Sensori "virtuali" per processi batch

di Eliana Zamprogna
e Massimiliano Barolo

Quando, in un processo batch, misurare in linea la composizione o un altro indice di qualità di prodotto è difficile o costoso, una possibilità è ricorrere all'impiego di sensori "virtuali".
Si tratta di strumenti software in grado di produrre stime accurate delle grandezze di interesse sfruttando altre misure di processo, ottenibili con maggior facilità e a basso costo. In questo articolo si presenta un'applicazione di queste tecniche per la stima delle composizioni dei prodotti in una colonna di distillazione batch.

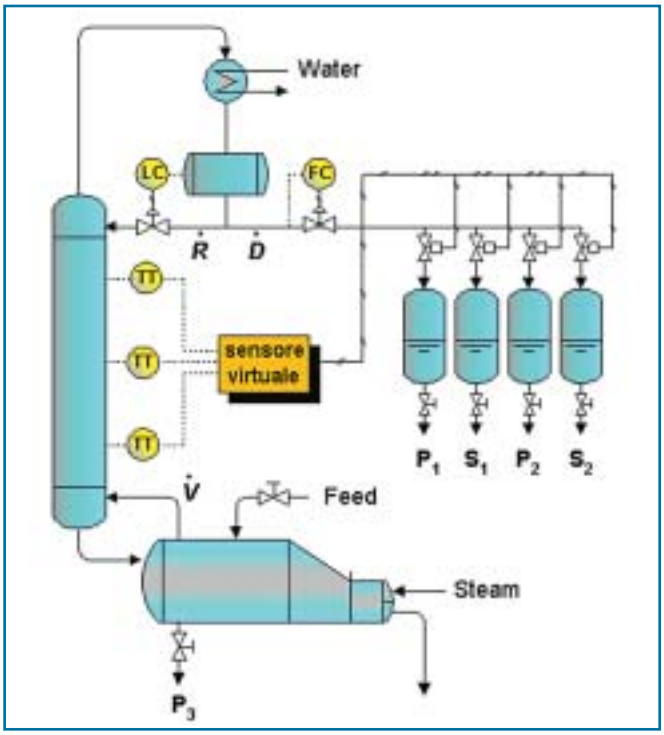

Figura 1 - Schema della colonna di distillazione batch e del sistema di regolazione basato sul sensore virtuale

Nonostante la composizione sia uno dei più importanti indicatori di qualità di prodotto, è talvolta difficile utilizzare questa grandezza direttamente per il monitoraggio e il controllo dei processi chimici, in particolar modo nelle produzioni discontinue. Ciò è dovuto al fatto che, pur avendo raggiunto un elevato grado di affidabilità, gli analizzatori di processo sono costosi, necessitano di manutenzione frequente, e hanno tempi di risposta spesso elevati. Ciò può rendere arduo il monitoraggio in linea della qualità dei prodotti, conducendo così a produzioni fuori specifiche. L'incidenza di questo problema può essere ridotta se si impiegano tecniche di "misura virtuale" di composizione.
Secondo questo approccio, le composizioni dei prodotti non vengono *misurate* direttamente, ma sono *stimate* da un sensore virtuale (o sensore software), che impiega in linea un modello matematico del processo e informazioni relative a grandezze secondarie, facilmente misurabili; tipicamente, possono essere utilizzate misure di temperatura, portata, o pressione, la cui rilevazione sperimentale risulta generalmente economica, accurata e sostanzialmente priva di ritardi.
Lo sviluppo di sensori software per processi batch risulta complicato dal fatto che la natura dinamica e non lineare di questi processi rende difficile l'impiego in linea di modelli a principi primi, i quali richiedono di solito un carico di calcolo elevato.
In effetti, una delle questioni più rilevanti che vanno affrontate nell'ambito dello sviluppo dei sensori software riguarda proprio la caratterizzazione del modello di processo più adeguato. Infatti, per poter rendere effettivamente applicabile in linea la tecnica della stima inferenziale (particolarmente per le produzioni discontinue), il modello da utilizzare deve essere "semplice" ma, al contempo, garantire una rappresentazione realistica, affidabile e precisa del sistema.
In questo articolo vengono presentati alcuni dei risultati ottenuti da uno studio di simulazione condotto recentemente presso il Dipartimento di Principi e Impianti di Ingegneria Chimica "I. Sorgato" dell'Università di Padova, nel quale è stato sviluppato un sensore virtuale per il monitoraggio e il controllo di un processo di distillazione discontinua. Lo sviluppo del sensore virtuale di composizione è stato condotto secondo un approccio basato sulla modellazione empirica del processo mediante l'impiego di tecniche di regressione multivariabile. In particolare, sono state ottenute misure simulate delle variabili di processo (temperature, portate, composizioni) da un modello matematico rigoroso del processo stesso, e tali informazioni sono state elaborate per mezzo di tecniche di regressione multivariabile al fine di ottenere un sensore virtuale a modello non strutturato con basso carico di calcolo.
In questo studio sono presentati alcuni risultati relativi alla verifica di fattibilità dell'approccio proposto e all'identificazione della tecnica di regressione che garantisce la migliore rappresentazione del comportamento del processo considerato, in termini di accuratezza e di robustezza di stima, anche a fronte di rumore nelle misure secondarie.

Descrizione del processo e delle tecniche di regressione

Il processo
Il processo considerato consiste nella distillazione discontinua di una miscela ternaria per mezzo di una colonna di rettifica con 20 piatti, al fine di ottenere la separazione dei singoli com-

E. Zamprogna, M. Barolo, DIPIC - Dipartimento di Principi e Impianti di Ingegneria Chimica "I. Sorgato" - Università di Padova. max.barolo@unipd.it

ponenti della carica di alimentazione ad un livello minimo di purezza assegnato. La colonna è esercita secondo la modalità a riflusso costante.
Come rappresentato in Figura 1, il sistema di monitoraggio proposto per la supervisione della strategia di raccolta dei prodotti (P_i) e dei tagli di scarto (S_i) è basato sull'applicazione in linea di un sensore virtuale. Secondo tale approccio, ad ogni istante di campionamento il sensore:
- riceve le misure di temperatura provenienti da alcune termocoppie collocate nei piatti della colonna e in caldaia;
- calcola la stima della frazione molare istantanea nel distillato del componente leggero e del componente intermedio ($x_{D,1}$ e $x_{D,2}$, rispettivamente), e della frazione molare del componente pesante in caldaia ($x_{B,3}$);
- sulla base del valore stimato delle composizioni, decide la strategia più opportuna per la raccolta dei prodotti.

Le tecniche di regressione
Per lo sviluppo del sensore virtuale a modello non strutturato sono state utilizzate tecniche di regressione multivariabile di tipo ai minimi quadrati parziali (Partial Least Squares; PLS) e a rete neurale artificiale (Artificial Neural Network; ANN). La regressione PLS può essere descritta dalle equazioni seguenti:

$$\mathbf{X} = \mathbf{T}\mathbf{P}^T + \mathbf{E}$$
$$\mathbf{Y} = \mathbf{U}\mathbf{Q}^T + \mathbf{F} \qquad (1)$$
$$\mathbf{u}^i = f_i(\mathbf{t}_i) + \mathbf{h}_i$$

In termini qualitativi, essa permette di caratterizzare le correlazioni esistenti fra due gruppi di dati: un gruppo di grandezze secondarie misurate **X** (ad esempio, temperature sui piatti) e un gruppo di grandezze primarie non misurate **Y** (ad esempio, composizione dei prodotti). Le relazioni che intercorrono tra **X** e **Y** sono ottenute attraverso alcuni parametri (codificati nelle matrici **T** e **U**) e nuove grandezze, definite "variabili latenti" (matrici **P** e **Q**), le quali riassumono il contenuto informativo e le leggi di correlazione dei set di dati di origine. Le funzioni (lineari o non lineari) f_i "legano" tra loro le informazioni contenute nelle matrici dei parametri, mentre la porzione di informazione "persa" mediante tutte queste trasformazioni viene trattenuta all'interno delle matrici **E** e **F**. La tecnica di regressione ANN, invece, permette di determinare le correlazioni esistenti fra i due gruppi di dati **X** e **Y** secondo una relazione del tipo:

$$\mathbf{Y} = \mathbf{N}_2(\mathbf{W}_2\mathbf{N}_1(\mathbf{W}_1\mathbf{X})) \qquad (2)$$

che rappresenta una di "rete" di trasformazioni lineari ($\mathbf{W}_1$, $\mathbf{W}_2$) e non lineari ($\mathbf{N}_1$, $\mathbf{N}_2$).
Queste tecniche sono state originariamente sviluppate per processi continui, e solo recentemente sono state estese ai processi discontinui, con l'obiettivo di stimare la qualità dei prodotti ottenuti alla fine del batch. Rispetto ai casi attualmente riportati in letteratura, questo studio ha permesso di verificare la possibilità d'impiego di questi metodi per lo sviluppo di sensori virtuali in grado di stimare la qualità dei prodotti non solo *alla fine* del processo batch, ma anche *durante* tutto il suo svolgimento.

Sviluppo del sensore virtuale

Lo sviluppo del sensore virtuale per la colonna di distillazione discontinua consiste in una fase di generazione dei dati di processo, una fase di calibrazione del sensore, e una fase di verifica delle sue prestazioni.

Tabella 1 - Caratterizzazione delle prove di distillazione utilizzate per la calibrazione e la verifica del sensore virtuale

Run	*Composizione iniziale (fr. mol.)*	*Portata vapore (mol/h)*	*Portata distillato (mol/h)*	t_{batch} *(h)*
Dati di calibrazione				
T01	0,25/0,60/0,15	105	52,50	3,96
T02	0,33/0,33/0,34	100	47,84	3,28
T03	0,40/0,20/0,40	130	68,06	2,42
T04	0,10/0,80/0,10	85	44,73	5,81
T05	0,10/0,20/0,70	90	42,65	2,27
T06	0,35/0,15/0,50	95	50,26	2,55
T07	0,20/0,45/0,35	105	49,52	3,33
T08	0,50/0,40/0,10	100	53,19	3,88
T09	0,60/0,25/0,15	115	53,99	3,80
T10	0,55/0,15/0,30	110	51,16	3,66
T11	0,10/0,05/0,85	80	42,78	1,13
Dati di verifica				
V01	0,45/0,40/0,15	110	58,82	3,38
V02	0,20/0,30/0,50	95	51,07	2,85
V03	0,33/0,50/0,17	75	40,54	5,00
V04	0,08/0,40/0,52	100	50,00	3,32
V05	0,20/0,10/0,70	120	56,33	1,37

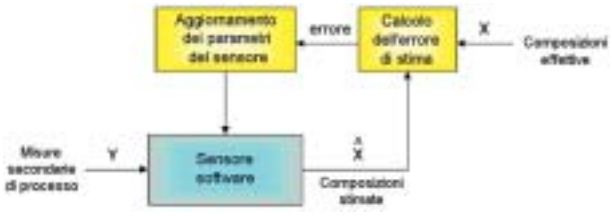

Figura 2 - Rappresentazione semplificata della procedura di calibrazione del sensore virtuale

Nella prima fase, un modello a principi primi del processo viene utilizzato per simulare una serie di batch. Come riportato in Tabella 1, le condizioni operative (composizione dell'alimentazione; portate di vapore e di distillato) variano da batch a batch, in modo che i dati generati contengano informazioni relative alla dinamica del processo in un campo operativo adeguatamente ampio.
Per ciascuna prova, vengono registrate tutte le grandezze che possono essere effettivamente misurate in linea sull'impianto (temperature sui piatti e in caldaia, portate esterne, pressione, livelli, perdite di carico) e le variabili che, non potendo essere misurate, vanno stimate in linea (composizioni istantanee del distillato e del prodotto in caldaia).
Nella fase di calibrazione del sensore virtuale, una parte dei dati simulati (run T01÷T11, nel caso di studio) viene impiegata per l'ottimizzazione dei parametri di regressione dei modelli PLS e ANN, mediante la procedura iterativa rappresentata in modo semplificato in Figura 2.
In questa fase, l'accuratezza del sensore virtuale è valutata in termini di deviazione dei valori stimati di composizione dai relativi valori reali x_i, mediante l'indice di errore MSQ:

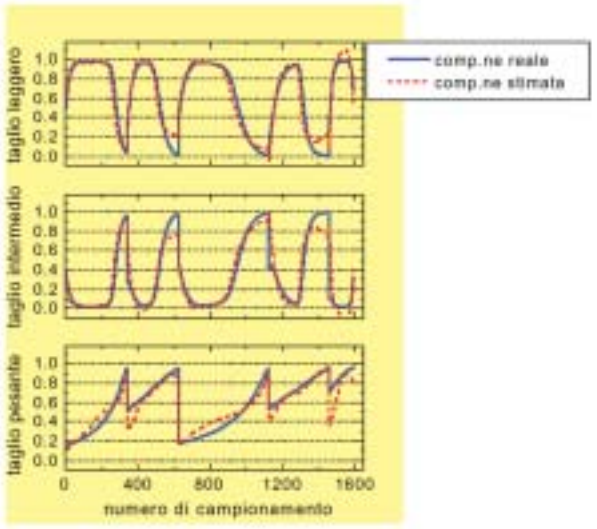

Figura 3 - Confronto fra i profili di composizione reali e quelli stimati dal sensore PLS lineare per i cinque set di dati di verifica

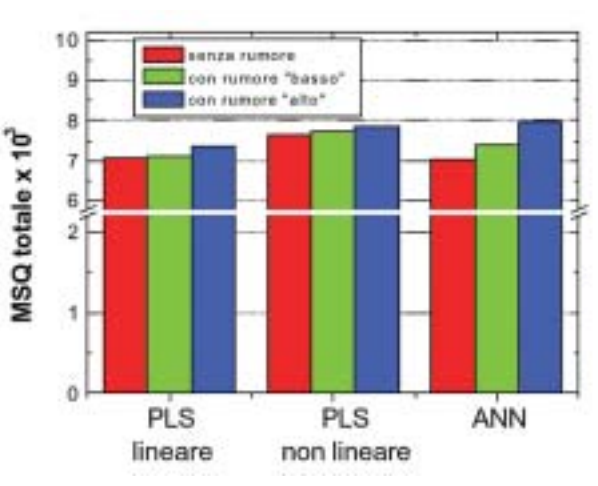

Figura 4 - Effetto del rumore di misura sull'errore di stima MSQ totale per i sensori PLS lineare, PLS non lineare e ANN (dati di verifica)

$$MSQ = \frac{\sqrt{(x_i - \hat{x}_i)(x_i - \hat{x}_i)^T}}{m} \quad (3)$$

in cui il termine m indica il numero di campionamenti effettuati. Nella successiva fase di verifica, la robustezza del sensore virtuale è caratterizzata in termini di capacità di stimare i profili di composizione in condizioni operative diverse da quelle considerate durante la fase di calibrazione (prove V01÷V05).

Tabella 2 - Errore di stima MSQx10³ sui dati di calibrazione e verifica

Metodo di regressione	*Calibrazione*				*Verifica*			
	$x_{D,1}$	$x_{D,2}$	$x_{B,3}$	*Totale*	$x_{D,1}$	$x_{D,2}$	$x_{B,3}$	*Totale*
PLS lineare	1,28	1,98	2,14	5,40	2,17	2,85	2,06	7,07
PLS non lineare	1,57	2,18	2,02	5,77	2,49	3,15	2,03	7,67
ANN	1,73	2,24	2,00	5,97	1,49	2,60	2,96	7,05

Risultati

Al fine di verificare quale, fra i metodi di regressione considerati, sia il più idoneo alla rappresentazione del comportamento del processo considerato, sono stati sviluppati sensori virtuali basati su modelli regressione diversi. In particolare, è stato sviluppato un sensore a modello PLS lineare, uno a modello PLS non lineare e uno a rete neurale artificiale. Il valore dell'indice di errore MSQ calcolato per le variabili stimate da ciascuno di tali sensori è riportato in Tabella 2. Come emerge dai risultati, in fase di calibrazione tutti i sensori raggiungono approssimativamente la stessa accuratezza di stima, e sono caratterizzati da valori di MSQ totale molto prossimi. Anche nella successiva fase di verifica, tutti i sensori virtuali sviluppati mostrano la buone prestazioni di stima.
In Figura 3 è riportata la prestazione di stima del sensore PLS lineare in fase di verifica per la sequenza di 5 batch consecutivi relativi ai dati di verifica. Si può apprezzare come i profili di composizione del prodotto leggero, intermedio e pesante vengano stimati con buona accuratezza dal sensore. È opportuno rimarcare il fatto che le stime di composizione possono essere ottenute in linea senza disporre di alcuna informazione relativa alla natura delle sostanze distillate (ad esempio, non è necessario conoscere nulla sull'equilibrio liquido/vapore della miscela da separare), e che i tempi di calcolo sono estremamente bassi (inferiori al secondo, su un comune personal computer).
L'affidabilità dei sensori è stata valutata anche nel caso in cui le misure di temperatura siano affette da rumore strumentale. Come suggerito dai risultati di stima riportati in Figura 4, i sensori sono risultati in generale insensibili alla presenza di rumore; infatti, il valore di MSQ totale rimane pressoché invariato anche per rumore di elevata intensità (banda di variazione delle misure di temperatura dal valor medio: ±3 °C). Solo nel sensore di tipo ANN si evidenzia una lieve riduzione di prestazione.
In complesso, i risultati ottenuti hanno permesso di evidenziare che, per il processo considerato, fra gli stimatori sviluppati il sensore PLS lineare garantisce la migliore prestazione di stima, risultando il più accurato in fase di calibrazione e di verifica, e mostrando robustezza alla presenza di rumore nelle misure in ingresso.

Conclusioni

Nello studio presentato è stata illustrata la possibilità di sviluppare un sensore virtuale in grado di stimare in linea la composizione istantanea dei prodotti ottenuti da un processo di distillazione batch, utilizzando misure di temperatura e un modello empirico del processo. In particolare, è stato verificato che il sensore può essere sviluppato adottando un approccio basato sull'impiego di tecniche di regressione multivariabile di tipo PLS e ANN. Data la relativa facilità di implementazione di queste tecniche e il basso carico di calcolo richiesto, l'approccio si conferma vantaggioso e attraente per applicazioni industriali nel campo delle produzioni batch e continue, particolarmente nei casi in cui la misura in linea degli indici di qualità del prodotto non sia possibile, oppure quando la descrizione del processo in termini di modello a principi primi risulti difficoltosa.