

Bogusław Haduch  
Instytut Nafty i Gazu, Kraków

## Zastosowanie symulacji neuronowych i algorytmów logiki rozmytej dla opisu nieliniowych zależności we właściwościach benzyn silnikowych zawierających w swoim składzie bioetanol

### Wstęp

Techniki modelowania sieciami neuronowymi powszechnie używa się do badań skomplikowanych funkcji (optymalizowanie zysku przedsiębiorstw, badanie celowości inwestycji itp.) i obserwowanych zjawisk (optymalizowanie procesów chemicznych, przewidywanie wyników nowatorskich eksperymentów), trudnych i niejednoznacznych przy próbie opisu. Takie problemy występują przy opisie właściwości paliw węglowodorowych, a szczególnie benzyn silnikowych zawierających związki tlenowe, np. etanol. Zastosowanie do badania tych zależności i tworzenia modelu danych uzyskanych za pomocą wielu metod badawczych wskaże wyraźniej czynniki wpływające na

nieliniowe właściwości benzyn silnikowych. W niniejszej pracy wykorzystano dane uzyskane w projekcie INiG 953/TP/2010 pt.: *Opracowanie technologii i wdrożenie do produkcji bezołowiowej benzyny silnikowej E10*.

Przeanalizowano też wyniki badań szeregu próbek paliw pochodzących z różnych źródeł (o różnym składzie) mieszczących się w zakresie składów benzyn silnikowych dostępnych na rynku paliw.

Szacowanie istotnych, ale nieliniowych właściwości benzyny silnikowej zawierającej związki tlenowe przy wykorzystaniu sieci neuronowych może być użytecznym narzędziem pomocnym producentowi tego gatunku paliwa.

### Problem nieaddytywności właściwości w benzynach silnikowych zawierających biokomponenty

Paliwa do silników o zapłonie iskrowym powinny spełnić wysokie wymagania współczesnych wysiłonych silników spalinowych, wyposażonych, między innymi, w wielopunktowe systemy wtrysku paliwa oraz katalityczne, wielofunkcyjne układy oczyszczania spalin, dlatego muszą posiadać odpowiednie właściwości użytkowe i eksploatacyjne. Jakość tych paliw, a więc ich właściwości, staje się wypadkową wymagań stawianych przez konstruktorów silników, ekologów, producentów paliw oraz ich możliwości technologicznych [4]. W miarę postępu w doskonaleniu konstrukcji silników samochodowych oraz technologii oczyszczania spalin będą wzrastać wymagania co do jakości paliw silnikowych.

Tymczasem wprowadzanie w skład benzyn silnikowych biokomponentów stwarza określone problemy [1, 5]. Jednym z nich jest nieaddytywność niektórych właściwości. Zjawisko to spowodowane jest tym, że w benzynie silnikowej mieszane są ze sobą frakcje węglowodorowe o różnym składzie grupowym. Sam proces zmieszania ze sobą różnych grup węglowodorowych powoduje, że dana właściwość mieszaniny jest różna od spodziewanej, wynikającej z prostego wyliczenia sumy iloczynów udziałów poszczególnych frakcji i wartości ich właściwości. Oznacza to, że w pewnych przypadkach właściwości benzyny bazowej, która jest przygotowywana do wkomponowywania etanolu, mogą wymagać korekty.

Do parametrów nieaddytywnych zalicza się liczby oktanowe i właściwości lotnościowe mieszanin etanolu z frakcjami węglowodorowymi oraz bazową benzyną silnikową.

Jednymi z najważniejszych nieaddytywnych właściwości komponentów są **liczby oktanowe** (badawcza i motorowa). Według [7] wprowadzenie do składu benzyn silnikowych (węglowodorowych) 10% (V/V) etanolu zwiększy o kilka jednostek indeks oktanowy tak powstałej mieszanki (liczba badawcza + liczba motorowa)/2. Przyrost oktanowy powstałej benzyny silnikowej zależy od liczb oktanowych poszczególnych składników węglowodorowych paliwa. Efekty przyrostu indeksu oktanowego są inne dla liczby oktanowej badawczej i liczby oktanowej motorowej. Liczba oktanowa motorowa wykazuje mniejszy przyrost niż liczba oktanowa badawcza.

Wielkością łączącą parametry (skład frakcyjny i prężność par) istotne dla stabilnej pracy silnika samochodowego jest lotność.

Poszczególne obszary krzywej składu frakcyjnego są istotne przy ocenie właściwości eksploatacyjnych benzyny silnikowej. Związane są z rozruchem zimnego silnika, szybkością nagrzewania się silnika, stabilnością pracy oraz z zawartością najcięższych składników benzyny silnikowej, które niekorzystnie wpływają na olej silnikowy, rozcieńczając go.

Na skłonność do tworzenia korków parowych w układzie paliwowym pojazdów oraz emisję szkodliwych substancji wskutek parowania węglowodorów wpływ ma

prężność par benzyny silnikowej, od której zależy również łatwość rozruchu zimnego silnika.

Dlatego określa się, w zależności od pory roku, zakres parametrów lotnościowych benzyny silnikowej (prężność par benzyny oraz jej procent odparowania do temperatury 70°C) – jest to niezbędne z uwagi na warunki klimatyczne kraju, w którym użytkowane jest paliwo.

Dodanie etanolu do mieszaniny węglowodorowej powoduje z reguły nieaddytywny wzrost ilości odparowania benzyny do 70°C (pomimo że temperatura wrzenia etanolu wynosi 78°C), a także wzrost ilości odparowanego paliwa do 100°C. Zależnie od składu komponentowego benzyny bazowej (szczególnie udziału lekkich frakcji węglowodorowych) wprowadzenie etanolu spowoduje, że mogą wystąpić problemy z osiągnięciem wymaganych wartości E70 oraz E100 [5, 7].

Pomimo niskiej prężności par etanolu (około 15,4 kPa) [7] jego zmieszanie z benzynowymi frakcjami węglowodorowymi powoduje uzyskanie bardzo wysokiej wartości prężności par [7] (nieaddytywne podnoszenie prężności par mieszanki w porównaniu do prężności par benzyny bazowej).

Trudności w określaniu prężności par benzyn silnikowych po zmieszaniu z bioetanolem były powodem stosowania różnych modeli matematycznych do przewidywania prężności par mieszanin, jednak stosowane dotychczas modele nie odzwierciedlają wszystkich spodziewanych przypadków, stąd pojawiające się rozbieżności.

### Sieci neuronowe jako przydatne narzędzie przy opisie skomplikowanych zjawisk fizykochemicznych [8, 9]

Podczas opisywania zjawisk fizykochemicznych zdarza się, że nie można któregoś z nich przedstawić w prosty, niebudzący wątpliwości sposób. Wówczas prosta aproksymacja liniowa nie oddaje sensu zjawiska. Zdarza się, że modele nie sprawdzają się, prowadząc czasem do formułowania niesłusznych opinii o całkowitym braku możliwości matematycznego opisywania całości lub części zjawisk. Właśnie w takich przypadkach najszybszym i najwygodniejszym rozwiązaniem problemu może stać się wykorzystanie sieci neuronowych, potrafiących opisywać zależności nieliniowe.

Sieci neuronowe [3, 8] są zdolne do odwzorowywania bardzo złożonych funkcji, co w szczególnych przypadkach przy połączeniu ich nieliniowego charakteru bardzo wzbogaca sferę ich zastosowań. Sieci neuronowe pozwalają kontrolować złożony problem wielowymiarowości, co jest znacznie trudniejsze przy zastosowaniu innych metod. Sieci neuronowe konstruują modele na podstawie danych

reprezentatywnych dla badanego zjawiska, zebranych i podanych przez badacza. Poprzez oparcie się na uzyskanej strukturze danych sieć eksploatuje powstały model realizujący oczekiwania użytkownika. Sieci neuronowe potwierdziły swoją przydatność w finansach, medycynie, geologii, fizyce, chemii, elektronice, automatyce itd.

Ze względu na swoje właściwości sieci neuronowe mogą być zastosowane z dużym prawdopodobieństwem sukcesu w sytuacjach, w których pojawiają się trudności wynikłe z próby tworzenia modelu matematycznego.

Dostosowanie modelu do obiektu następuje w wyniku doboru zmiennych opisujących model. Efekt zadowalający uzyskany jest wówczas, gdy spodziewany wynik zgadza się (z przyjętym dopuszczalnym błędem) z wynikami uzyskanymi doświadczalnie. Poprawny model matematyczny badanego zjawiska czy procesu pozwala prawidłowo rozwiązywać wiele problemów związanych z przewidywaniem, klasyfikacją lub sterowaniem. Aby możliwe było

stosowanie sieci neuronowych, konieczne jest istnienie rzeczywistej zależności lub zespołu zależności pomiędzy

obserwowanym zjawiskiem a zebranymi danymi, a także posiadanie odpowiedniej liczby danych.

### Logika rozmyta (*fuzzy logic*) jako przydatne narzędzie przy opisie skomplikowanych zjawisk fizykochemicznych; systemy hybrydowe [2, 3, 9]

Zbiory rozmyte zostały wprowadzone przez Lotfiego A. Zadeha w 1965 r. w celu reprezentowania przetwarzania danych i informacji posiadających niestatystyczne niepewności. Logika rozmyta jest składnikiem wnioskowania, umożliwiającym przybliżenie sposobu wnioskowania sztucznych systemów eksperckich do zdolności rozumowania ludzkiego.

Matematyczny model stworzony na bazie logiki rozmytej pozwala na przedstawienie niepewności związanej z procesami poznawczymi mózgu człowieka, w tym procesami myślenia i rozumowania. Logika konwencjonalna nie dostarcza narzędzi do opisu pojęć z łatwością opisywanych przez logikę rozmytą (np. problem jakościowego określenia wieku stary–młody przez osoby należące do różnych grup wiekowych). Metody oparte na prawach logiki klasycznej nie zapewnią właściwych granic koncepcyjnych dla prezentacji wiedzy z użyciem nieskomplikowanego rozumowania, ponieważ ten rodzaj wiedzy jest nieprecyzyjny i nieklasyfikowalny. Konieczność zdefiniowania problemów towarzyszących niepewności i małej dokładności wnioskowań była przyczyną powstania logiki rozmytej.

Podstawowe cechy logiki rozmytej (Lotfi A. Zadeh 1992):

- Logika rozmyta traktowana jest jako graniczny przybliżony przypadek rozumowania.
- W logice rozmytej wszystko jest kwestią stopnia przybliżenia.
- W logice rozmytej wiedza jest elastycznym zbiorem o rozmytych granicach.
- Wnioskowanie jest procesem propagowania elastycznych ograniczeń.
- Każdy system logiczny można poddać rozmyciu (zatarciu granic).

Dwie (bardzo przydatne w praktycznych zastosowaniach) główne cechy rozmytych systemów:

- Systemy rozmyte są najskuteczniejsze przy przybliżeniu trudnego do uzyskania modelu matematycznego.
- W warunkach niepełnych informacji logika rozmyta pozwala na podejmowanie decyzji z wartości szacunkowych (bardziej trafnie niż sztuczne sieci neuronowe).

### Systemy hybrydowe

Systemy hybrydowe łączą zasady logiki rozmytej, sieci neuronowych, algorytmów genetycznych oraz systemów eksperckich i potwierdzają ich skuteczność w rozwiązywaniu wielu problemów świata rzeczywistego. Sieci neuronowe są skuteczne przy określaniu wzorców, jednak ich charakter nie pozwala na jasne określenie jak podejmowane są decyzje przy określaniu tego wzorca.

Systemy rozmyte są skuteczne przy wykorzystywaniu nieprecyzyjnych informacji o procesie czy przy nieoczekiwanej zmianie warunków procesu (zmiana danych, nieoczekiwana zmiana warunków, właściwości surowca, komponentów itp.). Decyzje systemów wyposażonych w logikę rozmytą są bardzo efektywne, chociaż systemy te nie wykazują takiej efektywności podczas uczenia się zasad budujących wzorce postępowania.

Ograniczenia systemowe każdego ze składników spowodowały opracowanie inteligentnych systemów hybrydowych, łączących dwie (lub więcej) techniki w sposób niwelujący wady składników.

Zastosowanie systemów hybrydowych jest też istotne w trakcie rozważania różnorodności problemów rozwiązywanych przy ich pomocy. Każda dziedzina potrzebuje rozwiązania odmiennych problemów, zależnych od czynników często odmiennych i różnorodnych, z których każdy może wymagać innej obróbki. W złożonych przypadkach aplikacji, w których skład wchodzi zadania cząstkowe, metody oparte na odpowiednio zastosowanych rozwiązaniach hybrydowych mogą być wykorzystywane do rozwiązywania tych oddzielnych zadań, a także i całości problemu.

W wyniku powstawania udanych aplikacji systemów hybrydowych w wielu dziedzinach (np. kontroli procesów technicznych i technologicznych, symulacji poznawczych itp.) ich zastosowanie gwałtownie rośnie.

Dla upodobnienia działania systemu bazującego na sieciach neuronowych do wnioskowania typowego dla ludzi (poznawczego, określającego niepewność działania w sposób zbliżony do ludzkiego) dodaje się elementy oparte koncepcyjnie o założenia logiki rozmytej. Taki system hybrydowy nazywa się rozmytymi sieciami neuronowymi (*fuzzy-neuro network*).

Systemy hybrydowe, charakteryzujące się wnioskowaniem bardzo podobnym do ludzkiego, będą mogły

rozwiązywać, przy stosunkowo niskich kosztach, zadania nierozwiązywalne dla klasycznych sieci neuronowych.

### Wybór narzędzia do prowadzenia symulacji w realizowanym projekcie

Przy wyborze oprogramowania wzięto pod uwagę:

- możliwość współpracy systemu z ogólnie dostępnym w przemyśle oprogramowaniem Microsoft Office;
- łatwość rozbudowy oprogramowania, wszechstronność zastosowań pozostałych segmentów;
- możliwość implementowania rozwiązań w języku C;
- polskojęzyczny interfejs użytkownika.

Ocenie poddano dwa systemy oprogramowania: środowisko Matlab & Simulink oraz pakiet STATISTICA. Z obydwoma programami autor projektu miał wcześniejsze doświadczenia.

W wyniku analizy stwierdzono, że bardziej przydatnym dla potrzeb projektu będzie STATISTICA Automatyczne Sieci Neuronowe, jako oprogramowanie najbardziej przyjazne dla przeciętnego użytkownika.

### Opis istotniejszych dla realizacji projektu cech oprogramowania STATISTICA Automatyczne Sieci Neuronowe

#### Sieci jednokierunkowe

Przy praktycznym zastosowaniu sieci neuronowych można wykorzystywać ich różnorodne architektury.

W przypadku prostej jednokierunkowej struktury sygnały z wejścia przechodzą przez warstwy neuronów ukrytych do wyjścia (neurony wyjściowe). Struktura ta jest stabilna i w miarę odporna na błędy. Tego rodzaju sieci są najczęściej stosowane przy rozwiązywaniu rzeczywistych problemów. W typowej sieci jednokierunkowej neurony zorganizowane są w warstwy. Warstwa wejściowa wprowadza dane wejściowe do sieci. Neurony w warstwach ukrytej i wyjściowej łączą się z wszystkimi neuronami z warstwy poprzedniej.

Najczęściej stosowane w programie STATISTICA ASN architektury jednokierunkowych sieci neuronowych to:

- perceptron wielowarstwowy (MLP),
- radialne funkcje bazowe (RBF).

W chwili uruchamiania sieci dane (zmiennie) wejściowe pobierane są do neuronów wejściowych, następnie neurony warstw ukrytych oraz warstwy wyjściowej pobierają odpowiednie, obliczone wartości. Każdy z neuronów oblicza własny poziom aktywacji, będący ważoną sumą wyjść neuronów poprzedniej warstwy. Wynik tak otrzymanej aktywacji podlega przekształceniu przez funkcję aktywacji, co w efekcie daje wartość na wyjściu neuronu. Po przeprowadzeniu wszystkich obliczeń na wyjściu pojawia się wynik działania całej sieci.

#### Funkcja aktywacji

Wybór zależności matematycznej (funkcji aktywacji) określającej transmisję sygnału z wcześniejszych neuronów

ma istotny wpływ na działanie sieci. Neurony w warstwie wejściowej zazwyczaj wyposażone są w funkcję identycznościową, niezmienną sygnału. Sygnały z ich wyjścia poddawane są różnym wzajemnym kombinacjom (wagami neuronów warstwy ukrytej) i przesyłane do następnych neuronów (ukrytych).

Neurony wyjściowe wyposażone są w funkcję aktywacji zmieniającą się zależnie od sytuacji, może to być funkcja identycznościowa lub inna, np. dla zadań klasyfikacyjnych może to być zwykle funkcja *softmax* (Bishop 1995), a przy regresji – identycznościowa (z *tanh* przy neuronach ukrytych).

W programie STATISTICA Automatyczne Sieci Neuronowe dostępne są następujące funkcje aktywacji neuronów ukrytych i wyjściowych:

- funkcja identycznościowa – aktywacja neuronu przekazywana jest bezpośrednio na jego wyjście;
- funkcja logistyczna sigmoidalna – krzywa S-kształtna;
- tangens hiperboliczny – krzywa sigmoidalna podobna do funkcji logistycznej, często lepsza od logistycznej z powodu symetrii; doskonała dla perceptronu wielowarstwowego, szczególnie do warstw ukrytych;
- funkcja wykładnicza – funkcja wykładnicza (ujemnie);
- funkcja sinus – potencjalnie użyteczna w przypadku rozpoznawania danych rozrzuconych radialnie; nie jest używana domyślnie;
- funkcja Softmax – używana głównie (niewyłącznie) w zadaniach klasyfikacyjnych, przydatna w budowie sieci z wieloma znormalizowanymi wyjściami, czyli przy budowie klasyfikatorów z wyjściami probabilistycznymi;
- funkcja gaussowska – dzwonowa funkcja aktywacji używana jest wyłącznie w neuronach ukrytych sieci

RBF, gdzie tworzy właśnie owe radialne funkcje bazowe; parametry położenia (wektor wzorcowy) i parametry rozrzutu pełnią tu rolę wag występujących na granicy warstwy wejściowej i ukrytej sieci MLP.

### ***Dobór zmiennych wejściowych***

Podczas rozwiązywania postawionych zadań dostępna jest określona liczba zmiennych wejściowych i wyjściowych. Wstępnie zakłada się, że występuje związek między zmiennymi wejścia i wyjścia. Krytycznym warunkiem przy modelowaniu zależności między wejściem a wyjściem jest posiadanie wystarczającej liczby zmiennych wejściowych właściwych dla rozwiązywanego problemu. Przy tworzeniu modelu rozwiązania należy unikać nieistotnych zmiennych, w związku z ich niekorzystnym wpływem. Błędne lub zaszumione zmienne zwykle znacząco obniżają jakość predykcji sieci otrzymanej na podstawie tych danych.

### ***Stopień złożoności sieci***

Złożone sieci, o bardziej rozbudowanych warstwach ukrytych, posiadają szersze możliwości obliczeniowe i są bardziej elastyczne w czasie uczenia. Zależnie od konkretnego zagadnienia inna jest optymalna liczba neuronów (powiązana zwykle z liczbą zmiennych wejściowych). Rozwiązanie konkretnego problemu wymaga doboru architektury sieci.

Perceptron wielowarstwowy (MLP). Podstawowy model tworzy jedna warstwa ukryta, zawierająca liczbę neuronów równą połowie sumy neuronów wejściowych i wyjściowych. Rozbudowane sieci w większości przypadków wykazują mniejszy błąd, ale są podatniejsze na „przeuczenie” od prostszych sieci. Dla ograniczania problemu przeuczenia stosuje się proces walidacji, w czasie którego pewna liczba przypadków nie jest stosowana w trakcie uczenia sieci, lecz jest wykorzystywana w przeprowadzaniu niezależnej kontroli postępów algorytmu uczenia. Przy wyborze sieci należy dążyć do uproszczenia modelu przy zachowaniu możliwie małego błędu walidacyjnego sieci.

Sieć o radialnych funkcjach bazowych (RBF) wyposażona jest w jedną warstwę ukrytą, zawierającą neurony

radialne. Odpowiedź każdego neuronu w warstwie modeluje powierzchnię gaussowską. Charakter tych funkcji, silnie nieliniowy, powoduje, że zazwyczaj wystarcza jedna warstwa ukryta do przedstawienia funkcji o dowolnym kształcie. Jednakże skuteczny model uzyskuje się dopiero po osiągnięciu dostatecznej liczby neuronów radialnych w strukturze sieci. Wówczas do każdego istotnego szczegółu modelowanej funkcji można przydzielić odpowiedni neuron radialny, co spowoduje satysfakcjonującą wierność zadanej (poszukiwanej) funkcji.

Takie rozwiązania (sieci RBF) wymagają krótszego czasu uczenia, ale są wolniejsze w porównaniu z odpowiadającymi im sieciami MLP.

### ***Zespoły sieci neuronowych i wielokrotne próbkowanie***

Skutecznym sposobem polepszenia modelu może być utworzenie zespołu sieci. Prognozowana wartość jest średnią prognoz sieci wchodzących w skład zespołu lub wynika z głosowania sieci. Na wzrost skuteczności modelu wpływa uczenie poszczególnych sieci na innych próbach wylosowanych z dostarczonych danych. To wielokrotne próbkowanie zmniejsza zagrożenie przeuczeniem.

Zdolności generalizujące zespołu są zwykle lepsze od najlepszej z sieci składowych, zależą też od jakości sieci składających się na zespół.

Dostępne są dwa sposoby wielokrotnego próbkowania:

1. Przy zachowanej liczności prób prowadzone jest losowe dobieranie przypadków do prób: uczącej, losowej i testowej.
2. Technika bootstrap – próbę uczącą tworzy się przez losowanie ze zwracaniem. Dla każdego z przypadków istnieje jednakowe prawdopodobieństwo trafienia do próby uczącej i może to nastąpić wielokrotnie. Zwykle losowany jest zbiór o licznosci równej licznosci zbioru danych. Z uwagi na sposób losowania część przypadków nie trafia do próby uczącej – powstaje w ten sposób próba testowa. Wynikiem takiego działania jest zespół modeli o niewielkim obciążeniu, których wariancja zmniejsza się przez uśrednienie. Ponieważ w zespole występują różnorodne sieci, to zmniejsza się zazwyczaj udział błędów systematycznych popełnianych w różnych przestrzeniach zmiennych niezależnych sieci.

### **Część doświadczalna**

Badaniem objęto próbki benzyny silnikowej zawierającej biokomponenty: etanol i eter etylowo-tert-butylowy (EETB). Zakres udziałów % (V/V) komponentów przedstawiono

w tablicy 1. Przy wyborze składu komponentowego mieszanek objęto zakres w którym obserwowane są szczególnie silne efekty nieaddytywności dla badanych własności.

Tablica 1. Zakres udziałów % (V/V) komponentów w mieszankach benzyn silnikowych, będących przedmiotem badań

Komponent	Udział procentowy [% (V/V)]	Niepewność odtwarzalności pomiaru objętości [% (V/V)]
Fracje izoparafinowe C8	0÷10,7	0,05
Fracje aromatyczno-parafinowe	20÷37,6	0,05
Fracje benzynowe z krakingu katalitycznego	18÷48,1	0,05
Fracje benzynowe z hydrokrakingu	0÷8,3	0,05
Fracja C5	0÷10,7	0,05
Fracja C4	0÷4,0	0,05
Fracje izoparafinowe C5-C6	12÷25,9	0,05
Fracja aromatyczna C8-C9	0÷8	0,05
Etanol	6÷10,7	0,05
EETB	12,8÷22,4	0,05

### Niepewność metod badawczych stosowanych przy oznaczaniu właściwości benzyn silnikowych stanowiących dane wejściowe do obliczeń

W tablicy 2 zestawiono niepewność metod badawczych stosowanych przy badaniu właściwości mieszanek

paliwowych będących podstawą do zestawienia zbioru danych wejściowych.

Tablica 2. Niepewność metod badawczych stosowanych przy badaniu właściwości mieszanek paliwowych

Badana właściwość	Metoda oznaczenia według normy	Niepewność metody
Liczba oktanowa motorowa, LOM	PN-EN ISO 5163	±0,5 jedn.
Liczba oktanowa badawcza, LOB	PN-EN ISO 5164	±0,4 jedn.
Prężność par, DVPE	PN-EN 13016-1	±1,5 kPa
Zawartość etanolu	PN-EN 1601	±0,2% (V/V)
Zawartość EETB	PN-EN 1601	±0,6% (V/V)
Destylacja normalna		
E70	PN-EN ISO 3405	±3,9% (V/V)
E100	PN-EN ISO 3405	±2,1% (V/V)

### Przygotowanie zbioru danych wejściowych

Z komponentów wymienionych w tablicy 1 zestawiono szereg mieszanek benzynowych, dla których oznaczono: LOB, LOM, DVPE, E70, E100. Dla potrzeb sieci neuronowych potrojono ilość danych, uwzględniając w danych wynikowych kres górny i dolny niepewności odtwarzalności oznaczeń metod badawczych.

Tak przygotowane dane poddano obróbce za pomocą

oprogramowania firmy Statsoft STATISTICA Automataczne Sieci Neuronowe.

Ze zbioru danych wydzielono też próbki testowe i walidacyjne, których użyto przy sprawdzeniu poprawności działania wybranych modeli rozwiązań.

Ponadto wydzielono próbki, które później zostaną użyte do sprawdzenia dokładności wdrożonej sieci.

### Obliczenia i wdrożenie przyjętych rozwiązań

Po wczytaniu zbioru uczącego (danych doświadczalnych) do programu STATISTICA Automataczne Sieci Neuronowe dokonano analizy danych. W trakcie analizy

poszukiwanie sieci neuronowej może następować według założonej metodyki tworzenia modelu (1 z 3):

1. automatycznego poszukiwania sieci,

2. projektu użytkownika,
3. wielokrotnego próbkowania.

Następnie wybrano zmienne wyjściowe i wejściowe, po czym podzielono zbiór danych na części: uczącą (np. 70%), testową (np. 15%) i walidującą (np. 15%).

W kolejnym kroku wybrano typ poszukiwanej sieci

(w tym przypadku MLP lub RBF), liczbę uczonych sieci (2000) i zachowanych najlepszych sieci (5).

W celu uniknięcia przeuczenia sieci poddawanej następnie wdrożeniu przeprowadzono minimalizację liczby neuronów w warstwach ukrytych przy zachowaniu założonej dokładności predykcji sieci.

### Porównanie wyników otrzymanych przy wykorzystaniu sieci neuronowych z wcześniej stosowaną metodą parametryczną

W tablicach 3A, 3B, 3C i 3D zestawiono dokładności przewidywania rozwiązań osiągniętych przy pomocy metody parametrycznej oraz przy pomocy metody nieparametrycznej (sieci neuronowych).

W tablicach 4A i 4B zestawiono moduły odchyłeń pomiędzy wartościami przewidywanymi (obliczonymi) a zbadanymi, wyznaczono maksymalną i minimalną wartość modułu odchyłeń dla każdej kolumny tablicy.

Tablica 3A. Zestawienie przykładowych wyników analiz właściwości gotowych benzyn silnikowych zawierających EETB z wartościami obliczonymi metodą parametryczną i przy pomocy sieci neuronowych.

Lp.	Wyniki analiz					Wyniki obliczeń właściwości benzyn przy pomocy metody parametrycznej					Wyniki obliczeń właściwości benzyn przy pomocy sieci neuronowych				
	E70	E100	RVP	LOB	LOM	E70	E100	RVP	LOB	LOM	E70	E100	RVP	LOB	LOM
1	43,8	65,8	56,1	96,8	86,7	45,0	65,1	56,3	97,0	86,4	43,8	66,2	56,3	96,9	86,56
2	24,8	51,5	44,7	98,1	86,8	24,9	51,5	45,1	97,7	86,6	24,1	51,2	44,8	98,1	87,17
3	30,5	57,7	47,2	97,7	87,1	30,6	57,2	47,4	97,9	86,9	30,7	58,0	47,4	97,5	86,99
4	37,7	62,2	53,4	97,9	87,1	39,3	62	53,5	97,6	87,1	38,5	62,5	53,5	98,0	87,20
5	33,2	58,5	80,1	97,7	87,8	33,7	57,8	78,9	98,0	88,0	33,3	58,3	80,4	97,8	88,07
6	36,0	65,0	80,4	98,2	88,3	36,4	64,4	80,9	97,8	87,2	34,9	65,2	80,6	98,3	88,43
7	26,0	56,4	72,1	98,6	88,4	24,4	56,6	75,0	98,7	87,9	26,2	56,6	72,3	98,7	88,36
8	39,5	66,6	74,8	98,0	88,0	40,2	65,7	75,3	98,1	87,5	38,9	66,7	74,9	98,3	88,40
9	36,2	63,3	73,2	98,6	87,8	36,9	63,0	74,1	98,3	88	36,3	63,4	73,2	98,2	88,12
10	40,4	65,8	54,1	97,9	87,4	40,3	64,9	55,6	98,2	87,7	40,3	65,2	54,2	98,2	87,37
11	50,8	72,1	61,4	98,0	86,9	51,9	72,4	61,4	97,9	87,5	51,4	71,0	61,5	98,2	86,92
12	46,6	70,9	59,0	98,2	87,4	46,3	69,8	58,6	98,1	87,3	46,3	70,2	53,9	98,3	87,41
13	33,3	63,1	71,8	98,9	88,1	31,9	62,3	64,4	98,9	87,7	32,9	63,2	71,9	99,0	88,09
14	35,9	65,3	51,0	98,7	87,8	35,1	65,3	51,6	98,8	87,1	36,3	65,6	51,1	98,6	87,55
15	43,9	71,1	71,9	98,4	87,9	43,6	71,1	69,3	98,5	87,4	44,2	70,7	72,0	98,3	87,87
16	42,2	70,5	76,1	98,8	88,4	42,1	69,9	73,9	98,7	88,0	41,8	70,0	76,2	98,6	88,31
17	29,5	63,2	65,0	99,2	88,6	28,8	62,0	65,2	99,1	87,9	29,7	62,7	65,1	99,1	88,41
18	40,4	68,6	53,6	98,4	87,7	39,3	68,3	54,7	98,5	87,6	39,9	69,1	53,7	98,2	87,62
19	31,9	63,1	76,0	98,8	88,1	30,8	62,4	77,9	98,9	87,7	31,4	63,0	76,2	98,6	88,30
20	35,3	67,2	82,5	101,0	89,9	34,7	66,6	81,7	100,6	89,9	34,9	67,4	82,6	100,5	89,94
21	38,5	69,3	87,2	101,0	90,5	38,4	68,8	84,5	101,1	91,1	38,1	68,7	87,1	100,9	90,63
22	36,6	64,2	71,4	98,5	88,0	37,1	63,8	68,7	98,4	87,7	36,4	64,5	71,5	98,3	88,05

Tablica 3B. Zestawienie różnic między wartością zbadaną a obliczoną dla danych zawartych w Tablicy 3A

Lp.	Różnica między wartością zbadaną a obliczoną dla metody parametrycznej					Różnica między wartością zbadaną a obliczoną dla sieci neuronowych				
	$\Delta E70$	$\Delta E100$	$\Delta RVP$	$\Delta LOB$	$\Delta LOM$	$\Delta E70$	$\Delta E100$	$\Delta RVP$	$\Delta LOB$	$\Delta LOM$
1	-1,2	0,7	-0,2	-0,2	0,3	0,0	-0,4	-0,2	-0,1	0,1
2	-0,1	0,0	-0,4	0,4	0,2	0,7	0,3	-0,1	0,0	-0,4
3	-0,1	0,5	-0,2	-0,2	0,2	-0,2	-0,3	-0,2	0,2	0,1
4	-1,6	0,2	-0,1	0,3	0,0	-0,8	-0,3	-0,1	-0,1	-0,1
5	-0,5	0,7	1,2	-0,3	-0,2	-0,1	0,2	-0,3	-0,1	-0,3
6	-0,4	0,6	-0,5	0,4	1,1	1,1	-0,2	-0,2	-0,1	-0,1
7	1,6	-0,2	-2,9	-0,1	0,5	-0,2	-0,2	-0,2	-0,1	0,0
8	-0,7	0,9	-0,5	-0,1	0,5	0,6	-0,1	-0,1	-0,3	-0,4
9	-0,7	0,3	-0,9	0,3	-0,2	-0,1	-0,1	0,0	0,4	-0,3
10	0,1	0,9	-1,5	-0,3	-0,3	0,1	0,6	-0,1	-0,3	0,0
11	-1,1	-0,3	0,0	0,1	-0,6	-0,6	1,1	-0,1	-0,2	0,0
12	0,3	1,1	0,4	0,1	0,1	0,3	0,7	5,1	-0,1	0,0
13	1,4	0,8	7,4	0,0	0,4	0,4	-0,1	-0,1	-0,1	0,0
14	0,8	0,0	-0,6	-0,1	0,7	-0,4	-0,3	-0,1	0,1	0,3
15	0,3	0,0	2,6	-0,1	0,5	-0,3	0,4	-0,1	0,1	0,0
16	0,1	0,6	2,2	0,1	0,4	0,4	0,5	-0,1	0,2	0,1
17	0,7	1,2	-0,2	0,1	0,7	-0,2	0,5	-0,1	0,1	0,2
18	1,1	0,3	-1,1	-0,1	0,1	0,5	-0,5	-0,1	0,2	0,1
19	1,1	0,7	-1,9	-0,1	0,4	0,5	0,1	-0,2	0,2	-0,2
20	0,6	0,6	0,8	0,0	0,0	0,4	-0,2	-0,1	0,1	0,0
21	0,1	0,5	2,7	-0,1	-0,6	0,4	0,6	0,1	0,1	-0,1
22	-0,5	0,4	2,7	0,1	0,3	0,2	-0,3	-0,1	0,2	0,0

Tablica 3C. Zestawienie przykładowych wyników analiz właściwości gotowych benzyn silnikowych zawierających EETB z wartościami obliczonymi metodą parametryczną i przy pomocy sieci neuronowych

Lp.	Wyniki analiz właściwości benzyn gotowych					Wyniki obliczeń właściwości benzyn przy pomocy addytywnych wskaźników mieszania dla komponentów benzyn z etanolem					Wyniki obliczeń właściwości benzyn przy pomocy sieci neuronowych modelujących zależność pomiędzy składem komponentowym obliczanymi właściwościami benzyn z etanolem				
	E70	E100	RVP	LOB	LOM	E70	E100	RVP	LOB	LOM	E70	E100	RVP	LOB	LOM
1	38,6	52,6	56,6	97,0	86,3	38,8	52,0	57,8	97,0	86,3	38,4	51,8	56,8	97,2	86,47
2	41,1	53,7	72,6	97,6	87,6	41,6	53,8	73,7	97,4	87,1	41,4	53,7	72,7	97,5	86,97
3	38,7	51,3	68,7	96,7	86,4	38,7	51,2	70,3	96,8	86,6	38,1	51,7	68,8	96,7	86,66
4	38,1	51,3	56,6	-	-	37,9	50,8	57,2	96,2	84,8	37,7	50,9	56,7	97,4	84,95
5	37,9	51,4	59,5	-	86,1	37,5	51,3	59,4	97,1	85,8	37,7	51,2	59,6	98,0	86,30
6	39,2	52,8	60,1	-	-	39,5	52,5	57,8	97,3	86,7	39,2	53,0	60,2	97,5	86,66
7	36,6	50,0	55,2	-	86,0	36,5	49,9	54,3	96,7	86,2	35,7	49,6	55,4	96,8	86,37
8	35,4	48,6	53,8	-	-	34,2	47,9	54,3	96,2	85,2	34,5	48,3	54,0	96,9	85,60
9	45,9	54,4	86,4	97,4	86,1	46,0	54,7	87,2	97,4	86,3	46,1	54,5	86,5	97,2	86,37
10	44,0	53,7	57,7	97,0	86,1	45,1	54,7	57,7	96,9	86,1	43,8	53,9	57,8	97,1	86,05



cd. Tablica 3C

Lp.	Wyniki analiz właściwości benzyn gotowych					Wyniki obliczeń właściwości benzyn przy pomocy addytywnych wskaźników mieszania dla komponentów benzyn z etanolem					Wyniki obliczeń właściwości benzyn przy pomocy sieci neuronowych modelujących zależność pomiędzy składem komponentowym obliczanymi właściwościami benzyn z etanolem				
	E70	E100	RVP	LOB	LOM	E70	E100	RVP	LOB	LOM	E70	E100	RVP	LOB	LOM
11	47,2	55,5	80,7	97,4	86,1	45,6	54,8	77,6	97,4	86,3	46,0	55,4	81,2	97,5	86,37
12	42,3	51,8	55,4	-	-	42,1	52,0	55,1	96,7	85,7	42,2	52,1	55,3	97,1	85,64
13	41,5	51,7	54,7	-	-	41,9	51,8	54,8	96,8	85,8	41,9	51,9	55,0	97,1	85,72
14	45,2	55,3	61,1	-	-	44,8	54,9	60,1	97,4	86,0	45,1	55,6	61,2	98,4	86,41
15	42,1	51,4	55,6	-	86,1	41,6	52,0	55,2	97,1	85,5	41,6	51,2	55,8	97,4	85,79
16	42,8	53,0	57,0	-	-	42,6	52,8	56,9	97,9	86,0	42,8	53,0	57,3	98,1	86,19
17	41,5	51,7	57,0	-	85,9	41,6	52,2	56,8	97,8	85,6	41,7	52,2	57,1	98,0	85,85
18	43,3	53,0	57,8	-	-	42,8	53,0	56,8	97,2	85,8	43,2	53,4	57,8	97,6	85,97
19	45,9	55,7	-	97,1	86,5	46,5	54,7	87,1	97,1	86,5	46,4	55,1	165,7	97,0	86,31
20	44,7	53,7	-	97	86,4	44,7	53,5	74,8	97,0	86,3	44,6	53,8	90,3	97,1	86,15
21	46,3	55,1	-	98,2	86,8	45,8	54,8	80,8	98,2	86,6	46,3	54,9	84,8	98,2	86,70
22	45,0	54,5	-	97,9	86,1	43,7	53,5	72,8	98,0	86,0	44,2	53,8	61,8	98,0	86,17
23	44,4	53,0	52,9	97,3	86,2	46,1	53,9	54,6	97,4	86,1	44,8	51,9	53,0	97,2	86,24
24	46,0	54,6	75,4	98,2	85,7	47,7	54,9	80,4	98,1	85,8	46,5	54,9	75,5	98,1	85,90
25	46,5	55,1	57,0	98,1	85,6	47,0	55,1	58,3	97,9	85,3	46,6	55,3	57,1	98,1	85,59
26	49,4	55,5	56,6	97,7	85,8	49,7	56,6	56,6	97,9	86,4	49,5	55,4	56,8	97,7	86,04
27	42,7	52,5	56,1	-	-	44,3	52,8	56,4	97,9	85,2	42,5	52,2	56,3	98,1	85,41
28	46,0	54,5	55,9	-	86,6	48,0	55,2	55,7	97,1	86,3	46,2	54,2	56,0	97,0	86,36
29	44,3	52,9	54,1	-	-	44,6	53,0	54,6	97,3	85,2	44,5	52,7	54,3	97,6	85,58
30	49,3	56,4	82,4	97,7	86,2	48,6	55,4	79,5	97,7	85,9	48,7	56,4	82,6	97,5	86,00

Tablica 3D. Różnica między wartością zbadaną a obliczoną dla wyników obliczeń właściwości benzyn silnikowych z etanolem

Lp.	Różnica między wartością zbadaną a obliczoną					Różnica między wartością zbadaną a obliczoną				
	ΔE70	ΔE100	ΔRVP	ΔLOB	ΔLOM	ΔE70	ΔE100	ΔRVP	ΔLOB	ΔLOM
1	-0,2	0,6	-1,2	0,0	0,0	0,2	0,8	-0,2	-0,2	-0,2
2	-0,5	-0,1	-1,1	0,2	0,5	-0,3	0,0	-0,1	0,1	0,6
3	0,0	0,1	-1,6	-0,1	-0,2	0,6	-0,4	-0,1	0,0	-0,3
4	0,2	0,5	-0,6	-	-	0,4	0,4	-0,1	-	-
5	0,4	0,1	0,1	-	0,3	0,2	0,2	-0,1	-	-0,2
6	-0,3	0,3	2,3	-	-	0,0	-0,2	-0,1	-	-
7	0,1	0,1	0,9	-	-0,2	0,9	0,4	-0,2	-	-0,4
8	1,2	0,7	-0,5	-	-	0,9	0,3	-0,2	-	-
9	-0,1	-0,3	-0,8	0,0	-0,2	-0,2	-0,1	-0,1	0,2	-0,3
10	-1,1	-1,0	0,0	0,1	0,0	0,2	-0,2	-0,1	-0,1	0,0
11	1,6	0,7	3,1	0,0	-0,2	1,2	0,1	-0,5	-0,1	-0,3
12	0,2	-0,2	0,3	-	-	0,1	-0,3	0,1	-	-
13	-0,4	-0,1	-0,1	-	-	-0,4	-0,2	-0,3	-	-

cd. Tablica 3D

Lp.	Różnica między wartością zbadaną a obliczoną					Różnica między wartością zbadaną a obliczoną				
	$\Delta E70$	$\Delta E100$	$\Delta RVP$	$\Delta LOB$	$\Delta LOM$	$\Delta E70$	$\Delta E100$	$\Delta RVP$	$\Delta LOB$	$\Delta LOM$
14	0,4	0,4	1,0	-	-	0,1	-0,3	-0,1	-	-
15	0,5	-0,6	0,4	-	0,6	0,5	0,2	-0,2	-	0,3
16	0,2	0,2	0,1	-	-	0,0	0,0	-0,3	-	-
17	-0,1	-0,5	0,2	-	0,3	-0,2	-0,5	-0,1	-	0,1
18	0,5	0,0	1,0	-	-	0,1	-0,4	0,0	-	-
19	-0,6	1,0	-	0,0	0	-0,5	0,6	-	0,1	0,2
20	0,0	0,2	-	0,0	0,1	0,1	-0,1	-	-0,1	0,3
21	0,5	0,3	-	0,0	0,2	0,0	0,2	-	0,0	0,1
22	1,3	1,0	-	-0,1	0,1	0,8	0,7	-	-0,1	-0,1
23	-1,7	-0,9	-1,7	-0,1	0,1	-0,4	1,1	-0,1	0,1	0,0
24	-1,7	-0,3	-5,0	0,1	-0,1	-0,5	-0,3	-0,1	0,1	-0,2
25	-0,5	0,0	-1,3	0,2	0,3	-0,1	-0,2	-0,1	0,0	0,0
26	-0,3	-1,1	0,0	-0,2	-0,6	-0,1	0,1	-0,2	0,0	-0,2
27	-1,6	-0,3	-0,3	-	-	0,2	0,3	-0,2	-	-
28	-2,0	-0,7	0,2	-	0,3	-0,2	0,3	-0,1	-	0,2
29	-0,3	-0,1	-0,5	-	-	-0,2	0,2	-0,2	-	-
30	0,7	1,0	2,9	0,0	0,3	0,6	0,0	-0,2	0,2	0,2

Tablica 4A. Różnica między wartością zbadaną a obliczoną dla wyników obliczeń właściwości benzyn silnikowych z EETB

Lp.	Uzyskane metodą parametryczną					Uzyskane za pomocą sieci neuronowych				
	$ \Delta E70 $	$ \Delta E100 $	$ \Delta RVP $	$ \Delta LOB $	$ \Delta LOM $	$ \Delta E70 $	$ \Delta E100 $	$ \Delta RVP $	$ \Delta LOB $	$ \Delta LOM $
1	1,2	0,7	0,2	0,2	0,3	0,0	0,4	0,2	0,1	0,1
2	0,1	0,0	0,4	0,4	0,2	0,7	0,3	0,1	0,0	0,4
3	0,1	0,5	0,2	0,2	0,2	0,2	0,3	0,2	0,2	0,1
4	1,6	0,2	0,1	0,3	0,0	0,8	0,3	0,1	0,1	0,1
5	0,5	0,7	1,2	0,3	0,2	0,1	0,2	0,3	0,1	0,3
6	0,4	0,6	0,5	0,4	1,1	1,1	0,2	0,2	0,1	0,1
7	1,6	0,2	2,9	0,1	0,5	0,2	0,2	0,2	0,1	0,0
8	0,7	0,9	0,5	0,1	0,5	0,6	0,1	0,1	0,3	0,4
9	0,7	0,3	0,9	0,3	0,2	0,1	0,1	0,0	0,4	0,3
10	0,1	0,9	1,5	0,3	0,3	0,1	0,6	0,1	0,3	0,0
11	1,1	0,3	0,0	0,1	0,6	0,6	1,1	0,1	0,2	0,0
12	0,3	1,1	0,4	0,1	0,1	0,3	0,7	5,1	0,1	0,0
13	1,4	0,8	7,4	0,0	0,4	0,4	0,1	0,1	0,1	0,0
14	0,8	0,0	0,6	0,1	0,7	0,4	0,3	0,1	0,1	0,3
15	0,3	0,0	2,6	0,1	0,5	0,3	0,4	0,1	0,1	0,0
16	0,1	0,6	2,2	0,1	0,4	0,4	0,5	0,1	0,2	0,1
17	0,7	1,2	0,2	0,1	0,7	0,2	0,5	0,1	0,1	0,2
18	1,1	0,3	1,1	0,1	0,1	0,5	0,5	0,1	0,2	0,1
19	1,1	0,7	1,9	0,1	0,4	0,5	0,1	0,2	0,2	0,2
20	0,6	0,6	0,8	0	0,0	0,4	0,2	0,1	0,1	0,0

cd. Tablica 4A

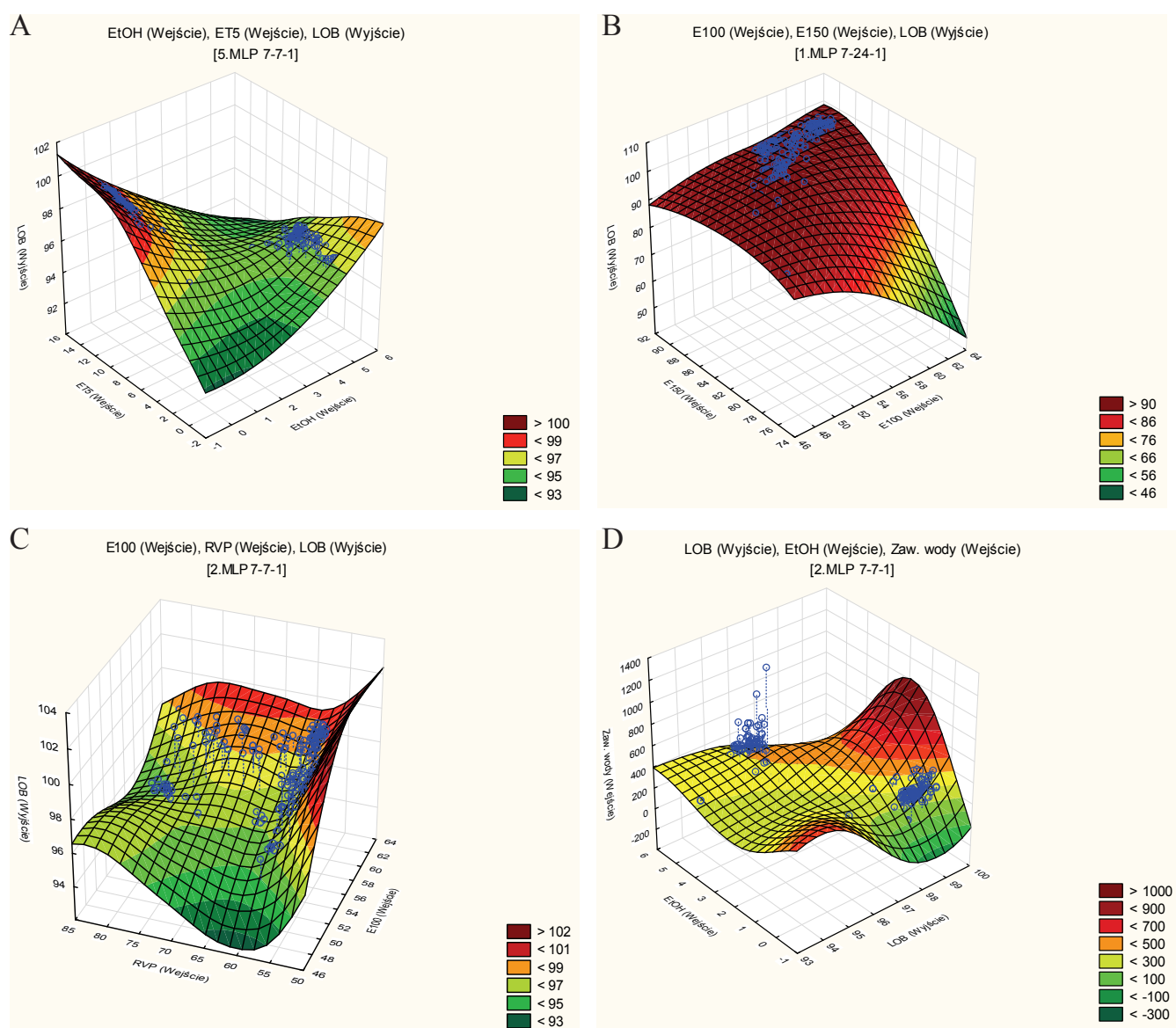
Lp.	Uzyskane metodą parametryczną					Uzyskane za pomocą sieci neuronowych				
	\u0394E70	\u0394E100	\u0394RVP	\u0394LOB	\u0394LOM	\u0394E70	\u0394E100	\u0394RVP	\u0394LOB	\u0394LOM
21	0,1	0,5	2,7	0,1	0,6	0,4	0,6	0,1	0,1	0,1
22	0,5	0,4	2,7	0,1	0,3	0,2	0,3	0,1	0,2	0,0
Max  odchylenie	1,6	1,2	7,4	0,4	1,1	1,1	1,1	5,1	0,4	0,4
Min  odchylenie	0,1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,1	0,0	0,0	0,0
MAE	0,69	0,52	1,41	0,16	0,38	0,39	0,36	0,35	0,15	0,13
RMSE	0,84	0,62	2,14	0,20	0,46	0,46	0,43	1,10	0,18	0,18
RMSE- MAE	0,15	0,10	0,73	0,04	0,08	0,08	0,07	0,74	0,02	0,06

Tablica 4B. Różnica między wartością zbadaną a obliczoną dla wyników obliczeń właściwości benzyn silnikowych z etanolem

Lp.	Uzyskane metodą parametryczną					Uzyskane za pomocą sieci neuronowych				
	\u0394E70	\u0394E100	\u0394RVP	\u0394LOB	\u0394LOM	\u0394E70	\u0394E100	\u0394RVP	\u0394LOB	\u0394LOM
1	0,2	0,6	1,2	0,0	0,0	0,2	0,8	0,2	0,2	0,2
2	0,5	0,1	1,1	0,2	0,5	0,3	0,0	0,1	0,1	0,6
3	0,0	0,1	1,6	0,1	0,2	0,6	0,4	0,1	0,0	0,3
4	0,2	0,5	0,6	-	-	0,4	0,4	0,1	-	-
5	0,4	0,1	0,1	-	0,3	0,2	0,2	0,1	-	0,2
6	0,3	0,3	2,3	-	-	0,0	0,2	0,1	-	-
7	0,1	0,1	0,9	-	0,2	0,9	0,4	0,2	-	0,4
8	1,2	0,7	0,5	-	-	0,9	0,3	0,2	-	-
9	0,1	0,3	0,8	0,0	0,2	0,2	0,1	0,1	0,2	0,3
10	1,1	1,0	0,0	0,1	0,0	0,2	0,2	0,1	0,1	0
11	1,6	0,7	3,1	0,0	0,2	1,2	0,1	0,5	0,1	0,3
12	0,2	0,2	0,3	-	-	0,1	0,3	0,1	-	-
13	0,4	0,1	0,1	-	-	0,4	0,2	0,3	-	-
14	0,4	0,4	1,0	-	-	0,1	0,3	0,1	-	-
15	0,5	0,6	0,4	-	0,6	0,5	0,2	0,2	-	0,3
16	0,2	0,2	0,1	-	-	0,0	0,0	0,3	-	-
17	0,1	0,5	0,2	-	0,3	0,2	0,5	0,1	-	0,1
18	0,5	0,0	1,0	-	-	0,1	0,4	0,0	-	-
19	0,6	1,0	-	0,0	0,0	0,5	0,6	-	0,1	0,2
20	0,0	0,2	-	0,0	0,1	0,1	0,1	-	0,1	0,3
21	0,5	0,3	-	0,0	0,2	0,0	0,2	-	0,0	0,1
22	1,3	1,0	-	0,1	0,1	0,8	0,7	-	0,1	0,1
23	1,7	0,9	1,7	0,1	0,1	0,4	1,1	0,1	0,1	0,0
24	1,7	0,3	5	0,1	0,1	0,5	0,3	0,1	0,1	0,2
25	0,5	0,0	1,3	0,2	0,3	0,1	0,2	0,1	0,0	0,0
26	0,3	1,1	0,0	0,2	0,6	0,1	0,1	0,2	0,0	0,2
27	1,6	0,3	0,3	-	-	0,2	0,3	0,2	-	-
28	2,0	0,7	0,2	-	0,3	0,2	0,3	0,1	-	0,2

cd. Tablica 4B

Lp.	Uzyskane metodą parametryczną					Uzyskane za pomocą sieci neuronowych				
	$ \Delta E70 $	$ \Delta E100 $	$ \Delta RVP $	$ \Delta LOB $	$ \Delta LOM $	$ \Delta E70 $	$ \Delta E100 $	$ \Delta RVP $	$ \Delta LOB $	$ \Delta LOM $
29	0,3	0,1	0,5	-	-	0,2	0,2	0,2	-	-
30	0,7	1,0	2,9		0,3	0,6	0,0	0,2	0,2	0,2
Max  odchylenie	2,0	1,1	5,0	0,2	0,6	1,2	1,1	0,5	0,2	0,6
Min  odchylenie	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
MAE	0,64	0,45	1,05	0,07	0,23	0,34	0,30	0,16	0,09	0,21
RMSE	0,86	0,56	1,55	0,11	0,29	0,45	0,39	0,19	0,12	0,25
RMSE- MAE	0,22	0,12	0,51	0,03	0,06	0,11	0,08	0,03	0,02	0,04



Wykres 1. Zależności występujące pomiędzy poszczególnymi składnikami benzyn silnikowych

Obliczono również [6]:

- wartość średniego błędu bezwzględnego MAE, według wzoru:

$$MAE = \frac{1}{m} \sum_{\tau=1}^m |y_{\tau} - y_{\tau}^p|$$

gdzie:

$y_{\tau}$  – wartość rzeczywista (wynik badań, pomiaru),

$y_{\tau}^p$  – wartość przewidywana (obliczona),

$m$  – liczba prognoz wartości zmiennej;

- wartość średniego błędu predykcji ex post RMSE, odpowiadającego pierwiastkowi błędu średniokwadratowego, według wzoru:

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{m} \sum_{\tau=1}^m (y_{\tau} - y_{\tau}^p)^2}$$

gdzie:

$y_{\tau}$  – wartość rzeczywista (wynik badań, pomiaru),

$y_{\tau}^p$  – wartość przewidywana (obliczona),

$m$  – liczba prognoz wartości zmiennej.

Analiza wartości MAE i RMSE zawartych w tablicach 4A i 4B wskazuje, że:

- dla wszystkich przewidywanych właściwości benzyn silnikowych z zawartością EETB (E70, E100, DVPE, LOM, LOB) zastosowanie rozwiązań używających sieci neuronowych daje bardziej precyzyjne wyniki (mniejsze wartości: max. |odchylenie|, MAE, RMSE dla metody używającej sieci neuronowych w porównaniu do metody parametrycznej);
- dla przewidywanych właściwości benzyn silnikowych z zawartością etanolu (E70, E100, DVPE, LOM) zastosowanie rozwiązań używających sieci neuronowych daje bardziej precyzyjne wyniki (mniejsze wartości: max. |odchylenie|, MAE, RMSE) dla metody używającej sieci neuronowych w porównaniu do metody parametrycznej. W przypadku przewidywania LOB obie metody dają porównywalną dokładność przewidywań.

Modele uzyskane przy zastosowaniu sieci neuronowych wykazują dobrą generalizację problemu zarówno dla wyników średnich, jak też rozszerzonych o błąd pomiaru. Zaproponowane modele sieci zawierające pojedyncze wyjścia (opisujące pojedynczo poszukiwane parametry) charakteryzują się większą dokładnością predykcji od sieci posiadających kilka wyjść (opisujących grupowo poszukiwane parametry – na wyjściu sieci jednocześnie np. E70, E100, LOM, LOB). Związane jest to z mniejszy-

mi wymaganiami takich sieci (w stosunku do koniecznej do zgromadzenia przed eksperymentem liczby danych).

Zależności występujące pomiędzy poszczególnymi składnikami analizy mogą być prezentowane w formie wykresów. Takie obrazowanie zależności może być pomocne przy przewidywaniu np. wpływu zawadnienia paliwa na jego parametry jakościowe i planowaniu działań pozwalających zapobiegać skutkom zanieczyszczeń. Również „sfałowanie” powierzchni obrazującej zależność pomiędzy zmiennymi wskazuje na niestabilność zachowań badanego składnika w mieszaninie i zwróci uwagę badacza przy planowaniu składu mieszanin z użyciem tego składnika, co wpłynie na zmniejszenie późniejszych problemów przy wdrażaniu konkretnej mieszanki w zastosowaniach przemysłowych. Na załączonych wykresach przedstawiono przykłady takich zależności występujących w mieszankach paliw dostępnych obecnie na rynku paliw.

Na wykresie 1A pokazano zależność badawczej liczby oktanowej mieszanek benzynowych, w których skład wchodzi składniki wymienione w tablicy 1, w zależności od zawartości etanolu (ETOH) i eteru o pięciu atomach węgla w cząsteczce. Zależności między składnikami opisano za pomocą sieci neuronowej MLP o 7 neuronach wejściowych, 7 neuronach w warstwie ukrytej i jednym neuronie wyjściowym (MLP 7-7-1).

Na wykresie 1B pokazano zależność badawczej liczby oktanowej mieszanek benzynowych, w których skład wchodzi składniki wymienione w tablicy 1, w zależności od stopnia oddestylowania do 100°C i 150°C. Zależności między składnikami opisano za pomocą sieci neuronowej MLP o 7 neuronach wejściowych, 24 neuronach w warstwie ukrytej i jednym neuronie wyjściowym (MLP 7-24-1).

Na wykresie 1C pokazano zależność badawczej liczby oktanowej mieszanek benzynowych, w których skład wchodzi składniki wymienione w tablicy 1, w zależności od stopnia oddestylowania do 100°C i prężności par RVP. Zależności między składnikami opisano za pomocą sieci neuronowej MLP o 7 neuronach wejściowych, 7 neuronach w warstwie ukrytej i jednym neuronie wyjściowym (MLP 7-7-1).

Na wykresie 1D pokazano zależność badawczej liczby oktanowej mieszanek benzynowych, w których skład wchodzi składniki wymienione w tablicy 1, w zależności od zawartości etanolu i wody. Zależności między składnikami opisano za pomocą sieci neuronowej MLP o 7 neuronach wejściowych, 7 neuronach w warstwie ukrytej i jednym neuronie wyjściowym (MLP 7-7-1).

## Podsumowanie

W pracy zbadano przydatność sieci neuronowych do modelowania nieliniowych zależności pomiędzy składem benzyn silnikowych zawierających biokomponenty (w szczególności bioetanol) a ich właściwościami.

Jak wykazano w tablicach 4A i 4B, już stosunkowo proste jednokierunkowe sieci neuronowe i modele uzyskiwane przy ich pomocy są mocnym i pewnym narzędziem przydatnym przy badaniach właściwości paliw ciekłych i przy opracowywaniu nowych technologii dla tych paliw.

Nawet przy niewielkiej liczbie danych doświadczalnych uzyskane modele wykazują dobre właściwości predykcyjne poszukiwanych właściwości benzyn, lepsze od dotychczas stosowanych metod, i mieszczą się w zakresie niepewności znormalizowanych metod badawczych stosowanych przy oznaczaniu tych właściwości.

Zbadano też przydatność sieci neuronowych przy poszukiwaniu zależności pomiędzy właściwościami benzyn silnikowych dla danych archiwalnych pochodzących z monitoringu jakości benzyn silnikowych w roku 2010. Przeprowadzone badania dowodzą, że modele opracowane na bazie sieci neuronowych i w tym przypadku się sprawdzają.

Modele opracowane na bazie sieci neuronowych dają oczekiwaną dokładność w przewidywaniu wartości właściwości wykazujących nieliniową zależność od składu benzyn silnikowych, dla których opracowano te modele.

Można przyjąć, że również sieci hybrydowych, jako bardziej złożonych i elastycznych, z pewnością będzie można używać do opisu i wyjaśniania zjawisk rządzących procesami zachodzącymi w paliwach ciekłych.

## Literatura

- [1] *Commission Staff Working Document: Impact Assessment of a Proposal for a directive of the European Parliament and of the Council modifying Directive 98/70/EC relating to the quality of petrol and diesel fuels*, SEC(2007) 55; Brussels. 31.01.2007.
- [2] Fuller R.: *Neural Fuzzy Systems*. 1995. ISBN 951-650-624-0, ISSN 0358-5654.
- [3] <http://www.statsoft.pl/czytelnia/neuron/wstepsieci.html>.
- [4] *Komunikat Komisji do Rady i Parlamentu Europejskiego: Wyniki przeglądu wspólnotowej strategii na rzecz zmniejszenia emisji CO<sub>2</sub> pochodzących z samochodów osobowych i lekkich pojazdów dostawczych*, COM(2007) 19 z dn. 07.02.2007.
- [5] Marshall E. L., Owen K.: *Motor Gasoline*. UK, The Royal Society of Chemistry, 1995.
- [6] Radziukiewicz M.: *Ocena dokładności i trafności prognoz. Wykłady*.
- [7] Reynolds R. E.: *Fuel specifications and fuel property issues and their potential impact on the use of ethanol as a transportation fuel*. Downstream Alternatives Inc., December 16, 2002.
- [8] Tadeusiewicz R.: *Sieci neuronowe*. Wyd. 2, Warszawa, Akademicka Oficyna Wydaw. RM, 1993.
- [9] Zadeh L. A.: *Fuzzy Logic, Neural Networks and Soft Computing*. Communications of the ACM 1994, vol. 37, issue 3, s. 77–84.

---

Mgr inż. Bogusław HADUCH – starszy specjalista badawczo-techniczny, kierownik Biura Kontroli w Pionie Technologii Nafty INiG. Zajmuje się tematyką związaną z technologią produkcji i jakością paliw oraz bezpieczeństwem ich użytkowania. Od ponad 10 lat zajmuje się opracowywaniem bezpiecznych metod zabezpieczania wiarygodnych i reprezentatywnych próbek produktów naftowych oraz wykrywaniem metod i technologii fałszowania ciekłych paliw silnikowych.