Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije

Metode umjetne inteligencije u kemijskom inženjerstvu

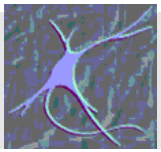
UMJETNE NEURONSKE MREŽE

Artifical Neural Networks (ANN)

Željka Ujević Andrijić

Nenad Bolf

SADRŽAJ PREDAVANJA



- Biološka i umjetna neuronska mreža
- Algoritam učenja neuronskih mreža
- Podjela neuronskih mreža
- Pregled primjene neuronskih mreža
- Pregled primjene neuronskih mreža u kemijskom inženjerstvu

ZAŠTO NEURONSKE MREŽE?

Tijekom evolucije ljudski mozak poprimio je niz karakteristika koje povezujemo s inteligencijom:

- **paralelno djelovanje** (različiti dijelovi mozga istovremeno rješavaju različite zadatke)
- **distribuirano** predočavanje i obrada (raspodjela zadataka se distribuira između više neurona u mreži)
- **sposobnost učenja** (mozak uči kroz iskustvo, prilagođavajući veze između neurona)
- sposobnost **uopćavanja** (naš mozak može primijeniti naučeno iz jedne situacije na druge situacije)
- **prilagodljivost**
- **suvislo** postupanje s informacijama
- **tolerancija na pogreške i nepotpune informacije**

NEURONSKE MREŽE

- Pojam dolazi iz područja umjetne inteligencije (***artificial intelligence*** - **AI**)

Umjetna neuronska mreža *je statistički model kojeg čini veliki broj jednostavnih, međusobno povezanih procesnih jedinica (**neurona**), koji obrađuje informacije shodno vanjskim ulazima.* **Nielsen (1990.)**

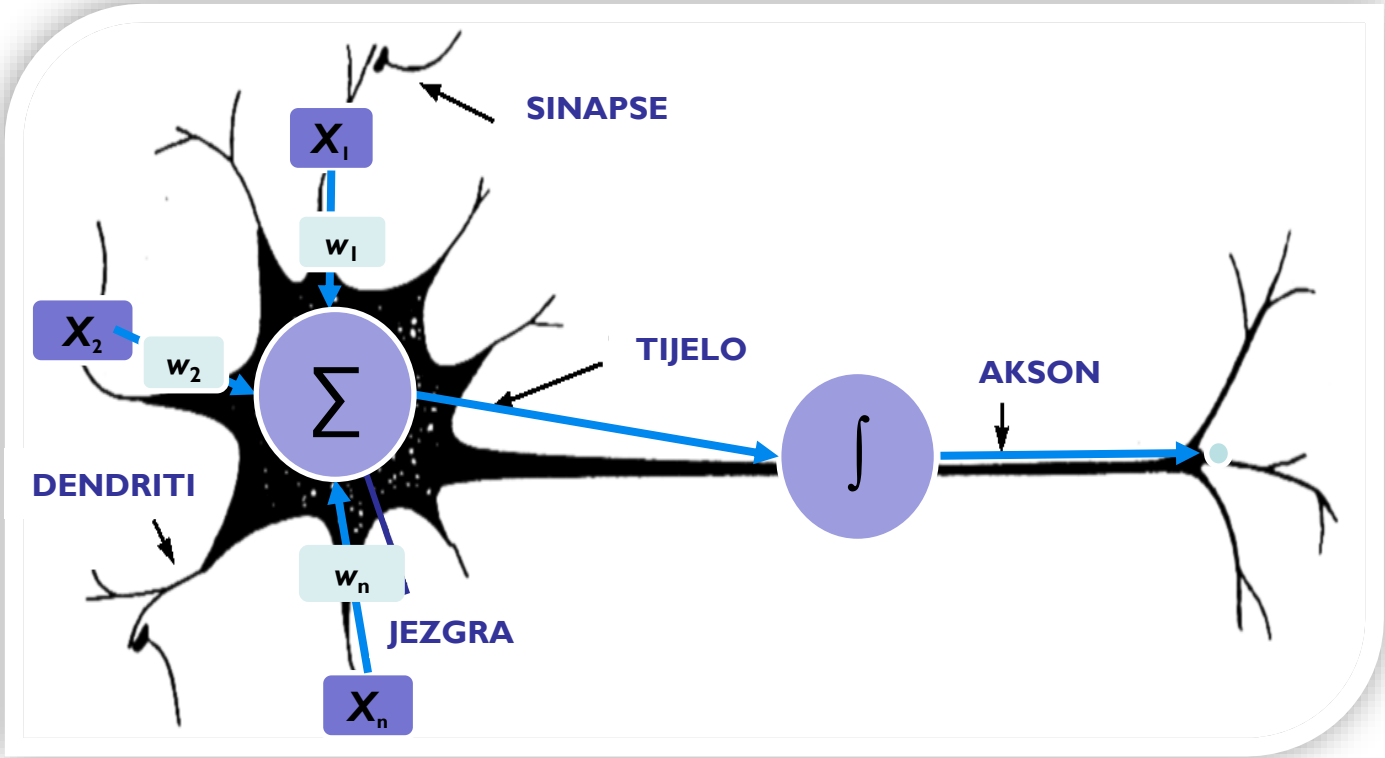
Neuronska mreža je računalni sustav inspiriran biološkim neuronskim mrežama, a sastoji se od povezanih umjetnih neurona organiziranih u slojeve.

Svaki umjetni neuron prima ulazne podatke, obrađuje ih pomoću težinskih faktora i praga, te generira izlaz koji može poslužiti kao ulaz za sljedeće neurone u mreži.

Ova struktura omogućuje neuronskim mrežama da se samostalno prilagođavaju i uče složene obrasce iz podataka.

BIOLOŠKI I UMJETNI NEURON - Analogija

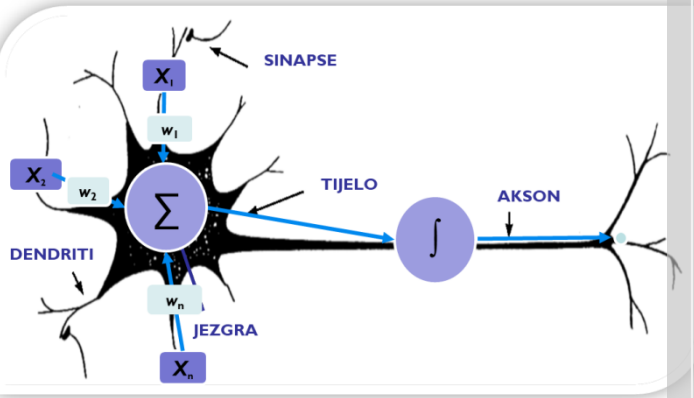
Neuron je osnovna funkcionalna jedinica živčanog sustava koja prenosi **električne signale**.

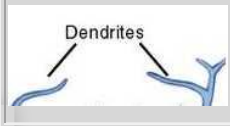
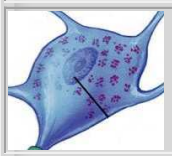
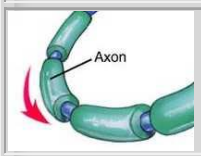
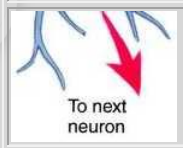


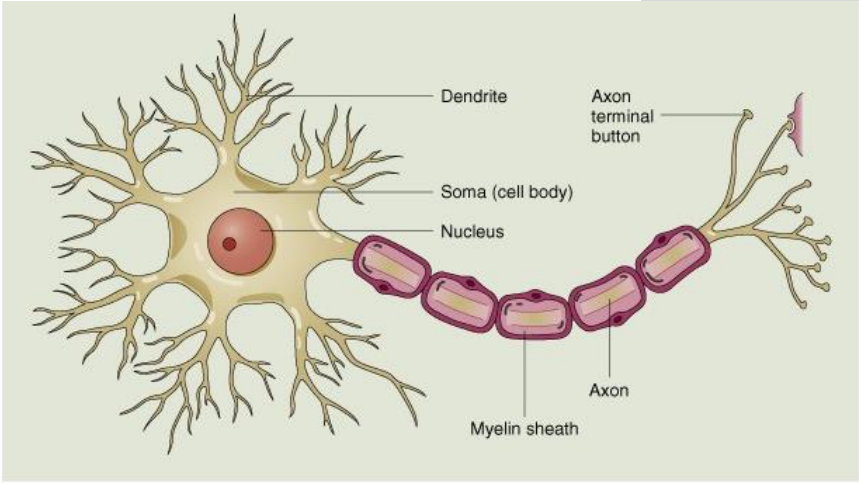
- ***Tijelo** stanice* - sadrži jezgru s informacijama o nasljednim značajkama;
- ***Dendriti*** - kraće niti oko stanice; primaju signale od drugih neurona i šalju ih prema tijelu stanice;
- ***Aksoni*** – duge i tanke niti; Ako signal koji dolazi do dendrita dostigne dovoljno visoki prag (aktivacije), aksoni prenose signal do drugih neurona;

Sinapse - funkcionalne poveznice između završetka aksona prethodnog neurona i dendrita sljedećeg neurona; oslobađaju neurotransmiter potreban stanici za prijenos signala. Električni impuls se prenosi preko sinapsi s jednog na drugi neuron. **Dendriti** pojačavaju ili prigušuju impuls, sumiraju se u jezgri.

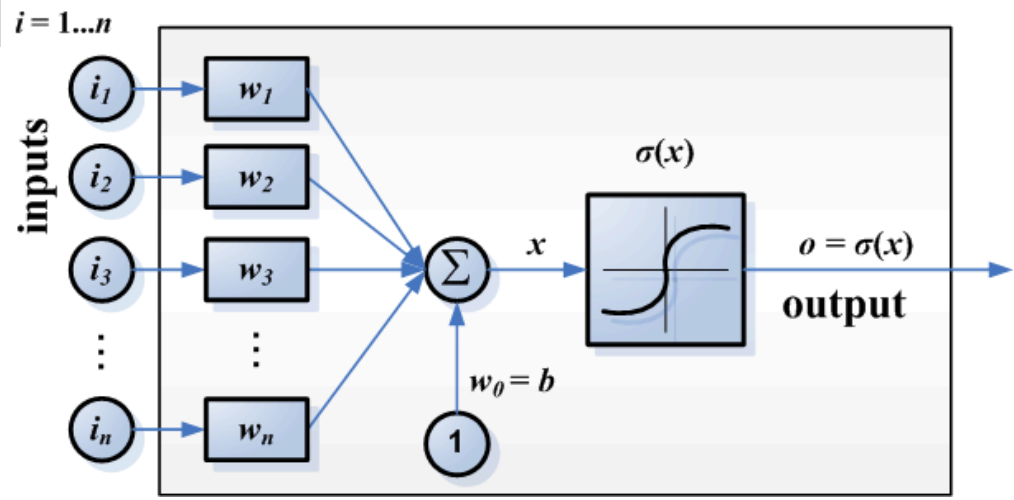
BIOLOŠKI I UMJETNI NEURON



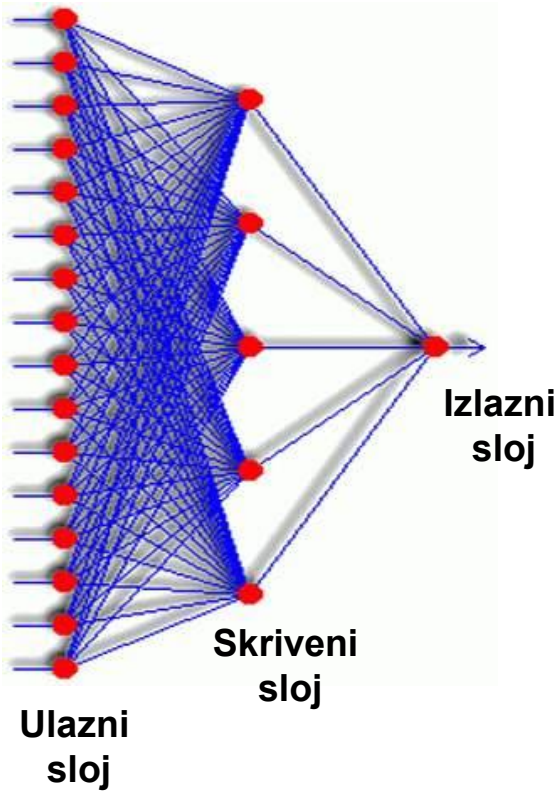
	Biološki neuron	Umjetni neuron
	Prima ulazni signal s drugih neurona putem **dendrita** (sinaptičke veze)	Prima ulaze (***i***) koji su određeni **težinskim** koeficijentima (***w***)
	Obrada signala u somi (tijelu)	Obrada ulaza, unutarnji prag - *bias* (**b**)
	Pretvara obrađeni ulaz u izlaz putem aksona	Pretvara ulaze u izlaz (*prijenosna funkcija*)
	Šalje informacije putem sinapsi do svih neurona s koji je neuron povezan	Šalje informaciju prema izlazu (***o***) i slijedećim neuronima



© 2000 John Wiley & Sons, Inc.



STRUKTURA UMJETNE NEURONSKE MREŽE

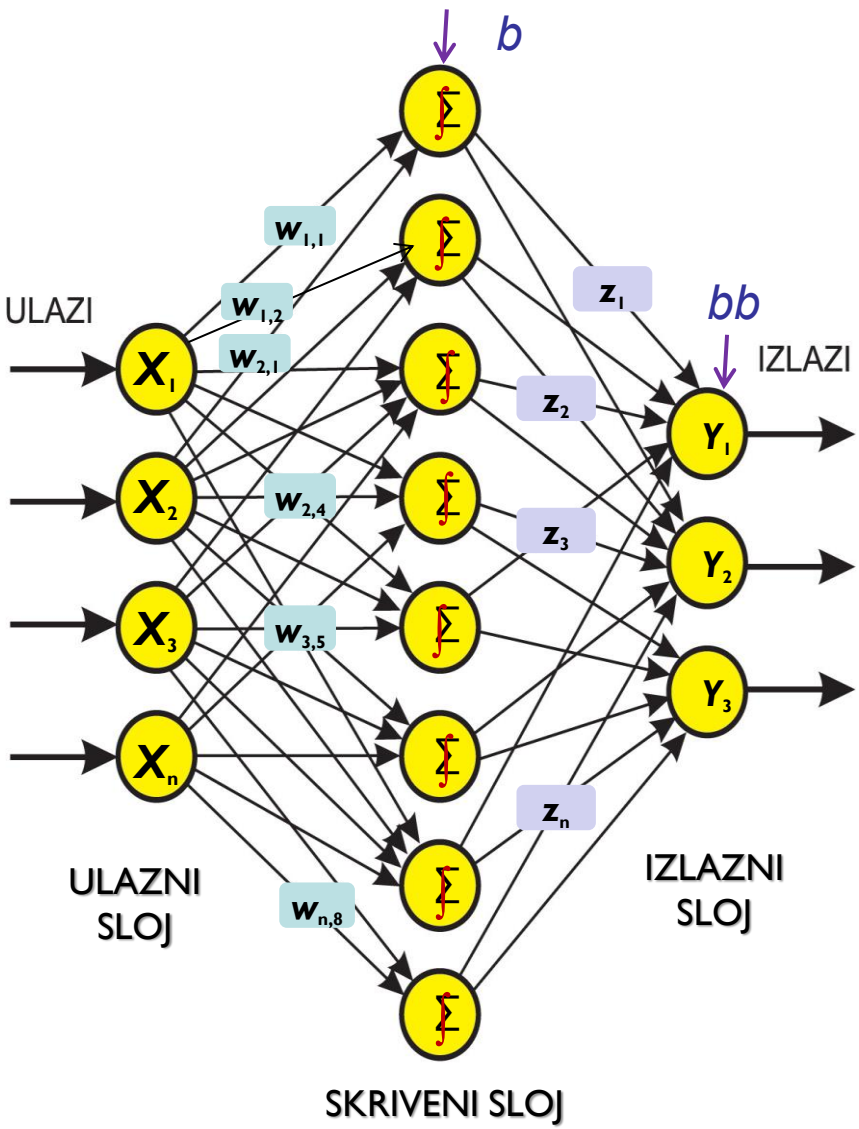


ULAZNI SLOJ (*input layer*)
- prvi sloj
- prima informacije i proslijeđuje mreži

SKRIVENI SLOJ(EVI) (*hidden layer*)
- prima informacije iz ulaznog sloja i obrađuje ih

IZLAZNI SLOJ (*output layer*)
- zadnji sloj
- prima obrađene informacije i daje rezultate

STRUKTURA UMJETNE NEURONSKE MREŽE



Ako je zbroj otežanih signala > od pomaka *b* (igra ulogu praga osjetljivosti neurona), nelin. aktivac. funkcija ***f*** generira izlazni signal neurona.

Interna aktivacija

$$I = \sum_{i=1}^{n} w_i * X_i + b$$

X - ulazne varijable
Y - izlazne varijable

w_i - težinski faktori
b – pristranost, pomak (*bias*)
z_i - težinski faktori

Prijenosna funkcija

$$X' = f\ (I)$$

$$Y = \sum_{i=1}^{n} z_i\ * X' + bb$$

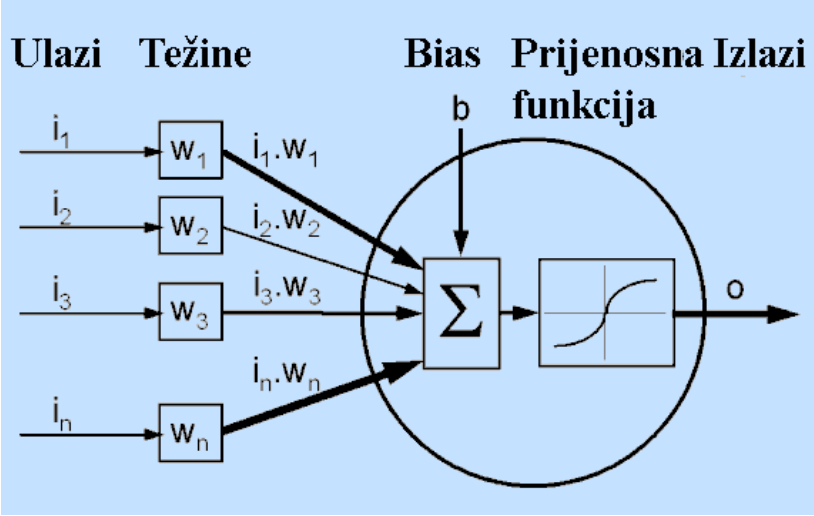
STRUKTURA UMJETNE NEURONSKE MREŽE

- Svaki neuron prima **ulazne signale** i_i koji dolaze kao izlazi drugih neurona ili dolaze izvan mreže, te **pristranost (pomak)** ***b*** (***bias***). *Bias* omogućuje mreži da nauči optimalne pomake (*b* omogućuje neuronu da se "pomakne" od početne ili neke fiksne pozicije, što mu omogućava da prepozna različite obrasce).

- Svaki ulazni signal ima svoj **težinski faktor** w_i. Ono što je jačina sinaptičke veze između dva biološka neurona, to je težinski faktor između dva umjetna neurona. Što je veća vrijednost težinskog faktora, jača je i veza između dva neurona.

- Ulazni signali „otežani“ težinskim faktorima se zbrajaju te se rezultirajući signal, tzv. **aktivacija**, predaje **prijenosnoj funkciji**.

- Krajnji **izlaz neurona** može se proslijediti slijedećim neuronima ili postati izlazni sloj mreže.

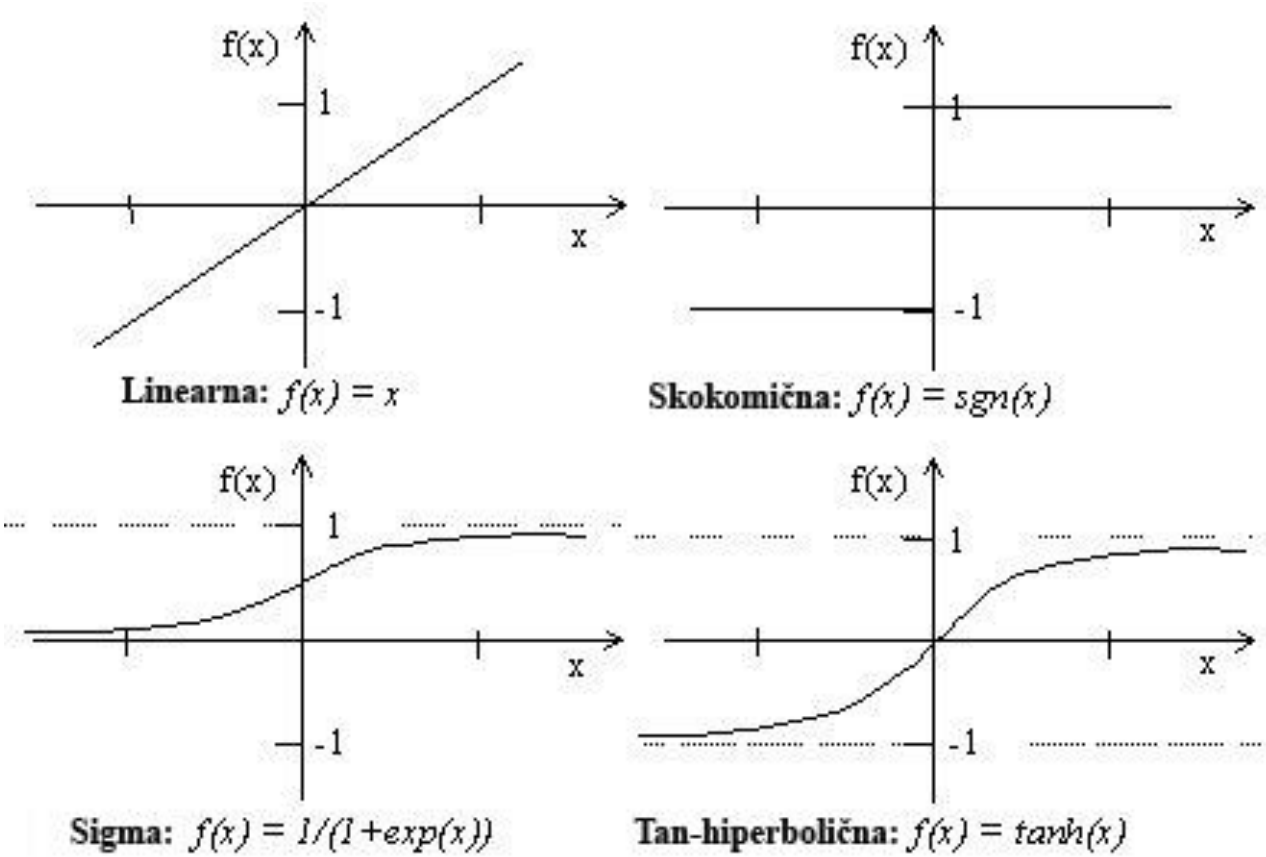


$$o_j = f\left(\sum_{i=1}^{n}(w_{ij}i_i) - b_j\right)$$

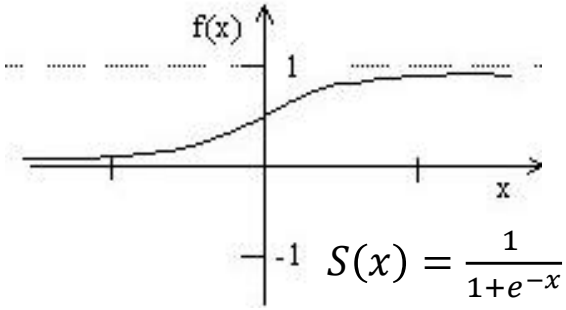
Prijenosna funkcija

PRIJENOSNA (AKTIVACIJSKA) FUNKCIJA

- Obično **nelinearna** funkcija koja omogućuje mreži da nauči nelinearne funkcijske ovisnosti;
- Najčešće funkcije: sigmoidna i tangens-hiperbolna - kontinuirane funkcije koje su aproksimacija skokomične funkcije kakva se nalazi i u biološkom neuronu.

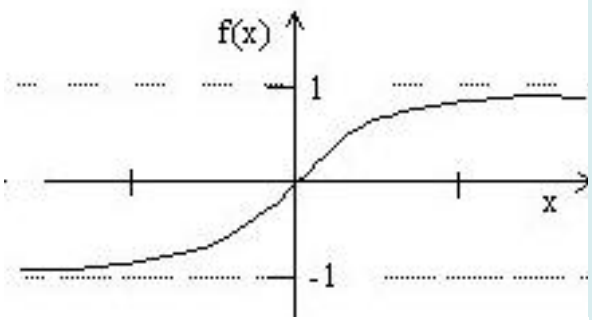


PRIJENOSNA (AKTIVACIJSKA) FUNKCIJA



$$S(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$$

- **Sigmoidna funkcija** uvodi nelinearnost u model pri čemu izlazne veličine poprimaju vrijednosti u rasponu od **0 do 1**.
- Nije centrirana oko nule → ažuriranje težinskih faktora može biti neefikasno (sporo). Pri većim ulaznim vrijednostima: sigmoid brzo 'zasiti' i svoje izlaze približi 0 ili 1. U tim krajevima krivulje njezin je gradijent gotovo nula, → mreža praktički ne može učiti, promjena težina postaje zanemariva → problem nestajućeg gradijenta.
- Zbog faktora e^x vrlo je zahtjevna za računanje.



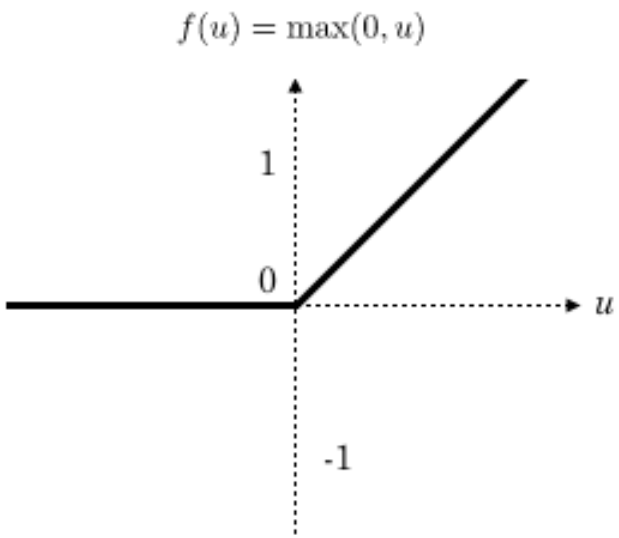
Tan-hiperbolična: $tanh \rightarrow f(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}$

- **Tangens-hiperbolna** funkcija daje izlaze u rasponu od **-1 do 1** i centrirana je oko nule. Kod funkcije *tanh* gradijent je nešto veći nego kod sigmoidne funkcije pa mreža može brže učiti.

- Problemi koji se javljaju kod funkcije *tanh*:
- Zasićeni neuron (kada su izlazne vrijednosti velike neurona, izlaz funkcije se približi vrijednostima –1 i 1) uzrokuje problem nestajućeg gradijenta.
- Zbog člana funkcije e^x zahtijeva puno računalne snage.

PRIJENOSNA (AKTIVACIJSKA) FUNKCIJA

ReLU (engl. *rectified linear unit)* - funkcija „ispravljene linearne jedinice“ (tzv. zglobnica)



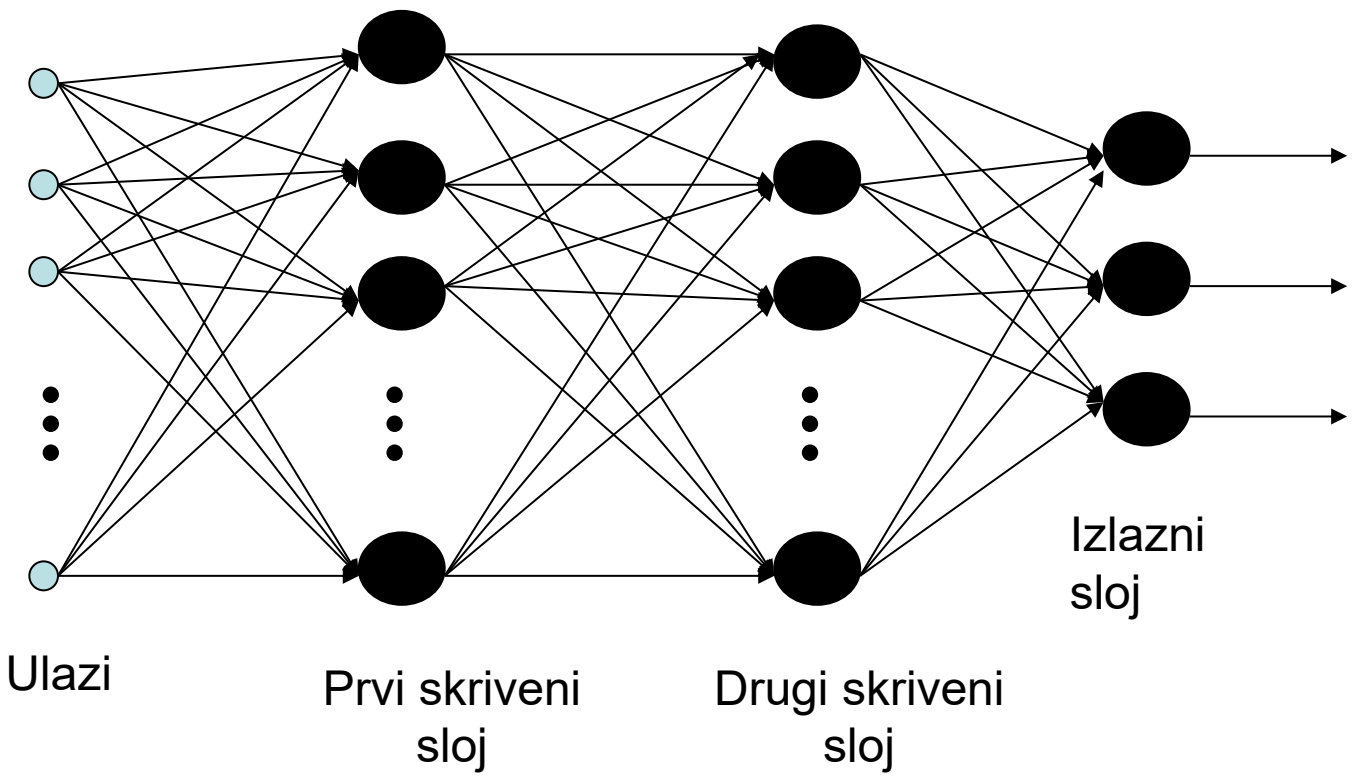
$$f(x) = \frac{x+|x|}{2} \quad (1)$$

$$f(x) = \max\left(0, \sum_{i=1}^{i=n} w_i x_i + b\right) \quad (2)$$

- Operacija **max** vraća *veću* od dvije vrijednosti. Ako je **f (x)** (tj. interna aktivacija) **negativna**, tada je veća vrijednost **0**, pa je izlaz = 0.
- Ako je **f(x) pozitivna**, veća vrijednost je **I**, pa je izlaz = I.

- **ReLU funkcija** (1) za sve negativne vrijednosti ulaza daje izlaz 0, a za pozitivne vrijednosti izlaz je jednak ulazu.
- Često se koristi zbog svoje jednostavnosti kod dubljih mreža.
- **Prednost** - ne dolazi do zasićenja neurona kod velikih pozitivnih vrijednosti ulaza. Računski jednostavan.
- **Nedostaci** - ako je zbroj svih otežanih ulaza plus *bias* negativan tada ne dolazi do aktivacije neurona (izlaz je uvijek 0, gradijent je 0 → taje neuron se više ne aktivira – ne uči).

VIŠESLOJNA NEURONSKA MREŽA



Mreža može imati **više skrivenih slojeva**. U okviru *BigData* platformi razvijaju se neuronske mreže koje imaju po nekoliko stotina skrivenih slojeva, što se danas naziva **duboko učenje** (engl. *deep learning*).

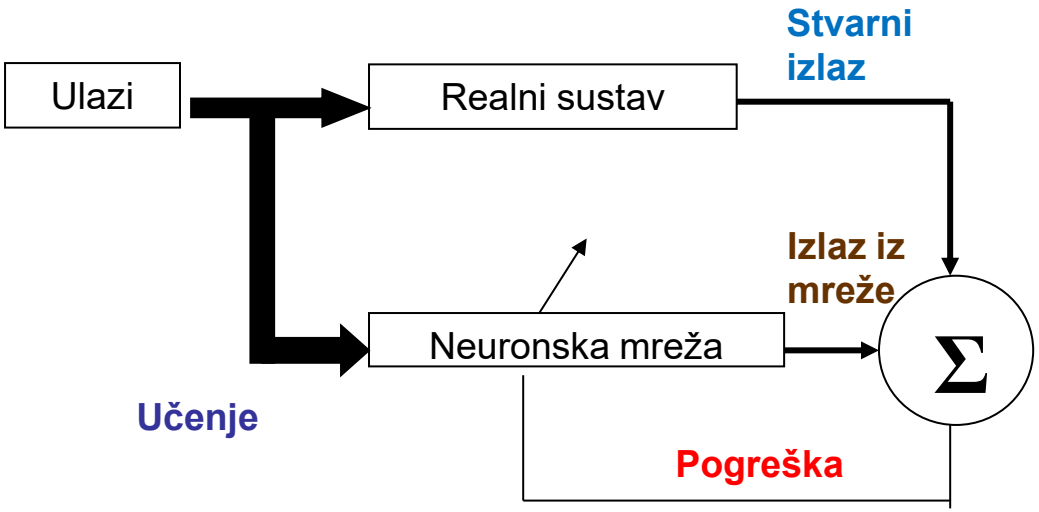
Specificiranje neuronske mreže

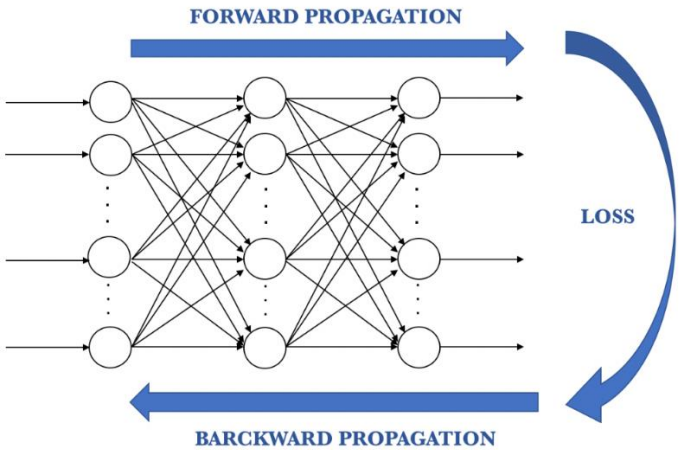
Specificiranje neuronske mreže:

1. **Struktura mreže** – shema povezivanja neurona (broj skrivenih slojeva i broj neurona u slojevima)
2. **Prijenosna funkcija** neurona
3. **Pravilo učenja**

- **Parametri modela** – podešavaju se tijekom učenja (**težinski koeficijenti** i **pristranost** u neuronskim mrežama)
- **Hiperparametri** - biraju se na temelju prethodno provedenih eksperimenata i iskustva (**prijenosna funkcija**, **broj neurona** i skrivenih slojeva, **algoritam** učenja,…).

UČENJE NEURONSKE MREŽE





Učenje neuronske mreže - iteracijski postupak podešavanja veza među neuronima. Podešavanje težinskih koeficijenata odvija se pronalaženjem minimalne vrijednosti **pogreške** između izlaza dobivenog modelom i stvarne vrijednosti izlazne veličine.

Težinski koeficijenti - nosioci „znanja“ u neuronskoj mreži. Do njihovih vrijednosti dolazi se treniranjem, tj. učenjem mreže na određenom skupu ulaznih podataka.

ALGORITAM unatražne propagacije

- **Prve** vrijednosti težinskih faktora i *bias*-a se **nasumično** generiraju.
- Mreža u **prvom unaprijednom** prolazu izbacuje predviđene vrijednosti izlazne varijable mreže te se uspoređuje sa stvarnom vrijednošću.
- Na temelju **pogreške** između stvarne i predviđene vrijednosti, ispravljaju se vrijednosti težinskih faktora **metodom unatražne propagacije**. Postupak se ponavlja (iterativno) dokle god nije zadovoljen zadani **kriterij uspješnosti**.
- U svakom skrivenom sloju u *n*-dimenzionalnom prostoru kojeg čine osi svih težinskih faktora tog sloja minimizira se ukupna pogreška mreže, npr. **metodom gradijentnog spusta** (engl. *gradient descent*).
- **Funkcija pogreške** izlaznog sloja često je zbroj kvadrata pogreške.

ALGORITAM UČENJA

- Učenje neuronske mreže odvija se prema nekom pravilu učenja - **Pravilo širenja unatrag** (eng. ***Backpropagation***) ili **algoritam unatražne propagacije izlazne pogreške**.
- Razlika vrijednosti dobivene modelom i stvarne vrijednosti služi za korekciju težinskog koeficijenta pomoću tzv. **Delta pravila**:

$$w_{ij}^{novi} = w_{ij}^{stari} + \Delta w_{ij}$$

$$\Delta w_{ij} = \eta\, \boldsymbol{y_i} \varepsilon_j$$

Korektivni faktor
(promjena težinskog faktora između neurona *i* i neurona *j*)

w_{ij} - neuron *i* povezan sa neuronom *j*

η - koeficijent učenja (*eng.* ***learning rate***),

y_i - izlaz prethodnog neurona (neurona *i)*
ε_j – pogreška neurona *j* (vrijednost koju daje neuronska mreža−stvarna vrijednost)

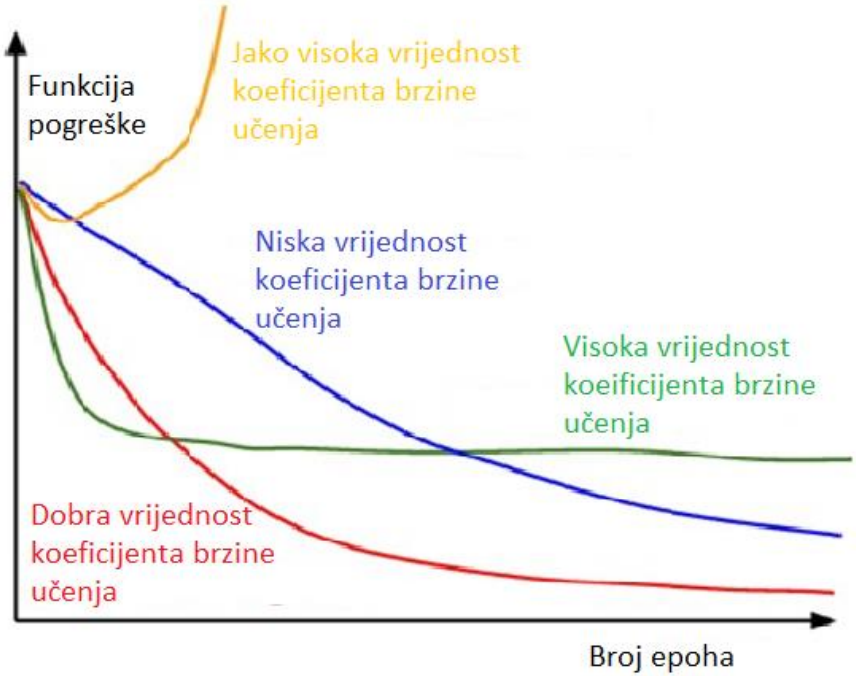
Globalna greška mreže (funkcija pogreške)

$$E = \frac{1}{2}\sum_i (\hat{y}_i - y_i)^2$$

i - broj neurona u izlaznom sloju
y_i – željena vrijednost, vrijednost dobivena eksperimentom
$\hat{y}_i$ - vrijednost dobivena pomoću neuronske mreže

ALGORITAM UČENJA

- **Koeficijent učenja** je parametar koji se mora zadati, a koji diktira brzinu promjene težinskih koeficijenata uzimajući u obzir vrijednost pogreške ε. O njemu ovisi koliko brzo će se konvergencijom doći do rješenja.
- **Premala vrijednost** koeficijenta učenja može rezultirati presporim učenjem, a kod **prevelikih vrijednosti** se nikada ne može pronaći minimum funkcije pogreške (može doći do "preskakanja" minimuma funkcije pogreške)



broj epoha → jedan prolaz podataka kroz cijelu mrežu.

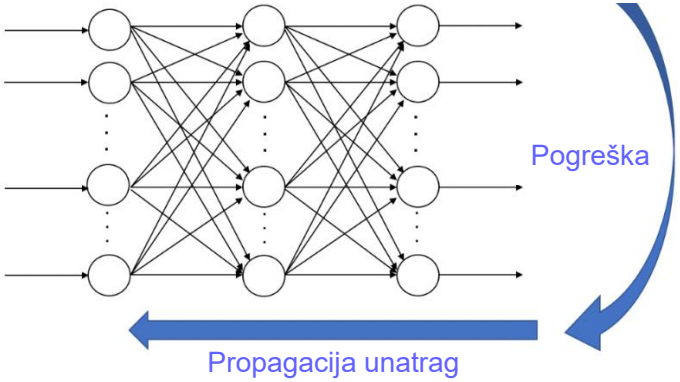
Utjecaj vrijednosti koeficijenta brzine učenja na učenje mreže

Učenje - Postupak propagacije pogreške unatrag

- Ako je funkcija pogreške derivabilna, moguće je koristiti optimizacijske postupke koji se temelje na izračunu **gradijenta funkcije pogreške** (**parcijalnih derivacija funkcije pogreške** s obzirom na svaku težinu i prag!)
- Parcijalna derivacija pogreške nam govori kako će se funkcija pogreške promijeniti ako malo povećamo težinu.
- Tu informaciju možemo iskoristiti kako bismo ciljano povećavali ili smanjivali težine s ciljem smanjivanja vrijednosti funkcije pogreške *E*
- Ključna ideja je da se *prilagodba težinskih faktora odvija u smjeru koji smanjuje pogrešku,* što se postiže uzimanjem negativnog gradijenta funkcije pogreške.

Postupak propagacije pogreške unatrag
(engl. *Error Backpropagation*)

Postupak **učenja** neuronskih mreža koji se temelji na učinkovitom izračunu svih parcijalnih derivacija funkcije pogreške i njihovoj primjeni na određivanje korekcije težina.

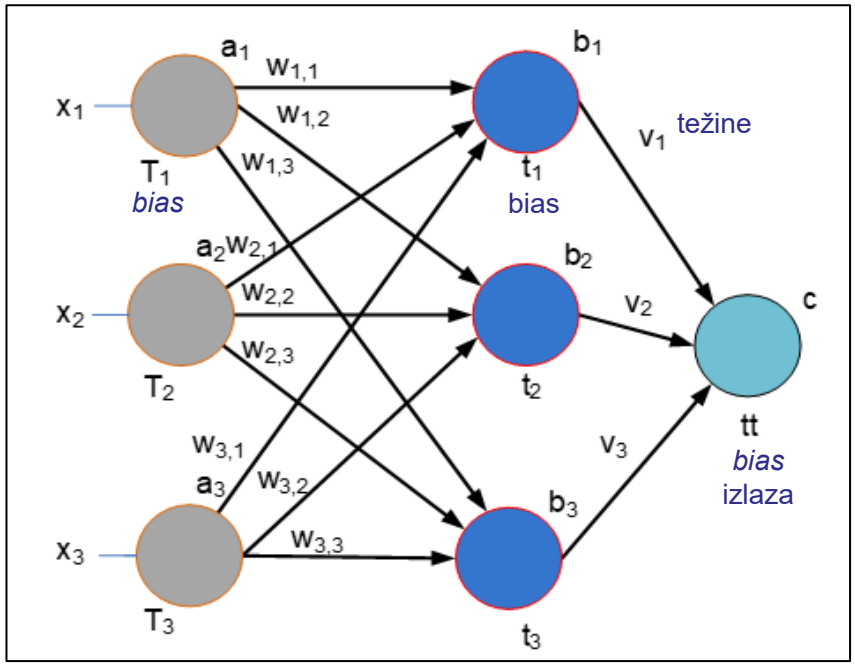


Primjer izračuna izlaza neuronske mreže 3x3x1

$$a_1 = \mathrm{x}_1 - \mathrm{T}_1$$

$$b_1 = f\left(w_{1,1}a_1 + w_{2,1}a_2 + w_{3,1}a_3 - t_1\right)$$

$$c = f\left(v_1 b_1 + v_2 b_2 + v_3 b_3 - tt\right)$$



ili

$$c = f\left(\begin{array}{l} \overbrace{v_1 f\left(w_{1,1}(\mathrm{x}_1-\mathrm{T}_1)+w_{2,1}(\mathrm{x}_2-\mathrm{T}_2)+w_{3,1}(\mathrm{x}_3-\mathrm{T}_3)-t_1\right)}^{b_1} + \overbrace{v_2 f\left(w_{1,2}(\mathrm{x}_1-\mathrm{T}_1)+w_{2,2}(\mathrm{x}_2-\mathrm{T}_2)+w_{3,2}(\mathrm{x}_3-\mathrm{T}_3)-t_2\right)}^{b_2} + \ldots \\ \ldots + v_3 f\left(w_{1,3}(\mathrm{x}_1-\mathrm{T}_1)+w_{2,3}(\mathrm{x}_2-\mathrm{T}_2)+w_{3,3}(\mathrm{x}_3-\mathrm{T}_3)-t_3\right) - tt \end{array}\right)$$

U matričnom obliku:

$$\vec{b} = f\left(\mathbf{W}\cdot\vec{X} - \vec{T}\right)$$

$$\vec{c} = f\left(\mathbf{v}\cdot\vec{b} - \vec{tt}\right)$$

Algoritam unatražne propagacije - Primjer izračuna 1. iteracije

1) Unos i normaliziranje ulaznih vrijednosti *x*

- u rasponu od 0 do 1 - vrijednost svake varijable se podijeli sa varijablom najveće vrijednosti u setu podataka;
- **nasumično** postavljanje težinskih faktora i *bias*-a

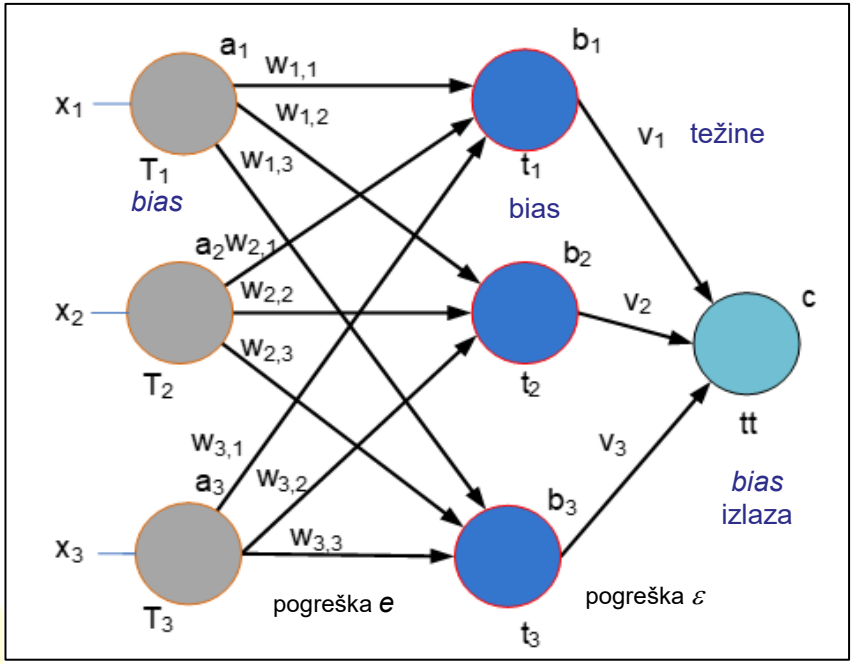
2) Izračunavanje ukupnog izlaza *c* iz slojeva (unaprijedno)

$$a_1 = x_1 - T_1$$

Na primjeru sigmoidne funkcije

$$b_1 = f\left(w_{1,1}a_1 + w_{2,1}a_2 + w_{3,1}a_3 - t_1\right) = \frac{1}{1+e^{-(w_{1,1}a_1 + w_{2,1}a_2 + w_{3,1}a_3 - t_1)}}$$

$$c = f\left(v_1 b_1 + v_2 b_2 + v_3 b_3 - tt\right) = \frac{1}{1+e^{-(v_1 b_1 + v_2 b_2 + v_3 b_3 - tt)}}$$



3) Računanje pogreške po slojevima (unatražno)

$$\varepsilon = c(1-c)(y_1 - c)$$

realna vrijednost izlaza

izlaz mreže

$$e_1 = b_1(1-b_1)(v_1\,\varepsilon)$$

pogreška 1. neurona u skrivenom sloju

4) Postavljanje novih vrijednosti varijabli (korekcije težina)

$$w^{nova}{}_{1,1} = w^{stara}{}_{1,1} + \eta_a a_1 e_1 \qquad T^{nova}{}_1 = T^{stara}{}_1 + \eta_a e_1$$

$$v^{nova}{}_1 = v^{stara}{}_1 + \eta_b b_1 \varepsilon \qquad t^{nova}{}_1 = t^{stara}{}_1 + \eta_b \varepsilon \qquad tt^{nova} = tt^{stara} + \eta_c \varepsilon$$

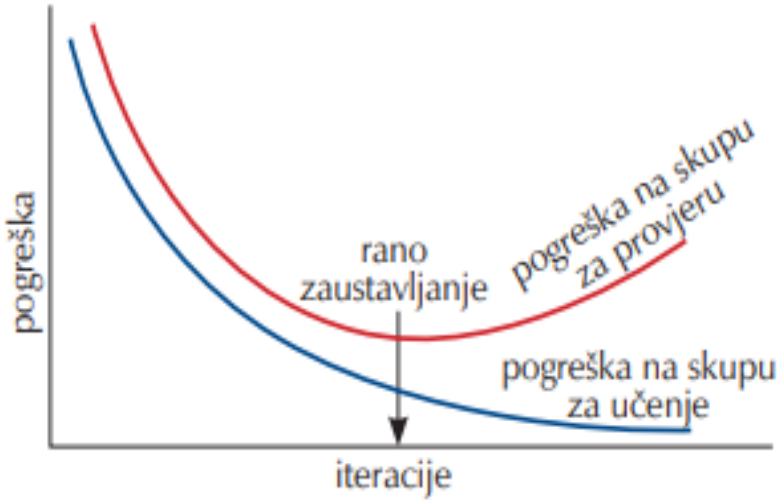
$c(1-c)$
$b(1-b)$

Posljedica deriviranja sigmoidne prijenosne fukcije

$$\sigma'(z) = \sigma(z)(1-\sigma(z))$$

Pretreniranost mreže

- Nakon predobrade podataka obrađeni podaci dijele se u tri skupa: **skup za učenje, skup za provjeru i skup za testiranje**.
- Podaci iz **skupa za učenje** služe za ugađanje vrijednosti težinskih faktora među neuronima.
- **Skup za provjeru** služi za provjeru modela - je li došlo do **pretreniranosti mreže** → neuronska mreža daje odlične rezultate na skupu podataka na kojem je učila, dok na novim podacima pokazuje vrlo loše rezultate.
- Cilj je postići što veću sposobnost **generaliziranja** na novim podatcima.



- U svrhu sprječavanja pretreniranja mreže koristi se **tehnika „ranog zaustavljanja“**(engl. *early stopping*).
- Učenje mreže valja zaustaviti onda kada pogreška na skupu za učenje i dalje pada, ali pogreška na skupu za provjeru dostiže svoj minimum.

POSTUPAK RAZVOJA NEURONSKIH MREŽA

1. **Planiranje eksperimenta** (ako nisu prije provedeni)
   - **vrsta, broj i veličina ulaznih promjena**
   - **analiza statičkog i dinamičkog vladanja procesa**

2. **Prikupljanje i obrada podataka**
   - **promjena ulaza prema planu eksperimenta (laboratorij)**
   - **praćenje i pohrana ulaznih i izlaznih podataka (baza podataka)**
   - **obrada dobivenih podataka**

3. **Izbor strukture modela neuronske mreže**
   - **odabir ulaznih i izlaznih veličina**
   - **specificiranje strukture mreže**

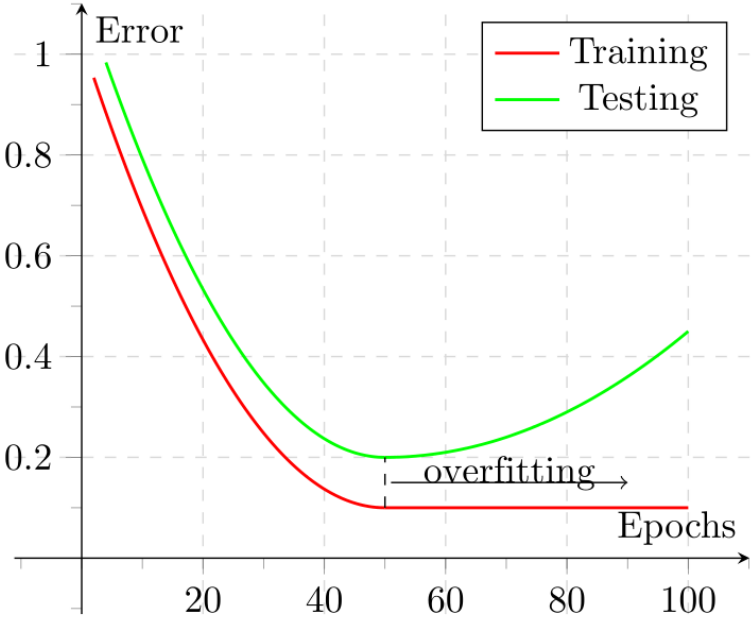
4. **Izvedba (učenje/treniranje) neuronske mreže**
   iteracijsko podešavanje težinskih koeficijenata

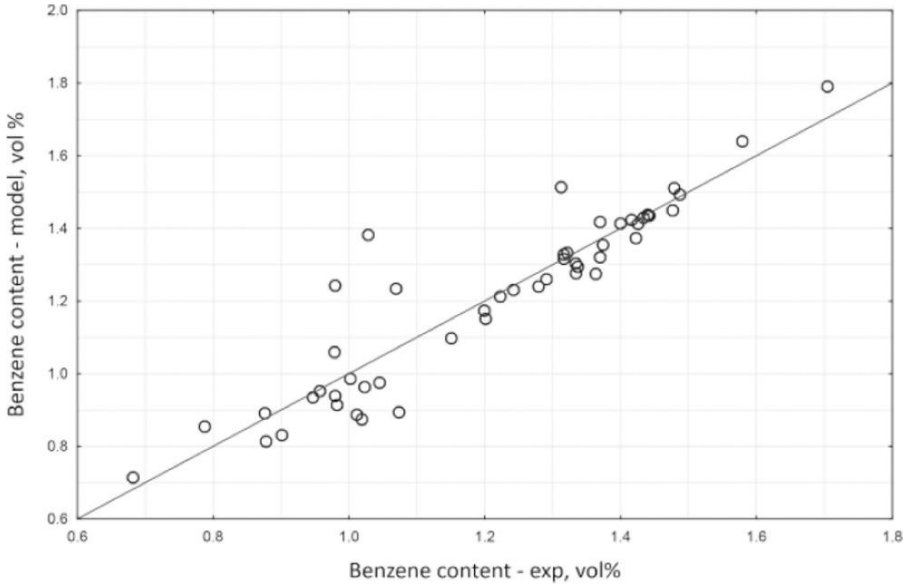
5. **Ocjena (vrednovanje/validacija) modela**
   - **provjera i testiranje dobivenog modela**

OCJENA IZVEDBE NEURONSKE MREŽE

Vrednovanje / Validiranje

- **Novi skup podataka** - mreža uspoređuje svoje izlaze sa željenim izlazima (težinski koeficijenti se sada **ne mijenjaju**);
- Kriteriji pogreške (*MSE*, R^2) govore o kvaliteti i robusnosti (generalizaciji) mreže

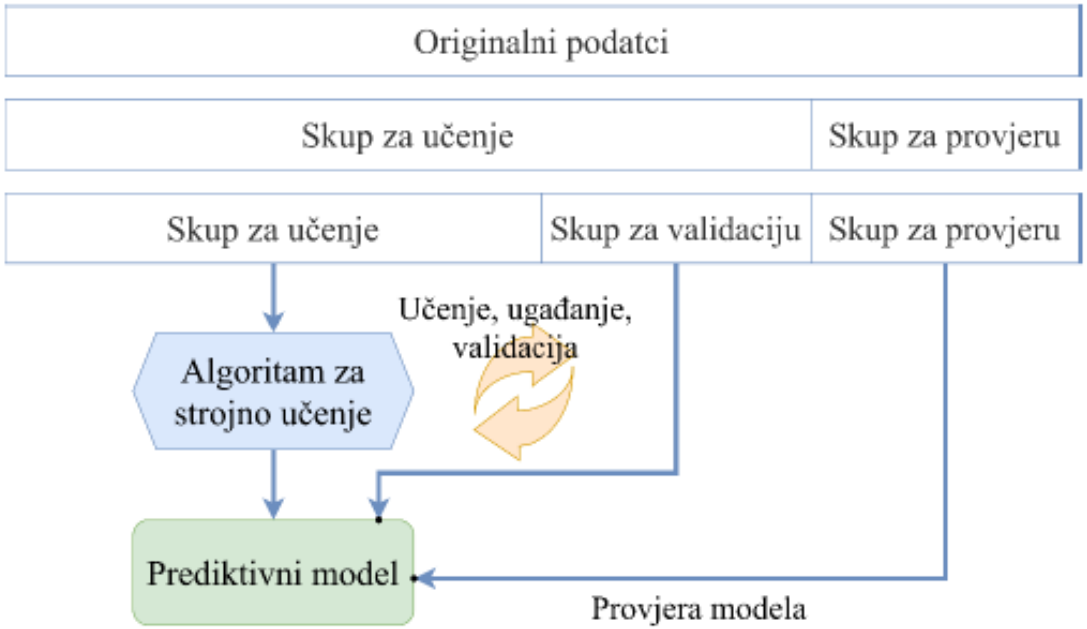




OCJENA IZVEDBE NEURONSKE MREŽE

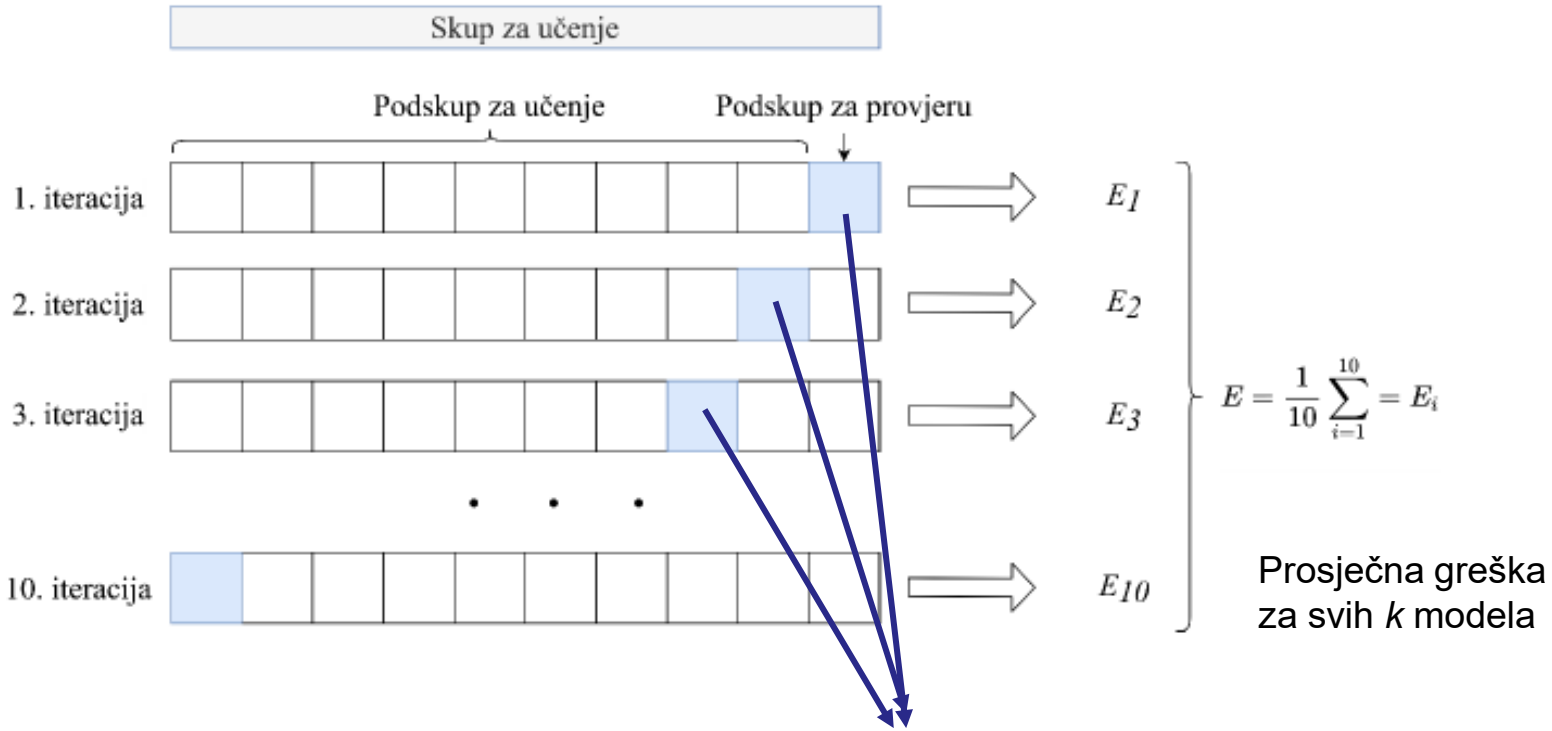
- **Križna validacija** (engl. *cross-validation)* je statistička tehnika koja se koristi u strojnom učenju kako bi se procijenila izvedba modela na način koji smanjuje vjerojatnost pretreniranja i omogućuje **bolju generalizaciju** modela na nepoznate podatke.

- **Križna validacija uz zadržavanje** (engl. *holdout cross-validation*) osjetljiva je na način na koji su podatci razdvojeni pa ocjena valjanosti može varirati za različite uzorke podataka. Dobra za velike skupove podataka.



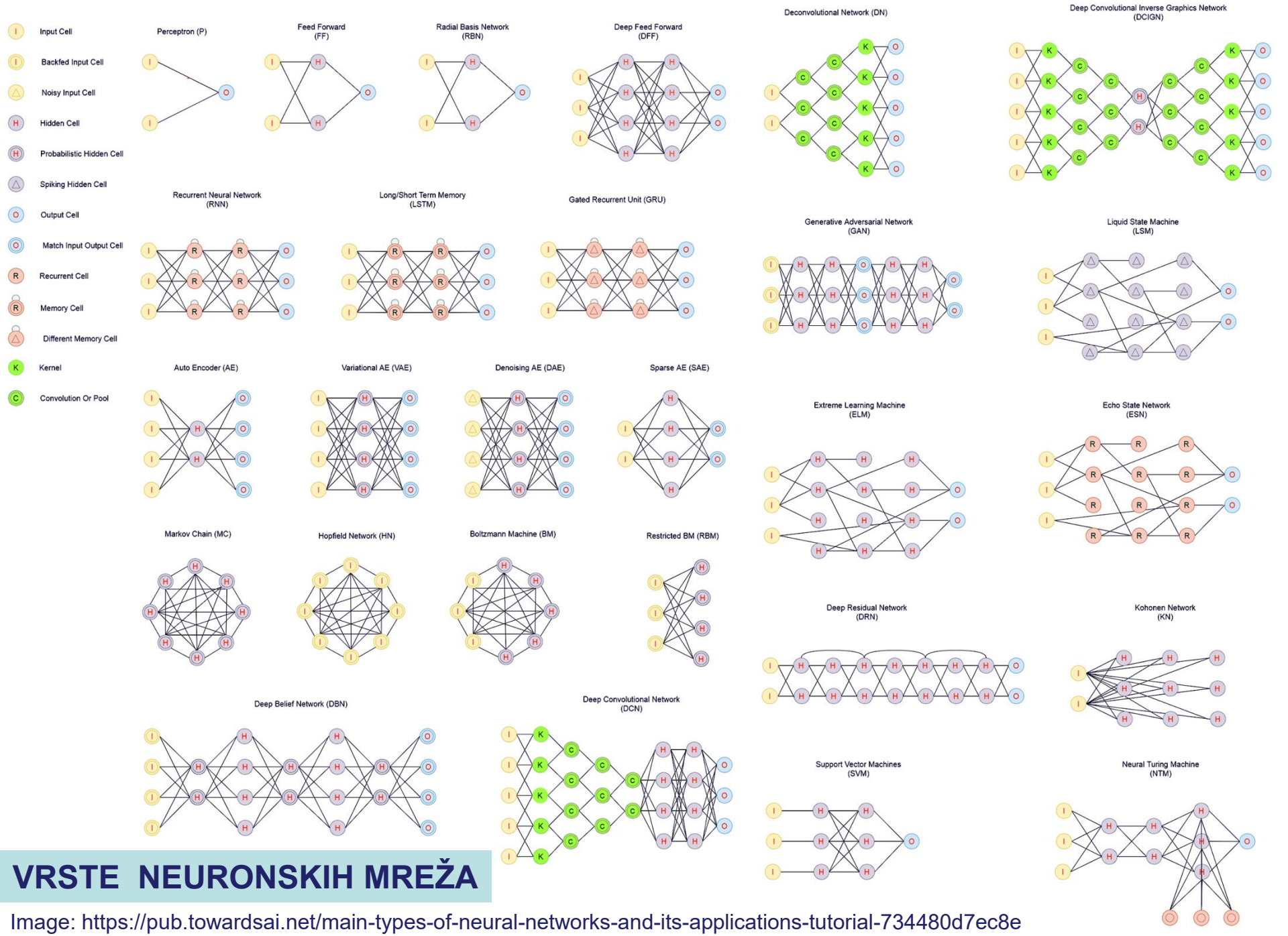
OCJENA IZVEDBE NEURONSKE MREŽE

- **Križna validacija koja se ponavlja *k* puta** (engl. ***k-fold cross-validation***) je u prednosti jer se svaka uzorkovana točka uzima kao dio podataka za validaciju točno jednom, što rezultira manjom varijabilnosti u ocjeni izvedbe modela.



Podatci se nasumično podijele u ***k*** skupina.
→ Više različitih skupova za učenje i validiranje.

Svaki podatak se nađe jednom u validacijskom skupu podataka



VRSTE NEURONSKIH MREŽA

Image: https://pub.towardsai.net/main-types-of-neural-networks-and-its-applications-tutorial-734480d7ec8e

DINAMIČKE NEURONSKE MREŽE

- Dinamičke neuronske mreže dizajnirane su za obradu sekvencijalnih podataka gdje trenutni izlaz ovisi o prošlim ulazima.

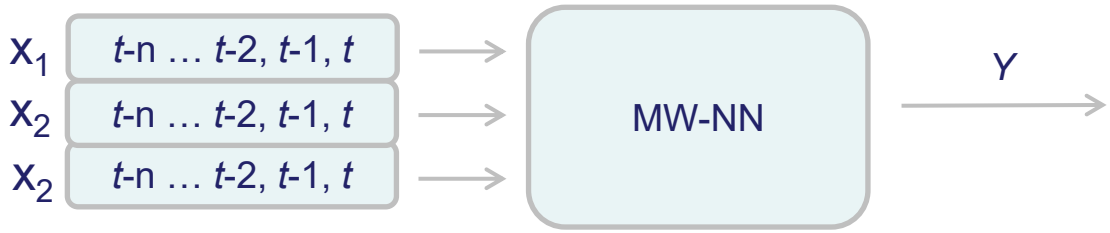
- Primjene uključuju predviđanje *vremenskih serija*, sustave upravljanja i vođenja procesa kod sporih nestacionarnih procesa, prepoznavanje govora i financijske analize.

Ključne vrste:

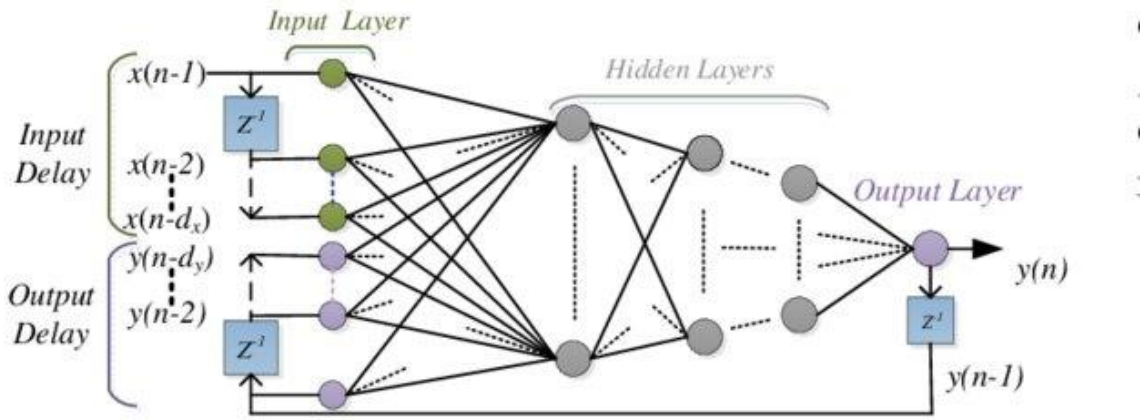
- **NARX (nelinearni autoregresivni modeli s egzogenim ulazima)**
- ***Moving Window* neuronske mreže**
- **Rekurentne neuronske mreže (RNN)**
- ***Long Short-Term Memory* (LSTM) mreže**

DINAMIČKE NEURONSKE MREŽE

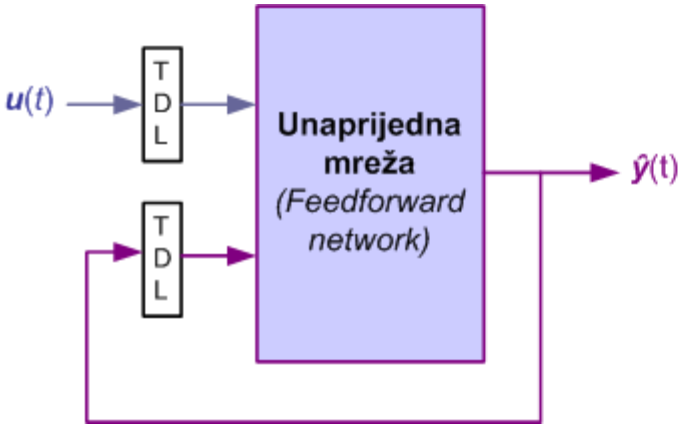
MW-ANN



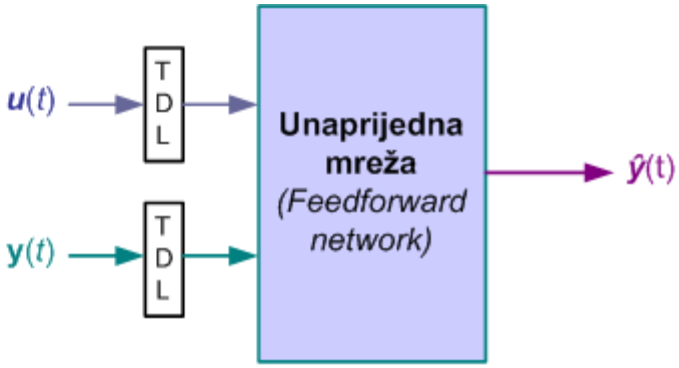
NARX



TDL – zadrška (*tapped delay lines*)



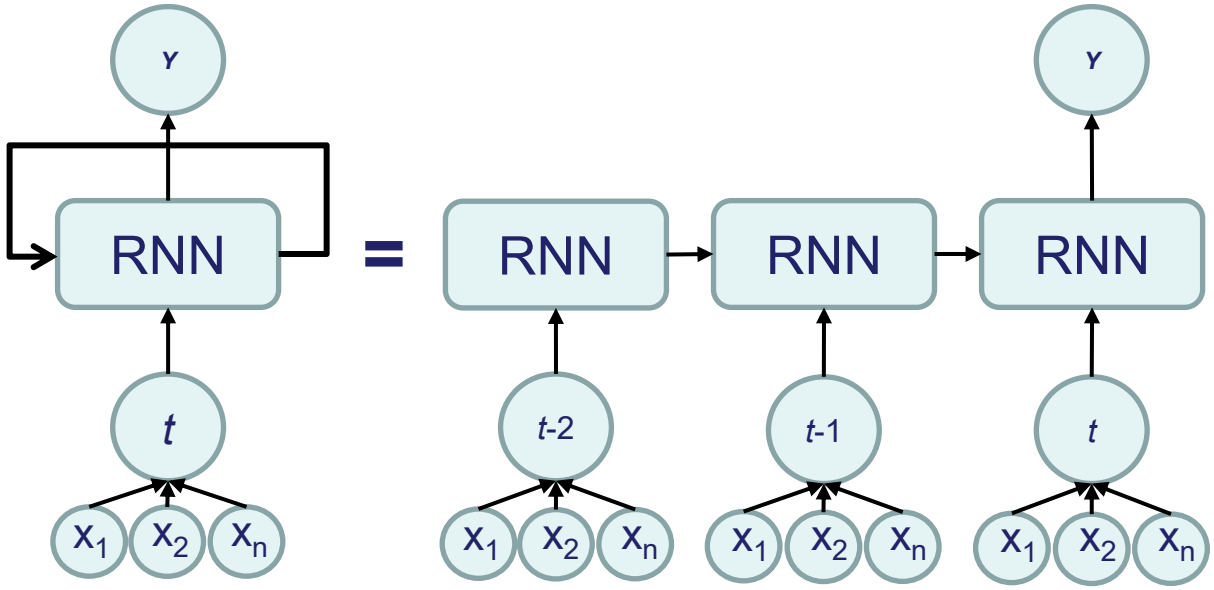
Paralelna struktura



Serijski -paralelna struktura

DINAMIČKE NEURONSKE MREŽE

RNN - **Rekurentne neuronske mreže**



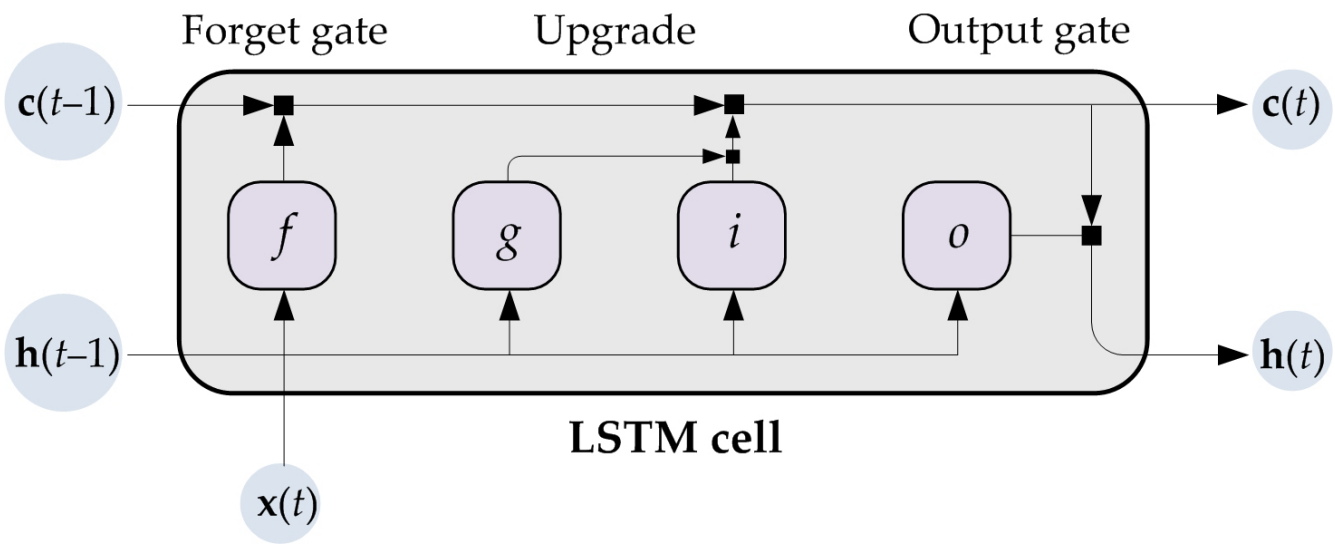
• RNN imaju **povratne** veze, → izlaz iz prethodnog vremenskog koraka postaje dio ulaza u sljedećem koraku. Na taj način mreža može 'pamtiti' informacije tijekom vremena i obrađivati sekvencijalne podatke (vremenske serije, govor ili tekst).

• Imaju tendenciju "zaboravljanja" starijih (udaljenijih) podataka zbog problema **eksponencijalnog smanjenja gradijenta**. Tijekom učenja gradijenti koji se propagiraju unatrag kroz mnogo vremenskih koraka postupno postaju vrlo mali, praktično nestaju. To otežava učenje dugoročnih ovisnosti u sekvenci.

DINAMIČKE NEURONSKE MREŽE

LSTM (*Long Short-Term Memory*) mreže

- LSTM je specifičan tip RNN, dizajniran da prevlada problem "zaboravljanja".
- Koristi tzv. **ćelijsku memoriju** i **sustav vrata** (*input, forget i output gates*) za kontrolu toka informacija.
- Omogućuje da se relevantne informacije pamte kroz duže vremenske korake, čineći ga pogodnim za rad s dugoročnim zavisnostima u podacima.



PRIMJENA NEURONSKIH MREŽA

Modeliranje i vođenje procesa

Model neuronske mreže za razvoj modela procesa i automatsko vođenje; optimizaciju procesa; upravljanje robotima

Dijagnostika procesa i strojeva

Detekcija stanja pri radu procesa i strojeva tako da se sustav može automatski zaustaviti pri pojavi problema;

Medicinska dijagnostika

Pomaže pri dijagnosticiranju bolesti analizom simptoma ili vizualnih podataka kao što su MRI (***Magnetic Resonance Imaging***) ili rendgen; u genetskom istraživanju.

Kontrola kvalitete

Kamere ili senzori na kraju procesa proizvodnje u svrhu automatskog otkrivanja grešaka

Računalni vid (*Computer Vision*)

Prepoznavanje objekata, klasifikaciju slika, detekciju lica, praćenje pokreta, optičko prepoznavanje znakova (npr. kod skeniranja) i druge zadatke u računalnom vidu.

Prepoznavanje govora

Pretvaranje izgovorenih riječi u ASCII tekst.

PRIMJENA NEURONSKIH MREŽA

Procjena kreditne sposobnosti

Procjenjivanje kreditne sposobnosti pojedinaca ili tvrtka na temelju njihovog financijskog stanja;

Ciljani marketing

Statistička karakterizacija populacije u svrhu ciljanih marketinških kampanja;

Financijsko predviđanje

Na temelju prethodnih podataka o cijenama vrijednosnih papira predviđanje budućeg kretanja cijena i tržišnih kretanja općenito, detekciju prevara;

Inteligentno pretraživanje i preporučiteljski sustavi

Internetsko pretraživanje relevantnog sadržaja. Personalizirano preporučivanje proizvoda, filmova, glazbe i drugih sadržaja temeljem ponašanja korisnika;

Prepoznavanje ciljeva

Primjena u vojne svrhe - video i/ili IC snimke za prepoznavanje vojnih ciljeva;

Autonomna vozila

Percepcijia okoline, prepoznavanje prometnih znakova, praćenje cesta...

PRIMJENA NEURONSKIH MREŽA

Prirodni jezik (*Natural Language Processing - NLP*)

U obradi prirodnog jezika, strojno prevođenje, prepoznavanje entiteta, generiranje teksta, analiza sentimenta i druge zadatke vezane uz jezik.

Igranje igara

Razvoj agenata koji mogu naučiti igrati kompleksne igre poput šaha, videoigara i drugih.

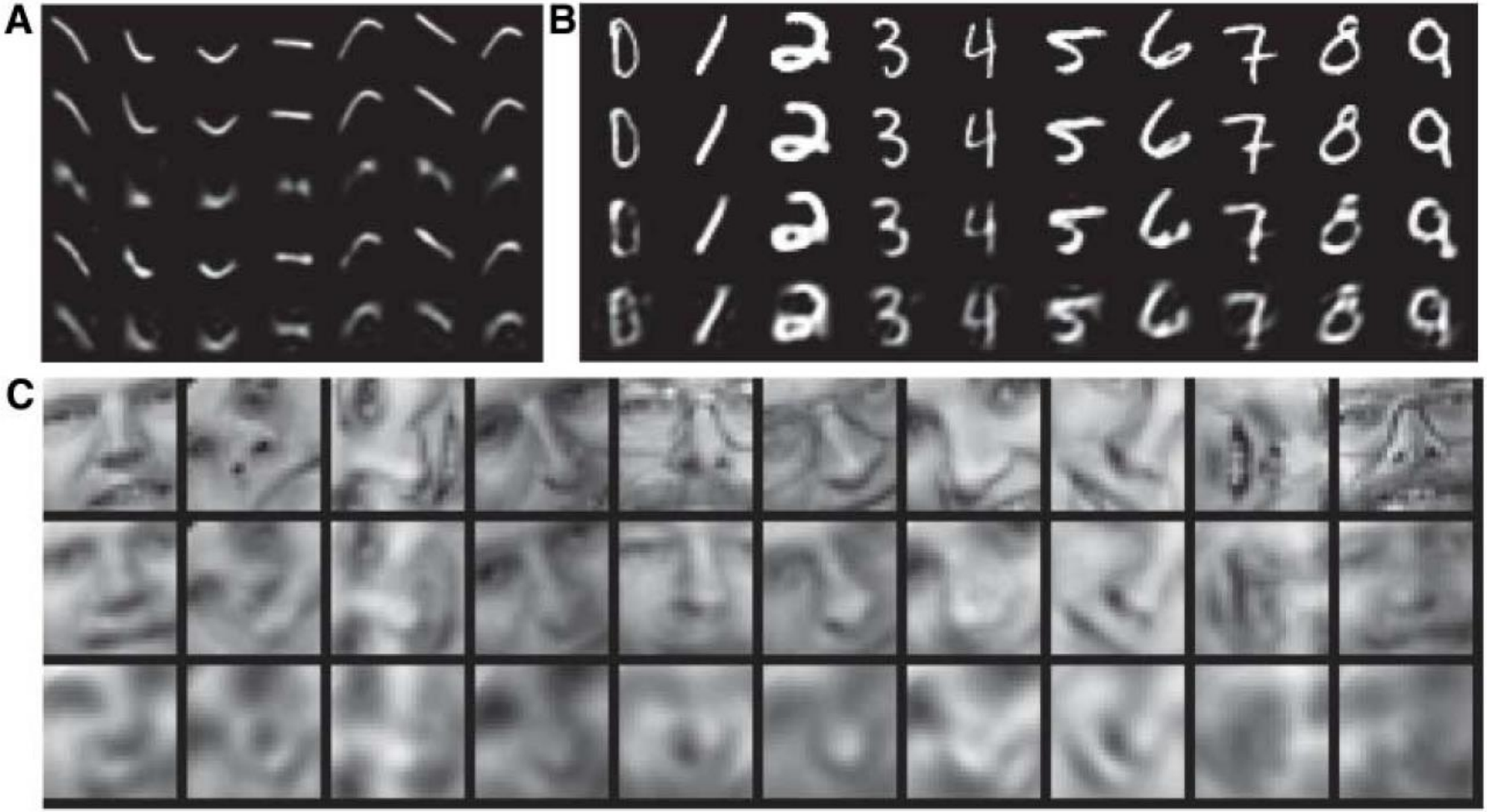
Energetika

Predviđanje potrošnje energije, održavanje energetskih sustava i optimizaciji distribucije energije.

Obrambena industrija;

Svemir i svemirske tehnologije

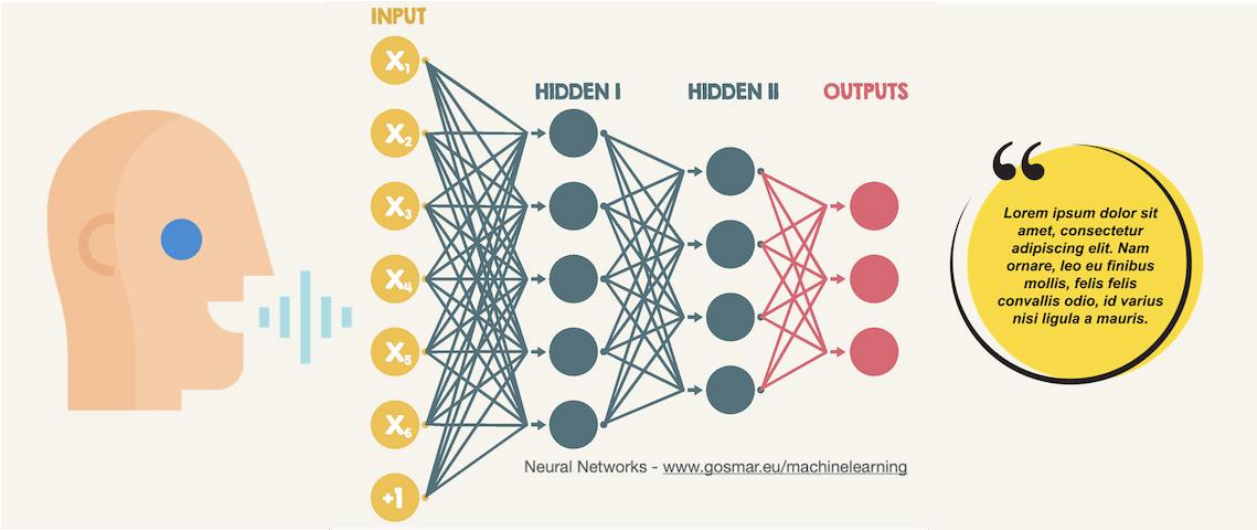
PRIMJENA NEURONSKIH MREŽA



Prepoznavanje rukopisa i lica

PRIMJENA NEURONSKIH MREŽA

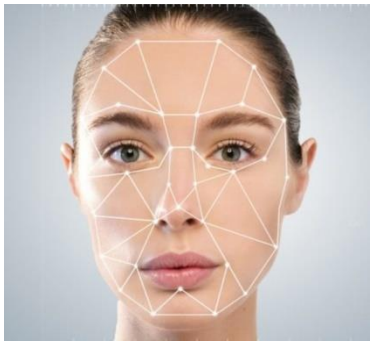
Prepoznavanje govora (*Speech Recognition*)



Za prepoznavanje govora koriste se najčešće **konvolucijske** neuronske mreže (CNN) i **rekurentne** neuronske mreže (RNN).

PRIMJENA NEURONSKIH MREŽA

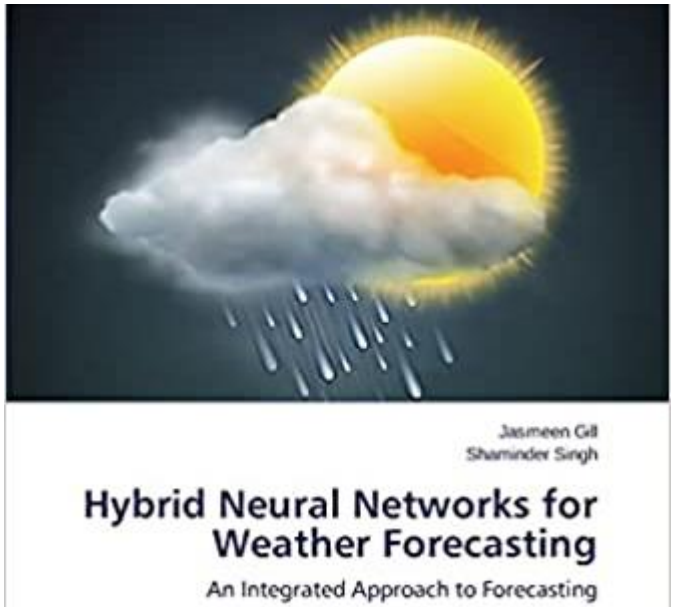
Prepoznavanje lica (*Facial Recognition*)



Sustavi za prepoznavanje uspoređuju ljudsko lice s digitalnim slikama. Mogu se koristiti u uredima/institucijama za selektivne ulaske ljudi. Sustavi tako autentificiraju ljudsko lice i usklađuju ga s popisom ID-ova koji su prisutni u njegovoj bazi podataka.

Za prepoznavanje lica i obradu slika koriste se najčešće konvolucijske neuronske mreže.

Vremenska prognoza (*Weather Forecasting*)



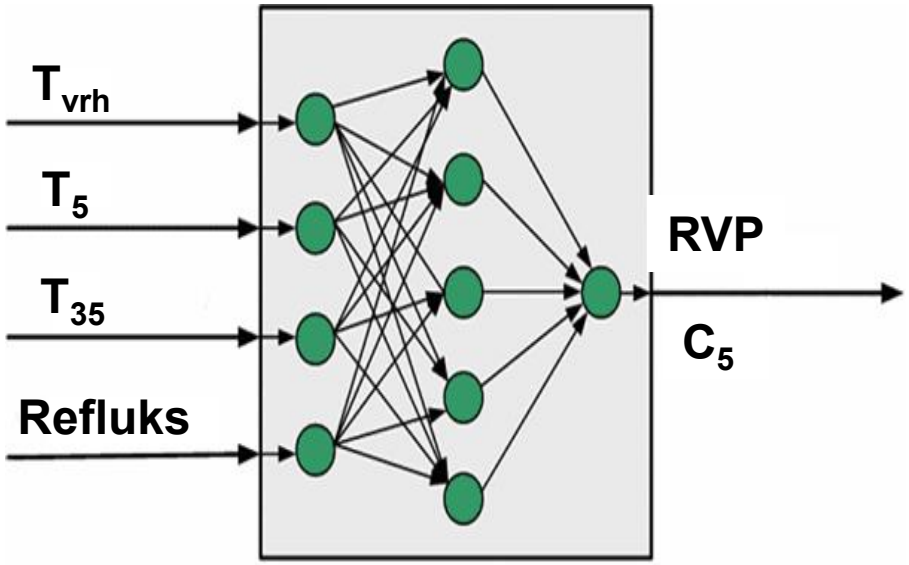
PRIMJERI SA ZMAVP

NEURONSKI MODEL SOFT SENZORA

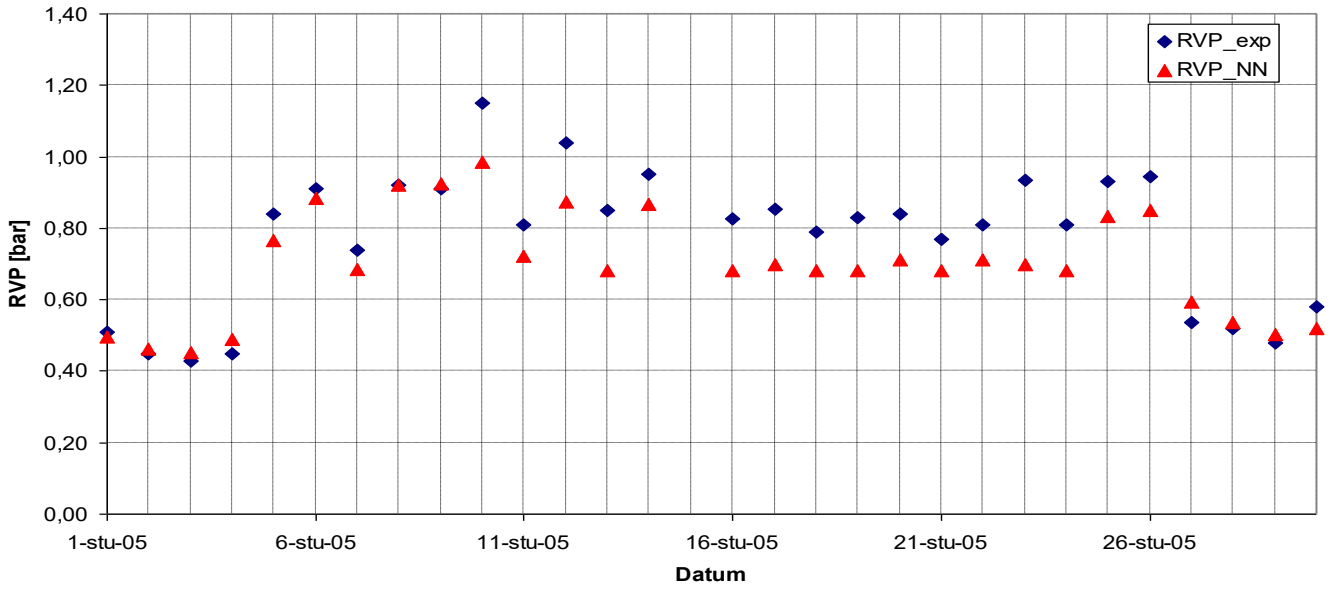
- **U rafinerijskom FCC postrojenju na temelju raspoloživih procesnih mjerenja i laboratorijskih analiza razvijena su:**

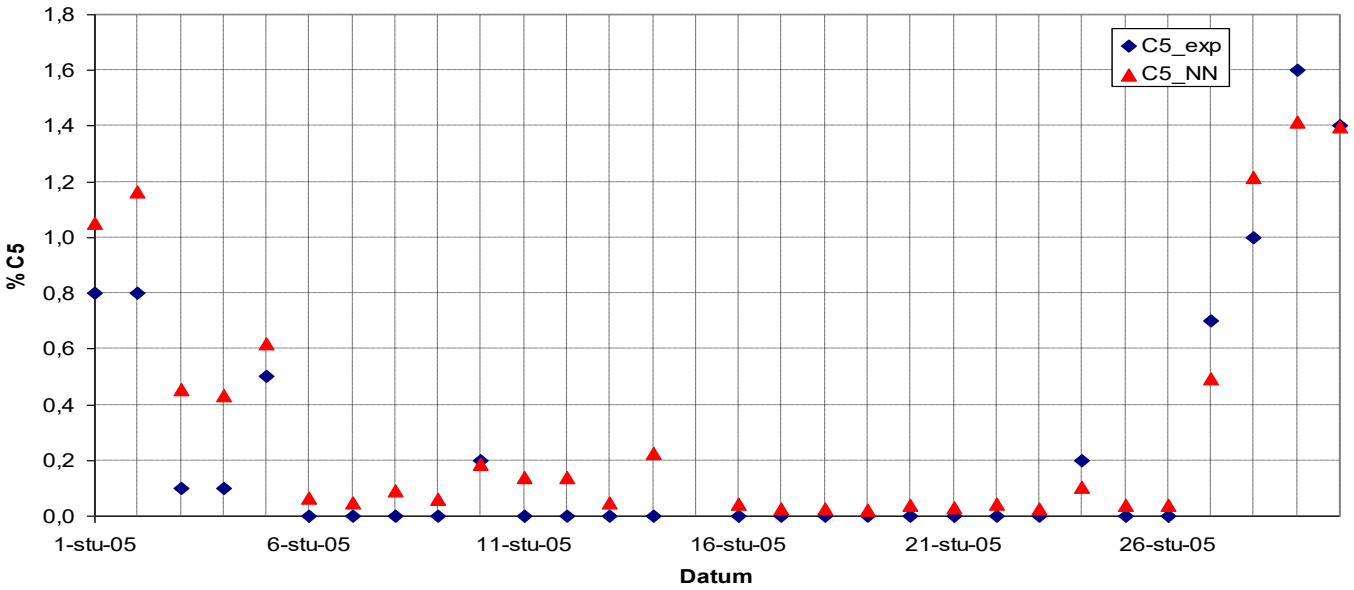
dva modela softverskih senzora:

- za predviđanje **RVP** vrijednosti stabiliziranog FCC benzina
- za predviđanje sadržaja **C_5** frakcije u UNP-u

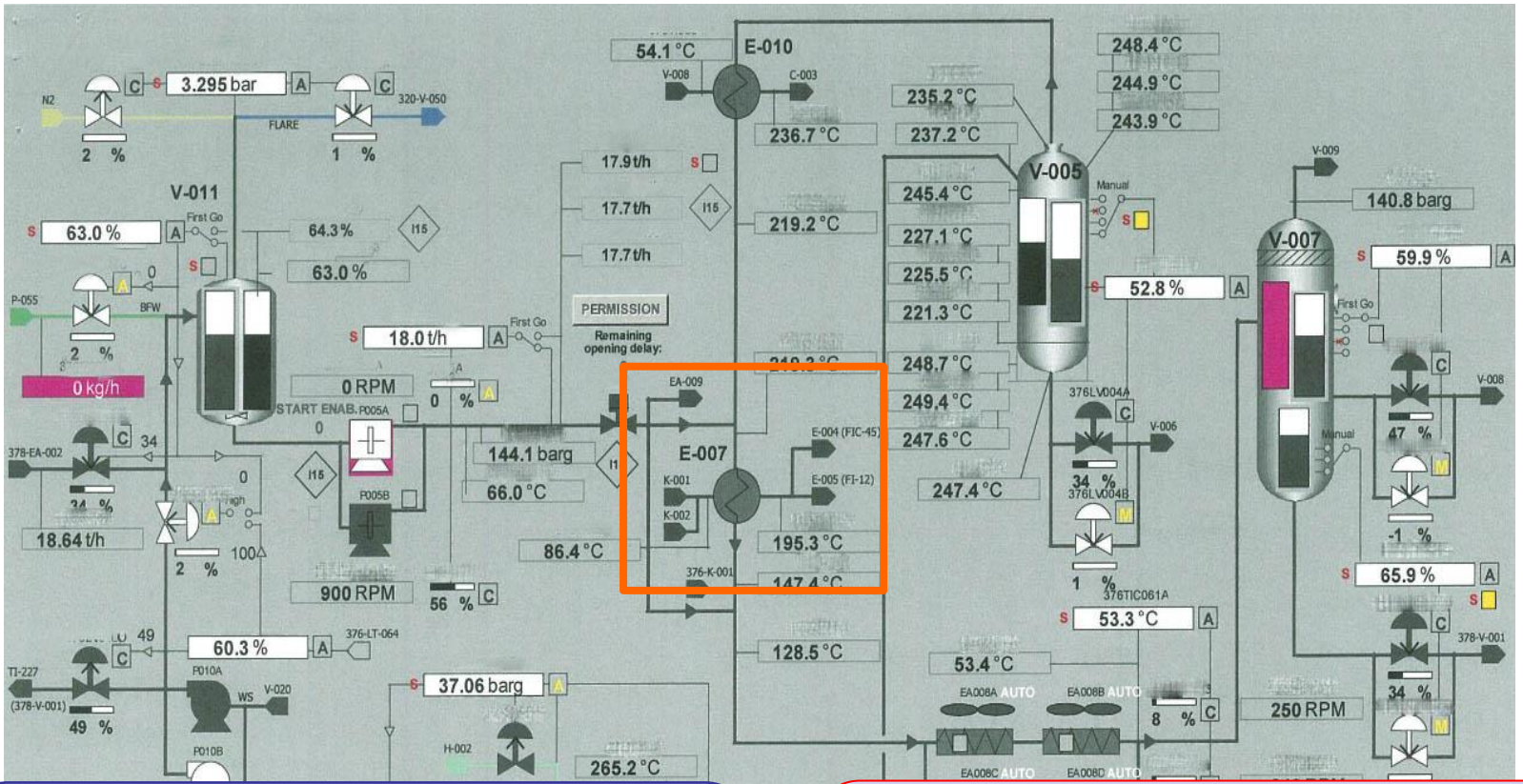


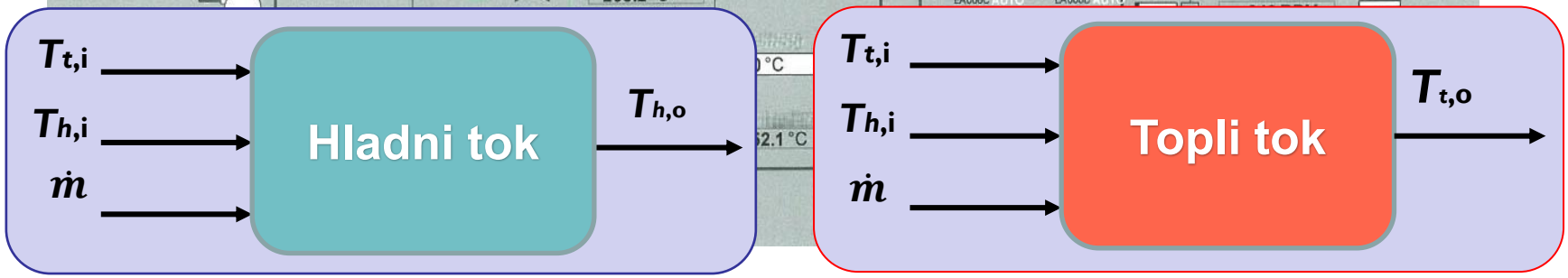
Usporedba modela i laboratorijskih podataka za RVP i C_5

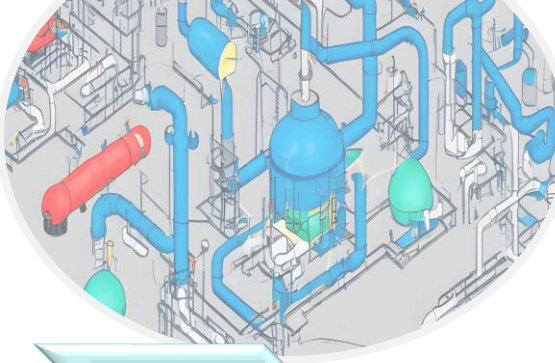




Prediktivna dijagnostika izmjenjivača topline – postrojenje hidrokrekinga







Prediktivna dijagnostika izmjenjivača topline

Problemi

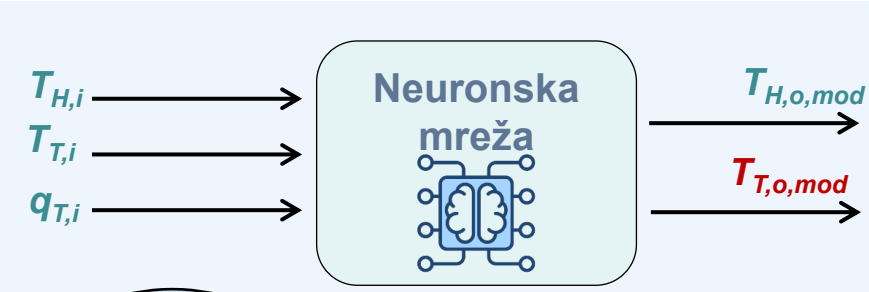
- Smanjenje prijenosa topline povećanje troškova rada
- Nastale naslage utječu na toplinske i mehaničke karakteristike izmjenjivača topline.

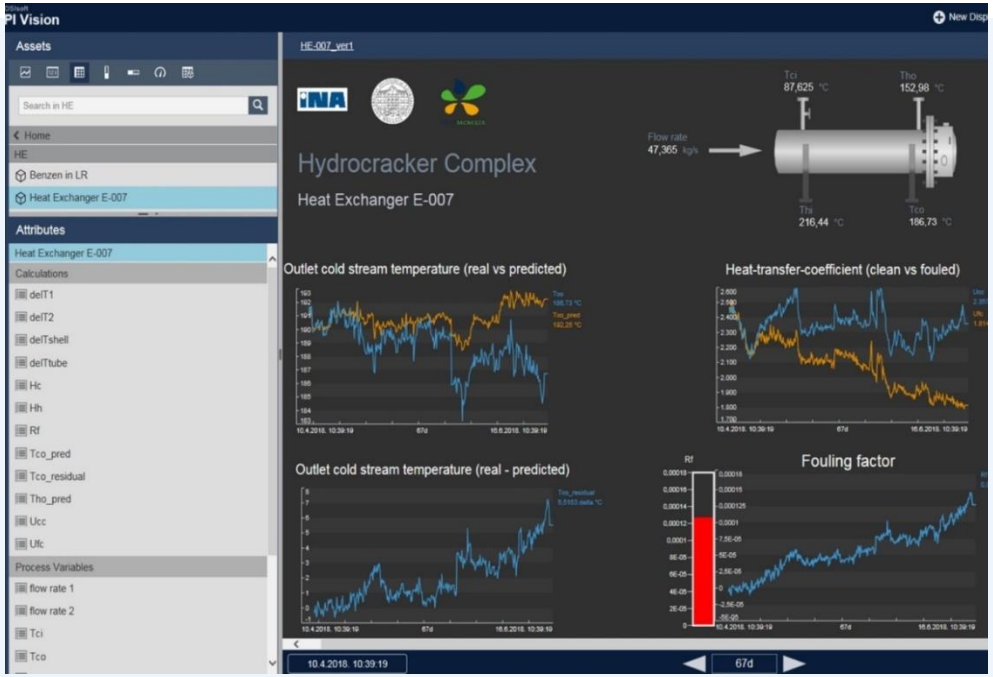
Rješenje

- Razvoj modela za praćenje prijenosa topline razvijenih na osnovu dostupnih podataka.
- Izračun različitih pokazatelja nastajanja naslaga

Rezultati

- Sustav za kontinuirano praćenje izmjenjivača topline i procesa nastajanja naslaga





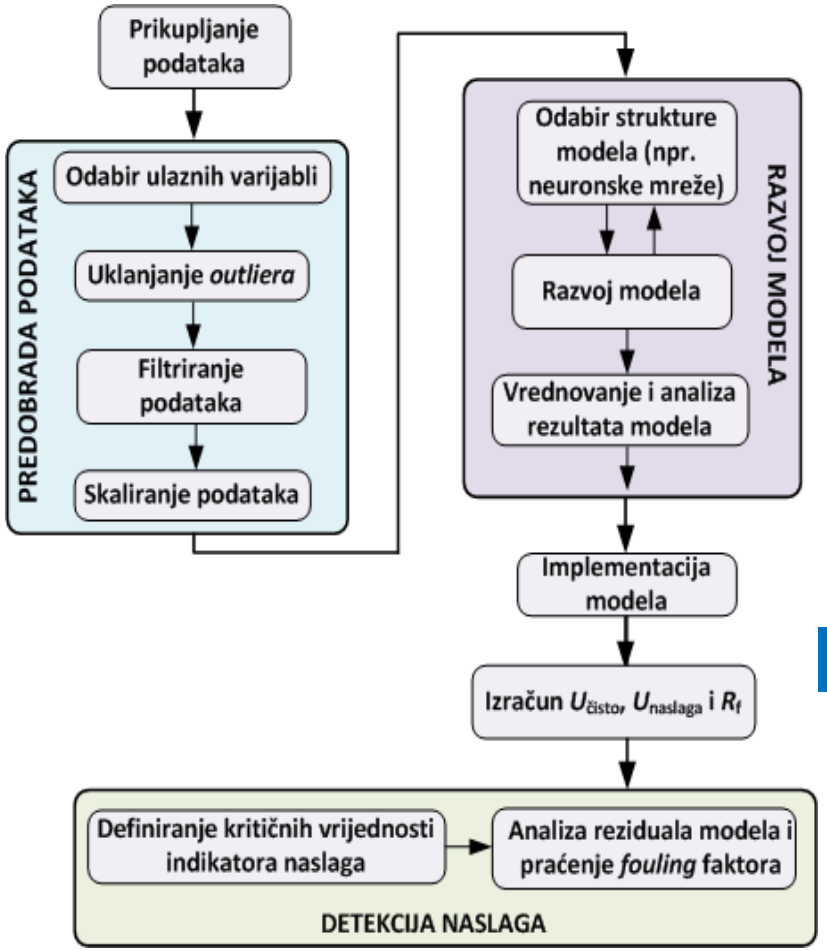
Metodika dijagnostike izmjenjivača topline

Potrebni podaci

- **Prikupljanje procesnih mjerenja** sa postrojenja u određenom vremenskom periodu:
  - **Temperature** na ulazima i izlazima oba fluida
  - **Protoci i tlak (poželjno)**
- **Podaci** o izmjenjivaču topline:
  - **Radni list izmjenjivača** („*Data Sheet*")
  - **Fizikalno – kemijske karakteristike** fluida
  - **Iskustvene činjenice**

Predobrada podataka

- **Statistička analiza** ulaznih varijabli
- **Uklanjanje** ekstremnih vrijednosti te **filtriranje** podataka po potrebi.
- **Skaliranje** podataka prema zahtjevima razvoja modela.



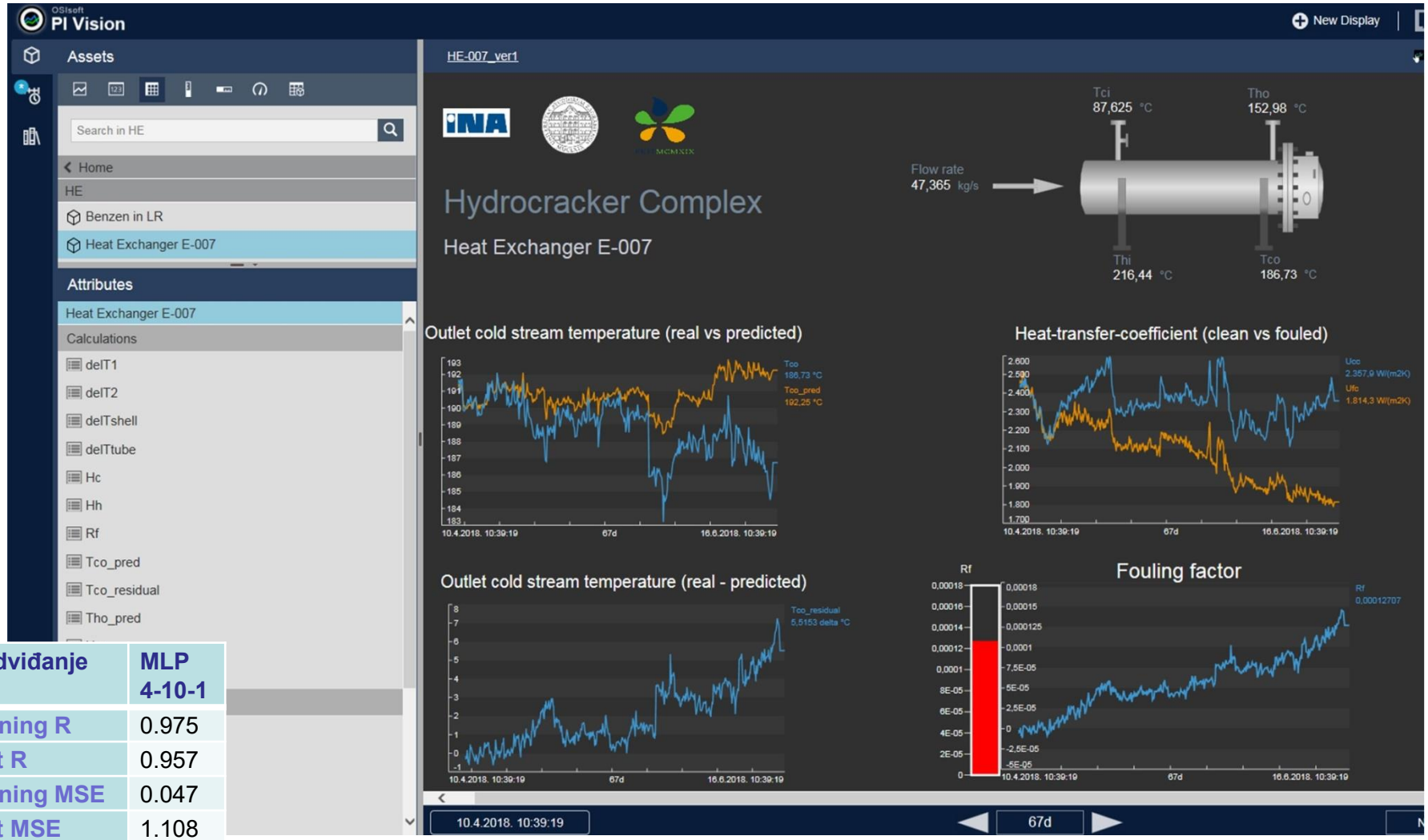
Razvoj modela

- **Odabir fundamentalnog** ili **modela strojnog učenja**.
- **Razvoj modela** identificiranjem parametara i hiper-parametara modela.
- **Vrednovanje rezultata modela** primjenom različitih statističkih kriterija.

Rezultat

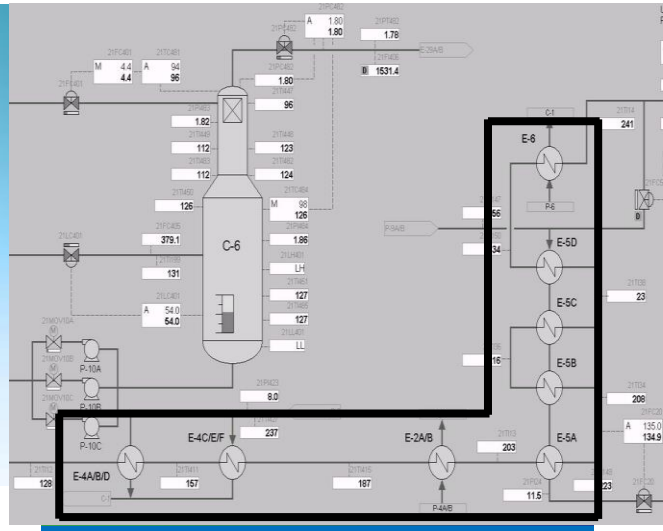
- **Izračun veličina** potrebnih za **dijagnostiku** rada izmjenjivača topline prema rezultatima modela.
- **Implementacija** dijagnostičkog alata u sustav za praćenje rada izmjenjivača topline.

Sučelje za dijagnostiku izmjenjivača topline na rafinerijskom postrojenju hidrokrekinga



Predviđanje $T_{H,o}$	MLP 4-10-1
Training R	0.975
Test R	0.957
Training MSE	0.047
Test MSE	1.108
Algorithm	adam
Hidden act.	relu
Output act.	linear

Sekcija za predgrijavanje sirove nafte



PROBLEMI

- **Mehanizam** nastajanja naslaga nepoznat**.**
- Proces pod najvećim utjecajem nastajanja naslaga u čitavoj rafineriji.
- Ogromni troškovi zbog naslaga.
- Dinamičke promjene ulaznih veličina i fizikalno-kemijskih svojstava te česte izmjene sirovina.

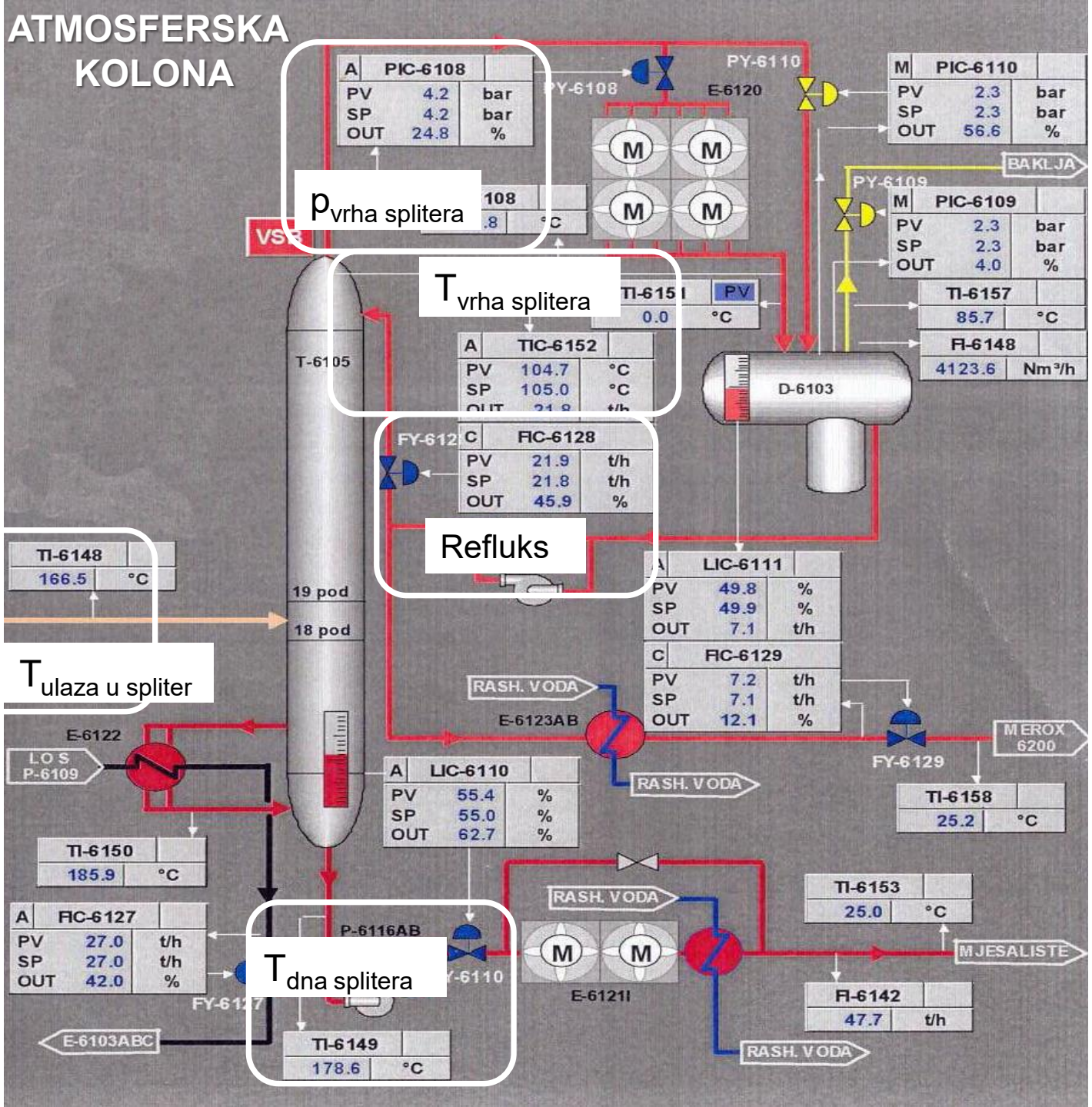
RJEŠENJE

- **Razvoj modela** prema naprednim „*data-driven*" metodama. Ne utvrđuje se mehanizam nastanka naslaga nego se **identificiraju relacije između ulaznih i izlaznih varijabli**.
- Modeli **strojnog učenja** (umjetne inteligencije) za predobradu i analizu ulaznih veličina te za procjenu izlaznih veličina.

REZULTAT

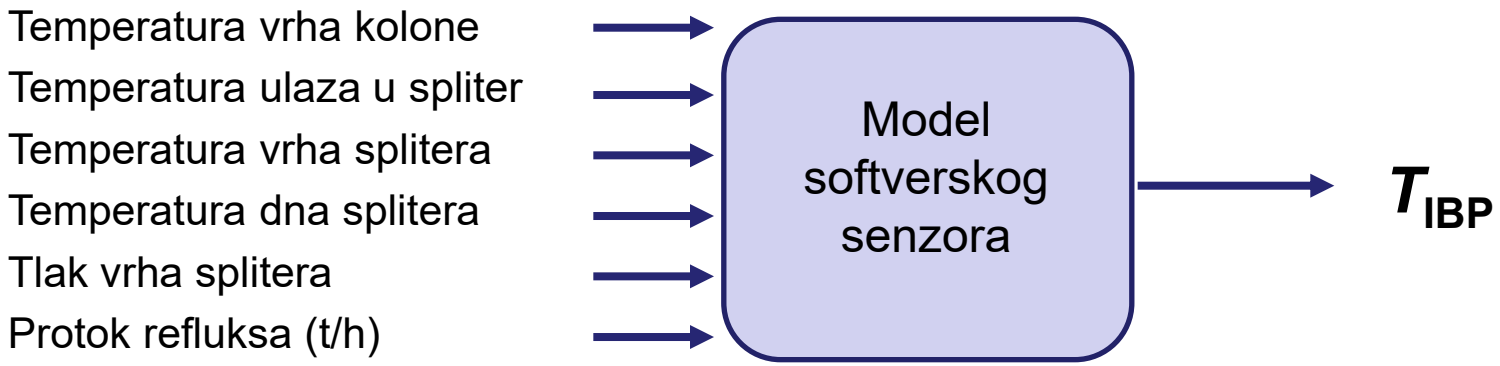
- ***On-line* alat** za praćenje i predviđanje nastanka naslaga i ukupne efikasnosti izmjenjivača
- **Napredna dijagnostika** rada izmjenjivača topline
- Omogućuje provedbu preventivnog i prediktivnog održavanja.

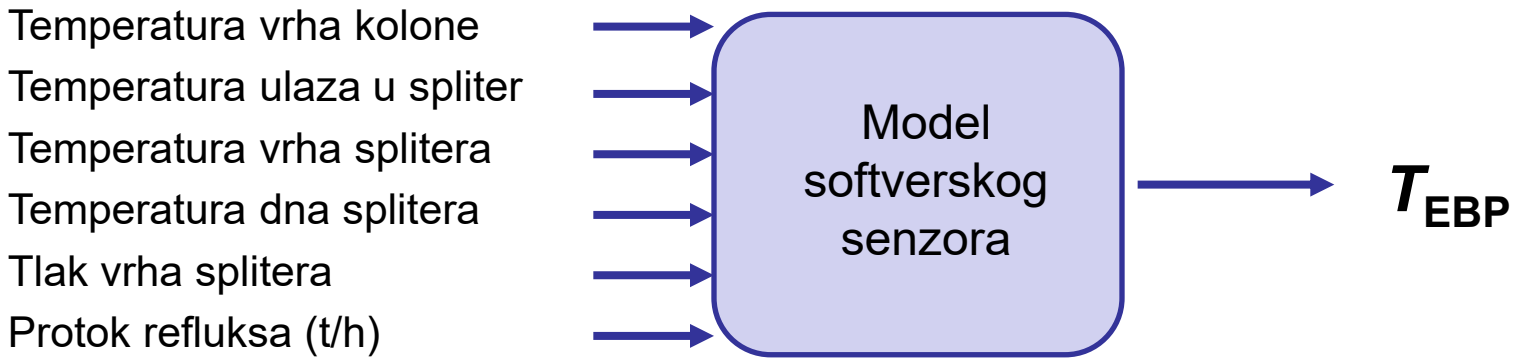
Soft senzor za predviđanje točke početka i kraja destilacije dna splitera



Soft senzor za predviđanje točke početka i kraja destilacije dna splitera

Struktura modela



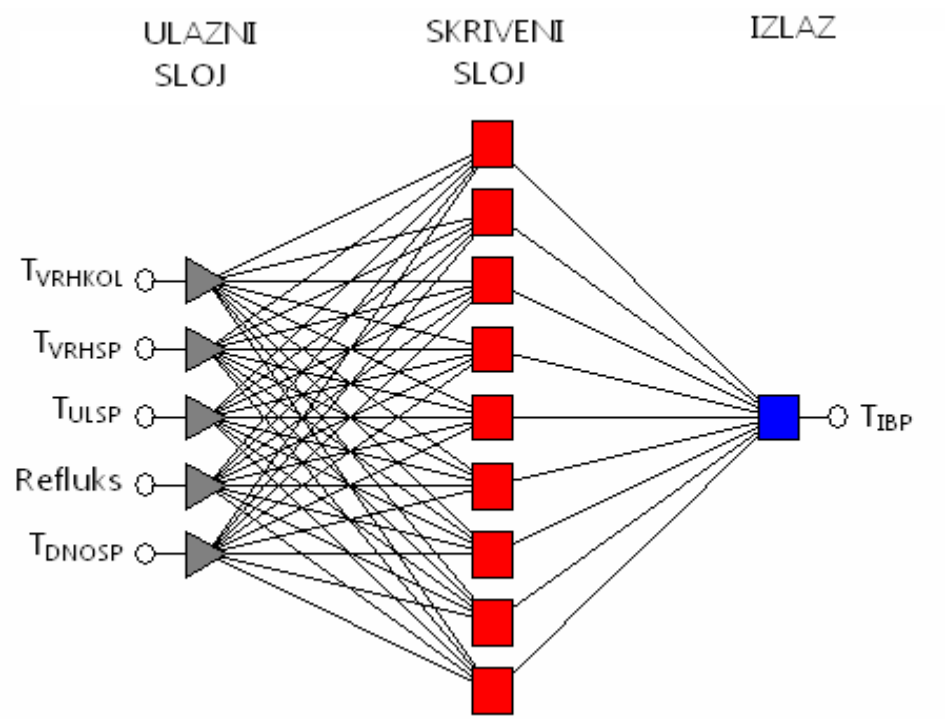


Soft senzor za predviđanje točke početka i kraja destilacije dna splitera

Početak destilacije dna splitera - T_{IBP}

- Struktura mreže: 5 - 9 -1

	T	S	V	Ukupno
Sr. vrijednost podataka	80,76	81,99	80,44	80,96
Sr. vrijednost pogreške	0,06	-0,12	0,40	0,09
S.D. pogreške	2,98	2,03	2,96	2,80
Korelacija	0,85	0,87	0,86	0,86



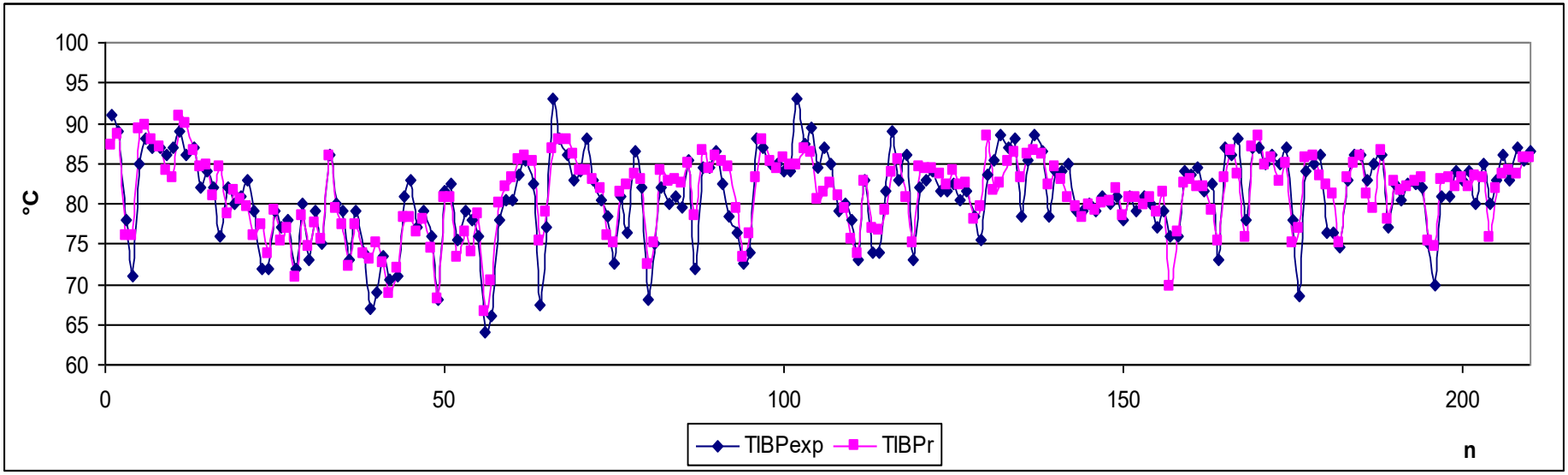
Analiza osjetljivosti

	T_{vrhkol}	p_{vrhsp}	Refluks	T_{ulsp}	T_{dnosp}
Ratio	1,20	1,84	1,07	1,03	2,27
Rank	3	2	4	5	1

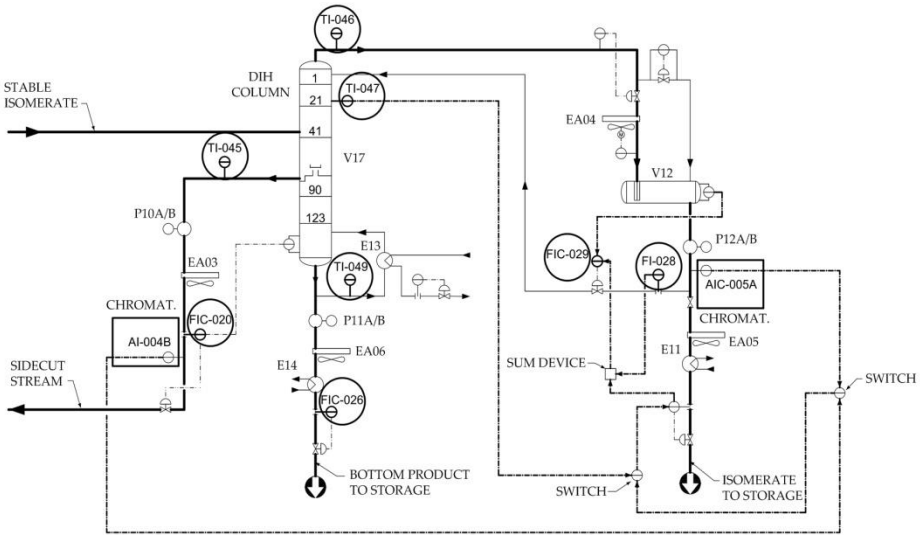
Soft senzor za predviđanje točke početka i kraja destilacije dna splitera

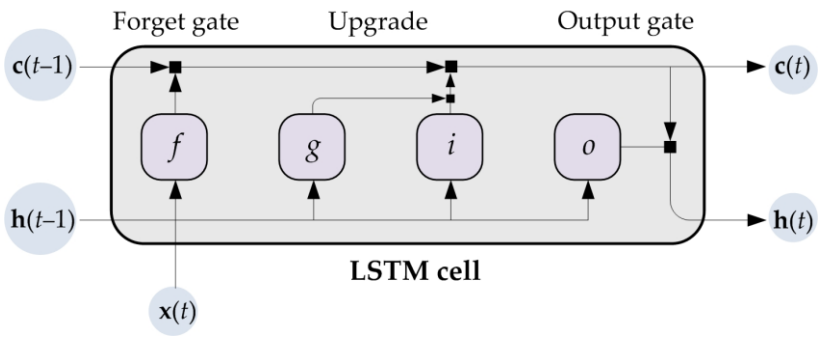
Početak destilacije dna splitera - T_{IBP}

- grafička usporedba eksperimentalnih i podataka dobivenih modelom



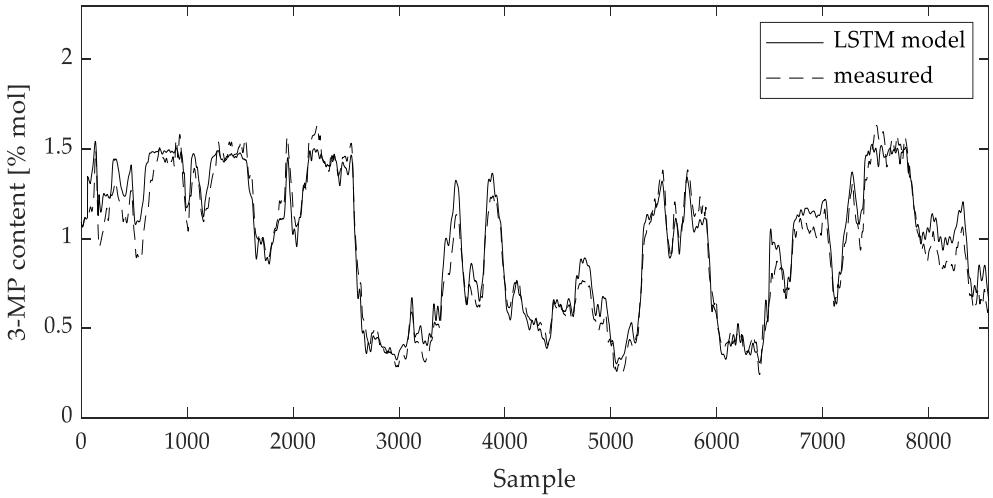
Soft senzor za predviđanje sadržaja 3-MP u izomerizatu



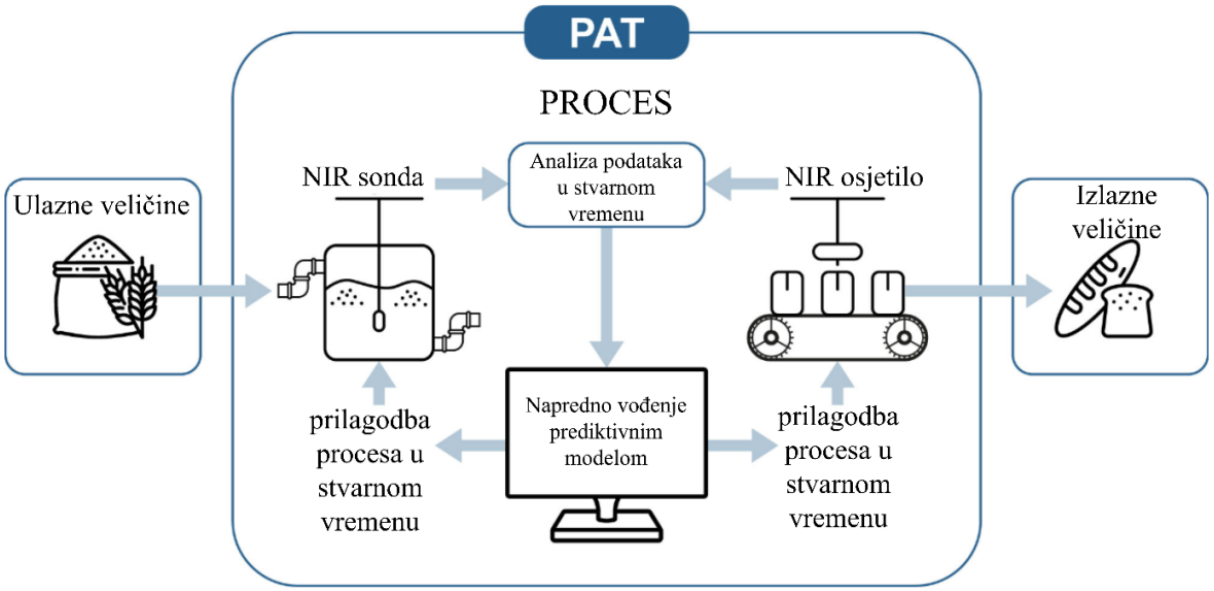


Feature	Test data set
Learning algorithm	ADAM
Activation function	*tanh*
Number of past time steps	55
Number of hidden units	25
R	0.988
RMSE **[% mol]**	0.048
MAE **[% mol]**	0.037

Model	*R* (test)	*RMSE* (test) [% mol]	*MAE* (test) [% mol]
LSTM	0.988	0.048	0.037
MLP 6-20-1	0.968	0.091	0.067
SVM	0.982	0.069	0.045
NARX	0.985	0.054	0.046
HW	0.995	0.033	0.026



Praćenje koncentracije u procesu kristalizacije primjenom neuronskih mreža



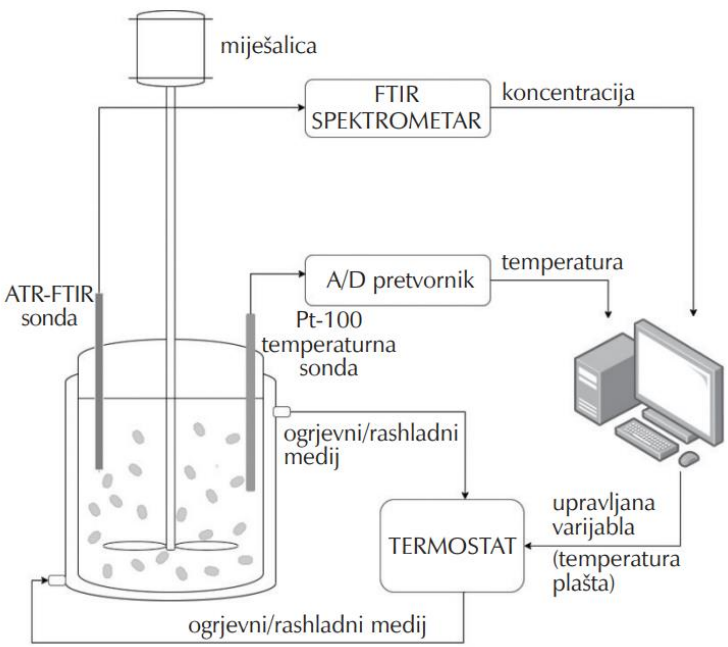
- Razvijeni su **kalibracijski** modeli neuronskih mreža za modeliranje ovisnosti **koncentracije aktivne tvari** o temperaturi i spektralnim podacima dobivenim mjerenjima u FTIR, UV-Vis I RAMAN uređajima.
- Kalibracijski modeli služit će za kontinuirano praćenje koncentracije aktivne tvari u procesu kristalizacije.

Tesa Herceg, diplomski rad

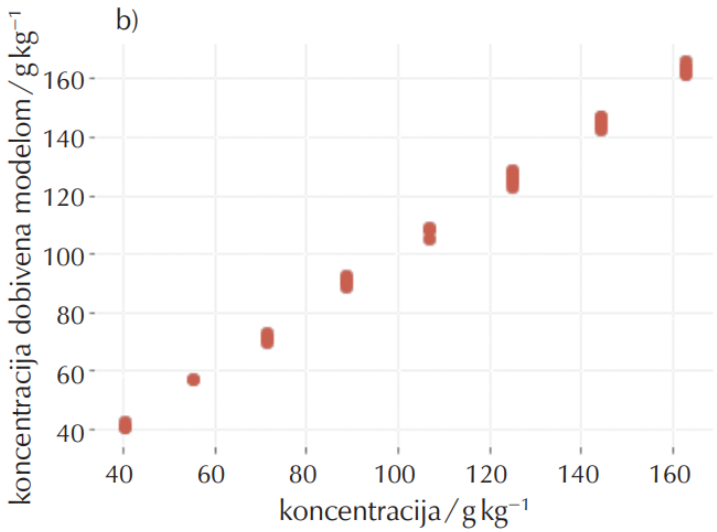
Praćenje koncentracije u procesu kristalizacije primjenom neuronskih mreža

Ulazne varijable: Temperatura, FTIR spektralni podaci; **Izlazna varijabla**: Koncentracija otopine

Broj neurona u skrivenom sloju Number of neurons in the hidden layer	Aktivacijska funkcija – skriveni sloj Activation function in the hidden layer	Aktivacijska funkcija – izlazni sloj Activation function in the output layer	*Loss* funkcija Loss function	Algoritam učenja Training algorithm	Broj epoha Number of epochs
10	*ReLU*	*LINEAR*	*MSE*	NADAM	40



Praćenje procesa kristalizacije primjenom procesne analitičke tehnologije

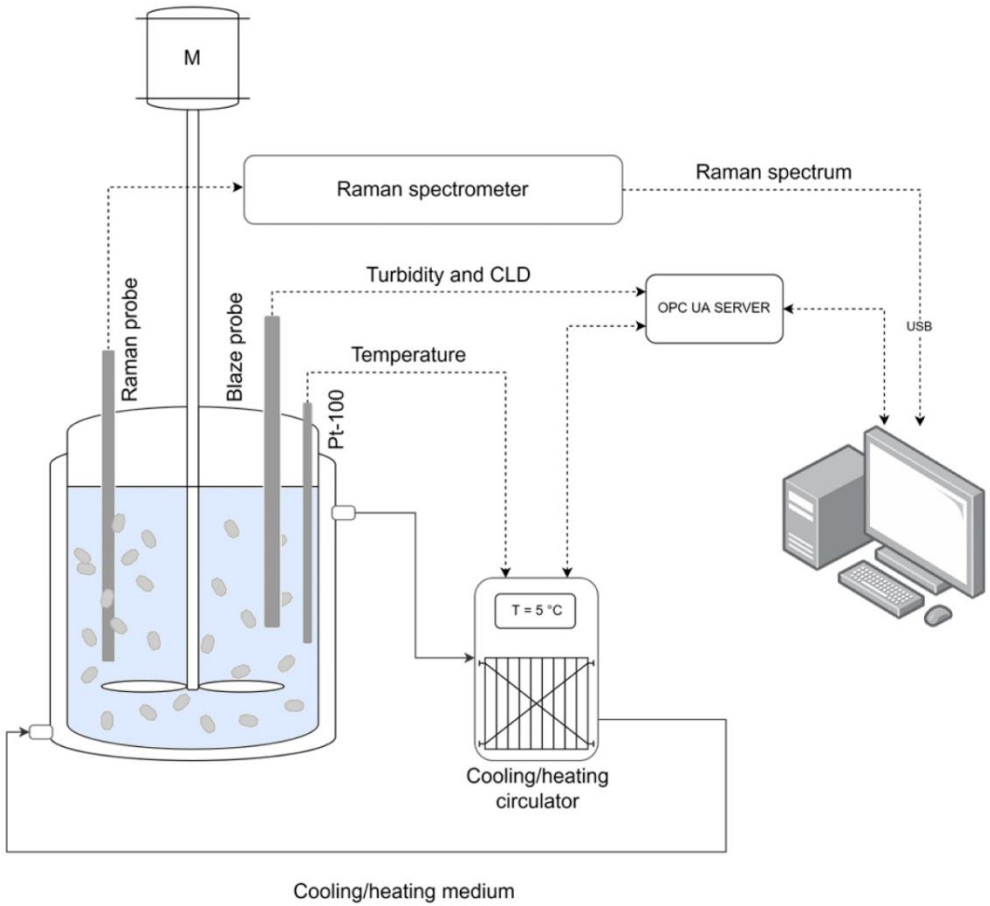


Usporedba stvarnih (FTIR) koncentracija i onih dobivenih NN modelom na skupu podataka za provjeru

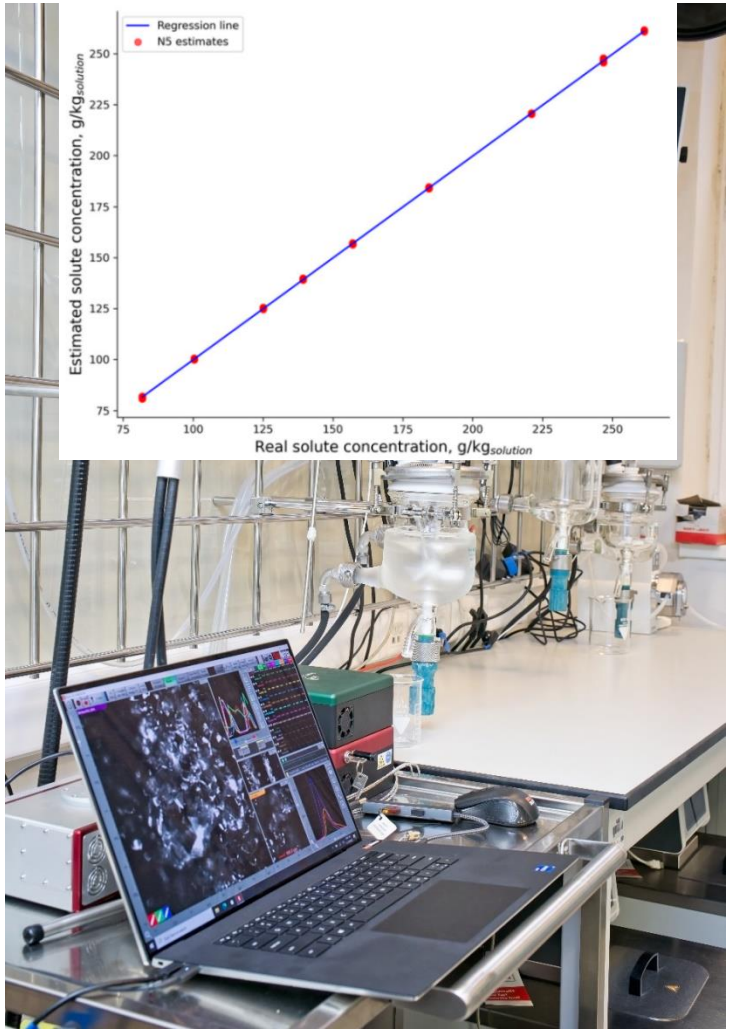
Matea Gavran, disertacija

Praćenje koncentracije u procesu kristalizacije primjenom neuronskih mreža

Ulazne varijable: Temperatura, Ramanovi spektralni podaci, percentili distribucije veličine čestica D10, D50 i D90 te zamućenost.

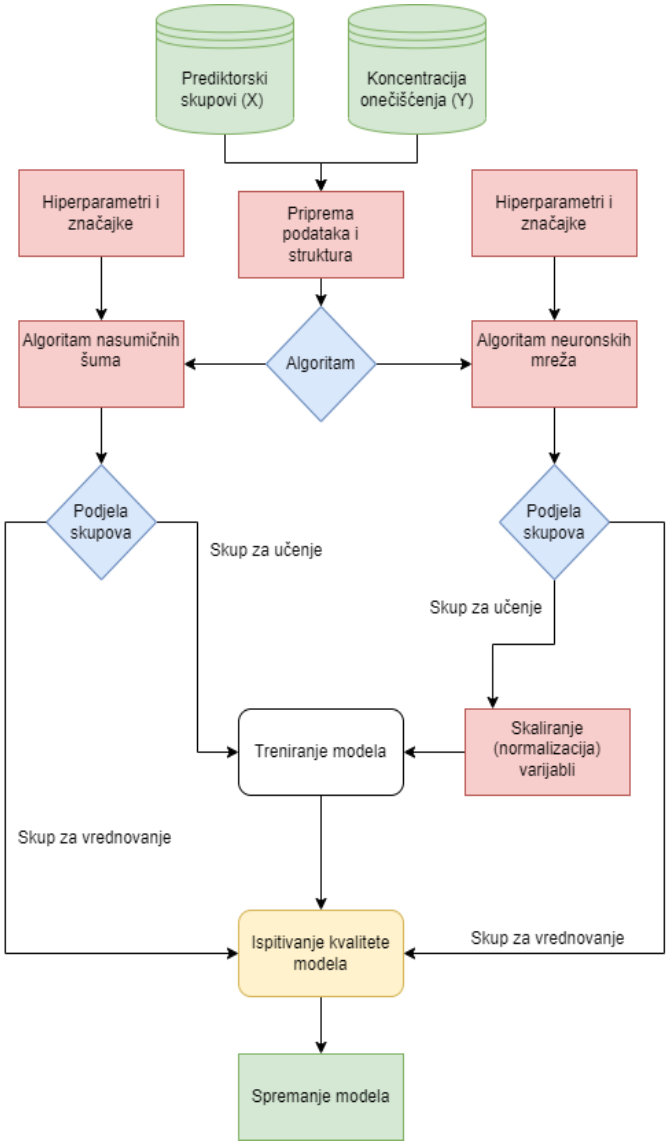


Praćenje procesa kristalizacije primjenom procesne analitičke tehnologije



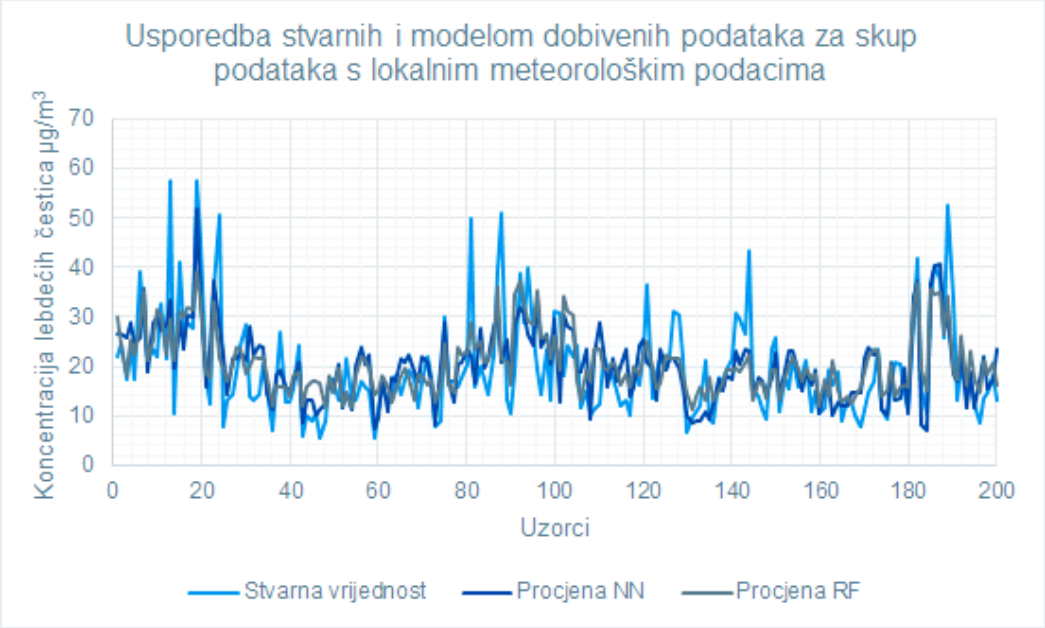
Usporedba stvarnih (RAMAN) koncentracija i onih dobivenih NN modelom na skupu podataka za validiranje

Predviđanje koncentracije lebdećih čestica u zraku primjenom neuronskih mreža



Valentino Petrić, diplomski rad

Lokacija	Algoritam	Hiperparametri modela
Sjever Graz	Neuronske mreže	alpha': 0.05, 'early_stopping': True, 'hidden_layer_sizes': (500, 100, 10), 'learning_rate_init': 0.0001, 'max_iter': 300, 'random_state': 42, 'solver': 'adam'
Sjever Graz	Nasumične šume	max_depth': 10, 'max_samples': 0.5, 'min_samples_leaf': 2, 'n_estimators': 200, 'n_jobs': -1, 'random_state': 42},



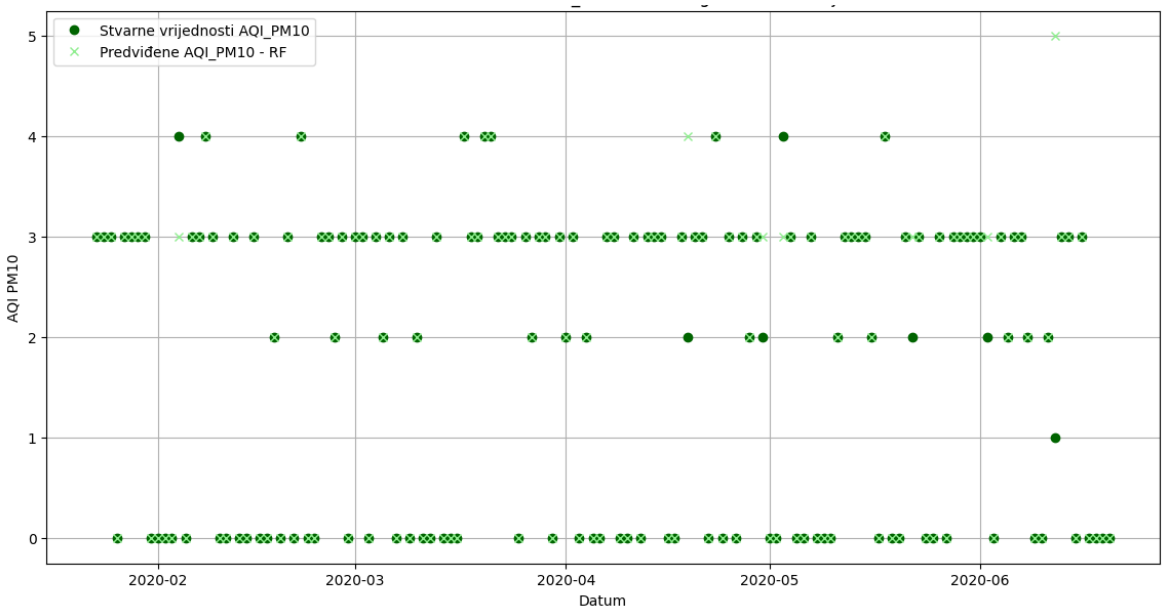
Sveučilište u Zagrebu
Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije
Metode umjetne inteligencije
LAM

Paola Klonkay, diplomski rad

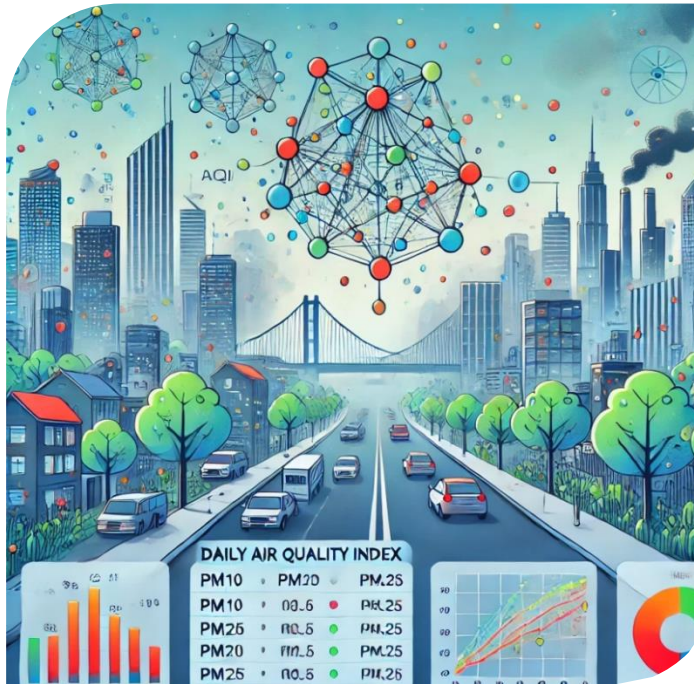
Predviđanje koncentracije lebdećih čestica u zraku primjenom neuronskih mreža

- Procjena dnevnog ***Indeksa kvalitete zraka*** preko polutanata PM10 i PM2.5.
- **Klasifikacijski *Random Forest*** i ***Support Vector Machine*** modeli su razvijeni, koristeći Python.
- Podaci: masene koncentracije PM10, PM2.5 i meteorološki podaci sa tri meteorološke stanice.

Metrika	RF	SVM
Točnost	0.96	0.88

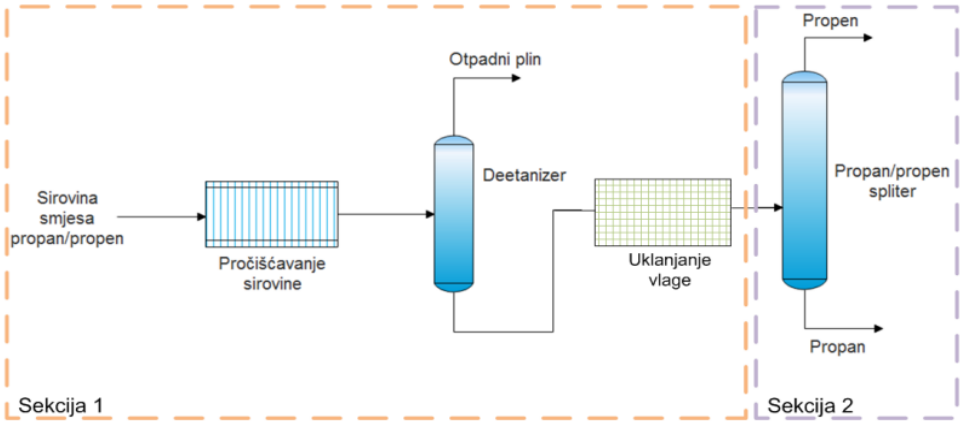


Comparison of actual and model-predicted AQI values (validation data)

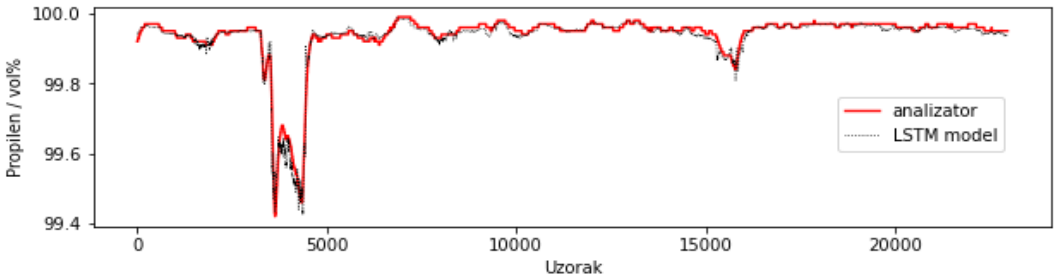


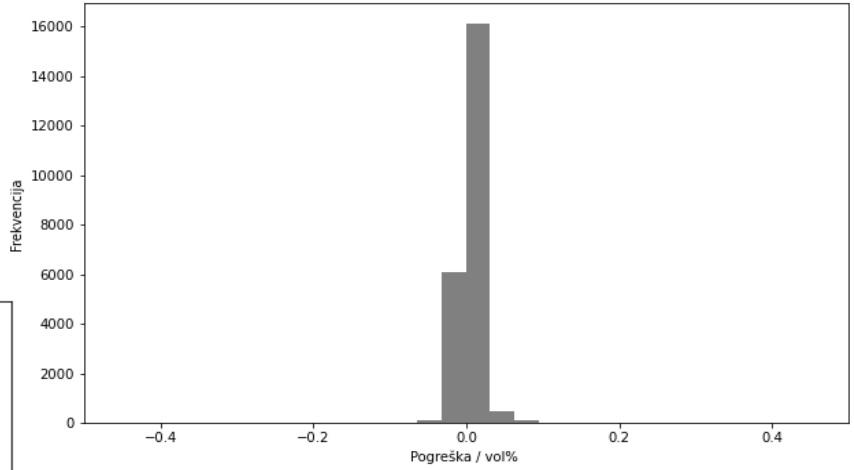
Predviđanje sadržaja propilena primjenom neuronskih mreža

Ines Martić, diplomski rad



Korelacija na cjelokupnim podacima	0.985
Korelacija na skupu podataka za učenje	0.985
Korelacija na test skupu podataka	0.986
Korelacija na validacijskom skupu	0.981
Sr. kvadr. pogreška na skupu za učenje	0.036
Sr. kvadr. pogreška na test skupu	0.031
Sr. kvadr. pogreška na validacij. skupu	0.037



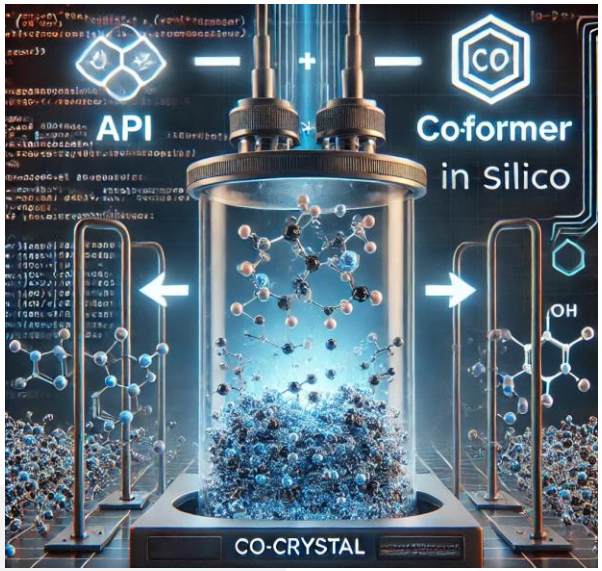


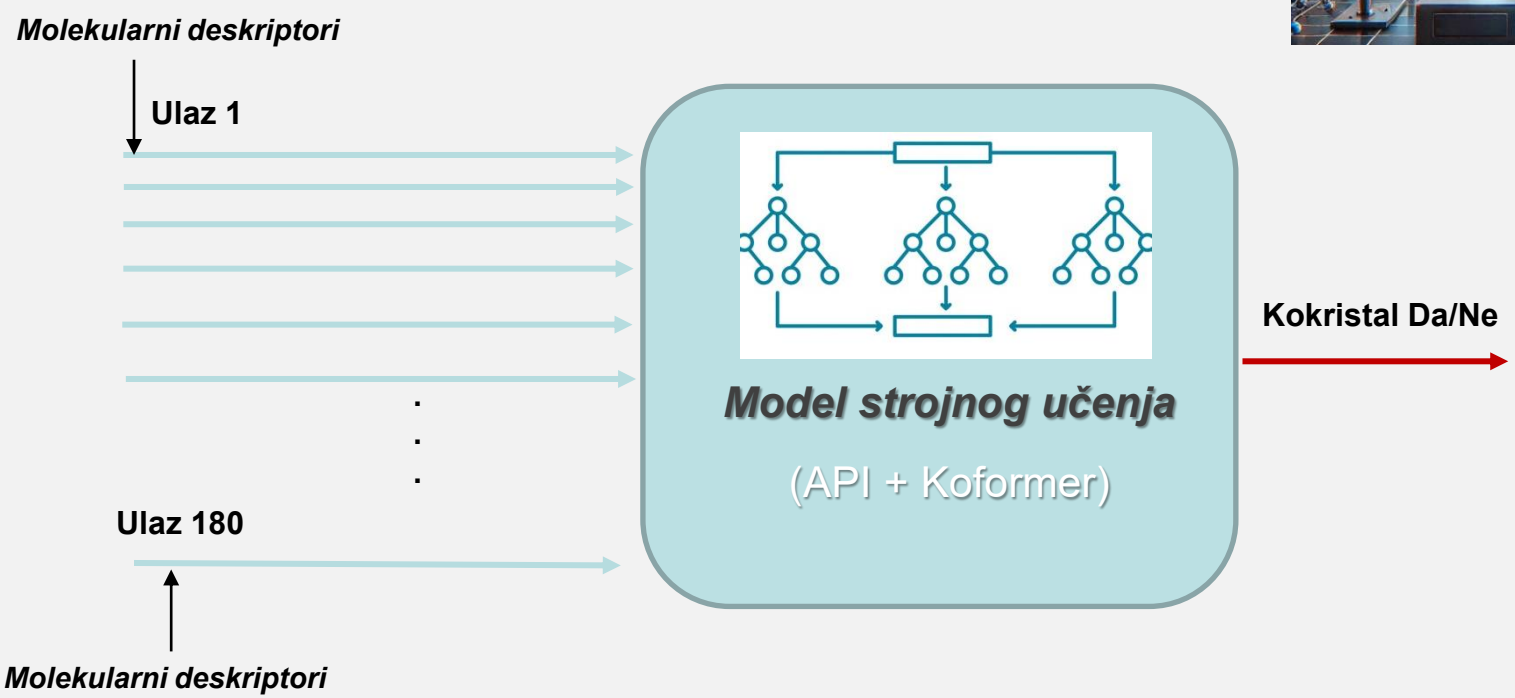
Histogram pogreške

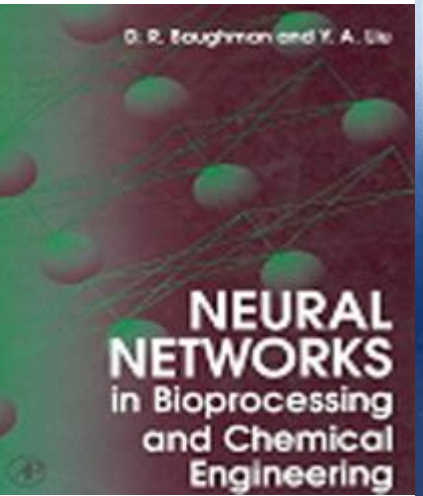
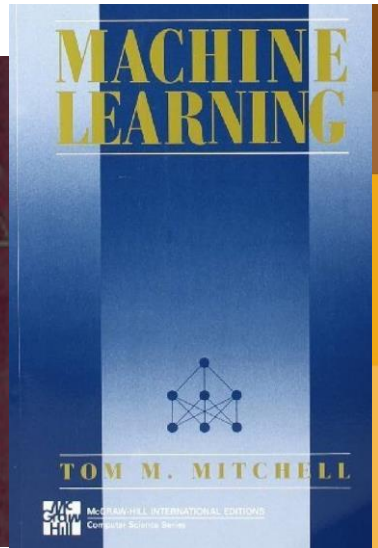
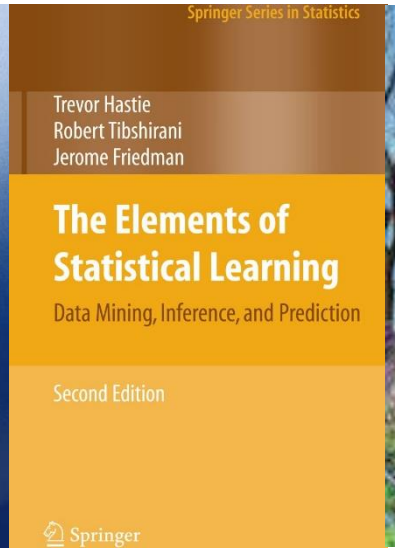
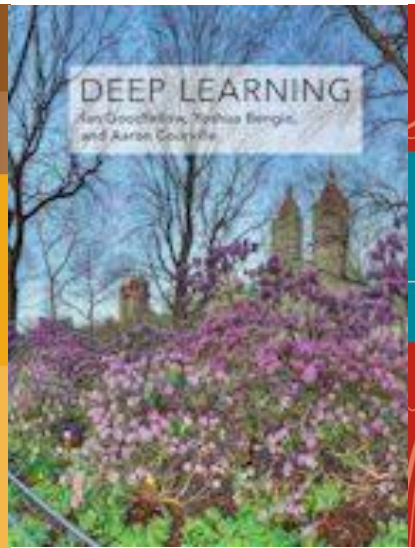
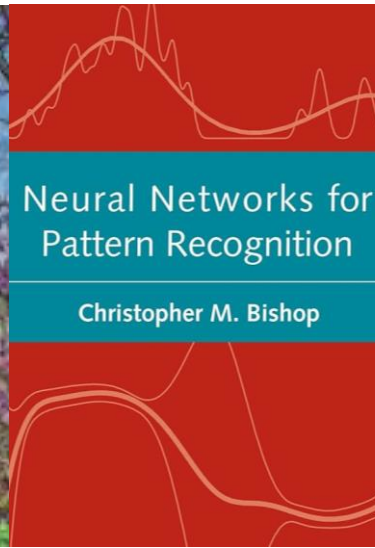
*Usporedba između stvarnih podataka sadržaja propilena i vrijednosti dobivenih **LSTM modelom** za model sa ReLU funkcijom, 33 LSTM jedinice i 33 vremenska koraka u prošlost*

Primjer: Predviđanje nastajanja kokristala u farmaceutskom razvoju

- Cilj: identificirati koformere koji mogu tvoriti stabilne kokristale s djelatnom farmaceutskom tvari.
- Uobičajena metoda za odabir koformera je eksperimentalna metoda pokušaja i pogrešaka, koja zahtijeva značajno laboratorijsko vrijeme i potrošnju reagensa.
- Primjenom robusnih prediktivnih alata, proces bi se mogao učiniti učinkovitijim. → klasifikacijski modeli





Literatura iz neuronskih mreža

- D. R. Baughman, Y. A. Liu, ***Neural networks in Bioproceesing and Chemical Engineering***, Academic Press, 1995
- Mitchell, T. M., *Machine Learning*, McGrowHill, 1997
- Hastie, T., Tibshirani, R., Friedman, J.H., *The elements of statistical learning: Data mining, inference, and prediction*, Springer, New York, 2009
- Goodfellow, I., Bengio, Y., Courville, A., *Deep Learning*, An MIT Press Book, 2016
- Bishop, C.M, *Neural Networks for Pattern Recognition*, Clarendon Press Oxford, 1995.