



UNIUNEA EUROPEANĂ



GUVERNUL ROMÂNIEI
MINISTERUL MUNCII, FAMILIEI ȘI
PROTECȚIEI SOCIALE
AMPOSDRU



Fondul Social European
POSDRU 2007-2013



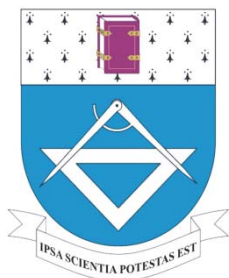
Instrumente Structurale
2007-2013



MINISTERUL
EDUCAȚIEI
CERCETĂRII
TINERETULUI
ȘI SPORTULUI
OIPOSDRU



UNIVERSITATEA TEHNICĂ
"GHEORGHE ASACHI"
DIN IAȘI



UNIVERSITATEA TEHNICĂ
"GHEORGHE ASACHI" DIN IAȘI

Facultatea de Inginerie Chimică și Protecția
Mediului



METODOLOGII DE MODELARE ȘI OPTIMIZARE BAZATE PE TEHNICI NEURO-EVOLUTIVE APLICATE PROCESELOR DIN INGINERIA CHIMICĂ

- REZUMAT TEZĂ DE DOCTORAT -

Conducător de doctorat:

Prof. univ. dr. Silvia Curteanu

Doctorand:

Ing. Elena-Niculina Drăgoi

IASI - 2012



UNIUNEA EUROPEANĂ



GUVERNUL ROMÂNIEI
MINISTERUL MUNCII, FAMILIEI ȘI
PROTECȚIEI SOCIALE
AMPOSDRU



Fondul Social European
POSDRU 2007-2013



Instrumente Structurale
2007-2013



MINISTERUL
EDUCAȚIEI
CERCETĂRII
TINERETULUI
ȘI SPORTULUI

OIPOSDRU



UNIVERSITATEA TEHNICĂ
"GHEORGHE ASACHI"
DIN IASI

Teza de doctorat a fost realizată cu sprijinul financiar al proiectului „Burse doctorale pentru performanță în cercetare la nivel european (EURODOC)”.

Proiectul „Burse doctorale pentru performanță în cercetare la nivel european (EURODOC)”, POSDRU/88/1.5/S/59410, ID 59410, este un proiect strategic care are ca obiectiv general „Dezvoltarea capitalului uman pentru cercetare prin programe doctorale pentru îmbunătățirea participării, creșterii atractivității și motivației pentru cercetare. Dezvoltarea la nivel european a tinerilor cercetători care să adopte o abordare interdisciplinară în domeniul cercetării, dezvoltării și inovării.”

Proiect finanțat în perioada 2009 - 2012.

Finanțare proiect: 18.943.804,97 RON

Beneficiar: Universitatea Tehnică “Gheorghe Asachi” din Iași

Partener: Universitatea „Babeș Bolyai” din Cluj-Napoca

Director proiect: Prof. univ. dr. ing. Mihaela-Luminița LUPU

Responsabil proiect partener: Prof. univ. dr. ing. Alexandru
OZUNU

UNIVERSITATEA TEHNICĂ "GHEORGHE ASACHI" IAȘI
RECTORATUL

Către

Vă facem cunoscut că în ziua de **19 Octombrie 2012** la ora 10⁰⁰, în **Sala de Consiliu a Facultății de Inginerie Chimică și Protecția Mediului**, va avea loc susținerea publică a tezei de doctorat intitulată:

**„MODELLING AND OPTIMIZATION METHODS BASED ON NEURO-
EVOLUTIVE TECHNIQUES APPLIED TO CHEMICAL ENGINEERING
PROCESSES”**

**(Metodologii de modelare și optimizare bazate pe tehnici neuro-evolutive aplicate
proceselor din ingineria chimică)**

elaborată de inginer **Elena-Niculina DRĂGOI** în vederea conferirii titlului științific de doctor.

Comisia de doctorat este alcătuită din:

- | | |
|--|-----------------------|
| 1. Prof.univ.dr.ing. Nicolae HURDUC
Universitatea Tehnică "Gheorghe Asachi" din Iași | președinte |
| 2. Prof.univ.dr.ing. Silvia CURTEANU
Universitatea Tehnică "Gheorghe Asachi" din Iași | conducător științific |
| 4. Prof.univ.dr.ing. Dan CAȘCAVAL
Universitatea Tehnică "Gheorghe Asachi" din Iași | membru |
| 5. Conf.dr. Sabin BURAGA
Universitatea „Alexandru Ioan Cuza” din Iași | membru |
| 6. C.S. II. dr.ing. Florin ROTARU
Institutul de Informatică Teoretică al Academiei Romane, Filiala Iași | membru |

Vă trimitem rezumatul tezei de doctorat cu rugămintea de a ne comunica, în scris, aprecierile dumneavoastră.

Cu această ocazie vă invităm să participați la susținerea publică a tezei de doctorat.

RECTOR,

Prof. univ. dr. ing. **ION GIURMA**



Secretar universitate,

Ing. Cristina Nagiț



UNIUNEA EUROPEANĂ



GUVERNUL ROMÂNIEI
MINISTERUL MUNCII, FAMILIEI ȘI
PROTECȚIEI SOCIALE
AMPOSDRU



Fondul Social European
POSDRU 2007-2013



Instrumente Structurale
2007-2013



MINISTERUL
EDUCAȚIEI
CERCETĂRII
TINERETULUI
ȘI SPORTULUI
OIPOSDRU



UNIVERSITATEA TEHNICĂ
"GHEORGHE ASACHI"
DIN IASI

Mulțumiri

Doresc să adresez sincere mulțumiri doamnei prof. univ. dr. ing. Silvia Curteanu pentru îndrumarea, sprijinul și ajutorul necondiționat acordat pe întreaga durată a cercetării și elaborării tezei de doctorat. Realizările mele și experiența acumulată în domeniul aplicațiilor inteligenței artificiale în modelarea și optimizarea proceselor din ingineria chimică nu ar fi fost posibile fără îndrumarea domniei sale.

De asemenea, doresc să îmi exprim aprecierea și deosebita recunoștință față de domnul ș.l. dr. ing. Florin Leon pentru suportul și indicațiile valoroase oferite în dezvoltarea și implementarea aplicațiilor software bazate pe instrumente ale inteligenței artificiale.

Mulțumesc tuturor colegilor pentru cadrul profesional creat și sprijinul acordat de-a lungul anilor de doctorat.

Alese mulțumiri cadrelor didactice de la Facultatea de Automatică și Calculatoare pentru pregătirea pe care mi-au oferit-o în timpul studiilor universitare.

Aș dori, de asemenea, să mulțumesc domnului prof. univ. dr. Antonello Baressi și CP Davide Fissore de la Politecnico di Torino din Italia pentru colaborarea eficientă pe parcursul stagiului de pregătire extern.

Cele mai calde gânduri și mulțumiri sunt adresate familiei mele pentru înțelegerea, răbdarea și încurajările acordate în toți acești ani.

CUPRINS

1. INTRODUCERE	1
1.1. <i>Obiectivele tezei</i>	2
1.2. <i>Structura tezei</i>	3
2. CALCUL DE INSPIRAȚIE BIOLOGICĂ. APLICAȚII ÎN INGINERIA CHIMICĂ..7	7
2.1. <i>Aspecte generale</i>	7
2.2. <i>Optimizare și optimizatori</i>	8
2.3. <i>Modele și modelare</i>	13
2.3.1. <i>Aspecte generale</i>	13
2.3.2. <i>Modele clasice versus Rețele neuronale</i>	15
2.3.3. <i>Rețele neuronale artificiale</i>	17
2.3.4. <i>Aplicații ale rețelelor neuronale în ingineria chimică.....</i>	21
2.3.4.1. <i>Protecția mediului.....</i>	21
2.3.4.2. <i>Polimerizare.....</i>	22
2.3.4.3. <i>Bio-chimie</i>	24
2.4. <i>Neuro-evoluție</i>	25
2.4.1. <i>Aspecte generale</i>	25
2.4.2. <i>Codare</i>	26
2.4.3. <i>Nivele de evoluție</i>	27
2.5. <i>Sisteme imune artificiale</i>	28
2.5.1. <i>Aspecte generale</i>	29
2.5.2. <i>Algoritm de selecție clonală.....</i>	32
2.5.2.1. <i>Inițializare</i>	34
2.5.2.2. <i>Selecție și clonare</i>	35
2.5.2.3. <i>Maturarea afinității și editarea receptorilor</i>	36
2.5.3. <i>Aplicații ale algoritmilor imuni artificiali.....</i>	38
2.6. <i>Concluzii.....</i>	40
3. EVOLUȚIE DIFERENȚIALĂ	43
3.1. <i>Structura algoritmului</i>	45
3.1.1. <i>Inițializare</i>	45
3.1.2. <i>Mutație</i>	46
3.1.3. <i>Încrucișare (Crossover)</i>	48
3.1.4. <i>Selecție.....</i>	50
3.2. <i>Criterii de stop</i>	52
3.3. <i>Variante ale evoluției diferențiale</i>	54
3.3.1. <i>Probleme ale evoluției diferențiale</i>	58
3.3.2. <i>Direcții de îmbunătățire</i>	60
3.3.2.1. <i>Parametri și auto-adaptare în algoritmul DE</i>	60
3.3.2.2. <i>Hibridizare</i>	65
3.3.2.3. <i>Noi strategii de mutație.....</i>	68
3.4. <i>Evoluție diferențială și rețele neuronale</i>	70
3.4.1. <i>Ponderi. Arhitecturi.....</i>	70
3.4.2. <i>Optimizare simultană a topologiei și parametrilor.....</i>	71
3.5. <i>Aplicații ale evoluției diferențiale în ingineria chimică.....</i>	72
3.5.1. <i>Optimizarea procesului utilizand diferite variante ale algoritmului DE.....</i>	73
3.5.2. <i>Estimare de parametri</i>	74

3.5.2.1.	Optimizarea modelelor statistice utilizand algoritmul DE	74
3.5.2.2.	Determinarea rețelelor neuronale artificiale cu ajutorul metodelor bazate pe variante ale DE.....	75
3.6.	Concluzii.....	76
4.	FRAMEWORK PENTRU MODELAREA ȘI OPTIMIAZREA PROCESELOR DIN INGINERIA CHIMICĂ.....	79
4.1.	<i>Aspecte generale referitoare la dezvoltarea framework-ului</i>	<i>80</i>
4.1.1.	Codarea indivizilor algoritmilor din framework-ul OPT-NN.....	81
4.1.1.1.	Codarea pentru optimizarea modelului.....	82
4.1.1.2.	Codarea pentru optimizarea procesului	83
4.1.2.	Funcția de potrivire (Fitness).....	84
4.1.2.1.	Funcția de potrivire pentru optimizarea modelului	84
4.1.2.2.	Funcția de potrivire pentru optimizarea procesului.....	85
4.1.3.	Rețele neuronale simple sau organizate în stive	85
4.2.	<i>Evaluarea complexității și a performanței algoritmilor</i>	<i>88</i>
4.3.	<i>Implementarea framework-ului</i>	<i>91</i>
4.3.1.	Structura generală a codării framework-ului OPT-NN.....	91
4.3.2.	Interfața utilizator a framework-ului OPT-NN	96
4.4.	Concluzii.....	99
5.	METHODOLOGIE BAZATĂ PE VARIANTE SIMPLE ALE EVOLUȚIEI DIFFERENTIALE ȘI REȚELE NEURONALE	102
5.1.	<i>Aspecte particulare ale DE-NN.....</i>	<i>102</i>
5.2.	<i>Aplicații în ingineria chimică.....</i>	<i>104</i>
5.2.1.	Polimerizarea radicalică a stirenului (CS1)	104
5.2.1.1.	Descrierea procesului	105
5.2.1.2.	Modelarea procesului și predicții	106
5.2.2.	Eliminarea compușilor biologici activi din hidrogeluri (CS2)	110
5.2.2.1.	Descrierea procesului	111
5.2.2.2.	Modelarea procesului și predicții	112
5.2.3.	Transferul de masă al oxigenului în bioreactoarele cu amestec (CS3).....	119
5.2.3.1.	Descrierea procesului	120
5.2.3.2.	Modelarea procesului și predicții	121
5.2.3.3.	Modelarea procesului și clasificare	129
5.3.	Concluzii.....	131
6.	DEVOLUȚIE DIFERENȚIALĂ CU AUTO-ADAPTARE ȘI REȚELE NEURONALE ARTIFICIALE	133
6.1.	<i>Aspecte particulare ale jDE-NN și SADE-NN</i>	<i>133</i>
6.2.	<i>Aplicații în ingineria chimică.....</i>	<i>136</i>
6.2.1.	Transferul de masă al oxigenului în bioreactoarele cu amestec (CS3).....	136
6.2.1.1.	Modelarea procesului și predicții	136
6.2.1.2.	Modelarea procesului și clasificare	142
6.2.2.	Predicția proprietății de cristal lichid a unor compuși organici (CS4).....	143
6.2.2.1.	Descrierea problemei.....	144
6.2.2.2.	Modelare și clasificare.....	146
6.3.	Conclusions	153
7.	VERSIUNI HIBRIDE ALE ALGORITMULUI EVOLUȚIE DIFERENȚIALĂ ÎN COMBINAȚIE CU REȚELE NEURONALE	157

7.1.	<i>Aspecte particulare ale versiunilor hibride DE</i>	158
7.1.1.	SADE-NN-1	158
7.1.2.	SADE-NN-2	161
7.2.	<i>Aplicații în ingineria chimică</i>	163
7.2.1.	Influența adăugării n-dodecan -ului asupra coeficientului de transfer de masă al oxigenului pentru diferite amestecuri (CS5)	163
7.2.1.1.	Descrierea procesului	164
7.2.1.2.	Analiza de sensibilitate	166
7.2.1.3.	Fermentarea bacteriilor	167
7.2.1.4.	Fermentarea drojdiilor	174
7.2.2.	Uscarea prin înghețare a produselor farmaceutice (CS6)	179
7.2.2.1.	Descrierea procesului	179
7.2.2.2.	Metodologii de abordare	182
7.2.2.3.	Determinarea modelului neuronal	185
7.2.2.4.	Monitorizarea procesului	191
7.2.2.5.	Modelarea procesului și identificarea sistemului	197
7.3.	<i>Concluzii</i>	200
8.	OPTIMIZARE NEURONALĂ BAZATĂ PE ALGORITMUL DE SELECȚIE CLONALĂ	204
8.1.	<i>Aspecte particulare ale CS-NN</i>	204
8.2.	<i>Aplicații în ingineria chimică</i>	206
8.2.1.	Îndepărtarea metalelor grele din apele reziduale	206
8.2.1.1.	Descrierea procesului	207
8.2.1.2.	Modelarea procesului și predicții	207
8.2.2.	Separarea acidului succinic din amestecurile de fermentație	210
8.2.2.1.	Descrierea procesului	211
8.2.2.2.	Modelarea procesului și predicții	212
8.3.	<i>Concluzii</i>	214
9.	CONCLUZII FINALE	217
9.1.	<i>Concluzii referitoare la obiectivele tezei</i>	217
9.2.	<i>Aspecte originale</i>	223
9.3.	<i>Direcții pentru continuarea cercetărilor</i>	224
	Lista figurilor	226
	Lista tabelor	230
	Publicații ce vizează obiectivele rezolvate în teză	232
	Lucrări ISI	232
	Lucrări indexate în bazele de date internaționale	232
	Participări la manifestările științifice (comunicări, postere)	232
	Patente	233
	Bibliografie	234

1. Introducere

În cadrul oricărui sistem, este de dorit realizarea unui stări optimale. În domeniul ingineriei chimice, problemele principale care apar în cazul optimizării diferitelor procese sunt, în general, legate de natura multi-obiectiv a acestora, metodele utilizate sau modelele necesare. Majoritatea abordărilor clasice sunt bazate pe legile fizice și chimice care guvernează procesele, legi care sunt descrise de modele matematice aplicate la diferite nivele care variază de la macroscopic la molecular. Aceste modele sunt reprezentate, în general, de forme derivative ale unor funcții puternic neliniare care, de cele mai multe ori, sunt greu de rezolvat. În consecință, implementarea acestora în aplicații software necesită programe eficiente care nu numai că sunt greu de utilizat, dar sunt și foarte scumpe.

Astfel, sunt necesare noi abordări pentru modelarea și optimizarea proceselor chimice. Inteligența artificială, care este o ramură a științei calculatoarelor ce se ocupă cu studierea și dezvoltarea de metode inteligente pentru maximizarea eficienței unui sistem dinamic, poate oferi asemenea metode. Un număr mare de algoritmi eficienți aparținând inteligenței artificiale pot fi regăsiți în literatura de specialitate, rețelele neuronale (NN) fiind una din numeroasele instrumente utilizate pentru rezolvarea unor probleme dificile din diferite domenii.

Algoritmii de inspirație biologică sunt metode bazate pe modele simplificate ale structurilor biologice, acestea încercând să imite diferite procese pentru a crea proceduri de optimizare. Dintre numeroasele metode de inspirație biologică, printre cele mai cunoscute se afla algoritmii evolutivi (EA), sistemele artificiale imune (AIS) sau rețele neuronale.

Algoritmii EA se bazează pe principiile propuse de către Darwin, indivizii cei mai adaptați la mediu supraviețuind generațiilor următoare. Pe de altă parte, AIS este inspirat din sistemul imunitar și lucrează cu o populație de anticorpi care, pentru a putea identifica și distruge antigenii ce invadează organismul, sunt supuși unui proces de clonare, hipermutație și selecție. Acești algoritmi au o organizare proprie, sunt decentralizați, flexibili și eficienți (Folino and Mastroianni, 2010) și pot fi utilizați în ingineria chimică deoarece: i) nu necesită valori inițiale; ii) sunt capabili să determine optimul global chiar și în situații în care există optime locale multiple; și iii) nu utilizează forme derivative ale funcției obiectiv.

Rețelele neuronale sunt inspirate din funcționarea creierului biologic și sunt considerate modele de tip „cutie-neagră” care pot funcționa ca aproximator de funcții. În consecință, pot fi utilizate ca modele ale proceselor din ingineria chimică, dependența intrare - ieșire fiind determinată fără a fi necesare cunoștințe legate de procesul studiat.

Un aspect important care trebuie luat în considerare este faptul ca aceste metode ale inteligenței artificiale nu înlocuiesc metodele clasice, ci completează aria de metode, fiind considerate alternative viabile, în special în cazurile în care complexitatea și numărul ridicat de parametri

pun probleme abordărilor clasice. În unele cazuri, ambele metode sunt recomandate, în special pentru a oferi o bază de comparație în ceea ce privește eficiența.

1.1. Obiectivele tezei

În cadrul tezei de doctorat „Metodologii de modelare și optimizare bazate pe tehnici neuro-evolutive aplicate proceselor din ingineria chimică”, algoritmul evoluție diferențială (DE) care este o variantă a algoritmilor evolutivi și algoritmul selecție clonală (CS) aparținând clasei AIS, în combinație cu rețele neuronale, sunt utilizați pentru modelarea, optimizarea și monitorizarea diferitelor aspecte ale proceselor din ingineria chimică. Rețelele neuronale (simple sau agregate în stivă) stau la baza metodologiilor elaborate, acestea reprezentând modelul procesului, scopul principal fiind acela de a crea metode îmbunătățite care să optimizeze eficient nu numai modelul, dar și sistemul chimic.

Au fost selectate ca studii de caz o serie de procese chimice, fiecare dintre acestea fiind descrise de către un set complet de date experimentale. Cerințele fiecărei probleme sunt rezolvate pentru prima oară folosind metodologiile ce combină diferite variante ale celor trei algoritmi. Astfel, studiile de caz considerate sunt:

- polimerizarea radicalică a stirenului,
- obținerea de hidrogeluri cu potențial medical,
- influența adăugării n-dodecanului asupra coeficientului de transfer de masă al oxigenului în cazul folosirii diferitelor amestecuri,
- proprietatea de cristal lichid a unor compuși organici,
- uscarea prin înghețare a produselor farmaceutice,
- îndepărtarea metalelor grele din apele uzate folosind turba,
- separarea acidului succinic din amestecurile de fermentație.

Principalele obiective propuse și rezolvate în cadrul tezei sunt legate de crearea unui framework general care să fie ușor de utilizat de inginerii chimiști. Acestea sunt:

- Dezvoltarea de metode bazate pe NN în combinație cu DE și aplicarea acestora pentru rezolvarea unor procese chimice complexe. Diferitele combinații realizate constau în:
 - i) rețele simple sau de tip stivă optimizate cu variante simple ale DE (DE-NN);
 - ii) îmbunătățirea algoritmului DE prin introducerea a două principii diferite de auto-adaptabilitate (jDE-NN , SADE-NN);
 - iii) hibridizarea algoritmului DE folosind principiul opoziției, un algoritm de învățare cu propagare înapoi și o nouă strategie de mutație (SADE-NN-1 și SADE-NN-2).

- Crearea unei metodologii pentru modelare și optimizare folosind versiuni modificate ale CS în combinație cu rețele neuronale (CS-NN).
- Includerea tuturor metodologiilor într-un framework general concretizat într-o aplicație software originală care:
 - i) poate fi ușor îmbunătățită prin introducerea de noi algoritmi; și
 - ii) poate fi utilizată de inginerii chimiști pentru rezolvarea unor probleme variate.

1.2. Structura tezei

Această teză este organizată astfel încât fiecare direcție de îmbunătățire (care are ca finalitate unul sau mai mulți algoritmi) este prezentată separat, ordinea acestora fiind direct legată de creșterea complexității și adăugarea de noi elemente. Este prezentat framework-ul general care cuprinde toți algoritmi și care stabilește cadrul comun al acestora. Acesta conține elemente specifice precum: structura și tipul de codare utilizat, limitele aplicate topologiei rețelelor neuronale, funcțiile de potrivire și caracteristicile generale ale algoritmului de optimizare, metode pentru evaluarea complexității și a performanței. Sunt prezentate apoi particularitățile fiecărui algoritm bazat fie pe DE, fie pe CS, urmate de studiile de caz ce ilustrează performanța acestora. Pentru a determina performanțele algoritmilor într-un context mai general, pentru unele procese sunt testați mai mulți algoritmi, o serie de comparații indicând care este cea mai bună abordare în funcție de caracteristicile fiecărui proces. Pentru aceste studii de caz sunt discutate o serie de particularități ca: structura bazei de date reprezentată de date experimentale sau obținute folosind simulatoare, adaptarea algoritmilor la limitările impuse de caracteristicile procesului, rezultatele obținute și interpretarea acestora.

Din punct de vedere structural, teza este alcătuită din noua capitole dintre care Capitolul 1 reprezintă introducerea, Capitolele 2 și 3 conțin partea teoretică fundamentală a modelării și optimizării împreună cu principiile de bază ale rețelelor neuronale, sistemelor imune artificiale și ale algoritmului evoluție diferențială. Următoarele 5 capitole (4-8) reprezintă contribuția originală a tezei. Fiecare capitol se încheie cu o secțiune de concluzii, ultimul capitol conținând concluziile finale prezentate din două puncte de vedere distincte: i) aspectele originale legate de dezvoltarea de noi algoritmi pentru rezolvarea diferitelor probleme specifice ingineriei chimice; și ii) procesele considerate și procedurile de modelare și optimizare aplicate.

Capitolul 1 prezintă a serie de aspecte generale, constituind o introducere în conținutul tezei. Sunt enumerate obiectivele principale ale tezei și este prezentată structura generală.

Capitolul 2 prezintă principalele elemente teoretice ale algoritmilor de inspirație biologică în contextul modelării și optimizării proceselor din ingineria chimică. Având în vedere că unul din principalele obiective ale tezei este reprezentat de crearea unor algoritmi pentru determinarea unor modele neuronale bune pentru procesele chimice, sunt discutate elemente specifice ale

domeniului neuro-evolutiv, subliniind caracteristicile rețelelor neuronale și a procedurilor de optimizare. De asemenea, sunt incluse o serie de detalii legate de sistemele imune artificiale.

Capitolul 3, al doilea capitol teoretic, detaliază funcționarea algoritmului evoluție diferențială, condițiile de oprire, versiunile sale, posibilele direcții de îmbunătățire în contextul proceselor din ingineria chimică. Deoarece majoritatea algoritmilor dezvoltați în această teză sunt bazați pe diferite versiuni ale DE, sunt, de asemenea, prezentate o serie de detalii teoretice ale acestui algoritm (avantaje, dezavantaje, limitări, metode de eliminare a unor probleme specifice).

Capitolul 4 este primul capitol care abordează contribuțiile originale ale tezei. Plecând de la o serie de considerente practice, sunt prezentate elementele de bază ale framework-ului OPT-NN dezvoltat pentru a include toate metodologiile și algoritmii creați. Aceste elemente sunt reprezentate de: tipul și structura codării, funcțiile de fitness, avantajele și dezavantajele algoritmilor. Sunt detaliate fluxurile principale și combinațiile „proces” – „rețea neuronală” – „algoritm de optimizare”.

Capitolul 5 prezintă primul algoritm dezvoltat folosind framework-ul OPT-NN. Acesta este bazat pe o versiune simplă DE, cu ajutorul lui realizându-se o optimizare simultană a topologiei și parametrilor interni ai rețelelor neuronale de tip multi-strat cu propagare înainte. Aceste rețele constituie modelele proceselor alese ca studii de caz (polimerizarea radicalică a stirenului, transferul de masă al oxigenului în bireactoare cu amestecare și eliminarea/desorbția unor compuși din hidrogeluri). Modelarea procesului de transfer de masă al oxigenului este studiat folosind două abordări diferite: modele neuronale simple și rețele neuronale organizate în stivă.

Capitolul 6 abordează o primă direcție de îmbunătățire a algoritmului DE reprezentată de înlocuirea metodei clasice de selecție a parametrilor de control cu mecanisme auto-adaptive. Au fost dezvoltate și implementate două metodologii: jDE-NN și SADE-NN. Algoritmul jDE-NN este bazat pe o versiune adaptivă întâlnită în literatura de specialitate, iar SADE-NN lucrează cu un principiu nou de auto-adaptare. Acești algoritmi sunt aplicați pentru transferul de masă al oxigenului în bioreactoare și pentru determinarea proprietății de cristal lichid a unor compuși organici.

Capitolul 7 prezintă doi algoritmi noi care aplică principiul hibridizării (denumiți în teză SADE-NN-1 și SADE-NN-2). Acești algoritmi includ două metode de căutare locală, performanțele lor fiind testate în cadrul a două studii de caz reprezentate de procese complexe din ingineria chimică: influența adăugării n-dodecanului asupra transferului de masă al oxigenului când sunt considerate diferite amestecuri și uscarea prin înghețare a produselor farmaceutice.

În **capitolul 8** este descris și testat un algoritm bazat pe principiul selecției clonale. Aceasta se bazează pe o variantă nouă de CS, în care modificarea la nivel de hipermutație este efectuată în scopul creșterii performanței algoritmului. Două probleme complexe legate de eliminarea

metalelor grele din apele reziduale și separarea acidului succinic din amestecuri de fermentare sunt rezolvate cu această metodologie.

Secțiunea **Concluzii** subliniază realizarea obiectivelor propuse din două puncte de vedere: *algoritmice* (tehniciile bazate pe instrumente de inteligență artificială dezvoltate și aplicate) și *proces* (problemele rezolvate, modelările și optimizările efectuate, precum și rezultatele obținute).

Elementele originale ale tezei sunt reprezentate de: i) metodologiile noi și puternice dezvoltate folosind diverse combinații ale algoritmilor de inspirație biologică; ii) modificările efectuate la diferite nivele asupra algoritmilor cunoscuți cum ar fi determinarea structurii, introducerea procedurii de decodificare, înlocuirea inițializării clasice cu principiul opoziției, dezvoltarea unei strategii noi de mutație pentru DE, iii) asocierea metodologiilor noi cu procese din inginerie chimică; iv) aplicații software noi și ușor de utilizat care permit o gamă largă de setări. Metodologiile dezvoltate au un caracter general și pot fi ușor adaptate și aplicate alte procese și sisteme din domeniul ingineriei chimice. Cercetarea realizată în cadrul acestei teze deschide noi perspective și posibilități de a modela eficient procese chimice complexe, cu aplicații practice în tehnica experimentală (economii de materiale, energie, timp) și industrială (eficientizarea controlului optimal). Interfața grafică a aplicației software propusă permite inginerului chimist să obțină cu ușurință predicții ori de câte ori este necesar și în orice condiții experimentale.

Figura 1.1 ilustrează structura tezei, marcând clar cele două niveluri pe care a fost construită (algoritmi de inspirație biologică și procesele din domeniul ingineriei chimice).

La final, toate cele 328 de referințe utilizate sunt prezentate în ordine alfabetică. Aceste referințe sunt reprezentate de articole și cărți consultate, articole publicate de către autoare. Rezultatele cercetării prezentate în teză sunt concretizate în 5 articole ISI și 3 participări la conferințe naționale sau internaționale (2 prezentări și un poster). De asemenea, software-ul propriu dezvoltat este patentat (2 brevete).

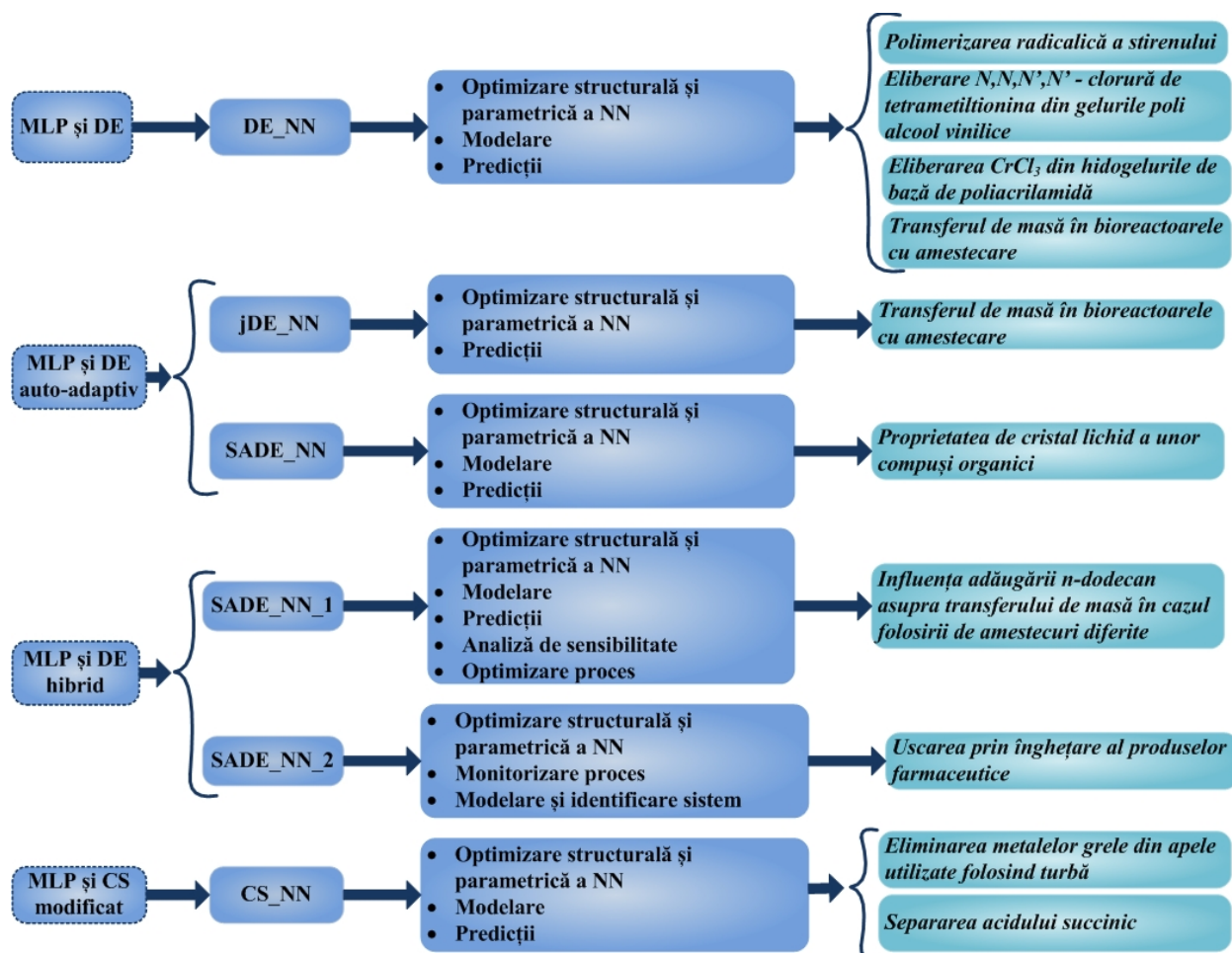


Figura 1.1. Structura tezei

4. Framework pentru modelarea și optimizarea proceselor din ingineria chimică

Framework-ul utilizat în această teză a fost dezvoltat pentru modelarea, predicția, clasificarea, optimizare, monitorizare și identificarea sistemelor din ingineria chimică. Pentru a lucra cu o gamă largă de procese și a avea rezultate optime, framework-ul se bazează pe rețele neuronale de tip perceptron multi-strat cu propagare înainte (care acționează ca un model general datorită capacității de approximator universal) și pe un algoritm de optimizare (DE și / sau AIS).

4.1. Principii generale în dezvoltarea framework-ului

Framework-ul propus, numit OPT-NN (denumire derivată din termenii optimizare și rețele neuronale) este unul general, putând rezolva diferite aspecte ale unui sau mai multor procese. Procedura de optimizare necesită un model bun și, din moment ce există încă procese pentru care metodele convenționale nu oferă un model acceptabil, au fost alese rețelele neuronale

pentru a reprezenta procesul, modelele ce se bazează pe date experimentale. O schemă conceptuală a framework-ului este prezentată în Figura 4.1.

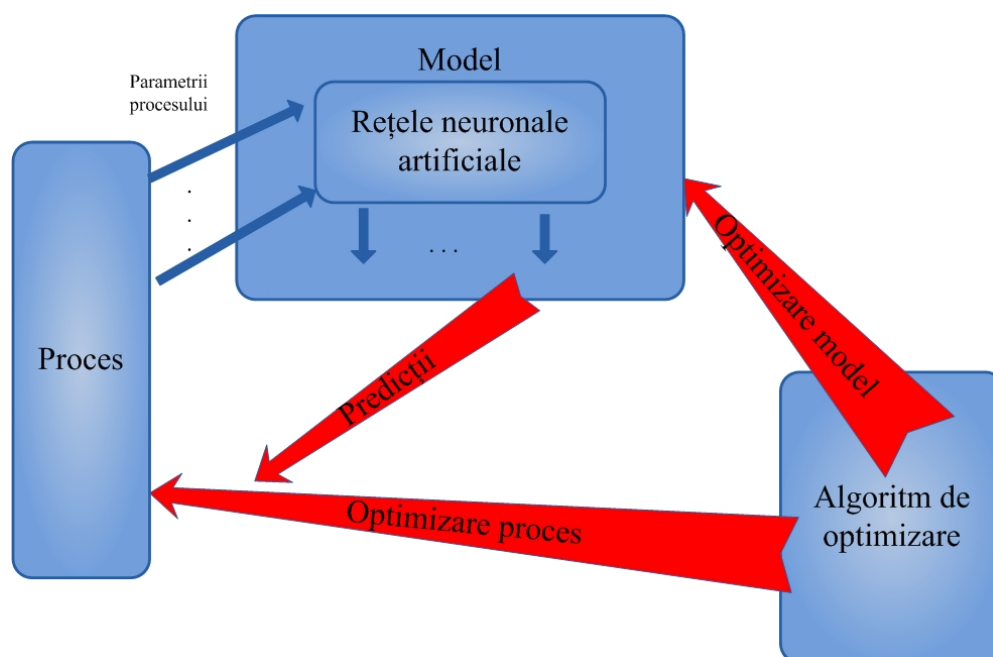


Figura 4.1 Schema conceptuală a framework-ului

Pentru ca un algoritm de optimizare bazat pe populații să poată lucra cu o rețea neuronală, este necesară o strategie pentru crearea și evaluarea indivizilor. Astfel, a fost concepută o metodă care are ca rezultat indivizi ce pot fi înțeleși de către procedura de optimizare și care, în același timp, conțin toate informațiile rețelei. Metoda include atât codarea, cât și procedura de decodare (care are rolul de a crea o legătură puternică între fenotip și genotip), precum și funcțiile obiectiv specifice. Pentru toți algoritmi propuși în teză, această strategie este fixă, diferențele dintre variante constând în tipul de optimizare (DE sau AIS), hibridizare, modalitate de îmbunătățire a soluțiilor la nivel local și procedurile de inițializare.

4.1.1. Codarea indivizilor în cadrul algoritmilor

Pentru metodologia propusă, structura fiecărui individ, care reprezintă o rețea neuronală specifică, este prezentată în Figura 4.2. Parametrul $NL = \{1, 2\}$ reprezintă numărul de straturi, N_{h1} și N_{h2} sunt numărul de neuroni din primul și, respectiv, al doilea strat ascuns, w_i cu $i = 1 \dots n$ reprezintă ponderile, b_i , $i = 1 \dots m$ sunt bias-urile, și f_i , $i = 1 \dots m$ sunt funcțiile de activare.

NL	N_{h1}	N_{h2}	w_1	..	w_n	b_1	..	b_m	f_1	..	f_m
------	----------	----------	-------	----	-------	-------	----	-------	-------	----	-------

Figura 4.2. Codarea fenotip-genotip

Diferența majoră între codificarea utilizată pentru cele două tipuri de optimizare (model și proces) provine din două considerente principale: i) obiectivele și ii) numărul de parametri

necesari. În consecință, în cazul optimizării procesului, numărul de parametri care trebuie să fie optimizați este deja cunoscut și nu este necesară calcularea lor ca în cazul optimizării modelului neuronal. Ca urmare, structura indivizilor atunci când se realizează optimizarea procesului este următoarea:

<i>Input₁</i>	<i>Input₂</i>	..	<i>Input_p</i>
--------------------------	--------------------------	----	--------------------------

Figura 4.3. Codarea indivizilor în cazul optimizării procesului

4.1.2. Funcția de potrivire (fitness)

În funcție de adaptarea lor la mediul înconjurător, indivizii din populație sunt modificați fie prin evoluție în cadrul algoritmului DE (mutație, încrucișare, selecție), fie prin procedurile de selecție clonală ale algoritmului AIS. Funcția de potrivire utilizată în framework-ul OPT-NN este dependentă de eroarea pătratică medie pentru datele de antrenare ($MSE_{training}$) și este dată în ecuația 4.4:

$$Fitness = \frac{1}{MSE_{training} + low} \quad (4.4)$$

În care *low* este un parametru introdus pentru a elimina cazul improbabil în care numitorul este egal cu 0. Valoarea lui este setată ca fiind $\exp(-10)$.

În cazul optimizării, funcția de fitness descrie rezultatul dorit (maximizarea sau minimizarea ieșirii) și depinde de modelul utilizat și de tipul de optimizare. Dacă, de exemplu, este necesară o minimizare a tuturor ieșirilor, ecuația 4.6 descrie funcția de fitness.

$$fitness = \frac{no_outpts}{\sum_{i=0}^{no_outputs} model_output(i)} \quad (4.6)$$

unde $model_output(i)$ este ieșirea *i* a modelului utilizat.

4.2. Evaluarea complexității și a performanței unui algoritm

Performanța este un aspect cheie atunci când se proiectează și testează un algoritm pentru rezolvarea unei probleme specifice. În plus, indicatorii de performanță pot indica dacă modulele specifice lucrează conform așteptărilor, permițând în acest fel o îmbunătățire a metodologiei, în special în zonele nesigure (cu rezultate slabe). Metodologia propusă este scrisă în NET Framework 4.0, în limbajul de programare C#. Figura 4.4 prezintă algoritmul numit SADE-NN-1 bazat pe evoluția diferențială auto-adaptivă. Complexitatea sa este $O(n^5 \log(n))$ atunci când sunt considerate funcțiile interne ale framework-ului și $O(n^4)$ în caz contrar.

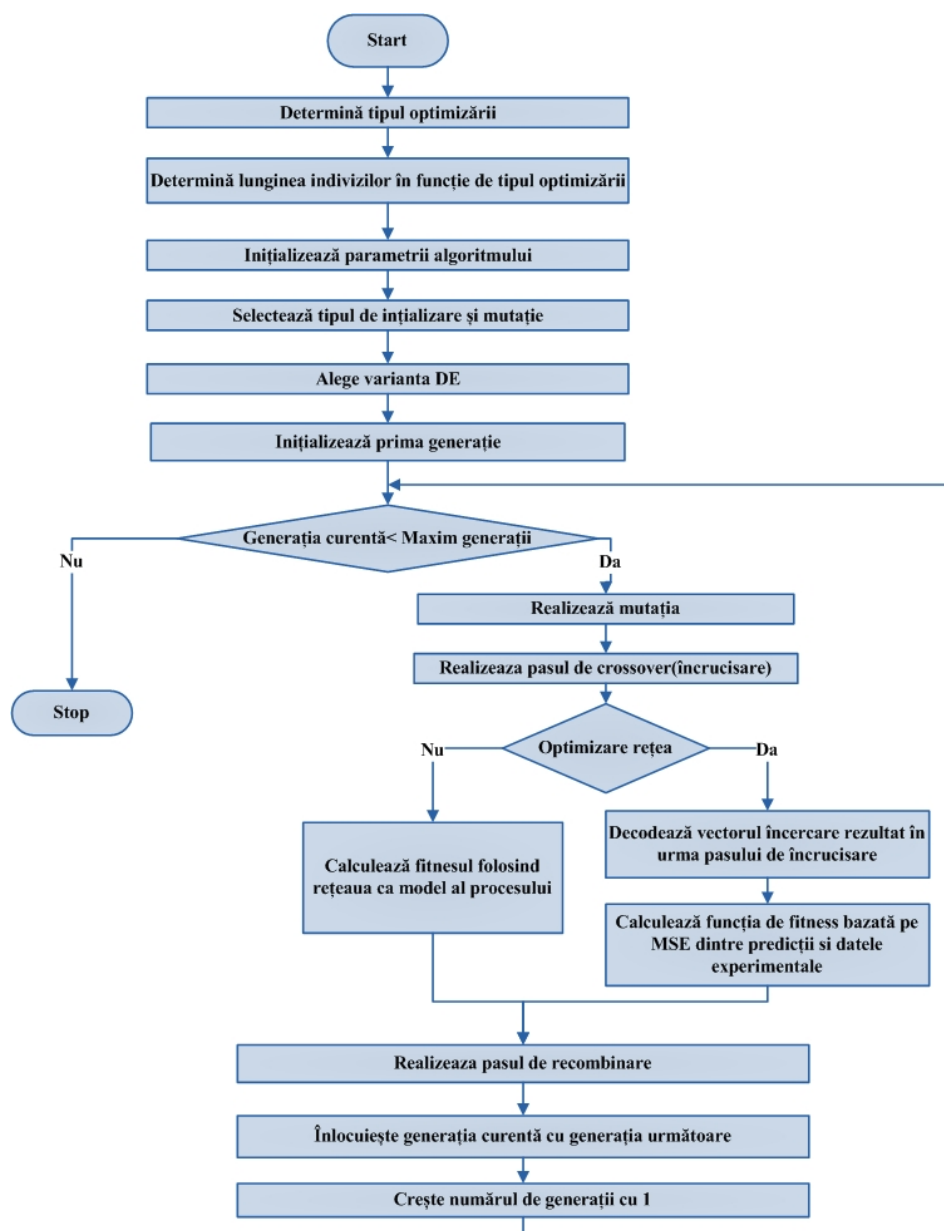


Figure 4.4. Schema unui algoritm creat folosind framework-ul OPT-NN.

4.3. Rețele neuronale simple sau organizate în stivă

OPT-NN a fost proiectat astfel încât să permită utilizarea atât a rețelelor neuronale simple, cât și a celor organizate în stivă. În cazul rețelelor neuronale simple, modelul obținut trebuie să aibă o performanță bună, deoarece aceasta influențează procesul de optimizare. Pentru a determina modele bazate pe rețele neuronale stivă, au fost definite două clase de stive: de tip I și tip II. Principala diferență dintre cele două categorii constă în modul în care sunt create ponderile de ieșire (folosite pentru a lega rețelele unice și pentru a crea stiva). În cazul stivelor de tip I, ponderile sunt calculate pe baza unor combinații liniare (fix, aleator, proporțional cu fitnessul sau MSE), în timp ce în cazul stivelor de tip II, ponderile sunt determinate utilizând altă rețea neuronală și sunt, de obicei, reprezentate de combinații neliniare.

4.4. Implementarea framework-ului

În general, designul algorimilor implementați în OPT-NN este modular, ceea ce permite adăugarea cu ușurință de noi module, proceduri de optimizare, funcții de fitness sau codificări pentru rețelele neuronale. Această modularitate oferă posibilitatea creării de algoritmi cu metode și funcționalități comune. În cadrul framework-ului OPT-NN au fost creați șase algoritmi (cinci bazați pe DE și 1 pe AIS).

4.4.1. Structura generală a framework-ului OPT-NN

La baza framework-ului OPT-NN se află conceptul de rețele neuronale, diagrama de clase a acestuia fiind prezentată în figura 4.6. El conține toate informațiile despre rețea și structura de bază, seturile de date de antrenare și testare, predicții.

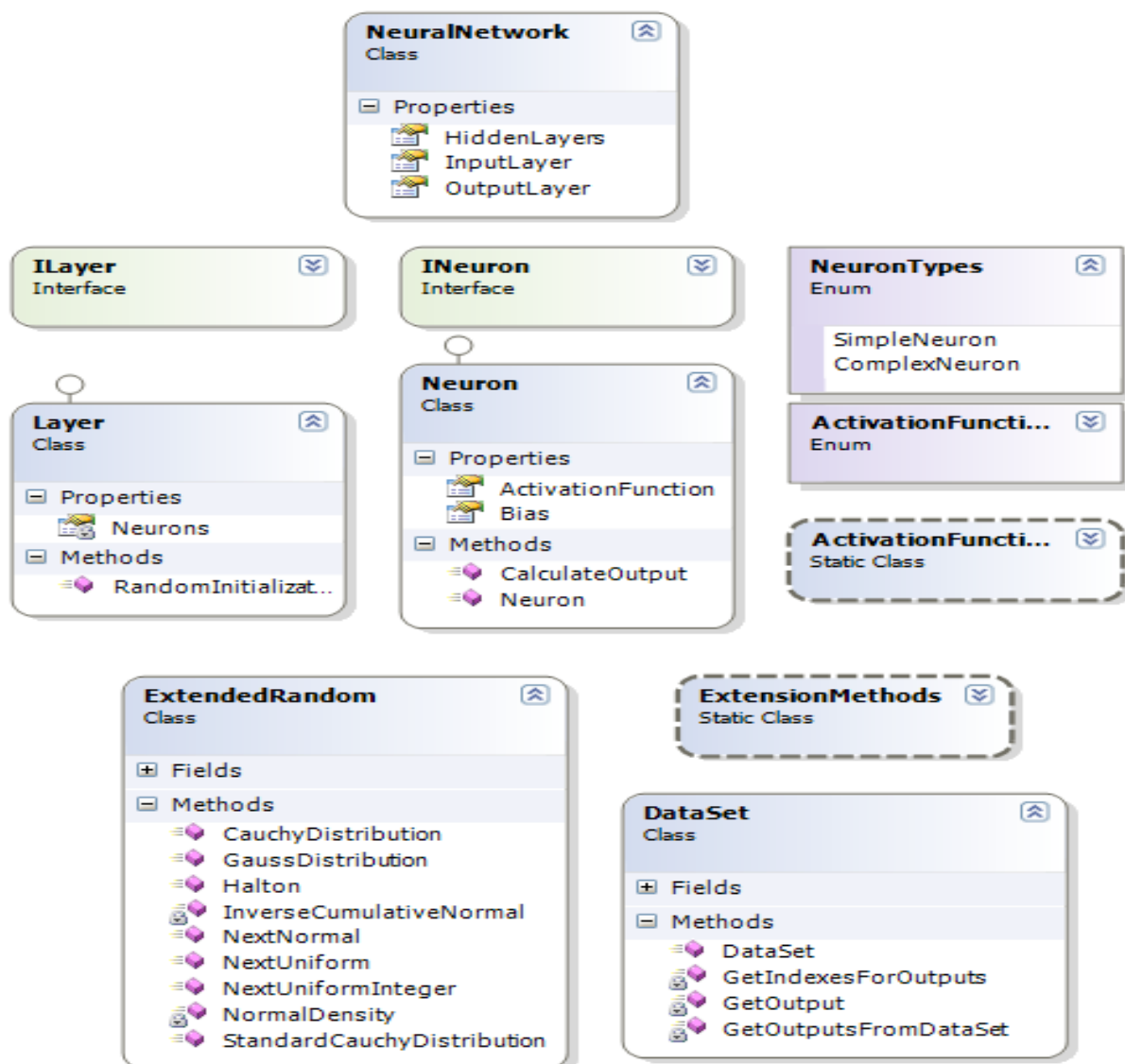


Figura 4.6. Diagramele de clasă ale modulului ce descrie rețelele neuronale.

Clasa Neural Network operează cu elemente ca: stratul de intrare, stratul de ieșire și o listă de straturi ascunse, acestea permițând crearea dinamică a unei multitudini de topologii. Fiecare strat este o colecție de neuroni cu proprietăți specifice.

Un aspect important care trebuie menționat este faptul că unele din metodele specifice cromozomilor și anticorpilor (în cazul algoritmilor de optimizare) pot fi aplicate numai pe cazuri specifice. În funcție de problemă și algoritmul selectat, pot fi alese diverse setări pentru parametri interni ai algoritmilor (Figura 4.9).

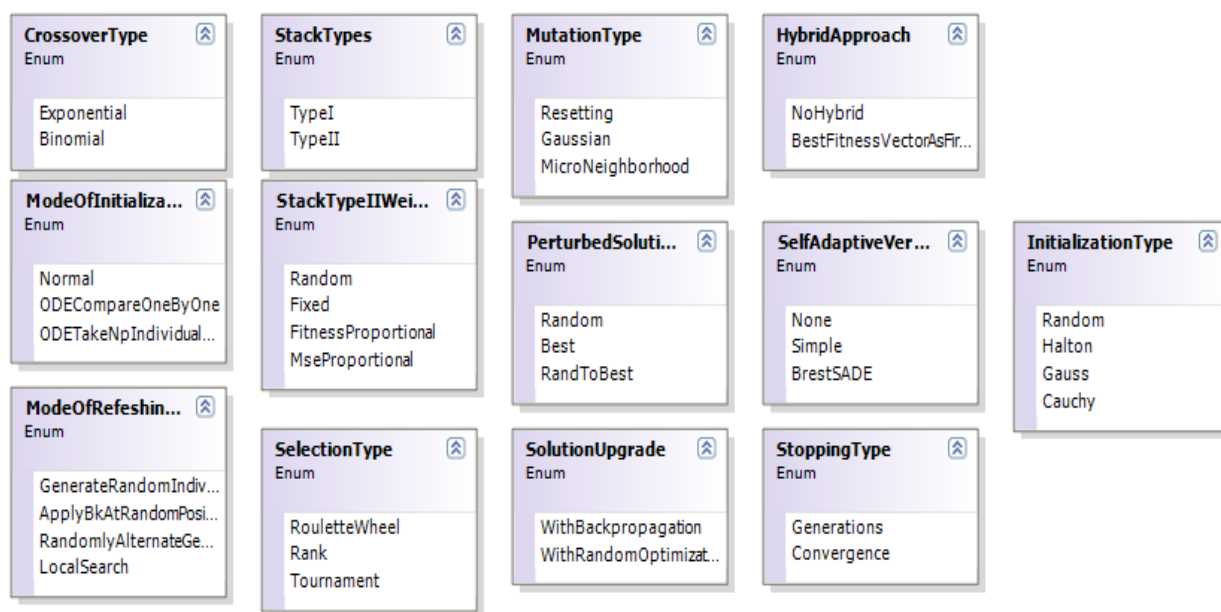


Figura 4.9. Diferite setări pentru opțiuni specifice algoritmilor DE și AIS.

4.4.2. Interfața utilizator a framework-ului OPT-NN

Metodologiile incluse în cadrul framework-ului OPT-NN sunt concepute pentru a fi instrumente pe care inginerii chimiști să le poată utiliza în scopul îmbunătățirii înțelegerii diferitelor interacțiuni interne care apar în procesele chimice. În consecință, a fost creată o interfață intuitivă și ușor de folosit. Pagina principală este reprezentată de o listă de meniuri din care utilizatorul poate alege acțiunea care urmează să fie efectuată (Figura 4.10).

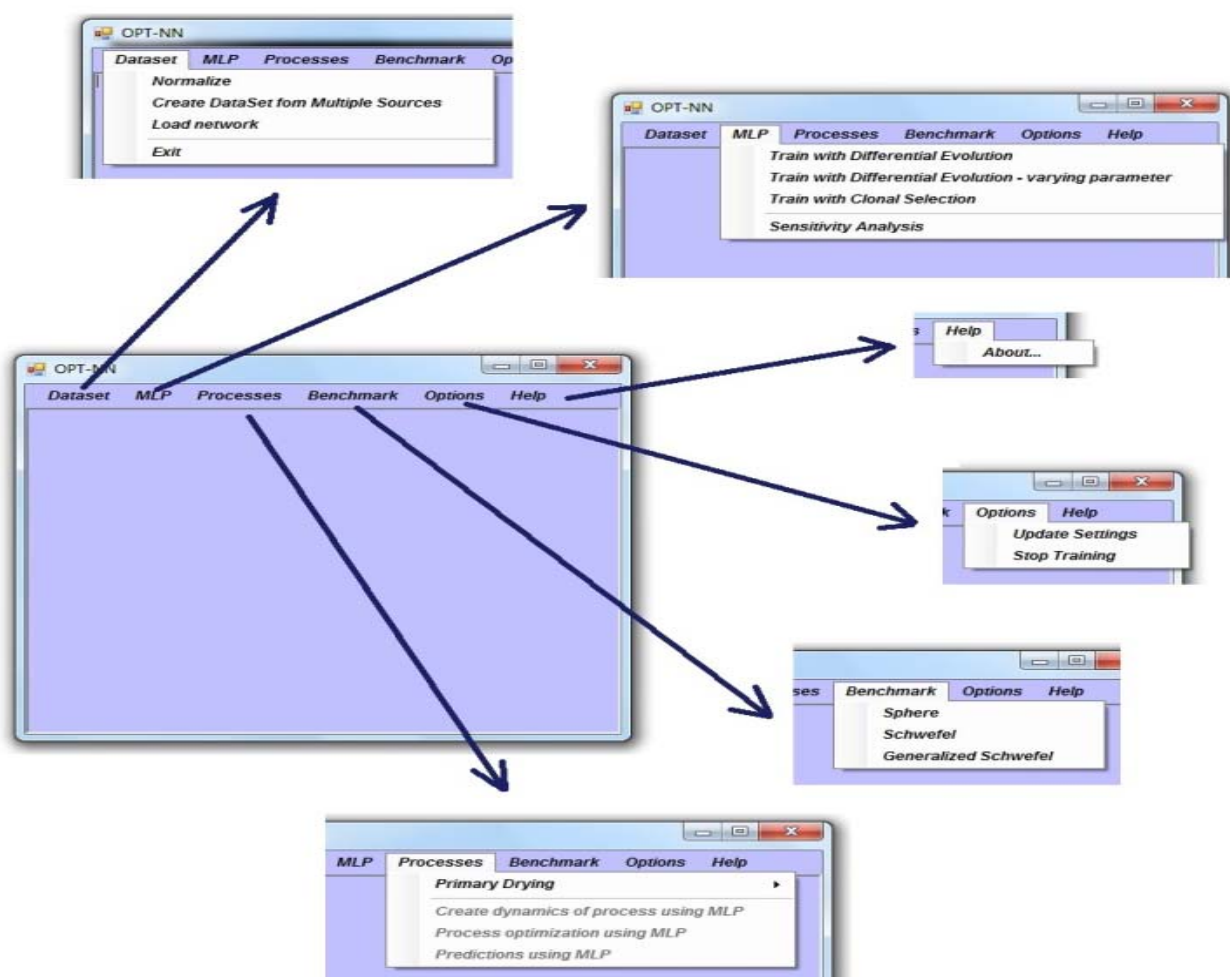


Figura 4.10. Meniul principal al aplicației OPT-NN.

5. Metodologie bazată pe versiuni simple ale algoritmului evolutiv diferențial și rețele neuronale

În cadrul framework-ului OPT-NN, pot fi dezvoltate diferite tipuri de algoritmi de optimizare (simplici, clasici și hibridi), în combinație cu rețele neuronale simple sau organizate în stivă. Această flexibilitate permite crearea de noi metodologii puternice. Prima încercare de a crea o astfel de metodologie se bazează pe o variantă simplă a algoritmului clasic evoluție diferențială și pe rețele neuronale.

Metoda DE-NN a fost dezvoltată pentru a efectua simultan optimizarea structurală și parametrică a modelelor neuronale folosite pentru predicția și clasificarea diverselor proprietăți ale sistemelor chimice. Pentru a inițializa populația de indivizi, pot fi folosite două tipuri de distribuție: uniformă sau neuniformă. Metodologia DE-NN poate lucra cu rețele neuronale simple sau agregate în stive, principala diferență dintre cele două tipuri de modele constând în: i) numărul de rețele utilizate; și ii) modalitatea de a combina mai multe rețele într-o singură

structură. În cazul rețelelor simple (SNN), deoarece este vorba doar de o singură rețea, nu este necesară aplicarea unei proceduri de combinare. În scopul stabilirii performanței algoritmului, sunt alese ca studii de caz o serie de trei procese din diferite domenii ale ingineriei chimice.

5.2. Aplicații în ingineria chimică

5.2.1. Polimerizarea radicalică a stirenului (CS1)

În cazul exemplului considerat – polimerizarea prin radicali liberi a stirenului – a fost utilizat un model matematic complet, bazat pe ecuații de conservare aplicate elementelor din amestecul de reacție, iar pentru rezolvare s-a folosit metoda momentelor de distribuție a concentrațiilor (Curteanu, 2003). Pe baza acestui model, a fost generată o bază de date completă formată din 3494 exemplare (simulare pe modelul cinetic). Rețele neuronale determinate de metodologia DE-NN (figurile 5.3 și 5.4) au fost folosite pentru predicția conversiei monomerului și a maselor moleculare, în funcție de concentrația de inițiator, temperatură și timp de reacție. În plus, în figurile 5.3 și 5.4 s-au folosit pentru comparație rezultate furnizate de modelele neuronale determinate cu alte două metode: un algoritm bazat pe o căutare sistematizată de tip încercare și eroare (OMP) și o metodă bazată pe un algoritm genetic simplu (GA).

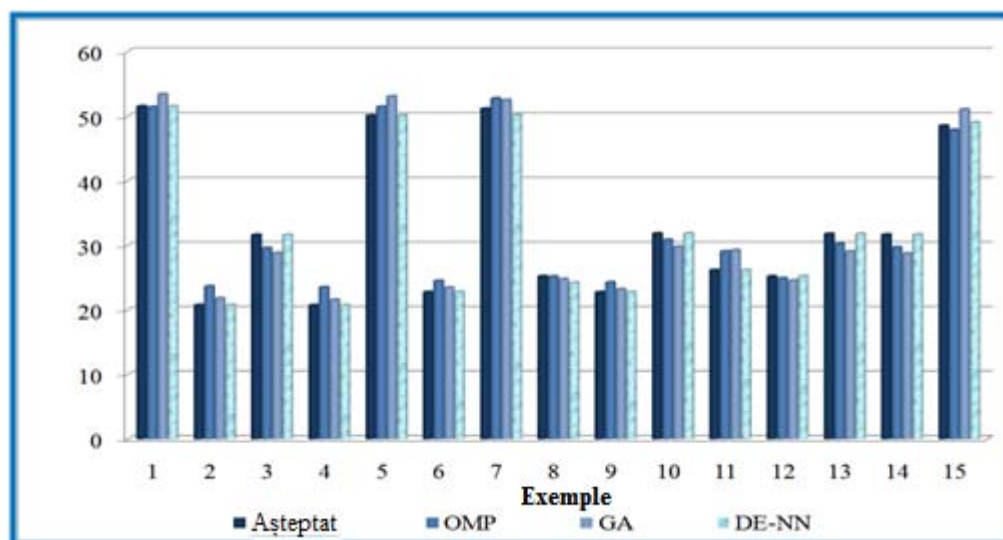


Figura 5.3. Câteva valori pentru masa moleculară medie numerică: valori experimentale și mase moleculare obținute în faza de testare cu modelele neuronale determinate cu cele 3 metode (OMP, GA, DE).

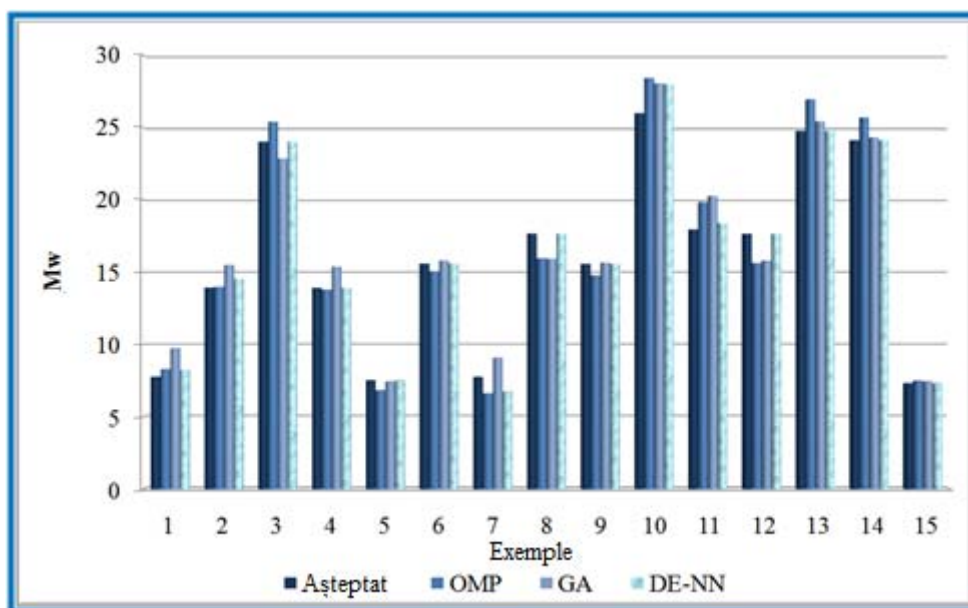


Figura 5.4. Câteva valori pentru masa moleculară medie gravimetrică: valori experimentale și mase moleculare obținute în faza de testare cu modelele neuronale determinate cu cele 3 metode (OMP, GA, DE).

5.2.2. Eliminarea unor compuși biologici activi din hidrogeluri (CS2)

S-au sintetizat două sisteme multicomponente de tip hidrogel "încărcate" cu un compus mic molecular: a) un gel bazat pe polialcool vinil (PVA) și N, N, N', N' – clorură de tetrametiltionină (CITMeTn) și b) un gel reticulat pe bază de poliacrilamidă (PAAM), "încărcat" cu clorură de crom (III). Complexitatea fenomenelor de difuzie necesită o corelație între procesul de umflare și parametrii morfo-structurali din matricea polimetrică. Aceste două studii de caz au fost folosite în modelare bazată pe rețele neuronale, ceea ce a permis studierea performanței aplicației software, respectiv a componentei de determinare a modelelor neuronale cu metodologia DE-NN.

5.2.2.1. Eliminarea de N,N,N',N' - clorură de tetrametiltionină din gelurile poli alcool vinilice (CS2.1)

Numărul de intrări și ieșiri ale rețelei neuronale a fost determinat de caracteristicile procesului studiat, parametrul de intrare fiind reprezentat de volumul eluentului, în timp ce ieșirile au fost concentrația reală a compusului triazinic și CITMeTn (raportul dintre cantitatea de compus biologic activ care trebuie eliminată și valoarea inițială a acesteia).

Rezultatele obținute pentru datele de testare și cele așteptate (date experimentale) sunt comparate în figurile 5.6 și 5.7 pentru cele două ieșiri: concentrația reală și raportul între valoarea eliminată și valoarea inițială a compusului triazinic. Diferențele dintre simulare și

experiment au fost foarte mici, fapt ce atestă capacitățile bune de generalizare ale rețelelor neuronale dezvoltate cu algoritmul DE.

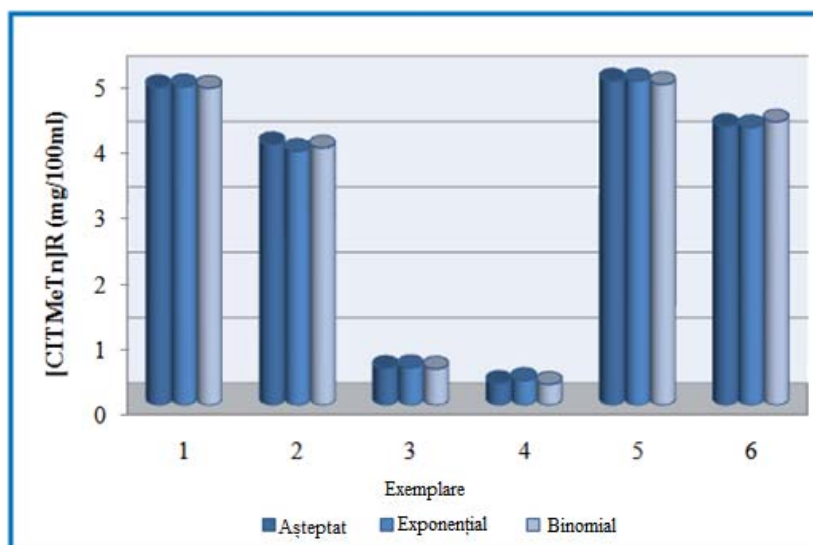


Figura 5.6. Valori experimentale și predicții realizate cu rețelele MLP(1:11:2) și MLP(1:1:4) pentru concentrația compusului triazinic

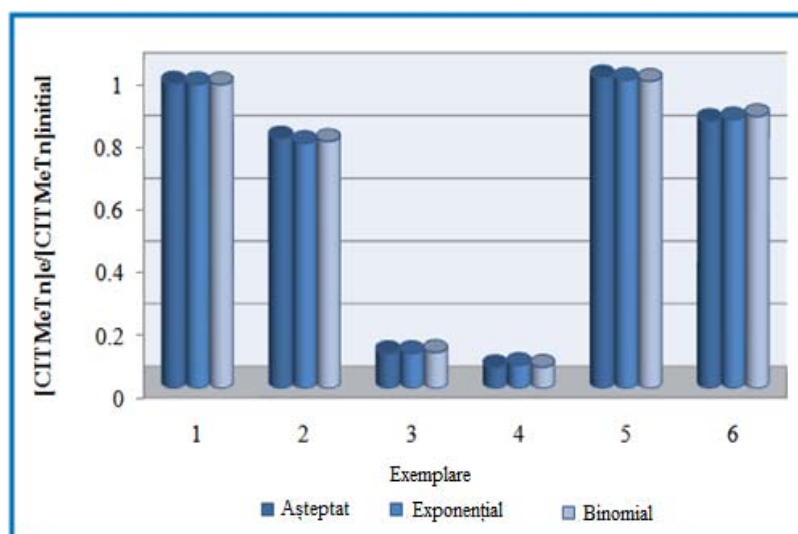


Figura 5.7. Valori experimentale și predicții realizate cu rețelele MLP(1:11:2) și MLP(1:1:4) pentru raportul dintre cantitatea eliminată și cea inițială a compusului triazinic.

Predicțiile suplimentare efectuate cu cea mai bună rețea neuronală, MLP (1:11:2), sunt enumerate în Tabelul 5.4. Dacă inginerul chimist trebuie să producă hidrogeluri cu proprietăți prestabilite impuse de concentrația reală ($[CITMeTn]_R$) și raportul dintre cantitatea eliminată și cea inițială a compusului triazinic ($[CITMeTn]_e / [CITMeTn]_{inițială}$), metodologia DE-NN

oferă un punct de plecare pentru procedurile experimentale prin informații utile practicii de laborator.

Tabelul 5.4. Predicțiile obținute cu cea mai bună rețea neuronală MLP(1:11:2) pentru eliminarea clorurii de N,N,N',N'-tetrametil tionină din gelurile PAV.

Index	Intrare	Predicții	
	[CITMeTn]inițial	[CITMeTn]R (mg/100ml)	[CITMeTn]e / [CITMeTn]inițial
1	3	0.141	0.031
2	11	0.91	0.188
3	19	2.452	0.497
4	27	3.863	0.776
5	35	4.45	0.892
6	43	4.816	0.964

5.2.2.2. Eliberarea CrCl_3 din gelurile de tip PAAM (CS2.2)

Pentru a determina cele mai bune rețele neuronale pentru modelarea procesului de eliminare a CrCl_3 din hidrogeluri pe bază de poliacrilamidă, s-a folosit același algoritm DE-NN și aceiași parametri de control ca în cazul precedent. Rezultatele obținute sunt prezentate în figura 5.8 pentru încrucișarea (crossoverul) de tip binomial și în figura 5.9 pentru cel exponențial. Au fost efectuate diferite simulări în care parametrul Cr a variat în intervalul $[0.9, 0.99]$, figurile 5.8 și 5.9 prezentând curba de fitness pentru numai trei valori reprezentative.

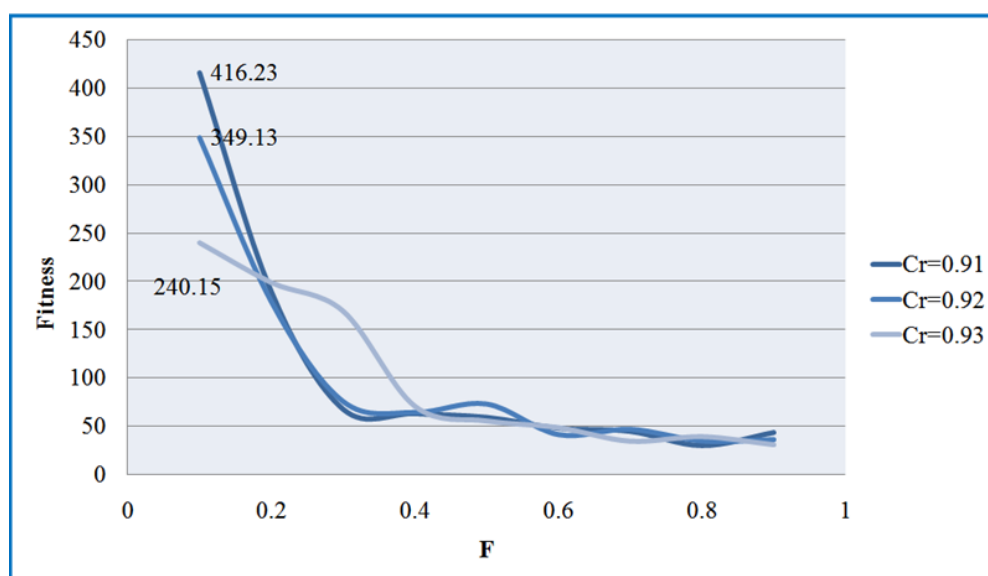


Figura 5.8. Variația valorilor de fitness pentru algoritmul DE bazat pe încrucișarea binomială.

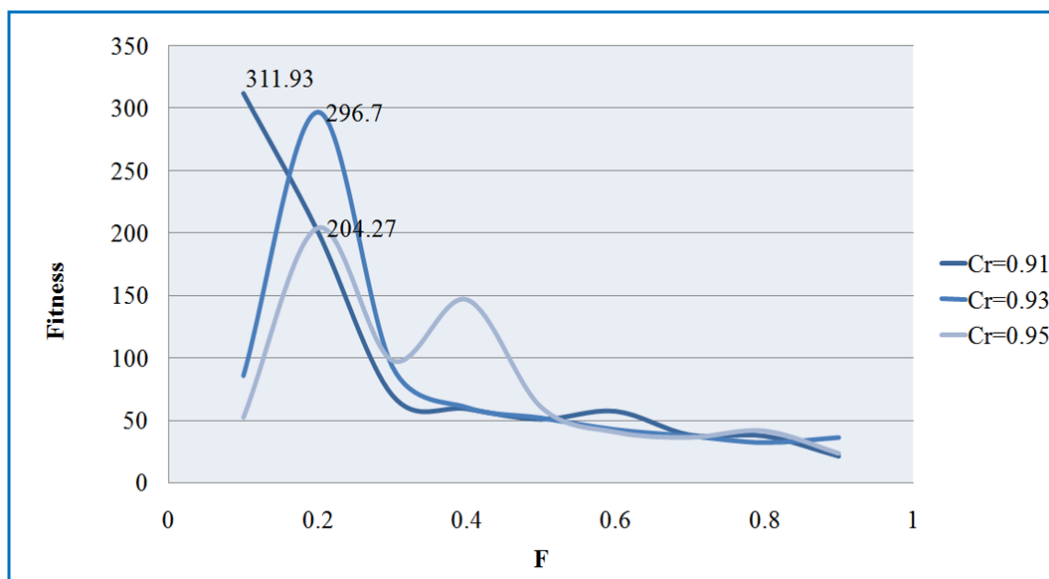


Figura 5.9. Variația valorilor de fitness pentru algoritmul DE bazat pe încrucișarea exponențială.

Aceste rezultate indică faptul că, în funcție de particularitățile procesului studiat, tipul de crossover are o influență semnificativă asupra performanței celui mai bun model neuronal. În plus, valoarea de fitness a celui mai bun model pentru studiul de caz CS2.1 este de aproximativ două ori mai mare față de cea obținută în procesul CS2.2.

5.2.3. Transferul de masă al oxigenului în bireactoare cu amestecare (CS3)

Pentru a modela și simula coeficientul de transfer de masă al oxigenului în prezența de n-dodecan ca vector-oxigen, a fost folosită o bază de date cu 229 de exemplare. Scopul modelării neuronale a fost acela de a evalua eficacitatea transferului de masă al oxigenului în funcție de condițiile de lucru în bireactoare în două situații distincte din punct de vedere al problemei formulate: predicție și clasificare.

5.2.3.2. Modelarea procesului de transfer de masă și efectuarea de predicții

Predicția constă în găsirea celei mai bune mapări între intrări și ieșiri, în scopul evaluării cu precizie a rezultatelor furnizate de seturi de date experimentale necunoscute pentru model. Pentru studiul de caz abordat, au fost testate două tipuri de modele: sNN (rețele neuronale simple) și eNN (ansambluri de rețele neuronale). Datorită factorului aleator prezent în procedurile de inițializare, mutație și crossover, pentru fiecare simulare, au fost obținute rețele diferite cu topologie și parametri specifici (tabelul 5.7).

Tabelul 5.7. Rezultatele obținute pentru diferite simulări folosind trei variante de inițializare.

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Aleator	36.014 (4:3:1)	37.055 (4:2:1)	37.821 (4:4:1)	37.985 (4:2:1)	38.750 (4:2:1)	39.316 (4:2:1)	39.823 (4:2:1)	41.785 (4:3:1)	41.807 (4:2:1)	44.171 (4:2:1)
Halton	34.572 (4:2:1)	35.300 (4:2:1:1)	35.308 (4:1:1)	35.467 (4:1:1)	35.552 (4:1:1)	36.491 (4:3:1)	38.189 (4:2:1:1)	38.493 (4:3:1)	42.869 (4:4:1)	44.874 (4:2:1)
Gauss	34.838 (4:2:1)	34.874 (4:2:1)	35.165 (4:4:1)	35.579 (4:5:1)	36.521 (4:5:1)	39.903 (4:11:1)	40.401 (4:5:1)	42.215 (4:4:1)	44.703 (4:4:1)	45.889 (4:2:1)

În cazul datelor de antrenare, predicțiile sunt apropiate de datele experimentale, fapt ce sugerează că rețeaua determinată este bună (a învățat bine comportarea procesului). Diferențele mari obținute la testare infirmă acest lucru, modelul neuronal având unele probleme în cazul datelor neutilizate în procedura de antrenare (modelul nu are capacitate bună de generalizare) (figura 5.12).

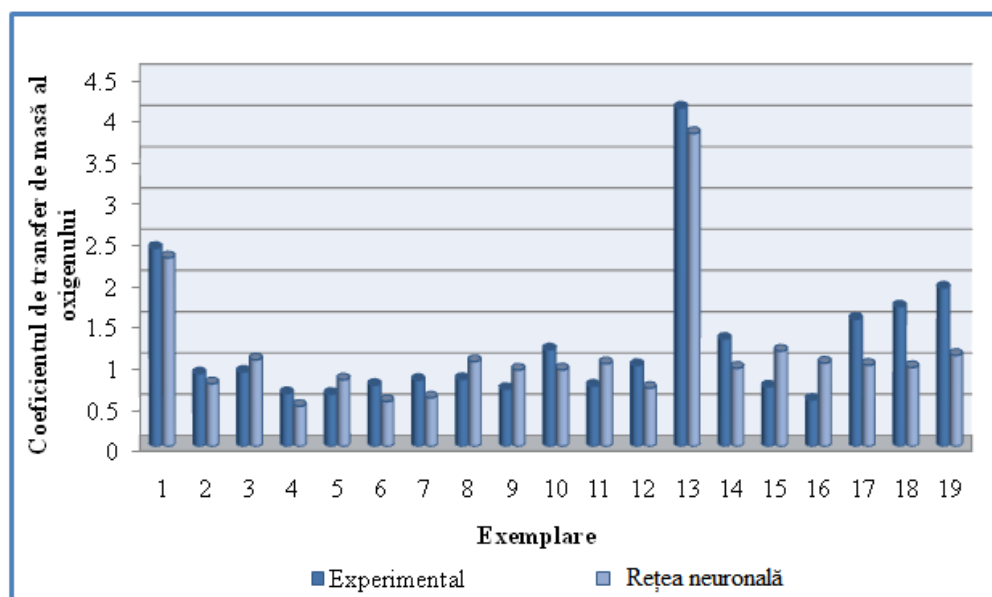


Figura 5.12. Comparație între valorile experimentale și cele determinate de rețeaua 4:2:1 în faza de testare.

Cea mai bună rețea neuronală pentru predicția coeficientului de transfer de masă a oxigenului, respectiv rețeaua cu configurația (4:2:1), are indici de performanță relativ buni: $MSE_{antrenare} = 0.0217$, $MSE_{testare} = 0.0218$, $Fitness = 45.889$, $RMSE_{testare} = 0.875$ și $RRMSE_{testare} = 0.860$, în condițiile în care valori minime ale indicatorilor de performanță și valori maxime ale funcției de fitness sunt necesare pentru rezultate acceptabile. În ciuda acestui fapt, simplitatea rețelei și complexitatea procesului indică faptul că există posibilitatea de supra-antrenare. Deși cu o performanță mai bună, determinarea rețelelor de tip eNN este mai dificilă decât în cazul sNN,

deoarece implică doi pași importanți. Rezultatele obținute cu algoritmul DE-NN pentru o serie de 10 simulări pentru un ansamblu format din trei rețele determinate individual pentru fiecare simulare sunt enumerate în tabelul 5.9.

Tabelul 5.9. Rezultate obținute cu rețele organizate în stive pentru modelarea transferului de masă în bioreactoare cu amestecare.

		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Metoda medierii ieșirilor	1 NN	45.283 (4:3:1)	35.573 (4:6:1:1)	34.825 (4:3:1)	37.055 (4:2:1)	29.477 (4:1:1)	40.964 (4:2:1)	35.85 (4:3:1)	54.936 (4:2:1)	32.046 (4:2:1)	27.592 (4:2:1)
	2 NN	29.512 (4:2:1)	39.672 (4:3:1)	25.659 (4:1:1)	35.235 (4:4:1)	29.657 (4:3:1)	38.162 (4:2:1)	42.128 (4:2:2:1)	38.325 (4:2:1)	26.209 (4:1:1)	25.659 (4:1:1)
	3 NN	31.851 (4:1:1)	34.269 (4:6:1)	24.225 (4:5:1)	39.245 (4:2:1)	39.326 (4:7:1)	35.066 (4:3:1)	39.256 (4:4:1)	35.573 (4:1:1)	42.943 (4:2:1)	25.660 (4:1:1)
	Rezultate generale	41.258	43.572	44.287	46.854	47.256	48.675	50.179	53.267	59.354	78.245
Metoda generalizării	1 NN	27.941 (4:2:1)	31.538 (4:2:1)	29.317 (4:1:1)	33.474 (4:2:1)	18.795 (4:5:3:1)	23.421 (4:2:1)	36.323 (4:3:1)	27.369 (4:2:1)	28.885 (4:2:1)	12.930 (4:11:1:1)
	2 NN	39.474 (4:2:1)	35.167 (4:3:1)	29.363 (4:3:1)	43.921 (4:4:1)	38.491 (4:3:1)	29.171 (4:1:1)	38.152 (4:2:1)	29.348 (4:2:1)	29.210 (4:2:1)	27.658 (4:1:1)
	3 NN	43.827 (4:2:1)	47.129 (4:2:1)	47.283 (4:3:1)	92.482 (4:2:1)	39.934 (4:2:1)	96.792 (4:1:1)	42.203 (4:2:1)	45.309 (4:3:1)	48.268 (4:2:1)	40.505 (4:3:1)
	Rezultate generale	111.422 (4:1:1)	110.251 (4:1:1)	112.159 (4:1:1)	114.279 (4:1:1)	120.89 (4:3:1)	143.949 (4:3:1)	126.378 (4:14:1)	143.842 (4:5:1)	148.252 (4:2:1)	149.388 (4:2:1)

În cazul stivelor de rețele neuronale, diferențele dintre predicții și datele experimentale sunt mai mici decât cele obținute cu rețele simple (figura 5.14).

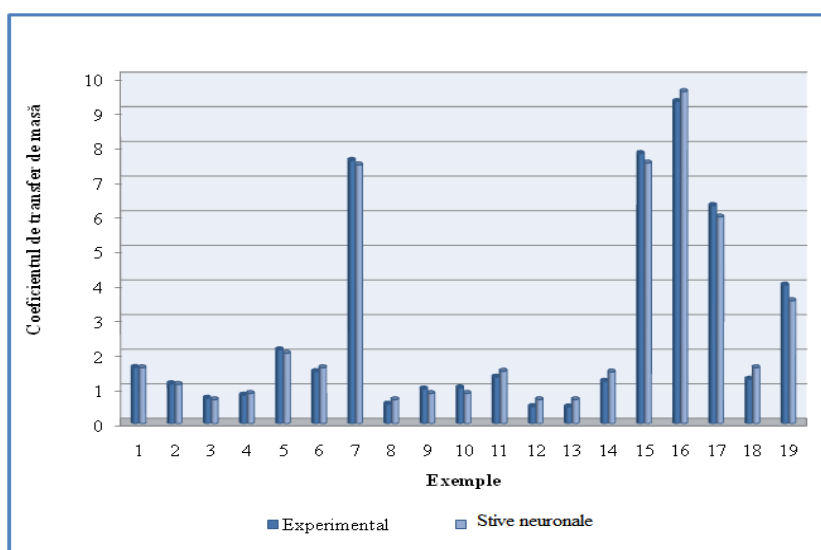


Figura 5.14. Comparatie între valorile obținute experimental și predicțiile celei mai bune rețele neuronale în faza de testare.

5.2.3.3. Modelarea procesului de transfer de masă pe baza clasificării valorilor coeficientului de transfer

Scopul problemei de clasificare este de a plasa elemente în grupe sau clase bazate pe valorile coeficientului de transfer de masă și de a determina în mod eficient clasele corespunzătoare datele neutilizate în procesul de antrenare. Au fost folosite aceleași date de intrare ca și în cazul predicției (vâscozitate, rata de aerare, consumul specific de energie și fracția volumetrică oxigen-vector), dar ieșirea indică o serie de clase corespunzătoare următoarelor intervale ale coeficientului de transfer de masă: $0 - 5 \times 10^{-2} \text{ s}^{-1}$, $5 - 8 \times 10^{-2} \text{ s}^{-1}$ și mai mare ca $8 \times 10^{-2} \text{ s}^{-1}$. Coeficienții de eroare ai celei mai bune rețele neuronale sunt prezentați în tabelul 5.13. Au fost obținute rezultate acceptabile pentru toate cele trei clase (procent de răspunsuri corecte peste 90% pentru fiecare categorie, atât în etapa de antrenare, cat și în cea de testare).

Tabelul 5.13. Coeficienții de eroare pentru rezultatele obținute cu rețeaua 4:3:4:3
în funcție de clasificare.

		Clasa 1	Clasa 2	Clasa 3
Antrenare	MSE	0.136		
	Procent de răspunsuri corecte	95.65 %	93.54 %	95.72 %
Testare	MSE	0.096		
	Procent de răspunsuri corecte	90 %	100 %	100 %

6. Evoluție diferențială cu auto-adaptare și rețele neuronale

Reglajul manual al parametrilor de control ai algoritmului DE este o sarcină dificilă, realizarea unui număr mare de simulări extinse pe întreg spațiul de căutare necesitând efort și o putere mare de calcul. Pentru a obține rezultate bune, fiecare problemă necesită o anumită combinație între elementele specifice algoritmului: mutație, crossover, parametrii F și Cr . Prin urmare, în framework-ul dezvoltat, după crearea algoritmului DE-NN, următorul pas a constat în implementarea unui sistem auto-adaptiv.

Dintre variantele existente în literatura de specialitatea, a fost aleasă cea propusă de Brest *et al.* (2006) pentru a fi implementată și testată pe diferite studii de caz selectate din domeniul inginerie chimice. Noul algoritm a fost numit jDE-NN. De asemenea, a fost concepută o variantă auto-adaptivă nouă și simplă, algoritmul rezultat fiind numit SADE-NN.

6.1. Aspecte particulare ale metodologiei jDE-NN

Principalele diferențe dintre algoritmi DE-NN, jDE-NN și SADE-NN constau în introducerea modului de auto-adaptare și a unei noi variante DE numită DE/Rand/2/Bin. Pe de altă parte, diferența dintre jDE-NN și SADE-NN este reprezentată de modul în care se realizează auto-adaptarea. Noul modul auto-adaptiv a necesitat modificarea structurii codării folosite pentru reprezentarea rețelelor neuronale prin adăugarea la sfârșitul vectorului a două poziții noi rezervate pentru F și Cr . Ideea este că acești parametri de control codificați determină indivizi buni, indivizi care au o probabilitate mai mare de supraviețuire deoarece aceștia sunt mai bine adaptați la mediu. Schema celor două mecanisme de auto-adaptive, în contextul frameworkului OPT-NN este prezentată în figura 6.1.

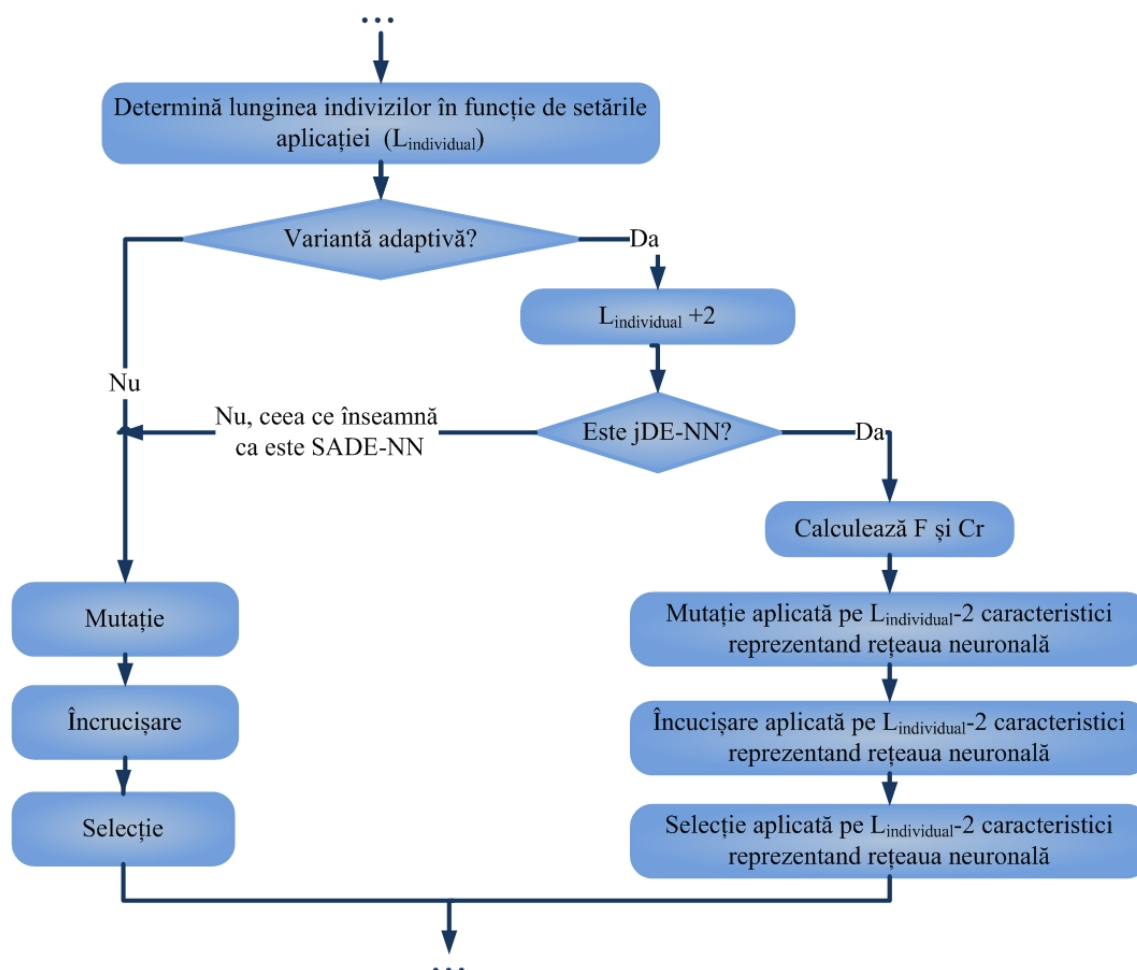


Figura 6.1. Schema variantei adaptive vs. varianta non-adaptivă atașată algoritmului DE.

Pașii mutație, crossover și selecție rămân nemodificați, singura diferență dintre varianta non-adaptivă și auto-adaptivă constând în numărul de caracteristici care sunt modificate în timpul acestor proceduri ($L_{rețea}$ pentru DE-NN și jDE-NN și $L_{rețea}+2$ pentru SADE-NN, $L_{rețea}$

reprezentând caracteristicile individuale ale unei rețele codate într-un vector). În cazul în care nu mai sunt incluse alte informații în vector, atunci lungimea sa (L_{indiv}) este egal cu $L_{\text{rețea}}$.

6.2. Aplicații în ingineria chimică

6.2.1. Transferul de masă al oxigenului în bioreactoare cu amestec (CS3)

În scopul evaluării performanțelor metodologiei jDE-NN, în contextul algoritmului DE-NN, a fost luat în considerare un studiu de caz anterior, respectiv transferul de masă în bioreactoare cu amestecare (CS3). În acest caz, se pune problema determinării modelului coeficientului de transfer de masă de oxigen (k_{La}), în prezența vectorilor oxigen, funcție de condițiile de lucru.

Primul pas constă în determinarea performanțelor algoritmului jDE-NN pentru sNN. Au fost folosite aceleași setări și aceleași condiții ca în metodologia DE-NN aplicată anterior, în scopul reducerii influenței factorilor externi asupra modelelor neuronale determinate. Cea mai bună rețea neuronală a avut o topologie 4:6:1 cu $MSE_{\text{antrenare}} = 0.0110$, $MSE_{\text{testare}} = 0.0127$, $Fitness = 90.260$, $RMSE_{\text{testare}} = 0.667$ și $RRMSE_{\text{testare}} = 0.669$. Comparatii între predicțiile rețelei neuronale (4:2:1) determinată cu DE-NN și predicțiile rețelei (4:6:1) determinată cu jDE-NN sunt prezentate în figura 6.3 pentru setul de testare.

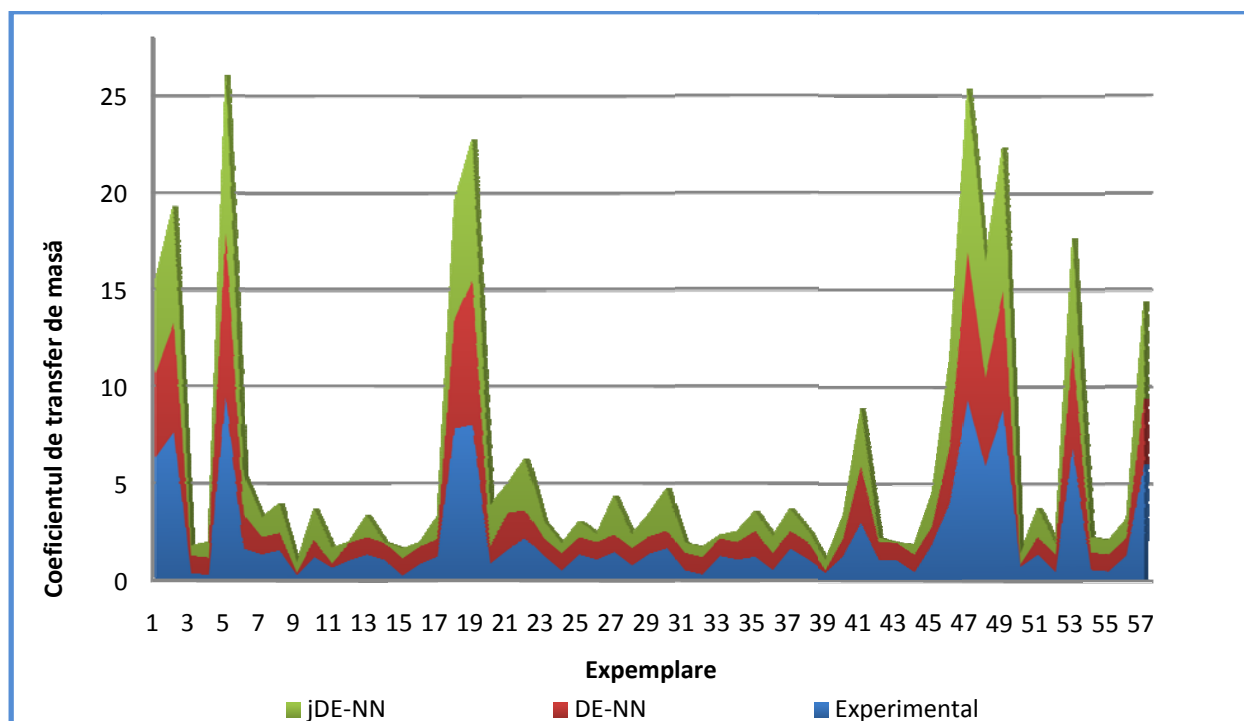


Figura 6.3. Comparatie între datele experimentale și predicțiile realizate cu modele neuronale determinate cu algoritmi DE-NN și jDE-NN în faza de testare.

Diferențele între rezultatele dorite și cele obținute cu ajutorul rețelelor neuronale determinate cu abordarea jDE și cu metoda adaptivă Friedman sunt vizibile în figura 6.5.

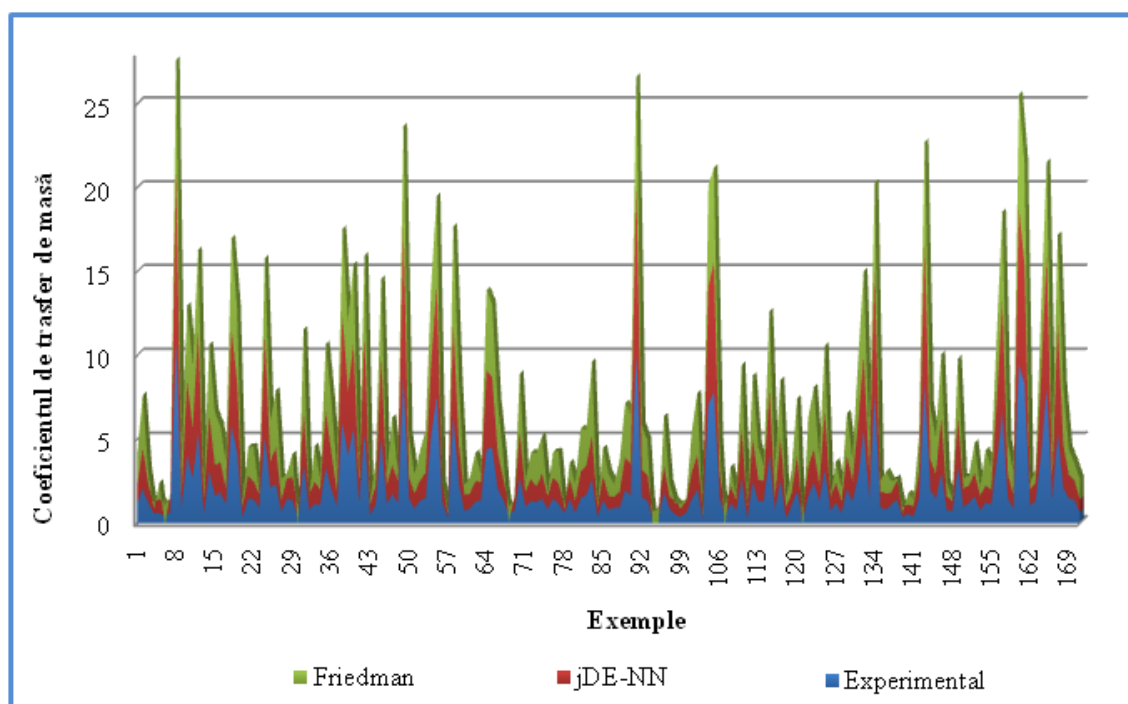


Figura 6.5. Comparație între predicțiile realizate cu metoda Friedman, predicțiile stivelor determinate cu jDE-NN și datele experimentale în faza de testare.

Similar cu procesele de modelare și predicție, aceleași etape au fost repetate pentru problema de clasificare. Pentru a determina care dintre cei doi algoritmi este cel mai potrivit pentru clasificare, este importantă obținerea unor rezultate comparative. O serie de zece simulări au fost efectuate folosind metodologia jDE-NN, rezultatele obținute fiind prezentate în tabelul 6.4.

Tabelul 6.4. Rețele neuronale obținute cu algoritmul jDE în cazul problemei de clasificare pentru procesul de transfer de masă în bioreactoare cu amestecare.

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
4.316	4.411	4.444	4.457	4.607	4.733	4.812	5.624	5.914	6.329
(4:7:3)	(4:1:3)	(4:5:3)	(4:7:3)	(4:3:2:3)	(4:8:3)	(4:7:3)	(4:5:3)	(4:5:3)	(4:3:3)

Au fost obținute rezultate bune pentru toate cele trei clase (procente de răspunsuri corecte mai mari de 80% pentru fiecare categorie, atât la antrenare, cât și la testare). În faza de antrenare, procentul de clasificare dat de cea mai bună rețea a fost de 95.90%, iar în faza de testare a fost de 98.24%. Acest lucru indică faptul că rezultatele obținute cu cea mai bună rețea neuronală au fost corecte, ceea ce înseamnă că rețeaua a realizat foarte bine clasificarea dorită.

6.2.2. Predicția proprietății de cristal lichid a unor compuși organici (CS4)

Clasificarea compușilor organici pe baza proprietății lor de cristal lichid (LC) este o problemă complexă care poate fi rezolvată folosind abordări diferite. Luând în considerare toate aspectele legate de această problemă, algoritmi jDE-NN și SADE-NN au fost testați pentru a stabili care dintre ei este mai eficient în găsirea rețele optime capabile să realizeze o performanță mai bună decât alți algoritmi de clasificare.

Pentru a determina modele neuronale optime, a fost utilizată o bază de date (371 în total) care include o mare varietate de compuși bis-aromatici (-ph-ph-) și azo-aromatici (-ph-n = n-ph-). După ce au fost stabilite clasele de compuși a fost realizată o pre-procesare a datelor, operație reprezentată de amestecarea aleatoare a acestora și divizarea lor în două subseturi, corespunzătoare antrenării și testării. Pentru a eticheta datele, au fost folosite două clase de procente: (75%, 25%) și (67%, 33%), procentele (75% și 67%) fiind corespunzătoare antrenării, iar procentele (25% și 33%) testării.

Cea mai bună soluție pentru predicția proprietății de cristal lichid a fost obținută folosind rețele neuronale determinate cu algoritmul SADE-NN, valoarea funcției de fitness fiind 3.329. O serie de date utilizate pentru testarea acestei rețele, împreună cu predicțiile rezultate, sunt enumerate în tabelul 6.9.

Tabelul 6.9. Rezultate obținute în cazul folosirii a 10% din date pentru testarea rețelei 4:8:1 determinată cu algoritmul SADE-NN.

Date de intrare				Valori așteptate	Valori obținute	Rotunjiri
Lfix	Lflex	S	M	LC	LC	LC
9.99	26.52	0.088	494.765	0	0.016	0
9.21	26.09	0.081	496.653	1	0.016	0
10	29.11	0.081	578.927	0	0	0
9.98	20.84	0.152	524.748	0	0	0
9.22	6.22	0.187	270.29	1	0.833	1
9.21	19.7	0.098	458.606	0	0.099	0
9.22	9.95	0.152	312.372	1	0.8	1
9.21	24.19	0.087	500.687	0	0.051	0
10	18.85	0.098	438.656	0	0.084	0
9.23	10.23	0.146	310.399	0	0.805	1

În scopul testării algoritmului aplicat (SADE-NN) pentru determinarea celei mai bune rețele neuronale și în scopul comparării rezultatelor cu cele dintr-un studiu anterior în care modelul neuronal a fost determinat prin încercări succesive, a fost folosită clasa 2 de compuși ca în Leon

et al. (2010). Procentele utilizate pentru divizarea bazei de date au fost aceleași pentru ambele metode: 90% pentru datele de antrenare și 10% pentru datele de testare. Cea mai bună rețea obținută cu SADE-NN a fost o rețea MLP cu o topologie 4:9:1, comparativ cu MLP(4:42:14:1,) determinată prin procedeul încercare și eroare.

7. Versiuni hibride ale algoritmului evoluție diferențială în combinație cu rețele neuronale

O altă direcție de îmbunătățire este reprezentată de hibridizarea algoritmului DE cu alți algoritmi. În scopul creșterii performanței algoritmilor existenți, a fost realizată asocierea între DE și doi algoritmi de optimizare locali, rezultând două metodologii noi: SADE-NN-1 și SADE-NN-2. Împreună cu hibridizarea generală (global + local), sunt modificate și alte mecanisme interne prin introducerea unor noi principii și idei care au rolul de a îmbunătăți nu numai performanța, ci și viteza de calcul.

7.1. Aspecte particulare ale versiunilor DE hibride

Fiecare dintre cei doi algoritmi noi are propriile sale caracteristici și proprietăți. Ei folosesc deja principiul simplu auto-adaptiv propus în SADE-NN, putând fi astfel considerați variante îmbunătățite ale algoritmului SADE-NN, deoarece îndeplinesc aceleași sarcini și au aceeași structură de bază.

SADE-NN-1 utilizează principiul opoziției (OBL), împreună cu o strategie nouă de mutație și un total de opt funcții de activare (liniară, limită, sigmoidă bipolară, sigmoidă logaritmică, sigmoidă tangentă, sinusoidală, radială cu centru punct fix situat la 0 și funcții triunghiulare). SADE-NN-2 combină NN cu DE și cu algoritmul back-propagation (BK).

Toți parametrii sunt inițializați folosind valori aleatoare în intervalul acceptat. Pentru cei doi algoritmi, au fost utilizate două tipuri de inițializare: distribuția normală și distribuția normală combinată cu OBL. Într-o serie de studii, OBL a fost introdus în algoritmul DE în două etape - inițializarea și crearea de noi indivizi - cu rezultate încurajatoare (Rahnamayan și Tizhoosh, 2008; Rahnamayan *et al.*, 2008; Rahnamayan *et al.*, 2007).

Inițial, populația a fost generată folosind distribuția normală. După aceea, indivizii opuși au fost calculați pentru fiecare caracteristică. Din reuniunea celor două populații au fost selectați indivizii cu valorile cele mai mari ale funcției de fitness. În cadrul SADE-NN-1, împreună cu auto-adaptarea și OBL, a fost utilizată o strategie de mutație modificată (figura 7.1). Două aspecte determină flexibilitatea algoritmului propus. În primul rând, varianta DE considerată ca

punct de plecare poate fi modificată de către utilizatorul final cu doar un simplu click. În al doilea rând, tipurile de inițializare și mutație pot fi, de asemenea, schimbate cu ușurință.

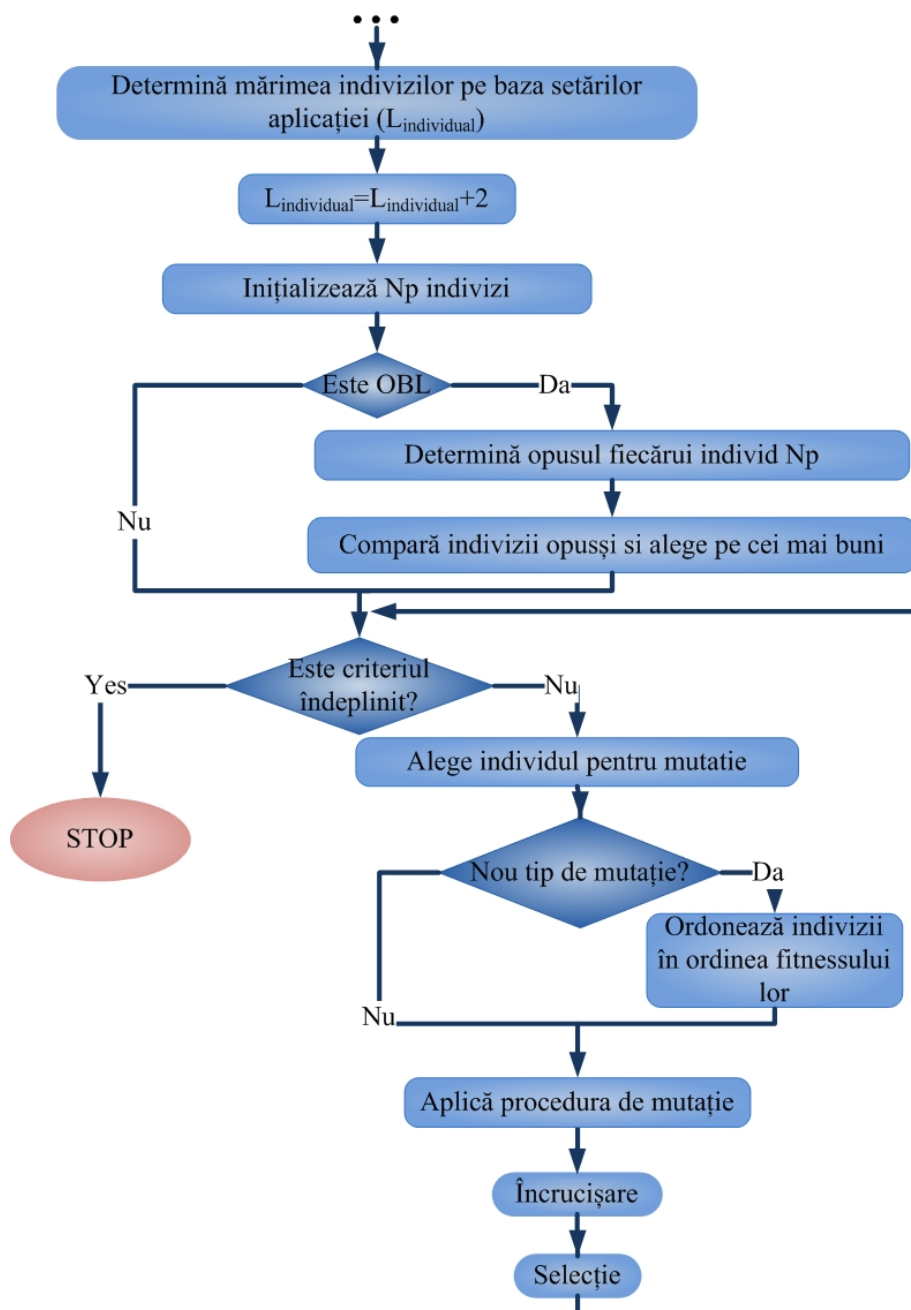


Figura 7.1. Schema algoritmului SADE-NN-1.

Dacă SADE-NN-1 este o metodologie generală care poate fi aplicată unor procese diferite, SADE-NN-2 a fost dezvoltată cu scopul de a încorpora informații specifice procesului, astfel încât diferite caracteristici ale acestuia să fie incluse într-o structură de control. Două proceduri de antrenare sunt aplicate rețelelor neuronale: în primul rând DE, care acționează ca un algoritm de căutare la nivel global și în al doilea rând, BK care efectuează o căutare locală îmbunătățind

doar cea mai bună soluție obținută la sfârșitul fiecărei generații din DE. Numărul maxim de straturi ascunse și neuroni în fiecare strat ascuns sunt stabilite pe baza unor legi empirice și, în timpul procesului evolutiv, pot fi modificate la orice valoare posibilă din intervalul acceptat.

În ceea ce privește algoritmul DE, a fost folosită o inițializare bazată pe o distribuție normală combinată cu o mutație modificată și o versiune auto-adaptivă. Modificarea adăugată la pasul mutație constă în ordonarea indivizilor pe baza fitnessului lor. Structura generală a algoritmului SADE-NN-2 este prezentată în figura 7.2.

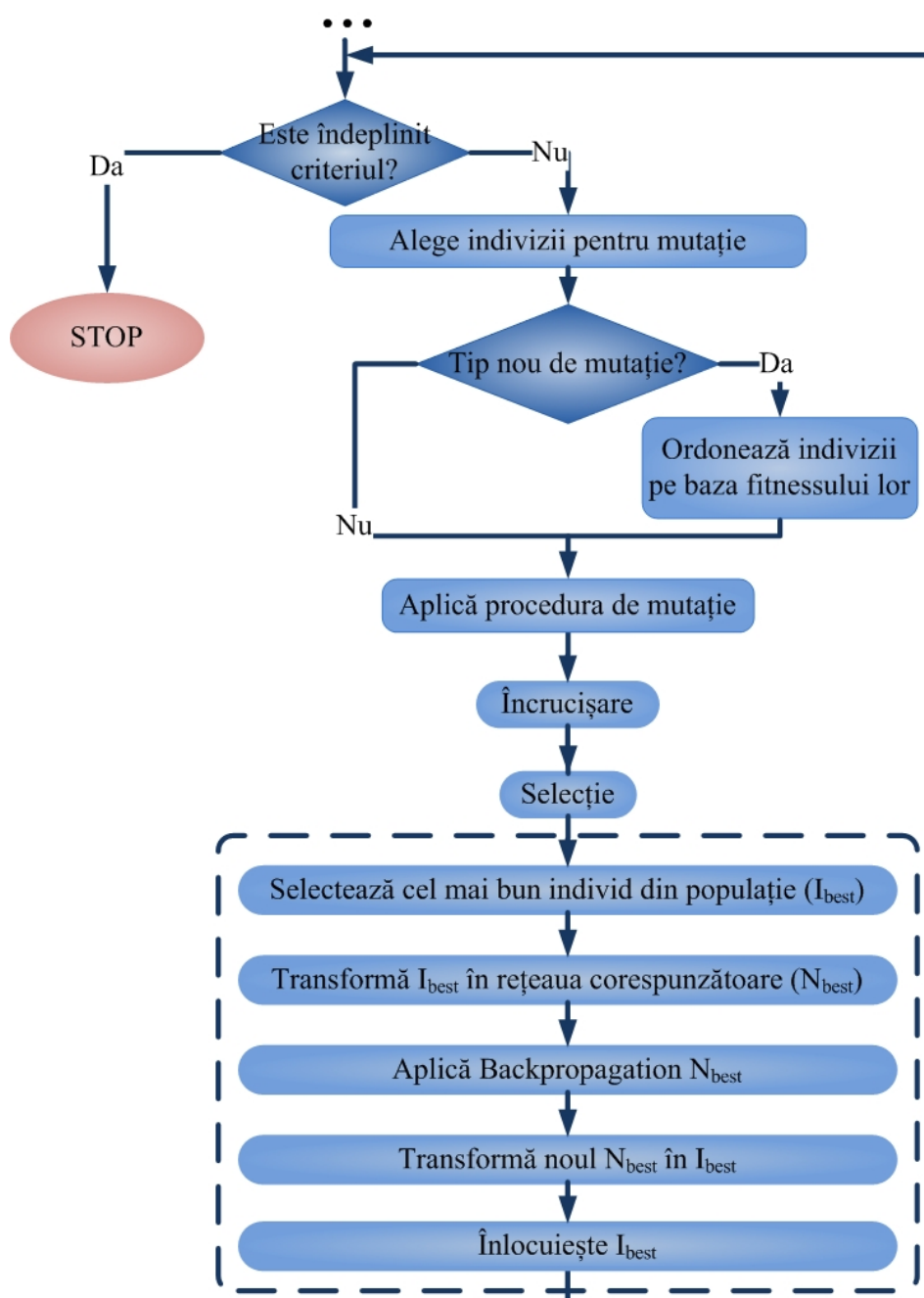


Figura 7.2. Structura algoritmului SADE-NN-2.

7.2. Aplicații în ingineria chimică

7.2.1. Influența adăugării n-dodecan-ului asupra coeficientului de transfer de masă pentru diferite amestecuri (CS5)

Experimentele efectuate pentru sistemele de biosinteză care conțin drojdie de bere sau celule bacteriene au indicat faptul că adăugarea n-dodecanului ca vector oxigen a indus creșterea semnificativă a ratei de transfer de oxigen din aer la microorganisme, fără a avea nevoie de o intensificare suplimentară a amestecării. În acest context, pentru obținerea de rezultate precise și utile, investigațiile privind efectul adăugării n-dodecanului asupra fermentației aerobe a bacteriilor (*P. shermanii*) și drojdiilor (*S. Cerevisiae*) au fost analizate și modelate separat, luându-se în considerare eficiența transferului de masă, descrisă prin intermediul coeficientului de transfer de masă al oxigenului, $k_L a$.

Ca și în cazul algoritmilor anteriori, varianta auto-adaptivă include parametrii F și Cr în fiecare individ. Împreună cu aceștia, în algoritmul DE au fost folosiți încă doi parametri: mărimea populației, Np , și numărul maxim de generații, G . Având în vedere influența tuturor parametrilor asupra timpului de calcul și asupra performanței metodologiei, valorile alese pentru aceștia au fost $Np = 500$ și $G = 500$.

Baza de date utilizată în acest studiu de caz a fost compusă din 192 de date pentru fermentarea bacteriilor și 192 de date pentru drojdiile. Datorită caracteristicilor procesului și datorită abordării sistematice referitoare la colectarea datelor, sursa de date are: i) proprietăți funcționale referitoare la existența dependențelor între intrări și ieșiri și ii) proprietăți formale referitoare la existența unui număr suficient de date pentru antrenare și testare, date care sunt distribuite uniform în spațiul de căutare. Rețelele neuronale care modelează cele două procese au patru intrări (concentrația biomasei, viteza superficială a aerului, puterea specifică, fracția volumetrică oxigen-vector) și o ieșire (coeficient de transfer de masă al oxigenului).

7.2.1.3. Fermentarea bacteriilor

Folosind diverse strategii DE ca bază, au fost efectuate o serie de simulări în scopul determinării celui mai bun model neuronal pentru fermentarea bacteriilor. Rezultatele obținute cu metodologia SADE-NN-1 sunt prezentate în tabelul 7.1. Cele mai bune rețele neuronale obținute au fost MLP (4:8:1) în cazul inițializării normale și MLP (4:5:1) pentru inițializarea bazată pe OBL.

Cea mai bună rețea neuronală MLP (4:5:1), care va fi utilizată în continuare ca model pentru optimizarea procesului, a fost obținută folosind forma clasică de mutație și inițializarea OBL.

Faptul că cea mai bună soluție a fost determinată cu o procedură de mutație clasică indică existența unor cazuri în care procedura OBL eșuează în furnizarea celor mai bune modele.

După determinarea celui mai bun model al procesului (atunci când este utilizat un amestec de bacterii), a fost realizată o analiză de sensibilitate pentru a determina influența fiecărui parametru asupra ieșirii modelului neuronal. Valori mai mari ale sensibilității indică faptul că intrarea specifică are o influență mare asupra rețelei. În consecință, influența parametrilor de intrare în ordine descrescătoare este următoarea: 1 (concentrația biomasei), 2 (viteza superficială a aerului), 4 (puterea specifică), 3 (fracția volumetrică a vectorului - oxigen). Aceste rezultate sunt în concordanță cu cele observate în cazul experimentelor de laborator.

Tabelul 7.1. Rezultate obținute cu algoritmul SADE-NN-1 în cazul fermentării bacteriilor.

	Varianta DE	Mutație	Cea mai bună rețea obținută				Medie		
			MSE antrenare	MSE testare	Fitness	Topologie	MSE antrenare	MSE testare	Fitness
Inițializare clasică	Rand/1/Exp	Normal	0.029	0.027	34.035	4:10:1	0.033	0.031	29.323
		Modificat	0.029	0.028	33.548	4:9:5:1	0.033	0.032	29.425
	Rand/1/Bin	Normal	0.016	0.019	61.035	4:5:1	0.020	0.018	48.867
		Modificat	0.015	0.015	65.581	4:6:4:1	0.022	0.022	45.965
	Best/1/Exp	Normal	0.019	0.020	51.814	4:10:1	0.026	0.026	38.558
		Modificat	0.018	0.018	54.388	4:5:1	0.027	0.026	38.157
	Best/1/Bin	Normal	0.004	0.005	221.346	4:8:1	0.007	0.010	145.980
		Modificat	0.004	0.006	234.42	4:8:1	0.007	0.010	137.098
	Rand-To-Best/1/Exp	Normal	0.027	0.023	35.741	4:5:5:1	0.031	0.030	31.570
		Modificat	0.026	0.020	37.348	4:8:1	0.029	0.031	32.932
Inițializare OBL	Rand/1/Exp	Normal	0.02	0.022	49.474	4:7:1	0.023	0.025	41.569
		Modificat	0.019	0.016	51.669	4:10:1	0.024	0.021	41.430
	Rand/1/Bin	Normal	0.019	0.033	51.318	4:10:1	0.022	0.024	42.661
		Modificat	0.016	0.017	62.206	4:3:1	0.021	0.020	46.437
	Best/1/Exp	Normal	0.012	0.010	77.573	4:10:1	0.016	0.018	61.393
		Modificat	0.007	0.011	125.47	4:7:1	0.015	0.015	68.039
	Best/1/Bin	Normal	0.003	0.009	278.423	4:5:1	0.008	0.012	134.667
		Modificat	0.004	0.005	248.909	4:9:1	0.005	0.007	187.307
	Rand-to-Best/1/Exp	Normal	0.019	0.017	51.938	4:9:1	0.021	0.021	45.307
		Modificat	0.017	0.023	58.388	4:8:1	0.021	0.025	45.752

		Cea mai bună rețea obținută					Medie		
	Varianta DE	Mutație	MSE antrenare	MSE testare	Fitness	Topologie	MSE antrenare	MSE testare	Fitness
	Rand-to-Best/1/Bin	Normal	0.011	0.015	84.977	4:5:1	0.014	0.016	66.896
		Modificat	0.015	0.017	66.092	4:5:1	0.016	0.018	60.452

După efectuarea analizei de sensibilitate, cel mai bun model neuronal a fost inclus în procedura de optimizare aplicată procesului. Metodologia bazată pe DE caută parametrii optimi care conduc la maximizarea coeficientului de transfer de masă. Din punct de vedere al procesului, rezultatele prezentate în tabelul 7.4 sugerează că valoarea maximă obținută pentru transferul de masă al oxigenului se poate atinge chiar și pentru amestecuri concentrate de bacterii ($30 \text{ g}\cdot\text{l}^{-1}$) la o intensitate scăzută a amestecării, dacă viteza superficială a aerului și fracția volumetrică oxigen-vector sunt ridicate. În cazul în care costul consumului de energie este luat în considerare, această combinație reprezintă un optim pentru procesul de fermentație analizat.

Tabelul 7.4. Condițiile optime pentru maximizarea coeficientului de transfer de masă al oxigenului în cazul fermentației bacteriilor.

Număr simulare	Intrare 1	Intrare 2×10^{-3}	Intrare 3	Intrare 4	Ieșire (Fitness)
1	29.51927	5.24875	212.95808	0.15526	0.67747
2	29.55468	5.24866	213.80439	0.15554	0.67749
3	29.50641	5.24474	213.79509	0.15512	0.67740
4	29.52328	5.25209	213.14236	0.15501	0.67743
5	29.50584	5.24404	213.42678	0.15486	0.67730
6	29.69535	5.24711	214.18417	0.15531	0.67729
7	29.52156	5.24002	213.75447	0.15543	0.67739
8	29.51374	5.24703	212.85931	0.15549	0.67753
9	29.56118	5.24523	213.81442	0.15551	0.67741
10	29.55148	5.24900	214.03304	0.15532	0.67743

7.2.1.4. Fermentarea drojdiilor

Comparativ cu bacteriile, comportamentul celulelor de drojdie este diferit datorită afinității lor pentru mediile de hidrocarburi ce duc la creșterea concentrației masei de *S. cerevisiae* și la o scădere a coeficientului k_{La} . Spre deosebire de comportamentul *P. shermanii*, scăderea fracției volumetrică de n-dodecan determină scăderea k_{La} .

Ca și în cazul bacteriilor, au fost efectuate simulări utilizând diverse strategii DE pentru amestecurile de drojdii. Cele mai bune rețele neuronale MLP au avut topologia (4:6:1) în cazul inițializării clasice și MLP (4:9:1) în cazul inițializării bazate pe OBL. Pentru majoritatea variantelor, valoarea fitnessului rețelelor determinate folosind varianta de mutație modificată este mai mare decât cea a rețelelor determinate cu varianta clasică. În plus, în ambele versiuni de mutație, atunci când este folosit crossoverul binomial, funcția de fitness are valoare mai mare decât cea corespunzătoare crossoverului exponențial.

Prin compararea inițializării normale cu cea bazată pe principiul opoziției, se poate observa că prima metodă furnizează valori mai mari ale funcției de fitness. Același comportament a fost observat și în cazul bacteriilor, dar cea mai bună rețea a fost determinată folosind OBL. Comparativ cu cele mai bune valori ale fitnessului obținute în cazul bacteriilor (determinate atunci când a fost folosită inițializarea bazată pe principiul opoziției, varianta "Best/1/Bin" și mutație clasică), cel mai bun fitness pentru drojdii (obținut folosind inițializare normală, varianta "Best/1/ Bin", și mutație modificată) este mai mare.

Acest lucru înseamnă că modelarea drojdiilor dă rezultate mai precise în fazele de antrenare și testare comparativ cu cele obținute cu rețele neuronale determinate pentru bacterii. În figura 7.6 sunt comparate datele experimentale, predicțiile modelului fenomenologic și predicțiile rețelei neuronale pentru datele de testare. Folosind modelul MLP (4:6:1), pentru setul de antrenare a fost obținut un $RMSE = 0.00903$ și o corelație de 0.9946, iar pentru setul de testare, $RMSE = 0.01411$ și corelația 0.9842. Pentru modelul fenomenologic, dezvoltat cu o metodă bazată pe multi-regresie, $RMSE = 0.2751$ și corelația = 0.0505 pentru datele de antrenare și $RMSE = 0.2719$, corelație = 0.4284 pentru datele de testare.

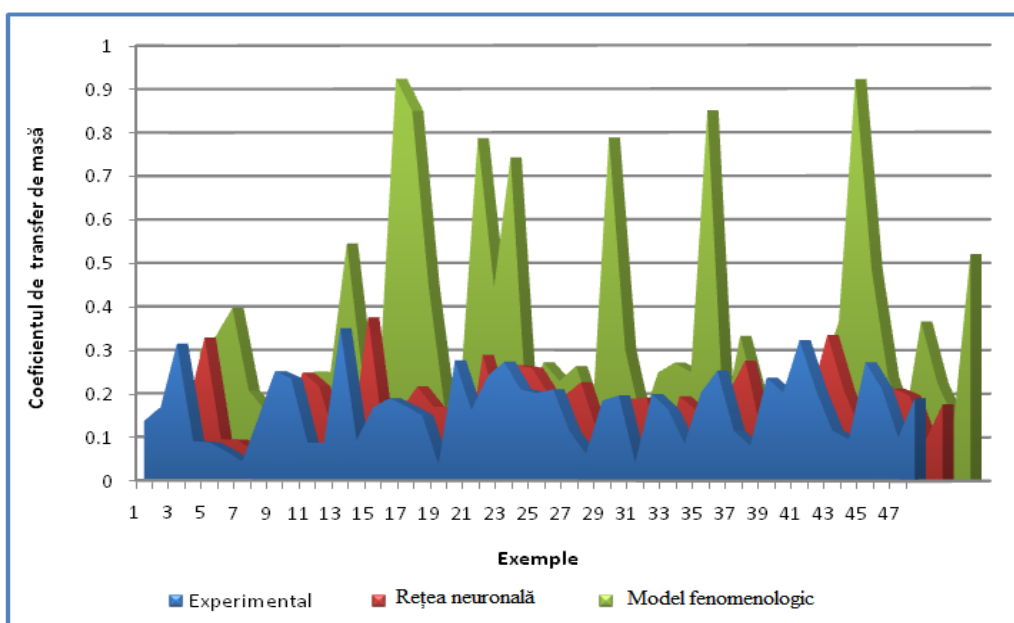


Figura 7.6. Comparație între datele experimentale, modelul fenomenologic și predicțiile obținute cu MLP(4:6:1) în faza de testare.

După efectuarea analizei de sensibilitate folosind cel mai bun model neuronal, procesul a fost optimizat pentru a stabili condițiile în care coeficientul de transfer de masă este maxim, în cazul folosirii amestecurilor de drojdii. În tabelul 7.7 sunt prezentate zece condiții de lucru care conduc la maximizarea coeficientului de transfer de masă (care se corelează cu valoarea de fitness, în acest caz k_{La} fiind egal cu ieșirea și valoarea de fitness deoarece modelul neuronal are doar o singură ieșire).

Tabelul 7.7. Condiții optime care realizează maximizarea coeficientului de transfer de masă în cazul fermentării bacteriilor.

Număr simulare	Intrare 1	Intrare 2×10^{-3}	Intrare 3	Intrare 4	Ieșire (Fitness)
1	52.48671	5.23278	457.61143	0.15363	0.42771
2	54.81902	5.23523	452.90035	0.15503	0.42829
3	55.15521	5.20603	456.30984	0.15495	0.42823
4	56.31236	5.23270	452.79534	0.15497	0.42823
5	58.72966	5.22904	457.35711	0.15469	0.42844
6	57.81024	5.24613	458.06709	0.15528	0.42912
7	53.55575	5.24458	458.01373	0.15508	0.42891
8	61.73874	5.21964	452.18218	0.15533	0.42808
9	51.42616	5.24750	458.11657	0.15538	0.42903
10	54.45847	5.21003	456.45343	0.15535	0.42854

Rezultatele din tabelul 7.7 subliniază influența negativă a concentrației de biomasă asupra vitezei de transfer de oxigen în acest amestec de fermentție. Prin urmare, valoarea maximă a coeficientului k_{La} se obține la valori mici ale concentrației drojdiei și ale vitezei superficiale a aerului, putere specifică, și concentrație de vectori oxigen mare.

7.2.2. Uscarea prin înghețare a produselor farmaceutice (CS6)

În industria farmaceutică, procesul de liofilizare este utilizat pe scară largă pentru a recupera un medicament dintr-o soluție. Interacțiunile chimice complexe, presiunea înaltă și temperatura scăzută necesare indică faptul că este dificilă experimentarea în cazul acestui proces. De asemenea procesul este dificil de modelat și de optimizat.

Monitorizarea dinamicii procesului reprezentată de evoluția temperaturii și cantitatea de gheață reziduală în produs este obligatorie, deoarece are o mare influență asupra formei și dimensiunii cristalelor de gheață, care, la rândul lor, influențează stabilitatea și caracteristicile produsului final. În timpul fabricației, este necesar un senzor corect proiectat pentru indicarea cazului în

care condițiile de funcționare selectate permit îndeplinirea constrângerilor cu privire la temperatura produsului și finalizarea uscării primare. Obiectul acestui studiu de caz este folosirea unui model neuronal feed-forward simplu atât pentru modelare, cât și pentru monitorizare.

Studiul de caz investigat este reprezentat de uscarea prin înghețare a unei soluție 10% w/w de zaharoză. Valorile coeficientului de transfer termic (K_v) folosite pentru a modela dependența fluxul de căldură de la raft la produs în partea de jos a flaconului (J_q) de forța motrice este preluată din (Giordano *et al.*, 2011.). Tot din aceeași referință este luată și valoarea rezistenței stratului uscat (R_p) necesară pentru modelarea dependenței fluxului de sublimare de la interfața de sublimare a camerei de uscare (J_w) de forța motrice.

7.2.2.2. Metodologii de abordare

Complexitatea și numărul mare de parametri care pot fi luați în considerare fac liofilizarea un proces dificil de modelat. Numărul mare de combinații posibile, împreună cu metodologiile ineficiente de optimizare, pot duce la rezultate slabe. Pentru a evita aceste probleme, au fost testate abordări diferite pentru a identifica varianta cea mai potrivită. În cadrul algoritmului SADE-NN-2, a fost introdusă o procedură de căutare locală reprezentată de algoritmul BK cu scopul de a îmbunătăți performanța și a concentra atenția asupra pașilor necesari pentru crearea unei serii de date bune pentru antrenare și testare și pentru alegerea unei combinații adecvate de intrări. În consecință, au fost determinate patru etape de cercetare, fiecare aspect având o influență considerabilă asupra rezultatului general. Acești pași sunt: i) structura modelului (tipul de informații din datele de învățare); ii) proiectarea experimentului (tip de învățare); iii) caracteristicile rețelei neuronale și iv) setările aplicației. Primele două sunt legate de tipul și structura setului de învățare, în timp ce ultimele două sunt legate de stabilirea rețelei (Drăgoi *et al.*, 2012c).

În scopul proiectării modelelor neuronale specifice procesului de liofilizare este necesar un set de date de învățare. Acestea au fost obținute pe baza unei analize detaliate a modelului mono-dimensional care consideră legile chimice și fizice ce guvernează procesul (Velardi și Barresi, 2008). Scopul folosirii unui model deja existent ca generator de date de învățare este eliminarea unor proceduri experimentale, consumatoare de timp, obținând în acest fel un set de date cu erori de măsurare mici.

După ce sursa de date a fost stabilită și datele colectate, următorul pas a constat în determinarea structurii datelor de învățare. În scopul acoperirii uniforme a spațiului de căutare, datele de antrenare au fost selectate pe principiul că cei mai importanți parametri de operare sunt reprezentați de presiunea camerei de uscare ($P_{cameră}$) și temperatura raftului (T_{raft}). Pe de altă parte, acești doi parametri de funcționare pot fi măsurați în timpul experimentelor fără a interfera

cu procesul în sine. Au fost considerate variații diferite în timp a acestor parametri, structura datelor de testare fiind: i) $P_{cameră}$ și T_{raft} constante; ii) $P_{cameră}$ constantă și T_{raft} variabilă; iii) $P_{cameră}$ constantă și T_{raft} variabil în etape; iv) variații aleatorii pentru $P_{cameră}$ și T_{raft} .

Pe de altă parte, nu numai tipul datelor de antrenare este important, ci și numărul de exemplare disponibil. Întrucât aplicația este utilizată pentru determinarea dinamicii întregului sistem în faza primară a procesului de liofilizare, este firesc să fie inclus în procesul de antrenare cel puțin un set de date care să descrie sistemul de la început până la sfârșit. Acest pas este considerat ca fiind proiectarea experimentului. Un singur set de date randomizat și apoi împărțit în 75% pentru antrenare și 25% pentru testare nu a condus la un model bun. De aceea au fost luate în considerare seturi diferite de date, cu structuri diferite, respectiv repartizate diferit în domeniul de variație: i) seturi multiple distribuite aleatoriu în spațiul de căutare; ii) distribuție sub formă de cub parțial; și iii) distribuție sub formă de cub.

În procesul de liofilizare, modelul neuronal trebuie să fie în măsură să furnizeze informații cu privire la starea produsului în funcție de condițiile de operare. Starea produsului este identificată prin temperatura la interfața de sublimare (T_i), care trebuie să rămână sub valoarea limită a produsului și prin grosimea stratului uscat (L_{uscat}), această variabilă oferind informații despre progresul uscării primare. Pe baza acestor considerente, au fost testate configurații diferite legate de stabilirea corectă a parametrilor ca intrări și ieșiri pentru rețele neuronale (tabelul 7.8).

Tabelul 7.8. Lista diferitelor combinații intrări-ieșiri testate pentru determinarea celui mai bun model al procesului de uscare prin înghețare al produselor farmaceutice.

Caz	Intrări											Ieșiri		
	Timp	T_{raft}	$P_{cameră}$	$t-3\Delta t$ T_i	$t-2\Delta t$ T_i	$t-\Delta t$ T_i	$t-2\Delta t$ Subl. Flux	$t-\Delta t$ Subl. flux	$t-3\Delta t$ L_{uscat}	$t-2\Delta t$ L_{uscat}	$t-\Delta t$ L_{uscat}	t T_i	t L_{uscat}	t Subl. flux
1		x			x	x						x		
2		x					x	x						x
3		x	x	x	x	x						x		
4		x	x	x	x	x							x	
5		x	x	x	x	x						x	x	
6		x	x	x	x	x					x	x	x	
7	x	x	x	x	x	x				x	x	x	x	
8	x	x	x			x					x	x	x	
9	x	x	x		x	x					x	x	x	
10	x	x	x		x	x				x	x	x	x	
11	x	x	x	x	x	x					x	x	x	
12	x	x	x	x	x	x			x	x	x	x	x	

Intervalul de timp Δt trebuie să fie atent selectat în procedura de identificare deoarece poate afecta semnificativ acuratețea rezultatelor obținute cu modelul neuronal. În literatura de specialitate se indică folosirea unei fracțiuni din constanta de timp a procesului. În consecință, au fost testate diferite variații Δt : i) 1 minut; ii) 5 minute; iii) 10 minute.

Un alt aspect care trebuie menționat este faptul că aceste teste au fost efectuate incremental, utilizând o creșterea treptată a complexității structurii rețelei și a datelor de antrenare. Cazurile 1 și 2 din tabelul 7.8 sunt aplicate folosind o variație liniară pentru $P_{cameră}$ și T_{raft} și un singur set de condiții specifice ce descrie dinamica întregului proces. În cazurile 3-5 sunt utilizate mai multe seturi de date cu variație liniară.

7.2.2.3. Determinarea modelului procesului de uscare prin înghețare

Primul pas în aplicarea abordării SADE-NN-2 este determinarea celei mai bune rețele neuronale care modelează procesul (modelul optim). Distinct de alte abordări implementate în cadrul OPT-NN, această metodologie a fost elaborată doar pentru procesul de liofilizare, deoarece au fost incluse în algoritm numeroase informații despre parametrii interni și condițiile de operare pentru a permite modelului efectueze predicții în situații specifice. Se consideră inițial o structură generală a modelului neuronal (figura 7.7) și apoi aceasta este rafinată în scopul găsirii celui mai bun model.

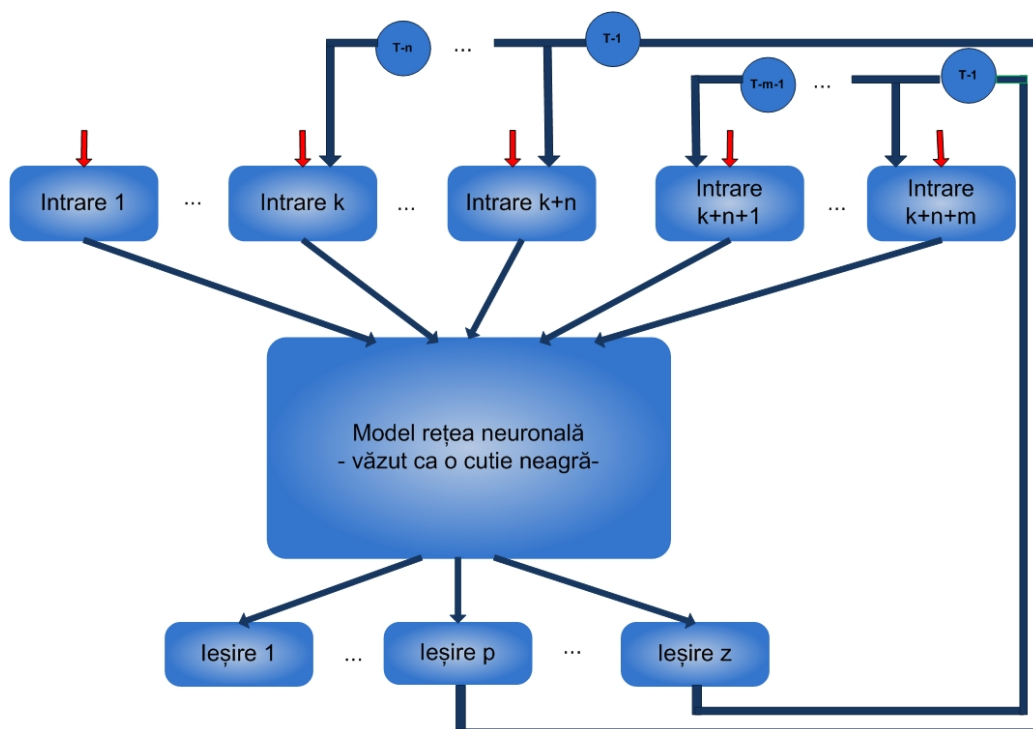


Figura 7.7. Structura generală a modelului neuronal dezvoltat pentru procesul de uscare prin înghețare aplicat produselor farmaceutice.

Se consideră întârzieri aplicate intrărilor, deoarece modelul nu este utilizată numai pentru predicții la un moment viitor specificat, ci și pentru determinarea temperaturii maxime și a timpul de uscare. Acest lucru înseamnă că trebuie estimate variabile diferite pe durata întregului proces fără a avea nici un fel de informații furnizate, cu excepția stării sistemului la momentul ales de timp.

După stabilirea faptului că sunt obligatorii cel puțin trei intrări (t , $P_{cameră}$ și T_{raft}) și două ieșiri (T_i și L_{uscat}) și că abordarea optimă presupune utilizarea de valori constante pentru modelul de învățare, următorul pas a fost determinarea ordinului de mărime pentru fiecare ieșire. Acesta a constat în ajustarea rezultatelor pe baza testării diferitelor setări și variante DE. Prin urmare, au fost utilizate două versiuni ale algoritmului DE pentru a obține cel mai bun model neuronal pentru procesul primar de uscare: DE/Best/1/Bin și DE/RandToBest/1/Bin. În tabelul 7.11, este listat un set de cinci rezultate pentru fiecare versiune.

Tabelul 7.11. Topologiile rețelelor neuronale obținute cu cea mai bună abordare SADE-NN-2.

Versiunea DE	Simulări	Topologie rețea	Valoare fitness
Best/1/Bin	1.	9:9:2	878 878.471
	2.	9:7:2	288 318.847
	3.	9:9:2	899 495.271
	4.	9:10:4:2	660 923.537
	5.	9:8:2	985 436.259
	Medie	-	742 610.482
RandToBest/1/Bin	1.	9:9:2	736 362.096
	2.	9:5:2:2	294 705.385
	3.	9:6:2	1 070 414.421
	4.	9:7:2	941 897.479
	5.	9:8:2	793 596.163
	Medie	-	761 995.108

Cea mai bună rețea obținută cu algoritmul SADE-NN-2 a avut un strat de intrare cu 9 neuroni, corespunzători variabilelor de intrare, 6 neuroni intermediari și 2 neuroni în stratul de ieșire pentru cele două variabile modelate. Trebuie remarcat că pe lângă timp, T_{fluid} și $P_{cameră}$ la momentul t , variabilele de intrare cuprind valorile T_i și L_{uscat} în ultimele trei momente de timp.

7.2.2.4. Monitorizarea procesului

Pentru a determina capacitatea reală de generalizare a modelului neuronal dezvoltat cu SADE-NN-2, au fost efectuate o serie de teste. Datele de testare sunt generate fie cu ajutorul unui model fenomenologic, fie sunt obținute experimental. În scopul evaluării performanței modelului propus, au fost luate în considerare două situații principale: i) modificări în tipul de variație pentru $P_{cameră}$ și T_{raft} ; și ii) diferența dintre K_v și R_p . Deoarece datele de antrenare au fost compuse exclusiv din cicluri sistem determinate cu $P_{cameră}$ și T_{raft} constante, sunt utilizate noi variații liniare sau de tip pas. În al doilea caz, au fost luate în considerare valori diferite ale diferenței dintre K_v utilizat în faza de antrenare ($K_v, antrenare$) și în faza de monitorizare ($K_v, monitorizare$), precum și între valoarea R_p utilizată în faza de antrenare ($R_p, antrenare$) și în faza de monitorizare ($R_p, monitorizare$).

Deoarece principalii pași ai procesului de uscare primară sunt legați de scăderea presiunii în camera de uscare și de creșterea temperaturii raftului, $P_{cameră}$ și T_{raft} variază în timp. Acest comportament este diferit de cel aplicat pentru a crea baza de date utilizată pentru antrenare și, în consecință, performanța rețelei trebuie să fie testată atunci când se confruntă cu situații similare cu ceea ce se întâmplă într-un ciclu real de liofilizare. Figura 7.9 prezintă evoluția în timp a erorilor care afectează temperatura produsului și grosimea stratului uscat pentru $P_{cameră} = 19.4 \text{ Pa}$ și $T_{raft} = 266.85 \text{ K}$.

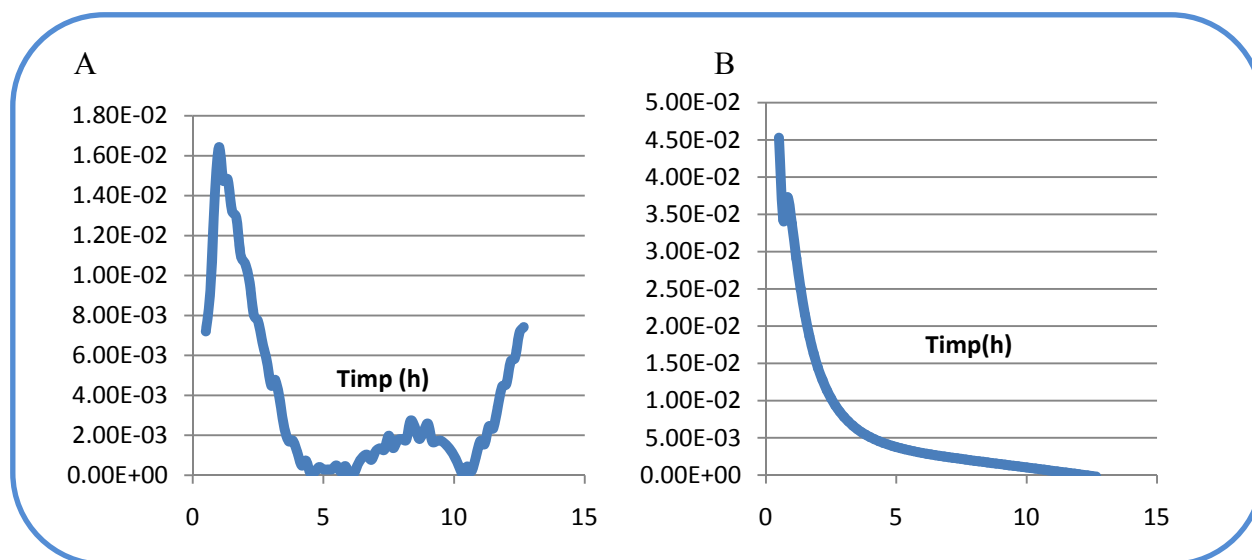


Figura 7.9. Evoluția erorii absolute pentru temperatura produsului (A) și evoluția erorii relative pentru grosimea stratului uscat (B), în cazul în care T_{raft} și $P_{cameră}$ sunt constante.

Cu excepția variației T_{raft} și $P_{cameră}$, o altă metodă de determinare a flexibilității celui mai bun model neuronal este de a folosi diferite valori pentru K_v și R_p . Figura 7.11 prezintă o comparație

între erorile de estimare folosind senzorul soft pe baza modelului neuronal pentru temperatura produsului și a grosimii stratului uscat pe durata unui ciclu cu $T_{raft} = 269.2$ K și $P_{cameră} = 18.3$ Pa.

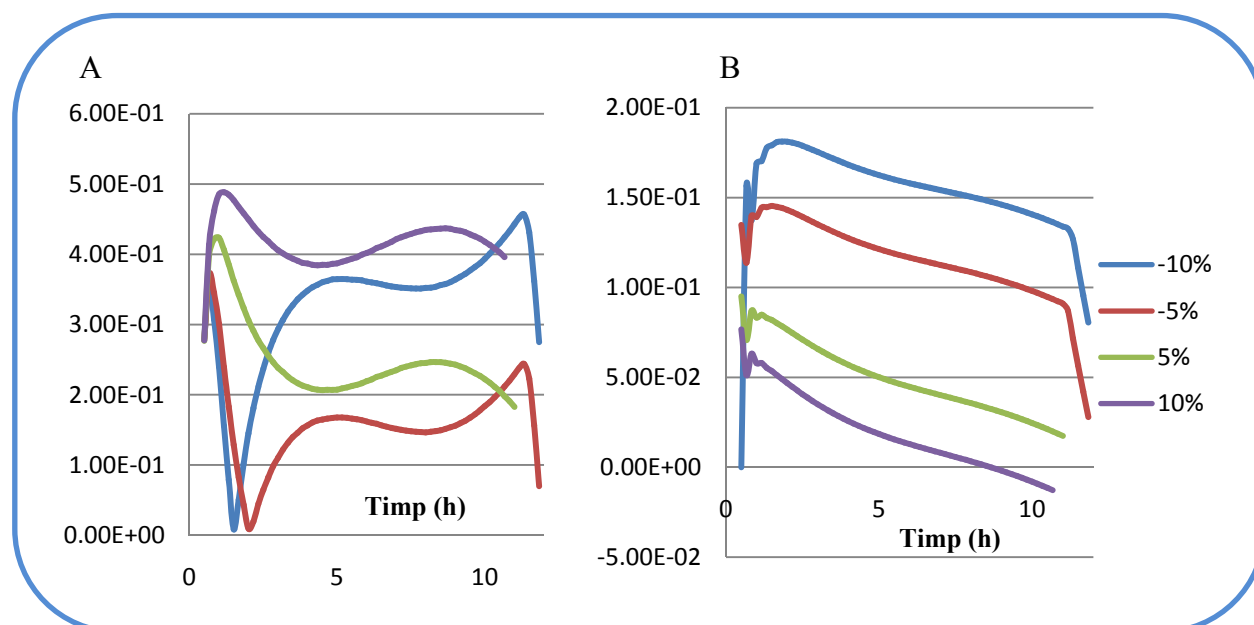


Figura 7.11. Influența parametrului K_v asupra variației erorii relative pentru temperatura produsului (A) și a stratului uscat (B).

După o serie de teste folosind datele generate de un model fenomenologic, a fost colectat un set de date experimentale și utilizat pentru determinarea performanței modelului. Figura 7.14 ilustrează un exemplu de validare a senzorului soft.

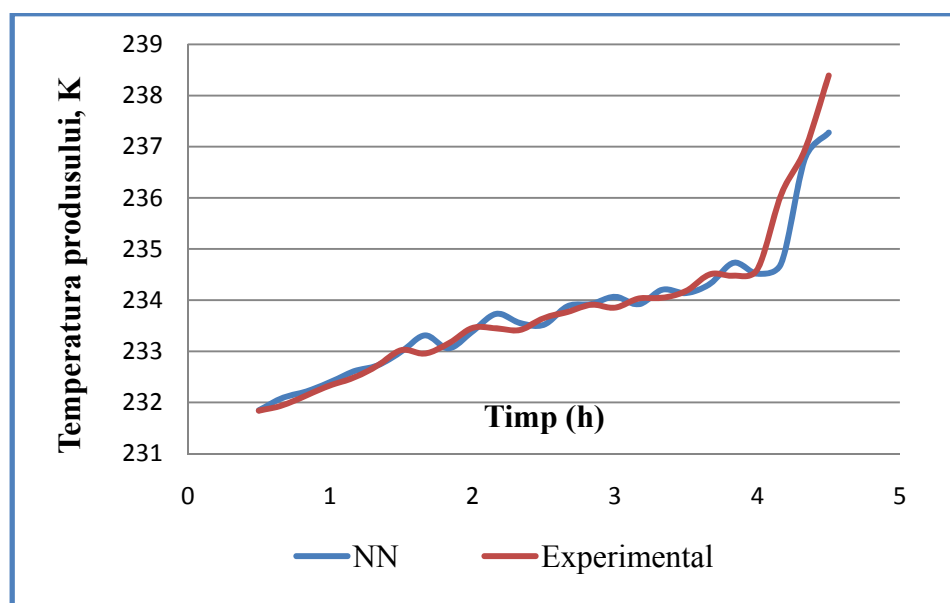


Figura 7.14. Comparație între predicțiile rețelei neuronale și datele experimentale.

7.2.2.5. Modelarea procesului și identificarea sistemului

Așa cum a fost menționat anterior, cel mai bun model neuronal obținut cu SADE-NN-2 poate fi folosit nu numai pentru monitorizare, dar și pentru modelarea și identificarea sistemului. În acest context, identificarea sistemului se referă la determinarea dinamicii sale. Pe baza informațiilor de la un anumit moment t și folosind tehnici de manipulare a datelor pentru simularea recurențelor în model, rețeaua este în măsură să calculeze evoluția stării produsului. Interesează în mod special temperatura maximă a produsului ($T_{i,max}$) și timpul de uscare. După cum se arată în figura 7.15, erorile de estimare a temperaturii maxime a produsului devin mai mici pe măsură ce timpul trece. La un anumit moment de timp, rețeaua primește starea actuală a sistemului și, pe baza acestor informații, prezice valoarea maximă a T_i .

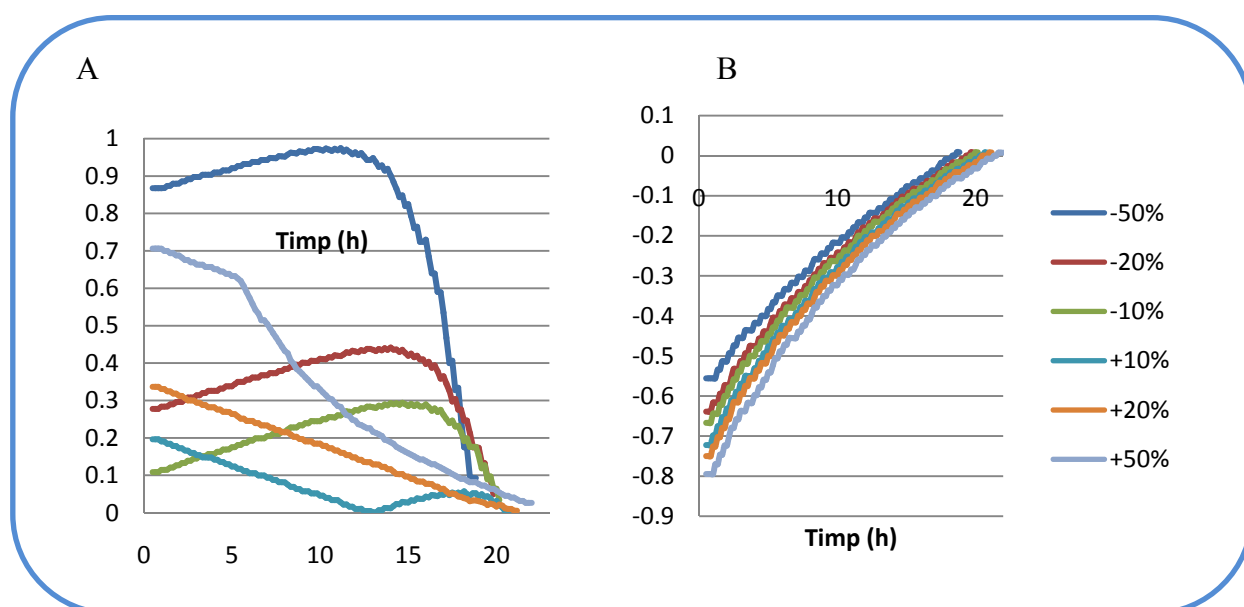


Figura 7.15. Eroarea absolută a dinamicii temperaturii produsului (A) și eroarea relativă a predicțiilor timpului de uscare (B) când R_p variază.

8. Optimizare neuronală bazată pe algoritmul Selecție Clonală

8.1. Aspecte generale ale algoritmului selecție clonală

Framework-ul propus în teză permite utilizarea de algoritmi diferiți de optimizare, nu numai pentru determinarea unui model bun, ci și pentru optimizarea procesului. Prin urmare, a fost ales un alt algoritm de inspirație biologică pentru a efectua diferite sarcini de optimizare: selecție clonală (CS). Algoritmul CS-NN (figura 8.1) este o variantă modificată a algoritmului

CLONEALG (de Castro și Von Zuben, 2002), în care sunt combinate două principii de mutație pentru a crea un nou operator de hipermutație.

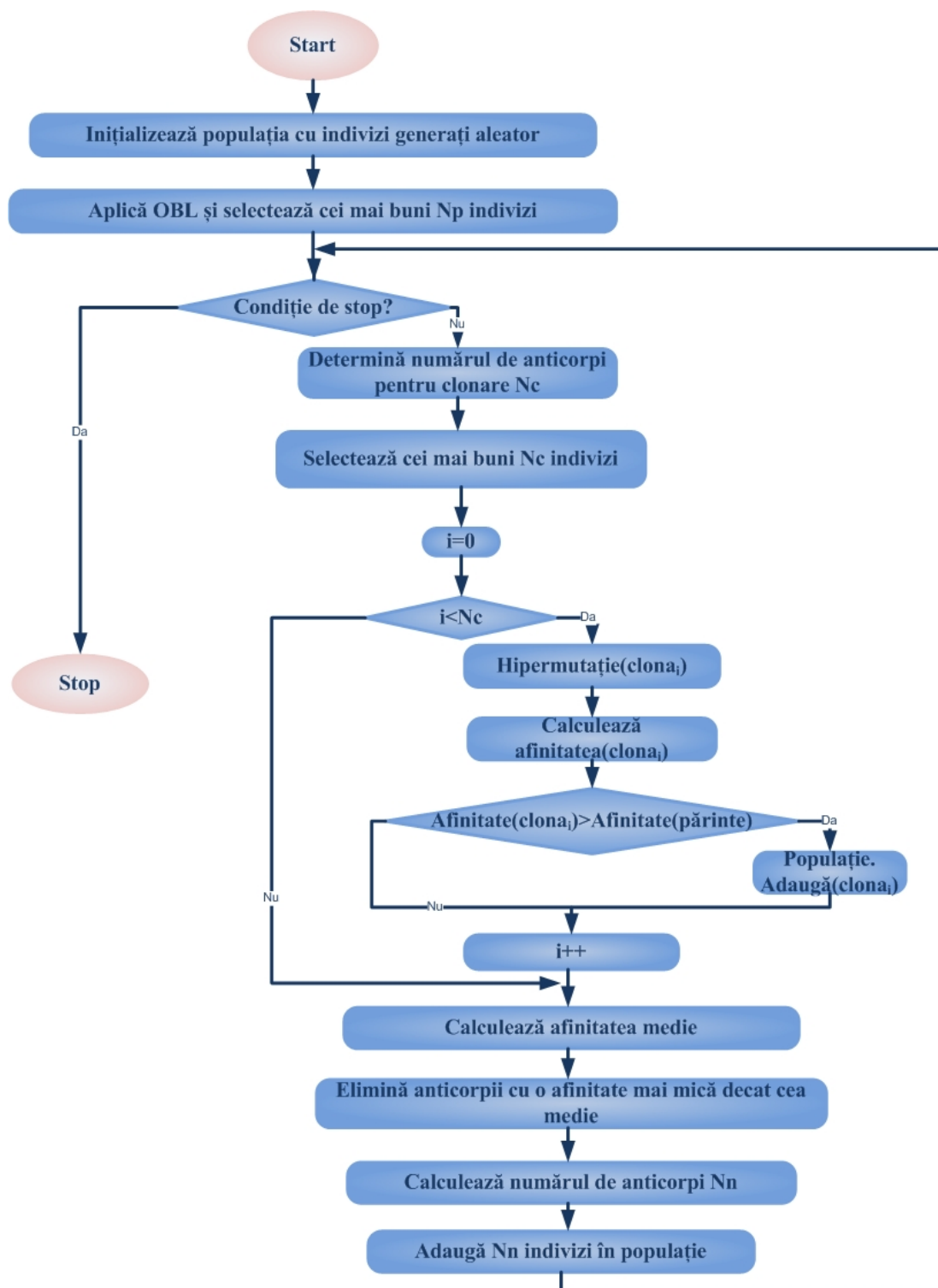


Figura 8.1. Schema logică a algoritmului CS-NN.

Noul operator de hipermutație combină trei tipuri de hipermutație: Gauss, ne-uniform și schimb de pereche. La un moment dat, pe baza unui număr generat aleator este ales și aplicat unul din cele trei tipuri de hipermutație. Mutația bazată pe schimbul de perechi este propusă în (Ulutas și

Islie, 2009), un nou individ fiind generat prin comutarea a doi parametri selectați în mod aleatoriu. În cadrul framework-ului OPT-NN, pentru optimizarea rețelelor neuronale, fiecare individ are anumite zone care conțin parametri de rețea codați fie ca întregi, fie ca numere reale. Pentru a evita probleme specifice cum ar fi o funcție de activare să fie înlocuită cu o pondere, a fost impusă o limitare la acest tip de mutație, schimbarea fiind permisă numai între ponderi. Ponderile au fost alese pe baza considerentului că sunt cele mai numeroase, o mică variație în valoarea lor ducând la variații mari în performanța generală.

O altă modificare a algoritmului CLONEALG de bază constă în mecanismul utilizat pentru îndepărtarea anticorpilor cu afinitate scăzută. Este calculată o valoare medie a afinității și, în cazul în care anticorpii sunt destul de vechi și nu au reușit să evolueze astfel încât afinitatea lor să fie mai mare decât valoarea medie, atunci ei sunt eliminați din populație.

8.2. Aplicații în ingineria chimică

8.2.1. Îndepărtarea metalelor grele din apele reziduale (CS7)

Cantitățile mari de ape reziduale produse în fiecare zi și numărul mare de poluanți constituie o mare problemă de mediu, în special pentru zonele puternic industrializate. Acest studiu de caz, numerotat CS7, se bazează pe serii de date experimentale obținute printr-o metodă de adsorbție pe turbă. Baza de date utilizată conține 985 valori corespunzătoare la cinci tipuri de ioni metalici: cadmiu (Cd), cobalt (Co), nichel (Ni), mercur (Hg) și cupru (Cu). Pentru a studia prin simulare procesul de adsorbție, au fost considerați șase parametri: tipul de metal descris prin electronegativitatea sa (1.69 pentru Cd, 1.88 pentru Co, 1.91 pentru Ni, 2 pentru Hg și 2.33 pentru Cu), concentrația sorbentului ($3.06 - 40.03 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$), pH-ul soluției inițiale (1.75 - 6), concentrația inițială a soluției ce conține ioni metalici ($0.38 - 519.36 \text{ mg}\cdot\text{L}^{-1}$) și timpul de contact (0 - 24 ore).

Utilizând o variantă modificată a selecției clonale, au fost efectuate o serie de simulări pentru a determina cel mai bun model neuronal care să simuleze eliminarea metalelor grele din apele uzate. În acest scop, s-au stabilit mai întâi valorile parametrilor de optimizare referitori la algoritmul CS. Astfel, procentajul din populație care este clonat în fiecare generație (C_l) a fost stabilit la 30, au fost generate 10 clone pentru fiecare individ selectat (C_{li}), anticorpii noi generați care sunt introduși în populație (N_a) reprezintă 5% din populația actuală, factorul de mutație (M_f) = 20, iar numărul de generații (G) a fost setat la 2000.

Unii dintre acești parametri (C_l , M_f) sunt aleși pe baza recomandărilor din literatură, în timp ce alții sunt stabiliți în corelație cu complexitatea și dimensionalitatea problemei de rezolvat. Folosind aceste setări, au fost obținute o serie de modele neuronale, MSE în fazele de antrenare și testare având valori acceptabile. La o analiză mai atentă a datelor, s-a constatat că pentru un

set specific de date aparținând Hg, eroarea este mare (electronegativitate = 2, concentrație adsorbant = $5 \text{ g} \cdot \text{L}^{-1}$, pH-ul soluției inițiale = 6, concentrația inițială a soluției ce conține ioni metalici = $161.041 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$). Din moment ce toate datele utilizate în studiul actual au fost adunate din mai multe surse întâlnite în literatura de specialitate, aceste rezultate pot fi puse pe seama unor: i) erori în procesul experimental; ii) calibrări diferite pentru echipamentele de măsurare; iii) alte condiții în laborator; sau iv) eroare umană.

Pentru a stabili un model bun pentru toate datele considerate acceptabile, subsetul eronat a fost eliminat, din 985 de datele ramand 949. În continuare, a fost efectuat un alt set de simulări, MSE-ul pentru datele de antrenare și testare fiind în jurul aceluiași valori. Întrucât cea mai bună rețea neuronală a fost obținută cu setul complet de date, s-a ajuns la concluzia că eliminarea datelor eronate a avut un efect neașteptat. Deoarece fiecare subset din baza de date descrie un anumit aspect al procesului considerat, eliminarea acestuia din faza de antrenare a avut un efect negativ, rețeaua obținută nefiind capabilă să reproducă pe deplin sistemul. Pentru cea mai bună rețea neuronală obținută, diferențele dintre valorile așteptate (experimentale) și cele prezise (de simulare) sunt prezentate în figura 8.2. După cum se poate observa, există cazuri în care se înregistrează erori mari, deci rețeaua nu reușește să furnizeze predicții într-un interval acceptabil (eroarea medie absolută mai mare de 50%).

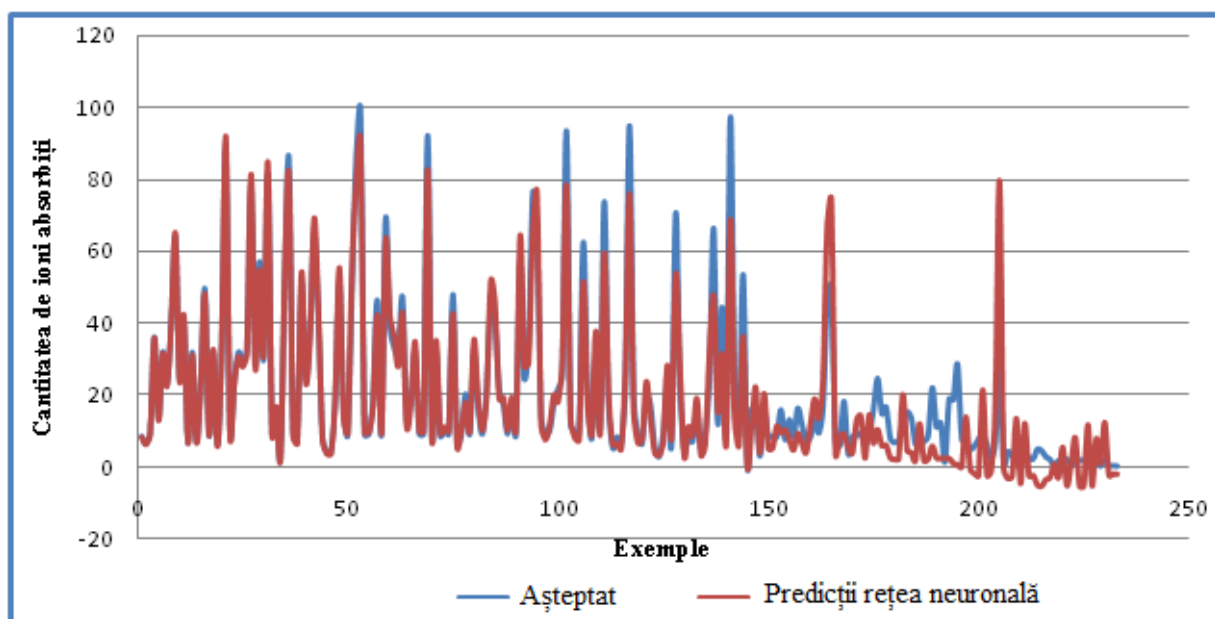


Figura 8.2. Diferența dintre valorile așteptate și cele generate de rețeaua neuronală în faza de testare.

8.2.2. Separarea acidului succinic din amestecuri de fermentație (CS8)

Acidul succinic, cunoscut de asemenea sub numele de acid butandioic, este utilizat pe scară largă în multe domenii, producția acestui compus din resurse regenerabile fiind mai rentabilă

decât din resursele pe bază de petrol (Song și Lee, 2006). Prin urmare, determinarea unei surse bune pentru obținerea acidului succinat în condiții optime pentru obținerea eficienței maxime sunt probleme care trebuie rezolvate. Separarea acidului succinic din amestecurile de fermentare este dificilă, în special datorită prezenței acizilor carboxilici. O serie de experimente anterioare au indicat faptul că este posibilă separarea selectivă a acestor acizi din amestecul obținut prin fermentarea *A. succinogenes* (Galaction *et al.*, 2012).

Au fost efectuate experimente cu parametri diferiți, baza de date finală conținând 2370 date. Ca și în studiile de caz anterioare, 75% sunt utilizate în faza de antrenare și 25% în faza de testare. De asemenea, este aplicată o procedură de normalizare în scopul reducerii diferenței dintre valorile maxime și minime ale fiecărui parametru.

Ca și în cazul eliminării metalelor grele din apele uzate, au fost efectuate o serie de simulări cu algoritmul CS-NN în scopul determinării celei mai bune rețele neuronale care modelează procesul de separare a acidului succinic din amestecuri de acizi (succinic, acetic și formic). Principalii parametri avuți în vedere pentru modelarea procesului de pertracție au fost: valoarea pH-ului fazei de extracție (pH_F), valoarea pH-ului fazei de reextracție (pH_S), concentrația tri-n-octilamină (C_{TOA} , g / l) și viteza de rotație a agitatorului (N , rpm). În tabelul 8.4, sunt listate rezultatele unei serii de cinci simulări legate de procesul luat în considerare.

Tabelul 0.1. Cele mai bune rețele neuronale obținute cu algoritmul CS-NN pentru separarea acidului succinic din amestecuri de fermentație.

Topologie	Fitness	Antrenare		Testare	
		MSE	Corelație	MSE	Corelație
4:4:1	21.311	0.0469	0.9650	0.0604	0.9637
4:6:1	21.047	0.0475	0.9643	0.06438	0.9564
4:7:1	20.696	0.0483	0.9625	0.0646	0.9596
4:4:1	20.473	0.0488	0.9614	0.0630	0.9599
4:3:1	20.381	0.0490	0.9612	0.0580	0.9594

După cum se poate observa din tabelul 8.4, cea mai bună rețea neuronală are o topologie 4:4:1, MSE în fazele de antrenare și testare fiind relativ scăzut. De asemenea, corelația are valori peste de 0.9, valoarea ideală fiind 1. În figura 8.3 sunt prezentate comparativ datele experimentale și predicțiile rețelei selectate pentru 100 de exemplare, în faza de testare.

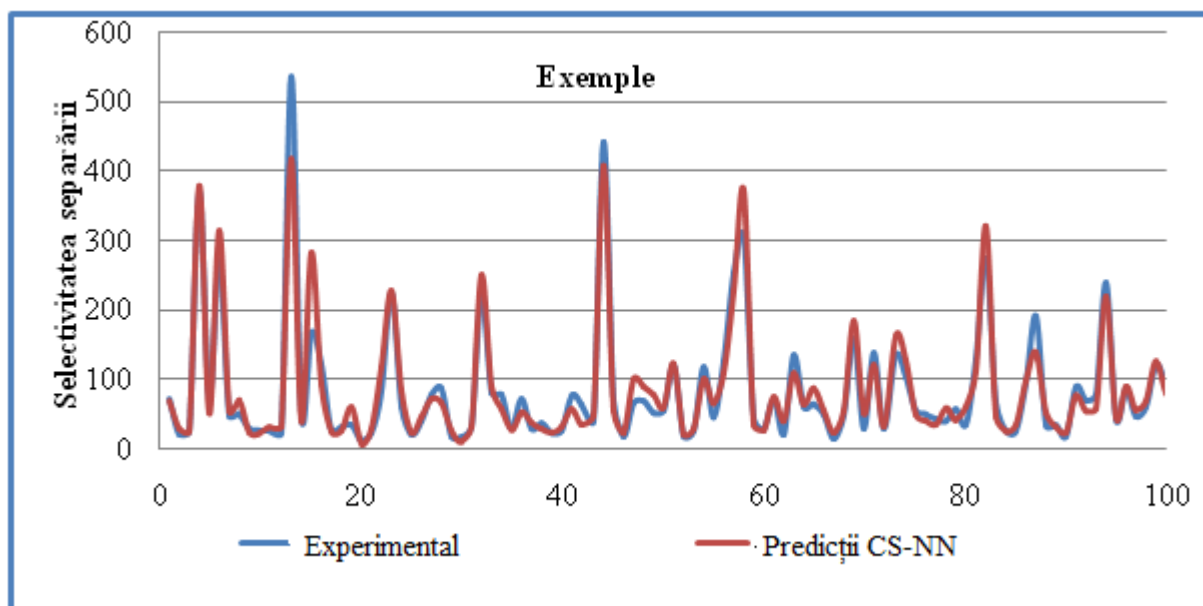


Figura 0.1. Comparație între datele experimentale și predicțiile celei mai bune rețele determinate cu algoritmul CS-NN în faza de testare.

9. Concluzii finale

9.1. Concluzii referitoare la obiectivele tezei

Majoritatea proceselor din ingineria chimică sunt descrise prin interacțiuni complexe care se traduc în relații complexe între variabilele ce le caracterizează. Acest lucru este unul dintre aspectele cele mai importante care trebuie luat în considerare când se încearcă obținerea unei înțelegeri aprofundate a mecanismelor interioare necesare pentru optimizarea diferitelor caracteristici ale proceselor. De asemenea, această complexitate duce la modele fenomenologice ce nu descriu complet interacțiunile interne, fapt ce indică necesitatea unor noi instrumente puternice pentru determinarea modelelor optime care pot fi incluse în proceduri de optimizare. O alternativă la modelarea fenomenologică bazată pe legi fizice și chimice este reprezentată de rețele neuronale artificiale (NN). În această teză, rețele neuronale sunt implementate într-un framework general (OPT-NN), care include diferite tehnici din inteligența artificială utilizate pentru a crea cu ușurință modele neuronale optime și pentru a optimiza diferite procese din ingineria chimică. Tehnicile generale utilizate sunt reprezentate de:

- **Rețelele neuronale artificiale**, care au fost utilizat pentru modelarea, predicția, clasificarea sau monitorizarea diferitelor procese din ingineria chimică;
- **Evoluția diferențială (DE)**, care a fost folosită ca un algoritm de optimizare global fie pentru determinarea topologiei rețelei și a structurii interne, fie (în combinație cu un model existent) pentru optimizarea proceselor chimice.

- **Selecția clonală (CS)**, aparținând sistemelor imunitare artificiale, care, similar algoritmului DE, a fost aplicată pentru modelarea și optimizarea proceselor.
- **Algoritmi hibridi.** Prin combinarea NN, DE și CS în diferite forme, sunt obținuți algoritmi hibridi noi și puternici. Hibridizările efectuate în această teză (DE + NN, NN + DE + BK, DE + NN + OBL, CS + NN + OBL) păstrează caracteristicile favorabile fiecăruia dintre algoritmi și sunt dezvoltate astfel încât să fie reduse la minim dezavantajele și limitările algoritmilor individuali.

Prin utilizarea acestor instrumente în diferite combinații și abordări, au fost atinse următoarele obiective:

➤ **Formularea unui principiu general pentru optimizarea rețelelor neuronale și a proceselor.** Toate metodologiile prezentate în această teză sunt bazate pe același principiu, utilizând un algoritm de optimizare pentru determinarea celui mai bun model neuronal, iar apoi pentru monitorizarea, modelarea și optimizarea procesului considerat. Deși ideea de a aplica un algoritm de căutare pentru determinarea unei rețele neuronale nu este nouă, optimizarea simultană a topologiei și structurii este rar întâlnită, iar metodologiile utilizate sunt independente de problema abordată. În această teză, toți algoritmii dezvoltați au un caracter general și pot fi aplicați pentru orice proces dacă se respectă două reguli simple: existența unei dependențe între intrări și ieșiri și acoperirea întregului spațiu de căutare cu date disponibile. Rețelele neuronale dezvoltate au fost de tipul perceptron multistrat cu propagare înainte și au fost alese pe baza următoarelor considerații: i) structură simplă; ii) ușurință în implementare; iii) performanță ridicată. Un alt aspect este codarea folosită (în teza de față fiind folosit un tip direct de codare) și informația inclusă în procesul de codare (numărul de straturi ascunse, numărul de neuroni în fiecare strat, ponderi, bias-uri și funcția de activare pentru fiecare neuron).

➤ **Optimizarea topologiei cu DE simplu.** A fost creată o metodă simplă și eficientă pentru optimizarea simultană a topologiei și a parametrilor interni a unei rețele neuronale, utilizând o versiune simplă a algoritmului DE. Metodologia a fost numită DE-NN și a fost aplicată la trei studii de caz: polimerizarea radicalică a stirenului, sinteza unor hidrogeluri și transferul de masă al oxigenului în bioreactoarele cu amestecare.

➤ **Îmbunătățirea performanței algoritmului DE prin auto-adaptare și prin introducerea de noi strategii de mutație și hibridizare.** Deși în comparație cu alți algoritmi de căutare DE înregistrează, în general, performanțe ridicate, au fost realizate o serie de îmbunătățiri. *Auto-adaptarea* a fost primul pas și a constat în înlocuirea metodei de alegere manuală a parametrilor de control cu o abordare auto-adaptivă în care parametrii sunt introduși în algoritm și determinați în mod automat. Al doilea pas este reprezentat de crearea unei noi *strategii de mutație* pe baza funcției de fitness a fiecărui individ care participă la procesul de mutație. Al treilea nivel de îmbunătățire a algoritmului a fost *hibridizarea*. În această teză se prezintă hibridizarea realizată cu doi algoritmi: propagarea înapoi (care a acționat ca o procedură de căutare locală a celui mai bun individ) și principiul opoziției care a fost folosit pentru a

îmbunătăți inițializarea). Algoritmii noi rezultați, denumiți **jDE-NN**, **SADE-NN**, **SADE-NN-1** și **SADE-NN-2** (corespunzătoare introducerii gradate a elementelor de îmbunătățire) au fost aplicați cu succes pe diferite probleme din ingineria chimică. jDE-NN și SADE-NN au fost aplicați la două studii de caz: transferul de masă al oxigenului în bioreactoare și predicția proprietății de cristal lichid a unor compuși organici. SADE-NN-1 a fost folosit pentru a cuantifica influența adăugării n-dodecanului utilizat ca vector oxigen la transferul de masă în bioreactoare, pentru diferite amestecuri de fermentație (culturi de *Propionibacterium shermanii* și *Saccharomyces cerevisiae*). SADE-NN-2 a fost aplicat pentru monitorizarea și identificarea procesului de uscare prin înghețare a produselor farmaceutice. Acești algoritmi au fost dezvoltati într-o manieră incrementală, rezultatele obținute indicând faptul că modificări specifice în cadrul DE duc la o performanță mai bună.

➤ **Aplicarea unei metodologii bazate pe Selecția Clonală pentru determinarea topologiei optime a unui model neuronal.** În timp ce evoluția diferențială este inspirată din principiul Darwinist de evoluție, algoritmul de selecție clonală este bazat pe principiul de clonare întâlnit în sistemului imunitar al mamiferelor. Ca și în cazul altor metodologii dezvoltate pe baza algoritmului DE, CS-NN este utilizat pentru optimizarea modelelor neuronale și a diferite aspecte ale unor procese: eliminarea metalelor grele din ape reziduale și separarea acidului succinic din amestecuri de fermentație.

➤ **Îmbunătățirea performanțelor modelelor neuronale** prin utilizarea a opt funcții de activare, variate reguli empirice pentru limitarea structurii maxime admise și prin luarea în considerație a două tipuri de modele neuronale. Regulile pentru limitarea topologiei maxime au fost aplicate pentru a reduce resursele computaționale, deci pentru a obține o metodologie mai rapidă. În plus, algoritmul de optimizare poate determina modele viabile, reprezentate de rețele neuronale simple sau agregate în stive. Sunt disponibile diferite variante de combinare a rețelelor individuale într-o stivă, obținându-se stive: de tipul I (care conțin metode liniare) și de tipul II (care conțin metode neliniare). În urma comparațiilor realizate pe diferite tipuri de stive s-a observat că tipul II este mai eficient, având în vedere faptul că utilizează metode neliniare de combinare a rețelelor, maximizând astfel performanța ieșirilor.

➤ **Asamblarea tuturor metodologiilor dezvoltate într-un framework general și flexibil.** Fiecare metodă prezentată în această teză este bazată pe principiul general de optimizare formulat anterior și, în consecință există aspecte comune ale acestora, fapt care a determinat gruparea lor într-un framework unitar numit **OPT-NN**. OPT-NN este flexibil din mai multe puncte de vedere, avantajele majore pe care le aduce față de alte metode existente fiind numărul mare a problemelor care pot fi rezolvate, rezultate bune furnizate și ușurința în utilizare. În vederea testării performanței diferitelor metodologii incluse în framework, au fost folosiți diferiți indicatori de performanță: *MSE*, evaluarea fitness-ului, numărul de iterații și timpul de calcul. În plus, a fost creată o condiție de oprire, combinând un număr predefinit de iterații cu performanța soluției cele mai bune obținute până la realizarea acestuia.

➤ **Crearea unui software original prin implementarea algoritmilor de modelare și optimizare.** Pentru fiecare metodă a fost implementată o aplicație .NET 4.0 utilizând C#. Toți algoritmi au fost grupați sub un singur framework cu o interfață simplă, care permite utilizatorului să aleagă nu numai varianta dorită, ci și setările specifice care controlează aplicația.

➤ **Aplicarea strategiilor de modelare și optimizare diferitelor procese din domeniul ingineriei chimice** pentru a determina proprietăți specifice ale produsului obținut sau caracteristici de reacție. Au fost rezolvate o serie de probleme cum ar fi: modelarea, predicția, clasificarea, monitorizarea și optimizarea pentru un set de opt studii de caz din domeniul ingineriei chimice, folosind algoritmi din framework-ul OPT-NN. Astfel, vechile și uneori ineficiente metode de rezolvare a problemelor din ingineria chimică au fost înlocuite cu un singur framework. Cele opt studii de caz luate în considerare au fost:

- o Polimerizarea radicalică a stirenului (CS1);
- o Eliminarea componentelor mic moleculare din hidrogeluri (CS2);
- o Transferul de masă al oxigenului în bioreactoarele cu amestecare (CS3);
- o Proprietatea de cristal lichid a unor compuși organici (CS4);
- o Influența adăugării n-dodecanului asupra transferului de masă al oxigenului în amestecuri de fermentație (CS5);
- o Procesul de uscare prin înghețare a produselor farmaceutice (CS6);
- o Eliminarea metalelor grele din ape reziduale (CS7);
- o Separarea acidului succinic din soluții de fermentație (CS8);

Fiecare proces a fost abordat folosind cel puțin una din metodologiile disponibile în framework-ul OPT-NN. Inițial este prezentată o scurtă descriere a caracteristicilor problemei pentru fiecare proces, împreună cu modul în care au fost obținute datele pentru simulare. Apoi, în funcție de aspectele luate în considerare, se aplică metodologiile adecvate, iar rezultatele obținute sunt analizate și discutate. Un aspect important este faptul că asociația „*proces chimic ingineresc*” – „*metodologie*” este nouă și nu este întâlnită în literatură.

o **CS1.** Polimerizarea radicalică a stirenului realizată printr-un procedeu în suspensie reprezintă primul studiu de caz. Au fost aleși ca intrări ale modelelor neuronale trei parametri: concentrația inițiatorului, temperatura și timpul de reacție, iar alți trei au fost selectați ca ieșiri: conversia monomerului, masa moleculară medie numerică și masa moleculară medie gravimetrică. A fost realizată o comparație între DE-NN și alte două abordări (OMP și GA) pentru a aprecia capacitățile lor de generalizare. În faza de testare, toate cele trei metode au furnizat rezultate bune, eroarea relativă procentuală fiind mai mică de 7 %. Deși rezultatele generale au fost similare, fiecare metodă are atuurile sale, DE-NN și GA oferind predicții mai bune pentru masa moleculară, iar OMP pentru conversia moleculară. OMP este o metodă bazată pe încercări succesive condusă sistematic.

o **CS2.** Al doilea studiu de caz este reprezentat de eliminarea compușilor mici moleculari din sisteme macromoleculare cu arhitectură complexă (geluri cu proprietăți antiseptice și/sau tensioactive). Procesul a fost urmărit prin simulare bazată pe rețele neuronale pentru a determina condițiile de eliminare/desorbție a unor compuși din geluri, în vederea determinării vitezei de eliberare adecvată pentru aplicații biomedicale și pentru recuperarea ionilor metalici. Din acest grup de probleme au fost abordate două aplicații privind modelarea eliberării de clorură de N,N,N',N' -tetrametilitionină din gelurile pe bază de polialcool vinilic și eliminarea de ioni metalici $CrCl_3$ din hidrogelurile pe bază de poliacrilamidă. Eficiența metodologiei în găsirea unei rețele neuronale aproape optime este demonstrată de abilitatea bună de generalizare a modelului dezvoltat.

o **CS3.** Alimentarea cu oxigen în soluțiile de fermentație reprezintă cel mai important factor legat de exploatarea unui bioreactor cu amestecare. Prin urmare, modelarea, predicția și clasificarea au fost realizate în scopul de a evalua eficacitatea transferului de masă al oxigenului în funcție de condițiile de lucru (vâscozitate aparentă, viteza superficială a aerului, putere specifică și fracția volumetrică oxigen-vector). Pentru problema predicției, au fost luate în considerare două abordări: cu rețelele neuronale simple și organizate în stivă, în timp ce pentru problema clasificării a fost testată doar abordarea NN simplă.

În cazul predicției, utilizarea rețelelor neuronale stratificate a fost motivată de faptul că rețeaua simplă a avut o performanță scăzută. Cum era de așteptat, cele mai bune rezultate au fost obținute folosind a doua strategie, dar abordarea a avut un dezavantaj major: o perioadă lungă de timp de calcul determinată de optimizarea a $S + 1$ rețele neuronale, unde S reprezintă numărul de rețele în stivă. Prin urmare, s-a considerat că abordarea bazată pe rețele neuronale stratificate trebuie să fie utilizată numai atunci când timpul de calcul nu reprezintă un impediment.

În cazul problemei clasificării, clasele au fost create prin aplicarea unei metode de discretizare. S-au stabilit intervalele de valoare pentru coeficientul de transfer de masă și fiecare instanță a fost asociată cu o anumită clasă pe baza intervalului corespunzător. O rețea neuronală simplă, de tip feed-forward, cu două straturi ascunse, proiectată printr-o procedură utilizând metodologia DE-NN, a oferit rezultate precise.

o **CS4.** Proprietatea de cristal lichid (LC) este una dintre cele mai interesante proprietăți ale unui compus organic, materialele în această stare având două caracteristici principale legate de ordine și mobilitate. Un aspect important a fost acela de a cuantifica proprietatea de cristal lichid și de a obține cei mai importanți descriptori structurali care influențează în mod semnificativ această proprietate. Au fost calculați prin modelare moleculară o serie de descriptori care reprezintă caracteristici structurale și moleculare: lungimea părții rigide, lungimea părții flexibile, greutatea moleculară și un factor de asimetrie calculat ca raport între diametrul și lungimea totală a moleculei. SADE-NN s-a dovedit a fi o tehnică potrivită

pentru a găsi cele mai bune rețele neuronale, fiind în măsură să estimeze proprietatea de cristal lichid a compusului analizat.

Simulările efectuate pe două clase de compuși au dat rezultate încurajatoare, clasificarea corectă a proprietății de cristal lichid fiind realizată cu o rată de succes ridicată (85-90 %). Rezultatele bune obținute demonstrează faptul că metodologia propusă pentru găsirea topologiei optime a rețelelor neuronale este eficientă și, datorită flexibilității sale, poate fi aplicată la o gamă largă de probleme în domeniul ingineriei chimice.

o **CS5.** Experimentele efectuate de diverși cercetători pentru sistemele de biosinteză care conțin drojdie de bere sau celule bacteriene au indicat faptul că adăugarea de n-dodecan ca vector oxigen induce creșterea semnificativă a vitezei de transfer de oxigen din aer la microorganisme, fără a avea nevoie de o intensificare suplimentară a amestecării. Influența vectorilor oxigen trebuie analizată în corelație cu caracteristicile amestecului. SADE-NN-1 a fost utilizat pentru a cuantifica influența adăugării de n-dodecan (utilizat ca vector de oxigen) asupra transferul de masă al oxigenului în bioreactoarele cu amestecare, pentru diferite amestecuri de fermentație (culturi de *Propionibacterium shermanii* și *Saccharomyces cerevisiae*). Coeficientul de transfer de masă al oxigenului a fost evaluat funcție de condițiile de lucru reprezentate de: concentrația biomasei, viteza superficială a aerului, fracția volumetrică a vectorului oxigen și puterea specifică.

Au fost luate în considerare diferite variante de bază DE, fiind combinate cu un mecanism simplu de auto-adaptare și cu un principiu de mutație modificat. Împreună cu aceste îmbunătățiri, au mai fost realizate modificări la două niveluri (inițializarea algoritmului DE și tipurile de funcții de activare pentru rețelele neuronale) în scopul creșterii performanței metodologiei. Datorită diferitelor performanțe obținute în situații distincte (în general superioare variantelor simple), nu se poate concluziona ce elemente ale metodologiei au avut influență mai puternică, dar, în funcție de caracteristicile procesului, este clar că aceste îmbunătățiri au afectat semnificativ performanța algoritmului în sens favorabil.

Analiza de sensibilitate aplicată celor mai bune modele neuronale a avut drept scop ordonarea intrărilor în funcție de influența lor asupra ieșirilor. Rezultatele au fost în concordanță cu experimentele practice, influența intrărilor având următoarea ordine descrescătoare: concentrația biomasei, viteza superficială a aerului, puterea specifică, fracția volumetrică a vectorului oxigen.

Metodologia de optimizare bazată pe DE a fost de asemenea aplicată pentru determinarea condițiilor optime de lucru care să conducă la o valoare maximă a coeficientului de transfer de masă al oxigenului. Rețelele neuronale dezvoltate cu SADE-NN-1 au fost incluse în procedurile de optimizare, fiind astfel obținute informații semnificative utile pentru practica experimentală.

o **CS6.** În industria farmaceutică, liofilizarea este utilizată pe scară largă pentru a recupera un medicament dintr-o soluție apoasă, procesul desfășurându-se la temperatură scăzută, conservând astfel moleculele sensibile la căldură. O metodă SADE-NN-2 a fost folosită atât pentru modelarea, cât și pentru monitorizarea procesului. În primul caz, metoda a fost capabilă să prezică cu exactitate evoluția produsului funcție de condițiile de operare. Astfel, aceasta poate fi utilizată pentru a determina off-line "cea mai bună" rețea neuronală (pentru a minimiza timpul de uscare), precum și pentru a optimiza procesul în timp real, de exemplu, într-un algoritm de control predictiv. În al doilea caz, rețele neuronale au fost utilizate ca senzori soft pentru a estima variabilele care nu pot fi măsurate în timp real (grosimea stratului uscat), pe baza măsurărilor disponibile (temperatura produsului). În ambele cazuri, rețele neuronale s-au dovedit a fi un instrument eficient pentru a obține calitatea dorită a produsului într-un proces de liofilizare.

Pe de altă parte, modelul neuronal optim a fost testat în cazurile în care principalii parametri au fost diferiți față de cei utilizați în etapa de antrenare. Precizia senzorului a fost foarte mare pentru ambele variabile monitorizate, evidențiind astfel capacitatea modelului NN de a oferi estimări destul de precise chiar și atunci când valorile principalilor parametri ai procesului sunt diferite față de cele utilizate în faza de antrenare. Acest lucru este foarte important deoarece: i) valorile determinate experimental pentru ambii parametri urmăriți pot fi afectate de erori semnificative; ii) în unele cazuri, investigarea experimentală poate fi imposibil de realizat, de exemplu, în procese de liofilizare la scară industrială. Astfel, antrenarea modelului NN se bazează pe valori ale parametrilor principali luate din literatura de specialitate, iar aceste valori sunt afectate, printre altele, de tipul de liofilizare și de flaconul utilizat, precum și de fenomenele de nucleizare care au loc în faza de congelare (fenomene complet stocastice).

o **CS7.** Îndepărtarea metalelor grele din apele reziduale este o problemă esențială, cu implicații asupra mediului și a sănătății umane. Pentru un astfel de studiu de caz a fost aplicată o metodologie îmbunătățită bazată pe CS și NN, numită CS-NN. Deși existența unor date eronate în antrenare în setul de date influențează indicii de performanță ale celor mai bune rețele neuronale determinate, simulările efectuate au indicat faptul că metodologia a fost capabilă să găsească modele acceptabile.

o **CS8.** Ultimul studiu de caz a fost reprezentat de separarea acidului succinic din amestecuri de fermentare. Procesul de sinteză a acidului succinic prin fermentare are ca rezultat obținerea unui amestec care conține acizii acetic, formic și succinic. În scopul optimizării selectivității de separare, au fost utilizate o serie de date experimentale pentru antrenarea și testarea rețelelor neuronale dezvoltate cu metodologia CS-NN. Rezultatele obținute au avut erori mici și, prin urmare, modelele neuronale astfel determinate pot fi folosite într-o procedură de optimizare.

9.2. Aspecte originale

Aplicarea unor instrumente ale inteligenței artificiale pentru rezolvarea diferitelor aspecte ale proceselor din inginerie chimică este în fază incipientă, majoritatea cercetărilor bazându-se încă pe abordările clasice. Pentru a schimba această viziune, teza propune un framework general care conține diferite metodologii alternative pentru modelarea, predicția, clasificarea și monitorizarea proceselor chimice. Metodologiile sunt noi și se bazează pe diferite combinații de algoritmi de optimizare și modelare. Contribuțiile originale prezentate în această teză constau în:

- Dezvoltarea unei metodologii generale pentru optimizarea topologică și structurală a modelelor neuronale, metodologie bazată pe doi algoritmi de optimizare globali: evoluția diferențială și selecția clonală. Caracteristicile specifice ale metodologiilor constau în i) codificarea directă utilizată, incluzând toți parametri importanți ai rețelei: straturile ascunse, numărul de neuroni din straturile ascunse, ponderile, biasurile, funcțiile de activare, ii) utilizarea diferitelor tipuri de funcții de activare care pot fi aplicate la nivel de neuron și nu la nivel de strat ca în majoritatea abordărilor întâlnite în literatura de specialitate; iii) utilizarea unei funcții de fitness simplă, bazată pe MSE în faza de antrenare.

- Dezvoltarea unei aplicații folosind două tipuri diferite de stive, în scopul de a îmbunătățirii capacității de generalizare a modelelor și pentru a aborda nivelul de complexitate a proceselor care pot fi rezolvate cu rețele neuronale.

- Îmbunătățirea algoritmului DE folosind abordări diferite, cum ar fi: adăugarea unei strategii noi de mutație sau hibridizarea cu principiul opoziției și cu algoritmul back-propagation. Aceste îmbunătățiri pot fi aplicate individual sau în combinație, fapt care se traduce într-o flexibilitate ridicată și o înaltă performanță într-o gamă largă de situații.

- Particularizarea metodologiilor prin introducerea de informații despre proces în scopul determinării dinamicii și duratei procesului folosind doar starea sistemului la un anumit moment de timp (aplicație – uscarea prin înghețare).

- Adaptarea algoritmului selecție clonală pentru a funcționa cu rețele neuronale și aplicarea acestuia pentru rezolvarea unor probleme de optimizare.

- Combinarea tuturor algoritmilor într-un framework nou pentru optimizarea diferitelor tipuri de probleme din ingineria chimică (optimizare model și proces). Framework-ul are o interfață grafică care este foarte ușor de utilizat. Acesta este un avantaj, mai ales pentru ingineri chimiști, care se pot concentra pe problemele ridicate de proces și nu pe mecanismele interioare ale algoritmilor. În același timp, framework-ul reprezintă și aplicații software originale.

9.3. Direcții de continuare a cercetărilor

Cercetările efectuate în această teză vor fi continuate în trei direcții principale: i) optimizarea multi-obiectiv; ii) utilizarea diferitelor tipuri de rețele neuronale și iii) implementarea unor algoritmi de optimizare noi sau îmbunătățirea celor actuali.

- În ceea ce privește optimizarea multi-obiectiv, cele mai importante aspecte sunt legate de considerarea fronturilor Pareto și eliminarea soluțiilor duplicat.
- Referitor la utilizarea diferitelor tipuri de rețele neuronale, este bine cunoscut faptul că, deși MLP sunt aproximatori universali, există cazuri în care alte tipuri de rețele pot fi mai potrivite. Prin urmare, introducerea de noi tipuri de rețele (cum ar fi rețelele radiale, cu auto-organizare, Kohonen sau mașina Boltzmann) pot face frameworkul OPT-NN mai puternic.
- Dezvoltarea unor algoritmi de inspirație biologică care pot (singuri sau în combinație cu alte tehnici de optimizare) realiza determinarea modelelor optime și optimizarea proceselor. Deși algoritmi de optimizare globali utilizați în teză furnizează rezultate acceptabile pentru anumite probleme specifice cum ar fi procesul de uscare prin înghețare, ca urmare a complexității interacțiunilor interne, este necesară identificarea de algoritmi mai buni și mai puternici.

Publicații ce vizează obiectivele rezolvate în teză

• Lucrări ISI

1. **Drăgoi, E.-N.**, Curteanu, S., Galaction, A.- I., and Cascaval, D., 2011, Modeling of oxygen mass transfer in the presence of oxygen-vectors using neural networks developed by differential evolution algorithm : Engineering Applications of Artificial Intelligence, v. 24, no. 7, p. 1214–1226. *ISI 1.665, Scor relativ de influență 1.110*
2. **Drăgoi, E.-N.**, Curteanu, S., and Fissore, D., 2012, Freeze-drying modeling and monitoring using a new neuro-evolutive technique: Chemical Engineering Science, v. 72, p.195-204. *ISI 2.601, Scor relativ de influență 2.270*
3. **Drăgoi, E.-N.**, Curteanu, S., and Lisa, C., 2012, A neuro-evolutive technique applied for predicting the liquid crystalline property of some organic compounds: Engineering Optimization, DOI: 10.1080/0305215X.2011.644546. *ISI 0.936, Scor relativ de influență 1.055*
4. **Drăgoi, E.-N.**, Curteanu, S., Galaction, A.- I., Cașcaval, D., 2012, Optimization methodology based on neural networks and self-adaptive differential evolution algorithm applied to an aerobic fermentation process: Applied Soft Computing, DOI: 10.1016/j.asoc.2012.08.004. *ISI 2.860, Scor relativ de influență 1.112*
5. **Drăgoi, E.-N.**, Curteanu, S., and Fissore, D., 2012, On the use of Artificial Neural Networks to monitor a pharmaceutical freeze-drying process: Drying technology, accepted paper. *ISI 2.084, Scor relativ de influență 0.858*

Total ISI: **10.146**

Total scor relativ de influență: **6.405**

• **Lucrări indexate în baze de date internaționale**

1. Curteanu, S., Leon, F., Furtuna, R., **Drăgoi, E.-N.**, and Curteanu, N., 2010, Comparison between different methods for developing neural network topology applied to a complex polymerization process. The 2010 International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN), 18-23 July 2010, p. 1-8. *IEEE Proceedings*

• **Participări la manifestări științifice (comunicări, postere)**

1. Dafinescu, V., and **Drăgoi, E.-N.**, 2009, Contributions in the measurement of blood glucose concentration. Progrese in ingineria biomedicală.Volumul de lucrări al conferinței naționale de bioinginerie medicală INGIMED X 2009.
2. **Drăgoi, E.-N.**, and Dafinescu, V., 2009, “Medical services optimization using artificial intelligence. Progrese in ingineria biomedicală.Volumul de lucrări al conferinței naționale de bioinginerie medicală INGIMED X 2009.
3. **Drăgoi, E.-N.**, Curteanu S., and Mihailescu, C., 2010, Retele neuronale dezvoltate cu ajutorul algoritmului Differential Evolution aplicate la studiul unor sisteme biologice active. Simpozionul național de Bioinginerie Medicală XIII.
4. **Drăgoi, E.-N.**, Curteanu, S., and Mihailescu, C., 2010, Modeling methodology based on Differential Evolution algorithm applied to a series of hydrogels: Advances in intelligent Systems and Technologies, 07 – 09 octombrie, Iasi, Romania.

• **Patente**

1. **Drăgoi, E.-N.**, and Curteanu, S., Algoritm evolutiv diferențial proiectat pentru dezvoltarea topologiei rețelelor neuronale. Înregistrat la ORDA nr. 14645/22.11.2010.
2. **Drăgoi, E.-N.**, and Curteanu, S., Metodologie de optimizare bazată pe o variantă îmbunătățită a algoritmului evoluție diferențială cu auto adaptare, SADE-NN-1. Înregistrat la ORDA nr. 1261/21.09.2011.

Bibliografie (selectivă)

Ali, M. M., 2007, Differential evolution with preferential crossover: European Journal of Operational Research, v. 181, no. 3, p. 1137-1147.

Angira, R., and A. Santosh, 2007, Optimization of dynamic systems: A trigonometric differential evolution approach: Computers & Chemical Engineering, v. 31, no. 9, p. 1055-1063.

Bosca, S., and D. Fissore, 2011, Design and validation of an innovative soft-sensor for pharmaceuticals freeze-drying monitoring: Chemical Engineering Science, v. 66, no. 21, p. 5127-5136.

- Brest, J., A. Zamuda, I. Fister, B. Boskovic, M. S. Maucec, 2011. Constrained real-parameter optimization using a Differential Evolution algorithm. *Differential Evolution (SDE)*, 2011 IEEE Symposium on. *Differential Evolution (SDE)*, p. 1-8.
- Brownlee, J., 2007, *Clonal Selection Algorithms*. Technical Report 070209A.
- Cascaval, D., A. I. Galaction, E. Folescu, and M. Turnea, 2006, Comparative study on the effects of n-dodecane addition on oxygen transfer in stirred bioreactors for simulated, bacterial and yeasts broths: *Biochemical Engineering Journal*, v. 31, no. 1, p. 56-66.
- Curteanu, S., H. Cartwright, 2012, Neural networks applied in chemistry. I. Determination of the optimal topology of multilayer perceptron neural networks: *Journal of Chemometrics*, v. 25, no. 10, p. 527-549.
- Cutello, V., G. Nicosia, and M. Pavone, 2004, *Exploring the capability of immune algorithms: A characterization of hypermutation operators*, Springer-Verlag, Berlin.
- Das, S., and P. N. Suganthan, 2011, Differential Evolution: A Survey of the State-of-the-Art: *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, v. 15, no. 1, p. 4-31.
- Dasgupta, D., S. Yu, and F. Nino, 2011, Recent Advances in Artificial Immune Systems: Models and Applications: *Applied Soft Computing*, v. 11, no. 2, p. 1574-1587.
- Feoktistov, V., 2006, *Differential evolution: in search of solutions*, Springer.
- Fernandes, F. A. N., and S. Rodrigues, 2006, Optimization of panose production by enzymatic synthesis using neural networks: *Process Biochemistry*, v. 41, no. 5, p. 1090-1096.
- Galaction, A. I., D. Cascaval, and N. Nicuta, 2008, Selective removal of Gentamicin C1 from biosynthetic Gentamicins by facilitated pertraction for increasing antibiotic activity: *Biochemical Engineering Journal*, v. 42, no. 1, p. 28-33.
- Liao, T. W., 2010, Two hybrid differential evolution algorithms for engineering design optimization: *Applied Soft Computing*, v. 10, no. 4, p. 1188-1199.
- Price, K., 2008, Eliminating Drift Bias from the Differential Evolution Algorithm, in U. Chakraborty ed., *Advances in Differential Evolution*: Springer Berlin / Heidelberg, *Studies in Computational Intelligence*, p. 33-88.
- Storn, R., 2008, Differential Evolution Research -Trends and Open Questions, in U. Chakraborty ed., *Advances in Differential Evolution*: Springer Berlin / Heidelberg, *Studies in Computational Intelligence*, p. 1-31.
- Velardi, S. A., H. Hammouri, and A. A. Barresi, 2010, Development of a High Gain Observer for In-Line Monitoring of Sublimation in Vial Freeze Drying: *Drying Technology*, v. 28, no. 2, p. 256-268.
- Zaharie, D., 2009, Influence of crossover on the behavior of Differential Evolution Algorithms: *Applied Soft Computing*, v. 9, no. 3, p. 1126-1138.