

RAPORTARE ȘTIINȚIFICĂ etapa anuală 2024

- Contract nr. 11/2024 din 21.03.2024; etapa nr. 1/2024;
 - UN MODEL DIGITAL BAZAT PE DATE PENTRU RECIPIENTE DE STOCARE A HIDROGENULUI RASPUNZAND PROVOCARILOR DE TRANZITIE ENERGETICA.
- Proiect COFUND-LEAP-RE D3T4H2S;

DESCRIEREA ȘTIINȚIFICĂ

1. Rezumatul etapei anuale - coordonate științifice ¹

Forme generatoare de energie regenerabilă, cum este hidrogenul, necesită stocare și transport sigur de la locul de producție la utilizatori. Consorțiul internațional al celor 6 parteneri implicați în proiectul D3T4H2S se ocupă de această problemă prin dezvoltarea unui model digital (digital twin) al vaselor de hidrogen termoplastice biodegradabile ranforsate cu nanotuburi și care sunt reciclabile. Metodologia propusă în acest proiect este bazată pe o abordare hibridă ce presupune modelare complexă (multi-scale) dar și o caracterizare experimentală avansată, ce reflectă expertiza multidisciplinară a echipelor implicate în proiect:

1. -proiectarea materialelor compozite,
2. -studiul experimental al comportamentului lor termo-mecanic,
3. -modelarea numerică, și
4. -utilizarea învățării automate (machine learning) pentru modele predictive și procese optime.

Domeniul științific abordat în cadrul etapei

Ca să localizăm exact din punct de vedere științific activitățile derulate de colectivul de cercetători (doi profesori și un cercetător postdoctorand) de la Universitatea Dunărea de Jos din Galați (partener UGAL) în cadrul etapei, precizăm de la început că zona științifică acoperită de colectivul implicat se referă la domeniul 4, adică utilizarea învățării automate (machine learning, abreviat ML) pentru modele predictive și procese optime.

Ca partener în acest proiect, UGAL este în principal responsabil pentru două tipuri de taskuri:

- (A) *Elaborarea unor tehnici de optimizare* ce vor fi utilizate în partea a doua a proiectului, la implementarea în consorțiu a unui program expert pentru evaluarea și optimizarea în timp real a recipientelor de stocare a hidrogenului. Acest task este acoperit de **Activitatea 1.1** din planul de realizare.
- (B) *Predicția comportamentului materialelor compozite* utilizate la fabricarea tankurilor de hidrogen, având diferite structuri, la variația unor parametri fizici. Acest task este acoperit de **Activitățile 1.2, 1.3 și 1.4** din planul de realizare.

Modul de lucru interactiv cu partenerii din consorțiu

În perioada inițială a colaborării în consorțiu, până la sincronizarea activității de cercetare cu partenerii, echipa UGAL a atacat taskul (A) care a permis continuarea unor cercetări anterioare ale membrilor echipei și obținerea unor rezultate exploatabile în faza a doua a proiectului D3T4H2S. Analizând obiectivele generale ale proiectului a fost realizat un studiu prin simulare a proceselor de decizie optimă ce va fi util la implementarea sistemului expert din Etapa 2.

Pentru rezolvarea taskului (B), echipa UGAL a lucrat în această etapă în mod interactiv, în principal, cu coordonatorul S VERTICAL și partenerul P2, ENSTA Bretagne (École nationale

¹ Rezumatul executiv este plasat la sfârșitul acestui document

supérieure de techniques avancées Bretagne), care au furnizat datele experimentale pentru a construi modelele de ML pentru materialele compozite. Interacțiunea dintre UGAL și cei doi parteneri din consorțiu s-a realizat ca secvența de subactivități ordonate temporal astfel:

<i>Subactivități</i>	<i>Activitate</i>	<i>Parteneri implicați</i>
B1. Definirea la nivel tehnologic a problemei de modelare a materialelor compozite și furnizarea primelor date partenerului UGAL	Activitatea 1.2	S VERTICAL și P2
B2. Prelucrarea datelor primite și definirea setului de date (data set) pentru problema de ML.	Activitatea 1.2	UGAL
B3. Definirea problemei (B) ca problema de construcție a unui model ML.	Activitatea 1.2	UGAL
B4. Definirea datelor de antrenare (training) și testare (testing) pentru diversele tipuri de modele ML.	Activitatea 1.2	UGAL
B5. Construcția de diverse tipuri de modele ML și analiza lor comparativă.	Activitatea 1.3	UGAL
B6. Analiza predicțiilor obținute cu diverse modele	Activitatea 1.3	UGAL
B7. Generarea unor date noi de test pentru predicție, inexistente în datele inițiale și analiza rezultatelor	Activitatea 1.3	UGAL
B8. Participări la întâlniri ale consorțiului, vizite de lucru, sau participări la manifestări tehnico-științifice internaționale pe domeniu	Activitatea 1.4	UGAL și partenerii din consorțiu

REZULTATE OBTINUTE

(1) Activitatea 1.1 din planul de realizare, adică "Analiza echivalenței unui algoritm de tip machine-learning cu un algoritm metaeuristic de decizie optimă, în vederea implementării prin ML a sistemului expert din Etapa 2", s-a concretizat prin publicarea studiului

Machine Learning Algorithms That Emulate Controllers Based on Particle Swarm Optimization - An Application to a Photobioreactor for Algal Growth.

Processes 2024, 12, 991. Published: 13 May 2024

<https://doi.org/10.3390/pr12050991>

Impact Factor 2.8; (wos SCIE Q2); Citescore: 5.1 (Q2)

Special Issue: *Industrial Process Operation State Sensing and Performance Optimization*

(2) Activitățile 1.2 și 1.3 din planul de realizare s-au concretizat în elaborarea unui studiu de cercetare intitulat

Machine Learning models' construction for the load behavior of composite materials in the undamaged zone - Report of UGAL for the project Leap-Re D3T4H2S.

Acest studiu a fost livrat coordonatorului S VERTICAL pentru a fi disponibil tuturor partenerilor pe platforma proiectului D3T4H2S.

(3) Implementarea informatică a modelelor construite în livrabilului (2) (studiul de mai sus) este realizată prin programele MATLAB. Acestea sunt arhivate în fișierul "[WorkMLModels.zip](#)" (fișiere script, funcții și spații de lucru .mat).

(4) Activitatea 1.4 a implicat și discuții științifice referitoare la producerea și stocarea hidrogenului ce au dus la publicarea, sub forma de articol, a studiului

Green Hydrogen—Production and Storage Methods: Current Status and Future Directions. Energies 2024, 17, 5820; Section A5: Hydrogen Energy

<https://doi.org/10.3390/en17235820>

Published: 21 November 2024

Impact Factor 3 (wos SCIE); Citescor: 6.2 (Q1).

2. Descrierea activităților

Activitate 1.1

Activitatea intitulată "Analiza echivalenței unui algoritm de tip "machine-learning" cu un algoritm metaeuristic de decizie optimă, în vederea implementării prin ML a sistemului expert din Etapa 2", s-a desfășurat în faza de început a etapei analizate și a permis continuarea eficientă a unor cercetări anterioare ale membrilor echipei și obținerea unor rezultate utile în faza a doua a proiectului D3T4H2S.

Multe probleme de decizie optimă necesită utilizarea unor algoritmi metaeuristici (AM) specifici Inteligenței Artificiale (IA) care caută soluția optimă, în special când 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 implicând optimalitate.

Aceste instrumente sunt robuste și flexibile, dar uneori pot genera un efort computațional foarte mare, ceea ce constituie uneori 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 că AM ce utilizează PSO pot fi "învățați automat" de algoritmi de ML, pentru a fi reprodusi în structuri optime.

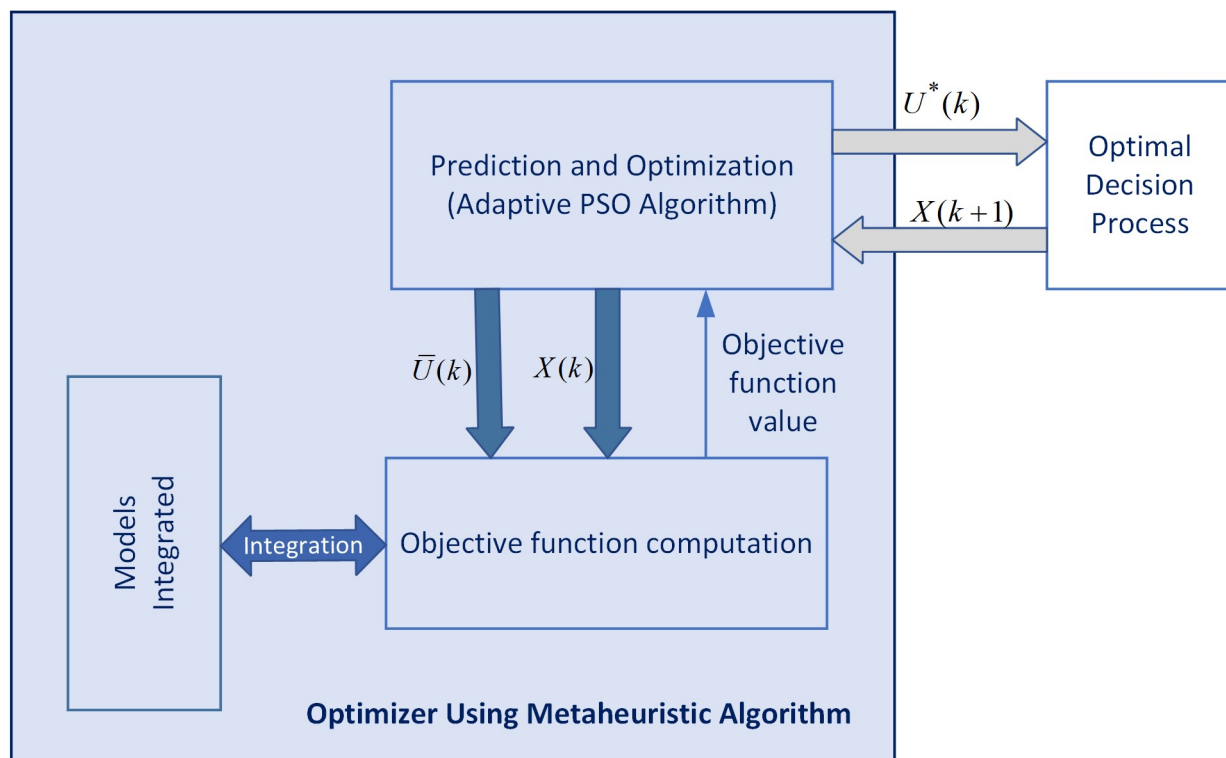


Figura 1. Algoritm Metaeuristic bazat pe PSO adaptiv pentru decizii optime

În Figura 1, procesul luării unei decizii optimale este prezentat ca o evoluție în bucla închisă pe spațiul stărilor X . Semnificația diferitelor elemente ale problemei de optim este:

- X ($X \in \mathcal{X}$) este mulțimea de variabile a căror evoluție trebuie optimizată și U^* este mulțimea valorilor optimale ale variabilelor de decizie.
- Funcția obiectiv (cost) este o funcție de vectorii X și U , care trebuie optimizată.
- Variabilele k acoperă situația în care procesul de decizie este iterativ. Pentru optimizări staționare indexarea (k și $k+1$) nu trebuie luată în considerare.

Modulul optimizator 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 optimă tratată. Grosso modo, 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?" 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 .

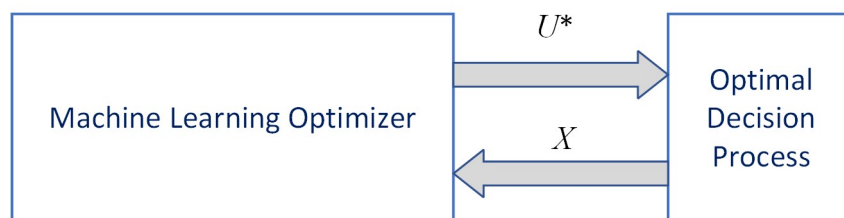


Figura 2 Optimizator ML "echivalent" cu un optimizator realizat cu un AM

Studiul nostru din această etapă, care s-a ocupat de taskul (A) de mai sus, indică complet cum se poate realiza decizia optimă prin ML (în locul AM), dar mult mai rapid, evitând o complexitate computațională importantă. Noul optimizator este mai simplu, el continuând doar modelul deja antrenat, model ce evită căutări în spațiul variabilelor de decizie și integrările numerice. Acest studiu

- descrie principiile, metoda și algoritmi care să genereze modelul de ML,
- implementează modelele de ML,
- verifică prin simulare MATLAB și comparație nouă abordare de optimizare ML.

Studiul este prezentat în lucrarea

Mînză, 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 afectează generalitatea prezentării și garantează posibilă utilizare ca instrument eficient de ML pentru optimizările implicate în sistemul expert din Etapa 2 a proiectului D3T4H2S.

Activitatea 1.2

Activitățile se referă la taskul (B) (definit în rezumat), Predicția comportamentului materialelor compozite, și vor fi analizate în cele ce urmează.

Subactivitatea B1. Definirea la nivel tehnologic a problemei de modelare a materialelor compozite și furnizarea primelor date partenerului UGAL.

Teste mecanice complexe, pentru materiale ce sunt utilizate la fabricarea tankurilor de transport al hidrogenului, au fost efectuate de colegi de la compania S VERTICAL și ENSTA Bretagne. Testul la tracțiune, unul din cele mai des utilizate pentru caracterizarea mecanică, a fost realizat utilizând INSTRON 5969, care are două prinderi între care este plasat specimenul.

Probleme la nivel tehnologic: Cateva 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 3.

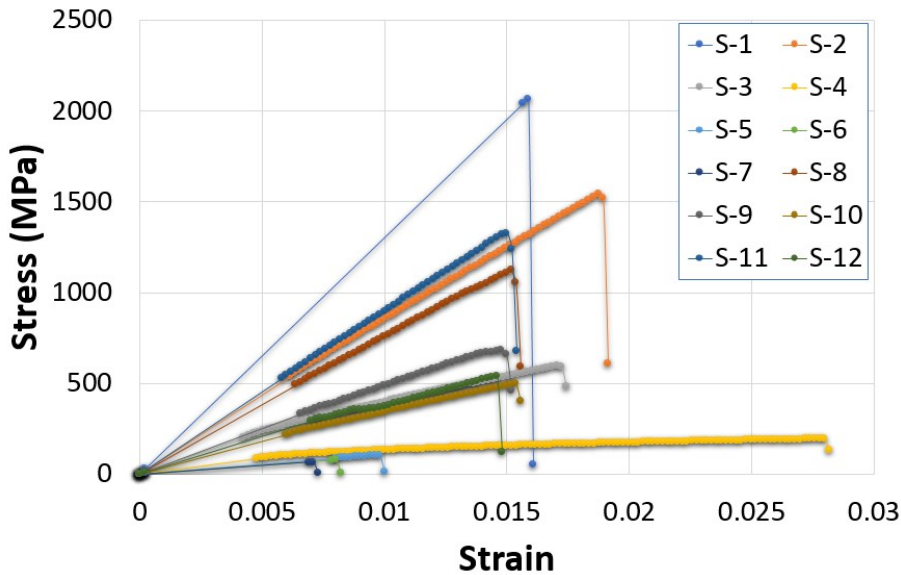


Figura 3. Dependenta *stress-strain* în timpul testului de tracțiune pentru cele 12 specimene.

Datele recepționate se referă doar la zonele quasi-liniare ale deformării, fără zona de avarii (de rupere). În Tabelul 1, sunt indicate limitele minimă și maximă ale parametrilor Stress (în MPa) și Strain pentru cele 12 specimene.

Tabelul 1. Limitele parametrilor Strain și Stress

	Strain (min)	Strain (max)	Stress (min)	Stress (max)
S-1	0	0.01587015	0	2064.24019
S-2	0	0.01874477	0	1540.16043
S-3	0	0.01705347	0	593.258184
S-4	0	0.02798728	0	192.457154
S-5	0	0.00981914	0	101.786008
S-6	0	0.00803761	0	77.3136431
S-7	0	0.00709987	0	63.9780266
S-8	0	0.01537992	0	1121.76279
S-9	0	0.01478241	0	680.072911
S-10	0	0.01536462	0	499.329696
S-11	0	0.01499824	0	1327.03122
S-12	0	0.0146055	0	540.079359

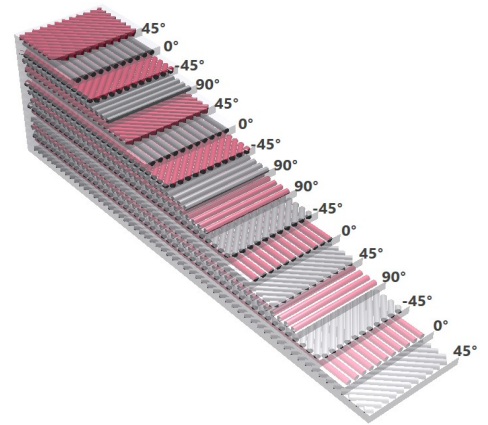


Figura 4. Specimenul S-9 cu multistraturi de diferite orientări

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 de mai sus este indicată stratificarea specimenului S9, codificată pe scurt astfel:

$[0/45/-45/90]_{2s}$, adică combinație dublată și simetrizată.

Tabelul 2 furnizează orientarea straturilor celor 12 specimene de material compozit.

Unit system: MPa (t, mm, s, °C, N, MPa, mJ)
 Essai traction
 Norme: UNT-ASTMD3039
 S-1: [0]₁₆
 S-2: [±20]₈
 S-3: [±30]₈
 S-4: [±45]₈
 S-5: [±60]₈
 S-6: [±70]₈
 S-7: [90]₁₆
 S-8: [0/45/0/90/0/-45/0/45]_s
 S-9: [45/0/-45/90]_{2s}
 S-10: [45/-45/0/45/-45/90/45/-45]_{2s}
 S-11: [0/30/0/90/0/-30/0/30]_{2s}
 S-12: [60/0/-60/90]_{2s}

Tabelul 2 Orientarea straturilor (pattern-uri) pentru cele 12 spaecimene

Subactivitatea B2. Prelucrarea datelor primite și definirea setului de date (data set) pentru problema de ML.

Prelucrarea datelor a relevat o dependenta quasiliniara a functiei $\text{Stress}=f(\text{Strain})$ și o zona de imprecizie neliniara in zona originii. Notam cu F_i aceste functii, i fiind indicele specimenului.

Fiecare specimen este compus din 16 straturi compozite avand diferite orientari. Secventa de mai jos poate caracteriza staea specimenul

$$\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{16}, \text{Strain}, \text{Stress} \quad (**)$$

Fiecare din speciemenele testate are o anumita combinatie de unghiuri $\alpha_i, i=1, \dots, 16$. Structura (**) face un mix între parametrii specimenului și parametrii fizici din timpul testului la tractiune.

Subactivitatea B3. Definirea problemei (B) ca problema de constructie a unui model ML.

Asa cum am menționat, obiectivul principal este sa construim modele ML care sa "înțeleaga" și sa "asimileze" toate masuratorile descrise anterior, cu scopul de a prezice valorile Stress, precizand patternul și valoarea Strain. Traducerea problemei tehnologice într-o problema de inteligenta artificila s-a concretizat în precizarea obiectivelor echipei UGAL astfel:

1. Generarea unui "dataset" suficient de mare pentru a construi modele ML care pot generaliza raspunsul pentru orice pattern și valoare Strain.
2. Construirea mai întâi a unui model de regresie parametric (e.g. regresie liniara multipla) care este usor de inteles și care poate fi comparat cu modelele dezvoltate ulterior.
3. Construirea unor modele nonparametrice (decision trees, Support Vector Machines, Gaussian process regression, neural networks), analiza preciziei lor, și compararea lor cu modelul parametric.
4. Alegerea celui mai precis model ce poate fi utilizat în cercetarile ulterioare.

Subactivitatea B4. Definirea datelor de antrenare (training) și testare (testing) pentru diversele tipuri de modele ML.

Pentru a produce un dataset care poate fi utilizat la antrenarea și testarea modelelor de ML, trei idei de baza au fost utilizate:

- Un zgomot uniform distribuit perturba patternurile, adica afecteaza orientarile unghiulare ale straturilor cu o valoare ce apartine intervalului $[-d, d]$ (e.g., $d=2$ grade). Aceasta perturbatie

modeleaza imprecizia în relizarea orientarilor straturilor și, de asemenea, diversifica valorile orientarilor pentru a face generalizarea posibila.

- Consideram un numar de M (e.g. $M=30$) "data points" (exemple) generate de M valori ale variabilei *Strain* pentru fiecare specimen. Cele M valori Stress corespunzatoare sunt obtinute utilizand functiile liniare F_i .

$$\text{Stress}_k = F_i(\text{Strain}_k) \quad k=1, \dots, M; i=1, \dots, 12.$$

- De fiecare data cand un data point este generat, patternul este perturbat.

Remarca: Avem un proces de generare a voturilor (*data-generating process*). Utilizand o distributie de probabilitate care respecta ipoteza unor date independente și distribuite identic (*independent and identically distribution assumptions*). Multimile de antrenare și de test vor fi generate independent utilizand aceeasi distributie de probabilitate.

Programul **H2Data2** construiește patternurile, functii, valorile *stress* și *strain* pentru fiecare data point. Genereaza de asemenea "the design matrix" numita *BigData*.

Vectorul *PATTERN* contine orientarile straturilor pentru orice specimen.

```
PATTERN=zeros(12,16);
PATTERN(1,:)= [0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0.];
PATTERN(2,:)= [20. -20. 20. -20. 20. -20. 20. -20. 20. -20. 20. -20. 20. -20. 20. -20.];
PATTERN(3,:)= [30. -30. 30. -30. 30. -30. 30. -30. 30. -30. 30. -30. 30. -30. 30. -30.];
PATTERN(4,:)= [45. -45. 45. -45. 45. -45. 45. -45. 45. -45. 45. -45. 45. -45. 45. -45.];
PATTERN(5,:)= [60. -60. 60. -60. 60. -60. 60. -60. 60. -60. 60. -60. 60. -60. 60. -60.];
PATTERN(6,:)= [70. -70. 70. -70. 70. -70. 70. -70. 70. -70. 70. -70. 70. -70. 70. -70.];
PATTERN(7,:)= [90. 90. 90. 90. 90. 90. 90. 90. 90. 90. 90. 90. 90. 90. 90. 90.];
PATTERN(8,:)= [0. 45. 0. 90. 0. -45. 0. 45. 45. 0. -45. 0. 90. 0. 45. 0.];
PATTERN(9,:)= [45. 0. -45. 90. 45. 0. -45. 90. 90. -45. 0. 45. 90. -45. 0. 45.];
PATTERN(10,:)= [45. -45. 0. 45. -45. 90. 45. -45. -45. 45. 90. -45. 45. 0. -45. 45.];
PATTERN(11,:)= [0. 30. 0. 90. 0. -30. 0. 30. 30. 0. -30. 0. 90. 0. 30. 0.];
PATTERN(12,:)= [60. 0. -60. 90. 60. 0. -60. 90. 90. -60. 0. 60. 90. -60. 0. 60.];
```

Aspecte de implementare:

```
- F: array de functii handles
- strain: matrice cu valorile variable strain pentru fiecare specimen și pentru M=30 abscise
- nc=18;

- BigData=zeros(12*M,nc); % matrice cu 360 data points
- PAT=PATTERN(Sk,:) + random('unif',-delta,delta,[1,16]);
- BigData(i,:)=[PAT, strain(Sk,j), F{Sk}(strain(Sk,j))];
- save('WS_data360','BigData','F','strain','delta','M');
```

Exemplul (Data point) cu numarul #220 este, de exemplu, vectorul [18,1]:

```
[ 1.391   45.331   0.34471   91.703   0.30031  -46.96   1.2375   45.435   44.92
 0.92624 -45.968 -0.075962  88.909  -1.8056   43.677  -0.96621  0.0051266  393.11].
```

Programul **H2Construction** construiește tablourile pentru antrenare și testare. El splitteaza liniile matricii *BigData* în doua matrici *Dtrain* and *Dtest*. Fiecare specimen genereaza 30 (M) data points. Primele 25 și ultimele 5 linii vor fi adaugate respectiv matricilor *DTrain* și *Dtest*. Ulterior cele 2 matrici sunt convertite în tabele pentru antrenare și testare:

```
TableTrain ← DTrain
TableTest ← DTest
```

Activitatea 1.3

Subactivitatea B5. Constructia de diverse tipuri de modele ML și analiza lor comparativa.

Primul model construit este, așa cum s-a indicat mai sus, o regresie liniară multiplă pentru a avea o referință pentru celelalte modele implementate.

REGRESIE LINIARĂ MULTIPLĂ CE UTILIZEAZĂ TEHNICA STEP - WISE

Regresia liniară multiplă (RLM), pe care am reținut-o din setul de regresii liniare implementate în cazul proiectului, conține de asemenea termeni neliniari (produse ale predictorilor) și utilizează tehnica "step - wise". Modelul își păstrează linearitatea în raport cu coeficienții săi. Vom reține modelul SW Linear Regression bazat pe strategia de regresie step - wise. Aceasta constă în adăugarea sau stergerea iterativă de termeni (predictori sau combinații), plecând de la un model (termen) constant. În sistemul MATLAB utilizat în implementările realizate în proiect, această strategie este realizată printr-o funcție specializată *step - wise* (T), care întoarce un model ce "învăță" un data set T.

În cazul nostru caracteristicile modelului sunt $x_1, \dots, x_{16}$ pentru orientările $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{16}$, și St și Ss pentru *Strain* și *Stress*, respectiv.

Dam mai jos rezultate ale antrenării și testării, utilizând această tehnică.

Linear regression model:

$$Ss \sim 1 + x_1 \cdot x_9 + x_1 \cdot St + x_2 \cdot x_{13} + x_2 \cdot St + x_9 \cdot St + x_{12} \cdot St + x_{13} \cdot St$$

Estimated Coefficients:

	Estimate	SE	tStat	pValue
(Intercept)	66.289	16.348	4.0548	6.4742e-05
x_1	-1.0564	0.90931	-1.1618	0.24629
x_2	5.299	1.5056	3.5196	0.00050263
x_9	-2.1988	0.58916	-3.7322	0.000229
x_{12}	-1.5438	0.30825	-5.0083	9.6246e-07
x_{13}	0.42446	0.401	1.0585	0.29071
St	1.2418e+05	1901.7	65.3	7.0906e-174
$x_1 : x_9$	0.04764	0.012162	3.9171	0.00011217
$x_1 : St$	-1320.7	54.246	-24.346	1.1118e-71
$x_2 : x_{13}$	-0.065347	0.01489	-4.3885	1.607e-05
$x_2 : St$	-176.64	54.038	-3.2687	0.0012122
$x_9 : St$	-170.77	29.761	-5.7382	2.4366e-08
$x_{12} : St$	666.06	38.01	17.523	3.3209e-47
$x_{13} : St$	-307.24	37.886	-8.1096	1.5046e-14

Valoarea *Intercept* corespunde termenului liber, celelalte valori din coloana *Estimate* fiind coeficienții diferiților factori liniari sau neliniari. De exemplu, coeficientul termenului neliniar $x_9 \cdot St$ este -170.77.

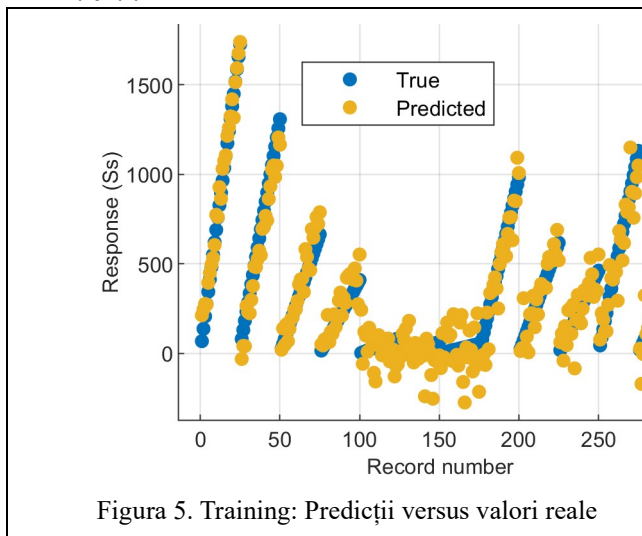


Figura 5. Training: Predicții versus valori reale

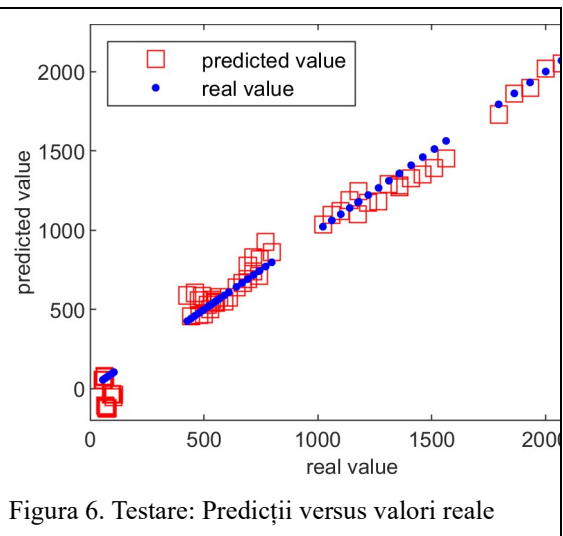


Figura 6. Testare: Predicții versus valori reale

Lista de simulare următoare face o comparație între valorile *stress* adevărate și cele predictate utilizând datele de test.

	Stress	Predictie
1	1793.4	1771.2
2	1862.4	1812.9

3	1931.4	1963.1
4	2000.4	1966.8
5	2069.4	2062.7
6	1358.4	1234.1
7	1409.5	1256.4
8	1460.6	1339.7
9	1511.7	1409.9
10	1562.8	1472.7
11	691.2	765.74
12	717.77	837
13	744.33	830.2
14	770.9	881.83
15	797.46	972.66
16	426.61	455.18
17	443.02	583.99
18	459.42	525.39
19	475.83	588.2
20	492.24	567.19
21	90.999	-46.329
22	94.498	-23.934
23	97.997	-29.726
24	101.5	-18.482
25	105	-27.37
26	67.043	-83.925
27	69.621	-118.72
28	72.2	-102.75
29	74.779	-121.22
30	77.357	-129.23
31	56.218	27.051
32	58.379	57.544
33	60.54	60.965
.....		
59	588.55	571.09
60	608.84	620.91

Statisticile acestui model sunt date în coloana **SW Linear Regression** a Tabelului 7. Deși modelul regresiv oferă predicții bune pentru majoritatea speciilor, el nu oferă predicții satisfăcătoare pentru cele cu un domeniu restrâns al variabilei *stress*. Figurile 5 și 6 arată anumite exemple pentru care predicția este negativă. Există 10 astfel de date points, pe care le numim critice, ce corespund speciilor al căror domeniu Stress este foarte îngust. Aceste predicții inacceptabile sunt redate în Tabelul 3.

Stress True value	90.999	94.498	97.997	101.5	105.	67.043	69.621	72.2	74.779	77.357
Stress Predicted value	-46.32	-23.93	-29.72	-18.4	-27.3	-83.92	-118.7	-102.	-121.2	-129.2

Tabelul 3. Predicții critice al modelului SW Linear Regression

De aceea vom considera alte clase de modele parametrice care vor ameliora predicția variabilei *Stress* pentru toate speciile.

MODELE BAZATE PE SUPPORT VECTOR MACHINES (SVM)

Au fost realizate mai multe modele SVM care au marcat o ameliorare a acurateții 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

```

Un model bun pe datele curente este cel cu optimizarea hiperparametrilor. Modelul este antrenat utilizand functia `fitrsvm` din MATLAB ca în scriptul de mai jos:

Dam mai jos cateva detalii de implementare a antrenarii.

Acest model a fost antrenat si testat utilizand Regression Learner Application care a dus la rezultatele prezentate in tabelul 7, coloana **SVM Regression 1**.

RMSEValid = 34.945

RMSETest = 52.108

Valorile RMSE sunt mai mici decat la modelul **SW linear Regression**, demonstrand ca modelul SVM funcționeaza mai bine. Figurile 10 si 11 ilustreaza acest lucru daca comparam cu figurile 8 si 9

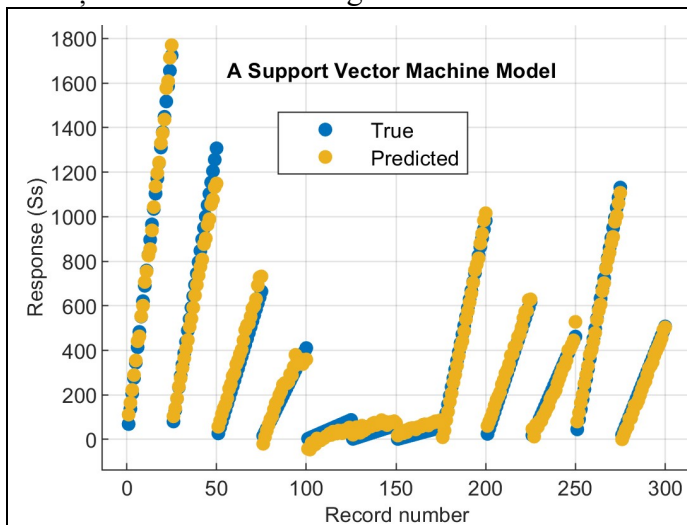


Figure 7 Predicted versus real values for the training data set - **SVM Regression 1**

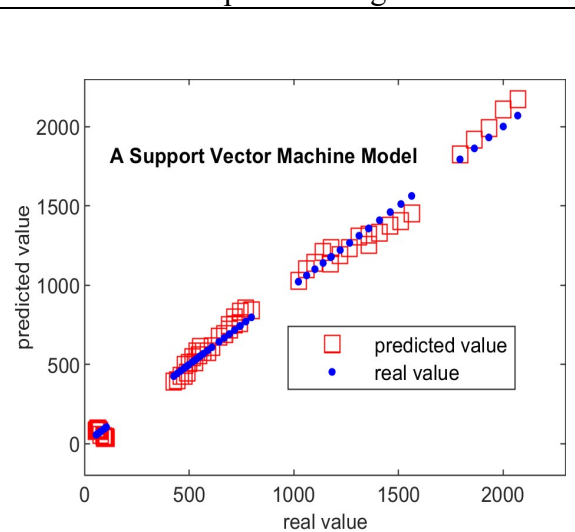


Figure 8. Predicted versus real values for the test data set - **SVM Regression 1**

Predicțiile pentru exemplele (data points) critice sunt date în Tabelul 4. Desi nu sunt foarte bune, sunt mai bune decat cele din Tabelul 3, macar si pentru faptul ca sunt pozitive.

Stress True value	90.999	94.498	97.997	101.5	105.	67.043	69.621	72.2	74.779	77.357
Stress Predicted value	47.679	35.616	39.292	42.684	34.877	82.007	89.711	81.055	81.242	56.943

Tabelul 4. Multimea de predicții critice obtinute cu SVM Regression 1.

Am construit de asemenea un alt model SVM care prediceaza 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 optimizeaza combinatia de hiperparametri printr-o optimizare Bayesiană.

Un fragment din rezultatele obtinute în predicție sunt furnizate mai jos.

Nr	Model	RealValue	SVM
—	liniar	—	—
1	1732	1793.4	1722.4
2	1860.7	1862.4	1752
3	1898.5	1931.4	1779.1

4	2020.2	2000.4	1786.9
5	2053	2069.4	1795.6
6	1280.4	1358.4	1299.1
7	1325.2	1409.5	1325.1
8	1350.6	1460.6	1325.9
9	1390.2	1511.7	1296

20	585.09	492.24	441.92
21	-37.373	90.999	93.074
22	-34.88	94.498	95.691
23	-32.447	97.997	100.18
24	-52.129	101.5	105.26
25	-37.333	105	110.17
26	-103.89	67.043	68.82
27	-114.62	69.621	71.944
28	-120.05	72.2	74.032
29	-124.01	74.779	77.312
30	-120.17	77.357	80.144
31	56.668	56.218	57.801

Un model care da predicții
bune în domeniul critic.

59	548.51	588.55	565.74
60	576.88	608.84	581.46

RMSEValid = 46.903

RMSETest = 86.383

Size: 40kB

Tabelul 5 arata predicții excelente pentru exemplele critice.

Stress True value	90.999	94.498	97.997	101.5	105.	67.043	69.621	72.2	74.779	77.357
Stress Predicted value	93.074	95.691	100.18	105.26	110.17	68.82	71.944	74.032	77.312	80.144

Tabelul 5. Multimea de predicții critice obținute cu SVM Model 2.

Totusi statisticile modelului **SVM Regression 2** sunt inferioare modelului **SVM Regression 1**. Mai mult de atat, dimensiunea modelului, 40kB, este mai mare decat a primului model. In concluzie, **SVM Regression 1** este mai bun decat al doilea model, în pofida optimizarii hiperparametrilor.

MODELE BAZATE PE RETELE NEURONALE

Am construit modele de tip Regression Neuronal Network (RNN) pentru predicții in contextul problemei descrise. Mai multe tipuri de RNN au fost considerate pentru a putea extrage modelul RNN ce ofera o acuratete ridicata si o memorie necesare acceptabila.

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 din Tabelul 7, aratand o mai buna acurateta la predicție, desi dimensiunea modelului este de 8 kB.

Lista de executie care da predicțiile pentru "TableTest" este prezentata mai jos. Predicțiile pentru modelul liniar, considerat si anterior, sunt indicate in coloana a 2-a.

Nr	LM	RealValue	RNN 1
----	----	-----------	--------------

1	1732	1793.4	1768.9
2	1860.7	1862.4	1855.2
3	1898.5	1931.4	1911
4	2020.2	2000.4	2003.1
5	2053	2069.4	2055.2
6	1280.4	1358.4	1359.6
7	1325.2	1409.5	1437.7
8	1350.6	1460.6	1484.2
9	1390.2	1511.7	1494.5
20	585.09	492.24	782.71
21	-37.373	90.999	99.325
22	-34.88	94.498	94.041
23	-32.447	97.997	95.63
24	-52.129	101.5	106.8
25	-37.333	105	94.882
26	-103.89	67.043	57.712
27	-114.62	69.621	58.986
28	-120.05	72.2	54.844
29	-124.01	74.779	55.906
30	-120.17	77.357	56.941
31	56.668	56.218	58.724
58	576.83	568.26	641.77
59	548.51	588.55	653.03
60	576.88	608.84	714.61

Constatam ca predicția valorilor *Stress* pentru exemplele critice sunt foarte bune (zona albastra), apropiate de cele din Tabelul 5, ceea ce înseamna ca problema este rezolvata.

Modelul cu cea mai mare acuratete în predicție este o alta Regression NN, modelul **RNN 2**, ai carui parametri sunt afisati în ultima coloana a Tabelului 22. Este vorba de un model regresiv RNN cu 3 straturi, ai carui hiperparametri sunt gasiti utilizand optimizare Bayesiană. Dam mai jos cateva detalii de structura si antrenare.

```
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);
```

Tabelul 6 arata ca predicțiile critice sunt foarte bune, mai bune decat cele ale modelele anterioare.

Stress True value	90.999	94.498	97.997	101.5	105.	67.043	69.621	72.2	74.779	77.357
Stress Predicted value	92.233	96.111	102.73	107.33	113.38	67.583	70.387	73.247	76.896	80.282

Tabelul 6. Multimea de predicții critice obtinute cu modelul RNN 2.

Pretul care trebuie platit pentru aceasta acuratețe este dimensiunea modelului, 1MB, care este cea mai mare.

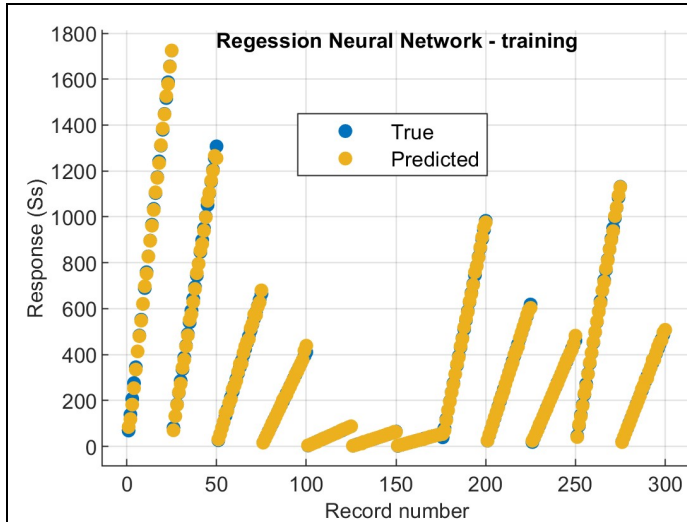


Figure 9. Predicted versus real values - the training of RNN2

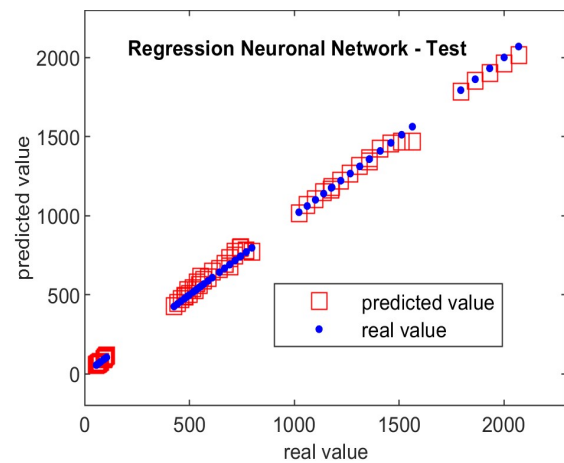


Figure 10. Predicted versus real values - the test of RNN2

Figurile 9 si 10 arata eficienta proceselor de training si de testare, and dovedesc ca RNN2 este cel mai precis pentru data setul considerata. În functie de contextul de utilizare a RNN, RNN1 poate fi utilizat cu succes în locul modelului RNN2, datorita faptului ca este un bun model predictiv pentru problema noastra, avand o dimensiune mica si o buna acurateta.

Subactivitate B6. Analiza predicțiilor obținute cu diverse modele

Analiza si evaluarea modelelor ML construite în aceasta etapa a fost facuta pe parcursul derularii Activităților 1.2 si 1.3. Uzual, procesele de antrenare si testare pot fi caracterizate de statistici, permitandu-ne sa comparam modelele ML construite pe aceleasi seturi de date. Elementul principal în analiza comparativa a modelelor este calitatea predicțiilor, în cazul nostru predicția valorii *Stress*, data fiind orientare straturilor specimenului si a deformatiei relative *Strain*.

Mai jos, tabelul 7 ne va permite sa comparam diferitele modele ML retinute ca fiind reprezentative pentru clasa lor. Statisticile date în Tabelul 7 pentru diferitele modele construite sunt valorile Root mean squared error (RMSE), R-squared, si Mean absolute error (MAE).

De asemenea, este idicata si dimensiunea modelului care este foarte importanta în aplicatii. Putem conchide ca cele mai performante modele ML pentru problema noastra sunt cele apartinand clasei Regression Neuronal Network, RNN1 si RNN2.

	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 7. Statistici ale proceselor de antrenare si testare si dimensiunea modelului pentru diferitele modele retinute

Subactivitate B7. *Generarea unor date noi de test pentru predicție, inexistente in datele initiale și analiza rezultatelor.*

Subactivitatea B7 s-a axat pe modul cum modelele ML prezentate mai sus pot fi utilizate, adică de a reproduce sau prezice comportamentul materialelor compozite fibre de carbon - epoxy pentru diferite orientări, incluzând noi combinații de stratificări.

Până acum, puterea de generalizare a modelelor ML a fost testată utilizând seturi de date de testare rezervate pentru acest obiectiv. Seturile de date de testare provin din aceleași teste de tracțiune; ele au același suport fizic real. Puterea de generalizare a unui model ML va fi dovedită pentru date points pe care modelul nu le-a "văzut", adică exemplele nu aparțin datelor de antrenare și nici celor de testare. Pentru testele software, a fost utilizat modelul RNN 2 ca fiind cel mai performant pentru problema dată și pentru datele disponibile.

Noi combinații cu aceeași structură

A fost considerat cazul când o nouă combinație are aceeași structură ca și una care a contribuit la construcția modelului ML, diferind de aceasta numai prin orientarea câtorva straturi. De exemplu, putem genera noi combinații de stratificări derivate din paternul S8 ca "vecini" ai acestuia: secvența din mijloc 45/45 este înlocuită cu α/α . Acest patern, notat Snew, devine:

$$\text{Snew} = [0/45/0/90/0/-45/0/\alpha/\alpha/0/-45/0/90/0/45/0].$$

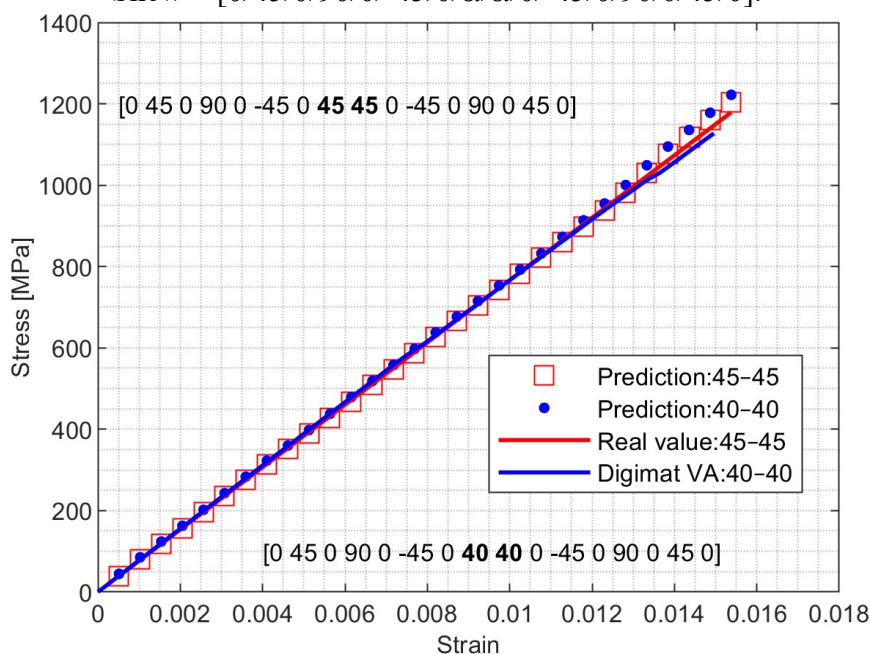


Figura 11. Valorile reale și predictate ale parametrului Stress pentru $\alpha=45^\circ$ și $\alpha=40^\circ$

Sub această ipoteză, RNN 2 poate acoperi și prezice comportamentul noii combinații? Patru valori ale unghiului α au fost considerate și au generat 4 noi stratificări pentru materialul compozit.

Figura 11 prezintă valorile reale și predictate pentru $\alpha=45^\circ$ și, pentru comparație, $\alpha=40^\circ$. Curbele albastră și roșie sunt mai scurte pentru că se opresc la începutul zonei de avarii.

Curba albastră este mai scurtă pentru că se oprește la începutul zonei de avarii. Partenerul P2 a simulat cu programul Digimat VA comportamentul și a determinat valorile considerate reale, iar echipa UGAL a determinat predicțiile. Rezultatele dovedesc acuratețea predicțiilor.

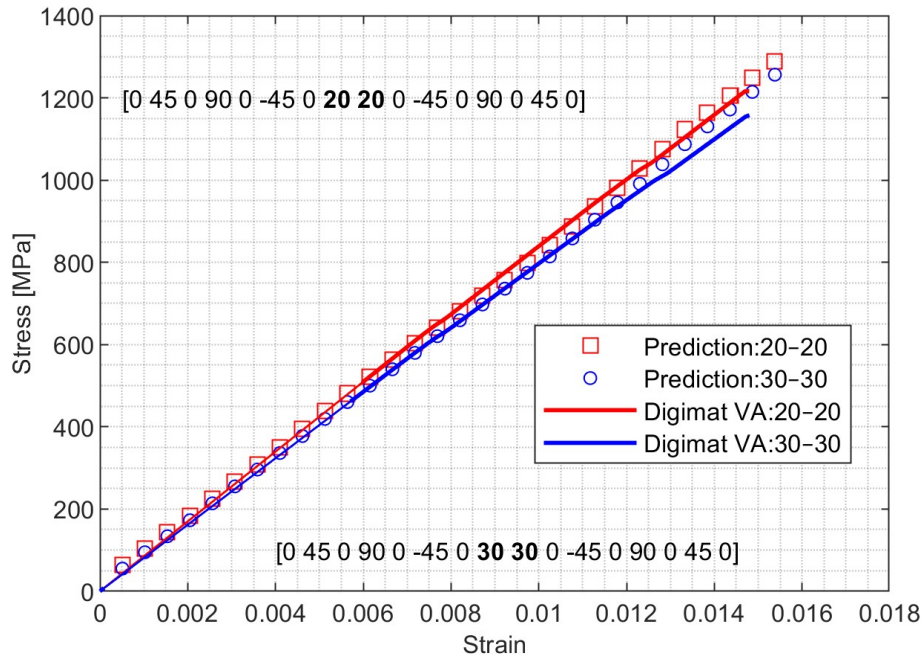


Figura 12. Valorile reale si predictate ale parametrul Stress pentru $\alpha=20^\circ$ si $\alpha=30^\circ$

Figura 12 prezinta valorile reale si predictate pentru $\alpha=20^\circ$ și, pentru comparatie, $\alpha=30^\circ$. Curbele albastră și roșie sunt mai scurte pentru ca se opresc la începutul zonei de avarii.

Remarca: Doua aspecte pot fi subliniate:

- Predicțiile facute de catre modelul ML (aici RNN 2) sunt foarte bune în interiorul zonei fara avarii.
- Predicțiile dau erori mai mari la sfârșitul acestei zone, ramanand, totuși, în limite total acceptabile.

Noi combinații generate aleator

Au fost considerate specimene cu orientari generate aleator, care, altfel spus, nu au contribuit la data setul initial utilizat în construirea Modelului ML. Apoi am comparat predicțiile pentru aceste specimene cu rezultatele simulatorului DIGIMAT. Prezentam mai jos numai 4 specimene ca sa se poata urmarii mai usor. Pentru a ramane conectati la zona de generalizare a RNN 2, am ales mai întâi 4 specimene de baza care au fost supuse testului la tractiune, PAT2, PAT6, PAT9, și PAT11. Acestea au furnizat exemple utilizate la antrenarea modelului și au comportamente diferite în spatiul Strain–Stress. Fiecarui strat al acestor specimene a fost modificat independent utilizand o perturbatie distribuita uniform în domeniul $[-4^\circ, +4^\circ]$. Au rezultat specimenele NEW2, NEW6, NEW9, și NEW11 generate aleator, diferite de cele initiale, dar în zona de reprezentare a modelului. De exemplu, Figura 13 prezinta cele 16 orientari ale specimenului NEW2, dar si cele ale specimenului PAT2.

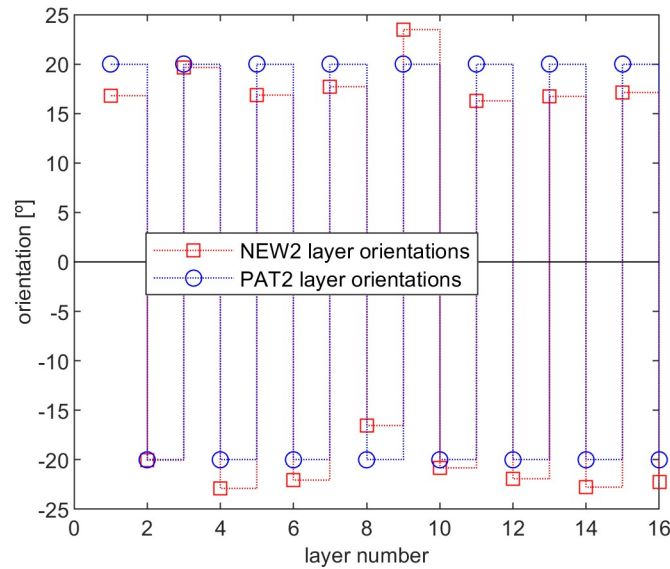


Figura 13. Orientarile straturilor specimenelor NEW2 și PAT2

	ang1	ang2	ang3	ang4	ang5	ang6	ang7	ang8
PAT2	20.00	-20.00	20.00	-20.00	20.00	-20.00	20.00	-20.00
NEW2	16.80	-20.05	19.67	-22.92	16.85	-22.06	17.68	-16.53
DIFF2	-3.20	-0.05	-0.33	-2.92	-3.15	-2.06	-2.32	3.47
PAT6	70.00	-70.00	70.00	-70.00	70.00	-70.00	70.00	-70.00
NEW6	71.47	-69.27	68.30	-70.32	73.18	-71.33	67.00	-68.95
DIFF6	1.47	0.73	-1.70	-0.32	3.18	-1.33	-3.00	1.05
PAT9	45.00	0.00	-45.00	90.00	45.00	0.00	-45.00	90.00
NEW9	46.59	3.31	-42.30	88.52	48.57	-1.31	-44.54	88.57
DIFF9	1.59	3.31	2.70	-1.48	3.57	-1.31	0.46	-1.43
PAT11	0.00	30.00	0.00	90.00	0.00	-30.00	0.00	30.00
NEW11	-3.49	26.87	-0.14	89.83	2.48	-33.05	3.61	32.53
DIFF11	-3.49	-3.13	-0.14	-0.17	2.48	-3.05	3.61	2.53
	ang9	ang10	ang11	ang12	ang13	ang14	ang15	ang16
PAT2	20.00	-20.00	20.00	-20.00	20.00	-20.00	20.00	-20.00
NEW2	23.49	-20.79	16.26	-21.91	16.71	-22.76	17.14	-22.26
DIFF2	3.49	-0.79	-3.74	-1.91	-3.29	-2.76	-2.86	-2.26
PAT6	70.00	-70.00	70.00	-70.00	70.00	-70.00	70.00	-70.00
NEW6	69.55	-73.38	67.92	-67.99	73.58	-72.32	69.08	-70.79
DIFF6	-0.45	-3.38	-2.08	2.01	3.58	-2.32	-0.92	-0.79
PAT9	90.00	-45.00	0.00	45.00	90.00	-45.00	0.00	45.00
NEW9	90.23	-48.59	3.12	45.28	92.95	-41.92	-1.90	42.29
DIFF9	0.23	-3.59	3.12	0.28	2.95	3.08	-1.90	-2.71
PAT11	30.00	0.00	-30.00	0.00	90.00	0.00	30.00	0.00
NEW11	29.95	1.22	-28.86	-0.13	92.30	-0.28	26.92	-0.82
DIFF11	-0.05	1.22	1.14	-0.13	2.30	-0.28	-3.08	-0.82

Tabelul 8. Orientarile straturilor pentru speciemenle NEW2 si PAT2 si diferenta dintre ele.

Tabelul 8 furnizeaza orientarile specimenelor de baza si perturbate, precum si diferenta dintre ele (DIFF2, DIFF6, DIFF9, DIFF11). Pentru ca speciemenle de baza au contribuit la construirea modelului ML, predicțiile lor pentru *stress* dandu-se valorile *strain* au deja o acuratete acceptabila. Pentru noile speciemenle, acuratetea predicțiilor trebuie confirmata de simularile Digimat (partener P2).

Figura 14 prezinta toate curbele obtinute prin simulare precum si predicțiile facute pe model si certifica foarte buna acuratete a predicțiilor facute de RNN 2 pe noile speciemenle. Perechile de curbe avand aceeasi culoare dovedesc ca eroarea de predicție este foarte mica pentru toate valorile parametrului *strain*.

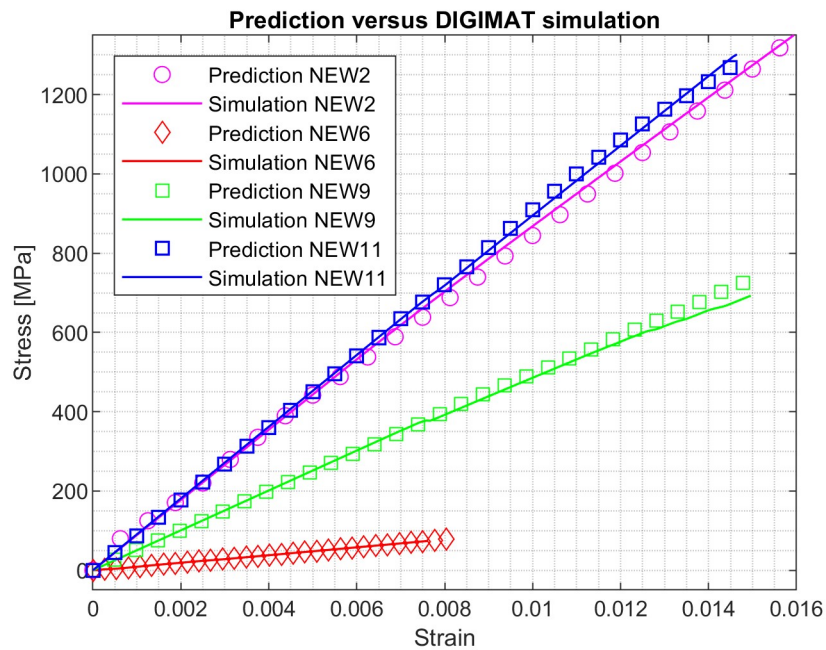


Figura 14. Comparatie între valorile reale si cele predictate pentru cele 4 specimene generate aleator. Pentru a face un zoom pe eroarea de predicție, Figura 15 prezinta eroarea relativa de predicție într-un numar de puncte situate în domeniul de variatie al parametrului Strain considerat in Figura 14.

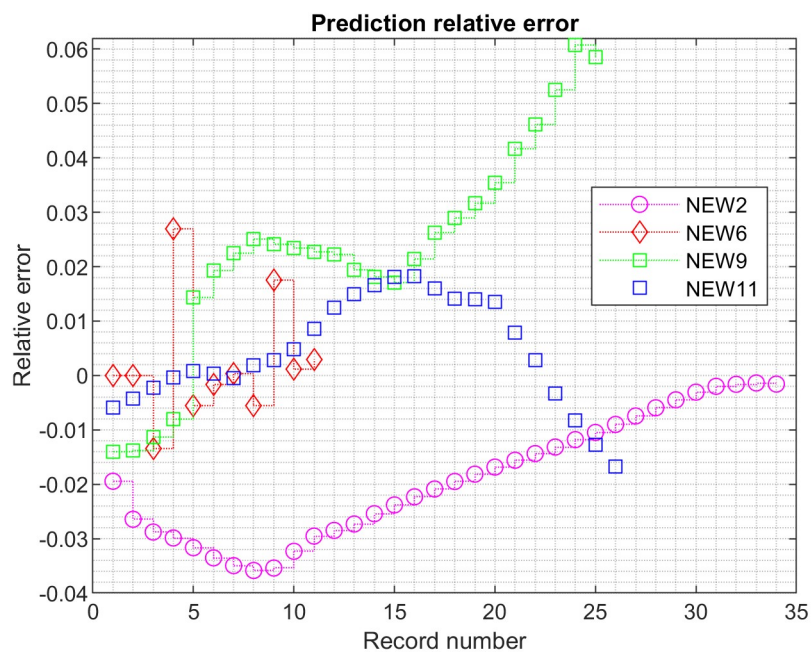


Figura 15. Eroarea relativa de predicție pentru cele patru specimene generate aleator.

Eroarea relativa, adica cea raportata la valoarea reala, este situata în intervalul $[-0.04, 0.06]$, ceea ce înseamna ca acuratetea predicției este foarte buna. Modelul ML propus are o buna putere de generalizare, daca este bine utilizat, adica:

- Specimenul este în interiorul domeniului de reprezentare al modelului ML, și
- Valoare *strain* sunt în interiorul domeniului ce corespunde zonei fara avarii.

Activitatea 1.4

Participari la intalniri ale consorțiului, vizite de lucru, sau participari la manifestari tehnico-științifice internationale pe domeniu

Rezultatele obtinute de echipa UGAL au fost prezentate în cadrul numeroaselor meetinguri online organizate pe platforma TEAMS si care sunt înregistrate. Participare echipei noastre a fost activa si rezultatele au fost apreciate si validate. Precizez ca rapoarte științifice au fost trimise coordonatorului proiectului care le-a pus pe platforma proiectului comun.

Rezultatele noastre au facut parte integranta din expunera facuta de consorțiul proiectului D3T4H2S în cadrul evenimentului major organizat la Milano, 8-11 octombrie 2024:

LEAP-RE Pillar 1 Project Second Call: ***Mid-term scientific evaluation.***

Cu aceasta ocazie s-a facut o evaluare favorabila activității științifice din proiectul D3T4H2S.

GRADUL DE REALIZARE A OBIECTIVELOR

În planul de realizare a proiectului, ne-am angajat la obtinerea urmatoarelor rezultate:

1. Modele de tip machine-learning (ML) ce caracterizeaza comportamentul termo-mecanic al materialelor compozite.

În cadrul activităților 1.2 si 1.3 au fost realizate si validate modelele de machine-learning (ML) ce caracterizeaza comportamentul termo-mecanic al materialelor compozite. Aceste modele sunt descrise în studiul intitulat

Machine Learning models' construction for the load behavior of composite materials in the undamaged zone - Report of UGAL for the project Leap-Re D3T4H2S.

Acest studiu a fost prezentat în meetingurile online și înaintat coordonatorului consorțiului, Mourad Nachtane, de la societate S VERTICAL pentru a fi accesibil tuturor partenerilor din proiectul D3T4H2S.

Modelele de Machine Learning elaborate au fost realizate si validate la nivel informatic utilizand sistemul MATLAB. Toate scripturile, functiile si spatiile de lucru ".mat" realizate au fost arhivate în fisierul ***WorkMLModels.zip***. Studiul de mai sus face apel la multiplele programe cuprinse în arhiva si bine comentate pentru a fi utilizate. Aceste programe confera si o modalitate de verificare a modelelor de tip ML.

2. Studiu publicabil în revista/volum conferinta naționala/internaționala

Acest studiu este publicat în articolul ISI (wos)

Machine Learning Algorithms That Emulate Controllers Based on Particle Swarm Optimization - An Application to a Photobioreactor for Algal Growth.

Processes 2024, 12, 991. Published: 13 May 2024

<https://doi.org/10.3390/pr12050991>

Impact Factor 2.8; (wos SCIE Q2); Citescore: 5.1 (Q2)

Special Issue: *Industrial Process Operation State Sensing and Performance Optimization*

În plus, s-a mai realizat un studiu publicat în articolul ISI (wos)

*Green Hydrogen—Production and Storage Methods: Current Status and Future Directions. **Energies** 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).

Livrabile:

- Studiul *Machine Learning models' construction for the load behavior of composite materials in the undamaged zone - Report of UGAL for the project Leap-Re D3T4H2S*.
- Cele doua articole ISI
- Arhiva **WorkMLModels.zip** continand programele de implementare a modelelor de Machine Learning.

Indicatori de rezultat:

- studii: 1
- articole publicate ISI: 2
- produse informatice: programele de implementare a modelelor ML (Arhiva **WorkMLModels.zip**)
- participari conferinte: 1 (la Milano, 8-11 octombrie 2024: LEAP-RE Pillar 1 Project Second Call: Mid-term scientific evaluation.)

Diseminare rezultate prin:

- site proiect <https://www.d3t4h2s.ugal.ro/index.php>
- cele 2 publicatii
- participare la conferinta de la Milano

Concluzie: Gradul de realizare al acestei etape este de 100%

Un model digital bazat pe date pentru recipiente de stocare a hidrogenului răspunzând provocărilor de tranziție energetică.

Proiect COFUND-LEAP-RE D3T4H2S

Rezumat executiv al activităților realizate în perioada martie - decembrie 2024

Forme generatoare de energie regenerabilă, cum este hidrogenul, necesită stocare și transport sigur de la locul de producție la utilizatori. Consorțiul internațional al celor șase parteneri implicați în proiectul D3T4H2S se ocupă de această problemă prin dezvoltarea unui model digital (digital twin) al vaselor de hidrogen termoplastice biodegradabile ranforsate cu nanotuburi și care sunt reciclabile. Metodologia propusă în acest proiect este bazată pe o abordare hibridă ce presupune modelare complexă (multi-scale) dar și o caracterizare experimentală avansată, ce reflectă expertiza multidisciplinară a echipelor implicate în proiect: (1) proiectarea materialelor compozite, (2) studiul experimental al comportamentului lor termo-mecanic, (3) modelarea numerică, și (4) utilizarea învățării automate (machine learning) pentru modele predictive și procese optime.

Zona științifică acoperită de cercetătorii partenerului Univ. Dunărea de Jos - Galați (UGAL) se referă la utilizarea învățării automate (machine learning) pentru modele predictive și procese optime. Ca partener în acest proiect, UGAL este în principal responsabil pentru două tipuri de taskuri:

- (A) *Elaborarea unor tehnici de optimizare* ce vor fi utilizate în partea a doua a proiectului, la implementarea în consorțiu a unui program expert pentru evaluarea și optimizarea în timp real a recipientelor de stocare a hidrogenului. Acest task este acoperit de Activitatea 1.1 din planul de realizare, adică *Analiza echivalenței unui algoritm de tip machine-learning cu un algoritm metauristic de decizie optimă, în vederea implementării prin ML a sistemului expert din Etapa 2*.
- (B) *Predicția comportamentului materialelor compozite* utilizate la fabricarea tankurilor de hidrogen, având diferite structuri, la variația unor parametri fizici. Acest task a implicat:

- Preluarea si analiza datelor obtinute de Coordonator si partenerul P2, ce caracterizeaza comportamentul termo-mecanic al materialelor compozite la scara micro; se va genera setul de date utilizabil pentru ML in actiunea 1.3;
- Constructia de modele de tip ML pentru comportamentul in sarcina a materialelor compozite utilizand datele generate de Activitatea 1.2 si sistemul de programare/simulare MATLAB.

Ca rezultat al cercetarii, a fost elaborat un studiu 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"

care a fost depus la coordonatorul S VERTICAL. Studiul este însoțit de programele MATLAB care reprezinta implementari ale modelelor de ML construite pentru rezolvarea problemei de predicție.

Alte rezultate ale proiectului au fost publicate în doua articole:

(1) *Machine Learning Algorithms That Emulate Controllers Based on Particle Swarm Optimization.*

Processes 2024, 12, 991. Published: 13 May 2024; <https://doi.org/10.3390/pr12050991>

Impact Factor 2.8; (wos SCIE Q2); Citescore: 5.1 (Q2)

Special Issue: *Industrial Process Operation State Sensing and Performance Optimization*

(2) *Green Hydrogen—Production and Storage Methods: Current Status and Future Directions.*

Energies 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).

Director Proiect

Viorel MÎNZU

