



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ

ΔΙΑΤΜΗΜΑΤΙΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΣΠΟΥΔΩΝ

«ΜΙΚΡΟΣΥΣΤΗΜΑΤΑ ΚΑΙ ΝΑΝΟΔΙΑΤΑΞΕΙΣ»

**Μηχανική μάθηση και Νανοτεχνολογία: Σύνδεση
δομικών και λειτουργικών παραμέτρων νανοδομημένων
επιφανειών με νανοτραχύτητα**

ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ: Δρ Β. Κωνσταντούδης, Δρ. Γ. Γιαννακόπουλος

ΤΡΙΜΕΛΗΣ ΕΠΙΤΡΟΠΗ: Δρ Β. Κωνσταντούδης, Δρ. Γ. Γιαννακόπουλος, Καθ. Δ. Τσουκαλάς

ΣΠΟΥΔΑΣΤΗΣ: Αντώνιος Χαράλαμπος Στέλλας

ΑΘΗΝΑ 2018

Περιεχόμενα

0. Συνοπτική περιγραφή της εργασίας	4
0.1 Σύντομη περίληψη	4
0.2 Εκτενής περίληψη: Το πρόβλημα και η προσέγγισή μας	6
1 Εισαγωγή	13
1.1 Μηχανική μάθηση	13
1.2.1 Γενικά	13
1.2.2 Τι είναι η μηχανική μάθηση?	14
1.2.3 Μέθοδοι μηχανικής μάθησης	16
1.2.4 Μηχανική μάθηση και περιορισμοί λόγω δεδομένων	29
1.3 Νανοτεχνολογία	31
1.3.1 Εισαγωγή	31
1.3.2 Γενικά	31
1.3.3 Κατασκευή νανοδομών (Nanofabrication)	35
1.3.4 Νανομετρολογία	37
2 Σχετική βιβλιογραφία	41
2.1 Νανοτεχνολογία και Τεχνητή Νοημοσύνη	41
2.1.1 Εισαγωγή	41
2.1.2 Σημασία της συνεργασίας των πεδίων	41
2.1.3 Εφαρμογές τεχνητής νοημοσύνης στη νανοτεχνολογία	43
2.2 Το δικό μας πρόβλημα: Βασική ροή παραγωγής νανοδομών	45
3 Τραχύτητα νανοδομημένων επιφανειών	48
3.1 Μαθηματικά και στατιστικά χαρακτηριστικά	48
3.1.1 Στατιστική ανάλυση	48
3.1.2 Παράμετροι τραχύτητας	53
3.1.2.1 Παράμετροι πλάτους	56
3.1.2.2 Χωρικοί παράμετροι	59
3.1.2.3 Υβριδικές παράμετροι	61
3.2 Προσομοίωση επιφανειών με νανοτραχύτητα	62
3.2.1 Εισαγωγή	62
3.2.2 Παραγωγή Γκαουσιανών συσχετισμένων νάνο-επιφανειών	62
3.2.3 Περιορισμοί διακριτής και πεπερασμένης επιφάνειας	66
3.2.4 Παραγωγή Μη-Γκαουσιανών συσχετισμένων νάνο-επιφανειών	70

3.2.5 Μέτρηση ενεργούς επιφάνειας παραγόμενων επιφανειών	75
4. Αποτελέσματα σύνδεσης δομικών και λειτουργικών παραμέτρων	78
4.1 Γενικά.....	78
4.2 Αποτελέσματα I: Σύνδεση δομικών και λειτουργικών παραμέτρων για προσομοιωμένες επιφάνειες με νανοτραχύτητα.....	79
.....	79
4.2.1 Γκαουσιανές επιφάνειες	80
4.2.2 Μη-Γκαουσιανές επιφάνειες	82
4.3 Αποτελέσματα II: Σύνδεση δομικών και λειτουργικών μέσω μεθόδων μηχανικής μάθησης	86
4.3.1 Βάσεις δεδομένων εκπαίδευσης και ελέγχου	86
4.3.2 Παραδοχές, λογισμικό και μέτρα αξιολόγησης	89
4.3.3 Αποτελέσματα μοντέλου γραμμικής παλινδρόμησης	90
4.5.2 Αποτελέσματα μοντέλου τυχαίων δασών	94
5.5.3 Μοντέλα Νευρωνικών δικτύων	96
5. Σύνοψη και Συμπεράσματα	101
5.1 Πρόβλημα	101
5.2 Μεθοδολογία.....	102
5.3 Αποτελέσματα	102
5.4 Συμπεράσματα.....	103
5.5 Προοπτικές	103

0. Συνοπτική περιγραφή της εργασίας

0.1 Σύντομη περίληψη

Σε αυτή την εργασία, διερευνάται αν και με ποιο τρόπο οι μέθοδοι της τεχνητής νοημοσύνης μπορούν να βοηθήσουν στη σύνθετη διαδικασία κατασκευής, χαρακτηρισμού και χρήσης νανοδομημένων υλικών. Η διερεύνηση αυτή αποτελεί μια προσπάθεια ενίσχυσης της αμφίδρομης σχέσης ανάμεσα στη νανοτεχνολογία και τη τεχνητή νοημοσύνη όπου η δεύτερη δεν θα επωφελείται μόνο από την πρώτη με τη χρήση των νανοηλεκτρονικών κυκλωμάτων αλλά και θα ενισχύει την περαιτέρω ανάπτυξή της με την έξυπνη ανάλυση των νανοδομημένων της. Πιο αναλυτικά γίνεται χρήση μεθόδων μηχανικής μάθησης (υποπεδίου της τεχνητής νοημοσύνης) για τη σύνδεση δομικών και λειτουργικών παραμέτρων σε νανοδομημένες επιφάνειες με τραχύτητα. Η βελτιστοποίηση αυτής της σύνδεσης είναι κρίσιμη για την περαιτέρω ανάπτυξη της νανοτεχνολογίας και κυρίως για την μετατροπή των αποτελεσμάτων της σε νανοπροϊόντα ευρείας χρήσης.

Βασικό κίνητρο της μελέτης αυτής αποτελεί ο στοχαστικός χαρακτήρας των επιφανειών με τραχύτητα που οδηγεί σε μεγάλο αριθμό παραμέτρων για την περιγραφή τους, χωρίς όμως να είναι σαφής σε πολλές περιπτώσεις η σύνδεση τους με συγκεκριμένη επιθυμητή λειτουργικότητα. Η χρήση της μηχανικής μάθησης για τον σκοπό της εργασίας μας, θα διευκόλυνε την πρόβλεψη των λειτουργικών παραμέτρων από τις δομικές. Παράλληλα θα μπορούσε να εξάγει εσωτερικά χαρακτηριστικά από τη σύνδεση αυτή, απατώντας σε ερωτήματα όπως: Μπορούν τα μοντέλα μηχανικής μάθησης να επιδείξουν ποιες δομικές παράμετροι έχουν μεγαλύτερη σημασία για τις αντίστοιχες λειτουργικές; Συγκεκριμένα, η μελέτη επικεντρώνεται στις παράμετρο της ενεργού επιφάνειας, η οποία επηρεάζει τη λειτουργικότητα σε πολλές εφαρμογές (καταλυτική συμπεριφορά, βιοδραστικότητα, υδροφοβικότητα, ανακλαστικότητα κ.α.), αναζητώντας την εξάρτησή της από δομικές παραμέτρους τραχύτητας ύψους και πλάτους (Rms, μήκη συσχέτισης, λοξότητα, κύρτωση).

Στο πρώτο μέρος της δουλειάς μας μελετάμε την εξάρτηση της ενεργού επιφάνειας από τις δομικές παραμέτρους με τη βοήθεια της προσομοίωσης επιφανειών με τραχύτητα και των σχετικών μετρήσεων. Στο δεύτερο μέρος ελέγχουμε κατά πόσο μπορεί η μηχανική μάθηση να χρησιμοποιηθεί για τη πραγματοποίηση αυτής της σύνδεσης χρησιμοποιώντας για εκπαίδευση των μοντέλων της επιλεκτικά αποτελέσματα της προσομοίωσης του πρώτου μέρους. Από τα αποτελέσματα αυτής της δουλειάς μπορούμε να συμπεράνουμε πως τα μοντέλα της μηχανικής μάθησης που βασίζονται στη μέθοδο των τυχαίων δασών και των βαθέων νευρωνικών δικτύων προβλέπουν με εξαιρετική ακρίβεια την ενεργό επιφάνεια μέσω των δομικών παραμέτρων. Επιπλέον, στη μέθοδο των βαθιών νευρωνικών δικτύων η ακρίβεια αυτή διατηρείται και σε μικρό αριθμό επιφανειών εκπαίδευσης καθιστώντας τη μέθοδο την πλέον κατάλληλη για ρεαλιστικές εφαρμογές. Τέλος, σχεδόν όλες οι μέθοδοι μας φανερώνουν ότι το Rms αποτελεί τη κρίσιμότερη

παράμετρο για τη πρόβλεψη της ενεργού επιφάνειας με δεύτερη το μήκος συσχέτισης, εύρημα που συμφωνεί με τις μεθόδους προσομοίωσης του πρώτου μέρους της μελέτης.

Abstract

In this diploma thesis, we investigate how artificial intelligence methods can assist the complex process of manufacturing, characterization and the use nanostructured materials. This research is an attempt to reinforce the two-way relationship between nanotechnology and artificial intelligence, where the latter will not only benefit from the first by using nanoelectronics but also enhance its further development by efficient analyzing its nano-data. Specifically, we use methods of machine learning (subfield of artificial intelligence) in order to connect the structural and functional parameters to nanostructured surfaces with roughness. Optimizing this link is crucial for further developments of nanotechnology and, above all, for the transformation of its results into widespread nanoproducts.

The main motivation of this study is the stochastic character of surfaces with roughness that leads to a large number of parameters used to describe the roughness of a surface, however it is not clear in many cases their connection with a particular desirable functionality. The use of machine learning for the purpose of our work, for the purpose of diplomacy, would facilitate the prediction of functional parameters by the structural ones. At the same time, it could extract internal attributes from this link by asking questions such as: Can machine learning models demonstrate which structural parameters are of greater importance for this connection? In particular, our study focuses on the parameter of the active area, which affects the functionality in many applications (catalytic behavior, bio-structure, hydrophobicity, reflectivity, etc.), seeking its dependence on structural parameters of height and width roughness (Rms, correlation length, skewness, kurtosis).

In the first part of our work we study the dependence of the active area on the structural parameters by means of simulated surfaces with roughness. In the second part we check whether machine learning can be used to make this connection by using model selective simulation results of the first part. From the results of this work we can conclude that models of machine learning based on the method of random forests and deep neural networks with differences between them manage to predict the precision of the active surface through the structural parameters. In addition, in the method of deep neural networks, this precision is maintained on a small number of training surfaces, making the method the most suitable for realistic applications. Finally, almost all methods show us that the Rms is the most critical parameter for predicting the active surface with a second correlation length, a finding that is confirmed and agrees with the simulation methods of the first part of the study.

0.2 Εκτενής περίληψη: Το πρόβλημα και η προσέγγισή μας

Οι εξελίξεις στην τεχνολογία υπήρξαν πάντοτε καθοριστικός παράγοντας που σηματοδοτούσε σημαντικές αλλαγές στην επιστήμη και τη βιομηχανία. Ειδικά τα τελευταία χρόνια, όπου η πρόοδος της τεχνολογίας λαμβάνει χώρα σε πολλούς και διαφορετικούς τομείς συχνά με εκθετικό ρυθμό. Δύο παραδείγματα τέτοιων τομέων είναι η νανοτεχνολογία και η τεχνητή νοημοσύνη. Από τη μία πλευρά, η **νανοτεχνολογία** με τη δυνατότητα που προσφέρει στην ελεγχόμενη κατασκευή και χρήση δομών σε νάνο-διαστάσεις έχει βοηθήσει στην ανάπτυξη καινοτόμων εφαρμογών σε ευρύ φάσμα περιοχών όπως η ηλεκτρονική, η φωτονική η βιοϊατρική, οι αισθητήρες, οι επικαλύψεις, τα καλλυντικά κ.α. Από την άλλη πλευρά, η **τεχνητή νοημοσύνη (TN)** με τη χρήση προχωρημένων αλγορίθμων για τη έξυπνη διαχείριση πληροφοριών και δεδομένων έχει ενταχθεί στην καθημερινότητα μας, προσφέροντας μας τη δυνατότητα να πραγματοποιούμε εργασίες πιο εύκολα και πιο αποδοτικά.

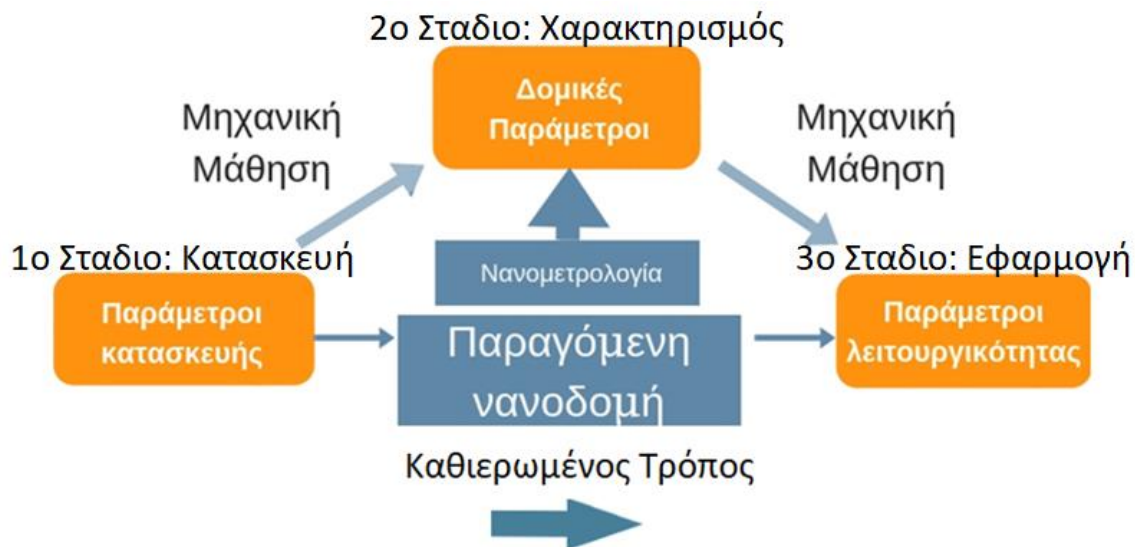
Παρά τις εμφανώς διαφορετικές εφαρμογές των δύο τομέων, τα συναρπαστικά αποτελέσματα της τεχνητής νοημοσύνης δεν ήρθαν τυχαία και ανεξάρτητα από τις προόδους στη νανοτεχνολογία και πιο συγκεκριμένα σε έναν από τους σημαντικότερους κλάδους της τη νανοηλεκτρονική. Η εκθετική σμίκρυνση των διαστάσεων των τρανζίστορ στα ολοκληρωμένα κυκλώματα της νανοηλεκτρονικής, οδήγησε σε συνεχείς βελτιώσεις στην απόδοση των υπολογιστών, ενώ παράλληλα αύξησε τις δυνατότητες αποθήκευσης και διαχείρισης μεγάλου όγκου δεδομένων. Με αυτό τον τρόπο οι αλγόριθμοι της τεχνητής νοημοσύνης μπορούν να υλοποιούνται πιο γρήγορα και αποτελεσματικά και να επεξεργάζονται σε σύντομο χρονικό διάστημα το μεγάλο πλήθος δεδομένων που συσσωρεύεται από την αυξανόμενη ψηφιοποίηση της ζωής του σύγχρονου ανθρώπου δίνοντας λύσεις σε πληθώρα προβλημάτων του.

Το αφετηριακό ερώτημα για αυτή την εργασία είναι κατά πόσο η σχέση νανοτεχνολογίας/νανοηλεκτρονικής και τεχνητής νοημοσύνης μπορεί να γίνει αμφίδρομη. Όπως εξηγήσαμε παραπάνω, η σχέση αυτή προς το παρόν είναι κυρίως μονόδρομη: η νανοηλεκτρονική έχει προσφέρει και συνεχίζει να προσφέρει το υλικό υπόβαθρο (hardware) για την επιτυχή υλοποίηση των αλγορίθμων της τεχνητής νοημοσύνης. Μπορεί όμως να γίνει το αντίστροφο; Μπορεί, δηλαδή, οι μέθοδοι της τεχνητής νοημοσύνης να υποστηρίξουν την περαιτέρω ανάπτυξη της νανοτεχνολογίας και νανοηλεκτρονικής; Και αν ναι, με ποιόν τρόπο μπορεί να γίνει αυτό; Τι είδους προβλήματα μπορεί η TN να λύσει και τι είδους τροποποιήσεις πρέπει να γίνουν στις μεθόδους της ώστε αυτό να είναι εφικτό;

Επί του παρόντος, η εφαρμογή εργαλείων της τεχνητής νοημοσύνης στη νανοτεχνολογία είναι περιορισμένη και έχει επικεντρωθεί κυρίως στην ερμηνεία εικόνων μικροσκοπίας σάρωσης ακίδας, στην πρόβλεψη ιδιοτήτων νανοϋλικών, στον σχεδιασμό νανοσυστημάτων και στην επιλογή παραμέτρων σε προσομοιώσεις νανοδιεργασιών [1]. Εντούτοις, τα εργαλεία λογισμικού που χρησιμοποιούνται από τις τεχνικές της μηχανικής μάθησης (υποπεδίο της τεχνητής νοημοσύνης) θα μπορούσαν να προσθέσουν αξία στη σύνθετη διαδικασία κατασκευής, χαρακτηρισμού και χρήσης των νανοδομών επιτρέποντας πιο αποτελεσματικό χειρισμό των δεδομένων, μειωμένη πολυπλοκότητα και ορθότερη λήψη αποφάσεων. Πιο συγκεκριμένα, στην εργασία αυτή εστιάζουμε στο πρόβλημα του στοχευμένου χαρακτηρισμού της μορφολογίας

νανοδομημένων επιφανειών με τραχύτητα. Με τον όρο στοχευμένο εννοούμε τον χαρακτηρισμό που προσδιορίζεται από την συγκεκριμένη εφαρμογή της νανοδομημένης επιφάνειας που θέλουμε να χαρακτηρίσουμε. Με άλλα λόγια, ο στόχος μας είναι να επιλεγούν για τον μορφολογικό χαρακτηρισμό τους οι παράμετροι εκείνοι που είναι κρισιμότεροι για την εφαρμογή που στοχεύει η κατασκευή τους.

Για να γίνει κατανοητό το παραπάνω πρόβλημα, θα βοηθούσε να επιμερίσουμε σε τρία στάδια (σχήμα 0.1) όλη τη διαδικασία από την παραγωγή ενός προϊόντος που περιέχει νανοδομές (π.χ. νανοδομημένες επιφάνειες) μέχρι την τελική χρήση του: α) την κατασκευή, β) τον μετρολογικό χαρακτηρισμό και γ) την εφαρμογή και χρήση του. Η κατασκευή είναι υπεύθυνη για το σχεδιασμό και την παραγωγή της νανοδομημένης επιφάνειας. Σε αυτό το στάδιο, πρέπει να αποφασιστούν βασικοί παράγοντες σχετικά με τη κατασκευή των νανοδομών, όπως το είδος υλικού που πρέπει να χρησιμοποιηθεί όπως και με ποιες διεργασίες πρέπει να γίνει η επεξεργασία του ώστε να επιτευχθεί η σχεδιαζόμενη νανοδομή. Οι εμπλεκόμενες παράμετροι σε αυτό το στάδιο μπορεί είναι πολλές και συσχετισμένες με πολύπλοκο τρόπο. Αφού κατασκευαστεί η νανοεπιφάνεια, πρέπει να χαρακτηριστεί μορφολογικά (γεωμετρικά) και χημικά, δηλ. να μετρηθεί ένα άλλο σύνολο παραμέτρων για τον χαρακτηρισμό των δομών της (τοπογραφία, τραχύτητα κλπ.) αλλά και για τη χημική σύστασή της. Οι τεχνικές του μορφολογικού και χημικού χαρακτηρισμού μπορούν να περιλαμβάνουν τη χρήση SPM (μικροσκοπία σάρωσης με ακίδα) ή SEM (ηλεκτρονική μικροσκοπία σάρωσης) ή οπτικών μεθόδων ανάλυσης όπου ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία συγκεκριμένου φάσματος αλληλοεπιδρά με τη νανοδομημένη επιφάνεια ή υλικό. Το τελευταίο στάδιο της διαδικασίας παραγωγής νανοδομών είναι η διασφάλιση της συγκεκριμένης επιδιωκόμενης λειτουργικότητας. Αυτό το στάδιο περιλαμβάνει παραμέτρους που σχετίζονται με τις επιθυμητές τελικές ιδιότητες της νανοδομής, όπως για παράδειγμα συγκεκριμένη υπερυδροφοβικότητα, αντίσταση, αντανάκλαση του φωτός, απόδοση των τσιπ κλπ. Ο χαρακτηρισμός και η ποσοτικοποίηση αυτών των ιδιοτήτων μπορεί να σχετίζεται με μια ποικιλία τεχνικών μέτρησης, που αξιολογούν πόσο επιτυχής ήταν ο αρχικός σχεδιασμός.



Σχήμα 0.1) Σχηματική αναπαράσταση διαδικασίας παραγωγής νανοδομών επιμερισμένη σε τρία βασικά στάδια, της κατασκευής, χαρακτηρισμού και εφαρμογής-

Όπως είναι προφανές, σε αυτή την αλυσίδα βημάτων για την παραγωγή ενός νανοπροϊόντος, το κρισιμότερο στοιχείο είναι το πώς συνδέονται οι παράμετροι που εμπλέκονται σε κάθε στάδιο/βήμα. Συνήθως ξεκινάμε στοχεύοντας σε μία νανοδομημένη επιφάνεια με συγκεκριμένες ιδιότητες και λειτουργικότητα και το πρώτο ερώτημα είναι

α) ποιες είναι οι μορφολογικές και χημικές παράμετροι που πρέπει να χαρακτηρίζουν την νανοεπιφάνεια ώστε αυτή να έχει τις επιθυμητές ιδιότητες και λειτουργικότητα

Δηλαδή η διερεύνηση της σύνδεσης μεταξύ του δεύτερου και τρίτου σταδίου. Ωστόσο, αυτό που μπορεί να ελεγχθεί είναι το πρώτο στάδιο, δηλ. η επιλογή των υλικών και των διεργασιών επεξεργασίας τους. Αυτό μας οδηγεί στο δεύτερο ερώτημα της σύνδεσης μεταξύ των σταδίων 2 και 1:

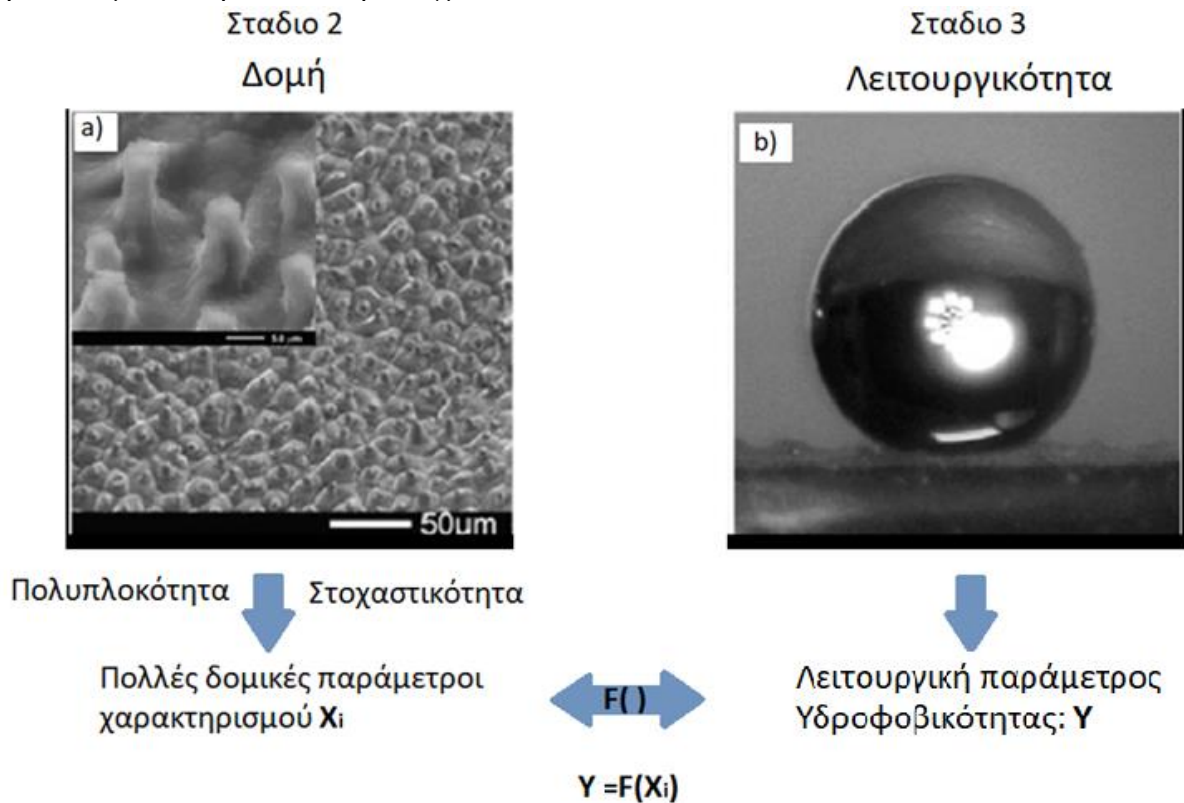
β) ποιές είναι οι κατάλληλες παράμετροι των υλικών και διεργασιών που εμπλέκονται στο στάδιο της κατασκευής ώστε η παραγόμενη νανοδομημένη επιφάνεια να χαρακτηρίζεται από τις μορφολογικές και χημικές παραμέτρους που έχουν προκύψει από τη διερεύνηση του πρώτου ερωτήματος.

Η διερεύνηση των παραπάνω ερωτημάτων καταναλώνει σημαντικό χρόνο και πόρους σε όλους τους κλάδους της τεχνολογίας και ιδιαίτερα της νανοτεχνολογίας όπου οι απαιτήσεις ακρίβειας και κατανόησης είναι αυξημένες λόγω της εξαιρετικά μικρής διάστασης των εμπλεκόμενων δομών. Οι καθιερωμένοι τρόποι αντιμετώπισης των ερωτημάτων αυτών είναι δύο. Ο πρώτος είναι η εμπειρία που έχει συσσωρευθεί σε κάθε κλάδο της τεχνολογίας και βιομηχανίας μαζί με τη σχετική γνώση οι οποίες μεταφέρονται από γενιά σε γενιά καθοδηγώντας τους μηχανικούς στις επιλογές τους. Ο δεύτερος είναι η χρήση μοντέλων προσομοίωσης των διαδοχικών σταδίων που η φύση τους καθορίζεται ανάλογα με την περίπτωση.

Σε αυτή την εργασία χρησιμοποιούμε μεθόδους τεχνητής νοημοσύνης και συγκεκριμένα ενός υποπεδίου της, τη μηχανική μάθηση με επίβλεψη, για να αντιμετωπιστούν οι δυσκολίες αυτές. Η μηχανική μάθηση παρέχει αλγόριθμους-μοντέλα, που μαθαίνουν να πραγματοποιούν συγκεκριμένες εργασίες (προβλέψεις) αξιοποιώντας δεδομένα-μετρήσεις της διαδικασίας. Η ουσία της μηχανικής μάθησης στην αντιμετώπιση του προβλήματος μας έγκειται στο ότι, το χάσμα εμπειρίας και θεωρητικής γνώσης, μπορεί να καλυφθεί μέσα από τη χρήση δεδομένων. Υπό συγκεκριμένες προϋποθέσεις (που θα αναφερθούμε στη συνέχεια) τα δεδομένα-μετρήσεις περιέχουν τα απαραίτητα πρότυπα (patterns) που θα θέλαμε να γνωρίζουμε ή να έχουμε την εμπειρία να τα αναπαράγουμε. Τα μοντέλα μηχανικής μάθησης χρησιμοποιώντας ήδη υπάρχουσες μετρήσεις μπορούν και αναπαράγουν αυτά τα σημαντικά πρότυπα. Συνεπώς μέσα από τη χρήση δεδομένων και τη δημιουργία μοντέλων μηχανικής μάθησης θεωρούμε ότι μπορούν να αντιμετωπιστούν οι δυσκολίες που προκύπτουν στη διαδικασία παραγωγής και εφαρμογής νανοδομών. Αυτό θα πραγματοποιήσει τη αμφίδρομη σχέση μεταξύ νανοτεχνολογίας και τεχνητής νοημοσύνης που αναφέραμε προηγουμένως.

Στην παρούσα εργασία ειδικότερα, επικεντρωνόμαστε στη σύνδεση του 2^{ου} και 3^{ου} σταδίου (σχήμα 0.1) και μελετούμε κατά πόσο είναι δυνατή η χρήση μοντέλων μηχανικής μάθησης για τη πρόβλεψη των λειτουργικών παραμέτρων από τις δομικές. Παράλληλα προσπαθούμε να εξάγουμε εσωτερικά χαρακτηριστικά από τη σύνδεση αυτή, απαντώντας σε ερωτήματα όπως:

Μπορούν τα μοντέλα να μας επιδείξουν ποιες δομικές παράμετροι έχουν μεγαλύτερη σημασία για τις αντίστοιχες λειτουργικές. Για να κατανοηθεί η σημασία αυτού του ερωτήματος παραθέτουμε το παρακάτω παράδειγμα:



Σχήμα 0.2) Στο σχήμα παρουσιάζεται ένα παράδειγμα εφαρμογής της υδροφοβικότητας από νανοδομημένες επιφάνειες πολυμερούς PDMS. Στο σχήμα γίνεται αναπαράσταση [2]

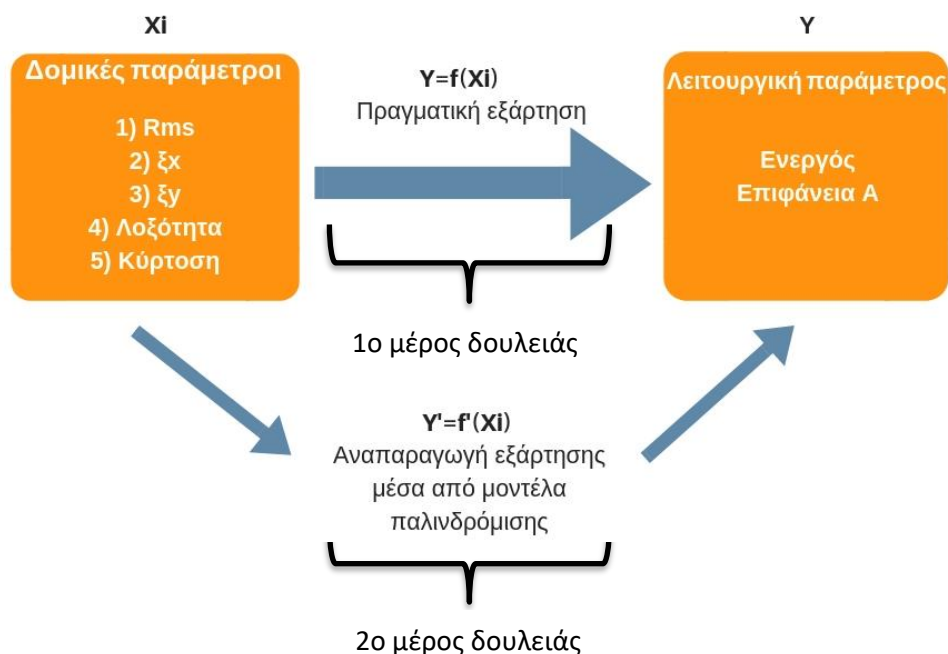
Στο Σχήμα 0.2 παρουσιάζεται μια εικόνα ηλεκτρονική μικροσκοπίας νανοδομημένης επιφάνειας από πολυμερές PDMS που κατασκευάστηκε με σκοπό την επίτευξη υψηλής υδροφοβικότητας [2]. Με βάση τη διαδικασία παραγωγής του σχήματος 1.1, στο δεύτερο στάδιο, μπορούμε να λάβουμε δομικές παραμέτρους μέσα από νανομετρολογικές μεθόδους χαρακτηρισμού. Έτσι ένα χρήσιμο ερώτημα που ανακύπτει είναι: Ποιες δομικές παράμετροι περιγράφουν καλύτερα τη λειτουργικότητα της υψηλής υδροφοβικότητας που θέλουμε να πετύχουμε στο τρίτο στάδιο? Εάν δεν υπάρχει εμπειρία ή θεωρητική γνώση για τη σύνδεση των σταδίων τότε θα πρέπει να ληφθούν απαραίτητες μετρήσεις για τη κατανόηση της σύνδεσης. Οι παράμετροι όμως μπορεί να είναι

πολλοί και η πολυπλοκότητα των μεθόδων χαρακτηρισμού να δυσκολεύουν την ταυτοποίηση τους.

Στη παρούσα διπλωματική προσπαθούμε να μελετήσουμε μια όμοια σύνδεση με το παράδειγμα αλλά σε νανοδομημένες επιφάνειες με νανοτραχύτητα. Βασικό κίνητρο αποτελεί ο μεγάλος αριθμός παραμέτρων που χρησιμοποιείται για το χαρακτηρισμό της τραχύτητας μίας επιφάνειας, χωρίς όμως να είναι σαφής η σύνδεση σε συγκεκριμένη επιθυμητή λειτουργικότητα [3] [4].

Πιο συγκεκριμένα στο **πρώτο μέρος** της δουλειάς μας (Σχήμα 0.3) μελετάμε τη παραμέτρο της ενεργού επιφάνειας, η οποία επηρεάζει τη λειτουργικότητα σε πολλές εφαρμογές (υδροφοβικότητα, ανακλαστικότητα κ.α.), και αναζητούμε την εξάρτησή της από δομικές παραμέτρους τραχύτητας ύψους και πλάτους (Rms, correlation lengths, skewness, kurtosis). Οι επιφάνειες που χρησιμοποιούνται στη δημιουργούνται μέσα από υψηλής ακρίβειας προσομοιώσεις. Το πρώτο μέρος της δουλειάς είναι σημαντικό διότι θα αποτελέσει το υπόβαθρο γνώσης για την κατανόηση και αξιολόγηση των αποτελεσμάτων των μοντέλων μηχανικής μάθησης.

Στο **δεύτερο μέρος** της δουλειάς μας δοκιμάζουμε την ισχύ της μηχανικής μάθησης. Με άλλα λόγια διαλέγουμε να δουλέψουμε σε μια απλοποιημένη εκδοχή του παραπάνω προβλήματος, στην οποία η σύνδεση με μεταξύ δομικών και λειτουργικών παραμέτρων θα μπορεί να αναπαρασταθεί από τα μοντέλα μηχανικής μάθησης (Σχήμα 0.3). Τελικά μέσω των μοντέλων αυτών θα μπορέσουμε να κάνουμε προβλέψεις τιμών ενεργής επιφάνειας από τις δομικές παραμέτρους αλλά και να συμπεράνουμε πια δομική παράμετρος αποτέλεσε σημαντικότερη για τη πρόβλεψη της ενεργού επιφάνειας.



Σχήμα 0.3) Αναπαράσταση εξάρτησης ενεργού επιφάνειας από τις δομικές παραμέτρους. Μέσω της μηχανικής μάθησης θα προσπαθήσουμε να αναπαράγουμε αυτήν την εξάρτηση χρησιμοποιώντας συγκεκριμένα μοντέλα παλινδρόμησης.

Προϋπόθεση δημιουργίας των μοντέλων αποτελεί η χρησιμοποίηση δεδομένων-μετρήσεων από το ίδιο το πρόβλημα. Συνεπώς θα πρέπει να δοθεί στα μοντέλα μια κατάλληλη βάση δεδομένων από επιφάνειες για να δημιουργηθούν-εκπαιδευτούν αλλά να ελεγχθούν ως προς την ορθότητά τους. Έτσι παράγοντας διαφορετικούς τύπους επιφανειών δημιουργούμε δύο σύνολα βάσης δεδομένων (datasets). Το πρώτο το χρησιμοποιούμε για να εκπαιδεύσουμε τα μοντέλα μηχανικής μάθησης ενώ το δεύτερο για να ελέγξουμε τη προβλεπτική τους ικανότητα. Τα μοντέλα που χρησιμοποιούμε για τη διπλωματική είναι της γραμμικής παλινδρόμησης, τυχαίων δέντρων και νευρωνικών δικτύων. Η επιλογή τους έγινε με σκοπό να ελέγξουμε τις διαφορές κάθε μοντέλου στη μελέτη του προβλήματος μας. Αφού εκπαιδευτούν τα μοντέλα, αξιολογούμε την ικανότητα πρόβλεψής τους. Επίσης, αξιοποιούμε τις τιμές των βαρών που αποδόθηκαν από τα μοντέλα στις παραμέτρους εισόδου κατά τη διάρκεια της εκπαίδευσης. Αυτά τα βάρη μπορούν να δώσουν την σημαντικότητα κάθε παραμέτρου εισόδου (δομικές παράμετροι) σε σχέση με της εξόδου (ενεργό επιφάνεια).

Η δομή της υπόλοιπης εργασίας είναι η ακόλουθη. Στο πρώτο κεφάλαιο γίνεται μία εισαγωγική αναφορά στη μηχανική μάθηση καθώς και στις μεθόδους όπου χρησιμοποιούνται στην εργασία. Στη συνέχεια πραγματοποιείται μια ανασκόπηση των σημαντικότερων σημείων της νανοτεχνολογίας, που σχετίζονται με την παρούσα εργασία. Το δεύτερο κεφάλαιο αναφέρεται στην εφαρμογή της μηχανικής μάθησης στην νανοτεχνολογία. Συγκεκριμένα, σημειώνονται παραδείγματα εφαρμογών από σχετική βιβλιογραφία και στη συνέχεια γίνεται εστίαση στην εφαρμογή της στη διαδικασία παραγωγής νανοεπιφανειών. Στο τρίτο κεφάλαιο περιγράφονται τα μαθηματικά εργαλεία με τα οποία χαρακτηρίζουμε τη τραχύτητα καθώς και στη μεθοδολογία με την οποία παράγονται οι επιφάνειες. Στο τέταρτο, παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της μελέτης σύνδεσης της ενεργού επιφάνειας από τις δομικές για τις προσομοιωμένες νανοεπιφάνειες με τραχύτητα. Παράλληλα, γίνεται παρουσίαση και συζήτηση των αποτελεσμάτων των μοντέλων μηχανικής μάθησης που χρησιμοποιήθηκαν για τη σύνδεση αυτή. Η εργασία κλείνει με μια σύνοψη συμπερασμάτων στο πέμπτο κεφάλαιο.

1 Εισαγωγή

1.1 Μηχανική μάθηση

1.2.1 Γενικά

Τα τελευταία χρόνια η τεχνητή νοημοσύνη έχει διεισδύσει τόσο στην επιστημονική κοινότητα όσο και στην καθημερινότητα μας. Για την εποχή μας θεωρείται ως μία επαναστατική τεχνολογία [5] που έχει αναδείξει πολλές νέες εφαρμογές μέσω χρήσης μοντέλων βασισμένων πάνω σε δεδομένα. Αυτά τα μοντέλα όπως θα δούμε, διαφέρουν από τη κλασική έννοια όπως έχουμε συνηθίσει από τη φυσική. Οι στόχοι των εφαρμογών της ποικίλουν: αναγνώριση εικόνας, ήχου, επεξεργασία κειμένων, ταξινόμηση, παλινδρόμηση.

Πολλές από τις τεχνικές της τεχνίτης νοημοσύνης δεν δημιουργήθηκαν πρόσφατα. Οι υλοποιήσεις τους χρονολογούνται από τη δεκαετία του '50 και πολλοί βασικοί αλγόριθμοι σχεδιάστηκαν στη δεκαετία του '80 και του '90 [6]. Αν όμως οι ίδιες τεχνικές δεν ξεκίνησαν τη σημερινή έξαψη στη χρήση της, ποιες είναι οι πραγματικές της αιτίες?

Τα τελευταία χρόνια ο αριθμός δεδομένων που είναι διαθέσιμος από τις εφαρμογές αυξάνεται με έντονο ρυθμό και η τεχνητή νοημοσύνη είναι μια τεχνολογική εφαρμογή που τρέφεται από αυτό το ψηφιακό αποτύπωμα του ανθρώπου [7]. Με απλά λόγια, τα ίδια τα δεδομένα είναι αυτά που δίνουν τη δυνατότητα στους αλγόριθμους να λύσουν τα προβλήματα που τους αναθέτουμε. Πρέπει να τονιστεί όμως πως όλη αυτή την αύξηση του ψηφιακού αποτυπώματος βασίζεται και στις συνεχείς εξελίξεις της τεχνολογίας υπολογιστών. Η βιομηχανία των διατάξεων ημιαγωγών επέτρεψε τη δημιουργία ενισχυμένων υπολογιστών, αισθητήρων, κ.α. Από αυτά οι ηλεκτρονικές συσκευές έχουν τη δυνατότητα να τρέχουν πολλές εφαρμογές, να επικοινωνούν με πολλαπλές πλατφόρμες και να δημιουργούν, επεξεργάζονται και αποθηκεύουν τεράστιες ποσότητες δεδομένων. Η εισαγωγή της τεχνολογίας Pentium συνέβαλε στη βελτίωση επεξεργασίας πληροφορίας, η οποία κατέστησε τους υπολογιστές πιο γρήγορους και ικανότερους να τρέξουν περίπλοκα λογισμικά, να αποθηκεύουν και να αναλύουν τεράστια ποσά δεδομένων [8]. Συνεπώς, η συνεχώς διογκούμενη χρήση της τεχνίτης νοημοσύνης οφείλεται στις, εν μέρη, στις νέες δυνατότητες που προσφέρουν οι υπολογιστές καθώς και στο μεγάλο μέγεθος του ψηφιακού αποτυπώματος του ανθρώπου.

Σκοπός του κεφαλαίου αρχικά, είναι περιγράψει ένα υποπεδίο της τεχνητής νοημοσύνης που ονομάζεται μηχανική μάθηση και να δώσει τους βασικούς τρόπους λειτουργίας της. Στη συνέχεια γίνεται μια εισαγωγική περιγραφή των μοντέλων μηχανικής μάθησης. (μοντέλα παλινδρόμησης) Τα μοντέλα αυτά χρησιμοποιούνται στο τελευταίο κεφάλαιο (Κεφάλαιο 4) για να αντιμετωπίσουν το πρόβλημα που μας απασχολεί στη τρέχουσα διπλωματική εργασία.

1.2.2 Τι είναι η μηχανική μάθηση;

Η μηχανική μάθηση περιέχει αλγόριθμους (θα τα αποκαλούμε μοντέλα), οι οποίοι αντιπροσωπεύουν περίπλοκες συναρτήσεις. Αυτοί οι αλγόριθμοι δέχονται δεδομένα εισαγωγής X και συνδέονται με μια έξοδο πολλές φορές σε μορφή άλλων δεδομένων Y και χωρίζονται σε κατηγορίες όπως οι στατιστικοί τις χωρίζουν (για παράδειγμα παλινδρόμηση, ταξινόμηση, ομαδοποίηση, ανίχνευση ανωμαλιών κ.α.). Οι πιο γνωστές μοντέρνες τεχνικές είναι: η βαθιά μάθηση (Deep Learning) νευρωνικών δικτύων, η ενισχυμένη μάθηση (Reinforcement learning) κ.α. Όλες αυτές οι τεχνικές είναι αλγόριθμοι-μοντέλα που αναπαριστούν μια συνάρτηση που συνδέει δεδομένα εισόδου με εξόδου. Αλλά πως ακριβώς σχεδιάζονται ώστε να κάνουν προβλέψεις που άλλοι αλγόριθμοι παραδοσιακής προσέγγισης δε μπορούν;

Εάν έπρεπε να σχεδιαστεί ένας αλγόριθμος που να πραγματοποιεί μια περίπλοκη πρόβλεψη για παράδειγμα, από μια εικόνα να προβλέψει το περιεχόμενο της θα ήταν δύσκολο έως αδύνατο. Αυτό συμβαίνει διότι ο αλγόριθμος δε μπορεί να χωρίσει σε τετριμμένα βήματα τη διαδικασία που χρειάζεται για να κάνει την αναγνώριση. Ό,τι δηλαδή είναι προφανές για τον ανθρώπινο εγκέφαλο είναι δύσκολο για έναν υπολογιστή. Μια τέτοια εργασία αλλά και πολλές άλλες δεν είναι μια απλή συνάρτηση. Η αναγνώριση εικόνας, ήχου μέχρι και πολλά προβλήματα περιγράφονται από μη γραμμικές συναρτήσεις με μεγάλη πολυπλοκότητα. Η υπολογιστική προσέγγιση για τη λύση τους με αλγοριθμικό τρόπο δεν είναι τόσο αποδοτική με το μέχρι πρότινος παραδοσιακό τρόπο.

Ωστόσο μπορούμε να αντιμετωπίσουμε αυτά τα προβλήματα με έναν άλλο τρόπο. Εφόσον εμείς δεν είμαστε ικανοί στο να ορίσουμε ένα αλγόριθμο που να αναγνωρίζει μια εικόνα, μπορούμε να φτιάξουμε έναν αλγόριθμο-αντιπρόσωπο που αυτός με τη σειρά του θα δημιουργήσει έναν αλγόριθμο για να πραγματοποιήσει την αναγνώριση. Αυτό γίνεται μέσω της εκπαίδευσης μοντέλων και συγκεκριμένα της λεγόμενης μηχανικής μάθησης. Οι αλγόριθμοι-αντιπρόσωποι πραγματοποιούν μια αναδρομική διαδικασία που ονομάζεται εκπαίδευση προσαρμόζοντας ελεύθερες εσωτερικές παραμέτρους, βασισμένοι σε δεδομένα-παράδειγμα που του έχουμε δώσει σχετικά με το πρόβλημα. Έτσι τα βασικά στοιχεία που κάνουν να λειτουργούν αυτά τα μοντέλα είναι η διαδικασία της εκπαίδευσης καθώς και τα ίδια τα δεδομένα.

Η μηχανική μάθηση λοιπόν, είναι ένα υποπεδίο της τεχνητής νοημοσύνης που περιέχει στατιστικές τεχνικές (δημιουργία μοντέλων) που επιτρέπουν τις μηχανές να εκπαιδευτούν ώστε να πραγματοποιήσουν εργασίες όπως προβλέψεις, ομαδοποιήσεις κ.α. Η κατηγορία αυτή περιέχει και τη βαθιά μάθηση (Deep Learning). Πρέπει να τονιστεί ότι η μηχανική μάθηση δεν προσπαθεί να μιμηθεί ανθρώπινες ικανότητες με αυτόματο τρόπο, αλλά να χρησιμοποιήσει τις δυνατότητες των υπολογιστών για να συμπληρώνουν την ανθρώπινη νοημοσύνη, συχνά εκτελώντας εργασίες που ξεπερνούν τις ανθρώπινες ικανότητες. Για παράδειγμα, η ικανότητα σάρωσης και η επεξεργασία τεράστιων βάσεων δεδομένων επιτρέπει στα μοντέλα μηχανικής μάθησης να αναγνωρίσουν μοτίβα που θα ήταν αδύνατο να ανιχνεύσει ένας άνθρωπος [9].

Πώς όμως γίνεται ένα μοντέλο που δεν βασίζεται σε θεμελιωμένους νόμους για παράδειγμα φυσικής να μπορεί να κάνει προβλέψεις? Η απάντηση σε αυτό το ερώτημα είναι ότι

η έλλειψη της γνώσης σε θεωρητικό επίπεδο καλύπτεται με τη χρήση δεδομένων. Τα δεδομένα είναι πολλά παραδείγματα με παρατηρήσεις και αντίστοιχες προβλέψεις που έχουν προκύψει από το σύστημα υπό μελέτη. Αυτά είναι που θα εκπαιδεύσουν το μοντέλο για να μπορέσει στη συνέχεια να πραγματοποιήσει τις εργασίες (προβλέψεις) που του αναθέτουμε. Συνεπώς θα βασιστούμε από τη μία, στην ικανότητα αναγνώρισης προτύπων από το μοντέλο και από την άλλη, σε χαρακτηριστικά δεδομένων όπως ποιότητα, ορθότητα και ποικιλία τους. Επί της ουσίας, με βάση τα παραδείγματα, ανακαλύπτουμε κανόνες ή αντίστοιχες που (ελπίζουμε ότι) αντικατοπτρίζουν την πραγματικότητα. Ένας αλγόριθμος μηχανικής μάθησης είναι μία μέθοδος εξαγωγής κανόνων/αντιστοιχιών από παραδείγματα. Οι εξηγμένοι κανόνες αποτελούν το εκπαιδευμένο μοντέλο, που προσπαθεί να αντικατοπτρίσει τη σύνδεση μίας εισόδου με μία έξοδο.

Δύο από τις βασικές κατηγορίες της μηχανικής μάθησης είναι μάθηση **με επίβλεψη** και **χωρίς επίβλεψη**. Κάθε κατηγορία εφαρμόζεται ανάλογα με την φύση του προβλήματος, Δηλαδή, το αποτέλεσμα το οποίο αναζητούμε είναι και στην ουσία το κριτήριο για την επιλογή.

Με επίβλεψη:

Η κατηγορία αυτή θα μας απασχολήσει ιδιαίτερα στη διπλωματική. Κατά την μηχανική μάθηση με επίβλεψη έχουμε δεδομένα εισαγωγής (X) (συνήθως τα αποκαλούμε και παραδείγματα) και δεδομένα εξόδου (Y). Τα μοντέλα μηχανικής μάθησης θα δημιουργηθούν ώστε να μάθουν να συνδέουν την εισαγωγή X με έξοδο Y μέσω της διαδικασίας της εκπαίδευσης.

$$Y=f(X)$$

Η εκπαίδευση είναι μια αναδρομική διαδικασία κατά την οποία οι ελεύθερες παράμετροι του μοντέλου ρυθμίζονται αλγοριθμικά δημιουργώντας μια συνάρτηση f ώστε να προβλέψει τα αποτελέσματα Y από τα δεδομένα X. Η ονομασία μάθηση με επίβλεψη προέρχεται από τη διαδικασία εκπαίδευσης όπου, γνωρίζοντας τις σωστές απαντήσεις κατά το πρώτο στάδιο, ο αλγόριθμος κάνει επανειλημμένα προβλέψεις για τα δεδομένα. Οι διορθώσεις γίνονται με επίβλεψη από τα αποτελέσματα (έξοδοι Y) των αντίστοιχών εισόδων X που εκπαιδεύεται. Η μάθηση σταματά όταν ο αλγόριθμος ξεπεράσει μια τιμή επιθυμητής προβλεπτικής απόδοσης.

Σταδιο εκπαίδευσης:



Σταδιο πρόβλεψης:



Σχήμα 1.1) Στάδια εκπαίδευσης και πρόβλεψης στη μηχανική μάθηση με επίβλεψη.

Χωρίς επίβλεψη:

Σε αυτή τη κατηγορία έχουμε μόνο δεδομένα εισόδου X χωρίς αντίστοιχη μεταβλητή εξόδου Y . Ο στόχος της μάθησης χωρίς επίβλεψη είναι να μοντελοποιήσει τη δομή ή τη κατανομή των δεδομένων εισόδου προκειμένου να λάβει χρήσιμες πληροφορίες για αυτές. Η ονομασία χωρίς επίβλεψη οφείλεται, σε αντίθεση με την εποπτευόμενη μάθηση στο ότι δεν υπάρχει καμία συγκεκριμένη πληροφορία που θέλουμε να προβλέψουμε και άρα δεν υπάρχει κάποιος να εποπτεύει μια διαδικασία εκπαίδευσης. Οι αλγόριθμοι αφήνονται στις δικές τους ιδιότητες για να ανακαλύψουν και να ενδιαφέροντα πρότυπα (patterns) που συναντώνται στα δεδομένα από τα δεδομένα.

1.2.3 Μέθοδοι μηχανικής μάθησης

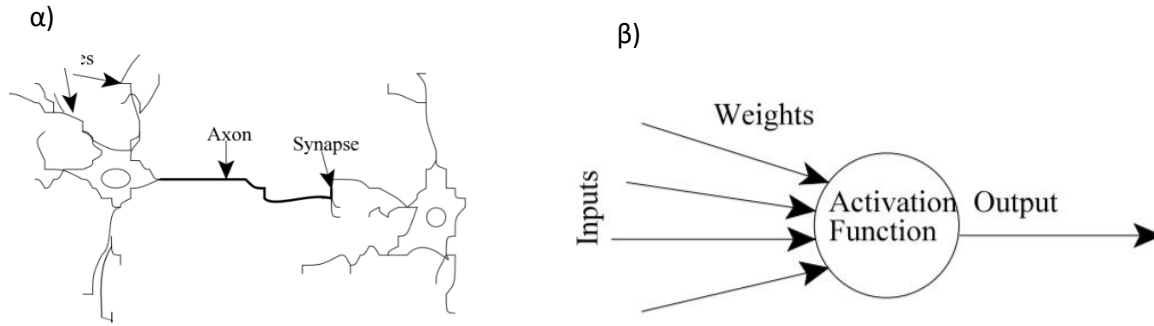
Σε αυτή την υποενότητα θα περιγράψουμε τις μεθόδους μηχανικής μάθησης που χρησιμοποιήθηκαν στη διπλωματική. Συγκεκριμένα θα αναφερθούμε σε μοντέλα νευρωνικών δικτύων, τυχαίων δένδρων αποφάσεων καθώς και σε βοηθητικές τεχνικές όπως Bagging και k-fold cross validation.

Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα

Στην επιστήμη πληροφορίας η ρήση του Ιούλιου Καίσαρα "διαίρει και βασίλευε" αποτελεί μια πολύ χρήσιμη μεθοδολογία λύσης προβλημάτων. Ένα πολύπλοκο σύστημα μπορεί να αποσυντεθεί σε απλούστερα, προκειμένου να κατανοηθεί πιο εύκολα. Τα δίκτυα αποτελούν μια προσέγγιση για την επίτευξη αυτής της λογικής και όπως θα δούμε μπορούν να έχουν πολλές μορφές (αρχιτεκτονική). Τα δίκτυα χαρακτηρίζονται από τα εξής στοιχεία: ένα σύνολο κόμβων (nodes) και συνδέσεις μεταξύ κόμβων (links or edges) [10].

Οι κόμβοι μπορούν να θεωρηθούν ως ατομικές υπολογιστικές μονάδες (computational units) που εισάγονται σε αυτές κάποια στοιχεία (inputs), επεξεργάζονται και δίνουν μια έξοδο (output). Αυτή η επεξεργασία μπορεί να είναι πολύ απλή (για παράδειγμα άθροισμα όλων των τιμών εισόδου), ή πολύπλοκη (ένας κόμβος μπορεί να περιέχει άλλο δίκτυο).

Αυτό που κάνει όμως το δίκτυο και συγκεκριμένα το νευρωνικό δίκτυο, όπως θα αναλύσουμε στη συνέχεια, είναι οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ των κόμβων. Σήμερα, αυτές οι μέθοδοι χρησιμοποιούνται για να μοντελοποιήσουν ένα ευρύ φάσμα φαινομένων στη φυσική, την επιστήμη των υπολογιστών, βιοχημεία, μαθηματικά, κοινωνιολογία, οικονομία, τηλεπικοινωνίες σε πολλούς άλλους τομείς όπου υπάρχουν προβλήματα περίπλοκα και μη-γραμμικά.

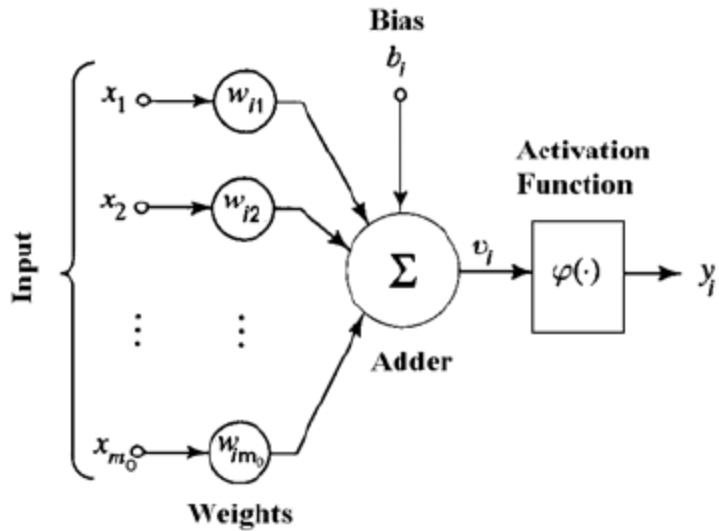


Σχήμα 1.2) α) Νευρώνας ανθρώπινου εγκεφάλου β) Τεχνητός νευρώνας [10]

Τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα (ΤΝΔ, artificial neural networks ANN) αποτελούν ένα τύπο δικτύου, εμπνευσμένα από τους φυσικούς νευρώνες του εγκεφάλου. Οι φυσικοί νευρώνες λαμβάνουν σήματα μέσω συνάψεων που βρίσκονται στους δενδρίτες του νευρώνα. Όταν τα σήματα που λαμβάνονται είναι αρκετά δυνατά (δηλαδή ξεπερνούν ένα συγκεκριμένο κατώφλι), ο νευρώνας ενεργοποιείται και εκπέμπει σήμα μέσω του νευράξονα. Αυτό το σήμα μπορεί να μεταφέρεται σε άλλες συνάψεις και να ενεργοποιεί άλλους νευρώνες. Στη περίπτωση τη δική μας οι νευρώνες είναι οι κόμβοι ενώ οι άξονες είναι οι συνδέσεις μεταξύ των κόμβων.

Φυσικά οι πραγματικοί νευρώνες είναι πολύ πιο πολύπλοκοι από αυτούς που προσπαθούμε να μοντελοποιήσουμε για να λύσουμε τα δικά μας προβλήματα και συνεπώς θα λέγαμε ότι είναι μια μορφή «έμπνευσης» και όχι αναπαράστασης. Τα τεχνητά νευρωνικά (σχήμα 1.2 α και β) αποτελούνται [12]:

- 1) Από εισόδους x_1, \dots, x_m στις οποίες αντιστοιχούν βάρη w_{i1}, \dots, w_{im} σε κάθε νευρωνικό κόμβο i . Συγκεκριμένα τα x_m πολλαπλασιάζονται με τα βάρη w_{im} (καθορίζουν τη δύναμη των αντίστοιχων σημάτων εισόδου) ενώ ο προσθετικός όρος b_i στις γραμμικές εξαρτήσεις εξασφαλίζεται από τον κόμβο του Bias που χαρακτηρίζεται πάντα από τη μονάδα.
- 2) Στη συνέχεια όλα τα σήματα με τα αντίστοιχα βάρη περνάνε από ένα αθροιστή Σ και όπου αθροίζονται.
- 3) Τέλος μια άλλη συνάρτηση που ονομάζεται «συνάρτηση ενεργοποίησης» $\varphi(u_i)$ υπολογίζει την έξοδο y_i του τεχνητού νευρώνα. Συνήθως, το εύρος εξόδου του νευρώνα είναι κανονικοποιημένο με τιμές: $[0,1]$ ή $[-1,1]$.



Σχήμα 1.3) Βασικό σχήμα ενός τεχνητού νευρώνα [10]

Το σήμα μετά την έξοδο από το δίκτυο των κόμβων και πριν τη συνάρτηση ενεργοποίησης θα έχει τη μορφή:




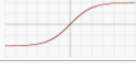
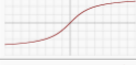




$$v_l = \sum_{j=1}^m w_{lj}x_j + b \quad (1.1)$$

και στη συνέχεια μετά τη συνάρτηση ενεργοποίησης:

$$y_l = \varphi(v_l) \quad (1.2)$$

Ουσιαστικά ένας νευρώνας μπορούμε να πούμε ότι μετασχηματίζει ένα πολυδιάστατο γραμμικό σήμα σε διδιάστατο σήμα. Οι συναρτήσεις ενεργοποίησης $\varphi(\cdot)$ όπως είδαμε καθορίζουν την έξοδο y_l του νευρώνα.

Υπάρχουν πολλές διαφορετικές συναρτήσεις ενεργοποίησης [13]:

Name	Plot	Equation	Derivative
Identity		$f(x) = x$	$f'(x) = 1$
Binary step		$f(x) = \begin{cases} 0 & \text{for } x < 0 \\ 1 & \text{for } x \geq 0 \end{cases}$	$f'(x) = \begin{cases} 0 & \text{for } x \neq 0 \\ ? & \text{for } x = 0 \end{cases}$
Logistic (a.k.a Soft step)		$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}$	$f'(x) = f(x)(1 - f(x))$
Tanh		$f(x) = \tanh(x) = \frac{2}{1 + e^{-2x}} - 1$	$f'(x) = 1 - f(x)^2$
ArcTan		$f(x) = \tan^{-1}(x)$	$f'(x) = \frac{1}{x^2 + 1}$
Rectified Linear Unit (ReLU)		$f(x) = \begin{cases} 0 & \text{for } x < 0 \\ x & \text{for } x \geq 0 \end{cases}$	$f'(x) = \begin{cases} 0 & \text{for } x < 0 \\ 1 & \text{for } x \geq 0 \end{cases}$
Parameteric Rectified Linear Unit (PReLU) ^[2]		$f(x) = \begin{cases} \alpha x & \text{for } x < 0 \\ x & \text{for } x \geq 0 \end{cases}$	$f'(x) = \begin{cases} \alpha & \text{for } x < 0 \\ 1 & \text{for } x \geq 0 \end{cases}$
Exponential Linear Unit (ELU) ^[3]		$f(x) = \begin{cases} \alpha(e^x - 1) & \text{for } x < 0 \\ x & \text{for } x \geq 0 \end{cases}$	$f'(x) = \begin{cases} f(x) + \alpha & \text{for } x < 0 \\ 1 & \text{for } x \geq 0 \end{cases}$
SoftPlus		$f(x) = \log_e(1 + e^x)$	$f'(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}$

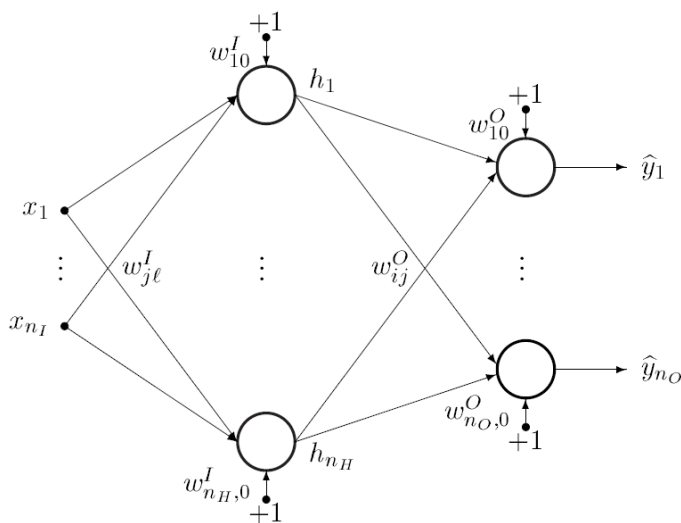
Σχήμα 1.4. Πίνακας από συναρτήσεις ενεργοποίησης

Στα μοντέλα της διπλωματικής χρησιμοποιούμε κατά το πλείστον τη συνάρτηση ενεργοποίησης που ονομάζεται Rectified Linear Unit ή ReLU. Η επιλογή της συνάρτησης ενεργοποίησης σε μεγάλα και βαθιά νευρωνικά δίκτυα επηρεάζει αρκετά την χρονική απόδοση τους και τη περιπλοκότητά τους. Η ReLU είναι μια καλή επιλογή για αντιμετώπιση των παραπάνω διότι όταν το σήμα δεν είναι ισχυρό τότε θα του αναθέσει τη τιμή 0 και άρα δε θα το λάβει υπόψιν του σε κάποιο επόμενο νευρώνα ή σε σχετικό υπολογισμό.

Όσο υψηλότερη είναι η τιμή του βάρους ενός τεχνητού νευρώνα, τόσο πιο σημαντική είναι η εισαγωγή του στο κόμβο (τα βάρη μπορούν επίσης να είναι αρνητικά). Ανάλογα με το βάρος, οι νευρώνες διαφοροποιούνται. Έτσι με την προσαρμογή των βαρών ενός τεχνητού νευρώνα μπορεί να αλλάξει η έξοδος όλου του δικτύου ώστε να κάνει τη πρόβλεψη που εμείς θέλουμε. Ουσιαστικά τα βάρη αποτελούν τις ελεύθερες παραμέτρους που ρυθμίζονται κατά την εκπαίδευση ώστε να δουλέψει το τελικό μοντέλο. Αλλά όταν έχουμε ένα νευρωνικό δίκτυο εκατοντάδων ή χιλιάδων νευρώνων, θα ήταν πολύ περίπλοκο να βρούμε αναλυτικά όλα τα απαραίτητα βάρη.

Ωστόσο όπως αναφέραμε και στην εισαγωγή αυτού του υποκεφαλαίου μπορούμε να διαλέξουμε έναν εκπρόσωπο (αλγόριθμο) ο οποίος να προσαρμόσει τα βάρη του ΤΝΔ για να αποκτήσει την επιθυμητή έξοδο με το βέλτιστο τρόπο (και άρα να κάνει τη πρόβλεψη που θέλουμε). Αυτή η διαδικασία προσαρμογής των βαρών αποτελεί την εκπαίδευση.

Παρακάτω δίνεται μια μορφή ενός τεχνητού νευρωνικού δικτύου που ονομάζεται νευρωνικό δίκτυο εμπρόσθιας τροφοδότησης. Αυτό σημαίνει ότι οι τεχνητοί νευρώνες οργανώνονται σε στρώματα, και στέλνουν τα σήματα τους προς μία κατεύθυνση.



Σχήμα 1.5) Νευρωνικό δίκτυο εμπρόσθιας τροφοδότησης με ένα κρυφό στρώμα κόμβων [11]

Δίκτυα που έχουν σειρές από κόμβους μεταξύ της εισόδου και εξόδου καλούνται δίκτυα πολλαπλών επιπέδων (Multilayer Networks) [11]. Αυτά τα επίπεδα ονομάζονται κρυφά και όσο αυξάνονται κάνουν το νευρωνικό δίκτυο πιο βαθύ με περισσότερες δυνατότητες να προσεγγίζει συναρτήσεις μεγαλύτερης πολυπλοκότητας. Συνεπώς το σύνολο y_1, y_2, \dots, y_n αποτελεί την έξοδο του τελευταίου επιπέδου του δικτύου για τα δεδομένα εισόδου x_1, x_2, \dots, x_n με h_1, h_2, \dots, h_n κόμβους κρυφού στρώματος στο σχήμα 1.5.

Εκπαίδευση νευρωνικού δικτύου μέσω μεθόδου Gradient Descend

Η μέθοδος Gradient Descend [11] χρησιμοποιείται στα Νευρωνικά δίκτυα εμπρόσθιας τροφοδότησης για να πραγματοποιήσει εργασίες όπως παλινδρομήσεις ή κατηγοριοποιήσεις μέσω εποπτευόμενης μάθησης. Δηλαδή όπως αναφέραμε στην αρχή του κεφαλαίου, παρέχουμε στον αλγόριθμο δεδομένα-παραδείγματα εισόδων που θέλουμε να μάθει το μοντέλο. Συγκεκριμένα προσπαθούμε να ελαχιστοποιήσουμε το σφάλμα απόδοσης δηλαδή, τη διαφορά μεταξύ πραγματικών και αναμενόμενων αποτελεσμάτων. Η ιδέα της μεθόδου είναι να μειώσει αυτό το σφάλμα κάτω από ένα κατώφλι μέσω μιας αναδρομικής διαδικασίας ή οποία λέγεται

εκπαίδευση. Η εκπαίδευση αρχίζει αναθέτοντας τυχαία βάρη στο δίκτυο, και ο στόχος είναι να τα προσαρμόσει έτσι ώστε το σφάλμα να μικραίνει σε κάθε βήμα. Η προσαρμογή γίνεται με ένα τρόπο ανατροφοδότησης από την έξοδο στην είσοδο στο κάθε βήμα.

Ως μετρική απόδοσης για τη ρύθμιση τιμών βάρους του δικτύου, με απώτερο σκοπό τη μείωση του σφάλματος, χρησιμοποιείται συνήθως το μέσο τετραγωνικό σφάλμα συνάρτησης κόστους [11] (mean square error, MSE cost function):

$$\begin{aligned} S_T(\vec{w}) &= \frac{1}{N_{train}} \sum_{k=1}^{N_{train}} (y(k) - \hat{y}(k))^2 \\ &= \frac{1}{N_{train}} \sum_{k=1}^{N_{train}} e^2(k) \quad (1.3) \end{aligned}$$

Όπου k θεωρούμε ένα δεδομένο-παράδειγμα, δηλαδή ένα σύνολο X δεδομένων που δίνουν μία αναμενόμενη έξοδο Y (υποεπινότητα 1.2.2). Η τιμή της συνάρτησης κόστους υπολογίζεται για κάθε παράδειγμα k πολλαπλασιάζοντας την είσοδο διανύσματος $\mathbf{x}(k)$ χρησιμοποιώντας τα βάρη \mathbf{w} υπολογίζοντας το $\hat{\mathbf{y}}(k)$ (υπολογιζόμενο από το μοντέλο αποτέλεσμα των δεδομένων $\mathbf{x}(k)$). Στη συνέχεια λαμβάνεται η τετραγωνική διαφορά του από την αναμενόμενη έξοδο $y(k)$, αθροίζεται για κάθε παράδειγμα k και διαιρείται από όλα τα παραδείγματα N_{train} (λαμβάνοντας έτσι τον αριθμητικό μέσο τους). Φυσικά όσο μικραίνει η συνάρτηση κόστους τόσο λιγότερα «λάθη» κάνει το μοντέλο στις προβλέψεις του (καλύτερη απόδοση).

Η συνάρτηση κόστους $S_T(\mathbf{w})$ είναι μια συνεχής συνάρτηση εξαρτώμενη από τα βάρη \mathbf{w} με τον αριθμό τους να φτάνει τα $m = n_l \cdot n_h + 2 \cdot n_h + 1$. Η διαδικασία εκπαίδευσης απαιτεί τη ρύθμιση τιμής αυτού του αριθμού βαρών με σκοπό την ελαχιστοποίηση της συνάρτησης κόστους. Η ελαχιστοποίηση πολυπαραγοντικών συναρτήσεων είναι ένα αρκετά μελετημένο πεδίο περιέχοντας πολλές αριθμητικές τεχνικές.

Οι συγκεκριμένες συναρτήσεις κόστους είναι συνήθως κυρτές και συνεπώς μπορούν να υπάρξουν πολλά τοπικά ελάχιστα. Η αναζήτηση σε μια τέτοια πολυπαραγοντική συνάρτηση ενός μόνο ολικού ελαχίστου είναι δύσκολη έως αδύνατη. Έτσι μέσω των διαφόρων μεθόδων καλούμαστε να βρούμε το βέλτιστο τοπικό ελάχιστο (local optimum). Η απαραίτητη προϋπόθεση για την εύρεση βέλτιστου τοπικού ελαχίστου των βαρών $\hat{\mathbf{w}}$ είναι να μηδενιστεί η βαθμίδα της συνάρτησης κόστους:

$$\nabla S_T(\hat{\mathbf{w}}) = \frac{\partial S_T(\mathbf{w})}{\partial \mathbf{w}} \Big|_{\mathbf{w}=\hat{\mathbf{w}}} = \left[\frac{\partial S_T(\mathbf{w})}{\partial w_1} \Big|_{\mathbf{w}=\hat{\mathbf{w}}}, \dots, \frac{\partial S_T(\mathbf{w})}{\partial w_m} \Big|_{\mathbf{w}=\hat{\mathbf{w}}} \right]^T = 0 \quad (1.4)$$

Για τη λύση της παραπάνω εξίσωσης χρησιμοποιείται η μέθοδος Gradient Descent [14]. Κατά αυτή τη μέθοδο ξεκινώντας από μια τυχαία αρχική επιλογή βαρών $\mathbf{w}^{(0)}$ και μεταβολής $\Delta\mathbf{w}^{(0)}$ όπου όμως εξασφαλίζει τη μείωση της συνάρτησης κόστους, τα βάρη θα ανανεώνονται ως εξής:

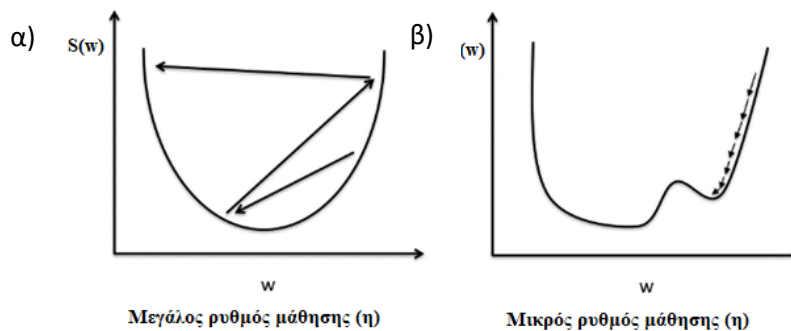
$$\mathbf{w}^{(j+1)} = \mathbf{w}^{(j)} + \eta\Delta\mathbf{w}^{(j)} \quad (1.5)$$

Όπου $\mathbf{w}^{(j+1)}$ αποτελούν τα διορθωμένα βάρη για την j επανάληψη και $\eta > 0$ μια σταθερά που καθορίζει τη ταχύτητα εύρεσης ελάχιστου S_T συνεπώς ρυθμού εκπαίδευσης. Κατά τη μέθοδο αυτή ισχύει ότι $\Delta\mathbf{w}^{(j)} = \nabla S_T(\mathbf{w}^{(j)})$. Έτσι η μεταβολή των βαρών επιλέγεται να είναι κατά τη κατεύθυνση όπου μικραίνει η τιμή της συνάρτησης κόστους και άρα της αρνητικής βαθμίδας. Ως κριτήριο τερματισμού μπορούμε να διαλέξουμε μια σταθερή μικρή τιμή τ_{cost} κατά την οποία η μέθοδος θα συνεχίζει να επαναλαμβάνει την εύρεση ελαχίστου μέχρι η συνάρτηση κόστους να γίνει μικρότερη από αυτή:

$$S_T(\mathbf{w}^{(j+1)}) < \tau_{cost} \quad (1.6)$$

Φυσικά μπορούν να υιοθετηθούν πολλά άλλα κριτήρια τα οποία να έχουν μια καλύτερη προσέγγιση στη βέλτιστη αναζήτηση βαρών [11].

Η σταθερά η ανάλογα με τη τιμή που λαμβάνει καθορίζει και τη σταθερότητα της μεθόδου. Αυτό συμβαίνει διότι από τι τιμή αυτή δεν επηρεάζεται μόνο ο ρυθμός σύγκλισης αλλά και η ίδια επιτυχία της εύρεσης ελαχίστου. Αν το η είναι αρκετά μικρό, η διαδικασία εκπαίδευσης προχωράει με ομαλό τρόπο αλλά με μεγάλη καθυστέρηση (σχήμα 1.6 β) και με μεγάλη πιθανότητα να βρεθεί ένα μη ικανοποιητικό τοπικό ελάχιστο. Από την άλλη, αν επιλεγθεί μεγάλο η , ο χρόνος σύγκλισης μικραίνει, και γίνεται με πιο ασταθή τρόπο. Λόγω αυτών των θεμάτων έχουν προταθεί μέθοδοι [14] που αλλάζουν κατάλληλα την τιμή η κατά τη διάρκεια της εκπαίδευσης ώστε η σύγκλιση να γίνεται με βέλτιστο τρόπο.

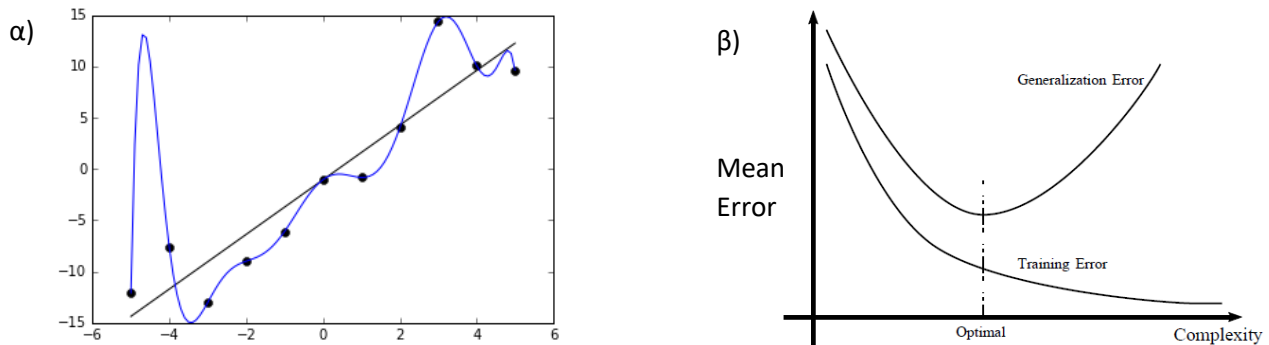


Σχήμα 1.6) Απλοποιημένο διάγραμμα 2 διαστάσεων τιμής συνάρτησης κόστους ως προς το βάρος α) για μεγάλο ρυθμό και μικρό ρυθμό μάθησης

Όπως είδαμε η μέθοδος εκπαίδευσης Gradient descend απαιτεί τον υπολογισμό της βαθμίδας $\nabla S_T(\mathbf{w}^{(l)})$. Φυσικά ο υπολογισμός αυτός μπορεί να γίνει με έναν αλγοριθμικό τρόπο για να επιτευχθεί η μέγιστη αποδοτικότητα μέσω του αλγορίθμου backpropagation [15].

Υπέρ-εκπαίδευση

Εάν ένα μοντέλο μηχανικής μάθησης είναι αρκετά περίπλοκο, για παράδειγμα ένα τεχνητό νευρωνικό δίκτυο έχει πολλούς νευρώνες και στρώματα, μπορεί εκτός από τη επιθυμητή συνάρτηση, να μάθει και το θόρυβο γύρω από αυτή. Συνεπώς το μοντέλο θα μάθει πολύ καλά τα δεδομένα εκπαίδευσης που δίνουμε, αλλά σε άλλα δεδομένα, θα έχει μεγάλα σφάλματα κατά τη μέτρηση της απόδοσής του. Στο σχήμα 1.7 α) παρουσιάζεται η έννοια της υπερ-εκπαίδευσης σε μια απλή αναπαράσταση δεδομένων που μπορεί να προσεγγιστεί από μια γραμμική συνάρτηση. Ένα υπερ-εκπαιδευμένο μοντέλο θα μάθαινε μόνο τα σημεία που δόθηκαν για αυτή τη προσέγγιση δημιουργώντας μια περίπλοκη μη γραμμική συνάρτηση. Το σχήμα 1.7 β) δείχνει ότι όσο αυξάνεται η πολυπλοκότητα του μοντέλου από ένα σημείο και μετά θα σημειωθεί η υπερ-εκπαίδευση. Μια τέτοια αναπαράσταση μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να εντοπιστεί αυτό το φαινόμενο.



Σχήμα 1.7) α) Παράδειγμα υπερεκπαίδευσης σε πειραματικά σημεία τα οποία προσεγγίζονται καλύτερα από μια γραμμική συνάρτηση β) Γράφημα που παρουσιάζει το μέσο σφάλμα ενός μοντέλου από τα δεδομένα εκπαίδευσης και ελέγχου καθώς αυξάνεται η πολυπλοκότητα του μοντέλου.

Γενικά ο σκοπός είναι να μειωθεί το σφάλμα γενίκευσης και όχι το σφάλμα εκπαίδευσης. Ωστόσο, μόνο τα δεδομένα εκπαίδευσης είναι διαθέσιμα. Παρ' όλα αυτά είναι δυνατόν να εκτιμηθεί το σφάλμα γενίκευσης κρατώντας μερικά δεδομένα για τη δοκιμή και τον υπολογισμό του σφάλματος ή μέσω τεχνικών όπως k-fold cross validation (θα γίνει αναφορά στη συνέχεια). Το μειονέκτημα είναι ότι θα πρέπει να χρησιμοποιηθούν πολλά δεδομένα ελέγχου που μπορεί να μην έχουμε στη διάθεση μας.

Ένας άλλος τρόπος αντιμετώπισης της υπερ-εκπαίδευσης είναι μέσω της μείωσης της πολυπλοκότητας του δικτύου, αφαιρώντας μερικά βάρη. Η μέθοδος βέλτιστης βλάβης εγκεφάλου (Optimal Brain Damage OBD) [16] είναι μια μέθοδος όπου κόβει βάρη από το δίκτυο με τυχαίο τρόπο.

Μέθοδοι δένδρων αποφάσεων

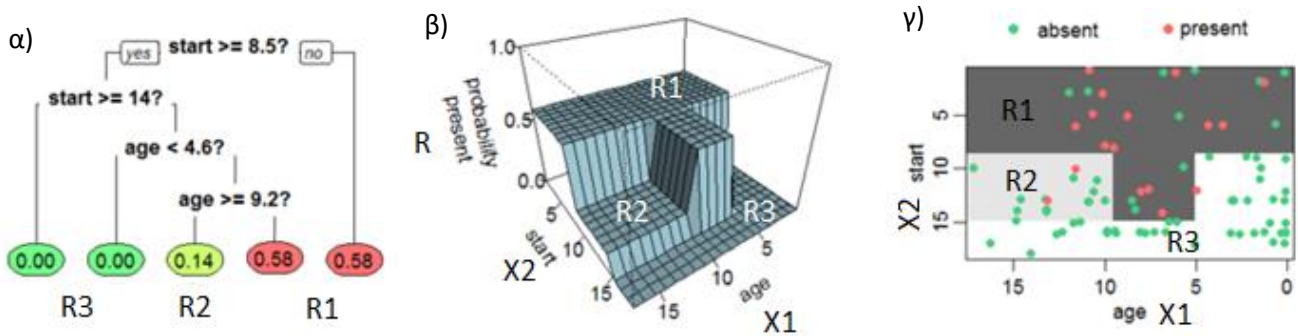
Σε αυτή την υποενότητα θα αναφέρουμε μεθόδους μηχανικής μάθησης που βασίζονται σε δέντρα αποφάσεων με σκοπό τη παλινδρόμηση (οι μέθοδοι αυτοί φυσικά περιέχουν και δυνατότητες για ταξινόμηση που δε θα μας απασχολήσουν) [17]. Οι συγκεκριμένες μέθοδοι διαφέρουν από τις υπόλοιπες διότι κάνουν προβλέψεις διαμερίζοντας το χώρο σε μια σειρά περιοχών για τα δεδομένα. Λόγω του συνόλου των κανόνων διαίρεσης που χρησιμοποιούνται για να ταξινομηθεί ο χώρος προβλέψεων, η όλη διαδικασία μπορεί να αναπαρασταθεί με ένα δέντρο και κατά συνέπεια αυτές οι μεθοδολογίες ονομάστηκαν δέντρα απόφασης. Αν και τα δέντρα απόφασης έχουν το πλεονέκτημα εύκολης ερμηνείας των αποτελεσμάτων, συνήθως δεν έχουν τόσο καλή απόδοση όσο άλλες μέθοδοι μηχανικής μάθησης με επίβλεψη. Έτσι για τη βελτίωση χρησιμοποιούνται βοηθητικές μέθοδοι όπως επίσης Bagging και τυχαίων δασών (random forests). Κάθε μία από αυτές τις προσεγγίσεις περιλαμβάνει την παραγωγή πολλαπλών δέντρων τα οποία στη συνέχεια συνδυάζονται για να δώσουν μια ενιαία συνολική πρόβλεψη.

Παλινδρόμηση μέσω δένδρων αποφάσεων

Η μέθοδος των δένδρων αποφάσεων με στόχο τη παλινδρόμηση περιέχει δύο βασικά βήματα (Σχήμα 1.8)[17]:

- 1) Διαχωρίζουμε τον χώρο πρόβλεψης - δηλαδή, το σύνολο των πιθανών τιμών για χαρακτηριστικά (features) X_1, X_2, \dots, X_p σε J διακριτές και μη επικαλυπτόμενες περιοχές, R_1, R_2, \dots, R_J . Κάθε R_j ονομάζεται φύλλο δέντρου απόφασης.
- 2) Για κάθε παρατήρηση που περιέχεται στην περιοχή R_j , κάνουμε την ίδια πρόβλεψη θέτοντας την μέση τιμή των ποσοτήτων στο χώρο προβλέψεων.

Για παράδειγμα δίνεται η περίπτωση πρόβλεψης ασθένειας μέσω δέντρων απόφασης:



Σχήμα 1.9) Το σχήμα δείχνει ένα δένδρο απόφασης που προβλέπει την πιθανότητα της κύφωσης μετά από χειρουργική επέμβαση, δεδομένης της ηλικίας ($X_1=age$) του ασθενούς και του σπονδύλου στον οποίο ξεκίνησε ($X_2=start$) η χειρουργική επέμβαση. Το ίδιο δέντρο παρουσιάζεται με τρεις διαφορετικούς τρόπους. α) Αριστερά τα χρωματιστά φύλλα δείχνουν την πιθανότητα της κύφωσης μετά τη χειρουργική επέμβαση και του ποσοστού των ασθενών στο φύλλο. β) Το δέντρο σε χώρο τρισδιάστατο με τα X_1, X_2 χαρακτηριστικά. γ) Ο χώρος χαρακτηριστικών X_1, X_2 όπου έχει χωριστεί σε τρεις περιοχές R_1, R_2, R_3 προβλέψεων [18].

Ο σχηματισμός των υποπεριοχών (κλαδιών) βασίζεται στην ελαχιστοποίηση μιας συνάρτησης κόστους περίπου όμοιας με αυτή των νευρωνικών δικτύων που αναφέραμε. Συγκεκριμένα στόχος είναι να βρεθούν οι περιοχές R_1, \dots, R_J που ελαχιστοποιούν τη σχέση:

$$\sum_{j=1}^J \sum_{i \in R_j} (y_i - \hat{y}_{R_j})^2 \quad (1.7)$$

Όπου \hat{y}_{R_j} είναι η μέση τιμή για τις παρατηρήσεις στο j κουτί. Επειδή είναι ανέφικτο υπολογιστικά να διαχωριστεί ο χώρος των χαρακτηριστικών ανάλογα με το κάθε δεδομένο, γίνεται μια προσέγγιση που ονομάζεται recursive binary splitting, η οποία διαχωρίζει τα χαρακτηριστικά σε δύο κατηγορίες «ναι» ή «όχι» μέσω μιας συνθήκης. Κάθε διαχωρισμός δημιουργεί και δύο νέα κλαδιά με τρόπο που ονομάζεται “greedy” καθώς σε κάθε βήμα της διαδικασίας δημιουργίας κλαδιών, ο καλύτερος διαχωρισμός πραγματοποιείται για αυτό το συγκεκριμένο βήμα, αντί να γίνεται κάποιος υπολογισμός που να λαμβάνει υπόψιν τα επόμενα και να πάρει μια διάσπαση που θα οδηγήσει σε ένα καλύτερο δέντρο.

Η διαδικασία διαχωρισμού συνεχίζεται μέχρι να πραγματοποιηθεί κάποιο δοθέν κριτήριο που να σχετίζεται με τον αριθμό των διαχωρισμών. Για παράδειγμα, μπορούμε να συνεχίσουμε μέχρι η κάθε περιοχή R_j να μην περιέχει περισσότερες από πέντε παρατηρήσεις των X_1, \dots, X_p χαρακτηριστικών.

Μέθοδος Bagging και Bootstrapping

Η Bootstrap aggregation ή Bagging είναι μια μέθοδος [19] που μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε πολλά μοντέλα μηχανικής μάθησης για τη βελτίωση της ταξινόμησης ή παλινδρόμησης. Στόχος της είναι να μειώσει τη διακύμανση που παρουσιάζουν οι τιμές πρόβλεψης.

Η μέθοδος Bagging περιέχει τα παρακάτω βήματα:

- 1) Ένας συγκεκριμένος αριθμός δειγμάτων δεδομένων-παραδειγμάτων διαλέγονται από τα διαθέσιμα δεδομένα.
- 2) Σε κάθε διαφορετικό σύνολο δειγμάτων εφαρμόζεται η μέθοδος μηχανικής μάθησης.
- 3) Λαμβάνεται ο μέσος όρος της απόδοσης κάθε συνόλου δεδομένων που εφαρμόστηκε η μηχανική μάθηση.

Έτσι μέσω των βημάτων αυτών μειώνεται η διακύμανση των προβλέψεων. Αυτό συμβαίνει γιατί δεδομένου ενός συνόλου n ανεξάρτητων παρατηρήσεων Z_1, \dots, Z_n , (το καθένα με διακύμανση σ^2), η διακύμανση του μέσου όρου \bar{Z} των παρατηρήσεων είναι σ^2 / n . Με άλλα λόγια, ο μέσος όρος μιας σειράς δειγμάτων από παρατηρήσεις μειώνει τη διακύμανση.

Έτσι, αν συμβολίζαμε με f_i την απόκριση της μεθόδου μηχανικής μάθησης, θα μπορούσαμε να υπολογίσουμε τα $\hat{f}^1(x), \hat{f}^2(x), \dots, \hat{f}^N(x)$ χρησιμοποιώντας ξεχωριστά N σύνολα εκπαίδευσης. ο μέσος όρος τους αποτελεί ουσιαστικά ένα ενιαίο μοντέλο μηχανικής μάθησης χαμηλής διακύμανσης, και δίνεται από:

$$\hat{f}_{avg}(x) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \hat{f}^n(x) \quad (1.8)$$

Ένα σύνθηρες πρόβλημα είναι ότι δεν έχουμε τη δυνατότητα πρόσβασης σε μεγάλα σύνολα εκπαίδευσης. Έτσι δε μπορούμε να τα διαχωρίσουμε σε ικανό αριθμό δειγμάτων ώστε α) να εκπαιδευτεί ικανοποιητικά το μοντέλο (επειδή δεν θα έχουμε αρκετά δεδομένα για τη διαδικασία της εκπαίδευσης) και β) να είναι μεγάλος ο αριθμός n των συνόλων ώστε να επιτευχθεί η μείωση της διακύμανσης.

Σε αυτή τη περίπτωση μπορεί να γίνει μια bootstrapped δειγματοληψία. Κατά αυτή τη μέθοδο επαναλαμβάνουμε πάνω από μια φορά υπάρχοντα δείγματα από ένα σύνολο δεδομένων

εκπαίδευσης. Με άλλα λόγια, κάθε σύνολο θα έχει τον ίδιο αριθμό δεδομένων αλλά κάθε ένα θα διαφέρει από το αρχικό διότι πολλά από τα δεδομένα θα επαναλαμβάνονται τυχαία μέσα στο σύνολο. Η ιδέα αυτή μπορεί να κατανοηθεί καλύτερα από το παρακάτω σχήμα:



Σχήμα 1.9) Το παραπάνω σχήμα παρουσιάζει τρία bootstrapped δείγματα δεδομένων (για εκπαίδευση και έλεγχο) που λήφθηκαν από μια βάση δεδομένων 10 αντικειμένων $(x_1, x_2, \dots, x_{10})$. Κάθε bootstrapped δείγμα περιέχει επαναλαμβανόμενα δεδομένα από το αρχικό σύνολο [20].

Για να εφαρμόσει η μέθοδος Bagging στο μοντέλο δέντρων απόφασης, κατασκευάζουμε B (σε αριθμό) τυχαία δέντρα μέσω συνόλου δεδομένων. Εφαρμόζουμε τη μέθοδο bootstrap αν δεν έχουμε αρκετά δεδομένα. Κάθε δέντρο, σε αυτό το στάδιο, θα έχει μεγάλη διακύμανση αλλά μικρό bias. Έτσι η λήψη του μέσου όρου των αποτελεσμάτων από όλα τα B δέντρα θα μειώσει τη διακύμανση (Variance). Συγκεκριμένα, από τη στατιστική, αν διαλέξουμε να μετράμε την απόδοση των προβλέψεων μέσω του σφάλματος MSE (mean square error), ισχύει ότι:

$$MSE = noise + Variance + Bias^2 \quad (1.10)$$

Αν πάμε να μελετήσουμε την απόκλιση συγκεκριμένα για τη μέθοδο αυτή θα δούμε ότι :

$$\begin{aligned} Variance\left(\frac{1}{B} \sum_{b=1}^B \hat{f}^b(x)\right) &= \frac{1}{B^2} \sum_{i=1}^B \sum_{j=1}^B Cov\left(\hat{f}^i(x), \hat{f}^j(x)\right) \\ &= \frac{1}{B^2} \sum_{i=1}^B \left(\sum_{j \neq i}^B Cov\left(\hat{f}^i(x), \hat{f}^j(x)\right) + Var\left(\hat{f}^i(x), \hat{f}^j(x)\right) \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{B^2} \sum_{b=1}^B ((B-1)\sigma^2 \cdot p + \sigma^2) = \frac{B(B-1)p\sigma^2 + B\sigma^2}{B^2} \\
&= p\sigma^2 + \sigma^2 \frac{1-p}{B} \quad (1.11)
\end{aligned}$$

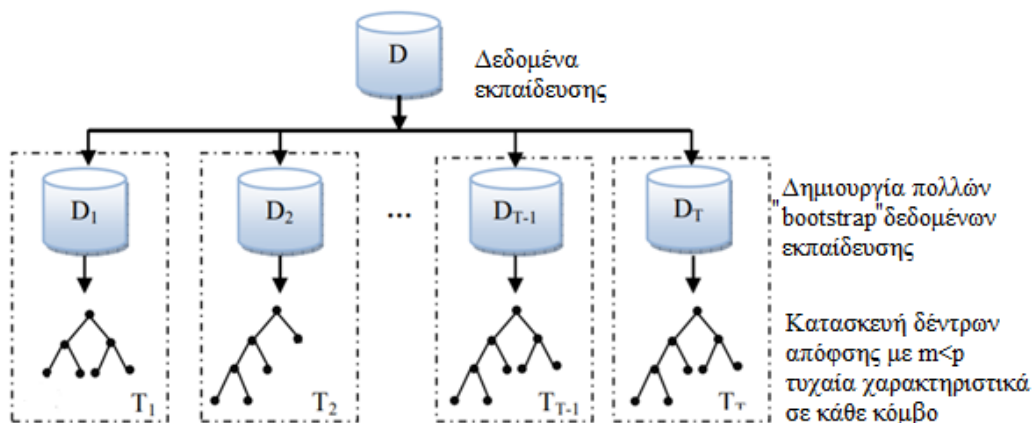
Συνεπώς αν το B αυξηθεί, θα μειωθεί η διακύμανση και θα έχουμε μικρότερο σφάλμα συνολικά στις προβλέψεις.

Η επόμενη μέθοδος που αναφέρουμε ονομάζεται τυχαία δάση και επικεντρώνεται ξανά στη μείωση της διακύμανσης αλλά όπως φαίνεται και στη σχέση στη μείωση της ποσότητας p.

Μέθοδος τυχαίων δασών

Η μέθοδος μάθησης των τυχαίων δασών αποτελεί με τη σειρά της μια βελτίωση της Bagging μεθόδου. Η μέθοδος αυτή καταφέρνει και αποσυσχετίζει τα δέντρα μεταξύ τους μειώνοντας και άλλο τη διακύμανση των προγνώσεων κατά τη τελική συνάθροιση των δεντρών.

Κατά τη μέθοδο Bagging, κατά το σχηματισμό κλαδιών από κόμβους η επιλογή ανάμεσα στο διαχωρισμό λαμβάνονται υπόψη όλα τα X_p χαρακτηριστικά (features) που είναι διαθέσιμα. Όμως κατά τη μέθοδο τυχαίων δασών (Σχήμα 1.10) ο αριθμός p αλλάζει και συγκεκριμένα γίνεται ανάμεσα σε $m < p$ τυχαία χαρακτηριστικά X_m . Το πλήθος m συνήθως διαλέγεται να είναι $m = \sqrt{p}$ δηλαδή, ο αριθμός των χαρακτηριστικών-προγνωστικών X_m που λαμβάνονται υπόψη σε κάθε διάσπαση κλαδιού να είναι ίσος στην τετραγωνική ρίζα του συνολικού αριθμού των χαρακτηριστικών-προγνωστικών X_p . Η βελτίωση της διακύμανσης (Variance) της πρόβλεψης κατά αυτή τη μέθοδο φαίνεται από τη σχέση (1.11) όπου μειώνοντας το p μπορεί και μειώνεται το δεξί μέλος της τελευταίας εξίσωσης (δηλαδή η διακύμανση).

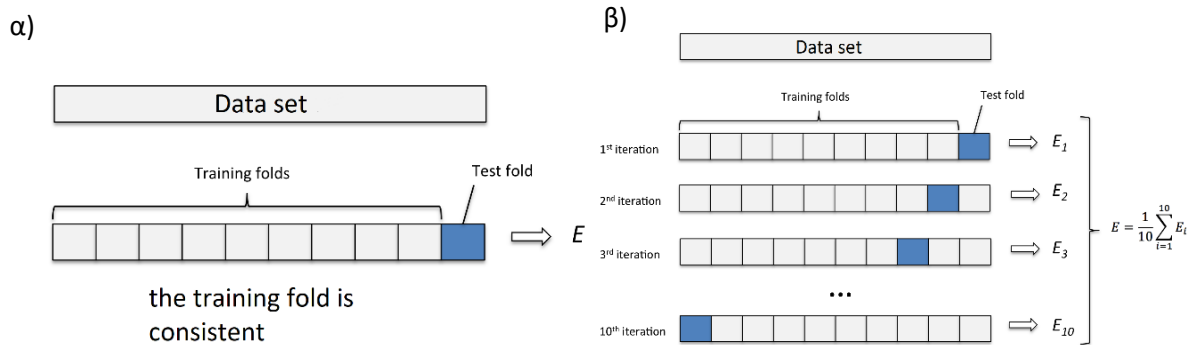


Σχήμα 1.10) Σχηματική περιγραφή μεθόδου τυχαίων δασών. Ξεκινώντας από μια βάση δεδομένων εκπαίδευσης δημιουργούμε πολλά bootstrap δεδομένα και από αυτά κατασκευάζουμε τυχαία δέντρα απόφασης. Στη μέθοδο αυτή κατά την κατασκευή δέντρων αποφάσεων σε κάθε δημιουργία κόμβου λαμβάνονται υπόψη λιγότερα χαρακτηριστικά (features) από τα διαθέσιμα. Τέλος λαμβάνεται ο μέσος όρος απόδοσης όλων των δέντρων. [21]

Διασταυρωμένη επικύρωση (Cross Validation)

Η διασταυρωμένη επικύρωση (cross validation) είναι μια τεχνική για την αξιολόγηση απόδοσης μοντέλων μηχανικής μάθησης [22]. Συνήθως η αξιολόγηση των μοντέλων γίνεται από συγκεκριμένα δείγματα δεδομένων που κρατήθηκαν έξω (holdout data) από τη διαδικασία εκπαίδευσης (Σχήμα 1.11 α).

Κατά τη διασταυρωμένη επικύρωση, η βάση δεδομένων χωρίζεται σε k τυχαία υποσύνολα (training folds), καθένα περίπου ίσου μεγέθους. Κατά αυτό το τρόπο η εκπαίδευση και ο έλεγχος απόδοσης του μοντέλου εκτελείται k φορές (Σχήμα 1.11 β). Συγκεκριμένα για μια επανάληψη i από τις k , το σύνολο δεδομένων χωρίζεται σε ένα τυχαίο υποσύνολο ($1/k$ σε αριθμό) για τον έλεγχο απόδοσης, ενώ τα υπόλοιπα δεδομένα $((k-1)/k) \cdot [\text{αριθμός όλων των δειγμάτων}]$ σε αριθμό χρησιμοποιούνται συλλογικά για την εκπαίδευση του μοντέλου. Τέλος λαμβάνεται ο μέσος όρος της απόδοσης από κάθε επανάληψη. Μέσω αυτή της διαδικασίας μειώνεται αρκετά η διακύμανση που έχει η απόδοση του μοντέλου από τη βάση δεδομένων που έχουμε.



Σχήμα 1.11) α) Απλή μέθοδος εκπαίδευσης και ελέγχου μοντέλου μηχανικής μάθησης από τα δεδομένα. Εδώ ένα τυχαίο μέρος χρησιμοποιείται για την εκπαίδευση και το υπόλοιπο για τον έλεγχο. Αυτή η διαδικασία γίνεται μόνο μια φορά. β) k -fold cross validation παράδειγμα (συγκεκριμένα για $k=10$) Σε αυτή τη περίπτωση η βάση δεδομένων χωρίζεται σε τυχαία 10 υποσύνολα (folds) για τη πραγματοποίηση της εκπαίδευσης και του ελέγχου. Στο τέλος λαμβάνεται ο μέσος όρος τους.

1.2.4 Μηχανική μάθηση και περιορισμοί λόγω δεδομένων

Η μηχανική μάθηση δεν θα πρέπει να εξιδανικεύεται. Χρησιμοποιείται όπου υπάρχουν πολλά δεδομένα και συνεπώς βασίζεται σε αυτά. Η δύναμη της είναι ότι μπορεί να δημιουργήσει και να τελειοποιήσει τους αλγόριθμους από μόνη της μαθαίνοντας από τα δεδομένα. Κάτι τέτοιο απαιτεί ένα επαρκές σύνολο με μεγάλη εμβέλεια και ποιότητα ώστε οι αλγόριθμοι να αποκτήσουν

την επιθυμητή ακρίβεια. Αυτό ενισχύει την ανάγκη για αναζήτηση βάσης δεδομένων που να ικανοποιεί αυτά τα χαρακτηριστικά πριν πάει να αντιμετωπιστεί ένα πρόβλημα. Συνεπώς θα πρέπει να ακολουθούνται στο χτίσιμο της βάσης δεδομένων όπως καθαρισμού δεδομένων (data cleaning).

Εάν δε δοθεί η απαραίτητη προσοχή στο χτίσιμο της βάσης δεδομένων μπορούν εύκολα να δημιουργηθούν μοντέλα με μεροληψία (bias). Ένα τέτοιο παράδειγμα σχετικά με την ελλιπή εμβέλεια των δεδομένων αποτελεί η αναγνώριση περιεχομένου εικόνων της Google [23]. Η Google είχε σχεδιάσει έναν αλγόριθμο όπου ενημέρωνε το χρήστη για το περιεχόμενο μιας εικόνας που ανέβαζε στο διαδίκτυο. Πριν από πολύ καιρό, ο αλγόριθμος αυτός άρχισε να επισημαίνει μελαμψούς ανθρώπους ως "γορίλλες". Η Google άμεσα επενέβη για να διορθώσει το λάθος. Από πολλούς υποστηρίζεται πως αυτό το πρόβλημα δημιουργήθηκε διότι στο μοντέλο, κατά την εκπαίδευση του, δεν δόθηκαν πολλές φωτογραφίες από μελαμψούς ανθρώπους με αποτέλεσμα να δημιουργηθεί ένα bias στις προβλέψεις. Εάν δηλαδή περιοριστούν τα δεδομένα εκπαίδευσης σε μικρή εμβέλεια πληροφορίας (δηλαδή λίγες φωτογραφίες από διαφορετικές εθνότητες) θα αναπαράγουν μόνο αυτές και εάν προκύψει κάτι νέο το μοντέλο θα κάνει λάθος προβλέψεις.

Αυτό αποτελεί ένα παράδειγμα σχετικά με την σημασία της εμβέλεια των δεδομένων. Αντίστοιχη προσοχή πρέπει να δίνεται και σε θέματα ποιότητας. Εάν τα δεδομένα έχουν λάθη θα οδηγήσουν και σε λάθος συμπεράσματα από τα μοντέλα ("Garbage in garbage out").

Όπως αναφέραμε στην αρχή της υπο-ενότητας αυτής η μηχανική μάθηση τρέφεται από τα δεδομένα και συνεπώς η τροφή θα πρέπει να πληροί κάποιες προϋποθέσεις σχετικά με τη ποσότητα και τη ποιότητα ώστε τα μοντέλα να δουλεύουν σωστά. Συνεπώς θα πρέπει να δίνεται μεγάλη προσοχή σε σχετικά βήματα και παράλληλα οι μέθοδοι να χρησιμοποιούνται λαμβάνοντας υπόψη τους περιορισμούς τους. Πάντα όμως, είναι κρίσιμο τα δεδομένα εκπαίδευσης να εκπροσωπούν όσο πιο αντιπροσωπευτικά γίνεται τον πληθυσμό (την κατανομή) των δειγμάτων που περιμένει να συναντήσει κανείς στο χώρο των δειγμάτων (και συνεπώς και στο χώρο δειγμάτων ελέγχου)

1.3 Νανοτεχνολογία

1.3.1 Εισαγωγή

Στη τρέχουσα διπλωματική τα μοντέλα της μηχανική μάθησης εφαρμόζονται σε προβλήματα που εμφανίζονται στη νανοτεχνολογία. Για να γίνει κατανοητή η σημασία τους, στο κεφάλαιο αυτό θα γίνει μια γενική εισαγωγή στη νανοτεχνολογία και στα βήματα που εμπλέκονται για τη κατασκευή, τον χαρακτηρισμό και την εφαρμογή των νανοδομημένων επιφανειών.

1.3.2 Γενικά

Ως Νανοτεχνολογία ορίζουμε τον σχεδιασμό, κατασκευή και λειτουργία διατάξεων και συστημάτων που περιέχουν νανοδομημένα υλικά, δηλ. υλικά με δομές που έχουν τουλάχιστον μία χαρακτηριστική **διάσταση μικρότερη των 100nm**. Ένα νανόμετρο (nm) αντιστοιχεί σε 10^{-9} μέτρα (m). Σε ατομική κλίμακα είναι περίπου δέκα φορές η διάμετρος τους Ηλίου (He). Για να γίνει κατανοητή η κλίμακα αυτή, αρκεί να σημειώσουμε ότι η ανθρώπινη τρίχα έχει 60-80,000 nm πάχος. Δηλ. η νανοτεχνολογία χειρίζεται δομές που η διάστασή τους είναι περίπου το 1/1000 του πάχους της ανθρώπινης τρίχας.

Μια από τις πρώτες και πιο σημαντικές αναφορές στη νανοτεχνολογία έγινε το 1959 από τον διάσημο φυσικό Richard Feynman κατά τη διάρκεια της διάλεξής του στην ετήσια συνάντηση της Αμερικανικής Φυσικής Εταιρείας (American Physical Society) στο Ινστιτούτο Τεχνολογίας της Καλιφόρνιας (Caltech) [23]. Στην ομιλία του ανέφερε το πρόβλημα χειρισμού και ελέγχου των πραγμάτων σε ατομική κλίμακα. Η κατασκευή συσκευών σε τέτοια κλίμακα θα μπορούσε να λύσει προβλήματα αποθήκευσης χώρου, ενέργειας και λειτουργικότητας. Μεταξύ άλλων ανέφερε επίσης «Όταν φτάσουμε σε αυτό το μικρόκοσμο – για παράδειγμα σε κυκλώματα επτά ατόμων - θα εμφανιστούν πολλά νέα φαινόμενα που θα αντιπροσωπεύουν εντελώς νέες ευκαιρίες για το σχεδιασμό συσκευών». Αυτή μάλιστα, ήταν και η αντίληψη της επιστημονικής κοινότητας όταν κατάφεραν να μελετήσουν διατάξεις τέτοιων μικροσυστημάτων. Τα υλικά σε μικρές διαστάσεις (νάνο-σωματίδια, λεπτά φιλμ κ.α.) μπορούν να έχουν έντονα διαφορετικές ιδιότητες συγκριτικά με τα ίδια υλικά σε αντίστοιχα μεγάλες διαστάσεις [24]. Μέσω αυτής της ιδιαιτερότητας μπορούν να δημιουργηθούν πολλές μικροσυσκευές με μοναδικά χαρακτηριστικά. Για να συμβεί όμως αυτό πρέπει να κατανοήσουμε τον τρόπο και τις συνθήκες κατασκευής τους. Το πρώτο βήμα λοιπόν, για τη μελέτη της κατασκευής τους ξεκίνησε μετά το 1974 όπου οι επιστημονικές ανακαλύψεις και εργαστηριακές μέθοδοι πορευτήκαν με εφευρέσεις όπως του διάσημου Dr. Tuomo Suntola και

την ατομική εναπόθεση στρωμάτων (ALD) [26]. Έτσι ξεκίνησε να ανοίγει ο δρόμος για την νανοτεχνολογία και την αναγνώρισή της από τους επιστημονικούς φορείς. Στα τέλη της δεκαετίας του 1980 η νανοτεχνολογία αρχίζει να αναγνωρίζεται και ως διακριτό αντικείμενο μελέτης και από εταιρίες με αποτέλεσμα από το 2000 να αρχίσουν να αναπτύσσονται εμπορικά προϊόντα και να κυκλοφορούν στην αγορά. Σημαντικός παράγοντας αποτέλεσε η προσαρμογή των τεχνικών εργαστηρίου για βιομηχανική παραγωγή των προϊόντων και η χρήση φθηνών πρώτων υλών όπως το Πυρίτιο (Si).

Η νανοτεχνολογία ακόμα και σήμερα θεωρείται μια αναδυόμενη τεχνολογία, κυρίως λόγω της ποιοτικής κατασκευής νανοδιατάξεων που στοχεύουν στη δημιουργία νέων προϊόντων με τελείως καινούργια και μοναδικά χαρακτηριστικά. Το εύρος των εφαρμογών που μπορούν να καλύψουν αυτές οι συσκευές είναι τεράστιο. Επειδή η νανοτεχνολογία ορίζεται με όρους κλίμακας διαστάσεων, έχει εφαρμογές σε πολλά πεδία και μπορούμε να πούμε ότι διατρέχει οριζόντια πολλές περιοχές της επιστήμης και τεχνολογίας ανεξάρτητα με τη φύση των εμπλεκόμενων υλικών και διεργασιών. Οι καινοτομίες και λύσεις των προβλημάτων που έχει συνεισφέρει στην τεχνολογία και κοινωνία γενικότερα έχουν αναγνωρισθεί και γι'αυτό έχει επιλεγεί από την Ευρωπαϊκή Ένωση ως ένας τομέας έρευνας με προτεραιότητα στην εξασφάλιση κονδυλίων χρηματοδότησης.

Η νανοτεχνολογία μπορεί να θεωρηθεί ότι περιέχει τρεις βασικούς τομείς που σήμερα δρουν σε συνεργασία ή και ανεξάρτητα:

Νανοηλεκτρονική, που είναι εξέλιξη της μικροηλεκτρονικής και αποτελεί την περιοχή της νανοτεχνολογίας με την πιο «επιθετική» σμίκρυνση διαστάσεων με μεγάλες απαιτήσεις ακρίβειας αφού οι νανοδομές που απαιτεί η κατασκευή των τρανζίστορ των σύγχρονων ολοκληρωμένων κυκλωμάτων έχουν προσεγγίσει τα 10nm με ακρίβεια κάτω του 1nm.

Νανοβιοτεχνολογία και Νανοιατρική, ο οποίος είναι ένας ραγδαία αναπτυσσόμενος κλάδος της σύγχρονης νανοεπιστήμης σε στενή συνεργασία με τη βιολογία και την ιατρική στον οποίον εφαρμόζονται τα εργαλεία και οι διεργασίες κατασκευής νανοδιατάξεων για τη μελέτη βιολογικών συστημάτων αλλά και την κατασκευή διαγνωστικών διατάξεων και νέων φαρμάκων [33].

Νανοϋλικά, όπου αναπτύσσονται και διερευνώνται υλικά με νανοδομημένες επιφάνειες ή νανοδομές στο εσωτερικό τους που επηρεάζουν κρίσιμα και στοχευμένα τις ιδιότητες τους .

Μίκρο και Νάνο-ηλεκτρονική

Η νανοηλεκτρονική και η μικροηλεκτρονική αποτελούν δύο από τις κινητήριες δυνάμεις για την ανάπτυξη της νανοτεχνολογίας. Αυτές οι δύο έχουν οδηγήσει σε επενδύσεις όπως της ευρωπαϊκής ένωσης το 2013, όπου έθεσε ως στόχο το διπλασιασμό της παραγωγής ολοκληρωμένων συστημάτων σε περίπου 20% τη ολόκληρης παραγωγής της [32].

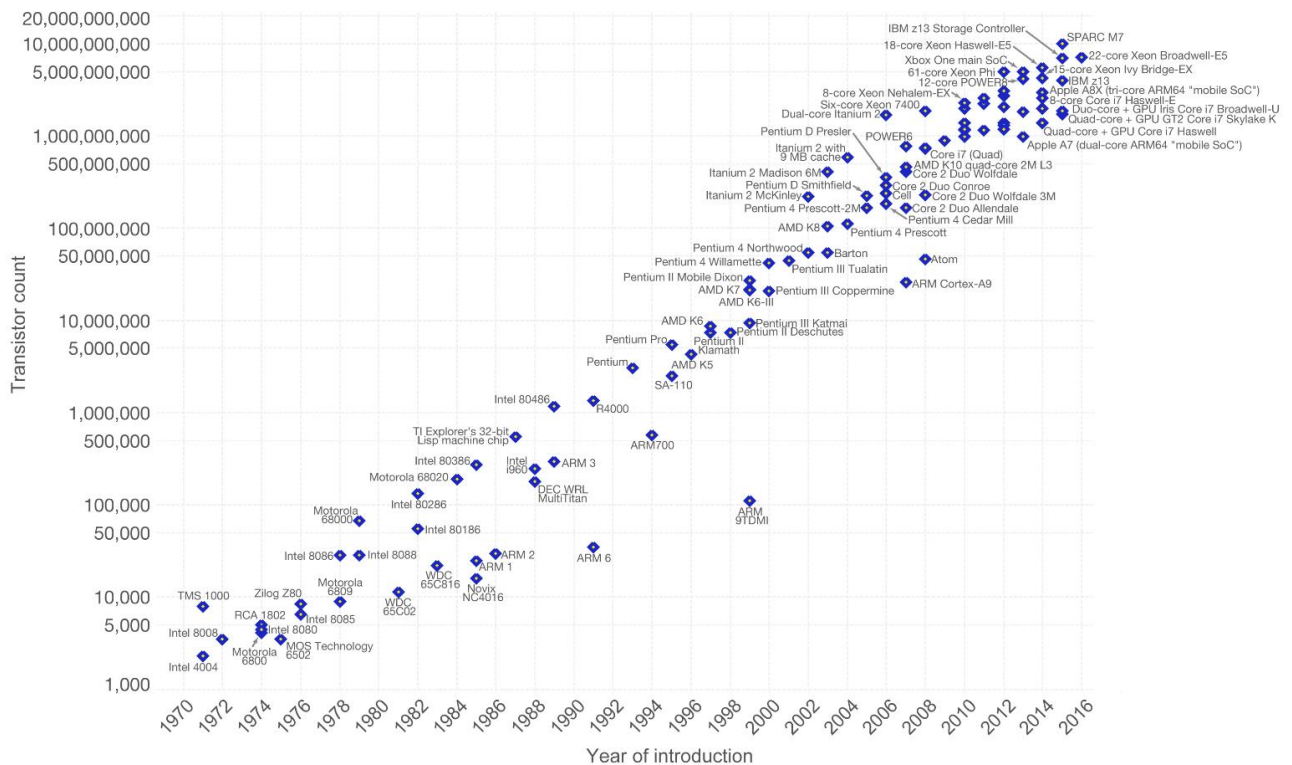
Η πληροφορία πλέον καθημερινά μεταφέρεται και αναπαράγεται ψηφιακά με την ηλεκτρονική να αποτελεί κεντρικό πυρήνα της. Η σμίκρυνση διαστάσεων των ηλεκτρονικών συστημάτων έχει αυξήσει τις δυνατότητες χρήσης τους κατασκευάζοντας αμέτρητες συσκευές (γρήγορες, λειτουργικές, φθηνές αλλά παράλληλα μεγάλης αξίας) μέσω της βιομηχανικής καινοτομίας στο χώρο αυτό. Οι βιομηχανίες αυτές δημιουργούν στοιχεία ενεργητικών κυκλωμάτων (τρανζίστορ, διόδους, οπτοηλεκτρονικές διατάξεις) σε μικρο και νάνο κλίμακα και μέσω τον συνδυασμό τους είναι δυνατόν να σχεδιαστούν τα ψηφιακά συστήματα που χρησιμοποιεί ο κόσμος καθημερινά. Βασικό ρόλο σε αυτή τη διαδικασία αποτελεί η κατανόηση των διεργασιών παράλληλα με τις φυσικές, μηχανικές και χημικές ιδιότητες των επιμέρους υλικών όπως μετάλλων, ημιαγωγών και ιδιαίτερα του πυριτίου.

Πάνω από το 90% του φλοιού της Γης αποτελείται από πυριτικά ορυκτά, καθιστώντας το πυρίτιο το δεύτερο πιο πλούσιο σε στοιχείο στον ανώτερο γήινο φλοιό (περίπου 28% κατά μάζα) μετά το οξυγόνο [33]. Συνεπώς η αφθονία σε συνδυασμό με την επιστημονική μελέτη και ικανότητας επεξεργασίας του (μεταβολή των ιδιοτήτων) προσφέρει μεγάλες δυνατότητες στη σύγχρονη ηλεκτρονική. Το πυρίτιο σε σχέση με τα γειτονικά στοιχεία στο περιοδικό πίνακα παρουσιάζει τις υψηλότερες θερμοκρασίες τήξης. Μάλιστα, το φυσικό του οξείδιο, SiO_2 είναι επίσης εύχρηστο και μπορεί να σχηματίσει φιλικές επαφές ζεύγους ημιαγωγών - διηλεκτρικών, σε σχέση με κάθε άλλο γνωστό υλικό. Το SiO_2 παράλληλα με τις νοθέσεις Si τύπου p και n αποτελούν τη βάση των ολοκληρωμένων κυκλωμάτων και γενικά των μικρο και νάνο συστημάτων.

Δομικό στοιχείο που περιέχεται στα ολοκληρωμένα κυκλώματα είναι το τρανζίστορ. Η λειτουργία του τρανζίστορ ταυτίζεται με την ψηφιακή λογική αφού δρα ως ένας πολύ γρήγορος διακόπτης με το συνδυασμό τους δημιουργεί λογικά κυκλώματα. Στα τρανζίστορ περιέχεται μια σημαντική κατηγορία, τα τρανζίστορ εκπομπής πεδίου (Field Effect Transistors, FET) τα οποία χωρίζονται σε δύο άλλες υποκατηγορίες με σημαντικότερη εξ' αυτών τα τρανζίστορ μετάλλου-οξειδίου-ημιαγωγού (Metal-Oxide-Semiconductor FET-MOSFET). Τα MOSFET αποτελούνται από διαδοχικά λεπτά στρώματα μετάλλου, οξειδίου και ημιαγωγού. Για μέταλλο χρησιμοποιείται Αλουμίνιο (Al) είτε μια πολυκρυσταλλική μορφή πυριτίου (polysilicon). Οι ιδιότητες των MOSFET συνδέονται άμεσα με τις γεωμετρικές διαστάσεις του. Το μέγεθος μάλιστα των

χαρακτηριστικών εσωτερικών αποστάσεων χαρακτηρίζει τις διαφορετικές γενιές της τεχνολογίας των κυκλωμάτων του.

Η απόδοση μιας ηλεκτρονικής συσκευής και συγκεκριμένα των τσίπ καθορίζεται από τον αριθμό των τρανζίστορ. Ο μεγάλος αριθμός των τρανζίστορ αντιστοιχεί σε πληθώρα λογικών πυλών ανά μονάδα χρόνου. Για παράδειγμα η σημερινή απόδοση των ηλεκτρονικών υπολογιστών οφείλεται στην αύξηση των τρανζίστορ στα τσίπ παράλληλα με τη σμίκρυνση τους. Το 1965, μέλος των ιδρυτών της εταιρείας Intel προέβλεψε το ταχύ ρυθμό της τεχνολογικής καινοτομίας. Η πρόβλεψη τους, γνωστή και ως «Νόμος του Moore» αναφέρει ότι ο αριθμός των τρανζίστορ σε ένα ολοκληρωμένο κύκλωμα ή τσίπ θα διπλασιάζεται κάθε δύο χρόνια.



Σχήμα 1.15 Νόμος του Moore γραφικά [34]

Ο πρώτος μικροεπεξεργαστής προωθήθηκε από την Intel το 1971 (4004) και περιείχε 2,300 τρανζίστορ. Ένας επεξεργαστής τεχνολογίας 2010 σήμερα έχει 2,000,000,000 τρανζίστορ. Παρ' όλα αυτά ο σχεδιασμός και η ανάπτυξη τους έχει φτάσει σε ένα ανώτερο όριο όπου όσο μικραίνουν δεν σημαίνει ότι έχουν και τα αναμενόμενα πλεονεκτήματα. Ο κύριος λόγος σε αυτό πρόβλημα αποτελεί η θερμότητα και η μείωση ισχύς που δέχονται οι ημιαγωγικές διατάξεις [28]. Τα φαινόμενα αυτά οφείλονται σε νόμους της κβαντομηχανικής. Καθώς εισάγονται νέα φαινόμενα στις πιο μικρές διαστάσεις, αλλάζουν και οι διαδικασίες λειτουργίας των τρανζίστορ. Συνεπώς, οι κατασκευή τους και μέθοδοι που έχουν αναπτυχθεί θα πρέπει να αναπροσαρμοστούν κατάλληλα.

Η μοριακή ηλεκτρονική αποτελεί μια προτεινόμενη λύση σε αυτό το πρόβλημα. Δηλαδή, η

επεξεργασία πληροφορίας σε μοριακό επίπεδο μέσω νανοδομημένων διατάξεων όπως μόρια, νανοσωματίδια, νανοσωλήνες κ.α.[35] Η τοπολογία τους βασίζεται σε τεχνικές ανάπτυξης bottom up και στην αξιοποίηση κβαντικών φαινομένων.

1.3.3 Κατασκευή νανοδομών (Nanofabrication)

Όταν μια σταγόνα νερού πέφτει πάνω σε φύλλο λωτού κυλιέται πάνω του χωρίς να αφήσει κανένα ίχνος. Παράλληλα εάν εντοπίσει κάποια βρομιά την παρασέρνει μαζί της. Αυτή η ικανότητα αυτόματου καθαρισμού είχε εντυπωσιάσει για αρκετό καιρό τους επιστήμονες. Δεν άργησαν όμως να συνειδητοποιήσουν ότι οφείλεται σε συγκεκριμένες νανοδομές που έχει η επιφάνεια του φύλλου. Οι νανοδομές δημιουργούν μεγάλη υδροφοβικότητα στην επιφάνεια αφού μειώνουν δραστικά το εμβαδό της επιφάνειας του νερού που αλληλοεπιδρά με τα επιφανειακά μόρια του φύλλου. Σήμερα οι επιστήμονες έχουν καταφέρει να αναπαράγουν αυτή την λειτουργικότητα τεχνητά σε πολλά πολυμερικά υλικά και κυρίως μέσω επεξεργασίας του πολυμερούς τεφλόν (PTFE) [28] ενώ προσπαθούν να την συνδυάσουν και με άλλες επιθυμητές ιδιότητας επιδιώκοντας την κατασκευή πολύ-λειτουργικών επιφανειών.

Οι κατασκευές τέτοιων νανοδομών πραγματοποιούνται σήμερα από αρκετές βιομηχανίες και ερευνητικά εργαστήρια προσπαθώντας παράλληλα να τις εξελίσουν περαιτέρω. Οι τεχνικές κατασκευής είναι πολλές στο πλήθος και μπορούν να χωριστούν σε δύο γενικές κατηγορίες : Την bottom up και την top down.

Η top-down αποτελεί κατηγορία μεθόδων που έχουν το χαρακτηριστικό ότι η κατασκευή των νανοδομών ξεκινάει μακροσκοπικά και καταλήγει στη νάνοκλίμακα αφαιρώντας ύλη. Οι top down τεχνικές έχουν προχωρήσει σε επαναστατικές εφαρμογές στην ηλεκτρονική καθώς, και σε άλλα πεδία. Οι σημερινοί επεξεργαστές που περιέχουν πολλά εσωτερικά μικρά τρανζίστορ κατασκευάζονται ως αποτέλεσμα αυτών των τεχνικών. Γενικότερα πολλές σύγχρονες μηχανές παραγωγής για τη τεχνολογία βασίζονται σε αυτές τις μεθόδους. Το κόστος εξοπλισμού είναι μεγάλο και η ανάγκη για πολλά στάδια παραγωγής αναπόφευκτη. Δύο από τις πιο διάσημες μεθόδους της είναι η λιθογραφία (lithography) και η εγχάραξη (etching). Το βασικό χαρακτηριστικό αυτών των μεθόδων είναι ότι η νανοδόμηση γίνεται χρησιμοποιώντας μακροσκοπικά εργαλεία για τη σχηματοποίηση των υλικών σε επιθυμητά σχήματα και διατάξεις.

Άλλες τεχνικές top down σχετίζονται με εναπόθεση στρωμάτων λεπτών υμενίων πάνω σε συγκεκριμένες βάσεις υλικών. Στη βιομηχανική παραγωγή τους, δυο είναι οι σημαντικότερες κατηγορίες τεχνικών ανάπτυξης που χρησιμοποιούνται: 1) Η χημική εναπόθεση ατμών (Chemical Vapor Deposition, C.V. D.) 2) Η φυσική εναπόθεση ατμών (Physical Vapor Deposition, P.V. D.)

[29].

Κατά τη C. V. D. η εναπόθεση γίνεται σε κλειστό θάλαμο με βαλβίδες που ελέγχουν τη ροή μόριων σε αέρια μορφή. Τα μόρια περνάνε από το θάλαμο και καταλήγουν στην επιφάνεια του υποστρώματος μέσω κάποιας χημικής αντίδρασης. Στη περίπτωση της P. V. D. γίνεται με φυσική μεταφορά ατόμων, ιόντων ή μορίων και οι τρόποι εναπόθεσης περιέχουν τεχνικές όπως εναπόθεση με πλάσμα. Η εναπόθεση με πλάσμα, κατά την οποία σε ένα κενό χώρο δημιουργείται πλάσμα αδρανούς υλικού (συνήθως αργό), το οποίο μέσω των κρούσεων του με το υλικό στόχο, αποκολλά μόρια που καταλήγουν στην επιφάνεια [30].

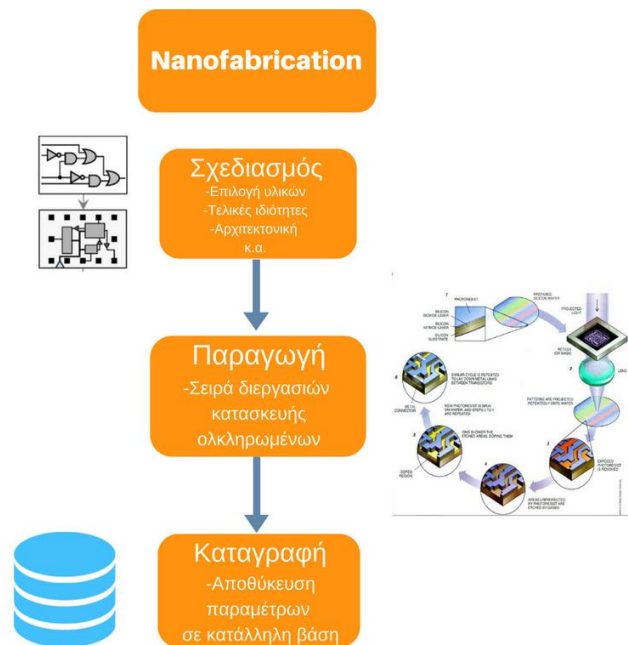
Από την άλλη πλευρά οι μέθοδοι bottom up αποτελούν την αντίστροφη διαδικασία των top-down. Χαρακτηρίζονται για τη σύνθεση μικροσκοπικών δομών μέσα από διαδικασίες αυτό-οργάνωσης μικρών μορίων. Σε αυτές τις διαδικασίες, η κατασκευή ξεκινά από τη μικρότερη διάσταση και στη συνέχεια αυξάνεται. Συνηθέστερες δομές που έχουν δημιουργηθεί κατά αυτό το τρόπο εμφανίζονται στη φύση όπως στο παράδειγμα από το φύλλο λατού. Ο έλεγχος και η αναπαραγωγή της από τους επιστήμονες είναι δύσκολος διότι αφορά δυνάμεις εσωτερικά των ατόμων. Αυτές οι δυνάμεις προκαλούν μια λεγόμενη αυτοσυναρμολόγηση (self-assembly) όπου καταφέρνουν να ενώσουν βασικά μέρη ύλης σε μεγαλύτερα. Σε εργαστήρια εντοπίζονται τέτοιες μέθοδοι, κυρίως χημικές, όπως η Sol-Gel με πολλά προϊόντα σήμερα να έχουν ως βάση όμοιες της τεχνικές στο χώρο της βιοχημείας, βιοτεχνολογίας κ.α. [31].

Διεργασίες κατασκευής για τη δημιουργία ολοκληρωμένων κυκλωμάτων

Η παραγωγή ολοκληρωμένων κυκλωμάτων (Integrated Circuits) σε υποστρώματα (wafers) πυριτίου γίνεται μέσω επαλληλίας πολλών διαφορετικών στρωμάτων από μονωτικών, αγωγίμων και ημιαγωγίμων υλικών [30]. Τα στρώματα αυτά διαμορφώνονται με διαδικασίες (συνηθέστερα) top down (λιθογραφία, εγχάραξης, εμπλουτισμού κτλ.) έτσι ώστε το τελικό προϊόν να έχει τις επιθυμητές ηλεκτρικές και μηχανικές ιδιότητες. Επίσης σημαντικό είναι σε αυτά τα βήματα να γίνει η κατάλληλη σύνδεση των επιμέρους τμημάτων της δομής για τη τελικές λειτουργίες. Για την επίτευξη αυτών των διαδικασιών θα πρέπει να ακολουθηθούν συγκεκριμένα κατασκευαστικά βήματα για την παραγωγή ενός ολοκληρωμένου κυκλώματος. Αυτά θα πρέπει να εκτελεσθούν με αυστηρά καθορισμένη σειρά, που αποτελεί τη ροή διεργασιών κατασκευής ολοκληρωμένων κυκλωμάτων (Integrated Circuits process flow). Η κατασκευή των ολοκληρωμένων γίνεται με μαζικό τρόπο σε ομάδες δισκίων πυριτίου (batches ή lots) λόγω της άμεσης φύσης που χαρακτηρίζει τις top down μεθόδους.

Αφού έχει πλήρως διαμορφωθεί η διαδικασία ροής διεργασιών στη συνέχεια

καταγράφεται ένα σύνολο διαδοχικών λεπτομερών εντολών για την κατασκευή του ολοκληρωμένου κυκλώματος. Αυτές οι οδηγίες περιλαμβάνουν τις κατάλληλες συνθήκες όπως θερμοκρασίες, ροές και πιέσεις αερίων, χρονικά διαστήματα, επίπεδα ισχύος κλπ. που απαιτούνται για κάθε κατασκευαστικό βήμα ώστε να παραχθούν οι επιθυμητές δομές. Επίσης θα πρέπει να γίνει και καταγραφή των παραμέτρων που αναφέρονται σε αυτές τις συνθήκες παραγωγής δομών για τη τελική δημιουργία λίστας οδηγιών (lot traveler). Αυτή η λίστα οδηγιών συνοδεύει την ομάδα δισκίων πυριτίου στα οποία πραγματοποιείται η κατασκευή των ολοκληρωμένων κυκλωμάτων καθώς η διαδικασία παραγωγής τους προχωρεί. Στο παρακάτω σχήμα 1.16 παρουσιάζεται μια τυπική ροή διεργασιών ολοκληρωμένων.



Σχήμα 1.16) Βασικά βήματα ροής διεργασιών κατασκευής ολοκληρωμένων όπως περιγράφεται στο κεφάλαιο.

1.3.4 Νανομετρολογία

Μετά τη κατασκευή μιας νανοδομής σημαντικό βήμα αποτελεί ο χαρακτηρισμός της. Η γνωστή φράση «Δε μπορείς να κατασκευάσεις κάτι που δε μπορείς να μετρήσεις» έχει μεγάλη σημασία σε αυτό το σημείο. Η δραματικά αυξανόμενη χρήση νανοδομών σε ένα ευρύ φάσμα βιομηχανικών τομέων έχει ανάγκη για την επίβλεψη των εσωτερικών δομών της. Ο έλεγχος των δομικών χαρακτηριστικών των νανοδομών θα μπορούσε να βοηθήσει σημαντικά στον έλεγχο της

λειτουργικότητας τους.

Στη βιβλιογραφία ο επιστημονικός χώρος υπεύθυνος για τα παραπάνω ονομάζεται Νανομετρολογία (Nanometrology) και ορίζεται ως η επιστήμη μετρήσεων σε διαστάσεις μικρότερες από 100 nm [36]. Οι μετρήσεις αυτές ωστόσο δεν αφορούν μόνο τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά μετρήσεων (ύψος, πλάτος, τραχύτητα κ.α.) αλλά και ένα γενικό χαρακτηρισμό των υλικών όπως χημικές ενώσεις, φυσικές ιδιότητες, αλληλεπιδράσεις με το περιβάλλον κ.α. Η νανομετρολογία θεωρείται ως ένα αναπόσπαστο κομμάτι της νανοτεχνολογίας και η ίδια αποτελεί ένα μεγάλο μέρος της βιομηχανίας και αναμένεται να συνεχίσει να αυξάνεται με γρήγορους ρυθμούς. Η νανομετρολογία βρίσκεται ανάμεσα στα βήματα της κατασκευής και εφαρμογής των νανοδομών και συνεπώς καλείται να απαντήσει σημαντικά ερωτήματα για την αξιολόγηση τους.

Η επιτυχία στη παραγωγή νανοδιατάξεων βασίζεται στη ποιοτική νανομετρολογία και ανάπτυξη νέων μεθόδων. Οι τεχνικές θα πρέπει να γίνονται με μεγάλη λεπτομέρεια μεταφέροντας τη πλήρη εικόνα. Πολλές φορές λόγω των περίπλοκων φαινομένων η διακασία αυτή μπορεί να υποβοηθηθεί από θεωρητικές μελέτες και μοντελοποίηση.

Εδώ θα πρέπει να τονιστεί ότι η έρευνα στις μεθόδους χαρακτηρισμού είναι καλά καθορισμένη τόσο στα ερευνητικά ιδρύματα όσο και στο βιομηχανικό τομέα. Ωστόσο, υπάρχουν μεγάλες διαφορές σχετικά με την οικονομική αποδοτικότητα και τις συνθήκες μέτρησης μεταξύ τους. Για το χαρακτηρισμό διατάξεων σε νανοδιαστάσεις έχουν αναπτυχθεί τεχνικές που πραγματοποιούνται σε διαφορετικές συνθήκες παρέχοντας έτσι, μια πληθώρα επιλογών.

Η απαίτηση για μεγάλη διακριτική ικανότητα στην οπτικοποίηση των νανοδομών οδηγεί στη χρήση σκέδασης ηλεκτρονίων είτε φωτεινής ακτινοβολίας με πολύ μικρό μήκος κύματος. Η ηλεκτρονική μικροσκοπία (SEM) κάνοντας χρήση του φαινομένου της οπισθοσκέδασης ηλεκτρονίων και την καθοδήγηση τους μέσω μαγνητικού πεδίου αποτελεί το πιο γνωστό τρόπο οπτικοποίησης σήμερα. Την ίδια διακριτική ικανότητα μπορεί να φτάσει η Η/Μ ακτινοβολία αν χρησιμοποιηθεί υπεριώδες φάσμα δυσκολεύοντας όμως τη χρήση του. Παρ' όλα αυτά σήμερα η Η/Μ ακτινοβολία χρησιμοποιεί το μεγαλύτερο μήκος κύματος της για το χαρακτηρισμό χημικών ενώσεων και δομής. Συγκεκριμένα, στις νανοδιαστάσεις ένα παράδειγμα μιας τέτοιας τεχνικής αποτελεί η TERS (Tip enhanced Raman spectroscopy) [37]. Ο ίδιος τύπου χαρακτηρισμός μπορεί να πραγματοποιηθεί και από τα ηλεκτρόνια κατά συλλέγοντας τη σκέδαση τους από το υλικό (XPS για μελέτη χημικών ενώσεων και XRD για μελέτη δομής).

Οι μέθοδοι της νανομετρολογίας για να έχουν την αποδοτικότερη μορφή τους, θα πρέπει να γίνονται σε πραγματικό χρόνο για παράδειγμα, παράλληλα με τη κατασκευή. Η ελλειψομετρία αποτελεί μία τεχνική που ικανοποιεί τα παραπάνω [28]. Αφού με κατάλληλες τροποποιήσεις μπορεί και δίνει πληροφορία πολύ σημαντικές ιδιότητες.

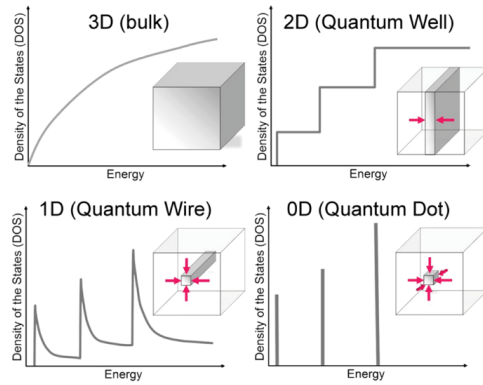
Τέλος, μια κατηγορία άμεσων τεχνικών νανομετρολογίας για κατανόηση των δομών και διεργασιών σε ατομική κλίμακα γίνεται από τα σαρωτικά μικροσκόπια και καθετήρων σήραγγας (αντίστοιχα STM και SPM). Οι τεχνικές αυτές βασίζουν τη λειτουργία τους στο κβαντικό

φαινόμενο σήραγγας). Το μικροσκόπιο ατομικής δύναμης (AFM) κατηγορίας SPM, αποτελεί ένα πολύ υψηλής ανάλυσης (1000 φορές καλύτερη από εκείνη των κλασικών ηλεκτρονικών μικροσκοπίων) μικροσκόπιο σάρωσης με ακίδα. Η χρήση της στη νανομετρολογία και συγκεκριμένα στον χαρακτηρισμό των επιφανειών αποτελεί μέρος σχεδόν κάθε εργαστηρίου. Με την σαρωτική μικροσκοπία αντίχνευσης μπορεί να μελετηθεί η μορφολογία υλικού σε μακροσκοπική, μικροσκοπική ή ατομική κλίμακα. Στο όργανο αυτό, υπάρχει μια ακίδα, που βρίσκεται εξαιρετικά κοντά στο δείγμα αλληλοεπιδρώντας με την επιφάνεια σε κάθε σημείο λαμβάνει πληροφορίες που σχετίζονται με παραμέτρους της τοπογραφίας και ιδιοτήτων του υλικού. Ανάλογα με τη φύση αλληλεπίδρασης, υπάρχουν και διαφορετικές τεχνικές μέτρησης. Συγκεκριμένα ο ακριβής έλεγχος του μεγέθους των νανοδομών είναι βασικό στοιχείο για την νανοτεχνολογία και χρήση νέων μεθόδων για τη μελέτη τους είναι αναγκαία. Στη συνέχεια θα δοθεί μια περιεκτική περιγραφή των νανοδομών με τις φυσικές τους ιδιότητες.

Μορφές νανοδομών

Όταν η ύλη περιέχει νανοδομές, η αλληλεπίδραση μεταξύ τους μπορεί να παρουσιάσει νέες ιδιότητες. Με την ανακάλυψη τεχνικών παρακολούθησης αυτών των δομών (για παράδειγμα το ηλεκτρονικό μικροσκόπιο), τα τελευταία χρόνια έχει δοθεί η δυνατότητα κατανόησης και σχετικού ελέγχου.

Οι νανοδομές διαφοροποιούνται σε συγκεκριμένες διατάξεις όπως: νανοσωματίδια (δηλαδή και οι τρεις διαστάσεις μικρότερες από 100 nm 0D), νανοσωλήνες (δύο διαστάσεις μικρότερες από 100 nm 1D), λεπτά υμένα (μία διάσταση μικρότερη από 100 nm 2D). Το μέγεθος, σχήμα, η περιοδικότητα και η πυκνότητα τους αποτελούν τις σημαντικότερες παραμέτρους για το χαρακτηρισμό ενός νανο-υλικού [38]. Τα περισσότερα νανοσωματίδια κάτω από το κρίσιμο μέγεθος των 30 nm παρουσιάζουν νάνο-ιδιότητες διαφοροποιημένες από ίδιο υλικό σε μεγαλύτερη διάσταση. Σημαντικός παράγοντας αποτελεί το μέγεθος του υλικού όταν μικραίνει σε τέτοιες διαστάσεις, ο αριθμός των ατόμων που υπάρχουν στην επιφάνεια σωματιδίου αυξάνονται εκθετικά και συνεπώς αυτά είναι που θα αλληλοεπιδράσουν περισσότερο.



Σχήμα 1.17: Πυκνότητα ενεργειακών καταστάσεων για ημιαγώγιμα υλικά 0D,1D,2D,3D διατάξεων [31]

Οι αλλαγές των ιδιοτήτων στις νανοδιαστάσεις οφείλονται σε κβαντικά φαινόμενα [28]. Σε μικρές κλίμακες τα ηλεκτρόνια ενός υλικού έχουν τελείως διαφορετική συμπεριφορά. Είναι γνωστό πως η πυκνότητα ενεργειακών καταστάσεων των ηλεκτρονίων στην ύλη καθορίζει και τις ιδιότητες του. Σε μια τόσο μικρή κλίμακα και ανάλογα με τη διάταξη που έχουν τα υλικά αποκτούν και άλλη πυκνότητα ενεργειακών καταστάσεων.

2 Σχετική βιβλιογραφία

2.1 Νανοτεχνολογία και Τεχνητή Νοημοσύνη

2.1.1 Εισαγωγή

Στη σύγχρονη εποχή η νανοτεχνολογία έχει επηρεάσει ιδιαίτερα την ανάπτυξη της τεχνολογίας ενώ αναμένονται ακόμα περισσότερες εξελίξεις στο μέλλον. Για πάνω από μια δεκαετία γίνεται συζήτηση γύρω από τη δυνατότητα σύγκλισης της με τη τεχνητή νοημοσύνη (Artificial Intelligence) με σκοπό τη ανάδειξη νέων εφαρμογών. Ωστόσο, αυτή η αναμενόμενη ενσωμάτωση βρίσκεται ακόμη σε εξέλιξη [1]. Η νανοτεχνολογία συνδυάζει επιστημονικά πεδία όπως τη φυσική, χημεία και μηχανολογίας ενώ η τεχνητή νοημοσύνη αποτελεί πεδίο εμπνευσμένο από βιολογικά συστήματα αναπτύσσοντας μερικά από τα πιο αποδοτικά μοντέλα που χρησιμοποιούνται σήμερα στα πλαίσια της μηχανικής μάθησης όπως τα νευρωνικά δίκτυα.

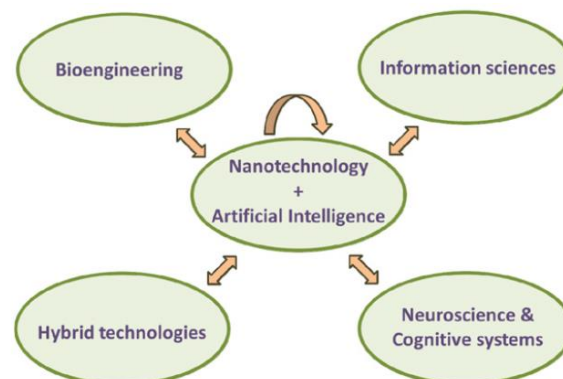
2.1.2 Σημασία της συνεργασίας των πεδίων

Η συνεργασία της νανοτεχνολογίας και τεχνητής νοημοσύνης μπορεί να εμπνεύσει νέους κλάδους μελέτης ή να ενισχύσει τους ήδη υπάρχοντες. Στη κατεύθυνση αυτής της σκέψης, πολλά εργαλεία της τεχνητής νοημοσύνης έχουν ήδη ξεκινήσει να χρησιμοποιούνται σε διάφορα πεδία της νανοτεχνολογίας και της ερευνάς της. Τέτοια παραδείγματα περιέχουν την κατανόηση αποτελεσμάτων πειραματικών τεχνικών ή και την ενίσχυση μεθόδων για σχεδιασμό νανοϋλικών και άλλων σχετικών συστημάτων [43][47]. Συζήτηση γίνεται ακόμα γύρω από την ιδέα χρήσης τους για την ενίσχυση υπολογιστικής δύναμης [48]. Στη τρέχουσα διπλωματική εργασία γεννιέται η ιδέα του συνδυασμού των δύο αυτών κλάδων με σκοπό της βελτιστοποίησης αλλά και

κατανόησης σύνδεσης σταδίων της διαδικασίας παραγωγής επιφανειών με νανοτραχύτητα.

Η ανάπτυξη τεχνικών τεχνητής νοημοσύνης έχει προσανατολισμό με γνώμονα τα δεδομένα (Κεφάλαιο 1.2). Δηλαδή, οι δυνατότητες που προσφέρουν τα μοντέλα αποκτώνται από τα διαθέσιμα δεδομένα-μετρήσεις του προβλήματος που θέλουμε να λύσουμε. Για αυτό είναι πολύ σημαντικό να είναι διαθέσιμα πολλά δεδομένα με μη επαναλαμβανόμενη πληροφορία μεταξύ τους. Τα μοντέλα της τεχνητής νοημοσύνης θα προσπαθήσουν να αναγνωρήσουν τα πρότυπα που κρύβονται μέσα στα δεδομένα και να τα αναπαράγουν.

Ένας από τους βασικούς λόγους που τα μοντέλα της τεχνητής νοημοσύνης χρησιμοποιούνται στη νανο επιστήμη αποτελεί ότι η φυσική στις νανοδιαστάσεις διαφέρει σε σχέση με τις μακροσκοπικές διαστάσεις. Σε αυτές τις μικρές διαστάσεις αναδύονται περίπλοκα φαινόμενα αλληλεπιδράσεων κβαντικής φύσης και συνεπώς, η προσπάθεια πλήρους θεωρητικής περιγραφής τους καθίσταται δύσκολη. Από την άλλη πλευρά η αναλυτική προσέγγιση συχνά είναι αδύνατη και η χρήση θεωρητικών μοντέλων αναγκαία για την ερμηνεία πειραματικών αποτελεσμάτων. Σε αυτό το πλαίσιο τα εργαλεία της τεχνητής νοημοσύνης, όπως για παράδειγμα η μηχανική μάθηση, μπορούν διαδραματίσουν ένα ενισχυτικό ρόλο στην ερμηνεία πειραματικών αποτελεσμάτων, φαινομένων, καθώς και στην ανάπτυξη μελλοντικών εφαρμογών. Η πολυπλοκότητα των μοντέλων μηχανικής μάθησης είναι σε θέση να αντιμετωπίσει την υψηλή μη γραμμικότητα που χαρακτηρίζει τη φυσική στις νανοδιαστάσεις. Επίσης μπορεί να λειτουργήσει και αντίστροφα παρέχοντας πληροφορίες για το σχεδιασμό επιθυμητών δομών [39]. Πιο συγκεκριμένα, η μηχανική μάθηση μπορεί να αναπαραστήσει μη γνωστές συναρτήσεις χρησιμοποιώντας αντ' αυτού υπάρχουσα γνώση σε μορφή δεδομένων. Τα δεδομένα αυτά δίνονται στα μοντέλα τα οποία δημιουργούνται μέσω ενός εποπτευόμενου (supervised) αλγορίθμου για να μάθουν να προβλέπουν στατιστικά τα αποτελέσματα από τα δεδομένα που δίνονται. Η χρήση αυτών των μοντέλων μπορεί να γίνει μεμονωμένα ή συνδυαστικά με άλλα.



Σχήμα 2.1: Σχεδιάγραμμα που δείχνει τα πεδία που επηρεάζει η συνεργασία της νανοτεχνολογίας με τη τεχνητή νοημοσύνη [1].

2.1.3 Εφαρμογές τεχνητής νοημοσύνης στη νανοτεχνολογία

Η σύγκλιση των δύο επιστημών έχει περάσει στην επιστημονική κοινότητα με ιδέες που προκύπτουν από τα ανοιχτά προβλήματα της νανοτεχνολογίας και χρήσης της τεχνητής νοημοσύνης για τη προσέγγισή τους. Στη συνέχεια θα δοθούν παραδείγματα για τα οποία η τεχνητή νοημοσύνη βασισμένη στα δεδομένα και στη χρήση μοντέλων έχει δώσει σχετικές λύσεις.

Ένα σημαντικό παράδειγμα παρουσιάζεται από τη δουλειά των Kim et.al [41] όπου έκαναν χρήση μοντέλων νευρωνικών δικτύων. Τα μοντέλα αυτά έχουν την ικανότητα να αναπαριστούν περίπλοκες μη γραμμικές σχέσεις μεταξύ παραμέτρων εισόδου και εξόδου αλλά και να επισημάνουν τη σημαντικότητα των παραμέτρων για τη σύνδεση αυτή. Την δυνατότητα αυτή τη χρησιμοποίησαν για να συνδέσουν παραμέτρους κατά τη διαδικασία εναπόθεσης λεπτού φιλμ ενός διάφανου ηλεκτροδίου In_2O_3 -10 wt% ZnO (IZO). Η χρήση τέτοιων φιλμ έχει εφαρμογές σε οπτο-ηλεκτρονικά συστήματα όπως ηλιακά κελιά, οπτικά πάνελ κ.α.

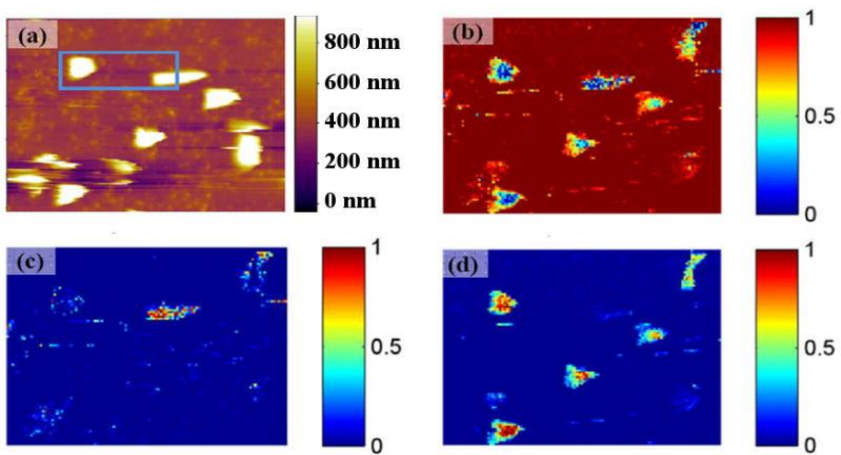
Από το παράδειγμα αυτό κατάφεραν οι Kim et. al. να εντοπίσουν συγκεκριμένο αριθμό παραμέτρων από μια μεγάλη πληθώρα που ήταν ιδιαίτερα σημαντικές για τα πειράματα εναπόθεσης. Συγκεκριμένα, ο ρυθμός εναπόθεσης λεπτών φιλμ IZO φάνηκε από τα μοντέλα να επηρεάστηκε έντονα από παραμέτρους όπως την RF (radio frequency) ισχύ και τη θερμοκρασία του υποστρώματος. Επίσης, οι ηλεκτρικές ιδιότητες των λεπτών φιλμ IZO εξαρτήθηκαν κυρίως από την αναλογία O_2 ως προς θερμοκρασία του υποστρώματος. Επιπλέον τα προβλεπόμενα χαρακτηριστικά εξόδου από το μοντέλο που εκπαιδεύτηκε μπορεί να εξηγήσουν επαρκώς τον μηχανισμό της διεργασίας εναπόθεσης IZO καθώς και να παράγουν αξιόπιστες προβλέψεις.

Όμοιες δουλειές έχουν γίνει και για τη βελτιστοποίηση κατασκευής νανο-κεραίων και άλλων νανοσύνθετων [42] [43] υλικών. Τα μοντέλα τεχνητής νοημοσύνης μπορούν να γεφυρώσουν τις παραμέτρους κατασκευής με τις τελικές επιθυμητές ιδιότητες, εάν τους δοθεί μια κατάλληλη βάση δεδομένων εκπαίδευσης. Σε αυτό το πλαίσιο ανάδειξης χαρακτηριστικών και πρόβλεψης τελικών ιδιοτήτων βασίζεται και η τρέχουσα διπλωματική εργασία.

Μια ακόμα σημαντική εφαρμογή, παρουσιάζεται στα μικροσκόπια σαρωτικής ανίχνευσης (SPM). Η δυσκολία σε αυτές τις τεχνικές είναι ότι οι περισσότερες αλληλεπιδράσεις ακίδας-υλικού, δεν είναι εύκολο να κατανοηθούν και εξαρτώνται από πολλές παραμέτρους. Ειδικά τελευταία χρόνια όπου πιο περίπλοκες τεχνικές SPM εμφανίζονται [44] [45] η πληροφορία που δίνεται από αυτά τα συστήματα πολλαπλασιάζεται με μεγάλο ρυθμό. Για την αντιμετώπιση αυτού το προβλήματος οι Nikiforov et al. [46] εισήγαγαν μια διαφορετική τεχνική SPM, που ονομάζεται λειτουργική αναγνώριση (Functional Recognition FR-SPM), η οποία μέσω από παράλληλες φασματοσκοπικές μετρήσεις προσπαθεί να λάβει πληροφορίες για τα τοπικά χαρακτηριστικά

χρησιμοποιώντας νευρωνικά δίκτυα που εκπαιδεύτηκαν με μια σειρά από πειραματικές μετρήσεις. Στη συνέχεια, ο Nikiforov εκτός από τα νευρωνικά δίκτυα χρησιμοποίησε και άλλες τεχνικές όπως τη Principal Component Analysis (PCA). Αυτή τη τεχνική μειώνει τον αριθμό των παραμέτρων εισαγωγής του μοντέλου χωρίς όμως να χάνεται πολύ η σημαντικότητα της πληροφορίας τους. Η PCA επιλέγεται συνήθως ώστε στη συνέχεια το νευρωνικό δίκτυο να χρειάζεται λιγότερη πληροφορία για να εκπαιδευτεί και να έχει πιο γρήγορα αποτελέσματα. Η μέθοδος FR-SPM κατάφερε να προβλέψει αποτελέσματα που προκύπτουν από μετρήσεις SPM αλλά και να εντοπίσει ποιες ήταν οι σημαντικότερες παράμετροι για τη πρόβλεψη αυτή. Η αποδοτικότητα του FR-SPM μετρήθηκε από πείραμα σχετικά με τη ταυτοποίηση βακτηριδίων πάνω σε πολυμερή υποστρώματα

Το σχήμα 2.2 εμφανίζει τις εικόνες τοπογραφίας με χρωματική κλίμακα για τα τρία διαφορετικά στοιχεία χρήσης του νευρωνικού δικτύου για την αναγνώριση βακτηριδίων. Στην πρώτη εικόνα (α), παρουσιάζεται το σύνολο δεδομένων πραγματικής μέτρησης του SPM όπου ένα μέρος του χρησιμοποιήθηκε για την εκπαίδευση και εμφανίζεται στο μπλε πλαίσιο. Εδώ είναι σημαντικό να κατανοηθεί κάθε μοντέλο νευρωνικού δικτύου για να δουλέψει σωστά πρέπει να εκπαιδευθεί με δεδομένα που αντιπροσωπεύουν το πρόβλημα. Δηλαδή σε αυτή τη περίπτωση το σύνολο δεδομένων εκπαίδευσης πρέπει να περιλαμβάνει μια ευρεία αναπαράσταση των τριών στοιχείων που θα κληθεί στη συνέχεια να προσδιοριστεί από άλλες εικόνες. Συνεπώς τα δεδομένα εκπαίδευσης περιέχουν εικόνα που διακρίνονται δύο βακτήρια (έντονο φωτεινό σήμα) και το σήμα υποβάθρου. Η (b) δείχνει τα αποτελέσματα που είχε το μοντέλο στο υπόστρωμα που εκπαιδεύτηκε ενώ οι υπόλοιπες εικόνες (c) (d) δείχνουν τη χρήση του μοντέλου σε άλλα υποστρώματα. Τα αποτελέσματα όπως φαίνεται από τις εικόνες είναι ικανοποιητικά και η αναγνώριση για τα περισσότερα βακτήρια επιτυχής.



Σχήμα 2.2(a) Τοπογραφία των βακτηριδίων (b),(c) και (d) δείχνουν τις αντίστοιχες προβλέψεις ενός νευρωνικού δικτύου για τον εντοπισμό βακτηριδίων στο συγκεκριμένο δείγμα. Η μπάρα δεξιά δείχνει τη πιθανότητα παρουσίας βακτηριδίων [1].

Η σκέψη σύγκλησης των δύο αυτών πεδίων έχει περάσει και από μεγάλες τεχνολογικές εταιρείες. Ο Dario Gil, αντιπρόεδρος της επιστήμης και των λύσεων της IBM Research το 2017 αναφέρει “Με την πρόοδο της τεχνητής νοημοσύνης και της νανοτεχνολογίας, επιδιώκουμε να εφεύρουμε μια νέα γενιά επιστημονικών μέσων που θα καταστήσουν τα σύνθετα αόρατα συστήματα στον κόσμο σήμερα ορατά κατά τα επόμενα πέντε χρόνια”[40].

Τα επόμενα χρόνια, νέα ιατρικά εργαστήρια, ενσωματωμένα σε ένα τσιπ (lab on a chip) θα χρησιμεύσουν ως νανοτεχνολογικές ιατρικές γνωματεύσεις εντοπίζοντας “κρυφές” ενδείξεις ασθένειας. Ο στόχος είναι να συρρικνωθούν σε ένα ενιαίο τσιπ πυριτίου όλες οι διαδικασίες που είναι απαραίτητες για την ανάλυση μιας ασθένειας που κανονικά θα διεξαγόταν σε ένα εργαστήριο πλήρους κλίμακας. Η τεχνολογία lab on a chip θα μπορούσε τελικά να κατασκευαστεί σε μια βολική συσκευή χειρός για να επιτρέπει στους ανθρώπους να μετράνε σε πραγματικό χρόνο την παρουσία βιολογικών δεικτών που βρίσκονται σε μικρές ποσότητες από τα σωματικά υγρά, στέλνοντας αυτή τη ροή πληροφοριών σε ένα νέφος (cloud). Εκεί θα μπορούσε να συνδυαστεί με δεδομένα από άλλες συσκευές IoT (internet of things), όπως οθόνες ύπνου και έξυπνα ρολόγια. Οι πληροφορίες αυτές στη συνέχεια θα συλλέγονται και θα αναλύονται από μοντέλα τεχνητής νοημοσύνης.

2.2 Το δικό μας πρόβλημα: Βασική ροή παραγωγής νανοδομών

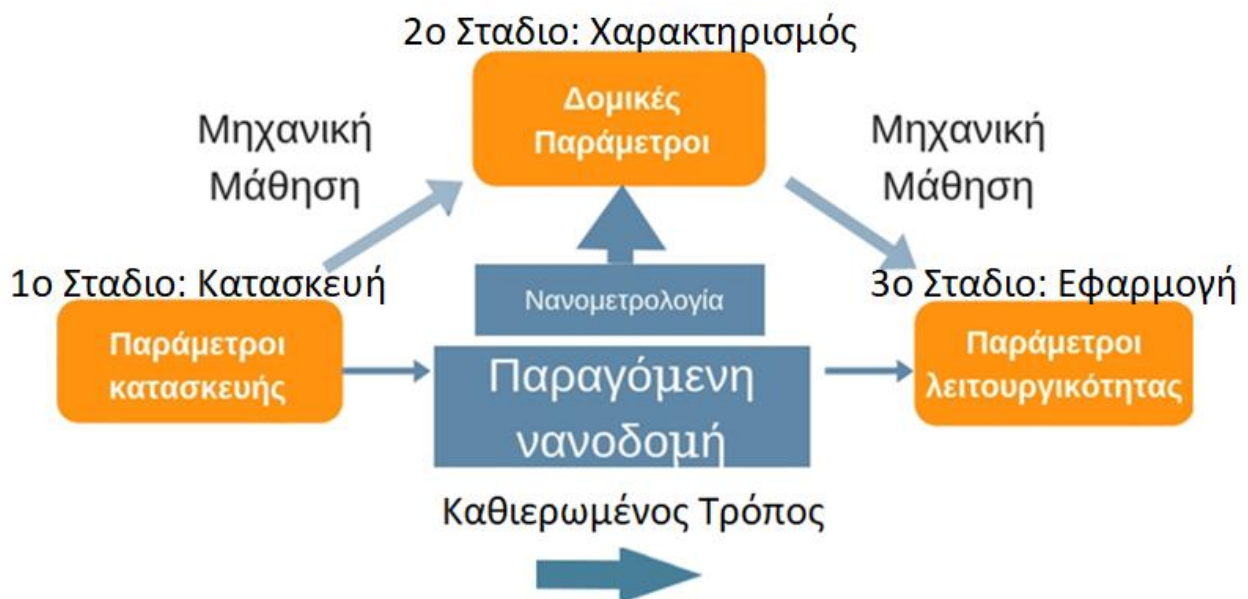
Στο σχήμα 2.3 παρουσιάζονται τα βασικά στάδια της διαδικασίας παραγωγής νανοδομών έτσι όπως χωρίστηκαν στο κεφάλαιο 1.1. Η κατασκευή, ο χαρακτηρισμός και η λειτουργικότητα είναι τα τρία βασικά βήματα που μπορούν να παρουσιαστούν στη διαδικασία αυτή. Η κατασκευή όπως έγινε αναφορά, περιέχει παραμέτρους που σχετίζονται με τον ορισμό συνθηκών και τεχνικών που δημιουργούν την επιφάνεια ενώ οι νανομετρολογικές με αυτές που χαρακτηρίζουν τα δομικά χαρακτηριστικά της. Στη τρίτη και τελευταία διαδικασία γίνεται ο έλεγχος της λειτουργικότητας.

Η λειτουργικότητα των νανοδομών αφορά τις τελικές ιδιότητες που θέλαμε να πετύχουμε κατά το σχεδιασμό όλης της κατασκευής. Οι παράμετροι λειτουργικότητας διαφέρουν από αυτές της νανομετρολογίας καθώς δεν έχουν ως πρωταρχικό στόχο το χαρακτηρισμό παραμέτρων σχετικά με τα δομικά χαρακτηριστικά που αναφέρθηκαν (παρ' όλα αυτά είναι ισχυρά εξαρτώμενες από αυτές) αλλά με τις τελικές ιδιότητες λειτουργίας.

Χαρακτηριστικό παράδειγμα αποτελεί η υδροφοβικότητα, δηλαδή η γωνία επαφής που έχουν υγρές σταγόνες με μια επιφάνεια. Η δουλειά των Christian Dorrer και Jürgen Rühle [50] δείχνει πως η υδροφοβικότητα εξαρτάται από τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά της επιφάνειας.

Οι παράμετροι όπως φάνηκε και από το παράδειγμα έχουν ισχυρή εξάρτηση μεταξύ τους για κάθε στάδιο ξεχωριστά. Η γνώση της σύνδεσης τους είναι σημαντική καθώς καθορίζει την ακρίβεια της επιθυμητής λειτουργικότητας. Συνεπώς, σε αυτή την αλυσίδα βημάτων για την παραγωγή ενός νανοπροϊόντος με την επιθυμητή λειτουργικότητα, το κρισιμότερο στοιχείο είναι το πώς συνδέονται οι παράμετροι που εμπλέκονται σε κάθε στάδιο. Η πραγματοποίηση της παραπάνω διαδικασίας, κατά το καθιερωμένο τρόπο, λειτουργεί με βάση την εμπειρία και γνώση. Δηλαδή η λήψη αποφάσεων για τη ρύθμιση κάθε παραμέτρου σε κάθε βήμα βασίζεται σε ήδη υπάρχουσες δοκιμές ή και από σχετικό θεωρητικό υπόβαθρο. Σε διάφορες περιπτώσεις όμως αυτός ο καθιερωμένος τρόπος δεν επαρκεί για την επίτευξη του τελικού στόχου. Αυτό συμβαίνει συχνά, διότι στη νανοκλίμακα ανακλύπουν πολλά νέα και περίπλοκα φαινόμενα. Η φυσική στις νανοδιαστάσεις έχει ιδιαίτερα και καινούρια χαρακτηριστικά σε σχέση με τις μακροσκοπικές όπως έχουμε αναφέρει. Συνεπώς η προσπάθεια θεωρητικής περιγραφής τους καθίσταται δύσκολη και αυτή οδηγεί σε πολλές δοκιμές ανά βήμα, καταναλώνοντας σημαντικό χρόνο και πόρους.

Η χρήση τεχνικών μηχανικής μάθησης θα μπορούσε να συμβάλει στην αντιμετώπιση αυτών των δυσκολιών παρέχοντας κατάλληλα μοντέλα, που μαθαίνουν να πραγματοποιούν συγκεκριμένες εργασίες (προβλέψεις) αξιοποιώντας δεδομένα-μετρήσεις για τη σύνδεση κάθε σταδίου. Η ουσία της μηχανικής μάθησης στην αντιμετώπιση του προβλήματος μας έγκειται στο ότι, το χάσμα εμπειρίας και θεωρητικής γνώσης, μπορεί να καλυφθεί μέσα από τη χρήση δεδομένων. Υπό συγκεκριμένες προϋποθέσεις, όπως είδαμε από τα παραδείγματα, τα δεδομένα-μετρήσεις περιέχουν τα απαραίτητα πρότυπα (patterns) που θα θέλαμε να γνωρίζουμε ή να έχουμε την εμπειρία να τα αναπαράγουμε. Τα μοντέλα μηχανικής μάθησης χρησιμοποιώντας ήδη υπάρχουσες μετρήσεις μπορούν και αναπαράγουν αυτά τα σημαντικά πρότυπα. Συνεπώς μέσα από τη χρήση δεδομένων και τη δημιουργία μοντέλων μηχανικής μάθησης θεωρούμε ότι μπορούν να αντιμετωπιστούν οι δυσκολίες που προκύπτουν στη διαδικασία παραγωγής και εφαρμογής νανοδομών.



Σχήμα 2.3) Σχηματική αναπαράσταση διαδικασίας παραγωγής νανοδομών επιμερισμένη σε τρία βασικά στάδια, της κατασκευής, χαρακτηρισμού και εφαρμογής-λειτουργικότητας.

3 Τραχύτητα νανοδομημένων επιφανειών

3.1 Μαθηματικά και στατιστικά χαρακτηριστικά

Η τοπογραφία των τραχειών επιφανειών στις μικρο-νάνο διαστάσεις είναι ιδιαίτερα ακανόνιστη. Η προσπάθεια περιγραφή τους μπορεί γίνει μέσω από στατιστικές μεθόδους με χρήση πολλών παραμέτρων όπως τα Rms, correlation length, skewness kurtosis κ.α. Στο κεφάλαιο αυτό θα γίνει μια συνοπτική περιγραφή τους.

3.1.1 Στατιστική ανάλυση

Γενικά στην στατιστική και στην ανάλυση δεδομένων εάν είναι γνωστή η κατανομή που ακολουθούν ή έστω προσεγγίζουν τα δεδομένα, μπορεί να υπολογιστεί η πιθανότητα εμφάνισης μιας τυχαίας τιμής (ή εύρους τιμών) αυτού του πληθυσμού. Αυτό φυσικά δίνει χρήσιμες πληροφορίες γύρω από τη συγκεκριμένη τιμή στη κατανομή. Τέτοιες πληροφορίες αποτελούν χαρακτηριστικές παραμέτρους της κατανομής, όπως για παράδειγμα τη μέση τιμή ή άλλες στατιστικές ροπές. Γνωρίζοντας από τη κατανομή τη συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας (PDF probability density function) θεωρητικά μπορούν να υπολογιστούν τέτοιες παράμετροι [51].

Αν έστω συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας $f(x)$ είναι θετική παντού και κανονικοποιημένη τότε ορίζει ένα μέτρο πιθανότητας εμφάνισης εύρους τιμών μεταξύ a και b :

$$\int_a^b f(x)dx = P(a < X \leq b) \quad (3.1)$$

Γενικά σε δεδομένα (πχ. Μια επιφάνεια 2 διαστάσεων) που ακολουθούν μια συνεχή συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας $f(x)$ η ν -οστή ροπή u_ν γύρω από τη μέση τιμή \bar{x} εκφράζεται ως εξής:

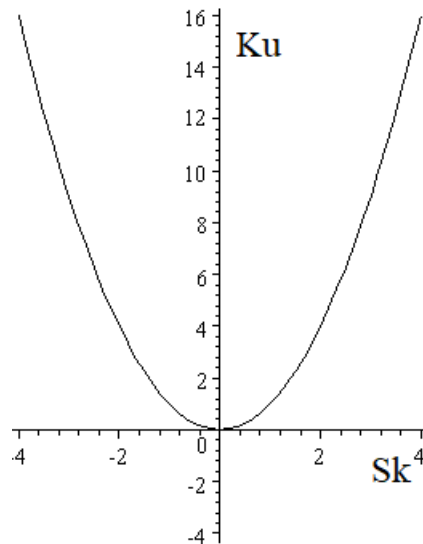
$$u_\nu = E((x - \bar{x})^\nu) = \int_{-\infty}^{+\infty} (x - \bar{x})^\nu f(x)dx \quad (3.2)$$

Όπου E είναι ο τελεστής της αναμενόμενης τιμής $E(X)$.

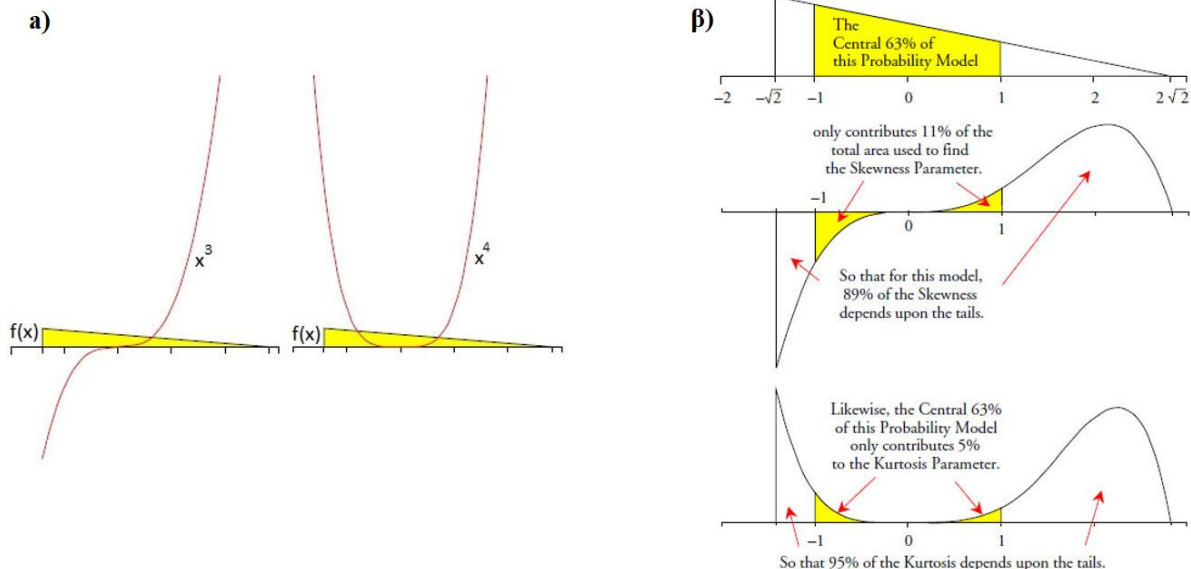
Οι ροπές περί την μέση τιμή έχουν ιδιαίτερη σημασία γιατί μεταφέρουν την εικόνα για το πως μια τυχαία μεταβλητή κατανέμεται γύρω από την μέση τιμή της. Η πρώτη ροπή για $\nu=1$ αναφέρεται στη μέση τιμή που έχει η κατανομή, όπου σύμφωνα με το τύπο (2), $u_1=0$. Αν λάβουμε τη πρώτη ροπή γύρω από το 0 τότε η μέση τιμή είναι:

$$\text{Μέση τιμή} = \bar{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} xf(x)dx \quad (3.3)$$

Η ροπή 2ης τάξης αποτελεί τη διακύμανση που έχει η κατανομή με $u_2 = \Delta(X) = \sigma^2$, όπου σ η διασπορά της. Στη συνέχεια η ροπή 3ης τάξης (u_3) περί την μέση τιμή χρησιμοποιείται σαν μέτρο λοξότητας ή ασυμμετρίας (skewness) της κατανομής. Η κανονικοποιημένη της μορφή μετατρέπεται με διαίρεση της από τη ποσότητα σ^3 και συνεπώς, $Sk = \frac{u_3}{\sigma^3}$. Αν η κατανομή είναι συμμετρική γύρω από τη μέση τιμή τότε $u_3 = 0$. Η 3η ροπή θεωρείται ως η σημαντικότερη κεντρική ροπή που δίνει ένδειξη για διαφορές στην μορφή της κατανομής από τη μια πλευρά της κατανομής (αναφορικά με τη μέση τιμή Σχήμα 3.2). Τέλος, η ροπή 4ης τάξης περί την μέση τιμή (πιο συγκεκριμένα η κανονικοποιημένη ποσότητα $Ku = \frac{u_4}{\sigma^4}$) λέγεται και συντελεστής ή μέτρο κύρτωσης (kurtosis) γιατί μετρά πόσο αιχμηρή είναι η κατανομή. Αυτές οι δύο ροπές περιορίζονται στο χώρο $Ku - Sk^2 - 1 \geq 0$ [11] (Σχήμα 3.1) και φημίζονται ως οι παράμετροι που καθορίζουν το “σχήμα” της κατανομής (Σχήμα 3.2) [53]. Κυρίως σχετίζονται με τα άκρα (“ουρές”) της κατανομής.



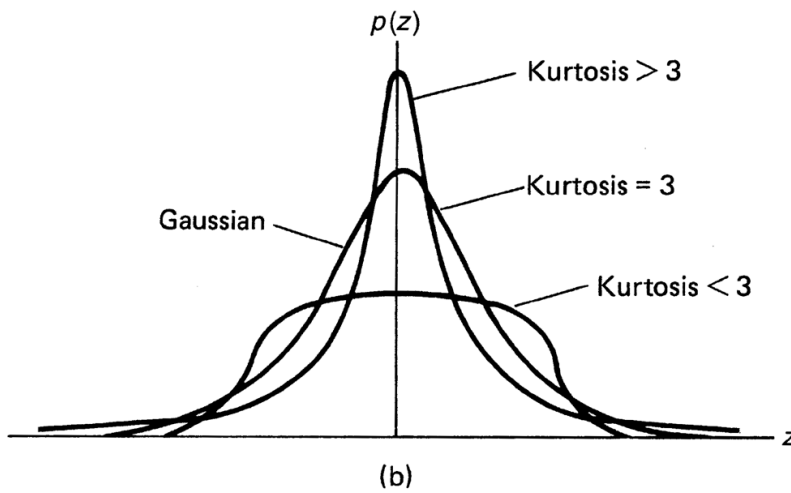
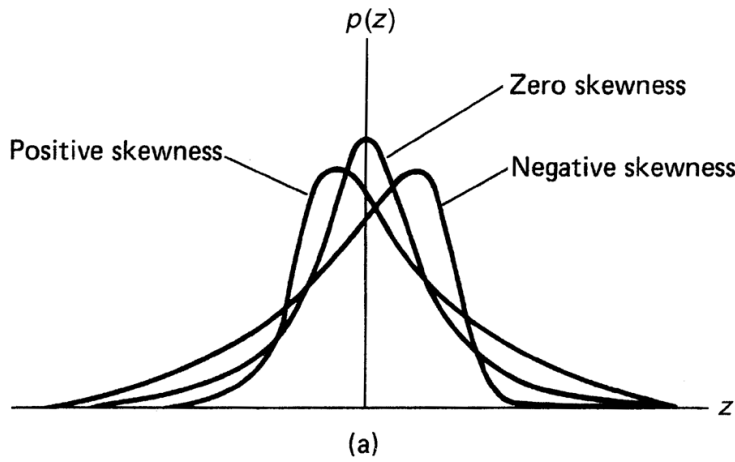
Σχήμα 3.1) Χώρος επιτρεπόμενων τιμών ασυμμετρίας (Sk) και κυρτότητας (Ku)



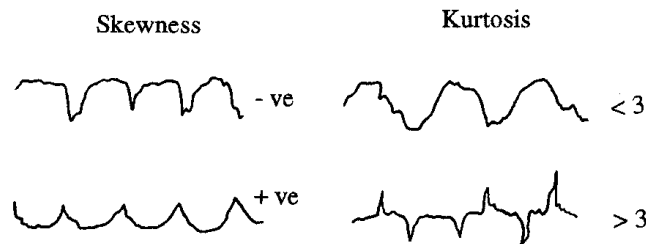
Σχήμα 3.2) α) Για μία τυχαία κατανομή $f(x)$, η κυβική και η τετραγωνική καμπύλη που σχετίζονται με την ολοκλήρωση για την εύρεση ασυμμετρίας και κύρτωσης αντίστοιχα β) Η ασυμμετρία και η κύρτωση επηρεάζονται κυρίως τις ουρές μιας κατανομής.

Για μία τυχαία κατανομή $f(x)$ ο υπολογισμός της 3ης και 4ης ροπής αναπαριστούνται σχηματικά όπως στο σχήμα 3.2. Η συνεισφορά στα ολοκληρώματα u_3 και u_4 γίνεται από τα άκρα κυρίως. Ενώ το κεντρικό τμήμα της παραπάνω κατανομής συμβάλλει 63% της συνολικής περιοχής, μόνο το 11% των συνδυασμένων περιοχών στο Σχήμα 3.1, και μόνο το 5% της περιοχής στο σχήμα, αντιστοιχούν στο κεντρικό τμήμα του μοντέλου πιθανότητας.

Από τη μελέτη των ροπών λοιπόν, μπορούν να χρησιμοποιηθούν κριτήρια χαρακτηρισμού επιφανειών. Στο κεφάλαιο 4 χρησιμοποιούνται σε τραχιές επιφάνειες που προσομοιώνονται με Gaussian και non-Gaussian κατανομές. Συγκεκριμένα, η Gaussian κατανομή (με μηδέν κυρτότητα και ασυμμετρία) θα έχει ίσο αριθμό τοπικών μεγίστων και ελαχίστων γύρω από μια μέση γραμμή αναφοράς. Μια επιφάνεια (Σχήμα 3.4) με μεγάλη αρνητική ασυμμετρία έχει σε μεγάλο βαθμό τοπικά μέγιστα σε σχέση με την Gaussian, ενώ για θετική ασυμμετρία ισχύει το αντίστροφο. Επίσης μια επιφάνεια με μεγάλη κύρτωση παρουσιάζει λεπτές κορυφές τοπικών μεγίστων και ελαχίστων ενώ όταν είναι μικρή, οι κορυφές γίνονται πιο πλατιές.

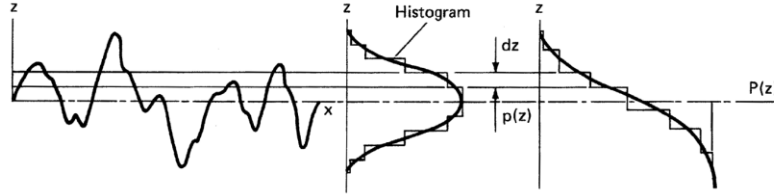


Σχήμα 3.3 α) Συναρτήσεις πυκνότητας πιθανότητας για τυχαίες κατανομές με διαφορετική ασυμμετρία, και για β) συμμετρικές κατανομές (μηδενική ασυμμετρία) με διαφορετική κύρτωση.



Σχήμα 3.4 Σχηματική απεικόνιση για τυχαίες επιφάνειες με διάφορες τιμές ασυμμετρίας και κύρτωσης.

Η στατιστική αναπαράσταση μιας επιφάνειας ως προς τη συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας περιγράφεται από το ιστόγραμμα ή τη συνάρτηση κατανομής των υψών. Για τη διακριτή περίπτωση των επιφανειών, το ιστόγραμμα μπορεί να προσεγγίσει τη μορφή που θα είχε το αντίστοιχο συνεχές, όπως φαίνεται και στο παρακάτω σχήμα.



Σχήμα 3.5) Ένα τυχαίο Γκαουσιανό προφίλ επιφάνειας και οι αντίστοιχες κατανομές και πυκνότητες πιθανότητας.

Για τον υπολογισμό των ροπών στη διακριτή περίπτωση, αν θεωρηθεί ότι δίνεται μια τραχιά επιφάνεια τριών διαστάσεων με κορυφές ακολουθίας $z(n,m)$. Η σχέση (3.1) για την ακολουθία $z(n,m)$ μετατρέπεται σε:

$$\mathbf{u}_v = \mathbf{E}((z - \bar{z})^v) = \frac{\sum_{k=0}^{m-1} \sum_{l=0}^{n-1} (z_{k,l} - \bar{z})^v}{mn} \quad (3.4)$$

Έτσι οι τέσσερις πρώτες ροπές μπορούν να γραφτούν ως εξής:

$$\mu = \frac{\sum_{k=0}^{m-1} \sum_{l=0}^{n-1} z_{k,l}}{mn} \quad (3.5)$$

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum_{k=0}^{m-1} \sum_{l=0}^{n-1} (z_{k,l} - \mu)^2}{mn}} \quad (3.6)$$

$$S_{kz} = \frac{\sum_{k=0}^{m-1} \sum_{l=0}^{n-1} (z_{k,l} - \mu)^3}{mn\sigma^3} \quad (3.7)$$

$$K_{uz} = \frac{\sum_{k=0}^{m-1} \sum_{l=0}^{n-1} (z_{k,l} - \mu)^4}{mn\sigma^4} \quad (3.8)$$

Όπου n και m αποτελούν τις συντεταγμένες διακριτών υψών z της τραχείας επιφάνειας. Η σ ερμηνεύεται και ως η ρίζα μέσου τετραγώνου (Root mean square ή Rms) μια πολύ σημαντική παράμετρο για το χαρακτηρισμό της τραχύτητας, όπου η εφαρμογή της περιγράφεται στη παρακάτω υποενότητα.

3.1.2 Παράμετροι τραχύτητας

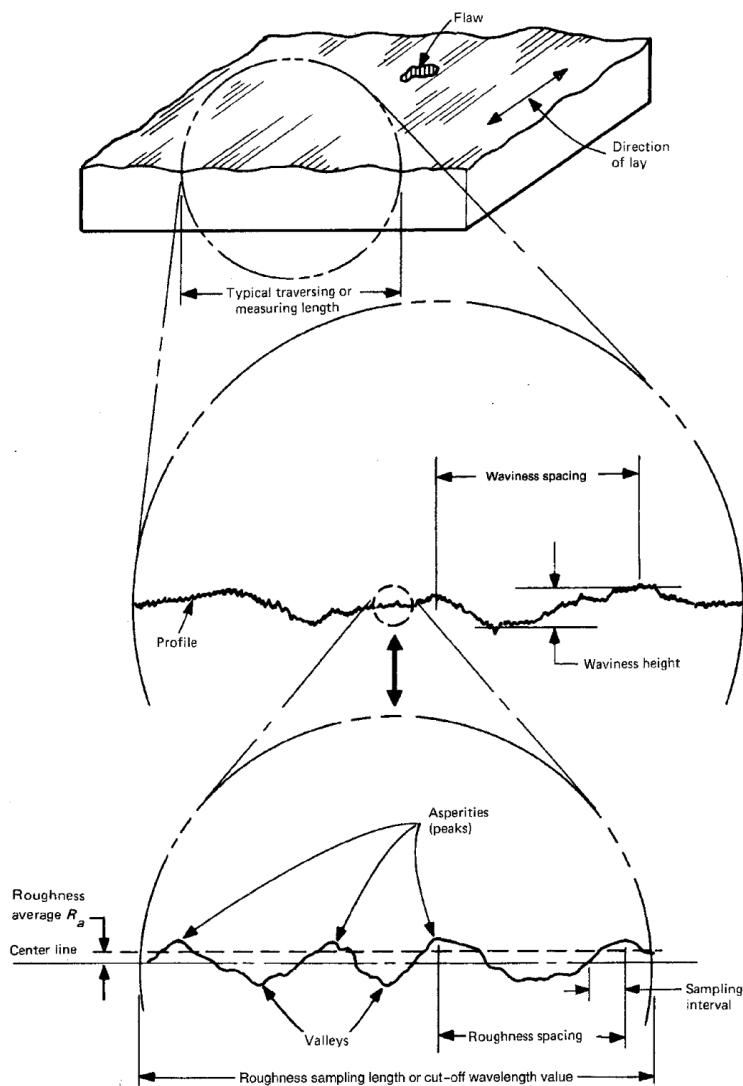
Όλες οι επιφάνειες ακόμα και φαινομενικά λείες στο ανθρώπινο μάτι, έχουν κάποια μορφολογία. Η οπτικοποίηση τους σε πιο μικρές κλίμακες θα εμφάνιζε περίπλοκες και πιθανά τυχαίες γεωμετρικές κατασκευές. Η μελέτη του τρόπου σχηματισμού αλλά και των ιδιοτήτων τους έχουν αποκτήσει μεγάλη σημασία για τις σημερινές τεχνολογίες.

Συγκεκριμένα, η ακριβής περιγραφή μιας επιφάνειας, ιδιαίτερα στις νανοδιαστάσεις αποτελεί σημαντικό παράγοντα για πολλούς τομείς όπως στη φαρμακευτική, τριβολογία, ηλεκτρολογία κλπ. Ένας από τους κύριους λόγους για το έντονο ενδιαφέρον είναι οι ισχυρές αλληλεπιδράσεις που παρουσιάζουν τα επιφανειακά άτομα λόγω της φυσικής και χημικής τους αστάθειας. Από φυσικής πλευράς οι ιδιότητες εξαρτώνται από την ατομική διάταξη και την επιφανειακή ενέργεια. Οι ασταθείς ατομικές δυνάμεις σε αυτές τις επιφάνειες αυξάνουν την ενέργεια των ατόμων αλληλοεπιδρώντας πιο έντονα με το περιβάλλον [54].

Ένα μέρος της νανομετρολογίας σήμερα ερευνά μεθόδους χαρακτηρισμού των παραπάνω. Από τις μεθόδους που χρησιμοποιεί η νανομετρολογία για τις επιφανειακές μετρήσεις, προέκυψε η ανάγκη για τη παραμετροποίηση και τη ποσοτικοποίηση τους. Ιδανική περίπτωση θα αποτελούσε η ακριβής περιγραφή μιας επιφάνειας με πεπερασμένες παραμέτρους. Ωστόσο καμία σχεδόν παράμετρος δε μπορεί να χαρακτηρίσει τραχιές επιφάνειες με ευστοχία λόγω της πολυπλοκότητας και της στοχαστικότητας τους. Επιπλέον, έχει υπάρξει πολλαπλασιασμός παραμέτρων και ορισμένες από αυτές εμφανίζονται να μην έχουν καμία χρησιμότητα [55]. Το αποτέλεσμα αυτού του εξανθήματος είναι η σύγχυση και η δαπάνη

Η μορφολογία της επιφάνειας επηρεάζει έντονα διάφορα φαινόμενα όπως για παράδειγμα, τριβή, πρόσφυση, γωνία επαφής, απορρόφηση φωτονίων και ανάκλαση φωτός. Επίσης υπάρχουν πολλές έρευνες όπου η τραχύτητα διαδραματίζει σημαντικό ρόλο, όπως η διασφάλιση της ποιότητας, επαφή υλικών, την τριβολογία (τριβή, λίπανση και φθορά), υδροδυναμική, ωκεανογραφία κ.α. Συνεπώς ένα σύνολο παραμέτρων που περιέχουν και στατιστικές μεταβλητές αποτελεί σημαντικό τρόπο χαρακτηρισμού της μορφολογίας μίας τραχείας επιφάνειας. Στη συνέχεια θα γίνει ανάλυση της τραχύτητας των επιφανειών με αναφορά στη κατηγοριοποίηση τους και τη παραμετροποίηση που έχει δοθεί σύμφωνα πρότυπα ISO [60].

Η επιφάνεια ανάλογα με τη κλίμακα της μπορεί να λάβει και διαφορετικά χαρακτηριστικά. Ο Bharat Bhushan στο βιβλίο του [56] δίνει τα παρακάτω χαρακτηριστικά-επίπεδα για τη μορφολογία της επιφάνειας (Σχήμα 2.6): (1) Τραχύτητα (σε νανο ή μικρο κλίμακα) (2) κυματικότητα (waviness σαν μακρο-κλίμακα και μακρο-τραχύτητα) (3) κατεύθυνση επιφάνειας (4) ατέλειες.



Σχήμα 3.6) Διαφορετικά επίπεδα μορφολογίας επιφάνειας [56]

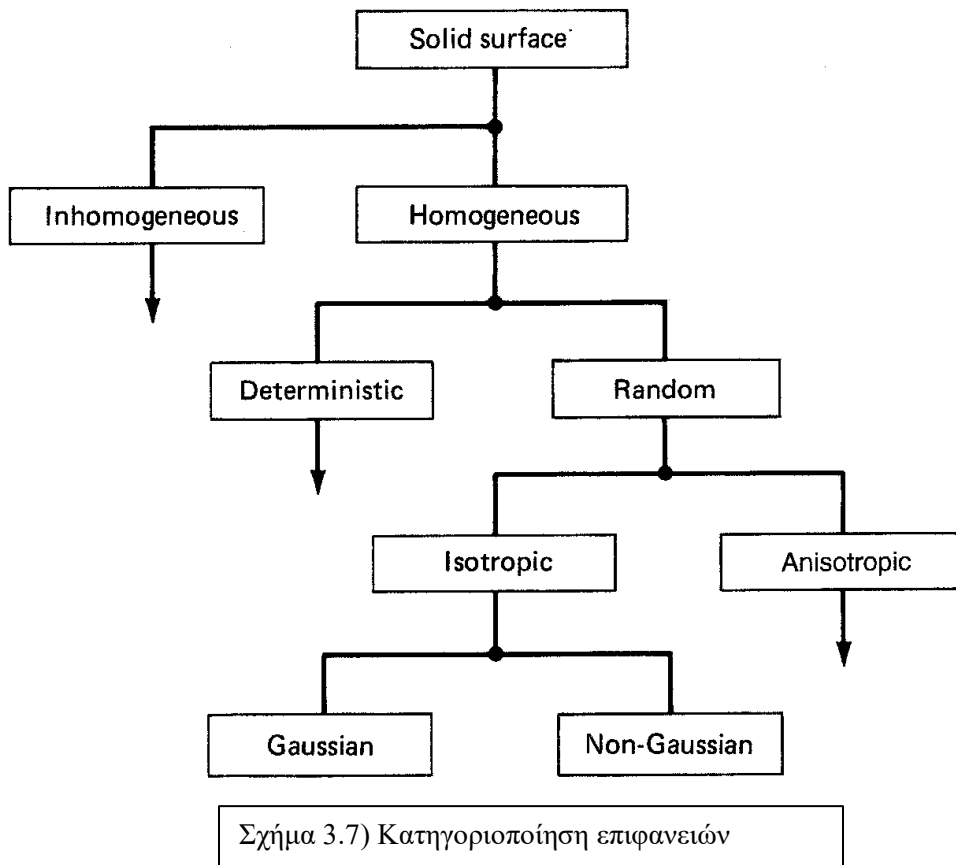
Σε νανο και μικρο κλίμακα η τραχύτητα (1) σχηματίζεται από διακυμάνσεις στην επιφάνεια με μικρά μήκη κύματος με κορυφές (τοπικά μέγιστα) και κοιλάδες (τοπικά ελάχιστα) σε διάφορα

μεγέθη και αποστάσεις μεταξύ τους. Οι διακυμάνσεις αυτές σχετίζονται με διαστάσεις ατομικών και μοριακών διαστάσεων και αποτελούν εγγενή χαρακτηριστικά που προέρχονται από το είδος του υλικού.

Η κυματικότητα (2) μπορεί να προέρχεται από παράγοντες όπως μηχανική επεξεργασία, δόνηση, θερμική επεξεργασία ή παραμορφώσεις. Δηλαδή, οι παράγοντες σχετίζονται κυρίως από τις μεθόδους επεξεργασίας. Οι αποστάσεις των κορυφών σε αυτή τη κλίμακα είναι μεγαλύτερες από τη τραχύτητα και λιγότερο τυχαίες.

Η κατεύθυνση (3) επιφάνειας της μορφολογίας, συνήθως επηρεάζεται με τη μέθοδο παραγωγής. Τέλος, οι ατέλειες (4) είναι απροσδόκητα και ανεπιθύμητα χαρακτηριστικά.

Ένα ερώτημα που απασχολεί την επιστημονική και μη κοινότητα είναι αν μπορεί να γίνει κατηγοριοποίηση των χαρακτηριστικών αυτών ανάλογα με το τρόπο επεξεργασίας και στη συνέχεια παραμετροποίηση τους. Ως ένα σημείο αυτό μπορεί να γίνει, καθώς όμως μικραίνει η κλίμακα παραμετροποιήσεις όπως της τραχύτητας είναι δύσκολη και αμφιλεγόμενη λόγω της στοχαστικότητας που παρουσιάζει. Μια πολύ γενική κατηγοριοποίηση παρουσιάζεται στο Σχήμα 3.7. Οι επιφάνειες που η μορφολογία τους είναι ντετερμινιστική περιγράφονται με πεπερασμένες παραμέτρους και να μελετηθούν με σχετικά απλές αναλυτικές μεθόδους. Φυσικά αν είναι πραγματικές αυτές οι επιφάνειες, η ντετερμινιστική υπόθεση τους γίνεται για λόγους απλότητας. Παρόλα αυτά οι περισσότερες επιφάνειες είναι τυχαίες, ιστροπικές ή μη-ιστροπικές και Γκαουσιανές ή μη-Γκαουσιανές. Η παρουσία αυτών των χαρακτηριστικών στις επιφάνειες εξαρτάται από φυσικά και χημικά χαρακτηριστικά καθώς και η μέθοδος διεργασίας τους [9]. Επιφάνειες που παράγονται με cumulative διαδικασίες στις οποίες το τελικό σχήμα κάθε περιοχής είναι συνολικό αποτέλεσμα ενός μεγάλου αριθμού διαφορετικών τυχαίων τοπικών συμβάντων και ανεξάρτητα από τη κατανομή που διέπει κάθε ξεχωριστό συμβάν, θα έχει μορφή Gaussian. Αυτό αποτελεί άμεση συνέπεια του κεντρικού οριακού θεωρήματος της στατιστικής (central statistical limit theorem). Από την άλλη, Single point και extreme-value επεξεργασίες γενικά καταλήγουν σε ανιστροπικές και non-Gaussian επιφάνειες.



Στη συνέχεια θα γίνει μια συνοπτική παρουσίαση σημαντικότερων παραμέτρων που χαρακτηρίζουν την τραχύτητα σε δύο και τρεις διαστάσεις καθώς και τη μέθοδο υπολογισμού τους.

3.1.2.1 Παράμετροι πλάτους

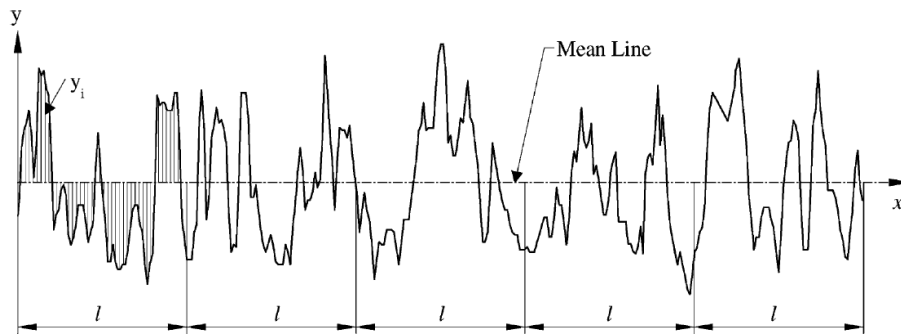
Οι παράμετροι πλάτους αποτελούν τις πιο σημαντικές παραμέτρους που χρησιμοποιούνται για τον χαρακτηρισμό της τοπογραφίας μιας επιφάνειας. Συγκεκριμένα δίνουν πληροφορία για τις κάθετες μεταβολές των υψών της επιφάνειας σε σχέση με ένα επίπεδο αναφοράς και η μέτρηση τους γίνεται σε ένα προφίλ μιας ή δύο διαστάσεων. Η κατηγοριοποίηση γίνεται με βάση προτύπων ISO [60] με σκοπό της χρήση κοινής “διαλέκτου” παραμέτρων από την επιστημονική κοινότητα καθώς λόγω στοχαστικού χαρακτήρα η περιγραφή της τραχύτητας είναι δύσκολη.

Δύο από τις πιο διαδεδομένες και χρήσιμες ποσότητες που περιγράφουν το πλάτος είναι οι: (1) R_a , CLA(κεντρικό άξονας διαμέσου) ή AA(αριθμητικός μέσος) (2) η τυπική απόκλιση ή

διασπορά (σ), R_q ή RMS. Η R_a χρησιμοποιείται παγκοσμίως για γενικό έλεγχο ποιότητας επιφανειών. Ορίζεται ως η μέση απόκλιση κατά απόλυτη τιμή των μεταβολών των υψών σε σχέση με ένα ύψος αναφοράς. Η μαθηματική σχέση που περιγράφει τα παραπάνω σε ένα συνεχές και διακριτό προφίλ επιφάνειας είναι:

$$R_a = \frac{1}{l} \int_0^l |y(x)| dx \quad (3.9)$$

$$R_a = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i| \quad (3.10)$$



Σχήμα 3.8) Σχηματική ανά παράσταση κεντρικού άξονα διαμέσου R_a σε ένα τυχαίο προφίλ επιφάνειας

Η αναπαράσταση της δίνεται από το Σχήμα 3.8 . Γενικά η R_a είναι εύκολη στη μέτρηση της και θεωρείται ότι δίνει μια πολύ καλή γενική εικόνα των μορφολογιών [57].

Η παράμετρος R_q γνωστή και ως RMS αναπαριστά τη τυπική απόκλιση της κατανομής των υψών. Η παράμετρος αυτή είναι πολύ σημαντική καθώς είναι η δεύτερη στατιστική ροπή και γενικά χρησιμοποιείται συνεχώς σε στατιστικές αναλύσεις. Σχετικά με το αριθμητικό μέσο (R_a) η R_q είναι μια πιο ευαίσθητη παράμετρος σε μεγάλες μεταβολές υψών γύρο από τη γραμμική αναφοράς. Η μαθηματική της σχέση σε ένα συνεχές και διακριτό προφίλ επιφάνειας είναι:

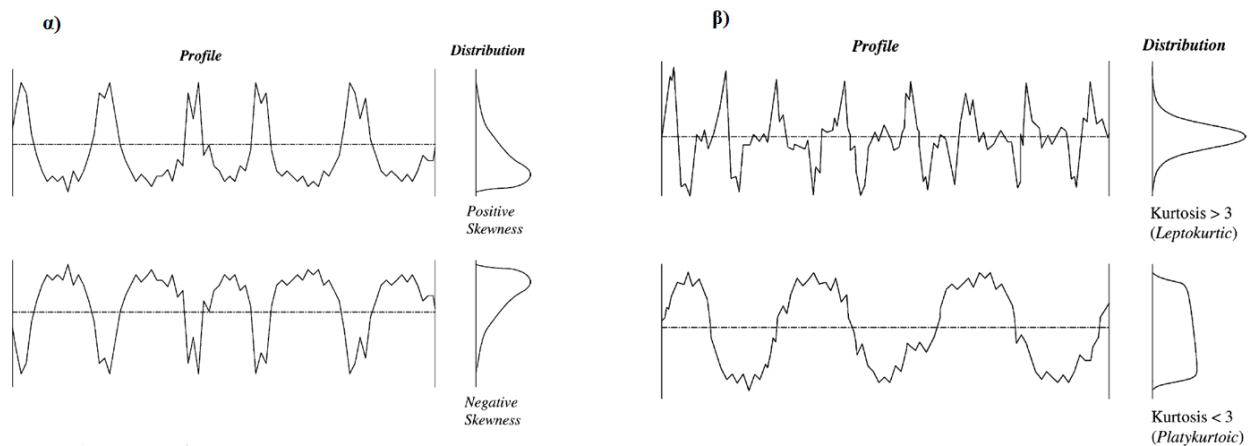
$$R_q = \sqrt{\frac{1}{l} \int_0^l y^2(x) dx} \quad (3.11)$$

$$R_q = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i^2} \quad (3.12)$$

Η ασυμμετρία Sk και κύρτωση Ku αποτελούν τις επόμενες δύο κατά σειρά στατιστικές ροπές και παράλληλα σημαντικές παράμετροι πλάτους.

$$R_{sk} = \frac{1}{R_q^3} \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} y^3(x) dx} \quad (3.13) \quad R_{ku} = \frac{1}{R_q^4} \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} y^4(x) dx} \quad (3.15)$$

$$R_{sk} = \frac{1}{nR_q^3} \sum_{i=1}^n y_i^3 \quad (3.14) \quad R_{ku} = \frac{1}{nR_q^4} \sum_{i=1}^n y_i^4 \quad (3.16)$$



Σχήμα 3.9) Σχηματική αναπαράσταση α) Θετικής και αρνητικής ασυμμετρίας β) Κύρτωσης για διαφορετικά τυχαία προφίλ επιφανειών

Η σημαντικότητα τους μπορεί να παρατηρηθεί από τη διαφορά που έχουν τραχιά προφίλ με το ίδιο R_a . Συγκεκριμένα στο Σχήμα 3.9 τα δύο ζευγάρια προφίλ έχουν μεγάλες διαφορές στη μορφολογία έχοντας όμως το ίδιο αριθμητικό μέσο. Από αυτό το παράδειγμα μπορεί να γίνει κατανοητή η ανάγκη της χρήσης πολλών παραμέτρων για τη περιγραφή τραχειών μορφολογιών.

Πέντε παράμετροι ακραίων τιμών των υψών ορίζονται από τις: R_t που είναι η απόσταση μεταξύ της μέγιστης κορυφής και ελάχιστης κοιλάδας. Η R_p που ορίζεται ως η απόσταση μεταξύ της μέγιστης κορυφής και γραμμής του αριθμητικού μέσου. Αντίστοιχα, η R_v είναι η απόσταση της ελάχιστης κοιλάδας και της γραμμής του αριθμητικού μέσου. Η R_z ορίζεται ως η μέση απόσταση των πέντε μέγιστων κορυφών και της γραμμής του αριθμητικού μέσου και τέλος, αντίστοιχα η R_{pm} η μέση απόσταση των πέντε ελάχιστων κοιλάδων με τη γραμμή του αριθμητικού μέσου. Ο λόγος που λαμβάνεται ο μέσος όρος των υψών οι κοιλάδων είναι για να μειωθεί η συνεισφορά με επιθυμητών κορυφών και κοιλάδων που σε πραγματικές επιφάνειες εμφανίζονται συχνά που άλλες παράμετροι επηρεάζονται έντονα. Οι R_z και R_{pm} είναι αρκετά συχνές εμφανιζόμενες παράμετροι

και χρησιμοποιούνται κυρίως από τρυβλόλογους στηριγμένοι στο πρότυπο ISO.

Οι παράμετροι που αναφέρθηκαν ασχολούνται πρωτίστως με τις κάθετες αποκλίσεις των προφίλ και δεν παρέχουν καμία πληροφορία σχετικά με τη συχνότητα ή ασυνέχεια ή γενικότερα τις οριζόντιες μεταβολές. Οι παραπάνω μεμονωμένοι αριθμητικοί παράμετροι είναι χρήσιμοι για την ταξινόμηση επιφανειών του ίδιου τύπου που παράγονται με την ίδια μέθοδο. Πολλές επιφάνειες με ίδιο R_a ή R_q να έχουν πολύ διαφορετική μορφολογία όπως έγινε αναφορά κατά τη περιγραφή της ασυμμετρίας και κύρτωσης. Συνεπώς για την οριζόντια περιγραφή της μορφολογίας θα γίνει αναφορά σε χωρικά χαρακτηριστικά.

3.1.2.2 Χωρικοί παράμετροι

Όπως οι παράμετροι πλάτους έτσι και οι χωρικές είναι μεγάλες στο πλήθος. Οι στατιστικές παράμετροι των χωρικών χαρακτηριστικών καθορίζονται κυρίως από την ACF ή PSD [58]. Η PSD που έγινε συζήτηση στην αρχή της ενότητας, μπορεί να ληφθεί από τη συνάρτηση ACF μέσω Fast Fourier transformation (FFT). Για μια συνεχή κανονικοποιημένη συνάρτηση ύψους $y(x)$, η ACF μπορεί να περιγράψει ως εξής:

$$ACF(r_x) = \frac{1}{R_q^2(l-r_x)} \int_0^{l-r_x} y(x)y(x+r_x)dx \quad (3.17)$$

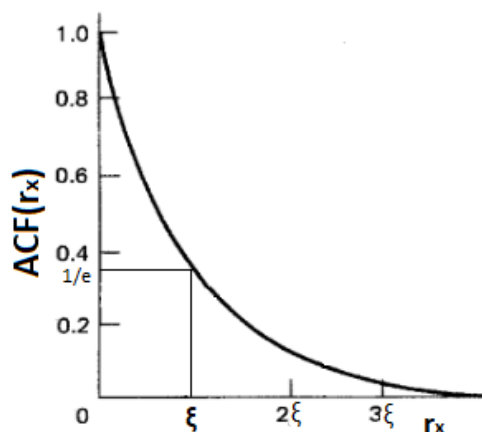
Όπου l η το μήκος του προφίλ στη κατεύθυνση κατά το x -άξονα, η r_x είναι η απόσταση μεταξύ δύο σημείων του προφίλ που γίνεται ο υπολογισμός. Στη διακριτή περίπτωση:

$$ACF(r_x) = \frac{1}{R_q^2(l-r_x)} \sum_1^{l-r_x} (y(x) - \langle y \rangle)(y(x+r_x) - \langle y \rangle) \quad (3.18)$$

Πολλές επιφάνειες ή προφίλ για μικρά r_x μπορούν να αναπαραστήσουν την ACF και απο μια εκθετική μορφή:

$$ACF(r_x) = \exp(-r_x/\beta) \quad (3.19)$$

Το μέτρο για το πόσο γρήγορα το τυχαίο γεγονός μειώνεται ονομάζεται μήκος συσχέτισης. Το μήκος συσχέτισης για μια επιφάνεια η προφίλ, είναι το μήκος που η συνάρτηση αυτοσυσχέτισης μειώνεται σε ένα συγκεκριμένο ποσοστό, συνήθως κοντά στο 10% της αρχικής τιμής. Τότε η εκθετική μορφή θα έχει μήκος συσχέτισης $ACF=0.1$ άρα $\beta^*=2.3\beta$. Άλλες φορές μπορεί να είναι μεγαλύτερο το ποσοστό, για παράδειγμα 37% όπου τότε $ACF=1/e$.

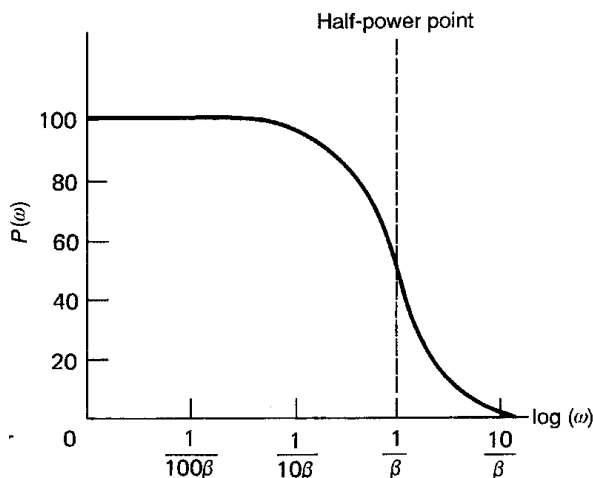


Σχήμα 3.10) Εκθετική συνάρτηση αυτοσυσχέτισης (ACF) (για μικρά r_x)

Μια ακόμα μια σημαντική συνάρτηση που τα τελευταία χρόνια χρησιμοποιείται για το χωρικό χαρακτηρισμό συχνοτήτων τραχιών επιφανειών αποτελεί το PSD. Το εύρος συχνοτήτων που περιέχει είναι από το μηδέν (απόλυτα επίπεδη επιφάνεια) μέχρι το άπειρο (άπειρες συνεχόμενες κορυφές και κοιλάδες). Η PSD μπορεί να παραχθεί λαμβάνοντας την FFT πάνω στην ACF. Στη διακριτή περίπτωση:

$$PSD(f_r) = \left| \sum_{k=0}^{m-1} ACF(k) \exp[-2\pi i kr/m] \right| \quad (3.20)$$

όπου $r=0,1,\dots,m-1$ και f_x είναι η συχνότητα κατά το x άξονα με $f_x=r/(m\Delta x)$. Το σημείο όπου $f_r=1/\beta$, ονομάζεται Half-power point και από αυτό μπορεί να βρεθεί το μήκος αυτοσυσχέτισης.



Σχήμα 3.11) Αντίστοιχη PSD της συνάρτησης αυτοσυσχέτισης (ACF) σχήματος 3.10 .

Το παραπάνω σχήμα 3.11 παρουσιάζει την PSD συνάρτηση της εκθετικής μορφής ACF σχέσης (3.19). Η PSD για μικρές συχνότητες έχει την μορφή του λευκού θορύβου και καθώς αυξάνονται

υπάρχει η σχετική μείωση κοντά στο half-power point.

Τέλος έχει παρατηρηθεί [55] πως ένα τυχαίο προφίλ Γκαουσιανής μορφής και η εκθετική του συνάρτηση αλληλοσυσχέτισης μπορούν να αναπαρασταθούν με τη χρήση μόνο δύο παραμέτρων: το RMS, και την απόσταση αλληλοσυσχέτισης (αν έχω επιφάνεια θα έχω και δύο μήκη αλληλοσυσχέτισης στους δύο άξονες επιπέδου). Συνεπώς είναι χρήσιμο για λόγους απλότητας πολλές φορές να προσεγγίζεται ή να αναπαρίσταται μια πραγματική επιφάνεια σε Γκαουσιανή μορφή για να αποφεύγονται περίπλοκες περιγραφές από πολλές παραμέτρους όταν είναι φυσικά δυνατόν.

3.1.2.3 Υβριδικές παράμετροι

Η υβριδικές ιδιότητες είναι οι συνδυασμοί παραμέτρων πλάτους και χωρικότητας. Συνεπώς κάθε αλλαγή που γίνεται από αυτές τις παραμέτρους έχουν κάποια επιρροή στις υβριδικές ιδιότητες. Η συνολική κλίση της επιφάνειας, η καμπυλότητα και η ενεργός επιφάνεια αποτελούν σημαντικές υβριδικές παράμετροι σε επιστήμες όπως στη τριβολογία όπου καθορίζουν και άμεσα τις τελικές ιδιότητες των επιφανειών [57].

3.2 Προσομοίωση επιφανειών με νανοτραχύτητα

3.2.1 Εισαγωγή

Σε αυτό το κεφάλαιο θα γίνει αναφορά στη διαδικασία παραγωγής προσομοιωμένων επιφανειών με νανοτραχύτητα με σκοπό τη δημιουργία μιας βάσης δεδομένων από επιφάνειες. Αρχικά, γίνεται αναφορά στη παραγωγή συσχετισμένων Γκαουσιανών επιφανειών καθώς και σε περιορισμούς που ανακύπτουν από μια τέτοια υπολογιστική προσομοίωση. Στη συνέχεια, παρουσιάζεται η μεθοδολογία παραγωγής μη- Γκαουσιανών επιφανειών και της διαδικασίας μέτρησης της ενεργούς επιφάνειάς τους.

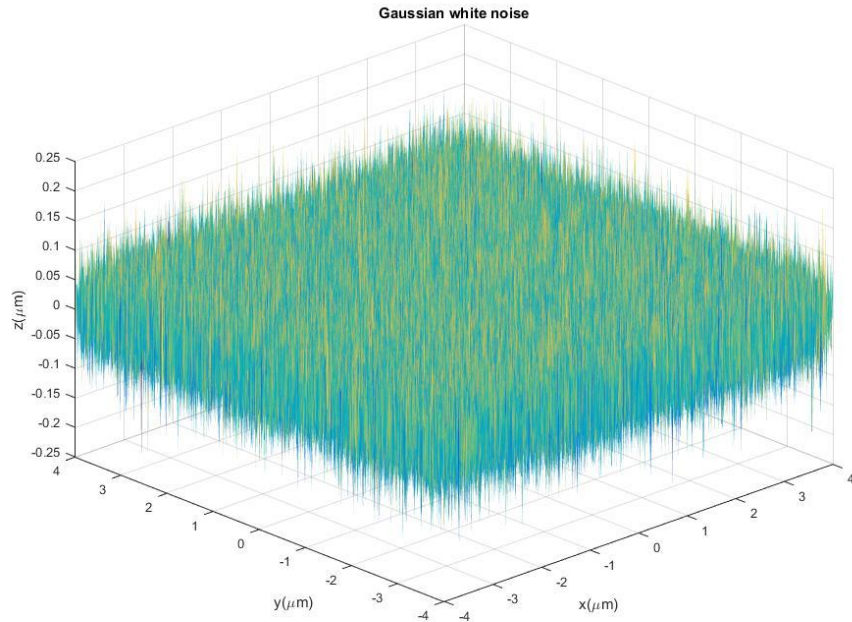
3.2.2 Παραγωγή Γκαουσιανών συσχετισμένων νάνο-επιφανειών

Λόγω του κεντρικού στατιστικού θεωρήματος πολλές από τις επιφάνειες με τραχύτητα που παράγονται θα μπορούσαν να περιγραφούν στατιστικά γκαουσιανές κατανομές[62]. Συνεπώς η αναπαραγωγή τέτοιων επιφανειών σε υπολογιστικό επίπεδο αποτελεί σημαντικό βήμα για την περιγραφή τους. Στο σχήμα 3.12 παρουσιάζονται τα βήματα που ακολουθούνται για τη παραγωγή Γκαουσιανών τριών διαστάσεων (3D) τετραγωνικών επιφανειών με καθορισμένα τα R_{ms} και τα μήκη συσχέτισης κατά τον x και y άξονα (ξ_x και ξ_y). Για την επιτυχή προσομοίωση της τραχύτητας με τα επιθυμητά R_{ms} , ξ_x , ξ_y απαιτείται επίσης ο καθορισμός διαστατικών παραμέτρων, όπως του μήκους rL των επιφανειών, καθώς και ο αριθμός των σημείων αναπαράστασης N κατά μήκος του rL . Τα βήματα της προσομοίωσης είναι τα ακόλουθα βασισμένα στην δουλειά του Garcia et.al. [63]:

- 1) Παραγωγή λευκού θορύβου $Z(x,y)$ (μέσω εντολής Matlab $R_{ms}*\text{randn}(N_x,N_y)$) με N διακριτά σημεία σε τετραγωνικό πλέγμα μήκους rL . Η κατανομή υψών του λευκού θορύβου ορίζεται ώστε να έχει μέση τιμή μηδέν και διασπορά όσο το R_{ms} που επιλέγεται. Αυτή θα αποτελεί την πρώτη μη συσχετισμένη μορφή της επιφάνειας (Σχήμα 4.1).
- 2) Δημιουργία Γκαουσιανού φίλτρου:

$$F_{iso}(x, y) = \exp\left(-\left(\frac{2x^2+2y^2}{\xi_x^2}\right)\right) \quad (\text{για ισοτροπική επιφάνεια}) \quad (3.21)$$

$$F_{aniso}(x, y) = \exp\left(-\left(\frac{2x^2}{\xi_x^2} + \frac{2y^2}{\xi_y^2}\right)\right) \quad (\text{για μη ισοτροπική επιφάνεια}) \quad (3.22)$$



Σχήμα 3.12) Γκαουσιανός λευκός θόρυβος. Δηλαδή η μη συσχετισμένη επιφάνεια, όπως παράγεται από το βήμα (1) (N=600, rL=8 μm, Rms=10 nm)

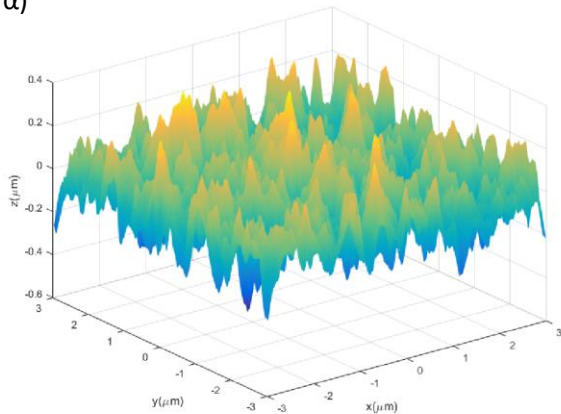
- 3) Στη συνέχεια, η επιφάνεια γίνεται συσχετισμένη υπολογίζοντας τα Z_{iso} ή Z_{aniso} (εάν επιλέγεται η επιφάνεια να είναι ισοτροπική ή ανισοτροπική) με μήκη συσχέτισης ξ_x και ξ_y για τις x και y κατευθύνσεις. Ο υπολογισμός απαιτεί τη χρήση Fast Fourier transformation του Γκαουσιανού στο λευκό θορύβου (βήμα 1) και στο φίλτρο (βήμα 2), όπου στη συνέχεια στο γινόμενο τους λαμβάνεται το Inverse Fast Fourier Transformation. Το αποτέλεσμα πολλαπλασιάζεται με παράγοντες κανονικοποίησης.

$$Z_{iso} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{rL}{N\sqrt{\xi_x}} \cdot IFFT(FFT(Z) \cdot FFT(F_{iso})) \quad (\text{ισοτροπική επιφάνεια}) \quad (3.24)$$

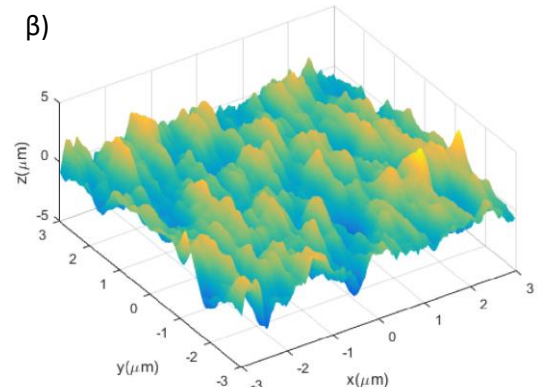
$$Z_{aniso} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{rL}{N \sqrt{\xi_x \xi_y}} \cdot IFFT(FFT(Z_{WG}) \cdot FFT(F_{aniso})) \text{ (ανισοτροπική επιφάνεια) (3.25)}$$

Παραδείγματα Γκαουσιανών συσχετισμένων ισοτροπικών και μη ισοτροπικών επιφανείων, όπως παράγονται από τα βήματα αυτά, δίνονται στο Σχήμα 4.2.

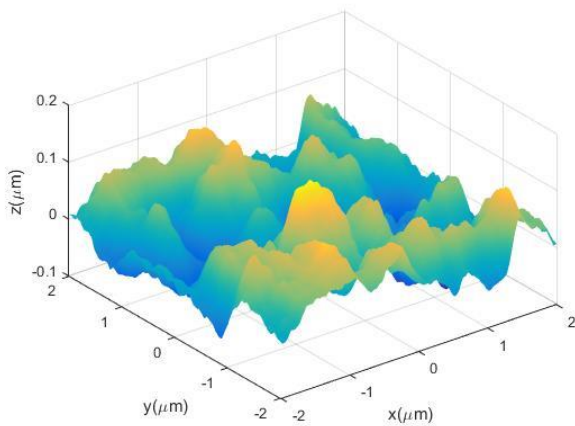
α)



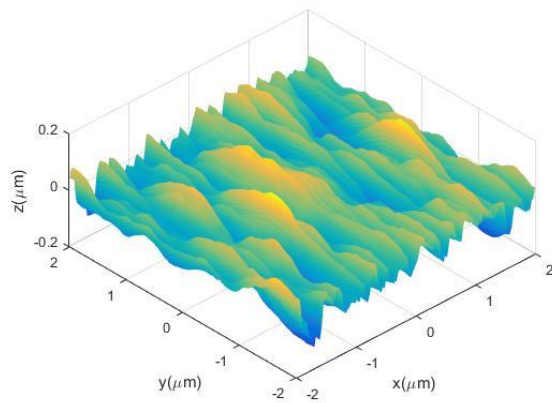
β)



γ)



δ)



Σχήμα 3.13) Συσχετισμένες Γκαουσιανές νανο-επιφάνειες.

α) Ισοτροπική Γκαουσιανή επιφάνεια N=600 σημεία, L=6 μm, $\xi_x=\xi_y=0.2$ μm, Rms=0.1 μm

β) Ανισοτροπική Γκαουσιανή επιφάνεια N= 600 σημεία, L=6 μm, $\xi_x=0.2$, $\xi_y=0.6$ μm, Rms=0.1 μm

γ) Ισοτροπική Γκαουσιανή επιφάνεια N= 600 σημεία, L=4 μm, $\xi_x=0.5$, $\xi_y=0.5$ μm, Rms=0.1 μm

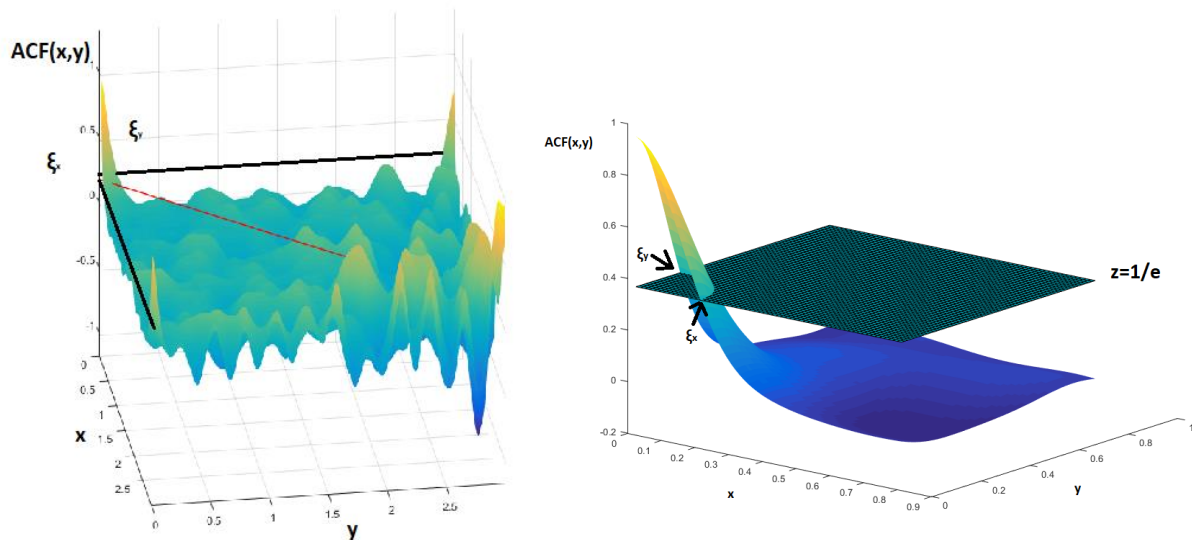
δ) Ανισοτροπική Γκαουσιανή επιφάνεια N= 600 σημεία, L=6 μm, $\xi_x=0.1$, $\xi_y=0.9$ μm, Rms=0.1 μm

- 4) Στο τελευταίο βήμα υπολογίζονται οι παράμετροι τραχύτητας που εισήγαγε ο χρήστης στην αρχή, όπως το Rms και τα μήκη συσχέτισης ξ_x , ξ_y της παραγόμενης πια επιφάνειας. Επίσης ελέγχεται κατά πόσο αποκλίνει από την εισαγόμενη τιμή τους. Εάν το σφάλμα απόκλισης είναι υψηλό, η παραγωγή της επιφάνειας επαναλαμβάνεται. Στο Σχήμα 3.15 παρουσιάζεται το διάγραμμα ροής για την παραγωγή Γκαουσιανών συσχετισμένων επιφανειών.

Το Rms υπολογίζεται χρησιμοποιώντας τη σχέση (3.6) πάνω στην ακολουθία Z_{iso} ή Z_{aniso} , ενώ η μέτρηση των μηκών συσχέτισης ξ_x , ξ_y απαιτεί τον υπολογισμό αρχικά της συνάρτησης αυτοσυσχέτισης ACF (διακριτή περίπτωση σχέση (3.18)). Μέσω αυτής της συνάρτησης και συγκεκριμένα ακολουθίας δύο διαστάσεων που παράγεται από την ACF, λαμβάνονται τα σημεία: $ACF(x, y = 0) = \frac{1}{e}$ και $ACF(x = 0, y) = \frac{1}{e}$. Για τόσο μικρές τιμές θεωρείται ότι η ACF ακολουθεί την εκθετική μορφή.

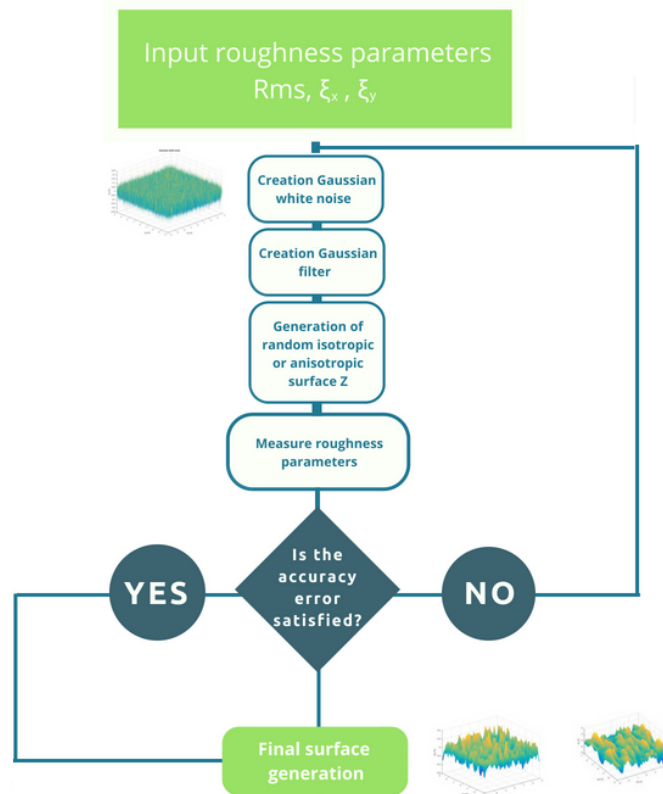
Συνεπώς,

$$ACF(x, y = 0) = \frac{1}{e} \Leftrightarrow x = \xi_x \text{ και } ACF(x = 0, y) = \frac{1}{e} \Leftrightarrow y = \xi_y$$



Σχήμα 3.14 α) Ένα παράδειγμα ACF β) Η ACF του α) αλλά σε μεγένθυση κοντά στην αρχή των αξόνων. Για μικρά x, y η ACF συμπεριφέρεται ως εκθετική συνάρτηση. Στο σχήμα β) επίσης έχει προστεθεί το επίπεδο $z=1/e$ για τον εντοπισμό των μηκών συσχέτισης ξ_x , ξ_y

Gaussian surface generator flow chart



Σχήμα 3.15) Διαγραμμα ροής παραγωγής Γκαουσιανών επιφανειών

3.2.3 Περιορισμοί διακριτής και πεπερασμένης επιφάνειας

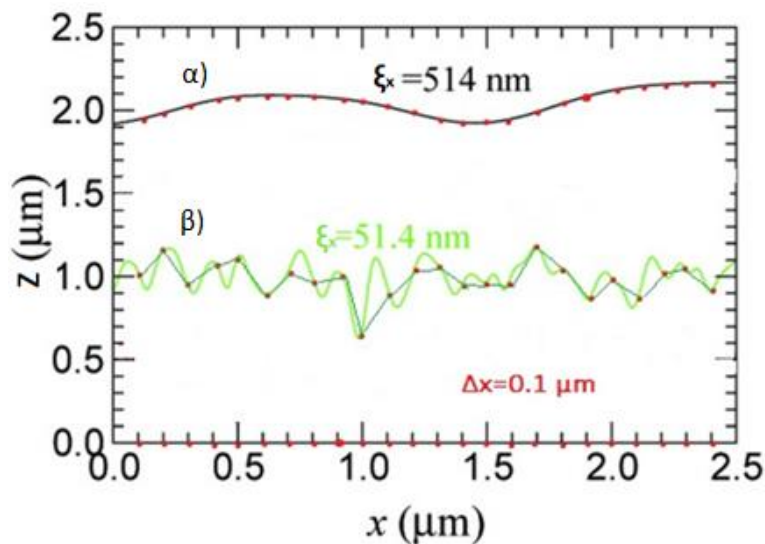
Στη τρέχουσα διπλωματική εργασία οι επιφάνειες σχεδιάζονται υπολογιστικά προσπαθώντας να προσομοιάσουν τη μορφή μιας πραγματικά τραχιάς επιφάνειας. Οι παράμετροι τραχύτητας που εισάγονται για τη δημιουργία τους έχουν ως στόχο την προσομοίωση σε μεγάλα εύρη τραχιών μορφολογιών. Όμως, η υπολογιστική προσομοίωση καθαυτή, προσδίδει στη μελέτη δύο βασικούς περιορισμούς: τη **Διακριτότητα** και το **Πεπερασμένο μήκος επιφάνειας**.

Με απλά λόγια, η επιφάνεια αναπαράγεται από διακριτά σημεία και με πεπερασμένο μήκος.

Διακριτότητα

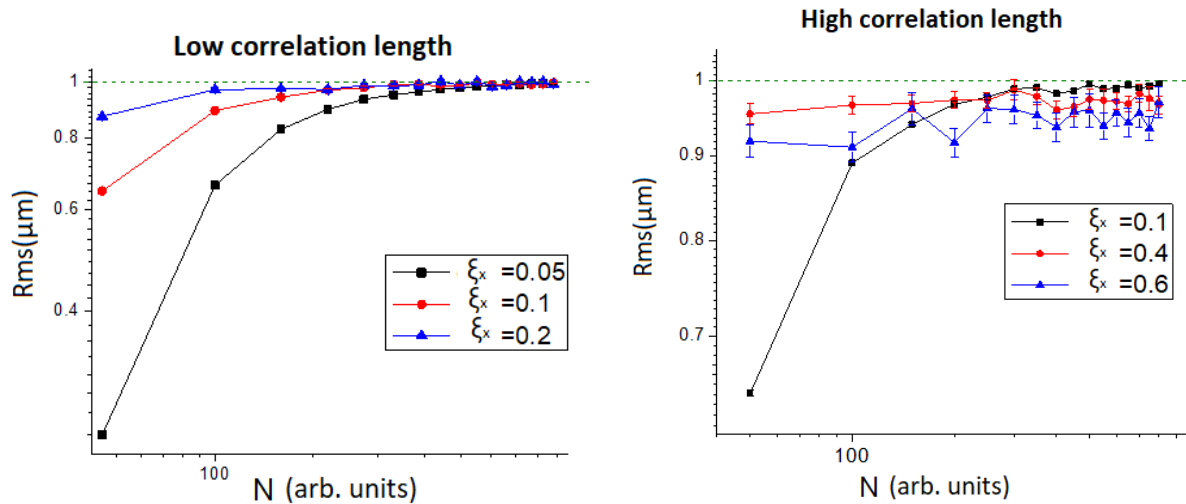
Προφανώς μια πραγματική επιφάνεια θεωρείται συνεχής, ενώ μια προσομοιωμένη θα έπρεπε να περιέχει άπειρα σημεία για να μπορεί να προσεγγίσει την πραγματική. Αυτό όμως είναι αδύνατο να συμβεί κυρίως λόγω κόστους μνήμης και υπολογιστικής δύναμης. Συνεπώς, θα πρέπει να βρεθεί κατά πόσο η διακριτότητα αλλοιώνει τις παραμέτρους που εισάγονται στην επιφάνεια και να καθοριστεί ο βέλτιστος αριθμός σημείων που θα αναπαριστούν μια επιφάνεια χωρίς παράλληλα να επιβαρύνουν χρονικά την υπολογιστική προσομοίωση τους.

Στο Σχήμα 3.16 παρουσιάζονται δύο προφίλ 2 διαστάσεων. Στο πάνω προφίλ α) έχει δοθεί η τιμή $\xi_x=514$ nm ενώ στο β) μια τάξη μικρότερη από ξ_x . Για το ίδιο μήκος προφίλ και αριθμό σημείων N φαίνεται ότι το α) μπορεί να αναπαρασταθεί επιτυχώς από τα κόκκινα σημεία, ακολουθώντας δηλαδή τη μορφολογία. Αντίθετα το β) προφίλ λόγω μικρού μήκους συσχέτισης έχει μια πιο περίπλοκη μορφολογία και ο αριθμός σημείων αναπαράστασης N δεν μπορεί να την ακολουθήσει. Συνεπώς στη περίπτωση β) η προσομοιωμένη επιφάνεια αλλοιώνεται και οι παράμετροι τραχύτητας θα αποκλίνουν από αυτή που καθορίστηκε αρχικά. Η λύση σε αυτό το πρόβλημα θα ήταν να αυξηθούν τα σημεία N βρίσκοντας το βέλτιστο αριθμό.



Σχήμα 3.16) Παράδειγμα περιορισμού προσομοίωσης λόγω διακριτότητας.

Συγκεκριμένα στις επιφάνειες που παράγονται από τη τρέχουσα διπλωματική εργασία έγινε καταγραφή αυτού του περιορισμού αναζητώντας σε κάθε περίπτωση το βέλτιστο αριθμό σημείων N αναπαράστασης. Στο Σχήμα 3.17 παρουσιάζεται πώς η διακριτότητα αλλοιώνει την τιμή $Rms = 1 \mu m$ που εισάγεται για σταθερό μήκος $L=6 \mu m$ τεταγωνικού προφίλ.

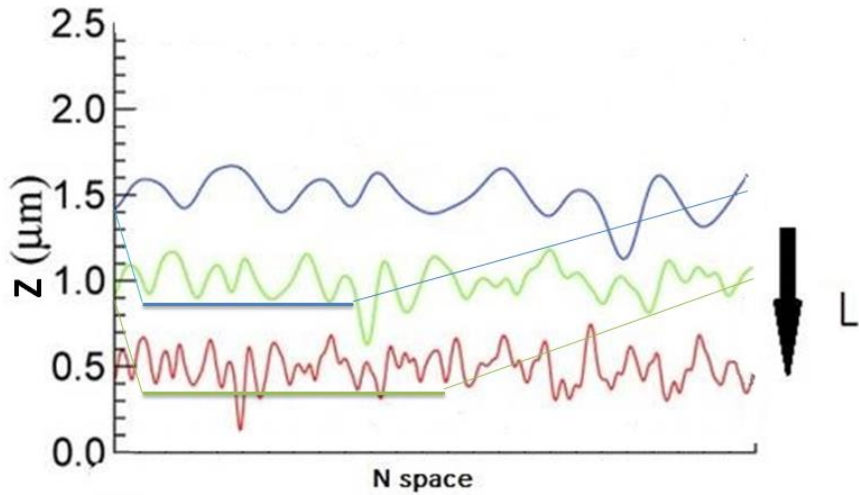


Σχήμα 3.17) Συνέπειες διακριτότητας μέσα από διαγράμματα Rms vs N (αριθμού σημείων κατά μήκος L τετραγωνικής επιφάνειας τριών διαστάσεων) για μεγάλα και μικρά μήκη συσχέτισης. Ως τιμή εισαγωγής στις επιφάνειας δόθηκε Rms=1 μm και L=6 μm

Όπως φαίνεται από το Σχήμα 3.17 στα διαγράμματα για μικρές τιμές αριθμού σημείων N το Rms υποεκτιμάται από αυτό που δόθηκε αρχικά. Μάλιστα, όσο μικρότερο είναι το μήκος συσχέτισης τόσο μεγαλύτερη απόκλιση υπάρχει. Φυσικά όπως φάνηκε και από το Σχήμα 3.16 αυτό έχει μεγαλύτερη επίπτωση για μικρά μήκη συσχέτισης, καθώς τα σημεία αναπαράστασης δεν μπορούν να ακολουθήσουν τις απότομες αλλαγές της μορφολογίας. Επομένως, όσο αυξάνεται το N, τόσο προσεγγίζεται με μεγάλη ακρίβεια το Rms.

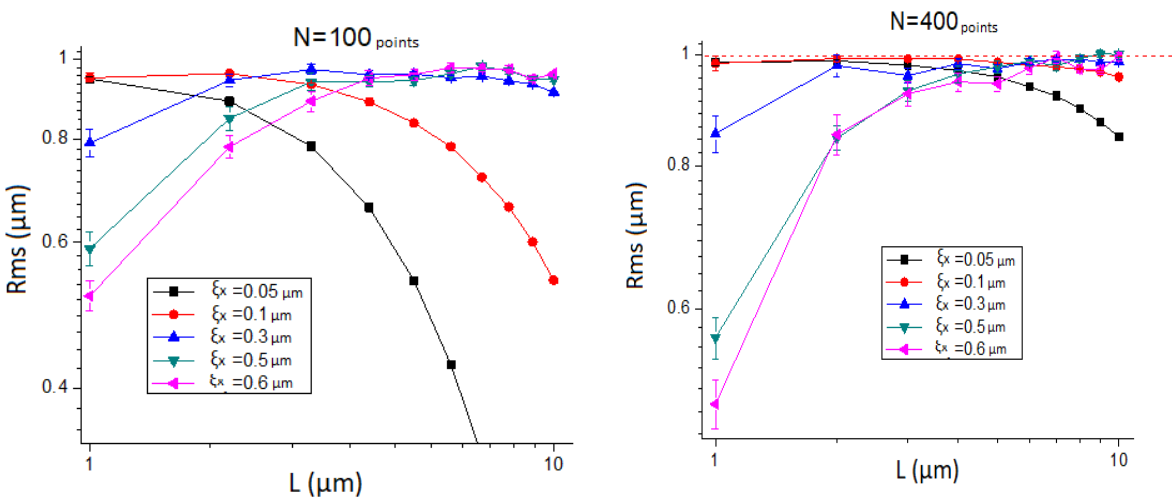
Πεπερασμένο μήκος επιφάνειας

Ο δεύτερος περιορισμός που προσδίδεται σε μια προσομοιωμένη επιφάνεια αφορά το πεπερασμένο μήκος της. Συγκεκριμένα η ιδιότητα αυτή σχετίζεται με την κλίμακα που γίνεται η μελέτη μιας επιφάνειας. Στο σχήμα 3.18 δίνεται ένα παράδειγμα όπου το μήκος ενός προφίλ 2 διαστάσεων παρουσιάζει διαφορετική μορφολογία ανάλογα με το διάστημα μήκους που επιλέγεται να παρουσιαστεί. Όπως φαίνεται από την εικόνα το κάθε μήκος αναπαράστασης παρουσιάζει τη μορφολογία με διαφορετικό τρόπο. Συνεπώς η τραχύτητα διαφοροποιείται ανάλογα με τη κλίμακα. Συγκεκριμένα, για πολύ μικρά μήκη L (ή κλίμακα) αλλάζει δραματικά η τραχύτητα και επομένως οι παράμετροι τραχύτητας.



Σχήμα 3.18) Παράδειγμα περιορισμού προσομοίωσης λόγω πεπερασμένης επιφάνειας (αλλαγή μήκους L).

Συνεπώς, θα πρέπει να βρεθεί μια τιμή κάτω ορίου μήκους L της τετραγωνικής επιφάνειας που παράγεται στην τρέχουσα εργασία, ώστε να μην αλλοιώνονται οι παράμετροι τραχύτητας. Η μελέτη για αυτόν τον περιορισμό έγινε εξετάζοντας την αλλοίωση του Rms=1μm που δίνεται αρχικά στο σύστημα για σταθερό αριθμό N και μηκών συσχέτισης ξ (Σχήμα 3.19).



Σχήμα 3.19) Συνέπειες πεπερασμένου μήκους επιφανειών μέσα από διαγράμματα Rms vs L για N=400 και 100 σημεία. Ως τιμή εισαγωγής στις επιφάνεις δόθηκε Rms=1 μm

Από τα διαγράμματα στην Σχήμα 3.19 φαίνεται ότι υπάρχουν δύο περιοχές απόκλισης Rms (από την εισαγόμενη τιμή Rms= 1μm) για συγκεκριμένα μήκη συσχέτισης ξ κατά μήκος του L.

Για μικρά μήκη συσχέτισης $\xi < 0.3$ μm όταν το μήκος L (κλίμακα επιφάνειας) αυξάνεται, η τιμή του Rms αποκλίνει σημαντικά. Αυτό σχετίζεται με τον περιορισμό της διακριτότητας που συζητήθηκε προηγουμένως και επιβεβαιώνεται από τα διαγράμματα, διότι για N=400 σημεία η καμπύλη επιφανειών με $\xi = 0.05, 0.1$ μm βελτιώνεται σημαντικά στη προσέγγιση του Rms σε αντίθεση με ό,τι συμβαίνει (φτιάξε το αν μπορείς καλύτερα αυτό) όταν N=100.

Όμως για μεγάλα μήκη συσχέτισης $\xi > 0.3$ μm αν και δεν υπάρχει τόσο το πρόβλημα της διακριτότητας παρατηρείται απόκλιση του Rms για μικρά L. Αυτό σχετίζεται άμεσα με το περιορισμό που έχει η επιλογή κλίμακας της επιφάνειας. Όπως φαίνεται και στο Σχήμα 3.17 τα μεγάλα μήκη συσχέτισης για να μπορούν να αναπαρασταθούν σωστά πρέπει να έχουν μεγάλες κλίμακες προσομοίωσης. Έτσι για $\xi = 0.6$ μm για μικρά L υπάρχει μεγάλη απόκλιση της παραμέτρου τραχύτητας Rms. Η σωστή αναπαράσταση θα πρέπει να γίνεται για $L > 5$ μm (N=400).

3.2.4 Παραγωγή Μη-Γκαουσιανών συσχετισμένων νανο-επιφανειών

Η μέθοδος που χρησιμοποιήθηκε για τη παραγωγή μη-Γκαουσιανών συσχετισμένων νανο-επιφανειών με τραχύτητα βασίστηκε στα συστήματα μετασχηματισμού των Johnson και Pearson και της δουλειάς των Yang et. al. [64]. Ο πίνακας 3.1 περιέχει όλες τις παραμέτρους τραχύτητας που επιλέχθηκαν να αναπαράσταση των Γκαουσιανών και Μη-Γκαουσιανών επιφανειών της τρέχουσας διπλωματικής εργασίας. Οι μέθοδοι των Johnson και Pearson φημίζονται για τη μεγάλη ακρίβεια προσέγγισης (πολύ μικρή απόκλιση από τις τιμές εισόδου) παραμέτρων τραχύτητας ιδιαίτερα για την λοξότητα (Skewness-Sk) και την κυρτότητα (Kurtosis-Ku), καθώς καλύπτουν όλο το χώρο τιμών $Ku - Sk^2 - 1 \geq 0$ (Σχήμα 3.1)

Πιο συγκεκριμένα, η μέθοδος Johnson μετασχηματίζει ένα τυχαίο λευκό Γκαουσιανό θόρυβο σε μη Γκαουσιανό με καθορισμένες από το χρήστη τιμές: μέση τιμή, τυπική απόκλιση, λοξότητα και κυρτότητα. Αυτό γίνεται μέσα από τρεις μεθόδους. S_B , S_U και S_L όπου για κάθε μία αντιστοιχεί μια κατανομή που εξαρτάται από τις παραμέτρους που μόλις αναφέρθηκαν. Οι κατανομές S_B , S_U και S_L είναι :

$$\text{H Lognormal κατανομή } S_L: \quad z_2 = \xi + \lambda e^{(\eta - \gamma)/\delta} \quad (\xi < \eta) \quad (3.26)$$

$$\text{H bounded κατανομή } S_B: z_2 = \xi + \frac{\lambda e^{(\eta-\gamma)/\delta}}{1+e^{(\eta-\gamma)/\delta}} \quad (\xi < \eta < \xi + \lambda) \quad (3.27)$$

$$\text{H unbounded κατανομή } S_U: z_2 = \xi + \lambda \sinh \frac{\eta-\gamma}{\delta} \quad (3.28)$$

Όπου η είναι ο Γκαουσιανός λευκός θόρυβος και z_2 ο μη Γκαουσιανός. Οι μεταβλητές γ, δ, λ και ξ υπολογίζονται από τις τιμές της λοξότητας (Skewness-Sk) και κύρτωσης (Kurtosis-Ku), δηλαδή της τρίτης και τέταρτης στατιστικής ροπής της επιθυμητής μη-Γκαουσιανής κατανομής.

Στη μεθοδολογία που ακολουθείται αρχικά δημιουργείται ο Γκαουσιανός θόρυβος η (τυχαία ακολουθία) με τις καθορισμένες τις δύο πρώτες στατιστικές ροπές. Στη συνέχεια, θα δοκιμαστούν οι S_B και S_U για να μετασχηματιστεί ο θόρυβος σε μη-Γκαουσιανό. Από τις κατανομές στη συνέχεια μπορεί να ελεγχθεί κατά πόσο η μετασχηματισμένη διακριτή κατανομή συγκλίνει στην αντίστοιχη συνεχή. Εάν οι στατιστικές ροπές αποκλίνουν από τις επιθυμητές, τότε οι υπολογισμοί επαναλαμβάνονται επιλέγοντας τη καλύτερη μέθοδο Johnson. Συγκεκριμένα όταν οι S_B και S_U δεν συγκλίνουν τότε επιλέγεται αυτόματα η S_L .

Όμως η μέθοδος S_L θεωρείται από τους Yang et.al [64] πως δεν δίνει καλή ακρίβεια και γι' αυτό προτείνεται στη θέση της η χρήση συστήματος μετασχηματισμού Pearson.

Ο Karl Pearson δημιούργησε ένα σύστημα που περιέχει μοναδικές κατανομές οι οποίες αντιστοιχούν σε κάθε έγκυρο συνδυασμό των τεσσάρων πρώτων στατιστικών ροπών. Με τη χρήση αυτών των τεσσάρων ροπών είναι δυνατό να βρεθεί η κατάλληλη κατανομή συστήματος Pearson, ώστε στη συνέχεια να παραχθεί η τυχαία ακολουθία ή θόρυβος. Η πυκνότητα πιθανότητας $p(x)$ της μη-Γκαουσιανής κατανομής του συστήματος Pearson μπορεί να βρεθεί από [5]:

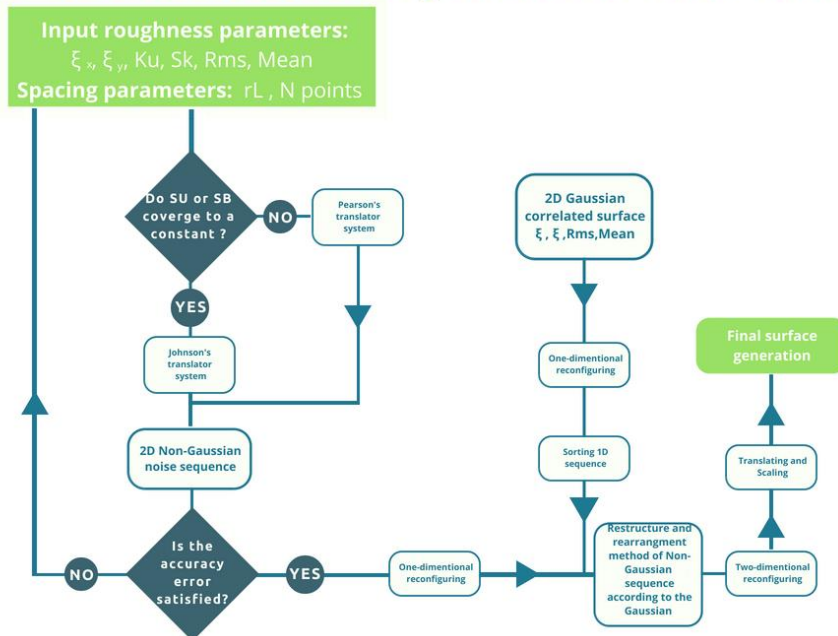
$$\frac{d(\log p(x))}{dx} = -\frac{\alpha+x}{c_0+c_1x+c_2x^2} \quad (3.29)$$

Όπου α, c_0, c_1 και c_2 είναι σταθερές που μπορούν να υπολογιστούν από τις τέσσερις πρώτες στατιστικές ροπές.

Από τη λύση της (3.29) μπορούν να προκύψουν διαφορετικά είδη κατανομών όπως beta, gamma, F-distribution, t-distribution κ.α., ώστε να μπορεί να γίνει η καλύτερη επιλογή κατανομής για την προσέγγιση των επιθυμητών παραμέτρων στατιστικών ροπών με μικρές αποκλίσεις.

Παρακάτω δίνεται το διάγραμμα ροής παραγωγής μη-Γκαουσιανών επιφανειών:

Non-Gaussian surface generator flow chart



Σχήμα 3.20) Διάγραμμα ροής παραγωγής μη-Γκαουσιανών επιφανειών

Όπως είδαμε τα συστήματα μετασχηματισμού Johnson's και Pearson's μπορούν να μετασχηματίσουν ένα τυχαίο Γκαουσιανό θόρυβο σε μη-Γκαουσιανό, με καθορισμένες τιμές από το χρήστη όπως μέση τιμή, απόκλιση, ασυμμετρία και κυρτότητα. Η διαδικασία που ακολουθείται για όλα τα παραπάνω είναι η εξής:

- 1) Δημιουργία τυχαίου Γκαουσιανού θορύβου δύο διαστάσεων $\eta(m,n)$ (όπως στην προηγούμενη ενότητα 3.2.2 και μετατροπή σε μη-Γκαουσιανή $z_2(m,n)$ μέσω συστήματος μετασχηματισμού Johnson, δίνοντας ως παραμέτρους εισόδου τις τέσσερις πρώτες στατιστικές ροπές. Εάν η S_B ή S_U δεν μπορούν να συγκλίνουν τότε χρησιμοποιείται το σύστημα Pearson και η αντίστοιχη κατανομή εξαρτώμενη από τις παραμέτρους εισόδου.
- 2) Στη συνέχεια μετριέται η λοξότητα και η κύρτωση της $z_2(m,n)$ μέσω των σχέσεων 3.5 και 3.6 και επαναλαμβάνεται μέχρι να ικανοποιηθούν οι συνθήκες ακριβείας.

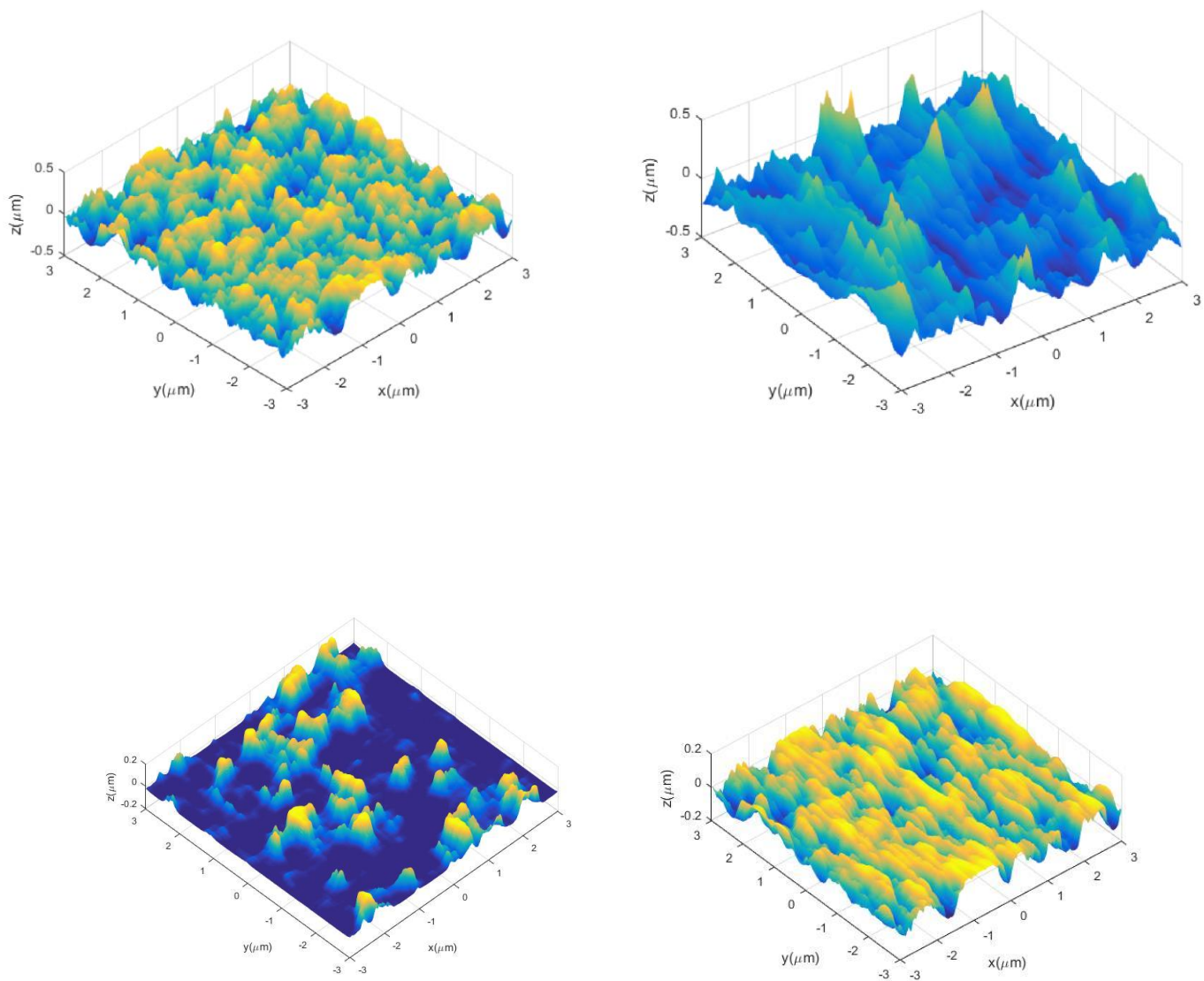
Εισαγωγή συσχετίσεων μη-Γκαουσιανής επιφάνειας μέσω μεθόδου ανακατασκευής και αναδιάταξης

Μέχρι στιγμής έχουμε δημιουργήσει μια Μη-Γκαουσιανή επιφάνεια χωρίς όμως συσχετισμούς. Για να εισαγάγουμε τους συσχετισμούς μία επιλογή είναι να γίνει η χρήση ενός Γκαουσιανού φίλτρου (ενότητα 3.2.2) ή της συνάρτησης αυτοσυσχέτισης [64]. Ένας πιο σύντομος τρόπος χρονικά από θέμα υπολογισμών αποτελεί η διαδικασία ανακατασκευής και αναδιάταξης της ακολουθίας $z_2(m,n)$. Η μέθοδος αυτή καταφέρνει να μετατρέψει την $z_2(m,n)$ ακολουθία στη συσχετισμένη Μη-Γκαουσιανή επιφάνεια $z_N(m,n)$ ικανοποιώντας παράλληλα τη δεδομένη ACF στις κατευθύνσεις x και y .

Η μέθοδος ακολουθεί τα εξής βήματα:

- 1) Παραγωγή Γκαουσιανής συσχετισμένης επιφάνειας $z_G(m,n)$ όπως έγινε στην ενότητα 3.2.2 με μήκη συσχέτισης ξ_x και ξ_y και μη-Γκαουσιανής επιφάνειας $z_2(m,n)$ χωρίς συσχετισμούς.
- 2) Ανακατασκευή των επιφανειών από δύο διαστάσεις σε μία: $z_G(m,n) \rightarrow q(m^*n,1)$ και $z_2(m,n) \rightarrow Q(m^*n,1)$.
- 3) Ταξινόμηση των $q(m^*n,1)$ και $Q(m^*n,1)$ από τη μεγαλύτερη στη μικρότερη τιμή.
- 4) Αναταξινόμηση της $Q(m^*n,1)$ πίσω στη μη ταξινομημένη μορφή αλλά με τον ίδιο τρόπο που ταξινομήθηκε η $q(m^*n,1)$.
- 5) Ανακατασκευή της $Q(m^*n,1)$ σε δύο διαστάσεις: $Q(m^*n,1) \rightarrow z_N(m,n)$ όπου η συσχετισμένη μη-Γκαουσιανή επιφάνεια θα έχει σε πολύ καλή προσέγγιση ίδια ACF με την αντίστοιχη συσχετισμένη Γκαουσιανή $z_G(m,n)$

Παραδείγματα Μη-Γκαουσιανών συσχετισμένων ισοτροπικών και μή ισοτροπικών επιφανειών, όπως παράγονται από τα βήματα αυτά, δίνονται στο Σχήμα 3.21



Σχήμα 3.22) Συσχετισμένες Γκαουσιανές νανο-επιφάνειες.

α) Ισοτροπική μη-Γκαουσιανή επιφάνεια $N=600$ σημεία, $L=6 \mu\text{m}$, $\xi_x=\xi_y=0.2 \mu\text{m}$, $Rms=0.1 \mu\text{m}$, $Sk=0$, $Ku=2$

β) Ανισοτροπική μη-Γκαουσιανή επιφάνεια $N= 600$ σημεία, $L=6 \mu\text{m}$, $\xi_x=0.2$, $\xi_y=0.6 \mu\text{m}$, $Rms=0.1 \mu\text{m}$, $Sk=1$, $Ku=4$

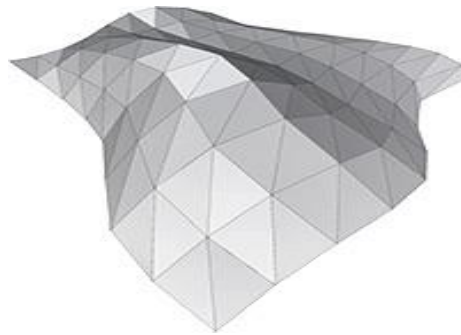
γ) Ισοτροπική μη-Γκαουσιανή επιφάνεια $N= 600$ σημεία, $L=6 \mu\text{m}$, $\xi_x=0.5$, $\xi_y=0.5 \mu\text{m}$, $Rms=0.05 \mu\text{m}$, $Sk=2$, $Ku=6$

δ) Ανισοτροπική Γκαουσιανή επιφάνεια $N= 600$ σημεία, $L=6 \mu\text{m}$, $\xi_x=0.2$, $\xi_y=0.6 \mu\text{m}$, $Rms=0.05 \mu\text{m}$, $Sk=-0.4$, $Ku=2$

3.2.5 Μέτρηση ενεργούς επιφάνειας παραγόμενων επιφανειών

Η ιδιότητα που θέλουμε να εξετάσουμε στη διπλωματική, αφορά την ενεργό επιφάνεια των νανο-επιφανειών. Σε αυτή την υποενότητα θα αναφερθούμε στην μεθοδολογία που ακολουθήθηκε για τη μέτρησή της από τις προσομοιωμένες επιφάνειες. Γενικά η μέτρησή της με ικανοποιητική ακρίβεια δεν είναι δύσκολο να υλοποιηθεί στα πλαίσια προγραμματισμού. Αυτό που έχει σημασία είναι το κόστος χρόνου αυτού του υπολογισμού.

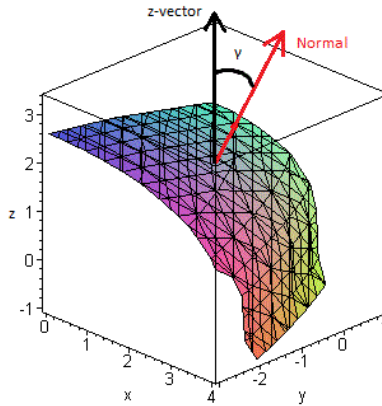
Η πιο διαδεδομένη μεθοδολογία υπολογισμού την ενεργούς (διακριτής) επιφάνειας είναι μέσω της χρήσης τριγώνων. Σύμφωνα με αυτή τη μεθοδολογία κάθε σημείο της ακολουθίας $z(m,n)$ ενώνεται με τα δύο γειτονικά του, μέσω τριγώνων σχηματίζοντας μια επιφάνεια όπως στο παρακάτω σχήμα:



Σχήμα 3.23) Διακριτή επιφάνεια αυθαίρετης μορφής.

Σε κάθε τρίγωνο μετριέται το εμβαδόν και στη συνέχεια αυτό επαναλαμβάνεται για κάθε τριάδα που δεν έχει μετρηθεί αθροίζοντάς τα όλα στο τέλος.

Μια μεθοδολογία πιο γρήγορη από θέμα υπολογισμού που ακολουθήθηκε στη διπλωματική εργασία, περιέχει τη χρήση κανονικών διανυσμάτων επιφάνειας. Συγκεκριμένα η ενεργός επιφάνεια μετρήθηκε ολοκληρώνοντας τη διατέμνουσα (\secant , $\sec\theta=1/\cos\theta$) της γωνίας γ μεταξύ των διανυσμάτων επιφάνειας και της z κανονικής συνιστώσας:



Σχήμα 3.24) Επιφάνεια όπου σε ένα σημείο παρουσιάζεται το κανονικό διάνυσμα και η γωνία γ που σχηματίζει με το κάθετο z-διάνυσμα.

$$\iint dA = \iint \sec(\gamma) dx dy \quad (3.30)$$

Όπου η γ μπορεί επίσης θεωρηθεί και ως η γωνία που σχηματίζεται από την κάθετο συνιστώσα z και το κανονικό διάνυσμα της διαφορικής επιφάνειας dA . Αν η επιφάνεια της οποίας θέλουμε να υπολογίσουμε το εμβαδόν περιγράφεται από τη συνάρτηση $\varphi(x,y,z)=0$ τότε το συνημίτονο της γωνίας γ του κανονικού διανύσματος $\vec{N} = \nabla\varphi$ που σχηματίζεται με το z -άξονα είναι:

$$\cos(\gamma) = \frac{1}{\sec(\gamma)} = \hat{z} \cdot \left(\frac{\nabla\varphi}{|\nabla\varphi|} \right) \quad (3.31)$$

όπου $\frac{\nabla\varphi}{|\nabla\varphi|}$ είναι το μοναδιαίο κανονικό διάνυσμα για ένα σημείο στην επιφάνεια.

Επιφάνεια	Παράμετροι εισαγωγής		Τελική παράμετρος μέτρησης
	Χωρικές	Τραχύτητας	
Γκαουσιανή	N, rL	Rms, ξ_x, ξ_y	Ενεργός επιφάνεια
Μη-Γκαουσιανή		Rms, Sk, Ku, ξ_x, ξ_y	

Πίνακας 3.1 : Πίνακας παραμέτρων εισαγωγής και εξαγωγής που χρησιμοποιούνται για τη προσομοίωση Γκαουσιανών και Μη-Γκαουσιανών επιφανειών

4. Αποτελέσματα σύνδεσης δομικών και λειτουργικών παραμέτρων

4.1 Γενικά

Η διαδικασία εφαρμογής των νανοδομών πέρα από τη πολυπλοκότητα της τεχνογνωσίας περιέχει πολλά στάδια (κεφάλαιο 1.1) για τη κατασκευή και το χαρακτηρισμό τους. Παράλληλα, απαιτείται εμπειρία και συντονισμός πολλών παραμέτρων σε κάθε στάδιο ξεχωριστά. Πολλές φορές ο συντονισμός αυτών των παραμέτρων δεν είναι βασισμένος σε κάποιο υπόβαθρο γνώσης ή κάποιο μελετημένο φυσικό φαινόμενο δημιουργώντας δυσκολίες στη λήψη αποφάσεων. Ως μια προσπάθεια αντιμετώπισης αυτών των δυσκολιών, προτείνεται η χρήση μεθόδων μηχανικής μάθησης. Μέσω της χρήσης τους υπάρχει δυνατότητα πρόβλεψης των παραμέτρων σε κάθε στάδιο ξεχωριστά καθώς και δυνατότητα εξαγωγής γνώσης για την ίδια τη διαδικασία. Στο πλαίσιο αυτό η παρούσα διπλωματική εργασία αποτελεί το πρώτο βήμα για την υλοποίηση μιας τέτοιας βελτιστοποίησης, εφαρμόζοντας μοντέλα μηχανικής μάθησης για τη σύνδεση δομικών και λειτουργικών παραμέτρων προσομοιωμένων τραχιών επιφανειών. Στο κεφάλαιο αυτό θα παρουσιαστούν τα αποτελέσματα αυτής της μελέτης.

Αρχικά, διερευνάται η εξάρτηση των λειτουργικών από τις δομικές παραμέτρους και παρουσιάζονται οι βάσεις δεδομένων με τις οποίες γίνεται η εκπαίδευση και ο έλεγχος των μοντέλων.

Στη συνέχεια γίνεται αναφορά στις παραδοχές, το λογισμικό και τα μέτρα αξιολόγησης των αποτελεσμάτων. Τέλος, παρουσιάζονται και συζητούνται τα αποτελέσματα των μοντέλων μηχανικής μάθησης ξεχωριστά.

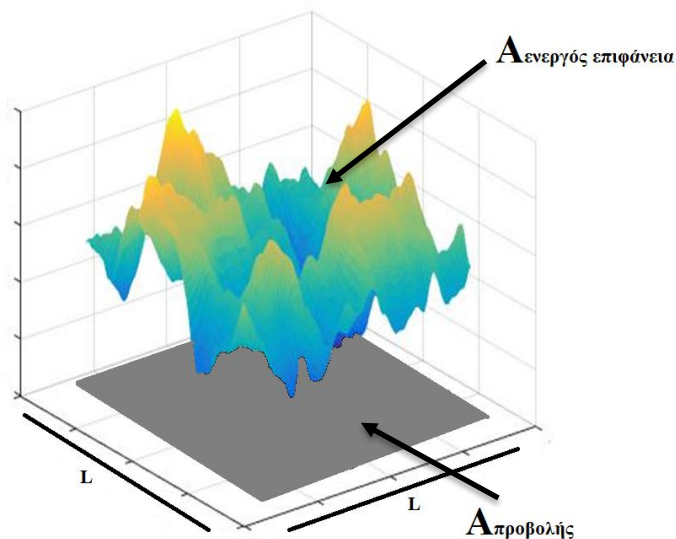
4.2 Αποτελέσματα I: Σύνδεση δομικών και λειτουργικών παραμέτρων για προσομοιωμένες επιφάνειες με νανοτραχύτητα.

Σε αυτή την υποενότητα θα εξετάσουμε τις εξαρτήσεις της ενεργού επιφάνειας από τις δομικές παραμέτρους (Rms, ξ_x , ξ_y , λοξότητα και κύρτωση). Τα αποτελέσματα από τις εξαρτήσεις θα μας δώσουν ένα υπόβαθρο γνώσης για την αξιολόγηση και κατανόηση των μοντέλων μηχανικής μάθησης. Αυτό είναι σημαντικό διότι αφού τα μοντέλα εκπαιδευτούν, θα προσπαθήσουν να αναπαράγουν τις εξαρτήσεις μεταξύ των παραμέτρων ώστε να μπορέσουν να κάνουν προβλέψεις με επιτυχία.

Η μέτρηση της ενεργού επιφάνειας (Active Area), σε αυτή την υποενότητα, θα γίνεται σε κανονικοποιημένη μορφή. Συγκεκριμένα θα μετριέται η κανονικοποιημένη μεταβολή S_{dr} της ενεργού επιφανείας A ως προς τη προβεβλημένη επιφάνεια $A_{\text{προβολής}}$, και ορίζεται ως ο λόγος:

$$S_{dr} = \frac{A - A_{\text{προβολής}}}{A_{\text{προβολής}}}$$

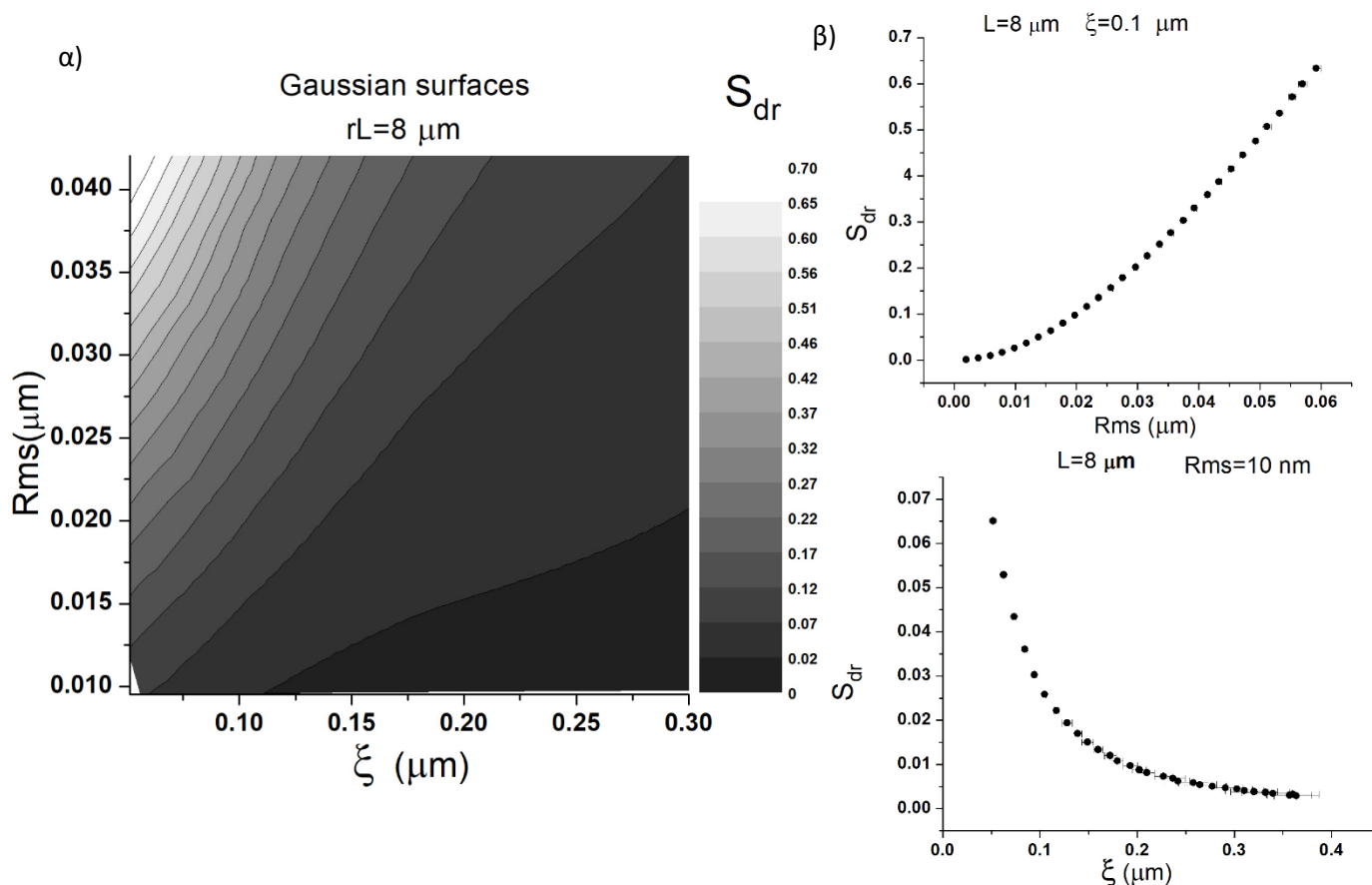
Για όλες τις επιφάνειες στη παρούσα διπλωματική ισχύει: $A_{\text{προβολής}} = L^2 = 64 \mu\text{m}^2$ (όπου L το τετραγωνικό μήκος)



Σχήμα 4.1 Παράδειγμα προσομοιωμένης επιφάνειας με τραχύτητα. Η επιφάνεια έχει τετραγωνικό μήκος L .

4.2.1 Γκαουσιανές επιφάνειες

Αρχικά μελετάμε τις εξαρτήσεις παραμέτρων των γκαουσιανών προσομοιωμένων επιφανειών. Στο σχήμα 4.1 α) εμφανίζεται η εξάρτηση της κανονικοποιημένης μεταβολής ενεργού επιφάνειας S_{dr} από το Rms και το μήκος συσχέτισης ξ :

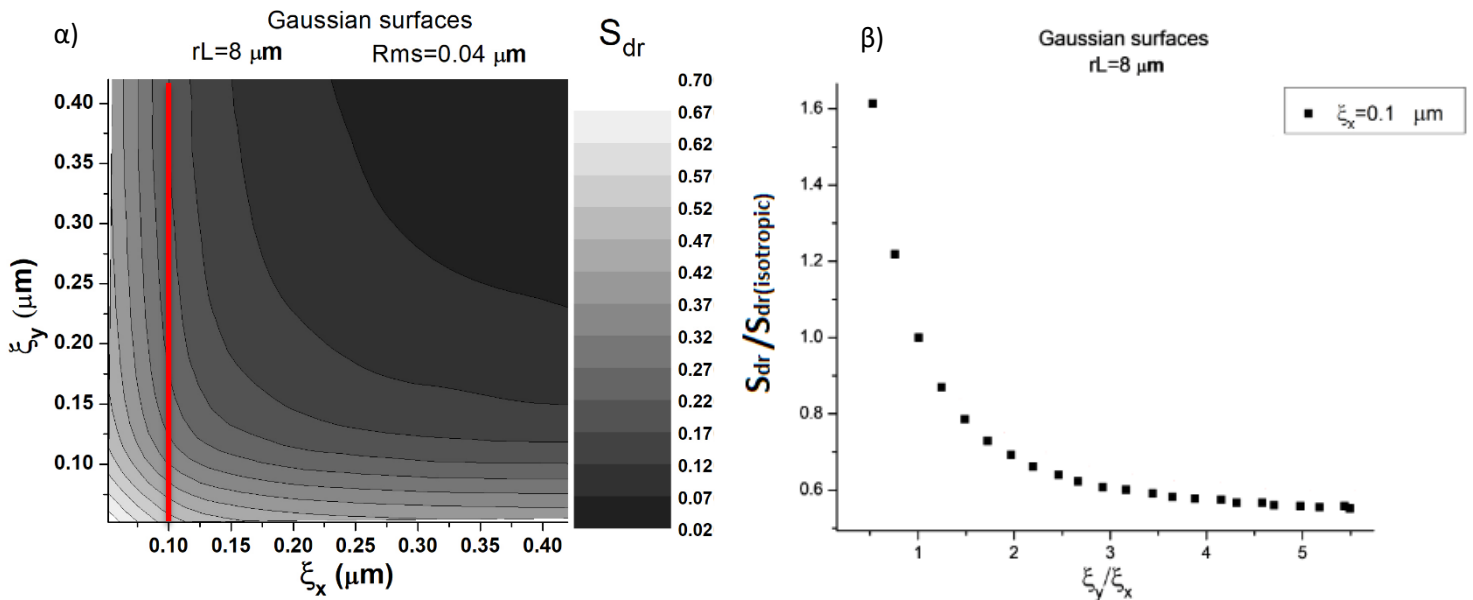


Σχήμα 4.2 α) Διάγραμμα ισοϋψών της κανονικοποιημένης μεταβολής S_{dr} ως συνάρτηση του μήκους συσχέτισης ξ και Rms . β,γ) Τομές του διαγράμματος ισοϋψών του α) που δείχνουν το S_{dr} ως συνάρτηση του ξ για σταθερό $Rms=10$ nm (β) ως συνάρτηση του Rms για σταθερό $\xi=0.1$ μm (γ)

Το σχήμα 4.2 α) δείχνει πως για μικρά μήκη συσχέτισης ($\xi < 200$ nm) υπάρχει σημαντική εξάρτηση του S_{dr} από το Rms . Με άλλα λόγια, το εύρος τιμών του S_{dr} αλλάζει έντονα καθώς μεταβάλλεται το Rms για κάθε σταθερό μήκος συσχέτισης ξ . Για παράδειγμα, στο σχήμα 4.2 α) όταν το $\xi=0.15$ μm το ποσοστό S_{dr} αλλάζει σε εύρος [0.004%,0.27%] ως συνάρτηση του Rms . Από την άλλη πλευρά, η εξάρτηση του S_{dr} από το ξ γίνεται ισχυρή μόνο για τις υψηλές τιμές του Rms . Δηλαδή η μεταβολή του S_{dr} ως συνάρτηση του ξ γίνεται πιο μεγάλη για υψηλές σταθερές τιμές Rms . Για παράδειγμα στο σχήμα 4.2 α) όταν το $Rms=10$ nm το ποσοστό S_{dr} αλλάζει σε εύρος [0.005%,0.065%] ως συνάρτηση του ξ . Όμως όταν $Rms=40$ nm (σχήμα 4.2 α) έχουμε ότι $S_{dr}=[0.01\%,0.70\%]$. Γενικά οι εξαρτήσεις από το S_{dr} γίνονται ιδιαίτερα ισχυρές στις περιοχές

μεγάλων Rms και μικρών ξ και αντιθέτως ανίσχυρες στις περιοχές όπου το Rms μειώνεται και το ξ αυξάνεται.

Τα διαγράμματα του σχήματος 4.2 β) και γ) αναδεικνύουν το τρόπο με τον οποίο το S_{dr} μεταβάλλεται ξεχωριστά ως προς τη συνάρτηση του Rms (β) και μήκους συσχέτισης ξ (γ). Για σταθερό $\xi=0.1 \mu\text{m}$, το S_{dr} αυξάνεται αρχικά με παραβολικό ρυθμό και στη συνέχεια με γραμμικό (Σχήμα 4.2 β) (Απόδειξη στο Παράρτημα 1). Για σταθερό Rms=10 nm η ποσότητα S_{dr} μειώνεται με μη γραμμικό ρυθμό συναρτήσει του μήκους συσχέτισης ξ (Σχήμα 4.2 γ). Στη συνέχεια εξετάζεται η εξάρτηση της κανονικοποιημένης μεταβολή S_{dr} της ενεργού επιφανείας στην περίπτωση επιφανειών με ανισοτροπίας (δηλαδή όταν: $\xi_x/\xi_y \neq 1$).



Σχήμα 4.3 α) Διάγραμμα εξάρτησης S_{dr} ως συνάρτηση των μηκών συσχέτισης ξ_x και ξ_y
 β) Λόγος S_{dr} προς το ιστροπικό S_{dr} ως συνάρτηση του λόγου ξ_y/ξ_x (ανισοτροπίας) για σταθερό $\xi_x=0.1 \mu\text{m}$. Η περιοχή που μελετάμε απεικονίζεται στο α με τη κόκκινη γραμμή

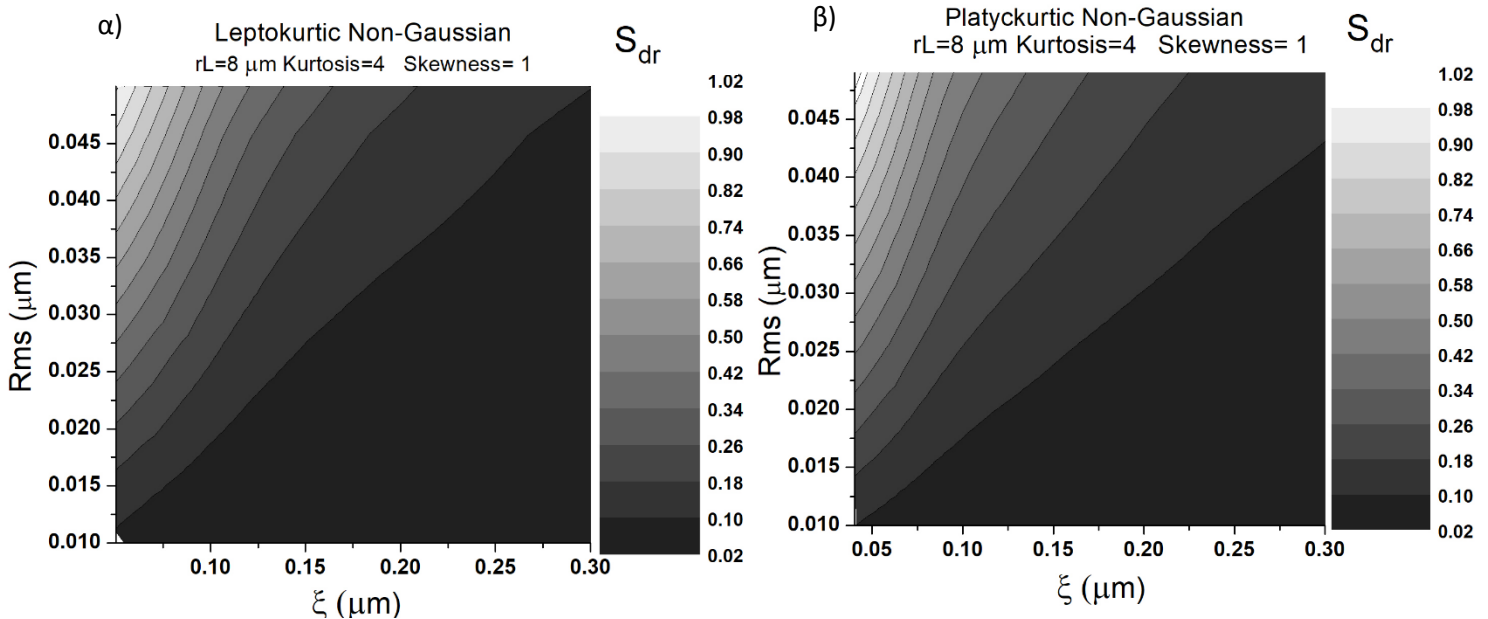
Τα αποτελέσματα της επίδρασης του βαθμού ανισοτροπίας στο S_{dr} συνοψίζονται στο σχ.4.3. Πιο συγκεκριμένα, το σχήμα 4.3α παρουσιάζει την εξάρτηση του S_{dr} από τα μήκη συσχέτισης κατά τους άξονες x και y σε ένα διάγραμμα ισοϋψών. Όπως θα περίμενε κανείς, υπάρχει συμμετρία γύρω από τη διαγώνιο. Το εύρος τιμών του S_{dr} μεγιστοποιείται γύρω από τη διαγώνιο και ελαχιστοποιείται για μικρές τιμές των ξ_x και ξ_y αντίστοιχα ($\xi < 0.2 \mu\text{m}$). Για να γίνει πιο καθαρή η επίδραση της ανισοτροπίας, στο σχήμα 4.3 β εμφανίζεται ο λόγος του S_{dr} της ανισότροπης επιφάνειας προς το αντίστοιχο ιστροπικό S_{dr} (όπου $\xi_x/\xi_y=1$) ως συνάρτηση του λόγου ανισοτροπίας ξ_y/ξ_x . Το διάγραμμα έχει προκύψει διατηρώντας σταθερό το ξ_x και μεταβάλλοντας το ξ_y . Παρατηρούμε ότι η επίδραση της ανισοτροπίας εξαρτάται από τον τρόπο που αυτή προκαλείται. Αν αυτό γίνεται αυξάνοντας το μήκος συσχέτισης ξ_y τότε οι περισσότεροι ανισότροποι επιφάνειες έχουν μικρότερη ενεργό επιφάνεια. Η μείωση αυτή γίνεται εντονότερη για μεγάλα μήκη συσχέτισης ξ_y και ασθενέστερη για μικρά. Αντίθετα, αν η ανισοτροπία προκληθεί από μείωση του ξ_y και ο λόγος ξ_x/ξ_y γίνει μικρότερος της μονάδας τότε η ανισοτροπία έχει θετική επίδραση στην ενεργό επιφάνεια. Προφανώς λόγω συμμετρίας και όπως φαίνεται από

το σχήμα 4.3 α) αυτή συμπεριφορά είναι παρόμοια εάν εναλλαχθούν οι ρόλοι των αξόνων x και y.

Συνοψίζοντας, στη μελέτη γκαουσιανών ισοτροπικών επιφανειών φάνηκε πως η ενεργός επιφάνεια μεγιστοποιείται σε μεγάλα Rms και σε μικρά μήκη συσχέτισης ξ , δηλ. σε επιφάνειες με μεγάλες κάθετες διακυμάνσεις και πυκνή χωρική διάταξή τους. Το αποτέλεσμα αυτό θεωρείται αναμενόμενο αφού η ενεργός επιφάνεια σχετίζεται με την τοπική παράγωγο της επιφάνειας η οποία στην προαναφερόμενη περιοχή παίρνει τις μεγαλύτερες τιμές της [55]. Το Rms είναι η κυρίαρχη παράμετρος που επηρεάζει την ενεργό επιφάνεια. Η εξάρτηση της από το Rms παρουσιάζει παραβολική αύξηση για μικρά Rms και γραμμική αύξηση για μεγάλα. Η συμπεριφορά αυτή μπορεί να προβλεφθεί αναλυτικά (Παράρτημα I). Η εξάρτηση της ενεργού επιφάνειας από ξ είναι μη γραμμική και γίνεται σημαντική για μεγάλες τιμές Rms. Στη περίπτωση των γκαουσιανών ανισοτροπικών επιφανειών η ενεργός επιφάνεια μειώνεται καθώς η ανισοτροπία (ξ_x/ξ_y) αυξάνεται αν η σύγκριση γίνεται με την ισότροπη επιφάνεια του μικρότερου μήκους συσχέτισης.

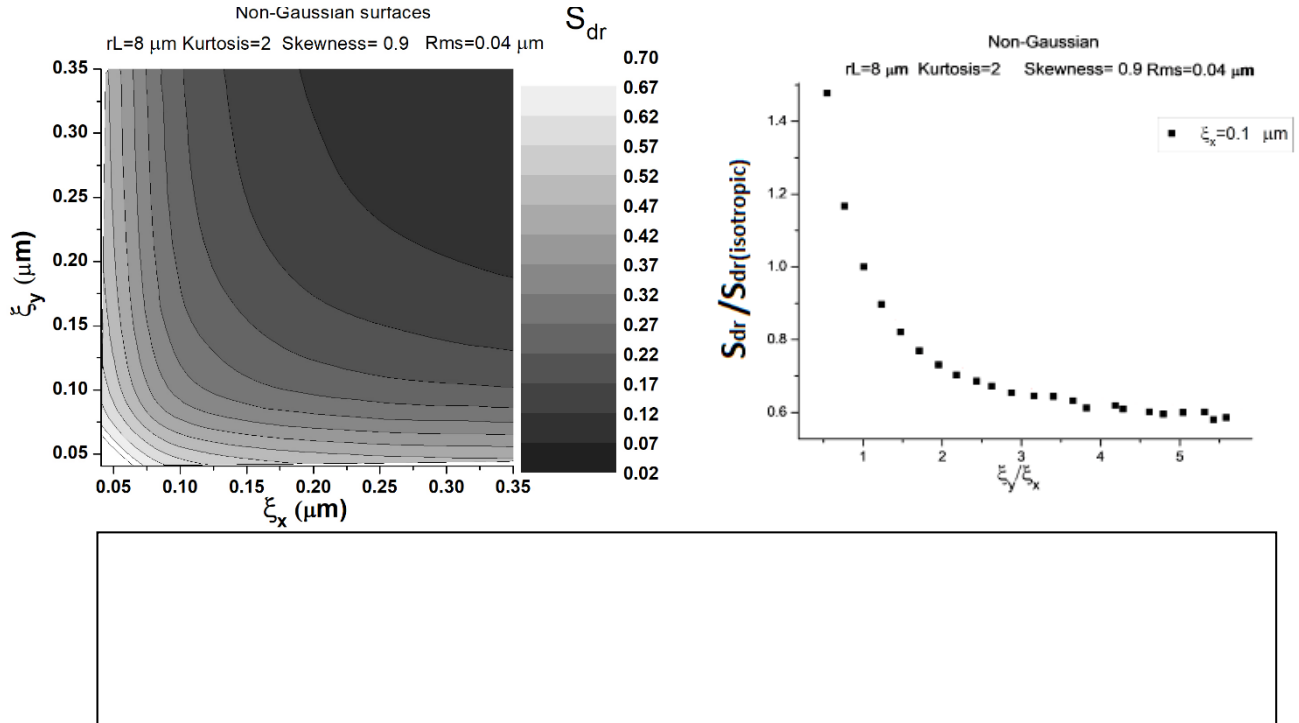
4.2.2 Μη-Γκαουσιανές επιφάνειες

Στη συνέχεια εξετάζονται οι εξαρτήσεις των δομικών και λειτουργικών παραμέτρων για μη γκαουσιανές επιφάνειες

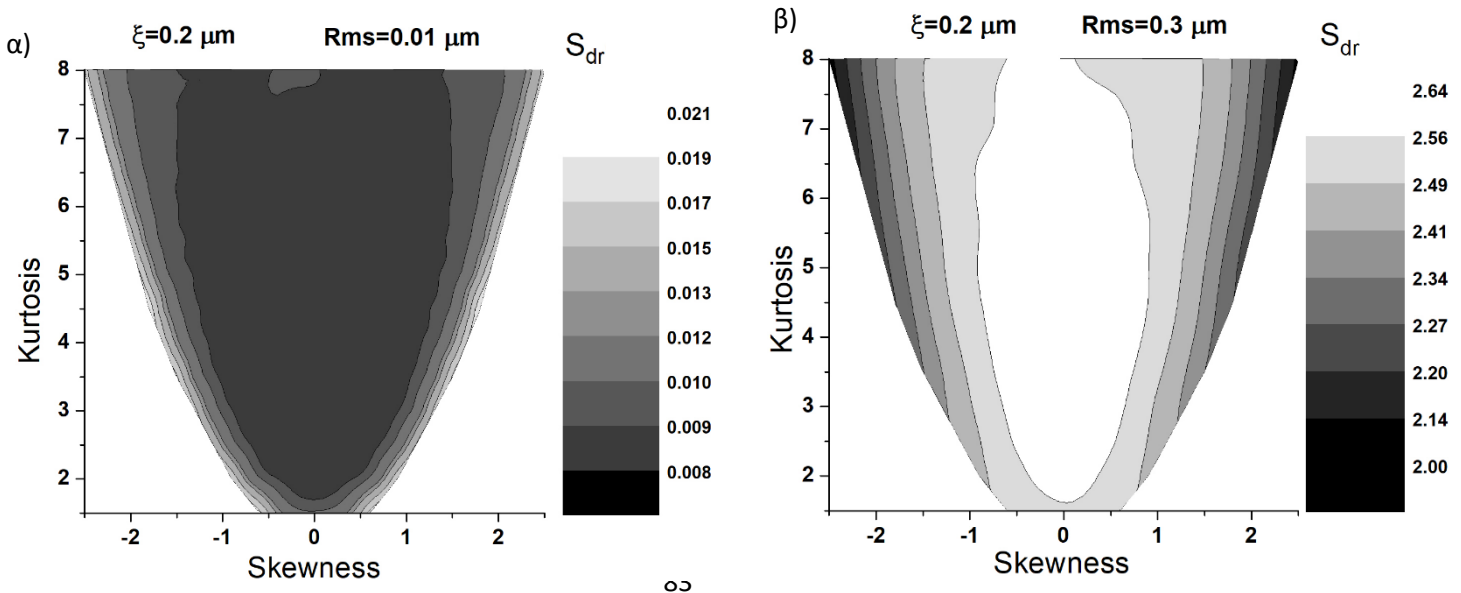


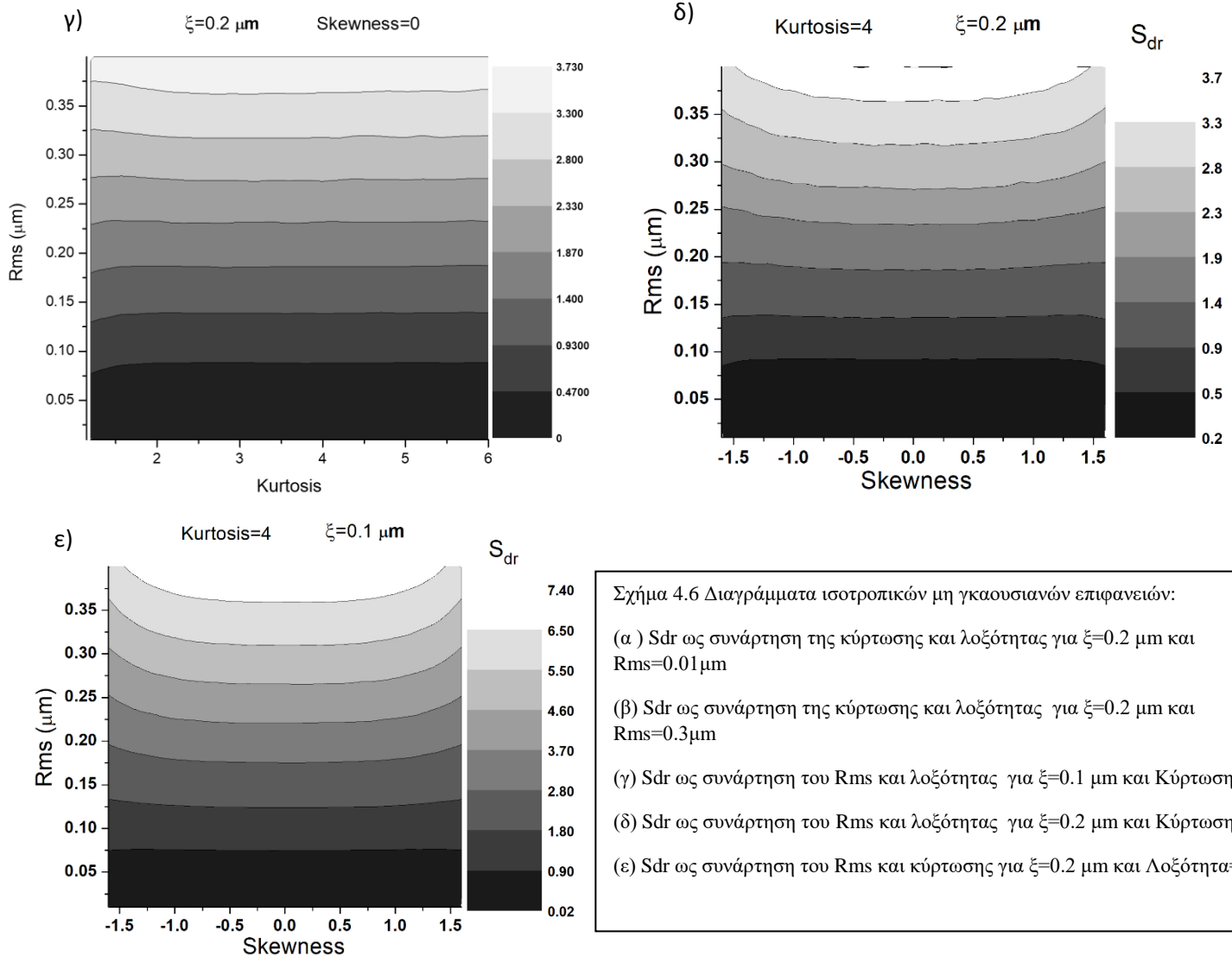
Σχήμα 4.4 α) Διάγραμμα εξάρτησης S_{dr} ως συνάρτηση του Rms και ισοτροπικού μήκους συσχέτισης για Leptokurtic μη Γκαουσιανή επιφάνεια όπου Κύρτωση=4 και Λοξότητα=1
 β) Διάγραμμα εξάρτησης S_{dr} ως συνάρτηση του Rms και ισοτροπικού μήκους συσχέτισης για Platykurtic μη Γκαουσιανή επιφάνεια όπου Κύρτωση=2 και Λοξότητα=-0.9

Τα διαγράμματα του σχήματος 4.4 αναπαριστούν τις εξαρτήσεις της κανονικοποιημένης μεταβολής ενεργού επιφάνειας S_{dr} σε σχέση με το Rms και το μήκος συσχέτισης ξ για δύο μη γκαουσιανές περιπτώσεις: Kurtosis>3 (Leptokurtic) και Kurtosis<3 (Platykurtic). Τα διαγράμματα επιβεβαιώνουν πως η συμπεριφορά παραμένει ίδια με αυτή της Γκαουσιανής του σχήματος 4.2 α). Το ίδιο συμβαίνει και στη περίπτωση της ανισοτροπίας (Σχήμα 4.5 α και β):



Στο τελευταίο μέρος γίνεται μελέτη εξάρτησης της ποσότητας S_{dr} από τις παραμέτρους λοξότητας και κύρτωσης.





Το σχήμα 4.6 α) εμφανίζει την εξάρτηση του S_{dr} , για σταθερό μήκος συσχέτισης $\xi=0.2 \mu\text{m}$ και $Rms=0.01 \mu\text{m}$, στο χώρο τιμών Λοξότητας-Κύρτωσης $Ku - Sk^2 - 1 \geq 0$ (υποενότητα 3.1.2). Από όλο το διάγραμμα 4.6 α) η ποσότητα S_{dr} μεταβάλλεται αυξανόμενη μόνο όταν η λοξότητα φτάνει στις ακραίες τιμές της. Η κύρτωση για σταθερή λοξότητα επηρεάζει το S_{dr} κυρίως στις μικρότερες επιτρεπόμενες τιμές με τις επιφάνειες μεγαλύτερης κύρτωσης να έχουν μικρότερη ενεργό επιφάνεια. Ωστόσο, οι τάσεις αλλάζουν στο διάγραμμα 4.5β που έχει υπολογισθεί για μεγαλύτερο $Rms=0.3 \mu\text{m}$. Για να κατανοηθεί καλύτερα αυτή η αλλαγή, προχωρήσαμε στο διάγραμμα 4.6 γ) το οποίο παρουσιάζει την εξάρτηση του S_{dr} από τη λοξότητα για διάφορα Rms. Συγκεκριμένα, για υψηλές τιμές Rms ($Rms > 0.25 \mu\text{m}$), το S_{dr} αυξάνεται καθώς απομακρύνεται η λοξότητα από το μηδέν. Αντιθέτως για μικρά Rms ($Rms < 0.20 \mu\text{m}$) παρατηρείται ακριβώς η αντίθετη συμπεριφορά. Μια ενδιαφέρουσα κατάσταση εμφανίζεται όταν η τιμή του Rms είναι κατά

προσέγγιση κοντά σε αυτή του μήκους συσχέτισης (διάγραμμα σχήματος 4.6 β), όπου και η λοξότητα δεν επηρεάζει το S_{dr} .

Η λοξότητα φαίνεται να έχει επιρροή στο S_{dr} στο χώρο Λοξότητας-Κύρτωσης, όταν ο λόγος $Rms/\xi > 1$ αυτό παρουσιάζεται στα διαγράμματα 4.5 γ) και δ) όπου η ενδιάμεση κατάσταση μεταβάλλεται καθώς αυξάνεται το μήκος συσχέτισης ξ .

Η κύρτωση καταφέρει να έχει σχετική επιρροή στο S_{dr} για μικρές τιμές εύρους $Ku=[1, 2]$ (διάγραμμα 4.5 ε). Όμοια με τη περίπτωση της λοξότητας υπάρχει μια ενδιάμεση κατάσταση, για σταθερό μήκος συσχέτισης, όπου κάτω από αυτή το S_{dr} αυξάνεται καθώς αυξάνεται η κύρτωση για μικρά Rms , ενώ πάνω από αυτή παρατηρείται το ακριβώς αντίθετο φαινόμενο.

Τέλος θα πρέπει να τονιστεί πως το εύρος τιμών με το οποίο μεταβάλλεται το ποσοστό S_{dr} ως συνάρτηση της λοξότητας και κύρτωσης είναι πολύ μικρότερο σε σχέση τις παραμέτρους Rms και μήκη συσχέτισης ξ_x, ξ_y (σχήματα 4.2, 4.3). Με άλλα λόγια η εξαρτήσεις του S_{dr} από τη κύρτωση και τη λοξότητα είναι πολύ πιο ασθενείς από αυτές του Rms και των ξ_x, ξ_y .

Συνοψίζοντας, στη μελέτη μη-γκαουσιανών ισοτροπικών επιφανειών φάνηκε πως οι εξαρτήσεις της ενεργού επιφάνειας από το Rms , ξ και της ανισοτροπίας είναι όμοιες με αυτές στις γκαουσιανές. Από την άλλη πλευρά, οι εξαρτήσεις της ενεργού επιφάνειας από τη λοξότητα και κύρτωση δεν είναι τόσο ισχυρές όσο του Rms και του ξ . Παρ'όλα αυτά η επίδραση της λοξότητας γίνεται αξιοσημείωτη όταν αυξάνουμε το Rms . Ο τρόπος συμπεριφοράς της εξάρτησης αυτής είναι ο ακόλουθος: για μικρά Rms , η ενεργός επιφάνεια αυξάνεται ενώ για μεγάλα μειώνεται καθώς μεταβάλλεται η λοξότητα από το μηδέν. Ένα κατώφλι Rms^* μπορεί να οριστεί για να ποσοτικοποιήσει αυτή τη μετάβαση και αυξάνεται όσο αυξάνεται το ξ . Τέλος, η επίδραση της κύρτωσης γίνεται αισθητή για μικρές τιμές [1,3] γύρω από μηδενική λοξότητα, όπου η ενεργός επιφάνεια μειώνεται για μικρά Rms και αυξάνεται για τα υψηλά. Αυτό δημιουργεί ένα όμοιο κατώφλι Rms^* όπως στην επίδραση της λοξότητας.

4.3 Αποτελέσματα II: Σύνδεση δομικών και λειτουργικών μέσω μεθόδων μηχανικής μάθησης

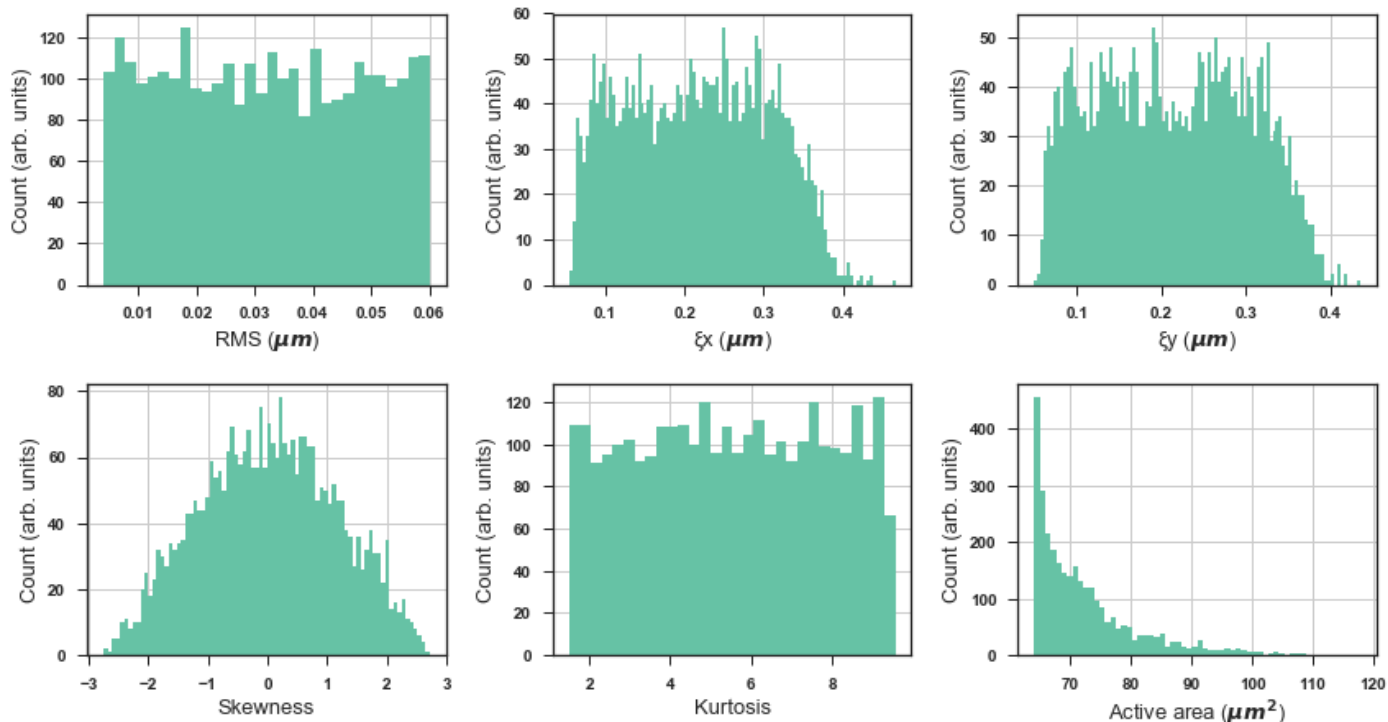
Στη προηγούμενη υποενότητα είδαμε πώς η λειτουργική παράμετρος που εξετάζουμε (ενεργός επιφάνεια) εξαρτάται από τις δομικές (Rms, ξ_x , ξ_y , λοξότητα και κύρτωση). Σε αυτή την υποενότητα θα χρησιμοποιήσουμε μεθόδους (μοντέλα) της μηχανικής μάθησης για να αναπαράγουμε αυτή τη σύνδεση και να ελέγξουμε κατά πόσο είναι επιτυχής. Τα μοντέλα αυτά θα μπορούν, να κάνουν προβλέψεις για την ενεργό επιφάνεια δίνοντας τιμές από τις δομικές παραμέτρους αλλά και να εντοπίσουν ποιες παράμετροι ήταν οι σημαντικότεροι για αυτή τη πρόβλεψη. Φυσικά, τα μοντέλα αυτά για δημιουργηθούν θα πρέπει να εκπαιδευτούν και να ελεγχθούν πάνω σε δεδομένα-επιφάνειες με καθορισμένες τιμές δομικών και λειτουργικών παραμέτρων. Έτσι αρχικά, δημιουργούμε αυτές τις βάσεις δεδομένων (επιφάνειες) από τη μεθοδολογία προσομοίωσης της ενότητας 3.2.

4.3.1 Βάσεις δεδομένων εκπαίδευσης και ελέγχου

Για την εκπαίδευση και τον έλεγχο των μοντέλων μηχανικής μάθησης δημιουργήθηκε μια βάση δεδομένων από προσομοιωμένες τραχιές επιφάνειες. Συγκεκριμένα, δημιουργήθηκαν επιφάνειες με διαφορετικά εύρη τιμών από δομικές παραμέτρους (Rms, μήκη συσχέτισης, λοξότητα και κύρτωση) με την αντίστοιχη λειτουργική παράμετρο (ενεργό επιφάνεια). Συνεπώς καταγράφηκε και αποθηκεύτηκε μια βάση δεδομένων από αυτές τις επιφάνειες με τις αντίστοιχες τιμές παραμέτρων. Αυτό το βήμα είναι ιδιαίτερα σημαντικό διότι η ποιότητα λειτουργίας των μοντέλων εξαρτάται από τα δεδομένα εκπαίδευσης καθώς και από τον έλεγχο απόδοσης τους. Ένα επιτυχές μοντέλο σε ένα περίπλοκο σύστημα πρέπει να εκπαιδευτεί σε δεδομένα με μεγάλη κλίμακα και εύρος τιμών παραμέτρων ώστε να αποφευχθούν φαινόμενα όπως της υπερεκπαίδευσης (Υποενότητα 1.2.3).

Τα χαρακτηριστικά των δύο βάσεων δεδομένων (Εκπαίδευσης και Ελέγχου) φαίνονται στους Πίνακες 4.1 α) και β) αντίστοιχα. Στα Σχήματα 4.7 α) και β) παρουσιάζονται τα περιεχόμενα αυτών των δεδομένων σε ιστογράμματα ανά δομική και λειτουργική παράμετρο:

Βάση δεδομένων εκπαίδευσης

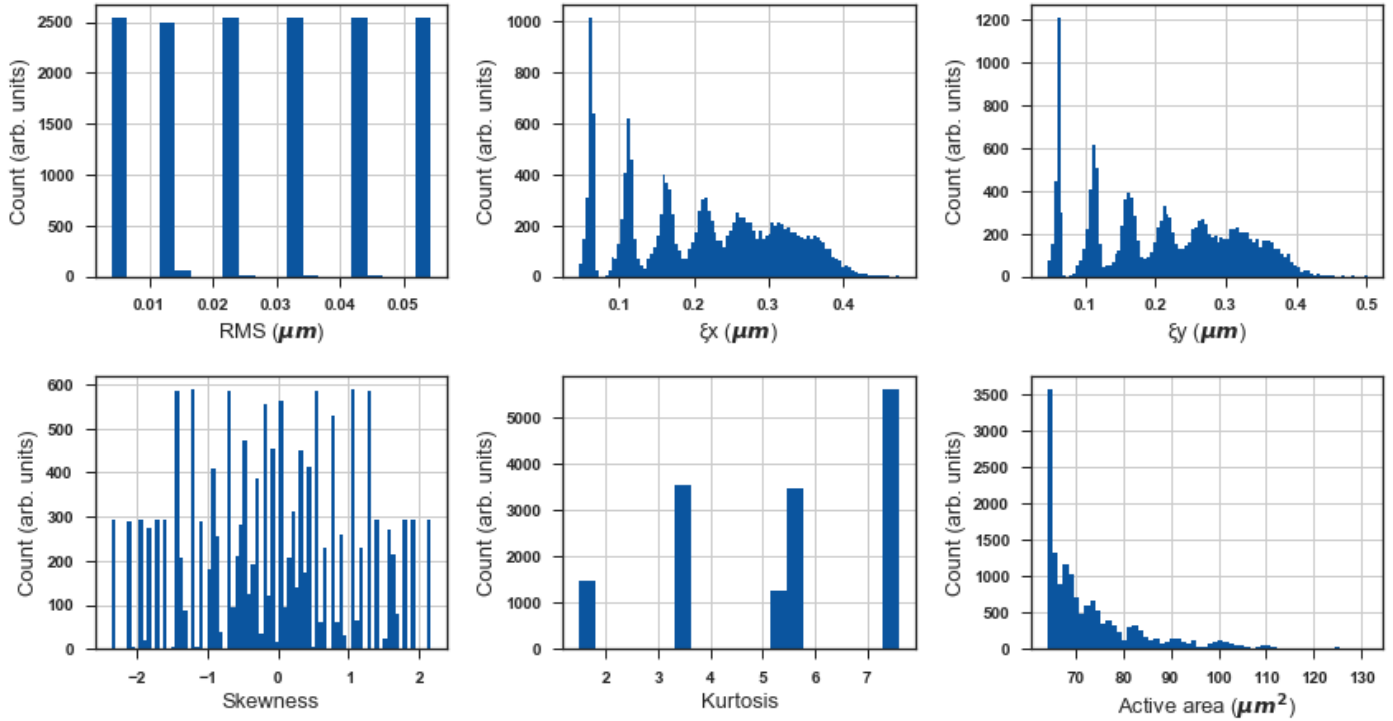


Σχήμα 4.7α) Βάση δεδομένων εκπαίδευσης. Ιστογράμματα δομικών (Rms, ξx,ξy, skewness, kurtosis) και λειτουργικής παραμέτρου A. Αυτά τα δεδομένα χρησιμοποιήθηκαν για να εκπαιδεύσουν τα μοντέλα μηχανικής μάθησης

	Rms (μm)	ξx (μm)	ξy (μm)	Skewness	Kurtosis	Active Area (μm ²)
count	3053	3053	3053	3053	3053	3053
mean	0.032	0.22	0.22	0.02	5.51	73
std	0.016	0.09	0.09	1.14	2.31	8.7
min	0.004	0.05	0.05	-2.75	1.50	64
25%	0.018	0.14	0.14	-0.82	3.57	66
50%	0.032	0.22	0.21	0.03	5.47	70
75%	0.046	0.29	0.29	0.85	7.54	76
max	0.060	0.47	0.44	2.72	9.56	118

Πίνακας 4.1 α) Στατιστικά χαρακτηριστικά της βάσης δεδομένων εκπαίδευσης

Βάση δεδομένων ελέγχου απόδοσης μοντέλων



Σχήμα 4.7 β) Βάση δεδομένων ελέγχου απόδοσης μοντέλων. Ιστογράμματα δομικών (Rms, ξx, ξy, skewness, kurtosis) και λειτουργικής παραμέτρου Active Area. Αυτά τα δεδομένα χρησιμοποιήθηκαν για να ελέγξουν την απόδοση των μοντέλων μηχανικής μάθησης.

	Rms (μm)	ξx (μm)	ξy (μm)	Skewness	Kurtosis	Active Area (μm ²)
count	15288	15288	15288	15288	15288	15288
mean	0.029	0.21	0.21	-0.08	5.4	73
std	0.017	0.10	0.10	1.13	2.0	10
min	0.004	0.05	0.05	-2.37	1.5	64
25%	0.014	0.12	0.12	-0.95	3.5	65
50%	0.029	0.21	0.21	-0.05	5.5	69
75%	0.044	0.29	0.29	0.80	7.5	77
max	0.054	0.48	0.50	2.20	7.6	131

Πίνακας 4.1 β) Στατιστικά χαρακτηριστικά της βάσης δεδομένων ελέγχου απόδοσης.

Τα δεδομένα εκπαίδευσης χρησιμοποιούνται για τη δημιουργία των μοντέλων μηχανικής μάθησης ενώ τα δεδομένα ελέγχου για τη μελέτη απόδοσης των μοντέλων αλλά και για τον έλεγχο φαινομένων όπως της υπερεκπαίδευσης. Όπως θα δείξουμε στη συνέχεια, θα λαμβάνεται ένα συγκεκριμένο ποσοστό από τη βάση δεδομένων εκπαίδευσης για τη δημιουργία των μοντέλων.

Στη συνέχεια η αξιολόγησή τους θα γίνεται συγκρίνοντας την πρόβλεψη τους από πραγματικά δεδομένα ελέγχου της αντίστοιχης βάσης.

4.3.2 Παραδοχές, λογισμικό και μέτρα αξιολόγησης

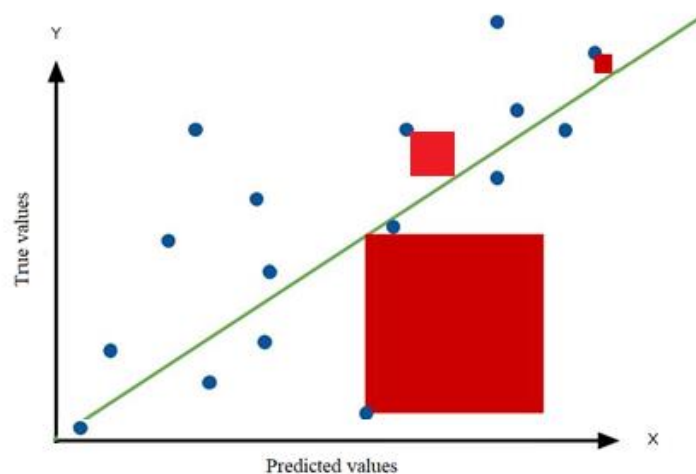
Η παραγωγή βάσεων δεδομένων των τραχιών επιφανειών πραγματοποιείται με τις τεχνικές που συζητήθηκαν στο κεφάλαιο 3. Στη συνέχεια τα δεδομένα εισάγονται σε περιβάλλον προγραμματισμού της Python ώστε να αξιοποιηθούν για τη μηχανική μάθηση. Συγκεκριμένα στη διπλωματική εργασία χρησιμοποιούνται μοντέλα γραμμικής παλινδρόμησης, τυχαίων δασών και νευρωνικών δικτύων (βιβλιοθήκη `skitlearn` [65]) καθώς και τα βαθιά νευρωνικά δίκτυα (βιβλιοθήκη `Keras` [66]).

Η αξιολόγηση της προβλεπτικής ικανότητας των μοντέλων μηχανικής μάθησης θα πραγματοποιείται μέσω διαγραμμάτων απόδοσης. Τα διαγράμματα απόδοσης μετράνε το σφάλμα απόκλισης της προβλεπόμενης ενεργού επιφάνειας A_p από τη πραγματική A_r μέσω του ποσοστιαίου σφάλματος $RMSE$ (Relative Mean Square Error) (σχήμα 4.X) ως προς το προβλεπμένο εμβαδόν της επιφάνειας $A_{\text{προβολής}}$:

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (A_p - A_r)^2}{N}}$$

$$\text{Σφάλμα απόκλισης} = \frac{RMSE \cdot 100}{A_{\text{προβολής}}}$$

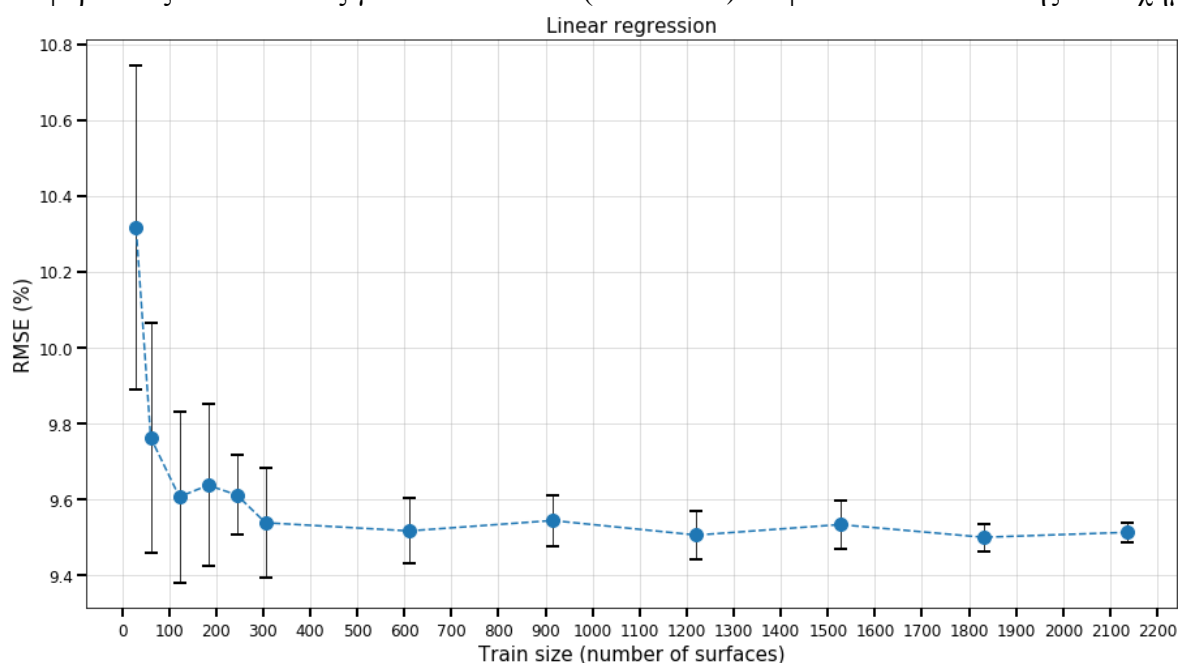
Για όλες τις επιφάνειες στη παρούσα διπλωματική ισχύει: $A_{\text{προβολής}} = L^2 = 64 \mu\text{m}^2$.



Σχήμα 4.8) Παράδειγμα μέτρησης σφάλματος $RMSE$ για τα διαγράμματα απόδοσης των μοντέλων μηχανικής μάθησης. Κάθε σημείο απεικονίζει τη πρόβλεψη μιας τιμής που πρόβλεψε το μοντέλο μηχανικής μάθησης (Predicted values) σε σύγκριση με τη πραγματική (True values). Με κόκκινο τετράγωνο απεικονίζεται το σφάλμα ενός σημείου-επιφάνειας από την ιδανική περίπτωση (πράσινη γραμμή). Αθροίζοντας όλα τα σφάλματα βρίσκουμε τη τιμή $RMSE$.

4.3.3 Αποτελέσματα μοντέλου γραμμικής παλινδρόμησης

Παρακάτω παρουσιάζονται τα αποτελέσματα του μοντέλου γραμμικής παλινδρόμησης για τη σύνδεση των δομικών παραμέτρων (Rms, μηκών συσχέτισης, λοξότητας και κύρτωσης) με την λειτουργική παράμετρο της ενεργού επιφάνειας. Στο σχήμα 4.9 εμφανίζεται η μέση τιμή του ποσοστιαίου σφάλματος RMSE και η τυπική απόκλιση των προβλεπόμενων τιμών ενεργού επιφάνειας για διάφορα μεγέθη δεδομένων εκπαίδευσης (Train Size). Το ποσοστιαίο σφάλμα RMSE υπολογίστηκε ύστερα από τη σύγκριση των προβλεπόμενων με τις αντίστοιχες πραγματικές τιμές ενεργού επιφάνειας της βάσης δεδομένων ελέγχου (υποενοότητα 4.4). Η κάθε μέση τιμή και τυπική απόκλιση του υπολογιζόμενου σφάλματος RMSE εκτιμήθηκε για 20 διαφορετικές εκπαιδεύσεις για το κάθε ποσό (Train Size) επιφανειών εκπαίδευσης του σχήματος.

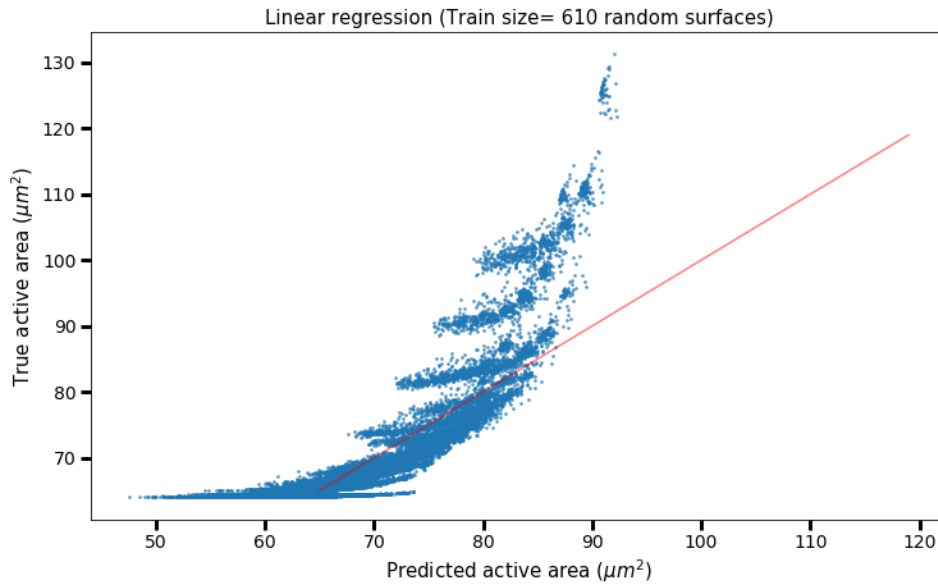


Σχήμα 4.9) Διάγραμμα απόδοσης μοντέλων γραμμικής παλινδρόμησης (RMSE) σε συνάρτηση με το μέγεθος της βάσης εκπαίδευσης δηλ. τον αριθμό επιφανειών που λαμβάνονται υπόψη στο στάδιο της εκπαίδευσης.

Όπως αναμένεται, το RMSE μειώνεται (η απόδοση βελτιώνεται) καθώς αυξάνεται ο αριθμός επιφανειών που χρησιμοποιείται για την εκπαίδευση των μοντέλων και φαίνεται να σταθεροποιείται στο 9.5% για 300 επιφάνειες και πάνω. Από τις 300 και μέχρι τις 100 παρουσιάζεται μια μικρή αύξηση στο μέσο σφάλμα της τάξεως 0.1%, ενώ από τις 100 επιφάνειες εκπαίδευσης και κάτω σημειώνεται μια απότομη αύξηση στο ποσοστιαίο σφάλμα που φτάνει το 10.3%. Επιπλέον, όσο μειώνονται τα δεδομένα εκπαίδευσης από τις 300 επιφάνειες και κάτω η απόκλιση της μέσης τιμής αυξάνεται ιδιαίτερα. Η μείωση της απόδοσης μπορεί να δικαιολογηθεί

λόγω της δυσκολίας που έχουν τα μοντέλα να αναπαράγουν τις εξαρτήσεις των παραμέτρων μεταξύ τους όταν εκπαιδεύονται με λίγα δεδομένα.

Σε αυτό το σημείο θα ήταν χρήσιμο να δοθεί και το διάγραμμα προβλέψεων πραγματικών μετρήσεων ενεργής επιφάνειας (True active area) σε σύγκριση με τη προβλεπόμενη (Predicted active area). Στο παρακάτω σχήμα παρουσιάζουμε ένα τέτοιο διάγραμμα για ένα σταθερό ποσό 610 επιφανειών εκπαίδευσης.

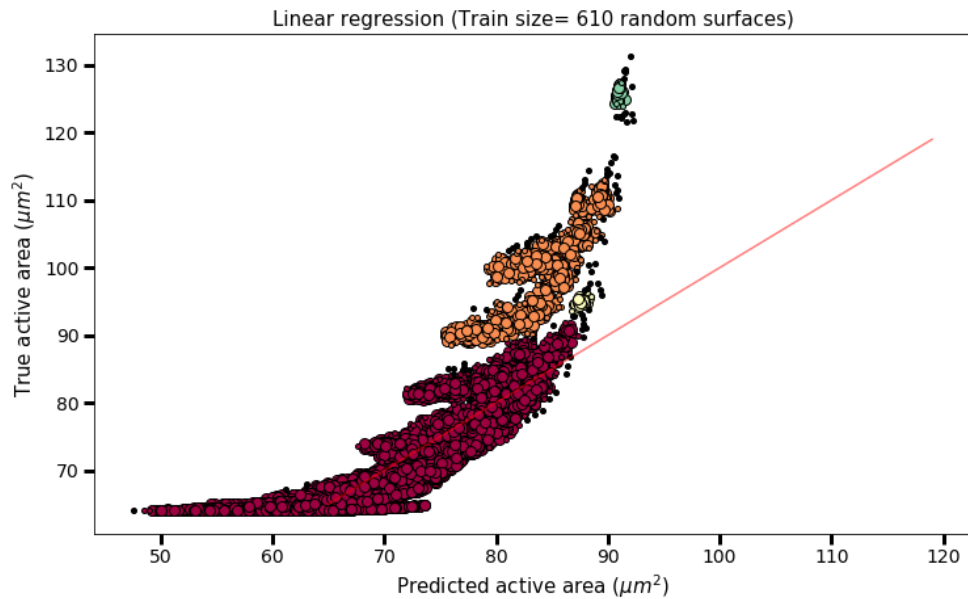


Σχήμα 4.10) Διάγραμμα πραγματικών τιμών ενεργού επιφάνειας ως προς τις προβλεπόμενες από το μοντέλο γραμμικής παλινδρόμησης. Το συγκεκριμένο μοντέλο εκπαιδεύτηκε με 610 τυχαία δεδομένα επιφανειών από τα συνολικά δεδομένα εκπαίδευσης της υποενότητας 4.3.

Το σχήμα 4.10 υποδεικνύει πως για ενεργές επιφάνειες άνω των $80 \mu\text{m}^2$ υπάρχει σημαντική υποεκτίμηση από την ιδανική πρόβλεψη (κόκκινη γραμμή). Για να κατανοηθεί περισσότερο ο λόγος αυτής της απόκλισης θα πρέπει να εντοπιστούν αν υπάρχουν κάποια ιδιαίτερα χαρακτηριστικά αυτών των υποεκτιμημένων επιφανειών.

●	Rms(μm)	$\xi_x(\mu\text{m})$	$\xi_y(\mu\text{m})$	Skewness	Kurtosis	Active Area(μm^2)
Count	1343	1343	1343	1343	1343	1343
mean	0.048	0.14	0.14	-0.08	5.4	99
std	0.006	0.10	0.10	1.1	2.0	6
min	0.034	0.05	0.05	-2.4	1.5	89
25%	0.044	0.06	0.06	-1.0	3.5	93
50%	0.044	0.07	0.07	-0.05	5.5	99
75%	0.054	0.21	0.21	0.8	7.5	102
max	0.054	0.39	0.39	2.2	7.6	113

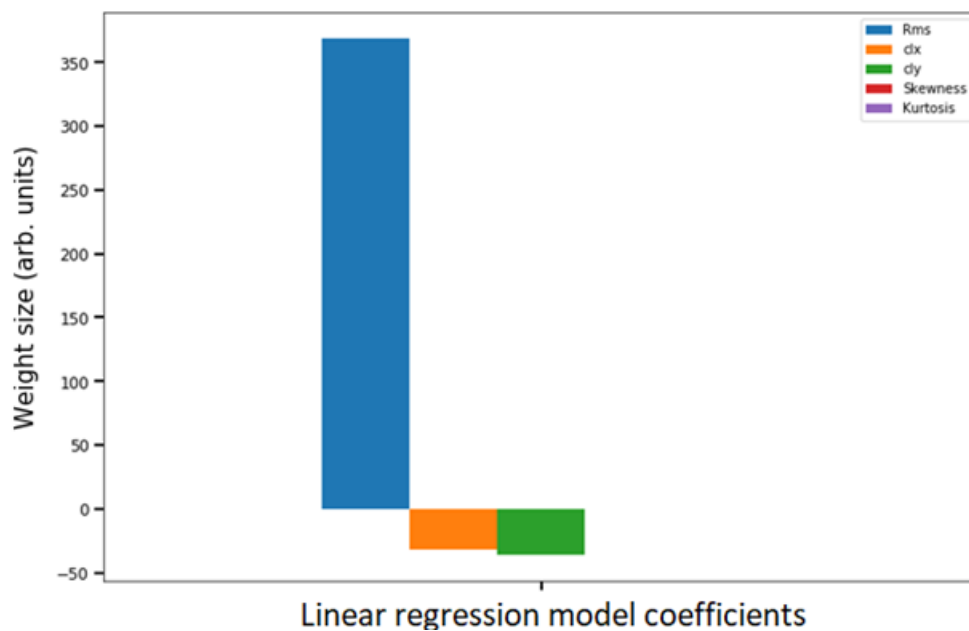
Πίνακας 4.3) Στατιστικά χαρακτηριστικά των 1343 επιφανειών βάσης δεδομένων ελέγχου που έχουν υποεκτιμηθεί από το μοντέλο γραμμικής παλινδρόμησης.



Σχήμα 4.11 Ίδιο διάγραμμα με αυτό του σχήματος 5.8 με τα σημεία ομαδοποιημένα σε διαφορετικά χρώματα. Κάθε ομάδα χρώματος αντιπροσωπεύει διαφορετικές εκτιμήσεις προβλεπόμενων επιφανειών από τα μοντέλα. Με πορτοκαλί και πράσινο έχουν ομαδοποιηθεί οι επιφάνειες που είναι υποεκτιμημένες από το μοντέλο γραμμικής παλινδρόμησης.

Το σχήμα 4.11 περιέχει κάθε πρόβλεψη αλλά ομαδοποιημένη σε χρώματα ανάλογα με την απόδοση της. Συνεπώς κάθε ομάδα προβλέψεων θα έχει και αντίστοιχα, δικά της χαρακτηριστικά δομικών και λειτουργικών παραμέτρων. Από το πίνακα 4.3 μπορεί να παρατηρηθεί ότι οι πορτοκαλί-υποεκτιμώμενες (σχήμα 4.9) επιφάνειες αποτελούνται από μεγάλες τιμές του Rms με μέση τιμή $\overline{Rms} = 48 \text{ nm}$ αντί της συνολικής 32nm, ενώ το εύρος διακύμανσης των τιμών του Rms περιορίζεται στις μεγάλες τιμές >34nm. Η λοξότητα και κύρτωση και τα μήκη συσχέτισης από τη άλλη πλευρά δεν φαίνεται αρχικά να έχουν κάποιο ιδιαίτερο χαρακτηριστικό στο πίνακα καθώς καλύπτουν όλο το φάσμα τιμών που τους δόθηκε. Αυτή η υποεκτίμηση μπορεί να δικαιολογηθεί από τη μελέτη της ενότητας 4.2.1 και συγκεκριμένα από το σχήμα 5.1γ. στο οποίο δείχνεται ότι η εξάρτηση της ενεργού επιφάνειας από τα μήκη συσχέτισης ξ είναι μη-γραμμική (σχήμα 4.2γ). Έτσι, στις περιοχές υψηλών τιμών Rms (όπως στο πίνακα 4.2), αυτή η εξάρτηση γίνεται είναι σημαντική καθώς επηρεάζει έντονα την ενεργό επιφάνεια. Συνεπώς το γραμμικό μοντέλο παλινδρόμησης δε μπορεί να αναπαράγει αυτές τις μη-γραμμικές εξαρτήσεις.

Στη συνέχεια αναζητούμε τις τιμές των συντελεστών κάθε παραμέτρου έτσι όπως δόθηκαν μετά τη διαδικασία της εκπαίδευσης. Οι συντελεστές θα μπορέσουν να μας δώσουν τη πληροφορία για το ποιες παραμέτρους θεώρησε το μοντέλο πιο σημαντικές για τη πρόβλεψη της ενεργού επιφάνειας. Συγκεκριμένα, σε ένα μοντέλο γραμμικής παλινδρόμησης που εκπαιδεύτηκε σε 610 δεδομένα, οι συντελεστές βαρύτητας στις δομικές παραμέτρους για τη πρόβλεψη της ενεργού επιφάνειας βρέθηκαν όπως φαίνεται στο σχ. 4.12:



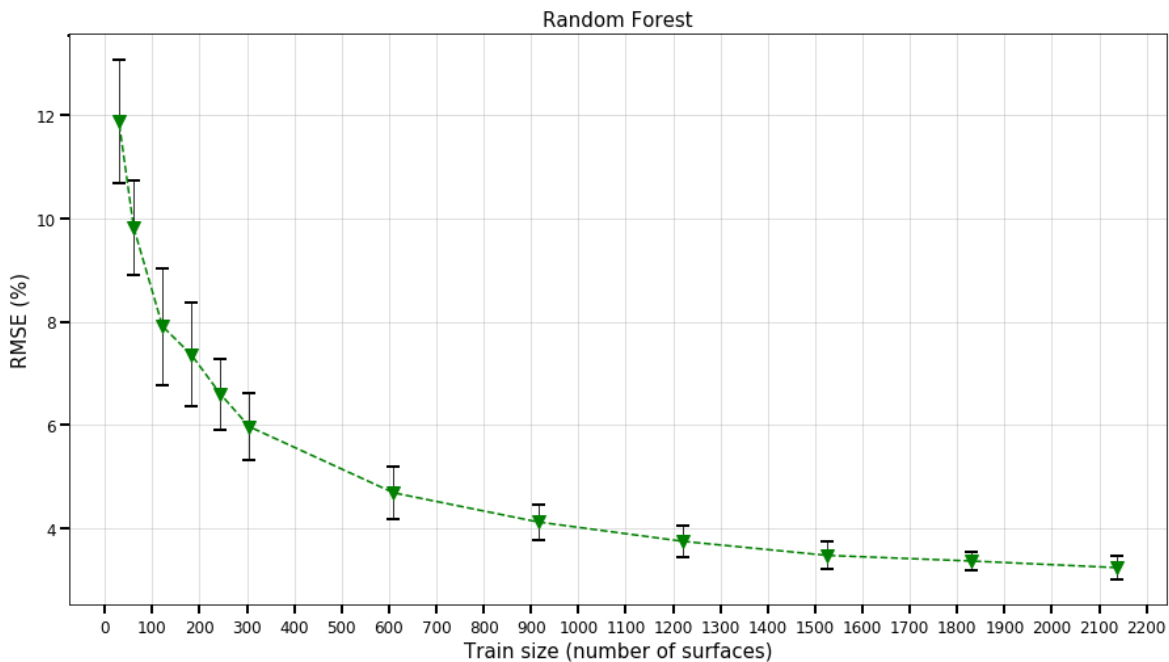
Σχήμα 4.12) Συντελεστές βαρύτητας των δομικών παραμέτρων στην πρόβλεψη της ενεργής επιφάνειας όπου προσδιορίζονται από το μοντέλο γραμμικής παλινδρόμησης που εκπαιδεύτηκε με 610 τυχαίες επιφάνειες.

Από το σχήμα 4.12 φαίνεται πως το Rms έχει λάβει το μεγαλύτερο συντελεστή. Αμέσως μετά έρχονται τα μήκη συσχέτισης κατά τους άξονες x και y έχοντας πιο μικρό αλλά αξιοσημείωτο

συντελεστή με αρνητικό πρόσημο. Τέλος στην λοξότητα και κύρτωση το μοντέλο ανέθεσε κατά προσέγγιση μηδενικό συντελεστή συνεισφοράς για τη πρόβλεψη της ενεργού επιφάνειας.

4.5.2 Αποτελέσματα μοντέλου τυχαίων δασών

Στη συνέχεια παρουσιάζονται τα αποτελέσματα του μοντέλου μηχανικής μάθησης τυχαίων δασών. Στο σχήμα 4.13 εμφανίζεται (παρόμοια με το σχήμα 4.9) η μέση τιμή και η τυπική απόκλιση του ποσοστιαίου σφάλματος RMSE των προβλεπόμενων τιμών ενεργού επιφάνειας για διάφορα μεγέθη δεδομένων-επιφανειών εκπαίδευσης (Train Size).

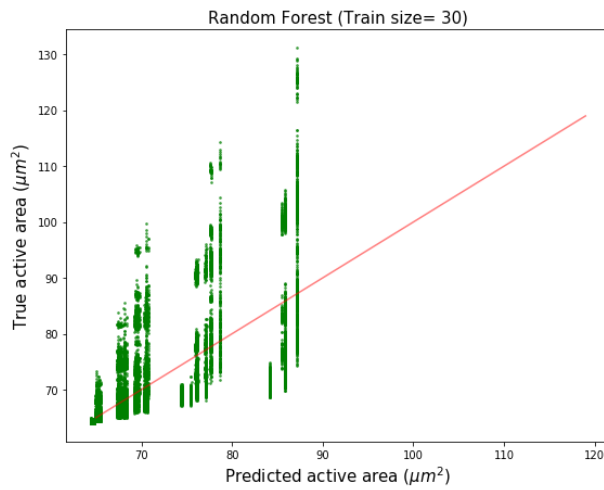


Σχήμα 4.13) Διάγραμμα απόδοσης των μοντέλων τυχαίων δασών σε συνάρτηση με το μέγεθος του συνόλου εκπαίδευσης (αριθμός επιφανειών) που χρησιμοποιήθηκε στο στάδιο της εκπαίδευσης

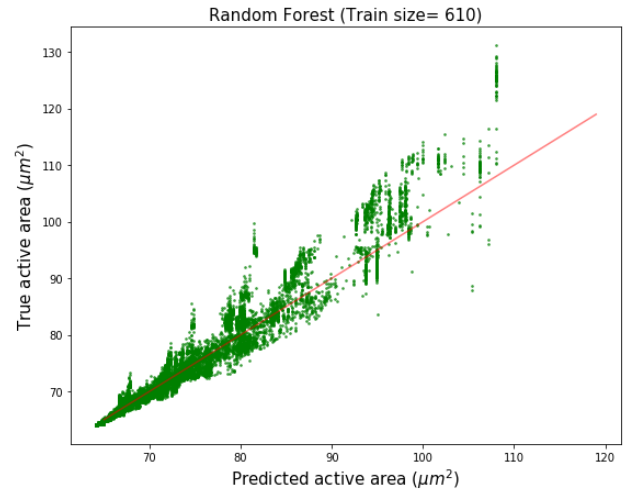
Από το διάγραμμα φαίνεται πως για μεγάλο ποσό δεδομένων-επιφανειών εκπαίδευσης το ποσοστιαίο σφάλμα του μοντέλου τυχαίων δασών τείνει μειούμενο στα 3.5%, τιμή αρκετά μικρότερη από την αντίστοιχη των μοντέλων γραμμικής παλινδρόμησης. Καθώς μειώνονται τα δεδομένα εκπαίδευσης το σφάλμα αυτό αυξάνεται σταδιακά μέχρι τα 600 δεδομένα όπου ανέρχεται σε ποσοστό 4.8%. Στη συνέχεια, κάτω από τα 300 δεδομένα εκπαίδευσης το ποσοστιαίο σφάλμα RMSE έχει μια απότομη αύξηση που φτάνει τα 12% για 30 δεδομένα εκπαίδευσης. Η τυπική απόκλιση των τιμών του διαγράμματος επίσης παρουσιάζει αύξηση καθώς μειώνονται τα δεδομένα εκπαίδευσης.

Και εδώ θα ήταν χρήσιμο να παρουσιαστεί το διάγραμμα προβλέψεων πραγματικών μετρήσεων ενεργής επιφάνειας σε σύγκριση με τη προβλεπόμενη από το μοντέλο για δύο διαφορετικά μεγέθη (μικρό και μεγάλο) της βάσης δεδομένων εκπαίδευσης (Σχήμα 4.12 α και β).

α)



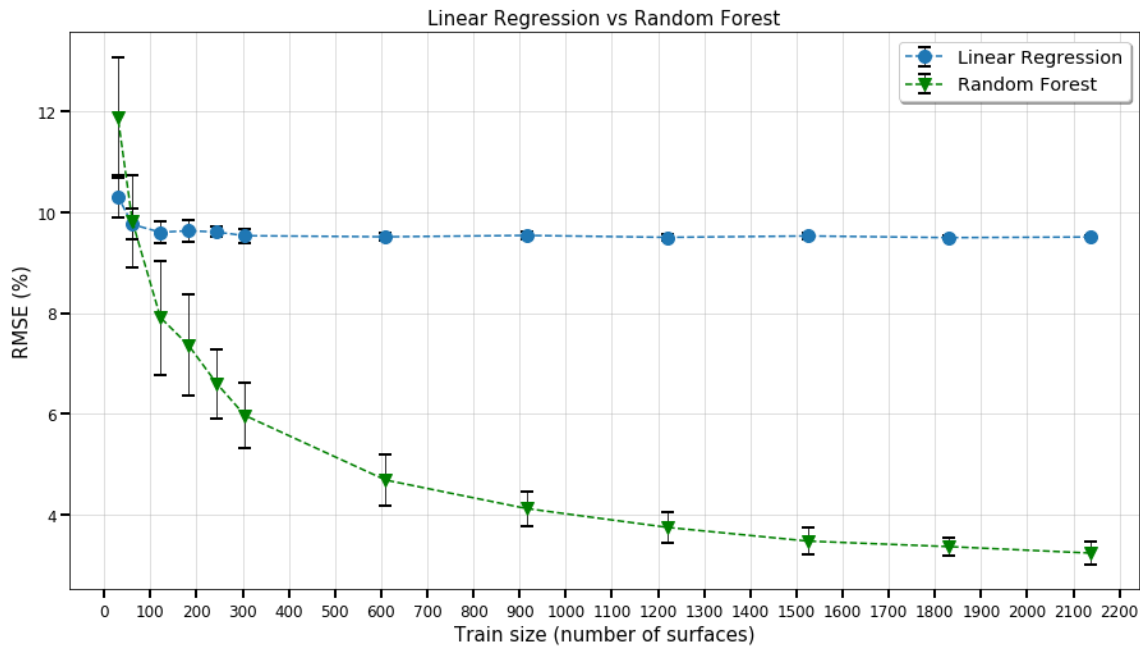
β)



Σχήμα 4.14) Διάγραμμα πραγματικών τιμών ενεργού επιφάνειας ως προς τις προβλεπόμενες από το μοντέλο τυχαίων δασών. Τα μοντέλα εκπαιδεύτηκαν με α) 30 και β) 610 τυχαίες επιφάνειες αντίστοιχα. Είναι εμφανής η βελτίωση της πρόβλεψης με την αύξηση των δεδομένων εκπαίδευσης.

Από το σχήμα 4.14 α) φαίνεται η χαμηλή ικανότητα πρόβλεψης που έχει το μοντέλο τυχαίων δασών για μικρό ποσό 30 δεδομένων εκπαίδευσης. Αντιθέτως εάν δοθούν αρκετά δεδομένα η απόδοση του μπορεί να είναι πολύ ισχυρή όπως φαίνεται στο σχήμα 4.14 β όπου τα σημεία πρόβλεψης του μοντέλου ακολουθούν αρκετά καλά την ιδανική γραμμή με μια μικρή απόκλιση ~ 5-10% στις υψηλές τιμές της ενεργού επιφάνειας.

Στα επόμενα διαγράμματα εμφανίζεται η σύγκριση μεταξύ του μοντέλου γραμμικής παλινδρόμησης και τυχαίων δασών:

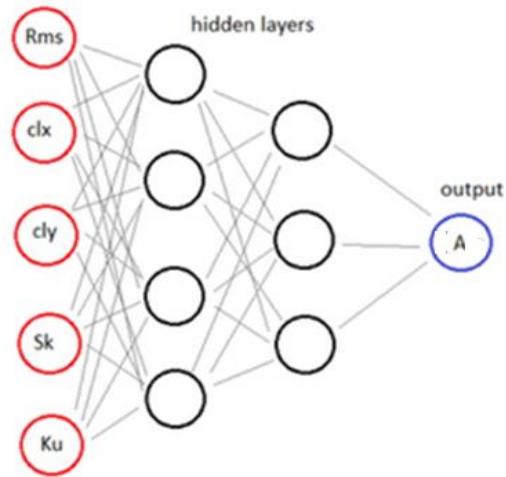


Σχήμα 4.15) Διαγράμματα απόδοσης μοντέλων γραμμικής παλινδρόμησης και τυχαίων δασών ως συνάρτηση του αριθμού επιφανειών που χρησιμοποιήθηκαν στο στάδιο της εκπαίδευσης.

Από τη σύγκριση των δύο μοντέλων για μεγάλα ποσά εκπαίδευσης φαίνεται πως η απόδοση των τυχαίων δασών είναι πολύ καλύτερη σε σχέση με αυτή της γραμμικής παλινδρόμησης όπως ήδη σημειώσαμε. Η διαφορά τους μικραίνει καθώς μειώνονται τα δεδομένα εκπαίδευσης μέχρι τα 30 όπου το μοντέλο τυχαίων δασών αποκτά μεγαλύτερο σφάλμα. Εδώ φαίνεται μάλιστα και η σημασία που δίνεται στο ποσό των δεδομένων εκπαίδευσης για το μοντέλο τυχαίων δασών σε αντίθεση με το μοντέλο της γραμμικής παλινδρόμησης. Στη γραμμική παλινδρόμηση υπάρχει μια σταθερότητα στην απόδοση του για τα μεγάλα ποσά δεδομένων εκπαίδευσης σε αντίθεση με το μοντέλο τυχαίων δασών που παρουσιάζει συνεχώς μια αύξουσα μεταβολή στο ποσοστιαίο σφάλμα RMSE.

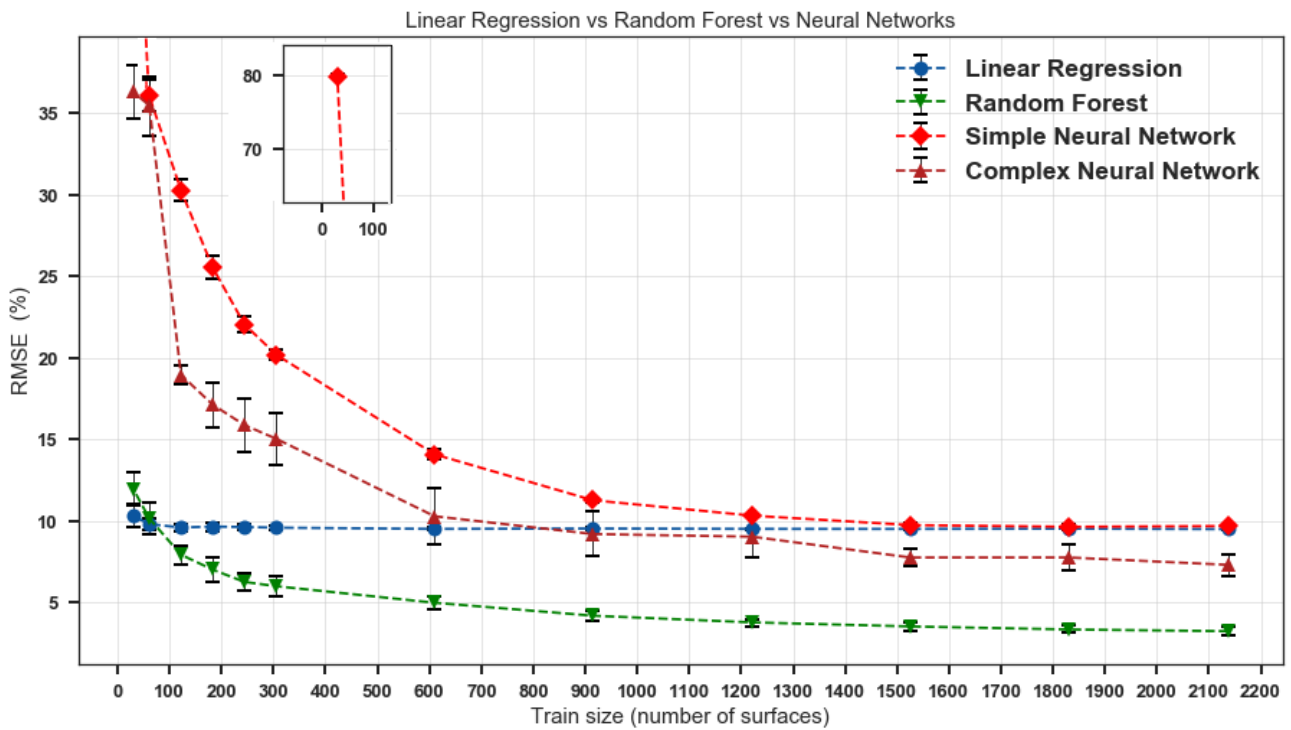
5.5.3 Μοντέλα Νευρωνικών δικτύων

Στη συνέχεια παρουσιάζονται αποτελέσματα μοντέλων νευρωνικών δικτύων απλής και σύνθετης αρχιτεκτονικής. Ως νευρωνικό δίκτυο απλής αρχιτεκτονικής θεωρούμε δίκτυο με δύο εσωτερικά κρυφά επίπεδα τεσσάρων και τριών (4,3) κόμβων (Σχήμα 4.16) αντίστοιχα και ως σύνθετο, δίκτυο πέντε κρυφών εσωτερικών επιπέδων με (15,25,40,25,15) κόμβους.



Σχήμα 4.16) Αναπαράσταση αρχιτεκτονικής απλού νευρωνικού δικτύου όπως χρησιμοποιείται στη διπλωματική.

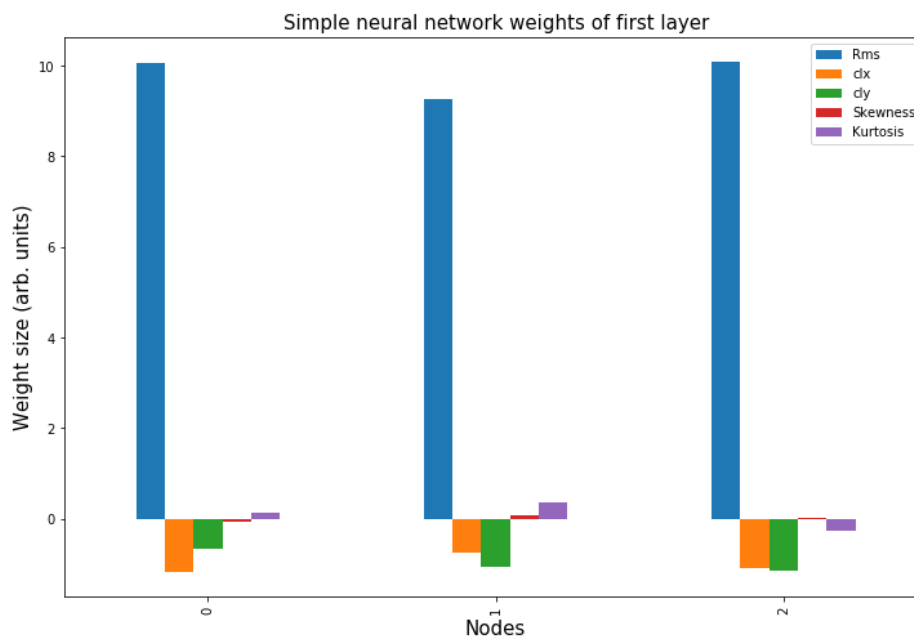
Η απόδοση τους φαίνεται στα παρακάτω σχήματα συγκριτικά με τα προηγούμενα μοντέλα:



Σχήμα 4.17) Διαγράμματα απόδοσης μοντέλων απλών, σύνθετων νευρωνικών δικτύων, γραμμικής παλινδρόμησης και τυχαίων δασών ως συνάρτηση με τυχαίο ποσό επιφανειών για το στάδιο της εκπαίδευσης.

Το απλό νευρωνικό δίκτυο όπως εμφανίζεται στο σχήμα 4.17 έχει το μεγαλύτερο ποσοστιαίο σφάλμα RMSE σε όλο το φάσμα μεγέθους δεδομένων εκπαίδευσης. Συγκεκριμένα, ξεκινώντας από την ίδια απόδοση με το γραμμικό μοντέλο παλινδρόμησης (~10%) μετά τα 1500 δεδομένα εκπαίδευσης το ποσοστιαίο σφάλμα του αυξάνεται με μεγάλο ρυθμό ιδιαίτερα για κάτω από 100 δεδομένα όπου φτάνει το 80%. Το σύνθετο νευρωνικό δίκτυο από τη άλλη πλευρά φαίνεται να έχει καλύτερη απόδοση για πάνω 1000 δεδομένα εκπαίδευσης (~4% λιγότερο σφάλμα από το απλό νευρωνικό δίκτυο) αλλά και αυτό στη συνέχεια, για κάτω από 100 δεδομένα εκπαίδευσης, χάνει τη προβλεπτική ικανότητά του. Η χαμηλή απόδοση των δύο νευρωνικών δικτύων πιθανά να οφείλεται στην αρχιτεκτονική τους, δηλαδή στον αριθμό επιπέδων και κόμβων. Η αρχιτεκτονική αυτή λοιπόν δεν επιτρέπει στα μοντέλα να αναπαράγουν με επιτυχία τις εξαρτήσεις μεταξύ των δομικών παραμέτρων με την ενεργό επιφάνεια.

Από το απλό νευρωνικό δίκτυο μπορούμε με ευκολία να δούμε τις τιμές των βαρών για κάθε δομική παράμετρο όπως δόθηκαν από το μοντέλο μετά τη διαδικασία της εκπαίδευσης. Συγκεκριμένα για δίκτυο (τριών και τεσσάρων κόμβων) που εκπαιδεύτηκε σε 1300 τυχαίες επιφάνειες, ανατέθηκαν τα παρακάτω βάρη (για το πρώτο επίπεδο) στις δομικές παραμέτρους για τη πρόβλεψη της ενεργού επιφάνειας:



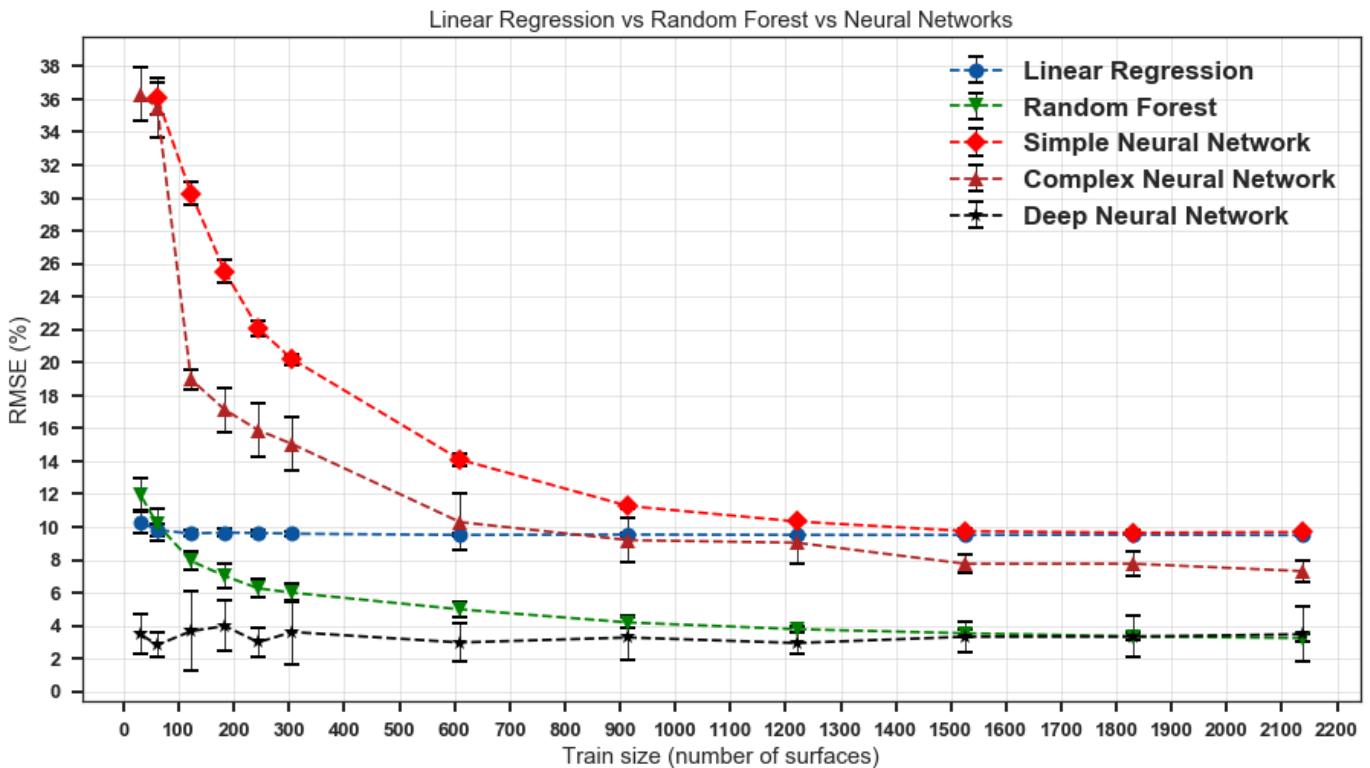
Σχήμα 4.18) Συντελεστές βάρους των δομικών παραμέτρων για το πρώτο επίπεδο απλού νευρωνικού δικτύου (3,4) όπως προσδιορίστηκαν ύστερα από την εκπαίδευση του με 1000 επιφάνειες.

Από το σχήμα 4.18 φαίνεται πως το Rms συνεισφέρει περισσότερο από κάθε άλλη παράμετρο εισαγωγής στη πρόβλεψη της ενεργού επιφάνειας. Τα μήκη συσχέτισης συνεισφέρουν αρνητικά αλλά σε πολύ μικρότερο βαθμό από το Rms. Η λοξότητα και η κύρτωση σε αντίθεση με

το γραμμικό μοντέλο έχουν αποκτήσει έναν πολύ μικρό συντελεστή βάρους και εμφανίζονται στα διαγράμματα. Τα αποτελέσματα συμφωνούν με τα αντίστοιχα της γραμμικής παλινδρόμησης ως προς τη σχετική βαρύτητα των R_{ms} , ξ_x και ξ_y και επιπλέον ανιχνεύουν την παρουσία των παραμέτρων Λοξότητας και Κύρτωσης .

Τέλος θα παρουσιαστούν τα αποτελέσματα από ένα βαθύ νευρωνικό δίκτυο (Deep Neural Network). Το δίκτυο αποτελείται από τρία κρυφά εσωτερικά επίπεδα, το πρώτο με δέκα κόμβους ενώ το δεύτερο και τρίτο με εκατό (10,100,100). Για την αποφυγή της υπερεκπαίδευσης (overfitting υποενότητα 1.2.3.) στις τιμές βάρους του τελευταίου επιπέδου επιβλήθηκε γκαουσιανός θόρυβος κατά τη διάρκεια της εκπαίδευσης. Ο θόρυβος αυτός αλλάζει τυχαία τις τιμές βάρους κατά ένα μικρό ποσοστό στη γκαουσιανή κατανομή. Η κατανομή επιλέχθηκε να έχει μέση τιμή μηδέν και τυπική απόκλιση ίση με ένα.

Η απόδοση του μοντέλου φαίνεται στα παρακάτω σχήματα σε σύγκριση με τα προηγούμενα:

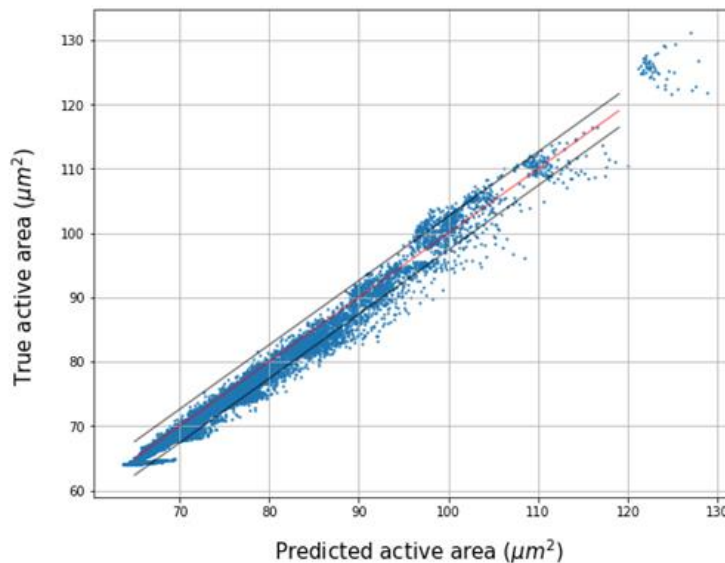


Σχήμα 4.19) Διαγράμματα απόδοσης νευρωνικών δικτύων, γραμμικής παλινδρόμησης και τυχαίων δασών ως συνάρτηση με τυχαίο ποσό επιφανειών για το στάδιο της εκπαίδευσης.

Όπως φαίνεται από το σχήμα 4.19 το βαθύ νευρωνικό δίκτυο σημειώνει τη καλύτερη απόδοση σε όλο το φάσμα μεγέθους δεδομένων εκπαίδευσης συγκριτικά με τα υπόλοιπα μοντέλα. Το ποσοστιαίο σφάλμα RMSE παραμένει σταθερό γύρω στα 3.5% που είναι η τιμή που τείνει το

σφάλμα στην πρόβλεψη του μοντέλου των τυχαίων δασών. Μεγάλο ενδιαφέρον έχει επίσης, η επιτυχία του μοντέλου στα πολύ μικρά ποσά δεδομένων εκπαίδευσης. Όπως βλέπουμε από το σχήμα 4.19, τα περισσότερα μοντέλα χάνουν τη καλή απόδοση τους για μικρό ποσό (~100) δεδομένων εκπαίδευσης.

Η επιτυχία του μοντέλου πρέπει να οφείλεται στην ικανότητα που έχει να αναπαραστήσει τις εξαρτήσεις μεταξύ των παραμέτρων με μεγάλη ακρίβεια λόγω της πλούσιας αρχιτεκτονικής του (πολλοί κόμβοι σε κάθε επίπεδο). Αυτό φαίνεται και από τη μορφή του διαγράμματος προβλέψεων πραγματικών μετρήσεων ενεργού επιφάνειας σε σύγκριση με τη προβλεπόμενη από το μοντέλο για μόλις 60 δεδομένα-επιφάνειες φαίνεται στο σχήμα 4.20:



Σχήμα 4.20) Διάγραμμα πραγματικών τιμών ενεργού επιφάνειας ως προς τις προβλεπόμενες για το βαθύ νευρωνικό δίκτυο με 60 δεδομένα εκπαίδευσης.

Στο παραπάνω σχήμα κάθε ενεργός επιφάνεια των δεδομένων ελέγχου προβλέπεται με καλή ακρίβεια από το βαθύ νευρωνικό δίκτυο ανεξαρτήτως των δομικών παραμέτρων τους. Η απόδοση του βαθύως νευρωνικού δικτύου για λίγες επιφάνειες εκπαίδευσης (<40) χαλάει όταν τα δεδομένα που θα λάβει για εκπαίδευση δε καλύπτουν ευρύ φάσμα στο χώρο των παραμέτρων Rms και ξ . Με απλά λόγια, τα μοντέλα αυτά χρειάζονται στα δεδομένα εκπαίδευσης όλη συμπεριφορά των κρίσιμων παραμέτρων (παραβολική και γραμμική συμπεριφορά Rms σε μεγάλο φάσμα και μη γραμμικότητα του ξ) ώστε να πραγματοποιήσουν τη παλινδρόμηση σε αυτά.

5. Σύνοψη και Συμπεράσματα

5.1 Πρόβλημα

Η νανοτεχνολογία και η τεχνητή νοημοσύνη αποτελούν δύο από τις σημαντικότερες εξελίξεις της σύγχρονης τεχνολογίας με άμεση και καταλυτική επιρροή στη ζωή μας. Η μέχρι τώρα σχέση τους είναι κυρίως μονόδρομη με τη νανοτεχνολογία να αποτελεί μία από τις κινητήριες δυνάμεις για την σύγχρονη έκρηξη των εφαρμογών της τεχνητής νοημοσύνης εξασφαλίζοντας το τεχνολογικό υπόβαθρο υλοποίησης των αλγορίθμων της. Στη παρούσα διπλωματική διερευνήσαμε τη δυνατότητα η σχέση αυτή να γίνει αμφίδρομη με την τεχνητή νοημοσύνη να προσφέρει λύσεις σε προβλήματα της νανοτεχνολογίας. Η αμφίδρομη αυτή σχέση επί του παρόντος βρίσκεται σε πρώιμο στάδιο και είναι επικεντρωμένη σε εφαρμογές όπως χρήση μεθόδων τεχνητής νοημοσύνης σε προβλήματα μικροσκοπίας, περιγραφής ιδιοτήτων υλικών, προσομοιώσεων στη ναοκλίμακα, σχεδιασμού νανοσυστημάτων και βιολογικών-ιατρικών εφαρμογών στη ναοκλίμακα [1]. Τα παραπάνω προβλήματα, όπως και άλλα που μπορεί να εφαρμοσθεί η τεχνητή νοημοσύνη, ανακύπτουν λόγω της συνήθους πολυπλοκότητας των διεργασιών στη ναοκλίμακα σε συνδυασμό με την απαιτούμενη ακρίβεια στη χρήση τους που συχνά καθιστούν ανεπαρκή τη χρήση της γνώσης και των μοντέλων προσομοίωσης που βασίζονται στις φυσικές θεωρίες και ερμηνείες ή και την προηγούμενη εμπειρία. Η κύρια λύση που προσφέρει η μηχανική μάθηση (ως υποπεδίο της τεχνητής νοημοσύνης) σε αυτά τα προβλήματα αποτελεί η χρήση στατιστικών μοντέλων που «εκπαιδεύονται» σε δεδομένα-μετρήσεις της εκάστοτε εφαρμογής ώστε να προβλέπουν συμπεριφορές και να αξιολογούν τη βαρύτητα των εμπλεκόμενων παραμέτρων. Η μηχανική μάθηση και η εξ'αυτής βασιζόμενη σε δεδομένα, γνώση μπορεί να προσφέρει καλύτερη διαχείριση και αξιολόγηση πολλών παραμέτρων πληροφοριών και ικανότητας γρήγορων προβλέψεων παραμέτρων με ελάχιστο κόστος.

Στη τρέχουσα εργασία επικεντρωθήκαμε στη χρήση αυτών των μεθόδων για να βελτιστοποιήσουμε ένα μέρος της διαδικασίας της παραγωγής νανοδομών, η οποία γενικά μπορεί να χωριστεί σε τρία στάδια: 1) Κατασκευή 2) Μετρολογικός χαρακτηρισμός 3) Εφαρμογή και χρήση. Μπορούμε να δούμε ότι κάθε στάδιο χαρακτηρίζεται από μια σειρά παραμέτρων. Αυτές οι παράμετροι συνήθως είναι πολλές και συσχετισμένες με πολύπλοκο τρόπο. Η διαδικασία παραγωγής των νανοδομών εμπλέκει αυτή την αλυσίδα σταδίων και ένα ερώτημα που προκύπτει είναι πως συνδέονται οι παράμετροι που εμπλέκονται σε κάθε στάδιο.

Στη παρούσα εργασία μελετήσαμε τέτοια ερωτήματα σε νανοδομημένες επιφάνειες με τραχύτητα και εστίασαμε στη σύνδεση του 2^{ου} και 3^{ου} σταδίου. Ένα βασικό πρόβλημα σε αυτές τις επιφάνειες αποτελεί ο μεγάλος αριθμός παραμέτρων που χρησιμοποιείται για το χαρακτηρισμό της τραχύτητας μίας επιφάνειας, χωρίς όμως να είναι σαφής η σύνδεση σε συγκεκριμένη επιθυμητή λειτουργικότητα [3][4]. Η μελέτη μας επικεντρώθηκε στη σύνδεση της ενεργού επιφάνειας, η οποία επηρεάζει τη λειτουργικότητα σε πολλές εφαρμογές (καταλυτική συμπεριφορά, βιοδραστικότητα, υδροφοβικότητα, ανακλαστικότητα κ.α.), αναζητώντας την εξάρτησή της από

δομικές παραμέτρους τραχύτητας ύψους και πλάτους (Rms, μήκη συσχέτισης, λοξότητα, κύρτωση).

Στο πρώτο μέρος της μελέτης αναζητήσαμε τη σύνδεση των παραμέτρων μέσα από προσομοιωμένες νανοεπιφάνειες με τραχύτητα ενώ στο δεύτερο ελέγξαμε κατά πόσο μπορούν τα εργαλεία μηχανικής μάθησης να συνεισφέρουν σε αυτή σύνδεση.

5.2 Μεθοδολογία

Στο πρώτο μέρος της μελέτης αρχικά, ακολουθήσαμε σχετική βιβλιογραφία για τη προσομοίωση επιφανειών με νανοτραχύτητα. Ειδικότερα, παρήγαμε συσχετισμένες Γκαουσιανές και μη-Γκαουσιανές νανοεπιφάνειες με καθορισμένες δομικές παραμέτρους (Rms, μήκη συσχέτισης, λοξότητα και κύρτωση) και την αντίστοιχη τιμή της ενεργού επιφάνειας. Στη συνέχεια, ελέγξαμε τους περιορισμούς της διακριτότητας και πεπερασμένου μήκους των επιφανειών που προκύπτουν λόγω της προσομοίωσης. Ο έλεγχος αυτός μας έδωσε τα κατάλληλα εύρη τιμών των παραμέτρων όπου μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε για την επίτευξη υψηλής ποιότητας προσομοιώσεων. Τέλος, παράγοντας μεγάλο αριθμό προσομοιωμένων επιφανειών μελετήσαμε τις εξαρτήσεις που παρουσιάζονται μεταξύ των παραμέτρων για τις Γκαουσιανές και μη-Γκαουσιανές επιφάνειες.

Στο δεύτερο μέρος της μελέτης αρχικά, χρησιμοποιήσαμε τη προηγούμενη μεθοδολογία προσομοίωσης επιφανειών για τη δημιουργία βάσεων δεδομένων. Μέσω των αυτών των βάσεων εκπαιδεύσαμε και ελέγξαμε την απόδοση των μοντέλων μηχανικής μάθησης. Συγκεκριμένα χρησιμοποιήσαμε μοντέλα 1) Γραμμικής παλινδρόμησης, 2) Τυχαίων δένδρων 3) Απλών, σύνθετων και βαθιών νευρωνικών δικτύων. Σε κάθε μοντέλο ελέγξαμε την απόδοση πρόβλεψης της ενεργού επιφάνειας μεταβάλλοντας τον αριθμό δεδομένων-επιφανειών εκπαίδευσης αλλά και τη συγκρίναμε μεταξύ των μοντέλων. Επίσης εντοπίστηκαν τα βάρη που δόθηκαν από τα μοντέλα γραμμικής παλινδρόμησης και νευρωνικών δικτύων για τις δομικές παραμέτρους. Τα βάρη αυτά μπόρεσαν και μας έδωσαν μια αίσθηση για το ποιες παράμετροι συνέβαλαν περισσότερο σε αυτή τη πρόβλεψη.

5.3 Αποτελέσματα

Στο πρώτο μέρος της εργασίας μας, που εστίασε στη μελέτη εξαρτήσεων των παραμέτρων γκαουσιανών και μη-γκαουσιανών επιφανειών από συμβατικές μεθόδους προσομοίωσης, βρέθηκε πως η ενεργός επιφάνεια έχει ισχυρή εξάρτηση από το Rms παραβολική για μικρά Rms και στη συνέχεια γραμμική (Παράρτημα I). Οι εξαρτήσεις από τις υπόλοιπες παραμέτρους είναι μη-γραμμικές και η επιρροή τους στην ενεργό επιφάνεια (μηκών συσχέτισης, λοξότητας και κύρτωσης) γίνεται σημαντική κυρίως στη περίπτωση επιφανειών με υψηλές τιμές Rms. Τέλος, η εξάρτηση της ενεργού επιφάνειας από τη λοξότητα και την κύρτωση παρουσιάζει μεταβολές ανάλογα με τις τιμές Rms και μηκών συσχέτισης.

Το δεύτερο μέρος της δουλειάς έδειξε πως υπάρχουν ομοιότητες και διαφορές στην απόδοση των μοντέλων μηχανικής μάθησης στην πρόβλεψη της σύνδεσης των δομικών παραμέτρων και της ενεργού επιφάνειας. Συγκεκριμένα κάθε μοντέλο για μεγάλο αριθμό δεδομένων εκπαίδευσης (>500 επιφάνειες) παρουσίαζε σταθερή απόδοση στη πρόβλεψη της ενεργού επιφάνειας. Καθώς όμως, τα δεδομένα εκπαίδευσης μειωνόντουσαν κάθε μοντέλο (πλην των βαθιών νευρωνικών δικτύων) παρουσίαζε σταδιακή μείωση της απόδοσης. Αναλυτικότερα, τη μεγαλύτερη μείωση τη παρουσίαζαν τα απλά και σύνθετα νευρωνικά δίκτυα. Αντιθέτως τα βαθιά νευρωνικά δίκτυα και τα τυχαία δένδρα είχαν τη καλύτερη απόδοση σχεδόν σε όλο το φάσμα δεδομένων-επιφανειών εκπαίδευσης. Η διαφορά της απόδοσης οφειλόταν (όπως έγινε σχετική μελέτη στο μοντέλο γραμμικής παλινδρόμησης) στην αδυναμία των μοντέλων να αναπαράγουν μη-γραμμικές εξαρτήσεις όπως παρουσιάστηκαν στο πρώτο μέρος της δουλειάς. Τέλος, από τα μοντέλα γραμμικής παλινδρόμησης και απλών νευρωνικών δικτύων παρατηρήθηκε ότι το Rms έλαβε το μεγαλύτερο συντελεστή βάρους. Δεύτερα έρχονται τα μήκη συσχέτισης έχοντας πιο μικρό αλλά αξιοσημείωτο συντελεστή με αρνητικό πρόσημο. Τέλος, στη λοξότητα και στη κύρτωση τα μοντέλα ανέθεσαν κατά προσέγγιση μηδενικό συντελεστή συνεισφοράς για τη πρόβλεψη της ενεργού επιφάνειας. Τα αποτελέσματα αυτά συμφωνούν με την ανάλυση εξαρτήσεων του πρώτου μέρους

5.4 Συμπεράσματα

Αρχικά από τα αποτελέσματα μπορούμε να συμπεράνουμε ότι είναι δυνατή η σύνδεση μεταξύ δομικών παραμέτρων και ενεργού επιφάνειας, λόγω της επιτυχημένης ικανότητας πρόβλεψης των μοντέλων μηχανικής μάθησης. Τα μοντέλα αυτά μπορούν και κάνουν στατιστικές προβλέψεις για τις τιμές ενεργού επιφάνειας με ελάχιστο χρονικό κόστος.

Ο αριθμός των δεδομένων-επιφάνειες που απαιτούνται για να γίνει η επιτυχής η σύνδεση αυτή είναι αντικειμενικά προσβάσιμος και διαφέρει ανάλογα με το μοντέλο. Για το συγκεκριμένο πρόβλημα, χρησιμοποιώντας βαθιά νευρωνικά δίκτυα υπάρχει δυνατότητα χρήσης λιγότερο από 100 δεδομένων-επιφανειών (με τη προϋπόθεση η πληροφορία που περιέχεται μεταξύ τους να μην είναι επαναλαμβανόμενη).

Τέλος, εντοπίστηκε πως το Rms ήταν η κρισιμότερη παράμετρος για τη σύνδεση των παραμέτρων λιγότερο τα μήκη συσχέτισης, λοξότητα και κύρτωση.

5.5 Προοπτικές

Για μελλοντική ερευνητική δουλειά αρχικά, προτείνεται η χρήση μοντέλων μηχανικής μάθησης σε πραγματικές επιφάνειες και γενικά σε μια πραγματική διαδικασία παραγωγής νανοδομών. Επίσης θα ήταν δυνατή η χρήση των ήδη υπάρχων μοντέλων μηχανικής μάθησης για τη πρόβλεψη της ενεργού επιφάνειας πραγματικών επιφανειών με νανοτραχύτητα.

Επιπλέον, προτείνεται η πραγματοποίηση επέκτασης της σύνδεσης των δομικών και λειτουργικών παραμέτρων, προσθέτοντας παραμέτρους της κατασκευής (πρώτου σταδίου).

Τέλος θα μπορούσαν να εμπλουτιστούν οι δομικές παράμετροι με περισσότερες παραμέτρους τραχύτητας εντοπίζοντας και άλλες παραμέτρους που πιθανά να επηρεάζουν σημαντικά την ενεργό επιφάνεια.

Παράρτημα 1:

Απόδειξη παραβολικής και γραμμικής συμπεριφοράς ενεργού επιφάνειας ως συνάρτηση του Rms.

Σε αυτό το παράρτημα εξετάζουμε τη παραβολική και γραμμική συμπεριφορά του σχήματος 5.1 β. Οι συμπεριφορές αυτές μπορούν να εξηγηθούν προσεγγίζοντας την ενεργό επιφάνεια των επιφανειών για μικρές και μεγάλες τιμές του Rms. Για λόγους απλότητας θα προσεγγίζουμε το ενεργό μήκος δύο διαφορετικών προφίλ 2 διαστάσεων. Προφανώς σε μία επιφάνεια το άθροισμα των ενεργών μηκών θα αντιστοιχεί στην ενεργό επιφάνεια.

Στο παρακάτω σχήμα παρουσιάζονται τα δύο τυχαία πεπερασμένα προφίλ (α και β) όπως προσομοιώνονται στην εργασία. Τα προφίλ εξετάζουν τις περιπτώσεις παραβολικής και γραμμικής συμπεριφοράς αντίστοιχα.

Ας υποθέσουμε ότι μια επιφάνεια περιγράφεται από ένα πεπερασμένο σύνολο από $i = 1, 2, 3 \dots, n$ σημεία με δχι ίση απόσταση μεταξύ τους. Θα συμβολίσουμε με δh_i τα ύψη σε κάθε σημείο του προφίλ. Συνεπώς το μήκος του προφίλ υπολογίζεται από το άθροισμα: $L_1 + L_2 + \dots + L_n$. (Προφανώς με την ίδια λογική, στη περίπτωση μελέτης επιφανειών 3 διαστάσεων το άθροισμα αυτό αντιστοιχεί στην ενεργό περιοχή).

Στο σχήμα 5.1 α) το μήκος L_i υπολογίζεται ως εξής:

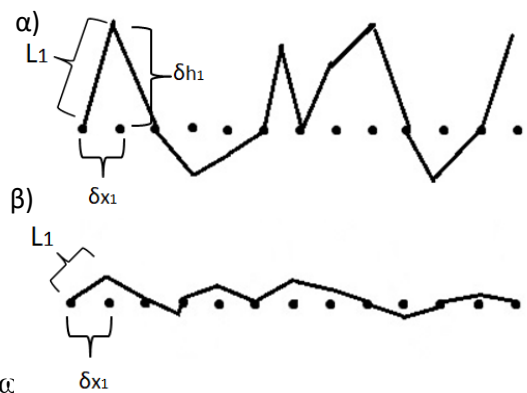
$$L_i = \sqrt{\delta x_i^2 + \delta h_i^2}$$

Για τη περίπτωση α όπου το Rms είναι μεγάλο δηλαδή

$$\delta h_i \gg \delta x_i:$$

$$\text{ισχύει: } L_i \sim \delta h_i$$

Συνεπώς για μεγάλα rms το L_i , και άρα το άθροισμα όλων τα i (ενεργό μήκος), είναι κατά προσέγγιση ανάλογο του δh_i (και άρα του Rms)



Σχήμα 5.1) τυχαία παραδείγματα πεπερασμένων προφίλ 2 διασταστάσεων με δx_i ίσων αποστάσεων και δh_i ύψη:

α) μεγάλα Rms

β) μικρά Rms

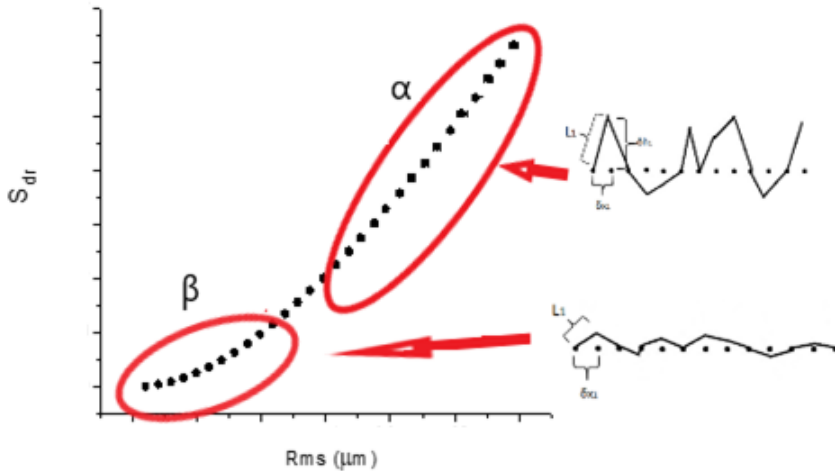
Στο σχήμα 5.1 β) το μήκος L_i σε κάθε πεπερασμένο σημείο του προφίλ, προσεγγίζεται μέσω της σειράς Maclaurin ως εξής:

$$L_i = \delta x_i + \frac{\delta h_i^2}{2\delta x_i} - \frac{\delta h_i^4}{8\delta x_i^3} + \dots O(x^6)$$

Για μικρά Rms $\delta h_i \ll \delta x_i$ όμως, ισχύει:

$$L_i = \delta x_i + \frac{\delta h_i^2}{2\delta x_i} - \frac{\delta h_i^4}{8\delta x_i^3} + \dots O(x^6) \approx \delta x_i + \frac{\delta h_i^2}{2\delta x_i}$$

Όπου σε αυτή την περίπτωση το μήκος του προφίλ έχει παραβολική εξάρτηση με τα ύψη δh_i και συνεπώς το Rms.



Σχήμα 5.2) Παραβολική και γραμμική συμπεριφορά εξάρτησης (κανονικοποιημένης) ενεργού επιφάνειας με το Rms. Στη καμπύλη έχουμε αντιστοιχίσει τις εξαρτήσεις όπως φαίνονται στο σχήμα 5.1 (α για γραμμική και β για παραβολική)

Αναφορές

- [1] Sacha GM1 Varona P. Artificial intelligence in nanotechnology. Nanotechnology. 2013 Nov 15;24(45):452002 Epub 2013 Oct 11
- [2] S Latthe, Sanjay & Terashima, Chiaki & Nakata, Kazuya & Fujishima, Akira. (2014) Development of sol-gel processed semi-transparent and self-cleaning superhydrophobic coatings.
- [3] Deltombe, Raphael & Kubiak, Krzysztof & Bigerelle, Maxence. (2014). How to Select the Most Relevant 3D Roughness Parameters of a Surface. Scanning. 36. 150-160. 10.1002/sca.21113.
- [4] R. Leach, Characterization of Areal Surface Texture (Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg, 2013)
- [5] www.forbes.com/sites/bernardmarr/2016/05/25/why-artificial-intelligence-will-change-our-world-and-why-it-needs-to-be-purposeful/#444161ef5482
- [6] <https://cloud.withgoogle.com/build/data-analytics/explore-history-machine-learning/>
- [7] Kudyba, Stephan & Kwatinetz, Matthew. (2014). Introduction to the Big Data Era. 1-16. 10.1201/b16666-2.
- [8] Kudyba, S. Information Technology, Corporate Productivity, and the New Economy. Westport, Connecticut: Quorum Books. 2002
- [9] Understanding Machine Learning: From Theory to Algorithms, 2014 by Shai Shalev-Shwartz and Shai Ben-David
- [10] Artificial Neural Networks for Beginners Carlos Gershenson
- [11] Introduction to Artificial Neural Networks 1st Edition 1999 by Jan Larsen
- [12] Kuri, Angel. (2014). The Best Neural Network Architecture. 10.1007/978-3-319-13650-9_7.
- [13] <https://towardsdatascience.com/activation-functions-neural-networks-1cbd9f8d91d6>
- [14] Y Bengio, P Simard, and P Frasconi, "Learning longterm dependencies with gradient descent is difficult", *IEEE Transactions on Neural Networks*, , No. 5, 157-166, 1994.
- [15] Learning representations by back-propagating errors David E. Rumelhart Geoffrey E. Hinton & Ronald J. Williams *Nature* volume323, pages533-536 (09 October 1986)
- [16] Y. LE GUN, J.S. DENKER, S.A. SOLLA: "Optimal Brain Damage," in D.S. Touretzsky (ed.) *Advances in Neural Information Processing Systems II* San Mateo: Morgan Kaufman, pp. 598-605, 1990

- [17] Gareth James Daniela Witten Trevor Hastie Robert Tibshirani. An Introduction to Statistical Learning with Applications in R Springer
- [18] Wikipedia Decision Tree Learning example
- [19] Breiman, L. (1996a). Bagging predictors. *Machine Learning* 24, 123–140.
- [20] <https://sebastianraschka.com/blog/2016/model-evaluation-selection-part2.html>
- [21] ΤΑΞΙΝΟΜΗΣΗ ΕΙΚΟΝΩΝ ΜΕ ΤΥΧΑΙΑ ΔΑΣΗ Η ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ ΕΞΕΙΔΙΚΕΥΣΗΣ Αγγλική Τσιάρα
- [22] *Data Mining, Concepts and Techniques Third Edition* Jiawei Han et.al.
- [23] <https://www.theguardian.com/technology/2015/jul/01/google-sorry-racist-auto-tag-photo-app>
- [24] *Caltech Engineering and Science*, Volume 23:5, February 1960, pp 22-36
- [25] WHAT IS NANOTECHNOLOGY? Adapted from Online Materials Available from NNIN: <http://www.nnin.org/nninedu.html>
- [26] A Short History of Atomic Layer Deposition: Tuomo Suntola's Atomic Layer Epitaxy, Riikka L. Puurunen
- [27] The History of Nanotechnology <http://nanogloss.com>
- [28] S. Logothetidis (ed.), *Nanostructured Materials and Their Applications*, NanoScience and Technology
- [29] *Silicon VLSI Technology: Fundamentals, Practice and Modeling*
Book by James D. Plummer, Michael Deal, and Peter B. Griffin [**Chapter 9**]
- [30] ΑΠΟΣΠΑΣΜΑ ΣΗΜΕΙΩΣΕΩΝ ΤΟΥ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΟΥ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ «ΜΙΚΡΟ-NANO ΑΙΣΘΗΤΗΡΕΣ» Δ. Τσουκαλάς
- [31] Σύνθεση, με την τεχνική της κολλοειδούς γέλης (sol-gel), και χαρακτηρισμός νανοδοχείων για βελτίωση αντιδιαβρωτικών ιδιοτήτων επιστρώσεων (Κ.Χαριτίδης, Ε. Κανελλοπούλου, Ι. Καρτσωνάκης – Σχ. Χημ. Μηχ. – Ε.Μ.Π.)
- [32] EE—Times News and Analysis, Europe launches \$12 billion chip support campaign, Peter Clarke
- [33] Nave, R. Abundances of the Elements in the Earth's Crust, Georgia State University
- [34] <https://ourworldindata.org/technological-progress/> Technological Progress by Max Roser and Hannah Ritchie
- [35] D.Vuillaume, Molecular nanoelectronics, *Proc. IEEE* 98,12,2111,-2123 (2010)
- [36] Nanometrology Articles R. Herrera-Basurto^{1,2}, B.M. Simonet¹ (2013)
- [37] Tip-Enhanced Raman Spectroscopy: Technique and Recent Advances Prabhat Verma* *Chem.*

Rev., 2017, 117 (9), pp 6447–6466

[38] Physical and Chemical Nature of Nanoparticles, S.C. Subbenaik

[39] Deep Learning for Design and Retrieval of Nano-phonic Structures Itzik Malkiel^{1*}, Achiya Nagler^{2*}, Uri Arieli², Michael Mrejen^{2*}, U

[40] IBM: Next 5 years AI, IoT and nanotech will literally change the way we see the world By Michael Cooney Network World

[41] Kim C E, Soo Shin H, Moon P, Jae Kim H and Yun I 2009 Curr. Appl. Phys. 9 1407–10

[42] Macias D, Adam P-M, Ruiz-Cortes V, Rodriguez-Oliveros R and Sanchez-Gil J A 2012 Opt. Express 20 13146–63

[43] Ginzburg P, Berkovitch N, Nevet A, Shor I and Orenstein M 2011 Nano Lett. 11 2329–33

[44] Rodriguez B J, Callahan C, Kalinin S V and Proksch R 2007 Nanotechnology 18 475504

[45] Raman A, Melcher J and Tung R 2008 Nano Today 3 20–7

[46] Nikiforov M P, Reukov V V, Thompson G L, Vertegel A A, Guo S, Kalinin S V and Jesse S 2009 Nanotechnology 20 405708

[47] Deep Learning for Design and Retrieval of Nano-phonic Structures Itzik Malkiel^{1*}, Achiya Nagler^{2*}, Uri Arieli², Michael Mrejen^{2*}, Uri Arieli² Lior Wolf¹ and Haim Suchowski^{2§} (2017)

[48] December 6, 2017 Posted in: Systems The future of hardware is AI by Jeff Welse Vice President and Director, IBM Research - Almaden

[49] Why Is Everyone Talking About Artificial Intelligence? *Nothing Can Stop AI* by David Fumo *towardsdatascience.com*

[50] Dorrer,C.; Rhe, J. *Beilstein J. Nanotechnol.* **2011**, *2*, 327–332. doi:10.3762/bjnano.2.38

[51] H. Derin, Probability and Random Processes for Engineers, 2001. Chapter 7

[52] Yang Li Numerical simulation of 3D rough

[53]<https://www.qualitydigest.com/inside/quality-insider-article/problems-skewness-and-kurtosis-part-one.html>

[54] The effect of surface roughness parameters on contact and wettability of solid surfaces Yilei Zhang Iowa State University (2007)

[55] D.J. Whitehouse, The parameter rash — is there a cure?, Wear, Volume 83, Issue 1, 1982, Pages 75-78, ISSN 0043-1648,

[56] Bharat Bhushan *The Ohio State University Surface Roughness Analysis and Measurement Techniques*

- [57] Roughness parameters E.S.Gadelmawla et.al. (2002)
- [58] Guoqing Yang¹, Baotong Li^{2;3}, YangWang² and Jun Hong² Guoqing Yang¹, Baotong Li^{2;3}, YangWang² and Jun Hong²
- [59] Effects of Stochastic (Random) Surface Roughness on Hydrodynamic Lubrication of Deterministic Asperity Prerit Vyas University of Kentucky
- [60] ISO 4287:1997 Geometrical Product Specifications (GPS) -- Surface texture: Profile method -- Terms, definitions and surface texture parameters
- [61] Emmanuel Jurczenko, Bertrand Maillet Multi-moment Asset Allocation and Pricing Models (2015),Ch 1 : Theoretical Foundations of Asset Allocation and Pricing Models with Higher-order Moments (pages 5–6)
- [62] Bharat Bhushan *The Ohio State University Surface Roughness Analysis and Measurement Techniques*
- [63] Garcia, N. and Stoll, E., Monte Carlo Calculation for Electromagnetic-Wave Scattering from Random Rough Surfaces, Phys. Rev. vol 52, issue 20,pg 1798-1801 (1984)
- [64] Yang, Guoqing & Li, Baotong & Wang, Yang & Hong, Jun. (2014). Numerical Simulation of 3D Rough Surfaces and Analysis of Interfacial Contact Characteristics. CMES - Computer Modeling in Engineering and Sciences. 103. 251-279.
- [65] www.scikit-learn.org/stable/supervised_learning.html#supervised-learning
- [66] www.keras.io/#keras-the-python-deep-learning-library