

Razvoj i primjena softverskog senzora na postrojenju za proizvodnju propilena

Martić, Ines

Master's thesis / Diplomski rad

2023

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **University of Zagreb, Faculty of Chemical Engineering and Technology / Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://urn.nsk.hr/urn:nbn:hr:149:297122>

Rights / Prava: [In copyright](#)/[Zaštićeno autorskim pravom.](#)

Download date / Datum preuzimanja: **2024-07-17**



Repository / Repozitorij:

[Repository of Faculty of Chemical Engineering and Technology University of Zagreb](#)



SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
FAKULTET KEMIJSKOG INŽENJERSTVA I TEHNOLOGIJE
SVEUČILIŠNI DIPLOMSKI STUDIJ

Ines Martić

DIPLOMSKI RAD

Zagreb, studeni 2023.

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
FAKULTET KEMIJSKOG INŽENJERSTVA I TEHNOLOGIJE
SVEUČILIŠNI DIPLOMSKI STUDIJ

Ines Martić

RAZVOJ I PRIMJENA SOFTVERSKOG SENZORA NA
POSTROJENJU ZA PROIZVODNJU PROPILENA

DIPLOMSKI RAD

Mentor: doc. dr. sc. Željka Ujević Andrijić

Članovi ispitnog povjerenstva:

Željka Ujević Andrijić, doc. dr. sc.

Nenad Bolf, prof. dr. sc.

Miroslav Jerković, doc. dr. sc.

Zamjena:

Igor Dejanović, izv. prof. dr. sc.

Zagreb, studeni 2023.

SAŽETAK

U ovome radu prikazan je razvoj modela softverskih senzora za kontinuirano praćenje sadržaja propilena u rafinerijskom postrojenju propan/propilen splitter.

Dobiveni podaci ulaznih varijabli usklađeni su vremenski sa izlaznom varijablom te su obrađeni različitim metodama predobrade. U programskom jeziku Python izrađeni su modeli softverskih senzora primjenom neuronskih mreža s višeslojnim perceptomom (engl. *Multi-layer perceptron, MLP*) i neuronskih mreža s dugotrajnim kratkoročnim pamćenjem (engl. *long short-term memory, LSTM*).

Pri razvoju MLP modela analizirani su hiperparametri modela kao što su: broj neurona u skrivenom sloju i utjecaj vrste prijenosne funkcije (*sigmoid, tanh, ReLU i ELU*) na kvalitetu razvijenih neuronskih mreža. Pri razvoju LSTM modela se dodatno ispitivao i broj vremenskih koraka u prošlost te broj LSTM jedinica.

Oba modela dala su visoke i slične vrijednosti koeficijenta korelacije te niske pogreške između modeliranog sadržaja propilena i realnih podataka sa postrojenja te se mogu primijeniti u rafinerijskom informacijskom sustavu. Analiza trenda i histograma pogreške razvijenih modela dodatno ukazuje na zadovoljavajuću kvalitetu razvijenih modela.

Primjenom softverskih senzora smanjuje se potreba za korištenjem skupe mjerne analitičke opreme i opreme koja se često kviri, te je u konačnici moguće potpuno zamijeniti postojeće analizatore u procesu. Primjenom softverskih senzora na postrojenju unaprijedit će se automatsko vođenje procesa što će utjecati na stabilnije odvijanje procesa i veću kvalitetu konačnog proizvoda.

Ključne riječi: softverski senzor, neuronske mreže, višeslojni perceptron, mreže s dugotrajnim kratkoročnim pamćenjem, propilen

ABSTRACT

This paper presents the development of soft sensor models for continuous monitoring of propylene content in refinery propane/propylene splitter.

The goal of this paper is to develop soft sensor models based on given experimental data about refinery process of propane and propylene separation, validate and compare developed models. The development of models began with the preprocessing of the collected measurement data. Soft sensor models were created in the Python programming language using the methods of multilayer perceptron networks and long short-term memory networks.

During development of multilayer perceptron networks model it was tested how hyperparameters such as number of neurons in hidden layers and activation function (*sigmoid*, *tanh*, *ReLU* i *ELU*) affect on quality of the developed neural networks. During the development of LSTM models, additional testing of the number of time steps into the past and the number of LSTM units on model quality were examined.

A statistical analysis of the results was carried out, which shows that both types of models give high correlation values of model data with real propylene content data, so both types of models can be applied in the refinery information system. Error trend analysis and error histogram of the developed models additionally indicate the satisfactory quality of the developed models.

By applying the developed soft sensors it is possible to decrease the need for high cost measurement equipment and equipment that breaks down frequently, and ultimately completely replace the existing analyzers in the process and improve the automatic management of the process. Application of software sensors will improve automatic process control, which will result in more stable process management at the plant and higher quality of the final product.

Key words: software sensor, neural networks, multi-layer perceptron, long short-term memory networks, propylene

SADRŽAJ

1. UVOD	1
2. OPĆI DIO	2
2.1. Softverski senzori	2
2.2. Strojno učenje	5
2.3. Umjetne neuronske mreže	8
2.3.1. Višeslojni perceptron (engl. <i>Multi-layer perceptron, MLP</i>)	10
2.3.2. Povratne neuronske mreže (engl. <i>Recurrent neural networks, RNN</i>)	10
2.3.3. Aktivacijske funkcije	14
2.3.4. Algoritam širenja pogreške unatrag	18
3. EKSPERIMENTALNI DIO	19
3.1. Postrojenje propan/propilen splitter	19
3.2. Prikupljanje i predobrada podataka	21
3.3. Razvoj modela MLP	23
3.4. Razvoj modela LSTM	24
3.5. Vrednovanje MLP i LSTM modela	24
4. REZULTATI I RASPRAVA	25
4.1. Predobrada podataka modela	25
4.2. Rezultati MLP modela	29
4.3. Rezultati modela LSTM	44
5. ZAKLJUČAK	60
6. LITERATURA	61
7. POPIS SIMBOLA	62

1.UVOD

U mnogim procesima i postrojenjima često je teško kontinuirano i pouzdano mjeriti ključne procesne veličine. Vođenje takvih procesa ovisi o laboratorijskim analizama koje su vrlo često rijetke i dugotrajne, a troškovi primjene i održavanja *on-line* analizatora mogu biti iznimno visoki. Iz tih razloga javlja se potreba za razvojem i korištenjem inteligentnih softvera pomoću kojih bi se kontinuirano pratila različita fizikalno-kemijska svojstva i procesne varijable. Pomoću softverskih senzora moguće je na temelju lako mjerljivih sekundarnih veličina, kao što su temperatura, tlak i protok, zaključivati o stanju teško mjerljivih veličina određivanjem njihovih funkcijskih veza. Razvoj softverskih senzora na području kemijskog inženjerstva zahtijeva znanja iz različitih znanstvenih disciplina te uključuje spoj znanstvenih istraživanja i iskustva inženjera s postrojenja.

U ovom diplomskom radu prikazan je razvoj modela softverskih senzora za kontinuirano praćenje sadržaja propilena u rafinerijskom postrojenju propan/propilen splitter (PPS postrojenje).

Propilen je vrlo bitan međuproizvod za proizvodnju petrokemikalija, tj. polimera, zbog čega je bitno da krajnji proizvod propilen ima visoku čistoću. S obzirom na česte kvarove i potrebe za održavanjem kao i visoku cijenu *on-line* analizatora koji se koriste za kontinuirano mjerenje sadržaja propilena, potrebno je razviti model za kontinuiranu procjenu sadržaja propilen proizvoda u proizvodnom postrojenju propan/propilen splitter.

2. OPĆI DIO

2.1. Softverski senzori

Krajem 90tih godina 20. stoljeća pojavila se ideja za korištenjem podataka mjerenim fizičkim osjetilima kao što su temperatura, tlak i protok za razvoj prediktivnih modela, tj. modela softverskih senzora. Pojam softverski senzori kombinacija je dvije riječi - „softver“, koji se odnosi na činjenicu da su modeli uobičajeno računalni programi, i „senzor“ jer imaju istu svrhu kao i hardverski senzori. Softverski senzori su sposobni procijeniti stanja procesa koja je teško ili nemoguće izmjeriti u realnom vremenu pomoću hardverskih senzora zbog velikog kašnjenja mjerenja, tehnoloških ograničenja ili visokih investicijskih troškova. U nekim slučajevima, čak i kada je moguće koristiti hardverske senzore, prednost se daje softverskim rješenjima jer stabiliziraju rad te smanjuju potrošnju energije i materijala. [1]

Soft senzori su modeli procesa koji se dijele u 3 osnovne kategorije: modeli bijele kutije (engl. *white-box models*) poznati i kao „mehanistički“, „analitički“ i „fundamentalni“ modeli, modeli sive kutije (engl. *gray-box models*) poznati i kao „polu-analitički“ i „hibridni“ modeli, te modeli crne kutije (engl. *black-box models*) poznati i kao „empirijski“ i engl. „*data-driven*“ modeli.

Modeli bijele kutije temelje se na teorijskom znanju o procesu dok se modeli crne kutije temelje isključivo na podacima prikupljenim iz procesa. Modeli bijele kutije opisuju temeljne zakone znanosti i inženjerstva po kojima se vlada proces, a oslanjaju se pretežito na kinetiku reakcije, termodinamiku i svojstva fluida te na zakone o očuvanju mase, energije i momenta. Teorijski pristup razvoju modela često rezultira vrlo složenim nelinearnim i dinamičkim modelima koji zahtijevaju puno pretpostavki i vremena za njihovo rješavanje. Matematičke jednadžbe ovih modela najčešće su oblika običnih ili parcijalnih diferencijalnih jednadžbi s definiranim početnim i rubnim uvjetima. Modele bijele kutije procesni operateri i inženjeri mogu fizikalno jednostavno interpretirati, no takvi modeli imaju određena ograničenja. Ograničenja se ogledaju u tome da je njihove parametre, a pogotovo u realnim složenim sustavima teško procijeniti, a i često ne mogu u potpunosti opisati pravu dinamiku kompleksnog industrijskog procesa te je na kraju količina i veličina pogrešaka predviđanja kod takvih modela veća u odnosu na modele crne kutije.

Modeli crne kutije, u mnogim slučajevima mogu pružiti bolje rezultate u predviđanju, no manje su intuitivni po prirodi. Koriste se za opisivanje složenih procesa koje je teško opisati

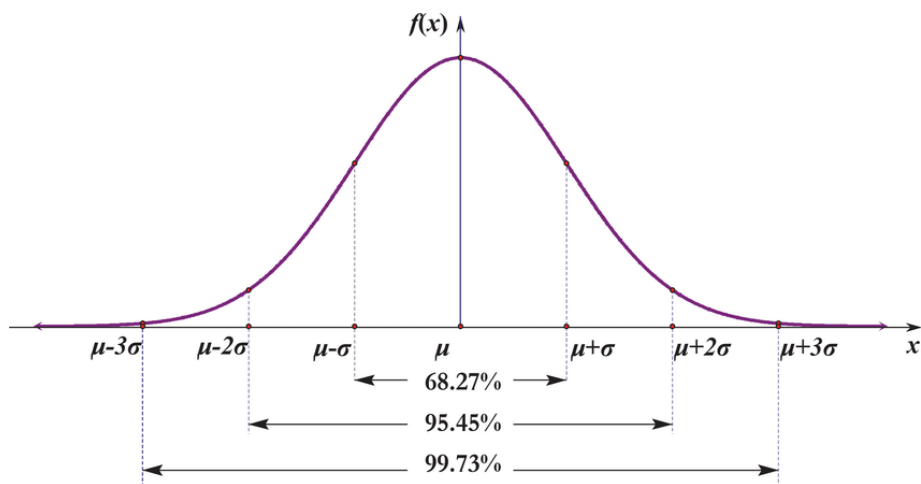
modelima bijele kutije. Sami pojam „crna kutija“ odnosi se na vladanje modela gdje zapravo nije nužno poznavanje prirode samog procesa već se model gradi isključivo pronalaženjem funkcijske veze između ulaza i izlaza procesa. Izostanak fizičkog značenja ovih modela smatra se nedostatkom, ali je i prednost jer omogućuje modeliranje procesa usprkos nepoznavanja detalja o temeljnom procesu. Iako imaju mnoge prednosti nad modelima bijele kutije, u odnosu na njih mogu biti skuplji u smislu računalnog opterećenja i vremena potrebnog za razvoj uz već postojeće poteškoće realizacije optimalnog dizajna i točnih vrijednosti parametara.

Modeli sive kutije integriraju modele crne i bijele kutije za rješavanje problema, odnosno pri njihovom razvoju koristi se teorijsko znanje o procesu u kombinaciji sa prikupljenim podacima iz procesa. Samim time, nadoknađuju nedostatke samostalnih modela bijele i crne kutije.[1]

Neki od ključnih čimbenika i procjenitelja uspješnosti softverskih senzora su dostupnost izlaznih podataka i pouzdanost procijenjenog izlaza. Dostupnost podataka se odnosi na osiguravanje dobivanja stabilnih vrijednosti izlaza. Ovaj problem dostupnosti izlaza softverskih senzora je drugačiji od fizičkih odnosno hardverskih senzora jer se, u *online* fazi primjene modela, softverski senzori pokreću vrijednostima varijabli koje se također mjere kontinuirano *online*. Iz tog razloga potrebno je uzeti u obzir i probleme sinkronizacije i heterogenosti podataka. Nominalno vremensko kašnjenje softverskog senzora se izražava kao suma najvećeg kašnjenja svakog fizičkog senzora ili mjernog instrumenta, kašnjenja u prijenosu (mrežna komunikacija) i računskog vremena algoritma. Pouzdanost se odnosi na točnost procijenjene vrijednosti izlaza koja ne smije odstupati previše od stvarne vrijednosti izlaza. Prilikom procjene izvedbe senzora potrebno je osim prosječne točnosti provjeriti i raspodjelu pogrešaka kao i njihovu učestalost. Također, ako je moguće, pomoću fizičkog senzora trebalo bi direktno mjeriti odgovarajući izlaz softverskog senzora povremeno ili kontinuirano kako bi se provodile njegove povremene adaptacije i korekcije u svrhu *online* kalibracije.

Opći postupak razvoja modela softverskog senzora podrazumijeva prikupljanje podataka, razvoj modela i implementaciju soft senzora. Prilikom prikupljanja podataka važna je dostupnost i kvaliteta podataka jer oni čine osnovu za sve sljedeće korake. Prilikom faze razvoja modela, teorijsko znanje o procesu kao što su fizikalna načela, jednadžbe reakcija i sl., mogu olakšati odabir ulaznih varijabli i predobradu podataka. Također, iskustvo operatera i stručnjaka za održavanje opreme i procesa dodatni su izvor informacija koje mogu pomoći pri razvoju softverskog senzora. Nakon prikupljanja podataka potrebno je napraviti njihovu predobradu koja uključuje razne korake kao što su vizualizacija podataka, detektiranje

ekstremnih i nedostajućih vrijednosti, filtriranje podataka i sl. Pravilo 3σ , također poznato kao pravilo 68-95-99.7, temeljni je koncept u statistici koji se koristi za opisivanje distribucije podataka i vjerojatnosti nalaženja podatkovne točke unutar određenog raspona. Temelji se na konceptu standardne devijacije (σ) i posebno je značajan u kontekstu normalnih distribucija. U normalnoj distribuciji, oko 68% podatkovnih točaka leži unutar jedne standardne devijacije (σ) srednje vrijednosti (prosjeaka), 95% leži unutar dvije standardne devijacije, a približno 99,7% leži unutar tri standardne devijacije. Ovaj princip može se grafički prikazati slikom 1., gdje je μ srednja vrijednost podataka.



Slika 1. Prikaz 3σ pravila

Na slici 1. krivulja u obliku zvona predstavlja normalnu distribuciju. Središte krivulje predstavlja srednju vrijednost podataka, dok udaljenost od središta do ruba krivulje predstavlja standardna odstupanja. Pravilo 3 sigma vrlo je primjenjivo u kontroli kvalitete, nadzoru procesa, financijama i raznim znanstvenim područjima. Pomaže u prepoznavanju anomalija i ekstrema koji bi mogli biti izvan očekivanog raspona, ukazujući na moguće pogreške ili rijetke neočekivane događaje. [2]

Kada su podaci predobrađeni odabiru se utjecajne varijable, odnosno ulazne varijable koje pokazuju određeni utjecaj na izlaznu varijablu čiju vrijednost želimo predvidjeti te se odabire i vrsta modela za razvoj senzora. U svrhu odabira utjecajnih varijabli često se koristi Pearsonov koeficijent korelacije. Pearsonov koeficijent korelacije statistička je mjera koja se koristi za kvantificiranje linearnog odnosa između dviju kontinuiranih varijabli. Vrijednosti koeficijenta kreću se između -1 i 1, indicirajući intenzitet i smjer odnosa između varijabli. Procjenjuje koliko su podatkovne točke dviju varijabli prikazane u koordinatnom sustavu poravnate duž ravne crte.

Matematički se Pearsonov koeficijent korelacije može prikazati formulom:

$$r_{xy} = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}} \quad (1)$$

gdje je n broj uzoraka, x_i i y_i su pojedinačni uzorci, a \bar{x} i \bar{y} su srednje vrijednosti uzorka. Pozitivna vrijednost " r " označava pozitivnu korelaciju, što znači da kako jedna varijabla raste, druga također ima tendenciju povećanja. Suprotno tome, negativan " r " označava negativnu korelaciju, gdje je povećanje jedne varijable povezano sa smanjenjem druge varijable. Vrijednost " r " blizu 0 sugerira slab ili nikakav linearni odnos između varijabli. Međutim, važno je napomenuti da Pearsonov koeficijent korelacije mjeri samo linearne odnose između varijabli te da postoji mogućnost da neće ukazati na korelaciju kod nelinearnih odnosa ili ovisnosti između podatkovnih točaka. Osim toga, odstupajuće vrijednosti mogu značajno utjecati na vrijednost " r ", potencijalno dovodeći do pogrešnog tumačenja intenziteta odnosa. Unatoč ograničenjima, poznavanje vrijednosti Pearsonovog koeficijenta omogućuje istraživačima i analitičarima da otkriju skrivene veze unutar podataka. [3]

Softverski senzori se mogu koristiti i za *online* dijagnostiku rada hardverskog senzora/uređaja; zatim za procjenu nemjerljivih veličina stanja procesa, npr. pri ekstremnim uvjetima rada gdje fizički senzori nisu u mogućnosti mjeriti neku od veličina stanja; kada je implementacija nekog fizičkog senzora neekonomična ili pak nepoželjna zbog veličine fizičkog senzora ili kada je potrebna neinvazivna metoda mjerenja. Soft senzori se mogu koristiti za procjenu kvalitete proizvoda kada su laboratorijske analize dugotrajne ili jako skupe ili kada je potrebno pratiti kvalitetu proizvoda u stvarnom vremenu. [4]

U mnogim praktičnim primjerima u industriji, evidentan je nedostatak poznavanja egzaktnih fizikalnih fenomena koji se javljaju u procesu, a samim time i parametara modela, a često je potrebno i detaljno poznavanje kinetike procesa, stoga je fundamentalne modele teško razviti. Kako su s druge strane u postrojenjima dostupna mjerenja primarnih varijabli kao što su temperatura, tlak i protok za razvoj modela softverskih senzora često se koriste metode strojnog učenja koje će biti objašnjene u idućem poglavlju.

2.2. Strojno učenje

Učenje se, u generičkom smislu, odnosi na stjecanje novih ili modificiranje postojećih ponašanja, vrijednosti, znanja ili vještina. Strojno učenje je, na temeljnoj razini, grana umjetne inteligencije koja se bavi oblikovanjem algoritama koji svoju učinkovitost poboljšavaju kroz

iskustvo i korištenje novih podataka. To je istraživačko polje koje obuhvaća znanja iz statistike, umjetne inteligencije i računalne znanosti te je također poznato i pod nazivom prediktivna analitika ili statističko učenje. Treba napomenuti da za razliku od tradicionalne umjetne inteligencije, strojno učenje ne pokušava automatizirano oponašati inteligentno ponašanje, nego koristi posebne sposobnosti računala da nadopuni ljudsku inteligenciju, često obavljajući zadatke koji nadilaze ljudske sposobnosti. Za razliku od tradicionalnog programiranja gdje funkcijsku vezu između podataka određuje programer direktnim pisanjem formula ili pravila izraženih programskim jezikom, kod strojnog se učenja podaci inicijalno daju algoritmu koji onda pokušava samostalno odrediti funkcijsku vezu između unesenih podataka. [5]

Dok ljudi uče na temelju iskustva, računala se oslanjaju na učenje iz podataka. Računala nemaju sposobnost učenja na temelju samih pohranjenih podataka već se razvijaju pogodni računalni algoritmi, odnosno matematički modeli koji će im omogućiti učenje na osnovu podataka. Te metode se optimiraju i prilagođavaju proučavanom problemu, odnosno dostupnom skupu podataka kako bi postigle najbolje moguće rezultate. Proces učenja svodi se na modifikaciju radnji računala kako bi se poboljšala točnost predikcije, odnosno smanjila razlika između predviđene i stvarne vrijednosti izlaza modela. Cilj strojnog učenja je omogućiti računalu da izgradi određeni uglavnom matematički model kako bi uspješno predvidjelo vrijednost izlaza na temelju dobivenih ulaznih podataka.

Izraz strojno učenje osmislio je Arthur Samuel 1959. godine, koji je definirao strojno učenje kao znanstveno područje koje računalima pruža mogućnost učenja bez eksplicitnog programiranja, no Tom Mitchell je dao definiciju koja se pokazala nešto korisnijom za inženjersku primjenu: “Za računalni program se kaže da uči iz iskustva E s obzirom na neki zadatak T i neku mjeru učinka P , ako se njegova izvedba na T , kako je izmjereno od P , poboljšava s iskustvom E ” . [6]

Razvoj modela strojnog učenja sastoji se od šest koraka neovisnih o primijenjenom algoritmu:

1. **Prikupljanje i priprema podataka:** Primarni zadatak u procesu strojnog učenja je prikupiti i pripremiti podatke u obliku koji se može dovesti kao ulaz u algoritam. Prikupljene podatke treba „očistiti“ i prethodno obraditi u pogodan strukturirani format.
2. **Odabir značajki:** Podaci dobiveni iz gornjeg koraka mogu sadržavati brojne značajke od kojih su samo neke važne za proces učenja. Druge značajke treba ukloniti.

3. **Izbor algoritma:** Nisu svi algoritmi strojnog učenja namijenjeni za rješavanje svih problema. Odabir najboljeg algoritma strojnog učenja za dani problem je imperativ za dobivanje najboljeg mogućeg rezultata.
4. **Odabir modela i parametara:** Većina algoritama strojnog učenja zahtijeva inicijalno postavljanje prikladnih vrijednosti različitih parametara modela.
5. **Treniranje modela:** Nakon odabira odgovarajućeg algoritma i odgovarajućih vrijednosti parametara, model se trenira korištenjem određenog dijela skupa podataka odnosno korištenjem podataka za trening (učenje).
6. **Procjena izvedbe:** Prije implementacije sustava u stvarnom vremenu, model mora biti testiran na podacima na kojima nije bio treniran kako bi se procijenilo koliko je zapravo naučeno korištenjem različitih statističkih parametara vrednovanja modela. [7]

Ovisno o vrsti zadatka koji se treba riješiti, primjenjuje se odgovarajući pristup strojnom učenju. Zadaci klasifikacije su problemi u kojima izlaz može biti samo jedan od fiksno postavljenog broja izlaznih klasa kao što su da/ne i točno/netočno. Ovisno o broju izlaznih klasa, ovakav problem može biti binaran ili multiklasan. Zadaci otkrivanja anomalija su problemi u kojima algoritam traži odstupanja ili promjene u uzorku. Zadaci regresije su problemi koji koriste kontinuirane numeričke izlaze. Korištenjem regresijskih algoritama pokušava se doći do krajnjeg numeričkog rezultata, odnosno izlaza koji ovisi o poznatim ulazima. U zadacima klasteriranja algoritmi pokušavaju naučiti strukture i sličnosti podataka i napraviti klastere na temelju sličnosti u strukturi podataka.

Postoje četiri glavna pristupa strojnom učenju: nadzirano, nenadzirano, polunadzirano i podržano učenje.

Nadzirano učenje (engl. *supervised learning*) podrazumijeva učenje na temelju poznatih, označenih podataka. Skup podataka koji se koristi podijeljen je u dvije grupe: skup podataka za učenje ili trening i skup podataka za testiranje/validaciju. Matematički model dalje analizira podatke iz skupa za učenje i kreira određenu funkciju. Algoritmu strojnog učenja predaje se poznati skup podataka koji sadrži podatke od ulaza i izlaza modela, a algoritam generira adekvatnu funkciju koja omogućava da se iz danih vrijednosti ulaza dođe do određene vrijednosti izlaza, odnosno algoritam identificira uzorke u podacima, uči iz opažanja i daje predviđanja. Uz određeni kriterij točnosti ovaj proces učenja se nastavlja sve dok algoritam ne postigne visoku razinu točnosti. Problemi u kojima se koristi metoda nadziranog učenja mogu se dalje grupirati u probleme klasifikacije i probleme regresije. U zadacima klasifikacije, program strojnog učenja izvodi zaključak iz opaženih vrijednosti i određuje kojoj kategoriji

pripadaju nova opažanja. U zadacima regresije, program strojnog učenja procjenjuje odnose među varijablama. Regresijska analiza usredotočuje se na uglavnom jednu zavisnu varijablu i niz drugih promjenjivih ulaznih varijabli. [7]

Nenadzirano učenje (engl. *unsupervised learning*) temelji se na prepoznavanju neidentificiranih postojećih obrazaca iz podataka. Koristi neoznačene i neklasificirane skupove podataka za izradu predviđanja bez ljudske intervencije. Ova je metoda korisna za kategorizaciju ili grupiranje nesortiranih podataka na temelju sličnosti i razlika, kao i za otkrivanje skrivenih obrazaca i trendova u ulaznim podacima. Za razliku od nadziranog učenja, algoritmi za nenadzirano učenje uče iz podataka bez fiksne izlazne varijable. [7]

Polunadzirano učenje (engl. *semi-supervised learning*) uključuje kombiniranje označenih i neoznačenih podataka tijekom procesa učenja. Ova tehnika omogućuje strojevima učenje iz svih dostupnih podataka korištenjem prednosti nadziranog i nenadziranog učenja. Prvo se koriste algoritmi nenadziranog učenja za grupiranje neoznačenih podataka, a zatim se koriste algoritmi nadziranog učenja gdje se prethodno neoznačenim podacima dodaju oznake. Označeni podaci su u biti informacije koje imaju smislene oznake tako da algoritam može razumjeti podatke, dok neoznačenim podacima nedostaje ta informacija. [7]

Podržano učenje (engl. *reinforcement learning*) uključuje učenje na temelju metode pokušaja i pogreške. Podaci koji se koriste su neoznačeni, a algoritmu se pruža samo odgovor je li izlaz točan ili ne. Algoritam uči na temelju iskustva i dobivanja povratne informacije od okoline – učenje na temelju nagrade za poduzimanje radnji koje dovode do pozitivnog ishoda ili učenje na temelju kazne za poduzimanje radnji koje dovode do negativnog ishoda. Na temelju iskustva, algoritam uči izbjegavati kazne i izvoditi radnje koje dovode do nagrade. [7]

2.3. Umjetne neuronske mreže

Umjetne neuronske mreže su računalni modeli koji se koriste za strojno učenje, a način obrade podataka umjetnih neuronskih mreža se temelji na funkcioniranju ljudskog mozga samo na znatno manjoj skali. Koriste se za rješavanje raznih složenih problema, kao što su prepoznavanje uzoraka, klasifikacija, regresija i rješavanje optimizacijskih zadataka. Svaki neuron obrađuje informacije i prosljeđuje ih drugim neuronima, omogućujući mreži da uči i daje predviđanja. Ljudski mozak sastavljen je od oko 10^{11} neurona kojih ima više od 100 vrsta i koji su shodno svojoj funkciji raspoređeni prema točno definiranom rasporedu. Svaki je

neuron u prosjeku povezan s 10^4 drugih neurona i sastoji se od tri osnovna dijela: tijela stanice, skupa dendrita i aksona.

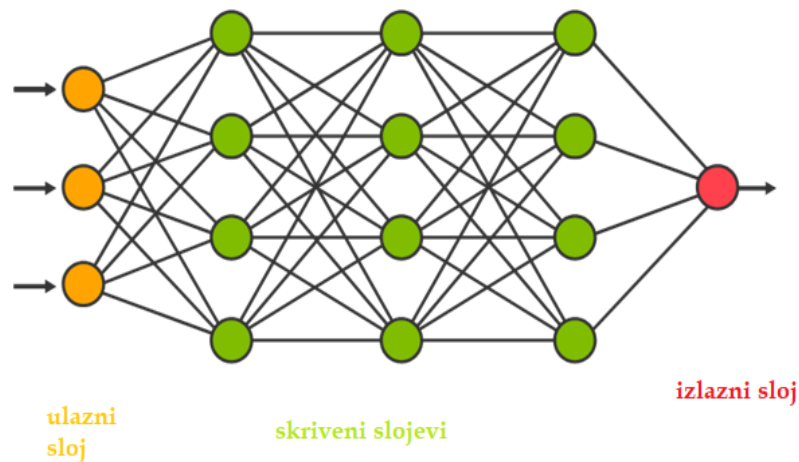
Tijelo stanice sadrži i obrađuje informaciju, dendriti su kraće niti oko stanice koje primaju signale s drugih neurona pri čemu ih mogu prigušivati ili pojačavati i prenose ih do tijela stanice, a akson je duga tanka nit koja prenosi signale od tijela stanice do drugih neurona pri čemu se grana u vlakna. Signal se prenosi preko sinapsi, funkcionalnih jedinica između završetka aksona prethodnog neurona i dendrita sljedećeg neurona, s jednog neurona na drugi. Shodno tome, umjetna neuronska mreža je sastavljena od velikog broja procesnih jedinica, zvanih čvorovi ili neuroni i njihovih međusobnih veza. Osnovna arhitektura umjetne neuronske mreže, prikazana na slici 2., se sastoji od 3 vrste slojeva koji su sastavljeni od čvorova - ulazni sloj, proizvoljan broj skrivenih slojeva i izlazni sloj, pri čemu je izlaz iz jednog sloja ulaz u sljedeći sloj. Ulazni sloj prima sirove informacije i u ovom koraku se ne obavlja računanje već ulazni neuroni samo prosljeđuju ulaznu informaciju skrivenom sloju. U skrivenom sloju se uvode aktivacijske funkcije i najčešće svi skriveni slojevi koriste istu aktivacijsku funkciju. Izlazni sloj je krajnji sloj mreže koji dobiva informaciju naučenu kroz skrivene slojeve i pretvara ju u krajnji rezultat. U izlaznom sloju se također može koristiti aktivacijska funkcija koja se najčešće razlikuje od one korištene u skrivenim slojevima. Svaki čvor ima vlastitu ulaznu informaciju preko koje prima komunikaciju od drugih čvorova i okoline te vlastitu izlaznu informaciju preko koje komunicira s drugim čvorovima i okolinom. Također svaki čvor ima i vlastitu aktivacijsku funkciju f putem koje se ulazna informacija transformira u izlaznu. Veze između neurona u umjetnoj neuronskoj mreži otežane su nekim težinskim koeficijentom w_i koji predstavlja jačinu veze između neurona. Ulazi se množe težinskim koeficijentima i zatim sumiraju u skrivenom sloju pomoću funkcije sumiranja, a njihova suma se uspoređuje s pragom osjetljivosti neurona. Ako suma otežanih ulaza premašuje prag osjetljivosti neurona θ aktivacijska funkcija f generira izlaz neurona. Ovaj postupak prikazan je grafički na slici 3., gdje su:

$$net = \sum_{i=0}^n w_i x_i \quad (2)$$

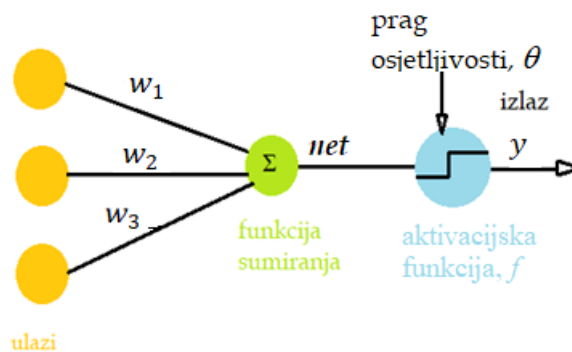
$$y = f(net - \theta). \quad (3)$$

S obzirom na to koriste li se aktivacijske funkcije te na koji način se ažuriraju težinski koeficijenti veza između neurona postoji više različitih vrsta umjetnih neuronskih mreža od kojih su najpoznatije perceptron, unaprijedne neuronske mreže, konvolucijske neuronske mreže, višeslojni perceptron, mreže s radijalnim baznim funkcijama te povratne neuronske mreže. [8,9]

U ovom radu su korištene višeslojne perceptronske mreže i povratne (rekurentne) neuronske mreže, odnosno posebna vrsta povratnih neuronskih mreža – mreže s dugotrajnim kratkoročnim pamćenjem (engl. *Long short-term memory networks, LSTM*).



Slika 2. Osnovna struktura neuronske mreže



Slika 3. Prikaz pretvorbe ulaznih informacija u izlazne u skrivenom sloju neurona

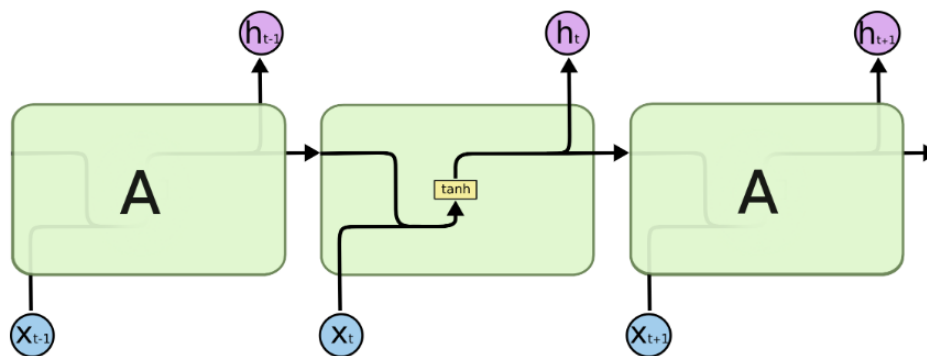
2.3.1. Višeslojni perceptron (engl. *Multi-layer perceptron, MLP*)

Višeslojni perceptroni su neuronske mreže koje se sastoje od višestrukih skrivenih slojeva i aktivacijskih funkcija. Učenje se odvija na nadzirani način gdje se težine ažuriraju pomoću gradijenta pogreške. Višeslojni perceptron je dvosmjernan, ulazna informacija se širi unaprijed, a težinski koeficijenti se ažuriraju unatrag. Od aktivacijskih funkcija koriste se *sigmoid*, *tanh*, *ReLU* i *ELU* koje će kasnije biti objašnjene.

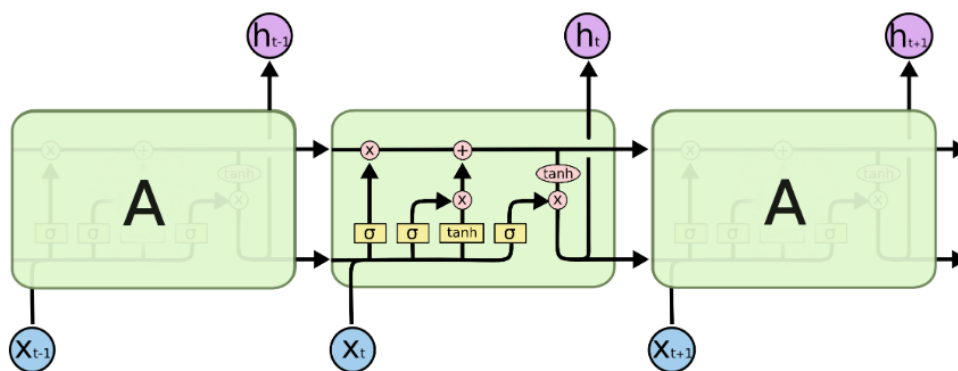
2.3.2. Povratne neuronske mreže (engl. *Recurrent neural networks, RNN*)

Povratne (rekurentne) neuronske mreže su vrsta neuronskih mreža koje se koriste za modeliranje sekvenci odnosno niza podataka. Svi ulazi i izlazi u standardnim neuronskim

mrežama neovisni su jedni o drugima, međutim u nekim okolnostima, kao što je kod predviđanja sljedeće riječi, prethodne riječi su neophodne, pa se moraju zapamtiti. Kao rezultat toga, stvorene su RNN mreže. Najvažnija komponenta RNN mreža je njihovo tzv. skriveno stanje, koje pamti specifične informacije o nizu. RNN mreže imaju memoriju koja pohranjuje sve informacije o izračunima. Koriste iste postavke za svaki ulaz budući da proizvodi isti ishod izvodeći isti zadatak na svim ulazima ili skrivenim slojevima. Iako imaju mogućnost pamćenja, RNN mreže također imaju i problem nestajućeg gradijenta pogreške zbog kojeg se informacije često ne mogu zadržati duže vrijeme u memoriji. Problem nestajućeg gradijenta se javlja zbog vrlo niskih vrijednosti derivacije $f'(x)$, odnosno gradijent postaje sve manji i težine se svakom iteracijom mijenjaju za vrlo male vrijednosti što dovodi do spore konvergencije ili nemogućnosti učenja. Kao rješenje tog problema nastale su mreže s dugotrajnim kratkoročnim pamćenjem. Tradicionalne RNN dakle imaju problem s učenjem dugoročnih ovisnosti. LSTM mreže rješavaju ovaj problem uvođenjem memorijske ćelije, tj. svojevrsnog spremnika koji može čuvati informacije dulje vremensko razdoblje. Kao što je prikazano na slikama 4. i 5., i povratne neuronske mreže i LSTM mreže imaju lančani oblik s ponavljajućim jedinicama. Kod povratnih neuronskih mreža ponavljajuća jedinica ima jednostavnu strukturu koja uključuje samo jedan sloj s jednom aktivacijskom funkcijom dok kod LSTM modela ponavljajuća jedinica ima 4 sloja koja djeluju na jedinstven način.



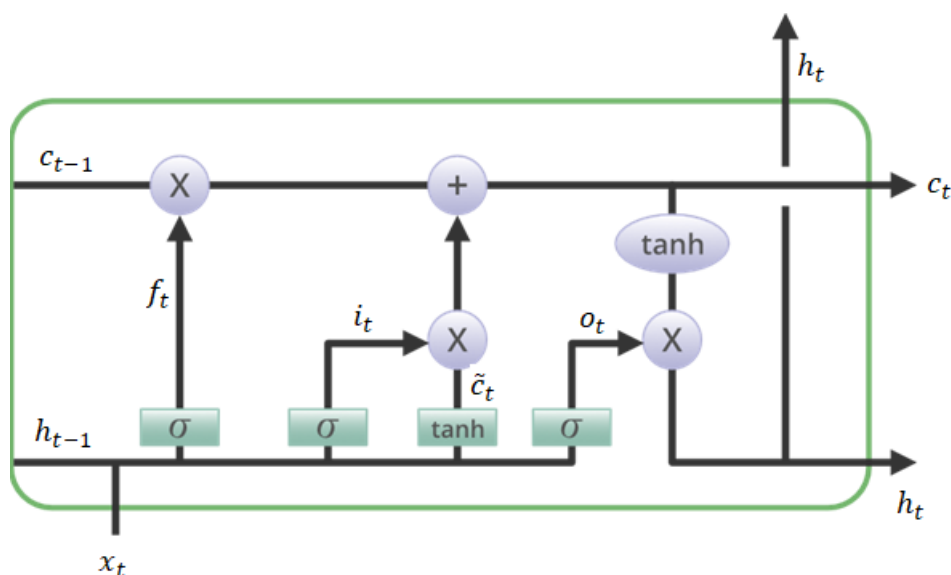
Slika 4. *Struktura povratne neuronske mreže*



Slika 5. Struktura LSTM mreže

Memorijskom ćelijom LSTM modela upravljaju troja tzv. vrata (engl. *gate*): ulazna vrata, vrata zaboravljanja i izlazna vrata. Upravo ova vrata odlučuju koje informacije će se dodati u memorijsku ćeliju, a koje informacije će se ukloniti i u konačnici izvući iz nje.

Ulazna vrata kontroliraju koje se informacije dodaju u memorijsku ćeliju, vrata zaborava kontroliraju koji se podaci uklanjaju iz memorijske ćelije, a izlazna vrata kontroliraju koje informacije izlaze iz memorijske ćelije. To omogućuje LSTM mrežama da selektivno zadrže ili odbace informacije, što im omogućuje učenje dugoročnih ovisnosti. Osnovna struktura memorijske ćelije prikazana je na slici 6 .



Slika 6. Osnovna struktura memorijske ćelije LSTM mreže

Kod LSTM mreža istovremeno se koriste dva puta za predviđanje - dugotrajno i kratkoročno pamćenje. Stanje ćelije (engl. *cell state*) predstavlja dugotrajno pamćenje i ono se ažurira pomoću operacije množenja ili sumiranja, te na to stanje nema direktnog utjecaja težina.

Skriveno stanje (engl. *hidden state*) predstavlja kratkoročnu memoriju i na njega utječu vrijednosti težina. Kao što je vidljivo na slici 6. s lijeve strane se nalaze 2 ulaza u memorijsku ćeliju. Gornji ulaz predstavlja stanje ćelije, a donji ulaz predstavlja skriveno stanje. Prva vrata koja kontroliraju informacije su vrata zaborava, a tok informacija je sljedeći: skriveno stanje iz prethodnog vremenskog koraka h_{t-1} množi se sa svojim težinskim koeficijentom te se zbraja sa umnoškom ulazne informacije trenutnog vremenskog koraka x_t i njenog težinskog koeficijenta. Ovoj sumi dodaje se određeni unutarnji prag (engl. *bias*) b te se cjelokupni rezultat provlači kroz *sigmoidnu* funkciju koja kao rezultat vraća broj između 0 i 1 koji se zatim množi sa stanjem ćelije iz prethodnog vremenskog koraka c_{t-1} . Jednadžba koja opisuje vrata zaborava može se zapisati kao:

$$f_t = \sigma((w \times x_t + w \times h_{t-1}) + b) \quad (4)$$

Primjenom jednadžbe (4) dobiva se novo ažurirano stanje ćelije. Sljedeća vrata su ulazna vrata u kojima se također skriveno stanje iz prethodnog vremenskog koraka h_{t-1} množi sa svojim težinskim koeficijentom te se zbraja sa umnoškom ulazne informacije trenutnog vremenskog koraka x_t i njenog težinskog koeficijenta. Ovoj sumi dodaje se određeni unutarnji prag b te cjelokupni rezultat prolazi kroz *sigmoidnu* funkciju koja kao rezultat vraća broj između 0 i 1. Istovremeno se odvija isti postupak gdje se skriveno stanje iz prethodnog vremenskog koraka h_{t-1} množi sa svojim težinskim koeficijentom te se zbraja sa umnoškom ulazne informacije trenutnog vremenskog koraka x_t i njenog težinskog koeficijenta. Ovoj sumi dodaje se određeni unutarnji prag b te se cjelokupni rezultat provlači kroz *tanh* funkciju koja kao rezultat vraća broj između -1 i 1. Ta dva rezultata se međusobno množe i pridodaju ažuriranom stanju ćelije iz prethodnog vremenskog koraka koje sada postaje trenutno stanje ćelije c_t . Matematički se jednadžba ulaznih vrata može zapisati kao:

$$i_t = \sigma((w \times x_t + w \times h_{t-1}) + b) \quad (5)$$

koja predstavlja postotak potencijalne memorije dugotrajne memorije koja će se zapamtiti te

$$\tilde{c}_t = \sigma((w \times x_t + w \times h_{t-1}) + b) \quad (6)$$

koja predstavlja potencijalnu dugotrajnu memoriju. Kao konačna jednadžba dobiva se:

$$c_t = c_{t-1} \times f_t + i_t \times \tilde{c}_t \quad (7)$$

Zadnja vrata koja kontroliraju protok informacija su izlazna vrata. Ponovno se skriveno stanje iz prethodnog vremenskog koraka h_{t-1} množi sa svojim težinskim koeficijentom te se

zbraja sa umnoškom ulazne informacije trenutnog vremenskog koraka x_t i njenog težinskog koeficijenta. Ovoj sumi dodaje se određeni unutarnji prag b te se cjelokupni rezultat podlaže *sigmoidnoj* funkciji koja kao rezultat vraća broj između 0 i 1. Zatim se taj rezultat množi sa ažuriranim stanjem ćelije u trenutnom vremenskom koraku koje je podlegnuto *tanh* funkciji i dobivamo novo ažurirano skriveno stanje u trenutnom vremenskom koraku h_t . Matematički se jednadžba izlaznih vrata može zapisati kao:

$$o_t = \sigma((w \times x_t + w \times h_{t-1}) + b) \quad (8)$$

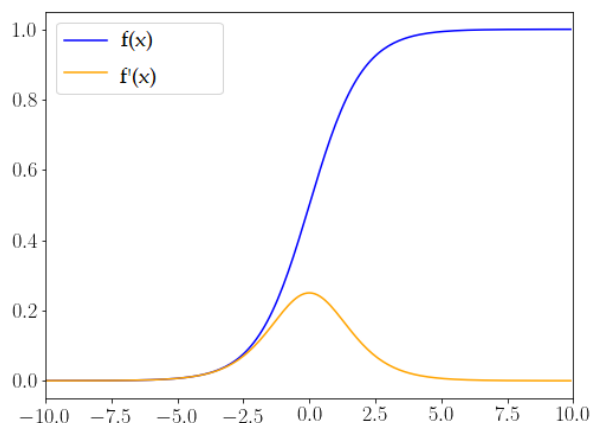
koja predstavlja postotak potencijalne kratkoročne memorije koja će se zapamtiti. [10] Konačna jednadžba izlaznih vrata glasi:

$$h_t = o_t + \tanh(c_t) \quad (9)$$

2.3.3. Aktivacijske funkcije

Mreža s linearnom aktivacijskom funkcijom može se prilagoditi samo linearnim promjenama ulaznih informacija no budući da se umjetne neuronske mreže koriste za rješavanje složenih problema preporučuje se uvesti nelinearnost u modele što se postiže uvođenjem nelinearnih aktivacijskih funkcija. Važna značajka nelinearnih aktivacijskih funkcija je njihova derivabilnost kako bi se mogao primijeniti algoritam unatragne propagacije za računanje pogrešaka s obzirom na težinske koeficijente i shodno tome optimizirati težine koristeći neku od optimizacijskih tehnika. Nelinearne aktivacijske funkcije koje se najčešće koriste kod neuronskih mreža su *sigmoid*, *ReLU*, *ELU* i *tanh*. [11]

Sigmoidna aktivacijska funkcija uzima vrijednosti ulaza i transformira ih u izlazne vrijednosti u rasponu od 0 do 1. Što je ulaz (x) pozitivniji to će izlazna vrijednost (y) biti bliža 1, a što je ulaz negativniji to će izlazna vrijednost biti bliža 0.



Slika 7. Prikaz sigmoidne funkcije $f(x)$ i njene derivacije $f'(x)$

Matematički se sigmoidna funkcija može prikazati kao:

$$f(x) = \frac{1}{1+e^{-x}} \quad (10)$$

a derivacija funkcije kao:

$$f'(x) = f(x) \times (1 - f(x)) \quad (11)$$

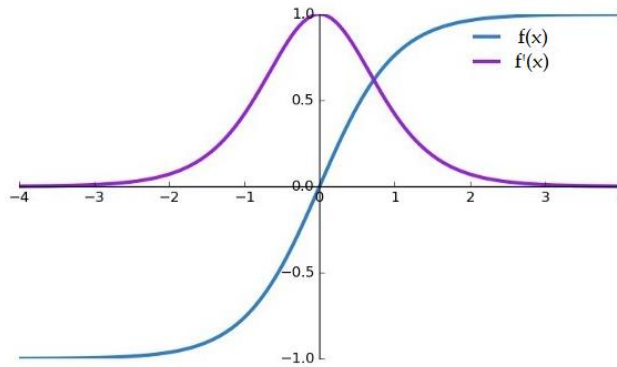
Grafički se funkcija *sigmoid* i njena derivacija mogu prikazati slikom 7. Neki od nedostataka ove funkcije su izraženi problem nestajućeg gradijenta, izlazne vrijednosti nisu centrirane oko 0, i na pozitivnom i na negativnom kraju x osi gradijent postaje zasićen na vrijednosti 0. Problem nestajućeg gradijenta se javlja prilikom korištenja algoritma unatražne propagacije za učenje mreže, gdje zbog vrlo niskih vrijednosti derivacije $f'(x)$, kako se krećemo unatrag, gradijent postaje sve manji i težine se svakom iteracijom mijenjaju za vrlo mali korak što dovodi do spore konvergencije ili nemogućnosti učenja. Necentriranost funkcije oko vrijednosti 0 se odnosi na činjenicu da su sve izlazne vrijednosti ove funkcije pozitivne što znači da će svi gradijenti koji su povezani s nekim neuronom u nekom sloju biti ili pozitivni ili negativni. Takvo ponašanje mreže rezultira dužim vremenom konvergencije.

Tanh aktivacijska funkcija je vrlo slična *sigmoidnoj*, te također ima karakterističan S oblik s promjenom raspona izlaznih vrijednosti od -1 do 1. Što je ulaz pozitivniji to će izlazna vrijednost biti bliža 1, a što je ulaz negativniji to će izlazna vrijednost biti bliža -1. Matematički se *tanh* funkcija može prikazati kao:

$$f(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}} \quad (12)$$

a njena derivacija kao:

$$f'(x) = 1 - \tanh^2(x) \quad (13)$$



Slika 8. Prikaz \tanh funkcije $f(x)$ i njene derivacije $f'(x)$

Kao što je vidljivo iz slike 8., \tanh aktivacijska funkcija također ima problem nestajućeg gradijenta i zasićenosti gradijenta na pozitivnom i negativnom kraju x osi no za razliku od sigmoidne funkcije kod \tanh funkcije izlazne vrijednosti su centrirane oko 0 što znači da gradijenti nisu ograničeni pomicati se samo u određenom smjeru.

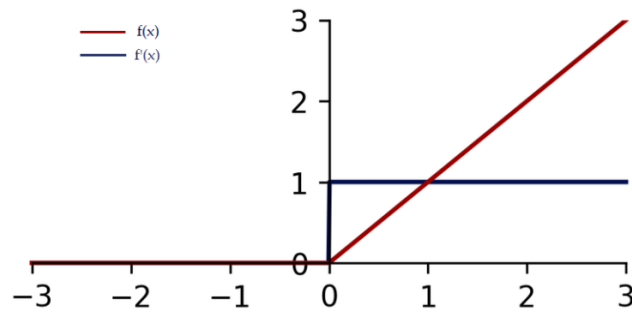
$ReLU$ (engl. *Rectified Linear Unit*) aktivacijska funkcija ne aktivira sve neurone u isto vrijeme, odnosno neuron će biti deaktiviran samo kada je izlaz linearne transformacije manji od 0. Matematički se ova funkcija može opisati kao:

$$f(x) = \max(0, x) \quad (14)$$

Prednosti korištenja ove funkcije su veća učinkovitost budući da nisu svi neuroni aktivirani kao i ubrzana konvergencija prema globalnom minimumu funkcije gubitka zbog njene linearnosti. S druge strane, ova funkcija je ograničena prilikom učenja mreže za sve negativne ulaze, jer derivacijom ove funkcije svi negativni ulazi poprimaju vrijednost 0 što stvara „mrtve“ neurone koji se nikada ne aktiviraju. Derivacija $ReLU$ funkcije se može matematički prikazati kao:

$$f'(x) = \begin{cases} 1 & \text{za } x \geq 0 \\ 0 & \text{za } x < 0 \end{cases} \quad (15)$$

Na slici 9. prikazani su grafički prikazi $ReLU$ funkcije $f(x)$ i njene derivacije $f'(x)$.



Slika 9. Grafički prikaz $ReLU$ funkcije $f(x)$ i njene derivacije $f'(x)$

ELU (engl. *Exponential Linear Unit*) funkcija je varijacija $ReLU$ funkcije koja modificira nagib negativnog dijela $ReLU$ funkcije pomoću logaritamske krivulje. Ovom modifikacijom se eliminira problem „mrtvih“ neurona kod $ReLU$ funkcije. Matematički se može definirati kao:

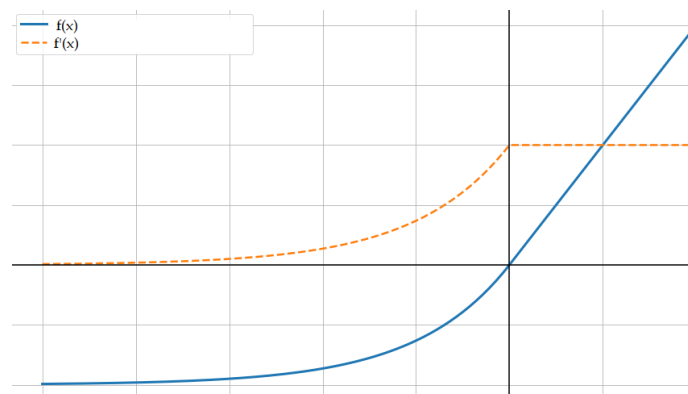
$$f(x) = \begin{cases} x & \text{za } x \geq 0 \\ \alpha(e^x - 1) & \text{za } x < 0 \end{cases} \quad (16)$$

a njena derivacija kao:

$$f'(x) = \begin{cases} 1 & \text{za } x \geq 0 \\ f(x) + \alpha & \text{za } x < 0 \end{cases} \quad (17)$$

gdje je α hiperparametar funkcije.

Grafički prikaz ELU funkcije i njene derivacije prikazan je na slici 10.



Slika 10. Grafički prikaz ELU funkcije $f(x)$ i njene derivacije $f'(x)$

Ograničenja ELU funkcije su povećano vrijeme izračuna zbog uvođenja eksponencijalne operacije te problem eksplodirajućeg gradijenta. Problem eksplodirajućeg gradijenta je zapravo suprotan problemu nestajućeg gradijenta jer je gradijent kojim se ažuriraju

težine u ovom slučaju velikog reda veličine te se prolaskom kroz slojeve sve više povećava što dovodi do nestabilnog ponašanja mreže.

2.3.4. Algoritam širenja pogreške unatrag

Nakon što mreža izračuna izlaz, on se uspoređuje sa stvarnom vrijednošću izlaza. Kvadrat razlike te dvije vrijednosti, odnosno srednja kvadratna pogreška (engl. *Mean Square Error, MSE*) predstavlja funkciju gubitka za probleme regresije. *MSE* se matematički može prikazati formulom:

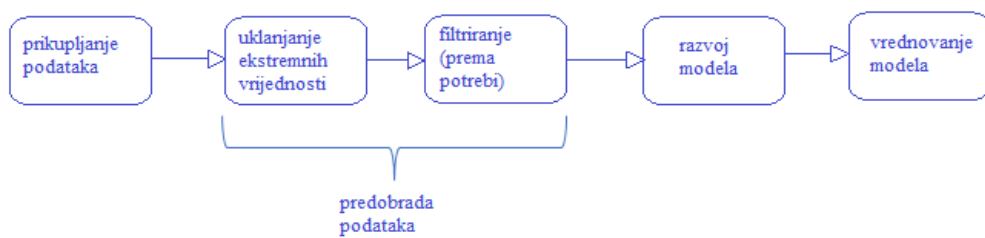
$$MSE = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_i)^2}{n} \quad (18)$$

gdje je n broj uzoraka, y_i je stvarna vrijednost izlaza, a \bar{y}_i odgovarajuća predviđena vrijednost izlaza. Algoritmom unatragne propagacije ili algoritmom širenja pogreške unatrag, izračunava se gradijent, odnosno iznos za koji se težine w_i moraju promijeniti u pozitivnom ili negativnom smjeru kako bi se minimizirala funkcija gubitka. Prvotne vrijednosti težina izabiru se nasumično i prolaskom kroz mrežu dobiva se prva vrijednost \bar{y}_i koja se uspoređuje s y_i . Nakon izračuna gradijenta optimiziraju se težine sloj po sloj, počevši unatrag, odnosno od zadnjeg skrivenog sloja prema ulaznom sloju sve dok se pogreška više ne mijenja. U tom trenutku zaustavlja se učenje i pretpostavka je da je funkcija gubitka dosegla globalni minimum. Problemi koji se javljaju prilikom ovakvog postupka učenja mogu biti dostizanje lokalnog umjesto globalnog minimuma te pretreniranje (engl. *overfitting*) mreže. Pretrenirana mreža ima vrlo malu pogrešku na podacima za učenje no na skupu podataka za testiranje pogreška je znatno veća, odnosno mreža gubi sposobnost generalizacije i postaje specifična samo za određeni skup podataka. Iako je poželjno da je pogreška što manjeg iznosa, također je bitno da bude usklađena na skupu za učenje i provjeru modela kako bi model imao odgovarajuću učinkovitost pri uvođenju novih podataka.[12]

3. EKSPERIMENTALNI DIO

Modeli za procjenu sadržaja propilena u proizvodnom postrojenju propan/propilen splitter su razvijani u programskom jeziku *Python* (verzija *Python 3.9.7*) i njegovoj distribuciji *Anaconda* (verzija *Anaconda Navigator 2.1.1*).

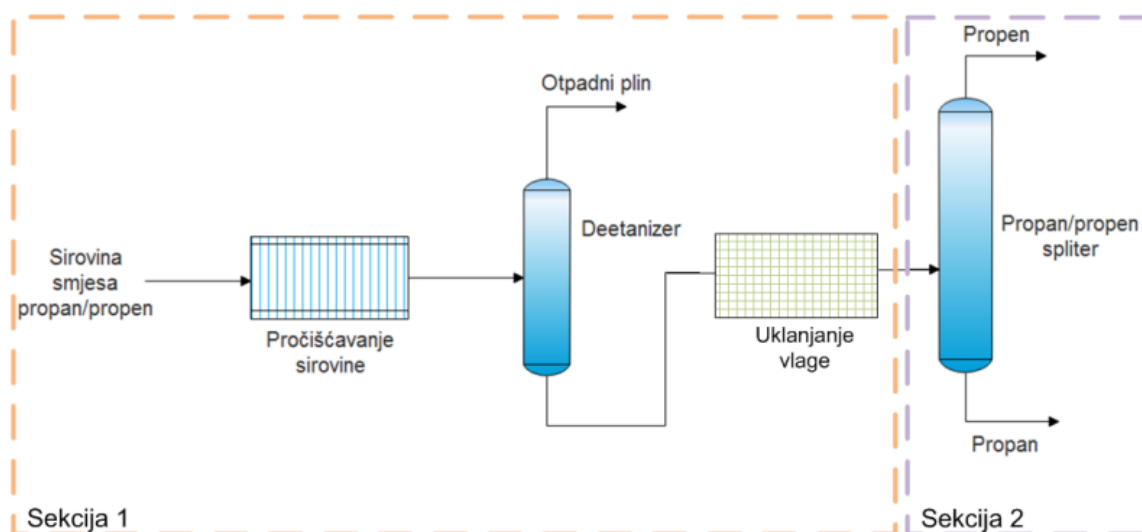
Na slici 11. prikazan je tijek razvoja softverskog senzora, a u nastavku ovog poglavlja detaljnije je objašnjen svaki od koraka.



Slika 11. Shematski prikaz razvoja softverskog senzora

3.1. Postrojenje propan/propilen splitter

PPS postrojenje sastoji se od dvije sekcije prikazane na slici 12. Sekcija 1 je sekcija napojne posude sirovine i njezinog pročišćavanja, dok sekcija 2 služi za razdvajanje smjese propana i propilena.



Slika 12. Prikaz sekcija postrojenja PPS

Sekcija napojne posude i pročišćavanja sirovina sastoji se od napojne posude, adsorpcijske zaštitne posude, deetanizer kolone te paketa sušionika. Sekcija razdvajanja smjese propana i propilena sastoji se od 2 destilacijske kolone te refluksne posude.

Sirovina koja ulazi u PPS postrojenje je propan/propilen frakcija koja se sastoji od laganih komponenti (C_2, CO_2, CO, O_2) te onečišćenja (H_2S, COS, RSH , voda, arsin, fosfin). Propan/propilen frakcija se proizvodi u kompleksu katalitičkog krekinga (FCC kompleks) u sekciji koncentracije plina kao vršni produkt C_3/C_4 splittera nakon čega ide na PPS na daljnju obradu. [13] Prilikom obrade u PPS postrojenju u posudi se separiraju 2 tekuće faze ulazne sirovine, uklanja se slobodna voda iz ugljikovodika te se osigurava dovoljno sirovine za rad sekcije za pročišćavanje i sekcije za razdvajanje smanjujući fluktuaciju sirovine. U adsorpcijskim zaštitnim posudama uklanjaju se nečistoće kao što su laki merkaptani, COS, H_2S i tragovi arsina te fosfina dok se u deetanizeru razdvajaju lake komponente (uglavnom metan i etan) iz sirovine od smjese propan/propilen. Uloga sušionika je smanjiti sadržaj vode ispod 1 mg/L zbog mogućeg zaleđivanja uslijed smanjenja tlaka.

Sekcija razdvajanja pročišćene smjese propana i propilena splitter se sastoji od dvije sekcije, PP splitter 1. dio i PP splitter 2. dio. Budući da propan i propilen imaju blisku molekularnu veličinu i fizikalna svojstva, njihovo razdvajanje je izazovno. Odvajanje se uglavnom provodi u destilacijskoj koloni sa oko 150-200 tanjura, s omjerom refluksa od 10-20 i pri visokom tlaku od oko 16-26 bar. Proces zahtijeva velike kapitalne troškove i veliku potrošnju energije. S inženjerskog stajališta, osim metode destilacije, apsorpcija, adsorpcija, ekstraktivna-destilacija i membranska tehnika su alternativni postupci destilaciji. Međutim, istraživanja provedena na ovim tehnikama pokazala su se nedovoljno selektivnima i ekonomski održivima. [14] Kako bi ograničili ukupnu visinu kolone zbog lokalnih konstrukcijskih ograničenja koja se odnose na veliku brzinu vjetra, sekcija PP splitera se sastoji od dvije kolone koje su opremljene sa istim brojem plitica. Svaka kolona se sastoji od 104 plitice, te je za zadovoljavajuću čistoću proizvoda ukupno potrebno 208 plitica. Cilj PP splittera je postizanje maksimalne čistoće propilena ($C_{3=}$ frakcija) te minimiziranje propilena u propanu (C_3 frakcija).

Kao poluproizvodi i proizvodi PPS postrojenja nastaju propan, propilen, suhi plin, smjesa propana i propilena te zauljena voda.

Propan koji nastaje u procesu naziva se tehnički propan, a minimalna čistoća ovog proizvoda iznosi 97,7 vol%. Tehnički propan se proizvodi u sekciji razdvajanja smjese propana i propilena. Sprema se u spremnike ili može biti preusmjeren u zajednički prostor UNP-a.

Propilen koji nastaje u procesu je plin bez boje mirisa i okusa, zapaljiv. Minimalna potrebna čistoća mu iznosi 99,6 vol% te se proizvodi i u sekciji razdvajanja smjese propana i propilena. Skladišti se u spremnicima ili se preusmjerava u zajednički prostor UNP-a.

Suhi plin je smjesa plinovitih ugljikovodika, sumporovodika, vodika, inertnih plinova i ugljikovog monoksida koje se proizvodi u sekciji pročišćavanja; te se preusmjerava na FCC kompleks u visokotlačni akumulator.

Smjesa propana i propilena je propan/propen frakcija koja nastaje u 1. i 2. stupnju PPS splittera u slučaju proizvodnje istih izvan specifikacije. Usmjerava se u namjenske spremnike UNP-a.

Zauljena ili kisela voda je voda bez boje, okusa sa intenzivnim mirisom. Nastaje u obje sekcije postrojenja, osobito u prihvatnoj posudi, kondenzacijskoj posudi i akumulatoru, a cilj je ukloniti slobodnu vodu iz ugljikovodika. Ovaj proizvod se usmjerava na FCC postrojenje u sekciju za obradu otpadnih voda.

3.2. Prikupljanje i predobrada podataka

U svrhu izrade ovog rada iz baze podataka prikupljeni su podaci za procjenu sadržaja proizvoda propilena u proizvodnom postrojenju PPS. Preuzeti podaci se sastoje od ulaznih varijabli i izlazne varijable izmjerenih u periodu od 1. rujna 2022. do 31. listopada 2022. Uzeto je približno 75.000 podataka s vremenom uzorkovanja od 1 minute za sve ulazne varijable i izlaznu varijablu. Podaci za izlaznu varijablu (sadržaj propilena) uzeti su sa analizatora plinskog kromatografa AI201A/B čije je vrijeme uzorkovanja 7 minuta.

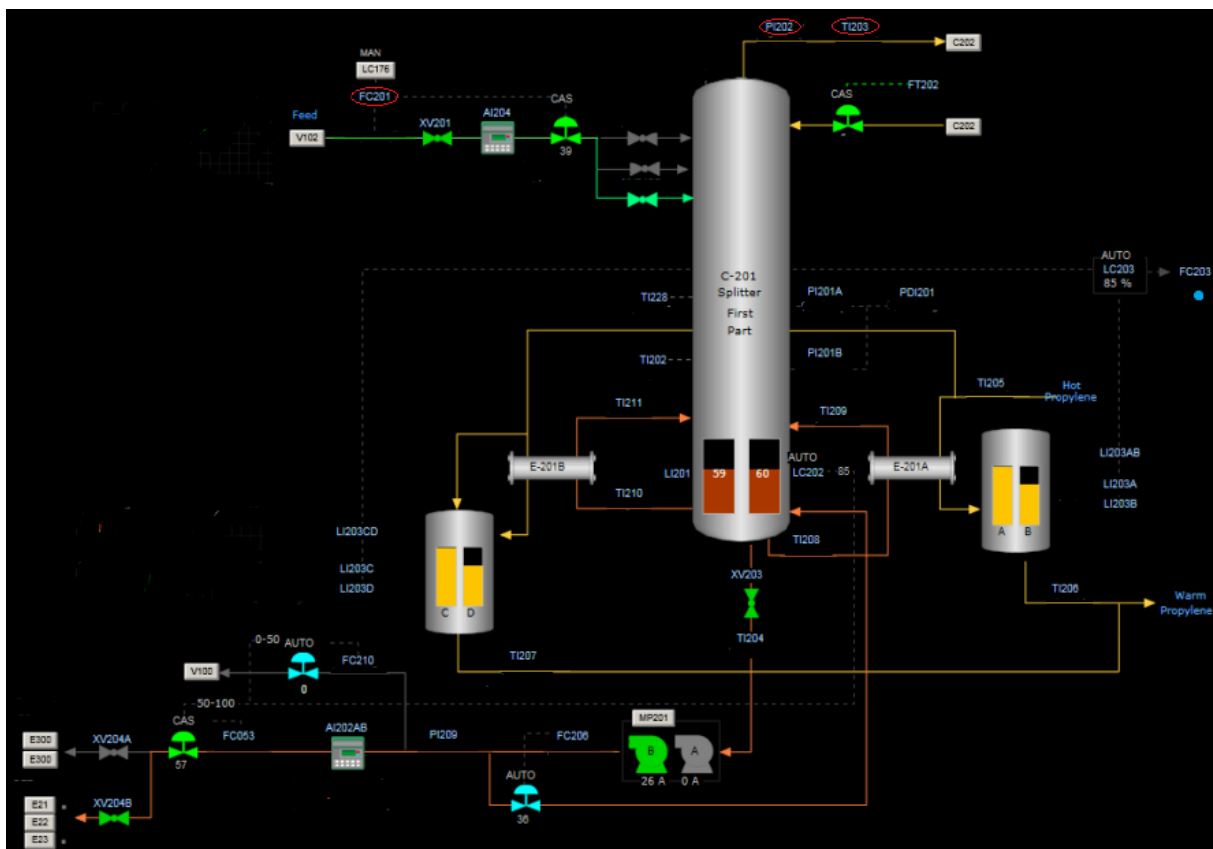
Važno je napomenuti da s obzirom da se radi o proizvodnom postrojenju ulazno/izlazni signali su mjereni za vrijeme normalnog rada procesa uz korištenje "prirodnih" ispitnih signala, tj. nisu se koristili dodatni ili "umjetni" poremećaji kako se ne bi utjecalo na kvalitetu proizvoda. Za što bolju uspješnost modela potrebno je stoga prikupiti podatke iz što dužeg vremenskog razdoblja rada postrojenja, obuhvaćajući pri tom što je moguće više različitih režima rada.

Nakon prikupljanja podataka s postrojenja, uslijedila je predobrada podataka. Predobrada podataka za razvoj MLP modela obuhvatila je: pomicanje podataka ulaznih varijabli za određeni broj vremenskih koraka zbog mrtvog vremena, tj. vremena potrebnog da ulazna varijabla počne utjecati na izlaznu, zatim detekciju i uklanjanje ekstremnih vrijednosti te određivanje korelacije između ulaznih varijabli i izlazne varijable. Otkrivanje ekstremnih

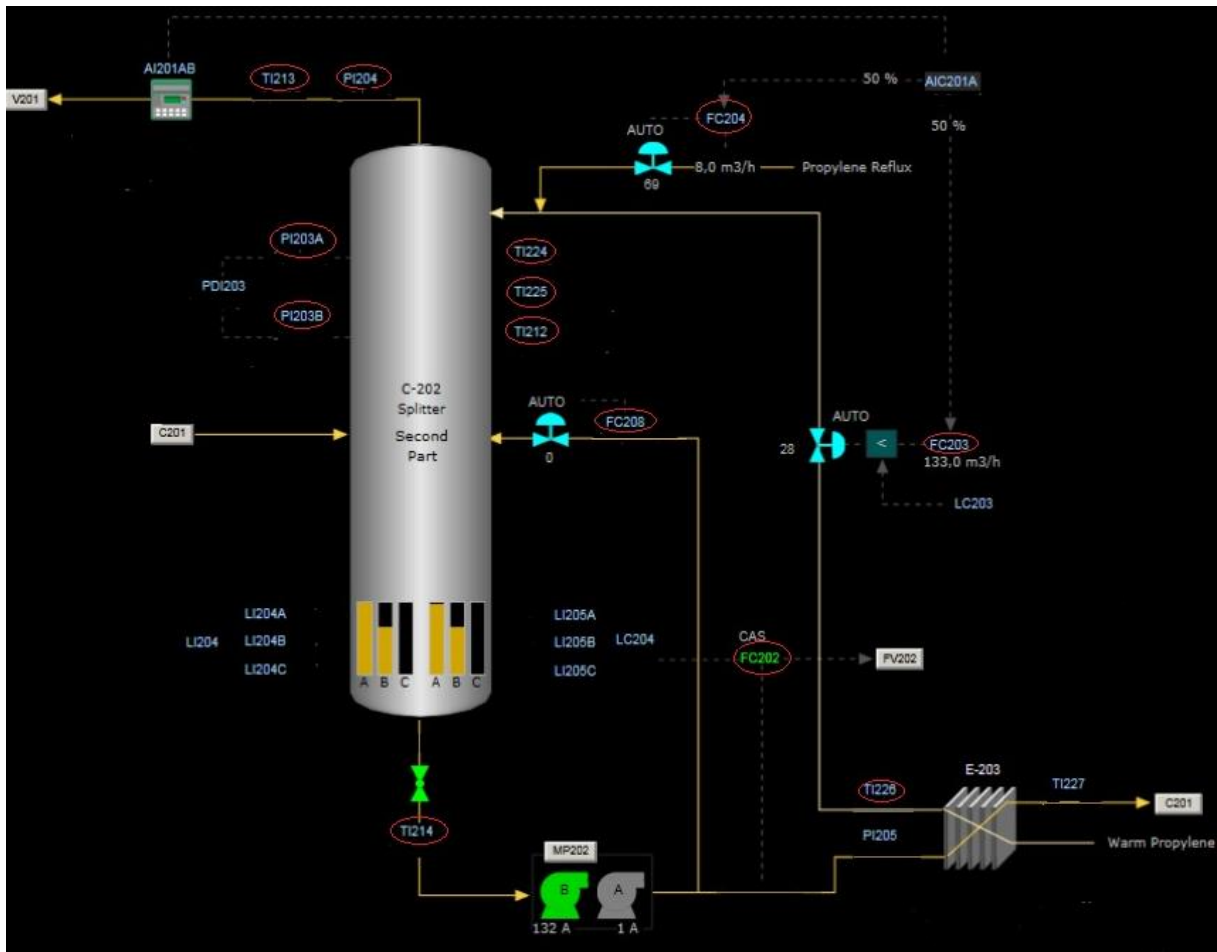
vrijednosti se provelo uporabom 3σ metode te vizualnom provjerom budući da vrijednosti koje 3σ detektira kao ekstremne mogu biti dio dinamičkog vladanja procesa koji je važan za izradu modela. Prije razvoja MLP modela, vrijednosti poput 0 i pravih ekstremnih vrijednosti su uklonjene.

Kod razvoja LSTM modela predobrada podataka je također obuhvatila pomicanje ulaznih podataka za određeni broj vremenskih koraka zbog mrtvog vremena, a ekstremne vrijednosti nisu uklanjane budući da takvi modeli koriste sekvence podataka i važan im je vremenski slijed podataka.

Korelacija između ulaznih varijabli i izlazne varijable određena je pomoću Pearsonovog koeficijenta korelacije. Pri odabiru broja ulaznih varijabli se pazilo da broj ulaznih utjecajnih veličina mora biti dovoljno velik da obuhvati što više bitnih informacija iz procesa, ali ne i prevelik zbog potrebe jednostavnosti modela. Na temelju dobivenih korelacija, neke od ulaznih varijabli nisu razmatrane kod daljnjeg razvoja modela. Tako se od ukupno 16 dostupnih ulaznih varijabli označenih crvenom bojom na slikama 13. i 14., odabralo njih 7 koje su imale izvjesnu korelaciju sa izlazom za daljnji razvoj modela.



Slika 13. Prikaz ulaznih varijabli korištenih za razvoj modela MLP i LSTM iz kolone C-201



Slika 14. Prikaz ulaznih varijabli korištenih za razvoj modela MLP i LSTM iz kolone C-202

3.3. Razvoj modela MLP

Prilikom razvoja modela višeslojnog perceptona (MLP) skup podataka se podijelio na 3 dijela: skup za treniranje (učenje), skup za testiranje i skup za validaciju. Skup za treniranje iznosio je 80% podataka, dok je skup za testiranje iznosio 20% podataka. Skup za validaciju iznosio je 20% skupa za treniranje. Prilikom razvoja mreža broj skrivenih slojeva iznosio je 1 dok su se mijenjale aktivacijske funkcije i broj neurona u skrivenom sloju. Od aktivacijskih funkcija koristile su se već spomenute *sigmoid*, *tanh*, *ReLU* i *ELU* funkcije, a broj neurona u skrivenom sloju je varirao u rasponu od 1 do 20. Za svaku od korištenih aktivacijskih funkcija odabrana je po jedna mreža kod koje se postiže maksimalan koeficijent korelacije, a minimalna srednja kvadratna pogreška. Kao optimizacijski algoritam koristio se Adam algoritam.

3.4. Razvoj modela LSTM

Prilikom razvoja modela LSTM skup podataka se podijelio na 3 dijela: skup za treniranje, skup za testiranje i skup za validaciju. Skup za treniranje iznosio je 80% podataka, dok je skup za testiranje iznosio 20% podataka. Skup za validaciju iznosio je 20% skupa za treniranje. Prilikom razvoja LSTM mreža broj LSTM jedinica varirao je od 1 do 35, što je ujedno predstavljalo i broj vremenskih koraka u prošlost, te su se mijenjale aktivacijske funkcije. Od aktivacijskih funkcija koristile su se već spomenute *sigmoid*, *tanh*, *ReLU* i *ELU* funkcije. Za svaku od korištenih aktivacijskih funkcija odabrana je najbolja mreža, tj. mreža kod koje se postiže maksimalan koeficijent korelacije, a minimalna srednja kvadratna pogreška. Kao optimizacijski algoritam koristio se Adam algoritam.

3.5. Vrednovanje MLP i LSTM modela

Pored grafičke usporedbe rezultata modela i eksperimentalnih mjerenja, usporedba razvijenih modela unutar određene skupine modela provedena je na temelju srednje kvadratne pogreške izračunate na skupu za treniranje, test i validacijskom skupu te na temelju Pearsonovog koeficijenta korelacije između rezultata izračunatih modelom i stvarnih podataka.

Sukladnost dobivenih rješenja s pravim vrijednostima izlaza dokaz je kvalitete razvijene neuronske mreže. Set podataka za treniranje mora biti dovoljno velik kako bi se osiguralo kvalitetno učenje mreže koristeći različite vrijednosti ulaza. S druge strane, set za testiranje mreže također mora biti dovoljno velik kako bi se provela ispravna validacija mreže. Najbolji modeli iz pojedine skupine modela dodatno su vrednovani analizom praćenja trenda pogreške (reziduala) modela te putem histograma pogreške.

4. REZULTATI I RASPRAVA

U ovom su poglavlju prikazani rezultati ovog rada koji obuhvaćaju predobradu podataka, razvoj modela MLP i LSTM te analizu i vrednovanje rezultata dobivenih modela.

4.1. Predobrada podataka modela

Sa postrojenja su prikupljeni podaci od 16 ulaznih varijabli s vremenom uzorkovanja od 1 minute te jedne izlazne varijable, odnosno sadržaja propilena, s vremenom uzorkovanja od 1 minute. Uzeto je približno 75.000 podataka za svaku od ulaznih varijabli i za izlaznu varijablu. Prilikom predobrade podataka za razvoj MLP i LSTM modela vrijednosti ulaznih varijabli su pomaknute za 7 vremenskih koraka, odnosno 7 minuta u prošlost u odnosu na izlaznu varijablu (koliko traje uzorkovanje i izračun *online* analizatora). Preliminarno su izračunate vrijednosti Pearsonovog koeficijenta korelacije sa pomakom za 7 vremenskih koraka čiji su rezultati prikazani u tablici 1.

Tablica 1. Preliminarne vrijednosti Pearsonovog koeficijenta korelacije za ulazne varijable sa 7 vremenskih koraka u prošlost

	Korelacija s AI201A/B
TI214	-0.097
FIC208	0.502
FIC204	0.799
FIC203	0.504
PI203A	0.141
PI202	0.557
FIC201	-0.154
TI224	0.019
TI225	-0.079
TI212	-0.065
FIC202	0.500
PI203B	0.541
TI226	-0.072
TI203	-0.048
TI213	0.065
PI204	0.042

Zatim se prilikom razvoja MLP modela u obzir uzimalo mrtvo vrijeme, tj. vrijeme potrebno da ulazna varijabla krene utjecati na izlaznu varijablu. Izračunale su se vrijednosti

Pearsonovog koeficijenta korelacije sa pomakom za 7 vremenskih koraka uz vrijeme kašnjenja ulaznih varijabli od 30, 60, 90 i 120 minuta. Nakon usporedbe svih vrijednosti korelacija za budući rad uzeti su podaci sa pomakom od 7 vremenskih koraka plus 90 minuta kašnjenja. Iako ti podaci nisu pokazali najveću vrijednost Pearsonovog koeficijenta korelacije, svakim daljnjim povećanjem kašnjenja ulaza Pearsonov koeficijent se mijenjao za manje od 1% što je neznatna promjena. Prvotno su kao utjecajne varijable uzete sve ulazne varijable čija je korelacija s izlaznom varijablom bila veća od $\pm 0,09$. Zatim su promatrane međusobne korelacije između različitih ulaznih varijabli. S obzirom na dobivene rezultate korelacija za daljnji razvoj modela su odabrane ulazne varijable: TI214 (temperatura izlaza iz kolone C-202 (dno kolone)), FIC208 (protok refluksa proizvoda dna kolone C-202 u sredinu kolone C-202), FIC204 i FIC203 (protoci refluksa propilen proizvoda na vrhu kolone C-202), PI203A (tlak na vrhu kolone C-202), PI202 (tlak proizvoda izlaza iz kolone C-201) i FIC201 (protok proizvoda iz V-102 na vrh kolone C-201).

Varijable PI202 i PI203B su imale sličnu vrijednost korelacije s AI201A/B, a međusobno su imale korelaciju od 95,5% zbog čega varijabla PI203B nije uzeta za daljnji razvoj modela. Analogno, varijable FIC202 i FIC208 su imale sličnu vrijednost korelacije s AI201A/B, a međusobno su imale korelaciju od 99,5% zbog čega varijabla FIC202 nije uzeta za daljnji razvoj modela.

Prilikom razvoja MLP modela uklonjene su nedostajuće vrijednosti (engl. *missing data*) i pripadajući podaci za ostale varijable te su pravilom 3σ određene ekstremne vrijednosti. Treba naglasiti da nisu sve vrijednosti detektirane 3σ metodom uklonjene prilikom razvoja modela mreže višeslojnog perceptona jer su neke detektirane vrijednosti bile dio izraženijeg dinamičkog vladanja procesa i utjecale su na izlaznu varijablu pa su samim time i bile važne za razvoj modela.

Prilikom razvoja LSTM modela u predobrađi podataka se nije u obzir uzimalo mrtvo vrijeme ulaznih varijabli budući da LSTM u svom proračunu uzima ulazne varijable pomaknute za određeni broj vremenskih koraka u prošlost. Upravo se variranjem broja vremenskih koraka u prošlost koje LSTM model uzima u obzir prilikom razvoja, može odrediti mrtvo vrijeme ulaznih varijabli u procesu. Prvotno su kao utjecajne varijable uzete sve ulazne varijable čija je korelacija s izlaznom varijablom bila veća od $\pm 0,09$. Zatim su promatrane međusobne korelacije između različitih ulaznih varijabli. S obzirom na ove rezultate korelacija za daljnji razvoj modela je odabrano sedam utjecajnih varijabli: TI214 (temperatura izlaza iz kolone C-202 (dno kolone)), FIC208 (protok refluksa proizvoda dna kolone C-202 u sredinu kolone C-

202), FIC204 i FIC203 (protoci refluksa propilen proizvoda na vrh kolone C-202), PI203A (tlak na vrhu kolone C-202), PI202 (tlak proizvoda izlaza iz kolone C-201) i FIC201 (protok proizvoda iz V-102 na vrh kolone C-201).

Varijable PI202 i PI203B su imale sličnu vrijednost korelacije s AI201A/B, a međusobno su imale korelaciju od 95,5% zbog čega varijabla PI203B nije uzeta za daljnji razvoj modela. Varijable FIC202 i FIC208 su imale sličnu vrijednost korelacije s AI201A/B, a međusobno su imale korelaciju od 99,5% zbog čega varijabla FIC202 nije uzeta za daljnji razvoj modela.

Tijekom predobrade podataka za LSTM modele nisu se uklanjale ekstremne vrijednosti budući da takvi modeli koriste sekvence podataka i važan im je vremenski slijed podataka.

Prilikom predobrade podataka za obje vrste modela, kako bi smanjili količinu podataka, a samim time i vrijeme izračuna odnosno razvoja modela, napravljeno je ponovno uzorkovanje sa vremenskim korakom od 3 minute. Zatim je ponovno izračunat Pearsonov koeficijent korelacije koji se neznatno povećao, odnosno sve varijable uzete u obzir u prethodnom koraku su i dalje imale zadovoljavajuću vrijednost Pearsonovog koeficijenta za daljnji razvoj modela.

Modeli su razvijani uz pomoć programskog jezika Python (verzija *Python 3.9.7*) i njegove distribucije *Anaconda* (verzija *Anaconda Navigator 2.1.1*). Preliminarno je razvijeno 80 MLP modela čija se struktura razlikovala s obzirom na hiperparametre modela kao što su broj neurona u skrivenim slojevima te korištene aktivacijske funkcije. Također, preliminarno je razvijeno 140 LSTM modela koji su se razlikovali s obzirom na hiperparametre LSTM modela kao što su aktivacijske funkcije i broj koraka u prošlost.

Cjelokupni podaci podijeljeni su na skup za učenje i test skup u omjeru 0.8:0.2. 20% podataka iz skupa za učenje uzeto je kao skup za validaciju. Zatim su se računale vrijednosti Pearsonovog koeficijenta samo na skupu podataka za treniranje kako bi se izbjeglo eventualno curenje podataka (engl. *data leakage*). Naime, prilikom razvoja modela, ako se koriste cjelokupni podaci, postoji mogućnost curenja podataka u kojoj se podaci koji su izvan skupa za treniranje koriste za neki od koraka pri izradi modela. Ove dodatne informacije mogu omogućiti modelu da nauči ili sazna nešto što inače ne bi znao te tako dati lažno zadovoljavajuću procjenu izvedbe modela.

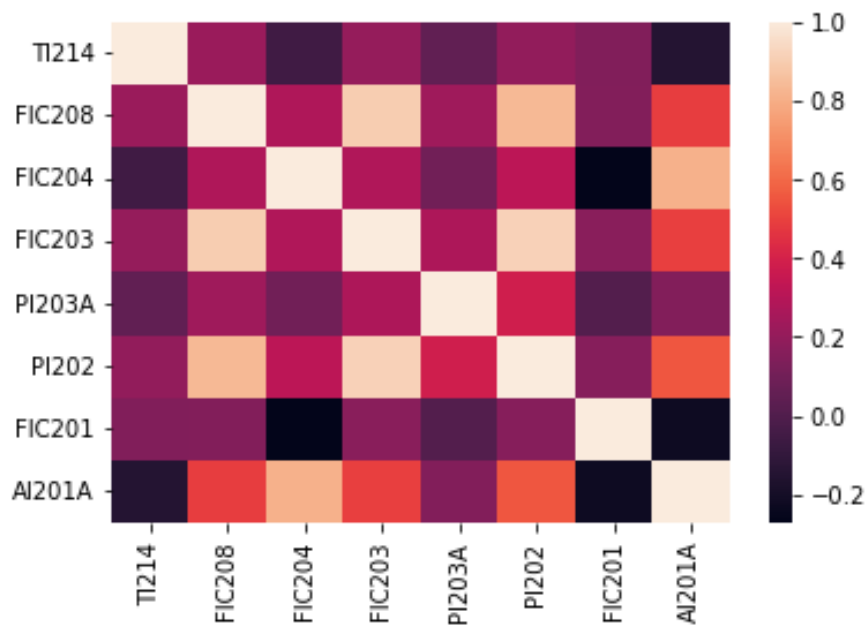
Rezultati korelacija odabranih ulaznih varijabli sa izlaznom varijablom su prikazani u Tablici 2. za MLP model i Tablici 3. za LSTM model te grafički pomoću toplinske mape (engl. *heatmap*) na slici 15. za MLP model i slici 16. za LSTM model.

Tablica 2. *Pearsonovi koeficijenti korelacije za ulazne varijable na skupu podataka za učenje za MLP model*

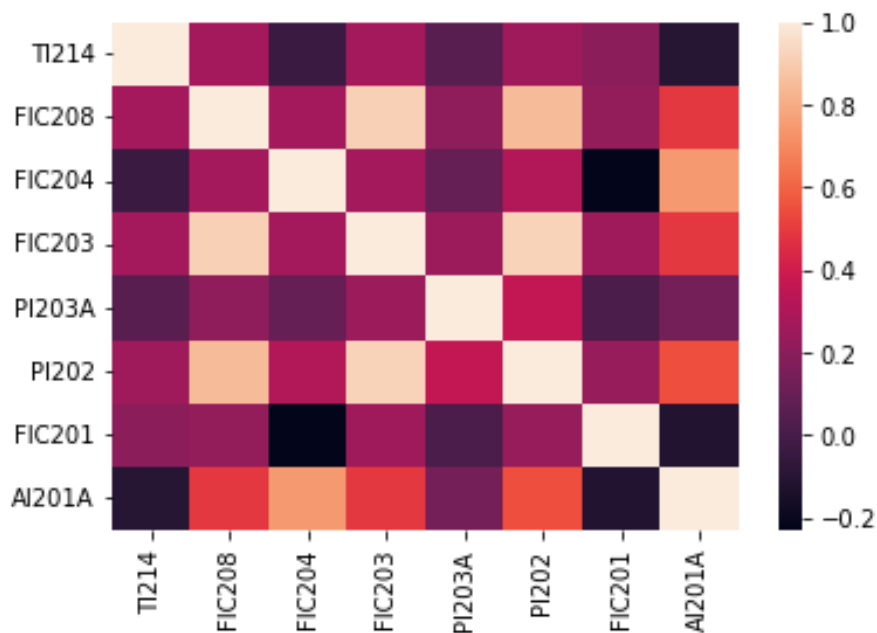
	Korelacija s AI201A
TI214	-0.099
FIC208	0.497
FIC204	0.799
FIC203	0.504
PI203A	0.137
PI202	0.554
FIC201	-0.158

Tablica 3. *Pearsonovi koeficijenti korelacije za ulazne varijable na skupu podataka za učenje za LSTM model*

	Korelacija s AI201A
TI214	-0.103
FIC208	0.488
FIC204	0.742
FIC203	0.489
PI203A	0.137
PI202	0.554
FIC201	-0.116



Slika 15. Toplinska mapa Pearsonovih koeficijenata za ulazne i izlaznu varijablu na skupu podataka za učenje za MLP model



Slika 16. Toplinska mapa Pearsonovih koeficijenata za ulazne i izlaznu varijablu na skupu podataka za učenje za LSTM model

4.2. Rezultati MLP modela

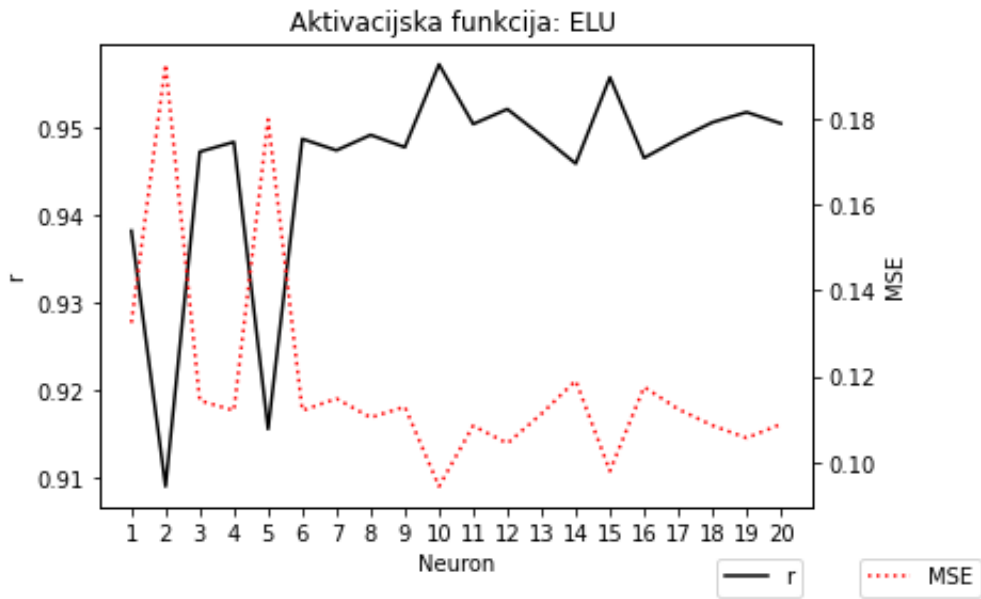
Prilikom razvoja MLP modela za svaku od odabranih aktivacijskih funkcija (*tanh*, *sigmoid*, *ReLU*, *ELU*) proveden je računalni eksperiment kojim je određen broj neurona u

skrivenom sloju pri kojemu se postiže maksimalan korelacijski faktor i minimalna srednja kvadratna pogreška na skupu podataka za učenje. Osim korelacijskog faktora i srednje kvadratne pogreške, na uspješnost modela utječe i međusobna usklađenost korelacijskih faktora na skupu za učenje i skupu za testiranje i vrednovanje te na cjelokupnim podacima, jer model sa najvećom korelacijom u skupu za učenje možda neće dati i najveću korelaciju na skupu za vrednovanje i na cjelokupnim podacima. Također, prilikom određivanja uspješnosti modela bitno je pratiti i vrijednost srednje kvadratne pogreške.

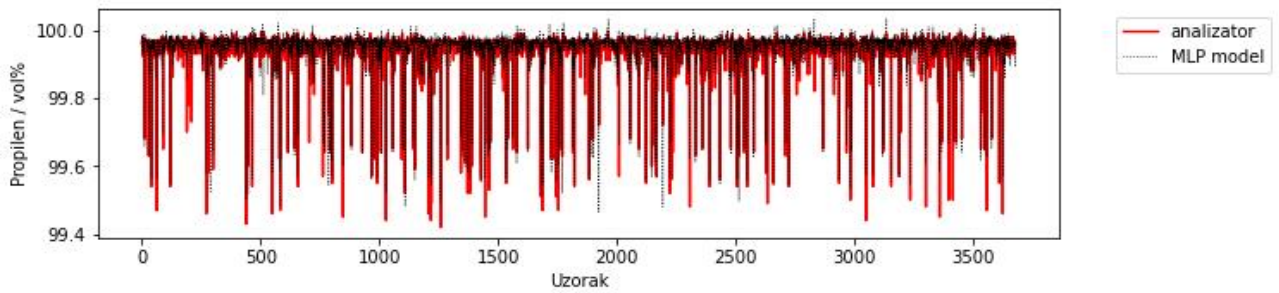
Za aktivacijsku funkciju *ELU*, prema slici 17., vidljivo je da se maksimalna korelacija i minimalna srednja kvadratna pogreška postižu pri 10 neurona u skrivenom sloju. Za taj model dodatno je napravljena grafička analiza na validacijskom skupu i cjelokupnim podacima. U tablici 4. prikazane su vrijednosti srednje kvadratne pogreške na trening, test i validacijskom skupu te korelacijski faktor na trening, test skupu i cjelokupnim podacima. Iz numeričkih rezultata prikazanih u tablici 4. vidljivo je da koeficijenti korelacije svih skupova podataka prelaze 95% te da su međusobno vrlo slični. Srednja kvadratna pogreška na svim skupovima podataka je također slična i ne prelazi 0.096. Na slikama 18. i 19. prikazana je usporedba izlaznih vrijednosti predviđenih modelom i stvarnih vrijednosti sadržaja propilena na validacijskom skupu i cjelokupnim podacima gdje je vidljivo da predviđanja modela dobro prate trend stvarnih vrijednosti podataka uz nekoliko odstupanja.

Tablica 4. Rezultati za MLP model sa *ELU* aktivacijskom funkcijom i 10 neurona u skrivenom sloju

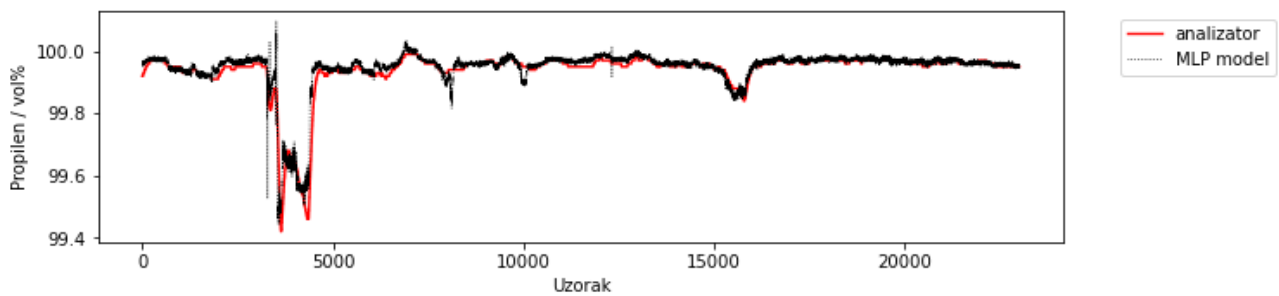
Korelacija na cjelokupnim podacima	0.956
Korelacija na skupu podataka za učenje	0.957
Korelacija na test skupu podataka	0.953
Korelacija na validacijskom skupu podataka	0.955
Srednja kvadratna pogreška na skupu podataka za učenje	0.094
Srednja kvadratna pogreška na test skupu podataka	0.096
Srednja kvadratna pogreška na validacijskom skupu podataka	0.093



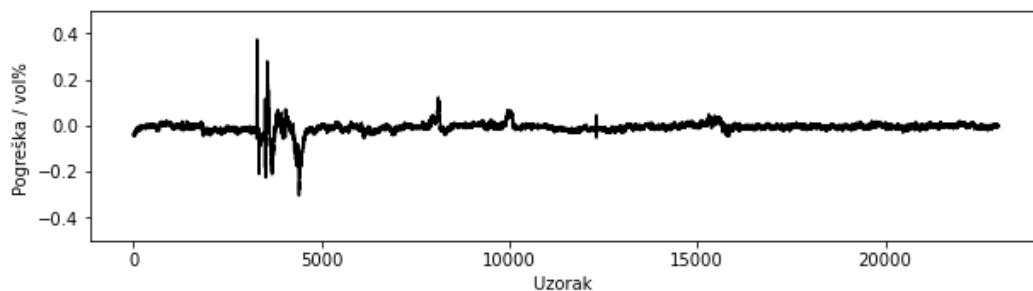
Slika 17. Utjecaj broja neurona u skrivenom sloju MLP modela na korelacijski faktor i srednju kvadratnu pogrešku za aktivacijsku funkciju ELU



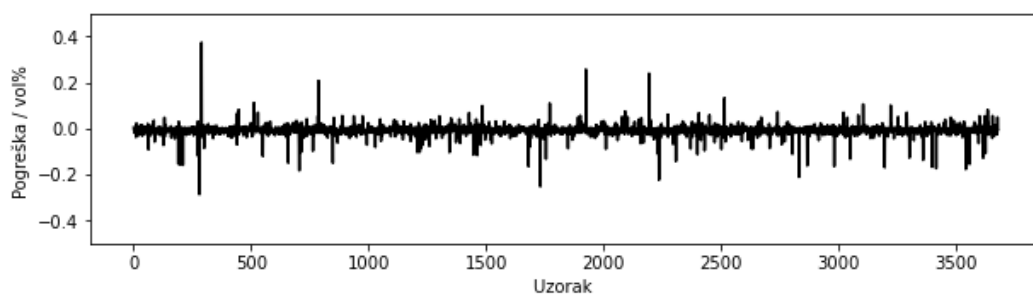
Slika 18. Usporedba između stvarnih podataka sadržaja propilena i vrijednosti dobivenih MLP modelom na validacijskim podacima za model ELU sa 10 neurona u skrivenom sloju



Slika 19. Usporedbe između stvarnih podataka sadržaja propilena i vrijednosti dobivenih MLP modelom na cjelokupnim podacima za model ELU sa 10 neurona u skrivenom sloju

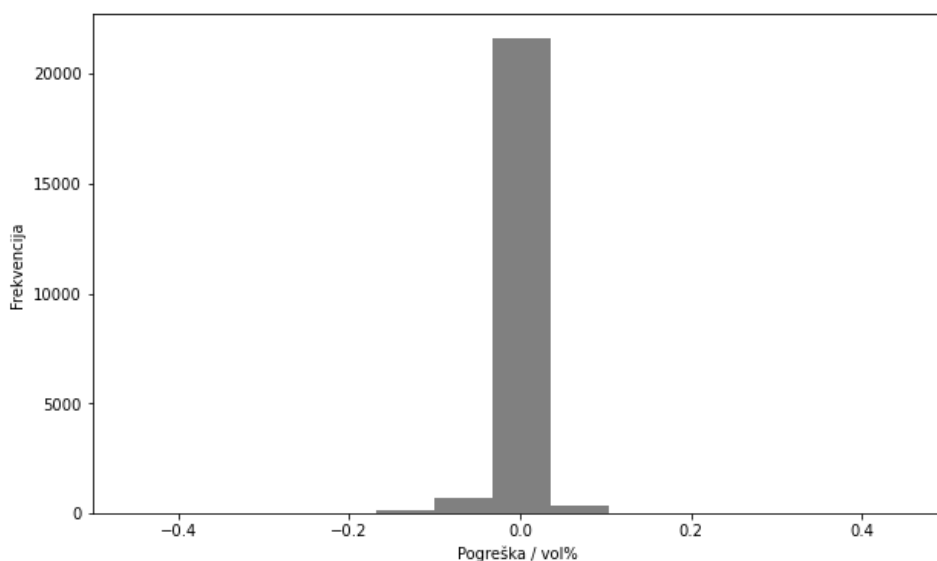


Slika 20. Trend vrijednosti pogreške na cjelokupnim podacima za MLP model ELU sa 10 neurona u skrivenom sloju

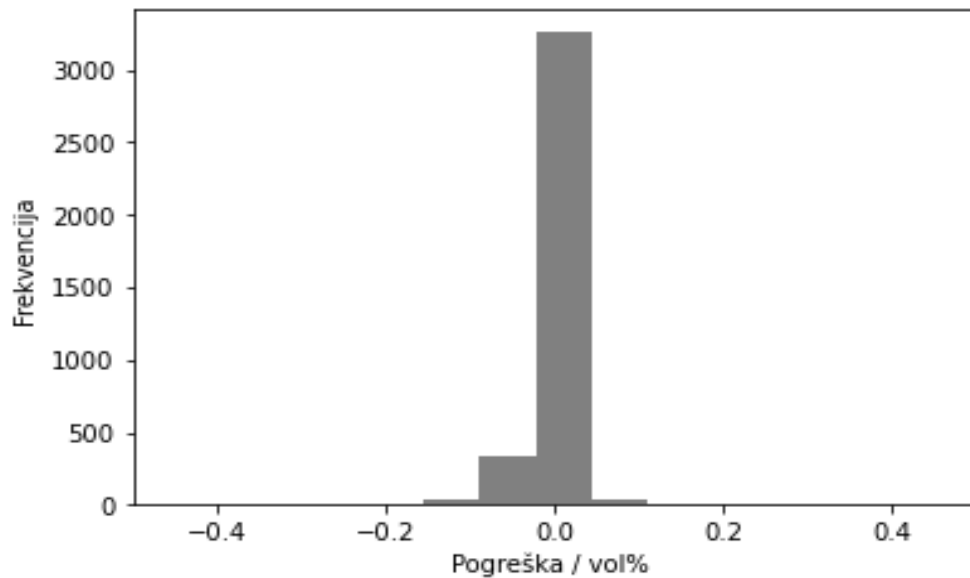


Slika 21. Trend vrijednosti pogreške na validacijskim podacima za MLP model ELU sa 10 neurona u skrivenom sloju

Na slici 22., prikazan je histogram raspodjele vrijednosti pogreške na cjelokupnim podacima MLP modela, a na slici 23. histogram raspodjele vrijednosti pogreške na validacijskim podacima MLP modela. Prema oba histograma vidljivo je da je iznos pogreške između $\pm 0.15\%$ što je zadovoljavajuće, a da je najučestalija pogreška samo $\pm 0.05\%$.



Slika 22. Histogram raspodjele vrijednosti pogreške na cjelokupnim podacima za MLP model ELU sa 10 neurona u skrivenom sloju



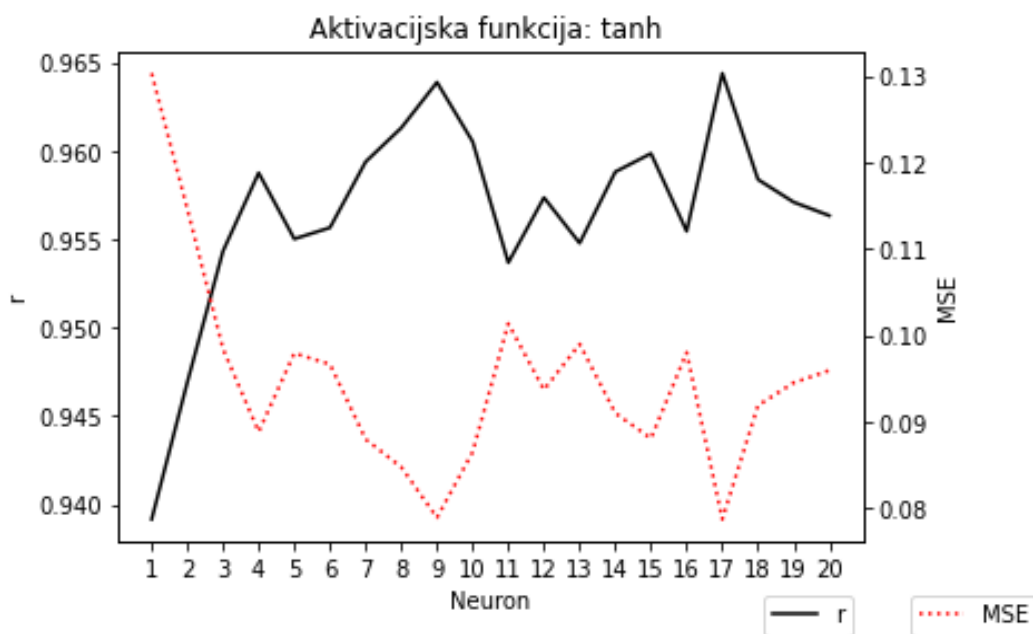
Slika 23. Histogram raspodjele vrijednosti pogreške na validacijskim podacima za MLP model ELU sa 10 neurona u skrivenom sloju

Za aktivacijsku funkciju *tanh*, prema slici 24., vidljivo je da se maksimum korelacije i minimalna srednja kvadratna pogreška postižu pri 17 neurona u skrivenom sloju. Za taj model dodatno je napravljena grafička analiza na trening, test, validacijskom skupu i cjelokupnim podacima. U tablici 5. prikazane su vrijednosti srednje kvadratne pogreške na trening, test i validacijskom skupu te korelacijski faktor na trening, test skupu i cjelokupnim podacima. Iz numeričkih rezultata prikazanih u tablici 5. vidljivo je da koeficijenti korelacije svih skupova podataka prelaze 96% te da su međusobno vrlo slični. Srednja kvadratna pogreška na svim skupovima podataka je također slična i ne prelazi 0.078. Na slikama 25. i 26. prikazana je usporedba izlaznih vrijednosti predviđenih modelom i stvarnih vrijednosti na validacijskom skupu i cjelokupnim podacima gdje je vidljivo da predviđanja modela dobro prate trend stvarnih vrijednosti podataka uz nekoliko odstupanja.

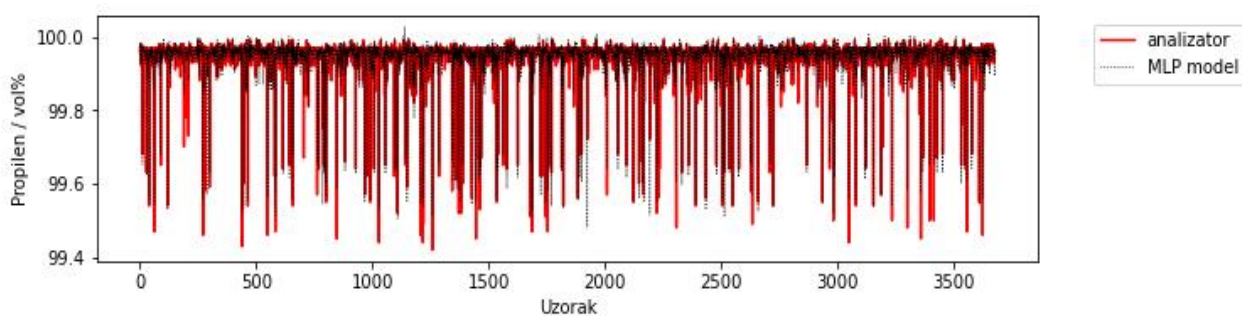
Tablica 5. Rezultati za MLP model sa *tanh* aktivacijskom funkcijom i 17 neurona u skrivenom sloju

Korelacija na cjelokupnim podacima	0.964
Korelacija na skupu podataka za učenje	0.964
Korelacija na test skupu podataka	0.962

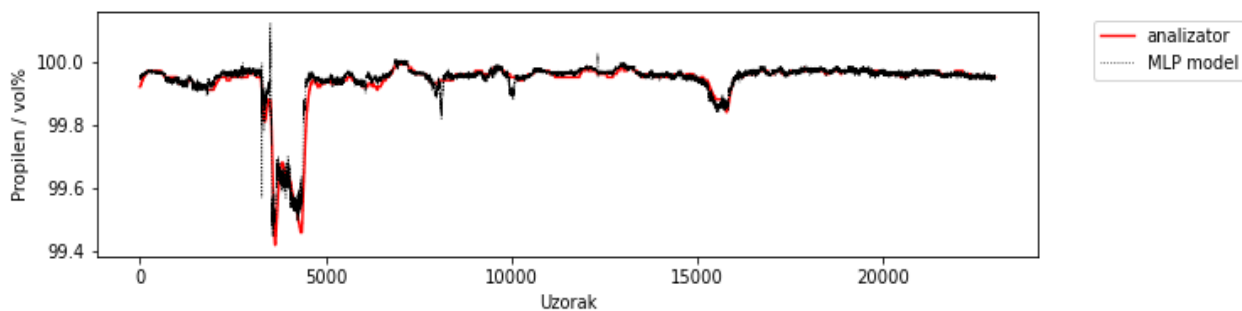
Korelacija na validacijskom skupu podataka	0.961
Srednja kvadratna pogreška na skupu podataka za učenje	0.078
Srednja kvadratna pogreška na test skupu podataka	0.077
Srednja kvadratna pogreška na validacijskom skupu podataka	0.076



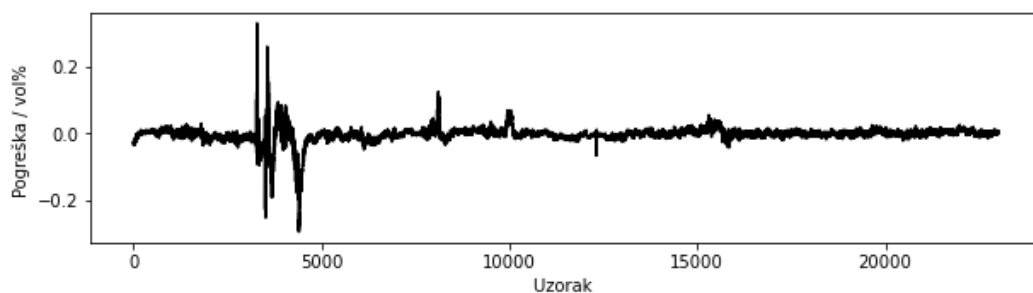
Slika 24. Utjecaj broja neurona u skrivenom sloju MLP modela na korelacijski faktor i srednju kvadratnu pogrešku za aktivacijsku funkciju tanh



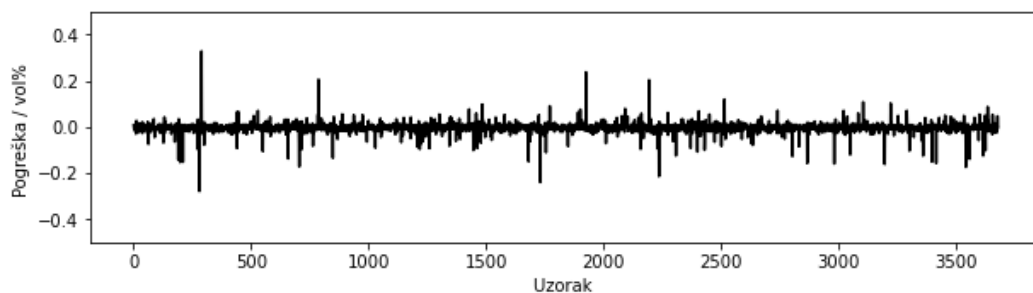
Slika 25. Usporedba između stvarnih podataka sadržaja propilena i vrijednosti dobivenih MLP modelom na validacijskim podacima za model tanh sa 17 neurona u skrivenom sloju



Slika 26. Usporedba između stvarnih podataka sadržaja propilena i vrijednosti dobivenih MLP modelom na cjelokupnim podacima za model tanh sa 17 neurona u skrivenom sloju

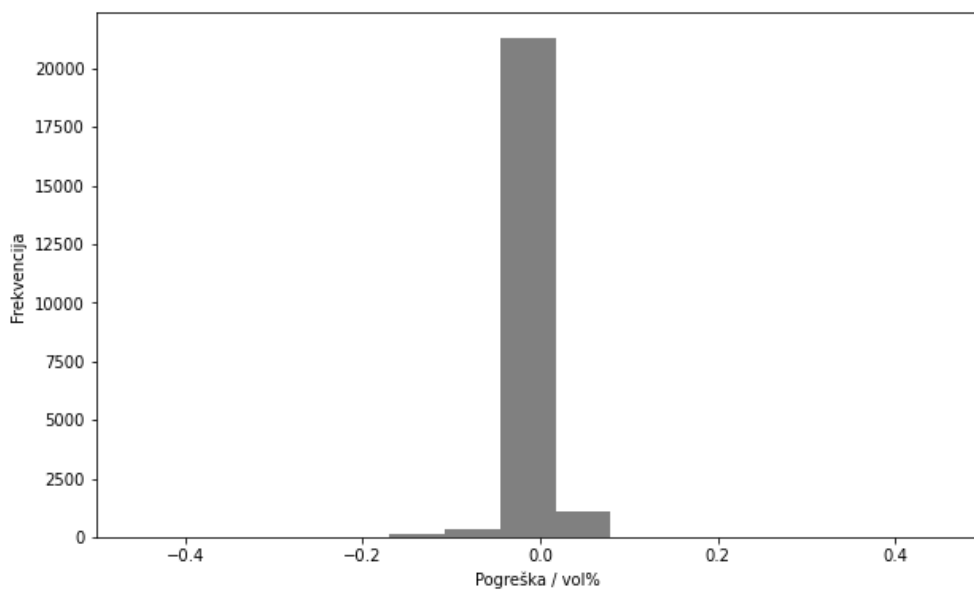


Slika 27. Trend vrijednosti pogreške na cjelokupnim podacima za MLP model tanh sa 17 neurona u skrivenom sloju

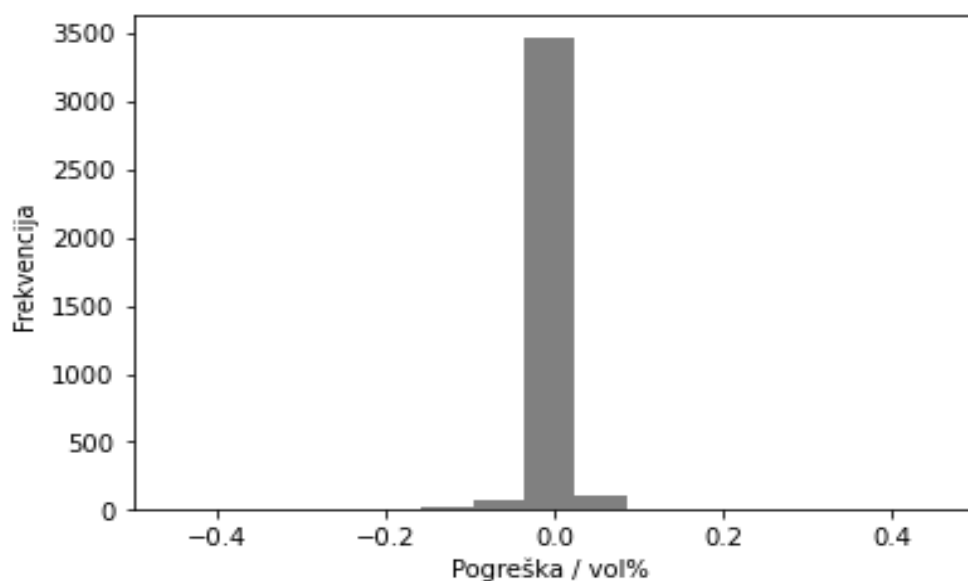


Slika 28. Trend vrijednosti pogreške na validacijskim podacima za model tanh 17 neurona

Na slici 29., prikazan je histogram raspodjele vrijednosti pogreške na cjelokupnim podacima MLP modela, a na slici 30. histogram raspodjele vrijednosti pogreške na validacijskim podacima MLP modela. Prema oba histograma vidljivo je da je iznos pogreške između $\pm 0.15\%$, a da najveći dio pogrešaka spada $\pm 0.1\%$ što je zadovoljavajuće za primjenu na postrojenju.



Slika 29. Histogram raspodjele vrijednosti pogreške na cjelokupnim podacima za MLP model tanh sa 17 neurona u skrivenom sloju



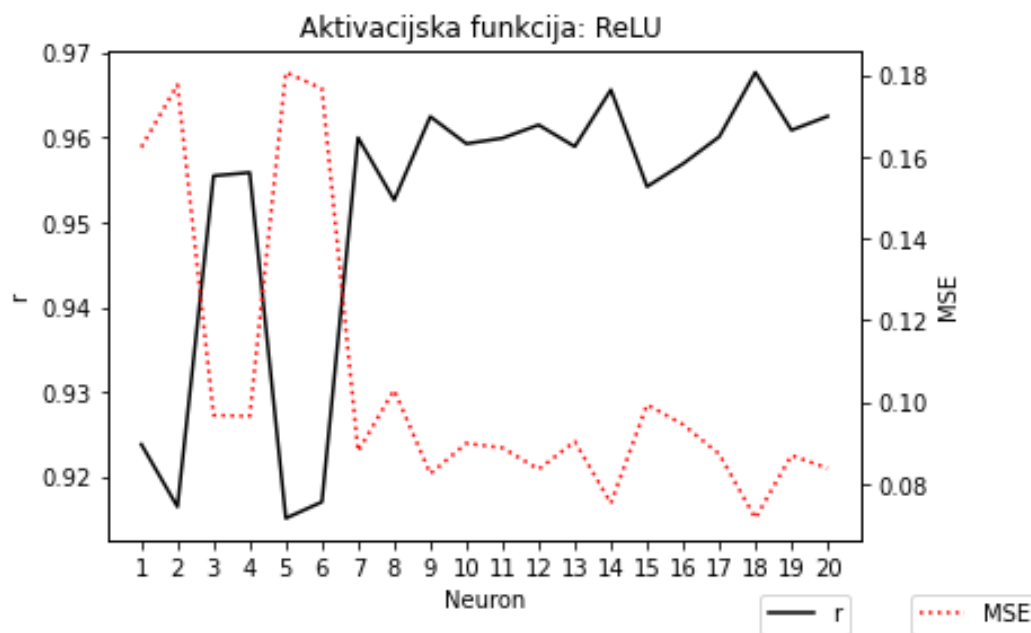
Slika 30. Histogram raspodjele vrijednost pogreške na validacijskim podacima za MLP model tanh sa 17 neurona u skrivenom sloju

Za aktivacijsku funkciju *ReLU*, prema slici 31., vidljivo je da se maksimum korelacije i minimalna srednja kvadratna pogreška postiču pri 18 neurona u skrivenom sloju. Za taj model dodatno je napravljena grafička analiza na trening, test, validacijskom skupu i cjelokupnim podacima. U tablici 6. prikazane su vrijednosti srednje kvadratne pogreške na trening, test i validacijskom skupu te korelacijski faktor na trening, test skupu i cjelokupnim podacima. Iz

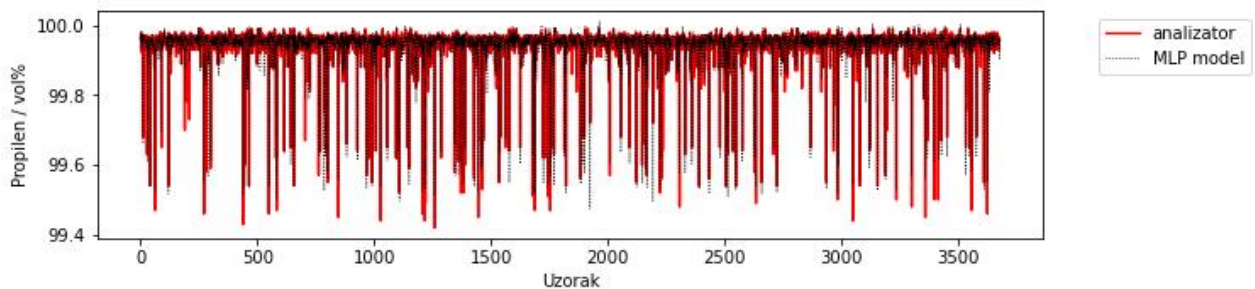
numeričkih rezultata prikazanih u tablici 6. vidljivo je da koeficijenti korelacije svih skupova podataka prelaze 96% te da su međusobno vrlo slični. Srednja kvadratna pogreška na svim skupovima podataka je također slična i ne prelazi 0.072. Na slikama 32. i 33. prikazana je usporedba izlaznih vrijednosti predviđenih modelom i stvarnih vrijednosti na validacijskom skupu i cjelokupnim podacima gdje je vidljivo da predviđanja modela dobro prate trend stvarnih vrijednosti podataka uz nekoliko odstupanja.

Tablica 6. Rezultati za MLP model sa ReLU aktivacijskom funkcijom i 18 neurona u skrivenom sloju

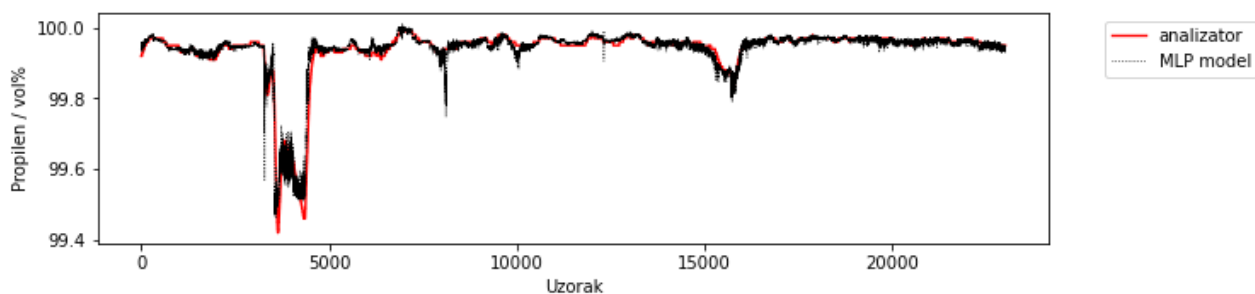
Korelacija na cjelokupnim podacima	0.967
Korelacija na skupu podataka za učenje	0.968
Korelacija na test skupu podataka	0.967
Korelacija na validacijskom skupu podataka	0.967
Srednja kvadratna pogreška na skupu podataka za učenje	0.072
Srednja kvadratna pogreška na test skupu podataka	0.070
Srednja kvadratna pogreška na validacijskom skupu podataka	0.069



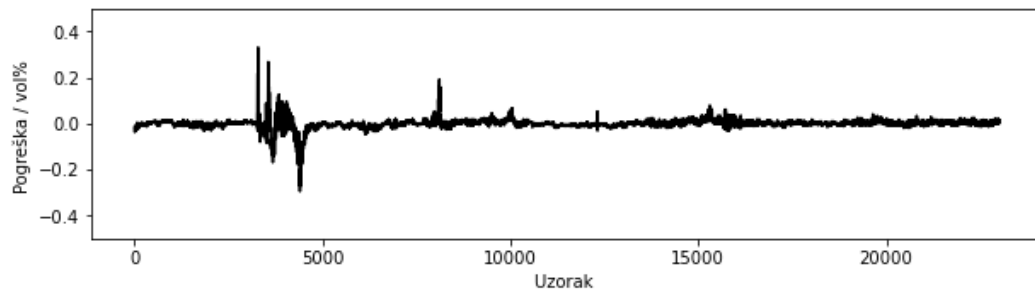
Slika 31. Utjecaj broja neurona u skrivenom sloju MLP modela na korelacijski faktor i srednju kvadratnu pogrešku za aktivacijsku funkciju ReLU



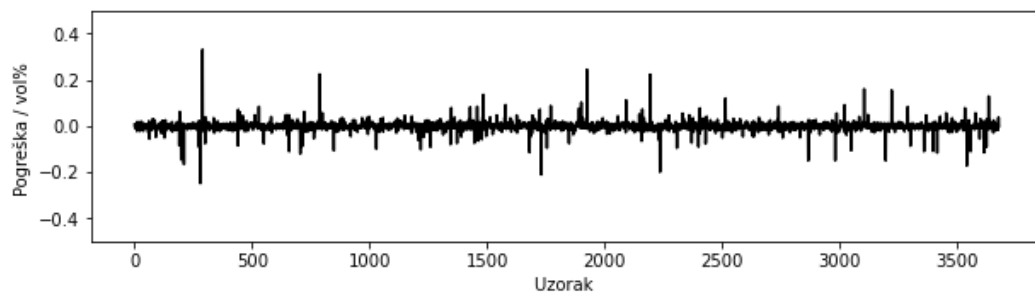
Slika 32. Usporedba između stvarnih podataka sadržaja propilena i vrijednosti dobivenih MLP modelom na validacijskim podacima za model ReLU sa 18 neurona u skrivenom sloju



Slika 33. Usporedba između stvarnih podataka sadržaja propilena i vrijednosti dobivenih MLP modelom na cjelokupnim podacima za model ReLU sa 18 neurona u skrivenom sloju

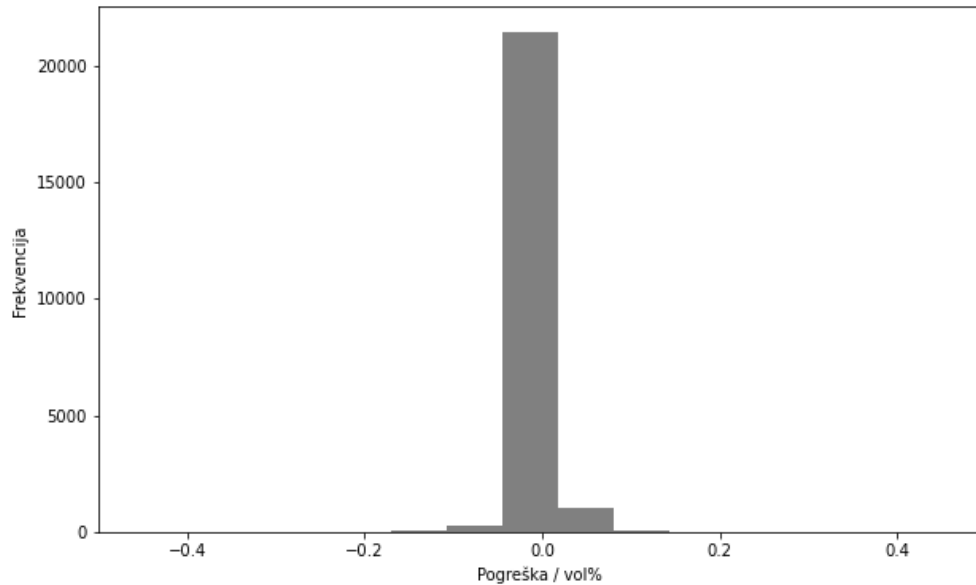


Slika 34. Trend vrijednosti pogreške na cjelokupnim podacima za MLP model ReLU sa 18 neurona u skrivenom sloju

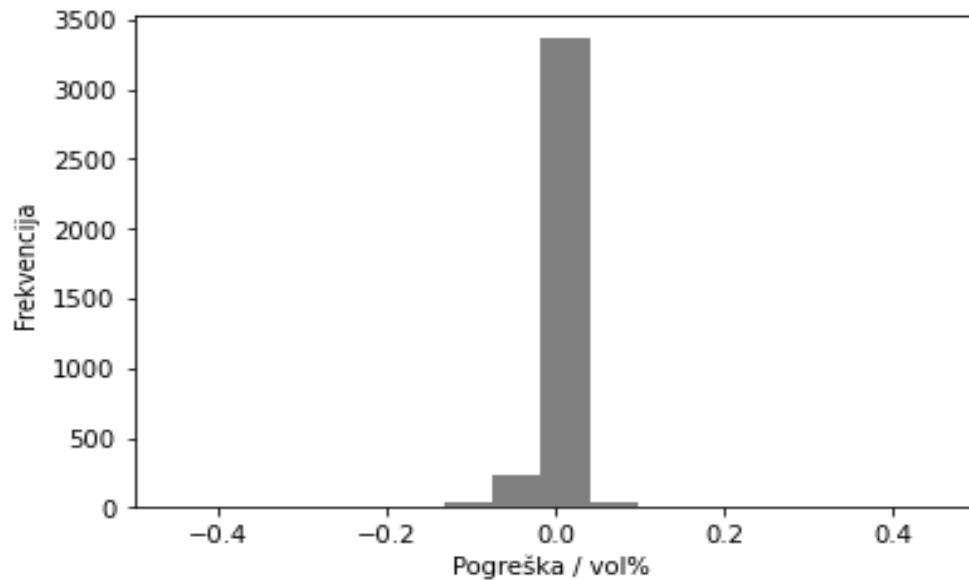


Slika 35. Trend vrijednosti pogreške na validacijskim podacima za MLP model ReLU sa 18 neurona u skrivenom sloju

Na slici 36., prikazan je histogram raspodjele vrijednosti pogreške na cjelokupnim podacima MLP modela, a na slici 37. histogram raspodjele vrijednosti pogreške na validacijskim podacima MLP modela. Prema oba histograma vidljivo je da je iznos pogreške većinom između $\pm 0.10\%$ što je zadovoljavajuće.



Slika 36. Histogram raspodjele vrijednosti pogreške na cjelokupnim podacima za MLP model ReLU sa 18 neurona neurona u skrivenom sloju

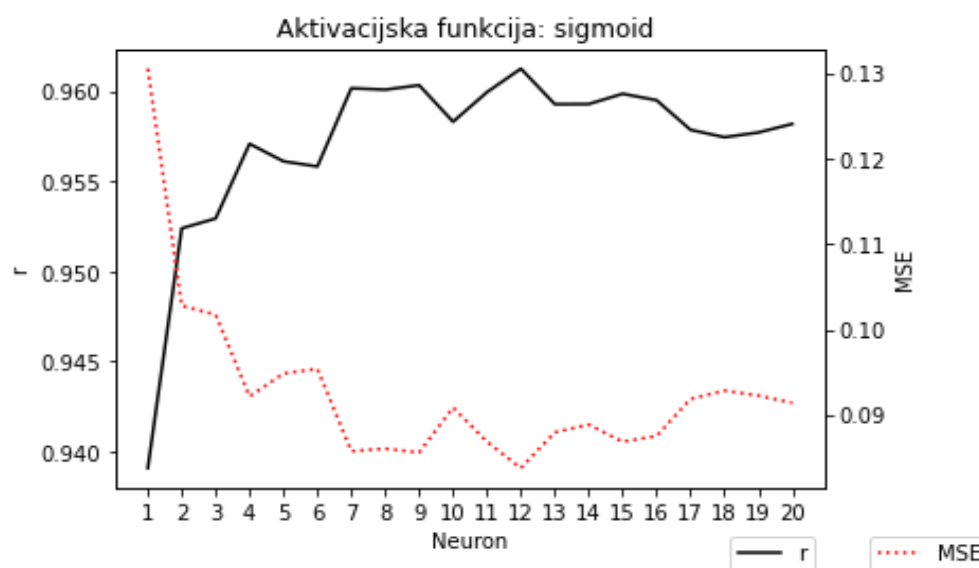


Slika 37. Histogram raspodjele vrijednosti pogreške na validacijskim podacima za MLP model ReLU sa 18 neurona neurona u skrivenom sloju

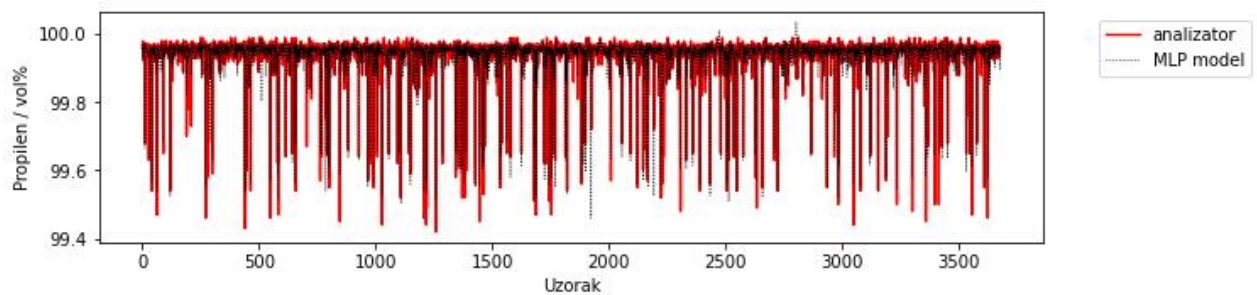
Za aktivacijsku funkciju *sigmoid*, prema slici 38., vidljivo je da se maksimum korelacije i minimalna srednja kvadratna pogreška postižu pri 12 neurona. Za taj model dodatno je napravljena grafička analiza na trening, test, validacijskom skupu i cjelokupnim podacima. U tablici 7. prikazane su vrijednosti srednje kvadratne pogreške na trening, test i validacijskom skupu te korelacijski faktor na trening, test skupu i cjelokupnim podacima. Iz numeričkih rezultata prikazanih u tablici 7. vidljivo je da koeficijenti korelacije svih skupova podataka prelaze 95% te da su međusobno vrlo slični. Srednja kvadratna pogreška na svim skupovima podataka je također slična i ne prelazi 0.084. Na slikama 39. i 40. prikazana je usporedba izlaznih vrijednosti predviđenih modelom i stvarnih vrijednosti validacijskom skupu i cjelokupnim podacima gdje je vidljivo da predviđanja modela dobro prate trend stvarnih vrijednosti podataka uz nekoliko odstupanja.

Tablica 7. Rezultati za MLP model sa sigmoid aktivacijskom funkcijom i 12 neurona u skrivenom sloju

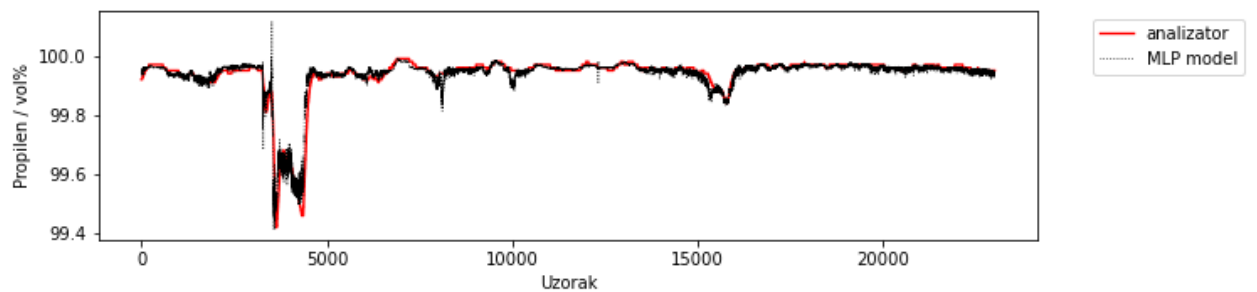
Korelacija na cjelokupnim podacima	0.961
Korelacija na skupu podataka za učenje	0.961
Korelacija na test skupu podataka	0.959
Korelacija na validacijskom skupu podataka	0.959
Srednja kvadratna pogreška na skupu podataka za učenje	0.084
Srednja kvadratna pogreška na test skupu podataka	0.082
Srednja kvadratna pogreška na validacijskom skupu podataka	0.084



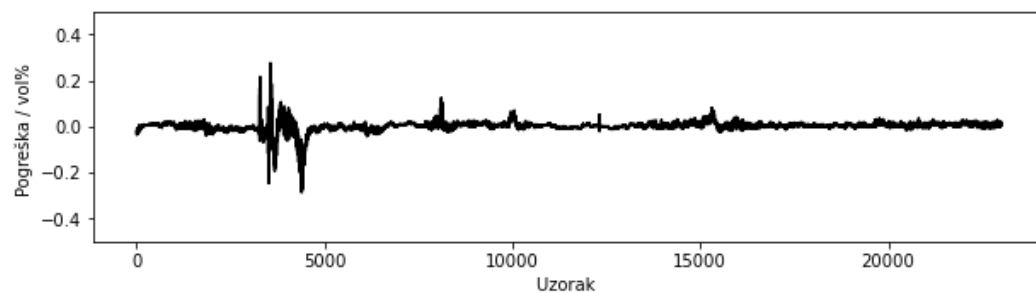
Slika 38. Utjecaj broja neurona u skrivenom sloju MLP modela na korelacijski faktor i srednju kvadratnu pogrešku za aktivacijsku funkciju sigmoid



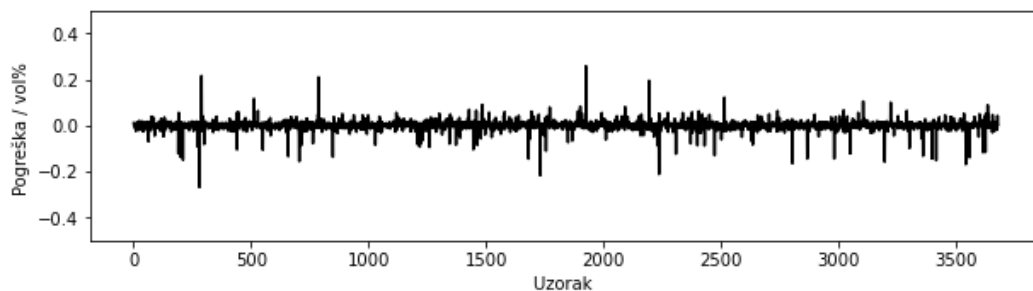
Slika 39. Usporedba između stvarnih podataka sadržaja propilena i vrijednosti dobivenih MLP modelom na validacijskim podacima za model sigmoid sa 12 neurona u skrivenom sloju



Slika 40. Usporedba između stvarnih podataka sadržaja propilena i vrijednosti dobivenih MLP modelom na cjelokupnim podacima za model sigmoid sa 12 neurona u skrivenom sloju

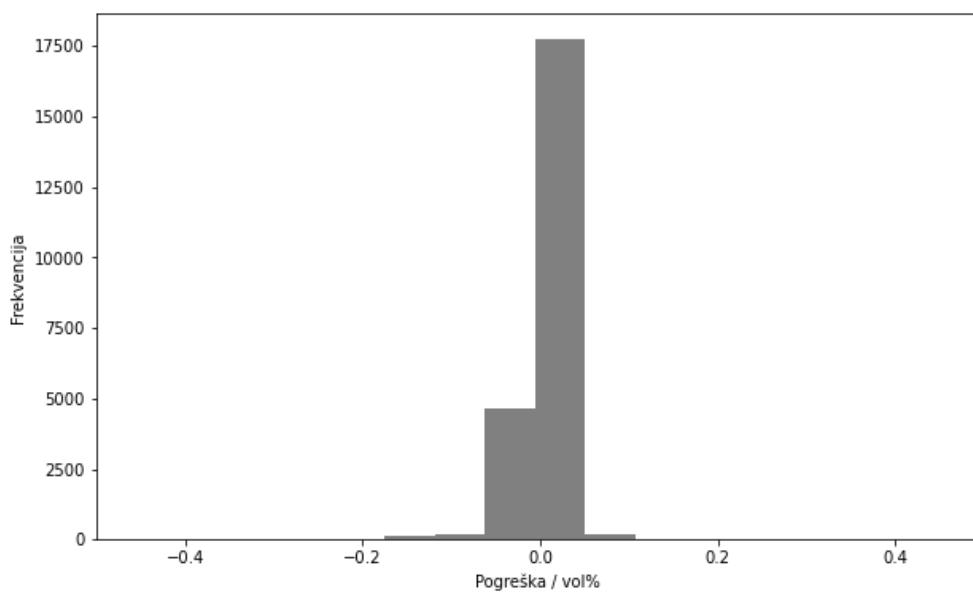


Slika 41. Trend vrijednosti pogreške na cjelokupnim podacima za MLP model sigmoid sa 12 neurona u skrivenom sloju

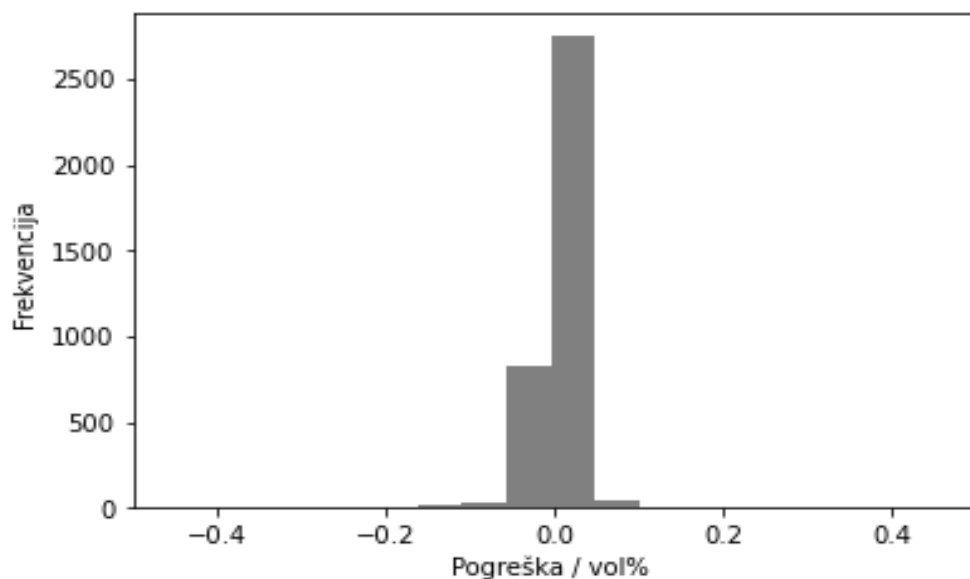


Slika 42. Trend vrijednosti pogreške na validacijskim podacima za MLP model sigmoid sa 12 neurona u skrivenom sloju

Na slici 43., prikazan je histogram raspodjele vrijednosti pogreške na cjelokupnim podacima MLP modela, a na slici 44. histogram raspodjele vrijednosti pogreške na validacijskim podacima MLP modela. Prema oba histograma vidljivo je da je iznos pogreške većinom između ± 0.10 što je zadovoljavajuće.



Slika 43. Histogram raspodjele vrijednost pogreške na cjelokupnim podacima za MLP model sigmoid sa 12 neurona u skrivenom sloju



Slika 44. Histogram raspodjele vrijednost pogreške na validacijskim podacima za MLP model sigmoid sa 12 neurona u skrivenom sloju

Tablica 8. Usporedba modela MLP s obzirom na korelacijske faktore i srednje kvadratne pogreške za različite aktivacijske funkcije

Aktivacijska funkcija i broj neurona u skrivenom sloju	<i>tanh</i> 17	<i>sigmoid</i> 12	<i>ReLU</i> 18	<i>ELU</i> 10
Korelacija na cjelokupnim podacima	0.964	0.961	0.967	0.956
Korelacija na skupu podataka za učenje	0.964	0.961	0.968	0.957
Korelacija na test skupu podataka	0.962	0.959	0.967	0.953
Korelacija na validacijskom skupu podataka	0.961	0.959	0.967	0.955
Srednja kvadratna pogreška na skupu podataka za učenje	0.078	0.084	0.072	0.094
Srednja kvadratna pogreška na test skupu podataka	0.077	0.082	0.070	0.096
Srednja kvadratna pogreška na validacijskom skupu podataka	0.076	0.084	0.069	0.093

Prema rezultatima prikazanim u tablici 8., zaključeno je da su svi modeli zadovoljavajuće točnosti za primjenu na postrojenju prema visokim vrijednostima korelacijskih faktora. Najmanju srednju kvadratnu pogrešku na test skupu pokazuje model *ReLU* sa 18 neurona u skrivenom sloju, a nešto veću model *tanh* 17 neurona. Prema slikama 24. i 31.

zaključeno je da modeli s aktivacijskom funkcijom *tanh* pokazuju veću stabilnost pogreške sa promjenom broja neurona u skrivenom sloju u odnosu na modele s aktivacijskom funkcijom *ReLU*.

4.3. Rezultati modela LSTM

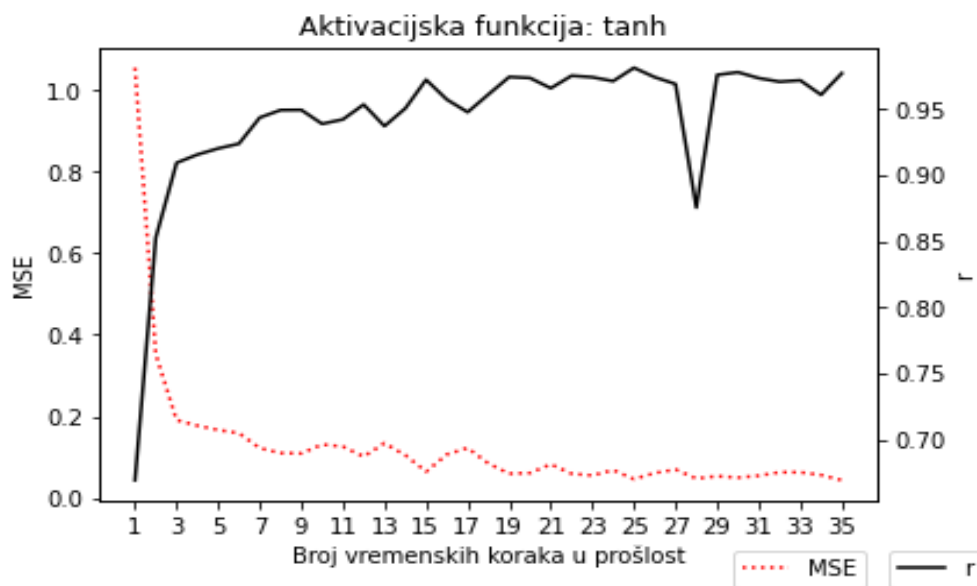
Prilikom razvoja modela LSTM za svaku od odabranih aktivacijskih funkcija (*tanh*, *sigmoid*, *ReLU*, *ELU*) proveden je računalni eksperiment kojim je određen broj vremenskih koraka u prošlost pri kojemu se postiže minimalna srednja kvadratna pogreška i maksimalan korelacijski faktor na skupu podataka za učenje. Kao i kod MLP modela i ovdje se vodilo sa tim da osim korelacijskog faktora i srednje kvadratne pogreške, na uspješnost modela utječe i međusobna usklađenost korelacijskih faktora na skupu za učenje i skupu za vrednovanje te na cjelokupnim podacima. Također, prilikom određivanja uspješnosti modela bitno je pratiti i vrijednost srednje kvadratne pogreške.

Za aktivacijsku funkciju *tanh*, prema slici 45., vidljivo je da se maksimum korelacije i minimalna srednja kvadratna pogreška postižu pri 25 vremenskih koraka u prošlost i 25 LSTM jedinica. Za taj model dodatno je napravljena grafička analiza na test, validacijskom skupu i cjelokupnim podacima. U tablici 9. prikazane su vrijednosti srednje kvadratne pogreške na trening, test i validacijskom skupu te korelacijski faktor na trening, test, validacijskom skupu i cjelokupnim podacima. Iz numeričkih rezultata prikazanih u tablici 9. vidljivo je da koeficijenti korelacije svih skupova podataka prelaze 97,9% te da su međusobno vrlo slični. Srednja kvadratna pogreška na svim skupovima podataka je također slična i ne prelazi 0.047. Na slikama 46. i 47. prikazana je usporedba izlaznih vrijednosti predviđenih modelom i stvarnih vrijednosti sadržaja propilena na validacijskom skupu i cjelokupnim podacima gdje je vidljivo da predviđanja modela dobro prate trend stvarnih vrijednosti podataka uz nekoliko odstupanja.

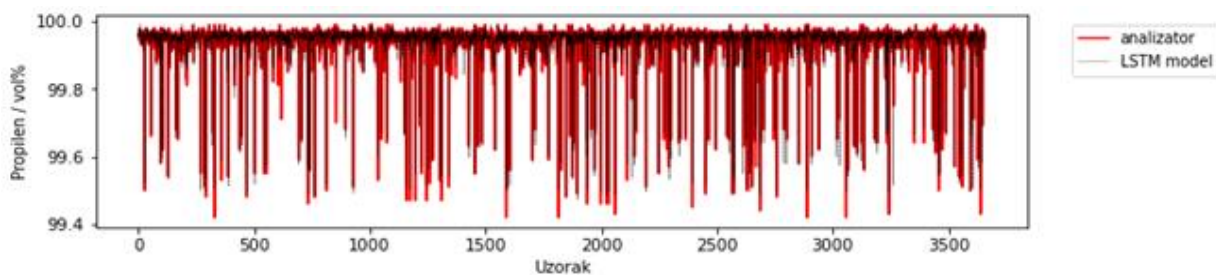
Tablica 9. Rezultati za LSTM model sa *tanh* aktivacijskom funkcijom i 25 LSTM jedinica te 25 vremenskih koraka u prošlost

Korelacija na cjelokupnim podacima	0.981
Korelacija na skupu podataka za učenje	0.982
Korelacija na test skupu podataka	0.979
Korelacija na validacijskom skupu podataka	0.981
Srednja kvadratna pogreška na skupu podataka za učenje	0.047

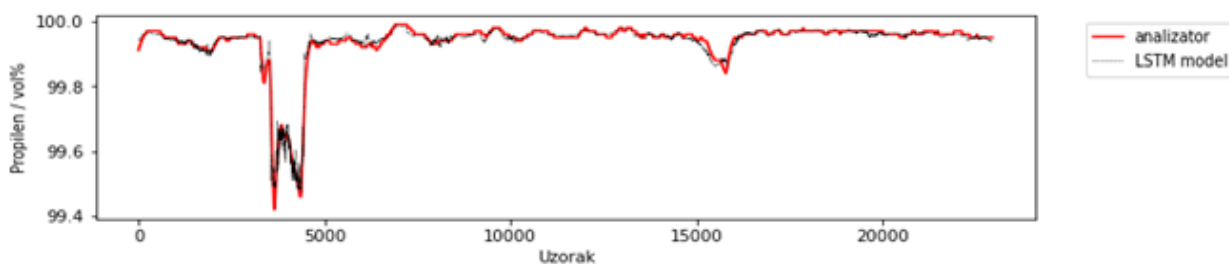
Srednja kvadratna pogreška na test skupu podataka	0.045
Srednja kvadratna pogreška na validacijskom skupu podataka	0.045



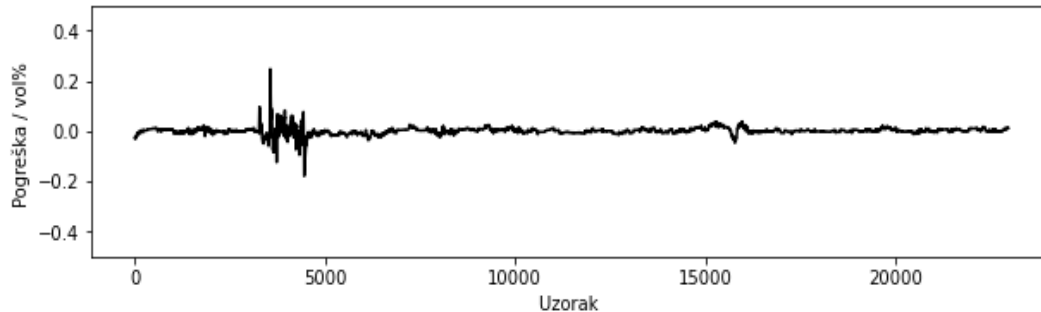
Slika 45. Utjecaj broja vremenskih koraka u prošlost LSTM modela na korelacijski faktor i srednju kvadratnu pogrešku za aktivacijsku funkciju tanh



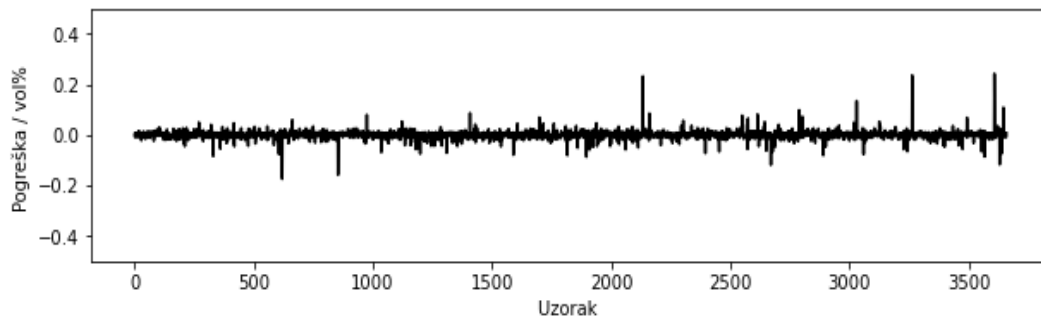
Slika 46. Usporedba između stvarnih podataka sadržaja propilena i vrijednosti dobivenih LSTM modelom na validacijskim podacima za model tanh sa 25 LSTM jedinica i 25 vremenskih koraka u prošlost



Slika 47. Usporedba između stvarnih podataka sadržaja propilena i vrijednosti dobivenih LSTM modelom na cjelokupnim podacima za model tanh sa 25 LSTM jedinica i 25 vremenskih koraka u prošlost

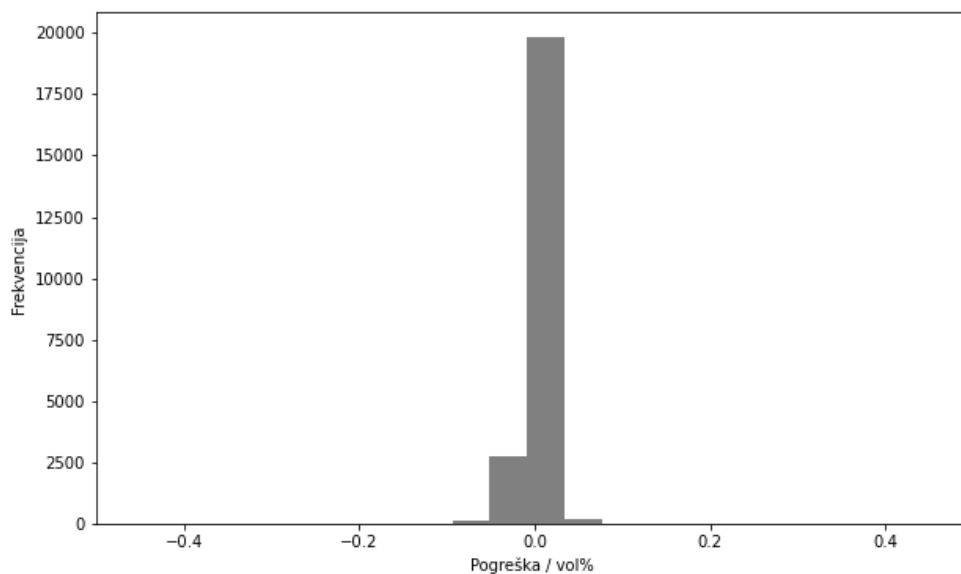


Slika 48. Trend vrijednosti pogreške na cjelokupnim podacima za LSTM model tanh sa 25 LSTM jedinica i 25 vremenskih koraka u prošlost

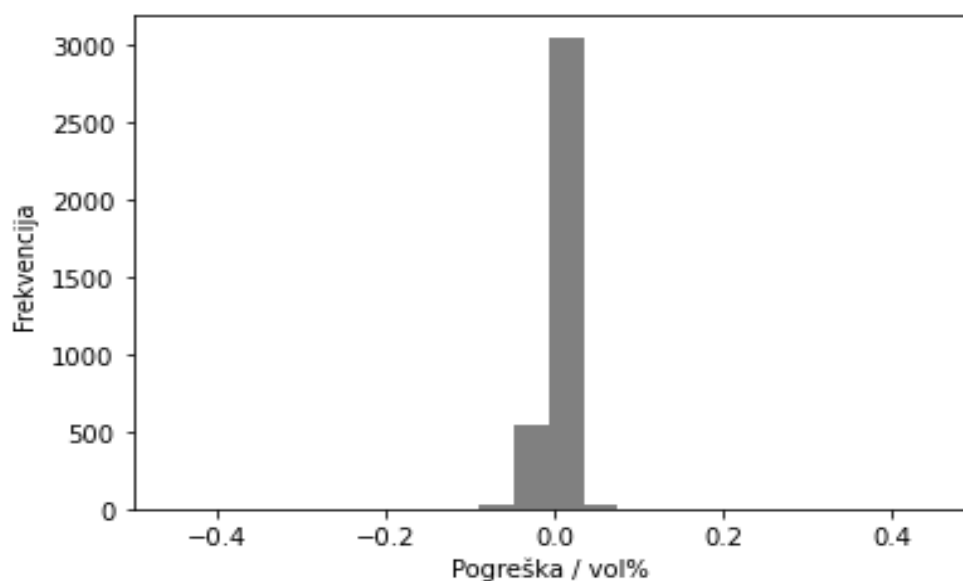


Slika 49. Trend vrijednosti pogreške na validacijskim podacima za LSTM model tanh sa 25 LSTM jedinica i 25 vremenskih koraka u prošlost

Na slici 50., prikazan je histogram raspodjele vrijednosti pogreške na cjelokupnim podacima LSTM modela, a na slici 51. histogram raspodjele vrijednosti pogreške na validacijskim podacima LSTM modela. Prema oba histograma vidljivo je da je iznos pogreške između $\pm 0.1\%$ što je zadovoljavajuće.



Slika 50. Histogram raspodjele vrijednosti pogreške na cjelokupnim podacima za LSTM model tanh sa 25 LSTM jedinica i 25 vremenskih koraka u prošlost



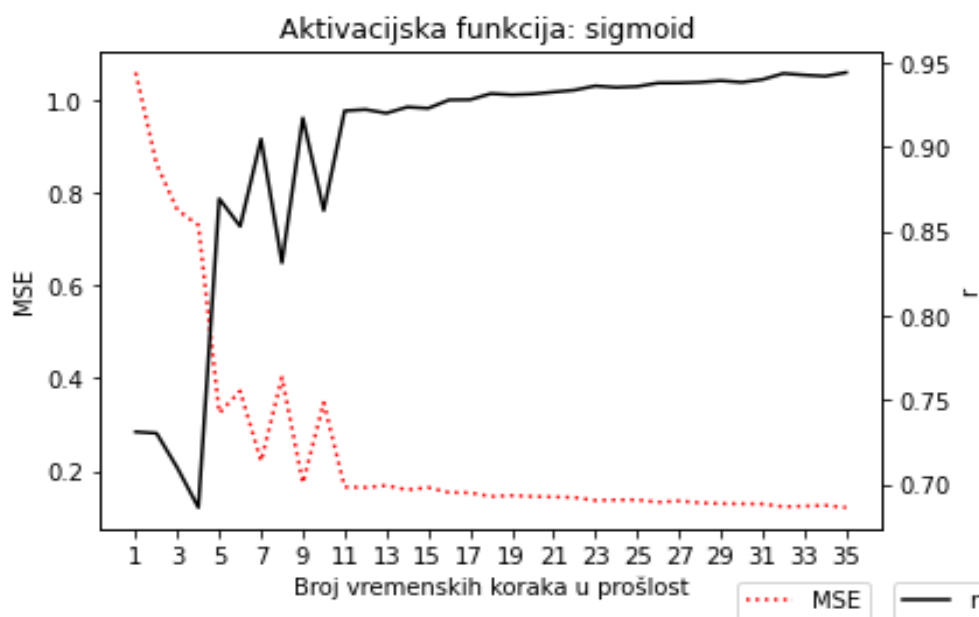
Slika 51. Histogram raspodjele vrijednosti pogreške na validacijskim podacima za LSTM model tanh sa 25 LSTM jedinica i 25 vremenskih koraka u prošlost

Za aktivacijsku funkciju *sigmoid*, prema slici 52., vidljivo je da se maksimum korelacije i minimalna srednja kvadratna pogreška postižu pri 31 vremenskom koraku u prošlost i 31 LSTM jedinicom. Za taj model dodatno je napravljena grafička analiza na test, validacijskom skupu i cjelokupnim podacima. U tablici 10. prikazane su vrijednosti srednje kvadratne pogreške na trening, test i validacijskom skupu te korelacijski faktor na trening, test,

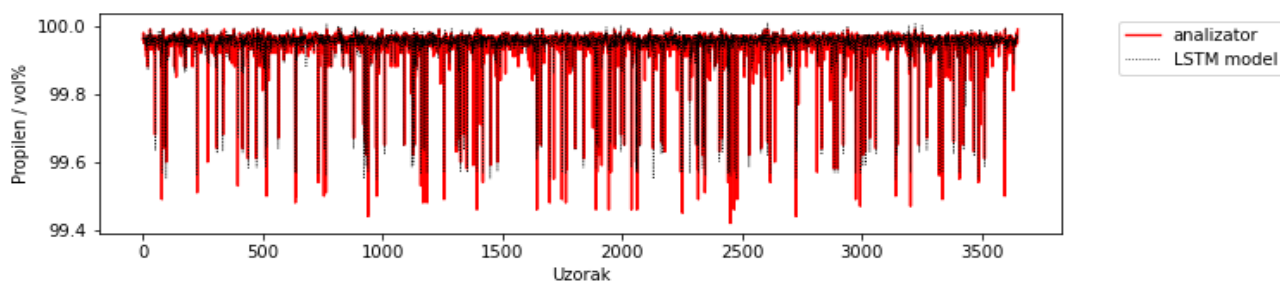
validacijskom skupu i cjelokupnim podacima. Iz numeričkih rezultata prikazanih u tablici 10. vidljivo je da koeficijenti korelacije svih skupova podataka prelaze 93,8% te da su međusobno vrlo slični. Srednja kvadratna pogreška na svim skupovima podataka je također slična i ne prelazi 0.129. Na slikama 53. i 54. prikazana je usporedba izlaznih vrijednosti predviđenih modelom i stvarnih vrijednosti sadržaja propilena na validacijskom skupu i cjelokupnim podacima gdje je vidljivo da predviđanja modela dobro prate trend stvarnih vrijednosti podataka uz nekoliko odstupanja.

Tablica 10. Rezultati za LSTM model sa sigmoid aktivacijskom funkcijom i 31 LSTM jedinicom te 31 vremenski koraka u prošlost

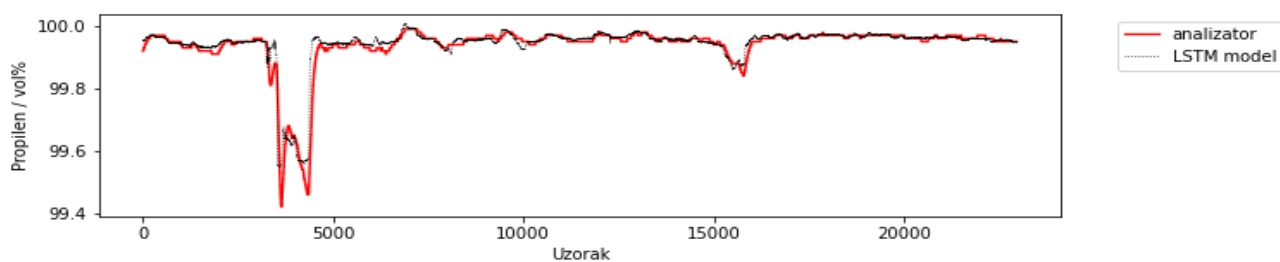
Korelacija na cjelokupnim podacima	0.940
Korelacija na skupu podataka za učenje	0.938
Korelacija na test skupu podataka	0.948
Korelacija na validacijskom skupu podataka	0.951
Srednja kvadratna pogreška na skupu podataka za učenje	0.129
Srednja kvadratna pogreška na test skupu podataka	0.110
Srednja kvadratna pogreška na validacijskom skupu podataka	0.114



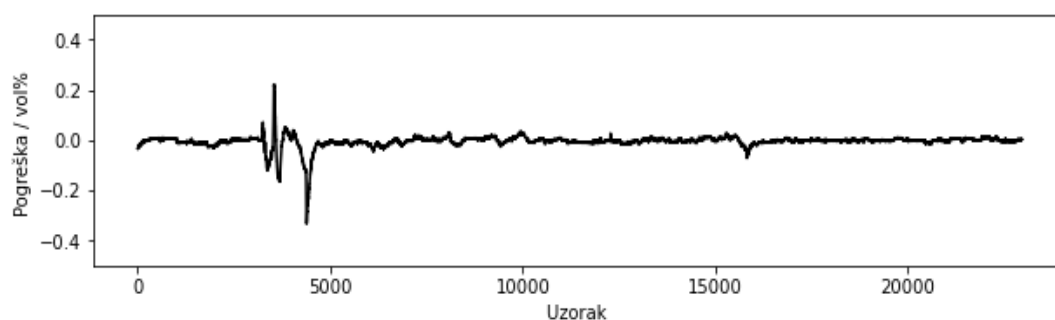
Slika 52. Utjecaj broja vremenskih koraka u prošlost LSTM modela na korelacijski faktor i srednju kvadratnu pogrešku za aktivacijsku funkciju sigmoid



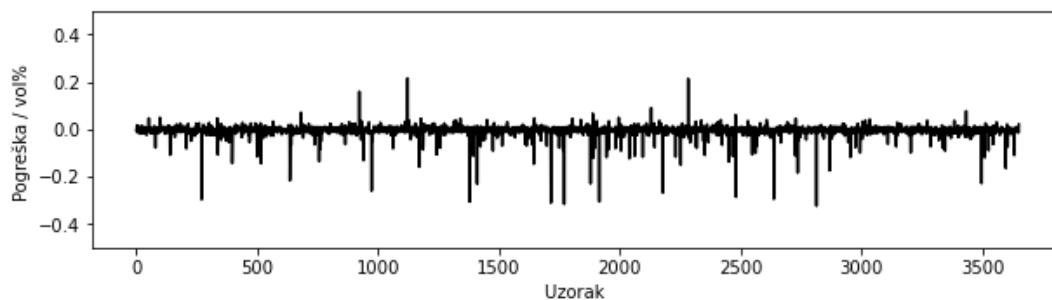
Slika 53. Usporedba stvarnih podataka sadržaja propilena i vrijednosti dobivenih LSTM modelom na validacijskim podacima za model sa sigmoid funkcijom, 31 LSTM jedinicom i 31 vremenskim korakom u prošlost



Slika 54. Usporedba stvarnih podataka sadržaja propilena i vrijednosti dobivenih LSTM modelom na cjelokupnim podacima za model sa sigmoidnom funkcijom, 31 LSTM jedinicom i 31 vremenskim korakom u prošlost

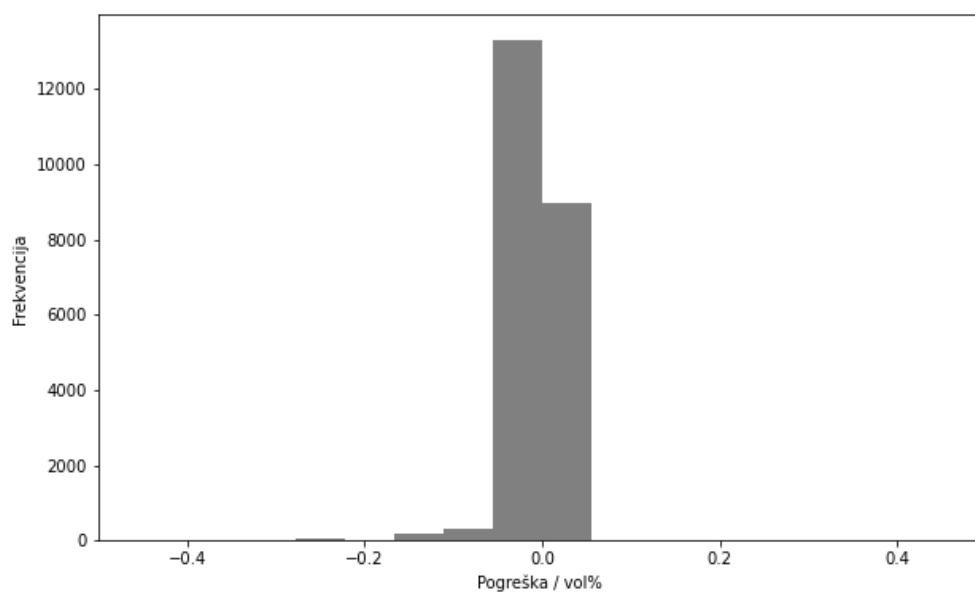


Slika 55. Trend vrijednosti pogreške na cjelokupnim podacima za LSTM model sigmoid sa 31 LSTM jedinicom i 31 vremenskim korakom u prošlost

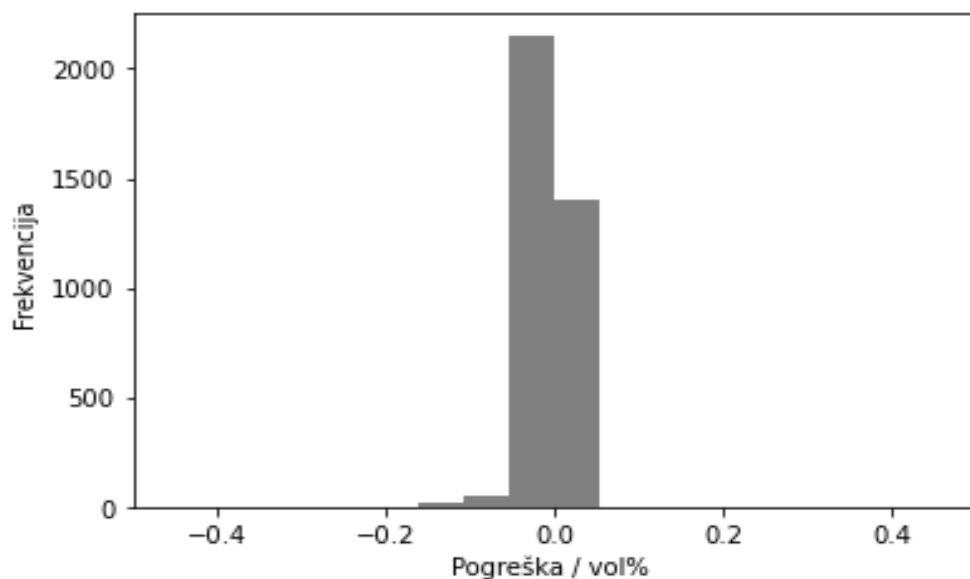


Slika 56. Trend vrijednosti pogreške na validacijskim podacima za LSTM model sigmoid sa 31 LSTM jedinicom i 31 vremenskim korakom u prošlost

Na slici 57., prikazan je histogram raspodjele vrijednosti pogreške na cjelokupnim podacima LSTM modela, a na slici 58. histogram raspodjele vrijednosti pogreške na validacijskim podacima LSTM modela. Prema oba histograma vidljivo je da je iznos pogreške uglavnom između $\pm 0.05\%$ što je dosta zadovoljavajuće.



Slika 57. Histogram raspodjele vrijednosti pogreške na cjelokupnim podacima za model sigmoid sa 31 LSTM jedinicom i 31 vremenskim korakom u prošlost



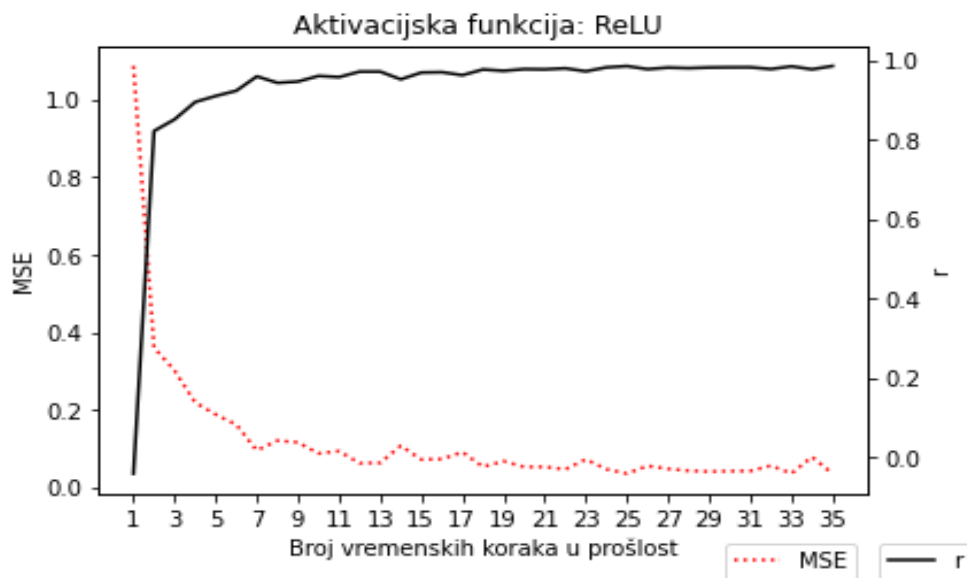
Slika 58. Histogram raspodjele vrijednosti pogreške na validacijskim podacima za model sa sigmoidnom funkcijom, 31 LSTM jedinicom i 31 vremenskim korakom u prošlost

Za aktivacijsku funkciju *ReLU*, prema slici 59., vidljivo je da se maksimum korelacije i minimalna srednja kvadratna pogreška postižu pri 33 vremenska koraka u prošlost i 33 LSTM jedinice. Za taj model dodatno je napravljena grafička analiza na test, validacijskom skupu i cjelokupnim podacima. U tablici 11. prikazane su vrijednosti srednje kvadratne pogreške na trening, test i validacijskom skupu te korelacijski faktor na trening, test, validacijskom skupu i cjelokupnim podacima. Iz numeričkih rezultata prikazanih u tablici 11. vidljivo je da koeficijenti korelacije svih skupova podataka prelaze 98,1% te da su međusobno vrlo slični. Srednja kvadratna pogreška na svim skupovima podataka je također slična i ne prelazi 0.037. Na slikama 60. i 61. prikazana je usporedba izlaznih vrijednosti predviđenih modelom i stvarnih vrijednosti sadržaja propilena na validacijskom skupu i cjelokupnim podacima gdje je vidljivo da predviđanja modela dobro prate trend stvarnih vrijednosti podataka uz nekoliko odstupanja.

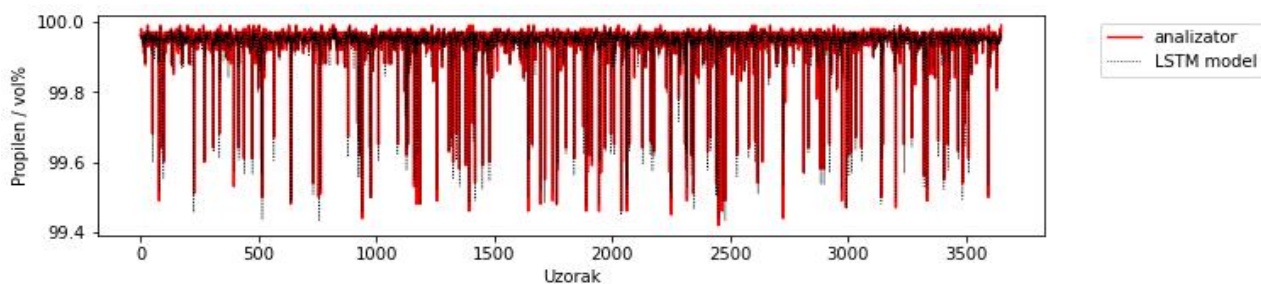
Tablica 11. Rezultati za LSTM model sa *ReLU* aktivacijskom funkcijom i 33 LSTM jedinice te 33 vremenska koraka u prošlost

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 podataka	0.981

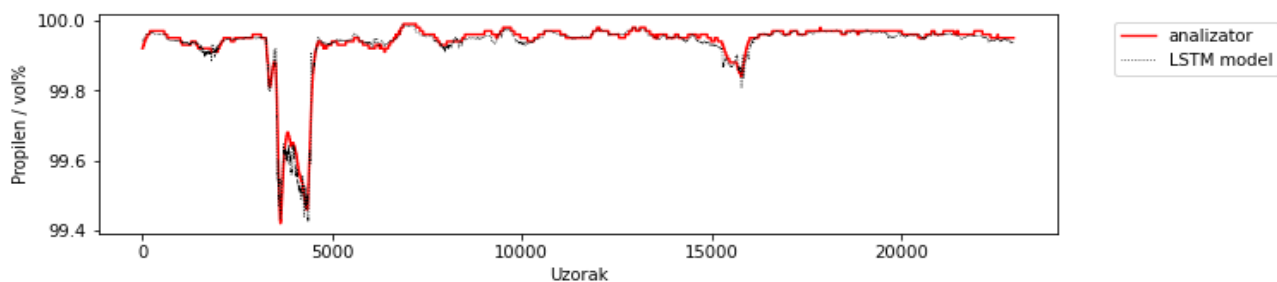
Srednja kvadratna pogreška na skupu podataka za učenje	0.036
Srednja kvadratna pogreška na test skupu podataka	0.031
Srednja kvadratna pogreška na validacijskom skupu podataka	0.037



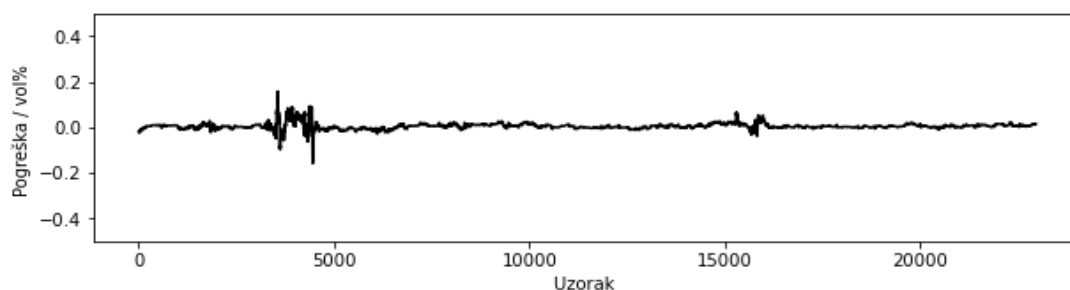
Slika 59. Utjecaj broja vremenskih koraka u prošlost LSTM modela na korelacijski faktor i srednju kvadratnu pogrešku za aktivacijsku funkciju ReLU



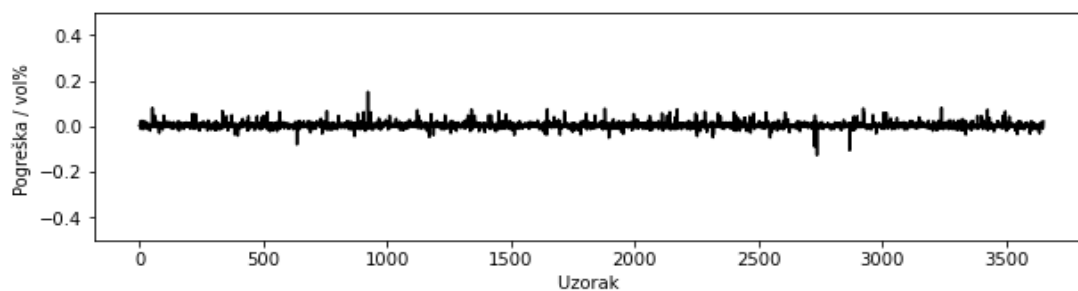
Slika 60. Usporedba između stvarnih podataka sadržaja propilena i vrijednosti dobivenih LSTM modelom na validacijskim podacima za model ReLU sa 33 LSTM jedinice i 33 vremenska koraka u prošlost



Slika 61. *Usporedba između stvarnih podataka sadržaja propilena i vrijednosti dobivenih LSTM modelom na cjelokupnim podacima za model ReLU sa 33 LSTM jedinice i 33 vremenska koraka u prošlost*

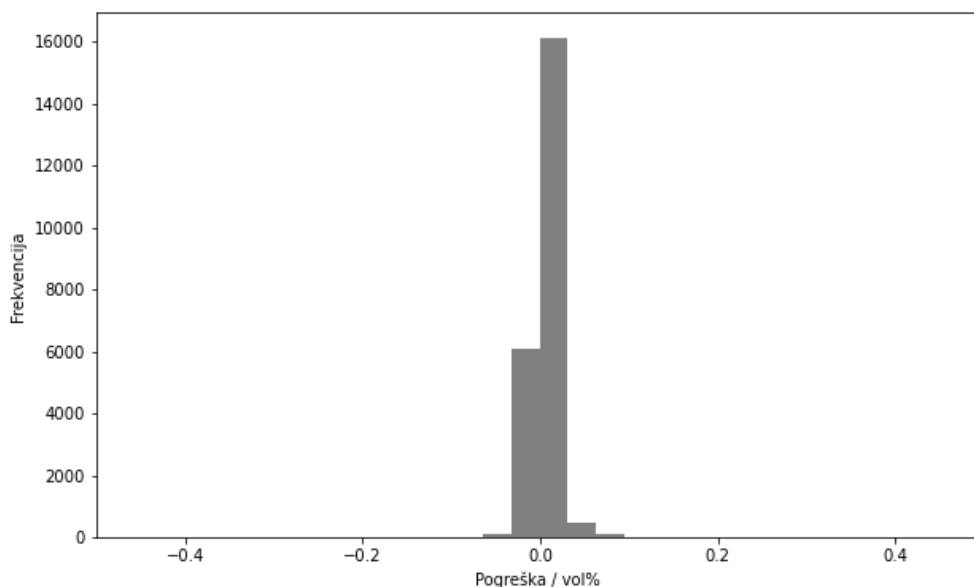


Slika 62. *Trend vrijednosti pogreške na cjelokupnim podacima za LSTM model ReLU sa 33 LSTM jedinice i 33 vremenska koraka u prošlost*

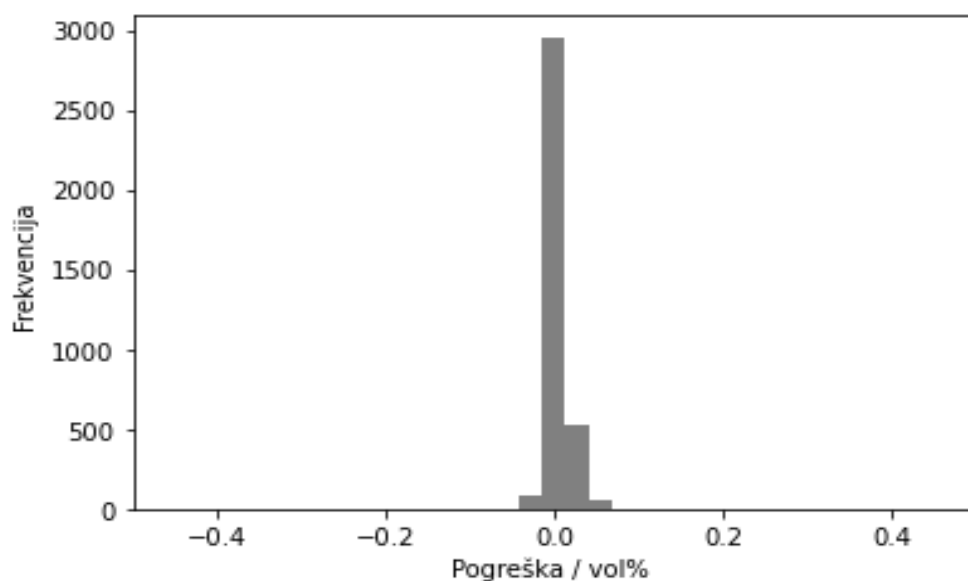


Slika 63. *Trend vrijednosti pogreške na validacijskim podacima za LSTM model ReLU sa 33 LSTM jedinice i 33 vremenska koraka u prošlost*

Na slici 64., prikazan je histogram raspodjele vrijednosti pogreške na cjelokupnim podacima LSTM modela, a na slici 65. histogram raspodjele vrijednosti pogreške na validacijskim podacima LSTM modela. Prema oba histograma vidljivo je da je iznos pogreške većinom između $\pm 0.05\%$ što ukazuje da je razvijeni LSTM model izrazito pouzdan.



Slika 64. Histogram raspodjele vrijednosti pogreške na cjelokupnim podacima za LSTM model ReLU sa 33 LSTM jedinice i 33 vremenska koraka u prošlost



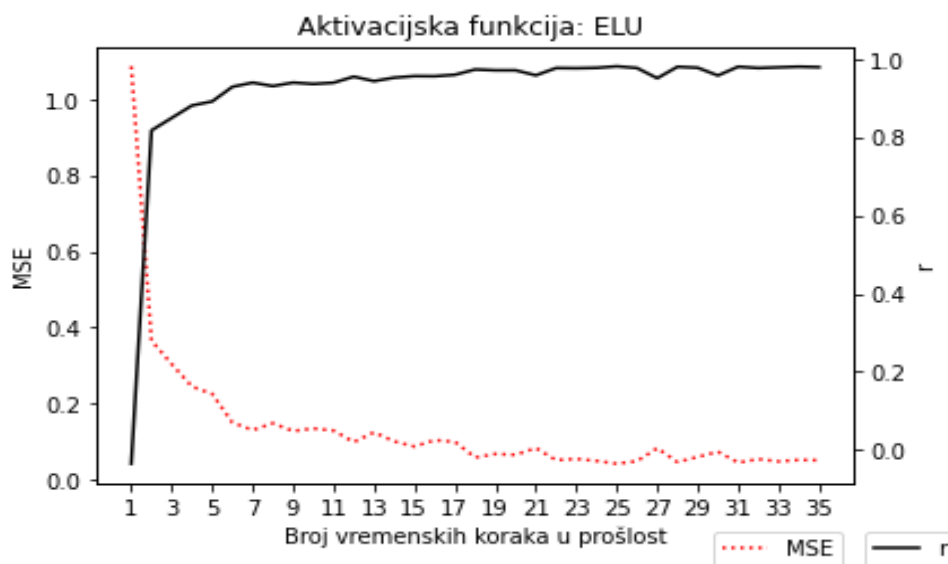
Slika 65. Histogram raspodjele vrijednosti pogreške na validacijskim podacima za LSTM model ReLU sa 33 LSTM jedinice i 33 vremenska koraka u prošlost

Za aktivacijsku funkciju *ELU*, prema slici 66., vidljivo je da se maksimum korelacije i minimalna srednja kvadratna pogreška postižu pri 31 vremenskom koraku u prošlost i 31 LSTM jedinicom. Za taj model dodatno je napravljena grafička analiza na test, validacijskom skupu i cjelokupnim podacima. U tablici 12. prikazane su vrijednosti srednje kvadratne pogreške na trening, test i validacijskom skupu te korelacijski faktor na trening, test, validacijskom skupu i

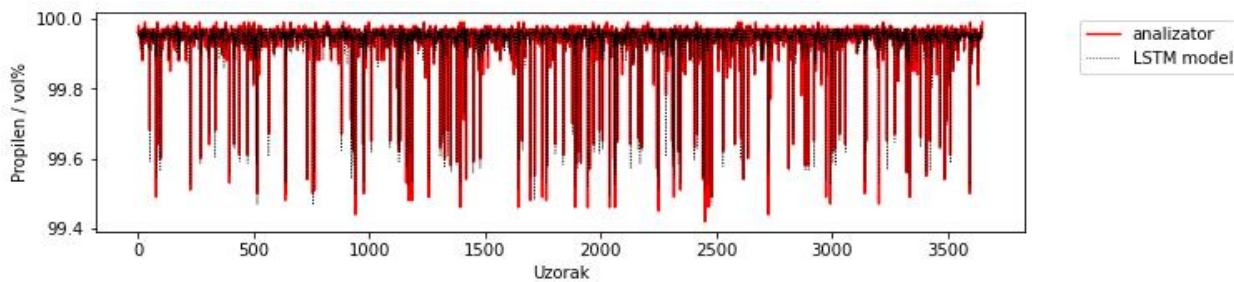
cjelokupnim podacima. Iz numeričkih rezultata prikazanih u tablici 12. vidljivo je da koeficijenti korelacije svih skupova podataka prelaze 98,1% te da su međusobno vrlo slični. Srednja kvadratna pogreška na svim skupovima podataka je također slična i ne prelazi 0.045. Na slikama 67. i 68.. prikazana je usporedba izlaznih vrijednosti predviđenih modelom i stvarnih vrijednosti sadržaja propilena na validacijskom skupu i cjelokupnim podacima gdje je vidljivo da predviđanja modela dobro prate trend stvarnih vrijednosti podataka uz nekoliko odstupanja.

Tablica 12. Rezultati za LSTM model sa ELU aktivacijskom funkcijom i 31 LSTM jedinicom te 31 vremenskim korakom u prošlost

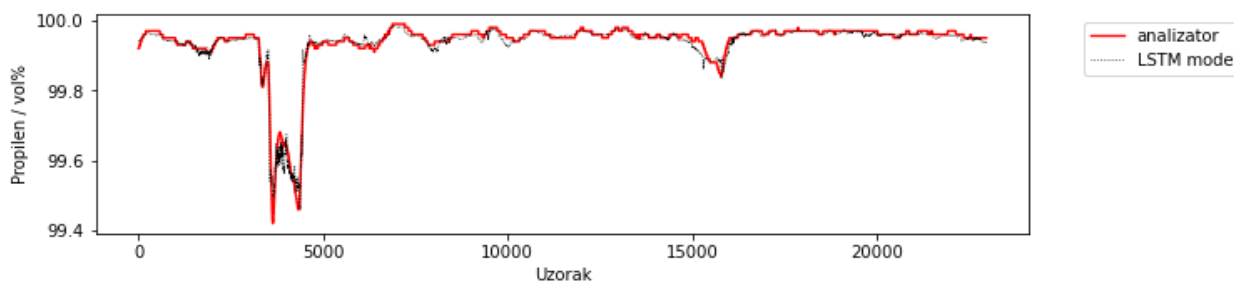
Korelacija na cjelokupnim podacima	0.981
Korelacija na skupu podataka za učenje	0.981
Korelacija na test skupu podataka	0.982
Korelacija na validacijskom skupu podataka	0.983
Srednja kvadratna pogreška na skupu podataka za učenje	0.045
Srednja kvadratna pogreška na test skupu podataka	0.039
Srednja kvadratna pogreška na validacijskom skupu podataka	0.041



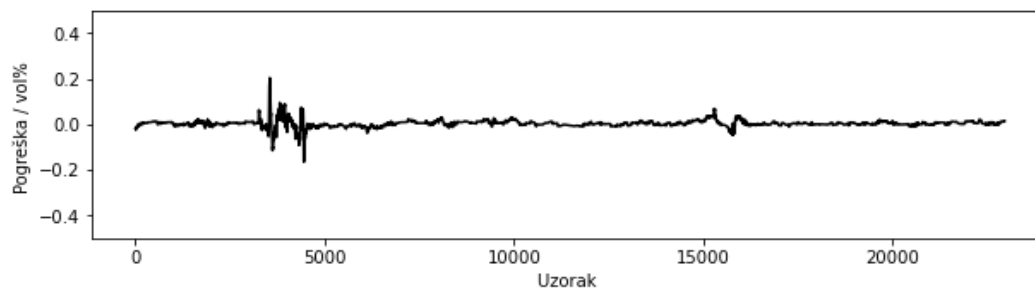
Slika 66. Utjecaj broja vremenskih koraka u prošlost LSTM modela na korelacijski faktor i srednju kvadratnu pogrešku za aktivacijsku funkciju ELU



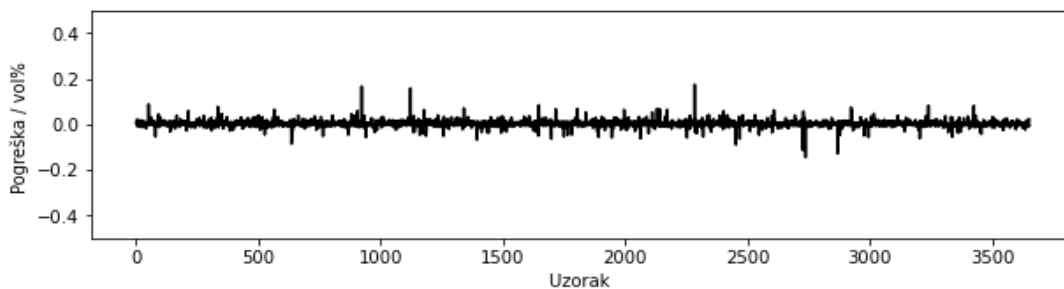
Slika 67. Usporedba stvarnih podataka sadržaja propilena i vrijednosti dobivenih LSTM modelom na validacijskim podacima za model sa ELU funkcijom, 31 LSTM jedinicom i 31 vremenskim korakom u prošlost



Slika 68. Usporedba stvarnih podataka sadržaja propilena i vrijednosti dobivenih LSTM modelom na cjelokupnim podacima za model sa ELU funkcijom, 31 LSTM jedinicom i 31 vremenskim korakom u prošlost

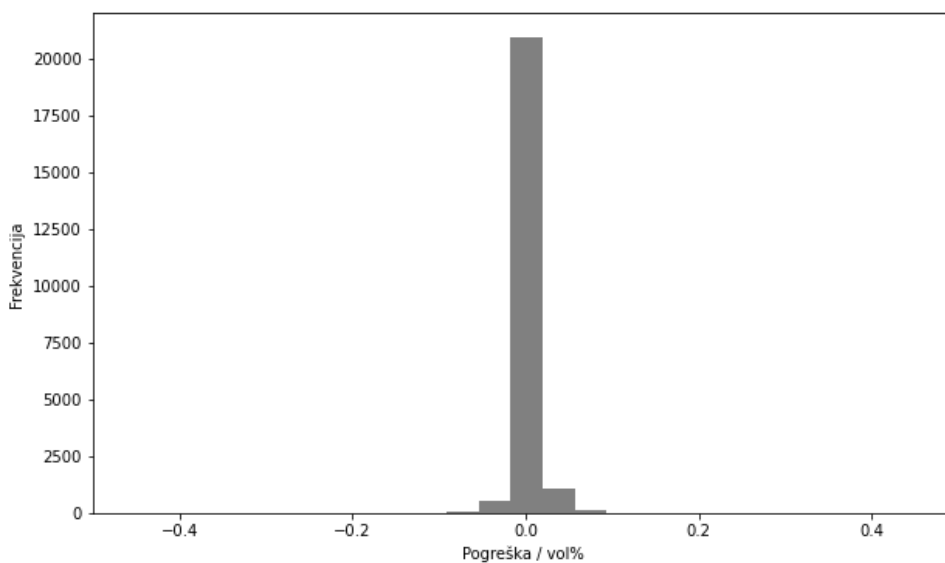


Slika 69. Trend vrijednosti pogreške na cjelokupnim podacima za LSTM model ELU sa 31 LSTM jedinicom i 31 vremenskim korakom u prošlost

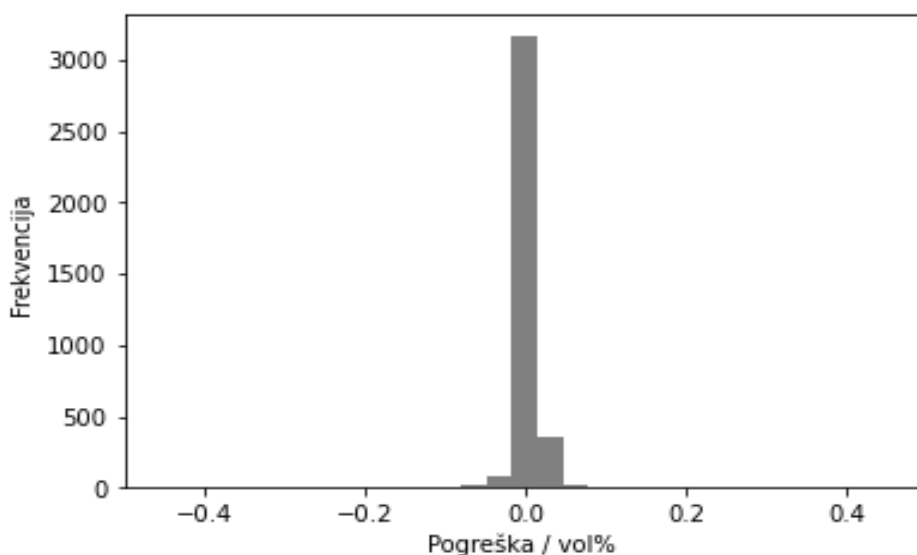


Slika 70. Trend vrijednosti pogreške na validacijskim podacima za LSTM model sa ELU funkcijom, 31 LSTM jedinicom i 31 vremenskim korakom u prošlost

Na slici 71., prikazan je histogram raspodjele vrijednosti pogreške na cjelokupnim podacima LSTM modela, a na slici 72. histogram raspodjele vrijednosti pogreške na validacijskim podacima LSTM modela. Prema oba histograma pogreške vidljivo je da je iznos pogreške većinom između $\pm 0.05\%$ što je zadovoljavajuće.



Slika 71. Histogram raspodjele vrijednosti pogreške na cjelokupnim podacima za LSTM model sa ELU funkcijom, 31 LSTM jedinicom i 31 vremenskim korakom u prošlost



Slika 72. Histogram raspodjele vrijednosti pogreške na cjelokupnim podacima za LSTM model ELU sa 31 LSTM jedinicom i 31 vremenskim korakom u prošlost

Tablica 13. Usporedba modela LSTM s obzirom na korelacijske faktore i srednje kvadratne pogreške za različite aktivacijske funkcije

Aktivacijska funkcija	<i>tanh</i>	<i>Sigmoid</i>	<i>ReLU</i>	<i>ELU</i>
Broj LSTM jedinica	25,	31,	33,	31,
Broj vremenskih koraka u prošlost	25	31	33	31
Korelacija na cjelokupnim podacima	0.981	0.940	0.985	0.981
Korelacija na skupu podataka za učenje	0.982	0.938	0.985	0.981
Korelacija na test skupu podataka	0.979	0.948	0.986	0.982
Korelacija na validacijskom skupu podataka	0.981	0.951	0.981	0.983
Srednja kvadratna pogreška na skupu podataka za učenje	0.047	0.129	0.036	0.045
Srednja kvadratna pogreška na test skupu podataka	0.045	0.110	0.031	0.039
Srednja kvadratna pogreška na validacijskom skupu podataka	0.045	0.114	0.037	0.041

Prema rezultatima prikazanim u tablici 13., zaključeno je da su svi LSTM modeli zadovoljavajuće točnosti za primjenu na postrojenju prema kriteriju jako visokih vrijednosti korelacijskih faktora. Najmanju srednju kvadratnu pogrešku na test skupu pokazuje model sa *ReLU* funkcijom i 33 vremenska koraka u prošlost i 33 LSTM jedinice u skrivenom sloju, a nešto veću model *ELU* sa 31 vremenskim korakom u prošlost i 31 LSTM jedinicom u

skrivenom sloju. Prema slikama 59. i 66. zaključeno je da modeli s aktivacijskim funkcijama *ReLU* i *ELU* pokazuju jednaku stabilnost sa promjenom broja vremenskih koraka i LSTM jedinica u skrivenom sloju. Najveće odstupanje pokazuje model s aktivacijskom funkcijom *sigmoid* sa 31 vremenskim korakom u prošlost i 31 LSTM jedinicom, i to sa srednjom kvadratnom pogreškom koja je veća za puni red veličine od pogrešaka drugih modela te otprilike 4% manjom korelacijom od ostalih modela.

5. ZAKLJUČAK

U PPS postrojenju u rafineriji nafte Rijeka vrlo je važno kontinuirano pratiti količinu propilen proizvoda u produktu procesa razdvajanja propilena i propana zbog ekonomičnosti procesa. Minimalna potrebna čistoća propilena iznosi 99,6 vol% kako bi bio povoljan za korištenje u svrhu proizvodnje polimera.

Primjena softverskog senzora za *on-line* provjeru kvalitete proizvoda uvelike bi olakšala i poboljšala vođenje procesa budući da su troškovi primjene i održavanja *on-line* analizatora iznimno visoki. Rad je prikazao razvoj modela neuronskih mreža s višeslojnim perceptronima i neuronskih mreža s dugotrajnim kratkoročnim pamćenjem u svrhu praćenja količine propilena u produktu PPS postrojenja. Modeli su razvijani u programskom jeziku Python uz pomoć *open-source* integriranog razvojnog okruženja otvorenog koda Spyder.

Od stotine razvijenih modela u konačnici je izabran po jedan najbolji model za neuronske mreže s višeslojnim perceptronima i jedan model neuronskih mreža s dugotrajnim kratkoročnim pamćenjem. Kao najbolji model iz skupine MLP modela izabran je model s aktivacijskom funkcijom *tanh* i 17 neurona u skrivenom sloju zbog veće stabilnosti pogreške, a kao najbolji model iz skupine LSTM modela izabran je model s aktivacijskom funkcijom *ReLU* te 33 vremenska koraka u prošlost i 33 LSTM jedinice u skrivenom sloju. Usporedbom histograma pogreške na cjelokupnim podacima ta 2 modela, prema slikama 29. i 64., vidljivo je da za MLP model najveći dio pogrešaka spada u ± 0.1 vol% dok je kod LSTM modela vidljivo da je iznos pogreške većinom između ± 0.05 vol%. S obzirom na sve grafičke i numeričke rezultate prednost ima LSTM model zbog većih korelacija, manjih pogrešaka te bolje stabilnosti modela prilikom promjene hiperparametara.

Najbolji modeli iz obje vrste softverskih senzora su dala više nego zadovoljavajuće rezultate sa sličnim vrijednostima koeficijenta korelacije i pogreške izlaznih podataka modela te se oba modela mogu primijeniti u rafinerijskom informacijskom sustavu.

Na temelju primjene razvijenih softverskih senzora moguće je očekivati poboljšanje vođenja procesa i konačne kvalitete proizvoda, a time i značajne uštede u proizvodnji.

6. LITERATURA

- [1] I.Ahmad, A. Ayub , M. Kano, I. I. Cheema, Gray-box Soft Sensors in Process Industry: Current Practice, and Future Prospects in Era of Big Data, *Processes* (2020), 8, 243
- [2] URL: <https://www.indeed.com/career-advice/career-development/3-sigma>
- [3] URL: <https://www.scribbr.com/statistics/pearson-correlation-coefficient/>
- [4] P. Kadlec, B. Gabrys, S. Strandt, Data-driven Soft Sensors in the process industry, *Computers & Chemical Engineering* (2009), 33, str. 795.-814.
- [5] L. Moroney, AI and Machine Learning for Coders A Programmer's Guide to Artificial Intelligence, O'Reilly Media, Sebastopol, 2020., str. 1-7.
- [6] T. M. Mitchell, *Machine learning* , Vol. 1 , McGraw-hill New York, New York, 1997., str. 2
- [7] J.Alzubi , A. Nayyar , A.Kumar, Machine Learning from Theory to Algorithms: An Overview, *J. Phys.: Conf. Ser. 1142*, 2018, str. 012012
- [8] E.Grossi, M. Buscema, Introduction to artificial neural networks, *European journal of gastroenterology & hepatology 19* (2008), str. 1046.-1054.
- [9] D. R. Baughman, Y. A. Liu, Neural networks in Bioprocessing and Chemical Engineering, Academic Press, San Diego, 1995., str.1-87
- [10] URL: <https://colah.github.io/posts/2015-08-Understanding-LSTMs/>
- [11] S. Sharma, S. Sharma, A. Athaiya, Activation functions in neural networks, *International Journal of Engineering Applied Sciences and Technology* Vol. 4(12) (2020), str. 310.-316.
- [12] A. Krogh, What are artificial neural networks?, *Nat Biotechnol* 26 (2008.), str. 195.–197.
- [13] <https://www.eia.gov/todayinenergy/detail.php?id=9150>
- [14] P. Bryan, Removal of Propylene from Fuel-Grade Propane, *Separation and Purification Reviews* 33 (2007), str. 157.-182.

7. POPIS SIMBOLA

PPS – propan/propilen splitter

UNP – ukapljeni naftni plin

FCC – fluidizirano katalitičko kreiranje

E - iskustvo

T - zadatak

P – učinak

f – aktivacijska funkcija

w_i - težinski koeficijent

θ – prag osjetljivosti neurona

MLP – višeslojni perceptron

RNN – povratna neuronska mreža

LSTM – mreža s dugotrajnim kratkoročnim pamćenjem

x_t - ulazna informacija trenutnog vremenskog koraka

b – unutarnji prag

h_{t-1} – skriveno stanje iz prethodnog vremenskog koraka

c_{t-1} – stanje ćelije iz prethodnog vremenskog koraka

c_t – stanje ćelije u trenutnom vremenskom koraku

h_t – skriveno stanje u trenutnom vremenskom koraku

MSE – srednja kvadratna pogreška

