

## Raport de cercetare științifică ETAPA II. Modelare si optimizare REM

### Cuprins

1. Rezumat etapa .....	2
2. Descriere științifică și tehnică .....	3
2.1. Metodologie de lucru .....	3
2.2. Act2.1 - Implementarea si îmbunătățirea optimizatorilor de inspirație biologică (T2.2).....	3
2.2.1. Optimizatori .....	3
2.2.2. Strategie de îmbunătățire .....	4
2.3. Act2.2 - Optimizare model pentru sistemul hibrid (T2.2) .....	6
2.4. Act 2.3 - Optimizare de proces pentru sistemul REM (T2.3) – partea 1 .....	9
3. Rezultate obținute .....	12
4. Referințe.....	<u>1514</u>

## 1. Rezumat etapa

Etapa 2 a proiectului de cercetare „Modelare și optimizare bazată pe inteligența artificială aplicată unui sistem hibrid dezvoltat prin simbioza unor metode de tratare a apelor uzate” a fost axată pe implementarea algoritmilor de inteligență artificială, într-o formă optimizată pentru a modela și optimiza componentele sistemului REM în vederea identificării celor mai bune condiții de proces specifice fiecărui tip de sistem.

Astfel, au fost implementați următorii algoritmi: Bacterial Foraging Optimization (BFO), Grey Wolf Optimization (GWO), Invasive Weed Optimization (IWO) și Dragonfly Algorithm (DA). Aceștia, împreună cu Virus Optimization Algorithm (VOA) au fost dezvoltați și perfecționați folosind diferite tehnici specifice algoritmilor de inspirație biologică (Activitatea 2.1). În continuare, algoritmi obținuți au fost combinați cu Rețele Neuronale Artificiale (ANN) pentru a identifica cele mai bune modele care simulează sistemul analizat (Activitatea 2.2.). Structurile ANN optime au fost aplicate pentru optimizarea unor procese fizico-chimice de degradare sau reținere a poluanților (adsorbție pe cărbune activ, degradare fotochimică, fotocatalitică, sonochimică). Ca substanțe model au fost folosite: lichior negru (poluant caracteristic industriei celulozei), diverși coloranți (verde de bromcrezol, negru eriocrom T), antibiotice (eritromicină) și cianuri (Activitatea 2.3.).

În tabelul 1 sunt centralizați algoritmi, procedeele și metodele aplicate și modalitățile prin care au fost valorificate rezultate obținute. Au fost realizate toate activitățile prevăzute în planul de realizare pentru Etapa II și obiectivele propuse au fost îndeplinite 100%.

**Tabelul 1.** Îndeplinirea obiectivelor și valorificarea datelor experimentale în etapa 2 (2022)

Activitate	Metode utilizate	Observații	Valorificarea rezultatelor	
			Participări conferințe	Articole în extenso
<a href="#">T2.1. Optimizatori</a>	Bacterial Foraging Optimization (BFO) Grey Wolf Optimization (GWO) Invasive Weed Optimization (IWO) Dragonfly Algorithm (DA)	Algoritm implementat în varianta simplă și îmbunătățită folosind teoria haosului (ca metoda de inițializare), principiul opoziției (în varianta modificată), îmbunătățirea locală a celei mai bune soluții	<a href="#">EEC-22,</a> <a href="#">BRAMAT-22,</a> <a href="#">ICEPTP'22,</a> <a href="#">CABES-22</a>	<a href="#">POLYMER</a> <a href="#">RS,</a> <a href="#">AS &amp; T,</a> <a href="#">CABES,</a> <a href="#">CTSSMD-</a> <a href="#">22,</a> <a href="#">BIPI</a>
<a href="#">T2.2. Optimizare model</a>	BIA-ANN	Algoritmii implementați în T2.2 au fost combinați cu rețele neuronale și aplicați pentru optimizarea parametrilor rețelei astfel încât să fie identificat modelul cu cea mai bună performanță	<a href="#">CTSSMD-22,</a> <a href="#">CSD-22</a> <a href="#">SICHEM-22</a>	
<a href="#">T2.3 Optimizare proces-partea</a>	BIA-ANN/regresie-proces	Rețelele cele mai bune obținute în T2.3, individuale sau combinate cu modele de regresie au fost aplicate în diferite cazuri pentru a identifica condițiile de proces cu eficiența cea mai mare.		

## 2. Descriere științifică și tehnică

### 2.1. Metodologie de lucru

Pentru a modela eficient procesele studiate, au fost stabiliți o serie de pași în cadrul unei metodologii de lucru:

- [1] Crearea unui framework general care să cuprindă elementele comune ale tuturor algoritmilor prin implementarea de interfețe și clase abstracte în C# (Microsoft Visual Studio).
- [2] Implementarea fiecărui algoritm de inspirație biologică considerat, luând în calcul particularitățile acestuia și caracteristicile generale (parametri de control, strategie pentru păstrarea echilibrului explorare-exploatare, strategie pentru memorarea celei mai bune soluții temporare).
- [3] Modificarea algoritmilor BIA implementați anterior prin aplicarea unor strategii de îmbunătățire: i) la nivel de inițializare (utilizarea principiilor de haos în varianta simplă sau combinată cu principiul opoziției modificat); ii) la nivel de cea mai bună soluție (prin utilizarea principiului de căutare locală aplicată celei mai bune soluții obținute până în acel moment).
- [4] Testarea algoritmilor în varianta clasică precum și modificată în vederea identificării strategiilor care duc la îmbunătățirea performanței pentru fiecare algoritm în parte. În acest caz, testarea s-a realizat pe probleme sintetice (problema cercului, problema Rosenbrok, etc.).
- [5] Combinarea algoritmilor implementați anterior cu ANNs. În acest caz rețeaua este considerată ca o problemă de optimizare, unde parametrii sistemului reprezintă caracteristicile rețelei (număr de straturi ascunse, număr de neuroni pe fiecare strat și parametri interni - ponderi și bias-uri) iar ieșirea ce se dorește a fi minimizată este eroarea dintre predicțiile generate de model și datele experimentale care descriu procesul de studiat.
- [6] Testarea combinației BIA-ANN în vederea identificării modelului optim pentru fiecare caz studiat (la nivel de modul REM).

### 2.2. Act2.1 - Implementarea și îmbunătățirea optimizatorilor de inspirație biologică (T2.2)

#### 2.2.1. Optimizatori

**BFO** [1] este inspirat din mecanismul de căutare al hranei de către bacterii (*E. coli*) și este un algoritm de tip swarm care simulează o serie de procese biologice: chemotaxa, roire, reproducere, eliminare - dispersie. Pasul de chemotaxă simulează mișcarea bacteriilor în funcție de gradientul chimic din mediu. Mișcarea este compusă din două tipuri de rotație: (i) în sensul acelor de ceasornic, rezultând o mișcare înainte; și (ii) în sens invers acelor de ceasornic, ceea ce generează o mișcare de rostogolire. În pasul de reproducere se realizează copii pentru cele mai sănătoase 50% dintre bacterii. Starea de sănătate se măsoară folosind o funcție care în terminologia standard a algoritmilor evolutivi este referită ca funcție de fitness. În etapa de eliminare-dispersare, unele bacterii sunt înlocuite cu o probabilitate prestabilită.

Rolul acestei etape este de a genera diversitate și de a evita cazurile în care toți indivizii sunt concentrați într-o anumită zonă (minime locale).

**GWO** [2] este un algoritm inspirat din comportamentul lupilor (*Canis Lupus*) și modul în care aceștia vânează. Mecanismele simulate sunt: i) ierarhia socială (unde fiecărui animal din haita îi este asociată o categorie: cel mai bun  $\alpha$ , următorii doi cei mai buni  $\beta$  și  $\delta$  iar restul  $\omega$ ). Căutarea este ghidată de  $\alpha$ ,  $\beta$  și  $\delta$ ; ii) încercuirea prăzii; iii) vânatoare; iv) atacarea prăzii (corespunzătoare mecanismului de exploatare) și v) căutarea prăzii (corespunzătoare mecanismului de explorare).

**IWO** [3] simulează mecanismul prin care se propagă buruienile. Inițial, un număr finit de semințe sunt răspândite în aria de căutare (pas echivalent cu inițializarea specifică oricărui algoritm de inspirație biologică). Fiecare sămânță generează o plantă, care la rândul ei, produce un nou set de semințe (procesul de reproducere). Semințele nou generate sunt aleator dispersate (simulare generată folosind un generator de numere aleatoare cu o distribuție normală și o deviația standard variabilă în funcție de iterația curentă). În momentul în care numărul de plante este suficient de mare, apare competiția, plantele mai puțin adaptate (indice măsurat prin funcția de fitness) sunt eliminate.

**DA**[4] este un algoritm de tip swarm care modelează interacțiunile din grupurile de libelule la nivel social, navigare, căutare hrană și evitare prădători la nivel static (grup local caracterizat prin mișcări bruște) și la nivel global (grup mare de insecte care migrează într-o singură direcție pe distanțe lungi). Comportamentul local corespunde procesului de exploatare în timp ce comportamentul dinamic simulează procesul de explorare. Mecanismele simulate includ: separarea (procesul prin care la nivel static se evită coliziunile dintre două sau mai multe libelule din aceeași zonă), alinierea (corespunzătoare procesului de sincronizare a vitezelor insectelor din aceeași vecinătate) și coeziunea (tendința insectelor de a se comasa în centrul vecinătății).

Implementarea acestor algoritmi în C# poate fi găsită pe site-ul proiectului ([link](#))

### 2.2.2. Strategie de îmbunătățire

Toți algoritmi selectați, deși au surse de inspirație diferite, sunt optimizatori care au la bază același principiu: o populație de indivizi este inițial generată și aceasta evoluează (folosind diferite mecanisme) până când o condiție de stop este îndeplinită. Deși de cele mai multe ori condiția de stop este considerată ca fiind reprezentată de numărul de iterații/generații, pentru a avea un control asupra procesului de identificare a celei mai bune soluții pentru sistemele analizate, numărul de funcții de evaluare (FE) reprezintă criteriul comun de stop. În contextul curent, funcția de evaluare este reprezentată de funcția de fitness. De fiecare dată când această funcție este apelată, contorul pentru FE este incrementat.

Astfel, pentru majoritatea algoritmilor, calitatea soluțiilor inițiale influențează procesul de căutare. În acest context, una din posibilele strategii de îmbunătățire constă în înlocuirea distribuției normale utilizate în mod standard cu un alt tip de distribuție sau cu principiile teoriei haosului. O altă strategie constă în aplicarea principiului opoziției (Opposition Based Learning-OBL) pentru a îmbunătăți funcția de fitness a populației inițiale. În acest caz, OBL se poate face aplicând mai multe strategii: i) comparare între fiecare individ și opusul acestuia și selecția

celui mai bun; ii) generarea tuturor opușilor și selecția celor mai buni indivizi din reuniunea celor două mulțimi.

În cazul în care se aplică îmbunătățiri la nivel de soluție locală, s-au aplicat două variante: i) algoritmul BackPropagation (BK) (combinație posibilă doar în cazul în care optimizarea se face pentru ANN) și ii) hibridizarea Random Search (RS) cu OBL (combinație posibilă indiferent de tipul de optimizare considerat - de model sau de proces). BK este algoritmul de antrenare standard utilizat pentru optimizarea rețelelor neuronale de tip MLP și este bazat pe calculul gradientilor. Pe de altă parte, RS și OBL pot fi aplicate oricărei structuri codate în vectori de numere reale, astfel că limitarea specifică BK nu se aplică și în cazul acestora.

Indicatorii statistici între diferitele combinații realizate pentru rezultatele obținute în cazul problemei Sfera cu dimensionalitate 10 atunci când se consideră un număr de funcții de evaluare (FE)=10000 și 50 de simulări sunt prezentați în tabelul 2. Pentru această funcție, minimumul este cunoscut și are valoarea 0. Astfel, algoritmiile cu rezultatele cele mai apropiate de zero sunt considerate cei mai buni.

**Tabel 2.** Indicatorii statistici metode de îmbunătățire a algoritmilor BIA la nivel de inițializare

		Medie	Minim	Maxim	Deviație standard
BFO	Clasic	6,33E+00	8,72E-12	1,95E+02	2,90E+01
	Haos	2,83E+01	5,90E-10	4,52E+02	8,39E+01
	OBL_1	3,81E+01	2,01E-10	8,52E+02	1,40E+02
	OBL_2	6,73E+00	4,61E-11	2,30E+02	3,30E+01
DA	Clasic	5,11E-02	2,31E-06	4,88E-01	9,27E-02
	Haos	4,41E-02	5,38E-06	8,53E-01	1,29E-01
	OBL_1	5,52E-02	5,51E-06	1,10E+00	1,55E-01
	OBL_2	4,40E-02	5,94E-06	4,91E-01	8,42E-02
GWO	Clasic	4,31E-66	1,94E-79	1,86E-64	2,62E-65
	Haos	1,54E-190	2,09E-243	3,70E-189	0,00E+00
	OBL_1	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
	OBL_2	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
IWO	Clasic	2,09E-03	4,17E-06	2,89E-02	5,48E-03
	Haos	3,99E-04	4,56E-06	1,02E-02	1,55E-03
	OBL_1	9,50E-04	5,34E-06	1,83E-02	3,00E-03
	OBL_2	5,82E+03	3,66E-04	2,91E+05	4,07E+04
VOA	Clasic	4,49E-04	5,87E-08	3,86E-03	8,59E-04
	Haos	7,99E-04	2,40E-07	5,65E-03	1,41E-03
	OBL_1	2,27E-04	3,77E-08	2,11E-03	3,93E-04
	OBL_2	3,85E-04	3,61E-08	5,12E-03	8,63E-04

După cum se poate observa, aplicarea diferitelor metode de îmbunătățire a avut o influență diferită asupra performanței totale a algoritmilor considerați. Pentru modificările la nivel de cel mai bun individ, s-au păstrat setările considerate pentru îmbunătățirile la nivel de inițializare. Statisticile rezultatelor obținute în acest caz sunt prezentate în Tabel 3. După cum poate fi observat, pentru funcția testată, utilizarea unei proceduri de îmbunătățire locală a celei mai bune soluții nu duce întotdeauna la creșterea performanței. Acest lucru poate fi explicat de

faptul că îmbunătățirea locală blochează identificarea unor noi zone cu performanță similară, în special pentru algoritmi cu o metoda „greedy” de selecție a unei noi populații.

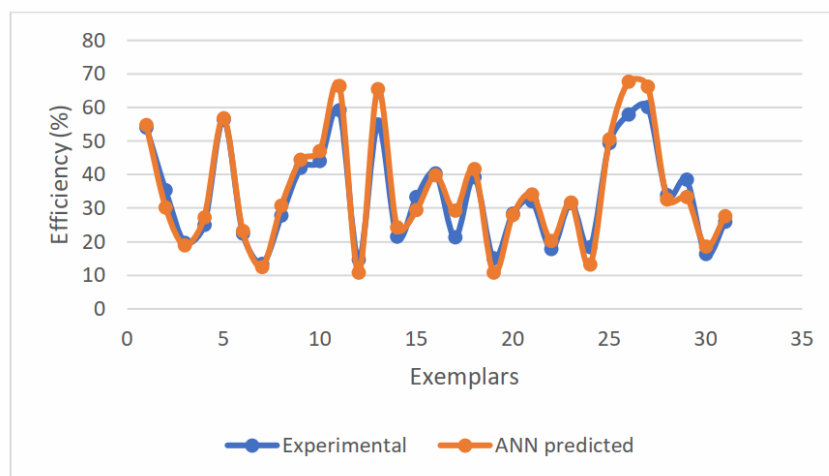
**Tabel 3.** Indicatori statistici metode de îmbunătățire a algoritmilor BIA la nivel de cel mai bun individ

	Medie	Minim	Maxim	Deviație standard
BFO	7,83E-11	1,59E-14	3,29E+02	4,61E+01
DA	4,21E-02	2,59E-05	3,35E-01	7,27E-02
GWO	8,14E-95	3,13E-116	4,07E-93	5,69E-94
IWO	3,67E-02	2,36E-03	2,64E+01	5,01E+00
VOA	7,83E+00	3,92E-12	5,16E-07	7,27E-02

### 2.3. Act2.2 - Optimizare model pentru sistemul hibrid (T2.2)

Pentru modelarea componentelor sistemului REM, algoritmi cu cele mai bune performanțe au fost combinați cu ANN. În acest caz, având în vedere structurile cu care algoritmi pot lucra (vectori de numere reale), a fost aplicată o procedură de codare a ANN. Astfel, toți parametrii ANN care se doresc a fi optimizați (număr de straturi ascunse, număr de neuroni în fiecare strat, ponderi, bias și funcții de activare pentru fiecare neuron) au fost codati direct. Totodată, potrivirea indivizilor la mediu (funcția de fitness) este calculată folosind eroarea medie pătratică determinată în faza de testare. Pașii parcurși pentru optimizarea de model sunt următorii: 1) datele sunt împărțite în 2 seturi (antrenare și testare); 2) sunt setați parametrii de control pentru optimizatori; 3) sunt setate limitele maxime pentru arhitectura rețelei; 4) se aplică optimizatorul (care folosește o serie alternată codare-decodare pentru a evolua o mulțime generată aleator de ANN); 5) rețeaua cea mai bună generată de către optimizator se aplică în diferite cazuri pentru a testa capacitatea de generalizare.

De exemplu, pentru modelarea procesului de decolorare *a verdei de bromcrezol* folosind cărbune activ, metoda de regresie clasică a fost comparată cu varianta BFO-ANN. Compararea între datele prezise de către cea mai bună rețea (cu o topologie 3:33:22:1) și datele obținute experimental sunt prezentate în Figura 1. Rezultatele complete ale acestui studiu sunt prezentate în [5].



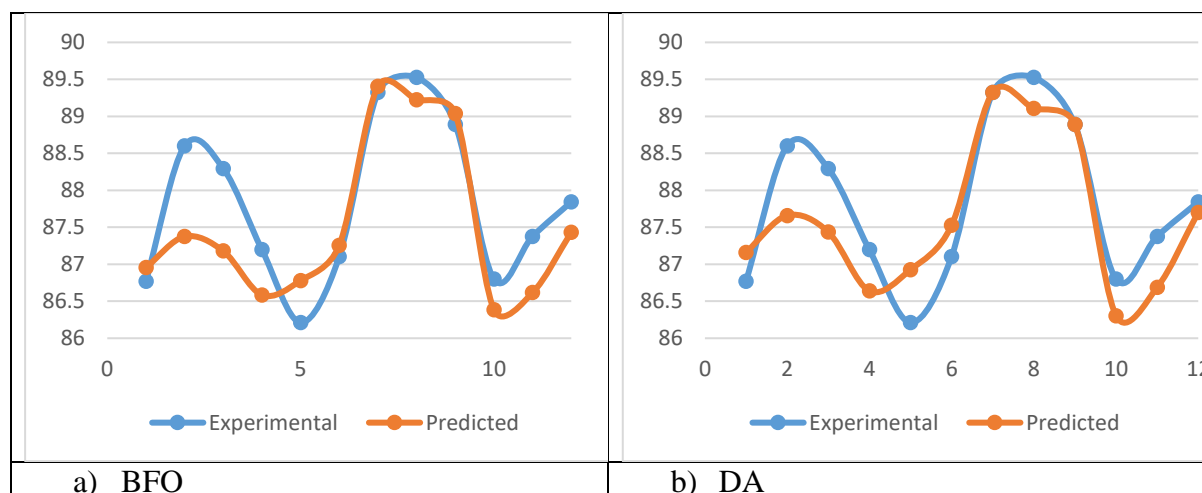
**Figura 1.** Comparație între predicțiile ANN și datele experimentale.

Un alt exemplu este cel al procesului de *degradare al eritromicinei* prin metode fotocatalitice. Pentru realizarea acestui studiu au fost folosite diverse concentrații de  $TiO_2$ , urmărindu-se identificarea cantității optime de catalizator, menținând constante concentrația inițială de poluant și timpul de expunere la radiația ultravioletă. În acest caz, pe baza datelor experimentale obținute, s-a determinat modelul neuronal cu cea mai bună performanță. Folosind algoritmi anteriori, în configurația clasică, pentru 50 de simulări realizate în fiecare caz, statisticile sunt prezentate în Tabelul 4.

**Tabel 4.** Statistici modelele neuronale obținute pentru procesul de degradare al eritromicinei.

	Model	Fitness	MSE <sub>tr</sub>	MSE <sub>test</sub>	Corell <sub>tr</sub>	Corell <sub>test</sub>
BFO	Cel mai bun	62,76687	0,015932	0,018756	0,880618	0,86823
	Cel mai rău	51,55974	0,019395	0,01896	0,852644	0,84787
	Medie	58,40183	0,017155	0,016245	0,87136	0,874116
DA	Cel mai bun	61,09734	0,016367	0,015219	0,878351	0,872184
	Cel mai rău	52,65268	0,018992	0,018308	0,866939	0,864864
	Medie	56,35407	0,017766	0,016453	0,869942	0,875057
GWO	Cel mai bun	53,45641	0,016357	0,017217	0,764334	0,745454
	Cel mai rău	3,406332	0,293571	0,321747	0,534223	0,365478
	Medie	45,73448	0,039357	0,021747	0,658426	0,625454
IWO	Cel mai bun	9,907513	0,100934	0,060807	0,703236	0,795064
	Cel mai rău	0,107612	9,292637	9,0396	-0,8576	-0,85496
	Medie	3,620452	1,174362	1,097731	-0,36515	-0,36578
VOA	Cel mai bun	60,69715	0,016475	0,017768	0,878995	0,866129
	Cel mai rău	54,03855	0,018505	0,019298	0,871994	0,89145
	Medie	57,50657	0,017402	0,016109	0,872129	0,878226

O comparație între predicțiile obținute în faza de testare pentru algoritmi BFO și DA este prezentată în Figura 2. După cum se poate observa, deși rețeaua obținută cu BFO are o performanță ușor mai ridicată în faza de antrenare, capacitatea de generalizare a ANN determinate cu DA este mai mare. Astfel, pentru acest caz, algoritmul DA a fost considerat ca fiind cel mai potrivit pentru faza de modelare.



**Figura 2.** Comparație între predicțiile obținute cu algoritmi DA și BFO pentru datele de test.

O procedura similară a fost aplicată pentru a modela procesul de degradare sonochimică a **cianurilor**. Experimentele au fost efectuate pornind de la o concentrație de ioni CN<sup>-</sup> de 0,1 mg/L, la o temperatură de 30-35 °C, folosind un volum de soluție de 100 mL. Au fost testate trei cazuri diferite: a) ultrasunete + oxigen din aer; b) ultrasunete + oxigen din aer + BaO<sub>2</sub>; c) ultrasunete + oxigen din aer + H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>. Astfel, eficiența a fost determinată considerând ca parametri: timpul și prezența BaO<sub>2</sub> sau H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>. Pentru a determina cel mai bun model neuronal, au fost aplicați algoritmi implementați în varianta OBL-1 (Tabel 5).

**Tabel 5.** Statistici pentru ANN determinate pentru modelare degradare cianuri

		Fitness	MSEtr	MSEtest	CorellTr	CorellTst	Topologie
BFO	Cel mai bun	130,9557	0,007636	0,003002	0,785328	0,4531	3:07:01
	Cel mai rău	73,52418	0,013601	0,001148	0,494284	0,675013	3:03:01
	Medie	97,18191	0,010548	0,001136	0,652263	0,464639	
DA	Cel mai bun	81,95439	0,012202	0,002816	0,594604	0,476312	3:06:01
	Cel mai rău	61,88654	0,016159	0,00567	0,3848	0,497846	3:14:01
	Medie	71,18085	0,014108	0,002759	0,491208	0,372592	
GWO	Cel mai bun	90,40274	0,011062	0,002924	0,645529	0,356381	3:14:01
	Cel mai rău	67,98867	0,014708	0,001246	0,48371	0,368836	3:05:01
	Medie	73,40566	0,013671	0,002309	0,508817	0,38875	
IWO	Cel mai bun	9,171629	0,109032	0,086857	0,256756	0,380236	3:11:01
	Cel mai rău	0,137733	7,260441	5,380446	0,032853	0,217443	3:16:01
	Medie	2,886022	1,32308	1,237102	0,058216	0,10742	

După cum se poate observa din Tabelul 5, cel mai bun model a fost determinat de algoritmul BFO, cele mai ineficiente rezultate pentru acest caz obținându-se cu algoritmul IWO. Acest lucru poate fi explicat de faptul că faza de explorare a IWO are nevoie de mai multe funcții de evaluare pentru a identifica zone de minim local. Relațiile matematice (Python) care descriu ANN obținute de BFO, varianta îmbunătățită cu OBL-1 sunt:

$$INP\_0 = -1E - 20 + 0.001 + (timp - 0) * (0.999 - 0.001) / (35 - 0) \quad (1)$$

$$INP\_1 = -1E - 20 + 0.001 + (BaO2\_prezent - 0) * (0.999 - 0.001) / (1 - 0) \quad (2)$$

$$INP\_2 = -1E - 20 + 0.001 + (H2O2\_prezent - 0) * (0.999 - 0.001) / (1 - 0) \quad (3)$$

$$H1\_0 = \max(0, +INP\_0 * -0.957874563958245 + INP\_1 * 0.691599787669831 + INP\_2 * 0.518840990427546 + -0.393247707013902) \quad (4)$$

$$H1\_1 = ((\text{math.sqrt}(\text{math.pow}(+INP\_0 * 0.880010932891452 + INP\_1 * -0.24008722270303 + INP\_2 * -0.136490968504373 + 0.153745868937479, 2) + 1.0) - 1.0) / 2.0 + +INP\_0 * 0.880010932891452 + INP\_1 * -0.24008722270303 + INP\_2 * -0.136490968504373 + 0.153745868937479) \quad (5)$$

$$H1\_2 = ((\text{math.exp}(0.743344184963114 * (+INP\_0 * -0.726733104913272 + INP\_1 * -0.106423079337348 + INP\_2 * -0.42437786020433 + -0.167027779051227)) - 1) / 0.743344184963114 + 0.743344184963114) \quad (6)$$



$$H1_3 = \max(0, +INP_0 * -0.0661876064329061 + INP_1 * -0.574225754316385 + INP_2 * -0.217773008721337 + 0.672051927919784) \quad (7)$$

$$H1_4 = (2.0 / (1.0 + \text{math.exp}(-2 * (+INP_0 * -0.00788786206861526 + INP_1 * -0.430220229430248 + INP_2 * 0.671985839956993 + 0.00599270776067229))) - 1) \quad (8)$$

$$H1_5 = \text{math.abs}(+INP_0 * -0.923654434052291 + INP_1 * 0.259451761895012 + INP_2 * 0.212936096779567 + -0.0853937273477763) \quad (9)$$

$$H1_6 = (1.0 / (1.0 + \text{math.exp}(-(+INP_0 * -0.83169180898953 + INP_1 * -0.439003040705034 + INP_2 * 0.221825629548235 + 0.26204760015885)))) \quad (10)$$

$$OUTPUT_1 = \text{math.abs}(+H1_0 * 0.925458620474711 + H1_1 * -0.611096685793087 + H1_2 * 0.0979494705604952 + H1_3 * -0.0114381299920824 + H1_4 * -0.00552713408644828 + H1_5 * 0.907577870183149 + H1_6 * 0.552275056541536 + -0.301855274312587) \quad (11)$$

$$\text{Eficienta} = (OUTPUT_1 + 1E - 20 - 0.001) * (1 - 0.03) / (0.999 - 0.001) + 0.03 \quad (12)$$

#### 2.4. Act 2.3 - Optimizare de proces pentru sistemul REM (T2.3) – partea 1

Pentru a optimiza sistemul REM, diferite elemente individuale au fost analizate în vederea identificării condițiilor ce duc la eliminarea maximă a diferitelor clase de poluanți analizați. S-au utilizat atât modele neuronale determinate cu algoritmi de optimizare prezentați în secțiunea anterioară cât și metode statistice clasice.

De exemplu, pentru optimizarea procesului de eliminare a *Eriocrom Negru T* prin adsorbție pe cărbune activ, s-a utilizat o metoda de regresie standard combinată cu metodele clasice de optimizare prezente în aplicația software Minitab. În acest caz, a fost investigată experimental eficiența procesului de adsorbție în regim static (fără agitare mecanică) și în regim dinamic (cu agitare mecanică). S-a demonstrat că varianta cu amestecare conduce la rezultate mai bune comparativ cu varianta statică.

Pe de altă parte, pentru același colorant, s-a aplicat și procesul de degradare fotocatalitică cu TiO<sub>2</sub>. Au fost făcute predicții asupra randamentului de îndepărtare a colorantului (Y, %), valori care au fost validate practic. Astfel, în urma optimizării procesului de decolorare s-a obținut o creștere a randamentului de la 75.35 % (randamentul obținut în timpul determinărilor) la 98.37 % (randamentul obținut la validare). Rezultate parțiale au fost publicate în [6]. Pentru același proces, optimizarea folosind algoritmi de inspirație biologică a identificat mai multe condiții de lucru care conduc la rezultate optime, existând posibilitatea de alege varianta cea mai bună din mai multe considerente (consum de catalizator, timp, economic, etc). Combinațiile identificate pentru valorile parametrilor de proces care conduc la cele mai bune sunt prezentate în Tabelul 6. Rezultatele complete ale acestui studiu sunt prezentate în [7].

**Tabel 6.** Rezultate optimizare pentru procesul de eliminare al Eriocrom Negru T

Varianta	Z1	Z2	Z3	Eficiență (%)
DE Clasic	1,533	1961,250	0,325	98,901
	1,249	1961,250	0,325	97,853
	0,735	1961,250	0,325	92,924
JADE	1,722	1961,250	0,325	98,934
	1,094	1958,317	0,325	96,642
	1,260	1876,835	0,325	93,961
SADE	1,706	1961,250	0,325	98,951
	1,480	1961,250	0,325	98,797
	1,301	1961,250	0,325	98,135

Pentru optimizarea procesului de decolorare a *lichiorului negru* obținut prin hidroliză alcalină din tulpini de porumb folosind adsorbția pe cărbune activ și degradarea fotochimică în prezență de TiO<sub>2</sub>, s-au aplicat algoritmi de inspirație biologică în mai multe cazuri: i) limitele condițiilor de funcționare au fost aceleași ca în datele experimentale (cazul 1); ii) limitele au fost extinse la ±20 % (extrapolare) (cazul 2); și iii) cantitatea de reactivi activi adăugată a fost limitată (1-20 g/L cărbune activ și 0,4-1 g/L TiO<sub>2</sub>) (cazul 3). Tabelele 7 și 8 enumeră cinci soluții obținute în fiecare dintre aceste trei cazuri. Este demn de menționat faptul că, datorită naturii aleatorii a optimizatorului, la fiecare rulare, se pot obține soluții diferite. Rezultatele complete ale acestui studiu sunt prezentate în [8].

**Tabel 7.** Soluții de optimizare în cazul decolorării cu cărbune activ

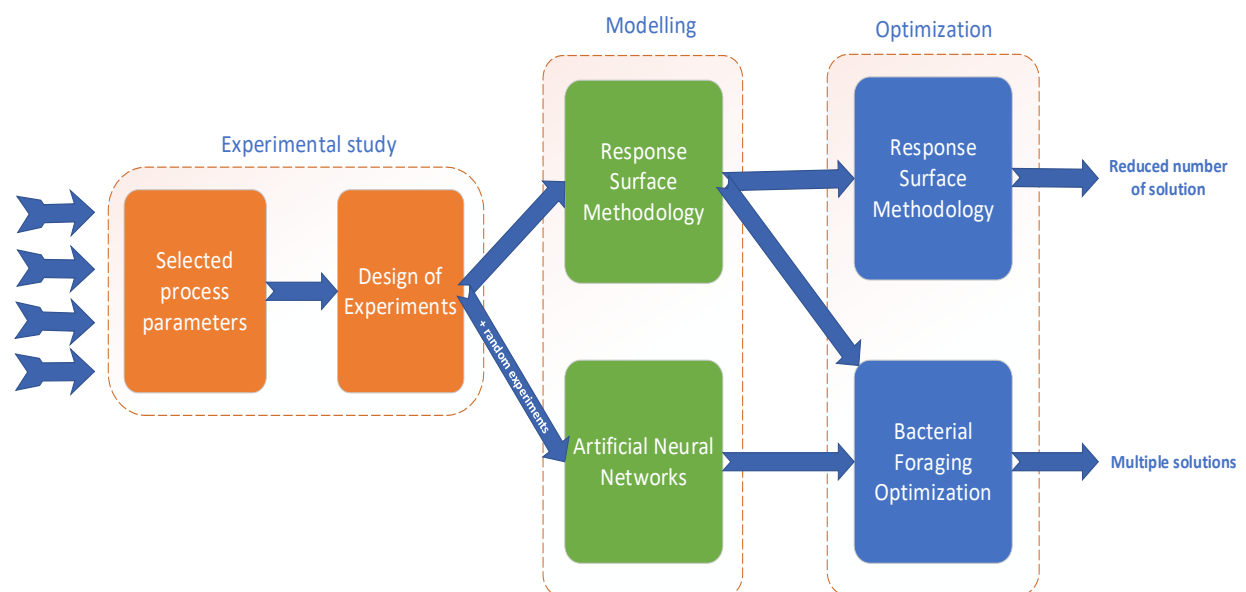
Caz	Soluție	AC, g/L	Ct, min	Dil,	η <sub>ACD</sub> , (%) - prezis	η <sub>ACD</sub> , (%) - experimental
Caz 1	1	19,07	47,51	169,59	100	99,03
	2	36,3	41	138,16	100	-
	3	25,87	42,6	131,24	100	-
	4	31,27	39,15	104,08	99,98	-
	5	7,29	52,42	121,7	99,97	98,87
Caz 2	1	56,76	50,48	134,08	100	97,42
	2	32,21	42,92	191,68	100	-
	3	25,94	43,69	152,67	100	-
	4	19,46	46,83	157,38	99,97	-
	5	55,7	48,1	120,17	99,95	98,24
Caz 3	1	4,84	55,18	135,77	100	98,76
	2	8,98	54,14	172,91	100	-
	3	12,34	50,02	137,35	100	-
	4	17,99	46,49	135,48	100	-
	5	19,99	47,38	183,31	99,98	98,69

**Tabel 8.** Soluții de optimizare în cazul aplicării procesului de fotocataliză

Caz	Soluție	TiO <sub>2</sub> , g/L	It, min	hUV, cm	η <sub>PCD</sub> , (%) - prezis	η <sub>PCD</sub> , (%) - experimental
Caz 1	1	0,89	59,99	2,85	41,64	40,84

	2	0,90	58,83	3,03	40,98	-
	3	0,90	57,74	2,96	40,88	-
	4	0,99	59,82	3,04	40,45	-
	5	1,10	57,74	3,33	38,70	36,42
	Caz 2	1	0,71	71,98	2,28	46,58
	2	0,72	68,42	2,30	45,88	-
	3	0,75	70,08	2,34	45,77	-
	4	0,78	69,11	2,46	45,08	-
	5	0,87	69,03	3,41	42,34	42,4
	Caz 3	1	0,40	59,99	2,85	46,83
	2	0,49	57,28	2,88	45,09	-
	3	0,48	55,41	3,57	43,53	-
	4	0,43	48,59	3,11	43,26	-
	5	0,56	54,91	3,65	42,35	41,75

În cazul procesului de adsorbție a colorantului *verde de bromcrezol*, procedura de modelare și optimizare a inclus atât metode statistice cât și combinații cu optimizatorul BFO și ANN. Etapele efectuate pentru realizarea acestui studiu sunt reprezentate grafic în Figura 3. Rezultatele complete ale acestui studiu au fost prezentate în [9].



**Figura 3.** Pașii de modelare și optimizare aplicați pentru procesul de decolorare a colorantului verde de bromocrezol.

Pentru optimizare, au fost luate în considerare trei situații: i) când limitele de căutare sunt cele obținute prin experimentele suplimentare efectuate pentru a extinde setul de date ii) când limitele sunt stabilite ca în abordarea DOE (-1,1) și iii) atunci când limitele sunt stabilite la  $(-\alpha, \alpha)$ . Cele mai bune soluții obținute în cele 3 cazuri sunt prezentate în Tabel 9.

**Tabel 9.** Optimizarea decolorării colorantului verde de bromocrezol

	Soluție	AA [g/L]	CT [min]	BCG [g/L]	$\eta$ [%]
i) Limite extinse	1	0,110	4080	0,001730	99,9
	2	1,012	3862	0,001490	95,8
	3	1,188	1813	0,000330	93,0
	4	0,188	1737	0,000330	92,5
	5	2,771	3551	0,043100	92,3
ii) (-1,1) din DOE *	6	1,777	237	0,009000	45,6
	7	1,685	235	0,009800	43,9
	8	1,687	227	0,011010	43,9
	9	1,795	238	0,009070	43,8
	10	1,353	155	0,027460	37,1
iii) (- $\alpha$ , $\alpha$ ) din DOE *	11	1,844	197	0,005111	39,3
	12	2,112	212	0,005184	39,1
	13	2,243	202	0,006830	37,4
	14	1,485	123	0,007219	37,1
	15	1,162	79	0,007698	36,0

După cum se poate vedea în tabelul 7, rezultatele pentru cazul cu limitele extinse permit identificarea condițiilor care conduc la o eficiență de ~100%. În ceea ce privește cazurile în care a fost luat în considerare intervalul (-1,1), soluțiile furnizate cu modelul bazat pe ANN au o eficiență mai mare decât cele obținute cu modelul bazat pe RSM. Pe de altă parte, pentru (- $\alpha$ ,  $\alpha$ ), soluțiile furnizate au avut o eficiență similară.

Pentru procesul de degradare al **cianurilor** folosind ultrasunete, folosind modelul neuronal descris de ecuațiile 1-12, s-a realizat și optimizarea procesului în scopul identificării condițiilor care duc la maximizarea eficienței. În acest caz datorită faptului că doi dintre cei trei parametri de optimizat sunt valori discrete (care identifică procesul ce folosește BaO<sub>2</sub> sau H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>), s-a aplicat optimizatorul care în majoritatea testelor aplicate a dat cele mai bune rezultate (BFO). Spre deosebire de celelalte procese, unde diferite combinații ale parametrilor de proces aveau aceeași eficiență de degradare, pentru procesul de degradare al cianurilor, optimizarea a indicat faptul că aplicarea H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> duce la cele mai bune rezultate.

### 3. Rezultate obținute

**Tabel 11.** Centralizator

Denumire	Planificat	Grad de realizare (planificat/realizat)	Detalii
D1.1. Baza de date cu rezultatele experimentale procesate	Baza de date	Îndeplinit(1/1)	Pe site ( <a href="#">link</a> )
D1.2 Algoritmi de optimizare	Raport	Îndeplinit(1/1)	Raportul științific și tehnic (document curent)

D2.3. Metodologie de modelare și optimizare	Metodologie de lucru	Îndeplinit(1/1)	Metodologia prezentată în secțiunea 2.1.
D1.3 Diseminare	4 conferințe internaționale 2 articole ISI de înaltă calitate	Îndeplinit (4/7 2/2; 0/1; 0/2)	7 manifestări științifice internaționale ( <b>Tabel 12</b> ) 2 articole ISI (1 în zona roșie și unul în zona galbenă) 1 BDI în curs de publicare, 2 abstracte în extenso în volume ale conferințelor ( <b>Tabel 13</b> )

**Tabel 12.** Participări conferințe

Nr. crt.	Conferința	Titlu	Autori
1	The 7 <sup>th</sup> International Conference "Ecological and Environmental Chemistry-2022" (EEC-2022), March 3-4, 2022, Chișinău, Republic of Moldova	Wastewater treatment of effluents containing eriochrome black T using an UV reactor. Experimental, modelling and optimization ( <a href="#">link</a> )	GD Suditu, EN Drăgoi, V Dafinescu, L Pintilie, MT Nechita
2	The 12 <sup>th</sup> International Conference on "Materials Science & Engineering" (BRAMAT 2022), March 9-12, 2022, Brasov, Romania	Photochemical decolorization: investigations regarding economic viability of cosmetic grade TiO <sub>2</sub> ( <a href="#">link</a> )	L Pintilie, EN Drăgoi, GD Suditu, MT Nechita, V Dafinescu
3	The 7 <sup>th</sup> International Conference on "Environmental Pollution, Treatment and Protection" (ICEPTP'22), April 10-12, 2022, Lisbon, Portugal	Eriochrome black T decolorization with active carbon and hv/TiO <sub>2</sub> : modeling and process optimization ( <a href="#">link</a> )	L Pintilie, EN Drăgoi, GD Suditu, MT Nechita, V Dafinescu
4	The 24 <sup>th</sup> Paris International Conference on "Advances on Chemical, Agricultural, Biological & Environmental Sciences" (CABES-22), April 19-21, 2022, Paris, France	Photo-decolorization of eriochrome black T: process optimization with Differential Evolution algorithm ( <a href="#">link</a> )	L Pintilie, MT Nechita, GD Suditu, EN Drăgoi, V Dafinescu
5	Conferința tehnico-științifică a studenților, masteranzilor și doctoranzilor, 2022. Universitatea Tehnică a Moldovei, Martie 29 - 31, 2022, Chișinău, Republica Moldova	Optimizarea procesului de decolorare a unui efluent folosind metoda suprafeței de răspuns ( <a href="#">link</a> )	E Sava, L Pintilie, MT Nechita
6	"Gheorghe Asachi" Technical University of Iasi, Romania 5 <sup>th</sup> International Conference of the Doctoral School, May 18 - 20, 2022, Iași, România	Application of Response Surface Method for Optimization of Eriochrome Black T	L Pintilie, E Sava, EN Drăgoi, C Teodosiu

		Removal by Adsorption ( <a href="#">link</a> )	
7	SICHEM 2022: Symposium Of Chemical Engineering And Materials , Faculty of Chemical Engineering and Biotechnologies, Bucharest, Romania 17-18 November, 2022	Synergetic effect of ultraviolet light and ultrasound. Case study: photochemical degradation of methylene blue ( <a href="#">link</a> )	AE Sava, EN Drăgoi, GD Suditu, MT Nechita

**Tabel 13.** Publicații in extenso

Nr. crt.	Revista	Zona si FI	Titlu lucrare	Autori
1	POLYMERS, 2022, 14(9), 1662 <a href="https://doi.org/10.3390/poly m14091662">https://doi.org/10.3390/poly m14091662</a>	Roșie, <b>4.967</b>	An Experimental Study on the Hot Alkali Extraction of Xylan-Based Hemicelluloses from Wheat Straw and Corn Stalks and Optimization Methods ( <a href="#">link</a> )	AC Puitel, GD Suditu, M Danu, GL Ailiesei, MT Nechita
2	ADSORPTION SCIENCE & TECHNOLOGY, ID articol 8110436, doi: 10.1155/2022/8110436	Galbenă <b>4.373</b>	Artificial Intelligence-Based Tools for Process Optimization: Case Study—Bromocresol Green Decolorization with Active Carbon ( <a href="#">link</a> )	GD Suditu, EN Drăgoi, AG Apostică, AM Mănăilă, VM Radu, AC Puițel, MT Nechita
3	Proceedings book, The 24th Paris International Conference on Advances on Chemical, Agricultural, Biological & Environmental Sciences (CABES-22), 2022, 43 – 47, ISBN: 978-989-9121-02-7	Capitol carte	Photo-decolorization of eriochrome black T: process optimization with Differential Evolution algorithm ( <a href="#">link</a> )	L Pintilie, MT Nechita, GD Suditu, EN Drăgoi, V Dafinescu
4	Conferința tehnico-științifică a studenților, masteranzilor și doctoranzilor, Vol.1, Chișinău, R.Moldova, Editura: Tehnica-UTM 2022. ISBN: 978-9975-45-828-3.	Capitol carte	Optimizarea procesului de decolorare a unui efluent folosind metoda suprafeței de răspuns ( <a href="#">link</a> )	E Sava, L Pintilie, MT Nechita
5	Ecological and environmental chemistry - 2022. Ediția 7, Vol.1, 3-4 martie 2022, Chișinău. Chisinau: Centrul Editorial-Poligrafic al USM, 2022, pp. 128-129. ISBN 978-9975-159-06-7	Capitol carte	Wastewater treatment of effluents containing eriochrome black T using an UV reactor. Experimental, modelling and optimization ( <a href="#">link</a> )	GD Suditu, EN Drăgoi, V Dafinescu, L Pintilie, MT Nechita

6	The Bulletin of the Polytechnic Institute from Iași. Chemistry and Chemical Engineering Section	BDI	Application of Response Surface Method for Optimization of Eriochrome Black T Removal by Adsorption (acceptata)	L Pintilie, S Ema, EN Drăgoi, C Teodosiu
---	---	-----	---	--

#### 4. Referințe

1. Passino, K.M., *Biomimicry of bacterial foraging for distributed optimization and control*. IEEE control systems magazine, 2002. **22**(3): p. 52-67.
2. Mirjalili, S., S.M. Mirjalili, and A. Lewis, *Grey Wolf Optimizer*. Advances in Engineering Software, 2014. **69**: p. 46-61.
3. Mehrabian, A.R. and C. Lucas, *A novel numerical optimization algorithm inspired from weed colonization*. Ecological Informatics, 2006. **1**(4): p. 355-366.
4. Mirjalili, S., *Dragonfly algorithm: a new meta-heuristic optimization technique for solving single-objective, discrete, and multi-objective problems*. Neural Computing and Applications, 2016. **27**(4): p. 1053-1073.
5. Suditu, G.D., et al., *Artificial Intelligence-Based Tools for Process Optimization: Case Study—Bromocresol Green Decolorization with Active Carbon*. Adsorption Science & Technology, 2022. **2022**: p. 8110436.
6. Suditu, G.D., et al. *Wastewater treatment of effluents containing Eriochrome Black T using an uv reactor. Experimental, modelling and optimization*. in *Ecological and environmental chemistry*. 2022.
7. Pintilie, L., et al. *Eriochrome Black T Decolorization with Active Carbon and H<sub>v</sub>/TiO<sub>2</sub>: Modeling and Process Optimization*. in *World Congress on Civil, Structural, and Environmental Engineering*. 2022.
8. Nechita, M.T., et al., *Differential evolution-based optimization of corn stalks black liquor decolorization using active carbon and TiO<sub>2</sub>/UV*. Scientific Reports, 2021. **11**(1): p. 18481.
9. Suditu, G.D., et al., *Artificial Intelligence-Based Tools for Process Optimization: Case Study-Bromocresol Green Decolorization with Active Carbon*. Adsorption Science and Technology, 2022. **2022**.