Downloaded from UvA-DARE, the institutional repository of the University of Amsterdam (UvA)
http://dare.uva.nl/document/76112

File ID	76112
Filename	SAMENVATTING VOOR NIET INGEWIJDEN*

SOURCE (OR PART OF THE FOLLOWING SOURCE):

Type	Dissertation
Title	Statistical batch process monitoring
Authors	H.J. Ramaker, E.N.M. van Sprang
Faculty	Faculty of Science
Year	2004

FULL BIBLIOGRAPHIC DETAILS:
http://dare.uva.nl/record/161629

Copyright

It is not permitted to download or to forward/distribute the text or part of it without the consent of the author(s) and/or copyright holder(s), other then for strictly personal, individual use.

UvA-DARE is a service provided by the library of the University of Amsterdam (http://dare.uva.nl)

♦ SAMENVATTING VOOR NIET INGEWIJDEN*

Een groot aantal producten die worden gebruikt in het dagelijkse leven (bijvoorbeeld plastics, antibiotica of bier) zijn afkomstig uit de chemische, farmaceutische of voedingsmiddelenindustrie. Deze producten kunnen op twee manieren worden geproduceerd, continue of batch. Een continue productie houdt in dat er dag en nacht reactanten in een reactor bij elkaar worden gevoegd om tot het gewenste product te reageren. Een batch productie houdt in dat er een vooraf vastgestelde hoeveelheid reactanten in een reactor worden gedaan en deze onder vastgestelde procescondities te laten reageren tot het eindproduct.

In dit proefschrift staat het batchgewijs produceren centraal. Een batchreactor is in wezen een uit de kluiten gewassen pan, vaak uitgerust met een roerder en een koel-verwarmingsmantel om de reactor te verwarmen of te koelen. Het batchgewijs produceren gaat volgens een recept. De reactor wordt gevuld met reactanten. Daarna wordt de reactor gesloten en de roerder wordt aangezet. Vervolgens ontstaat er een chemische reactie waarna het uiteindelijke product ontstaat. De duur van zo'n batch reactie hangt af van het type product en kan uiteenlopen van enkele minuten tot enkele dagen. Als alle reactanten omgezet zijn tot het gewenste eindproduct, wordt de batch gestopt en de reactor geleegd. Vervolgens kan de volgende batch reactie worden gestart.

Een belangrijk kenmerk van een batchproces is dat dit proces volgens een recept uitgevoerd wordt. De procesoperator heeft een recept van bijvoorbeeld temperaturen en drukken die gedurende de reactie nauwkeurig moet worden uitgevoerd. Hoe nauwkeuriger de procesoperator dit recept navolgt, hoe zekerder het is dat er een kwalitatief goed eindproduct zal zijn. Er bestaan echter altijd bronnen van variatie in een proces die ervoor zorgen dat de uiteindelijke kwaliteit van het eindproduct zal verschillen van batch tot batch. Denk hierbij bijvoorbeeld aan een plotselinge verstoring van de hoeveelheid koelwater naar de reactor toe. Door een dergelijke procesfout loopt de chemische reactie niet meer volgens het recept en kunnen er ongewenste bijproducten worden gevormd. Het is echter belangrijk voor

---

*HJR/EVS

de producent om de spreiding in de productkwaliteit zo klein mogelijk te houden teneinde een zekere kwaliteit van het eindproduct te kunnen garanderen. Echter, er zijn andere redenen dan alleen de productkwaliteit om een batch gedurende de reactie te bewaken. Een processtoring kan namelijk ook tot gevaarlijke situaties leiden. In dat geval is een tijdige detectie van een temperatuurverstoring gewenst in verband met de veiligheid. Ook kan de productie van ongewenste bijproducten kan om milieutechnische redenen ongewenst zijn. Kortom, batchbewaking is wenselijk om verschillende redenen waaronder veiligheid, milieu en productkwaliteit.

De traditionele manier van batchbewaking gaat meestal aan de hand van het volgen van belangrijke procesparameters, zoals de druk en temperatuur. Deze procesvariabelen worden gemeten door middel van sensoren die in de reactor zijn geplaatst. De uitkomst van elke afzonderlijke meting wordt weergegeven in een zogeheten univariate controlekaart. De uitkomst van elke meting mag een bepaalde limietwaarde niet overschrijden. Is dit wel het geval, dan volgt er een waarschuwing in de desbetreffende controlekaart. In dit geval is er hoogstwaarschijnlijk een procesverstoring aanwezig.

Echter, deze manier van monitoren heeft nadelen. Zo moet er voor elk gemeten procesparameter een univariate kaart worden bewaakt. Als er bijvoorbeeld meer dan twintig van deze procesparameters worden bewaakt, is het bijna al een ondoenlijke zaak om al deze kaarten afzonderlijk te bewaken. Verder hebben univariate controlekaarten de eigenschap om valse signalen te genereren, dit wil zeggen, een procesparameter overschrijdt zijn controlelimiet maar in werkelijkheid is er niets aan de hand. Een ander belangrijk punt is dat procesparameters vaak een onderling verband hebben. Bijvoorbeeld, als de druk in de reactor omhoog gaat, dan gaat de temperatuur vaak ook omhoog. Als nu door een procesverstoring dit verband, of deze correlatie, verbroken wordt, dan gaat dit onopgemerkt in univariate controlekaarten.

De aanpak die in dit proefschrift beschreven staat, houdt rekening met het verband tussen de procesparameters en heeft veel minder last van deze nadelen. Om een batch te bewaken worden zogeheten multivariate kaarten gebruikt. In tegenstelling tot de univariate kaarten zijn er nu slechts twee controlekaarten nodig.

Om deze multivariate kaarten te kunnen construeren, is een model nodig. Dit model vormt de basis van de controlekaarten. Een statistisch batchbewakingsmodel wordt in grote lijnen als volgt verkregen. Allereerst moeten er data worden verzameld.

Het idee achter statistische batchbewaking is dat er wordt geluisterd naar wat de reactor te vertellen heeft door simpelweg procesparameters te meten. Een ander alternatief zou zijn om fysische modellen van de reactor te ontwikkelen waarmee het tijdsverloop van de procesparameters kan worden voorspeld.

De chemie van een batchreactor is echter vaak dusdanig complex dat deze fysische modellen geen betrouwbare resultaten opleveren. Hoe gaat het verzamelen van de data in zijn werk? Stel nu dat er methyl-methacrylaat (polymeer) wordt gemaakt in een batchreactor. Van deze batchreactie worden elke tien seconden twintig procesparameters gemeten. Het batchproces zelf duurt 3 uur. Aan het einde van de batch is een grote hoeveelheid aan data verzameld. Een extra kwaliteitsmeting aan het einde van deze batch vertelt dat het eindproduct van een goede kwaliteit is. Dit betekent dat het recept correct is uitgevoerd door de procesoperator, ook al zijn er hier en daar wat variaties opgetreden ten opzichte van het recept. Deze variaties zijn onvermijdbaar, maar klaarblijkelijk toegestaan om toch nog een product af te leveren van een voldoende kwaliteit. Het is deze variatie in de gemeten procesdata waar het om draait als er een statistisch model wordt gebouwd. Omdat we nu weten hoeveel variatie er is toegestaan om een goed eindproduct af te leveren, kunnen we net als bij de univariate kaarten controle limieten berekenen. Omdat er gebruik wordt gemaakt van statistiek, is het belangrijk om zoveel mogelijk data te gebruiken. Dus procesdata van slechts 1 batch is niet voldoende. Daarom worden de data van meerder batches verzameld (> 30) om de zogeheten referentiedistributie van mogelijke procesvariatie zo groot mogelijk te maken. Hoe meer procesdata er verzameld wordt, des te betrouwbaarder de controlelimieten worden. Als er eenmaal genoeg procesdata zijn verzameld, dan wordt de procesvariatie in kaart gebracht met een model. Met behulp van dit model kunnen er er twee controlekaarten worden geconstrueerd. Het proces kan nu worden bewaakt aan de hand van deze controlekaarten. Het verloop van een nieuwe batch wordt gevolgd en samengevat in twee teststatistieken, die op hun beurt worden weergegeven in de twee controlekaarten. Blijft de teststatistiek binnen de controlelimieten, dan opereert het proces volgens wens. Is dit niet het geval, dan is er een procesverstoring aanwezig.

Er bestaat een ruime keus aan modellen, in dit proefschrift wordt een aantal van deze modellen vergeleken en getoetst aan de hand van industriële procesdata. Er wordt onder andere getoetst hoe vaak een vals alarm wordt gegenereerd in de controlekaarten voor een specifiek model. Verder wordt er getoetst hoe snel een

model in staat is om een procesfout te detecteren in deze controlekaarten. De controlekaarten zelf en de statistiek die erachter zit worden aan de tand gevoeld.
Traditioneel worden drukken en temperaturen gemeten aan batchprocessen. Deze procesvariabelen meten de fysische eigenschappen van een proces, maar geven weinig inzicht in de onderliggende chemie. De onderliggende chemie is veel beter te meten door gebruik te maken van spectroscopische instrumenten zoals nabij-infraroodinstrumenten (NIR). Een bundel licht met een bepaalde golflengte wordt dan door het reactiemengsel gestuurd met behulp van een speciale probe. Dit licht heeft een bepaalde energie, en moleculen in het reactiemengsel absorberen een gedeelte van deze energie. De bundel licht wordt vervolgens weer gedetecteerd. De hoeveel energie die is geabsorbeerd door de moleculen is een maat voor de hoeveelheid van een bepaalde component. Hiermee kan de conversie in de reactor worden gevolgd. Deze metingen zijn dus rijk aan chemische informatie en maken het batchbewakingsmodel een stuk krachtiger. Immers, nu kunnen ook chemische veranderingen worden gedetecteerd. Dit proefschrift beschrijft hoe batchprocessen die zijn uitgerust met NIR-apparatuur kunnen worden bewaakt.

Uiteindelijk is het de bedoeling dat de procesoperator in de controle kamer slechts twee controle kaarten hoeft te bewaken. Vroegtijdige en betrouwbare detectie van procesverstoringen is indirect een kostenbesparing op het proces. Het is daarom zaak een zo goed mogelijk model te kiezen in combinatie met de juiste statistiek.

Uiteindelijk is het de bedoeling dat de procesoperator in de controle kamer slechts twee controle kaarten hoeft te bewaken. Vroegtijdige en betrouwbare detectie van proces verstoringen is indirect een kostenbesparing op het proces. Het is daarom zaak een zo goed mogelijk model te kiezen in combinatie met de juiste statistiek.