

Tekoäly tuo tehoa kemian työkalupakkiin

■ **Tekoälystä on tulossa kemian teollisuuden ja tutkimuksen uusi, arvokas työkalu. Koneoppiminen tehostaa prosesseja ja näkyy suoraan tuloksena viivan alla. Tutkijoita tekoäly voi auttaa esimerkiksi reaktioiden suunnittelussa ja uusien lääkemolekyylien metsästyksessä.**

Kalevi Rantanen

Näytön poikki kulkee monta ylös ja alas sahaavaa käyrää. Kehityspäällikkö **Samuli Bergman** suunnitteluyhtiö Neste Engineering Solutionsista esittelee kemiantehtaan operaattorin työnäkymää.

”Ajassa muuttuvat suureet muodostavat yhdessä prosessin sormenjäljen, jota kokenut operaattori osaa tulkita”, Bergman kertoo.

Piikki yksittäisessä suureessa ei välttämättä merkitse mitään. Kahden suureen yhtäaikainen muuttuminen voi jo tarkoittaa sitä, että prosessiin pitää tehdä muutoksia.

Päätökset prosessin ajamisessa ovat viime vuosiin asti perustuneet operaattorin peukalosääntöihin, kokemukseen ja hiljaiseen tietoon. Rajoittuneen ihmillisen tietämyksen on ollut pakko riittää, koska perinteiseltä automaatiolta on puuttunut kykyä antaa älykkäitä suosituksia.

Tekoällyn työntövoimia

Nyt tilanne on muuttunut. On syntynyt sekä uusia mahdollisuuksia että uusia tarpeita.

Tekoälymallien raaka-ainetta eli mittausdataa syntyy raskaassa kemiassa ja isoissa tehtaissa paljon.

Esimerkiksi öljynjalostamossa on 20–30 yksikköä. Jokaisessa yksikössä on tuhansia antureita, jotka mittaavat jatkuvasti lämpötilaa, virtausta, painetta, pinnankorkeutta ja muita suureita. Dataa myös säilytetään jo paineastiamääräysten ja muiden lakien perusteella pitkään, tavallisesti noin viisi vuotta.

Muita työntövoimia ovat laskentateknologian ja algoritmien tehostuminen ja paraneminen. Teknologia muuttuu älykkääksi, kun se saa oppi-

miskykyä. Aivoja jäljittelevien monikerroksisten neuroverkkojen oppimisteknologia, syvä koneoppiminen, on edistynyt merkittävästi.

Myös kemianteknologiassa neuroverkot mahdollistavat vaikeiden vuorovaikutusten mallintamisen. Tyypillisen reaktorin sisällä lämpötilat, katalyytin tila, likaantumisen aste ja monet muut suureet vaihtelevat.

Inhimillisen operaattorin on mahdotonta päätellä tarkasti, mitä monen muuttujan yhteisvaikutuksesta seuraa. Koneoppimisen avulla hän pystyy näkemään reaktorin sisälle virtuaalisesti.

Paikkoihin, joissa ei pystytä tekemään suoria mittauksia, voi esimerkiksi syntyä lämpökeskittymiä, kuumia pisteitä. Ne pitää ennakoida jo turvallisuussyistä. Tekoäly pystyy varoittamaan kuumista pisteistä. Se kykenee myös kertomaan katalyytin kunnosta, haitallisista sivureaktioista ja monista muista seikoista, jotka aikaisemmin ovat jääneet piiloon.

Parin viime vuoden aikana kehitetyt tekoälymallit pystyvät käsittelemään suuria muuttujamääriä ja hallitsemaan kokonaisia prosessiyksiköitä.

Myös imua lisää

Myös vetovoimat eli kysyntä ja vaatimukset ovat kasvaneet ja muuttuneet.

Vielä parikymmentä vuotta sitten tyypillinen kemiantehdas tuotti pitkiä aikoja samaa tuotetta samoista raaka-aineista. Nyt asiakkaat kysyvät erilaisia tuotteita lyhyehköillä aikaväleillä.

Raaka-aineetkin ovat entistä kirjavampia. Jopa öljyteollisuuden fossiiliset raaka-aineet vaihtelevat paljon. Uusiutuvat raaka-aineet tuovat mukaan lisää muuttujia.

Vanhat peukalosäännöt auttavat prosessin ajamisessa entistä vähemmän.



Kemian tehtaan operaattorin työpiste on vaativa paikka, joka vaatii erikoisosaamista. Tekoäly avaa virtuaalisen näkymän reaktorien sisälle, mikä helpottaa prosessin hallitsemista.

Peukalosääntöjen rakentaminenkin on vaikeutunut. Työsuhteet ovat lyhentyneet, jolloin kokemusperäistä tietoa kertyy yhdelle ihmiselle vähemmän kuin ennen. Hiljaista tietoa siirtyi eteenpäin entistä niukemmin.

Raakaan maailmaan

Jo 1980-luvulta alkaen on ollut käytössä optimointimenetelmiä, jotka ovat parantuneet koko ajan. On syntynyt kehittyneitä säästöä, reaaliaikaista prosessin optimointia ja adaptiivista teknologiaa. Mukaan on tullut tekoälyn aineksia.

Neste Engineering Solutions tuottaa optimointiratkaisuja teollisuuden käyttöön. Yhtiöllä on asiakkaita tätä nykyä viidessätoista maassa.

Kesäkuussa 2018 yritys teki yhteistyösopimuksen tekoölyalan tuotekehittäjän Curious AI:n kanssa. Tekoölyn ja koneoppimisen avulla luodaan uusia ratkaisuja prosessiteollisuuden tarpeisiin.

”Kehittyneet optimointituotteemme käyttävät jo nyt tekoölyä, mutta haluamme viedä tuotteemme vielä seuraavalle tasolle”, Samuli Bergman sanoo.

Tärkeä kilpailutekijä on koneoppimismallin oppimiskyky. Malli koulutetaan opetusdatalla. Sitten seuraa ratkaiseva testi. Katsotaan, toimiiko malli, kun siihen opetusdatan sijaan syötetään uutta, ”vierasta” dataa.

”Ensimmäiset kokemukset Curious AI:n teknologiasta ovat olleet rohkaisevia.”

Vaikka uusia sovelluksia voi verrat kuvien ja kasvojen tunnistamiseen, teollisuudessa tulee vastaan myös merkittäviä eroja.

Kemiantehtaan käyntijaksot ovat pitkiä, jopa 5–6 vuotta. Laitteisto kuluu mekaanisesti ja likaantuu. Vuorokausivaihtelun voi vaikuttaa toimintaan. Ulkona sijaitsevan reaktorin tai putken lämpötila voi olla päivällä korkea ja yöllä matala.

Joku mittari saattaa lakata toimimasta, eikä sitä voida vaihtaa pariin vuoteen. Mallin on siten toimittava epätodellisella datalla. Joskus tulee kokonaan väärää dataa. Mallin on pystyttävä vastaamaan yllättäviinkin tilanteisiin.

”Teoriasta siirrytään raakaan käytän-

töön ja tuotannon maailmaan”, Bergman kuvailee muutosta.

Kymmeneksen tuloslisäys

Optimoinnissa lähtötasona on tavallisesti kuvitelma siitä, miten prosessi voi parhaimmillaan toimia.

Sitten on havaittu, että oletettua maksimitulosta voidaan vielä parantaa kymmenen prosenttia. Tuotantoa voidaan lisätä tai energian kulutusta vähentää. Jos lisätuotanto pystytään myymään, tulos sataa suoraan viimeiselle riville.

Koneoppimisella ja muilla tekoölyratkaisuilla tehdään optimaalisesta vielä optimaalisempaa.

”Tekoölyllä saadaan saman suuruusluokan eli keskimäärin kymmenen prosentin arvonlisäys”, Bergman arvioi.

Tekoölyn käyttöönotto vie luonnollisesti aikaa. Nyt ollaan kokeiluvaiheessa. Bergman

kertoo yhtiön tehneen erilaisia pilotteja muutaman vuoden verran.

Luotettavuus on varmistettava. Hyöty prosessin tehostumisesta menetetään, jos tekoölymallin häiriö pysäyttää laitoksen, vaikka vain muutamaksi tunniksi. Jo turvastyistä aloitetaan pienistä kokeiluista.

”Tarvitaan esimerkkejä. Niitä uskotaan.”

Kovaa kilpailua

Neste Engineering Solutions ja Curious AI ovat molemmat kotimaisia yrityksiä. Suomessa on kyetty luomaan kilpailukykyistä tekoölyteknologiaa.

Kilpailukyvyyn säilyttäminen ja vahvistaminen vaatii työtä. Alan toimijoita, suuria ja pieniä, riittää ympäri maailman.

Espanjalainen öljy-yhtiö Repsol ilmoitti viime vuonna käynnistävänsä Google Cloudin kanssa tekoölyhankkeen Tarragonan jalostamossa Katalonian rannikolla. Yhtiö kertoo, että laitoksessa pystytään digitaalisesti hallitsemaan kolmeakymmentä muuttujaa. Koneoppimisen avulla muuttujien määrä nostetaan neljänsataan.

Tekoölyn avulla espanjalaisyrittäjä arvioi parantavansa jalostusmarginaalia 30 senttiä tynnyriä kohti, mikä Tarragonassa merkitsee 20 miljoonan

dollarin tulonlisäystä vuositasolla.

Alan pioneeri, yhdysvaltalainen SAS aloitti yli 40 vuotta sitten suurdatan analyysipalvelujen kehittämisen. Nyt yhtiö etenee tekoölyssä leveällä rintamalla.

Maaliskuussa 2018 SAS solmi belgialaisen erikoiskemikaalien valmistajan Solvayn kanssa sopimuksen digitaalisen transformaation tehostamisesta edistyneellä data-analytiikalla. Tavoitteena on parantaa tuotannon optimointia merkittävästi.

Sopimuksen yksityiskohdista vaietaan, mutta arvata voi, että tekoölyä on mukana. Semminkin, kun sama Solvay on sopinut kalifornialaisen tekoöly-yrityksen Stem Inc:n kanssa tekoölyjärjestelmän asentamisesta Kanadaan, jossa järjestelmällä hallitaan energiavarastojä.

Tuotepäällikkö **Marcia Walker** SAS:n pääkonttorista Pohjois-Carolinasta valottaa kokonaiskuvaa.

”Monet ihmiset kuvittelevat hengetömiä robotteja tekemässä toistuvia tehtäviä, kun he ajattelevat tekoölyä. Tämä on vanhentunut käsitys”, Walker sanoo.

Hän muistuttaa, että tekoölyn sovellukset eivät rajoitu mekaniikkaan. Tekoöly voi edistää kemianteollisuutta vaikkapa konenäöllä ja luonnollisen kielen prosessoinnilla.

”Esimerkiksi maalinvalmistaja voi käyttää konenäköä tuottamaan hienopiirteisiä värisävyjä, jotka aikaisemmin olivat vaikeita. Kielen prosessoinnilla valmistaja voi muokata rakenteettomia tekstilähteitä, kuten laitteiden ylläpitoasiakirjoja, toimitusasiakirjoja ja asiakaspalvelukeskusten tallenteita niin, että syntyy uusia oivalluksia.”

Ennustetaan reaktioita

Tutkimuksessa tekoölyä sovelletaan esimerkiksi prosessien ja reaktioiden suunnittelussa.

Yhdysvaltalaisen Princetonin yliopiston ja kemianjätti Merckin tutkijaryhmä on professori **Abigail Doyle**n johdolla kehittänyt algoritmeja, jotka ennustavat neljän komponentin reaktioiden kulkua.

Ryhmä tutki muun muassa lääke-teollisuudessa tärkeitä ristikytkentäreaktioita, joilla hiilen ja typen yhdisteitä liitetään toisiinsa.

Tutkijat kävivät läpi erilaisia maattisia malleja. He päätyivät käyttä-

mään koneoppimisessa yleisiä päätöspuita ja niistä rakennettuja ”satunnaismetsiä”. Samalla osoitettiin, että tekoäly tuottaa myös kauniita kuvaesityksiä.

”Professori Doyle ja hänen työtoverinsa ovat soveltaneet tekoälyä terävällä tavalla ongelmaan, jota on vaikea käsitellä yksinkertaisilla lineaarisilla malleilla”, sanoo Wisconsin–Madisonin yliopiston matematiikan ja biokemian professori **Julia Mitchell**, joka ei osallistunut tutkimukseen.

”Kemiallisessa avaruudessa pienillä muutoksilla voi olla dramaattisia seurauksia. Sellaiset ilmiöt saadaan paremmin hallintaan satunnaismetsän mallilla.”

Lääkkeitä tekoälyllä

Toukokuussa 2018 huippuyliopisto MIT (Massachusetts Institute of Technology) muodosti uuden, koneoppimista ja tekoälyä hyödyntävän konsortion kahdeksan johtavan lääkealan yrityksen kanssa. Mukaan tulivat Amgen, BASF, Bayer, Eli Lilly, Novartis, Pfizer, Sunovion ja WuXi App Tech.

Konsortion tavoitteena on edistää uusien ohjelmien kehittämistä pienten molekyylien synteesiä varten. Yksi MIT:n tutkijoista on Suomesta lähtenyt fyysikko ja laskennallisen molekyylibiologian tutkija **Tommi Jaakkola**.

Lääkejätti GlaxoSmithKline on tehnyt tekoäly-yhteistyötä niin ikään pienten lääkemolekyylien löytämiseksi. Sen kumppanina on tekoäly-yritys Cloud Pharmaceuticals.

Cloud Pharmaceuticalsin operatiivinen johtaja **Don van Dyke** sanoo *Pharmaphorum*-lehdessä, että tekoälyprosessi lyhentää kehitysaikaa yli viidestä vuodesta muutamaan kuukauteen. Prosessin yksityiskohdat ovat kuitenkin yrityssalaisuuksia.

Kultajyvät hypekanoista

Väitteet kehitysajan lyhentämisestä alle kymmenesosaan ja vastaavat julistukset herättävät luonnollista epäluuloa.

Yhdysvaltain kemianseuran ACS:n lehti *Chemical & Engineering News* kokosi viime elokuussa yhteen asiantuntijoiden kokemuksia ja näkemyksiä aiheesta.

Painotus- ja näkemuseroista riippumatta ”kemiallisen tekoälyn” tutkijat ovat yhtä mieltä parista perusasiasta. Heidän mukaansa koneoppimisen



Neste Engineering Solutions

merkitystä liioitellaan. Siitä huolimatta kyseessä on aidosti arvokas työkalu.

Paljon riippuu lähtötietojen tasosta. Tarvitaan runsaasti hyvin järjestettyä dataa, joka mielellään sisältää myös negatiiviset tulokset. Toistaiseksi tiedelehdissä on esitelty tietoja onnistuneista reaktioista, niitäkin hajanaisesti ja kirjavasti. Harhalaukausten kuvaukset on tavallisesti jätetty pois.

Glasgow'n yliopiston kemisti **Leroy Cronin** sanoo, että pitää oppia rakentamaan tietokantoja ja kuvaamaan data algoritmeille käyttökelpoisessa muodossa.

Tekoälykeskustelun sekavuus johtuu osittain käsitteiden hämäryydestä ja vakiintumattomuudesta. Keskustelijat tarkoittavat samalla sanalla eri asioita.

Kaupallisia järjestelmiä, jotka nyt tulevat voimalla teollisuuteen ja tutkimukseen, voidaan kutsua kapeatekoälyksi. Järjestelmät ovat oppimiskykyisiä ja pystyvät itsenäiseen toimintaan kapealla alueella.

Yleistekoäly, joka kykenee ihmisen tavoin käsittelemään monenlaisia teh-

”Prosessien optimointituotteemme käyttävät tekoälyä jo nyt, mutta haluamme nostaa ne vielä seuraavalle tasolle”, sanoo kehityspäällikkö Samuli Bergman Neste Engineering Solutionista.

täviä, on vielä kaukana. Vielä kauempana, ehkä mahdottoman kaukana, on ihmiskunnan kyvyt ylittävä superäly.

Puheet yleistekoälyn tulemisesta jo lähivuosina ovat useimpien asiantuntijoiden mukaan yliarvioita ja turhaa hypetystä. Kapeatekoäly on sen sijaan jo arkinen välttämättömyys. Epäorganen kemisti **Javier Garcia Martinez** espanjalaisesta Alicanten yliopistosta sanookin, että alan koulutuksen täytyy muuttua.

Nykyään jokainen tohtoriopiskelija tuntee NMR:n ja röntgensädediffraktion. Koneoppiminen ja tekoäly tulevat pian niiden rinnalle. Koulutuksensa jo päättäneitä kemistejä Garcia Martinez rohkaisee itseopiskeluun ilmaisten verkkotyökalujen avulla. □

Kirjoittaja on vapaa tiedetoimittaja.
kalevi.rantanen@kolumbus.fi