

Stratégies de discrimination de polymères sur des procédés continus par spectroscopie proche infrarouge en ligne

**Safia Montagnier¹, Jordane Lallemand²,
Perrine Hebert¹, Jean Guilment¹ et Sylvie Roussel²**

¹ ARKEMA - CERDATO / Laboratoire d'Étude des Matériaux (LEM) - Route du Rilsan, 27470
Serquigny – France - perrine.dubuc@arkema.com

² Ondalys - 4 rue Georges Besse, 34830 Clapiers, France - jlallemand@ondalys.fr

Résumé de l'étude

- Contexte et problématique d'Arkema

- Gestion de la transition de production entre 2 polymères (3-4h)
- Modèle quantitatif performant spécifique de chaque famille de polymères
- En routine, pour que le bon modèle soit utilisé, cela signifie :
 - Soit de demander à l'opérateur de spécifier la transition en cours
 - Soit de détecter automatiquement le polymère



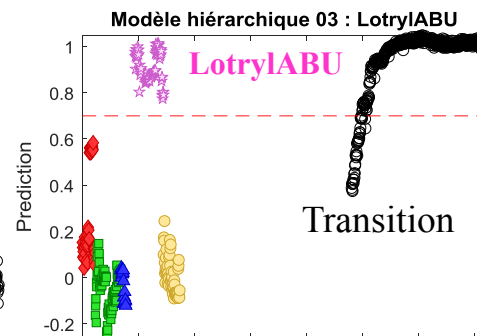
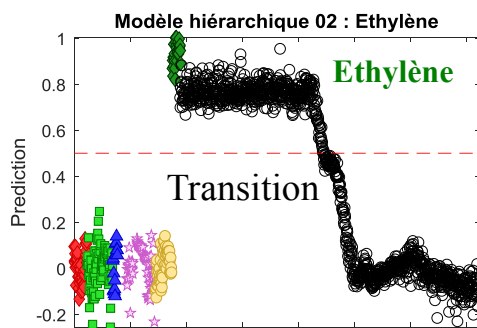
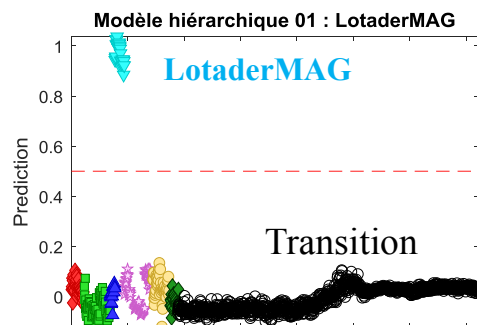
➔ **Modèles de discrimination des polymères à l'état stable afin de détecter le polymère et la fin de transition**

- Matériel

- Ligne de contrôle OCS avec un spectromètre NIR Bruker qui mesure en continu les granulés passant dans une trémie

Résumé de l'étude

- Stratégies de discrimination testées
 - PLS-DA classique
 - PLS-DA hiérarchique
 - PLS-DA « 1 vs tous »
- Jeu de test indépendant
 - Modèles appliqués à des transitions complètes indépendantes
- Résultats
 - La PLS-DA hiérarchique donne de meilleures performances mais est moins adaptée pour le suivi de transitions
 - Exemple de test sur une transition d'éthylène pur vers LotryLABU



15 ans déjà
au service de l'analyse de données...

Venez voir notre poster
sur ce sujet
au stand 

Discriminant strategies for polymer identification during continuous on-line processes by near infrared spectroscopy

Safa MONTAGNIER¹, Jordane LALLEMAND¹, Perrine HEBERT¹, Jean GUILMENT¹ and Sylvie ROUSSEL²
¹Arkema France, ²Arkema Research & Development

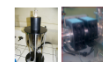
→ **CONTEXT & OBJECTIVES**

- ✓ Continuous polymerization process, with co-polymer transitions
- ✓ On-line NIR analysis for
 - Transition monitoring and transition end-point determination
 - Polymer quality composition in steady state
- ✓ Chemometrics models for
 - Discrimination strategy → Polymer type identification
 - Quality characterization → Polymer viscosity and chemical composition



→ **MATERIAL & METHODS**

- ✓ On-line BRUKER MATRIX FT-NIR Spectrometer
- ✓ Industrial co-polymer products during production
 - Ethylene acrylate binder copolymers: 4 LotyP[®]ASU
 - Ethylene Acrylate copolymers: 2 LotyP[®]ASU
 - Ethylene

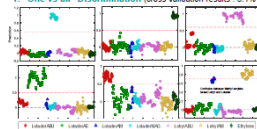


DISCRIMINATION STRATEGIES

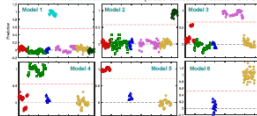
- ✓ PLS-DA with different approaches
 1. "One versus all" discrimination
 2. Hierarchical discrimination
 3. "Classical" discrimination
- ✓ Calibration set: steady state
- ✓ Test set: transitions of different days

→ **RESULTS & DISCUSSION**

1. "One vs all" Discrimination (cross-validation results: 0.4% error)

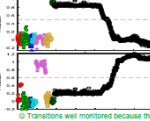


2. Hierarchical Discrimination (cross-validation results: 0% error)

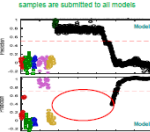


TRANSITION TEST SET

Example: Ethylene → LotyP[®]ASU



↳ Transitions well monitored because the samples are submitted to all models



↳ Transitions more difficult to monitor since the samples are predicted, they are not submitted to the next hierarchical discrimination models

→ **CONCLUSIONS**

1. Hierarchical discrimination
 - ⊗ Accurate discrimination results, especially for difficult classes
 - ⊗ Not well adapted to monitor transition
2. "One versus all" discrimination
 - ⊗ well adapted to monitor the transition
 - ⊗ Not less accurate for discrimination
3. "Classical all classes" discrimination
 - ⊗ well adapted to monitor the transition
 - ⊗ Not less accurate for discrimination than the other two

→ **FUTURE STRATEGY:** a mix between "one versus all" and hierarchical discrimination will be tested to combine the advantages of both methods