

Cercetari in domeniul modelarii si simularii proceselor de sinteza a compusilor macromoleculari

Doctorand: ing. Teodora Rusu

Conducator Stiintific: Prof. Dr. Ing. Victor Bulacovschi

Prezenta teza de doctorat, a abordat aspecte ale inteligenței artificiale în domeniul modelării proceselor de sinteza a compusilor macromoleculari. S-a urmarit modelarea procesului de sinteza macromoleculară, astfel incat sa poată fi obținuti compusi macromoleculari cu proprietati prestabilite. Proiectarea asistata pe calculator a acestor compusi reprezinta un real folos in chimia moderna deoarece conduce la eliminarea numeroaselor seturi de cicluri sinteza – caracterizare, specifice chimiei clasice. Prin eliminarea acestor etape, se poate realiza o economie de materii prime, reducerea expunerii la substante chimice nocive si o importanta economie de timp. Realizarea unui sistem fiabil, pentru proiectarea unor astfel de compusi reprezinta o provocare din punct de vedere al realizarii sistemului informatic care trebuie astfel proiectat incat sa descrie corespunzator ansamblul [structura – proprietati].

Prezentarea rezultatelor obtinute in cadrul tezei de doctorat a fost realizata prin impartirea lor in patru capitole distincte: **capitolul II** prezinta sinteza, conditiile de lucru, caracterizarea și tehnicile folosite la obținerea polimerilor si copolimerilor utilizati in cadrul tezei de doctorat; **capitolul III** descrie utilizarea rețelilor neuronale in proiectarea compusilor macromoleculari, fiind prezentate modelarea proceselor de sinteza realizate, cu detaliera etapelor metodologiei utilizate; **capitolul IV** prezinta utilizarea algoritmilor genetici in optimizarea procesului de sinteza a compusilor macromoleculari; **capitolul V** abordeaza utilizarea algoritmilor micști bazați pe rețele neuronale si algoritmi genetici combinati cu diversi alți algoritmi (Monte Carlo, Tabu Search, algoritmi meta-euristici etc.).

Per total, din rezultatele obtinute in cadrul prezentei teze de doctorat au fost publicate 10 lucrari stiintifice (7 din ele in reviste ISI), 3 capitole in carti si 4 lucrari in extenso in volume ale unor manifestari stiintifice. O parte din aceste rezultate au fos prezentate si la manifestari stiintifice nationale si internationale, respectiv: 4 comunicari si 18 postere.

Activitate stiintifica in cadrul tezei de doctorat (lista selectiva)

Capitole in carti

1. **Teodora Rusu**, O. M. Gogan, Artificial intelligence methods a challenge for the modern polymer chemistry, Intelligent Production Machines and Systems (1st IPROMS Virtual Conference, ISBN – 10: 0080447309, Ed. Elsevier, p 301 - 307, 2005
2. **Teodora Rusu**, C. Iojoiu, V. Bulacovschi, Neuronal Network Used For Investigation Of Water In Polymer Gels, W.C. Conner and J. Fraissard (eds.), Fluid Transport in Nanoporous Materials, 657–670, Springer Ed., 2006.
3. A. Farcas, **Teodora Rusu**, Pseudo-rotaxani si rotaxani, Polimeri degradabili si biocompatibili, Cap. XXIII, pg 476-489, Editori: C.Vasile, A.P.Chiriac, L.Nita; Editura Tehnopress, Iasi -2006

Articole aparute

1. **Teodora Rusu**, S. Ioan, S. C. Buraga, Amphiphilic Copolymers as water deliverable systems, Eur. Polym. J., 37, 2005, 25, 2001
2. **Teodora Rusu**, O. M. Gogan, Application of genetic algorithms to control synthesis of block copolymers containing PDMS – co - PMAA sequences, Mol. Cryst. Liq. Cryst., Vol. 416, pp. 155–164, 2004
3. **Teodora Rusu**, Victor Bulacovschi, Artificial Intelligence Methods used in Complex Macromolecular Compounds Design, e-Polymers, e-polymers.org/paris
4. **Teodora Rusu**, V. Bulacovschi, Multiobjective Tabu Search method used in chemistry, International Journal of Quantum Chemistry, vol 106, issue 6, 1406-1412, 2006
5. **Teodora Rusu**, M. Pinteala, S. C. Buraga, Computer aid design of polydimethylsiloxanes copolymer with imposed water delivery properties, Lecture Series on Computer and Computational Sciences, Volume 7, pp. 477-480, 2006
6. **Teodora Rusu**, O. M. Gogan, « Tabou Search » Methode Dans La Generation Assistee Sur Ordinateur Des Composés Macromoléculaires; SCIENTIFIC STUDY & RESEARCH, Vol. VII (1), 965-972 (ISSN 1582-540X), 2006
7. **Teodora Rusu**, O. M. Gogan, Computational Challenges In Condensed Matter Applications, Romanian Journal of Physics, Volume 51, Numbers 1-2, P. 187-196, Bucharest, 2006
8. **Teodora Rusu**, V. Bulacovschi, Controlled Water Delivery Systems for Dried Soils I. Copolymer Synthesis and Water delivery Mechanism, Buletinul Institutului Politehnic din Iasi Tom LI(LV), Fasc 3-4, Chimie si inginerie Chimica, 67 - 76, 2005
9. **Teodora Rusu**, V. Bulacovschi; Computer Aid Molecular Design Based on Meta-Heuristics Techniques; *International Journal of Quantum Chemistry*, vol 107, 1745-1751, 2007
10. **Teodora Rusu**, H. CARTWRIGHT; Applications Of Artificial Intelligence Methods In Macromolecular Chemistry - Computer-Aided Molecular Design; SCIENTIFIC STUDY & RESEARCH, Vol. IX (1), 2008, ISSN 1582-540X, p 27- 33, 2008