

ESTIMACIÓN DE LAS PROPIEDADES DE CURADO DE GOMAS MEDIANTE SVM

A. González Marcos, E.P. Vergara González, A.V. Pernía Espinoza, M. Castejón Limas, F.J. Martínez de Pisón

Abstract

The Support Vector Machine (SVM) is a novel type of learning machine, based on statistical learning theory, with the capability of learning separating functions in pattern recognition (classification) or performing functional estimation in regression problems. The concept of SVM was introduced by V. Vapnik in the late 1970's in pattern recognition problems. In the 1990's the method was generalized and nowadays a growing interest has emerged as a result of the remarkable efficiency shown by SVMs, especially when compared with traditional artificial neural networks, like the multilayer perceptron. The main advantage of SVM, with respect to neural networks, consists in the structure of the learning algorithm, characterized by the resolution of a constrained quadratic programming problem, where the drawback of local minima is completely avoided.

In this paper, we present an SVM model applied to the particular case of predicting the cure characteristics of the blends according to their chemical composition and mixing conditions. The advantages of this methodology are showed by comparing the obtained results with those obtained by mean of a feedforward neural network model, trained with the backpropagation algorithm, proposed in a previous work.

Key-Words: Rubber extrusion lines; cure characteristics; data mining; support vector machine; neural networks.

Resumen

Las máquinas de vectores soporte (*Support Vector Machine*, SVM) son potentes estructuras de aprendizaje automático, basadas en la teoría estadística del aprendizaje, capaces de resolver problemas de clasificación, regresión y estimación y que han sido importante objeto de estudio en los últimos años. El método fue propuesto por V. Vapnik a finales de los 70 en problemas de reconocimiento de patrones. En los años 90 el método fue generalizado y en la actualidad es objeto de un gran interés, por su mejor desempeño que las redes neuronales, cuyo aprendizaje está basado, en general, en la minimización del error, lo que no asegura, por sí sólo, la maximización de sus capacidades de generalización. Las máquinas de vectores soporte aportan mejoras a los métodos clásicos de aprendizaje: la talla de la red no se fija desde un principio y se garantiza, matemáticamente, el máximo nivel de generalización.

En este trabajo se presenta un modelo basado en SVM para la predicción de las propiedades de curado de mezclas de gomas a partir de su composición química y de las condiciones de mezclado del caucho. Su potencia se muestra al comparar los resultados obtenidos con los del modelo neuronal *feedforward* estándar, entrenado mediante el algoritmo de retropropagación (*backpropagation*), propuesto en un trabajo previo.

Palabras clave: Extrusión de gomas; propiedades de curado; minería de datos; máquinas de vectores soporte; redes neuronales.

1. Introducción

Si bien el proceso productivo de extrusión de elastómeros ha sido utilizado durante muchos años, no existe un conocimiento cierto acerca de la relación existente entre los parámetros de producción durante el proceso y las propiedades resultantes del producto final.

En este tipo de líneas de producción, los esfuerzos por obtener un mayor conocimiento del proceso y, por tanto, por mejorar la productividad, abarcan tanto la etapa de mezclado del elastómero como el propio proceso de extrusión. De hecho, en la literatura especializada se encuentra una amplia variedad de trabajos desarrollados con este propósito.

En la fase de mezclado, uno de los temas que más preocupa es el diseño de los rotores de los mezcladores internos [1]-[4]. Aunque éste es un aspecto importante, también es necesario conocer el mecanismo, química y reología del proceso de mezclado para saber lo que ocurre cuando se combina el caucho con otros ingredientes dentro de un mezclador interno [5]-[9].

En cuanto al proceso de extrusión, se propone el uso de métodos inteligentes para realizar un diseño más eficiente de las matrices de extrusión [10, 11]; se analizan las causas del hinchamiento a la salida de la matriz de extrusión, buscando un modelo capaz de predecir dicho fenómeno [12]; se proponen modelos matemáticos para describir el comportamiento del flujo de la goma fundida dentro de la extrusora [13]; etc.

Puesto que la etapa de mezclado es la que alimenta al resto del proceso y, dado que si no se parte de un material con las propiedades adecuadas, el producto final no poseerá la calidad requerida por el cliente, en este trabajo se propone el uso de herramientas de minería de datos para extraer conocimiento útil a partir de la información almacenada procedente del propio proceso de mezclado.

En este caso, “conocimiento útil” se traduce en un modelo capaz de predecir las propiedades del material a extruir. En trabajos previos, desarrollados por el grupo de investigación al que pertenecen los autores (EDMANS)¹, se propuso el uso de redes neuronales para la obtención de dicho modelo [14]. Los resultados obtenidos fueron bastante buenos, sin embargo, con el fin de conseguir todavía mejores resultados, en este trabajo se hace uso de las máquinas de vectores soporte (*Support Vector Machine*, SVM) [15] en el modelado de las propiedades de curado.

Integrando el modelo propuesto en el sistema de producción, es posible mejorar el flujo de información de la planta al evitar las esperas introducidas por los ensayos de laboratorio. De esta forma, se asegura la trazabilidad del producto en el proceso y se consigue una mejora de las funciones de planificación y control al conocer los cambios que se producen en el material en tiempo real pudiendo, por tanto, tomar decisiones que permitan mantener la producción de acuerdo con el programa.

Estas mejoras en el proceso permitirían realizar una planificación de consignas en función de las características específicas del material. Asimismo, se reducirían los costes derivados de menores tasas de material desechado en la realización de pruebas, menores costes de fallo, tanto externos como internos, etc.

¹ Engineering Data Mining And Numerical Simulations

El resto del documento está organizado de la siguiente manera. En la sección 2 se describe el proceso de mezclado de caucho de la línea de extrusión de elastómeros objeto de estudio. Posteriormente, en la sección 3, se describe la metodología empleada en el desarrollo del modelo y en la sección 4 se analizan los resultados. Por último, se presentan las conclusiones en la sección 5.

2. Proceso de fabricación del caucho

La preparación de las mezclas se realiza en lotes y tiene lugar en dos etapas para evitar la obtención de lotes prematuramente vulcanizados debido a las altas temperaturas alcanzadas durante el mezclado:

1. En la primera etapa se hace uso de un mezclador interno para mezclar el caucho y el negro de carbono, junto con otras cargas o rellenos y aceites plastificantes, dilatadores y reblandecedores, que pueden contener el compuesto. La adición de ingredientes se hace en dos o tres veces, dependiendo de la cantidad de los mismos.
2. Esta primera mezcla se descarga del mezclador interno y se enfría antes de continuar en la segunda etapa, en la que se añaden los agentes de vulcanización en un mezclador de cilindros, puesto que, de esta manera, la mezcla se mantiene fría más fácilmente [16].

Finalmente, y tras tomar muestras que se analizarán en el laboratorio, las mezclas pasan a un tren de enfriado, corte y apilado en plancha, que frecuentemente se conoce como *batch-off*. Para impedir que durante el almacenamiento se peguen entre sí las láminas apiladas, éstas se recubren con un antiadherente.

2.1. Ensayos de control de las mezclas acabadas

Los datos de laboratorio utilizados en este trabajo proceden de un reómetro de disco oscilante (ODR 2000). Del registro del par resistente en función del tiempo de calentamiento a la temperatura elegida, 180 °C, se pueden medir los siguientes parámetros útiles [17]:

- el par mínimo (m), que da una indicación de la viscosidad de la mezcla;
- el tiempo para que el valor del par suba una unidad sobre el valor mínimo ($ts1$), que es el tiempo de comienzo del curado o *Scorch Time* y es una medida de seguridad del proceso;
- el tiempo en alcanzar el 90% de reticulación final ($tc90$), esto es, el tiempo para que el valor del par alcance, sobre el valor mínimo registrado, un aumento equivalente al 90% de la diferencia entre par máximo y par mínimo designado. Este valor se considera, generalmente, como tiempo óptimo de vulcanización a la temperatura considerada;
- el tiempo en alcanzar el 50% de reticulación final ($tc50$), esto es, el tiempo para que el valor del par alcance, sobre el valor mínimo registrado, un aumento equivalente al 50% de la diferencia entre par máximo y par mínimo designado.

Uno de los principales problemas con los que se encuentran los fabricantes de caucho es que la materia prima es intrínsecamente variable. Esto implica que, independientemente de como se manipule para conseguir resultados consistentes, esto es, lotes de alta calidad reproducibles con un ratio de material desechado nulo, la variabilidad del producto en sí mismo permanece. No cabe, por tanto, ninguna duda de las dificultades con las que se encuentran día a día los fabricantes de elastómeros, y de la necesidad de seguir investigando para conseguir productos de calidad con el mínimo coste.

3. Modelado de las propiedades de curado mediante SVM

3.1. Descripción de la base de datos

La base de datos utilizada, la misma que la empleada en [14]², contiene 1123 muestras y 17 variables del proceso de mezclado:

- *ingredientes de la mezcla*: caucho (*vca1*, *vca2* y *vca3*), negros de humo (*vne1*, *vne2* y *vne3*), aceites (*vexten*)
- *proceso de mezclado en el mezclador interno*: temperaturas inicial (*terein*) y final (*terefi*) de la mezcla; potencia consumida (*pocome*); velocidad de los rotores (*prerci1*, *prerci2*); duración de cada ciclo de mezclado (*predu1*, *predu2*); y duración real de la mezcla (*dureme*).
- *curva reométrica*: de todos los parámetros recogidos en esta curva, se pretende predecir el valor del par mínimo (*ml*), ya que es da una indicación de la viscosidad de la mezcla; el tiempo de comienzo del curado o Scorch Time (*ts1*), que es una medida de seguridad del proceso; el tiempo a un 50% del curado completo (*tc50*); y el tiempo a un 90% del curado completo (*tc90*), que se considera como tiempo óptimo de vulcanización a la temperatura considerada.

3.2. Modelos SVM

Las máquinas de vectores soporte son potentes estructuras de aprendizaje automático, basadas en la teoría estadística del aprendizaje, capaces de resolver problemas de clasificación, regresión y estimación. El método, propuesto por V. Vapnik [15], es, en la actualidad, objeto de gran interés, por su mejor desempeño que las redes neuronales, cuyo aprendizaje está basado, en general, en la minimización del error, lo que no asegura, por sí sólo, la maximización de sus capacidades de generalización. Las máquinas de vectores soporte aportan mejoras a los métodos clásicos de aprendizaje: la talla de la red no se fija desde un principio y se garantiza, matemáticamente, el máximo nivel de generalización.

Del mismo modo que en [14], para cada uno de los cuatro parámetros de la curva reométrica analizados, se ha desarrollado un modelo. En este caso, los datos se han dividido en dos conjuntos de patrones: entrenamiento (85% de las muestras) y test (15% restante). Para poder realizar una comparación más precisa entre estos nuevos modelos y las predicciones obtenidas con las redes neuronales desarrolladas en dicho trabajo, los patrones de test han sido seleccionados de tal modo que coincidan con los utilizados por los modelos neuronales previos.

En el panel superior de la figura 1 se muestra la salida del modelo SVM desarrollado (línea discontinua azul), así como los patrones de test utilizados (en verde), en el caso del tiempo a un 90% del curado completo (*tc90*). Se observa que las predicciones obtenidas se ajustan bastante bien a la realidad. Además, en el panel inferior, se han representado distintos gráficos de residuos con el fin de evaluar la normalidad de los mismos y determinar si existe una estructura interna remanente que el modelo no es capaz de explicar: a la vista de los resultados, se puede considerar que los residuos siguen una distribución normal y, por tanto, verifican la bondad del ajuste realizado.

² En este trabajo se muestran los detalles sobre la preparación y análisis previo de este conjunto de datos.

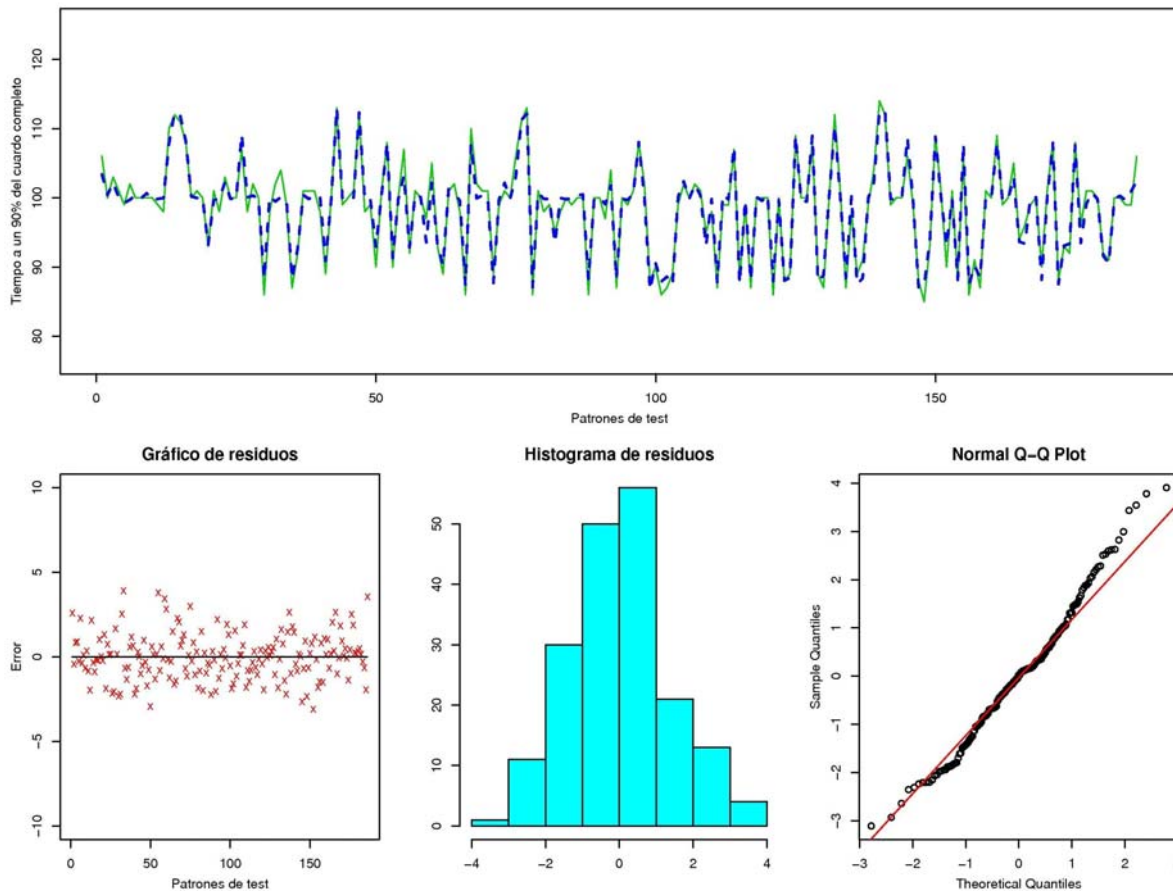


Figura 1. Resultados de test del modelo SVM para el tiempo a un 90% del curado completo (tc_{90}).

Aunque en este trabajo únicamente se muestran de forma gráfica los residuos de test de la variable tiempo a un 90% del curado completo (tc_{90}), debe señalarse que los residuos de los modelos neuronales del resto de características también siguen una distribución normal. A modo de resumen, la tabla 1 muestra los siguientes resultados con los patrones de test:

- Suma total al cuadrado (*Sum Squared Total*, SST). Recoge la variación total de la variable dependiente.
- Suma de los errores de predicción al cuadrado (*Sum Squared Error*, SSE). Indica la parte de la varianza total no explicada por el modelo, por lo que es importante que sea pequeño.
- Error cuadrático medio (*Mean Squared Error*, MSE). Es la medida de los errores cometidos por el modelo para cada uno de los patrones de test.
- Errores mínimo y máximo. Muestran el rango en el que se mueven los errores de predicción.
- Error medio. Valor medio de los errores de predicción.
- Desviación típica. Es una medida de la dispersión de los errores y determina la variabilidad de los mismos frente a la media. Si el valor es pequeño, los errores están próximos a la media y, si es grande, están separados de ella.
- Error medio relativo (%). Valor medio, en tanto por ciento, de los errores relativos de predicción.

Parámetro de curado	SST	SSE	MSE	Error mínimo	Error máximo	Error medio	Desviación típica	Error medio relativo (%)
ml	325.5	7.69	0.041	-0.53	0.64	-0.007	0.204	2.95
ts1	12427.5	636.24	3.421	-6.66	5.99	0.045	1.854	3.51
tc50	18390.2	740.85	3.983	-5.93	6.17	0.027	2.001	2.11
tc90	8390.6	349.56	1.88	-3.11	3.91	0.007	1.37	1.09

Tabla 1. Resultados de los modelos SVM.

De los resultados mostrados en la tabla 1 se desprende que los modelos obtenidos son bastante buenos, ya que son capaces de explicar la mayor parte de la varianza total de los datos, el error medio en todos los casos se encuentra próximo a cero y su desviación típica no es grande. Además, los errores relativos son bajos, estando el más alto en torno al 3.5%.

Comparando estos modelos con las redes neuronales desarrolladas en [14] (ver tabla 2), se observa que los modelos SVM mejoran ligeramente las predicciones en todos los parámetros objeto de estudio, salvo en el caso del tiempo a un 50% del curado completo (*tc50*): la varianza explicada por las SVM es mayor; el error medio y la desviación típica mejoran; y, los errores relativos son inferiores.

Parámetro de curado	SST	SSE	MSE	Error mínimo	Error máximo	Error medio	Desviación típica	Error medio relativo (%)
ml	325.5	7.86	0.042	-0.54	0.68	-0.011	0.206	2.95
ts1	12427.5	644.41	3.464	-6.84	5.48	-0.164	1.859	3.56
tc50	18390.2	711.32	3.824	-6.03	5.40	-0.332	1.932	2.13
tc90	8390.6	359.21	1.931	-3.78	3.70	-0.235	1.373	1.13

Tabla 2. Resultados de las redes neuronales.

3.3. Implementación

El trabajo presentado en este artículo, ha sido completamente desarrollado sobre un sistema operativo Linux con herramientas de libre distribución. El paquete de análisis matemático R³, disponible para múltiples plataformas y que incluye una amplia variedad de técnicas estadísticas y gráficas, ha sido fundamental a lo largo de todo el proceso de análisis y modelado de los datos.

4. Conclusiones

En este trabajo se presentan modelos basados en máquinas de vectores soporte, razonablemente buenos, de las características de curado analizadas, a partir de la composición de las mezclas y de sus condiciones de mezclado.

La utilización de los modelos propuestos en el control de la fase de mezclado supone una mejora importante en el proceso productivo de extrusión de elastómeros. La predicción *on-line* de las características específicas de curado de la mezcla procesada, permite tener un

³ <http://www.r-project.org>

mayor conocimiento de lo que se está fabricando y, por tanto, realizar un control más eficiente del proceso. Así, por ejemplo, durante la primera fase del mezclado sería posible detectar los lotes fuera del rango de tolerancias, lo que permitiría modificar los parámetros de fabricación para mejorar el resultado final.

Las principales ventajas obtenidas son las siguientes:

- Por un lado, permite una reducción de costes al disminuir la cantidad de producto desechado.
- Por otro, mejora la calidad del producto terminado y la uniformidad entre distintos lotes, consecuencia de la reducción de incertidumbre respecto al trabajo realizado.

Agradecimientos

Los autores desean expresar el agradecimiento al Ministerio de Educación y Ciencia de España, Dirección general de Investigación, a través del proyecto DPI2004-07264-C02-01, al II Plan Riojano de I+D+i y a la Unión Europea, a través del proyecto CEUTIC de INTERREG IIIA, así como del programa RFCS mediante los contratos RFS-CR-04023 y RFS-CR-04043, por su contribución a la financiación parcial de estos trabajos.

Referencias

- [1] Hou, L., Nassehi, V., "Evaluation of stress-effective flow in rubber mixing". *Third World Congress of Nonlinear Analysis*, Vol. 47, 2001, pp. 1809-1820.
- [2] Koolhiraan, A., White, J.L., "Comparasion of intermeshing rotor and traditional rotors of internal mixers in dispersing silica and other fillers". *Journal of Applied Polymer Science*, Vol. 78 (8), 2000, pp. 1551-1554.
- [3] Limper, A., Moessinger, J., "Production mixer with variable intermeshing rotor clearance". *Gummi, Fasern, Kunststoffe*, Vol. 53 (3), 2000, pp. 158-161.
- [4] Freakley, P.K., Fletcher, J.B., "The single-rotor continuous mixing system". *Rubber World*, Vol. 226 (4), 2002, pp. 28-31.
- [5] El-Nashar, D.E., Turky, G., "Effect of mixing conditions and chemical cross-linking agents on the physicomechanical and electrical properties of NR/NBR blends". *Polymer-plastics Technology and Engineering*, Vol. 42 (2), 2003, pp. 269-284.
- [6] Drozdov, A.D., Dorfmann, A., "The nonlinear viscoelastic response of carbon black-filled natural rubbers". *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 39, 2002, pp. 5699-5717.
- [7] Menon, A.R.R., Aigbodion, A.I., Pillai, C.K.S., Mathew, N.M., "Processability characteristics and physico-mechanical properties of natural rubber modified with cashewnut shell liquid and cashewnut shell liquid-formaldehyde resin". *European Polymer Journal*, Vol. 38, 2002, pp. 163-168.
- [8] Sirisinha, C., Bauler-Limcharoen, S., Thunyarittikorn, J., "Relationships among blending conditions, size of dispersed phase, and oil resistance in natural rubber and nitrile rubber blends". *Journal of Applied Polymer Science*, Vol. 82 (5), 2001, pp. 1232-1237.
- [9] Zhang, A., Wang, L., Zhou, Y., "A study on rheological properties of carbon black extended powdered SBR using a torque rheometer". *Polymer Testing*, Vol. 22, 2003, pp. 133-141.
- [10] Wu, C.-Y., Hsu, Y.-C., "Optimal shape design of an extrusion die using polynomial networks and genetic algorithms". *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, Vol. 19 (2), 2002, pp. 79-87.

- [11] Ordieres, J., López, L.M., Bello, A., Forcada, A., "Intelligent methods helping the design of a manufacturing system for die extrusion rubbers". *International Journal of Computer Integrated Manufacturing*, Vol. 16 (3), 2003, pp. 173-180.
- [12] Sombatsompop, N., Dingtangee, R., "Effects of the actual diameters and diameter ratios of barrels and dies on the elastic swell and entrance pressure drop of natural rubber in capillary die flow". *Journal of Applied Polymer Science*, Vol. 86 (7), 2002, pp. 1762-1772.
- [13] Azhari, C.H., Sahari, J., Qing, L., "Mathematical modeling of thermoplastic natural rubber melt flow in a double feed extrusion system". *Polymer*, Vol. 39 (20), 1998, pp. 4915-4921.
- [14] González Marcos, A., Ordieres Meré, J., Pernía Espinoza, A., García Forcada, A., "Identificación de mezclas de gomas". *Proceedings of VII International Congress on Project Engineering*, 2003.
- [15] Vapnik, V.N., *The nature of statistical learning theory*, 2nd ed. Springer-Verlag, New York, 2000.
- [16] Morton-Jones, D.H., "Procesamiento de plásticos". Limusa, Mexico, 1993.
- [17] Royo, J., "Manual de Tecnología del Caucho". Consorcio Nacional de Industriales del Caucho, Madrid:, 1989.
- [18] <http://www.r-project.org>. The R project for statistical computing.

Correspondencia

Ana González Marcos, Universidad de León, Área de Proyectos de Ingeniería, Departamento de Ingeniería Eléctrica y Electrónica, Campus de Vegazana s/n, 24071 León, Spain. Phone: +34 987 291 000 - ext. 5286. Fax: +34 987 291 790. E-mail: ana.gonzalez@unileon.es