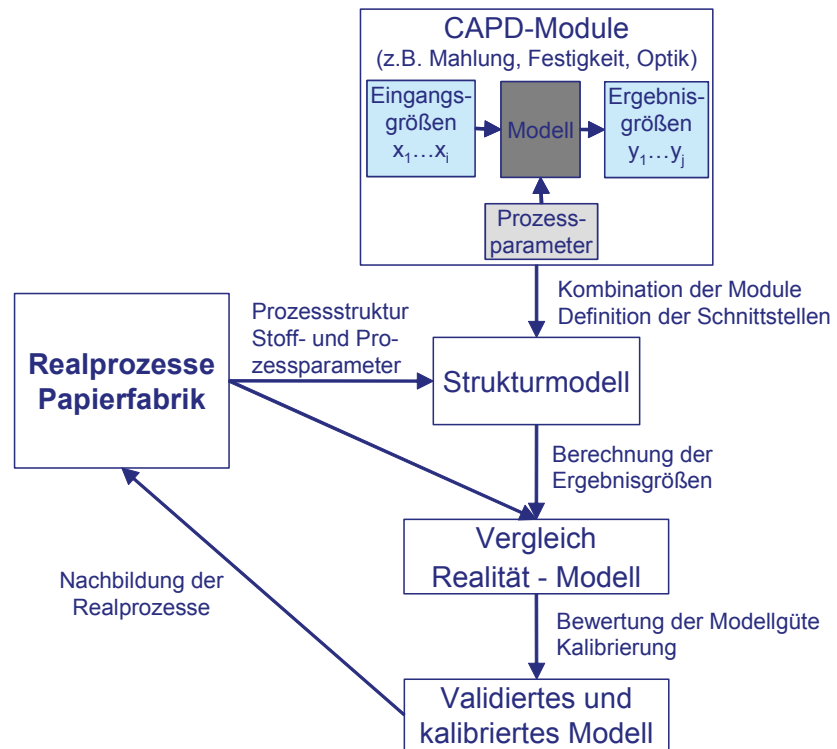
**Abbildung zur
Modell-
validierung**

Abb. 1: Übersicht der Zusammenhänge bei der Modellvalidierung

4 Stand des Wissens und der Technik

4.1 Mathematische Modelle zur Prognose von Papiereigenschaften

Einteilung Modelle

Grundsätzlich kann man Modelle für die Prognose von Papiereigenschaften drei verschiedenen Typen zuordnen, wobei zur Modellgenerierung jeweils unterschiedliche mathematische Verfahren zum Einsatz kommen (siehe Abb. 2).

- „Black-Box-Modelle“: Mit Methoden des Data Mining (Datenanalysemethoden) werden anhand des Input-Output-Verhaltens des zu modellierenden Prozesses Modelle generiert. Der Prozess selbst ist einer direkten Analyse wegen seiner Komplexität nicht zugänglich.
- „White-Box-Modelle“: Der zu modellierende Prozess ist vollständig in seinen Abläufen beobachtbar. Die Modelle ergeben sich aus der mathematischen Formulierung der bekannten chemischen und physikalischen Gesetzmäßigkeiten.
- „Grey-Box-Modelle“: Einzelne Abläufe des zu modellierenden Prozesses sind algorithmisierbar, werden aber durch weitere komplexe Prozesse überlagert. Die in den Modellen enthaltenen unbekannt Parameter sind mit geeigneten Datenanalysemethoden berechenbar.

Schaubild

chaotisch		deterministisch	Input-Output-Verhalten
Black Box	Grey Box	White Box	Modellansätze
Data Mining	semi-physikalisch	Grundlagenforschung	Modellgenerierung
Neuronale Netze	Page (Mechanik)	Kubelka-Munk (Optik)	Beispiel

Abb. 2: Modellansätze für die Prognose von Papiereigenschaften [6]

Black-Box

Anwendungen im Rahmen der Prozesssteuerung und -regelung benutzen bevorzugt vor allem Black-Box-Modelle. Die Verfügbarkeit großer Datenmengen gewährleistet eine ausreichende Datenbasis für die Modellgenerierung mittels Faktoranalyse [7] oder Neuronalen Netzen [8]. Allerdings sind alle „trainierten“ Modelle nur in einem eng definierten Bereich gültig. Kleinste Änderungen in der Prozessführung setzen alle Modelle außer Kraft und zwingen zu einer vollständigen Modellüberarbeitung.

White-Box

White-Box- bzw. deterministische Modelle sind im Bereich der Prognose physikalischer Papiereigenschaften eher die Ausnahme. Insbesondere die stochastische Natur der Fasernetzwerke erschwert eine Modellbildung bei ausschließlicher Anwendung physikalischer Gesetze. Existierende Modelle versuchen diese stochastische Natur durch Annahme geeigneter Ersatzmedien (optisch halbdurchlässiges Medium im Fall des Kubelka-Munk-Modells [9]) oder durch diskrete Ersatzmodelle (Fasernetzwerke in KCL Pakka [10]) zu umgehen. Zur Beschreibung des mechanischen Verhaltens von Papier existieren beispielsweise in der Literatur verschiedene Theorien, wobei das Papier in Abhängigkeit vom jeweiligen Modellansatz z.B. als ein aus Einzelfasern gebildetes Netzwerk oder als Kontinuum betrachtet wird [11, 12, 13]. Die zum Teil recht anspruchsvollen Modelle erfordern jedoch die Kenntnis einer großen Anzahl an Parametern (Fasergeometrie und -orientierung, Anzahl und Größe der Faser-Faser-Bindungen u. a.), die i. d. R. nicht alle bzw. nur mit großem Aufwand bestimmt werden können. Diese Vorgehensweise ist in der Praxis häufig zu kompliziert und findet daher keine Anwendung.

Grey-Box

Grey-Box-Modelle stellen einen Kompromiss aus den beiden Ansätzen dar. Beispielsweise gehen in die so genannte Page-Gleichung [14] oder in Modelle für die scheinbare Blattdichte [15], deterministische Ansätze ein (Zugverhalten und Lage benachbarter Fasern), die durch Parameter verbunden sind, welche in Ermangelung messtechnischer Möglichkeiten auf der Basis von Regressionen bestimmt werden.

Stand der Modellentwicklung

Die unterschiedlichen Herangehensweisen spiegeln sich auch in den derzeit bekannten Ansätzen für eine softwaregestützte Modellentwicklung wider. KCL-PAKKA [16] macht unter Verwendung eines physikalisch determinierten, wirklichkeitsnahen Modells ein dreidimensionales Fasernetzwerk zugänglich. Bei der Untersuchung von Praxisfällen ist jedoch eine Überprüfbarkeit der für die Modellierung des Fasernetzwerkes getroffenen Annahmen als schwierig einzuschätzen. Als Anwendungsgebiet ist daher eher die weitere Aufklärung der Fasernetzwerkstruktur z.B. im Rahmen von Forschungsprojekten zu sehen.

Demgegenüber umfasst das am CTP entwickelte StatMorf [17] eine Beschreibung des Faserstoffverhaltens ausschließlich anhand der mit einem optischen Fasermessgerät gemessenen fasermorphologischen Eigenschaften, welche in eine multivariate Datenanalyse einfließen und anhand von Kalibrierdatensätzen eine Zuordnung von zu erwartenden Papiereigenschaften ermöglichen sollen. Die Anwendbarkeit bleibt auf den durch die Kalibrierdatensätze vorgegebenen Bereich beschränkt und eine Übertragbarkeit der Modelle ist nicht gegeben.

Eine reine „Black Box“-Entwicklungsumgebung stellt IDEAS-Kodiak [18] zur Verfügung. Hierbei muss der Nutzer auf der Grundlage von Vorversuchen wesentliche Modellparameter experimentell ermitteln und in vorbereitete Strukturen einfügen. Die gewählte Vorgehensweise ist dabei pragmatisch und bleibt auf den spezifischen Anwendungsfall beschränkt.

Problem

Die aufgeführten Beispiele machen das schon angesprochene Problem deutlich: Während physikalisch determinierte Modelle Allgemeingültigkeit und hohe Modellgüte versprechen, jedoch erst nach unverhältnismäßig hohem Entwicklungsaufwand Praxisnähe erreichen, führen die auf der „Black box“ basierenden Modelle recht schnell zu einer Lösung, die jedoch außerhalb der definierten Datenumgebung zu fatalen Fehlschlüssen führen kann.

**Ansatz
Modellentwicklung
PTS**

Der an der PTS realisierte Ansatz basiert deshalb als „Grey-Box“ sowohl auf physikalisch determinierten Zusammenhängen als auch auf Elementen der „Black Box“, wobei der Gesamtprozess modular abgebildet wird. Der Vorteil dieser Vorgehensweise besteht darin, dass bei schneller Anwendbarkeit eine weitestgehende Übertragbarkeit und Allgemeingültigkeit der Modelle sichergestellt wird. Die eingeschränkte Verfügbarkeit an „White-Box“-Modellen und der enge Gültigkeitsbereich der „Black-Box“-Modelle werden damit ausgeglichen.

4.2 Modellvalidierung**Modellakzeptanz**

Die Akzeptanz der entwickelten Modelle in der Praxis hängt wesentlich von ihrer Vertrauenswürdigkeit und deren Nachweisbarkeit ab. Dieser Nachweis erfolgt üblicherweise im Rahmen einer Validierung und Kalibrierung. Mit Hilfe der Validierung wird gezeigt, dass die Modellbildung der vorgegebenen Problemstellung angepasst ist und der reale Prozess hinreichend genau nachgebildet wurde¹. Damit verbunden ist eine Prüfung der Modellergebnisse auf Plausibilität. Eine Kalibrierung wird durchgeführt, um mit dem Modell möglichst naturnahe Ergebnisse zu erzielen, womit i. d. R. eine Parameteridentifikation verbunden ist. Diese Vorgehensweise ist notwendig, da durch das Modell keine exakte Nachbildung aller natürlichen Vorgänge erfolgt.

**Abweichungen
Modell - Messung**

Abweichungen zwischen Modellergebnissen und Messwerten können prinzipiell die folgenden Ursachen haben:

- Messfehler bei der Datenerfassung
- Subjektive (falsche) Einschätzungen des Modellentwicklers
- Übersehene wichtige Variablen oder Relationen beim Modellentwurf
- Falsche Parameterwerte oder Variablenverknüpfungen
- Programmierfehler bei der Implementierung

Zur Identifikation bzw. Korrektur der verschiedenen Fehlerquellen sind unterschiedliche Schritte der Validierung vorzusehen. Geht man davon aus, dass die Modellbildung ausgehend vom Realsystem über ein konzeptuelles Modell bis hin zu einem Computermodell erfolgt [19], dann lassen sich unterschiedliche Stufen der Validierung finden (s. Abb. 3).

¹ Definition der Validierung nach DIN EN ISO 8402: Bestätigen aufgrund einer Untersuchung und durch Bereitstellung eines Nachweises, dass die besonderen Forderungen für einen speziellen beabsichtigten Gebrauch erfüllt worden sind.

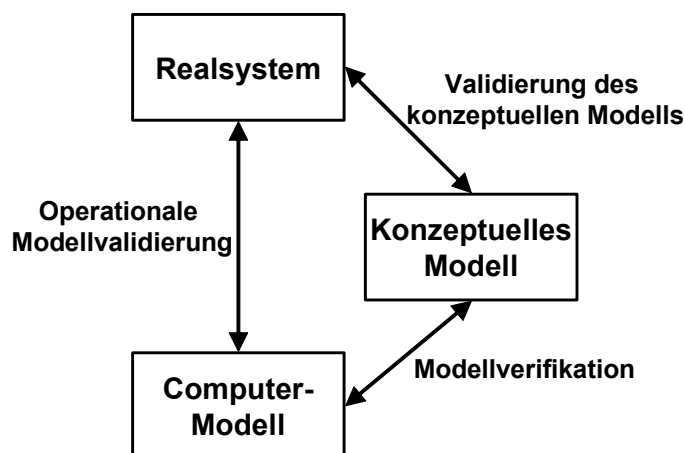
Validierungsstufen

Abb. 3: Validierungszyklus [19]

Schritte der Validierung

Eine Validierung des konzeptuellen Modells umfasst zunächst eine Plausibilitätsprüfung der vereinfachenden Modell-Annahmen und der verwendeten Hypothesen, welche mit bekannten Theorien des Anwendungsgebietes vereinbar sein müssen. Ebenso wird die Struktur, d.h. der innere Aufbau des Modells, einer Überprüfung unterzogen. Aus dem zugrunde liegende Datenbestand werden zwei Teilmengen gebildet, welche unabhängig voneinander für Modellentwurf und Validierung verwendet werden.

Der Schritt der Modellverifikation enthält den Test, ob das erstellte Programm das konzeptuelle Rechenmodell korrekt wiedergibt, wozu in ausgewählten Fällen ein Nachkalkulieren der Ergebnisse erfolgt.

Im Rahmen der operationalen Modellvalidierung wird schließlich die Verhaltensgültigkeit des Modells, d.h. die Ähnlichkeit der Abläufe in Realsystem und Modell, überprüft. Neben einer erneuten Plausibilitätsprüfung sind insbesondere die Sensitivitätsanalyse, der Outputvergleich und die Kalibrierung wesentlich.

Sensitivitätsanalyse / Outputvergleich

Im Rahmen der Sensitivitätsanalyse wird herausgefunden, welche Eingangsgrößen den stärksten Einfluss auf das Modellergebnis haben. Dadurch können mögliche Strukturfehler erkannt und kritische Größen ausgemacht werden, die für die Simulation möglichst genau vorzugeben sind.

Von großer Bedeutung sind weiterhin der Outputvergleich, d.h. der Vergleich von Simulationsergebnissen mit den Werten des Realsystems, und die Kalibrierung, welche eine Anpassung des Modells an das Realsystem durch Veränderung von Parametern, die am Realsystem nur ungenau oder überhaupt nicht zugänglich sind, umfasst. Zur Sicherstellung der Glaubwürdigkeit der Modelle sollte die Kalibrierung auf wenige Parameter beschränkt sein und die Ergebnisse der Kalibrierungsläufe genauestens offen gelegt werden.

4.3 Prognose-Algorithmen der PTS

Prognose-Algorithmen der PTS

Seit 2000 werden an der PTS mathematische Modelle für Stoffsuspensions- und Papiereigenschaften in Abhängigkeit von Rohstoff- und Prozessparametern entwickelt [6].

Der modulare Aufbau der entwickelten Modelle soll es zukünftig ermöglichen, die Einflüsse auf die Papiereigenschaften entlang der Prozesskette vom Faserstoffeinsatz, über seine Aufbereitung bis hin zur Ausprägung der Papiereigenschaften auf der Papiermaschine zu verfolgen. Alle Modelle sollen weitestgehend auf Grey-Box-Ansätzen aufbauen. Ein solcher Zugang eröffnet die Möglichkeit, rechnergestützt

- kostengünstige Faserstoffrezepturen zu ermitteln,
- optimale Prozessparameter zu bestimmen und
- die Machbarkeit von Papierprodukten mit einem definierten Eigenschaftsspektrum zu beurteilen.

Vorhandene Modelle

Bislang wurden an der PTS Prognose-Algorithmen in den Modulen „Mahlung“, „Fraktionierung“, „Mischung“ sowie „Festigkeit“ und „Optik“ (Abb. 4) entwickelt. Diese Methodenbibliothek wird gegenwärtig durch Integration weiterer Module (wie z.B. „Füllstoff“ sowie „Gemischt- und Getrenntmahlung“) weiter ausgebaut.

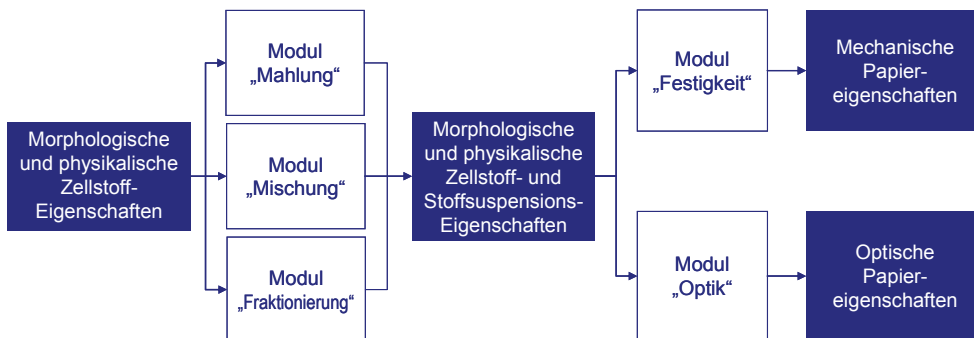


Abb. 4: Zusammenwirken der bislang realisierten Prognose-Module

Modellvalidierung im Technikum und in Realprozessen

Die Validierung der Modelle soll in zwei Stufen erfolgen: Stufe 1 im Technikum der PTS und Stufe 2 in der industriellen Praxis. Die Validierung 1 umfasst dabei im Wesentlichen die Validierung des konzeptuellen Modells und die Modellverifikation (s. Abb. 3). Dieser Schritt ist integraler Bestandteil der Modellentwicklung und für die bereits bestehenden Module innerhalb der bislang durchgeführten Forschungsprojekte abgeschlossen (s. [1, 4, 5]).

Die Parameter der Modelle für einzelne Prozessschritte entsprechen zunächst den Parametern, die mit der verfügbaren PTS-Versuchstechnik variiert werden können. Die Modelle reproduzieren im Wesentlichen die Ergebnisse der kleintechnischen Versuchsverfahren und der Laboranalytik der PTS.

Die Validierstufe 2 dient der Überprüfung der Anwendbarkeit und Kalibrierung der entwickelten Modelle in Papierfabriken (Realprozessen) und entspricht damit im Wesentlichen der operationalen Modellvalidierung (s. Abb. 3).

Modellkalibrierung

Zur Anwendung der Modellergebnisse auf den Realprozess muss zunächst geprüft werden, inwieweit eine Anpassung der Modelle im Rahmen einer Kalibrierung notwendig ist (vgl. stark vereinfachte Darstellung in Abb. 5). Mit der (in der Regel notwendigen) Kalibrierung soll erreicht werden, dass die Modelle den Ist-Zustand in der Papierfabrik hinreichend genau abbilden.

Eine Kalibrierung der Modelle würde in idealer Weise auf Basis einer Reihe von in der Papierfabrik erfassten Einzelwerten und dem mittels geeigneter Parametrierung erzielten Abgleich der Modelle auf diese den Ist-Zustand abbildenden Messwerte erfolgen.

In der Datenaufnahme vor Ort können aufgrund der laufenden Produktion in der Regel nur wenige Ist-Werte aufgenommen werden. Die Kalibrierung der Modelle erfolgt anhand der verfügbaren Stützpunkte für jede Papierfabrik.

Abbildung zur Modellkalibrierung

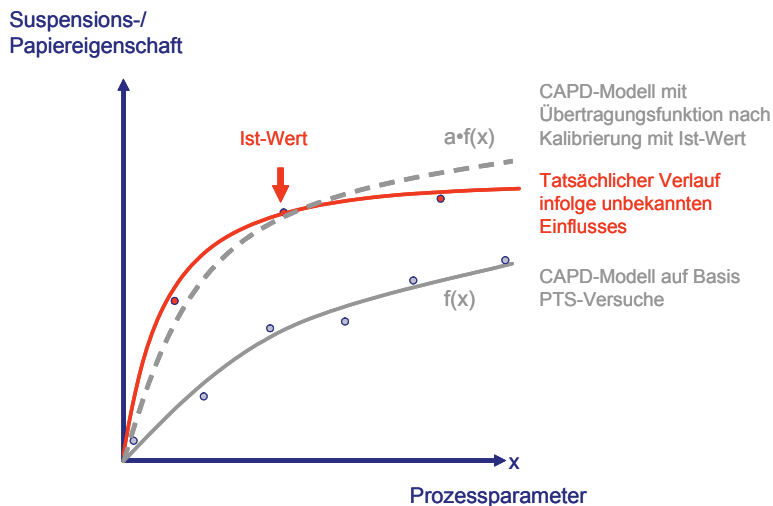


Abb. 5: Prinzip der Kalibrierung

Fazit

Alle zu Projektbeginn vorliegenden Prognose-Modelle wurden auf Basis von Versuchen im Technikum der PTS entwickelt und hinsichtlich der dort vorliegenden Bedingungen validiert.

Da sich die Versuchsbedingungen im Technikum und in der Papierfabrik zum Teil erheblich unterscheiden, besteht ein dringender Bedarf, die Prognoseergebnisse der Modelle unter Berücksichtigung der komplexen Einflüsse des Realprozesses in der Papierfabrik zu überprüfen.

Dies beinhaltet

- den Nachweis, dass die für die Papierfabrik relevanten Papiereigenschaften in ihrer Abhängigkeit von den Prozessparametern durch die Modelle plausibel nachgebildet werden und
- den Nachweis, dass dieselben Modelle für Papierfabriken mit unterschiedlichen Produktspezifikationen anwendbar sind.

5 Durchführung der Untersuchungen

Konzeptentwicklung und Planung Im ersten Schritt erfolgten die Konzeption und Planung zur Entwicklung einer allgemeingültigen Vorgehensweise zur Validierung von Prognose-Modellen in Realprozessen. Die praktischen Untersuchungen werden dazu exemplarisch für die bereits fertig gestellten Modelle der Faserstoffmahlung, Mischung und Blattbildung durchgeführt:

- Identifikation und Auswahl geeigneter Papierfabriken
- Erfassen eines breiten Spektrums unterschiedlich stark gemahlener Zellstoffe im Bereich 17 bis 60 SR, wobei Papierfabriken mit den entsprechenden unterschiedlichen Produkten berücksichtigt werden.
- Planung der Vorgehensweise zur Erfassung der relevanten Stoff- und Prozessparameter

Im Ergebnis der durchgeführten Konzeption wurde ein Untersuchungsplan für die Vor-Ort-Untersuchungen und anschließenden Messungen bereitgestellt. Diese Vorgehensweise wurde bei acht Anwendungsfällen in Papierfabriken eingesetzt.

**Aufnahme
Prozessdaten
und Probenahme**

Der nächste Schritt umfasste die Aufnahme der Rohstoff- und Prozessparameter und die Entnahme von Stoffproben in Papierfabriken für 8 Anwendungsfälle gemäß dem erstellten Versuchsplan. Bei den Untersuchungen in den Papierfabriken wurden insbesondere auch Angaben zu den folgenden Punkten erfasst:

- Faserstoffeigenschaften (Spezie und Herkunft, Aufschluss- und Bleichverfahren etc.)
- Parameter der Mahlmaschine wie z.B. Bauart, Garnitur und Maschinenleistung
- Prozessparameter wie Mahlenergie und Durchsatz

Anhand der aufgenommenen Kennwerte werden dann weitere Größen berechnet, wie z.B. die spezifische Mahlenergie und die spezifische Kantenlast.

Charakterisierung Faserstoffe

Die in den Papierfabriken entnommenen Stoffproben wurden bezüglich folgender Parameter charakterisiert:

- Fasermorphologie (Verteilung von Faserlänge, -durchmesser und -wandstärke, Curl, Coarseness)
- Suspensionseigenschaften (Stoffdichte, Entwässerungswiderstand)

**Laborblattbildung
und Prüfung**

Ausgehend von den bereitgestellten Stoffsuspensionen wurden Laborblätter (DIN 54358-1) hergestellt und bezüglich folgender Größen geprüft:

- strukturelle Eigenschaften wie Dicke, Blattdichte und Luftdurchlässigkeit
 - mechanische Eigenschaften wie Tensile-Index, Tear-Index, Berst-Index
 - optische Eigenschaften wie spektrale Lichtstreu- und Lichtabsorptionskoeffizienten sowie abgeleitete Größen wie Opazität und Weißgrad
-

Erstellung Strukturmodelle

Mit Hilfe der verfügbaren Prognose-Module wurde die Struktur der Realprozesse, d.h. die Kombination und Schaltung der einzelnen Prozessschritte, nachgebildet. Dazu wurden die folgenden Schritte ausgeführt:

- Kombination der Module „Mahlung“, „Blattbildung Optik“ und „Blattbildung Festigkeit“ sowie gegebenenfalls „Mischung“ und „Fraktionierung“
- Definition der Schnittstellen für Ein- und Ausgangsparameter
- Bereitstellung der Daten in dem von den Prognose-Modellen benötigten Format
- Einrichtung des Strukturmodells für die unterschiedlichen Anwendungsfälle (Implementierung der spezifischen Bedingungen, wie z.B. der Faserstoffgruppe des verwendeten Rohstoffes)

Vorgehen

Um den Vergleich Modellergebnis – Messwert nicht nur an Einzelwerten vornehmen zu können, wurde die Praxismahlung nach Möglichkeit als Mahlreihe nachgebildet (Entwicklung der Eigenschaften in Abhängigkeit von der spezifischen Mahlenergie). Dazu wurden in Reihe geschaltete Refiner (Mahlstufen) als Ergebnis eines Modell-Refiners wiedergegeben.

Bei Fasermischungen wurde der Mahlprozess im Modell als Getrennt-Mahlung beschrieben. Die gemahlene Faserstoffkomponenten werden im Anschluss gemischt (Beispiel: Mix aus drei Faserstoffen, s. Abb. 6).

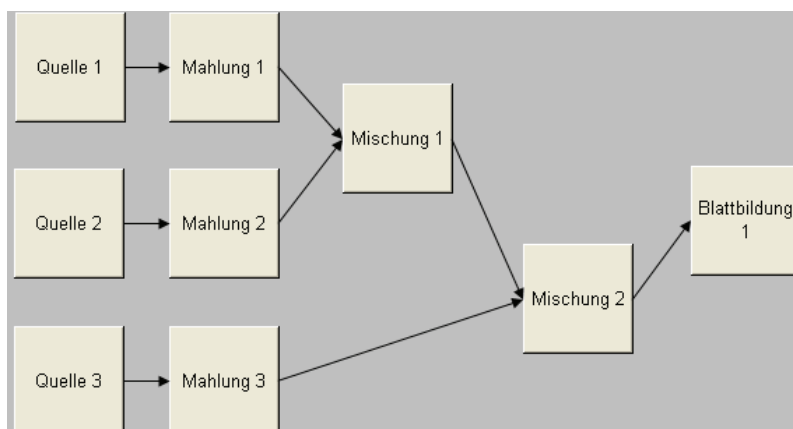


Abb. 6: Modellstruktur der Mahlung bei einer Mischung aus drei Faserstoffen

Vergleich Messwerte vs. Modellrechnung

Im nächsten Schritt wurden mit Hilfe der Strukturmodelle Modellrechnungen durchgeführt. Das Ergebnis dieser Rechnungen wurde dann den gemessenen Werten gegenübergestellt. Zur Beurteilung der Modellgüte erfolgte die Abarbeitung der folgenden Schritte:

- Vergleich für die verschiedenen Ergebnisparameter
- Visualisierung bzw. graphische Darstellung der Abweichungen
- Fehlerdiskussion (Genauigkeit bei der Bestimmung der Stoff- und Prozessparameter)
- Sensitivitätsanalyse (Auswirkung ungenau bekannter bzw. fehlerbehafteter Daten auf das Ergebnis der Modellrechnungen)

Modellanpassung Auf Basis der vorangegangenen Schritte wurde für jeden der untersuchten Anwendungsfälle ein angepasstes, kalibriertes Modell zur Verfügung gestellt. Dies umfasst die folgenden Punkte:

- Entscheidung, ob Modell ausreichend genau
- Maßnahmen, wenn Modell ohne Anpassung zu ungenau:
 - Diskussion der Ursachen für die Abweichungen (nicht berücksichtigte Parameter, Rohstoffschwankungen, Prozessbedingungen, die sich einer messtechnischen Erfassung entziehen)
 - Ableitung von Kalibrierfaktoren
- Auswertung und Diskussion für die einzelnen Anwendungsfälle
- Modellgenauigkeit nach Kalibrierung, Fehlerdiskussion

Validier- und Kalibriermethodik Abschließend erfolgte anhand der Ergebnisse der vorangegangenen Arbeitspakete die Ableitung einer universellen Methodik für die Validierung und Kalibrierung für Prognose-Modelle. Diese Methodik enthält insbesondere eine standardisierte, vom konkreten Modell unabhängige Vorgehensweise zu den Punkten:

- Erfassung aller notwendigen Stoff- und Prozessparameter und deren Schwankungen vor Ort sowie Abschätzung des hierfür benötigten Aufwandes
 - Generierung eines Prozessmodells auf Basis der verfügbaren Prognose-Module und Definition der Schnittstellen (Strukturmodell der Papierfabrik)
 - Beurteilung der Modellgüte (einschl. einer Sensitivitätsanalyse)
 - Kalibrierung des Prozessmodells anhand von Differenzen zwischen Modellprognosen und Ist-Werten
-

6 Ergebnisse

Gliederung Ergebnisse

In diesem Abschnitt werden die in den beschriebenen Arbeitspaketen gewonnenen Ergebnissen entsprechend den angestrebten Projektzielen zusammenhängend vorgestellt. Dabei werden die folgenden Punkte behandelt:

- Stoff- und Prozessdaten aus den Praxisuntersuchungen
- Beschreibung der durchgeführten Modellrechnungen einschließlich der verwendeten Modellansätze für die Berechnung der Suspensions- und Papiereigenschaften
- Vergleich der Rechenergebnisse mit den Messwerten aus den Praxisproben
- Bewertung der Abweichungen / Modellgüte / Sensibilitätsanalyse
- Verringerung der Abweichungen zwischen Modellergebnis und Messwerten
- Generelle Vorgehensweise für die Modellvalidierung

6.1 Stoff- und Prozessdaten / Anwendungsfälle

Erfassung Stoff- und Prozessdaten

Als erster Schritt zur Validierung der Prognose-Modelle wurden für die acht Anwendungsfälle alle notwendigen Stoff- und Prozessparameter vor Ort erfasst.

Dazu erfolgte vor und nach jeder Refiner-Stufe eine Probenahme für die Bestimmung der Faserstoffcharakteristik und für die Blattbildung. Parallel dazu wurden die Rohstoff- und Prozessbedingungen zum Zeitpunkt der Probenahme erfasst. Mit der Auswahl der Anwendungsfälle (s. Tab. 1) konnte ein breites Spektrum verschiedener Rohstoffeinsätze bzw. in unterschiedlicher Weise und Intensität gemahlener Faserstoffe erfasst werden.

Anwendungsfälle

Tab. 1: Übersicht über die untersuchten Anwendungsfälle

Papierfabrik	Faserstoff	Produkt	SR-Wert nach Mahlung
A	Langfaser-Zellstoff	Tissue	36 - 39
B	Mischung aus Lang- und Kurzfaser-Zellstoff	Werkdruck	24 - 28
C	Mischung aus Lang- und Kurzfaser-Zellstoff	Hochporöse Spezialpapiere	17 - 19
D	Kurzfasierzellstoff	Spezialpapiere	35 - 38
E	Altpapier-Mix	WPR Weiße Decklage	60 - 65
F	Mischung aus Langfaser-Zellstoffen und BCTMP	Spezialpapiere	60 - 65
G	Mischung aus Lang- und Kurzfaser-Zellstoff	Plakatpapier	ca. 25
H	Linters-Zellstoff	Spezialpapiere	ca. 35

6.2 Beschreibung der Grundannahmen zu den durchgeführten Modellrechnungen

Vorgehensweise Die zur Berechnung der Suspensions- und Papiereigenschaften verwendeten Modelle lassen sich drei Berechnungsschritten zuordnen:

- Veränderung von Faser- und Suspensionseigenschaften durch Prozesse der Stoffaufbereitung (im Rahmen dieses Projektes Untersuchung der Mahlung)
- Mischung von Faserstoffen
- Blattbildung aus den Faserstoffsuspensionen (Laborblattbildung Rapid-Köthen) mit den resultierenden Blatteigenschaften

Stoffaufbereitung (Mahlung) Durch Prozesse der Stoffaufbereitung werden die Faser- und Suspensionseigenschaften modifiziert. Als Ergebnis liegt eine Faserstoffsuspension mit veränderten Eigenschaften vor.

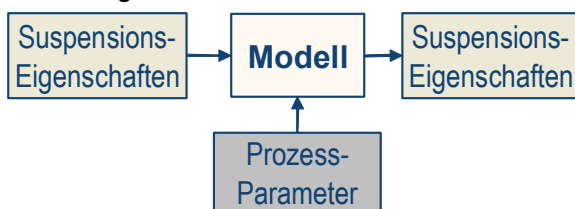


Abb. 7: Modellstruktur Stoffaufbereitung / Mahlung

Mischung Die Mischung der Eigenschaften von zwei oder mehr Komponenten liefert als Ergebnis die Faser- und Suspensionseigenschaften der Mischung.

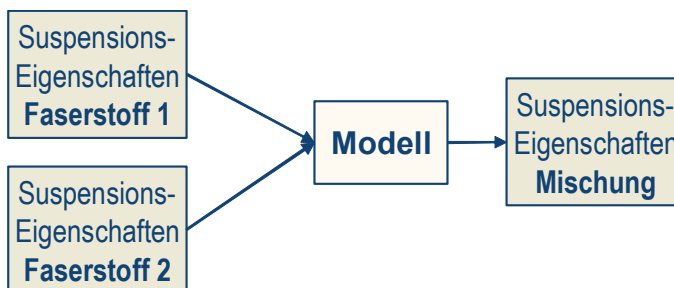


Abb. 8: Modellstruktur Mischung

Blattbildung/ Papiereigenschaften

Ausgehend von den Eigenschaften der Faserstoffsuspension werden die Kennwerte eines vereinfachten Fasernetzwerkes berechnet und in einem weiteren Schritt die Prognose der Papiereigenschaften vorgenommen. Wegen der standardisierten Prozedur zur Blattbildung (Laborblatt RK) treten hier keine Prozessparameter auf.



Abb. 9: Modellstruktur Blattbildung / Papiereigenschaften

**Genutzte
Berechnungs-
algorithmen**

Die Berechnungen folgen überwiegend den in [1] und [3] publizierten Algorithmen. Erweiterungen der Modelle betreffen insbesondere:

- Den Ersatz des Entwässerungswiderstandes SR durch die spezifische Oberfläche SSA und Übergang zu einem linearen Ansatz der Abhängigkeit zwischen SSA und Mahlenergie (RITTINGER's Gesetz) und
 - die Integration von Kalibrierparametern zur Berücksichtigung spezifischer Effekte industrieller Mahlanlagen
-

6.3 Vergleich der Messwerte mit den Modellergebnissen

Vorgehen

Auf Basis der Prozessstruktur und der beschriebenen Berechnungsalgorithmen wurde für jeden Anwendungsfall ein Strukturmodell erstellt, indem die Prozessabläufe der Papierfabrik durch eine Kombination der entsprechenden Prognose-Module nachgebildet werden.

Die angewandten Prognosemodelle basieren auf systematischen Mahlversuchen an Faserstoffen, die denen in den Realprozessen vergleichbar waren. Mit Hilfe dieser Modelle werden für einen breiten Bereich die Änderungen der Faser- und Suspensionseigenschaften in Abhängigkeit der Mahlparameter beschrieben.

**Diagramm-
darstellungen**

Im Folgenden werden die Ergebnisse der Modellrechnungen den Messwerten für die Proben aus den Papierfabriken jeweils analog zu einer Mahlreihe in Abhängigkeit von der spezifischen Mahlenergie (SRE) gegenübergestellt. Diese Darstellungsweise bietet den Vorteil, dass neben der Beurteilung der Prognosegüte für Einzelwerte auch der Trend des Verlaufes der Mahlung bewertet werden kann. Dazu wurden jeweils die Mahlungszustände der verschiedenen Mahlungsstufen aufgetragen, bzw. die Ergebnisse von gezielten Versuchen mit Variation des spezifischen Energieeintrages dargestellt.

Folgende Kenngrößen sind dabei in Diagrammen aufgetragen und werden diskutiert:

- Suspensionseigenschaften: SR-Wert
 - Strukturelle Eigenschaften: Rohdichte, Luftdurchlässigkeit
 - Festigkeitseigenschaften: Tensile-Index, Tear-Index, Berst-Index
 - Optische Eigenschaften: Weißgrad
-

**Bewertung
Suspensions-
eigenschaften
SR-Wert**

Abb. 10 zeigt die Daten der Modellrechnungen und der Messwerte für den SR-Wert als maßgebliche Suspensionseigenschaft der Fasersuspensionen.

Prinzipiell ist die beobachtete Zunahme des Entwässerungswiderstandes bei allen Modellen wieder zu finden. In fast allen Fällen gibt es Mahlungszustände, bei denen Probenwerte und Modellergebnis deckungsgleich sind.

Auffallend ist die große Streuung der Messwerte in den Papierfabriken A und B mit Abweichungen von bis zu > 10 Einheiten SR.

Als Ursache für die Abweichungen werden schwankende Prozessbedingungen in der Papierfabrik vermutet, die stark abweichende Suspensionseigenschaften zur Folge hatten.

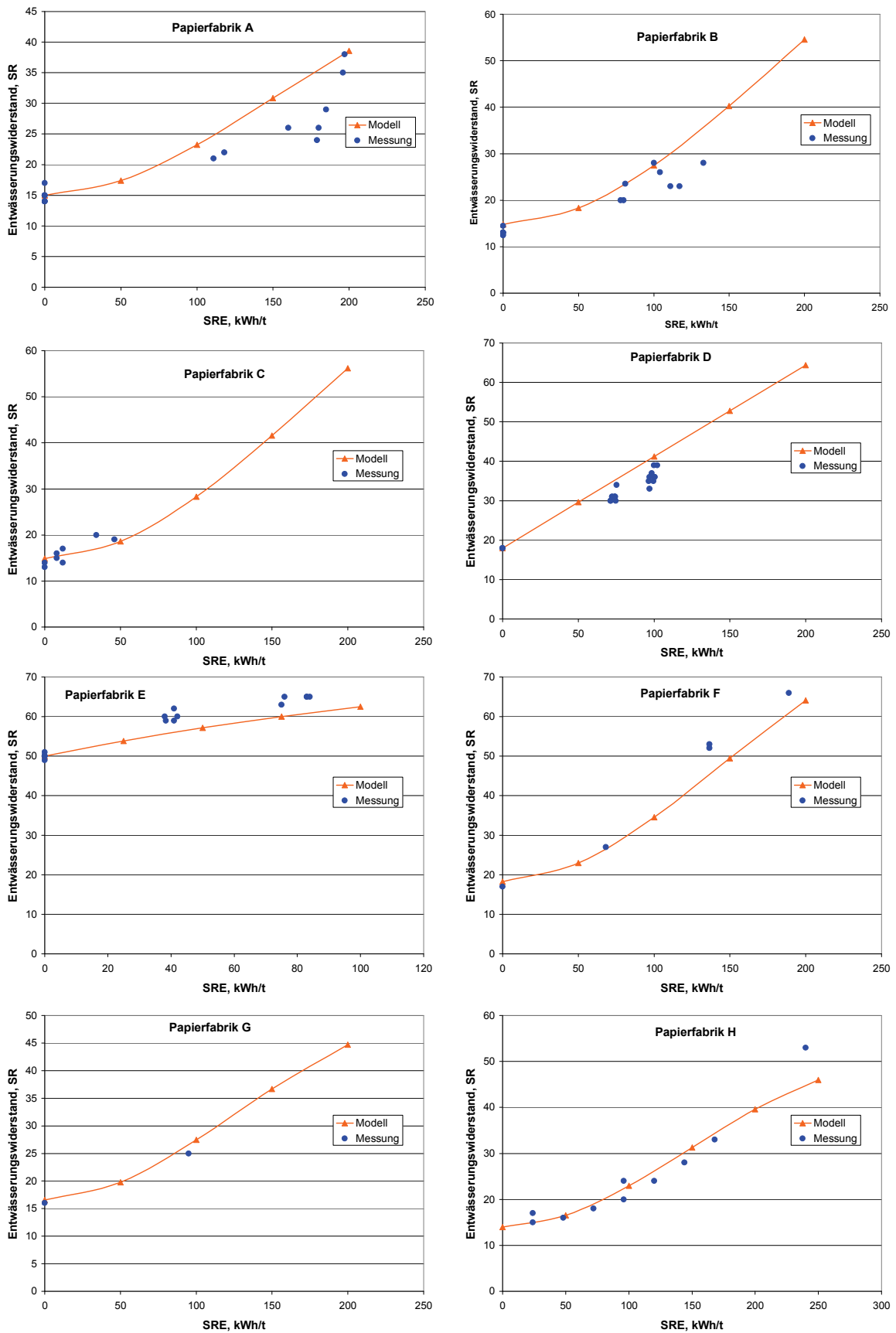


Abb. 10: Suspensionseigenschaften, Entwässerungswiderstand SR

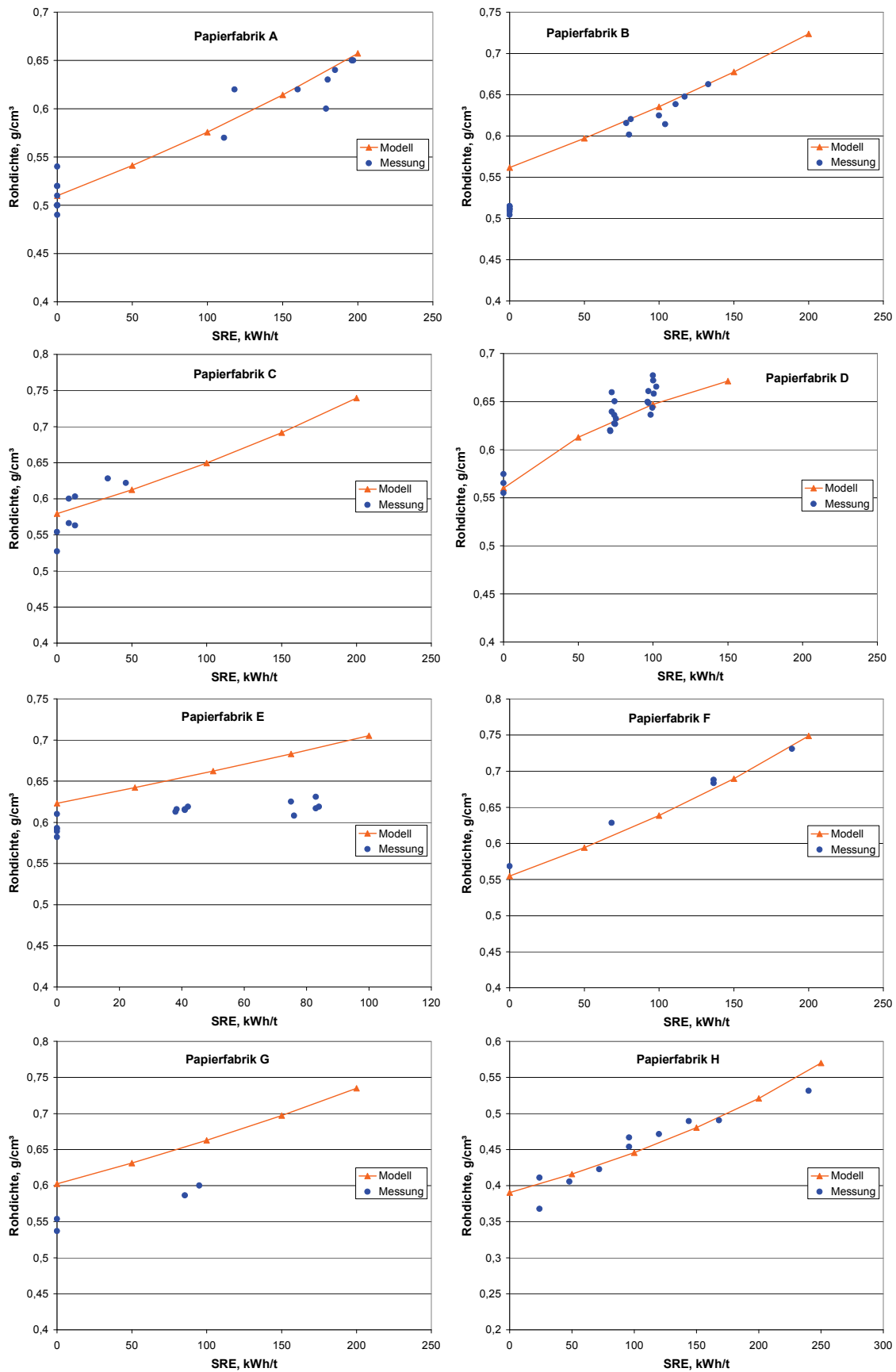


Abb. 11: Strukturelle Eigenschaften, Rohdichte

Bewertung Struktureigenschaften Rohdichte

In Abb. 11 sind die ermittelten Messwerte mit Ergebnissen der Modellrechnungen für die Rohdichte verglichen worden. Der Verlauf der Rohdichte in Abhängigkeit von der Mahlergie wird von den Modellergebnissen sehr gut wiedergegeben. Lediglich bei den Papierfabriken E und G tritt auch eine systematische Abweichung auf, (die neben der wie schon beim Entwässerungswiderstand beobachteten Streuung der Messwerte größere Abweichungen verursachen).

Bewertung Struktureigenschaften Luftdurchlässigkeit

Abb. 12 zeigt in analoger Weise die Ergebnisse für die Luftdurchlässigkeit (Gurley). Die Modellergebnisse beschreiben in beiden Fällen gut den praktisch beobachteten Verlauf einer moderaten Abnahme der Luftdurchlässigkeit (Zunahme der Werte für $s/100m^3$) infolge der größeren Blattdichte bei zunehmender Mahlergie. Das Modellergebnis liefert jedoch in beiden Fällen deutlich größere Absolutwerte.

Ursachen für diese Abweichungen liegen vermutlich in den noch nicht genügend berücksichtigten Feinstoffanteilen. Weiterführende Untersuchungen zur Verbesserung der Modelle werden im Projekt IW072042 bearbeitet. Hinzu kommt der exponentielle Einfluss des SR-Wertes in die Berechnung der Luftdurchlässigkeit, womit bereits minimale Schwankungen dieser Eingangsgröße signifikante Änderungen der Zielgröße bewirken.

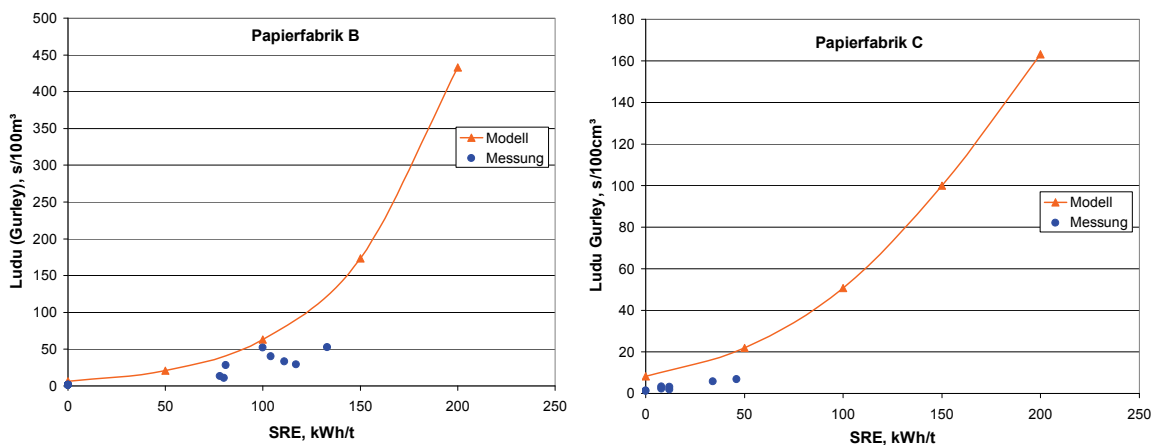


Abb. 12: Strukturelle Eigenschaften, Luftdurchlässigkeit

Bewertung Festigkeitseigenschaften Tensile-Index

Der Vergleich von Messergebnissen und Modellrechnung für den Tensile-Index ist in Abb. 13 aufgetragen. Qualitativ zeigen beide Werte bei allen Fällen einen ähnlichen Verlauf. Bei den Papierfabriken B und C stimmen auch die Absolutwerte sehr gut überein. In den anderen Fällen treten systematische Abweichungen auf, wobei bis auf D der Tensile-Index durch das Modell jeweils zu hoch prognostiziert wird. Bei der Papierfabrik D treten wie schon bei den zuvor diskutierten Eigenschaften große Schwankungen der Einzelwerte auf, wodurch eine genaue Modellprognose erschwert wird.

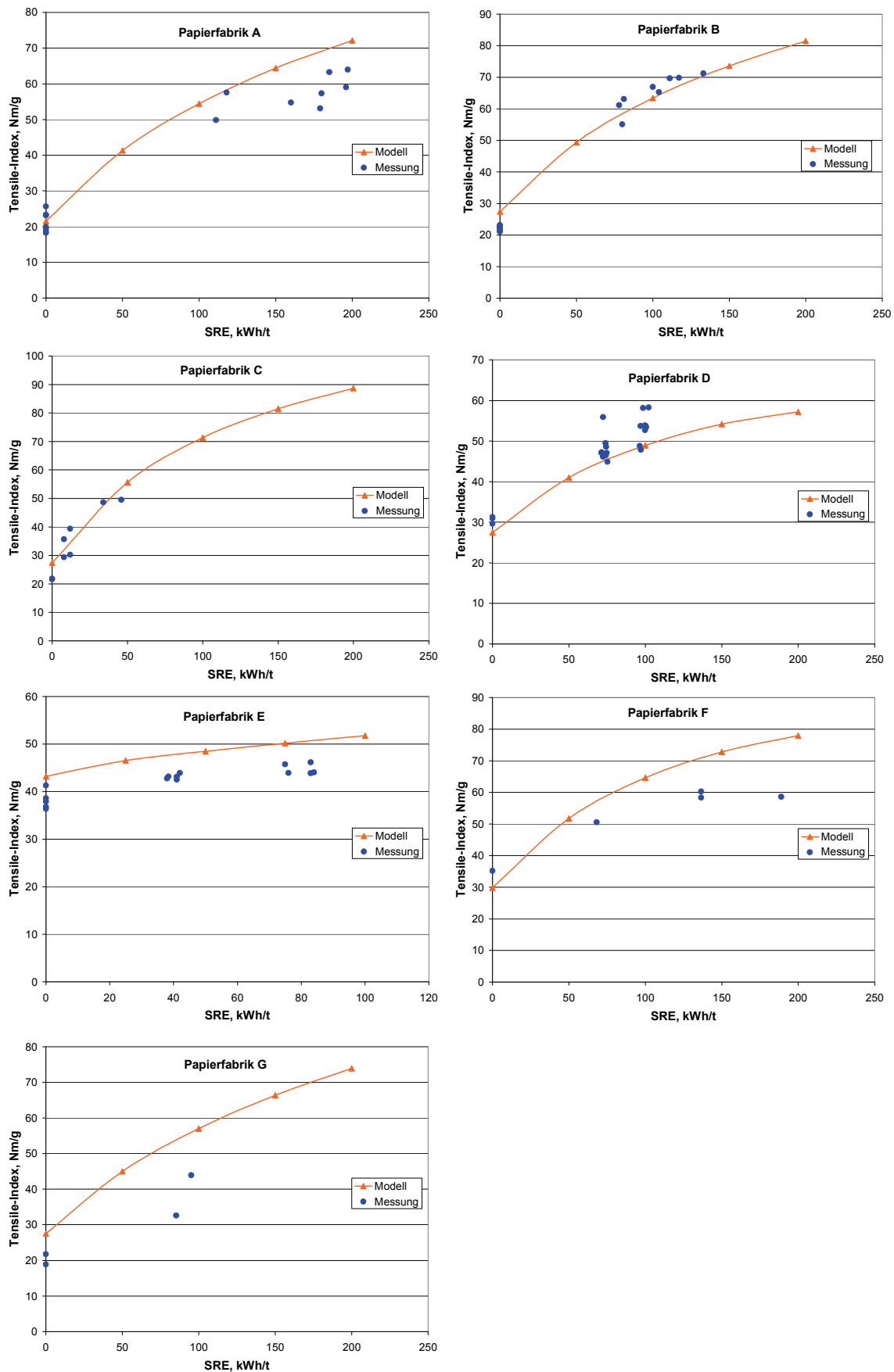


Abb. 13: Festigkeitseigenschaften, Tensile-Index

**Bewertung
Festigkeitseigen-
schaften
Tear-Index**

Die Ergebnisse für den Tear-Index sind in Abb. 14 enthalten. Die starke Streuung der Messwerte erschwert eine Überprüfung der Trendgenauigkeit der Modelle. Für Papierfabrik F wird die erwartete Abnahme des Tear-Indexes mit zunehmender Mahlenergie bestätigt. Für Anwendungsfall D wird der beobachtete Verlauf bei Mahlenergien von ca. 75 bis ca. 100 kWh/t nicht durch das Modell wiedergegeben. Hier treten jedoch wiederum stark streuende Einzelwerte auf, was den Bedarf an reproduzierbaren Messergebnissen hoher Genauigkeit verdeutlicht.

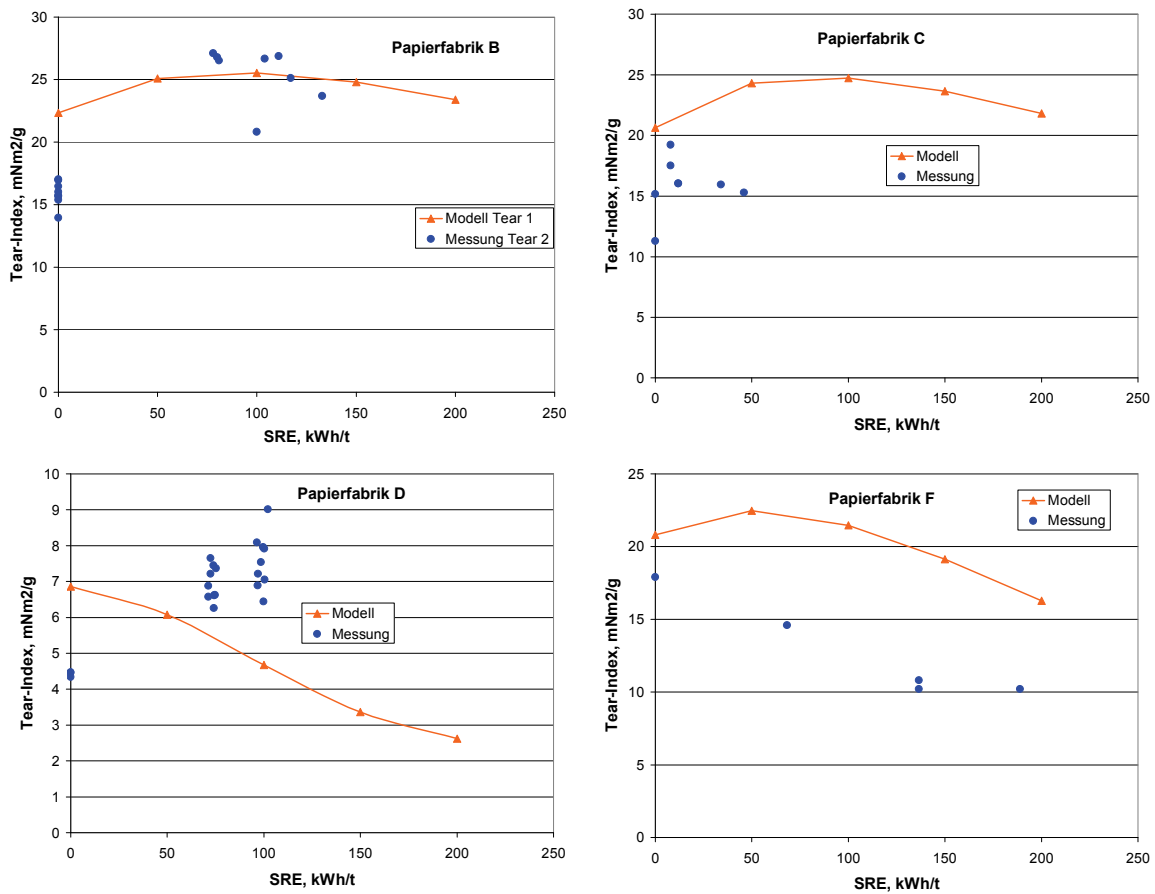


Abb. 14: Festigkeitseigenschaften, Tear-Index

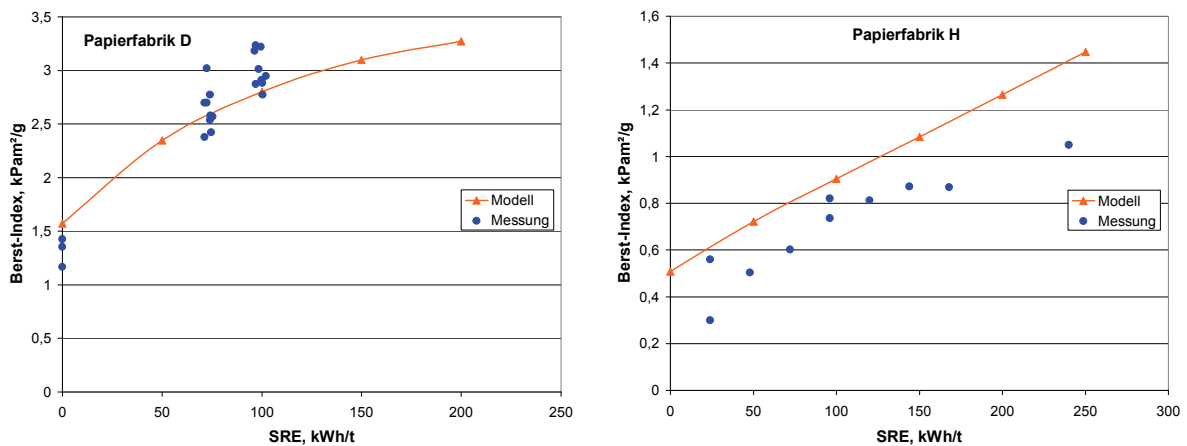


Abb. 15: Festigkeitseigenschaften, Berst-Index

Bewertung Festigkeitseigenschaften Berst-Index

In Abb. 15 ist der Vergleich zwischen Modell und Messwert für den Berst-Index dargestellt. In beiden Fällen wird der gemessene Trend gut vom Modell wiedergegeben. Bei H zeigt sich eine deutliche systematische Abweichung, welche später ggf. im Rahmen einer geeigneten Anpassung vermindern lässt.

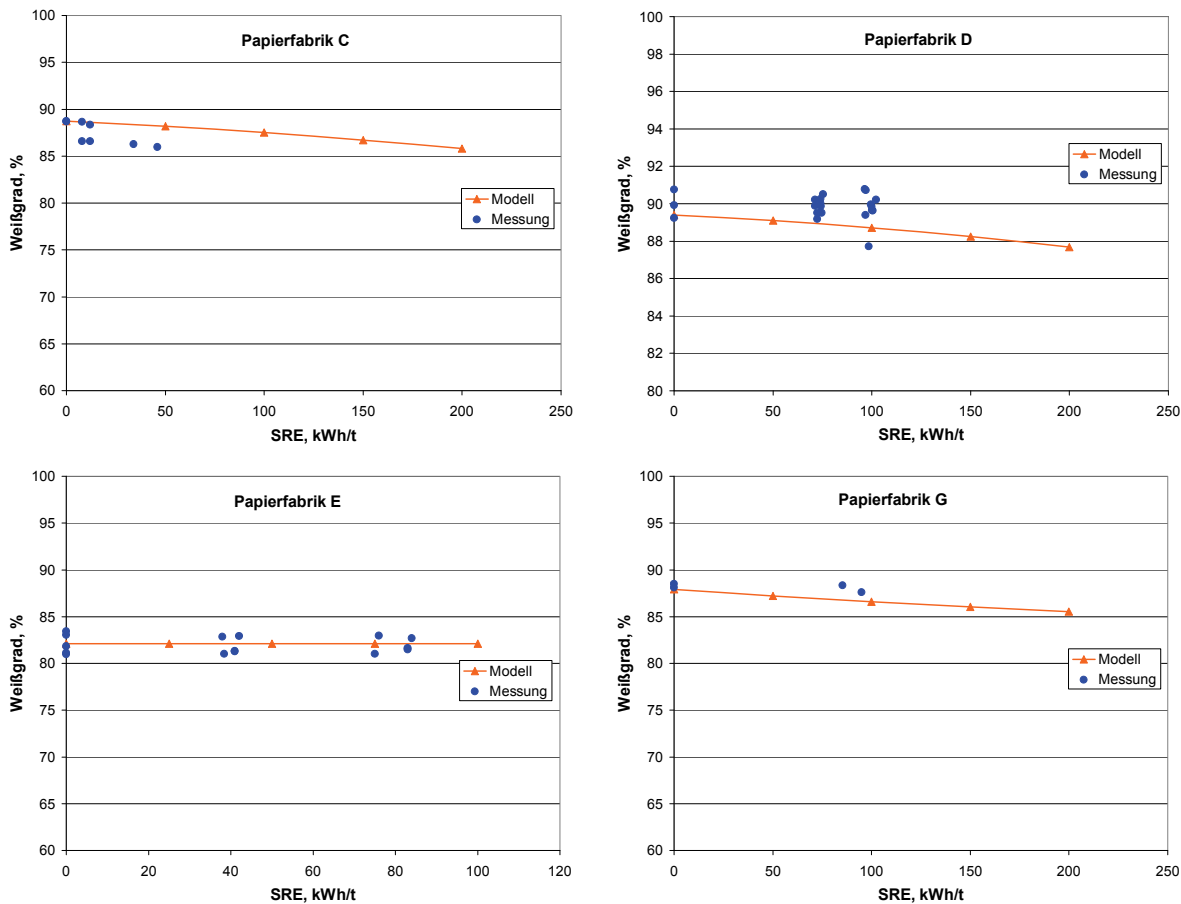


Abb. 16: Optische Eigenschaften, Weißgrad

Bewertung Optische Eigenschaften Weißgrad

Für den Weißgrad ist die Gegenüberstellung von Modellergebnis und Messwerten in Abb. 16 dargestellt. Anhand der Fälle C, D, G ist das leichte Absinken der Werte mit zunehmender Mahlenergie nachvollziehbar. Die Prognosegenauigkeit liegt im Rahmen der Streuung der Einzelwerte.

Vergleich von Messwerten und Modellrechnung

Der Vergleich der ermittelten Messwerte mit Ergebnissen der Modellrechnungen ermöglicht die Beurteilung der Modellgüte. Dabei zeigt sich, dass die Ergebnisse der Industriemahlung für viele Fälle bereits ohne eine zusätzliche Kalibrierung gut mit den Berechnungsmodellen beschrieben werden können. Dies bestätigt die prinzipielle Eignung der Modellansätze. Für weitere Fälle, bei denen die Genauigkeit ohne zusätzliche Kalibrierung nicht ausreicht, wurde eine Vorgehensweise zur Modellanpassung erarbeitet, welche im nächsten Kapitel vorgestellt wird.

**Gründe für -
Abweichungen**

Die Gründe für die auftretenden Abweichungen zwischen Modellergebnis und Messwerten sind darin zu sehen, dass neben ggf. Abweichungen in den verwendeten Mahlparametern weitere unbekannte oder nur ungenau bekannte Einflussgrößen auftreten, die nicht realitätsnah im Rahmen der kleintechnischen Versuche im PTS-Technikum abgebildet werden können. Bei solchen Einflussgrößen handelt es sich z.B. um zusätzliche maschinentechnische Parameter aus dem Betrieb, Abnutzungserscheinungen an den Mahlwerkzeugen, Änderungen in der praktischen Anlagenfahrweise oder zeitliche Schwankungen der Stoffdichte (vgl. [20]) und der Rohstoffqualität. Weiterhin unterliegt die Messgenauigkeit der erfassten Messwerte Schwankungen.

**6.4 Bewertung der Prognosegenauigkeit der Modellrechnungen sowie Ableitung von
Kalibrierungsfaktoren****Prognosefehler**

Die Anwendbarkeit der Modelle hängt maßgeblich von der Größe des Prognosefehlers (Abweichung des tatsächlichen Wertes vom Modellergebnis) ab, aber auch davon, welcher Art die auftretenden Abweichungen sind (systematische Abweichungen oder z.B. Messwertschwankungen) und ob ggf. durch eine geeignete Kalibrierung eine Verbesserung der Modellgüte erzielt werden kann.

Daher wurden für die untersuchten Anwendungsfälle jeweils die maximalen Abweichungen zwischen Modell und Messwert bestimmt und als positive bzw. negative Differenz zum Modellergebnis aufgetragen (s. Abb. 17)

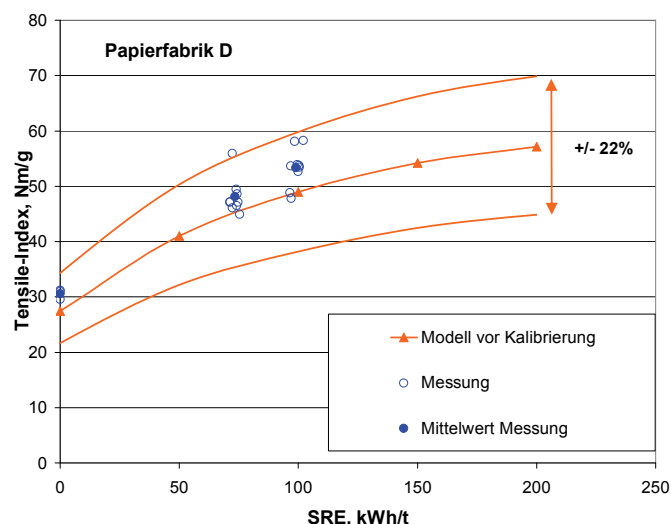
**Abweichung
Modell - Messung**

Abb. 17: Veranschaulichung der Bestimmung der maximalen Abweichungen zwischen Modellrechnung und Messwerten.

Kalibrierung

In einem nächsten Schritt wurde untersucht, inwieweit sich die Abweichungen durch eine Kalibrierung verringern lassen. Die Kalibrierfunktion soll dabei möglichst einfach sein, damit die benötigten Kalibrierfaktoren sicher anhand der Analyse des Ist-Zustandes in einer Papierfabrik bestimmt werden können.

Abb. 18 zeigt die Abweichungen für das Beispiel aus Abb. 17 nach Kalibrierung, wobei für den Kalibrierungsfaktor ein Wert von $a_{kal} = 1,1$ verwendet wurde:

$$E_{Kalibriert} = a_{kal} \cdot E \tag{1}$$

Die verbliebenen Abweichungen resultieren aus Messwertschwankungen. Würde man die Mittelwerte der Messungen heranziehen, dann könnten die Abweichungen auf ca. 2% reduziert werden.

Abweichung nach Kalibrierung

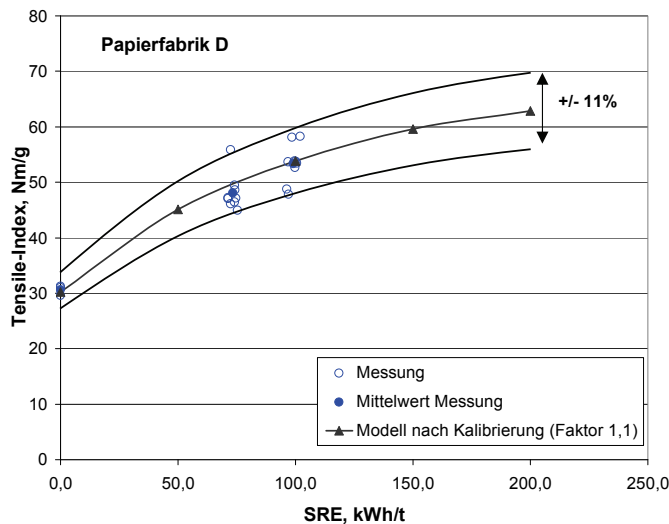


Abb. 18: Verringerte maximale Abweichungen zwischen Modellrechnung und Messwerten nach Kalibrierung

SR-Wert

Der Prognosefehler vor und nach Kalibrierung (falls damit Verringerung möglich) für den SR-Wert ist in folgender Darstellung für alle untersuchten Papierfabriken aufgetragen. Durch eine Kalibrierung kann die Prognosegenauigkeit insbesondere bei sehr großen Abweichungen (Papierfabriken A, B und D) deutlich verbessert werden. Die maximalen Abweichungen betragen dann $\leq 15\%$.

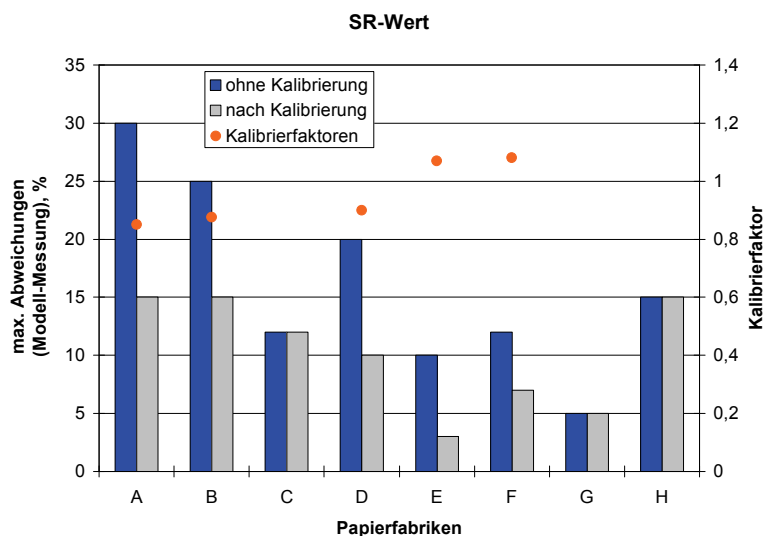


Abb. 19: Prognosefehler SR-Wert

Rohdichte

Für die Rohdichte beträgt der Prognosefehler ohne Kalibrierung maximal 11%. Durch eine Kalibrierung kann die Prognosegenauigkeit insbesondere für die Anwendungsfälle E und G signifikant gesteigert werden. Die maximalen Abweichungen betragen dann $\leq 5\%$.

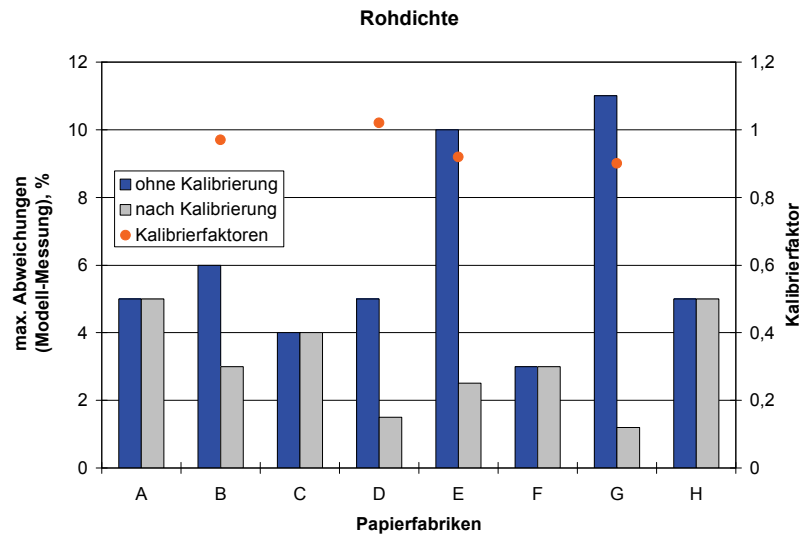


Abb. 20: Prognosefehler Rohdichte

Luftdurchlässigkeit

Die Luftdurchlässigkeit wird deutlich zu groß prognostiziert (s. Seite 22). Die Abweichungen betragen hierbei bis zu 70%. Durch eine Kalibrierung kann der Prognosefehler auf $\leq 35\%$ verringert werden.

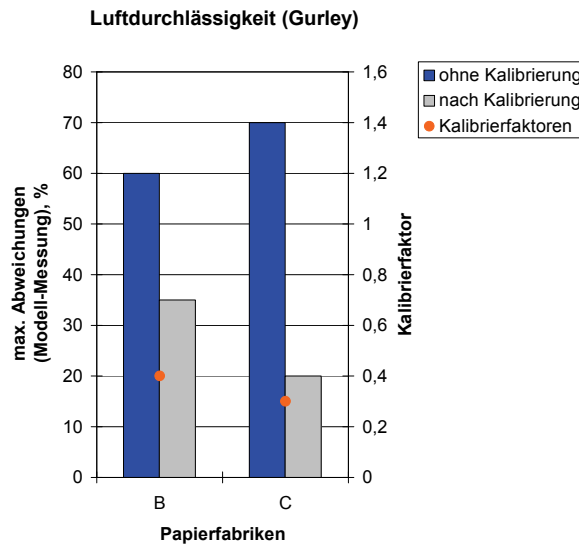


Abb. 21: Prognosefehler Luftdurchlässigkeit

Tensile-Index

Durch eine Kalibrierung kann die Prognosegenauigkeit für den Tensile-Index insbesondere bei sehr großen Abweichungen (max. 37%) deutlich verbessert und auf $\leq 15\%$ begrenzt werden.

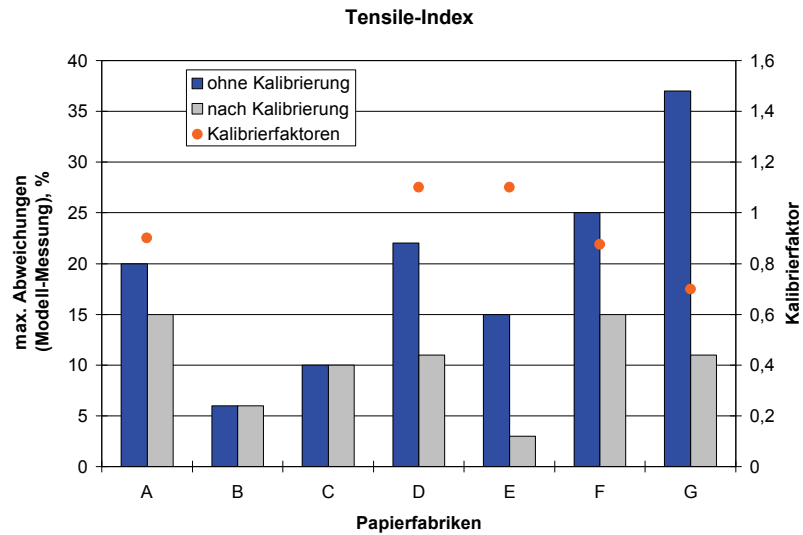


Abb. 22: Prognosefehler Tensile-Index

Tear-Index

Für die Anwendungsfälle A, C und F konnte der Prognosefehler infolge einer Kalibrierung von maximal 45% auf $\leq 15\%$ verringert werden. Für den Anwendungsfall D betrug die maximale Abweichung 60%, hier konnte auch wegen der starken Messwertschwankungen durch eine Kalibrierung keine Verbesserung erzielt werden.

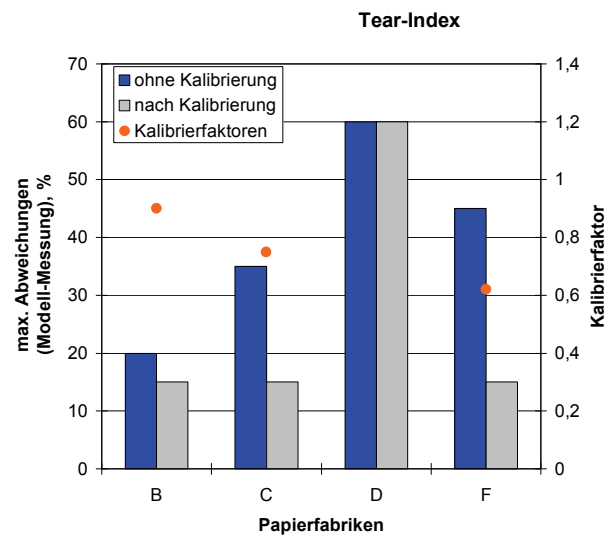


Abb. 23: Prognosefehler Tear-Index

Berst-Index

Für den Berst-Index konnte der Prognosefehler bei den zwei untersuchten Anwendungsfällen nach Kalibrierung auf $\leq 35\%$ begrenzt werden.

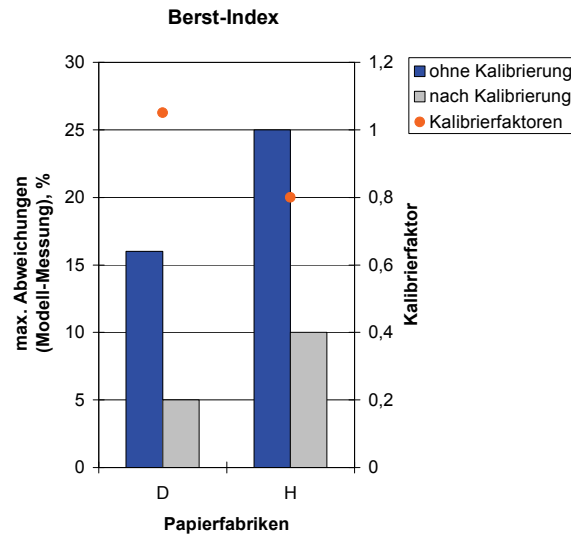


Abb. 24: Prognosefehler Berst-Index

Weißgrad

Für den Weißgrad beträgt der Prognosefehler ohne Kalibrierung maximal 3%. Durch eine Kalibrierung kann die Prognosegenauigkeit für die Anwendungsfälle C, D, und G signifikant verbessert werden. Die maximalen Abweichungen betragen dann $\leq 1,5\%$.

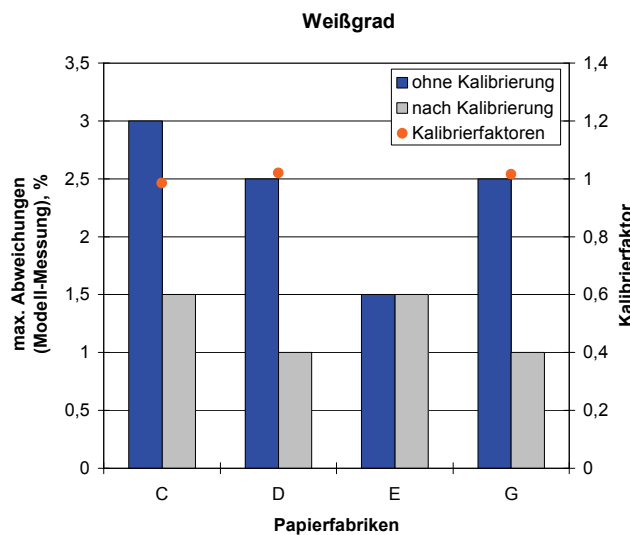


Abb. 25: Prognosefehler Weißgrad

Schlussfolgerungen Die beobachteten Abweichungen zwischen den Ergebnissen der Modellrechnung und den Messwert setzen sich aus systematischen Abweichungen und Messwertschwankungen zusammen. Der Prognosefehler aufgrund systematischer Abweichungen kann durch eine Kalibrierung deutlich verringert werden.

Eine solche Kalibrierung kann anhand des Ist-Zustandes in einer Papierfabrik erfolgen. Dazu wird ein Kalibrierfaktor gemäß Gleichung (1) bestimmt. Für die kalibrierten Modelle ergaben sich für die untersuchten Anwendungsfälle folgende maximale Abweichungen:

- SR-Wert $\leq 15\%$
- Rohdichte $\leq 5\%$
- Luftdurchlässigkeit $\leq 35\%$
- Festigkeitseigenschaften $\leq 15\%$
- Weißgrad $\leq 1,5\%$

Zur Reduzierung der Messwertschwankungen sollten Wiederholungsmessungen an mehreren unabhängigen Proben durchgeführt. Dadurch lässt sich die Aussagegenauigkeit noch verbessern.

6.5 Fehlerrechnung und Sensitivitätsanalyse

Fehlerrechnung Zur Interpretation der auftretenden Prognosefehler wurde exemplarisch für den Tensile-Index eine Fehlerrechnung durchgeführt. Unter Anwendung des Fehlerfortpflanzungsgesetzes und Bildung der partiellen Ableitungen nach den einzelnen Einflussgrößen erfolgte dazu die Berechnung des mittleren Fehlers (vgl. und Tab. 2).

**Mittlerer Fehler
Tensile-Index**

Tab. 2: Berechnung des mittleren Fehlers anhand der Effekte der einzelnen Einflussgrößen

Größe	Einheit	Min	Max	Wert	Mittlerer Fehler
F_z	Mpa	200	500	350	50
A_Q	μm^2	30	50	40	5
ρ_w	g/cm^3	1,48	1,5	1,49	0,01
b	MPa	2	20	8	2
P	μm	15	35	25	3
FL_0	μm	500	2500	1500	100
RBA		0	1	0,25	0,05
T	Nm/g	10	100	44,83	7,99

Tab. 2 enthält die für die Berechnung zugrunde gelegten Werte und Fehler der einzelnen Eingangsgrößen. Bei einem Wert für den Tensile-Index von 44,83 Nm/g ergibt sich ein mittlerer Fehler von 7,99 Nm/g. Der prozentuale Fehler (ca. 18 %) liegt im Bereich der für den Tensile-Index festgestellten Abweichungen zwischen Modellergebnis und Messwerten nach Kalibrierung (vgl. Abb. 22).

**Sensitivitäts-
analyse**

Weiterhin wurde im Rahmen einer Sensitivitätsanalyse untersucht, in welchem Maße einzelne Einflussgrößen das Berechnungsergebnis der physikalisch bzw. geometrisch basierten Berechnungsgleichungen für Rohdichte, Tensile-Index und Tear-Index bestimmen. Dazu wurden die relevanten Einflussgrößen zur Berechnung der genannten Größen um jeweils 5% Prozent variiert und die Auswirkung dieser Änderung auf das Ergebnis betrachtet (s. Abb. 26 - Abb. 28).

Rohdichte

In die Prognose der Rohdichte anhand des vereinfachten Strukturmodells (vgl. **Fehler! Verweisquelle konnte nicht gefunden werden.**) gehen die Größen Faserdurchmesser und Faserabstand (d-Faktor) des Faserstoffes ein. Die Abweichung entspricht in etwa der Variation der Einflussgröße. Beide Größen werden durch die Mahlung (Mahlenergie SRE) beeinflusst. Eine Ungenauigkeit bei der Bestimmung von SRE hat aber nicht so große Auswirkung wie bei den anderen beiden Größen.

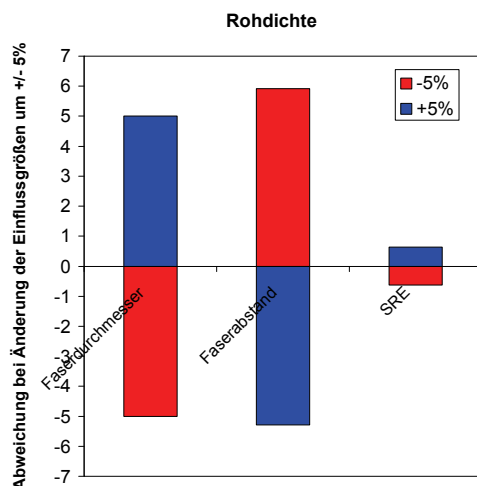


Abb. 26: Sensitivitätsanalyse Rohdichte

Tensile-Index

Bei der Berechnung des Tensile-Index bewirkt eine Variation der Einflussgrößen um +/- 5% eine Abweichung beim Tensile-Index von maximal ca. 3%. Den größten Einfluss haben die fasermorphologischen Eigenschaften und der Faserabstand (d-Faktor). Der Tensile-Index reagiert damit vergleichsweise robust auf Ungenauigkeiten der Eingangsgrößen.

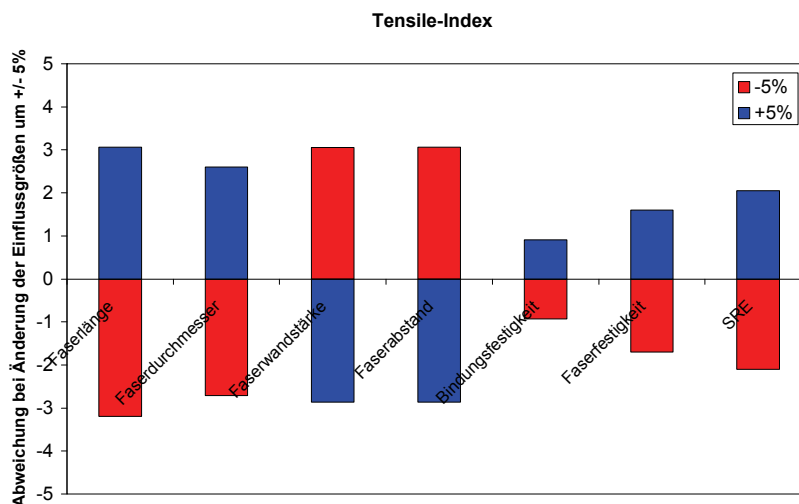


Abb. 27: Sensitivitätsanalyse Tensile-Index

Tear-Index

Bei der Berechnung des Tear-Index haben die beiden Größen Faserlänge und Faserwandstärke einen überproportionalen Einfluss auf das Ergebnis. Ungenauigkeiten bei der Bestimmung dieser Parameter führen zu deutlich abweichenden Ergebnissen. Dies könnte auch eine Ursache für die teilweise beobachteten großen Abweichungen zwischen Modell und Messwert bzw. die starken Schwankungen der Messwerte. Der Faserabstand (d-Faktor) verändert das Ergebnis demgegenüber etwa proportional zu seiner Variation.

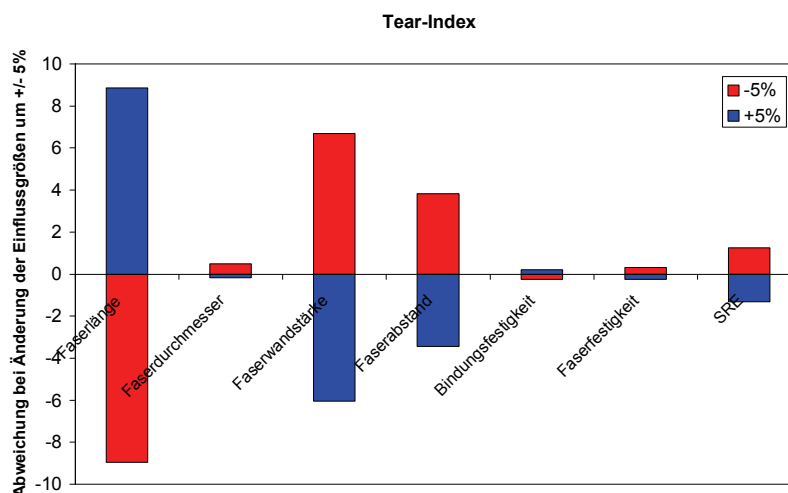


Abb. 28 Sensitivitätsanalyse Tear-Index

Fazit

Die für den Tensile-Index durchgeführte Fehlerrechnung weist für diese Größe einen mittleren Fehler von ca. 18% aus. Dieser Wert stimmt näherungsweise mit den für den Tensile-Index ermittelten Abweichungen nach Kalibrierung (Ausschluss systematischer Abweichungen) überein und verdeutlicht die Begrenzung der Prognosegenauigkeit durch fehlerbehaftete Werte für die Eingangsgrößen.

Die durchgeführte Sensitivitätsanalyse zeigt den großen Einfluss der fasermorphologischen Größen und der Kennwerte des vereinfachten Fasernetzwerkmodells auf die Größen Rohdichte, Tensile-Index und Tear-Index auf. Diese Größen müssen für eine hohe Prognosegenauigkeit möglichst genau bekannt sein. Die Parameter Faserlänge und Faserwandstärke haben auf den berechneten Tear-Index einen überproportionalen Einfluss. Fehlereinflüsse bei diesen Größen verursachen möglicherweise die teilweise beobachteten größeren Abweichungen zwischen Modellergebnis und Messwerten.

6.6 Bewertung und Übertragbarkeit der Methodik für die Validierung und Kalibrierung

Schlussfolgerungen aus Modellvalidierung

Im Rahmen der durchgeführten Untersuchungen wurden die Modelle zur Faserstoffmahlung, Mischung und Blattbildung/Papiereigenschaften validiert. Prinzipiell zeigte sich eine gute Übereinstimmung zwischen den Ergebnissen der Modellrechnungen und den Messwerten. In vielen Fällen lag auch ohne weitergehende Korrektur bzw. Anpassung eine gute Prognosegenauigkeit vor.

Daraus kann geschlussfolgert werden, dass die entwickelte Vorgehensweise prinzipiell richtig ist bezüglich der physikalisch basierten Modellansätze sowie der betrachteten Einflussgrößen und Parameter.

Der qualitative Verlauf der untersuchten Eigenschaften als Ergebnis der nachgebildeten Mahlreihe gibt generell den Trend der Messwerte gut wieder. Dies bietet die Möglichkeit für eine Anpassung der Modelle an den jeweiligen Anwendungsfall (Kalibrierung) zur Verbesserung der Prognosegenauigkeit. Die Kalibrierfaktoren können jeweils anhand des Ist-Zustandes bestimmt werden.

Neben systematischen Abweichungen wird die Prognosegüte insbesondere durch Messwertschwankungen beeinträchtigt. Diese Effekte lassen sich durch eine Fehlerrechnung abschätzen. Um die hierdurch verursachten Abweichungen möglichst klein zu halten, sollten die Einflussgrößen möglichst genau und an mehreren unabhängigen Proben gemessen werden.

Großen Einfluss auf die berechneten Eigenschaften haben die zugrunde gelegten Faserstoffeigenschaften. Für eine hohe Modellgenauigkeit müssen diese möglichst genau gemessen werden.

Übertragbarkeit der Ergebnisse

Alle derzeit vorhandenen bzw. in Entwicklung befindlichen Modelle sind in gleicher Weise aufgebaut und folgenden 2 Schritten zuordenbar:

1. Schritt: Veränderung der Faser- und Suspensionseigenschaften durch die Prozesse der Stoffaufbereitung (wie z.B. Mahlung und Fraktionierung) und Mischung verschiedener Rohstoffkomponenten.
2. Schritt: Ableitung der Papiereigenschaften auf der Basis der Suspensionseigenschaften anhand eines vereinfachten Strukturmodells

In diese Systematik können auch die Effekte der derzeit in weiteren Forschungsprojekten untersuchten Einflüsse des Füllstoffeinsatzes und der unterschiedlichen Auswirkungen von Getrennt- bzw. Gemischtmahlung eingegliedert werden.

Im Rahmen von Schritt 2 können auch Eigenschaften wie Anisotropie und die Effekte von Trocken- und Nasspressen integriert werden. Damit kann prinzipiell auch der Übergang von den bislang hauptsächlich betrachteten isotropen Laborblättern zu Maschinenblättern modellmäßig erfasst werden. Die Vorgehensweise zur Modellvalidierung, wie sie in den vorangegangenen Abschnitten beschrieben wurde, ist für diese neuen Modelle in gleicher Weise anwendbar.

Ansprechpartner für weitere Informationen:

Dr.-Ing. Timo Kuntzsch
Tel. 03529 / 551-614
timo.kuntzsch@ptspaper.de

Papiertechnische Stiftung PTS
Pirnaer Straße 37
01809 Heidenau
Tel. 03529 / 551-60
Fax 03529 / 551-899
www.ptspaper.de

Glossar

Glossar	λ	Parameter der Pull-Out-Wahrscheinlichkeit
	η	Viskosität
	ε	Porosität
	α_F [%]	Anteil zerrissener Fasern (Fracture-Wahrscheinlichkeit)
	α_N [%]	Anteil freier Faserenden
	α_P [%]	Anteil herausgezogener Fasern (Pull-Out-Wahrscheinlichkeit)
	ρ_W [g/cm ³]	Dichte des Faserwandmaterials (Zellulose)
	$2mga$	doppelt massegewichtete Mischungsregel
	A_B [μm ²]	gebundene Faseroberfläche einer Elementarzelle
	AD [g/cm ³]	Scheinbare Blattichte
	AD_0 [g/cm ³]	Scheinbare Blattichte (Feinstofffrei)
	ASH [%]	Anteil anorganischer Stoffe (am Gesamtfaserstoff)
	ASH_{ret} [%]	Anteil retendierte anorganischer Stoffe (am Gesamtfaserstoff)
	A_T [μm ²]	Gesamtfaseroberfläche einer Elementarzelle
	b [MPa]	mittlere Bindungsfestigkeit der Fasern
	CWT_{KF} [μm]	mittlere Faserwanddicke der Kurzfaser-Fraktion
	CWT_{LF} [μm]	mittlere Faserwanddicke der Langfaser-Fraktion
	d [μm]	mittlere Faserabstand im Fasernetzwerk
	D [μm]	mittlerer Durchmesser einer kollabierten Faser
	E	Papiereigenschaft
	e	Fasermerkmal
	FL_{FS} [μm]	mittlere Faserlänge der Feinstoff-Fraktion
	FL_{KF} [μm]	mittlere Faserlänge der Kurzfaser-Fraktion
	FL_{LF} [μm]	mittlere Faserlänge der Langfaser-Fraktion
	FS [%]	Feinstoffanteil (am Gesamtfaserstoff)
	FS_{ret} [%]	Anteil retendierter organischer Feinstoffe (am Gesamtfaserstoff)
	F_Z [MPa]	mittlere Zugfestigkeit der Fasern
	H [μm]	mittlere Höhe einer kollabierten Faser
	KF [%]	Kurzfasernanteil (am Gesamtfaserstoff)
	K_X, K_Y, K_Z, K_{457}	(spektrale) Lichtabsorptionskoeffizienten

**Glossar
(Fortsetzung)**

L^*, a^*, b^*	CIE-Farbkoordinaten
LF [%]	Langfaseranteil (am Gesamtfaserstoff)
LUG [s/100cm ³]	Luftdurchlässigkeit (nach GURLEY)
m_{Faser}	(mittlere) Masse einer Faser
mga	einfache massegewichtete Mischungsregel
O [%]	Opazität
P [μm]	mittlerer Umfang einer kollabierten Faser
R_{457} [%]	Weißgrad
SR [°]	Entwässerungswiderstand (nach SCHOPPER-RIEGLER)
SSA [m ² /g]	massebezogene spezifische Faseroberfläche
SSA_V [m ² /m ³]	volumenbezogene spezifische Faseroberfläche
S_x, S_y, S_z, S_{457}	(spektrale) Lichtstreuoeffizienten
T [Nm/g]	Tensile-Index
TI [mNm ² /g]	Tear-Index
V_P [μm ³]	Porenvolumen einer Elementarzelle
V_T [μm ³]	Gesamtvolumen einer Elementarzelle
w [%]	Gewichte
W_F	mittlere Fracture-Arbeit für Einzelfaser
W_{KF} [μm]	mittlerer Faserdurchmesser der Kurzfaser-Fraktion
W_{LF} [μm]	mittlerer Faserdurchmesser der Langfaser-Fraktion
W_P	mittlere Pull-Out-Arbeit für Einzelfaser
WRV [%]	Wasserrückhaltevermögen
X, Y, Z	Normfarbwerte
ZI [Nm/g]	Zerospan-Tensile-Index

Literatur

- [1] BÄR, G.; MEINL, G.:
Entwicklung von Algorithmen zur Prognose des Mahlungsverhaltens morphologisch unterschiedlicher Zellstoffe.
PTS-Forschungsbericht 04/05
- [2] KUNTZSCH, T.:
Effektive Bewertung von Trennprozessen in der Stoffaufbereitung durch moderne fasermorphologische Messverfahren.
http://www.ptspaper.de/live/dokukategorien/dokumanagement/psfile/file/2/IW_05028046382fec1230d.pdf
- [3] MEINL, G.:
Senkung der Rohstoffeinstandskosten durch angepasste Mischung von Faserstoffen ohne nachteilige Einflüsse auf Erzeugungsprozess und Produktqualität.
PTS-Forschungsbericht 01/08
- [4] MEINL, G.:
Computerunterstützte Prognose der optischen Eigenschaften holzfreier Papiere aus Eigenschaften der Faserstoffkomponenten.
PTS-Forschungsbericht 05/05
- [5] MEINL, G.; STRAUSS, J.:
Computerunterstützte Berechnung des Festigkeitsverhaltens holzfreier Papiere.
PTS-FB 11/01
- [6] ERHARD, K.; MEINL, G.:
Modellierung und Prognose von Papiereigenschaften.
Wochenblatt für Papierfabrikation 132, 314-318 (2005) Nr.7
- [7] FERRITSIUS, O.; FERRITSIUS, R.:
Vergleich einiger physikalischer Qualitätsdaten von CTMP, TMP, Holzschliff und Zellstoffen.
International Mechanical Pulping Conference.; 1997; Stockholm
- [8] VIEIRA-KLABIN, O.; LIMA, E. L.; GERHARD, M.:
Prediction of Paperboard Properties With Virtual On-line Analyzers.
<http://www.tappi.org/index.asp?rc=1&pid=26983&ch=1&ip=>
- [9] BRECHT, W.; HOLLE, D.; VOLK, W.; WANKA, R.:
Die Opazität des Papiers in Theorie und Praxis.
Wochenblatt für Papierfabrikation 98, 821-826 (1968) Nr.23/24
- [10] HELLEN, E. K. O.; KETOJA, J. A.; NISKANEN, K. J. et al.:
Diffusion through fibre networks.
Journal of Pulp and Paper Science 28; 55-62 (2002) Nr.2
- [11] NISKANEN, K. (Ed.):
Paper Physics.
In: Papermaking Science and Technology. Book 16. Helsinki: TAPPI Press, 1998
- [12] BATTEN, G. L.; NISSAN, A. H.:
Unified Theory of the Mechanical Properties of Paper and other H-bond-dominated Solids.
Tappi 70 (1987), Nr. 9, 119/123
- [13] PRAAST, H.; WOHLBOLD, J.; GÖTTSCHING, L.:
Modellierung mechanischer Eigenschaften von Papier bei Variation seiner Zusammensetzung. Das Papier 3 (1998), 111/118

- [14] PAGE, D. H.:
A theory for the tensile strength of paper
TAPPI J., 52, 674-681 (1969) Nr.4
- [15] AMIRI, R.; WOOD, J. R.; KARNIS, A.; GÖRRES, J.:
The Apparent Density of Paper.
Journal of Pulp and Paper Science Nr. 5, 1994
- [16] NILSEN, N.; NISKANEN, K.; ZABIHIAN, M.:
KCL-PAKKA: a simulation tool for paper properties
In: Engineering & Papermakers: Forming Bonds for Better; Papermaking. Book 3. Conference
Nashville 06.-09.10.1997, Atlanta: TAPPI Press 1997, S. 1311-1314
- [17] Eymin Petot-Tourtollet, G. et al.:
STATMORF: An easy-to-use tool for pulp quality control and physical properties predictions.
Proceedings PTS Pulp Technology Symposium 2005 (Ed.: Erhard, K.; Meinel, G.), PTS Symposium
FS 503, 22
- [18] SCOTT, W.; SHIRT, R.:
Potential application of predictive tensile strength models in paper manufacture: Part II – Integration
of a tensile strength model with a dynamic paper machine material balance simulation.
TAPPI Papermakers Conference. Conference 11.-14.03 2001 Cincinnati, Ohio, Atlanta: TAPPI Press
2001, 1-9
- [19] PAGE, B.:
Diskrete Simulation.
Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag, 1991
- [20] FLADDA, G. et al.:
Accurate consistency. A handbook on accurate consistency measurement in pulp and paper
processing.
BTG Pulp & Paper Technology AB, Schweden, 1999, S. 218