***A dőlt betűvel, sárgával jelzett szövegrész belső használatra szól, a beadandó fejezetekből törölni kell!***

*Mérföldkő: 2. A kémiai adatbázisra és a robotizált eljárásokra épülő webes szolgáltatás kifejlesztése (2022.07.01.-2023.06.30.)*

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| *Mérföldkő/ részfeladat* | *Határidő* | *Elvárt output* | *Felelős személy/csapat* | *Elszámolható idő [embernap]* |
| *2/6* | *2023.05.31.* | *ld. az oldal alján lévő felsorolást* | *vegyész csapat 20%*  *gépész/robotika/IT csapat 80%* | *580 nap* |

*Részfeladat sorszáma:* ***6.***

*(Alkalmazott /ipari kutatás) (80% támogatási intenzitás)*

*Részfeladat tartalma (kötött szöveg, a jóváhagyott pályázatban pontosan így szerepel):*

*„Cél, hogy a robotizált rendszer napi több száz receptúrát tudjon kipróbálni és bevizsgálni. Olyan receptúra mátrixot szükséges összeállítani, amelyet utána a mesterséges intelligencia könnyebben meg tud tanulni. Algoritmikus gépi receptúra-tervezéssel, a vegyészmérnök és informatikus szakértők együttműködésével ez a probléma áthidalható.”*

*Szükséges szakmai input a jelentésekhez (módosítható megfogalmazás belső használatra):*

*Elsősorban informatikai feladat, de a megfelelő alapanyagok kezelése, a robot részére történő odakészítése vegyészmérnöki, a robot működtetése pedig gépészmérnöki feladat.*

**6.** **Algoritmus kifejlesztése az automatizált receptúra kombinációs mátrix előállításához**

**6.1 Bevezetés**

A műgyanták kombinációs mátrixa a gyakorlatban egy olyan táblázat, amely a műgyanták receptúráit alkotó komponensek kombinációs lehetőségeit tartalmazza. A mátrix egy adott műgyanta receptúrájának minden olyan lehetséges kombinációját be kell hogy mutassa, amelyek előállíthatók az e célra kiválasztott komponensek keverésével. A kombinációs mátrix mérete attól függ, hogy hányféle komponens lehet a receptúrában, és hányféle különböző arányban keverhetők össze ezek a komponensek. Az algoritmus a kombinációs mátrixot használhatja annak megállapításához, hogy várhatóan melyik receptúra fogja produkálni a kívánt műgyanta tulajdonságokat. Esetünkben elvileg csaknem végtelen méretű is lehet a mátrix, tekintettel arra, hogy a nagy számú lehetséges komponens egymáshoz viszonyított (ekvivalens) aránya csak az egymással közvetlenül elreagáló komponensek esetében rögzített. Olyan esetekben, amikor egy anyagkeveréken belül többféle reakció is lezajlik, például az „interpenetrating network”-öt alkotó hibridgyanták esetében, a két- vagy többféle kémiai kötés aránya minden egyes összetevő esetében folytonosan változtatható 0 és 100% között. Emiatt elvileg végtelen sok elemből is állhat a kombinációs mátrix. Ez a gyakorlatban jelentősen egyszerűsíthető, ha egy-egy párosításban 10%-os lépéseket alkalmazunk, ami a későbbiekben bármikor lehetővé teszi az interpolációt. Nagy mértékben növelik viszont a lehetőségek számát a többszörösen hibridizált keverékek.

**6.2 Automatizált keverés, próbatest-gyártás és -vizsgálat**

Az első mérföldkőről szóló, 2022. júliusában benyújtott jelentés 3.-4.-5. fejezetében már részletesen bemutattuk az automatizált, robottal segített rendszer működését. Először a 3D tervek, majd a kész, működő megoldások szintjén mutattuk be a fólia adagolását, méretre vágását, klipszelését, az alapanyagok tömeg szerinti adagolását, a gyantakomponensek elállítását keveréssel, majd a próbatestek előállítását a viszkozitás közvetett mérésével, a tárolást és végül a háromféle mechanikai jellemző mérését. Ennek lényegét az alábbiakban tömören összefoglaljuk.

A folyékony alapanyagok kezelése kulcsszerepet játszik a vegyi laboratóriumokban. Nagy az igény a folyamatosan, precízen dolgozó automatizált folyadékkezelési módszerekre, például szenzorokkal integrált robotrendszerekre. Többcélú alkalmazás esetében nagyobb szabadságfokú robotokra van szükség, amit már bevált ipari robotok adaptálásával, kiegészítésével érnek el. Mi is ezt a megoldást választottuk egy hattengelyes ipari robot adaptálásával a Polinvent Kft. gyáli telephelyén.

A folyamatot egy fixen telepített robot karja kezeli, amelytől az egyes munkafázisokat végző berendezéseket körben, azonos távolságra helyeztük el. A folyamat lépései:

* A zacskót képező fólia adagolása és méretre vágása tekercsből,
* Folyadékzáró klipszek felhelyezése,
* Alapanyagok adagolása, mérése,
* Folyékony gyantakomponensek gyártása,
* Próbatestek készítése és viszkozitásmérés,
* Tárolás, érlelés,
* Mechanikai vizsgálatok.

A berendezések elhelyezése a 6.1. ábrán látható. Jobbra van a fólia adagolását, vágását és klipszek elhelyezését végző szerkezet. Ezt követik az alapanyagokat tartalmazó álló hengeres silók, majd a keverést és a próbatestek készítését végző egységek. A bal szélen látható szekrényben tárolja a rendszer a próbatesteket a mechanikai vizsgálatok elvégzéséig. A fénykép a mechanikai vizsgálatokat végző egység felől készült.

A képen molnár látható

Automatikusan generált leírás

* 1. ábra: Az egységek elhelyezkedése a robot körül

Az állomások között a robotkar továbbítja az üres, majd anyaggal teli fóliát, és helyezi a megfelelő helyre a következő állomáson. A teljes folyamat egyetlen fólián belül megy végbe: oda adagoljuk a komponenseket, és ott történik a keverés, majd a kémiai reakció lefutásának vizsgálata. Ebben a fóliában van a megszilárdult próbatest a mechanikai tulajdonságok vizsgálata során is.

A próbatestek gyártása a zacskót képező fólia méretre vágásával kezdődik. A 6.2. ábrán látható a tekercselt fóliát adagoló és méretre vágó egység. A tekercsben érkező fóliát két henger továbbítja. Az alattuk lévő vágóél a fóliát a programnak megfelelő méretre vágja.

|  |  |
| --- | --- |
|  | A képen beltéri látható  Automatikusan generált leírás |
| a) | b) |
| * 1. ábra: A fólia adagolását és méretre vágását végző egység.  a) terv, b) megvalósult állapot | |

Ezt követi a folyadékzáró klipszek automatikus felhelyezése a fólia megfelelő részére, az alapanyagok számától függően. A „köztes” klipszeket (amelyek elválasztják az egyes alapanyagokat tartalmazó fóliarészeket) keveréskor eltávolítják (6.3. ábra).

A képen beltéri, fal, piszkos látható

Automatikusan generált leírás

6.3. ábra: A robotkar felső állásában két klipsszel ellátott zacskót tart

A megfogó fejen van az adagoláshoz használt mérleg (6.4. ábra), ami visszajelzést küld, amikor elértük az adagolandó mennyiséget.

|  |  |
| --- | --- |
|  | A képen fal látható  Automatikusan generált leírás |
| a) | b) |
| * 1. ábra: az adagolást végző, mérleggel ellátott megfogó fej.  a) fej, b) megvalósult állapot | |

Az alapanyagok adagolása túlnyomás alatt álló tartályokból történik. A folyadékok fóliába adagolására kétféle módszert dolgoztunk ki. A nagyobb viszkozitású anyagok mozgatását fogaskerék-szivattyú, a kisebb viszkozitású anyagokét egy speciális szelep végzi.

A keverőegységben minden fóliarész külön keverhető, amit ütemesen egymáshoz nyomódó bordázott felületek valósítanak meg. A külön-külön elkészült komponenseket a robotkar visszaviszi a fóliában a klipszelő egységhez, ami leveszi a köztes klipszeket, hogy a komponensek elegyedni tudjanak a zacskón belül. Ezután a gép visszateszi a zacskót a keverő egységbe, ahol immár a kész komponensek keverednek el egymással.

A próbatestgyártó szerszámban egyidejűleg készül a háromféle próbatest. A két szerszámfél összezáródásával a fóliában lévő anyag kitölti a formát. A gyantakeverék reológiai vizsgálatát az automatizált eszköz úgy végzi, hogy a nyomófej – az erő mérésével – sűrűn ismételve be-benyomódik az anyagba annak megszilárdulásáig. A mérőegység folyamatosan regisztrálja az anyag felületi hőmérsékletét is.

A gyantakeverő és próbatestgyártó egység az 6.5. ábrán látható. A három, egymás fölött elhelyezkedő bordázott keverőfej egyidejűleg keveri a különböző fólia-részekbe előzőleg adagolt gyantakomponenseket. A keverőfejek mozgásának amplitúdója a viszkozitástól függ.

|  |  |
| --- | --- |
|  | **A képen beltéri, rendetlen látható  Automatikusan generált leírás** |
| 1. terv | 1. megvalósult állapot |
| * 1. ábra: Keverő és próbatestgyártó egység, amely egyidejűleg gyárt 3-3 darabot a háromféle próbatestből | |

A mechanikai vizsgáló egység (6.6. ábra) részben kereskedelemben kapható, részben általunk CNC-eszterga és lézervágó, valamint 3D nyomtató segítségével előállított elemekből áll. Megszilárdulás után a robot ebbe az egységbe helyezi a próbatesteket tartalmazó fóliazacskót, amit hidraulikus munkahengerek rögzítenek. Ezek a nyomószilárdság vizsgálatára tüskéket nyomnak a próbatestbe. Második lépés a hárompontos hajlítás 80 mm fesztávolságon, harmadik lépés a húzóvizsgálat. A mechanikai vizsgálatokat a rendszer mindhárom esetben elmozdulás szerint vezérelve, kétfázisú léptető motorral és golyósorsós hajtással végzi. A felvett erőt beépített erőmérő cellák mérik.

A vizsgálatok végén a berendezés automatikusan alaphelyzetbe áll. Kinyílnak a hidraulikus munkahengerek, a tönkrement próbatest kiesik a vizsgáló berendezésből, ami ezután készen áll a következő próbatest fogadására.

Az automatizált, nem szabványos berendezéssel mért értékeket a szabványos méréssel nyert eredményekkel összehasonlítva a mérés kalibrálható. Erről a **7. részfeladatról** szóló jelentésben számolunk be részletesen, adatokkal és diagramokkal.

|  |  |
| --- | --- |
| A képen játék látható  Automatikusan generált leírás | A képen motor látható  Automatikusan generált leírás |
| a) | b) |
| * 1. ábra: Automatikus mechanikai vizsgáló egység, felülről: nyomás, hajlítás és húzás a) terv, b) megvalósult állapot | |

**6.3 Algoritmus kifejlesztése a kombinációs mátrixhoz**

Algoritmuson vagy eljáráson általában olyan megengedett lépésekből álló módszert, utasítássorozatot, részletes útmutatást, receptet értünk, amely valamely felmerült probléma megoldására alkalmas. Az algoritmus megengedett utasításokból, lépésekből álló sorozat, amely egy probléma, feladat megoldásához vezet. Más szóval: az algoritmus egy probléma megoldásának gondolatmenete. Turing-géppel formális definíció is adható az algoritmus fogalmára. Eszerint „Egy probléma megoldására adott utasítássorozat akkor tekinthető algoritmusnak, ha van egy vele ekvivalens Turing-gép, ami minden megoldható bemenetre megáll.” A definícióból levezethetők az algoritmusok közös tulajdonságai:

1. Az eljárás egyértelműen leírható véges szöveggel.
2. Az eljárás minden lépése ténylegesen kivitelezhető.
3. Az eljárás minden időpontban véges sok tárat használ.
4. Az eljárás véges sok lépésből áll.

Ezek alapján az algoritmus fogalmát gyakorlatilag a következőkre korlátozhatjuk:

1. Az algoritmus ugyanarra a bemenetre mindig ugyanazt az eredményt adja.
2. Minden időpontban egyértelműen adott a következő lépés.

Az algoritmusok dokumentálására számos eszköz áll rendelkezésünkre. Használhatók matematikai jelölések, az UML aktivitás diagramja, egyszerű **folyamatábra**, pszeudó kód vagy akár tényleges **programkód.**

Egy program vagy algoritmus specifikációja az alábbiakat tartalmazza:

* Milyen bemenő adatokat vár a program?
* Milyen feltételek érvényesek a bemenő adatokra?
* Milyen kimenő adatokat várunk, és azokra milyen feltételeket várunk, azaz mikor tekintjük helyesnek és mikor hibásnak az eredményt?
* Eljárások, függvények dokumentálása.
* Minden esetben szükséges a programban meghívott, nem triviális eljárások esetén leírni, hogy mit várunk a meghívott eljárástól. Az eljárás kifejtésekor pedig célszerű leírni az eljárás fejléceként, hogy az eljárás mit végez el, milyen típusú bemenő adatokat produkál és milyen kimenő adatokat várunk tőle.

Algoritmusunk kialakítása során háromféle machine learning technika alkalmazásával foglalkoztunk: a regressziós analízis, a klaszterezés, és a neural network. A munka célja az volt, hogy az algoritmus egyre pontosabb legyen a növekvő adatmennyiséggel és az egyre finomabb modellbeli beállításokkal.

A **regressziós analízist** a következő módon használtuk a műgyanták tulajdonságainak az előrejelzésére:

1. Adatgyűjtés: Az alapul szolgáló adatok a meglévő műgyanták tulajdonságait tartalmazták, beleértve a viszkozitást, sűrűséget, húzószilárdságot, rugalmassági modulust és szakadási nyúlást.
2. Adatvizualizáció: Az adatokat grafikus formában ábrázoltuk, hogy jobban megértsük az egyes tulajdonságok kapcsolatait és a lehetséges függőségeket.
3. Adatfelvétel: Felvettük az adatokat az algoritmus számára, hogy megvizsgálhassa őket.
4. Regressziós modell kiválasztása: Kiválasztottunk egy olyan regressziós modellt, amelynek segítségével az algoritmus előre tudja jelezni a műgyanták tulajdonságait.
5. Modell betanítása: Az algoritmus betanította a modellt a meglévő adatok segítségével, és ennek alapján előre tudta jelezni a műgyanták tulajdonságait.
6. Modell értékelése: Az előrejelzéseket az adatokkal összehasonlítva értékeltük, hogy megállapíthassuk a modell pontosságát és esetleges hiányosságait.
7. Modell finomítása: Ha szükséges, a modell további finomítása szükséges, hogy növelni tudjuk az előrejelzés pontosságát.

A **klaszterezést** hasonló módon végeztük:

1. Adatgyűjtés: Az alapul szolgáló adatok a meglévő műgyanták tulajdonságait tartalmazták.
2. Adatvizualizáció: Az adatokat grafikus formában ábrázoltuk.
3. Adatfelvétel: Felvettük az adatokat az algoritmus számára.
4. Klaszterezési modell kiválasztása: Kiválasztottunk egy megfelelő klaszterezési modellt, amelynek segítségével az algoritmus előre tudja jelezni a műgyanták tulajdonságait.
5. Modell betanítása: Az algoritmus betanította a modellt a meglévő adatok segítségével, hogy előre tudja jelezni a műgyanták tulajdonságait.
6. A módszer lényege a klaszterek létrehozásán alapult: Az algoritmus olyan csoportokat alakított ki, amelyek hasonló tulajdonságú műgyantákat tartalmaznak.
7. Modell értékelése: Az előrejelzéseket az adatokkal összehasonlítva értékeltük, megállapítva a modell pontosságát.
8. Modell finomítása: Ha szükséges, itt is sor kerülhet a modell finomítására, hogy növelhessük annak pontosságát.

Az előző kettőtől kicsit eltért a **neural network** módszer alkalmazása.

1. Adatgyűjtés: Az alapul szolgáló adatok a meglévő műgyanták tulajdonságait tartalmazzák.
2. Adatelőkészítés: Az adatokat előkészítése a modell számára, ami ez esetben magában foglalja a normalizálást, a szegmentálást és a darabolást.
3. Modell kialakítása: A kialakított modell tartalmazza a bemeneti rétegeket, a rejtett rétegeket és a kimeneti réteget, amely az eljárás célját megvalósítva a műgyanták tulajdonságainak előrejelzését adja.
4. Modell betanítása: Az algoritmus betanította a modellt a meglévő adatok segítségével, hogy előre tudja jelezni a műgyanták tulajdonságait.
5. Hiperparaméterek állítása: Eltérően az első két módszertől, itt végre kellett hajtani a modell hiperparamétereinek beállítását, beleértve a tanulási rátát, a dropout mértékét és az optimalizálást.
6. Modell értékelése: Az előrejelzéseket az adatokkal összehasonlítva értékeltük, megállapítva a modell pontosságát.
7. Modell finomítása: Ha szükséges, itt is sor kerülhet a modell finomítására, hogy növelhessük annak pontosságát.

**Algoritmusok dokumentálása**

*Ide kellenének majd folyamatábrák és leírások, esetleg itt bemásolt vagy függelékben csatolt kódsorok, amelyek meggyőzően alátámasztják, hogy megvalósult a részfeladat programozási része.*

*-*

*-*

*-*

*A nem teljesen magától értetődő zárt programrészek előtt tömören le kellene írni a feladataikat, esetleg annak magyarázatát, hogy miért pont úgy, azokkal az eszközökkel valósítjuk meg a folyamatot.*

**6.4 Megvalósult receptúra-kombinációs mátrixok**

*(Az itt szereplő három táblázatot Csabival készítettük Excel-ben, az Excel fájl ugyanebben a mappában van. Csabi tudna mind a háromhoz kémiai szakmai magyarázatot írni.)*

*-*

*-*







**6.5 Webes szolgáltatás kifejlesztése**

A kémiai adatbázisra és a robotizált eljárásokra épülő **webes szolgáltatás kifejlesztése a projekt egyik célkitűzése**. A fejlesztés tárgya egy, a világon jelenleg nem, vagy alig létező szolgáltatás: a vevő egy kényelmes felhasználói felületen maga állítja be azokat a műszaki paramétereket, amelyeket a számára előállítandó műgyantától vár, és megjelöli az általa feltételesen igényelt mennyiséget. A mesterséges intelligenciával támogatott rendszer ennek alapján – korábban elvégzett nagy számú kísérlet eredményeire támaszkodva – megtervezi annak az új anyagnak a receptúráját, ami a lehető legközelebb áll a kívánt receptúrához. Kikalkulálja ennek árát, és azt – többféle szállítási lehetőséggel együtt - közli a potenciális vevővel. Amennyiben a vevő az ajánlatot elfogadja és kiválasztja a számára megfelelő szállítási módot, a rendszer átirányítja a fizetéshez. A fizetés megtörténte után az adott egyedi tétel bekerül a gyártási programba. A legyártott termékhez a szolgáltató biztonsági adatlapot mellékel, és az árut a vevő által kívánt szállítási módon kiküldi.

A projekt keretében kifejlesztett, mesterséges intelligencia alapú megoldás nagyfokú rugalmasságot biztosít. A létrehozott új rendszer által elkészített új gyantakomponensek a felhasználók egyedi igényeire szabott tulajdonságokkal rendelkeznek. Ennek megfelelően a célcsoporthoz olyan felhasználók tartoznak, amelyek esetében az egyedi, speciális anyaghasználat igénye felmerül. A rendszer által biztosított speciális gyantákat várhatóan bevonatként, vagy kompozit anyagok részeként használják fel.

A rendszer a következőképpen működik:

*link megadása, ami a következő tartalmú oldalra vezet:*

**Személyre szabott gyantareceptúra!**

**Segítségünkkel Ön tervezheti meg és gyártathatja le egyedi, korábban nem létező műgyantáját!**

Kötelezettség nélkül, könnyen kiválaszthatja az Önnek leginkább megfelelő összetételű műgyantát.

Kérjük, vegye fel velünk a kapcsolatot egyedi kémiai szintézis szolgáltatásunkkal kapcsolatban a [service@polinvent.com](mailto:service@polinvent.com) címen, és mi a lehető leghamarabb válaszolunk egy részletes árajánlattal. Ez a folyamat általában 24-48 órát vesz igénybe, és az árajánlat tartalmazza a becsült árat, valamint a projekt befejezéséhez szükséges időt. Minden megkeresést és későbbi projektet szigorúan bizalmasan kezelünk, és amennyiben a partner igényli, titoktartási megállapodást kötünk.”

*Itt kellene bemutatni egy működő, akár egy alapos hivatali ellenőr számára is meggyőző példát, hogy milyen kattintásra mi jön elő, hol van döntési pont, minden lépést képernyőfotóval illusztrálva.*

*Ezekkel együtt várhatóan össze is jön a kívánatos 20+ oldal terjedelem.*

**6.6 Összefoglalás**

A 6. részfeladat keretében elkészült az algoritmus az automatizált receptúra kombinációs mátrix előállításához. Ehhez igénybe vettük a mesterséges intelligencia által kínált lehetőségeket is. A kombinációs mátrixot négy kémiai osztályba tartozó gyantacsaládra készítettük el: kétkomponensű epoxigyanták, direkt úton előállított kétkomponensű polikarbamid (polyurea) gyanták, indirekt úton előállított kétkomponensű polikarbamid (ún. szilikát) gyanták, illetve UV-sugárzásra térhálósodó egykomponensű metakrilát gyanták. Elkészült az a webes felület, amelyen az érdeklődő potenciális felhasználók saját elképzeléseik alapján meghatározhatják a kívánt új gyantatípus(ok) műszaki paramétereit. A felhasználó által megadott tulajdonságok alapján a mesterséges intelligencia megtervezi az azokat a lehető legnagyobb mértékben megközelítő receptúrát, majd kikalkulálja annak költségeit és árajánlatot ad többfélelehetséges mennyiségre. Ezek után a felhasználó dönt, hogy megrendeli-e az érintett új terméket, és ha igen, milyen mennyiségben. Amennyiben a megrendelő igényli, titoktartási megállapodást kötünk. Mivel a vevő csak az igényt fogalmazza meg, a megoldást pedig (az AI segítségével) a szolgáltató hozza létre, a létrejött új anyagokra vonatkozó szellemi tulajdonjogok a szolgáltatót illetik meg, azok átadása külön megállapodás alapján lehetséges.

(1351 karakter)