

## **Allegato A – Piano delle attività**

### **ID del progetto**

3288

### **Acronimo del progetto**

A.L.I.C.E.

### **Titolo del progetto**

Analysis of Laboratory and Industrial scale in Chemical Environment – A Machine Learning approach to scale processes

## **RICHIESTA AZIENDA**

### **Obiettivi**

Gli algoritmi di Machine Learning usano metodi matematico-computazionali per apprendere informazioni direttamente dai dati mediante l'utilizzo di modelli predittivi avanzati. Nell'ambito dell'industria chimica, e non solo, sono disponibili grandi volumi di dati d'impianto ad alta frequenza (big data) di importanza strategica nello studio dell'evoluzione di sistemi dinamici complessi, quali i processi di produzione industriale. In tale frame, l'approccio A.L.I.C.E. consta nella comprensione delle dinamiche di produzione attraverso l'analisi dati con tecniche di Machine Learning dei parametri di processo (sensori on-line, analisi off-line, formulazioni, ecc.). Il metodo prevede che tale indagine venga fatta parallelamente sia in laboratorio che sulla linea industriale col fine di trasferire le indicazioni trovate su una scala, in ipotesi l'impianto di ricerca con volumi ridotti, all'altra, impianto produttivo h24, e viceversa, agevolando così la risoluzione di inefficienze, l'ottimizzazione delle condizioni operative o lo sviluppo di nuovi prodotti.

### **Tematiche**

Big Data & Analytics

### **Piano delle attività:**

#### **WP1 – Analisi esplorativa e correlativa dei dati di impianto e processo**

##### Obbiettivi:

Applicazione delle tecniche di machine learning per l'estrazione delle informazioni sul processo dai dati di produzione disponibili (impianto e laboratorio), congiuntamente alle informazioni chimico fisiche delle materie in ingresso ed in uscita e alla ricetta obiettivo per i prodotti.

### Descrizione dei task

- Titolo 1 – tecniche multivariate di machine learning (ML) e data analytics verranno utilizzate per una analisi esplorativa e l'estrazione di informazioni di dati disponibili.
- Titolo 2 – Tecniche di data mining e di pattern recognition al fine di ottenere una comprensione approfondita del processo
- Titolo 3 – metodiche di fusione dei dati verranno adottate per estrarre informazioni sulla correlazione tra le materie prime, la ricetta utilizzata, i parametri di processo, le impostazioni dell'impianto e le misure raccolte in linea e registrate dai computer di processo.

### Input iniziale per lo svolgimento delle attività

Dati di processo, informazioni chimico fisiche sui materiali in ingresso ed in uscita, ricetta obiettivo per i prodotti. I dati saranno estratti dai sistemi informatici di logging dei dati di processo, dai dati analitici prodotti (LIMS), dalle specifiche produttive.

### Prodotti della ricerca ("deliverable")

- D2 – Report scritto sull'analisi esplorativa e correlativa dei dati e sulla comprensione di processo da metodi multivariati basati su dati

## **WP2 – Identificazione inefficienze produttive**

### Obbiettivi:

L'analisi svolta al punto WP1 sarà la base per la messa a punto di algoritmi in grado di rilevare disallineamenti produttivi dell'impianto, in modo da rendere possibile identificare e gestire con anticipo le criticità operative e produzioni fuori specifica.

### Descrizione dei task

- Titolo 1 – sviluppo di tecniche per l'individuazione delle criticità d'impianto e il rilevamento di anomalie e malfunzionamenti dovute sia a cattive procedure, che ad errori di operatori, errori sulla ricetta o a problemi dovuti alle materie prime.
- Titolo 2 – rilevamento delle anomalie (early fault detection) e risoluzione delle problematiche d'impianto e processo (troubleshooting) permettendo di intervenire sui parametri di processo o sulla ricetta in modo mirato.

### Input iniziale per lo svolgimento delle attività

Al fine di istruire gli algoritmi di early faulting, verranno forniti set di dati selezionati, relativi alle situazioni ottimali, a confronto con situazioni anomale, riscontrate nella storia dell'impianto. Verranno forniti set di dati storici di impianto relativi a situazioni anomale, selezionati tramite la collaborazione competente dei gestori di impianto.

### Prodotti della ricerca (“deliverable”)

- D1 – Report scritto sullo studio e l’analisi delle inefficienze per le scale produttive prese in esame e sulla precedente analisi esplorativa

## **WP3 – Analisi delle scale pilota e industriale e trasferimento di scala del processo**

### Obbiettivi:

Messa a punto algoritmi di scale-up e scale-down, che siano in grado di replicare in impianto pilota produzioni analoghe a quanto realizzato in impianto industriale, e viceversa, a partire dai dati obiettivo e dai dati di processo raccolti in real time.

### Descrizione dei task

- Titolo 1 – analisi delle similitudini e differenze dei fenomeni chimico-fisici tra gli impianti della scala pilota e industriale.
- Titolo 2 – sviluppo di un sistema di ML basato su dati e conoscenze dettagliate di processo per accelerare il trasferimento del processo, del prodotto e anche delle tecnologie associate all’impianto dalla scala pilota a quella di produzione commerciale, tenendo conto anche delle problematiche afferenti a efficienza catalitica e di scambio termico.

### Input iniziale per lo svolgimento delle attività

Al fine di istruire gli algoritmi di scale-up e scale-down, verranno forniti set di dati selezionati, relativi a produzioni realizzate in impianto pilota, a confronto con produzioni analoghe realizzate in impianto industriale. I modelli ML realizzati in WP1 e WP2 faranno da guida aggiuntiva per questa selezione.

### Prodotti della ricerca (“deliverable”)

- D3 – Report scritto sui modelli di correlazione per la determinazione delle dinamiche comuni a supporto dello scale-up/scale-down

## **WP4 – Sviluppo di modelli predittivi per il monitoraggio della qualità del prodotto**

### Obbiettivi:

Messa a punto di algoritmi per la realizzazione di sensori virtuali, in grado di rilevare le caratteristiche dei prodotti replicando i parametri tipici di monitoraggio e di orientare la produzione verso i target di qualità. Monitoraggio della qualità con logiche multivariate per sfruttare quanto evidenziato nelle correlazioni a WP1 ed evidenze rilevate grazie ai modelli di ML dei punti WP2 e WP3.

### Descrizione dei task

- Titolo 1 – saranno sviluppati dei sensori virtuali per la previsione della qualità degli intermedi e dei prodotti finiti dai dati di ricetta, le impostazioni di impianto, la qualità delle materie prime e i dati di processo disponibili in tempo reale.

### Input iniziale per lo svolgimento delle attività

Quanto ottenuto nelle precedenti fasi del progetto e dati di conduzione processo in entrambi le scale.

### Prodotti della ricerca (“deliverable”)

- D4 – Report scritto sui test del modello predittivo per le scale produttive prese in esame.

## **WP5 – Sviluppo di modelli predittivi per il monitoraggio della qualità del prodotto**

### Obiettivi:

Messa a punto di modelli chemiometrici per l'ottenimento degli obiettivi ottimali di produzioni target utilizzando le informazioni disponibili da entrambi le scale produttive

### Descrizione dei task

- Titolo 1 – Sviluppo di modelli in grado di proporre la formulazione più appropriata per ottenere su scala industriale un prodotto di qualità assegnata a partire dalla conoscenza storica di formulazioni già ottenute a quella scala e da campagne sperimentali condotte sulla scala pilota.

### Input iniziale per lo svolgimento delle attività

Quanto ottenuto nelle precedenti fasi del progetto con particolare riferimento ai modelli ML di WP3 e WP4, dati di conduzione processo in entrambi le scale e parametri desiderati per esplorazione nuove formulazioni.

### Prodotti della ricerca (“deliverable”)

- D5 – Report scritto su modelli predittivi, modelli di trasferimento e sui test di trasferimento tra le scale.

## Articolazione temporale del progetto

	I	II	III	IV	I							
	2021										2022	
	mar	apr	mag	giu	lug	ago	set	ott	nov	dic	gen	feb
<b>WP1 - Analisi esplorativa e correlativa dei dati di impianto e processo</b>												
D1: Report orale sull'analisi esplorativa e correlativa dei dati e sulla comprensione di processo da metodi multivariati basati su dati		X										
<b>WP2 - Identificazione inefficienze produttive</b>												
D2: Report scritto sullo studio e l'analisi delle inefficienze per le scale produttive prese in esame e sulla precedente analisi esplorativa			X									
<b>WP3 - Analisi delle scale pilota e industriale e trasferimento di scala del processo</b>												
D3: Report orale sui modelli di correlazione per la determinazione delle dinamiche comuni a supporto dello scale-up/scale-down								X				
<b>WP4 - Sviluppo di modelli predittivi per il monitoraggio della qualità del prodotto</b>												
D4: Report orale sui test del modello predittivo per le scale produttive prese in esame									X			
<b>WP5 - Formulazione di prodotto in scala pilota e trasferimento su scala industriale</b>												
D5: Report scritto su modelli predittivi, modelli di trasferimento e sui test di trasferimento tra le scale												X

## Tempo di esecuzione del progetto

La durata complessiva dell'attività di ricerca è di 12 mesi

WP	Inizio	Fine
WP1	Mese 1	Mese 2
WP2	Mese 3	Mese 4
WP3	Mese 5	Mese 8
WP4	Mese 9	Mese 9
WP5	Mese 10	Mese 12

## Sintesi dei prodotti della ricerca

<b>WP/Task</b>	<b>Deliverable</b>	<b>Tempo di consegna</b>
WP1	D2	Mese 4
WP2	D1	Mese 6
WP3	D3	Mese 8
WP4	D4	Mese 9
WP5	D5	Mese 12