

Technology fascinates ■

Identify – Das Kurvenerkennungs- und
Datenbanksystem der Thermischen Analyse

AK-Thermophysik, Dr. Alexander Schindler, 25.04. 2016

-
1. Einführung. Was gibt's Neues?
 2. Ansätze zur Kurvenerkennung
 3. Einschränkungen
 4. Nutzen und Anwendungsbeispiele
 5. Zusammenfassung

01 Einführung. Was gibt's Neues?



Database-supported thermal analysis involving automatic evaluation, identification and classification of measurement curves

Alexander Schindler¹ · Claire Strasser¹ · Stefan Schmölzer¹ · Mihal Bodek² · Rafal Seniuta² · Xiayun Wang³

Received: 15 July 2015 / Accepted: 1 September 2015

© The Author(s) 2015. This article is published with open access at Springerlink.com

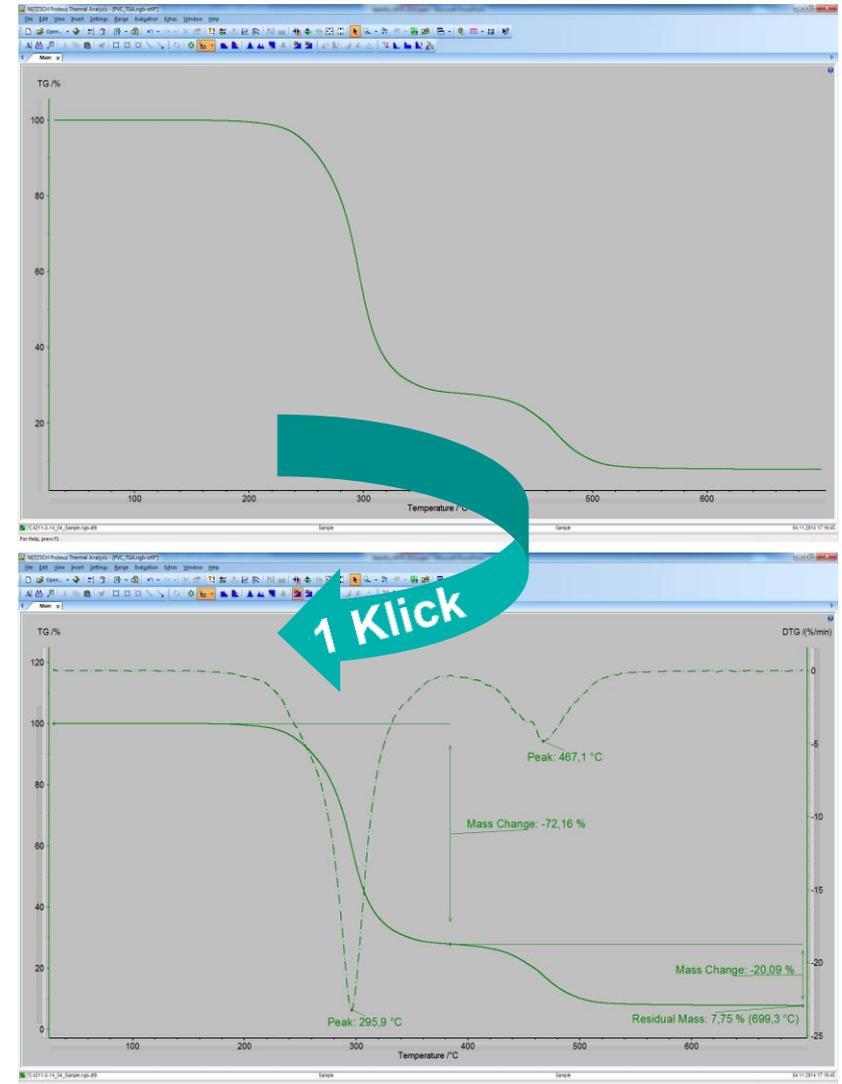
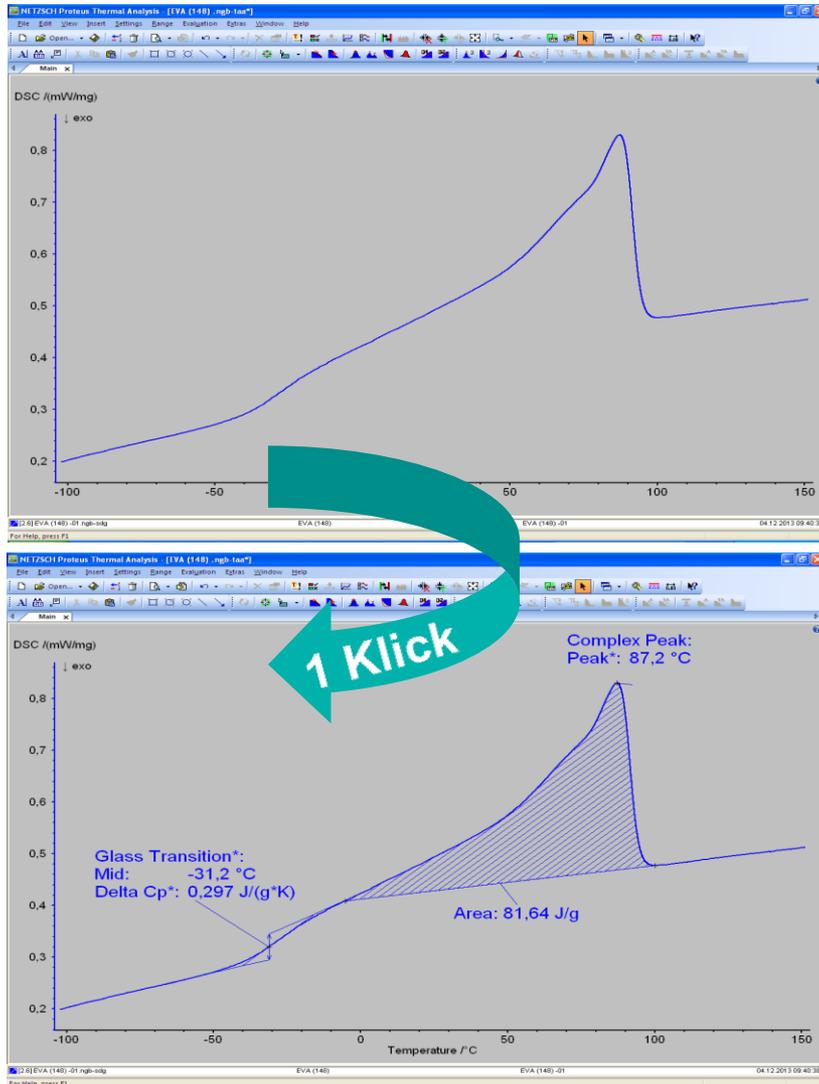
Abstract The philosophy of the recently presented computer-based curve recognition and database system for differential scanning calorimetry (DSC) measurements, *Identify*, is highlighted. This involves autonomous evaluation of measurements by the novel *AutoEvaluation* software function. A substantial expansion of *Identify* is furthermore introduced, including data not only from DSC but also from thermogravimetry (TG), dilatometry (DIL) and thermomechanical analysis (TMA) as well as data on the specific heat capacity, c_p , within the same database system. Libraries with more than 1000 measurements and

Keywords Database · Curve identification · Classification · Quality control · Automatic evaluation

Introduction

In the history of thermal analysis, the consideration of measurement signals originating, for example, from the methods differential scanning calorimetry (DSC), thermogravimetry (TG), dilatometry (DIL) or thermomechanical analysis (TMA) required intensive examination by exper-

- Siehe auch Video unter <https://vimeo.com/143356782>

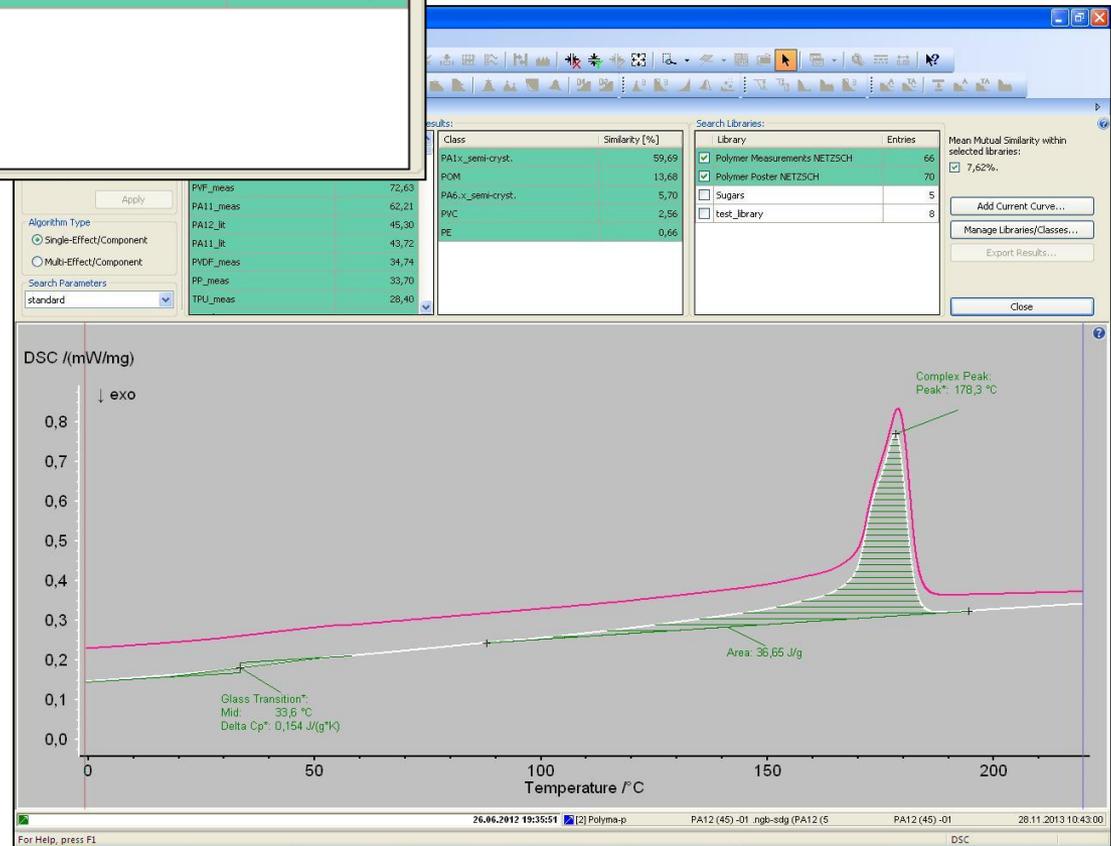


Results:

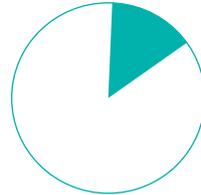
Measurement/Literature Data	Similarity [%]
PA12_meas	87,51
PVF_meas	72,63
PA11_meas	62,21
PA12_lit	45,30
PA11_lit	43,72
PVDF_meas	34,74
PP_meas	33,70
TPU_meas	28,40

Class	Similarity [%]
PA1x_semi-cryst.	59,69
POM	13,68
PA6.x_semi-cryst.	5,70
PVC	2,56
PE	0,66

Ebenfalls nach einem Klick:

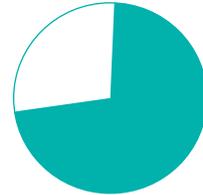


DSC



Polymere
Organika
Nahrungsmittel
Pharmazeutika

Datenbankeinträge: ~**220**



DSC
C_p
DIL / TMA
TGA

Polymere
Organika
Nahrungsmittel
Pharmazeutika
chem. Elemente
Keramik/Anorganik
Metalle/Legierungen

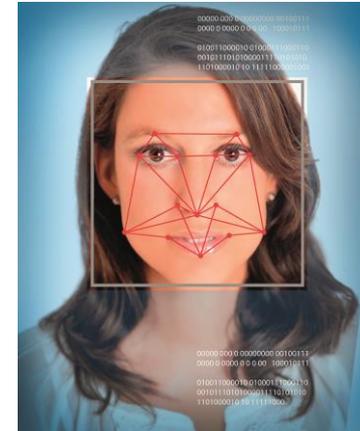
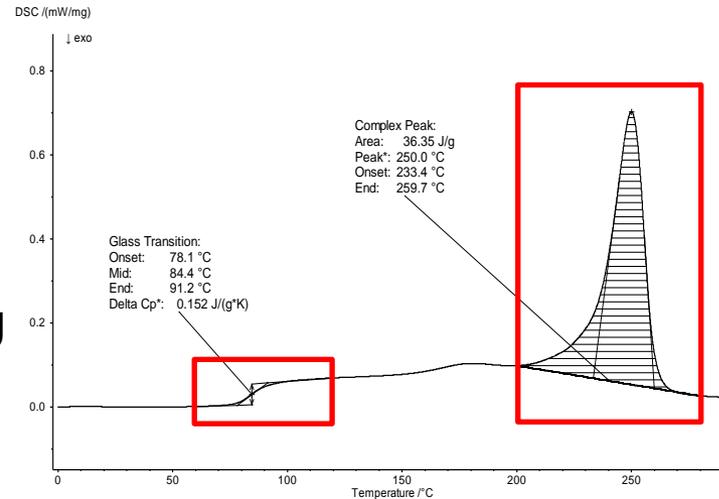
Datenbankeinträge: **~1100***

*erweiterbar durch den Benutzer. Anwenderbibliotheken können im Computer-Netzwerk mit mehreren Benutzern gleichzeitig geteilt werden.

02 Ansätze zur Kurvenerkennung

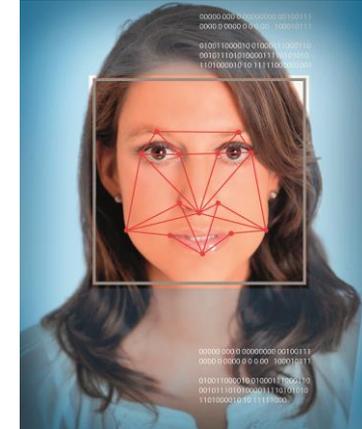
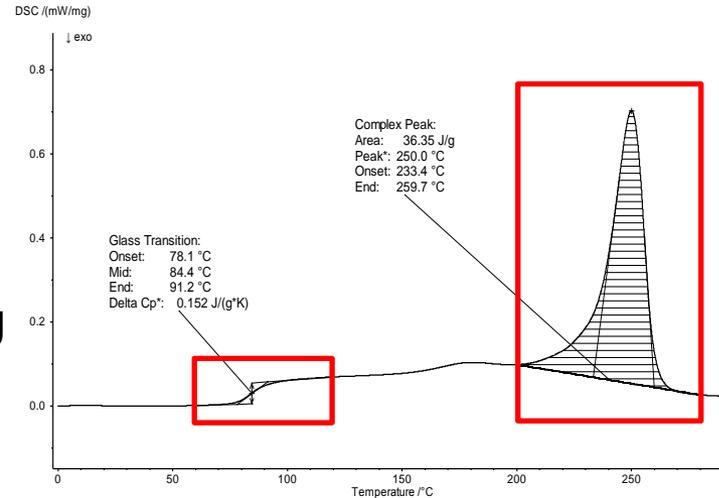
DSC, TGA:

- *Effekt-basiert*, dadurch ...
...schnell, intelligent, anpassbar
...sehr gute Performance
- *standardisierte Auswertungen* nötig
(ideal mit: *AutoEvaluation*)



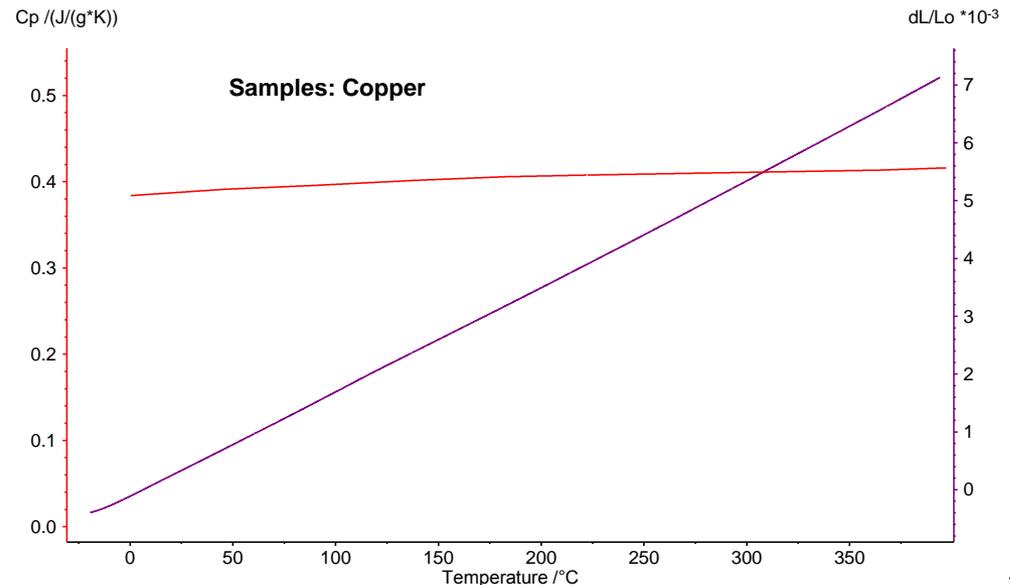
DSC, TGA:

- *Effekt-basiert*, dadurch ...
...schnell, intelligent, anpassbar
...sehr gute Performance
- *standardisierte Auswertungen* nötig
(ideal mit: *AutoEvaluation*)



DIL/TMA, Cp:

- in vielen Fällen *keine Effekte* oder *keine standardisierten Effekte*.
- *Absolutwerte wichtig!*
für DIL/TMA: 4 Dekaden!
- deshalb Algorithmen *basiert auf den Datenpunkten selbst!*



Signaltyp	DIL/ TMA C_p	Typischerweise keine oder nicht standardisierte Effekte	✓
	DSC TGA	✓	funktioniert typischerweise nicht für ganze Kurven
		Effekt-basiert	Datenpunkt-basiert

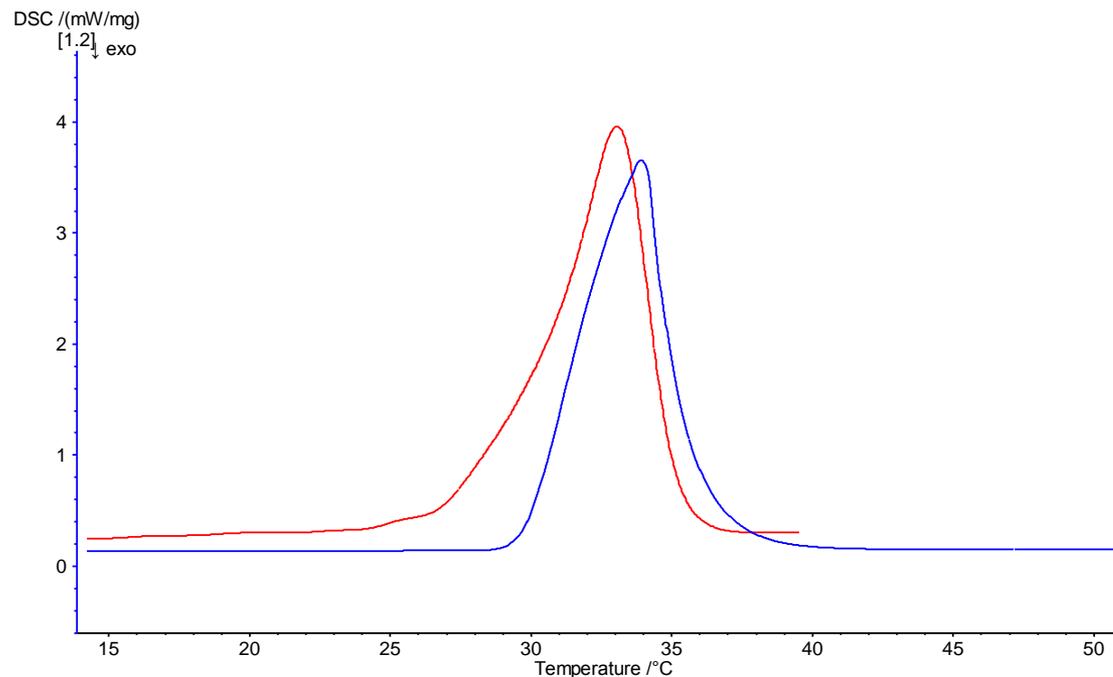
Ansätze zur Kurvenerkennung

03 Einschränkungen

Mehrere Interpretationen möglich

- Wähle geeignete Bibliotheken!
- Betrachte nicht nur den besten Treffer !
- Betrachte mehrere Signale (DSC, TGA, ...) !

DSC-Signal von Schokolade oder Gallium ?

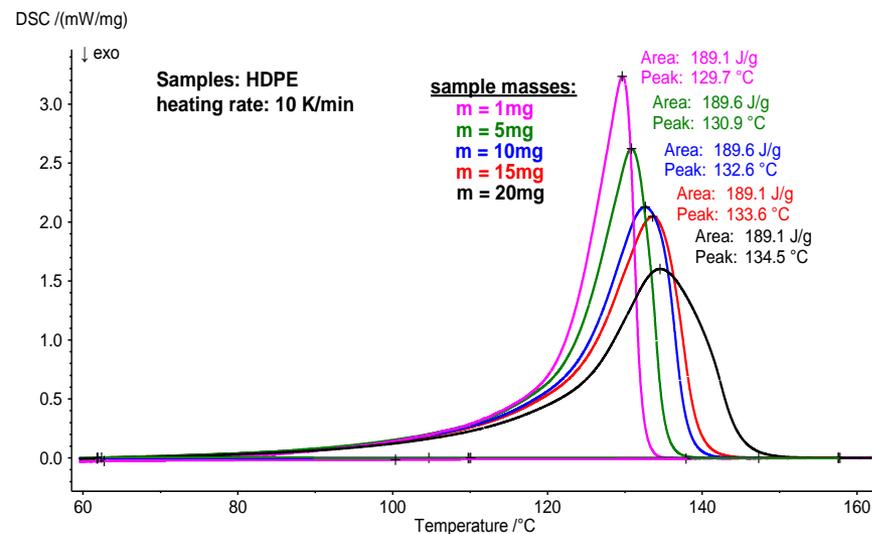


Mehrere Interpretationen möglich

- Wähle geeignete Bibliotheken!
- Betrachte nicht nur den besten Treffer !
- Betrachte mehrere Signale (DSC, TGA, ...) !

Abhängigkeit von den Messbed.

- Intelligente Algorithmen !
- Füge Messungen mit mehreren Messbedingungen zur Datenbank hinzu !
- Filtern der Datenbank-Einträge nach ihren Messbedingungen möglich !



Mehrere Interpretationen möglich

- Wähle geeignete Bibliotheken!
- Betrachte nicht nur den besten Treffer !
- Betrachte mehrere Signale (DSC, TGA, ...) !

Abhängigkeit von den Messbed.

- Intelligente Algorithmen !
- Füge Messungen mit mehreren Messbedingungen zur Datenbank hinzu !
- Filtern der Datenbank-Einträge nach ihren Messbedingungen möglich !

**Es gibt noch keinen
ähnlichen Treffer in der Datenbank**

- Erweitere die Datenbank !

04

Nutzen und
Anwendungsbeispiele

Kurven-/Material-Identifikation

Häufig hat man keine völlig unbekannte Probe ...

Archivieren/Heraussuchen

... sondern möchte *vor einer Messung* wissen, was zu erwarten ist und was für Messbedingungen man verwenden könnte.

Qualitäts-Kontrolle (QC)

Vergleich mit anderen Messungen.
Ist die aktuelle Messung o.k.?

Kurvenidentifikation

DSC-Beispiel: Erkennung des Polymers EVA



NETZSCH

NETZSCH Proteus Thermal Analysis - [fig2_EVA.ngb-taa]

File Edit View Insert Settings Range Evaluation Extras Window Help

Main Identify x

Search Temperature Range: Min: -52,1, Max: 152,0

Algorithm Type: Single-Effect/Component

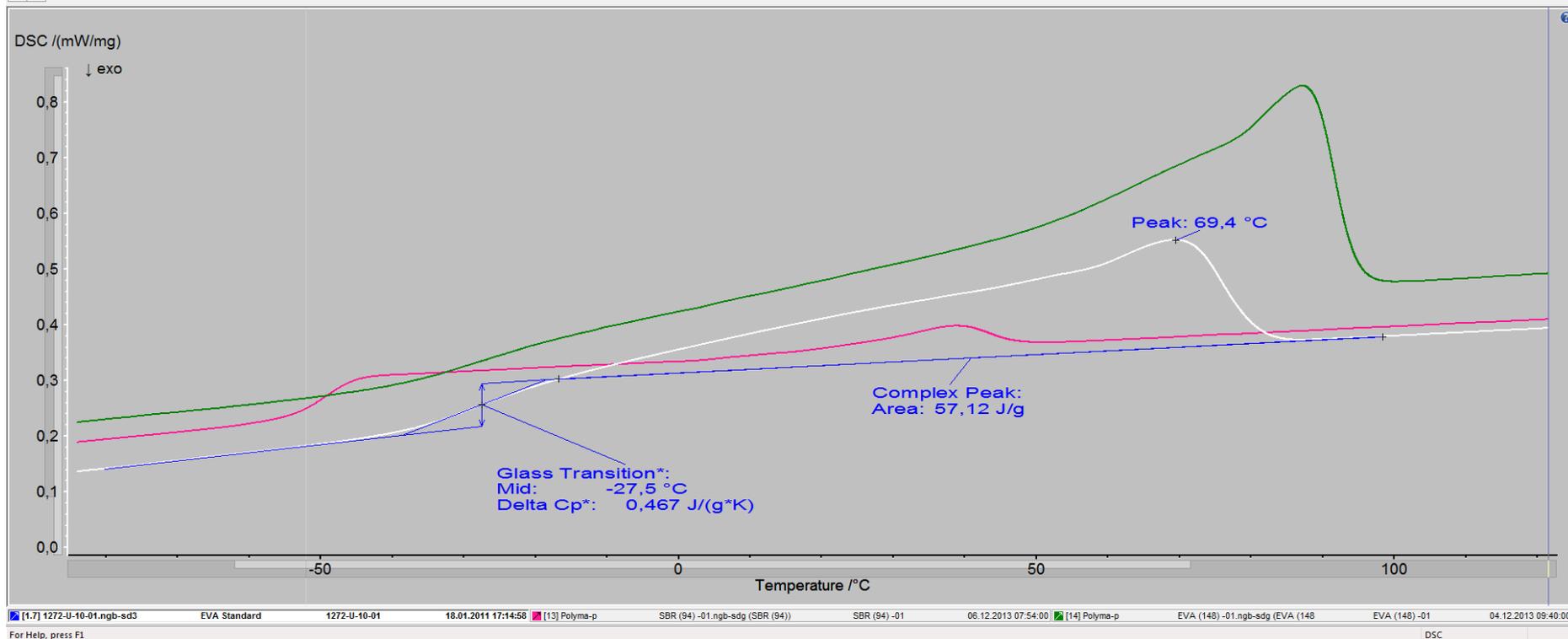
Search Parameters: standard

Measurement/Literature Data	Similarity [%]
EVA_DSC	79,56
CR_lit	32,33
POE_DSC	24,03
EVA_lit	23,06
EPDM_lit	20,32
SBR_DSC	20,20
NR_lit	19,69
PB_DSC	16,72

Library	Entries
Alloys Poster NETZSCH	42
Ceramics Poster NETZSCH	32
Ceramics_Inorganics NETZSCH	254
Elements Poster NETZSCH	104
Metals_Alloys NETZSCH	135
Organics_Food_Pharma NETZSCH	304
Polymers cooling	63
Polymers NETZSCH	176
Polymers Poster NETZSCH	70

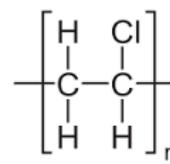
Mean Mutual Similarity within selected libraries: 0,67 %

Buttons: Add Current Curve..., Manage Libraries/Classes..., Export/Print..., Further Settings..., Close

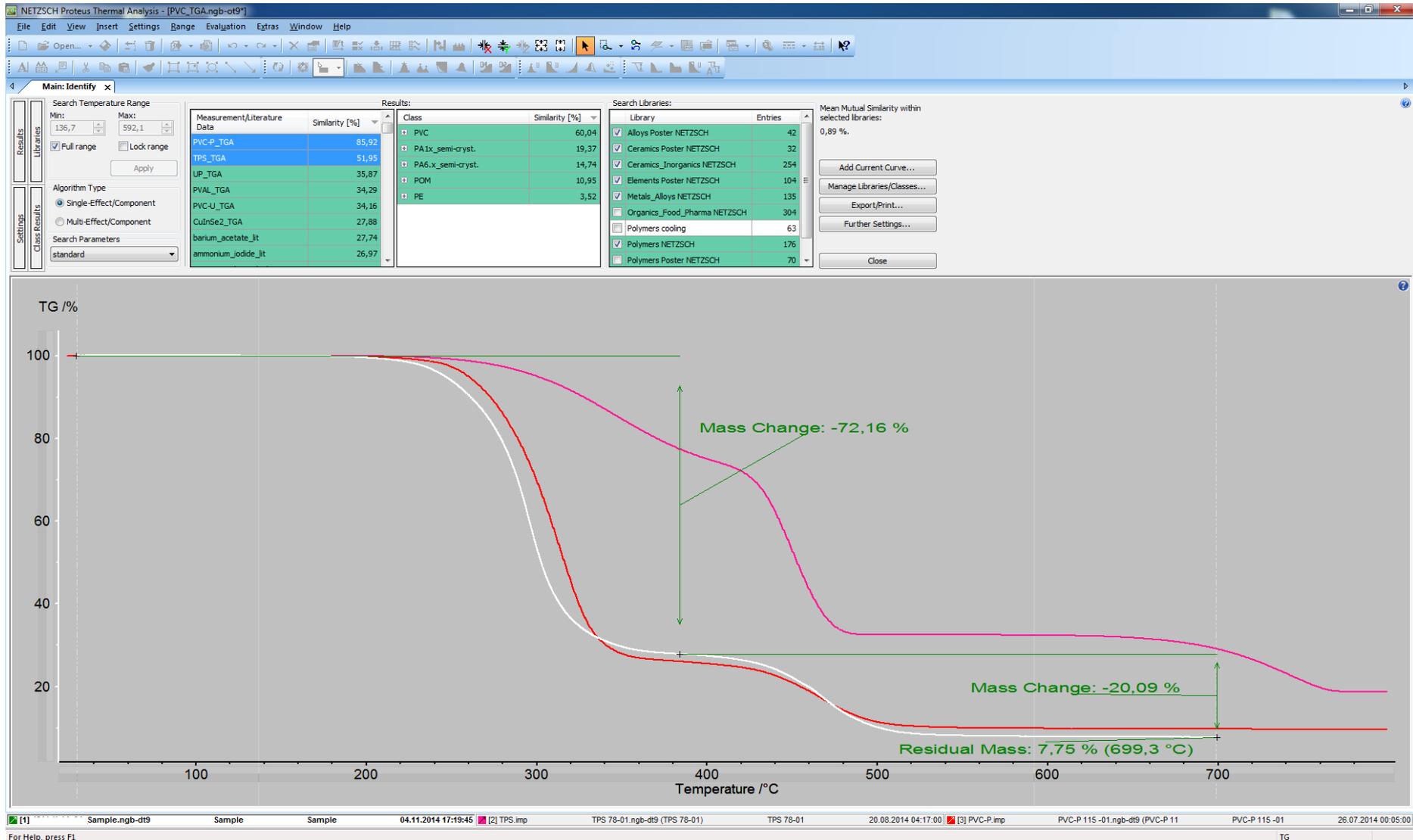


Kurvenidentifikation

TGA-Beispiel: Erkennung des Polymers PVC-P



NETZSCH

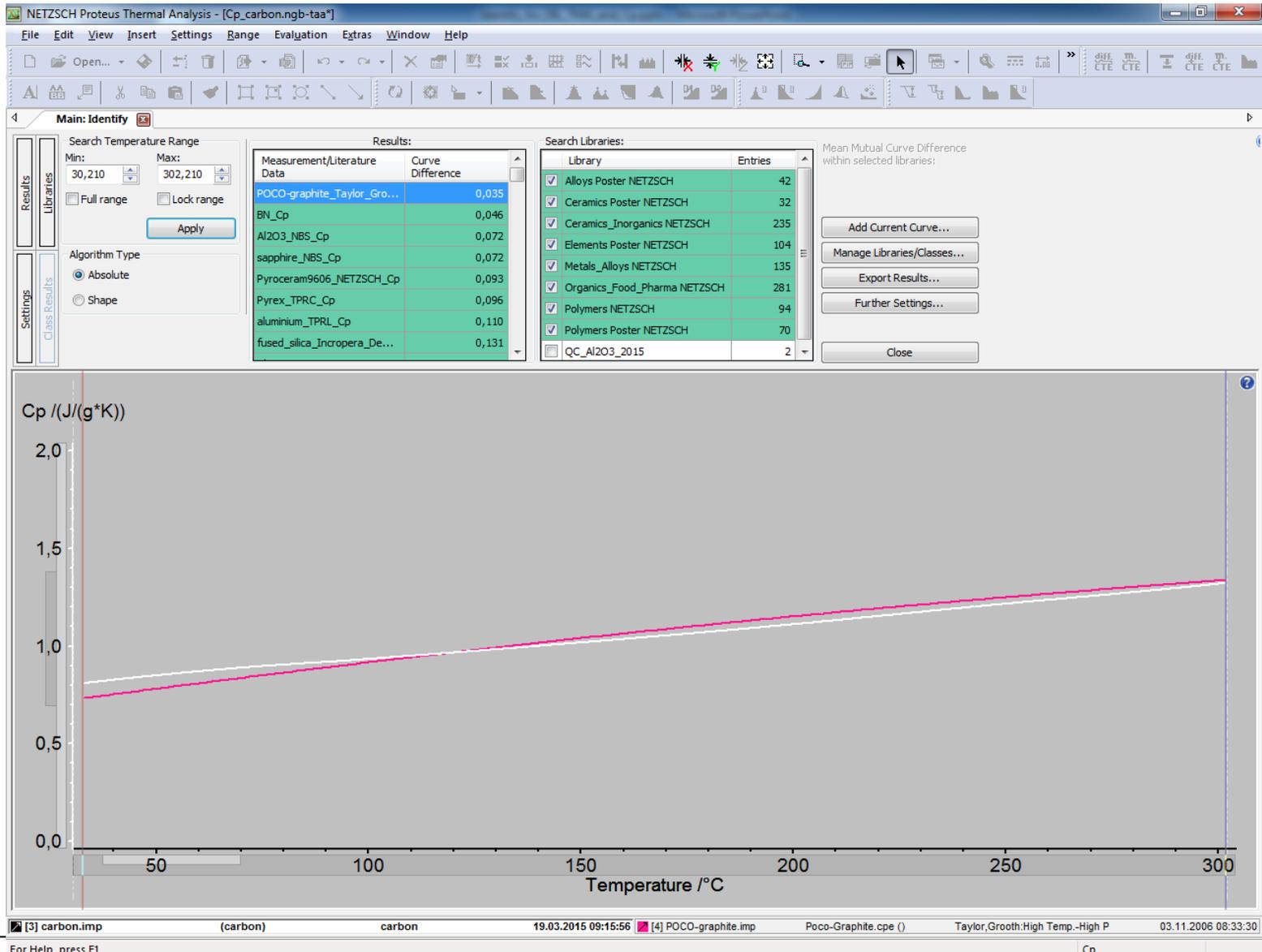


Kurvenidentifikation

C_p-Beispiel "Carbon", Algorithmus "Absolutwerte"



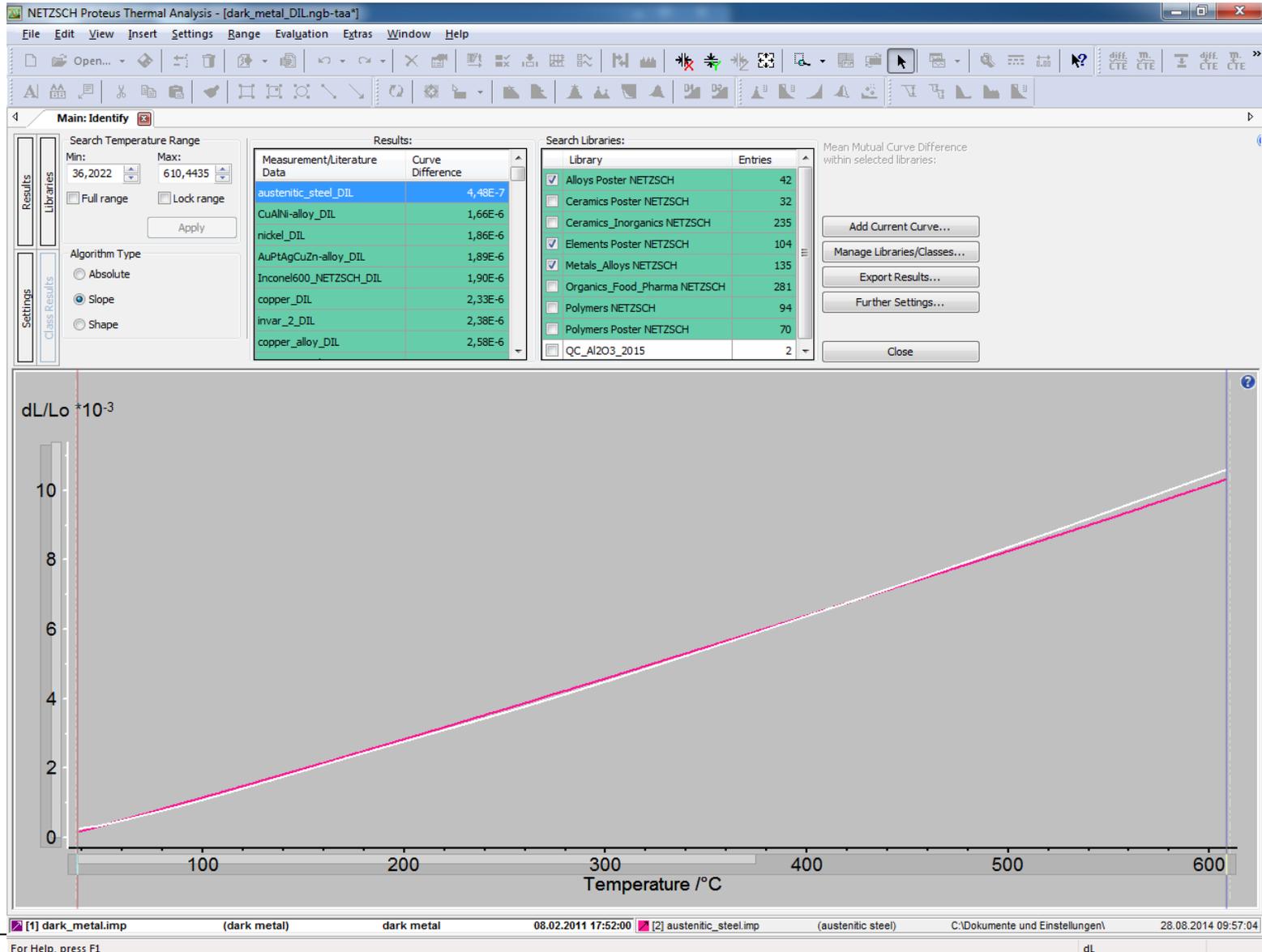
NETZSCH



Kurvenidentifikation DIL-Beispiel "Metall", Algorithmus "Steigung"

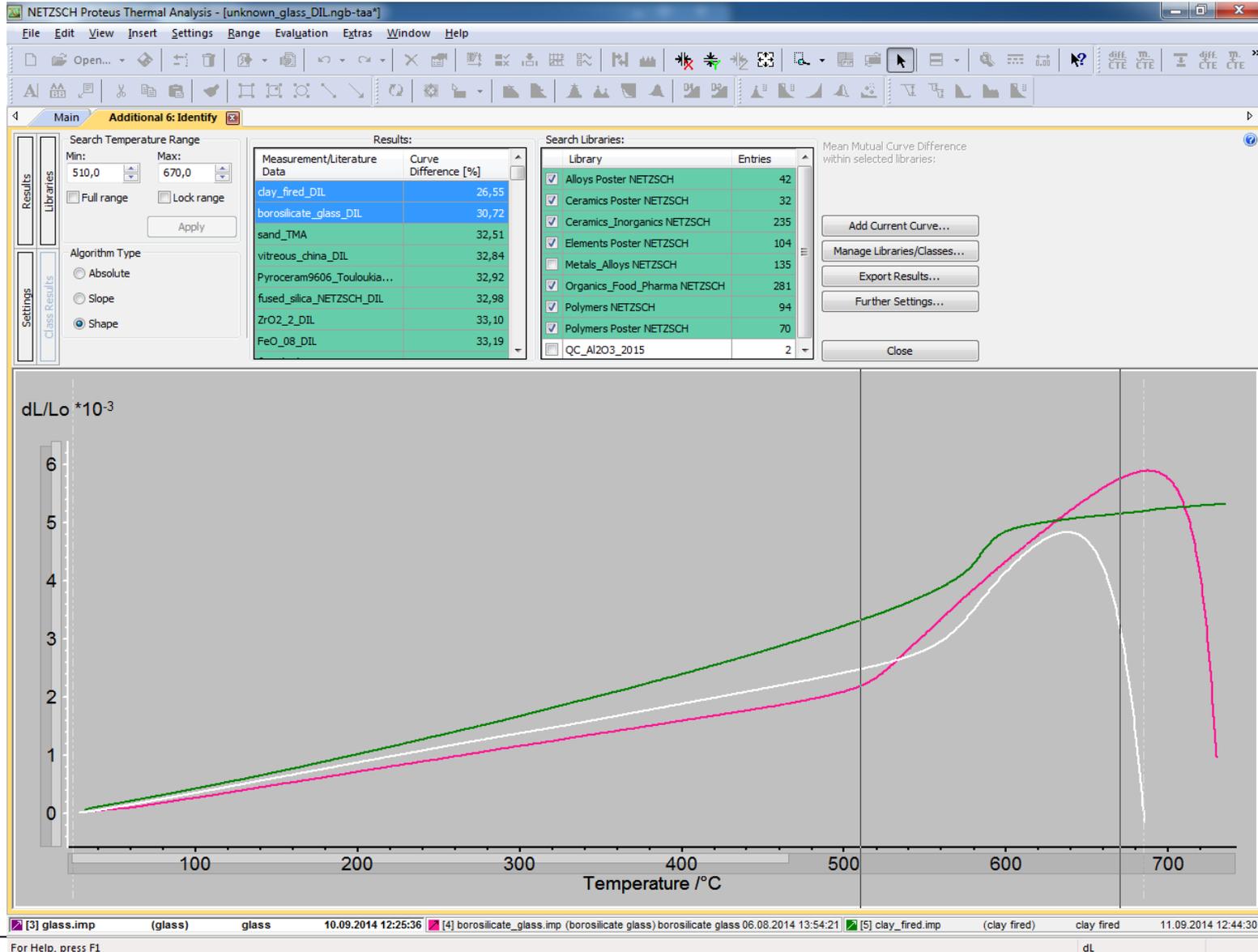


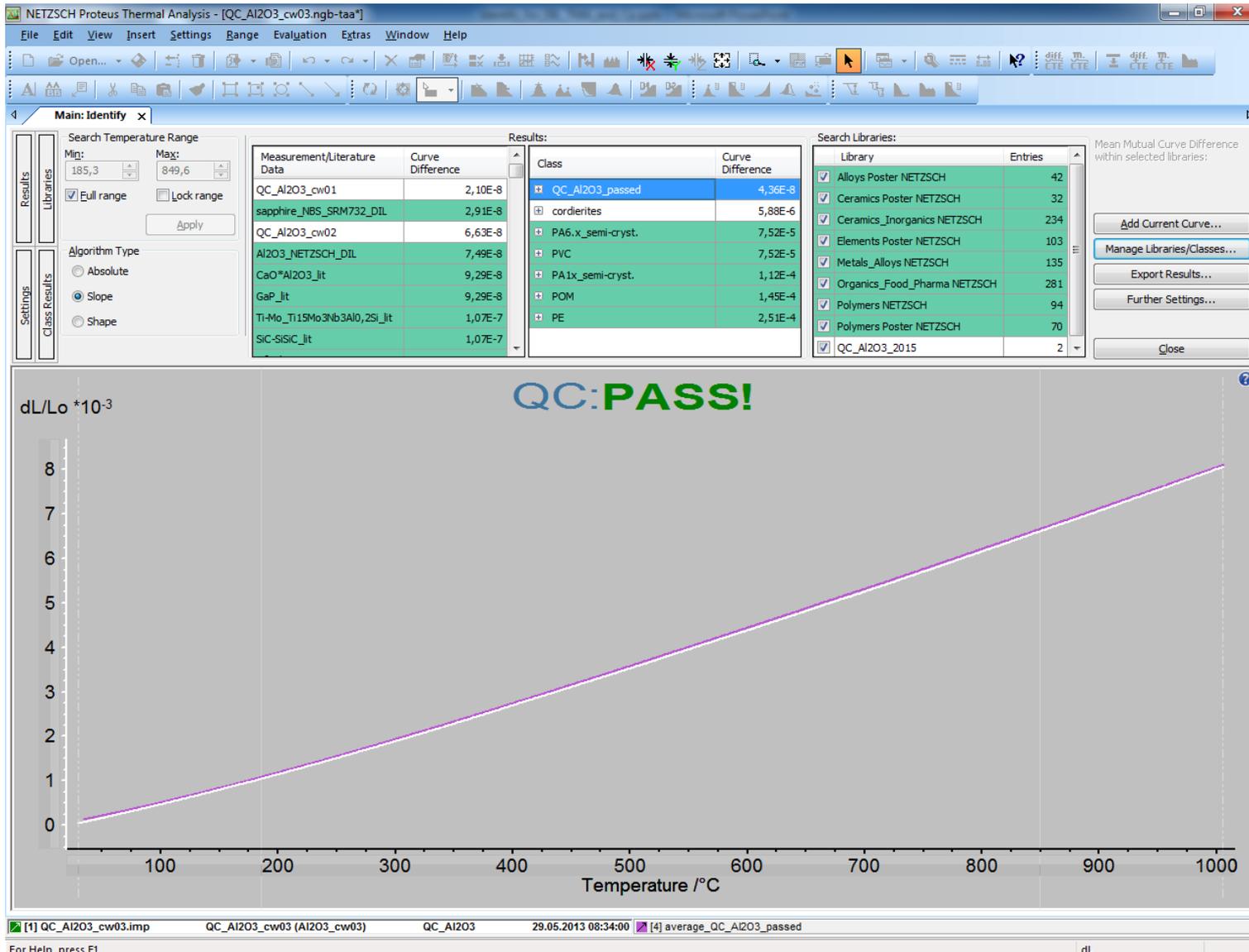
NETZSCH

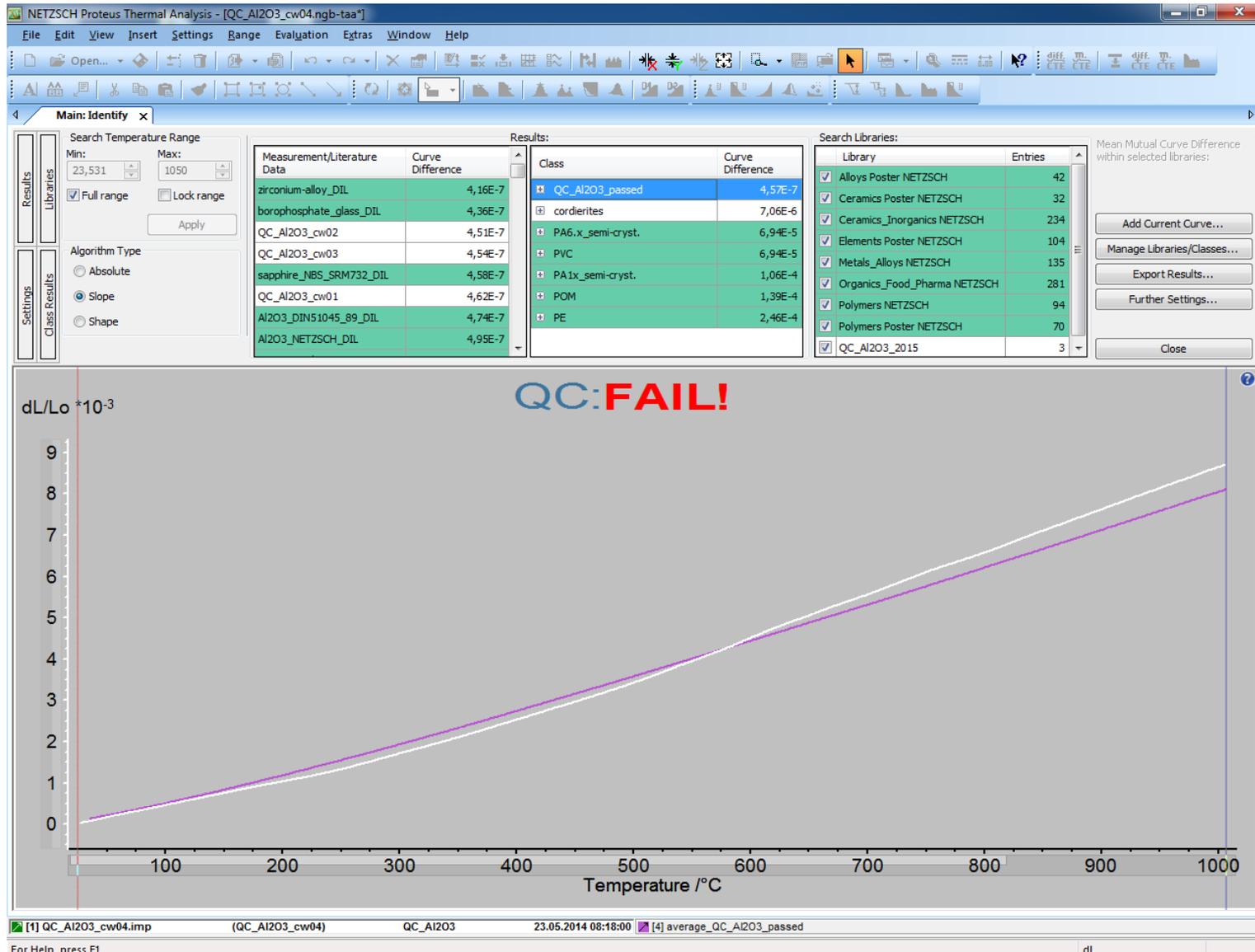


Kurvenidentifikation

DIL-Beispiel "Glas", Algorithmus "Kurvenform"





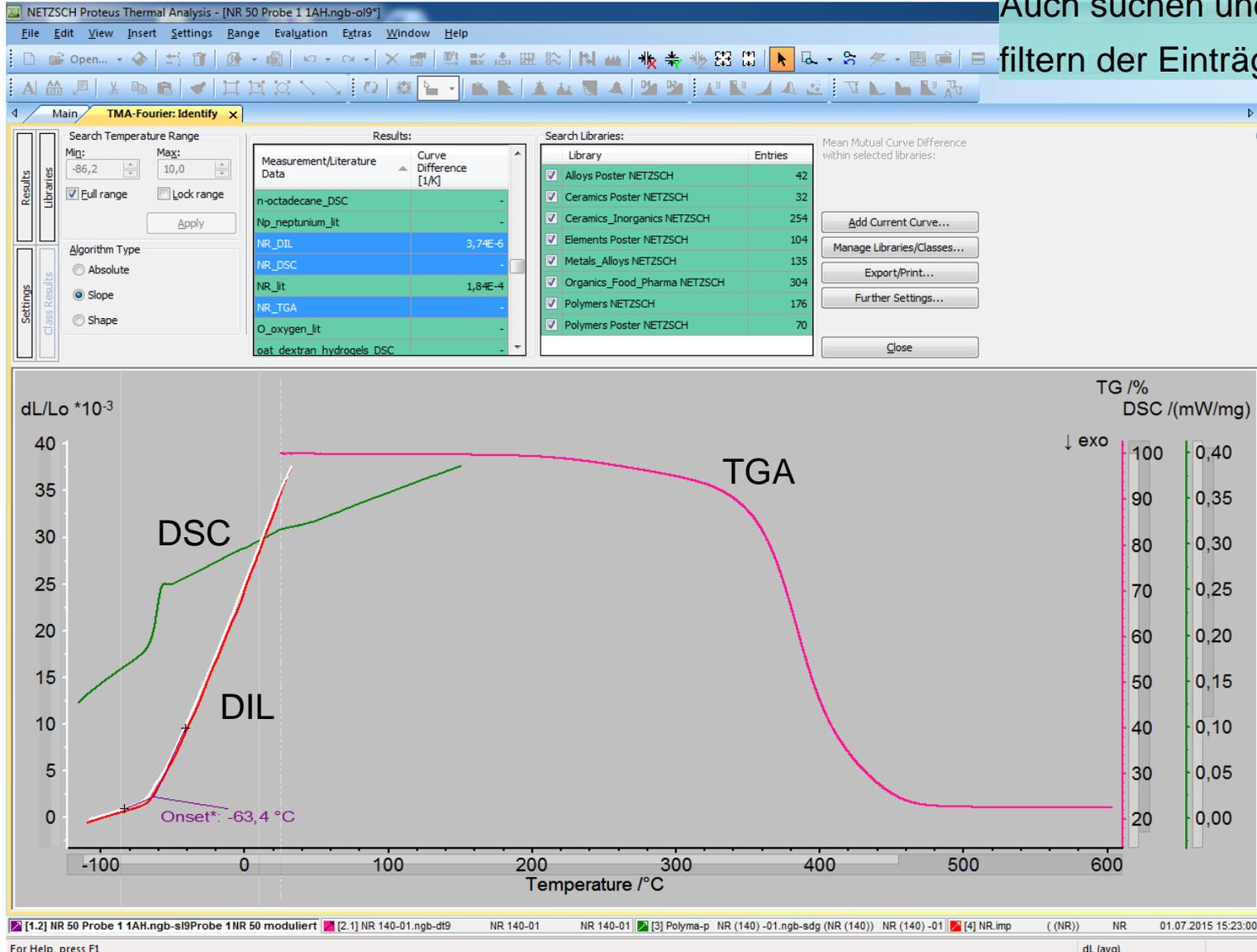


Kurven unterschiedlichen Signaltyps übereinanderlegen

Material hier NR (natural rubber). Analysezustände lassen sich direkt öffnen !



Auch suchen und filtern der Einträge!



05 Zusammenfassung

-
- Einzigartiges Datenbanksystem der Thermischen Analyse für DSC, TGA, DIL/TMA, C_p , ...
 - beinhaltet NETZSCH-Bibliotheken mit derzeit ~1100 Einträgen aus den Bereichen Keramik und Anorganik, Metalle und Legierungen, Polymere, Organik, Nahrungsmittel und Pharmazeutika, chem. Elemente.
 - Erweiterbar durch eigene Bibliotheken, die man im Computer-Netzwerk mit mehreren Nutzern gleichzeitig teilen kann.
 - Mit einem Klick:
 - + Identifikation von Messkurven
 - + Qualitätskontrolle mit definierbaren Schwellwerten
 - außerdem:
 - + Archivierung/Heraussuchen/Übereinanderlegen von Datenbank-Einträgen

Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit!

NETZSCH

Dr. rer. nat. Alexander Schindler

Research & Development

NETZSCH Gerätebau GmbH

Tel.: +49 9287 881-141

Fax: +49 9287 881-405

alexander.schindler@netzsch.com

www.netzsch.com