



Vaasan yliopisto
UNIVERSITY OF VAASA

Ossi Pohjolainen

Uusiutuvan polttoaineen pitoisuuden määrittäminen seoksesta mallintamisen avulla

Meriliikenne ja työkoneet

Tekniikan ja innovaatiojohtamisen akateeminen yksikkö
Kandidaatintutkielma
Automaatio ja tietotekniikka, tekniikan kandidaatti

Vaasa 2025

VAASAN YLIOPISTO**Tekniikan ja innovaatiojohtamisen akateeminen yksikkö**

Tekijä:	Ossi Pohjolainen		
Tutkielman nimi:	Uusiutuvan polttoaineen pitoisuuden määrittäminen seoksesta mallintamisen avulla - Meriliikenne ja työkoneet		
Tutkinto:	Tekniikan kandidaatti		
Oppiaine:	Automaatio ja tietotekniikka		
Työn ohjaaja:	Timo Mantere		
Valmistumisvuosi:	2025	Sivumäärä:	37

TIIVISTELMÄ:

Päästövähennysten tavoitteisiin pääsemisen vuoksi fossiilisille polttoaineille tarvitaan vähähiilipäästöisiä vaihtoehtoja. Uusiutuvien polttoaineiden mallintaminen on tärkeää, koska tarvitaan tietoa eri lähtömateriaaleista valmistetuista polttoaineista, kuin myös eri tarkoituksiin soveltuvista polttoaineista. Tässä kandidaatintutkielmassa käydään läpi uusiutuvien polttoaineiden ominaisuuksia ja sitä, miten ominaisuuksia voi mallintaa. Aihe on rajattu meriliikenteen ja työkoneiden käyttöön soveltuviin nestemäisiin dieselpolttoaineisiin.

Uusiutuvia dieselpolttoaineita valmistetaan useista lähtömateriaaleista, ja uusia mahdollisuuksia tutkitaan ja kehitetään. Tehokkaan palamisen takaamiseksi polttoaineiden ominaisuudet täytyy optimoida, ja tällöin päästöt vähenevät todenmukaisesti. Mallintamisesta on paljon kirjallisuutta myös muilta aloilta kuin polttoainetutkimuksesta. Taustamateriaalina tässä tutkielmassa on käytetty polttoainetutkimuksien lisäksi kemiantutkimuksia, lääketutkimuksia ja tekoälytutkimuksia. Kirjallisuuskatsauksessa on koottu tapoja mallintaa uusiutuvia polttoaineseoksia.

Spektroskopiassa on eri aallonpituuksiin ja eri laskutapoihin liittyviä keinoja tutkia polttoaineiden ominaisuuksia. Monia polttoaineiden kemiallisia ominaisuuksia mallinetaan onnistuneesti kirjallisuudessa tekoälyn avulla. Monen mallin ja tekoälyn lopputulos vastaa hyvin kokeellisesti testattua, ja tämä antaa vahvistuksen sille, että tekoälyn käyttö polttoaineiden ominaisuuksien arvioinnissa on kannattavaa. Perinteisiä kemometrian tapoja kannattaa käyttää tulosten tarkistamiseen, koska tekoälyn laskentaperusteita ei kyetä välttämättä tarkastamaan. Tekoälyn päätelyketjun askeleita on mahdoton tarkastaa jälkikäteen, joten tulosten tarkastamisella voi arvioida luotettavuutta.

Tekoälyä hallitusti käyttämällä saadaan luotettavia tuloksia, joita kannattaa varmentaa fyysisillä mittauksilla. Monia mittaus- ja mallinnustapoja kannattaa käyttää rinnakkain, ja valita tutkimuskohteeseen sopivat aineistot ja menetelmät. Monessa tutkimuksessa käytetään tekoälyä, joka voi antaa mahdollisuudet laajempaan tietoaaineistoon, monimutkaisempiin laskuihin ja nopeuttaa ja optimoida mallinnusta. Kvanttitietokoneilla käyttöön saa laajat aineistot, mutta kvanttietokoneiden käyttö tutkimuksessa ei ole vielä yleistä.

AVAINSANAT: uusiutuva diesel, uusiutuva polttoaine, biodiesel, mallinnus, tekoäly, neuroverkot, koneoppiminen, sumea logiikka

Sisällys

1	Johdanto	6
2	Uusiutuvat dieselpolttoaineet	8
2.1	Työkoneiden ja laivaliikenteen polttomoottorit	10
2.2	Kemialliset ja fyysikaaliset ominaisuudet	11
2.3	Yleistymisen haasteet	13
3	Kemiantutkimuksen menetelmiä mallinnuksen avuksi	15
3.1	Spektroskopia	15
3.2	Kemometria ja kromatografia	18
4	Tekoäly, koneäly, neuroverkot ja koneoppiminen	19
4.1	Neuroverkot (ANN, Artificial neural network)	21
4.2	Koneoppiminen, machine learning	22
4.2.1	Ohjattu oppiminen, supervised learning	22
4.2.2	Ohjaamaton oppiminen, unsupervised learning	22
4.2.3	Vahvistusoppiminen, reinforced learning	23
4.2.4	Syväoppiminen, deep learning	23
4.3	Sumea logiikka, fuzzy logic	24
4.4	Monte Carlo ja dropout -metodit	25
5	Polttoaineiden mallintaminen kirjallisuudessa	26
5.1	Mallintamisen lähtöarvot	26
5.2	Tekoäly polttoaineiden ominaisuuksien mallintamisessa	27
6	Johtopäätökset	30
	Lähteet	32

Kuviot

Kuvio 1. Etaani, esimerkki parafiinista C_nH_{2n+2}	9
Kuvio 2. Koneälyn yhteen liittyvät termit (mukailtu lähteestä: Siddique & Adeli, 2013, s. 4)	19
Kuvio 3. Kolmikerroksisen neuroverkon kaavakuva	21

Taulukot

Taulukko 1. Polttoaineiden ominaisuuksia (Sirviö, 2018; Balogun ja muut, 2024, s. 3)	12
Taulukko 2. Vertailu uusiutuvan Neste MY -dieselin ja fossiilisen dieselin lukuarvoista (Neste, 2020, s. 18, s. 19)	13
Taulukko 3. Spektroskopian jaottelu aaltoluvun ja aallonpituuden mukaan (El-Azazy, 2019, s. 3)	17
Taulukko 4. Tekoälytekniikat, joita käytetään polttoainetutkimuksessa	29

Lyhenteet

AI	Artificial Intelligence, tekoäly
ANFIS	Adaptive neuro-fuzzy inference system
ATR, FTIR-ATR	Attenuated total reflection, vaimentunut kokonaisheijastus
CFPP	Cloud filter plugging point, suodatettavuuden rajalämpötila
CI	Computational Intelligence
CN	Cetane number, setaaniluku
CP	Cloud point, samepiste
DCN	Derived cetane number, johdettu setaaniluku
FAME	Fatty acid methyl ester, rasvahappometyyliesteri
FIR	Far-infrared, kauko-infrapuna
FTIR	Fourier transform infrared spectroscopy, Fourier-infrapunaspektroskopia
GC x GC	Two-dimensional gas chromatography, kaksiulotteinen kaasukromatografia
HVO	Hydrotreated vegetable oil, vetykäsitelty kasviöljy

IRS	Infrared Spectroscopy, infrapunaspektroskopia
LHV	Lower heating value, tehollinen lämpöarvo, alempi lämpöarvo
MCNN	Monte-Carlo Dropout Neural Network
MIR	Mid-infrared, keski-infrapuna
MLPNN	Multi-layer perceptron neural network
M-QSPR	Mean quantitative structure–property relationship, keskimääräinen kvantitatiivinen rakenne-ominaisuus -yhteys
NIR	Near infrared spectroscopy, lähi-infrapunaspektroskopia
NIR-FT-IR	Near infrared Fourier transform infrared, lähi-infrapuna Fourier-muunnettu infrapunaspektroskopia
OSI	Oxidation stability, hapettumisvakaus
QSPR	Quantitative structure–property relationship, kvantitatiivinen rakenne-ominaisuus -yhteys
Vis-NIR	Visible-near infrared, näkyvä lähi-infrapuna
WtW	Well-to-Wake, tuotantoprosessin ja käytön aikaiset kokonaispäästöt meriliikenteessä

1 Johdanto

Tämä kandidaatintutkielma sisältää kirjallisuuskatsauksen meriliikenteessä ja työkooneissa käytettävien nestemäisten uusiutuvien polttoaineiden ominaisuuksien mallintamiseen. Meriliikenteessä ja työkooneissa tullaan käyttämään polttomoottoreita vielä pitkään, koska moottoreiden käyttöikä on vuosikymmeniä. Tämän vuoksi diesel-tyyppisten uusiutuvien polttoaineiden tutkiminen on tärkeää. Uusiutuvilla polttoaineilla voidaan korvata fossiilisia polttoaineita ja vähentää kasvihuonekaasupäästöjä.

Polttoainetutkimuksessa mallintamisella voidaan selvittää ja vertailla eri seosten ominaisuuksia. Tämä tutkielma on avuksi uusiutuvia polttoaineita tutkiville ryhmille, jotka haluavat kuulla mitä keinoja viime vuosina on käytetty polttoaineiden mallintamiseen. Tässä tutkielmassa kootaan koneälyn keinoja, jotka soveltuvat polttoaineiden tutkimiseen. Mallintamisella ja koneälyllä hyödynnetään ohjelmallista laskentatehoa. Tutkielmassa on kerätty tietoa siitä, millaiset tekniikat ovat tehokkaita ja luotettavia tutkimuskäytössä.

Tutkielman tavoitteena on koota kirjallisuudesta tietoa siitä, mitä tekniikoita on tutkittu ja todettu hyväksi menetelmiksi selvittää uusien seoksien kemiallisia ominaisuuksia, enakoimaan mitä ominaisuuksia eri seoksilla voisi olla, ja miten koota tarvittava tietoaaineisto. Tämä kandidaatintutkielma ei sisällä kokeellista tutkimusta mallinnuksesta, vaan se on kirjallisuuskatsaus tutkituista menetelmistä. Aiheen ulkopuolelle on rajattu myös tarkempi markkinakatsaus. Tutkielma sisältää pienen osion uusiutuvien polttoaineiden yleistymisen haasteista. Tutkimusmateriaalina ovat olleet polttoainetutkimukset, kemiantutkimukset, lääketutkimukset ja tekoälytutkimukset.

Lähtöoletus ja tutkimusasetelma kirjallisuuskatsaukselle on ollut se, että viime vuosina on ilmestynyt paljon tutkimuksia uusiutuvista polttoaineista ja on ajankohtainen haaste miten uusiutuvien polttoaineiden käyttöä saadaan laajennettua. Saatavuuden lisäksi tärkeitä osa-alueita käytön yleistymiseen on, että uudet polttoaineet ovat tasalaatuisia,

niitä voi sekoittaa fossiilisten polttoaineiden kanssa ja että niillä on hyvä säilyvyys. Ominaisuuksien arvioinnissa tietotekninen mallintaminen on kustannustehokas työväline.

Uusiutuvat ja kierrätetyistä öljyistä tehdyt polttoaineet ovat avainasemassa päästövähennystavoitteiden täyttämässä. Uusia polttoaineita valmistetaan eri raaka-aineista, ja niitä voidaan seostaa perinteisten polttoaineiden kanssa. Mallintamista voidaan hyödyntää polttoaineseosten ominaisuuksien ja pitoisuuksien arvioinnissa ja laadunvalvonnassa.

Polttoaineen kulutuksen ja energiantarpeen on ennustettu nousevan, mutta päästöjä pitää alentaa mm. EU:n tavoitteiden vuoksi (Sirviö, 2018, s. 1). Nestemäiset polttoaineet ovat energiatihedeltään ylivoimaisia ja moottoreiden pitkän käyttöiän vuoksi ne tulevat vielä olemaan käytössä sinä aikana, kun päästöjä pitää vähentää (Sirviö, 2018, s. 1). Suurin osa meriliikenteen polttoaineista on nykyään raskaita polttoöljyjä ja tislepolttoaineita, yhteensä yli 90 %, joten dieselmoottoriin on yksinkertaisinta vaihtaa ensin uusiutuva dieselpolttoaine (Aakko-Saksa ja muut, 2023, s. 4). Tämä luo suuren tarpeen uusiutuville polttoaineille, jotta päästövähennystavoitteisiin voidaan päästä.

Päätökset polttoaineiden seostamisesta tulee tehdä tapauskohtaisesti polttoaineiden ominaisuuksien mukaan (Sirviö, 2018, s. 51). Tämän vuoksi tiedot seoksista ovat erittäin tärkeitä. Seoksien arviointi luo tarpeen, että ominaisuuksia voidaan mallintaa. Mallintamisella voidaan optimoida seostuksia, valvoa laatua ja tutkia käyttäytymistä.

2 Uusiutuvat dieselpolttoaineet

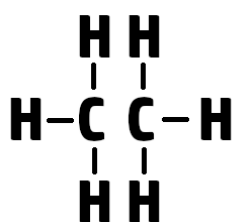
Ensimmäisen polven uusiutuvat FAME-biodieselit (Fatty Acid Methyl Ester, rasvahappometyyliesteri) on tehty ruoaksi sopivista kasveista, joten niiden valmistus vie pinta-alaa ruokatuotannolta (Balogun ja muut, 2024, s. 1; Jansen, 2013, s. 13). Monissa maissa peltotilaa on rajatusti, ja se pitäisi Jansenin mukaan (2013, s. 13) käyttää ruoantuotantoon, eikä polttoaineiden raaka-aineiden kasvatukseen. Perinteisiä biodieseleitä valmistetaan mm. transesterifikaatiolla (FAME-biodieselit) (Aakko-Saksa ja muut, 2019, s. 40).

Toisen polven uusiutuvat parafiinipohjaiset dieselit voidaan valmistaa nykyään öljyjen vetykäsittelyllä ja biomassan kaasutuksella ja nesteytyksellä Fischer-Tropsch-menetelmällä (FT) (Jansen, 2013, s. 186; Aakko-Saksa ja muut, 2019, s. 6, s. 41; Neste, n.d). Parafiinipohjaisen uusiutuvan dieselin etu on, että sitä voi käyttää sellaisenaan tai fossiilisen rinnalla kaikissa dieselmootoreissa (Aakko-Saksa ja muut, 2019, s. 41), kun taas perinteisen biodieselin tilavuussuhde on rajattu 7 % Euroopassa sekoitettuna fossiiliseen dieseliin.

Uusiutuvat polttoaineet, kuten parafiinipohjainen HVO-diesel (Hydrotreated Vegetable Oil, vetykäsittely kasviöljy), on valmistettu materiaaleista, jotka eivät ole fossiilisista alkuperää, eivätkä materiaalit ole sopivia ruokatuotantoon (Balogun ja muut, 2024, s. 1; Jansen, 2013, s. 24). Esimerkkejä raaka-aineista ovat maatalousjäte, metsäteollisuuden jäte, kotitalousjäte, eläinperäinen jäte, muun teollisuuden jäte ja energiakasvit esim. öljyjatroppa, pongamia, ruistankio (camelina) ja merilevä (Jansen, 2013, s. 25).

Energiakasvien kasvattamiselle käy usein myös maasto, jossa ei voi kasvattaa ruokaa, eli joutomaa (Jansen, 2013, s. 25). Energiakasvien kasvatus joutomaassa lähellä käyttöpaikkaa voi parantaa valtion riippumattomuutta ulkopuolisista toimittajista (Jansen, 2013, s. 27). Biodieselin käyttö lähituotetuista energiakasveista parantaa energiasektorin turvallisuutta, koska se vähentää riippuvuutta öljyntoimittajista (Jansen, 2013, s. 28).

Parafiinit, eli alkaanit, ovat yksinkertaisin sidoksin muodostuneita täysin kylläisiä hiiliveityjä, eli yhtään hiiliatomia ei pysty lisäämään (kuvio 1) (Heywood, 2018, s. 87). Jokaisella hiilellä on neljä sidosta ja jokainen vetyatomi on yhdistynyt hiileen (Speight, 2017, s. 553). Alkaanit eivät ole yhdistyneet ympyräketjuksi (Speight, 2017, s. 553). Ne ovat heikosti reagoivia ja toimivat monien enemmän reagoivien funktionaalisten ryhmien pohjana (Speight, 2017, s. 553). Erimerkiksi metaani CH_4 , etaani C_2H_6 ja propaani C_3H_8 ovat kolme lyhyintä parafiinia ja yleinen muoto on C_nH_{n+2} (Heywood, 2018, s. 87).



Kuvio 1. Etaani, esimerkki parafiinista C_nH_{n+2}

Toisen polven uusiutuvien polttoaineiden lasketaan olevan vähäpäästöisiä, koska niiden hiilipohjaiset päästöt lasketaan otetuksi luonnon kiertokulusta valmistusvaiheessa, eivätkä ne siten lisää päästöjä käyttövaiheessa luontoon (Balogun ja muut, 2024, s. 1). Päästöjen vähenemisen on laskettu olevan suuri verrattuna siihen, että maasta porataan uutta öljyä, jonka päästöt tulevat lisäksi ilmakehään (Jansen, 2013, s. 28).

Toisen polven polttoaineissa ei tulisi käyttää ruoaksi sopivia kasveja. Vertailuna soijasta ja palmuöljystä valmistetuista polttoaineista on vuonna 2011 on tutkittu, että poltettaessa päästöt fossiilisilla ja biopohjaisilla polttoaineilla ovat samaa luokkaa (Petzold ja muut, 2011, s. 10396 taulukko 3). Sen sijaan, kun maankäytön kasvihuonepäästöt otetaan laskuihin mukaan, ilman maaperän laadun erittelyä, saadaan päästöjä alenemaan tutkituilla soijapohjaisilla ja palmuöljypohjaisilla polttoaineilla (Petzold ja muut, 2011, s. 10399 taulukko 4). Kasvupaikka voi suurentaa päästöjen määrää, jopa kaksi kertaa fossiilisen polttoaineen verran, jos sademetsää muutetaan kasvatusalustaksi palmuöljyä varten (Petzold ja muut, 2011, s. 10399 taulukko 4). Oikein valituilla menetelmillä uusiutuvan parafiinipohjaisen dieselpolttoaineen päästöt voivat olla jopa 90 % pienemmät kuin

fossiilisen koko elinkaaren aikana (Petzold ja muut, 2011, s. 10399 taulukko 4; Motiva, 2024).

2.1 Työkoneiden ja laivaliikenteen polttomoottorit

Suuret hidaskäyntiset yli 20 MW tehoiset laivamoottorit ovat usein kaksitahtisia puristus-tytetytteisiä (compression ignition, CI) dieselmoottoreita (Heywood, 2018, s. 37). Niitä käytetään esimerkiksi suurissa kuljetusaluksissa ja tankkereissa (Aakko-Saksa ja muut, 2023, s. 4). Maailmanlaajuisesti tällaiset isot hitaat dieselmoottorit (SSD, slow-speed diesel engine) käyttävät 70 % meripolttoaineista, ja tuotavat suurimman osan meriliikenteen päästöistä (Aakko-Saksa ja muut, 2023, s. 4). Keskinopeat dieselmoottorit (medium-speed diesel MSD) ovat usein nelitahtisia, ja niitä käytetään pienemmissä aluksissa ja työkoneissa. Keskikokoiset moottorit kuluttavat noin 19 % meripolttoaineista (Aakko-Saksa ja muut, 2023, s. 4). Niitä on päämoottoreina pienemmissä aluksissa ja apumoottoreina kokoluokassa 1–10 MW ja yleisimmin apumoottori on teholtaan noin 1 MW luokkaa (Aakko-Saksa ja muut, 2023, s. 4).

Suoraruiskutuksella (direct injection, DI) riittävän suuren ruiskutuspaineen avulla polttoaineen tunkeuma palotilaan on riittävän laaja ja polttoainesuihku hajoaa pieniksi nopeasti höyrystyviksi pisaroiksi (Heywood, 2018, s. 519; Turunen ja Niemi, toim. Raiko ja muut. 2002, s. 597, s. 599). Dieselmoottorissa palamista hallitaan polttoaineen suihkutuksella (Heywood, 2018, s. 519; Turunen ja Niemi, toim. Raiko ja muut. 2002, s. 599).

Dieselpolttoaineen ominaisuudet vaikuttavat moottorin käytettävyyteen, kylmäkäyttöominaisuuksiin ja ympäristövaikutuksiin (Turunen ja Niemi, toim. Raiko ja muut. 2002, s. 603). Käytettävyysominaisuuksiin Turunen ja Niemi (2002) luokittelevat setaaniluvun, tiheyden ja lämpöarvon. Tiheyden ja lämpöarvon on tärkeitä olla moottorin käyttöön sopivissa rajoissa uusiutuvalla polttoaineella, koska polttoainetta annostellaan tilavuuden

mukaan ja ruiskutuksella säädetään moottorin tehoa kuormituksen mukaan (Turunen ja Niemi, toim. Raiko ja muut. 2002, s. 603).

2.2 Kemialliset ja fyysikaaliset ominaisuudet

Setaaniluku vaikuttaa palamisominaisuuksiin ja tehoon. Setaaniluku on tärkeä puristus-sytytteisillä moottoreilla, koska polttoaineen pitää olla herkästi itsesyttävää. Korkea setaaniluku vähentää syttymisviivettä, jolloin sylinteripaine ei nouse liian jyrkästi ja hallitsemattomasti, mikä vähentää nakutusta, hiilivetypäästöjä ja muita epätoivottuja ilmiöitä (Heywood, 2018, s. 569; Turunen ja Niemi, toim. Raiko ja muut. 2002, s. 603). Setaaniluku kuvaa polttoaineen syttymisherkkyttä, ja se määritellään mittaamalla ja vertaamalla sitä referenssiaineisiin koemoottorissa (Turunen ja Niemi, toim. Raiko ja muut. 2002, s. 603).

Kylmäominaisuuksista keskeinen ominaisuus dieselpolttoaineella on samepiste, eli alin säilytyslämpötila, jossa ei muodostu kiteitä. Samepiste on se lämpötila, jossa vaha muuttuu näkyväksi, kun polttoainetta jäähdytetään (Sirviö, 2018, s. 7). Alhainen samepiste on tärkeä kylmissä olosuhteissa. Kylmäominaisuuksista kertoo myös jähmettymispiste. Jähmettymispiste on se lämpötila, jossa vahakristallit kasvavat ja muuttuvat geeliksi, joka estää virtaamisen (Sirviö, 2018, s. 7). Kylmäominaisuuksiin vaikuttavat myös viskositeetti ja suodatettavuus (Turunen ja Niemi, toim. Raiko ja muut. 2002, s. 603). Suodatettavuuden rajalämpötila on se alin lämpötila, jossa 20 ml polttoainetta läpäisee metalliverkon, jossa on 45 mikrometrin aukot, alle 60 sekunnissa (Sirviö, 2018, s. 7). Myös setaaniluku vaikuttaa kylmäkäyttöön (Turunen ja Niemi, toim. Raiko ja muut. 2002, s. 603).

Uusiutuvalla toisen polven parafiinipohjaisella dieselillä on matala samepiste, jopa -32°C ja setaaniluku jopa 70 (Neste, n.d.). Biodieselillä samepiste -5°C ja setaaniluku 51 (Neste, n.d.). Vaatimukset biodieselille ovat standardissa EN 14214. Perinteisen fossiilisen dieselin setaaniluku on noin 40-55 (Heywood, 2018, s. 46).

Lisäksi tärkeitä tarkasteltavia asioita ovat myös hapettuminen, varastointikestävyys ja yhteensopivuus voiteluöljyn kanssa (Sirviö, 2018, s. 5). Uusiutuvien polttoaineiden säilyvyysaika voi olla lyhyt, siksi myös happoluku, joka kuvaa polttoaineen happamuutta, on tärkeä ominaisuus (Sirviö, 2018, s. 10). Taulukossa 1 on lueteltu eri ominaisuuksia.

Taulukko 1. Polttoaineiden ominaisuuksia (Sirviö, 2018; Balogun ja muut, 2024, s. 3)

Lyhenne	Selite	Englanniksi
OSI	hapettumisenkesto	oxidation stability
	happoluku	acid number
DCN	johdettu setaaniluku	derived cetane number
	jähmettymispiste	pour point
	kinemaattinen viskositeetti	kinematic viscosity
	leimahduspiste	flash point
	CP	samepiste
CN	setaaniluku	cetane number
CFPP	suodatettavuuden rajalämpötila	cloud filter plugging point
LHV	tehollinen lämpöarvo	lower heating value
	tiheys	density
	tislauskäyrä	distillation curve
	voitelevuus	lubricity

Ympäristöön vaikuttavista ominaisuuksista dieselpolttoaineella merkityksellisiä tietoja ovat rikkipitoisuus, aromaattipitoisuus ja mahdolliset epäpuhtaudet (Turunen ja Niemi, toim. Raiko ja muut. 2002, s. 603). Dieselmoottorin pakokaasun hiukkaset muodostuvat fossiilisella polttoaineella suurimmiksi osin nokeen absorboituneista orgaanisista yhdisteistä, sulfideista ja vesihöyrystä (Turunen ja Niemi, toim. Raiko ja muut. 2002, s. 620). Hiukkaspäästöjä nostaa korkea aromaattipitoisuus (Turunen ja Niemi, toim. Raiko ja muut. 2002, s. 620). Taulukossa 2 vertaillaan Nesteen MY -uusiutuvan dieselin ja fossiilisen dieselin kemiallisia ja fyysisiä ominaisuuksia.

Taulukko 2. Vertailu uusiutuvan Neste MY -dieselin ja fossiilisen dieselin lukuarvoista (Neste, 2020, s. 18, s. 19)

Lyhenne	Selite	Uusiutuva diesel	Fossiilinen diesel
	aromaatit, % (m/m)	ei havaittavissa	≤ 8
OSI	hapettumisenkesto	< 2	≤ 25
	leimahduspiste, °C	> 70	> 55
	rikkipitoisuus, mg/kg	≤ 5	≤ 10
CP	samepiste, °C	talvilaatuja koviin pakkasiin olemassa	≤ - 10 ... ≤ -34
CN	setaaniluku	> 70	≥ 51
CFPP	suodatettavuuden rajalämpötila, °C	lähellä samepistettä	≤ 5 ... ≤ -44
LHV	tehollinen lämpöarvo MJ/litra	34	36
	tiheys 15 °C, kg/m ³	780	820-845
	tislaus 95% (V/V), °C	295	≤360
	viskositeetti, 40 °C	3	2-4,5

2.3 Yleistymisen haasteet

Esteinä uusiutuvien polttoaineiden leviämislle on suurien markkinoiden puuttumien, hinta ja poliittiset päätökset. Esimerkiksi Saksassa tehdyn tutkimuksen mukaan suurimpia esteitä ovat puutteelliset poliittiset säädökset ja -asetukset uusiutuville polttoaineille, kaluston ja tekniikan päivittämisen haasteet ja tuotantoketjun koordinoimattomuus (Ebadi Torkayesh ja muut, 2024, s. 1029).

Yksi yllättävä este Limin ja muiden (2023) yhdysvaltalaisessa tutkimuksessa fossiilisen polttoaineen käytön ja tuotannon vähenemiselle on se, että usein uusiutuviin polttoaineisiin liittyvät työt sijaitsevat muualla kuin fossiilisen polttoaineen tuotantoon liittyvät työt, ja se luo työllistymishaasteen, koska työvoimaa ei liiku niin paljon (s. 5). Heidän

tutkimuksensa mukaan fossiilisen teollisuuden alasajo luo epäoikeudenmukaisia ongelmia työmarkkinoille (Lim ja muut, 2023, s. 5). Tutkimuksen mukaan fossiilisten polttoaineiden kanssa työskentelevien taidoilla pystyy parhaiten siirtymään uusiutuvien polttoaineiden kanssa työskentelyyn, mutta muille tuotannon aloille siirtyminen vaatii täydennyskoulutusta (Lim ja muut, 2023, s. 5). Yhdistyneiden kansakuntien (YK) vuonna 2015 asettamat kestävän kehityksen tavoitteet sisältävät ensimmäisen tavoitteen ei köyhyyttä ja kahdeksantena säädyllystä työtä kaikille ja taloudellista kasvua. Työmarkkinat ja työntekijöiden uudelleensijoitus on yksi tärkeä aspekti kestävän energiamurroksen toteuttamisessa.

Virran mukaan Tekniikan maailman artikkelissa (2025) Nesteen uusiutuvan dieselin markkinat näyttävät huonoilta koska sen hinta on kallis verrattuna fossiiliseen dieseliin ja tuote tuottaa tappiota yritystoiminnalle. USDA:n (U.S. Department of agriculture) (2024) mukaan uusiutuvan dieselin tuotanto on noussut USA:ssa paljon: yli tuplaantunut vuodesta 2020 vuoteen 2022. Global Market Insights (GMI, 2025) ennustaa kuitenkin vuoteen 2034 mennessä 8,1 % kasvua uusiutuvien polttoaineiden markkinoille. Nämä ovat keskeisiä esimerkkejä vakautumattomien markkinoiden tilanteesta.

3 Kemiantutkimuksen menetelmiä mallinnuksen avuksi

Mallintamisen lähtökohdaksi tarvitaan tutkittavien aineiden lähtötietoja. Tietokantojen ja kirjallisuuden lisäksi seoksista voi selvittää kemiallisia ja fyysisiä ominaisuuksia niin kajoavilla kuin kajoamattomilla menetelmillä. Samoja tutkimusmenetelmiä käytetään laajasti monilla tieteen ja teollisuuden aloilla esimerkiksi lääke-, ympäristö-, materiaali-, elintarvike-, maatalous- ja polttoainetutkimuksessa.

3.1 Spektroskopia

Infrapunaspektroskopia, IRS (Infrared Spectroscopy), on kajoamaton tutkimustapa, jossa elektromagneettisella säteilyllä saadaan esiin tutkittavan aineen spektri, josta voidaan päätellä aineen sisältämiä rakenneosia (Barra ja muut, 2021, s. 2; El-Azazy ja muut, 2023, s. 1). Kun valo osuu tutkittavaan aineeseen, se heijastuu, taittuu, siroaa tai läpäisee aineen (El-Azazy ja muut, 2023, s. 1). Läpäistessään aineen, se vaikuttaa molekyyliin riippuen valon energiasta, joka on suoraan verrannollinen taajuuteen (kaava 1) ja kääntäen verrannollinen aallonpituuteen (kaava 4) (El-Azazy ja muut, 2023, s. 1). Infrapunasäteily aiheuttaa aineessa erilaisia värähtelyitä, joista voi päätellä yhdisteen alkuaineita, sidoksia ja toiminnallisia osia (El-Azazy ja muut, 2023, s. 3). Värähtelyreaktiot riippuvat sidoksen vahvuudesta ja yhdistyneiden atomien massasta, ja eri ominaisuuksista aiheutuu erilainen värähtelyn taajuus (El-Azazy ja muut, 2023, s. 3).

Seuraavaksi käydään läpi valon aaltoliikkeen ja fotonin energiaan liittyvät fysiikan kaavat. Ne auttavat ymmärtämään valon ominaisuuksia aaltoliikkeenä ja hiukkasten, fotonien, liikkeenä.

Fotonin energia E on Planckin vakio h kertaa taajuus ν (kaava 1) (El-Azazy ja muut, 2023, s. 1, kaava 1):

$$E = h\nu \text{ [J]}, \quad (1)$$

missä Planckin vakio on $h = 6,62607015 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$.

Taajuus ν on valonnopeus tyhjiössä C jaettuna aallonpituudella λ (kaava 2) (El-Azazy ja muut, 2023, s. 1, kaava 2):

$$\nu = \frac{c}{\lambda} \text{ [Hz]}, \quad (2)$$

missä valon nopeus tyhjiössä on $C = 2,998 \cdot 10^8 \text{ m/s}$.

Aaltoluku $\bar{\nu}$ ilmaistaan kemiassa usein $1/\lambda$ (kaava 3) (El-Azazy ja muut, 2023, s. 1):

$$\bar{\nu} = 1/\lambda \text{ [cm}^{-1}\text{]}. \quad (3)$$

Kun taajuuden ja aaltoluvun yhdistää energian kaavaan saadaan (kaava 4 ja 5) (El-Azazy ja muut, 2023, s. 1, kaavat 3 ja 4):

$$E = \frac{hc}{\lambda}, \text{ ja edelleen} \quad (4)$$

$$E = hc\bar{\nu}. \quad (5)$$

Eri aaltolukuihin ja aallonpituuksiin pohjautuvat menetelmät lajitellaan alueen mukaan lähi-infrapuna eli NIR (near infrared spectroscopy) aaltoluvuilla $13000 - 4000 \text{ cm}^{-1}$, näkyvä lähi-infrapuna Vis-NIR (visible-near infrared) $28600 - 4000 \text{ cm}^{-1}$ ja keski-infrapuna spektroskopiaan MIR (mid-infrared), joka sisältää Fourier muunnetun infrapunaspektroskopian FTIR (Fourier transform infrared) ja vaimentuneen kokonaisheijastus spektroskopian FTIR-ATR (attenuated total reflection) aaltoluvuilla $4000 - 400 \text{ cm}^{-1}$ ja Raman

spektroskopian aaltoluvuilla $1500 - 500 \text{ cm}^{-1}$ (Barra ja muut, 2021, s. 2). Näiden lisäksi spektriä voidaan tutkia kauko-infrapuna-alueella FIR-alueella (far infrared) aaltoluvuilla $400-10 \text{ cm}^{-1}$ (El-Azazy, 2019, s. 3). Aaltolukualueiden ja aallonpituuksien numeroarvoissa on pieniä eroja eri lähteiden mukaan ja taulukossa 3 on esitetty tiivistetysti edellisistä hieman eroavat arvot.

Taulukko 3. Spektroskopian jaottelu aaltoluvun ja aallonpituuden mukaan (El-Azazy, 2019, s. 3)

Lyhenne	Nimi	Aaltoluku (cm^{-1})	Aallonpituus (μm)
NIR	lähi-infrapuna, near-infrared	14000 – 4000	0,7 – 2,5
MIR	keski-infrapuna, mid-infrared	4000-400	2,5 – 25
FIR	kauko-infrapuna, far-infrared	400-10	25 – 300

Suurin osa reaktioista tapahtuu MIR-alueella (El-Azazy ja muut, 2023, s. 2). Se voidaan jakaa ”sormenjäki”-alueeksi ja ”diagnostisen tai toiminnallisen ryhmän” alueeksi (El-Azazy ja muut, 2023, s. 3). Sormenjälki-alueen huippuja on usein vaikea määrittää spektrikuviosta, mutta siellä ilmenevät huiput ovat yksilöllisiä tietyille yhdisteille (El-Azazy ja muut, 2023, s. 3). Toisella alueella tietoja on helpompi lukea eri toiminnallisista ryhmistä (El-Azazy ja muut, 2023, s. 3).

FTIR on nopeampi kuin perinteinen, koska siinä yksi sensori havainnoi spektriä koko laajuudelta interferometrin avulla (Tasumi, 2014, s. 123, s. 132). Se on suosittu menetelmä, joka on ollut laajalti käytössä 1970-luvulta lähtien (Tasumi, 2014, s. 116). FTIR tuloksia voi hyödyntää esimerkiksi kemometrian keinoilla (El-Azazy ja muut, 2023, s. 7–8). FTIR spektroskopia perustuu interferenssi-ilmiöön kahden valonsäteen välillä (Stuart, 2004, s. 18). Interferenssikuvio muodostuu, kun valo taittuu pienestä raosta kulkiessaan, ja laite analysoi tuloksia (Stuart, 2004, s. 18). Tiedot muunnetaan analogisesta digitaaliseksi, jotta laitteen tietokoneyksikkö voi käyttää niihin Fourier transformaatiota (Stuart, 2004, s. 18).

Interferenssissä aallot kohtaavat toisensa, ja ne muodostavat summa-aallon, jossa osa aallosta vahvistuu ja osa kumoutuu. Vahvistumisen kohdalla aallot ovat käyrämuodoltaan samaan suuntaan ja kumoutumisen kohdalla ne ovat vastakkaisia, joten summaksi tulee vähemmän valoa tai ei yhtään.

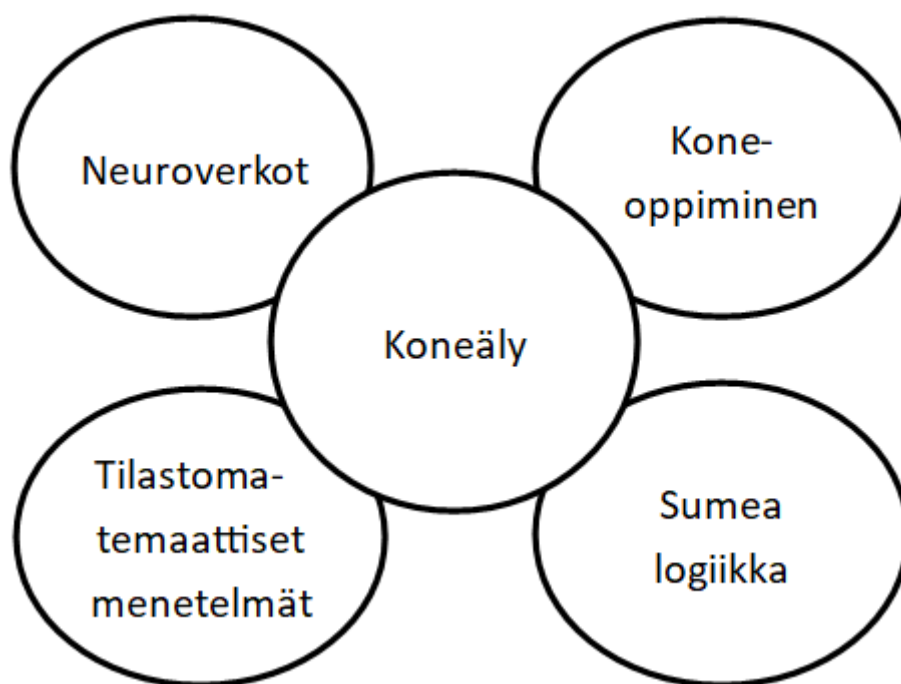
3.2 Kemometria ja kromatografia

Kemometrialla tarkoitetaan matemaattista ja tilastotieteellistä tietojenkäsittelyä materiaalitutkimuksessa (Adams & Barnett, 1995, preface). Se käsittää laajan valikoiman matemaattisia ja tilastotieteellisiä keinoja analysoida laajojen ja monimutkaisten aineistojen kemiallista analyysia (Speight, 2017, s. 135). Polttoaineista voidaan selvittää mm. tiheys, viskositeetti, setaaniluku ja muita kemiallisia ja fyysisiä ominaisuuksia (Speight, 2017, s. 135). Keskeisiä käsitteitä ovat monimuuttujainen normaalijakauma, lineaarinen regressio, derivaatat, matriisit ja vektorit (Mark & Workman, 2007).

Kromatografia tarkoittaa nesteiden ainesosien tutkimista. Niistä erotellaan eri faaseja, liikkuvia ja kiinteitä, ja miten ne suodattuvat (Hoang, 2019, preface). Kromatografia on kajoava menetelmä, jossa erotellaan fyysisesti eri osuuksia tutkittavasta aineesta. Retentioaika on aika, jonka aine tarvitsee siirtyessään alueelta toiselle kromatografiassa (Chromatography Today, n.d.).

4 Tekoäly, koneäly, neuroverkot ja koneoppiminen

Monia koneälyn, tekoälyn ja koneoppimisen tekniikoita voi käyttää samankaltaisiin tehtäviin. Hyötyjä voi saada yhdistämällä eri tapoja. Koneäly (Computational intelligence) koostuu eri osa-alueista, ja joskus näitä nimitetään myös yleisesti tekoälyksi. Tässä kapaleessa käymme läpi mitä eri älykkään tietojenkäsittelyn termit tarkoittavat. Tekoälyä käytetään nykyään yleisterminä puhekielessä kaikenlaiseen automatisoituun tietojenkäsittelyyn, mutta tekniikassa tekoälyyn liittyvät termit jaotellaan tarkemmin. Tekoälyt ja kielimallit, joita netissä voi käyttää, on eri haarassa kuin mallintamiseen käytetyt menetelmät, vaikka tekoälybotit, tai chatbotit, voivat käyttää neuroverkkoja tai vaikkapa syväoppimistä. Mallintamiseen taas voi käyttää koneoppimista, neuroverkkoja ja niiden kanssa sumeaa logiikkaa ja päättelyjärjestelmiä. Kuviossa 2 on mallintamisessa käytettäviä termejä ja ne sisältyvät koneälyyn.

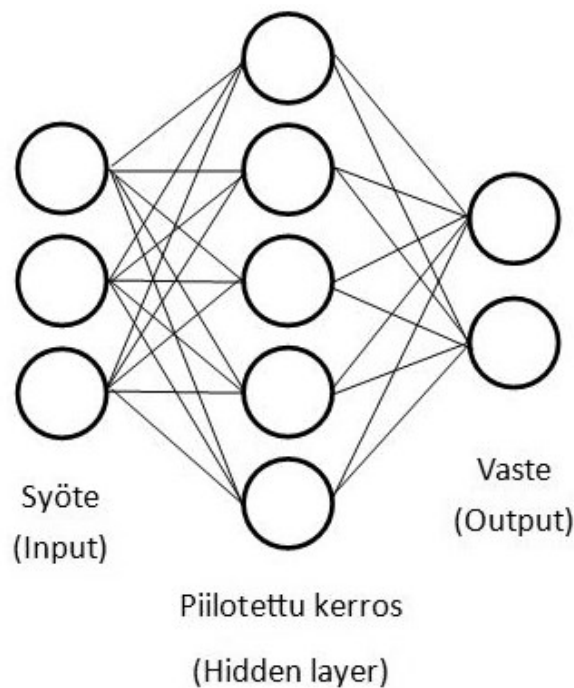


Kuvio 2. Koneälyn yhteen liittyvät termit (mukailtu lähteestä: Siddique & Adeli, 2013, s. 4)

Eri tekniikoita yhdistämällä saadaan synergiaetua, koska joillain tekniikoilla voi olla helppompaa hallita epävarmuutta ja toisilla tavoilla voidaan saada optimoituja koneoppimisen tulokset (Siddique & Adeli, 2013, s. 11). Tietojenkäsittelyssä tavoitteena on optimoitu ja kustannustehokas toiminta, joten tällaisia useita tekniikoita yhdistäviä hybridijärjestelmiä suositaan monissa tutkimuksissa (Siddique & Adeli, 2013, s. 11). Esimerkiksi sumealla (fuzzy) logiikalla voi saada realistisia päättelyketjuja, mutta neuroverkoilla rakennetaan järjestelmän oppiminen lähtöarvoista (Siddique & Adeli, 2013, s. 11). Synergia voidaan jaotella vahvasti tai heikosti yhdistyneisiin tekniikoihin. Vahvasti yhdistyneissä tekniikoita ei pysty erottamaan toisistaan, vaan ne muodostavat yhtenäisen kokonaisuuden, ja heikosti yhdistyneissä jokainen teknologia tai moduuli hoitaa oman osuutensa toistensa kanssa vuorovaikutuksessa (Siddique & Adeli, 2013, s. 11). Erityisesti sumea (fuzzy) logiikka on hyvä apu mallintamiseen, mutta seuraavaksi käydään läpi ensin pohjateoriaa, jota sumean logiikan kanssa yhdistetään.

4.1 Neuroverkot (ANN, Artificial neural network)

Siddique ja Adeli kuvaavat kirjassaan (2013, s. 5) hyvin neuroverkkoja. He kertovat, että neuroverkot simuloivat aivojen toimintaa. Heidän mukaansa, neuroverkossa ohjelmoidut neuronit lähettävät tietoa toisilleen samoin kuten neuronit välittävät tietoa aivoissa synapsien kautta toisilleen. Kuviossa 3 on yksinkertainen neuroverkko kolmella kerroksella, joista yksi on piilotettu. Todellisessa käytössä rakenne voi olla monikerroksinen. Kirjan mukaan neuroverkot ovat tietojenkäsittelyssä tehokkaita, virheenkestäviä ja oppimiskykyisiä (Siddique & Adeli, 2013, s. 5).



Kuvio 3. Kolmikerroksisen neuroverkon kaavakuva

Neuroverkkoja on käytetty jo vuosikymmeniä. Ne ovat keskeinen käsite koneoppimisessa. Koneoppimiseen on eri tapoja, ja siitä seuraavassa kappaleessa. Tekoälyä, joka tekee päätöksiä, sanotaan agentiksi.

4.2 Koneoppiminen, machine learning

Koneoppimisella lajitellaan, määritellään tai ennustetaan tietoa. Yleisesti ottaen koneoppimisessa neuronin kuvaus yritetään arvata neuronin sisällön perusteella (Jung, 2022, s. 12). Määrittämiseen tai ennustamiseen käytetään valittuja oletuksia ja funktioita, jotka ovat kuin ohjeita tekoälyn agentille, ja valittu tapa määrittää miten funktioita käytetään. Tapoja on ohjattu oppiminen, ohjaamaton oppiminen ja vahvistettu oppiminen (Jung, 2022, s. 12).

4.2.1 Ohjattu oppiminen, supervised learning

Ohjatussa oppimisessa neuroverkkoa koulutetaan valmiiksi luokitellulla opetusaineistolla, jonka ihminen on valmiiksi määritellyt (Jung, 2022, s. 12). Siitä järjestelmä oppii tunnistamaan olennaisia kaavoja, ja löytää yhtenäisyydet, jotta se pystyy luokittelemaan tietoa samankaltaisesti kuin opetusaineistossa (Jung, 2022, s. 12). Koulutuksen aikana verkon tuottamia tuloksia verrataan toivottuihin tuloksiin, ja verkon toimintaa säädetään tarpeen mukaan, jotta tulokset vastaavat riittävän hyvin toivottuja tuloksia (Siddique & Adeli, 2013, s. 124). Lopulta agentti pystyy luokittelemaan tietoa ilman esimäärittelyjä (Jung, 2022, s. 12). Tässä yhteydessä puhutaan usein ylisovittamisesta (overfitting), jos verkon koulutusta jatketaan liian kauan. Se tarkoittaa, että verkko ei pysty enää luokittelemaan saman kaltaista tietoa, vaan pelkästään samaa tietoa kuin opetusaineistossa. Silloin verkon toiminta heikkenee, eikä sen vastaukset ole luotettavia. Goodfellow ja muut (2016) sanoivat kirjassaan, että ylisovittamisen voi havaita, kun opetusaineiston ja testiaineiston virhe eroavat liikaa toisistaan (s. 110).

4.2.2 Ohjaamaton oppiminen, unsupervised learning

Ohjaamatonta oppimista käytetään tiedon lajitteluun, kategorisointiin ja ominaisuuksien ja yhtäläisyyksien löytämiseen (Siddique & Adeli, 2013, s. 138–139). Ohjatusta eroten ohjaamattomassa metodissa lähtötietoja ei ole luokiteltu, ja agentti luokittelee tietoa

tunnistamalla samankaltaisuuksia neuroneista ja luomalla omat luokittelusäännöt neuronin ominaisuuksien perusteella (Jung, 2022, s. 13). Sääntöjen luomiseen voi käyttää esimerkiksi lokerointia ja ominaisuuksien oppimista (Jung, 2022, s. 13). Lokeroinnissa tieto laitellaan joukkoihin, joissa on samankaltaisia neuroneja (Jung, 2022, s. 13). Ominaisuuksien oppimisessa käytetään neuronin numeerisia arvoja neuronien lajitteluun (Jung, 2022, s. 13). Ominaisuuksien oppimista käytetään esimerkiksi tiedon visualisointiin ja ulottuvuuden vähentämiseen (Jung, 2022, s. 13).

4.2.3 Vahvistusoppiminen, reinforced learning

Tappiofunktio asettaa neuronin ja hypoteesin yhteyteen arvon, joka kertoo hypoteesin onnistumisesta (Jung, 2022, s. 14). Koneoppimisella yleensä haarukoidaan sellaisia hypoteeseja, joilla tappion arvo on minimaalinen (Jung, 2022, s. 14). Sen sijaan että agentti käyttäisi tappiofunktio-metodia, vahvistusoppimisessa järjestelmä käyttää hypoteesien ennusteita uusien tietueiden luomiseen (Jung, 2022, s. 14).

4.2.4 Syväoppiminen, deep learning

Neuroverkkoa, jossa on monia piilotettuja kerroksia, kutsutaan syväksi verkoksi (deep net). Sen kanssa käytetään syväoppimista. Ei ole tiettyä lukumäärää tarvittaville kerroksille, mutta yleisesti ottaen enemmän perinteisesti (Goodfellow ja muut, 2016, s. 8). Syvän verkon avulla voidaan rakentaa monimutkainen ratkaisualgoritmi yksinkertaisista palasista (Goodfellow ja muut, 2016, s. 5). Usein syvä ja kapea verkko luo luotettavampia tuloksia helpommin kuin leveä ja matala verkko (Eldan & Shamir, 2016, s. 1). Syvät verkot ovat viime vuosien tekoälyn nopean kehityksen takana (Jung, 2022, s. 74). Tyypillisin syväoppimismalli on myötäkytketty syvä neuroverkko (feedforward deep network) eli monitasoinen havainnointiverkko MLP (multilayer perceptron neural network) (Goodfellow ja muut, 2016, s. 5).

4.3 Sumea logiikka, fuzzy logic

Perinteiset tietojenkäsittelymetodit saattavat olla heikkoja epävarmuuksien tai epälineaaristen arvojen käsittelyssä. Yksinkertaisesti sanottuna tietojenkäsittelyn perusta nojaa siihen onko arvo 0 vai 1, päällä tai pois päältä, mutta mitä jos vastaus onkin puolittain päällä tai ehkä päällä. L. A. Zadeh esitteli teoriansa sumeasta logiikasta vuonna 1965, ja hän selitti, että tämänkaltaisiin tilanteisiin soveltuu hyvin sumea logiikka, joka yrittää mallintaa inhimillistä käsitteellisyyttä (s. 338). Sumeat mallit koostuvat kielellisistä kuvauksista järjestelmän toiminnasta (Siddique & Adeli, 2013, s. 67). Näiden ominaisuuksien vuoksi sumea logiikka sopii oikein hyvin monien asioiden mallinnukseen, ja sitä käytetään paljon myös kontrollijärjestelmissä (Siddique & Adeli, 2013, s. 75).

Sumeaa logiikkaa yhdistetään usein neuroverkkojen kanssa neurosumeaksi järjestelmäksi (neurofuzzy) (Alavala, 2008, s.217). Mukautuva neurosumeaa järjestelmä ANFIS (Adaptive Neuro-Fuzzy Inference System) on tällainen tekniikoiden yhdistelmä (Siddique & Adeli, 2013, s. 404).

Sumean mallin rakentaminen koostuu kahdesta eri lähtökodasta: rakenteen valinta ja muuttujien yksilöiminen. Rakennetta valittaessa määritellään toivotut syötteet ja vasteet, päättelyjärjestelmä, kielelliset kuvaukset vastaamaan syötteitä ja vasteita ja luodaan joukko sumeita ehtolausekkeita (Siddique & Adeli, 2013, s. 69). Päättelyjärjestelmiä ovat esimerkiksi Mamdani, Sugeno tai Tsukamoto (Siddique & Adeli, 2013, s. 69). Muuttujiksi asetetaan sumean setin jäsenfunktioiden parametreja, joille asetetaan kielelliset kuvaukset (Siddique & Adeli, 2013, s. 70).

Yleisimpiä sumeita päättelyjärjestelmiä ovat seuraavat:

1. Mamdani fuzzy inference,
2. Sugeno fuzzy inference ja
3. Tsukamoto fuzzy inference (Siddique & Adeli, 2013, s. 49–50).

Mamdanin sumean mallin toiminnassa syötteenä käytetään tarkkoja arvoja, ja algoritmin lopputulos selkiytetään (defuzzification) tarkaksi arvoksi (Siddique & Adeli, 2013, s.

50). Sugeno-mallissa yhdistyy Takagin ja Sugenon (v. 1985) ja Sugenon ja Kangin (v. 1988) teorit. Sen avulla luodaan sumeita ehtolauseita annetun syöte- ja vastejoukon pohjalta (Siddique & Adeli, 2013, s. 50). Se on hieman nopeampi ajaa kuin Mamdani-malli, koska erillistä selkiyttämisvaihetta ei tehdä, vaan päättelyssä käytetään painotettuja keskiarvoja (Siddique & Adeli, 2013, s. 52). Tsukamotoissa on yksinkertaistettu selkiyttämisvaihe, ja sitä ei käytetä kovin paljoa tutkimuksessa (Siddique & Adeli, 2013, s. 54).

4.4 Monte Carlo ja dropout -metodit

Monte Carlo algoritmit arvioivat keskimääräisen tuloksen jonkinlaisella virhearvolla (Goodfellow ja muut, 2016, s. 587). Se on usein kustannustehokas metodi (Goodfellow ja muut, 2016, s. 587). Monte Carlo Dropout on Y. Galin ja Z. Ghahramanin vuonna 2016 esittelemä tehokas koneoppimistekniikoiden yhdistelmä.

Aiemmin mainittua ylisovittamista koitetaan ehkäistä dropout-metodilla. R. Vij (2023) luonnehtii dropout-metodia vastaavaksi kuin luonnon evoluutio. Hän selittää, että neuroverkosta pudotetaan pois summittaisesti ennalta valittu määrä neuroneita ja liitoksia pois joka kerrokselta, ja tämän vuoksi verkko joutuu soveltamaan enemmän tuottaakseen vastaavia tuloksia.

5 Polttoaineiden mallintaminen kirjallisuudessa

Bukkarapu ja Krishnasamy (2022) ovat arvioineet tutkimuksessaan malleja, joilla ennustetaan biodieselin ominaisuuksia (s. 13). Käytettyjä keinoja tutkimuksissa ovat sekoituslait, FAME-pohjaiset mallit, koostumuksen pohjalta tehdyt arviot ja datapohjaiset tekniikat (Bukkarapu & Krishnasamy, 2022, s. 13). He ovat koonneet malleja eri ominaisuuksien ennustamiseen: lämpöarvo, setaaniluku, suodatettavuuden rajalämpötila, Conradson-hiiltojäännös, tiheys, leimahduspiste, jodiluku, kinemaattinen viskositeetti, voitelevuus ja hapettumisvakaus (s. 14–22). He löysivät malleista tiettyjä puutteita ja suosittelivat että neuroverkolla voisi kiertää mallintamisen ongelmat (s. 22).

Hall ja muut (2022, s. 463) käyttivät tutkimuksessaan kvantitatiivinen rakenne-ominaisuus -yhteyttä (quantitative structure–property relationship, QSPR) ennustamaan potentiaalisia polttoaineita. Heidän mukaansa ottamalla tietoaaineistoksi puhtaita aineita, pystyy ennustamaan lähes mitä vaan ominaisuuksia rakenteen vertailulla (s. 464). Siinä on kuitenkin haasteensa Hallin ja muiden mukaan (s. 464). Hekin optimoivat tutkimustuloksia myös koneoppimisella (s. 466).

5.1 Mallintamisen lähtöarvot

Mallintamiseen tarvittavia lähtöarvoja voi koota tutkittavista seoksista spektroskopialla ja kromatografialla. Cunhan ja muiden (2020) tutkimuksessa käytettiin 149 näytettä sekoittamalla erilaisia biodieseleitä keskenään (s. 5). He tutkivat näytteet lähi-infrapuna Fourier-muunnetulla infrapunaspektroskopialla (NIR-FT-IR), ja tekivät muita mittauksia lähtötietojen hankintaan (s. 6). Koska spektroskopian metodeja on monia, sovelias tutkimusmetodi täytyy valita tutkimuskohteen partikkelikoon ja tarkkuuden mukaan (Balogun ja muut, 2024, s. 4). Hall ja muut (2022, s. 465) mittasivat tietoja polttoaineseoksista kaksikulotteisella kaasukromatografialla (two-dimensional gas chromatography, GC x GC). Vaikka Hall ja muut (2022) tutkivat ensisijaisesti perinteisiä lentopolttoaineita, oli tutkimuksessa myös e-polttoaineita.

Yksi tapa on koostaa lähtöarvoja muista tutkimuksista (Mostafaei, 2018, s. 671) tai tietokannoista (Hall ja muut, 2022, s. 465). He koostivat puhtaiden yhdisteiden datasetin eri tietokannoista (Hall ja muut, 2022, s. 465).

5.2 Tekoäly polttoaineiden ominaisuuksien mallintamisessa

Tekoälyyn liittyen eräitä koneoppimista käyttäviä tutkimuksia biodieselin mallintamisesta olivat Bukkarapun ja Krishnasamyn (2022) koosteessa mm. Mostafaein (2018) tutkimus, jossa käytettiin adaptiivista sumeaa neuroinferenssijärjestelmää (ANFIS, adaptive neuro-fuzzy inference system), ja Cunhan ja muiden (2020) monimuuttujaisia regressiomalleja käyttävä tutkimus. Cunhan ja muiden (2020) tutkimuksessa todettiin, että heidän käyttämänsä keino sopii kustannustehokkaaksi tavaksi valvoa polttoaineiden ominaisuuksia (s. 11).

Aghbashlon ja muiden (2021) koostetutkimuksessa on käyty läpi tutkimuksia, joissa on käytetty koneoppimista biodieselin tuotantoon, ominaisuuksien mallintamiseen ja biodieseliä käyttävien moottoreiden toiminnan mallintamiseen. Heidän tutkimuksensa yhteenvetona selvisi, että MLPNN (Multi-Layer Perceptron Neural Network) ja Takagi-Sugeno ANFIS (Adaptive Network-based Fuzzy Inference System) menetelmillä pystyttiin luotettavasti ennustamaan biodieselin fysikaaliskemiallisia ominaisuuksia (Aghbashlo ja muut, 2021, s. 90).

Tekoälyä on käytetty monissa tutkimuksissa spektroskopian datan analysointiin (Barra ja muut, 2021, s. 9; Hall ja muut, 2022, s. 466) ja kromatografian retentioaikojen ennustamiseen (Singh ja muut, 2023, s. 7). Hallin ja muiden (2022) käyttämä metodi oli M-QSPR (Mean quantitative structure–property relationship), jonka kanssa he käyttivät Monte-Carlo dropout -neuroverkkoa (Monte-Carlo dropout neural network, MCNN) (s. 476). He käyttivät kolmea datasettiä tekoälyn kouluttamiseen (s. 466). Ensimmäisessä oli puhtaita

yhdisteitä (pure compounds), toisessa puhtaita yhdisteitä (pure compounds) ja perinteisiä polttoaineita, ja kolmannessa edellisten lisäksi myös synteettisiä polttoaineita (s. 466). Näillä he pystyivät vertailemaan tuloksien oikeellisuutta (Hall ja muut, 2022, s. 466).

Mean quantitative structure–property relationship (M-QSPR) yhdistettynä Monte-Carlo dropout -neuroverkkoon kiersi kvantitatiivisen rakenne-ominaisuus -yhteys metodin (quantitative structure–property relationship, QSPR) ongelman (Hall ja muut, 2022, s. 476). Näitä tekniikoita yhdistämällä vältyttiin sekoitussääntöjen käytöltä ja yhdistäminen mahdollisti suuremman lähtöaineiston käytön.

Kvanttikoneoppimista on ruvettu tutkimaan ja käyttämään lääkkeiden mallintamisessa (Elbadawi ja muut, 2021, s. 776; Xia & Kais, 2018, s. 4). Elbadawi ja muiden tutkimuksensa yhteenvedoissa esitetään, että Bayesialaisella neuroverkolla voi välttää ylisovittamisen. Kvanttilaskennalla voi saada tutkimukseen lisää laskentatehoa, jotta monimutkaisemmat kaavat tai laajemmat datasetit saadaan käsiteltyä. Joka tapauksessa tutkimuksessa muistutetaan, että laskennan lopputuloksen laatu riippuu lähtödatan laadusta (Elbadawi ja muut, 2021, s. 776). Taulukossa 4 on koottuna eri tekoälytekniikoita kirjallisuudesta.

Taulukko 4. Tekoälytekniikat, joita käytetään polttoainetutkimuksessa

Lyhenne	Selite englanniksi	Käytösesimerkki
ANFIS	Adaptive neuro-fuzzy inference system	Setaaniluvun ennustaminen (Mostafaei, 2018)
ANN	Artificial neural network	Kromatografian retentioaikojen ennustaminen (Singh ja muut, 2023, s. 7)
ML - DL	Machine learning - deep learning	Kromatografian retentioaikojen ennustaminen (Singh ja muut, 2023, s. 7)
MLPNN	Multi-Layer perceptron neural network	Biodieselin fyysisten ominaisuuksien ennustaminen (Aghbashlo ja muut, 2021, s. 90)
	Multivariate regression model, monimuuttujainen regressiomalli	Polttoaineiden ominaisuuksien ennustaminen (Cunhan ja muut, 2020 s. 3)
M-QSPR with MCNN	Mean quantitative structure–property relationship with Monte-Carlo dropout neural network	Polttoaineiden ominaisuuksien ennustaminen (Hall ja muut, 2022, s. 476)
RL	Reinforced learning, vahvistettu oppiminen	Molekyyliden optimointi (Elbadawi ja muut, 2021, s. 771; Zhou, 2019, s. 3)
QDL, QML	Quantum deep learning, Quantum machine learning	Molekyyliden rakenteiden laskeminen (Xia & Kais, 2018, s. 4)

6 Johtopäätökset

Koneälyn tekniikoista erityisesti sumeat neuroverkot ovat tehokkaita mallinnuksessa. Monte Carlo ja dropout -metodien yhdistäminen vaikutti myös olevan tehokas tekniikka, jolla pystyi saamaan luotettavia tuloksia.

Tekoälyllä saa apua laajojen tietoaaineistojen analysointiin monessa eri kemian tutkimuksessa. Tulokset kannattaa aina varmistaa kokeellisin keinoin. Tekoälyn käytöstä saa isojen lähtöaineistojen käsittelyyn sen hyödyn, että tietokone käy lyhyemmässä ajassa läpi suuren aineiston kuin ihminen, ja tekoälyn antamien tulosten perusteella voidaan kokeellisesti mitata valitut asiat. Perinteiset kemometrian tavat ovat hyödyllisiä tekoälyn rinnalla validointiin. Tekoälyllä voi optimoida seosten koostumuksia, ja se on tehokkain tapa selvittää uusia mahdollisia polttoaineseoksia. Lähtödatan on oltava laadukasta, jotta tekoälyn avulla saatavat tulokset ovat luotettavia ja todenmukaisia.

Kirjallisuuden perusteella tietoja polttoaineseoksien pitoisuuksista voi mallintaa lähtöaineiden pohjalta, jos tietää mitä ainesosia polttoaine sisältää, sekä seoksen rakenteellisen koostumuksen pohjalta. Ainesosien koostumuksen ja ominaisuudet voi koota olemassa olevista lähteistä, ja mitata eri menetelmin laboratoriossa.

Kirjallisuudessa lähtödataa on kerätty eri tavoin. Tapoja kannattaa käyttää rinnakkain, ja vertailla saatuja tuloksia varmistaakseen tulosten laadukkuus. Olemassa olevaa tietoa voi kerätä eri tietokannoista ja tutkimuksista, ja tutkittavaksi saatavia testieriä polttoaineista voi tutkia spektroskopian ja kromatografian keinoin.

Tulevaisuudessa kvanttietokoneita voi olla laajemmin käytössä, ja niillä voi lisätä laskentatehoa ja nopeutta isojen aineistojen käsittelyyn. Lähitulevaisuudessa monilla tutkimuskeskuksilla voi olla edessään selvittää voisiko tekoälyn ottaa käyttöön tutkimustyössä. Lähtöaineiston ja lopputulosten laadun varmistaminen on avainasemassa, jotta tutkimustuloksia voi pitää luotettavina.

Jatkon kannalta kannattaa etsiä johonkin tiettyyn tarpeeseen ja projektiin sopivat parhaat tekniikat. Käyttöön kannattaa ottaa rinnakkain koneälyn tekniikat ja fyysiset mitaustekniikat. Myös markkinoiden kysyntää uusiutuville polttoaineille ja poliittisten päätösten tilannetta ja vaikutusta kannattaa tutkia lisää. Ympäristöstandardien muutoksia on syytä seurata arvioidessa vaihtoehtoja uusiksi polttoaineiksi.

Opetellakseen tekoälyn käyttöä mallinnuksessa kannattaisi testata esimerkkejä Matlab-ohjelmalla Siddiquen ja Adelin kirjasta ”Computational Intelligence: Synergies of Fuzzy Logic, Neural Networks and Evolutionary Computing” (2013): Fuzzy Logic (s. 434), Neural Systems (s. 461) ja Neuro-Fuzzy Systems (s. 498). Matlabista löytyy valmiita kirjastoja avuksi, ja myös monille eri ohjelmointikielille löytyy esimerkkejä neuroverkkojen ohjelmoinnista kirjallisuudesta.

Lähteet

- Aakko-Saksa, P. T., Lehtoranta, K., Kuitinen, N., Järvinen, A., Jalkanen, J.-P., Johnson, K., Jung, H., Ntziachristos, L., Gagné, S., Takahashi, C., Karjalainen, P., Rönkkö, T., & Timonen, H. (2023). Reduction in greenhouse gas and other emissions from ship engines: Current trends and future options. *Progress in Energy and Combustion Science*, 94, 101055. <https://doi.org/10.1016/j.pecs.2022.101055>
- Aakko-Saksa, P., Murtonen, T., Söderena, P., Laurikko, J., & Nylund, N.-O. (2019). Sustainable and clean fuels for heavy-duty vehicles. In N. Schubert (Ed.), *Fuels : conventional and future energy for automobiles: 12th International Colloquium Fuels - Conventional and Future Energy for Automobiles (2019), Ostfildern, Deutschland, 25.06.2019 – 26.06.2019* (s. 39-45). Technische Akademie Esslingen.
- ABC. (n.d.). *Uusiutuvan HVO dieselin valinta on vastuullinen teko*. Noudettu 24.1.2025 osoitteesta <https://www.abcasemat.fi/artikkelit/tankkaus-nero-diesel-vastuullinen-teko>
- Adams, M. J., & Barnett, N. W. (1995). *Chemometrics in Analytical Spectroscopy*. Royal Society of Chemistry, The. <http://ebookcentral.proquest.com/lib/tritonia-ebooks/detail.action?docID=1185363>
- Aghbashlo, M., Peng, W., Tabatabaei, M., Kalogirou, S. A., Soltanian, S., Hosseinzadeh-Bandbafha, H., Mahian, O., & Lam, S. S. (2021). Machine learning technology in biodiesel research: A review. *Progress in Energy and Combustion Science*, 85, 100904. <https://doi.org/10.1016/j.pecs.2021.100904>
- Alavala, C. R. (2008). *Fuzzy Logic and Neural Networks: Basic Concepts & Application*. New Age International Ltd. <http://ebookcentral.proquest.com/lib/tritonia-ebooks/detail.action?docID=442130>
- Balogun, F., Wang-Alho, H., Sirviö, K., & Mikulski, M. (2024). FTIR Analysis for Determining Stability of Methanol–HVO Blends for Non-Road Engine Application. *Energies*, 17(16), Article 16. <https://doi.org/10.3390/en17163921>

- Barra, I., Haefele, S. M., Sakrabani, R., & Kebede, F. (2021). Soil spectroscopy with the use of chemometrics, machine learning and pre-processing techniques in soil diagnosis: Recent advances—A review. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, 135, 116166. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2020.116166>
- Bukkarapu, K. R., & Krishnasamy, A. (2022). A critical review on available models to predict engine fuel properties of biodiesel. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 155, 111925. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2021.111925>
- Cunha, C. L., Torres, A. R., & Luna, A. S. (2020). Multivariate regression models obtained from near-infrared spectroscopy data for prediction of the physical properties of biodiesel and its blends. *Fuel*, 261, 116344. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2019.116344>
- Chromatography Today (n.d.). Understanding the Difference Between Retention Time and Relative Retention Time. *Chromatography Today*. Noudettu 31.3.2025 osoitteesta <https://www.chromatographytoday.com/news/autosamplers/36/breaking-news/understanding-the-difference-between-retention-time-and-relative-retention-time/31166>
- Dang Hoang, V. (Toim.). (2019). *Chemometrics and Data Analysis in Chromatography*. IntechOpen. <https://doi.org/10.5772/intechopen.72089>
- Ebadi Torkayesh, A., Hendiani, S., Walther, G., & Venghaus, S. (2024). Fueling the future: Overcoming the barriers to market development of renewable fuels in Germany using a novel analytical approach. *European Journal of Operational Research*, 316(3), 1012–1033. <https://doi.org/10.1016/j.ejor.2024.02.039>
- El-Azazy, M. (Toim.). (2019). *Infrared Spectroscopy: Principles, Advances, and Applications*. IntechOpen. <https://directory.doabooks.org/handle/20.500.12854/130616>
- El-Azazy, M., Al-Saad, K., & El-Shafie, A. S. (Toim.). (2023). *Infrared Spectroscopy: Perspectives and Applications*. IntechOpen. <https://directory.doabooks.org/handle/20.500.12854/97346>

- Elbadawi, M., Gaisford, S., & Basit, A. W. (2021). Advanced machine-learning techniques in drug discovery. *Drug Discovery Today*, 26(3), 769–777. <https://doi.org/10.1016/j.drudis.2020.12.003>
- Eldan, R., & Shamir, O. (2016). *The Power of Depth for Feedforward Neural Networks* (No. arXiv:1512.03965). arXiv. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1512.03965>
- Gal, Y., & Ghahramani, Z. (2016). *Dropout as a Bayesian Approximation: Representing Model Uncertainty in Deep Learning* (No. arXiv:1506.02142). arXiv. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1506.02142>
- GMI. (2025). Renewable Diesel Market Size, Global Report 2025-2034. *Global Market Insights Inc.* Noudettu 29.3.2025 osoitteesta <https://www.gminsights.com/industry-analysis/renewable-diesel-market>
- Goodfellow, I., Bengio, Y. & Courville, A. (2016). *Deep Learning*. MIT Press. Noudettu 28.3.2025 osoitteesta <https://www.deeplearningbook.org/>
- Gordon, B. M. (2011). *Artificial Intelligence: Approaches, Tools, and Applications: Approaches, Tools and Applications*. Nova Science Publishers, Incorporated. <http://ebookcentral.proquest.com/lib/tritonia-ebooks/detail.action?docID=3021220>
- Hall, C., Creton, B., Rauch, B., Bauder, U., & Aigner, M. (2022). Probabilistic Mean Quantitative Structure–Property Relationship Modeling of Jet Fuel Properties. *Energy & Fuels*, 36(1), 463–479. <https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.1c03334>
- Heywood, J. B. (2018). *Internal combustion engine fundamentals* (Second edition.). McGraw-Hill Education.
- Jansen, R. A. (2013). *Second generation biofuels and biomass: Essential guide to investors, scientists and decision makers / Roland A. Jansen*. Wiley.
- Jung, A. (2022). *Machine Learning: The Basics*. Springer. <http://ebookcentral.proquest.com/lib/tritonia-ebooks/detail.action?docID=6869311>
- Lim, J., Aklin, M., & Frank, M. R. (2023). Location is a major barrier for transferring US fossil fuel employment to green jobs. *Nature Communications*, 14(1), 5711. <https://doi.org/10.1038/s41467-023-41133-9>

- Mark, H., & Workman Jr., J. (2007). *Chemometrics in Spectroscopy*. Elsevier Science & Technology. <http://ebookcentral.proquest.com/lib/tritonia-ebooks/detail.action?docID=305536>
- Mikkonen, S. & Nuottimäki, J. (2019). Sustainable and clean fuels for heavy-duty vehicles. In N. Schubert (Ed.), *Fuels : conventional and future energy for automobiles: 12th International Colloquium Fuels - Conventional and Future Energy for Automobiles (2019), Ostfildern, Deutschland, 25.06.2019 – 26.06.2019* (s. 22-26). Technische Akademie Esslingen.
- Mostafaei, M. (2018). ANFIS models for prediction of biodiesel fuels cetane number using desirability function. *Fuel*, 216, 665–672. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2017.12.025>
- Motiva. (2024, 20. helmikuuta). *Uusiutuva diesel*. Noudettu 4.7.2024 osoitteesta [https://www.motiva.fi/ratkaisut/kestava liikenne ja liikkuminen/vaalitse auto viisaasti/energiالاhteet/uusiutuva diesel](https://www.motiva.fi/ratkaisut/kestava_liikenne_ja_liikkuminen/vaalitse_auto_viisaasti/energiالاhteet/uusiutuva_diesel)
- Neste. (n.d.). *Neste MY Uusiutuva Diesel – huominen tehdään tänään*. Noudettu 31.3.2025 osoitteesta <https://www.neste.fi/yrityksille/tuotteet/polttoaineet/neste-my-uusiutuva-diesel>
- Neste. (2020). *Neste Renewable Diesel Handbook*. Noudettu 31.3.2025 osoitteesta <https://static1.squarespace.com/static/6155b5bdada6ea1708c2c74d/t/64c9fab8847f6205f545a21c/169095853375/0/2020-10+Neste+Renewable+Diesel+Handbook.pdf>
- Petzold, A., Lauer, P., Fritsche, U., Hasselbach, J., Lichtenstern, M., Schlager, H., & Fleischer, F. (2011). Operation of Marine Diesel Engines on Biogenic Fuels: Modification of Emissions and Resulting Climate Effects. *Environmental Science & Technology*, 45(24), 10394–10400. <https://doi.org/10.1021/es2021439>
- Rodrigue, J.-P., Comtois, C., & Slack, B. (2016). *The Geography of Transport Systems*. Taylor & Francis Group. <http://ebookcentral.proquest.com/lib/tritonia-ebooks/detail.action?docID=4771887>
- Siddique, N., & Adeli, H. (2013). *Computational Intelligence: Synergies of Fuzzy Logic, Neural Networks and Evolutionary Computing*. John Wiley & Sons, Incorporated.

- <http://ebookcentral.proquest.com/lib/tritonia-ebooks/detail.action?docID=1160768>
- Singh, Y. R., Shah, D. B., Maheshwari, D. G., Shah, J. S., & Shah, S. (2023). Advances in AI-Driven Retention Prediction for Different Chromatographic Techniques: Unraveling the Complexity. *Critical Reviews in Analytical Chemistry*, 0(0), 1–11. <https://doi.org/10.1080/10408347.2023.2254379>
- Sirviö, K. (2018). *Issues of various alternative fuel blends for off-road, marine and power plant diesel engines* [doctoral Thesis, Vaasan yliopisto]. <https://osuva.uwasa.fi/handle/10024/7363>
- Stuart, B. H. (2004). *Infrared Spectroscopy: Fundamentals and Applications*. John Wiley & Sons, Incorporated. <http://ebookcentral.proquest.com/lib/tritonia-ebooks/detail.action?docID=194354>
- Tasumi, M. (2014). *Introduction to Experimental Infrared Spectroscopy: Fundamentals and Practical Methods*. John Wiley & Sons, Incorporated. <http://ebookcentral.proquest.com/lib/tritonia-ebooks/detail.action?docID=7103967>
- Turunen, R., & Niemi, S. (2002). *Polttomoottorit*. Teoksessa: Raiko, R. ja muut. (toim.), International Flame Research Foundation – Suomen kansallinen osasto. *Poltto ja palaminen* (2. täyd. p.). Teknillistieteelliset akatemit.
- USDA. (2024, kesäkuuta 11). U.S. Renewable Diesel Production Growth Drastically Impacts Global Feedstock Trade | USDA, U.S. Department of agriculture, Foreign Agricultural Service. <https://www.fas.usda.gov/data/us-renewable-diesel-production-growth-drastically-impacts-global-feedstock-trade>
- Vij, R. (2023, 3. maaliskuuta). Combating Overfitting with Dropout Regularization. *Towards Data Science*. Noudettu 28.3.2025 osoitteesta <https://towardsdatascience.com/combating-overfitting-with-dropout-regularization-f721e8712fbe/>
- Virta, I. (2025, 19. helmikuuta). Nesteen juhlistu huipputuote näyttää nyt ongelmajätteeltä—*Tekniikan Maailma*. Noudettu 29.3.2025 osoitteesta <https://tekniikanmaailma.fi/nesteen-juhlittu-huipputuote-nayttaa-nyt-ongelmajatteelta/>

- Xia, R., & Kais, S. (2018). Quantum machine learning for electronic structure calculations. *Nature Communications*, 9(1), 4195. <https://doi.org/10.1038/s41467-018-06598-z>
- Yhdistyneet kansakunnat. (2015). *THE 17 GOALS | Sustainable Development*. Noudettu 29.3.2025 osoitteesta <https://sdgs.un.org/goals>
- Zadeh, L. A. (1965). Fuzzy sets. *Information and Control*, 8(3), 338–353. [https://doi.org/10.1016/S0019-9958\(65\)90241-X](https://doi.org/10.1016/S0019-9958(65)90241-X)
- Zhou, Z., Kearnes, S., Li, L., Zare, R. N., & Riley, P. (2019). Optimization of Molecules via Deep Reinforcement Learning. *Scientific Reports*, 9(1), 10752. <https://doi.org/10.1038/s41598-019-47148-x>