

Monitoraggio della qualità tramite un sensore software neurale dinamico

Alberto Servida, Paolo Moretti, Christian Parisi, Marianna Suar

Il lavoro discute l'applicazione di un sensore software per il monitoraggio in linea di un reattore di ter-polimerizzazione. L'indice di qualità monitorato è la viscosità Mooney che rappresenta uno dei principali indicatori per la classificazione del prodotto finale. Nel lavoro sono illustrati i risultati ottenuti tramite l'applicazione fuori linea di un sensore software neurale dinamico (DNSS: Dynamic Neural Software Sensor), le cui prestazioni sono confrontate con quelle di un precedente sensore basato su una rete neurale feed-forward classica.



L'impianto Polimeri Europa di Ferrara

Keyword

Sensori software, monitoraggio qualità, polimerizzazione

I polimeri sono utilizzati in un'ampia famiglia di settori industriali (automobilistico, apparecchiature elettriche, elettrodomestici, tessile, imballaggio ecc.). Oggigiorno, sono notevolmente migliorate le capacità dei produttori di fornire materiali con proprietà ritagliate sulle esigenze degli utilizzatori finali. Tutto ciò richiede produzioni di materiali polimerici con specifiche di qualità sempre più stringenti e severe.

L'avvento dei sistemi di controllo distribuiti (DCS: *Distributed Control Systems*) e la disponibilità di piattaforme di calcolo economiche ad elevate prestazioni hanno facilitato l'adozione di sistemi di controllo avanzato (APC: *Advanced Process Control*) - controllo inferenziale, *model predictive control*, sintesi diretta, eccetera - che consentono di ottenere miglioramenti significativi in termini di qualità dei prodotti, produttività e conformità alla normativa ambientale e della sicurezza. I sistemi di controllo avanzato dipendono non solo su modelli di processo adeguati ma anche sulla disponibilità di misure di processo collegate a indici di prestazione di impianto o di qualità. Infatti, i moderni algoritmi di controllo ottimizzano le azioni sulle variabili manipolate sulla base delle informazioni

sullo stato (assetto) attuale del processo. Spesso, la misura delle variabili di processo primarie (per esempio, composizioni o indici di qualità) o non sono disponibili o sono difficilmente acquisibili in linea per ragioni legate ai tempi di acquisizione o ai costi. Questo offre grandi opportunità per lo sviluppo di sistemi inferenziali (Sensori Software, SS) capaci di stimare indici di qualità o di prestazione di impianto che altrimenti non sarebbero facilmente disponibili.

I reattori di polimerizzazione, per la loro intrinseca complessità, costituiscono un interessante banco di prova per lo sviluppo e la convalida di sistemi inferenziali capaci di stimare gli indici di qualità strettamente legati alle caratteristiche richieste dai clienti finali. Le problematiche più critiche sono associate:

- al marcato carattere non lineare dei sistemi di polimerizzazione;
- alla parziale conoscenza della cinetica chimica;
- alle difficoltà legate alla formulazione di modelli a principi primi;
- ai frequenti cambi delle condizioni operative richiesti per rispettare le diverse specifiche di prodotto;
- all'elevato tempo di ritardo della misura di laboratorio;
- alla mancanza di strumenti analitici adeguati per la misura in linea delle principali proprietà dei polimeri.

L'ultimo punto è forse il più critico ed è quello che ha favorito una fervente attività finalizzata allo sviluppo di sensori hardware e software [1] e [2].

A. Servida, P. Moretti - D.C.C.I. Università di Genova; C. Parisi - Lamberti Spa; M. Suar - Polimeri Europa Spa

Background

I sensori software sono sistemi inferenziali capaci di stimare le variabili di processo primarie difficilmente misurabili in linea (per esempio, composizioni, indici di prestazione o indicatori di qualità). L'idea alla base dei sensori software è quella di utilizzare le misure delle variabili di processo facilmente acquisibili in linea integrate con un modello semplificato del processo. In linea di principio, è sempre possibile ricostruire lo stato di un sistema partendo da un insieme incompleto di misure in linea e da un adeguato modello del processo studiato [3] e [4].

I componenti principali di un SS sono:

- le variabili di ingresso, ovvero le variabili di processo facilmente misurabili in linea;
- le variabili di uscita, ovvero le variabili di processo primarie che si desidera stimare;
- il modello del processo che descrive la dipendenza funzionale delle variabili di uscita da quelle di ingresso.

I modelli di processo utilizzati nello sviluppo di SS devono essere un compromesso tra semplicità, per garantire una facile soluzione numerica in tempo reale, e un adeguato grado di rappresentatività del processo esaminato. A questo riguardo, la modellizzazione con reti neurali rappresenta un efficiente ambiente di sviluppo per la formulazione di sensori software, come è dimostrato dall'elevato numero di studi pubblicati nei più diversi settori applicativi: controllo della qualità dei polimeri [2 - 6]; monitoraggio dei processi chimici [7]; calcolo delle traiettorie ottimali nei sistemi discontinui [8] e [9]; controllo inferenziale [10].

La mancanza di strumentazione analitica adeguata rende, ancora oggi, il controllo della qualità nei reattori di polimerizzazione un problema non completamente risolto. Il problema principale sta nella capacità di collegare i cambiamenti nelle condizioni operative con le variazioni nelle proprietà del polimero che sono di interesse all'utilizzatore finale. La criticità della tematica è dimostrata dagli innumerevoli studi finalizzati al controllo della qualità e all'ottimizzazione dei reattori di polimerizzazione; in particolare, il lavoro [11] fornisce una completa panoramica degli studi pubblicati fino al 1997.

In questo lavoro verranno illustrati i risultati conseguiti nello sviluppo di un sensore software neurale per la stima della viscosità Mooney di elastomeri EPDM (ter-polimeri etilene-propilene-diene) prodotti attraverso la polimerizzazione in soluzione con catalizzatori Ziegler-Natta. Pochissimi studi hanno affrontato il problema del controllo di qualità nei reattori di ter-polimerizzazione [11] e [12].

Il sensore software discusso si basa su una rete dinamica neurale [14] che descrive la dipendenza funzionale, tra l'indice di qualità e le variabili di processo, attraverso una rete neurale ricorrente.

Definizione del problema

Il processo

Il processo di polimerizzazione esaminato in questo studio è il

processo di polimerizzazione (per la produzione di elastomeri EPDM) in esercizio presso lo stabilimento di Ferrara di Polimeri Europa. Uno degli indicatori primari della qualità dei ter-polimeri è la viscosità Mooney, che deve rispettare specifiche stringenti dipendenti dal grado del polimero.

Le sezioni principali dell'impianto sono:

- il reattore CSTR di polimerizzazione raffreddato attraverso un sistema di evaporazione-condensazione;
- le sezioni di *stripping* (primaria e secondaria) necessarie per il recupero del solvente e dei monomeri non reagiti;
- la sezione di finitura utilizzata per produrre il polimero nella forma e nella pezzatura desiderata.

La viscosità Mooney è misurata in laboratorio sui campioni di polimero prelevati all'uscita dello stripping primario e della sezione di finitura. Il controllo della qualità è realizzato tramite il sistema di controllo multivariabile del reattore di polimerizzazione.

Il sensore software

L'esigenza di un controllo stringente della qualità dell'elastomero EPDM ha richiesto lo sviluppo di un SS capace di predire la viscosità Mooney all'uscita dello stripping primario sulla base delle condizioni operative di esercizio del reattore di polimerizzazione.

I problemi di maggiore rilevanza che sono stati affrontati sono:

- il ritardo della misura di laboratorio della viscosità Mooney all'uscita dello stripping primario, che è effettuata con una frequenza di una misura ogni due - quattro ore;
- l'esigenza di utilizzare le misure delle sole variabili di processo disponibili.

Progetto del sensore software

Struttura

Il sensore di viscosità sfrutta un modello semplificato che si basa su una rete dinamica neurale (DNN: *Dynamic Neural Network*) a tre strati: lo strato di ingresso, lo strato nascosto (intermedio) e lo strato di uscita. Quest'ultimo è costituito da un unico neurone dinamico la cui uscita è calcolata come:

$$\tau \frac{dy}{dt} + y = \sum_{j=1}^{n_h} w_j z_{2,j}, \quad (1)$$

con condizioni iniziali:

$$y = y_o \text{ for } t = t_o. \quad (2)$$

dove y rappresenta la stima dell'uscita (viscosità Mooney), y_o la viscosità Mooney all'istante t_o , n_h il numero dei neuroni dello strato nascosto, $\mathbf{z}_2=[z_{2,j}]$ (con $j= 1, 2, \dots, n_h$) le uscite dei neuroni dello strato intermedio, $\mathbf{w}=[w_j]$ i pesi di connessione tra i neuroni dello strato nascosto e quello strato di uscita. Le uscite dei neuroni dello strato nascosto sono calcolate attraverso la funzione di attivazione sigmoidale, ed è per questo che esibiscono una dipendenza non-lineare dagli ingressi alla rete neurale.

Se si assume \mathbf{z}_2 costante sull'orizzonte di integrazione (t_o ,

$t_0 + \Delta t$), allora la soluzione analitica del modello (1) e (2) è:

$$y = y_0 E(t) + \sum_{j=1}^{n_h} w_j z_{2,j} [I - E(t)]$$

$$E(t) = \text{Exp}[-(t - t_0)/\tau] \quad (3)$$

L'equazione (3) costituisce il modello dinamico approssimato del processo che consente di calcolare la sequenza delle previsioni della viscosità Mooney sull'orizzonte temporale Δt . y_0 coincide con la misura di laboratorio all'istante t_0 , se disponibile, in caso contrario, è uguale al valore di viscosità calcolato alla fine della sequenza precedente.

La struttura del modello proposto è simile a quella dei modelli tipo Hammerstein che sono costituiti da una componente statica non-lineare seguita da una componente dinamica lineare [15].

L'insieme dei valori $\{\tau, [w_j]\}$ costituisce l'insieme dei parametri del modello che sono calcolati durante la calibrazione, articolata in una fase di addestramento (training) e in una fase di convalida incrociata (cross validation). Quest'ultima è resa necessaria per evitare il fenomeno di *over parametrization*, ovvero l'eccessivo addestramento del modello sui dati di calibrazione.

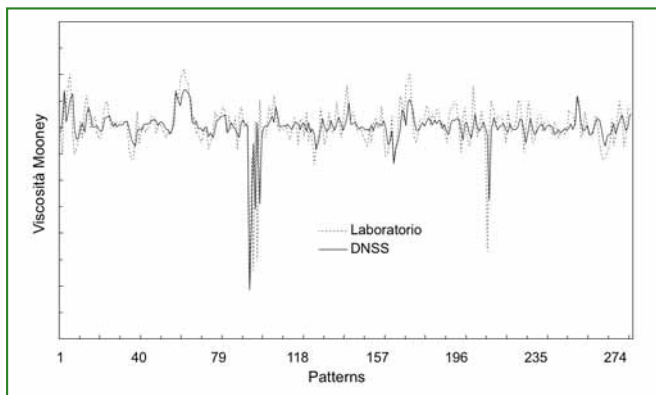


Figura 1 - Confronto tra le previsioni del sensore DNSS e le misure di laboratorio: dati di cross validation

Sviluppo del sensore software neurale

Lo sviluppo dei sensori software neurali è un processo che si articola in più stadi: acquisizione dei dati di impianto, pre-trattamento (*preprocessing*) dei dati acquisiti, selezione delle variabili di processo da utilizzare come ingressi alla rete neurale, calibrazione del modello neurale e convalida fuori linea. Le prime tre fasi sono particolarmente critiche per poter formulare un modello neurale efficiente.

Nella fase di acquisizione dei dati di impianto è essenziale analizzare la qualità e il grado di rappresentatività dei dati sperimentali con senso critico, in quanto la calibrazione dei modelli neurali richiede la disponibilità di dati storici di funzionamento che siano realmente rappresentativi delle condizioni operative nelle quali il sensore software sarà chiamato a operare. Di conseguenza è essenziale riconoscere i dati rappresentativi di con-

dizioni di funzionamento non normali (*outlier*) che potrebbero compromettere la calibrazione dei modelli stessi.

Già nella fase di pre-trattamento dei dati è possibile rendersi conto di quali sono le variabili di processo che influenzano in modo più marcato la variabile (o le variabili) che è necessario stimare. Tra tutte le potenziali variabili, è necessario selezionare quelle che forniscono informazioni sufficienti per determinare prontamente le variazioni di assetto del processo.

Una buona comprensione dei fenomeni chimico-fisici che regolano il processo esaminato aiuta sicuramente la scelta delle variabili di processo che influenzano in modo più marcato il comportamento del processo. L'identificazione dell'insieme delle variabili di ingresso al modello neurale può essere facilitata dall'impiego di alcuni strumenti dell'analisi statistica multivariata, quali l'analisi dei componenti principali (PCA: *Principal Component Analysis*) o l'analisi dei coefficienti di correlazione di Pearson. Questi strumenti consentono di cogliere le correlazioni tra le variabili di processo e di conseguenza, se sono adeguatamente integrati con la conoscenza disponibile sul processo, possono dimostrarsi efficienti strumenti di analisi. Un vantaggio dell'analisi PCA sta nella possibilità di costruire carte di controllo multivariate che consentono di semplificare e di automatizzare l'identificazione di outlier. Questa è una delle ragioni che fanno dell'analisi PCA un mezzo particolarmente efficiente per il monitoraggio e il controllo di qualità di processi multivariati.

La formulazione di un sensore software neurale è il risultato di un giusto compromesso tra le caratteristiche di interpolazione e di generalizzazione – predizione. Le prime si riferiscono alla capacità del modello nel riprodurre i dati utilizzati nella fase di calibrazione, mentre le seconde sono legate all'accuratezza con cui il modello neurale è in grado di descrivere dati sperimentali mai utilizzati nella fase di calibrazione. Un problema da evitare è il fenomeno di *overtraining* od *overparamterization*, che corrisponde a una eccessiva calibrazione della rete neurale sui dati di addestramento. Per evitare questo si adotta il metodo di cross validation, che consiste nell'impiegare 2/3 dei dati di calibrazione per stimare i parametri della rete (training) e 1/3 dei dati per controllare l'errore di predizione della rete su dati non utilizzati direttamente per la stima dei parametri (*cross validation*). Lo stadio di calibrazione è seguito da una fase di convalida fuori linea durante la quale le caratteristiche predittive del sensore sono verificate impiegando nuovi dati di impianto.

L'applicazione industriale

Acquisizione dei dati

Il sensore software neurale dinamico è stato sviluppato utilizzando dati storici di impianto relativi a un periodo di funzionamento di quattro mesi. Questi sono gli stessi dati già impiegati per la formulazione di un sensore software statico, basato su una rete neurale classica *feed-forward* [16], che è attualmente in uso in linea.

L'insieme dei dati utilizzati per la calibrazione e la convalida del sensore neurale è costituito sia da misure continue (relative

alle variabili di processo caratterizzanti il reattore e l'accumulo dello *stripper* primario) sia da misure di laboratorio (viscosità Mooney). Mentre le prime sono acquisite con una frequenza di campionamento di una misura ogni sei minuti, la misura di laboratorio è disponibile con una frequenza di una misura ogni due - quattro ore. L'insieme dei dati è composto da 17183 misure continue, relative a 67 variabili di processo, e da 863 misure di laboratorio di viscosità Mooney.

Il primo problema affrontato è stato quello relativo all'identificazione degli *outlier* per eliminare tutti i dati non rappresentativi di condizioni di marcia normali. Questa operazione, realizzata utilizzando la PCA, ha permesso di ridurre l'insieme delle misure continue a 16581. Il secondo problema affrontato è stato quello relativo alla sincronizzazione delle misure della sezione di reazione con le misure di laboratorio della viscosità Mooney all'uscita dello *stripper* primario. La difficoltà sta nel fatto che, pur avendo a disposizione una misura in linea del *hold up* dello *stripper* primario, non si ha alcuna misura della portata in uscita dal reattore di polimerizzazione. Questa portata è stata calcolata tramite l'applicazione di semplici bilanci materiali e di energia. L'approccio si è dimostrato valido per stimare la portata totale della corrente diluente - polimero, la potenzialità (in termini di polimero prodotto per unità di tempo) e la composizione media del polimero. In particolare, l'informazione sulla composizione media del polimero, espressa come frazione ponderale di diene e di etilene, è risultata fondamentale per lo sviluppo dei sensori software neurali. Il risultato della sincronizzazione ha consentito di allineare le 830 misure sperimentali di viscosità Mooney con le rispettive misure delle 66 variabili di processo caratterizzanti il reattore di polimerizzazione. L'insieme delle misure in continuo è stato successivamente integrato con le seguenti variabili calcolate: rapporto tra le portate di ingresso di etilene/propilene e diene/propilene e la frazione ponderale (media) di etilene e diene nel polimero prodotto.

Selezione degli ingressi

La scelta dei potenziali ingressi al modello neurale dinamico è stata realizzata sulla base delle analisi di correlazione (PCA e Pearson) e delle discussioni con gli operatori di impianto. Il risultato di questa analisi ha portato alla seguente scelta delle variabili di processo da utilizzare come ingressi al sensore:

- il rapporto tra le portate in ingresso del diene e del propilene;
- la frazione ponderale media del diene nel polimero prodotto;
- la portata di ingresso dell'agente di trasferimento della catena (Nm³/h);
- la frazione molare dell'agente di trasferimento di catena nella corrente gassosa uscente dal reattore;
- il rapporto molare solvente/(solvente + propilene) nella corrente gassosa uscente dal reattore;
- la temperatura del reattore.

Delle variabili di processo elencate, la percentuale di diene nel polimero e il rapporto tra la portata in ingresso al reattore di diene monomero e la portata di propilene sono risultate essere le variabili di processo che più influenzano la viscosità Mooney. Il risultato, del tutto inatteso da parte degli operatori dell'impianto, trova una giustificazione nel fatto che l'inserzione

di unità dieniche nella catena polimerica in accrescimento favorisce fenomeni di *branching*, che hanno un marcato impatto sul comportamento reologico del polimero. L'effetto è osservato anche alle piccole percentuali ponderali di diene che si riscontrano nel prodotto finale (< 10%). Tutto ciò mostra come un uso appropriato degli strumenti di analisi statistica multivariata consenta di ottenere informazioni che contribuiscono ad accrescere la comprensione dei processi.

Il sensore software dinamico è stato calibrato e convalidato fuori linea utilizzando le 830 misure di laboratorio di viscosità Mooney sincronizzate con le misure in continuo delle sei variabili di processo sopra elencate; 548 dati sono stati utilizzati per la calibrazione del sensore (363 per l'addestramento e 183 per la *cross validation*), i rimanenti 282 dati sono stati utilizzati per la convalida fuori linea.

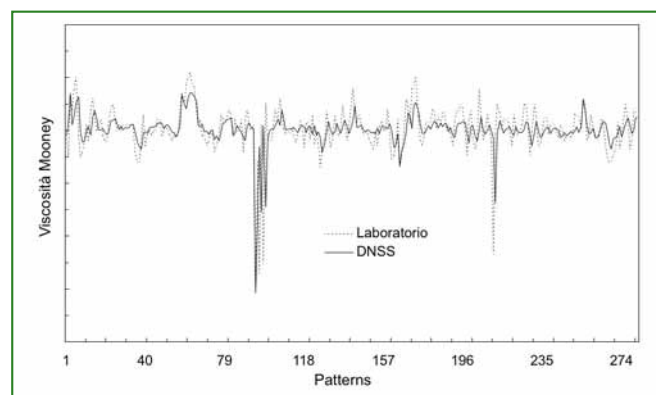


Figura 2 - Confronto tra le previsioni del sensore DNSS e le misure di laboratorio: dati di convalida

Risultati e discussione

La valutazione delle prestazioni del DNSS è stata effettuata confrontando le previsioni del sensore con le misure di laboratorio. I risultati ottenuti per i dati di *cross validation* e di convalida sono mostrati nelle figure 1 e 2, rispettivamente. La scala della viscosità Mooney è volutamente omessa per ragioni di riservatezza.

I risultati si riferiscono al sensore dinamico con sei ingressi, due neuroni nello strato nascosto e un neurone dinamico nello strato di uscita. Questa è stata la struttura che ha esibito l'errore percentuale medio inferiore (APE: *Average Percentage Error*) e la maggiore correlazione con le misure di laboratorio. In *cross validation* si è raggiunto un APE del 3,8% e un coefficiente di correlazione di 0,76, mentre in convalida si è ottenuto un APE del 4,3% nonostante la presenza di quattro misure (corrispondenti ai quattro picchi verso il basso) con errore percentuale maggiore del 30% e non giustificabili con l'occorrenza di condizioni operative anomale al reattore.

Il sensore neurale dinamico è in grado di descrivere le caratteristiche dinamiche essenziali del processo, sebbene utilizzi un modello di processo semplificato. Quanto osservato dimostra che l'insieme delle variabili di processo utilizzate come ingressi al modello sono in grado di cogliere le variazioni delle condizioni operative nel reattore.

È stata effettuata un'ulteriore verifica fuori linea dei sensori neurali simulando una installazione in linea con l'intento di

verificare le capacità del sensore nel cogliere la variabilità del processo. La figura 3 mostra i risultati della prova che è stata effettuata utilizzando i dati di impianto relativi a 20 ore di funzionamento durante la marcia del 1/10/2004; i *pattern* sono

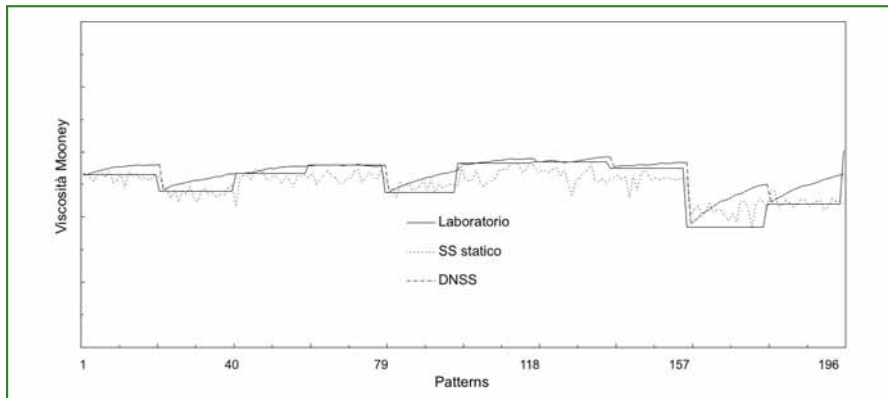


Figura 3 - Simulazione di un'installazione in linea: i dati si riferiscono a 20 ore di funzionamento

relativi a dati equidistanziati di 6 min. Nella figura le predizioni del DNSS sono confrontate con le misure di laboratorio (fornite a intervalli regolari di due ore) e con le predizioni di un sensore software statico precedentemente sviluppato [16]. Il sensore statico usa lo stesso insieme di variabili di ingresso di quello dinamico ed è basato su una rete neurale *feed forward* con struttura *sliding window*. Ciò consiste nell'usare non solo i valori attuali delle variabili di ingresso ma anche i valori al tempo di campionamento in corrispondenza del quale era disponibile l'ultima misura di laboratorio. In definitiva, il sensore statico ha 13 ingressi (6 coppie di misure di variabili di processo e l'ultima misura disponibile di viscosità Mooney) e tre neuroni nello strato nascosto.

Il sensore neurale dinamico esibisce le prestazioni migliori in quanto riesce ad anticipare meglio le variazioni di viscosità Mooney. Inoltre, nei periodi tra due misure di laboratorio consecutive, il sensore neurale dinamico fornisce una stima di viscosità meno erratica. Ciò è dovuto al fatto che il sensore neurale con struttura statica risente in modo più marcato della variabilità degli ingressi del modello: è come se le fluttuazioni che entrano nel processo venissero istantaneamente trasmesse all'uscita. Ciò non accade con il sensore dinamico che è in grado, attraverso la sua dinamica, di assorbirle attenuandole.

Conclusioni

Nel lavoro sono stati illustrati i risultati ottenuti dall'applicazione di un sensore neurale dinamico per il monitoraggio della qualità di un reattore di polimerizzazione per la produzione di elastomeri EPDM. Il sensore sfrutta un modello neurale dinamico che è stato calibrato utilizzando dati di impianto e misure di laboratorio. Il sensore neurale dinamico si è dimostrato capace di cogliere la dipendenza della viscosità Mooney dalle condizioni operative del reattore di polimerizzazione, nonostante la sua semplicità.

Bibliografia

- [1] O. Kammona, E.G. Chatzi, C. Kiparissides, "Recent developments in hardware sensors for the on-line monitoring of polymerization reactions", *JMS-Rev. Macromol. Chem. Phys.*, vol. C39, pp. 57-134, 1999.
- [2] M. Ohshima, M. Tanigaki, "Quality control of polymer production processes", *J. Process Control*, vol. 10, pp. 135-148, 2000.
- [3] A.H. Jazwinski, *Stochastic Processes and Filtering Theory*. New York: Academic Press, 1970.
- [4] A. Gelb, *Applied Optimal Estimation*, Cambridge, MA: MIT, 1974.
- [5] J. Zhang, A.J. Morris, E.B. Martin, C. Kiparissides, "Prediction of polymer quality in batch polymerization reactors using robust neural networks", *Chem. Engng. J.*, pp. 135-143, 1998.
- [6] M. Hinchliffe, G. Montague, M. Willis, A. Burke, "Hybrid approach to modeling an industrial polyethylene process," *AIChE J.*, pp. 3127-3137 (2003).
- [7] R. Baratti, A. Servida, "Nonlinear observer based on hybrid modeling of chemical reactors", *Chem. Engng. Comm.*, vol. 179, pp. 219 - 231, 2000.
- [8] M. Krothapally, S. Palanki, "A neural network strategy for batch process optimization," *Computers Chem. Engng.*, vol. 21, pp. S463-S468, 1997.
- [9] M. Krothapally, B., Bennett, W., Finney, S. Palanki, "Experimental implementation of an on-line optimization scheme to batch PMMA synthesis," *ISA Transactions*, vol. 38, pp. 185-198, 1999.
- [10] R. Baratti, G. Vacca, A. Servida, "Neural networks: modeling of distillation column," *Hydroc. Process.*, vol. 74 (6), pp. 35-38, 1995.
- [11] M. Embirucu, E.L. Lima, J.C. Pinto, "A survey of advanced control of polymerization reactors," *Polymer Engng. and Sci.*, vol.36, pp. 433-447, 1996.
- [12] B.A. Ogunnaike, "On-line modeling and predictive control of an industrial terpolymerization reactor," *Int. J. Control*, vol. 59, pp. 711-729, 1994.
- [13] R. Li, A.B. Corripio, M.A. Henson, M.J. Kurtz, "On-line state and parameter estimation of EPDM polymerization reactors using a hierarchical extended Kalman filter," *J. Proc. Control*, vol. 14, pp. 837-852, 2004.
- [14] R. Baratti, A. Servida, "Dynamic Neural Model for DMC Applications," *Engineering Benefits from Neural Networks*, A.B. Bulsari, J.F. de Canete, S. Kallio, Eds., Turku, FL: Systeemiteknikan seura ry, pp. 110-113, 1998.
- [15] W.M. Ling, D.E. Rivera, "A methodology for control-relevant nonlinear system identification using restricted complexity models," *J. Proc. Control*, vol. 11, pp. 209-222, 2001.
- [16] C. Parisi, A. Servida, V. Banzi, M. Suar, "Un sensore software per la stima della qualità di un elastomero", *Automazione e Strumentazione*, issue 5, pp. 94-101, 2005. ■