



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
Szerves Kémiai és Technológia Tanszék

Mesterséges intelligencia alapú objektumfelismerés gyógyszertechnológiai folyamatok valós idejű minőségellenőrzésében

Galata Dorián László, Ficzer Máté, Péterfi Orsolya, Nagy Zsombor



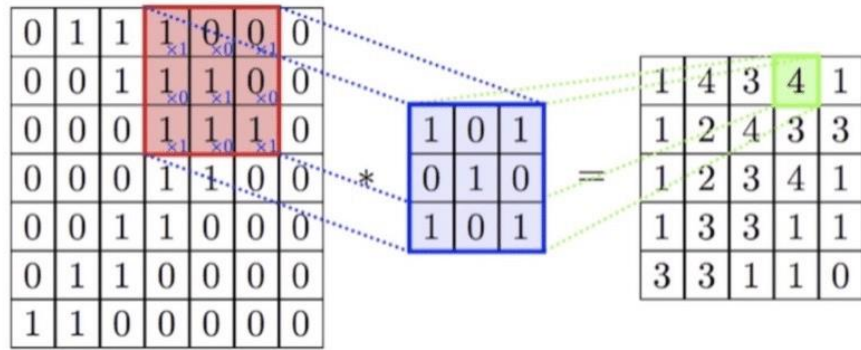
MESTERSÉGES INTELLIGENCIA
Nemzeti Laboratórium



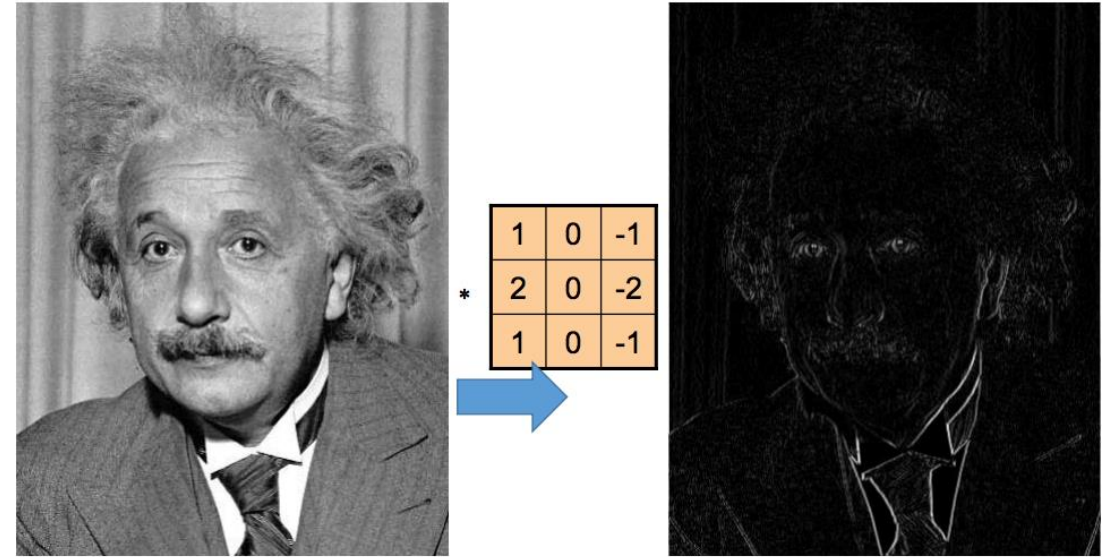
Fire pharma

Konvolúciós neurális hálózatok

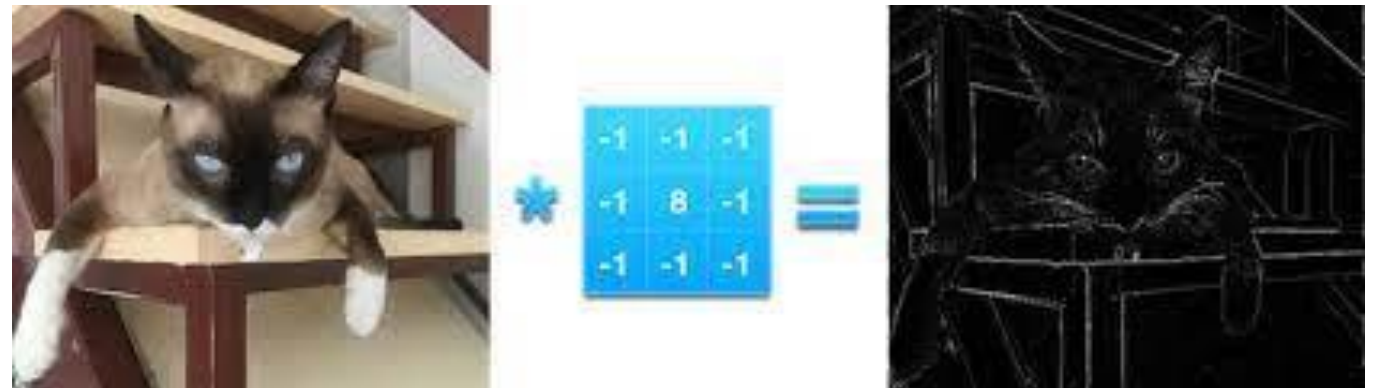
Kép mint bemeneti információ hatékony feldolgozása



Függőleges élek felismerése

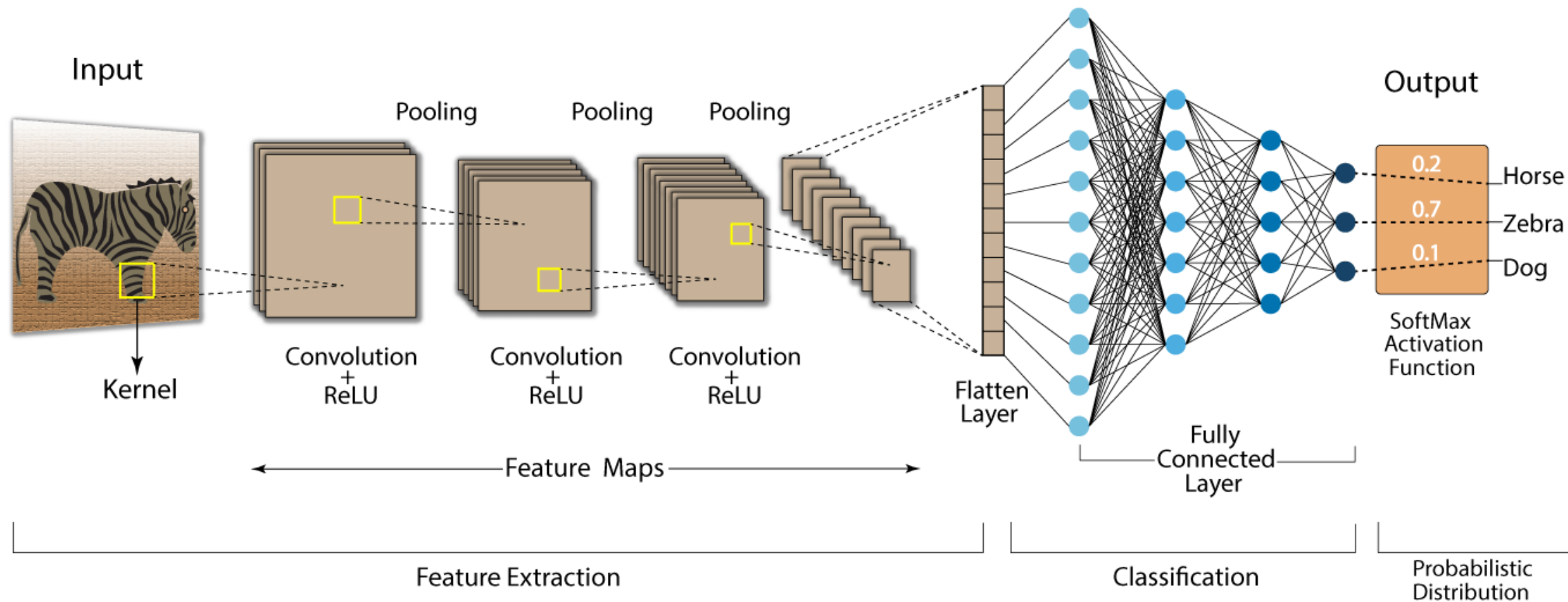


Vízszintes élek felismerése



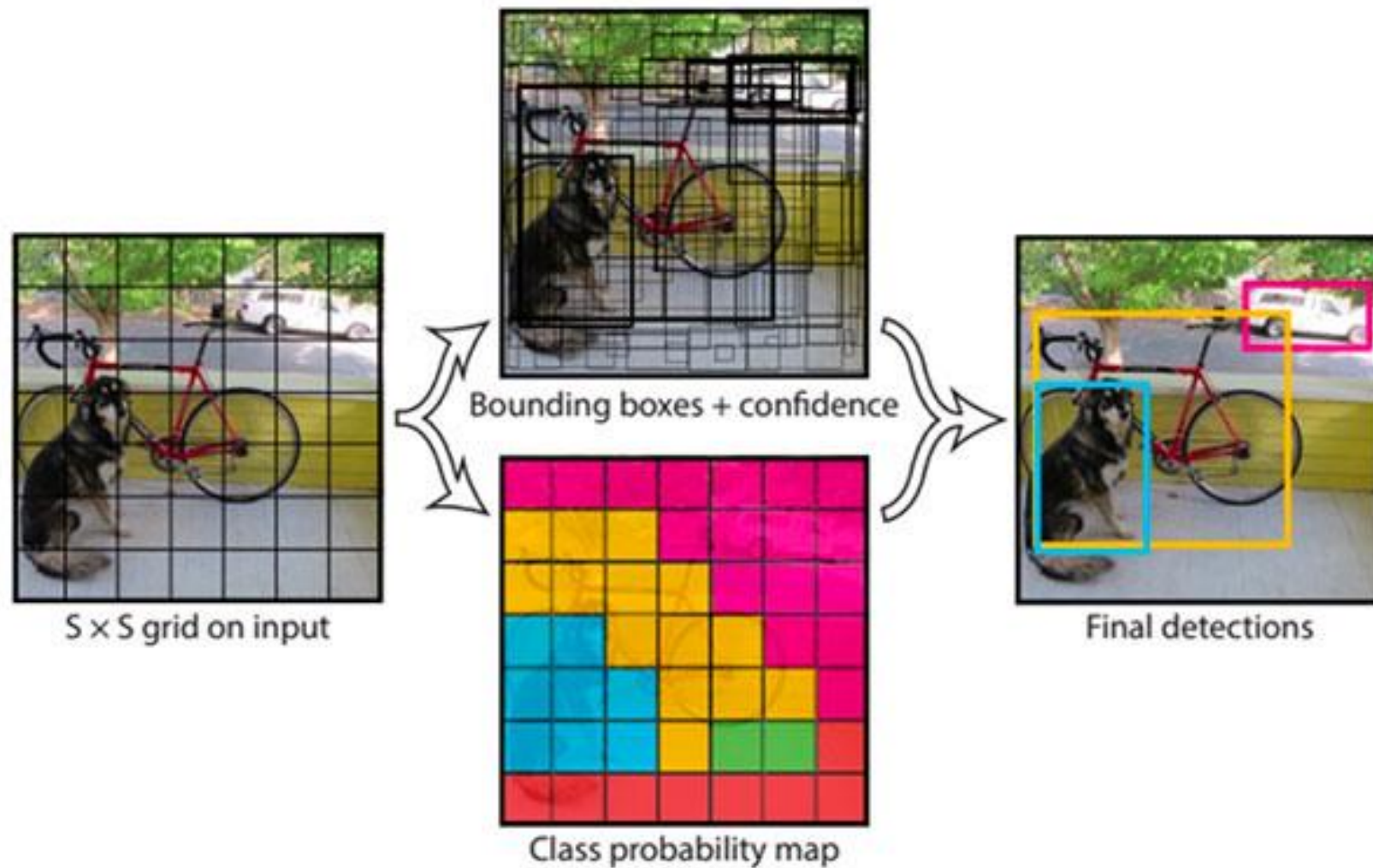
Konvolúciós neurális hálózatok

Egész kép osztályozása



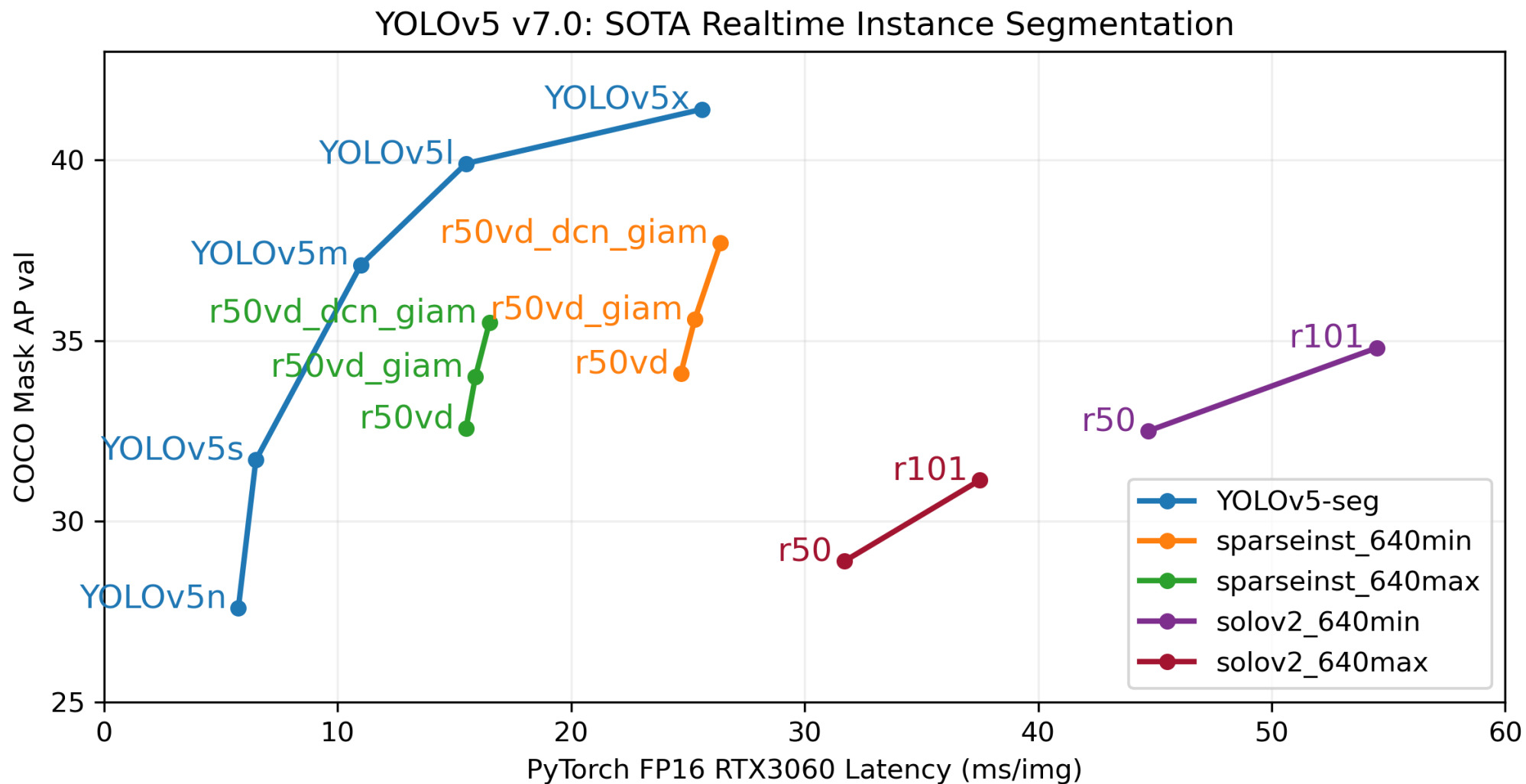
Konvolúciós neurális hálózatok

Egyedi objektumok bejelölése a képen: YOLO (You Only Look Once)



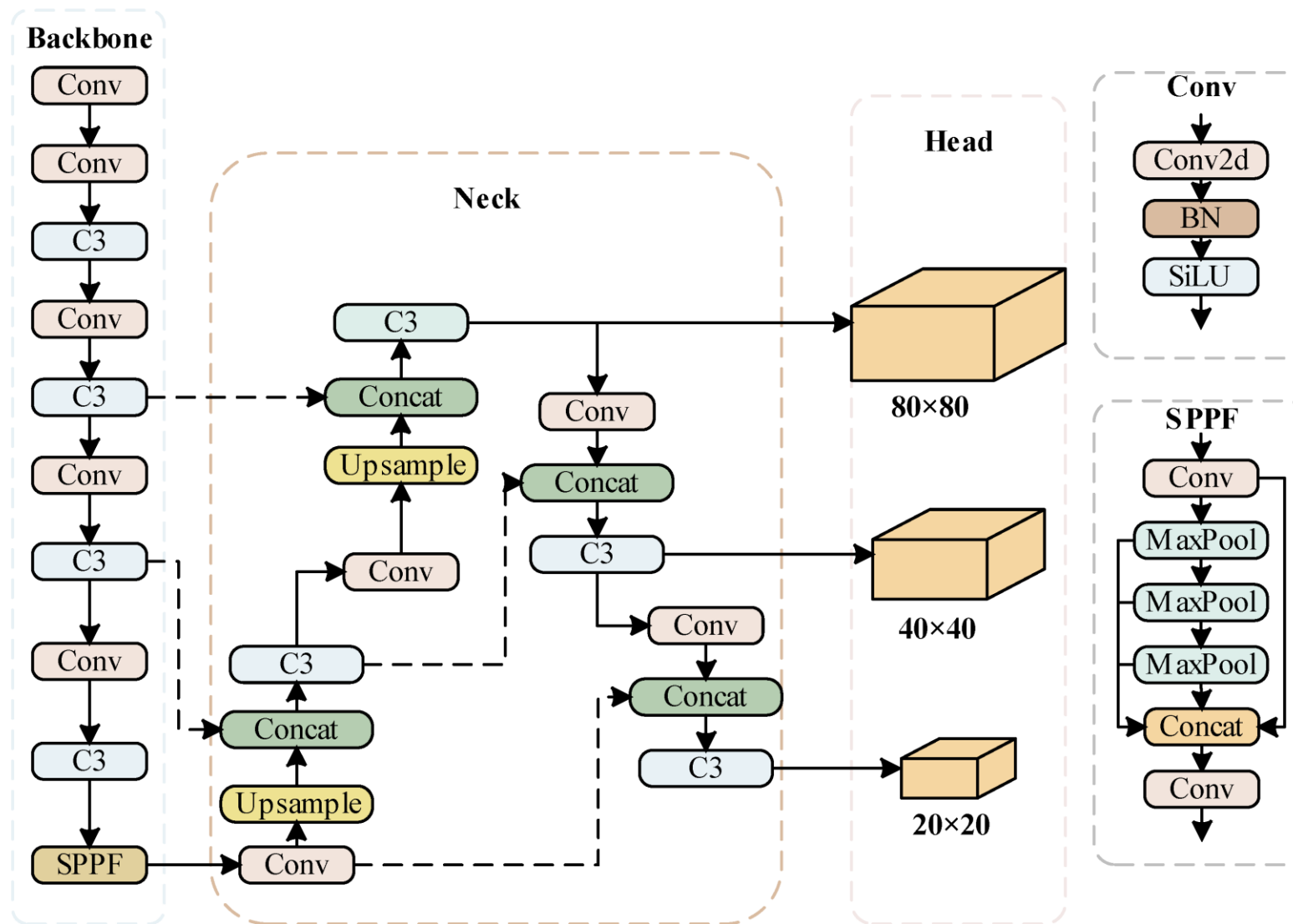
Konvolúciós neurális hálózatok

YOLO teljesítmény más algoritmusokhoz viszonyítva



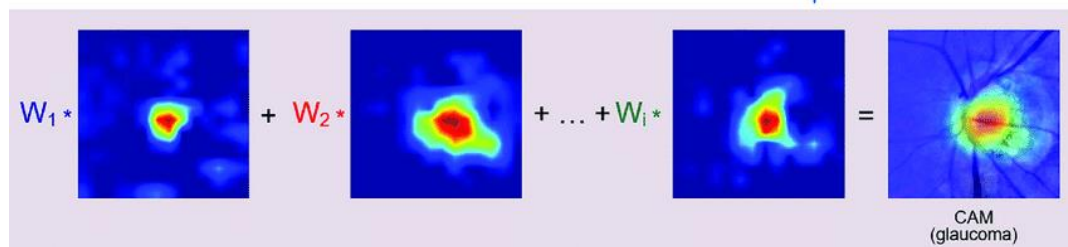
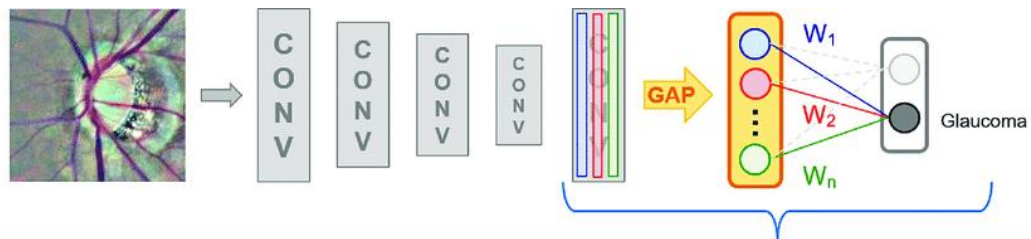
Konvolúciós neurális hálózatok

YOLO algoritmus felépítése: kb. 20 millió paraméter



Konvolúciós neurális hálózatok

Modell értelmezése: osztály aktiváció mérés hőterképpel



Input

Label: tiger cat

Label: bull mastiff



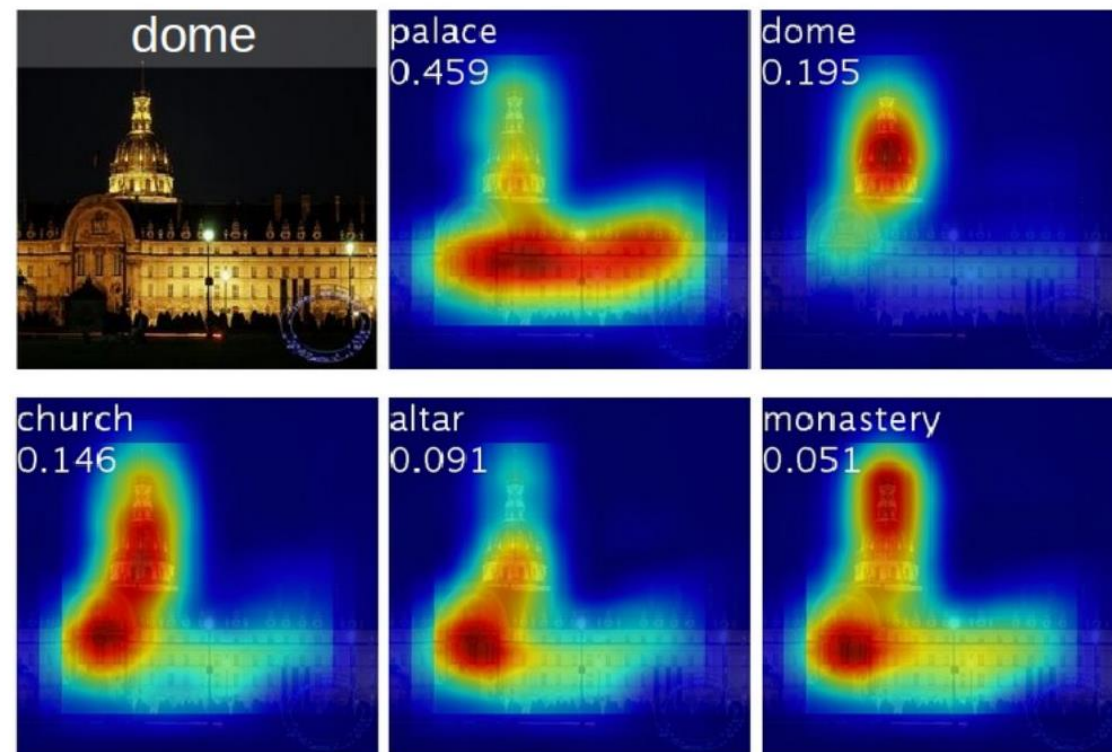
(a)



(b)

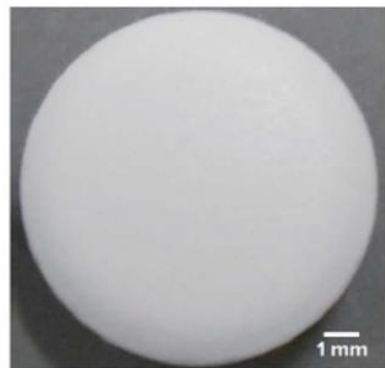


(c)

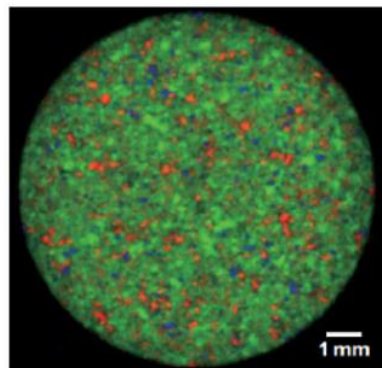


In vitro kioldódási profil becslése kémiai térkép alapján

Kémiai térképezés



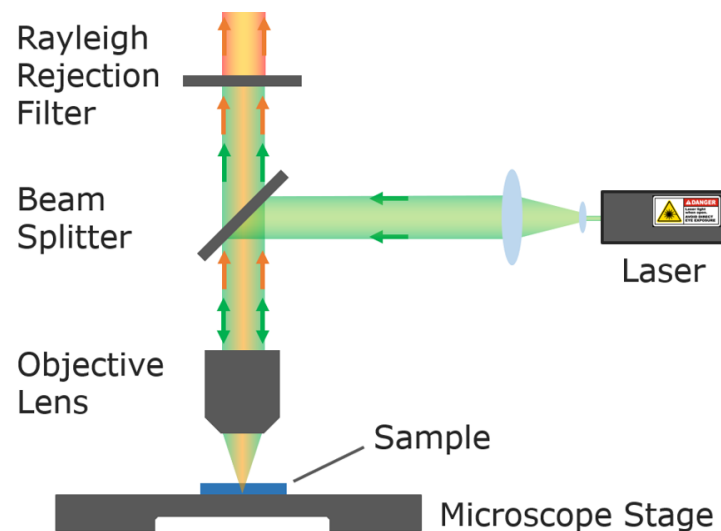
Pharmaceutical tablet



Red: Acetaminophen

Raman spektroszkópia

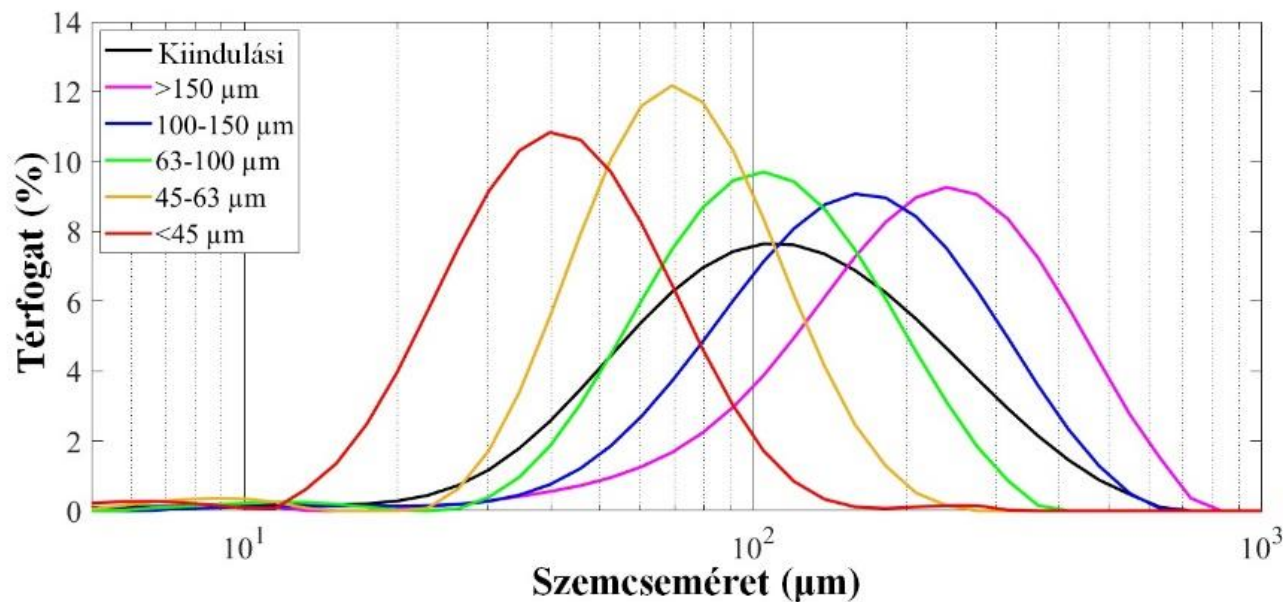
- Lézerrel sugározzuk be a mintát
- Rugalmatlan ütközés miatt a fotonok kis hányadának (1 000 000 000-ból 1) megváltozik az energiája
- Energiaváltozás a kötése gerjesztése miatt (hasonló középső infravöröshöz)
- Megváltozott energiájú fotonok elkülönítése és számlálása



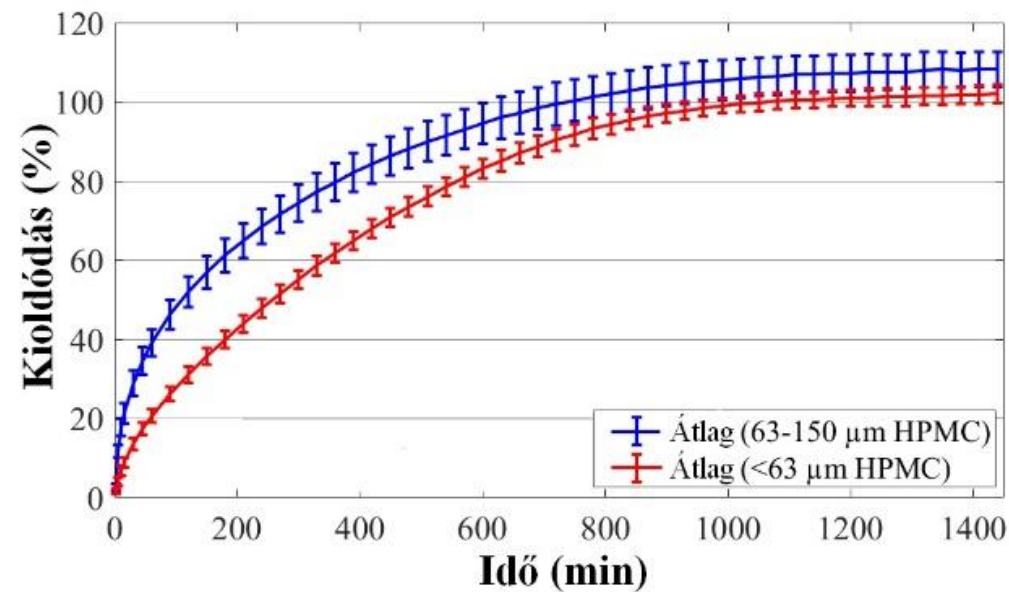
In vitro kioldódási profil becslése kémiai térkép alapján

Gélképző (HPMC) szemcseméretének hatása a kioldódásra

HPMC 5 frakcióra szitálva



HPMC szemcseméret hatása

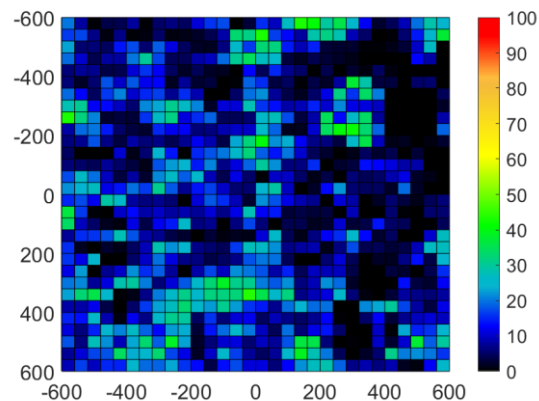


In vitro kioldódási profil becslése kémiai térkép alapján

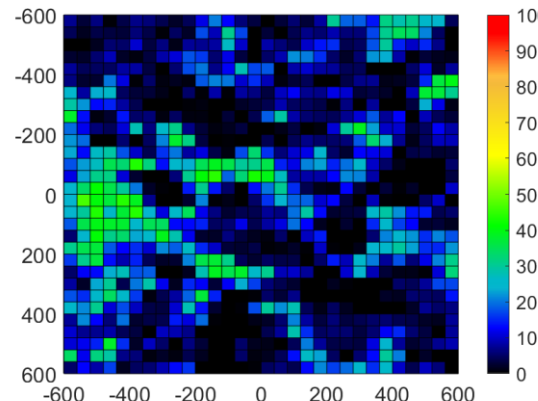
A tabletta felszínéről felvett kémiai eloszlástérkép és a kioldódás közötti kapcsolat keresése

- Raman térképek

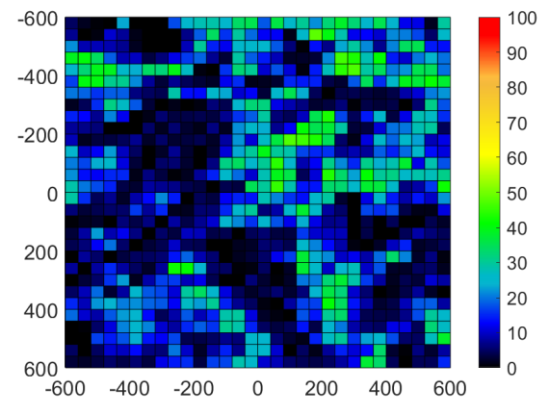
< 45 μm , 20% HPMC



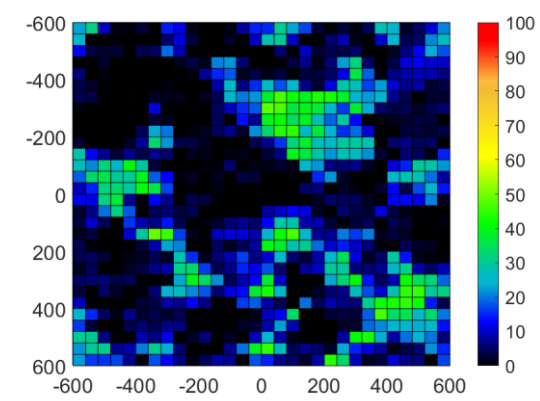
45-63 μm , 20% HPMC



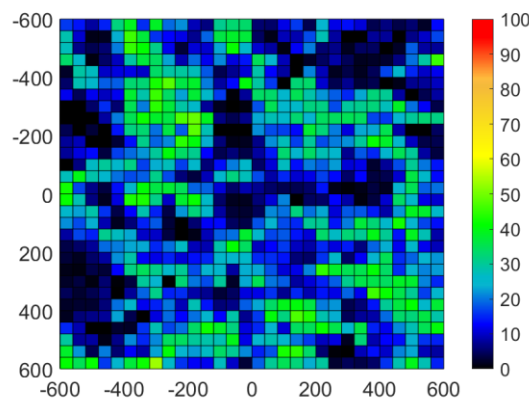
63-100 μm , 20% HPMC



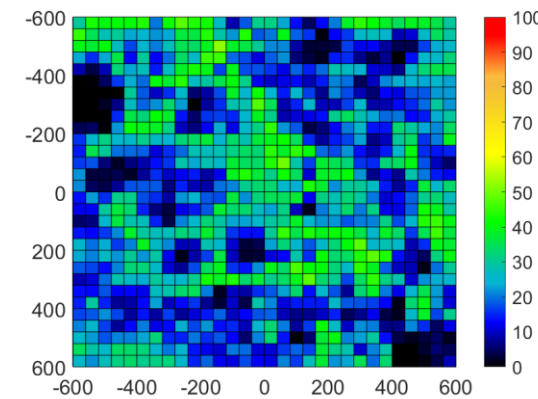
100-150 μm , 20% HPMC



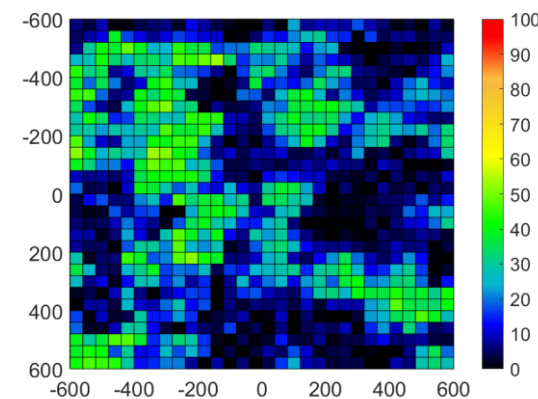
< 45 μm , 30% HPMC



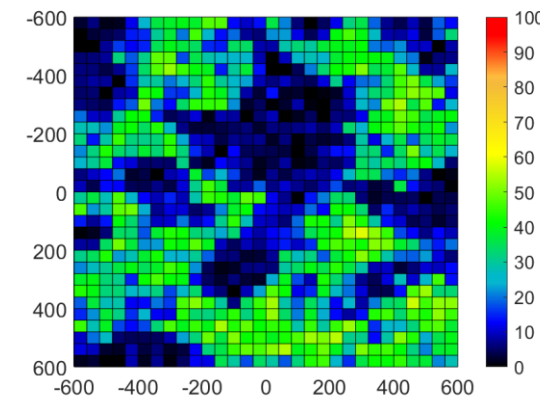
45-63 μm , 30% HPMC



63-100 μm , 30% HPMC



100-150 μm , 30% HPMC

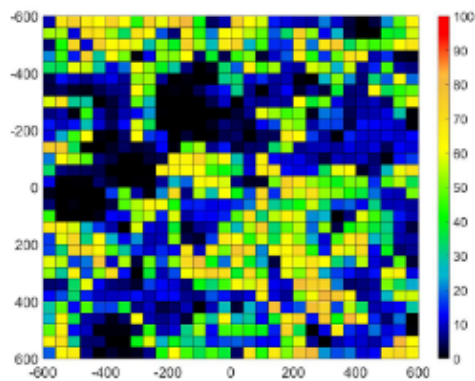


In vitro kioldódási profil becslése kémiai térkép alapján

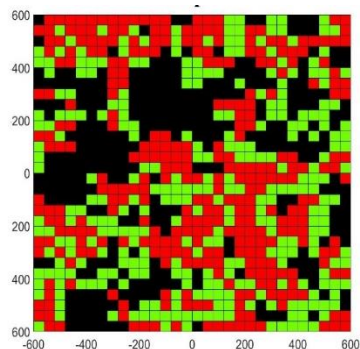
A tabletta felszínéről felvett kémiai eloszlástérkép és a kioldódás közötti kapcsolat keresése

- Térkép előzetes feldolgozása

Raman térkép HPMC eloszlásról



Diszkretizálás



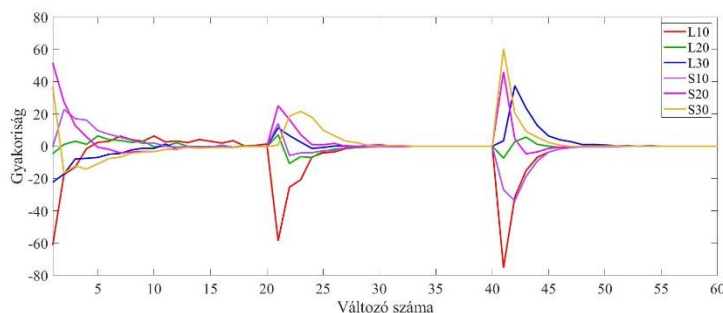
HPMC tartalom



HPMC szemcseméret



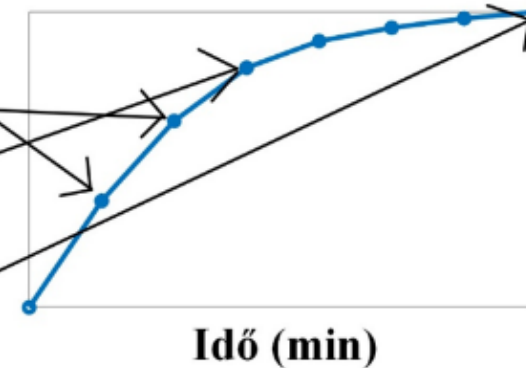
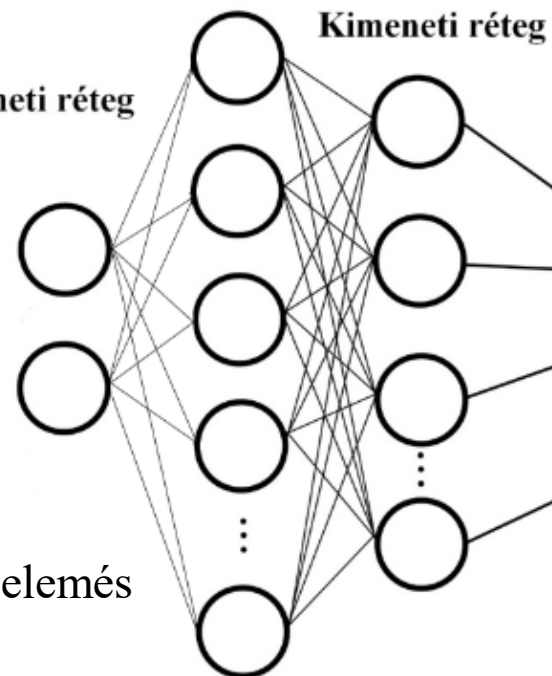
Főkomponens-elemés



Rejtett réteg

Kimeneti réteg

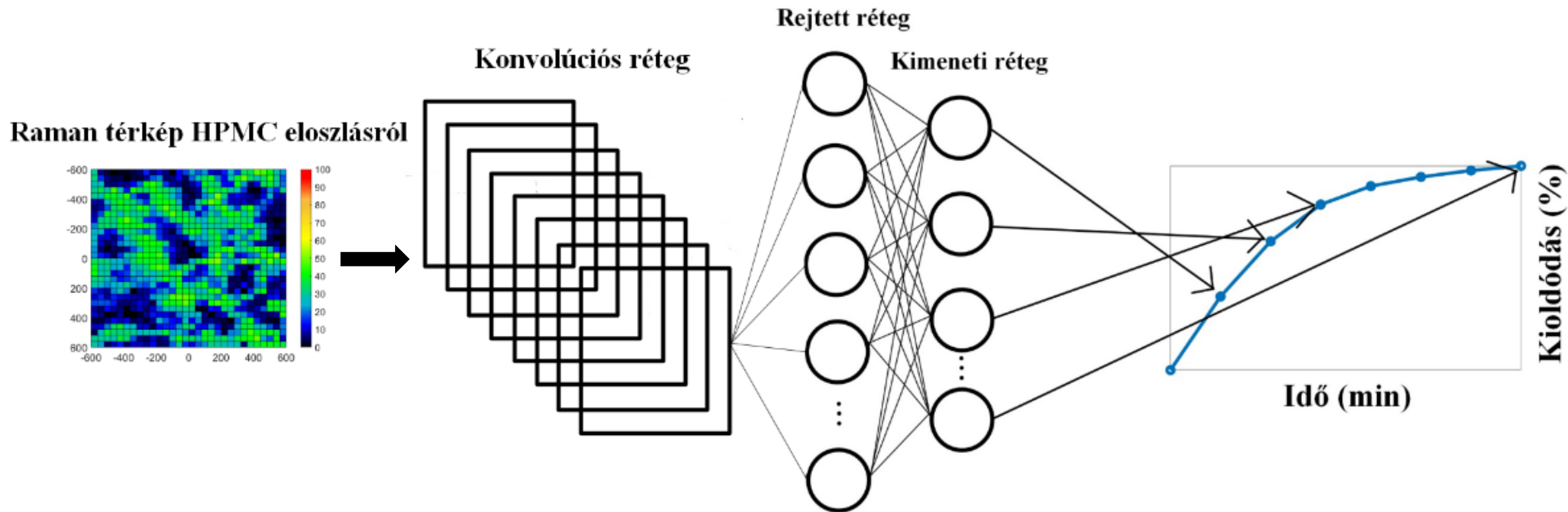
Bemeneti réteg



In vitro kioldódási profil becslése kémiai térkép alapján

A tabletta felszínéről felvett kémiai eloszlástérkép és a kioldódás közötti kapcsolat keresése

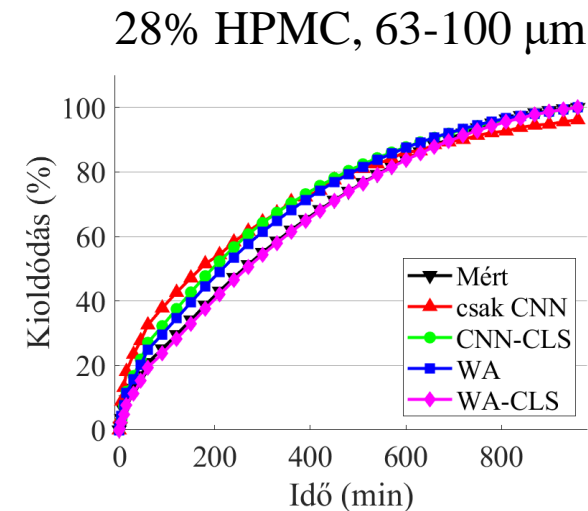
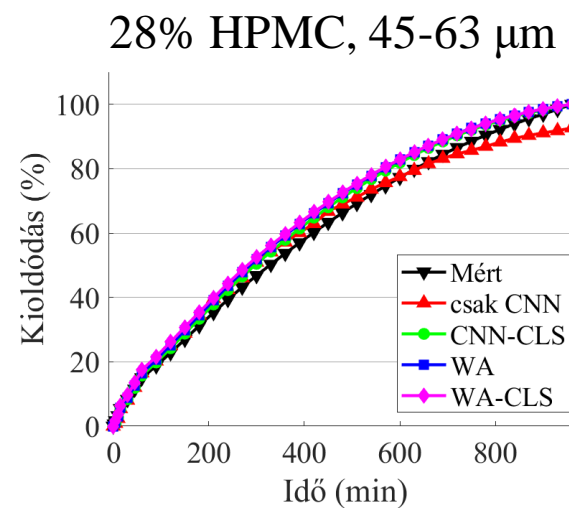
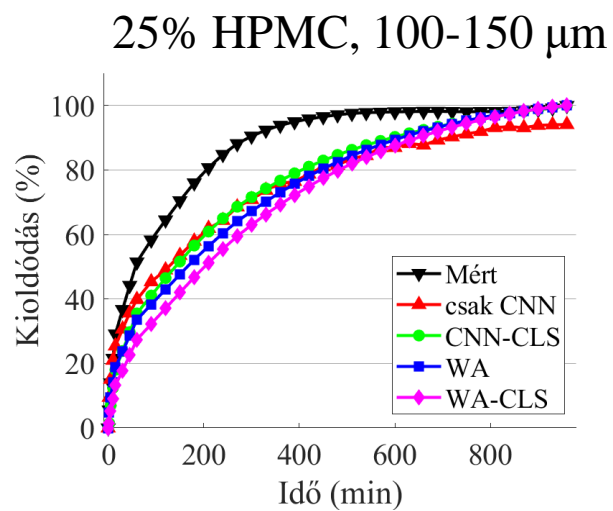
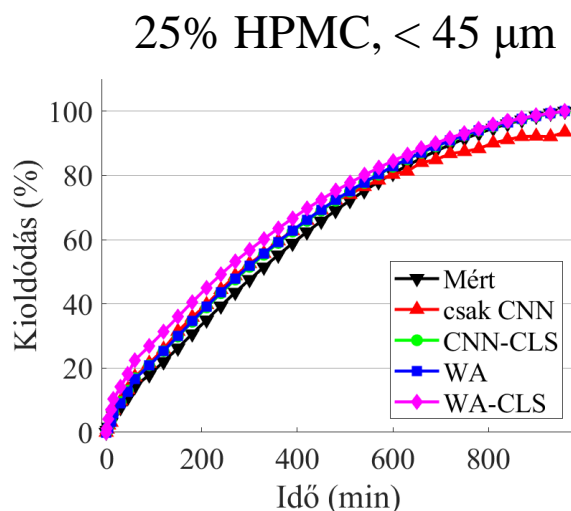
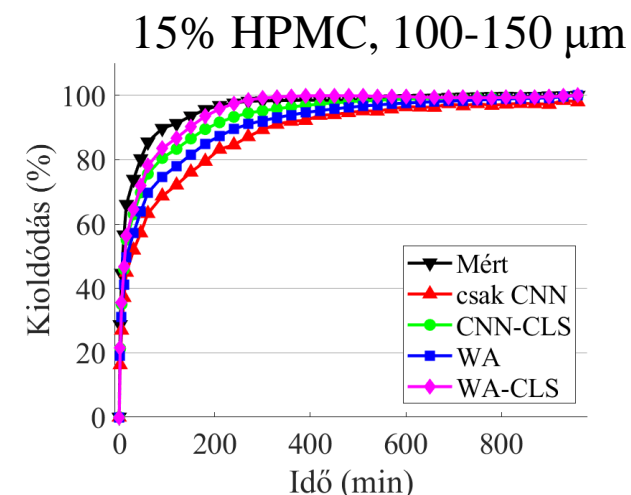
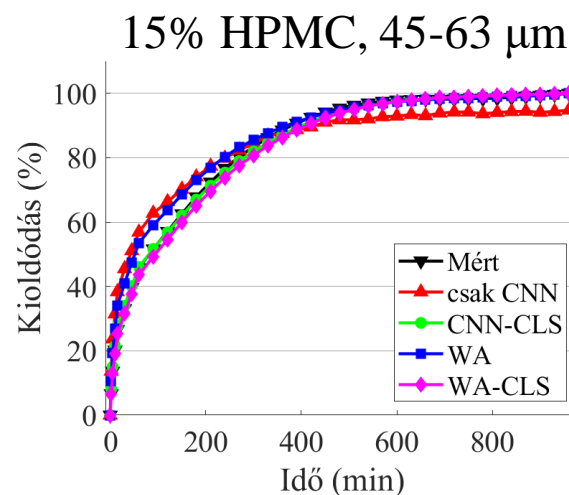
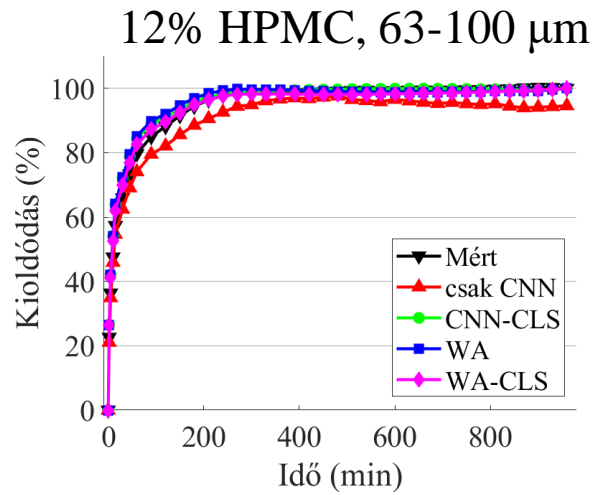
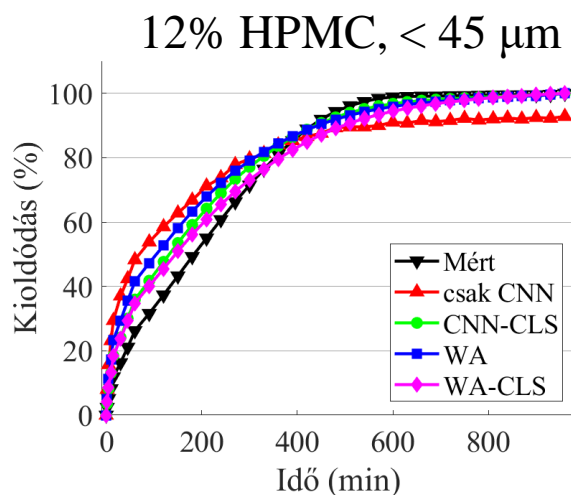
- Térkép közvetlen betáplálása CNN-be



In vitro kioldódási profil becslése kémiai térkép alapján

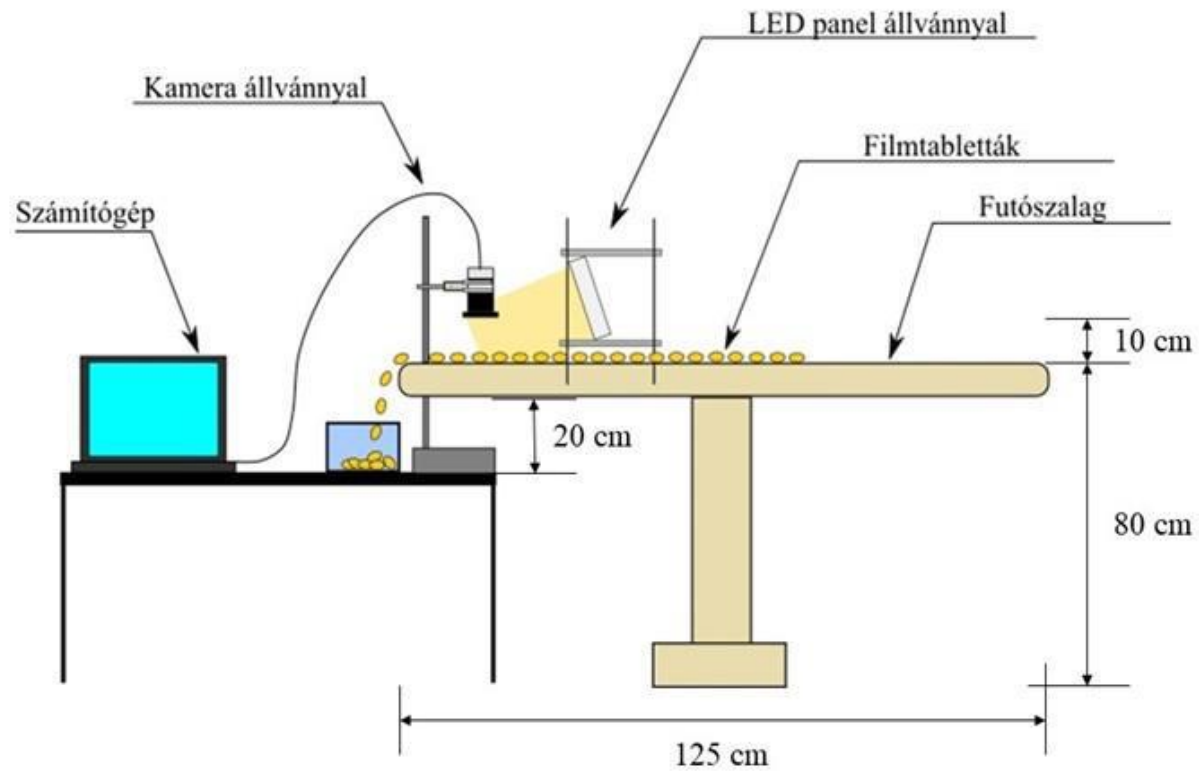
A tabletta felszínéről felvett kémiai eloszlástérkép és a kioldódás közötti kapcsolat keresése

- Becsült kioldódási profilok a kémiai térkép alapján



Sérült tabletták automata azonosítása

Nálunk fejlesztett elrendezés



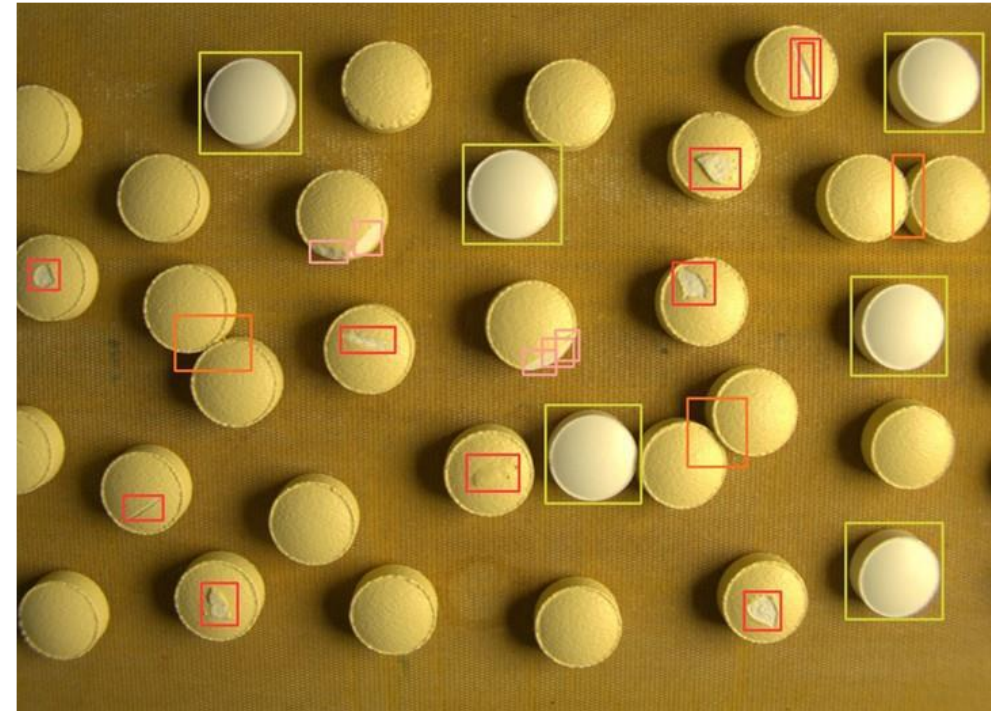
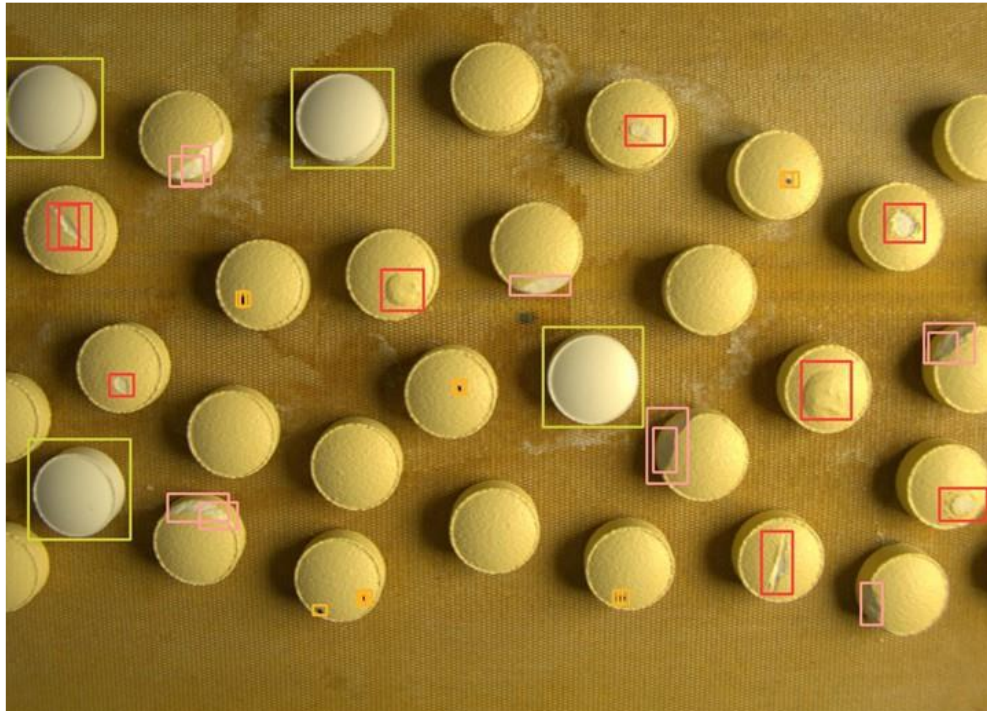
Iparban használt berendezés



Sérült tabletták automata azonosítása

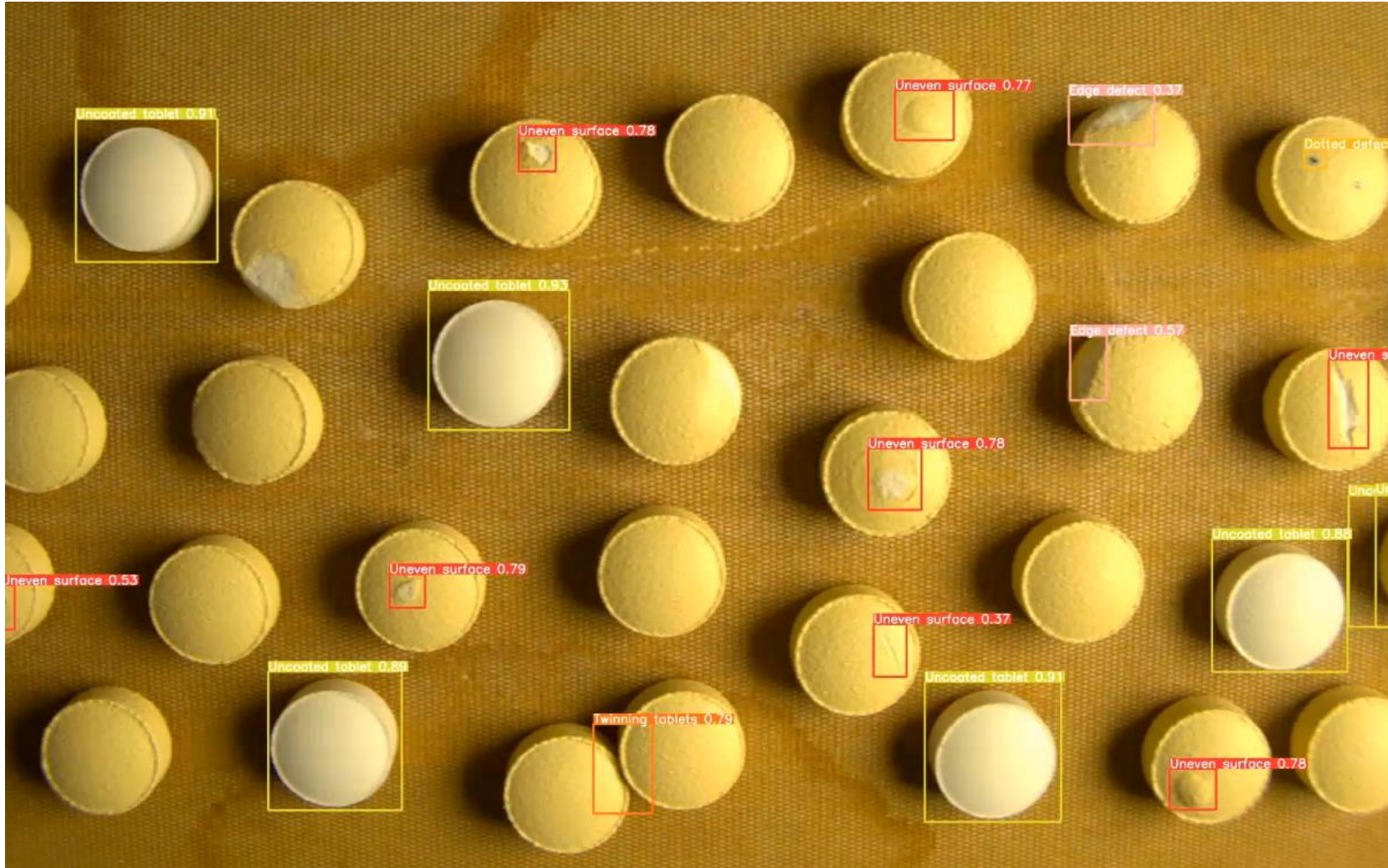
Színes filmtabletta hibák bejelölése YOLO algoritmussal

- 6 osztály



Sérült tabletták automata azonosítása

Videó futószalagon érkező tablettákról



Sérült tabletták automata azonosítása

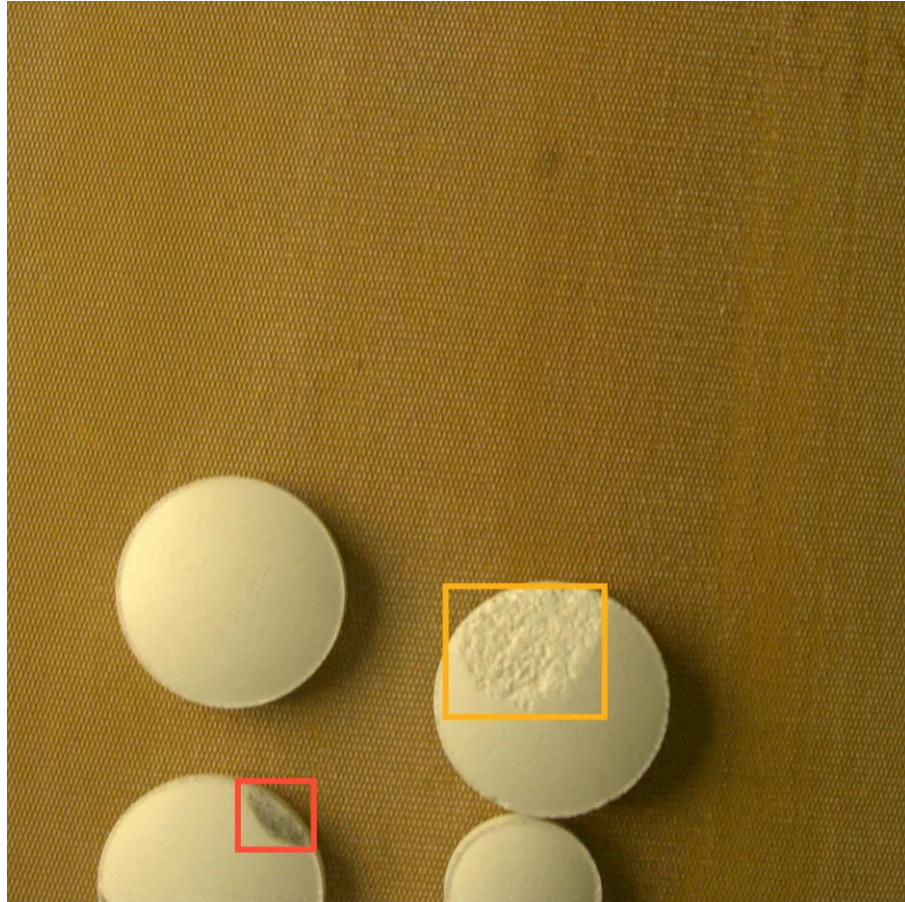
Tévesztési mátrix

98,2% pontosság

Valós osztály	Bevonatlan	40					
	Egyenetlen felület		87				
	Hibás szél			27	4		
	Hibátlan				75	1	
	Ikresedés					21	
	Pöttyözött						29
		Bevonatlan	Egyenetlen felület	Hibás szél	Hibátlan	Ikresedés	Pöttyözött
		Becsült osztály					

Sérült tabletták automata azonosítása

Fehér tabletta magok



Sérült tabletták automata azonosítása

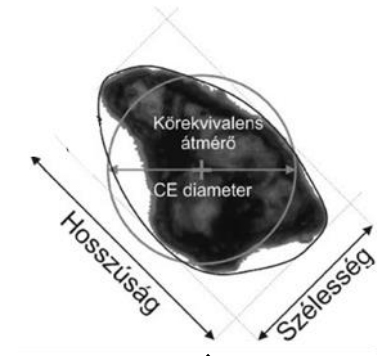
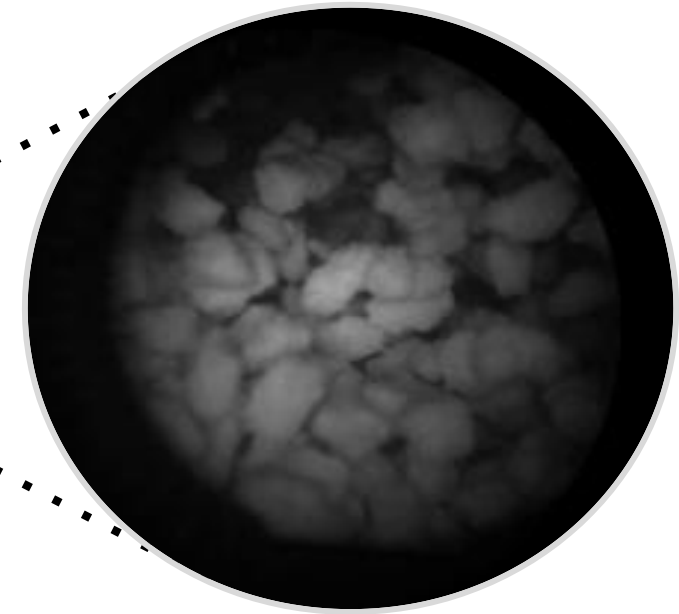
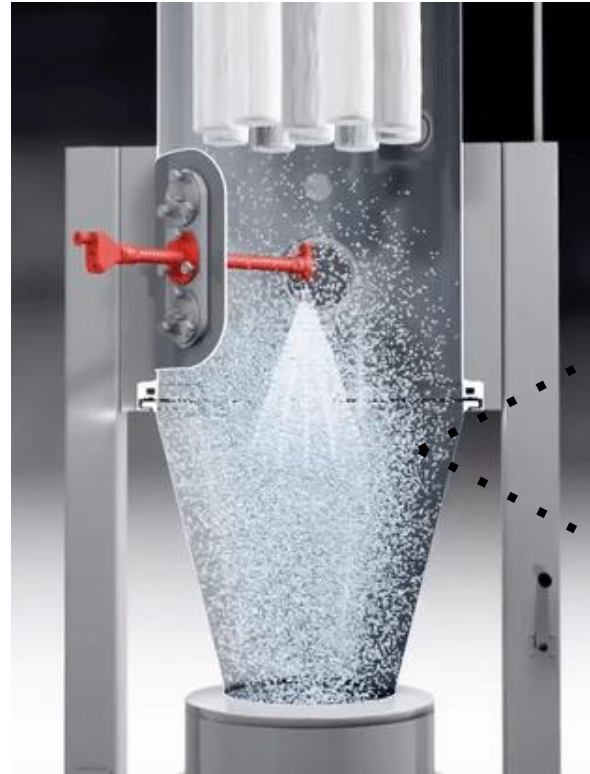
Tévesztési mátrix

99,2% pontosság

	Felületi hiba	Folt	Hibátlan	Kopott szélű	Pötty	Vékony karc	
Valós osztály	Felületi hiba	31					
	Folt		35	2			
	Hibátlan			84			
	Kopott szélű				34		
	Pötty					30	
	Vékony karc						29
	Felületi hiba	Folt	Hibátlan	Kopott szélű	Pötty	Vékony karc	
	Becsült osztály						

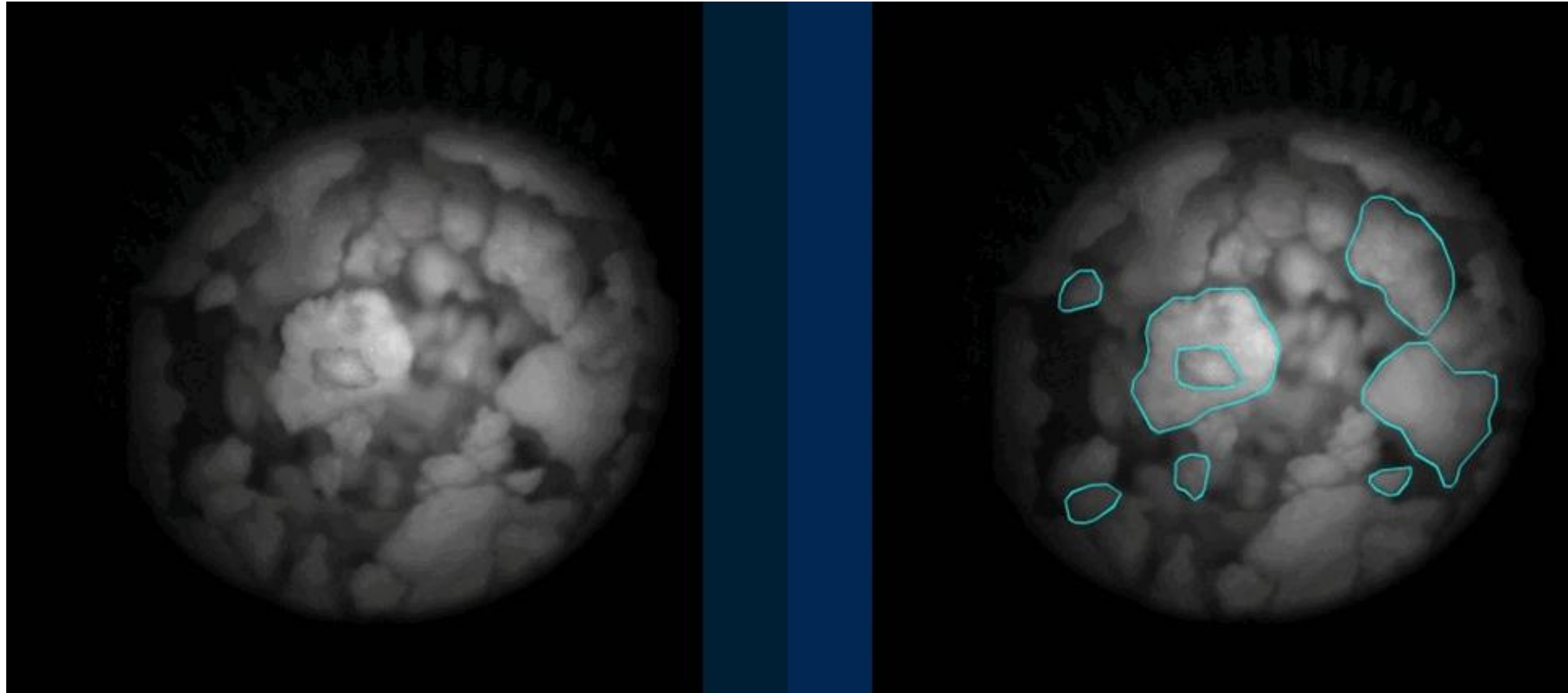
Nedves granulálás valós idejű követése

Nedves granulálás: szemcseméret javítása gyógyszeripari porkeverékeknél



Nedves granulálás valós idejű követése

Nedves granulálás: szemcseméret javítása gyógyszeripari porkeverékeknél

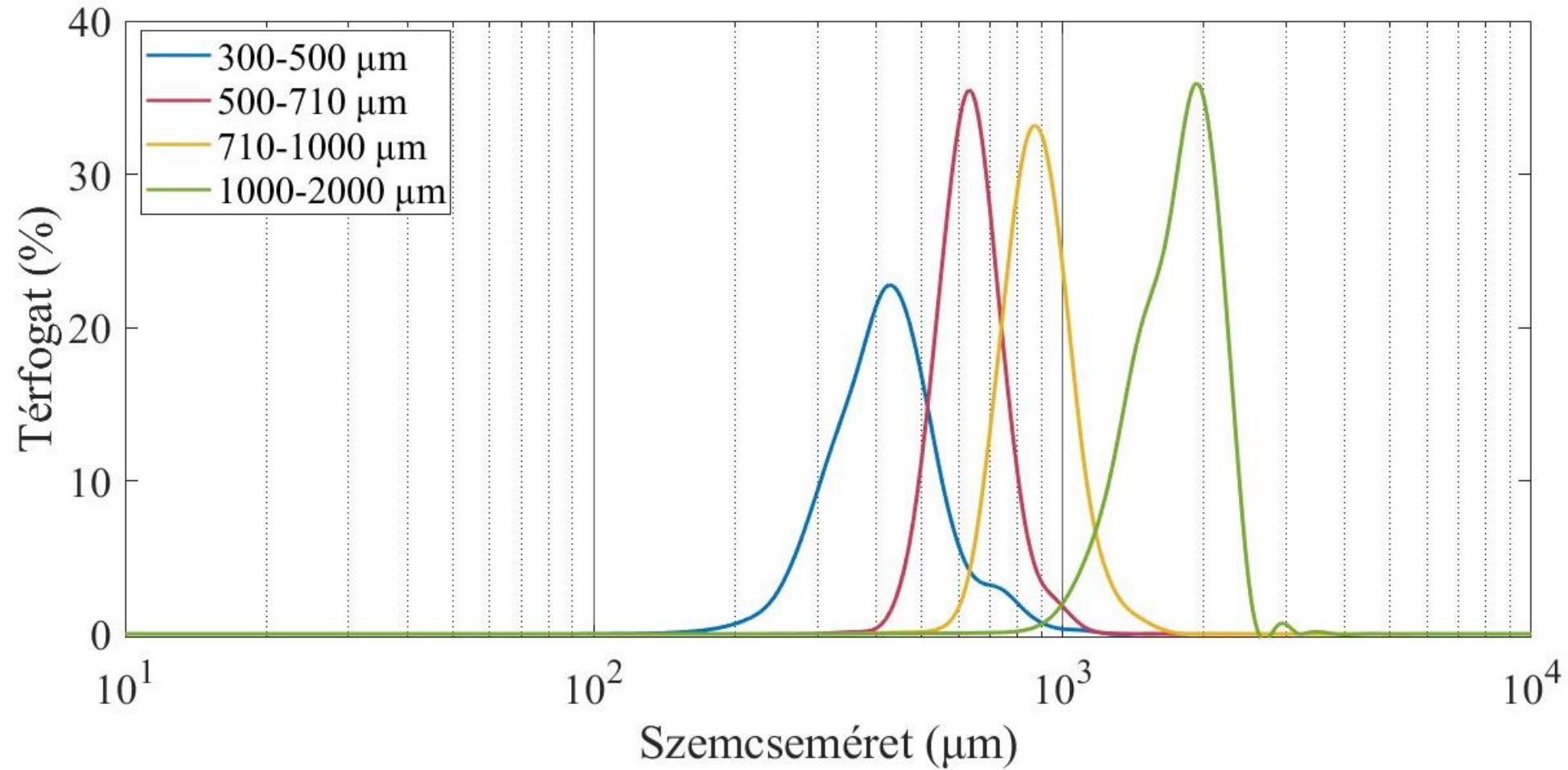


Eredeti videó

Felismert granulátumokkal

Nedves granulálás valós idejű követése

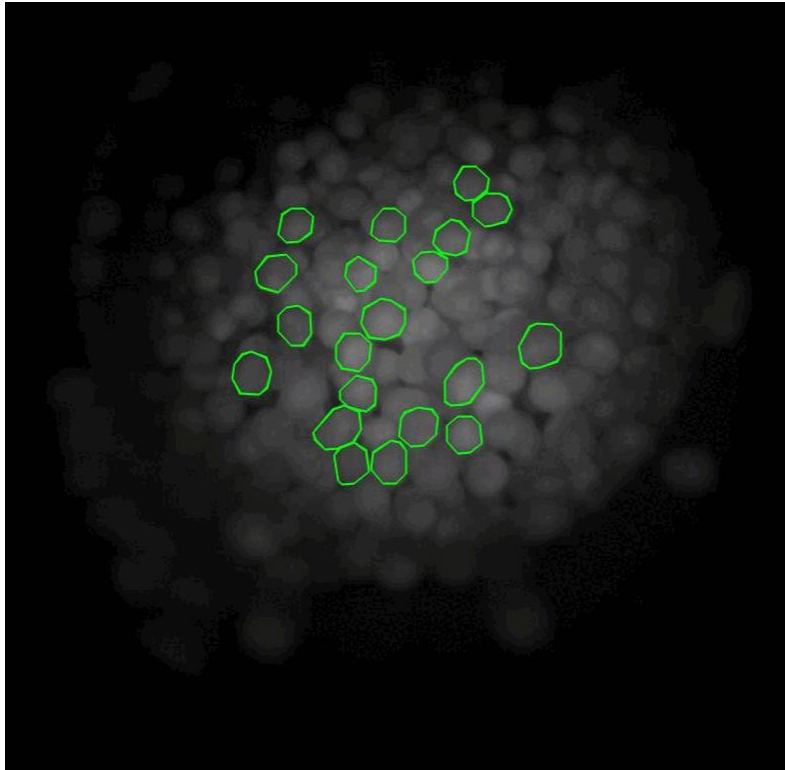
Nedves granulálás: felvételtől kinyert szemcseméret-eloszlás



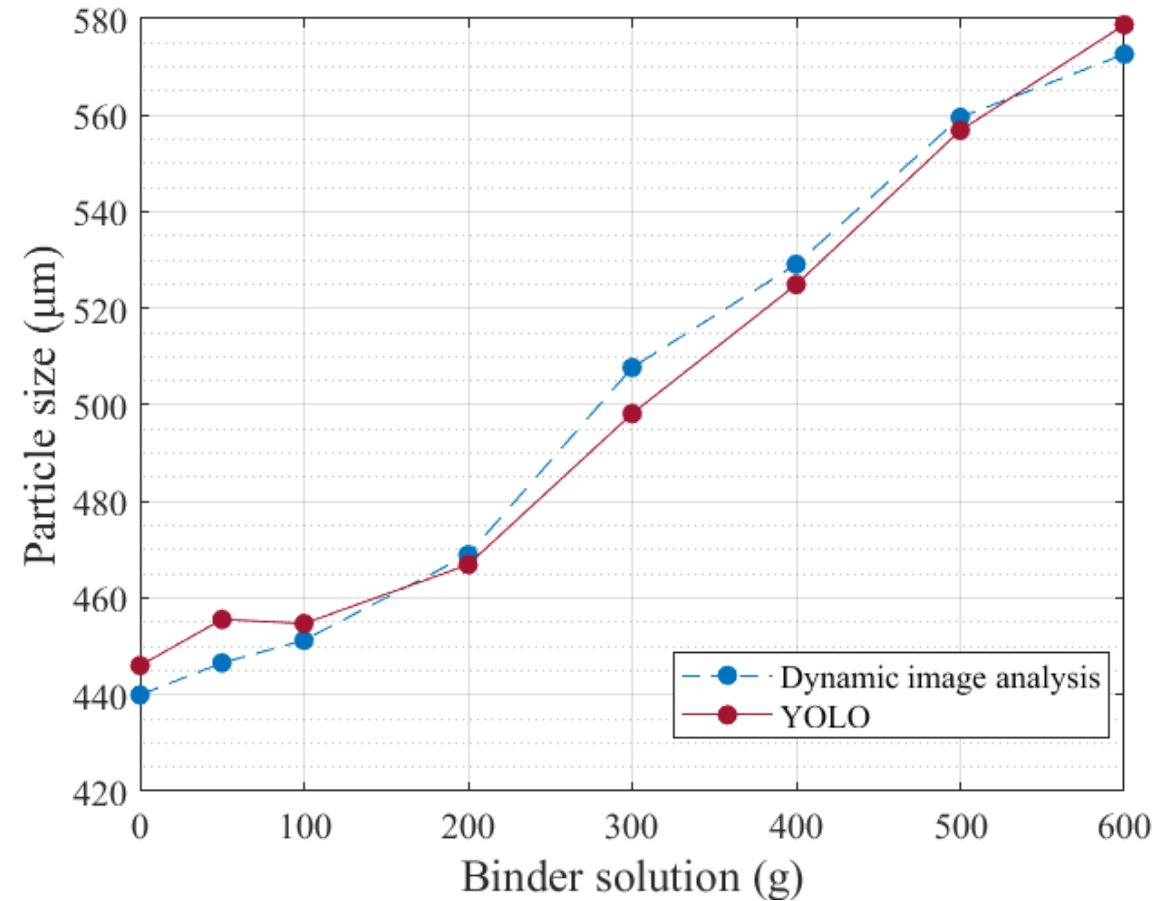
Pellet rétegezés valós idejű követése

Hatóanyagot tartalmazó bevonat felvitele pelletekre

- kisebb méretváltozások
- felvitt hatóanyag mennyiségének becslése



Szemcseméret változása

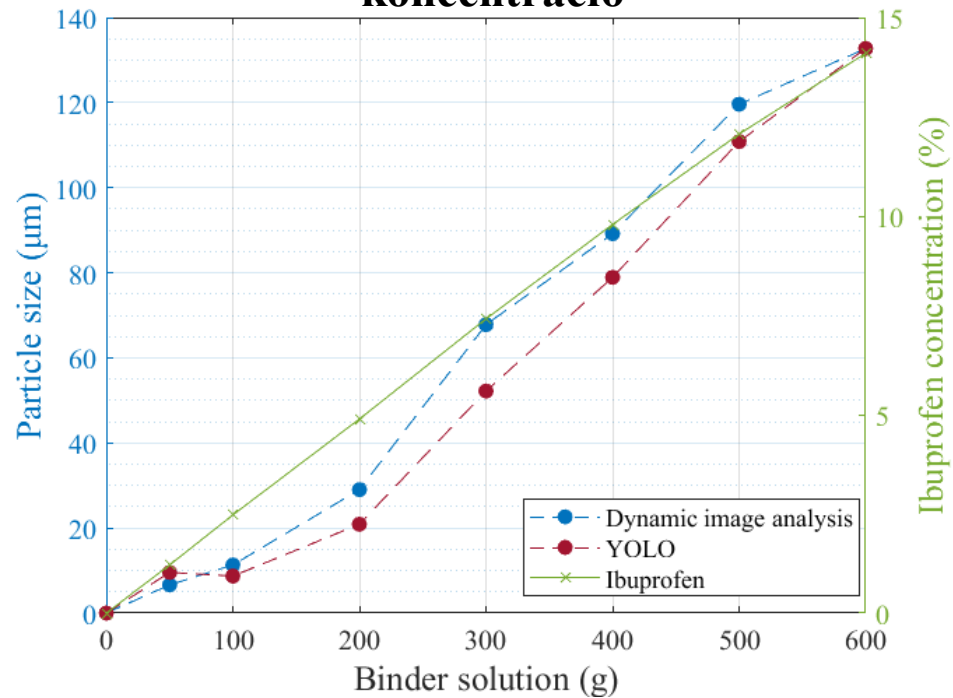


Pellet rétegezés valós idejű követése

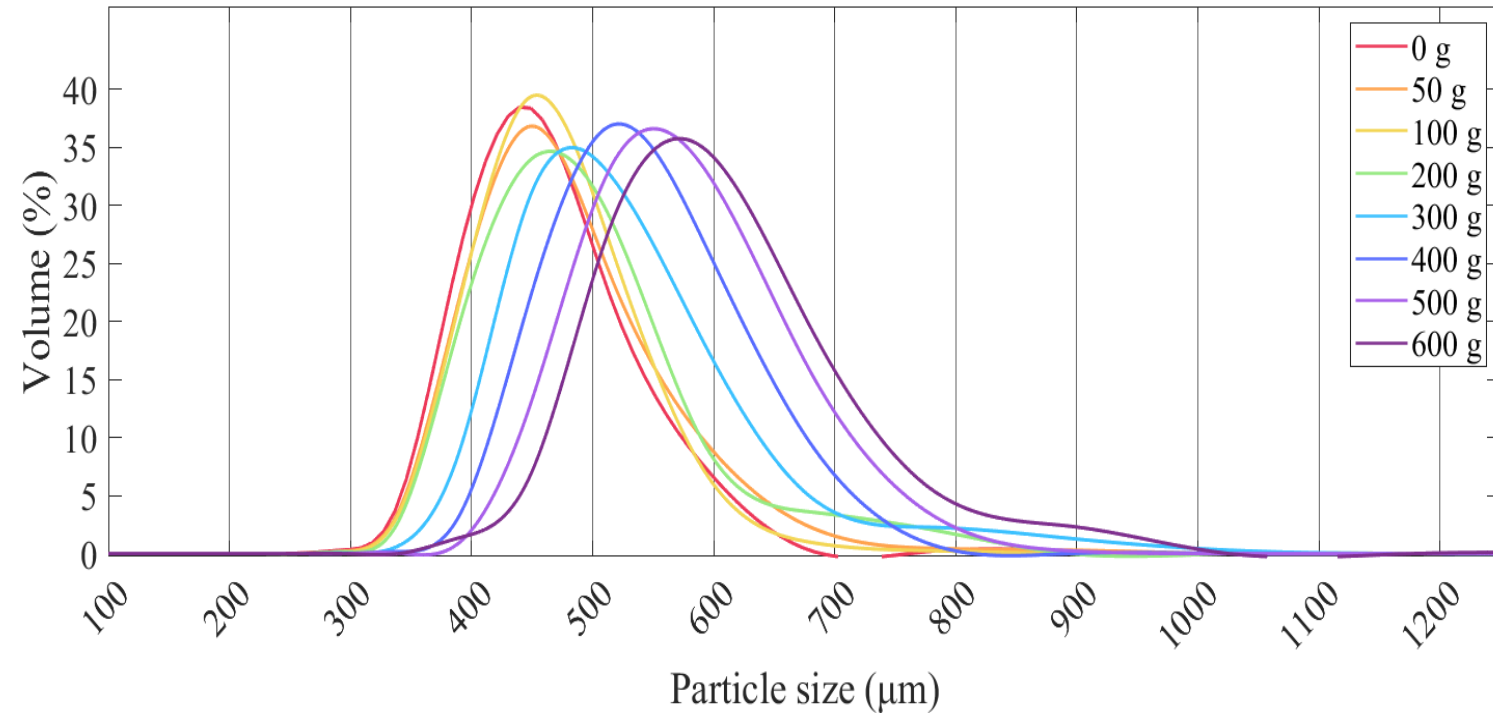
Hatóanyagot tartalmazó bevonat felvitele pelletekre

- kisebb méretváltozások
- felvitt hatóanyag mennyiségének becslése

Méretnövekedés és hatóanyag koncentráció



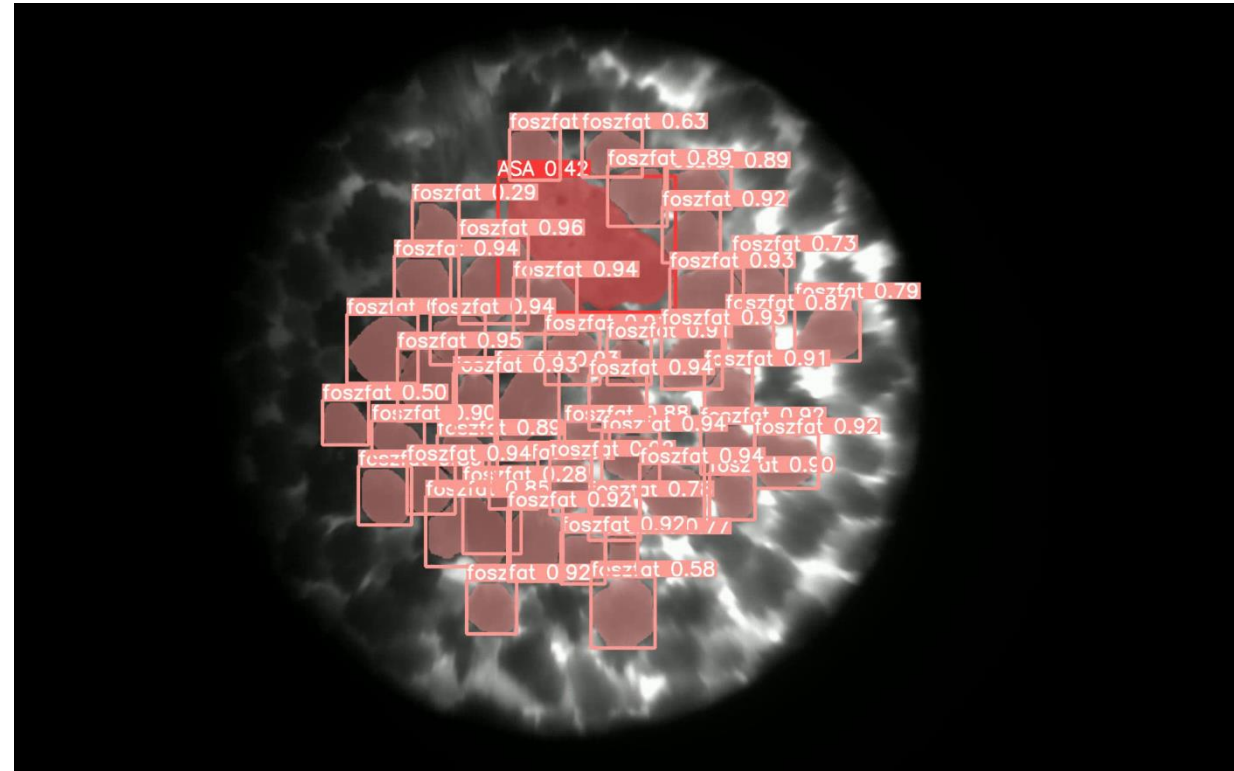
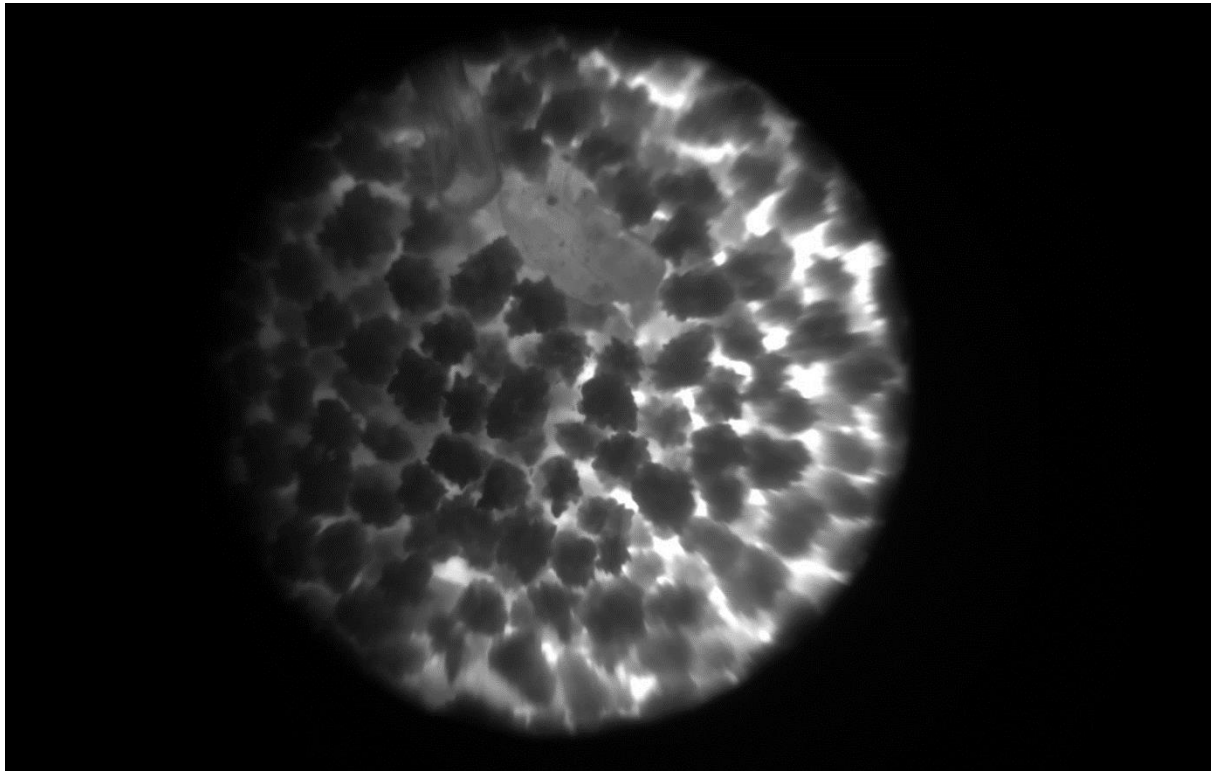
Szemcseméret-eloszlás változása



Porkeverék szemcséinek azonosítása

Komponensek felismerése szondás felvételen

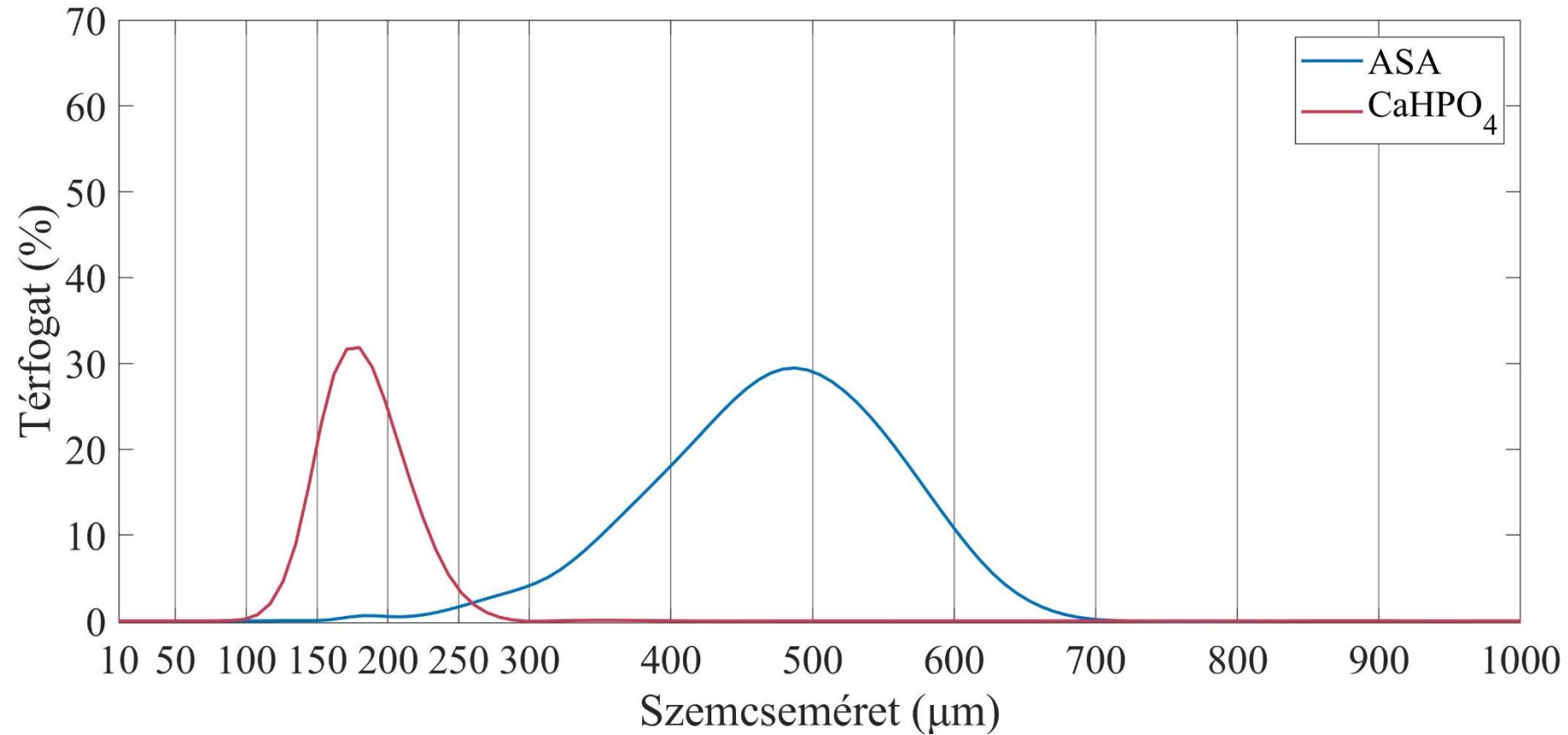
- példányszegmentálás alapján méret és alak jellemzés



Porkeverék szemcséinek azonosítása

Komponensek felismerése szondás felvételen

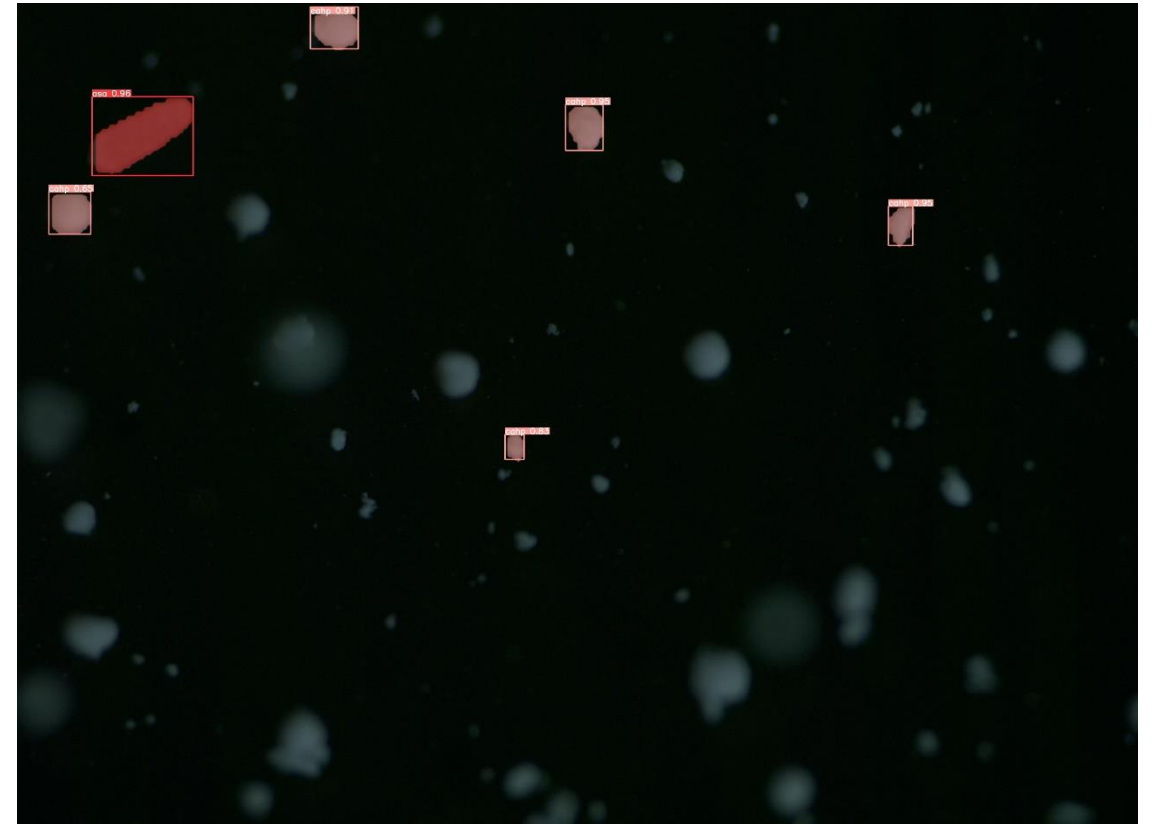
- példányszegmentálás alapján méret és alak jellemzés



Porkeverék szemcséinek azonosítása

Komponensek felismerése adagolóból távozó szemcsék felvételén

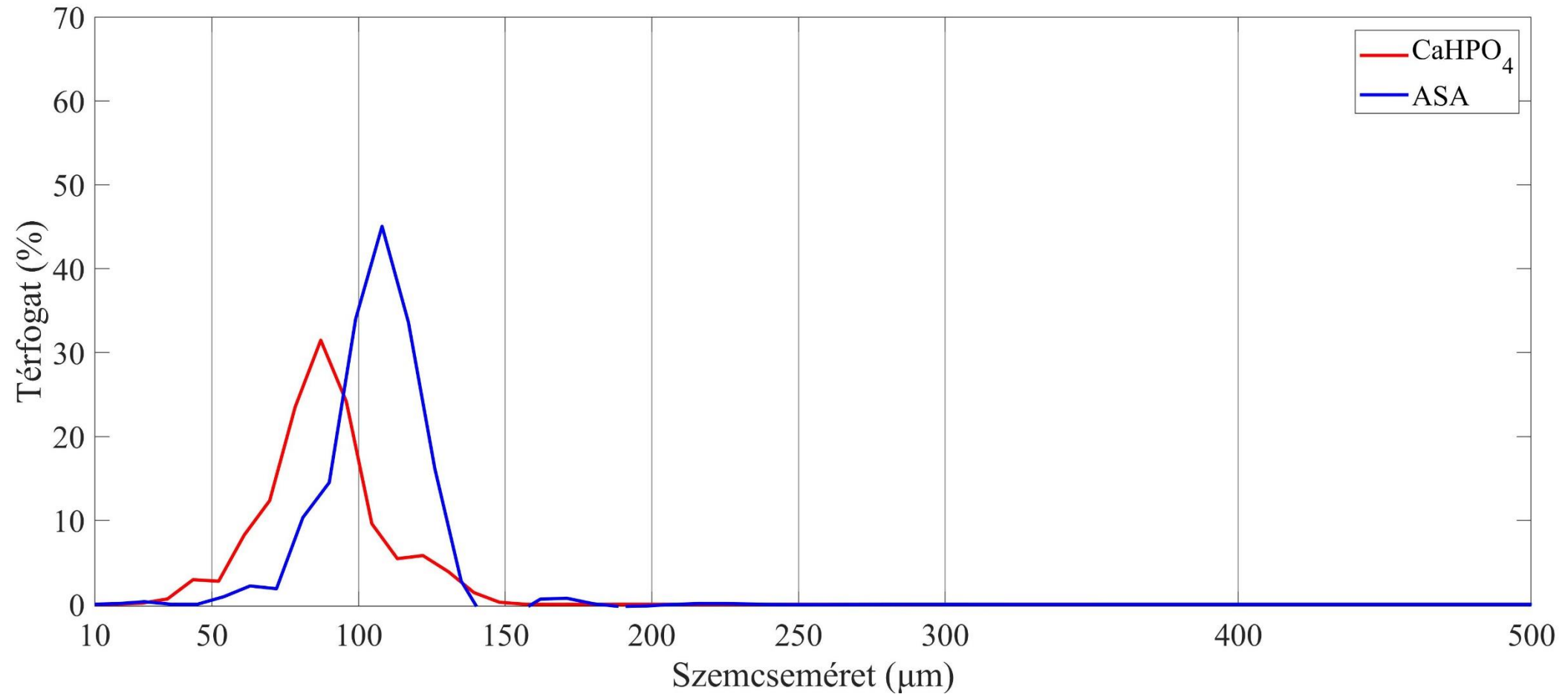
- példányszegmentálás alapján méret és alak jellemzés



Porkeverék szemcséinek azonosítása

Komponensek felismerése adagolóból távozó szemcsék felvételén

- példányszegmentálás alapján méret és alak jellemzés



Köszönöm a figyelmet!



MESTERSÉGES INTELLIGENCIA
Nemzeti Laboratórium



A kutatás az Európai Unió támogatásával valósult meg, az RRF-2.3.1-21-2022-00004 azonosítójú, Mesterséges Intelligencia Nemzeti Laboratórium projekt keretében.