



Institute for



Jeroen Jansen

Leyla Özkan

Tim Offermans

Carlos Samuel Méndez-Blanco



Institute for  
Sustainable  
Process Technology



## Eindrapport (openbare versie)

|                                     |  |
|-------------------------------------|--|
| Project nummer RVO en/of ISPT(-TKI) | PI-20-14   |
| Project titel + acronym             | INSPEC (INtegrating Sensor based Process monitoring and advanced procEss Control)  |
| Penvoerder                          | ISPT   |
| Naam cluster directeur              | John Harinck   |
| Naam projectleider                  | Jeroen Jansen  |
| PhD                                 | Tim Offermans<br>Carlos Samuel Mendez Blanco   |
| Financieringsbron                   | Dit project is medegefinancierd door TKI-E&I met de aanvullende beurs 'TKI-Toeslag' voor topconsortia voor kennis en innovaties (TKI's) van het Ministerie van Economische Zaken en Klimaat. |
| Startdatum project                  | 01-01-2017   |
| Originele einddatum project         | 31-12-2020   |
| Daadwerkelijke einddatum project    | 30-06-2021   |

## Partners



Institute for  
Sustainable  
Process Technology





## Publiek eindrapport

### 1. Samenvatting

#### Uitgangspunten & doelstelling

Industriële productieprocessen moeten goed gecontroleerd worden om efficiënt product te maken van hoge kwaliteit. De controlelimieten die hiervoor worden toegepast zijn echter typisch zo conservatief dat ze de potentiële efficiëntie van de productie juist verminderen. Door beter om te gaan met beschikbare kennis en data van een productieproces kunnen controlelimieten gedefinieerd worden die een efficiëntere productie kunnen garanderen zonder te productiekwaliteit te compenseren. Idealiter wordt hiertoe kennis die vloeit uit fysieke, kinetische modellen en de ontworpen productie representeert gefuseerd en geïntegreerd met kennis die vloeit uit gemeten productiedata en die de daadwerkelijke productie representeert. Het doel van INSPEC is om methoden en technologieën te ontwikkelen die deze integratie ondersteunen.

TU Eindhoven en de Radboud Universiteit hebben leiding gehad over het ontwikkelen van deze wetenschappelijke innovaties, aan de hand van casestudies ingebracht door Corbion, DSM, FrieslandCampina en Huntsman. ISPT was verantwoordelijk voor het projectmanagement en de communicatie en disseminatie activiteiten.

Binnen INSPEC zijn er diverse wetenschappelijk innoverende technologieën ontwikkeld die het statistisch en het kinetisch modelleren van zowel historische als real-time productiedata verbeteren. Het is aangetoond dat deze ontwikkelingen leiden tot meer begrip van de relaties en afhankelijkheden binnen een productieproces en van de optimale productiecondities. Daarnaast kunnen zij gebruikt worden om moeilijk/niet meetbare kritische productieparameters direct te berekenen, hetgeen automatische productiecontrole (beter) mogelijk maakt. Verschillende ontwikkelingen zijn reeds geïmplementeerd door INSPEC-partners, en zijn daarnaast gedissemineerd buiten INSPEC via wetenschappelijke tijdschriften en conferenties.

### 2. Discussie

#### Resultaten

Er is tijdens het project een grote interesse geweest in het voorspellen van productiekwaliteit-parameters die normaliter alleen offline gemeten kunnen worden, gebruik makend van online metingen zoals temperaturen en drukken maar ook geautomatiseerde spectroscopische instrumenten. Statistisch modelleren met Partial Least Squares (PLS) is bevonden als een geschikte methode om zulke voorspellingen te doen, en kan ook het begrip van de relaties in het productieproces verhogen. Kritische productievariabelen die voorspeld worden vanuit een kinetisch model omdat ze niet of onnauwkeurig direct gemeten kunnen worden, kunnen ook worden ondergebracht in een PLS-model om de voorspelnaauwkeurigheid en het begrip van het proces verder te verbeteren. Het synchroniseren van productievariabelen die asynchroon gemeten worden (met verschillende meetintervallen) is geïdentificeerd als een cruciale maar onderbelichte stap voor het succesvol statistisch modelleren van de betreffende data. Een geavanceerde automatische optimalisatiestrategie voor datasynchronisatie is daarom ontwikkeld en gedemonstreerd binnen INSPEC. Ook is er een nieuwe strategie ontwikkeld voor het optimaliseren van productieparameters op basis van historische data. Statistisch modelleren is hiervoor gecombineerd met technieken voor experimentontwerp (design of experiments) tot een complete strategie voor retrospectieve kwaliteit door ontwerp (retrospective quality by design). Voor batchgewijze producties is er een focus geweest op het detecteren en voorspellen van het eindpunt van de productie, zowel op basis van spectroscopische data als van traditionele procesvariabelen en zowel met



statistische als met kinetische modellen. ENDBOSS is ontwikkeld als een nieuwe methode voor eindpuntdetectie op spectroscopische data die meer robuust is tegen variaties tussen batches en welke ook gebruik maakt van data voorbewerking optimalisatie. Het voorspellen van het eindpunt voordat het gebeurd is meer uitdagend, maar een aangepaste versie van de statistische mixture-of-PLS-experts methode is ontwikkeld die de huidige alternatieve statistische methoden overtreft in termen van accuraatheid van eindpuntvoorspelling maar vooral in termen van model interpreteerbaarheid. Hierdoor kan er beter onderzocht worden welke aspecten van het proces de productielengte beïnvloeden. Een dynamische real-time methode gebaseerd op neurale netwerken is ontwikkeld voor het meer exact monitoren van de operatiestatus van een batch proces. Verder is het aangetoond dat de operatieverschillen tussen verschillende productiefasen van een batch proces, indien aanwezig, beter uitgelicht en begrepen kunnen worden door dynamic time warping te combineren met known data regression (DTW-KDR). Conditioneel pad modelleren is ontwikkeld als een methode om te berekenen hoe de relaties binnen een productieproces afhankelijk zijn van productieomstandigheden zoals seizoen en kwaliteit. Deze methode kan gebruikt worden om grote hoeveelheden historische data makkelijker te interpreteren in context van de dagelijkse operatie van een productieplant. Wat betreft kinetisch modellering is er daarnaast een rigoureuze modellering strategie ontwikkeld en gedemonstreerd die nauwkeuriger parameters kan schatten. Dit kan helpen in het optimaliseren van de productietijd en –kwaliteit van (batch) processen. Voor transferfuncties van derde orde is het verder aangetoond dat zij de dynamiek van een proces beter kunnen beschrijven, wat leidt tot een verbeterde selectie en ontwikkeling van controlestrategieën van productiefaciliteiten.

## Knelpunten

Hoewel hier actief naar gestreefd is, was de volledige integratie van kinetisch en statistisch modelleren van productiedata niet mogelijk voor elke INSPEC casestudy. Dit omdat de productiedata of -kennis die hiervoor benodigd was niet altijd beschikbaar was, en/of het voor sommige partners buiten bereik lag om zo een integratie volledig te implementeren en te valideren. Alle ontwikkelde INSPEC technologieën ondersteunen deze integratie echter wel, en kunnen later door de partners op eigen initiatief geïmplementeerd worden.

Het regelen van (bilaterale) juridische zaken omtrent het delen van vertrouwelijke informatie en data tussen partners duurde soms langer dan verwacht, en heeft wat vertraging veroorzaakt voor sommige casestudies.

De kwaliteit en/of toelichting van de initieel gedeelde productiedata voor sommige casestudies was ontoereikend om modellen te produceren met de beoogde nauwkeurigheid. Eén reden hiervoor is dat fundamentele veranderingen in de operatiestrategie van de productieplant soms in de initieel gedeelde data vertegenwoordigd waren, maar niet goed genoeg beschreven waren. Alhoewel modellen uiteindelijk met dit soort verandering om moeten kunnen gaan, kan hun initiële ontwikkeling hierdoor geremd worden. De kwaliteit en annotatie van de data is gedurende de casestudies gaandeweg verbeterd, maar heeft in sommige gevallen wel vertraging opgeleverd.

## Perspectief voor toepassing

Een aantal technologieën ontwikkeld binnen INSPEC worden reeds geïmplementeerd bij de betreffende productiefaciliteiten van de industriële partners. Dit geldt in bijzonder voor technologieën die het (beter) voorspellen van kritische productieparameters of –variabelen mogelijk maken. Het is binnen INSPEC aangetoond dat deze technologieën de procesoperators voorziet van cruciale productieinformatie die zij nog niet hadden of die veel kostbaarder was om te genereren, wat hen helpt met het beter controleren van het proces. Alhoewel de meeste technologieën slechts als adviesinstrumenten zijn geïmplementeerd kunnen zij op initiatief van de partners inbegrepen worden in de huidige geautomatiseerde controlestrategieën. De



wetenschappelijke innovaties achter deze ontwikkelingen zijn gepubliceerd, en kunnen (indien relevant) ook geïmplementeerd worden door industriële producenten buiten het INSPEC project.

## Eventuele spin-off

Tijdens INSPEC is het naar voren gekomen dat modellen op productiedata regelmatig onderhouden en bijgewerkt moeten worden, ongeacht de aard van de modellen. Het ontwikkelen dan wel verbeteren van zulk modelonderhoud (model maintenance) was geen focuspunt van INSPEC, maar is wel van interesse voor alle partners binnen INSPEC en zou daarom een interessant en vruchtbaar onderwerp zijn voor een toekomstig project.

## 3. Bijdrage aan de doelstellingen van de regeling

Het INSPEC project heeft veel inzichten en technologieën opgeleverd om industriële productiedata beter te analyseren en modelleren ten behoeve van de processcontrole en daarmee de kwaliteit, efficiëntie en duurzaamheid van industriële productie. Deze ontwikkelingen ondersteunen de integratie van statistisch en kinetisch modelleren, maar hebben ook bewezen waarde voor wanneer zulke integratie buiten bereik ligt. Een deel van de ontwikkelingen maakt het mogelijk om kritische processparameters te voorspellen die anderzijds kostbaar of zelfs onmogelijk zijn om te meten. Met deze modellen kan er ook meer begrip verkregen worden van wat deze kritische parameters tot stand brengt en beïnvloed. Andere ontwikkelingen stellen operators in staat om (historische) datasets begrijpelijk te analyseren die veel groter en geïntegreerder zijn dan de datasets die ze gewend zijn te analyseren. Hierdoor kunnen zij meer begrip van het productieproces en de optimale productieomstandigheden krijgen. Verschillende INSPEC technologieën worden reeds geïmplementeerd door de projectpartners als adviesinstrumenten, met een mogelijke uitbreiding naar implementatie in een automatische processcontrolestrategie. Voor mogelijke toekomstige projecten hebben de partners vooral interesse getoond in het ontwikkelen van (betere) methodes voor automatisch onderhoud van modellen op productiedata, ongeacht hun aard.

## 4. Publieke communicatie / disseminatie

### Activiteiten

Tijdens het project zijn de volgende communicatie- en verspreidingsactiviteiten uitgevoerd:

- Organiseren van projectbijeenkomsten vier keer per jaar samen met partners
- Organiseren van bilaterale besprekingen over vertrouwelijke aspecten van de casestudies
- De ISPT plaza en later Microsoft Teams zijn gebruikt geworden om de projectadministratie bij te houden en voor het archiveren van notities, presentatieslides, resultaten en publicaties.
- Hoogtepunten van het project zijn gepresenteerd op de jaarlijkse ISPT-conferentie in november.
- Nieuwsbrieven zijn geplaatst op de ISPT-website, en zijn gedeeld via social media kanalen.
- Een algemene projectposter is gemaakt, is gepresenteerd op verschillende conferenties (ook niet-ISPT conferenties) en is publiek beschikbaar op <https://ispt.eu/publications/?project-tag=PI-20-14>
- Een projectsamenvatting is publiek beschikbaar op <https://projecten.topsectorenergie.nl/projecten/inspec-00028956>
- Een projectpagina is beschikbaar op de ISPT website op <https://ispt.eu/projects/inspec/>



- Hoogtepunten van het INSPEC project zijn gepresenteerd geworden op de Industrie 4.0 open cluster meeting op 14 juli 2021

## Publicaties

T. Offermans (2021) *Improved understanding from industrial production data with chemometrics*, Radboud Repository (thesis)

T. Offermans (2021) *Automated synchronization optimization of individual process variables*, ENBIS spring meeting (presentation)

T. Offermans, L. Hendriks, et al. (2021) *Improved understanding of industrial process relationships through conditional path modelling with Process PLS*, *Frontiers in Analytical Science* (paper)

T. Offermans, E. Szymańska, et al. (2021) *Automatically optimizing dynamic synchronization of individual process variables for statistical modelling*, *Computers & Chemical Engineering* (paper)

Topsector energie (2021) *Energiezuiniger produceren door van procesdata te leren*, Topsector energie site (news article)

T. Offermans, T. Wijker, et al. (2021) *ENDBOSS: Industrial endpoint detection using batch-specific control spaces of spectroscopic data*, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* (paper)

G. Van Kollenburg, R. Bouman, et al. (2021) *Process PLS: Incorporating substantive knowledge into the predictive modelling of multiblock, multistep, multidimensional and multicollinear process data*, *Computers & Chemical Engineering* (paper)

T. Offermans (2020) *Dynamically synchronizing production data for industrial soft-sensors*, CHAINS (presentation)

T. Offermans, E. Szymańska, et al. (2020) *Dynamically synchronizing production data for industrial soft-sensors*, CHAINS (poster)

T. Offermans (2020) *Industrial endpoint detection using batch-specific control spaces of spectroscopic data*, SIMMposium (presentation)

T. Offermans, E. Szymańska, et al. (2020) *Improving dynamic synchronization of production data for better process modelling*, ISPT website (news article)

T. Offermans, E. Szymańska, et al. (2020) *Synchronizing process variables in time for industrial process monitoring and control*, *Computers & Chemical Engineering* (paper)

C. Méndez-Blanco, L. Özkan (2019) *Physics-based model structural identifiability in closed-loop*, NA (paper)

A. Marquez-Ruiz, C. Méndez-Blanco, et al. (2019) *Modeling of reactive batch distillation processes for control*, *Computers & Chemical Engineering* (paper)

T. Offermans (2019) *Improved statistical assessment of industrial process quality*, VOC anniversary meeting (presentation)

ISPT (2019) *INSPEC @2019 Jubilee meeting VOC*, ISPT website (news update)

C. Méndez-Blanco (2019) *Structural identifiability in closed-loop for linear physics-based models*, NA (presentation)

T. Offermans (2019) *Dynamic synchronization of production data for industrial process monitoring and control*, SIMMposium (presentation)

T. Offermans, J. Jansen (2019) *INSPEC project poster*, ISPT website (poster)



- T. Offermans, J. Jansen (2019) *INSPEC: Dynamic synchronization of production data for industrial process monitoring and control*, ISPT conference (poster)
- L. Galvis, J. Jansen (2019) *INSPEC project: DSM case study polyester production*, ISPT conference (poster)
- M. Porru, L. Özkan, T. Huppertz, et al. (2019) *Dynamic modeling of milk acidification for production design and process control*, NA (presentation)
- T. Offermans, E. Szymańska, et al. (2019) *Mineral content in industrial-scale production of milk protein: prediction and insight*, SSC Oslo (poster)
- T. Offermans, T. Wijker, et al. (2019) *Batch-invariant detection of end of industrial batch reactions*, FAST (poster)
- C. Méndez-Blanco, L. Özkan (2019) *On the state and output sensitivity of first-principle models*, AIChE Annual Conference Proceedings (presentation)
- T. Offermans (2019) *One-class modelling of PAT data for detection of byproduct formation*, VOC spring meeting (presentation)
- T. Offermans, J. Jansen (2018) *INSPEC: Chemometrics meets Advanced Process Control*, CHAINS (poster)
- C. Méndez-Blanco, L. Özkan (2018) *Dynamic model maintenance for improved process operation*, NA (poster)
- T. Offermans, J. Jansen (2018) *INSPEC: Chemometrics meets Advanced Process Control*, ISPT-day (poster)
- T. Offermans, J. Jansen (2018) *INSPEC: Chemometrics meets Advanced Process Control*, CAC Halifax (poster)
- C. Méndez-Blanco, A. Marquez-Ruiz, et al. (2018) *Control of reaction systems via extent transformations*, NA (presentation)
- T. Offermans, J. Jansen (2018) *INSPEC: Integrating Sensor Based Process Monitoring and Advanced Process Control*, NPS (poster)
- T. Offermans, J. Jansen (2018) *INSPEC: Integrating Sensor Based Process Monitoring and Advanced Process Control*, FAST (poster)
- M. Porru, L. Özkan (2018) *Prediction-based delay compensation for staged crystallization*, NA (presentation)
- T. Offermans, J. Jansen (2017) *INSPEC: Integrating Sensor Based Process Monitoring and Advanced Process Control*, CHAINS (poster)
- T. Offermans, J. Jansen (2017) *INSPEC: Integrating Sensor Based Process Monitoring and Advanced Process Control*, ISPT-day (poster)
- T. Offermans, J. Jansen (2017) *INSPEC: Integrating Sensor Based Process Monitoring and Advanced Process Control*, ICRM (poster)
- J. Jansen (2017) *INSPEC project page*, Radboud University website (website)
- ISPT (2017) *INSPEC project page*, ISPT website (website)



## 5. Acknowledgement

Dit project is medegefinancierd door TKI-E&I met de aanvullende beurs 'TKI-Toeslag' voor topconsortia voor kennis en innovaties (TKI's) van het Ministerie van Economische Zaken en Klimaat.

