

RAPORT FINAL

Proiect COFUND-LEAP-RE D3T4H2S

(martie 2024 – decembrie 2025)

- Contract nr. 11/2024 din 21.03.2024;
- UN MODEL DIGITAL BAZAT PE DATE PENTRU RECIPIENTE DE STOCARE A HIDROGENULUI RASPUNZAND PROVOCARILOR DE TRANZITIE ENERGETICA.

Proiect COFUND-LEAP-RE D3T4H2S;

1. Obiectivele prevăzute/realizate;

Colectivul de cercetători ai Universității Dunarea de Jos din Galați (partener UGAL)– prof. V. Mînză, prof. E. Rusu, postdoctorand A.-M. Chiroșcă – a făcut parte alături de alte cinci colective, S Vertical (Medium Entreprise-Franța), ENSTA Bretagne (École nationale supérieure de techniques avancées Bretagne - P2), doua universități din Maroc și una din Republica Sud Africană, dintr-un consorțiu care si-a asumat realizarea acestui proiect.

Obiectivul principal al colectivului UGAL a fost acela de a realiza părți din modelul bazat pe date al recipientelor de stocare a hidrogenului, la care s-a angajat consorțiul. Mai concret UGAL și-a asumat doua mari obiective prin pachetele de activități:

- Elaborarea de modele de Machine Learning pentru materialele compozite din care se fabrică aceste recipiente în vederea predicției comportamentului mecanic al acestora.
- Elaborarea de tehnici de optimizare însoțite de programele aferente care să poată fi utilizate la proiectarea optimală a materialelor compozite folosite la fabricarea recipientelor de stocare.

UGAL a interacționat cu coordonatorul și partenerul P2, în special pentru recepționarea unor date ce se referă la teste de tracțiune stress-strain (tensiune-elongație). De asemenea obiectivele concrete au fost discutate, în primă fază, cu acești parteneri. Ulterior, le-am rafinat în termeni științifici mai preciși de Machine Learning și optimizări cu algoritmi metaeuristici.

Nr./Etapă	Obiectiv prevăzut/realizat	Comentariu
(1) I - 2024	Construcția de modele de tip data-driven ale materialelor compozite utilizate.	Obiectivul vizează construcția de modele de tip machine learning (ML) ce caracterizează comportamentul termo-mecanic al materialelor compozite doar în zona elastică.
(2) I - 2024	Analiza echivalenței unui algoritm de tip machine learning cu un algoritm metaeuristic de optimizare.	Obiectiv <i>neprevăzut</i> inițial, pregatitor pentru Etapa a II-a. A dus la dezvoltarea unei versiuni de Particle Swarm Optimization folosit în etapa a II-a.
(3) II-2025	Modele de tip ML ce caracterizează comportamentul la tracțiune și termo-mecanic al materialelor compozite, extinse și în zona plastică și de ruptură.	Obiectivul vizează construcția de modele extinse de tip ML ce caracterizează comportamentul la tracțiune al materialelor compozite, atât în zona elastică cât și plastică. Datele primite nu au caracterizat și zona de ruptură, ce nu poate fi abordată similar.
(4) II-2025	Algoritmi bazati pe AI pentru proiectarea optimală a recipientelor de stocare a hidrogenului din material compozit.	Au fost vizate doua aspecte: (1) optimizarea structurii laminatelor compozite multistrat utilizand AI și (2) integrarea algoritmilor de tip ML și a algoritmilor metaeuristici precum PSO într-o structură de optimizare.

Tabelul de mai sus sintetizează obiectivele principale menționate în planul de realizare al proiectului, ultima variantă. Fiecare activitate, sau grup de activități, a contribuit la atingerea unui obiectiv de etapă.

Considerăm ca obiectivele proiectului au fost realizate și că activitățile și implementarea algoritmilor au prilejuit reflecții ce au dus la rezultate neprevăzute inițial; de exemplu, modelarea mai eficientă a unei familii de materiale compozite care au o caracteristică comună (fibra de carbon), sau structura de optimizare "Optimization FrameWork" care poate avea un cadru mai larg de utilizare (cu alte metaheuristici și/sau pentru alte tipuri de probleme).

2. Prezentarea rezultatelor obținute

În cele ce urmează, vom prezenta rezultatele obținute în legătură cu cele 4 obiective majore stabilite în proiect. Rezultatele vor fi prezentate prin câteva elemente esențiale, fără a aminti anumite detalii ce se găsesc în rapoartele de proiect înaintate coordonatorului și chiar cele două rapoarte anuale înaintate UEFISCDI.

OBIECTIVUL 1

Construcția de modele de tip data-driven ale materialelor compozite utilizate.

Obiectivul vizează construcția de modele de tip machine learning (ML) ce caracterizează comportamentul termo-mecanic al materialelor compozite doar în zona elastică.

Câteva date parțiale de test ne-au fost puse la dispoziție pentru a genera modele Machine Learning (ML, modele obținute prin învățare automată) pentru dependența *deformație relativă - presiune* (*stress-strain*) caracterizând diferite specimene de material compozit supuse testului. Datele recepționate se referă la 12 specimene multistrat având domenii diferite de deformare relativă (strain) și presiune (stress). Datele transmise corespund aproximativ segmentelor din Figura 1.

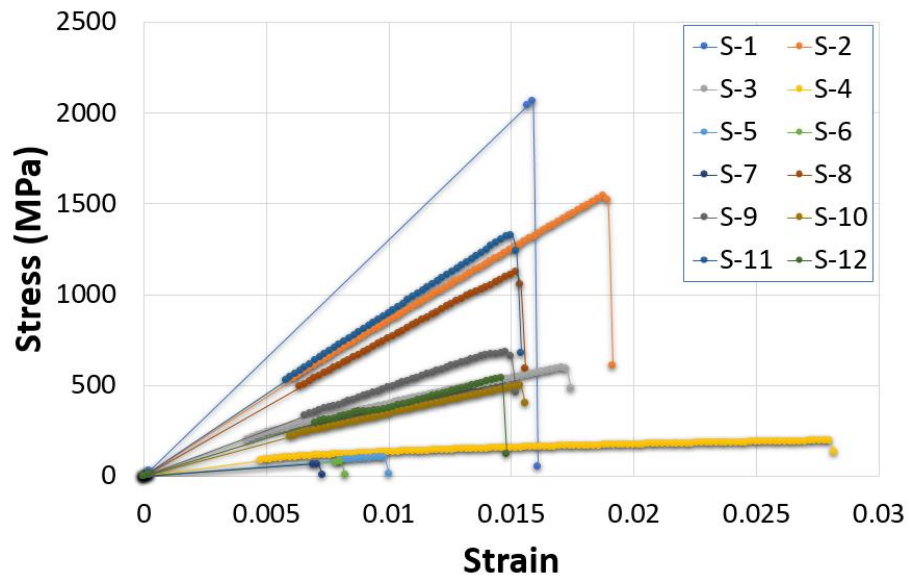


Figura 1. Dependenta *stress-strain* în timpul testului de tracțiune pentru cele 12 specimene.

Un specimen este obținut printr-o asamblare a 16 straturi de material compozit, fiecare strat având o anumită orientare (exprimată în grade) în raport cu direcția de aplicare a încărcării. În figura 2 este indicată stratificarea specimenului S9, codificată pe scurt astfel: $[0/45/-45/90]_{2s}$, adică combinație dublată și simetrizată.

Fiecare specimen este compus din 16 straturi compozite având diferite orientări. Secvența de mai jos poate caracteriza starea specimenului și este folosită ca structură a unui data point:

$\alpha_1, \alpha_2, K, \alpha_{16}, \text{Strain}, \text{Stress}$

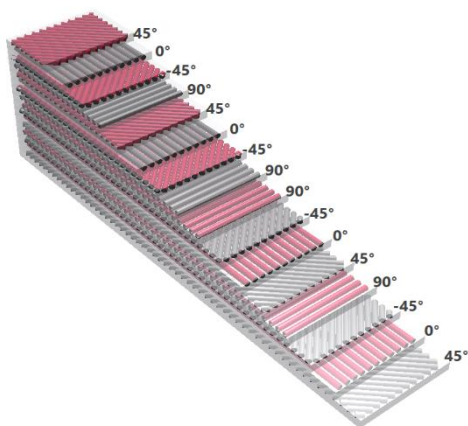


Figura 2. Specimenul S-9 multistrat de diferite orientari

Pentru a obține modelele regresive de ML au fost parcurse cateva etape:

- *Prelucrarea datelor primite și definirea setului de date (data set) pentru problema de ML.*
- *Definirea problemei de predicție ca problema de construcție a unui model ML.*
- *Definirea datelor de antrenare (training) și testare (testing) pentru diversele tipuri de modele ML.*
- *Construcția de diverse tipuri de modele ML și analiza lor comparativă.*

MODELE OBȚINUTE PRIN REGRESIE LINIARĂ MULPTIPLĂ

Regresia liniară multiplă (RLM), pe care am reținut-o din setul de regresii lineare implementate în cazul proiectului, conține de asemenea termeni neliniari (produse ale predictorilor) și utilizează tehnica "step - wise". Acest model a fost studiat pentru comparație cu modelele parametrice ce au fost implementate ulterior.

Linear regression model:

$$Ss \sim 1 + x1 \cdot x9 + x1 \cdot St + x2 \cdot x13 + x2 \cdot St + x9 \cdot St + x12 \cdot St + x13 \cdot St$$

O evaluare sintetică a acurateții acestui model poate fi făcută în figurile de mai jos:

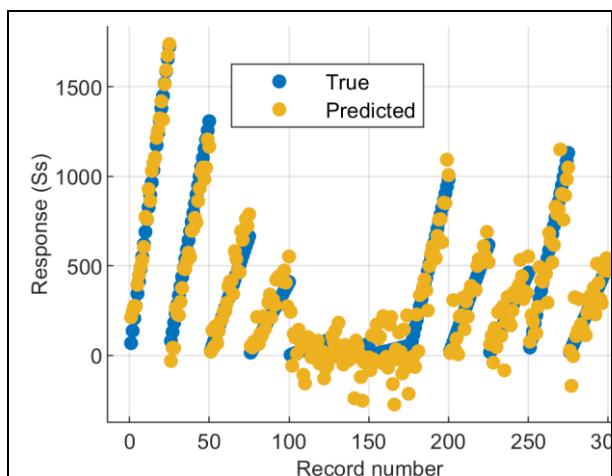


Figura 3. Training: Predicții versus valori reale

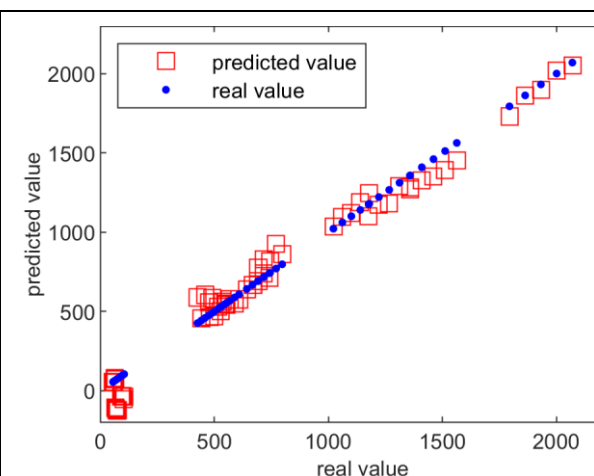


Figura 4. Testare: Predicții versus valori reale

MODELE BAZATE PE "SUPPORT VECTOR MACHINES" (SVM)

Au fost realizate mai multe modele SVM care au marcat o ameliorare a acuratetii predicției în raport cu **SW Linear Regression**. Support Vector Machine generează modele ML de bună calitate pentru problema noastră. Dintre modelele SVM construite în cadrul acestui studiu, prezentăm aici numai două modele SVM ce corespund obiectivelor noastre. Primul model SVM, numit **SVM Regression 1**, are o funcție Kernel cubică și un set de Hiperparametri interni (definiți în sistemul MATLAB) deși antrenarea este făcută fără optimizarea hiperparametrilor.

Hyperparameters Model:

```
PolynomialOrder; Preset Quadratic SVM
Kernel function: Cubic
Kernel scale 3.001
Box constraint: Automatic
Epsilon Auto
```

RMSEValid = 34.945

RMSETest = 52.108

Valorile RMSE sunt mai mici decât la modelul **SW linear Regression**, demonstrând că modelul SVM funcționează mai bine. Figurile 5 și 6 ilustrează acest lucru dacă comparăm cu figurile 3 și 4.

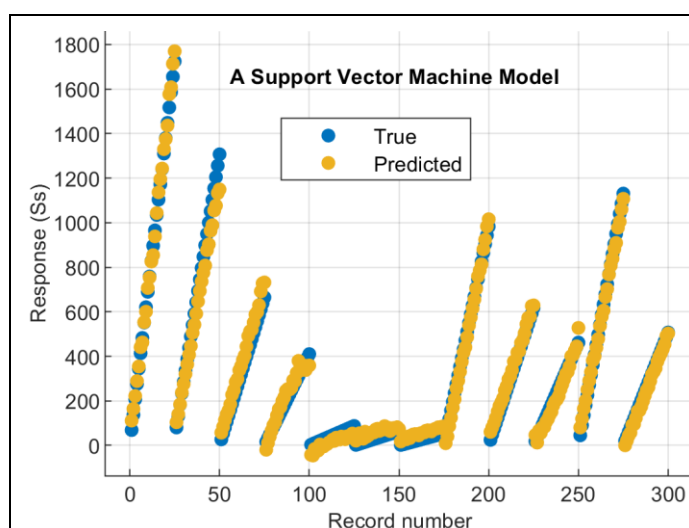


Figure 5 Predicted versus real values for the training data set - SVM Regression 1

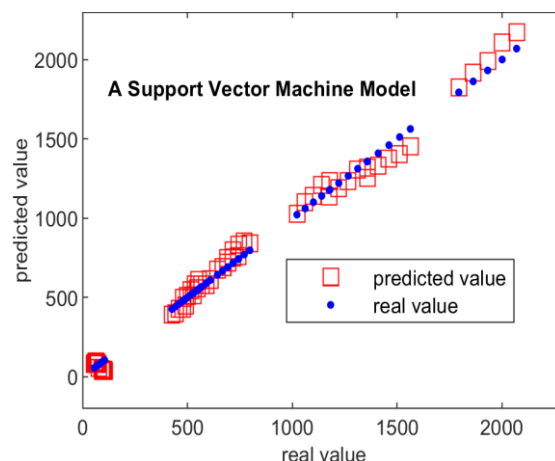


Figure 6. Predicted versus real values for the test data set - SVM Regression 1

Am construit de asemenea un alt model SVM care predictează foarte bine exemplele critice, numit **SVM Regression 2**. Hiperparametrii modelului sunt

Hyperparameters Model:

```
Preset: Optimisable SVM,
Kernel function: Quadratic
Kernel scale: Automatic
Standardisation data: Yes
```

Procesul de antrenare optimizează combinația de hiperparametri printr-o optimizare Bayesiană. Acest model are predicții excelente pentru exemplele (data points) critice, dar statisticile modelului **SVM Regression 2** sunt inferioare modelului **SVM Regression 1**. În concluzie, **SVM Regression 1** este mai bun decât al doilea model, în pofida optimizării hiperparametrilor.

MODELE BAZATE PE REȚELE NEURONALE

Am construit modele de tip Regression Neuronal Network (RNN) pentru predicții în contextul problemei descrise. Mai multe tipuri de RNN au fost considerate pentru a putea extrage modelul RNN ce oferă o acuratețe ridicată și o memorie necesare acceptabilă.

Primul model, RNN 1, este o retea Narrow Neuronal Network cu un singur strat ascuns. Functia de antrenare `fitrnet` este apelata cu urmatoarele optiuni:

```
Preset Narrow NN;
Number of fully connected layers 1
....'LayerSizes', 10,
'Activations', 'relu',
'Lambda', 0,
'IterationLimit', 1000,
'Standardize', true);
```

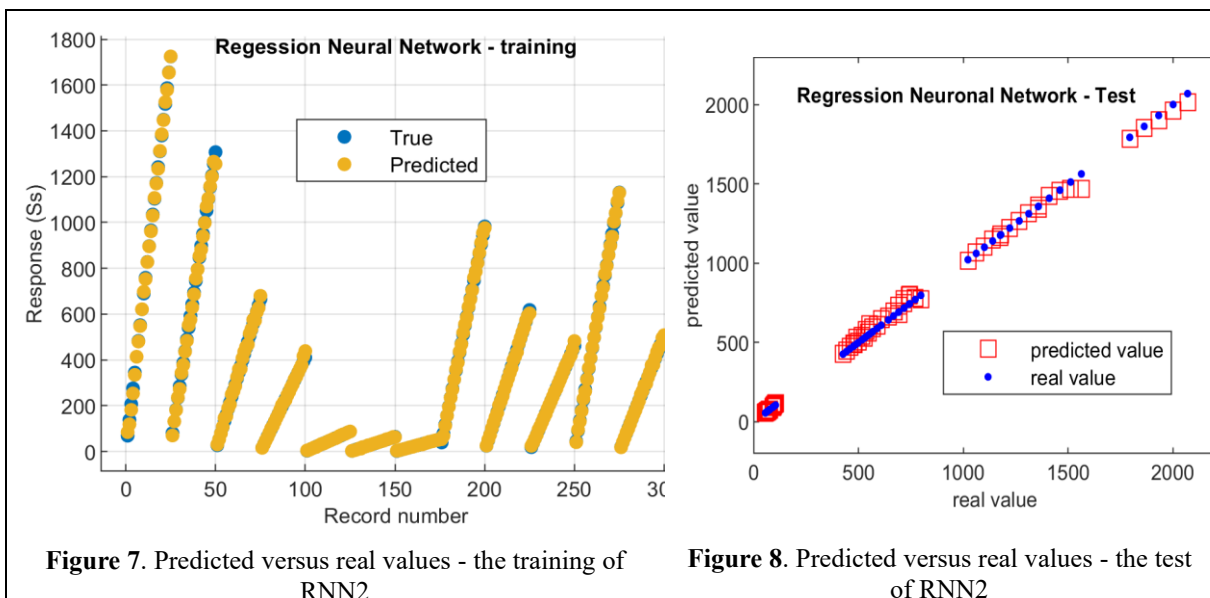
Hiperparametrii sunt optimizati printr-o procedura euristica. Constatam ca valorile RMSE si MAE sunt mai bune decat cele ale modelelor anterioare, aratând o mai buna acuratețe la predicție, desi dimensiunea modelului este de doar 8 kB.

Modelul cu cea mai mare acuratețe în predicție este o alta Regression NN, modelul RNN2. Este vorba de un model regresiv RNN cu 3 straturi, ai carui hiperparametri sunt gasiti utilizand optimizare Bayesiană.

```
Preset Optimizable NN
Iteration limit: 1000
Optimiser: Bayesian optimisation

RNN2 = fitrnet(...
    predictors, ...
    response, ...
    'LayerSizes', [166 280 298], ...
    'Activations', 'relu', ...
    'Lambda', 3.6315e-08, ...
    'IterationLimit', 1000, ...
    'Standardise', true);
```

Pretul care trebuie platit pentru aceasta acuratețe este dimensiunea modelului, 1MB, care este cea mai mare. Figurile 8 și 9 atestă foarte buna acuratețe a acestui model RNN2



➤ *Analiza predicțiilor obținute cu diverse modele*

O sinteză clară a performanțelor modelelor construite și reținute spre a fi folosite este dată în tabelul 1.

	Statistics	SW Linear Regression	SVM Regression 1	SVM Regression 2	RNN1	RNN2
Training results	RMSE	52.045	34.93	46.903	41.135	6.375
	R-Squared	0.98	0.99	0.98	0.99	1.
	MAE	37.42	28.324	31.44	19.132	3.9465
Test results	RMSE	91.091	52.108	86.383	99.206	34.385
	R-Squared	0.97	0.99	0.98	0.97	1.
	MAE	66.667	43.38	66.255	67.875	19.829
Model size		22 kB	16 kB	40 kB	8 kB	1 MB

Tabelul 1. Statistici ale proceselor de antrenare și testare și dimensiunea modelului pentru diferitele modele reținute

- *Generarea unor date noi de test pentru predicție, inexistente în datele inițiale și analiza rezultatelor.*

Au fost considerate specimene cu orientări generate aleator, care, altfel spus, nu au contribuit la data setul inițial utilizat în construirea Modelului ML. Apoi am comparat predicțiile pentru aceste specimene cu rezultatele simulatorului DIGIMAT (care pot fi considerate ca fiind cele rezultate din testele fizice de tracțiune).

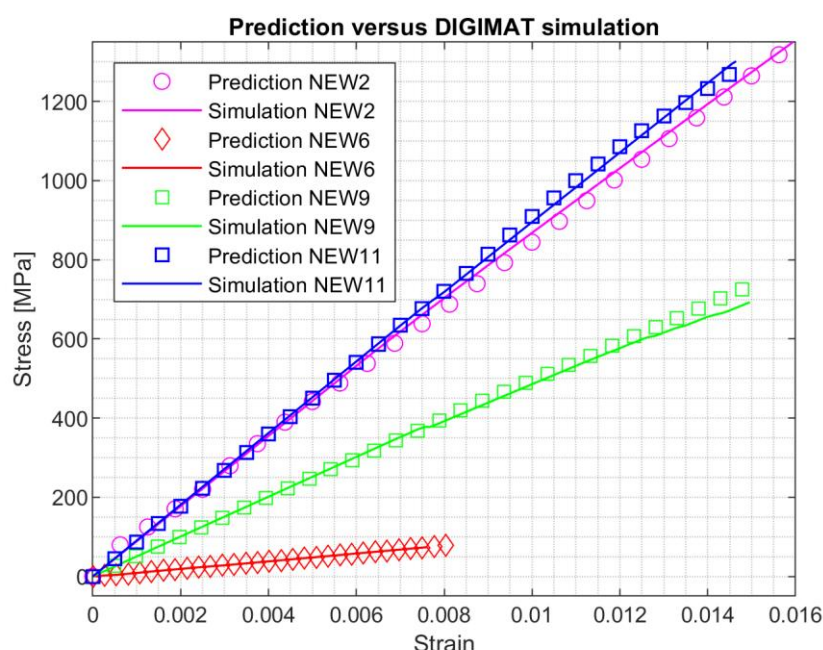


Figura 9. Comparatie între valorile reale și cele predictate pentru cele 4 specimene generate aleator

Acuratețea este remarcabilă. În plus, RNN2 dă dovadă de o putere de generalizare importantă. De fapt, domeniul de reprezentare al acestui model va fi garanția utilizării sale, ulterior, și în structura de optimizare OFW.

OBIECTIVUL 2

Analiza echivalenței unui algoritm de tip machine learning cu un algoritm metaeuristic de optimizare.

Pînă la sincronizarea activităților cu partenerii, întrucît proiectul a fost demarat cu cateva luni mai târziu, UGAL a continuat unele cercetari anterioare ale membrilor echipei în domeniul utilizării unor metaeuristici, cum ar fi Particle Swarm Optimization, în conjuncție cu Machine Learning și a obținut rezultate utile în faza a doua a proiectului D3T4H2S.

Multe probleme de decizie optimală necesită utilizarea unor algoritmi metaeuristici (AM) specifici Inteligenței Artificiale (AI) care caută soluția optimală, în special cînd funcția cost are caracteristici matematice dificile (lipsa derivabilității, neliniarități, parametri distribuiți, etc). Acesta este un subiect vast, tratat în literatura de decenii, care face din AM (algoritmi genetici, algoritmi evolutivi, optimizare cu roiuri de particule - Particle Swarm Optimisation-PSO, etc.) instrumente realiste și eficiente pentru modulele de optimizare din diferite aplicații implicînd optimalitate.

Aceste instrumente sunt robuste și flexibile, dar uneori pot genera un efort computațional foarte mare, ceea ce constituie o piedică în utilizarea lor. Există o abordare interesantă și eficientă a membrilor echipei UGAL care permite înlocuirea unui AM cu un algoritm de Machine Learning (ML) echivalent, numai în faza de execuție, pentru a reduce drastic efortul computațional. Membri ai echipei UGAL au propus anterior acestui proiect analiza unei posibile "echivalențe" între unii AM (algoritmi evolutivi și genetici) și algoritmi de ML. În această etapă, membrii echipei UGAL au arătat ca un AM ce utilizează PSO poate fi "învățat automat" de către algoritmi de ML, pentru a fi reproduși în structuri optimale.

În Figura 10, procesul luării unei decizii optimale este prezentat ca o evoluție în bucla închisă pe spațiul stărilor X din proces.

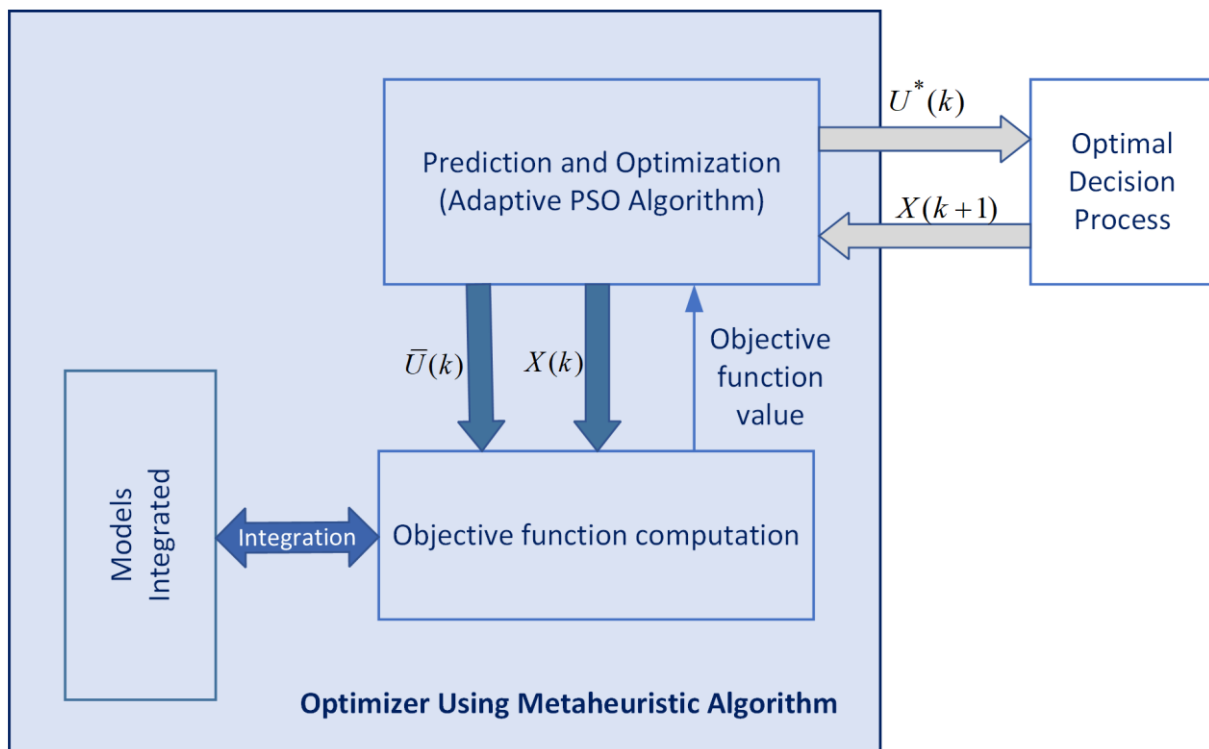


Figura 10. Algoritm Metaeuristic bazat pe PSO adaptiv pentru decizii optimale

Modulul optimizer este bazat pe algoritmul PSO (o versiune adaptivă). O altă posibilitate investigată anterior este cea a Algoritmilor Genetici (specializare a Algoritmilor Evolutivi). În

general, putem utiliza un AM potrivit pentru problema de decizie optimala tratată. În mare, modulul optimizator pe care dorim să-l implementăm răspunde la următoarea problemă:

"Când procesul este caracterizat de setul de variabile X , care sunt valorile variabilelor de decizie U care optimizează funcția obiectiv?" Soluție: Optimizatorul găsește soluția U^* utilizând AM ales.

Principiu general:

Dacă un optimizator este construit utilizând un AM, putem realiza un algoritm de ML care să "capteze" optimalitatea modului cu AM și să reacționeze optimal la starea curentă X .

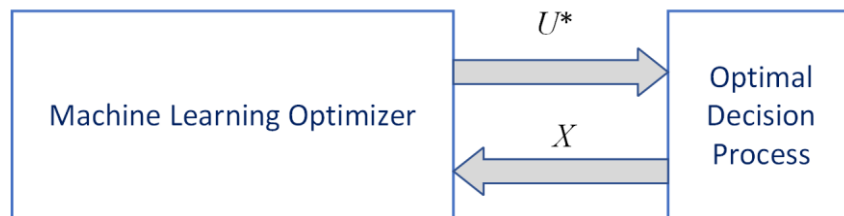


Figura 11. Optimizator ML "echivalent" cu un optimizator realizat cu un AM

Studiul este prezentat în lucrarea

Mînz, V.; Arama, I.; Rusu, E.

Machine Learning Algorithms That Emulate Controllers Based on Particle Swarm Optimization - An Application to a Photobioreactor for Algal Growth. *Processes* 2024, 12, 991, <https://doi.org/10.3390/pr12050991>.

În această lucrare, este luat ca exemplu particular de decizie optimă, comanda optimă a unui proces dinamic (un fotobioreactor). Această opțiune nu a afectat generalitatea prezentării. Cu acest prilej, a fost implementat algoritmul "Hybrid Topology Particle Swarm Optimization" adaptiv folosit în etapa a doua a proiectului D3T4H2S.

OBIECTIVUL 3

Modele de tip ML ce caracterizează comportamentul la tracțiune și termo-mecanic al materialelor compozite, extinse și în zona plastică și de rupătură.

Obiectivul vizează construcția de modele extinse de tip ML ce caracterizează comportamentul la tracțiune al materialelor compozite, atât în zona elastică cât și plastică. Datele primite nu au caracterizat și zona de rupătură, pentru că nu poate fi abordată similar.

Pentru a obține modelele regresive de ML care acoperă zona liniară (elastică) și zona neliniară (plastică) au fost parcurse câteva etape:

- *Definirea la nivel tehnologic a problemei de modelare cu modele de ML a materialelor compozite, în zona elastică și plastică.*

Partenerii S VERTICAL și ENSTA Bretagne au furnizat date referitoare la specimene de materiale compozite (MC), dar mai complete față de etapa 1. Specimenele de MC sunt fabricate din fibra de carbon AS4, iar matricea din rasina epoxidica 8552. Matricea este dublu ranforsată cu poliamide (PA6, PA12, PA11) și dopată cu nanotuburi de carbon. Cunoșcându-se parametrii de material și raportul volumic dintre fibra și matrice, testul de tracțiune a fost înlocuit cu simulări de mare precizie bazată pe integrarea cu element finit, folosind simulatorul DIGIMAT-VA. Aceste simulări au furnizat date tabelare despre dependența stress-strain, ca și când au fost furnizate de teste de tracțiune.

Cele trei MC sunt notate în continuare CF/6, CF/12, and CF/11, în funcție de poliamida folosită. Modelele obținute prin algoritmi de ML vor fi notate ML/6, ML/12, and ML/11 respectiv.

Parametri de material:

Density (tonne/mm ³) [20-25°C],	Hardening modulus (MPa),
Matrix Young Modulus E_m (MPa),	Hardening exponent,
Poisson ratio, Yield stress (MPa),	Linear hardening modulus (MPa),
Yield stress (MPa),	Volume fraction V_f .

➤ *Prelucrarea datelor primite și definirea setului de date (data set) pentru problema de ML.*

În plus de direcția de încărcare codificată printr-o eticheta, se aduga la **Strain** și **Stress** și cei 8 parametri de material. Se obține astfel Table 2 cu primele 5 linii din datele primite pentru CF/6.

Table 2. The first five lines of the dataset for CF/6, which consists of 203 data points.

LoadD	Density	Em	Poisson	YieldS	Hm	He	Lhm	Vf	Strain11	Stress11
LD11	1.14e-09	3000	0.37	25	3000	0.17	1000	0.6	5e-14	6.0014e-09
LD11	1.14e-09	3000	0.37	25	3000	0.17	1000	0.6	0.0005	60.014
LD11	1.14e-09	3000	0.37	25	3000	0.17	1000	0.6	0.000853	102.38
LD11	1.14e-09	3000	0.37	25	3000	0.17	1000	0.6	0.001353	129.17
LD11	1.14e-09	3000	0.37	25	3000	0.17	1000	0.6	0.001853	153.49

➤ *Definirea datelor de antrenare (training) și testare (testing) pentru diversele tipuri de modele ML.*

Ca și în cazul activităților din etapa 1, pentru generarea algoritmilor de predicție inclusiv zona plastică, următoarele etape au fost parcurse:

1. Generarea unui "dataset" suficient de mare pentru a construi modele de ML care pot generaliza răspunsul pentru orice pattern și valoare Strain.
2. Stabilirea datelor de antrenare, validare și testare pentru fiecare MC.

➤ *Dezvoltarea de algoritmi de predicție utilizând diferite modele de ML pentru un singur material compozit.*

Au fost considerate 5 modele de regresie ML. Pe lângă un model de regresie parametric (e.g. regresie liniară multiplă step-wise), încă 4 modele parametrice: decision trees, Support Vector Machines, Gaussian Process Regression, Regression Neural Networks, adecvate obiectivului nostru.

Pentru fiecare algoritm regresiv de ML (Prediction Algorithm - PA) dezvoltat în această etapă, s-a parcurs o întreaga **Sesiune de Proiectare** care se poate caracteriza prin:

- A fost folosită Regression Learner Application (RLA) din mediul MATLAB pentru a analiza PA generați de diferite modele de ML, pe datele de antrenare și testare stabilite.
- Au fost utilizate în cadrul RLA, pentru instruire cele 5 modele regresive de ML enumerate anterior.
- Procedura a permis o comparație a parametrilor statistici ce caracterizează fiecare PA generat.
- Selecția celui "mai bun" PA s-a făcut pe baza acurateții de predicție exprimată, în principal, prin valoarea RMSE (root mean square error) între valoarea reală și cea predictată.

Pentru a exemplifica (tot pentru CF/6), menționăm că am parcurs o Sesiune de Proiectare utilizând RLA din mediul MATLAB. Dintre toate modelele, cel mai acurat este o RNN. Scriptul PA6DamageRNN4 generează și utilizează acest model regresiv.

Mai întâi, funcția `trainRegNN4` generează un algoritm ML antrenat. Funcția `fitrnet` este apelată cu următorii parametri pentru a genera o RNN care constituie algoritmul de predicție construit. El este numit în proiect `mdlNN4`.

```
regressionNeuralNetwork =
fitrnet(...
    predictors, ...
    response, ...
    'LayerSizes', 226, ...
    'Activations', 'relu', ...
    'Lambda', 6.366e-08, ...
    'IterationLimit', 1000, ...
    'Standardize', true);
```

Apoi se apelează funcția de predicție a obiectului `mdlNN4`. Apelând `mdlNN4.predictFcn`, se calculează 40 de predicții pentru setul `D6Test`. Rezultatul este arătat în Figura 12. Predicțiile sunt de o acuratețe remarcabilă.

Toti pașii parcurși în subactivitățile A3 și A4 au fost repetați și pentru celelalte materiale, CF/12 și CF/11, cu tot ceea ce implică: sesiuni de proiectare, scrieri de programe și teste.

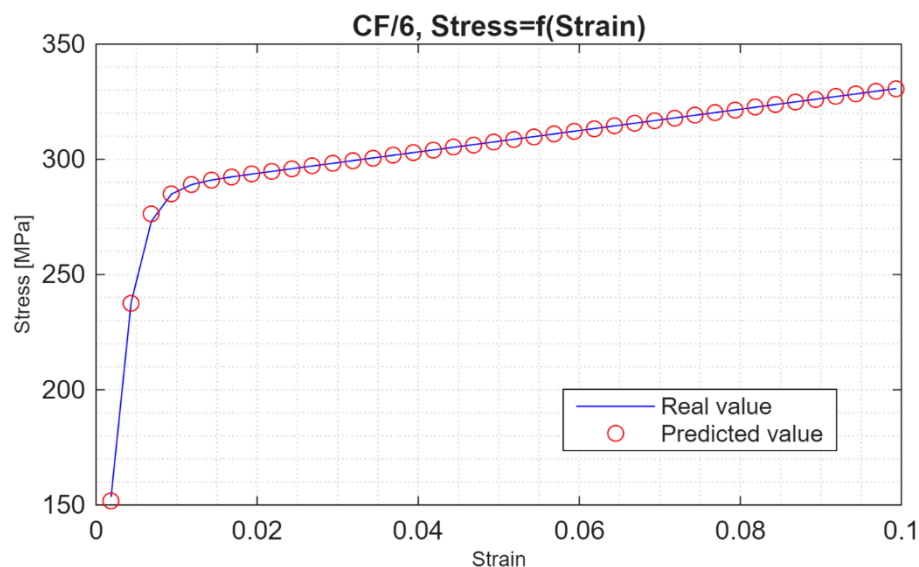


Figure 12. Stress versus strain functions: real and predicted values (with `mdlNN4`).

- *O metoda de reprezentare a dependenței stress-strain ca o funcție, folosind predictorul furnizat de ML.*
- *Posibilitatea reprezentării familiei de MC (CF/6, CF/12, CF/11) mai eficient la nivelul dimensiunii datelor de antrenare.*

Se poate pune întrebarea: *Putem construi un model comun familiei de MC care să necesite o dimensiune mai mică a setului de date pentru antrenare, datorită caracteristicii comune, aceeași CF?*

În dezvoltarea până la implementare a acestor idei au fost parcurse câteva etape pe care le sintetizăm mai jos.

- 1) Am construit un model comun de predicție pentru CF/6 și CF/12, numit ML/6-12 prin unirea seturilor de date de antrenare corespunzătoare celor două modele ML/6 și ML/12.

2) Am construit un model comun *exploratoriu* de predicție pentru CF/6, CF/12 și CF/11, numit ML/6-12-11 pentru care la dataset-ul modelului ML/6-12 am adăugat un număr mic, $n_{11}=12$, de data points caracterizând ML/11. Predicția pentru CF/11 nu a funcționat cu acuratețe.

3) Printr-o procedură iterativă, sub controlul dezvoltatorului de model, a fost mărit succesiv numărul n_{11} de data points, până când s-a atins acuratețea dorită.

Figura 13 prezintă grafic această dezvoltare de modele de predicție (TD6, TD12 și TD11 sunt datele de antrenare corespunzătoare).

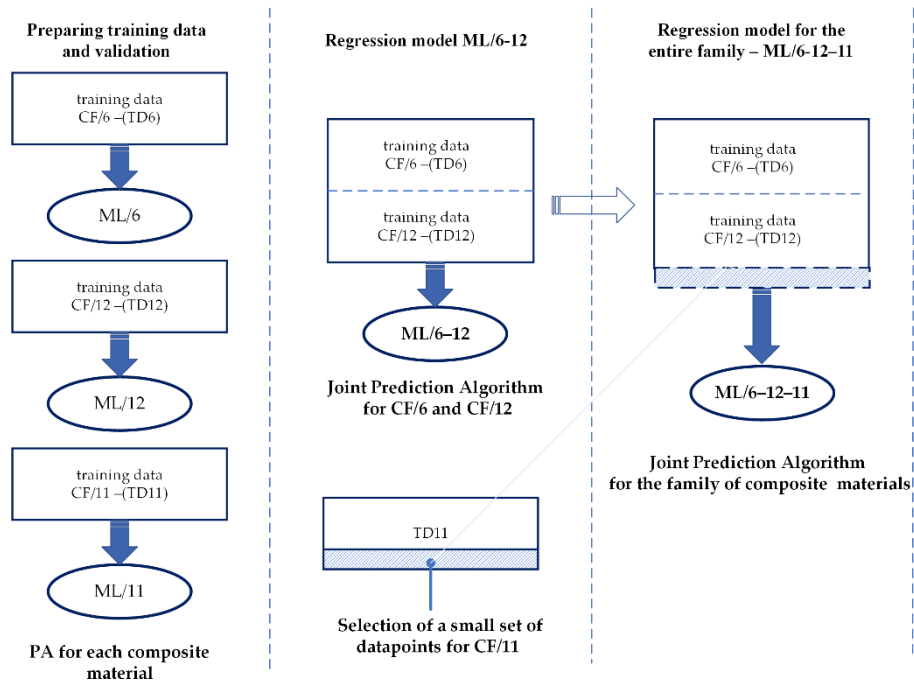


Figure 13. Construction phases of the common model for the entire family of composite materials

În fiecare etapă au fost lansate Sesiuni de Proiectare utilizând cele 5 modele de ML.

➤ *Implementarea procedurii de determinare a unui model de ML comun pentru întreaga familie de MC.*

Procedura iterativă de la punctul 3) de mai sus trebuie implementată sub controlul dezvoltatorului de model comun pentru familia de MC, din doua motive:

- Există mai multe soluții și implementatorul trebuie să aleagă în funcție de acuratețea dorită a PA;
- Implementatorul trebuie să execute niște sesiuni de proiectare de modele ML utilizand RLA.

În raportul de cercetare 2 și în articolul aferent 6 este prezentat algoritmul "**GenerateCommonPA**" care implementează procedura iterativă.

➤ *Caracterizarea celui mai bun model de regresie ML construit pentru familia de MC.*

Pe datele noastre, sesiunile de proiectare arată ca PA sunt fie RNN, fie GPR (Gaussian Process Regression). De data aceasta, soluția care a avut acuratețea necesară a fost generat de un model GPR. Figura 14 face comparația dintre valorile reale și cele predictate de modelul de regresie comun al familiei (GPR).

Putem adăuga următoarele detalii:

- Gaussian Process Regression, Bayesian optimization,

- Size of training data: 470 observations; validation: 5-fold cross-validation.
- $\text{vrms} = 0.91445$ (the RMSE using the test data set during the training procedure),
- $R^2 = 1$; $\text{MAE} = 0.59945$ (the Mean Absolute Error in test during the training procedure;
- $\text{RMSE}_{\text{Valid}} = 1.970$ (the RMSE after training using a test dataset composed of unseen data points).

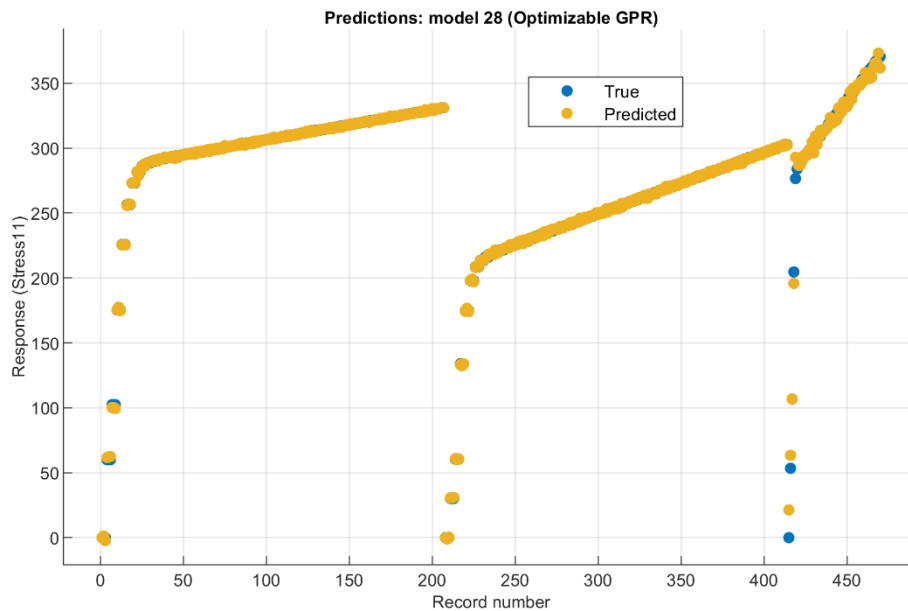


Figure 14. ML/6–12–11 prediction algorithm: predicted and real values for all the records.

OBIECTIVUL 4

Algoritmi bazați pe AI pentru proiectarea optimă a recipientelor de stocare a hidrogenului din material compozit.

Proiectarea optimă a recipientelor de stocare a hidrogenului presupune, în primul rând, proiectarea optimă a materialului compozit, în cazul nostru un laminat compozit cu 16 straturi cu orientări diferite. Celelalte aspecte ale proiectării recipientului nu au intrat în zona de competență a UGAL, dar pot genera probleme de alegere optimă ce pot fi rezolvate cu structura de optimizare propusă de UGAL (OFW).

Pentru a dezvolta o metodă și un instrument de optimizare a structurii unui laminat compozit au fost parcurse mai multe etape prezentate Raport de cercetare 3 intitulat:

Contributions to the Optimization of Multilayer Composite Laminated Structures Using Particle Swarm Optimization and Machine Learning

➤ *Selectarea unui model regresiv de ML pentru laminate compozite cu putere mare de generalizare.*

În Etapa I, am văzut că, pentru zona elastică a laminatelor compozite, modelul cu cea mai mare acuratețe în predicție este modelul RNN2. Ceea ce caracterizează RNN2 nu este doar acuratețea predicțiilor pe datele de test, ci mai ales proprietatea de *generalizare* pe combinații noi de unghiuri care nu au făcut parte din datele de antrenare și test (nevazute). Aceasta proprietate este, în general, dificil de apreciat. Generalizarea este posibilă în așa-zisul *domeniu de reprezentare al modelului*.

Existența unui astfel de PA (prediction algorithm) permite aflarea răspunsului oricărei combinații din domeniul de reprezentare al modelului. Optimizarea structurii LC înseamnă stabilirea unghiurilor $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{16}$ a.î. să se maximizeze sau minimizeze un indice de performanță.

➤ *Colaborarea unui algoritm de optimizare metaeuristic cu un model regresiv de ML pentru laminate compozite*

Soluția care a fost propusă este adoptarea unui cadru sistematic de optimizare (Optimization Framework – OFW). Figura 15 prezintă structura dezvoltată în proiect.

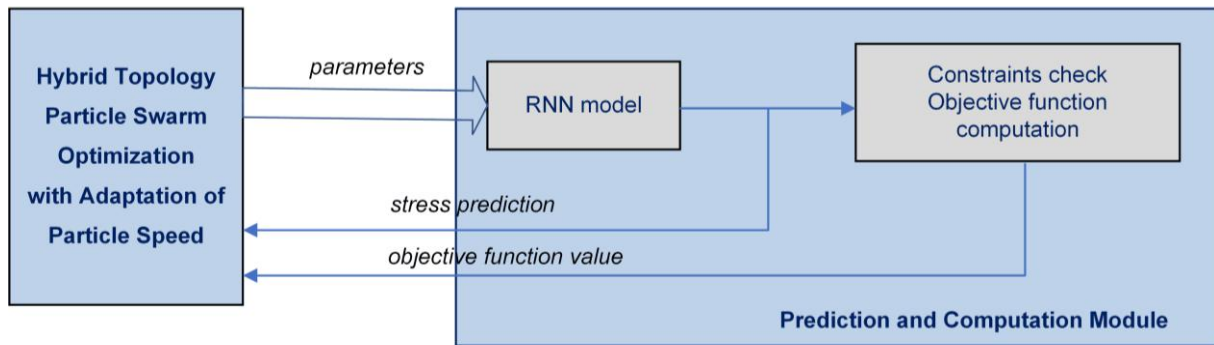


Figure 15: Structure of the Optimization Framework

Caracterul de *sistematic* ține de faptul că toate elementele ce caracterizează problema de optimizare, adică modelul obiectului sau sistemului, restricțiile și funcția obiectiv, sunt tratate de un singur modul, "Prediction and Computation Module". În figura 15 se considera că mecanismul de căutare a soluției optime este asigurat de o variantă a algoritmului PSO (Particle Swarm Optimization). Acesta poate fi înlocuit, în funcție de problemă, cu un alt algoritm metaeuristic pe care computational intelligence îl oferă. De exemplu, Evolutionary Algorithms, GA, etc.

Remarcă: Deși PSO este o metaeuristică cunoscută, în proiect a fost furnizată varianta actualizată pentru structura OFW și laminate compozite. De aceea am reamintit cele două îmbunătățiri care o fac mai performantă, obținând algoritmul HTPSO adaptiv.

Topologia hibridă

Utilizând notațiile consacrate descrierii PSO, dăm mai jos, elementele suplimentare ale acestei duble topologii. Forma standard de comunicare a PSO – care definește și prima topologie – este cea care utilizează rețeaua formată din toate particulele din roi –care se deplasează– și cea mai bună soluție găsită la un moment dat, P_{gbest} . A doua topologie este dată de "vecinatatea socială". Particula $\#i$ va determina cea mai bună experiență locală, $P_{lbest}(i)$, ca fiind cea mai bună experiență din "vecinatatea socială", adică 3 particule cu care comunică, desemnate aleatoriu la fiecare iterație a algoritmului, plus ea însăși. În general, avem:

$$P_{lbest}(i) = \left(P_{lbest}(i)^1, K, P_{lbest}(i)^d, K, P_{lbest}(i)^n \right); \quad d = 1, L, n;$$

Ca urmare, un nou termen apare în ecuația vitezei conținând

Adaptarea vitezei particulelor

Această tehnică modifică coeficienții C_1 , C_2 , C_3 , și w în timpul procesului de căutare. Obiectivul este să fie adaptați la faza procesului de căutare și să îmbunătățească convergența. Adaptarea este realizată prin creșterea liniară a coeficienților C_1 , C_2 , and C_3 între valorile lor minimă și maximă. Simultan, parametrul w scade liniar

Rezultatele comunicate în lucrarea

Mînz, V.; Arama, I.; Rusu, E;

arată, printre altele, și foarte buna comportare a versiunii "adaptive cu topologie hibridă" a algoritmului PSO în asigurarea mecanismului de cautare a soluției quasi-optime.

➤ *Studiu de caz 1– Compromis între rigiditate si rezistența la forfecare pentru un LC.*

Contextul de optimizare se refera la "off-axis oriented specimens", adică la LC avand paternurile de forma $[a1/-a1/a2/-a2/..., a8/-a8]$. Aplicând predicția cu RNN2 (modelul cu putere mare de generalizare) se obțin raspunsurile pentru 3 specime (S2 ($[\pm 20]_s$), S3 ($[\pm 30]_s$), S4 ($[\pm 45]_s$)), în figura 16. *Strain0* este valoarea maxima a elongatiei pentru intervalul de referință $[0, \text{Strain0}]$.

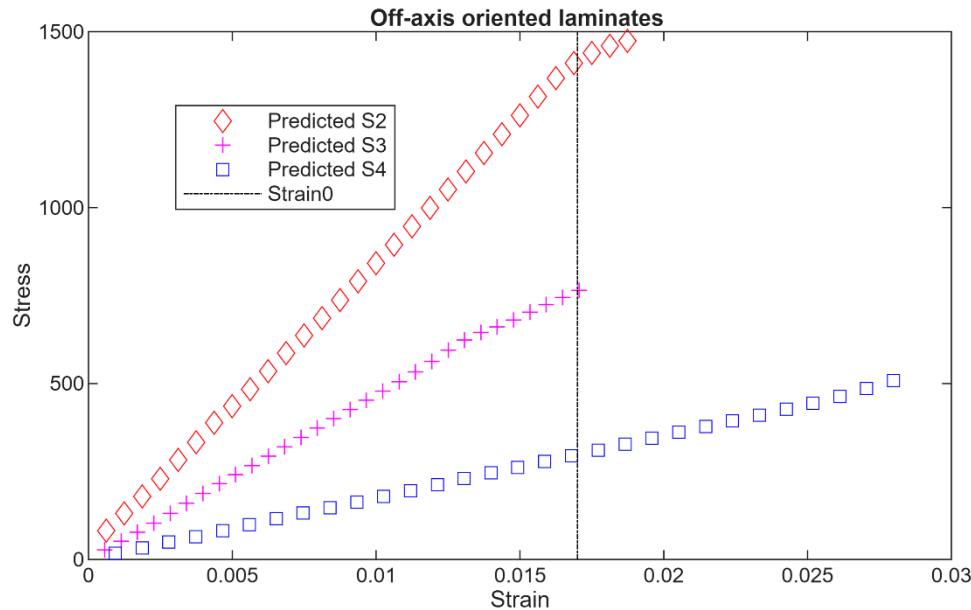


Figure 16: Stress-strain curves for three off-axis oriented laminates

Studiul de caz 1. Se caută o structura de LC din familia "off-axis oriented specimens", Soluția optimală trebuie să îndeplinească două condiții:

1. Valoarea *Stress* pentru *Strain0* trebuie să fie de minimum 1000 MPa.
2. Curba stress–strain trebuie să fie cat mai apropiată de curba pentru S3.

Semnificația este următoarea: Prima condiție setează un minim de rigiditate (stiffness) a.î. curba pentru optim va sta cat mai aproape de S2, care are o valoare maximă de 1500 MPa. A doua restricție reflectă necesitatea de a avea o buna rezistență la forfecare (shear), ceea ce înseamnă ca soluția trebuie să fie cat mai apropiată de curba S3.

Această problema de optimizare (OP1) poate fi formulată astfel:

I. Modelul obiectului sau sistemului ce face obiectul optimizării

Obiectul este definit prin toate speciamele pentru care avem:

$$X = [x_1, x_2, \dots, x_8] \subset \Omega = [0, 30]^8 \quad (x_i \in R, i=1, \dots, 8).$$

RNN2 este modelul regresiv pentru curba stress-strain.

II. Restricții

$$\text{Stress0} \geq 1000, \text{ cu } \text{Stress0} = \text{stress}(\text{Strain0}).$$

III. Funcția obiectiv

$$J(X) = \sum_{i=1}^8 (x_i - 30)^2; \text{ Criteriul de optim: } J_0 = \min_{X \in \Omega} J(X).$$

Pentru a folosi platforma OFW propusă mai sus, trebuie sa proiectăm doar Prediction and Computation Module (PCM) care va reuni toate specificitățile problemei OP1. Rezultatul este o funcție MATLAB `JXRefCurve` care se apelează după șablonul:

```
/* Function call: [ssp0, J] ← JXRefCurve (x, xRef, MLmodel, Strain0, Stress0) */
```

Input: x , the vector with the positive angles of the balanced specimen, $xRef$, the reference stress-strain curve, $MLmodel$, the ML regression model, $Strain0$, the upper limit of the strain interval, $Stress0$, the minimum admissible stress value

Output: J , the value of the objective function, and $ssp0$, the predicted stress value for $Strain0$.

Argumentul x este soluția candidat – analizată de HTPSO – pentru care se calculează J , valoarea funcției obiectiv. Dacă restricțiile nu sunt verificate, J ia valoarea infinit. In cazul nostru $xRef$ corespunde curbei S3 ($[\pm 30]_8$). Implementarea PCM, adică funcția `JXRefCurve`, este detaliată in raportul 3 și articolul din lista de livrabile.

In general, funcția obiectiv este de forma unde $xRef$ este vectorul cu unghiurile pozitive din pattern:

$$J(x) = \sum_{i=1}^8 (x_i - xRef_i)^2$$

Soluția optimă este dată mai jos:

Unghiuri: 25.22/ -25.22/ 27.53/ -27.53/ 26.13/ -26.13/ 26.94/ -26.94/
 26.99/ -26.99/ 26.86/ -26.86/ 25.63/ -25.63/ 28.08/ -28.08/
 Stress maxim=Stress(Strain0)= 1000.0 MPa

Răspunsul acestui specimen este dat de Figura 17 și corespunde curbei colorată în verde.

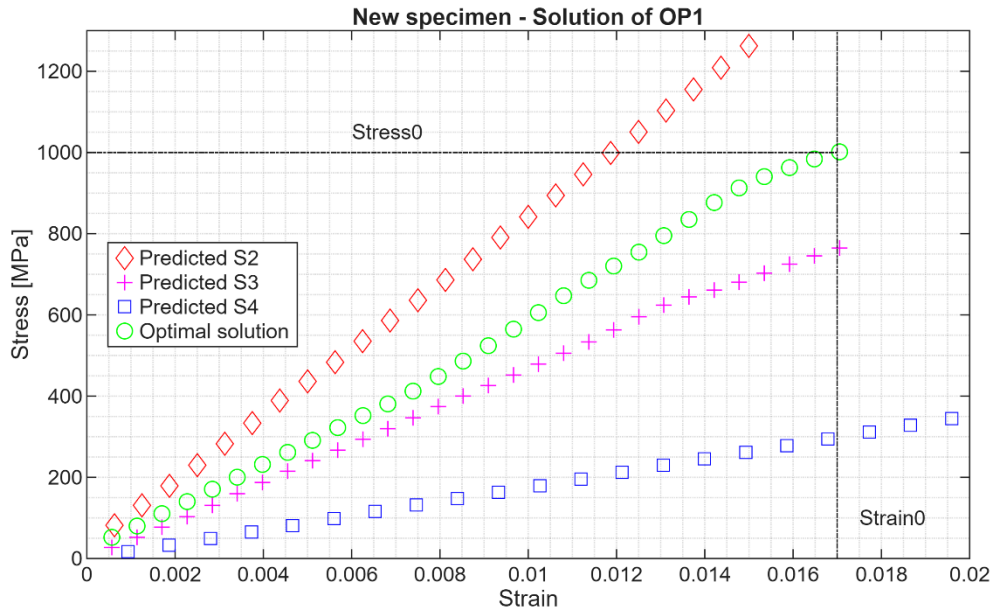


Figure 17: The optimal solution curve for OP1 compared to other oriented laminates.

Rezultatul are o explicație logică. Pentru a avea o rigiditate cât mai bună, curba optimă trebuie să fie mai apropiată de S2, dar pentru o rezistență la forfecare cât mai bună trebuie să fie cât mai apropiată de referința S3. Soluția optimă stabilește un echilibru între cele două tendințe.

➤ *Studiul eficacității structurii "Optimization Framework" – Studiu de caz 2.*

Studiul de caz 2. Se caută o structura de LC din familia "off-axis oriented specimens", Soluția optimă trebuie să aibă structura $[a/-a/ a/-a/... a/-a]$ și să asigure un răspuns de exact $Stress0 = 1000$ MPa pentru $Strain0 = 0.017$.

Pentru un specimen caracterizat de unghiul a , valoare maximă $Stress0$ pentru $Strain0$ poate fi privită ca o funcție $S(a) = stress(a, Strain0)$.

Această problema de optimizare (OP2) poate fi formulată astfel:

I. Modelul obiectului sau sistemului ce face obiectul optimizării

Obiectul este definit prin toate speciamele pentru care avem:

- $a \in \Omega = [20, 30]$
- RNN2 este modelul regresiv pentru curba stress-strain.

II. Restricții

Nu există în afară de $a \in \Omega$.

III. Funcția obiectiv

$J(a) = |S(a) - S_0|$; unde $S_0 = 1000$ MPa; Performance index: $J_0 = \min_{a \in \Omega} J(a)$.

Trebuie să proiectăm doar "Prediction and Computation Module" (PCM) care va reuni toate specificitățile problemei OP2. Rezultatul este o funcție MATLAB `JFixPoint` care se apelează după șablonul:

```
/* Function call: J ← JFixPoint (x, MLmodel, Strain0, Stress0) */
/* Calculate the cost function for a specimen with the pattern [x. -x, x, -x, ..., x, -x] */
```

Input: x , the positive angle of the balanced specimen, $MLmodel$, the ML regression model, $Strain0$, the given limit of the strain interval, $Stress0$, the imposed stress value for the $Strain0$.

Output: J , the value of the cost function for the given arguments.

O execuție tipică a OFW, care apelează în mod repetat funcția `JFixPoint` până la convergență, produce următoarele rezultate:

Optimal $a = 26.43$; $J_0 = 1.136868e-13$; $S_0 = 1000.00$ MPa.
Orientările optime ale straturilor: 26.43/-26.43/...../26.43/-26.43/

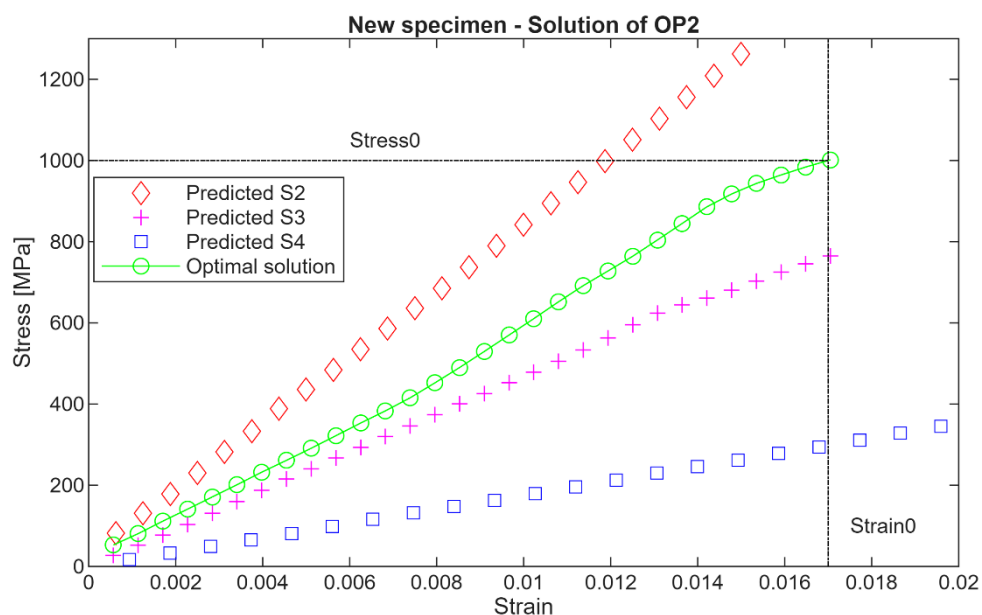


Figura 18. Curba stress-strain pentru soluția optimă a OP2 ($a = 26.43$) și pentru celelalte trei laminate compozite

Curba asociată soluției optime este prezentată în figura 18. Funcția `JFixPoint` a fost apelată de 4260 de ori, ceea ce ne dă o imagine a complexității computaționale pentru rezolvarea OP2 prin metoda propusă. Putem alege și o altă valoare pentru $S_0 = 900.00$ MPa. În acest caz, OFW furnizează o altă soluție tipică:

Optimal $\alpha = 27.87^\circ$; $J_0 = 1.136868e-13$; $S_0 = 900.00$ MPa.

Orientările optime ale straturilor: 27.87/-27.87/...../27.87/-27.87/

De data aceasta, numărul de apeluri ale funcției `JFixPoint` este 4320. Acest comportament variabil este, desigur, datorat faptului că HTPSO este un algoritm stochastic, cu soluții aproximative, dar precise la convergență.

Valorile minimă, medie, maximă și tipică, precum și deviația standard a indecelui de performanță J_0 sunt furnizate de Table 3. Un alt fapt ce ilustrează natura stochastică a OFW este numărul de apelări, `Ncalls`, ale funcției ce implementează PCM. Ultimul integrează și calculul criteriului de optim. O statistică pentru `Ncalls` este prezentată în linia a doua a acestui tabel, pentru aceleași 30 de execuții ale OFW.

Table 3. OP1–Statistics on the performance index and call count for the PCM function.

	min	avg	max	typical	Sdev
J_0	94.522	94.738	95.653	94.74	0.274
Ncalls	3300	5987	8760	5940	1445

Valoarea tipică pentru un lot de 30 execuții succesive este cea mai apropiată valoare a unei execuții de valoarea medie. Deviația standard a valorii `Ncalls` este destul de mare pentru ca inițializarea roiului de particule s-a făcut într-o manieră simplă: 30 de particule – vectori cu 8 elemente pozitive – au fost distribuiți uniform în domeniul de căutare $[20, 30]^8$. Aici este loc de ameliorare a procedurii de inițializare pentru o mai bună acoperire a domeniului.

Tabelul 4 prezintă statistici similare pentru soluția optimă a OP2.

Table 4. OP2–Statistics on the angle α , performance index, and call count for the PCM function.

	min	avg	max	typical	Sdev
α	26.4301	26.4304	26.4312	26.4304	0.0002
J_0	274074e-07	1.600905e-03	5.651415e-02	3.737492e-03	174176e-02
Ncalls	140	254.8	413	252	67.2

OP2 a fost rezolvată pentru diferite valori ale lui S_0 (la elongația considerată *Strain0*) utilizând același LC modelat de RNN2. Valorile lui S_0 au fost alese să acopere domeniul dintre S2 și S3, adică 900, 1000, 1100, 1200, și 1300 MPa. Soluțiile sunt date în Table 5, indicând unghiul α pentru fiecare S_0 .

Table 5. OP2–The solution α , and the performance index for the five runs

S_0 [MPa]	900	1000	1100	1200	1300
α	27.87°	26.43°	24.98°	23.52°	22.04°

Rezultatele obținute prin simulări MATLAB au dovedit că ambele studii de caz sunt rezolvate eficient.

Limitări în utilizarea platformei și programului OFW.

Structura și programul OFW nu asigură rezolvarea unei OP referitoare la LC decât dacă modelul de regresie ML are într-adevăr o bună putere de generalizare și o utilizăm corect, adică în interiorul

domeniului de reprezentare al modelului de ML. Acesta este mai greu de stabilit a priori. El nu este atât de mare pe cât ne dorim să fie, a.î să nu abordăm problema cu precauție. Dezvoltatorul trebuie să stabilească a priori prin analiză limitele "geometrice" între care curbele asociate soluțiilor candidat se pot situa. Depinzând de dataset și de aplicația practică, utilizatorul poate presupune din start domeniul de reprezentare al modelului regresiv ML și să verifice prin teste și simulări dacă ipoteza este corectă.

3. Indicatori de rezultat și eventuale nerealizări față de rezultatele estimate

În planul de realizare al proiectului am definit 4 obiective majore. Realizarea fiecărui obiectiv a fost marcată, pe lângă acumularea de cunoaștere pe fondul problemei și scrierea și testarea de programe de validare a progresului, de elaborarea unor materiale care pot dovedi atingerea obiectivului și care se constituie în livrabile ale proiectului. Se întâmplă ca fiecare obiectiv din cele patru să fi generat 3 livrabile de tipuri diferite:

- un raport care să descrie desfășurarea activităților care au dus la atingerea obiectivului;
- un produs informatic: arhiva programelor scrise și testate pentru a da suport activităților asociate obiectivului;
- un studiu publicat (articol de cercetare) într-o revistă ISI de foarte bună vizibilitate (într-un singur caz, revista este indexată în baze de date consacrate).

Doar OBIECTIVUL 3 furnizează două astfel de grupări pentru că de fapt el este constituit din două sub-obiective. Unul este neprevăzut inițial, cel referitor la crearea unui model al familiei de trei MC cu scopul de a micșora volumul de date de antrenare. Tabelul de mai jos face bilanțul pe obiective al întregului proiect D3T4H2S.

OBIECTIV 1: Constructia de modele de tip data-driven ale materialelor compozite utilizate	
Raport de cercetare	Machine Learning models' construction for the load behavior of composite materials in the undamaged zone - Report of UGAL for the project Leap-Re D3T4H2S. PART I: Machine Learning Models for the Traction Test
Programe	Fisier arhiva: WorkMLModels.zip
Studiu Publicat (articol)	<i>Green Hydrogen—Production and Storage Methods: Current Status and Future Directions. Energies</i> 2024, 17, 5820; Section A5: Hydrogen Energy; https://doi.org/10.3390/en17235820 Published: 21 November 2024; Impact Factor 3 (wos SCIE); Citescore: 6.2 (Q1).
OBIECTIV 2: Analiza echivalenței unui algoritm de tip machine learning cu un algoritm metaeuristic de optimizare	
Raport de cercetare	Machine Learning models' construction for the load behavior of composite materials in the undamaged zone - Report of UGAL for the project Leap-Re D3T4H2S. PART II: ML algorithms that Emulate Metaheuristic Algorithms for optimal decision-making
Programe	Arhiva disponibila la https://www.mdpi.com/article/10.3390/pr12050991/s1
Studiu Publicat (articol)	Machine Learning Algorithms That Emulate Controllers Based on Particle Swarm Optimization - An Application to a Photobioreactor for Algal Growth; <i>Processes</i> 2024, 12, 991. Published: 13 May 2024; https://doi.org/10.3390/pr12050991
OBIECTIV 3: Modele de tip ML ce caracterizeaza comportamentul la tracțiune si termo-mecanic al materialelor compozite, extinse si in zona plastica si de ruptura	
Raport de cercetare 1	Implementation aspects of stress-strain characteristics' regression models for composite materials.

	Part I: The modeling of the stress-strain characteristic -including the "damaged" zone. Part II: Machine Learning Predictions for the Comparative Mechanical Analysis of Composite Laminates with Various Fiber Orientations
Programe	Arhivă disponibilă la https://www.mdpi.com/article/10.3390/pr13030602/s1 Fisier arhivă: ART_Matlb.zip
Studiu Publicat (articol)	<i>Machine Learning Predictions for the Comparative Mechanical Analysis of Composite Laminates with Various Fibers. Processes</i> , 13(3), 602. Published: 20 February 2025. https://doi.org/10.3390/pr13030602
Raport de cercetare 2	Implementation of Machine Learning Models for Composite Materials with the Same Carbon Fiber but Different Matrices .
Programe	Fisier arhivă: JMSCE_supplementary.zip
Studiu publicat (articol)	<i>A New Method to Predict the Mechanical Behavior for a Family of Composite Materials. Journal of Materials Science and Chemical Engineering</i> . Vol.13 No.9. Published: 23.09.2025. https://www.scirp.org/journal/paperinformation?paperid=145844 ; DOI: 10.4236/msce.2025.139009
OBIECTIV 4: Algoritmi bazati pe AI pentru proiectarea optima a recipientelor de stocare a hidrogenului din material compozit	
Raport de cercetare 3	Contributions to the Optimization of Multilayer Composite Laminate Structures Using Particle Swarm Optimization and Machine Learning
Programe	Fisier arhivă: OFW_Mtlb.zip
Studiu Publicat (articol)	Articol trimis la publicare într-o revistă ISI (IF 1.7; SCITESCORE 6.1) (<u>unpublished</u>). <i>Optimal Structure Determination for Composite Laminates Using Particle Swarm Optimization and Machine Learning</i> .

Addendum la livrabilele pentru Etapa 2025

Lucrări prezentate la conferințe internaționale cu *tematică conexă* cu cea a proiectului D3T4H2S.

Trei articole au fost acceptate să fie prezentate, în luna decembrie, la conferința internațională *SGEM International Scientific Conferences on Earth & Planetary Science*, Extended Scientific Sessions *GREEN SCIENCES FOR GREEN LIFE*. Schönbrunn Palace, Vienna 03 - 06 December 2025

<https://sgemviennagreen.org/index.php>

Mihalcea, A.; Chiroasca, A-M.; Rusu, L.;

A new approach to green hydrogen research – challenges and solutions towards emission reduction and a cleaner maritime transportation

Chiroasca, A-M.; Popa, V-I.; Rusu, E.

Assessment of green hydrogen production and potential utilization in the hydrodynamic environment of the Danube

Bujor, A; Chiroasca, A-M.; Gasparotti, C.; Rusu, E.

Hybrid energy solutions: hydrogen integration in floating production, storage, and offloading units.

Obiectivul 3 vizează construcția de *modele extinse* de tip ML ce caracterizează comportamentul la tracțiune al materialelor compozite, în zona plastică și *de ruptură*. Datele primite de la perteneri nu au caracterizat și zona de ruptură, care, de fapt, nu poate fi abordată similar. Predicția și structura rupturii nu pot fi abordate prin tehnici de ML.

Considerăm ca obiectivele proiectului au fost realizate și că activitățile plus implementarea algoritmilor au dus la rezultate neprevăzute inițial; de exemplu, modelarea mai eficientă (în sensul scăderii dimensiunii setului de antrenare) a unei familii de materiale compozite care au o caracteristică comună (fibra de carbon), sau structura de optimizare "Optimization FrameWork" care poate avea un cadru mai larg de utilizare (cu alte metaeuristici și/sau pentru alte tipuri de probleme).

În octombrie 2025, LEAP-RE (Parteneriatul pe termen lung UE-UA) a organizat un Forum important al Părților Interesate la Bruxelles, în perioada 21-23 octombrie. În data de 22 Octombrie, 2025 s-a organizat conferința "Scientific & Methodological Clusters" la care prof. V Mînză a participat online la sesiunea "Grid Modelling Cluster" cu teme: a) Energy Planning challenges; b) Energy Modelling Approaches of the different speakers; c) Data availability and Data collection techniques.

Indicatori de rezultat:

- rapoarte de cercetare (studii): 5
- articole publicate: 5 (4 ISI și unul indexat în baze de date consacrate)
- produse informatice: programele de implementare a modelelor ML și cele ale platformei Optimization Framework.

Arhive programe:

WorkMLModels.zip;
 processes-12-00991-s001.zip;
 (<https://www.mdpi.com/article/10.3390/pr12050991/s1>) ;
 ART_Matlb.zip;
 JMSCE_supplementary.zip;
 OFW_Mtlb.zip.

- articole susținute la conferințe internaționale: 3
- participări la conferințe pe teme conexe:
 1. Milano, 8-11 online, octombrie 2024: LEAP-RE Pillar 1 Project Second Call: Mid-term scientific evaluation.)
 2. Bruxelles, 22 Octombrie 2025, online, LEAP-RE Forum anual, "Scientific & Methodological Clusters" , sesiunea "Grid Modelling Cluster" cu teme: a) Energy Planning challenges; b) Energy Modelling Approaches; c) Data availability and Data collection techniques.

Diseminare rezultate prin:

- site proiect <https://www.d3t4h2s.ugal.ro/index.php>
- cele 5 publicatii în reviste.
- participare la conferința de la Milano (2024) și Bruxelles (2025)

4. Modul de atribuire și exploatare de către parteneri a drepturilor de proprietate (intelectuală, de producție, difuzare, comercializare etc.) asupra rezultatelor proiectului;

În Articolul 10 al Acordului de Consorțiu sunt prevăzute toate regulile de protecție intelectuală a "Cunoștințelor Proprii" valabile pentru acest proiect. Ele sunt, după cunoștințele noastre, reguli obișnuite și echitabile. Regula de bază este că fiecare partener își asigură modul propriu de protecție a dreptului de proprietate.

Activitatea de cercetare desfășurată în cadrul proiectului D3T4H2S nu a necesitat acțiuni specifice de protecție intelectuală. Această stare de lucruri rezultă din considerarea câtorva aspecte:

- Activitățile derulate de UGAL au avut un caracter de cercetare științifică fără finalitate imediată în zona aplicării industriale aducătoare de profit.
- Toate activitățile UGAL se pot încadra, ca metodă de lucru, în zona "studiu simulat". De aceea, toate produsele informatice dezvoltate au servit studiului simulat fără finalitate economică și nu au trebuit protejate intelectual.
- Rezultatele obținute au fost publicate în reviste de specialitate, practic integral, ca articole de cercetare axate pe ideile și tehnicile dezvoltate. Odată înțelese, părți interesate pot aplica ideile și metodele, prin effort propriu, pe propriile produse.
- Colectivul UGAL a dezvoltat acest studiu simulat utilizând date furnizate de coordonator și P2. Nu ni s-a notificat vreo obligație de protecție intelectuală. De altfel, majoritatea datelor au rezultat din simulări ale partenerului P2 și au fost perturbate de către UGAL aleatoriu pentru augmentarea lor din necesități științifice.

Ceilalți parteneri își vor alege propriile modalități de protecție intelectuală, în măsura în care este cazul.

Difuzarea ideilor și metodelor dezvoltate în proiect s-a făcut prin publicații, unde toți autorii și-au dat consimțământul publicării (după regulile academice). Nu există activități de producție sau comercializare de vreun fel.

5. Impactul estimat al rezultatelor obținute, cu sublinierea celui mai semnificativ rezultat obținut.

Este oportun să precizăm, încă o dată, ca toate activitățile de cercetare ale UGAL se pot încadra, ca metodă de lucru, în zona "studiu simulat". Acest studiu a avut ca obiectiv dezvoltarea de metode de aplicare a inteligenței artificiale în două zone de interes:

- Dezvoltarea de metode de predicție a comportamentului mecanic al materialelor compozite folosite la fabricarea tancurilor de transport al hidrogenului.
- Crearea unei metode de optimizare a structurii acestor materiale compozite prin simbioza dintre inteligența computațională și algoritmi de învățare automată (machine learning) utilizați la predicția comportamentului mecanic.

Cele două zone de interes au fost tratate în ambele etape ale proiectului.

Impactul estimat al primei direcții de cercetare se răsfrânge, în special, asupra specialiștilor în materiale compozite, fie ei specialiști în știința materialelor sau profesioniști în fabricarea acestor materiale, în cunoașterea și utilizarea metodelor de predicție de tip machine learning. Ei vor ști să folosească următoarele tehnici adaptate materialelor compozite:

- alegerea variabilelor predictor din modelele regresive (de predicție) care să corespundă cerințelor de modelare și predicție ale specialiștilor ;

- modalități practice de codificare a exemplurilor de date (data points), specifice materialelor compozite;
- dezvoltarea, asistată sau nu de un software adecvat, a propriilor modele de ML care să realizeze predicțiile dorite de specialiști;
- folosirea de către specialiști a modelelor de predicție, cu precauție, ținând cont de limitările de domeniu de reprezentare și capacitate de generalizare a acestora.

Cercetarea științifică în domeniul materialelor compozite va fi desigur facilitată de existența unor astfel de modele de ML, în special cele care au făcut obiectul predilect al acestui proiect, modele de tracțiune tensiune – elongație atât în zona elastică cât și plastică.

A doua zonă de interes a proiectului, crearea unei metode de optimizare a structurii materialelor compozite, poate aduce specialistului în știința materialelor o perspectivă nouă asupra optimizărilor pe care le poate aborda. De obicei, ei nu sunt specialiști în tehnici de optimizare. De aceea rezultatele obținute de UGAL le deschid noi perspective:

- alegerea structurii materialului în cauză ca soluție a unei probleme de optimizare de mare complexitate computațională;
- simbioza dintre un model de ML și un algoritm metaeuristic de optimizare, cum este Particle Swarm Optimization, poate fi cheia rezolvării problemei de optim;
- formularea restricțiilor și a funcției obiectiv ca elemente cheie în definirea problemei de optim pentru alegerea structurii materialului compozit;
- utilizarea unui cadru de optimizare, cum este Optimization Framework propus de UGAL, pentru rezolvarea efectivă a problemei de optim referitoare la structura materialului compozit. Realizarea unui astfel de cadru poate fi inspirată de arhiva de programe furnizată de UGAL care poate ușura mult sarcina implemetării unui program croit pe necesitățile specialistului în știința materialelor.

Cel mai semnificativ rezultat obținut

Considerăm că rezultatul cel mai semnificativ este plasat în a doua zonă de interes a proiectului, cea referitoare la crearea unei metode de optimizare a structurii materialelor compozite. Reluam aici figura 15, pentru a urmării, cu ușurința, contribuția adusă.

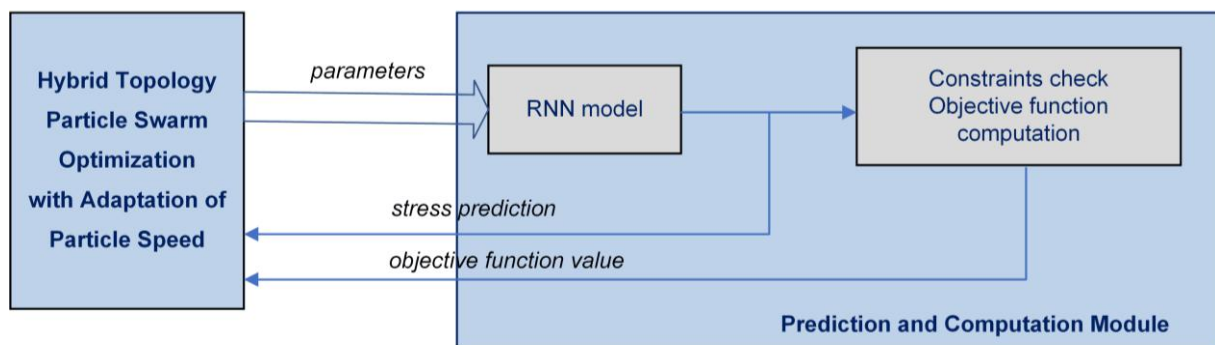


Figure 15: Structure of the Optimization Framework

Contribuția adusă este această structura de optimizare (Optimization Framework, pe scurt OFW) cu următoarele caracteristici:

- Este format din două module ce comunică și lucrează în simbioză: unul este algoritmul bazat pe metaeuristica "HTPSO adaptiv", iar cea de al doilea este Modulul de Predicție și Calcule (PCM).

- Structura are un caracter sistematic pentru că separă taskurile. Tot ce ține de problema de optimizare este programat în PCM, în timp ce modulul "adaptive HTPSO" realizează mecanismul de căutare al soluției optime, obținută la convergență.
- Utilizatorul se focalizează pe scrierea PCM, care va conține modelul de ML al obiectului supus optimizării, verificarea restricțiilor problemei și calculul funcției obiectiv.
- Structura OFW a rezolvat eficient cele două studii de caz referitoare la laminate compozite cu 16 straturi de diverse orientări în raport cu direcția principală de încărcare,

Rezultatul este semnificativ pentru că există și două extensii posibile importante:

- Algoritmului PSO poate fi înlocuit, în funcție de problemă, cu un alt algoritm metaeuristic pe care "computational intelligence" îl oferă. De exemplu, Evolutionary Algorithms, GA, etc.
- Structura OFW poate fi folosită la rezolvarea și a altor tipuri de probleme de optimizare, nu neapărat legate de structura materialelor compozite, unde modelul obiectului (sau sistemului) poate fi reprezentat de un model de ML echivalent modelului fizic.

Contribuția a fost cuprinsă într-un articol supus publicării:

Articol trimis la publicare într-o revistă ISI (în evaluare - unpublished).

Optimal Structure Determination for Composite Laminates Using Particle Swarm Optimization and Machine Learning

Director Proiect,

Prof. dr. ing. Viorel MÎNZU



Link către prezentarea succintă a rezultatele obținute:

<https://www.d3t4h2s.ugal.ro/index.php>

La secțiunea (tabul) "Rezultate" se găsește textul solicitat.