

APLICAȚII ALE INTELIGENȚEI ARTIFICIALE ÎN INGINERIA REACȚIILOR DE POLIMERIZARE

Doctorand: ing. Cătălin Lisa

Conducător științific: prof.dr.ing. Victor Bulacovschi

Teza de doctorat abordează posibilitatea extinderii aplicării diferitelor instrumente ale inteligenței artificiale pentru corelarea relației structură-proprietăți în ingineria reacțiilor de polimerizare.

Principalele obiective propuse și rezolvate în această lucrare sunt:

- ✚ Constituirea unor baze de date care să permită modelarea unor interacțiuni importante între unitățile structurale de bază pentru predicția unor proprietăți impuse, precum și localizarea eficientă a unor structuri viabile care să conducă la performanța dorită în sinteză.
- ✚ Determinarea unor relații cantitative structură-proprietăți utilizând metode adecvate, dependente de proprietățile investigate.
- ✚ Testarea aplicabilității diferitelor instrumente ale inteligenței artificiale: rețele neuronale, algoritmi genetici, tehnici de clasificare, precum și a metodelor combinate, în predicția de proprietăți, atât pentru compuși mic moleculari, cât și pentru diferite materiale polimerice.

Principalele contribuții personale constau în utilizarea unor metode combinate și a unor algoritmi originali, precum și în predicția cu ajutorul diferitelor instrumente ale inteligenței artificiale a unor proprietăți cum ar fi: **proprietatea de cristal lichid, termostabilitatea, constanta dielectrică**. Modelarea cu ajutorul instrumentelor inteligenței artificiale a acestor proprietăți nu este întâlnită în literatura de specialitate, cu excepția constantei dielectrice la compuși mic moleculari. Referitor la această proprietate, în teza de doctorat, s-a urmărit posibilitatea extinderii aplicării modelelor neuronale și la materialele polimerice.

În modelarea cu diferite instrumente ale inteligenței artificiale a unei proprietăți, una dintre problemele dificile, cu impact semnificativ asupra rezultatelor modelării, este stabilirea parametrilor de intrare. Aceștia trebuie să cuprindă o serie de *descriptori moleculari* care să lege proprietatea urmărită de structura compușilor analizați. Pentru a facilita găsirea setului optim de descriptori care leagă structura chimică a materialelor polimerice cu proprietatea dorită s-a realizat, într-o primă fază, modelarea unor proprietăți pentru compuși mic moleculari. Această strategie s-a aplicat pentru a găsi mai ușor acei descriptori ce ar putea determina relația cantitativă structură-proprietăți și apoi, prin selectarea parametrilor adecvați, s-a trecut de la modelarea structurilor simple la cele mult mai complexe.

Teza de doctorat are o extindere de 235 pagini, conține un număr de 48 figuri, 57 tabele și este organizată în 8 capitole, concluzii generale și bibliografie care cuprinde un număr de 274 de citări. Materialul conține, de asemenea, cca 140 de pagini anexă cu diverse structuri chimice, care au constituit baza de date în aplicarea tehnicilor inteligenței artificiale la calculele predictive efectuate.

Rezultatele obținute în teză se regăsesc în 6 articole publicate sau acceptate spre publicare în reviste ISI, 3 articole în reviste BDI, 2 articole trimise spre publicare în reviste ISI, 6 participări la manifestări științifice. Exemple:

1. Leon F., Silvia C., **Lisa Cătălin**, Hurduc N., Machine learning methods used to predict the liquid crystalline behavior of some copolyethers, *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, 469(1), 1-22, **2007**.
2. **Lisa Cătălin**, Curteanu S., Neural network based predictions for the liquid crystal properties of organic compounds, *Computer Aided Chemical Engineering*, 24, 39-44, **2007**.
3. **Lisa Cătălin**, Curteanu S., Bulacovschi V., Apreutesei D., Artificial intelligence methods applied to prediction of the liquid crystalline behavior of some ferrocene derivatives, *Revue Roumaine de Chimie*, 53(4), 283-290, **2008**.
4. Leon F., **Lisa Cătălin**, Curteanu S., Prediction of the liquid crystalline property using different classification methods, *Molecular Crystals and Liquid crystals*, acceptată spre publicare, 13 octombrie **2009**.
5. **Lisa Cătălin**, Lisa Gabriela, Curteanu Silvia, Neural networks used for the prediction of the structure-thermalstability relation, acceptată la *Revue Roumaine de Chimie*, **2009**.
6. **Lisa Cătălin**, Curteanu S., Lisa G., Apreutesei D., Neural networks used to predict the relationship between liquid crystalline behaviour and chemical structures *Bulletin of the Transilvania of Brasov*, 3, 521-526, **2007**.
7. **Lisa Cătălin**, Bulacovschi V., Prediction of the liquid crystalline behavior for some bis phenil aromatic derivatives with artificial neural networks, *Studii și Cercetări Științifice, VIII(2)*, 103-110, **2007**.
8. **Lisa Cătălin**, Curteanu S., Lisa G., Apreutesei D., „Neural networks for modelling material thermostability”, lucrare publicată electronic la 17th European Symposium on Computer Aided Process Engineering – ESCAPE17, V. Plesu and P.S. Agachi (Editors), © 2007 Elsevier B.V./Ltd. All rights reserved, ISBN (CD): 978-0-444-53158-2, **2007**.