DATA-ANALYTIIKAN HYÖDYNTÄMINEN PANOSTOIMISISSA KEMIANTE-OLLISUUDEN PROSESSEISSA

Lappeenrannan–Lahden teknillinen yliopisto LUT

Tuotantotalouden kandidaatintyö

2022

Jyri Montonen

Tarkastaja: Tutkijatohtori Antti Ylä-Kujala

TIIVISTELMÄ

Lappeenrannan–Lahden teknillinen yliopisto LUT

LUT Teknis-luonnontieteellinen

Tuotantotalous

Jyri Montonen

Data-analytiikan hyödyntäminen panostoimisissa kemianteollisuuden prosesseissa

Tuotantotalouden kandidaatintyö

2022

34 sivua, 10 kuvaa

Tarkastaja: Tutkijatohtori Antti Ylä-Kujala

Avainsanat: kemianteollisuus, kemiantekniikka, panostoiminen prosessi, data-analytiikka

Työn tarkoituksena oli selvittää mitä haasteita panostoimissa kemianteollisuuden prosesseissa on data-analytiikalle. Tämän lisäksi tutkittiin mihin data-analytiikka voidaan käyttää panostoimisissa kemianteollisuuden prosesseissa. Työ toteutettiin kirjallisuuskatsauksena ja lähteinä käytettiin aiheeseen liittyvää teoriakirjallisuutta.

Panostoimiset prosessit ovat tärkeässä roolissa kemiateollisuudessa. Näiden prosessien avulla valmistetaan monia erikoiskemikaaleja ja kuluttajatuotteita, kuten kosmetiikkaa, lääkkeitä ja elintarvikkeitta. Tuotteita joiden valmistus on monimutkaista, ja joiden laatu on täytettävä tietyt vaatimukset.

Yhtenä keskeisenä haasteena data-analytiikalle on panostoimisten prosessien datan laadun monimuotoisuus ja datan rakenne, joka tekee analysoinnista hankalaa ja monimutkaista. Haasteena havaittiin myös tiedontallentamisen haasteet, johtuen datan suuresta määrästä. Data-analytiikkaa hyödynnetään tuotannonsuunnitteluun ja aikataulutukseen, jotka ovat keskeisessä roolissa juuri panostoimisissa prosesseissa. Yhtenä keskeisenä analytiikan hyödyntämiskohteena havaittiin tuotelaadun parantaminen, johon voidaan käyttää muun muassa koneoppimista. Tulevaisuudessa datan määrä ja monimutkaisuus kasvat entisestään. Yhtenä ratkaisuna tähän esitetiin tensoriaalista data-analytiikan hyödyntämistä.

Sisällysluettelo

Tiivistelmä

1 Johdanto 4
1.1 Tausta 4
1.2 Työn tavoite ja tutkimuskysymykset 5
1.3 Tutkimusmenetelmät ja rajaus 5
1.4 Työn rakenne 6
2 Data-analytiikka 8
2.1 Data-analytiikan määritelmä 8
2.2 Big data 10
2.3 Koneoppiminen 11
3 Kemianteollisuus 13
3.1 Kemianteollisuus yleisesti 13
3.2 Panostoimiset prosessit 18
4 Data-analytiikka kemianteollisuudessa 25
4.1 Data panostoimisissa kemianteollisuuden prosesseissa 25
4.2 Data-analytiikan haasteet ja hyödyt panostoimisissa prosesseissa 26
4.3 Data-analytiikan tulevaisuuden mahdollisuudet 29
5 Johtopäätökset 30
Lähteet 32

1 Johdanto

1.1 Työn tausta

Data on muuttamassa meidän maailmaamme ja tapaa, jolla me elämme ja työskentelemme ennennäkemättömällä tahdilla. Data on jo mullistanut tavan, jolla yritykset toimivat ja se tulee olemaan kasvavissa määrin äärimmäisen tärkeää yrityksille tulevina vuosina. Ne yritykset, jotka näkevät data strategisena vahvuutena tulevat selviytymään ja menestymään. Big datan sekä esineiden internetin (IoT) massiivinen kasvu yhdistettynä nopeasti kehittyviin analysointi menetelmiin, datan tärkeys liiketoiminnan kaikilla osa-alueille tulee vain kasvamaan. (Marr2017) Datan määrän kasvu eksponentiaalisesti parin viimeisen vuoden aikana on tehnyt data-analytiikasta ja datan prosessoinnista välttämätöntä mille tahansa organisaatiolle. Mooren laki on ylitetty jo useita vuosia sitten, suunnaton määrä dataa kätkee itseensä todella hyödyllisiä tietoja. Todellinen haaste tulee olemaan siinä, miten tämä hyödyllinen informaatio saadaan poimittua onnistuneesti tästä suunnattoman suuresta datan määrästä tehokkailla prosesseilla kohtuullisin kustannuksin. (S. Benjelloun et al.2020)

Prosessiteollisuudella on suuri rooli globaalin talouden kasvun edistämisessä ja sosiaalisten etujen turvaamisessa. Tämän osoittaa se, että maailman 500 parhaan yrityksen listalla on useita prosessiteollisuuden yrityksiä kuten Sinopec, Shell ja ExxonMobil. Kemiantekniikan sekä tietotekniikan kehittyessä, nykyaikaisten prosessiteollisuuden tuotannollinen mittakaava ja toiminnallinen monimutkaisuus lisääntyvät nopeasti. (Shangja You, 2019)

Panostoimisilla prosesseilla on keskeinen rooli nykyajan teollisuudessa, ja ne ovat käytössä monilla aloilla, kuten kemikaalien ja biopolttoaineiden valmistuksessa, öljynjalostuksessa, lääketeollisuudessa ja elintarvike teollisuudessa. Panostoimisille prosesseille on ominaista ennalta määrättyjen toimintojen jaksottainen toistuminen. Panostoimiset prosessit voidaan katsoa koostuvan eri erävaiheista, jotka voidaan jakaa esimerkiksi raaka-aineiden syöttöön, reaktio-olosuhteiden asettaminen, reaktioajan säätäminen, reaktion tyhjentäminen ja puhdistaminen. Panostoimisissa prosesseissa prosessiolosuhteita ja tuotantomääriä on helppo hallita, mikä tekee tuotannosta joustavaa. Panostoimisia prosesseja käytetään yleensä silloin kuin tuotantomäärät ovat alhaisemmat ja vaihtelevia. Myös jos halutaan tuottaa useampaa eri tuotetta, käytetään panostoimisia prosesseja. (Rendall, Chiang ja Reis, 2019)

1.2 Työn tavoite ja tutkimuskysymykset

Tämän työn tavoitteena on antaa hyvä yleiskuva data-analytiikasta ja sen hyödyntämisestä kemianteollisuudessa panostoimisissa prosesseissa. Työn aihe on mielekäs ja ajankohtainen, sillä aiheesta ei ole juurikaan tehty suomeksi tutkimuksia. Tämän lisäksi data-analytiikka on hyvin suosittu aihe niin työelämässä kuin akateemisellakin puolella. Myös kemianteollisuus on läsnä jokapäiväisessä elämässämme. Työn tarkoituksena on selvittää, miten data-analytiikka tällä hetkellä hyödynnetään panostoimisissa prosesseissa ja missä tarkoituksissa. Työssä myös käsitellään minkälaisia haasteita data-analytiikka kohtaa panostoimissa prosesseissa. Tämän lisäksi työn tavoitteena on selvittää mitä tulevaisuuden trendejä ja minkälaisia mahdollisuuksia data-analytiikalla on panostoimisissa prosesseissa. Tämän kandidaatintyön päätutkimuskysymykset ovat:

- Minkälaisia haasteita panostoimissa prosesseissa on data-analytiikalle?
- Mihin data-analytiikkaa voidaan hyödyntää panostoimissa prosesseissa?

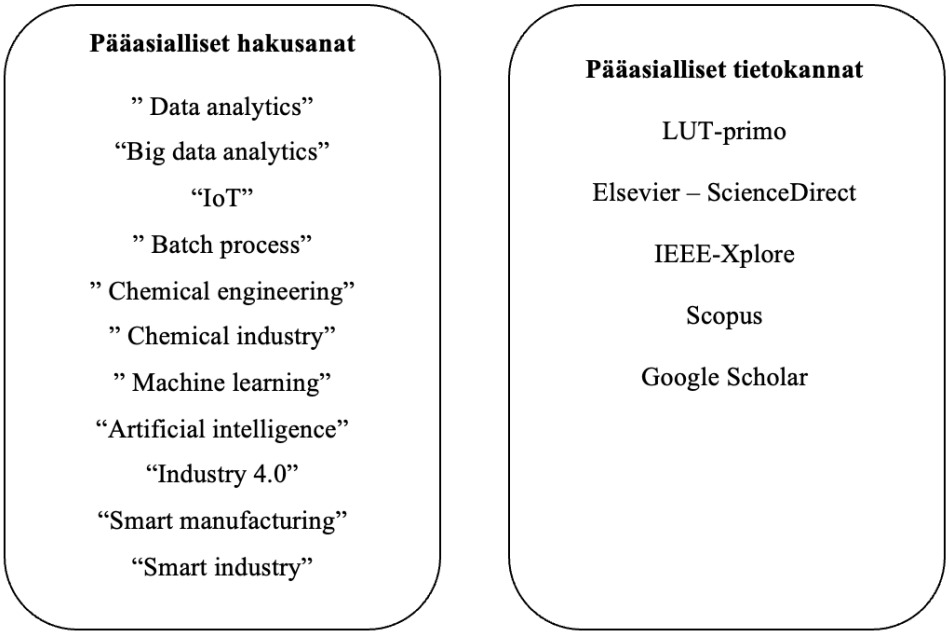
Tutkimuskysymyksien vastausten perusteella on tarkoitus selvittää, minkälaista juuri panostoimistenprosessien data on ja mistä se koostuu kemianteollisuudessa. Tarkoituksena olisi myös, että vastausten perusteella voitaisiin saada selville, miten dataa ja analytiikkaa voidaan hyödyntää paremmin, jotta panostoimisista prosesseista saataisiin parempia. Työstä voi olla apua ja hyötyä henkilöille, jotka työskentelevät kemianteollisuuteen liittyvien tuotteiden tuotannon parissa tai muuten vain tuotannon parissa, joka toteutetaan panostoimisilla prosesseilla. Myös henkilöille, joita kiinnostaa data-analytiikka, mitä se on ja mihin sitä voidaan soveltaa, tästä työstä voi olla hyötyä.

1.3 Tutkimusmenetelmät ja rajaus

Tämä työ toteutetaan kirjallisuuskatsauksena. Lähteinä käytetään pääasiassa aiheeseen liittyvää teoriakirjallisuutta, tieteellisiä artikkeleita ja muuta kirjallisuutta. Työ rajataan koskemaan kemianteollisuudessa panostoimisia prosesseja. Data-analytiikkaa käsiteltäessä ei ole tarkoitus mennä syvälle teknisen toteutukseen, vaan asioita käsitellään enemmänkin pintapuolisesti tältä kannalta. Data-analytiikan osalta keskitytään kuvamaan minkälaisia haasteita data-analytiikka kohtaa panostoimisissa kemianteollisuuden prosesseissa ja mitä hyötyjä

data-analytiikasta saadaan panostoimisissa prosesseissa. Tämän lisäksi tarkoituksena olisi luoda katsaus data-analytiikan tulevaisuuden mahdollisiin käyttökohteisiin panostoimisissa prosesseissa.

Työssä on käytetty tiedon hakemiseen seuraavia hakusanoja:” Data analytics”, ”Big data”,”Big data analytics”, ”IoT”, ”Machine learning”, ”Artificial intelligence”, ”Industry 4.0”, ”Batch process”, ”Chemical engineering” ja ”Chemical industry”, sekä näiden hakusanojen erilaisiin yhdistelmiin. Pääasiallisesti tietoa on haettu englanniksi. Myös suomenkielistä tietoa on etsitty hakusanojen suomenkielisiä käännöksiä hyödyntäen. Kuvassa 1 on esitetty pääasialliset hakusanat sekä tietokannat, joita tässä työssä on käytetty.



Kuva 1 Kandidaatin työn pääasialliset hakusanat ja tietokannat

1.4 Työn rakenne

Tämä kandidaatin työ koostuu viidestä luvusta. Ensimmäisenä lukuna on johdanto. Toisessa luvussa käsitellään data-analytiikka ja määritellään mitä se on. Lisäksi luvussa selvitetään mitä ovat big data ja koneoppiminen. Luvun jälkeen lukijalla on pitäisi olla ymmärrys mitä

on data ja data-analytiikka sekä näiden roolin nykyaikaisessa liiketoimintaympäristössä. Työn kolmannessa luvussa esitetään kemianteollisuutta yleisellä tasolla sekä panostoimisten prosessien perusperiaatteet. Luvun jälkeen lukijalla pitäisi olla selkeä kuva kemianteollisuudesta alana sekä riittävät tiedot panostoimisten prosessien luonteesta. Nämä kappaleet luovat pohjan neljännelle kappaleelle, jossa data-analytiikka ja panostoimiset prosessit yhdistetään. Luvussa selvitetään kemianteollisuuden panostoimistenprosessien datan lähteitä, data-analytiikan tuomia hyötyjä ja haasteita sekä selvitetään, miten prosesseja voidaan kehittää paremmiksi. Viidennessä ja viimeisessä luvussa esitetään työn johtopäätökset. Luvussa vastataan työn tutkimus kysymyksiin ja näiden avulla vastausten avulla voidaan selvittää, miten data-analytiikkaa pystytään hyödyntää panostoimisissa prosesseissa kemianteollisuudessa.

2 Data-analytiikka

Kasvavia määriä dataa kerätään, varastoidaan sekä prosessoidaan teollisesta tuotannosta, valmistuksesta, jakelusta, logistiikasta ja toimitusketjuprosesseista prosessien automatisoimiseksi ja kontrolloimiseksi. Dataa käytetään kaikilla automaation eri tasoilla. Sensoreissa ja laitteissa kenttä tasolla, ohjaussignaaleja ohjaustasolla, toiminta ja valvonta dataa tuotantotasolla, aikatauluja ja mittareita suunnittelu tasolla. Teollisuudessa data-analytiikan avulla pyritään optimoimaan prosesseja ja tämän avulla saavuttamaan kilpailuetua suhteessa muihin yrityksiin. (Runkler2020)

2.1 Data-analytiikan määritelmä

Analytiikka tarkoittaa matematiikan ja tilastotieteen yhdistämistä tietokoneohjelman avulla ja niiden hyödyntämistä siihen, että datasta pystytään hankkimaan liiketoimintatietoja. Analytiikka voidaan jakaa neljään tyyppiin, joita ovat kuvaileva, diagnostiivinen, ennakoiva, ja ohjaileva analytiikka. (Fleckensteinja Fellows, 2018) Runklerin (2020, s.1-4) mukaan data-analytiikka on tietokonejärjestelmien soveltamista suurten data settien analysoimiksesi päätöksenteon tueksi. Lisäksi Runkler mainitsee, että data-analytiikka on hyvin monitieteinen ala, joka on omaksunut piirteitä monista muista tieteenaloista, muun muassa tilastotieteestä, koneoppimisesta, hahmontunnistamisesta, systeemiteoriasta, operaatioanalyysistä ja tekoälystä.

Kuvaileva analytiikka keskittyy kuvailemaan sitä mitä on jo tapahtunut ja sen avulla yritetään löytää perimmäisiä syitä tapahtuneelle. Kuvaileva analytiikka perustuu tyypillisesti perus kyselyihin, raportointiin ja historiallisten tietojen visualisoimiseen. (Fleckensteinja Fellows, 2018) Kuvaileva analytiikka on yleensä ensimmäinen askel analyyttisessa päätöksenteossa. Siinä vastataan kysymyksen ”mitä on tapahtunut?”. Sen avulla luodaan yhteenveto datasta. Analytiikka sisältää yksinkertaisten tekniikoiden hyödyntämisen, kuten regressioanalyysiä muuttujien välisten suhteiden löytämiseksi. Kuvailevan analytiikan tarkoitus on esittää tiedot tarkoituksenmukaisella ja ymmärrettävällä tavalla. (Pusala et al.2016, s.11-40)

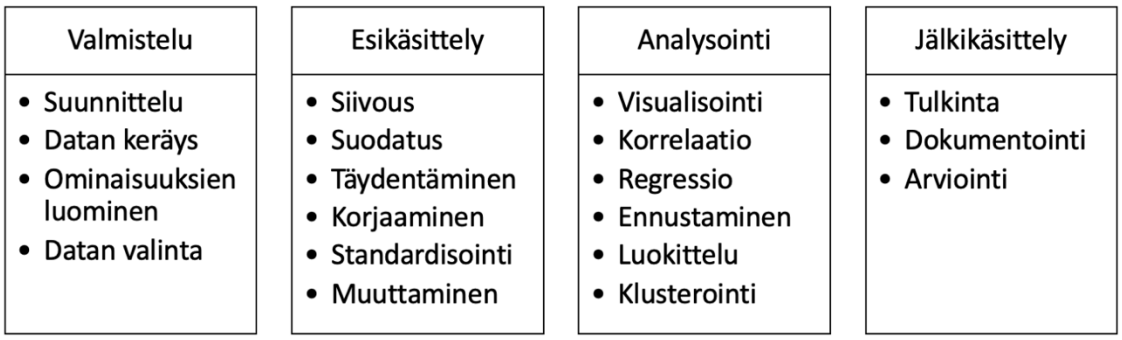
Diagnostiivisen analytiikan avulla pyritään vastaamaan kysymykseen, miksi jokin tapahtuma tapahtui. Esimerkiksi miksi jokin suuri myrsky tapahtui jollain tietyllä

maantieteellisellä alueella tai miksi selittämätön liikenneruuhka ilmaantui ei ruuhka aikaan. Tämän tyyppinen analytiikka vaatii mallien ja kuvioiden etsimistä suuresta määrästä dataa. (Fleckensteinja Fellows, 2018)

Ennustavan analytiikan avulla louhitaan datasta kuvioita ja yhteyksiä tulevia tapahtumia ja käyttäytymismalleja varten. Datan avulla määritetään esimerkiksi tapahtuman todennäköinen lopputulos tai jonkun tietyn tilanteen todennäköisyys. (Fleckensteinja Fellows, 2018) Ennustavaa analytiikka käytetään korkeammalla päätöksenteon tasolla ja sen avulla koitetaan vastata kysymykseen ”mitä voisi tapahtua?”. Ennustava analytiikka yhdistää eri lähteistä peräisin olevan tiedon tulevaisuuden trendien ja tapahtumien ennustamiseksi. Ennustavassa analytiikassa sen nimen mukaisesti luodaan ennustemalleja datasta. (Pusala et al.2016, s.11-40)

Ohjaileva analytiikka on seuraava päätöksenteko taso ennustavasta analytiikasta. Se on suhteellisen uusi analyyttinen menetelmä eikä kovin laajassa käytössä yrityksissä. Suunnilleen vain noin kolme prosenttia yrityksistä käyttää ohjailevaa analytiikka osana heidän päätöksentekoaan. Ohjailevassa analytiikassa käytetään tekniikoita kuten optimointia, numeerisia menetelmiä ja simulaatiota. (Pusala et al.2016, s.11-40) Ohjaileva analytiikka käyttää ennakoivan analytiikan tuloksia ehdottaakseen toimenpiteitä, jotka sopivat parhaiten ennustettuihin lopputuloksiin ja todennäköisyyksiin. Ohjailevassa analytiikassa analysoidaan mahdollisia päätöksiä, päätösten välisiä vuorovaikutuksia sekä päätöksen vaikutusta mahdolliseen lopputulokseen. Esimerkkinä kuljetusyritys voi käyttää GPS-tietoja ja ohjailevaa analytiikkaa määrittääkseen optimaalisen reitin lyhentääkseen toimitusaikaa. Yksinkertaistettuna ohjaileva analytiikka pyrkii löytämään parhaan ratkaisun tai lopputuloksen eri vaihtoehtojen joukosta. (Fleckensteinja Fellows, 2018)

Data-analytiikka projektit voidaan jakaa neljään eri vaiheeseen (kuva 2), näitä ovat valmistelu, esikäsittely, analysointi ja jälkikäsittely. (Runkler2020, s.1-4)



Kuva 2 Analytiikan vaiheet

2.2 Big data

Digitaalisessa maailmassa määrä, jota dataa luodaan ja varastoidaan kasvaa koko ajan. Arvioidaan, että datan määrä vähintään tuplaantuu joka toinen vuosi. Big data tuli terminä käyttöön suurteen yhtiöiden kuten Googlen, Yahoon ja Facebookin tarpeesta analysoida suuria määriä dataa. Tämä nopeasti kasva datan määrä tuo mukanaan myös haasteita. (Yaqoob et al.2016)

Big datalla tarkoitetaankin yleensä datan määrän räjähdysmäistä kasvua. Terminä ”big data” on hyvin trendaava aihe niin teollisuudessa kuin akateemisissakin piireissä. Yhtenä big datan määritelmänä pidetään sitä, että se on määrältään niin suurta, ettei sitä pystytä käsittelemään tai analysoimaan tavanomaisia datan käsittely ja varastointin työkaluja hyödyksi käyttäen. (Pusala et al.2016) Määriteltäessä big dataa voidaan apuna käyttää kolmen v: n mallia, jossa piirteet ovat: määrä (volume), nopeus (velocity) ja monimuotoisuus (variety). Määrällä tarkoitetaan nimensä mukaisesti data suurta määrä. Nopeudella viitataan siihen, kuinka nopeasti dataa luodaan. Datan monimuotoisuudella taas kuvataan sitä, että dataa on saatavilla monista eri lähteistä ja monessa eri muodossa. (Yaqoob et al.2016)

Big data voidaan myös määrittää käyttäen hyödyksi viiden v:n mallia, jossa edellä mainittujen piirteiden lisäksi olisivat piirteet arvo (value) sekä totuudenmukaisuus (veracity). Termillä totuudenmukaisuus tarkoitetaan datan uskottavuutta. Dataa on paljon saatavilla ja data on tunnettava ja pystyttävä arviomaan mikä data on luotettavaa. Suuressa määrässä dataa voi

olla valtava potentiaalinen arvo, mutta se pystyä vain erottamaan koko datan määrästä. (Li, Chen ja Shang, 2022)

Perinteisesti suurin osa saatavilla olevasta datasta on strukturoitua dataa ja se voidaan varastoida tavanomaisiin tietokantoihin ja tietovarastoihin. Data on pystytty myös analysoimaan tavanomaisia data-analyysi työkaluja hyödyntäen. Big datasta puhuttaessa, data ei välttämättä ole enää strukturoitua dataa, vaan data on peräisin monista eri lähteistä. Tämän lisäksi data voi olla luonteeltaan strukturoitua, puolistrukturoitua tai strukturoimatonta. Arvioidaan, että 85 prosenttia datasta, jonka yritykset ja organisaatiot tuottavat olisi strukturoimatonta dataa. On myös arvioutu, että melkein kaikki data, jonka yksilöt tuottavat kuten sähköpostit, viestit, videot ja kuvat olisi strukturoimatonta dataa. Tavanomaiset relationaaliset tietokannat eivät enää ole mahdollinen tapa varastoida tekstiä, videoita, ääntä, kuvia ja muita strukturoimattoman datan muotoja. Tämä luo tarpeen uuden tyyppisille tietokannoille ja edistyneille analytiikka menetelmille. (Pusala et al.2016) Myös Yaqoob et al, (2016) mainitsevat big datan haasteeksi sen analysoinnin ja varastoinnin. Vain kehittyneet datan louhinta ja varastointi tekniikat mahdollistavat valtavien data määrien varastoinnin, hallinnan ja analysoimisen.

2.3 Koneoppiminen

Koneoppiminen ei ole mitenkään uusia asia, joka olisi keksitty vasta viimevuosina. Koneoppista on käsitelty ja se on ollut pinnalla jo ainakin 1970-luvulta lähtien. Ensimmäiset algoritmit koneoppimiseen ilmestyivät silloin. Tietokoneiden laskentateho on kasvanut räjähdysmäisesti 1970-luvulta. Tämä mahdollistaa sen, että koneoppimisen avulla pystytään ratkaisemaan yhä monimutkaisempia ongelmia. Koneoppimisessa tietokone harjoittelee suorittamaan tietyn tehtävän, jonka se harjoittelee ensin sille annetusta datasta. Tämän jälkeen tietokone suorittaa saman tehtävän datalla, jota se ei ole aikaisemmin nähnyt eikä pystynyt harjoittelemaan. (Louridasja Ebert, 2016)

Koneoppimisessa tietokoneen oppiminen voidaan jakaa kahteen eri tapaan, ohjattuun oppimiseen sekä itsenäiseen oppimiseen. Ohjatussa oppimisessa tietokoneelle annetaan harjoittelu data, joka sisältää tehtävän suorittamiseen tarvittavan datan ja oikeat ratkaisut tehtävään. Ohjatussa oppimisessa käytetään luokittelualgoritmeja. Luokittelussa tietokone harjoittelee historiallisen datan avulla luokittelemaan tiedon, jotta se pystyy tekemään saman uudelle datalle. Data voi sisältää esimerkiksi vanhoja lainahakemuksia ja tiedon siitä, miten hyvin

ne ovat menneet. Tämä tiedon perusteella tietokone pystyy luokittelemaan uusia lainahakemuksia. Ohjatussa oppimisessa käytetään muun muassa logistista regressiota, päätöspuuta, tukivektorikonetta ja satunnaispäätösmetsiä datan käsittelyyn. (Louridasja Ebert, 2016)

Itsenäisessä oppimisessa tietokoneelle annetaan harjoittelu data, joka sisältää tehtävän suorittamiseen tarvittavan data muttei ratkaisuja siihen kuten ohjatussa oppimisessa. Tietokoneen täytyy löytää tehtävän ratkaisut itse. Itsenäisessä oppimisessa käytetään klusterointialgoritmeja, jotka jakavat annetun datan eri ryhmiin tiettyjen kriteerien mukaan**.** K-means klusterointi algoritmi on yleinen ja paljon käytetty algoritmi. Muita menetelmiä, joita itsenäisessä oppimisessa käytetään ovat muun muassa hierarkkinen klusterointi, Gaussian seosmalli ja geneettiset algoritmit. (Louridasja Ebert, 2016)

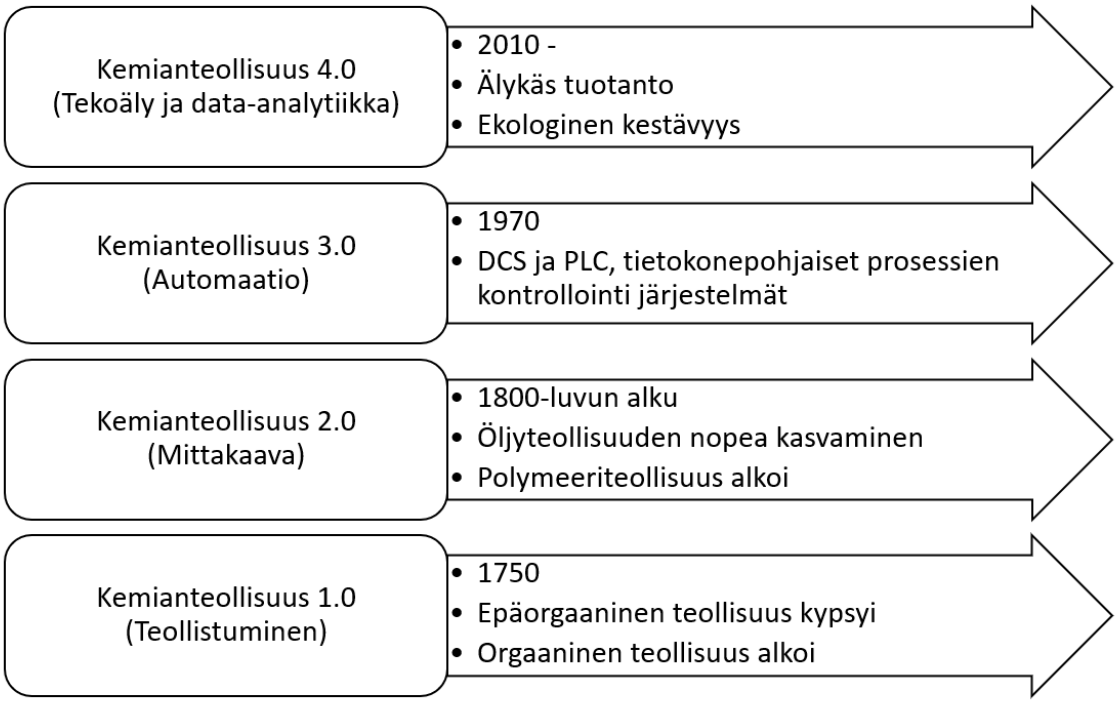
3 Kemianteollisuus

Tämän kappaleen tarkoituksena on muodostaa yleiskuva kemiateollisuudesta teollisuuden alana. Tämän lisäksi tarkoituksena on selvittää mitä ovat panostoimiset prosessit.

3.1 Kemianteollisuus yleisesti

Vaikkakin kemikaalien käyttö ylettyy aina muinaisiin sivilisaatioihin saakka, niin kehitys siihen minkä me tunnistamme moderniksi kemianteollisuudeksi alkoi paljon myöhemmin. Tarkkaa ajankohtaa on haasteellista märitellä, mutta sen voidaan arvioida alkaneen vuosien 1750–1800 paikkeilla teollisenvallankumouksen aikoihin. Aluksi valmistettiin epäorgaanisia kemikaaleja muiden teollisuusalojen käyttöön, kuten alkalia saippuanvalmistukseen, valkaisujauhetta puuvillan valmistukseen, ja kvartsia sekä soodaa lasin valmistukseen. Orgaanisten kemikaalien valmistus alkoi vuonna 1760 kun William Henry Perkin keksi ensimmäisen synteettisen väriaineen. (Heaton1994, s. 1-2)

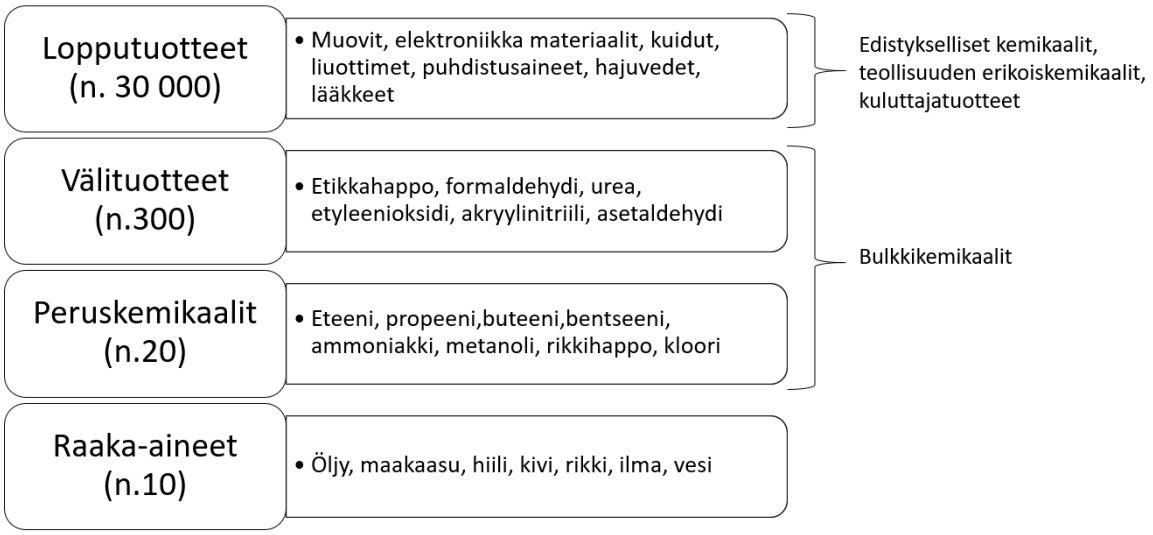
Lahiri (2020) esittää, että modernin kemianteollisuuden kehitys voidaan jakaa neljään eri tasoon, jotka ovat kemiateollisuus 1.0, 2.0, 3.0 ja 4.0. Kemianteollisuus 1.0 sijoittuu teollistumisen aikaan. Kemianteollisuus 2.0 nähdään aikana, jolloin mittakaavaa ja kapasiteetin määrää kasvatettiin tuotannossa. Tällöin Öljyteollisuus kasvoi huomattavasti ja polymeerejä alettiin valmistaa. Kemianteollisuus 3.0 nähdään aikana, jolloin tietokonepohjaisten prosessien kontrollijärjestelmien kehitys ja käyttöönotto tapahtui. Ajanjakso nähdään aikana, jolloin automaatio tuli osaksi kemianteollisuutta. Tämän arvioidaan tapahtuneen 1970-luvun aikoihin. Tällä hetkellä kemianteollisuuden katsotaan olevan siirtymässä uuteen aikakauteen, kemianteollisuus 4.0:aan. Tekoäly, data-analytiikka, big data, koneoppiminen ja esineiden internet (IoT) ovat jo osana kemianteollisuutta ja tulevat tulevaisuudessa olemaan yhä suuremmassa roolissa. Niiden vaikutus alkaa näkymään tuotantotehokkuuden merkittävässä parantumisena, parempana energian hyödyntämisenä, koko valmistusprosessin optimoinnissa, toimitusketjujen parempana integroimisena sekä uusien tuotteiden kehittämisessä. (Lahiri2020) Kuvassa 3 on havainnollistettu kemianteollisuuden kehittymistä.



Kuva 3 Kemianteollisuuden kehittyminen (mukaillen Lahiri 2020)

Kemianteollisuudessa raaka-aineet muutetaan tuotteiksi muille teollisuuden aloille sekä kuluttajatuotteiksi. Tuotteiden valikoima on valtava, mutta valtaosa näistä kemikaaleista, noin 85 prosenttia valmistetaan hyvin rajallisesta määrästä yksinkertaisia kemikaaleja. Näitä kemikaaleja kutsutaan peruskemikaaleiksi, jotka ne taas ovat valmistettu vain noin kymmenestä eri raaka-aineesta. Nämä raaka-aineet voidaan jakaa orgaanisiin ja epäorgaanisiin materiaaleihin. Epäorgaaniset raaka-aineet sisältävät ilman, veden ja mineraalit. Öljy, hiili ja maakaasu yhdessä muodostavat fossiiliset polttoaineet. Nämä kuuluvat orgaanisiin raaka-aineisiin. Näiden lisäksi myös biomassa on orgaaninen raaka-aine.

Peruskemikaaleista voidaan tuottaa noin 300 erilaista välituotetta, jotka ovat edelleen suhteellisen yksinkertaisia molekyylejä. Molempia peruskemikaaleja ja välituotteita voidaan pitää bulkkikemikaaleina. Suuri määrä edistyksellisiä kemikaaleja, teollisuuden erikoiskemikaaleja sekä kuluttajatuotteita, valmistetaan yhä jatkojalostamalla välituotteita. (Moulijn, Makkee ja Diepen, 2001) Tuotteen arvo lisääntyy jokaisella tasolla lähdettäessä raaka-aineista, kohti lopputuotetta. Lopputuotteen arvo voikin olla moninkertainen verrattuna raaka-aineiden arvoon. (Heaton1994, s. 1-2) Kuvassa 4 on havainnollistettu kemian teollisuuden rakennetta.

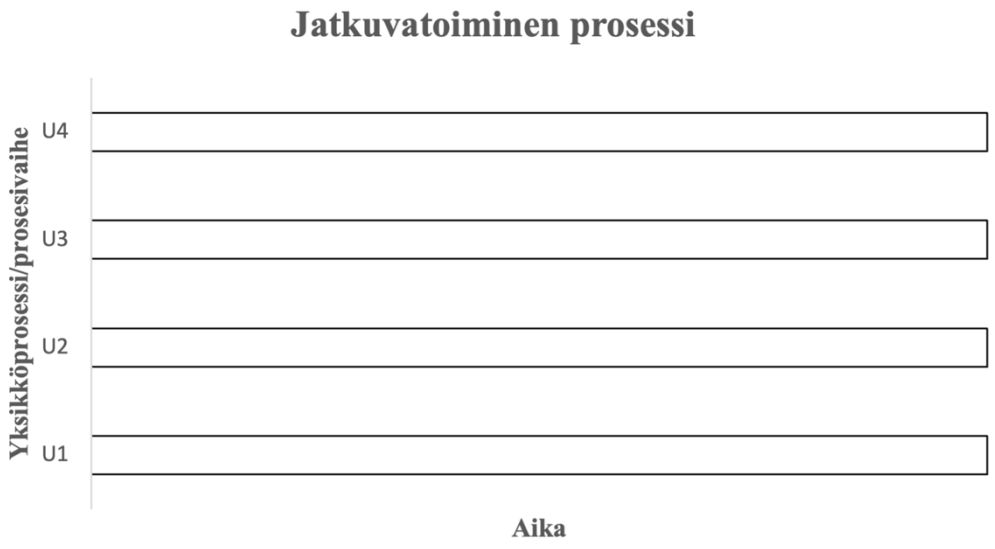


Kuva 4 Kemianteollisuuden rakenne (mukaille Moulijn et. al 2001)

Kemianteollisuudessa tehdastyypit voidaan jakaa karkeasti kahteen eri tyyppiin sen perusteella mitä tehtaassa tuotetaan. Ensimmäinen on massahyödykkeiden tuottamiseen suuntautunut tehdas ja toinen erikoistuotteisiin suuntautunut tehdas. Massahyödyketehtaat ovat suunniteltu tuottamaan suuria määriä jotain tiettyä tuotetta. Tuotanto voi olla luonteelta myös sellaista, että tuotetaan yhtä päätuotetta ja tämän lisäksi valmistetaan muutamaa muuta sivutuotetta. Esimerkkinä tällaisesta tehtaasta on muun muassa kloorin valmistuksen erikoistunut tehdas. Päätuotteena valmistetaan klooria ja sivutuotteina vetyä ja natriumhydroksidia. Yleensä tuotteilla, joita tuotetaan suuria määriä marginaalit ovat pieniä, eli tuotteen arvo on pienempää kuin valmistuskustannukset. Tehtaiden toiminnan suunnittelu on silloin äärimmäisen tärkeää, jotta tuotanto olisi mahdollisimman tehokasta. Käytännössä suurin osa massatuotteista tuotetaan jatkuvatoimisten prosessien avulla. (Perryja Green, 2008, s. 8-47)

Erikoistuotteisiin suuntautuneessa tehtaassa tuotetaan pieniä määriä erilaisia tuotteita. Tällaiset tehtaat ovat tyyppilisiä, kun valmistetaan hienokemikaaleja, lääketieteen tuotteita, elintarvikkeita, jne. Tuotteilla on yleensä korkeat marginaalit. Kun valmistusmäärät ovat suhteellisen pieniä ei ole taloudellisesti järkevää keskittyä valmistamaan ainoastaan yhtä tuotetta. Tällöin tuotannossa hyödynnetään panostoimisia prosesseja, jotta voidaan valmistaa useitta (jopa satoja) eri tuotteita samoilla tuotantolaitteilla. Yksi keskeisimmistä ongelmista on pystyä valmistamaan johdonmukaisesti jokainen tuote siten, että laatuvaatimukset täyttyvät. (Perryja Green, 2008, s. 8-47)

Voidaan ajatella, että edellä mainitut tehdastyypit sekä prosessityypit ovat ääripäät, sillä on myös hyvin yleistä, että tehtaissa käytetään molempia prosesseja. Jopa prosessi, joka mielletään jatkuvatoimiseksi prosessiksi voi sisältää vaiheen, joka toimiikin panostoimisesti. (Perryja Green, 2008, s. 8-47)



Kuva 5 Jatkuvatoimisen prosessin toimintaperiaatteen havainnollistaminen

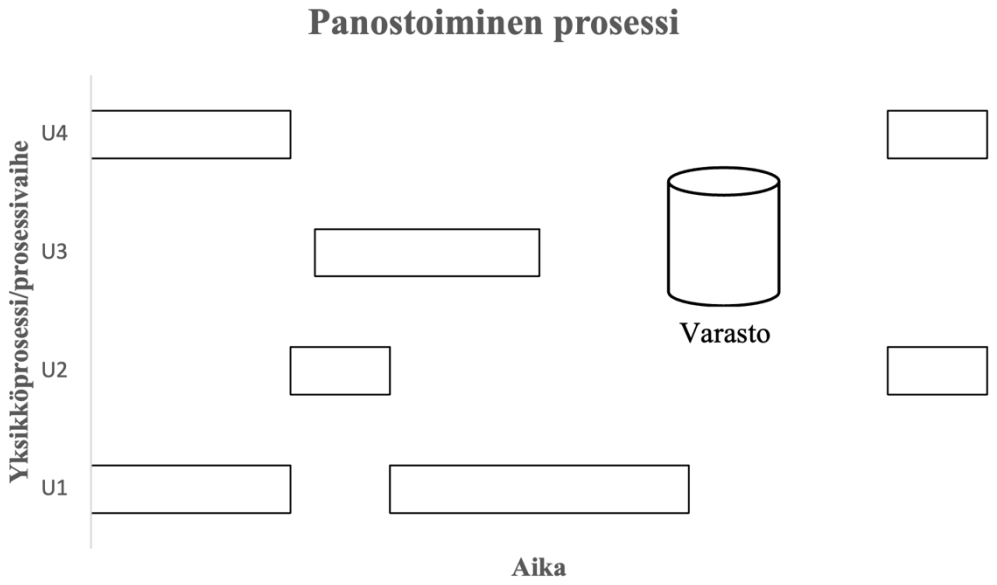
Kemianteollisuudessa prosessit voidaan jakaa jatkuvatoimisiin prosesseihin (kuva 5) sekä panostoimisiin prosesseihin. Jatkuvatoimiset prosessit ovat suunniteltu toimimaan 24 tuntia vuorokaudessa, seitsemänä päivänä viikossa vuoden jokaisen päivänä. (Sinnottja Towler, 2009, s. 9-10)

Jatkuvatoimisissa prosesseissa prosessiolosuhteet säilyvät samoina käynnistyksestä alkaen, Kun taas panostoimissa prosesseissa olosuhteissa on vaihtelua. Toki jatkuvatoimisten prosessien prosessiolosuhteissa vaihtelua voi esiintyä esimerkiksi prosessin syötössä tai lämpötilassa. Nämä vaihtelevuudet pysyvät kuitenkin yleensä keskiarvossa, eli tai niiden muutos on asteittaista pitkällä aikavälillä. Keskiarvollinen data tunneittain tai päivittäin onkin merkityksellistä jatkuvatoimisissa prosesseissa. (Perryja Green, 2008, s. 8-47)

Todellisuudessa mikään prosessi ei voi toimia ilman pysähdyksiä kokonaista vuotta. Toiminta pysähtyy käytännössä huoltojen ja kunnossapidon ajaksi, jossain prosesseissa on lisäksi tarpeen tehdä katalysaattorien uudelleen generointeja. Jatkuvatoimisten prosessien toiminta-aste kertoo sen, kuinka monta tuntia prosessi on ollut toiminnassa vuoden aikana.

Siinä verrataan kokonaistuntimäärää vuodessa, jona prosessi on ollut käytössä siihen kuinka paljon tunteja, on vuodessa yhteensä. Toiminta-aste ilmoitetaan prosentteina ja se on yleensä 90 ja 95 prosentin välissä.

Panostoimiset prosessit (kuva 6) ovat suunniteltu toimimaan ajoittaisesti. Panostoimisissa prosesseissa, joko koko prosessi käynnistetään ja suljetaan aika ajoin. Toinen vaihtoehto on, että osa prosessin vaiheista on suljettuna ja osa toiminnassa. On myös melko yleistä, että prosessissa on yhdistettynä näitä molempia ominaisuuksia. Esimerkiksi panostoimista reaktoria voidaan käyttää, kun halutaan syöttää materiaalia tietyn väliajoin jatkuvatoimiseen tislauskolonniin. (Sinnottja Towler, 2009, s. 9-10) Panostoimisten prosessien toimintaa tarkastellaan yksityiskohtaisemmin seuraavassa luvussa.



Kuva 6 Panostoimisen prosessin toimintaperiaatteen havainnollistaminen

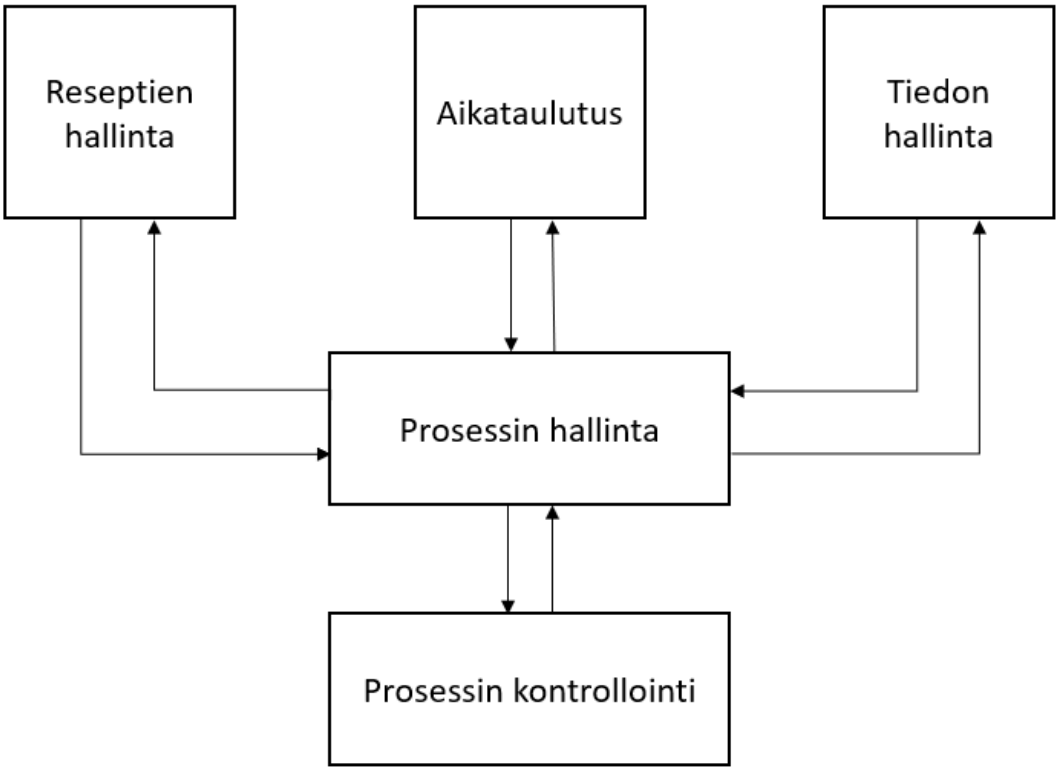
Jatkuvatoimiset prosessit ovat yleensä paljon taloudellisimpia tilanteissa, jossa tuotanto tapahtuu suuressa mittakaavassa. Panostoimisiaprosesseja käytetään, kun tuotanto vaatii joustavuutta tuotantomäärissä tai kun tuotteessa on tietyt latuvaatimukset. Panostoimisten prosessien korkeammat kiinteät kustannukset ja matalampi toiminta-aste tekevät niiden käytöstä käytännössä järkevää tilanteissa, kun valmistetaan tuotteita, joilla on korkea arvo mutta valmistusmäärät ovat pienempiä. Tällaisia tuotteita ovat esimerkiksi elintarvikkeet,

lääketeollisuuden tuotteet kuten rokotteet, hygienia tuotteet ja erikoiskemikaalit. Näitäkin tuotteita on mahdollista valmistaa jatkuvatoimisilla prosesseilla, silloin valmistusprosessi täytyy kuitenkin tuntea todella hyvin, tämän lisäksi tuotantomäärän on oltava suurta ja tuotteen valmistamisen taloudellisesti kannattavaa kyseiselle yritykselle. (Sinnottja Towler, 2009, s. 9-10)

3.2 Panostoimiset prosessit

Mikä tahansa prosessi, joka koostuu erillisistä prosessivaiheista, joiden on noudatettava tiettyä ennalta määrättyä järjestystä raaka-aineen syötöstä lopputuotteeseen, kutsutaan panostoimiseksi prosessiksi. Tätä ennalta määrättyä toimintojen säännönmukaista sarjaa voidaan kutsua ”reseptiksi”. Minkä tahansa panostoimisen prosessin pääpiirteet ovat se mitä materiaaleja käytetään ja kuinka paljon sekä jokaisen prosessivaiheeseen käytetty aika. Toissijaisia piirteitä ovat prosessivaiheiden toimintaolosuhteet ja harvinaisemmissa tapauksissa se missä prosessi toteutetaan maantieteellisesti. Prosesseissa, joissa turvallisuus on suurena huolen aiheena, saattaa olla tarpeen suorittaa prosessi sille suunnittelulla alueella, jossa on asiaankuuluvat turvajärjestelyt. (Majozi2010, s. 1–11)

Yleensä valmistusohjeista käytetään termiä ”resepti”. Resepti kertoo tavallisesti kaksi asiaa. Se ilmoittaa mitä materiaalia tarvitaan ja kuinka paljon, jotta tuote voidaan valmistaa. Tämän lisäksi se kertoo mitä raaka-aineelle pitää tehdä valmistaakseen halutun tuotteen. Termiä ”resepti” käytetään joskus kuvaamaan ainoastaan raaka-aineita ja niiden määrää, käytäntö sopii osaan panostoimisista prosesseista, mutta joissakin prosesseissa tämän tyyppinen käytäntö on liian rajoittava. Osassa tuotteissa erot erituotteiden välillä ovat käytännössä fysikaalisia kuin kemiallisia. Tällaisia tuotteita valmistaessa valmistusohjeet ovat erityisen tärkeitä. Tällöin termi ”valmistuskaava” voisi olla sopivampi raaka-ainemäärille ja muille prosessiparametreille. Asian voi ajatella, sillä tavalla, että resepti sisältää sekä valmistuskaavan, joka kertoo materiaalien määrän ja muut parametrit sekä valmistusohjeet siitä, että mitä tehdään missäkin järjestyksessä. (Perryja Green, 2008, s. 8-47)



Kuva 7 Panostoimisen prosessin hallinta (mukaillen Perry & Green 2008)

Kuvassa 7 on havainnollistettu mitä asioita panostoimisten prosessein hallintaa liittyy. Reseptien hallinta on keskeisessä osassa panostoimisia prosesseja. Jokainen tuote valmistetaan sille kuuluvalla reseptillä. Tuotannon suunnittelu ja aikataulutus ovat keskeisessä roolissa prosessien mahdollisimman sujuvan toiminnan kannalta. Prosesseista kerätään monenlaista dataa. Itsessään prosessista kerätään dataa esimerkiksi sen kestosta ja olosuhteista. Tämän lisäksi muun muassa valmistetusta tuotteesta halutaan kerätä tietoja.

Panostoimisetprosessit voidaan jakaa kolmeen eri kategoriaan sen perusteella, miten valmistuskaava ja valmistusohjeet eroavat toisistaan. Ensimmäinen kategoria ovat jaksottaiset panosprosessit, joissa valmistuskaava ja valmistusohjeet ovat samat panos erien välillä. Toinen kategoria ovat prosessit, joissa valmistusohjeet ovat samat mutta valmistuskaava vaihtelee panos erien välillä. Esimerkiksi jos halutaan valmistaa erilaatuisia PVC muoveja valmistusohjeet ovat samat mutta valmistuskaavat ovat erilaisia. Tämä siis tarkoittaa sitä, että raaka-aineet ovat samat mutta niiden suhde voi olla erilainen, myös prosessointi aika ja lämpötila saattavat vaihdella. Kolmantena kategoriana on joustavat panosprosessit. Näissä

prosesseissa sekä valmistuskaava että valmistusohjeet ovat erilaiset. Tällöin siis raaka-aineet ja niiden määrät ovat erilaiset eri panoserien välillä, tämän lisäksi myös prosessi parametrit eroavat erien välillä. Tämän tyyppisiä panostoimisia prosesseja on kaikista vaikein automatisoida, ja ne vaativat monimutkaisia kontrollointi järjestelmiä kuin kummatkaan kaksi ensin mainittua panosprosessi tyyppiä. (Perryja Green, 2008, s. 8-47)

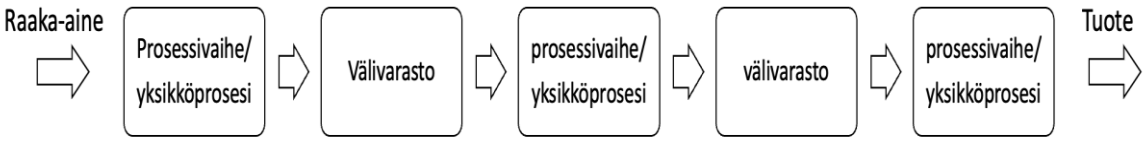
Panostoimisia prosesseja käytetään laajasti kemian prosessiteollisuuden eri aloilla muun muassa valmistamaan erilaisia kuluttajatuotteita kuten erikoiskemikaaleja, lääkkeitä, maaleja, polymeerejä, elintarvikkeita ja kosmetiikkaa. Panostoimisia prosesseja suositellaan käytettäväksi monimutkaisissa kemiallisissa erotus – ja puhdistus vaiheissa. Panostoimisia prosesseja käytetään myös silloin kun tuotanto tapahtuu pienemmissä määrin (10 000 tonnia/vuosi). Monia uusia tuotteita valmistetaan aluksi pienemässä skaalassa panostoimisten prosessien avulla. Myöhemmin siirrytään mahdollisesti jatkuvatoimisiin prosesseihin teknologian kehittyessä ja tuotteen kysynnän kasvaessa markkinoilla, jolloin tuotanto suuremmissa määrissä olisi taloudellisesti kannattavaa. (Dimian, Bildea ja Kiss, 2014)

Panostoimiset prosessit voidaan jakaa myös kahteen kategoriaan sen perusteella, minkälaisia tuotteita niillä valmistetaan. Prosessit luokitellaan monituotteisiin ja monikäyttöisiin prosesseihin. Kun puhutaan monituotteisesta prosessista, tarkoitetaan, että jokainen valmistettu erä noudattaa saama järjestystä prosessivaiheissa alusta loppuun. Myöskin raaka-aineet ovat samat, jokaisella valmistuskerralla. Valmistetun erän ei kuitenkaan tarvitse kuulua samaan tuotteeseen. Prosessivaiheiden kesto voi vaihdella riippuen minkä tuotteen erästä on kyse. Kun eri tuotteilla on identtiset ja muuttumattomat reseptit ihanteellinen vaihtoehto monituotteinen prosessi. Jos taas on tuotteita, joiden reseptit vaihtelevat tuotantoerien välillä monikäyttöinen prosessi on silloin parempi vaihtoehto. Vaihtelu resepteissä tuotantoerien välillä ei automattisesti tarkoita, että kyseessä oli eri tuote. Toisin sanoen samalla tuotteella voi olla useita reseptejä. Tällaisissa tapauksissa. monikäyttöiset prosessit ovat sopivampi vaihtoehto, koska tässäkin tilanteessa tuotantoerien välillä on vaihtelua resepteissä. Monikäyttöiset prosessit ovat monimutkaisempia kuin monituotteiset prosessit. (Majozi2010, s. 1-11)

Panostoimisten prosessien toimintaa voidaan tarkastella erilaisten toimintafilosofioiden kautta. Erilaiset toimintafilosofiat ovat tarpeen sillä panostoimiset prosessit ovat monimutkaisia ja ajasta riippuvaisia. Ensimmäisenä toimintafilosofiana esitellään ei välivarastoa- toimintafilosofia (NIS). Nimi tulee englannin kielen sanoista ”no intermediate strorage”. Toimintaperiaate perustuu siihen, että välituotetta pidetään siinä prosessiyksikkö, jossa se on

tuottettu siihen asti, kunnes se voidaan siirtää seuraavaan vaiheeseen. Tätä toimintafilosofiaa käytetään tilanteissa, joissa käyttötila on tärkeässä roolissa. Voi olla tilanne, jossa tilaa on rajallisesti, eikä näin ollen välivarastolle löydy tilaa. (Majozi2010, s. 1-11)

Seuraavaksi esitellään toimintafilosofioita, jotka hyödyntävät välivarastointia eri tavoin (kuva 8). Ensimmäinen tämä tyylinen toimintafilosofia on nimeltään rajallinen välivarasto (FIS). Nimi tulee englannin kielen sanoista ”finite intermediate storage”. Tässä toimintafilosofiassa välituote varastoidaan prosessivaiheen jälkeen ennen kuin se siirtyy seuraavaan vaiheeseen. Välivarastointia voidaan tarvita, jos on kapasiteettiin tai aikatauluun liittyviä haasteita. Jos esimerkiksi prosessivaiheen B syötön kapasiteetti on pienempää kuin mitä prosessivaiheesta A on saatu välituotetta, eikä kaikkea voida käyttää kerralla vaiheessa B, silloin osa tästä välituotteesta täytyy varastoida. Prosessivaiheilla on eri kestoja, jolloin osa vaiheista saadaan suoritettua nopeammassa aikataulussa kuin toiset, tällöin välivarastoinnilla pyritään poistamaan pullonkauloja ja lisäämään tuotannon joustavuutta. Rajallisuus tässä toimintafilosofiassa tarkoittaa sitä, että on mahdollisuus, että jossain kohtaa syntyy tilanne, ettei välivarastoon enää mahdu varastoitavaa. (Majozi2010, s. 1-11)

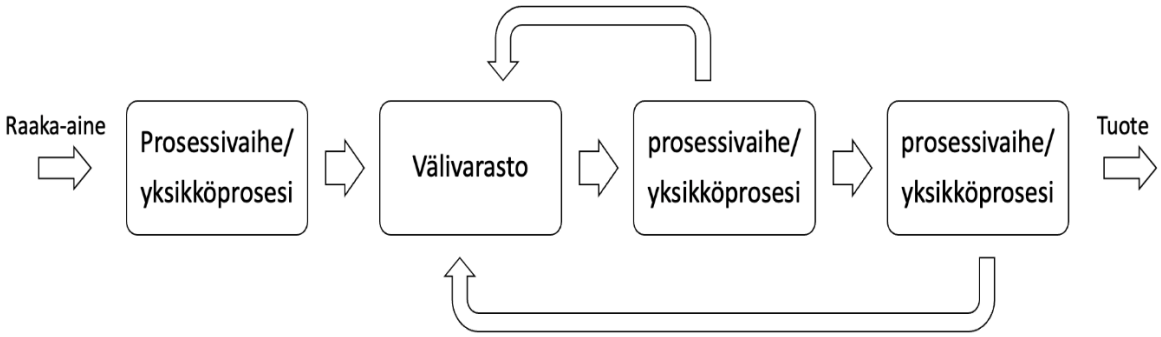


Kuva 8 Panostoiminen prosessi välivarastolla (mukaille Majozi 2010)

Toinen toimintafilosofia, joka käyttää välivarastointia tunnetaan nimellä rajoittamaton välivarasto (UIS), joka tulee englannin kielen sanoista ”unlimited intermediate storage”. Tämä toimintafilosofia on samantyylinen kuin rajallinen välivarasto- filosofia, sillä erolla, että

välivarastossa on aina tilaa riippumatta ajan hetkestä. Välituote voidaan varastoida heti ilman varastointikapasiteetin rajoituksia. Tämä voidaan saavuttaa siten, että varaston kapasiteetti on liian suurta verrattuna tuotantokapasiteettiin. (Majozi2010, s. 1-11)

Kolmas toimintafilosofia (kuva 9), joka käyttää välivarastointia on nimeltään yhteinen välivarasto (CIS), nimi tulee englannin kielen sanoista ”common intermediate storage”. Tässä filosofiassa välivarastointi jaetaan eri prosessi vaiheiden kesken. Varastoitaessa välituotteita tällä tavalla on noudatettava tiukkoja toimenpiteitä sen varmistamiseksi, ettei tuotteen eheys kärsi siitä, kun varastointi jaetaan muidenkin tuotteiden kesken. Varastointisäiliö voidaan joutua esimerkiksi pesemään perusteellisesti eri materiaalien välillä, tästä seuraa ylimääräisiä kustannuksia esimerkiksi pesemisestä syntyvän jäteveden käsittelyn seurauksena. (Majozi2010, s. 1-11)



Kuva 9 Panostoimien prosessi välivarastolla (Mukaillen Majozi 2010)

Harvoin käytännön tuotannossa toimitaan vain yhden toimintafilosofian perusteella, vaan niissä yhdistellään edellä mainittuja filosofioita. Muita yleisesti tavattuja toimintafilosofioita ovat sekavälivarastointi (MIS), joka tulee englanninkielisestä ilmaisusta ”mixed intermediate storage”. 0-odotus (ZW) tulee englannin kielen sanoista ”zero-wait”. Näiden lisäksi tavataan filosofiat rajallinen odotus (FW), joka tulee englannin kielen ilmaisusta ”finite wait” ja rajoittamaton odotus (UW), englanninkielinen ilmaisu tälle on ”unlimited wait”. Sekavälivarastointi filosofiaa tavataan, kun tuotannossa esiintyy vähintään kaksi aiemmin mainituista NIS, FIS tai CIS filosofioista rinnakkain.

ZW, FW ja UW toimintafilosofioita sovelletaan välituotteen vakauteen nähden. 0-odotus-filosofiaa käytetään silloin, kun välituote on epävakaata, tällöin on aina suositeltavaa edetä valmistuksen seuraavaan vaiheeseen heti edellisen vaiheen päätyttyä. Tämä filosofia ei luonteensa puolesta vaadi välivarastointia. Välituote voi olla myös vain osittain stabiilia ja alkaa hajoamaan vasta tietyn ajan kuluttua. Tällaisissa tapauksissa hyödynnetään rajallista odotus-filosofiaa. Säilytys ajan on oltava rajallinen, jotta pystytään estämään ei toivotun materiaalin muodostuminen. Rajoittamatonta odotus- filosofiaa käytetään tilanteessa, jossa välituote on stabiilia merkittävästi pidemmän aikaa, jolloin tuotetta voidaan pitää varastossa kauemmin eikä ole kiirettä siirtää sitä seuraavaan prosessivaiheeseen. Näissä kahdessa viimeksi mainitussa toimintafilosofiassa varastointi voi tapahtua joko prosessointilaitteistossa tai erillistä välivarastoa käyttäen. (Majozi2010, s. 1-11)

Yksi panostoimisten prosessien etuna on niiden monipuolisuus, kuten aikaisemmin on tullut selväksi panostoimisella tuotannolla, voidaan tuottaa monia eri tuotteita tai samaa tuotetta mutta usealla eri laadulla. Kun tuotanto halutaan pitää joustavana ja monipuolisena myös laitteiston on oltava monipuolinen. Laitteisto voi tämän seurauksena olla ominaiskustannuksiltaan kallista, juuri pienemmän tuotantomäärän ja laitteiston tekniikan monimutkaisuuden takia. Tosin jos monimutaisia laitteita ei tarvita, kustannukset laitteiden ja tehtaan tarvitseman tilan puolesta voivat olla alhaisempia verrattuna jatkuvatoimisiin prosesseihin. (Dimian et al.2014, s.449-488) Muita panostoimisten prosessien etuja ovat se, että tuotteen laatua pystytään tarkkailemaan, jokaisen tuotantoerän jälkeen ja laitteisto on helpompi siivota ja pitää steriilinä kun tuotanto on luonteeltaan ajoittaista. (Sinnottja Towler, 2009, s. 9-10)

Panostoimisten prosessien yhtenä heikkoutena pidetään niiden alhaisempaa tuottavuutta verrattuna jatkuvatoimisiin prosesseihin. Panostoimisissa prosesseissa vain osa ajasta kuluu itse tuotantoon. Aika kuluu myös tuotantoerien mahdollisiin esivalmisteluihin ja jälkikäsittelyyn. Panostoimisia prosesseja rasittavat pienemmän tuotantomäärän seurauksena korkeammat materiaali ja energiakustannukset tuotettua määrää kohden. Panostoimisissa prosesseissa useiden tuotteiden tuotantoerät voivat jakaa samat tuotantolaitteet, tällöin aikataulutus on todella tärkeässä roolissa. Panostoimisia prosesseja käytetään tyypillisesti laboratorioissa, kun halutaan tutkia kemiallisten tuotteiden valmistuksen kannattavuutta.

Panostoimisia prosesseja käytetään myös, kun halutaan optimoida tuotteen valmistuskaava ja valmistusohjeet. Näitä tietoja voidaan käyttää, kun tuotanto halutaan skaalata teollisuuden mittakaavaan. (Dimian et al.2014, s. 449-488) Yhtenä heikkoutena voidaan pitää myös sitä,

että tuotannossa tulee jossain vaiheessa raja vastaan, jota enempää ei pystytä tuottamaan. Mittakaava etuja on vaikea saavuttaa panostoimisilla prosesseilla. Panostoimisissa prosesseissa esiintyy myös laadun vaihtelua, siitä syntyy kustannuksia, jos tuotteen laatu ei täytä sille määriteltyjä kriteerejä ja joudutaan hylkäämään tuotettu erä. Ja koska panostoimiset prosessit ovat osan ajasta pois toiminnasta eikä tuotantomäärät ole yhtä suuria kuin jatkuva toimisissa prosesseissa, ovat kiinteät kustannukset tuotettua määrää kohden korkeammat kuin jatkuvatoimisissa prosesseissa. (Sinnottja Towler, 2009,s. 9-10) Kuvaan 10 on koottu panostoimiset prosessien etuja ja haittoja.

Edut	Haitat
- Tuotannon monipuolisuus ja joustavuus - Laadun tarkkailu - Helppo pitää puhtaana ja steriilinä - Uusien tuotteiden kehittäminen - Tuotannon kehittäminen	- Alhaisempi tuottavuus - Mittakaavaetuja hankala saavuttaa - Laadun vaihtelu - Kiinteät kustannukset korkeammat

Kuva 10 Panostoimisten prosessien etuja ja haittoja

4 Data-analytiikka kemianteollisuudessa

4.1 Data panostoimisissa kemianteollisuuden prosesseissa

Kemianteollisuuden prosessidata on yhdistelmä reaaliaikaista ja ei-reaaliaikaista dataa ja se on tallennettuna eri tietokantoihin. Reaaliaikainen data on esimerkiksi dataa, jota saadaan suoraan prosessista kuten erilaiset lämpötila ja paine tiedot. Ei-reaaliaikaista dataa taas ovat esimerkiksi aineiden erilaiset mittaus- ja laatu tiedot. Reaaliaikaista dataa saadaan mitattua antureiden avulla lähes jatkuvasti ja sitä on saatavilla käytännössä jopa rajoittamaton määrä. Todellisuudessa tiedonkeruujärjestelmien on kuitenkin rajoitettava tallennetavan datan määrä. Tämä tehdään erilaisin tiedonpakkausalgoritmein, joiden avulla pyritään säilyttämään datassa suurin mahdollinen informaatio, samalla kuitenkin rajoittaen datan määrää ja ulottuvuutta. Datan määrä kasvaa niin suureksi, että tärkeäksi tekijäksi nousee datan analysoinnin tehokkuus. Panostoimisissa prosesseissa haasteita aiheuttaa tuotantoerien eri pituudet, erilaiset datan ulottuvuudet erien ja muuttujien välillä, lisäksi datassa voi esiintyä vääristymiä eri muuttujien välillä. Edellä mainitut seikat on otettava huomioon ja pohdittava täytyykö dataa esimerkiksi skaalata jotenkin, ennen kuin sitä voidaan analysoida. (Mears et al.2016)

Kemianteollisuudessa dataa saadaan muun muassa sensoreista, jotka mittaavat prosessi olosuhteita kuten painetta ja lämpötilaa. Dataa voi esiintyä myös kuva muodossa, jota saadaan esimerkiksi spektroskopiasta, jonka avulla voidaan tutkia esimerkiksi aineen koostumusta. Kemianteollisuudessa esiintyvän datan rakenne vaihtelee. Esimerkiksi kiteytymisprosessissa lämpötilan ja konsentraation muutoksesta dataa kerätään ajan suhteen, tällöin data esiintyy kaksiulotteisena. Mutta esimerkiksi kun käytetään spektroskopiaa data esiintyy kolmiulotteisessa muodossa. (Gargja Mhaskar, 2018)

Panostoimisten prosessien data voidaan jaotella kolmen luokkaan. Ensimmäisenä on tieto raaka-aineista, jotka saadaan ennen kuin prosessi on käynnistetty. Seuraavana on tiedot, joita saadaan prosessin aikana. Viimeisenä ovat valmiin lopputuotteen tiedot, jotka saadaan, kun kaikki prosessin vaiheet ovat suoritettu. (Wang, Gopaluni, Chen ja Song, 2020) Panostoimisten prosessien data on laadultaan yleensä heikompaa verrattuna

jatkuvatoimistenprosessien dataan, johtuen erilaisista näytteenottotaajuuksista, puuttuvan kontekstin ja rajallisesta mittaustekniikasta. (L. Chiang, B. Lu ja I. Castillo, 2017)

Jatkuvatoimisten prosessien ulkopuolella johdonmukaiset ja strukturoidut data setit ovat harvinaisuus. Panostoimisista prosesseista saatava data voi olla skalaari-, vektori-, matriisi- tai tensoridataa. (Chiang, Lu ja Castillo, 2017) Yleensä kuinenkin panostoimisista prosesseista saatava data on rakenteeltaan kolmeulotteista dataa eli tensori dataa (I x J x K). Datassa esiintyy ulottuvuudet I, J ja K. Kirjain I tarkoittaa tuotantoerien lukumäärää, J prosessissa olevien muuttujien lukumäärää, muuttujia ovat muun muassa raaka-aineet ja niiden määrät, prosessiolosuhteet kuten lämpötila, paine ja tilavuus. Viimeisenä ulottuvuutena on K eli aika. Panostoimissa prosesseissa erien välinen aika voi vaihdella riippuen erästä ja prosessivaiheesta. Verrattuna jatkuvatoimisiin prosesseihin, joiden data koostuu vain kahdesta ulottuvuudesta, ajasta K ja prosessimuuttujista J, on panostoimisten prosessien data paljon monimutkaisempaa. (Reisja Saraiva, 2022)

4.2 Data-analytiikan haasteet ja hyödyt panostoimisissa prosesseissa

Haasteet

Yhtenä data-analytiikan haasteena on hyödyntää kaksiulotteista ja kolmeulotteista dataa saman aikaisesti. (Gargja Mhaskar, 2018) Tämän lisäksi panostoimisten prosessien datan rakanenne tekee sen analysoimisesta vaikeampaa kuin jatkuvatoimisten. Useimmat analysointimenetelmät mitä tämän tyyppisen datan käsittelyyn käytetään perustuvat kolmiulotteisen rakenteen avaamisen kaksiulotteiseksi. Kolmiulotteinen (I x J x K) rakenne avataan I x (J x K) muotoon, jolloin saadaan jopa tuhansia muuttujia sisältävä matriisi. (Reisja Saraiva, 2022) Tämän tyyppisen datan analysointi on haastava tehtävä. Voi olla myös tilanne, jossa käytettävissä on vain pieniä määriä suuren varianssin omaavaa dataa, jolloin analyysin ja oikean päätöksen tekeminen vaikeutuu. (Thebelt et al.2022)

Panostoimisen prosessin joustavuus ja vaihtelu tuotannossa, lisäävät datan vaihtelua ja saattavat aiheuttaa ongelmia tuotantoerän kehityksessä, jos prosessia ei valvota ja ohjata kunnolla. Tämän lisäksi panostoimiset prosessit ovat luonnostaan dynaamisia ja ei stationäärisiä, jonka takia ne edellyttävät asianmukaisia data-analytiikka tekniikoita, jotka pystyvät ottamaan nämä ominaisuudet huomioon oikealla tavalla. (Rendall et al.2019)

Vaikkakin kemianteollisuus on hyödyntänyt data-analytiikkaa monia vuosia ja vaikka kemianteollisuus on ollut varhainen omaksuja tietokonepohjaisessa prosessin kontrolloinnissa. Kohtaa kemianteollisuus silti haasteita data-analytiikan hyödyntämisessä kuten erilaisia teknisiä ongelmia, ohjelmisto ongelmia ja kulttuurisia ongelmia. Jotta data-analytiikka pystyttäisiin soveltamaan paremmin, vaatii se lisää tietotaitoa kemiantekniikan osaamisen ulkopuolelta. Data-analytiikkaa tullaan tarvitsemaan prosesseissa, joiden mekanismeja ja toimintaa ei vielä ymmärretä hyvin. Data-analytiikka tulisikin huomioida koulutuksessa, jotta sitä pystyttäisiin lopulta hyödyntämään paremmin. Kemiantekniikan insinööreillä on vahvat matemaattiset- ja ongelmanratkaisutaidot, jotka edesauttavat data-analytiikan oppimista ja hyödyntämistä tulevaisuudessa. (Duever2019)

Hyödyt

Data-analytiikalla voidaan etsiä ratkaisuja ainakin seuraaviin haasteisiin, joita panostoimiset prosessit kohtaavat. Data-analytiikan avulla voitaisiin löytää pullonkauloja tuotannosta. Optimoida tuotanto, siten että prosessi oli mahdollisimman vähän aikaa käyttämättä. Myös tuote laadun vaihteluun ja sen parantamiseen voidaan etsiä ratkaisuja analytiikan avulla. (Gargja Mhaskar, 2018) Lisäksi sitä käytetään prosessin monitorointiin ja kontrollointiin, prosessi virheiden havaitsemiseen ja diagnosointiin. (Rendall et al.2019)

Panostoimisen prosessin tuotelaadun parantamisessa ideana on tarkentaa halutun aineen tuotanto parametrejä, hyödyntäen historiallisia tuotantotietoja yrittäen näen saada seuraavan tuotantoerän laadun lähemmäs tavoiteltua laatua. Yhtenä panostoimisten prosessien vahvuutena data-analytiikan hyödyntämisessä tuotelaadun parantamisessa on, se että historiallista dataa on paljon saatavilla ja myös se, että data voidaan analysoida aina jokaisen tuotantoerän jälkeen. (Aumi, Corbett, Clarke-Pringle ja Mhaskar, 2013)

Panostoimisten prosessien tuotannon suunnittelu ja aikatauluttaminen on tärkeää, jotta voidaan taata raaka-aineiden muuntaminen lopputuotteiksi ja minimoiden erilaiset kustannukset kuten energian kulutus. Panostoimisissa prosesseissa myös varaston optimointi on tärkeää. Näitä tavoitteita voidaan saavuttaa data-analytiikan avulla. Analytiikan avulla pystytään ajoittamaan panostoimisten prosessein toimintaa ja allokoimaan rajoitetut resurssit, jotta materiaaleja, prosessilaitteita ja työvoimaa käytettäisiin ajallisesti mahdollisimman tehokkaasti. Analytiikan avulla pystytään lisäksi optimoimaan ja käsittelemään mahdollisia odottamattomia poikkeamia ja epävarmuuksia, joita tuotannossa mahdollisesti esiintyy.

(Pistikopoulos et al.2021) Tämän lisäksi analytiikan avulla voidaan parantaa panostoimisten prosessien ajan käyttöä. Tämä voidaan saavuttaa esimerkiksi parantamalla logistiikkaa ja poistamalla mahdollisesti tarpeettomia toimintoja. Tuotantoprosessit ovat yleensä monimutkaisia ja dataa on paljon saatavilla, koneoppimisen erilaiset algoritmit ovat yksi vaihtoehto, jolla näitä asioita pyritään ratkaisemaan. (Reisja Saraiva, 2021)

Prosessitietoja voidaan analysoida koneoppimistekniikoita soveltaen ja siitä onkin tulossa yhä suositumpaa koska sen avulla pystytään parantamaan prosessin tuottavuutta, luotettavuutta ja hallintaa. Anturiteknologioiden ja langattomien verkkojen kehityksen myötä erityyppisten tietojen saatavuuden lisääntyminen ja tiedonkeruun ja tallennuskustannusten laskeminen mahdollistavat prosessidata-analytiikan laajan soveltamisen. Analytiikkaa voidaan käyttää esimerkiksi ennusteiden tekemiseen, kuten sellaisten tuotantoerien varhaiseen tunnistamiseen, jotka eivät lopulta täytä tuotevaatimuksia tai muuttaa prosessin loppupään toimintaa tuotelaadun parantamiseksi. Analytiikkaa voidaan lisäksi hyödyntää prosessin ohjaukseen, jossa lasketaan prosessimuuttujien arvoja ja säädetään niitä mallin mukaan, jotta pystyttäisiin saamaan haluttu laatu tuotteelle. Tämän lisäksi analytiikkaa voidaan käyttää prosessin reaaliaikaiseen havaitsemiseen ja diagnosointiin, tämän avulla pyritään huomaamaan prosessin poikkeava käytös mahdollisimman aikaisessa vaiheessa. (Sunja Braatz, 2020)

Lisäksi koneoppimista hyödynnetään eri tuotantoketjun vaiheissa, datan analysointiin ja monimutkaisten mallien muodostamiseen. Koska lopputuotteen laatu riippuu suuresti tuotantoketjun sisäisitä vuorovaikutuksista, prosessinohjausjärjestelmän on otettava huomioon jokaisen prosessivaiheen ja puolivalmiiden tuotteiden tiedot huomioon, jotta lopputuotteen laaduksi saataisiin mahdollisimman korkea. Koneoppimisen avulla voidaan optimoida panostoimisen prosessin tuotanto siten, että huomioiden raaka-aineiden, käytettyjen prosessilaitteiden ja lopputuotteen laatua koskevien parametrien välillä olisi mahdollisimman suuri keskinäinen riippuvuus. (Meiners, Mayr, Thomsen ja Franke, 2020)

4.3 Data-analytiikan tulevaisuuden mahdollisuudet

Tiedonkeruun- ja tallennustekniikan yhä kehittyessä kemiallisista valmistusprosesseista on saatavilla uudentyyppistä korkeamman asteen tensoriaalisia datavirtoja, jotka sisältävät arvokasta tietoa prosessin tilasta ja tuotteen laadusta. Tensoriaalista dataa ei kuitenkaan ole vielä täysin hyödynnetty, eikä tensorianalytiikan soveltamista valmistusprosesseihin ole tutkittu perusteellisesti. Tensoriaalinen data-analytiikka verrattuna perinteisiin oppimismenetelmiin avaa uusia mahdollisuuksia hyödyllisen prosessitiedon poimintaan ja on lupaava työkalu prosessien parempaan ymmärtämiseen ja optimointiin. Koska tensoriaalista data-analytiikkaa ei ole laajalti käytetty kemian prosessiteollisuudessa tarvitaan systemaattista ja syvällistä eri tensoriaalisten menetelmien vertailua tuotantosovellustarkoituksiin, jotta saadaan tietoa siitä mitä menetelmiä tulisi käyttää missäkin tilanteessa ja miten menetelmiä voitaisiin käyttää tehokkaasti. (Sunja Braatz, 2020)

Kemiallisten prosessitietojen analysoinnin yleistyminen tensorinalyysiin on tärkeää monimutkaisissa järjestelmissä kuten epälineaarisissa, dynaamisissa ja ajassa vaihtelevat prosesseissa (Sunja Braatz, 2020). Tällaisia prosesseja ovat esimerkiksi tässä työssä esitellyt panostoimiset prosessit.

Sun ja Braatz (2020) esittävät, että tensorianalytiikkaan tulisi laajentaa todennäköisyyspohjaista tensorimallinnusta, jonka avulla pystyttäisiin sisällyttämään prosessin epävarmuustekijät ja luontainen vaihtelevuus riskiarviointiin. Myös monimutkaisia muuttujien vuorovaikutuksia ja tietojen kohinaa voidaan yhdistää todennäköisyysmallinnukseen, mallin tarkkuuden ja tehokkuuden parantamiseksi. Lopuksi tensoriaalinen data-analytiikka tulisi integroida osaksi prosessikehitystä.

5 Johtopäätökset

Tämän työn tarkoituksena oli tutkia, minkälaisia haasteita panostoimisissa kemianteollisuuden prosesseissa on data-analytiikalle. Tämän lisäksi tutkittiin mihin data-analytiikkaa voidaan hyödyntää panostoimisissa kemianteollisuuden prosesseissa. Työn toisena päätutkimuskysymyksenä oli:

- Minkälaisia haasteita panostoimissa prosesseissa on data-analytiikalle?

Yhtenä keskeisimpänä haasteena havaittiin datan suuri määrä ja sen vaihtelevuus. Dataa saadaan niin reaaliajassa kuin ei-reaaliajassa ja se on tallennettuna eri tietokantoihin. Lisäksi datan suuresta määrästä johtuen on mietittävä, kuinka tallennettavan datan määrää rajoitetaan, kuitenkin siten, että säilytettäisiin datassa suurin mahdollinen informaatio. Panostoimisten prosessien datan rakenne aiheuttaa lisäksi omia ongelmia. Data voi olla monessa eri muodossa. Osa datasta voi olla kaksiulotteisessa muodossa ja osa kolmiulotteisessa muodossa. Haasteena havaittiin näiden kahden rakenteen hyödyntäminen samanaikaisesti. Lisäksi kolmiulotteisessa rakenteessa olevaa dataa on vaikeampaa ja monimutkaisempaa analysoida. Ja se halutaankin yleensä muuttaa ensin kaksiulotteiseen muotoon. Lisäksi panostoimisten prosessien eri pituiset tuotantoerät aiheuttavat ongelmia data-analytiikalle. Tämän seurauksena datan määrä vaihtelee erien välillä, hankaloittaen datan analysointia ja päätösten tekemistä.

Lisäksi työtä tehdessä havaittiin, että data-analytiikka kohtaa myös kulttuurillisia ongelmia. Jotta data-analytiikkaa voitaisiin hyödyntää vieläkin paremmin kemianteollisuudessa, on se huomioitava nykyistä paremmin koulutuksessa ja sitä kautta kehitettävä työntekijöiden data-analytiikka osaamista. Voidaan todeta, että vaikka analytiikkaa käytetäänkin kemianteollisuudessa, olisi sen hyödyntämisellä vieläkin isompi potentiaali tulevaisuudessa. Tämä edellyttää kuitenkin sen, että erilaiset edellä mainitut tekniset ja kulttuuriset haasteet pystytään selvittämään.

Toisena päätutkimuskysymyksenä, johon tässä työssä etsittiin vastausta oli:

- Mihin data-analytiikkaa voidaan hyödyntää panostoimissa prosesseissa?

Työtä tehdessä havaittiin, että data-analytiikkaa voidaan hyödyntää moniin eri tarkoituksiin panostoimisissa prosesseissa. Data-analytiikalla pystytään esimerkiksi löytämään pullonkauloja prosessista. Analytiikan avulla pystytään myös suunnittelemaan ja aikatauluttamaan tuotantoa siten, että raaka-aineita, prosessilaitteita ja työvoimaa käytettäisiin mahdollisimman tehokkaasti minimoiden ylimääräisiä kustannuksia. Tämä onkin tärkeää varsinkin panostoimisissa prosesseissa, jossa yhtäaikaisesti voidadaan tuottaa monia eri tuotteita. Myös kustannuksia on tärkeä pystyä pienentämään, koska tuotantomäärät ovat pienempiä ja kustannukset suurempia verrattuna jatkuvatoimisiin prosesseihin.

Yhtenä keskeisenä asiana mihin data-analytiikalla voidaan vaikuttaa, on tuotteen laatu. Tuotteen laatuun vaikuttaa moni eri asia. Havaittiin, että laadun parantamiseksi voidaan käyttää esimerkiksi koneoppimista, jonka avulla pystytään tekemään erilaisia ennusteita ja analysoimaan monimutkaisia malleja.

Lisäksi työssä havaittiin, että datan monimutkaisuus kasvaa yhä tulevaisuudessa. Jotta tästä monimutkaisesta datasta pystyttäisiin saamaan arvokasta tietoa, on analysointimenetelmiä kehitettävä. Yhtenä esimerkkinä uudentyyppisestä analysointi menetelmänä kemianteollisuudelle esitettiin tensoriaalista-analytiikka.

Työnperusteella voidaan sanoa, että data-analytiikalla on ja tulee olemaan yhä suurempi rooli panostoimisten prosessien parantamisessa. Ja yritysten onkin keksittävä miten he pystyvät vastaamaan haasteisin, joita kasvava määrä monimutkaista dataa aiheuttaa.

Lähteet

Aumi S, Corbett B, Clarke-Pringle T ja Mhaskar P (2013) Data-driven model predictive quality control of batch processes. *AIChE Journal; AIChE J* 59(8): 2852-2861.

Chiang L, Lu B ja Castillo I (2017) Big Data Analytics in Chemical Engineering. *Annual Review of Chemical and Biomolecular Engineering* 8.

Dimian AC, Bildea CS ja Kiss AA, (2014) *Integrated Design and Simulation of Chemical Processes.* Oxford: Elsevier Science & Technology.

Duever T (2019) Data Science in the Chemical Engineering Curriculum. *Processes* 7: 830.

Fleckenstein M and Fellows L, (2018) *Modern Data Strategy.* Cham: Springer International Publishing.

Garg Aja Mhaskar P (2018) Utilizing big data for batch process modeling and control. *Computers & Chemical Engineering* 119: 228-236.

Heaton A (1994) *The Chemical Industry.* London: Blackie Academic & Professional.

L. Chiang, B. Lu ja I. Castillo, *Advances in Big Data Analytics at the Dow Chemical Company.* (2017) - 2017 6th International Symposium on Advanced Control of Industrial Processes (AdCONIP). 207-208.

Lahiri SK (2020) *Profit Maximization Techniques for Operating Chemical Plants.* Newark: John Wiley & Sons, Incorporated.

Li C, Chen Y ja Shang Y (2022) A review of industrial big data for decision making in intelligent manufacturing. *Engineering Science and Technology, an International Journal* 29: 101021.

Louridas Pja Ebert C (2016) Machine Learning. *IEEE Software* 33(5): 110-115.

Majozi T (2010) *Batch Chemical Process Integration Analysis, Synthesis and Optimization.* Dordrecht: Springer Netherlands.

Marr B (2017) *Data Strategy : How to Profit from a World of Big Data, Analytics and the Internet of Things.* London: Kogan Page.

Mears L, Nørregård R, Sin G, Gernaey KV, Stocks SM, Albaek MO ja Villez K (2016) Functional unfold principal component regression methodology for analysis of industrial batch process data. *AIChE Journal; AIChE J* 62(6): 1986-1994.

Meiners M, Mayr A, Thomsen M ja Franke Jö (2020) Application of Machine Learning for Product Batch Oriented Control of Production Processes. *Procedia CIRP; 53rd CIRP Conference on Manufacturing Systems 2020* 93: 431-436.

Moulijn JA, Makkee M ja Diepen Av, (2001) *Chemical Process Technology.* Chichester: Wiley.

Perry RH and Green DW, (2008) *Perry's Chemical Engineers' Handbook.* New York: McGraw-Hill.

Pistikopoulos EN, Barbosa-Povoa A, Lee JH, Misener R, Mitsos A, Reklaitis GV, Venkatasubramanian V, You F ja Gani R (2021) Process systems engineering – The generation next? *Computers & Chemical Engineering* 147: 107252.

PusalaAmini Salehi MKatukuri JRXie Y, Raghavan V, (2016) *Massive Data Analysis: Tasks, Tools, Applications, and Challenges.* Teoksessa: Toim. Pyne S, Rao, B. L. S. Prakasa and Rao SB. Big Data Analytics: Methods and Applications. New Delhi: Springer India, 11-40.

Reis MSja Saraiva PM (2022) Data-Driven Process System Engineering–Contributions to its consolidation following the path laid down by George Stephanopoulos. *Computers & Chemical Engineering* 159: 107675.

Reis MSja Saraiva PM (2021) Data-centric process systems engineering: A push towards PSE 4.0. *Computers & Chemical Engineering* 155: 107529.

Rendall R, Chiang LH ja Reis MS (2019) Data-driven methods for batch data analysis – A critical overview and mapping on the complexity scale. *Computers & Chemical Engineering* 124: 1-13.

Runkler TA (2020) *Data Analytics Models and Algorithms for Intelligent Data Analysis.* Wiesbaden: Springer Fachmedien Wiesbaden.

S. Benjelloun, M. E. M. E. Aissi, Y. Loukili, Y. Lakhrissi, S. E. B. Ali, H. Chougrad, et al., *Big Data Processing: Batch-Based Processing and Stream-Based Processing.* (2020) - 2020 Fourth International Conference On Intelligent Computing in Data Sciences (ICDS). 1-6.

Shang Cja You F (2019) Data Analytics and Machine Learning for Smart Process Manufacturing: Recent Advances and Perspectives in the Big Data Era. *Engineering* 5(6): 1010-1016.

Sinnott RK and Towler G, (2009) *Chemical Engineering Design: SI Edition.* Oxford: Elsevier Science & Technology.

Sun Wja Braatz RD (2020) Opportunities in tensorial data analytics for chemical and biological manufacturing processes. *Computers & Chemical Engineering* 143.

Thebelt A, Wiebe J, Kronqvist J, Tsay C ja Misener R (2022) Maximizing information from chemical engineering data sets: Applications to machine learning. *Chemical Engineering Science* 252.

Wang K, Gopaluni RB, Chen J ja Song Z (2020) Deep Learning of Complex Batch Process Data and Its Application on Quality Prediction. *IEEE Transactions on Industrial Informatics* 16(12): 7233-7242.

Yaqoob I, Hashem IAT, Gani A, Mokhtar S, Ahmed E, Anuar NB ja Vasilakos AV (2016) Big data: From beginning to future. *International Journal of Information Management* 36(6): 1231-1247.