

Predviđanje nastajanja naslaga u industrijskom izmjenjivaču topline primjenom metoda strojnog učenja

Vretenar, Filip

Master's thesis / Diplomski rad

2024

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:149:920595>

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

Download date / Datum preuzimanja: **2025-04-01**



FKITMCMXIX

Repository / Repozitorij:

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



zir.nsk.hr



SVEUČILISTE U ZAGREBU
FAKULTET KEMIJSKOG INŽENJERSTVA I TEHNOLOGIJE
SVEUČILIŠNI DIPLOMSKI STUDIJ

Filip Vretenar

DIPLOMSKI RAD

Zagreb, studeni 2024.

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
FAKULTET KEMIJSKOG INŽENJERSTVA I TEHNOLOGIJE
POVJERENSTVO ZA DIPLOMSKE ISPITE

Kandidat **Filip Vretenar**

Predao je izraden diplomski rad dana: 26. studenog 2024.

Povjerenstvo u sastavu:

Izv. prof. dr. sc. Željka Ujević Andrijić, Sveučilište u Zagrebu
Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije

Dr. sc. Srećko Herceg, Sveučilište u Zagrebu Fakultet
kemijskog inženjerstva i tehnologije

Izv. prof. dr. sc. Igor Dejanović, Sveučilište u Zagrebu
Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije

Dr. sc. Goran Lukač, Sveučilište u Zagrebu Fakultet
kemijskog inženjerstva i tehnologije (zamjena)

povoljno je ocijenilo diplomski rad i odobrilo obranu diplomskog
rada pred povjerenstvom u istom sastavu.

Diplomski ispit održat će se dana: 29. studenog 2024.

SVEUČILISTE U ZAGREBU
FAKULTET KEMIJSKOG INŽENJERSTVA I TEHNOLOGIJE
SVEUČILIŠNI DIPLOMSKI STUDIJ
KEMIJSKO INŽENJERSTVO

Filip Vretenar

PREDVIĐANJE NASTAJANJA NASLAGA U INDUSTRIJSKOM
IZMJENJIVAČU TOPLINE PRIMJENOM METODA STROJNOG UČENJA

DIPLOMSKI RAD

Mentor: izv. prof. dr. sc. Željka Ujević Andrijić, FKIT

Članovi ispitnog povjerenstva:

izv. prof. dr. sc. Željka Ujević Andrijić, FKIT

dr. sc. Srećko Herceg, FKIT

izv. prof. dr. sc. Igor Dejanović, FKIT

Zagreb, studeni 2024.

Ovaj diplomski rad izrađen je pod vodstvom izv. prof. dr. sc. Željke Ujević Andrijić na Zavodu za mjerenja i automatsko vođenje procesa na Fakultetu kemijskog inženjerstva i tehnologije Sveučilišta u Zagrebu. Prvenstveno se zahvaljujem mentorici izv. prof. dr. sc. Željki Ujević Andrijić na strpljenju, pomoći, pruženom povjerenju i savjetima tijekom izrade ovog rada. Također se želim zahvaliti mag. ing. oecoing. Nikoli Rimcu na strpljenju i pomoći pri izradi modela. Zahvaljujem Emi na velikoj podršci pri izradi rada.

Sažetak

Nastajanje naslaga u industrijskim izmjenjivačima topline smanjuje učinkovitost izmjenjivača, povećava operativne troškove, dovodi do veće potrošnje energenata i posljedično povećane emisije CO₂. Naslage predstavljaju jedan od najvećih problema u rafinerijskim postrojenjima, a njihovo nastajanje posebno je izraženo u sekciji za predgrijavanje sirove nafte. Kako bi se optimiziralo održavanje izmjenjivača topline i postigle financijske uštede, potrebno je kontinuirano pratiti nastajanje naslaga u izmjenjivačima topline. Zbog složenog sastava sirove nafte, nepoznatog mehanizma nastajanja naslaga i promjenjivih procesnih uvjeta ne postoji opće prihvaćeni empirijski ili polu-empirijski model za praćenje nastajanja naslaga u izmjenjivačima topline u sekciji za predgrijavanje. Stoga se sve češće koriste modeli temeljeni na podacima. U ovom diplomskom radu, razvijeni su modeli umjetnih neuronskih mreža i modeli ekstremnog gradijentnog pojačavanja za predviđanje izlazne temperature tople i hladne struje čistog izmjenjivača topline. Modeli su razvijeni koristeći fizikalno-kemijska svojstva sirove nafte i kontinuirane praćene procesne varijable iz rafinerijskog postrojenja. Postupna razlika između predviđenih i stvarnih temperatura ukazuje na smanjenje učinkovitosti izmjenjivača topline zbog prisutnosti naslaga. Najbolji modeli detaljnije su analizirani, a njihove izlazne temperature korištene su za izračun *fouling* faktora, koji pruža kvantitativan uvid u proces nastajanja naslaga. Koristeći ovu metodologiju može se dobiti uvid u trend nastajanja naslaga. Primjena razvijenih modela na rafinerijskom postrojenju omogućila bi kontinuirano praćenje nastajanja naslaga u izmjenjivačima topline, čime bi se postigle značajne financijske uštede i osiguralo pravovremeno čišćenje izmjenjivača.

Ključne riječi: izmjenjivač topline, nastajanje naslaga, neuronske mreže, ekstremno gradijentno pojačavanje, sirova nafta

Abstract

Fouling formation in industrial heat exchangers reduces their efficiency, increases operational costs, leads to higher energy consumption which consequently raises CO₂ emissions. Fouling is one of the biggest problems in refineries, particularly pronounced in crude oil preheating plant. To optimize the maintenance of heat exchangers and achieve financial savings, it is essential to continuously monitor fouling formation in heat exchangers. Due to the complex composition of crude oil, the unknown mechanisms of fouling formation, and variable process conditions, there is no generally accepted empirical or semi-empirical model for monitoring fouling in heat exchangers within the preheat train. Therefore, it has become a common practice to use data-driven models. In this master's thesis, artificial neural network and Extreme Gradient Boosting models have been developed to predict the outlet temperatures of the hot and cold streams of the clean heat exchanger. These models were developed using the physicochemical properties of crude oil and continuously monitored process variables from the refinery. The gradual difference between the predicted and actual temperatures indicates a reduction in the efficiency of the heat exchanger due to the presence of fouling. The best models were analyzed in detail, and their outlet temperatures were used to calculate the fouling factor, which provides quantitative insight into the fouling formation process. Using this methodology, it is possible to gain insight into the trend of fouling formation. The application of the developed models in the refinery would enable continuous monitoring of fouling in heat exchangers, resulting in significant financial savings and ensuring timely cleaning of the exchangers.

Key words: heat exchanger, fouling formation, neural networks, Extreme Gradient Boosting, crude oil

Sadržaj

1. Uvod.....	1
2. Teorijski dio	2
2.1. Izmjenjivači topline.....	2
2.2. Naslage	3
2.2.1. Proces nastajanja naslaga	5
2.2.2. Naslage u sekciji za predgrijavanje sirove nafte	6
2.2.3. Prevencija nastanka naslaga i čišćenje izmjenjivača.....	7
2.2.4. Metode praćenja nastajanja naslaga	8
2.3. Strojno učenje.....	9
2.4. Umjetne neuronske mreže	11
2.4.1. Klasifikacija neuronskih mreža	14
2.4.2. Aktivacijske funkcije.....	14
2.4.3. Funkcija gubitka	18
2.4.4. Metoda gradijentnog spusta	18
2.4.4. Algoritam unatražne propagacije	19
2.4.5. Koeficijent brzine učenja	20
2.4.6. Prevencija pretreniranosti modela	20
2.5. Stablo odlučivanja	21
2.6. Slučajna šuma.....	22
2.7. Pojačavanje.....	23
2.8. Gradijentno pojačavanje.....	24
2.9. Ekstremno gradijentno pojačavanje (XGBoost)	25
2.9.1. Karakteristike XGBoost algoritma.....	25
2.9.2. Načela rada XGBoost algoritma	26
2.9.3. Hiperparametri XGBoost algoritma	28
3. Eksperimentalni dio.....	29
3.1. Sekcija za predgrijavanje sirove nafte.....	29
3.2. Prikupljanje podataka	30
3.3. Softversko razvojno okruženje.....	30
3.4. Predobrada podataka	32
3.4.1. <i>Hampel</i> filtar	32
3.4.2. Koeficijenti korelacije	32
3.4.3. Skaliranje podataka	34
3.5. Metodologija razvoja modela.....	35
3.6. Razvoj modela neuronskih mreža	36
3.7. Razvoj XGBoost modela.....	37

3.8. Izračun ukupnog koeficijenta prijenosa topline i <i>fouling</i> faktora	38
3.9. Vrednovanje modela neuronskih mreža i XGBoost modela.....	39
4. Rezultati i rasprava.....	40
4.1. Modeli neuronskih mreža.....	40
4.1.1. Modeli neuronskih mreža za predviđanje izlazne temperature tople struje	40
4.1.2. Modeli neuronskih mreža za predviđanje izlazne temperature hladne struje	45
4.1.3. <i>Fouling</i> faktor (izračunat modelom neuronske mreže)	50
4.2. XGBoost modeli.....	51
4.2.1. XGBoost modeli za predviđanje izlazne temperature tople struje.....	51
4.2.2. XGBoost modeli za predviđanje izlazne temperature hladne struje	56
4.2.3. <i>Fouling</i> faktor (izračunat XGBoost modelom)	61
5. Zaključak.....	62
6. Literatura	63
7. Popis simbola	68
8. Životopis.....	70

1. Uvod

Jedan od najvećih izazova u radu rafinerijskih postrojenja je nastajanje naslaga u izmjenjivačima topline. Naslage povećavaju otpor prijenosu topline i operativne troškove, ugrožavaju stabilnost rada postrojenja i negativno utječu na mehaničke značajke izmjenjivača. Stoga je važno kontinuirano pratiti nastajanje naslaga kako bi se optimiziralo održavanje izmjenjivača topline i postigle financijske uštede. [1,2]

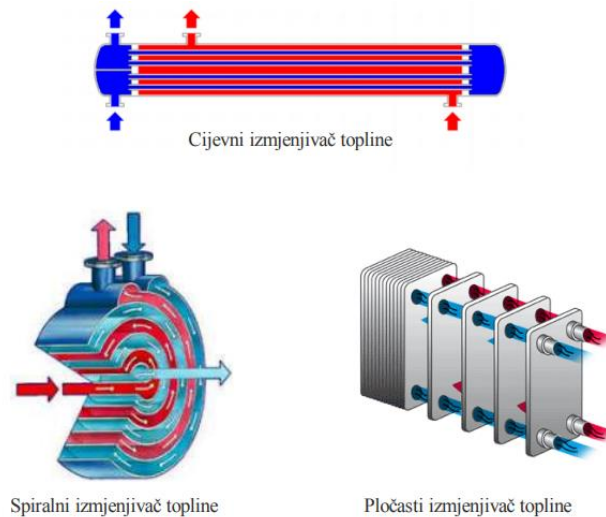
Atmosferska destilacija sirove nafte je prvi korak u procesu rafiniranja, a energija potrebna za ovaj proces dobiva se iz sirove nafte koja se prethodno zagrijava u sekciji za predgrijavanje i peći. Naslage u izmjenjivačima topline u sekciji za predgrijavanje sirove nafte dovode do povećane potrošnje goriva u peći, što posljedično uzrokuje znatno veće operativne troškove i emisije CO₂. Nastajanje naslaga u sekciji za predgrijavanje sirove nafte predstavlja složen problem koji uključuje različite mehanizme i njihove kombinacije. S obzirom na ovu složenost i promjenjive procesne uvjete, sve češće se koriste modeli temeljeni na podacima (engl. *data-driven models*). Ovi modeli ne pružaju cjelovito fizikalno-kemijsko razumijevanje mehanizama nastajanja naslaga, no omogućuju prepoznavanje odnosa između ulaznih i izlaznih varijabli, što je uglavnom dovoljno za precizno predviđanje vladanja procesa. [1,2]

U ovom radu razvijeni su modeli umjetnih neuronskih mreža (engl. *Artificial Neural Networks*, ANN) i modeli ekstremnog gradijentnog pojačavanja (engl. *Extreme Gradient Boosting*, XGBoost) za predviđanje izlazne temperature toplog i hladnog medija čistog izmjenjivača topline. Ulazne varijable modela uključuju fizikalno-kemijska svojstva sirove nafte i kontinuirano praćene procesne varijable. Modeli su razvijeni koristeći podatke iz inicijacijske faze rada izmjenjivača, kada se pretpostavlja da nema naslaga. Ovako razvijeni modeli, na novim podacima nakon inicijacijske faze kada nastanu određene naslage u izmjenjivaču, predviđaju izlazne temperature kakve bi bile da je izmjenjivač ostao čist. Postupna razlika između predviđenih i stvarnih izlaznih temperatura nakon inicijacijske faze, ukazuje na smanjenje učinkovitosti izmjenjivača topline zbog prisutnosti naslaga. Pomoću predviđenih i stvarnih izlaznih temperatura izračunava se *fouling* faktor, koji kvantificira otpor nastalih naslaga. Korištenjem ove metodologije, dobiva se uvid u tijek, odnosno trend nastajanja naslaga. Primjena ovakvih modela na rafinerijskom postrojenju mogla bi pomoći u optimizaciji održavanja izmjenjivača topline, smanjenju operativnih troškova i emisija CO₂.

2. Teorijski dio

2.1. Izmjenjivači topline

Izmjenjivači topline su uređaji u kojima se toplinska energija prenosi s jednog fluida na drugi bez međusobnog miješanja ta dva fluida. Neizostavan su dio opreme u rafinerijama nafte, kemijskim i petrokemijskim postrojenjima, obradi prirodnog plina, klimatizaciji, automobilskoj industriji i drugim industrijama. Zbog njihove široke primjene, postoji velik broj klasifikacija izmjenjivača topline. [3,4] Jedna od njih je klasifikacija prema konstrukciji, koja dijeli izmjenjivače topline na cijevne, pločaste i spiralne (Slika 1.). Najširu industrijsku primjenu imaju cijevni izmjenjivači topline, iako spiralni i pločasti izmjenjivači zauzimaju manje prostora u odnosu na cijevne izmjenjivače s istom površinom izmjene.



Slika 1. Klasifikacija izmjenjivača topline prema konstrukciji [4]

Još jedna značajna klasifikacija izmjenjivača topline odnosi se na smjer strujanja fluida, prema kojem se izmjenjivači dijele na istostrujne, protustrujne i križne. Kod istostrujnih izmjenjivača topline topli i hladni fluid ulaze na istoj strani, dok kod protustrujnih ulaze na suprotnim stranama. Kod križnih izmjenjivača topline topli i hladni fluid ulaze okomito jedan na drugoga. [4]

U izmjenjivačima topline prijenos topline odvija se konvekcijom i kondukcijom, a rijetko i radijacijom. Toplina se kroz fluide prenosi konvekcijskim mehanizmom, dok se kroz stijenku izmjenjivača prenosi kondukcijskim mehanizmom. Mehanizam koji pruža veći otpor prijenosu topline bit će kontrolirajući, odnosno ograničavat će ukupnu učinkovitost prijenosa topline kroz sustav. [3,4]

Bilanca topline u idealnom izmjenjivaču topline može se definirati sljedećim izrazima:

$$\dot{Q}_T = \dot{m}_T \cdot c_{p,T} \cdot \Delta T_T \quad (1)$$

$$\dot{Q}_H = \dot{m}_H \cdot c_{p,H} \cdot \Delta T_H \quad (2)$$

gdje je \dot{Q} toplinski tok (W), \dot{m} je maseni protok (kg/s), c_p je specifični toplinski kapacitet (J/kg·K), a ΔT je razlika između temperature fluida na ulazu i izlazu iz izmjenjivača topline. Oznake T i H predstavljaju topli i hladni fluid. [1]

Prijenos topline može se izračunati sljedećom jednadžbom:

$$\dot{Q} = K \cdot A \cdot \Delta T_{LM} \quad (3)$$

gdje je K ukupni koeficijent prijenosa topline (W/m²·K⁻¹), A je površina izmjene topline (m²), a ΔT_{LM} je srednja logaritamska razlika temperatura (K). [1] Ukupni koeficijent prijenosa topline definira se kao recipročna vrijednost sume svih otpora koji postoje u sustavu, uključujući kondukcijski, konveksijski i otpor naslaga. Može se prikazati sljedećom jednadžbom:

$$K = \frac{1}{\sum_i R_i} = \frac{1}{\sum_j R_{konveksijski,j} + \sum_k R_{kondukcijski,k} + \sum_l R_{f,l}} \quad (4)$$

gdje je $R_{konveksijski}$ faktor otpora prijenosu topline konveksijom, $R_{kondukcijski}$ je faktor otpora prijenosu topline kondukcijom, a R_f je faktor otpora naslaga (engl. *fouling factor*). Ukupan koeficijent prijenosa topline također se može izraziti sljedećom jednadžbom:

$$K = \frac{\dot{m} \cdot c_p \cdot \Delta T}{A \cdot F \cdot \Delta T_{LM}} \quad (5)$$

gdje je F geometrijski korekcijski faktor. [1,4]

2.2. Naslage

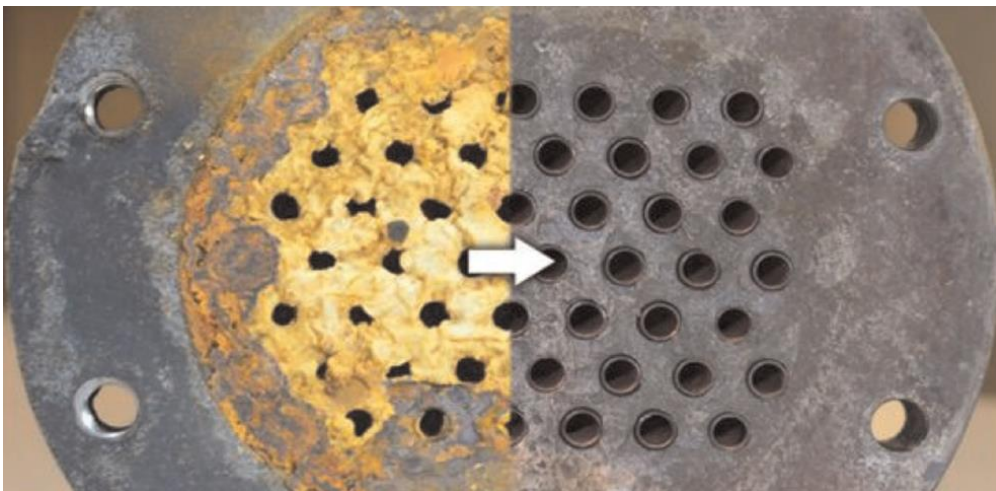
Učinkovitost izmjenjivača topline ovisi o površini izmjene topline koja bi trebala biti čista i nekorodirana. Naslage (engl. *fouling*) se definiraju kao akumulacija i stvaranje nepoželjnog materijala na površinama procesne opreme. Povećavaju otpor prijenosu topline i uzrokuju pad tlaka, što rezultira smanjenjem učinkovitosti izmjenjivača topline. Nastajanje naslaga je izuzetno kompleksan fenomen te se smatra glavnim neriješenim problemom u

prijenosu topline. [4,5,6] *Fouling* faktor, R_f , kvantitativno izražava otpor naslaga koje se stvaraju na površinama procesne opreme. Može se izračunati pomoću ukupnog koeficijenta prijenosa topline čistog izmjenjivača topline i izmjenjivača s naslagama, prema jednadžbi:

$$R_f = \frac{1}{K_{s \text{ naslagama}}} - \frac{1}{K_{\text{čisti}}} \quad (6)$$

gdje je $K_{s \text{ naslagama}}$ ukupni koeficijent prijenosa topline izmjenjivača topline s naslagama, a $K_{\text{čisti}}$ je ukupni koeficijent prijenosa topline čistog izmjenjivača topline. [1]

Naslage u velikoj mjeri doprinose gubitku energije, posebno u rafinerijama, gdje gubitak može doseći i do 2% ukupne potrošnje energije. [7] Problem gubitka energije ima i ekološke i ekonomske posljedice. Naslage u izmjenjivačima topline otežavaju prijenos topline, što zahtijeva veću potrošnju goriva kako bi se postigle željene temperature. To rezultira povećanom emisijom CO₂ i dodatnim onečišćenjem okoliša. [8] Na Slici 2. prikazan je primjer usporedbe izmjenjivača topline s naslagama (lijevo) i čistog izmjenjivača topline (desno).



Slika 2. Usporedba izmjenjivača topline s naslagama i čistog izmjenjivača topline [9]

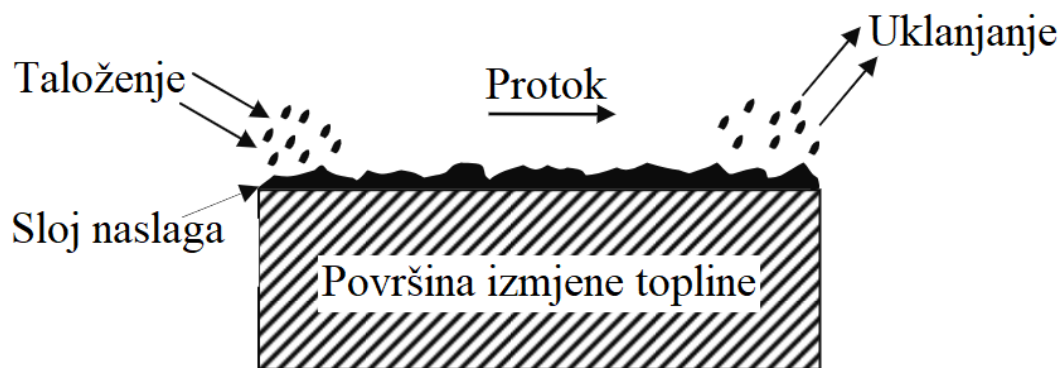
Naslage mogu biti kristalinični materijal, biološki materijal i produkti kemijskih reakcija (uključujući koroziju). Svojstva naslaga ovise o fluidu koji prolazi kroz izmjenjivač topline. Nastajanje naslaga može uzrokovati sam fluid, na primjer u slučaju razgradnje organske tekućine uslijed određenih temperaturnih uvjeta unutar izmjenjivača topline. Međutim, naslage češće uzrokuje neka vrsta onečišćivača unutar fluida kao što su krute čestice ili mikroorganizmi. [5]

2.2.1. Proces nastajanja naslaga

Proces nastajanja naslaga rezultat je dva simultana procesa: procesa taloženja i procesa uklanjanja naslaga (Slika 3.). Ta dva procesa mogu se sažeti u pet faza [6]:

1. Formiranje materijala u masi fluida.
2. Transport materijala do granice faza naslaga-fluid.
3. Adhezija/reakcija formiranja na granici faza naslaga-fluid.
4. Uklanjanje naslaga, odnosi se spontani proces (nije ljudski faktor).
5. Transport s granice faza naslaga-fluid u fluid.

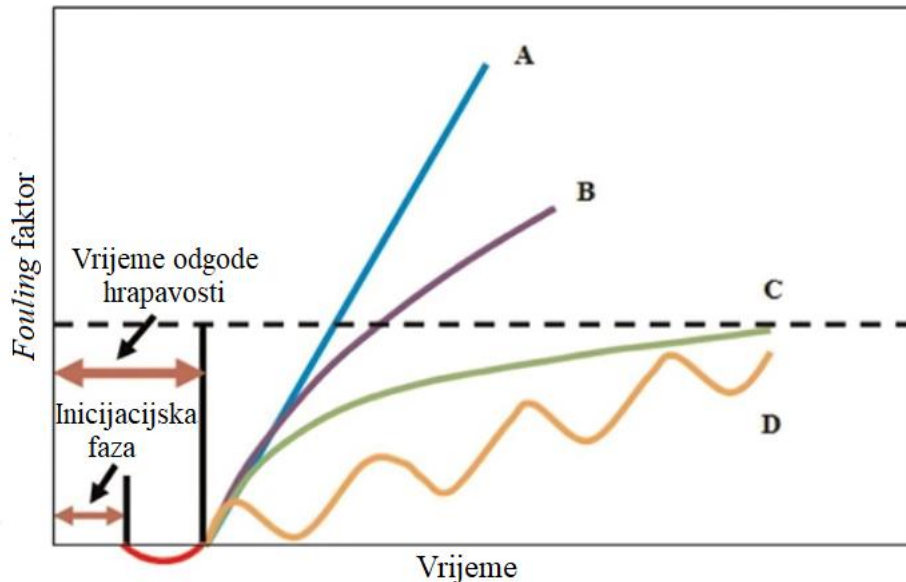
Brzina rasta naslaga može se smatrati razlikom između brzine taloženja i uklanjanja. Treba napomenuti da neka od faza ne mora biti prisutna u određenim situacijama nastajanja naslaga, primjerice, nastajanje naslaga korozijom. [6]



Slika 3. *Procesi taloženja i uklanjanja naslaga* [6]

Fouling krivulje su grafički prikazi koji prikazuju nastajanje naslaga (*fouling* faktor) kroz vrijeme. Slika 4. prikazuje klasifikaciju karakterističnih *fouling* krivulja te različite faze procesa nastajanja naslaga. U inicijacijskoj fazi se smatra da ne dolazi do nastajanja naslaga. Radi se o periodu od puštanja čistog izmjenjivača topline u rad do prvih znakova naslaga. Zbog promjena u karakteristikama protoka u blizini stijenke, početni rast naslaga može dovesti do povećanja ukupnog koeficijenta prijenosa topline umjesto njegovog smanjenja. Promjene u karakteristikama protoka uzrokuju turbulenciju koja povećava koeficijent prijenosa topline na granici između naslaga i fluida. Ovo povećanje može biti veće od smanjenja uzrokovanog otporom naslaga, što dovodi do porasta ukupnog koeficijenta prijenosa topline. Kao rezultat toga, *fouling* faktor može poprimiti negativne vrijednosti. Ovaj proces se nastavlja sve dok smanjenje ukupnog koeficijenta prijenosa topline zbog otpora naslaga ne postane veće od povećanja uzrokovanog turbulencijom. Razdoblje od samog

početka rada izmjenjivača topline do trenutka kada *fouling* faktor opet poprimi vrijednost 0 naziva se vrijeme odgode hrapavosti (engl. *roughness delay time*). U skladu s mehanizmom nastajanja naslaga i procesnim uvjetima *fouling* krivulje se nakon vremena odgode hrapavosti mogu klasificirati u četiri kategorije: linearna (A), opadajuća (engl. *falling*) (B), asimptotska (C) i *saw-tooth* (D). [9]



Slika 4. *Fouling* krivulje [9]

2.2.2. Naslage u sekciji za predgrijavanje sirove nafte

Jedan od najvećih problema u rafinerijama nafte je nastajanje naslaga u izmjenjivačima topline. Ekonomski troškovi povezani s naslagama u rafinerijama su značajni i uključuju, među ostalim, predimenzioniranje izmjenjivača topline, povećanu potrošnju goriva i ekološke kazne. [1] Panchal i Huangfu u svom radu tvrde da je gubitak temperature od 1°C u procesnim grijačima doveo do dodatnih troškova uzrokovanim potrošnjom energije od 4 milijuna dolara godišnje za rafinerije u SAD-u 2010. godine. [10] Prvi korak u rafiniranju nafte je atmosferska destilacija, a cjelokupna energija potrebna za proces destilacije dobiva se iz sirove nafte koja se zagrijava u sekciji za predgrijavanje sirove nafte i peći. [11] Tendencija je postići što više temperature u sekciji za predgrijavanje, kako bi se smanjila potrošnja goriva u peći. [12] Sekcija za predgrijavanje sirove nafte bit će detaljnije objašnjenja u eksperimentalnom dijelu ovog rada. Izmjenjivači topline u sekciji za predgrijavanje sirove nafte izrazito su skloni nastajanju naslaga. [13] Nastajanje naslaga je najizraženije u izmjenjivačima topline gdje su temperature visoke, a brzine protoka niske. [11] Zbog

složenog sastava sirove nafte i promjenjivih procesnih uvjeta, nastajanje naslaga u izmjenjivačima topline u ovoj sekciji je kompleksan fenomen. [14]

Naslage u rafinerijama nafte mogu biti organskog i anorganskog podrijetla. Njihovo nastajanje je kompleksan fenomen, posebno u sekciji za predgrijavanje sirove nafte, gdje su naslage rezultat nečistoća u sirovoj nafti, poput vode, soli, sedimenata ili korozivskih produkata nastalih zbog nečistoća. Također, naslage mogu biti rezultat taloženja asfaltena, toplinske razgradnje reaktivnih komponenata nafte ili autooksidacije komponenata nafte. [2] Prisutnost vode u nafti može dovesti do nastanka naslaga uslijed korozije. Osim toga, soli u vodi mogu uzrokovati taloženje zbog promjena u koncentraciji i temperaturi, što može dovesti do taloženja mineralnih naslaga. [5] Korozivski proizvodi, kao što su FeS, nastaju kada željezo reagira s organskim kiselinama u sirovoj nafti, što doprinosi nastajanju naslaga. Asfalteni su problematični zbog svoje velike molekulske mase, kompleksne strukture i netopljivosti u n-heptanu. Autooksidacija u sirovoj nafti stvara „gumaste“ tvari koje nisu topljive i talože se na površinama izmjenjivača topline, dok termičkom razgradnjom komponenata sirove nafte pri visokim temperaturama nastaju koks i polimeri. [11]

Nastajanje naslaga u izmjenjivačima topline u sekciji predgrijavanja sirove nafte odvija se različitim mehanizmima i njihovim kombinacijama. Procesni uvjeti u rafinerijama, poput temperature i protoka medija, mogu varirati, kao i vrsta sirove nafte koja se rafinira. Miješanje sirove nafte, koje uključuje kombiniranje različitih vrsta sirove nafte kako bi se postigla željena kvaliteta goriva, može dovesti do nestabilnih mješavina. Ove nestabilne mješavine često uzrokuju brzo nastajanje naslaga. [11] Uzimajući sve navedeno u obzir, teoretski opis fenomena nastajanja naslaga u sekciji za predgrijavanje sirove nafte postaje vrlo složen.

2.2.3. Prevencija nastanka naslaga i čišćenje izmjenjivača

Postoji niz tehnika za smanjenje nastajanja naslaga, no važno je napomenuti da su naslage kroničan problem koji se ne može u potpunosti spriječiti. Postoji nekoliko općih pristupa za prevenciju i smanjenje nastajanja naslaga u izmjenjivačima topline [6]:

1. Projektiranje postrojenja ili procesa na način da se uvjeti koji dovode do stvaranja naslaga ograniče ili smanje.
2. Uvođenje sustava za čišćenje opreme kada naslage počnu značajno utjecati na efikasnost izmjenjivača topline.

3. Korištenje kemijskih dodataka, kao što su sredstva za disperziju i inhibitori korozije, ili specifičnih sredstava protiv naslaga (engl. *antifoulants*) u tekućini koja uzrokuje nastajanje naslaga.

2.2.4. Metode praćenja nastajanja naslaga

Tradicionalne metode praćenja nastajanja naslaga u izmjenjivačima topline uključuju [1]:

- Određivanje koeficijenta prijenosa topline
- Mjerenje pada tlaka i protoka
- Mjerenje temperature
- Ultrazvučne i električne metode
- Vaganje ploča izmjenjivača topline

Navedene metode imaju nekoliko ograničenja. Prve tri metode zahtijevaju stacionarne uvjete što je često teško postići u kontinuiranoj industrijskoj proizvodnji. Pad tlaka može se značajno razlikovati za različite vrste izmjenjivača topline pri istim procesnim uvjetima i jednakom razinom kontaminacije. Metode mjerenja pada tlaka i protoka nisu osjetljive na tanke slojeve naslaga, a mjesto gdje se nalaze naslage često ostaje nepoznato. Ultrazvučne i električne metode za detekciju naslaga koriste sonde postavljene na mjesta gdje se očekuje nastajanje naslaga, ali postaju neučinkovite ako naslage nastanu na drugim mjestima. Osim toga parametri ultrazvučne metode ovise o temperaturi, stoga je potrebno uključiti korekcije vezane uz temperaturu. [1]

Kako bi se osigurao održiv i siguran rad te optimiziralo vrijeme remonta unutar programa preventivnog održavanja, potrebno je kontinuirano pratiti nastajanje naslaga u izmjenjivačima topline. [1] Stoga, znanstvenici predlažu korištenje naprednih modela za predviđanje nastajanja naslaga. [7] Zbog nedostatka analiziranih fizikalno-kemijskih varijabli sirove nafte, složenosti mehanizma nastajanja naslaga i promjena procesnih uvjeta, ne postoji opće prihvaćeni empirijski ili poluempirijski model za detekciju nastajanja naslaga u izmjenjivačima topline u sekciji za predgrijavanje sirove nafte. [2] S obzirom na nedostatak općeprihvaćenih modela i složenost mehanizama, znanstvenici se sve više okreću *data-driven* modelima. [7] Ti modeli ne pružaju detaljan fizikalni uvid u mehanizam procesa. Međutim, zadovoljavajuće opisuju odnose između ulaznih i izlaznih varijabli, što je često dovoljno za predviđanje vladanja procesa, uključujući predviđanje nastajanja naslaga u izmjenjivačima

topline. [2] Umjetne neuronske mreže posebno su korisne za predviđanje naslaga jer mogu učiti složene obrasce i prilagoditi se promjenama. Također, u istu svrhu mogu se koristiti neuronske mreže s dugotrajnim kratkoročnim pamćenjem (engl. *Long Short-Term Memory*, LSTM), regresija parcijalnih najmanjih kvadrata (engl. *Partial Least Squares*, PLS) te nelinearni modeli temeljeni na autoregresiji s egzogenim ulazima (engl. *Nonlinear Autoregressive with Exogenous Inputs*, NARX). [1,7]

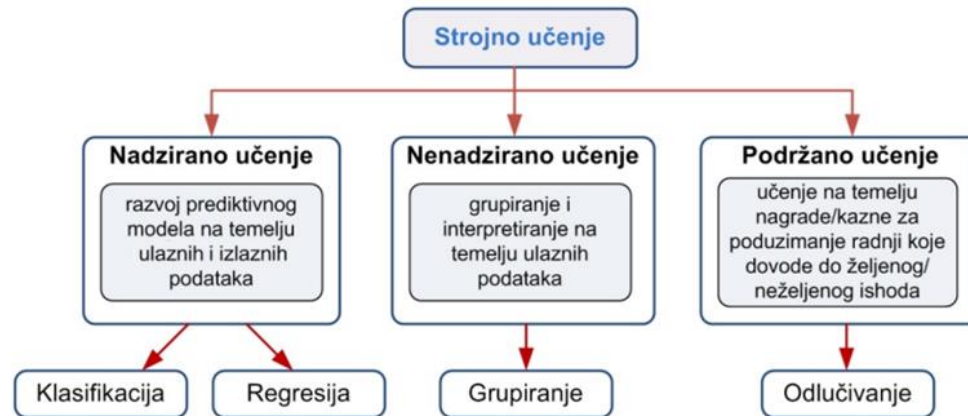
2.3. Strojno učenje

Strojno učenje (engl. *Machine Learning*) jedna je od aktualnih tema u istraživanju i industriji, koja se kontinuirano razvija kroz nove metode i algoritme. [15] To je grana umjetne inteligencije koja omogućuje sustavima da uče iz podataka bez eksplicitnog programiranja. [16] Strojno učenje integrira znanja iz statistike, umjetne inteligencije i računalne znanosti. Također je poznato i pod nazivom prediktivna analitika ili statističko učenje. Za razliku od tradicionalnih metoda umjetne inteligencije, koje se fokusiraju na automatizirano oponašanje inteligentnog ponašanja, strojno učenje koristi jedinstvene sposobnosti računala kako bi nadopunilo ljudsku inteligenciju, obavljajući zadatke koji često nadmašuju ljudske sposobnosti. [17] Cilj algoritama strojnog učenja je prepoznati obrasce i veze u podacima, što omogućuje donošenje preciznih predviđanja. Strojno učenje primjenjuje se prilikom rješavanja kompleksnih zadataka ili problema koji uključuju veliku količinu podataka i broj varijabli, pri čemu ne postoje unaprijed definirane formule ili jednadžbe. [15,18]

Iako strojno učenje kao koncept vuče korijene još iz Drugog svjetskog rata, mogućnost primjene složenih matematičkih izračuna na velike količine i raznolike vrste podataka relativno je nova. Danas, s velikim porastom količine podataka (engl. *big data*), interneta stvari (engl. *Internet of Things*, IoT) i sveprisutnog računalstva (engl. *ubiquitous computing*) [16], strojno učenje postalo je ključno za rješavanje problema u brojnim područjima, kao što su [15]:

- Računalne financije (bodovanje kredita, algoritamsko trgovanje)
- Računalni vid (prepoznavanje lica, praćenje pokreta, detekcija objekata)
- Računalna biologija (DNK sekvenciranje, otkrivanje tumora na mozgu, otkrivanje lijekova)
- Industrijska proizvodnja (prediktivno održavanje)
- Obrada prirodnog jezika (prepoznavanje glasa)

Razlikuju se tri osnovne tehnike strojnog učenja (Slika 5.) [18]: nadzirano učenje (engl. *supervised learning*), nenadzirano učenje (engl. *unsupervised learning*) i podržano učenje (engl. *reinforcement learning*).



Slika 5. Osnovna podjela strojnog učenja [18]

Kod **nadziranog učenja** modeli se uče koristeći skup ulaznih podataka (ulazi modela) i izlaznih podataka (izlazi modela) prikupljenih eksperimentom ili akvizicijom kako bi mogli predviđati buduće izlaze na temelju dostupnih ulaza. Izazovi u kojima se primjenjuje metoda nadziranog učenja mogu se klasificirati u probleme klasifikacije i regresije. U klasifikaciji se predviđaju diskretni odzivi, pri čemu se ulazni podaci razvrstavaju u kategorije. Primjeri uključuju prepoznavanje je li elektronska pošta neželjena ili originalna, utvrđivanje je li tumor karcinogen ili dobroćudan, te prepoznavanje riječi i fraza u govoru ili znakova u tekstu. Regresija se koristi za predviđanje kontinuiranih odziva. Regresijom se predviđaju kontinuirane varijable kao što su promjene temperature ili koncentracije u reaktoru, sastav i kvaliteta proizvoda, te fluktuacije potrošnje električne energije.

Nenadzirano učenje pronalazi skrivene uzorke ili intrinzične strukture u podacima. Ova metoda grupira uzorke ili otkriva strukture. Koristi se za izvođenje zaključaka iz skupova podataka koji sadrže samo ulazne podatke, bez informacija o izlazima. Najčešća tehnika nenadziranog učenja je grupiranje (engl. *clustering*), koja se koristi za identifikaciju skrivenih obrazaca ili grupa. Nenadzirano učenje koristi se za analizu sekvenci gena, analizu tržišta i prepoznavanje objekata. [15,18]

Podržano učenje se temelji na metodi pokušaja i pogreške. Podaci koji se koriste su neoznačeni, a algoritmu se pruža samo informacija o tome je li izlaz točan ili ne. Algoritam uči iz iskustva i povratnih informacija od okoline, nagrađujući radnje koje dovode do

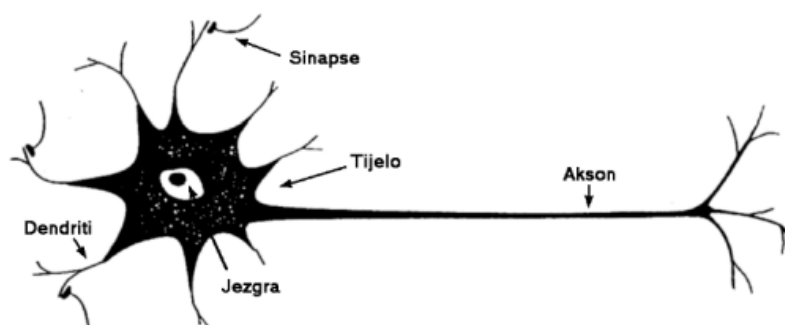
pozitivnih ishoda i kažnjavajući one koje dovode do negativnih ishoda. Na temelju tih iskustava, algoritam uči izbjegavati kazne i izvoditi radnje koje dovode do nagrade. [18]

Kod razvoja modela strojnog učenja obično se iteracijski pokušavaju različiti pristupi i ideje. Većina izazova vezana je uz baratanje podacima i pronalazak pravog modela. [15] Razvoj modela strojnog učenja sastoji se od šest koraka neovisnih o primijenjenom algoritmu [19]:

- 1. Prikupljanje i priprema podataka:** Primarni zadatak u procesu strojnog učenja je prikupiti i pripremiti podatke u oblik koji se može koristiti kao ulaz u algoritam. Podaci iz realnih sustava mogu biti nestrukturirani, nepotpuni i u različitim formatima. Često sadrže „šumove“ i ekstremne vrijednosti (engl. *outliers*). Stoga je podatke potrebno „očistiti“ i predobraditi ih u pogodan strukturirani format.
- 2. Odabir značajki:** Podaci dobiveni iz prethodnog koraka mogu sadržavati brojne značajke, od kojih nisu sve važne za proces učenja. Za razvoj modela potrebno je odabrati samo važne značajke.
- 3. Izbor algoritma:** Nisu svi algoritmi strojnog učenja namijenjeni za rješavanje svih problema. Korištenje najprikladnijeg algoritma za određeni problem ključno je za postizanje najboljeg mogućeg rezultata.
- 4. Odabir modela i parametara:** Većina algoritama strojnog učenja zahtijeva početno postavljanje odgovarajućih vrijednosti različitih parametara modela.
- 5. Učenje modela:** Nakon odabira odgovarajućeg algoritma i odgovarajućih vrijednosti parametara, model se uči (trenira) koristeći određen dio podataka, odnosno koristeći skup za učenje (training).
- 6. Vrednovanje izvedbe:** Prije primjene, model mora biti testiran na neviđenim podacima kako bi se procijenilo koliko je zapravo naučeno. Za tu svrhu koriste se različite metrike i grafički prikazi za procjenu izvedbe modela.

2.4. Umjetne neuronske mreže

Umjetne neuronske mreže su računalni modeli inspirirani načinom na koji ljudski mozak obrađuje informacije. [20] Koriste se za rješavanje složenih problema i optimizaciju u različitim primjenama. Temelje se na biološkim neuronskim mrežama, gdje neuroni međusobno komuniciraju kako bi obradili informacije i donijeli odluke. [21] Svaki biološki neuron, kao što je prikazano na Slici 6. sastoji se od sljedećih dijelova [18]:

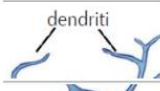
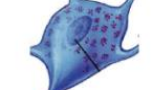
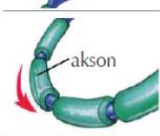



Slika 6. Prikaz biološkog neurona [18]

- **tijela stanice**, sadrži jezgru ili nukleus s informacijama o nasljednim značajkama
- **dendrita**, kraćih niti oko stanice, koji prenose signale (impulse) s drugih neurona
- **aksona**, dugih i tankih niti, koji prenose signal do drugih neurona, pri čemu se granaju u vlakna
- **sinapse**, funkcionalne jedinice između završetka aksona prethodnog neurona i dendrita sljedećeg neurona, oslobađaju materijal potreban stanici za prijenos signala, neurotransmiter, pri čemu se odvija elektrokemijska reakcija.

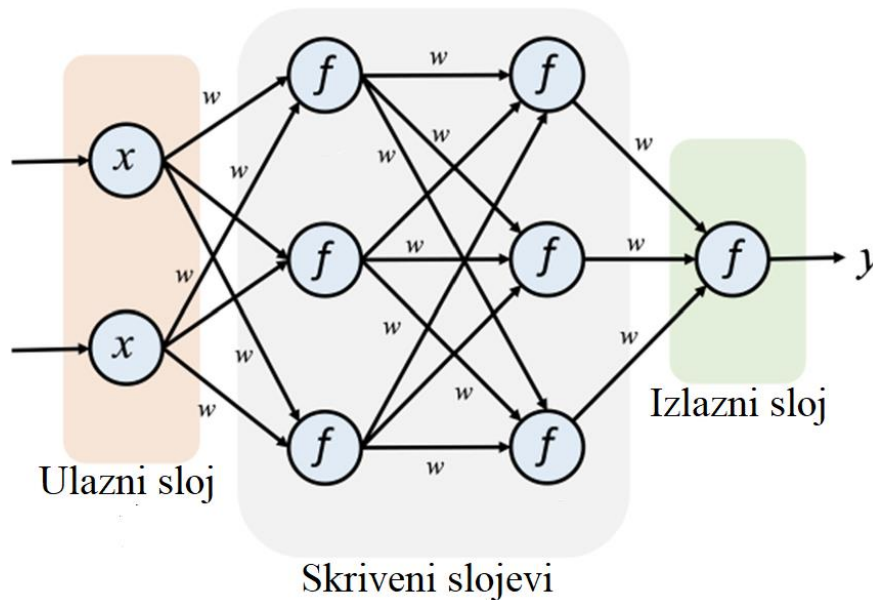
Razumijevanje strukture i načina funkcioniranja ljudskog mozga i neurona potaknulo je istraživanje i razvoj umjetnih neuronskih mreža. Topološka analogija umjetnih neuronskih mreža s biološkim prikazana je u Tablici 1. [18]

Tablica 1. Analogija biološkog i umjetnog neurona [18]

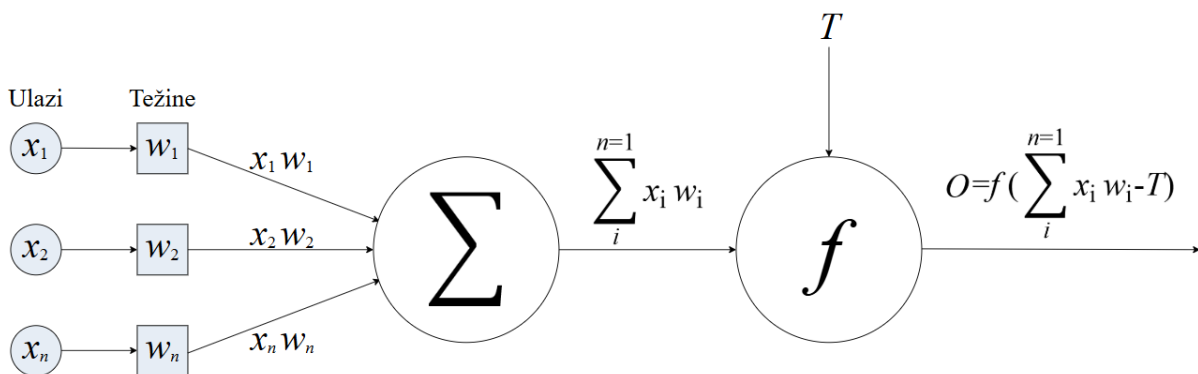
	Biološki neuron	Umjetni neuron
	Prima ulazni signal putem dendrida (sinaptičke veze)	Prima ulaze (i) koji su određeni težinskim koeficijentima (w)
	Obrada signala u somi	Obrada ulaza, unutarnji prag – bias (b)
	Pretvara obrađeni ulaz u izlaz putem aksona	Pretvara ulaze u izlaz (prijenosna funkcija)
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

Osnovna struktura većine neuronskih mreže uključuje: ulazni sloj, skriveni sloj(evi) i izlazni sloj (Slika 7.). [22] Ulazni sloj (engl. *input layer*) je prvi sloj u mreži koji prima informacije (ulazne signale) te ih prosljeđuje dalje u mrežu. Svaki ulazni signal množi se s

odgovarajućim težinskim koeficijentom w_i , koji je sličan ulogama dendrita u biološkim neuronima. Tako otežani ulazni signali se zbrajaju, a njihov se zbroj uspoređuje s pragom osjetljivosti neurona, T (engl. *threshold*). Skriveni sloj (engl. *hidden layer*) prima informacije iz ulaznog sloja i obrađuje ih tako što zbraja otežane ulaze koristeći neku funkciju sumiranja, čime stvara internu aktivaciju. Ako je zbroj otežanih signala veći od praga osjetljivosti neurona, nelinearna aktivacijska funkcija f generira izlazni signal neurona iznosa O . Ovaj postupak prikazan je grafički na Slici 8. Aktivacijska (prijenosna) funkcija može biti diskontinuirana skokomična funkcija ili neka kontinuirana funkcija, na primjer sigmoidna ili tangens-hiperbolna. [18,23] Izlazni sloj (engl. *output layer*) je krajnji sloj mreže koji prima informacije naučene kroz skrivene slojeve i pretvara ih u konačni rezultat. [23] U izlaznom sloju također se može koristiti aktivacijska funkcija, koja se često razlikuje od one korištene u skrivenim slojevima. [24]



Slika 7. Osnovna struktura neuronske mreže [22]



Slika 8. Prikaz pretvorbe ulaznih informacija u izlazne u skrivenom sloju neurona [23]

2.4.1. Klasifikacija neuronskih mreža

Sa strukturnog gledišta, neuronske mreže dijele se na statičke unaprijedne (engl. *feedforward*) i dinamičke povratne (engl. *feedback*), ovisno o modelu neurona i načinu prostiranja signala kroz mrežu. U kemijskoj i srodnim industrijama najviše se koriste višeslojne statičke neuronske mreže za identificiranje nelinearnih procesa. Među dinamičkim neuronskim mrežama najčešće se koriste višeslojne mreže s elementima zadržke (engl. *time delay neural networks*), povratne ili rekurentne mreže (engl. *recurrent neural network*, RNN), te LSTM mreže. Konvolucijske neuronske mreže (engl. *convolutional neural networks*, CNN) se najviše koriste u području računalnog vida. Neizrazite neuronske mreže (engl. *fuzzy neural networks*) izdvajaju se kao zasebne strukture. [18] Neuronske mreže koje imaju tri ili više skrivenih slojeva, a često čak i stotine ili tisuće slojeva, koriste se za učenje i prepoznavanje obrazaca u velikim količinama podataka. Ovaj pristup poznat je kao duboko učenje (engl. *deep learning*). [25]

2.4.2. Aktivacijske funkcije

Zahvaljujući aktivacijskim funkcijama, neuronske mreže mogu učiti i obavljati složene zadatke. One obavljaju nelinearne transformacije na izlazima svakog neurona što omogućava modelima da uče i aproksimiraju nelinearne odnose među podacima. Zbog aktivacijskih funkcija neuronske mreže mogu riješiti probleme koji se ne mogu riješiti linearnim modelima. [18,26] U ovom radu, u skrivenim slojevima korištene su sljedeće aktivacijske funkcije: sigmoidna, tangens-hiperbolna, funkcija ispravljene linearne jedinice (engl. *Rectified Linear Unit*, ReLU) i funkcija eksponencijalne linearne jedinice (engl. *Exponential Linear Unit*, ELU). U izlaznom sloju korištena je linearna aktivacijska funkcija koja omogućava da izlaz neurona bude direktno proporcionalan ulazu. Ova karakteristika omogućava modelu da slobodno predviđa bilo koju realnu vrijednost, što je ključno za regresijske zadatke. [27]

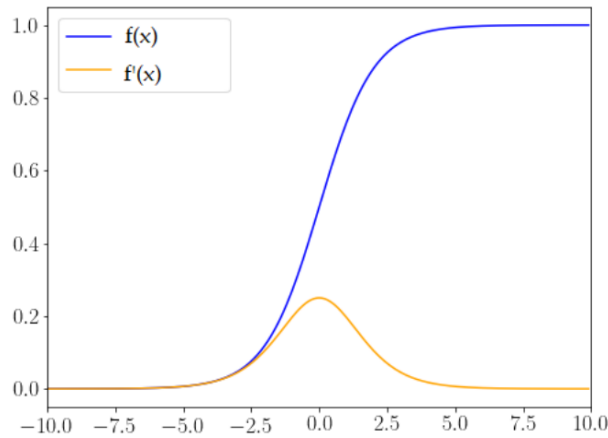
Sigmoidna funkcija uzima vrijednosti ulaza i transformira ih u izlazne vrijednosti u rasponu od 0 do 1. Što je ulaz (x) pozitivniji to će izlazna vrijednost (y) biti bliža 1, a što je ulaz negativniji to će izlazna vrijednost biti bliža 0. Matematički se sigmoidna funkcija može prikazati kao:

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \quad (7)$$

a derivacija funkcije kao:

$$f'(x) = f(x) \times (1 - f(x)) \quad (8)$$

Na Slici 9. grafički je prikazana sigmoidna funkcija i njena derivacija



Slika 9. Grafički prikaz sigmoidne funkcije $f(x)$ i njene derivacije $f'(x)$ [18]

Neki od nedostataka ove funkcije uključuju problem nestajućeg gradijenta, izlazne vrijednosti nisu centrirane oko 0, te 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 funkcije, kretanjem 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 nule podrazumijeva da su sve izlazne vrijednosti pozitivne. Zbog toga će gradijenti povezani s neuronima biti ili pozitivni ili negativni, što može rezultirati dužim vremenom konvergencije mreže. [18]

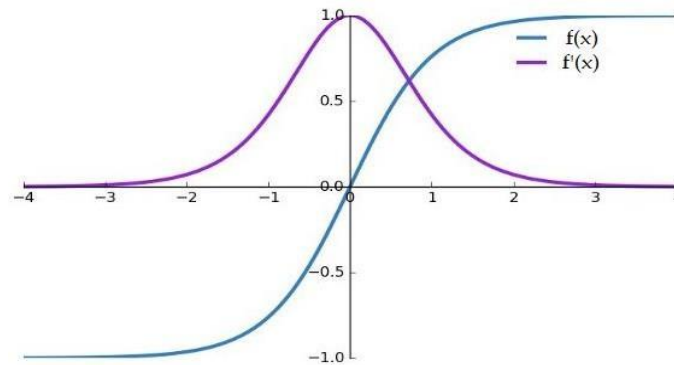
Tangens-hiperbolna funkcija vrlo je slična sigmoidnoj funkciji i također ima karakterističan S oblik. Međutim, ima raspon izlaznih vrijednosti u intervalu $[-1, 1]$ i centrirana je oko nule. Kada je ulaz pozitivniji, izlazna vrijednost se približava 1, dok se kod negativnog ulaza izlazna vrijednost približava -1. Matematički se tangens-hiperbolna funkcija može prikazati kao:

$$f(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}} \quad (9)$$

a njena derivacija kao:

$$f'(x) = 1 - \tanh^2(x) \quad (10)$$

Slika 10. prikazuje tangens-hiperbolnu funkciju i njenu derivacija.



Slika 10. Grafički prikaz tangens-hiperbolne funkcije $f(x)$ i njene derivacije $f'(x)$ [18]

Ova aktivacijska funkcija također ima problem nestajućeg gradijenta i zasićenosti gradijenta na krajevima x osi, ali za razliku od sigmoidne funkcije ima izlazne vrijednosti koje su centrirane oko nule. To znači da gradijenti nisu ograničeni samo na jedan smjer, što može poboljšati učenje. [18]

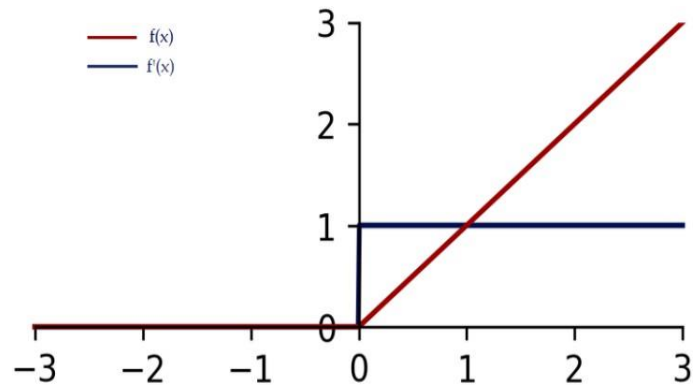
ReLU funkcija ne aktivira sve neurone istovremeno, odnosno neuron će biti deaktiviran samo kada je izlaz linearne transformacije manji od 0. Kod ReLU funkcije problem nestajućeg gradijenta ne postoji, a konvergencija prema globalnom minimumu funkcije je brža. Matematički se ova funkcija može opisati kao:

$$f(x) = \max(0, x) \quad (11)$$

Još jedna prednost korištenja ove funkcije je veća računalna učinkovitost jer se ne aktiviraju svi neuroni. Glavni nedostatak ReLU funkcije je ograničenje 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. [18,28]. Derivacija ReLU funkcije se može matematički prikazati kao:

$$f'(x) = \begin{cases} 1 & \text{za } x \geq 0 \\ 0 & \text{za } x < 0 \end{cases} \quad (12)$$

Na Slici 11. prikazana je ReLU funkcija i njena derivacija.



Slika 11. Grafički prikaz ReLU funkcije $f(x)$ i njene derivacije $f'(x)$ [18]

ELU funkcija je varijacija ReLU funkcije koja modificira nagib negativnog dijela ReLU funkcije pomoću logaritamske krivulje. Ova modifikacija uklanja problem "mrtvih" neurona prisutan kod ReLU funkcije. Matematički se može definirati kao:

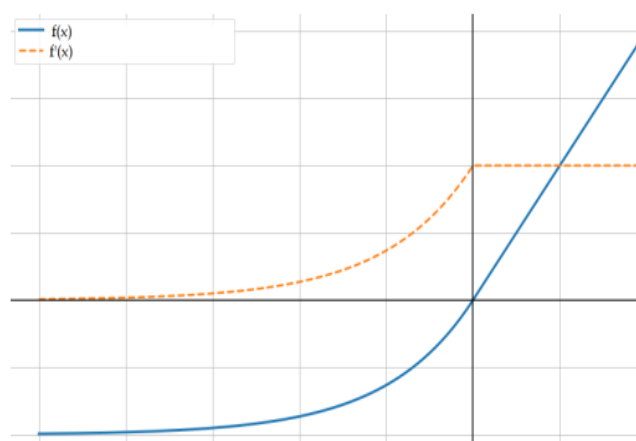
$$f(x) = \begin{cases} x & \text{za } x \geq 0 \\ \alpha(e^x - 1) & \text{za } x < 0 \end{cases} \quad (13)$$

a njena derivacija kao:

$$f'(x) = \begin{cases} 1 & \text{za } x \geq 0 \\ f(x) + \alpha & \text{za } x < 0 \end{cases} \quad (14)$$

gdje je α hiperparametar funkcije.

Na Slici 12. prikazana je ELU funkcija i njena derivacija.



Slika 12. Grafički prikaz ELU funkcije $f(x)$ i njene derivacije $f'(x)$ [18]

Glavni nedostaci ELU funkcije su povećano vrijeme izračuna zbog eksponencijalne operacije i problem eksplodirajućeg gradijenta. Ovaj problem je suprotan problemu nestajućeg gradijenta jer gradijenti koji ažuriraju težine postaju izuzetno veliki i povećavaju se kroz slojeve, što dovodi do nestabilnog ponašanja mreže. [18]

2.4.3. Funkcija gubitka

Funkcija gubitka (engl. *Loss function*) je jedan od važnijih elemenata u učenju neuronskih mreža i drugih modela strojnog učenja. Ova funkcija kvantificira razliku između stvarnih i predviđenih vrijednosti. Cilj učenja neuronskih mreža je minimizirati funkciju gubitka. Odabir funkcije gubitka ovisi o vrsti problema. Najčešće korištene funkcije gubitka kod neuronskih mreža su srednja kvadratna pogreška (engl. *Mean squared error, MSE*) i unakrsna entropija (engl. *Cross entropy, CE*). [29] *MSE* se koristi za regresijske probleme, a matematički se može prikazati sljedećom formulom:

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (15)$$

gdje je n broj uzoraka, y_i je stvarna vrijednost, a \hat{y}_i predviđena vrijednost. *MSE* ima brojne karakteristike koje je čine pogodnom za izračunavanje funkcije gubitka. Razlika je kvadrirana, što znači da nije važno je li predviđena vrijednost veća ili manja od stvarne vrijednosti. *MSE* je konveksna funkcija koja ima jasno definiran globalni minimum što omogućava lakšu optimizaciju metodom gradijentnog spusta. *CE* je funkcija gubitka koja se često koristi u klasifikacijskim problemima. Ona omogućuje usporedbu vjerojatnosti pripadnosti različitim klasama. [30]

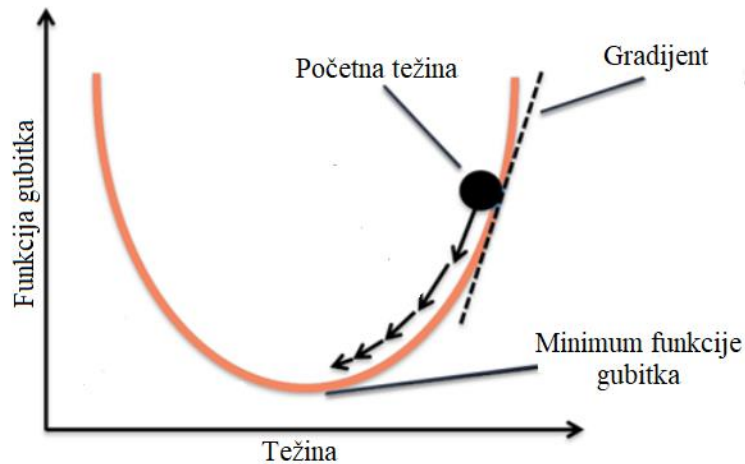
2.4.4. Metoda gradijentnog spusta

Metoda gradijentnog spusta (engl. *Gradient Descent*) je iterativni optimizacijski algoritam prvog reda koji se koristi za pronalazak lokalnog minimuma ili maksimuma funkcije. Ova metoda se često koristi u strojnom učenju kako bi se smanjila vrijednost funkcije gubitka. Algoritam gradijentnog spusta nije univerzalno primjenjiv za sve funkcije. Postoje dva ključna uvjeta koja funkcija mora zadovoljiti [31]:

1. Funkcija mora biti diferencijabilna, što znači da ima derivaciju u svakoj točki svoje domene.

2. Funkcija mora biti konveksna, odnosno svaki lokalni minimum predstavlja i globalni minimum.

U strojnom učenju gradijentni spust se koristi za ažuriranje težina (parametara) modela. Težine se prilagođavaju u smjeru negativnog gradijenta funkcije gubitka, što postepeno smanjuje funkciju gubitka modela. Na Slici 13. prikazan je proces gradijentnog spusta. [32]



Slika 13. Proces gradijentog spusta [32]

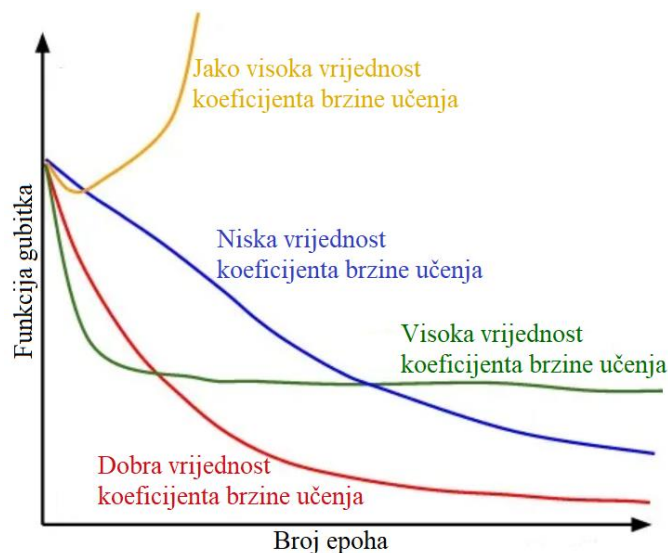
2.4.4. Algoritam unatražne propagacije

Algoritam unatražne propagacije (engl. *Backpropagation algorithm*) je iterativni algoritam koji određuje iznos za koji se težine mreže moraju prilagoditi kako bi se minimizirala funkcija gubitka. Algoritam se sastoji od dva koraka: propagacije unaprijed i propagacije unatrag. U fazi propagacije unaprijed, ulazi modela prolaze kroz neuronsku mrežu sloj po sloj kako bi se generirala predikcija, dok se u fazi propagacije unatrag, računa gradijent funkcije gubitka u odnosu na težine neuronske mreže. Gradijent funkcije gubitka određuje iznos i smjer u kojem se moraju prilagoditi težine kako bi se smanjila funkcija gubitka. Težine će se prilagođavati koristeći metode optimizacije, kao što je navedena metoda gradijentnog spusta. Proces se iterativno ponavlja kroz više epoha (ciklusa učenja) dok se funkcija gubitka ne stabilizira. Stabilizacija funkcije gubitka je pokazatelj da su težine optimalno podešene. [33,34] Algoritam može naići na probleme poput lokalnih minimuma i pretreniranja. Lokalni minimumi mogu spriječiti mrežu da pronade globalno optimalno rješenje, a pretreniranje (engl. *overfitting*) smanjuje sposobnost generalizacije modela na neviđene podatke. [34] Pretrenirana neuronska mreža pokazuje vrlo malu pogrešku na

podacima za učenje, dok na skupu za testiranje pogreška može biti znatno veća. Drugim riječima, do pretreniranosti dolazi kada se model previše prilagodi podacima za učenje. [35]

2.4.5. Koeficijent brzine učenja

Koeficijent brzine učenja (engl. *learning rate*) određuje brzinu promjena težina u odnosu na vrijednost funkcije gubitka, što direktno utječe na brzinu konvergencije modela. Određivanje optimalne vrijednosti koeficijenta učenja je vrlo važno. Premali koeficijent može rezultirati presporim učenjem, dok preveliki koeficijent može spriječiti postizanje minimuma funkcije gubitka. Na Slici 14. prikazan je utjecaj vrijednosti koeficijenta brzine učenja na učenje mreže. Na apscisi se nalazi broj epoha koji predstavlja jedan prolaz podataka kroz cijelu mrežu. [18]

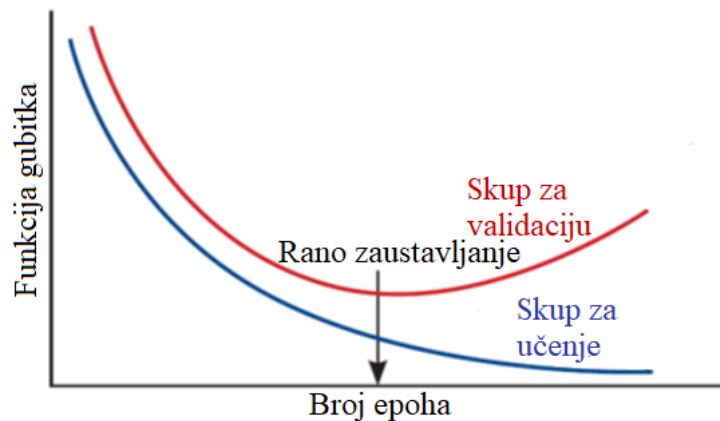


Slika 14. Utjecaj vrijednosti koeficijenta brzine učenja na učenje mreže [18]

2.4.6. Prevencija pretreniranosti modela

Pri razvoju modela, podaci se dijele na tri skupa: skup za učenje, skup za validaciju i skup za testiranje. Skup za učenje koristi se za učenje modela prilagođavanjem njegovih težina (parametara). Skup za validaciju koristi se za praćenje generalizacije modela na neviđene podatke tijekom učenja i za prepoznavanje pretreniranosti. Kako bi se spriječila pretreniranost, koristi se tehnika ranog zaustavljanja (engl. *early stopping*), koja zaustavlja učenje kada se funkcija gubitka na skupu za učenje i dalje smanjuje, dok funkcija gubitka na skupu za validaciju dosegne minimum. Skup za testiranje upotrebljava se za konačnu

procjenu modela na dosad neviđenim podacima. Na Slici 15. prikazana je ovisnost funkcije gubitka na skupu za učenje i validaciju o broju epoha s tehnikom ranog zaustavljanja.

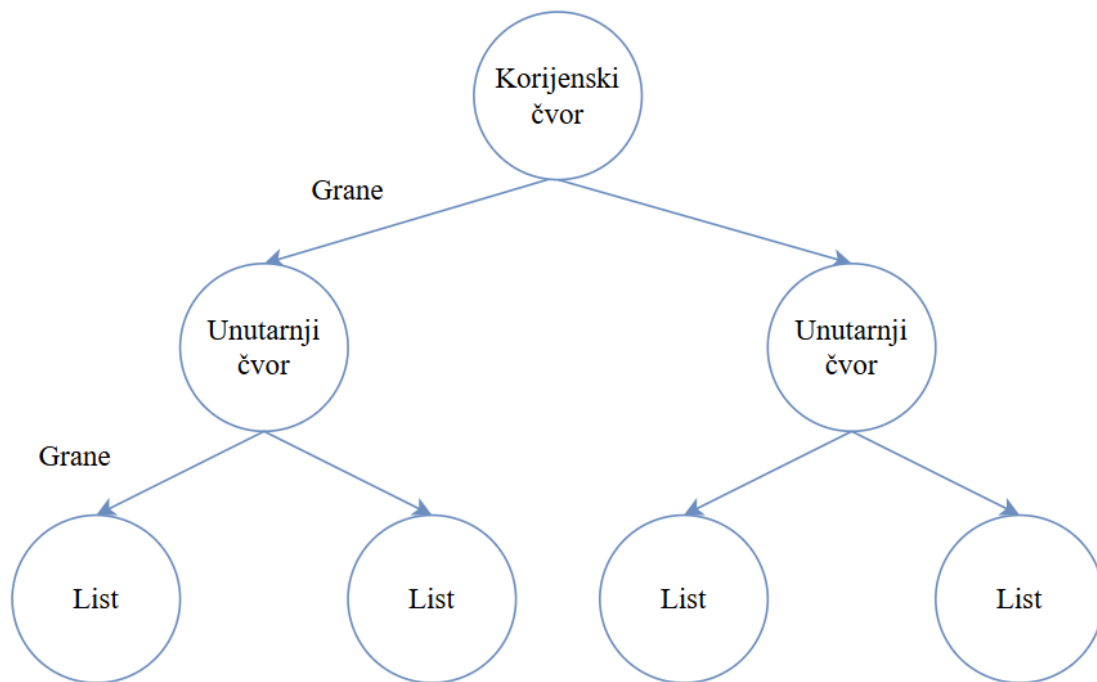


Slika 15. Prikaz učenja neuronske mreže s tehnikom ranog zaustavljanja [35]

Prije točke minimuma vrijednost funkcije gubitka na oba skupa se smanjuje. Nakon te točke, funkcija gubitka na skupu za učenju i dalje se smanjuje, dok funkcija gubitka na validacijskom skupu raste, što ukazuje na pretreniranost. Kako bi se to spriječilo, učenje treba zaustaviti kada funkcija gubitka na validacijskom skupu počne rasti. [35]

2.5. Stablo odlučivanja

Stablo odlučivanja (engl. *decision tree*) je nadzirani model strojnog učenja koji ima strukturu nalik stablu. [36] Njegova glavna prednost je to što omogućuje jednostavno razumijevanje i interpretaciju odluka, jer jasno prikazuje kako se donose odluke kroz različite faze analize podataka. [37] Model ima hijerarhijsku strukturu koja se sastoji od korijenskog čvora (engl. *root node*), unutarnjih čvorova (engl. *internal nodes*), grana (engl. *branches*) i listova (engl. *leaf nodes*). [36] **Korijenski čvor** je početni čvor u stablu odlučivanja, u kojem se skup za učenje počinje dijeliti na temelju atributa podataka. Atributi su karakteristike ili svojstva koja se koriste za podjelu podataka. **Unutarnji čvorovi** provode testove ili donose odluke temeljem atributa podataka te predstavljaju mjesta daljnjeg razdvajanja podataka. **Grane** predstavljaju ishod testa ili odluke te vode do sljedećeg čvora ili **lista** koji predstavlja konačnu predikciju ili odluku. [37,38] Na Slici 16. prikazan je primjer stabla odlučivanja koji ilustrira njegovu osnovnu strukturu.



Slika 16. *Primjer stabla odlučivanja* [38]

Izgradnja stabla odlučivanja sastoji se od sljedećih koraka [37]:

1. **Odabir najboljeg atributa:** Prvi korak je odabrati atribut koji najbolje razdvaja podatke prema nekom kriteriju.
2. **Podjela skupa podataka:** Podaci se dijele na podskupove na temelju odabranog atributa.
3. **Ponavljanje procesa:** Proces se ponavlja rekurzivno za svaki podskup, pri čemu se stvara novi unutarnji čvor ili list sve dok se ne ispune određeni kriteriji za zaustavljanje, poput unaprijed određenih dubina stabla ili kada podaci u čvoru pripadaju istoj klasi.

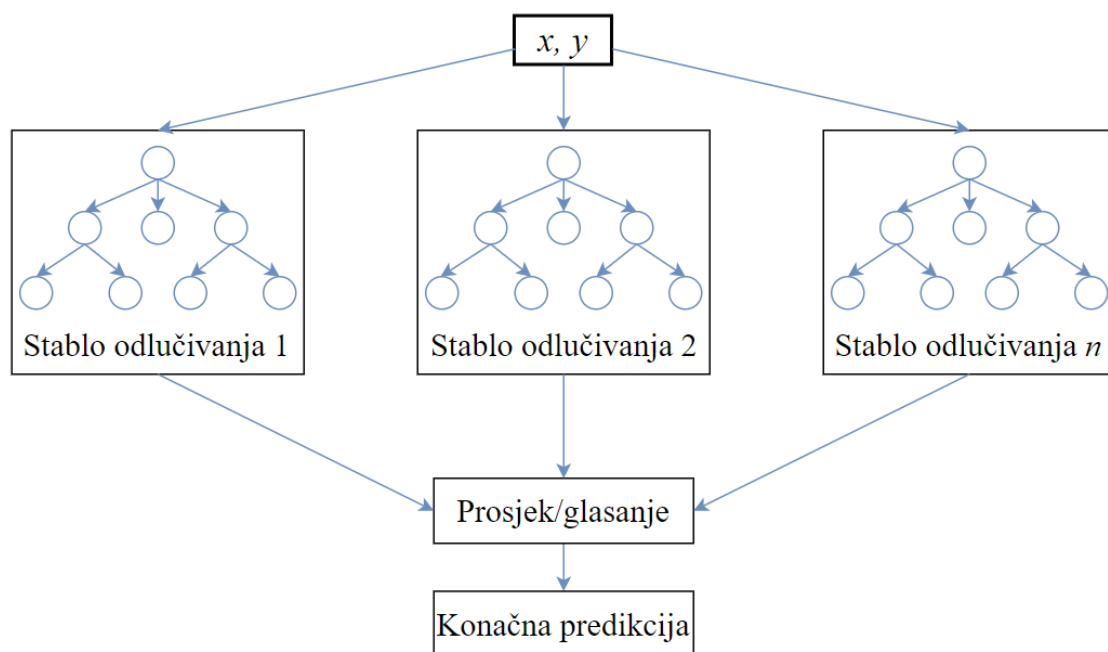
2.6. Slučajna šuma

Ansambl metode strojnog učenja kombiniraju predviđanja više „slabih“ modela s ciljem poboljšanja točnosti i robusnosti. Osim toga, korištenjem ovih metoda može se smanjiti rizik od pretreniranja. [39] Slučajna šuma (engl. *random forest*) je ansambl metoda koja koristi velik broj stabala odlučivanja. Dvije ključne karakteristike modela slučajne šume su pakiranje (engl. *bootstrapping*) i nasumičan odabir značajki. [40]

Pakiranje je ansambl metoda koja koristi više modela temeljenih na istom algoritmu učenja. Svaki model se uči na različitim nasumično odabranim podskupovima originalnog

skupa podataka. Kombiniranjem rezultata putem računanja prosjeka u regresiji ili tzv. glasanja u klasifikaciji, dobiva se konačna predikcija.

Nasumičan odabir značajki odnosi se na način na koji se odabiru značajke za svaki čvor u stablu. Svako stablo u slučajnoj šumi gradi se koristeći nasumičan podskup podataka i nasumičan odabir značajki. Za svaki unutarnji čvor, nasumično se odabire manji skup značajki iz ukupnog skupa značajki. Ovaj pristup povećava raznolikost među stablima. Na temelju tog nasumično odabranog skupa značajki, bira se najbolja značajka za testiranje u svakom čvoru. Proces se ponavlja za sve čvorove u stablu. Rezultat svakog stabla odlučivanja je jedna predikcija, a konačna predikcija modela slučajne šume dobiva se korištenjem prosjeka rezultata u regresiji ili glasanjem u klasifikaciji. [39,41] Na Slici 17. prikazan je ilustrativni primjer strukture slučajne šume.



Slika 17. Struktura modela slučajne šume [42]

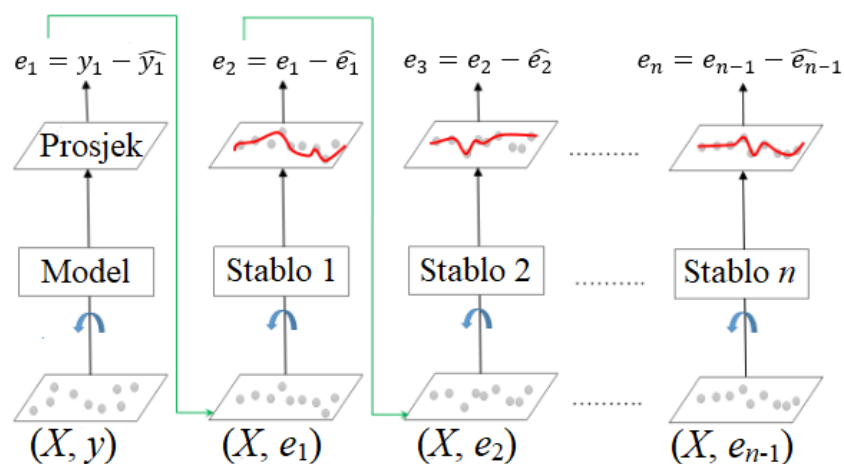
2.7. Pojačavanje

Pojačavanje (engl. *boosting*) je ansambl metoda čiji je cilj poboljšanje modela u područjima gdje inicijalno ne postižu dobre rezultate. Za razliku od pakiranja kod kojeg se „slabi“ modeli uče neovisno i paralelno, pojačavanje je slijedni (sekvencijalni) postupak u kojem je svaki novi model razvijen na temelju pogrešaka prethodnog. Najčešće korišteni "slabi" modeli su stabla odlučivanja. Jedan od poznatijih algoritama pojačavanja je adaptivno pojačavanje (engl. *Adaptive Boosting*, AdaBoost). Postupak pojačavanja počinje učenjem

jednostavnog modela, nakon čega se procjenjuju njegovi rezultati i identificiraju pogreške. U adaptivnom pojačavanju težine uzoraka (engl. *instance weights*) se prilagođavaju tako da oni uzorci na kojima je model napravio veće pogreške dobiju veće težine. Sljedeći model uči se pomoću ažuriranih težina, nakon čega daje svoja predviđanja, a težine uzoraka se ponovno ažuriraju itd. [39,43]

2.8. Gradijentno pojačavanje

Gradijentno pojačavanje (engl. *gradient boosting*) je ansambl metoda u kojoj se svaki novi „slabi“ model uči kako bi minimizirao funkciju gubitka prethodnog modela koristeći gradijentni spust. U svakoj iteraciji, gradijentni spust izračunava gradijent funkcije gubitka u odnosu na trenutne predikcije ansambla. Predikcije novog modela zatim se dodaju u ansambl, a proces se ponavlja dok se ne ispuni kriterij zaustavljanja. Za razliku od adaptivnog pojačavanja, koje prilagođava težine uzoraka, gradijentno pojačavanje (engl. *gradient boosting*) koristi pogreške (rezidualne) prethodnog modela kao ciljne vrijednosti sljedećeg modela. Slika 18. prikazuje proces gradijentnog pojačavanja za regresijske probleme. Ansambl se sastoji od n stabala. Početni model je jednostavan, poput prosjeka, a koristi ulazne varijable X i izlaznu varijablu y . Zatim se uči prvo stablo koristeći ulazne varijable X i pogreške e_1 , koje predstavljaju razliku između stvarnih vrijednosti i početne procjene (prosjeaka). Prvo stablo daje predikcije pogreške \hat{e}_1 koje se koriste za izračunavanje novih pogrešaka e_2 , koje predstavljaju razliku između pogreške e_1 i predikcije pogreške \hat{e}_1 . Nakon toga, drugo stablo uči se na temelju novih pogrešaka e_2 , a proces se nastavlja iterativno dok se ne izgrade sva n stabla u ansamblu. [44,45]



Slika 18. Gradijentno pojačavanje za regresijske probleme [44]

2.9. Ekstremno gradijentno pojačavanje (XGBoost)

Ekstremno gradijentno pojačavanje je optimizirani algoritam gradijentnog pojačavanja dizajniran za učinkovito i skalabilno učenje modela. [46] Razvili su ga Tianqi Chen i Carlosa Guestrin 2016. godine na Sveučilištu u Washingtonu. Ovaj algoritam se ističe zbog svojih uspjeha na brojnim natjecanjima u analizi podataka i strojnom učenju, kao i zbog široke primjene u različitim industrijskim rješenjima. [47] XGBoost je ansambl model strojnog učenja koji se temelji na višestrukim stablima odlučivanja. Drugim riječima, stabla odlučivanja su „slabi“ modeli koji se sekvencijalno poboljšavaju. Za razliku od slučajne šume gdje se konačna predikcija temelji na glasanju ili prosjeku, XGBoost sumira predikcije pojedinačnih stabla. [47,48]

2.9.1. Karakteristike XGBoost algoritma

XGBoost algoritam donosi niz poboljšanja u odnosu na klasično gradijentno pojačavanje. U ovom dijelu objašnjena su neka od ključnih poboljšanja.

Regularizacija je tehnika u strojnom učenju koja pomaže u prevenciji pretreniranja modela. Uvodi „kaznene“ članove ili ograničenje na parametre modela tijekom učenja. XGBoost algoritam koristi dva glavna tipa regularizacije:

L1 (Lasso) regularizacija uvodi kaznu za visoke težine. To znači da model smanjuje vrijednosti težina za značajke koje nisu toliko važne, često ih postavljajući na nulu. Na taj način model „ignorira“ manje važne značajke i koristi samo one koje su važne za predikciju. Smanjivanjem složenosti značajki, L1 regularizacija pomaže u sprječavanju pretreniranja. Matematički se to može prikazati sljedećom jednadžbom:

$$L_{L1} = L_{izvorna} + \lambda \sum_{i=1}^n |w_i| \quad (16)$$

gdje je L_{L1} nova funkcija gubitka s L1 regularizacijom, $L_{izvorna}$ je izvorna funkcija gubitka bez regularizacije, λ je parametar regularizacije koji određuje intenzitet kazne, n je broj značajki, a w_i su koeficijenti značajki (težine). [49,50]

L2 (Ridge) regularizacija, uvodi kazneni član proporcionalan kvadratu težina u funkciju gubitka modela. Ovo potiče model da ravnomjerno rasporedi težine među svim značajkama. Na taj način se sprječava pretjerana ovisnost o pojedinoj značajki i time se smanjuje pretreniranost. Matematički se može prikazati kao:

$$L_{L2} = L_{izvorna} + \lambda \sum_{i=1}^n |w_i|^2 \quad (17)$$

gdje je L_{L2} nova funkcija gubitka s L2 regularizacijom.

XGBoost algoritam može istovremeno koristiti L1 i L2 regularizaciju za upravljanje sa složenosti modela. Regularizacija se primjenjuje kada se stvara svako novo stablo u procesu gradijentnog pojačavanja. To pomaže u vođenju rasta stabala na način da se minimizira funkcija gubitka, a istovremeno kontrolira složenost modela. [50,51]

XGBoost ima robustan mehanizam za **rukovanje nedostajućim podacima**, što je čest izazov pri radu s realnim podacima iz industrije. Tijekom učenja modela, algoritam „inteligentno“ određuje najbolji smjer u stablu za uzorke (npr. jedan red u tablici podataka) s nedostajućim vrijednostima. To postiže tako da uspoređuje različite opcije i procjenjuje njihov utjecaj na funkciju gubitka, kako bi optimalno smjestio te uzorke u strukturu stabla. [52,53]

Paralelizacija u XGBoost algoritmu odnosi se na njegovu sposobnost generiranja različitih čvorova stabla istovremeno. [46] XGBoost organizira podatke u blokove, pri čemu svaki blok obuhvaća određeni broj značajki iz cijelog skupa. Neovisna obrada tih blokova omogućava učinkovitije korištenje računalnih resursa i paralelno generiranje čvorova. [53]

Obrezivanja stabla (engl. *tree pruning*) je metoda koja se koristi u strojnom učenju za smanjivanje stabala odlučivanjem uklanjanjem čvorova koji ne dovode do značajnog poboljšanja modela. Obrezivanje stabala koristi se kako bi se izbjeglo pretreniranje i nepotrebna složenost modela. U XGBoost algoritmu obrezivanje stabala kontrolira se putem hiperparametara kao što su maksimalna dubina stabla, *gamma* i *min child weight*. [54,55]

Skalabilnost u kontekstu strojnog učenja je sposobnost modela da obrađuje velike količine podataka ili da upravlja velikim opterećenjem bez ugrožavanja performansi modela. [56] Prema Chenu i Guestrinu, najvažniji faktor efikasnosti XGBoost-a je njegova skalabilnost u svim primjenama. Skalabilnost XGBoost algoritma rezultat je ključnih optimizacija algoritma kao što su paralelizacija i rukovanje nedostajućim podacima. [47]

2.9.2. Načela rada XGBoost algoritma

Kao što je već rečeno, XGBoost je napredna implementacija algoritma gradijentnog pojačavanja. Na iterativni način gradi prediktivni model kombiniranjem predikcija više pojedinačnih stabala odlučivanja. Algoritam funkcionira sekvencijalnim dodavanjem „slabih“

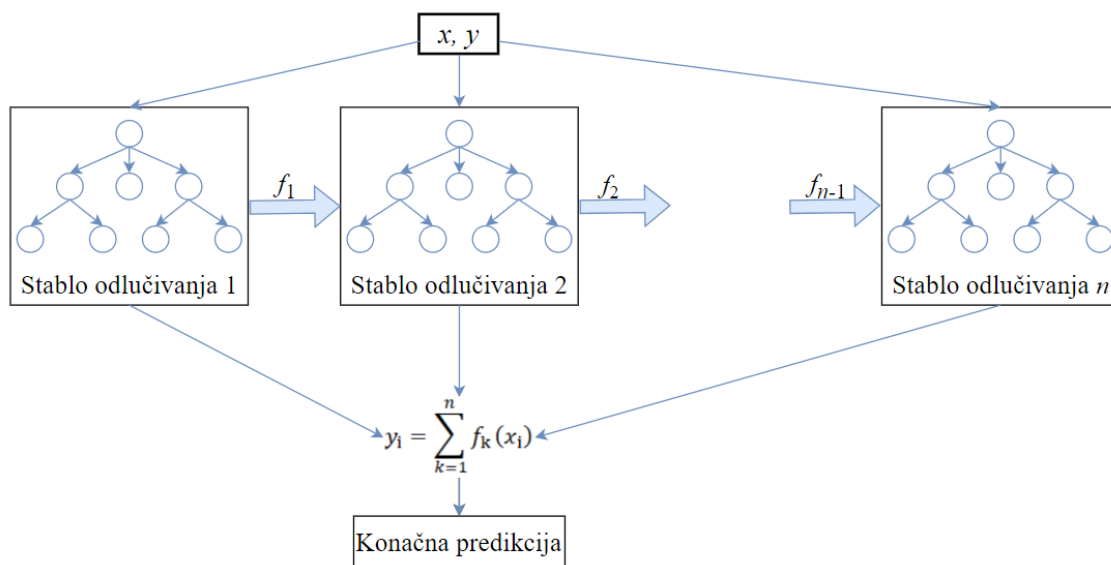
učenika (stabala odlučivanja) u ansambl, pri čemu svako novo stablo teži ispravljanju pogrešaka koje su napravili postojeći. Drugim riječima, XGBoost dodaje stablo po stablo u ansambl, a svako stablo pokušava ispraviti pogreške prethodnih. [46,47] Postoji i opcija da se umjesto stabala odlučivanja koriste linearni modeli u ansamblu, ali ta se opcija koristi znatno rjeđe u praksi. [57]

Funkcija gubitka sastoji se od dva dijela: osnovne funkcije gubitka koja mjeri pogreške modela i regularizacijskog dijela koji pomaže u kontroliranju složenosti modela. U svakoj iteraciji, novo stablo se dodaje ansamblu, a funkcija gubitka se optimizira koristeći algoritam gradijentnog pojačavanja. [53] Za dobivanje konačne predikcije u gradijentnom pojačavanju koristi se tehnika smanjivanja (engl. *shrinkage*), u kojoj se smanjuje doprinos pojedinog stabla u ansamblu množenjem s koeficijentom brzine učenja. Svako stablo prvo daje svoju predikciju, koja se zatim množi s koeficijentom brzine učenja kako bi se smanjio njegov individualni utjecaj u konačnom modelu. [44]

Na kraju učenja, predikcija modela se dobiva sumiranjem predikcija svih stabala odlučivanja i početnog jednostavnog modela. Matematički se to može prikazati sljedećim izrazom:

$$y_i = \sum_{k=1}^n f_k(x_i) \quad (18)$$

Gdje f_k odgovara stablu, $f_k(x_i)$ je rezultat koji daje stablo k za ulaz x_i , y_i je predikcija koju daje XGBoost model za ulaz x_i . Slika 19. prikazuje osnovnu strukturu XGBoost algoritma. [48]



Slika 19. Osnovna struktura XGBoost algoritma [48]

2.9.3. Hiperparametri XGBoost algoritma

XGBoost algoritam ima širok spektar hiperparametara, a u ovom poglavlju bit će objašnjeni oni koji su ključni za regresijske modele. [58]

Broj stabala (engl. *number of estimators*) kontrolira broj stabala u modelu. Povećanje ove vrijednosti općenito poboljšava performanse modela, ali može dovesti do pretreniranja.

Gamma parametar kontrolira minimalno smanjenje funkcije gubitka potrebno za podjelu u stablu. Veća vrijednost znači da će model zahtijevati veće poboljšanje funkcije gubitka da bi se izvršila daljnja podjela.

Min child weight je minimalna težina svih uzoraka ili broj podataka (ako svi podaci imaju težinu 1) potrebnih za stvaranje novog čvora u stablu. Manji *min child weight* omogućava algoritmu da stvori više čvorova koja odgovaraju manjem broju podataka, čime se dopuštaju složenija stabla.

Maksimalna dubina stabla (engl. *max depth*) kontrolira maksimalnu dubinu stabala u modelu. Veća vrijednost ovog hiperparametra znači da će model biti kompleksniji, što može dovesti do pretreniranja. S druge strane, manja vrijednost maksimalne dubine stabla znači da će model biti jednostavniji, što može dovesti do nedovoljno naučenog modela (engl. *underfitting*). Korištenjem tehnika poput križne validacije, objašnjene u eksperimentalnome dijelu ovoga rada, može se pronaći optimalna dubina stabla koja predstavlja ravnotežu između složenosti modela i rizika od pretreniranja.

Subsample kontrolira udio podataka koji se koriste za izgradnju svakog stabla u modelu. Vrijednost 1 znači da će model koristiti cijeli skup podataka za učenje. Manja vrijednost znači da će model koristiti samo nasumično odabrani podskup podataka.

Colsample bytree kontrolira udio značajki koje će se koristiti za izgradnju svakog stabla u modelu. Vrijednost 1 znači da će model koristiti sve značajke, dok manja vrijednost znači da će model koristiti samo nasumično odabran podskup značajki.

Koeficijent brzine učenja kontrolira veličinu koraka kojom model ažurira svoje težine tijekom učenja.

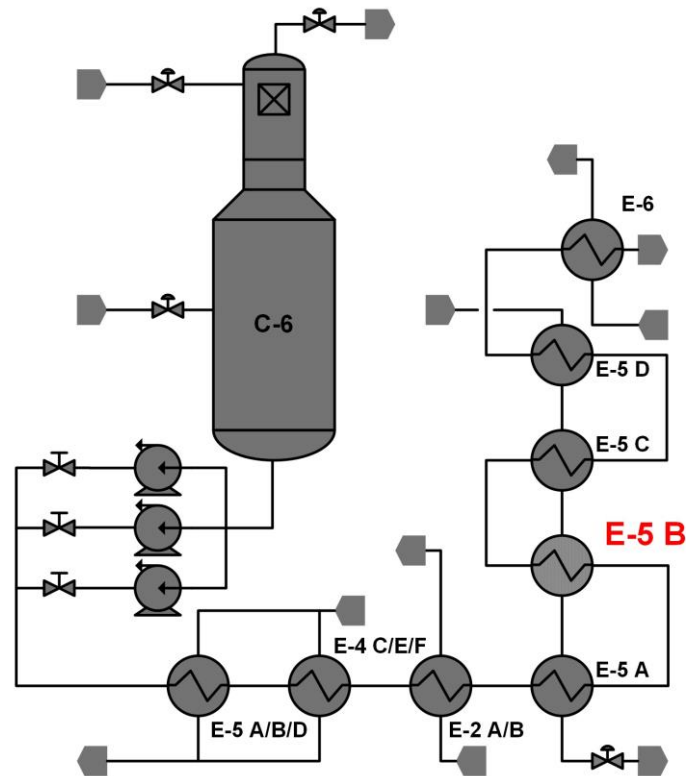
Alpha regularizacija predstavlja regularizacijski član L1 (*Lasso*), dok **lambda regularizacija** predstavlja regularizacijski član L2 (*Ridge*) [58,59,60]

3. Eksperimentalni dio

3.1. Sekcija za predgrijavanje sirove nafte

Atmosferska destilacija sirove nafte prvi je korak u rafiniranju nafte. Cjelokupna energija potrebna za odvijanje procesa destilacije dobiva se iz sirove nafte, koja se zagrijava u sekciji za predgrijavanje i peći. [11] Sekcija za predgrijavanje sirove nafte sastoji se od serija izmjenjivača topline koje su strateški smještene između odsoljivača, *flash* kolone i peći. [2] Izmjenjivači topline u ovoj sekciji su protustrujni. Na jednoj strani izmjenjivača kroz cijevi prolazi nafta koju treba zagrijati, dok s druge strane kroz plašt prolazi vrući medij (frakcije iz atmosferske kolone), kojeg treba ohladiti. [12] Ovim procesom rekuperira se toplina, pri čemu se može iskoristiti čak 65% ukupne energije potrebne za destilaciju sirove nafte, dok preostalih 35% energije osigurava peć. [13] U izmjenjivačima sirova nafta izmjenjuje toplinu s frakcijama (proizvodima) iz atmosferske kolone. Što je ta frakcija teža, to je njezin sadržaj topline veći. Količina frakcije također utječe na sadržaj topline. Tendencija je da se sirova nafta što više zagrije prije ulaska u peć, kako bi se smanjila potrošnja goriva u peći. [12]

Na Slici 20. prikazan je dio sekcije za predgrijavanje sirove nafte. Unutar tog dijela sekcije nalazi se izmjenjivač topline E-5 B, za koji se u ovom radu predviđa nastajanje naslaga. Sirova nafta prije nego što stigne do izmjenjivača E-5 B prošla je kroz značajan broj izmjenjivača topline i jedinica za obradu, poput odsoljivača. U ovom izmjenjivaču topline sirova nafta zagrijava se pomoću atmosferskih ostataka, težih frakcija koje nisu isparile tijekom destilacije i nalaze se na dnu destilacijske kolone. Ovaj dio sekcije za predgrijavanje sirove nafte je posljednji u sekciji i postiže najviše temperature unutar same sekcije. Visoke temperature, zajedno s visokom koncentracijom asfaltena u atmosferskim ostacima stvaraju pogodne uvjete za nastajanje naslaga.



Slika 20. Dio sekcije za predgrijavanje sirove nafte s ispitivanim izmjenjivačem topline

3.2. Prikupljanje podataka

U ovom diplomskom radu korišteni su povijesni podaci preuzeti iz baze podataka postrojenja, koji obuhvaćaju razdoblje od 7 mjeseci kontinuiranog rada rafinerije nafte. Vrijeme uzorkovanja procesnih podataka je 5 minuta. Procesni podaci sadrže ulaznu temperaturu tople struje ($T_{T,u}$), izlaznu temperaturu tople struje ($T_{T,i}$), ulaznu temperaturu hladne struje ($T_{H,u}$), izlaznu temperaturu hladne struje ($T_{H,i}$), maseni protok tople struje (\dot{m}_T) i maseni protok hladne struje (\dot{m}_H). Za isto razdoblje prikupljeni su i podaci o fizikalno-kemijskim svojstvima sirove nafte. Ti podaci uključuju gustoću sirove nafte, te količinu asfaltena, sedimenata i vode, dušika, soli i vode u nafti. Za razvoj modela neuronskih mreža i modela ekstremnog gradijentnog pojačavanja koriste se podaci iz inicijacijske faze rada izmjenjivača topline. U ovom slučaju, to uključuje prvih 5000 podataka, što odgovara otprilike 417 radnih sati rafinerije nakon remonta postrojenja.

3.3. Softversko razvojno okruženje

Modeli su razvijeni koristeći programski jezik *Python* (verzija 3.10.12) i njegovu distribuciju *Anaconda* (verzija Navigator 2.5.0). *Python* je programski jezik kojega je razvio

Guido van Rossum i prvi put je predstavljen 1991. godine. Poznat je po svojoj jednostavnoj i čitljivoj sintaksi. *Python* se koristi u mnogim područjima kao što su razvoj internetskih stranica, znanstvena istraživanja, umjetna inteligencija i analiza podataka. Njegova jednostavnost, fleksibilnost i bogat ekosustav biblioteka čine ga jednim od najpopularnijih programskih jezika. [61] *Anaconda* je distribucija *Python*-a i *R*-a otvorenog koda (engl. *open source*) koja je specijalizirana za analizu podataka, znanstvene izračune i strojno učenje. [62]

U ovom radu korištene su sljedeće *Python* biblioteke: *pandas*, *Matplotlib*, *Numpy*, *seaborn*, *Tensorflow*, *Keras*, *KerasTuner*, *Xgboost*, *scikit-learn* i *hampel*.

- *pandas* je korišten za učitavanje, manipulaciju i analizu podataka iz *Excel* datoteke. Kroz *pandas* su učitani podaci u podatkovni okvir (engl. *DataFrame*)
- *Matplotlib* je korišten za vizualizaciju podataka. Kreirani su različiti grafički prikazi, poput histograma pogrešaka i grafičkog prikaza trenda pogreške.
- *NumPy* je korišten za rad s numeričkim podacima i matricama. Koristeći *NumPy*, podaci su transformirani u oblike potrebne za modeliranje, te su provedene različite matematičke operacije.
- *seaborn* je korišten za kreiranje toplinske mape (engl. *heat map*) koja prikazuje korelacije između različitih varijabli.
- *scikit-learn* je korišten za skaliranje podataka i podjelu podataka na skupove za učenje, validaciju i test. Osim toga, korišten je za izračunavanje evaluacijskih metrika i pronalaženje optimalnih hiperparametara XGBoost modela pomoću *GridSearchCV*-a.
- *hampel* je korišten za primjenu *hampel* filtra pomoću kojeg su detektirane i zamijenjene ekstremne vrijednosti
- *TensorFlow* je korišten je za razvoj modela neuronskih mreža. *Keras* je programsko sučelje (engl. *Application Programming Interface*, API) razvijeno za potrebe dubokoga učenja koje u svojoj pozadini koristi platformu JAX, *TensorFlow* ili *PyTorch*. *Keras* omogućuje brz i jednostavan razvoj modela dubokoga učenja. [63] Kroz *Keras* programsko sučelje definirana je arhitektura mreže i njeni hiperparametri.
- *KerasTuner* je korišten za optimizaciju hiperparametara modela neuronskih mreža pomoću Bayesove optimizacije (engl. *Bayesian optimization*).
- *Xgboost* je korišten za razvoj modela ekstremnog gradijentnog pojačavanja.

3.4. Predobrada podataka

Nakon što su podaci učitani u *Python* slijedila je predobrada podataka. Predobrada podataka ista je za modele neuronskih mreža i modele ekstremnog gradijentnog pojačavanja. Industrijski podaci često mogu sadržavati ekstremne vrijednosti koje značajno odstupaju od ostalih podataka, kao i nedostajuće podatke. Međutim, u ovom slučaju nije bilo nedostajućih podataka.

3.4.1. Hampel filtar

Pravilo 3σ , koje se često koristi u statistici, kaže da će se u normalnoj distribuciji oko 99,7% podataka nalaziti unutar tri standardne devijacije ($\pm 3\sigma$) od srednje vrijednosti podataka. Podaci izvan ovog raspona smatraju se potencijalnim ekstremnim vrijednostima. Kada se želi smanjiti utjecaj višestrukih odstupajućih vrijednosti na procijenjenu srednju vrijednost i standardnu devijaciju varijable, srednja vrijednost se može zamijeniti medijanom, a standardna devijacija medijanom apsolutnog odstupanja od medijana. Pravilo 3σ s robusnijim skaliranjem, često se u literaturi naziva *Hampel* identifikatorom. U ovom radu korišten je *Hampel* filtar, koji služi za detekciju i zamjenu ekstremnih vrijednosti, a temelji se na *Hampel* identifikatoru. Zamjenjuje ekstremne vrijednosti u nizu podataka medijanom unutar kliznog prozora (engl. *window size*) koji određuje broj uzoraka uzetih za izračunavanje medijana. Važno je napomenuti da neuobičajeni podaci mogu ponekad predstavljati važnu karakteristiku dinamičkog vladanja procesa. Iz tog razloga *Hampel* filter nije automatski primijenjen, nego su podaci temeljito pregledani. [18]

3.4.2. Koeficijenti korelacije

Sljedeći korak bio je odabir utjecajnih varijabli, odnosno ulaznih varijabli koje imaju određeni utjecaj na izlaznu varijablu. Previše ulaznih varijabli s malim utjecajem uvodi nepotrebnu kompleksnost u model. Za odabir utjecajnih varijabli često se koristi Pearsonov koeficijent korelacije. Pearsonov koeficijent korelacije (r) predstavlja mjeru linearne povezanosti između dvije normalno distribuirane varijable. Vrijednosti koeficijenta kreću se između -1 i 1, pri čemu ove vrijednosti pokazuju intenzitet i smjer odnosa između varijabli. Korelacija koja je bliža 1 ili -1 je jača, dok je korelacija bliža 0 slabija. [18] Pearsonovi koeficijenti korelacije potencijalnih ulaznih varijabli s izlaznom temperaturom tople struje prikazani su u Tablici 2., dok su u Tablici 3. prikazani Pearsonovi koeficijenti korelacije

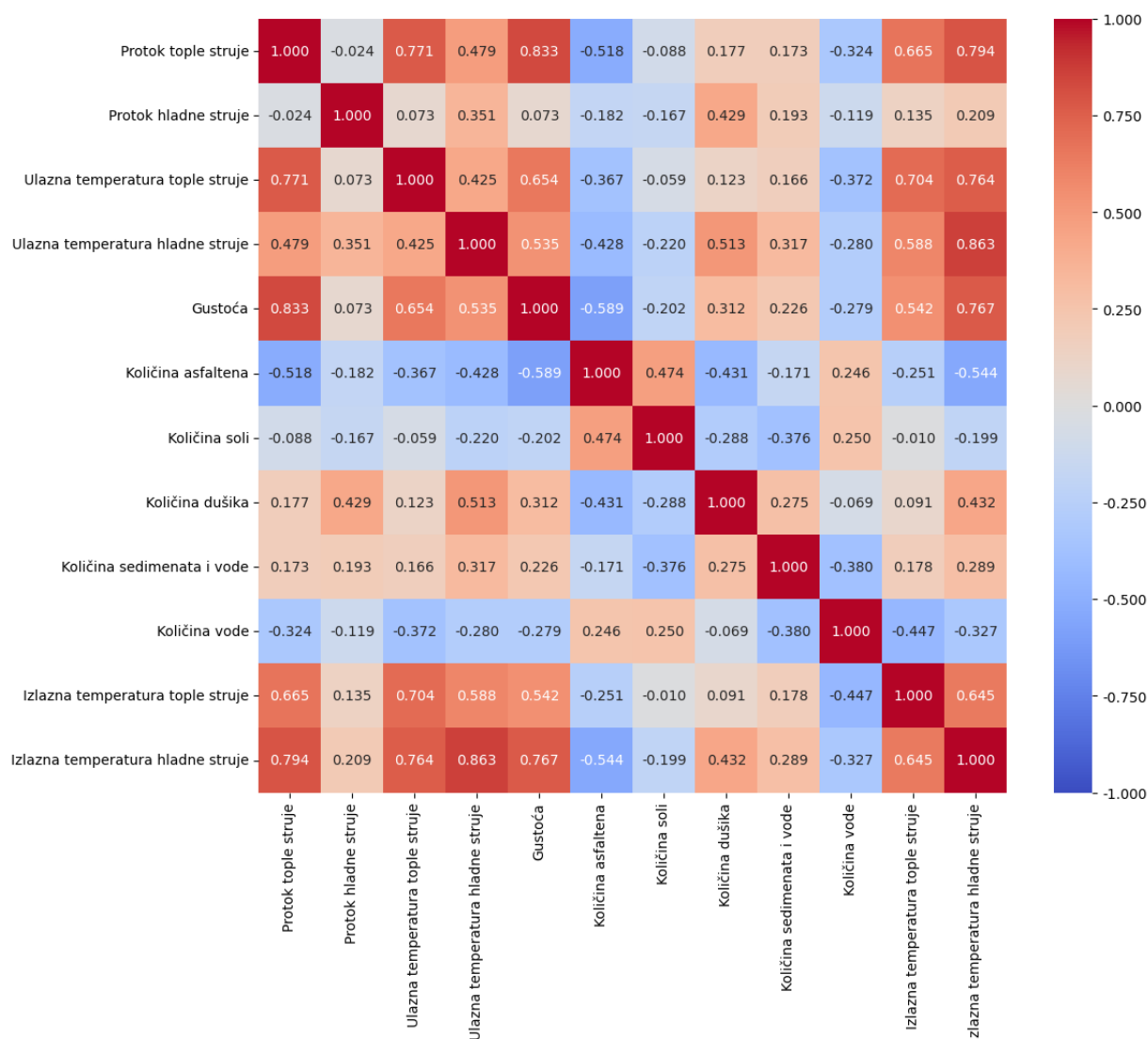
potencijalnih ulaznih varijabli s izlaznom temperaturom hladne struje. Korelacije su prikazane i grafički pomoću toplinske mape (Slika 21.). Važno je napomenuti da se ove korelacije odnose na prvih 5000 podataka koji su korišteni za razvoj modela.

Tablica 2. *Pearsonovi koeficijenti korelacije za potencijalne ulazne varijable (topla struja)*

Potencijalna ulazna varijabla	Korelacija s izlaznom temperaturom tople struje
Protok tople struje	0,665
Protok hladne struje	0,135
Ulazna temperatura tople struje	0,704
Ulazna temperatura hladne struje	0,588
Gustoća	0,542
Količina asfaltena	-0,251
Količina sedimenata i vode	-0,010
Količina dušika	0,091
Količina soli	0,178
Količina vode	-0,447

Tablica 3. *Pearsonovi koeficijenta korelacije za potencijalne ulazne varijable (hladna struja)*

Potencijalna ulazna varijabla	Korelacija s izlaznom temperaturom hladne struje
Protok tople struje	0,794
Protok hladne struje	0,209
Ulazna temperatura tople struje	0,764
Ulazna temperatura hladne struje	0,863
Gustoća	0,767
Količina asfaltena	-0,544
Količina sedimenata i vode	-0,199
Količina dušika	0,432
Količina soli	0,289
Količina vode	-0,327



Slika 21. Toplinska mapa Pearsonovih koeficijenata za potencijalne ulazne i izlazne varijablu

Na temelju Pearsonovih koeficijenata korelacije i poznavanja procesa, kao ulazne varijable modela koji predviđaju izlaznu temperaturu tople struje odabrane su: protoci tople i hladne struje, ulazne temperature tople i hladne struje, gustoća sirove nafte, te količina asfaltena i vode u sirovoj nafti. Za modele koji predviđaju izlaznu temperaturu hladne struje, odabrane ulazne varijable su: protoci tople i hladne struje, ulazne temperature tople i hladne struje, gustoća sirove nafte, količina asfaltena, sedimenata i vode, dušika i vode u sirovoj nafti.

3.4.3. Skaliranje podataka

Ulazne varijable često mogu imati različite vrijednosti, ovisno o njihovim fizikalnim jedinicama i prirodi procesa. To može dovesti do toga da varijable s većim broječanim

iznosima imaju veći utjecaj na razvoj modela u odnosu na one s manjim iznosima. Kako bi se to izbjeglo, provodi se skaliranje podataka. Ulazne varijable skalirane su pomoću *min-max* normalizacije, koja prilagođava vrijednosti varijabli tako da se nalaze unutar raspona od 0 do 1, prema sljedećoj formuli:

$$x_{\text{norm}}^i = \frac{x^i - x_{\text{min}}}{x_{\text{max}} - x_{\text{min}}} \quad (19)$$

pri čemu je x neskaliрана varijabla, x_{norm} skalirana varijabla, x_{max} maksimalna vrijednost varijable, a x_{min} minimalna vrijednost varijable.

Izlazne varijable su skalirane koristeći *z-score* normalizaciju (standardizaciju), koja svaku vrijednost prilagođava tako da srednja vrijednost bude 0, a standardna devijacija 1, prema sljedećoj formuli:

$$x' = \frac{x - \bar{x}}{\sigma_x} \quad (20)$$

gdje je x' skalirana varijabla, x je neskaliрана varijabla, \bar{x} je srednja vrijednost, a σ_x je standardna devijacija. [18]

3.5. Metodologija razvoja modela

U ovom radu razvijeni su modeli neuronskih mreža i modeli ekstremnog gradijentnog pojačavanja za predviđanje izlaznih temperatura tople i hladne struje čistog izmjenjivača topline. Oba modela koriste procesne podatke vezane uz izmjenjivač topline i fizikalno-kemijska svojstva sirove nafte. Modeli se razvijaju koristeći podatke iz inicijacijske faze rada izmjenjivača, koja obuhvaća razdoblje tijekom kojeg naslage imaju mali ili nikakav utjecaj na prijenos topline u izmjenjivaču topline. Budući da se modeli razvijaju koristeći podatke iz inicijacijske faze, predviđene izlazne temperature trebale bi odražavati učinkovitost čistog izmjenjivača. Procesni i fizikalno-kemijski podaci prikupljeni nakon inicijacijske faze koriste se za predviđanje izlaznih temperatura u sljedećem operativnom razdoblju, kada su na izmjenjivaču prisutne naslage. Razlika između predviđenih i stvarnih izlaznih temperatura ukazuje na smanjenje učinkovitosti izmjenjivača topline zbog prisutnosti naslaga.

3.6. Razvoj modela neuronskih mreža

U ovom radu razvijeni su modeli višeslojne perceptron mreže (engl. *Multilayer Perceptron*, MLP), vrste neuronskih mreža koja se sastoji od ulaznog, skrivenih i izlaznog sloja, pri čemu su neuroni u svim slojevima međusobno povezani. Skup podataka podijeljen je na tri dijela: skup za učenje, skup za validaciju i skup za testiranje. Skup za učenje iznosio je 80% podataka, dok je skup za testiranje iznosio preostalih 20%. Unutar skupa za učenje, 20% podataka korišteno je za validaciju. Kao funkcija gubitka korištena je srednja kvadratna pogreška. Kako bi se spriječilo pretreniranje modela, korištena je tehnika *early stopping*. Za pretragu optimalnih hiperparametara neuronskih mreža modela korištena je biblioteka *KerasTuner*. Ova biblioteka omogućava pronalaženje optimalnih hiperparametara različitih vrsta modela strojnog učenja koji su razvijeni pomoću *Kerasa*. Kao metoda optimizacije korištena je Bayesova optimizacija. Ova metoda koristi probabilistički model, odnosno stvara model vjerojatnosti funkcije gubitke za određenu kombinaciju hiperparametara. Pretragu sljedećih kombinacija vrši na osnovu prethodnih rezultata pretrage, za razliku od *GridSearchCV* algoritma koji istražuje sve moguće kombinacije hiperparametara. [64,65] Pretraživani su sljedeći hiperparametri modela: broj neurona u skrivenom sloju, aktivacijska funkcija skrivenih slojeva, broj skrivenih slojeva, optimizator, broj epoha i veličina serije (engl. *batch size*). Optimalna kombinacija hiperparametara traži se na temelju srednje kvadratne pogreške modela na validacijskom skupu. U Tablici 4. prikazani su hiperparametri koji su pretraživani za oba modela (topla i hladna struja).

Tablica 4. Pretraživani hiperparametri neuronskih mreža

Hiperparametar modela neuronskih mreža	Pretražene vrijednosti
Broj neurona u skrivenim slojevima (topla struja)	[7, 50]
Broj neurona u skrivenim slojevima (hladna struja)	[9, 50]
Aktivacijska funkcija u skrivenim slojevima	<i>ReLU, tanh, sigmoid, ELU</i>
Broj skrivenih slojeva	[1, 2]
Optimizator	<i>AdaDelta, Adam, RMSprop, Nadam</i>
Broj epoha	[10, 500] s korakom 5
Veličina serije	32, 64, 128, 256

Optimalni hiperparametri neuronskih mreža prikazani su u poglavlju Rezultati i rasprava.

3.7. Razvoj XGBoost modela

Prilikom razvoja XGBoost modela, skup podataka podijeljen je na dva dijela: skup za učenje i skup za testiranje. Skup za učenje iznosio je 80% podataka, dok je skup za testiranje iznosio preostalih 20%. Kao funkcija gubitka korištena je srednja kvadratna pogreška. *Early stopping* metoda korištena je za sprječavanje pretreniranja modela. Pronalaženje optimalnih hiperparametara provedeno je koristeći *GridSearchCV* algoritam, koji sistematski istražuje sve moguće kombinacije unutar unaprijed definiranog raspona hiperparametara. *GridSearchCV* koristi *K-fold* križnu validaciju (engl. *K-fold cross validation*) koja dijeli skup podataka na nekoliko manjih podskupova (engl. *folds*). Model se uči na $n-1$ podskupova podataka, dok se preostali dio koristi za validaciju. Svaki podskup podataka koristi se jednom za validaciju tijekom cijelog procesa. Na taj način se postiže pouzdana procjena sposobnosti generalizacije modela na neviđene podatke i smanjuje se rizik od pretreniranja. Budući da *GridSearchCV* koristi križnu validaciju, nije bilo potrebe izdvajati poseban validacijski skup kao kod razvoja modela neuronskih mreža. Za odabir najboljih kombinacija hiperparametara, *GridSearchCV* koristi prosjek određenih evaluacijskih metrika pojedinih podskupova podataka. [66,67] Na početku pretrage hiperparametara provedeno je nekoliko pretraga s širim rasponima hiperparametara kako bi se identificirala područja u kojima model daje bolje rezultate. Nakon što je stečen uvid u početne rezultate, slijedilo je nekoliko pretraga s užim rasponima hiperparametara. Pretraživane su vrijednosti sljedećih hiperparametara XGBoost modela: broj stabala, maksimalna dubina stabla, *min child weight*, *subsample*, *colsample bytree*, koeficijent brzine učenja, *gamma*, *alpha* regularizacija i *lambda* regularizacija. Za križnu validaciju podaci su podjeljeni na 3 podskupa. U Tablici 5. prikazani su hiperparametri i njihov raspon pretražen *GridSearchCV*-om. Ove vrijednosti hiperparametara pretražene su za oba modela (topla i hladna struja). Važno je napomenuti da nisu svi hiperparametri pretraživani ravnomjernim koracima, na primjer *Lambda* regularizacija pretraživana je s manjim koracima unutar raspona od 0 do 1, a većim koracima unutar raspona od 1 do 10.

Tablica 5. Pretražen raspon vrijednosti hiperparametara XGBoost modela

Hiperparametar XGBoost modela	Pretražen raspon
Broj stabala	[50, 500]
Maksimalna dubina stabla	[3, 10]
<i>Min child weight</i>	[1, 10]
<i>Subsample</i>	[0,5, 1,0]
<i>Colsample bytree</i>	[0,5, 1,0]
Koeficijent brzine učenja	[0,01, 0,3]
<i>Gamma</i>	[0, 0,5]
<i>Alpha</i> regularizacija	[0, 1]
<i>Lambda</i> regularizacija	[0, 5]

Optimalni hiperparametri XGBoost modela prikazani su u poglavlju Rezultati i rasprava.

3.8. Izračun ukupnog koeficijenta prijenosa topline i *fouling* faktora

Krajnji cilj modeliranja u ovom diplomskom radu je predviđanje nastajanja naslaga u izmjenjivaču topline. Kvantitativni uvid u nastajanje naslaga može se dobiti izračunom *fouling* faktora. Za izračun *fouling* faktora, potrebno je uzeti u obzir stvarne vrijednosti ukupnog koeficijenta prijenosa topline (s naslagama) i vrijednosti koeficijenta dobivene modelom (bez naslaga). Ukupni koeficijent prijenosa topline s naslagama, K_s naslagama, izračunava se na temelju stvarnih izlaznih temperatura izmjenjivača topline, prema sljedećoj formuli:

$$K_{s \text{ naslagama}} = \frac{\dot{m} \cdot c_p \cdot (T_{T,\text{ulaz}} - T_{T,\text{izlaz}})}{A \cdot F \cdot \frac{(T_{T,\text{ulaz}} - T_{H,\text{izlaz}}) - (T_{T,\text{izlaz}} - T_{H,\text{ulaz}})}{\ln\left(\frac{T_{T,\text{ulaz}} - T_{H,\text{izlaz}}}{T_{T,\text{izlaz}} - T_{H,\text{ulaz}}}\right)}} \quad (21)$$

gdje je T_{ulaz} ulazna temperatura tople struje, T_{izlazna} izlazna temperatura tople struje. Oznake T i H predstavljaju toplu i hladnu struju. Ukupni koeficijent prijenosa topline čistog izmjenjivača topline, $K_{\text{čisti}}$, izračunava se na temelju izlaznih temperatura predviđenih modelom, prema sljedećoj formuli:

$$K_{\text{čisti}} = \frac{\dot{m} \cdot c_p \cdot (T_{T,\text{ulaz}} - T_{T,\text{izlaz,M}})}{A \cdot F \cdot \frac{(T_{T,\text{ulaz}} - T_{H,\text{izlaz,M}}) - (T_{T,\text{izlaz,M}} - T_{H,\text{ulaz}})}{\ln\left(\frac{T_{T,\text{ulaz}} - T_{H,\text{izlaz,M}}}{T_{T,\text{izlaz,M}} - T_{H,\text{ulaz}}}\right)}} \quad (22)$$

Oznaka M predstavlja temperaturu predviđenu modelom. Nakon što se izračunaju vrijednosti ukupnog koeficijenta izmjenjivača s naslagama i čistog izmjenjivača, *fouling* faktor se tada može izračunati pomoću jednadžbe (6).

3.9. Vrednovanje modela neuronskih mreža i XGBoost modela

Posljednji korak u razvoju modela je vrednovanje modela. Za vrednovanje modela u ovom radu koriste se sljedeće evaluacijske metrike: srednja kvadratna pogreška, koeficijent višestruke determinacije (R^2) i Pearsonov koeficijent korelacije. Koeficijent višestruke determinacije je mjera koja pokazuje koliko dobro model objašnjava varijabilnost u podacima. Vrijednosti R^2 nalaze se u rasponu od 0 do 1, pri čemu vrijednost 1 označava savršeno podudaranje modela s podacima, dok vrijednost 0 ukazuje da model ne objašnjava varijabilnost u podacima. [68] Modeli se vrednovani i grafički putem usporedbe stvarnih vrijednosti sa predikcijama, trenda vrijednosti pogreške (reziduala) i histograma pogrešaka. Pogreška se može matematički prikazati kao:

$$e_i = y_i - \hat{y}_i \quad (23)$$

gdje je e_i pogreška, y_i je stvarna vrijednost, a \hat{y}_i predviđena vrijednost.

4. Rezultati i rasprava

U ovom poglavlju predstavljene su rezultati modela neuronskih mreža i modela ekstremnog gradijentnog pojačavanja. Glavni cilj bio je razviti modele sa što boljim evaluacijskim metrikama, uz istovremeno vođenje računa o dinamici procesa nastajanja naslaga i dinamičkom vladanju procesu.

4.1. Modeli neuronskih mreža

U ovom poglavlju prikazani su rezultati pet najboljih modela neuronskih mreža za predviđanje izlazne temperature tople i hladne struje. Nakon toga, najbolji od tih pet modela tople i hladne struje bit će detaljnije analiziran, a njihove izlazne temperature koristit će se za izračun ukupnog koeficijenta prijenosa topline, odnosno *fouling* faktora. Odabir najboljeg modela temelji se na kompromisu između evaluacijskih metrika modela i njegove sposobnosti praćenja dinamike procesa.

4.1.1. Modeli neuronskih mreža za predviđanje izlazne temperature tople struje

U Tablici 6. prikazani su hiperparametri pet najboljih modela neuronskih mreža za predviđanje izlazne temperature tople struje, dok su u Tablici 7. prikazane njihove srednje kvadratne pogreške na skupu za učenje, validaciju i testiranje. Modeli su rangirani prema srednjoj kvadratnoj pogrešci na skupu za testiranje.

Tablica 6. Hiperparametri najboljih modela neuronskih mreža (topla struja)

Model neuronske mreže	1	2	3	4	5
Broj skrivenih slojeva	2	2	1	1	2
Broj neurona u prvom skrivenom sloju	50	43	50	32	36
Broj neurona u drugom skrivenom sloju	13	7	/	/	16
Aktivacijska funkcija u skrivenim slojevima	ReLU	ReLU	ReLU	ReLU	ReLU
Optimizator	Nadam	Nadam	Nadam	Nadam	Nadam
Broj epoha	264	175	204	308	220
Veličina serije	32	32	32	32	128

Aktivacijska funkcija izlaznih slojeva je linearna. Ulazni sloj ima broj neurona jednak broju ulaznih varijabli, odnosno 7.

Tablica 7. *MSE najboljih modela neuronskih mreža (topla struja)*

Model neuronske mreže	1	2	3	4	5
<i>MSE</i> na skupu za učenje	$3,719 \cdot 10^{-2}$	$4,209 \cdot 10^{-2}$	$4,383 \cdot 10^{-2}$	$4,972 \cdot 10^{-2}$	$4,774 \cdot 10^{-2}$
<i>MSE</i> na skupu za validaciju	$3,751 \cdot 10^{-2}$	$4,178 \cdot 10^{-2}$	$4,119 \cdot 10^{-2}$	$4,701 \cdot 10^{-2}$	$4,825 \cdot 10^{-2}$
<i>MSE</i> na skupu za testiranje	$4,227 \cdot 10^{-2}$	$4,837 \cdot 10^{-2}$	$5,023 \cdot 10^{-2}$	$5,448 \cdot 10^{-2}$	$5,863 \cdot 10^{-2}$

U ispitivanom rasponu od 7 do 50 neurona, u prvom skrivenom sloju najbolji modeli su se pokazali oni koji imaju veći broj neurona, od 32 do 50. Kod modela s dva skrivena sloja, broj neurona u drugom skrivenom sloju manji je od broja neurona u prvom skrivenom sloju. Svi najbolji modeli koriste ReLU aktivacijsku funkciju u skrivenim slojevima. Što se tiče optimizatora svi najbolji modeli koriste Nadam. Broj epoha kod najboljih modela varira u rasponu od 175 do 308. Za većinu najboljih modela optimalna veličina serije je 32.

Najbolji modeli pokazuju relativno slične vrijednosti srednje kvadratne pogreške. Osim srednje kvadratne pogreške i drugih evaluacijskih metrika, važno je bilo provjeriti kako modeli prate dinamiku procesa. Stoga su modeli analizirani i grafički kako bi se utvrdilo koji najbolje prati dinamiku promjena temperatura i nastajanja naslaga na koju ukazuje razlika između stvarnih temperatura i onih koje predviđa model. Na temelju ta dva kriterija, kao najbolji model iz ove skupine modela odabran je Model 2. U Tablici 8. prikazani su hiperparametri Modela 2, a vrijednosti srednje kvadratne pogreške, koeficijenta višestruke determinacije i Pearsonovog koeficijenta korelacije tog modela prikazane su u Tablici 9.

Tablica 8. *Hiperparametri najboljeg modela neuronske mreže (topla struja)*

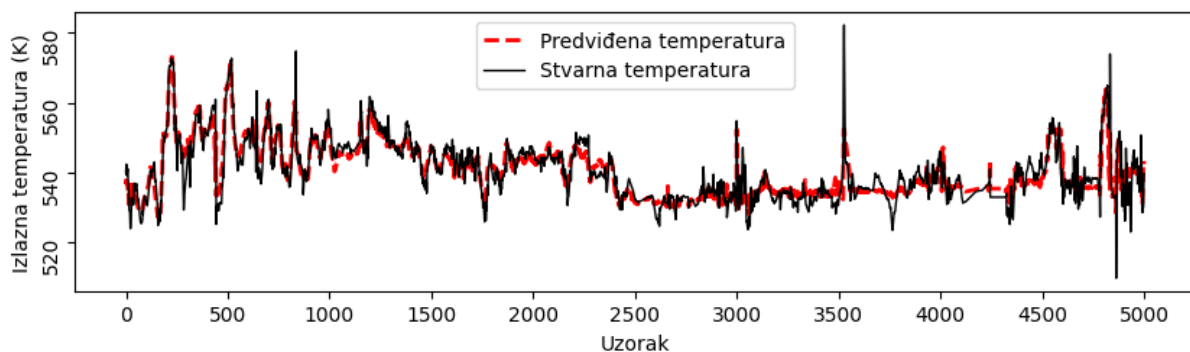
Broj neurona u prvom skrivenom sloju	43
Broj neurona u drugom skrivenom sloju	7
Aktivacijska funkcija u skrivenim slojevima	ReLU
Broj skrivenih slojeva	2
Optimizator	Nadam
Broj epoha	175
Veličina serije	32

Tablica 9. *MSE, R^2 i r najboljeg modela neuronske mreže (topla struja)*

	Skup za učenje	Skup za validaciju	Skup za testiranje
<i>MSE</i>	$4,209 \cdot 10^{-2}$	$4,178 \cdot 10^{-2}$	$4,837 \cdot 10^{-2}$
R^2	0,8378	0,8463	0,8288
r	0,9155	0,9204	0,9105

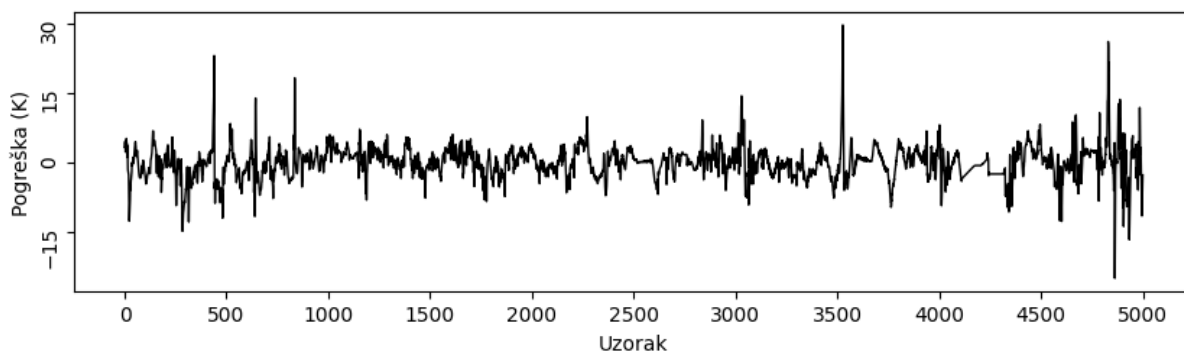
Vrijednosti *MSE*, R^2 i r slične su na sva tri skupa, što ukazuje na to da nije došlo do pretreniranja modela, odnosno da model ima dobru sposobnost generalizacije na novim, neviđenim podacima.

Slika 22. prikazuje usporedbu predviđene izlazne temperature najboljim modelom neuronske mreže sa stvarnim vrijednostima izlazne temperature tople struje u inicijacijskoj fazi koja se koristila za razvoj modela. Kao što je već navedeno, vrijeme uzorkovanja procesnih podataka je 5 minuta. Na apcisi grafičkog prikaza nalazi se redni broj uzorka. Primjećuje se da model dobro predviđa izlazne temperature tople struje u inicijacijskoj fazi uz nekoliko izraženih odstupanja. Model ne uspijeva dobro pratiti nagle promjene temperature, poput one pri samom kraju inicijacijske faze i oko 3500. uzorka, zbog nedostatka reprezentativnih podataka u tom rasponu na skupu za učenje.



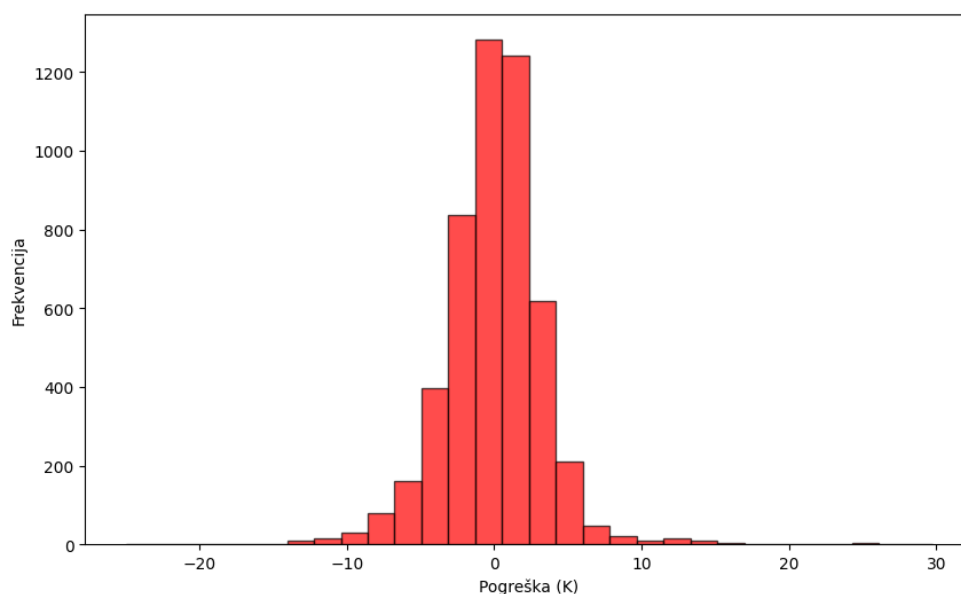
Slika 22. *Usporedba predviđene izlazne temperature najboljim modelom neuronske mreže sa stvarnim vrijednostima izlazne temperature tople struje u inicijacijskoj fazi*

Slika 23. prikazuje trend vrijednosti pogreške najboljeg modela neuronske mreže za predviđanje izlazne temperature tople struje u inicijacijskoj fazi. Iznos većine pogrešaka je relativno mali, dok su značajnije pogreške zabilježene na već spomenutim dijelovima, gdje dolazi do naglih promjena temperature. Najveća zabilježena, no izolirana pogreška iznosi 30 K.



Slika 23. Trend vrijednosti pogreške najboljeg modela neuronske mreže za predviđanje izlazne temperature tople struje u inicijacijskoj fazi

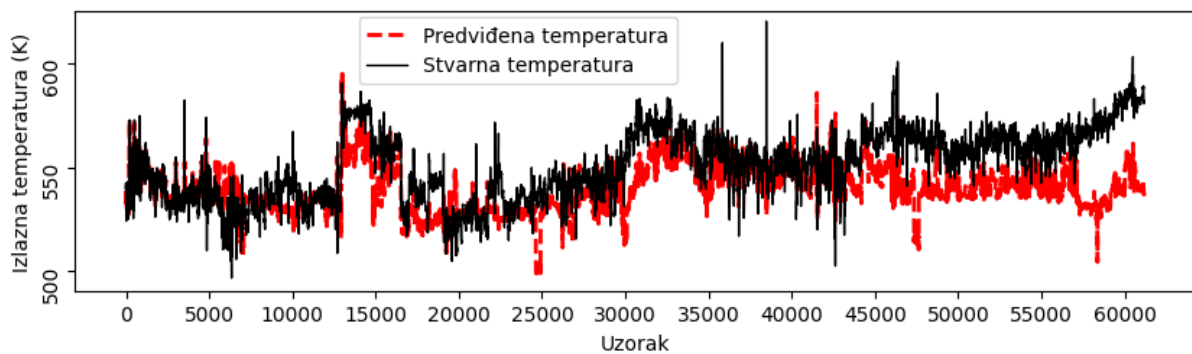
Histogram pogrešaka najboljeg modela neuronske mreže za predviđanje izlazne temperature tople struje u inicijacijskoj fazi prikazan je na Slici 24. Većina pogrešaka koncentrirana je relativno blizu nule i slijedi normalnu raspodjelu. To ukazuje na visoku točnost modela, a centriranost pogreške oko nule ukazuje na činjenicu da je većina pogrešaka slučajnog karaktera.



Slika 24. Histogram pogrešaka najboljeg modela neuronske mreže za predviđanje izlazne temperature tople struje u inicijacijskoj fazi

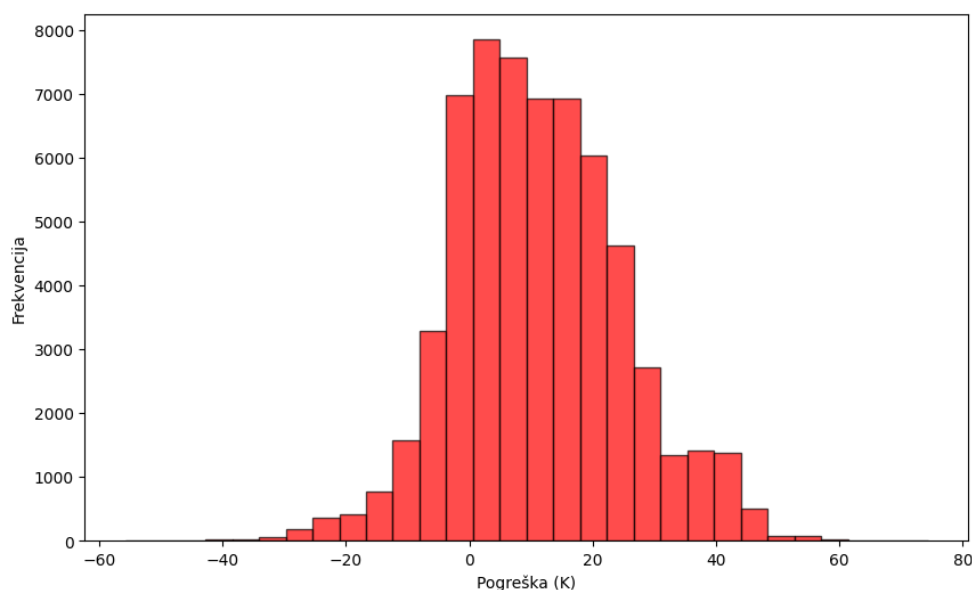
Na Slici 25. prikazana je usporedba predviđene izlazne temperature najboljim modelom neuronske mreže sa stvarnim vrijednostima izlazne temperature tople struje kroz analizirani period rada izmjenjivača topline. Tijekom inicijacijske faze, koja obuhvaća prvih 5000 uzoraka model pokazuje dobro podudaranje sa stvarnim vrijednostima, što je i očekivano jer u toj fazi još ne bi trebale nastati naslage. Nakon inicijacijske faze, primjećuju se određene

razlike između predviđenih i stvarnih vrijednosti izlaznih temperatura tople struje. Te razlike ne rastu linearno, već se periodično povećavaju i smanjuju. Međutim, može se primijetiti da s vremenom postaju sve izraženije. Razlike u predviđenim izlaznim temperaturama tople struje ukazuju na nastajanje naslaga, budući da bi se u čistom izmjenjivaču više topline prenijelo s tople na hladnu struju, što bi rezultiralo nižom izlaznom temperaturom tople struje. Drugim riječima, stvarne temperature tople struje su više od onih predviđenih modelom jer je zbog nastalih naslaga manje topline preneseno na hladnu struju.



Slika 25. *Usporedba predviđene izlazne temperature najboljim modelom neuronske mreže sa stvarnim vrijednostima izlazne temperature tople struje kroz analizirani period*

Na Slici 26. nalazi se histogram pogrešaka najboljeg modela neuronske mreže za predviđanje izlazne temperature tople struje kroz analizirani period rada izmjenjivača topline. Histogram pogrešaka pokazuje da pogreške nisu ravnomjerno raspodjeljene oko nule, već su većinom pozitivne. To sugerira da model sustavno podcjenjuje izlazne temperature tople struje, što ukazuje na prisutnost naslaga i otežan prijenos topline.



Slika 26. *Histogram pogreška najboljeg modela neuronske mreže za predviđanje izlazne temperature tople struje kroz analizirani period*

4.1.2. Modeli neuronskih mreža za predviđanje izlazne temperature hladne struje

U Tablici 10. prikazani su hiperparametri pet najboljih modela za predviđanje izlazne temperature hladne struje, dok su u Tablici 11. prikazane njihove srednje kvadratne pogreške na skupu za učenje, validaciju i testiranje. Modeli su rangirani prema srednjoj kvadratnoj pogrešci na skupu za testiranje.

Tablica 10. *Hiperparametri najboljih modela neuronskih mreža (hladna struja)*

Model neuronske mreže	1	2	3	4	5
Broj skrivenih slojeva	2	2	1	2	2
Broj neurona u prvom skrivenom sloju	50	50	50	50	50
Broj neurona u drugom skrivenom sloju	50	7	/	44	50
Aktivacijska funkcija u skrivenim slojevima	ReLU	ReLU	ReLU	ReLU	ReLU
Optimizator	Nadam	Nadam	Nadam	Nadam	Nadam
Broj epoha	210	299	177	90	259
Veličina serije	32	64	32	32	128

Aktivacijska funkcija izlaznih slojeva je linearna. Ulazni sloj ima broj neurona jednak broju ulaznih varijabli, odnosno 9.

Tablica 11. *MSE najboljih modela neuronskih mreža (hladna struja)*

Model neuronske mreže	1	2	3	4	5
<i>MSE</i> na skupu za učenje	$4,959 \cdot 10^{-3}$	$5,286 \cdot 10^{-3}$	$5,868 \cdot 10^{-3}$	$6,047 \cdot 10^{-3}$	$6,238 \cdot 10^{-3}$
<i>MSE</i> na skupu za validaciju	$4,852 \cdot 10^{-3}$	$5,355 \cdot 10^{-3}$	$5,990 \cdot 10^{-3}$	$6,220 \cdot 10^{-3}$	$6,525 \cdot 10^{-3}$
<i>MSE</i> na skupu za testiranje	$6,275 \cdot 10^{-3}$	$6,548 \cdot 10^{-3}$	$6,841 \cdot 10^{-3}$	$7,447 \cdot 10^{-3}$	$7,603 \cdot 10^{-3}$

Svi najbolji modeli u prvom skrivenom sloju imaju 50 neurona. Većina najboljih modela ima 2 skrivena sloja. U modelima s 2 skrivena sloja, 2 od 4 modela ima 50 neurona i u drugom skrivenom sloju. Svi najbolji modeli koriste ReLU aktivacijsku funkciju u skrivenim slojevima. Što se tiče optimizatora svi najbolji modeli koriste Nadam. Broj epoha kod najboljih modela kreće se u rasponu od 90 do 299. Veličina serije varira među modelima, kod tri od pet modela ona iznosi 32.

Najbolji modeli neuronskih mreža za predviđanje izlazne temperature hladne struje imaju nešto niže vrijednosti srednje kvadratne pogreške u usporedbi s modelima za predviđanje izlazne temperature tople struje. Vrijednosti srednje kvadratne pogreške i drugih evaluacijskih metrika najboljih modela su vrlo zadovoljavajuće i imaju slične vrijednosti. Od tih modela, dinamiku procesa (temperaturu u cijelom promatranom periodu) najbolje prati Model 3, koji je stoga odabran kao najbolji model iz ove skupine modela i bit će detaljnije analiziran.

U Tablici 12. prikazani su njegovi hiperparametri, a vrijednosti srednje kvadratne pogreške, koeficijenta višestruke determinacije i Pearsonovog koeficijenta korelacije tog modela prikazani su u Tablici 13.

Tablica 12. *Hiperparametri najboljeg modela neuronske mreže (hladna struja)*

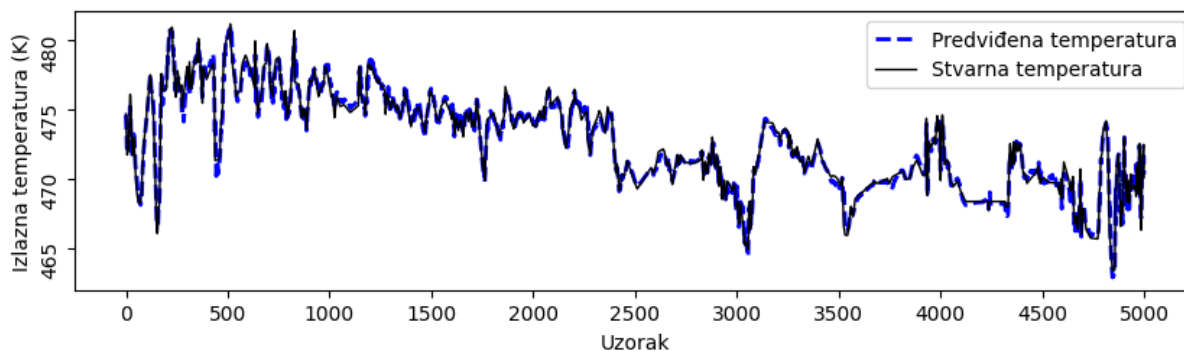
Broj neurona u skrivenom sloju	50
Aktivacijska funkcija u skrivenom sloju	ReLU
Broj skrivenih slojeva	1
Optimizator	Nadam
Broj epoha	177
Veličina serije	32

Tablica 13. *MSE, R^2 i r najboljeg modela neuronske mreže (hladna struja)*

	Skup za učenje	Skup za validaciju	Skup za testiranje
<i>MSE</i>	$5,868 \cdot 10^{-3}$	$5,990 \cdot 10^{-3}$	$6,841 \cdot 10^{-3}$
R^2	0,9869	0,9870	0,9862
r	0,9935	0,9935	0,9932

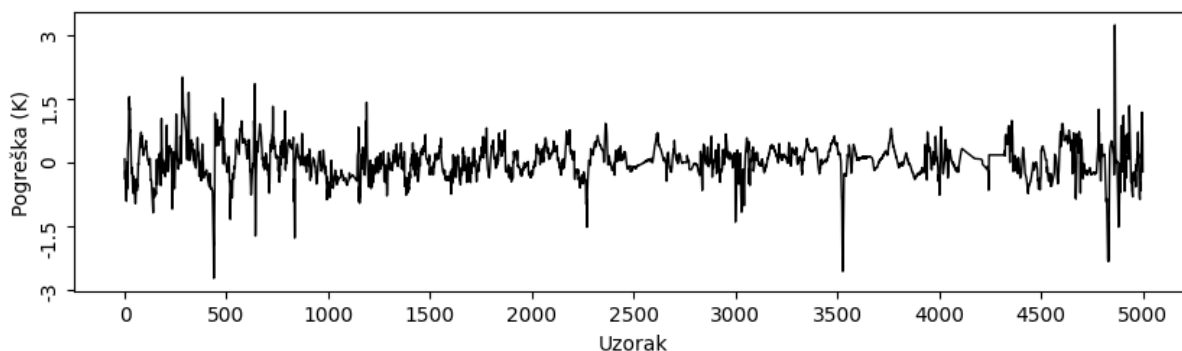
Na sva tri skupa, vrijednosti MSE , R^2 i r su vrlo slične, što sugerira da model nije pretreniran i da ima dobru sposobnost generalizacije.

Slika 27. prikazuje usporedbu predviđene izlazne temperature najboljim modelom neuronske mreže sa stvarnim vrijednostima izlazne temperature hladne struje u inicijacijskoj fazi. Može se primjetiti da model vrlo uspješno predviđa izlazne temperature hladne struje.



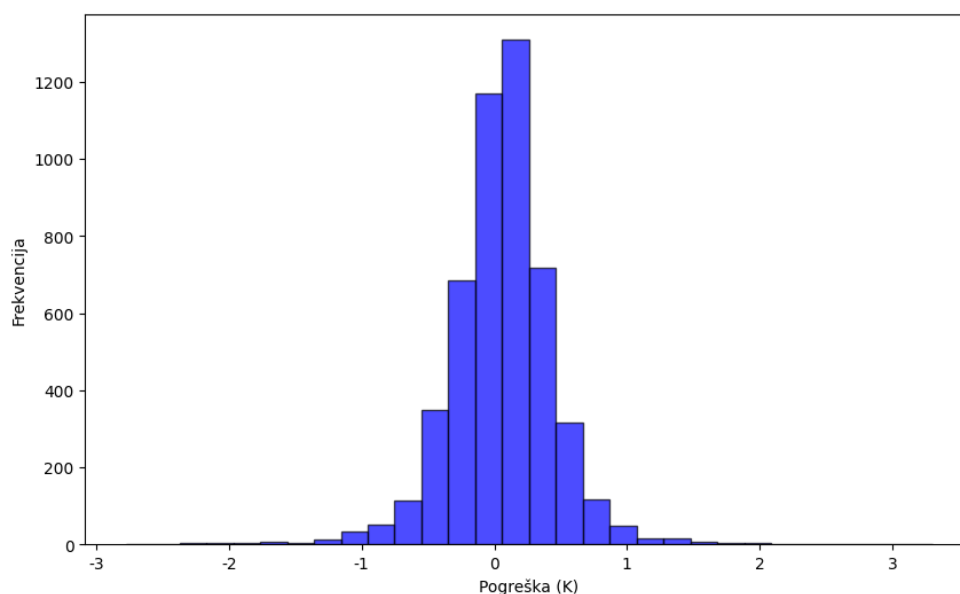
Slika 27. *Usporedba predviđene izlazne temperature najboljim modelom neuronske mreže sa stvarnim vrijednostima izlazne temperature hladne struje u inicijacijskoj fazi*

Trend vrijednosti pogreške najboljeg modela neuronske mreže za predviđanje izlazne temperature hladne struje u inicijacijskoj fazi prikazan je na Slici 28. Pogreške su relativno malog iznosa i kreću se najčešće ± 1 K, pri čemu najveća izolirana pogreška iznosi 3 K. U usporedbi s najboljim modelima za predviđanje izlazne temperature tople struje, pogreške su generalno manjeg iznosa.



Slika 28. Trend vrijednosti pogreške najboljeg modela neuronske mreže za predviđanje izlazne temperature hladne struje u inicijacijskoj fazi

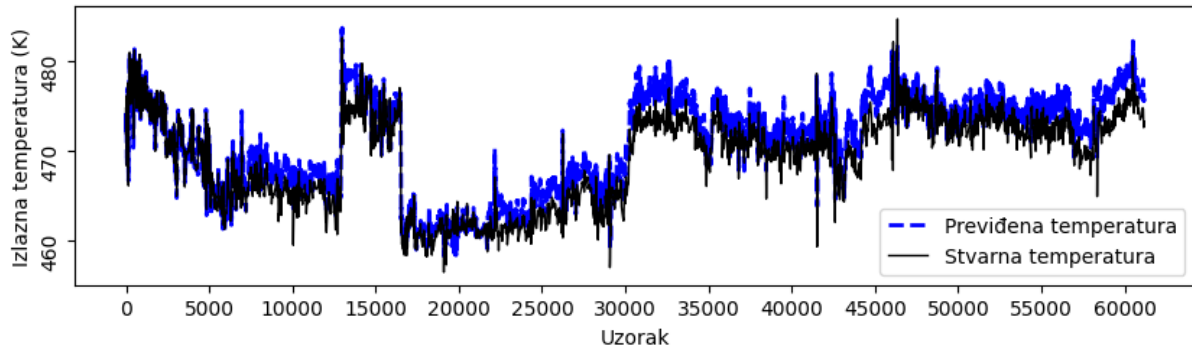
Slika 29. prikazuje histogram pogrešaka najboljeg modela neuronske mreže za predviđanje izlazne temperature hladne struje u inicijacijskoj fazi. Pogreške su male i koncentrirane oko nule te slijede normalnu raspodjelu, što sugerira da je većina pogrešaka slučajna. Većina pogrešaka smještena je unutar granica $\pm 0,6$ K.



Slika 29. Histogram pogrešaka najboljeg modela neuronske mreže za predviđanje izlazne temperature hladne struje u inicijacijskoj fazi

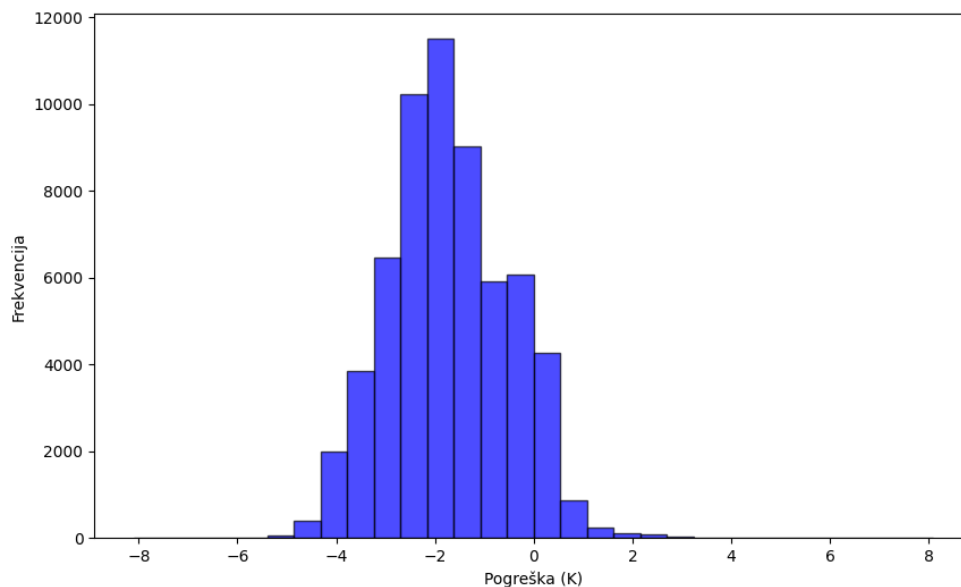
Usporedba predviđene izlazne temperature najboljim modelom neuronske mreže sa stvarnim vrijednostima izlazne temperature hladne struje kroz analizirani period rada izmjenjivača topline prikazana je na Slici 30. Može se primjetiti da model vrlo dobro prati čak i nagle promjene temperature u procesu. Nakon inicijacijske faze rada izmjenjivača, primjećuje se razlika između stvarnih temperatura i temperatura predviđenih modelom. Kao i kod modela tople struje, razlika se naizmjenično povećava i smanjuje, pri čemu je vidljivo da

s vremenom te razlike postaju sve veće. Ove razlike u izlaznim temperaturama hladne struje ukazuju na prisutnost naslaga, budući da bi se u čistom izmjenjivaču više topline prenijelo s tople na hladnu struju, što bi rezultiralo višom izlaznom temperaturom hladne struje. Drugim riječima, stvarne temperature hladne struje niže su od onih predviđenih modelom jer je zbog naslaga manje topline preneseno na hladnu struju.



Slika 30. Usporedba predviđene izlazne temperature najboljim modelom neuronske mreže sa stvarnim vrijednostima izlazne temperature hladne struje kroz analizirani period

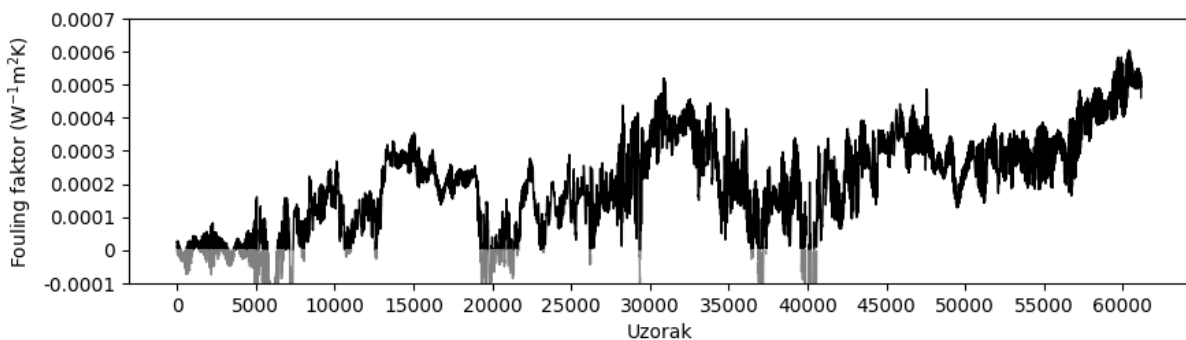
Na Slici 31. prikazan je histogram pogrešaka najboljeg modela neuronske mreže za predviđanje izlazne temperature hladne struje kroz analizirani period rada izmjenjivača topline. Iz histograma je jasno vidljivo da pogreške nisu ravnomjerno raspoređene oko nule, već su uglavnom negativne. Model sustavno precjenjuje izlazne temperature hladne struje što ukazuje na prisutnost naslaga i otežan prijenos topline.



Slika 31. Histogram pogrešaka najboljeg modela neuronske mreže za predviđanje izlazne temperature hladne struje kroz analizirani period

4.1.3. *Fouling* faktor (izračunat modelom neuronske mreže)

Izračunati *fouling* faktor često sadrži šumove i ekstremne vrijednosti, pa je za smanjenje šuma potrebno primijeniti filtre poput *moving average* filtra i *sigma clippinga* za uklanjanje ekstremnih vrijednosti. Korištenjem ovih filtara dobiva se jasniji uvid u trend *fouling* faktora. Na Slici 32. prikazan je *fouling* faktor (*fouling* krivulja) kroz analizirani period rada izmjenjivača topline, pri čemu su pozitivne vrijednosti označene crnom bojom, a negativne vrijednosti sivom. Važno je napomenuti da je ovaj grafički prikaz, radi preglednosti, samo segment unutar kojeg se nalazi većina vrijednosti *fouling* faktora. U inicijacijskoj fazi *fouling* faktor je očekivano blizu nule, što ukazuje na to da još nisu nastale naslage. Nakon inicijacijske faze, uočava se pad *fouling* faktora, te nakon nekog vremena rast. Ovaj pad nakon inicijacijske faze opisan je u teorijskom dijelu (poglavlje 2.2.1). Budući da i predviđene izlazne temperature u hladnoj i toploj struji (Slika 25. i Slika 30.) dobro prate dinamiku pada i rasta stvarnih vrijednosti, ali s određenim *offset*-om koji se periodično pojačava i smanjuje te pokazuje ukupni rastući trend, uzrok lokalnog periodičnog pada *fouling* faktora ne treba tražiti u pogrešci modela (za predikciju izlaznih temperatura). To ukazuje na to da se ovakva *fouling* krivulja može okarakterizirati kao *saw-tooth* krivulja. Ovaj fenomen javlja se kada se dio naslaga odvoji nakon što se postigne kritično vrijeme zadržavanja ili kritična debljina naslaga. Zatim, sloj naslaga ponovo raste i opet se odvoji. Takva periodična promjena može biti uzrokovana tlakovima, zarobljavanjem zraka u površinskim naslagama tijekom stanki u radu ili drugim faktorima. [69] Na kraju analiziranog perioda, *fouling* faktor postiže konačnu vrijednost od približno $0,0005 \text{ W}^{-1} \text{ m}^2 \text{ K}$.



Slika 32. *Fouling* faktor kroz analizirani period (neuronske mreže)

4.2. XGBoost modeli

U ovom poglavlju prikazano je pet najboljih modela dobivenih primjenom ekstremnog gradijentnog pojačavanja za predviđanje izlaznih temperatura tople i hladne struje. Najbolji model za svaku od struja (toplu i hladnu) bit će detaljnije analiziran, a izlazne temperature koje predviđa koriste se za izračun ukupnog koeficijenta prijenosa topline, odnosno *fouling* faktora. Odabir najboljeg modela temelji se na kompromisu između evaluacijskih metrika modela i njegove sposobnosti praćenja dinamike procesa. Optimalan broj stabala XGBoost modela određen je pomoću tehnike *early stopping*.

4.2.1. XGBoost modeli za predviđanje izlazne temperature tople struje

Hiperparametri najboljih XGBoost modela za predviđanje izlazne temperature tople struje prikazani su u Tablici 14., dok su Tablici 15. prikazane njihove vrijednosti srednje kvadratne pogreške na skupu za učenje i testiranje. Modeli su rangirani prema srednjoj kvadratnoj pogrešci na testnom skupu.

Tablica 14. Hiperparametri najboljih XGBoost modela (topla struja)

XGBoost model	1	2	3	4	5
Broj stabala	209	346	306	179	174
Maksimalna dubina stabla	10	9	9	10	9
<i>Min child weight</i>	3	4	3	3	4
<i>Subsample</i>	0,8	0,8	0,8	0,9	0,9
<i>Colsample bytree</i>	0,9	0,9	0,9	0,9	0,9
Koeficijent brzine učenja	0,05	0,05	0,05	0,075	0,075
<i>Gamma</i>	0	0	0	0	0
<i>Alpha</i> regularizacija	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1
<i>Lambda</i> regularizacija	2	3	2,5	2	2,0

Tablica 15. MSE najboljih XGBoost modela (topla struja)

XGBoost model	1	2	3	4	5
MSE na skupu za učenje	$2,194 \cdot 10^{-3}$	$1,910 \cdot 10^{-3}$	$1,843 \cdot 10^{-3}$	$1,322 \cdot 10^{-3}$	$2,417 \cdot 10^{-3}$
MSE na skupu za testiranje	$2,035 \cdot 10^{-2}$	$2,060 \cdot 10^{-2}$	$2,069 \cdot 10^{-2}$	$2,136 \cdot 10^{-2}$	$2,138 \cdot 10^{-2}$

Broj stabala najboljih modela dobiven metodom *early stopping* varira od 174 do 346. Što se tiče maksimalne dubine stabla, najbolji modeli imaju maksimalnu dubinu stabla 9 i 10 razina, što ukazuje na to da modelima odgovaraju veće maksimalne dubine stabala. Skoro svi

najbolji XGBoost modeli imaju niže vrijednosti koeficijenta brzine učenja. Svi najbolji modeli koriste vrijednost *colsample bytree* 0,9, što znači da pri svakom učenju stabla model koristi 90% varijabli, u ovom slučaju 6 varijabli jer će zaokružiti na cijeli broj. *Gamma* je kod svih najboljih modela 0 što znači da model vrši podjele isključivo prema poboljšanju funkcije gubitka koje svaka podjela donosi, bez minimalnih zahtjeva za poboljšanje. Vrijednosti hiperparametra *min child weight* su 3 i 4, što znači da se modelima više odgovara manja minimalna težina za stvaranje čvorova. *Subsample* u najboljim modelima odgovara vrijednostima od 0,7 i 0,8 što omogućuje modelima da se uče na dovoljno podataka, dok istovremeno pružaju dobru sposobnost generalizacije. Vrijednosti hiperparametra *alpha* regularizacije su niže, dok su vrijednosti *lambda* regularizacije umjerene.

Najbolji modeli pokazuju slične, niske vrijednosti srednje kvadratne pogreške. Može se primjetiti da su vrijednosti *MSE* na skupu za učenje nešto niže od onih na skupu za testiranje. Vrijednosti *MSE* kod XGBoost modela na oba skupa nešto su niže u usporedbi s najboljim modelima neuronskih mreža. Modeli su analizirani grafički kako bi se utvrdilo koji model najbolje prati dinamiku promjena temperatura i nastajanja naslaga. Razlika u praćenju dinamike gotovo da nema. Stoga je za daljnju analizu i proračun *fouling* faktora odabran Model 1 s najmanjih vrijednostima *MSE*. U Tablici 16. prikazani su hiperparametri Modela 1, dok su vrijednosti srednje kvadratne pogreške, koeficijenta višestruke determinacije i Pearsonovog koeficijenta korelacije tog modela prikazane u Tablici 17.

Tablica 16. Hiperparametri najboljeg modela XGBoost modela (topla struja)

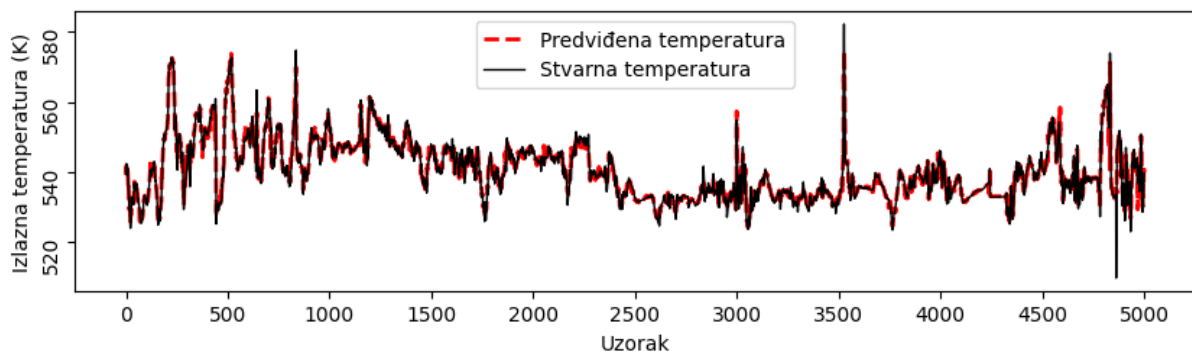
Broj stabala	209
Maksimalna dubina stabla	10
<i>Min child weight</i>	3
<i>Subsample</i>	0,8
<i>Colsample bytree</i>	0,9
Koeficijent brzine učenja	0,05
<i>Gamma</i>	0
<i>Alpha</i> regularizacija	0,1
<i>Lambda</i> regularizacija	2

Tablica 17. *MSE*, R^2 i r najboljeg XGBoost modela (topla struja)

	Skup za učenje	Skup za testiranje
<i>MSE</i>	$2,194 \cdot 10^{-3}$	$2,035 \cdot 10^{-2}$
R^2	0,9916	0,9279
r	0,9959	0,9638

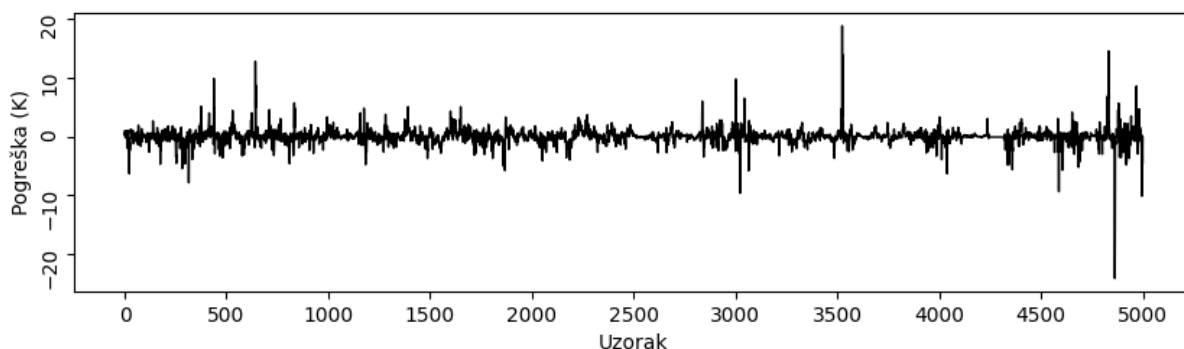
Vrijednosti evaluacijskih metrika XGBoost modela su vrlo dobre za oba skupa, ali se primjećuju određene razlike između metrika na skupu za učenje i skupu za testiranje. U usporedbi s najboljim modelom neuronske mreže za predviđanje izlazne temperature tople struje, najbolji XGBoost model u inicijacijskoj fazi pokazuje bolje rezultate prema svim evaluacijskim metrikama.

Na Slici 33. nalazi se usporedba predviđene izlazne temperature najboljim XGBoost modelom sa stvarnim vrijednostima izlazne temperature tople struje u inicijacijskoj fazi. Model uspješno predviđa izlazne temperature tople struje u inicijacijskoj fazi, uz nekoliko izraženijih odstupanja. Na samom kraju i oko 3500. uzorka javljaju se nagle promjene temperature koje model ne uspijeva uspješno predvidjeti, što rezultira izraženijim odstupanjima. Iako su odstupanja u cijelosti nešto manja u usporedbi s modelom neuronske mreže, XGBoost model također ne uspijeva dobro pratiti nagle promjene temperature zbog nedostatka reprezentativnih podataka u tom rasponu na skupu za učenje.



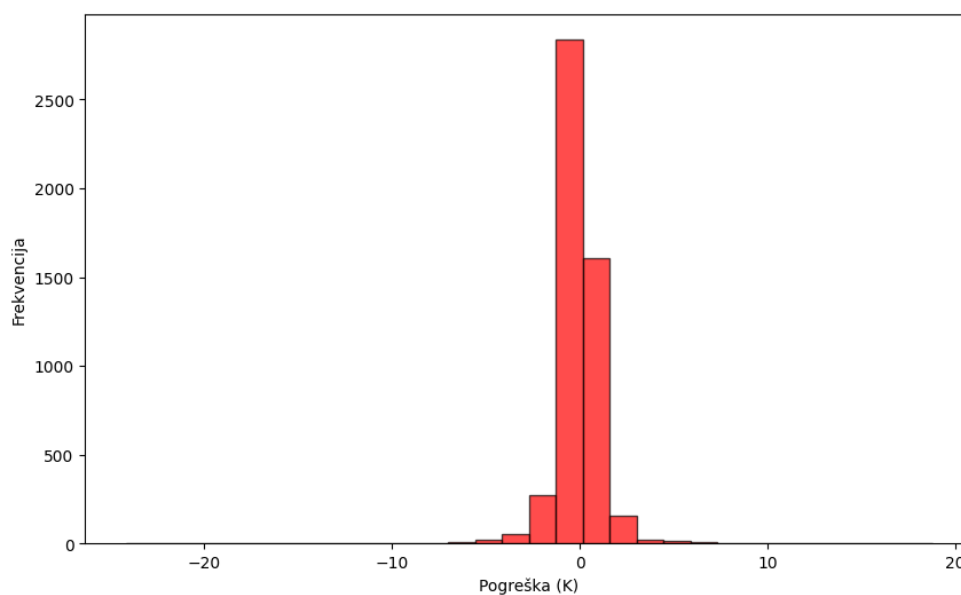
Slika 33. *Usporedba predviđene izlazne temperature najboljim XGBoost modelom sa stvarnim vrijednostima izlazne temperature tople struje u inicijacijskoj fazi*

Na slici 34. prikazan je trend vrijednosti pogreške najboljeg XGBoost modela za predviđanje izlazne temperature tople struje u inicijacijskoj fazi. Na samom kraju inicijacijske faze i oko 3500. uzorka, primjećuje se izražena pogreška, dok su ostale pogreške relativno male.



Slika 34. Trend vrijednosti pogreške najboljeg XGBoost modela za predviđanje izlazne temperature tople struje u inicijacijskoj fazi

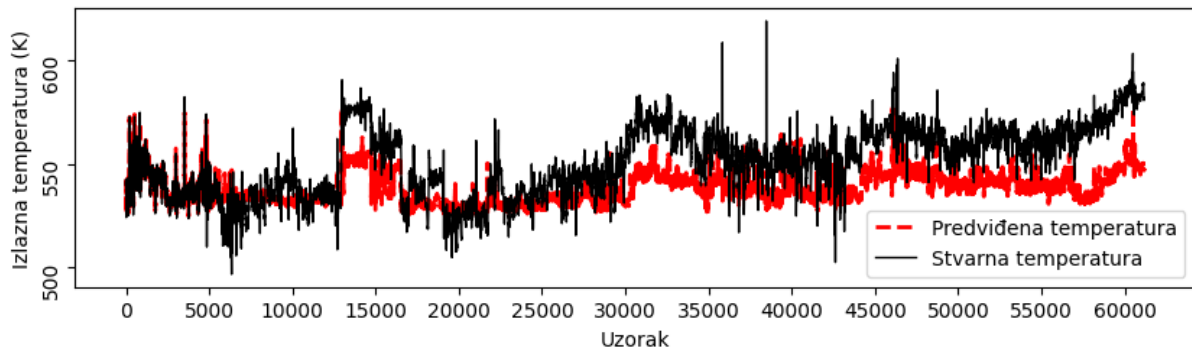
Na slici 35. nalazi se histogram pogrešaka najboljeg XGBoost modela za predviđanje izlazne temperature tople struje u inicijacijskoj fazi. Većina pogrešaka koncentrirana je oko nule, što ukazuje na visoku točnost modela. U usporedbi s histogramom pogrešaka najboljeg modela neuronske mreže, histogram XGBoost modela je uži. Većina pogrešaka nalazi se unutar granica ± 2 K.



Slika 35. Histogram pogrešaka najboljeg XGBoost modela za predviđanje izlazne temperature tople struje u inicijacijskoj fazi

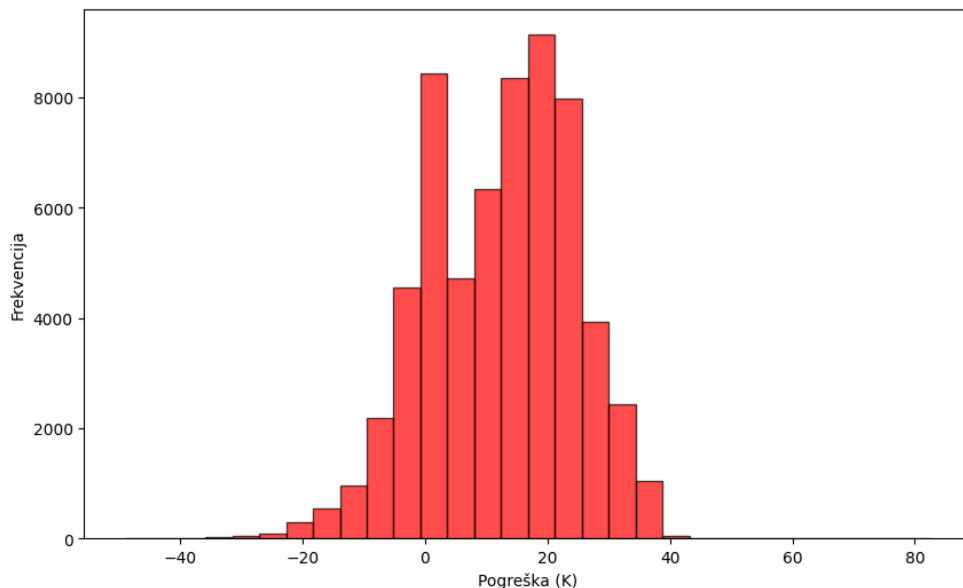
Na Slici 36. prikazana je usporedba predviđene izlazne temperature najboljim XGBoost modelom sa stvarnim vrijednostima izlazne temperature tople struje kroz analizirani period rada izmjenjivača topline. Razlike između predviđenih i stvarnih temperatura periodično se povećavaju i smanjuju, slično kao kod modela neuronskih mreža. Međutim, razlike postaju izraženije ranije u analiziranom periodu. Između 10.000. i 20.000. uzorka vidljiv je period u

kojem model značajno podcjenjuje izlaznu temperaturu. Ovako velika pogreška u početnom dijelu analiziranog razdoblja nije očekivana. Ova pojava vjerovatno je posljedica loše ekstrapolacije XGBoost modela izvan raspona varijabli korištenih tijekom učenja, što će biti detaljnije objašnjeno u analizi XGBoost modela za predviđanje izlazne temperature hladne struje.



Slika 36. Usporedba predviđene izlazne temperature najboljim XGBoost modelom sa stvarnim vrijednostima izlazne temperature tople struje kroz analizirani period

Na Slici 37. prikazan je histogram pogrešaka najboljeg XGBoost modela za predviđanje izlazne temperature tople struje kroz analizirani period rada izmjenjivača topline. Većina pogrešaka je pozitivna, što ukazuje na prisutnost naslaga i otežan prijenos topline.



Slika 37. Histogram pogrešaka najboljeg XGBoost modela za predviđanje izlazne temperature tople struje kroz analizirani period

4.2.2. XGBoost modeli za predviđanje izlazne temperature hladne struje

U Tablici 18. prikazani su hiperparametri najboljih XGBoost modela za predviđanje izlazne temperature hladne struje, dok su vrijednosti srednje kvadratne pogreške najboljih modela na skupu za učenje i testiranje prikazane u Tablici 19. Modeli su rangirani prema srednjoj kvadratnoj pogrešci na testnom skupu.

Tablica 18. Hiperparametri najboljih XGBoost modela (hladna struja)

XGBoost model	1	2	3	4	5
Broj stabala	261	327	377	195	270
Maksimalna dubina stabla	9	9	10	10	9
<i>Min child weight</i>	7	6	5	7	6
<i>Subsample</i>	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6
<i>Colsample bytree</i>	0,8	0,8	0,7	0,8	0,7
Koeficijent brzine učenja	0,075	0,075	0,05	0,075	0,075
<i>Gamma</i>	0	0	0	0	0
<i>Alpha</i> regularizacija	0	0	0	0	0
<i>Lambda</i> regularizacija	3	3	2,5	2,5	3

Tablica 19. MSE najboljih XGBoost modela (hladna struja)

XGBoost model	1	2	3	4	5
MSE na skupu za učenje	$5,722 \cdot 10^{-4}$	$3,444 \cdot 10^{-4}$	$3,223 \cdot 10^{-4}$	$6,480 \cdot 10^{-4}$	$5,102 \cdot 10^{-4}$
MSE na skupu za testiranje	$3,789 \cdot 10^{-3}$	$3,808 \cdot 10^{-3}$	$3,812 \cdot 10^{-3}$	$4,029 \cdot 10^{-3}$	$4,096 \cdot 10^{-3}$

Broj stabala kod najboljih modela varira između 195 i 377, dok je maksimalna dubina stabala 9 ili 10 razina. Najbolji modeli imaju niže vrijednosti koeficijenta brzine učenja. Hiperparametar *colsample bytree* ima vrijednosti od 0,7 do 0,8, što znači da model koristi 70% ili 80% varijabli (6 ili 7 varijabli) pri svakom učenju stabla. *Gamma* je kod svih najboljih modela 0. Vrijednosti *min child weight* iznose 5, 6 i 7, što ukazuje na to da su modelima najprikladnije srednje vrijednosti minimalne težine za stvaranje čvorova. Što se tiče hiperparametra *subsample*, najboljim modelima odgovara vrijednost 0,6, što znači da koriste 60% podataka za učenje pojedinih stabala. *Alpha* regularizacija je 0, dok su vrijednosti *lambda* regularizacije 2,5 i 3.

Srednje kvadratne pogreške najboljih modela za predviđanje izlazne temperature hladne struje niže su u odnosu na modele za izlaznu temperaturu tople struje. U usporedbi s najboljim modelima neuronskih mreža za predviđanje izlazne temperature hladne struje, MSE na

testnom skupu su nešto niže, ali vrlo slične. Najbolji modeli imaju slične vrijednosti srednje kvadratne pogreške na skupu za učenje i testiranje. Što se tiče praćenja dinamike promjena temperature i rasta naslaga, razlike među modelima gotovo pa nema. Stoga je, kao i kod modela za predviđanje izlazne temperature tople struje, za daljnju analizu i izračun *fouling* faktora odabran Model 1, koji ima najmanje *MSE*. U Tablici 20. prikazani su hiperparametri Modela 1, dok su vrijednosti srednje kvadratne pogreške, koeficijenta višestruke determinacije i Pearsonovog koeficijenta korelacije tog modela prikazane u Tablici 21.

Tablica 20. Hiperparametri najboljeg modela XGBoost modela (hladna struja)

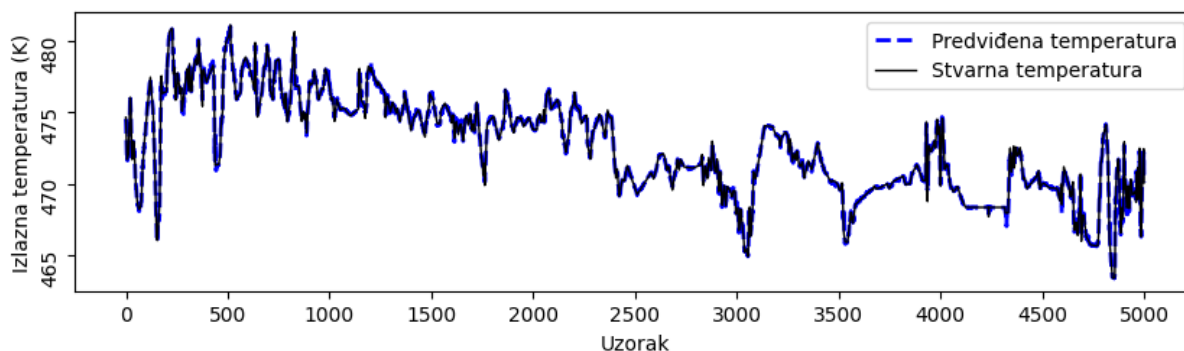
Broj stabala	261
Maksimalna dubina stabla	9
<i>Min child weight</i>	7
<i>Subsample</i>	0,6
<i>Colsample bytree</i>	0,8
Brzina učenja	0,075
<i>Gamma</i>	0
<i>Alpha</i> regularizacija	0
<i>Lambda</i> regularizacija	3

Tablica 21. *MSE*, R^2 i r najboljeg XGBoost modela (hladna struja)

	Skup za učenje	Skup za testiranje
<i>MSE</i>	$5,722 \cdot 10^{-4}$	$3,789 \cdot 10^{-3}$
R^2	0,9987	0,9924
r	0,9994	0,9962

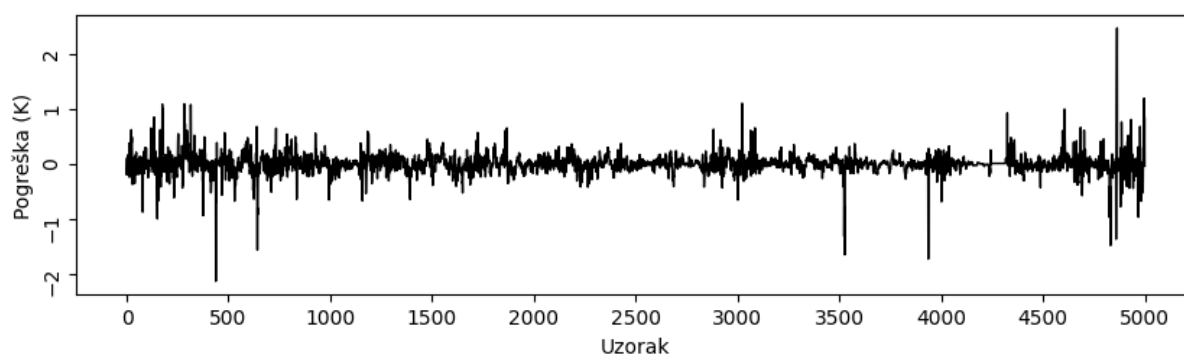
Vrijednosti evaluacijskih metrika XGBoost modela vrlo su dobre na oba skupa. U usporedbi s najboljim modelom neuronske mreže za predviđanje izlazne temperature hladne struje u inicijacijskoj fazi, najbolji model XGBoost pokazuje bolje rezultate.

Na Slici 38. nalazi se usporedba predviđene izlazne temperature najboljim XGBoost modelom sa stvarnim vrijednostima izlazne temperature hladne struje u inicijacijskoj fazi. Primjećuje se da model vrlo uspješno predviđa izlazne temperature hladne struje u inicijacijskoj fazi, bez izraženih odstupanja.



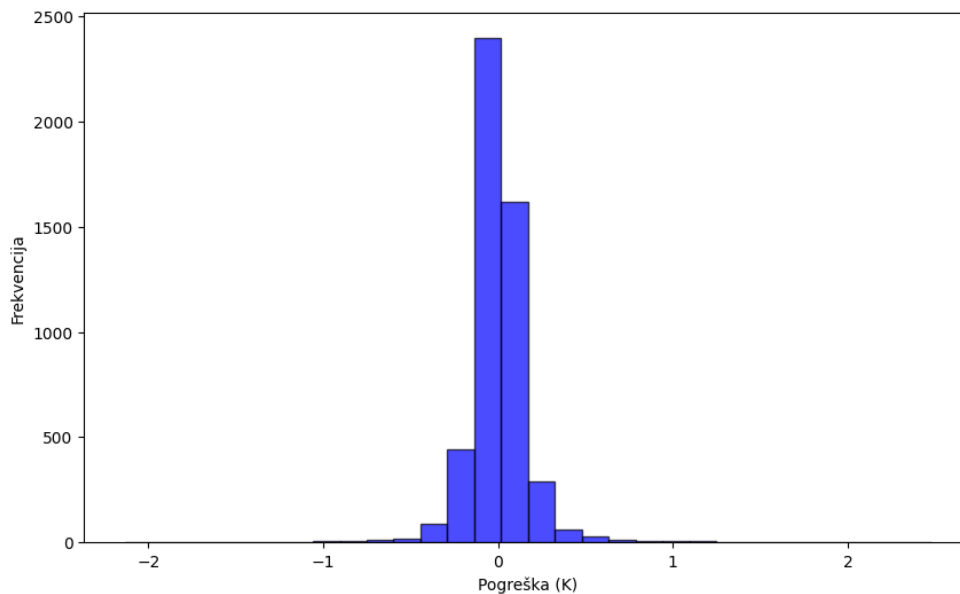
Slika 38. *Usporedba predviđene izlazne temperature najboljim XGBoost modelom sa stvarnim vrijednostima izlazne temperature hladne struje u inicijacijskoj fazi*

Slika 39. prikazuje trend vrijednosti pogreške najboljeg XGBoost modela za predviđanje izlazne temperature hladne struje u inicijacijskoj fazi. Najčešće pogreške su nešto manje ($\pm 0,5$ K) u odnosu na najbolji model neuronske mreže, a najveće iznose ± 2 K.



Slika 39. *Trend vrijednosti pogreške najboljeg XGBoost modela za predviđanje izlazne temperature hladne struje u inicijacijskoj fazi*

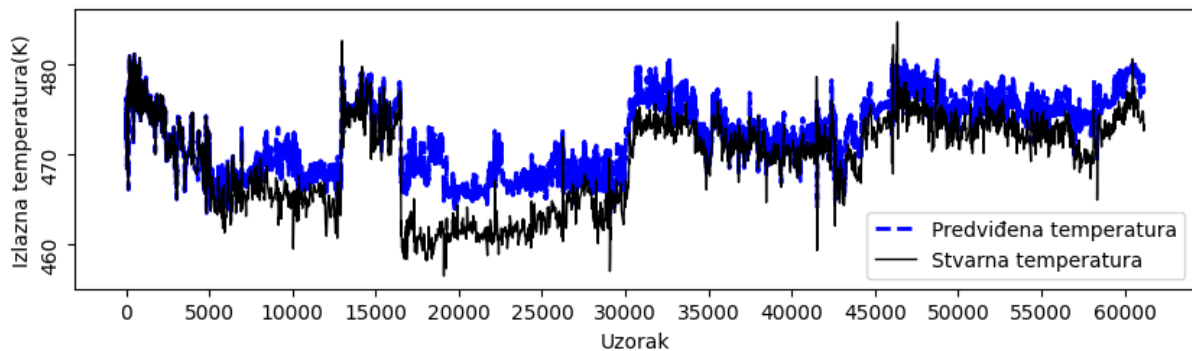
Na slici 40. nalazi se histogram pogrešaka najboljeg XGBoost modela za predviđanje izlazne temperature hladne struje u inicijacijskoj fazi. Većina pogreške koncentrirana je oko nule, što ukazuje na visoku točnost modela.



Slika 40. *Histogram pogrešaka najboljeg XGBoost modela za predviđanje izlazne temperature hladne struje u inicijacijskoj fazi*

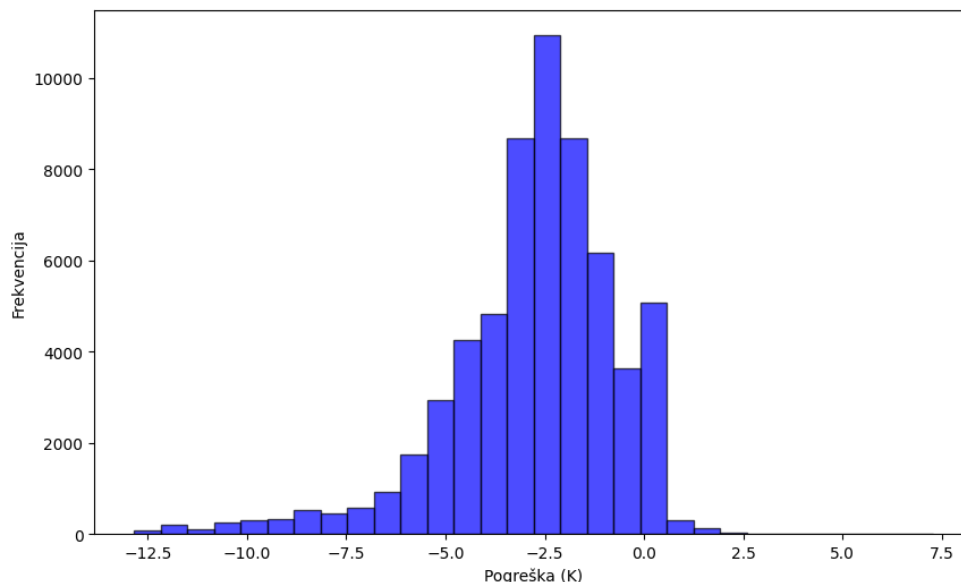
Usporedba predviđene izlazne temperature najboljim XGBoost modelom sa stvarnim vrijednostima izlazne temperature hladne struje kroz analizirani period rada izmjenjivača topline prikazana je na Slici 41. Nakon inicijacijske faze, počinju se uočavati određeni problemi s ekstrapolacijom XGBoost modela izvan raspona varijabli korištenih za učenje modela, a postaju posebno očiti nakon naglog pada temperature poslije 15000. uzorka. Nakon naglog pada temperature slijedi period u kojem model značajno precjenjuje izlazne temperature hladne struje. Precjenjivanje je očekivano zbog rasta naslaga, ali ne u tolikoj mjeri i ne toliko rano u analiziranom periodu. Problemi s ekstrapolacijom karakteristični su za XGBoost model, kao i za druge modele koji se temelje na stablima odlučivanja. Ovi modeli rade na principu dijeljenja varijabli u intervale putem čvorova stabla. Svaki čvor stvara podjelu koja se temelji na logici „veće od“ ili „manje od“, odnosno prema određenim pragovima. Kada se ulazna varijabla nalazi izvan raspona korištenog prilikom učenja, model nema mehanizam za pravilnu procjenu tih vrijednosti, jer nastavlja odlučivati na temelju raspona korištenog prilikom učenja. To često dovodi do netočnih ili ekstremnih predviđanja. Nakon 30000. uzorka, model počinje blago precjenjivati vrijednosti izlazne temperature hladne struje. U periodu nakon 30000. uzoraka, ulazne varijable nalaze se unutar raspona korištenog za učenje, te se vidi da model predviđa vrlo dobro, odnosno da predviđene temperature imaju smisla. U konačnici, može se zaključiti da modeli neuronskih mreža bolje prate dinamiku procesa u širem temperaturnom području. Glavni razlog tome je u ovom

slučaju bolja ekstrapolacija modela neuronskih mreža izvan raspona procesnih varijabli korištenih tijekom učenja modela.



Slika 41. *Usporedba predviđene izlazne temperature najboljim XGBoost modelom sa stvarnim vrijednostima izlazne temperature hladne struje kroz analizirani period*

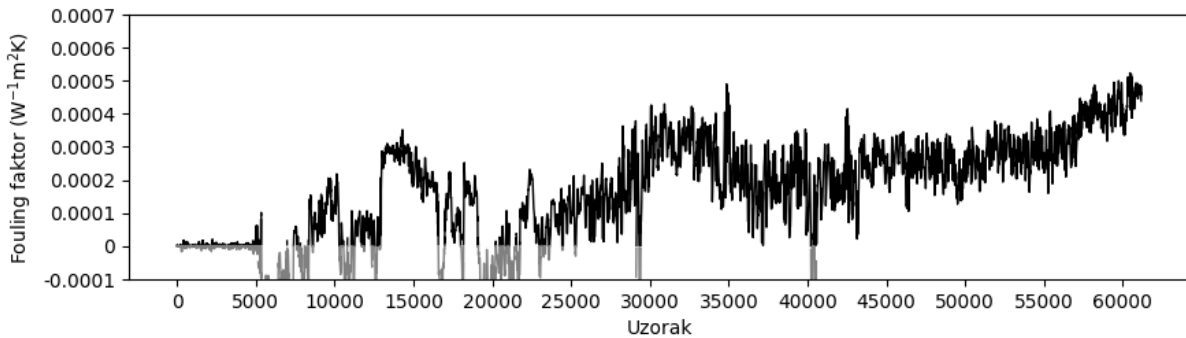
Slika 42. prikazuje histogram pogrešaka najboljeg XGBoost modela za predviđanje izlazne temperature hladne struje kroz analizirani period rada izmjenjivača topline. Pogreške su većinom negativne, što ukazuje na prisutnost naslaga i otežan prijenos topline. Primjećuje se veći udio negativnijih (većih) pogrešaka u usporedbi s histogramom modela neuronske mreže. Razlog tome je izraženo precjenjivanje vrijednosti izlazne temperature kroz period u kojem model loše ekstrapolira.



Slika 42. *Histogram pogrešaka najboljeg XGBoost modela za predviđanje izlazne temperature hladne struje kroz analizirani period*

4.2.3. *Fouling* faktor (izračunat XGBoost modelom)

Segment grafičkog prikaza *fouling* faktora (*fouling* krivulja) kroz analizirani period rada izmjenjivača topline prikazan je na Slici 43. Pozitivne vrijednosti *fouling* faktora označene su crnom bojom, a negativne vrijednosti sivom. Iz razloga navedenih u prethodnom poglavlju *fouling* krivulja može se opisati kao *saw-tooth* krivulja. Na kraju analiziranog perioda, *fouling* faktor doseže konačnu vrijednost od približno $0,0005 \text{ W}^{-1} \text{ m}^2 \text{ K}$. Iako *fouling* krivulja dobivena korištenjem XGBoost modela na prvi pogled izgleda vrlo slično onoj dobivenoj modelima neuronskih mreža, *fouling* krivulja dobivena modelima neuronskih mreža trebala bi se smatrati pouzdanijom iz razloga što modeli neuronskih mreža bolje prate sveobuhvatnu dinamiku procesa, što je ključno za praćenje razlika između predviđenih i stvarnih izlaznih temperatura.



Slika 43. *Fouling* faktor kroz analizirani period (XGBoost)

5. Zaključak

Naslage u izmjenjivačima topline uzrokuju pad efikasnosti izmjenjivača primarno zbog otežanog prijenosa topline. S obzirom na složenost mehanizama nastajanja naslaga i promjenjive procesne uvjete u sekciji za predgrijavanje sirove nafte, u posljednje se vrijeme sve više koriste modeli temeljeni na podacima. Cilj ovog rada bio je razviti modele neuronskih mreža i XGBoost modele u svrhu kontinuiranog praćenja nastajanja naslaga u izmjenjivačima topline u sekciji za predgrijavanje sirove nafte.

Nakon predobrade podataka i pretrage optimalnih hiperparametara modela, modeli su razvijeni koristeći podatke iz inicijacijske faze rada izmjenjivača topline. U konačnici su izabrana 4 modela, najbolji modeli neuronskih mreža te najbolji XGBoost modeli za predviđanje izlazne temperature tople i hladne struje. Niske vrijednosti srednje kvadratne pogreške na testnom skupu, kao što su 0,04837 za model neuronske mreže koji predviđa izlaznu temperaturu tople struje i 0,006841 za hladnu struju, te 0,02035 i 0,003789 za XGBoost modele, ukazuju na to da su modeli uspješno naučeni. Nakon inicijacijske faze, stvarne izlazne temperature razlikuju se od onih predviđenih modelima. Ova razlika ukazuje na otežan prijenos topline uzrokovan nastankom naslaga. Iako se primjenom obje vrste modela može dobiti uvid u nastajanje naslaga, postoji važna razlika između njih. Modeli neuronskih mreža bolje prate dinamiku procesa nakon inicijacijske faze, što ih čini primjenjivijima i pouzdanijima u predviđanju nastajanja naslaga. Glavni razlog tome je ekstrapolacijska mana XGBoost modela. Konačna vrijednost *fouling* faktora dobivena koristeći obje vrste modela iznosi približno $0,0005 \text{ W}^{-1} \text{ m}^2 \text{ K}$.

Primjena razvijenih modela na rafinerijskom postrojenju omogućila bi kontinuirano praćenje nastajanja naslaga u izmjenjivačima topline, što bi osiguralo planiranje pravovremenog čišćenja i održavanja izmjenjivača topline. Time bi se osigurao stabilniji rad postrojenja, ostvarile značajne financijske uštede i smanjio ugljični otisak postrojenja.

6. Literatura

- [1] Ujević Andrijić, Ž., Bolf, N., Rimac, N., Brzović, A., Fouling Detection in Industrial Heat Exchanger Using Number of Transfer Units Method, Neural Network, and Nonlinear Finite Impulse Response Models, *Heat Transfer Engineering*, **43(21)** (2022) 1852-1866.
- [2] Rimac, N., Ujević Andrijić, Ž., Monitoring of heat exchangers in preheat trains using neural networks, *Petroleum Science and Technology*, (2024) 1-19.
- [3] Nimankar, S. J., Dahake S. K., REVIEW OF HEAT EXCHANGERS, *Global Journal of Engineering Science and Researches*, **3(12)** (2016)
- [4] Sander, A., Odabrani toplinski separacijski procesi za procese prijenosa i separacija (Interna skripta), Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Zagreb, 2014.
- [5] Bott, T.R., *Fouling of Heat Exchangers*, Elsevier, Amsterdam, 1995. str.1-2.
- [6] Awad, M.M., Fouling of Heat Transfer Surfaces, u: Belmiloudi, A., *Heat Transfer - Theoretical Analysis*, u: Belmiloudi, A., *Experimental Investigations and Industrial Systems*, Rijeka, IntechOpen (2011) 506-546.
- [7] Madhu P.K., R., Subbaiah, J., Krithivasan, K., RF-LSTM-based method for prediction and diagnosis of fouling in heat exchanger, *Asia-Pacific Journal of Chemical Engineering*, **16(5)** (2021)
- [8] Abdulhusein, Z., Al-sharify, Z., Alzurajji, M., Onyeaka, H., ENVIRONMENTAL SIGNIFICANCE OF FOULING ON THE CRUDE OIL FLOW. A COMPREHENSIVE REVIEW, *Journal of Engineering and Sustainable Development*, **27(3)** (2023) 317-338.
- [9] Jradi, R., Marvillet, C., Jeday Razak, M., Fouling in Industrial Heat Exchangers: Formation, Detection and Mitigation u: Kazi, S.N., u: *Heat Transfer - Fundamentals, Enhancement and Applications*, IntechOpen, Rijeka, (2022) 227-245.
- [10] Huangfu, E., Panchal, C., Effects of mitigating fouling on the energy efficiency of Crude-Oil distillation, *Heat Transfer Engineering*, **21(3)** (2000) 3–9.
- [11] Rammerstorfer, E., Karner, T., Siebenhofer, M., The kinetics and mechanisms of fouling in crude oil heat transfer, *Heat Transfer Engineering*, **41(8)** (2019) 691–707.
- [12] Cerić, E., *Nafta : Procesi i proizvodi*, INA industrija nafte, Kigen d.o.o, Zagreb, 2006. str 76-77.
- [13] Apio, A., Martinelli, G. B., Trierweiler, L. F., Farenzena, M., Trierweiler, J. O., Fouling monitoring of a heat exchanger network of an actual crude oil distillation unit by constrained extended Kalman filter with smoothing, *Chemical Engineering Communications*, **210(12)** (2023) 2229–2248.

- [14] Deshannavar, U., Rafeen, Ramasamy, M., Subbarao, D., Crude Oil Fouling: A Review, *Journal of Applied Sciences*, **10(24)** (2010) 3167–3174.
- [15] Bolf, N., Strojno učenje, *Kem. Ind.*, **70(9-10)** (2021) 591-593.
- [16] <https://www.spiceworks.com/tech/artificial-intelligence/articles/what-is-ml/> (pristup 11. kolovoza 2024.)
- [17] Moroney, L. *AI and Machine Learning for Coders A Programmer's Guide to Artificial Intelligence*, O'Reilly Media, Sebastopol, 2020., str.1-3.
- [18] Ujević Andrijić, Ž., *Metode umjetne inteligencije u kemijskom inženjerstvu* (Interna skripta), Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Zagreb, 2024.
- [19] Alzubi, J., Nayyar, A., Kumar, A., *Machine Learning from Theory to Algorithms: An Overview*. *Journal of Physics Conference Series*, **1142** (2018)
- [20] <https://www.geeksforgeeks.org/artificial-neural-networks-and-its-applications/> (pristup 13. kolovoza 2024.)
- [21] Dastres, R., Soori, M., *Artificial Neural Network Systems*, *International Journal of Imaging and Robotics (IJIR)*, **21(2)** (2021) 13-25.
- [22] Ünal, H.T., Başçiftçi, F., *Evolutionary design of neural network architectures: a review of three decades of research*, *Artificial Intelligence Review*, **55** (2022) 1723–1802.
- [23] Ujević Andrijić, Ž., *Metode umjetne inteligencije u kemijskom inženjerstvu* (Interna prezentacija), Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Zagreb, 2023.
- [24] <https://machinelearningmastery.com/choose-an-activation-function-for-deep-learning/> (pristup 14. kolovoza 2024.)
- [25] <https://www.ibm.com/topics/deep-learning> (pristup 14. kolovoza 2024.)
- [26] Sharma, S., Sharma, S., Athaiya, A., *Activation Functions In Neural Networks*, *International Journal of Engineering Applied Sciences and Technology*, **4(12)** (2020) 310–316.
- [27] <https://www.datacamp.com/tutorial/introduction-to-activation-functions-in-neural-networks> (pristup 15. kolovoza 2024.)
- [28] <https://www.analyticsvidhya.com/blog/2020/01/fundamentals-deep-learning-activation-functions-when-to-use-them/> (pristup 15. kolovoza 2024.)
- [29] <https://blog.stackademic.com/understanding-the-importance-of-loss-functions-in-deep-learning-dd5ff33551d5> (pristup 16. kolovoza 2024.)
- [30] <https://towardsdatascience.com/loss-functions-and-their-use-in-neural-networks-a470e703f1e9> (pristup 16. kolovoza 2024.)

- [31] <https://towardsdatascience.com/gradient-descent-algorithm-a-deep-dive-cf04e8115f21> (pristup 16. kolovoza 2024.)
- [32] <https://www.analyticsvidhya.com/blog/2020/10/how-does-the-gradient-descent-algorithm-work-in-machine-learning/> (pristup 16. kolovoza 2024.)
- [33] <https://www.geeksforgeeks.org/backpropagation-in-neural-network/> (pristup 17. kolovoza 2024.)
- [34] Krogh, A., What are artificial neural networks?, *Nature Biotechnology*, **26(2)** (2008) 195–197.
- [35] Ujević Andrijić, Ž., Umjetne neuronske mreže, *Kem. Ind.*, **68 (5-6)** (2019) 219-220.
- [36] <https://www.ibm.com/topics/decision-trees> (pristup 17. kolovoza 2024.)
- [37] <https://www.geeksforgeeks.org/decision-tree/> (pristup 17. kolovoza 2024.)
- [38] <https://medium.com/@jainvidip/understanding-decision-trees-1ba0ef5f6bb4> (pristup 18. kolovoza 2024.)
- [39] Stojanović, A., Kovačević, Ž., Ivošević, D., Ansambl Metode Strojnog Učenja, *Polytechnic & Design*, **11(4)** (2023) 245-252.
- [40] https://medium.com/@divine_inner_voice/bagging-vs-random-forest-understanding-the-difference-f5272d33d02a (pristup 18. kolovoza 2024.)
- [41] <https://www.geeksforgeeks.org/random-forest-algorithm-in-machine-learning/> (pristup 18. kolovoza 2024.)
- [42] <https://medium.com/@denizgunay/random-forest-af5bde5d7e1e> (pristup 18. kolovoza 2024.)
- [43] <https://www.geeksforgeeks.org/bagging-vs-boosting-in-machine-learning/> (pristup 18. kolovoza 2024.)
- [44] <https://www.geeksforgeeks.org/ml-gradient-boosting/> (pristup 18. kolovoza 2024.)
- [45] <https://www.datacamp.com/tutorial/guide-to-the-gradient-boosting-algorithm> (pristup 19. kolovoza 2024.)
- [46] <https://www.geeksforgeeks.org/xgboost/> (pristup 19. kolovoza 2024)
- [47] Chen, T., Guestrin, C., XGBoost: A Scalable Tree Boosting System, *International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*, (2016) 785-794.
- [48] Wang, Y., Pan, Z., Zheng, J., Qian, L., Li, M., A hybrid ensemble method for pulsar candidate classification, *Astrophysics and Space Science*, **364(8)** (2019)
- [49] <https://www.analyticsvidhya.com/blog/2018/09/an-end-to-end-guide-to-understand-the-math-behind-xgboost/> (pristup 19. kolovoza 2024.)
- [50] <https://www.geeksforgeeks.org/how-does-l1-and-l2-regularization-prevent-overfitting/>

(pristup 19. kolovoza 2024.)

[51] <https://albertum.medium.com/l1-l2-regularization-in-xgboost-regression-7b2db08a59e0>

(pristup 20. kolovoza 2024.)

[52] <https://medium.com/@data-overload/unlocking-the-power-of-xgboost-a-deep-dive-into-the-extreme-gradient-boosting-algorithm-05de7c478338> (pristup 20. kolovoza 2024.)

[53] <https://medium.com/@soyoungluna/simple-explanation-of-xgboost-without-complicated-mathematics-622c9c54c8a9> (pristup 20. kolovoza 2024.)

[54] Arif, Z., Abduljabbar, Z. H., Taher, H. A., Sallow, A., Almufti, S. M., Exploring the Power of eXtreme Gradient Boosting Algorithm in Machine Learning, Academic Journal of Nawroz University (AJNU), **12(2)** (2023)

[55] <https://towardsdatascience.com/decision-trees-60707f06e836> (pristup 21. kolovoza 2024.)

[56] <https://www.giskard.ai/glossary/ml-scalability> (pristup 21. kolovoza 2024.)

[57] <https://www.ibm.com/docs/en/cloud-paks/cp-data/5.0.x?topic=modeling-xgboost-linear-node> (pristup 21. kolovoza 2024.)

[58] <https://www.kaggle.com/code/prashant111/a-guide-on-xgboost-hyperparameters-tuning> (pristup 22. kolovoza 2024.)

[59] <https://medium.com/@rithpansanga/the-main-parameters-in-xgboost-and-their-effects-on-model-performance-4f9833cac7c> (pristup 22. kolovoza 2024.)

[60] <https://blog.cambridgespark.com/hyperparameter-tuning-in-xgboost-4ff9100a3b2f> (pristup 22. kolovoza 2024.)

[61] https://www.w3schools.com/python/python_intro.asp (pristup 22. kolovoza 2024.)

[62] <https://www.anaconda.com/open-source> (pristup 22. kolovoza 2024.)

[63] <https://keras.io/about/> (pristup 23. kolovoza 2024.)

[64] Snoek, J., Larochelle, H., Adams, R. P., Practical Bayesian Optimization of Machine Learning Algorithms, arXiv.org (2012) <https://arxiv.org/abs/1206.2944>

[65] <https://www.comet.com/site/blog/hyperparameter-tuning-with-bayesian-optimization/> (pristup 23. kolovoza 2024.)

[66] Liashchynskiy, P., Liashchynskiy, P., Grid Search, Random Search, Genetic Algorithm: A Big Comparison for NAS, (2019) <https://arxiv.org/abs/1912.06059>

[67] <https://towardsdatascience.com/cross-validation-and-grid-search-efa64b127c1b> (pristup 23. kolovoza 2024.)

[68] Jones, T., A Coefficient of Determination for Probabilistic Topic Models, (2019) <https://arxiv.org/abs/1911.11061>

[69] Jradi, R., Fguiri, A., Marvillet, C., Razak Jeday, M., Tubular Heat Exchanger Fouling in Phosphoric Acid Concentration Process u: Bhattacharya, S., Moghimi Ardekani, M., Biswas, R., Mehta, R. C., Inverse Heat Conduction and Heat Exchangers, IntechOpen, Rijeka, (2019) 47-63.

7. Popis simbola

XGBoost - ekstremno gradijentno pojačavanje (engl. *Extreme Gradient Boosting*)

CO₂ - ugljikov dioksid

\dot{Q}_T – toplinski tok toplog fluida (W)

\dot{Q}_H – toplinski tok hladnog fluida (W)

\dot{m} - maseni protok (kg/s)

c_p - specifični toplinski kapacitet (J/kg·K)

ΔT_T - razlika između temperature toplog fluida na ulazu i izlazu iz izmjenjivača topline (K)

ΔT_H - razlika između temperature hladnog fluida na ulazu i izlazu iz izmjenjivača topline (K)

K - ukupni koeficijent prijenosa topline (W/m²·K⁻¹)

A - površina izmjene topline (m²)

ΔT_{LM} - srednja logaritamska razlika temperatura (K)

$R_{konvekcijski}$ - faktor otpora prijenosu topline konvekcijom (W⁻¹ m² K)

$R_{kondukcijski}$ - faktor otpora prijenosu topline kondukcijom (W⁻¹ m² K)

R_f - faktor otpora naslaga (engl. *fouling factor*) (W⁻¹ m² K)

F - geometrijski korekcijski faktor

$K_{s\ naslagama}$ - ukupni koeficijent prijenosa topline izmjenjivača topline s naslagama (W/m²·K⁻¹)

$K_{čisti}$ - ukupni koeficijent prijenosa topline čistog izmjenjivača topline (W/m²·K⁻¹)

FeS – željezo (II) sulfid

ANN - Umjetne neuronske mreže (engl. *Artificial Neural Network*)

LSTM - dugotrajno kratkoročno pamćenje (engl. *Long Short-Term Memory*)

PLS – metoda parcijalnih najmanjih kvadrata (engl. *Partial Least Squares*)

NARX - nelinearni modeli temeljeni na autoregresiji s egzogenim ulazima (engl. *Nonlinear Autoregressive with Exogenous Inputs*)

IoT – internet stvari (engl. *Internet of Things*)

DNK - deoksiribonukleinska kiselina

w_i - težinski koeficijent

T - prag osjetljivosti (engl. *threshold*)

O – izlazni signal neurona

ReLU - ispravljena linearna aktivacijska funkcija (engl. *Rectified Linear Unit*)

ELU - eksponencijalna linearna aktivacijska funkcija (engl. *Exponential Linear Unit*)

$f'(x)$ – derivacija funkcije

MSE - srednja kvadratna pogreška (engl. *Mean squared error*)

CE - unakrsna entropija (engl. *Cross entropy*)
 y_i - stvarna vrijednost izlaza
 \hat{y}_i - predviđena vrijednost izlaza
AdaBoost - adaptivno pojačavanje (engl. *Adaptive Boosting*)
 X – ulazne varijable
 e – pogreška
 $L1$ – *Lasso* regularizacija
 L_{L1} - funkcija gubitka s $L1$ regularizacijom
 $L_{izvorna}$ - izvorna funkcija gubitka bez regularizacije
 λ - parametar regularizacije
 n - broj značajki
 $L2$ – *Ridge* regularizacija
 L_{L2} - nova funkcija gubitka s $L2$ regularizacijom
 f_k – stablo k
 $f_k(x_i)$ - rezultat koji daje stablo k za ulaz x_i
 r - Pearsonov koeficijent korelacije
 x_{norm} – skalirana varijabla
 x_{max} - maksimalna vrijednost varijable
 x_{min} - minimalna vrijednost varijable
 \bar{x} - srednja vrijednost
 σ_x - standardna devijacija
MLP - višeslojni perceptron (engl. *Multilayer Perceptron*)
 $T_{T,ulaz}$ – ulazna temperatura tople struje (K)
 $T_{T,izlaz}$ - izlazna temperatura tople struje (K)
 $T_{H,ulaz}$ – ulazna temperatura hladne struje (K)
 $T_{H,izlaz}$ – izlazna temperatura hladne struje (K)
 $T_{T,izlaz,M}$ - predviđena izlazna temperatura tople struje (K)
 $T_{H,izlaz,M}$ – predviđena izlazna temperatura hladne struje (K)
 R^2 - koeficijent višestruke determinacije

8. Životopis

Filip Vretenar [REDACTED] Osnovnoškolsko obrazovanje stekao je u Osnovnoj školi Dragutina Kušlana u Zagrebu, a srednjoškolsko u Gornjogradskoj gimnaziji, pohađajući opći smjer. Maturirao je 2018. godine te iste godine upisao preddiplomski studij Kemije i inženjerstva materijala na Fakultetu kemijskog inženjerstva i tehnologije u Zagrebu. Stručnu praksu u sklopu preddiplomskog studija odradio je na Institutu Ruđer Bošković, na Zavodu za kemiju materijalu, u Laboratoriju za radijacijsku kemiju i dozimetriju. U rujnu 2022. godine stječe titulu sveučilišnog prvostupnika inženjera kemijskog inženjerstva obranom završnog rada na temu Metode intenzifikacije procesa temeljene na fenomenima, vođenim pod mentorstvom izv. prof. dr. sc. Igora Dejanovića. Iste godine upisuje diplomski studij Kemijsko inženjerstvo, modul Kemijsko-procesno inženjerstvo. Od ožujka 2024. zaposlen je studentski u Selviti d.o.o. na odjelima za spektroskopiju nuklearne magnetske rezonancije (NMR) i analitičku kemiju.