

## **Modeling and optimization approaches to enhance the performance of chemically bonded nonwovens – Dr. Henrik Schmidt (BASF SE)**

Die Geschäftseinheit "Fiber Bonding" beschäftigt sich im Unternehmensbereich „Dispersions & Resins“ mit der Entwicklung von Bindemitteln für die chemische Verfestigung von Vliesstoffen für unterschiedlichste Anwendungsbereiche, die Kunden kommen beispielsweise aus dem Automobilbereich oder dem Bausektor.

Im Bereich Faserbindung bietet die BASF eine umfassende Kundenunterstützung an. Diese reicht von Imprägnierversuchen an Kundenvliesen über die Fertigung von Formteilen bis hin zur Charakterisierung der verfestigten Vliese oder Formteile.

Durch diesen umfassenden Support und die Kenntnis unserer Bindemittel sind große Datenmengen vorhanden, die folgendes beinhalten:

- Eigenschaften der Rohvliese
- Binderformulierung
- Prozessparameter der Imprägnierung
- Ergebnisse der Charakterisierung der imprägnierten Vliese.

Die Daten wurden systematisch aufbereitet und Modelle entworfen, die den Zusammenhang zwischen Rohvlies, Binderformulierung, Prozessparametern und den mechanischen Eigenschaften eines imprägnierten Vlieses beschreiben.

Basierend auf den Modellen kann die Neuentwicklung oder Modifikation eines Bindemittels unterstützt und effizienter gestaltet werden. Darüber hinaus können Vorhersagen zur Performance einer kundenspezifischen Binderformulierung, die beispielsweise aus einem Binder und einer oder zwei zusätzlichen Komponenten besteht, getroffen werden.

Die Einbettung der Modelle in Ein- oder Mehrzieloptimierungsalgorithmen erlaubt die Aussagen über die Potentiale einer kundenspezifischen Binderformulierung oder unterstützt eine zielgerichtete Binderentwicklung.

Die Vorgehensweise und Ergebnisse werden exemplarisch am Beispiel eines Trägervlieses für eine Bitumendachbahn gezeigt (roofing carrier). Das Trägervlies soll möglichst hohe Steifigkeiten und Festigkeiten bei Raumtemperatur sowie bei 180°C aufweisen. Zudem ist eine möglichst hohe Thermodimensionsstabilität erforderlich. Anwendungstechnisch werden die entsprechenden Kennwerte durch Zugversuche bzw. durch Messung von Längs- und Querdehnung nach Belastung mit konstanter Last bei 200°C ermittelt.

Herausforderungen für die Modellgenerierung stellen bei dem o.g. Anwendungsfall die Datenhistorie, die statistische Verteilung einzelner anwendungstechnischer Prüfergebnisse und die Datenreproduzierbarkeit dar:

- für einzelne chemische Bestandteile der Bindemittel erlauben die Modelle bislang nur wenig abgesicherte Vorhersagen
- je nach statistischer Verteilung der Prüfergebnisse erfolgt eine mathematische Transformation, die bessere Modellvorhersagen erlaubt
- liegen für eine Bindeformulierung auf einem Vlies mehrere Versuchsdaten vor, so werden für die Modellgenerierung Mittelwerte verwendet.

Darüber hinaus liegen die Prüfdaten auf verschiedenen Kundenvliesen vor, was die Mitberücksichtigung und Charakterisierung der Rohvlieseigenschaften erfordert.

Im Rahmen der Modellerstellung wurden verschiedene Algorithmen untersucht (Regression, Support Vector Machine, Neuronale Netze, ...), die Gesamtdatenmenge wurde während der Modellgenerierung mit Kreuzvalidierungen Trainings- und Testdatensätze zerlegt.

Exemplarische Ergebnisse der Modellierung sind in Abbildung 1 dargestellt. Für verschiedene Kundenvliese sind die experimentellen Daten (y-Achse) sowie die mittels Modell abgeschätzten Daten (x-Achse) für insgesamt acht verschiedene Rohvliese gegenübergestellt. Dabei ist zwischen Trainings- und Testdaten unterschieden. Das Modell ist in der Lage die Experimente gut zu approximieren was durch R-Werte  $> 0.9$  und mittlere Abweichungen zwischen Modell und Experiment von unter 8% verdeutlicht wird. Da die Vorhersagegüte zwischen Trainings- und Testdaten ähnlich ist neigt das Modell nicht zum „Overfitting“. Ähnlich gute Modelle konnten beispielsweise auch für die Zugfestigkeit in Maschinenrichtung bei 180°C sowie den Schrumpf im Rahmen der Thermodimensionsstabilitätsprüfung (TDS) generiert werden.

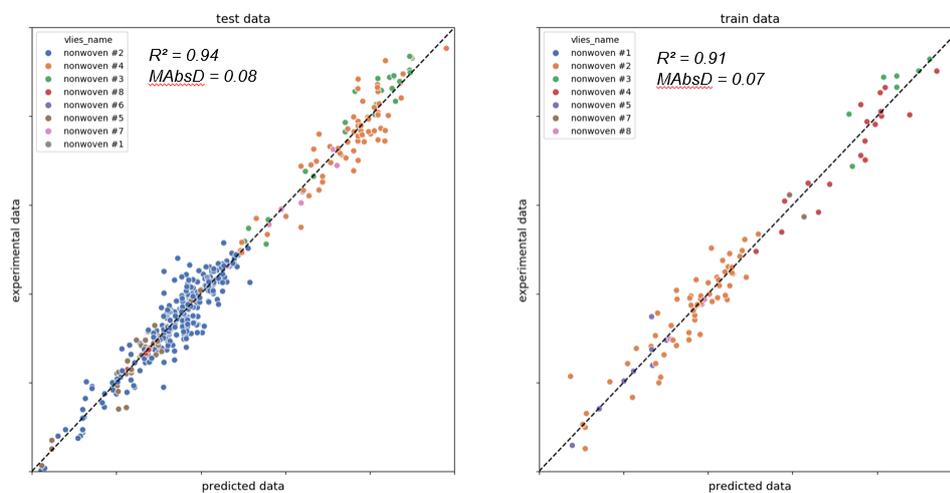


Abbildung 1 - Vergleich zwischen experimentellen und mittels Model vorhergesagten Daten (Zugfestigkeit in Maschinenrichtung bei Raumtemperatur)

Der Leistungsfähigkeit des Modells wurde im Rahmen der Modifikation eines XSB-Binders (Styrofan) für roofing-Dachbahnen gezeigt. Für den existierenden Binder sollte die chemische Zusammensetzung modifiziert werden, so dass höhere Vlies-Festigkeiten bei 180°C (MD- und CD-Richtung) sowie ein geringerer Schrumpf bei der TDS-Prüfung erzielt werden. Mit Hilfe des Modells wurde die Performance verschiedener Binderrezepturen abgeschätzt. Die Rezepturen wurden im Labor hergestellt, verschiedene Rohvliese wurde imprägniert und anwendungstechnisch geprüft. Es zeigte sich, dass trotz geringer Abweichungen Modellvorhersage und Experiment gute Übereinstimmungen aufweisen und dass die mit Hilfe des Modells modifizierte Binderrezeptur zu den erforderlichen Vlieseigenschaften führt.

Im nächsten Schritt wurden die generierten Modelle zur Vorhersage der mechanischen Vliesstoffkennwerte in Optimierungsalgorithmen eingebettet. Hierbei wurden exemplarisch für die o.g. XSB-Rezeptur zunächst Einzielloptimierungen durchgeführt und dabei nacheinander die entsprechenden Zielparameter definiert optimiert. Der jeweilige Optimierungszyklus konnte die gewünschte Zielparameter deutlich verbessern, allerdings wurde deutlich, dass gleichzeitig andere Kenngrößen signifikant schlechter werden können. Diese Tatsache verdeutlicht die Notwendigkeit einer Mehrzieloptimierung (MOO), die als Ergebnis eine Menge sog. Pareto-Optima generiert. Alle pareto-optimalen Punkte zeichnen sich dadurch aus, dass ein Parameter nur zu Lasten eines anderen weiter verbessert werden kann. Durch Vergabe von

Gewichtungen für die einzelnen Optimierungsparameter kann ein Punkt der Pareto-Optima ausgewählt werden.

Das Ergebnis der Mehrzieloptimierung einer XSB-Binder-Rezeptur ist in Abbildung 2 dargestellt. Die Variationsgrenzen der Binderkomponenten wurden identisch zur Einzeloptimierung gesetzt. Mit Hilfe der Ergebnisse einer Mehrzieloptimierung können Optimierungspotentiale bestehender Binder bzw. Binderrezepturen abgeschätzt werden.

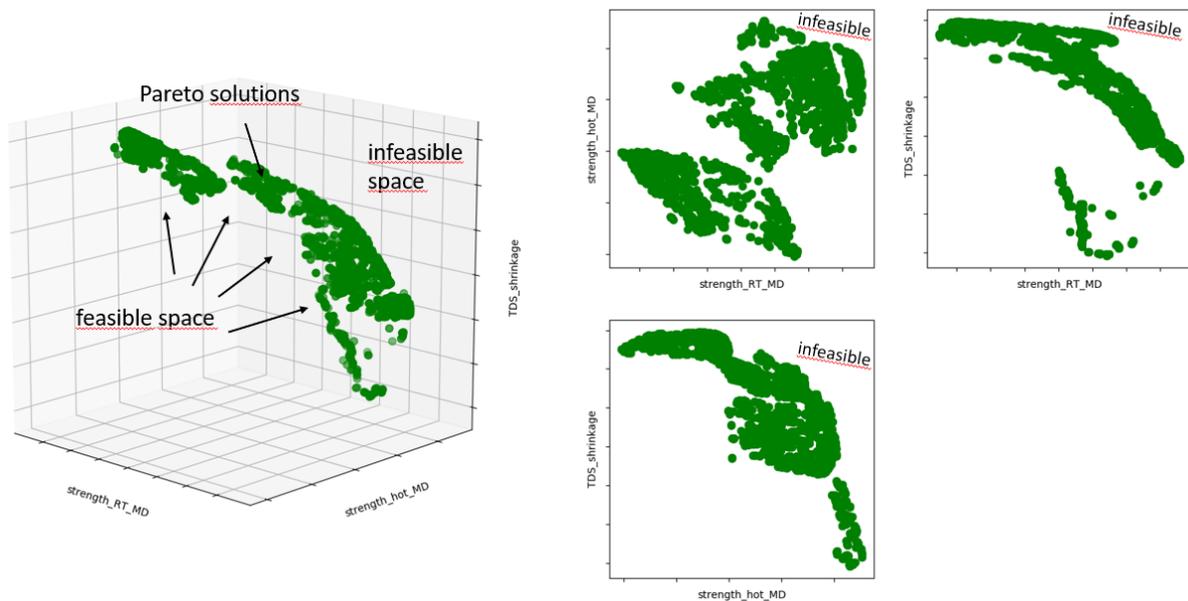


Abbildung 2 – Mehrzieloptimierung einer XSB-Binder-Rezeptur: Pareto-Optima

Die entwickelten Modelle und der Workflow zeigen, dass die Vorhersage und Optimierung anwendungstechnischer Vliesstoffeigenschaften von chemisch gebundenen Vliesen möglich sind. Die BASF nutzt dabei Daten entlang der gesamten Prozesskette (Rohvlieskennwerte und Binderrezeptur bis hin zur anwendungstechnischen Charakterisierung). Das Vorgehen erlaubt die kundenspezifische Entwicklung und Anpassung von chemischen Binder bzw. die Anpassung und Optimierung von Binderrezepturen.