



VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

FAKULTA STROJNÍHO INŽENÝRSTVÍ

FACULTY OF MECHANICAL ENGINEERING

ÚSTAV AUTOMATIZACE A INFORMATIKY

INSTITUTE OF AUTOMATION AND COMPUTER SCIENCE

Virtuální senzory a jejich aplikace

Data-driven sensors and their applications

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

BACHELOR'S THESIS

AUTOR PRÁCE

AUTHOR

Jiří Pakr

VEDOUcí PRÁCE

SUPERVISOR

Ing. Pavel Škrabánek, Ph.D.

BRNO 2021

Zadaní bakalářské práce

Ústav: Ústav automatizace a informatiky
Student: **Jiří Pakr**
Studijní program: Strojírenství
Studijní obor: Aplikovaná informatika a řízení
Vedoucí práce: **Ing. Pavel Škrabánek, Ph.D.**
Akademický rok: 2020/21

Ředitel ústavu Vám v souladu se zákonem č.111/1998 o vysokých školách a se Studijním a zkušebním řádem VUT v Brně určuje následující téma bakalářské práce:

Virtuální senzory a jejich aplikace

Stručná charakteristika problematiky úkolu:

Získání informace o aktuálním stavu systému je nezbytným předpokladem pro jeho úspěšné řízení. Aktuální stav řízeného systému je monitorován pomocí řady různých senzorů, které měří různé fyzikální veličiny v různých částech systému. V případě, že nelze některé z veličiny měřit přímo, je možné tyto veličiny odhadnout za pomoci ostatních měřených veličin. Tyto odhady zajišťují tzv. virtuální senzory. Virtuální senzory lze realizovat mimo jiné s využitím strojového učení.

Cíle bakalářské práce:

Student vypracuje rešerši současného stavu poznání v problematice virtuálních senzorů a oblastí jejich aplikace. Student návrh možné směřování budoucího výzkumu, popř. možnosti dalšího uplatnění virtuálních senzorů v praxi.

Seznam doporučené literatury:

KADLEC, Petr a Bogdan GABRYS. Soft sensors: where are we and what are the current and future challenges?. IFAC Proceedings Volumes [online]. 2009, 42(19), 572-577 [cit. 2018-09-10]. DOI: 10.3182/20090921-3-TR-3005.00098. ISSN 14746670. Dostupné z: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1474667015308958>.

WANG, Zi Xiu, Q. Peter HE a Jin WANG. Comparison of variable selection methods for PLS-based soft sensor modeling. Journal of Process Control [online]. 2015, 26, 56-72 [cit. 2018-09-10]. DOI: 10.1016/j.jprocont.2015.01.003. ISSN 09591524. Dostupné z: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0959152415000050>.

SOUZA, Francisco A.A., Rui ARAÚJO a Jérôme MENDES. Review of soft sensor methods for regression applications. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* [online]. 2016, 152, 69-79 [cit. 2018-09-10]. DOI: 10.1016/j.chemolab.2015.12.011. ISSN 01697439. Dostupné z: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0169743915003263>.

Termín odevzdání bakalářské práce je stanoven časovým plánem akademického roku 2020/21

V Brně, dne

L. S.

doc. Ing. Radomil Matoušek, Ph.D.
ředitel ústavu

doc. Ing. Jaroslav Katolický, Ph.D.
děkan fakulty

ABSTRAKT

Virtuální senzory jsou postupně se rozšiřující technikou v oblasti průmyslových měření. Jedná se o počítačové programy, které za pomoci dříve získaných dat poskytují další údaje podobně jako klasické hardwarové senzory. Tyto údaje získávají pomocí prediktivních modelů založených na metodách strojového učení jako jsou například neuronové sítě nebo support vector machines. Tato práce obsahuje především řešení fungování, struktury a tvorby virtuálních senzorů. Dále popisuje strojové učení, rozdělení jeho algoritmů a seznamuje s metodami běžně využívanými v oblasti virtuálních senzorů. Ke konci autor popisuje jejich možný budoucí vývoj a směr jejich dalších aplikací.

ABSTRACT

Soft sensors are a gradually expanding technique in the field of industrial measurement. These sensors are computer programs that provide additional data using previously acquired data in a similar way to conventional hardware sensors. The additional data is obtained using predictive models based on machine learning methods such as neural networks or support vector machines. This work mainly includes a research on the function, structure and creation of soft sensors. It also describes machine learning, the distribution of its algorithms and introduces the methods commonly used in the field of virtual sensors. Towards the end, the author describes possible future development of soft sensors and the direction of further applications.

KLÍČOVÁ SLOVA

Virtuální senzor, strojové učení, prediktivní modely

KEYWORDS

Soft sensor, machine learning, predictive models



ÚSTAV AUTOMATIZACE
A INFORMATIKY



2021

BIBLIOGRAFICKÁ CITACE

PAKR, Jiří. *Virtuální senzory a jejich aplikace*. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, Ústav automatizace a informatiky, 2021, 54 s. Bakalářská práce. Vedoucí práce: Ing. Pavel Škrabánek, Ph.D.

PODĚKOVÁNÍ

Děkuji Ing. Pavlu Škrabánkovi, Ph.D. za odborné vedení práce, věcné připomínky, dobré rady a vstřícnost při konzultacích a vypracování bakalářské práce.

ČESTNÉ PROHLÁŠENÍ

Prohlašuji, že, že tato práce je mým původním dílem, vypracoval jsem ji samostatně pod vedením vedoucího práce a s použitím odborné literatury a dalších informačních zdrojů, které jsou všechny citovány v práci a uvedeny v seznamu literatury.

Jako autor uvedené práce dále prohlašuji, že v souvislosti s vytvořením této práce jsem neporušil autorská práva třetích osob, zejména jsem nezasáhl nedovoleným způsobem do cizích autorských práv osobnostních a jsem si plně vědom následku porušení ustanovení § 11 a následujících autorského zákona c. 121/2000 Sb., včetně možných trestně právních důsledků.

V Brně dne 21. 5. 2021

.....

Jiří Pakr

OBSAH

1	ÚVOD.....	13
2	STROJOVÉ UČENÍ.....	15
2.1	Přístupy k učení	15
2.1.1	Učení s učitelem (supervised learning)	15
2.1.2	Učení bez učitele (unsupervised learning).....	16
2.1.3	Kombinace učení s učitelem a bez učitele (semi-supervised learning)	17
3	PREDIKTIVNÍ MODELY	19
3.1	Model-driven	20
3.1.1	First principle model (FPM)	20
3.2	Data-driven	21
3.2.1	Adaptivní modely	22
3.3	Metody strojového učení využívané data-driven modely.....	23
3.3.1	Umělé neuronové sítě (Artificial neural networks - ANN)	23
3.3.2	Neuro-Fuzzy Systémy	26
3.3.3	Metody podpůrných vektorů (Support vector machines - SVM).....	27
3.3.5	K – Nejbližších sousedů (K – Nearest Neighbors).....	29
3.4	Gray-box.....	30
4	TVORBA VIRTUÁLNÍCH SENZORŮ	31
4.1	Postup tvorby data-driven virtuálních senzorů.....	32
4.1.1	Sběr a filtrování dat	33
4.1.2	Výběr vstupních proměnných.....	33
4.1.3	Výběr modelu virtuálního senzoru	34
4.1.4	Trénování a validace modelu.....	35
4.1.5	Údržba (maintenance) modelu.....	35
5	POUŽITÍ V PRAXI.....	37
5.1	Typy aplikací ve výrobních procesech	37
5.1.1	Off-line predikce.....	37
5.1.2	On-line predikce	37
5.1.3	Monitorování procesu.....	37
5.2	Průzkum metod aplikovaných v praxi	38
6	BUDOUCÍ MOŽNÉ SMĚŘOVÁNÍ VÝVOJE	41
7	ZÁVĚR	43
8	SEZNAM POUŽITÉ LITERATURY	45



1 ÚVOD

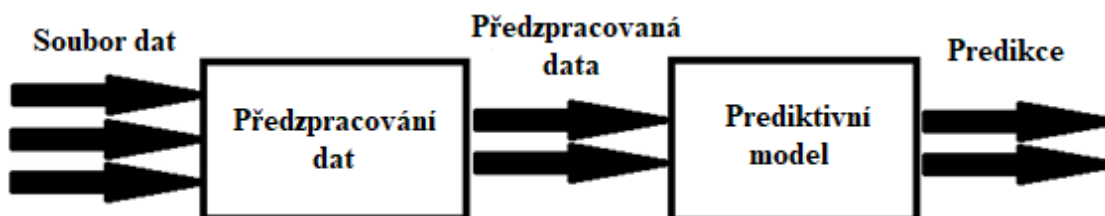
Díky dnešním technologiím a technickému pokroku v různých odvětvích můžeme pomocí mnohých měřících přístrojů či senzorů získávat velmi cenná data umožňující sledovat a odhadovat chování výrobních procesů. Tato data jsou nezbytným předpokladem pro úspěšné řízení. Se získáním těchto dat mohou nastat různorodé problémy například nemožnost provedení dalších měření, neschopnost přímého měření sledované veličiny nebo pouze vysoká nákladnost potřebných měření. K řešení takových problémů mohou přispět virtuální senzory neboli soft sensors, jenž poskytují predikce vývoje sledovaného procesu. Obecně lze virtuální senzory popsat jako inferenční modely založené na strojovém učení zejména na regresi využívající snadno měřitelné proměnné pro predikci proměnných, které nelze jednoduše měřit [1].

Soft sensors je zkrácený anglický název a vychází ze slovního spojení software sensor [2]. Což lehce napovídá, že se jedná o počítačové programy, které dovolují získávání dat podobně jako u hardwarových senzorů. V literatuře se objevují i pod názvy inferenční senzory (inferential sensors) [3], virtuální on-line analyzátoři (virtual on-line analyzers) [4] nebo senzory založené na pozorovateli (observer-based sensors) [5].

Výhody využití virtuálních senzorů jsou:

- získávání predikce k rychlejšímu a objektivnějšímu rozhodování [6],
- snižování nákladů na měření obtížně měřitelných veličin a případné zastoupení drahých měřících přístrojů [7],
- možnost použití pro již existující přístroje (např. mikrokontrolery) a schopnost přenastavení virtuálního senzoru, když se parametry procesu změni [7].

Na obr.1. lze vidět schéma popisující obecné fungování virtuálního senzoru. Soubor dat popisující sledovaný proces je nejprve předzpracován. Předzpracování dat slouží k odstranění známých problémů jako jsou odlehlé hodnoty, problémy s přesností způsobené vysokofrekvenčním šumem a další. Dále jsou data předána prediktivnímu modelu, který na základě těchto dat vypracuje predikci pomocí předem zvoleného a validovaného modelu.



Obr. 1: Zjednodušené blokové schéma virtuálního senzoru

Nejběžnější aplikací virtuálních senzorů je predikce probíhající v reálném čase. Tyto predikce jsou získány pomocí prediktivního modelu z dat získaných on-line automatizovanými měřeními. Tato aplikace se označuje jako online-predikce. K tvorbě prediktivního modelu se využívají metody strojového učení.

Virtuální senzory se dělí na [2, 6]:

1. virtuální senzory založené na modelu (model-driven soft sensors),
2. virtuální senzory založené na datech (data-driven soft sensors).

Virtuální senzory založené na modelu (dále označovány jen model-driven) jsou zaměřeny na plánování a rozvrh výrobních procesů, a proto se obvykle zaměřují na popis ideálních ustálených stavů procesu. Oproti tomu virtuální senzory založené na datech (dále jen data-driven) jsou postaveny na datech přímo získaných při průběhu vybraného průmyslového procesu, a tedy popisují skutečné podmínky procesu [2]. V některých situacích lze využít i model kombinující obě výše zmíněné metody. Tyto modely se nazývají gray-box modely.

2 STROJOVÉ UČENÍ

Nejprve, než lze hovořit o samotné problematice virtuálních senzorů je nutno představit strojové učení, ze kterého celá problematika vychází. Strojové učení (angl. machine learning) je odvětví umělé inteligence (artificial intelligence). Základní myšlenkou strojového učení je umožnit počítačům naučit se vykonat určitou úlohu bez potřeby ji explicitně naprogramovat [8]. Strojové učení využívá řadu iterativních algoritmů, díky kterým se učí z dat zdokonalovat, popisovat souvislosti dat a predikovat výsledky [9]. Algoritmy tedy přijímají tréninková data, na jejichž základě vytvoří model strojového učení. Schopnost reprezentace reality modelu se zlepšuje s tím čím více tréninkových dat je modelu poskytnuto. Jakmile je trénování dokončeno bude model na vstupy odpovídat určitými výstupy.

2.1 Přístupy k učení

U strojního učení je snaha získat co nejpřesnější modely. Přístupy k učení se tedy mohou lišit dle toho na jaké problémy je budeme aplikovat. Existují různé přístupy vhodné pro dané typy a objemy dat. Tato podkapitola se zabývá přístupy k učení, kterými jsou učení s učitelem, učení bez učitele a následně jejich kombinace. Všechny tyto přístupy jsou významné pro virtuální senzory. Dalším přístupem k učení je zpětnovazební učení (reinforcement learning), které s virtuálními senzory tolik nesouvisí, a proto není do této práce zařazeno.

2.1.1 Učení s učitelem (supervised learning)

Algoritmy učení s učitelem využívají oštitkovaný (labeled) datový soubor [9]. Obecně lze říct, že se jedná o datové soubory, který obsahují vstupní hodnoty x a k nim konkrétní výstupní hodnoty y . Zjednodušeně oštitkovaná data získáme tak, že vezme sadu dat a přiřadíme každé části nějaký „štítek“ (label) či „označení“ (tag), které je nějakým způsobem informativní nebo žádoucí znát [10]. Příkladem označení (labelu) může být, co obsahuje zvolená fotka třeba je na ní pes či kočka, nebo o čem se píše v nějakém konkrétním článku. Pomocí tréninkových dat se algoritmus učí, jaké mít výstupy podobně jako se malé dítě učí identifikovat zvířátka pomocí obrázkové knihy. Vzniklý model je poté testován k určení kvality jeho výstupů. To je prováděno pomocí dat, které model ještě nezná čímž zabráníme tomu, že model bude správně reagovat jen na určitá data [9]. Učení s učitelem lze dělit na klasifikaci, která je pro diskrétní aplikace a regresi pro spojitě [11].

Klasifikace se pomocí určitých vlastností snaží zařadit vzorky do dvou nebo více kategorií zvaných třídy, na základě jejich podobnosti. Tyto třídy jsou tvořeny z předešlých pozorování pomocí tréninkových dat. Příkladem může být třeba binární klasifikace, kde jsou vzorky klasifikovány do dvou tříd např. pozitivní a negativní výsledky. Cílem klasifikace je identifikovat opakující se vztahy mezi proměnnými, které

popisují vzorky patřící do stejné třídy [12]. Na základě těchto vztahů jsou vytvořeny klasifikační pravidla, která se používají pro predikci třídy dalších vzorků. Mezi příklady metod klasifikace patří Algoritmus k-nejbližších sousedů, Bayesovská klasifikace a Klasifikace podpůrných vektorů. Tyto příklady slouží hlavně pro ukázkou, většina metod lze využít jak pro klasifikaci, tak regresi. To ale neznamená, že jsou všechny metody vhodné pro obě aplikace.

Regresní metody se běžně využívají pro statistickou analýzu. Regrese identifikuje vztah mezi zvolenou závislou proměnou na základě znalosti jiných nezávislých veličin [12]. Na základě dříve získaných dat se také využívá k predikci budoucích hodnot [9]. Cíle regrese jsou tedy interpretace závislosti zvolené proměnné na ostatních proměnných a predikce vývoje hodnoty zvolené proměnné na základě identifikace funkční závislosti. Příklady regresních metod jsou lineární regrese a metoda nejmenších čtverců.

Regresní modely jsou nejčastěji využívány jako prediktivní modely, které jsou bezpochyby nejdůležitější částí celého virtuálního senzoru. Ze zvolené regresní metody tedy vychází prediktivní schopnosti virtuálního senzoru.

2.1.2 Učení bez učitele (unsupervised learning)

Algoritmy učení bez učitele pracují s neoštitkovanými (unlabeled) daty a dělí je do skupin na základě vzorů a podobných vlastností těchto dat [9]. Tyto skupiny mohou být poté oštitkovány pro další využití. Rozdíl oproti učení s učitelem je v tom, že při učení bez učitele souvislosti v datech jsou pochopena až během učení [9]. Učení bez učitele může pomoci s analýzou velkých datových souborů, kde není znám kontext získaných dat. Díky tomu se využívají jako první krok před předáním dat algoritmům učení s učitelem. Podle využití lze učení bez učitele dělit na: shlukování (clustering) a redukci dimenzionality (Dimensionality reduction).

Cílem shlukování je v dané množině objektů nalézt její podmnožiny takzvané shluky tak, aby objekty uvnitř shluku si byli dostatečně podobné, ale lišily se od objektů ve shluku jiném [13]. Příklady metod shlukování jsou Algoritmus K-means a shlukování nejbližších sousedů (Nearest Neighbor Clustering).

Redukce dimenzionality je technika používána k transformaci dat z prostoru vyšší dimenze do prostoru dimenze nižší s co nejmenší ztrátou informace [14]. Cílem je snížit počet datových vstupů na zvládnutelnou velikost a zároveň maximálně zachovat integritu souboru dat [15]. V oblasti virtuálních senzorů se běžně využívá pro předzpracování dat. Příkladem metody redukce dimenzionality je Analýza hlavních komponent (Principal component analysis) nebo Samoorganizující se mapy (Kohonenovy mapy).

2.1.3 Kombinace učení s učitelem a bez učitele (semi-supervised learning)

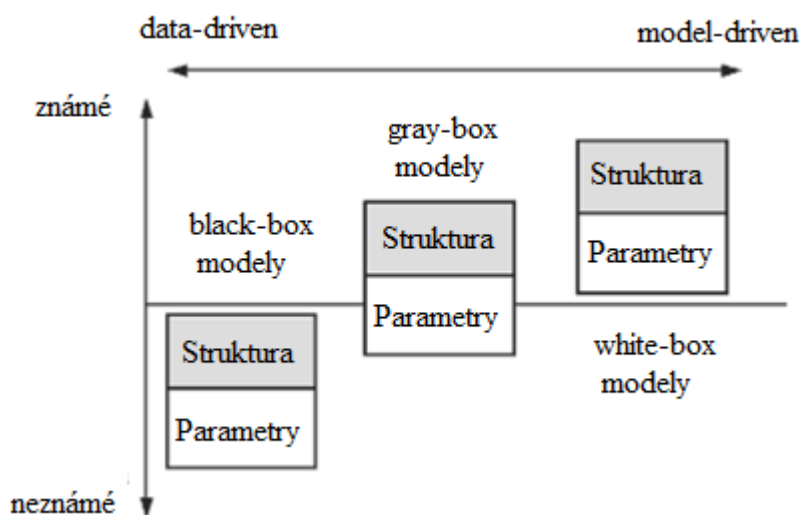
Cílem Algoritmů kombinace učení s učitelem a bez učitele je zlepšit výkon v jednom z těchto způsobů učení tím, že využívají informace obecně spojené s tím druhým způsobem. Například při řešení klasifikačního problému mohou být použity další data, která nejsou ošitkována (labeled), aby pomohly v procesu klasifikace [16].

Tyto metody se ukazují zvláště výhodné pro použití v případech, kde je obtížné sestavit spolehlivý prediktivní model (např. klasifikátor) kvůli nedostatku ošitkovaných dat. V praxi se tedy používají tyto kombinace učení s učitelem a bez učitele v případech kdy neošitkovaná data poskytují dodatečné informace, které jsou relevantní pro predikci a mohou být využita k dosažení lepšího prediktivního výkonu [16].

V této oblasti podobně jako v učení s učitelem je v odborných pracích věnováno více pozornosti spíše klasifikačním metodám [16]. Přesto lze najít množství i regresních aplikací, které jsou velmi často rozšířené vhodné metody klasifikace. Tyto regresní metody mají poměrně velký význam v oblasti virtuálních senzorů, kde umožňují tvorby prediktivních modelů, které lze trénovat i pomocí neošitkovaných dat.

3 PREDIKTIVNÍ MODELY

Hlavní částí virtuálních senzorů jsou právě prediktivní modely. Proto jsou také virtuální senzory právě podle typu prediktivního modelu rozděleny (viz Úvod). Tato kapitola tedy popisuje tyto typy prediktivních modelů. Model-driven metody jsou zmíněny spíše okrajově, protože se s nimi nelze setkat tak často jako právě s Data-driven metodami. A proto je i celá práce koncipovaná tak, že se spíše zaměřuje na informace o data-driven metodách. Na obr. 2. lze názorně vidět, že u data-driven modelů jsou struktura i parametry neznámé, u model-driven jsou známy a gray-box modely využívají různé kombinace známých a neznámých parametrů. Co to pro jednotlivé typy znamená je vysvětleno dále v jednotlivých kapitolách.



Obr. 2: Typy prediktivních modelů [17]

3.1 Model-driven

Model-driven modely se také nazývají white-box modely, protože jsou založeny na znalostech získaných zkoumáním vybraných jevů popisujících souvislosti procesu. Tyto modely jsou založeny na rovnicích popisujících chemické a fyzikální principy z nichž proces vychází [2]. Nevýhodou tohoto typu modelů je, že jejich tvorba vyžaduje odborné znalosti procesů, které nemusí být vždy dostupné. Mezi další nevýhody patří, že jejich teoretický popis je často zjednodušený a popisuje optimální ustálené stavy procesů. U složitých systémů může být tvorba model-driven modelu velmi obtížná [1]. I přesto jsou model-driven modely v nějakých případech používány [2]. Mezi nejrozšířenější model-driven modely patří First principle modely.

3.1.1 First principle model (FPM)

First principle modely využívají znalostí fyzikálních a chemických základů systému k odvození jeho matematických definic. Vývoj těchto analytických modelů je nákladný, protože je nutná odbornost v oblasti modelovaného problému na vysoké úrovni. Výhodou tohoto přístupu je, že poskytuje hloubkový vhled do chování systému [17].

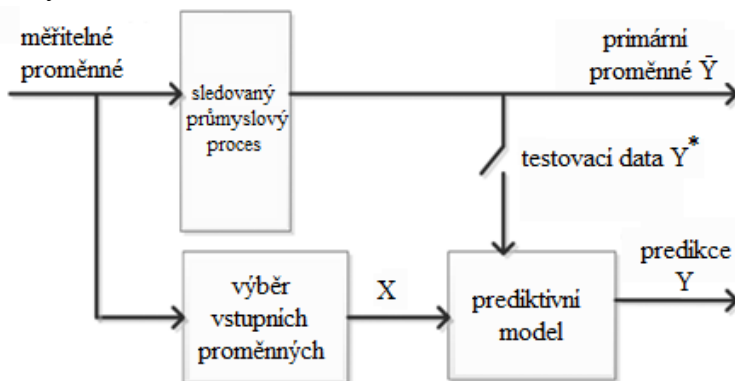
Obecně platí, že výchozí struktura modelu formulovaná na základě fyzikálních poznatků musí být upřesněna, aby odpovídala datům získaným experimentálně. Činnost při vývoji analytického modelu se skládá ze základního modelování, experimentů, odhadů, rozšířeného modelování a ověřování modelu [17].

3.2 Data-driven

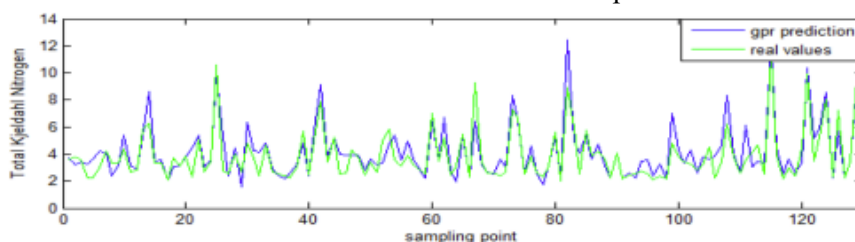
Model data-driven virtuálního senzoru je typem black-box modelu založeném na měřeních vstupů a výstupů průmyslových procesů. Black-box model nebo česky černá skříňka je systém, na který lze nahlížet z hlediska jeho vstupů a výstupů bez znalosti jeho vnitřního fungování [18]. V modelování virtuálních senzorů se využívají sekundární proměnné X jako vstupy do prediktivního modelu virtuálního senzoru a jeho výstupy popisují primární proměnné \bar{Y} . Model virtuálního senzoru zaznamenává a snaží se predikovat funkční vztah primárních a sekundárních proměnných. Cílem data-driven modelů je za pomoci dat provádět predikce chování zvoleného procesu v reálném čase bez potřeby modelování struktury onoho procesu.

Tento model je vytvořen na základě dat (získaný z distribuovaných řídicích systému, systémů řízení kvality, výrobních systémů a dalších databází), pomocí kterých je trénován. Model samotný bez komplexních dat a dostatečného trénování nedokáže poskytnout užitečné predikce. Po trénování jsou výstupy modelu porovnány s testovacími daty Y^* . Následně jsou vyhodnoceny metriky pro kvalitu predikce a model je validován [19]. Poté co je model validován může pomocí dat získaných on-line provádět predikce v reálném čase. Schopnost predikce modelu může klesnout, protože dodaná data modelu nemusí popisovat všech možné stavy. Model je proto neustále testován, zda predikce odpovídá realitě. Není-li schopnost predikce modelu dostatečně kvalitní musí být model aktualizován. S tímto problémem se lze vypořádat i využitím adaptivních modelů.

Na obr. 3 lze vidět schéma fungování data-driven modelu, kde z měřitelných proměnných jsou vybrány ty vstupní proměnné X , které představují nejvyšší informační hodnotu a na jejich základě je vypracována predikce Y . Obr. 4 zobrazuje srovnání predikce modelu využívající Gaussovu procesní regresi (Gaussian Process Regression) s dříve naměřenými hodnotami na datech z [20].



Obr. 3: Blokové schéma virtuálního senzoru s data-driven prediktivním modelem [20]



Obr. 4: Srovnání predikce GPR modelu (modře) s reálnými hodnotami (zeleně) [20]

3.2.1 Adaptivní modely

Jako adaptivní modely jsou obecně označovány modely, které mají schopnost automaticky měnit následující aspekty během online fáze [21]:

1. jejich atributy (příkladem mohou být třeba váhy spojení Neuronových sítí),
2. jejich strukturu (například počet skrytých neuronů NS).

V literatuře se lze setkat s pojmem Concept drift, což znamená že se statistické vlastnosti cílové proměnné v průběhu času mění, kde pojem concept představuje objekt/proměnnou, co se má predikovat [1]. Adaptivní modely se využívají k řešení problémů způsobeném Concept driftem. K řešení tohoto problému se užívají tyto tři metody: výběr vzorku (sample selection), vážení vzorku (sample weighting) a ensemblové učení (ensemble learning) [1].

Při výběru vzorků je kladen důraz na vybraní relevantních vzorků, co souvisí s aktuálním conceptem a ty jsou následně použity k aktualizaci nebo tréninku modelu. Příkladem postupu využívaném touto metodou je technika Moving window (posuvné okno), která se využívá pro Umělé neuronové sítě [1].

Vážení vzorků přiřazuje vzorkům váhy podle jejich staří s tím, že jejich důležitost v čase klesá [1]. Čímž model získá schopnost „zapomenout“ staré hodnoty a může se více soustředit na nové a relativní informace. Příkladem využití této metody je třeba Rekurzivní metoda (částečných) nejmenších čtverců nebo Online sekvenční stroj extrémního učení (online sequential extreme learning machine).

Přístup ensemblového učení má za cíl vytvořit model pro každý concept v datovém souboru [1]. Výsledná hodnota predikce je kombinací výsledků všech modelů dříve vytvořených pro všechny concepty např. váženým průměrem všech výsledků. Adaptace může být prováděna na úrovni modelů nebo jejich kombinací.

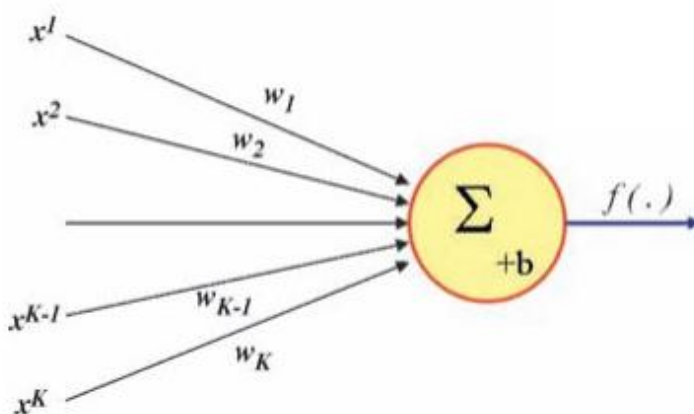
3.3 Metody strojového učení využívané data-driven modely

V této sekci následuje seznámení s často využívanými metodami v oblasti data-driven virtuálních senzorů a zjednodušený popis jejich základních principů. Cílem je čtenáře seznámit s problematikou a uvést příklady těchto metod, které se využívají v praxi. Bylo zvoleno několik metod, které jsou poměrně názorné pro vytvoření představy, jak prediktivní modely virtuálních senzorů fungují. Mimo zmíněné metody v této kapitole se lze setkat s Metodami nejmenších čtverců (Partial least squares) [22], Regresí hlavních komponent (Principal component regression) [23], metodami Náhodný les (Random forest) [24], Gaussovou procesní regresí (Gaussian process regression) [25], Mnohonásobnou lineární regresí (Multiple linear regression) [26] a dalšími metodami. Dále je vhodné uvést že u některých metod není jednoznačný český překlad, proto v práci jsou často uváděny v závorkách i anglické názvy.

3.3.1 Umělé neuronové sítě (Artificial neural networks - ANN)

Umělé neuronové sítě jsou systémy pro zpracování informací, které jsou inspirovány způsobem, jakým funguje biologický nervový systém a mozek. Cílem neuronových sítí je přiblížit počítače a jejich programy ke způsobu učení lidí. Umělé neuronové sítě se využívají pro aplikace jako je dolování dat (data mining), rozpoznávání vzorů (pattern recognition) a získávání informací (information retrieval) [27]. Neuronové sítě lze využít pro učení s učitelem, bez učitele, jejich kombinaci a zpětnovazební učení záleží dle zvoleného typu sítě. Výhodou neuronových sítí je, že mohou být bez velkých obtíží aplikovány i pro nelineární nebo vysoce dimenzionální datové soubory [27].

Základním prvkem umělé neuronové sítě je neuron. Perceptron je nejjednodušším typem neuronové sítě s jedním neuronem a poměrně hezky na něm lze vysvětlit fungování neuronových sítí. Tento neuron má několik vstupů, přičemž každý z nich má svou váhu. Kombinuje tyto vstupy váženým součtem, aby vytvořil vnitřní úroveň aktivace. Model perceptronu lze vidět na obr.5. Čím větší je úroveň aktivace, tím silnější je signál, který je vyslán do dalších neuronů v síti. Neurony se někdy nazývají uzly či buňky, odkazy se nazývají synapse (synaptická spojení) a bias se označuje jako aktivační práh [27].



Obr. 5: Model Perceptronu [27]

Matematicky lze výstup neuronu y popsat následující rovnicí [27].

$$y = f(\sum_{i=1}^K w_i x^i + b) \quad (1)$$

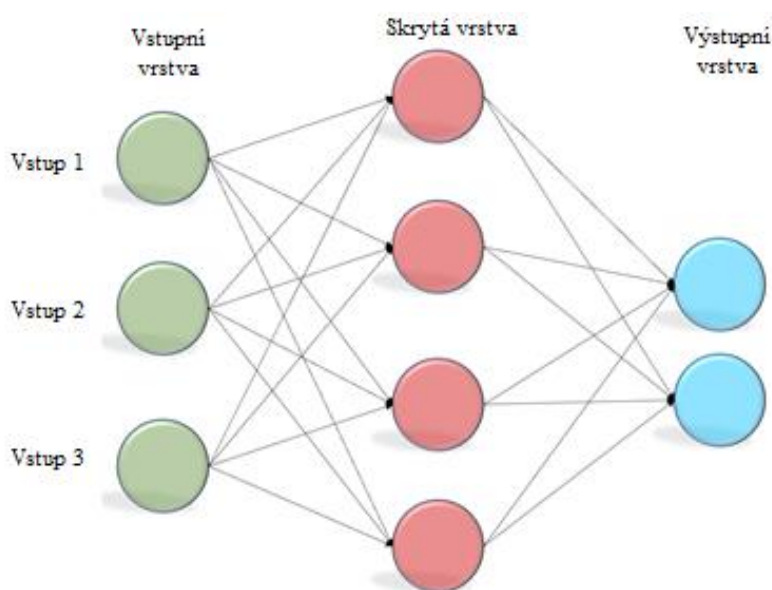
Kde vstupy jsou označeny x^i a jejich váhy w_i , dále b je bias neboli zkreslení, f je zvolená aktivační funkce a K je počet vstupů. Dle zvolené aktivační funkce může být výstup buď spojitý nebo kvantovaný. Příkladem využívané aktivační funkce je hyperbolický tangens [27].

Aby síť produkovala požadované výstupy musí být učená. Učení obvykle probíhá přivedením učebních vzorů, přičemž síť změní svou váhovou funkci podle dříve definovaných pravidel učení. Nejběžnější metodou pro učení umělých neuronových sítí je algoritmus zpětného šíření chyby (backpropagation algorithm) [27]. Algoritmus porovnává výstup sítě s žádaným výstupem, vyhodnocuje velikost chyby a opakuje se trénování, aby byla kvalita predikce nejvyšší možná.

Neuronové sítě jsou nejběžnější metodou využívanou pro prediktivní modely virtuálních senzorů. Mezi často využívané typy neuronových sítí v oblasti virtuální senzorů patří Vícevrstvý dopředný Perceptron, Rekurentní neuronové sítě (Recurrent neural networks), Automatické kodéry (Autoencoders), Extrémní učící se stroje (Extreme learning machines) a další.

Vícevrstvý dopředný Perceptron (Multi-layer Perceptron - MLP)

Jedná se o dopřednou neuronovou síť tzn., že je bez zpětných vazeb, bočních připojení a informace proudí pouze jedním směrem od vstupu k výstupu [28]. Tato síť obsahuje propojené perceptrony uspořádané do několika vrstev. Každý neuron je propojen se všemi neurony další vrstvy viz obr.6. Skládá se z vstupní, výstupní vrstvy a skryté vrstvy.



Obr. 6: Struktura vícevrstvého Perceptronu. Převzato z [29]

Pro tréninkový režim nám stačí náhodná čísla jako hodnoty vah. Trénování probíhá v tzv. epochách což jsou sety iterací, ve kterých trénování probíhá. V každé epoše probíhá úprava vah tak, aby byla snížena chyba výstupu [30]. Pro daný tréninkový soubor může učení probíhat dvěma způsoby: dávkový režim (batch mode) a on-line režim (online mode). Dávkový režim dodává každé iteraci kompletní sadu vzorků, takže úpravy vah závisí na celé sadě trénovacích dat. Při on-line režimu jsou vzorky poskytovány síti po jednom nebo v malých dávkách (mini-batch) a tyto redukované sady se postupně využívají k úpravě vah [31].

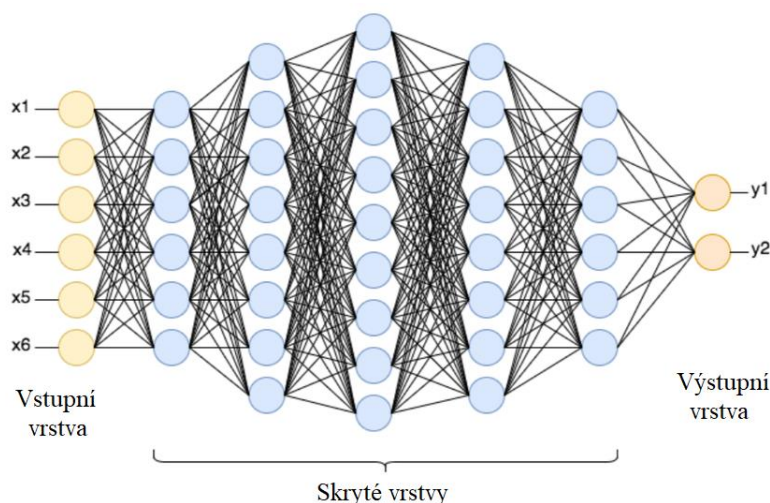
V prediktivním režimu data prochází dopředu sítí od vstupů po výstup. Síť provádí jednotlivé procesy jeden po druhém, přičemž vytváří predikci výstupních hodnot dle hodnot vstupních. Výsledná chyba se využívá jako odhad kvality trénované sítě.

Hluboké učení (deep learning)

Deep learning je metodou strojového učení založená na neuronových sítích. Lze ji využít pro všechny tři v této práci zmíněné přístupy k učení. Rozdíl oproti klasickému využití neuronových sítí je v tom, že deep learning využívá víc skrytých vrstev, které představují zmíněnou „hloubku“ (příklad na obr. 7). Tento fakt umožňuje metodám využívajícím deep learning se lépe vypořádat s komplexními problémy. Obecně platí, že čím je problém komplexnější tím více skrytých vrstev model využije [9]. Výhodou deep learningu proti ostatním metodám strojového učení je tedy to, že dokáže pracovat s většími objemy dat. Dále dokáže být zvláště užitečný pro modely založené na nestructurovaných datech [9]. K trénování se využívá stejně jako u klasických neuronových sítí algoritmus zpětné propagace (Backpropagation).

Mezi metody neuronových sítí využívajících deep learning patří Konvoluční neuronové sítě (Convolutional neural networks), Dlouhá krátkodobá paměť (Long short-term memory) a další.

Deep learning je pro oblast virtuálních senzorů celkem podstatný, protože v průmyslových procesech, kde jsou virtuální senzory často aplikovány, se lze setkat s velkým množstvím dat, pro které by využití deep learningových metod mělo být hodně užitečné.



Obr. 7: Příklad Neuronové sítě využívající deep learning [32]

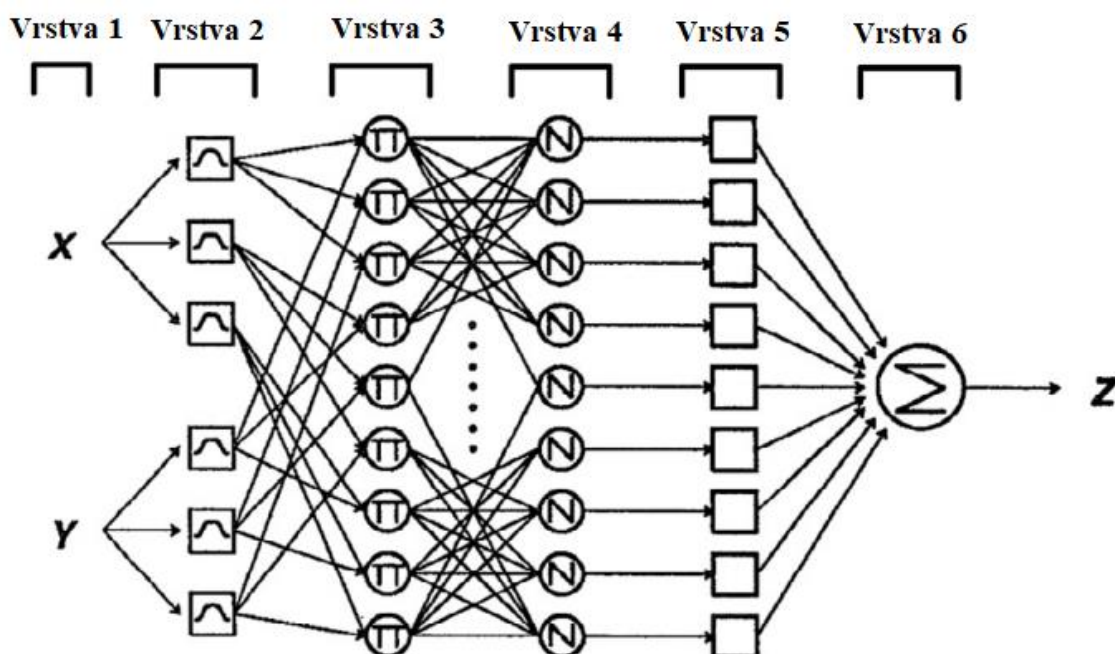
3.3.2 Neuro-Fuzzy Systémy

Jedná se o kombinaci Neuronových sítí a fuzzy logiky. Fuzzy logika je rozšíření výrokové logiky o hodnoty z intervalu $<0; 1>$, které reprezentují jakousi míru nejistoty. Základy fuzzy logiky definoval profesor L. A. Zadeh v roce 1965 [33].

Neuro-fuzzy systémy tedy přebírají z fuzzy logiky popis nejistoty, neurčitosti a kombinují to se strojním učením z neuronových sítí, kde je cílem potlačení nevýhod obou zmíněných přístupů. Pro Neuro-fuzzy systémy lze využít jednu z několika architektur, přičemž Adaptivní síťové fuzzy inferenční systémy (zkráceně ANFIS) vykazují jedny z nejlepších přesností predikcí [34].

Adaptivní síťové fuzzy inferenční systémy (Adaptive neuro fuzzy inference system)

Adaptivní síťové fuzzy inferenční systémy jsou jedny z prvních neuro-fuzzy systémů. Tato architektura využívá Takagi–Sugeno–Kangův fuzzy inferenční systém [34]. Na obr. 8 lze vidět strukturu této sítě, která se skládá z 6 vrstev [34].



Obr. 8: Struktura ANFIS [34]

V první vrstvě jsou vstupní neurony, které přiřazují vstupní hodnoty další vrstvě. Následující druhá vrstva se stará o přiřazení fuzzy hodnot výstupním hodnotám. Neurony třetí vrstvy reprezentují pravidla a přepočítávají výstup podle síly pravidla, co reprezentují. Ve čtvrté vrstvě se vypočítá poměr síly pravidla k sumě všech pravidel. V páté vrstvě probíhá defuzzyfikace a poslední vrstva (případně vrstvy) je výstupní vrstva sumující všechny své vstupy.

Učení této sítě probíhá ve dvou fázích, které se iterativně opakují. V první fázi jsou parametry funkcí v páté vrstvě vyladěny pomocí metody nejmenších čtverců (least mean square method) [34]. Ve druhé fázi jsou pomocí algoritmu zpětné propagace (backpropagation algorithm) upraveny parametry funkcí ve druhé vrstvě [34].

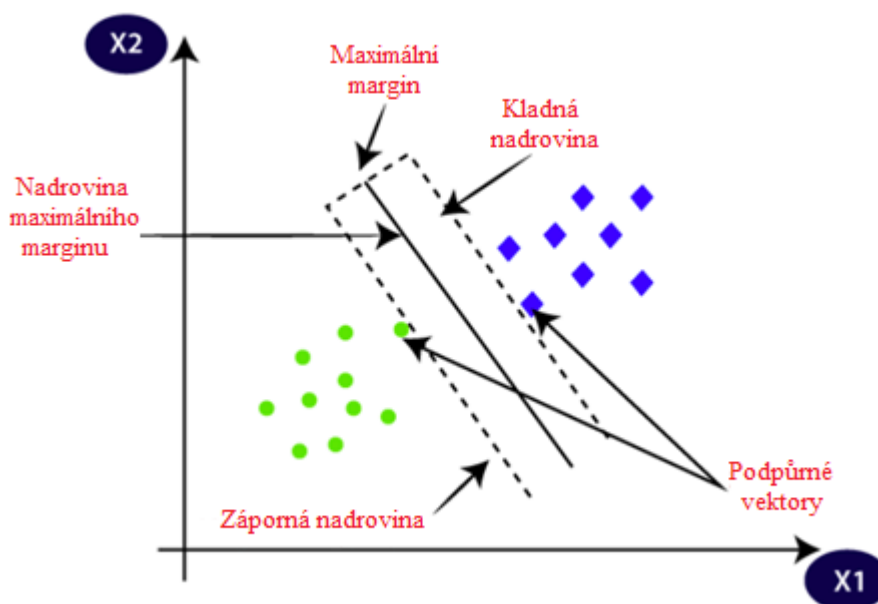
3.3.3 Metody podpůrných vektorů (Support vector machines - SVM)

Metody podpůrných vektorů v literatuře známé také jako Kernel machines jsou metodou strojového učení, která je založena na statistické teorii učení. Mají dobře známou vlastnost, že jsou universálními aproximátory jakékoliv vícerozměrné funkce na jakýkoliv požadovaný stupeň přesnosti [35, 36].

Metody podpůrných vektorů mohou mít tři různé typy výstupů: binární, multinomiální nebo spojité [37]. První dva typy spadají pod klasifikaci podpůrných vektorů (Support vector classification). Spojité výstupy poté představují regresi podpůrných vektorů (Support vector regression - SVR) [37].

Klasifikace podpůrných vektorů

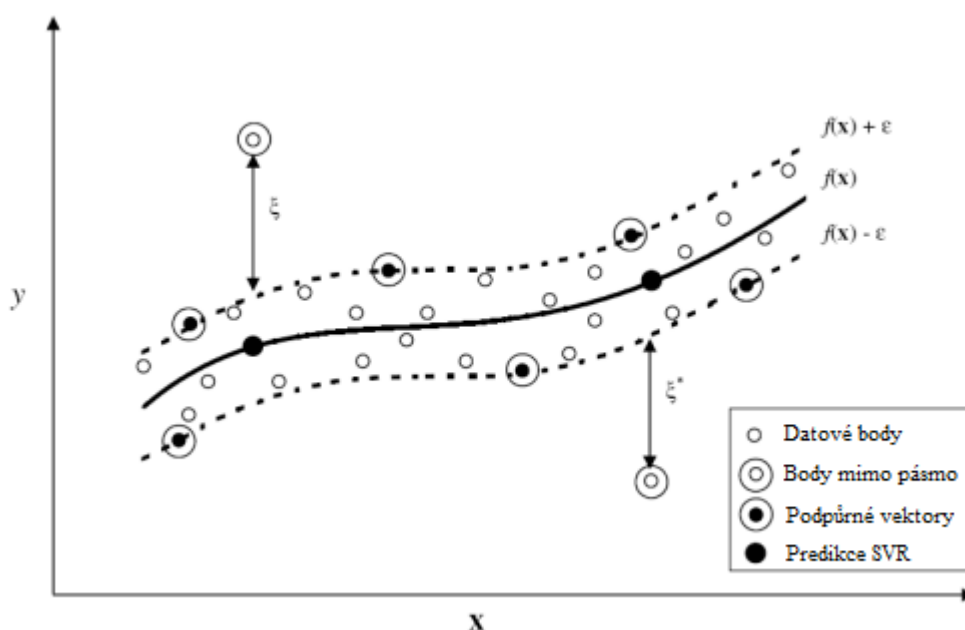
Cílem klasifikace podpůrných vektorů je vytvořit nejlepší hranici, která může rozdělit n -dimenzionální prostor do tříd, abychom mohli v budoucnu snadno zařadit nová data do správné kategorie. Tato hranice se nazývá nadrovina (hyperplane). K tvorbě této nadroviny si algoritmus vybere hraniční body/vektory. Tyto hraniční případy se nazývají podpůrné vektory. Vzdálenost mezi nadrovinou a podpůrnými vektory se označuje jako margin. Optimální nadrovina má maximální vzdálenost mezi nejbližšími datovými body z každé třídy [38]. Jednoduchý příklad této klasifikace lze vidět na obr.9. Tento odstavec vychází z článku [39], kde lze nalézt další informace k tvorbě této metody.



Obr. 9: Klasifikace podpůrných vektorů [38]

Regrese podpůrných vektorů

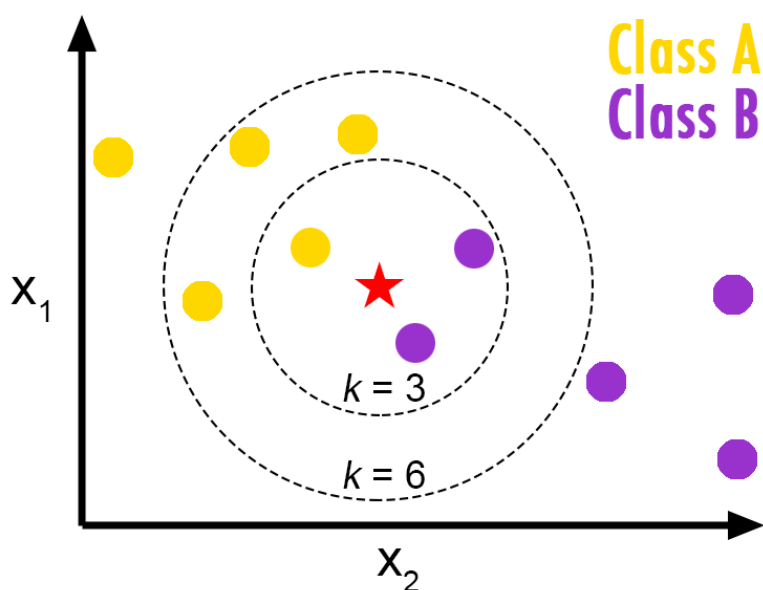
Regrese podpůrných vektorů je rozšíření metody podpůrných vektorů. Rozdíl oproti původní metodě je v tom, že místo hledání rozdělující nadroviny se snaží predikovat funkční závislost $f(x)$ pomocí „uzavření“ co nejvíce datových bodů v pásmu ohraničeném podpůrnými vektory [40]. K lepšímu pochopení je nutno zavést parametr ε . Tento parametr udává šířku okraje, a proto se od něj odvíjí tolerance chyb modelu [40]. Pro různé datové soubory je třeba zvolit jinou hodnotu parametru ε . Na obr. 10 lze vidět příklad použití nelineární regrese podpůrných vektorů.



Obr. 10: Příklad regrese podpůrných vektorů převzato z [41]

3.3.5 K – Nejbližších sousedů (K – Nearest Neighbors)

K – Nejbližších sousedů je běžně využívaný algoritmus pro klasifikaci i regresi. V klasifikaci je každá třída dána sadou ukázkových vzorků, kterými je natrénována. Když poté má být klasifikována nově přidaná neznámá hodnota, algoritmus najde na základě vzdálenostní funkce (např. Euklidovské vzdálenosti) jeho k nejbližší sousedy mezi ostatními vzorky a zařadí do tříd na základě většího množství sousedů z dané třídy [42]. Hodnota k je tedy počet nejbližších sousedů. Aby se zabránilo nerozhodným výsledkům, v oblastech překrývání tříd, volí se hodnota k lichá. Míra chybovosti je díky tomu v praxi malá [42]. Na obr. 11 lze vidět jednoduchý příklad klasifikace do dvou tříd se znázorněním rozsahů vzdálenostní funkce k pro vybrané hodnoty.

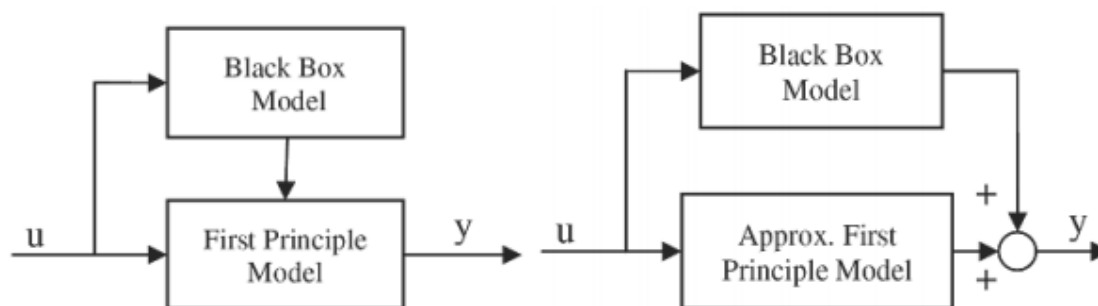


Obr. 11: Příklad metody klasifikace k – nejbližších sousedů [43]

3.4 Gray-box

Gray-box modely kombinují model-driven (white-box) a data-driven (black-box) modely, což znamená že využívají část známých a neznámých parametrů. V literatuře se lze s nimi setkat i pod názvy „semi-analytické“, „semi-fyzické“, „semi-parametrické“ nebo „hybridní“ modely [44]. Jako hybridní modely jsou označovány i spojení dvou black-box modelů z čeho vyplývá, že všechny gray-box modely lze označovat jako hybridní modely, ale všechny hybridní modely nemusí být zrovna gray-box modely [44]. Cílem gray-box modelů je kompenzovat nedostatky samostatných black-box nebo white-box modelů zvýšením přesnosti a spolehlivosti. Principem hybridních modelů je, že když se objeví nový provozní stav tak se predikce přikloní spíše k výsledkům white-box modelu. Predikce black-box modelu se využívají spíše při již známých provozních stavech [16].

Existují dva hlavní přístupy využívané u gray-box modelů: sériové a paralelní modely [16]. Na obr.12 lze vidět sériový (vlevo) a paralelní model (vpravo), kde u jsou vstupy modelu a y výstupy modelu.



Obr. 12: Schéma sériového a paralelního gray-box modelu [16]

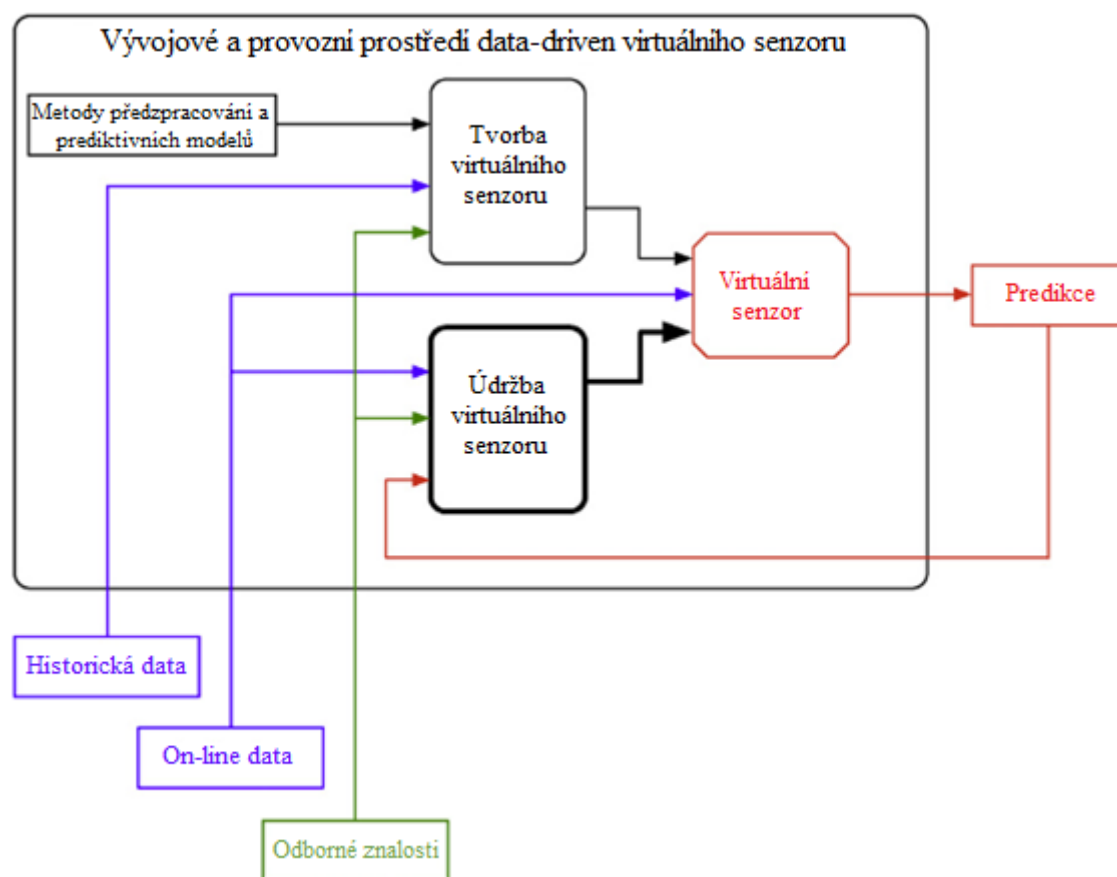
Sériový přístup využívá black-box model k tvorbě modelových parametrů ve white-box modelu, který pak představuje výsledný modelovaný proces [16, 42]. Díky tomu mohou být parametry modelu neznámé, neměřitelné, měnící se časem nebo jinak nejisté.

Paralelní přístup využívá black-box modely predikci zbytků, které nejsou objasněny pomocí white-box modelu [16, 44]. Při provozu je predikce z black-box modelu přidána k výstupu white-box modelu, čímž se dosáhne výsledné predikce, která je více odpovídá reálnému chování systému.

4 TVORBA VIRTUÁLNÍCH SENZORŮ

V této sekci následuje seznámení s obecnou metodologií používanou při tvorbě virtuálních senzorů a popis jednotlivých kroků. Pro vytvoření model-driven senzoru je především nutno sestavit vztahy popisující fyzikální vlastnosti procesu. Z tohoto důvodu je jejich tvorba o něco složitější a tato práce se tímto nebude zabývat.

Při tvorbě data-driven senzorů se využívá zobecněný postup. V literatuře [1, 2, 7, 45] se postupy mírně odlišují, ale v podstatě jde o to samé. Na obr. 13 lze vidět prostředí virtuálního senzoru, kde k tvorbě jsou potřeba dříve získaná (historická) data a odborné znalosti. Dále je třeba zvolit vhodné metody předzpracování a predikce, díky tomu může vzniknout virtuální senzor, který poté pomocí on-line dat vytvoří predikci. Ovšem ke zvýšení kvality predikce je nutno provádět údržbu virtuálního senzoru. Údržba vyžaduje odborných znalostí, on-line dat a předchozích predikcí, pomocí kterých umožňuje virtuálnímu senzoru přizpůsobovat se dynamickým procesům. Následující podkapitola se zabývá obecným postupem k tvorbě data-driven virtuálního senzoru.

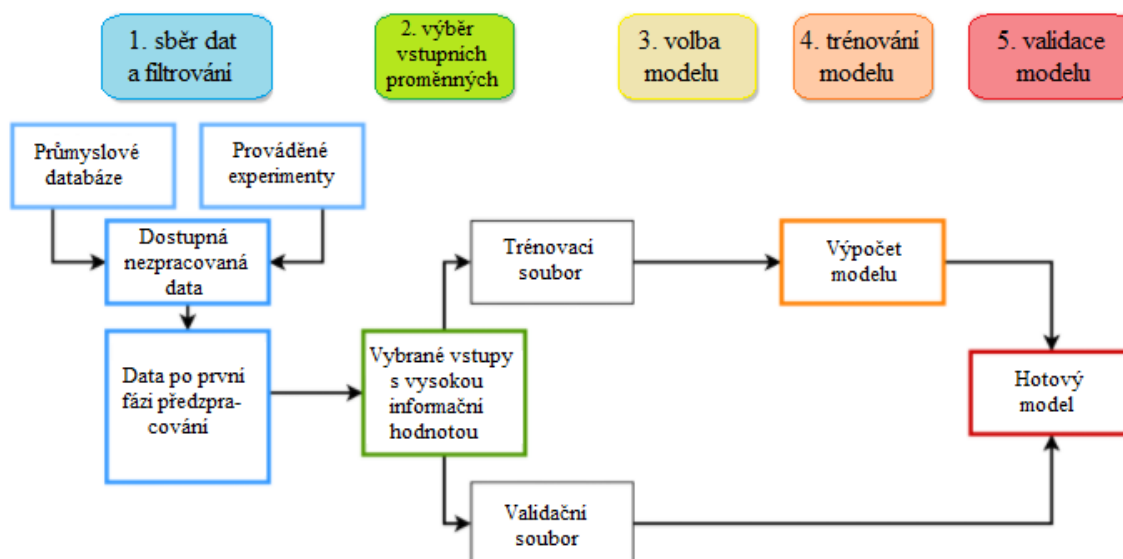


Obr. 13: Vývojové a provozní prostředí virtuálního senzoru převzato z [21]

4.1 Postup tvorby data-driven virtuálních senzorů

Tvorba data-driven senzorů je prováděna v podobných krocích jako rozpoznávání vzorů (pattern recognition) a teorie identifikace systémů. Postup tvorby popsany v této práci je inspirován hlavně z [45], ale podobné přístupy či popisy dílčích kroků lze najít v [1, 2, 6, 19, 46]. Postup tvorby virtuálních senzorů lze shrnout do pěti obecných kroků (viz obr. 14), ke kterými je ještě v této kapitole ke konci přidána z důvodu její důležitosti i údržba modelu. Pět zmíněnými kroky jsou:

1. sběr a filtrování dat,
2. výběr vstupních proměnných,
3. výběr modelu,
4. trénování modelu,
5. ověření (validace) modelu.



Obr. 14: Schéma tvorby data-driven senzorů [45]

4.1.1 Sběr a filtrování dat

Sběr dat probíhá z řídicích systémů, historických databází či je lze získat pomocí experimentů. Nasbíraná data by měla co nejlépe popisovat celou dynamiku systému, model nemůže poskytnout více informací, než je uloženo v datech samotných [45]. Po shromáždění dat probíhá první část jejich filtrování a předzpracování. Běžně tato část spočívá v převzorkování (resampling), detekci a odstranění odlehlých hodnot, filtrování šumu a normalizaci [19, 45]. Cílem této části je získat přehled o celkové struktuře dat a rozpoznat evidentní problémy, se kterými se lze vypořádat již v počátcích tvorby [19]. Tento krok představuje první fázi předzpracování. Druhou a poslední fázi představuje následující krok – výběr vstupních proměnných.

4.1.2 Výběr vstupních proměnných

Výběr vstupních proměnných obecně slouží k protřídění možných vstupních proměnných pouze na ty, jež mají co nejvyšší možnou informační hodnotu. Soubory dat z různých databází či informačních systému běžně mohou obsahovat data, která nebudou příliš relevantní pro konkrétní aplikace virtuálních sensorů. Jejich odstraněním tedy nebude nijak nepříznivě ovlivněna schopnost predikce. Cílem výběru vstupních proměnných je zkrácení doby vývoje modelu, snížení jeho komplexnosti, snížení pravděpodobnosti přeučení (overfittingu) a celkově umožnění vývoje virtuálního senzoru pro určité aplikace [1,19]. Většina literatury uvádí, že k úspěšnému sestavení modelu virtuálního senzoru je zapotřebí pouze malé množství proměnných [1].

Pokud je to možné tak výběr nejrelevantnějších vstupních proměnných provádějí kvalifikovaní pracovníci, kteří mají dostatečné zkušenosti a znalosti najít proměnné nejvíce ovlivňující cílovou proměnnou. V aplikacích virtuálních sensorů se mohou vyskytovat velké množství kandidátů na vstupní proměnné, jejich počet může dosahovat až tisíců [1]. Pro tyto případy nemusí být výběr vhodných proměnných na základě znalostí procesu proveditelný.

Pro výběr vstupních proměnných se využívají metody učení bez učitele konkrétně redukce dimenzionality (viz kapitola 2.1.2). Mezi tyto metody patří Analýza hlavních komponent (Principal Component Analysis – PCA) a její rozšíření jako jsou Nonlinear PCA [46], Kernel PCA [47] či jiné [43]. Dále je možno využít i další metody jako Kohonenovy samo-organizační mapy (Self-Organizing Maps) [48], Isomapy (Isomaps) [49, 50], Laplaceovy Eigenmapy (Laplacian Eigenmaps) [51, 52] a další [43]. Porovnání vybraných metod výběru proměnných pro virtuální senzor využívající metodu nejmenších čtverců lze nalézt v [53].

Popřípadě lze využít i metody učení s učitelem. Při výběru vstupních proměnných pomocí těchto metod se zohledňují vztahy mezi vstupními a výstupními proměnnými, které souvisí s přesností příslušného modelu [1]. Cílem je dosáhnout co nejvyšší možné přesnosti modelu. Pro hledání mezi možnými vstupními proměnnými se využívají různé strategie, které lze dělit do následujících skupin: filtrovací metody, wrapperové metody (wrapper methods), vestavěné metody (embedded methods) a hybridní metody [43,54].

Filtrovací metody využívají statistické míry (např. korelační koeficient, vzájemná informace) ke kvantifikaci kvality podskupiny nezávisle na použitém modelu [1]. Wrapperové metody používají jako kritérium výkonnost modelu, například pomocí Střední kvadratické chyby (Mean squared error) nebo Akaikova informačního kritéria (Akaike information criterion) [1]. Vestavěné metody provádějí výběr proměnných v procesu učení a jsou obvykle specifické pro dané strojové učení [54]. Hybridní metody kombinují různé dříve jmenované metody, čím často přináší lepší výsledky a menší náročnost výpočtů [43].

4.1.3 Výběr modelu virtuálního senzoru

Dále je třeba se rozhodnout jaký typ modelu bude pro daný účel nejvhodnější. Model-driven modely jsou obvykle zaměřeny na popis optimálních ustálených stavů. Tento typ virtuálních senzorů je založen především na odvození rovnic, které mohou popsat fyzikální a chemické vztahy procesu. Jejich hlavní nevýhodou je, že jsou považovány za poměrně časově náročné, protože většina procesů je složitá, a navíc nejsou schopny popisovat skutečné podmínky procesu [19]. Pro komplexní systémy může být tento přístup i prakticky nerealizovatelný [1].

Data-driven modely jsou schopny popsat skutečné podmínky procesu, umožňují spolehlivý odhad neměřitelných procesních veličin a vyžadují méně znalostí o systému, který má být modelován. Z těchto důvodů se data-driven modely stávají stále populárnější v průmyslové praxi [2]. Nicméně tento přístup vyžaduje intenzivní práci s daty. Problémy data-driven senzorů spočívají ve výběru správné metody a struktury prediktivního modelu. Výběr prediktivního modelu je velmi důležitý, protože prediktivní model je srdcem virtuálního senzoru a jeho optimální výběr je důležitý pro výkonnost samotného virtuálního senzoru [19]. Proto velká část publikovaných prací, které se soustředí na vývoj virtuálních senzorů pro konkrétní aplikace vždy navrhuje několik metod, které následně mezi sebou porovná a vybere tu nejlepší z nich.

Zvolená metoda prediktivního modelu se odvíjí od datového souboru popisujícím proces, pro který se bude virtuální senzor modelovat. Existují dvě možnosti: lineární a nelineární model. Podle mnoha autorů by měl být lineární model zvažován vždy před modelem nelineárním [1]. Popřípadě je možnost začít s jednoduchým modelem jako je lineární regrese a postupně zvyšovat složitost modelu, dokud nebude uživatel s modelem spokojený [19]. Příkladem nelineárních modelů jsou hluboké neuronové sítě (deep neural networks), které mají uspokojivé výsledky pro vysoce nelineární procesy, protože získávají podrobnější informace v hlubších vrstvách sítě při velkých tréninkových souborech [19]. Cílem je tedy učinit správné rozhodnutí na základě dostupných dat a potřeby aplikace, tak aby model poskytoval uspokojivé výsledky, nebyl zbytečně složitý a zvolená metoda byla schopna reprezentovat realitu. Dosáhnutí těchto cílů souvisí s zkušenostmi daného pracovníka, co bude virtuální senzor aplikovat a s jeho znalostí využívaných metod a jejich aplikace.

4.1.4 Trénování a validace modelu

Virtuální senzory často pracují s velkým počtem vzorků a využívají poměrně složité metody modelování, proto běžně vyžadují velmi dlouhou dobu trénování. Kvůli tomu je typické používat jednoduché rozdělení vzorků dat na trénovací a validační, popřípadě na trénovací a testovací data [19]. Pomocí trénovacích dat je vybraný model virtuálního senzoru trénován a následně pomocí validačních/testovacích dat je vyhodnocena jeho výkonnost. Samotné trénování se pak odvíjí od zvolené metody. Pro provádění vyhodnocení jsou nezbytné nezávislá data, existují různé přístupy k tomuto vyhodnocení jako jsou automatické rozdělení trénovacího souboru dat na trénovací a validační soubor dat nebo vyhodnocení výkonnosti pomocí k-násobné křížové validace [19].

Cílem validace je vyhodnotit schopnost natrénovaného modelu provést zobecnění na neznámá data. Validace se provádí pomocí nějaké metriky výkonnosti, obvykle pomocí střední kvadratické chyby (Mean Squared Error – MSE) nebo pomocí normalizované efektivní chyby (Normalized Root Mean Squared Error – NRMSE) [1]. NRMSE je normalizovanou verzí MSE, často je vyjádřena v procentech pro intuitivnější analýzu výkonu modelu [1]. U obou těchto metrik platí, že nižší hodnoty značí lepší modely.

4.1.5 Údržba (maintenance) modelu

Při tvorbě virtuálního senzoru využíváme dříve získaná data. Tato data však mohou obsahovat jen omezené informace, které odpovídají určitému časovému období, popřípadě se zaměřují na omezené množství provozních oblastí zvoleného procesu. Při řešení událostí, které nejsou popsány v těchto dříve získaných datech, mají virtuální senzory tendenci snižovat svůj výkon [1].

Cílem údržby modelu je udržovat vyhovující úroveň predikce i za přítomnosti variací procesu nebo nějaké změny dat. Toho je obecně dosaženo aktualizací modelu virtuálního senzoru pomocí nových vzorků získaných v průběhu procesu [1]. V této souvislosti jsou modely virtuálních senzorů označovány jako adaptivní [1,21].

V současné době pořád platí, že většina virtuálních senzorů navrhovaných v literatuře neobsahuje automatizované mechanismy jejich údržby [2]. Následkem toho je nutnost pravidelných kontrol kvality predikce virtuálních senzorů, což může zvýšit jejich nákladnost.

5 POUŽITÍ V PRAXI

V této kapitole následuje seznámení typy využití virtuálních senzorů převážně v průmyslové praxi. Poté následuje průzkum metod využívaných pro prediktivní modely. Průzkum je zaměřen hlavně na aktuální trendy.

5.1 Typy aplikací ve výrobních procesech

Prvotní aplikací virtuálních senzorů je off-line predikce [2]. Následným vývojem byli metody používané pro tvorbu off-line virtuálních senzorů rozšířeny i pro on-line predikci a další aplikace.

5.1.1 Off-line predikce

Jedná se o predikci na základě dříve získaných dat, která neprobíhá v reálném čase. K off-line predikci lze využít metody lineární regrese, metodu nejmenších čtverců, metoda částečných nejmenších čtverců a další [21]. Dnes je tato metoda málo využívána, protože pro většinu aplikací je on-line predikce vhodnější.

5.1.2 On-line predikce

Nejběžnější aplikace virtuálních senzorů. Jedná se o odhad hodnot probíhající v reálném čase. Většinou se využívá pro hodnoty, co nelze měřit pomocí automatizovaných měření. To často platí pro kritické hodnoty, které souvisí s kvalitou výsledného produktu. Virtuální senzory můžou v takových případech poskytnout užitečné informace o sledovaných hodnotách a v případě, že predikce splňuje dané standardy, může být také začleněna do automatických regulačních smyček procesu [2]. Trénování virtuálních senzorů aplikovaných pro on-line predikce stále probíhá off-line pomocí dříve získaných dat.

5.1.3 Monitorování procesu

Další oblastí využití virtuálních senzorů je sledování procesů. Systémy můžou být učeny, aby analyzovali provozní stav eventuálně, aby rozpoznávali možné chyby procesu. Výhodami této metody jsou zohlednění všech vstupních parametrů, čehož dosahují použitím vícerozměrné statistiky (multivariate statistics) a poskytnutí informací o podílu jednotlivých parametrů na případném porušení monitorovací statistiky [2].

5.2 Průzkum metod aplikovaných v praxi

V této části následuje lehký přehled metod využívaných ve vědeckých publikacích. Následující tabulka Tab.1 vychází z 50 náhodně vybraných článků publikovaných v roce 2020 nebo 2021 na téma virtuální senzorů (soft sensors) [56-105]. Jedná se o metody využívané primárně pro prediktivní modely. Většina článku obsahuje více metod, ale pro větší přehlednost byla vybrána vždy metoda, která ve zvoleném článku měla nejlepší výsledky nebo byla zvolena pro danou aplikaci. Kategorizace v tabulce nemusí přesně odpovídat metodám užitých v pracích. Většina z nich využívá různorodé rozšíření a optimalizace metod, které metody výrazně odlišují a tato práce slouží spíše pro všeobecný přehled.

n	Využívané metody	Využito v pracích	Počet prací	Procentuální zastoupení v pozorovaném celku
1	Neuronové sítě	[56],[58], [61], [63-64], [67-68], [72], [75-77], [79-82], [84-98], [90-94], [98], [101], [103]	28	56 %
2	Metoda nejmenších čtverců	[66], [78], [83], [100], [104]	5	10 %
3	Algoritmus k-nejbližších sousedů	[59], [65], [70], [95]	4	8 %
4	Náhodný les (Random Forest)	[69], [73]	2	4 %
5	Metoda podpůrných vektorů (Support vector machines)	[62]	1	2 %
6	Metoda relevantních vektorů (Relevant vector machine)	[74]	1	2 %
7	Regrese hlavních komponent (Principal component regression)	[60]	1	2 %
8	Gaussova procesní regrese (Gaussian process regression)	[61]	1	2 %
9	Gaussova směsná regrese (Gaussian mixture regression)	[105]	1	2 %
10	D-vine copula kvantilová regrese D-vine copula quantile regression	[57]	1	2 %
11	Evolutionary optimization-based pseudo labeling method	[97]	1	2 %
12	Hybridní First principle model	[99]	1	2 %
13	Stacking generalization	[102]	1	2 %
14	Neuro-fuzzy system	[89]	1	2 %
15	Multiple linear regression	[96]	1	2 %

Tab. 1: Aplikované metody v literatuře [60-110]

Z dat vyplývá, že nejběžněji využívanou metodou jsou Umělé neuronové sítě. To je ovšem pořád velmi široký rozsah, do kterého spadá velké množství metod. Proto byla zpracována další tabulka Tab. 2 kde je vidět, které konkrétní typy Neuronových sítí jsou využívány.

n	Využívaná metoda NN	Využito v pracích	Počet	Procentuální zastoupení v NN
1	Multi-layer Perceptron	[56], [58], [63], [94]	4	14,3 %
2	Long short-term memory - deep learning	[72], [86], [90], [92]	4	14,3 %
3	Recurrent neural network	[81], [84], [91], [98]	4	14,3 %
4	Convolutional neural network - deep learning	[64], [75], [79]	3	10,7 %
5	Stacked Autoencoders - deep learning	[80], [88], [101]	3	10,7 %
6	Extreme learning machine	[68], [87], [103]	3	10,7 %
7	Autoencoders	[61], [77]	2	7,1 %
8	Echo state network	[76], [93]	2	7,1 %
9	Ensemble deep learning	[67]	1	3,6 %
10	Generative adversarial network	[82]	1	3,6 %
11	Deep belief network	[8]	1	3,6 %

Tab. 2: Konkrétní metody aplikace neuronových sítí z Tab. 1

V Tab.2 lze vidět již mnohem rovnoměrnější rozdělení, kde není žádná metoda většinově zastoupena. Dále je vhodné zmínit že metody využívající deep learning představují zhruba 43 % z výše zmíněných metod [64, 67, 72, 85, 79, 80, 85, 86, 88, 90, 92, 101].

Ze zmíněných prací využívají [62, 80, 85, 97] kombinované metody učení s učitelem a bez učitele (semi-supervised learning), které mohou umožnit tvorbu virtuálního senzoru v případě malého množství ošitkovaných dat. Tyto metody budou v budoucnosti více zkoumány, protože jejich přínosem může být rychlejší a lepší tvorby virtuálních senzorů.

Dominantním typem aplikace virtuálních senzorů je On-line predikce. Tento typ lze nalézt skoro v každé výše zmíněných pracích, až na nějakou výjimkou, kde je typem aplikace monitorování systému [64, 65].

Většina virtuálních senzorů ve zmíněném souboru prací využívají Data-driven metody. Model-driven metody samostatně nejsou využity ani v jedné práci, ale v hybridním modelu v kombinaci s data-driven metodami jsou využity v pracích [70, 81, 96, 104].

V některých pracích jsou zmíněné i adaptivní modely. Nejčastěji zmíněnými adaptivním modelem je Just-in-time learning, který je zmíněn i aplikován v [74, 77, 78, 87, 90, 105].

Oblasti aplikací virtuálních senzorů jsou různorodé. Ve zmíněném souboru prací jsou virtuální senzory aplikovány v chemickém průmyslu [57, 58, 60, 66, 69, 80, 96, 97, 103], v rafineriích [67, 87, 88, 94, 95], v čističkách odpadních vod [56, 62, 65, 104], ve výrobě polymerů [67, 91, 92, 93], v elektrárnách [82, 87] a dalších aplikacích. Mezi zajímavé metody aplikace patří virtuální senzor na neinvazivní hodnocení kardiovaskulárního rizika [73] a virtuální senzor pro posuzování chování řidičů [89].

6 BUDOUCÍ MOŽNÉ SMĚŘOVÁNÍ VÝVOJE

Virtuální senzory získávají postupně na popularitě v širokém spektru průmyslových aplikací pro sledování procesů a řízení. Dle názoru autora je to částečně důsledkem většího rozšíření strojového učení, které se ve formě virtuálních senzorů snaží i dostat do průmyslu. Problémem virtuálních senzorů je, že dost záleží na individuální aplikaci, pro kterou musí být onen virtuální senzor vytvořen „na míru“ což činí zařazení do řídicích struktur o něco složitější. Rozhodně v blízké době vzniknou nebo dokonce již vznikají frameworky, což jsou softwarové struktury sloužící jako podpora při programování a vývoji, které tvorbu virtuálních senzorů mnohonásobně usnadní. Popřípadě i jiné nástroje pro další usnadnění jejich tvorby a aplikace.

Autor při hledání informací o tomto tématu narazil na mnoho již vytvořených virtuálních senzorů pro jednodušší aplikace např. měření teploty či vlhkosti vzduchu, kde se použilo méně klasických senzorů a predikci dodatečných měření prováděli právě ty virtuální [55]. Tento trend bude jistě pokračovat a postupně se rozšiřovat do četného množství průmyslových aplikací jako jsou například automatické výrobní linky a obecně aplikace průmyslu 4.0, kde mohou virtuální senzory pomoci nahradit velké množství hardwarových senzorů nebo umožnit jinak obtížná měření a tím snížit náklady výroby. Další uplatnění v praxi virtuální senzory najdou hlavně v automatizované výrobě.

V kapitole 5.2 byl uveden průzkum článků vydaných přibližně v posledním roce sloužící k zjištění aktuálních trendů v oblasti virtuálních senzorů. Tam bylo zjištěno, že zhruba 50 % článků o virtuálních senzorech z vybraného vzorku využívá Umělé neuronové sítě, část z toho asi kolem 40 % deep learning. Takže lze usoudit, že neuronové sítě jsou atraktivní metodou pro virtuální senzory a nejspíše budou i do budoucna.

V budoucnu se budou více využívat metody kombinace učení s učitelem a bez učitele. Jejich hlavní výhodou je, že nepotřebují tolik oštitkovaných (labeled) dat k trénování a lze je trénovat i pomocí dat neoštitkovaných (unlabeled). To může být obzvláště výhodné pro aplikace s velkým množstvím nestrukturovaných dat, kde nebude potřeba věnovat tolik úsilí strukturování a oštitkování dat. Ve výsledku to může ušetřit čas nebo dokonce umožnit nějaké jinak příliš obtížné aplikace.

Dále adaptivní modely budou hrát podstatnou roli v budoucnosti virtuálních senzorů. Umožní dlouhodobou aplikaci virtuálních senzorů, který bude adaptivně udržován díky čemuž se jeho výsledky nebudou časem tolik zhoršovat, což je u obyčejných data-driven senzorů problém nastávající poměrně běžně. Již dnes lze v člancích najít frameworky pro adaptivní modely nezávislé na zvoleném prediktivním modelu. Příkladem je Just-in-time learning. Jedná se on-line modelovací framework vhodný pro průmyslové procesy s komplikovanými nelineárními charakteristikami [92].

7 ZÁVĚR

Obecně jsou virtuální senzory metodou, která má velký potenciál v průmyslových aplikacích. Jejich zavedení může být velkou oporou pro řízení, kde můžou dodávat cenné informace o kvalitě procesů, případně pomoci se snížením výdajů na nákladná měření či umožnit získat uspokojivé výsledky s nižším počtem běžných senzorů. Cílem této práce je informovat o možnostech virtuálních senzorů, seznámit čtenáře s jejich strukturami, tvorbou a metodami strojového učení, které se běžně využívají. Dále poskytnout náhled do jejich možných aplikací v budoucnu jako je například zařazení virtuálních senzorů do řídicích struktur či čtené rozšíření aplikace virtuálních senzorů v rámci průmyslu 4.0.

První kapitola po úvodu se snaží čtenáře seznámit se strojovým učením obecně. Informuje o různých přístupech k učení jako je učení s učitelem, učení bez učitele a kombinace učení s učitelem a bez učitele. Poté kapitola popisuje cíle klasifikace, regrese, shlukování a redukce dimenzionality a jejich vztah k virtuálním senzorům.

Další kapitola popisuje prediktivní modely, které jsou nejdůležitější částí virtuálních senzorů. Popisuje typy struktur a rozdíly mezi jednotlivými strukturami. Kapitola (i práce obecně) je více zaměřená na data-driven virtuální senzory, protože jsou nejvíce využívány.

Následující kapitola se zabývá tvorbou virtuálních senzorů. Popisuje obecný postup, který lze při jejich tvorbě využít a upozorňuje na co si dávat při tvorbě pozor.

Předposlední kapitola se věnuje využití virtuálních senzorů v praxi. Popisuje jejich běžné typy aplikací. Dále je proveden průzkum jejich aplikací a vývoje v posledním zhruba roce, což umožňuje shrnutí nových trendů. Jejich dominantní aplikace je on-line predikce a nejčastěji využívanou metodou jsou neuronové sítě.

Poslední kapitola se věnuje budoucnosti virtuálních senzorů. Zde autor dle svých názorů zhodnotí další vývoj a popíše co si myslí o dalších aplikacích virtuálních senzorů. To je v širším aplikování virtuálních senzorů v průmyslu 4.0, častější využití adaptivních modelů a kombinace učení s učitelem a bez učitele.

8 SEZNAM POUŽITÉ LITERATURY

- [1] SOUZA, Francisco A.A, Rui ARAÚJO a Jérôme MENDES. Review of soft sensor methods for regression applications. *Chemometrics and intelligent laboratory systems* [online]. Elsevier B.V, 2016, **152**(C), 69-79 [cit. 2021-02-18]. ISSN 0169-7439. Dostupné z: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0169743915003263>.
- [2] KADLEC, Petr, Bogdan GABRYS a Sibylle STRANDT. Data-driven Soft Sensors in the process industry. *Computers & chemical engineering* [online]. Elsevier, 2009, **33**(4), 795-814 [cit. 2021-02-19]. ISSN 0098-1354. Dostupné z: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0098135409000076>
- [3] HAN, Chonghun a Young-hak LEE. Intelligent integrated plant operation system for Six Sigma. *Annual reviews in control* [online]. Elsevier, 2002, **26**(1), 27-43 [cit. 2021-03-10]. ISSN 1367-5788. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1367578802800086>
- [4] GOODWIN, Graham C. Predicting the performance of soft sensors as a route to low cost automation. *Annual reviews in control* [online]. Elsevier, 2000, **24**, 55-66 [cit. 2021-3-10]. ISSN 1367-5788. Dostupné z: <https://www-sciencedirect-com.ezproxy.lib.vutbr.cz/science/article/pii/S1367578800900130>
- [5] JORDAAN, Elsa, Arthur KORDON, Leo CHIANG a Guido SMITS. *Robust Inferential Sensors Based on Ensemble of Predictors Generated by Genetic Programming: Parallel Problem Solving from Nature* [online]. Berlin: Springer, 2004, , 522-531 [cit. 2021-3-10]. ISSN 978-3-540-30217-9. Dostupné z: https://link.springer.com/chapter/10.1007%2F978-3-540-30217-9_53
- [6] KADLEC, Petr a Bogdan GABRYS. Soft sensors: where are we and what are the current and future challenges? *IFAC Proceedings Volumes* [online]. 2009, **42**(19), 572-577 [cit. 2021-2-20]. ISBN 9783902661661. ISSN 1474-6670. Dostupné z: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1474667015308958>
- [7] FORTUNA, Luigi, Salvatore GRAZIANI, Alessandro RIZZO a Maria Gabriella XIBILIA. *Soft Sensors for Monitoring and Control of Industrial Processes*. 1. Londýn, UK: Springer, 2007. ISBN 978-1-84628-480-9.
- [8] MOHAMMED, Mohssen. *Machine Learning: Algorithms and Applications*. 2016. ISBN 9781315354415.
- [9] HURWITZ, J, a D. KIRSCH. *Machine Learning for Dummies* [online]. IBM Limited Edition. Hoboken, NJ: John Wiley, 2018 [cit. 2021-4-02]. ISBN 978-1-119-45494-6. Dostupné z: <https://www.ibm.com/downloads/cas/GB8ZMQZ3>
- [10] What is the difference between labeled and unlabeled data? *Stackoverflow* [online]. [cit. 2021-4-26]. Dostupné z: <https://stackoverflow.com/questions/19170603/what-is-the-difference-between-labeled-and-unlabeled-data/19172720#19172720>
- [11] ZHANG, Xian-Da. *A Matrix Algebra Approach to Artificial Intelligence*. 2020. ISBN 9789811527708. Dostupné z: https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-981-15-2770-8_6
- [12] VERCELLIS, Carlo. *Business Intelligence: Data Mining and Optimization for Decision Making*. 2009. ISBN 9780470753859.
- [13] KELBEL, Jan a David ŠILHÁN. *Shluková analýza* [online]. In: . [cit. 2021-4-23]. Dostupné z: http://cmp.felk.cvut.cz/cmp/courses/recognition/zapis_prednasky/zapis_02/13/shlukovani.pdf

- [14] ČEPEK, Miroslav. *Vytěžování Dat Přednáška 13 – Redukce dimenzionality*. Fakulta Elektrotechnická, ČVUT. Dostupné z: <https://cw.fel.cvut.cz/old/media/courses/a7b36vyd/prednasky/13-dimred-print.pdf>
- [15] Unsupervised Learning. *Ibm.com* [online]. [cit. 2021-4-23]. Dostupné z: <https://www.ibm.com/cloud/learn/unsupervised-learning>
- [16] VAN ENGELEN, Jesper E. a Holger H. HOOS. A survey on semi-supervised learning. *Machine Learning* [online]. Springer, 2020, **109**(2), 373 [cit. 2021-4-20]. ISSN 0885-6125. Dostupné z: <https://www.proquest.com/docview/2367633899?pq-origsite=primo>
- [17] CZOP, P., G. KOST, D. SŁAWIK a G. WSZOŁEK. Formulation and identification of First-Principle Data-Driven models. *Journal of Achievements in Materials and Manufacturing Engineering* [online]. 2011, **44**(2) [cit. 2021-5-2]. Dostupné z: http://jamme.acmsse.h2.pl/papers_vol44_2/4427.pdf
- [18] PENG, Zhang. Industrial Control System Simulation Routines. *Advanced Industrial Control Technology*. Elsevier, 2010, s. 1-2. ISBN 9781437778076. Dostupné z: https://app.knovel.com/web/toc.v/cid:kpAICT0003/viewerType:toc//root_slug:viewerType%3Aatoc/url_slug:root_slug%3Aadvanced-industrial-control?kpromoter=federation
- [19] ZHU, Xianglin, Khalil Ur REHMAN, Bo WANG, Muhammad SHAHZAD a Xianglin ZHU. Modern Soft-Sensing Modeling Methods for Fermentation Processes. *Sensors (Basel, Switzerland)* [online]. 2020, **20**(6) [cit. 2021-4-29]. Dostupné z: <https://search.proquest.com/docview/2383731508/fulltextPDF/11BE0460AD744202PQ/1?accountid=17115>
- [20] YAN, Weiwu, Pengju GUO, Yu TIAN a Jianjun GAO. A Framework and Modeling Method of Data-Driven Soft Sensors Based on Semisupervised Gaussian Regression. *Industrial & Engineering Chemistry Research* [online]. 2016, **55**(27), 7394-7401 [cit. 2021-5-20]. ISSN 0888-5885. Dostupné z: <https://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/acs.iecr.5b04118>
- [21] KADLEC, Petr, Ratko GRBIĆ a Bogdan GABRYS. Review of adaptation mechanisms for data-driven soft sensors. *Computers & chemical engineering* [online]. Elsevier, 2011, **35**(1), 1-24 [cit. 2021-2-]. ISSN 0098-1 Dostupné z: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0098135410002838>
- [22] ZAMPROGNA, Eliana, Massimiliano BAROLO a Dale E SEBORG. Estimating product composition profiles in batch distillation via partial least squares regression. *Control engineering practice* [online]. Elsevier, 2004, **12**(7), 917-929 [cit. 2021-5-17]. ISSN 0967-0661. Dostupné z: <https://www.sciencedirect.com.ezproxy.lib.vutbr.cz/science/article/pii/S0967066103002557>
- [23] GE, Zhiqiang, Biao HUANG a Zhihuan SONG. Nonlinear semisupervised principal component regression for soft sensor modeling and its mixture form. *Journal of Chemometrics* [online]. 2014, **28**(11), 793-804 [cit. 2021-5-17]. ISSN 0886-9383. Dostupné z: <https://analyticalsciencejournals.onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/cem.2638>
- [24] KNEALE, Casey a Steven D BROWN. Small moving window calibration models for soft sensing processes with limited history. *Chemometrics and intelligent laboratory systems* [online]. Elsevier B.V, 2018, **183**, 36-46 [cit. 2021-5-17]. ISSN 0169-7439. Dostupné z: <https://www.sciencedirect.com.ezproxy.lib.vutbr.cz/science/article/pii/S0169743918301692>

- [25] MEI, Congli, Ming YANG, Dongxin SHU, Hui JIANG, Guohai LIU a Zhiling LIAO. Soft sensor based on Gaussian process regression and its application in erythromycin fermentation process. *Chemical Industry and Chemical Engineering Quarterly* [online]. 2016, 22(2), 127-135 [cit. 2021-5-17]. ISSN 1451-9372. Dostupné z: <http://www.doiserbia.nb.rs/img/doi/1451-9372/2016/1451-93721500026M.pdf>
- [26] ASY'ARI, Muhammad Khamim, Ali MUSYAFI, Ronny Dwi NORIYATI a Katherin INDRIAWATI. Soft Sensor Design of Solar Irradiance Using Multiple Linear Regression. In: 2019 *International Seminar on Intelligent Technology and Its Applications (ISITIA)* [online]. IEEE, 2019, s. 56-60 [cit. 2021-5-17]. Dostupné z: <https://ieeexplore-ieee.org.ezproxy.lib.vutbr.cz/document/8937150>
- [27] KANEVSKI, Mikhail. Artificial Neural Networks. *Machine Learning for Spatial Environmental Data: Theory, Applications, and Software*. EPFL Press, 2009, s. 139-257. Dostupné z: <https://www-taylorfrancis-com.ezproxy.lib.vutbr.cz/chapters/artificial-neural-networks-mikhail-kanevski/10.1201/9781439808085-6>
- [28] KRAMER, Mark A. Nonlinear principal component analysis using autoassociative neural networks. *AIChE Journal* [online]. New York: American Institute of Chemical Engineers, 1991, 37(2), 233-243 [cit. 2021-5-8]. ISSN 0001-1541. Dostupné z: <https://aiche.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/aic.690370209>
- [29] Multi layer Perceptron (MLP) Models on Real World Banking Data. *Becominghuman.ai* [online]. 2019 [cit. 2021-5-18]. Dostupné z: <https://becominghuman.ai/multi-layer-perceptron-mlp-models-on-real-world-banking-data-f6dd3d7e998f>
- [30] LIU, Yidong, Siting LIU, Yanzhi WANG, Fabrizio LOMBARDI a Jie HAN. A Stochastic Computational Multi-Layer Perceptron with Backward Propagation. *IEEE Transactions on Computers* [online]. IEEE, 2018, 67(9), 1273-1286 [cit. 2021-02-24]. ISSN 0018-9340. Dostupné z: <https://ieeexplore-ieee.org.ezproxy.lib.vutbr.cz/document/8319953>
- [31] PÉREZ-SÁNCHEZ, Beatriz, Oscar FONTENLA-ROMERO, Bertha GUIJARRO-BERDIÑAS, Pedro MESEGUER, Lawrence MANDOW a Rafael M GASCA. An Incremental Learning Method for Neural Networks Based on Sensitivity Analysis. 5988. *Current Topics in Artificial Intelligence: 13th Conference of the Spanish Association for Artificial Intelligence, CAEPIA 2009, Seville, Spain, November 9-13, 2009. Selected Papers*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2010, s. 42-50. ISBN 9783642142635. Dostupné z: https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-642-14264-2_5
- [32] BAHY, Meriem a Mohamed BATOUCHE. Deep Learning for Ligand-Based Virtual Screening in Drug Discovery. In: 2018 *3rd International Conference on Pattern Analysis and Intelligent Systems (PAIS)* [online]. IEEE, 2018, s. 1-5 [cit. 2021-5-18]. Dostupné z: https://www.researchgate.net/publication/330120030_Deep_Learning_for_Ligand-Based_Virtual_Screening_in_Drug_Discovery
- [33] ZADEH, L.A. Fuzzy sets. *Information and control* [online]. Elsevier B.V, 1965, 8(3), 338-353 [cit. 2021-02-28]. ISSN 0019-9958. Dostupné z: <https://www-sciencedirect-com.ezproxy.lib.vutbr.cz/science/article/pii/S001999586590241X>
- [34] VIHAROS, Zs.J a K.B KIS. Survey on Neuro-Fuzzy systems and their applications in technical diagnostics and measurement. *Measurement: journal of the International Measurement Confederation* [online]. Elsevier, 2015, 67(C), 126-136 [cit. 2021-02-28]. ISSN 0263-2241. Dostupné z: <https://www-sciencedirect-com.ezproxy.lib.vutbr.cz/science/article/pii/S0263224115000585>

- [35] WANG, Lipo, ed., 2005. *Support Vector Machines: Theory and Applications* [online]. 1. Singapore: Springer [cit. 2021-02-26]. ISBN 3-540-24388-7. Dostupné z: https://books.google.cz/books?hl=cs&lr=&id=uTzMPJjVjsMC&oi=fnd&pg=PA1&dq=Support+Vector+Machines&ots=GFAH9sZKi9&sig=urba4Uh7q9ujxmzSYbR0PSmiKb4&redir_esc=y#v=onepage&q=Support%20Vector%20Machines&f=false
- [36] Masarykova univerzita - : Studijní materiály předmětu FI:PA034 [online]. 2006, 14.11.2010 [cit. 2021-02-26]. Support vector machines. Dostupné z : http://is.muni.cz/el/1433/podzim2006/PA034/09_SVM.pdf?fakulta=1433;obdobi=3523;kod=PA034.
- [37] GUENTHER, Nick a Matthias SCHONLAU. Support Vector Machines. *The Stata journal* [online]. Los Angeles, CA: SAGE Publications, 2016, **16**(4), 917-937 [cit. 2021-4-28]. ISSN 1536-867X. Dostupné z: <https://web-a-ebsohost-com.ezproxy.lib.vutbr.cz/ehost/detail/detail?vid=0&sid=280f3668-68ee-4187-8b03-c7bec92ee95c%40sessionmgr4007&bdata=Jmxhbmc9Y3Mmc2l0ZT1laG9zdC1saXZl#AN=120828766&db=a9h>
- [38] Support Vector Machine Algorithm. *Javatpoint* [online]. [cit. 2021-4-28]. Dostupné z: <https://www.javatpoint.com/machine-learning-support-vector-machine-algorithm>
- [39] GUNN, Steve. Support Vector Machines for Classification and Regression. Southhampton, 1998. Technical Report. University of Southhampton. Dostupné z: <http://ce.sharif.ir/courses/85-86/2/ce725/resources/root/LECTURES/SVM.pdf>
- [40] BRERETON, Richard G. a Gavin R. LLOYD. Support Vector Machines for classification and regression. *The Analyst* [online]. 2010, 135(2), 230-267 [cit. 2021-4-28]. ISSN 0003-2654. Dostupné z: <https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2010/AN/B918972F#!divAbstract>
- [41] THE SUPPORT VECTOR REGRESSION WITH THE PARAMETER TUNING ASSISTED BY A DIFFERENTIAL EVOLUTION TECHNIQUE: STUDY OF THE CRITICAL VELOCITY OF A SLURRY FLOW IN A PIPELINE. *Chemical Industry and Chemical Engineering Quarterly* [online]. Association of the Chemical Engineers of Serbia, 2008, 14(3), 191-203 [cit. 2021-4-28]. ISSN 1451-9372. Dostupné z: <https://doaj.org/article/69ff4a840e4a40cf948bae3ab79759cf>
- [42] LAAKSONEN, J a E OJA. Classification with learning k-nearest neighbors. In: *Proceedings of International Conference on Neural Networks (ICNN'96)* [online]. IEEE, 1996, 1480-1483 vol.3 [cit. 2021-5-2]. ISBN 0780332105. Dostupné z: <https://ieeexplore.ieee.org/stamp/stamp.jsp?tp=&arnumber=549118>
- [43] CHANDAK, Gaurav. K-nearest neighbors algorithm (k-NN). *Medium.com* [online]. [cit. 2021-5-2]. Dostupné z: <https://medium.com/learning-machine-learning-by-gc-nit/k-nearest-neighbors-algorithm-k-nn-937917329d4d>
- [44] CURRERI, Francesco a Giacomo FIUMARA. Input Selection Methods for Soft Sensor Design: A Survey. *Future internet* [online]. MDPI, 2020, **12**(97), 97 [cit. 2021-04-16]. Dostupné z: <https://www.mdpi.com/1999-5903/12/6/97/htm>
- [45] HAIMI, Henri, Michela MULAS, Francesco CORONA a Riku VAHALA. Data-derived soft-sensors for biological wastewater treatment plants: An overview. *Environmental modelling & software: with environment data news* [online]. Elsevier, 2013, **47**(C), 88-107 [cit. 2021-5-2]. ISSN 1364-8152. Dostupné z: <https://www.sciencedirect-com.ezproxy.lib.vutbr.cz/science/article/pii/S1364815213001308?via%3Dihub>
- [46] KRAMER, Mark A. Nonlinear principal component analysis using autoassociative neural networks. *AIChE Journal* [online]. New York: American Institute of Chemical Engineers, 1991, **37**(2), 233-243 [cit. 2021-5-8]. ISSN 0001-1541. Dostupné z: <https://aiche.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/aic.690370209>

- [47] SCHÖÖLKOPF, Bernhard, Alexander SMOLA a Klaus-robert MÜÖLLER. Nonlinear Component Analysis as a Kernel Eigenvalue Problem. *Neural Computation* [online]. MIT Press, 1998, **10**(5), 1299-1319 [cit. 2021-5-8]. ISSN 0899-7667. Dostupné z: <https://web-b-ebsohost-com.ezproxy.lib.vutbr.cz/ehost/detail/detail?vid=0&sid=b19de9e7-b799-4fef-aa3d-b06af0ee12a4%40pdc-v-sessmgr03&bdata=Jmxhbm9Y3Mmc2l0ZT1laG9zdC1saXZl#AN=839050&db=a9h>
- [48] KOHONEN, Teuvo. Self-organized formation of topologically correct feature maps. *Biological Cybernetics* [online]. 1982, 43, 59–69 [cit. 2021-5-8]. Dostupné z: <https://link.springer.com/article/10.1007/BF00337288>
- [49] The Isomap algorithm and topological stability. (Technical Comments).(Brief Article). *Science* [online]. American Association for the Advancement of Science, 2002, **295**(5552), 7 [cit. 2021-5-8]. ISSN 0036-8075. Dostupné z: <https://science.sciencemag.org/content/295/5552/7/tab-pdf>
- [50] WANG, Jianzhong. Isomaps. *Geometric Structure of High-Dimensional Data and Dimensionality Reduction*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2011, s. 151-180. ISBN 9783642274961. Dostupné z: https://link-springer-com.ezproxy.lib.vutbr.cz/chapter/10.1007%2F978-3-642-27497-8_8
- [51] BELKIN, Mikhail a Partha NIYOGI. Laplacian Eigenmaps for Dimensionality Reduction and Data Representation. *Neural Computation* [online]. MIT Press, 2003, **15**(6), 1373-1396 [cit. 2021-5-8]. ISSN 0899-7667. Dostupné z: <https://web-b-ebsohost-com.ezproxy.lib.vutbr.cz/ehost/detail/detail?vid=0&sid=3bba5c23-3705-4b81-a9f0-168d20f7e943%40pdc-v-sessmgr03&bdata=Jmxhbm9Y3Mmc2l0ZT1laG9zdC1saXZl#db=a9h&AN=9737845>
- [52] WANG, Jianzhong. Laplacian Eigenmaps. *Geometric Structure of High-Dimensional Data and Dimensionality Reduction*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2011, s. 235-247. ISBN 9783642274961. Dostupné z: https://link-springer-com.ezproxy.lib.vutbr.cz/chapter/10.1007%2F978-3-642-27497-8_12
- [53] WANG, Zi Xiu, Q. Peter HE a Jin WANG. Comparison of variable selection methods for PLS-based soft sensor modeling. *Journal of Process Control* [online]. 2015, 26, 56-72 [cit. 2018-09-10]. DOI: 10.1016/j.jprocont.2015.01.003. ISSN 09591524. Dostupné z: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0959152415000050>.
- [54] GUYON, Isabelle a Andre ELISSEEFF, KAELBLING, Leslie Pack, ed. An Introduction to Variable and Feature Selection. *Journal of Machine Learning Research* [online]. 3(2003) [cit. 2021-5-8]. Dostupné z: <https://www.jmlr.org/papers/volume3/guyon03a/guyon03a.pdf?ref=driverlayer.com/web>
- [55] TOSHIBA】 Virtual Sensing Technology. *Youtube* [online]. 2016 [cit. 2021-5-19]. Dostupné z: <https://www.youtube.com/watch?v=HlOv2gp2saY>
- [56] FOSCHI, Jacopo, Andrea TUROLLA a Manuela ANTONELLI. Soft sensor predictor of E. coli concentration based on conventional monitoring parameters for wastewater disinfection control. *Water research (Oxford)* [online]. Elsevier, 2021, **191** [cit. 2021-5-18]. ISSN 0043-1354. Dostupné z: <https://www-sciencedirect-com.ezproxy.lib.vutbr.cz/science/article/pii/S004313542100004X>
- [57] NI, Jianeng a Shaojun LI. An adaptive soft sensor method of D-vine copula quantile regression for complex chemical processes. *Chemical engineering science* [online]. Elsevier, 2021, **230** [cit. 2021-5-18]. ISSN 0009-2509. Dostupné z: <https://www-sciencedirect-com.ezproxy.lib.vutbr.cz/science/article/pii/S0009250920307429>

- [58] ZHANG, Ai-hui, Kai-yi ZHU, Xiao-yan ZHUANG, Lang-xing LIAO, Shi-yang HUANG, Chuan-yi YAO a Bai-shan FANG. A robust soft sensor to monitor 1,3-propanediol fermentation process by *Clostridium butyricum* based on artificial neural network. *Biotechnology and Bioengineering* [online]. 2020, **117**(11), 3345-3355 [cit. 2021-5-18]. ISSN 0006-3592. Dostupné z: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/bit.27507>
- [59] LIU, Bingyu, Bojian LIU, Xianwen GAO, Dingsen ZHANG, Dezhi HAO a Xinyang LI. A soft sensor based on case-based reasoning for iron ores flotation. *Ironmaking & steelmaking* [online]. Taylor & Francis, 2020, **47**(2), 150-158 [cit. 2021-5-11]. ISSN 0301-9233. Dostupné z: <https://www.tandfonline.com.ezproxy.lib.vutbr.cz/doi/full/10.1080/03019233.2018.1497760>
- [60] ZHU, Pengbo, Xianqiang YANG a Hang ZHANG. Mixture robust L1 probabilistic principal component regression and soft sensor application. *Canadian Journal of Chemical Engineering* [online]. Hoboken, USA: John Wiley & Sons, 2020, **98**(8), 1741-1756 [cit. 2021-5-18]. ISSN 0008-4034. Dostupné z: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/cjce.23739>
- [61] LIU, Kang, Weiming SHAO a Guoming CHEN. Autoencoder-based nonlinear Bayesian locally weighted regression for soft sensor development. *ISA transactions* [online]. Elsevier, 2020, **103**, 143-155 [cit. 2021-5-18]. ISSN 0019-0578. Dostupné z: <https://www.sciencedirect.com.ezproxy.lib.vutbr.cz/science/article/pii/S0019057820301191>
- [62] LI, Dong, Daoping HUANG, Yiqi LIU a Dong LI. A novel two-step adaptive multioutput semisupervised soft sensor with applications in wastewater treatment. *Environmental science and pollution research international* [online]. 2021 [cit. 2021-5-18]. ISSN 09441344. Dostupné z: <https://link.springer.com/article/10.1007/s11356-021-12656-9>
- [63] CORRIGAN, Jeremiah a Jie ZHANG. Integrating dynamic slow feature analysis with neural networks for enhancing soft sensor performance. *Computers & chemical engineering* [online]. Elsevier, 2020, **139** [cit. 2021-5-18]. ISSN 0098-1354. Dostupné z: <https://www.sciencedirect.com.ezproxy.lib.vutbr.cz/science/article/pii/S0098135419313134>
- [64] ALONSO, Serafin, Antonio MORAN, Daniel PEREZ, Miguel A. PRADA, Ignacio DIAZ a Manuel DOMINGUEZ. Estimating cooling production and monitoring efficiency in chillers using a soft sensor. *Neural Computing & Applications* [online]. Springer, 2020, **32**(23), 17291 [cit. 2021-5-18]. ISSN 0941-0643. Dostupné z: <https://link.springer.com/article/10.1007/s00521-020-05165-2>
- [65] PATTANAYAK, Arunima Sambhuta, Bhawani Shankar PATTAIAK, Siba K UDGATA a Ajit Kumar PANDA. Development of Chemical Oxygen on Demand (COD) Soft Sensor Using Edge Intelligence. *IEEE sensors journal* [online]. IEEE, 2020, **20**(24), 14892-14902 [cit. 2021-5-18]. ISSN 1530-437X. Dostupné z: <https://ieeexplore-ieee.org.ezproxy.lib.vutbr.cz/document/9143142>
- [66] LIU, Jingxiang, Dan WANG, Junhui CHEN a Jie HOU. Functional Soft Sensor Based on Spectra Data for Predicting Multiple Quality Variables. *IEEE access* [online]. IEEE, 2020, **8**, 160355-160362 [cit. 2021-5-18]. Dostupné z: <https://ieeexplore.ieee.org/document/9173659>
- [67] YI, Ling, Jun LU, Jinliang DING, Changxin LIU a Tianyou CHAI. Soft sensor modeling for fraction yield of crude oil based on ensemble deep learning. *Chemometrics and intelligent laboratory systems* [online]. Elsevier B.V., 2020, **204** [cit. 2021-5-18]. ISSN 0169-7439. Dostupné z: <https://www.sciencedirect.com.ezproxy.lib.vutbr.cz/science/article/pii/S0169743919307543>

- [68] POERIO, Dominic V. a Steven D. BROWN. Localized and adaptive soft sensor based on an extreme learning machine with automated self-correction strategies. *Journal of Chemometrics* [online]. 2020, **34**(7), n/a-n/a [cit. 2021-5-18]. ISSN 0886-9383. Dostupné z: <https://analyticalsciencejournals.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/cem.3088>
- [69] NKULIKIYINKA, Paula, Yongliang YAN, Fatih GÜLEÇ, Vasilije MANOVIC a Peter T. CLOUGH. Prediction of sorption enhanced steam methane reforming products from machine learning based soft-sensor models. *Energy and AI*. 2020, **2**(November). Dostupné z: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2666546820300379>
- [70] HOU, Shuai, Xinyuan ZHANG, Wei DAI, Xiaolin HAN, Fuan HUA a Shuai HOU. Multi-Model- and Soft-Transition-Based Height Soft Sensor for an Air Cushion Furnace. *Sensors (Basel, Switzerland)* [online]. 2020, **20**(3) [cit. 2021-5-18]. Dostupné z: <https://doaj.org/article/3750435752e944e287639e3bf857c5e1>
- [71] SHENG, Xiaochen, Junxia MA, Weili XIONG a Xiaochen SHENG. Smart Soft Sensor Design with Hierarchical Sampling Strategy of Ensemble Gaussian Process Regression for Fermentation Processes. *Sensors (Basel, Switzerland)* [online]. 2020, **20**(7) [cit. 2021-5-18]. Dostupné z: <https://doaj.org/article/955666e0481142d99ef5493ecc7c2cf1>
- [72] YUAN, Xiaofeng, Lin LI, Yuri A. W SHARDT, Yalin WANG a Chunhua YANG. Deep Learning With Spatiotemporal Attention-Based LSTM for Industrial Soft Sensor Model Development. *IEEE transactions on industrial electronics (1982)* [online]. IEEE, 2021, **68**(5), 4404-4414 [cit. 2021-5-18]. ISSN 0278-0046. Dostupné z: <https://ieeexplore-ieee-org.ezproxy.lib.vutbr.cz/document/9062588>
- [73] ARPAIA, Pasquale, Renato CUOCOLO, Francesco DONNARUMMA, Antonio ESPOSITO, Nicola MOCCALDI, Angela NATALIZIO a Roberto PREVETE. Conceptual design of a machine learning-based wearable soft sensor for non-invasive cardiovascular risk assessment. *Measurement: journal of the International Measurement Confederation* [online]. Elsevier, 2021, **169** [cit. 2021-5-18]. ISSN 0263-2241. Dostupné z: <https://www.sciencedirect-com.ezproxy.lib.vutbr.cz/science/article/pii/S0263224120310721>
- [74] WANG, Jianlin, Kepeng QIU, Yongqi GUO, Rutong WANG a Xinjie ZHOU. Soft sensor development based on improved just-in-time learning and relevant vector machine for batch processes. *Canadian Journal of Chemical Engineering* [online]. Hoboken, USA: John Wiley & Sons, 2021, **99**(1), 334-344 [cit. 2021-5-18]. ISSN 0008-4034. Dostupné z: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/cjce.23848>
- [75] YUAN, Xiaofeng, Shuaibin QI, Yalin WANG a Haibing XIA. A dynamic CNN for nonlinear dynamic feature learning in soft sensor modeling of industrial process data. *Control engineering practice* [online]. Elsevier, 2020, **104** [cit. 2021-5-18]. ISSN 0967-0661. Dostupné z: <https://www.sciencedirect-com.ezproxy.lib.vutbr.cz/science/article/pii/S0967066120301854>
- [76] HUANG, Ruoyu, Zetao LI, Bin CAO. A Soft Sensor Approach Based on an Echo State Network Optimized by Improved Genetic Algorithm. *Sensors (Basel, Switzerland)* [online]. 2020, **20**(17) [cit. 2021-5-18]. <https://www.proquest.com/docview/2440605845/fulltextPDF/3F40C6BBDD7C4EBBPQ/1?accountid=17115>
- [77] GUO, Fan, Ruimin XIE a Biao HUANG. A deep learning just-in-time modeling approach for soft sensor based on variational autoencoder. *Chemometrics and intelligent laboratory systems* [online]. Elsevier B.V, 2020, **197** [cit. 2021-5-18]. ISSN 0169-7439. Dostupné z: <https://www.sciencedirect-com.ezproxy.lib.vutbr.cz/science/article/pii/S0169743919307622>

- [78] YUAN, Xiaofeng, Jiao ZHOU a Yalin WANG. A spatial-temporal LWPLS for adaptive soft sensor modeling and its application for an industrial hydrocracking process. *Chemometrics and intelligent laboratory systems* [online]. Elsevier B.V., 2020, **197** [cit. 2021-5-18]. ISSN 0169-7439. Dostupné z: <https://www-sciencedirect-com.ezproxy.lib.vutbr.cz/science/article/pii/S0169743918302612>
- [79] ZHAO, Yantao, Bochuan DING, Yuling ZHANG, Liming YANG, Xiaochen HAO a Yantao ZHAO. Online cement clinker quality monitoring: A soft sensor model based on multivariate time series analysis and CNN. *ISA transactions* [online]. 2021 [cit. 2021-5-18]. ISSN 00190578. Dostupné z: <https://www-sciencedirect-com.ezproxy.lib.vutbr.cz/science/article/pii/S0019057821000689>
- [80] SHEN, Bingbing, Le YAO a Zhiqiang GE. Nonlinear probabilistic latent variable regression models for soft sensor application: From shallow to deep structure. *Control engineering practice* [online]. Elsevier, 2020, **94** [cit. 2021-5-18]. ISSN 0967-0661. Dostupné z: <https://www-sciencedirect-com.ezproxy.lib.vutbr.cz/science/article/pii/S0967066119301765>
- [81] COSOLI, G, P CHIARIOTTI, M MARTARELLI, S FOGLIA, M PARRINI a E. P TOMASINI. Development of a Soft Sensor for Indirect Temperature Measurement in a Coffee Machine. *IEEE transactions on instrumentation and measurement* [online]. IEEE, 2020, **69**(5), 2164-2171 [cit. 2021-5-19]. ISSN 0018-9456. Dostupné z: <https://ieeexplore-ieee-org.ezproxy.lib.vutbr.cz/document/8736259>
- [87] WANG, Xiao a Han LIU. Data supplement for a soft sensor using a new generative model based on a variational autoencoder and Wasserstein GAN. *Journal of process control* [online]. Elsevier, 2020, **85**, 91-99 [cit. 2021-5-19]. ISSN 0959-1524. Dostupné z: <https://www-sciencedirect-com.ezproxy.lib.vutbr.cz/science/article/pii/S0959152419307954>
- [83] YAGINUMA, Keita, Shuichi TANABE, Takuya MIYANO, Hiroshi NAKAGAWA, Satoshi SUZUKI, Shuichi ANDO, Manabu KANO a Keita YAGINUMA. Scale-Free Soft Sensor for Monitoring of Water Content in Fluid Bed Granulation Process. *Chemical & pharmaceutical bulletin* [online]. 2020, **68**(9), 855-863 [cit. 2021-5-19]. ISSN 00092363. Dostupné z: https://www.jstage.jst.go.jp/article/cpb/68/9/68_c20-00315/article
- [84] FONTES, Diane Otilia Lima, Luis Gonzaga Sales VASCONCELOS a Romildo Pereira BRITO. Blast furnace hot metal temperature and silicon content prediction using soft sensor based on fuzzy C-means and exogenous nonlinear autoregressive models. *Computers & chemical engineering* [online]. Elsevier, 2020, **141** [cit. 2021-5-19]. ISSN 0098-1354. Dostupné z: <https://www-sciencedirect-com.ezproxy.lib.vutbr.cz/science/article/pii/S009813542030452X>
- [85] ZHENG, Shuihua, Kaixin LIU, Yili XU, Hao CHEN, Xuelei ZHANG, Yi LIU a Shuihua ZHENG. Robust Soft Sensor with Deep Kernel Learning for Quality Prediction in Rubber Mixing Processes. *Sensors (Basel, Switzerland)* [online]. 2020, **20**(3) [cit. 2021-5-19]. Dostupné z: <https://www.mdpi.com/1424-8220/20/3/695/htm>
- [86] PAN, Hongguang, Tao SU, Xiangdong HUANG, Zheng WANG a Kang LI. LSTM-based soft sensor design for oxygen content of flue gas in coal-fired power plant. *Transactions of the Institute of Measurement and Control* [online]. London, England: SAGE Publications, 2021, **43**(1), 78-87 [cit. 2021-5-19]. ISSN 0142-3312. Dostupné z: <https://journals-sagepub-com.ezproxy.lib.vutbr.cz/doi/full/10.1177/0142331220932390>
- [87] ZHANG, Xiangrui, Xiaogang DENG a Ping WANG. Double-Level Locally Weighted Extreme Learning Machine for Soft Sensor Modeling of Complex Nonlinear Industrial Processes. *IEEE sensors journal* [online]. IEEE, 2021, **21**(2), 1897-1905 [cit. 2021-5-19]. ISSN 1530-437X. Dostupné z: <https://ieeexplore-ieee-org.ezproxy.lib.vutbr.cz/document/9174762>

- [88] YUAN, Xiaofeng, Yongjie GU, Yalin WANG, Chunhua YANG a Weihua GUI. A Deep Supervised Learning Framework for Data-Driven Soft Sensor Modeling of Industrial Processes. *IEEE transaction on neural networks and learning systems* [online]. IEEE, 2020, **31**(11), 4737-4746 [cit. 2021-5-19]. ISSN 2162-237X. Dostupné z: <https://ieeexplore-ieee-org.ezproxy.lib.vutbr.cz/document/8941265>
- [89] ESCANO, Juan Manuel, Miguel A RIDAO-OLIVAR, Carmelina IERARDI, Adolfo J SANCHEZ a Kumars ROUZBEHI. Driver Behavior Soft-Sensor Based on Neurofuzzy Systems and Weighted Projection on Principal Components. *IEEE sensors journal* [online]. IEEE, 2020, **20**(19), 11454-11462 [cit. 2021-5-19]. ISSN 1530-437X. Dostupné z: <https://ieeexplore-ieee-org.ezproxy.lib.vutbr.cz/document/9097169>
- [90] SHEN, Feifan, Jiaqi ZHENG, Lingjian YE a Xiushui MA. LSTM Soft Sensor Development of Batch Processes With Multivariate Trajectory-Based Ensemble Just-in-Time Learning. *IEEE access* [online]. IEEE, 2020, **8**, 73855-73864 [cit. 2021-5-19]. Dostupné z: <https://ieeexplore.ieee.org/document/9072176>
- [91] GAO, Shuzhi, Yimeng ZHANG, Yimin ZHANG a Guoguang ZHANG. Elman Neural Network Soft-Sensor Model of PVC Polymerization Process Optimized by Chaos Beetle Antennae Search Algorithm. *IEEE sensors journal* [online]. IEEE, 2021, **21**(3), 3544-3551 [cit. 2021-5-19]. ISSN 1530-437X. Dostupné z: <https://ieeexplore-ieee-org.ezproxy.lib.vutbr.cz/document/9205653>
- [92] ZHU, Xiuli, Kuangrong HAO, Ruimin XIE a Biao HUANG. Soft sensor based on eXtreme gradient boosting and bidirectional converted gates long short-term memory self-attention network. *Neurocomputing (Amsterdam)* [online]. Elsevier B.V, 2021, **434**, 126-136 [cit. 2021-5-19]. ISSN 0925-2312. Dostupné z: <https://www-sciencedirect-com.ezproxy.lib.vutbr.cz/science/article/pii/S0925231220319287>
- [93] HE, Yan-lin, Ye TIAN, Yuan XU a Qun-xiong ZHU. Novel soft sensor development using echo state network integrated with singular value decomposition: Application to complex chemical processes. *Chemometrics and intelligent laboratory systems* [online]. Elsevier B.V, 2020, **200** [cit. 2021-5-19]. ISSN 0169-7439. Dostupné z: <https://www-sciencedirect-com.ezproxy.lib.vutbr.cz/science/article/pii/S0169743919308184>
- [94] FAN, Yajun, Bo TAO, Ying ZHENG a Shi-shang JANG. A Data-Driven Soft Sensor Based on Multilayer Perceptron Neural Network With a Double LASSO Approach. *IEEE transactions on instrumentation and measurement* [online]. IEEE, 2020, **69**(7), 3972-3979 [cit. 2021-5-19]. ISSN 0018-9456. Dostupné z: <https://ieeexplore-ieee-org.ezproxy.lib.vutbr.cz/document/8867909>
- [95] NIÑO-ADAN, Iratxe, Itziar LANDA-TORRES, Diana MANJARRES a Eva PORTILLO. Soft-sensor design for vacuum distillation bottom product penetration classification. *Applied soft computing* [online]. Elsevier B.V, 2021, **102** [cit. 2021-5-19]. ISSN 1568-4946. Dostupné z: <https://www-sciencedirect-com.ezproxy.lib.vutbr.cz/science/article/pii/S1568494620310103>
- [96] BRUNNER, Vincent, Manuel SIEGL, Dominik GEIER a Thomas BECKER. Biomass soft sensor for a *Pichia pastoris* fed-batch process based on phase detection and hybrid modeling. *Biotechnology and Bioengineering* [online]. 2020, **117**(9), 2749-2759 [cit. 2021-5-19]. ISSN 0006-3592. Dostupné z: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/bit.27454>
- [97] JIN, Huaiping, Zheng LI, Xiangguang CHEN, Bin QIAN, Biao YANG a Jianwen YANG. Evolutionary optimization based pseudo labeling for semi-supervised soft sensor development of industrial processes. *Chemical engineering science* [online]. Elsevier, 2021, **237** [cit. 2021-5-19]. ISSN 0009-2509. Dostupné z: <https://www-sciencedirect-com.ezproxy.lib.vutbr.cz/science/article/pii/S0009250921001251>

- [98] QIAN, Xing, Shengkun JIA, Kejin HUANG, Haisheng CHEN, Yang YUAN, Xigang YUAN a Liang ZHANG. MPC-PI cascade control for the Kaibel dividing wall column integrated with data-driven soft sensor model. *Chemical engineering science* [online]. Elsevier, 2021, **231** [cit. 2021-5-19]. ISSN 0009-2509. Dostupné z: <https://www.sciencedirect.com.ezproxy.lib.vutbr.cz/science/article/pii/S0009250920307727>
- [99] WANG, Zilong, Reza KAMYAR, Hamidreza MEHDIZADEH a Pushkar Yashvant PENDSE. Moisture soft sensor for agitated pan dryers using a hybrid modeling approach. *International journal of pharmaceutics* [online]. Elsevier B.V, 2020, **586** [cit. 2021-5-19]. ISSN 0378-5173. Dostupné z: <https://www.sciencedirect.com.ezproxy.lib.vutbr.cz/science/article/pii/S0378517320305020>
- [100] MATSUYAMA, Yukio, Sanghong KIM a Shinji HASEBE. Robust parameter tuning method of LW-PLS and verification of its effectiveness by twelve industrial processes. *Computers & chemical engineering* [online]. Elsevier, 2021, **146** [cit. 2021-5-19]. ISSN 0098-1354. Dostupné z: <https://www.sciencedirect.com.ezproxy.lib.vutbr.cz/science/article/pii/S0098135421000028>
- [101] WANG, Yuhong a Shengkun WANG. Soft Sensor for VFA Concentration in Anaerobic Digestion Process for Treating Kitchen Waste Based on SSAE-KELM. *IEEE access* [online]. IEEE, 2021, **9**, 1-1 [cit. 2021-5-19]. Dostupné z: <https://ieeexplore.ieee.org/document/9366748>
- [102] WANG, Bin, Shi-dong FAN, Pan JIANG, Han-hua ZHU, Ting XIONG, Wei WEI, Zhen-long FANG a Bin WANG. A Novel Method with Stacking Learning of Data-Driven Soft Sensors for Mud Concentration in a Cutter Suction Dredger. *Sensors (Basel, Switzerland)* [online]. 2020, **20**(21) [cit. 2021-5-19]. Dostupné z: <https://www.mdpi.com/1424-8220/20/21/6075/htm>
- [103] ZHANG, Xiao-han, Yuan XU, Yan-lin HE a Qun-xiong ZHU. Novel manifold learning based virtual sample generation for optimizing soft sensor with small data. *ISA transactions* [online]. Elsevier, 2021, **109**, 229-241 [cit. 2021-5-19]. ISSN 0019-0578. Dostupné z: <https://www.sciencedirect.com.ezproxy.lib.vutbr.cz/science/article/pii/S0019057820304018>
- [104] MERINO, A, D GARCIA-ALVAREZ, G.I SAINZ-PALMERO, L.F ACEBES a M.J FUENTE. Knowledge based recursive non-linear partial least squares (RNPLS). *ISA transactions* [online]. Elsevier, 2020, **100**, 481-494 [cit. 2021-5-19]. ISSN 0019-0578. Dostupné z: <https://www.sciencedirect.com.ezproxy.lib.vutbr.cz/science/article/pii/S0019057820300082>
- [105] DONG, Jie, Yingze TIAN a Kaixiang PENG. Just-in-Time Learning-Based Soft Sensor for Mechanical Properties of Strip Steel via Multi-Block Weighted Semisupervised Models. *IEEE access* [online]. IEEE, 2020, **8**, 123869-123881 [cit. 2021-5-19]. Dostupné z: <https://ieeexplore.ieee.org/document/9127931>