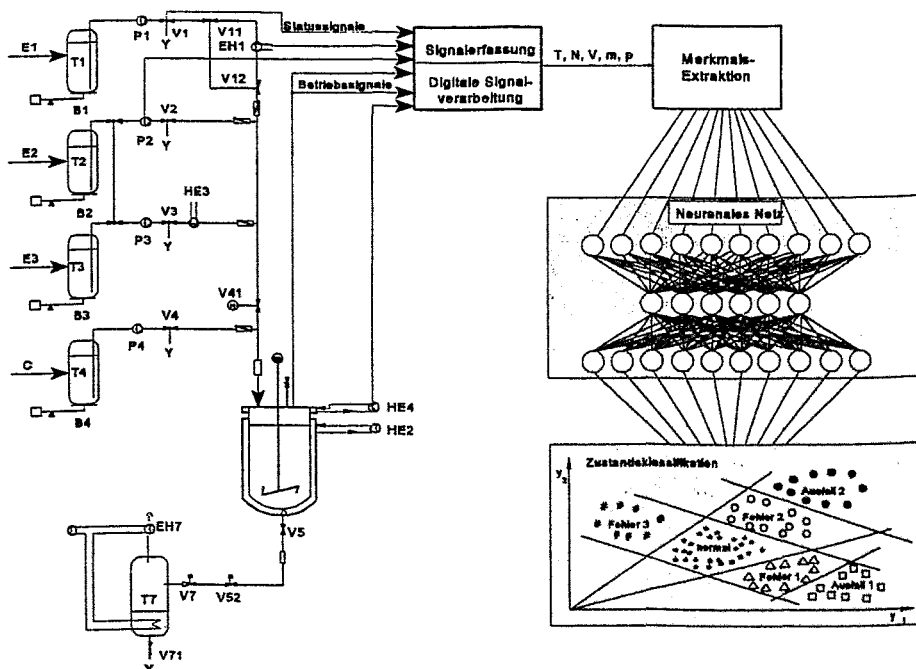


FZR-223

Juni 1998

G. Hessel, D. Hoppe, W. Schmitt, N. Tefera,
K. van der Vorst, F.-P. Weiß

Anwendungsmöglichkeiten neuartiger EDV-gestützter Erkennungsmethoden zur Identifizierung gefährlicher Betriebszustände in Chemieanlagen (I)



Abschlußbericht zum BMBF-Fördervorhaben
Förderkennzeichen 01RG94235

Archiv-Ex.:

Das diesem Bericht zugrunde liegende Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Bildung, Wissenschaft, Forschung und Technik (BMBF) unter dem Förderkennzeichen 01RG94235 gefördert. Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei den Autoren.

Herausgeber:

FORSCHUNGSZENTRUM ROSSENDORF

Postfach 51 01 19

D-01314 Dresden

Telefon (03 51) 26 00

Telefax (03 51) 2 69 04 61

Als Manuskript gedruckt

Alle Rechte beim Herausgeber

Berichtsblatt

1. ISBN oder ISSN ISSN 0178-2312	2. Berichtsart Abschlußbericht
3a. Titel des Berichts Anwendungsmöglichkeiten neuartiger EDV-gestützter Erkennungsmethoden zur Identifizierung gefährlicher Betriebszustände in Chemieanlagen (I)	
3b. Titel der Publikation Früherkennung gefährlicher Betriebszustände in Chemieanlagen mit neuronalen Netzen	
4a. Autoren des Berichts (Name, Vorname(n)) Hessel, Günther; Hoppe, Dietrich; Schmitt, Wilfried; Tefera, Nurelegne; van der Vorst, Klaus; Weiß, Frank-Peter	5. Abschlußdatum des Vorhabens Dezember 1997
4b. Autoren der Publikation (Name, Vorname(n)) Schlüter, Stefan; Neumann, Joachim; Steiff, Arthur; Schmitt, Wilfried; Hessel, Günther; van der Vorst, Klaus; Weiß, Frank-Peter	6. Veröffentlichungsdatum Februar 1998
	7. Form der Publikation Fachzeitschrift
	9. Ber. Nr. Durchführende Institution
8. Durchführende Institution(en) (Name, Adresse) Forschungszentrum Rossendorf e.V. Institut für Sicherheitsforschung Postfach 510119 01314 Dresden	10. Förderkennzeichen *) 01RG94235
	11a. Seitenzahl Bericht 93
	11b. Seitenzahl Publikation 7
	12 Literaturangaben 36
13. Fördernde Institution (Name, Adresse) Bundesministerium für Bildung , Wissenschaft, Forschung und Technologie (BMBF) 53170 Bonn	14. Tabellen 4
	15. Abbildungen 32
16. Zusätzliche Angaben	
17. Vorgelegt bei (Titel, Ort, Datum)	
18. Kurzfassung Das Vorhaben erbrachte einen Beitrag zur operatorunabhängigen Beurteilung des Prozeß- und Anlagenzustandes chemischer Reaktoren, insbesondere zur Identifizierung gefährlicher Betriebszustände bei der diskontinuierlichen und kontinuierlichen Fahrweise exothermer Reaktionen. Die Eignung von Mustererkennungsmethoden zur Prozeßdiagnose wurde am Beispiel eines chemischen Laborreaktors für einen stark exothermen Referenzprozeß - säurekatalysierte Veresterung von Essigsäureanhydrid mit Methanol - untersucht. Vor ihrer Anwendung als Zustandsklassifikator mußten die Mustererkennungssysteme zunächst mit den Prozeßdaten des normalen und gestörter Reaktionsverläufe unter Zuhilfenahme von Expertenwissen trainiert werden, um das komplexe nichtlineare Prozeßverhalten bis hin zum Entscheidungsergebnis abzubilden. Danach konnte der trainierte Klassifikator zur Prozeßdiagnose genutzt werden. Die besten Ergebnisse bei der Erkennung von Betriebszuständen in Semibatch-Prozessen wurden mit dreischichtigen Perceptron-Netzen erreicht. Sie konnten auch Mehrfachfehler und nichttrainierte Reaktionsverläufe klassifizieren. Um das Gefährdungspotential von fehlerhaften Betriebszuständen beurteilen zu können, wurden separate Perceptron-Netze für die Gefahren- und Fehlerklassifikation eingesetzt. Ihre Leistungsfähigkeit wurde sowohl für den Semibatch-Betrieb als auch für die kontinuierliche Fahrweise experimentell nachgewiesen.	
19. Schlagwörter Prozeßdiagnose, Chemieanlagen, Fehlerdiagnose, Mustererkennung, neuronale Netze, Fuzzy-Logik	
20. Verlag R. Oldenbourg Verlag GmbH, München	21. Preis DM 48,-

Document Control Sheet

1. ISBN or ISSN ISSN 0178-2312	2. Type of Report Final report
3a. Report Title Identification of Undesired Operational States in Chemical Plants Using Neural Networks	
3b. Title of Publication Early Fault Detection of Undesired Operational States in Chemical Plants Using Neural Networks	
4a. Author(s) of the Report (Family Name, First Name(s)) Hessel, Günther; Hoppe, Dietrich; Schmitt, Wilfried; Tefera, Nurelegne; van der Vorst, Klaus; Weiß, Frank-Peter	5. End of Project December 1997
4b. Author(s) of the Publication (Family Name, First Name(s)) Schlüter, Stefan; Neumann, Joachim; Steiff, Arthur; Schmitt, Wilfried; Hessel, Günther; van der Vorst, Klaus; Weiß, Frank-Peter	6. Publication Date February 1998
	7. Form of Publication Technical Journal
	9. Originator's Report No.
8. Performing Organization(s) (Name, Address) Forschungszentrum Rossendorf e.V. Institut für Sicherheitsforschung PF 510119 D-01314 Dresden Germany	10. Reference No. 01RG94235
	11a. No. of Pages Report 93
	11b. No. of Pages Publication 7
	12 No. of References 36
13. Sponsoring Agency (Name, Address) Bundesministerium für Bildung , Wissenschaft, Forschung und Technologie (BMBF) 53170 Bonn	14. No. of Tables 4
	15. No. of Figures 32
16. Supplementary Notes	
17. Presented at (Title, Place, Date)	
18. Abstract The project contributes to operator-independent assessing of the process & plant states of chemical reactions, particularly to identifying undesired operational states in discontinuous and continuous operations of exothermic reactions. The suitability of pattern recognition for process diagnosis was investigated in a miniplant in which a strongly exothermic chemical reference process, the acid-catalysed esterification between acetic anhydride and methanol, was carried out. Before being applied to state classification, the pattern recognition-based classifiers first have to be trained using process data of normal and faulty sequences of reaction and with the aid of expert know how to establish a nonlinear decision model between plant parameters and state classification. Afterwards, the trained classifiers can be used for process diagnosis. Best results for state classification in semibatch reactions were reached with three-layer perceptron networks. They were also capable of classifying multiple faults and untrained sequences of reaction. For assessing the danger potential of faulty operational states, separate perceptron-networks for danger classification and for fault isolation were used. Their efficiency could experimentally be proven both in semibatch reactions and in continuous operations.	
19. Keywords Process diagnosis, chemical plant, exothermic reactions, early fault detection, pattern recognition, neural networks, fuzzy logic	
20. Publisher R. Oldenbourg Verlag GmbH, München	21. Price DM 48,-

Kurzfassung

Das Vorhaben erbrachte einen Beitrag zur operatorunabhängigen Beurteilung des Prozeß- und Anlagenzustandes chemischer Reaktoren, insbesondere zur Identifizierung gefährlicher Betriebszustände bei der diskontinuierlichen und kontinuierlichen Fahrweise exothermer Reaktionen.

Die Eignung von Mustererkennungsmethoden zur Prozeßdiagnose wurde am Beispiel eines chemischen Laborreaktors für einen stark exothermen Referenzprozeß - säurekatalysierte Veresterung von Essigsäureanhydrid mit Methanol - untersucht. Vor ihrer Anwendung als Zustandsklassifikator mußten die Mustererkennungssysteme zunächst mit den Prozeßdaten des normalen und gestörter Reaktionsverläufe unter Zuhilfenahme von Expertenwissen trainiert werden, um das komplexe nichtlineare Prozeßverhalten bis hin zum Entscheidungsergebnis abzubilden. Danach konnte der trainierte Klassifikator zur Prozeßdiagnose genutzt werden.

Die besten Ergebnisse bei der Erkennung von Betriebszuständen in Semibatch-Prozessen wurden mit dreischichtigen Perceptron-Netzen erreicht. Sie konnten auch Mehrfachfehler und nichttrainierte Reaktionsverläufe klassifizieren. Um das Gefährdungspotential von fehlerhaften Betriebszuständen beurteilen zu können, wurden separate Perceptron-Netze für die Gefahren- und Fehlerklassifikation eingesetzt. Ihre Leistungsfähigkeit wurde sowohl für den Semibatch-Betrieb als auch für die kontinuierliche Fahrweise experimentell nachgewiesen.

Abstract

The project contributes to operator-independent assessing of the process & plant states of chemical reactions, particularly to identifying undesired operational states in discontinuous and continuous operations of exothermic reactions.

The suitability of pattern recognition for process diagnosis was investigated in a miniplant in which a strongly exothermic chemical reference process, the acid-catalysed esterification between acetic anhydride and methanol, was carried out.

Before being applied to state classification, the pattern recognition-based classifiers first have to be trained using process data of normal and faulty sequences of reaction and with the aid of expert know how to establish a nonlinear decision model between plant parameters and state classification. Afterwards, the trained classifiers can be used for process diagnosis.

Best results for state classification in semibatch reactions were reached with three-layer perceptron networks. They were also capable of classifying multiple faults and untrained sequences of reaction.

For assessing the danger potential of faulty operational states, separate perceptron-networks for danger classification and for fault isolation were used. Their efficiency could experimentally be proven both in semibatch reactions and in continuous operations.

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Stand der Technik und Entwicklungstendenzen	4
2.1 Entwicklungsstand vor dem Projekt	4
2.2 Fortschritte während der Projektdurchführung	6
3. Grundlagen und Voraussetzungen der Identifizierung gefährlicher Betriebszustände mit Mustererkennungsverfahren	10
3.1 Funktionsprinzip	10
3.2 Daten und Klassifikationsaufgabe	11
3.3 Definition von Meßgrößen	14
3.4 Detektionszeiten	15
3.5 Datenkopplung	16
3.6 Klassifikatoren	22
3.6.1 Neuronale Netze	22
3.6.2 Fuzzy-Logik	24
3.6.3 Tensororientierte Klassifikation	26
4. Identifizierung gefährlicher Betriebszustände mit neuronalen Netzen ..	30
4.1 Normierung der Meßgrößen	30
4.2 Untersuchungen zur Zustandsklassifikation	32
4.2.1 Zustandsklassifikation mit simulierten Störfällen	32
4.2.2 Zustandsklassifikation realer Versuchsverläufe	34
4.2.3 Einfluß verschiedener Solltemperaturen auf die Generalisierung	36
4.2.4 Untersuchungen zur Generalisierung	38
4.3 Fehler- und Gefahrenklassifikation bei Semibatch-Prozeßführung	40
4.3.1 Fehlerklassifikation	41
4.3.2 Gefahrenklassifikation	47
4.4 Fehler- und Gefahrenklassifikation bei kontinuierlicher Fahrweise	53
4.4.1 Fehlerklassifikation	54
4.4.2 Gefahrenklassifikation	55
5. Identifizierung mit Fuzzy- Logik	59
5.1 Zustandsklassifikation	59
5.2 Fehler- und Gefahrenklassifikation	61

6. Tensororientierte Klassifikation	67
7. Vergleich der Klassifikationsverfahren	69
8. Schlußfolgerungen und Ausblick	71
9. Publikation der Ergebnisse	74
10. Literaturverzeichnis	77
A. Anhang	81
A.1 Meßlanze	81
A.2 Programm minicom	84
A.3 Merkmalsvektoren, Normierungen, Klassen und Netzgrößen	86
A.4 Gerätetechnische Basis und Software	93

1. Einleitung

Motivation und Zielsetzung

Die Analyse von Störfällen an verfahrenstechnischen Anlagen mit Gefährdungspotential zeigt, daß ein wesentlicher Teil der Störfälle auf menschliches Versagen zurückzuführen ist, insbesondere weil der Anlagenzustand von dem Bedienungspersonal in Streßsituationen nicht umfassend und teilweise falsch eingeschätzt wird. Aus dem "Major Accident Reporting System" des Europäischen Forschungszentrums in Ispra (Italien) geht hervor, daß die Mehrzahl der Störfälle in Chemieanlagen durch operatorunabhängige Anwendung des verfügbaren Expertenwissens zum Anlagenverhalten einerseits und zum Störfallablauf in ähnlichen Situationen andererseits hätte vermieden werden können [beza81]. Die Gründe, warum das Expertenwissen im Bedarfsfalle nicht abgerufen werden kann, sind vielfältig und können beispielsweise sein:

- unzureichendes Personaltraining
- mangelnde Aufmerksamkeit infolge Übermüdung oder Desensibilisierung durch vermeintliche Betriebsroutine,
- Fehleinschätzung der Anlagensituation bei Streß,
- Fehlreaktionen bei unbekanntem Situationen,
- Informationsverluste durch schlechte Organisation des Betriebsablaufes (z. B. Schichtübergaben) und
- Überforderung durch ein übermäßiges Informationsangebot.

Dieser Tatbestand legt es nahe, den Anlagenoperator durch zusätzliche Anlagenüberwachungssysteme zur Fehlerfrüherkennung und möglichst auch zur Identifizierung des Fehlertyps zu unterstützen und in einer späteren Etappe auch Handlungsempfehlungen und Entscheidungshilfen zur Schadensvermeidung und wenigstens zur Begrenzung der Schadensauswirkungen anzubieten.

Das Ziel des Vorhabens war es deshalb, lernfähige Mustererkennungsmethoden wie z. B. neuronale Netze oder Fuzzy-Klassifikatoren zur Identifizierung gefährlicher Betriebszustände in Chemieanlagen zu nutzen, die dem Anlagenoperator Entscheidungshilfen beim Erkennen und Bewerten kritischer Situationen zur Verfügung stellen.

Insbesondere sollte durch Erprobung an numerisch simulierten Prozeßabläufen bzw. anhand experimenteller Störungssimulationen nachgewiesen werden, daß fortgeschrittene Mustererkennungsverfahren (Fuzzy-Logik, neuronale Netze, tensororientierte Mustererkennung in der Lage sind

- zu Zustandseinschätzungen zu kommen, die denen eines "idealen" menschlichen Beobachters entsprechen,
- den anstehenden Echtzeitanforderungen zu genügen,
- auf Situationen zu reagieren, die keinem angelernten Zustandsmuster entsprechen (=Generalisierungsfähigkeit) und
- dynamisch ablaufende Prozeßänderungen in die Zustandsbewertung einzubeziehen.

Mit diesen zusätzlichen Überwachungssystemen sollen sich anbahnende Fehler frühzeitig erkannt und identifiziert werden, um den Operator in die Lage zu versetzen, streßfrei und überlegt geeignete Maßnahmen einzuleiten. Störfallverhindernde Maßnahmen können dadurch bereits vor Eintritt gefährlicher Betriebszustände wirksam werden. Außerdem können mit dieser neuen Technik Beiträge zu umweltgerechten Produktion in der chemischen Industrie geleistet werden, indem z.B. Störungen, die zur Emission von Schadstoffen führen können, oder Abweichungen von der optimalen Prozeßführung, die u.a. toxische Nebenprodukte, Fehlchargen oder schlechte Ausbeuten liefern würden, frühzeitig erkannt und korrigiert werden.

Das zu entwickelnde Überwachungssystem soll zunächst die Funktion eines Operator-Beratungssystems ausüben, das nicht in die Prozeßleittechnik-Schutzeinrichtung eingebunden ist und das ohne direkten Prozeßeingriff eingesetzt werden soll.

Voraussetzungen

Durch die Zusammenarbeit des Institutes für Umwelt-, Sicherheits- und Energietechnik e. V. (UMSICHT) Oberhausen und des Forschungszentrums Rossendorf e. V. (FZR) waren die Voraussetzungen für eine erfolgreiche Realisierung des Forschungsvorhabens "Anwendungsmöglichkeiten neuartiger EDV-gestützter Erkennungsmethoden zur Identifizierung gefährlicher Betriebszustände in Chemieanlagen" gegeben.

Für die Projektbearbeitung wurden dadurch die langjährigen Erfahrungen auf den Gebieten "Fehlererkennung durch Mustererkennungsverfahren" und "Simulation chemisch/verfahrenstechnischer Anlagen" effektiv kombiniert, so daß das Vorhaben in zeitlicher und fachlicher Hinsicht optimal bearbeitet werden konnte.

Für die Durchführung des Vorhabens stand die im Anhang A.4 zusammengestellte Gerätetechnik und Software zur Verfügung.

Planung und Ablauf des Vorhabens

Das Vorhaben wurde entsprechend dem gemeinsamen Arbeitsprogramm des Verbundvorhabens bearbeitet. UMSICHT war verantwortlich für die Auswahl und die Simulation des chemischen Referenzprozesses, den Aufbau der Versuchsanlage und für die Durchführung gezielter Experimente, während das FZR den Anteil bearbeitete, der mit der Konzipierung und Erprobung des Mustererkennungsverfahrens und mit der Auskopplung der Prozeßdaten zusammenhing.

Um die Echtzeitanforderungen erfüllen zu können, war es nötig, eine schnelle und zuverlässige Ankopplung des Zustandsklassifikators an den Prozeß zu konzipieren und zu realisieren, wobei die räumliche Ausdehnung von chemischen Produktionsanlagen und die teilweise speziellen Sicherheitsanforderungen wie Explosionsschutz zu berücksichtigen waren.

Die Eignung fortgeschrittener Mustererkennungsverfahren zur Identifizierung gefähr-

licher Betriebszustände wurde für einen chemischen Referenzprozeß in einem Laborreaktor systematisch untersucht. Da die überwiegende Mehrzahl der Chemieunfälle bei exothermen Prozessen geschehen, wurde als Referenzprozeß die stark exotherme säurekatalysierte Veresterung von Essigsäureanhydrid mit Methanol zu Essigsäuremethylester und Essigsäure gewählt. Diese Reaktion besitzt eine ausreichende Eigendynamik, so daß damit sicherheitstechnisch relevante Betriebszustände eingestellt werden können. Die Mustererkennungsverfahren erfordern vor ihrer Anwendung zur Zustandsklassifikation eine sogenannte Trainingsphase, in der sie die später zu erkennenden Prozeßzustände und -abläufe erlernen. Zu diesem Zweck müssen die Daten von bestimmungsgemäßen und nichtbestimmungsgemäßen Betriebszuständen in einer Versuchsanlage erzeugt werden. Um eine eindeutige Zuordnung zwischen den Meßgrößen und den Betriebszuständen zu erreichen, müssen geeignete Sätze von Meßgrößen gefunden werden, aus denen zustandspezifische Merkmale abgeleitet werden können. Da sicherheitstechnisch bedenkliche bzw. gefährliche Zustände auch an der Versuchsanlage nur mit Einschränkungen herbeigeführt werden können, wurde zu Beginn der Untersuchungen auf einen Prozeßsimulator dieser Versuchsanlage zurückgegriffen.

Die numerische Simulation ermöglichte den gefahrlosen Umgang mit aufgeprägten Störungen und deren Auswirkungen. Zudem konnten wichtige Grenzsituationen ausgelotet und verläßlich bewertet werden. Zu den Störfallszenarien, die vor dem Experiment im Labor zunächst mit dem Anlagensimulator zu untersuchen waren, gehören beispielsweise: totaler Kühlungsausfall, Ausfall des Rührwerks und Fehldosierung eines Eduktes.

Zusammenarbeit mit anderen Stellen

Im Verbundprojekt wurde hauptsächlich mit UMSICHT Oberhausen zusammengearbeitet. Im Rahmen eines Werkvertrages mit der Technischen Universität Bergakademie Freiberg wurden Untersuchungen zur Nutzung eines tensororientierten Mustererkennungsverfahrens für die Zustandsklassifikation begonnen. Diese Arbeiten wurden ab 1.1.1997 im Forschungszentrum Rossendorf fortgesetzt, nachdem der Mitarbeiter der Bergakademie im Rahmen des WIP/HEP-Programmes in das FZR zurückgekehrt war. Eine ausführliche Beschreibung dieser Arbeiten ist in [hopp98] enthalten. Dieser FZR-Report ist dem Abschlußbericht als Ergänzung beigefügt.

Ein zweiter Werkvertrag wurde mit der Firma Digitale Signalverarbeitung GmbH MEDAV, Uttenreuth zur Anpassung und Lieferung von Kommunikationssoftware zwischen PC und miniSYS zur Datenfernübertragung abgeschlossen. Mit dieser Software-Entwicklung wurde u.a. die Übertragungsgeschwindigkeit der RS 232-Schnittstelle auf 38 k Bits/s erhöht, die Einbindung von PC mit miniSYS in ein lokales Netz (LAN) mit der Möglichkeit des direkten Zugriffs eines an das LAN angeschlossenen Rechners auf das miniSYS realisiert und Quellprogramme für die eigene Entwicklung der Kopplung miniSYS-Workstation zur Verfügung gestellt.

2. Stand der Technik und Entwicklungstendenzen

2.1 Entwicklungsstand vor dem Projekt

Neuronale Netzwerke werden seit vielen Jahren in verschiedenen industriellen Bereichen erfolgreich zur Mustererkennung eingesetzt, z. B. bei der Qualitätskontrolle in der Motoren-Serienproduktion, der Objekterkennung und Auswertung von Sonarsignalen in der Militärtechnik, der Sprach- und Bildererkennung in der Kommunikationstechnik [schö90]. Entsprechende Anwendungen haben sich in industriellen Chemieanlagen dagegen noch nicht durchgesetzt.

Erst durch die Untersuchungen von Hoskins und Himmelblau [hosk88] wurde nachgewiesen, daß neuronale Netzwerke auch ein bedeutendes Potential für die Erkennung und Diagnose von Fehlern chemischer Prozesse besitzen. Verschiedene Fehler eines analytischen Prozeßmodells, das aus drei in Reihe geschalteten Rührkesselreaktoren gebildet wurde, konnten mit Hilfe eines mehrlagigen Perceptron-Netzwerkes zuverlässig identifiziert werden.

Wie zahlreiche Veröffentlichungen [fan93, hosk92, hosk91, hosk90, hsu92, sors91, sors93, viad92a, viad92b, venk90, wata91] zur Fehlerdiagnose mit Hilfe neuronaler Netzwerke an verfahrenstechnischen Anlagen in den letzten Jahren zeigen, hat das wissenschaftliche Interesse an der Anwendung neuronaler Netzwerke zur Erkennung und Diagnose von Fehlern in chemischen Prozessen deutlich zugenommen.

In der Fachliteratur wird diesem Forschungsgebiet ein hohes Entwicklungspotential beigemessen. Die bisher dokumentierten Forschungsergebnisse und Testbeispiele lassen den Schluß zu, daß fortgeschrittene Mustererkennungsverfahren zur Detektion und Diagnose von Fehlern an chemischen Anlagen während des Betriebes durchaus leistungsfähiger sein können als beispielsweise modellgestützte Fehlerdiagnoseverfahren, insbesondere wenn es sich um komplexe, nichtlineare Prozesse handelt.

Die Vorteile neuronaler Netzwerke werden von Venkatasubramanian und Chan [venk89] auch im Vergleich mit dem Expertensystem CATDEX bei der Fehlerdiagnose am Testbeispiel einer fluidisierten katalytischen Crack-Anlage der Petrolchemie nachgewiesen. Es wird sogar erwartet, daß die Kombination des Expertensystems mit neuronalen Netzwerken den industriellen Einsatz von Expertensystemen attraktiver macht, weil z. B. die Ausführungsgeschwindigkeit verbessert sowie die Komplexität und die Zeit, die zum Aufbau eines intelligenten Expertensystems erforderlich ist, reduziert werden.

Die Schwerpunkte der bisherigen Forschungsarbeiten liegen sehr unterschiedlich. Sie können grundsätzlich in zwei Kategorien eingeteilt werden:

1. Strategien zur Verbesserung der Fehlerdiagnose und -lokalisierung,
2. Modifikation der Netzarchitekturen.

Die Diagnose singulärer Fehlerquellen in chemischen Prozessen ist vielfach als

grundlegende Problemstellung untersucht worden [hosk91, hosk90, venk90]. Das Lokalisieren multipler Fehlerquellen war Gegenstand weiterführender Untersuchungen. Dazu wurden verschiedene Strategien verfolgt. Watanabe und Mitarbeiter [wata91, wata89] verwenden hierarchisch strukturierte neuronale Netzwerke zur Detektion multipler Fehlerquellen. Hierbei werden verschiedene neuronale Netzwerke auf zwei Ebenen miteinander verknüpft. Die erste Ebene enthält ein neuronales Netzwerk, die zweite so viele Netzwerke gleichen Typs wie Ausgänge in der ersten Ebene vorhanden sind. Der zweiten Ebene werden als Eingabegrößen neben den anliegenden Prozeßgrößen auch der Ausgabevektor des Netzwerkes der ersten Ebene zugeführt. Auf diese Weise gelingt es, Fehlerkombinationen zu ermitteln.

Ein anderer Ansatz stammt von Fan et al. [fan93]. Sie erreichen die multiple Fehlererkennung durch Modifikation der Eingabeschicht des neuronalen Netzwerkes, indem jedem Eingangsneuron Funktionselemente vorgeschaltet werden. Diese Funktionselemente führen orthonormale Transformationen der Eingangssignale durch, um die Dimension des Merkmalsraumes zu erhöhen. Das ist notwendig, wenn mit wenigen Prozeßsignalen viele Fehlersituationen zuverlässig identifiziert werden sollen. Auch können Fehlertyp und Schwere des Fehlers simultan durch die Modifikation der Eingänge eines Backpropagation-Netzwerkes ermittelt werden. Diese Methode setzt jedoch ein hohes Maß an Empirie voraus und führt zu größeren Rechenzeiten.

Die meisten Anwendungsbeispiele beschränken sich auf stationäre Prozeßzustände [fan93, hosk92, hosk91, hosk90, hsu92, sors91, venk90, wata91]. Nur zwei Arbeiten [vaid92a] und [sors93] untersuchen das dynamische Übergangsverhalten eines ideal gerührten Tankreaktors mit Wärmetauscher-Wandung für eine irreversible, exotherme Reaktion erster Ordnung. Vaidyanathan und Venkatasubramanian untersuchen die dynamischen Prozeßdaten in Form von Zeitreihenwerten mit Hilfe eines mehrlagigen Perceptron-Netzwerkes mit Fehler-Backpropagation, während Sorsa und Mitarbeiter die dynamischen Prozeßdaten mit einem Radial-Basis-Funktion-Netzwerk analysieren.

Grundsätzlich handelt es sich um spezielle Verfahren oder um idealisierte Teilprobleme eines bestimmten Prozesses. Ein verallgemeinerbares Konzept zur Identifikation auftretender Fehler in dynamischen Prozeßabläufen steht bislang nicht zur Verfügung.

Ein weiteres grundsätzliches Problemfeld stellt die Bereitstellung von Trainingsdaten dar. Das richtige Training des Klassifikators ist i. allg. eine wesentliche Voraussetzung für dessen erfolgreiche Funktion in der sogenannten recall-Phase, der Arbeitsphase eines Klassifikationssystems. Die notwendigen Daten können entweder aus archivierten Datensammlungen bestehender Anlagen oder mit Hilfe von Simulatoren gewonnen werden [hosk91]. Im allgemeinen ist es unwahrscheinlich, daß ein ausreichendes Potential an realen Daten für die Trainingsphase zur Verfügung steht. Das betrifft vor allem Meßdatensätze für gefährliche Fehlersituationen. Bisher werden in den recherchierten Anwendungen neuronaler Netze nur Daten von Fehlerzuständen verwendet, die aus bekannten Prozeßmodellen für bestimmte Abweichungen vom Dauerbetriebszustand gewonnen werden [fan93]. Teilweise wird Rauschen von bis zu 10% addiert, um realere Prozeßdaten zu simulieren und die Generalisierungsfähigkeit

des Klassifikators bezüglich nicht angelernter Fehlersituationen zu testen [sors93, wata89].

In diesem Zusammenhang sind folgende Probleme zu berücksichtigen:

- Der "Runaway Path" (Herauslaufen des Prozesses aus dem bestimmungsgemäßen Bereich auf einen gefährlichen Betriebszustand hin) muß aus den Daten ersichtlich sein, d.h. der Störungsablauf muß identifizierbar und charakterisierbar sein. Solche Verläufe sind selten und lassen sich z.T. nur im Labor realisieren.
- Die Verfügbarkeit von Daten ist begrenzt, z. T. aus Geheimhaltungsgründen.
- Die Vollständigkeit der Informationen ist nicht immer gewährleistet.

Hoskins und Mitarbeiter [hosk91] empfehlen daher unter dem Gesichtspunkt der praktischen Anwendung eines neuronalen Netzes zur Fehleridentifikation in chemischen Anlagen die Entwicklung oder Modifikation eines Anlagensimulators zur Trainingsdatenerzeugung. Die Simulationsergebnisse sollten dabei mit Hilfe historischer Daten verifiziert werden.

Als Defizite bei den bisherigen Anwendungen neuronaler Netzwerke zur Erkennung und Diagnose von Prozeßfehlern in chemischen Anlagen sind zu nennen:

- Es steht i.allg. nur eine geringe Anzahl von signifikanten Eingangssignalen bei einer Vielzahl von Fehlersituationen zur Verfügung.
- Nichttrainierte neue Fehlersituationen können von den angewendeten neuronalen Netzen nicht nachgelernt werden, ohne daß der Klassifikator vollständig neu trainiert werden muß [mart93].
- Die Schwankungssignale der Prozeßgrößen (Rauschsignale) werden gegenwärtig nicht verwendet, obwohl sie signifikante Informationen für die Fehlerfrüherkennung liefern und den Merkmalsvektor für die Klassifikation wesentlich vergrößern würden.
- Korrelationen zwischen den Schwankungssignalen verschiedener Prozeßparameter werden nicht zur Fehlererkennung und -diagnose angewendet.
- Sicherheitsrelevante Statussignale der Anlage werden nicht in den Merkmalsvektor eingebunden
- Die Parameter des Reaktionsverlaufes, z. B. Druck und Temperatur werden über dem Reaktionsvolumen nicht örtlich aufgelöst.
- Die Erprobung an industriellen Chemieanlagen fehlt.

In der Fachliteratur werden gegenwärtig i.allg. Laborprozesse, die eine geeignete begrenzte Umgebung bieten, als günstigste chemische Anlage angesehen, um später komplexe Industrieanlagen effektiv überwachen zu können [sors91, vaid92b].

2.2 Fortschritte während der Projektdurchführung

Im Zeitraum des Vorhabens ist die stürmische Entwicklung auf dem Gebiet der künstlichen neuronalen Netze weitergegangen. Die Vielzahl der Veröffentlichungen zur

Entwicklung neuer Netzalgorithmen und zur Weiterentwicklung bekannter Algorithmen ist auch für den Anwender schwer zu überschauen [arbi95].

Im folgenden können deshalb nur einige Entwicklungstrends kurz beschrieben werden, die für die zukünftige Entwicklung auf dem Gebiet der Fehlerdetektion und -diagnose in Chemieanlagen von Bedeutung sein könnten. Multi-Layer-Perceptron-Netze (MLPN) und Radial-Basis-Function-Netze (RBFN) sind die am meisten angewendeten Netztypen [gomm95]. Durch die rasanten Fortschritte bei der Erhöhung der Rechengeschwindigkeit und der Speicherkapazität von Personalcomputern sind die Kosten und der Aufwand bei der Anwendung neuronaler Netze inzwischen soweit gesunken, daß diese Methoden großtechnisch zum Einsatz kommen konnten [fro96].

Gegenwärtig wird hauptsächlich das off-line-Training der neuronalen Netze mit numerisch simulierten Daten oder mit aufgezeichneten Anlagendaten vorgenommen. Das hat den Vorteil, daß die Trainingsphase nicht zeitkritisch ist, andererseits ist die Qualität der Trainingsdaten entscheidend für die Leistungsfähigkeit der neuronalen Netze bei der on-line-Fehlerdiagnose. Eine schlechte Datenqualität ist gegeben, wenn z. B.

- die Anlagendaten aus einer großen Anzahl von Normalbetriebsdaten und nur relativ wenig Daten der Fehlerzustände bestehen oder
- die simulierten Fehlerdaten vom realen Anlagenverhalten des nichtbestimmungsgemäßen Betriebes sehr stark abweichen und der Übergangsbereich zum Runway nicht mit Daten belegt ist.

Während der Durchführung des Vorhabens war in der Literatur noch kein Netztyp zu finden, der alle Anforderungen an ein fortgeschrittenes intelligentes Diagnosesystem für industrielle Chemieanlagen hätte erfüllen können. Folgende Fähigkeiten wären u.a. notwendig:

- on-line Trainingsmöglichkeit (ohne daß Zeitprobleme auftreten),
- selbständiges Erkennen von neuen Fehlern und
- Implementierung neuer Fehlerzustände ohne Verlust des bisher erlernten Wissens.

Erste Schritte zur on-line-Adaption von neuen Fehlern sind bei der Weiterentwicklung des Radial-Basis-Function-Netzes (RBFN) unternommen worden [gomm95, pate97]. Die in [gomm95] entwickelten Netzalgorithmen sollen ein im off-line Training vorbereitetes RBFN in die Lage versetzen, während des on-line Einsatzes an einer realen Anlage neue Fehler nachlernen zu können. Durch die self-adapting Algorithmen werden neue Hidden- und Output-Neuronen selbständig generiert, wenn neue Fehlerzustände während des on-line Betriebes auftreten. Vielversprechende Ergebnisse wurden beim Test mit Daten eines simulierten endothermen CSTR-Prozesses (continuous stirred tank reactor) nachgewiesen.

Modifizierte Algorithmen wurden in einem autonom lernenden Fehlerdetektionssystem

für Gasturbinen angewendet [pate96]. Bei dem Test des mit Simulationsdaten vorbereiteten Netzes konnten an einem Gasturbinen-Prüfstand auch Mehrfach-Fehler detektiert werden. Weitere Untersuchungen werden bei Rolls-Royce Aerospace unternommen, um dieses Fehlerdetektionssystem mit neuronalen Netzen später einmal an Bord von Düsenflugzeugen einsetzen zu können.

Große Bedeutung für die Modellierung nichtlinearer dynamischer Systeme haben rückgekoppelte neuronale Netze (RNN: Recurrent Neural Networks) erlangt, die feedforward MLPN mit Rückkopplungen von den Netzausgängen zu den Netzeingängen sind. Im Gegensatz zu den Gewichten der feedforward-Verbindungen sind diese Gewichte nicht trainierbar, sie speichern aber die dynamischen Systemeigenschaften. Die rückgekoppelte Netzstruktur führt allerdings zu wesentlich längeren Trainingszeiten, so daß eine möglichst geringe Anzahl von rückgekoppelten Neuronen genutzt werden sollte.

Der Vorteil der RNN ist, daß durch die Rückkopplungen eine zeitliche (one-step) Vorhersage erhalten wird [pham95]. Eine zeitliche Vorhersage mit Hilfe von MLPN ist dagegen nur durch die aufwendige Moving-Windows-Methode bei der Auswertung von Zeitreihen zu erreichen. Hierbei besteht der Eingangsvektor des Netzes aus seriell zusammengesetzten Datenvektoren des gegenwärtigen und mehrerer vergangener Zeitpunkte, während der Ausgangsvektor des Netzes die entsprechenden Daten des zukünftigen Zeitpunktes enthält [zupa93]. Die Anzahl der Eingangsneuronen vervielfacht sich dadurch entsprechend der benutzten vergangenen Zeitschritte, so daß die Trainingszeit stark ansteigt.

Daher wird offensichtlich ein on-line-Training nur für rückgekoppelte Netze (RNN) zur Modellierung nichtlinearer dynamischer Systeme in der Literatur vorgeschlagen [schu97]. In der Literatur sind keine Algorithmen für RNN und MLP-Netze bekannt, die ein selbständiges Erkennen und (Nach-)Lernen von nichttrainierten Fehlern ermöglichen.

In den letzten Jahren wurden im wachsenden Maße Kombinationen von neuronalen Netzen und Fuzzy Logik als Mustererkennungssystem eingesetzt, um die Vorteile beider Verfahren zu nutzen. Beispielsweise werden bei einem Neuro-Fuzzy-Ansatz die Vorzüge der neuronalen Lernfähigkeit mit der Transparenz der Fuzzy-Logik kombiniert. Das neuronale Netz wird hierbei zum selbständigen Aufstellen der Fuzzy-Regeln genutzt, so daß der Black-Box-Charakter der neuronalen Wissensspeicherung (das Wissen ist in der Netzstruktur, den Gewichten und den Schwellwerten des Netzes implizit enthalten) vermieden wird [benk97].

Beim Fuzzy-Neuro-Ansatz kann z. B. eine Fuzzifizierungsschicht als zusätzliche Eingangsschicht dem neuronalen Netz vorgeschaltet werden. Dadurch wird jedes analoge Eingangssignal den drei Zugehörigkeitsfunktionen (abnehmend, stationär oder steigend) zunächst zugeordnet, die dann als Merkmale des Netzes verarbeitet werden. Das führt u.a. zu einer verringerten Empfindlichkeit des Netzes gegenüber Signalfuktuationen [zhan95].

Die gesteigerte Leistungsfähigkeit neuronaler Netze hat im Verlaufe des Vorhabens dazu geführt, daß sie nun im wachsenden Umfange in allen drei Kategorien der Fehlerdiagnoseverfahren eingesetzt werden:

- Mustererkennungsverfahren
- wissens(regel)basierte Expertensysteme
- modellbasierte Verfahren.

Neuronale Netze und Fuzzy-Logik, werden seit Ende der achtziger Jahre zur Fehlerklassifikation erfolgreich angewendet. Diese Vorgehensweise wird auch in diesem Vorhaben zur Identifizierung gefährlicher Betriebszustände in Chemieanlagen untersucht.

Die zeit- und kostenaufwendigen Arbeiten zum Aufstellen des Regelwerkes von Expertensystemen oder zur Modellierung komplexer nichtlinearer Systeme können durch die Anwendung neuronaler Netze wesentlich verkürzt und erleichtert werden.

Ein weiterer Vorteil ist, daß analytische oder heuristische Modelle nichtlinearer dynamischer Systeme als "neuronale Modelle" von hoher Genauigkeit durch Training des neuronalen Netzes mit geeigneten Prozeßdaten abgebildet werden können.

Aufgrund der Spezifik der modellgestützten Fehlerdetektion und -diagnose (Residuen-generierung durch Vergleich zwischen aktuellem Prozeßverhalten und Verhalten des fehlerfreien Modells sowie Residuenauswertung zum Erkennen von Fehlern und deren Ursachen) können neuronale Netze auf verschiedenen Wegen vorteilhaft angewendet werden:

1. Ein "neuronales" Prozeßmodell wird zur Residuengenerierung benutzt und die Residuenauswertung erfolgt konventionell [yu96].
2. Neuronale Netze werden sowohl bei der Residuengenerierung als auch bei der Residuenauswertung verwendet [benk96].
3. Für jeden Fehler (Residuum) wird ein spezielles neuronales Prozeßmodell antrainiert, so daß eine Bank von neuronalen Netzen für die Fehlerdiagnose zur Verfügung steht [zhou97].

Im dritten Fall ist der Trainingsaufwand relativ groß, wobei aber folgende Vorteile erzielt werden können:

- hohe Fehlerempfindlichkeit bei geringer Fehlalarmrate
- Aussagen zur Schwere des Fehlers
- Vorhersage von Fehlern durch Anwendung von rückgekoppelten Netzen (s.o. RNN).

Bisher wurden mit einer Bank von RNN vielversprechende Ergebnisse bei der Fehlerdiagnose von Gasturbinen erzielt [zhou97]. Hierbei wurden drei Fehlertypen durch RNN-Modelle abgebildet, die mit der dynamischen Prozeßsimulation-Software SIMULINK numerisch simuliert wurden. Experimentelle Erprobungen an einem Gasturbinen-

Teststand zeigten, daß zuverlässige Informationen über Fehlertyp, Schwere und Dauer des Fehlers gewonnen werden können. Der Nachteil ist, daß nicht vorhersehbare Fehler nicht erkannt werden, da entsprechende Modelle nicht trainiert wurden.

Die aufgezeigten Entwicklungstrends wurden bei der Durchführung des Vorhabens beachtet, sofern sie die mustererkennungsbasierten Fehlerdetektion und -diagnose betreffen. Sowohl Fuzzy-Logik als auch neuronale Netze wurden für die Identifizierung gefährlicher Betriebszustände genutzt. Im Vorhaben stand die Fähigkeit eines on-line Lernens nicht im Vordergrund, da von der chemischen Versuchsanlage nur off-line Daten zur Verfügung standen. Andererseits konnten alle typischen Fehler numerisch und/oder experimentell simuliert werden, so daß Trainingsdaten hoher Qualität verfügbar waren. Eine Zielstellung des Vorhabens war, die Eignung neuronaler Netz-Software zur Fehlererkennung- und diagnose in chemischen Prozessen zu testen.

3. Grundlagen und Voraussetzungen der Identifizierung gefährlicher Betriebszustände mit Mustererkennungsverfahren

3.1 Funktionsprinzip

Alle Mustererkennungsverfahren müssen in einem ersten Verfahrensschritt unbedingt trainiert werden. Allerdings erübrigt sich auf diese Weise die analytische Modellbildung oder die Aufstellung des Regelwerkes bei den modellgestützten bzw. regelbasierten Fehlererkennungsverfahren.

Die sinngemäß auf alle Mustererkennungsverfahren übertragbare Lernprozedur soll am Beispiel der Anwendung von neuronalen Netzen zur Zustandserkennung beschrieben werden. Im Bild 3.1 ist das Funktionsprinzip dargestellt. Das neuronale Netz ist hier ein aus drei Schichten bestehendes Netzwerk von Rechenelementen (Neuronen), wobei jedes Neuron mit allen Neuronen der folgenden Schicht verbunden ist, um den Signalfuß von der Eingangs- zur Ausgangsschicht zu gewährleisten.

Dabei ist die Anzahl der Neuronen in der Eingangsschicht identisch mit der Anzahl der Merkmale, die aus den Prozeßvariablen gewonnen werden; während die Anzahl der Neuronen der Ausgangsschicht im allgemeinen der Anzahl der Zustandsklassen entspricht, die während des Trainings angelernt werden. Durch eine oder mehrere zusätzliche Neuronenschichten, sogenannte Hidden-Schichten, wird ein nichtlineares System in Bezug auf das Eingangs-Ausgangs-Verhalten des Netzwerkes erreicht. Die Wahl der nichtlinearen Transferfunktion von jedem Neuron und die Anzahl der Hidden-Neuronen bestimmt das nichtlineare Gesamtverhalten.

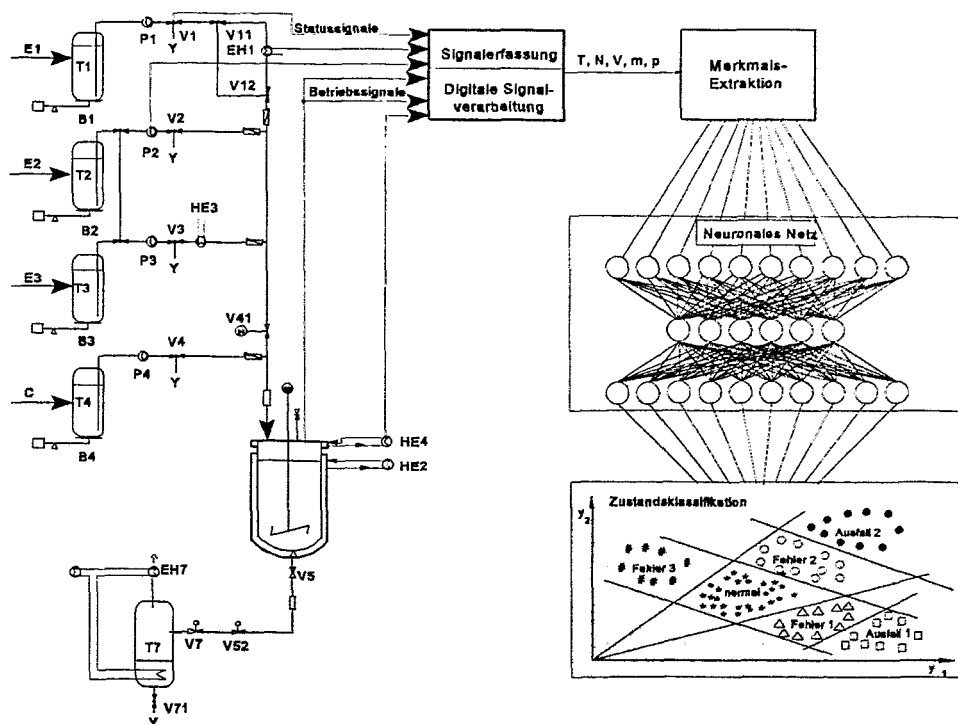


Bild 3.1 Identifizierung gefährlicher Betriebszustände in Chemieanlagen mit neuronalen Netzen.

Zur qualitativen Zustandsklassifikation muß ein überwachtes Lernen durchgeführt werden, um das Klassifikationsmodell (die Wissensbasis) in den Verbindungsstärken zu speichern. Das geschieht, indem während der Lernphase das neuronale Netz gleichzeitig mit Paaren von Merkmalsvektoren und Ergebnisvektoren, die das Expertenwissen über den jeweiligen Betriebszustand enthalten, an der Eingangsschicht bzw. an der Ausgangsschicht konfrontiert wird. Durch spezielle Lernalgorithmen und wiederholtes Training werden die Verbindungsstärken zwischen den Neuronen der verschiedenen Schichten so lange variiert, bis die Abweichungen zwischen den gewünschten Klassifikationsergebnissen und den vom Netz beim Test gelieferten Ergebnissen minimal werden. Die Wissensbasis wird so in den Verbindungsstärken gespeichert, und das neuronale Netz kann dann auch unbekannte Mustervektoren richtig klassifizieren, wenn sie zur Menge der angelernten Zustandsklassen gehören. Die Zustandsklassifikation reduziert sich nun auf eine Lagebestimmung der unbekannt-ten Mustervektoren in dem durch Training unterteilten Merkmalsraum, wie am Beispiel eines zweidimensionalen Merkmalsraumes im Bild 3.1 dargestellt ist.

3.2 Daten und Klassifikationsaufgabe

Die zum Training und Test der Mustererkennungsverfahren benötigten Prozeßdaten wurden von dem Fraunhofer Institut für Umwelt-, Sicherheits- und Energietechnik

(UMSICHT) Oberhausen bereitgestellt, das für den chemischen Teil des Verbundprojektes verantwortlich war [neum97].

Als chemische Referenzreaktion wurde die säurekatalysierte Veresterung von Essigsäureanhydrid mit Methanol ausgewählt, die in der Literatur häufig bei sicherheitsrelevanten Untersuchungen angewendet wird. Diese stark exotherme Reaktion ist durch geeignete Betriebsbedingungen beherrschbar und hat eine ausreichende Eigendynamik bei der chemischen Wärmeproduktion, um gefährliche Betriebszustände (Durchgehen der Reaktion) in Abhängigkeit von der Temperatur und der Konzentration des Reaktionsgemisches realisieren zu können.

Da solche Betriebszustände an real betriebenen Anlagen aus Sicherheitsgründen nicht zielgerichtet herbeigeführt werden können, sollte, sofern möglich, am Beginn der Untersuchungen auf Prozeßsimulatoren zurückgegriffen werden.

Bei UMSICHT wurde für das genannte Stoffsystem ein Prozeßsimulator entwickelt und eine Versuchsanlage im Labormaßstab betrieben. Der Prozeßsimulator CASI (Calorimeter Simulator) basiert auf physikalisch begründeten Modellen für häufig wiederkehrende Komponenten eines chemischen Prozesses (z.B. Wärmeübertrager, Reaktoren, Pumpen, Regler), die als Module implementiert sind und zu einem Prozeßmodell zusammengefügt worden sind. Für die dynamische Simulation wurden neben verfahrenstechnischen Komponenten auch Meß- und Regeleinrichtungen abgebildet. Um die Daten des Prozeßsimulators gemeinsam mit Meßdaten eines realen Versuches an der Versuchsanlage nutzen zu können, wurde der Simulator so entworfen, daß dieselben Signale wie im Laborexperiment zur Verfügung stehen.

Das Kernstück der Laboranlage (Bild 3.2) besteht aus einem computergestützten Reaktionskalorimeter (RC1, Fa. Mettler) mit einem 1,8 Liter-Stahlrührkessel in der Druckausführung HP60 (60 bar) und einer Mantelkühlung. Weitere Komponenten sind Vorlagebehälter, Waagen, Pumpen, zusätzliche Wärmeübertrager, Stell- und Regeleinrichtungen. Im Bild 3.2 ist das Fließbild des Laborreaktors auf der linken Bildhälfte dargestellt.

Zur sicherheitstechnischen Bewertung von Störungen in einer chemischen Anlage ist unbedingt die Kenntnis erforderlich, ob ein Gefahrenpotential vorhanden ist, so daß durch diese Störung ein Störfall initiiert werden könnte, wenn keine geeigneten Gegenmaßnahmen getroffen werden. Unter Störungen werden in diesem Kontext Fehler und Ausfälle von Anlagenkomponenten sowie geringe und starke Abweichungen von der bestimmungsgemäßen Prozeßführung verstanden. Ein enormes Gefahrenpotential, das durch eine kritische Störung zum Durchgehen der Reaktion führen könnte, stellen beispielsweise hohe Reaktantenakkumulationen bei stark exothermen Reaktionen dar. Um die Auswirkungen verschiedener Störungen auf den gewählten exothermen Referenzprozeß zu untersuchen, wurden im Laborreaktor typische Störungen simuliert, wie z.B.:

- Variation der Katalysatorkonzentration

- Variation der Dosierzeit von Methanol (und damit der Dosierleistung)
- Rührerausfälle
- Fehldosierungen
- Kühlpannen (z. B. keine Wärmeabführung bei adiabatischer Prozeßführung)
- Kryostatfehler (Kühlungsfehler)
- Temperaturstörungen/Fehler

Die experimentellen Störungssimulationen wurden vorwiegend bei dosierungskontrollierten Semibatch-Reaktionen durchgeführt, weil beim Batch-Betrieb die gesamte Reaktantenmenge während des Reaktionsbeginns im Reaktor vorhanden und dadurch das Risiko einen möglichen Runaways bei kritischen Störungen wesentlich größer ist.

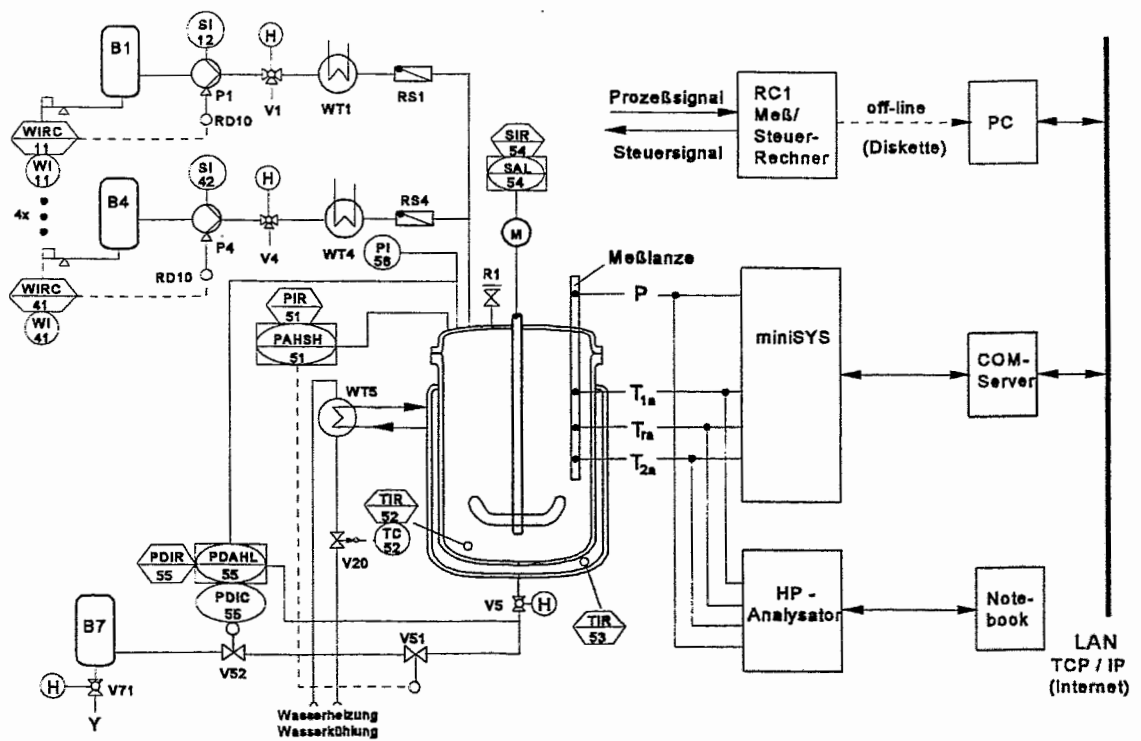


Bild 3.2 Schematische Darstellung des Laborreaktors sowie der Datenerfassung und -übertragung.

Als störungsfreier Standardversuch wurde ein Reaktionsverlauf festgelegt, der durch folgende Kriterien bestimmt wird:

- T_j -Modus, $T_j = 28^\circ\text{C}$
- Rührerdrehzahl 200 rpm
- Vorlage Essigsäureanhydrid mit Katalysator Schwefelsäure
- 20 min Dosierung von Methanol

Gemäß Aufgabenstellung sollen gefährliche Betriebszustände bzw. Fehler frühzeitig erkannt werden, um eine tatsächliche Gefährdung ausschließen zu können. Die Anforderung an den Klassifikator ist deshalb einerseits, die Gefährlichkeit des Anlagenzustandes einzuschätzen und andererseits eine Aussage zur Fehlerursache zu liefern, damit geeignete Gegenmaßnahmen zur Störungsbeseitigung frühzeitig getroffen werden können.

Bis die EDV-gestützte Überwachungsmethode zu einer Klassifikation kommt, sind mehrere logische Schritte zurückzulegen. Zuerst müssen relevante Signale der Anlage (z.B. Temperaturen, Drücke, usw) erfaßt und vorverarbeitet werden. Danach werden geeignete Merkmale aus diesen Signalen gebildet und normiert. Diese normierten Merkmale werden schließlich in den Klassifikator gegeben, der dann die Klassifizierung vornimmt. Dieser Ablauf ist im Bild 3.1 mit einem neuronalen Netz als Klassifikator schematisch wiedergegeben.

3.3 Definition von Meßgrößen

Um die gemeinsame Nutzung der Daten des Prozeßsimulators und der Meßdaten eines realen Versuches zu ermöglichen, mußte für beide Datenquellen eine identische Datenbasis definiert werden. Einerseits ist eine möglichst große Anzahl von Daten in dieser Basis wünschenswert, um eine gute Klassifikation zu unterstützen, andererseits muß darauf geachtet werden, daß diese Meßgrößen und davon abgeleitete Größen auch in einer realen Anlage zur Verfügung stehen, um eine Übertragung der Ergebnisse zu ermöglichen. Ausgehend von den Daten, die das RC1 zur Verfügung stellt, wurden folgende Größen in die Datenbasis aufgenommen:

- Füllhöhe im Reaktor
- Temperatur in der Methanol-Zuspeisung
- Temperatur in der Essigsäureanhydrid-Zuspeisung
- Temperatur in der Auslaßleitung
- Stellungsanzeige der Kugelhähne
- Reaktordruck
- Signale der vier Waagen
- berechnete Wärmekapazität des Reaktorinhaltes
- Reaktortemperatur
- zeitliche Ableitung der Reaktortemperatur
- Kalibrierheizleistung
- bilanzierte Reaktionsleistung
- Rührerdrehzahl
- Manteltemperatur
- Kühlmitteltemperatur
- berechnetes Volumen des Reaktorinhaltes

Hinzu kommen einige Stellgrößen, die für jeden Versuchsablauf vorab festgelegt wurden:

- Solltemperatur
- Kryostattemperatur
- Soll-Rührerdrehzahl

Ausgehend von dieser Datenbasis wurden bei verschiedenen Untersuchungen unterschiedliche Meßgrößen für den Merkmalsvektor generiert. So zeigte sich z.B., daß die Stellungsanzeige der Kugelhähne in Semibatch-Versuchen keine Bedeutung hat und demnach weggelassen werden konnte. Die Kalibrierheizung fand nur bei Untersuchungen zum Stoffsystem und seiner Dynamik Verwendung und wurde ebenso aus dem Merkmalsatz gestrichen. Weiterhin wurde möglichst auf Größen, die aus Meßgrößen desselben Merkmalsvektors berechnet werden müssen verzichtet, weil diese zusätzlichen Merkmale für den Klassifikator redundant sind.

Allerdings wurde auch festgestellt, daß zusätzliche Größen, die aus verschiedenen Merkmalsvektoren der Datenbasis berechnet werden, günstigen Einfluß auf die Klassifikation haben können. Zu nennen wären diverse zeitliche Ableitungen der Signale. Durch diese Ableitungen erhält das Netz zusätzliche Informationen über den zeitlichen Ablauf des Prozesses, obwohl es nur diskrete Zeitschritte klassifiziert. Ebenso haben die absoluten Mengen der Stoffe auf den Waagen prinzipiell keinen Einfluß auf die Reaktion und somit auf die Klassifikation, so daß die Signale der Waagen durch ihre Ableitung ersetzt wurden.

Um nicht für alle, bei verschiedenen Temperaturen durchgeführten Reaktionsverläufe jeweils ein eigenes Netz realisieren zu müssen, wurden diejenigen Temperaturen, die von der Normalbetriebstemperatur abhängen, relativ zu dieser angegeben. Ebenso wurde mit der Rührerdrehzahl verfahren (siehe auch Kapitel 4.1 und Anhang A.3).

3.4 Detektionszeiten

Ziele des Überwachungssystems sind die unabhängige Einschätzung des Gefährdungsgrades eines vorliegenden Anlagenzustandes sowie eine Entscheidungsunterstützung für das Anlagenpersonal. Die erforderlichen Detektionszeiten hängen stark von der Kinetik des Prozesses sowie den Karenzzeiten für Operatorhandlungen und den Stellzeiten bis zur Wirkung der Gegenmaßnahmen ab. Die maximal zulässigen Detektionszeiten von Zuständen, die vom Normalbetrieb abweichen, richten sich sinnvollerweise nach der Sicherheitsrelevanz der Anlagenzustände (unzulässig, unerwünscht, normal), den Änderungsgeschwindigkeiten der Prozeßparameter und der Reaktionszeit des Personals.

Betrachtet man zunächst einmal die Reaktionszeit des Bedienungspersonals. Diese wird in einem Bereich von 10 bis 30 Sekunden angenommen. Um dem Personal bei einem erfolgten Alarm schon einen weiteren Trend aufzuzeigen, ist es sinnvoll, daß nach diesen 10 bis 30 Sekunden weitere Klassifikationen vorliegen. Dies sollten aber aus Gründen der Übersichtlichkeit und Erfassbarkeit nur einige wenige sein, so daß man davon ausgehen kann, daß eine Zustandseinschätzung mindestens alle 5 bis 10 Sekunden notwendig ist.

Berücksichtigt man nun, daß die Detektion eines anormalen Betriebszustandes aus Gründen der Zuverlässigkeit auf mehreren einzelnen Klassifikationen begründet werden sollte, muß die Klassifikationsrate höher als die Rate der Zustandeinschätzungen sein, um die Zeitspanne vom Eintritt des Zustandes bis zur Reaktion des Personals kurz zu halten. Die Verwendung von bis zu 5 einzelnen Klassifikationen ist vorgesehen, so daß eine einzelne Klassifikation alle 1 bis 2 Sekunden durchgeführt werden muß.

Betrachtet man nun die Änderungsgeschwindigkeiten der Prozeßparameter und wie häufig die Signale erfaßt werden, so kann auf die minimale Zeitspanne für eine sinnvolle Klassifikation geschlossen werden. Das heißt, eine Klassifizierung, die häufiger erfolgt als Änderungen in den Signalen geschehen oder erfaßt werden, ist überflüssig. Deshalb wird durch die Steuerungssoftware des Laborreaktors RC1 eine minimale Meßzykluszeit von zwei Sekunden realisiert. Allgemein kann man im chemischen Bereich von einer Messung ca. alle 10 Sekunden ausgehen, so daß eine Klassifikation in 1 bis 2 Sekunden auch hier vollkommen ausreichend ist.

Bei einer durchgehenden Reaktion kann diese Erfassungsrate aber auch zu gering sein, wie im Anhang A.1 anhand der lokalen Temperatur nach einem Rührerfehler gezeigt wird. Dort wurden Temperaturgradienten von mehr als 70 K/s ermittelt.

Da die verwendeten Klassifikationsverfahren unabhängig vom Anlagenzustand die Klassifikation in konstanter Zeit berechnen, ist eine Staffelung der Detektionszeiten in Abhängigkeit von der Sicherheitsrelevanz der Anlagenzustände nicht notwendig, solange die maximal zulässige Detektionszeit unterboten werden kann. Dazu muß geklärt werden, eine Klassifikation überhaupt in diesen 1 bis 2 Sekunden möglich ist. Dabei spielt in erster Linie die Komplexität des Klassifikators und die Hardware, auf der der Klassifikator ausgeführt wird, eine Rolle. Bei den bisher benutzten Klassifikatoren ist selbst auf Rechnern mittlerer Leistung wie etwa dem eingesetzten miniSYS-System eine Klassifikation pro Sekunde möglich. Bei wesentlich komplexeren Klassifikatoren kann durch eine gestaffelte Bearbeitung die Klassifikationsrate gehalten werden, wie im folgenden Kapitel u.a. ausgeführt wird.

3.5 Datenkopplung

Für die Erarbeitung einer Überwachungskonzeption für weiträumige technische Anlagen in ihrer Gesamtheit ist immer auch die für die Überwachung notwendige Informationsübertragung und -verarbeitung von der Informationsgewinnung in den Sensoren bis zur Informationsaufnahme durch das Betriebspersonal zu betrachten. Das frühzeitige Erkennen gefährlicher Betriebszustände erfordert eine geeignete und unter Umständen aufwendige Verarbeitung der von den Sensoren empfangenen Signale (Merkmalsextraktion). Da große technische Anlagen auch über eine große Anzahl von Sensoren verfügen, entsteht naturgemäß ein sehr großer Umfang an Primärinformation, der bei zentraler Informationsverarbeitung hohe Anforderungen an die Informationsübertragungs- und Verarbeitungssysteme stellt. Eine wesentliche Zielstellung der Forschungsaufgabe ist aber gerade die Reduktion der Menge an Informa-

tion, die an das Betriebspersonal übergeben wird, auf die sicherheitsrelevanten Inhalte des Informationsangebotes.

Gegenüber der zentralen Informationsverarbeitung lassen sich mit einer dezentralen Struktur folgende Vorteile erreichen:

- Der technische Aufwand für die Informationsübertragung kann verringert werden.
- Unterschiedliche Informationsübertragungssysteme lassen sich leichter kombinieren und das Auswahlangebot ist größer.
- Die Komponenten einer Anlage können von Subsystemen relativ unabhängig voneinander überwacht werden.
- Die Zuverlässigkeit des Fehlerfrüherkennungssystems hängt weniger von der Zuverlässigkeit der Übertragungswege ab, weil durch die dezentrale Verarbeitung keine Informationsübertragung in Echtzeit notwendig ist.
- Service- oder Erweiterungsarbeiten können mit weniger Auswirkungen auf das gesamte Überwachungssystem ausgeführt werden, weil durch die Selbständigkeit der Teilsysteme die gesamte Anlage durch Ausfall einer Teilanlage in ihrer Funktion weniger beeinträchtigt wird.
- Die Nachrüstung bestehender Chemieanlagen kann schrittweise und kostengünstiger realisiert werden.

Beim Einsatz einer dezentralen Informationsverarbeitung müssen auch einige ungünstige Eigenschaften beachtet werden, welche die Inbetriebnahme und den Service beeinflussen:

- Störungen und Fehlfunktionen von Subsystemen können vom Operator meist schlecht behoben werden.
- Die Umgebungsbedingungen für die Subsysteme sind oft unterschiedlich und erfordern besondere konstruktive Lösungen (z. B. Gehäuse).
- Für Abgleicharbeiten während der Inbetriebsetzung sind u.U. wesentlich größere Informationsmengen zu übertragen als im Normalbetrieb, so daß spezielle Geräte für die Inbetriebnahme notwendig sind.

Im Rahmen des Projektes wurde nur die dezentrale Informationsverarbeitung betrachtet, weil die Versuchsanlage beim Projektpartner steht und damit das Problem der Datenübertragung ohnehin gelöst werden mußte [hess97b]. Für die spätere Erprobung der Methode an einer bestehenden Industrieanlage muß diese Anlage nachgerüstet werden, was sich mit einer dezentralen Struktur der Informationsverarbeitung mit weniger negativen Rückwirkungen auf die Industrieanlage realisieren läßt.

Die Datenfernverarbeitung geht von einer anlagennahe Komponente und einem Host-Rechner aus, der die Kommunikation mit dem Bedienpersonal realisiert (Bild 3.2). In Anlagennähe werden die Sensorsignale direkt oder über Vorverstärker übernommen und digitalisiert. Die in der anlagennahen Komponente enthaltenen Rechner erzeugen aus den digitalisierten Signalen für die Zustandsklassifikation geeignete Merkmale. Die

aus mehreren Merkmalen generierten Merkmalsvektoren werden klassifiziert oder an den Host-Rechner übertragen. Wenn die Klassifikation anlagennah erfolgen kann, werden zum Host-Rechner nur Klassifikationsergebnisse übertragen, wodurch sich die notwendige Datenübertragungsrate weiter verringert.

Der Host-Rechner übernimmt die Merkmalsvektoren und Klassifikationsergebnisse der anlagennahen Komponenten zur Zustandsklassifikation, Entscheidungsfindung und Ergebnisdarstellung für das Bedienpersonal. Außerdem steuert der Host-Rechner die einzelnen Geräte durch Übergabe von Steuerdaten und Programmen.

Für die Untersuchungen im Rahmen des Projektes wurde als anlagennahe Komponente ein leistungsfähiges, frei programmierbares und autonom arbeitsfähiges Signalerfassungsgerät (miniSYS) beschafft. Das miniSYS besteht aus einem Einplatinensteuerrechner (MSKOP) und bis zu 8 Signalerfassungs-Boards (MSDSP) mit jeweils 2 analogen Ein- und Ausgängen. Jeder MSDSP besitzt einen eigenen Signalprozessor mit Speicher. Je nach Gehäusegröße kann das miniSYS 2 bis maximal 16 Signale mit einer Signalbandbreite von 0 bis 48KHz mittels MSDSP erfassen. Zusätzlich verfügt der MSKOP über 8 weitere Analog-eingänge, die eine maximale Erfassungsrate von 1Hz und 8 Bit Auflösung realisieren. Die Komponenten von miniSYS haben folgende Aufgaben:

MSDSP:

- Signalkonditionierung und -erfassung
- Bereitstellung von Steuer- und Versorgungsspannungen für Sensoren
- Signalverarbeitung und -analyse
- Merkmalsextraktion
- Klassifikation (1. Ebene)

MSKOP:

- Steuerung innerhalb miniSYS und die Kommunikation mit dem Host-Rechner
- Datentransfer zum MSDSP und zum Host-Rechner
- Zwischenspeicherung von Daten auf RAM-Disk
- Programmverwaltung im miniSYS
- Zeitsteuerung von Programmablauf und Signalerfassung (Echtzeituhr)
- langsame Signalerfassung (z. B. Betriebsdaten, Statussignale usw.)
- Klassifikation (2. Ebene)

Die Verbindung zum Host-Rechner erfolgt über eine serielle Schnittstelle RS 232 mit einer Übertragungsrate bis maximal 38,4 Kbaud. Diese relativ niedrige Datenrate hat den Vorteil, daß für die Datenübertragung vom miniSYS zum Host-Rechner eine große Anzahl von Übertragungsverfahren zur Auswahl stehen und somit die Anpassung an den konkreten Einsatzfall erleichtert wird. Für die Klassifikation im Host-Rechner können bei maximaler Übertragungsrate ca. 1000 Merkmale pro Sekunde übertragen werden.

Die zentrale Betriebssoftware im miniSYS ist ein CP/M-Betriebssystem, das auf dem

MSKOP läuft und alle Steuerfunktionen im miniSYS, die RAM-Disk-Organisation, die Schnittstellenbedienung und die Programmverwaltung realisiert. Über die RS 232-Schnittstelle kann ein Terminal direkt mit dem Betriebssystem kommunizieren. Die Anwendersoftware wird in C programmiert, wobei für Bedienfunktionen wie beispielsweise Echtzeituhrbedienung, Signalerfassung, Signalverstärkung, Datenaustausch zwischen den Komponenten usw. Bibliotheksroutinen existieren, die eine effektive Nutzung der Ressourcen des miniSYS erlauben. Für die MSDSP sind auch Bibliotheksroutinen für kompliziertere Signalanalysefunktionen wie Filterung, FFT usw. vorhanden. Die Klassifikationssoftware wird extern erstellt (trainiert) und als C-Routine in das Anwenderprogramm eingebunden. Beim Einsatz mehrerer MSDSP in einem miniSYS können auf den Boards unterschiedliche Anwenderprogramme laufen. Die Steuerung wird von einem Steuerprogramm realisiert, welches gleichzeitig auf dem MSKOP läuft.

Das Verfahren der Datenübertragung von der anlagennahen Komponente (miniSYS) zum Host-Rechner wird sehr stark von den örtlichen Gegebenheiten an der technischen Anlage bestimmt. Im Fall der Nachrüstung eines Fehlerfrüherkennungssystems hängt das Verfahren auch von anlagentechnischen Voraussetzungen wie bereits vorhandene oder vorgeschriebene Kabeltrassen ab.

Für die Untersuchungen im Rahmen des Projektes wird bezüglich der Datenübertragung von folgenden Randbedingungen ausgegangen:

- Es werden mehrere miniSYS (anlagennahe Komponenten) eingesetzt.
- Wenn ein Datenaustausch zwischen den miniSYS erforderlich ist, wird dies über den Host-Rechner realisiert.
- Die anlagennahen Komponenten sind sternförmig mit dem Host-Rechner verbunden.
- Die miniSYS arbeiten autonom und werden vom Host-Rechner abgefragt.
- Die miniSYS können Daten über einen begrenzten Zeitraum zwischenspeichern, so daß eine Datenabfrage in Echtzeit nicht erforderlich ist.
- Der Abstand zwischen miniSYS und Host-Rechner bzw. zur Datenfernverbindung beträgt maximal 500 Meter.
- Im Bereich zwischen miniSYS und Host-Rechner können auch Gebiete liegen, in denen sich das Verlegen von Kabeln verbietet z. B. wegen Umgebungsbedingungen oder Vorschriften.
- Die Datenübertragung soll wenig Anforderungen an das Übertragungsmedium stellen, damit möglichst auch vorhandene ältere Kabel genutzt werden können.
- Der Zugriff auf die anlagennahen Komponenten soll möglichst einfach und vom Aufstellungsort des Host-Rechners unabhängig sein.
- Als Host-Rechner können sowohl PCs als auch Workstations genutzt werden.

Durch die serielle RS 232-Schnittstelle des miniSYS, die auch einen Telefonmodem bedienen kann, ist die direkte Kommunikation mit dem Betriebssystem des miniSYS über ein serielles Kabel von jedem PC aus, der über ein Terminalprogramm verfügt

(beispielsweise "Terminal" unter Windows), möglich. Eine besonders flexible Nutzung des miniSYS ist möglich, wenn ein lokales Netz (LAN) mit TCP/IP-Protokoll genutzt werden kann. In diesem Fall kann über einen COM-Server von allen Rechnern am LAN und über INTERNET, prinzipiell weltweit, mit dem miniSYS kommuniziert werden. Über diesen Weg kann die anlagennahe Komponente problemlos von Workstations genutzt werden. Diese Option ist für das Training und die Anpassung von neuronalen Netzen vorteilhaft, weil zu diesem Zeitpunkt der Systemkonfiguration oft sehr große Datenmengen verarbeitet werden müssen. Große Rechenleistungen werden auch benötigt, wenn in das Fehlerfrüherkennungssystem komplexe Trendanalysen und Ablaufprotokollierungen integriert werden sollen.

Wenn im Anlagenbereich Datenübertragungsstrecken auftreten, in denen keine Kabelverlegung möglich ist, kann die serielle Verbindung mittels Funkmodem oder Funktelefon realisiert werden. Die Funktelefonverbindung ist von der möglichen Übertragungsstrecke am flexibelsten. Die Kosten für eine längerfristige Verbindung sind aber sehr hoch. Eine solche Verbindung ist sinnvoll wenn in einer einzelnen anlagennahen Komponente die Fehlerfrüherkennung bis zur Entscheidung mit entsprechender Signalisation realisiert werden kann. Dann wird die Verbindung nur im Fall der notwendigen Signalisation aktiviert. Für komplexere Überwachungsaufgaben mit Nutzung mehrerer anlagennaher Komponenten sind Funkmodems geeigneter, weil sie neben der drahtlosen Übertragung auch das Umschalten zwischen mehreren Übertragungsstrecken erlauben, so daß der Host-Rechner nur eine serielle Schnittstelle bedienen muß. Die mit Funkmodem überwindbaren Strecken liegen bei einigen 100 Metern bis einige Kilometer. Längere Distanzen müssen über Richtfunk überwunden werden, wodurch eine erhebliche Kostensteigerung entsteht.

Für die Datenübertragung vom miniSYS zum Host-Rechner wurden folgende geräte-technischen Lösungen getestet:

- ISDN-Telefon
- COM-Server zum Anschluß an TCP/IP-Netz
- Funkmodem TiMo 9600
- COM-Schnittstellenumleitung für COM-Server unter Windows

In der schematischen Darstellung des Bildes 3.3 wird zwischen Direkt- und Feldanschluß des miniSYS unterschieden, wobei im Falle des Direktanschlusses immer eine serielle Rechnerschnittstelle oder im Falle des COM-Serveranschlusses eine TCP/IP-Adresse einem miniSYS zugeordnet ist. In diesem Fall muß die Software im Host-Rechner mehrere Schnittstellen bedienen können. Für die Datenübertragungsrates kann jedes miniSYS die volle Rate seiner seriellen Schnittstelle nutzen. Im Fall des Feldanschlusses werden mehrere miniSYS auf eine serielle Verbindung zum Host-Rechner vereinigt und können von dort sequentiell abgefragt werden. Die Funkmodems TiMo 9600 können bis zu 255 Schnittstellen verknüpfen. In diesem Fall steht dem miniSYS im Mittel nur ein Anteil der Übertragungsrates entsprechend der Anzahl der angeschlossenen anlagennahen Einheiten zur Verfügung.

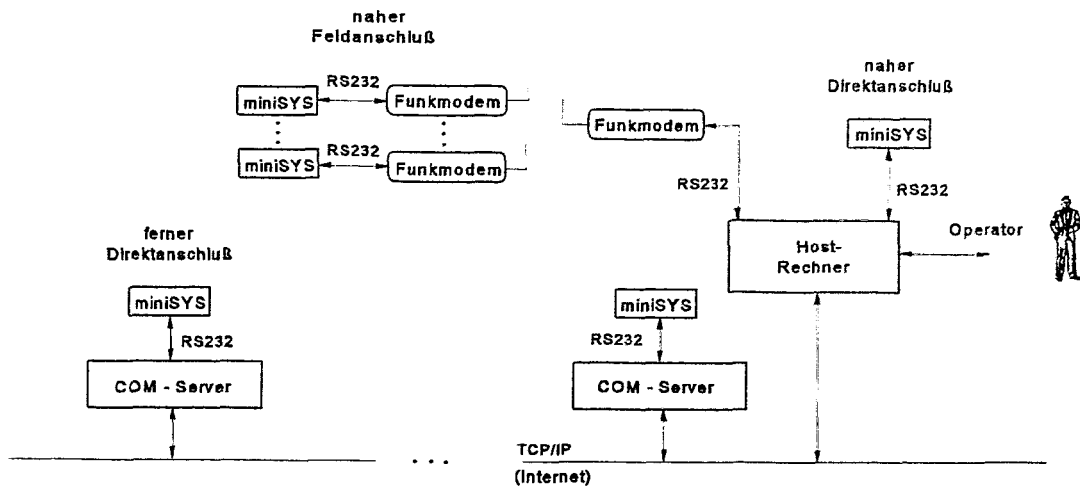


Bild 3.3 Schema der Datenübertragungsvarianten mit Hilfe des Signalergfassungsgerätes miniSYS.

Geräte zur Realisierung eines Feldanschlusses mit Kabelverbindungen sind nicht untersucht worden, weil damit keine neuen Erkenntnisse bezüglich der Datenübertragung zu erwarten sind.

Mit Hilfe der Software zur Schnittstellenumleitung unter Windows kann die Zahl der möglichen COM-Schnittstellen am PC auf maximal 8 erweitert werden. Von einem normalen PC können 3 COM-Server unter Windows bedient werden. Unter TELNET kann eine beliebige Anzahl von COM-Servern angesprochen werden, weil jeder COM-Server als eine eigene Station an das TCP/IP-Netz angeschlossen ist.

Die getaktete Arbeitsweise des Erfassungssystem des RC1 erlaubte keine kontinuierliche und störungsfreie Auskopplung analoger Signale, so daß im Rahmen des Projektes leider keine on-line-Klassifikation realisiert werden konnte. Alle Daten mußten nach Versuchsende per Diskette auf einen vernetzten Rechner übertragen werden und waren erst dann verfügbar.

Jedoch wurde das miniSYS zur Erfassung von höherauflösenden Temperatur- und Drucksignalen einer zusätzlichen Meßlanze benutzt (siehe Anhang A.1). Dazu war das miniSYS mittels eines COM-Servers an das INTERNET angeschlossen. Über mehrere Monate konnte diese Verbindung zur Steuerung des miniSYS (siehe dazu auch Anhang A.2) und zur Datenübertragung genutzt werden und hat sich bewährt.

3.6 Klassifikatoren

Aufgrund der Problemstellung in diesem Projekt wird ein Klassifikator benötigt, der universell einsetzbar ist. Er muß gute Generalisierungseigenschaften haben, um für ihn unbekannte und nicht trainierte Anlagenzustände sinnvoll den antrainierten Klassen zuzuordnen, aber auch um bei stark verrauschten Meßsignalen noch brauchbare Ergebnisse zu liefern. Desweiteren sollte er eine ausreichend kurze Klassifikationszeit besitzen, fehlerrobust und einfach in ein System zu integrieren sein. Aus diesen Gründen scheinen für die Zustandsklassifikation einer Chemieanlage, d.h. für die Verarbeitung analoger Prozeßsignale, binärer Statusinformationen, sowie zusätzlicher Prozeß- und Anlagendiagnosekenngrößen prinzipiell

- * neuronale Netze und
- * Fuzzy-Logik

geeignet zu sein. Darüber hinaus wurden tensororientierte Klassifikationsverfahren erprobt, die über Kooperation mit der TU BA Freiberg verfügbar gemacht werden konnten.

In den folgenden Abschnitten werden die Funktionsgrundlagen der oben genannten Klassifikationsverfahren erläutert.

3.6.1 Neuronale Netze

Unter der Bezeichnung Neuronale Netze werden viele unterschiedliche Verfahren zusammengefaßt, die zumeist in Anlehnung an die Arbeitsweise des (menschlichen) Gehirns oder bestimmten Teilen davon entstanden sind. Teilweise sind diese Modelle sehr speziell und nur in einem eng begrenzten Bereichen sinnvoll einsetzbar, bzw. ihren speziellen Stärken stehen oft auch ausgeprägte Schwächen entgegen.

Ein wesentliches Unterscheidungsmerkmal für die verschiedenen Verfahren ist die Art des Lernens. So unterscheidet man selbstlernende Netze (unsupervised/unüberwacht) und welche, die mit Lehrer (supervised/überwacht) lernen. Erstere sind für die anstehende Klassifikationsaufgabe weniger geeignet, da sie nach Häufungen (cluster) in den Lerndaten suchen und diese dann verschiedenen Klassen zuordnen. Da das Netz aber eine Klassifikation in von Experten vorgegebene Klassen vornehmen soll, eignen sich die Netze mit einer überwachten Lernmethode besser, da die Häufungen von Daten einer Klasse aufgrund der kontinuierlichen Meßgrößen nicht mit den Klassen übereinstimmen muß.

Bei der Benutzung der Netze lassen sich zwei unterschiedliche Phasen ausmachen: zum einen die eigentliche Anwendung des fertigen Klassifikators, der sogenannten Klassifikationsphase, in der das Netz den aktuellen Anlagenstatus erkennen soll, zum anderen die vorher benötigten Lernphase. Während dieser Lernphase werden dem mit Lehrer lernenden Klassifikator sowohl ein Anlagenzustand, beschrieben durch einen Merkmalsvektor, als auch das gewünschte Klassifikationsergebnis vorgegeben. Mittels

seines Lernverfahrens und der meist iterativen Wiederholung zahlreicher Beispiele (Muster) adaptiert der Klassifikator seine Struktur so, daß er die geforderte Aufgabe lösen kann (Kap. 3.1).

Zur Lösung der Klassifikationsaufgabe kommen u.a. die folgenden drei unterschiedlichen Netztypen in Frage:

- nearest neighbor-Netze (NNN)
Dieser Netztyp basiert auf einem einfachen Prinzip: er speichert alle Lern-
daten, und sucht während der Klassifikationsphase einfach denjenigen
Lerndatensatz, der zum aktuellen Satz am ähnlichsten ist. Trotz des sehr
einfachen Verfahrens, das genaugenommen auf keinem neuronalen Hinter-
grund basiert, lassen sich oft sehr gute Ergebnisse erzielen. Nachteilig ist,
daß für eine Klassifikation grundsätzlich alle Lerndaten vollständig durchsucht
werden müssen, was zu langen Klassifikationszeiten führen kann. Das Netz
ist nicht in der Lage zu generalisieren. Alle Lerndaten bleiben gespeichert;
dies bedingt einen großen Speicherplatzbedarf. In praktischen Anwendungen
ist dieser Netztyp daher kaum zu finden, auch wenn die Lernzeit sehr gering
ist.
- multi-layer-perceptron Netze (MLPN)
MLPN weisen eine dem Gehirn ähnliche Struktur auf: einfache Verarbei-
tungseinheiten (vergleichbar den Neuronen) sind mittels gewichteter Verbin-
dungen hochgradig vernetzt. Während der Lernphase werden die angebote-
nen Lerndaten nicht auswendig gelernt, sondern eine in den Daten enthalte-
ne Systematik gesucht (Gradientenabstiegsverfahren). Dies führt letztlich
auch zu einer guten Generalisierung. Jedoch müssen dazu die Lerndaten
wiederholt dem Netz präsentiert werden, was eine längere Lernzeit nach sich
zieht.
- radial-basis-function Netze (RBFN)
Die RBFN sind eine neuere Entwicklung, die auf den MLPN basiert. Durch
geänderte Verarbeitungseinheiten konnte der komplizierte Lernalgorithmus
des MLPN vereinfacht und wesentlich schneller gemacht werden. Als Folge
dessen haben sich allerdings die Generalisierungseigenschaften, insbeson-
dere in stark von den Lerndaten abweichenden Fällen, verschlechtert.

Während die Klassifikationszeit beim NNN von der Anzahl der Lerndaten abhängt, ist sie sowohl beim MLPN als auch beim RBFN für ein bestimmtes Netz immer konstant, weil die Struktur und damit die Anzahl der Neuronen während der Lernphase nicht geändert werden, sondern lediglich die Gewichtung einzelner Verbindungen. Um letztlich eine Echtzeitklassifizierung zu ermöglichen, muß die Klassifikationszeit eines Netztypes konstant sein. Diese Anforderung erfüllt das NNN jedoch nicht. Aufgrund der zu erwartenden geringen Netzgröße und dem Einsatz einer Workstation fällt die kürzere Trainingszeit der RBFN kaum ins Gewicht, so daß die besseren Generalisierungseigenschaften des MLPN ausschlaggebend für die Wahl der MLPN waren.

Zur Verwendung kamen dreischichtige (input, hidden, output) MLPN mit Backpropagation-Lernregel und Momententerm. Die Neuronen berechnen die gewichtete Summe ihrer Eingänge und verwenden die sigmoide Funktion als Transferfunktion. Das Netz war zwischen aufeinanderfolgenden Schichten stets vollständig vernetzt. Während des Lernprozesses wurden die Lernparameter (Lernrate, Momentum) kontrolliert und manuell angepaßt. In der Lernphase waren für die Netze 50-100 Lernepochen ausreichend, in denen die einzelnen Datensätze in zufälliger Reihenfolge präsentiert wurden.

Der Wertebereich der Eingangsneuronen wurde durch Normierung der Merkmale (siehe Kap. 4.1) auf den Bereich 0 bis 1 beschränkt. Die Aktivität der Neuronen der Ausgangsschicht, im weiteren mit Klassenzugehörigkeit bezeichnet, konnte die Werte 0 bis 1 annehmen, wobei in der Trainingsphase für eine aktive Klasse der Wert 1 und für eine inaktive Klasse der Wert 0 eingesetzt wurde.

3.6.2 Fuzzy-Logik

Fuzzy-Logik beschreibt eine wissensbasierte Methodik, mit der unscharfe Informationen und unscharfes, unvollständiges und z. T. widersprüchliches Expertenwissen über Zusammenhänge zur Unterstützung von Entscheidungsprozessen des Menschen und zur Lösung von Steueraufgaben auf verschiedenen Hierarchien rechnergestützt erfaßt, verarbeitet und genutzt werden kann.

In der Fuzzy-Theorie werden zwei methodische Linien unterschieden:

- Die regelbasierte Beschreibung, d. h. die Fuzzy-Logik im engeren Sinn,
- die Pattern- oder Musterbeschreibung, die sich aus den Verfahren der automatischen Strukturbildung (Clusterung), gekoppelt mit der Theorie der Fuzzy-Sets entwickelt hat.

Die Fuzzy-Logik besitzt Vorteile bei der vorrangigen Nutzung von Expertenwissen für den Aufbau eines Entscheidungsmodells oder Klassifikators und findet in der Form von Fuzzy-Reglern ein weites Einsatzfeld in der Steuer- und Regelungstechnik.

Bei der Fuzzy-Pattern-Klassifikation erfolgt die Problemmodellierung in einem mehrdimensionalen Raum, der von den signifikanten Merkmalen aufgespannt wird. Diese der Klassifikation dienenden Merkmale, Attribute, Kenngrößen oder Parameter können unmittelbar aus Meßsignalen hervorgehen oder aus diesen mittels mathematischer Verfahren abgeleitet werden. Sie dienen im Zusammenhang mit der automatischen Strukturbildung zur Parametrierung vordefinierter parametrischer Zugehörigkeitsfunktionen. Dieser Ablauf kann mit dem Trainieren eines neuronalen Netzes verglichen werden.

Im Fall des in dieser Arbeit benutzten PC-Tool "microFUCS" haben die parametrischen Zugehörigkeitsfunktionen die Form von Potentialfunktionen entsprechend Gleichung (1)

$$\mu_k(x_j) = \frac{1}{1 + \left| \frac{x_j - x_{ik}}{c_{ik\pm}} \right|^{d_{ik\pm}}}, \quad (1)$$

wobei gilt

- μ_k Zugehörigkeit des Merkmals x_j zur Klasse k
- x_{ik} Schwerpunkt des Merkmals x_i der Klasse k
- $c_{ik\pm}$ "Abstand" der linken (-) und rechten (+) Grenze vom Schwerpunkt x_{ik}
- $d_{ik\pm}$ beschreibt den Abfall der Zugehörigkeitsfunktionen links (-) und rechts (+) vom Schwerpunkt.

Aus den Zugehörigkeitsfunktionen, die für alle Merkmale und alle Klassen aus den Lernmustern erzeugt werden, ergibt sich die Zugehörigkeit eines Merkmalsvektors \underline{X} zu einer Klasse k , auch Sympathie genannt, nach Gleichung (2)

$$\mu_k(\underline{X}) = \frac{1}{1 + \sum_{i=1}^N \left| \frac{x_i - x_{ik}}{c_{ik\pm}} \right|^{d_{ik\pm}}}, \quad (2)$$

Alle Sympathiewerte bilden den Sympathievektor, der alle Zugehörigkeiten eines Merkmalsvektors \underline{X} zu allen definierten Klassen enthält.

Für die praktische Nutzung des Klassifikationsergebnisses (Sympathievektor) werden vom Nutzer Bewertungskriterien formuliert, z. B. in Form von Sympathieschwellen, oder der Sympathievektor wird durch Defuzzifizierung in physikalische Größen umgewandelt und danach bewertet.

Die Genauigkeit oder Zuverlässigkeit des Klassifikationsergebnisses läßt sich nach der Defuzzifizierung für einen einzelnen Merkmalsvektor nicht angeben, wenn nicht auch eine Bewertung der absoluten Sympathiewerte innerhalb des Merkmalsvektors erfolgt ist, weil die Defuzzifizierung, speziell bei der Schwerpunktbildung, nur relative Unterschiede zwischen den Sympathiewerten auswertet. Die Güte von solchen Ergebnissen kann nur durch Wiederholungsmessungen über statistische Verfahren und durch Trendanalyse bewertet werden. Dieses Verfahren bietet sich besonders für on-line Klassifikationen an.

Für die Zuordnung (Klassifikation) eines Merkmalsvektors zu einer Klasse berücksichtigt microFUCS bei der Analyse des Sympathievektors Gl. (2) drei Kriterien:

1. Der Merkmalsvektor wird als nicht klassifizierbar abgewiesen, wenn ein minimaler Sympathiewert S_0 (Identifikationsschwelle) von keinem der Sympathiewerte

des Sympathievektors überschritten wird. ($\mu_k(\underline{x}) < S_o$)

2. Das Produkt aus maximaler Sympathie und einem vorgegebenen Identifikationsabstand A ist größer oder gleich dem zweiten Sympathiemaximum.

$$(S_{\max_1} * A) \geq S_{\max_2} \quad (3)$$

wobei gilt $0 < A \leq 1$

$$S_{\max_1} = \max_k \mu_k(\underline{x})$$

$$S_{\max_2} = \max_{k \neq \max_1} \mu_k(\underline{x})$$

In diesem Fall wird der Merkmalsvektor "eindeutig" der Klasse \max_1 zugeordnet.

3. Für $(S_{\max_1} * A) < S_{\max_2}$ (4)

wird der Merkmalsvektor als "riskant" zur Klasse \max_1 zugeordnet.

Zur Früherkennung gefährlicher Betriebszustände wurde nur die Fuzzy-Pattern-Klassifikation untersucht, weil bei diesem Verfahren der Klassifikator analog zum neuronalen Netz durch Training mit Lernmustern gebildet werden kann. Der Fuzzy-Pattern-Klassifikator ist von seinen Ankoppelbedingungen an die Merkmalsgewinnung, der Darstellung und der Weiterverarbeitung der Klassifikationsergebnisse mit neuronalen Netzen austauschbar. Dabei sind allerdings einige spezifische Einschränkungen zu berücksichtigen:

1. Die Klassenbildung erfolgt clusterorientiert bezüglich jedes Merkmales.
2. Jedes Trainingsmuster darf nur einer Klasse zugeordnet werden. Training mit Mustern, die Mehrfachfehlern repräsentieren, ist nicht möglich.
3. Es können nur diskrete Klassen angelernt werden. Kontinuierliche Klassifizierungsvorgaben müssen in mehrere Klassen aufgespalten werden. Nach erfolgter Klassifikation kann auf dem Weg der Defuzzifizierung wieder ein kontinuierliches Klassifikationsergebnis erzeugt werden.

3.6.3 Tensororientierte Klassifikation

Unter tensororientierter Klassifikation (eine Arbeitsbezeichnung) wird ein Verfahren zur

Objekt- bzw. Mustererkennung verstanden, das auf einer nichtlinearen, im Sinne eines tensoriellen Gütekriteriums optimalen Metrik beruht. Das Verfahren arbeitet allerdings nicht mit Tensoren (ist nur tensor"orientiert"), sondern vergleicht das jeweils zu klassifizierende (unbekannte) Muster unmittelbar mit den Mustern einer Stichprobe aus vorklassifizierten (Referenz-)Mustern. Die Wirkungsweise des Verfahrens ist dadurch besonders einfach und durchsichtig.

Aus den gefundenen Ähnlichkeiten zwischen dem unbekanntem Muster und den Referenzmustern wird anhand der Metrik auf die Klassenzugehörigkeit des unbekanntem Musters geschlossen. Aus diesem vergleichsweise einfachen Grundprinzip resultiert eine - insbesondere für sicherheitsrelevante Problemstellungen bedeutsame - Transparenz und Nachvollziehbarkeit von Erkennungen. So ist es u.a. möglich, die Ursachen von Falschkennungen hinsichtlich des verantwortlichen Merkmals zu lokalisieren und gezielt (und ohne eine eventuell unbemerkte Entstehung neuer Fehlerquellen) zu beseitigen.

Eine ausführliche Darstellung zur Motivation des tensororientierten Verfahrens, zu seinen mathematischen Grundlagen, zur Extraktion klassenrelevanter Merkmale anhand der statistischen Informationstheorie sowie zur Signalerkennung am betrachteten chemischen Prozeß findet sich in [hopp98].

In diesem Abschnitt werden die wesentlichen Verfahrensschritte in knapper algorithmischer Form aber ergänzt durch einfache veranschaulichende Beispiele angegeben. Im Kapitel 6 folgen dann in kompakter Darstellung die wesentlichen Ergebnisse zur Signalerkennung am chemischen Prozeß.

Vorausgesetzt werden binärwertige Merkmale $x_n \in \{0,1\}$, $n \in \{1,2,\dots,N\}$, N : Anzahl der Merkmale. Der Übersichtlichkeit halber werden die Merkmale unbekannter Muster mit u_n bezeichnet. Ein Merkmalswert 1/0 drückt rein qualitativ aus, ob das betrachtete Objekt (Objekt hier: Gesamtheit Signale aus dem chemischen Prozeß) eine bestimmte Eigenschaft aufweisen/nicht aufweisen. Quantitäten können an das binäre Grundschema angepaßt werden, z.B. ein Signalverlauf per Zeitdiskretisierung und Wertquantisierung. Ein Merkmalswert drückt dann aus, daß ein Signal durch ein bestimmtes Zeit/Wert-Intervall verläuft.

Klassenzugehörigkeiten bzw. die Elemente des Klassencodes y_k ($k \in \{1,2,\dots,K\}$, K : Anzahl der Klassen) werden ebenfalls binär ausgedrückt. Die Gesamtheit der Merkmale und - soweit vorhanden - des Klassencodes eines Objektes bilden ein Muster. Für die binären Muster werden zwei Darstellungsformen verwendet:

- (N+K)-dimensionaler Vektor. In einem Referenzvektor drücken die Elemente $y_k=1/0$ Klassen-Zugehörigkeit/Nichtzugehörigkeit aus, während in einem unbekanntem Vektor generell $y_k=0 \forall k$ ist, was hierbei die unbekanntem Klassenzugehörigkeit ausdrückt.
- Mengendarstellung: Zur (Merkmals-)Menge gehören diejenigen Merkmale und Elemente des Klassencodes, die besetzt (gleich Eins) sind.

Die Merkmale und Klassencodes der Referenzmuster werden zusätzlich mit m indiziert, $m \in \{1, 2, \dots, M\}$, M : Anzahl der Referenzmuster.

Beispiel 1: Mit $N=7$ Merkmalen und $K=2$ Klassen sind alle Merkmalsvektoren $(N+K)=9$ -dimensional. Beim Referenzvektor $\underline{x}_m = (x_{m1}, \dots, x_{m7}, y_{m1}, y_{m2})^T$ gehört zur Realisierung $\underline{x}_m = (010110110)^T$ die Merkmalsmenge $\{x_m\} = \{x_{m2}, x_{m4}, x_{m5}, x_{m7}, y_{m1}\}$. Bei unbekanntem Muster sind die Elemente des Klassencodes nicht besetzt: $\underline{u} = (u_1, \dots, u_7, 0, 0)^T$. Die Merkmalsmenge eines unbekanntem Musters $\{u\}$ enthält deswegen keine Klassenbezeichnungen.

Algorithmus für die Klassifizierung:

1. Bildung aller Mengendurchschnitte zwischen der Merkmalsmenge des unbekanntem Musters und der Merkmalsmenge jedes einzelnen Referenzmusters: $\{u\} \cap \{x_m\} \forall m$. Die Schnittmengen haben Elementezahlen $g_m \leq N$.

Beispiel 2: Mit $\{x_m\}$ aus Beispiel 1 und $\{u\} = \{u_2, u_5, u_6\}$ bzw. $\underline{u} = (010011000)^T$ ergibt sich die $g_m=2$ -elementige Schnittmenge $\{u\} \cap \{x_m\} = \{x_{m2}, x_{m5}\}$ bzw. vektoriell ausgedrückt $(010010000)^T$.

2. Jeder Klasse y_k , die im Referenzvektor \underline{x}_m mit $y_{mk}=1$ codiert ist, wird anhand der Elementezahl g_m das (Klassen-)Gewicht

$$G_m = G_m(y_{mk}=1) = 2^{g_m} - 1 \quad (1)$$

zugeordnet, $G_m \in \{0, 1, 2, \dots, 2^N - 1\}$; andernfalls ist $G_m(y_{mk}=0) = 0$.

Beispiel 3: Im Referenzvektor \underline{x}_m aus Beispiel 1 ist $y_{m1}=1$, $y_{m2}=0$. Folglich ergibt sich nach Gl.(1) mit $g_m=2$ (s. Beispiel 2) das Klassengewicht $G_m(y_{m1}) = 2^2 - 1 = 3$; des weiteren ist $G_m(y_{m2}) = 0$.

3. Die nach Gl.(1) bestimmten Klassengewichte $G_m(y_{mk})$ werden über alle Referenzmuster summiert: $\sum_{m=1}^M G_m(y_{mk}) \forall k$. Die entstehende K -elementige Verteilung der resultierenden Klassengewichte bildet das Klassifizierungsergebnis.

Anmerkung:

Bei disjunkten Klassen (zu jedem Referenzmuster gehört nicht mehr als eine Klasse) ist es möglich und zweckmäßig, die erhaltene Gewichtsverteilung mit der Summe aller erhaltenen Gewichte zu normieren. Die normierten Klassengewichte sind dann als Wahrscheinlichkeiten für die Klassenzugehörigkeit des unbekanntem Objektes interpretierbar.

Die Bedeutung der exponentiellen Klassenwichtung nach Gl.(1) ist wie folgt: Die Klassenzugehörigkeit desjenigen Referenzvektors \underline{x}_m , der die meisten Merkmalsübereinstimmungen mit dem unbekanntem Vektor aufweist, dominiert die Gewichtsverteilung im Klassifizierungsergebnis. Diese Dominanz ist im wesentlichen von der Differenz der g_m -Werte bestimmt, unwesentlich nur von deren Absolutwert.

Beispiel 4: Seien g_a und g_b die Elementezahlen zweier Schnittmengen gemäß Punkt 1 des obigen Algorithmus. Für $g_a > g_b$ (im Klassifizierungsergebnis dominiert die Klassenzuordnung des a-ten Referenzmuster gegenüber derjenigen des b-ten Referenzmusters) ist das Verhältnis der Klassengewichte

$$G_a/G_b = (2^{g_a} - 1)/(2^{g_b} - 1) \approx 2^{g_a}/2^{g_b} = 2^{g_a - g_b},$$

also näherungsweise nur von der Differenz $g_a - g_b$ abhängig.

Wegen dieser Metrik kann die Klassenzugehörigkeit eines unbekanntem Musters auch dann sicher nachgewiesen werden, wenn die betreffende Klasse durch viel weniger Referenzmuster als andere Klassen repräsentiert ist; entscheidend für eine sichere Klassifizierung ist eine - eventuell nur wenig - größere Anzahl übereinstimmender Merkmale. Dies entschärft z.B. das praxistypische Problem, daß über Gefahrensituationen viel weniger Datenmaterial als über den Normalbetrieb verfügbar ist.

Das folgende Beispiel veranschaulicht die Wirkungsweise des Klassifizierungsverfahrens insgesamt.

Beispiel 5: Gegeben sind Referenzvektoren x_m ($m \in \{1, 2, \dots, M=4\}$) mit den Merkmalen x_{mn} ($n \in \{1, 2, \dots, N=6\}$) und den disjunkten Klassencode-Elementen y_{mk} ($k \in \{1, 2, \dots, K=M\}$), außerdem zwei unbekannte Vektoren u mit je $N=6$ Merkmalen u_n und unbesetztem (da unbekanntem) Klassencode, s. nachfolgendes Schema (die Vektoren entsprechen den Zeilen).

	x_{m1}	x_{m2}	x_{m3}	x_{m4}	x_{m5}	x_{m6}	y_{m1}	y_{m2}	y_{m3}	y_{m4}
$m=1$	0	1	1	0	1	1	1	0	0	0
2	0	1	0	0	1	0	0	1	0	0
3	1	0	0	1	1	0	0	0	1	0
4	0	1	0	1	1	1	0	0	0	1

	u_1	u_2	u_3	u_4	u_5	u_6				
a)	1	0	0	0	1	1	0	0	0	0
b)	1	0	1	0	1	1	0	0	0	0

Nach dem obigen Algorithmus ergeben sich für die Fälle a) und b) folgende Schnittmengen $\{u\} \cap \{x_m\}$, Elementanzahlen g_m , Klassengewichte G_m und normierte Klassifizierungsergebnisse y_m (fett hervorgehoben):

a)	$\{X_m\}$	$\{u\}$	$\{u\} \cap \{X_m\}$	g_m	G_m	y_m (normiert)
m=1	$\{X_2, X_3, X_5, X_6, Y_1\}$	$\{u_1, u_5, u_6\}$	$\{X_5, X_6\}$	2	$2^2 - 1 = 3$	0,3
2	$\{X_2, X_5, Y_2\}$	"	$\{X_5\}$	1	$2^1 - 1 = 1$	0,1
3	$\{X_1, X_4, X_5, Y_3\}$	"	$\{X_1, X_5\}$	2	$2^2 - 1 = 3$	0,3
4	$\{X_2, X_4, X_5, X_6, Y_4\}$	"	$\{X_5, X_6\}$	2	$2^2 - 1 = 3$	0,3

b)	$\{X_m\}$	$\{u\}$	$\{u\} \cap \{X_m\}$	g_m	G_m	y_m (normiert)
m=1	$\{X_2, X_3, X_5, X_6, Y_1\}$	$\{u_1, u_3, u_5, u_6\}$	$\{X_3, X_5, X_6\}$	3	$2^3 - 1 = 7$	0,5
2	$\{X_2, X_5, Y_2\}$	"	$\{X_5\}$	1	$2^1 - 1 = 1$	0,071
3	$\{X_1, X_4, X_5, Y_3\}$	"	$\{X_1, X_5\}$	2	$2^2 - 1 = 3$	0,214
4	$\{X_2, X_4, X_5, X_6, Y_4\}$	"	$\{X_5, X_6\}$	2	$2^2 - 1 = 3$	0,214

Aufgrund der exponentiellen Klassenwichtung bewirkt eine zusätzliche Merkmalsübereinstimmung um nur ein Merkmal ($g_m \rightarrow g_m + 1$) mehr als eine Verdoppelung des Klassengewichtes G_m .

4. Identifizierung gefährlicher Betriebszustände mit neuronalen Netzen

Im Rahmen dieser Arbeiten wurde hauptsächlich der Stuttgarter Neuronale Netz Simulator (SNNS, Uni Stuttgart), aber auch NeuralWorks eingesetzt. SNNS konnte auf den SUN-Workstations (Ultra 1, S20 und classic) eingesetzt werden, NeuralWorks auf einer Workstation (SUN S20) und PCs.

4.1 Normierung der Meßgrößen

Neben der Auswahl des Netztyps und der optimalen Netztopologie ist vor allem die Gewinnung geeigneter Merkmale für den Eingangsvektor (Merkmalsvektor) von entscheidender Bedeutung für gute Klassifikationsergebnisse. Sind geeignete Merkmale für die betreffenden Klassen (Betriebszustände) vorhanden, so reduziert sich die Zustandsklassifikation auf eine Lagebestimmung der unbekanntenen Mustervektoren in dem durch das Training unterteilten Merkmalsraum, wie bereits am Beispiel eines zweidimensionalen Merkmalsraumes im Bild 3.1 (in Kapitel 3.1) erläutert wurde.

Doch auch über die gewählte Normierung der Merkmale wird die Güte der Klassifikation mitbestimmt. Eine gute Normierung erleichtert den Lernprozeß und führt zu besseren Ergebnissen, weil zusätzlich zu den reinen Daten Expertenwissen in den Merkmalsvektor eingeht. Das Expertenwissen geht über den benutzten Wertebereich ein, so daß die wichtigen Bereiche des Merkmals hervorgehoben werden bzw. die unwichtigen Bereiche weniger Beachtung finden. Somit wirken sich extreme Störungen in den Signalen nicht überproportional auf das Klassifikationsergebnis aus.

Die Normierung der Merkmale erfolgte stets in das Intervall $[0; 1]$. Auch andere Intervalle sind ohne weiteres möglich, aber die zumeist in den Neuronen benutzte sigmoide Transferfunktion hat diesen Wertebereich und wird daher auch gerne für die Normierung der Eingangsmerkmale verwendet. Die sigmoide Funktion bildet ein unendliches Intervall in den Bereich $[0; 1]$ ab und ist daher für eine Normierung im obigen Sinne geeignet, ohne den Wertebereich des Merkmales zu beschneiden.

Folgende Normierungen wurden bei der Arbeit mit neuronalen Netzen benutzt:

- **Stufenfunktion**
Werte über einer bestimmten Schwelle wurden auf 1 abgebildet, alle anderen auf 0.
Hintergrund: Generierung eines binären Signals aufgrund eines analogen Eingangssignals.
- **lineare Normierung**
Der Definitionsbereich des Merkmales $[\min; \max]$ wurde linear in den Wertebereich $[0,2; 0,8]$ überführt. Werte außerhalb des Definitionsbereiches wurden auf die untere bzw. obere Grenze des Wertebereiches gesetzt.
Hintergrund: Beschränkung des Definitionsbereiches auf ein kleineres Intervall.
- **sigmoide Normierung**
Der gesamte Wertebereich des Merkmales wurde mittels der sigmoiden Funktion in den Wertebereich $[0; 1]$ überführt, so daß das Intervall $[\min; \max]$ auf $[0,2; 0,8]$ abgebildet wurde.
Hintergrund: Abbildung des Definitionsbereiches ohne Einschränkung, wobei jedoch ein Teilintervall auf ein größeres/kleineres Intervall abgebildet werden kann (z.B. um kleine Temperaturschwankungen deutlich abzubilden)
- **prozentuale sigmoide Normierung**
Das gesamte Intervall $[-r; r]$ für ein gegebenes r wird auf 0,5 abgebildet. Das Intervall $[\min; -r]$ wurde sigmoid auf $[0,2; 0,5]$, $[r; \max]$ auf $[0,5; 0,8]$ abgebildet.
Hintergrund: Abbildung des Definitionsbereiches ohne Einschränkung, wobei jedoch ein Teilintervall auf ein größeres/kleineres Intervall abgebildet werden kann. Zusätzlich kann ein gesamtes Intervall im Kern des Definitionsbereiches auf einen Punkt im Wertebereich abgebildet werden (z.B. relative Abweichung der Rührerdrehzahl von einem Sollwert in bestimmten Bereich uninteressant).

Eine Übersicht über die bei den verschiedenen Versuchen tatsächlich benutzten Normierungen findet sich im Anhang A.3.

Bei der Benutzung der verschiedenen Programme zur Simulation der Klassifikatoren mußten die Daten auch in unterschiedliche Formate konvertiert werden. Dazu wurde einerseits ein selbstentwickeltes Programm benutzt, welches über eine Steuerdatei verschiedene Formate lesen, bearbeiten und abspeichern konnte. Andererseits wurden Shell-Skripte und Tools (sed, awk) unter UNIX dazu eingesetzt. Beide Varianten waren auch in der Lage, Normierungen an den Ausgangsdaten vorzunehmen.

4.2 Untersuchungen zur Zustandsklassifikation

Obwohl als Zielstellung eine Gefahren- und Fehlerklassifikation angestrebt wird, werden in diesem Kapitel die Untersuchungen mit den Zustandsklassen

- Temperieren
- Heizen
- Kalibrieren
- Dosieren
- Reaktion
- starke Exothermie
- Fehler am Rührer
- Kühlen
- Feedtemperatur abnormal
- Pumpe schafft Soll nicht
- Fremdförderung
- Fehldosierung

durchgeführt. In diese Klassen wurden die Versuchsverläufe von UMSICHT standardmäßig eingeteilt. Prinzipiell können auch mehrere Klassen gleichzeitig aktiv sein. Die Besonderheit der Zustandsklassifikation ist, daß während des normalen Betriebes verschiedene Zustandsklassen unterschieden werden, wie z.B. Temperieren, Heizen, Kühlen, Kalibrieren usw.

Für die grundlegenden Untersuchungen sind die Klasseneinteilungen nicht allzu wichtig. Die während dieser Voruntersuchungen gemachten Erfahrungen gingen in die spätere Definition der Gefahren- und Fehlerklassen ein.

Da die Daten mit denen die Zustandsklassifikation durchgeführt wurden, zumeist von der in Kapitel 3.3 festgelegten Datenbasis abweichen und sich dadurch auch die Vorverarbeitung unterscheidet, gibt es wesentliche Unterschiede in der Dimension des Merkmalvektors. Auch die Klasseneinteilung hat sich geändert, so daß auch die Ausgangsdimension unterschiedlich groß ist. Eine genaue Auflistung des Merkmalvektors, dessen Normierung und der verwendeten Klassen findet sich deshalb im Anhang A.3.

4.2.1 Zustandsklassifikation mit simulierten Störfällen

Um das Klassifikationsverhalten eines neuronalen Netzes bei verschiedenen Betriebs-

zuständen zu untersuchen, wurden simulierte Reaktionsverläufe von Kühlpannen benutzt. Bei diesen Versuchen fällt die Mantelkühlung während der kontinuierlichen Zudosierung von Essigsäureanhydrid und Methanol (Verhältnis 7:3) zu der im Reaktor bei 50°C vorhandenen äquimolaren Vorlage (1,5 l aus Essigsäureanhydrid und Methanol, inkl. H₂SO₄ als Katalysator) unterschiedlich lange aus. Wie Bild 4.1 zeigt, steigt die Reaktortemperatur infolge der freiwerdenden Reaktionswärme zuerst langsam (Klasse "Dosieren/Reaktion"). Danach folgt ein steiler Temperaturanstieg aufgrund der beschleunigten, exponentiell ansteigenden Reaktionsgeschwindigkeit bei höheren Gemischtemperaturen (Klasse "Exothermie"). Erst wenn die Vorlage im Reaktor vollständig umgesetzt ist, fängt sich die durchgehende Reaktion selbst (Klasse "Fangen"). Dieser Zustand ist am langsamen Temperaturabfall infolge von Wärmeverlusten nach Erreichen der Maximaltemperatur zu erkennen. Die steilen Temperaturabfälle sind durch die wiedereinsetzende Wandkühlung (Klasse "Kühlen") bedingt. Um die Reaktortemperatur nach der Abkühlung wieder auf die Solltemperatur von 50°C zu bringen, muß geheizt (Klasse "Heizen") und temperiert (Klasse "Temperieren") werden.

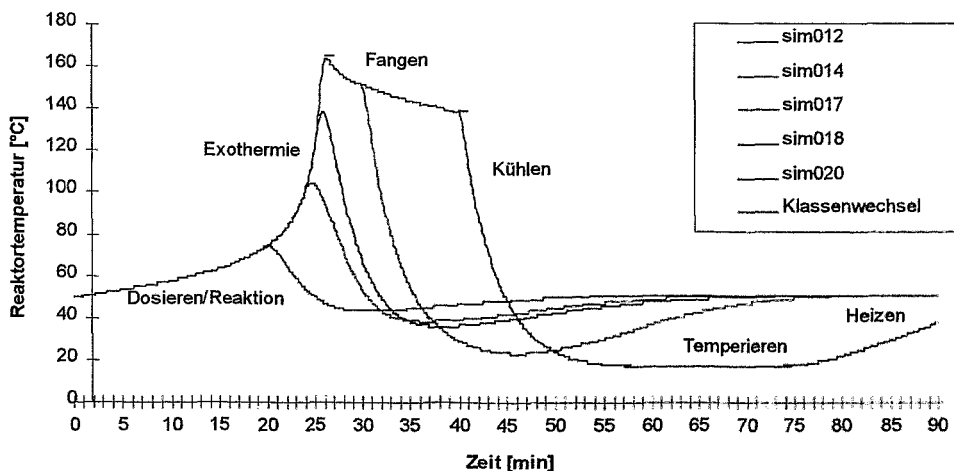


Bild 4.1 Simulierter Verlauf der Reaktortemperatur und Definition der Betriebszustände beim Ausfall (t=2 min) und Wiedereinsetzen der Mantelkühlung nach unterschiedlichen Zeiten (t=20, 24, 25, 28, 40 min).

Der Reaktionsverlauf sim017, bei dem die Kühlung erst nach Erreichen der maximalen Temperatur wieder einsetzt, wurde zum Anlernen von neuronalen Netzen benutzt. Im Bild 4.2 ist das Klassifizierungsverhalten eines Perceptron-Netzes mit 10 verdeckten Neuronen dargestellt, dem die obengenannten 6 Betriebszustände angelernt wurden. Die tatsächlich vorliegenden Klassen sind im unteren Bildteil durch verschiedene Farben gekennzeichnet. Die Ampelfarben grün ("Dosieren/Reaktion"), gelb ("Fangen") und rot ("Exothermie") sollen dabei die Gefährlichkeit der betreffenden Betriebszustände während der Kühlpanne charakterisieren. Die Farben dunkelblau, magenta und hellblau geben die Betriebszustände "Kühlen", "Heizen" bzw. "Temperieren" an. Im oberen Teil von Bild 4.2 ist das Klassifikationsverhalten des mit den Simulations-

daten sim017 trainierten Perceptron-Netzes wiedergegeben. Wie der Vergleich mit den gewünschten Betriebszuständen (unteres verkleinertes Farbdigramm im Bild 4.2) zeigt, werden mit diesem Perceptron-Netz gute Klassifikationseigenschaften bei der Wiedergabe des simulierten Reaktionsverlaufes erzielt. Die Mächtigkeit [%] der jeweiligen Farbschicht entspricht der Klassenzugehörigkeit des vorliegenden Betriebszustandes zu den verschiedenen Zustandsklassen.

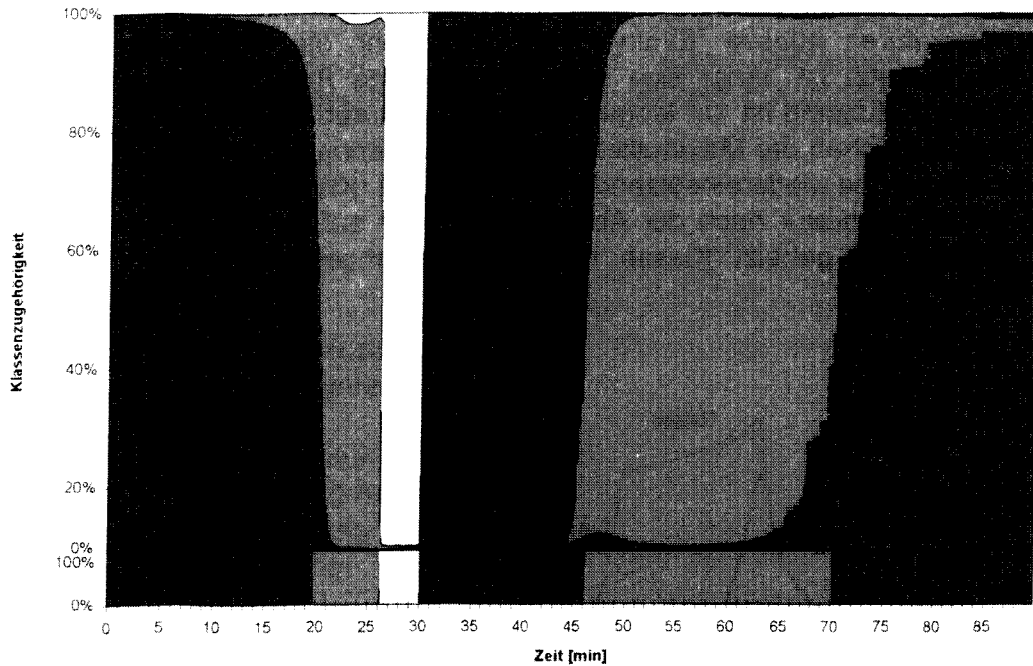


Bild 4.2 Betriebszustandsklassifikation des Perceptron-Netzes (14/10/6) beim simulierten Reaktionsverlauf sim017; der Verlauf der vorgegebenen Betriebszustände ist jeweils im unteren Teil des Bildes im verkleinerten Maßstab dargestellt (Expertenklassifikation).

Dieses Perceptron-Netz kann auch die Datensätze von nichttrainierten Reaktionsverläufen klassifizieren, wie das Bild 4.3 für die Simulationsdaten sim020 (vgl. Bild 4.1) bestätigt. Das neuronale Netz erkennt den dominanten Zustand zwar etwas verzögert, alle Betriebszustände werden aber richtig erkannt. Die geringe Verzögerung resultiert wahrscheinlich aus der benutzten "1-aus-N"-Klassifizierung, die die Daten zu jedem Zeitpunkt immer nur einer Klasse zuordnet. Dies widerspricht teilweise aber den tatsächlichen Gegebenheiten im Reaktionsgefäß, wo zwei Klassen insbesondere im Übergangsbereich gleichzeitig aktiv sein können, wie z. B. die Klassen "Dosierung/Reaktion (grün)" und "Exothermie (rot)" im Bild 4.3.

4.2.2 Zustandsklassifikation realer Versuchsverläufe

Im Laufe der Aufbauarbeiten für den Laborreaktor und der Bestimmung anlagenspezifischer Kenngrößen wurden mehrere einfache Versuchsabläufe durchgeführt, bei

denen noch keine Störfälle aufgeprägt wurden. Am Beispiel des Versuches "V1708" soll hier die prinzipielle Einsatzfähigkeit der neuronalen Netzes mit realen Daten gezeigt werden.

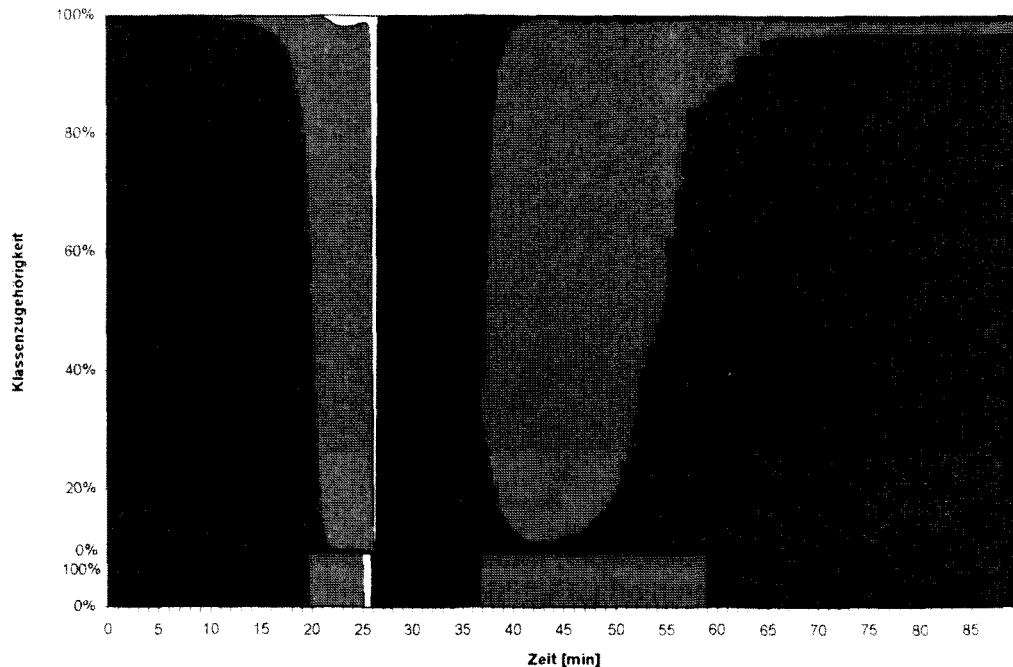


Bild 4.3 Betriebszustandsklassifikation des Perceptron-Netzes (14/10/6) beim nicht-trainierten simulierten Reaktionsverlauf sim020 (Lerndaten sim017).

Bild 4.4 zeigt die Klassifikationsergebnisse für das Betriebsregime eines Semibatchprozesses im Versuchsreaktor. Hier wurde zuerst die Vorlage aus Methanol und Schwefelsäure (Katalysator) durch "Heizen (magenta)", "Temperieren (hellblau)" und "Kalibrieren (braun)" auf die Solltemperatur von 50°C gebracht. Anschließend wurde innerhalb von 60 min Essigsäureanhydrid zudosiert. Durch die beginnende heftige Reaktion stieg die Reaktortemperatur zunächst so schnell an, daß dies als "Exothermie" (rot) klassifiziert wurde. Ein Durchgehen der Reaktion wurde durch eine erhöhte Mantelkühlung vermieden, die die beschleunigte Reaktion abfing (gelb) und einen normalen Reaktionsverlauf ("Dosierung/Reaktion (grün)") gewährleistete. Vor dem Ende der Zudosierung klassifiziert das neuronale Netz den Betriebszustand "Kühlen (dunkelblau)" und "Temperieren (hellblau)", weil infolge der verbrauchten Methanol-Vorlage keine Reaktionswärme mehr erzeugt wurde. Die folgenden Betriebszustände charakterisieren wieder das Einstellen der Solltemperatur des Reaktors. Der Vergleich mit den vorgegebenen Betriebszuständen im unteren Farbdia-gramm (Bild 4.4) beweist, daß ein neuronales Netz prinzipiell in der Lage ist, den echten Reaktionsablauf im Reaktorgemisch zu erkennen, z. B. wenn die Vorlage durch die Reaktion aufgebraucht ist.

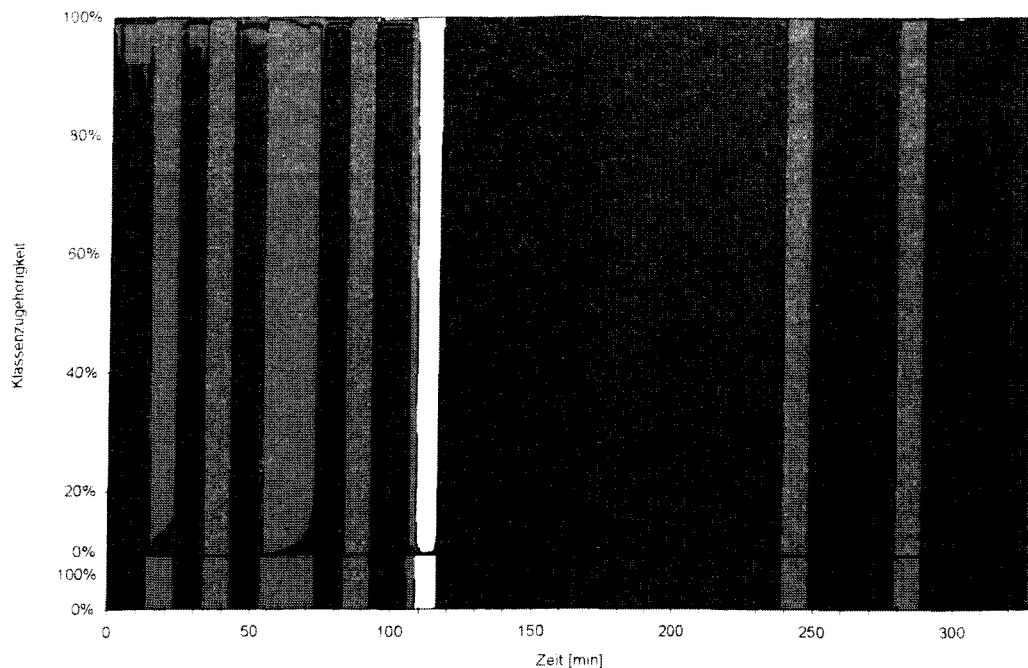


Bild 4.4 Betriebszustandsklassifikation des Perceptron-Netzes (19/15/7) beim gemessenen Reaktionsverlauf V1708.

Da dies ein einzelner Versuch zur Bestimmung von Anlagenkenngrößen war, mußten die Lern- und Testdaten aus diesem Versuch entnommen werden. Es wurde in zeitlicher Reihenfolge abwechselnd jeweils ein Merkmalsvektor den Lerndaten und der nächste den Testdaten zugeordnet. Lediglich aus der Klasse "Temperieren" wurde aufgrund der großen Anzahl der Vektoren nur jeder dritte in die Lerndaten aufgenommen. Das Bild 4.4 zeigt die Netzklassifikation des kompletten Versuchsablaufes, d.h. sowohl gelernte (Reklassifikation) als auch unbekannte (Klassifikation) Merkmalsvektoren wurden vom Netz abwechselnd zugeordnet.

4.2.3 Einfluß verschiedener Solltemperaturen auf die Generalisierung

Zur Überprüfung der vorgenommenen Temperaturnormierung wurden Daten von zwei Versuchen benutzt. In beiden Versuchen gab es einen 10 minütigen Rührerausfall zu Beginn der 20 minütigen Dosierung, so daß es nach dem Wiederanstellen des Rührers zu einer starken Exothermie kam. Die Versuche unterschieden sich nur in der vorgegebenen Solltemperatur. Während der Versuch mit der Solltemperatur 40°C (sz-fzr04) komplett trainiert wurde, wurde der Versuch mit 28°C (sz-fzr02) klassifiziert. Obwohl sich die Exothermie aufgrund der Solltemperatur unterschiedlich stark auswirken muß, konnte das neuronale Netz mittels der Temperaturnormierung die Versuche richtig klassifizieren. In den Bildern 4.5 und 4.6 ist die Expertenvorgabe und die Klassifikation des Netzes für den nichttrainierten Versuch sz-fzr02 zu sehen.

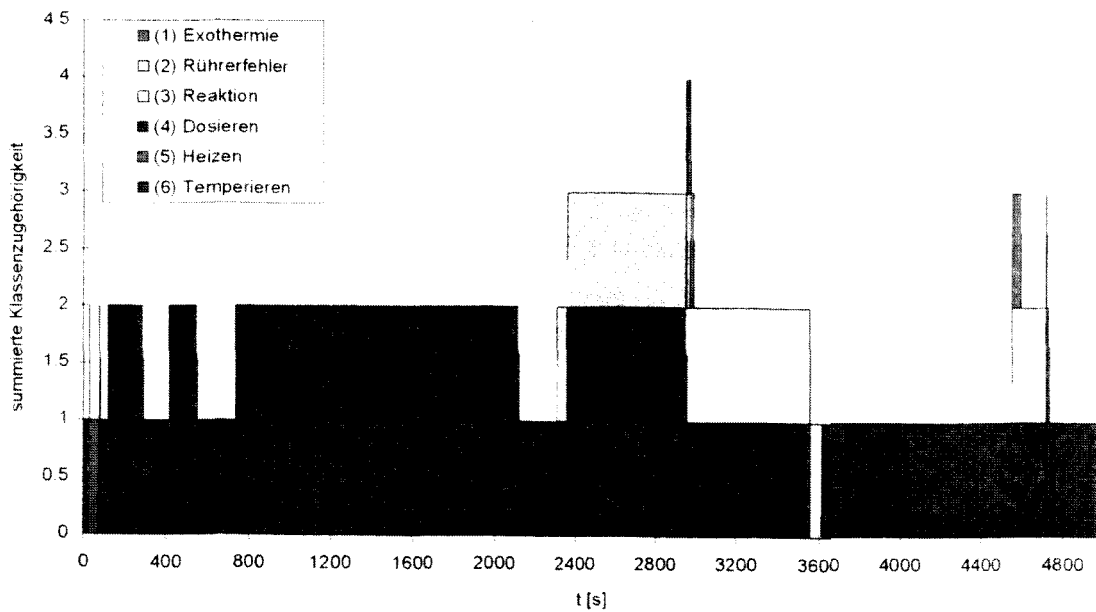


Bild 4.5 Vorgegebene Betriebszustände (Expertenklassifikation) einer Semibatch-Reaktion mit Rührerfehler (sz-fzr02, Solltemperatur $T_j=28^\circ\text{C}$).

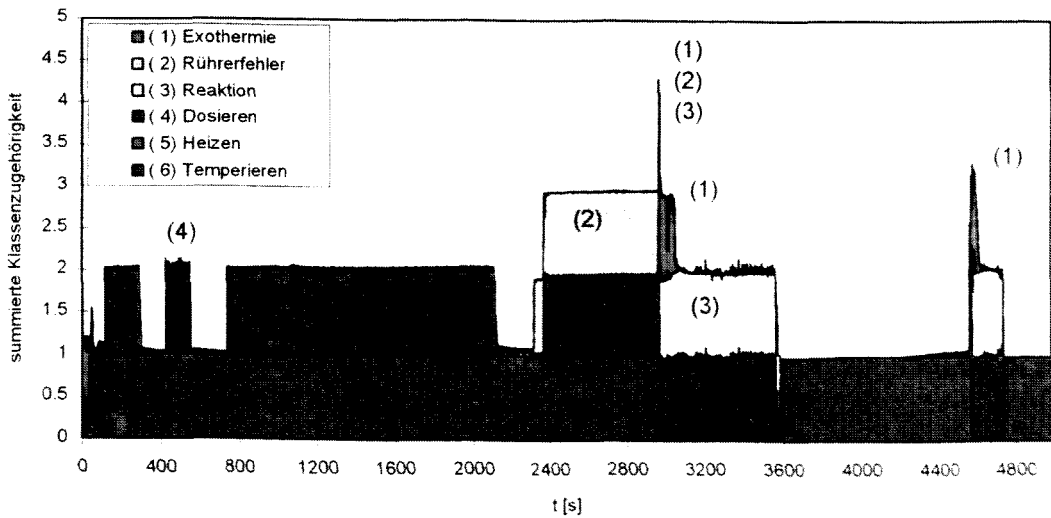


Bild 4.6 Zustandsklassifikation eines nichttrainierten Semibatch-Reaktionsverlaufes mit Rührerfehler (sz-fzr02, Solltemperatur $T_j=28^\circ\text{C}$) mit Hilfe eines Perceptron-Netzes, das mit den Daten des Versuchsablaufes sz-fzr04 (Solltemperatur $T_j=40^\circ\text{C}$) trainiert wurde.

Lediglich die Dosierung des Katalysators wird nicht durchgehend gut klassifiziert. Im Bild 4.7 ist ein Ausschnitt zu sehen, anhand dessen zu erkennen ist, daß der schwarze Bereich eigentlich ein Pulsieren in der Aktivität der Dosierungsklasse ist. Dies kann

darauf zurückgeführt werden, daß die geringe Menge des Katalysators mit einer so geringen Dosierrate zugespeist wird, daß das Waagesignal sich nicht immer zwischen zwei Messungen verändert. Somit kann das Netz, das sich offensichtlich an den Änderungen des Waagesignals orientiert, diese Klasse nicht optimal erkennen.

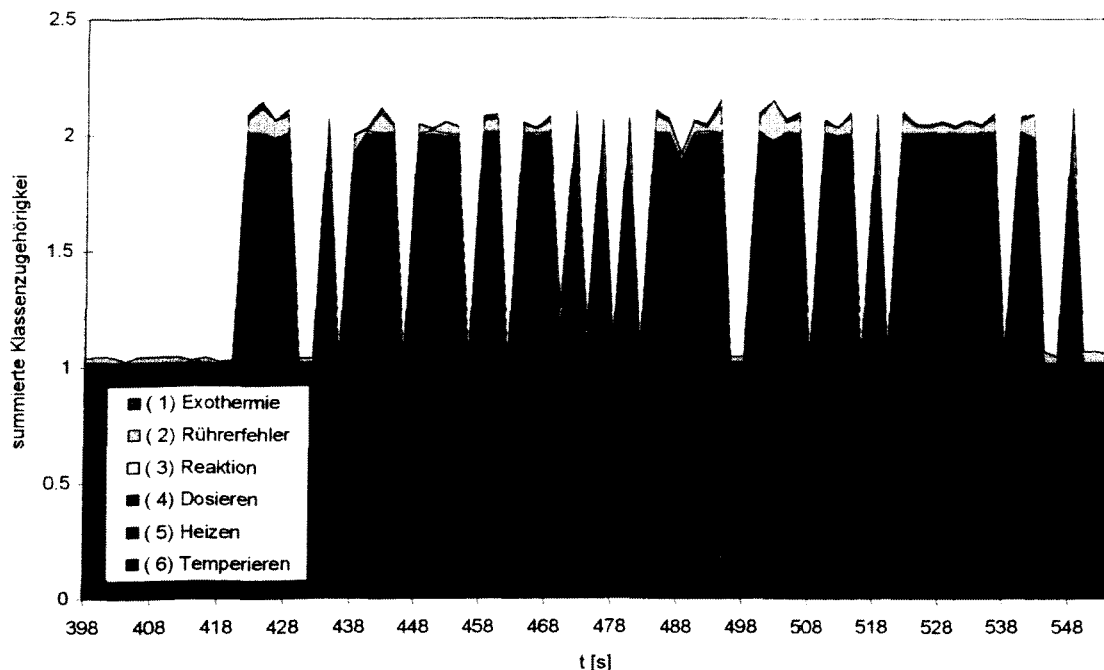


Bild 4.7 Gezoomte Zustandsklassifikation der Katalysatordosierung von Bild 4.6 (420 bis 550 s).

4.2.4 Untersuchungen zur Generalisierung

Um auch mehrere, gleichzeitig auftretende Zustandsklassen (Betriebszustände) korrekt erkennen zu können, wurde die Struktur des neuronalen Netzes modifiziert und die summierte Klassenzugehörigkeit als Klassifikationsergebnis eingeführt. Dadurch kann jede Klasse mit einer maximalen Zugehörigkeit von 1 auftreten (Bild 4.5).

Bild 4.6 zeigt, daß aufgrund seiner Generalisierungsfähigkeit das Perceptron-Netz sogar nichttrainierte Reaktionsverläufe mit mehreren, gleichzeitig auftretenden Zustandsklassen richtig klassifizieren kann [hess97b].

Aufgrund des Gefahrenpotentials bei der Durchführung von Versuchen mit Störungen, aber auch wegen der Anzahl möglicher Störfallszenarien, wäre eine Verwendung von numerisch simulierten Daten für das Training eines neuronalen Netzes vorteilhaft.

Deshalb wurde die Generalisierungseigenschaft eines neuronalen Netzes untersucht,

welches mit einem simulierten Versuchsverlauf trainiert worden war, indem es reale Versuche klassifizieren mußte [hess97a]. Simulation und realer Versuch haben neben der unterschiedlichen Solltemperatur T_j auch im Reaktionsverlauf etwas unterschiedliche Temperaturgänge, obwohl die Versuchsdurchführung in allen anderen Randbedingungen identisch waren. Dies liegt an dem im Simulator verwendeten Punktmodell, das die realen Verhältnisse nicht ausreichend beschreibt. Für das Training des neuronalen Netzes ist dies aber letztlich nicht entscheidend, da die Klassen nicht aufgrund des Versuchsablaufes sondern anhand von Betriebsbedingungen (Tabelle 2, Anhang A.3) festgelegt wurden.

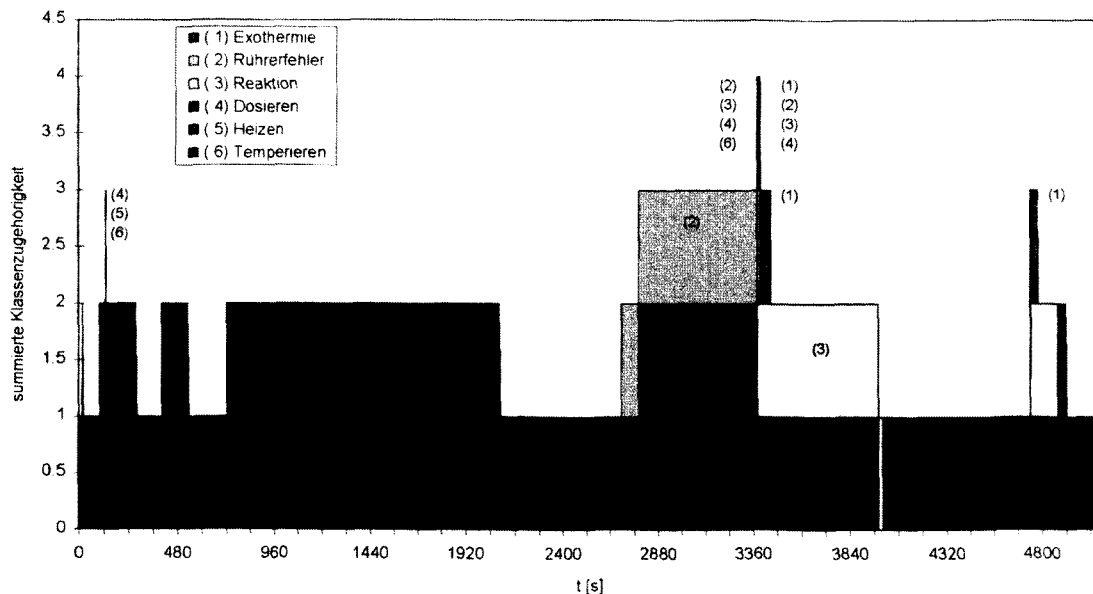


Bild 4.8 Expertenklassifikation (Vorgabe) des Reaktionsverlaufes sz-fzr04 (Solltemperatur $T_j=40^{\circ}\text{C}$).

Aufgrund ständiger Schwankungen im Füllstandssignal im realen Versuch konnte das neuronale Netz durch Training alleine mit einem simulierten Versuchsverlauf keine befriedigenden Ergebnisse bei der Klassifikation von realen Versuchen erzielen. Deutlich bessere Ergebnisse konnten aber erreicht werden, nachdem die problematischen Signale - Füllstand, berechnetes Reaktorvolumen und deren relativen Änderungen - dem neuronalen Netz nicht mehr angeboten wurden. Trainiert wurde ein simulierter Reaktionsverlauf (fzr2-sim, Solltemperatur 28°) und klassifiziert wurde der reale Versuch sz-fzr04. Im Bild 4.8 ist die Expertenvorgabe und im Bild 4.9 die Netz-Klassifikation zu sehen, jeweils für den Versuch sz-fzr04. Die in den Ergebnissen der realen Versuche während der Dosierungen vorkommenden schwarzen Bereiche sind Schwankungen in der klassifizierten Zugehörigkeit um ca. 30%. Diese sind darin begründet, daß die Pumpen letztlich stoßweise dosieren (vgl. Kapitel 4.2.3).

Der Vergleich von Bild 4.8 und 4.9 zeigt, daß die beiden Klassen 'Heizen' und 'Exothermie' von dem Netz nicht klassifiziert werden konnten. Bei der Exothermie ist dies

ganz sicher durch eine zu geringe Anzahl von Mustern für diese Klasse in der Simulation zu erklären, die aus dem Temperaturunterschied zwischen Simulation und realem Versuch herrührt (s.o.). Beim Heizen kann dies auch die Erklärung sein, da wegen der Fehlerminimierung über das Backpropagation-Verfahren beim Training eine Klasse mit wenigen Merkmalsvektoren (Mustern) prinzipiell einen geringeren Einfluß auf den Gesamtfehler hat und somit durch den Lernalgorithmus (Gradientenabstiegsverfahren) benachteiligt gelernt wird.

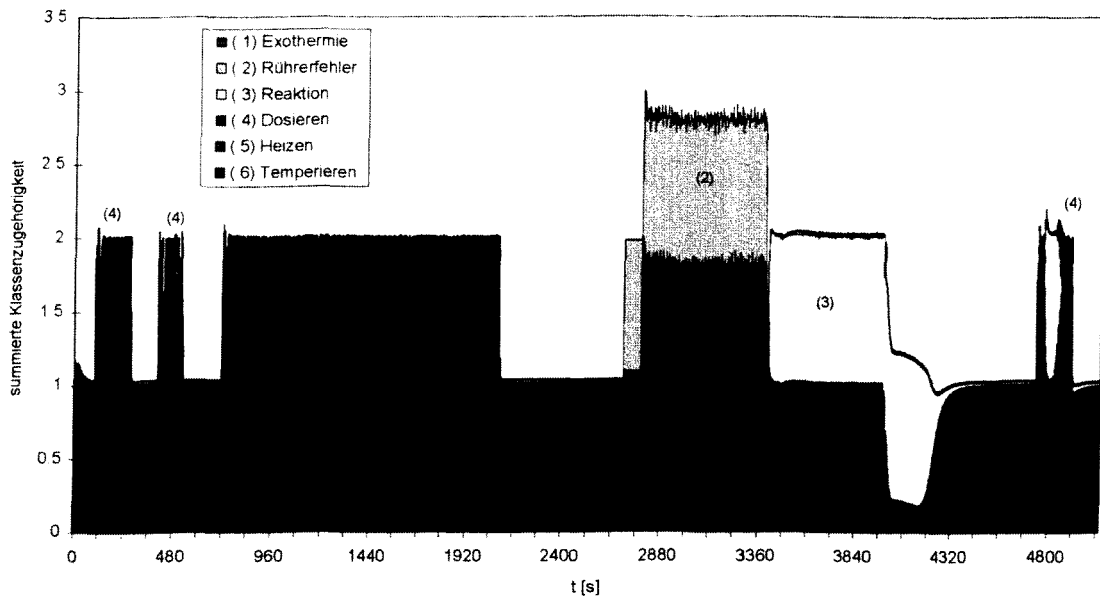


Bild 4.9 Klassifikation des nichttrainierten Reaktionsverlaufes sz-fzr04 ($T_j=40^\circ\text{C}$) mit einem Perceptron-Netz, das mit simulierten Daten fzr2-sim ($T_j=28^\circ\text{C}$) trainiert wurde.

Trotz der voneinander abweichenden Daten für einen festgelegten Versuchsablauf konnte gezeigt werden, daß sich Simulationen zum Anlernen eines neuronalen Netzes eignen. Deutliche Verbesserungen sind zu erwarten, wenn die Lerndaten nicht nur, wie bereits erwähnt, annähernd gleiche Datenmengen pro Klasse enthielten, sondern auch die simulierten Daten durch einige experimentelle Daten ergänzt werden. Dadurch erhält das neuronale Netz die Möglichkeit, systematische Abweichungen zwischen Simulation und realem Versuch zu generalisieren.

4.3 Fehler- und Gefahrenklassifikation bei Semibatch-Prozeßführung

Wie aus Kapitel 4.2.4 hervorgeht, ist die Klassifikation des neuronalen Netzes in die Zustandsklassen sehr gut, sowohl für bekannte als auch unbekannte Daten. Die benutzten Klassen spiegeln eine Zustandsbeschreibung der Anlage oder einzelner Teile wider. Jedoch sind diese Klassen teilweise direkt von einzelnen Merkmalen abhängig. Mit dem Wissen des entsprechenden Schwellenwertes könnte über eine entsprechende Normierung das neuronale Netz durch eine Stufenfunktion ersetzt

werden. Dies macht aber insbesondere im Hinblick auf generalisierende Eigenschaften, die ein neuronales Netz bietet, keinen Sinn. Weiterhin ist ein wesentliches Ziel dieser Arbeit die Einschätzung des Gefährdungspotentiales der Anlage, was durch Klassen, die lediglich einen Zustand oder einen Fehler beschreiben, nicht realisiert werden kann. Durch die Einführung von zusätzlichen Klassen für jeden Fehler, die die Stärke der Gefährdung charakterisieren, würde die Netzgröße stark anwachsen und die Generalisierungsfähigkeit des Netzes sinken.

Aus diesem Grunde werden die separaten Netze für die Fehler- und Gefahrenklassifikation eingeführt. Das bedeutete jedoch, daß sowohl für die Fehlerklassifikation als auch für die Gefahrenklassifikation jeweils eine neue Klasseneinteilung vorgenommen werden mußte.

4.3.1 Fehlerklassifikation

Bei der Definition der neuen Fehlerklassen wurde darauf geachtet, daß für die einzelnen Anlagenfehler brauchbare, tatsächlich typische, d.h. fehler- und problemfreie Versuchsdaten existierten, um Schwierigkeiten beim Lernprozeß und aufgrund einer schlechten Generalisierung auch bei der Klassifikation vorzubeugen. Als neue Fehlerklassen wurden schließlich die folgenden sechs Klassen festgelegt:

- Rührerausfall
- Kühlpanne
- hohe Dosierrate
- niedrige Dosierrate
- Fremdstoff im Reaktionsgemisch
- Temperaturfehler (falsches Temperaturniveau)

Aus den zur Verfügung stehenden Versuchen wurden für die definierten Klassen exemplarische Daten vom Experten ausgewählt und zu einem Lerndatensatz zusammengesetzt. Damit wurden die neuronalen Netze trainiert. Da in diesem Lerndatensatz die Muster (Merkmalsvektoren) von Fehlern aus unterschiedlichen Versuchen (Reaktionsverläufen) zusammengestellt sind, wird hier die Abzisse nicht als Zeitachse sondern als Merkmalsvektor-Nummer definiert.

Ziel des Trainings mit solchen Lerndatensätzen war es, das Perceptron-Netz möglichst generalisierungsfähig gegenüber nichttrainierten Reaktionsverläufen und unempfindlich (robust) gegenüber zufälligen Störungen des Informationsgehaltes (z.B. Meßrauschen) zu machen.

Die Klassifikationsergebnisse bzgl. nichttrainierter Reaktionsverläufe werden in den folgenden Abschnitten des Kapitels 4 beschrieben. Da es sich hierbei wieder um Merkmalsvektoren handelt, die zeitlich aufeinander folgen, wird die Zeitachsen-Darstellung in diesen Fällen wieder benutzt.

Durch diese Vorgehensweise wurden einige bis dahin unbekannte Störungen (in den Signalen oder im Stoffsystem) entdeckt und konnten korrigiert bzw. berücksichtigt werden. So wurden extreme Schwankungen in den Waagesignalen während der Dosierungen festgestellt. Diese hatten sich in geringem Maße bereits bei der Zustandsklassifikation (siehe Kapitel 4.2.3) aufgrund der stoßweisen Förderung der Speisepumpen störend bemerkbar gemacht. Daraufhin wurden diese vier Signale mit der Formel

$$\text{wert_glatt}(t) = (1 - a) * \text{wert_glatt}(t-1) + a * \text{wert}(t) \quad (1)$$

geglättet. Durch diese Berechnung geht der neue, evt. pulsierende Meßwert z.B. nur zur Hälfte ein, wenn der Faktor $a = 0,5$ gewählt wird. Der andere Anteil besteht aus dem letzten geglätteten Wert. Die Wahl des Faktors $a = 0,5$ ist ein guter Kompromiß zwischen schneller Anpassung und Dämpfung. Höhere Werte bewirken eine schnellere Anpassung bei geringerer Dämpfung. Bei niedrigeren Werten erreicht das geglättete Signal aufgrund der hohen Dämpfung erst mit einer deutlichen Zeitverzögerung den Signalpegel.

Die anschließende Normierung wurde unverändert belassen. Wie erwartet konnten damit die wechselnde Zuordnung zu den beiden Dosierungsklassen deutlich verringert werden.

Bild 4.10 zeigt die Reklassifikation der Lerndaten. In Schwarz ist jeweils die Expertenvorgabe für die einzelnen Fehler dargestellt, farblich die zugehörige, vom Netz ausgegebene Klassifikation. Zumeist ist die schwarze Linie der Expertenvorgabe gar nicht zu sehen, weil sie von dem Ergebnis der Netzklassifikation abgedeckt wird, was als sehr guter Lernerfolg zu interpretieren ist. Vereinzelt sind kurzzeitige oder geringfügige Abweichungen zu erkennen. Einzig in der Klasse Fremdstoff ist ein kompletter Bereich (950 - 1000) überhaupt nicht gelernt worden, obwohl ein anderer Bereich derselben Klasse (ab 8035) korrekt reklassifiziert wurde. Dies liegt offenbar daran, daß die Klasse Fremdstoff durch zwei fundamental unterschiedliche Sachverhalte definiert wird. Einmal durch eine falsche Dosierungsreihenfolge, d.h. es wird Methanol statt Essigsäureanhydrid in die Vorlage gegeben, zum anderen durch Wasser im Reaktionsgemisch, worum es sich bei dem nicht richtig reklassifizierten Bereich handelt.

Dieser Teil der Klasse Fremdstoff ist einerseits durch wenig Merkmalsvektoren in den Lerndaten vertreten, andererseits unterscheiden sich die Merkmalsvektoren sehr stark von denen der falschen Dosierungsreihenfolge. Dadurch ist es für das Netz schwierig, die Vorgaben exakt zu erlernen. Durch ein größeres Netz und intensiveres Training ist das Erlernen auch dieses kurzen Bereiches ohne weiteres möglich, jedoch würde sich die Generalisierung dadurch wesentlich verschlechtern. Da keine weitere fehlerhafte Reklassifikation vorhanden ist, wurde diese Schwäche des Netzes in diesen Betrachtungen toleriert.

Weiterhin ist bereits an den Lerndaten zu erkennen, daß die angewendete Normierung der Temperaturen bezüglich einer Solltemperatur funktioniert, da Versuche mit unter-

schiedlichen Solltemperaturen in den Lerndaten verwendet wurden. Die hier angewendete Normierung der Temperaturen unterscheidet sich in einigen Merkmalen von der in Kapitel 4.2.3 untersuchten; gleichgeblieben ist allerdings, daß keine absoluten Temperaturen im Merkmalsvektor verwendet werden, sondern lediglich Relationen (siehe Anhang A.3.5).

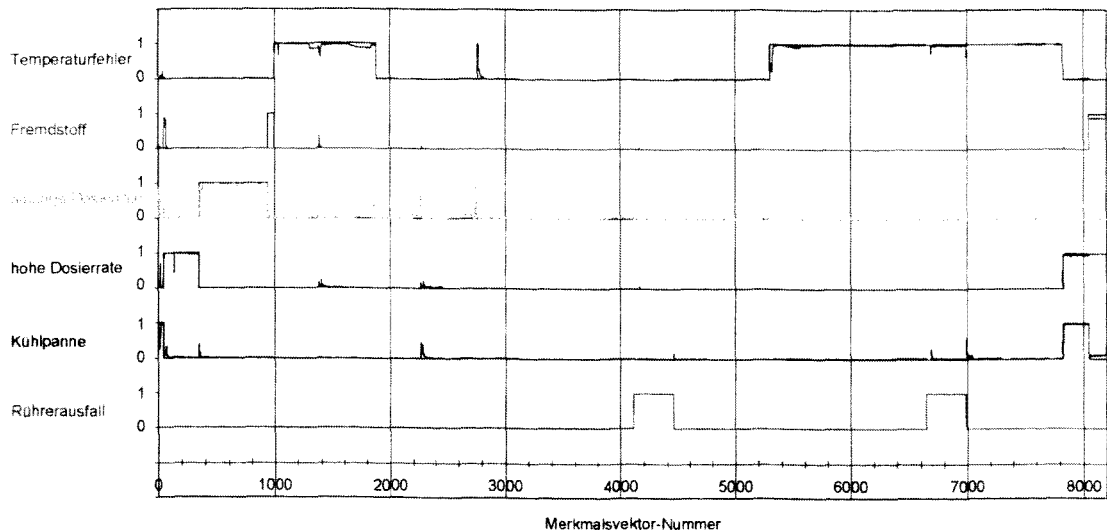


Bild 4.10 Expertenvorgabe (schwarze Linie) und Reklassifikation (farbige Linien) der Lerndaten (Semibatch-Prozeßführung) mit dem Fehlerklassifikations-Perceptron-Netz.

In den Bildern 4.11c und 4.12c ist das Klassifikationsergebnis eines nichttrainierten Reaktionsverlaufes gezeigt, der einmal mit korrekter Solltemperatur (Versuch 7b1, $T_j = T_{\text{Soll}} = 40^\circ\text{C}$, Bild 4.11c), das andere Mal mit einer falschen Solltemperatur (Versuch 7b, $T_j = 40^\circ\text{C}$, $T_{\text{Soll}} = 28^\circ\text{C}$, Bild 4.12c) normiert worden ist. Während des Versuches gab es keine weiteren Störungen. Da bei der Klassifikation eines nichttrainierten Reaktionsverlaufes dem neuronalen Netz die Expertenvorgabe unbekannt ist, wurde zum besseren Verständnis und zum Vergleich der zeitliche Verlauf einiger Meßdaten im Bildteil (a) dargestellt.

Es bedeuten:

- T_c Kühlmittelreservoir-Temperatur [$^\circ\text{C}$]
- T_j Kühlmanteltemperatur (jacket) [$^\circ\text{C}$]
- T_r Reaktortemperatur (Reaktionsgemisch) [$^\circ\text{C}$]
- N Rührerdrehzahl [Umdrehungen pro Minute, cpm]
- $M1$ Masse des Eduktes (Reaktanten) 1 [kg] = bei Semibatch-Prozeßführung
- $M2$ Masse des Eduktes (Reaktanten) 2 [kg] = Zudosierung

Weiterhin ist im Bildteil (b) das Ergebnis des anderen Perceptron-Netzes gezeigt, das die Gefahrenklassifikation durchführt.

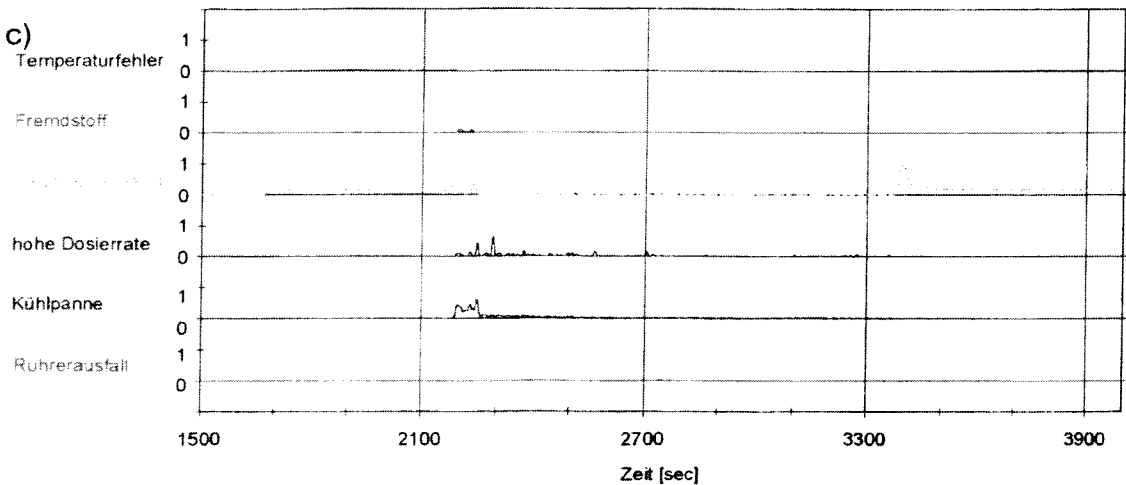
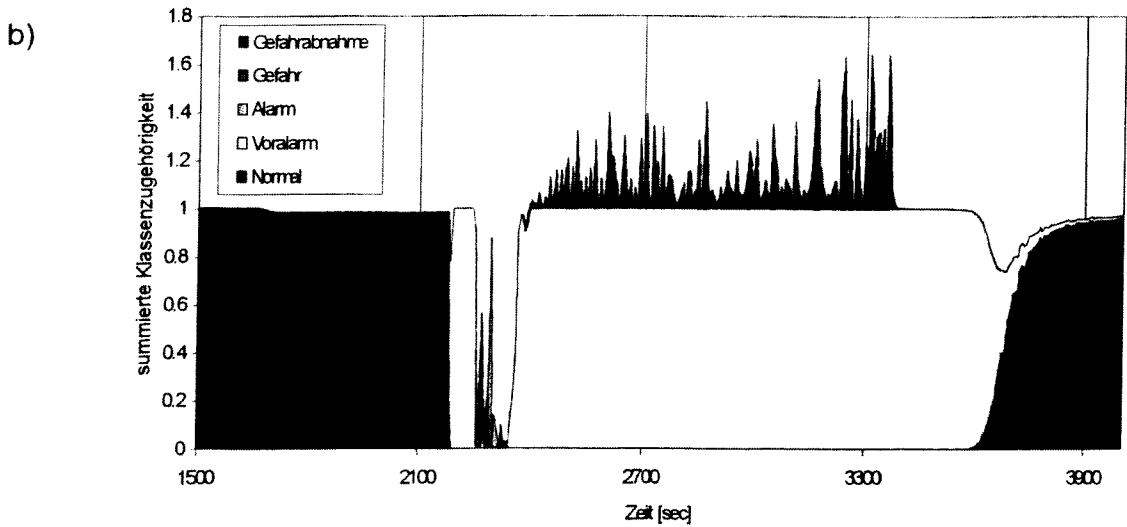
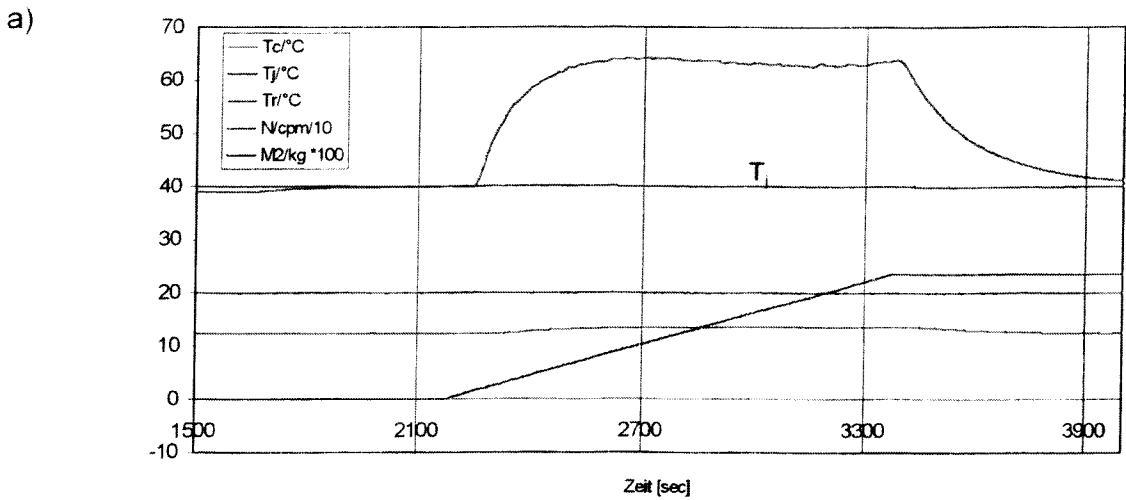


Bild 4.11 Zeitlicher Verlauf von Meßdaten (a) und Ergebnisse der Gefahren- (b) und der Fehlerklassifikation (c) eines nichttrainierten Reaktionsverlaufes ohne Fehler (Versuch 7b1, $T_j=40^{\circ}\text{C}$) mit den Perceptron-Netzen bei einer Normierung auf die korrekte Solltemperatur (40°C).

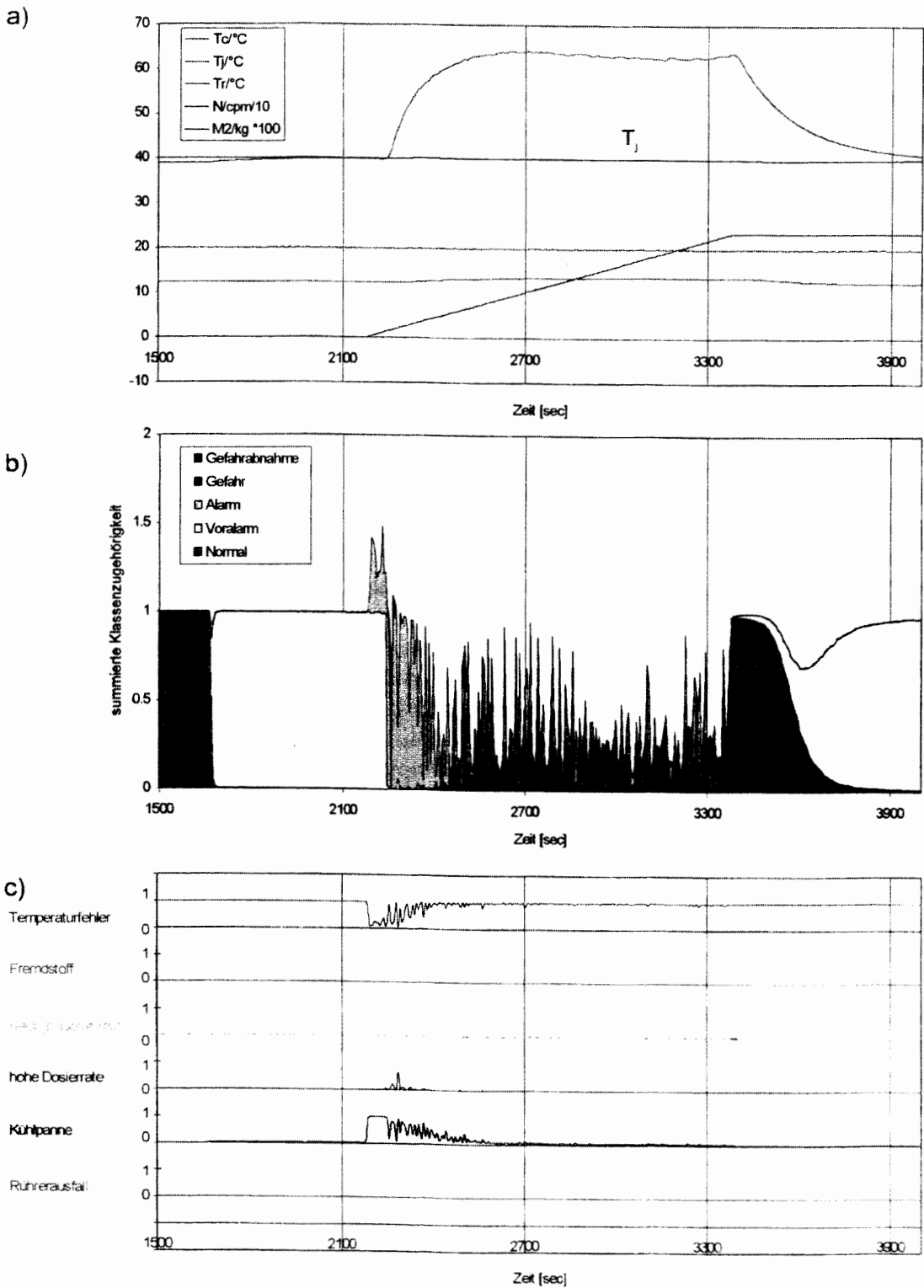


Bild 4.12 Zeitlicher Verlauf von Meßdaten (a) und Ergebnisse der Gefahren- (b) und der Fehlerklassifikation (c) eines nichttrainierten Reaktionsverlaufes ohne Fehler (Versuch 7b, $T_j=40^{\circ}\text{C}$) mit den Perceptron-Netzen bei einer Normierung auf eine falsche Solltemperatur (28°C).

Im Bild 4.12c hat das Netz eindeutig erkannt, daß die Temperatur, mit der der Versuch durchgeführt wird, nicht mit der Solltemperatur übereinstimmt (Klasse "Temperaturfehler"). Lediglich zu Beginn der Dosierung ($t=2200$) kann das Netz das falsche Temperaturniveau nicht sicher klassifizieren und aktiviert die Klasse "Kühlpanne". Da aber gerade zu Reaktionsbeginn schnell Wärme entsteht, die nicht sofort abgeführt werden kann, ist diese Klassifikation sinnvoll. Generell sollte aufgrund des klassifizierten "Temperaturfehlers" die Reaktion durch Dosierung erst gar nicht gestartet werden.

In Bild 4.13c sind die Ergebnisse eines Reaktionsverlaufes (sz-fzr03) wiedergegeben, bei dem die Dosierung zu schnell abläuft und zudem noch der Rührer ausgefallen ist. Beide Fehler werden vom Netz klassifiziert, wenn auch die hohe Dosierrate während des Rührerausfalles nicht mit maximaler Zugehörigkeit. Da durch den Rührerausfall eine Schichtung der Reaktanten im Reaktor auftritt, wird die Reaktion stark gehemmt und damit weniger Wärme erzeugt. Dies erkennt das neuronale Netz offensichtlich und klassifiziert daher mit einer geringeren Zugehörigkeit in die Klasse "hohe Dosierrate". Sobald der Rührer eingeschaltet wird, startet auch die Reaktion wieder. Aufgrund der Reaktantenakkumulation während des Rührerausfalles ist die Reaktion kurzfristig heftiger als normal und kann die Wärme nicht schnell genug abgeführt werden, zu erkennen an der Klasse Kühlpanne. Anschließend stabilisiert sich die Reaktion und die "hohe Dosierrate" wird als einziger Fehler korrekt klassifiziert. Wie der Vergleich anhand der im Bild 13a dargestellten zeitlichen Verläufe von Meßdaten zeigt, werden der ungestörte Reaktionsverlauf und die Ursachen des gestörten Verlaufes durch das Fehlerklassifikations-Perceptron-Netz richtig wiedergegeben. Der teilweise auftretende Doppelfehler wurde erkannt und führte zur Erhöhung des Gefährdungspotentials, wie es auch von dem Gefahrenklassifikations-Perceptron-Netz im Bild 4.13b angezeigt wird (siehe Kap. 4.3.2).

Ein Versuchsausschnitt mit falscher Reaktantenvorlage (sz-fzr13) ist im Bild 4.14c klassifiziert worden. Das Netz erkennt, daß bei der Dosierung des ersten Reaktanten (als Vorlage M1 wurde trainiert) ein falscher Stoff (M2) gegenüber der trainierten Eduktreihenfolge vorgelegt wird (Klasse "Fremdstoff"). Außerdem wird die Vorlage viel zu schnell dosiert. Zudem wird die Fehlerklasse "Kühlpanne" etwas aktiv, weil das im Reaktor vorgelegte Edukt mit Hilfe der "Mantelkühlung" auf die Solltemperatur für den Reaktionsstart aufgeheizt wird.

Das Bild 4.15c zeigt die Netzklassifikation eines ungestörten und nichttrainierten Versuchablaufes (sz-fzr16). Wie zu erkennen ist, werden mehrere Klassen vorübergehend aktiv, obwohl kein Fehler vorliegt; dies geschieht zum Zeitpunkt ($t=2540$) des Reaktionsstarts, wo ein instationäres Prozeßverhalten zunächst existiert. Aufgrund der schon oben erwähnten Trägheit bei der Wärmeabfuhr, wird die Klasse "Kühlpanne" teilweise aktiviert. Die etwa 40%ige Aktivierung der Klasse "geringe Dosierrate" (2250-2540) liegt noch vor der Dosierung, zu einer Zeit, in der keine Dosierung stattfindet. Allerdings sollte "keine Dosierung" nicht derart klassifiziert werden. Daß dies doch geschieht, liegt an den Streuungen der Signale zwischen den unterschiedlichen Versuchen. Um das Netz darauf zu trainieren, daß diese Streuungen durchaus normal sind, müßten die Lerndaten erweitert werden oder die Expertenvorgabe beim Training

anders gewählt werden.

Damit keine falschen Schlußfolgerungen hinsichtlich der Leistungsfähigkeit des trainierten Fehlerklassifikations-Netzes (Bild 4.10) gezogen werden, wird an dieser Stelle nochmals hingewiesen werden, daß es sich bei den in den Bildern 4.11c bis 4.15c dargestellten Fehlerklassifikationen um Ergebnisse eines auf Generalisierung ausgelegten neuronalen Netzes handelt, dem nichttrainierte Prozeßabläufe zur Klassifikation vorgelegt wurden.

4.3.2 Gefahrenklassifikation

Die Festlegung von Klassen für das Gefährdungspotential gestaltet sich einfacher als bei der Fehlerklassifikation, da unabhängig von den Fehlerursachen nur der Zustand der Anlage in Gefahrenstufen eingeteilt werden muß. Einzig die Anzahl der verschiedenen Klassen ist wählbar. Als Kompromiß zwischen vielen Klassen, Überlegungen zur Übersichtlichkeit und den vorhandenen Versuchsdaten wurden die folgenden fünf Gefahrenklassen eingeführt [hess98]:

- Normal
- Voralarm
- Alarm
- Gefahr
- Gefahrabnahme

Diese verschiedenen Stufen von Gefahrenklassen wurden gewählt, um den Beginn einer durchgehenden Reaktion (runaway) möglichst frühzeitig erkennen zu können. Zum Beispiel soll die Klasse "Gefahr" die höchste Alarmstufe charakterisieren, wo schnellstens geeignete Gegenmaßnahmen eingeleitet werden müssen, um ein Durchgehen zu verhindern. Die Klasse "Gefahrabnahme" zeigt an, wenn Gegenmaßnahmen zum Abfangen der durchgehenden Reaktion wirksam geworden sind und zur Temperaturabnahme (negativer Temperaturgradient) führten.

Die Bedingungen, die den verschiedenen Gefahrenklassen zugrunde liegen, sind in der Tabelle 4 (Anhang A.3.5) zusammengestellt. Sie sind nahezu identisch mit den oben beschriebenen zur Fehlerklassifikation. So wurden dieselben Merkmale für den Merkmalsvektor verwendet und dieselben Versuche klassifiziert, um einen Vergleich der Gefahren- und Fehlerklassifikation zu ermöglichen. Auch die Lerndaten wurden aus denselben Versuchen zusammengesetzt, lediglich die für die verschiedenen Klassen charakteristischen Bereiche wurden neu ausgewählt.

Für die Darstellung der Ergebnisse wurde eine andere Diagrammform als bei der Fehlerklassifikation gewählt. Wurde dort jeder Fehler separat dargestellt, werden nun die Aktivitäten aller Klassen aufsummiert und als Flächen dargestellt. So lassen sich Übergänge von einer Klasse in eine andere leichter erkennen.

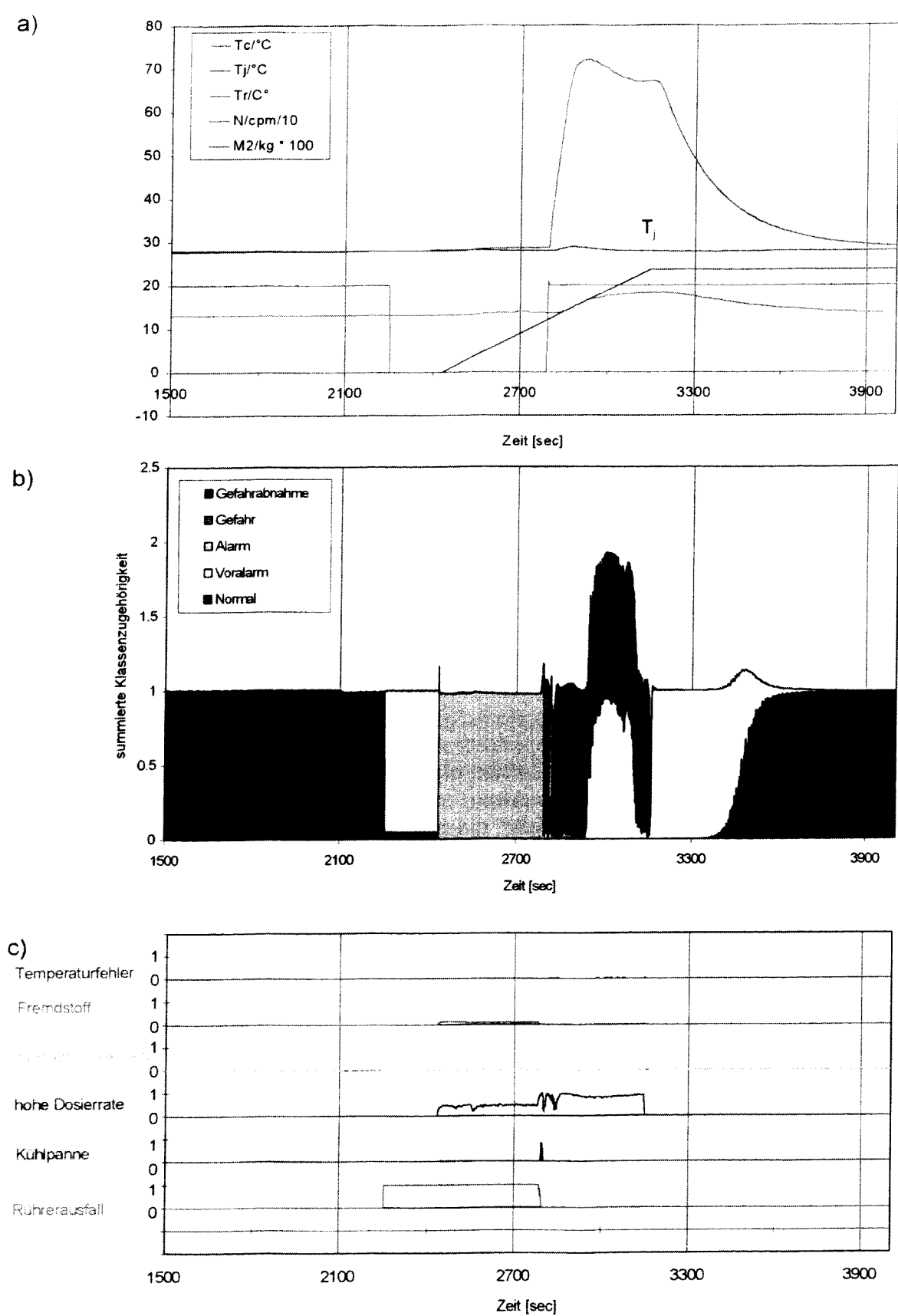


Bild 4.13

Zeitlicher Verlauf von Meßdaten (a) und Ergebnisse der Gefahren- (b) und der Fehlerklassifikation (c) eines nichttrainierten Reaktionsverlaufes (sz-fzr03 mit gleichzeitig auftretendem Rührer- und Dosierfehler/hohe Dosierrate) mit den Perceptron-Netzen.

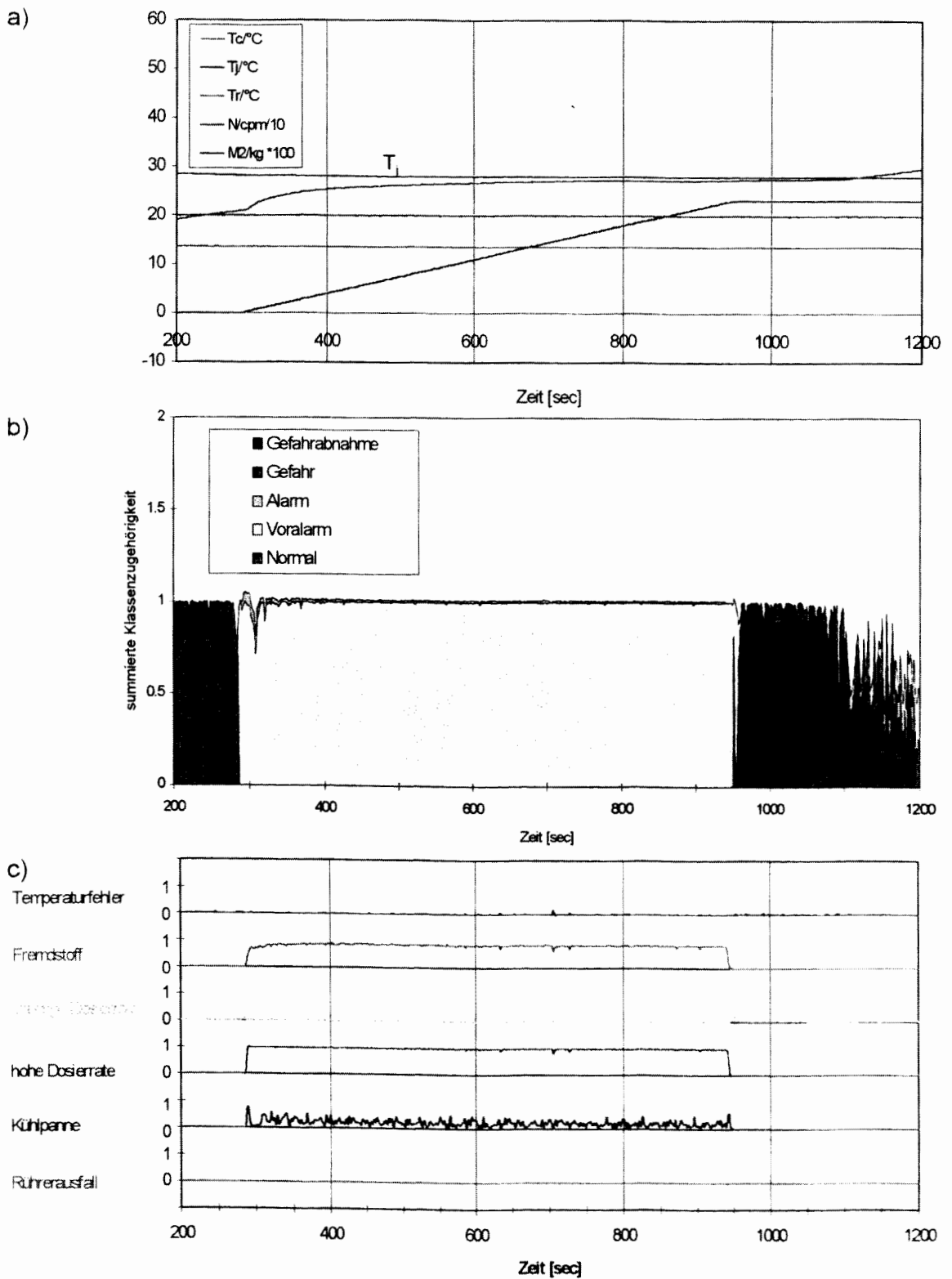


Bild 4.14 Zeitlicher Verlauf von Meßdaten (a) und Ergebnisse der Gefahren- (b) und der Fehlerklassifikation (c) eines nichttrainierten Versuchsablaufes (sz-fzr13 mit falscher Reaktantenvorlage und mit hoher Dosierrate) mit den Perceptron-Netzen.

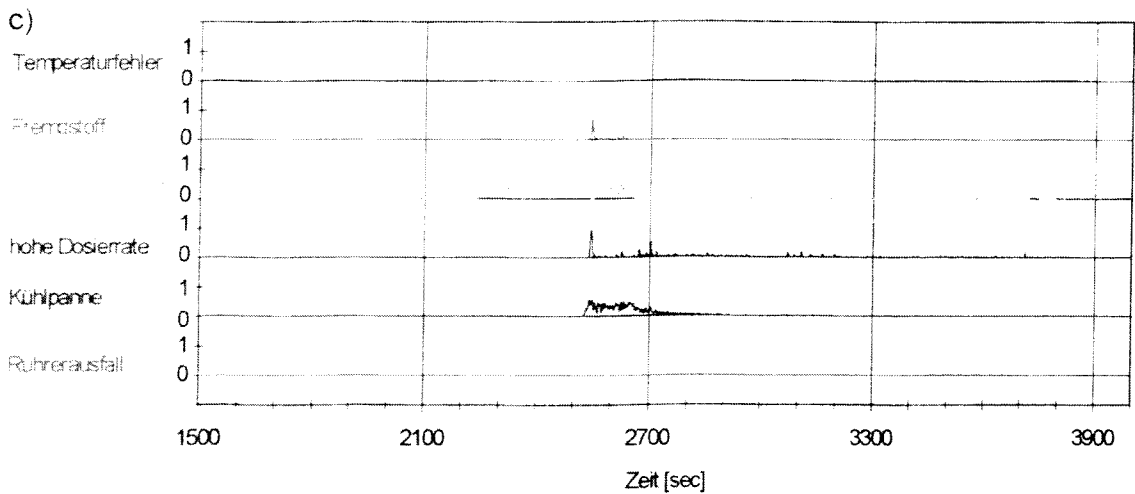
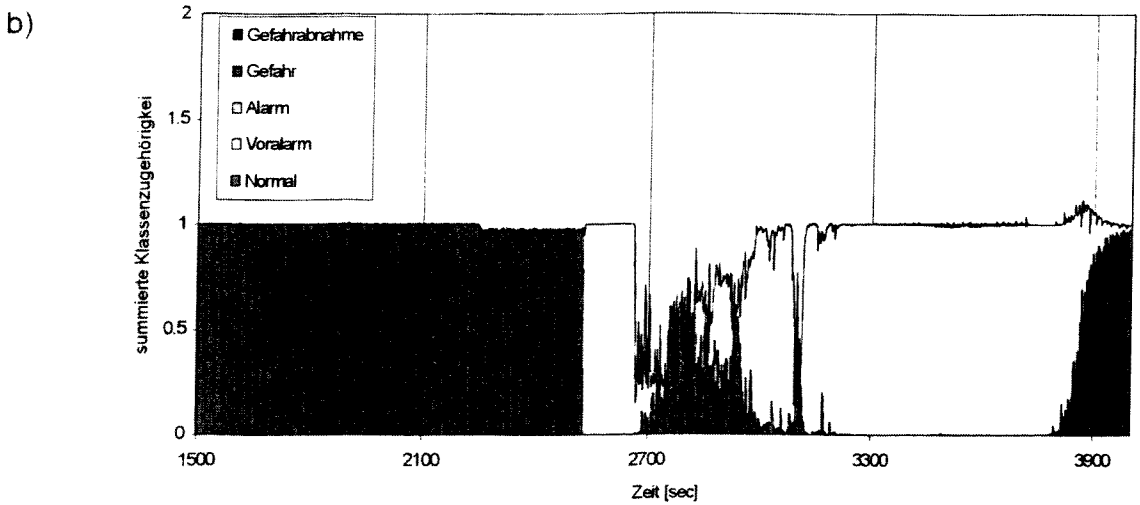
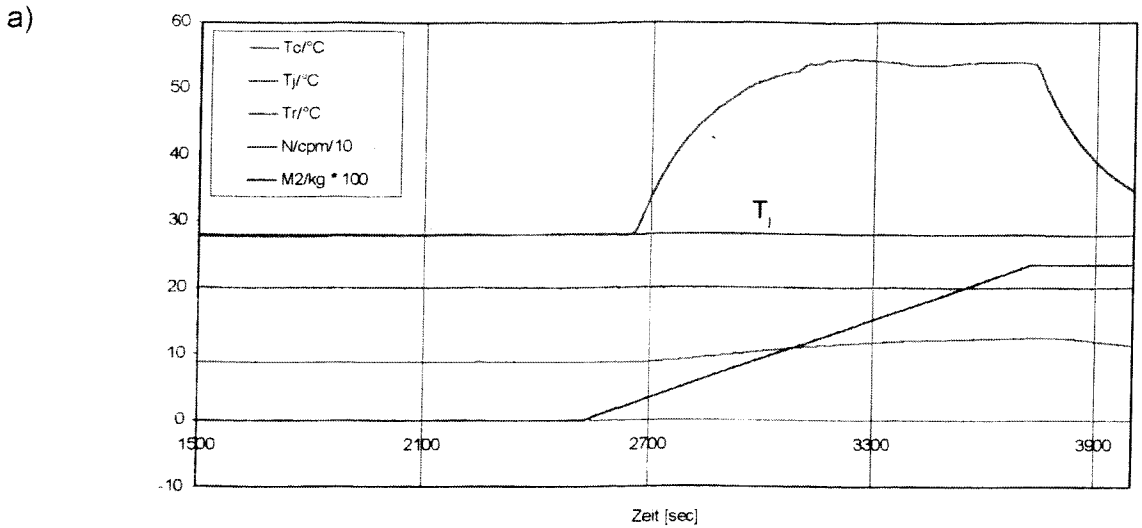


Bild 4.15 Zeitlicher Verlauf von Meßdaten (a) und Ergebnisse der Gefahren- (b) und der Fehlerklassifikation (c) eines ungestörten, nichttrainierten Reaktionsverlaufes (sz-fzr16) mit den Perceptron-Netzen.

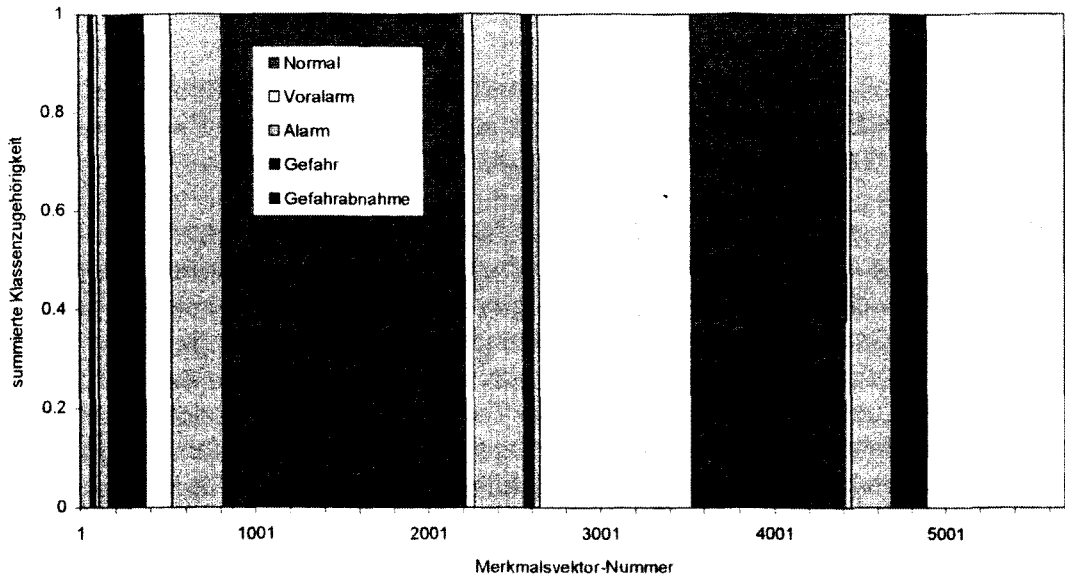


Bild 4.16 Klassenvorgaben der Lerndaten (Semibatch-Prozeßführung) für die Gefahrenklassifikation

Bild 4.16 zeigt die Klassenvorgaben der zusammengeführten Lerndaten, die zum Training des Netzes für die Gefahrenklassifikation benutzt wurden. Im Bild 4.17 ist die Reklassifikation dieser Lerndaten dargestellt. Es ist leicht zu erkennen, daß die Vorgaben gut gelernt worden sind. Es ist zu jedem Zeitpunkt eine, eben die trainierte Klasse eindeutig aktiv. Andere Klassen besitzen nur sehr kleine Zugehörigkeitswerte. Aber auch hier sind zwei Abweichungen von den Vorgaben zu erkennen. Einmal konnte das Netz die sehr kurze Phase des Alarms (2610-2647) nicht lernen, zum anderen erkennt das Netz entgegen der Vorgabe "normal" einen "Voralarm" (3923-3940). Letzteres fällt mit dem Dosierungsstart (instationärer Zustand) innerhalb eines normalen Versuches zusammen, so daß diese Abweichung verständlich ist und akzeptiert werden kann.

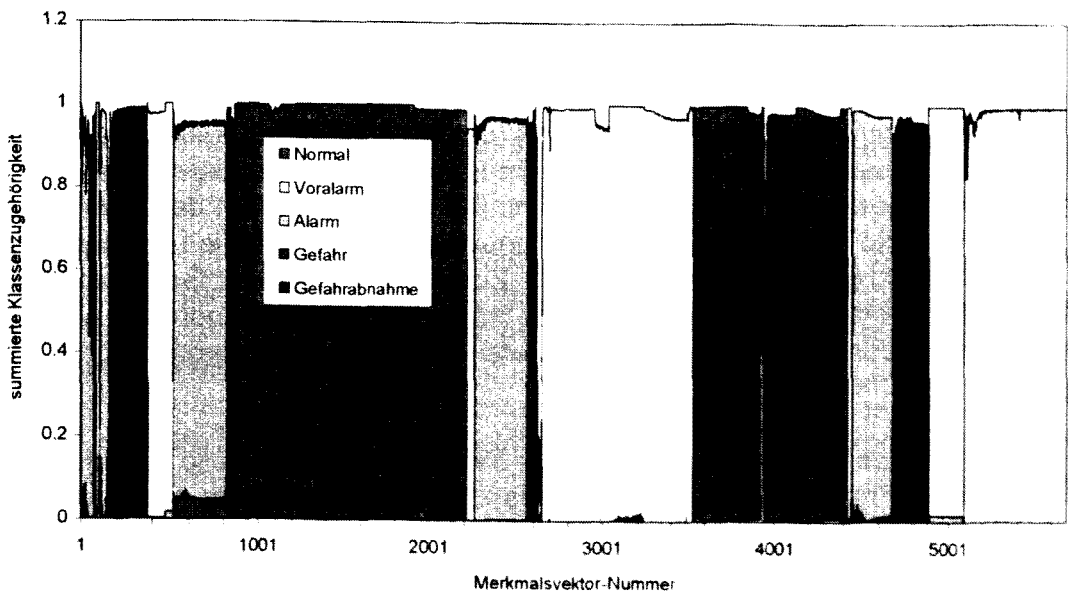


Bild 4.17 Reklassifikation der Lerndaten mit dem Gefahrenklassifikations-Perceptron-Netz

Im folgenden soll diskutiert werden, inwieweit dieses für die Gefahrenklassifikation trainierte Perceptron-Netz in der Lage ist, auch nichttrainierte Reaktionsverläufe hinsichtlich des Gefährdungspotentials zu klassifizieren.

Die Klassifikation des Versuches 7b ($T_j = 40\text{ °C}$), mit der Normierungstemperatur von 28 °C ist im Bild 4.12b wiedergegeben. Durch die falsche Temperaturnormierung und die Wärmeentwicklung bei Dosierungsbeginn ($t=2200$) klassifiziert das Netz den Zustand in die Gefahrenklasse "Alarm". Nachdem die Reaktion angelaufen ist, kann das Netz keine eindeutige Klassifikation mehr vornehmen. Begründet werden kann dies durch den Zustand der Reaktion, deren Temperatur zwar unüblich hoch ist, aber aufgrund der stabilen Temperaturverhältnisse kein größeres Gefährdungspotential enthält. Nach dem Dosierungsende ($t=3364$) kühlt der Reaktor zwar zunächst stark ab (Klasse "normal"), aber doch immer noch auf eine durch die vorgenommene Normierung zu hohe Temperatur (Klasse "Voralarm"), wie es auch vor dem Dosierungsbeginn der Fall war.

Im Bild 4.11b ist die Gefahrenklassifikation desselben Versuchsablaufes dargestellt, der nun aber mit der richtigen Temperatur ($T_j=40\text{ °C}$) normiert wurde. Das Netz klassifiziert diesen Versuch nun in deutlich geringere Gefährdungsklassen, zumeist nur "Voralarm", mit kurzem und geringem Anteil "Gefahr" bzw. "Alarm". Trotz korrekter Temperaturnormierung werden die Reaktortemperaturänderungen des ungestörten isoperibolen Semibatch-Betriebes bei $T_j=40\text{ °C}$ von dem trainierten Netz ($T_j=28\text{ °C}$) als nicht normal klassifiziert, weil infolge der höheren Reaktionsgeschwindigkeit höhere prozentuale Temperaturabweichungen als beim trainierten ungestörten isoperibolen Betrieb ($T_j=28\text{ °C}$) auftreten. Es muß hier beachtet werden, daß die Manteltemperatur $T_j=28\text{ °C}$ als sicherheitstechnisch optimale Temperatur ermittelt wurde. Das heißt, sie ist diejenige Betriebstemperatur, bei der im Pannenfall die niedrigste Maximaltemperatur erreicht wird. So wird verständlich, warum das trainierte Netz bei einer erhöhten Mantel-Betriebstemperatur auch im ungestörten Betriebsregime reagieren kann und sollte.

Der Versuchsablauf sz-fzr03 mit den gleichzeitig auftretenden Fehlern "hohe Dosier-rate" und "Rührerausfall" ist im Bild 4.13b als Gefahrenklassifikation des Netzes dargestellt. Mit Aussetzen des Rührers wird die Klasse "Voralarm" aktiviert, welche mit Einsetzen der Dosierung in "Alarm" übergeht. Bei Wiedereinsetzen des Rührers wird vorübergehend die Klasse "Gefahr" aktiv. Danach entspannt sich die Lage was durch die Klasse "Gefahrabnahme" angezeigt wird. Zusätzlich zur Klasse "Gefahrabnahme" wird "Voralarm" aktiviert, weil die Dosierung mit einer hohen Rate normiert wird. Erst nach der Dosierung ($t=3150$) wird das Gefährdungspotential wieder als "normal" eingestuft.

Wie die Vergleiche mit den Ergebnissen des Fehlerklassifikators (Bild 4.13c) und mit dem gestörten Prozeßablauf (Bild 4.13a) bestätigen, wird bei dem nichttrainierten, durch teilweise gleichzeitig auftretende Fehler gestörten Reaktionsverlauf das Gefährdungspotential vom Gefahrenklassifikator richtig erkannt. Der Rührerausfall ohne Reaktantenzudosierung wird entsprechend der Expertenvorgabe (siehe Einzelfehler

in Tab. 4 / Anhang 3.3) als Voralarm klassifiziert, der mit Dosierungsbeginn in die "Alarm"-Stufe übergeht. Beim Wiederstarten des Rührers kommt es aufgrund der Reaktantenakkumulation zu einer steigenden Reaktionsgeschwindigkeit, die bei ungenügender Kühlleistung zum Durchgehen (runaway) der Reaktion führen würde. Das wird als "Gefahr" richtig angezeigt. Durch eine erhöhte Kühlung wird die Reaktionsgeschwindigkeit wieder herabgesetzt, was dann als "Gefahrabnahme" klassifiziert wird und auch an der Abnahme der Reaktortemperatur T_r (Bild 4.13a) erkennbar ist. Nach dem Ende der Zudosierung wird der "Voralarm" aufrecht erhalten, weil die akkumulierten Reaktanten bei einer erhöhten Reaktortemperatur noch abreagieren müssen.

Wie im Bild 4.14b zu erkennen ist, klassifiziert das Gefahrenklassifikations-Netz auch den Versuch mit falscher Reaktantenvorlage sofort eindeutig mit "Voralarm". Obwohl hier ein sogenannter Doppelfehler vorliegt, erkennt das Gefahrenklassifikations-Netz selbständig, daß eine Alarm-Meldung aufgrund einer fehlenden Reaktionsmöglichkeit nicht notwendig ist.

Bild 4.15b zeigt wieder einen ungestörten Versuchsablauf. Mit dem Dosierungsbeginn wird der "Voralarm" mit einer kurzen Unterbrechung und Anteilen der Klasse "normal" bis zum Dosierungsende aktiviert. Für einen Versuch ohne Störung ist diese Klassifikation nicht einwandfrei. Wie auch schon bei der Fehlerklassifikation (Kap. 4.3.1) bemerkt, sind die Signale dieses Versuches sehr weit entfernt von den trainierten Versuchsdaten, wo die Voralarm-Klasse empfindlicher als die Gefahr-Klasse eingestellt wurde, um gefährliche Betriebszustände frühzeitig erkennen zu können.

Die Klassifikation des neuronalen Netzes bezüglich der Gefährdung der Anlage kann auch bei nichttrainierten Reaktionsverläufen durchaus als gut bezeichnet werden. Es lassen sich aber einige Schwächen erkennen, die in den Versuchssignalen bzw. den ausgewählten Versuchen und Normierungen begründet liegen. So sind trotz sorgfältiger Auswahl der Lemdaten einige Situationen nicht erfaßt, so daß in den Klassifikationen hin und wieder keine Klasse eindeutig aktiviert werden konnte.

4.4 Fehler- und Gefahrenklassifikation bei kontinuierlicher Fahrweise

Im Gegensatz zum isoperibolen Semibatch-Betrieb, der durch eine konstante Manteltemperatur $T_j = \text{const.}$ gekennzeichnet ist, wird bei der kontinuierlichen Fahrweise der Veresterungsreaktion die Reaktortemperatur T_r konstant gehalten. Das wird als isothermer Betrieb bezeichnet.

Obwohl sich die kontinuierliche Fahrweise deutlich vom Semibatch-Betrieb unterscheidet, wurden in den kontinuierlichen Versuchen diesselben Signale wie beim Semibatch-Betrieb erfaßt. Auch die Merkmalsverarbeitung und Normierung wurde identisch durchgeführt.

Die für das Training benutzten Daten wurden entsprechend den definierten Klassen

aus verschiedenen kontinuierlichen Experimenten ausgewählt, wohingegen zur Überprüfung des trainierten Netzes ein anderer Versuchsablauf mit verschiedenen Fehlern verwendet wurde.

Der Anfahrvorgang eines kontinuierlichen Versuches wird immer als eine Semibatch-Reaktion durchgeführt. Im Kapitel 4.3 wurde dieser Reaktionstyp bereits ausführlich untersucht, so daß er hier nicht mehr betrachtet wird. Deshalb wurde der Anfahrprozeß nicht angelernt.

4.4.1 Fehlerklassifikation

Folgende Fehlerklassen konnten mit Versuchsdaten abgedeckt werden:

- Rührerausfall
- Kühlpanne
- hohe Dosierrate
- niedrige Dosierrate
- Temperaturfehler (falsches Temperaturniveau)

Als Normierungstemperatur wurde bei der kontinuierlichen Fahrweise die konstante Reaktortemperatur $T_r=50^\circ\text{C}$ gewählt, die deutlich höher ist als bei Semibatch-Versuchen.

Wie anhand des Bildes 4.18 zu erkennen ist, das die Vorgabe und Reklassifikation der Lerndaten zeigt, wurden die durch die Lerndaten charakterisierten Fehler sehr gut trainiert. Das bedeutet, daß keine größeren Abweichungen zur Expertenvorgabe (schwarze Linie) vorhanden und die farbigen Fehleranzeigen identisch mit der Expertenvorgabe bei der Reklassifikation sind (Überdeckung).

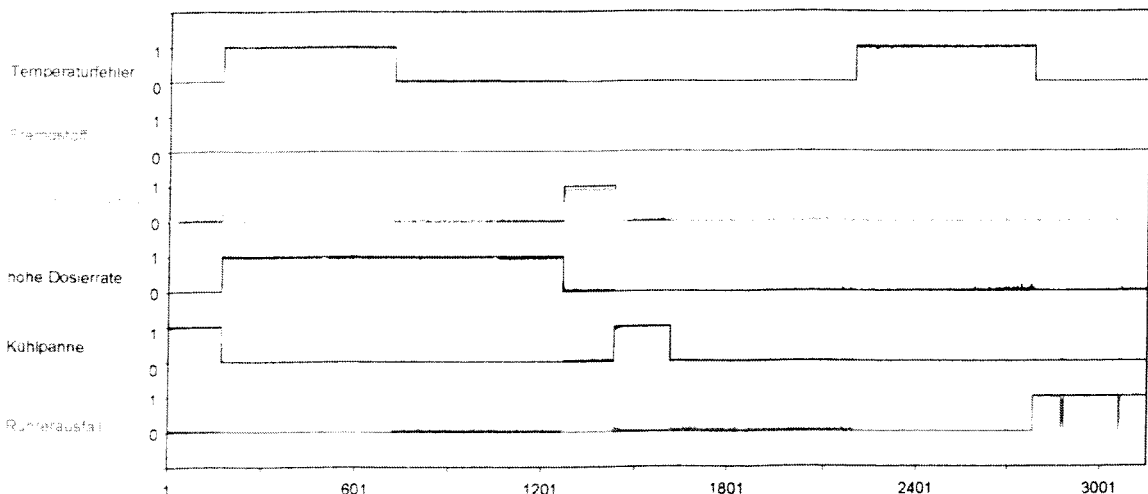


Bild 4.18 Fehlerklassifikation mit dem Perceptron-Netz bei kontinuierlicher Prozeßführung: schwarz - Expertenvorgabe, farbig - Reklassifikation der Lerndaten.

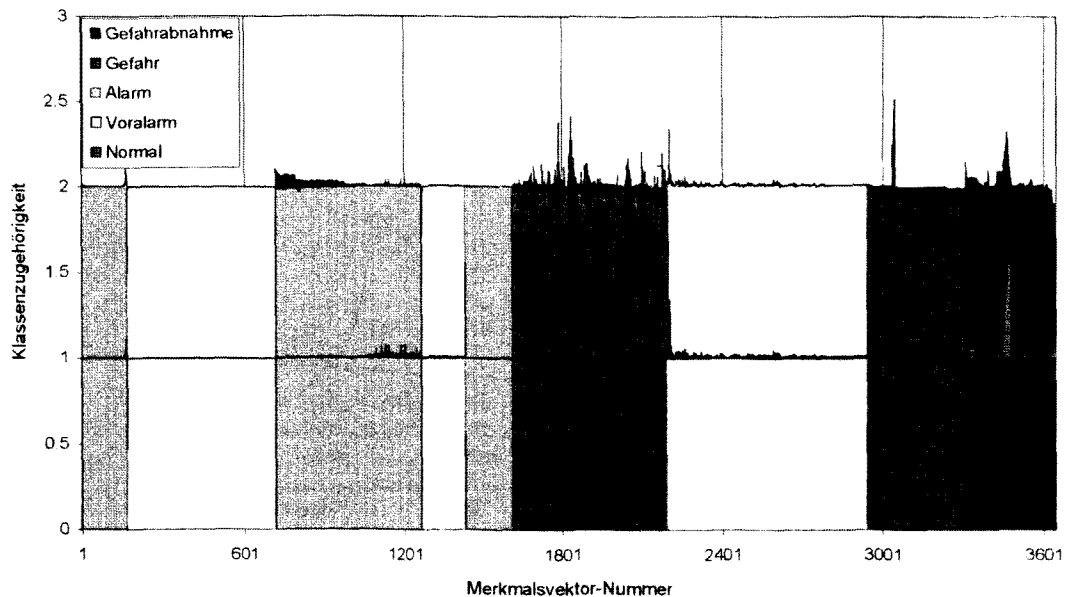


Bild 4.19 Expertenvorgabe (unteres Farbdigramm bis 1) und Reklassifikation der Lerndaten (Farbdigramm oberhalb 1) mit dem Gefahrenklassifikations-Perceptron-Netz bei kontinuierlicher Prozeßführung.

Bild 4.20c und Bild 4.21c zeigen die Ergebnisse der Fehlerklassifikation mit dem Perceptron-Netz für zwei Ausschnitte aus einem nichttrainierten, kontinuierlichen Versuch (fzr09), in dem zahlreiche Störungen experimentell simuliert wurden. Diese Ergebnisse werden im folgenden Kapitel zusammen mit der Gefahrenklassifikation diskutiert.

4.4.2 Gefahrenklassifikation

Die Einteilung in Gefahrenklassen wurde für die kontinuierliche Fahrweise so vorgenommen, wie sie wohl auch von dem Betriebspersonal einer Anlage vorgenommen werden würde: Die unterschiedlichen Fehler wurden einzeln und in den auftretenden Kombinationen in die fünf verschiedenen Gefahrenklassen eingeteilt. Dieser Ansatz ist wesentlich einfacher als eine Einteilung durch den Experten anhand der aufgezeichneten Signale, wie im Kapitel 4.3.2 gemacht. Die folgenden Ergebnisse zeigen, daß trotzdem brauchbare Ergebnisse erreicht wurden.

Bild 4.19 zeigt sowohl die Klassenvorgabe (unterer Teil des Diagramms), als auch die Reklassifikation des Netzes (oberer Teil). Bis auf den Übergang in den Normalzustand im Block der Gefahrabnahme sind die Ergebnisse sehr gut. Allerdings ist der Unterschied von "Gefahrabnahme" zu "Normal" sehr gering.

Bild 4.20 stellt für eine nichttrainierte, gestörte kontinuierliche Reaktion den zeitlichen Verlauf einiger Meßdaten dar (a), die Ergebnisse der Gefahren- (b) und der Fehlerklassifikation (c).

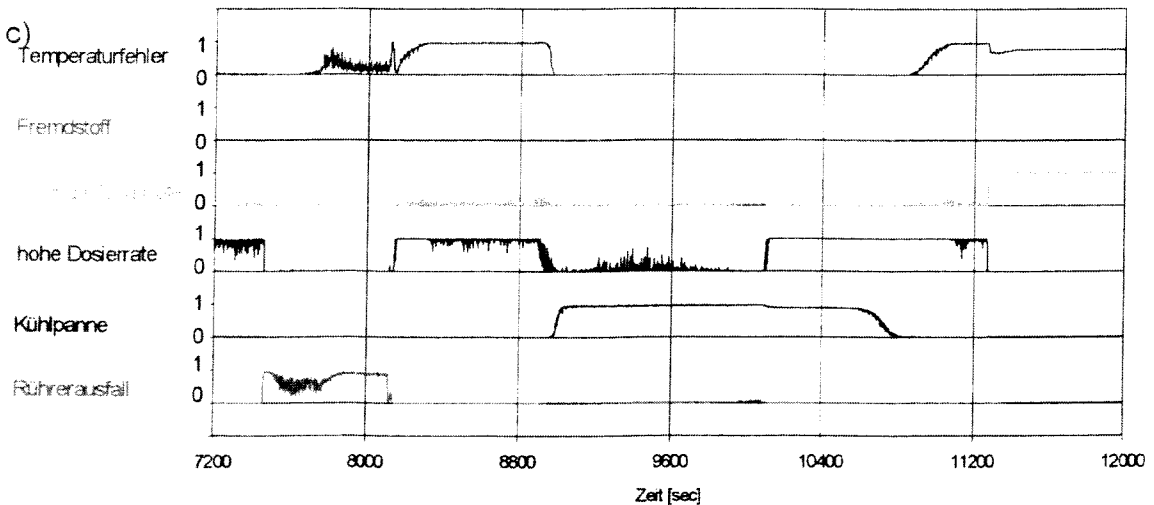
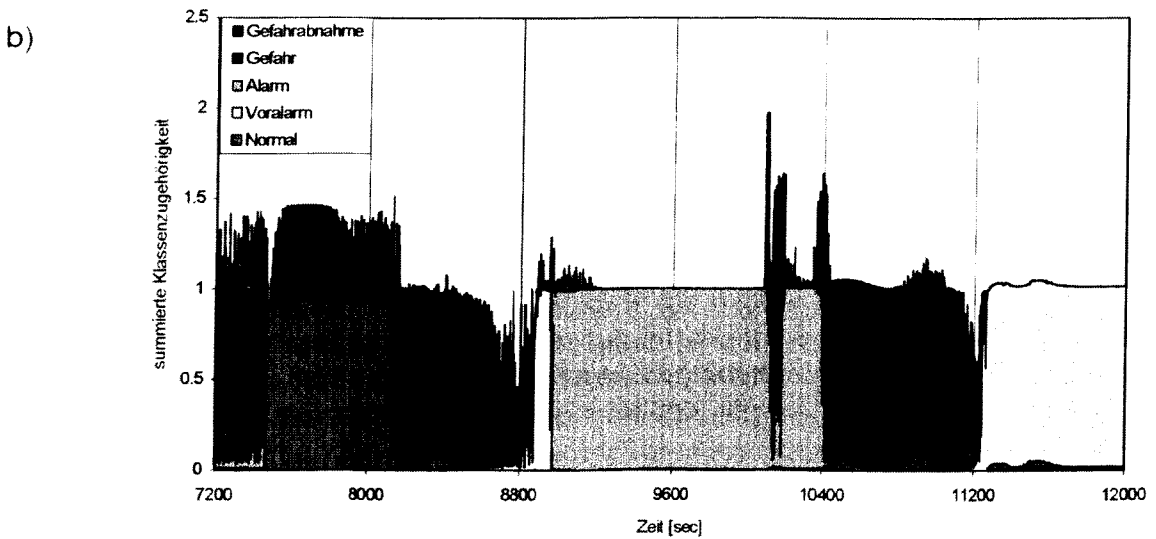
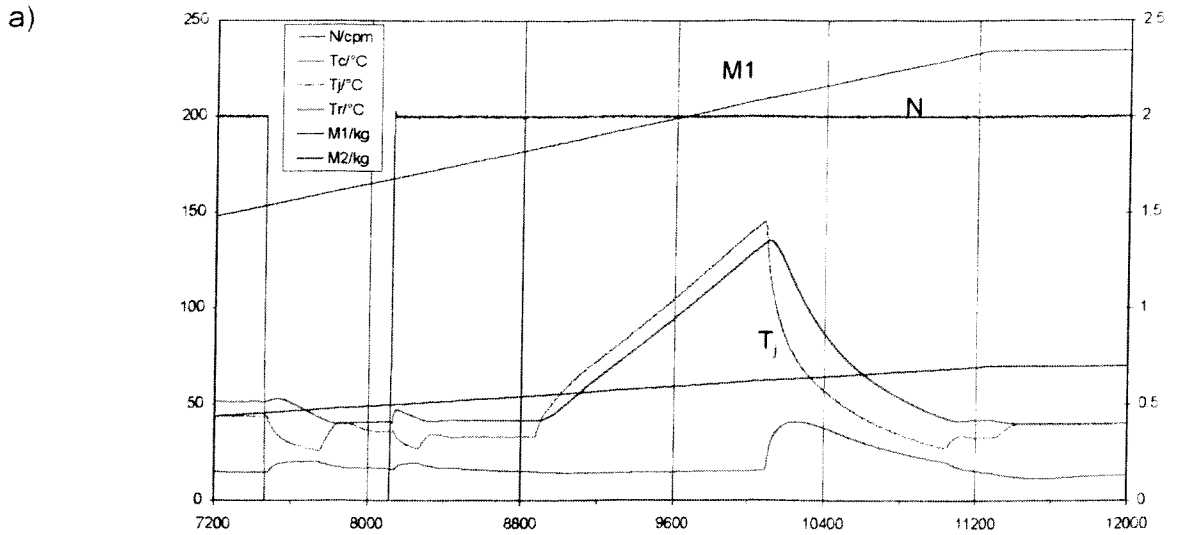


Bild 4.20 Zeitlicher Verlauf von Meßdaten (a) und Ergebnisse der Gefahren- (b) und Fehlerklassifikation (c) mit den Perceptron-Netzen bei einem gestörten, nichttrainierten Reaktionsverlauf (Ausschnitt des Conti-Prozesses fzr09 mit Rührerausfall, Temperaturfehler und Kühlpanne).

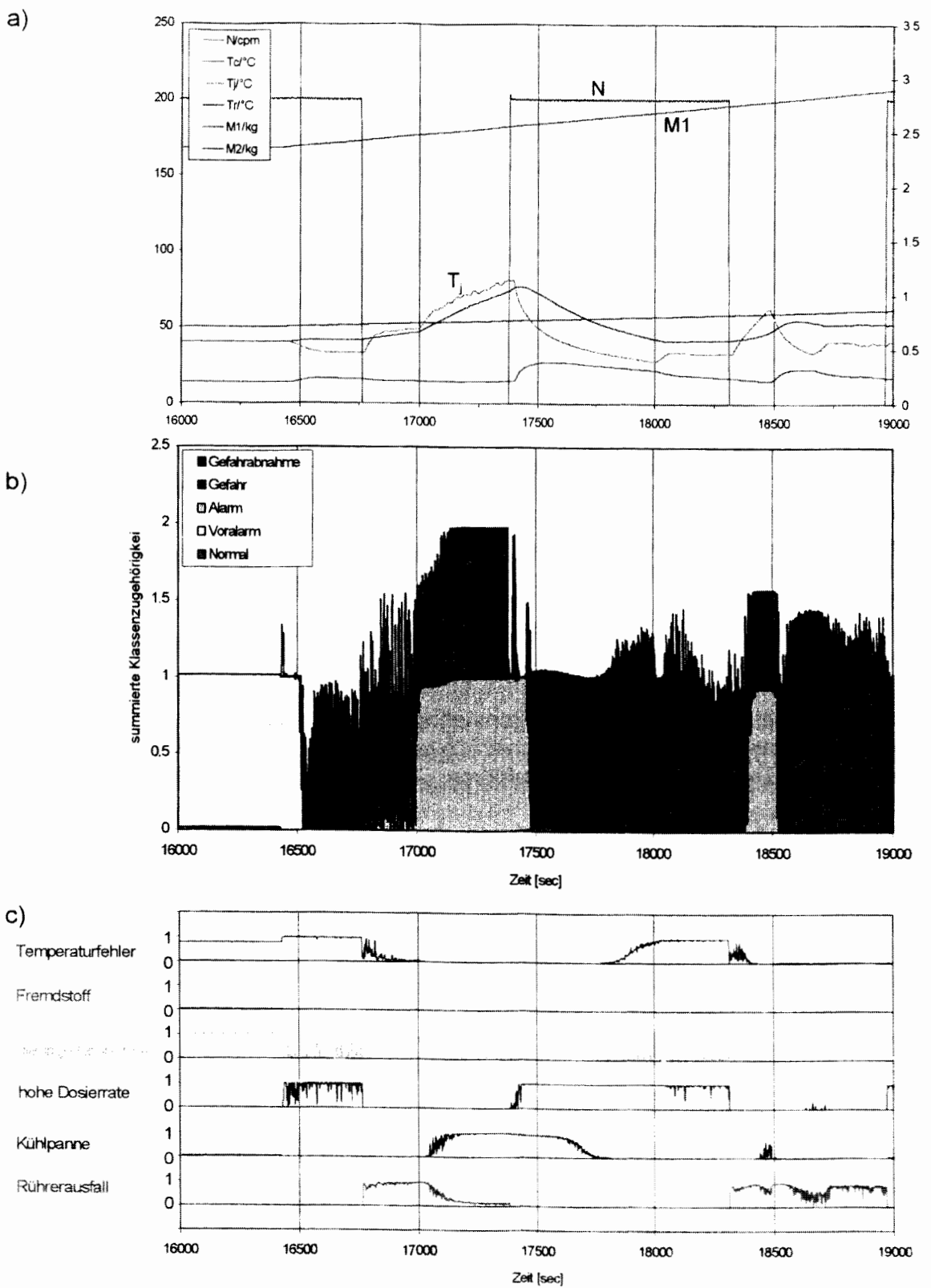


Bild 4.21 Zeitlicher Verlauf von Meßdaten (a) und Ergebnisse der Gefahren- (b) und Fehlerklassifikation (c) mit den Perceptron-Netzen bei einem gestörten, nichttrainierten Reaktionsverlauf (Ausschnitt des Konti-Prozesses fzr09 mit Temperaturverlauf (Ausschnitt des Konti-Prozesses fzr09 mit Temperaturverlauf, niedriger Dosierrate, Rührerausfall und Kühlpanne).

Der Rührerausfall wird bei der laufenden Dosierung beider Reaktanten vom Fehlerklassifikator zeitlich korrekt angezeigt. Aufgrund der schlechteren Durchmischung sinkt die Reaktionsgeschwindigkeit und somit auch die Reaktortemperatur, was als Temperaturfehler richtig erkannt wird. Der Gefahrenklassifikator klassifiziert diesen Rührerausfall als Gefahr, da eine Reaktantenakkumulation stattfindet. Gleichzeitig wird eine geringe Zugehörigkeit zur Klasse "Gefahrabnahme" angezeigt, weil die Reaktortemperatur gesunken ist.

Die Kühlpanne, die durch die adiabatische Fahrweise des Reaktors simuliert wurde, wird vom Fehlerklassifikator richtig erkannt, wobei der Temperaturfehler (falsches Temperaturniveau) nicht mehr aktiv ist. Allerdings wird aufgrund der bei hohen Reaktortemperaturen erhöhten Reaktionsgeschwindigkeit der Fehler "hohe Dosierrate" aktiv, obwohl beide Edukte mit konstanter Dosierrate zugespeist werden. Die Kühlpanne wird vom Gefahrenklassifikator als "Alarm" angezeigt. Die Ursache hierfür ist der konstante Temperaturgradient bei niedriger Kühlreservoirtemperatur T_c (Bild 4.20a). Erst wenn T_c ansteigt, kommt es zur zusätzlichen "Gefahr"-Anzeige. Danach wird die Kühlung verbessert, was durch eine "Gefahrabnahme" bestätigt wird. Nach dem Ende der Dosierungen bleibt der Gefahrenklassifikator im "Voralarm" weil "keine Dosierung" bei kontinuierlicher Fahrweise ein Fehler ist. Das wird vom Fehlerklassifikator als "niedrige Dosierrate" richtig angezeigt.

Nicht immer erklärbar ist, warum trotz konstanter Dosierrate der Fehler "hohe Dosierrate" teilweise anspricht. Das ist wahrscheinlich auf die geringe Streubreite der Dosierraten bei den Trainingsdaten zurückzuführen.

Im Bild 4.21 sind die Klassifikationsergebnisse dargestellt, wenn Doppelfehler bei einer nichttrainierten, gestörten kontinuierlichen Reaktion vorhanden sind. Das Fehlerklassifikations-Netz klassifiziert korrekt einen Temperaturfehler ($T_r=40^\circ\text{C}$ liegt deutlich unter dem Temperaturniveau des trainierten Standard-Konti-Prozesses von $T_r=50^\circ\text{C}=\text{konstant}$) und eine "niedrige Dosierrate" (keine Dosierung), die anschließend in eine "hohe Dosierrate" übergeht. Der folgende Rührerausfall und danach die Kühlpanne werden als Einzelfehler richtig erkannt. Der teilweise vorhandene Doppelfehler "Rührerausfall + Kühlpanne" wird dagegen nicht eindeutig zugeordnet. Das liegt daran, daß dieser Doppelfehler nicht trainiert wurde und der Einfluß beider Fehler auf die Reaktionsgeschwindigkeit entgegengesetzt ist.

Das Verschwinden des Temperaturfehlers beim Auftreten des Rührerausfalles und der Kühlpanne ist dagegen korrekt, weil dadurch instationäre Reaktortemperaturverläufe verursacht wurden. Der Gefahrenklassifikator erkennt die Gefährdungspotentiale richtig. Die Klasse "Normal" ist in diesem Reaktionsverlaufsausschnitt nicht vorhanden, weil immer ein falsches Temperaturniveau bezüglich des Standardversuches vorlag. Die fehlende Dosierung während eines Conti-Prozesses wird richtig als Voralarm klassifiziert. Der Rührerausfall wird wie im Bild 4.20 als "Gefahr" erkannt, während die Kühlpanne wieder als "Alarm" klassifiziert wird. Negative Temperaturgradienten, insbesondere bei der Kühlmittelreservoirtemperatur T_c , aktivieren die Klasse "Gefahrabnahme".

Zusammenfassend kann festgestellt werden, daß sowohl das Gefahrenklassifikations- als auch das Fehlerklassifikations-Perceptron-Netz sogar nichttrainierte, gestörte Konti-Prozeßverläufe im wesentlichen richtig klassifizieren können.

5. Identifizierung mit Fuzzy- Logik

Mit Hilfe der Fuzzy-Logik läßt sich eine Betrachtung meßtechnischer und auch diagnostischer Zusammenhänge durchführen. Es lassen sich Phänomene beschreiben, die nicht mit exakten Grenzwerten darstellbar sind. Auftretende Unschärfen können folgende Ursachen haben:

- große Fehler in der Grundinformation der Meßwerte
- Unschärfe der Modelle für Messung und Diagnose
- Formalisierungsschwierigkeiten und subjektive Begrenzung
- fehlende Information über einige Parameter
- nichtlineares dynamisches Verhalten des Systems

Im Falle der Früherkennung gefährlicher Betriebszustände sind bis auf die erste Ursache alle anderen Anstriche von Bedeutung.

Wegen der zu neuronalen Netzen analogen Trainingsfähigkeit wurde im Rahmen des Projektes die Fuzzy-Pattern-Klassifikation untersucht (siehe Kap. 3.6.2). Dabei wird der Klassifikator durch Parametrierung eines allgemeinen Regelwerkes erzeugt. Die Parametrierung eines Regelwerkes ist im Normalfall weniger zeitaufwendig und kann in weiten Teilen automatisiert werden. Die Problemmodellierung erfolgt dabei in einem hochdimensionalen Raum, der von den Merkmalen aufgespannt wird, mittels parametrierbarer Klassenzugehörigkeitsfunktionen. In den meisten Fällen werden die Parameter der Fuzzy-Klassifikatoren aus Lernvektoren berechnet (Trainingsphase). Eine verbesserte Anpassung an das reale Problem ist durch adaptives Nachlernen des Klassifikators oder durch Einstellen der Parameter durch den Experten möglich. Durch diese Parametereinstellung läßt sich auch ohne Anlernen ein "synthetischer Klassifikator" erzeugen. In jedem Fall ist das Ergebnis ein unscharfer Klassifikator der bei der Klassifikation mit scharfen Meßwerten, Merkmalen, gespeist wird.

5.1 Zustandsklassifikation

Die Leistungsfähigkeit der Fuzzy-Pattern-Klassifikation bezüglich der Zustandsklassifikation wurde für den Fall des Versuchsablaufes V1708 (siehe auch Bild 4.4) untersucht. Aus der Zuordnung von Meß- bzw. Simulationsdaten zu den Klassen wurden entsprechende Klassifikatoren in der Weise trainiert, daß eine möglichst vollständige Reklassifikation erfolgte. Die Reklassifikationsergebnisse der Fuzzy-Pattern-Klassifikatoren zeigten, daß sich der gesamte Versuchsablauf nicht vollständig in einem Klassifikator modellieren läßt. Die Reklassifikationsrate der Lernmuster lag mit 75% bis 90% deutlich unter den anzustrebenden 100%. Eine Ursache hierfür ist die schwierige Unterteilung des Versuchsablaufes in Klassen. Die problematischste Klasse ist hier

“Temperieren”. Wenn diese Klasse vom Klassifikator nicht trainiert werden muß, wird eine Reklassifikationsrate von über 99% erreicht. Diese Klassifikationsraten beziehen sich auf eine minimale Sympathie $S_0 = 0,1$ und das einfache Sympathiemaximum im Sympathievektor (d. h. riskante Entscheidung). Da sich viele Merkmale, z. B. Temperaturen, von einer Klasse zur anderen kontinuierlich verändern, hat die Klassenvorgabe für die Lerndaten großen Einfluß auf die Leistungsfähigkeit des Klassifikators. Das gilt besonders für die Trainingsdaten an den Klassengrenzen. Das Training mit Daten im Bereich der Klassengrenzen widerspricht dem Ansatz der Fuzzy-Klassifikation, die unscharfe Klassengrenzen und clusterartige Abbildung der Klassen im Merkmalsraum annimmt. Wenn an den Klassengrenzen keine eindeutige Klassifikation gefordert wird und Lerndaten für die Klassenzentren vorhanden sind, kann die Fuzzy-Klassifikation die Klassengrenzen aus ihrem unscharfen Ansatz heraus eigenständig festlegen und dann einen Klassifikator mit besseren Generalisierungseigenschaften erzeugen. Zur Untersuchung der Struktur der Lerndaten wurde ein hierarchischer Clusteralgorithmus auf die Lerndaten angewendet. Dabei wurden keine Klassenzuordnungen der Daten vorgegeben. Die Clusterung strukturierte die Daten nur in eine Klasse und verwarf 7 der 19 Merkmale als nicht wesentlich für die Strukturierung der Merkmalsvektoren. Dieses Ergebnis unterstützt die Aussage, daß sich Versuchsabläufe wegen der Kontinuität in den Meßdaten mit clusterorientierten Klassifikationsverfahren schlecht modellieren lassen.

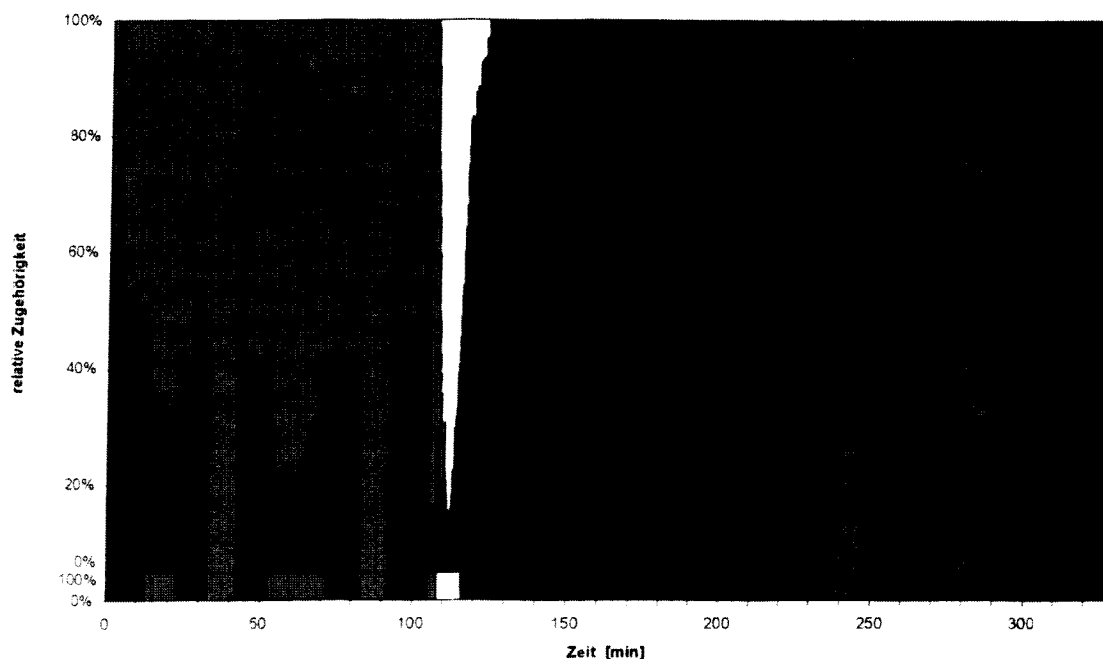


Bild 5.1 Ergebnis der Reklassifikation eines Fuzzy-Pattern-Klassifikators für den Semibatch-Versuch V1708

Bild 5.1 zeigt das Reklassifikationsergebnis für den Verlauf des Semibatch-Experimentes V1708, wobei die relativen Sympathieanteile der einzelnen Klassen über der Nummer der Merkmalsvektoren, die der Zeit entspricht, dargestellt ist. Das Bild 5.1 zeigt, daß der Fuzzy-Klassifikator die wesentlichen Abschnitte des Versuchsablaufes,

Kalibrieren (braun), Exothermie der Reaktion (rot), Fangen der Reaktion (gelb) und Dosieren (grün), erkennen kann. Die Abschnitte Heizen (Magenta) und Kühlen (blau) können nur mit Risiko und teilweisen Fehlklassifikationen von den Ruhe- oder Untergrundabschnitten, Temperieren (hellblau), klassifiziert werden.

5.2 Fehler- und Gefahrenklassifikation

Die bei der Zustandsklassifikation getroffenen Aussagen gelten auch bei der Fehler- und Gefahrenklassifikation zu. Allerdings stellen beide Aufgaben höhere Anforderungen an den Klassifikator, weil viele Zustände in unterschiedlichen Kombinationen im Klassifikator modelliert werden müssen.

Bei der Fehlerklassifikation können Mehrfachfehler wie beispielsweise "hohe Dosier-rate" und "Rührerausfall" auftreten. Diese können nur klassifiziert werden, wenn sich die Fehler unabhängig voneinander in den Merkmalen abbilden und Lerndaten für jeden Fehler einzeln zur Verfügung stehen. Beim Eintreten von Mehrfachfehlern liefert der Klassifikator für die entsprechenden Fehlerklassen etwa gleichgroße Sympathien. Das Training von Mehrfachfehlern ist bei der Fuzzy-Pattern-Klassifikation nicht möglich. Aus diesem Grunde mußten aus dem Trainingsdatensatz die Daten für die Doppelfehler entfernt werden.

Bei der Gefahrenklassifikation ist nur die Angabe eines Gefahrenpotentials für einen bestimmten Prozeß- bzw. Anlagenzustand sinnvoll. Nur im Sinne von Trendbetrachtungen hat das gemeinsame Auftreten von benachbarten Gefahrenklassen einen Sinn (z. B. Normal und Voralarm). Das gilt aber ausschließlich für die Klassifikationsphase und ist ein Ausdruck für die unscharfe Klassifikation. Für die Lernphase sind nur Einzelklassen relevant. Trotzdem haben die Probleme der Mehrfachfehler einen negativen Einfluß auf die Klassifikation von Gefahrenklassen, weil die Festlegung der Gefahrenpotentiale implizit die Mehrfachfehler beinhaltet, wenn z. B. das Auftreten einer Kühlpanne als "Alarm" und Kühlpanne plus Rührerausfall als "Gefahr" eingestuft werden. In dem Fall "Gefahr" werden die Merkmale für beide Fehler in einer Zugehörigkeitsfunktion vereinigt. Das hat zur Folge, daß die Zugehörigkeitsfunktion für diese Klasse einen weiten Bereich des Definitionsbereiches des Merkmals überdeckt und damit auch andere Klassenzugehörigkeitsfunktionen, wodurch die Trennschärfe der Klassifikation verschlechtert wird. Wenn auf die Trennschärfe der Klassifikation weniger Wert gelegt wird, weil beispielsweise das Gefahrenpotential aus der Trendanalyse der Klassifikationsergebnisse abgeschätzt wird, bieten große Überdeckungsgrade den Vorteil einer guten Generalisierungsfähigkeit des Klassifikators. Voraussetzung dafür ist allerdings, daß es bei der Merkmalsextraktion gelingt, Merkmale zu finden in denen sich die Gefahrenklassen monoton verteilen, d. h., daß das Gefahrenpotential mit der Größe des Merkmals steigt oder sinkt. Unter diesen Randbedingungen kann durch Schwerpunktbildung innerhalb des Sympathievektors (Defuzzifizierung) eine zuverlässigere Klassenzuordnung der Merkmalsvektoren erreicht werden.

Bei der Fuzzy-Pattern-Klassifikation ergibt sich die Sympathie eines Merkmalsvektors zu einer Klasse durch Superposition der mit den Klassenzugehörigkeitsfunktionen der

Merkmale gewichteten Elemente des zu klassifizierenden Merkmalsvektors. Dieser Sachverhalt muß bei der Bewertung des Klassifikationsergebnisses, der letztendlichen Entscheidung für eine oder mehrere Klassen, berücksichtigt werden (siehe auch Kap. 3.6.2, Gl. 3-5).

Wenn eine Klasse nur durch ein Merkmal beschrieben wird, z. B. die Klasse "Rührerausfall" durch das Merkmal "Rührerdrehzahl", muß bei den Trainingsdaten sichergestellt werden, daß keine Zugehörigkeitsfunktion anderer Merkmale Beiträge zur Klasse "Rührerausfall" liefert. Das bedeutet, daß man Lerndaten mit "Rührerausfall" benötigt, bei denen alle Merkmale außer "Rührerdrehzahl" alle möglichen Werte annehmen. Die Bereitstellung solcher Trainingsdaten ist in den meisten Fällen nicht möglich. Das Problem kann durch Einstellen des Fuzzy-Pattern-Klassifikators gelöst werden, indem für die Parameter c_{ikz} in Gl. 2 (Kap. 3.6.2) für alle nicht relevanten Merkmale der betreffenden Klasse so große Werte eingesetzt werden, daß die Beiträge dieser Merkmale zur Sympathie unwesentlich sind. Der Klassifikator wird durch diese Einstellung bezüglich der betrachteten Klasse völlig abhängig von einem (oder einigen) Merkmal, wodurch seine Fehlertoleranz gegenüber diesem Merkmal verloren geht. Deshalb sind solche Einstellungen nur dann vertretbar, wenn der Klassifikator eine schlechte Fehlertoleranz bezüglich der betreffenden Klasse hat, die durch das angesprochene Merkmal repräsentiert wird, im Beispiel "Rührerausfall". Das heißt, die Fehlerklasse bildet sich in anderen Merkmalen nicht ab.

Zur Einschätzung der Leistungsfähigkeit der Fuzzy-Pattern-Klassifikation wurden für die Gefahren- und die Fehlerklassifikation aus den normierten Lerndatensätzen "Fuzzy-spezifische" Lerndatensätze erzeugt. Dabei wurden für die Gefahrenklassifikation alle Lerndaten verwendet, während für die Fehlerklassifikation nur Lerndaten für Einzelfehler benutzt wurden. Außerdem wurden die Lerndaten einmal mit und einmal ohne die Klasse "fehlerfrei" erzeugt. Im Bild 5.2 ist das Ergebnis der Reklassifikation der Gefährdungsbewertung in einer Farbdarstellung zu sehen. Die Darstellung der Sympathiewerte (oberes Diagramm) zeigt, daß sich der komplizierte Sachverhalt der Gefahrenklassifikation mit einem trainierten Fuzzy-Pattern-Klassifikator schlecht modellieren läßt. Die Summe aller Sympathiewerte im Sympathievektor liegt für alle Lernvektoren unter eins. Das weist darauf hin, daß eine schlechte Klassentrennung vorliegt. Die Zuordnung der Sympathievektoren nach dem Maximum ist im unteren Diagramm neben der Klassenvorgabe (Expertenzuordnung) der Lernvektoren dargestellt. Danach werden die Lernvektoren nur zum Teil richtig zugeordnet (ca. 65 %). Die Fehlzuordnung erfolgt aber meist in eine benachbarte Klasse, z.B. Voralarm statt normal. Bei den Merkmalsvektoren um die Nummer 4000 treten größere, irreführende Zuordnungen auf. Die als "normal" vorgegebenen Vektoren werden zum Teil dem "Alarm" zugeordnet, was an der begrenzten Generalisierungsfähigkeit des Fuzzy-Pattern-Klassifikators liegt. Der komplizierte Sachverhalt eines normalen Versuchsverlaufs kann vom Klassifikator nicht korrekt modelliert werden.

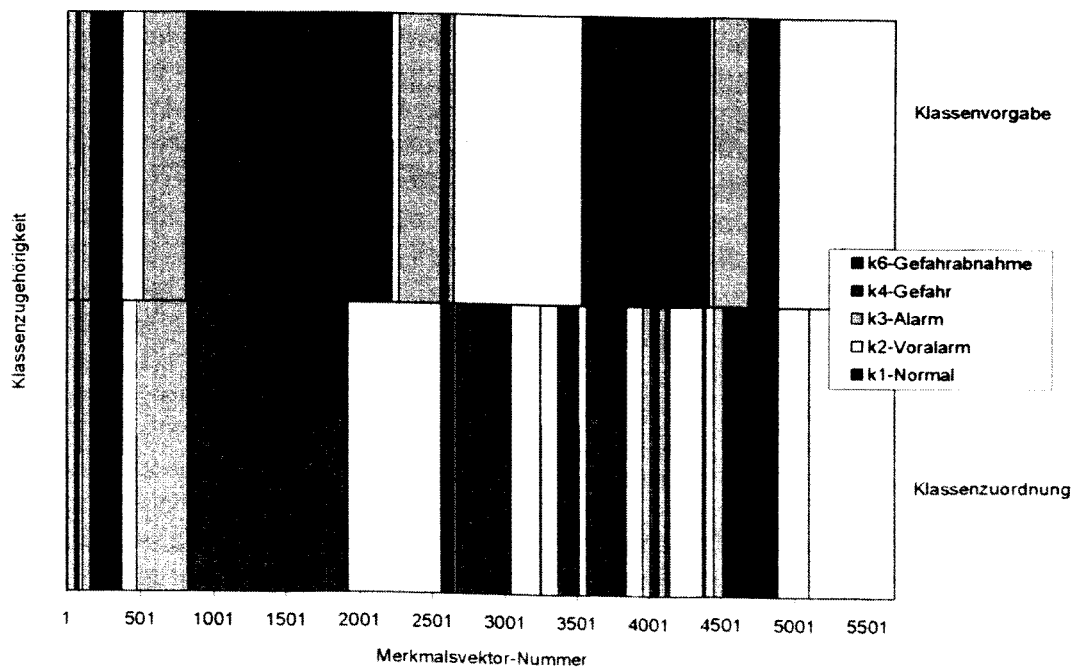
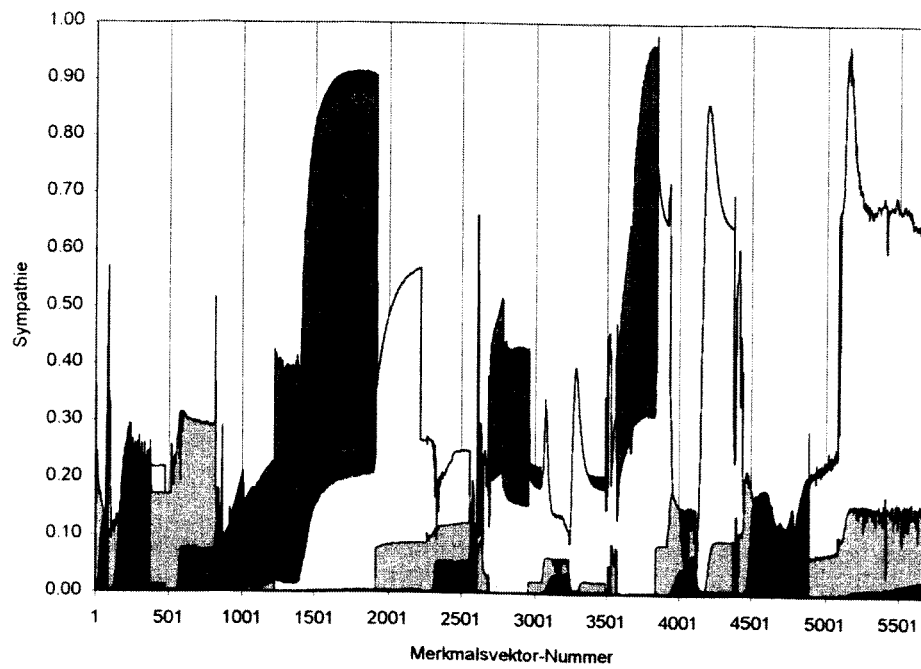


Bild 5.2 Reklassifikationsergebnisse bei der Gefahrenklassifikation mit einem Fuzzy-Pattern-Klassifikator bei 10% minimaler Unschärfe.

Durch die Änderung der minimalen Unschärfe beim Training des Klassifikators wurde keine Verbesserungen der Reklassifikation erreicht. Im Bereich von 0 bis 10 % minimaler Unschärfe variiert der Anteil der richtigen Zuordnungen $\pm 2\%$ um den Wert von 64 %. Unter der Zielstellung einer guten Generalisierung durch den Klassifikator wurde für die weiteren Untersuchungen ein Klassifikator mit der minimalen Unschärfe von 10 % benutzt. Dadurch wird auch die mittlere Sympathie über alle Lernvektoren und Klassen etwas größer (0,38 bei 0% und 0,62 bei 10 % Unschärfe).

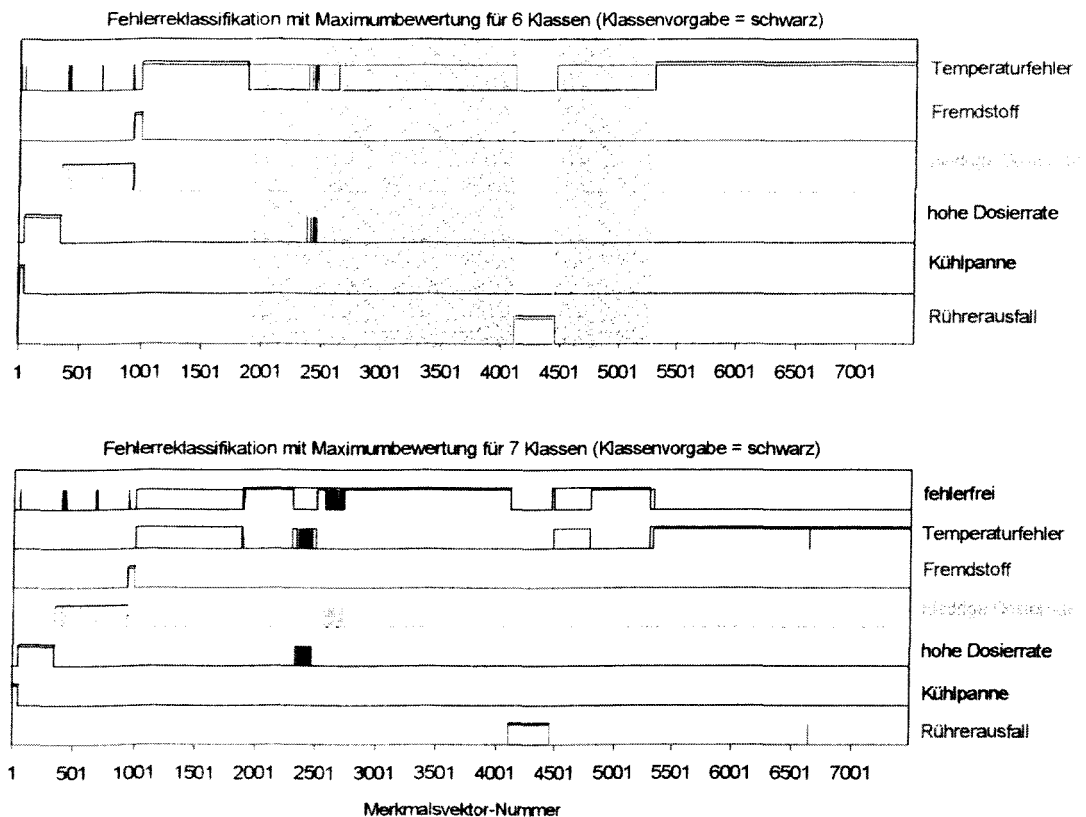
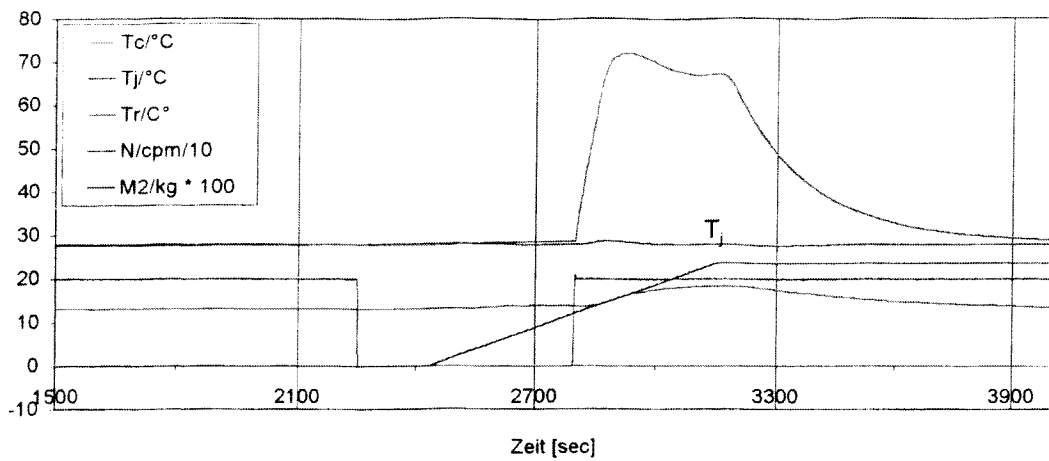


Bild 5.3 Klassifikation der Trainingsdaten mit dem Fuzzy-Pattern-Klassifikator für die Fehlerklassifikation ohne (oben) und mit der Klasse "fehlerfrei" (unten). Markierte Bereiche im oberen Diagramm wurden nicht trainiert.

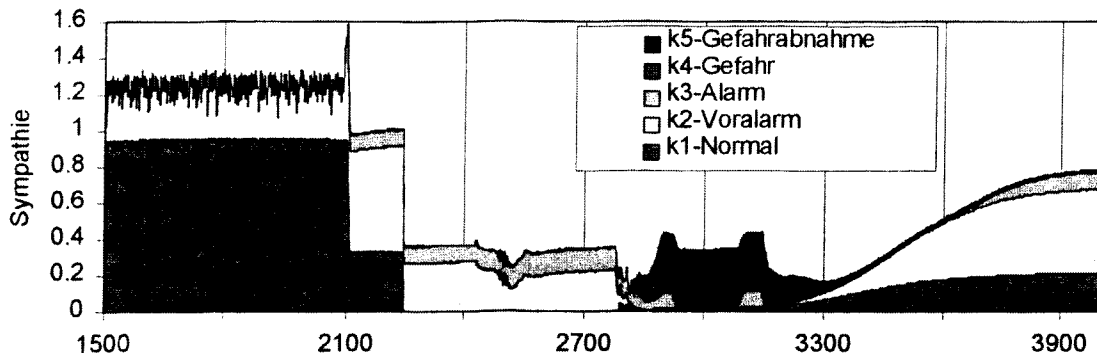
Bei der Klassifikation von Fehlern ist eine große Unschärfe ungünstig, weil dadurch meist die Trennschärfe der Klassen verringert wird. Das Ziel der Fehlerklassifikation ist aber die möglichst klare Aussage über die Fehlerursache. Bild 5.3 zeigt das Ergebnis der Fehlerklassifikation der Lerndaten für Einzelfehler. Die Ergebnisse werden für 2 Klassifikatoren dargestellt, die sich in der Zahl der trainierten Klassen unterscheiden. Im oberen Diagramm wurde der Klassifikator nicht mit der Klasse "fehlerfrei" trainiert, mit dem Ergebnis, daß die Lerndaten besser reklassifiziert wurden (99 % gegenüber 80 % bei 7 Klassen). In beiden Diagrammen von Bild 5.3 ist derselbe Prozeßverlauf

klassifiziert worden. Nur sind in dem oberen Diagramm die Vektoren nicht angelernt worden, die im unteren Diagramm mit der Vorgabe "fehlerfrei" mittrainiert worden sind (Vektoren 2000 - 4000 und 4500 - 4900). Bild 5.3 zeigt auch, daß der Klassifikator mit 6 Klassen zwar sehr gut reklassifiziert aber auf Kosten einer schlechteren Generalisierungsfähigkeit, was die klassifizierten Bereiche im oberen Diagramm (Vektoren 2000 - 4000 und 4500 - 4900) deutlich machen. In diesen Bereichen wurde fast vollständig falsch klassifiziert ("Temperaturfehler" obwohl "fehlerfrei"). Deshalb wurde für die Klassifikation eines nichttrainierten Versuchsverlaufes mit Fehlern ein Fehlerklassifikator mit 7 Klassen benutzt. Dieser Klassifikator wurde bezüglich des Merkmales "Rührerdrehzahl" eingestellt, weil die Klasse "Rührerfehler" nur von dem Merkmal "Rührerdrehzahl" abhängt. Die Zugehörigkeitsfunktionen für die Klasse "Rührerfehler" wurden für alle Merkmale mit einer sehr großen Unschärfe versehen, damit diese Merkmale nicht zur Sympathie für die Klasse "Rührerfehler" beitragen (siehe auch Gl. 2 in Kap. 3.6.2).

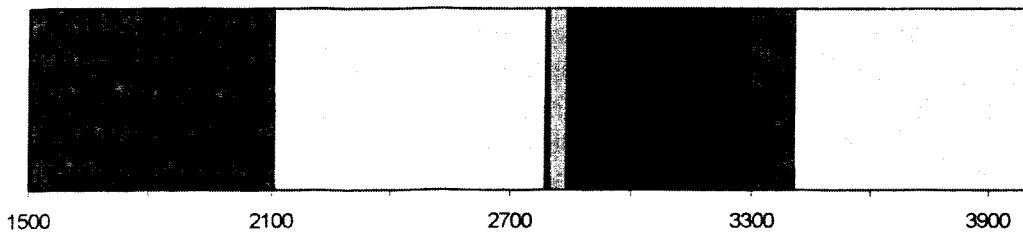
Die beschriebenen Fuzzy-Pattern-Klassifikatoren wurden anhand eines Semibatch-Reaktionsverlaufes mit Fehlern (sz-fzr03, siehe auch Bild 4.13) getestet. Die zeitlichen Verläufe wichtiger Meßgrößen während des Versuches und die Resultate der Gefahren- und Fehlerklassifikation sind im Bild 5.4 dargestellt. Die Ergebnisse zeigen, daß die Fuzzy-Pattern-Klassifikation bei der Gefahrenklassifikation überfordert ist. Es ergeben sich zwar keine völlig unverständlichen Klassifikationen, die Abstufung der Gefahr während des Versuches wird nicht richtig wiedergegeben. Die Gefahr wird im kritischen Bereich (2400 - 3100 Sekunden; Rührerausfall plus Dosierung) unterschätzt. Die Fehlerklassifikation liefert bessere Resultate. Der Rührerausfall ist richtig klassifiziert und die Klasse "fehlerfrei" weist im fehlerhaften Bereich auf das Vorhandensein von Fehlern hin. Das gleichzeitige Ansprechen von "Temperaturfehler" und "hohe Dosierrate" ist in der Einteilung der Fehlerklassen begründet, weil eine hohe Dosierrate meist mit einer Abweichung der Temperatur vom Normalverlauf verbunden ist. Der "Temperaturfehler" ist ein sehr sensibler Fehlerzustand, der auch auf unbekannte, nichttrainierte, Fehler hinweist. Daß der Fehler "hohe Dosierrate" nicht mit dem Dosierungsbeginn angezeigt wird, liegt einmal daran, daß der Fuzzy-Pattern-Klassifikator nur mit Einzelfehlern angelernt werden kann und zum anderen daran, daß diese Klasse nicht nur durch die Dosierungsgeschwindigkeit sondern auch durch Temperaturänderungen charakterisiert wird.



Gefahrenklassifikation (min. Unschärfe = 10%)



Klassenzuordnung entsprechend Sympathiemaximum (Gl. 3,5)



Fehlerklassifikation (min. Unschärfe = 3%)

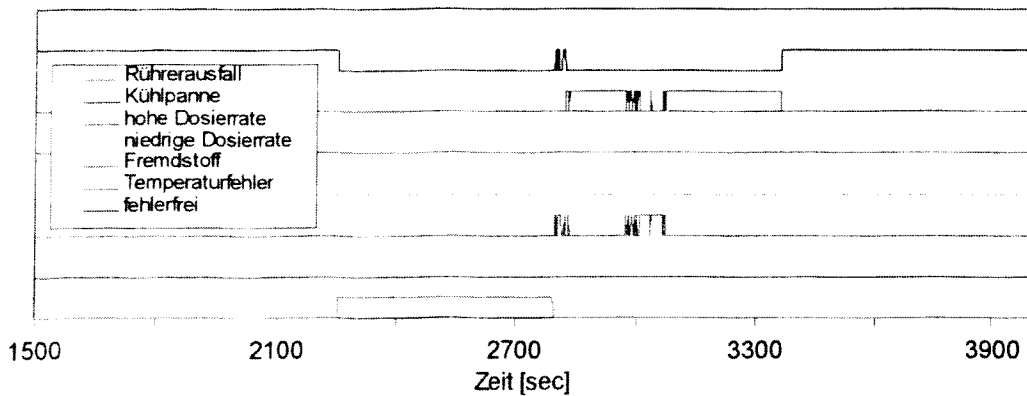


Bild 5.4 Gefahren- und Fehlerklassifikation des Semibatch-Versuches sz-fzr03 mit Fuzzy-Pattern-Klassifikatoren im Vergleich zum zeitlichen Verlauf der Meßdaten.

6. Tensororientierte Klassifikation

Entscheidend für eine richtige Klassifizierung ist die Verwendung richtiger (klassenrelevanter) Merkmale. Solche Merkmale können i. allg. nicht zielgerichtet bereitgestellt werden. Möglich ist jedoch eine Bewertung bereits vorhandener Merkmale nach ihrem klassenbezogenen Informationsgehalt. Deswegen werden zunächst subjektiv wesentlich mehr Merkmale bereitgestellt, als im Klassifikator berücksichtigt werden können. Diese Merkmale werden dann mit Mitteln der statistischen Informationstheorie nach den am meisten informationshaltigen Merkmalen auf eine praktisch handhabbare Merkmalsanzahl selektiert.

Als aussichtsreich für klassenrelevante Merkmale wird die Dynamik der vorliegenden Signale angesehen. Die Erfassung der Signaldynamik erfolgt in einem Zeitfenster, das sich vom aktuellen Zeitpunkt zu einem in konstantem Abstand zurückliegenden Zeitpunkt erstreckt. Im Zeitfenster werden die Signale verschiedenen Umformungen unterzogen, bis schließlich per Zeitdiskretisierung und Wertquantisierung insgesamt ca. 1000 binäre Merkmale gewonnen werden.

Um den Klassenbezug dieser Merkmale bewerten zu können, müssen die Klassen festgelegt sein. Eingeführt werden folgende, den Grad der Prozeßgefährdung kennzeichnende (Gefahren-) Klassen:

Klasse 1: Vorwarnung

Klasse 2: Warnung

Klasse 3: Gefahr

Eine Klasse für den Normalbetrieb wird nicht eingeführt, weil diese lediglich das Nichtvorhandensein der Gefahrenklassen ausdrücken und insofern redundant sein würde.

Die drei Gefahrenklassen wurden subjektiv ausgewählten Abschnitten der Signalrealisierungen in den Dateien sz-fzr 02, 04, 07, 12, 16 überschneidungsfrei zugeordnet. Auffällig ist, daß die Klassen 1 und 2 teilweise zwei nicht zusammenhängende Abschnitte desselben Signalverlaufes kennzeichnen.

Die informationstheoretische Bewertungsgröße heißt Transinformation (eine Entropie). Sie ist keine gerichtete Größe und erlaubt deshalb außer einer Merkmals- auch eine Klassenbewertung. Eine zunächst vorgenommene Klassenbewertung zeigt, daß die Klassen 1 und 2 zu allgemein (allgemeiner als die definierten Merkmale) sind. Dies hätte zur Folge, daß bei der nachfolgenden Merkmalsbewertung auch solche Merkmale unterbewertet würden, die eigentlich hinreichend sicher auf die Klassen 1 und 2 hinweisen. Um dies zu vermeiden, werden die

Klasse 1 in die Unterklassen 1.1 und 1.2 und die Klasse 2 in die Unterklassen 2.1 und 2.2

aufgeteilt, so daß nach fünf Klassen zu klassifizieren ist. Die Klassenteilung bedeutet, daß die nicht zusammenhängenden und bisher einer gemeinsamen Klasse zugehörigen Signalabschnitte nun unterschiedlichen Klassen angehören. Da die Klassenteilung erschöpfend ist, kann aus Klassifizierungsergebnissen trotzdem auf das Vorliegen der ursprünglichen Klassen geschlossen werden. Per Merkmalsbewertung werden von den ca. 1000 definierten Merkmalen ca. 100 klassenrelevante Merkmale selektiert.

Pro Klasse werden im Mittel ca. 15 Referenzmuster gebildet. Dazu wird das Zeitfenster an entsprechend vielen, etwa gleichmäßig verteilten Stellen in den vom Experten vorklassifizierten Signalabschnitten positioniert; die entstehenden Muster erhalten die zugehörigen Klassencodes. Wegen der Überschneidungsfreiheit der vorklassifizierten Signalabschnitte sind die Elemente des Klassencodes disjunkt (vgl. Beispiel 5 im Abschnitt 3.4.3). Referenzmuster werden nur aus den Signalverläufen der Dateien sz-fzr 04, 07, 12, 16 gebildet, während sz-fzr02 als unbekannt angenommen wird und automatisch klassifiziert werden soll. Die Vorklassifizierung von sz-fzr02 dient nur zur Einschätzung der Klassifizierungsergebnisse.

Das unbekannte Muster wird fortlaufend erzeugt und klassifiziert. Darum entstehen die Klassifizierungsergebnisse als Funktionen über der Zeit. Klassifiziert wird nach jeder Klasse separat, s. Bild 6.1.

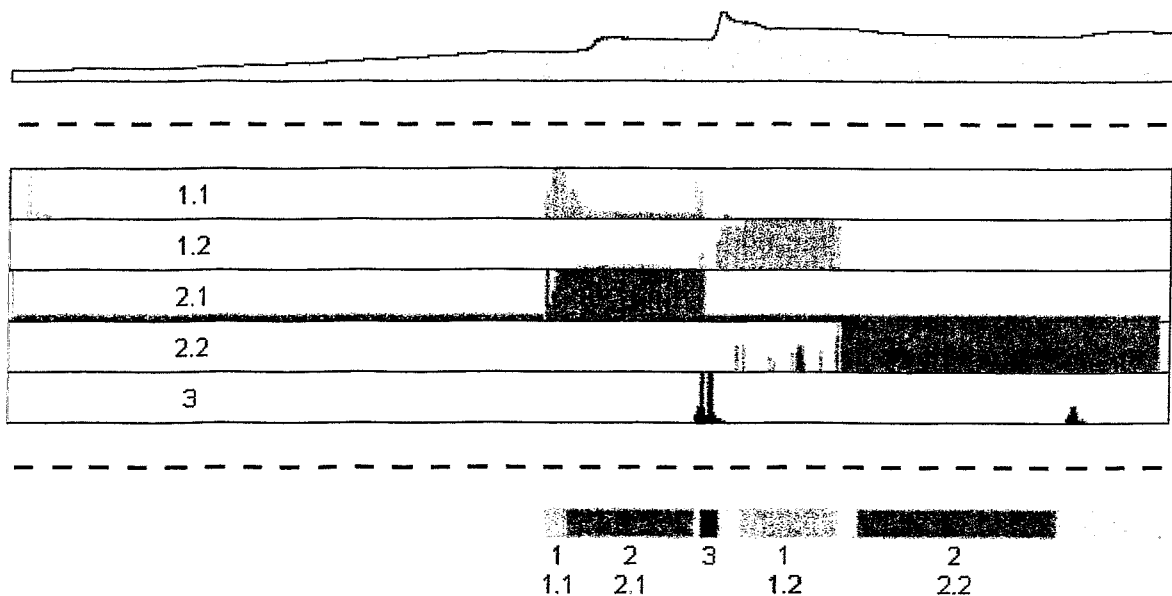


Bild 6.1 Gefahrenklassifizierung des nichttrainierten Semibatch-Reaktionsverlaufes sz-fzr02 bei getrennter Klassifikation nach den einzelnen Klassen unter Verwendung des tensororientierten Klassifizierungsverfahrens (gelb=normal).
 Oben: Für die zeitliche Orientierung: Signal "Druck im Reaktor" aus sz-fzr02
 Mitte: Klassifizierungsergebnisse in den einzelnen Gefahrenklassen
 Unten: Klassenvorgabe

Die einzelnen Klassen sind dort, wo sie subjektiv zugeordnet wurden, auch automatisch im wesentlichen exakt (100%ig richtig) erkannt worden. Außerhalb dieser Bereiche gibt es gewisse Unterschiede; zwei wesentliche werden diskutiert:

- Die Klasse 3 ist mit geringem Gewicht auch am Ende des dargestellten Zeitbereiches erkannt worden. Das ist richtig, denn auch der erfahrene Anlagenbediener schließt an dieser Stelle die Gefahrenstufe 3 nicht aus; es wurde lediglich bei der Vorklassifizierung nicht berücksichtigt.
- Die Klasse 2.2 wurde zu früh und außerdem viel zu lange erkannt. Die Ursache dafür ist sehr genau - und dies bestätigt die Transparenz des Klassifizierungsverfahrens - bei den selektierten Merkmalen zu lokalisieren: 13 der insgesamt 16 selektierten (hochwertigsten) Merkmale sind trotzdem nur wenig klassenrelevant. Nur die drei hochgradig klassenrelevanten Merkmale zur Erkennung der Klasse 2.2 heranzuziehen, wäre nicht sinnvoll. Die Klasse 2.2 wird dann zwar dort nicht mehr erkannt, wo sie auch nicht vorklassifiziert ist, allerdings auch dort nur noch lückenhaft, wo sie tatsächlich vorliegt. Drei Merkmale sind zu wenig, um das Klassifizierungsergebnis noch ausreichend statistisch abzusichern. Im Interesse der Prozeßsicherheit ist der im Bild gezeigte Fall günstiger. Weitere Verbesserungen setzen die Definition verbesserter Merkmale voraus.

7. Vergleich der Klassifikationsverfahren

Ein quantitativer Vergleich der Klassifizierungsleistung des tensororientierten Klassifikators mit den beiden anderen Mustererkennungsverfahren ist exakt nicht möglich, denn diese Leistung hängt nicht allein vom Verfahren sondern auch (und sogar vorrangig) von den verwendeten Merkmalen ab. Die Bereitstellung zweckmäßiger Merkmale ist aber nicht Bestandteil der Verfahren. Zudem werden verfahrensbedingt unterschiedliche, miteinander nicht vergleichbare Merkmale verwendet (beim tensororientierten Verfahren grundsätzlich nur binäre Merkmale).

Hinzu kommt, daß die tensororientierte Klassifikation noch keine Standardmethode ist, die automatisch auf dem PC abläuft. Sie braucht vielmehr noch den Experten, der die Fensterfunktionen für die Merkmalsgewinnung optimiert, um eine möglichst hohe Klassifikationsrate zu erzielen. In der Tabelle 1 sind die Trainings-, Reklassifikations- und Klassifikationseigenschaften der Perceptron-Netze, der Fuzzy-Pattern Klassifikatoren und des tensororientierten Klassifikators zum Vergleich angegeben.

Für diesen Vergleich wurden die drei Mustererkennungsverfahren mit denselben Ausgangsdaten von Semibatch-Prozessen (mit Fehlern) angelernet. Die Reklassifikationsrate gibt an, wieviel Prozent der Trainingsdaten richtig zugeordnet werden konnten, wenn den trainierten Klassifikatoren ihre Trainingsdaten wieder zur Klassifikation angeboten wurden. Die Klassifikationsrate bezieht sich dagegen auf Ausgangsdaten, die nicht zum Training benutzt wurden, aber denselben Prozeßverläufen (mit Fehlern) angehören.

Die Generalisierungseigenschaften der Klassifikatoren gegenüber nichttrainierten Prozeßverläufen (mit Fehlern) sind in der Tabelle nicht berücksichtigt worden, weil sie aufgrund der dem Netz unbekanntem Expertenvorgabe quantitativ nicht erfaßt werden können. Wie die umfangreichen Untersuchungen (Kap. 4 und Kap. 5) zeigten, besitzen die Perceptron-Netze die beste Generalisierungsfähigkeit, so daß diese Netze am umfassendsten untersucht wurden.

Wie die Vergleichsdaten in der Tab. 1 verdeutlichen, liefert das Perceptron-Netz bei den meisten Parametern die besten Ergebnisse. Obwohl die Trainingszeit des neuronalen Netzes durch die erhöhte Rechengeschwindigkeit moderner Computer erheblich reduziert werden konnte, liegt sie noch im Minutenbereich und ist damit wesentlich größer als die Trainingszeit (einige Sekunden) der Fuzzy-Pattern-Klassifikatoren. Bei der Überwachung von schnellen Prozeßverläufen wäre deshalb gegenwärtig nur ein on-line-Training oder Nachlernen zwischen den Überwachungsschritten mit Fuzzy-Logik möglich.

Zur on-line Klassifikation sind alle drei Klassifikatoren geeignet, da die Klassifikationszeit eines Musters einerseits unterhalb einer Sekunde liegt, andererseits die Datenerfassungszyklen in chemischen Anlagen in der Größenordnung von ca. 10 Sekunden sind (vgl. Kap. 3.4).

Der Vergleich zeigt eindeutig, daß mit den Perceptron-Netzen sowohl bei der Zustandsklassifikation als auch bei der Gefahren- und Fehlerklassifikation wesentlich bessere Reklassifikationsraten und Klassifikationsraten im Vergleich zu den Fuzzy-Pattern-Klassifikatoren erreicht wurden. Die Gründe liegen darin, daß die Fuzzy-Klassifikatoren eine clusterorientierte Klassenbildung bezüglich jedes Merkmals verwenden, wohingegen kontinuierliche Übergänge der Prozeßparameter bei den von den Experten eingeteilten Klassen der chemischen Prozeßverläufe vorliegen. Die daraus resultierenden Schwierigkeiten wurden in Kap. 5 beschrieben. Durch eine zusätzliche Klasse "fehlerfrei" bei der Fehlerklassifikation konnte die (Re)Klassifikationsrate von 80% auf 99% erhöht werden.

Die Klassifikationsergebnisse der Perceptron-Netze sind dagegen auch ohne Nachverarbeitung der Ausgangsneuronen-Werte nutzbar. Das jeweils erste Resultat (siehe Tab. 1) berücksichtigt nur Ausgangsneuronen-Werte größer als 0.9 als korrekt zugeordnet, während beim zweiten Wert eine Schwelle größer als 0.5 für die Klassenzugehörigkeit angenommen wurde. Durch eine Nachverarbeitung, die beim Vergleich nicht verwendet wurde und die die absoluten Werte und Relationen der Klassenzugehörigkeiten für die Klassenentscheidung berücksichtigt, können die Klassifikationsergebnisse noch weiter verbessert werden.

Vergleichswerte der tensororientierten Klassifikation liegen nur für die Gefahrenklassifikation vor. Gegenüber der Fuzzy-Pattern-Klassifikation werden wesentlich bessere Ergebnisse erzielt, die jedoch noch unter den Resultaten des Perceptron-Netzes liegen (siehe Tab. 1). Da es sich bei den tensororientierten Methoden um eine absolut neue Entwicklung handelt, sind die Möglichkeiten aber mit Sicherheit bei

weitem noch nicht ausgeschöpft.

Tabelle 1 Trainings- und Klassifikationseigenschaften

Klassifikator	Perceptron-Netz	Fuzzy-Logik	Tensororientierte Klassifikation
Trainingszeit	1 - 5 min	5s	20min
Klassifikationszeit	< 1s	< 1s	< 1s
Reklassifikationsrate			
- Zustand	100%	75-90%	-
- Gefahr	96-98%*)	65%	90%
- Fehler	98-99%	80-99% ^Δ)	-
Klassifikationsrate			
- Zustand	99-100%	75-90%	-
- Gefahr	96-98%	65%	85%
- Fehler	98-99%	80-99% ^Δ)	-

Δ zusätzlich Klasse "fehlerfrei"

*) Klassenzugehörigkeitsschwelle >0.9 bzw. >0.5 (zweites Resultat)

8. Schlußfolgerungen und Ausblick

Die wesentlichen Ergebnisse des Vorhabens werden im folgenden thesenartig zusammengefaßt.

Im Rahmen des Vorhabens wurde ein Konzept zur Identifizierung gefährlicher Betriebszustände mit Hilfe einer fortgeschrittenen Mustererkennungsmethode entwickelt und in einer Laborreaktoranlage beispielhaft bei einer exothermen Referenzreaktion getestet.

Durch den Einsatz von Mustererkennungsverfahren kann die sehr schwierige und z.T. sogar unmögliche analytische Modellierung komplexer, nichtlinearer chemischer Prozesse grundsätzlich umgangen werden. Zu diesem Zweck wurden die Mustererkennungsverfahren mit Hilfe von Signalmustern der bestimmungsgemäßen und nichtbestimmungsgemäßen Betriebszustände in einer überwachten Prozedur trainiert. Das heißt, das Verfahren wurde gleichzeitig mit den Signalmustern und mit den vom Experten vorgegebenen Zustandsklassifikationen konfrontiert. Auf diese Weise wird der nichtlineare Zusammenhang zwischen Prozeßparametern und Entscheidungsergebnis in den freien Parametern des Verfahrens (z. B. Verbindungsstärken bei neuronalen Netzen) abgebildet. Die dazu notwendigen Prozeßdaten wurden bei UMSICHT in einer im Rahmen des Verbundvorhabens errichteten Versuchsanlage generiert.

In dem Laborreaktor wurde als Referenzprozeß die stark exotherme säurekatalysierte Veresterung von Essigsäureanhydrid mit Methanol halbkontinuierlich (Semibatch-Betrieb) und kontinuierlich durchgeführt. Hierbei wurde im gezielt gestörten Betrieb

das Prozeßverhalten bei typischen Fehlern (z. B. Rührerausfall, Kühlpanne, hohe Dosierrate, niedrige Dosierrate, Fremdstoff im Reaktionsgemisch, Temperaturfehler usw.) aufgezeichnet, um einerseits die Mustererkennungsverfahren trainieren zu können, andererseits anschließend gestörte Prozeßverläufe mit Hilfe des trainierten Klassifikators bewerten zu können (UMSICHT-Abschlußbericht, Förderkennzeichen 01RG94248).

Um die Bewertung des Gefährdungspotentials der verschiedenen Störungen zu erleichtern und das Training der Musterklassifikatoren auch mit numerisch simulierten Prozeßdaten zu ermöglichen, wurde weiterhin bei UMSICHT ein Simulator für den Laborreaktor entwickelt.

Zur Simulation und sicherheitstechnischen Bewertung von Störungen wurde auch die im FZR vorhandene kommerzielle Prozeßsimulations-Software BatchCAD genutzt. Diese Untersuchungen zeigten, daß die häufig als Unfallursache auftretenden Rührerausfälle sowohl mit BatchCAD als auch mit dem entwickelten Simulator CASI (Oberhausen) nicht simuliert werden können (Anhang A.3). Die Ursache liegt in dem vorausgesetzten homogenen Vermischungsmodell, das bei Rührerausfall nicht gilt. Darüber hinaus zeigten die Untersuchungen, daß zur Früherkennung von gefährlichen Störungen die Messung von lokalen Temperaturverteilungen im Reaktionsgefäß von besonderer Bedeutung sind.

Mit diesen Prozeßdaten wurden unterschiedliche Mustererkennungsverfahren (Fuzzy-Pattern-Klassifikation, tensororientierte Klassifikation und verschiedene Typen neuronaler Netze) auf ihre Anwendungsmöglichkeiten zur Zustandsklassifikation in Chemieanlagen getestet. Der Vergleich zeigt, daß dreischichtige Perceptron-Netze aufgrund ihrer hohen Klassifikationsgenauigkeit und guten Generalisierungsfähigkeit gegenwärtig am besten zur Identifizierung gefährlicher Betriebszustände in exothermen chemischen Prozessen geeignet sind (Kap. 4). Deshalb wurden diese neuronalen Netze im Rahmen des Projektes am umfassendsten untersucht.

Der überwiegende Teil der Untersuchungen erfolgte bei Semibatch-Prozeßführung, weil hier infolge transienter Betriebsoperationen gefährliche Betriebszustände wesentlich häufiger als bei kontinuierlicher Fahrweise auftreten können (Störfallstatistik: 5-fache Häufigkeit von Chemieunfällen bei diskontinuierlicher Fahrweise [beza81]).

Der Stand der Technik in der Zustandsklassifikation mit Hilfe neuronaler Netze ist die korrekte Zuordnung der Trainingsdaten (Reklassifikation) und die Klassifikation von Mustern, die nicht beim Training benutzt wurden, aber zum Bestand der trainierten Datenbereiche (=Betriebszustände) gehören.

Das angestrebte Projektziel, gefährliche Betriebszustände mit EDV-gestützten Erkennungsmethoden zu identifizieren, wurde durch die Anwendung von dreischichtigen Perceptron-Netzen erreicht. Mit den neuronalen Zustandsklassifikatoren konnten sowohl bekannte als auch unbekannte (nichttrainierte) Reaktionsverläufe sehr gut zugeordnet werden. Selbst unerwünschte Betriebszustände, die sich bei Auftreten von

Mehrfachfehlern in der Anlage ergeben, können sinnvoll bewertet und klassifiziert werden.

Durch die Verbesserung der Generalisierungseigenschaften ist es gelungen, auch nichttrainierte Reaktionsverläufe mit Hilfe der Perceptron-Netze korrekt zu klassifizieren. Das wurde erreicht, indem

- die Netzstruktur (z. B. Nutzung einer minimalen Anzahl von Hidden-Neuronen zum Erreichen der Reklassifikations- und Klassifikationsraten von 100%) optimiert wurde,
- geeignete Normierungen der Prozeßvariablen vorgenommen wurden (z. B. Temperaturnormierung bzgl. Normalbetriebstemperaturen),
- signifikante Merkmale zur Charakterisierung der Klassen ausgewählt wurden (z. B. zeitliche Temperaturänderungen, Temperaturdifferenzen usw.) und
- Daten auch von extremen Bereichen der Prozeßvariablen (z.B. Durchgehen der Reaktion) zum Netztraining herangezogen wurden.

Die verbesserten Generalisierungseigenschaften sind äußerst wichtig, insbesondere um die Methodik auf andere Anlagen und Prozesse übertragen zu können. Die Klassifikationszeiten einzelner Muster konnten unterhalb eine Sekunde abgesenkt werden, so daß die Perceptron-Netze für eine on-line-Überwachung geeignet sind. Gegenwärtig ist das on-line-Nachlernen mit diesem Netztyp zwischen zwei Meßzyklen nicht möglich, weil alle Trainingsdaten angeboten werden müssen. Ebenso ist das selbständige Erlernen von unbekanntem fehlerhaften Betriebszuständen mit Perceptron-Netzen gegenwärtig nicht realisierbar.

Dynamisch ablaufende Prozeßänderungen wurden in die qualitative Zustandsbewertung einbezogen, indem zusätzliche Merkmale berechnet und in die Merkmalsvektoren integriert werden, die die zeitliche Struktur, insbesondere die Gradienten charakterisieren. Beispielsweise wurden neben den ersten Ableitungen einiger Signale (Temperatur, Druck, Dosierung) auch die zweite Ableitung der Reaktortemperatur als Merkmal genutzt, die die Änderung der Reaktionsgeschwindigkeit z.B. bei einer durchgehenden Reaktion charakterisiert.

Darüber hinaus sind Perceptron-Netze in der Lage, das Gefährdungspotential entsprechend den Expertenvorgaben zu bewerten. Zu diesem Zweck mußten jedoch separate Perceptron-Netze für die Gefahren- und Fehlerklassifikation trainiert werden, um möglichst auch nichttrainierte Reaktionsverläufe richtig klassifizieren zu können (Kap. 4.3).

Da ein weites Spektrum von nichttrainierten Reaktionsverläufen klassifiziert wurde, die Perceptron-Netze bzgl. der Früherkennung gefährlicher Betriebszustände sensibilisiert (d.h. hohe Empfindlichkeit der Voralarm-Klasse) und die Netze bzgl. der sicherheitstechnisch optimalen Betriebstemperatur normiert wurden, sank die Klassifikationsgenauigkeit in einigen Fällen etwas ab. Das könnte jedoch durch die Erweiterung des Lerndatensatzes und durch Nachlernen sowie die Nachbearbeitung der Klassifikationsresultate mit einer Auswertelogik verbessert werden.

Die Untersuchungen zeigten, daß es sinnvoll ist, spezielle Perceptron-Netze für die Überwachung diskontinuierlicher und kontinuierlicher chemischer Prozesse einzusetzen (Kap. 4.4).

Durch eine dezentrale Signalerfassung und Zustandsklassifikation, die sich an der räumlichen Struktur der Chemieanlage orientiert, wird die Menge der zu übertragenden Informationen erheblich reduziert und die Anforderungen an die Auslegung der Datenkopplung verringert. Eine Nachrüstung von Industrieanlagen ist damit kostengünstiger zu realisieren.

Die Realisierung des prototypischen Einsatzes eines on-line Klassifikators an einem chemischen Prozeß konnte an der Versuchsanlage aus gerätetechnischen Gründen nicht realisiert werden (Kap. 3.5). Alle im Rahmen des Projektes entwickelten off-line Klassifikatoren sind aber geeignet, auf der im FZR vorhandenen gerätetechnischen Plattform im on-line Betrieb eingesetzt zu werden.

Die Datenkopplung zwischen den einzelnen Meßgeräten der chemischen Anlage und dem Zustandserkennungssystem wurde so ausgelegt, daß der Host-Rechner im Prinzip auf alle im System verfügbaren Primärdaten zurückgreifen kann (Kap. 3.5). Dieser Zugriff ist für die Auslegung und Weiterentwicklung der Zustandsklassifikatoren sowie für Service-Zwecke (z. B. Sensorüberprüfung) notwendig. Die Datenübertragung muß für diese Zwecke nicht on-line erfolgen.

Die Datenkopplung über TCP/IP-Protokoll und COM-Server erwies sich als sehr flexibel einsetzbar, ohne daß merkliche Unterschiede zur direkten Kopplung erkennbar waren. Diese Kopplungsart hat sich im Nahbereich und bei der Datenfernübertragung über Internet bewährt.

Das Vorhaben hat insgesamt die Voraussetzungen geschaffen, um die automatisierte Anlagenüberwachung mit Mustererkennungsverfahren nun auch an Pilot- und Industrieanlagen erproben zu können. Dabei kann insbesondere die Überwachung hinsichtlich optimaler Prozeßführung und Vermeidung von unerwünschten Nebenprodukten ins Auge gefaßt werden.

9. Publikation der Ergebnisse

Im Zusammenhang mit der Bearbeitung des Verbundprojektes wurden bisher folgende Beiträge und Vorträge veröffentlicht bzw. gehalten:

Veröffentlichungen

Hessel, G., W. Schmitt, K. van der Vorst, F.-P. Weiß, J. Neumann, S. Schlüter:
Anwendungsmöglichkeiten neuronaler Netze zur Fehlererkennung in Chemieanlagen.
Tagungsband zu den DECHEMA-Jahrestagungen, Fachtreffen Sicherheitstechnik,
Wiesbaden, 21.-23.05.1996, Band II, S. 86-88

Hessel, G., W. Schmitt, K. van der Vorst, F.-P. Weiß: *Anwendung neuronaler Netze zur Identifizierung gefährlicher Betriebszustände in Chemieanlagen*. Preprints, 3. Fachtagung Anlagen-, Arbeits- und Umweltsicherheit, 07.-08.11.1996, Köthen, S. 141-147

Hessel, G., W. Schmitt, K. van der Vorst, F.-P. Weiß, J. Neumann, S. Schlüter: *Fault Diagnosis in Chemical Semibatch Reactors Using Neural Networks*. Proc. of 5th European Congress on Intelligent Techniques and Soft Computing, Aachen, Germany, September 08-11, 1997, pp. 1704-1708

Hessel, G., W. Schmitt, K. van der Vorst, F.-P. Weiß, J. Neumann, S. Schlüter, A. Steiff: *Identification of dangerous states in chemical batch reactors using neural networks*. Proc. of IFAC Symposium SAFEPROCESS '97, August 26-28, 1997, Hull, UK, pp. 926-931

Hessel, G., W. Schmitt, N. Tefera, K. van der Vorst, F.-P. Weiß, J. Neumann, S. Schlüter: *Untersuchung von Störungen in einem Semibatch-Versuchsreaktor*. Preprints, 3. Merseburger Fachtagung Automatisierung, Meßmethoden und Experimente in der chemischen Reaktionstechnik, 06.-07. November 1997, Merseburg, S. 109-116

Hessel, G., W. Schmitt, N. Tefera, K. van der Vorst, F.-P. Weiß, J. Neumann: *Danger Assessment and Fault Isolation in Chemical Plants Using Neural Networks*. Proc. of 6th European Congress on Intelligent Techniques and Soft Computing EUFIT '98, Aachen, Germany, September 07-10, 1998 (accepted paper)

Neumann, J., S. Schlüter, P.-M. Weinspach: *Experimentelle Untersuchungen zur Früherkennung sicherheitsrelevanter Betriebszustände in Chemieanlagen mit neuronalen Netzen*. Preprints, 3. Workshop Reaktionskalorimetrie, DECHEMA e.V., Hamburg, 18.04.1997, S. 83-86

Neumann, J., S. Schlüter, A. Steiff, P.-M. Weinspach: *Früherkennung sicherheitsrelevanter Betriebszustände in Chemieanlagen mit neuronalen Netzen*. in: Freska, C. (eds): *Proceedings in Artificial Intelligence*, Vol. 5, pp. 486-492, infix, 1997

Neumann, J., G. Deerberg, S. Schlüter, W. Schmitt, G. Hessel: *Früherkennung sicherheitsrelevanter Betriebszustände in Chemieanlagen mit neuronalen Netzen*. Tagungsband zu den DECHEMA-Jahrestagungen, Fachtreffen Sicherheitstechnik, 26.-28.5.1998, Wiesbaden, S. 149

Schlüter, S., J. Neumann, A. Steiff, W. Schmitt, G. Hessel, K. van der Vorst, F.-P. Weiß: *Früherkennung gefährlicher Betriebszustände in Chemieanlagen mit neuronalen Netzen*. Sonderheft: at (Automatisierungstechnik), 2 (1998), S. 104-110

Vorträge

Hessel, G.: *Application of miniSYS for early detection of dangerous operating states in complex industrial plants*. COPERNICUS - 7th Workshop, 23rd-25th April 1997, Prague

Neumann, J.: *Erkennung gefährlicher Zustände*. DECHEMA/GVC-Arbeitsausschuß "Sicherheitsgerechtes Auslegen von Chemieapparaten", Frankfurt/Main, 04.-05.10.1995

Neumann, J.: *Zur Identifizierung gefährlicher Betriebszustände in Chemieanlagen*. DECHEMA/GVC-Arbeitsausschuß "Reaktionstechnik sicherheitstechnisch schwieriger Prozesse", Oberhausen, 18.-19.03.1996

Neumann, J.: *Zur Erkennung gefährlicher Betriebszustände in Chemieanlagen*. DECHEMA/GVC-Arbeitsausschuß "Sicherheitsgerechtes Auslegen von Chemieapparaten", Rossendorf, 15.-16.10.1996

Neumann, J.: *Früherkennung sicherheitsrelevanter Betriebszustände in Chemieanlagen mit neuronalen Netzen*. Fuzzy-Neuro-Systeme '97 - Computational Intelligence - 4. Internationaler Workshop, Soest 12.-14.03.1997

Neumann, J.: *Früherkennung sicherheitsrelevanter Betriebszustände in Chemieanlagen mit neuronalen Netzen*. IVSS Sektion Chemie, Anlagensicherheit in der Chemischen Industrie - Strategien der Sicherheitstechnik, ACHEMA 97, Frankfurt/Main, 09.-11.06.1997

Neumann, J., W. Schmitt: *Zustandserkennung in Chemieanlagen mit neuronalen Netzen*. DECHEMA/GVC - Arbeitsausschuß "Sicherheitsgerechtes Auslegen von Chemieapparaten", Dortmund, 26./27.11.1997

Schmitt, W., A. Steiff: *Anwendungsmöglichkeiten neuartiger EDV-gestützter Erkennungsmethoden zur Identifizierung gefährlicher Betriebszustände in Chemieanlagen*. Preprints des Workshops "Reaktionsführung bei chemischen Synthesen im technischen Maßstab mit Unterstützung durch moderne Methoden elektronischer Datenverarbeitung", Bonn, 24.05.1995, S. 67-75

Schmitt, W.: *Identifizierung gefährlicher Betriebszustände in Batch-Reaktoren mit Mustererkennungsmethoden*. DECHEMA/GVC-Arbeitsausschuß "Sicherheitsgerechtes Auslegen von Chemieapparaten", Rossendorf, 15.-16.10.1996

van der Vorst, K.: *Fault Detection in Chemical Processes using Neural Networks*. COPERNICUS Workshop 11.-13.02.1996, Liberec

10. Literaturverzeichnis

- [arbi95] Arbib, M.A. (Ed.): The Handbook of Brain Theory and Neural Networks, MIT Press, 1995
- [benk96] Benkhedda, H. and R.J. Patton: Fault diagnosis using quantitative and qualitative knowledge integration, Proc. UKACC Int. Conf. Control '96, 2-5 Sept., 1996, Exter, U.K., Vol. 2, pp. 849-854
- [benk 97] Benkhedda, H., R.J. Patton: Information Fusion in Fault Diagnosis Based on B-Spline Networks, Proc. Of IFAC Symposium on Fault Detection, Supervision and Safety for Technical Processes-SAFEPROCESS'97, August 26-28, 1997, Hull (UK), pp. 681-686.
- [beza81] Benuzzi, A. Und Zaldivar, J.M. (Eds.): Safety of Chemical Batch Reactors and Storage Tanks. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1981, pp. 49-77.
- [fan93] Fan, J. Y.; M. Nikolaou, R. E.White: An Approach to Fault Diagnosis of Chemical Processes via Neural Networks, AIChE Journal 39 (1993), 82-88
- [froese96] Froese, Th.: Neuronale Netze in Meßtechnik und Sensorik, Mess. Tec 4, 1996, S. 130-132
- [gomm 95] Gomm, J.B.: Proces fault diagnosis using a self-adaptive neural network with on-line learning capabilities, Preprints of IRAC Workshop On-line fault detection and supervision in the chemical industries, June 12-13, 1995 Newcastle (UK), pp. 78-83.
- [hess97a] Hessel, G., W. Schmitt, K. van der Vorst, F.-P. Weiß, J. Neumann, S. Schlüter: Fault Diagnosis in Chemical Semibatch Reactors Using Neural Networks. Proc. of 5th European Congress on Intelligent Techniques and Soft Computing, Aachen, Germany, September 08-11, 1997, pp. 1704-1708
- [hess97b] Hessel, G., W. Schmitt, K. van der Vorst, F.-P. Weiß, J. Neumann, S. Schlüter, A. Steiff: Identification of dangerous states in chemical batch reactors using neural networks. Proc. of IFAC Symposium SAFEPROCESS '97, August 26-28, 1997, Hull, UK, pp. 926-931
- [hess97c] Hessel, G., W. Schmitt, N. Tefera, K. van der Vorst, F.-P. Weiß, J. Neumann, S. Schlüter: Untersuchung von Störungen in einem Semibatch-Versuchsreaktor. Preprints, 3. Merseburger Fachtagung Automatisierung, Meßmethoden und Experimente in der chemischen Reaktionstechnik, 06.-07. November 1997, Merseburg, S. 109-116

- [hess98] Hessel, G., W. Schmitt, N. Tefera, K. van der Vorst, F.-P. Weiß, J. Neumann: Danger Assessment and Fault Isolation in Chemical Plants Using Neural Networks. Proc. of 6th European Congress on Intelligent Techniques and Soft Computing EUFIT '98, Aachen, Germany, September 07-10, 1998 (accepted paper)
- [hopp98] Hoppe, D.: Nutzung der statistischen Informationstheorie und eines tensororientierten Klassifizierungsverfahrens zur Signalerkennung an einem chemischen Prozeß. FZR-Institutsbericht, in Vorbereitung
- [hosk88] Hoskins, J. C. and D. M. Himmelblau: Artificial Neural Network Models of Knowledge Representation in Chemical Engineering, *Comput. chem. Engng.* Vol. 12, No. 910, pp. 881-890, 1988
- [hosk90] Hoskins, J.C.; K.M. Kaliyur, D.M. Himmelblau: Incipient Fault Detection and Diagnosis Using Artificial Neural Networks, International Joint Conference on Neural Networks, San Diego, USA, 17-21 Juni 1990, I-81-86
- [hosk91] Hoskins, J.C.; K.M. Kaliyur, D.M. Himmelblau: Fault Diagnosis in Complex Chemical Plants Using Artificial Neural Networks, *AIChE Journal* 37 (1991), 137-141
- [hosk92] Hoskins, J.C.; D.M. Himmelblau: Process Control via Artificial Neural Networks and Reinforcement Learning, *Computers & Chemical Engineering* 16 (1992), 241-251
- [hsu92] Hsu, Y.; C. Yu: A Self-Learning Fault Diagnosis System Based on Reinforcement Learning, *Ind. Eng. Chem. Res.* 8 (1992), 1937-1946
- [mart93] Martinez, D.; H. Poulard, M. Chan, A. Herrera, L. Abadie and D. Esteve: Incremental Learning in a Multilayer Neural Network for Process-Fault Detection, Proceedings of the International Conference on Fault Diagnosis TOOLDIAG'93, Toulouse (France), April 5-7, 1993, pp. 154-159
- [pate 97] Patel, V.C., V. Kadiramanathan and H.A. Thompson: Autonomously learning fault detection system for gas turbine engines, Proc. Of IFAC Symposium on-Fault Detection, Supervision and Safety for Technical Processes-SAFEPROCESS'97, August 26-28, 1997 Hull (UK), pp.83-88.
- [pate 969] Patel, V.C., V. Kadiramanathan and H.A. Thompson: A Self-Learning Fault Detection System for Gas Turbine Engines, Proc. Of the UKACC International Conference on Control'96, Exeter, UK, pp. 867-872.
- [pham 95] Pham, D.T., X. Liu: *Neural Networks for Identification Prediction and Control*, Springer-Verlag London 1995.

- [schl98] Schlüter, S., J. Neumann, A. Steiff, W. Schmitt, G. Hessel, K. van der Vorst, F.-P. Weiß: *Früherkennung gefährlicher Betriebszustände in Chemieanlagen mit neuronalen Netzen*. Sonderheft: at (Automatisierungstechnik), 2 (1998), S. 104-110
- [schö90] Schöneburg, E.; N. Hansen, A. Gawelczyk: *Neuronale Netzwerke* Markt & Technik Verlag AG, Haar bei München, 1990
- [schu97] Schubert, M., B. Köppen-Seliger and P. M. Frank: Recurrent neural network for nonlinear system modelling in fault detection , Proc. Of IFAC Symposium on Fault Detection, Supervision and Safety for Technical Processes-SAFEPROCESS'97, August 26-28, 1997, Hull (UK), pp. 713-718.
- [sors91] Sorsa, T.; N. Heikki Koivo; Hannu Koivisto: Neural Networks in Process Fault Diagnosis, IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics, Vol. 21, No. 4, July / August 1991
- [sors93] Sorsa, T.; G. Suontausta and H.N. Koivo: Dynamic Fault Diagnosis Using Radial Basis Function Networks, Proceedings of the International Conference on Fault Diagnosis, TOOLDIAG'93, Toulouse (France), April 5-7, 1993, pp. 160-169
- [vaid92a] Vaidyanathan, R.; Venkatasubramanian, V.: Representing and Diagnosing Dynamic Process Data Using Neural Networks, Engng. Applic. Artif. Intell. 5 (1992), 11-21
- [vaid 92b] Vaidyanathan, R.; Venkatasubramanian, V.: On the Nature of Fault Space Classification Structure Developed by Neural Networks, Engng. Applic. Artif. Intell. 5 (1992), 289-297
- [venk89] Venkatasubramanian, V.; Chan, K.: A Neural Network Methodology for Process Fault Diagnosis, AIChE Journal, December 1989, Vol. 35, No. 12, pp. 1993-2002
- [venk90] Venkatasubramanian, V.; R. Vaidyanathan, Y. Yamamoto: Process Fault Detection and Diagnosis Using Neural Networks - I. Steady-State Processes, Computers & Chemical Engineering 14 (1990), 699-712
- [wata89] Watanabe, K.; I. Matsuura, M. Abe and D. M. Himmelblau: Incipient Fault Diagnosis of Chemical Processes via Artificial Neural Networks, AIChE Journal, November 1989, Vol. 35, No. 11, pp. 1803-1812
- [wata91] Watanabe, K.; S. Hirota: Incipient Diagnosis of Multiple Faults in Chemical Processes via Hierarchical Artificial Neural Network, IECON (1991), 1500-1505

- [yu96] Yu, D.L., D.N. Shields and S. Daley: A hybrid fault diagnosis approach using neural networks, *Neural Computing and Applications*, Vol. 4, No. 1 (1996), pp. 21-26
- [zhan 95] Zhang, J., A. J. Morris: A comparison of several on-line fault diagnosis system for a CSTR, *Preprints of IRAC Workshop On-line fault detection and supervision in the chemical industries*, June 12-13, 1995 Newcastle (UK), pp. 103-108.
- [zhou97] Zhou, J., S. Bennett: Dynamic System Fault Diagnosis based on Neural Network Modelling, *Proc. IFAC Symposium SAFE PROCESS '97*, August 26-28, 1997, Hull, U.K., Vol. 1, pp. 54-59
- [zupa93] Zupan, J., J. Gasteiger: *Neural Networks for Chemists*, VCH Verlagsgesellschaft Weinheim, 1993, pp. 158-160

A. Anhang

A.1 Meßlanze

Für die sicherheitstechnische Bewertung von exothermen Semibatch- und Batch-Reaktionen hat die experimentelle Simulation eine entscheidende Bedeutung. Für detaillierte in-pile-Messungen wurde deshalb der Laborreaktor in Oberhausen zusätzlich mit einer Meßlanze ausgerüstet. Sie gestattet eine verteilte Temperatur- und Druckmessung im Reaktionsbehälter. Beispielsweise sind fünf NiCr-Ni-Mantelthermoelemente (\varnothing 0,5mm) an der Lanze in verschiedenen Höhen und ein dynamischer Drucksensor zusätzlich im Gasraum angeordnet (Bild A.1). Die Signale der Meßlanze werden simultan zu den Signalen der Betriebsinstrumentierung erfaßt und verarbeitet, wie im Bild 3.2 durch das Signalerfassungsgerät miniSYS und den HP-Analysator schematisch dargestellt ist.

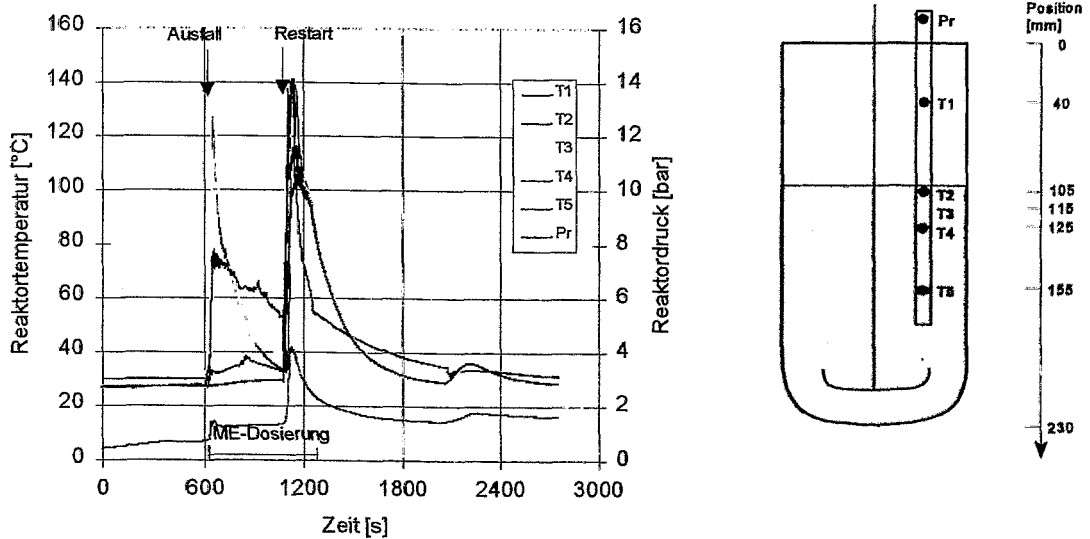


Bild A.1 Druck- und Temperatur-Profile beim 9 min. - Rührerausfall und 12 min. - Methanol - Zudosierung.

Aus der Vielfalt der möglichen Störungen wird im folgenden ein Rührerfehler näher diskutiert, da sein Potential häufig unterschätzt wird, gefährliche Situationen zu verursachen. Bild A.1 zeigt den Einfluß eines Rührerfehlers auf den Verlauf der Reaktor-temperatur und des Druckes. Bei diesem Semibatch-Prozeß werden zunächst bei laufendem Rührorgan Essigsäureanhydrid (ESA) und der Katalysator (Schwefelsäure) vorgelegt und auf die erwünschte Reaktionstemperatur von 28°C temperiert. An-

schließlich wird der Rührer ausgeschaltet, so daß bei der folgenden kontinuierlichen Methanol-Dosierung über einen Zeitraum von 12 Minuten zunächst keine Durchmischung der Reaktanten stattfindet. Aufgrund der geringen Dichte des Methanols kommt es zur Stratifikation (Schichtung). Das bedeutet, daß an der Grenzfläche das einspritzende, leichtere Methanol (Dosierpumpe) sofort mit dem Essig-säureanhydrid reagiert, wie der steile lokale Temperaturanstieg von über 100 Kelvin in den Thermoelementen T2 und T3 erkennen läßt. Infolge geringer Wärmekonvektion bemerkt das untere Thermoelement T5 die lokal durchgehende Reaktion überhaupt nicht, während das 20 mm unterhalb der Grenzfläche befindliche Thermoelement T4 noch einen Temperaturanstieg um ca. 50 Kelvin mißt.

Das weitere lokale Durchgehen wird dann wahrscheinlich durch folgende Effekte gestoppt:

- die einsetzende Naturkonvektion erzeugt eine Durchmischung mit kälterem Essigsäureanhydrid und die exponentielle Beschleunigung der Reaktionsgeschwindigkeit wird gestoppt.
- die entstehenden Produkte bilden eine Zwischenschicht, die verhindert, daß das weiter zudosierte kalte Methanol mit dem darunter befindlichen Essigsäureanhydrid weiter reagieren kann.

Dadurch sinkt die Temperatur des in der Grenzfläche befindlichen Thermoelementes T2 bis auf die Temperatur T1 (dunkelblau) im Gasraum ab.

Wie der Temperaturverlauf von T4 zeigt, bleibt offensichtlich eine Temperaturschichtung im Essigsäureanhydrid erhalten, die aber ständig kleiner wird. Erst nach dem Wiedereinsetzen des Rührers kommt es zur Reaktion des akkumulierten Methanols. Dabei ist der Temperaturanstieg (T2, T3, T4) bis auf etwa 140°C wieder in der Grenzflächennähe am größten. T5, das untere Thermoelement erreicht "nur" ca. 100°C. Es kommt zu einem Druckanstieg auf 3 bar infolge Verdampfung, so daß das Thermoelement T1 im Gasraum bis auf 110°C ansteigt.

Das völlige Durchgehen der Reaktion findet jedoch nicht statt, weil die Durchmischung mit kälteren Reaktanten die weitere Beschleunigung der Reaktionsgeschwindigkeit im Grenzflächenbereich stoppt, wie die gleichmäßige Temperaturverteilung (bei ca. 100°C) innerhalb der Flüssigkeit verdeutlicht. Der weitere Temperaturabfall ist durch das Ende der Methanol-Zudosierung bedingt.

Diese gefährliche Akkumulation der Reaktanten bei Rührerausfällen kommt durch die mangelnde Selbstmischung aufgrund der Dichteverhältnisse zustande. Das Gefährdungspotential ließe sich verringern, wenn Essigsäureanhydrid statt Methanol dosiert würde, welches aufgrund seiner höheren Dichte durch das Methanol sinken würde.

Bild A.2 bestätigt diese Vermutung. Das lokale Durchgehen (Selbstzünden) beginnt hier zunächst im unteren Thermoelement T5. Aufgrund der hohen Temperaturgradienten kommt es zur Naturkonvektion, so daß alle Thermoelemente bis auf die Meßstelle im Gasraum das Durchgehen der Reaktion während des Rührerausfalls registrieren. Die runaway-Reaktion bricht wieder allein zusammen. Die Reaktionsgeschwindigkeit bleibt etwa auf einem Niveau wie beim Restart des Rührers. Durch die nun bessere

Wärmeabfuhr über die Mantelkühlung fällt die Reaktionsgeschwindigkeit infolge der steil sinkenden Reaktortemperatur ebenfalls. Der geringere Druckerhöhung (nur maximal 3 bar) und die niedrigeren maximalen Reaktortemperaturen zeigen, daß eine Dosierungsreihenfolge, die Stratifikationen vermeidet, sicherheitstechnisch günstiger bei Rührerausfällen ist.

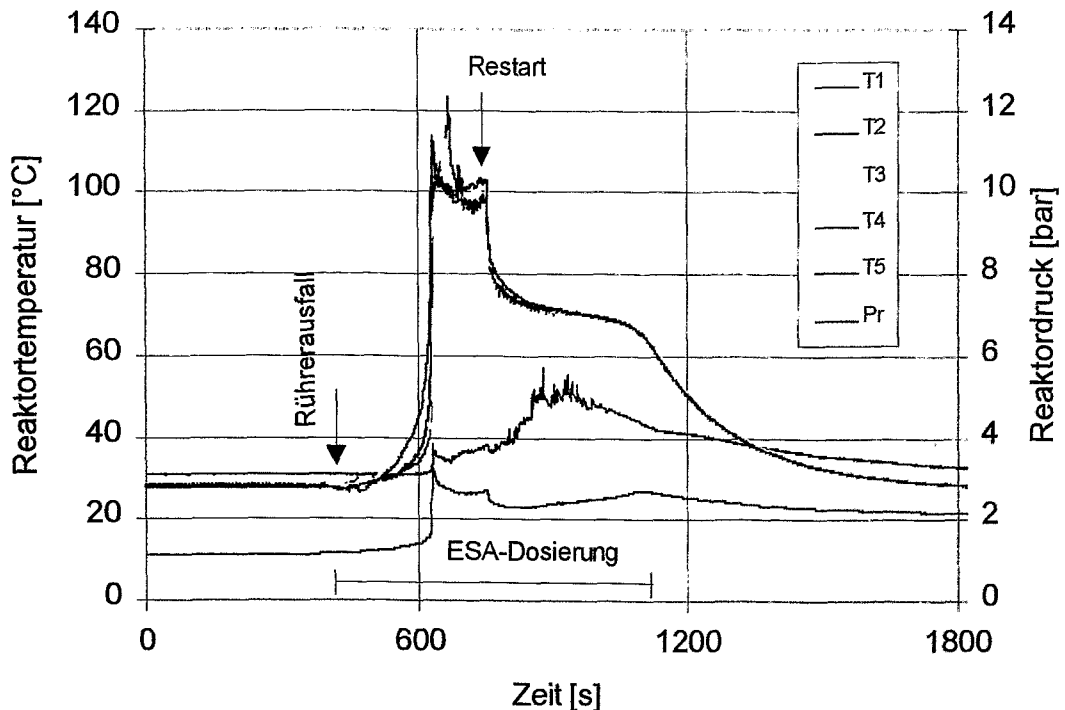


Bild A.2 Druck- und Temperatur - Profile beim 6 min. - Rührerausfall und 12 min. - Essigsäureanhydrid - Zudosierung.

Im allgemeinen können Störungen mit einer dynamischen Prozeßsimulations-Software relativ gut simuliert werden, wenn diese durch Störungsexperimente validiert wurde.

Für diese Zwecke standen der in Oberhausen entwickelte Calorimeter-Simulator CASI und die kommerzielle Software BatchCAD im Forschungszentrum Rossendorf zur Verfügung.

Die numerische Simulation lieferte gute Ergebnisse für die meisten Störungen, z. B. für die Kühlpanne. Sie muß jedoch bei der Simulation des Rührerausfalls versagen, weil eine homogene Vermischung im Rührkessel vorausgesetzt wird.

Diese Probleme bemerkt man jedoch nicht, wenn keine Temperaturverteilungen in Grenzflächennähe gemessen wurden. Dann könnte man nämlich annehmen, daß während des Rührerausfalls aufgrund der fehlenden Durchmischung keine Reaktionswärme erzeugt wird. Diese Annahme ist aber falsch, wie die durchgeführten Experimente zeigten.

Zur Abschätzung der maximalen Temperatur beim Rührer-Restart wurde beispielsweise angenommen, daß die gesamte akkumulierte Methanolmenge innerhalb der folgenden 20s nahezu vollständig abreagiert. Diese abgeschätzte Maximaltemperatur von $T_{r,vak}=160^{\circ}\text{C}$ bei vollständig akkumulierter Reaktantenmenge während des Rührer-ausfalles ist höher als die gemessene lokale Temperatur von $T_{1a}=143^{\circ}\text{C}$ (Bild A.3).

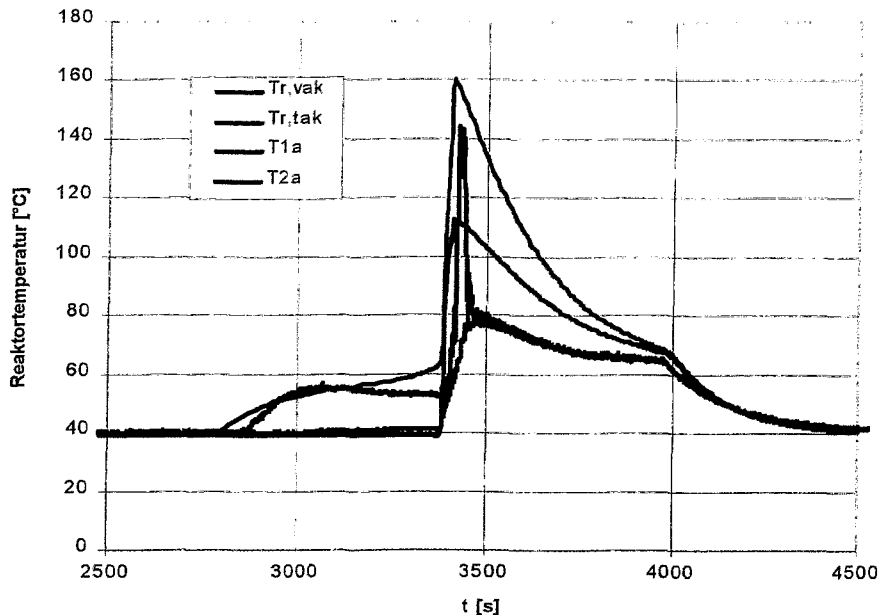


Bild A.3 Vergleich von gemessenen und simulierten Reaktortemperaturen (RC1-Simulator) beim Ausfall und Restart des Rührers während der Methanol-Dosierung (sz-fzr4)

Nimmt man an, daß nur 50% der bisher dosierten Methanolmenge (tak) akkumuliert sind und beim Restart zusätzlich reagieren, wird eine Maximaltemperatur von $T_{r,tak}=112^{\circ}\text{C}$ berechnet, die jedoch zu niedrig ist.

Das Fazit ist, daß die experimentelle Simulation insbesondere von Rührerfehlern für die on-line Überwachung mit neuronalen Netzen wichtig ist, weil Rührerfehler eine häufige Ursache von Störfällen in der chemischen Industrie sind [hess97c].

A.2 Programm minicom

Das in Kapitel 3.5 beschriebene und am Laborreaktor eingesetzte Signalerfassungsgerät miniSYS (siehe auch Kapitel A.1) besitzt eine serielle Schnittstelle, über die das System mit einem einfachen, textorientierten Terminalprogramm bedient werden kann. Zusätzlich besitzt das Gerät aber auch die Möglichkeit, eine paketorientierte Verbindung über diese serielle Schnittstelle aufzubauen. Mit dieser Verbindungsart können vom Hostrechner Funktionen des miniSYS mit einem selbstgeschriebenen Anwendungsprogramm direkt über ein definiertes Protokoll angesteuert werden. Insbesondere

re sind hier die Datenübertragungen komfortabler und doppelt so schnell möglich. Um diese Vorteile zu nutzen, wurde auf den SUN-Workstations unter UNIX ein Programm entwickelt, welches sowohl die textorientierte als auch die paketorientierte Kommunikation mit dem miniSYS bewerkstelligt.

Das Programm verbindet sich über Sockets und TCP/IP mit dem COM-Server, an welchem schließlich das miniSYS angeschlossen ist (Bild 3.2 und 3.3). Mit einfachen Befehlen können dann komplexe Aktionen auf oder mit dem miniSYS gestartet werden. Derzeit sind in der paketorientierten Protokollschicht folgende Befehle implementiert:

- hello
Aktiviert die paketorientierte Protokollschicht.
- put <dateiname>
Überträgt die Datei <dateiname> zum miniSYS.
- get <dateiname>
Überträgt die Datei <dateiname> vom miniSYS.
- abbruch
Bricht eine laufende Aktion der Protokollschicht ab.
- ren <dateialt> <dateineu>
Benennt auf dem miniSYS die Datei <dateialt> in <dateineu> um.
- del <dateiname>
Löscht auf dem miniSYS die Datei <dateiname>.
- cls
Löscht den Bildschirm.
- goodb
Beendet die paketorientierte Protokollschicht.
- quit
Beendet das Programm
- data
Zeigt während einer laufenden Messung die aktuell gemessenen Daten auf dem Bildschirm an.

Befehle, die auf der Protokollebene nicht definiert sind, werden automatisch textorientiert zum miniSYS übertragen und dort dem Betriebssystem zu Bearbeitung übergeben.

A.3 Merkmalsvektoren, Normierungen, Klassen und Netzgrößen

Wie in Kapitel 4.1 erläutert, ist neben der Auswahl des Netztyps und der Netztopologie auch die Gewinnung geeigneter Merkmale und deren Normierung von großer Bedeutung für die Klassifikationsergebnisse und Generalisierungseigenschaften des Netzes. Im folgenden werden hier für die einzelnen Untersuchungen die benutzten Merkmale und deren Normierung aufgelistet. Auf die Normierungsfunktion und die Bedeutung der Parameter \min , \max und r wird an dieser Stelle nicht mehr eingegangen (siehe dazu Kapitel 4.1).

Die in den entsprechenden Kapiteln genannten Ausgangsdimensionen der Netze stimmen nicht immer mit den hier aufgezählten Klassen exakt überein. Dies ist darauf zurückzuführen, daß in den folgenden Auflistungen nur verwendete Klassen erfaßt sind. In den genutzten Datensätzen waren jedoch aus Gründen der einfacheren Bearbeitung grundsätzlich die ursprünglichen 18 Zustandsklassen enthalten. Lediglich bei den neudefinierten Fehler- und Gefahrenklassen wurden die Klassenzahl in den Daten auf 6 bzw. 5 geändert.

A.3.1 Zustandsklassifikation bei simulierten Störfällen, Kap. 4.2.1

Die Normierung der Daten dieser Untersuchung wurde für alle Merkmale linear vorgenommen. Die Intervallgrenzen, \min und \max , wurden über alle verwendeten Daten, für jedes Merkmal getrennt, ermittelt. Das ermittelte Minimum eines Merkmal wurde dann auf 0, das Maximum auf 1 normiert.

Liste der benutzten Eingangssignale:

- Reaktortemperatur
- Manteltemperatur
- Temperatur des Kühlreservoirs
- Druck
- Rührerdrehzahl
- Volumen
- Rührerdrehmoment
- 1. Ableitung der Reaktortemperatur
- spez. Wärme des Reaktorinhaltes
- Volumen
- Masse im Reaktor
- Wärmeübertragungsfläche
- Kalibrierheizleistung
- Reaktionswärme
- F4

Verwendete Zustandsklassen :

- Temperieren
- Heizen
- Kalibrieren (mit Kalibrierheizung)
- Kühlen
- Dosieren (Reaktion)
- Starke Exothermie (Reaktion droht durchzugehen)
- Reaktion fängt sich
- Nachreaktion (Nach Beendigung der Dosierung)

Netzgröße: 15 x 10 x 8 Neuronen

Die Netzgröße gibt die ermittelte optimale Struktur des Perceptron-Netzes an, die die besten Ergebnisse hinsichtlich Klassifikationsgenauigkeit und eine gute Generalisierungsfähigkeit bzgl. nichttrainierter Reaktionsverläufe bei der gestellten Klassifikationsaufgabe lieferte.

Die erste Zahl, die Eingangsneuronen-Anzahl, entspricht der Anzahl der oben aufgelisteten, verwendeten Eingangssignale, während die dritte Zahl, die Anzahl der Ausgangsneuronen, identisch mit der Anzahl der verwendeten Zustandsklassen ist.

Die Anzahl der Hidden-(verdeckten) Neuronen wird durch die zweite Zahl bestimmt. Sie ist im wesentlichen für die Klassifikationsgenauigkeit und für die Generalisierungsfähigkeit verantwortlich und mußte deshalb optimiert werden (z.B. Tests mit variierender Hidden-Neuronenanzahl, Pruning (Löschen von Neuronen)).

Mit einer zweiten Hidden-Neuronenschicht konnten die Ergebnisse nicht verbessert werden, allerdings stieg die Trainingszeit stark an.

A.3.2 Zustandsklassifikation realer Versuchsverläufe, Kap. 4.2.2

Die Normierung der Daten dieser Untersuchung wurde für alle Merkmale linear vorgenommen. Die Intervallgrenzen, min und max, wurden über den gesamten Versuchsverlauf ermittelt, für jedes Merkmal getrennt. Das ermittelte Minimum eines Merkmal wurde dann auf 0, das Maximum auf 1 normiert.

Liste der benutzten Eingangssignale:

- Temperatur des Zudosierten
- Austauschfläche
- Dosiermenge
- spezifische Wärme der Reaktionsmasse
- 1. Ableitung Temperatur der Reaktionsmasse
- Masse im Reaktor
- korrigierte Masse im Reaktor
- Basislinie
- Kalibrierheizleistung
- Reaktionswärme
- korrigierte Reaktionswärme
- Rührerdrehzahl
- berechnete Manteltemperatur
- Kühlöltemperatur
- Manteltemperatur
- Reaktortemperatur
- Produkt totaler Wärmedurchgangskoeff. mit Fläche
- totaler Wärmedurchgangskoeffizient
- virtuelles Volumen

Verwendete Zustandsklassen :

- Temperieren
- Heizen
- Kalibrieren
(mit Kalibrierheizung)
- Kühlen
- Dosieren (Reaktion)
- Starke Exothermie (Reaktion droht durchzugehen)
- Reaktion fängt sich

Netzgröße: 19 x 15 x 7 Neuronen

A.3.3 Untersuchungen zur Generalisierung verschiedener Solltemperaturen, Kap. 4.2.3

Tabelle 2 Normierung der verschiedenen Signale bei der Zustandsklassifikation

Signalname	Normierungsart	min	max	r	Bem.
Füllstand	linear	0	1		
1. Ableitung Füllstand	linear	0	0,002		
Zuspeisetemperatur ME	sigmoid	-0,5	0,5		prozent. Abw. von Solltemp.
Zuspeisetemperatur ESA	sigmoid	-0,5	0,5		dito
Temp. in der Auslaßleitung	sigmoid	-0,5	0,5		dito
Kugelhähne	konstanter Wert				unbenutzt
Druck	linear	0	10		
1. Ableitung Druck	linear	-0,1	0,2		
1. Ableitung Waagesignal 1	linear	0	0,002		
1. Ableitung Waagesignal 2	linear	0	0,002		
1. Ableitung Waagesignal 3	linear	0	0,002		
1. Ableitung Waagesignal 4	linear	0	0,002		
Wärmekapazität des Inhalts	linear	1200	5000		
1. Ableitung Reaktortemperatur	sigmoid	-0,1	0,1		
Kalibrierheizleistung	linear	0	25		
bilanz. Reaktionsleistung	linear	-200	600		
1. Ableitung bilanz. Reaktionsleistung	sigmoid	-50	50		
Rührerdrehzahl	prozent. sigmoid	-0,6	0,6	0,5	prozent. Abw. von Soll-drehzahl
Kühlmitteltemperatur	sigmoid	-0,25	0,25		prozent. Abw. von Setztemp.
Manteltemperatur	sigmoid	-0,1	0,1		prozent. Abw. von Solltemp.
Temp.-differenz Mantel/Reaktor	sigmoid	-5	15		
Reaktortemperatur	sigmoid	-0,1	0,2		prozent. Abw. von Solltemp.
berechneter Reaktorinhalt	linear	0	1,8		
1. Ableitung berechn. Reaktorinhalt	linear	0	0,002		

Verwendete Zustandsklassen:

- Temperieren
- Heizen
- Dosieren
- Reaktion
- starke Exothermie
- Fehler am Rührer

Netzgröße: 24 x 4 x 8 Neuronen

A.3.4 Untersuchungen zur Generalisierung, Kap. 4.2.4

Für diesen Vergleich wurden die gleichen Signale verwendet, wie unter Kapitel A.3.3 aufgezählt, jedoch wurden vier Signale weggelassen, da die Signalcharakteristik beim Realversuch von starken Schwankungen der Dosierate (Dosierung kleiner Mengen mit einer Kolbenpumpe, z.B. Katalysator-Dosierung) bestimmt waren. Da jedoch mit Simulationsdaten trainiert wurde, konnte das Netz den Realversuch nicht sicher klassifizieren.

Nicht verwendet wurden die folgenden Merkmale:

- Füllstand im Reaktor
- 1. Ableitung Füllstand
- berechneter Reaktorinhalt
- 1. Ableitung berechneter Reaktorinhalt

Verwendete Zustandsklassen:

- Temperieren
- Heizen
- Dosieren
- Reaktion
- starke Exothermie
- Fehler am Rührer

Netzgröße: 20 x 5 x 18 Neuronen

A.3.5 Fehler- und Gefahrenklassifikation, Kap. 4.3 und Kap. 4.4

Tabelle 3 Normierung der verschiedenen Signale bei der Gefahren- und Fehlerklassifikation

Signalname	Normierungsart	min	max	r	Bem.
Druck	linear	0	10		
1. Ableitung Druck	linear	-0,1	0,2		
1. Ableitung Waage 1	sigmoid	0	0,0005		geglättet
1. Ableitung Waage 2	sigmoid	0	0,0005		geglättet
1. Ableitung Waage 3	sigmoid	0	0,0005		geglättet
1. Ableitung Waage 4	sigmoid	0	0,0005		geglättet
2. Ableitung Reaktortemperatur	sigmoid	-0,01	0,01		
Ableitung Reaktortemperatur	sigmoid	-0,1	0,1		
Rührerdrehzahl	prozent. sigmoid	-0,6	0,6	0,5	prozent. Abw. von Solldrehzahl
$(T_c - T_k) * T_k$	sigmoid	0	100		
$(T_j - T_s) * T_s$	sigmoid	50	500		
$T_j - T_r$	sigmoid	-40	0		
Ableitung $T_j - T_r$	sigmoid	-0,4	0,4		
$(T_r - T_s) / T_s$	sigmoid	0,2	2		
$(T_r - T_s) * T_s$	sigmoid	100	1200		

Verwendete Fehlerklassen bei Semibatch-Prozeßführung:

- Rührerausfall
- Kühlpanne
- hohe Dosierrate
- niedrige Dosierrate
- Kühlpanne
- falsches Temperaturniveau

Verwendete Gefahrenklassen bei Semibatch-Prozeßführung:

- Normal
- Voralarm
- Alarm
- Gefahr
- Entwarnung

Verwendete Fehlerklassen bei kontinuierlicher Fahrweise:

- Rührerausfall
- Kühlpanne
- hohe Dosierrate
- niedrige Dosierrate
- falsches Temperaturniveau

Verwendete Gefahrenklassen bei kontinuierlicher Fahrweise:

- Normal
- Voralarm
- Alarm
- Gefahr
- Entwarnung

Netzgrößen:

- Semibatch-Prozeßführung
 - Fehlerklassifikation: 15 x 7 x 6 Neuronen
 - Gefahrenklassifikation: 15 x 4 x 5 Neuronen
- Kontinuierliche Prozeßführung
 - Fehlerklassifikation: 15 x 3 x 6 Neuronen
 - Gefahrenklassifikation: 15 x 4 x 5 Neuronen

Tabelle 4 Definition der Gefahrenklassen

Klasse	Bedingungen
Normal	$T_i = 28^\circ\text{C}$, $t_{\text{dos}} = 20 \text{ min}$, $\left. \frac{dT_r}{dt} \right _{\text{max}} = 0,15 \text{ K/s}$, $\left. \frac{d^2T}{dt^2} \right _{\text{max}} = 0,005 \text{ K/s}^2$ $\left. \frac{dP}{dt} \right _{\text{max}} = 0,05 \text{ bar/s}$, $P_{\text{max}} = 2 \text{ bar}$ $T_{\text{max}} = 56^\circ\text{C}$
Voralarm	<p>Auftreten eines Fehlers, wie z. B.:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Abweichung vom normalen Zustand $\left(\text{z.B. } \left. \frac{dT_r}{dt} \right _{\text{max}} > \left. \frac{dT_r}{dt} \right _{\text{max}} , T_r > T_{r\text{max}} , T_j > T_{jN} \dots \right)$ <ul style="list-style-type: none"> • Rührerausfall • Dosierung ohne Füllstanderhöhung • Dosierung der Reaktanten und keine Temperaturänderung (Reaktantenakkumulation) • Höhere Dosierate • Fremdstoffdosierung
Alarm	<p>Auftreten von mindestens zwei Fehlern, z.B.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Rührerausfall und keine Temperaturänderung während der Reaktantendosierung • Große Abweichung vom normalen Zustand $\left. \frac{dT_r}{dt} \right _{\text{max}} > \left. \frac{dT_r}{dt} \right _{\text{max}} \text{ und } \left. \frac{d^2T_r}{dt^2} \right _{\text{max}} > \left. \frac{d^2T_r}{dt^2} \right _{\text{max}} \text{ und } T_r > T_{r\text{max}} \text{ und } P > P_{\text{max}}$ <ul style="list-style-type: none"> • Ausfall der Kühlung und $T_r > T_{\text{max}}$ und $P > P_{\text{max}}$ • Ausfall eines Kühlsystems (Mantelkühlung, Kryostat)
Gefahr	<ul style="list-style-type: none"> • Überschreiten der Temperaturgrenzen • höhere Beschleunigung der Reaktion, sehr hoher Druck und Temperaturanstieg • Beschleunigung der Reaktion und fehlende Gegenmaßnahme
Gefahrabnahme	<ul style="list-style-type: none"> • Abfall der Temperatur und des Druckes $\left(\frac{dT_r}{dt} , \frac{dP}{dt} < 0 \right) \text{ und}$ $T_r > T_{r\text{max}} \text{ und } P > P_{\text{max}}$

A.4 Gerätetechnische Basis und Software

Rechner:	SUN-Workstations (SPARCstation 20, SPARCclassic, Ultra) PCs 386 bis 586 Portable Computer N7-TX PC-notebook mit Dockingstation
Software:	NeuralWorks Professional II Plus Stuttgarter-Neuronale-Netz-Simulator (SNNS) microFUCS, editFUCS, ruleFUCS (Fuzzy Logik) MS-Excel 5.0 (Berichterstattung) WordPerfect 6.1 (Diagramme und Auswertung) Kommunikationssoftware zwischen PC und miniSYS C-Compiler für SUN (Solaris) C-Compiler für miniSYS (Motorola 56K, Z80) BATCHCAD (Prozeßsimulator) Simulationsprogramm CaSi (<u>C</u> alorimeter <u>S</u> imulator)
Meß- und Analysetechnik:	Signalanalysator SPEKTRO3000 Hewlett-Packard Signalanalysator Meß- und Analyserechner miniSYS Standardsensorik des RC1 Diverse Thermoelemente, PT-100 - Widerstandsthermometer, Drucksensoren, Körperschallaufnehmer
Datenübertragung:	LAN (Ethernet, Internet) COM-Server Funkmodems TiMo9600 ISDN-Telefone
Versuchsanlage:	Laborreaktor in Oberhausen