

# INSTRUMENTE ALE INTELIGENȚEI ARTIFICIALE UTILIZATE LA MODELAREA ȘI OPTIMIZAREA UNOR PROCESE DIN CHIMIA SILOXANILOR

Doctorand: chim. Nistor Alexandra

Conducător științific: prof. dr. ing. Silvia Curteanu

În ultimii ani, **tehnicele inteligenței artificiale** (IA) au înregistrat performanțe deosebite în diferite domenii, rezolvând probleme de modelare, optimizare sau reglare asociate unor procese complexe.

Prezenta teză de doctorat abordează o serie de aspecte de actualitate referitoare la modelarea și optimizarea unor procese folosind **rețele neuronale, algoritmi genetici și sisteme fuzzy**. Studiile de caz sunt reprezentate de o serie de procese de polimerizare în care sunt implicați compuși siloxanici, fiind astfel folosite în metodologiile de modelare seturi cuprinzătoare și relevante de date experimentale, obținute prin sinteza și caracterizarea compușilor macromoleculari.

**Principalele obiective** propuse și rezolvate în această lucrare au fost organizate pe două direcții:

O primă serie de obiective se referă la obținerea și caracterizarea unor compuși sau materiale siloxanice: sinteza unor  $\alpha,\omega$ -polisiloxan-dioli, prepararea unor materiale compozite pe bază de polidimetilsiloxan-silice (simple, cu lantan complexat, cu lignină) și a unor compozite polidimetildifenilsiloxan-silice, sinteza unor copolimeri dimetildifenilsiloxanici, a unei poliamide ferocenil-siloxanice și a unui polisiloxan liniar.

A doua serie de obiective se referă la modelarea proprietăților compușilor și materialelor enumerate anterior:

- modelarea cu rețele neuronale a unor proprietăți ale compușilor, respectiv materialelor, cum ar fi: proprietăți termice, optice, de suprafață, comportare în soluție, vâscozitate;
- dezvoltarea unor metodologii de modelare bazate pe diferite tipuri de rețele neuronale (perceptronul multistrat, MLP, rețele feed-forward generalizate, GFF, rețele neuronale modulare, MNN, rețele Jordan Elman, JEN, rețele cu funcție de bază radială, RBF);
- agregarea rețelelor neuronale în stive în scopul îmbunătățirii capacității de generalizare;
- determinarea topologiei optime a rețelelor neuronale prin diferite metode;
- optimizarea proceselor de sinteză prin modelare neuronală inversă;
- utilizarea logicii fuzzy pentru modelarea proprietăților materialelor preparate.

S-au proiectat și testat *diferite tipuri de rețele neuronale* (MLP, GFF, MNN, JEN, RBF), urmărindu-se mai ales capacitatea de generalizare a acestor modele. Utilizarea lor a presupus elaborarea unei metodologii specifice care implică colectarea și analiza datelor experimentale disponibile, stabilirea intrărilor și ieșirilor, dezvoltarea celui mai potrivit model, folosirea acestuia la efectuarea de predicții. Etapele enumerate prezintă o serie de aspecte particulare dependente de procesul sau sistemul abordat și de scopul vizat.

**Îmbunătățirea performanțelor modelelor neuronale** s-a realizat prin utilizarea unor rețele neuronale cu configurații speciale sau prin agregarea acestora în stive, însumând ponderat ieșirile rețelelor individuale. **Determinarea topologiei optime a unei rețele neuronale** s-a realizat prin metoda încercărilor succesive, cu algoritmul Hill Climbing și cu algoritmi genetici. Modelarea neuronală a fost condusă în diferite variante: **modelare directă**, determinându-se caracteristici de reacție sau proprietăți ale produselor finale funcție de condițiile de lucru și **modelare inversă**, ce presupune identificarea condițiilor care duc la proprietăți finale prestabilite.

Din punct de vedere structural, teza este constituită din 11 capitole dintre care: capitolul 1 reprezintă introducerea, capitolele 2 și 3 cuprind partea teoretică, iar următoarele contribuția propriu-zisă a tezei. Fiecare capitol se încheie cu o secțiune de concluzii, iar ultimul capitol este rezervat concluziilor generale. Fiecare capitol este prezentat din două puncte de vedere: contribuția tezei la rezolvarea obiectivelor IA propuse și prezentarea fiecărui studiu de caz abordat, cu metodele de sinteză și caracterizare, precum și cu procedurile de modelare și optimizare aplicate.

Rezultatele obținute în teză se regăsesc în 8 articole publicate sau acceptate spre publicare în reviste ISI, 2 articole în volume ale manifestărilor științifice, 2 articole trimise spre publicare, un capitol de carte și 30 participări la manifestări științifice. Exemple:

1. Curteanu, S., **Nistor, A.**, Curteanu, N., Airinei, A., Cazacu, M., Applying soft computing methods to fluorescence modeling of the polydimethylsiloxane/silica composites containing lanthanum, **Journal of Applied Polymer Science**, 117, 3160-3169, 2010.
2. **Nistor, A.**, Curteanu, S., Lisa, G., Cazacu, M., Modeling the thermal stability of the polydimethylsiloxanes/silica green composites using neural networks, **Environmental Engineering and Management Journal**, 9(8), 1053-1061, 2010.
3. **Nistor, A.**, Piuleac, C.G., Cazacu, M., Curteanu, S., Neural networks modeling of the equilibrium anionic polymerization of cyclic siloxanes, **Materiale Plastice**, 45(1), 67-73, 2008.
4. **Nistor, A.**, Lisa, G., Curteanu, S., Vlad, A., Cazacu, M., Neural networks used for modeling the thermal stability of polydimethylsiloxane silica composites containing complexed La, **Revue Roumaine de Chimie**, acceptată spre publicare, RRC 134/2009, 2010.
5. Drăgan, S., Cazacu, M., **Nistor, A.**, Ionic organic/inorganic materials. III. Stimuli responsive hybrid hydrogels based on oligo(N,N-dimethylaminoethylmethacrylate) and chloroalkyl-functionalized siloxanes (pNA), **Journal of Polymer Science Part A: Polymer Chemistry**, 47(24), 6801-6813, 2009.
6. Hummelshoj, J.S., ....., **Nistor, A.**, Norskov, J.K., Vegge, T., Density functional theory based screening of ternary alkali-transition metal borohydrides: A computational material design project, **Journal of Chemical Physics**, 130(1), 014101, 2009.
7. Alexandru, M., Cazacu, M., **Nistor, A.**, Musteață, V., Stoica, I., Grigoraș, C., Țîmpu, D., Simionescu, B., Polysiloxane/TiO<sub>2</sub> composites prepared by sol-gel process with potential applications as active element of nanoactuation devices, **Journal of Sol-Gel Science and Technology**, acceptată spre publicare, DOI: 10.1007/s10971-010-2307-5, 2010.
8. Alexandru, M., Răleş, C., Cazacu, M., **Nistor, A.**, Macsim, A.M., Polysiloxanes modified with aromatic diamines interconnecting with silica network, **Journal of Composite Materials**, acceptată spre publicare, 2010.