

# Primerjava podporno odločitvenih sistemov za optimizacijo industrijskega procesa na primeru proizvodnje penicilina

Gregor Mlinarič<sup>1</sup>, dr. Miha Glavan<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Fakulteta za računalništvo in informatiko, Univerza v Ljubljani, Večna pot 113, 1000 Ljubljana,

<sup>2</sup>Institut Jožef Stefan, Jamova cesta 39, 1000 Ljubljana

E-pošta: gm64765@student.uni-lj.si, miha.glavan@ijs.si

## Comparison of Decision Support Systems for Industrial Process optimisation: A Case Study of Penicillin Production

In our work we developed and evaluated two families of data-driven decision support systems to assist operators in managing the process within IndPenSim simulation environment. The first family of models is based on regression model optimisation framework (XGBoost, MLP + optimisation algorithms), while the second one relies on graph neural networks (GNN), which operate by linking measurements and manipulative variables. The experimental results show that the suggested approaches in majority cases overperform the predefined recipes and signify the importance of choosing appropriate method based on production objectives.

### 1 Uvod

V skladu s smernicami industrije 5.0 se razvoj tehnoloških rešitev usmerja na podporo ljudem v proizvodnem okolju. Z zadnjimi trendi je večji poudarek namenjen razvoju podpornih sistemov, ki operaterjem proizvodnje olajšajo vodenje njihove dejavnosti s tem, da jim spremljajo njihove aktivnosti in jim predlagajo, katere korekcijske akcije naj v danem trenutku izvedejo.

V nalogi smo se osredotočili na razvoj dveh sistemov za podporo pri odločanju in jih testirali na primeru simulacijskega okolja IndPenSim [3] za proizvodnjo penicilina. Prva skupina temelji na optimizaciji na osnovi napovednega modela, kjer smo najprej naučili napovedne modele, na zgodovinskih podatkih generiranih z IndPenSim in nato z izbrano optimizacijsko metodo poiskali optimalne vhodne spremenljivke. Omenjen pristop smo primerjali s priporočilnimi sistemi temelječimi na grafovskih nevronske mrežah (GNN). Podporni sistemi iz druge skupine izkoriščajo grafovsko predstavitev učnih primerov in zmogljivost nevronske mrež, specializiranih za delo s tovrstnimi podatki [2].

### 2 Študijski primer

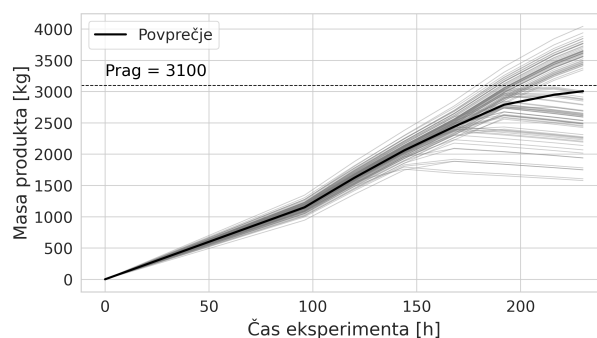
Goldrick et. al. so v članku razvili okolje IndPenSim, ki natančno simulira delovanje industrijskega bioreaktorja za proizvodnjo penicilina [3]. Z njegovo uporabo je bila generirana učna množica podatkov, ki obsega 6400 primerov. Attribute simuliranega procesa lahko razdelimo

na sledeče skupine.

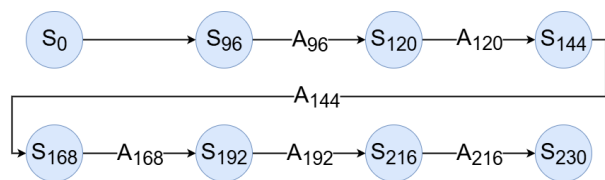
- *Spremenljivke stanja* (35 spremenljivk) opisujejo simulirane meritve med potekom proizvodnega procesa ob času  $t$ . Primera teh spremenljivk sta pretok hladilne tekočine  $F_c$  ali hitrost sproščanja ogljika ( $CER$ ). Predstavimo jih z vektorjem  $S_t$ .
- *Manipulativne spremenljivke* (11 spremenljivk) so tiste, na katere lahko operater neposredno vpliva z namenom povečanja mase proizvedenega penicilina. Za poenostavitev problema smo se osredotočili le na podmnožico šestih spremenljivk: *temperatur* ( $T$ ), *hitrost dovajanja slad* ( $F_s$ ), *pretok fenilacetne kisline* ( $F_{PAA}$ ), *pretok olja* ( $F_{oil}$ ), *pretok zraka* ( $F_g$ ) in *pretok vode* ( $F_w$ ). Ob času  $t$  so bile te spremenljivke predstavljene z vektorjem  $A_t$ .

$$A_t = [T^{(t)}, F_s^{(t)}, F_{PAA}^{(t)}, F_{oil}^{(t)}, F_g^{(t)}, F_w^{(t)}] \quad (1)$$

- Ciljni spremenljivki  $Y_{increase,t}$  in  $Y_{total,t}$  opisujeta spremembo v količini proizvedenega penicilina med potekom eksperimenta.  $Y_{increase,t}$  pove, za koliko se je povečala masa od prejšnjega časovnega koraka, medtem ko  $Y_{total,t}$  predstavlja skupno proizvedeno maso ob času  $t$ . Spremenljivko  $Y_{total,final}$  definiramo kot končni izplen penicilina na koncu eksperimenta.



Slika 1: Rast penicilina skozi čas ob uporabi predefiniranega recepta na 100 eksperimentih.



Slika 2: Shema prikazuje, kdaj operater vpliva na manipulativne spremenljivke opisane z  $A_t$ . Ob času  $t \in \{96, 120, 144, 168, 192, 216\}$  operater izvede akcijo  $A_t$  na podlagi trenutnega stanja opisanega s  $S_t$ . Trajanje proizvodnje je omejeno na 230 ur.

V industrijski praksi se proces tipično vodi na podlagi vnaprej definiranega *recepta*, ki temelji na preteklih praktičnih izkušnjah operaterjev in določa vrednosti manipulativnih spremenljivk. Vloga operaterjev je spremljanje trenutnega stanja procesa čez celoten čas proizvodnje in po potrebi korekcija recepta. Kot prikazuje slika 1 lahko proces ob uporabi istega recepta dosega zelo raznolike rezultate, kar poudarja pomen sprotnega nadzora in adaptacije manipulativnih spremenljivk.

Cilj naloge je bil preizkusiti delovanje različnih metod za identifikacijo optimalnejših manipulativnih spremenljivk, s katerimi bi bilo mogoče v okolju *IndPenSim* povečati končni izplen penicilina ( $Y_{total, final}$ ). V okviru eksperimenta smo predpostavili, da lahko operater izvaja akcije opisane z  $A_t$  ob vnaprej določenih časovnih točkah, kot je prikazano na sliki 2.

## 2.1 Generiranje učne množice

Učna množica je bila generirana s pomočjo simulacijskega okolja *IndPenSim* preko API vmesnika (tabela 1). Podatki so bili pridobljeni s tremi različnimi pristopi:

- *Predefinirani recept*: izvedenih je bilo 3200 eksperimentov, pri katerih operater ni izvajal nobenih prilagojenih akcij, temveč je uporabil vnaprej določen recept.
- *Monte Carlo sprehod*: izvedenih je bilo 1600 eksperimentov, pri katerih je operater v vsakem odločitvenem trenutku naključno izvedel eno iz nabora dovoljenih akcij.
- *Pohlepni sprehod*: izvedenih je bilo 1600 eksperimentov, pri katerih je operater v vsakem koraku izbral najboljšo iz nabora možnih akcij (tj. tisto, ki je najbolj povečala izplen penicilina v naslednjem koraku).

Nabor možnih akcij je bil definiran na naslednji način: operater je lahko ob vnaprej določenih časovnih trenutkih aktivno vplival le na manjšo podmnožico manipulativnih spremenljivk  $A_t$ . V večini primerov je šlo le za eno spremenljivko, v manjšem deležu pa za dve spremenljivki hkrati. Preostale manipulativne spremenljivke so sledile vrednostim iz recepta.

Nabor izbranih spremenljivk se med potekom posameznega eksperimenta ni spreminjal, medtem ko se je nabor možnih akcij prilagajal glede na prejšnjo izvedeno

akcijo. V vsakem odločitvenem trenutku ob času  $t$  je bila operaterju na razpolago množica petih možnih vrednosti za izbrano spremenljivko  $a_i \in A_t$ :

$$\{m - 2k, m - k, m, m + k, m + 2k\} \quad (2)$$

kjer je  $m$  vrednost spremenljivke  $a_i$  iz prejšnjega koraka in  $k$  velikost koraka (diskretna vrednost različna za vsako spremenljivko  $a_i$ ). V primeru hkratne manipulacije dveh spremenljivk so bile izbire med seboj neodvisne.

Eksperimenti so bili nadalje razdeljeni v dveh podskupini glede na čas začetka vplivanja. V eni skupini je operater začel vplivati na manipulativne spremenljivke že od začetka simulacije ( $t = 0h$ ), v drugi pa šel po natanko pretečenem času ( $t = 96$ ).

Za primerjavo so bili vsi eksperimenti, z uporabo istih semen generatorja naključnih vrednosti, ponovljeni tudi tako, da so v celoti sledili osnovnemu receptu proizvodnje brez operatorjevih posegov (R).

| Metoda | Št. eks. | Povprečje [kg] | Mediana [kg] | Std. odklon [kg] | Min [kg] | Max [kg] |
|--------|----------|----------------|--------------|------------------|----------|----------|
| MC     | 1600     | 2403           | 2541         | 1252             | 0        | 4715     |
| GGW    | 1600     | 3309           | 3548         | 652              | 1474     | 4900     |
| R      | 3200     | 3050           | 3390         | 654              | 1127     | 4207     |
| Skupaj | 6400     | 2953           | 3386         | 908              | 0        | 4900     |

Tabela 1: Statistični povzetek za končne donose po metodi za podatke učne množice.

## 3 Metodologija

Med potekom eksperimenta je treba v določenih časovnih trenutkih izbrati vrednosti manipulativnih spremenljivk  $A_t$  na podlagi trenutno razpoložljivih simuliranih meritev stanja  $S_t$ , kot prikazuje slika 2. Razviti in testirani sta bili dve družini podpornih sistemov:

1. *optimizacija na osnovi napovednega modela* in
2. *priporočilni sistemi na podlagi grafovskih nevronskih mrež (GNN)*.

Predlagane rešitve so bile evalvirane na 100 novih simulacijah eksperimentov, ki so bile izvedene z enakimi začetnimi pogoji (istih 100 naključnih semen). Za primerjavo so bili vsi eksperimenti ponovljeni tudi s fiksnimi akcijami na podlagi recepta.

### 3.1 Optimizacija napovednega modela

Podporni sistemi na podlagi *optimizacije napovednega modela* za priporočanje akcij  $A_t$  uporabljajo naslednji komponenti.

1. **Napovedni model**  $M_t$  na podlagi trenutnih vrednosti spremenljivk stanja  $S_t$  in manipulativnih spremenljivk  $A_t$  napove spremembo mase produkta v naslednjem časovnem koraku ( $Y_{increase, t+1}$ ). Uporabljen napovedni model sta bila *XGBoost* (XGB) in *večslojni perceptron* (MLP).

$$M_t(S_t, A_t) = Y_{increase, t+1} \quad (3)$$

2. **Optimizacijska metoda**  $Opt_t$  poišče optimalne vrednosti akcij  $A_t$  na osnovi simuliranih izmerjenih vrednosti  $S_t$  in napovednega modela  $M_t$ . Uporabljene so bile optimizacijske metode *gradientni spust* (GD), Adam optimizator (*Adam*), *Bayesovska optimizacija* (BAY), *CMA-ES* in *diferencialna evolucija* DE.

$$Opt_t(S_t, M_t) = A_t^{opt} \quad (4)$$

Vsak eksperiment v tej skupini je ob vsakem odločitvenem trenutku generiral priporočeno akcijo  $A_t^{opt}$ , ki je bila nato uporabljena za potek simulacije. Podporni sistemi so poimenovani v skladu z vzorcem  $M + O$ , kjer  $M$  označuje kratico za uporabljen napovedni model (XGB ali MLP) in  $O$  kratico za optimizacijsko metodo (npr.  $XGB + GD$  pomeni, da je podporni sistem uporabljal *XGBoost* in *gradientni spust*).

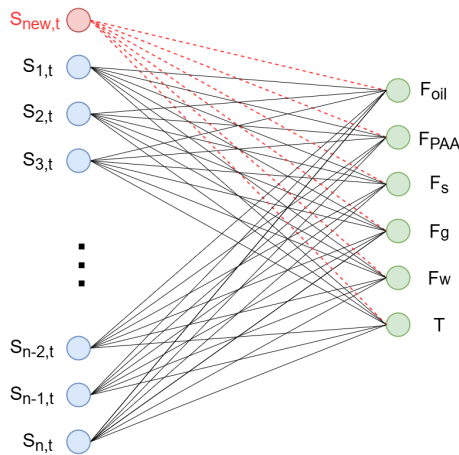
### 3.2 GNN priporočilni sistem

Pristopi na podlagi *GNN priporočilnih sistemov* izkoriščajo grafovsko predstavitev podatkov za odkrivanje primernih manipulativnih akcij na novih eksperimentih. Ključna dejavnika za učinkovitost pristopa sta izbor primerne grafovske predstavitve podatkov in ustrezne arhitekture modela, kar so podrobneje analizirali *You et. al.* [4].

#### 3.2.1 Struktura grafa

Eksperimentalne podatke strukturiramo v obliki *bipartitnega grafa*, kot prikazuje slika 3. Leva množica vozlišč predstavlja vektorje spremenljivk stanja  $S_{i,t}$  (t. j. meritve preteklih eksperimentov ob času  $t$ ). Na drugi strani desna množica vozlišč predstavlja manipulativne spremenljivke, na katere lahko operater vpliva. Ta vozlišča so brez atributov.

Povezave med vozlišči obeh skupin so *utežene*. Vsaka povezava med vozliščem  $S_{i,t}$  in manipulativnim vozliščem  $v \in \{F_{oil}, F_{PAA}, F_s, F_g, F_w, T\}$  nosi utež, ki ustreza vrednosti manipulativne spremenljivke  $v$ , uporabljene v eksperimentu  $i$  ob času  $t$ .



Slika 3: Osnovna struktura grafa za GNN priporočilni sistem.

Razviti sta bili dve poddružini GNN modelov: *HETv1* in *HETv2*.

- *HETv1*: modeli te skupine so naučeni na na grafi, katerih vozlišča  $S_{i,t}$  vsebujejo kot atribut resnično spremembo mase penicilina  $Y_{increase,t+1}$ . Za napoved akcij na novih vozliščih  $S_{new,t}$ , kjer vrednost  $Y_{increase,t+1}$  ni znana, vanjo vstavimo visoko vrednost (npr. 97. percentil vseh znanih vrednosti), s čimer usmerimo pozornost modela na pretekle uspešne eksperimente.
- *HETv2*: modeli te poddružine niso imeli na razpolago vrednosti  $Y_{increase,t+1}$ . Namesto tega smo v vsakem koraku iz učne množice izločili delež primerov z najnižjo rastjo mase penicilina in ohranili le  $p$  odstotkov najboljših primerov.

#### 3.2.2 Preiskovanje GNN prostora

Skladno z metodologijo, predstavljeno v [4], je bilo izvedeno preiskovanje *prostora možnih konfiguracij GNN modelov*. S tem smo želeli poiskati najboljše arhitekture za napovedovanje uteži povezav. Naš prostor hiperparametrov je bil definiran s pomočjo naslednjih dimenzij:

- Aktivacijska funkcija  $Act \in \{\text{ReLU}, \text{LeakyReLU}, \text{PreReLU}, \text{Swish}\}$
- Način agregacije  $Agg \in \{\text{max}, \text{mean}, \text{sum}\}$
- Prag povezovanja  $\varepsilon \in \{0.2, 0.15, 0.1, 0.05, 0.0\}$
- Skrita dimenzija  $HidDim \in \{32, 64, 128\}$
- Povezljivost med plastmi  $LayConn \in \{\text{skipcat}, \text{skipsun}, \emptyset\}$
- Število plasti za prenos sporočil  $MPL \in \{2, 3, 4\}$
- Število plasti predobdelave  $PostPL \in \{0, 1, 2\}$
- Število plasti poobdelave  $PrePL \in \{0, 1, 2\}$

Parameter  $\varepsilon$  določa stopnjo povezanosti *uporabniških vozlišč*. Povezava med dvema vozliščema uporabnikov je vzpostavljena, če je razlika v rasti mase penicilina med njima manjša od *praga*  $\varepsilon$  (vrednosti so normalizirane).

Tabela 2 prikazuje optimalne konfiguracije modelov za vsako časovno točko eksperimenta.

- *HETv1* – 97: model, ki za vsako časovno točko uporabi prilagojeno konfiguracijo iz tabele 2. Vrednost 97 pove, da je bila vstavljena vrednost  $Y_{increase,t+1}$  novega vozlišča enaka 97. percentilu.
- *HETv2*: modeli, ki so bili naučeni na istih konfiguracijah kot *HETv1*, vendar z učno množico, ki je bila predhodno filtrirana po načinu *HETv2*

|            | 96 h    | 120 h     | 144 h     | 168 h   | 192 h   | 216 h     |
|------------|---------|-----------|-----------|---------|---------|-----------|
| Act        | PreReLU | LeakyReLU | LeakyReLU | Swish   | Swish   | LeakyReLU |
| Agg        | max     | max       | max       | max     | sum     | max       |
| $\epsilon$ | 0.0     | 0.0       | 0.0       | 0.0     | 0.0     | 0.0       |
| HidDim.    | 128     | 64        | 128       | 64      | 64      | 64        |
| LayConn.   | skipsum | skipsum   | skipsum   | skipsum | skipsum | skipsum   |
| MPL        | 2       | 2         | 2         | 2       | 2       | 2         |
| PostPL     | 0       | 0         | 1         | 0       | 1       | 1         |
| PrePL.     | 0       | 0         | 0         | 0       | 0       | 0         |

Tabela 2: Pregled izbranih hiperparametrov po časovnih točkah

## 4 Rezultati

Tabela 3 prikazuje rezultate testnih eksperimentov. Izkazalo se je, da je z uporabo predlaganih podpornih sistemov v skoraj vseh primerih možno doseči boljše rezultate, kot če bi operater zgolj sledil akcijam iz vnaprej določenih receptov.

Uspešnost posameznih metod je bila ovrednotena na podlagi treh ključnih kriterijev:

1. **Stabilnost rezultatov:** ocenjena je bila na podlagi standardnega odklona končne mase penicilina na različnih eksperimentih.
2. **Povprečna izboljšava izplena:** izračunana je bila kot razlika med povprečnima končnima masama ob uporabi metode in pri uporabi recepta.
3. **Delež uspešnih eksperimentov:** delež testnih primerov, kjer je bil presežen prag 3100 kg končnega izplena.

Med predlaganimi rešitvami izstopata 2 podporno odločitvena sistema: *MLP + GD* in *HETv2 – T90*.

**MLP + GD:** ta kombinacija je med vsemi metodami dosegla najvišjo posamezno vrednost ( $Y_{total, final} = 5361$  kg), kot tudi najvišjo povprečno končno maso penicilina (tabela 3). Slabost metode je visok standardni odklon, kar nakazuje na visoko variabilnost rezultatov med eksperimenti in možnost slabših odločitev v posameznih situacijah, kar potrjuje slika 4.

**HETv2-T90:** ta GNN priporočilni sistem, ki je bil treniran na učni množici brez 10 % najslabših primerov, se je izkazal za najstabilnejšo rešitev z najnižjim standardnim odklonom. Glede na recept je model izboljšal končni izplen vseh 100 eksperimentov, za nameček so bile izboljšave konsistentno visoke. To nakazuje, da lahko s filtriranjem učne množice pozitivno vplivamo na robustnost in kvaliteto priporočil.

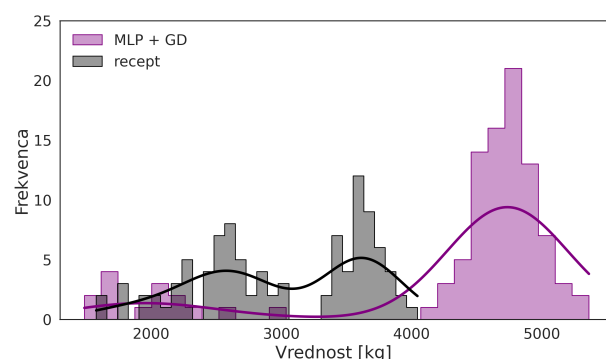
## 5 Zaključek

Rezultati kažejo, da je mogoče z uporabo različnih arhitektur razviti učinkovite podporno-odločitvene sisteme. Izkazalo se je, da je učinkovitost posameznega pristopa odvisna predvsem od prioritete procesa - ali za končni rezultat pomembnejša *stabilnost rezultatov* (v tem primeru se je za najučinkovitejšega izkazal *HETv2-T90*) ali *povprečni končni izplen* penicilina (za ta namen je bil najprimernejši kombiniran pristop *MLP + GD*).

Rezultati potrjujejo potencial podatkovno podprtih sistemov za odločanje v industrijskih okoljih. Obenem nakazujejo, da lahko s prilagojenim pristopom izboljšamo

| Model        | Povp.       | Std. dev.  | Min         | Max         | # nad     | # izboljšav |
|--------------|-------------|------------|-------------|-------------|-----------|-------------|
| HETv1-97     | 3948        | 369        | 2329        | 4522        | 94        | 99          |
| HETv2-T100   | 2797        | 661        | 1557        | 4733        | 20        | 30          |
| HETv2-T95    | 3691        | 771        | 1556        | 4785        | 77        | 90          |
| HETv2-T90    | 3917        | <b>262</b> | <b>2990</b> | 4508        | <b>99</b> | <b>100</b>  |
| HETv2-T85    | 3986        | 436        | 1417        | 4964        | 98        | 94          |
| HETv2-T80    | 2577        | 518        | 1574        | 4109        | 14        | 14          |
| MLP + Adam   | 3367        | 564        | 1599        | 4171        | 80        | 98          |
| MLP + GD     | <b>4329</b> | 1005       | 1487        | <b>5361</b> | 85        | 91          |
| MLP + CMA-ES | 3460        | 540        | 1438        | 4435        | 73        | 84          |
| XGB + CMA-ES | 3316        | 621        | 1506        | 4150        | 74        | 77          |
| MLP + DE     | 4180        | 904        | 1549        | 5228        | 87        | 91          |
| XGB + DE     | 3783        | 803        | 1369        | 5090        | 87        | 83          |
| MLP + BAY    | 3873        | 1115       | 486         | 5074        | 74        | 81          |
| XGB + BAY    | 3259        | 1130       | 0           | 5140        | 59        | 63          |
| Recept       | 3007        | 650        | 1578        | 4044        | 47        | 1           |

Tabela 3: Validacijska primerjava modelov z različnimi metriki. Predstavljena števila so v kg, razen zadnjih 3 stolpcev. Stolpec # nad označuje, koliko eksperimentov je presešlo prag 3100 kg. Zadnji stolpec predstavlja število izboljšanih eksperimentov, če operater sledi priporočilom modela v primerjavi z receptom.



Slika 4: Porazdelitev končne mase penicilina z uporabo priporočil MLP+GD in brez njega. Model temelji na večslojnim perceptronu in gradientnem spustu.

bodisi robustnost, bodisi izkoristek proizvodnje, odvisno od konkretnih zahtev procesa.

## 6 Zahvala

Delo je bilo izvedeno v okviru programa *DIGITOP* in nacionalnega raziskovalnega programa *P2-0001*.

## Literatura

- [1] A. Thelen, X. Zhang, O. Fink, Y. Lu, S. Ghosh, B. D. Youn, M. D. Todd, S. Mahadevan, C. Hu, and Z. Hu, "A comprehensive review of digital twin—part 1: modeling and twinning enabling technologies," *Structural and Multidisciplinary Optimization*, vol. 65, no. 12, p. 354, 2022.
- [2] S. Wu, F. Sun, W. Zhang, X. Xie, and B. Cui, "Graph neural networks in recommender systems: a survey," *ACM Computing Surveys*, vol. 55, no. 5, pp. 1–37, 2022.
- [3] S. Goldrick, A. Ștefan, D. Lovett, G. Montague, and B. Lennox, "The development of an industrial-scale fed-batch fermentation simulation," *Journal of Biotechnology*, vol. 193, pp. 70–82, 2015. Elsevier.
- [4] J. You, Z. Ying, and J. Leskovec, "Design space for graph neural networks," *Advances in Neural Information Processing Systems*, vol. 33, pp. 17009–17021, 2020.