

di Giovanni Pieri
Senior Research Manager, Gruppo M&G,
membro del Comitato Ricerca e Innovazione
di Federchimica
Massimo Buscema, Stefano Terzi
Semeion Centro Ricerche di Scienze
della Comunicazione, Roma

APPLICAZIONE DELLE RETI NEURALI A PROBLEMI DI FORMULAZIONE

Quasi la metà del valore del prodotto dall'industria chimica italiana è ottenuto con attività di formulazione, miscelando sostanze chimiche piuttosto che sintetizzandole. L'attività riguarda molti campi merceologici: vernici, adesivi, cosmetici, detersivi, fitofarmaci, fertilizzanti speciali, prodotti per l'edilizia, la cartotecnica, la casa, l'automedicazione, manufatti in plastica e in legno. L'attività di formulazione è molto complessa e richiede ai formulatori grande esperienza per gestire un gran numero di informazioni. Le Reti Neurali Artificiali (Rna; in inglese Ann, Artificial Neural Networks) sono uno strumento matematico di grande potenzialità in aiuto agli sperimentatori, come illustrato dall'esempio che segue.

Il problema delle formulazioni è caratterizzato da un gran numero di variabili indipendenti. Una formulazione tipica può averne decine secondo la composizione, le condizioni di preparazione del formulato e le sue condizioni d'impiego. Ma l'aspetto, forse, che comporta il massimo di complessità è che si tratta in genere di un problema multivariato, cioè provvisto non di una, ma di molte variabili dipendenti, ciascuna delle quali rappresenta una particolare esigenza dell'impiego del formulato stesso.

L'effetto delle variabili non è in genere lineare: non è detto che l'uso congiunto di

due componenti provochi la somma dei loro effetti o che raddoppiando la concentrazione di un componente si provochi un raddoppio dell'effetto. Sebbene nella prassi scientifica sia lecito semplificare i problemi, considerandoli lineari, non sempre i risultati sono soddisfacenti, specialmente se le conoscenze di base sono poche. La Fig. 1, a partire dalla quantità di dati e conoscenza teorica disponibili, rappresenta il migliore approccio per un dato problema. Nel caso dati e conoscenze di base siano entrambi scarsi, la soluzione è l'impiego di basi di conoscenza sotto forma di insiemi di regole, un mezzo infor-

matico comunemente indicato come sistema esperto. Nel caso ci siano pochi

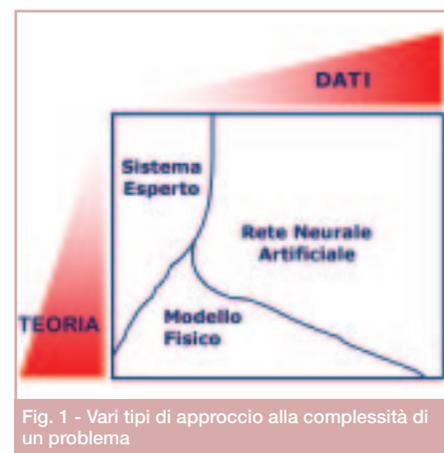


Fig. 1 - Vari tipi di approccio alla complessità di un problema

dati, ma le informazioni teoriche a disposizione siano abbondanti convergono modelli di tipo fisico, mentre con moltissimi dati, specialmente se in presenza di conoscenze teoriche scarse, i mezzi da scegliere sono le reti neurali.

Quando si studia una formulazione, tipicamente si dispone di un gran numero di dati e manca una descrizione teorica completa dei fenomeni fisici e chimici che determinano le proprietà desiderate. È per questo motivo che le reti neurali sono le più indicate per affrontare il problema.

Database di prova

Un problema contingente, ma non per questo meno importante, nell'illustrazione di

il miscelatore nel quale viene preparato il formulato è rappresentato dal solo numero di giri, mentre nella realtà a questa variabile si dovrebbero aggiungere altre condizioni di miscelazione, come la temperatura, il tempo dell'operazione e il tipo di miscelatore. La stessa composizione della miscela è ridotta a due soli componenti mentre in genere sono molti di più, tutti con effetti sulle prestazioni del formulato finale. Così solo poche proprietà meccaniche rappresentano il risultato della miscelazione, mentre nella pratica sono molto

- il costo della miscela contiene deliberatamente un errore sistematico, come se lo sperimentatore si fosse accorto solo ad un certo momento di avere fino ad allora sbagliato i calcoli, ma si fosse limitato a correggerli da quel momento in poi, comportamento del tutto plausibile nei casi reali con calcoli molto pesanti.

Per quanto sopra detto riteniamo che il

Tab. 1 - Variabili del database artificiale di prova

Variabili indipendenti	
Percentuale di comonomero	%
Percentuale di additivo elastomerico	%
Velocità del miscelatore	rpm
Variabili dipendenti	
- Modulo a flessione	MPa
- Resistenza all'urto	J/m
- Punto di fusione	°C
- Diametro delle particelle di gomma	m
- Valutazione soggettiva delle prestazioni	Scala da 1 a 10
- Costo finale del materiale	euro/kg

metodi di ausilio alle formulazioni, è la disponibilità di un database per la dimostrazione. Le basi di dati esistenti sono moltissime, su un gran numero di temi diversi, ma sono proprietarie, perché contengono know how aziendale, quindi sono indisponibili agli esterni.

A scopo esemplificativo è stato creato un database artificiale che simula la sperimentazione per l'ottenimento di un polimero antiurto, in base ad alcune ipotesi semplificative: è stato ridotto il numero di variabili a 9 soltanto, tra indipendenti e dipendenti e i risultati sperimentali delle singole prove nel data base sono stati generati rispecchiando quello che un tecnico medio del ramo si può aspettare da una sperimentazione di questo tipo. Le variabili utilizzate sono riportate nella Tab. 1.

La semplificazione riguarda sia le variabili indipendenti sia le dipendenti. Per esempio

più numerose e ad esse si aggiungono altri test come Dsc, immagini al microscopio ecc.

Commenti al database di prova

Il database di prova, benché semplificato, rappresenta bene le caratteristiche di una situazione reale:

- è simulato anche l'errore sperimentale;
- è simulato l'apprezzamento soggettivo dei risultati da parte dello sperimentatore;
- il diametro delle particelle di additivo elastomerico dopo compounding è una variabile dipendente che, a sua volta, può essere usata come variabile esplicativa dei risultati;
- il progredire dell'esperienza degli sperimentatori con l'accumularsi delle prove è simulato con il miglioramento progressivo dei risultati indipendentemente dalle condizioni di prova;

database di prova sia un buon benchmark per i metodi di elaborazione delle formulazioni. In Tab. 2 è riportata, a titolo d'esempio, una parte del database di prova.

Identificazione delle variabili più importanti

Il sistema Pst (Pick and Squash Tracking)¹ [1] produce mappe proiettive non lineari, che si basano su un concetto in sé semplice: il database può essere rappresentato come una collezione di punti in uno spazio multidimensionale. Ogni esperimento nel database rappresenta un asse coordinato in uno spazio a N dimensioni, dove N è il numero degli esperimenti presenti nel database. Su ciascun asse (in ciascun esperimento) ogni variabile prende un determinato valore quindi può essere rap-

¹Semeion Software Pst V. 3.0, M. Buscema, 2004

Tab. 2 - Data base semplificato (parziale)

N°	Test description	Comonomer %	Additive %	Mixer rpm	Flexural modulus MPa	Impact test J/m	Melting point °C	Additive particle diameter mm	Cost euro/kg	Subjective Performance
1	Omopolymer only	0	0	0	7.046	32	251	41	1.00	1
2	again	0	0	0	7.087	33	251	41	1.00	1
3	again	0	0	0	7.084	34	252	41	1.00	1
4	small Copolymer	2	0	0	6.822	34	240	40	1.02	1
5	again	2	0	0	6.882	35	241	41	1.02	1
6	more Copolymer	4	0	0	6.713	38	232	41	1.04	1
7	more Copolymer	6	0	0	6.549	42	220	40	1.06	2
8	full Copolymer	11	0	0	6.143	46	196	41	1.11	2
9	again	11	0	0	6.150	46	196	41	1.11	2
10	Additive	0	1	150	6.841	33	247	25	1.10	1
11	again	0	1	150	6.837	31	248	25	1.10	1
12	more Additive	0	2	150	6.657	36	247	25	1.20	2
13	more Additive	0	3	150	6.460	35	244	25	1.30	2
14	full Additive	0	7	150	5.816	41	238	28	1.70	2
15	again	0	7	150	5.795	42	240	28	1.70	1
16	Copolymer + additive	5	3	130	5.949	44	220	27	1.35	1
17	again	5	3	130	6.034	45	221	27	1.35	1
18	Double additive	5	6	130	5.476	49	215	29	1.65	2
19	again	5	7	130	5.308	52	215	30	1.75	2
20	less Copolymer	3	7	130	5.461	51	224	29	1.73	2
21	again	3	7	125	5.532	52	224	30	1.77	2

presentata come un punto nel sistema di riferimento. Nel caso del database di prova si rappresentano 9 punti, tanti quanti sono le variabili.

Tra i vari punti può essere definita la distanza euclidea: se è piccola significa che le due variabili si comportano in modo simile, se l'una cresce anche l'altra cresce e così via. Se sono entrambe variabili indipendenti significa che lo sperimentatore le ha fatte variare in parallelo; se sono entrambe variabili dipendenti significa che rispondono in modo simile alle variazioni delle variabili indipendenti. Se, infine, sono una dipendente e l'altra indipendente significa che l'una influenza l'altra strettamente. Se la nostra intuizione spaziale ci permettesse di vedere gli spazi a N dimensioni con $N > 3$ basterebbe un'occhiata per rendersi conto delle dipendenze tra le variabili. L'uso del Pst permette di avere comunque una visione immediata della situazione.

L'algorithmo del Pst genera iterativamente mappe per proiezione non lineare da uno spazio a N dimensioni su uno spazio bidimensionale e dispone in un piano i punti rappresentativi delle variabili conservando al massimo le distanze presenti nello spazio originale.

Per il database di prova questa rappresentazione è in Fig. 2. Nella figura, in alto a sinistra si trova la variabile di apprezzamento soggettivo delle prestazioni, mentre nell'angolo in basso a destra si trova il diametro delle particelle di gomma dopo il compounding. Il comportamento delle due variabili, entrambe dipendenti, è opposto:

quanto più la performance sale, tanto più le particelle di gomma rimpiccoliscono e, tra le altre variabili, non c'è un legame che risulti più forte di questo. È la chiara indicazione che tutto ciò che contribuisce a diminuire il diametro delle particelle contribuisce a migliorare la performance. Un'informazione di questo tipo dà un indirizzo forte a chi sperimenta. Nell'angolo in alto a sinistra si trovano anche altre variabili dipen-

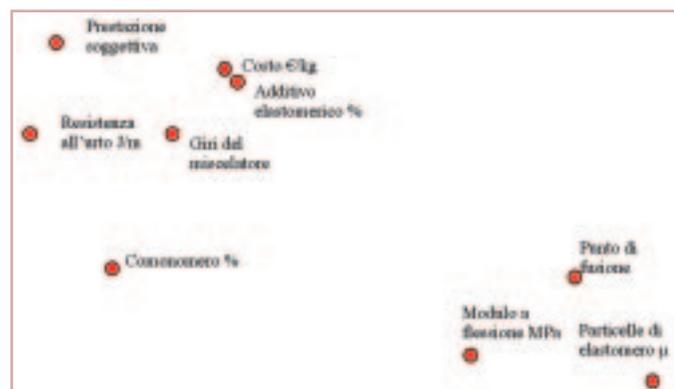


Fig. 2 - Proiezione bidimensionale non lineare della distanza tra variabili

denti: la resistenza all'urto e il costo del compound, indicazione che esse aumentano se aumenta la performance generale. Se questo è favorevole nel caso della resistenza all'urto, nel caso del costo significa che ogni miglioramento di prestazione sarà ottenuto a prezzo di sacrifici sui costi. La considerazione è rafforzata dal fatto che la variabile concentrazione dell'additivo è molto vicina al costo, per cui si dovrà limitare la concentrazione di additivo al minimo indispensabile per ottenere prestazioni accettabili, perché ogni aumento indiscriminato avrebbe una ripercussione immediata sui costi senza benefici confrontabili. Quanto sopra detto delinea una ben chiara strategia di sperimentazione. In un caso reale, con variabili molto più numerose e complesse, avere una visione delle variabili come quella precedentemente indicata può essere di grande aiuto nell'avviare le sperimentazioni nella direzione giusta.

Predizione di nuovi esperimenti e ottimizzazione

Le memorie autoassociative (Dynamic Auto-Associative Memory, Dam)² [2] sono strumenti dell'intelligenza artificiale provvisti di capacità di apprendere. Il processo è iterativo e il database è presentato più e più volte alla Dam, fino a quando le connessioni interne non cambiano più. Arrivati a questa convergenza, il processo di apprendimento può considerarsi terminato e le connessioni interne forniscono una rappresentazione implicita delle dipendenze funzionali presenti nel database. Questo processo è simile a quello dell'apprendimento umano: dopo avere preso familiarità con un insieme di dati le persone sono in grado di dire quale risultato "tipicamente" si accompagna con un

²Semeion Software n.13 Auto Associative V. 1.0-2.0, M. Buscema, 2000-2002

determinato valore di una certa variabile. Le Dam possono fare la stessa cosa: esiste un algoritmo, detto di interrogazione, che prende in input il valore di una o più variabili e restituisce il valore di *tutte* le variabili che meglio si accorda ai valori dati in input. Anche le Dam sono data oriented, cioè lavorano sui legami funzionali tra variabili per come li si individua tra i dati, ma senza distinguere tra variabili dipendenti e indipendenti. Tale proprietà è molto utile al fine di predire il risultato di nuovi esperimenti. In Tab. 3 è riportato il risultato di un'interrogazione in termini di variabili normalizzate tra zero e uno. La seconda colonna riporta i valori in input (l'interrogazione) e la terza quelli associati al risultato (la risposta). Esaminiamo in dettaglio la seconda colonna: in essa le

variabili indipendenti comonomero, additivo elastomerico e numero di giri del miscelatore hanno un valore positivo, mentre le altre sono tutte poste a zero, che significa che la domanda non pone vincoli su di loro. Questo è il modo convenzionale di porre l'interrogazione alla Dam e tradotta in parole suona: verrà condotto un esperimento ponendo al valore molto alto (l'uno della normalizzazione indica un valore pari al massimo valore presente nel data base) sia il contenuto di comonomero sia il contenuto di additivo elastomerico. Il numero di giri del miscelatore verrà messo ad un valore molto superiore a quello massimo presente nel database. La risposta, sempre in termini di valori normalizzati, è nella terza colonna, che rappresenta la previsione dell'esperimento

eseguito con le variabili indipendenti sopra specificate. Il sistema assegna un valore a tutte le variabili, sia indipendenti sia dipendenti, in modo che siano tutte coerenti con le dipendenze funzionali individuate nel database. I valori assegnati alle variabili indipendenti sono alquanto inferiori a quelli espressi nella domanda, ciò significa che la coerenza della risposta è trovata meglio con valori più vicini a quelli già presenti nel database, un invito a non esagerare con le novità e a non discostarsi troppo da quanto già sperimentato.

Tab. 3 - Interrogazione della Aam per predire un nuovo esperimento

Variables	I Values	F Values S
Monomer_%	0.00	0.6592
Comonomer_%	1	0.7475
Additive_%	1	0.8734
Mixer_rpm	3	1.9997
Flexural_modulus_Mpa	0.00	0.1405
Impact_test_J/m	0.00	0.8975
Melting_point_°C	0.00	0.1152
Additive_particle_diameter_micron	0.00	0.0000
Cost_euro/kg	0.00	0.8230
Subjective_performance_appraisal	0.00	0.9996

Contemporaneamente vengono previsti i risultati per le altre variabili. La performance soggettiva sarà molto vicina al massimo e così anche la resistenza all'urto. I risultati previsti sono quindi da considerarsi molto favorevoli nel senso di ottenere elevate prestazioni. Anche in termini di costi le cose non vanno male: siamo abbastanza vicini al massimo, ma meno di quanto non lo siano le prestazioni, indizio che in queste condizioni si trova un buon compromesso tra prestazioni e costi. Modulo elastico e punto di fusione risulteranno piuttosto bassi e questo dovrebbe essere un tema di verifica una volta compiuto l'esperimento, per essere sicuri di non ottenere un materiale troppo poco rigido e termoresistente. Il diametro delle particelle dell'elastomero dopo compounding risulterà pari al minimo

sperimentato, confermando che le più alte prestazioni sono accompagnate da un maggiore frazionamento dell'additivo, come già messo in luce con la Pst.

In Tab. 4 è riportato invece il caso di domanda inversa: fissato il valore desiderato per una delle variabili dipendenti vedere quale valore devono assumere le variabili indipendenti per raggiungere il risultato desiderato. Formalmente tutto funziona come nel caso precedente. I valori desiderati sono quattro: l'impact test decisamente superiore a quanto finora ottenuto (il valore 2 indica che si desidererebbe il doppio del massimo finora ottenuto), il valore della performance soggettiva anch'esso prossimo al doppio, il costo pari a 0,5 indica un valore intermedio tra il massimo e il minimo. Il risultato è quanto mai incoraggiante. Anche se le richieste non potranno essere letteralmente mantenute, sicuramente si otterranno decisi incrementi sia di resistenza all'urto sia di prestazione soggettiva, il tutto con incrementi di costo accettabili. I valori delle variabili indipendenti, in corrispondenza ai risultati, indicano di usare un alto contenuto di additivo ed un alto numero di giri del miscelatore, mentre si può tenere relativamente basso il contenuto di comonomero, che aumenta i costi, ma non le prestazioni.

Confronto con altri metodi

Risultati simili a quelli presentati sopra si sarebbero ottenuti anche con metodi statistici, ad esempio con una matrice di fattori di correlazione tra le variabili, con il metodo delle componenti principali o con l'impiego di regressioni. Ci sono però importanti differenze e sono a favore di Pst e

Dam. In primo luogo, gli algoritmi dell'intelligenza artificiale non sono lineari e si confrontano bene con i dati qualunque sia il tipo di dipendenza tra le variabili. Per esempio la non linearità della dipendenza metterebbe in crisi i fattori di correlazione, che risulterebbero insignificanti anche in caso di dipendenza molto forte. In secondo luogo, i metodi statistici funzionano tanto meglio quanto più i dati sono "ortogonali", cioè quando le variabili variano indipendentemente l'una dall'altra. Questo non ha influenza su Pst e Dam, che accettano ugualmente bene dati provenienti sia da una sperimentazione programmata sia da esperienza accumulata nel tempo; nel qual caso, è probabile che le variabili siano state fatte variare in modo sinergico piuttosto che indipendente. In definitiva, Pst e Dam non hanno alcun bisogno che si separino le variabili dipendenti da quelle indipendenti o che si pianifichi la sperimentazione, vanno bene con i dati che trovano.

Considerazioni conclusive

L'esempio riportato nei paragrafi precedenti è ben lungi dall'esaurire tutte le possibilità offerte dalle reti neurali nel campo della sperimentazione chimica. Esistono altri algoritmi ancora più potenti e si confrontano con successo con problemi molto più vasti di quelli esemplificati. Peraltro anche con le limitazioni del database di prova, sono state messe

Tab. 4 - Ricerca delle variabili che corrispondono ad un risultato desiderato

Variables	I Values	F Values S
Monomer_%	0.00	0.7545
Comonomer_%	0	0.2486
Additive_%	0	0,9893
Mixer_rpm	0	0.9949
Flexural_modulus_Mpa	0.00	0.0388
Impact_test_J/m	2	1.4935
Melting_point_°C	0.00	0.3938
Additive_particle_diameter_micron	0.01	0.0050
Cost_euro/kg	0.5	0.7433
Subjective_performance_appraisal	1.8	1.3998

in luce proprietà che rendono assai desiderabile l'uso delle reti neurali in chemiometria:

- la trattabilità di problemi altamente non lineari poco maneggevoli con i metodi tradizionali;
- la trattabilità di problemi con numero di variabili ben superiore a quello accettabile per un trattamento statistico (il limite superiore è circa una decina di variabili);
- la qualità delle reti neurali di essere data oriented, cioè trovano regolarità, dipendenze e classificazioni in base a quanto i dati contengono realmente, senza bisogno di preconstituire relazioni tra essi;
- la velocità di esecuzione. Gli algoritmi usati nelle reti neurali sono veloci, di rapida convergenza e facili nell'uso da parte degli operatori; in altre parole, non richiedono un esperto per essere usati, né l'opera di un esperto per interpretarne i risultati;
- il risparmio di tempo e di risorse. La valorizzazione dei dati già disponibili, senza richiedere sperimentazioni pianificate *ad hoc* e la capacità di individuare la soluzione ottimale senza bisogno di avvicinarla per passi, ne fanno un mezzo particolarmente adatto ad esaltare la rapidità di risposta che è fondamentale nei problemi di formulazione.

Bibliografia

[1] M. Buscema, S. Terzi, PST: un approccio evolutivo al problema della riduzione delle dimensioni, SAAB, 2005, n. 3, vol. 1, 154.

[2] M. Buscema, Reti neurali artificiali e sistemi sociali complessi. Vol. 1: Teoria, Modelli, Applicazioni. Franco Angeli, Milano, 1999.