



Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών

Μεταπτυχιακή Εργασία

---

**Μπεϋζιανή συμπερασματολογία σε  
προβλήματα νανομετρολογίας επιφανειών**

---

*Συγγραφέας:*

Σοφία Τσιλίδου

*Επιβλέποντες:*

Καθ. Απόστολος Μπουρνέτας

Δρ. Βασίλειος Κωνσταντούδης

Φεβρουάριος 2020

Η παρούσα διπλωματική εργασία εκπονήθηκε στο πλαίσιο των σπουδών για την απόκτηση του Μεταπτυχιακού Διπλώματος Ειδίκευσης στη

**ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ ΚΑΙ ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΗ ΕΡΕΥΝΑ**

που απονέμει το Τμήμα Μαθηματικών του Εθνικού και Καποδιστριακού Πανεπιστημίου Αθηνών.

**Εγκρίθηκε την 14/02/2020, από την εξεταστική επιτροπή:**

Όνοματεπώνυμο	Βαθμίδα	Υπογραφή
Απόστολος Μπουρνέτας	Καθηγητής	_____
Βασίλειος Κωνσταντούδης	Ερευνητής ΕΚΕΦΕ ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ	_____
Σάμης Τρέβεζας	Λέκτορας	_____

## Abstract

### *Bayesian inference on rough surfaces nanometrology problems*

The problem under study derives from the scientific field of nanometrology of stochastic nanostructured surfaces used amply in nanotechnology. In a wide range of applications, nanotechnology uses sophisticated processes to produce nanostructured surfaces characterized by roughness (stochastic spatial fluctuations) observed to the nanoscale, i.e. in the range 1-100nm, where  $1\text{nm} = 1 \times 10^{-9}\text{m}$ , in the most controlled way possible. Surface roughness is a characteristic that is related to the microstructure-nanostructure of the surface and expresses the stochastic deviations from the ideal form of a surface or the ideal plane. Reliable and proper use of these surfaces requires quantitative characterization, which is commonly conducted via the analysis of their images in powerful electronic and atomic microscopes. Such characterization as well as the interaction of surfaces (contact, friction) is one of the modern challenges of surface nanometrology.

Another important aspect of nanotechnology is the measurement of the contact area of two surfaces which come into contact. However, despite extensive literature, the method of calculating the interface area does not appear to have been explored as far as is required. The aim of this thesis is to contribute to the exploration of this issue. The stochasticity of surfaces raises significant difficulties in the study and this is where we are called upon, as mathematicians-researchers, to propose solutions.

In this thesis, we focused on the effect of roughness on contact area of two surfaces that approach each other. In particular, two-dimensional surface profiles were studied. Profiles are graphs of the height of the surface  $z$  as a function of length  $x$ . Furthermore, we introduce a way of modelling the surface contact taking into consideration their profiles. These two-dimensional profiles were derived either from simulated or real surfaces whose roughness data were observed using a roughness meter. Defining parameters were used to determine the roughness characteristics of each surface. Specifically, the Root Mean Square Roughness (RMS) corresponding to the standard deviation of the surface height as well as the correlation length ( $\xi$ ) were used. Finally, the proposed methodology for calculation of the contact area using Artificial Neural Networks (ANN) and the results from simulated and real data are presented. For completeness, we performed an experimental procedure to compare the actual-experimental results with the corresponding ANN outputs in order to

further evaluate the methodology, determine how much crucial the parameters are as well as their effect on the results and to conclude with themes for future research study.

TOPIC: Artificial Neural Networks (ANN), Nanometrology

KEYWORDS-PHRASES: Bayesian Inference, Artificial Neural Networks (ANN), Nanometrology Surface roughness, correlation length, contact area, friction

## Περίληψη

*Μπεϋζιανή συμπερασματολογία σε προβλήματα νανομετρολογίας επιφανειών*

Το υπό μελέτη πρόβλημα προέρχεται από τον ερευνητικό χώρο της νανομετρολογίας από και συγκεκριμένα από τις στοχαστικές νανοδομημένες επιφάνειες, οι οποίες χρησιμοποιούνται πολύ στην νανοτεχνολογία. Σε ένα μεγάλο εύρος των εφαρμογών της, η νανοτεχνολογία χρησιμοποιεί περίπλοκες διεργασίες για την παραγωγή νανοδομημένων επιφανειών που χαρακτηρίζονται από τραχύτητα (χωρικά στοχαστικές διακυμάνσεις) που εκτείνεται στη νανοκλίμακα, δηλαδή στο εύρος 1-100nm, όπου  $1\text{nm} = 1 \times 10^{-9}\text{m}$ , με όσο το δυνατόν πίο ελεγχόμενο τρόπο. Η τραχύτητα επιφάνειας είναι ένα μέγεθος που αφορά στη μικροδομή-νανοδομή της επιφάνειας και εκφράζει τις στοχαστικές αποκλίσεις από την ιδανική μορφή μιας επιφάνειας ή από το ιδανικό επίπεδο. Η αξιόπιστη και ασφαλής χρήση αυτών των επιφανειών απαιτεί τον ποσοτικό χαρακτηρισμό τους που συνήθως γίνεται διαμέσου της ανάλυσης των απεικονίσεών τους σε ισχυρά ηλεκτρονικά και ατομικά μικροσκόπια. Ο χαρακτηρισμός αυτών καθώς και η ανάλυση της αλληλεπίδρασης των επιφανειών (επαφή, τριβή) αποτελεί μία από τις σύγχρονες προκλήσεις της νανομετρολογίας επιφανειών.

Ένα άλλο σημαντικό μέγεθος που απασχολεί την επιστήμη της νανοτεχνολογίας είναι η επιφάνεια επαφής δύο επιφανειών που έρχονται σε επαφή (περιοχή επαφής) καθώς και η μέτρηση αυτής. Ωστόσο, παρά την εκτεταμένη βιβλιογραφία, δεν φαίνεται να έχει διερευνηθεί όσο απαιτείται ο τρόπος υπολογισμού της επιφάνειας διεπαφής. Ο στόχος της εργασίας αυτής είναι να συμβάλει στην διερεύνηση αυτού του θέματος. Η στοχαστικότητα των επιφανειών εγείρει σημαντικές δυσκολίες στην μελέτη και αυτό είναι το σημείο στο οποίο ως μαθηματικοί-ερευνητές καλούμαστε να προτείνουμε τρόπους προσέγγισης.

Σε αυτή την εργασία, επικεντρωθήκαμε στην επίδραση που έχει η τραχύτητα των επιφανειών στην επιφάνεια επαφής δύο επιφανειών που προσεγγίζουν η μία την άλλη. Συγκεκριμένα, μελετήθηκαν διδιάστατα προφίλ επιφανειών, δηλαδή γραφικές παραστάσεις του ύψους της επιφάνειας  $z$  συναρτήσει του μήκους  $x$  και κατόπιν μοντελοποιήθηκε ο τρόπος επαφής των επιφανειών με τραχύτητα. Τα διδιάστατα αυτά προφίλ προέκυψαν είτε από προσομοιωμένες επιφάνειες είτε από πραγματικές των οποίων τα δεδομένα της τραχύτητας παρατηρήθηκαν με χρήση τραχύμετρου. Για τον προσδιορισμό των χαρακτηριστικών της τραχύτητας της κάθε επιφάνειας χρησιμοποιήθηκαν χαρακτηριστικές

παράμετροι-μετρικές αυτής. Συγκεκριμένα, χρησιμοποιήθηκε το Root Mean Square Roughness (RMS) το οποίο αντιστοιχεί στην τυπική απόκλιση του ύψους της επιφάνειας καθώς και το correlation length ( $\xi$ ). Τέλος, παρουσιάζεται η προτεινόμενη μεθοδολογία για τον τρόπο υπολογισμού της επιφάνειας διεπαφής με χρήση Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων (ΤΝΔ) καθώς και τα αποτελέσματα από τη μελέτη των προσομοιωμένων και πραγματικών δεδομένων. Για περισσότερη πληρότητα πραγματοποιήθηκε η εκτέλεση μίας πειραματικής διαδικασίας προκειμένου να συγκριθούν τα πραγματικά-πειραματικά αποτελέσματα με τα αντίστοιχα αποτελέσματα του ΤΝΔ ώστε να αξιολογηθεί περαιτέρω η μεθοδολογία, να προσδιορισθεί η κρισιμότητα των παραμέτρων και η επίδραση τους στα αποτελέσματα καθώς και να προταθούν θέματα για μελλοντική περαιτέρω έρευνα.

ΘΕΜΑΤΙΚΗ ΠΕΡΙΟΧΗ: Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα, Νανομετρολογία

ΛΕΞΕΙΣ-ΦΡΑΣΕΙΣ ΚΛΕΙΔΙΑ: Μπεϋζιανή συμπερασματολογία, Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα, Υπολογιστική Νανομετρολογία, Τραχύτητα επιφάνειας, μήκος συσχέτισης, επιφάνεια διεπαφής, τριβή

## Ευχαριστίες

Φτάνοντας στο τέλος της διαδρομής του μεταπτυχιακού προγράμματος θεωρώ απαραίτητο να εκφράσω τις ευχαριστίες μου σε όλους τους ανθρώπους που συνέβαλαν άμεσα και έμμεσα στην ολοκλήρωση της διπλωματικής μου εργασίας, η οποία αποτελεί το επισφράγισμα της μεταπτυχιακής μου πορείας στο Τμήμα Μαθηματικών του Πανεπιστημίου Αθηνών .

Αρχικά, θα ήθελα να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα καθηγητή μου και πρόεδρο του Τμήματος Μαθηματικών, κύριο Απόστολο Μπουρνέτα για την εμπιστοσύνη, την στήριξη και την πολύτιμη καθοδήγησή του κατά τη διάρκεια εκπόνησης της παρούσας εργασίας. Επίσης, αισθάνομαι την υποχρέωση να ευχαριστήσω θερμά τον εξάίρετο και διακεκριμένο ερευνητή του Εθνικού Κέντρου Έρευνας Φυσικών Επιστημών Δημόκριτος , κύριο Βασίλειο Κωνσταντούδη για την συνεργασία μας, την καθοριστική συμβολή του στην πραγματοποίηση τούτης της πρωτόλειας επιστημονικής διατριβής, τις ουσιαστικές του κατευθύνσεις σε θέματα που άπτονται των φυσικών επιστημών και το χρόνο που αφιέρωσε αφειδώλευτα παρά το βεβαρημένο του πρόγραμμα. Επιπλέον, θα ήθελα να ευχαριστήσω τον κύριο Σάμη Τρέβεζα, λέκτορα του Τμήματος Μαθηματικών για την συμμετοχή του στην Τριμελή Εξεταστική Επιτροπή.

Φυσικά, θα ήταν αδύνατο να μην εκφράσω την ευγνωμοσύνη μου στην οικογένεια μου, τους γονείς μου, την αδελφή μου και τη Λόπη, οι οποίοι με υποστήριξαν αγόγγυστα, με κάθε τρόπο καθόλη τη διάρκεια των σπουδών μου. Έτσι, με ιδιαίτερη χαρά και υπερηφάνεια αφιερώνω την εργασία τόσο σε εκείνους όσο και στη μνήμη των παππούδων μου στους οποίους επίσης είμαι ευγνώμων.

Τέλος, δε θα μπορούσα να μην ευχαριστήσω τον εκλεκτό συνάδελφο, συμφοιτητή και φίλο Γιώργο Σαρίδη με τον οποίο συνεργαστήκαμε στενά, ανταλλάξαμε ιδέες και δουλέψαμε σκληρά προκειμένου να ολοκληρώσουμε με επιτυχία το πρόγραμμα σπουδών μας. Η συνεισφορά του στην προσπάθεια μου είναι πέραν οποιασδήποτε μνείας.

Σοφία Γ. Τσιλίδου

## Περιεχόμενα

<b>Abstract.....</b>	<b>iii</b>
<b>Περίληψη .....</b>	<b>v</b>
<b>Ευχαριστίες .....</b>	<b>vii</b>
<b>Λίστα Εικόνων .....</b>	<b>xi</b>
<b>Λίστα Πινάκων .....</b>	<b>xii</b>
<b>Κεφάλαιο 10 .....</b>	<b>1</b>
Εισαγωγή .....	1
<b>Κεφάλαιο 20 Θεωρητικό υπόβαθρο.....</b>	<b>4</b>
2.1 Επιφάνειες.....	4
2.1.1 Ορισμός, αναπαράσταση και μέτρηση επιφανειών .....	4
2.1.2 Ταξινόμηση επιφανειών .....	10
2.1.3 Μετρολογία επιφάνειας .....	17
2.1.4. Μοντελοποίηση τραχύτητας επιφάνειας .....	27
2.1.5 Fractal Επιφάνειες.....	27
2.1.6 Επαφή επιφανειών .....	29
2.2 Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα.....	31
Εισαγωγή.....	31
2.2.1 Αρχιτεκτονική ΤΝΔ .....	31
Γενικά.....	31
2.2.2 Συνάρτηση ενεργοποίησης .....	42
2.2.3 Διαδικασίες μάθησης-εκπαίδευσης.....	44
2.2.4 Χρησιμοποιούμενοι αλγόριθμοι εκπαίδευσης ΤΝΔ.....	46
2.2.5 Κριτήρια τερματισμού .....	53
2.2.6 Γενικά θέματα για την ανάπτυξη των Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων ..	55



2.2.7 Πλεονεκτήματα -μειονεκτήματα μοντέλου .....	56
<b>Κεφάλαιο 3ο .....</b>	<b>57</b>
3.1 Μαθηματική μοντελοποίηση και υπολογισμός αρχικών σημείων επαφής επιφανειών με τραχύτητα.....	57
3.2 Πρόταση υπολογισμού μεγέθους επιφάνειας διεπαφής με εξειδικευμένο Τεχνητό Νευρωνικό Δίκτυο .....	60
3.3 Στοιχεία χρησιμοποιούμενου ΤΝΔ – Προτεινόμενη μεθοδολογία.....	61
<b>Κεφάλαιο 4ο .....</b>	<b>65</b>
4.1 Ντετερμινιστικές Επιφάνειες .....	65
4.2 Στοχαστικές Επιφάνειες .....	73
4.2.1 Χρησιμοποιούμενος αλγόριθμος: Resilient backpropagation .....	74
4.2.2 Χρησιμοποιούμενος αλγόριθμος: Levenberg-Marquardt backpropagation	76
4.2.3 Χρησιμοποιούμενος αλγόριθμος: Gradient descent with adaptive learning rate backpropagation.....	78
4.2.4 Χρησιμοποιούμενος αλγόριθμος: Gradient descent with momentum backpropagation.....	80
4.2.5 Χρησιμοποιούμενος αλγόριθμος: Gradient descent with momentum and adaptive learning rate backpropagation.....	81
4.2.6 Χρησιμοποιούμενος αλγόριθμος: Bayesian regularization backpropagation .....	83
4.2.7 Ανάλυση αποτελεσμάτων.....	85
4.3 Πειραματικές Επιφάνειες .....	87
4.3.1 Ανάλυση πειραματικής διαδικασίας .....	87
4.3.2 Αποτελέσματα Πειραματός και σύγκριση με Αποτελέσματα Νευρωνικού Δικτύου .....	92
<b>Κεφάλαιο 5ο.....</b>	<b>96</b>
Συμπεράσματα.....	96
<b>Παράρτημα .....</b>	<b>98</b>
A. Απόδειξη RMS κανονικής κατανομής .....	98
B. Μετασχηματισμός Fourier, Αντίστροφος μετασχηματισμός Fourier και συνέλιξη	

συναρτήσεων .....	98
Γ. Κώδικας MATLAB για τον υπολογισμό σημείων επαφής .....	99
Δ. Κώδικας MATLAB για τα μοντέλα των νευρωνικών δικτύων .....	100
<b>Βιβλιογραφία .....</b>	<b>103</b>

## Λίστα Εικόνων

Εικόνα 1 Διαφορά πραγματικού και μετρούμενου προφίλ επιφάνειας.....	7
Εικόνα 2 Οπτική παρατήρηση επιφάνειας μετάλλων.....	7
Εικόνα 3 Παρατήρηση επιφάνειας μεταλλικών φιλμ με χρήση μικροσκοπίου AFM [21] .....	8
Εικόνα 4 Παρατήρηση Επιφανειών ανθρώπινων ερυθρών αιμοσφαιρίων με χρήση μικροσκοπίου AFM [21] .....	8
Εικόνα 5 Παρατήρηση Επιφανειών υλικού οδοντικής αποκατάστασης με χρήση μικροσκοπίου AFM .....	9
Εικόνα 6 Ταξινόμηση στερεών επιφανειών.....	10
Εικόνα 7 Κατανομή πιθανότητας ύψους επιφάνειας .....	14
Εικόνα 8 Ο ρόλος της λοξότητας και της κύρτωσης στις κατανομές.....	16
Εικόνα 9 Σχηματικό διάγραμμα χαρακτηριστικών επιφάνειας .....	18
Εικόνα 10 Γραφική παράσταση προφίλ επιφάνειας $z(x)$ .....	19
Εικόνα 11 Ο ρόλος της λοξότητας και της κύρτωσης στις επιφάνειες .....	21
Εικόνα 12 Προφίλ επιφανειών με το ίδιο $R_a$ αλλά διαφορετική χωρική διάταξη των υψών της επιφάνειας .....	22
Εικόνα 13 Τεχνητή επιφάνεια 200 σημείων με κανονική κατανομή ύψους και gaussian acf .....	24
Εικόνα 14 Τεχνητή επιφάνεια 200 σημείων με κανονική κατανομή ύψους και εκθετική acf.....	25
Εικόνα 15 Τεχνητή επιφάνεια 200 σημείων που έχει προκύψει από κανονική κατανομή με gaussian acf στην οποία έχει εφαρμοστεί λοξότητα 1 .....	25
Εικόνα 16 Προφίλ επιφάνειας εικόνας 13 με gaussian acf .....	26
Εικόνα 17 Προφίλ κανονικής επιφάνειας 200 σημείων με εκθετική acf.....	26
Εικόνα 18 Προφίλ κανονικής επιφάνειας 1200 σημείων με εκθετική acf.....	26
Εικόνα 19 Προφίλ fractal επιφάνειας .....	28
Εικόνα 20 Ονομαστική και πραγματική επιφάνεια επαφής .....	30
Εικόνα 21 Δομή Βιολογικού Νευρώνα .....	32
Εικόνα 22 Γραφική απεικόνιση νευρικού συστήματος.....	32
Εικόνα 23 Δομή ΤΝΔ.....	33
Εικόνα 24 Γραφική απεικόνιση ΤΝΔ δύο κρυφών επιπέδων .....	35
Εικόνα 25 Λειτουργία απλού νευρώνα .....	35
Εικόνα 26 Απλός νευρώνας με είσοδο διάνυσμα.....	37
Εικόνα 27 Σύντομη αναπαράσταση απλού νευρώνα.....	38
Εικόνα 28 ΤΝΔ με ένα κρυφό επίπεδο .....	39
Εικόνα 29 Σύντομη αναπαράσταση ΤΝΔ με ένα κρυφό επίπεδο.....	40
Εικόνα 30 ΤΝΔ τριών κρυφών επιπέδων.....	41
Εικόνα 31 Σύντομη αναπαράσταση ΤΝΔ τριών κρυφών επιπέδων.....	41
Εικόνα 32 Γράφημα συνάρτησης κατωφλίου .....	42
Εικόνα 33 Γράφημα τμηματικά γραμμικής συνάρτησης.....	43
Εικόνα 34 Γράφημα λογιστικής συνάρτησης .....	43
Εικόνα 35 Επίδραση μεταβολής παραμέτρου $a$ στη μορφή της λογιστικής συνάρτησης .....	44
Εικόνα 36 Κριτήριο τερματισμού εκπαίδευσης και επιλογή βέλτιστης αρχιτεκτονικής του ΤΝΔ .....	53
Εικόνα 37 Προφίλ τυχαίων επιφανειών με τραχύτητα.....	57
Εικόνα 38 Προφίλ διαφοράς επιφανειών εικόνας 21 .....	58
Εικόνα 39 Υπολογισμός σημείων επαφής με threshold.....	59
Εικόνα 40 Τεχνητό Νευρωνικό Δίκτυο .....	61
Εικόνα 41 Γενική Μορφή του Προτεινόμενου Νευρωνικού Δικτύου .....	63
Εικόνα 42 Επιφάνεια 2D .....	87
Εικόνα 43 Επιφάνειες 2D .....	87
Εικόνα 44 Διακριτοποιημένη επιφάνεια .....	89

Εικόνα 45 Επαφή προφίλ επιφανειών .....	89
Εικόνα 46 Επιφάνεια με τραχύτητα.....	91
Εικόνα 47 Επιβεβαίωση ΤΝΔ με τυχαία δεδομένα .....	94
Εικόνα 48 Πρόβλεψη ΤΝΔ για τα τυχαία δεδομένα.....	95

## Λίστα Πινάκων

Πίνακας 1 Δείγματα Επιφανειών .....	5
Πίνακας 2 Διάφορες παράμετροι ύψους επιφάνειας .....	21
Πίνακας 3 Συναρτήσεις χωρισμού δεδομένων για το ΤΝΔ .....	47
Πίνακας 4 Λίστα αλγορίθμων εκπαίδευσης στο matlab .....	48
Πίνακας 5 Επίδραση μεγέθους τιμών παραμέτρων ΤΝΔ .....	55
Πίνακας 6 Ο Confusion matrix του ΤΝΔ με αλγόριθμο εκπαίδευσης τον Resilient backpropagation.....	75
Πίνακας 7 Ο Confusion matrix του ΤΝΔ με αλγόριθμο εκπαίδευσης τον Levenberg-Marquardt backpropagation.....	77
Πίνακας 8 Ο Confusion matrix του ΤΝΔ με αλγόριθμο εκπαίδευσης τον Gradient descent with adaptive learning rate backpropagation .....	79
Πίνακας 9 Ο Confusion matrix του ΤΝΔ με αλγόριθμο εκπαίδευσης τον Gradient descent with momentum backpropagation.....	81
Πίνακας 10 Ο Confusion matrix του ΤΝΔ με αλγόριθμο εκπαίδευσης τον Gradient descent with momentum and adaptive learning rate backpropagation .....	83
Πίνακας 11 Ο Confusion matrix του ΤΝΔ με αλγόριθμο εκπαίδευσης τον Bayesian regularization backpropagation .....	84
Πίνακας 12 Πίνακας τιμών ύψους επιφάνειας .....	88
Πίνακας 13 Μηχανικών Ιδιοτήτων Υλικών.....	91

## Κεφάλαιο 1ο

### Εισαγωγή

Στη μικροσκοπική κλίμακα όλες οι πραγματικές επιφάνειες εμφανίζουν αποκλίσεις από την πλήρη ομαλότητα και επιπεδότητα. Όταν αυτές οι αποκλίσεις έχουν χαρακτηριστικά τυχαιότητας συνηθίζουμε να τις ονομάζουμε συνοπτικά τραχύτητα. Η τραχύτητα επηρεάζει σχεδόν όλες τις ιδιότητες του υλικού των επιφανειών (οπτικές, ηλεκτρικές, μηχανικές, διαβροχή, τριβή, βιολογικές) και κατά συνέπεια παίζει αποφασιστικό ρόλο στις εφαρμογές τους από την αυτοκινητοβιομηχανία και τη βιομηχανία χρωμάτων μέχρι την βιομηχανία ημιαγωγών, φωτονικών διατάξεων και αισθητήρων. Η πλειονότητα των κατασκευών που χρησιμοποιούνται στη βιομηχανία απαιτεί δύο ή περισσότερες επιφάνειες να έρχονται μεταξύ τους σε επαφή (τριβόσυστημα). Η αλληλεπίδραση των τριβόμενων επιφανειών εξαιτίας μη επιθυμητής τραχύτητας έχει ως αποτέλεσμα τη φθορά, την καταπόνηση, τη διάβρωση, την δημιουργία ρωγμών, τη κακή λειτουργία και τον μικρό χρόνο ζωής των επιφανειών. Οι επιφάνειες με μεγάλη τραχύτητα έχουν ως αποτέλεσμα την ταχύτερη καταπόνηση του υλικού. Εν γένει η μικρή τραχύτητα και η μικρή κυμάτωση συνδέεται με ακριβέστερη διεργασία.

Κατά την διαδικασία της παραγωγής, η μέτρηση της τραχύτητας είναι απαραίτητη, καθώς στα αρχικά στάδια γίνεται εφικτή η αναγνώριση σφαλμάτων, ενώ στα μετέπειτα, η τραχυμέτρηση λειτουργεί ως χρήσιμο εργαλείο ελέγχου για τη βελτιστοποίηση των διαφόρων κατεργασιών που πραγματοποιούνται. Στα σύγχρονα συστήματα κατεργασιών άλλωστε, η τραχύτητα λειτουργεί ως ελεγκτικό μέγεθος σε προβλήματα αυτόματου ελέγχου και διαγνωστικής δυσλειτουργιών ή βλαβών. Με τη γνώση της τραχύτητας γίνεται εφικτή η πρόβλεψη της διάρκειας ζωής μιας κατασκευής. Συνεπώς, η τραχύτητα βρίσκει εφαρμογές που αφορούν:

- Την τριβολογία: Τα τριβόσυστήματα όπως για παράδειγμα οι τροχοί των οχημάτων με το οδόστρωμα (μείωση ολισθηρότητας), τα τριβόσυστήματα όπου παρεμβάλεται λιπαντικό, όπως για παράδειγμα ο δακτύλιος ρουλεμάν. Η επιφάνεια του δακτυλίου πρέπει να είναι αρκετά λεία έτσι ώστε να συνεργάζεται με την επιφάνεια του άξονα, ωστόσο χρειάζεται την τραχύτητα για να συγκρατεί το στρώμα του λιπαντικού.
- Τον τριβοηλεκτρισμό: Παραγωγή ηλεκτρισμού μέσω της τριβής επιφανειών. Παράδειγμα αποτελεί η εφεύρεση της τριβοηλεκτρικής νανογεννήτριας χιονιού από ερευνητές του Πανεπιστημίου UCLA, η οποία παράγει ηλεκτρικό φορτίο μέσω

στατικού ηλεκτρισμού και μέσω της ανταλλαγής ηλεκτρονίων. Το χιόνι είναι θετικά φορτισμένο και απελευθερώνει ηλεκτρόνια. Ως επιφάνεια αλληλεπίδρασης με το χιόνι χρησιμοποιείται σιλικόνη η οποία είναι αρνητικά φορτισμένη. Όταν το χιόνι που πέφτει έρχεται σε επαφή με μια επιφάνεια σιλικόνης, παράγεται ένα φορτίο το οποίο η εν λόγω εφεύρεση μπορεί να πιάνει, δημιουργώντας ηλεκτρισμό.

- Τη νανοτεχνολογία-νανοτριβολογία : Δημιουργία επιφανειών οι οποίες μπορούν να απωθούν το νερό, τον πάγο, τα λάδια και τους μικροοργανισμούς, να συνδέουν μεγάλες ποσότητες βιομορίων σε πολύ μικρή επιφάνεια. Παραδείγματα τέτοιων επιφανειών είναι τα τζάμια και πλαστικά που δεν λερώνουν, δεν κρατούν το νερό ή το λάδι, δεν ανακλούν το φως, δεν πιάνουν ποτέ μικρόβια. (ανακάλυψη του τρόπου δημιουργίας υπερυδρόφοβων και υπερελαιόφοβων επιφανειών από επιστημονική-ερευνητική ομάδα του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος).
- Μικροηλεκτρονικές και οπτικοηλεκτρικές διατάξεις.
- Ηλιακές κυψέλες απόδοσης: Ηλιακά υλικά που παρουσιάζουν κάποια τραχύτητα απορροφούν περισσότερο φως από τις εντελώς λείες επιφάνειες, συνεπώς επιτυγχάνεται μεγαλύτερη απόδοση.
- Την βιοϊατρική: Τα βιοϊατρικά τριβολογικά συστήματα περιλαμβάνουν ένα ευρύ φάσμα συνθετικών υλικών και φυσικών ιστών, συμπεριλαμβανομένων των χόνδρων, των αιμοφόρων αγγείων, της καρδιάς, των τενόντων, των συνδέσμων και του δέρματος. Οι βιοτριβολόγοι ενσωματώνουν έννοιες τριβής, φθοράς και λίπανσης αυτών των βιολογικών επιφανειών σε διάφορες εφαρμογές, όπως ο σχεδιασμός αρθρώσεων και προσθετικών συσκευών, η φθορά των κοχλιών και των πλακών στην αποκατάσταση των οστικών καταγμάτων, η φθορά των οδοντοστοιχιών και των υλικών αποκατάστασης, η φθορά καρδιάς αντικατάστασης βαλβίδας και ακόμη και την τριβολογία των φακών επαφής.

Μία από τις βασικές ιδιότητες των επιφανειών που επηρεάζεται σημαντικά από την τραχύτητα είναι η ενεργός επιφάνεια τους. Η ενεργός επιφάνεια καθορίζει μεγάλο εύρος των ιδιοτήτων και λειτουργιών των επιφανειών όπως ο ρόλος τους στην κατάλυση αντιδράσεων καθώς και στη διαβροχή τους από υγρά. Επιπλέον, η τραχύτητα επιφάνειας επηρεάζει το εμβαδό της διεπαφής δύο επιφανειών με τραχύτητα όταν αυτές έρχονται σε επαφή. Η περιοχή διεπαφής συνιστά ένα μέγεθος δύσκολο ως προς τον προσδιορισμό και την ποσοτικοποίησή του αλλά παράλληλα εξαιρετικά κρίσιμο στον τομέα της τριβολογίας καθώς και της παραγωγής τριβηλεκτρικής ενέργειας. Στο βιβλίο των Bhusan και Nosonovsky η επαφή δύο

επιφανειών με τραχύτητα ισοδυναμεί με την επαφή μιας σύνθετης επιφάνειας με τραχύτητα (της οποίας τα χαρακτηριστικά σχετίζονται με αυτά των δύο αρχικών επιφανειών) με μία επίπεδη επιφάνεια. [1]

Σκοπός της παρούσας εργασίας είναι να παρουσιάσει ένα τρόπο μοντελοποίησης της επαφής δύο επιφανειών με τραχύτητα καθώς και να προτείνει τον προσδιορισμό του μεγέθους της από τα χαρακτηριστικά της τραχύτητας των δύο επιφανειών που έρχονται σε επαφή με χρήση Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων (ΤΝΔ). Συγκεκριμένα:

Στο **Κεφάλαιο 2** προσδιορίζεται το πλαίσιο της εργασίας με εισαγωγή και ανάλυση της έννοιας της επιφάνειας, της τραχύτητας και των παραμέτρων που τις χαρακτηρίζουν. Επιπλέον, μοντελοποιείται ο τρόπος επαφής δύο επιφανειών και γίνεται μία ανασκόπηση στο θεωρητικό κομμάτι των Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων το οποίο θα χρησιμοποιηθεί στην εφαρμογή της προτεινόμενης μεθοδολογίας.

Στο **Κεφάλαιο 3** γίνεται η περιγραφή του προβλήματος υπολογισμού της επιφάνειας διεπαφής και παρουσιάζεται η προτεινόμενη μεθοδολογία.

Στο **Κεφάλαιο 4** αναλύονται τα ευρήματα της μελέτης μας τόσο για ντετερμινιστικές όσο και για στοχαστικές και πειραματικές επιφάνειες που χρησιμοποιήσαμε.

Στο **Κεφάλαιο 5** επιδιώκουμε τα συνοψίσουμε τα συμπεράσματα που εξάγαμε από τα αποτελέσματα της μεθοδολογίας μας. Επιπρόσθετα, γίνεται αξιολόγηση της εν λόγω μεθοδολογίας και προτείνονται ιδέες για περαιτέρω μελέτη.

Στο παράρτημα της εργασίας μας παραθέτουμε τους κώδικες σε matlab που συντάξαμε για την υλοποίηση της μεθοδολογίας καθώς και κάποιες χρήσιμες μαθηματικές υπενθυμίσεις. Τέλος, περιλαμβάνεται όλη η βιβλιογραφία που μελετήσαμε και μας βοήθησε στην κατανόηση του προβλήματος καθώς και στον τρόπο σύνταξης της διπλωματικής εργασίας.

## Κεφάλαιο 2ο Θεωρητικό υπόβαθρο

### 2.1 Επιφάνειες

#### 2.1.1 Ορισμός, αναπαράσταση και μέτρηση επιφανειών

Η έννοια της επιφάνειας είναι διαισθητικά γνωστή από την καθημερινή εμπειρία της αλληλεπίδρασης του ανθρώπου με τη φύση. Μιλάμε λοιπόν για την επίπεδη επιφάνεια ενός τραπεζιού, την επιφάνεια μιας σφαίρας, ενός κώνου, ενός κυλίνδρου κ.λ.π. Η έννοια αυτή μπορεί να οριστεί με πλήθος τρόπων. Στο πλαίσιο της Αναλυτικής Γεωμετρίας, σαν επιφάνεια θεωρούμε τον γεωμετρικό τόπο των σημείων του χώρου, τα οποία ικανοποιούν μια ορισμένη γεωμετρική ιδιότητα. Για παράδειγμα η επιφάνεια της σφαίρας ορίζεται από την χαρακτηριστική ιδιότητα των σημείων της να απέχουν από ένα σταθερό σημείο σταθερή απόσταση. Μεταφράζοντας την γεωμετρική ιδιότητα στην αλγεβρική γλώσσα καταλήγουμε σε μια σχέση των συντεταγμένων  $(x,y,z)$  των σημείων της επιφάνειας, η οποία παίρνει την μορφή:

$$F(x,y,z)=0 \quad (2.1)$$

Η εξίσωση (2.1) πολλές φορές μπορεί να λυθεί ως προς μια των μεταβλητών, π.χ. ως προς  $z$ ,

$$z=f(x,y) \quad (2.2)$$

Άλλος τρόπος παρουσίασεως των επιφανειών είναι ο παραμετρικός τρόπος, ο οποίος εκφράζεται από τις παραμετρικές εξισώσεις:

$$x=x(u,v) , y=y(u,v) , z=z(u,v) \quad (2.3)$$

Επίσης μια επιφάνεια μπορεί να ορισθεί από τον τρόπο που παράγεται. Είναι φανερό ότι μια καμπύλη του χώρου, η οποία κινείται κατά έναν ορισμένο τρόπο, παράγει μια επιφάνεια. Όταν η καμπύλη είναι ευθεία γραμμή, η επιφάνεια λέγεται ευθειογενής. Τέτοιες επιφάνειες είναι π.χ. οι κωνικές, κυλινδρικές κ.λ.π. Όταν η καμπύλη περιστρέφεται γύρω από κάποιο σταθερό άξονα, η επιφάνεια, η οποία παράγεται λέγεται επιφάνεια εκ περιστροφής. Οι επιφάνειες μπορούν να ταξινομηθούν σε δυο κατηγορίες, ανάλογα με την μορφή της αναλυτικής τους εξίσωσης: α) σε αλγεβρικές επιφάνειες, όταν στην εξίσωση  $F(x,y,z)=0$  η έκφραση  $F(x,y,z)$  είναι πολυώνυμο ως προς  $x,y,z$  και β) σε υπερβατικές επιφάνειες όταν η εξίσωση τους δεν είναι αλγεβρική π.χ. η επιφάνεια με εξίσωση

$$z-\cos(x+y)=0 \quad (2.4)$$

Οι επιφάνειες μετρώνται σε τετραγωνικές μονάδες και ο αυστηρός μαθηματικός ορισμός τους είναι ο εξής:



Έστω  $A$  ένα μη κενό υποσύνολο του  $\mathbb{R}^3$  και έστω η συνάρτηση  $F: A \rightarrow \mathbb{R} : (x, y, z) \rightarrow F(x, y, z)$ . Το σύνολο  $S \equiv \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3 : F(x, y, z) = 0\}$  που είναι υποσύνολο του  $\mathbb{R}^3$  λέγεται επιφάνεια του  $\mathbb{R}^3$  με αναλυτική εξίσωση  $F(x, y, z) = 0$ . Αν η εξίσωση  $F(x, y, z) = 0$  επιλύεται ως προς μία από τις μεταβλητές της, έστω ως προς  $z$  δηλαδή  $F(x, y, z) = z - f(x, y) = 0$ , τότε η εξίσωση  $z = f(x, y)$  λέγεται καρτεσιανή εξίσωση της επιφάνειας  $S$ . Αν η  $F(x, y, z)$  είναι πολυώνυμο των  $x, y, z$  με πραγματικούς συντελεστές τότε η επιφάνεια  $S$  λέγεται αλγεβρική και ο βαθμός του πολυωνύμου λέγεται και βαθμός της επιφάνειας. [28]

Οι επιφάνειες χωρίζουν το χώρο σε δύο μέρη (υποχώρους). Ουσιαστικά, αποτελούν το όριο ενός υλικού σώματος το οποίο χωρίζει το εσωτερικό του από το εξωτερικό του περιβάλλον. Σε ό,τι αφορά την επιστήμη της νανοτεχνολογίας το ενδιαφέρον εστιάζεται στην εξαγωγή συμπερασμάτων αναφορικά με τις ιδιότητες ενός υλικού. Ο σκοπός αυτός επιτυγχάνεται αξιολογώντας στοιχεία τα οποία προκύπτουν από την παρατήρηση της μορφολογίας της επιφάνειας σε μικροσκοπική και νανοσκοπική κλίμακα. Οι επιφάνειες αφορούν διάφορες επιστήμες όπως η φυσική, η μηχανική, η χημεία, η βιολογία και ιατρική. Μερικά παραδείγματα επιφανειών υπάρχουν στον παρακάτω πίνακα:

<b>Επιφάνειες</b>
Μεταλλικά ελάσματα
Ξύλο
Γυαλόχαρτο
Άσφαλτος
Καθρέφτης
Ερυθρά αιμοσφαίρια
Φύλλα φυτών
Πολυμερή
Δέρμα
Χαρτί

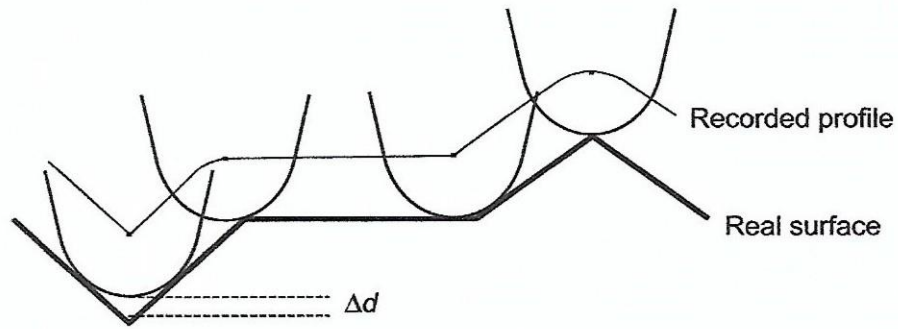
*Πίνακας 1 Δείγματα Επιφανειών*

Η τοπογραφία μιας επιφάνειας μπορεί να αναπαρασταθεί από ένα σύνολο δεδομένων το οποίο περιέχει τις συντεταγμένες των σημείων που βρίσκονται στην επιφάνεια. Ωστόσο, για να αποφασιστούν κατάλληλα τα χαρακτηριστικά τα οποία συνθέτουν την τοπογραφία της επιφάνειας, η απόσταση μεταξύ των γειτονικών μετρούμενων σημείων χρειάζεται να είναι σημαντικά μικρότερη από το μέγεθος αυτών των χαρακτηριστικών.

Κάποιες πολύ σημαντικές τεχνικές όπως η προφίλομετρία με ακίδα (Stylus profilometry) και η Μικροσκοπία Ατομικής Δύναμης (Atomic Force Microscopy AFM), μετρούν τις συντεταγμένες των σημείων της επιφάνειας με αλληλεπιδράσεις με την ακίδα τους. Οι συντεταγμένες των διακριτών σημείων μετρούνται διαδοχικά, γεγονός που θέτει όρια στη ταχύτητα με την οποία μπορούν να καταγράφονται οι μετρήσεις. Η τοπογραφία μιας επιφάνειας περιγράφεται από ένα σύνολο δεδομένων το οποίο περιλαμβάνει τις συντεταγμένες των σημείων είτε κατά μήκος μιας γραμμής είτε σε μία περιοχή της επιφάνειας. Στην προφίλομετρία, μία λεπτή ακίδα σύρεται ομαλά και σταθερά σε όλη την υπό εξέταση επιφάνεια. Η θέση της ακίδας στο επίπεδο της επιφάνειας καταγράφεται (συνήθως μέσω του συστήματος ενεργοποίησης κίνησης) και η κάθετη θέση της ακίδας καταγράφεται μέσω ενός μετατροπέα.

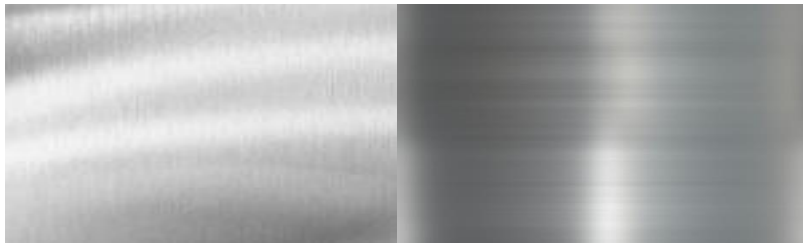
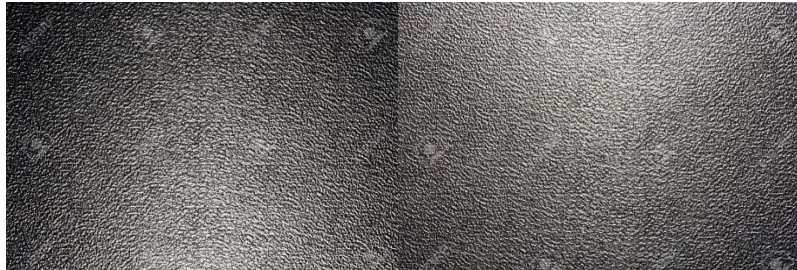
Η μέθοδος AFM χρησιμοποιεί πολύ λεπτότερη ακίδα και για αυτό οι συντεταγμένες μετρούνται με μεγαλύτερη ακρίβεια. Σε κάθε περίπτωση, με τη μέθοδο της ακίδας προκύπτουν κάποιοι αναπόφευκτοι περιορισμοί οι οποίοι πηγάζουν από το σχήμα της ακίδας. Σε κάποιες εφαρμογές, ιδίως στη ναυκλίμακα, αυτό μπορεί να οδηγήσει σε σημαντικό σφάλμα. Γενικά, όλες οι μέθοδοι που περιλαμβάνουν ακίδες παράγουν εξομαλυμένες επιφάνειες εξαιτίας των πεπερασμένων διαστάσεων της ακίδας.

Από τη στιγμή που τα τοπογραφικά δεδομένα έχουν συλλεγεί αναπαρίστανται γραφικά. Τα απλά προφίλ γραμμής μπορούν να παραχθούν από μετρήσεις σε μία περιοχή της επιφάνειας. Η γραφική αναπαράσταση του προφίλ της επιφάνειας διαφέρει από το αντίστοιχο πραγματικό προφίλ, δηλαδή το προφίλ που προκύπτει από την τομή της επιφάνειας με ένα επίπεδο, λόγω της διαμεσολάβησης της ακίδας και των επιδράσεων του μεγέθους της.

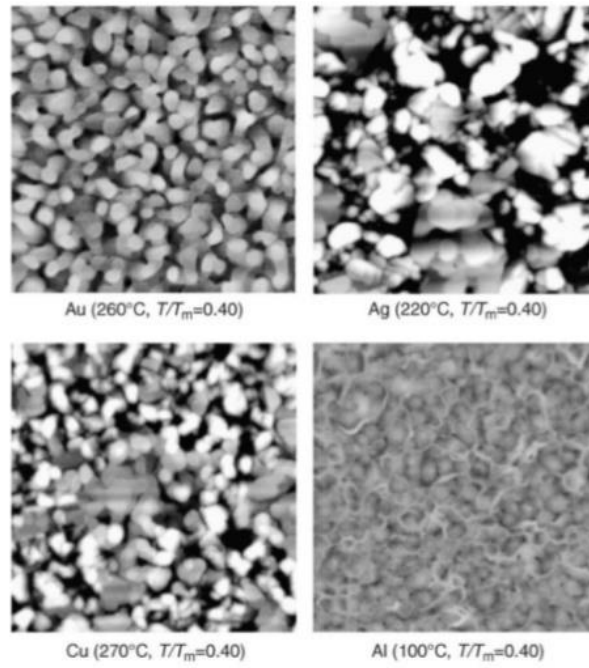


*Εικόνα 1 Διαφορά πραγματικού και μετρούμενου προφίλ επιφάνειας*

Η μορφολογία της επιφάνειας γίνεται αντιληπτή με διάφορους τρόπους από τον παρατηρητή όπως οπτική παρατήρηση, παρατήρηση με μικροσκόπια. Σαφώς, ακόμα και μία φαινομενικά λεία επιφάνεια αν ελεγχθεί μικροσκοπικά παρουσιάζει αποκλίσεις από το ιδανικό επίπεδο, όπως φαίνεται στις παρακάτω εικόνες:



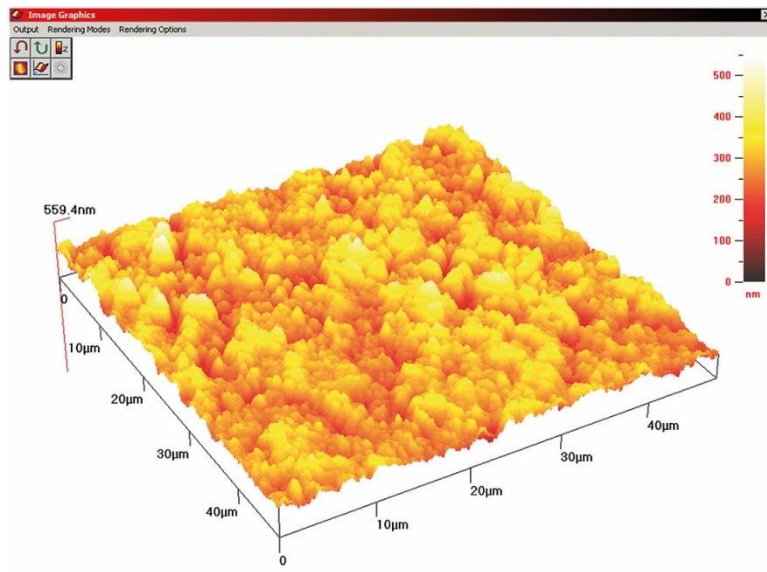
*Εικόνα 2 Οπτική παρατήρηση επιφάνειας μετάλλων*



Εικόνα 3 Παρατήρηση επιφάνειας μεταλλικών φίλμ με χρήση μικροσκοπίου AFM [21]



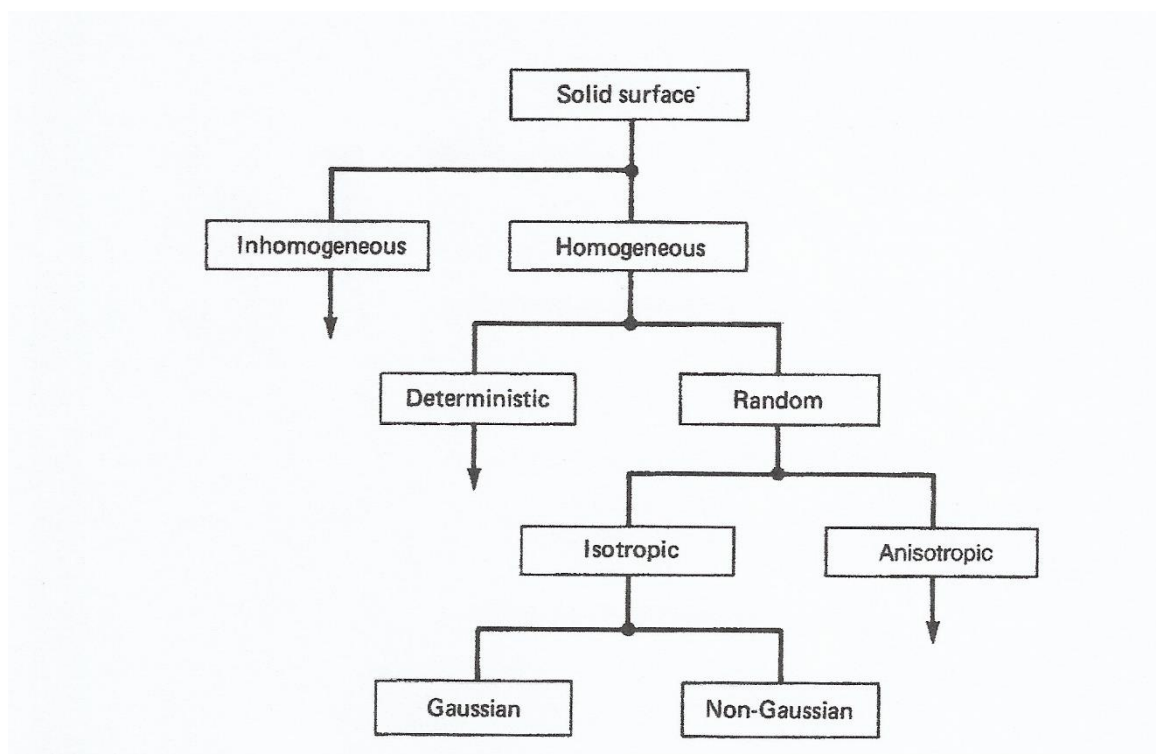
Εικόνα 4 Παρατήρηση Επιφανειών ανθρώπινων ερυθρών αιμοσφαιρίων με χρήση μικροσκοπίου AFM [21]



*Εικόνα 5 Παρατήρηση Επιφανειών υλικού οδοντικής αποκατάστασης με χρήση μικροσκοπίου AFM*

### 2.1.2 Ταξινόμηση επιφανειών

Μία πολύ συχνή κατηγοριοποίηση των στερεών επιφανειών φαίνεται στο παρακάτω διάγραμμα:



Εικόνα 6 Ταξινόμηση στερεών επιφανειών

Οι επιφάνειες ντετερμινιστικής φύσεως μπορούν να μελετηθούν με σχετικά απλές αναλυτικές και εμπειρικές μεθόδους. Ο λεπτομερής χαρακτηρισμός τους είναι άμεσος και σαφής. Παρ'όλα αυτά οι υψές των περισσότερων μηχανικών επιφανειών είναι τυχαίες, τόσο ισοτροπικές (στατιστικά παρόμοιες συσχετίσεις υψών προς όλες τις κατευθύνσεις) όσο και ανισοτροπικές. Επίσης, η κατανομή των υψών τους μπορεί να είναι Γκαουσιανή ή μη Γκαουσιανές. Το κατά πόσον η κατανομή του ύψους της επιφάνειας είναι ισοτροπική ή ανισοτροπική και Γκαουσιανή ή μη Γκαουσιανή εξαρτάται από τη φύση της μεθόδου κατασκευής. Οι επιφάνειες που έχουν μορφοποιηθεί από σωρευτική διαδικασία (σφυρηλάτηση, ηλεκτρολυτική στίλβωση και λείανση) στην οποία το τελικό σχήμα κάθε περιοχής είναι το αθροιστικό αποτέλεσμα ενός μεγάλου αριθμού από τυχαία διακριτά τοπικά γεγονότα και ανεξάρτητα από την κατανομή που καθορίζει κάθε ξεχωριστό γεγονός, θα παράγουν ένα σωρευτικό αποτέλεσμα το οποίο καθορίζεται από την Γκαουσιανή μορφή. Αυτό αποτελεί άμεση συνέπεια του Κεντρικού Οριακού Θεωρήματος της θεωρίας πιθανοτήτων και στατιστικής. Διαδικασίες όπως είναι το τριβή, η μορφοποίηση, η κονιοροποίηση και η κοπή γενικά οδηγούν σε

ανισοτροπικές και μη Γκαουσιανές επιφάνειες. Η Γκαουσιανή (κανονική) κατανομή έχει εξελιχθεί σε ένα από τους βασικούς πυλώνες της ταξινόμησης επιφανειών.

Σε αυτό το κεφάλαιο και πιο συγκεκριμένα στην ενότητα **2.2.3**, θα αναλύσουμε την έννοια της τραχύτητας και θα ορίσουμε τις παραμέτρους της ακολουθώντας στατιστική ανάλυση και τον φράκταλ (fractal) χαρακτηρισμό της τραχύτητας επιφανειών τα οποία είναι σημαντικά σε προβλήματα διεπαφής. Έμφαση θα δοθεί σε τυχαίες, ισοτροπικές επιφάνειες που ακολουθούν την κανονική κατανομή.

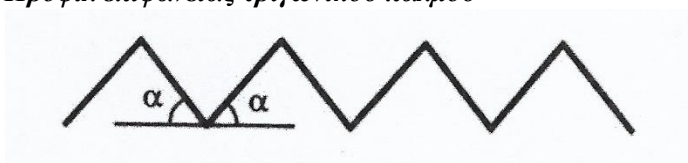
#### 2.1.2.a Περιοδικές επιφάνειες

Σε ό,τι αφορά τις ντετερμινιστικές επιφάνειες, δηλαδή τις επιφάνειες με συγκεκριμένη γεωμετρική δομή, το ενδιαφέρον εστιάζεται στις περιοδικές επιφάνειες, οι οποίες καλύπτουν μεγάλο μέρος επιφανειών που συναντώνται στη φύση. Για παράδειγμα, οι επιφάνειες φύλλων πολλών φυτών (π.χ του λωτού) τα οποία είναι υδροφοβικά. Αυτή η υδροφοβικότητα οφείλεται σε συγκεκριμένες νανοδομές στην επιφάνεια του φύλλου, εξαιτίας των οποίων το εμβαδόν της επιφάνειας του νερού που έρχεται σε επαφή με την επιφάνεια του φύλλου μειώνεται. Άλλο παράδειγμα περιοδικότητας αποτελούν οι αντιανακλαστικές δομές moth eye (Antireflective structure AR). Το moth eye είναι συστοιχίες προεξοχών, με διαστάσεις μικρότερες από το μήκος κύματος του φωτός που επέρχεται πάνω τους. Δημιουργούν μια περιοχή με διαβαθμισμένο δείκτη διάθλασης στη διεπιφάνεια μεταξύ δύο μέσων, μειώνοντας ουσιαστικά την ποσότητα φωτός που ανακλάται από τη διεπαφή.

Τέτοιες συστοιχίες προεξοχών εντοπίζονται στα μάτια ορισμένων ειδών σκώρου, πεταλούδας και μύγας, όπου η μείωση της ανακλαστικότητας θεωρείται ότι αυξάνει την ευαισθησία του οπτικού συστήματος. Τεχνητές δομές AR έχουν κατασκευαστεί σε μια σειρά υλικών όπως πολυμερή, γυαλί, πυρίτιο και αρσενικό του γαλλίου (Gallium arsenide GaAs ) για εφαρμογές που περιλαμβάνουν τεχνολογίες φωτοβολταϊκών και απεικόνισης.

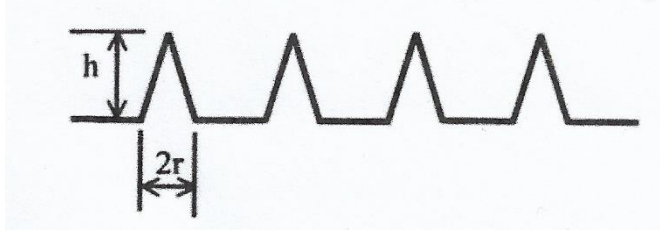
Παρακάτω διακρίνουμε κάποιες από τις σημαντικότερες κατηγορίες περιοδικών επιφανειών:

##### *ι. Προφίλ επιφάνειας τριγωνικού παλμού*

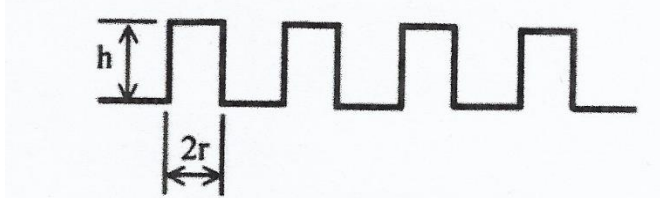




ii. Προφίλ επιφάνειας τριγωνικού παλμού με παύση



iii. Προφίλ επιφάνειας τετραγωνικού παλμού



iv. Προφίλ ημιτονοειδούς επιφάνειας



v. Προφίλ ημιανορθωμένης ημιτονοειδούς επιφάνειας



vi. Προφίλ Πλήρους ανορθωμένης ημιτονοειδούς επιφάνειας



Η τοπογραφική αναπαράσταση μιας περιοδικής επιφάνειας με περίοδο  $\lambda$  μπορεί να αναπαρασταθεί αριθμητικά ως μία σειρά Fourier:

$$z(x) = \frac{A_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} A_n \sin \frac{2\pi n x}{\lambda} + B_n \cos \frac{2\pi n x}{\lambda},$$

όπου  $A_n$ ,  $B_n$  οι συντελεστές Fourier που δίνονται από τις παρακάτω σχέσεις:

$$A_n = \frac{2}{\lambda} \int_{-\frac{\lambda}{2}}^{\frac{\lambda}{2}} z(x) \cos \left( \frac{2\pi n x}{\lambda} \right) dx, n = 0, 1, 2, ..$$



$$B_n = \frac{2}{\lambda} \int_{-\frac{\lambda}{2}}^{\frac{\lambda}{2}} z(x) \sin\left(\frac{2\pi nx}{\lambda}\right) dx, n = 0, 1, 2, \dots$$

Μία χρήσιμη παρατήρηση είναι ότι αν η συνάρτηση  $z(x)$  είναι άρτια, δηλαδή  $z(x) = z(-x)$  για κάθε  $x$ , τότε οι συντελεστές  $B_i$  για  $i=1, \dots, n, \dots$  μηδενίζονται και συνεπώς η σειρά Fourier είναι ανάπτυγμα μόνο συνημιτόνων. Αντίστοιχα, όταν η  $z(x)$  είναι περιττή, δηλαδή  $z(-x) = -z(x)$  για κάθε  $x$ , οι συντελεστές  $A_i$  για  $i = 1, \dots, n, \dots$  μηδενίζονται οπότε η σειρά Fourier είναι μόνο ανάπτυγμα ημιτόνων.

Η εύρεση των συντελεστών Fourier καθιστά δυνατή την ανάπτυξη της εκάστοτε συνάρτησης σε σειρά Fourier. Βέβαια, για να αναπτυχθεί μία συνάρτηση  $z(x)$  σε σειρά Fourier πρέπει να ικανοποιούνται οι παρακάτω συνθήκες:

- i. Η  $z(x)$  ορίζεται μονοσήμαντα στο διάστημα  $[x_0, x_0 + \lambda]$ , όπου  $x_0$  σημείο ασυνέχειας, εκτός ενδεχομένως από ένα πεπερασμένο το πλήθος σημείων αυτού του διαστήματος.
- ii. Η  $z(x)$  ορίζεται και εκτός του διαστήματος  $[x_0, x_0 + \lambda]$  ώστε να είναι περιοδική με περίοδο  $\lambda$ .
- iii. Η  $z(x)$  και η  $z'(x)$  να είναι κατά τμήματα συνεχείς στο διάστημα  $[x_0, x_0 + \lambda]$ .

### 2.1.2.b Στοχαστικές επιφάνειες

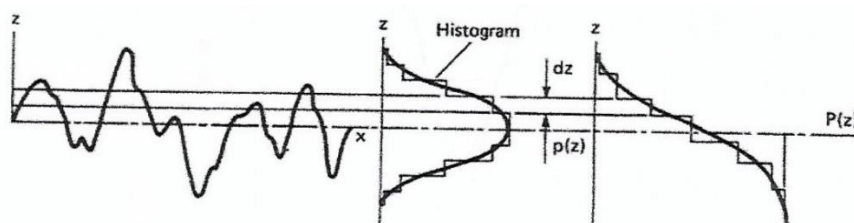
Η άλλη μεγάλη κατηγορία επιφανειών με την οποία θα ασχοληθούμε στην παρούσα εργασία είναι οι στοχαστικές ή αλλιώς τυχαίες επιφάνειες. Τέτοιου τύπου επιφάνειες δεν έχουν συγκεκριμένη γεωμετρική δομή που να καθορίζεται από κάποια γνωστή συνάρτηση. Εξαιτίας αυτού του γεγονότος στις τιμές του ύψους των προφίλ αυτών των επιφανειών ενυπάρχει τυχειότητα. Για το λόγο αυτό η μελέτη τους επιτυγχάνεται στατιστικά, θεωρώντας ότι το ύψος  $z(x)$  είναι μία συνεχής τυχαία μεταβλητή που ακολουθεί κάποια κατανομή πιθανότητας. Αυτή η θεώρηση μας δίνει χρήσιμες πληροφορίες για τα δεδομένα (τιμές ύψους του προφίλ της επιφάνειας) μέσω των παραμέτρων της κατανομής (μέτρα θέσης και διασποράς) οι οποίες εκτιμώνται από το δείγμα.

Η αθροιστική συνάρτηση κατανομής (σ.κ)  $F_Z(z)$  της τυχαίας μεταβλητής  $z(x)$  ορίζεται ως η πιθανότητα  $F_Z(z) = P(z(x) < z)$ . Η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας (σ.π.π)  $f_Z(z)$  ορίζεται ως η πρώτη παράγωγος της σ.κ, δηλαδή:

$$f_Z(z) = \frac{dF_Z(z)}{dz}$$

Αντίστροφα,  $F_Z(z) = \int_{R_1}^z f_Z(x) dx$ , όπου  $R_1$  είναι το αριστερό άκρο του στηρίγματος της κατανομής. Επίσης,  $\int_{R_1}^{R_2} f_Z(z) dz = 1$ , όπου  $R_1$  και  $R_2$  τα άκρα του στηρίγματος της κατανομής.

Προκειμένου να κατανοήσουμε καλύτερα την σύνδεση μεταξύ της μορφολογίας των στοχαστικών επιφανειών και των κατανομών πιθανότητας αρκεί να παρατηρήσουμε την παρακάτω εικόνα:



Εικόνα 7 Κατανομή πιθανότητας ύψους επιφάνειας

Ο κάθετος άξονας  $z$  αφορά τις τιμές ύψους ενός τυχαίου προφίλ μιας επιφάνειας (στην πραγματικότητα οι τιμές αυτές είναι πεπερασμένες το πλήθος - διακριτοποιημένο προφίλ επιφάνειας). Θεωρώντας το  $z$  τυχαία μεταβλητή παρουσιάζεται το ιστόγραμμα της  $z$  το οποίο απεικονίζει τη συχνότητα ή τον αριθμό των τιμών του ύψους που βρίσκεται ανάμεσα σε δύο συγκεκριμένες τιμές, οι οποίες ορίζουν μία κλάση, ως συνάρτηση του ύψους. Το ιστόγραμμα αυτό προσεγγίζεται αρκετά καλά με μία καμπύλη κανονικής κατανομής, αν θεωρηθεί ότι οι τιμές του ύψους αφορούν συνεχές διάστημα (Gaussian distribution curve fit). Γενικά, για τυχαία δεδομένα συνιστάται η χρήση 15 με 50 κλάσεων για τις τιμές του  $z$ . Συνήθως, επιλογή αριθμού κλάσεων αποτελεί έναν συμβιβασμό ανάμεσα στην ακρίβεια και την επίλυση του προβλήματος.

Τέλος, παρουσιάζεται και το αντίστοιχο γράφημα της αθροιστικής συνάρτησης κατανομής του ύψους  $z$ .

Η στατιστική ανάλυση ξεκινά με την εύρεση περιγραφικών στατιστικών μέτρων της υπό μελέτη κατανομής. Τέτοια περιγραφικά μέτρα συνιστούν **εκτιμητές** των βασικών παραμέτρων της κατανομής της  $z$  που μελετάμε, οι οποίοι υπολογίζονται από τις

παρατηρήσεις του δείγματος δίνοντας μας πληροφορίες για τα δεδομένα. Τα περιγραφικά στατιστικά μέτρα χωρίζονται σε τρεις κατηγορίες:

- Τα **μέτρα θέσης** τα οποία μας δίνουν μία εικόνα για τη θέση των παρατηρήσεων στο εύρος των δεδομένων όπως η δειγματική μέση τιμή, η δειγματική διάμεσος και η δειγματική επικρατούσα τιμή.
- Τα **μέτρα μεταβλητότητας** τα οποία μας πληροφορούν για τον διασκορπισμό (μεταβλητότητα) των δεδομένων γύρω από την μέση τιμή τους. Τέτοια μέτρα είναι η δειγματική διασπορά ή διακύμανση, το δειγματικό εύρος και τα ποσοστιαία σημεία.
- Τα **μέτρα λοξότητας και κύρτωσης** τα οποία μας δίνουν πληροφορίες για την μορφή της κατανομής του δείγματος όπως οι συντελεστές ασυμμετρίας και κύρτωσης.

Όλες οι παραπάνω παράμετροι που καθορίζουν την μορφή της κατανομής προκύπτουν από τον γενικό τύπο της ροπής  $n$ -οστής τάξης για διάφορες τιμές του  $n$ .

Η κεντρική ροπή  $n$ -οστής τάξης για συνεχή συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας δίνεται από τον τύπο:

$$E[(z - E(z))^n] = \int_{-\infty}^{+\infty} (z - E(z))^n f_z(z) dz$$

όπου  $E$  ο τελεστής της μέσης τιμής  $E(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} z f_z(z) dz$ .

Για  $n=1$  και  $E(z)=0$  προκύπτει η μέση τιμή ενώ για  $n=2$  η διασπορά

$$\sigma^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} (z - E(z))^2 f_z(z) dz$$

Για  $n=3$ , παίρνουμε την κεντρική ροπή 3<sup>ης</sup> τάξης

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (z - E(z))^3 f_z(z) dz$$

η οποία διαιρεμένη με το  $\sigma^3$  μας δίνει τον συντελεστή λοξότητας ή ασυμμετρίας (Skewness):

$$S_k = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} (z - E(z))^3 f_z(z) dz}{\sigma^3}$$

Ο συντελεστής αυτός μας δίνει το μέγεθος της ασυμμετρίας της κατανομής γύρω από τη μέση τιμή της, δηλαδή το κατά πόσο υπάρχει διαφοροποίηση της μορφής της κατανομής αριστερά (θετική ασυμμετρία) ή δεξιά (αρνητική ασυμμετρία) από τη μέση τιμή της.

Τέλος, για  $v=4$  προκύπτει η κεντρική ροπή 4<sup>ης</sup> τάξης

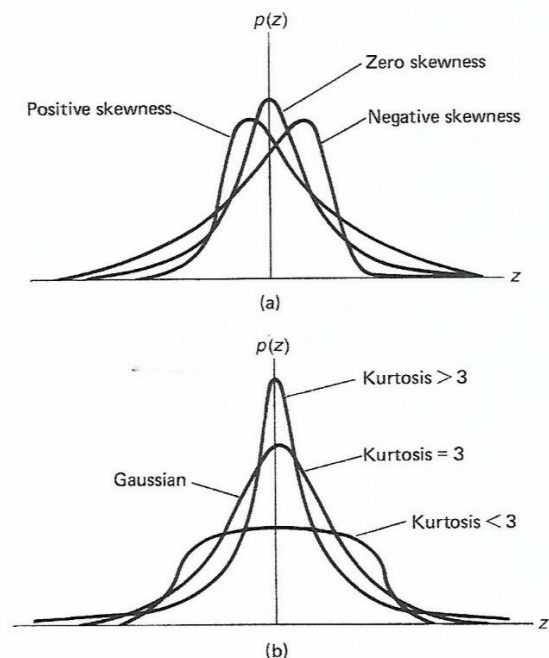
$$\int_{-\infty}^{+\infty} (z - E(z))^4 f_z(z) dz$$

η οποία διαιρεμένη με το  $\sigma^4$  μας δίνει τον συντελεστή κύρτωσης (Kurtosis) του Pearson:

$$K = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} (z - E(z))^4 f_z(z) dz}{\sigma^4}$$

Ο συντελεστής αυτός μας δίνει ένα μέτρο του πάχους της κατανομής. Αν  $K > 3$  η κατανομή είναι λεπτόκυρτη ενώ αν  $K < 3$  είναι πλατύκυρτη.

Για υπολογισμό των κεντρικών ροπών από το δείγμα αντικαθιστούμε τη θεωρητική μέση τιμή  $E(z)$  με τη δειγματική  $\bar{z}$ . Στη διακριτή περίπτωση το ολοκλήρωμα αντικαθίσταται με άθροισμα.



Εικόνα 8 Ο ρόλος της λοξότητας και της κύρτωσης στις κατανομές

Για την ειδική περίπτωση όπου  $S_k=0$  και  $K=3$  η κατανομή είναι η κανονική.

Σε πολλές πρακτικές εφαρμογές, τα δεδομένα των τιμών του ύψους τείνουν να ακολουθούν την κανονική κατανομή (Gaussian distribution) η οποία έχει την παρακάτω σ.π.π:

$$f_z(z) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(z-m)^2}{2\sigma^2}\right)$$

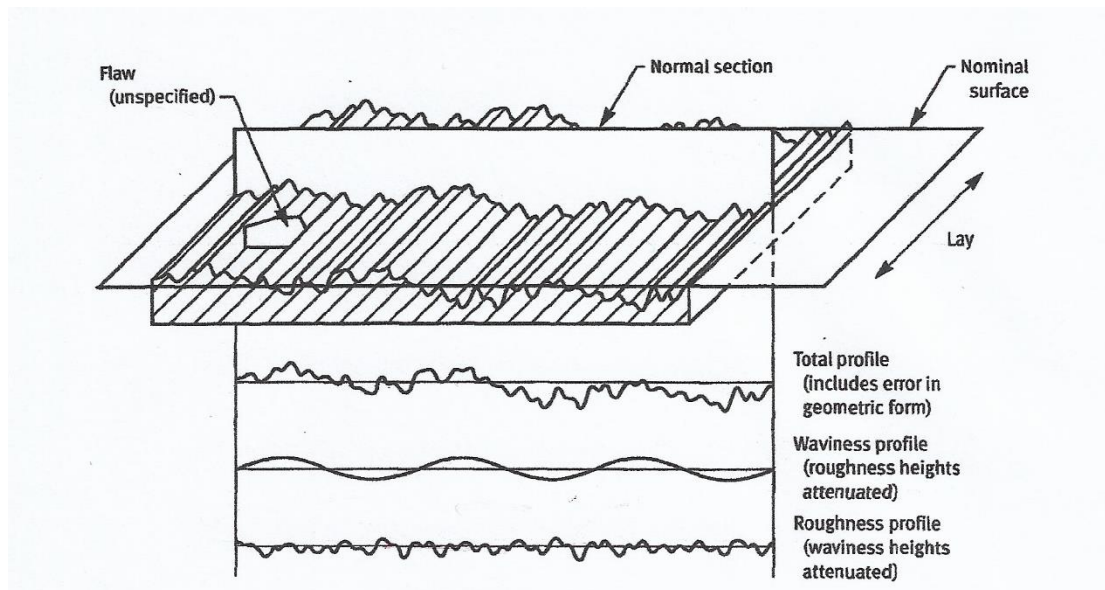
όπου  $m$  η μέση τιμή και  $\sigma$  η τυπική απόκλιση. Πολλές φορές για λόγους απλούστευσης θεωρούμε την κανονικοποιημένη τυχαία μεταβλητή  $z^* = \frac{z-m}{\sigma}$  της οποίας η σ.π.π είναι η παρακάτω:

$$f_z(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{z^{*2}}{2}\right)$$

Η κανονική κατανομή συναντάται στη φύση καθώς και σε τεχνικές εφαρμογές όταν η θεωρούμενη ως τυχαία ποσότητα είναι το άθροισμα πολλών τυχαίων και μεταξύ τους ανεξάρτητων παραγόντων. Για παράδειγμα, όταν κατασκευάζεται μία μηχανική επιφάνεια υπάρχουν πολλοί τυχαίοι παράγοντες οι οποίοι επηρεάζουν την τραχύτητα και συνεπώς το ύψος της τραχύτητας ακολουθεί την κανονική κατανομή. Κλείνοντας αυτή την ενότητα, είναι σημαντικό να τονίσουμε ότι από την στατιστική θεώρηση του ύψους των προφίλ των επιφανειών απορρέουν μετρικές σχέσεις που βοηθούν στον χαρακτηρισμό των επιφανειών όπως θα δούμε στο επόμενο κεφάλαιο.

### 2.1.3 Μετρολογία επιφάνειας

Η μορφολογία μιας επιφάνειας μπορεί να αναπτυχθεί σε διάφορες κλίμακες οι οποίες επικαλύπτονται η μία μέσα στην άλλη. Παραδοσιακά στη μηχανική, η μορφολογία της επιφάνειας ενός αντικειμένου χωρίζεται σε τρεις δομές ανάλογα με την κλίμακα στην οποία γίνεται η μελέτη. Αρχικά, στη μεγαλύτερη κλίμακα μπορούμε να παρατηρήσουμε με γυμνό μάτι το σχήμα-μορφή του αντικειμένου. Προχωρώντας σε μικρότερες κλίμακες, εμφανίζεται κυμάτωση με συγκεκριμένο διάνυσμα κύματος, η οποία απεικονίζεται με κυματικές διακυμάνσεις ενώ σε ακόμη μικρότερες κλίμακες, παρουσιάζεται τραχύτητα. Από τα παραπάνω συμπεραίνουμε ότι η κλίμακα παίζει σημαντικό ρόλο στον χαρακτηρισμό της μορφολογίας μιας επιφάνειας, όπως φαίνεται στην παρακάτω εικόνα:



Εικόνα 9 Σχηματικό διάγραμμα χαρακτηριστικών επιφάνειας

Η υφή της επιφάνειας είναι ή επαναλαμβανόμενη ή τυχαία απόκλιση από την επιπεδότητα. Η υφή της επιφάνειας περιλαμβάνει:

- i. Τραχύτητα ( μικρο ή νανο τραχύτητα)-Roughness
- ii. Κυμάτωση (μακροτραχύτητα)-Waviness
- iii. Κατεύθυνση της επιφάνειας-Lay
- iv. Ατέλειες-Flaws

Η νανο και μικρο-τραχύτητα σχηματίζονται από διακυμάνσεις στην επιφάνεια μικρών μηκών κύματος της τάξεως των μερικών δεκάτων του χιλιοστού ( $\mu\text{m}$ ) έως 100 nm που χαρακτηρίζονται από λόφους (τοπικά μέγιστα) και κοιλάδες (τοπικά ελάχιστα) ποικίλων υψών και χωρικών αποστάσεων.

Η κυμάτωση αποτελεί ένα είδος ανωμαλίας της επιφάνειας που αφορά μεγαλύτερα μήκη κύματος και συνήθως αναφέρεται ως μακροτραχύτητα καθότι παρουσιάζεται σε κλίμακα της τάξεως του χιλιοστού (mm). Η κυμάτωση μπορεί να είναι αποτέλεσμα πολλών παραγόντων όπως αποκλίσεις λόγω μηχανικής επεξεργασίας, δονήσεων, χτυπημάτων, θερμικής επεξεργασίας. Η κυμάτωση περιλαμβάνει όλες τις αποκλίσεις των οποίων η χωρική απόσταση είναι μεγαλύτερη από το μήκος δειγματοληψίας της τραχύτητας και μικρότερη από μήκος δειγματοληψίας της κυμάτωσης.

Όλες οι επιφάνειες, ακόμα και οι φαινομενικά λείες, παρουσιάζουν κάποια μορφολογία. Η μορφολογία αυτή συνίσταται σε διαδοχικές εξάρσεις και βυθίσεις του ανάγλυφου οι

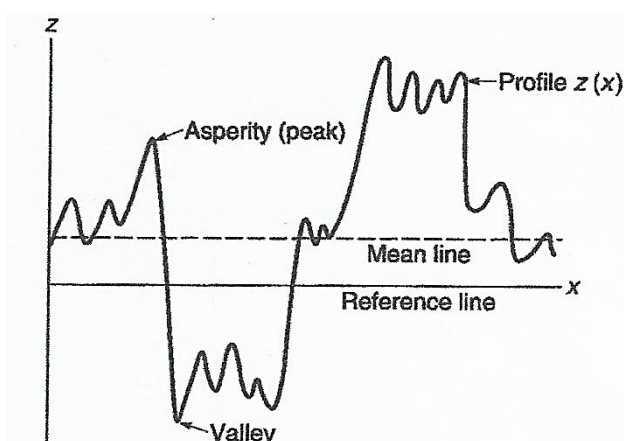
οποίες προκύπτουν από τον τρόπο κατασκευής της εκάστοτε επιφάνειας. Οι εξάρσεις και οι βυθίσεις του ανάγλυφου αποτελούν την επιφανειακή τοπογραφία που καθορίζει το πόσο λεία είτε πόσο τραχειά είναι μια επιφάνεια, ενώ η οπτικοποίηση τους σε διάφορες κλίμακες αναδεικνύει περίπλοκες και τυχαίες γεωμετρικές δομές.

Η τραχύτητα επιφάνειας συνήθως αφορά στις διακυμάνσεις του ύψους της επιφάνειας σε σχέση με ένα επίπεδο αναφοράς. Η μέτρηση της γίνεται είτε κατά μήκος ενός μεμονωμένου προφίλ γραμμής ή κατά μήκος ενός σετ από παράλληλα προφίλ γραμμής (διάγραμμα επιφάνειας). Η τραχύτητα συνήθως χαρακτηρίζεται με μία από τις δύο στατιστικές παραμέτρους περιγραφής του ύψους της επιφάνειας που υποστηρίζεται από το Αμερικανικό Εθνικό Ίδρυμα Προτυποποίησης (ANSI-American National Standards Institute) και του Διεθνούς Οργανισμού Τυποποίησης (ISO-International Standardization Organization). Οι παράμετροι αυτοί είναι:

### Παράμετροι ύψους

- i. το  $R_a$ , CLA (center line average) ή AA (arithmetic average)
- ii. το RMS (root mean square) ή τυπική απόκλιση  $\sigma$  ή  $R_q$ .

Δύο άλλες στατιστικές παράμετροι περιγραφής του ύψους της επιφάνειας που σπάνια χρησιμοποιούνται είναι η λοξότητα  $S_k$  (skewness) και η κύρτωση  $K$  (kurtosis). Ένα άλλο μέτρο της τραχύτητας επιφάνειας είναι η παράμετρος περιγραφής ακραίας τιμής ύψους  $R_{max}$  (μέγιστη τιμή κορυφής-κοιλιάδας ύψους).



Εικόνα 10 Γραφική παράσταση προφίλ επιφάνειας  $z(x)$

Υποθέτουμε ένα προφίλ επιφάνειας  $z(x)$ , στο οποίο το ύψος μετριέται από την γραμμή αναφοράς (Εικόνα 8). Ορίζουμε μία μέση γραμμή, έτσι ώστε το εμβαδόν που περικλείεται μεταξύ του προφίλ που βρίσκεται πάνω από τη μέση γραμμή και της μέσης γραμμής να

είναι ίσο με το εμβαδόν που περικλείεται μεταξύ του προφίλ που βρίσκεται κάτω από τη μέση γραμμή και της μέσης γραμμής. Το  $R_a$  είναι ο αριθμητικός μέσος των απολύτων τιμών των κάθετων αποκλίσεων από τη μέση γραμμή κατά μήκος του προφίλ. Η τυπική απόκλιση  $\sigma$  είναι η τετραγωνική ρίζα του αριθμητικού μέσου των τετραγώνων των κάθετων αποκλίσεων από τη μέση γραμμή. Το  $R_q = \text{RMS}$  είναι η τετραγωνική ρίζα του αριθμητικού μέσου των τετραγώνων των κάθετων αποκλίσεων. Οι μαθηματικοί τύποι που περιγράφουν αυτά τα μεγέθη είναι:

$$R_a = \frac{1}{L} \int_0^L |z - m| dx, \text{ όπου } m = \frac{1}{L} \int_0^L z dx$$

$$R_q^2 = \text{RMS}^2 = \frac{1}{L} \int_0^L (z^2) dx$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{L} \int_0^L (z - m)^2 dx = \text{RMS}^2 - m^2 \text{ (variance)}$$

Σημειώνουμε ότι  $L$  είναι το μήκος δειγματοληψίας του προφίλ της επιφάνειας.

Για την ειδική περίπτωση που  $m = 0$  τότε  $\text{RMS} = \sigma$ . Σε πολλές περιπτώσεις, το  $R_a$  και το  $\sigma$  είναι εναλλάξιμα και για Γκαουσιανές επιφάνειες ισχύει ότι:

$$\sigma \sim \sqrt{\frac{\pi}{2}} R_a \sim 1.25 R_a$$

Η λοξότητα (skewness) και η κύρτωση (kurtosis) στην κανονικοποιημένη μορφή δίνονται από τις σχέσεις:

$$Sk = \frac{1}{\sigma^3 L} \int_0^L (z - m)^3 dx$$

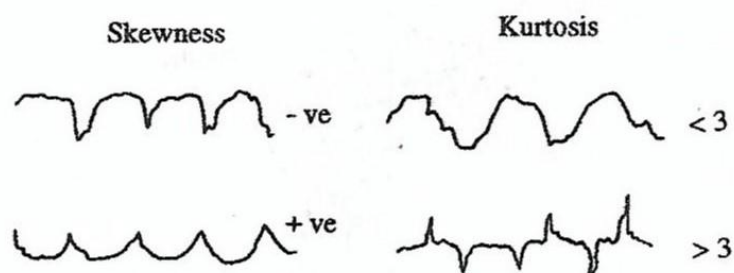
και

$$K = \frac{1}{\sigma^4 L} \int_0^L (z - m)^4 dx$$

Η λοξότητα και η κύρτωση είναι παράμετροι οι οποίες επηρεάζουν την εμφάνιση και την μορφή των τοπικών μεγίστων – ελαχίστων αντίστοιχα. Σε ό,τι αφορά τη λοξότητα αν η κατανομή του ύψους του προφίλ της επιφάνειας είναι συμμετρική ( $Sk=0$ ) τότε γύρω από τη μέση γραμμή ο αριθμός τοπικών μεγίστων είναι περίπου ίσος με τον αριθμό τοπικών ελαχίστων. Αν η κατανομή του ύψους παρουσιάζει θετική ασυμμετρία τότε γύρω από τη μέση γραμμή θα βρίσκονται περισσότερα τοπικά μέγιστα απ'ότι τοπικά ελάχιστα. Αντίστοιχα, αν η ασυμμετρία είναι αρνητική ο αριθμός των τοπικών ελαχίστων είναι μεγαλύτερος από τον αριθμό των τοπικών μεγίστων. Από την άλλη πλευρά, η κύρτωση επηρεάζει τον βαθμό αιχμηρότητας των τοπικών ακροτάτων. Αν ο συντελεστής κύρτωσης



είναι μεγαλύτερος από 3 τότε τα τοπικά ακρότατα είναι λεπτόκυρτα ενώ αν είναι μικρότερος από 3 είναι πλατύκυρτα.



Εικόνα 11 Ο ρόλος της λοξότητας και της κύρτωσης στις επιφάνειες

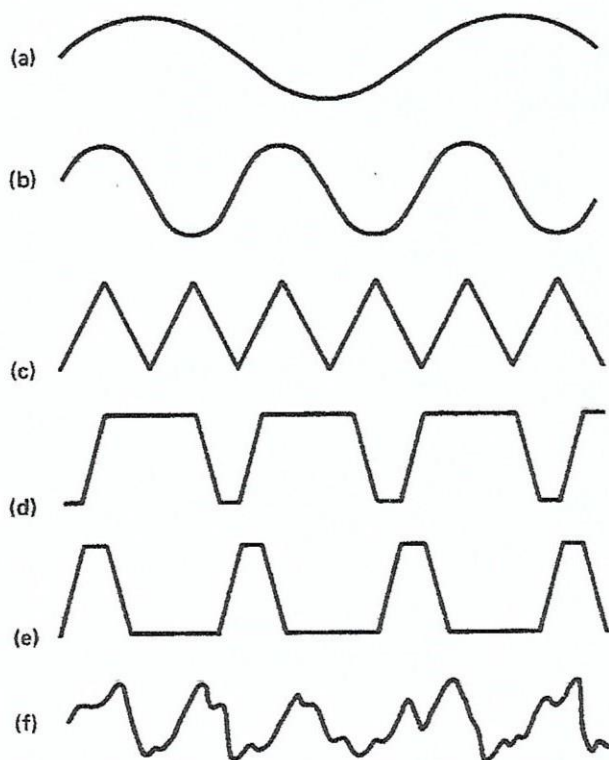
Άλλες παράμετροι ύψους	Ορισμός
Rt	Η απόσταση μεταξύ της ψηλότερης κορυφής και της χαμηλότερης κοιλάδας.
Rv	Η απόσταση μεταξύ της μέσης γραμμής και της χαμηλότερης κοιλάδας.
Rp	Η απόσταση μεταξύ της ψηλότερης κορυφής και της μέσης γραμμής.
Rz	Η απόσταση μεταξύ των μέσων όρων των τιμών ύψους των 5 μεγαλύτερων κορυφών και των 5 μικρότερων κοιλάδων.
Rpm	Η απόσταση μεταξύ του μέσου όρου των τιμών ύψους των 5 μεγαλύτερων κορυφών από τη μέση γραμμή.

Πίνακας 2 Διάφορες παράμετροι ύψους επιφάνειας

Ο λόγος για τον οποίο παίρνουμε τον μέσο όρο των κορυφών και των κοιλάδων είναι να ελαχιστοποιήσουμε το φαινόμενο των μη αντιπροσωπευτικών κορυφών και κοιλάδων οι οποίες εμφανίζονται περιστασιακά και δίνουν εσφαλμένες τιμές αν εξεταστούν ξεχωριστά. Το Rz υποστηρίζεται από τον ISO. Σε πολλές τριβολογικές εφαρμογές το ύψος των ψηλότερων κορυφών πάνω από τη μέση γραμμή είναι μία σημαντική παράμετρος επειδή στην επαφή δύο επιφανειών αν η μία επιφάνεια παρουσιάζει αυξημένη τραχύτητα (ψηλές κορυφές) όταν έρχεται σε επαφή με τη δεύτερη μπορεί να προκαλέσει φθορές στην διεπιφάνεια επαφής. Από την άλλη πλευρά, οι κοιλάδες μπορεί να επηρεάσουν τη ροή και τη διατήρηση της λίπανσης.

Παρότι οι παράμετροι ύψους συνιστούν ένα σημαντικό στοιχείο για τη μορφολογία των επιφανειών, ωστόσο αυτές καθαυτές δεν είναι επαρκείς καθώς δεν δύνανται να μας προσφέρουν έναν πλήρη χαρακτηρισμό για τα προφίλ των επιφανειών. Κατά κύριο λόγο,

αυτές οι παράμετροι αφορούν τη σχετική κίνηση του προφίλ μόνο στην κατακόρυφη διεύθυνση. Συνεπώς, δεν μας παρέχουν καμία πληροφορία για σχετικά με την κλίση, την μορφή και το μέγεθος των κορυφών όπως επίσης και για τη συχνότητα και την ομαλότητα της εμφάνισής τους. Είναι δυνατό για επιφάνειες των οποίων τα προφίλ διαφέρουν σε μεγάλο βαθμό οι τιμές των  $R_a$  ή RMS να είναι ίσες, όπως φαίνεται στην παρακάτω εικόνα:



Εικόνα 12 Προφίλ επιφανειών με το ίδιο  $R_a$  αλλά διαφορετική χωρική διάταξη των υψών της επιφάνειας

### Χωρικές παράμετροι

Ένας τρόπος να συμπληρώσουμε την πληροφορία του ύψους είναι να παρέχουμε κάποιους δείκτες για την απόσταση των κορυφών ή του μήκους κύματος (που αντιστοιχεί στην χωρική κατανομή) της επιφάνειας. Δύο παράμετροι που χρησιμοποιούνται περιστασιακά είναι η peak density,  $N_p(\eta)$  και η zero crossings density,  $N_0$ .  $N_p$  είναι η πυκνότητα των κορυφών (τοπικών μεγίστων) του προφίλ της επιφάνειας σε αριθμό ανά μονάδα μήκους και η  $N_0$  είναι η πυκνότητα των κορυφών της επιφάνειας σε αριθμό ανά μονάδα εμβαδού.  $N_p$  και η  $N_0$  είναι μέτρα μεγίστων ανεξάρτητα από το ύψος.  $N_0$  ορίζεται ως ο αριθμός των φορών που το προφίλ περνά πάνω από τη μέση γραμμή ανά μονάδα μήκους.  $N_0$  δίνεται από το συνολικό μήκος του περιγράμματος όπου η συνάρτηση

αυτοσυσχέτισης (autocorrelation function) είναι 0 ή 0.1 διαιρεμένο από το εμβαδόν της περιοχής που περικλείεται από το περίγραμμα. Αυτή η μέτρηση του  $N_0$  σπανίως χρησιμοποιείται.

Μία τρίτη παράμετρος είναι το mean peak spacing ( $A_R$ ) και ορίζεται ως ο μέσος όρος της απόστασης μεταξύ των κορυφών που έχουν μετρηθεί. Αυτή η παράμετρος είναι περίπου ίση με  $\frac{1}{N_p}$ . Άλλες παράμετροι που χρησιμοποιούνται σπάνια είναι η μέση κλίση (mean slope) και η μέση καμπυλότητα (mean curvature), οι οποίες είναι η πρώτη και η δεύτερη παράγωγος του προφίλ της επιφάνειας αντίστοιχα.

Τέλος, μία σημαντική χωρική παράμετρος είναι το μήκος συσχέτισης (correlation length)  $\xi$ . Για τον ορισμό του θα χρησιμοποιηθούν οι έννοιες των συναρτήσεων αυτοσυνδιακύμανσης και αυτοσυσχέτισης (autocovariance (ACVF) και autocorrelation function (ACF)). Για την συνάρτηση ύψους  $z(x)$  η συνάρτηση αυτοσυνδιακύμανσης είναι η μέση τιμή του γινομένου δύο τιμών της συνάρτησης ύψους,  $z(x)$  και  $z(x+d)$ , που απέχουν μεταξύ τους χωρική (οριζόντια) απόσταση  $d$ . Συγκεκριμένα δίνεται από τον τύπο:

$$R(d) = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \int_0^L z(x)z(x+d)dx$$

Όπου  $L$  είναι το μήκος δειγματοληψίας του προφίλ της επιφάνειας.

Η κανονικοποιημένη μορφή της ACVF είναι η συνάρτηση αυτοσυσχέτισης ACF, η οποία δίνεται από τον τύπο

$$\rho(d) = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L\sigma^2} \int_0^L [z(x) - m][z(x+d) - m]dx$$

Το μήκος συσχέτισης ορίζεται ως η μετατόπιση  $\xi$  για την οποία η συνάρτηση αυτοσυσχέτισης μεταξύ δύο σημείων συγκρατεί τις τιμές μικρότερες από  $\frac{1}{e}$ , όπου  $e$  η σταθερά του Euler  $\approx 2.7183$ . Συνεπώς, το correlation length προκύπτει από τη λύση της εξίσωσης  $\rho(d) = \frac{1}{e}$ .

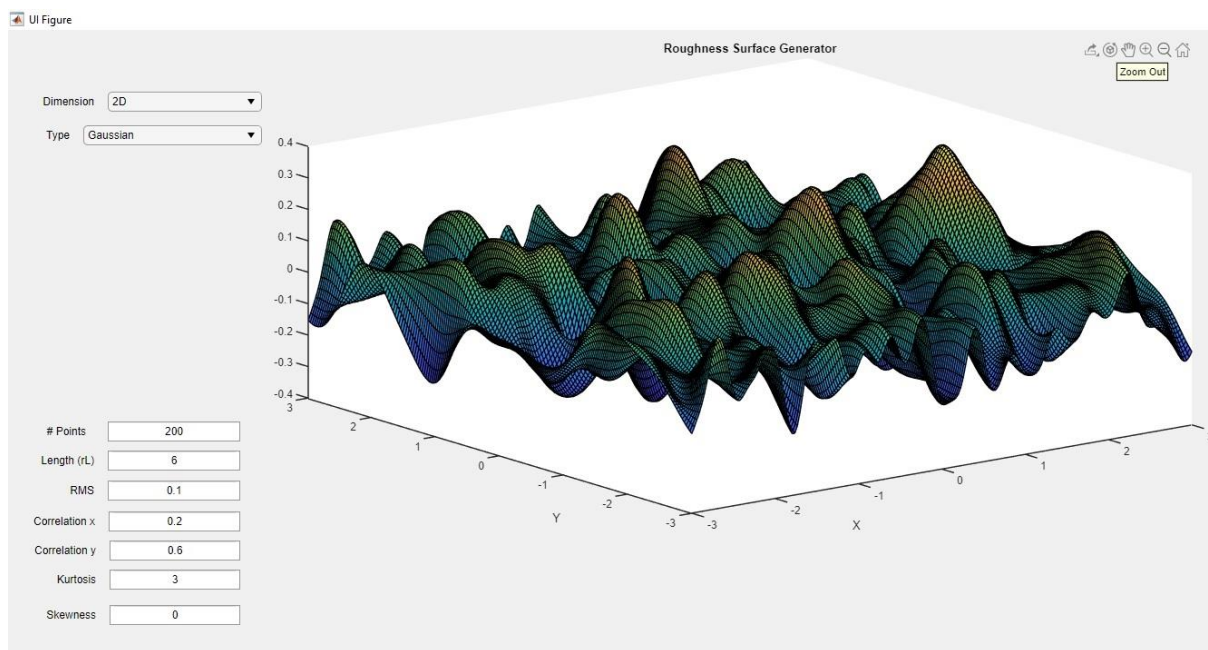
Αυτός ο ορισμός προκύπτει από το γεγονός ότι πολλές μηχανικές επιφάνειες διαπιστώνεται ότι έχουν εκθετική ACF, της μορφής:

$$C(d) = e^{-d/\xi}$$

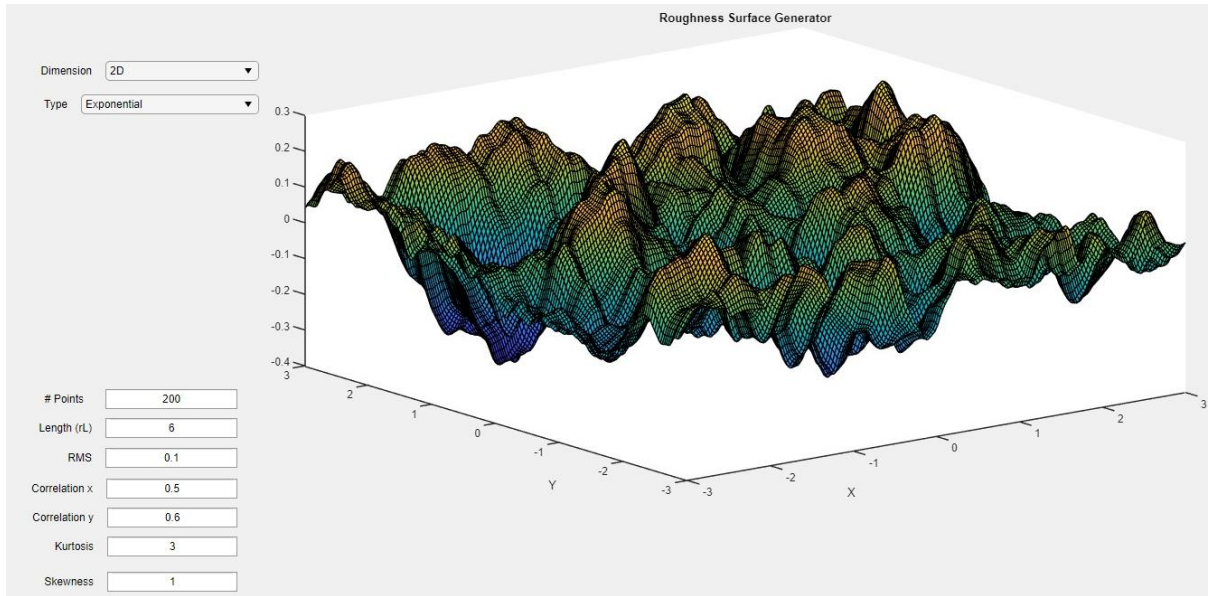
Το μήκος συσχέτισης συνιστά ένα δείκτη της ταχύτητας απόσβεσης των συσχετίσεων και εμφάνισης της τυχαιότητας. Είναι το μήκος πάνω από το οποίο η τιμή της συνάρτησης αυτοσυσχέτισης πέφτει σε ένα μικρό μέρος της αρχικής της τιμής.

Όταν η  $C(d)$  είναι κοντά στη μονάδα, δύο σημεία της επιφάνειας που απέχουν απόσταση  $d$  είναι ισχυρά συσχετισμένα. Αντίθετα, όταν η  $C(d)$  παίρνει τιμές κοντά στο μηδέν δύο σημεία της επιφάνειας που απέχουν απόσταση  $d$  μεταξύ τους είναι ασθενώς συσχετισμένα. Όταν η  $C(d)$  παίρνει τιμές κάτω από  $\frac{1}{e} \approx 0.36$  τότε τα σημεία της επιφάνειας που απέχουν απόσταση  $d$  μπορούν να θεωρηθούν ασυσχέτιστα και τυχαία. Το μήκος συσχέτισης ( $\xi$ ) μπορεί να ερμηνευθεί ως ένα μέτρο τυχαιότητας της επιφάνειας. Ο βαθμός αυτής της τυχαιότητας εξαρτάται από το μέγεθος του  $\xi$ . Όσο μικρότερη είναι η τιμή του  $\xi$  τόσο πιο έντονη θα είναι η τυχαιότητα.

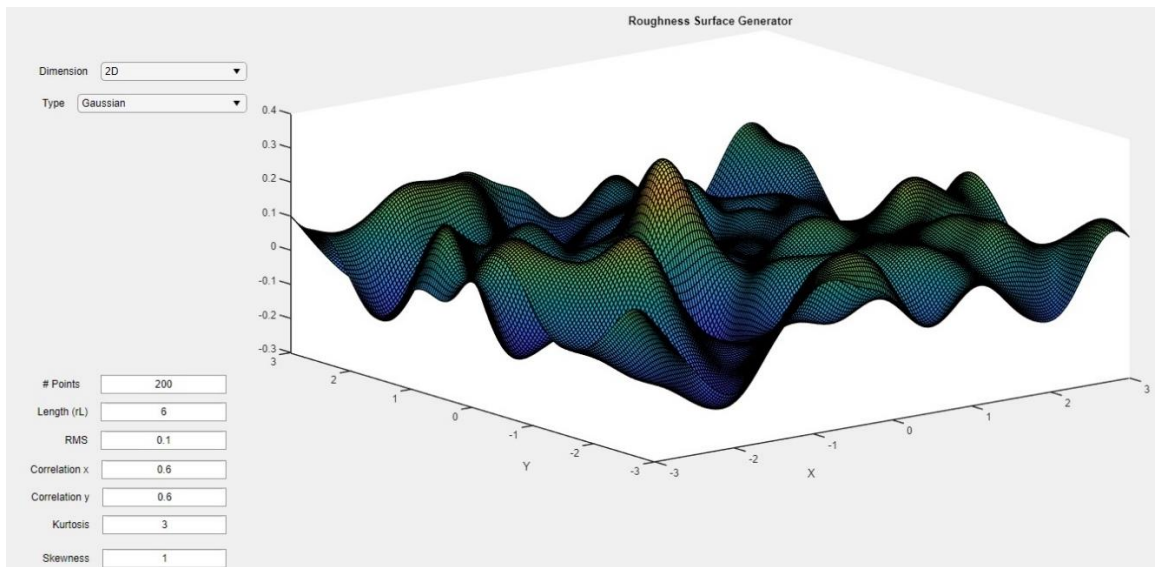
Παρακάτω παραθέτουμε μερικές εικόνες από στοχαστικές επιφάνειες τις οποίες δημιουργήσαμε με τη βοήθεια κώδικα που αναπτύξαμε.



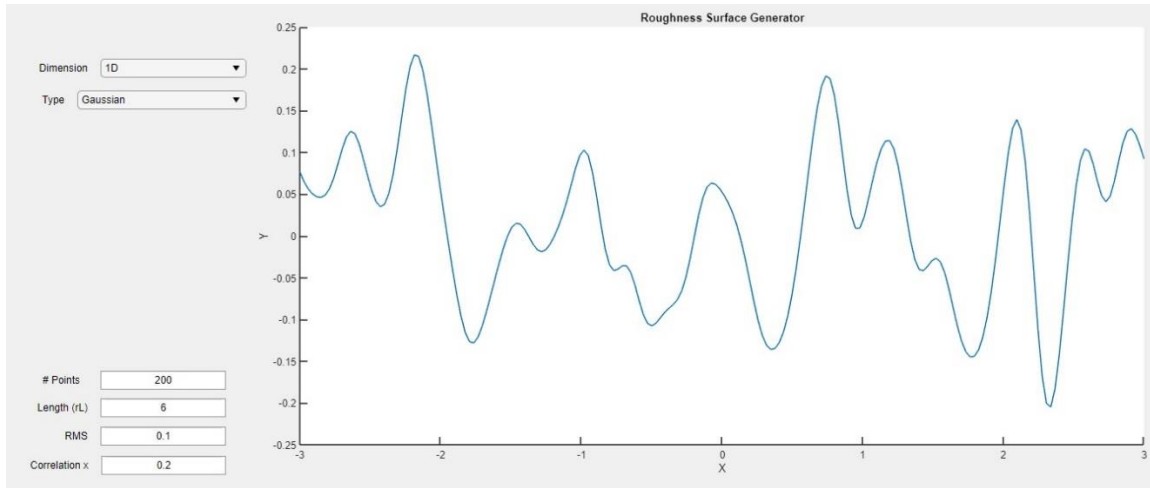
Εικόνα 13 Τεχνητή επιφάνεια 200 σημείων με κανονική κατανομή ύψους και gaussian acf



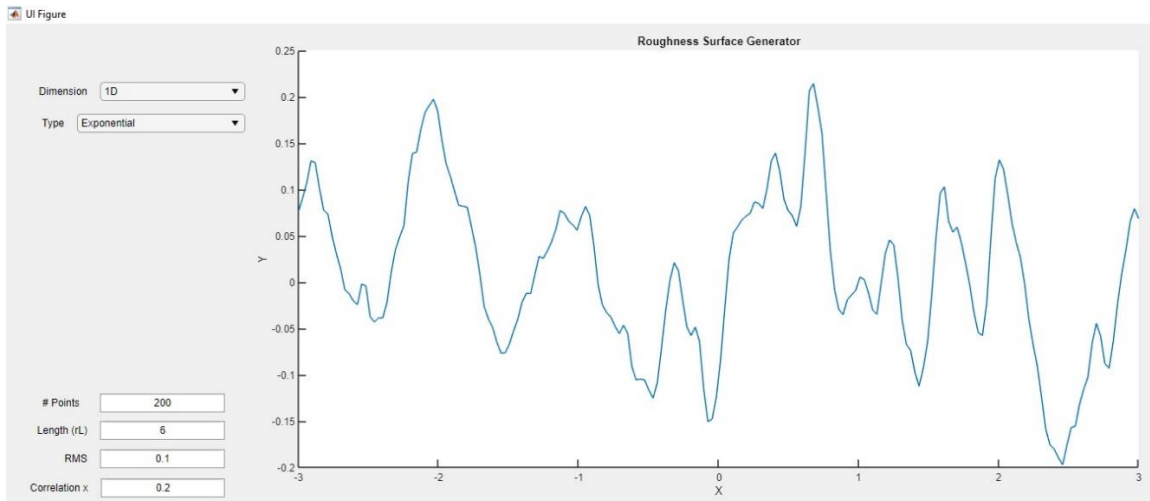
*Εικόνα 14 Τεχνητή επιφάνεια 200 σημείων με κανονική κατανομή ύψους και εκθετική acf*



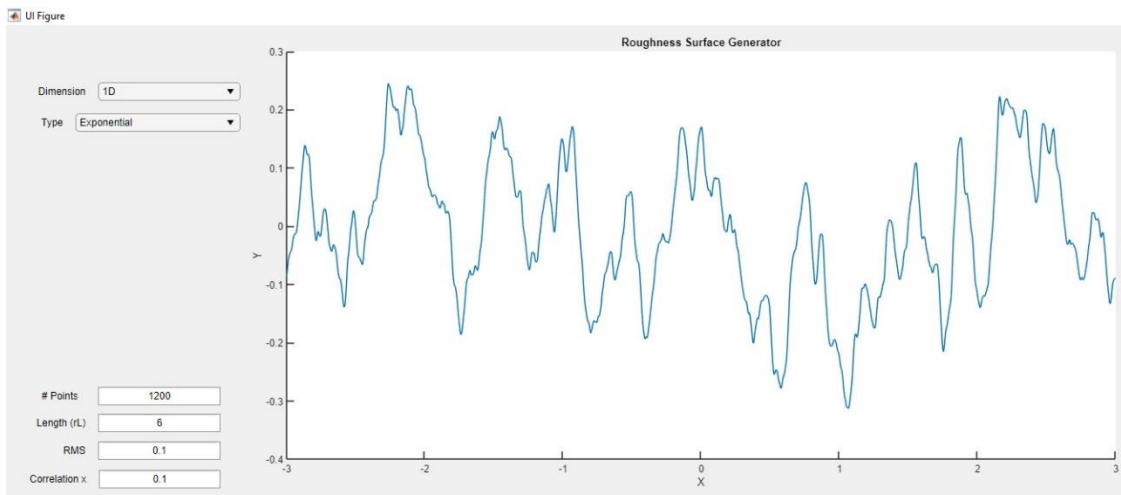
*Εικόνα 15 Τεχνητή επιφάνεια 200 σημείων που έχει προκύψει από κανονική κατανομή με gaussian acf στην οποία έχει εφαρμοστεί λοξότητα 1*



Εικόνα 16 Προφίλ επιφάνειας εικόνας 13 με gaussian acf



Εικόνα 17 Προφίλ κανονικής επιφάνειας 200 σημείων με εκθετική acf



Εικόνα 18 Προφίλ κανονικής επιφάνειας 1200 σημείων με εκθετική acf

#### 2.1.4. Μοντελοποίηση τραχύτητας επιφανείας

Ποικίλες μαθηματικές τεχνικές έχουν δοκιμαστεί για την αναπαράσταση επιφανειών με τραχύτητα. Λόγω της επεξεργασίας που υφίστανται οι επιφάνειες αποκτούν τραχύτητα καθώς και ηλεκτρονικής φύσεως ελατωματά. Οι τεχνικές που χρησιμοποιούνται για τη μοντελοποίηση τέτοιων επιφανειών περιλαμβάνουν τα Fast Fourier Transform και self similar fractals. Τα fractals είναι μία σχετικά πρόσφατη προσέγγιση και βοηθούν στη μοντελοποίηση της χωρικής μεταβλητότητας μέσω των συναρτήσεων Mandelbrot-Weierstrass. (Rajendra M.Patrikar, Kiruthika Ramanathan, Wenjun Zhuang).

Στην παρούσα εργασία όλα τα συνθετικά προφίλ επιφανειών που χρησιμοποιούμε έχουν δημιουργηθεί με τη βοήθεια του rsgene1D του matlab το οποίο κατασκευάζει μία μονοδιάστατη στοχαστική επιφάνεια (προφίλ) με N το πλήθος σημεία. Οι τιμές του ύψους ακολουθούν κανονική κατανομή και η συνάρτηση αυτοσυσχέτισης είναι Γκαουσιανή. Αρχικά, ο αλγόριθμος γεννά ασυσχέτιστα ύψη από την κανονική κατανομή με μέσο 0 και τυπική απόκλιση h, η οποία είναι το RMS της επιφάνειας με την εντολή

$Z = h \cdot \text{randn}(1, N)$ . Στη συνέχεια, εφαρμόζεται ένα Gaussian filter έτσι ώστε να προσδιοριστεί η μέση γραμμή (mean line) με την εντολή  $F = \exp(-\text{abs}(x) / (cL/2))$  και τέλος προστίθενται συσχετίσεις στις τιμές των υψών με τον αντίστροφο μετασχηματισμό Fourier της συνέλιξης των μετασχηματισμών Fourier του ύψους της επιφάνειας και του Gaussian filter και με την εντολή

$f = \text{sqrt}(2) \cdot \text{sqrt}(rL/N/cL) \cdot \text{ifft}(\text{fft}(Z) \cdot \text{fft}(F))$

όπου rL το μήκος του προφίλ και cL το μήκος συσχέτισης των υψών.

#### 2.1.5 Fractal Επιφάνειες

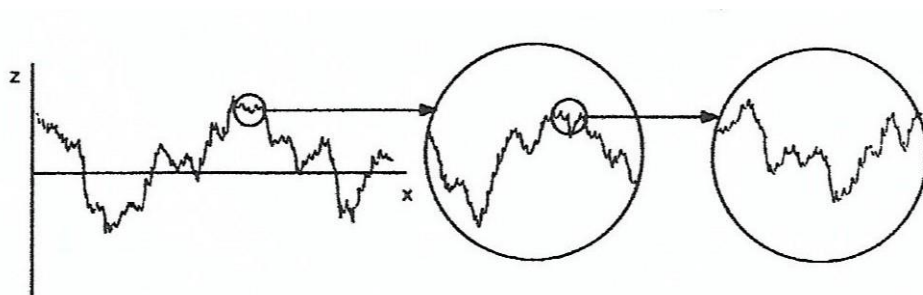
Η μέτρηση των παραμέτρων της τραχύτητας δείχνει ότι είναι ευαίσθητες στην κλίμακα, δηλαδή στην ανάλυση μιας συσκευής μέτρησης (το διάστημα δειγματοληψίας) καθώς και στο μέγεθος σάρωσης. Είναι προφανές ότι από τη στιγμή που η τραχύτητα συντίθεται από πολλά μήκη κύματος τα οποία υπερτίθενται μεταξύ τους και επηρεάζουν τις τιμές των παραμέτρων. Τα μήκη κύματος που είναι μικρότερα από το μήκος δειγματοληψίας ή μεγαλύτερα από το μέγεθος σάρωσης αποκόβονται και δεν συμβάλλουν στις παραμέτρους της τραχύτητας. Έτσι, οι μετρούμενες παράμετροι τραχύτητας εξαρτώνται από τα όρια μικρού και μεγάλου μήκους κύματος.

Οι διακυμάνσεις του ύψους επιφάνειας και άλλων παραμέτρων τραχύτητας εξαρτώνται από την ανάλυση του οργάνου μέτρησης της τραχύτητας. Καθώς αυξάνεται η ανάλυση,



μπορούν να παρατηρηθούν περισσότερες μικρές λεπτομέρειες για το προφίλ με τραχύτητα. Όταν μια τραχιά επιφάνεια μεγενθύνεται επαναλαμβανόμενα, αυξάνονται οι λεπτομέρειες της τραχύτητας που παρατηρούνται στη νανοκλίμακα. Η τραχύτητα σε όλες τις μεγεθύνσεις εμφανίζει αρκετά παρόμοια δομή. Αυτή η αυτοομοιότητα μπορεί να χαρακτηριστεί από τη fractal γεωμετρία.

Ο Archad πρότεινε μία επιφάνεια με τραχύτητα να περιγραφεί ως μία επιφάνεια η οποία καλύπτεται από ανομοιογένειες συγκεκριμένου μεγέθους, οι οποίες έχουν πολύ μικρότερες ανομοιογένειες στις κορυφές τους οι οποίες με τη σειρά τους έχουν και αυτές κι άλλες πολύ μικρότερες ανομοιογένειες στις κορυφές τους.



Εικόνα 19 Προφίλ fractal επιφάνειας

Απέδειξε ότι μία ελαστική επιφάνεια με τέτοια ιεραρχική δομή, η οποία θυμίζει fractal γεωμετρία, οδηγεί σε μία σχεδόν γραμμική εξάρτηση της πραγματικής περιοχής επαφής (της επιφάνειας με τραχύτητα και μίας επίπεδης επιφάνειας) και της κάθετης δύναμης που εφαρμόζεται. Αυτό μαζί με την γραμμική σχέση της δύναμης της τριβής με την πραγματική επιφάνεια επαφής εξηγεί και τη γραμμική σχέση της δύναμης τριβής με τη κάθετη δύναμη.

Οι αυτοόμοιες καμπύλες και επιφάνειες έχουν μελετηθεί από τους μαθηματικούς από το πρώτο μισό του 20<sup>ου</sup> αιώνα. Μία αξιοσημείωτη ιδιότητα αυτών των καμπυλών και επιφανειών είναι ότι διαθέτουν μία fractal διάσταση,  $D$ , με την έννοια ότι όταν η γραμμική κλίμακα μεγενθύνεται κατά μία συγκεκριμένη τιμή  $a$ , το μήκος της καμπύλης ή της περιοχής της επιφάνειας αλλάζει κατά αναλογία προς το  $a^D$ .

Αυτό συμβαίνει επειδή παρατηρούνται περισσότερες λεπτομέρειες με τη μεγέθυνση. Σε αντίθεση με τις περισσότερες μαθηματικές συναρτήσεις που χρησιμοποιούνται στην μηχανική, οι fractal καμπύλες δεν είναι παραγωγίσιμες σε κανένα σημείο. Ωστόσο, η αυτοομοιότητα υποδηλώνει ίση μεγέθυνση σε όλες τις κατευθύνσεις. Ο όρος



αυτοομοιότητα έχει ευρύτερη έννοια και δηλώνει ότι μία καμπύλη μπορεί να αναλυθεί υπό κλίμακα με έναν συγκεκριμένο τρόπο κατά τη μεγέθυνση.

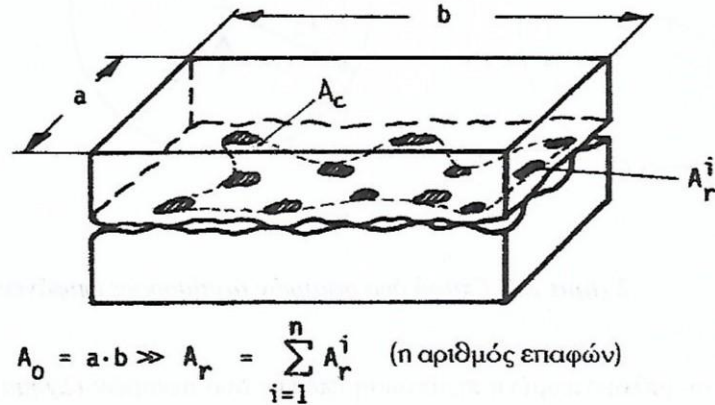
Από το 1980 προτάθηκε η εφαρμογή της fractal γεωμετρίας στον χαρακτηρισμό επιφανειών με τραχύτητα στον τομέα της τριβολογίας. Οι Majumdar και Bhushan (1990) υποστήριξαν ότι η συνάρτηση Mandelbrot-Weierstrass αποτυπώνει σημαντικά χαρακτηριστικά των προφίλ τραχύτητας με αυτοομοιότητα:

$$z(x) = G^{(D-1)} \sum_{n=n_j}^{\infty} \frac{\cos 2\pi \gamma^n x}{\gamma^{(2-D)n}}, \quad 1 < D < 2, \quad \gamma > 1,$$

όπου D είναι η fractal διάσταση, G είναι η αδιάστατη σταθερά κλίμακας και  $\gamma^n$  ορίζει το φάσμα της συχνότητας του προφίλ τραχύτητας. Οι παράμετροι D και G δίνουν ένα fractal χαρακτηρισμό στο προφίλ.

#### 2.1.6 Επαφή επιφανειών

Η επαφή δύο στερεών σωμάτων επιτυγχάνεται μέσω της εξωτερικής τους επιφάνειας. Όπως αναφέραμε σε προηγούμενη ενότητα, η κλίμακα παίζει πολύ σημαντικό ρόλο τόσο στη μελέτη επιφανειών αυτών καθ'αυτών όσο και στη μεταξύ τους αλληλεπίδραση (επαφή, τριβή). Πιο συγκεκριμένα, σε ο,τι αφορά την επαφή δύο επιφανειών η επιφάνεια επαφής που μετράται μακροσκοπικά λέγεται ονομαστική ή φαινόμενη επιφάνεια ( $A_0$ ). Ωστόσο, λόγω της μορφολογίας των πραγματικών επιφανειών η ύπαρξη τραχύτητας διαφοροποιεί την πραγματική επιφάνεια επαφής από την αντίστοιχη ονομαστική. Η πραγματική επιφάνεια επαφής ( $A_r$ ) θα μπορούσε να υπολογιστεί μικροσκοπικά αθροίζοντας όλες τις πραγματικές μικροεπαφές. Η επαφή των επιφανειών επιτυγχάνεται μέσω των κορυφών του αναγλύφου τους γεγονός που καθιστά την ονομαστική επιφάνεια πολύ μεγαλύτερη από την πραγματική επιφάνεια επαφής.



Εικόνα 20 Ονομαστική και πραγματική επιφάνεια επαφής

Όταν δύο επίπεδες και παράλληλες επιφάνειες έρχονται ομαλά κοντά η μία στην άλλη κάποια στιγμή θα έλθουν σε επαφή. Αρχικά, η επαφή θα επιτευχθεί σε ορισμένα μόνο σημεία. Όσο η κάθετη δύναμη αυξάνεται, οι επιφάνειες κινούνται πιο κοντά η μία στην άλλη και έτσι μεγαλύτερος αριθμός περιοχών στις δύο επιφάνειες έρχονται σε επαφή.

Δεδομένου ότι αυτές οι ανομοιογένειες των επιφανειών (εξάρσεις και βυθίσεις του αναγλύφου) παρέχουν τα μόνα σημεία στα οποία οι επιφάνειες ακουμπούν, είναι υπεύθυνες για την υποστήριξη του κάθετου φορτίου στην επιφάνεια και για τη δημιουργία οποιωνδήποτε δυνάμεων τριβής που δρουν μεταξύ τους. Αν ηλεκτρικό ρεύμα περάσει από την μία επιφάνεια στην άλλη τότε το ρεύμα περνάει από τα σημεία επαφής. Η κατανόηση του τρόπου με τον οποίο οι κορυφές των δύο επιφανειών αλληλεπιδρούν κάτω από ποικίλα φορτία είναι απαραίτητη για κάθε είδους μελέτη της τριβής, φθοράς ή ηλεκτρικής αντίστασης επαφής. Η έννοια της επαφής των κορυφών είναι αυτή που παρέχει μία φυσική εξήγηση για πολλές συνηθισμένες τριβολογικές παρατηρήσεις, όπως για παράδειγμα τη συσχέτιση του συντελεστή τριβής και της περιοχής επαφής.

Οι μακροσκοπικές ελαστικές κατανομές πίεσης που προκύπτουν όταν οι επιφάνειες συμπίεζονται μεταξύ τους είναι χρήσιμες στην εξέταση της υποεπιφανειακής παραμόρφωσης και βλάβης από πλαστική παραμόρφωση, ρωγμή ή καταπόνηση. Αυτές οι μακροσκοπικές πιέσεις μπορούν να προσδιοριστούν κάτω από την υπόθεση ότι οι επιφάνειες σε επαφή είναι λείες σε μικροσκοπικό επίπεδο. Όμως, πολλές πραγματικές επαφές επιφανειών δεν μπορούν να βασιστούν σε αυτήν την υπόθεση γεγονός που υποδηλώνει ότι οι επιφάνειες δεν ακουμπούν πλήρως αλλά σε μία μικρή περιοχή. Αν δύο ιδανικές επιφάνειες, δηλαδή επιφάνειες χωρίς μικροσκοπική τραχύτητα) τοποθετούνται η μία πάνω στην άλλη θα παραμορφωθούν, αρχικά ελαστικά. Η ανάλυση των περιοχών

ελαστικής πίεσης για επαφές επιφανειών ξεκίνησε για πρώτη φορά από τον Heinrich Hertz το 1881 και αναφέρεται ως Hertzian contact mechanics.

## **2.2 Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα**

### Εισαγωγή

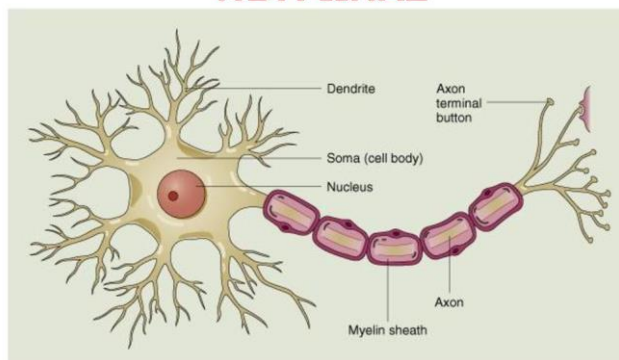
Σε αυτήν την ενότητα θα κάνουμε μία σύντομη παρουσίαση των βασικών εννοιών και αποτελεσμάτων της μαθηματικής μελέτης των ΤΝΔ. Η ανάλυσή μας βασίζεται στο βιβλίο του κ. Simon Haykin, καθηγητή του Πανεπιστημίου McMaster, Hamilton, Ontario (Αθήνα 2010) Τρίτη Έκδοση. Θα εισάγουμε την έννοια του τεχνητού νευρωνικού δικτύου, η οποία εντάσσεται σε ένα ευρύτερο, υπερσύγχρονο και ταχέως αναπτυσσόμενο επιστημονικό πεδίο, αυτό της υπολογιστικής νοημοσύνης, αντικείμενο της οποίας είναι η επεξεργασία αριθμητικών δεδομένων με χρήση διαφόρων μεθοδολογιών. Θα αναλύσουμε τα δομικά στοιχεία του καθώς και την κεντρική ιδέα πάνω στην οποία βασίζεται η κατασκευή του και η λειτουργία του, η οποία περιλαμβάνει τους τρόπους μάθησης και εκπαίδευσής του καθώς και την εξαγωγή των αποτελεσμάτων του και των προβλέψεών του. Προς αυτή τη κατεύθυνση και για αυτό τον σκοπό χρησιμοποιούνται υπολογιστικοί αλγόριθμοι τους οποίους επίσης θα μελετήσουμε προκειμένου να κατανοήσουμε ολιστικά τόσο τη φιλοσοφία όσο και την ακριβή λειτουργία των υπολογιστικών μας εργαλείων για την εκτίμηση της ενεργού επιφάνειας.

### 2.2.1 Αρχιτεκτονική ΤΝΔ

#### Γενικά

Τα Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα οφείλουν τη δημιουργία τους στην προσπάθεια κατανόησης του ανθρώπινου εγκεφάλου και της προσέγγισης της λειτουργίας του κατά την άνθιση της Τεχνητής Νοημοσύνης. Ο ανθρώπινος εγκέφαλος λειτουργεί εξαιρετικά πολύπλοκα (μη γραμμικά) και με ταχύτητα η οποία μπορεί να ξεπεράσει και τον ταχύτερο ψηφιακό υπολογιστή που υπάρχει σήμερα. Για τον σκοπό αυτό, οργανώνει τα δομικά του στοιχεία, τους νευρώνες, έτσι ώστε να αντιλαμβάνεται τα ερεθίσματα του περιβάλλοντος καθώς και να εκτελεί υπολογισμούς. Ωστόσο, παρά την πολυπλοκότητα του τρόπου λειτουργίας του, η μελέτη της φυσιολογίας του κεντρικού νευρικού συστήματος καταλήγει στην παρακάτω απλή δομή του νευρώνα:

## ΝΕΥΡΩΝΑΣ



Εικόνα 21 Δομή Βιολογικού Νευρώνα

Σε ο,τι αφορά την βιολογία ενός τυπικού νευρώνα, γνωρίζουμε ότι αποτελείται από

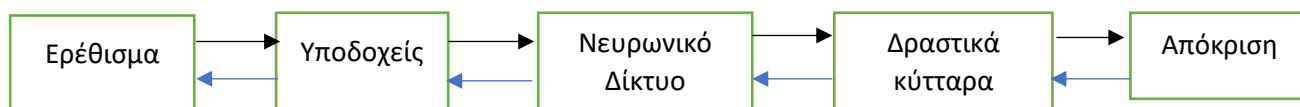
:

- Το **κυτταρικό σώμα (cell body)** το οποίο περιέχει τον πυρήνα και τα οργανίδια του κυττάρου.
- Τους **δενδρίτες** οι οποίοι είναι μικρές συνήθως σε μήκος αποφυάδες με πολλές διακλαδώσεις.
- Τους **νευροάξονες ή νευρίτες** οι οποίοι είναι αποφυάδες και το μήκος τους φτάνει μέχρι και ένα μέτρο. Διακλαδίζεται σε πολλές μικρές απολήξεις καθεμία από τις οποίες καταλήγει σε ειδικό άκρο, το τελικό κομβίο.

Οι νευρώνες συνδέονται με άλλους νευρώνες μέσω των συνάψεων. **Σύναψη** είναι η περιοχή λειτουργικής σύνδεσης των τελικών κομβίων του νευροάξονα ενός νευρώνα με άλλα νευρικά κύτταρα. Αποτελούν στοιχειώδεις δομικές και λειτουργικές μονάδες παίζοντας το ρόλο του διαμεσολαβητή για τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των νευρώνων.

(ΑΠΟ ΤΟ ΒΙΒΛΙΟ ΤΗΣ ΒΙΟΛΟΓΙΑΣ Α ΛΥΚΕΙΟΥ)

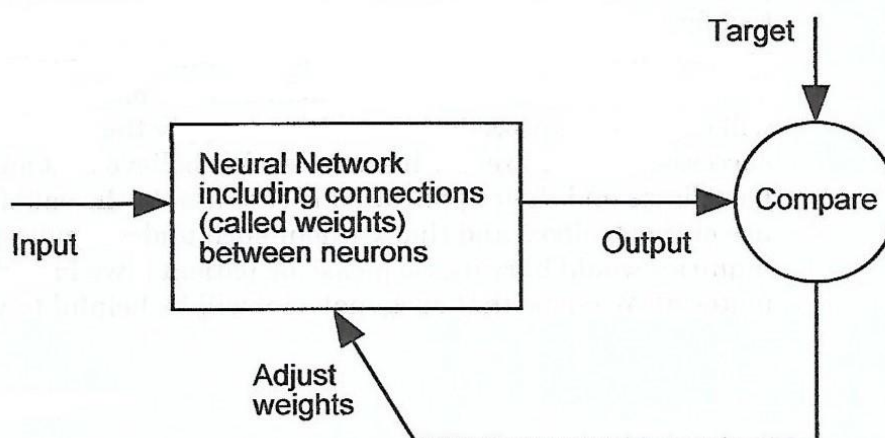
Το ανθρώπινο νευρικό σύστημα μπορούμε να το αναπαραστήσουμε σχηματικά ως εξής:



Εικόνα 22 Γραφική απεικόνιση νευρικού συστήματος

Τα Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα αποτελούνται από απλά στοιχεία τα οποία λειτουργούν παράλληλα. Αυτά τα στοιχεία είναι εμπνευσμένα από τα βιολογικά νευρικά συστήματα. Όπως και στη φύση, η λειτουργία του δικτύου καθορίζεται σε μεγάλο βαθμό από τις συνδέσεις μεταξύ των στοιχείων. Μπορούμε να εκπαιδεύσουμε ένα νευρωνικό δίκτυο προκειμένου να εκτελέσουμε μία συγκεκριμένη λειτουργία προσαρμόζοντας τις τιμές των συνδέσεων (βάρη) μεταξύ των στοιχείων.

Συνήθως, τα νευρωνικά δίκτυα προσαρμόζονται ή εκπαιδεύονται έτσι ώστε μία συγκεκριμένη είσοδος να οδηγεί σε μία συγκεκριμένη έξοδο-στόχο. Αυτή η διαδικασία απεικονίζεται στην παρακάτω εικόνα. Το δίκτυο προσαρμόζεται με βάση τη σύγκριση της εξόδου με τον στόχο μέχρις ότου η έξοδος του δικτύου να “ταιριάζει” με τον στόχο. Κατά κανόνα, χρησιμοποιούνται πολλά ζευγάρια εισόδου-στόχου για την εκπαίδευση του δικτύου με τη μέθοδο της επιβλεπόμενης μάθησης.



Εικόνα 23 Δομή ΤΝΔ

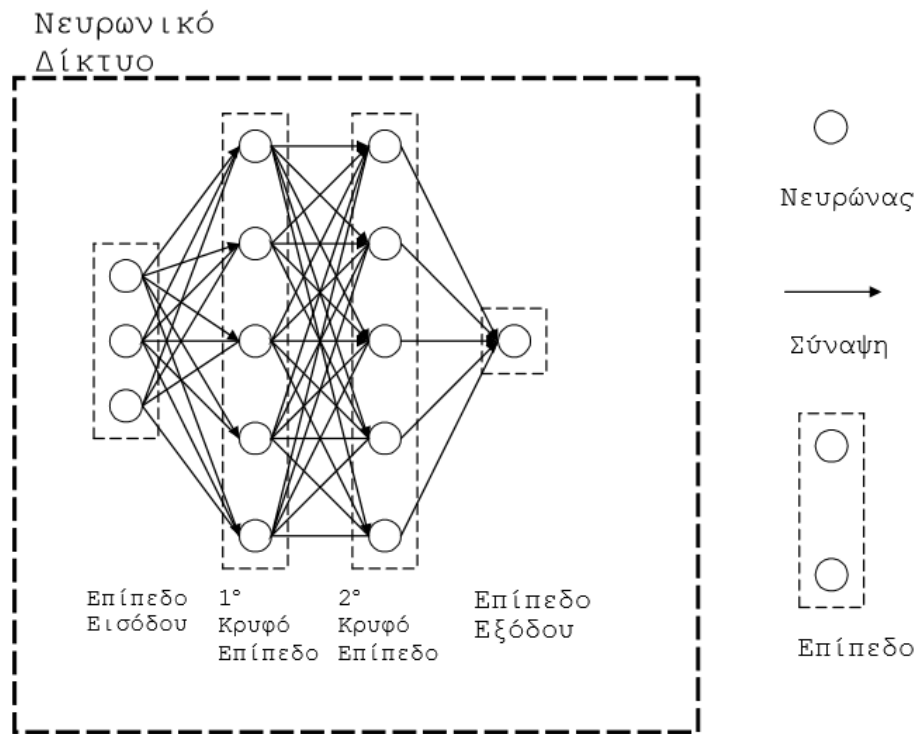
Τα νευρωνικά δίκτυα έχουν εκπαιδευτεί ώστε να εκτελούν πολύπλοκες λειτουργίες σε διάφορους τομείς εφαρμογών όπως η αναγνώριση προτύπων, η κατηγοριοποίηση της ομιλίας, της όρασης και των συστημάτων ελέγχου. Τα τελευταία χρόνια, τα νευρωνικά δίκτυα εκπαιδεύονται για να λύσουν προβλήματα τα οποία είναι δύσκολα για τους συμβατικούς υπολογιστές ή για τους ανθρώπους σε τομείς όπως η μηχανική, η αεροναυπηγική, τα οικονομικά κ.α

Οι μέθοδοι εκπαίδευσης με επίβλεψη είναι αυτές που χρησιμοποιούνται συνήθως, ωστόσο υπάρχουν και δίκτυα που προκύπτουν και με εκπαίδευση χωρίς επίβλεψη ή από απευθείας μεθόδους σχεδιασμού. Συγκεκριμένα είδη γραμμικών δικτύων και δικτύων

Hopfield είναι απευθείας σχεδιασμένα. Τέλος, υπάρχει ποικιλία μεθόδων σχεδιασμού και τεχνικών μάθησης που εμπλουτίζουν τις επιλογές που ο χρήστης μπορεί να κάνει.

Ένα τυπικό ΤΝΔ αποτελείται από τα εξής δομικά στοιχεία:

- i. **Τους νευρώνες** : Αναφέρονται και ως κόμβοι (nodes) ή κύτταρα (cells) και έχουν συνδέσεις οι οποίες τους επιτρέπουν να δέχονται “σήματα” (εισόδους – inputs) και να αποστέλλουν (εξόδους - outputs). Το σύνολο των εισερχομένων σημάτων “αθροίζεται” και στην περίπτωση που το αποτέλεσμα υπερβαίνει κάποιο όριο ενεργοποίησης (activation level), υφίστανται μετατροπή μέσω μίας συνάρτησης μεταφοράς (transfer function). Αυτό το εξερχόμενο σήμα θα παίζει το ρόλο δεδομένου εισόδου (input) σε επόμενο νευρώνα ή το αποτέλεσμα εξόδου (output) του δικτύου. Το σημείο επικοινωνίας μεταξύ δύο νευρώνων καλείται σύνδεση και η ισχύς της συναπτικό βάρος (synaptic weight).
- ii. **Τα επίπεδα (layers)**: Κάθε ΤΝΔ αποτελείται από επίπεδα νευρώνων τα οποία συνδέονται μεταξύ τους. Τα επίπεδα χωρίζονται σε τρεις κατηγορίες:
  - Το επίπεδο εισόδου (input layer)
  - Το κρυφό επίπεδο (hidden layer) – μπορεί να είναι ένα ή περισσότερα
  - Το επίπεδο εξόδου (output layer)
- iii. **Οι συνδέσεις (connections)**: Πρόκειται για κάθε γραμμή επικοινωνίας από τον νευρώνα-πομπό στο νευρώνα-δέκτη του σήματος. Υπάρχουν διεγερτικές (excitatory) συνδέσεις που προκαλούν πυροδότηση-ενεργοποίηση του νευρώνα και ανασταλτικές (inhibitory) που την αποτρέπουν. Υπάρχουν πολύπλοκα είδη συνδέσεων όπως ο ανταγωνισμός και η ανάδραση. Οι συνδέσεις, μαζί με τα συναπτικά βάρη που τις συνοδεύουν, καθορίζουν τη διάδοση-προσαγωγή του σήματος μέσα στο δίκτυο.

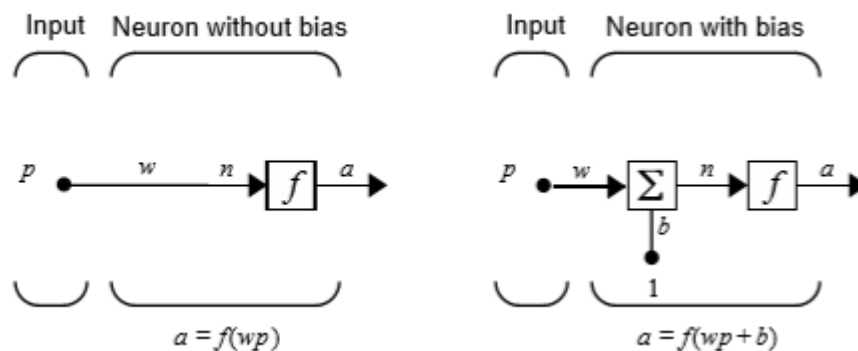


Εικόνα 24 Γραφική απεικόνιση ΤΝΔ δύο κρυφών επιπέδων

Κάθε σήμα που μεταφέρεται μέσω της σύνδεσης πολλαπλασιάζεται με το αντίστοιχο βάρος, το οποίο μπορεί να έχει είτε θετική, είτε αρνητική τιμή. Συνήθως παριστάνεται ως  $w_{ij}$  όπου  $i$  ο νευρώνας-δέκτης και  $j$  ο νευρώνας-αποστολέας.

### ΜΟΝΤΕΛΟ ΑΠΛΟΥ ΝΕΥΡΩΝΑ (PERCEPTRON)

Ένας νευρώνας με μία μοναδική βαθμωτή είσοδο χωρίς σταθερά bias παρουσιάζεται σχηματικά παρακάτω. Αριστερά και δεξιά βρίσκεται το μοντέλο του απλού νευρώνα χωρίς και με σταθερά bias αντίστοιχα.



Εικόνα 25 Λειτουργία απλού νευρώνα

Όπως βλέπουμε, η βαθμωτή είσοδος  $p$  μεταδίδεται μέσω της σύνδεσης η οποία πολλαπλασιάζει την ισχύ της με το βάρος  $w$  παράγοντας το γινόμενο  $wp$ , το οποίο με τη σειρά του είναι και αυτό βαθμωτό. Σε αυτό το σημείο, η σταθμισμένη είσοδος  $wp$  είναι η μόνη ποσότητα προς υπολογισμό από τη συνάρτηση μεταφοράς (transfer function), η οποία παράγει ως τιμή την βαθμωτή έξοδο  $a$ . Η ύπαρξη bias μπορεί να γίνει αντιληπτή ως μία σταθερά η οποία απλά προστίθεται στο γινόμενο  $wp$  ή αλλιώς ως μία μετακίνηση προς τα αριστερά της συνάρτησης  $f$  κατά μία ποσότητα  $b$ . Η σταθερά bias μοιάζει πολύ με βάρος, εκτός από το ότι έχει σταθερή είσοδο 1 η οποία συμβολίζει την ενεργοποίηση του νευρώνα προκειμένου να λάβει υπόψη το bias.

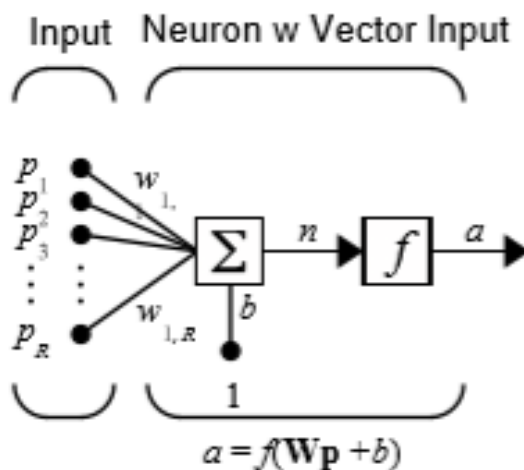
Στο μοντέλο με bias η είσοδος  $n$  στη συνάρτηση μεταφοράς είναι το άθροισμα της σταθμισμένης εισόδου  $wp$  και της σταθεράς bias  $b$ . Αυτό το άθροισμα αποτελεί την είσοδο στη συνάρτηση μεταφοράς  $f$  δίνοντας ως έξοδο τη σταθερά  $a$ . Η συνάρτηση μεταφοράς  $f$  είναι συνήθως μία step function ή μία sigmoid function. Παραδείγματα συναρτήσεων μεταφοράς δίνουμε σε επόμενη ενότητα. Να σημειώσουμε ότι τα  $w$  και  $b$  είναι ρυθμιζόμενοι παράμετροι του νευρώνα. Η κεντρική ιδέα των ΤΝΔ είναι ότι αυτές οι παράμετροι προσαρμόζονται έτσι ώστε το δίκτυο να επιδεικνύει μία επιθυμητή ή ενδιαφέρουσα συμπεριφορά. Έτσι, μπορούμε να εκπαιδεύσουμε το δίκτυο ώστε να εκτελεί μία συγκεκριμένη εργασία προσαρμόζοντας κατάλληλα τις τιμές των παραμέτρων ή αφήνοντας το δίκτυο μόνο του να προσαρμόσει τις κατάλληλες τιμές πετυχαίνοντας το επιθυμητό αποτέλεσμα.

Όπως προαναφέραμε, η σταθερά bias  $b$  είναι μία προσαρμόσιμη παράμετρος του νευρώνα. Δεν αποτελεί είσοδο.



## ΜΟΝΤΕΛΟ ΕΝΟΣ ΝΕΥΡΩΝΑ ΜΕ ΕΙΣΟΔΟ ΔΙΑΝΥΣΜΑ

Ένας νευρώνας με είσοδο ένα διάνυσμα τιμών διάστασης  $R$  ( $p_1, p_2, \dots, p_R$ ) με τα αντίστοιχα βάρη ( $w_{11}, w_{12}, \dots, w_{1R}$ ) φαίνεται παρακάτω:



Εικόνα 26 Απλός νευρώνας με είσοδο διάνυσμα

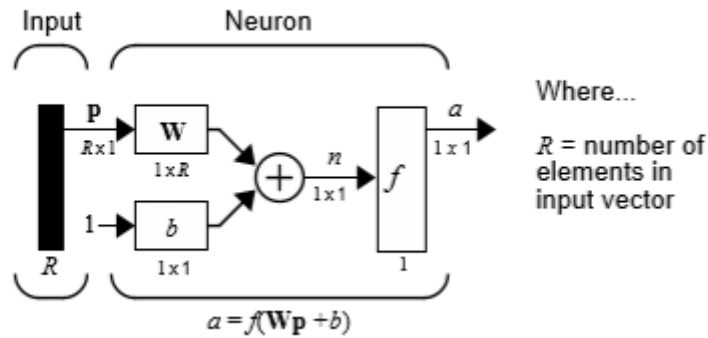
Εδώ κάθε είσοδος πολλαπλασιάζεται με το αντίστοιχο βάρος και το άθροισμα όλων των σταθμισμένων εισόδων μαζί με το bias μπαίνουν ως είσοδοι στην συνάρτηση μεταφοράς η οποία τελικά δίνει την τιμή  $a$ , η οποία και αποτελεί την έξοδο του δικτύου. Το άθροισμα των σταθμισμένων εισόδων αναπαρίσταται σε πινακική μορφή ως  $W \cdot p$ , με  $W$  ο πίνακας γραμμή με στοιχεία τα βάρη διάστασης  $1 \times R$  και  $p$  το διάνυσμα εισόδου. Εφόσον ο νευρώνας έχει bias το  $n$  δίνεται από τον παρακάτω τύπο:

$$n = w_{11} \cdot p_1 + w_{12} \cdot p_2 + \dots + w_{1R} \cdot p_R + b$$

ή σε πινακική μορφή

$$n = W \cdot p + b$$

Το μοντέλο του απλού νευρώνα που παρουσιάσαμε παραπάνω περιέχει ερκετή πληροφορία. Όταν σκεφτόμαστε δίκτυα με πολλούς νευρώνες και πολλά layers πολλών νευρώνων υπάρχει τόση πολλή λεπτομέρεια και πληροφορία που οι κύριες σκέψεις τείνουν να χάνονται. Έτσι, θα χρησιμοποιηθεί ένας σύντομος συμβολισμός για έναν ατομικό νευρώνα. Αυτός ο συμβολισμός θα χρησιμοποιηθεί και αργότερα σε δίκτυα πολλαπλών νευρώνων και επιπέδων.



Εικόνα 27 Σύντομη αναπαράσταση απλού νευρώνα

Στην παρακάτω εικόνα το διάνυσμα εισόδου  $p$  αναπαρίσταται από την μαύρη κάθετη μπάρα στα αριστερά. Η διάσταση του διανύσματος  $p$  βρίσκεται κάτω από το σύμβολο  $p$ ,  $R \times 1$ . Αυτό το διάνυσμα πολλαπλασιάζεται με τον πίνακα στήλη  $W$  ο οποίος περιέχει τα βάρη. Όπως και πριν, η σταθερά  $1$  εισέρχεται στον νευρώνα ως είσοδος και πολλαπλασιάζεται με τον αριθμό  $b$  (bias). Έπειτα το  $n = W \cdot p + b$  εισέρχεται ως είσοδος στην  $f$  δίνοντας ως έξοδο τον αριθμό  $a$ . Σημειώνουμε ότι εάν έχουμε παραπάνω από έναν νευρώνα η έξοδος του δικτύου θα είναι ένα διάνυσμα.

Το επίπεδο ενός δικτύου περιλαμβάνει τον συνδυασμό των βαρών, την διαδικασία του πολλαπλασιασμού και της άθροισης, η οποία παριστάνεται από την ποσότητα  $W \cdot p$ , το bias  $b$  και την transfer function  $f$ .

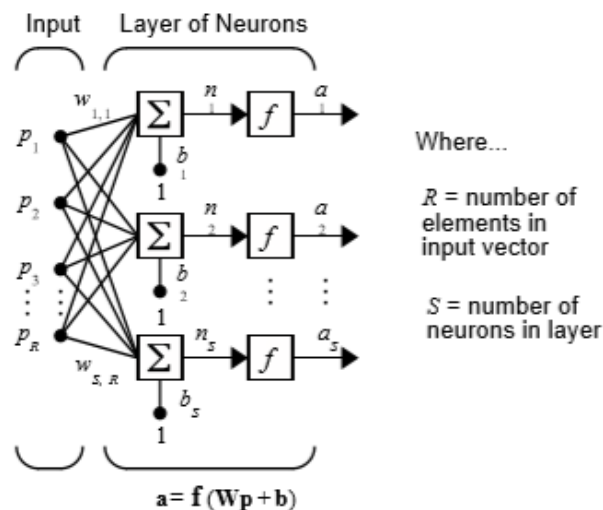
Κάθε φορά που θα χρησιμοποιείται αυτός ο σύντομος συμβολισμός για τα δίκτυα, η διάσταση των πινάκων θα βρίσκεται κάτω από το όνομα του πίνακα.

## ΜΟΝΤΕΛΟ ΤΝΔ ΜΕ ΕΝΑ ΕΠΙΠΕΔΟ

Ένα ΤΝΔ με ένα επίπεδο,  $R$  στοιχεία εισόδου και  $S$  πλήθος νευρώνων φαίνεται στην παρακάτω εικόνα:

### A Layer of Neurons

A one-layer network with  $R$  input elements and  $S$  neurons follows.



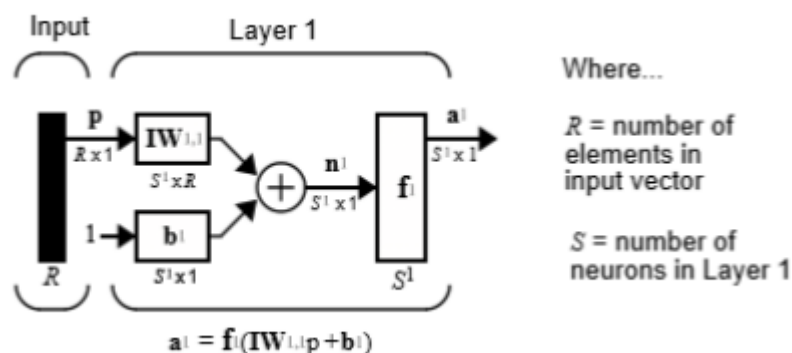
Εικόνα 28 ΤΝΔ με ένα κρυφό επίπεδο

Σε αυτό το δίκτυο κάθε στοιχείο του διανύσματος εισόδου συνδέεται με κάθε έναν νευρώνα μέσω του πίνακα  $W$ . Ο  $i$ -οστος νευρώνας έχει έναν αθροιστή ο οποίος συγκεντρώνει όλες τις σταθμισμένες εισόδους και το bias ώστε να προκύψει το αντίστοιχο output  $n(i)$ . Τα διάφορα  $n(i)$  συγκεντρώνονται ως συντεταγμένες του διανύσματος  $n$ . Ισχύει ότι  $\mathbf{a} = \mathbf{f}(\mathbf{W} \cdot \mathbf{p} + \mathbf{b},)$  όπου  $\mathbf{a} = (a_1, a_2, \dots, a_S)$  το διάνυσμα εξόδου του δικτύου που ως συντεταγμένες του έχει τις εξόδους κάθε νευρώνα,  $W$  είναι ο πίνακας των βαρών

$$\text{δηλαδή } W = \begin{bmatrix} w_{11} & \dots & w_{1R} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{S1} & \dots & w_{SR} \end{bmatrix}.$$

Σημειώνουμε ότι είναι συχνό φαινόμενο το  $R$  και το  $S$  να μην είναι ίσα. Ένα επίπεδο δεν είναι αναγκαίο να έχει ίσο αριθμό εισόδων και νευρώνων. Στην  $i$ -οστή γραμμή αυτού του πίνακα αντιστοιχούν στα βάρη των εισόδων του  $i$ -οστου νευρώνα. Το βάρος  $w_{ij}$  Το διάνυσμα  $\mathbf{p} = (p_1, p_2, \dots, p_R)$  αποτελεί το διάνυσμα εισόδου, όπου κάθε νευρώνας έχει το διάνυσμα  $\mathbf{p}$  ως είσοδο. Τέλος,  $\mathbf{b}$  είναι το διάνυσμα των bias, με  $b_i$  το bias κάθε νευρώνα.

Ένα ΤΝΔ με ένα επίπεδο μπορούμε να το αναπαραστήσουμε εν συντομία ως εξής:



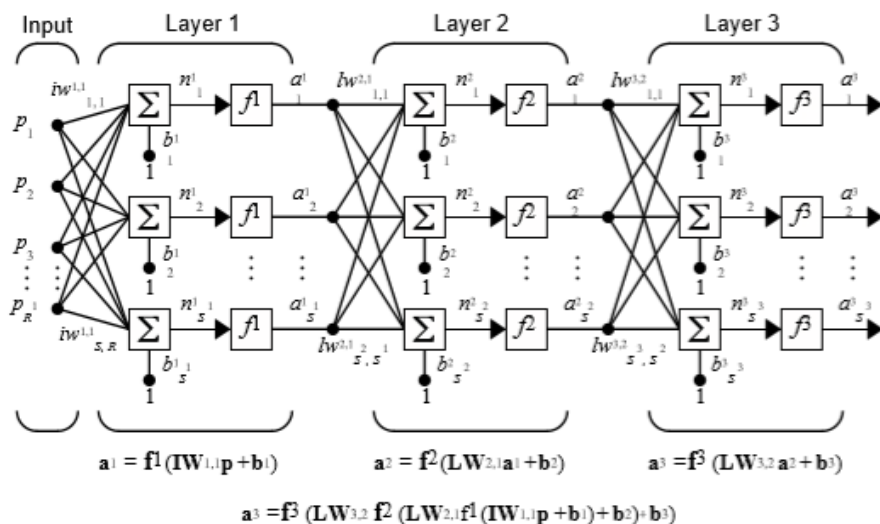
Εικόνα 29 Σύντομη αναπαράσταση ΤΝΔ με ένα κρυφό επίπεδο

Σημειώνουμε ότι με  $IW$  συμβολίζεται ο πίνακας ο οποίος αφορά τα βάρη του διανύσματος εισόδου. Ο πρώτος δείκτης 1 αφορά τον αριθμό του επιπέδου και ο δεύτερος την πηγή, δηλαδή το επίπεδο προέλευσης των βαρών.

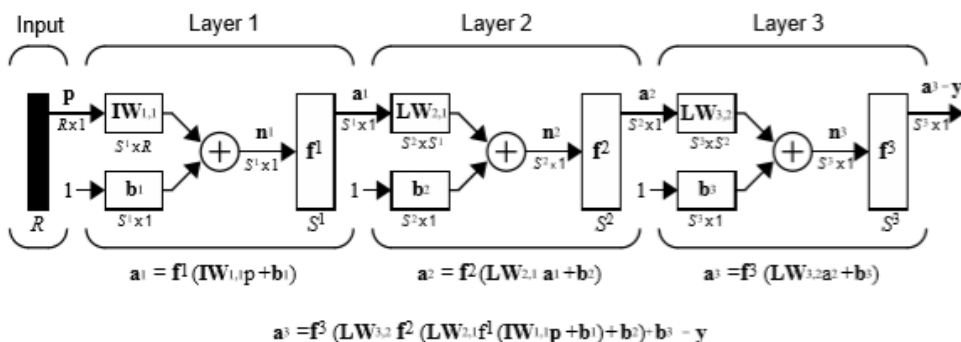
### ΜΟΝΤΕΛΟ ΤΝΔ ΜΕ ΠΟΛΛΑΠΛΑ ΕΠΙΠΕΔΑ ΝΕΥΡΩΝΩΝ

Ένα ΤΝΔ μπορεί να έχει αρκετά επίπεδα (layers). Κάθε επίπεδο έχει έναν πίνακα βαρών  $W$ , ένα διάνυσμα bias  $b$  και τέλος ένα διάνυσμα εξόδου  $a$ . Προκειμένου να ξεχωρίζουμε όλες τις προαναφερθείσες ποσότητες κάθε επιπέδου χρησιμοποιούμε κάποιους δείκτες. Για τους πίνακες βαρών όπως προαναφέραμε ο πρώτος δείκτης αφορά τον αριθμό του επιπέδου και ο δεύτερος την πηγή, δηλαδή το επίπεδο προέλευσης των βαρών. Για τα απλά διανύσματα χρησιμοποιείται μόνο ένας δείκτης ο οποίος δηλώνει το αντίστοιχο επίπεδο στο οποίο ανήκει το διάνυσμα. Κάθε συντεταγμένη των διανυσμάτων έχει δύο δείκτες. Ο άνω δείκτης δηλώνει τον αριθμό του επιπέδου και ο κάτω τον αριθμό του αντίστοιχου νευρώνα. Ο συμβολισμός  $LW$  (layer weight matrix) αφορά τους πίνακες από το δεύτερο επίπεδο και μετά.

Ακολουθεί παράδειγμα ΤΝΔ με τρία επίπεδα. Το πρώτο αφορά την αναλυτική αναπαράστασή του ενώ το δεύτερο τη σύντομη.



Εικόνα 30 ΤΝΔ τριών κρυφών επιπέδων



Εικόνα 31 Σύντομη αναπαράσταση ΤΝΔ τριών κρυφών επιπέδων

Μία πολύ σημαντική παρατήρηση για τα ΤΝΔ πολλαπλών επιπέδων είναι ότι η έξοδος που προκύπτει από κάθε επίπεδο συνιστά είσοδο για το κατά σειρά επόμενο επίπεδο, όπως άλλωστε είναι προφανές και από τη μαθηματική περιγραφή της τελικής εξόδου του δικτύου:

$$a^3 = f^3(LW_{3,2} f^2((LW_{2,1} f^1(IW_{1,1}p + b_1) + b_2) + b_3)$$

Φυσικά, αντίστοιχη ανάλυση μπορεί να γίνει για οποιονδήποτε πλήθος επιπέδων. Τα επίπεδα ενός πολυεπίπεδου ΤΝΔ παίζουν διαφορετικό ρόλο το καθένα. Το επίπεδο το οποίο δίνει την έξοδο του δικτύου ονομάζεται επίπεδο εξόδου (output layer). Όλα τα υπόλοιπα επίπεδα καλούνται κρυφά επίπεδα (hidden layers) εκτός φυσικά από το επίπεδο που περιέχει τις εισόδους το οποίο καλείται επίπεδο εισόδου (input layer). Τα ΤΝΔ πολλαπλών επιπέδων είναι αρκετά ισχυρά καθώς με κατάλληλη εκπαίδευση είναι ικανά να προσεγγίσουν αρκετά καλά οποιαδήποτε συνάρτηση με πεπερασμένες το πλήθος ασυνέχειες.

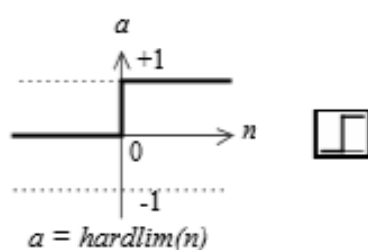
### 2.2.2 Συνάρτηση ενεργοποίησης

Η συνάρτηση ενεργοποίησης καθορίζει την έξοδο του κάθε νευρώνα, η οποία είτε θα είναι η τελική έξοδος του δικτύου είτε θα αποτελεί είσοδο για άλλον νευρώνα επόμενου επιπέδου. Στην βιβλιογραφία υπάρχουν πολλές συναρτήσεις ενεργοποίησης. Οι τρεις πιο συχνά χρησιμοποιούμενες συναρτήσεις ενεργοποίησης είναι οι παρακάτω:

#### i. Συνάρτηση κατωφλίου – Threshold/Step/Heaviside Function

Η συνάρτηση κατωφλίου δίνεται από τον εξής τύπο:

$$f(x) = \begin{cases} 1, & x \geq 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}$$



Hard-Limit Transfer Function

Εικόνα 32 Γράφημα συνάρτησης κατωφλίου

Η συνάρτηση κατωφλίου όπως φαίνεται παραπάνω δίνει την τιμή 0 ως έξοδο ενός νευρώνα αν η είσοδος είναι αρνητική ενώ την τιμή 1 αν η είσοδος είναι μεγαλύτερη ή ίση του μηδενός. Τέτοιοι νευρώνες αναφέρονται ως μοντέλο McCulloch-Pitts.

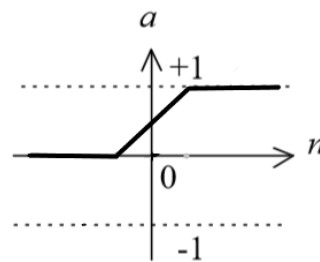
Αυτή η συνάρτηση χρησιμοποιείται κυρίως για νευρώνες, οι οποίοι παίρνουν αποφάσεις για κατηγοριοποίηση (classification).

#### ii. Κατά τμήματα γραμμική συνάρτηση – Piecewise Linear Function

Η κατά τμήματα γραμμική συνάρτηση δίνεται από τον τύπο:

$$f(x) = \begin{cases} 1, & x \geq \frac{1}{2} \\ x, & -\frac{1}{2} < x < \frac{1}{2} \\ 0, & x < -\frac{1}{2} \end{cases}$$

Η συνάρτηση αυτή αποτελεί μια πιο «ομαλή» μορφή της συνάρτησης κατωφλίου καθώς περιέχει τον επιπλέον κλάδο με την ταυτοτική συνάρτηση.

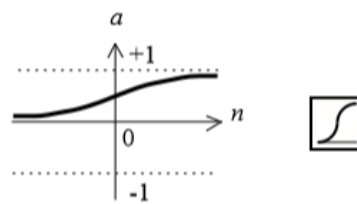


Εικόνα 33 Γράφημα τμηματικά γραμμικής συνάρτησης

### iii. Σιγμοειδής συνάρτηση (Sigmoid function)

Κατά την εξέλιξη του θεωρητικού πεδίου των ΤΝΔ διαπιστώθηκε ότι μία παραγωγίσιμη συνάρτηση είναι προτιμότερη στη χρήση από μία μη παραγωγίσιμη, καθώς η παράγωγος της συνάρτησης ενεργοποίησης μπορεί να βελτιώσει την εκπαίδευσή του. Το όνομά της προκύπτει από τη σιγμοειδή μορφή της γραφικής της παράστασης. Είναι μία γνησίως αύξουσα συνάρτηση, παραγωγίσιμη με ασυμπτωτικές ιδιότητες. Υπάρχουν πολλοί τύποι σιγμοειδών συναρτήσεων. Μία πολύ συχνά χρησιμοποιούμενη σιγμοειδής συνάρτηση είναι η λογιστική συνάρτηση, η οποία δίνεται από τον παρακάτω τύπο:

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-ax}}$$

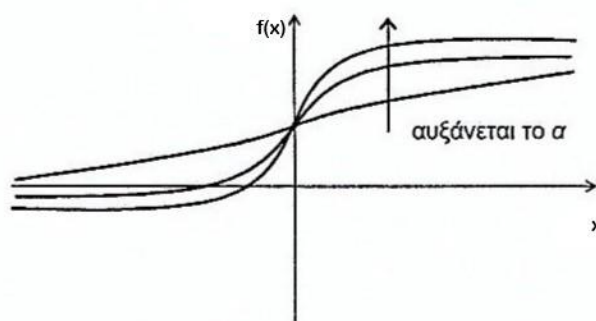


$$a = \text{logsig}(n)$$

Log-Sigmoid Transfer Function

Εικόνα 34 Γράφημα λογιστικής συνάρτησης

Το  $a$  είναι η παράμετρος κλίσης. Καθώς το  $a$  μεταβάλλεται λαμβάνουμε σιγμοειδείς συναρτήσεις με διαφορετικές κλίσεις όπως φαίνεται στο σχήμα:



Εικόνα 35 Επίδραση μεταβολής παραμέτρου  $\alpha$  στη μορφή της λογιστικής συνάρτησης

Αυτή η συνάρτηση χρησιμοποιείται συνήθως σε backpropagation δίκτυα.

Άλλες σιγμοειδείς συναρτήσεις που χρησιμοποιούνται ως συναρτήσεις μεταφοράς-ενεργοποίησης είναι η συνάρτηση της υπερβολικής εφαπτομένης (hyperbolic tangent function) και η συνάρτηση τόξου εφαπτομένης (arctangent function) που είναι η αντίστροφη συνάρτηση της εφαπτομένης.

Η συνάρτηση υπερβολικής εφαπτομένης έχει τύπο:

$$f(x) = \tanh(x) = \frac{e^{2x} - 1}{e^{2x} + 1}$$

### 2.2.3 Διαδικασίες μάθησης-εκπαίδευσης

**Μηχανική μάθηση** είναι η επιστήμη βάσει της οποίας δύναται ο υπολογιστής να ενεργεί, χωρίς να έχει προγραμματιστεί ρητά για την εκάστοτε ενέργεια. Αυτή η επιστήμη μας έχει ήδη προσφέρει τη δυνατότητα της αναγνώριση ομιλίας, των αυτοοδηγούμενων αυτοκινήτων, μεγαλύτερη κατανόηση του ανθρώπινου γονιδιώματος και αποτελεσματική αναζήτηση στο διαδίκτυο. Η μηχανική μάθηση έχει τόσο ευρείες εφαρμογές και χρησιμοποιείται σε καθημερινή βάση χωρίς καν να γίνεται αυτό αντιληπτό. Οι ερευνητές συμφώνησαν ότι η μηχανική μάθηση θα μας βοηθήσει να προχωρήσουμε στο ανθρώπινο επίπεδο της τεχνητής νοημοσύνης.

Η μηχανική μάθηση είναι ουσιαστικά ένα πεδίο τεχνητής νοημοσύνης (AI), το οποίο περιλαμβάνει τη μελέτη του τρόπου με τον οποίο οι υπολογιστές μπορούν να βελτιώσουν τη γνώση, την αντίληψη και τη δράση τους, χρησιμοποιώντας την εμπειρία τους. Οι



μηχανές αναμένεται να βελτιωθούν από τις γνώσεις, τα δεδομένα, την εμπειρία και την αλληλεπίδρασή τους.

Η μηχανική μάθηση μπορεί να έχει σημαντικές επιπτώσεις σε πολλές εφαρμογές που βασίζονται σε διάφορα είδη δεδομένων που έχουν καταγραφεί σε έναν υπολογιστή, όπως επιστημονικά δεδομένα, δεδομένα για την υγεία, δεδομένα θέσης, οικονομικά δεδομένα, δεδομένα ενέργειας, δεδομένα καιρού και άλλα είδη δεδομένων. Αυτό καθιστά την εκμάθηση μηχανής πολύ σημαντική τόσο για τις τρέχουσες όσο και για τις μελλοντικές εφαρμογές ηλεκτρονικών υπολογιστών.

Όπως είδαμε στην προηγούμενη ενότητα, κάθε σήμα που μεταφέρεται μέσω των συνδέσεων του νευρωνικού δικτύου πολλαπλασιάζεται με το αντίστοιχο βάρος  $w_{ij}$  το οποίο μπορεί να είναι είτε θετικός είτε αρνητικός αριθμός. Ο πρώτος δείκτης  $i$  δηλώνει τον νευρώνα αποστολέα και ο δεύτερος δείκτης  $j$  τον νευρώνα δέκτη του σήματος. Αρχικά, οι τιμές των βαρών επιλέγονται τυχαία. Η κατάλληλη προσαρμογή των βαρών είναι ένα ζήτημα ζωτικής σημασίας για την σωστή απόδοση του δικτύου και επιτυγχάνεται μέσω της διαδικασίας εκπαίδευσης και μάθησης.

Οι αλγόριθμοι μηχανικής μάθησης χωρίζονται σε τρεις μεγάλες κατηγορίες, την μάθηση με επίβλεψη, την μάθηση χωρίς επίβλεψη και την ενισχυτική μάθηση. Η διαφορά των πρώτων δύο κατηγοριών αλγορίθμων είναι ο τρόπος με τον οποίο τα δεδομένα εκπαίδευσης τροφοδοτούνται στους αλγορίθμους.

- i. Μάθηση με επίβλεψη (supervised learning):** Σε αυτήν την κατηγορία εκπαίδευσης μπορούμε να αντιλαμβανόμαστε τον αλγόριθμο μηχανικής μάθησης ως μία διαδικασία η οποία μετασχηματίζει τις εισόδους που παρέχονται στο δίκτυο σε επιθυμητές εξόδους. Σε αυτή την περίπτωση η διαδικασία μηχανικής μάθησης πρέπει να μάθει τον καλύτερο τρόπο μετασχηματισμού κάθε δυνατής εισόδου στην επιθυμητή έξοδο. Εφόσον η επιθυμητή έξοδος παρέχεται στο δίκτυο, μπορεί να υπολογιστεί η διαφορά της επιθυμητής εξόδου από την έξοδο του δικτύου. Αυτή η διαφορά καλείται σφάλμα και στόχος είναι η ελαχιστοποίηση του σφάλματος έπειτα από διαδοχικές αναπροσαρμογές των βαρών.
- ii. Μάθηση χωρίς επίβλεψη (unsupervised learning):** Σε αυτήν την κατηγορία εκπαίδευσης τα δεδομένα εκπαίδευσης των αλγορίθμων περιλαμβάνουν μόνο δεδομένα εισόδου χωρίς δεδομένα επιθυμητής εξόδου. Ο σκοπός σε αυτήν την

περίπτωση είναι να προσδιοριστούν οι κρυφές σχέσεις και δομές μεταξύ εισόδου και εξόδου. Εδώ τα βάρη δεν προσαρμόζονται. Το δίκτυο λειτουργεί αυτόνομα και αυτοελέγχεται και διορθώνει τα αποτελέσματα με μια διαδικασία ανάδρασης (feedback).

- iii. **Ενισχυτική μάθηση (Reinforced learning):** Στην ενισχυτική μάθηση δεν δίνονται στο δίκτυο ούτε είσοδοι ούτε επιθυμητές εξοδοι. Αντίθετα, το δίκτυο αφήνεται ελεύθερο να αλληλεπιδράσει με το περιβάλλον ώστε να μεγιστοποιηθεί ένας δείκτης αθροιστικής απόδοσης (Reinforcement signal). Κάθε ενέργεια πρέπει να έχει επίδραση στο περιβάλλον και το περιβάλλον με τη σειρά του δίνει feedback το οποίο θα βοηθήσει τον αλγόριθμο να μάθει. Ο αλγόριθμος αναμένεται να επιλέξει μία ενέργεια βασιζόμενος στη διαθέσιμη πληροφορία και έπειτα διαπιστώνει εάν αποφασή του ήταν καλή ή όχι.

#### 2.2.4 Χρησιμοποιούμενοι αλγόριθμοι εκπαίδευσης ΤΝΔ

Στην εκπαίδευση των ΤΝΔ ο αλγόριθμος εκπαίδευσης υποδεικνύει στο δίκτυο τον τρόπο προσαρμογής των βαρών σε κάθε επανάληψη-κύκλο εκπαίδευσης. Δεν υπάρχει αλγόριθμος εκπαίδευσης που να θεωρείται ο βέλτιστος. Η καταλληλότητα ενός αλγορίθμου εξαρτάται από το είδος του προβλήματος που μελετάμε καθώς και από την αρχιτεκτονική του δικτύου. Σε αυτό το σημείο πρέπει να αναφέρουμε ότι για την εκπαίδευση του ΤΝΔ απαιτούνται δεδομένα τα οποία χωρίζονται σε τρεις κατηγορίες:

- i. Τα δεδομένα εκπαίδευσης (training data), τα οποία περιλαμβάνουν όλα εκείνα τα δεδομένα που ανήκουν στο πεδίο του προβλήματος και χρησιμοποιούνται στην εκπαιδευτική διαδικασία για την ανανέωση των βαρών του δικτύου.
- ii. Τα δεδομένα ελέγχου (testing data), χρησιμοποιούνται κατά τη διάρκεια της εκπαιδευτικής διαδικασίας προκειμένου να ελέγξουν την απόκριση του δικτύου για δεδομένα τα οποία δεν ανήκουν στην κατηγορία i
- iii. Τα δεδομένα επικύρωσης (validation data) περιέχουν δεδομένα διαφορετικά από αυτά των προηγούμενων δύο κατηγοριών. Χρησιμοποιούνται μετά την επιλογή του βέλτιστου δικτύου προκειμένου να εξετάσουν περαιτέρω το δίκτυο και να επιβεβαιώσουν την ακρίβειά του.

Σε ό,τι αφορά τον χωρισμό των δεδομένων στα τρία σύνολα υπάρχουν διάφοροι τρόποι με τους οποίους αυτό επιτυγχάνεται. Στο matlab υπάρχουν τέσσερις συναρτήσεις οι οποίες εκτελούν τον χωρισμό στα τρία επιμέρους σύνολα. Αυτές είναι οι εξής:

<i>Συνάρτηση</i>	<i>Αλγόριθμος</i>
dividerand	Χωρίζει τα δεδομένα στα τρία σύνολα κατά τυχαίο τρόπο
divideblock	Τα δεδομένα χωρίζονται σε τρία υποσύνολα χρησιμοποιώντας τρία συνεχόμενα τμήματα του αρχικού συνόλου δεδομένων (δεδομένα εκπαίδευσης που περιλαμβάνει το πρώτο μπλοκ, επικύρωσης το δεύτερο και δοκιμής το τρίτο).
divideint	Ο χωρισμός των δεδομένων επιτυγχάνεται με μία μέθοδο παρεμβολής, όπως στο μοίρασμα μιας τράπουλας χαρτιών. Αυτό γίνεται έτσι ώστε διαφορετικά ποσοστά δεδομένων να μεταφέρονται στα τρία υποσύνολα.
divideind	Τα δεδομένα χωρίζονται σύμφωνα με τον δείκτη τους (αύξοντα αριθμό).

*Πίνακας 3 Συναρτήσεις χωρισμού δεδομένων για το TNA*

Στην παρούσα εργασία χρησιμοποιήθηκε η dividerand.

Σε ό,τι αφορά τους αλγορίθμους εκπαίδευσης υπάρχει πληθώρα διαφορετικών αλγορίθμων και παραλλαγών τους. Η επιλογή εξαρτάται από τη φύση του προβλήματος. Ακολουθεί μία ενδεικτική λίστα των πιο δημοφιλών αλγορίθμων:

<b>Αλγόριθμος</b>	<b>Περιγραφή</b>
trainb	Batch training with weight & bias learning rules
trainbfg	BFGS quasi-Newton backpropagation
trainbr	Bayesian regularization
trainc	Cyclical order incremental training w/learning functions
traincgb	Powell -Beale conjugate gradient backpropagation
traincgf	Fletcher-Powell conjugate gradient backpropagation
traincgp	Polak-Ribiere conjugate gradient backpropagation
traingd	Gradient descent backpropagation
traingdm	Gradient descent with momentum backpropagation
traingda	Gradient descent with adaptive lr backpropagation

traingdx	Gradient descent w/momentum & adaptive lr backpropagation
trainlm	Levenberg-Marquardt backpropagation
trainoss	One step secant backpropagation
trainr	Random order incremental training w/learning functions
trainrp	Resilient backpropagation (Rprop)
trains	Sequential order incremental training w/learning functions
trainscg	Scaled conjugate gradient backpropagation

Πίνακας 4 Λίστα αλγορίθμων εκπαίδευσης στο matlab

Στην παρούσα διπλωματική εργασία χρησιμοποιήσαμε και αναλύσαμε τους εξής αλγορίθμους:

### ***O Αλγόριθμος Backpropagation***

Ο Αλγόριθμος *Backpropagation* λειτουργεί σε δύο φάσεις, δηλαδή στο πέρασμα προς τα εμπρός και στο αντίστοιχο προς τα πίσω. Κατά τη διάρκεια της προς τα εμπρός κατεύθυνσης, παρέχονται στο δίκτυο οι εισοδοί καθώς και τα βάρη τους. Αυτές οι τιμές διέρχονται μέσω όλων των στρωμάτων και η τελική έξοδος λαμβάνεται στο στρώμα εξόδου. Η τιμή που λαμβάνεται στο στρώμα εξόδου συγκρίνεται με τη σωστή απάντηση. Αυτό μας βοηθά να καθορίσουμε το ποσοστό σφάλματος στην έξοδο και κατ' επέκταση το σφάλμα στο στρώμα εξόδου. Ωστόσο, το στρώμα εξόδου εξαρτάται από το προηγούμενο κρυφό στρώμα ή στρώματα. Εξαιτίας αυτού, πρέπει να προσδιορίσουμε το σφάλμα στα κρυμμένα στρώματα χρησιμοποιώντας την κλίση (gradient). Κατόπιν εφαρμόζουμε τα ίδια βήματα για την διόρθωση των βαρών και για το στρώμα εισόδου. Αυτή η διαδικασία των δύο φάσεων (προς τα εμπρός και προς τα πίσω κατεύθυνση του αλγορίθμου) δίνει και το όνομα στον αλγόριθμο, ως "backpropagation". Σε αυτή την οικογένεια αλγορίθμων εκπαίδευσης υπάρχει ένας αριθμός αλγορίθμων όπως ο gradient descent, ο gradient descent with momentum, ο conjugate gradient, ο quasi-Newton κ.α

### ***O Αλγόριθμος Gradient Descent***

Αποτελεί μία επαναληπτική μέθοδο ελαχιστοποίησης που ανήκει στην κατηγορία των αλγορίθμων backpropagation. Το gradient της συνάρτησης σφάλματος πάντα δείχνει την κατεύθυνση της απότομης ανόδου (steepest ascent) της συνάρτησης σφάλματος. Επιθυμούμε να προσδιορίσουμε τα βάρη  $w_{ij}$  τα οποία ελαχιστοποιούν τη συνάρτηση σφάλματος. Ο αλγόριθμος στηρίζεται στην εξής εντολή:

$w_{ij}^t \leftarrow w_{ij}^{t-1} - \eta \cdot \nabla E(w)$ , όπου  $E$  η συνάρτηση σφάλματος,  $t$  ο αριθμός της επανάληψης και  $\eta$  ο ρυθμός εκμάθησης (learning rate). Αυτή η επαναληπτική διαδικασία συνεχίζεται έως ότου το μέτρο του gradient πέσει κάτω από μία επιθυμητή τιμή. Αν το  $\eta$  είναι πολύ μεγάλο, τότε το ελάχιστο θα προσπεραστεί. Αν το  $\eta$  είναι πολύ μικρό τότε ο αλγόριθμος θα αργήσει να συγκλίνει στη λύση.

### **Ο Αλγόριθμος Marquardt-Levenberg**

Ο Αλγόριθμος Marquardt-Levenberg (LM) είναι μία επαναληπτική διαδικασία-τεχνική η οποία εντοπίζει το ελάχιστο μιας συνάρτησης που εκφράζεται ως το άθροισμα τετραγώνων μη γραμμικών συναρτήσεων. Συνιστά μία πρότυπη τεχνική για μη γραμμικά προβλήματα ελαχίστων τετραγώνων, υιοθετείται ευρέως από ένα ευρύ φάσμα επιστημονικών κλάδων και μπορεί να θεωρηθεί ως ένας συνδυασμός των μεθόδων steepest descent και Gauss-Newton. Όσο η τρέχουσα λύση απέχει πολύ από την σωστή λύση, ο αλγόριθμος LM συμπεριφέρεται όπως η μέθοδος steepest descent: αργή αλλά εγγυάται τη σύγκλιση. Όταν η τρέχουσα λύση είναι κοντά στη σωστή λύση ο αλγόριθμος LM γίνεται η μέθοδος Gauss-Newton.

Υποθέτουμε ότι έχουμε μία συνάρτηση  $V(\underline{x})$  την οποία θέλουμε να ελαχιστοποιήσουμε ως προς το διάνυσμα των παραμέτρων  $\underline{x}$ . Η μέθοδος Newton δίνει:

$$\Delta \underline{x} = -[\nabla^2 V(\underline{x})]^{-1} \nabla V(\underline{x})$$

όπου  $\nabla^2 V(\underline{x})$  είναι ο Εσσιανός πίνακας (Hessian matrix) και  $\nabla V(\underline{x})$  είναι το gradient (διάνυσμα πρώτων παραγώγων). Αν υποθέσουμε ότι  $V(\underline{x})$  είναι συνάρτηση αθροίσματος τετραγώνων, δηλαδή:

$$V(\underline{x}) = \sum_{i=1}^N e_i^2(\underline{x})$$

τότε αποδεικνύεται ότι:

$$\nabla V(\underline{x}) = J^T(\underline{x}) \underline{e}(\underline{x})$$

$$\nabla^2 V(\underline{x}) = J^T(\underline{x}) J(\underline{x}) + S(\underline{x})$$

όπου  $J(\underline{x})$  είναι ο Ιακωβιανός πίνακας (Jacobian matrix):

$$J(\underline{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial e_1(\underline{x})}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial e_1(\underline{x})}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial e_N(\underline{x})}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial e_N(\underline{x})}{\partial x_n} \end{bmatrix}$$

και

$$S(\underline{x}) = \sum_{i=1}^N e_i(\underline{x}) \nabla^2 e_i(\underline{x})$$

Για την μέθοδο Gauss-Newton υποθέτουμε ότι  $S(\underline{x}) \approx 0$  και έτσι η σχέση ... γίνεται:

$$\Delta \underline{x} = [J^T(\underline{x})J(\underline{x})]^{-1}J^T(\underline{x})\underline{e}(\underline{x})$$

Σημειώνουμε ότι αν ο Εσσιανός πίνακας δεν είναι θετικά ορισμένος ο αλγόριθμος θα κάνει άπειρα βήματα για την επίλυση του προβλήματος με τον κίνδυνο εύρεσης σαγματικού σημείου στο χώρο των βαρών του δικτύου. Ο αλγόριθμος LM επιλύει αυτή την αδυναμία εισάγοντας την παράμετρο  $\mu$ .

Η παραπάνω σχέση τροποποιείται στον αλγόριθμο LM ως εξής:

$$\Delta \underline{x} = [J^T(\underline{x})J(\underline{x}) + \mu I]^{-1}J^T(\underline{x})\underline{e}(\underline{x})$$

Η παράμετρος  $\mu$  πολλαπλασιάζεται με έναν παράγοντα  $\beta$  όποτε το βήμα έχει ως αποτέλεσμα την αύξηση του  $V(\underline{x})$ . Αντίθετα, όταν ένα βήμα οδηγεί σε μείωση του  $V(\underline{x})$ , το  $\mu$  διαιρείται με το  $\beta$ . Όταν το  $\mu$  είναι μεγάλο ο αλγόριθμος μετατρέπεται σε steepest descent με βήμα  $1/\mu$ . Αντίστοιχα, για μικρό  $\mu$  ο αλγόριθμος γίνεται ο Gauss-Newton. Το βήμα κλειδί για τον αλγόριθμο είναι ο υπολογισμός του πίνακα Jacobi  $J(\underline{x})$ . Για τα νευρωνικά δίκτυα η συνάρτηση  $V(\underline{x})$  είναι η συνάρτηση σφάλματος και για τον προσδιορισμό του Ιακωβιανού πίνακα χρειάζεται ο υπολογισμός των ποσοτήτων  $\frac{\partial e_q(m)}{\partial w_{ij}^k}$ , όπου  $e_q$  η απόκλιση του  $q$ -οστού στόχου από το  $q$ -οστό output του δικτύου (σφάλμα).

Εν συντομία ο αλγόριθμος LM:

- i. Με την χρήση των εισόδων στο δίκτυο υπολογίζει τις αντίστοιχες εξόδους και τα σφάλματα. Στη συνέχεια υπολογίζει το άθροισμα των τετραγωνικών σφαλμάτων για όλες τις εισόδους.
- ii. Υπολογίζει τον Ιακωβιανό πίνακα.
- iii. Υπολογίζει το βήμα  $\Delta \underline{x}$ .
- iv. Ανανεώνει την τιμή του βήματος σε  $\underline{x} + \Delta \underline{x}$  και ξαναεκτελεί το i. Αν το νέο άθροισμα είναι μικρότερο από αυτό στο i τότε μειώνει το  $\mu$  κατά  $\beta$  και επαναλαμβάνει το i. Σε αντίθετη περίπτωση, αυξάνει το  $\mu$  κατά  $\beta$  και στη συνέχεια εκτελεί το iii.
- v. Κριτήριο τερματισμού του αλγορίθμου (σύγκλιση σε λύση) είναι όταν το gradient  $\nabla V(\underline{x}) = J^T(\underline{x})\underline{e}(\underline{x})$  πέσει κάτω από μία προκαθορισμένη τιμή ή όταν το άθροισμα των τετραγώνων έχει μειωθεί σε μία επιθυμητή τιμή.

### ***Ο Αλγόριθμος Bayesian regularization***

Η μέθοδος της Μπεϋζιανής κανονικοποίησης (Bayesian regularization) αποτελεί μία μέθοδο προσέγγισης των παραμέτρων του δικτύου σύμφωνα με το πρότυπο πιθανότητας κατά Bayes. Περιλαμβάνει την τροποποίηση της συχνά χρησιμοποιούμενης αντικειμενικής συνάρτησης του μέσου τετραγωνικού σφάλματος του δικτύου  $MSE = E_D$

$= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (e_i)^2$ . Η τροποποίηση αυτή στοχεύει στη βελτίωση της ικανότητας γενίκευσης του μοντέλου. Η αντικειμενική συνάρτηση MSE επεκτείνεται με την προσθήκη ενός όρου, ο οποίος είναι το άθροισμα των τετραγώνων των συναπτικών βαρών του δικτύου  $E_w$ . Η νέα αντικειμενική συνάρτηση προς ελαχιστοποίηση έχει τύπο:

$$F = \beta ED + \alpha E_w$$

όπου  $\alpha$  και  $\beta$  είναι παράμετροι προς βελτιστοποίηση. Στο πλαίσιο της Μπεϋζιανής μεθοδολογίας που αναπτύχθηκε από τον David MacKay γίνεται η υπόθεση ότι τα βάρη και το bias είναι τυχαίες μεταβλητές που ακολουθούν την κανονική κατανομή και οι παράμετροι σχετίζονται με τις άγνωστες διακυμάνσεις αυτών των κατανομών. Είναι γνωστό ότι η βέλτιστη τεχνική κανονικοποίησης απαιτεί τον αρκετά «κοστοβόρο» υπολογισμό του Εσσιανού πίνακα. Για να ξεπεραστεί αυτή η δυσκολία, χρησιμοποιείται η προσέγγιση Gauss-Newton για τον Εσσιανό πίνακα. Ένα χαρακτηριστικό αυτού του αλγορίθμου είναι ότι παρέχει ένα μέτρο για τον αριθμό των παραμέτρων (βάρη και biases) οι οποίοι χρησιμοποιούνται αποτελεσματικά από το δίκτυο. Επιπλέον, ο συγκεκριμένος αλγόριθμος εκπαίδευσης με την κανονικοποίηση επιτυγχάνει καλύτερη γενίκευση μειώνοντας τον κίνδυνο υπερεκπαίδευσης και over ή under fitting.

Το γενικό πλαίσιο έχει ως εξής:

Επιλέγονται τα βάρη τα οποία μεγιστοποιούν την δεσμευμένη πιθανότητα των βαρών δοθέντων των δεδομένων. Σύμφωνα με τον τύπο του Bayes έχουμε:

$$P(x|D, \alpha, \beta, M) = \frac{P(D|x, \beta, M)P(x|\alpha, M)}{P(D|\alpha, \beta, M)}$$

Όπου  $x$  είναι το διάνυσμα που περιέχει τα βάρη και τα biases του δικτύου,  $D$  είναι το σύνολο των δεδομένων εκπαίδευσης,  $\alpha$  και  $\beta$  είναι οι παράμετροι που σχετίζονται με τις συναρτήσεις πυκνότητας  $P(D|x, \beta, M)$  και  $P(x|\alpha, M)$  και  $M$  είναι το επιλεγμένο μοντέλο νευρωνικού δικτύου.  $P(D|x, \beta, M)$  είναι η πυκνότητα πιθανότητας για τα δεδομένα εκπαίδευσης δοθέντων των βαρών, της παραμέτρου  $\beta$  και του μοντέλου  $M$  και περιγράφει πόσο πιθανό είναι ένα δοθέν σύνολο δεδομένων να παρατηρηθεί δοθέντων συγκεκριμένων τιμών των βαρών. Η  $P(x|\alpha, M)$  ονομάζεται εκ των προτέρων πιθανότητα (prior density) και αντιπροσωπεύει την γνώση μας σχετικά με τα βάρη του δικτύου προτού παρατηρήσουμε τα δεδομένα. Η  $P(D|\alpha, \beta, M)$  αποτελεί τον όρο κανονικοποίησης, ο οποίος δεν είναι συνάρτηση του  $x$ .

### ***Ο Αλγόριθμος Conjugate Gradient Descent***

Ο αλγόριθμος Conjugate Gradient Descent μπορεί να θεωρηθεί μία μέθοδος η οποία βρίσκεται ανάμεσα στη μέθοδο Gradient Descent (πρώτης τάξεως μέθοδος) και στη μέθοδο Newton (δεύτερης τάξεως μέθοδος). Κίνητρο δημιουργίας αυτού του αλγορίθμου υπήρξε η επιθυμία «επιτάχυνσης» του αλγορίθμου Gradient Descent και αποφυγής του μεγάλου υπολογιστικού κόστους της μεθόδου Newton.



### 2.2.5 Κριτήρια τερματισμού

Όλοι οι παραπάνω αλγόριθμοι εκπαίδευσης έχουν ένα κριτήριο σύμφωνα με το οποίο τερματίζουν την επαναληπτική τους διαδικασία έχοντας βρεί την επιθυμητή λύση, που στην περίπτωση μας είναι οι τιμές των συναπτικών βαρών του υπό μελέτη νευρωνικού δικτύου. Μόλις η επιθυμητή λύση επιτευχθεί λέμε ότι ο αλγόριθμος συγκλίνει.

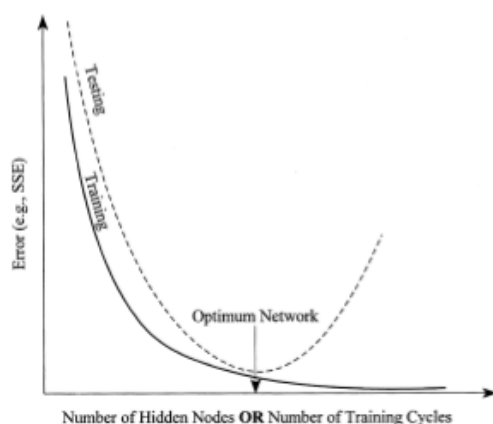
Συνήθως, χρησιμοποιούνται 3 κριτήρια τερματισμού και αυτά είναι τα εξής:

- i. Το σφάλμα της εκπαίδευσης, δηλαδή διαφορά του output από τον στόχο (target).
- ii. Η παράγωγος ή το gradient του output αν είναι μία τιμή ή διάνυσμα αντίστοιχα.
- iii. Η διασταυρωμένη επαλήθευση (cross validation) το οποίο αποτελεί και default κριτήριο στο matlab. Αν και «βαρύ» υπολογιστικά, θεωρείται από τα πιο αξιόπιστα κριτήρια.

Όπως αναφέραμε και στον αλγόριθμο Marquardt-Levenberg, ένα σύνηθες κριτήριο τερματισμού είναι το άθροισμα των τετραγωνικών σφαλμάτων, γνωστό και από την στατιστική ως SSE (Sum of Squares Error), με τύπο:

$$SSE = \sum_i \sum_j (t_{ij} - o_{ij})^2$$

Όπου  $i$  ο δείκτης που δηλώνει τον νευρώνα και  $j$  ο δείκτης που δηλώνει τον αριθμό του παραδείγματος της εκπαίδευσης. Κάποια SSE κριτήρια ενσωματώνουν ένα μέτρο πολυπλοκότητας της αρχιτεκτονικής του δικτύου. Γενικά, το σφάλμα των δεδομένων εκπαίδευσης μειώνεται όσο ο αριθμός των νευρώνων στο κρυφό επίπεδο ή οι κύκλοι εκπαίδευσης αυξάνονται. Αυτή η συμπεριφορά φαίνεται στην παρακάτω εικόνα:



Εικόνα 36 Κριτήριο τερματισμού εκπαίδευσης και επιλογή βέλτιστης αρχιτεκτονικής του ΤΝΔ

Η αρχική μείωση στο σφάλμα παρατηρείται αρκετά μεγάλη και γρήγορη εξαιτίας της μάθησης από την πλευρά του δικτύου. Όμως, η μεταγενέστερη αργή μείωση του σφάλματος μπορεί να αποδοθεί σε δύο λόγους:

- i. Στην απομνημόνευση του δικτύου η οποία προκύπτει από τον υπερβολικά μεγάλο αριθμό κύκλων εκπαίδευσης και/ή
- ii. Στην υπερφόρτωση του μοντέλου (overfitting) εξαιτίας του μεγάλου αριθμού νευρώνων.

Στα δεδομένα του test παρατηρείται αρχικά μείωση και έπειτα αύξηση του σφάλματος εξαιτίας και της υπερεκπαίδευσης (overtraining) του ΤΝΔ, δηλαδή της απομνημόνευσης (memorization) της διαδικασίας εκπαίδευσης από το δίκτυο γεγονός που έχει ως αποτέλεσμα την αδυναμία γενίκευσης σε testing δεδομένα.

### 2.2.6 Γενικά θέματα για την ανάπτυξη των Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων

Κατά την μελέτη και την εφαρμογή των Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων προκύπτουν διάφορα ερωτήματα αναφορικά με τα διάφορα χαρακτηριστικά τους καθώς και τον τρόπο επιλογής από τον χρήστη-σχεδιαστή αυτών των χαρακτηριστικών. Τέτοια χαρακτηριστικά είναι για παράδειγμα ο τύπος της συνάρτησης ενεργοποίησης, ο αριθμός των επαναλήψεων εκπαίδευσης, ο αριθμός των κρυφών επιπέδων και των νευρώνων τους, ο ρυθμός εκμάθησης, τα μεγέθη των σετ δεδομένων κλπ. Δεν υπάρχει κάποιος γενικός κανόνας που να καθορίζει τις επιλογές αυτές, καθώς κάθε πρόβλημα έχει τις δικές του ιδιαιτερότητες. Βασικός στόχος είναι η βέλτιστη επιλογή των τιμών των παραμέτρων πράγμα που συνήθως επιτυγχάνεται μέσω της μεθόδου trial and error.

Παρακάτω παρουσιάζουμε έναν πίνακα που δείχνει την επίδραση των τιμών κάποιων παραμέτρων στην απόδοση του δικτύου:

Παράμετρος ΤΝΔ	Πολύ μεγάλη τιμή	Πολύ χαμηλή τιμή
Αριθμός κρυφών επιπέδων και νευρώνων	Υπερεκπαίδευση και αδυναμία γενίκευσης	Underfitting
Μέγεθος υποσυνόλου δεδομένων εκπαίδευσης	Καλή απομνημόνευση και ικανότητα γενίκευσης	Αδυναμία πλήρους εξήγησης του προβλήματος και περιορισμένη ή κακή γενίκευση
Μέγεθος υποσυνόλου δεδομένων για Testing	Δυνατότητα επιβεβαίωσης της ικανότητας γενίκευσης	Ανεπαρκής επιβεβαίωση και ικανότητα γενίκευσης
Αριθμός επαναλήψεων εκπαίδευσης (epochs)	Καλή απομνημόνευση των δεδομένων αλλά κακή γενίκευση για νέα δεδομένα	Δίκτυο με αδυναμία αναπαράστασης των δεδομένων
Ρυθμός εκμάθησης (learning rate $\eta$ )	Ασταθές δίκτυο το οποίο ταλαντεύεται γύρω από τη βέλτιστη λύση	Αργή εκπαίδευση ΤΝΔ
Συντελεστής ροπής $\mu$	Μειώνει τον κίνδυνο εγκλωβισμού σε τοπικό ελάχιστο αλλά αυξάνει τον κίνδυνο παράβλεψης της λύσης	Αυξάνεται ο κίνδυνος εγκλωβισμού σε τοπικό ελάχιστο και αργή εκπαίδευση

Πίνακας 5 Επίδραση μεγέθους τιμών παραμέτρων ΤΝΔ

### 2.2.7 Πλεονεκτήματα -μειονεκτήματα μοντέλου

Η ελκυστικότητα των ΤΝΔ οφείλεται στα αξιοσημείωτα χαρακτηριστικά της επεξεργασίας των πληροφοριών των βιολογικών συστημάτων όπως η μη γραμμικότητα, ο έντονος παραλληλισμός, η ευρωστία, η αντοχή σφάλματος, η ικανότητα μάθησης για τον χειρισμό ανακριβών και ασαφών πληροφοριών καθώς και η ικανότητά τους για γενίκευση. Τα ΤΝΔ που κατέχουν αυτά τα χαρακτηριστικά είναι επιθυμητά γιατί:

- i. Η μη γραμμικότητα επιτρέπει την καλύτερη εφαρμογή στα δεδομένα.
- ii. Η μη ευαισθησία στο θόρυβο παρέχει ακριβή πρόβλεψη παρά την παρουσία αβέβαιων δεδομένων και σφαλμάτων στις μετρήσεις.
- iii. Ο έντονος παραλληλισμός συνεπάγεται γρήγορη επεξεργασία και ανοχή στα σφάλματα.
- iv. Η μάθηση και η προσαρμοστικότητα επιτρέπουν στο σύστημα να ενημερώνει (τροποποιεί) την εσωτερική δομή του ως αντίδραση στο μεταβαλλόμενο περιβάλλον.
- v. Η γενίκευση επιτρέπει την εφαρμογή του μοντέλου σε δεδομένα στα οποία δεν έχει εκπαιδευτεί.
- vi. Δεν απαιτείται καμία γνώση για την συσχέτιση των εισόδων (inputs) με τις εξόδους (outputs).
- vii. Θεωρητικά τα ΤΝΔ έχουν τη δυνατότητα να προσεγγίσουν οποιαδήποτε συνεχή συνάρτηση.
- viii. Συγκριτικά με τις παραδοσιακές στατιστικές τεχνικές, η λειτουργία τους βασίζεται σε λιγότερες παραδοχές και περιορισμούς για την κατανομή των δεδομένων.
- ix. Η ποικιλία των μοντέλων ΤΝΔ που μπορούν να δημιουργηθούν (δομή, αλγόριθμοι εκπαίδευσης, συνάρτηση ενεργοποίησης) προσφέρει πολλές δυνατότητες επίλυσης διαφόρων προβλημάτων.

Ωστόσο, υπάρχουν και ορισμένα μειονεκτήματα που πρέπει να αναφέρουμε όπως:

- i. Η ανάγκη για μεγάλο αριθμό δειγμάτων για την εκπαίδευση του δικτύου
- ii. Η ύπαρξη πολλών τοπικών ελαχίστων στη συνάρτηση σφάλματος

Η μη προσαρμοστικότητα σε δεδομένα που διαφέρουν σε μεγάλο βαθμό από τα δεδομένα εκπαίδευσης και έτσι κρίνεται αναγκαία η επανεκπαίδευση του ΤΝΔ

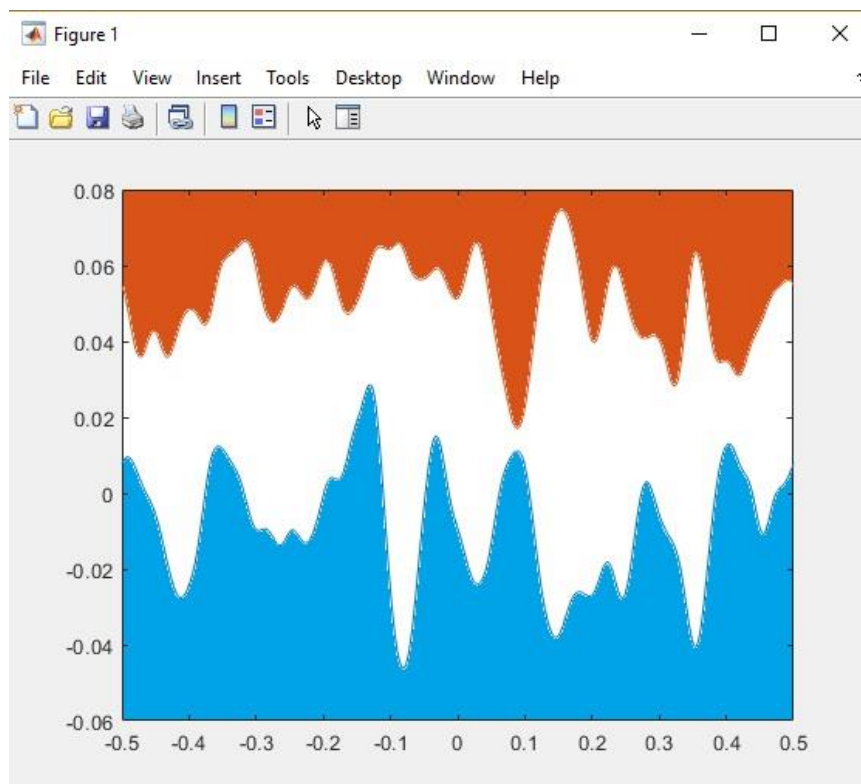
## Κεφάλαιο 3ο

### 3.1 Μαθηματική μοντελοποίηση και υπολογισμός αρχικών σημείων επαφής επιφανειών με τραχύτητα

Σε αυτό το κεφάλαιο παρουσιάζουμε μία νέα μεθοδολογία για τον υπολογισμό των σημείων επαφής των προφίλ δύο «τυχαίων» επιφανειών με τραχύτητα.

Πρόκειται να μελετηθούν οι επιφάνειες μέσω των προφίλ της τραχύτητάς τους και να προσδιορισθεί η επιφάνεια διεπαφής δύο επιφανειών που έρχονται σε επαφή. Προκειμένου να επιτευχθεί αυτό, ακολουθήθηκαν τα παρακάτω βήματα:

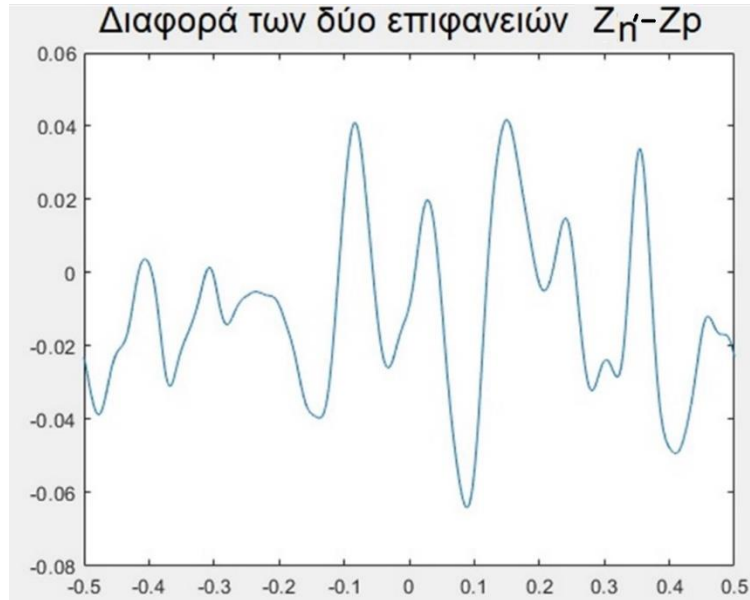
1. Δημιουργήθηκαν τεχνητά προφίλ επιφανειών με χρήση κώδικα που αναπτύξαμε στο matlab και παρουσιάζεται αναλυτικά στο παράρτημα. Το ένα προφίλ με παραμέτρους  $RMS_1$ ,  $\xi_1$  και το άλλο με παραμέτρους  $RMS_2$ ,  $\xi_2$  όπως φαίνεται παρακάτω:



Εικόνα 37 Προφίλ τυχαίων επιφανειών με τραχύτητα

2. Έπειτα, μοντελοποιήθηκε η διαδικασία επαφής των προφίλ επιφανειών με τραχύτητα, η οποία περιγράφεται στα παρακάτω στάδια:
  - i. Αρχικά, αναστράφηκε ( $Z_n'$ ) και μετακινήθηκε η πορτοκαλί επιφάνεια προς τα πάνω ώστε η ελάχιστη τιμή ύψους της να είναι το πάνω από την μέγιστη τιμή του ύψους της μπλέ.

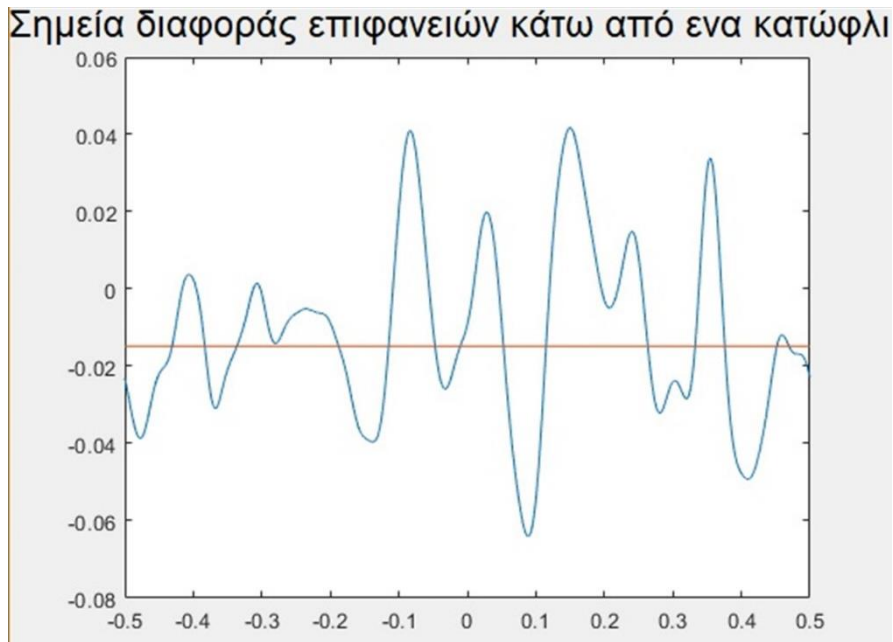
- ii. Κατόπιν, θεωρήσαμε τη διαφορά των υψών ανά  $x$ , δηλαδή την απόσταση των επιφανειών ανά σημείο  $x$ , της οποίας η γραφική παράσταση είναι:



Εικόνα 38 Προφίλ διαφοράς επιφανειών εικόνας 21

Σημειώνεται ότι η μέγιστη απόσταση των δύο επιφανειών προσεγγιστικά είναι  $6(\text{RMS}_1 + \text{RMS}_2)$  λόγω της κανονικής κατανομής των υψών.

- iii. Στη συνέχεια διακριτοποιήθηκε η διαφορά του ύψους σε  $N$  κλάσεις των οποίων η φυσική σημασία είναι το βήμα προσέγγισης των δύο προφίλ και μελετήθηκε η επαφή των δύο επιφανειών. Συγκεκριμένα, όταν βρισκόμαστε στην πρώτη κλάση οι επιφάνειες δεν έχουν έρθει ακόμα σε επαφή. Στην δεύτερη κλάση ένα μέρος των επιφανειών έχουν έρθει σε επαφή και συγκεκριμένα τα  $x$  για τα οποία η καμπύλη της διαφοράς είναι κάτω από την ευθεία που είναι το άνω όριο της κλάσης 2. Όταν βρισκόμαστε στην κλάση  $k$  έχουν έρθει σε επαφή τα σημεία των επιφανειών για τα οποία η διαφορά βρίσκεται κάτω από το άνω όριο της κλάσης  $k$  (κόκκινη ευθεία γραμμή) και αυτό συμβαίνει διότι όταν το βήμα προσέγγισης  $k$  ισούται με τη διαφορά ύψους αυτή η διαφορά έχει καλυφθεί και συνεπώς τα προφίλ έχουν ακουμπήσει.



Εικόνα 39 Υπολογισμός σημείων επαφής με threshold

Κατά την εισχώρηση του ενός προφίλ μέσα στο άλλο στην πραγματικότητα οι επιφάνειες παραμορφώνονται.

Για απλούστευση, η μελέτη της επαφής των προφίλ γίνεται μέσω της διαφοράς τους.

Με την μοντελοποίηση αυτή καταφέρνουμε να υπολογίσουμε την επιφάνεια διεπαφής για τα προφίλ επιφανειών με παραμέτρους  $RMS_1$ ,  $\xi_1$ ,  $RMS_2$ ,  $\xi_2$  όταν αυτές οι επιφάνειες έχουν προσεγγίσει κατά  $\frac{6(RMS_1+RMS_2)\kappa}{N}$ , δεδομένης της τυχαιότητας των επιφανειών που συναντώνται στη φύση. Ο υπολογισμός αυτός για κάθε ένα ζευγάρι επιφανειών θα ήταν δύσκολος. Για το λόγο αυτό προτείνεται η χρήση Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων όπως αναλύεται στο επόμενο κεφάλαιο.

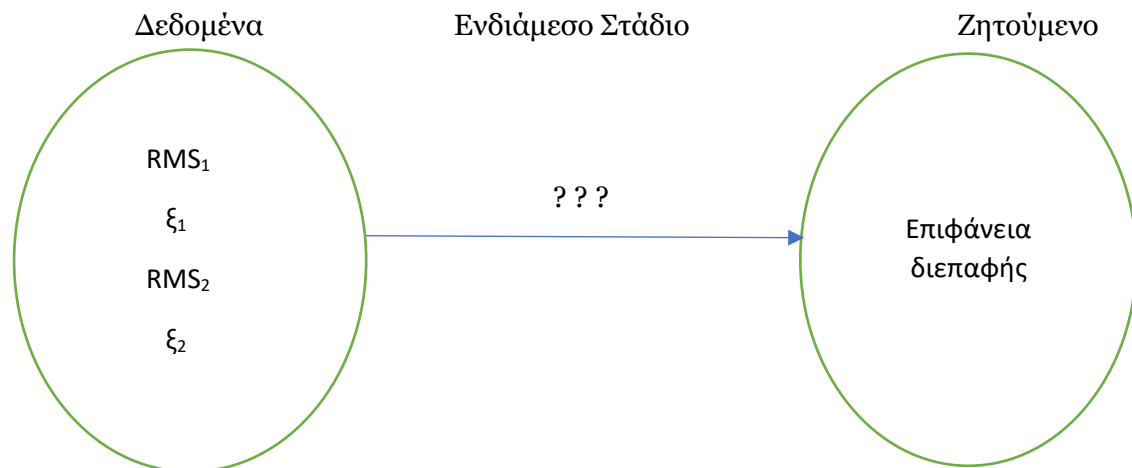
### **3.2 Πρόταση υπολογισμού μεγέθους επιφάνειας διεπαφής με εξειδικευμένο Τεχνητό Νευρωνικό Δίκτυο**

Σε αυτό το κεφάλαιο παρουσιάζεται η μεθοδολογία επίλυσης του προβλήματος υπολογισμού του εμβαδού διεπαφής δύο επιφανειών που έρχονται σε επαφή από τις παραμέτρους τραχύτητας των επιφανειών. Η πολυπλοκότητα της φύσης του προβλήματος, όπως περιγράφεται λεπτομερώς στο κεφάλαιο 2, γέννησε την ιδέα της μελέτης του με χρήση Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων (ΤΝΔ). Σημειώνεται ότι τα ΤΝΔ αποτελούν μία ισχυρή τεχνική της υπολογιστικής νοημοσύνης και έχει εφαρμοστεί σε διάφορα πεδία όπως η μηχανική και η επιστήμη των υπολογιστών. Αυτή η τεχνική είναι ιδιαίτερα χρήσιμη στη μοντελοποίηση και την πρόβλεψη σύνθετων προβλημάτων μηχανικής καθώς και προβλημάτων (ή συστημάτων) της επιστήμης των υπολογιστών όπου αναλυτικές λύσεις είναι δύσκολο να προκύψουν εξαιτίας της έλλειψης σχετικών θεωρητικών αποτελεσμάτων. Μεταξύ άλλων πλεονεκτημάτων των ΤΝΔ είναι η ανάδειξη μαθηματικών σχέσεων μεταξύ των μεταβλητών εισόδου και των μεταβλητών εξόδου που δεν μπορούν να εκφραστούν με αναλυτικές συναρτήσεις..

Πρέπει ωστόσο να μην παραβλέψουμε το γεγονός ότι πρακτικά τα Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα δεν προσφέρουν μία απευθείας λύση σε ένα πολύπλοκο πρόβλημα με απλή εισαγωγή των δεδομένων του. Αντίθετα, η προσέγγιση ενός πολύπλοκου προβλήματος με τη χρήση του ΤΝΔ αναλύεται σε εργασίες απλούστερες (υποπροβλήματα) οι οποίες είναι συμβατές με τις δυνατότητες των ΤΝΔ. Εφόσον αυτά εφαρμοστούν και εκτελεστούν επιτυχώς, παρέχουν αποτελέσματα χρήσιμα και ερμηνεύσιμα.

Στο υπό μελέτη πρόβλημα ο σκοπός είναι να εκτιμήσουμε το εμβαδό της επιφάνειας διεπαφής δύο επιφανειών που έρχονται σε επαφή καθώς η μία προσεγγίζει την άλλη με συγκεκριμένο τρόπο γνωρίζοντας κάποια επιμέρους χαρακτηριστικά καθεμίας από τις δύο επιφάνειες (RMS,  $\xi$ ). Σχηματικά η επιλογή των ΤΝΔ φαίνεται στην Εικόνα 24:





*Εικόνα 40 Τεχνητό Νευρωνικό Δίκτυο*

Στην παρούσα εργασία στοχεύουμε να μελετήσουμε και να αναλύσουμε το ενδιάμεσο στάδιο το οποίο περιλαμβάνει τις μεθόδους εκπαίδευσης που πρόκειται να ακολουθηθούν, το υπολογιστικό μέρος του προβλήματος καθώς και τους αλγορίθμους σύγκλισης. Συνεπώς, κρίνεται απαραίτητη μία εισαγωγή στα ΤΝΔ και τις διαθέσιμες μεθόδους της βιβλιογραφίας.

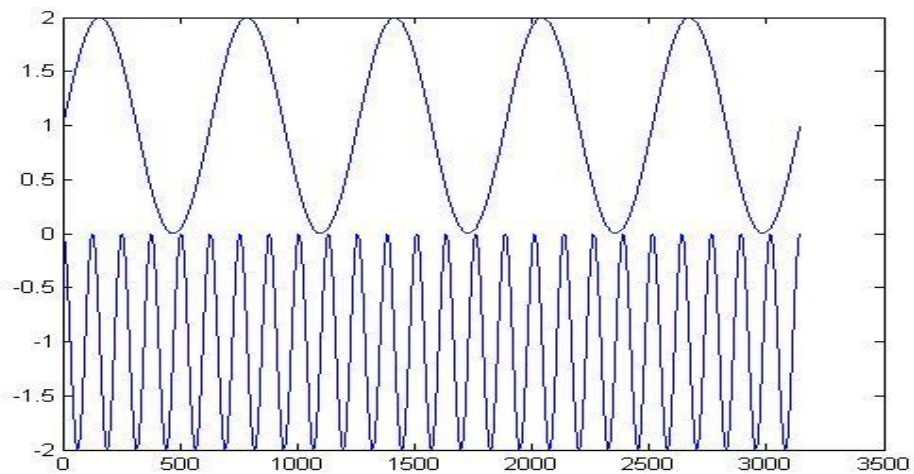
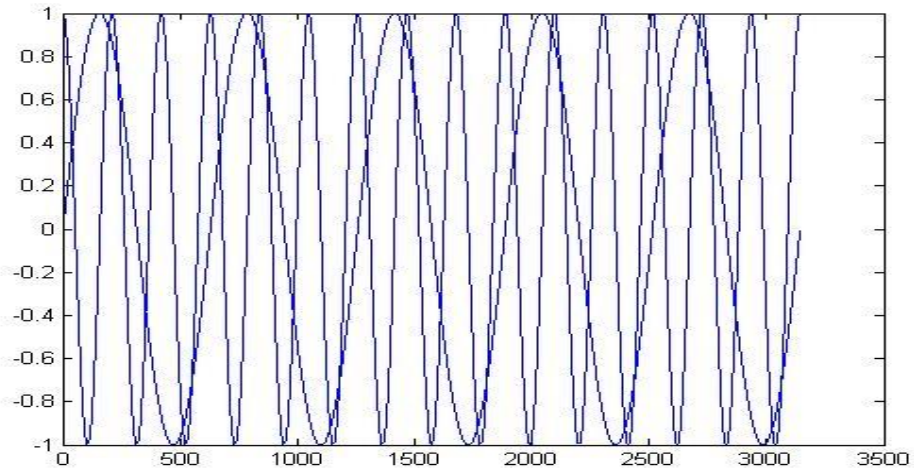
### **3.3 Στοιχεία χρησιμοποιούμενου ΤΝΔ – Προτεινόμενη μεθοδολογία**

Το κυριώς θέμα της παρούσας μεταπτυχιακής εργασίας είναι η πρόταση μίας νέας μεθοδολογίας για την εκτίμηση ενός φυσικού μεγέθους, της επιφάνειας διεπαφής μεταξύ δύο επιφανειών με τραχύτητα οι οποίες έρχονται σε επαφή. Η επιφάνεια διεπαφής είναι η περιοχή επαφής των δύο επιφανειών. Στην παρούσα εργασία η επιφάνεια διεπαφής υπολογίζεται με αριθμό σημείων επαφής των δύο επιφανειών. Εξαιτίας του ότι η μέτρηση αυτού του φυσικού μεγέθους καθίσταται δύσκολη χρησιμοποιώντας straightforward τρόπους λόγω της μη γραμμικής εξάρτησης του από διάφορες γνωστές και άγνωστες παραμέτρους, η ιδέα που προτείνεται βασίζεται στην χρήση νευρωνικών δικτύων.

#### **Πρόταση μοντελοποίησης προβλήματος**

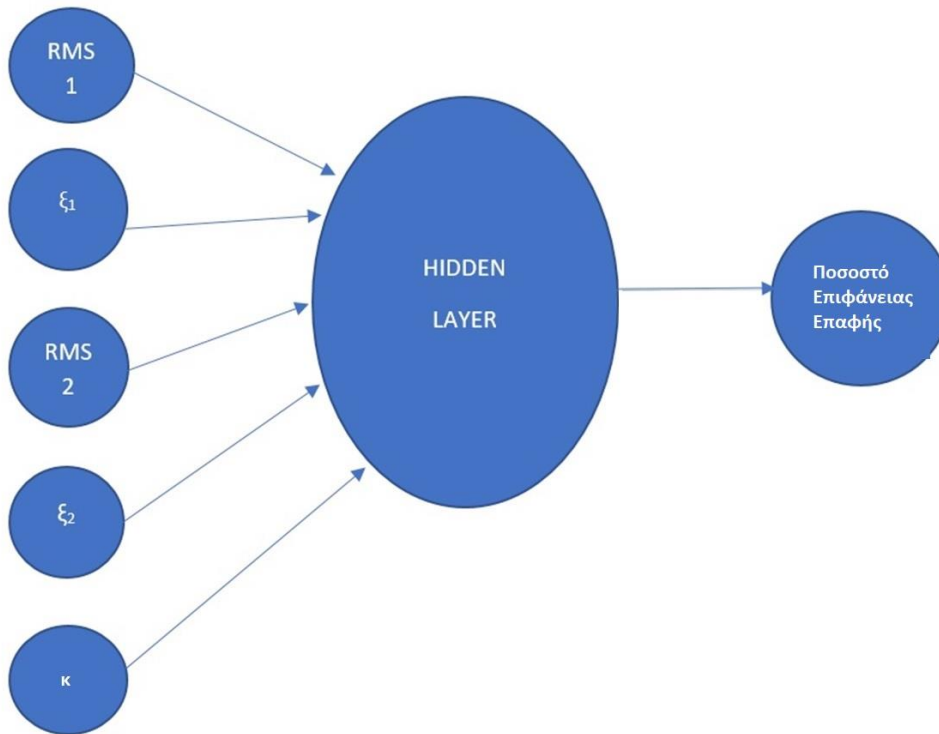
#### **ΒΗΜΑΤΑ ΠΟΥ ΘΑ ΑΚΟΛΟΥΘΗΣΟΥΝ**

1. Προσομοίωση ζευγών προφίλ επιφανειών με τραχύτητα (συνθετικές επιφάνειες) με τη χρήση του προγράμματος που αναπτύξαμε ειδικά για το σκοπό αυτό και παρατίθεται στο παράρτημα.



2. Μελέτη τους σε ένα ορθοκανονικό σύστημα αξόνων και προσέγγιση των δύο προφίλ με βήμα  $\alpha$ , το οποίο είναι ένα μέρος (τιμήμα) του  $6(\text{rms}_1 + \text{rms}_2)$  δηλαδή  $\alpha = \frac{6(\text{rms}_1 + \text{rms}_2)\kappa}{N}$ ,  $\kappa = 1, 2, \dots, N$ , όπου  $0 \leq \alpha \leq 6(\text{rms}_1 + \text{rms}_2)$ .

3. Δομή νευρωνικού δικτύου  
Γενική μορφή



Εικόνα 41 Γενική Μορφή του Προτεινόμενου Νευρωνικού Δικτύου

- i. Ως είσοδοι στο δίκτυο (Input Layer) θα δίνονται τα **RMS** και  $\xi$  κάθεμιας από τις δύο επιφάνειες καθώς και το βήμα προσέγγισης  $a$ . Υπενθυμίζουμε ότι το RMS (Root Mean Square Roughness) είναι η τετραγωνική ρίζα της μέσης τετραγωνικής απόκλισης από την επιπεδότητα.  
 Το  $\xi$  είναι το μήκος συσχέτισης (correlation length) δηλαδή το μήκος  $\xi$  κατά το οποίο οι τιμές του ύψους που αντιστοιχούν σε αυτό το μήκος του προφίλ είναι συσχετισμένες μεταξύ τους. Προφανώς για  $1 > \xi$  τα σημεία της επιφάνειας είναι ασυσχέιστα.
- ii. Ως έξοδος του δικτύου θα είναι ένα διάνυσμα  $(0,0,\dots,0,1,0, \dots,0)$  όπου η θέση που θα βρίσκεται η μονάδα θα δείχνει σε ποιο εύρος ποσοστού ανήκει το ποσοστό των σημείων επαφής των δύο επιφανειών. Για παράδειγμα, αν τα εύρη των ποσοστών είναι:
  1. (0% ,25%)
  2. (5% ,50%)
  3. (50% , 75%)
  4. (75% ,100%)

Και ως έξοδο έχουμε το διάνυσμα  $(0, 0, 1, 0)$  αυτό σημαίνει ότι το ΤΝΔ βγάζει ως αποτέλεσμα ότι οι επιφάνειες έχουν έρθει σε επαφή κατά 50% - 75%. ( Το 50% έως το 75% των σημείων τους).

## Κεφάλαιο 4<sup>ο</sup>

### 4.1 Ντετερμινιστικές Επιφάνειες

#### Σημεία αρχικής επαφής επιφανειών

Στην παρούσα παράγραφο θα μελετήσουμε αναλυτικά χωρίς την χρήση ΤΝΔ την επαφή προφίλ ορισμένων ντετερμινιστικών επιφανειών και συγκεκριμένα ημιτονοειδών προφίλ και θα προσδιορίσουμε αναλυτικά τα σημεία επαφής.

Έστω ότι οι τιμές ύψους των προφίλ των δύο επιφανειών δίνονται από τις παρακάτω συναρτήσεις:

$$z_1 = h_1 \cdot \sin(b_1x + c_1) \text{ \{γαλάζια καμπύλη\}} \text{ και } z_2 = h_2 \cdot \sin(b_2x + c_2) \text{ \{κόκκινη καμπύλη\}}$$

Όπως προαναφέραμε σε προηγούμενη ενότητα, ο προσδιορισμός των σημείων επαφής ανάγεται στο πρόβλημα ελαχιστοποίησης της διαφοράς των συναρτήσεων ύψους  $z(x) = z_1(x) - z_2(x) = h_1 \cdot \sin(b_1x + c_1) - h_2 \cdot \sin(b_2x + c_2)$  \{κίτρινη καμπύλη\}

$$\Leftrightarrow \frac{z(x)}{h_2} = \frac{h_1}{h_2} \sin(b_1x + c_1) - \sin(b_2x + c_2)$$

$$\Leftrightarrow \bar{z}(x) = \bar{h} \sin(\bar{x}) - \sin\left(\frac{b_2}{b_1} \bar{x} - \frac{b_2 c_1}{b_1} + c_2\right)$$

Για διάφορες συνθήκες που ισχύουν για τις παραμέτρους διακρίνουμε τις παρακάτω περιπτώσεις:

- i.  $h_1 \neq h_2$  και όλες οι άλλες παράμετροι ίσες

$$z(x) = h_1 \cdot \sin(bx + c) - h_2 \cdot \sin(bx + c) = (h_1 - h_2) \cdot \sin(bx + c)$$

- Αν  $h_1 - h_2 > 0$ , το ελάχιστο επιτυγχάνεται στο  $x$  όπου ελαχιστοποιείται το ημίτονο, δηλαδή  $x = 2k\pi + \frac{3\pi}{2}$ .
- Αν  $h_1 - h_2 < 0$ , το ελάχιστο επιτυγχάνεται στο  $x$  όπου μεγιστοποιείται το ημίτονο, δηλαδή  $x = 2k\pi + \frac{\pi}{2}$ .

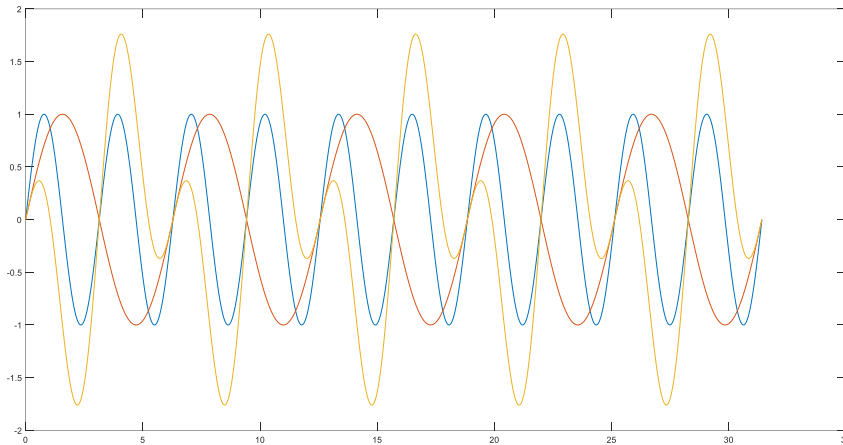
- ii.  $b_1 \neq b_2$  και όλες οι άλλες παράμετροι ίσες (διαφορά συχνότητας)

$$\begin{aligned} z(x) &= h \cdot \sin(b_1x + c) - h \cdot \sin(b_2x + c) = h \cdot [\sin(b_1x + c) - \sin(b_2x + c)] \\ &= 2h \cdot \sin\left(\frac{b_1 - b_2}{2} \cdot x\right) \cdot \cos\left(\frac{b_1 + b_2}{2} \cdot x + c\right) \end{aligned}$$

Με  $h_1 = h_2 = h$  και  $c_1 = c_2 = c$ .

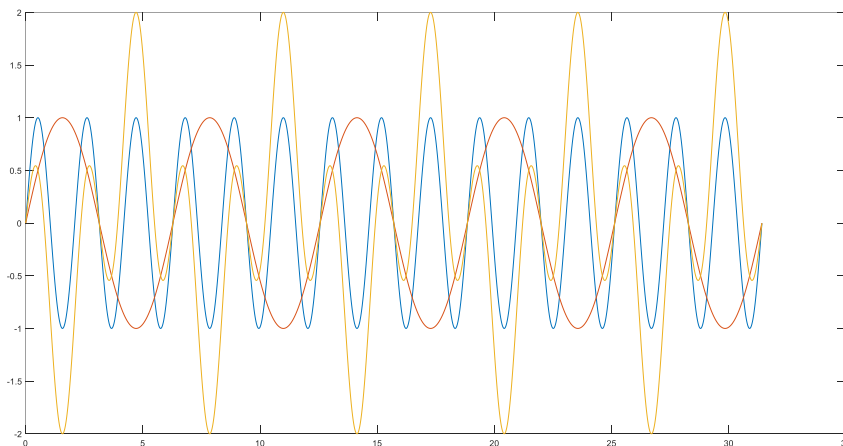
Θα μελετήσουμε αυτήν την περίπτωση μέσα από εφαρμογή συγκεκριμένων τιμών στις παραμέτρους.

➤  $h_1=1, h_2=1, b_1=2, b_2=1, c_1=0, c_2=0$



Γράφημα 1 Ημιτονοειδείς καμπύλες με διαφορετική συχνότητα στη μπλε καμπύλη (διπλάσια)

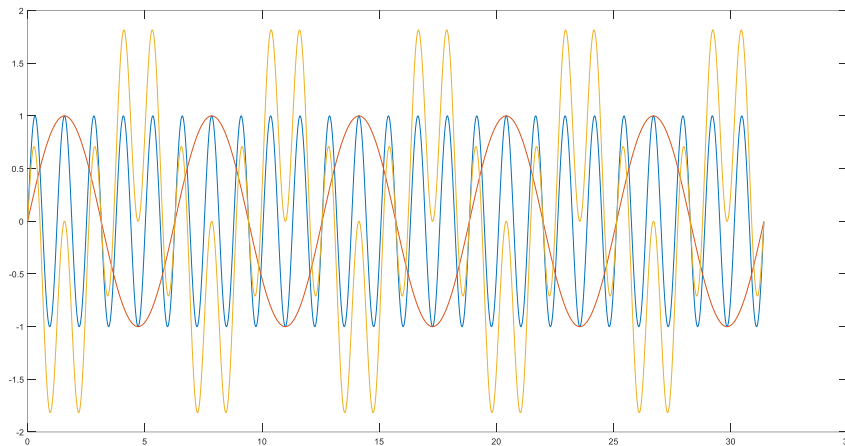
➤  $h_1=1, h_2=1, b_1=3, b_2=1, c_1=0, c_2=0$



Γράφημα 2 Ημιτονοειδείς καμπύλες με διαφορετική συχνότητα στη μπλε καμπύλη (τριπλάσια)

**Παρατήρηση:** Η θέση του ελαχίστου της  $z$  (κίτρινη καμπύλη) εξαρτάται από την θέση ελαχίστου της πάνω (μπλε) και έχει την συχνότητα της κάτω (κόκκινη).

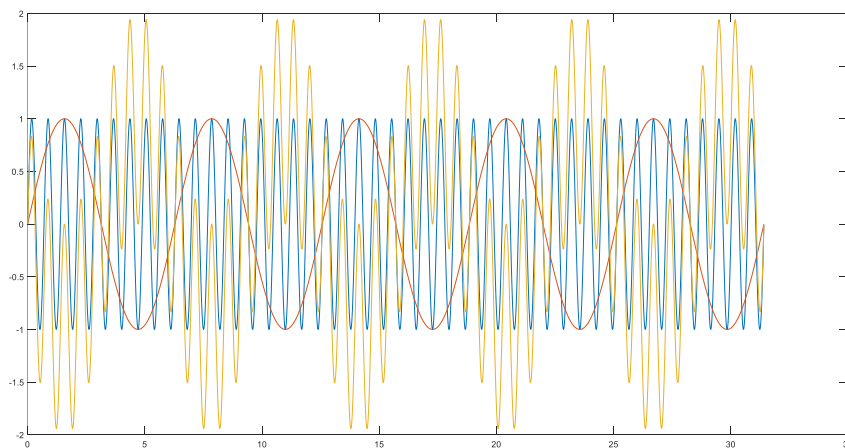
➤  $h_1=1, h_2=1, b_1=5, b_2=1, c_1=0, c_2=0$



Γράφημα 3 Ημιτονοειδείς καμπύλες με διαφορετική συχνότητα στη μπλε καμπύλη (πενταπλάσια)

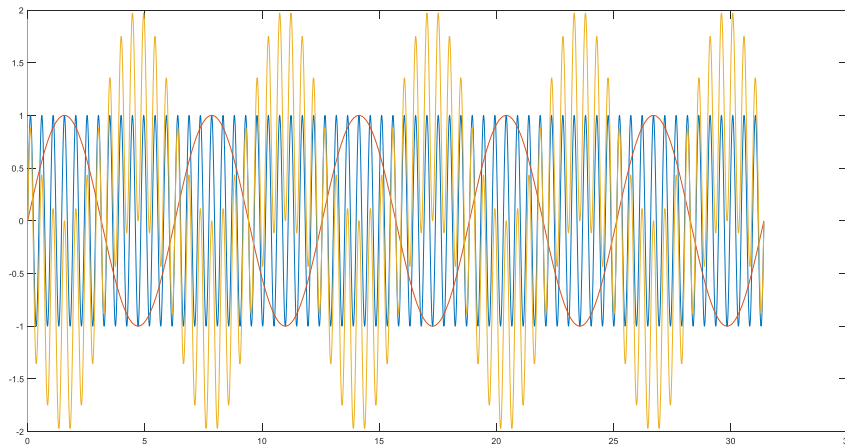
**Παρατήρηση:** Η θέση του ελαχίστου της  $z$  (κίτρινη καμπύλη) εξαρτάται από την θέση ελαχίστου της πάνω (μπλε) και έχει την συχνότητα της κάτω (κόκκινη). Παρατηρούνται όμως δύο ολικά ελάχιστα σε κάθε περίοδο της  $z$ .

➤  $h_1=1, h_2=1, b_1=9, b_2=1, c_1=0, c_2=0$



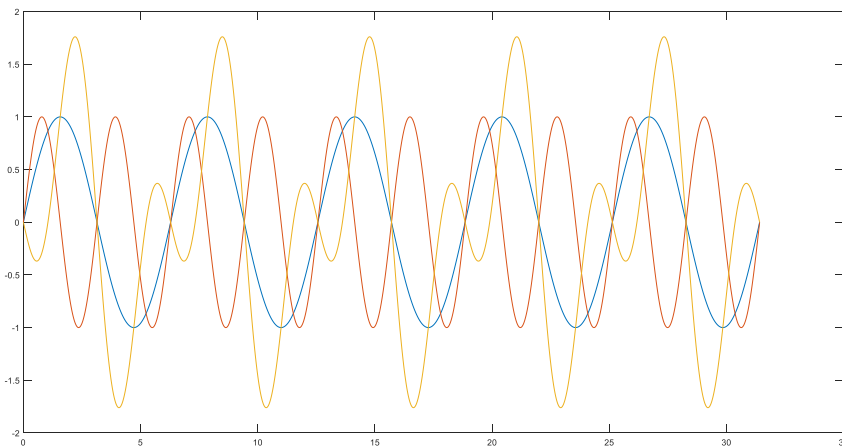
Γράφημα 4 Ημιτονοειδείς καμπύλες με διαφορετική συχνότητα στη μπλε καμπύλη (εννιαπλάσια)

➤  $h_1=1, h_2=1, b_1=13, b_2=1, c_1=0, c_2=0$



Γράφημα 5 Ημιτονοειδείς καμπύλες με διαφορετική συχνότητα στη μπλε καμπύλη (δεκατριπλάσια)

➤  $h_1=1, h_2=1, b_1=1, b_2=2, c_1=0, c_2=0$

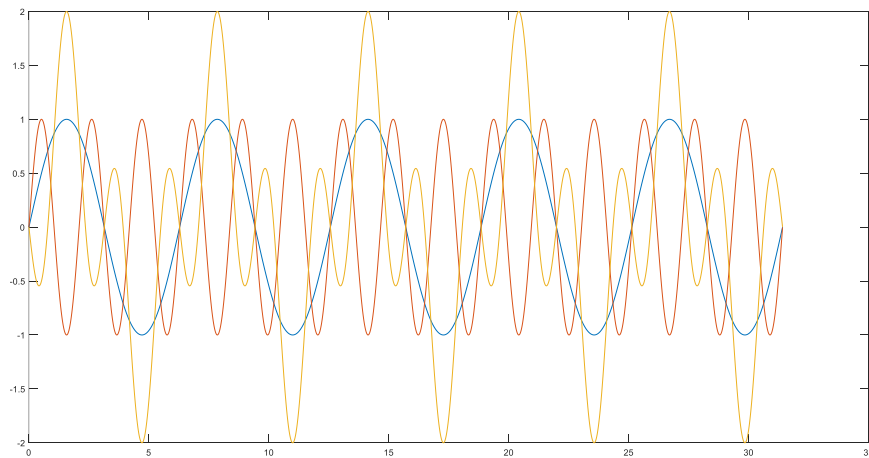


Γράφημα 6 Ημιτονοειδείς καμπύλες με διαφορετική συχνότητα στη κόκκινη καμπύλη (διπλάσια)

**Παρατήρηση:** Η θέση του ελαχίστου της  $z$  (κίτρινη καμπύλη) εξαρτάται από την θέση μεγίστου της κάτω (κόκκινη) και έχει την συχνότητα της πάνω (μπλε). Άρα η θέση του ολικού ελαχίστου εξαρτάται από τη θέση του αντίστοιχου ακροτάτου της καμπύλης με την μεγαλύτερη συχνότητα και συχνότητα ίδια με της καμπύλης με την μικρότερη συχνότητα (με την μεγαλύτερη περίοδο).

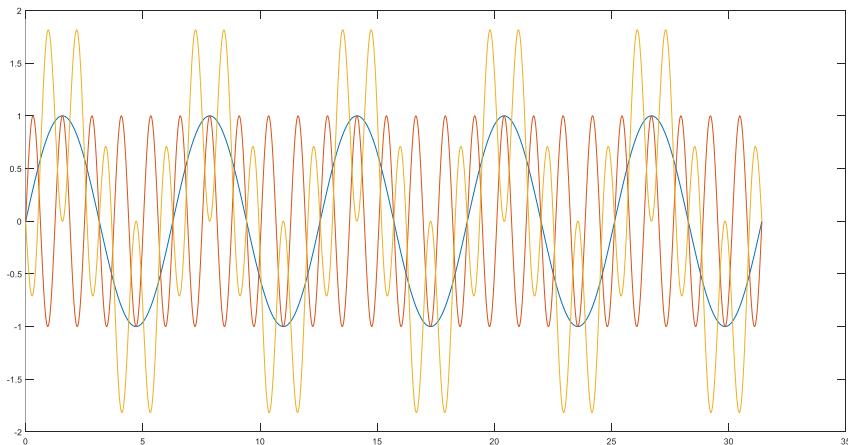


➤  $h_1=1, h_2=1, b_1=1, b_2=3, c_1=0, c_2=0$



Γράφημα 7 Ημιτονοειδείς καμπύλες με διαφορετική συχνότητα στη κόκκινη καμπύλη (τριπλάσια)

➤  $h_1=1, h_2=1, b_1=1, b_2=5, c_1=0, c_2=0$



Γράφημα 8 Ημιτονοειδείς καμπύλες με διαφορετική συχνότητα στη κόκκινη καμπύλη (πενταπλάσια)

**Παρατηρούνται δύο ολικά ελάχιστα σε κάθε περίοδο της  $z$ , όταν η μεγάλη συχνότητα είναι  $(4κ+1)$ .**

iii.  $c_1 \neq c_2$  και όλες οι άλλες παράμετροι ίσες (διαφορά φάσης)

Σε αυτήν την περίπτωση έχουμε ότι:

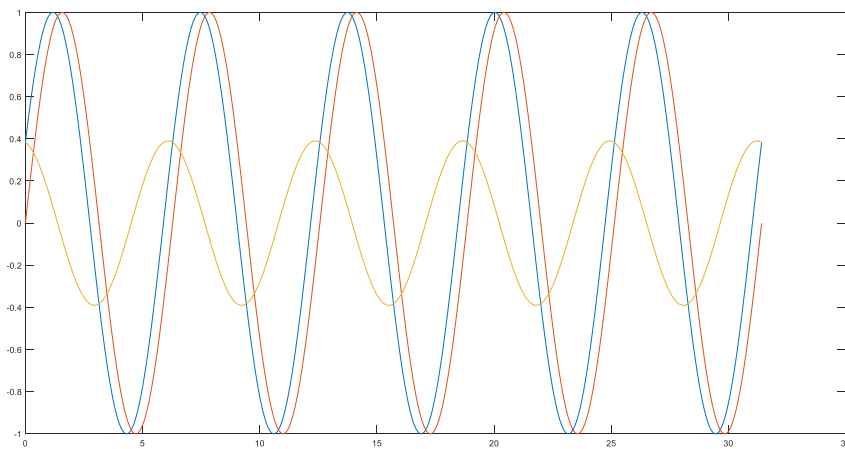
$$z(x) = h \cdot \sin(bx + c_1) - h \cdot \sin(bx + c_2) = h \cdot [\sin(bx + c_1) - \sin(bx + c_2)] =$$

$$= 2h \cdot \sin\left(\frac{c_1 - c_2}{2}\right) \cdot \cos\left(b \cdot x + \frac{c_1 + c_2}{2}\right)$$

Θα μελετήσουμε αυτήν την περίπτωση μέσα από εφαρμογή συγκεκριμένων τιμών στις παραμέτρους.

➤  $h_1=1, h_2=1, b_1=1, b_2=1, c_1=\pi/8, c_2=0$

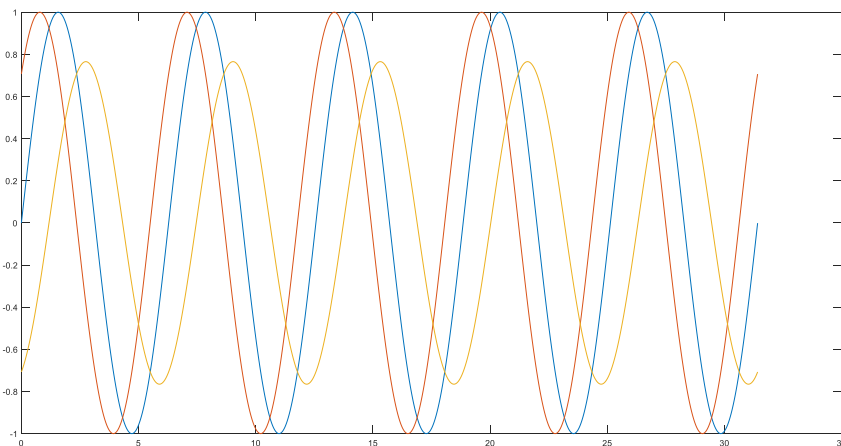
$$z(x) = \sin\left(x + \frac{\pi}{8}\right) - \sin(x) = 2 \cdot \sin\left(\frac{\pi}{16}\right) \cdot \cos\left(x + \frac{\pi}{16}\right)$$



Γράφημα 9 Ημιτονοειδείς καμπύλες με διαφορά φάσης  $\pi/8$  rad

➤  $h_1=1, h_2=1, b_1=1, b_2=1, c_1=0, c_2=\frac{\pi}{4}$

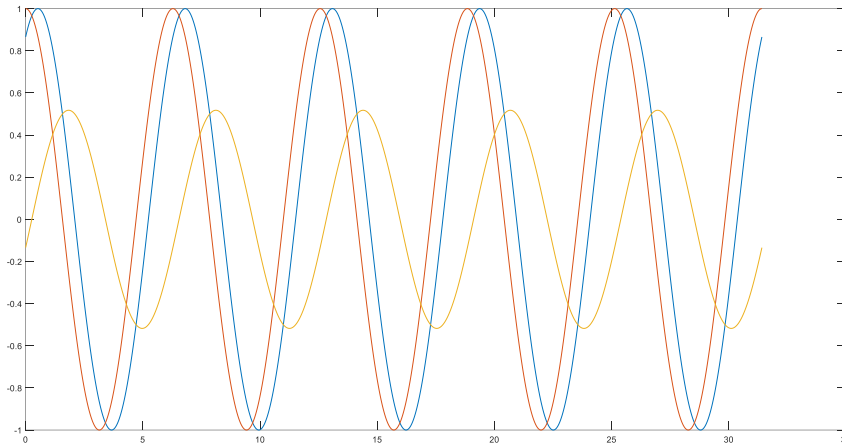
$$z(x) = \sin(x) - \sin\left(x + \frac{\pi}{4}\right) = -2 \cdot \sin\left(\frac{\pi}{8}\right) \cdot \cos\left(x + \frac{\pi}{8}\right)$$



Γράφημα 10 Ημιτονοειδείς καμπύλες με διαφορά φάσης  $\pi/4$  rad

$$\triangleright h_1=1, h_2=1, b_1=1, b_2=1, c_1=\frac{\pi}{3}, c_2=\frac{\pi}{2}$$

$$z(x) = \sin\left(x + \frac{\pi}{3}\right) - \sin\left(x + \frac{\pi}{2}\right) = -2 \cdot \sin\left(\frac{\pi}{12}\right) \cdot \cos\left(x + \frac{5\pi}{12}\right)$$



Γράφημα 11 Ημιτονοειδείς καμπύλες με διαφορά φάσης  $\pi/6$  rad

## ΣΥΝΟΨΗ

1. Εάν έχουμε ίδιες ημιτονοειδείς “ακουμπάνε” παντού.
2. Εάν οι ημιτονοειδείς έχουν διαφορά φάσης  $\varphi$  και όλες τις άλλες παραμέτρους ίσες, τότε η  $z$  είναι συνημιτονοειδής με φάση την  $\varphi/2$ . Άρα τα ελάχιστα είναι για  $x=2k\pi+\pi-\varphi/2$ , με  $k=0,1,2,\dots$
3. Εάν οι ημιτονοειδείς έχουν λόγο συχνοτήτων  $b$  και όλες τις άλλες παραμέτρους ίσες, τότε η θέση του ολικού ελαχίστου του  $z$  εξαρτάται από τη θέση του αντίστοιχου ακροτάτου της καμπύλης με την μεγαλύτερη συχνότητα και η συχνότητα εμφάνισης ολικών ελαχίστων είναι ίδια με αυτή της καμπύλης με την μικρότερη συχνότητα (με την μεγαλύτερη περίοδο).
4. Εάν οι ημιτονοειδείς έχουν λόγο πλατών  $h$ , δηλαδή  $z = h \cdot \sin x - \sin(x+c) = h \cdot \sin x - \sin x \cdot \cos c - \sin c \cdot \cos x = (h - \cos c) \cdot \sin x + (-\sin c) \cdot \cos x$ . Θέτουμε,  $\alpha = (h - \cos c)$ ,  $\beta = (-\sin c)$ .

$$z = \rho \sin(x+y). \text{ Έχουμε ότι: } z_{\min} = -\rho, \text{ όταν } \sin(x+y) = -1 \implies x = 2k\pi + \frac{\pi}{2} -$$

$$y \text{ με } \rho = \sqrt{(h - \cos c)^2 + (-\sin c)^2}, \cos y = \frac{h - \cos c}{\rho}, y = \arccos\left(\frac{h - \cos c}{\rho}\right).$$

5. Η γενική περίπτωση  $z=h\sin(bx)-\sin(x+c)$  αποτελεί συνδυασμό όλων των ανωτέρω.

## 4.2 Στοχαστικές Επιφάνειες

### Αποτελέσματα υπολογισμού επιφάνειας διεπαφής με την χρήση ΤΝΔ

Η διαδικασία που ακολουθήθηκε για την εξαγωγή των συμπερασμάτων αναφορικά με την ικανότητα πρόβλεψης της επιφάνειας διεπαφής με τη χρήση ΤΝΔ ήταν η ακόλουθη:

i. Κατασκευάσαμε 2.000 ζεύγη προφίλ επιφανειών. Κάθε επιφάνεια αποτελούταν από 10.000 σημεία. Συνεπώς, προέκυψαν δεδομένα τα οποία αποθηκεύτηκαν σε έναν πίνακα διάστασης 5x2.000. Σε κάθε στήλη αυτού του πίνακα περιέχονται τα στοιχεία που θα χρησιμοποιηθούν ως είσοδοι στο ΤΝΔ, δηλαδή τα **RMS** και  $\xi$  κάθεμιας από τις δύο επιφάνειες καθώς και το μέγεθος του βήματος προσέγγισης των δύο επιφανειών ( $\alpha$ ).

ii. Αναφορικά με την έξοδο του ΤΝΔ, επιλέχθηκε ο αριθμός των κλάσεων να είναι 5. Συνεπώς, οι προκύπτουσες κλάσεις είναι οι εξής:

- (0%, 20%)
- (20%, 40%)
- (40%, 60%)
- (60%, 80%)
- (80%, 100%)

iii. Οι τιμές στόχοι του ΤΝΔ οι οποίες θα χρησιμοποιηθούν για την εκπαίδευσή του προκύπτουν από την μεθοδολογία που αναπτύχθηκε στο κεφάλαιο 3.

iv. Στον κώδικα που κατασκευάστηκε χρησιμοποιήθηκε ως *συνάρτηση ενεργοποίησης* η *υπερβολική εφαπτομένη (tansig)* εξαιτίας του ότι παρουσιάζει ευεργετικές ιδιότητες όταν χρησιμοποιείται σε ΤΝΔ με σκοπό την κατηγοριοποίηση (classification) δεδομένων.

v. Δημιουργήθηκαν και εξετάστηκαν ως προς την αποδοτικότητα τους ΤΝΔ με διάφορους αλγόριθμους εκπαίδευσης και διάφορους αριθμούς κρυφών επιπέδων και νευρώνων.

Συγκεκριμένα κατασκευαστηκαν τρία διαφορετικά ΤΝΔ με βάση το πλήθος των χρησιμοποιούμενων κρυφών επιπέδων. Οι περιπτώσεις που αναλύθηκαν είναι οι παρακάτω και αφορούν ΤΝΔ με από ένα έως τρία κρυφά επίπεδα.

Η πρώτη περίπτωση αφορούσε ΤΝΔ με ένα κρυφό επίπεδο με 20 νευρώνες.

Η δεύτερη περίπτωση αφορούσε ΤΝΔ με δύο κρυφά επίπεδα με 20 και 30 νευρώνες αντίστοιχα.

Η τρίτη περίπτωση αφορούσε ΤΝΔ με τρία κρυφά επίπεδα με 20, 30 και 40 νευρώνες αντίστοιχα.

*Η επιλογή δεν έγινε με βάση κάποιον συγκεκριμένο κανόνα. Ο χρήστης μπορεί να πειραματιστεί με διάφορες επιλογές.*

Πλήθος Hidden Layers	1	2	3
Αριθμός νευρώνων ανά Hidden Layer	(20)	(20,30)	(20,30,40)

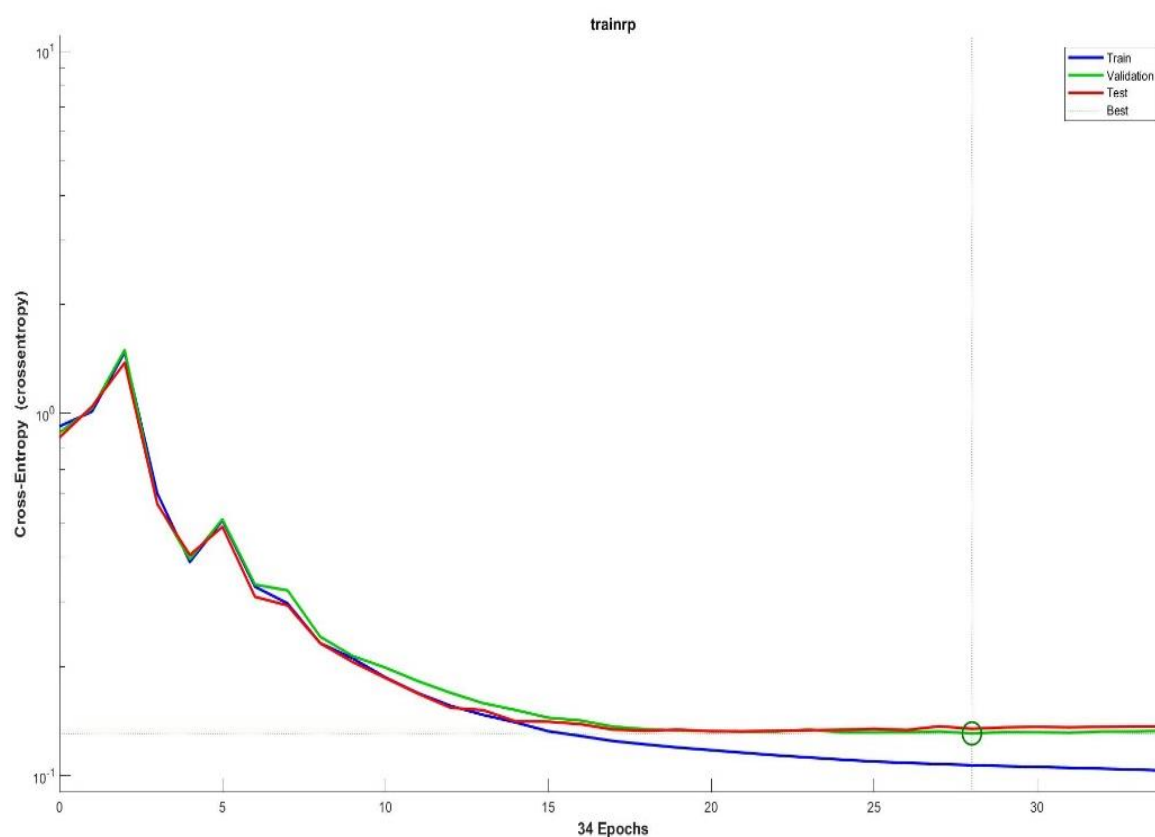
Σημειώνουμε ότι το 70% των ζευγών επιφανειών (1400 ζεύγη επιφανειών) χρησιμοποιήθηκε για την εκπαίδευση του ΤΝΔ, το 15% (300 ζεύγη) για έλεγχο (testing) και το υπόλοιπο 15% για επικύρωση (validation). Αναφορικά με τις διαδικασίες μάθησης χρησιμοποιήθηκαν οι παρακάτω αλγόριθμοι με τα αντίστοιχα αποτελέσματα ανά αλγόριθμο και πλήθος κρυφών επιπέδων:

#### 4.2.1 Χρησιμοποιούμενος αλγόριθμος: Resilient backpropagation (**trainrp**)

Σε αυτήν την περίπτωση δημιουργήσαμε ένα ΤΝΔ το οποίο εκπαιδεύσαμε με τον αλγόριθμο Resilient backpropagation (trainrp). Η συνάρτηση σφάλματος που χρησιμοποιήθηκε είναι η Cross Entropy η οποία για πολυεπίπεδα ΤΝΔ με πολλαπλούς νευρώνες ορίζεται ως:

$$C = -\frac{1}{n} \sum_x \sum_j [t_j \ln o_j + (1 - t_j) \ln(1 - o_j)]$$

Όπου  $t_j$  είναι οι επιθυμητές τιμές στόχοι,  $o_j$  οι έξοδοι του δικτύου,  $x$  οι είσοδοι του δικτύου.



Γράφημα 12 Σφάλμα Cross entropy συναρτήσει των επαναλήψεων (epochs)

Στην παραπάνω εικόνα βλέπουμε το γράφημα της συνάρτησης σφάλματος. Η μπλε χρώματος καμπύλη αφορά τα δεδομένα εκπαίδευσης, η πράσινη των δεδομένων επικύρωσης και η κόκκινη των δεδομένων ελέγχου. Η βέλτιστη επιλογή επαναλήψεων για το δίκτυο είναι 28. Μέχρι την περίπου εβδομη επανάληψη παρατηρείται αυξομείωση

του σφάλματος. Από εκεί και έπειτα σημειώνεται μείωση στο σφάλμα το οποίο τελικά είναι της τάξεως του  $10^{-1}$  και τελικά ο αλγόριθμος συγκλίνει. Μετά το τέλος των επαναλήψεων λαμβάνουμε το confusion matrix.

**trainrp Confusion Matrix**

Output Class	1	343 17.2%	55 2.8%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	86.2% 13.8%
	2	73 3.6%	286 14.3%	73 3.6%	2 0.1%	0 0.0%	65.9% 34.1%
	3	1 0.1%	75 3.8%	268 13.4%	64 3.2%	1 0.1%	65.5% 34.5%
	4	0 0.0%	2 0.1%	71 3.5%	262 13.1%	52 2.6%	67.7% 32.3%
	5	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	45 2.3%	327 16.4%	87.9% 12.1%
			82.3% 17.7%	68.4% 31.6%	65.0% 35.0%	70.2% 29.8%	86.1% 13.9%
		Target Class					
		1	2	3	4	5	

Πίνακας 6 Ο Confusion matrix του ΤΝΔ με αλγόριθμο εκπαίδευσης τον Resilient backpropagation

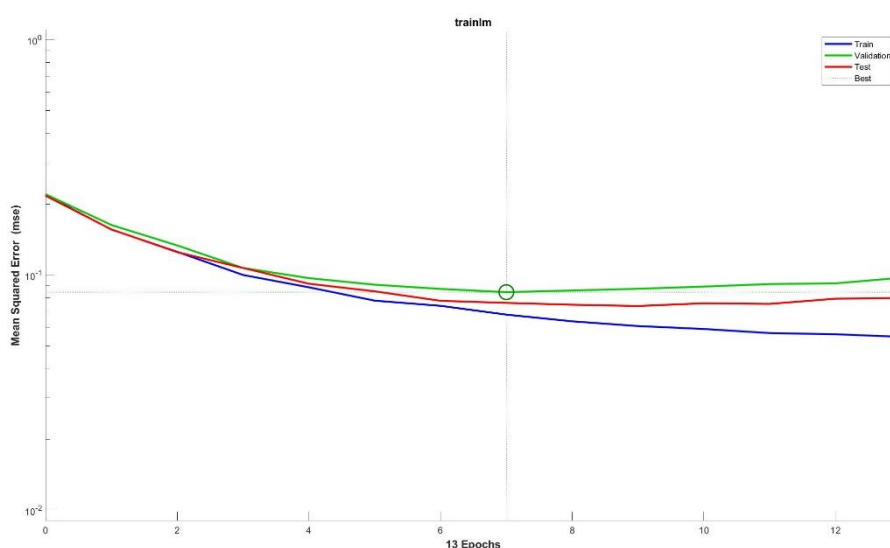
Το confusion matrix είναι ο πίνακας με τα ποσοστά σωστής (πράσινα κελιά) και λανθασμένης ταξινόμησης (κόκκινα κελιά) των ζευγών των επιφανειών που έρχονται σε επαφή. Τα στοιχεία του πίνακα  $a_{ij}$  είναι το πλήθος των στοιχείων που ανήκουν στην κλάση  $j$  αλλά έχουν ταξινομηθεί στην κλάση  $i$ .

Η συνολική επιτυχία του συγκεκριμένου ΤΝΔ ανέρχεται στο 74.3%. Αυτό σημαίνει ότι το 74.3% των συνολικών ζευγών των επιφανειών έχουν ταξινομηθεί στη σωστή κλάση ποσοστού σημείων επαφής.

Παρατηρούμε ότι τα κελιά με αυξημένα σφάλματα είναι αυτά που βρίσκονται ακριβώς πάνω και κάτω από την κύρια διαγώνιο (γειτονικά κελιά). Στα υπόλοιπα κελιά τα σφάλματα είναι πολύ μικρότερα σχεδόν αμελητέα. Αυτό ίσως είναι μία ένδειξη ότι το δίκτυο δυσκολεύεται να επιτύχει το σωστό αποτέλεσμα στις οριακές καταστάσεις.

#### 4.2.2 Χρησιμοποιούμενος αλγόριθμος: Levenberg-Marquardt backpropagation (**trainlm**)

Σε αυτήν την περίπτωση δημιουργήσαμε ένα ΤΝΔ το οποίο εκπαιδεύσαμε με τον αλγόριθμο Levenberg-Marquardt (**trainlm**). Η συνάρτηση σφάλματος που χρησιμοποιήθηκε είναι το Μέσο Τετραγωνικό Σφάλμα (Mean Squared Error). Παρατηρούμε ότι η συνάρτηση σφάλματος είναι γνησίως φθίνουσα και ο αλγόριθμος συγκλίνει πολύ γρήγορα, μόλις στην έβδομη επανάληψη. Αυτό δείχνει ότι το ΤΝΔ έχει μάθει ό,τι είναι να μάθει. Το σφάλμα είναι και εδώ της τάξεως του  $10^{-1}$  χωρίς να ξεπερνάει ποτέ το  $10^0$ , όπως στην πρώτη περίπτωση. Ωστόσο, τα αποτελέσματα χειροτερεύουν καθώς η συνολική επιτυχία του συγκεκριμένου ΤΝΔ είναι 73.6%.



Γράφημα 13 Μέσο τετραγωνικό σφάλμα συναρτήσει των επαναλήψεων (epochs)

Παρατηρούμε ότι και εδώ τα κελιά με αυξημένα σφάλματα είναι αυτά που βρίσκονται ακριβώς πάνω και κάτω από την κύρια διαγώνιο (γειτονικά κελιά). Στα υπόλοιπα κελιά τα σφάλματα είναι πολύ μικρότερα σχεδόν αμελητέα.



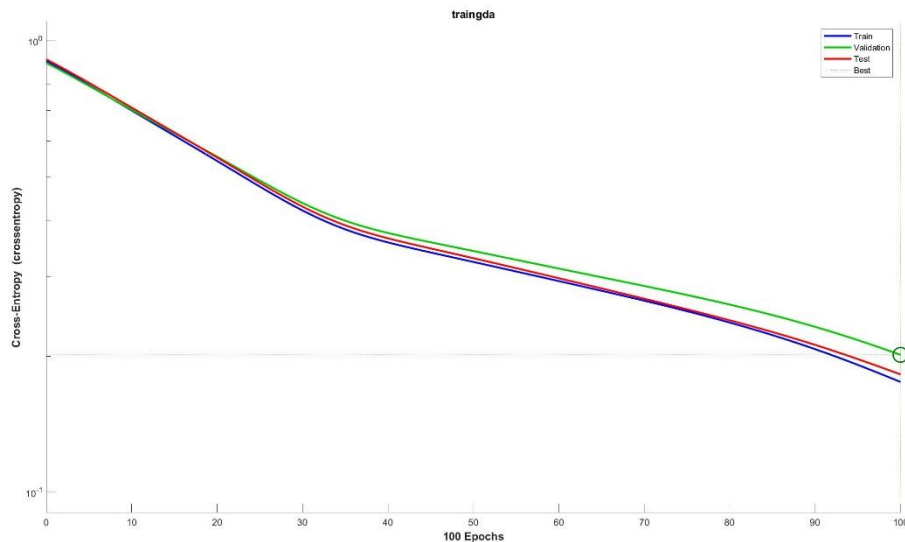
**trainlm Confusion Matrix**

Output Class	1	362 18.1%	66 3.3%	0 0.0%	0 0.0%	0 0.0%	84.6% 15.4%
	2	50 2.5%	248 12.4%	46 2.3%	0 0.0%	0 0.0%	72.1% 27.9%
	3	5 0.3%	94 4.7%	248 12.4%	41 2.1%	0 0.0%	63.9% 36.1%
	4	0 0.0%	10 0.5%	117 5.9%	272 13.6%	38 1.9%	62.2% 37.8%
	5	0 0.0%	0 0.0%	1 0.1%	60 3.0%	342 17.1%	84.9% 15.1%
			86.8% 13.2%	59.3% 40.7%	60.2% 39.8%	72.9% 27.1%	90.0% 10.0%
		1	2	3	4	5	
		<b>Target Class</b>					

*Πίνακας 7 Ο Confusion matrix του ΤΝΔ με αλγόριθμο εκπαίδευσης τον Levenberg-Marquardt backpropagation*

#### 4.2.3 Χρησιμοποιούμενος αλγόριθμος: Gradient descent with adaptive learning rate backpropagation (**traingda**)

Σε αυτήν την περίπτωση δημιουργήσαμε ένα ΤΝΔ το οποίο εκπαιδεύσαμε με τον αλγόριθμο Gradient descent with adaptive learning rate backpropagation (**traingda**). Η συνάρτηση σφάλματος που χρησιμοποιήθηκε είναι η Cross Entropy και όπως βλέπουμε η μείωση είναι μονότονη αλλά πολύ αργή. Το σφάλμα ξεκινά από το  $10^0$  αλλά δεν πέφτει κάτω από  $10^{-1}$ . Για να συγκλίνει ο αλγόριθμος χρειάστηκαν 100 επαναλήψεις. Τα αποτελέσματα για ακόμα μία φορά χειροτέρεψαν αισθητά πετυχαίνοντας συνολικό ποσοστό σωστής ταξινόμησης 60.6%.



Γράφημα 14 Σφάλμα Cross Entropy συναρτήσει των επαναλήψεων (epochs)

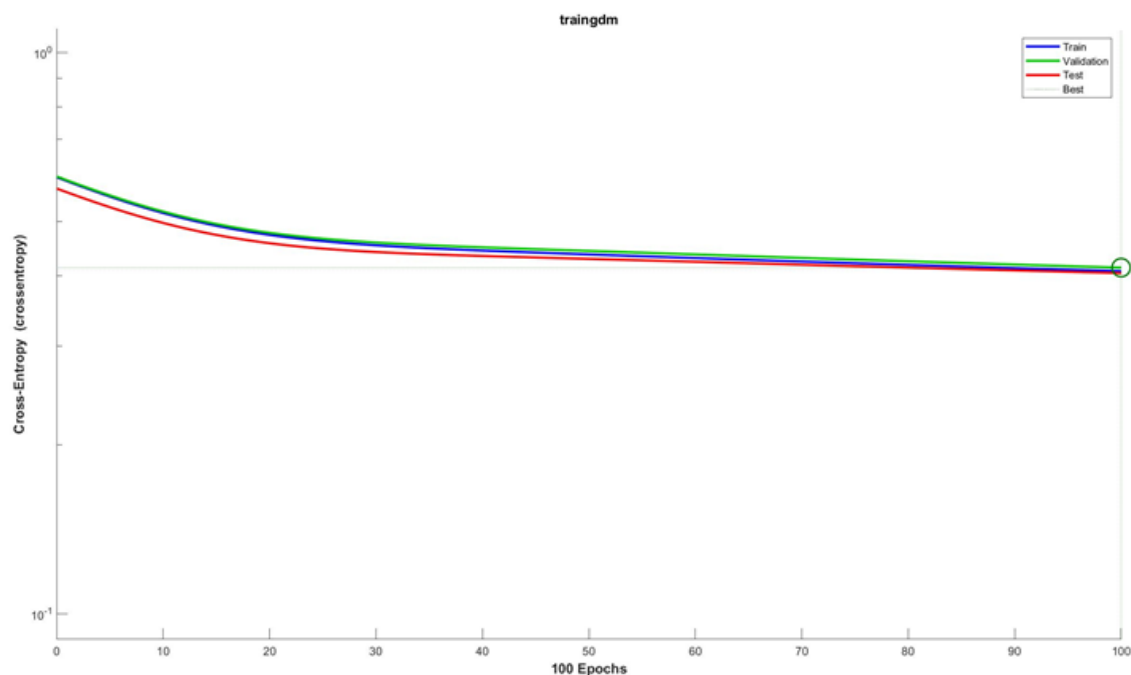
**traingda Confusion Matrix**

Output Class	1	318 15.9%	101 5.1%	20 1.0%	0 0.0%	0 0.0%	72.4% 27.6%
	2	84 4.2%	196 9.8%	84 4.2%	20 1.0%	3 0.1%	50.6% 49.4%
	3	15 0.8%	113 5.7%	223 11.2%	94 4.7%	6 0.3%	49.4% 50.6%
	4	0 0.0%	6 0.3%	69 3.5%	167 8.3%	63 3.1%	54.8% 45.2%
	5	0 0.0%	2 0.1%	16 0.8%	92 4.6%	308 15.4%	73.7% 26.3%
			76.3% 23.7%	46.9% 53.1%	54.1% 45.9%	44.8% 55.2%	81.1% 18.9%
		1	2	3	4	5	
		Target Class					

*Πίνακας 8 Ο Confusion matrix του ΤΝΔ με αλγόριθμο εκπαίδευσης τον Gradient descent with adaptive learning rate backpropagation*

#### 4.2.4 Χρησιμοποιούμενος αλγόριθμος: Gradient descent with momentum backpropagation (**traingdm**)

Σε αυτήν την περίπτωση σχεδιάσαμε ένα ΤΝΔ το οποίο εκπαιδεύσαμε με τον αλγόριθμο Gradient descent with momentum backpropagation. Η συνάρτηση σφάλματος που χρησιμοποιήθηκε είναι η Cross Entropy και όπως βλέπουμε η μείωση είναι μονότονη αλλά επίσης πολύ αργή. Το σφάλμα ξεκινά από περίπου 0.7 αλλά δεν πέφτει κάτω από περίπου 0.5. Για να συγκλίνει ο αλγόριθμος χρειάστηκαν 100 επαναλήψεις.



Γράφημα 15 Σφάλμα Cross Entropy συναρτήσει των επαναλήψεων (epochs)

Τα αποτελέσματα για πρώτη φορά είναι απογοητευτικά καθώς το ποσοστό σωστής ταξινόμησης άγγιξε το 22.1%. Βλέπουμε ότι το ΤΝΔ αδυνατεί σε πολύ μεγάλο βαθμό να διαχωρίσει τις γειτονικές κλάσεις επιτυγχάνοντας πολύ μεγάλα ποσοστά σφάλματος σε όλες τις περιπτώσεις.

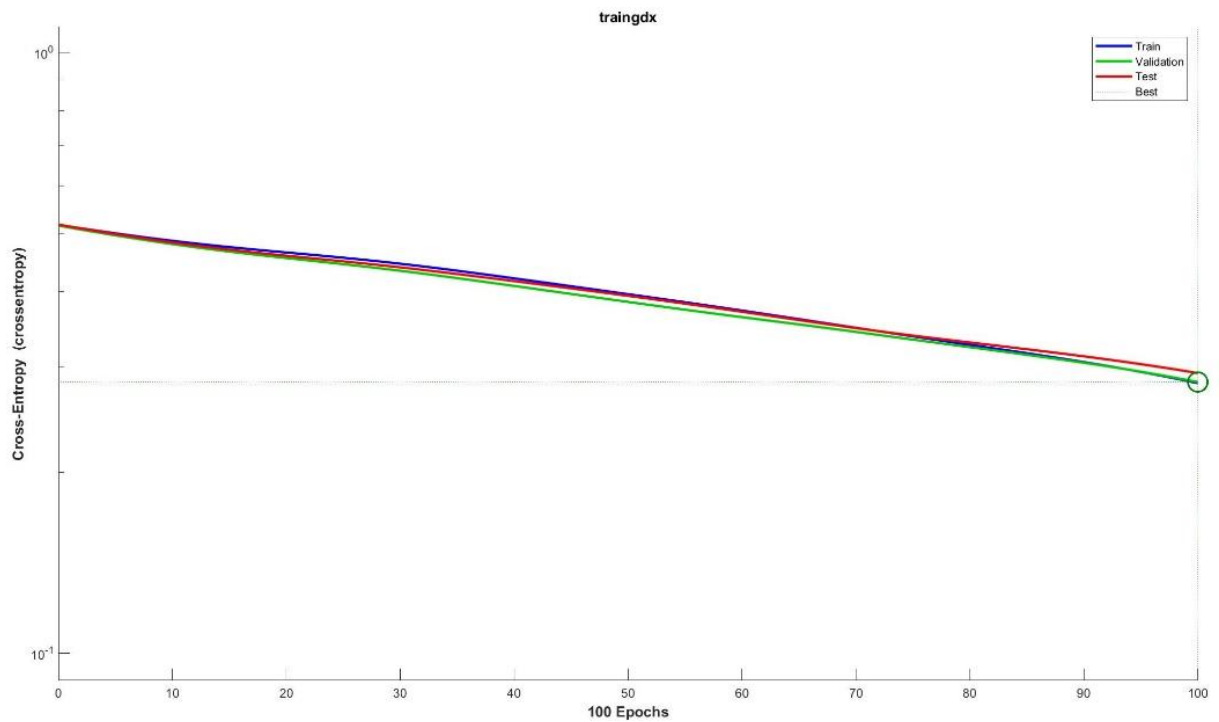
**traingdm Confusion Matrix**

1	108 5.4%	87 4.3%	51 2.5%	46 2.3%	17 0.9%	35.0% 65.0%
2	57 2.9%	67 3.4%	84 4.2%	82 4.1%	99 5.0%	17.2% 82.8%
3	122 6.1%	128 6.4%	118 5.9%	87 4.3%	96 4.8%	21.4% 78.6%
4	39 1.9%	45 2.3%	68 3.4%	86 4.3%	104 5.2%	25.1% 74.9%
5	91 4.5%	91 4.5%	91 4.5%	72 3.6%	64 3.2%	15.6% 84.4%
	25.9% 74.1%	16.0% 84.0%	28.6% 71.4%	23.1% 76.9%	16.8% 83.2%	22.1% 77.8%
	1	2	3	4	5	
	<b>Target Class</b>					

Πίνακας 9 Ο Confusion matrix του ΤΝΔ με αλγόριθμο εκπαίδευσης τον Gradient descent with momentum backpropagation

#### 4.2.5 Χρησιμοποιούμενος αλγόριθμος: Gradient descent with momentum and adaptive learning rate backpropagation (**traingdx**)

Σε αυτήν την περίπτωση σχεδιάσαμε ένα ΤΝΔ το οποίο εκπαιδεύσαμε με τον αλγόριθμο Gradient descent with momentum and adaptive learning rate backpropagation. Η συνάρτηση σφάλματος που χρησιμοποιήθηκε είναι η Cross Entropy και όπως βλέπουμε η μείωση είναι μονότονη αλλά επίσης πολύ αργή και σχεδόν γραμμική. Για να συγκλίνει ο αλγόριθμος χρειάστηκαν 100 επαναλήψεις οι οποίες κατά πάσα πιθανότητα οφείλονται στον χαμηλό ρυθμό μάθησης η.



Γράφημα 16 Σφάλμα Cross Entropy συναρτήσει των επαναλήψεων (epochs)

Τα αποτελέσματα δείχνουν μία βελτίωση σε σχέση με αυτά της περίπτωσης 4 ωστόσο τα ποσοστά σφάλματος εξακολουθούν να παραμένουν υψηλά. Επίσης, τα σφάλματα εξαπλώνονται και σε μη γειτονικές κλάσεις.

**traingdx Confusion Matrix**

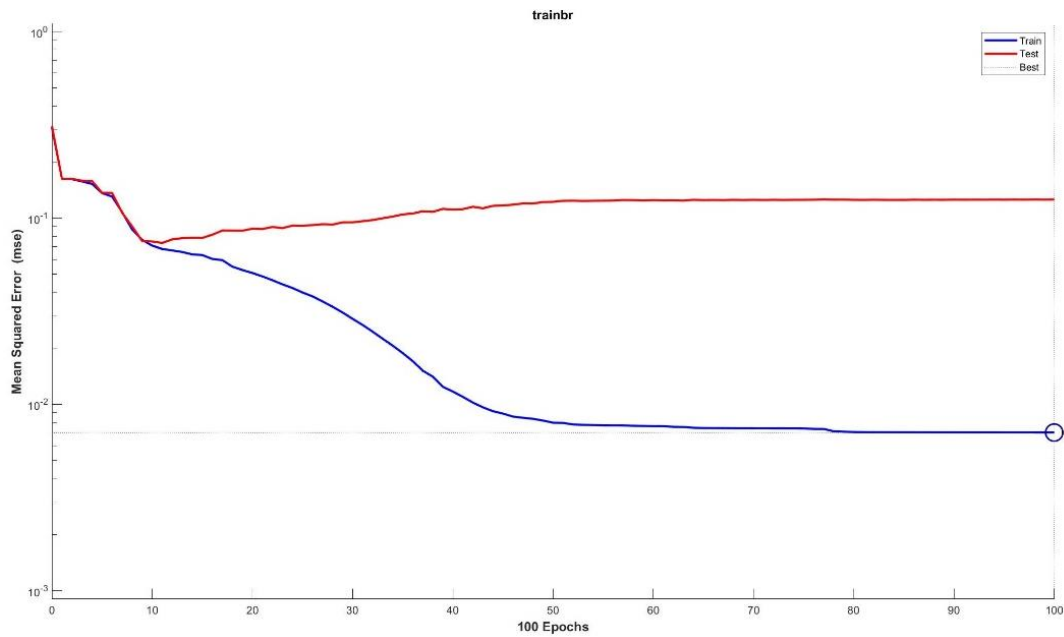
1	242 12.1%	136 6.8%	61 3.0%	38 1.9%	10 0.5%	49.7% 50.3%
2	69 3.5%	110 5.5%	104 5.2%	65 3.3%	25 1.3%	29.5% 70.5%
3	45 2.3%	79 4.0%	119 5.9%	98 4.9%	68 3.4%	29.1% 70.9%
4	56 2.8%	66 3.3%	57 2.9%	62 3.1%	31 1.6%	22.8% 77.2%
5	5 0.3%	27 1.4%	71 3.5%	110 5.5%	246 12.3%	53.6% 46.4%
	58.0% 42.0%	26.3% 73.7%	28.9% 71.1%	16.6% 83.4%	64.7% 35.3%	39.0% 61.1%
	1	2	3	4	5	
	Target Class					

Πίνακας 10 Ο Confusion matrix του ΤΝΔ με αλγόριθμο εκπαίδευσης τον Gradient descent with momentum and adaptive learning rate backpropagation

Σε όλες τις προηγούμενες περιπτώσεις τα τρία σετ δεδομένων στα σφάλματα έχουν κοινή πορεία.

#### 4.2.6 Χρησιμοποιούμενος αλγόριθμος: Bayesian regularization backpropagation (**trainbr**)

Σε αυτήν την περίπτωση σχεδιάσαμε ένα ΤΝΔ το οποίο εκπαιδεύσαμε με τον αλγόριθμο Bayesian regularization backpropagation. Η συνάρτηση σφάλματος που χρησιμοποιήθηκε είναι το Μέσο Τετραγωνικό Σφάλμα το οποίο για το σετ δεδομένων εκπαίδευσης είναι της τάξεως του  $10^{-2}$ . Το MSE ακολουθεί καθοδική πορεία και για τα δύο σετ δεδομένων ωστόσο μετά την δέκατη επανάληψη παρατηρείται μία απόκλιση της κοινής πορείας των δύο τύπων σφαλμάτων.



Γράφημα 17 Μέσο τετραγωνικό σφάλμα συναρτήσει των επαναλήψεων (epochs)

Τα αποτελέσματα αυτής της περίπτωσης είναι αρκετά καλύτερα από οποιαδήποτε άλλη μέθοδο μάθησης καθώς το ποσοστό συνολικής σωστής ταξινόμησης φτάνει το 93.1%. Τα σφάλματα περιορίζονται σε γειτονικές κλάσεις, είναι μικρά και κατά πάσα πιθανότητα οφείλονται σε αποτελέσματα του δικτύου τα οποία είναι πολύ κοντά στα άκρα των κλάσεων. Τα υπόλοιπα σφάλματα κρίνονται αμελητέα.

**trainbr Confusion Matrix**

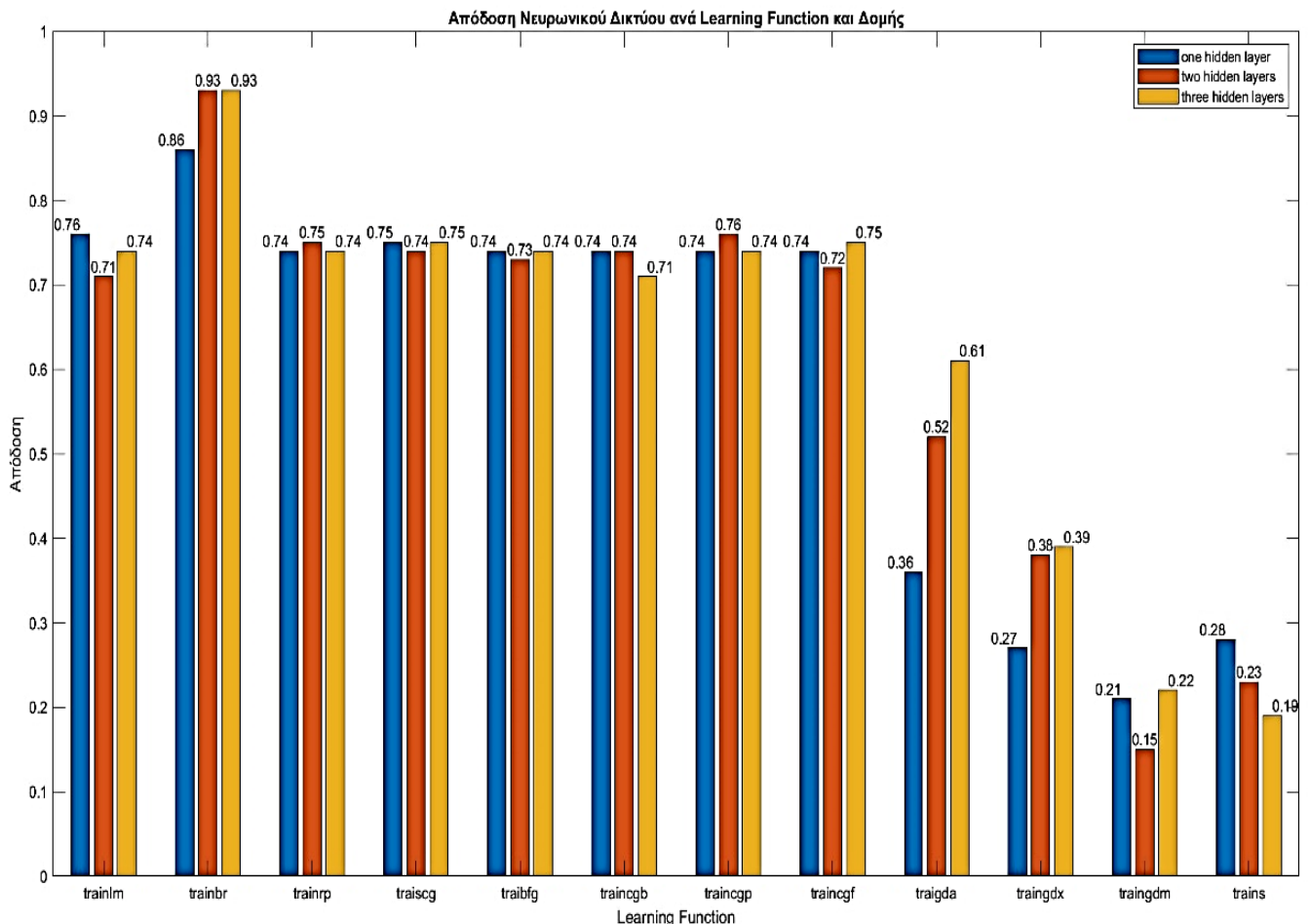
Output Class	1	389 19.4%	15 0.8%	1 0.1%	0 0.0%	0 0.0%	96.0% 4.0%
	2	24 1.2%	391 19.6%	26 1.3%	0 0.0%	1 0.1%	88.5% 11.5%
	3	4 0.2%	11 0.5%	374 18.7%	26 1.3%	2 0.1%	89.7% 10.3%
	4	0 0.0%	1 0.1%	9 0.4%	335 16.8%	4 0.2%	96.0% 4.0%
	5	0 0.0%	0 0.0%	2 0.1%	12 0.6%	373 18.6%	96.4% 3.6%
			93.3% 6.7%	93.5% 6.5%	90.8% 9.2%	89.8% 10.2%	98.2% 1.8%
		Target Class					

Πίνακας 11 Ο Confusion matrix του ΤΝΔ με αλγόριθμο εκπαίδευσης τον Bayesian regularization backpropagation



#### 4.2.7 Ανάλυση αποτελεσμάτων

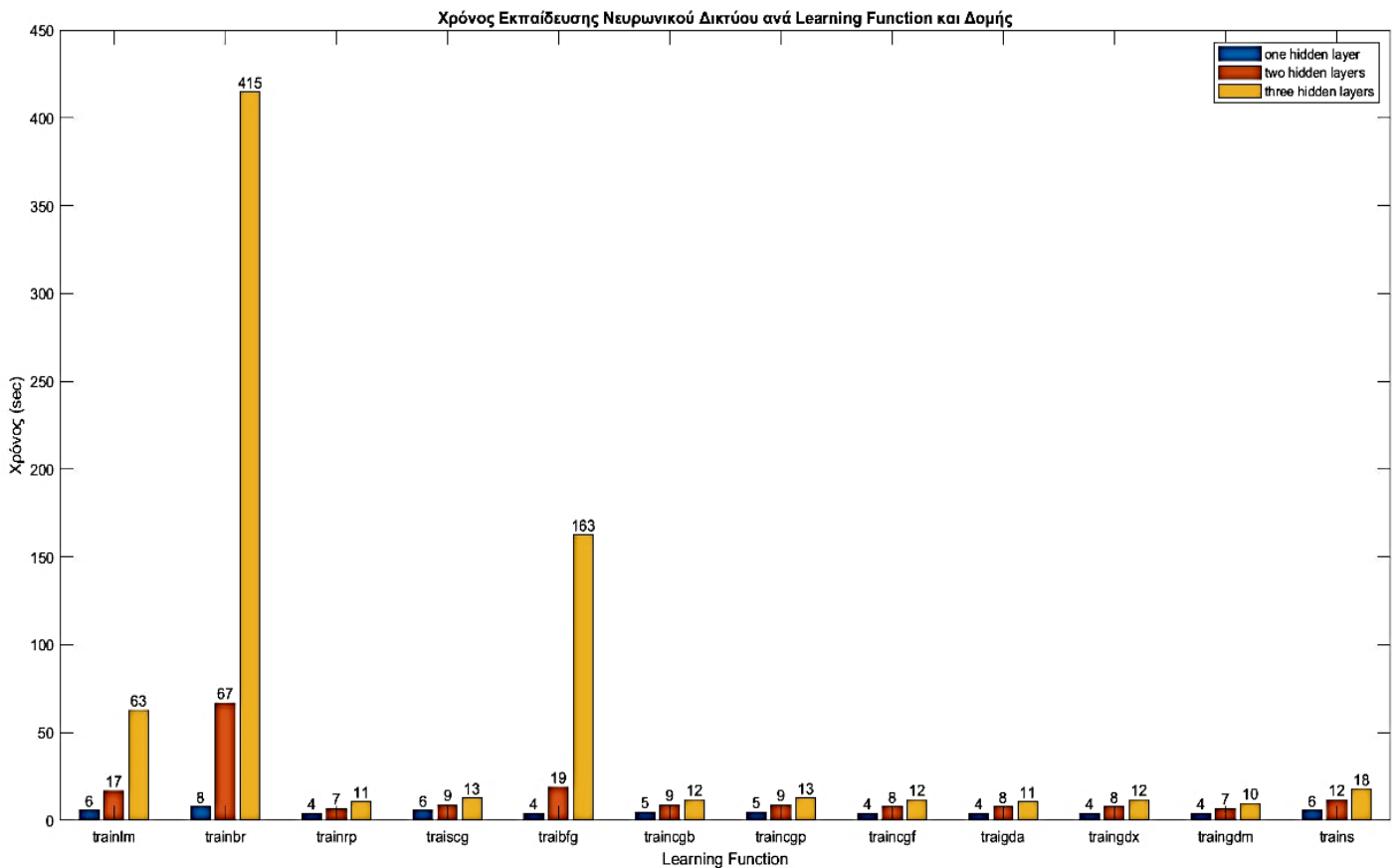
Από την συνδυαστική ανάλυση των παραπάνω ΤΝΔ παρατηρούμε ότι το δίκτυο με την καλύτερη απόδοση είναι με μεγάλη διαφορά αυτό στο οποίο εφαρμόζεται ο αλγόριθμος μάθησης Bayesian regularization backpropagation (trainbr). Αυτό θα λέγαμε ότι είναι κάτι που αναμέναμε να συμβεί καθώς στον συγκεκριμένο αλγόριθμο και εν γένει στην Μπεϋζιανή Συμπερασματολογία μας δίνεται η δυνατότητα να ενσωματώσουμε πρότερη γνώση μέσω της εκ των προτέρων πυκνότητας πιθανότητας για τα βάρη, δημιουργώντας ένα ΤΝΔ ισχυρό με καλή ικανότητα γενίκευσης. Σύμφωνα με τον McKay υποθέτουμε Γκαουσιανό θόρυβο για το σύνολο εκπαίδευσης D και Γκαουσιανή εκ των προτέρων πυκνότητα πιθανότητα για τα βάρη του δικτύου.



Γράφημα 18 Ποσοστά επιτυχίας ΤΝΔ

Για την πλειοψηφία των περιπτώσεων τα ΤΝΔ με 2 και 3 κρυφά επίπεδα δεν έχουν σημαντικές διαφορές στα αποτελέσματα. Στο Bayesian regularization backpropagation (trainbr) μοντέλο τα 2 κρυφά επίπεδα δίνουν το ίδιο αποτέλεσμα με τα 3 κρυφά επίπεδα και μάλιστα δεν υπάρχει προφανής λόγος να προτιμηθεί το δίκτυο με 3 κρυφά επίπεδα καθώς όπως παρατηρούμε στην εικόνα ... ο χρόνος για την εκπαίδευση του μοντέλου με 3 κρυφά επίπεδα είναι 415 seconds έναντι 67 seconds των 2 κρυφών επιπέδων. Σύμφωνα με τους Derrick Nguyen and Bernard Widrow έχει αποδειχθεί ότι ένα ΤΝΔ με δύο κρυφά επίπεδα μπορεί να προσεγγίσει οποιαδήποτε μη γραμμική συνάρτηση, δεδομένου ότι διαθέτουν ικανοποιητικό αριθμό νευρώνων σε κάθε επίπεδο.

Εξαιρεση αποτελεί το μοντέλο trains (Sequential order incremental training) το οποίο παρουσιάζει καλύτερα αποτελέσματα με 1 κρυφό επίπεδο παρά με 2 ή 3.



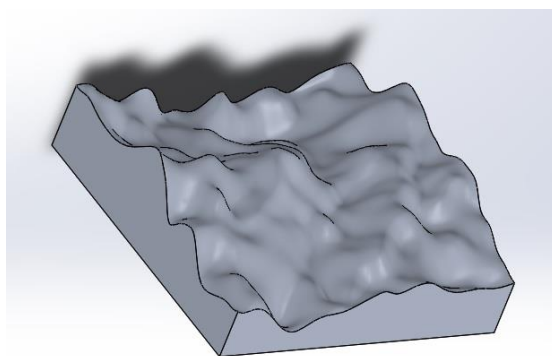
*Γράφημα 19 Χρόνοι σύγκλισης σε δευτερόλεπτα των αλγορίθμων εκπαίδευσης*

### 4.3 Πειραματικές Επιφάνειες

Για την εμπέδωση του μηχανισμού επαφής δύο επιφανειών και την επιβεβαίωση της σωστής λειτουργίας του Νευρωνικού δικτύου που εκπαιδεύσαμε (με χρήση του μηχανισμού μάθησης Bayesian Regularization), χρησιμοποιήθηκαν:

α. Επιπρόσθετες τυχαίες τεχνητές επιφάνειες για τις οποίες υπολογίστηκαν τα σημεία επαφής με χρήση του κώδικα σε matlab του Παραρτήματος “Γ”. Κατόπιν τα στοιχεία των επιφανειών τοποθετήθηκαν ως είσοδοι στο εκπαιδευμένο νευρωνικό μας δίκτυο το οποίο κατέταξε της επαφή των επιφανειών στην ορθή κλάση (στην ίδια κλάση που επέδειξε και ο κώδικας του Παραρτήματος “Γ”)

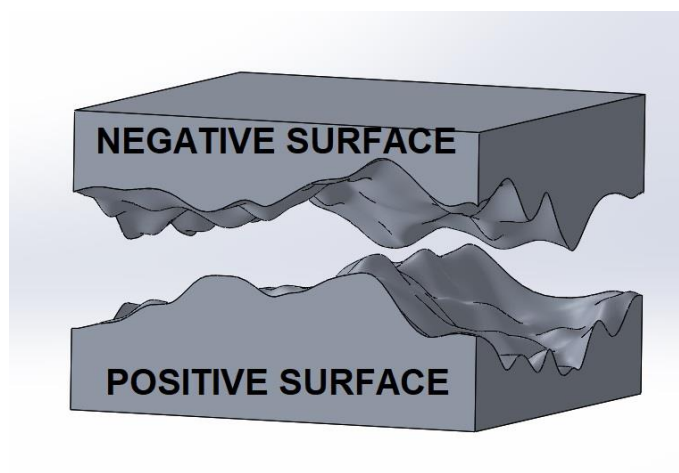
β. Επιπλέον χρησιμοποιήθηκαν πραγματικές επιφάνειες, οι οποίες μετρήθηκαν με χρήση τραχυμέτρου Mitutoyo SJ-201P (το οποίο παρασχέθηκε από την Πολεμική Αεροπορία για τις ανάγκες της εργασίας) και κατόπιν αξιοποιήθηκαν εργαλεία από την επιστήμη της μηχανικής και συγκεκριμένα από την **Θεωρία Ελαστικότητας** με τη χρήση της οποίας υπολογίστηκε το πόσο προσεγγίζουν δύο επιφάνειες κατά την επαφή τους.



Εικόνα 42 Επιφάνεια 2D

#### 4.3.1 Ανάλυση πειραματικής διαδικασίας

Έστω ότι παρατηρούμε την αλληλεπίδραση δύο τυχαίων επιφανειών οι οποίες προσεγγίζουν η μία την άλλη (Positive surface-Negative surface) όπως φαίνεται στην εικόνα:



Εικόνα 43 Επιφάνειες 2D

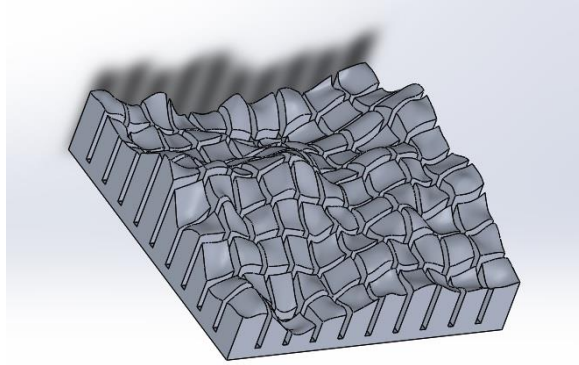
Για την μαθηματική μοντελοποίηση των επιφανειών είναι απαραίτητη η μαθηματική σχέση  $z = f(x, y)$ , όπως αναλύθηκε στην παράγραφο 2.2.1, όπου  $z$  το ύψος και  $x, y$  οι συντεταγμένες μήκους και πλάτους αντίστοιχα του υλικού σώματος του οποίου την επιφάνεια μοντελοποιούμε. Δεδομένου ότι οι επιφάνειες των υλικών σωμάτων στη φύση είναι συνεχείς, για την ανωτέρω μαθηματική μοντελοποίηση απαιτείται δειγματοληψία για την αναπαράσταση του ύψους  $z$  συναρτήσει των  $x, y$ . Για τον λόγο αυτό, το σύνολο των μετρητικών εργαλείων που χρησιμοποιούνται για την αριθμητική μοντελοποίηση της τραχύτητας διακριτοποιεί τις συντεταγμένες  $x, y$  της επιφάνειας σε ένα επιθυμητό πλήθος τιμών και προσδιορίζει το ύψος  $z$  στις συγκεκριμένες συντεταγμένες. Συνεπώς, η παρατηρούμενη επιφάνεια περιγράφεται μέσω της αντίστοιχης διακριτοποιημένης η οποία κατ'ουσίαν είναι ένας πίνακας τιμών  $x, y, z$ . Ο συγκεκριμένος πίνακας τιμών αναπαριστά εκ νέου την υπό μελέτη επιφάνεια ως ακολούθως:

rL

$z(1,n)$							
.			$z(m,n)$				
.							
.							
$z(1,2)$							
$z(1,1)$	$z(2,1)$	.	.	.	$z(n,1)$		

*Πίνακας 12 Πίνακας τιμών ύψους επιφάνειας*

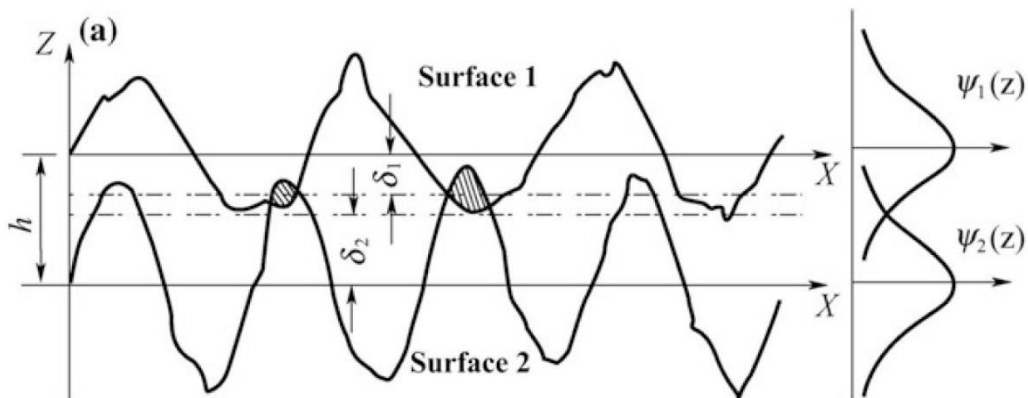
Σε κάθε κελί του παραπάνω διακριτοποιημένου πλέγματος έχει ανατεθεί μία τιμή ύψους  $z(x_n, y_n)$ . Συνοψίζοντας η επιφάνεια μας δύναται να προσεγγιστεί από συγκεκριμένο πλήθος κατακόρυφων ράβδων ύψους  $z = f(x, y)$  υπό μορφή χωρικού ραβδογράμματος.



Εικόνα 44 Διακριτοποιημένη επιφάνεια

Άρα, όταν μελετάμε δύο προσεγγίζουσες επιφάνειες (positive και negative) εφαρμόζουμε την παραπάνω διαδικασία για καθεμία από αυτές και έτσι λαμβάνουμε τους δύο πίνακες τιμών  $z_p = f_p(x, y)$  και  $z_n = f_n(x, y)$ .

Όταν η negative επιφάνεια πλησιάζει την positive επιφάνεια πρώτα θα έρθουν σε επαφή οι ράβδοι που έχουν πιο μεγάλο ύψος, όπως φαίνεται στην εικόνα:



Εικόνα 45 Επαφή προφίλ επιφανειών

Η ανωτέρω γραφική απεικόνιση, η οποία παρουσιάζει την επαφή δύο προφίλ επιφανειών, μεταφράζεται μαθηματικά ως ένα πρόβλημα ελαχιστοποίησης προκειμένου να προσδιοριστούν τα σημεία επαφής:

$$\min(h(x, y)) = \min(\alpha - z_n - z_p) = \min(z'_n - z_p)$$

όπου  $\alpha$  μία σταθερά [μεγαλύτερη του  $\max(z_p) + \min(z_n)$ ] η οποία κατ' ουσία είναι η αρχική μετακίνηση προς τα επάνω της Negative Surface έτσι ώστε στην αρχή της διαδικασίας να μην είναι σε επαφή οι δύο επιφάνειες.

Κατά την επαφή, οι ράβδοι αυτοί θα συμπιεστούν δεδομένης της πρώτης ύλης κατασκευής των επιφανειών και του εφαρμοζόμενου φορτίου. Από τη φυσική στερεών σωμάτων γνωρίζουμε ότι κάθε σώμα συμπεριφέρεται ως ελατήριο και η παραμόρφωσή του είναι ανάλογη της εφαρμοζόμενης δύναμης, σύμφωνα με τον Νόμο του Hooke:

$$F = k \cdot \Delta l \quad (1)$$

Σύμφωνα με τη θεωρία ελαστικότητας, η αναπτυσσόμενη τάση  $\sigma$  (πίεση) σε ένα συμπιεζόμενο υλικό είναι ανάλογη της παραμόρφωσής του (δηλαδή της σχετικής μείωσης του αρχικού μήκους) με τον συντελεστή αναλογίας να εξαρτάται από το υλικό (μέτρο ελαστικότητας  $E$ ). Συγκεκριμένα, ισχύει ότι:

$$\sigma = E \cdot \varepsilon \quad (2)$$

Η τάση  $\sigma$  είναι ο λόγος της δύναμης προς την επιφάνεια. Άρα προκύπτουν οι παρακάτω σχέσεις:

$$\sigma = \frac{F}{A} \quad (3)$$

$$\varepsilon = \frac{\Delta l}{L} \quad (4)$$

Από (1), (2), (3) και (4) συνεπάγεται ότι:

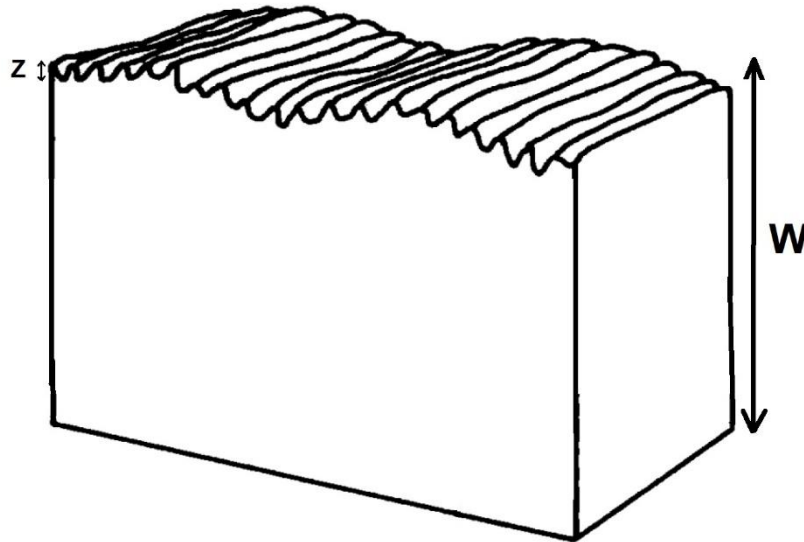
$$\frac{F}{A} = E \cdot \varepsilon \Leftrightarrow \frac{F}{A} = E \cdot \frac{\Delta l}{L} \Leftrightarrow F = \frac{E \cdot A}{L} \cdot \Delta l$$

Επομένως, η σταθερά ελατηρίου  $k$  της κάθε μιας ράβδου της υπό μελέτη επιφάνειας δίνεται από τον τύπο:

$$k = \frac{E \cdot A}{L}$$

Άρα, το πόσο θα προσεγγίσουν οι δύο επιφάνειες εξαρτάται από το εφαρμοζόμενο φορτίο και την πρώτη ύλη του υλικού.

Το αρχικό μήκος της ράβδου  $L$  αντιστοιχεί στη τιμή του ύψους του προφίλ της διακριτοποιημένης επιφάνειας στη συγκεκριμένη θέση συν το πάχος του υλικού όπως φαίνεται στην παρακάτω εικόνα:



Εικόνα 46 Επιφάνεια με τραχύτητα

$$L = W + z, \text{ με } W \gg z$$

Η επιφάνεια  $A$  αντιστοιχεί στην επιφάνεια στην οποία εφαρμόζεται η δύναμη. Οπότε η τιμή της είναι  $A = \Delta x \cdot \Delta y$ , όπου  $\Delta x = \frac{r_L}{N}$ , όπου  $r_L$  το μήκος δειγματοληψίας και  $N$  Το μέγεθος του δείγματος ανά διεύθυνση. Ομοίως για το  $\Delta y = \frac{r_L}{N}$ . Έτσι προκύπτει ότι

$$A = \left(\frac{r_L}{N}\right)^2$$

Σε ο,τι αφορά το μέτρο ελαστικότητας αυτό διαφοροποιείται ανάλογα με το υλικό. Οι τιμές για τα υλικά που χρησιμοποιήθηκαν κατά το πείραμα είναι αυτές του πίνακα:

A/A	Υλικό	Μετρο Ελαστικότητας $E$ (GPa= $10^9$ Pa= $10^9$ Nt/m <sup>2</sup> )
1	AL2024-O	73.1
2	AL7075-O	71.7

Πίνακας 13 Μηχανικών Ιδιοτήτων Υλικών

Άμεσα προκύπτει ότι η σταθερά ελατηρίου της ράβδου δίνεται από τον τύπο:

$$k_{\text{ράβδου}} = E \cdot \left(\frac{r_L}{N}\right)^2 \cdot \frac{1}{W + z}$$

Πρακτικά επειδή το  $z$  είναι αμελητέο σε σχέση με το  $W$  ο τύπος γίνεται:

$$k_{\rho\alpha\beta\delta\sigma\nu} = E \cdot \left(\frac{r_L}{N}\right)^2 \cdot \frac{1}{W}$$

Συνεπώς,  $k$  σταθερό για όλες τις ράβδους της ίδιας επιφάνειας και το συνολικό  $k$  ή αλλιώς  $k_{ολ}$  δίνεται από την παρακάτω σχέση δεδομένου ότι το πλήθος των ράβδων είναι  $N^2$  :

$$k_{ολ} = k_{\epsilon\pi\iota\phi\alpha\upsilon\epsilon\iota\alpha\varsigma} = k_{\rho\alpha\beta\delta\sigma\nu}(N)^2 = E \cdot (r_L)^2 \cdot \frac{1}{W}$$

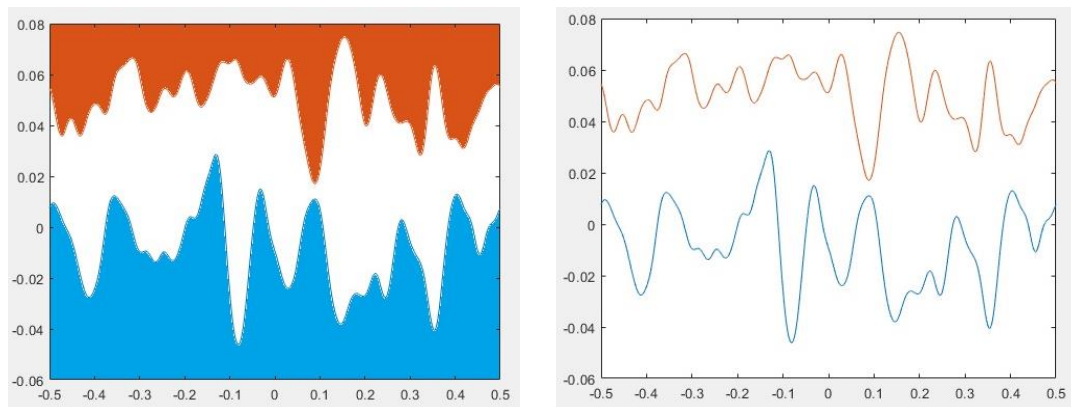
Από τα παραπάνω αντιλαμβανόμαστε ότι είναι εφικτό να υπολογίσουμε κατά πόσο προσεγγίζει μία επιφάνεια μία άλλη κατά την επαφή τους και συγκεκριμένα υπό την εφαρμογή μίας δύναμης  $F$  σύμφωνα με τον νόμο του Hook. Δηλαδή

$$F = k_{ολ}\Delta z \Leftrightarrow \Delta z = F/k_{ολ} \Leftrightarrow \Delta z = FW/(E \cdot r_L^2)$$

Η ανωτέρω τιμή  $\Delta z$  τοποθετείται ως είσοδος για την πειραματική επιβεβαίωση του νευρωνικού δικτύου.

#### 4.3.2 Αποτελέσματα Πειράματος και σύγκριση με Αποτελέσματα Νευρωνικού Δικτύου

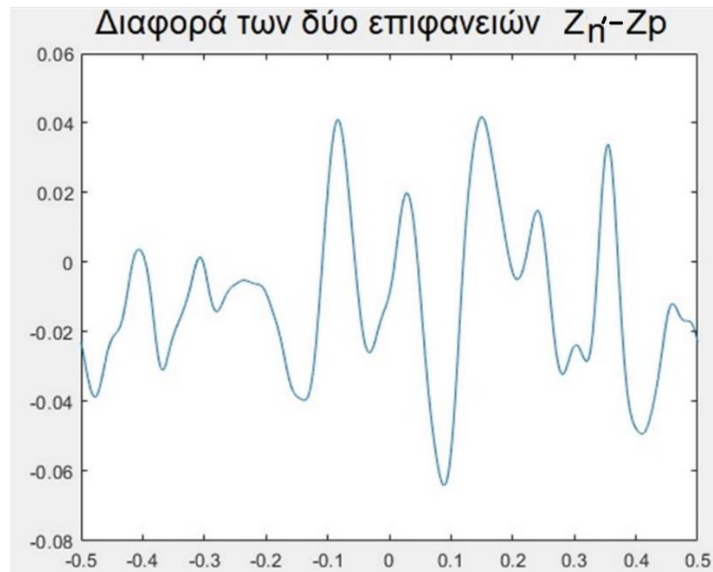
Τα τυχαία προφίλ των επιφανειών που προέκυψαν από την διαδικασία που περιγράψαμε στην παράγραφο 6α. είναι αυτές που φαίνονται στην παρακάτω εικόνα.



Γράφημα 20 Μοντελοποίηση προφίλ επιφανειών

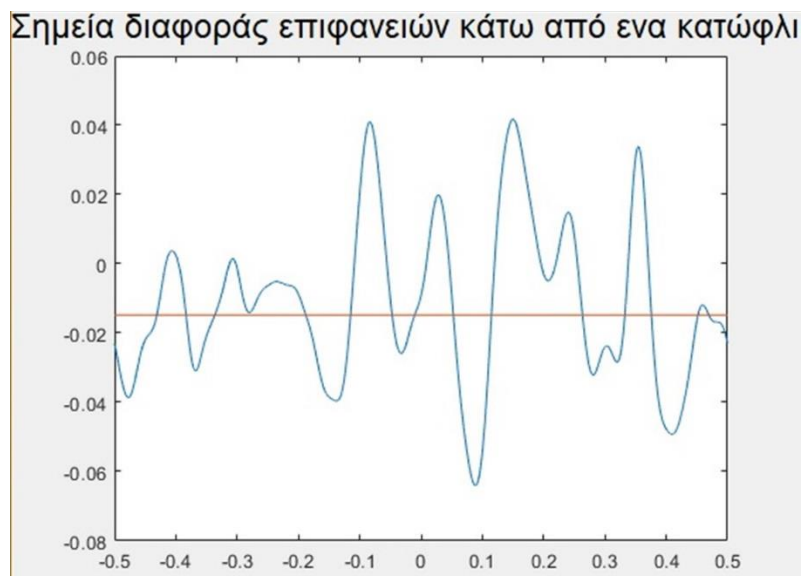
Για τον υπολογισμό των σημείων επαφής ο κώδικας θεωρεί την κάτω επιφάνεια ως positive surface και την πάνω ως negative surface. Για το λόγο αυτό αφαιρεί το προφίλ της πάνω επιφάνειας από το αντίστοιχο της κάτω. Το αποτέλεσμα απεικονίζεται στην ακόλουθη εικόνα.



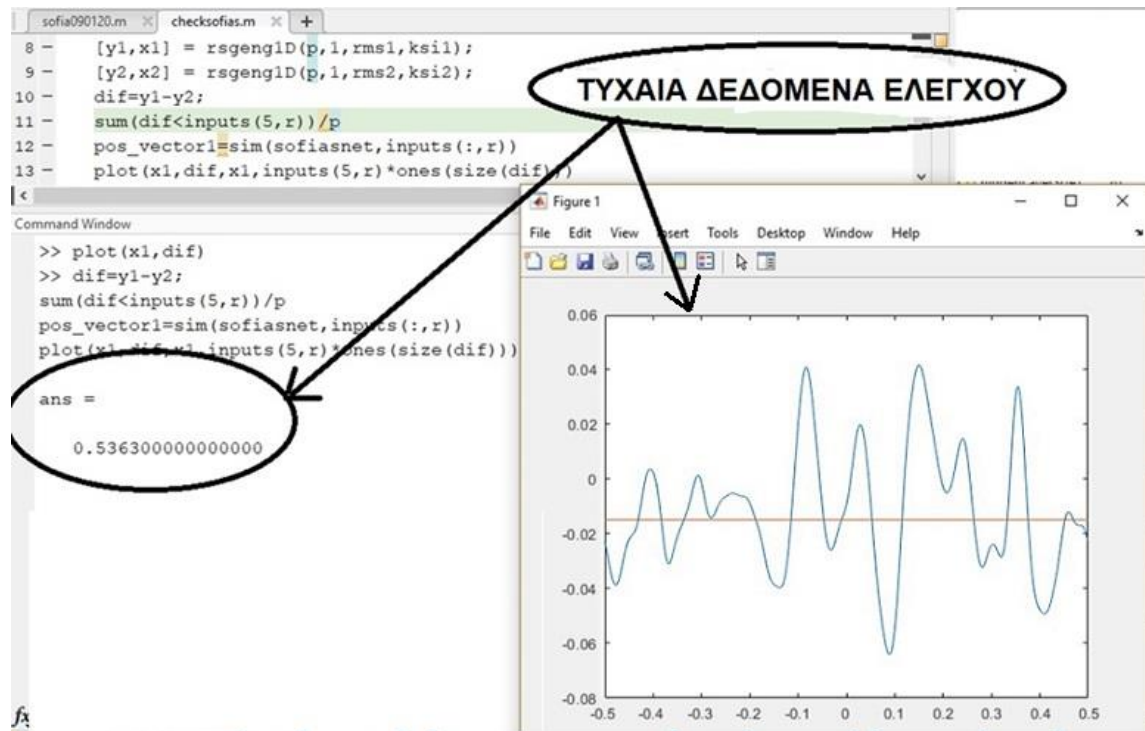


Γράφημα 21 Διαφορά προφίλ επιφανειών

Με την διαδικασία που αναλύθηκε στην παράγραφο 6β. υπολογίζεται πόσο κοντά έρχονται οι δύο επιφάνειες κατά την επαφή τους και αυτό τίθεται ως κατώφλι (πορτοκαλί οριζόντια γραμμή παρακάτω εικόνας). Με χρήση του κώδικα του Παραρτήματος “B” υπολογίζεται το ποσοστό των σημείων της καμπύλης που αναπαριστά την διαφορά των δύο προφίλ που βρίσκονται κάτω από το συγκεκριμένο κατώφλι.

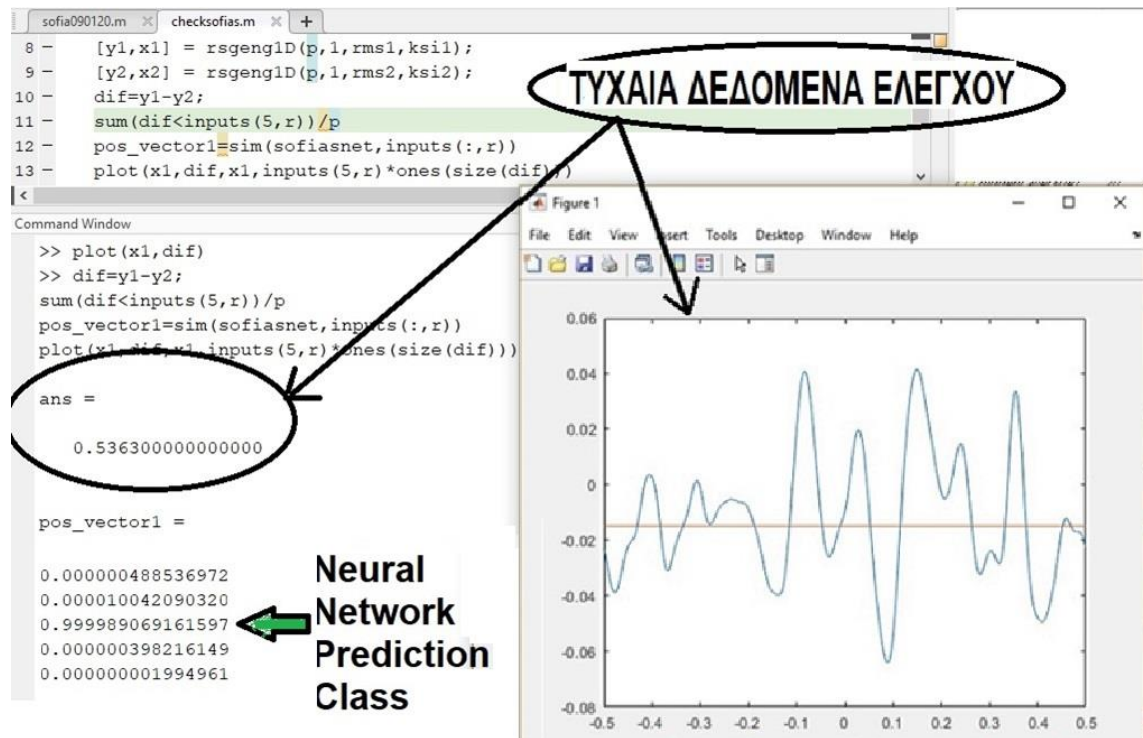


Γράφημα 22 Διαφορά προφίλ και κατώφλι



Εικόνα 47 Επιβεβαίωση ΤΝΔ με τυχαία δεδομένα

Ο κώδικας μας λοιπόν υπολόγισε ότι ακριβώς **53,63%** των σημείων των δύο επιφανειών έχουν έρθει σε επαφή. Τα ίδια δεδομένα εισήχθησαν στο νευρωνικό μας δίκτυο το οποίο πρόβλεψε ότι το μέγεθος της επιφάνειας επαφής θα πρέπει να καταταχθεί στην 3<sup>η</sup> κλάση με ποσοστό 99.99% (ήτοι το αναμενόμενο θα ήταν μία τιμή γύρο στο 50% για το ποσοστό επαφής των δύο επιφανειών), όπως φαίνεται στην παρακάτω εικόνα.



Εικόνα 48 Πρόβλεψη ΤΝΔ για τα τυχαία δεδομένα

Η διαδικασία αυτή για την πειραματική επιβεβαίωση επαναλήφθηκε για μεγάλο αριθμό τεχνητών αλλά και πειραματικών επιφανειών και επαληθεύτηκε η ορθότητα της πρόβλεψης του Νευρωνικού μας Δικτύου ποσοστό μεγαλύτερο του 95%. Συγκεκριμένα παρήχθησαν 100 ζευγάρια επιφανειών και το Νευρωνικό Δίκτυο πρόβλεψε στις 96 περιπτώσεις ορθή κλάση.

## Κεφάλαιο 5<sup>ο</sup>

### Συμπεράσματα

Είναι εφικτή η δημιουργία και η εκπαίδευση ενός νευρωνικού δικτύου το οποίο θα προβλέπει το ποσοστό του προφίλ της επιφάνειας διεπαφής δύο σωμάτων. Συγκεκριμένα το νευρωνικό δίκτυο θα κατατάσσει σε κλάσεις ποσοστού επαφής την επιφάνεια διεπαφής.

Ένα νευρωνικό δίκτυο ενός κρυφού επιπέδου μπορεί να επιτύχει ποσοστό ορθής πρόβλεψης περί το 70-75%.

Τα βέλτιστα αποτελέσματα μπορούν να επιτευχθούν με χρήση δύο κρυφών επιπέδων.

Επιπρόσθετα η βέλτιστη εκπαίδευση και απόδοση του ΤΝΔ επιτυγχάνεται με τη Bayesian Regularization Learning Method (trainbr).

Το ΤΝΔ με δύο κρυφά επίπεδα και trainbr έχουν την μέγιστη απόδοση, ήτοι 94% ορθής πρόβλεψης.

Η χρήση παραπάνω κρυφών επιπέδων βελτιώνει αμελητέα την απόδοση του ΤΝΔ (<0.5%) ενώ ο χρόνος που απαιτείται για την εκπαίδευση ανεβαίνει στο 800%. Κρίνεται λοιπόν ότι το συγκεκριμένο δίκτυο είναι το ιδανικό για την συγκεκριμένη εφαρμογή.

Το δίκτυο μελετήθηκε αναφορικά με την δυνατότητα του να προβλέπει τυχαία και πειραματικά δεδομένα με αντίστοιχη επιτυχία.

Αναφορικά με το πως θα μπορούσαν να επεκταθούν τα αποτελέσματα της παρούσας εργασίας σε μελλοντικές εργασίες ή έρευνες, επισημαίνεται ότι το συγκεκριμένο δίκτυο μπορεί να επεκταθεί σε τρισδιάστατες επιφάνειες και θα μπορούσε με κατάλληλη εκπαίδευση να έχει αντίστοιχα αποτελέσματα. Επιπρόσθετα δύναται να χρησιμοποιηθεί για την επιβεβαίωση πειραματικών αποτελεσμάτων πραγματικών επιφανειών σε μία οργανωμένη και συστηματική βάση. Τα στοιχεία που θα προκύψουν από μία τέτοια διαδικασία θα ήταν πολύ σημαντικά τόσο στην τριβολογία, τον τριβοηλεκτρισμό, την αεροδυναμική, την μηχανική κ.α..

Επιπρόσθετα, μία άλλη επέκταση της παρούσας μελέτης μπορεί να είναι η μελέτη του αντίστροφου προβλήματος. Δηλαδή, γνωρίζοντας το ποσοστό σημείων επαφής δύο επιφανειών και κάποια στοιχεία-παραμέτρους της μίας από τις δύο επιφάνειες να προβλέπονται χαρακτηριστικές παράμετροι της δεύτερης επιφάνειας. Μία τέτοια δυνατότητα θα είναι πολύ χρήσιμη σε ό,τι αφορά την παραγωγή επιφανειών και την

τριβολογία, καθώς αν είναι επιθυμητό ένα συγκεκριμένο εύρος ποσοστού επαφής δύο επιφανειών και ορισμένες παράμετροι της μιας επιφάνειας (RMS,  $\xi$ ) να μπορούν να προσδιορίζονται οι τιμές των παραμέτρων της δεύτερης επιφάνειας (RMS,  $\xi$ ), η οποία πρέπει να κατασκευαστεί για να ικανοποιεί την αρχική απαίτηση.

## Παράρτημα

### A. Απόδειξη RMS κανονικής κατανομής

Το RMS κανονικής κατανομής  $\sim \sqrt{\frac{\pi}{2}} R_a \sim 1.25 R_a$

(Όταν το ύψος της επιφάνειας  $z(x)$  ακολουθεί κανονική κατανομή με  $m=0$ )

#### Απόδειξη

Γνωρίζουμε ότι  $R_a = \frac{1}{L} \int_0^L |z - m| dx = R_a = \frac{1}{L} \int_0^L |z| dx$  ( $m=0$ ).

$$R_a \sim E(|z|)$$

$$E(|z|) = \int_0^\infty |z| f_{|z|} dz = 2 \int_0^\infty |z| \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{z^2}{2\sigma^2}} dz = 2 \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \frac{\Gamma(1)}{2 \cdot \frac{1}{2\sigma^2}} = \frac{2\sigma^2}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} = \sqrt{\frac{4\sigma^4}{2\pi\sigma^2}} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot \sigma$$

$$E(|z|) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot \sigma =$$

$$\text{Άρα, } R_a \sim \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot RMS \text{ ή ισοδύναμα } RMS \sim \sqrt{\frac{\pi}{2}} R_a.$$

### B. Μετασχηματισμός Fourier, Αντίστροφος μετασχηματισμός Fourier και συνέλιξη συναρτήσεων

Έστω συνάρτηση  $f(t)$ , η οποία ορίζεται για κάθε  $t$ . Ο μετασχηματισμός Fourier της συνάρτησης  $f(t)$  είναι το ολοκλήρωμα  $F(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) e^{i\omega t} dt$ . Σε αυτό το γενικευμένο ολοκλήρωμα η παράμετρος  $\omega$  παραμένει σταθερή κατά την ολοκλήρωση ενώ η μεταβλητή ολοκλήρωσης είναι η  $t$ . Έτσι, μετά την ολοκλήρωση εξαφανίζεται η μεταβλητή  $t$  και το αποτέλεσμα είναι συνάρτηση του  $\omega$ . Η συνάρτηση  $F(\omega)$  είναι μιγαδική και αποτελεί τον μετασχηματισμό Fourier της συνάρτησης  $f(t)$ . Αν θεωρηθεί γνωστή η συνάρτηση  $F(\omega)$  τότε η συνάρτηση  $f(t)$  δίνεται από τη σχέση:

$$f(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} F(\omega) e^{-i\omega t} d\omega, \text{ η οποία αποτελεί τον αντίστροφο μετασχηματισμό}$$

Fourier της συνάρτησης  $F(\omega)$ . Εδώ η μεταβλητή ολοκλήρωσης είναι το  $\omega$  ενώ η

παράμετρος  $t$  διατηρείται σταθερή κατά την ολοκλήρωση. Έτσι η  $\omega$  εξαφανίζεται μετά την ολοκλήρωση και το αποτέλεσμα είναι συνάρτηση του  $t$ .

Συνέλιξη δύο συναρτήσεων  $\varphi(t)$  και  $g(t)$  οι οποίες ορίζονται στους πραγματικούς αριθμούς είναι το ολοκλήρωμα  $I = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(u) \cdot g(t - u) du$  και συμβολίζεται με  $\varphi(t)*g(t)$ .

Αποδεικνύεται ότι ισχύουν οι εξής πολύ χρήσιμες ιδιότητες:

- i.  $\varphi(t)*g(t) = g(t)*\varphi(t)$  (αντιμεταθετική ιδιότητα)
- ii.  $F\{\varphi(t) * g(t)\} = F\{\varphi(t)\} \cdot F\{g(t)\}$  (ο μετασχηματισμός Fourier της συνέλιξης δύο συναρτήσεων είναι το γινόμενο των μετασχηματισμών Fourier των συναρτήσεων αυτών)

### Γ. Κώδικας MATLAB για τον υπολογισμό σημείων επαφής

```
%prompt = 'What is the number of points that surfaces have? ';
%p = input(prompt);
p=10000;
%prompt = 'What is the number of pairs of surfaces studied? ';
%n = input(prompt);
n=2000;
%prompt = 'What is the number of discrete percentage groups? ';
%N = input(prompt);
N=5;
inputs=zeros(n,5);
outputs=zeros(n,N);
tic
for jj=1:n
    rms1=0.005+0.01*rand;
    ksi1=0.01+0.02*rand;
    rms2=0.005+0.01*rand;
    ksi2=0.01+0.02*rand;
    k=normrnd(0,2*(rms1+rms2)/3);

    [y1,x1] = rsgeng1D(p,1,rms1,ksi1);
    [y2,x2] = rsgeng1D(p,1,rms2,ksi2);
    dif=y1-y2;
    maxx=max(dif)+eps;
    minn=min(dif)-eps;
    R=maxx-minn;
    threshold=k*ones(1,p);
    %threshold=(minn+k*R/10000)*ones(1,p);
    check=dif<threshold;
    np=sum(check);
    ii=0;
    while ii/N<np/p
        ii=ii+1;
    end
    index=ii;
    if index>N
```

```

        index=N;
elseif index==0;
        index=1;
end

```

## Δ. Κώδικας MATLAB για τα μοντέλα των νευρωνικών δικτύων

```

inputs(jj,1)=rms1;
inputs(jj,2)=ksi1;
inputs(jj,3)=rms2;
inputs(jj,4)=ksi2;
inputs(jj,5)=k;
outputs(jj,index)=1;
end

inputs=inputs';
targets=outputs';
for d=0:11
    tic
        for hd=1:3
hiddenLayerSize1 = 20;
hiddenLayerSize2 = 30;
hiddenLayerSize3 = 40;
hiddenlayers=[hiddenLayerSize1 hiddenLayerSize2 hiddenLayerSize3];
%net = patternnet([hiddenLayerSize1 hiddenLayerSize2
hiddenLayerSize3]);
net = patternnet(hiddenlayers(1,1:hd));
net.divideParam.trainRatio = 70/100;
net.divideParam.valRatio    = 15/100;
net.divideParam.testRatio   = 15/100;

fid = fopen ( 'learnfunctions.txt' )
        fseek(fid,0,'bof');
if fid ~= -1
        for i=1:d
            fgetl ( fid );
        end
        net.trainFcn = fgetl ( fid );
        net.trainParam.epochs=100;
        fclose ( fid );

[net,tr] = train(net,inputs,targets);
outputs = net(inputs);
errors = gsubtract(targets,outputs);
performance = perform(net,targets,outputs)
tInd = tr.testInd;
tstOutputs = net(inputs(:,tInd));
net.performFcn = 'mae';

layers = [ ...
        softmaxLayer
        classificationLayer]
net.layers{1}.transferFcn = 'tansig';
net.layers{2}.transferFcn = 'tansig';
tstPerform = perform(net,targets(:,tInd),tstOutputs)
%view(net)
figure(2*d+1), plotperform(tr), title(net.trainFcn)
set(gcf, 'WindowState', 'fullscreen')

```



```

saveas(gcf,fullfile(net.trainFcn),'jpeg')
figure(2*d+2), plotconfusion(targets,outputs,net.trainFcn)
set(gcf,'WindowState','fullscreen')
saveas(gcf,fullfile(net.trainFcn),'bmp')
wb = getwb(net);
[b,IW,LW] = separatewb(net,wb);
%sofiasnet=net;
%save sofiasnet
end
t(d+1,hd)=toc;
[C,CM,IND,PER] = confusion(targets,outputs);
perf(d+1,hd)=C;
xlab(1,d+1)=string(net.trainFcn);
    end
end
figure(d+1)
barperf=bar(round(1-perf,2))
xticks=(1:12);
xticklabels({'trainlm';'trainbr';'trainrp';'traiscg';'traibfg';'traincg
b';'traincgp';'traincgf';'traigda';'traingdx';'traingdm';'trains'})
legend(barperf,'one hidden layer','two hidden layers','three hidden
layers');
title('Απόδοση Νευρωνικού Δικτύου ανά Learning Function και Δομής')
ylabel('Απόδοση')
xlabel('Learning Function')
xtips1 = barperf(1).XEndPoints;
ytips1 = barperf(1).YEndPoints;
labels1 = string(barperf(1).YData);
text(xtips1,ytips1,labels1,'HorizontalAlignment','right',...
    'VerticalAlignment','bottom')
xtips2 = barperf(2).XEndPoints;
ytips2 = barperf(2).YEndPoints;
labels2 = string(barperf(2).YData);
text(xtips2,ytips2,labels2,'HorizontalAlignment','center',...
    'VerticalAlignment','bottom')
xtips3 = barperf(3).XEndPoints;
ytips3 = barperf(3).YEndPoints;
labels3 = string(barperf(3).YData);
text(xtips3,ytips3,labels3,'HorizontalAlignment','left',...
    'VerticalAlignment','bottom')
set(gcf,'WindowState','fullscreen')
saveas(gcf,fullfile('EfficiencyConfusionMatrix'),'jpeg')

figure(d+2)
bart=bar(round(t))
xticks=(1:12);
xticklabels({'trainlm';'trainbr';'trainrp';'traiscg';'traibfg';'traincg
b';'traincgp';'traincgf';'traigda';'traingdx';'traingdm';'trains'})
legend(bart,'one hidden layer','two hidden layers','three hidden
layers');
title('Χρόνος Εκπαίδευσης Νευρωνικού Δικτύου ανά Learning Function και
Δομής')
ylabel('Χρόνος (sec)')
xlabel('Learning Function')
xtips1 = bart(1).XEndPoints;
ytips1 = bart(1).YEndPoints;
labels1 = string(bart(1).YData);
text(xtips1,ytips1,labels1,'HorizontalAlignment','center',...
    'VerticalAlignment','bottom')
xtips2 = bart(2).XEndPoints;
ytips2 = bart(2).YEndPoints;

```

```
labels2 = string(bart(2).YData);
text(xtips2,ytips2,labels2,'HorizontalAlignment','center',...
     'VerticalAlignment','bottom')
xtips3 = bart(3).XEndPoints;
ytips3 = bart(3).YEndPoints;
labels3 = string(bart(3).YData);
text(xtips3,ytips3,labels3,'HorizontalAlignment','center',...
     'VerticalAlignment','bottom')
set(gcf,'WindowState','fullscreen')
saveas(gcf,fullfile('TimeNeuralNetwork'),'jpeg')
```

## Βιβλιογραφία

- [1] Bhushan, Bharat. 2000. *Modern tribology book*. CRC Press LLC.
- [2] Hajnsek, I., and K. Papathanassiou. 2005. "ESA Earth Observation Data." <https://earth.esa.int/>. January. Accessed 2019.  
[https://earth.esa.int/documents/653194/656796/Description\\_Of\\_Natural\\_Surfaces.pdf](https://earth.esa.int/documents/653194/656796/Description_Of_Natural_Surfaces.pdf).
- [3] Haykin, Simon. 2010. *Neural Networks*
- [4] Hutchings, Ian, and Philip Shipway. 2017. *Tribology Friction and Wear of Engineering Materials*. Elsevier.
- [5] Morihide, Higo, Fujita Katsuya, Tanaka Yuya, Mitsushio Masaru, and Yoshidome Toshifumi. 2006. "Surface Morphology of metal films deposited on mica at various temperatures observed by atomic force microscopy." *Applied surface science* 5083-5099.
- [6] Nosonovsky, Michael, and Bhushan Bharat. 2008. *Multiscale Dissipative Mechanisms and Hierarchical Surfaces*. Springer.
- [7] Standard, An American National. 2003. *Surface Texture (Surface Roughness, Waviness and Lay)*. The American Society of Mechanical Engineers.
- [8] ISO 4287:1997 Geometrical Product Specifications (GPS) -- Surface texture: Profile method -
- [9] Training Feedforward Networks with the Marquardt Algorithm Martin T. Hagan and Mohammad B. Menhaj IEEE TRANSACTIONS ON NEURAL NETWORKS, VOL. 5, NO. 6, NOVEMBER 1994
- [10] Neural Network Toolbox  
For Use with MATLAB® Howard Demuth Mark Beale User's Guide Version 4 The Mathworks
- [11] (Morihide, et al. 2006)] [13] Artificial neural networks: fundamentals, computing, design, and application I.A. Basheer , M. Hajmeer
- [12] Surface roughness and its effects in tribology Mitjan Kalin, Janez Kogovšek University of Ljubljana, Faculty of Mechanical Engineering Centre for Tribology and Technical Diagnostics October 25, 2011
- [13] Neural Network Design Martin T. Hagan Oklahoma State University, Stillwater Oklahoma , Howard B. Demuth University of Colorado, Boulder Colorado, Mark Hudson Beale MHB Inc. Hayden Idaho, Orlando De Jesus Consultant Frisco Texas
- [14] Bayesian Interpolation ,David J. C. MacKay' Computation and Neural Systems, California Institute of Technology 139-74, Pasadena, CA 91225 USA
- [15] Improving the Learning Speed of 2-Layer Neural Networks by Choosing Initial Values of the Adaptive Weights Derrick Nguyen and Bernard Widrow Information Systems Laboratory Stanford University Stanford, CA 94305
- [16] A Simplified Realization for the Gaussian Filter in Surface Metrology Y. B. Yuan (1) , T.V. Vorburger (2) , J. F. Song (2) , T. B. Renegar (2) 1 Guest Researcher, NIST; Harbin Institute of Technology (HIT), Harbin, China, 150001; 2 National Institute of Standards and Technology

(NIST), Gaithersburg, MD 20899 USA.

[17] Bearing Tribology Principles and Applications Ming Qiu · Long Chen Yingchun Li · Jiafei Yan, Springer

[18] <https://qcontrol.gr/blog/arthrografia/%CF%84%CF%81%CE%B1%CF%87%CF%8D%CF%84%CE%B7%CF%84%CE%B1/>

[19] <https://www.fortunegreece.com/article/elliniki-nanotechnologia-pagkosmies-prooptikes/>

[20] <http://www.mediazone.gr/2019/04/16/paragogi-energeias-apo-to-chioni/>

[21] <https://www.nanowerk.com/news/newsid=4546.php>

[22] Τραχύτητα στην πολυπλοκότητα και νανοτεχνολογία Βασίλης Κωνσταντούδης , INN, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος

[23] ΣΗΜΕΙΩΣΕΙΣ ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟΥ ΤΡΙΒΟΛΟΓΙΑΣ Α. ΜΟΥΡΛΑΣ 1Η ΑΣΚΗΣΗ: ΜΕΤΡΗΣΗ ΤΡΑΧΥΤΗΤΑΣ ΟΚΤΩΒΡΙΟΣ 2013

[24] ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΤΡΙΒΟΛΟΓΙΑΣ Α. ΜΟΥΡΛΑΣ 2Η ΑΣΚΗΣΗ: ΕΠΑΦΗ HERTZ ΜΑΙΟΣ 2011

[25] ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΤΡΙΒΟΛΟΓΙΑΣ Α. ΜΟΥΡΛΑΣ 3Η ΑΣΚΗΣΗ: ΜΕΛΕΤΗ ΤΗΣ ΤΡΙΒΗΣ ΜΑΙΟΣ 2011

[26] ΣΗΜΕΙΩΣΕΙΣ ΤΟΥ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΟΥ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ «ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ» Καθ. Απ. Μπουρνέτας

[27] Στατιστική-Χημειομετρία Μεταπτυχιακό Φαρμ. Ανάλυσης & Αναλ. Χημείας, Ιωάννης Ντότσικας Λέκτορας Εθνικών και Καποδιστριακών Πανεπιστημίων Αθηνών ΤΜΗΜΑ ΦΑΡΜΑΚΕΥΤΙΚΗΣ Τομέας Φαρμακευτικής Χημείας Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα

[28] Γραμμική Άλγεβρα και Αναλυτική Γεωμετρία Θανάση Ν. Χρυσάκη Αν.Καθηγητή Πανεπιστήμιο Αθήνας, Αθήνα 1998

