



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ
ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ

ΣΧΟΛΗ ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ

ΤΜΗΜΑ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΚΗΣ ΚΑΙ ΤΗΛΕΠΙΚΟΙΝΩΝΙΩΝ

Ενσωμάτωση ευφυών τεχνικών στην προσομοίωση αντοχής υλικών

ΜΑΚΡΗΣ ΓΕΩΡΓΙΟΣ

ΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

ΥΠΕΥΘΥΝΟΣ

ΚΟΛΟΜΒΑΤΣΟΣ ΚΩΝΣΤΑΝΤΙΝΟΣ
ΑΝΑΠΛΗΡΩΤΗΣ ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ

ΣΥΝΕΠΙΒΛΕΠΩΝ

ΚΑΡΑΚΑΣΙΔΗΣ ΘΕΟΔΩΡΟΣ
ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ
ΤΜΗΜΑ ΦΥΣΙΚΗΣ

Λαμία έτος 2025



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ
ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ

ΣΧΟΛΗ ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ

ΤΜΗΜΑ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΚΗΣ ΚΑΙ ΤΗΛΕΠΙΚΟΙΝΩΝΙΩΝ

Ενσωμάτωση ευφύων τεχνικών στην προσομοίωση αντοχής υλικών

ΜΑΚΡΗΣ ΓΕΩΡΓΙΟΣ

ΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

ΥΠΕΥΘΥΝΟΣ

ΚΟΛΟΜΒΑΤΣΟΣ ΚΩΝΣΤΑΝΤΙΝΟΣ
ΑΝΑΠΛΗΡΩΤΗΣ ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ

ΣΥΝΕΠΙΒΛΕΠΩΝ

ΚΑΡΑΚΑΣΙΔΗΣ ΘΕΟΔΩΡΟΣ
ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ
ΤΜΗΜΑ ΦΥΣΙΚΗΣ

Λαμία έτος 2025



UNIVERSITY OF
THESSALY

SCHOOL OF SCIENCE

DEPARTMENT OF COMPUTER SCIENCE & TELECOMMUNICATIONS

Integration of intelligent techniques in materials strength simulation

MAKRIS GEORGIOS

FINAL THESIS

ADVISOR

KOLOMVATSOS KONSTANTINOS
ASSOCIATE PROFESSOR

CO ADVISOR

KARAKASIDIS THEODOROS
PROFESSOR
DEPARTMENT OF PHYSICS

Lamia year 2025

«Με ατομική μου ευθύνη και γνωρίζοντας τις κυρώσεις ⁽¹⁾, που προβλέπονται από της διατάξεις της παρ. 6 του άρθρου 22 του Ν. 1599/1986, δηλώνω ότι:

1. Δεν παραθέτω κομμάτια βιβλίων ή άρθρων ή εργασιών άλλων αυτολεξεί **χωρίς να τα περικλείω σε εισαγωγικά** και χωρίς να αναφέρω το συγγραφέα, τη χρονολογία, τη σελίδα. Η αυτολεξεί παράθεση χωρίς εισαγωγικά χωρίς αναφορά στην πηγή, είναι λογοκλοπή. Πέραν της αυτολεξεί παράθεσης, λογοκλοπή θεωρείται και η παράφραση εδαφίων από έργα άλλων, συμπεριλαμβανομένων και έργων συμφοιτητών μου, καθώς και η παράθεση στοιχείων που άλλοι συνέλεξαν ή επεξεργάστηκαν, χωρίς αναφορά στην πηγή. Αναφέρω πάντοτε με πληρότητα την πηγή κάτω από τον πίνακα ή σχέδιο, όπως στα παραθέματα.
2. Δέχομαι ότι η αυτολεξεί **παράθεση χωρίς εισαγωγικά**, ακόμα κι αν συνοδεύεται από αναφορά στην πηγή σε κάποιο άλλο σημείο του κειμένου ή στο τέλος του, είναι αντιγραφή. Η αναφορά στην πηγή στο τέλος π.χ. μιας παραγράφου ή μιας σελίδας, δεν δικαιολογεί συρραφή εδαφίων έργου άλλου συγγραφέα, έστω και παραφρασμένων, και παρουσίασή τους ως δική μου εργασία.
3. Δέχομαι ότι υπάρχει επίσης περιορισμός στο μέγεθος και στη συχνότητα των παραθεμάτων που μπορώ να εντάξω στην εργασία μου εντός εισαγωγικών. Κάθε μεγάλο παράθεμα (π.χ. σε πίνακα ή πλαίσιο, κλπ), προϋποθέτει ειδικές ρυθμίσεις, και όταν δημοσιεύεται προϋποθέτει την άδεια του συγγραφέα ή του εκδότη. Το ίδιο και οι πίνακες και τα σχέδια
4. Δέχομαι όλες τις συνέπειες σε περίπτωση λογοκλοπής ή αντιγραφής.

Ημερομηνία: 21/02/2025

Ο Δηλών.

Μακρής Γεώργιος

(1) «Όποιος εν γνώσει του δηλώνει ψευδή γεγονότα ή αρνείται ή αποκρύπτει τα αληθινά με έγγραφη υπεύθυνη δήλωση του άρθρου 8 παρ. 4 Ν. 1599/1986 τιμωρείται με φυλάκιση τουλάχιστον τριών μηνών. Εάν ο υπαίτιος αυτών των πράξεων σκόπευε να προσπορίσει στον εαυτόν του ή σε άλλον περιουσιακό όφελος βλάπτοντας τρίτον ή σκόπευε να βλάψει άλλον, τιμωρείται με κάθειρξη μέχρι 10 ετών.»

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η μελέτη αυτή εστιάζει στην ανάπτυξη ενός υβριδικού συστήματος που συνδυάζει προσομοίωση Monte Carlo με τεχνητή νοημοσύνη για τη ανάλυση της αντοχής υλικών. Το σύστημα αποτελείται από δύο βασικά μέρη:

Πρώτων, τη Προσομοίωση Διάδοσης Ρωγμών, όπου χρησιμοποιείται ένας πιθανοθεωρητικός αλγόριθμος για την διαδικασία προσομοίωση της διάδοσης ρωγμών σε υλικά. Το σύστημα λαμβάνει υπόψη ποικίλα υλικά με διαφορετικές ιδιότητες όπως ΥΛΙΚΟ1 και ΥΛΙΚΟ2, και υπολογίζει την Ευκλείδεια και Manhattan απόσταση για την αξιολόγηση της διάδοσης. Τέλος περιλαμβάνει παραμέτρους όπως ισχύς (POWER), ποσοστά υλικών και θερμική ενέργεια ανά άτομο (kT).

Δεύτερον, το Νευρωνικό Δίκτυο Πρόβλεψης χρησιμοποιεί ένα “απλό” μοντέλο μηχανικής μάθησης για την πρόβλεψη της συμπεριφοράς των υλικών. Δέχεται ως εισόδους παραμέτρους όπως DE (διαφορά ενέργειας), ποσοστό υλικών και θερμική ενέργεια ανά άτομο. Το μοντέλο προβλέπει τη μέση Ευκλείδεια απόσταση και την τυπική απόκλιση, χρησιμοποιώντας τεχνικές όπως batch normalization και dropout για καλύτερη γενίκευση.

Τα κύρια πλεονεκτήματα αυτής της προσέγγισης περιλαμβάνουν την ικανότητα πρόβλεψης της συμπεριφοράς των υλικών χωρίς εκτενείς προσομοιώσεις, τη δυνατότητα χειρισμού πολλαπλών παραμέτρων και μη γραμμικών σχέσεων, την αυτόματη προσαρμογή του μοντέλου μέσω της εκπαίδευσης με πραγματικά δεδομένα και τη δυνατότητα οπτικοποίησης των αποτελεσμάτων για καλύτερη κατανόηση.

Τα αποτελέσματα αξιολογούνται με μετρικές όπως MAE (Mean Absolute Error) και RMSE (Root Mean Square Error), ενώ παρέχονται και οπτικοποιήσεις της εξέλιξης της εκπαίδευσης και των προβλέψεων.

Αυτή η προσέγγιση αποτελεί ένα σημαντικό βήμα στην ενσωμάτωση τεχνητής νοημοσύνης στην επιστήμη των υλικών, επιτρέποντας ταχύτερη και ακριβέστερη πρόβλεψη της συμπεριφοράς τους.

ABSTRACT

This study focuses on developing a hybrid system that combines Monte Carlo simulation with artificial intelligence for materials strength analysis.

The system consists of two Simulation. First, the Crack Propagation Simulation, which uses a probabilistic algorithm to simulate crack propagation in materials. It takes into account different materials with different properties, such as MATERIAL1 and MATERIAL2, and calculates Euclidian and Manhattan distances to evaluate propagation. The simulation includes parameters like power (POWER), material ratios, and the thermal energy per atom (kT).

Second, the Predictive Neural Network employs a “simple” Machine Learning Model to predict material behavior. It accepts input parameters including energy difference (DE), material ratios and the thermal energy per atom. The network predicts the mean Euclidian distance and standard deviation, utilizing techniques like batch normalization and dropout for improved generalization.

The main advantages of this approach encompass the ability to predict material behavior without extensive simulations, the capability to handle multiple parameters and non-linear relationships, automatic model adaptation through training with real data and the ability to visualize results for better understanding.

The results are evaluated using metrics such as MAE (Mean Absolute Error) and RMSE (Root Mean Square Error), while visualizations of training evolution and predictions are also provided.

ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

Με την ολοκλήρωση της παρούσας πτυχιακής εργασίας, θα ήθελα να εκφράσω τις ειλικρινείς μου ευχαριστίες σε όλους όσους συνέβαλαν στην εκπόνησή της.

Πρωτίστως, θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τον επιβλέποντα καθηγητή μου κ. Κωνσταντίνο Κολομβάτσο, για την πολύτιμη καθοδήγηση και υποστήριξή του καθ' όλη τη διάρκεια της εργασίας. Οι γνώσεις, η εμπειρία και οι συμβουλές του υπήρξαν καθοριστικές για την επιτυχή ολοκλήρωση αυτής της προσπάθειας.

Ιδιαίτερες ευχαριστίες οφείλω στον καθηγητή του Τμήματος Φυσικής κ. Θεόδωρο Καρακασίδη, του οποίου η επιστημονική καθοδήγηση και υποστήριξη συνέβαλαν στην κατανόηση του αντικειμένου και στην εκπόνηση της εν λόγω εργασίας.

Τέλος, θα ήθελα να εκφράσω τη βαθύτατη ευγνωμοσύνη μου στην οικογένειά μου. Στον πατέρα μου και στην μητέρα μου, για την αμέριστη υποστήριξή τους, την ενθάρρυνση και την κατανόηση που έδειξαν σε όλη τη διάρκεια των σπουδών μου. Ιδιαίτερη μνεία οφείλω στην γιαγιά μου, της οποίας η αγάπη και η φροντίδα υπήρξαν πολύτιμες καθ' όλη τη διάρκεια αυτού του ταξιδιού.

Table of Contents

ΠΕΡΙΛΗΨΗ	I
ABSTRACT	II
ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ	IV
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ	2
1.1 ΚΙΝΗΤΡΟ ΠΤΥΧΙΑΚΗΣ ΕΡΓΑΣΙΑΣ	2
1.2 ΙΣΤΟΡΙΑ ΤΗΣ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ ΑΝΤΟΧΗΣ ΥΛΙΚΟΥ ΚΑΙ ΤΩΝ ΕΥΦΥΩΝ ΤΕΧΝΙΚΩΝ	2
ΕΝΟΤΗΤΑ 1.2.Α ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΑΝΤΟΧΗΣ ΥΛΙΚΩΝ.....	2
ΕΝΟΤΗΤΑ 1.2.Β ΕΥΦΥΗΣ ΤΕΧΝΙΚΗ.....	3
1.3 ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΚΗ ΑΝΑΣΚΟΠΗΣΗ ΣΧΕΤΙΚΩΝ ΜΕΛΕΤΩΝ.....	5
1.4 ΔΥΣΚΟΛΙΕΣ - ΠΡΟΚΛΗΣΕΙΣ	6
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2 ΦΥΣΙΚΗ ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗ	7
2.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ.....	7
2.2 ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΦΥΣΙΚΗΣ ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗΣ ΚΑΙ ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑΣ.....	7
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3 ΕΥΦΥΗΣ ΤΕΧΝΙΚΗ	11
3.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ.....	11
3.2 ΣΥΓΧΡΟΝΕΣ ΤΕΧΝΙΚΕΣ	11
3.3 ΑΡΧΙΤΕΚΤΟΝΙΚΗ ΜΟΝΤΕΛΟΥ.....	12
ΕΝΟΤΗΤΑ 3.3.Α ΔΟΜΗ ΔΕΔΟΜΕΝΩΝ ΕΙΣΟΔΟΥ ΚΑΙ ΕΞΟΔΟΥ	12
ΕΝΟΤΗΤΑ 3.3.Β ΑΡΧΙΤΕΚΤΟΝΙΚΗ ΝΕΥΡΩΝΙΚΟΥ ΔΙΚΤΥΟΥ.....	12
3.4 ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗΣ	13
ΕΝΟΤΗΤΑ 3.4.Α ΠΡΟΕΠΕΞΕΡΓΑΣΙΑ ΔΕΔΟΜΕΝΩΝ.....	13
ΕΝΟΤΗΤΑ 3.4.Β ΠΑΡΑΜΕΤΡΟΙ ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗΣ.....	13
ΕΝΟΤΗΤΑ 3.4.Γ ΤΕΧΝΙΚΕΣ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗΣ	13
3.5 ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ ΤΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ	14
ΕΝΟΤΗΤΑ 3.5.Α ΜΕΤΡΙΚΕΣ ΑΠΟΔΟΣΗΣ.....	14
ΕΝΟΤΗΤΑ 3.5.Β ΟΠΤΙΚΟΠΟΙΗΣΗ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΟΣ.....	14
3.6 ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ ΚΑΙ ΜΕΛΛΟΝΤΙΚΕΣ ΒΕΛΤΙΩΣΕΙΣ.....	15
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4 ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΔΙΑΔΟΣΗΣ ΡΩΓΜΩΝ	16
4.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ.....	16
4.2 ΠΑΡΑΜΕΤΡΟΙ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ.....	16
ΕΝΟΤΗΤΑ 4.2.Α ΒΑΣΙΚΕΣ ΠΑΡΑΜΕΤΡΟΙ	16
ΕΝΟΤΗΤΑ 4.2.Β ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΥΛΙΚΩΝ.....	16
4.3 ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ	17
ΕΝΟΤΗΤΑ 4.3.Α ΑΡΧΙΚΟΠΟΙΗΣΗ ΠΛΕΓΜΑΤΟΣ.....	17
ΕΝΟΤΗΤΑ 4.3.Β ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ ΔΙΑΔΟΣΗΣ ΡΩΓΜΗΣ	17

ΕΝΟΤΗΤΑ 4.3.Γ ΚΡΙΤΗΡΙΑ ΤΕΡΜΑΤΙΣΜΟΥ.....	20
4.4 ΜΕΤΡΙΚΕΣ ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗΣ	21
ΕΝΟΤΗΤΑ 4.4.Α ΒΑΣΙΚΕΣ ΜΕΤΡΙΚΕΣ.....	21
ΕΝΟΤΗΤΑ 4.4.Β ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ	22
4.5 ΟΠΤΙΚΟΠΟΙΗΣΗ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ.....	22
ΕΝΟΤΗΤΑ 4.5.Α ΧΡΩΜΑΤΙΚΗ ΚΩΔΙΚΟΠΟΙΗΣΗ	22
ΕΝΟΤΗΤΑ 4.5.Β ΑΠΟΘΗΚΕΥΣΗ ΚΑΙ ΑΝΑΛΥΣΗ	23
4.6 ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ.....	24
 <u>ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5 ΚΩΔΙΚΕΣ ΚΑΙ ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΑ ΔΕΔΟΜΕΝΑ –</u>	
<u>ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ</u>	<u>25</u>
 5.1 ΚΩΔΙΚΕΣ.....	25
ΕΝΟΤΗΤΑ 5.1.Α ΚΩΔΙΚΑΣ ΕΥΦΥΟΥΣ ΤΕΧΝΙΚΗΣ	25
ΕΝΟΤΗΤΑ 5.1.Β ΚΩΔΙΚΑΣ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ ΑΝΤΟΧΗΣ ΥΛΙΚΩΝ	28
ΕΝΟΤΗΤΑ 5.1.Γ ΚΩΔΙΚΑΣ ΤΥΠΙΚΗΣ ΑΠΟΚΛΙΣΗΣ.....	38
5.2 ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΑ ΔΕΔΟΜΕΝΑ ΚΑΙ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ	39
ΕΝΟΤΗΤΑ 5.2.Α ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΕΥΦΥΟΥΣ ΤΕΧΝΙΚΗΣ.....	39
ΕΝΟΤΗΤΑ 5.2.Β ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ ΑΝΤΟΧΗΣ ΥΛΙΚΩΝ	44
ΕΝΟΤΗΤΑ 5.2.Γ ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ ΕΥΦΥΟΥΣ ΤΕΧΝΙΚΗΣ ΚΑΙ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ	
ΑΝΤΟΧΗΣ ΥΛΙΚΩΝ.....	53
 <u>ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6 ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ ΚΑΙ ΜΕΛΛΟΝΤΙΚΕΣ ΠΡΟΕΚΤΑΣΕΙΣ</u>	<u>56</u>
 6.1 ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ	56
6.2 ΜΕΛΛΟΝΤΙΚΕΣ ΠΡΟΕΚΤΑΣΕΙΣ.....	56
 <u>ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ.....</u>	<u>57</u>

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1 Εισαγωγή

1.1 Κίνητρο Πτυχιακής εργασίας

Η συνεχής εξέλιξη των υπολογιστικών συστημάτων και η ραγδαία ανάπτυξη των τεχνικών τεχνητής νοημοσύνης έχουν δημιουργήσει νέες προοπτικές στον τομέα της προσομοίωσης αντοχής υλικών. Η ενσωμάτωση ευφύων τεχνικών στις ήδη υπάρχουσες μεθόδους προσομοίωσης αποτελεί ένα πεδίο με σημαντικές προοπτικές τόσο σε ερευνητικό όσο και σε εφαρμοσμένο επίπεδο.

Η εν λόγω πτυχιακή εργασία έχει ως κίνητρο την ανάγκη βελτιστοποίησης των υφιστάμενων μεθόδων προσομοίωσης, με στόχο την επίτευξη ακριβέστερων προβλέψεων και τη μείωση του υπολογιστικού κόστους. Οι ευφυείς τεχνικές, όπως τα νευρωνικά δίκτυα και οι αλγόριθμοι μηχανικής μάθησης, προσφέρουν τη δυνατότητα για:

1. Ταχύτερη επεξεργασία πολύπλοκων μοντέλων προσομοίωσης.
2. Αναγνώριση μοτίβων και προτύπων στη συμπεριφορά των υλικών.
3. Βελτιστοποίηση των παραμέτρων προσομοίωσης.
4. Πρόβλεψη αστοχιών και κρίσιμων καταστάσεων.

Η σύγχρονη βιομηχανία απαιτεί ολοένα και πιο αξιόπιστες μεθόδους για την αξιολόγηση της αντοχής υλικών, καθώς οι απαιτήσεις για αποδοτικότητα και ασφάλεια αυξάνονται διαρκώς. Η ενσωμάτωση ευφύων τεχνικών στην προσομοίωση μπορεί να συμβάλει στην κάλυψη αυτών των αναγκών, προσφέροντας παράλληλα νέες δυνατότητες στην έρευνα και ανάπτυξη καινοτόμων υλικών.

Επιπρόσθετα, η διεπιστημονική φύση του θέματος, που συνδυάζει στοιχεία από τη μηχανική υλικών, την επιστήμη των υπολογιστών και την τεχνητή νοημοσύνη, προσφέρει ένα πλούσιο πεδίο έρευνας με σημαντικές προοπτικές για μελλοντική επέκταση και εφαρμογή σε διάφορους τομείς της βιομηχανίας.

1.2 Ιστορία της προσομοίωσης αντοχής υλικού και των ευφύων τεχνικών

Ενότητα 1.2.α Προσομοίωση αντοχής υλικών

Η μελέτη και η προσομοίωση της αντοχής των υλικών αποτελούν κύριους πυλώνες της μηχανικής επιστήμης, με ιστορία πολλών ετών. Η συστηματική μελέτη του πεδίου ξεκίνησε τον 17ο αιώνα, όταν ο Robert Hooke διατύπωσε τον ομώνυμο νόμο του (1660), ο οποίος περιέγραψε για πρώτη φορά τη γραμμική σχέση μεταξύ της εφαρμοζόμενης δύναμης και της παραμόρφωσης ενός ελαστικού σώματος (Zienkiewicz et al., 2013).

Κατά τον 19^ο αιώνα υπήρξε σημαντική εξέλιξη με τη συμβολή δύο σπουδαίων μαθηματικών και μηχανικών. Ο Claude-Louis Navier και ο Augustin-Louis Cauchy ανέπτυξαν τη θεωρία της ελαστικότητας, θέτοντας τη βάση για τη μηχανική των συνεχών μέσων. Η θεωρία τους παραμένει μέχρι σήμερα ο ακρογωνιαίος λίθος στην κατανόηση της συμπεριφοράς των υλικών υπό την επίδραση εξωτερικών φορτίων (Hughes, 1987), (Zienkiewicz et al., 2013).

Η πραγματική επανάσταση στην προσομοίωση αντοχής υλικών ήρθε στα μέσα του 20ού αιώνα με την ανάπτυξη της μεθόδου των πεπερασμένων στοιχείων (Finite Element Method

- FEM). Η μέθοδος αυτή, που αναπτύχθηκε από τους Richard Courant, Ray Clough και τους συνεργάτες τους τη δεκαετία του 1940, έδωσε για πρώτη φορά τη δυνατότητα αριθμητικής επίλυσης πολύπλοκων προβλημάτων μηχανικής (Felippa, 2004), (Zienkiewicz, 2000).

Η έλευση των ηλεκτρονικών υπολογιστών τη δεκαετία του 1960 σηματοδότησε μια νέα εποχή στην προσομοίωση αντοχής υλικών. Η NASA πρωτοστάτησε στην ανάπτυξη του NASTRAN, ενός από τα πρώτα προγράμματα ανάλυσης με πεπερασμένα στοιχεία (Hughes, 1987), (Felippa, 2004). Ακολούθησε η ανάπτυξη εμπορικών λογισμικών CAE (Computer-Aided Engineering) τις δεκαετίες 1970 και 1980, με πιο γνωστά το ANSYS και το ABAQUS, τα οποία έφεραν την τεχνολογία προσομοίωσης στη βιομηχανία (Zienkiewicz et al., 2013), (Hughes, 1987).

Από τη δεκαετία του 1990 μέχρι σήμερα, η διαρκής αύξηση της υπολογιστικής ισχύος έχει επιτρέψει την πραγματοποίηση όλο και πιο πολύπλοκων προσομοιώσεων. Σύγχρονες εφαρμογές περιλαμβάνουν προσομοιώσεις δυναμικών φαινομένων και πολύπλοκων συστημάτων, όπως και μη γραμμικές αναλύσεις (Zienkiewicz et al., 2013).

Ενότητα 1.2.8 Ευφυής τεχνική

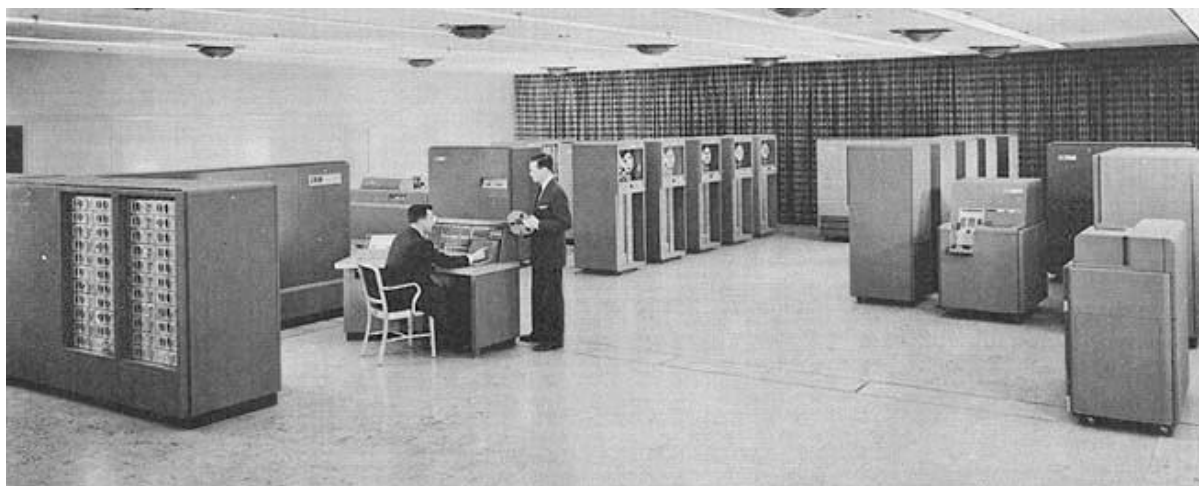
Πρώιμη Περίοδος (1940-1955):

Η ιστορία της τεχνητής νοημοσύνης αρχίζει με τη θεωρητική εργασία των McCulloch και Pitts (1943), οι οποίοι πρότειναν το πρώτο μαθηματικό μοντέλο τεχνητού νευρώνα (Russell & Norvig, 2020). Ο Alan Turing, το 1950, δημοσίευσε το ιστορικό άρθρο “Computing Machinery and Intelligence”, εισάγοντας το διάσημο τεστ “Turing” και θέτοντας τις βάσεις για τη συζήτηση περί μηχανικής νοημοσύνης (Turing, 1950).

Η Γέννηση του Πεδίου (1956-1969):

Στο συνέδριο του Dartmouth College (1956), καθιερώθηκε επίσημα ο όρος “Τεχνητή Νοημοσύνη” (McCorduck, 2004). Οι John McCarthy, Marvin Minsky, Nathaniel Rochester και Claude Shannon ήταν οι επικεφαλής αυτής της ιστορικής συνάντησης. Την ίδια περίοδο, αναπτύχθηκαν τα πρώτα προγράμματα επίλυσης προβλημάτων:

- Logic Theorist (1956) από τους Newell και Simon.
- General Problem Solver (1957) (Nilsson, 2009).
- LISP γλώσσα προγραμματισμού (1958) (Russell & Norvig, 2020).



Εικόνα 1. Το IBM 702 : ένας υπολογιστής που χρησιμοποιήθηκε από την πρώτη γενιά ερευνητών τεχνητής νοημοσύνης.

Η Πρώτη Χρυσή Εποχή (1970-1974):

Η περίοδος 1970-1974 σηματοδότησε το ξεκίνημα της Τεχνητής Νοημοσύνης, με την ανάπτυξη των πρώτων έμπειρων συστημάτων. Το DENDRAL, που αναπτύχθηκε το 1969, αποτέλεσε το πρώτο επιτυχημένο έμπειρο σύστημα σχεδιασμένο για την ανάλυση χημικών ενώσεων. Ακολούθησε το MYCIN, το 1972, ένα πρωτοποριακό σύστημα για τη διάγνωση λοιμώξεων του αίματος και τη συνταγογράφηση αντιβιοτικών (Russell & Norvig, 2020). Την ίδια χρονιά, η ανάπτυξη της γλώσσας προγραμματισμού PROLOG έθεσε νέα θεμέλια στον λογικό προγραμματισμό και την αναπαράσταση γνώσης (Nilsson, 2009).

Η Ανάπτυξη των Έμπειρων Συστημάτων (1980-1987):

Κατά τη δεκαετία του 1980, τα έμπειρα συστήματα γνώρισαν ευρεία εφαρμογή στη βιομηχανία. Χαρακτηριστικό παράδειγμα αποτελεί το σύστημα XCON της Digital Equipment Corporation, το οποίο χρησιμοποιήθηκε για τη διαμόρφωση συστημάτων υπολογιστών. Το PROSPECTOR, εφαρμόστηκε στη γεωλογική έρευνα επιδεικνύοντας τη δυνατότητα της τεχνητής νοημοσύνης να υποστηρίξει επιστημονικές ανακαλύψεις (Russell & Norvig, 2020).

Η Εποχή των Νευρωνικών Δικτύων (1987-1993):

Η περίοδος 1987-1993 χαρακτηρίστηκε από την ανάπτυξη του ενδιαφέροντος για τα νευρωνικά δίκτυα. Η δημιουργία του αλγόριθμου backpropagation αποτέλεσε ένα σημαντικό στοιχείο, επιτρέποντας την αποτελεσματική εκπαίδευση πολυεπίπεδων νευρωνικών δικτύων (Nilsson, 2009). Παράλληλα, η εμφάνιση των Συνελικτικών Νευρωνικών Δικτύων (CNN) άνοιξε νέους ορίζοντες στην επεξεργασία εικόνας (Russell & Norvig, 2020).

Σύγχρονη Εποχή (2000-σήμερα):

Η σύγχρονη εποχή της Τεχνητής Νοημοσύνης χαρακτηρίζεται από ραγδαίες εξελίξεις και επαναστατικές καινοτομίες. Το 2006 σηματοδότησε την έναρξη της εποχής του Deep Learning με την ανάπτυξη των Deep Neural Networks (Russell & Norvig, 2020). Το 2011, το IBM Watson επέδειξε τις δυνατότητες της Τεχνητής Νοημοσύνης στην επεξεργασία φυσικής γλώσσας, κερδίζοντας στο τηλεπαιχνίδι Jeopardy. Το 2012, το AlexNet σημείωσε ορόσημο στην αναγνώριση εικόνας, επιτυγχάνοντας πρωτοφανή ακρίβεια στον διαγωνισμό ImageNet (Russell & Norvig, 2020). Το 2014, η εισαγωγή των Generative Adversarial Networks (GANs) άνοιξε νέους ορίζοντες στη δημιουργική Τεχνητή Νοημοσύνη και τη σύνθεση εικόνων. Η αρχιτεκτονική Transformer, που παρουσιάστηκε το 2017, επαναπροσδιόρισε την

επεξεργασία φυσικής γλώσσας, οδηγώντας στην ανάπτυξη των Large Language Models (2018-2020) όπως τα GPT και BERT, που έχουν φέρει επανάσταση στην κατανόηση και παραγωγή κειμένου (Russell & Norvig, 2020).

1.3 Βιβλιογραφική Ανασκόπηση Σχετικών Μελετών

Η εφαρμογή νευρωνικών δικτύων στη προσομοίωση και πρόβλεψη της μηχανικής συμπεριφοράς υλικών έχει μελετηθεί από διάφορες ερευνητικές ομάδες, με διαφορετικές εστιάσεις και προσεγγίσεις. Οι Ghabussi και Sidarta (1998) επικεντρώθηκαν στην ανάπτυξη των Nested Adaptive Neural Networks (NANN) για τη μοντελοποίηση της συμπεριφοράς εδαφών. Χρησιμοποίησαν feed-forward νευρωνικά δίκτυα με αλγόριθμο εκπαίδευσης back-propagation, εστιάζοντας κυρίως στην πρόβλεψη των τάσεων - παραμορφώσεων σε γεωτεχνικές εφαρμογές.

Οι Ziemianski et al. (2001) παρουσίασαν μια ευρύτερη επισκόπηση των εφαρμογών νευρωνικών δικτύων στη μηχανική των κατασκευών. Η έρευνά τους εξέτασε διάφορες εφαρμογές των Multi-Layer Perceptrons (MLPs) σε προβλήματα δομικής ανάλυσης, συμπεριλαμβανομένης της ανάλυσης κατασκευών και της αναγνώρισης βλαβών, χωρίς να εστιάζει συγκεκριμένα στην αντοχή υλικών.

Ιδιαίτερα σημαντική για το πεδίο των σύνθετων υλικών είναι η ανασκόπηση του El Kadi (2006), η οποία επικεντρώθηκε στη μοντελοποίηση της μηχανικής συμπεριφοράς πολυμερών ενισχυμένων με ίνες. Η έρευνα εξέτασε διάφορες εφαρμογές νευρωνικών δικτύων στην πρόβλεψη ιδιοτήτων όπως η αντοχή σε εφελκυσμό, η αντοχή σε κόπωση και η συμπεριφορά σε κρούση των σύνθετων υλικών.

Συγκεκριμένα εξέτασε τη χρήση:

- Feed-Forward Back-Propagation Neural Networks (FFBP), για την πρόβλεψη μηχανικών ιδιοτήτων.
- Radial Basis Function Networks (RBF) για την πρόβλεψη μη γραμμικών συμπεριφορών.
- Learning Vector Quantization Networks (LVQ) για προβλήματα ταξινόμησης και αναγνώριση προτύπων αστοχίας.
- Modular Neural Networks, συνδυάζοντας πολλαπλά εξειδικευμένα δίκτυα.
- Recurrent Neural Networks για την πρόβλεψη χρονικά εξαρτώμενων ιδιοτήτων, ιδιαίτερα σε μελέτες κόπωσης.

Για την εκπαίδευση αυτών των δικτύων, χρησιμοποιήθηκαν διάφοροι αλγόριθμοι όπως Levenberg-Marquardt, conjugate gradient, delta rule και generalized delta rule.

Οι Balokas et al. (2018) εστίασαν στην πρόβλεψη των ελαστικών ιδιοτήτων τρισδιάστατων πλεκτών συνθέτων. Χρησιμοποίησαν ένα ensemble νευρωνικών δικτύων για να προβλέψουν το μέτρο ελαστικότητας και τον λόγο Poisson των υλικών, λαμβάνοντας υπόψη την αβεβαιότητα στις μικροδομικές παραμέτρους.

Οι Gu et al. (2018) ακολούθησαν μια διαφορετική προσέγγιση, εστιάζοντας στο σχεδιασμό νέων σύνθετων υλικών. Χρησιμοποίησαν συνδυασμό Deep Neural Networks και Generative Adversarial Networks για να δημιουργήσουν και να αξιολογήσουν νέους σχεδιασμούς σύνθετων υλικών με στόχο τη βελτιστοποίηση συγκεκριμένων μηχανικών ιδιοτήτων.

1.4 Δυσκολίες - Προκλήσεις

Οι δυσκολίες στην εν λόγω εργασία, παρουσιάστηκαν στην υλοποίηση του προσομοιωτή αντοχής υλικών και στην ευφυή τεχνική.

Αρχικά κατά την υλοποίηση του προσομοιωτή αντοχής υλικών, μια από τις δυσκολότερες προκλήσεις ήταν η επιλογή του κατάλληλου πιθανοθεωρητικού μοντέλου για την καλύτερη προσομοίωση της φύσης και των κανόνων της. Έπειτα, μια πρόκληση ήταν η επέκταση της ανάλυσης του προσομοιωτή στην ανάλυση δυο υλικών πρόσμειξης.

Στη συνέχεια, μια δυσκολία υπήρξε στην επιλογή της κατάλληλης αρχιτεκτονικής του μοντέλου και μια από τις πιο δύσκολες προκλήσεις ήταν η αντιμετώπιση του overfitting και του μεγάλου «θορύβου» των δεδομένων που παρέχουν αστάθεια στο μοντέλο.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2 ΦΥΣΙΚΗ ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗ

2.1 Εισαγωγή

Η μελέτη της διάδοσης ρωγμών σε υλικά με προσμίξεις αποτελεί ένα σύνθετο φυσικό φαινόμενο που απαιτεί την κατανόηση των μηχανισμών που λαμβάνουν χώρα τόσο σε μακροσκοπική όσο και σε μικροσκοπική κλίμακα. Η παρουσία προσμίξεων και των διεπιφανειών τους με τη μήτρα του υλικού επηρεάζει καθοριστικά τη συμπεριφορά και τις μηχανικές ιδιότητες του υλικού, ιδιαίτερα σε ότι αφορά την αντοχή του στη θραύση.

Σε αυτό το κεφάλαιο παρουσιάζεται η φυσική προσέγγιση του προβλήματος, εστιάζοντας στους δύο βασικούς μηχανισμούς διάδοσης των ρωγμών: την ενδοκρυσταλλική (transgranular) και την περικρυσταλλική (intergranular) διάδοση. Επίσης αναλύονται οι παράγοντες που επηρεάζουν την επιλογή της διαδρομής της ρωγμής, όπως οι διαφορές στους συντελεστές θερμικής διαστολής και τα ελαστικά μέτρα μεταξύ προσμίξεων και μήτρας, καθώς και τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά των κρυσταλλιτών.

Επιπλέον, περιγράφεται η θεωρητική βάση του υπολογιστικού μοντέλου που αναπτύχθηκε, το οποίο βασίζεται στην θεωρία του τυχαίου περιπατητή και ενσωματώνει τις ενεργειακές παραμέτρους των διαφορετικών φάσεων του υλικού. Το μοντέλο αυτό αποσκοπεί στην προσομοίωση της διάδοσης ρωγμών σε υλικά με προσμίξεις, επιτρέποντας τη μελέτη της επίδρασης διαφόρων παραμέτρων στην τελική συμπεριφορά του υλικού.

2.2 Περιγραφή Φυσικής Προσέγγισης και Μεθοδολογίας

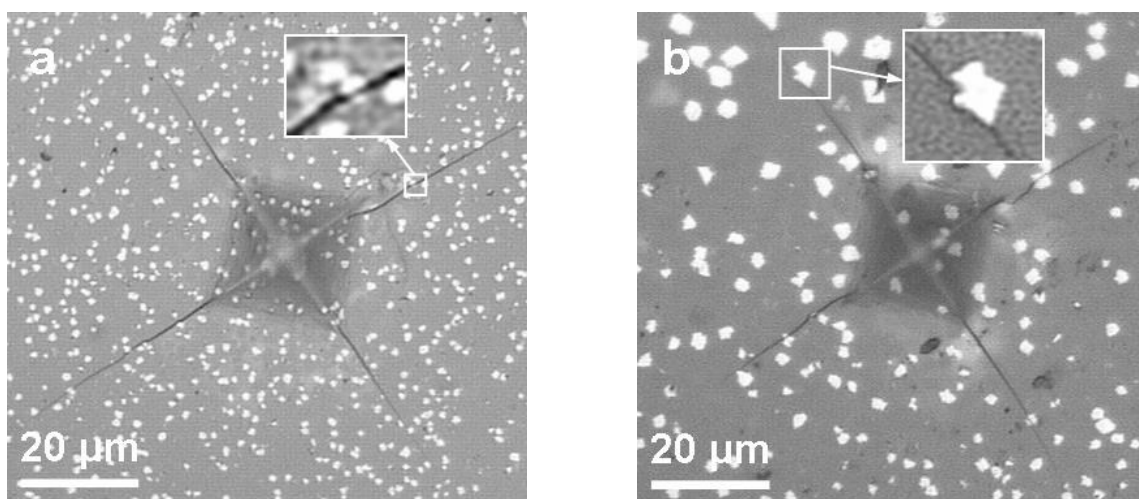
Η αντοχή ενός υλικού απέναντι στη διάδοση των ρωγμών αποτελεί μία από τις πιο καθοριστικές ιδιότητές του. Σε πολλά δομικά υλικά, μικροσκοπικές ρωγμές μπορούν να σχηματιστούν είτε λόγω εφαρμοζόμενων φορτίων είτε ως αποτέλεσμα της διαδικασίας παραγωγής, θερμικής επεξεργασίας και άλλων παραγόντων. Υπό συνθήκες πρόσθετης φόρτισης, αυτές οι ρωγμές ενδέχεται να αναπτυχθούν σημαντικά, φτάνοντας σε σημείο που οδηγεί στην αστοχία του υλικού (Orellana et al., 2017). Η διάδοση των ρωγμών, ιδιαίτερα στην περίπτωση της ψαθυρής θραύσης, είναι ένα φαινόμενο όπου οι μακροσκοπικές ιδιότητες του υλικού επηρεάζονται σχεδόν αποκλειστικά από διεργασίες που λαμβάνουν χώρα στην ατομική κλίμακα (Bitzek et al. 2015). Η ψαθυρή θραύση συνιστά έναν κρίσιμο μηχανισμό αστοχίας, καθώς οι ρωγμές διαδίδονται εξαιρετικά γρήγορα, συνοδεύονται από ελάχιστη πλαστική παραμόρφωση και εμφανίζονται απότομα, χωρίς προειδοποίηση, κυρίως σε κεραμικά και πολυμερή υλικά. Λόγω αυτών των χαρακτηριστικών, τα τελευταία χρόνια έχει αυξηθεί το επιστημονικό ενδιαφέρον για τη διερεύνηση της επίδρασης των προσμίξεων στην αντοχή και τη σκληρότητα των υλικών.

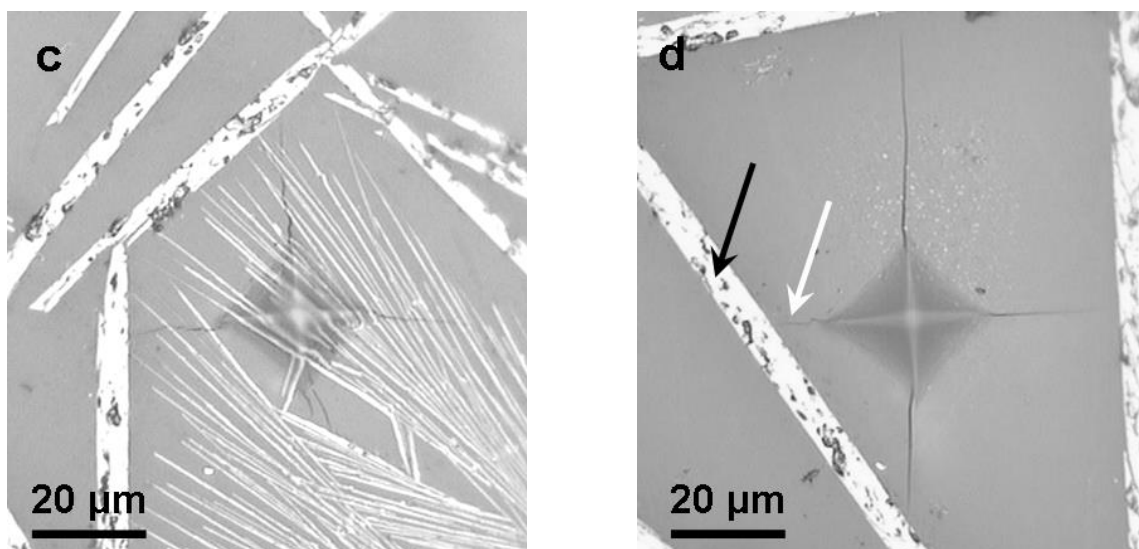
Η μελέτη των υλικών που περιέχουν προσμίξεις διαφορετικής σύνθεσης έχει προσελκύσει σημαντικό ενδιαφέρον (βλ. για παράδειγμα Steinhäuser & Hiermaier, 2009· Bitzek et al., 2015). Ο λόγος είναι ότι οι μηχανικές ιδιότητες των υλικών μπορούν να τροποποιηθούν σκόπιμα όταν συνδυάζονται με σύνθετες προσμίξεις, οδηγώντας στην κατασκευή εξατομικευμένων υλικών. Σε πολλές περιπτώσεις, το μέγεθος αυτών των προσμίξεων φτάνει την κλίμακα μερικών μικρομέτρων ή ακόμη και νανομέτρων.

Έχει αποδειχθεί ότι η αλλαγή της μορφολογίας και της μικροδομής των υλικών με έναν συγκεκριμένο τρόπο οδηγεί και σε αλλαγή των τρόπων θραύσης τους (Zhang et al., 2005). Οι διαφορετικοί τρόποι θραύσης μπορούν επίσης να ερμηνευθούν ως συγκεκριμένες μηχανικές ιδιότητες των υλικών, όπως η αντοχή και η σκληρότητα (βλ. για παράδειγμα Karakasidis &

Charitidis, 2011). Ο βασικός συνδετικός κρίκος μεταξύ των τρόπων θραύσης και των μηχανικών ιδιοτήτων των υλικών είναι το μήκος διάδοσης των ρωγμών. Επιπλέον, υπάρχουν πολλές περιπτώσεις στη βιομηχανία όπου η διαδρομή της ρωγμής πρέπει να προβλεφθεί ή να κατευθυνθεί με συγκεκριμένο τρόπο (Branco & Antunes, 2007).

Οι προσμίξεις και η διεπιφάνειά τους ή οι ζώνες των ορίων των κόκκων (GBs) μπορούν να επηρεάσουν σημαντικά το μέσο και το αποτελεσματικό μήκος, καθώς και τη μέση και την αποτελεσματική ταχύτητα των ρωγμών, βασισμένες σε δύο μηχανισμούς διάδοσης (Janeiro & Einstein, 2010· Chen et al., 2013). Η ρωγμή μπορεί είτε να διαπεράσει την πρόσμιξη ενώ διαδίδεται σε ενδοκρυσταλλικό (transgranular) τρόπο είτε να διαδοθεί μέσω της διεπιφάνειας της πρόσμιξης, κάτι που είναι γνωστό ως περικρυσταλλική (intergranular) διάδοση. Αυτοί οι τρόποι διάδοσης προκύπτουν από τις διαφορές στον συντελεστή θερμικής διαστολής και στο ελαστικό μέτρο της διεπιφάνειας μεταξύ της πρόσμιξης και της μήτρας, με αποτέλεσμα διάφορους μηχανισμούς θραύσης που καθορίζουν την αντοχή και τη σκληρότητα του υλικού (Orellana et al., 2015). Η διαδρομή της ρωγμής επηρεάζεται επίσης από τα χαρακτηριστικά των κρυσταλλιτών, όπως οι σχετικές αποστάσεις, η γεωμετρία και το μέγεθός τους (Falzone et al., 2016,· Cho et al., 2006). Η διεπιφάνεια των προσμίξεων διαφοροποιείται από την άμορφη μήτρα και τις προσμίξεις ως προς την ενέργεια σύνδεσης, και αποτελεί μια ειδική ζώνη (βλ. για παράδειγμα Janeiro & Einstein, 2010· Karakasidis & Charitidis, 2011). Στα περισσότερα ψαθυρά κρυσταλλικά υλικά, η διάδοση ρωγμών αντιστοιχεί στη διαδοχική θραύση ατομικών δεσμών κατά μήκος κρυσταλλογραφικών επιπέδων. Το είδος αυτό θραύσης ονομάζεται ενδοκρυσταλλική και οι ρωγμές διαπερνούν τους κρυσταλλίτες. Ο δεύτερος τρόπος διέλευσης της ρωγμής από τους κρυσταλλίτες πραγματοποιείται κατά μήκος των ορίων των κρυσταλλιτών. Τα όρια των κρυσταλλιτών αποτελούν τη διεπιφάνεια (grain boundary) μεταξύ μήτρας και των προσμίξεων. Εξετάζεται ως διαφορετική περιοχή και διαφέρει σε σύγκριση με την άμορφη μήτρα και τις προσμίξεις ως προς την ενέργεια σύνδεσης (Karakasidis & Charitidis, 2011). Στην Εικόνα 2 παρουσιάζονται παραδείγματα διαφόρων τρόπων διάδοσης ρωγμών από πειραματικά αποτελέσματα.





Εικόνα 2. Οπτικές μικρογραφίες ακτινικών ρωγμών που προκαλούνται από εσοχές από προϊόντα G και N που δείχνουν ενδοκρυσταλλική (α) και (γ) και μη ενδοκρυσταλλική (β) και (δ) διάδοση. Μεγεθυμένες φωτογραφίες που δείχνουν συμβάντα ενδοκρυσταλλική και μη ενδοκρυσταλλική ρωγμών εμφανίζονται ως ένθετα στα σχήματα α και β, αντίστοιχα (πηγή Charitidis et al. 2011).

Οι υπολογιστικές μέθοδοι προσφέρουν ένα εξαιρετικό εργαλείο για τη μελέτη της διάδοσης των ρωγμών. Οι πιο διαδεδομένες προσεγγίσεις είναι η Μέθοδος των Πεπερασμένων Στοιχείων (FEM), που βασίζεται στην προσέγγιση του συνεχούς μέσου, και η προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής (MD), που αντιμετωπίζει τα υλικά σε ατομική κλίμακα (Bitzek et al., 2015). Η πρώτη αντιμετωπίζει δυσκολίες κλίμακας, καθώς βασίζεται στη θεωρία της συνεχείας. Ως εκ τούτου, η κλίμακα στην οποία μπορούμε να φτάσουμε με αυτήν τη μέθοδο, ώστε να μην παραβιαστεί η θεωρία, δεν είναι ιδιαίτερα ικανοποιητική όταν η μελέτη του φαινομένου απαιτεί ατομικές κλίμακες. Επιπλέον, σε ορισμένες διατυπώσεις, η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων (FEM) είναι χρονοβόρα, καθώς απαιτεί συνεχή ανανέωση του πλέγματος για την παρακολούθηση της επέκτασης της ρωγμής (Knight et al., 2002).

Για να ξεπεραστούν τέτοια προβλήματα και να καλυφθούν διαφορετικές χωροχρονικές κλίμακες, έχουν προταθεί διάφορες μέθοδοι πολλαπλών κλιμάκων. Οι περισσότερες από αυτές συνδυάζουν τη μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων (FEM) μακριά από την περιοχή της ρωγμής με τη μέθοδο Μοριακής Δυναμικής (MD) στην περιοχή της ρωγμής (βλ. Steinhauser & Hiermaier, 2009). Ωστόσο, το ταυτόχρονο μοντέλο πολυκλιμακικής προσομοίωσης, όπου FEM και MD εφαρμόζονται ταυτόχρονα για την επίλυση του συστήματος, δεν είναι εύκολο στην υλοποίηση και απαιτεί σημαντικούς υπολογιστικούς πόρους (Bitzek et al., 2015· Farrell et al., 2007· Giannopoulos et al., 2019· Omid A. & Soheil M., 2019).

Κατά συνέπεια, προκύπτει η ανάγκη για την ανάπτυξη ενός αριθμητικού μοντέλου προσομοίωσης, ικανού να συνδυάζει την ακρίβεια και τη ρεαλιστική απεικόνιση του φαινομένου σε μικρή κλίμακα, διατηρώντας παράλληλα υψηλή αποδοτικότητα όσον αφορά τον απαιτούμενο υπολογιστικό χρόνο. Για τον λόγο αυτό, σε αρκετές περιπτώσεις εφαρμόζεται η ιεραρχική προσέγγιση πολλαπλών κλιμάκων (Karakasidis & Charitidis, 2011).

Στην κατεύθυνση αυτή αναπτύχθηκε υπολογιστικό μοντέλο που κατασκευάστηκε για την παρούσα εργασία, βασίστηκε στο αναλυτικό μοντέλο διάδοσης ρωγμών με την παρουσία προσμίξεων (Argyris & Kehr, 1992) και συνέχεια των εργασιών (Νασίκας 2018,

Αναγνωστόπουλος 2019, Anagnostopoulos et al. 2019) οι οποίες έδειξαν ότι κάτι τέτοιο είναι δυνατό να κατασκευαστεί ένα αδρομερές αριθμητικό μοντέλο το οποίο να ακολουθεί με αρκετά καλό τρόπο την αναμενόμενη γενική συμπεριφορά. Η υλοποίηση έγινε σε μοντέλα που ακολουθούσαν ποιοτικά την συμπεριφορά αντίστοιχων υλικών χωρίς να εστιάζουν στην ακριβή ποσοτική σύγκριση με πειραματικά δεδομένα πραγματικών υλικών. Φαίνεται πως υπάρχει συμφωνία μεταξύ των προτάσεων του μοντέλου και των πειραματικών δεδομένων (Charitidis κ.ά., 2007), ενώ στο μοντέλο ενσωματώθηκε η θεωρία του τυχαίου περιπατητή, λαμβάνοντας υπόψη τη διαφορετική συμπεριφορά των προσμίξεων και της μήτρας και της διεπιφάνειας, βάσει των ενεργειακών παραμέτρων.

Στην παρούσα εργασία τέθηκε ο στόχος να γίνουν προσομοιώσεις σε κρυστάλλους που να προσμοιάζουν περισσότερο σε πιο πραγματικά υλικά όσον αφορά τα ενεργειακά χαρακτηριστικά και να αναπτυχθεί μοντέλο μηχανική μάθησης το οποίο να επιτρέπει την πρόβλεψη του μήκους ρωγμών σε υλικά με τετραγωνικούς κρυσταλλίτες και στη συνέχεια πρόβλεψη ιδιοτήτων σε υλικά που συνδυάζουν δύο είδη προσμίξεων, και έλεγχος της δυνατότητας προβλεψιμότητας καθώς κάτι τέτοιο θα είναι σημαντικό στον ταχύτερο σχεδιασμό υλικών.

Τα μοντέλα θα μπορούν να συνδυαστούν στο μέλλον με δεδομένα από υπολογισμούς ακριβείας με μεθόδους όπως η Μοριακή δυναμική για τον σχεδιασμό πολύπλοκων υλικών με πολλές και διαφορετικές προσμίξεις ώστε να επιτυγχάνονται συγκεκριμένες αντοχές σε θραύση.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3 ΕΥΦΥΗΣ ΤΕΧΝΙΚΗ

3.1 Εισαγωγή

Στο παρόν κεφάλαιο παρουσιάζεται η ανάπτυξη και εφαρμογή ενός “απλού” μοντέλου Μηχανικής Μάθησης- Νευρωνικού Δικτύου για την πρόβλεψη των παραμέτρων του μέσου όρου της ευκλείδειας και της τυπικής απόκλισης. Η χρήση τεχνητής νοημοσύνης στην πρόβλεψη παραμέτρων υλικών αποτελεί μια σύγχρονη προσέγγιση που επιτρέπει την ακριβή εκτίμηση σημαντικών χαρακτηριστικών, βασιζόμενη σε πολλαπλές παραμέτρους εισόδου.

Η Μηχανική Μάθηση ως μεθοδολογία επιλέχθηκε λόγω της ικανότητά της να:

- Αναγνωρίζει πολύπλοκα μη γραμμικά πρότυπα στα δεδομένα (Géron, 2022).
- Προσαρμόζεται σε διαφορετικές κλίμακες και κατανομές δεδομένων (Goodfellow et al., 2016).
- Παρέχει ακριβείς προβλέψεις σε πολυδιάστατα προβλήματα (LeCun et al., 2015).

Τα Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα (ΤΝΔ) αποτελούν μία από τις σημαντικότερες τεχνικές μηχανικής μάθησης, εμπνευσμένη από την λειτουργία του εγκεφάλου (Goodfellow et al., 2016). Ένα νευρωνικό δίκτυο αποτελείται από διασυνδεδεμένους κόμβους (νευρώνες) οι οποίοι είναι οργανωμένοι σε επίπεδα, όπου κάθε σύνδεση έχει ένα βάρος που προσαρμόζεται κατά την διάρκεια της εκπαίδευσης (Bishop, 2006).

Τα βασικά στοιχεία ενός Νευρωνικού Δικτύου περιλαμβάνουν:

- Νευρώνες: Οι βασικές μονάδες επεξεργασίας που δέχονται εισόδους, τις επεξεργάζονται και παράγουν εξόδους (LeCun et al., 2015).
- Συναρτήσεις ενεργοποίησης: Μη γραμμικές συναρτήσεις που καθορίζουν την έξοδο κάθε νευρώνα (LeCun et al., 2015).
- Βάρη και μεροληψίες: Παράμετροι που προσαρμόζονται κατά την εκπαίδευση (Géron, 2022).
- Επίπεδα: Ομάδες νευρώνων οργανωμένες σε επίπεδα εισόδου, κρυφά επίπεδα και επίπεδα εξόδου (Goodfellow et al., 2016).

3.2 Σύγχρονες Τεχνικές

Στην παρούσα εργασία χρησιμοποιούνται σύγχρονες τεχνικές όπως:

- Κανονικοποίηση παρτίδας (Batch Normalization): Τεχνική με την οποία επιτυγχάνεται η εκπαίδευση και η βελτίωση της σταθερότητας του μοντέλου (Géron, 2022).
- Dropout: Μέθοδος κανονικοποίησης για την αποφυγή υπερπροσαρμογής με την οποία το μοντέλο προχωρεί στη μη ψευδαίσθηση των όμοιων δεδομένων (Goodfellow et al., 2016).
- L2 Κανονικοποίηση: Τεχνική ελέγχου της πολυπλοκότητας του μοντέλου (LeCun et al., 2015).
- Συνάρτηση ενεργοποίησης ELU: Προηγμένη συνάρτηση ενεργοποίησης που αντιμετωπίζει το πρόβλημα του εξαφανιζόμενου gradient (Goodfellow et al., 2016).

3.3 Αρχιτεκτονική Μοντέλου

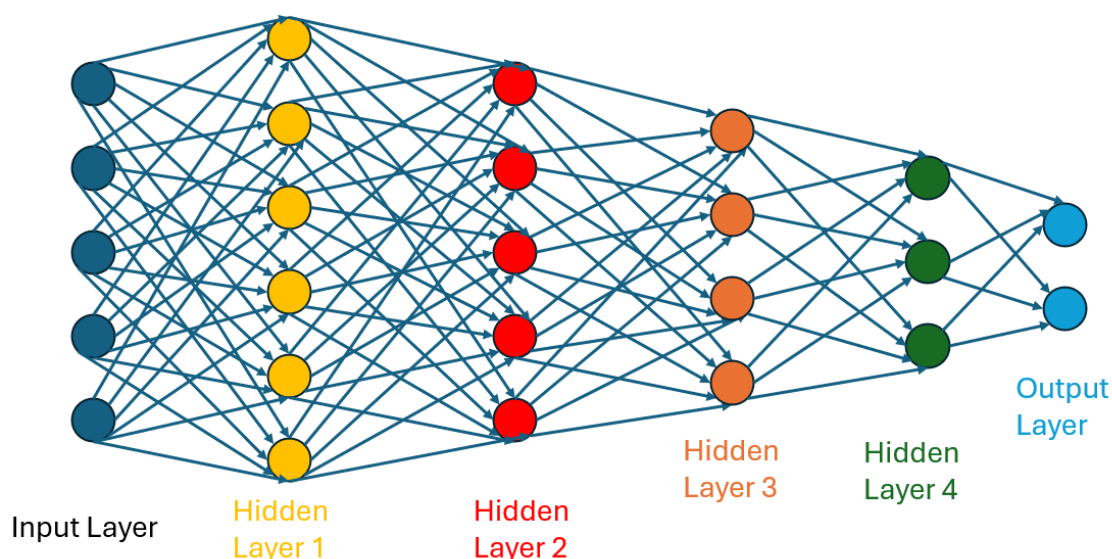
Ενότητα 3.3.α Δομή Δεδομένων Εισόδου Και Εξόδου

Το μοντέλο έχει σχεδιαστεί να δέχεται πέντε βασικές παραμέτρους εισόδου. Συγκεκριμένα, περιλαμβάνει δύο διακριτά ζεύγη παραμέτρων DE και PERCENTAGE. Το DE αντιπροσωπεύει τη διαφορά μεταξύ της ενέργειας του υλικού πρόσμειξης και της ενέργειας που χρειάζεται για να σπάσουν οι δεσμοί στο υλικό χωρίς πρόσμειξη ενώ το PERCENTAGE αντιπροσωπεύει το ποσοστό κάλυψης του σύνθετου υλικού στην μήτρα. Επιπρόσθετα, το μοντέλο δέχεται μία παράμετρο kT, η οποία αντιπροσωπεύει την θερμική ενέργεια ανά άτομο του συστήματος.

Ως αναφορά την έξοδο, το μοντέλο έχει σχεδιαστεί να εξάγει δύο προβλέψεις. Συγκεκριμένα περιλαμβάνει την έξοδο του μέσου όρου της ευκλείδειας απόστασης και της τυπικής απόκλισης.

Ενότητα 3.3.β Αρχιτεκτονική Νευρωνικού Δικτύου

Η αρχιτεκτονική του νευρωνικού δικτύου αποτελείται από ένα επίπεδο με πέντε (5) εισόδους, από τέσσερα (4) διαδοχικά κρυφά επίπεδα, καθένα με μειούμενο αριθμό νευρώνων. Το πρώτο επίπεδο διαθέτει εκατόν είκοσι οκτώ (128) νευρώνες και το δεύτερο επίπεδο εξήντα τέσσερις (64) νευρώνες. Το τρίτο επίπεδο περιλαμβάνει τριάντα δύο (32) νευρώνες, ενώ το τέταρτο επίπεδο αποτελείται από δεκαέξι (16) νευρώνες. Το τελικό επίπεδο εξόδου περιέχει δύο (2) νευρώνες, οι οποίοι είναι υπεύθυνοι για την παραγωγή των δύο (2) προβλέψεων του μοντέλου (μέσος όρος ευκλείδειας και τυπική απόκλιση).



Εικόνα 3. Απεικόνιση νευρωνικού δικτύου.

Κάθε κρυφό επίπεδο του δικτύου ενσωματώνει μια σειρά από σημαντικά χαρακτηριστικά για τη βελτιστοποίηση της απόδοσης. Συγκεκριμένα, χρησιμοποιείται η συνάρτηση ενεργοποίησης ELU (Exponential Linear Unit) για την εισαγωγή μη-γραμμικότητας στο μοντέλο. Επιπρόσθετα, εφαρμόζεται κανονικοποίηση παρτίδας (Batch Normalization) για τη σταθεροποίηση της διαδικασίας εκπαίδευσης και τη βελτίωση της σύγκλισης. Για την αποφυγή του φαινομένου της υπερπροσαρμογής (overfitting), το μοντέλο χρησιμοποιεί τεχνική Dropout, ενώ παράλληλα εφαρμόζεται L2 κανονικοποίηση (regularization) για τον περιορισμό της πολυπλοκότητας του μοντέλου και τη βελτίωση της γενίκευσής του.

3.4 Μεθοδολογία Εκπαίδευσης

Ενότητα 3.4.α Προεπεξεργασία Δεδομένων

Τα δεδομένα που χρησιμοποιήθηκαν στην παρούσα μελέτη που αφορούν μόνο προσμείξεις μήτρας με ένα υλικό προσμείξεων κατασκευάστηκαν μέσω του προσομοιωτή αντοχής υλικών, ο οποίος αναπτύχθηκε και περιγράφεται λεπτομερώς στο Κεφάλαιο 4 της παρούσας μελέτης. Τα δεδομένα υποβλήθηκαν σε προεπεξεργασία χρησιμοποιώντας τον RobustScaler, ο οποίος είναι ιδιαίτερα αποτελεσματικός στην αντιμετώπιση ακραίων τιμών (outliers) (Géron, 2022). Τα δεδομένα χωρίστηκαν σε σύνολο εκπαίδευσης (80%) και δοκιμής (20%).

Ενότητα 3.4.β Παράμετροι Εκπαίδευσης

Η εκπαίδευση του μοντέλου βασίζεται σε προσεκτικά επιλεγμένες παραμέτρους για τη βελτιστοποίηση της απόδοσής του. Για την εκπαίδευση του νευρωνικού δικτύου χρησιμοποιήθηκε η συνάρτηση σφάλματος Huber loss, η οποία συνδυάζει τα πλεονεκτήματα των συναρτήσεων Mean Squared Error και Mean Absolute Error, παρέχοντας ανθεκτικότητα και καλύτερη διαχείριση των ακραίων τιμών (Goodfellow et al., 2016). Για τη διαδικασία βελτιστοποίησης χρησιμοποιείται ο αλγόριθμος Adam με αρχικό ρυθμό μάθησης 0.001, ο οποίος προσαρμόζει δυναμικά τους ρυθμούς μάθησης για κάθε παράμετρο. Ο ρυθμός μάθησης 0.001 παρέχει μια καλή ισορροπία μεταξύ ταχύτητας σύγκλισης και σταθερότητας. Αν χρησιμοποιηθεί μεγαλύτερος ρυθμός μάθησης (π.χ. 0.01 ή 0.1), το μοντέλο μπορεί να συγκλίνει πιο γρήγορα, αλλά υπάρχει κίνδυνος να χάσει το βέλτιστο σημείο ή να παρουσιάσει αστάθεια κατά την εκπαίδευση. Αντίθετα, ένας μικρότερος ρυθμός μάθησης (π.χ. 0.0001) θα έκανε την εκπαίδευση υπερβολικά αργή και σταθερή (Bishop, 2006).

Η αξιολόγηση της απόδοσης του μοντέλου πραγματοποιείται μέσω τριών βασικών μετρικών: του Μέσου Απόλυτου Σφάλματος (MAE), της Ρίζας του Μέσου Τετραγωνικού Σφάλματος (RMSE) και της Ακρίβειας (Accuracy). Το μέγεθος της παρτίδας εκπαίδευσης (batch size) ορίστηκε στα εξήντα τέσσερα (64) δείγματα, ενώ η διαδικασία εκπαίδευσης εκτελείται για τριακόσιες (300) εποχές (epochs).

Ενότητα 3.4.γ Τεχνικές Βελτιστοποίησης

Για τη βελτίωση της απόδοσης του μοντέλου, εφαρμόζονται τρεις (3) βασικές τεχνικές βελτιστοποίησης. Αρχικά χρησιμοποιείται η τεχνική μείωσης του ρυθμού μάθησης (ReduceLROnPlateau) με παράγοντα μείωσης 0.2, η οποία προσαρμόζει δυναμικά τον ρυθμό μάθησης όταν η απόδοση του μοντέλου σταθεροποιείται ή η βελτίωση του μοντέλου

επιβραδύνεται (LeCun et al., 2015). Η επιλογή του παράγοντα μείωσης 0.2 είναι μια στρατηγική επιλογή για τη σταδιακή προσαρμογή του ρυθμού μάθησης. Αυτή η τιμή σημαίνει ότι όταν η βελτίωση του μοντέλου επιβραδύνεται, ο ρυθμός μάθησης θα μειωθεί στο 20% της προηγούμενης τιμής του. Για την αποφυγή της υπερπροσαρμογής (overfitting) εφαρμόστηκε η τεχνική Dropout, η οποία απενεργοποιεί τυχαία νευρώνες κατά τη διάρκεια της εκπαίδευσης (Goodfellow et al., 2016). Τέλος, χρησιμοποιείται η L2 κανονικοποίηση για τον έλεγχο της πολυπλοκότητας του μοντέλου, περιορίζοντας το μέγεθος των βαρών και βελτιώνοντας τη δυνατότητα γενίκευσης του μοντέλου σε νέα δεδομένα (LeCun et al., 2015).

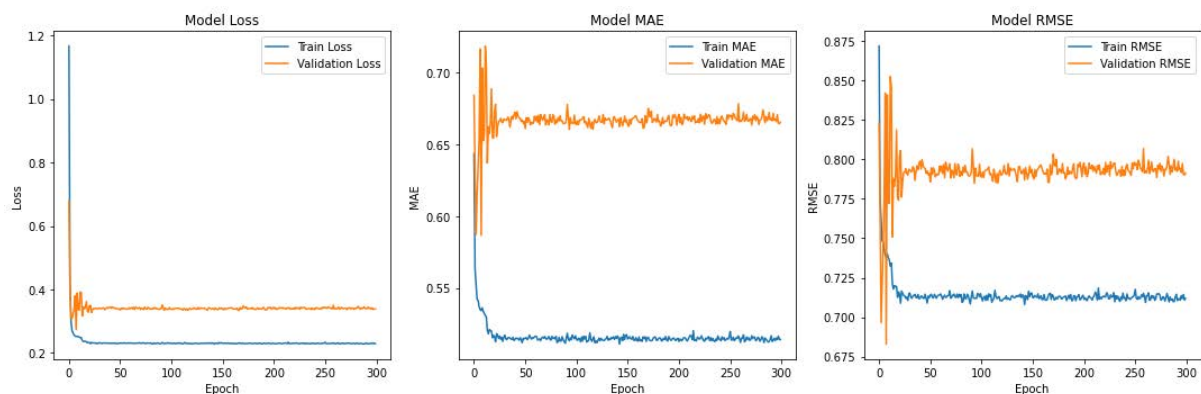
3.5 Αξιολόγηση του Μοντέλου

Ενότητα 3.5.α Μετρικές Απόδοσης

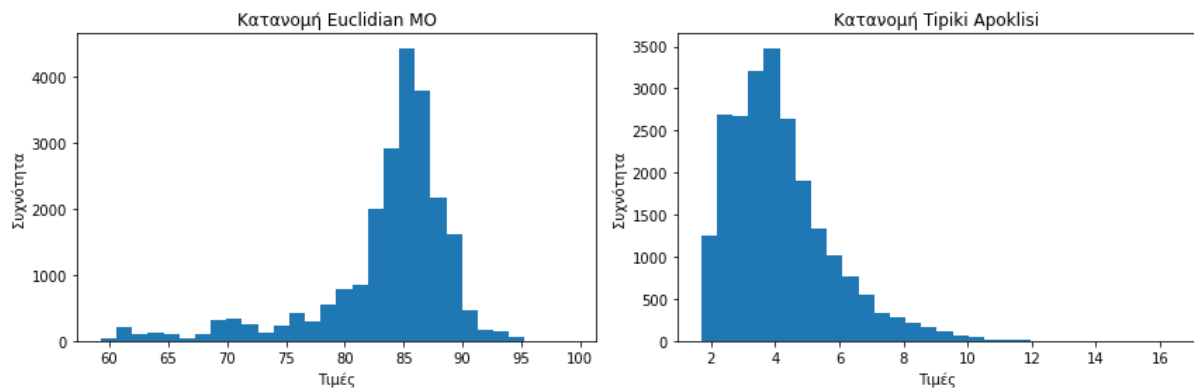
Για την αξιολόγηση της απόδοσης του νευρωνικού δικτύου χρησιμοποιήθηκαν τρεις (3) βασικές μετρικές που παρέχουν μια πολύπλευρη εικόνα της ικανότητας πρόβλεψης του μοντέλου. Το Μέσο Απόλυτο Σφάλμα (MAE) επιλέχθηκε ως βασική μετρική καθώς παρέχει μια άμεση και εύκολη ερμηνεύσιμη εκτίμηση του σφάλματος πρόβλεψης. Η Ρίζα του Μέσου Τετραγωνικού Σφάλματος (RMSE) εφαρμόστηκε για να δώσει μεγαλύτερη βαρύτητα στα μεγάλα σφάλματα, παρέχοντας έτσι μια πιο αυστηρή αξιολόγηση της απόδοσης του μοντέλου. Τέλος, η Ακρίβεια Πρόβλεψης (Accuracy) χρησιμοποιήθηκε ως γενική μετρική για την αξιολόγηση της συνολικής ποιότητας των προβλέψεων του μοντέλου.

Ενότητα 3.5.β Οπτικοποίηση Αποτελέσματος

Για την καλύτερη κατανόηση της συμπεριφοράς και της απόδοσης του μοντέλου, δημιουργήθηκε μια σειρά από γραφικές απεικονίσεις. Ειδικότερα, παρουσιάζεται η διαχρονική εξέλιξη του σφάλματος κατά τη διάρκεια της εκπαίδευσης, επιτρέποντας την παρακολούθηση της διαδικασίας μάθησης και τον εντοπισμό πιθανών προβλημάτων σύγκλισης. Επιπλέον, πραγματοποιήθηκε συγκριτική ανάλυση μεταξύ των προβλεπόμενων και των πραγματικών τιμών, δίνοντας μια άμεση οπτική αναπαράσταση της ακρίβειας του μοντέλου. Τέλος, η κατανομή των προβλέψεων απεικονίζεται γραφικά επιτρέποντας την αξιολόγηση της συνολικής συμπεριφοράς του μοντέλου και τον εντοπισμό πιθανών συστηματικών αποκλίσεων στις προβλέψεις.



Εικόνα 4. Η κατανομή του Loss του μοντέλου για κάθε μετρική.



Εικόνα 5. Οπτικοποίηση κατανομής δεδομένων εισόδου μοντέλου.

3.6 Συμπεράσματα και Μελλοντικές Βελτιώσεις

Το μοντέλο επιδεικνύει ικανοποιητική απόδοση στην πρόβλεψη των παραμέτρων (μήτρας με ένα ή/και δύο υλικά προσμείξεων), με τη χρήση προηγμένων τεχνικών Μηχανικής Μάθησης. Ο πειραματισμός με ποικίλες τεχνικές, η χρήση τεχνικών συνελκτικών νευρωνικών δικτύων και οι εφαρμογές τεχνικών αναζήτησης υπερπαραμέτρων, θα μπορούσαν να συμπεριληφθούν στις μελλοντικές βελτιώσεις.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4 ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΔΙΑΔΟΣΗΣ ΡΩΓΜΩΝ

4.1 Εισαγωγή

Αναπτύχθηκε ένας προσομοιωτής για τη μελέτη της διάδοσης ρωγμών σε σύνθετα υλικά. Ο προσομοιωτής χρησιμοποιεί μεθόδους για την προσομοίωση της εξέλιξης υπό την επίδραση ενός ή/και δύο διαφορετικών υλικών με διαφορετικές ιδιότητες.

4.2 Παράμετροι Προσομοίωσης

Η ακρίβεια και η αποτελεσματικότητα της προσομοίωσης διάδοσης ρωγμών εξαρτάται κατά πολύ από την ορθή επιλογή και ρύθμιση των παραμέτρων του συστήματος. Στη συγκεκριμένη ενότητα παρουσιάζονται αναλυτικά οι βασικές παράμετροι και οι ιδιότητες των υλικών που χρησιμοποιούνται στην προσομοίωση.

Ενότητα 4.2.α Βασικές Παράμετροι

Το σύστημα προσομοίωσης το υπό μελέτη υλικό σαν ένα δισδιάστατο υλικό προσομοιώνοντας ένα πείραμα διείσδυσης. Το υπολογιστικό πλέγμα, το οποίο αποτελεί τη μήτρα του συστήματος, έχει διαστάσεις 500x500 κελιών, παρέχοντας επαρκή χώρο για την ανάπτυξη και μελέτη της διάδοσης των ρωγμών. Το κάθε κελί του πλέγματος αντιπροσωπεύει ένα τμήμα του υλικού στο οποίο μπορούν να αποδοθούν χαρακτηριστικά που σχετίζονται με το υλικό. Η βασική παράμετρος είναι η ενέργεια σύνδεσης e_i των δεσμών των ατόμων που αντιστοιχούν στο υλικό αυτό. Υπάρχουν δύο είδη υλικών. Το υλικό της μήτρας και το υλικό της πρόσμιξης με αντίστοιχες ενέργειες σύνδεσης.

Δεδομένου ότι προσομοιώνεται ένα πείραμα διείσδυσης αρχικά θεωρούμε ότι υπάρχει μια πρόσκρουση σ ένα σημείο του υλικού στο οποίο δίνεται συγκεκριμένη ποσότητα ενέργειας που εδώ αντιστοιχεί σε 224 μονάδες ενέργειας. Σε κάθε βήμα της προσομοίωσης, στα κελιά χωρίς πρόσμειξη προκειμένου να σπάσουν οι δεσμοί και να συνεχίσει η ρωγμή καταναλώνονται δύο (2) μονάδες ενέργειας, ενώ για τα κελιά με πρόσμειξη, η ενέργεια καθορίζεται από την αντοχή του υλικού πρόσμειξης που έχει επιλεγεί για την συγκεκριμένη προσομοίωση.

Στην διάδοση ρόλο παίζει και η θερμοκρασία μέσω της θερμικής ενέργεια ανά άτομο (kT) όπου k σταθερά Boltzmann και T η απόλυτη θερμοκρασία (σε βαθμούς Kelvin), έχει τη δυνατότητα προσαρμογής της εκάστοτε τιμής ανάλογα με τις απαιτήσεις κάθε προσομοίωσης.

Ο αριθμός των γειτονικών κελιών (Z) ορίζεται σε έξι (6), συμπεριλαμβάνοντας πέντε (5) πιθανές κατευθύνσεις διάδοσης και τη δυνατότητα παραμονής στην τρέχουσα θέση.

Επίσης ως παράμετρος της προσομοίωσης είναι και η συγκέντρωση του υλικού της πρόσμιξης ως ποσοστό επί των κελιών του υλικού.

Ενότητα 4.2.β Ιδιότητες Υλικών

Η προσομοίωση υποστηρίζει τη χρήση ενός (1) ή δύο (2) διαφορετικών υλικών πρόσμειξης. Για το πρώτο υλικό πρόσμειξης, η παράμετρος e_i αντιπροσωπεύει την τιμή του σύνθετου υλικού (π.χ. 2.0125), ενώ το ποσοστό κάλυψης καθορίζει το ποσοστό της συνολικής επιφάνειας που καταλαμβάνει το υλικό (π.χ. 5% της συνολικής επιφάνειας).

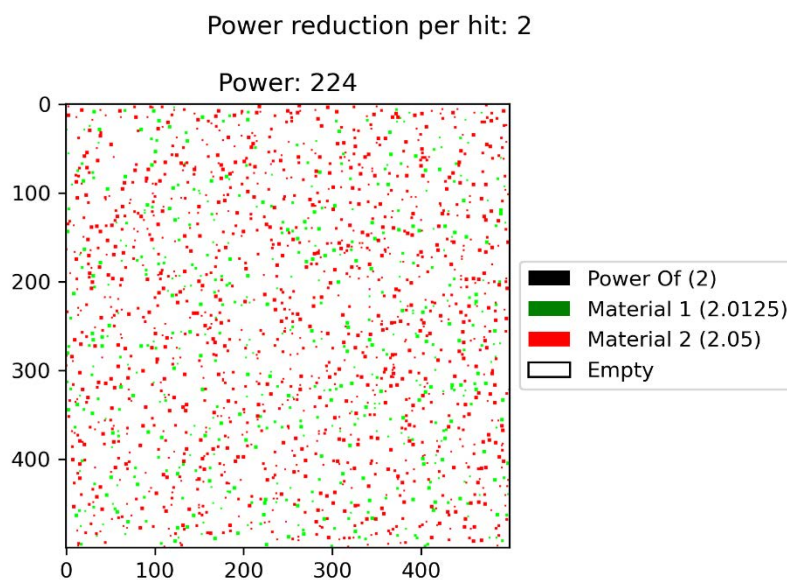
Στην περίπτωση που χρησιμοποιείται και το δεύτερο υλικό πρόσμειξης, η αντίστοιχη παράμετρος e_j ορίζει την τιμή του δεύτερου σύνθετου υλικού (π.χ. 2.05) και το αντίστοιχο ποσοστό κάλυψης προσδιορίζει το ποσοστό της επιφάνειας που καταλαμβάνει το δεύτερο υλικό (π.χ. 10% της συνολικής επιφάνειας).

Όλες οι παράμετροι των υλικών μπορούν να προσαρμοστούν ανάλογα με τις απαιτήσεις της κάθε προσομοίωσης, επιτρέποντας τη μελέτη διαφορετικών σεναρίων και συνθηκών διάδοσης ρωγμών. Αυτή η ευελιξία στη ρύθμιση των παραμέτρων επιτρέπει την εκτενή διερεύνηση της συμπεριφοράς των υλικών υπό διάφορες συνθήκες.

4.3 Μεθοδολογία Προσομοίωσης

Ενότητα 4.3.α Αρχικοποίηση Πλέγματος

Το πλέγμα αρχικοποιείται με τυχαία τοποθέτηση μπλοκ υλικών μεγέθους 2×2 έως 4×4 διασφαλίζοντας τα επιθυμητά ποσοστά κάλυψης για κάθε υλικό. Η μέθοδος (συνάρτηση) `add_random_block` υλοποιεί αυτή τη διαδικασία με μέγιστο αριθμό προσπαθειών 5000 για την πλήρη επίτευξη της κάλυψης όλου του υλικού βασισμένο στο ποσοστό.



Εικόνα 6. Material 1 με ποσοστό κάλυψης 2% και Material 2 με ποσοστό κάλυψης 5%.

Ενότητα 4.3.β Αλγόριθμος Διάδοσης Ρωγμής

Ο αλγόριθμος διάδοσης ρωγμών βασίζεται σε ένα σύνθετο πιθανοθεωρητικό μοντέλο, το οποίο ενσωματώνει διάφορους μηχανισμούς για τον προσδιορισμό της πορείας της ρωγμής.

- **Πιθανοθεωρητικό Μοντέλο:**

Στο πιθανοθεωρητικό μοντέλο χρησιμοποιούνται δύο (2) διακριτές πιθανότητες που προσαρμόζονται ανάλογα με την κατεύθυνση. Για την κύρια κατεύθυνση, ορίζεται η πιθανότητα p_1 που ισούται με $P_{\max}$ και έχει τιμή 0.95, ενώ για τις υπόλοιπες

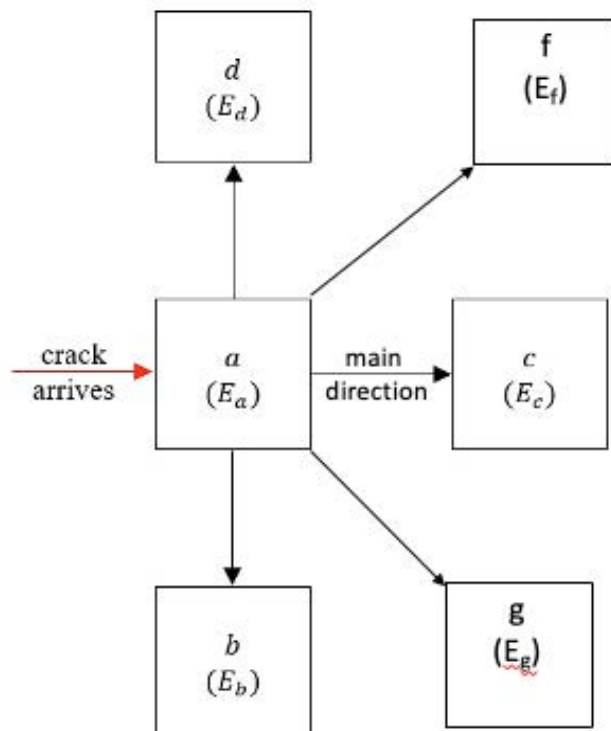
κατευθύνσεις χρησιμοποιείται η πιθανότητα p_2 που ισούται με $\frac{1-P_{max}}{Z-1}$, όπου Z ο αριθμός των γειτονικών κελιών.

- **Υπολογισμός Πιθανότητας Μετάβασης:**

Ο υπολογισμός της πιθανότητας μετάβασης πραγματοποιείται μέσω της συνάρτησης - κριτήριο Metropolis ή της μονάδας, αν η ενέργεια ανά βήμα (e_i) είναι μεγαλύτερη ή ίση της σύστασης του υλικού (e_j). Η συνάρτηση - κριτήριο Metropolis ισούται με $e^{-\frac{(e_j - e_i)}{Kt}}$, η οποία λαμβάνει υπόψη τρεις (3) βασικές παραμέτρους: τη σύσταση του υλικού (e_j), τη ενέργεια ανά βήμα (e_i) και την θερμική ενέργεια ανά άτομο (kT). Η διαδικασία έχει ως στόχο τον έλεγχο των γειτονικών κελιών μέσω της ειδικά σχεδιασμένης συνάρτησης `check_neighbors`, η οποία επιτρέπει την προσαρμογή των πιθανοτήτων με βάση τις ενεργειακές διαφορές μεταξύ των γειτονικών περιοχών.

- **Κίνηση Ρωγμής:**

Η κίνηση της ρωγμής ακολουθεί ένα δυναμικό μοντέλο με μεταβλητό αριθμό πιθανών κατευθύνσεων. Κατά την πρώτη εκτέλεση του αλγόριθμου, εξετάζονται οκτώ (8) ισοπίθανες κατευθύνσεις. Στη συνέχεια, ο αριθμός των πιθανών κατευθύνσεων μειώνεται σε πέντε (5), βελτιστοποιώντας έτσι την υπολογιστική διαδικασία. Η τελική επιλογή της κατεύθυνσης πραγματοποιείται με βάση τις υπολογισμένες πιθανότητες οι οποίες υπολογίζονται με τον τύπο $(p_1 \text{ ή } p_2) \times (\text{συνάρτηση - κριτήριο Metropolis ή της μονάδας})$ ανάλογα με την πιθανή κατεύθυνση (βλ. Εικόνα 8 και παράδειγμα), ενώ η εγκυρότητα κάθε κίνησης επαληθεύεται μέσω της συνάρτησης `check_for_random_number`, η οποία εξασφαλίζει την αξιοπιστία της προσομοίωσης.



Εικόνα 7. Απεικόνιση κατευθύνσεων προσομοιωτή με περιστροφή της απεικόνισης ανάλογα της main κατεύθυνσης.

Αυτή η μεθοδολογία επιτρέπει την ακριβή προσομοίωση της διάδοσης ρωγμών, λαμβάνοντας υπόψη τόσο τις τοπικές ιδιότητες του υλικού, όσο και τις ευρύτερες ενεργειακές συνθήκες του συστήματος.

		P_1	P_2	P_3	P_4	P_5	P_i
initial		$\frac{1-p_f}{z-1}$	$\frac{1-p_f}{z-1}$	p_f	$\frac{1-p_f}{z-1}$	$\frac{1-p_f}{z-1}$	$\frac{1-p_f}{z-1}$
Multiplying factor (MF)	If $E_j \leq E_i$	1	1	1	1	1	1
Multiplying factor (MF)	If $E_j > E_i$	$e^{-\frac{[E_j-E_i]}{kT}}$	$e^{-\frac{[E_j-E_i]}{kT}}$	$e^{-\frac{[E_j-E_i]}{kT}}$	$e^{-\frac{[E_j-E_i]}{kT}}$	$e^{-\frac{[E_j-E_i]}{kT}}$	Determined in next step
Final probability		$P_{1f}=MF*P_1$	$P_{2f}=MF*P_2$	$P_{3f}=MF*P_3$	$P_{4f}=MF*P_4$	$P_{5f}=MF*P_5$	$P_i=1-\sum P_{if}$ ($i=1,5$)

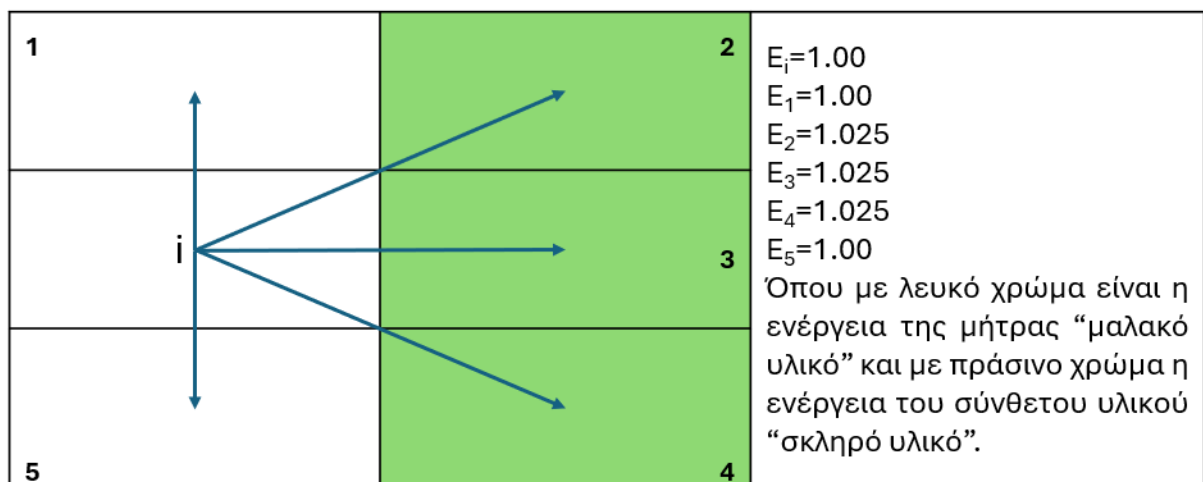
Εικόνα 8. Περιγραφή κατανομής των πιθανοτήτων ανάλογα με το κάθε υλικό.

Παράδειγμα :

Στο παρόν παράδειγμα εξετάζετε ένα σύστημα με τις εξής παραμέτρους:

- Κύρια κατεύθυνση: Ορίζεται ως η κατεύθυνση 3.
- Μέγιστη πιθανότητα $p_f = 0.95$.
- Αριθμός πιθανών κατευθύνσεων: $Z = 6$.
- Θερμική ενέργεια ανά άτομο: $kT = 0.025$.

Το σύστημα απεικονίζεται στην Εικόνα 9, όπου παρουσιάζονται οι ενεργειακές καταστάσεις E για κάθε θέση.



Εικόνα 9. Απεικόνιση ενεργειακών καταστάσεων για κάθε θέση.

Η διαδικασία υπολογισμού των πιθανοτήτων ακολουθεί τα εξής βήματα:

Αρχικά υπολογίζονται οι αρχικές πιθανότητες. Για της μη κύριες κατευθύνσεις $\{1,2,4,5\}$ οι αρχικές πιθανότητες ορίζονται σε $p = \frac{1-p_f}{z-1} = 0.01$, ενώ για την κύρια κατεύθυνση σε $p_3=p_f=0.95$.

Έπειτα για τον υπολογισμό των τελικών πιθανοτήτων εφαρμόζεται ο πολλαπλασιασμός του παράγοντα MF με της αρχικές πιθανότητες ανάλογα με τη σχέση των ενεργειών.

Όταν $E_j \leq E_i$ (όπου E_j τα $(E_1, E_2, E_3, E_4, E_5)$) τότε ο παράγοντας MF ισούται με 1 ενώ όταν $E_j \geq E_i$ τότε ο παράγοντας MF ισούται με $e^{-\left[\frac{E_j - E_i}{kT}\right]}$. Στη συνέχεια, ο πίνακας δείχνει αναλυτικά τον υπολογισμό των πιθανοτήτων.

		P_1	P_2	P_3	P_4	P_5	P_i
initial		$\frac{1-p_f}{z-1}=0.01$	$\frac{1-p_f}{z-1}=0.01$	$p_f=0.95$	$\frac{1-p_f}{z-1}=0.01$	$\frac{1-p_f}{z-1}=0.01$	$P_i=1-\sum_{i=1,5} P_{if}$
Multiplying factor (MF)	If $E_j \leq E_i$	1				1	1
Multiplying factor (MF)	If $E_j > E_i$		$e^{-\left[\frac{E_2 - E_i}{kT}\right]} = 0.367$	$e^{-\left[\frac{E_3 - E_i}{kT}\right]} = 0.0367$	$e^{-\left[\frac{E_4 - E_i}{kT}\right]} = 0.0367$		Determined in next step
Final probability		$P_{1f} = MF * P_1 = 0.01 * 1 = 0.01$	$P_{2f} = MF * P_2 = 0.01 * 0.367 = 0.00367$	$P_{3f} = MF * P_3 = 0.95 * 0.367 = 0.34865$	$P_{4f} = MF * P_4 = 0.01 * 0.367 = 0.00367$	$P_{5f} = MF * P_5 = 0.01 * 1 = 0.01$	$P_i = 1 - \sum_{i=1,5} P_{if}$ $P_i = 1 - (0.01 + 0.00367 + 0.34865 + 0.00367 + 0.01) = 0.62401$

Το συμπέρασμα της ανάλυσης δείχνει ότι η μεγαλύτερη πιθανότητα (62.401%) αντιστοιχεί στην παραμονή της ρωγμής στην αρχική της θέση, ακολουθούμενη από την πιθανότητα μετακίνησης προς την κυρία κατεύθυνση 3 (34.865%). Που αυτό θα εξαρτηθεί από την απόφαση του προσομοιωτή.

Ενότητα 4.3.γ Κριτήρια Τερματισμού

Στην παρούσα μελέτη, έχουν καθοριστεί τρία (3) βασικά κριτήρια τερματισμού του προσομοιωτή. Το πρώτο κριτήριο αφορά την εξάντληση της διαθέσιμης ενέργειας του συστήματος. Όταν η ενέργεια του συστήματος φτάσει κάτω από το μηδέν, ο προσομοιωτής τερματίζεται για τη συγκεκριμένη προσομοίωση και συνεχίζει στην επόμενη για να αποφευχθεί η περαιτέρω κατανάλωση πόρων.

Το δεύτερο κριτήριο σχετίζεται με την επίτευξη του μέγιστου αριθμού επαναλήψεων (τετρακόσιες (400) για κάθε σύστημα). Αυτό το όριο τίθεται για να διασφαλιστεί ότι ο προσομοιωτής δεν εκτελείται επ' άπειρον σε περιπτώσεις όπου δεν επιτυγχάνεται σύγκλιση, εξοικονομώντας έτσι υπολογιστικούς πόρους και χρόνο.

Το τρίτο κριτήριο αφορά τη σύγκλιση του αλγόριθμου με βάση την ευκλείδεια απόσταση. Συγκεκριμένα, έχει οριστεί ανοχή 0.015 στην ευκλείδεια απόσταση μεταξύ διαδοχικών λύσεων. Όταν η διαφορά $\left(\frac{new_{euclidian} - old_{euclidian}}{old_{euclidian}}\right)$ μεταξύ δύο (2) διαδοχικών (μέσων όρων ευκλείδειας) επαναλήψεων είναι μικρότερη από αυτή την τιμή, θεωρείται ότι ο αλγόριθμος έχει συγκλίνει επιτυχώς σε μια αποδεκτή λύση.

Τα παραπάνω κριτήρια λειτουργούν συμπληρωματικά, δίνοντας ένα ολοκληρωμένο πλαίσιο για τον έλεγχο και τον τερματισμό του προσομοιωτή. Η επιλογή των συγκεκριμένων τιμών για κάθε κριτήριο έγινε μετά από προσεκτική ανάλυση των απαιτήσεων του προβλήματος και πειραματική επαλήθευση της αποτελεσματικότητάς τους.

4.4 Μετρικές Αξιολόγησης

Ενότητα 4.4.α Βασικές Μετρικές

Στο πλαίσιο της ποσοτικής ανάλυσης του προσομοιωτή διάδοσης ρωγμών, αναπτύχθηκε ένα ολοκληρωμένο σύστημα μετρικών αξιολόγησης που εστιάζει σε δύο (2) κύριες κατηγορίες: το μέγεθος της ρωγμής και τις αποστάσεις διάδοσης.

- **Μέγεθος Ρωγμής:**

Η αξιολόγηση του μεγέθους της ρωγμής πραγματοποιείται μέσω δύο (2) βασικών προσεγγίσεων. Συγκεκριμένα, για κάθε προσομοίωση, καταγράφεται ο ακριβής αριθμός των κελιών που επηρεάζονται από τη διάδοση της ρωγμής. Αυτό επιτυγχάνεται μέσω της μεταβλητής `CRACK_SIZE`, η οποία υπολογίζεται διαιρώντας την αρχική ενέργεια (`POWER`) με τη σταθερά `POWER_OF`.

Παράλληλα, υπολογίζεται ο μέσος όρος του μεγέθους της ρωγμής (`average_of_crack`) για το σύνολο των προσομοιώσεων. Αυτή η μετρική παρέχει μια συνολική εικόνα της έκτασης της ζημίας στο υλικό, επιτρέποντας μια ολιστική προσέγγιση στην κατανόηση της συμπεριφοράς του υλικού υπό συνθήκες καταπόνησης.

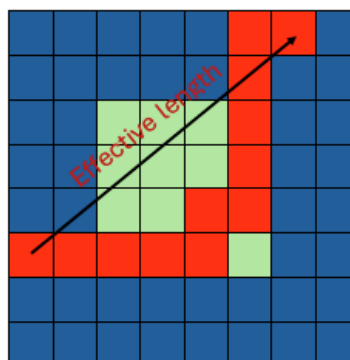
- **Αποστάσεις:**

Η ανάλυση των αποστάσεων διάδοσης πραγματοποιείται μέσω δύο διαφορετικών μετρικών. Η πρώτη μετρική είναι η Ευκλείδεια Απόσταση. Υπολογίζεται ως η ευθεία απόσταση από το κέντρο του πλέγματος έως το τελικό σημείο της ρωγμής όπως φαίνεται στην εικόνα 10. Ο μαθηματικός τύπος που χρησιμοποιείται για την ευκλείδεια απόσταση είναι:

$$\text{Ευκλείδεια απόσταση} = \sqrt{(\text{average}_{of\ matrix} - \text{position}_x)^2 + (\text{average}_{of\ matrix} - \text{position}_y)^2}.$$

Η δεύτερη μετρική είναι η Απόσταση Manhattan που προσδιορίζεται ως το άθροισμα των απόλυτων διαφορών των συντεταγμένων μεταξύ του κέντρου και του τελικού σημείου: $|\text{average}_{of\ matrix} - \text{position}_x| + |\text{average}_{of\ matrix} - \text{position}_y|$. Αυτή η προσέγγιση παρέχει μια εναλλακτική οπτική της διάδοσης της ρωγμής, συμπεριλαμβάνοντας την Ευκλείδεια Απόσταση.

Έπειτα, η Ευκλείδεια Απόσταση καταγράφεται για την υλοποίηση και τον υπολογισμό της τυπικής απόκλισης.



Εικόνα 10. Απεικόνιση ευθείας απόστασης από το κέντρο του πλέγματος έως το τέλος της ρωγμής.

Ενότητα 4.4.β Στατιστική Ανάλυση

Ανάλυση δεδομένων με την τυπική απόκλιση η οποία μας προσφέρει την δυνατότητα αντίληψης του μεγέθους των δεδομένων σε σχέση με τον μέσο όρο.

Για τη βαθύτερη κατανόηση των αποτελεσμάτων, εφαρμόζονται προηγμένες στατιστικές μέθοδοι. Αρχικά, υπολογίζονται οι μέσοι όροι των αποστάσεων (της Ευκλείδειας και της Manhattan), παρέχοντας μια συνοπτική περίληψη της συμπεριφοράς του συστήματος.

Επιπρόσθετα, η καταγραφή των αποτελεσμάτων πραγματοποιείται σε αρχεία CSV, επιτρέποντας την περαιτέρω στατιστική επεξεργασία και ανάλυση. Με τη μελέτη του μέσου όρου της Ευκλείδειας υπάρχει η δυνατότητα κατανομής των δεδομένων μέσω της τυπικής απόκλισης.

4.5 Οπτικοποίηση Αποτελεσμάτων

Ενότητα 4.5.α Χρωματική Κωδικοποίηση

Για την αποτελεσματική οπτικοποίηση της διάδοσης των ρωγμών και της σύνθεσης του υλικού, έχει δημιουργηθεί ένα σύστημα χρωματικής κωδικοποίησης που διευκολύνει την άμεση αναγνώριση των διαφόρων στοιχείων της προσομοίωσης. Ειδικότερα, στην οπτικοποίηση κάθε χρώμα αντιπροσωπεύει ένα διακριτό στοιχείο του συστήματος.

Το μαύρο χρώμα χρησιμοποιείται για την απεικόνιση της ρωγμής. Η επιλογή του μαύρου χρώματος επιτρέπει την εύκολη παρακολούθηση της διαδρομής της ρωγμής και την άμεση αναγνώριση του μοτίβου διάδοσής της στο υλικό.

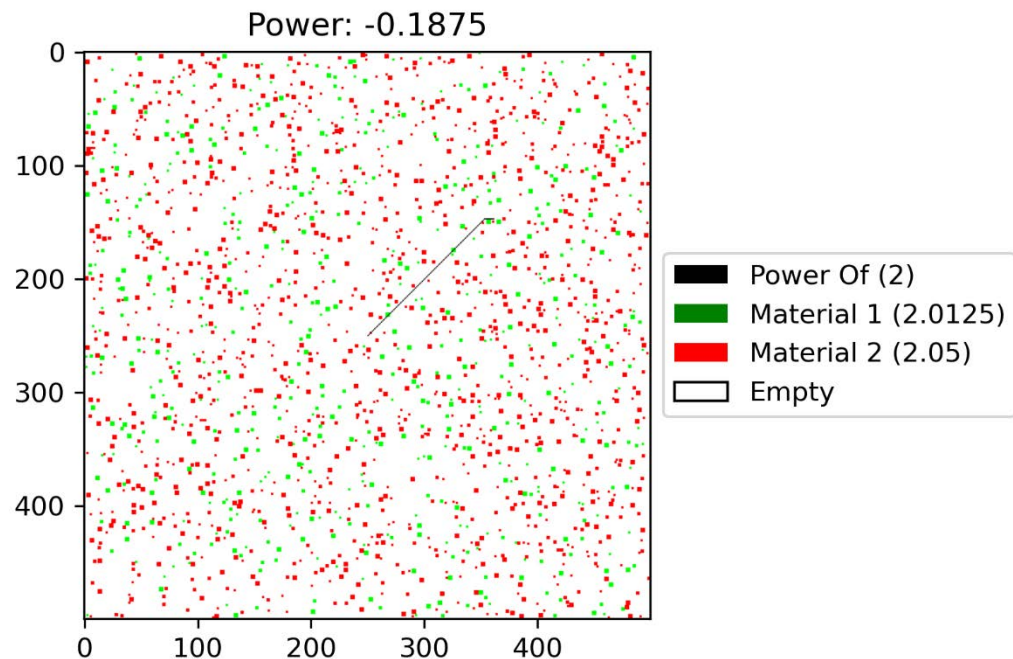
Το πράσινο χρώμα αντιπροσωπεύει το πρώτο υλικό (Material1) και επιλέχθηκε για να διακρίνεται εύκολα από τα υπόλοιπα στοιχεία της προσομοίωσης, ώστε να παρέχει αντίθεση με το φόντο.

Το κόκκινο χρώμα χρησιμοποιείται για τη απεικόνιση του δεύτερου υλικού (Material2), όταν αυτό υπάρχει στην προσομοίωση. Η επιλογή του κόκκινου χρώματος επιτρέπει την εύκολη διάκριση μεταξύ των δύο διαφορετικών υλικών.

Το λευκό χρώμα χρησιμοποιείται για την απεικόνιση των κενών περιοχών ή της μήτρας του υλικού. Αυτές οι περιοχές αποτελούν το βασικό υπόστρωμα στο οποίο εξελίσσεται η διάδοση της ρωγμής.

Η οπτικοποίηση συνοδεύεται από ένα υπόμνημα που επεξηγεί τη σημασία κάθε χρώματος, διευκολύνοντας την ερμηνεία των αποτελεσμάτων. Επίσης, κάθε απεικόνιση συνοδεύεται από πληροφορίες σχετικά με τις βασικές παραμέτρους της προσομοίωσης, όπως η μείωση ισχύος ανά χτύπημα (Power reduction per hit) και η συνολική ισχύς (Power), παρέχοντας ένα ολοκληρωμένο πλαίσιο για την κατανόηση των αποτελεσμάτων (βλ. εικόνα 11).

Power reduction per hit: 2



Εικόνα 11. Χρωματική απεικόνιση των υλικών και της ρωγμής για Material 1 με ποσοστό κάλυψης 2% και Material 2 με ποσοστό κάλυψης 5%.

Ενότητα 4.5.8 Αποθήκευση Και Ανάλυση

- Αυτόματη δημιουργία φακέλων για τα οπτικά αποτελέσματα.

```
plt.figure(dpi=300)
if not os.path.exists('plots'):
    os.makedirs('plots')
if not os.path.exists(f'plots/plots_{counter1}'):
    os.makedirs(f'plots/plots_{counter1}')
```

- Εξαγωγή δεδομένων σε csv αρχείο για περαιτέρω ανάλυση με την τυπική απόκλιση δεδομένων.

```
df = pd.DataFrame([[f"{mo:f}"]],
                  columns=['euclidian mo'])

df.to_csv('euclidian_mo.csv', index=False, mode='a',
header=False, encoding='utf-8')

mean, std_dev, std_dev_without_last, last_value_std,
last_value = analyze_csv_data('euclidian_mo.csv', 'euclidian mo')

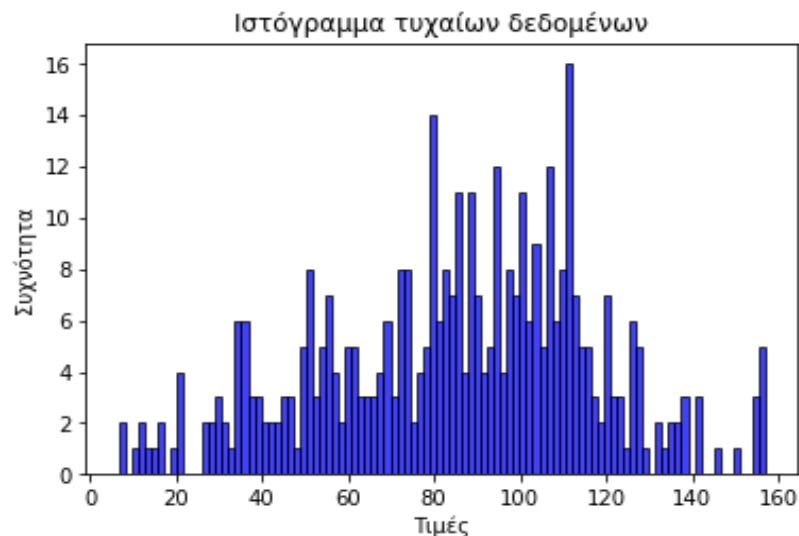
tpkap=
pd.DataFrame([[f"{last_value:f}",f"{mean:f}",f"{std_dev:f}",f"{std_d
ev_without_last:f}",f"{last_value_std:f}",f"correct"]],
              columns=['euclidian mo','mo
dedomenon','tipiki apoklisi dedomenon','tipiki apoklisi dedomenon
```

```
xoris ton teleutaiο arithmo','tipiki apoklisi teleytaioy
arithmou','siglisi'])
tpkap.to_csv('tipiki_apoklisi.csv', index=False, mode='a',
header=False, encoding='utf-8')
```

- Γραφήματα εξέλιξης μετρικών.



Εικόνα 12. Απεικόνιση εξέλιξης δεδομένων και τυπικής απόκλισης για πρόσμιξη με $DE1=0.025$ & $DE2=0.0375$, $PERCENTAGE1=10\%$ & $PERCENTAGE2=15\%$, $KT=0.075$.



Εικόνα 13. Συχνότητα εμφάνισης δεδομένων στο dataset για πρόσμιξη με $DE1=0.025$ & $DE2=0.0375$, $PERCENTAGE1=10\%$ & $PERCENTAGE2=15\%$, $KT=0.075$.

4.6 Συμπεράσματα

Ο προσομοιωτής επιτρέπει τη μελέτη της επίδρασης διαφορετικών υλικών στη διάδοση ρωγμών, παρέχοντας:

- Ποσοτική ανάλυση μεγέθους και μορφολογίας ρωγμών.
- Αξιολόγηση της επίδρασης των διαφορετικών υλικών.
- Στατιστική ανάλυση αποτελεσμάτων με τη βοήθεια της τυπικής απόκλισης.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5 ΚΩΔΙΚΕΣ ΚΑΙ ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΑ ΔΕΔΟΜΕΝΑ – ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

5.1 Κώδικες

Ενότητα 5.1.α Κώδικας Ευφυσούς Τεχνικής

```
import pandas as pd
import numpy as np
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.preprocessing import StandardScaler, RobustScaler
from tensorflow.keras.models import Sequential
from tensorflow.keras.layers import Dense, Dropout, BatchNormalization
from tensorflow.keras.optimizers import Adam
from tensorflow.keras.callbacks import EarlyStopping, ReduceLROnPlateau
from tensorflow.keras.regularizers import l2
import matplotlib.pyplot as plt
from tensorflow.keras import backend as K

data = pd.read_csv('output1.csv')

X = data[['DE', 'PERCENTAGE', 'KT']]
y = data[['euclidian mo', 'tipiki apoklisi dedomenon']]

X_scaler = RobustScaler()
y_scaler = RobustScaler()

X_scaled = X_scaler.fit_transform(X)
y_scaled = y_scaler.fit_transform(y)

X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X_scaled, y_scaled,
test_size=0.2, random_state=42)

model = Sequential([
    Dense(128, activation='elu', input_shape=(5,)),
    kernel_regularizer=l2(0.01)),
    BatchNormalization(),
    Dropout(0.3),

    Dense(64, activation='elu', kernel_regularizer=l2(0.01)),
    BatchNormalization(),
    Dropout(0.3),

    Dense(32, activation='elu', kernel_regularizer=l2(0.01)),
```

```

        BatchNormalization(),
        Dropout(0.2),

        Dense(16, activation='elu', kernel_regularizer=l2(0.01)),
        BatchNormalization(),

        Dense(2, activation='linear')
    ])

    reduce_lr = ReduceLROnPlateau(monitor='val_loss',
                                   factor=0.2,
                                   patience=5,
                                   min_lr=1e-6,
                                   verbose=1)

    def rmse(y_true, y_pred):
        return K.sqrt(K.mean(K.square(y_pred - y_true)))

    model.compile(optimizer=Adam(learning_rate=0.001),
                  loss='huber',
                  metrics=['mae', rmse, 'accuracy'])

    X_combined = np.column_stack((X_scaled, X_scaled[:, :2]))

    history = model.fit(X_combined, y_scaled,
                        epochs=300,
                        batch_size=64,
                        validation_split=0.2,
                        callbacks=[reduce_lr],
                        verbose=1)

    def predict_combined_parameters(de1, percentage1, de2, percentage2, kt):
        """
        Predict outcome for a material with two sets of parameters
        """

        input_data = np.array([[de1, percentage1, kt]])
        input_data2 = np.array([[de2, percentage2, kt]])

        input_scaled1 = X_scaler.transform(input_data)
        input_scaled2 = X_scaler.transform(input_data2)

        combined_input = np.column_stack((input_scaled1, input_scaled2[:, :2]))

```

```

prediction_scaled = model.predict(combined_input, verbose=0)
prediction = y_scaler.inverse_transform(prediction_scaled)

print("\nPrediction for combined parameters:")
print(f"Parameters Set 1: DE = {de1}, PERCENTAGE = {percentage1}")
print(f"Parameters Set 2: DE = {de2}, PERCENTAGE = {percentage2}")
print(f"KT = {kt}")
print(f"Predicted Euclidian MO: {prediction[0][0]:.4f}")
print(f"Predicted Tipiki Apoklisi: {prediction[0][1]:.4f}")

return prediction[0]

example_prediction = predict_combined_parameters(
    de1=0.025, percentage1=10,
    de2=0.0375, percentage2=15,
    kt=0.075
)

plt.figure(figsize=(15, 5))
plt.subplot(1, 3, 1)
plt.plot(history.history['loss'], label='Train Loss')
plt.plot(history.history['val_loss'], label='Validation Loss')
plt.title('Model Loss')
plt.xlabel('Epoch')
plt.ylabel('Loss')
plt.legend()

plt.subplot(1, 3, 2)
plt.plot(history.history['mae'], label='Train MAE')
plt.plot(history.history['val_mae'], label='Validation MAE')
plt.title('Model MAE')
plt.xlabel('Epoch')
plt.ylabel('MAE')
plt.legend()

plt.subplot(1, 3, 3)
plt.plot(history.history['rmse'], label='Train RMSE')
plt.plot(history.history['val_rmse'], label='Validation RMSE')
plt.title('Model RMSE')
plt.xlabel('Epoch')
plt.ylabel('RMSE')
plt.legend()

plt.tight_layout()
plt.show()

print("Στατιστικά για 'euclidian mo':")

```

```

print(data['euclidian mo'].describe())
print("\nΕλάχιστη τιμή:", data['euclidian mo'].min())
print("Μέγιστη τιμή:", data['euclidian mo'].max())
print("\nΣτατιστικά για 'tipiki apoklisi dedomenon':")
print(data['tipiki apoklisi dedomenon'].describe())
print("\nΕλάχιστη τιμή:", data['tipiki apoklisi dedomenon'].min())
print("Μέγιστη τιμή:", data['tipiki apoklisi dedomenon'].max())

print("\nΕύρος RMSE κατά την εκπαίδευση:")
print("Ελάχιστο RMSE:", min(history.history['rmse']))
print("Μέγιστο RMSE:", max(history.history['rmse']))

plt.figure(figsize=(12, 4))

plt.subplot(1, 2, 1)
plt.hist(data['euclidian mo'], bins=30)
plt.title('Κατανομή Euclidian MO')
plt.xlabel('Τιμές')
plt.ylabel('Συχνότητα')

plt.subplot(1, 2, 2)
plt.hist(data['tipiki apoklisi dedomenon'], bins=30)
plt.title('Κατανομή Tipiki Apoklisi')
plt.xlabel('Τιμές')
plt.ylabel('Συχνότητα')

plt.tight_layout()
plt.show()

```

Ενότητα 5.1.8 Κώδικας Προσομοίωσης Αντοχής Υλικών

```

# |8|1|2|
# -----
# |7|*|3|
# -----
# |6|5|4|

import random
import matplotlib.pyplot as plt
from matplotlib.colors import ListedColormap
import numpy as np
import os
from scipy.stats import skew, kurtosis
import time

```

```

import math
import pandas as pd
from tipiki_apoklisi import analyze_csv_data
from matplotlib.patches import Patch

NUMBER_OF_ARRAY = 500
POWER=STANDAR_POWER =224
POWER_OF=2
ILIK01 = 2.025
ILIK02 = 2.0375
POSOST01 = 10 # πρώτο ποσοστό
POSOST02 = 15 # δεύτερο ποσοστό
POSOST01 = POSOST01/100
POSOST02 = POSOST02/100
Kt=0.075
Z=6

counter =0
counter1 =0
epanalipsi=400
CRACK_SIZE= int(POWER/POWER_OF)
MAX_PROPABILITY = 0.95

numbers_of_crack=[]
numbers_of_manhatan=[]
numbers_of_euclidian=[]
def check_for_random_number(position_x_axon,position_y_axon,random_num):
    start_position_x = position_x_axon
    start_position_y = position_y_axon
    if random_num==1:
        return False,0
    else:

        if random_num ==1 or random_num ==2 or random_num==8:
            position_x_axon-=1
        elif random_num ==4 or random_num ==5 or random_num==6:
            position_x_axon +=1

        if random_num ==2 or random_num ==3 or random_num==4:
            position_y_axon+=1
        elif random_num ==6 or random_num ==7 or random_num==8:
            position_y_axon -=1

        if position_x_axon>=0 and position_x_axon<NUMBER_OF_ARRAY and
position_y_axon>=0 and position_y_axon<NUMBER_OF_ARRAY:
            if matrix[position_x_axon][position_y_axon]>=POWER_OF:
                return True,matrix[position_x_axon][position_y_axon]

```

```

        else:
            return True, POWER_OF

    else:
        return False, 0

def check_neighbors(matrix, i, j, kt):
    # Λίστα για αποθήκευση αποτελεσμάτων
    results = []

    # Το κεντρικό στοιχείο (ei)
    center_value = matrix[i][j]

    # Έλεγχος όλων των γειτονικών στοιχείων
    for di in [-1, 0, 1]:
        for dj in [-1, 0, 1]:
            # Παραλείπουμε το κεντρικό στοιχείο
            if di == 0 and dj == 0:
                continue

            # Ελέγχουμε αν είμαστε εντός ορίων του πίνακα
            new_i, new_j = i + di, j + dj
            if 0 <= new_i < matrix.shape[0] and 0 <= new_j < matrix.shape[1]:
                neighbor_value = matrix[new_i][new_j]

                # Εφαρμογή των συνθηκών
                if neighbor_value <= center_value:
                    results.append(1)
                else:
                    # Υπολογισμός του  $e^{-(e_j - e_i)/kt}$ 
                    power = -(neighbor_value - center_value) / kt
                    result = np.exp(power)
                    results.append(result)

    return results

def
probabilistic_random(random_num, num_of_repeat, choices, position_x_axon, position
_y_axon, matrix):
    p = MAX_PROPABILITY
    p2 = (1 - MAX_PROPABILITY) / (Z - 1)
    matrix1 = np.array(matrix)
    results = check_neighbors(matrix1, position_x_axon, position_y_axon, Kt)
    print("results:", results)
    if random_num == 1:
        pi = 1 - (p2 * results[3] + p2 * results[0] + p * results[1] +
p2 * results[2] + p2 * results[4])

```

```

        propability = [p2*results[3],p2*results[0], p*results[1],
p2*results[2],p2*results[4],pi]

    elif random_num ==2:
        pi=1-(p2*results[0]+p2*results[1]+ p*results[2]+
p2*results[4]+p2*results[7])
        propability = [p2*results[0],p2*results[1], p*results[2],
p2*results[4],p2*results[7],pi]

    elif random_num ==3:
        pi=1-(p2*results[1]+p2*results[2]+p*results[4]+
p2*results[7]+p2*results[6])
        propability = [p2*results[1],p2*results[2], p*results[4],
p2*results[7],p2*results[6],pi]

    elif random_num ==4:
        pi=1-(p2*results[2]+p2*results[4]+ p*results[7]+
p2*results[6]+p2*results[5])
        propability = [p2*results[2],p2*results[4], p*results[7],
p2*results[6],p2*results[5],pi]

    elif random_num ==5:
        pi=1-(p2*results[4]+p2*results[7]+ p*results[6]+
p2*results[5]+p2*results[3])
        propability = [p2*results[4],p2*results[7], p*results[6],
p2*results[5],p2*results[3],pi]

    elif random_num ==6:
        pi=1-(p2*results[7]+p2*results[6]+ p*results[5]+
p2*results[3]+p2*results[0])
        propability = [p2*results[7],p2*results[6], p*results[5],
p2*results[3],p2*results[0],pi]

    elif random_num ==7:
        pi=1-(p2*results[6]+p2*results[5]+ p*results[3]+
p2*results[0]+p2*results[1])
        propability = [p2*results[6],p2*results[5], p*results[3],
p2*results[0],p2*results[1],pi]

    elif random_num ==8:
        pi=1-(p2*results[5]+p2*results[3]+ p*results[0]+
p2*results[1]+p2*results[2])
        propability = [p2*results[5],p2*results[3], p*results[0],
p2*results[1],p2*results[2],pi]

print("propapillity",propability)

```

```

choices_matrix = [
    [7, 8, 1, 2, 3,-1],
    [8, 1, 2, 3, 4,-1],
    [1, 2, 3, 4, 5,-1],
    [2, 3, 4, 5, 6,-1],
    [3, 4, 5, 6, 7,-1],
    [4, 5, 6, 7, 8,-1],
    [5, 6, 7, 8, 1,-1],
    [6, 7, 8, 1, 2,-1]
]
choices =choices_matrix[random_num - 1]

return np.random.choice(choices,p=propability),choices

def change_of_coordinates(position_x_axon,position_y_axon,random_num):
    if random_num ==1 or random_num ==2 or random_num==8:
        position_x_axon-=1
    elif random_num ==4 or random_num ==5 or random_num==6:
        position_x_axon +=1

    if random_num ==2 or random_num ==3 or random_num==4:
        position_y_axon+=1
    elif random_num ==6 or random_num ==7 or random_num==8:
        position_y_axon -=1

    return position_x_axon,position_y_axon

def distance_to_last_point(average_of_matrix,position_x,position_y):
    print(average_of_matrix,position_x,position_y)

    Euclidean_distance = np.sqrt((average_of_matrix -position_x )**2 +
(average_of_matrix - position_y)**2)
    Manhattan_distance = abs(average_of_matrix-
position_x)+abs(average_of_matrix-position_y)
    return Euclidean_distance,Manhattan_distance

def print_matrix():
    for row in matrix:
        print(row)
    print("\n")

def check_convergence(old_euclidian, new_euclidian, i,tolerance =0.015):
    if abs(new_euclidian - old_euclidian)/old_euclidian < tolerance:
        print(f"Σύγκλιση επιτεύχθηκε στην επανάληψη {i+1}")
        return True
    else:
        return False

```

```

print("POWER_OF:", POWER_OF)

def show_matrix(counter, counter1):
    plt.figure(dpi=300)
    if not os.path.exists('plots'):
        os.makedirs('plots')
    if not os.path.exists(f'plots/plots_{counter1}'):
        os.makedirs(f'plots/plots_{counter1}')

    colored_matrix = np.zeros((NUMBER_OF_ARRAY, NUMBER_OF_ARRAY, 3))

    for i in range(len(matrix)):
        for j in range(len(matrix[0])):
            if matrix[i][j] == POWER_OF:
                colored_matrix[i][j] = [0, 0, 0] # Μαύρο για POWER_OF
            elif matrix[i][j] == ILIK01:
                colored_matrix[i][j] = [0, 1, 0] # Πράσινο για ILIK01
            elif matrix[i][j] == ILIK02:
                colored_matrix[i][j] = [1, 0, 0] # Κόκκινο για ILIK02
            else:
                colored_matrix[i][j] = [1, 1, 1] # Λευκό για τα υπόλοιπα

    plt.imshow(colored_matrix)

    plt.suptitle(f'Power reduction per hit: {POWER_OF}')
    plt.title(f'Power: {POWER}')

    legend_elements = [
        Patch(facecolor='black', label=f'Power Of ({POWER_OF})'),
        Patch(facecolor='green', label=f'Material 1 ({ILIK01})'),
        Patch(facecolor='red', label=f'Material 2 ({ILIK02})'),
        Patch(facecolor='white', edgecolor='black', label='Empty')
    ]
    plt.legend(handles=legend_elements, loc='center left', bbox_to_anchor=(1,
0.5))

    plt.tight_layout()
    plt.savefig(f'plots/plots_{counter1}/plot_{counter}.png',
bbox_inches='tight')
    plt.show()
def histogram(data):
    plt.hist(data, bins=100, alpha=0.75, color='blue', edgecolor='black')

    # Προσθήκη τίτλων και ετικετών
    plt.title('Ιστογράμμο τυχαίων δεδομένων')

```

```

plt.xlabel('Τιμές')
plt.ylabel('Συχνότητα')

# Εμφάνιση του ιστογράμματος
plt.show()

# Υπολογισμός της σκευότητας και της κυρτότητας
data_skewness = skew(data)
data_kurtosis = kurtosis(data)

print(f'Skewness: {data_skewness}')
print(f'Kurtosis: {data_kurtosis}')
average_of_crack=0
average_of_manhattan=0
average_of_euclidian=0
def add_random_block(arr, remaining_cells, iliko):
    max_attempts = 5000
    rows = len(arr)
    cols = len(arr[0])

    for _ in range(max_attempts):
        block_sizes = [size for size in [2, 3, 4] if size*size <=
remaining_cells]
        if not block_sizes:
            return 0
        block_size = random.choice(block_sizes)

        start_row = random.randint(0, rows - block_size)
        start_col = random.randint(0, cols - block_size)

        if all(arr[i][j] == 0
            for i in range(start_row, start_row+block_size)
            for j in range(start_col, start_col+block_size)):
            for i in range(start_row, start_row+block_size):
                for j in range(start_col, start_col+block_size):
                    arr[i][j] = iliko
            return block_size * block_size

    return 0

total_cells = NUMBER_OF_ARRAY * NUMBER_OF_ARRAY
target_cells1 = int(total_cells * POSOST01)
target_cells2 = int(total_cells * POSOST02)
old_euclidian=0
df = pd.DataFrame(columns=['euclidian mo'])
df.to_csv('euclidian_mo.csv', index=False, mode='w', encoding='utf-8')

```

```

tpkap= pd.DataFrame(columns=['euclidian mo','mo dedomenon','tipiki apoklisi
dedomenon','tipiki apoklisi dedomenon xoris ton teleutaio arithmo','tipiki
apoklisi teleytaioy arithmou','siglisi'])
tpkap.to_csv('tipiki_apoklisi.csv', index=False, mode='w', encoding='utf-8')
for j in range(0, epanalipsi):
    counter1 += 1
    counter = 0
    POWER = STANDAR_POWER
    matrix = [[0 for _ in range(NUMBER_OF_ARRAY)] for _ in
range(NUMBER_OF_ARRAY)]
    added_cells1 = 0
    added_cells2 = 0
    max_total_attempts = 5000 # Μέγιστος συνολικός αριθμός προσπαθειών
    for _ in range(max_total_attempts):
        remaining_cells = target_cells1 - added_cells1
        new_cells = add_random_block(matrix, remaining_cells, ILIK01)
        if new_cells == 0:
            break
        added_cells1 += new_cells
        if added_cells1 >= target_cells1:
            break

# Προσθήκη δεύτερου υλικού
    for _ in range(max_total_attempts):
        remaining_cells = target_cells2 - added_cells2
        new_cells = add_random_block(matrix, remaining_cells, ILIK02)
        if new_cells == 0:
            break
        added_cells2 += new_cells
        if added_cells2 >= target_cells2:
            break

    print(f"Προστέθηκαν {added_cells1} κελιά για το υλικό 1 (στόχος:
{target_cells1})")
    print(f"Ποσοστό κάλυψης υλικού 1: {added_cells1/total_cells*100:.2f}%")
    print(f"Προστέθηκαν {added_cells2} κελιά για το υλικό 2 (στόχος:
{target_cells2})")
    print(f"Ποσοστό κάλυψης υλικού 2: {added_cells2/total_cells*100:.2f}%")
    #time.sleep(2)
    average_of_matrix = int (NUMBER_OF_ARRAY/2)
    position_x = position_y = average_of_matrix
    print(position_x,position_y)
    if j==epanalipsi-1:
        show_matrix(counter,counter1)
    matrix[position_x][position_y]=POWER_OF
    POWER-=POWER_OF
    counter+=1

```

```

#show_matrix(counter,counter1)
choices=[0,0,0]
start_time = time.time()
old_random_num=0
while(POWER>0):

    if POWER==(CRACK_SIZE*POWER_OF)-POWER_OF:
        print("enter\n")
        random_num =random.randint(1, 8)
        print("the random is: ",random_num )
    else:
        old_random_num=random_num
        random_num,choices =
probabilistic_random(random_num,counter,choices,position_x,position_y,matrix)

        print("the random is: ",random_num )

        boolean,number = check_for_random_number(position_x,
position_y,random_num)
        print(boolean)
        print(number)
        print("POWER: ",POWER)
        print("the random is(choices): ",choices,"\n_____")
        if boolean == True:
            position_x,position_y=change_of_coordinates(position_x,
position_y, random_num)
            matrix[position_x][position_y]=POWER_OF
            counter+=1
            #print_matrix()
            POWER-=number
            #show_matrix(counter,counter1)
            start_time = time.time()
        else:
            random_num=old_random_num
            current_time = time.time()
            #if current_time - start_time > 10:
            # matrix.clear()

    if POWER==0:
        matrix.clear()

print("the size of the crack is:",CRACK_SIZE)
print("the active size of crack is(Euclidean, Manhattan
distance):",distance_to_last_point(average_of_matrix,position_x,position_y))
if(j==0):
    old_euclidian=average_of_euclidian

```

```

else:
    old_euclidian=average_of_euclidian/j
    average_of_crack+=CRACK_SIZE
    numbers_of_crack.append(CRACK_SIZE)
    average_of_euclidian+=distance_to_last_point(average_of_matrix,position_x,
position_y)[0]
    numbers_of_euclidian.append(distance_to_last_point(average_of_matrix,posit
ion_x,position_y)[0])
    average_of_manhattan+=distance_to_last_point(average_of_matrix,position_x,
position_y)[1]
    numbers_of_manhatan.append(distance_to_last_point(average_of_matrix,positi
on_x,position_y)[1])
    print("old:",old_euclidian)
    new_euclidian=distance_to_last_point(average_of_matrix,position_x,position
_y)[0]
    print("new",average_of_euclidian/(j+1))
    if check_convergence(old_euclidian, average_of_euclidian/(j+1), j)==True
and j!=0:
        mo=average_of_euclidian/(j+1)
        df = pd.DataFrame([[f"{mo:f}"]],
                           columns=['euclidian mo'])
        # Αποθήκευση στο CSV αρχείο σε λειτουργία append χωρίς να
ξαναγράφονται οι επικεφαλίδες
        df.to_csv('euclidian_mo.csv', index=False, mode='a', header=False,
encoding='utf-8')

        mean, std_dev, std_dev_without_last, last_value_std, last_value =
analyze_csv_data('euclidian_mo.csv','euclidian mo')

        tpkap=
pd.DataFrame([[f"{last_value:f}",f"{mean:f}",f"{std_dev:f}",f"{std_dev_without
_last:f}",f"{last_value_std:f}", "correct"]],
               columns=['euclidian mo','mo dedomenon','tipiki
apoklisi dedomenon','tipiki apoklisi dedomenon xoris ton teleutaio
arithmo','tipiki apoklisi teleytaioy arithmou','siglisi'])
        tpkap.to_csv('tipiki_apoklisi.csv', index=False, mode='a',
header=False, encoding='utf-8')

        continue
    print("hello")
    old_euclidian=new_euclidian
    print("old-new",old_euclidian)
    mo=average_of_euclidian/(j+1)
    df = pd.DataFrame([[f"{mo:f}"]],
                       columns=['euclidian mo'])
    # Αποθήκευση στο CSV αρχείο σε λειτουργία append χωρίς να ξαναγράφονται οι
επικεφαλίδες

```

```

df.to_csv('euclidian_mo.csv', index=False, mode='a', header=False,
encoding='utf-8')

mean, std_dev, std_dev_without_last, last_value_std, last_value =
analyze_csv_data('euclidian_mo.csv', 'euclidian mo')

tpkap=
pd.DataFrame([[f"{last_value:f}",f"{mean:f}",f"{std_dev:f}",f"{std_dev_without
_last:f}",f"{last_value_std:f}",f"---"]],
              columns=['euclidian mo','mo dedomenon','tipiki
apoklisi dedomenon','tipiki apoklisi dedomenon xoris ton teleutaio
arithmo','tipiki apoklisi teleytaioy arithmou','siglisi'])
tpkap.to_csv('tipiki_apoklisi.csv', index=False, mode='a', header=False,
encoding='utf-8')
if j==epanalipsi-1:
    show_matrix(counter,counter1)
show_matrix(counter,counter1)
average_of_crack=average_of_crack/(j+1)
average_of_euclidian=average_of_euclidian/(j+1)#epanalipsi
average_of_manhattan=average_of_manhattan/(j+1)#epanalipsi

print("averageof size is",average_of_crack)
print("averageof size is",average_of_euclidian)
print("averageof size is",average_of_manhattan)
histogram(numbers_of_crack)
histogram(numbers_of_euclidian)
histogram(numbers_of_manhatan)

```

Ενότητα 5.1.γ Κώδικας Τυπικής απόκλισης

```

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import pandas as pd

def analyze_csv_data(file_path, column_name):
    # Διάβασμα του CSV αρχείου
    df = pd.read_csv(file_path)

    # Εξαγωγή των δεδομένων από τη συγκεκριμένη στήλη
    data = df[column_name]

    # Υπολογισμός τυπικής απόκλισης όλων των δεδομένων
    std_dev = np.std(data)
    mean = np.mean(data)

    # Υπολογισμός τυπικής απόκλισης χωρίς τον τελευταίο αριθμό
    std_dev_without_last = np.std(data[:-1])

```

```

# Υπολογισμός τυπικής απόκλισης ΜΟΝΟ του τελευταίου αριθμού
last_value = data.iloc[-1]
data_without_last = data[:-1]
last_value_std = np.sqrt(((last_value - data_without_last.mean()) ** 2) /
len(data_without_last))

# Δημιουργία διαγράμματος
plt.figure(figsize=(10, 6))
plt.scatter(range(len(data)), data, color='blue', label='Δεδομένα')
plt.axhline(y=mean, color='r', linestyle='--', label='Μέσος Όρος')
plt.axhline(y=mean + std_dev, color='g', linestyle=':', label='Μέσος +
Τυπική Απόκλιση')
plt.axhline(y=mean - std_dev, color='g', linestyle=':', label='Μέσος -
Τυπική Απόκλιση')
plt.title(f'Διάγραμμα Δεδομένων (Τυπική Απόκλιση: {std_dev:.2f})')
plt.xlabel('Ευρετήριο')
plt.ylabel('Τιμή')
plt.legend()
plt.grid(True)
plt.show()

# Εκτύπωση βασικών στατιστικών
print(f"Μέσος Όρος: {mean:f}")
print(f"Τυπική Απόκλιση (όλα τα δεδομένα): {std_dev:f}")
print(f"Τυπική Απόκλιση (χωρίς τελευταίο αριθμό):
{std_dev_without_last:f}")
print(f"Τυπική Απόκλιση (τελευταίου αριθμού): {last_value_std:f}")
print(f"Τελευταίος αριθμός: {last_value}")

return mean, std_dev, std_dev_without_last, last_value_std, last_value

# Παράδειγμα χρήσης
#analyze_csv_data('euclidian_mo.csv', 'euclidian mo')

```

5.2 Πειραματικά Δεδομένα και Αποτελέσματα

Ενότητα 5.2.α Αποτελέσματα Ευφυούς Τεχνικής

Τα αποτελέσματα της Ευφυούς Τεχνικής λαμβάνονται από δεδομένα που έχουν κατασκευαστεί στον προσομοιωτή για προσμείξεις Μήτρας με ένα υλικό προσμείξεων. Πιο συγκεκριμένα, η ευφυής τεχνική είναι κατασκευασμένη να παράγει αποτελέσματα μονού, αλλά και διπλού υλικού με δεδομένα μόνο από προσμείξεις Μήτρας με ένα υλικό προσμείξεων. Με αυτό τον τρόπο αποδεικνύεται η δυνατότητα της ευφυούς τεχνικής να προβλέπει καταστάσεις στις οποίες δεν υπάρχουν δεδομένα. Παρακάτω αναλύονται τα αποτελέσματα για μήτρα με ένα υλικό αλλά και για δύο υλικά προσμείξεων.

- **Αποτελέσματα Ευφυούς Τεχνικής για Μήτρα με ένα υλικό προσμείξεων:**

Στις παρακάτω προσομοιώσεις εφαρμογής Ευφυούς Τεχνικής για Μήτρα με ένα υλικό προσμείξεων υπάρχει Accuracy 75% , δηλαδή το μοντέλο προβλέπει καλά τις εξόδους του προβλήματος, παρά του μεγάλου «θορύβου» που υπάρχει στα δεδομένα εισόδου. Οι παρακάτω προσομοιώσεις εφαρμογής Ευφυούς Τεχνικής υλοποιήθηκαν με σκοπό την εξέταση για τη σωστή λειτουργία του μοντέλου με βάση τον προσομοιωτή.

Για τις δύο πρώτες προσομοιώσεις εφαρμογής Ευφυούς Τεχνικής, έχουμε εισόδους μόνο μία ενέργεια DE, ένα ποσοστό (Percentage) και ένα Kt. Το DE είναι η διαφορά μεταξύ ενέργειας πρόσθετου υλικού και ενέργειας της μήτρας, ενώ το Percentage είναι το ποσοστό κάλυψης του υλικού. Τέλος, σαν είσοδο έχουμε το kT το οποίο είναι η θερμική ενέργεια ανά άτομο της προσομοίωσης - συστήματος.

Ως αποτελέσματα έχουμε τον μέσο όρο της ευκλείδειας (Ευκλείδεια MO) και την τυπική απόκλιση. Ο Ευκλείδεια MO είναι ο μέσος όρος της Ευκλείδειας (η μέση έκταση της ρωγμής) και η τυπική απόκλιση είναι το εύρος που μπορεί να έχει ο μέσος όρος της ευκλείδειας. Η δεύτερη έξοδος υπολογίζεται διότι μια ρωγμή δεν έχει ποτέ σταθερό μέσο όρο σε ένα συγκεκριμένο υλικό, οπότε πρέπει να υπολογίζεται και η απόκλιση. Τέλος, για να μπορέσουμε να διακρίνουμε αν το μοντέλο ξεφεύγει σε ακραίες τιμές, βλέπουμε το RMSE, δηλαδή το Μέσο Τετραγωνικό Σφάλμα που μας διασφαλίζει ότι το μοντέλο δεν έχει ξεφύγει στις ακραίες τιμές.

Αποτέλεσμα 1^{ης} εφαρμογής ευφυούς τεχνικής:

74,9% accuracy

Χρόνος: 3 λεπτά και 33 δεύτερα.

Prediction for combined parameters:

Parameters Set 1: DE = 0, PERCENTAGE = 0

Parameters Set 2: DE = 0.0125, PERCENTAGE = 2

KT = 0.05

Predicted Euclidian MO: 90.4490

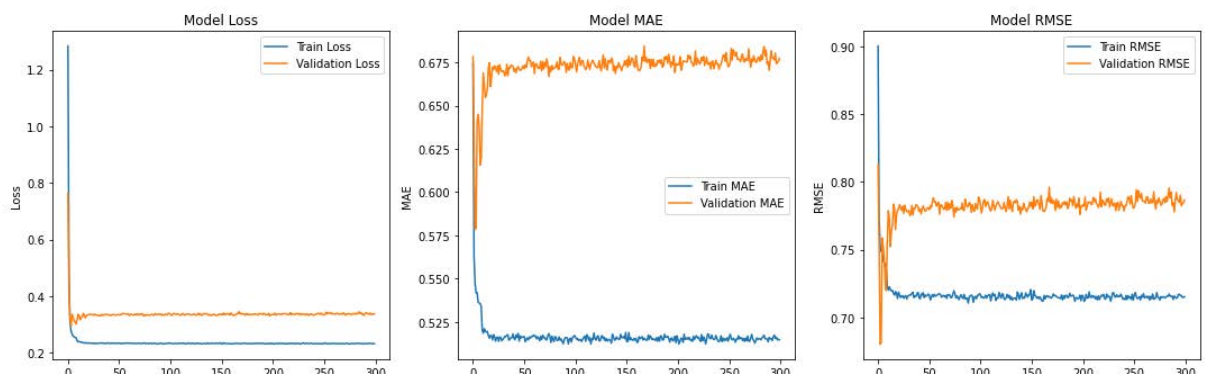
Predicted Tipiki Apoklisi: 3.7209

Εύρος RMSE κατά την εκπαίδευση:

Ελάχιστο RMSE: 0.7105151414871216

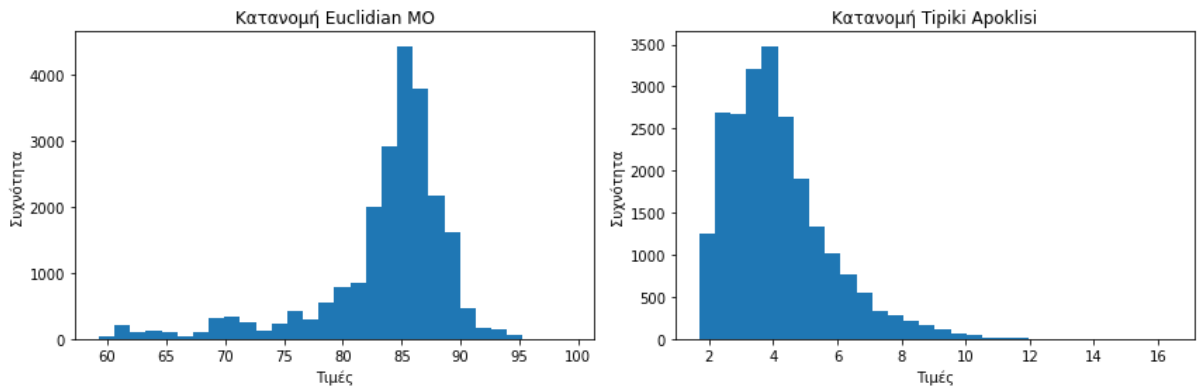
Μέγιστο RMSE: 0.9004440903663635

Στην Εικόνα 14 απεικονίζεται η διαδικασία εκπαίδευσης του μοντέλου σε τριακόσιες (300) εποχές και κατά πόσο το μοντέλο «χάνει» στην εκπαίδευση και στην πρόβλεψη. Συγκεκριμένα, απεικονίζεται το Loss, το MAE και το RMSE τρείς (3) βασικές μετρικές που μας δείχνουν την ευστοχία-αστοχία του μοντέλου.



Εικόνα 14. Η κατανομή του Loss του μοντέλου για κάθε μετρική.

Στην Εικόνα 15 απεικονίζεται η κατανομή των δεδομένων εκπαίδευσης για τον μέσο όρο της ευκλείδειας και την τυπική απόκλιση. Μέσω αυτών των σχημάτων, ο χρήστης μπορεί να διακρίνει το εύρος των δεδομένων.



Εικόνα 15. Οπτικοποίηση κατανομής δεδομένων εισόδου μοντέλου.

Αποτέλεσμα 2^{ης} εφαρμογής ευφυούς τεχνικής:

75% accuracy

Χρόνος: 3 λεπτά και 38 δεύτερα.

Prediction for combined parameters:

Parameters Set 1: DE = 0, PERCENTAGE = 0

Parameters Set 2: DE = 0.0375, PERCENTAGE = 15

KT = 0.075

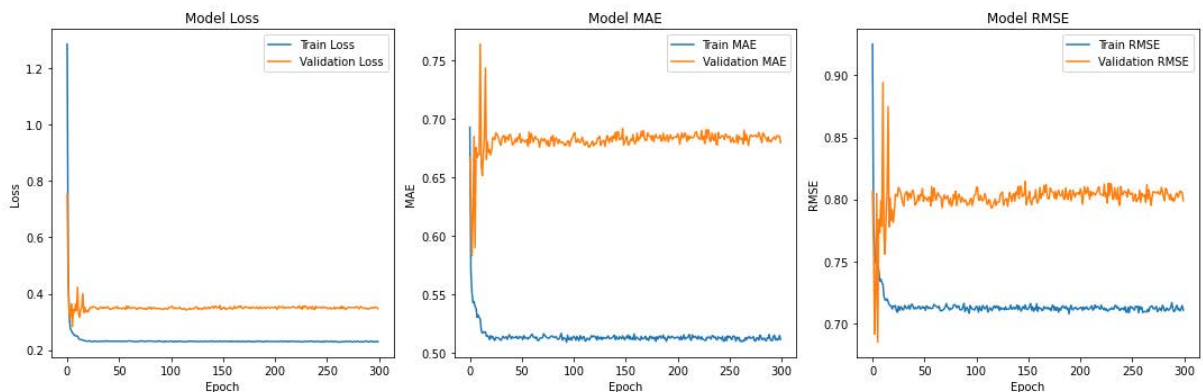
Predicted Euclidian MO: 86.9205

Predicted Τίπικι Αποκλιση: 3.9869

Εύρος RMSE κατά την εκπαίδευση:

Ελάχιστο RMSE: 0.7078540921211243

Μέγιστο RMSE: 0.9251092076301575



Εικόνα 16. Η κατανομή του Loss του μοντέλου για κάθε μετρική.

- **Αποτελέσματα Ευφυούς Τεχνικής στην περίπτωση Μήτρας με δύο είδη πρόσμειξης:**

Στις παρακάτω προσομοιώσεις εφαρμογής Ευφυούς Τεχνικής για Μήτρα με δύο είδη πρόσμειξης υπάρχει Accuracy περίπου 74,87%, δηλαδή το μοντέλο προβλέπει καλά τις εξόδους του προβλήματος, παρά του μεγάλου «θορύβου» που υπάρχει στα δεδομένα εισόδου. Οι παρακάτω προσομοιώσεις εφαρμογής Ευφυούς Τεχνικής υλοποιήθηκαν με σκοπό την ανάδειξη του μοντέλου στην ευστοχία του σε νέα δεδομένα, όπως τα δεδομένα Μήτρας με δύο είδη πρόσμειξης.

Το μοντέλο σε αυτήν την περίπτωση δέχεται πέντε (5) εισόδους: δύο ενέργειες DE(DE1 και DE2) που αντιπροσωπεύουν τα δύο υλικά, δύο ποσοστά (percentage) που αντιπροσωπεύουν τα ποσοστά κάλυψης του κάθε υλικού κι ένα kT που είναι η θερμική ενέργεια ανά άτομο της προσομοίωσης - συστήματος.

Όσον αφορά τα αποτελέσματα, το μοντέλο έχει κατασκευαστεί έτσι ώστε να είναι αποτελεσματικό στην συμπεριφορά υλικών με δύο είδη πρόσμειξης συνδυάζοντας δεδομένα από υλικά με ένα είδος πρόσμειξης. Ειδικότερα, το μοντέλο ενσωματώνει τις εισόδους σε μία είσοδο (input) για την πρόβλεψη και παρακολουθεί πώς επηρεάζονται οι δύο έξοδοι και προβλέπει δύο πιθανές εξόδους· τον μέσο όρο της ευκλείδειας και την τυπική απόκλιση. Με αυτόν τον τρόπο μπορεί το μοντέλο να δράσει αποτελεσματικά και εύστοχα στην σωστή πρόβλεψη της Μήτρας με δύο είδη πρόσμειξης.

Επίσης, και σε αυτές τις προσομοιώσεις εφαρμογής Ευφυούς Τεχνικής έχουμε το RMSE με το οποίο βλέπουμε αν το μοντέλο ξεφεύγει σε ακραίες τιμές.

Αποτέλεσμα 1^{ης} εφαρμογής ευφυούς τεχνικής:

74,81% Accuracy

Χρόνος: 3 λεπτά και 39 δεύτερα.

Prediction for combined parameters:

Parameters Set 1: DE = 0.0125, PERCENTAGE = 2

Parameters Set 2: DE = 0.05, PERCENTAGE = 5

KT = 0.05

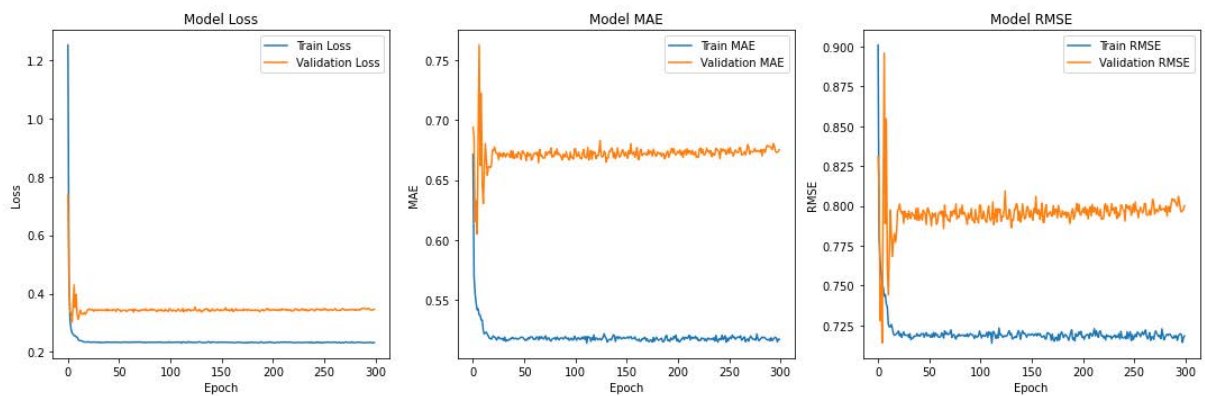
Predicted Euclidian MO: 87.2168

Predicted Tipiki Apoklisi: 4.0670

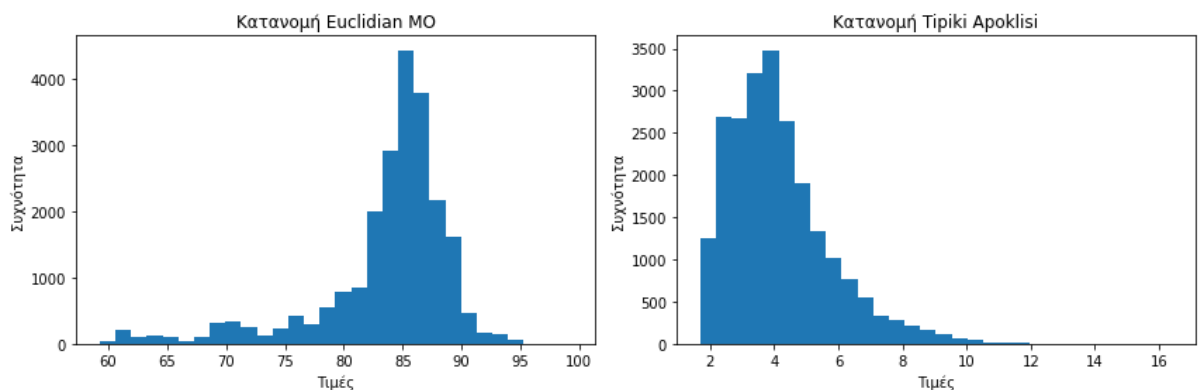
Εύρος RMSE κατά την εκπαίδευση:

Ελάχιστο RMSE: 0.7137998938560486

Μέγιστο RMSE: 0.9009422659873962



Εικόνα 17. Η κατανομή του Loss του μοντέλου για κάθε μετρική.



Εικόνα 18. Οπτικοποίηση κατανομής δεδομένων εισόδου μοντέλου.

Αποτέλεσμα 2^{ης} εφαρμογής ευφυούς τεχνικής:

74,94% Accuracy

Χρόνος: 3 λεπτά και 36 δεύτερα.

Prediction for combined parameters:

Parameters Set 1: DE = 0.025, PERCENTAGE = 10

Parameters Set 2: DE = 0.0375, PERCENTAGE = 15

KT = 0.075

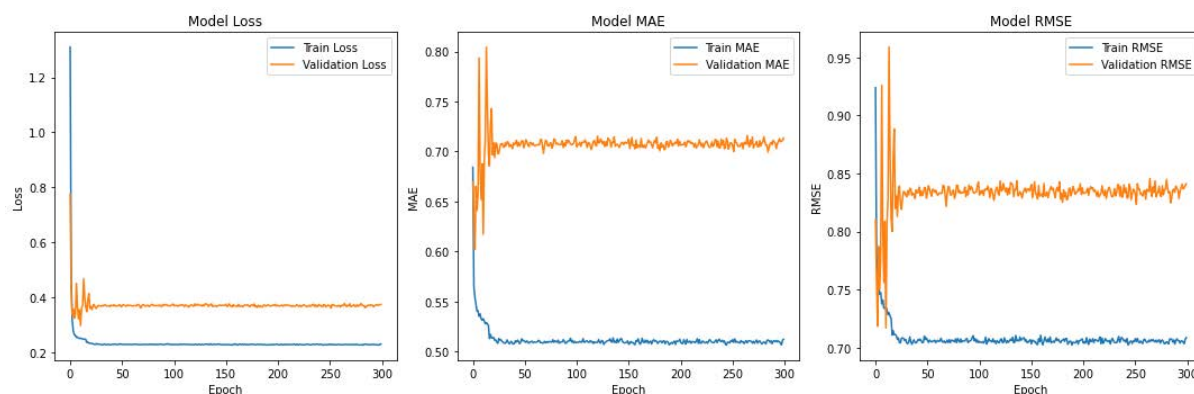
Predicted Euclidian MO: 85.0575

Predicted Tipiki Apoklisi: 4.5534

Εύρος RMSE κατά την εκπαίδευση:

Ελάχιστο RMSE: 0.7022263407707214

Μέγιστο RMSE: 0.9239577651023865



Εικόνα 19. Η κατανομή του Loss του μοντέλου για κάθε μετρική.

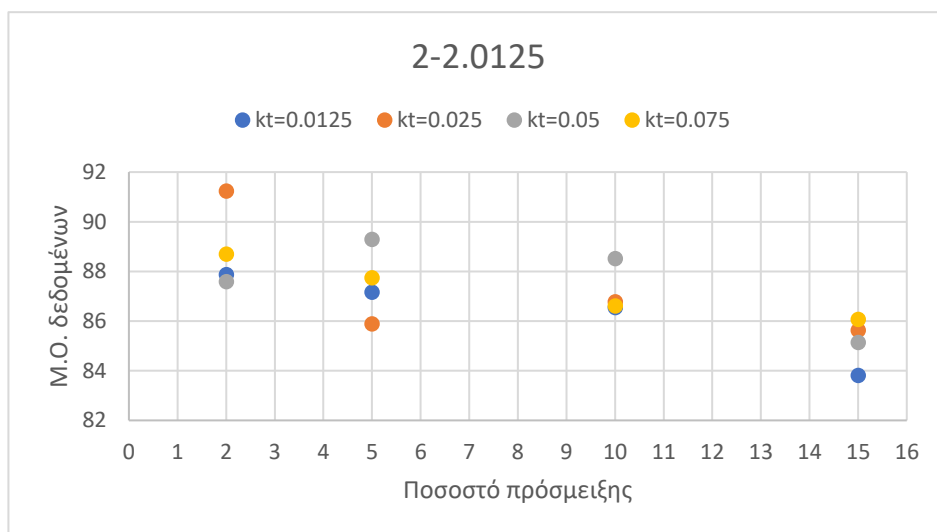
Ενότητα 5.2.8 Αποτελέσματα Προσομοίωσης Αντοχής Υλικών

Τα αποτελέσματα της προσομοίωσης ποικίλουν ανάλογα με το ποσοστό πρόσμειξης, τις ιδιότητες του υλικού και τα πολλαπλά υλικά. Ο προσομοιωτής είναι κατασκευασμένος έτσι ώστε να μπορεί να δημιουργήσει μια πλειάδα από δεδομένα για μία πρόσμειξη για ένα ή/και δύο υλικά. Έτσι, τα αποτελέσματά του μπορούν να συγκριθούν ανάλογα με το kT , δηλαδή τη θερμική ενέργεια ανά άτομο, αλλά και ανάλογα με το ποσοστό.

Πρόσμιξη με ίδιο DE και διαφορετικό kT :

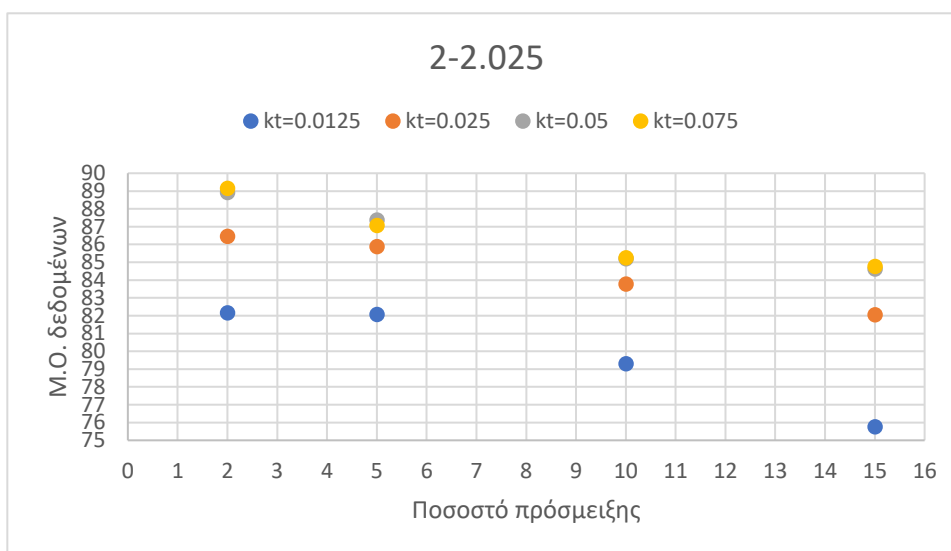
Τα παρακάτω διαγράμματα βοηθούν στην εξέταση της ορθότητας του προσομοιωτή σε σχέση με τη θερμική ενέργεια ανά άτομο. Κατά την αύξηση της θερμικής ενέργειας ανά άτομο (kT) η ρωγμή πρέπει να βρίσκεται σε υψηλότερα επίπεδα στο ίδιο ποσοστό και να μειώνεται αναλογικά κατά την αύξηση του ποσοστού.

Στην Εικόνα 20 αναλύεται το μήκος ρωγμής συναρτήσει της θερμοκρασίας για υλικό με μήτρα με ενέργεια $e_i=2.0$ και πρόσμειξη με ενέργεια $e_j=2.0125$. Στην εικόνα παρατηρείτε ότι καθώς αυξάνεται το ποσοστό πρόσμειξης μειώνεται το μέσο μήκος ρωγμής γεγονός που είναι αναμενόμενο. Επίσης παρατηρείτε ότι με την αύξηση της θερμοκρασίας έχουμε αύξηση του μέσου μήκους ρωγμής για κάθε ποσοστό αντίστοιχα.



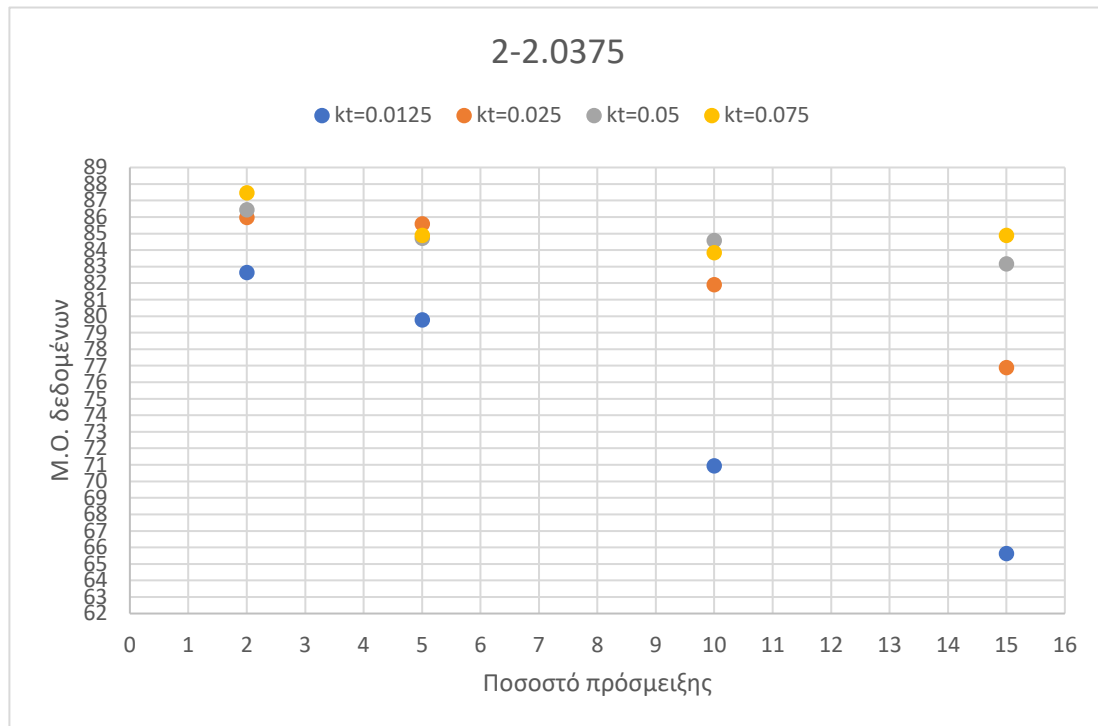
Εικόνα 20. Πρόσμιξη αντικειμένου 2-2.0125 δηλαδή $DE=0.0125$ με διαφορετικό kT .

Στην Εικόνα 21 αναλύεται το μήκος ρωγμής συναρτήση της θερμοκρασίας για υλικό με μήτρα με ενέργεια $\epsilon_i=2.0$ και πρόσμειξη με ενέργεια $\epsilon_j=2.025$ μεγαλύτερη σε σχέση με την προηγούμενη εικόνα. Στην εικόνα παρατηρείτε ότι καθώς αυξάνεται το ποσοστό πρόσμειξης μειώνεται το μέσο μήκος ρωγμής γεγονός που είναι αναμενόμενο. Επίσης παρατηρείτε ότι με την αύξηση της θερμοκρασίας έχουμε αύξηση του μέσου μήκους ρωγμής για κάθε ποσοστό αντίστοιχα.



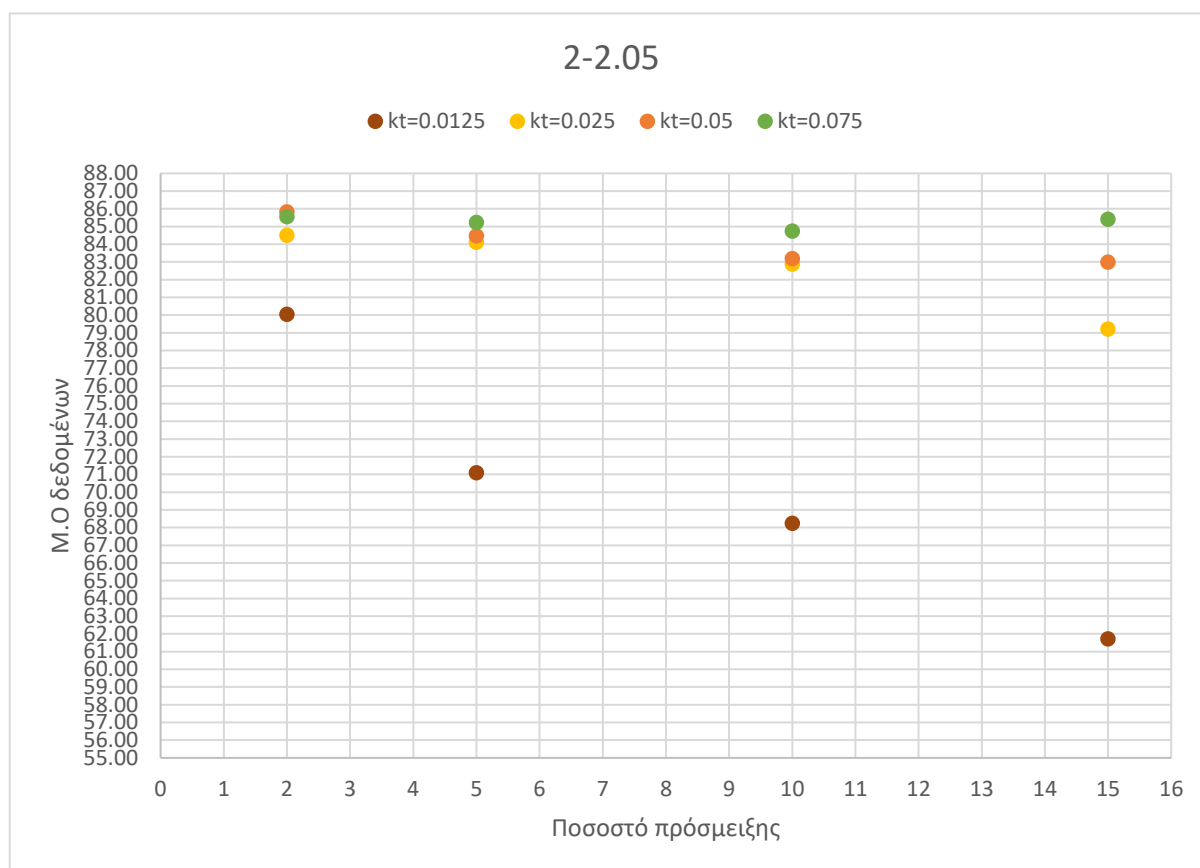
Εικόνα 21. Πρόσμειξη αντικειμένου 2-2.025 δηλαδή $DE=0.025$ με διαφορετικό K_t .

Στην Εικόνα 22 αναλύεται το μήκος ρωγμής συναρτήση της θερμοκρασίας για υλικό με μήτρα με ενέργεια $\epsilon_i=2.0$ και πρόσμειξη με ενέργεια $\epsilon_j=2.0375$ μεγαλύτερη σε σχέση με την προηγούμενη εικόνα. Στην εικόνα παρατηρείτε ότι καθώς αυξάνεται το ποσοστό πρόσμειξης μειώνεται το μέσο μήκος ρωγμής γεγονός που είναι αναμενόμενο. Επίσης παρατηρείτε ότι με την αύξηση της θερμοκρασίας έχουμε αύξηση του μέσου μήκους ρωγμής για κάθε ποσοστό αντίστοιχα.



Εικόνα 22. Πρόσμειξη αντικειμένου 2-2.0375 δηλαδή DE=0.0375 με διαφορετικό Kt.

Στην Εικόνα 23 αναλύεται το μήκος ρωγμής συναρτήσει της θερμοκρασίας για υλικό με μήτρα με ενέργεια $\epsilon_i=2.0$ και πρόσμειξη με ενέργεια $\epsilon_i=2.05$ μεγαλύτερη σε σχέση με την προηγούμενη εικόνα. Στην εικόνα παρατηρείτε ότι καθώς αυξάνεται το ποσοστό πρόσμειξης μειώνεται το μέσο μήκος ρωγμής γεγονός που είναι αναμενόμενο. Επίσης παρατηρείτε ότι με την αύξηση της θερμοκρασίας έχουμε αύξηση του μέσου μήκους ρωγμής για κάθε ποσοστό αντίστοιχα.

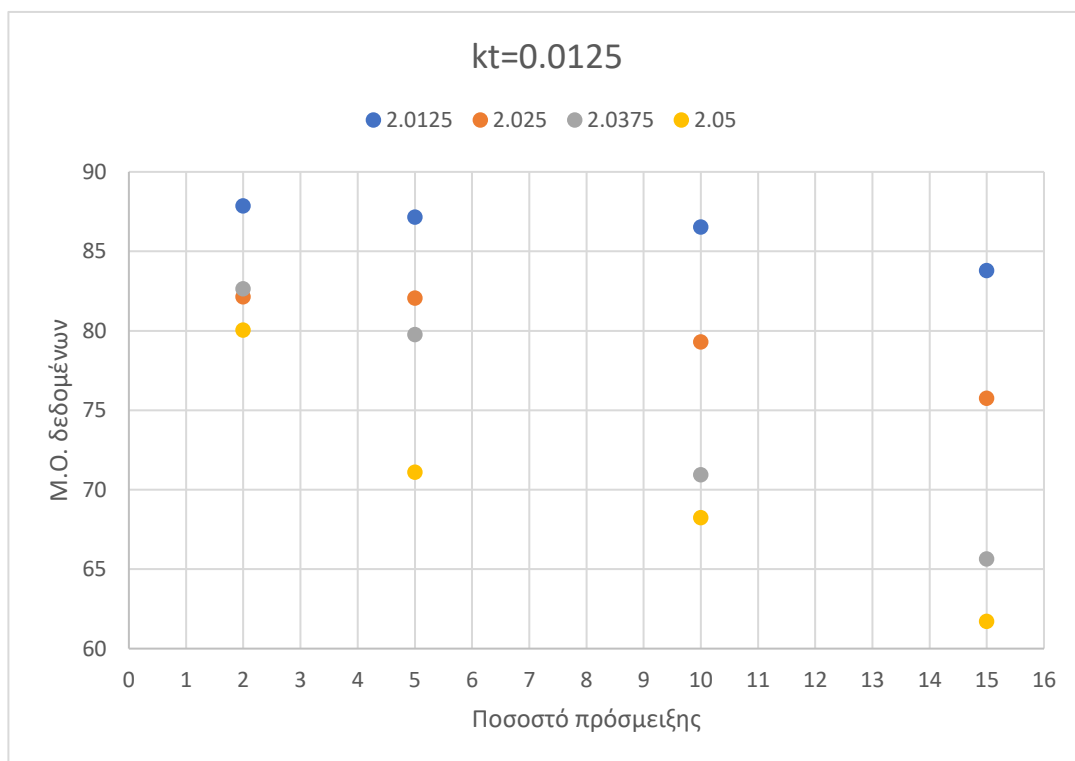


Εικόνα 23. Πρόσμειξη αντικειμένου 2-2.05 δηλαδή DE=0.05 με διαφορετικό Kt.

Πρόσμειξη με ίδιο kT και διαφορετικό DE (για προσμείξεις Μήτρας με ένα υλικό προσμείξεων για κάθε χρώμα):

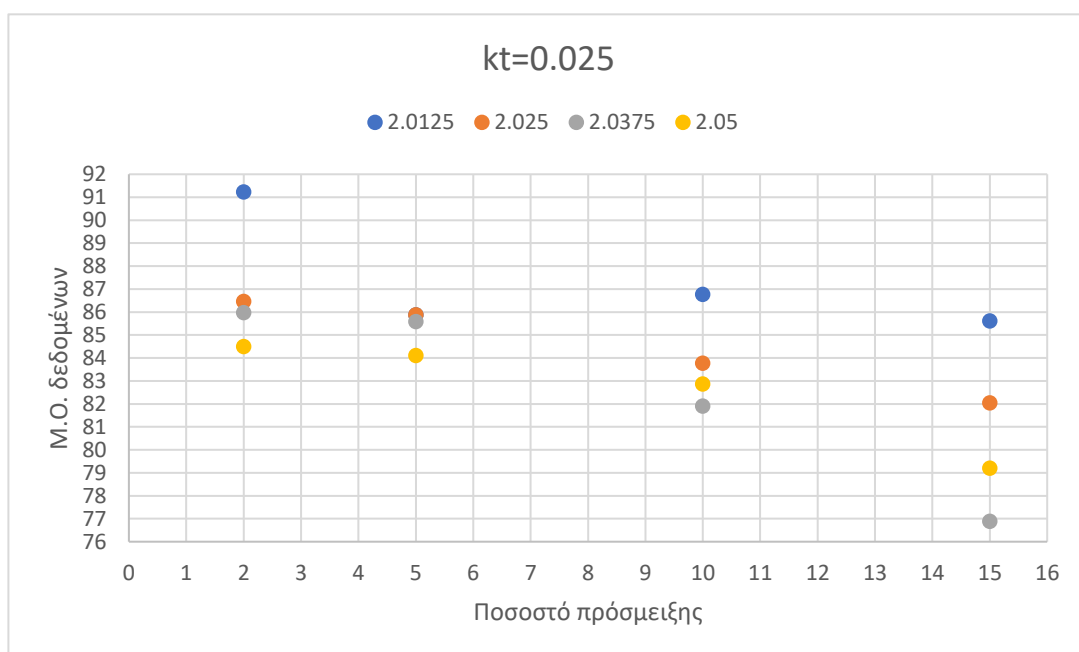
Τα παρακάτω διαγράμματα βοηθούν στην εξέταση της ορθότητας του προσομοιωτή σε σχέση με την αντοχή του κάθε υλικού. Κατά την αύξηση της αντοχής του υλικού, η ρωγμή πρέπει να βρίσκεται σε χαμηλότερα επίπεδα στο ίδιο ποσοστό και να μειώνεται ανάλογα κατά την αύξηση του ποσοστού. Επίσης, παρατηρείται ότι κατά την αύξηση της θερμικής ενέργειας ανά άτομο (kT) αυτή η αναλογία χάνεται λόγω των υψηλών θερμοκρασιών που θεωρείται φυσιολογικό.

Στην Εικόνα 24 παρουσιάζεται η επίδραση του ποσοστού πρόσμειξης στον μέσο όρο των δεδομένων για σταθερή θερμική ενέργεια ανά άτομο $kT=0.0125$ και διαφορετικές προσμείξεις (διαφορετική απόχρωση). Παρατηρείται ότι καθώς αυξάνεται το ποσοστό πρόσμειξης, υπάρχει μια γενική τάση μείωσης του μέσου όρου των δεδομένων που είναι αναμενόμενο. Επίσης παρατηρείται ότι κατά την αύξηση του kT στα επόμενα διαγράμματα αυτή η τάση μείωσης του μέσου όρου χάνεται, που θεωρείται φυσιολογικό λόγω των υψηλών θερμοκρασιών.



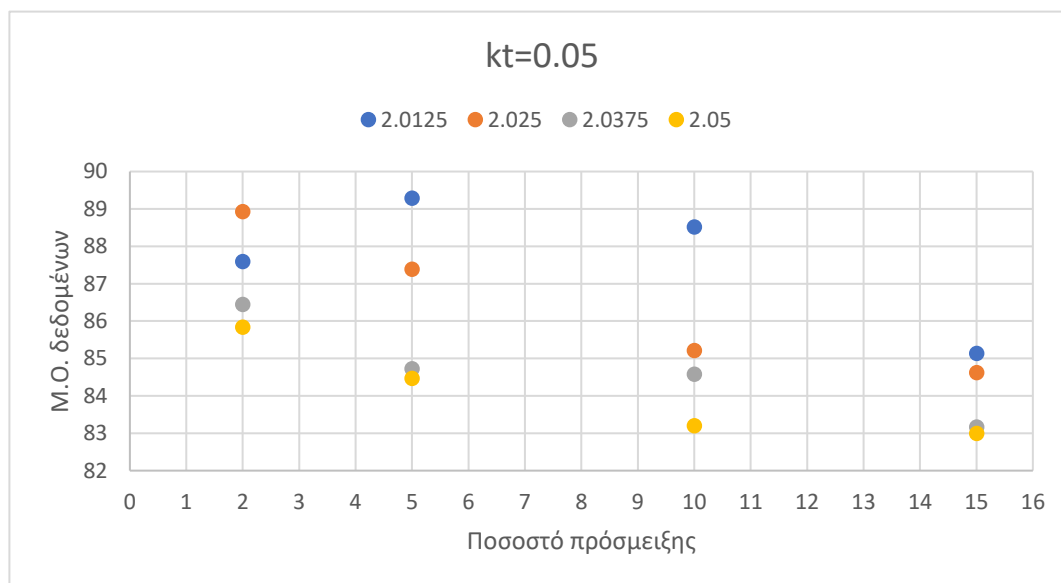
Εικόνα 24. Πρόσμειξη αντικειμένων με $Kt=0.0125$ και διαφορετικών DE (διαφορετική απόχρωση).

Στην Εικόνα 25 παρουσιάζεται η επίδραση του ποσοστού πρόσμειξης στον μέσο όρο των δεδομένων για σταθερή θερμική ενέργεια ανά άτομο $kT=0.025$ και διαφορετικές προσμείξεις (διαφορετική απόχρωση). Παρατηρείται ότι καθώς αυξάνεται το ποσοστό πρόσμειξης, υπάρχει μια γενική τάση μείωσης του μέσου όρου των δεδομένων που είναι αναμενόμενο. Επίσης παρατηρείται ότι κατά την αύξηση του kT αυτή η τάση αρχίζει να χάνετε, που θεωρείτε φυσιολογικό.



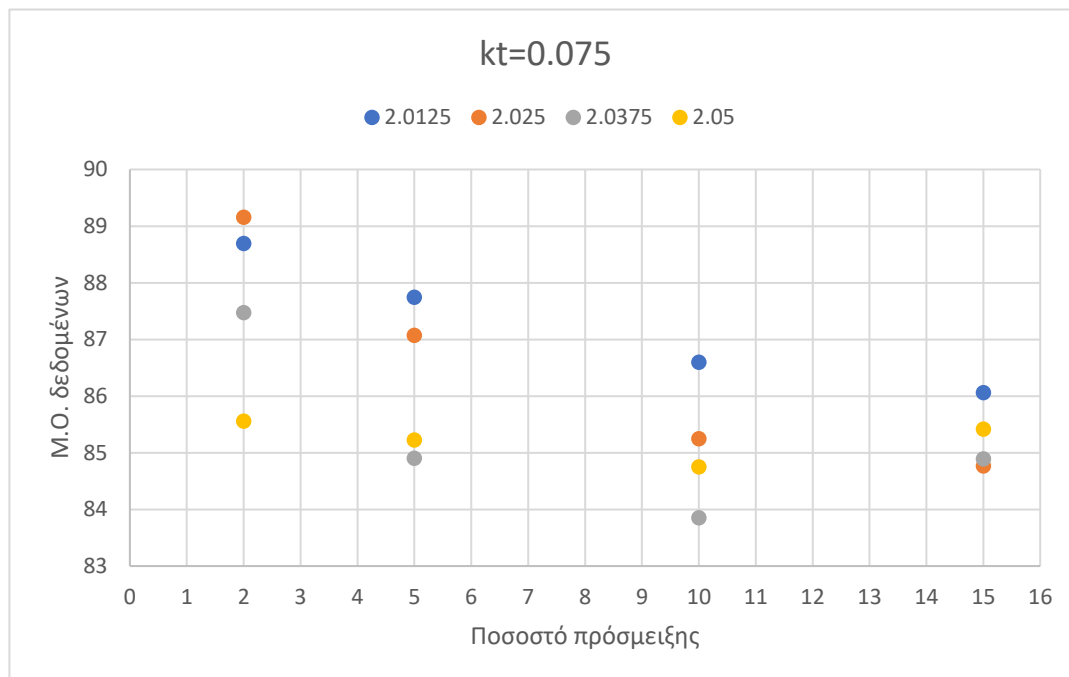
Εικόνα 25. Πρόσμειξη αντικειμένων με $Kt=0.025$ και διαφορετικών DE(διαφορετική απόχρωση).

Στην Εικόνα 26 παρουσιάζεται η επίδραση του ποσοστού πρόσμειξης στον μέσο όρο των δεδομένων για σταθερή θερμική ενέργεια ανά άτομο $kT=0.05$ και διαφορετικές προσμείξεις (διαφορετική απόχρωση). Παρατηρείται ότι καθώς αυξάνεται το ποσοστό πρόσμειξης, υπάρχει μια γενική τάση μείωσης του μέσου όρου των δεδομένων που είναι αναμενόμενο. Επίσης παρατηρείται ότι κατά την αύξηση του kT αυτή η τάση αρχίζει να χάνετε περισσότερο που θεωρείτε φυσιολογικό.



Εικόνα 26. Πρόσμειξη αντικειμένων με $Kt=0.05$ Και διαφορετικών DE(διαφορετική απόχρωση).

Στην Εικόνα 27 παρουσιάζεται η επίδραση του ποσοστού πρόσμειξης στον μέσο όρο των δεδομένων για σταθερή θερμική ενέργεια ανά άτομο $kT=0.075$ και διαφορετικές προσμείξεις (διαφορετική απόχρωση). Παρατηρείται ότι καθώς αυξάνεται το ποσοστό πρόσμειξης, υπάρχει μια γενική τάση μείωσης του μέσου όρου των δεδομένων που είναι αναμενόμενο. Επίσης παρατηρείται ότι κατά την αύξηση του kT αυτή η τάση έχει χαθεί που θεωρείτε φυσιολογικό λόγω της πάρα πολύ υψηλής θερμοκρασίας.



Εικόνα 27. Πρόσμειξη αντικειμένων με $Kt=0.075$ Και διαφορετικών DE(διαφορετική απόχρωση).

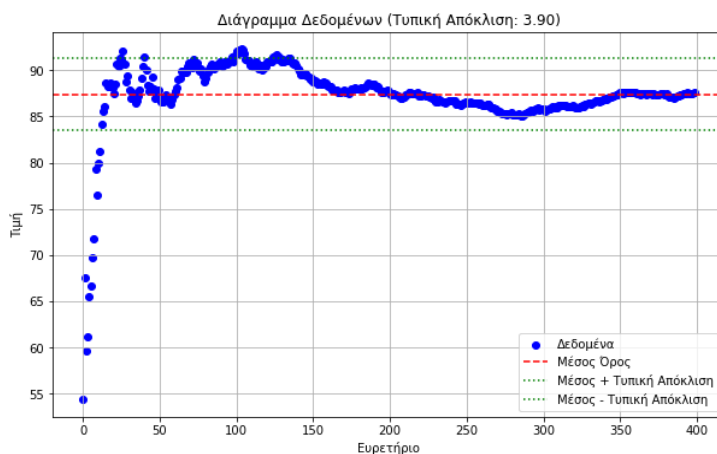
Ανάλυση αποτελεσμάτων προσομοιωτή για Μήτρα με ένα υλικό προσμείξεων και Μήτρα με δύο είδη πρόσμειξης.

Στη συνέχεια παρουσιάζονται τα αποτελέσματα προσομοιώσεων για δύο διαφορετικές περιπτώσεις. Για προσομοιώσεις Μήτρας με ένα υλικό προσμείξεων και για προσομοιώσεις Μήτρας με δύο είδη πρόσμειξης. Για κάθε περίπτωση δίνονται οι παράμετροι εισόδου του προσομοιωτή καθώς και ενδεικτικές τιμές από το Dataset των αποτελεσμάτων:

1. Μήτρα με ένα υλικό προσμείξεων:

Ανάλυση 1^η:

Σε προσομοίωση με υλικό 2-2.0125 (όπου 2 ενέργεια μήτρας /δύναμη ρωγμής και 2.0125 σύνθετο υλικό) με ποσοστό πρόσμειξης 2% και $kT=0.05$ λαμβάνονται τα εξής αποτελέσματα (χρόνος εκτέλεσης: 11 λεπτά και 58 δευτερά):

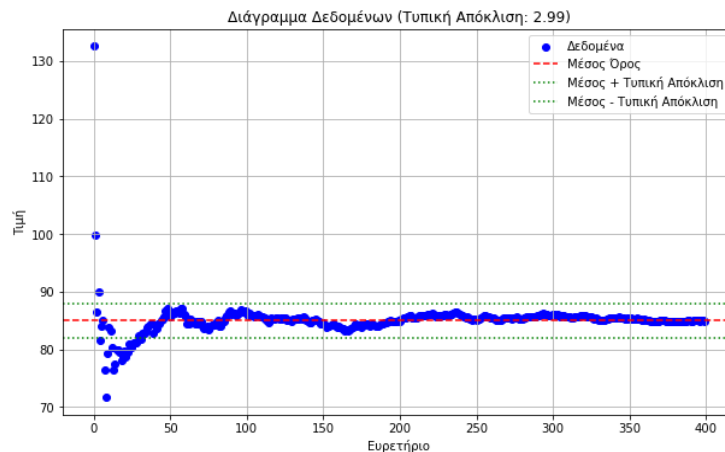


Εικόνα 28. Απεικόνιση εξέλιξης δεδομένων και τυπικής απόκλισης για πρόσμειξη με $DE=0.0125$, $PERCENTAGE=2\%$, $kT=0.05$.

Με κάποιες ενδεικτικές τιμές από το dataset του προσομοιωτή: Μέσος όρος ευκλείδειας απόστασης: 90.525994 και τυπική απόκλιση: 6.391939, Μέσος όρος ευκλείδειας απόστασης: 87.589607 και τυπική απόκλιση: 3.895519.

Ανάλυση 2^η:

Σε προσομοίωση με υλικό 2-2.0375 (όπου 2 ενέργεια μήτρας / δύναμη ρωγμής και 2.0375 σύνθετο υλικό) με ποσοστό πρόσμειξης 15% και $kT=0.075$ λαμβάνονται τα εξής αποτελέσματα (χρόνος εκτέλεσης: 12 λεπτά και 20 δεύτερα):



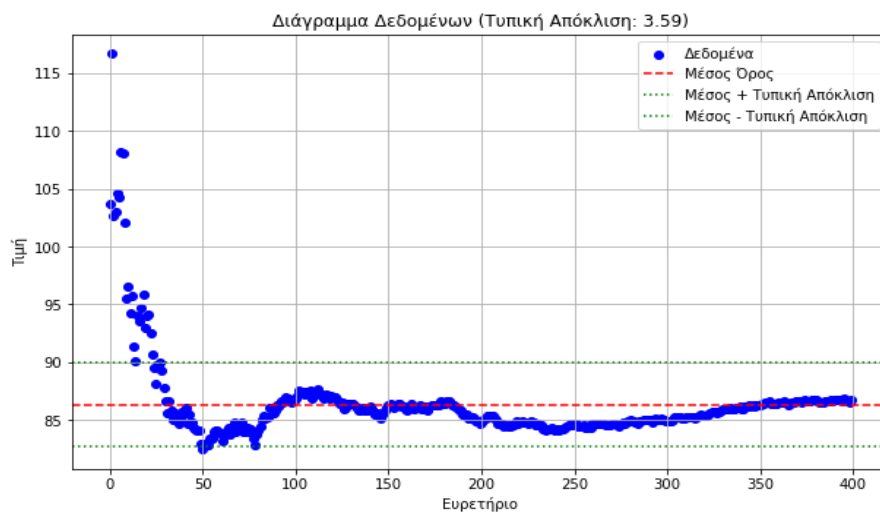
Εικόνα 29. Απεικόνιση εξέλιξης δεδομένων και τυπικής απόκλισης για πρόσμειξη με $DE=0.0375$, $PERCENTAGE=15\%$, $kT=0.075$.

Με κάποιες ενδεικτικές τιμές από το dataset του προσομοιωτή: Μέσος όρος ευκλείδειας απόστασης: 86.851269 και τυπική απόκλιση: 5.919367, Μέσος όρος ευκλείδειας απόστασης: 84.888027 και τυπική απόκλιση: 2.989727.

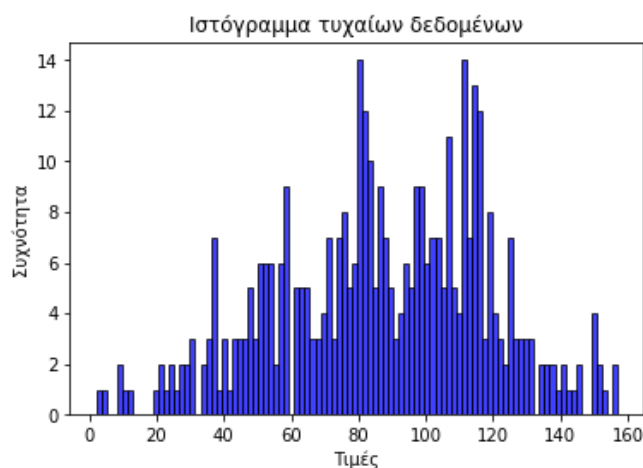
2. Μήτρα με δύο είδη πρόσμειξης:

Ανάλυση 1^η:

Σε προσομοίωση με υλικά 2-2.0125 και 2-2.05 (όπου 2 ενέργεια μήτρας / δύναμη ρωγμής και 2.0125, 2.05 σύνθετα υλικά) με ποσοστά πρόσμειξης 2% και 5% αντίστοιχα και $kT=0.05$ λαμβάνονται τα εξής αποτελέσματα (χρόνος εκτέλεσης: 12 λεπτά και 21 δεύτερα):



Εικόνα 30. Απεικόνιση εξέλιξης δεδομένων και τυπικής απόκλισης για πρόσμειξη με $DE1=0.0125$ & $DE2=0.05$, $PERCENTAGE1=2\%$ & $PERCENTAGE2=5\%$, $KT=0.05$.

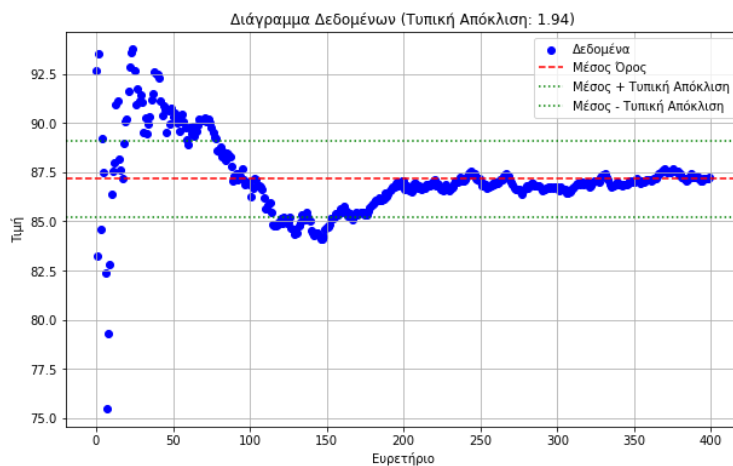


Εικόνα 31. Συχνότητα εμφάνισης δεδομένων στο dataset για πρόσμειξη με $DE1=0.0125$ & $DE2=0.05$, $PERCENTAGE1=2\%$ & $PERCENTAGE2=5\%$, $KT=0.05$.

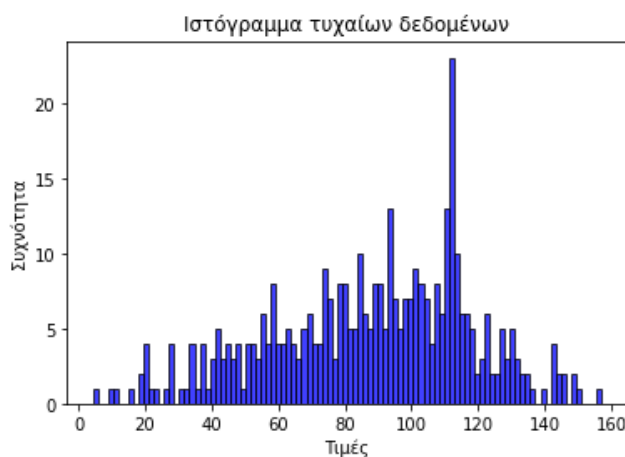
Με κάποιες ενδεικτικές τιμές από το dataset του προσομοιωτή: Μέσος όρος ευκλείδειας απόστασης: 87.230570 και τυπική απόκλιση: 6.134794, Μέσος όρος ευκλείδειας απόστασης: 86.721281 και τυπική απόκλιση: 3.592536.

Ανάλυση 2^η:

Σε προσομοίωση με υλικά 2-2.025 και 2-2.0375 (όπου 2 ενέργεια μήτρας /δύναμη ρωγμής και 2.025, 2.0375 σύνθετα υλικά) με ποσοστά πρόσμειξης 10% και 15% αντίστοιχα και $KT=0.075$ λαμβάνονται τα εξής αποτελέσματα (χρόνος εκτέλεσης: 12 λεπτά και 39 δεύτερα):



Εικόνα 32. Απεικόνιση εξέλιξης δεδομένων και τυπικής απόκλισης για πρόσμεξη με $DE1=0.025$ & $DE2=0.0375$, $PERCENTAGE1=10\%$ & $PERCENTAGE2=15\%$, $kT=0.075$.



Εικόνα 33. Συχνότητα εμφάνισης δεδομένων στο dataset για πρόσμεξη με $DE1=0.025$ & $DE2=0.0375$, $PERCENTAGE1=10\%$ & $PERCENTAGE2=15\%$, $kT=0.075$.

Με κάποιες ενδεικτικές τιμές από το dataset του προσομοιωτή: Μέσος όρος ευκλείδειας απόστασης: 85.112116 και τυπική απόκλιση: 2.885688, Μέσος όρος ευκλείδειας απόστασης: 87.262128 και τυπική απόκλιση: 1.939001.

Ενότητα 5.2.γ Σύγκριση Αποτελεσμάτων Ευφυούς Τεχνικής Και Προσομοίωσης Αντοχής υλικών

Η παρούσα ενότητα εξετάζει τη σύγκριση μεταξύ των αποτελεσμάτων που προκύπτουν από την ευφυή τεχνική και αυτών που παράγονται μέσω προσομοιώσεων αντοχής υλικών. Στόχος είναι να αναδειχθεί η ικανότητα της ευφυούς τεχνικής να προβλέπει δεδομένα που δεν περιλαμβάνονται στο αρχικό σύνολο εκπαίδευσής της και να αξιολογηθεί η ακρίβεια των προβλέψεων της συγκριτικά με τις παραδοσιακές προσομοιώσεις. Πρέπει να σημειωθεί ότι η ευφυής τεχνική έχει εκπαιδευτεί σε δεδομένα Μήτρας με ένα υλικό προσμείξεων. Πιο συγκεκριμένα οι προσομοιώσεις διακρίνονται σε προσομοιώσεις Μήτρας με ένα υλικό προσμείξεων και Μήτρας με δύο είδη πρόσμειξης.

**Σύγκριση Μήτρας με ένα υλικό προσμείξεων:
Παράδειγμα 1^ο:**

Προσομοιωτής αντοχής υλικών					Ευφυής τεχνική		% διαφορά Ευφυούς τεχνικής	
	Μέσος όρος Ευκλείδειας	Τυπική απόκλιση	2 ^{ος} Μέσος όρος Ευκλείδειας	2 ^η Τυπική απόκλιση	Μέσος όρος Ευκλείδειας	Τυπική απόκλιση	Μέσος όρος Ευκλείδειας	Τυπική απόκλιση
DE=0.03	88.155110	4.353411	87.207484	4.747692	88.1569	4.0719	1 ^η προσέγγιση	
Percentage= 12%							0.002%	6.46%
kT=0.035							2 ^η προσέγγιση	
							1.08%	14,23%

Όπου στο επί τις εκατό (%) διαφορά Ευφυούς τεχνικής αναγράφεται η ποσοστιαία απόκλιση μεταξύ των αποτελεσμάτων της ευφυούς τεχνικής και του προσομοιωτή για κάθε περίπτωση.

Παράδειγμα 2^ο:

Προσομοιωτής αντοχής υλικών					Ευφυής τεχνική		% διαφορά Ευφυούς τεχνικής	
	Μέσος όρος Ευκλείδειας	Τυπική απόκλιση	2 ^{ος} Μέσος όρος Ευκλείδειας	2 ^η Τυπική απόκλιση	Μέσος όρος Ευκλείδειας	Τυπική απόκλιση	Μέσος όρος Ευκλείδειας	Τυπική απόκλιση
DE=0.065	87.098920	3.994484	88.201023	4.136257	87.0826	4.1025	1 ^η προσέγγιση	
Percentage= 7%							0.018%	2.7%
kT=0.045							2 ^η προσέγγιση	
							1.26%	0.81%

Όπου στο επί τις εκατό (%) διαφορά Ευφυούς τεχνικής αναγράφεται η ποσοστιαία απόκλιση μεταξύ των αποτελεσμάτων της ευφυούς τεχνικής και του προσομοιωτή για κάθε περίπτωση.

Σύγκριση στην περίπτωση Μήτρας με δύο είδη πρόσμειξης:
Παράδειγμα 1^ο:

Προσομοιωτής αντοχής υλικών					Ευφυής τεχνική		% διαφορά Ευφυούς τεχνικής	
	Μέσος όρος Ευκλείδειας	Τυπική απόκλιση	2 ^{ος} Μέσος όρος Ευκλείδειας	2 ^η Τυπική απόκλιση	Μέσος όρος Ευκλείδειας	Τυπική απόκλιση	Μέσος όρος Ευκλείδειας	Τυπική απόκλιση
DE=0.0125	87.236538	4.273073	85.960130	5.181528	87.2168	4.0670	1 ^η προσέγγιση	
Percentage= 2%							0.022%	4.82%
DE2=0.05							2 ^η προσέγγιση	
Percentage2 = 5%							1.46%	21.5%
kT=0.05								

Όπου στο επί τις εκατό (%) διαφορά Ευφυούς τεχνικής αναγράφεται η ποσοστιαία απόκλιση μεταξύ των αποτελεσμάτων της ευφυούς τεχνικής και του προσομοιωτή για κάθε περίπτωση.

Παράδειγμα 2^ο:

Προσομοιωτής αντοχής υλικών					Ευφυής τεχνική		% διαφορά Ευφυούς τεχνικής	
	Μέσος όρος Ευκλείδειας	Τυπική απόκλιση	2 ^{ος} Μέσος όρος Ευκλείδειας	2 ^η Τυπική απόκλιση	Μέσος όρος Ευκλείδειας	Τυπική απόκλιση	Μέσος όρος Ευκλείδειας	Τυπική απόκλιση
DE=0.025	85.047717	4.219453	86.510246	3.986175	85.0575	4.5534	1 ^η προσέγγιση	
Percentage= 10%							0.011%	7.91%
DE2=0.0375							2 ^η προσέγγιση	
Percentage2= 15%							1.68%	14.22%
kT=0.075								

Όπου στο επί τις εκατό (%) διαφορά Ευφυούς τεχνικής αναγράφεται η ποσοστιαία απόκλιση μεταξύ των αποτελεσμάτων της ευφυούς τεχνικής και του προσομοιωτή για κάθε περίπτωση.

Το συμπέρασμα το οποίο προκύπτει είναι ότι η ευφυής τεχνική αποδεικνύει υψηλή ακρίβεια στην πρόβλεψη της αντοχής υλικών, ακόμα και για περιπτώσεις που η ίδια δεν έχει εκτεθεί σε εκμάθηση τέτοιων δεδομένων. Οι διαφορές από τις προσομοιώσεις είναι μικρές και σε ορισμένες περιπτώσεις, το νευρωνικό δίκτυο επιδεικνύει ελαφρώς μεγαλύτερη ευστοχία. Αυτό υποδηλώνει ότι οι ευφυείς τεχνικές μπορούν να αποτελέσουν μια αξιόπιστη εναλλακτική ή συμπληρωματική προσέγγιση στις ήδη υπάρχουσες τεχνικές προσομοίωσης αντοχής υλικών.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6 Συμπεράσματα Και Μελλοντικές Προεκτάσεις

6.1 Συμπεράσματα

Με την παρούσα μελέτη επιτεύχθηκε η υλοποίηση ενός πιθανοθεωρητικού προσομοιωτή και μιας ευφυούς τεχνικής. Πιο συγκεκριμένα, ο προσομοιωτής αναδείχθηκε για την αποτελεσματικότητά του στη διάδοση των ρωγμών σε σχέση με τη φύση και την επιτυχή προσαρμογή του σε διάφορα υλικά. Όσον αφορά την ευφυή τεχνική, το μοντέλο έδειξε ικανοποιητική ακρίβεια στην πρόβλεψη των χαρακτηριστικών των ρωγμών, ιδιαίτερα στα νέα δεδομένα. Σχετικά με τα πολλαπλά υλικά, τόσο ο προσομοιωτής, όσο και η ευφυής τεχνική έδειξαν αποτελεσματικότητα στη διάδοση των ρωγμών και την πρόβλεψη αντίστοιχα. Ιδιαίτερη έμφαση δίνεται στην ευφυή τεχνική, τα αποτελέσματα της οποίας παράγονται ταχύτατα σε σχέση με τον προσομοιωτή. Έχει παρατηρηθεί ότι ο χρόνος κέρδους κυμαίνεται στο 70 με 73 τις εκατό. Γεγονός που προσφέρει ευελιξία στην παρατήρηση νέων προσομοιώσεων ακόμα και για υλικά τα οποία δε βρίσκονται μέσα στα δεδομένα της ευφυούς τεχνικής, όπως προσομοιώσεις Μήτρας με δύο είδη πρόσμειξης.

Ένα αξιοσημείωτο στοιχείο της έρευνας είναι η εντυπωσιακή ικανότητα γενίκευσης του μοντέλου ευφυούς τεχνικής. Αν και η εκπαίδευση του νευρωνικού δικτύου πραγματοποιήθηκε αποκλειστικά με δεδομένα προσομοίωσης Μήτρας με ένα υλικό προσμείξεων. Το μοντέλο επέδειξε αξιοσημείωτη προσαρμοστικότητα στην πρόβλεψη συμπεριφοράς συστημάτων με δύο διαφορετικά υλικά. Οι προβλέψεις του μοντέλου για το σύστημα Μήτρας με δύο είδη πρόσμειξης (δύο διαφορετικά υλικά) επαληθεύτηκαν μέσω του προσομοιωτή, δείχνοντας υψηλή ακρίβεια και αξιοπιστία. Αυτή η ικανότητα του μοντέλου να εξαγάγει ακριβή συμπεράσματα για πιο πολύπλοκα συστήματα, χωρίς να έχει εκτεθεί σε αντίστοιχα δεδομένα κατά την εκπαίδευση, δείχνει τη δυνατότητα του να αναγνωρίζει και να γενικεύει βαθύτερα μοτίβα στη συμπεριφορά των υλικών.

6.2 Μελλοντικές Προεκτάσεις

Ορισμένες προεκτάσεις που θα μπορούσαν μελλοντικά να εφαρμοστούν στο σύστημα είναι:

- Βελτιώσεις Προσομοιωτή αντοχής υλικών:
Μια από τις κύριες βελτιώσεις που θα μπορούσαν να γίνουν είναι η ενσωμάτωση περισσότερων παραμέτρων και η επέκταση του προσομοιωτή στην τρισδιάστατη προσομοίωση.
- Εξέλιξη μοντέλου ευφυούς τεχνικής:
Μια βελτίωση που θα μπορούσε να γίνει είναι η ανάπτυξη του μοντέλου με νέες τεχνικές για την καλύτερη ευστοχία του και η αναζήτηση υπερπαραμέτρων.
- Δημιουργία εφαρμογής:
Για την καλύτερη κατανόηση όλου του συστήματος θα μπορούσε να δημιουργηθεί μια εφαρμογή με την οποία ο χρήστης θα έχει τη δυνατότητα διεπαφής με το ίδιο το σύστημα και καλύτερη οπτική απεικόνιση μέσω ενός visualization που θα του προσφέρει έναν τρισδιάστατο χώρο απεικόνισης των πειραμάτων όμοιων με τη φύση.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

1. Νασίκας Ν. (2018) «Αριθμητικό μοντέλο διάδοσης ρωγμών σε υλικά με τετραγωνικούς κρυσταλλίτες» Διπλωματική Εργασία, Τμήμα Πολιτικών Μηχανικών Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας.
2. Αναγνωστόπουλος Κ. (2019) «Αριθμητικό μοντέλο διάδοσης ρωγμών σε υλικά με επιμήκεις κρυσταλλίτες» Διπλωματική Εργασία, Τμήμα Πολιτικών Μηχανικών Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας.
3. Anagnostopoulos K., Nasikas N., Karakasidis T. "Multi-scale modeling of crack propagation in a matrix of inclusions" European Congress and Exhibition on Advanced Materials and Processes (EUROMAT2019), Symposium D8. Multiscale and Multiphysics Modelling of Materials, Processes and Devices, (1-5 September, 2019, Sweden).
4. Argyrakis, Panos., Kehr, Klaus W. (1992). Mean number of distinct sites visited by correlated walks. II. Disordered lattices. The Journal of Chemical Physics, 97 2718.
5. Charitidis, C. A., Karakasidis, T. E., Kavouras, P., Karakostas, Th. (2007). The size effect of crystalline inclusions on the fracture modes in glass-ceramic materials. J. Phys. : Condens. Matter. 19 266209.
6. Orellana, T., Tejado, E.M., Funke, C., Fütterer, W., Riepe, S., Moller, H.J., Pastor, J.Y. (2015). How do Impurity Inclusions Influence the Mechanical Properties of Multicrystalline Silicon? Int. J. Metall. Mater. Eng., 1: 101.
7. Bitzek, Er., Kermode, J. R., Gumbsch, P. (2015). Atomistic aspects of fracture. Int. J. Fract., 191, 13-30.
8. Zhang, S., Sun, D., Fu, Y., Du, H. (2005). Toughening of hard nanostructural thin films: a critical view. Surf. Coat. Technol., 198, 2-8.
9. Branco, R., Antunes, F.V. (2008). Finite element modelling and analysis of crack shape evolution in mode-I fatigue Middle Cracked Tension specimens. Engineering Fracture Mechanics, 75, 3020-3037.
10. Knight, M. G., Wrobel, L. C., Henshall, J. L., De Lacerda, L. A. (2002). A study of the interaction between a propagating crack and an uncoated/coated elastic inclusion using the BE technique. International Journal of Fracture, 114(1), 47-61.
11. Farrell, D. E., Park, H. S., & Liu, W. K. (2007). Implementation aspects of the bridging scale method and application to intersonic crack propagation. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 71(5), 583-605.
12. Omid Alizadeh, Soheil Mohammadi, The variable node multiscale approach: Coupling the atomistic and continuum scales, Computational Materials Science, Volume 160, 2019, Pages 256-274,
13. Giannopoulos, Georgios I., Stelios K. Georgantzinos, Androniki Tsiamaki, and Nicolaos Anifantis. "Combining FEM and MD to simulate C60/PA-12 nanocomposites." International Journal of Structural Integrity (2019).
14. Russell, S., & Norvig, P. (2016). "Artificial Intelligence: A Modern Approach" (4th ed.). Pearson.
15. Nilsson, N. J. (2009). "The Quest for Artificial Intelligence: A History of Ideas and Achievements". Cambridge University Press.
16. McCorduck, P. (2004). "Machines Who Think: A Personal Inquiry into the History and Prospects of Artificial Intelligence". A K Peters/CRC Press.

17. Boden, M. A. (2008). "Mind as Machine: A History of Cognitive Science". Oxford University Press.
18. Turing, A.M. (1950). "Computing Machinery and Intelligence". *Mind*, 59(236), 433-460.
19. Zienkiewicz, O.C. (2000). "A History of the Finite Element Method to 1970". In *The Finite Element Method, Part 1*. Wiley.
20. Zienkiewicz, O.C., Taylor, R.L., & Zhu, J.Z. (2013). "The Finite Element Method: Its Basis and Fundamentals". Butterworth-Heinemann.
21. Felippa, C.A. (2004). "Introduction to Finite Element Methods". University of Colorado Boulder.
22. Hughes, T.J.R. (1987). "The Finite Element Method: Linear Static and Dynamic Finite Element Analysis". Dover Publications.
23. Bishop, C. M. (2006). *Pattern Recognition and Machine Learning*. Springer.
24. Géron, A. (2022). *Hands-On Machine Learning with Scikit-Learn, Keras, and TensorFlow* (2nd ed.). O'Reilly Media.
25. Goodfellow, I., Bengio, Y., & Courville, A. (2016). *Deep Learning*. MIT Press.
26. LeCun, Y., Bengio, Y., & Hinton, G. (2015). Deep learning. *Nature*, 521(7553), 436-444.
27. Ghabussi, J., & Sidarta, D. E. (1998). "New nested adaptive neural networks (NANN) for constitutive modeling". *Computers and Geotechnics*, 22(1), 29-52.
28. Ziemiański, L et al. (2001). "Neural networks in mechanics of structures and materials - new results and prospects of applications". *Computers & Structures*, 79(22-25), 2261-2276.
29. Kadi, H. E. (2006). "Modeling the mechanical behavior of fiber-reinforced polymeric composite materials using artificial neural networks—A review". *Composite Structures*, 73(1), 1-23.
30. Balokas, G., Czichon, S., & Rolfes, R. (2018). "Neural network assisted multiscale analysis for the elastic properties prediction of 3D braided composites under uncertainty". *Composite Structures*, 183, 550-562.
31. Gu, G. X., Chen, C. T., & Buehler, M. J. (2018). "De novo composite design based on machine learning algorithm". *Extreme Mechanics Letters*, 18, 19-28.