

طراحی حسگر نرم داده محور به منظور پیش‌بینی کیفیت در فرآیند ناپیوسته صنعتی تولید رزین پلی‌استر

گوهر هادی‌زاده، جعفر صادقی، میرمحمد خلیلی‌پور لنگرودی* و بهاره بیدار

گروه مهندسی شیمی، دانشکده مهندسی شهید نیکبخت، دانشگاه سیستان و بلوچستان، زاهدان، ایران.

تاریخ دریافت: ۱۴۰۲/۰۴/۲۱ تاریخ پذیرش: ۱۴۰۲/۰۹/۱۱

چکیده

در این پژوهش، حسگر نرم داده محور بر مبنای روش مدل‌سازی پارامتر وابسته به متغیر حالت با استفاده از روش متغیر سودمند محلی (LIV) برای یک فرآیند ناپیوسته تولید رزین پلی‌استر طراحی شده است. برای مدل‌سازی حسگر نرم از داده‌های یک فرآیند صنعتی استفاده شده است. به‌منظور طراحی یک حسگر نرم دقیق، با در نظر گرفتن متغیر خروجی لحظه قبل در مجموعه متغیرهای ورودی، ماهیت پویای فرآیند در محاسبات لحاظ شده است. تعداد متغیرهای ورودی مدل نهایی از ۲۳ متغیر تعیین شده توسط دانش فرآیندی به‌تنها ۴ متغیر برای ویسکوزیته و ۳ متغیر برای عدد اسیدیتیه در این مطالعه کاهش یافت. مدل نهایی حسگر نرم با داده‌های یک نوبت آموزش داده شد، در نتیجه زمان و میزان محاسبات به شکل قابل توجهی کاهش یافت. با به‌کارگیری روش LIV در فرآیند ناپیوسته تولید رزین پلی‌استر، مقادیر شاخص‌های عملکردی MAE ، $RMSE$ و R^2 برای پیش‌بینی ویسکوزیته به‌ترتیب ۰/۰۰۱۵، ۰/۰۰۲۲ و ۰/۹۹۹۹ و برای پیش‌بینی عدد اسیدیتیه به ترتیب ۰/۰۰۳۰، ۰/۰۰۹۴ و ۰/۹۹۹۵ حاصل گردید. در مقایسه با سایر روش‌های مدل‌سازی حسگر نرم، مدل LIV متغیرهای شاخص کیفیت محصول را با تعداد نوبت‌ها و متغیرهای ورودی کم‌تر برای آموزش مدل اما با دقت بیشتر پیش‌بینی می‌نماید.

کلمات کلیدی: حسگر نرم داده محور، پیش‌بینی کیفیت، روش متغیر سودمند محلی (LIV)، فرآیند ناپیوسته، رزین پلی‌استر

مقدمه

قیمت‌ها، مشخصات محصول و محدودیت‌های زیست محیطی روبه‌رو هستند. این امر سبب تمایل به فرآیندهای ناپیوسته شده است که امکان توسعه سریع‌تر محصولات جدید را فراهم می‌کند و همچنین قابلیت انعطاف‌پذیری و انطباق‌پذیری بالایی دارند. فرآیندهای شیمیایی ناپیوسته در مواردی نظیر تولید در حجم پایین (یعنی، تولید

محیط‌های بازار رقابتی و به‌سرعت در حال تغییر، با عوامل متعددی نظیر عدم قطعیت و تغییر در تقاضای محصول، در دسترس بودن مواد اولیه،

*مسئول مکاتبات
آدرس الکترونیکی: a.khalilipour@eng.usb.ac.ir
شناسه دیجیتال: (DOI:10.22078/pr.2023.5167.3297)

داده‌های اندازه‌گیری شده در واحدهای فرآیندی قابل توسعه می‌باشند و بنابراین قابلیت توصیف شرایط فرآیند واقعی را دارند [۴]. در این راستا، تکنیک‌هایی آماری چند متغیره نظیر روش تحلیل مؤلفه اصلی^{۱۰} (PCA) و روش کمینه مربعات جزئی^{۱۱} (PLS) به‌عنوان روش‌های خطی به‌کار گرفته شدند [۵ و ۶]. ترکیب این مدل‌ها با مدل‌های برازشی منجر به ارائه روش‌های تعمیم‌یافته به نام‌های برازش مؤلفه اصلی^{۱۲} (PCR) و برازش کمینه مربعات جزئی^{۱۳} (PLSR) گردید. به‌دلیل عدم کارایی این مدل‌ها در پیش‌بینی رفتار سیستم‌های غیرخطی، مدل‌های توسعه‌یافته آن‌ها و مدل‌های پیشرفته غیرخطی با استفاده از تکنیک‌های یادگیری ماشین^{۱۴} (MLT) نظیر شبکه‌های عصبی مصنوعی^{۱۵} (ANNs)، برازش بردار پشتیبان^{۱۶} (SVR) و نوع الگوریتم‌های نظارت‌شده نظیر ماشین بردار پشتیبان^{۱۷} (SVM)، سیستم عصبی - فازی^{۱۸} (NFS) و برازش فرآیند گاوسی^{۱۹} (GPR) پیشنهاد شدند و به‌طور گسترده در طراحی حسگرهای نرم داده محور کاربرد پیدا کردند [۷-۱۱]. دسته دیگری از تحقیقات به توسعه حسگرهای نرم داده محور تطبیقی^{۲۰} پرداختند تا بتوانند به‌صورت برخط رفتار متغیر با زمان فرآیندها را پیش‌بینی نمایند. این تکنیک‌ها به استنتاج و به‌کاربردن سازوکاری به‌منظور نگهداشتن عملکرد حسگر نرم در یک سطح مطلوب نیازمند هستند.

کمتر از ۵۰۰/۰۰۰ kg)، فرآیندهای حساس، عملیات چندمحصولی و همچنین در زمانی که تغییر در نرخ یا اختلاط محصول مورد نیاز است، گزینه مناسبی می‌باشند. بدین طریق، طیف گسترده‌ای از محصولات در حجم کم و با ارزش افزوده بالا از جمله مواد شیمیایی و بیوشیمیایی مخصوص، مواد میکروالکترونیک^۱، محصولات دارویی، کشاورزی و بیوشیمیایی و غیره به‌صورت ناپیوسته تولید می‌شود [۱]. با این حال، فرآیندهای ناپیوسته معمولاً با مشکلات عملیاتی چالش برانگیزی نظیر ذات غیرخطی، رفتار پویای گذرا، مکانیسم و سنتیک‌های پیچیده واکنشی روبه‌رو هستند که مدیریت بهینه آن‌ها را مختل می‌سازد. یک چالش کلیدی که معمولاً نظارت یا کنترل آن‌ها را با مشکل مواجه می‌کند، در دسترس نبودن یک سیستم اندازه‌گیری کارآمد و برخط^۲ برای متغیرهای شاخص کیفیت^۳ (QIV) است. به همین جهت استفاده از حسگرهای نرم^۴ به‌عنوان راه‌حل امیدوارکننده پیشنهاد شده که کارایی خود را در موارد متعدد به اثبات رسانیده است [۲ و ۳]. حسگرهای نرم روش‌های محاسباتی هستند که با استفاده از متغیرهای فرآیندی آسان اندازه‌گیر^۵ مانند دما، فشار، شدت جریان و ... که توسط حسگرهای فیزیکی موجود به‌صورت قابل اعتماد و برخط اندازه‌گیری می‌شوند، تخمین‌های برخطی از متغیرهای فرآیندی سخت اندازه‌گیر^۶ از جمله QIVها ارائه می‌دهند. به‌طور کلی حسگرهای نرم را می‌توان در دو دسته کلی مدل محور^۷ و داده محور^۸ تقسیم‌بندی کرد. حسگرهای نرم مدل محور براساس مدل‌های اصول اولیه^۹ (FPM) ارائه می‌شوند. عموماً این مدل‌ها برای توصیف فرآیندهای پایا و ایده‌آل کاربرد دارند، لذا نمی‌توانند حالت واقعی فرآیند را توصیف کنند. همچنین توسعه آن‌ها نیازمند دانش فراوان متخصصان فرآیند است که این دانش همیشه در دسترس نیست. در مقابل حسگرهای نرم داده محور محبوبیت روبه‌رشدی در صنعت فرآیندی کسب نمودند. زیرا مدل‌های داده محور براساس

1. Microelectronic
2. Online
3. Quality Indicator Variables (QIV)
4. Soft Sensors
5. Easy-to-Measure-Variable
6. Hard-to-Measure-Variable
7. Model-Driven
8. Data-Driven
9. First Principle Model (FPM)
10. Principal Component Analysis (PCA)
11. Partial Least Squares (PLS)
12. Principal Component Regression (PCR)
13. Partial Least Squares Regression (PLSR)
14. Machine Learning Techniques (MLT)
15. Artificial Neural Networks (ANNs)
16. Support Vector Regression (SVR)
17. Support Vector Machine (SVM)
18. Neuro-Fuzzy System
19. Gaussian Process Regression (GPR)
20. Adaptive Data-Based Soft-Sensors

کند. بیدار و همکاران [۱۸] روش مدل‌سازی SDP را با تکنیک جدید متغیر سودمند محلی^{۱۰} (LIV) ارائه کردند. در این روش، مبنای الگوریتم بر روش کمینه مربعات وزنی^{۱۱} (WLS) استوار می‌باشد و مشکلات هموارسازی و مرتب‌نمودن داده‌ها در روش‌های SDP و MSDP را ندارد و امکان درون‌یابی در مجموعه داده‌های مدل را بدون پارامتری‌کردن مدل نهایی دارد. توکلی و همکاران [۱۹] در جهت رفع مشکل وجود داده‌های پرت و از دست رفته در مجموعه داده‌های صنعتی رویکردی با عنوان قدم تصادفی تعمیم یافته^{۱۲} پارامتر وابسته به چندین متغیر حالت (GRW-MSDP) براساس مدل‌های MSDP پیشنهاد کردند. این رویکرد غیرخطی بودن فرآیند را به‌خوبی مدیریت کرده و همچنین پیشرفت‌های قابل توجهی در هموارسازی پارامترها به‌دست آورد. در زمینه به‌کارگیری روش شناسایی و مدل‌سازی با پارامترهای وابسته به متغیر حالت مطالعات بسیاری انجام شده است. قره‌باغی و صادقی [۲۰] از رویکرد شناسایی MSDP به‌منظور طراحی حسگر نرم داده محور برای نظارت بر فرآیند غیرفعال شدن کاتالیست زئولیت در راکتور صنعتی بستر ثابت آلکیل‌سیون مجتمع پتروشیمی بوعلی سینا بندر ماهشهر استفاده کردند. بیدار و همکاران [۲۱] یک حسگر نرم داده محور براساس رویکرد شناسایی SDP برای بهبود پایش کیفیت محصول در برج دی‌بوتانایزر صنعتی ارائه کردند. مقایسه نتایج روش SDP و سایر روش‌های مدل‌سازی حسگر نرم در این واحد نشان داد که روش SDP توانایی شناسایی و پیش‌بینی صحیح رفتار غیرخطی سیستم با داده‌های از دست رفته را دارد.

روش پنجره متحرک^۱ و روش‌های بازگشتی^۲ بر مبنای PCA و PLS از روش‌های به‌روزرسانی متناوب در جهت رفع مشکل افت عملکرد مدل حسگر نرم می‌باشند. روش‌های بهنگام^۳ (JIT) و پس از آن روش بهنگام مبتنی بر همبستگی^۴ (CoJIT) به‌منظور تعمیم و ایجاد سازگاری خودکار مدل محلی توسعه داده شدند. در برخی موارد انطباق نامناسب مدل نیز در این مدل‌ها مشاهده می‌شود و از آنجایی که به فضای حافظه زیادی جهت انجام محاسبات نیاز دارند؛ برای اهداف کنترلی و نظارتی مناسب نیستند [۱۲ و ۱۳]. روش شناسایی پارامتر متغیر با زمان^۵ (TVP) با استفاده از اصول کمینه مربعات بازگشتی^۶ (RLS) شکل گرفت. یانگ [۱۴] با استفاده از مدل‌های مختلف برازش خطی، پیش‌بینی تغییرات آهسته پارامترهای متغیر با زمان را مورد مطالعه قرار داد و به‌کمک بهینه‌سازی پارامترهای کمکی و همچنین بهینه‌سازی روش‌های فیلتر بازگشتی، موفق به بهبود عملکرد پیش‌بینی پارامتر متغیر با زمان گردید. پارامترهای یک مدل خطی که برای پیش‌بینی یک سیستم غیرخطی به‌کار گرفته می‌شود؛ همواره وابسته به‌زمان نمی‌باشند. بنابراین الگوریتم TVP قادر به تشخیص تغییرات بسیار زیاد پارامترهای وابسته به متغیر حالت نبود. وابستگی این پارامترها به متغیرهای حالت و یا متغیرهای ورودی سیستم منجر به ایجاد الگوریتم پارامتر وابسته به‌حالت^۷ (SDP) برای توصیف رفتار سیستم‌های غیرخطی گردید. این الگوریتم با استفاده از پیش‌بینی هموارسازی فاصله ثابت^۸ (FIS) و مرتب کردن اطلاعات به‌ترتیب متغیر حالتی که پارامتر به آن وابسته است؛ روش TVP را تکمیل کرد [۱۵ و ۱۶]. صادقی [۱۷] برای توسعه الگوریتم هموارسازی فاصله ثابت، رویکرد جدیدی در مرتب‌سازی داده‌ها به‌کار گرفت. حاصل این توسعه، رویکردی به‌نام پارامترهای وابسته به چندین متغیر حالت^۹ (MSDP) است که می‌تواند سیستم‌هایی با پارامترهای وابسته به چند متغیر حالت متفاوت را شناسایی

1. Moving Window

2. Recursive Methods

3. Just-In-Time Method (JIT)

4. Correlation-Based just-in-Time method (CoJIT)

5. Time Variable Parameter (TVP)

6. Recursive least square (RLS)

7. State Dependent Parameter (SDP)

8. Fixed Interval Smoothing (FIS)

9. Multi state-Dependent Parameter Models (MSDP)

10. Local Instrument Variable (LIV)

11. Weighted Least Squares (WLS)

12. Generalized Random Walk (GRW)

تأثیرگذار باشد. لذا در فرآیندهای پلیمری، کنترل کیفیت به شدت به نحوه عملکرد تکنیک‌های نظارتی بستگی دارد. بنابراین تکنیک‌های مناسب حسگر نرم می‌تواند کمک شایانی در این زمینه داشته باشد. با توجه به نقش مهم فرآیندهای پلیمریزاسیون و به‌خصوص فرآیند تولید رزین پلی‌استر، در سال‌های اخیر، پژوهش‌های بسیاری به‌منظور شناسایی و مدل‌سازی رفتار این فرآیندها براساس داده‌های قابل تنظیم فرآیند انجام شده است [۳۰]. در ابتدا، رانار و همکاران [۳۱] یک رویکرد مبتنی بر روش PCA/PLS چند بلوکی بازگشتی (سلسله مراتبی) جهت نظارت بر فرآیندهای ناپیوسته ارائه نمودند. این الگوریتم بر روی داده‌های فرآیند پلیمریزاسیون ناپیوسته صنعتی ارزیابی شد و با رویکردهای مشابه نیز مقایسه گردید. این رویکرد توانست مزایای قابل توجهی در هنگام نظارت بر فرآیندهای ناپیوسته چند مرحله‌ای داشته باشد که در آن ساختار متغیر پنهان می‌تواند در چندین نقطه در طول هر نوبت^۱ تغییر کند. لی و همکاران [۳۲] یک الگوریتم بازگشتی غیرخطی PLS (RNPLS)^۲ برای مدل‌سازی رفتار متغیر با زمان فرآیند ارائه کردند. الگوریتم RNPLS بر روی یک فرآیند پلیمریزاسیون صنعتی تولید پروپیلن پیاده‌سازی شد. نتایج نشان داد که این الگوریتم تغییرات با زمان فرآیند را به‌خوبی دنبال کرده و نتایج رضایت بخشی ارائه می‌دهد. برای غلبه بر این مشکل که مدل‌های حسگر نرم با تغییرات فرآیند به‌روزرسانی نمی‌شوند، احمد و همکاران [۳۳]، یک حسگر نرم با استفاده از تکنیک به‌روزرسانی حداقل مربعات جزئی بازگشتی^۳ (RPLS) و همچنین به‌روزرسانی سوگیری مدل^۴ برای پیش‌بینی شاخص مذاب^۵ (MI) در فرآیندهای پلیمریزاسیون تولید پلی اتیلن با چگالی بالا^۶ (HDPE) توسعه دادند.

همچنین این مدل در مقایسه با دیگر روش‌ها به متغیرهای ورودی کمتری نیازمند است و در عین حال دقت تخمین بالاتری دارد. در پژوهش دیگری، بیدار و همکاران [۲۲] حسگر نرم بر مبنای رویکرد LIV برای تعیین کیفیت محصولات جانبی برج تقطیر نفت خام طراحی کردند. نتایج این پژوهش نشان داد که روش LIV قادر به شناسایی سیستم غیر خطی و پیچیده با دقت بالا می‌باشد. همچنین بیدار و همکاران [۲۳] حسگر نرم بر مبنای مدل MSDP برای پیش‌بینی متغیرهای خروجی در واحد بازیافت گوگرد را نیز ارائه نمودند و نتایج پیش‌بینی‌ها را با حسگرهای نرم مشابه مقایسه نمودند که باز هم برتری این روش تأیید گردید. در ادامه، نعیمی و همکاران [۲۴] و [۲۵] از تکنیک LIV برای طراحی حسگر نرم داده محور به‌منظور تخمین کیفیت نفت خام خروجی از واحد نمک‌زدایی/آب‌زدایی استفاده نمودند. حسگر نرم ارائه شده قابلیت عملکردی مناسبی در این سیستم غیرخطی نشان داد. حسن‌پور و همکاران [۲۶] و [۲۷] نیز حسگر نرم داده محور با استفاده از رویکرد LIV به‌منظور پیش‌بینی کیفیت در فرآیند تنسی ایستمن ارائه نمود. حسگر طراحی شده در مقایسه با روش‌های دیگر از میزان خطای پیش‌بینی و تعداد متغیرهای ورودی کمتر برخوردار بوده است. در دو دهه اخیر، حسگرهای نرم داده محور به‌طور گسترده‌ای برای پیش‌بینی کیفیت در فرآیندهای پیوسته به‌کار گرفته شدند. اما توسعه و استفاده از این نوع حسگرها برای فرآیندهای ناپیوسته، که ماهیت پیچیده، شرایط گذرا و غیرخطی دارند، به نسبت پیچیده‌تر و چالش برانگیز بوده و محققان را به شناسایی و مدل‌سازی این فرآیندها ترغیب کرده است [۲۸ و ۲۹]. پلی‌استرها یکی از مهم‌ترین پلیمرهای مورد استفاده می‌باشند که هم به‌صورت پیوسته و هم ناپیوسته تولید می‌شوند. پارامترهای قابل تنظیم در فرآیند ناپیوسته تولید پلی‌استر شامل دما، فشار، نرخ جریان و درصد بازشدگی شیرها می‌باشد. تنظیم دقیق این پارامترها می‌تواند به‌طور مستقیم بر کیفیت محصول نهایی

1. Batch

2. Recursive Nonlinear Partial least Square (RNPLS)

3. Recursive Partial least Square (RPLS)

4. Model Bias

5. Melt Index

6. High Density Polyethylene (HDPE)

شده را بهبود می‌بخشد. آبیگون [۳۸]، مروری جامع بر استفاده از تکنیک‌های حسگر نرم در صنعت تولید پلیمر، اکستروژن پلیمری و پلیمریزاسیون به‌همراه شناسایی قابلیت‌ها و محدودیت‌های آن‌ها ارائه کرد. یین و همکاران [۳۹] مدل پیشنهادی خود برای پیش‌بینی ویسکوزیته ذاتی پلی‌استر با استفاده از متغیرهای ورودی مؤثر با استفاده از رویکرد ماشین یادگیری افراطی^۴ (ELM) ارائه دادند. نتایج نشان داد که مدل پیشنهادی آن‌ها عملکرد بهتری نسبت به روش‌های متداول ELM، SVM و BPNN^۵ دارد. با توجه به ذات پویای برخی فرآیندها نظیر فرآیندهای ناپیوسته و عدم کارایی حسگرهای نرم توسعه یافته با استفاده از مدل‌های پایا، هی و همکاران [۴۰] رویکرد تجزیه مقادیر منفرد^۶ (SVD) مبتنی بر شبکه حالت اکو^۷ (ESN) را به‌عنوان نوعی شبکه عصبی بازگشتی ارائه کردند. برای اعتبارسنجی مدل از فرآیند تولید HDPE و فرآیند تولید اسید ترفتالیک خالص استفاده کردند. از نظر پیش‌بینی مدل پیشنهادی در مقایسه با روش ESN معمولی، ELM و ... عملکرد بهتری نشان داد. ژو و همکاران [۴۱] یک حسگر نرم جدید با نام Xgboost-BiCG-LSTM-SEA ارائه نمودند و اثربخشی رویکرد پیشنهادی را برای پیش‌بینی ویسکوزیته ذاتی پلی‌استر مذاب در فرآیند پلیمریزاسیون استفاده کردند. براساس معیار میانگین مربعات خطا^۸ (MSE)، حسگر جدید عملکرد بهتری در مقایسه با مدل‌های حسگر نرم نظیر SVR و PLS نشان داد. در همین راستا، الگوریتم جدیدی برای تخمین هم‌زمان چهار متغیر کیفیت نرخ استری شدن، درجه پلیمریزاسیون، میانگین وزن مولکولی و شاخص ویسکوزیته مذاب^۹ (MVI) برای فرآیند پلیمریزاسیون صنعتی پیشنهاد کردند.

به‌منظور مدیریت ویژگی‌های غیرخطی و تغییر درجه فرآیند پلیمریزاسیون از داده‌های یک فرآیند صنعتی استفاده نمودند و تکنیک پیشنهادی را با سایر روش‌ها مقایسه نموده و برتری آن را اثبات نمودند. فاکو و همکاران [۳۴] جهت پیش‌بینی عدد اسیدیته و ویسکوزیته در فرآیند پلیمریزاسیون ناپیوسته تولید رزین پلی‌استر از روش PLS استفاده نمودند. یکی از مزایای مدل پیشنهادی آن‌ها این است که پیاده‌سازی آسان است، زیرا نیازی به اصلاح ساختار الگوریتم PLS ندارد. اما، از آنجایی که فرآیندهای ناپیوسته در معرض تغییراتی قرار دارند که سبب می‌شود ساختار همبستگی بین نوبت‌ها نسبت به مدل اصلی تغییر کند. لذا، فاکو و همکاران [۳۵] در پژوهش دیگری، یک روش برای به‌روزرسانی خودکار حسگرهای نرم PLS در فرآیندهای ناپیوسته ارائه نمودند. اثربخشی روش به‌روزرسانی در یک فرآیند پلیمریزاسیون ناپیوسته صنعتی برای تولید رزین پلی‌استر بررسی گردید و نتایج قابل قبولی به‌دست آمد. در جهت رفع مشکل پیش‌بینی برخط کیفیت در فرآیندهایی با حالت‌های عملیاتی متعدد، سوزا و آراجو [۳۶] روش جدیدی به نام ترکیب برآزش حداقل مربعات جزئی^۱ (Mix-PLS) پیشنهاد کردند که در آن از الگوریتم امید ریاضی-بیشینه‌سازی^۲ (EM) و معیار اطلاعات بیزین استفاده کردند. روش Mix-PLS با موفقیت بر روی واحد پلیمریزاسیون تولید رزین پلی‌استر مورد ارزیابی قرار گرفت. نتایج نشان داد که مدل Mix-PLS در مقایسه با ترکیب استاندارد برآزش خطی کمتر مستعد بیش برآزش مدل است. فریرا و همکاران [۳۷] یک مدل برآزش نیمه نظارت شده مبتنی بر آموزش مشترک بر مبنای حداقل مربعات^۳ (CoRLSR) همراه با یک رویکرد رتبه‌بندی ویژگی که هدف آن حذف ویژگی‌های نامربوط است، ارائه نمودند. برای ارزیابی روش پیشنهادی، یک فرآیند پلیمریزاسیون صنعتی استفاده شد که نتایج آن نشان داد که رتبه‌بندی و انتخاب ویژگی ابداع‌شده مدل برآزش نیمه نظارت

1. Mixture of Partial least Squares Regression
2. Expectation-Maximization (EM) algorithm
3. Coregularized least Squares Regression
4. Extreme learning Machine (ELM)
5. Back Propagation Neural Network
6. Singular Value Decomposition (SVD)
7. Echo State Network (ESN)
8. Mean Squared Error (MSE)
9. Melt Viscosity Index (MVI)

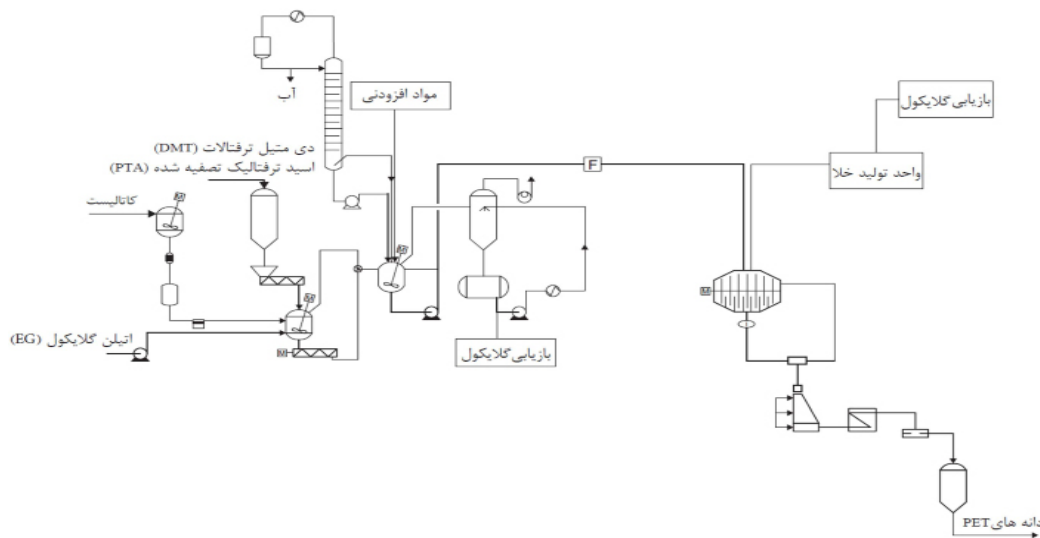
(TPA) تولید می‌شود. تولید PET به دو مرحله واکنش استری شدن و پلیمریزاسیون تراکمی نیاز دارد. همان‌طور که در شکل ۱ نشان داده شده است، به دلیل زمان ماندهای متفاوت برای مراحل استری شدن و پلیمریزاسیون تراکمی، فرآیند ناپیوسته صنعتی تولید PET با دو راکتور اصلی طراحی شده است که یک راکتور برای استری شدن و یک یا دو راکتور موازی برای پلیمریزاسیون تراکمی به کار می‌رود. کیفیت پلیمر تولیدی توسط دو خاصیت شیمیایی؛ عدد اسیدیته (N_A) و ویسکوزیته (μ) پلیمر تعیین می‌شود. اولین مرحله، مرحله استری شدن TPA با EG و تشکیل پیش پلیمری است که شامل مونومر بیس-هیدروکسی اتیل ترفتالات^۶ (BHET) و الیگومر کوتاه زنجیر می‌گردد. مونومرهای TPA و EG در جریان بالادست راکتور استری شدن با یکدیگر مخلوط می‌شوند. نسبت مولی EG به TPA در محدوده ۱/۳-۱/۱ قرار می‌گیرد. دمای استری شدن و نسبت مولی مونومرها مهم‌ترین فاکتورهای کنترلی برای درجه پلیمریزاسیون تراکمی محصول در مرحله استری شدن و همچنین برای میزان گروه انتهایی کربوکسیل و دی اتیلن گلایکول^۷ (DEG) می‌باشد. محدوده دمایی استری شدن بین ۲۳۵-۲۶۵ °C می‌باشد، در حالی که فشار مطلق بین فشار محیط تا فشار بالاتر (۰/۴-۰/۱ MPa) کنترل می‌شود. کنترل دقیق فشار توسط کنترل جریان نیتروژن اضافی انجام می‌شود. در انتهای استری شدن دما تا مقادیر ۲۶۰-۲۸۵ °C افزایش یافته و فشار تا میانگین مقدار خلأ اعمال شده کاهش می‌یابد. این فرآیند میزان تبخیر اتیلن گلایکول مازاد را افزایش می‌دهد. پلیمر نهایی توسط یک پمپ به راکتور پیش گرم کن پلیمریزاسیون تراکمی انتقال می‌یابد.

حسگر نرم پیشنهادی دارای مزایایی نظیر توانایی استخراج ویژگی‌های پیچیده، مقابله با بیش برآزش مدل و تخمین سریع متغیرهای کیفیت می‌باشد [۴۲]. پورا و همکاران [۴۳] شرح مفصلی از حسگرهای نرم در صنایع مختلف به ویژه فرآیند تولید پلیمر ارائه کردند و روش‌های مختلف را از جنبه عملکردی و دقت مورد ارزیابی و مقایسه قرار دادند. با توجه به بررسی‌های انجام گرفته، بدیهی است که توسعه یک حسگر نرم مناسب برای توصیف فرآیند ناپیوسته پلیمریزاسیون، هنوز نیازمند تلاش‌های بسیار زیادی است. لذا هدف از انجام این پژوهش طراحی حسگر نرم داده محور به منظور پیش‌بینی کیفیت در فرآیند ناپیوسته تولید رزین پلی‌استر بر مبنای روش پارامتر وابسته به متغیر حالت است که تاکنون مورد بررسی قرار نگرفته است. در این پژوهش از داده‌های یک فرآیند صنعتی استفاده شده است. به منظور اعتبارسنجی مدل پیشنهادی، نتایج پیش‌بینی مدل برای متغیرهای کیفیت عدد اسیدیته و ویسکوزیته با نتایج سایر روش‌های موجود مقایسه گردیده است.

فرآیند تولید پلی‌استر

امروزه پلی‌استر یا همان پلی‌اتیلن ترفتالات^۱ (PET) یکی از مهم‌ترین نوع پلیمرهای مورد استفاده می‌باشد که به‌طور پیوسته در مقیاس بالا و همچنین در واحدهای ناپیوسته در مقیاس کم تولید می‌شود. ظرفیت واحدهای ناپیوسته تولید پلی‌استر در محدوده ۶۰-۲۰ تن در روز می‌باشد. بسته به شرایط، تکنولوژی فرآیند و درجه طراحی پلی‌استر، بین ۱۰-۶ نوبت در روز و هر کدام با ظرفیت ۹-۱/۵ تن طراحی می‌شوند. واحدهای ناپیوسته اغلب به صورت چند منظوره طراحی می‌شوند که در آن پلی بوتیلن ترفتالات^۲ (PBT)، پلی اتیلن نفتالات^۳ (PEN) و دیگر پلیمرها نیز تولید می‌شوند. پلی‌استر، پلیمری است که توسط واکنش پلیمریزاسیون تراکمی میان اتیلن گلایکول^۴ (EG) و ترفتالیک‌اسید^۵

1. Polyethylene Terephthalate
2. Polybutylene Terephthalate
3. Polyethylene Naphthalate
4. Ethylene Glycol
5. Terephthalic Acid
6. Bis-hydroxyethyl Terephthalate
7. Diethylene Glycol



شکل ۱ نمودار جریان فرآیند ناپیوسته چند منظوره تولید PET [۴۴]

روش مدل سازی حسگر نرم داده محور تعیین متغیرها و داده های مورد نیاز

فرآیند ناپیوسته تولید رزین پلی استر که اولین بار توسط فکو و همکاران [۳۴] به کار گرفته شد؛ به عنوان مورد مطالعاتی این پژوهش انتخاب شده است. برای این فرآیند، مجموعه داده ها شامل متغیرهای آسان اندازه گیر و متغیرهای شاخص کیفیت در ۳۳ نوبت (۱۶ ماه) در دسترس است. اندازه گیری کیفیت محصول بر مبنای دو شاخص عدد اسیدیته پلیمر (N_A) و ویسکوزیته (μ) به صورت آزمایشگاهی انجام شده و لذا تنها ۱۵ تا ۲۰ اندازه گیری برای هر شاخص کیفیت در طول هر یک نوبت وجود دارد. مقادیر سایر متغیرهای این واحد توسط حسگرهای اندازه گیری موجود به صورت برخط توسط یک رایانه هر ۳۰ s ثبت شده است که در **جدول ۱** آورده شدند. با توجه به اندازه گیری های انجام شده حداقل ۴۰۰۰ داده برای هر متغیر آسان اندازه گیر در هر نوبت جمع آوری شده و در مجموع هر دسته داده مربوط به هر نوبت اجرای فرآیند حاوی یک ماتریس ۴۰۰۰×۲۳ از داده ها است.

شناسایی مدل حسگر نرم

پس از تأمین داده های مورد نیاز، انتخاب متغیرهای موثر و پیش پردازش داده ها (در صورت لزوم) نوبت به شناسایی مدل می رسد.

مرحله دوم واکنش، پلیمریزاسیون تراکمی است که در آن یک واکنش تبادل استری در فاز گداخته رخ می دهد. در راکتور پلیمریزاسیون تراکمی، پلیمر واکنش داده و زنجیره های بلندتر پلیمر را تشکیل می دهند و EG به عنوان محصول جانبی توسط خلأ شدید از فاز گداخته جدا می شود. برای هدایت تعادل شیمیایی به سمت محصول نهایی، محصول جانبی EG توسط خلأ حذف می شود. در یک چهارم اول فرآیند پلیمریزاسیون تراکمی، دمای واکنش تا مقادیر $۲۷۰-۲۹۰\text{ }^\circ\text{C}$ افزایش یافته و فشار به آرامی کاهش می یابد تا از حمل پیش پلیمر به سیستم خلأ جلوگیری نماید. درجه نهایی پلیمریزاسیون تراکمی توسط تنظیم زمان واکنش در یک مقدار ثابت برای عملیات در شرایط استاندارد و یا توقف واکنش در یک ویسکوزیته گداز مشخص کنترل می شود. در طول پلیمریزاسیون تراکمی، ویسکوزیته گداز از $۴۰۰-۰/۸\text{ Pa}\cdot\text{s}$ در دمای $۲۸۰\text{ }^\circ\text{C}$ افزایش می یابد. پس از اتمام پلیمریزاسیون تراکمی، شیر خلأ به راکتور پلیمریزاسیون تراکمی بسته می شود و مخزن توسط فشار گاز نیتروژن یا پمپ دنده ای تخلیه می شود [۴۴ و ۴۵].

جدول ۱ متغیرهای ورودی و خروجی حسگر نرم [۳۳]

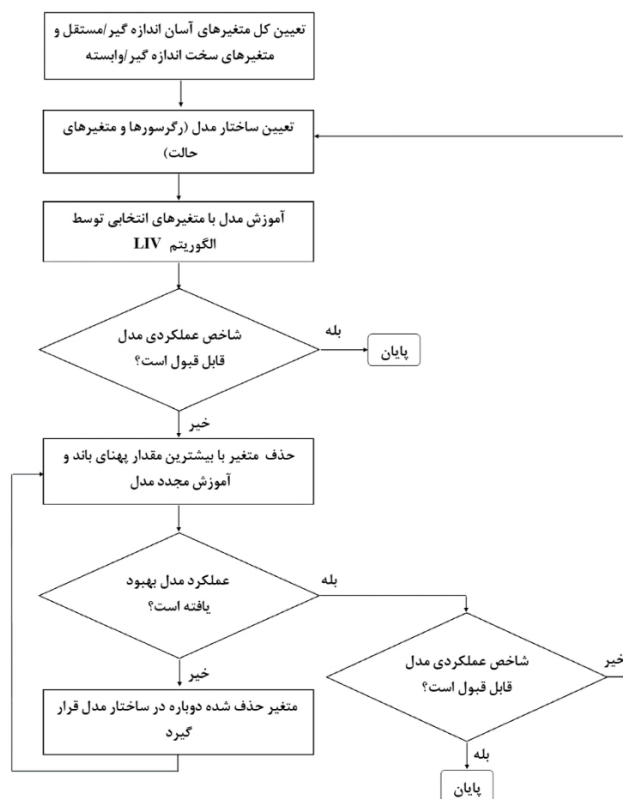
شرح متغیر	نوع متغیر ورودی / خروجی	اختصار متغیر ورودی
درصد نرخ اختلاط	Mixing rate percentage	MRP (X ₁)
نرخ اختلاط	Mixing rate	MR (X ₂)
دمای خط خلا	Vacuum line temperature	VLT (X ₃)
دمای روغن دوترم ورودی (حسگر ۱)	Inlet dowtherm temperature	IDT1 (X ₄)
دمای روغن دوترم خروجی	Outlet dowtherm temperature	ODT (X ₅)
دمای راکتور (حسگر ۱)	Reactor temperature (sensor1)	RT1 (X ₆)
دمای بالای برج (حسگر ۱)	Column head temperature	CHT1 (X ₇)
دمای بالای زداینده	Scrubber top temperature	STT (X ₈)
دمای آب ورودی	Inlet water temperature	IWT (X ₉)
دمای پایین برج	Column bottom temperature	CBT (X ₁₀)
دمای پایین زداینده	Scrubber bottom temperature	SBT (X ₁₁)
دمای راکتور (حسگر ۲)	Reactor temperature (sensor2)	RT2 (X ₁₂)
دمای ورودی چگالنده	Condenser inlet temperature	CIT (X ₁₃)
دمای شیر V14	Valve v14 temperature	V14T (X ₁₄)
دمای شیر V15	Valve v15 temperature	V15T (X ₁₅)
فشار دیفرانسیلی راکتور	Reactor differential pressure	RDP (X ₁₆)
دمای بالای برج (حسگر ۲)	Column top temperature PV (sensor2)	CTTPV2 (X ₁₇)
درصد بازشدگی مسیر اول شیر V42	V42 way-1 valve opening (%)	V421VO (X ₁₈)
دمای روغن دوترم ورودی (حسگر ۲)	Inlet dowtherm temperature PV (sensor2)	IDTPV2 (X ₁₉)
درصد بازشدگی مسیر دوم شیر V42	V42 way-1 valve opening (%)	V422VO (X ₂₀)
دمای راکتور (حسگر ۲)	Reactor temperature PV (sensor2)	RTPV2 (X ₂₁)
درصد بازشدگی شیر V42	Valve v42 valve opening (%)	V42VO (X ₂₂)
میزان خلا در راکتور	Reactor vacuum PV	RVPV (X ₂₃)
خروجی یک لحظه قبل ویسکوزیته	Viscosity Output _{t-1}	F _{1^{t-1}}
خروجی یک لحظه قبل عدد اسیدیته	Acidity number Output _{t-1}	F _{2^{t-1}}
ویسکوزیته	Viscosity	F1
عدد اسیدیته	Acidity number	F2

فرض می‌شود [۱۸]:

$$p_i = \begin{cases} -a_i & i \leq n \\ b_{i-(m+1)} & i > n \end{cases} \quad (1)$$

در رابطه بالا y_i داده خروجی حاصل از مدل، n تعداد پارامترها یا رگرسورها، $z_{i,t}$ رگرسور i ام و $a_i(\cdot)$ پارامتر وابسته به حالت i ام و تابعی از تعداد (ns_i) متغیرهای حالت مربوط به پارامتر i ام یا حالت‌های متناظر ($x_{j,i,t}$, $j=1,2,\dots,ns_i$) است. n_i زمانی که پارامتر

انتخاب یک ساختار بهینه برای عملکرد بهتر مدل و بهینه‌سازی پارامترهای آن از مراحل حائز اهمیت طراحی حسگر نرم می‌باشد. مراحل طراحی حسگر نرم داده محور به روش LIV مطابق الگوریتم نشان داده شده در شکل ۲ می‌باشد. مدل‌سازی داده محور سیستم غیرخطی، با پارامترهای وابسته به چندین متغیر حالت، در هر نمونه زمانی t ، به صورت زیر



شکل ۲ نمودار شناسایی مدل حسگر نرم براساس روش LIV و تعیین متغیرهای مؤثر مدل

محلی توصیف کننده پارامترهای وابسته به حالت و بردار جدید رگرسورها در نمونه زمانی t است. با در نظر گرفتن $\mathbf{Z}_t = [\mathbf{z}_1^T \ \mathbf{z}_2^T \ \mathbf{z}_3^T \ \dots]^T = [\mathbf{Z}_1 \ \mathbf{Z}_2 \ \dots \ \mathbf{Z}_p]$ که در آن $p = \sum_{i=1}^n p_i$ بیان کننده تعداد رگرسورها در \mathbf{Z}_t یا به صورت معادل برابر تعداد تمام پارامترهای مدل در \mathbf{A}_t است و در صورتی که $\mathbf{y} = [y_1 \ y_2 \ y_3 \ \dots]^T$ باشد، سپس با تخمین متغیر سودمند در رابطه ۲ در نمونه k ام، پارامترهای تخمین زده شده به صورت زیر بیان می شوند:

$$\hat{\mathbf{A}}_k = \mathbf{U}_k^T \mathbf{y} \quad (4)$$

$$\mathbf{P}_k = \hat{\sigma}_k^2 (\mathbf{U}_k^T \mathbf{U}_k) \quad (5)$$

\mathbf{P}_k ماتریس کوواریانس تخمین پارامتر وابسته به حالت است و \mathbf{U}_k نقش ماتریس IV در نمونه k ام را ایفا می کند که اصطلاحاً متغیر سودمند محلی (LIV) نامیده می شود. ماتریس وزنی محلی، $\mathbf{W}_{m,k}$ یک ماتریس قطری می باشد که درایه های قطری آن مقادیر تابع کرنل متناظر با i امین پارامتر وابسته

$a_{i,t}$ وابسته به هیچ حالتی نباشد؛ صفر در نظر گرفته می شود. عبارت $e_t = N(0, \sigma^2)$ ، معادل خطای ناشناخته سفید، با متوسط صفر، توزیع گوسی و واریانس σ^2 می باشد. اگر فرض شود که عملکرد هر پارامتر وابسته به حالت نسبت به حالت های متناظر آن می تواند توسط چند جمله ای محلی در فضای متغیر حالت تعریف شود، در نتیجه تخمین محلی پارامترهای این چند جمله ای ها با به کارگیری روش متغیر سودمند امکان پذیر خواهد بود. با این فرض، $a_{i,t}$ می تواند به صورت زیر تعریف گردد:

$$a_{i,t} = \sum_{j=1}^{s_i} \mathbf{A}_{i,t} \quad i=1,2,\dots,n \quad (2)$$

که در آن، بردار پارامترهای ثابت محلی چند جمله ای توصیف کننده $a_{i,t}$ است. تمامی عضوهای $\mathbf{A}_{i,t}$ توابع وابسته به حالت های s_i $x_{j,i,t}$ ، $j=1,2,\dots,n$ هستند. با جایگزین نمودن از رابطه ۲، مدل ارائه شده در رابطه ۱ به فرم برداری زیر تبدیل می شود:

$$\mathbf{y}_t = \mathbf{Z}_t \mathbf{A}_t + \mathbf{e}_t \quad (3)$$

که در آن، بردار پارامترهای چندجمله ای های

مقدار واقعی، مقدار تخمین زده شده، میانگین مقادیر λ و میانگین مقادیر $\hat{\lambda}$ است.

نتایج و بحث

یک فرآیند ناپیوسته صنعتی تولید رزین پلی استر [۳۴] به عنوان مورد مطالعه در این پژوهش استفاده شده است. با توجه به دانش فرآیندی ۲۳ متغیر آسان اندازه گیر به عنوان ورودی مدل حسگر نرم در نظر گرفته شد. این متغیرها شامل متغیرهای دما، فشار، نرخ جریان و میزان بازشدگی شیرها می باشند. ابتدا داده های نوبت ۳ به طور تصادفی، به عنوان داده های آموزش انتخاب گردید. برای حذف متغیرهای غیر ضروری از مدل، از روش ترکیبی حذف پس رو و معیار پهنای باند بهینه مدل LIV استفاده شد. برای تعیین مقادیر بهینه پهنای باند ($\lambda_{j,i}$) از روش بهینه سازی اعتبارسنجی متقابل^۵ استفاده شد. نوع تابع کرنل $K(\cdot)$ در رابطه ۶ از نوع گاوسی نرمال فرض شده است. ساختار مدل LIV برای خروجی F_1 (ویسکوزیته) و F_2 (عدد اسیدیته) مطابق رابطه ۱۰ در نظر گرفته شد. مدل سازی حسگر در محیط نرم افزار MATLAB و با استفاده از جعبه ابزارهای موجود و جعبه ابزار کدنویسی شده مربوط به روش LIV انجام گرفته است.

$$\begin{cases} F_{1,t} = a_{1,t} \{X_1, X_2, X_3, \dots, X_{22}, X_{23}\} \times 1 + e_t \\ F_{2,t} = a_{2,t} \{X_1, X_2, X_3, \dots, X_{22}, X_{23}\} \times 1 + e_t \end{cases} \quad (10)$$

در حالت اول، تمامی متغیرهای ورودی های که همان ۲۳ متغیر آسان اندازه گیر فرآیند می باشند، به عنوان متغیرهای حالت در یک پارامتر در نظر گرفته شد و رگرسیون مدل نیز یک فرض شده است. در این حالت مدل به صورت پایا فرض شده و از اثر پویایی فرآیند صرف نظر شده است. نتایج آموزش مدل برای پیش بینی ویسکوزیته در جدول ۲ آورده شده است.

به حالت در نمونه k ام است که به صورت زیر تعریف می شود:

$$\begin{cases} W_{m,k} = \text{diag}(K(\Delta_{i,k,t})) \\ \Delta_{i,k,t} = \sum_{j=1}^{n_i} \left(\frac{x_{j,i,t} - x_{j,i,k}}{\lambda_{j,i}} \right)^2 \end{cases} \quad \begin{cases} \forall t \\ 0 < \sum_{v=1}^{i-1} p_v < m \leq \sum_{v=1}^i p_v \end{cases} \quad (6)$$

$K(\cdot)$ تابع کرنل و $\lambda_{j,i}$ پهنای باند متناظر با $x_{j,i,t}$ است. $\lambda_{j,i}$ به عنوان آبر پارامتر^۱ شناخته می شود و می بایست در زمان شناسایی مدل توسط روند بهینه سازی تعیین گردد. برای مطالعه جزئیات بیشتر به مرجع [۱۸] مراجعه نمایید.

اعتبارسنجی مدل

آخرین گام طراحی حسگر نرم، اعتبارسنجی آن است. ارزیابی مدل حسگر نرم با استفاده از شاخص های عملکردی زیر انجام شده است. همبستگی پیرسون^۲ به عنوان رایج ترین شاخص اندازه گیری همبستگی در آمار شناخته می شود. این معیار همبستگی بین داده های واقعی و مقادیر پیش بینی شده معادل با همان مقادیر واقعی را ارزیابی می کند. همبستگی پیرسون توسط رابطه زیر بیان می شود:

$$R = \frac{\sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - \bar{y})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - \bar{y})^2 \sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2}} \quad (7)$$

یکی دیگر از شاخص های کاربردی جهت اعتبارسنجی کمی مدل، جذر میانگین مربع خطا^۳ (RMSE) است که متوسط مربع اختلاف میان مقادیر مشاهده شده واقعی و مقدار پیش بینی شده توسط مدل را اندازه گیری می کند.

$$\text{RMSE} = \sqrt{\sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2 / N} \quad (8)$$

ضریب تعیین^۴ که با R^2 نمایش داده می شود و میزان سازگاری داده تخمین زده شده با داده واقعی را نشان می دهد.

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2} \quad (9)$$

در روابط بالا، N تعداد داده ها، k تعداد متغیرهای مستقل موجود در مدل و y_i ، \hat{y}_i ، \bar{y} و $\bar{\hat{y}}$ به ترتیب

1. Hyper Parameter
2. Pearson Correlation
3. Root Mean Squares Error
4. Coefficient of Determination
5. Cross Validation

جدول ۲ نتایج عملکردی مدل حسگر نرم LIV برای پیش بینی ویسکوزیته محصول (۱۱)

مقایسه مقادیر پیش‌بینی شده مدل حسگر نرم آموزش دیده با مقادیر واقعی	شاخص‌های عملکردی تست مدل			نوبت آموزش / نوبت تست	تعداد متغیر مدل	متغیرهای مؤثر حاصل از شناسایی مدل	مرحله
	MAE	RMSE	R ²				
	۰/۰۰۵۳	۰/۰۰۸۴	۱	۲/۳	۵	ODT، CHT1، RT2، V15T، CTPV2	مرحله تست ۱
	۰/۰۰۴۵	۰/۰۰۲۳	۱	۲/۵ و ۳	۷	ODT، CHT1، RT2، V15T، CTPV2، CIT، RTPV2	مرحله تست ۲
	۱/۰۵۷۳ × ۱۰ ^{-۵}	۲/۹۱۹۵ × ۱۰ ^{-۵}	۱	۳	۲۴	SBT، V15T، CIT، F _{1,1-1}	مرحله آموزش
	۰/۰۰۱۵	۰/۰۰۲۲	۰/۹۹۹۹	نوبت ۴/۳ به صورت تصادفی	۴	SBT، V15T، CIT، F _{1,1-1}	مرحله تست ۲

نبودن مجموعه داده نوبت ۲ برای آموزش مدل و فرضیه دوم در نظر نگرفتن ماهیت پویای فرآیند است. جهت بررسی فرضیه اول، در مرحله دوم، داده‌های نوبت ۳ و نوبت ۵ به صورت تصادفی به عنوان داده‌های مرحله آموزش مدل و داده‌های نوبت ۲ به عنوان داده‌های مرحله اعتبارسنجی انتخاب گردید. آموزش مجدد با مجموعه داده جدید صورت گرفت و نتایج این آموزش در **جدول ۲** آورده شده است. به دلیل افزایش تعداد داده‌ها و وجود ۲۳ متغیر، بار محاسباتی و به تبع آن زمان انجام محاسبات در این آموزش به طور چشم‌گیری افزایش یافت. متغیرهای ODT، CHT1، RT2، V15T، RTPV2 و CIT، CTPV2 به عنوان متغیرهای نهایی

متغیرهای ODT، CHT1، RT2، V15T و CTPV2 به عنوان متغیرهای مؤثر حاصل از آموزش مدل با پهنای باند بهینه، انتخاب شدند. داده‌های نوبت ۲ به طور تصادفی برای اعتبارسنجی مدل پایای به دست آمده در نظر گرفته شد. مدل آموزش دیده، مطابق شکل مرحله اعتبارسنجی قادر به پیش‌بینی موفق نبود و با نتایج غیر قابل قبول مواجه گردید. همان‌طور که در شکل مرحله اول مشخص است خروجی مدل تنها تا مقادیر کمتر از ۱۰۰۰ داده را قادر به پیش‌بینی بوده و در ادامه مقادیر پیش‌بینی شده با نتایج واقعی، اختلاف زیادی دارند. دلایل این نتایج نامطلوب به دست آمده در دو فرضیه گنجانده شد. فرضیه اول جامع

به‌عنوان متغیرهای مؤثر بر پیش‌بینی ویسکوزیته تعیین گردیدند. هر چهار متغیر به‌عنوان متغیر حالت ورودی برای آموزش مدل نهایی لحاظ شدند. نتایج نهایی آموزش مدل به این روش نیز در **جدول ۲** آورده شده است. مقادیر شاخص‌های عملکردی R^2 RMSE، و MAE برای آموزش مدل در این مرحله به ترتیب ۱، $۲/۹۱۹۵ \times ۱۰^{-۶}$ و $۱/۰۵۸۳ \times ۱۰^{-۵}$ به‌دست آمد. پهنای باندها چهار متغیر ورودی SBT، $V15T$ ، CIT و $F_{1,t-1}$ بعد از آموزش مدل به ترتیب $۰/۹۰۱۱۹۶$ ، $۶/۲۰۹۴۴۳$ ، $۷/۶۷۶۵۳۸$ و $۰/۰۰۰۱۶۱$ به‌دست آمد. همچنین به‌دلیل وجود دو متغیر در مراحل آموزش، مدت زمان آموزش مدل در مقایسه با روش قبل حداقل به میزان $۰/۰۱$ برابر کاهش یافت. کارایی مدل به‌دست آمده بر روی چهار مجموعه داده مربوط به نوبت‌های دیگر مورد ارزیابی قرار گرفت. نوبت‌های انتخابی جهت اعتبارسنجی مدل به گونه‌ای انتخاب شدند که در برخی از آن‌ها روند داده‌های فرآیندی با داده‌های استفاده شده در مرحله آموزش متفاوت باشد تا عملکرد مدل به نحو مناسب‌تری مورد ارزیابی قرار گیرد.

حاصل از آموزش مدل، انتخاب شدند. نتایج پیش‌بینی مدل به‌دست آمده در شکل مرحله دوم **جدول ۲** نمایش داده شده است. با اعمال تغییرات مذکور، مدل آموزش داده شده تنها تا داده‌های کمتر از ۵۰۰ را با دقت پایین پیش‌بینی کرده و پس از آن مقادیر پیش‌بینی مدل پرت و غیر قابل قبول شدند. بنابراین، با وجود تغییر در داده‌های آموزش مدل، پیش‌بینی مدل بهبود نداشته و مدل قادر به پیش‌بینی داده‌های تست نبوده است. از این‌رو جهت بررسی فرضیه دوم، در مرحله سوم روش آموزش مدل تغییر داده شد. در هر مرحله آموزش مدل به جهت اعمال خاصیت غیرثابت بودن^۱ فرآیند، تنها دو متغیر در نظر گرفته شد. این دو متغیر شامل متغیر $F_{1,t-1}$ (مقدار خروجی مدل در لحظه قبل) به‌همراه یکی از متغیرهای آسان اندازه‌گیر در هر مرحله می‌باشد. نتایج پهنای باندها متغیرهای ورودی مدل حسگر نرم برای پیش‌بینی ویسکوزیته محصول مطابق **جدول ۳** می‌باشد. با توجه به نتایج پهنای باندها، متغیرهای SBT، $V15T$ ، CIT و $F_{1,t-1}$ که دارای حداقل پهنای باندها می‌باشند،

جدول ۳ نتایج پهنای باندها در آموزش مدل حسگر نرم به‌صورت دو متغیره برای پیش‌بینی ویسکوزیته محصول (μ)

متغیر	پهنای باندها ($\lambda_{j,t}$)	متغیر	پهنای باندها ($\lambda_{j,t}$)
$F_{1,t-1}$	۰/۰۰۰۱۶۱	RTPV2	۱۰۷۵/۷۶۰۰۰
SBT	۰/۹۰۱۴۶۱	IDT1	۱۰۷۶/۸۷۹۰۰
V15T	۶/۵۳۲۸۸۹	RDP	۱۰۷۶/۹۷۷۰۰
CIT	۷/۹۰۹۴۶۵	RT2	۱۰۸۰/۳۳۴۰۰
VLT	۱۷/۷۹۱۲۳۰	IWT	۱۰۸۰/۴۲۱۰۰
V422VO	۲۶/۱۳۳۶۵۰	RT1	۱۰۸۰/۹۱۷۰۰
CHT1	۶۳۵/۱۷۹۴۰۰	ODT	۱۰۸۲/۴۵۹۰۰
MR	۶۳۶/۹۷۸۵۰۰	IDTPV	۱۰۸۲/۸۶۵۰۰
CTTPV2	۷۹۸/۰۷۳۳۰۰	CBT	۱۹۱۳/۰۰۳۰۰
MRP	۹۱۰/۹۰۲۷۰۰	STT	۲۴۵۶/۱۶۶۰۰
RVPV	۱۰۷۰/۶۸۴۰۰۰	V14T	۶۶۰۹/۶۸۸۰۰
V42VO	۱۰۷۴/۸۴۶۰۰۰	V421VO	۸۴۴۷۱/۴۵۰۰۰

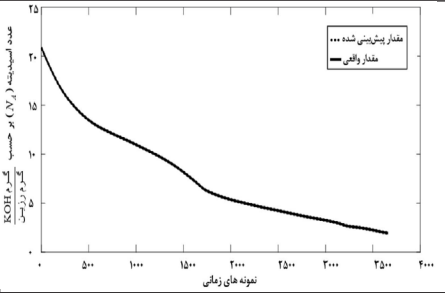
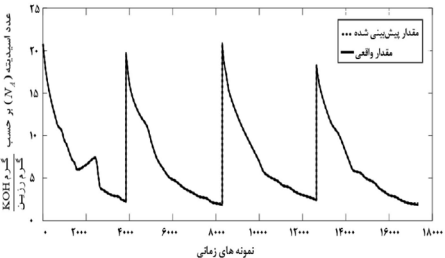
ارزیابی قرار گرفت. همان طور که در نمودار مرحله آموزش و تست **جدول ۵** مشاهده می شود، مدل ارائه شده توانست مقادیر عدد اسیدیته محصول را برای نوبت های مختلف با خطای قابل قبول پیش بینی نماید. شاخص های عملکردی مدل پیش بینی عدد اسیدیته در مرحله آموزش و تست مدل طبق **جدول ۵** دارای مقادیر قابل قبولی است. نمودارهای مقایسه مقادیر پیش بینی شده و مقادیر واقعی عدد اسیدیته در مرحله آموزش و تست نیز صحت این نتیجه را تأیید می کنند. با وجود روند متفاوت داده های مربوط به ویسکوزیته و عدد اسیدیته در برخی نوبت های انتخابی در مرحله تست، مدل حسگر نرم LIV توانست به خوبی این روندها را دنبال کرده و حداقل انحراف و خطا را در پیش بینی داشته باشد. در **جدول ۶** تعداد متغیرهای ورودی، تعداد نوبت های در نظر گرفته شده جهت آموزش مدل و در نهایت خطای مقادیر پیش بینی شده این پژوهش با دیگر مطالعات مقایسه شده است. مشاهده می شود که میزان خطا در مقایسه با کارهای مشابه گزارش شده در **جدول ۶**، بهبود چشم گیری داشته است.

مطابق شکل موجود در **جدول ۲**، مدل حاصل از این روش توانست در مرحله اعتبارسنجی مقدار ویسکوزیته محصول را برای نوبت های مختلف با دقت قابل قبول پیش بینی نماید. به همین ترتیب مراحل آموزش مدل برای به دست آوردن مدل مناسب جهت پیش بینی عدد اسیدیته انجام شد. در هر مرحله آموزش مدل دو متغیر شامل متغیر F_{2t-1} (مقدار خروجی مدل در لحظه قبل) به همراه یکی از متغیرهای آسان اندازه گیر در نظر گرفته شد. نتایج پهنای باند به دست آمده در **جدول ۴** آورده شده است. از آنجایی که متغیرهای CIT ، F_{2t-1} و ODT که دارای حداقل پهنای باند می باشند، به عنوان متغیرهای مؤثر بر پیش بینی عدد اسیدیته تعیین گردیدند. مقادیر شاخص های $RMSE$ ، R^2 و MAE برای آموزش مدل در این مرحله به ترتیب 1×10^{-5} ، $8/13 \times 10^{-5}$ و $1/72 \times 10^{-5}$ به دست آمد. پهنای باند بهینه برای سه متغیر ورودی CIT ، F_{2t-1} و ODT در مرحله آموزش مدل به ترتیب $0/000247$ ، $0/489766$ و $1/318222$ تعیین گردید. پس از اتمام آموزش مدل، کارایی مدل به دست آمده به صورت تصادفی بر روی چهار مجموعه داده مربوط به نوبت های دیگر مورد

جدول ۴ نتایج پهنای باند در آموزش مدل حسگر نرم به صورت دو متغیره برای پیش بینی عدد اسیدیته (N_A)

متغیر	پهنای باند ($\lambda_{j,i}$)	متغیر	پهنای باند ($\lambda_{j,i}$)
F_{2t-1}	0/000247	RVPV	10/238965
MRP	0/137217	RDP	11/045396
MR	0/145844	V42VO	685/512944
ODT	0/489773	RTPV2	685/933447
CTTPV2	0/750012	RT1	687/006125
IDTPV	1/209875	CHT1	1152/680675
IDT1	1/212885	SBT	1724/482013
CIT	1/332444	V15T	12013/682538
CBT	1/485482	RT2	15348/826412
V422VO	1/619033	STT	23523/536411
IWT	1/979438	V14T	53019/003971
VLT	2/146555	V421VO	218215/491511

جدول ۵ نتایج عملکردی مدل حسگر نرم LIV برای پیش‌بینی عدد اسیدیته محصول (N_A)

مقایسه مقادیر پیش‌بینی شده مدل حسگر نرم آموزش دیده با مقادیر واقعی	شاخص‌های عملکردی تست مدل			نوبت انتخاب شده	تعداد متغیر مدل	متغیرهای موثر حاصل از شناسایی مدل	مرحله آموزش
	MAE	RMSE	R^2				
	1.32×10^{-5}	7.13×10^{-5}	۱	۳	۲۴	$F_{2,t-1}$, CIT, ODT	مرحله آموزش
	۰/۰۰۳۰	۰/۰۰۹۴	۰/۹۹۹۵	نوبت ۴ به صورت تصادفی	۳	$F_{2,t-1}$, CIT, ODT	مرحله تست

جدول ۶ شاخص‌های عملکردی و تعداد متغیرهای ورودی مدل حسگرهای نرم برای فرآیند ناپیوسته تولید رزین پلی‌استر

R^2		RMSE		تعداد متغیر ورودی نهایی		تعداد نوبت برای آموزش مدل		نوع مدل	نویسندگان
N_A	μ	N_A	μ	N_A	μ	N_A	μ		
---	---	---	---	۲۳	۲۳	۲۷	۲۷	MATP+PLS	فکو و همکاران [۳۴]
---	---	---	---	۲۳	۲۳	۲۷	۲۷	NN+PLS	فکو و همکاران [۳۵]
---	---	---	---	۲۴	۲۴	۲۷	۲۷	Mix+PLS	سوزا و آراجو [۳۶]
۰/۸۵۱	۰/۹۰۳	۱/۷۲۷	۰/۹۱۵	۲۳	۲۳	۲۷	۲۷	CoRLSR	فریرا و همکاران [۳۷]
۰/۹۹۹۵	۰/۹۹۹۹	۰/۰۰۹۴	۰/۰۰۲۲	۳	۴	۱	۱	LIV	پژوهش فعلی

در مدل‌های حسگر نرم ارائه شده توسط دیگر محققین از تمامی متغیرهای موجود در مجموعه داده مرجع (۲۳ متغیر) به‌عنوان متغیرهای ورودی جهت پیش‌بینی ویسکوزیته (μ) و عدد اسیدیته محصول (N_A) استفاده شده است. اما با کاهش تعداد متغیرهای ورودی در این پژوهش، در نهایت مدل ارائه شده توانست با استفاده از ۴ متغیر ورودی برای ویسکوزیته و ۳ متغیر ورودی برای عدد اسیدیته پیش‌بینی قابل قبولی از این متغیرهای شاخص کیفیت داشته باشد. شاخص‌های R^2 و RMSE برای ویسکوزیته پیش‌بینی شده در این پژوهش، نسبت به روش CoRLSR به‌میزان ۹۵/۷۵٪ و ۱۰/۷۳٪ و برای عدد اسیدیته این شاخص‌ها به‌ترتیب ۹۹/۴۵٪ و

۲۴/۱۶٪ بهبود داشته است. برتری دیگر مدل LIV در مقایسه با دیگر مدل‌های ارائه شده، آموزش مدل با داده‌های تنها یک نوبت و عملکرد بسیار خوب در پیش‌بینی داده‌های سایر نوبت‌ها با روند متفاوت بوده است. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که تکنیک به‌کاررفته در این پژوهش، مدل حسگر نرمی با دقت بیشتر از مدل‌های مشابه ارائه کرده است که به تعداد نوبت‌های کم‌تر و همچنین متغیرهای ورودی کم‌تری نیازمند است.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش حسگر نرم داده محور بر مبنای روش مدل‌سازی LIV به‌منظور پیش‌بینی کیفیت

قبولی دارد. بنابراین مدلی که با تعداد داده پایین توانایی پیش‌بینی مناسبی داشته باشد، زمان و بار محاسباتی بسیار کمتری خواهد داشت. مدل LIV به کار گرفته شده در این پژوهش، متغیرهای ورودی مدل را از ۲۴ متغیر به ۴ متغیر برای ویسکوزیته و ۳ متغیر برای عدد اسیدیته کاهش داد. شاخص‌های عملکردی RMSE و R^2 پیش‌بینی شده در این پژوهش، نسبت به روش CoRLSR به میزان ۹۵/۷۵٪ و ۱۰/۷۳٪ برای ویسکوزیته و به میزان ۹۹/۴۵٪ و ۲۴/۱۶٪ برای عدد اسیدیته بهبود داشته است. مدل حسگر نرم ارائه شده توانست متغیر خروجی یک فرآیند ناپیوسته را با دقت بسیار بالایی پیش‌بینی نماید. از دیگر مزایای این مدل در مقایسه با دیگر مدل‌های حسگر نرم پیاده شده بر روی این مورد مطالعاتی، تعداد متغیرهای ورودی کمتر است که منجر به کاهش بار محاسباتی شده است.

محصول در فرآیند پلیمریزاسیون تولید رزین پلی‌استر ارائه شده است. مدل LIV منتخب در بخش آموزش مدل، شاخص‌های عملکردی RMSE، MAE و R^2 را برای ویسکوزیته محصول به ترتیب برابر ۰/۰۰۲۲، ۰/۰۰۱۵ و ۰/۹۹۹۹ و برای عدد اسیدیته به ترتیب برابر ۰/۰۰۹۴، ۰/۰۰۳۰ و ۰/۹۹۹۵ گزارش می‌دهد. مدل حسگر نرم نهایی که دارای شاخص عملکردی RMSE و MAE قابل قبولی است؛ با استفاده از داده‌های بسیار کمتری در مقایسه با دیگر روش‌ها، آموزش دیده شده است. به عبارت دیگر، در این پژوهش مدل حسگر نرم تنها با استفاده از مجموعه داده‌های ۱ نوبت آموزش داده شد، در حالی که در پژوهش‌های دیگر، از مجموعه داده‌های ۲۷ نوبت برای آموزش مدل استفاده شده است. از این رو می‌توان نتیجه گرفت که روش LIV، در شرایطی که تعداد داده‌های صنعتی کمی موجود باشد؛ توانایی به کارگیری و پیش‌بینی قابل

مراجع

- [1]. Jin H., Chen X., Yang, J., Wu, L., (2014). Adaptive soft sensor modeling framework based on just-in-time learning and kernel partial least squares regression for nonlinear multiphase batch processes. *Computers & Chemical Engineering*, 71, 77–93. doi: 10.1016/j.compchemeng.2014.07.014
- [2]. Shokry, A., Vicente, P., Escudero, G., Pérez-Moya, M., Graells, M., Espuña, A., (2018), Data-driven soft-sensors for online monitoring of batch processes with different initial conditions, *Computers & Chemical Engineering*, 118(4), 159-179. doi: 10.1016/j.compchemeng.2018.07.014
- [3]. Kadlec, P., Gabrys, B., Strandt, S., (2009). Data-driven soft sensors in the process industry, *Computers & Chemical Engineering*, 33(4), 795-814. doi: 10.1016/j.compchemeng.2008.12.012
- [4]. Jiang, Y., Yin, S., Dong, J., Kaynak, O., (2021), A Review on Soft Sensors for Monitoring, Control and Optimization of Industrial Processes, *IEEE Sensors Journal*, 21(11), 12868–12881. Doi: 10.1109/JSEN.2020.3033153
- [5]. Kaneko H., Arakawa M., Funatsu K., (2009), Development of a new soft sensor method using independent component analysis and partial least squares, *AIChE Journal*, 55(1), 87–98. Doi: 10.1002/aic.11648
- [6]. Sliskovic D., Grbic R., Hocenski Z., (2011), Methods for plant data-based process modeling in soft sensor development, *Automatika*, 52(4), 306–318. Doi: 10.1080/00051144.2011.11828430
- [7]. صادق صمیمی، ا.پ.، اسفندیاری بیات، ع. و امامزاده، ا.، (۱۴۰۱)، تعیین مشخصات جریان‌های دو فاز نفت-آب توسط شبکه عصبی کانولوشنی جریانی، پژوهش نفت، ۳۲(۱۲۷)، ۸۰-۶۵. Doi:10.22078/PR.2022.4895.3189
- [8]. Li, Z., Jin, H., Dong, S., Qian, B., Yang, B., Chen, X., (2022), Semi-supervised ensemble support vector regression based soft sensor for key quality variable estimation of nonlinear industrial processes with limited labeled data, *Chemical Engineering Research and Design*, 179, 510-526. Doi:10.1016/j.cherd.2022.01.026.
- [9]. Wang. Z.-H., Li, Y.-T., Wen, F.-C., (2023), A Novel In-Line Polymer Melt Viscosity Sensing System of Integrated Soft Sensor and Machine Learning, *IEEE Sensors Journal*, 23(11), 12181 – 12189. Doi: 10.1109/JSEN.2023.3267682
- [10]. Zhang, X., Song, C., Zhao, J., Xia, D., (2023), Gaussian mixture continuously adaptive regression for multimode processes soft sensing under time-varying virtual drift, *Journal of Process Control*, 124, 1-13. Doi: 10.1016/j.jprocont.2023.02.003

- [۱۱]. شکری، س.، صادقی، م.ت. و احمدی مروست، م.، (۱۳۹۲)، ارائه روش ترکیبی پیش‌پردازش داده‌ها در ماشین بردار رگرسیون جهت پیش‌بینی کیفیت گازوییل پالایش شده، پژوهش نفت، (۷۵)، ۲۳-۱۱۶-۱۰۲. doi: 10.22078/PR.2013.317
- [12]. Shao, W., Tian, X., (2015), Adaptive soft sensor for quality prediction of chemical processes based on selective ensemble of local partial least squares models, *Chemical Engineering Research and Design*, 95, 113-132. Doi: 10.1016/j.cherd.2015.01.006.
- [13]. Yeo, W.S., Saptoro, A., Kumar, P., Kano, M., (2023), Just-in-time based soft sensors for process industries: A status report and recommendations, *Journal of Process Control*, 128, 103025. Doi: 10.1016/j.jprocont.2023.103025.
- [14]. Young, P.C., (1999), Nonstationary time series analysis and forecasting. *Progress in Environmental Science*, 1, 3-48.
- [15]. Young, P.C., (2006), The data-based mechanistic approach to the modelling, forecasting and control of environmental systems. *Annual Reviews in Control*, 30(2), 169-182. Doi: 10.1016/j.arcontrol.2006.05.002.
- [16]. Young, P.C., McCabe, A.P., Chotai, A., (2002), State-dependent parameter nonlinear systems: identification, estimation and control, *IFAC Proceedings*, 35(1), 441-446. Doi: 10.3182/20020721-6-ES-1901.00235.
- [17]. Sadeghi, J., (2006), Modelling and control of non-linear systems using State-Dependent Parameter (SDP) models and Proportional-Integral-Plus (PIP) control method. Lancaster University: United Kingdom, Ph.D. Thesis.
- [۱۸]. بیدار، ب.، (۱۳۹۶)، طراحی حسگر نرم داده محور به‌منظور پیش‌بینی برخط کیفیت محصول در برج‌های تقطیر به‌روش پارامتر وابسته به متغیر حالت، دانشگاه سیستان و بلوچستان، زاهدان، ایران.
- [19]. Tavakoli Dashtjerd, F., Sadeghi, J., Shahraki, F., Khalilipour, M.M., Bidar, B., (2022), Soft sensor design using multi-state dependent parameter methodology based on generalized random walk method, *IEEE Sensors Journal*, 22(8). Doi: 10.1109/JSEN.2022.3147306.
- [20]. Gharehbaghi, H., Sadeghi, J., (2016), A novel approach for prediction of industrial catalyst deactivation using soft sensor modeling, *Catalysts*, 6(7), 93-109. Doi: 10.3390/catal6070093.
- [21]. Bidar, B., Sadeghi, J., Shahraki, F., Khalilipour, M.M., (2017), Data-driven soft sensor approach for online quality prediction using state dependent parameter models. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 162, 130-141. Doi: 10.1016/j.chemolab.2017.01.004.
- [22]. Bidar, B., Khalilipour, M.M., Shahraki, F., Sadeghi, J., (2018), A data-driven soft-sensor for monitoring ASTM-D86 of CDU side products using local instrumental variable (LIV) technique, *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*, 84, 49-59. Doi: 10.1016/j.jtice.2018.01.009.
- [23]. Bidar, B., Shahraki, F., Sadeghi, J., Khalilipour, M.M., (2018), Soft sensor modeling based on multi-state-dependent parameter models and application for quality monitoring in industrial sulfur recovery process, *IEEE Sensors Journal*, 18(11), 4583-4591. Doi: 10.1109/JSEN.2018.2818886.
- [۲۴]. نعیمی، ف.، (۱۳۹۷)، طراحی حسگر نرم‌افزاری داده محور به‌منظور پیش‌بینی برخط کیفیت نفت خام در واحد نمک‌زدایی / آب‌زدایی به روش پارامتر وابسته به متغیر حالت، دانشگاه سیستان و بلوچستان، زاهدان، ایران.
- [25]. Bidar, B., Naimi Rad, F., Khalilipour, M.M., Shahraki, F., Sadeghi, J., (2020), Quality Soft Sensor Design for Crude Oil Desalting/Dehydration Unit Using Local Instrumental Variable (LIV) Approach, *The 11th International Chemical Engineering Congress & Exhibition (IChEC 2020)*, Fouman, Iran.
- [۲۶]. حسن‌پور، ر.، (۱۳۹۸)، طراحی حسگر نرم داده محور با روش پارامتر وابسته به متغیر حالت به‌منظور پیش‌بینی کیفیت در فرآیند تنسی ایستمن، دانشگاه سیستان و بلوچستان، زاهدان، ایران.
- [۲۷]. حسن‌پور، ر.، خلیلی پور، م.م.، صادقی، ج.، بیدار، ب.، (۱۴۰۲)، ارزیابی کیفیت محصول مبتنی بر روش پارامتر وابسته به متغیر حالت با کاربرد در فرآیند تنسی ایستمن (TEP)، *مجله کنترل*، (۱)، ۷۷-۹۱.
- [28]. Jiang, Y., Yin, S., Dong, J., Kaynak, O., (2021), A review on soft sensors for monitoring, control, and optimization of industrial processes, *IEEE Sensors Journal*, 21(11), 12868 - 12881, 2021. Doi: 10.1109/JSEN.2020.3033153.
- [29]. Wang, L., Jin, H., Chen, X., Dai, J., Yang, K., Zhang, D., (2016), Soft sensor development based on the hierarchical ensemble of Gaussian process regression models for nonlinear and non-gaussian chemical processes. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 55(28), 7704-7719. Doi: 10.1021/acs.iecr.6b00240
- [30]. Frauendorfer, E., Wolf, A., Hergeth, W.D., (2010), Polymerization online monitoring, *Chemical Engineer-*

- [31]. Rännar, S., MacGregor, J.F., Wold, S., (1998), Adaptive batch monitoring using hierarchical PCA, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 41(1), 73-81. Doi: 10.1016/S0169-7439(98)00024-0.
- [32]. Li, C., Ye, H., Wang, G., Zhang, J., (2005), A recursive nonlinear PLS algorithm for adaptive nonlinear process modeling, *Chemical Engineering and Technology*, 28(2), 141-152. Doi: 10.1002/ceat.200407027.
- [33]. Ahmed, F., Nazir, S., Yeo, Y.K.Y., (2009), A new soft sensor based on recursive partial least squares for online melt index predictions in grade-changing hdpe operations, *Chemical Product and Process Modeling*, 4(1). Doi: 10.2202/1934-2659.1271.
- [34]. Facco, P., Doplicher, F., Bezzo, F., Barolo, M., (2009), Moving average PLS soft sensor for online product quality estimation in an industrial batch polymerization process, *Journal of Process Control*, 19(3), 520-529. Doi: 10.1016/j.jprocont.2008.05.002.
- [35]. Facco, P., Bezzo, F., Barolo, M., (2010), Nearest-neighbor method for the automatic maintenance of multivariate statistical soft sensors in batch processing, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 49(5), 2336-2347. Doi: 10.1021/ie9013919.
- [36]. Souza, F.A., Araújo, R., (2014), Mixture of partial least squares experts and application in prediction settings with multiple operating modes, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 130, 192-202. Doi: 10.1016/j.chemolab.2013.11.006.
- [37]. Ferreira, V., Souza, F.A., Araújo, R., (2017), Semi-supervised soft sensor and feature ranking based on co-regularised least squares regression applied to a polymerization batch process, 15th International Conference on Industrial Informatics (INDIN), Emden, Germany. Doi: 10.1109/INDIN.2017.8104781.
- [38]. Abeykoon, C., (2018), Design and applications of soft sensors in polymer processing: A review, *IEEE Sensors Journal*, 19(8), 2801-2813. Doi: 10.1109/JSEN.2018.2885609.
- [39]. Yin, Z., Hao, K., Chen, L., Cai, X., Zhu, X., (2019), Forecasting the intrinsic viscosity of polyester based on improved extreme learning machine, *International Conference on Artificial Intelligence and Computer Applications (ICAICA)*, Dalian, China. Doi: 10.1109/ICAICA.2019.8873494.
- [40]. He, Y.-L., Tian, Y., Xu, Y., Zhu, Q.-X., (2020), Novel soft sensor development using echo state network integrated with singular value decomposition: Application to complex chemical processes, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 200, 103981. Doi: 10.1016/j.chemolab.2020.103981.
- [41]. Zhu, X., Hao, K., Xie, R., Huang, B., (2021), Soft sensor based on extreme gradient boosting and bidirectional converted gates long short-term memory self-attention network, *Neurocomputing*, 434, 126-136. Doi: 10.1016/j.neucom.2020.12.028.
- [42]. Zhu, X., Damarla, S.K., Hao, K., Huang, B., Chen, H., Hua, Y., (2023), ConvLSTM and Self-Attention Aided Canonical Correlation Analysis for Multioutput Soft Sensor Modeling, *IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement*, 72. Doi: 10.1109/TIM.2022.3225004.
- [43]. Perera, Y.S., Ratnaweera, D.A.A.C., Dasanayaka, C.H., Abeykoon, C., (2023), The role of artificial intelligence-driven soft sensors in advanced sustainable process industries: A critical review, *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, 121, 105988. Doi: 10.1016/j.engappai.2023.105988.
- [44]. Scheirs, J., Long, T.E., (2005), *Modern polyesters: Chemistry and technology of polyesters and copolyesters*, John Wiley & Sons.
- [45]. Deopura, B. L., Alagirusamy, R., Joshi, M., Gupta, b., (2008), *Polyesters and polyamides*, Woodhead Publishing in Textiles: Number 71, CRC press.



Design of Data-Driven Soft Sensor for Quality Prediction in Industrial Polyester Resin Production Process

Gohar Hadizadeh, Jafar Sadeghi, Mir Mohammad Khalilipour* and Bahareh Bidar

Department of Chemical Engineering, Shahid Nikbakht Faculty of Engineering, University of Siستان and Baluchestan, Zahedan, Iran

a.khalilipour@eng.usb.ac.ir

DOI:10.22078/pr.2023.5167.3297

Received: July/12/2023

Accepted: December/02/2023

Introduction

Competitive and rapidly changing market environments face multiple factors of uncertainty and change in product demand, availability of raw materials, prices, product specifications, and environmental constraints. This has led to a desire for batch processes that allow for faster development of new products and also have high flexibility and adaptability. Batch chemical processes are a good option in cases such as low-volume production (i.e., production less than 500,000 kg), sensitive processes, multi-product operations, and when changes in product mix or rate are required. Therefore, a wide range of products in low volume and with high added value, including special chemical and biochemical materials, microelectronic materials, pharmaceutical, agricultural and biochemical products, etc., are produced continuously [1, 2, 3]. The purpose of this research is to design a novel data-driven soft sensor in order to predict the quality in the batch process of polyester resin production based on the parameter method dependent on the state variable, which has not been investigated so far. In this research, the information of an industrial process of polyester resin production has been investigated. In order to validate the proposed model, the prediction results of the model for acidity and viscosity number variables have been compared with the results of other existing methods.

Data based-Soft Sensor Design Identification of Soft Sensor Model

Choosing an optimal model structure for better

performance and optimizing model parameters is one of the important stages of soft sensor design. The design steps of data-based soft sensor using LIV method are depicted in Fig. 1.

Due to the different residence times required for the esterification and polymerization steps, the industrial batch process for PET production, based on Figure 1, is designed with two main reactors. One reactor for esterification and one or two parallel reactors for polymerization. The quality of the produced polymer is determined by two chemical properties, including the polymer acidity number (NA) and its viscosity (μ) [4, 5].

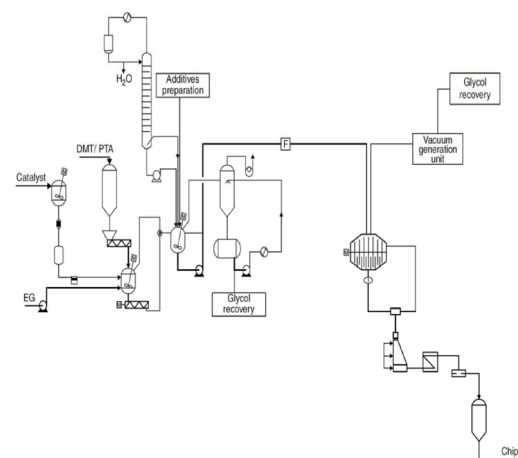


Fig. 1 The flow diagram of the batch multipurpose process of PET production [4].

The data-based modeling of the nonlinear system, with parameters dependent on the several states, in each time sample, is assumed as follows:

$$p_i = \begin{cases} -a_i & i \leq n \\ b_i - (m+1) & i > n \end{cases} \quad (1)$$

where, γ_t is the model output, n is the number of regressors, $Z_{i,t}$ is the i th regressor and $\alpha_i(\cdot)$ is the i th state dependent parameter that is a function of ns_i correspondent states ($x_{j,i,t}$, $j=1,2,\dots, ns_i$), when $\alpha_{i,t}$ is assumed to be constant, and it is not state dependent, $e_t = N(0, \sigma^2)$ ns_i is a zero mean white Gaussian distributed unknown noise with variance σ^2 .

were considered as inputs to the soft sensor model according to process knowledge. These variables include variables such as temperature, pressure, flow rate and valve opening rate. In this study, first, the data of batch 3 was randomly selected as the training data. The combined method of backward elimination and optimal bandwidth criterion of LIV model was used to eliminate unnecessary variables from the model. In the first case, all the 23 input variables are considered as state variables in one parameter, and the regressor model is assumed to be one. The prediction results of the obtained model which shown in figure of the second stage are shown in [Table 1](#).

Results and Discussion

For the current case study, 23 easy-to-measure variables

Table 1 Input and output variables of soft sensors [6].

Input abbreviation	Input/output variables	Variable description
MRP (X_1)	Mixing rate percentage	Mixing rate percentage
MR (X_2)	Mixing rate	Mixing rate
VLT (X_3)	Vacuum line temperature	Vacuum line temperature
IDT1 (X_4)	Inlet dowtherm temperature	Oil temperature with two terms (Sensor1)
ODT (X_5)	Outlet dowtherm temperature	Oil temperature with two terms (Sensor2)
RT1 (X_6)	Reactor temperature (sensor1)	reactor temperature (Sensor1)
CHT1 (X_7)	Column head temperature	Overhead temperature
STT (X_8)	Scrubber top temperature	Remover top temperature
IWT (X_9)	Inlet water temperature	Water input temperature
CBT (X_{10})	Column bottom temperature	Column bottom temperature
SBT (X_{11})	Scrubber bottom temperature	Remover bottom temperature
RT2 (X_{12})	Reactor temperature (sensor2)	reactor temperature (Sensor1)
CIT (X_{13})	Condenser inlet temperature	Condenser input temperature
V14T (X_{14})	Valve v14 temperature	V14 Temperature
V15T (X_{15})	Valve v15 temperature	V15 Temperature
RDP (X_{16})	Reactor differential pressure	Reactor Pressure
CTTPV2 (X_{17})	Column top temperature PV (sensor2)	Overhead temperature (sensor2)
V421VO (X_{18})	V42 way-1 valve opening (%)	V42 opening percentage in first path
IDTPV2 (X_{19})	Inlet downtherm temperature PV (sensor2)	Oil temperature with two terms (Sensor2)
V422VO (X_{20})	V42 way-1 valve opening (%)	V42 opening percentage in second path
RTPV2 (X_{21})	Reactor temperature PV (sensor2)	reactor temperature (Sensor2)
V42VO (X_{22})	Valve v42 valve opening (%)	V42 opening percentage
RVPV (X_{23})	Reactor vacuum PV	Vacuum pressure in the reactor
$F_{1,t-1}$	Viscosity Outputt-1	Viscosity output at (t-1)
$F_{2,t-1}$	Acidity number Outputt-1	Acidity number output at (t-1)
F1	Viscosity	Viscosity
F2	Acidity number	Acidity number

After completing the model training, the efficiency of the obtained model was randomly evaluated on 4 data sets related to other categories. As can be seen in the graph of the training and testing stage in Table 2, the presented model was able to predict the QIV values related to the acidity number of the product for different times with an acceptable error. The performance indicators of the acidity number prediction model in the training and testing phase of the model according to Table 2 have acceptable values. The graphs comparing the predicted values and the actual values of the acidity number in the training and testing phase are also confirm the results obtained

from performance indicators.

Despite the different trend of variable data of viscosity quality and acidity number at some selected times in the test phase, the LIV soft sensor model has been able to follow these trends very well, and it has the least amount of deviation and error in predicting values. In Table 2, the number of input variables, the number of batches considered for training the model and finally the error of the predicted values of this research are compared with other studies. It can be seen that the error rate has decreased significantly compared to similar studies reported in Table 3.

Table 2 Performance results of LIV soft sensor model for predicting product acidity number (NA).

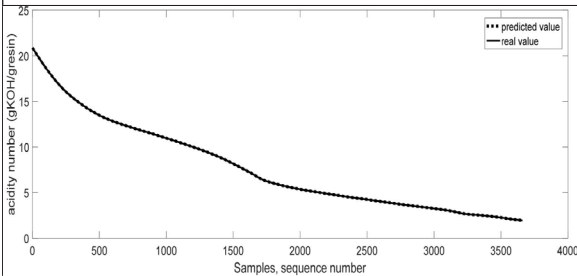
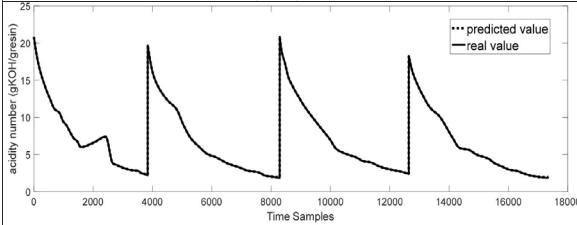
Comparing the predicted values of the trained soft sensor model with the actual values	Performance indicators of model testing			Selected batches	Number of model variables	Effective variables resulting from model identification	Stage
	MAE	RMSE	R ²				
	1.72×10 ⁻⁵	8.13×10 ⁻⁵	1	3	24	F _{2,t-1} , CIT, ODT	Training
	0.0030	0.0094	0.995	4 times randomly	3	F _{2,t-1} , CIT, ODT	Tests

Table 3 Performance indicators and the number of input variables of the soft sensors model for the discontinuous process of polyester resin production.

Literatures	Model	Number of time for training	Number of final variables	RMSE	R ²				
		μ	NA	μ	NA	μ	NA	μ	NA
Facco et al.[6]	MATP+PLS	27	27	23	23	---	---	---	---
Facco et al.[7]	NN+PLS	27	27	23	23	---	---	---	---
Souza et al. [8]	Mix+PLS	27	27	24	24	---	---	---	---
Ferreira et al. [9]	CoRLSR	27	27	23	23	0.915	1.727	0.903	0.851
Current study	LIV	1	1	4	3	0.0022	0.0094	0.9999	0.9995

Moreover, the soft sensor models presented by other researchers in order to predict viscosity (μ) and acidity number (NA) of the product, considered all the variables in the reference data set (23 variables) as the input for their model.

But in the current research, by reducing the number of input variables in this research, finally with 4 input variables for viscosity and 3 input variables for acidity number, the model has capability to predict quality index variables as well as similar models.

Another advantage of the proposed LIV model compared to other models presented by previous studies is that even though the model was trained using the data of one batch, it performs well in predicting the data of other batches with different trends. Therefore, it can be concluded that the technique used in this research has presented the soft sensor model with less number of batches and less input variables for training the model but with more accuracy than similar models.

Conclusions

In this research, a data-oriented soft sensor is presented to predict product quality in the polymerization process of polyester resin production based on the LIV modeling method

The structure of LIV model selected in the model training section, the RMSE, MAE and R2 performance indices for product viscosity are 0.0022, 0.0015 and 0.9999 respectively and for acidity number are 0.0094, 0.0030 and 9995 respectively. The final LIV model, which has an acceptable RMSE and MAE error performance index; It has been trained using much less data compared to other methods. It can be concluded that the LIV method, in a situation where there is a small amount of industrial data; It has the ability to use and predict acceptable in batch processes. The LIV model used in this research reduced the input variables from 24 variables for viscosity to 4 variables and for acidity number to 3 variables. In this research, the RMSE and R2 for the viscosity compared to the CoRLSR method improved by 95.75% and 10.73% and for the acidity number is improved by 99.45% and 24.16%, respectively.

Nomenclatures

LIV: Local Instrumental Variable

QIV: Quality index variables

References

1. Korovessi, E. and Linninger A.A. (2005). Batch Processes, 1st Edition, CRC Press, 2005. <https://doi.org/10.1201/9781420028164>.
2. in, H., Chen, X., Yang, J., & Wu, L. (2014). Adaptive soft sensor modeling framework based on just-in-time learning and kernel partial least squares regression for nonlinear multiphase batch processes. *Computers & Chemical Engineering*, 71, 77-93, <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2014.07.014>
3. Moreno Benito, M. (2014). Integrated batch process development based on mixed-logic dynamic optimization, Universitat Politècnica de Catalunya, Barcelona, Spain. Ph.D. thesis, doi:10.5821/dissertation-2117-95325.
4. Scheirs, J., & Long, T. E. (Eds.). (2005). Modern polyesters: chemistry and technology of polyesters and copolyesters, John Wiley & Sons.
5. Deopura, B. L., Alagirusamy, R., Joshi, M. and Gupta, b. (2008). Polyesters and polyamides, A Volume in Woodhead Publishing Series in Textiles, CRC press, .
6. Facco, P., Doplicher, F., Bezzo, F., & Barolo, M. (2009). Moving average PLS soft sensor for online product quality estimation in an industrial batch polymerization process, *Journal of Process Control*, 19(3), 520-529, <https://doi.org/10.1016/j.jprocont.2008.05.002>.
7. Facco, P., Bezzo, F., & Barolo, M. (2010). Nearest-neighbor method for the automatic maintenance of multivariate statistical soft sensors in batch processing. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 49(5), 2336-2347, <https://doi.org/10.1021/ie9013919>
8. Souza, F. A., & Araújo, R. (2014). Mixture of partial least squares experts and application in prediction settings with multiple operating modes. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 130, 192-202, <https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2013.11.006>
9. Ferreira, V., Souza, F. A., & Araújo, R. (2017). Semi-supervised soft sensor and feature ranking based on co-regularised least squares regression applied to a polymerization batch process, In 2017 IEEE 15th International Conference on Industrial Informatics (INDIN), 257-262, IEEE, <https://doi.org/10.1109/INDIN.2017.8104781>.