



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΤΩΝ ΚΑΤΕΡΓΑΣΙΩΝ

Prediction of residual stress profiles in welding using machine learning
Πρόβλεψη κατατομών παραμενουσών τάσεων στη συγκόλληση με χρήση μηχανικής μάθησης

A dissertation submitted to The National Technical University of Athens for the degree of
Diploma (Integrated Master) in Mechanical Engineering

Dimitra Rissaki

2116413

Supervisor: Assistant Professor Panorios Benardos

Date of submission

October 2021

Contents

Contents	2
Abstract	5
Περίληψη	6
Declaration of originality	7
Υπεύθυνη δήλωση για λογοκλοπή και κλοπή πνευματικής ιδιοκτησίας	8
Acknowledgements	9
1 Introduction	10
1.1 Background	10
1.2 Research Objectives	12
1.3 Research Structure	12
2 Literature Review	13
2.1 Overview of Machine Learning Techniques	13
2.2 Machine Learning for Residual Stress Prediction	15
2.3 Artificial Neural Networks (ANNs)	17
2.3.1 Structure of ANNs	17
2.3.2 Feature Selection and Pre-Processing of data in ANNs	18
2.3.3 Training of ANNs	19
2.3.4 Ensemble of ANNs	20
3 Methodology	22
3.1 Understanding the Domain	22
3.2 Data	22
3.2.1 Data Selection	22
3.2.2 Feature Selection	23
3.2.3 Data Pre-Processing	24
3.3 Modelling Techniques	24
3.3.1 Predictive Model	24
3.3.2 Objective Function for Architecture Selection	26
3.4 Tools	28
4 Implementation	30
4.1 Data	30
4.1.1 Feature Selection	30
4.1.2 Data Interpolation	30
4.1.3 Selection of Training, Validation and Testing Sets	31

4.2	Modelling	35
4.3	Results	35
5	Interpretation of Results	42
5.1	Objective Function Value	42
5.2	Architecture Selection	43
5.3	Comparison with Other Methods	46
5.3.1	Comparison with Using One Architecture	46
5.3.2	Comparison with Using All the Architectures	48
6	Conclusion	50
6.1	General Summary	50
6.2	Theoretical Contribution	50
6.3	Limitations	50
6.4	Future Research	51
7	Εισαγωγή	52
7.1	Θεωρητικό Υπόβαθρο	52
7.2	Στόχοι Έρευνας	54
7.3	Δομή Έρευνας	55
8	Βιβλιογραφική Ανασκόπηση	56
8.1	Ανασκόπηση Τεχνικών Μηχανικής Μάθησης	56
8.2	Μηχανική Μάθηση στην Πρόβλεψη Παραμενουσών Τάσεων	58
8.3	Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα (ΤΝΔ)	61
8.3.1	Δομή ΤΝΔ	62
8.3.2	Επιλογή Εισόδων και Προεπεξεργασία δεδομένων σε ΤΝΔ	62
8.3.3	Εκπαίδευση ΤΝΔ	63
8.3.4	Σύνολο από ΤΝΔ	65
9	Ερμηνεία αποτελεσμάτων	66
9.1	Τιμή Αντικειμενικής Συνάρτησης	66
9.2	Επιλογή Αρχιτεκτονικής	66
9.3	Σύγκριση με Άλλες Μεθόδους	67
9.3.1	Σύγκριση με τη Χρήση Μίας Αρχιτεκτονικής	67
9.3.2	Σύγκριση με τη Χρήση Όλων των Αρχιτεκτονικών	68
10	Συμπεράσματα	69
10.1	Γενική Περίληψη	69
10.2	Θεωρητική Συμβολή	69
10.3	Περιορισμοί	69
10.4	Μελλοντική Έρευνα	70

References 71

Appendix 76

Abstract

Pressure vessels and other critical for safety components used in today's industry require careful structural integrity assessment. A factor that should be determined in order to assess the integrity and lifetime of structures is residual stresses. Residual stresses are encountered in the welding region of these components, due to the uneven thermal distribution during welding. Measurements of residual stresses can be achieved by various techniques, but have their disadvantages, for instance cost, inaccuracy, and that in some of them the removal of material is required. The prediction of residual stresses can be achieved computationally, with Finite Element Simulation, but again there are disadvantages, for example inaccuracy due to assumptions for welding parameters and computational cost. Another method that has been proposed recently for the prediction of residual stresses is machine learning, which is cost-effective, and it appears promising in terms of accuracy of predictions. Machine learning has been used in literature for predicting results of Finite Element Simulations as well as predicting results of measurements.

In the current study, the residual stresses induced by welding were predicted using an ensemble of Artificial Neural Networks (ANNs). The acquired data concern measurements of through-thickness residual stress profiles of austenitic stainless steel pipes in Weld Centre Line (WCL) and Heat Affected Zone (HAZ) regions. To assess the various architectures of Artificial Neural Networks an objective function was formed, which was based on four criteria, namely training and generalisation error, solution space consistency and feedforward architecture. One hidden layer was selected due to the simplicity of the problem, and fifteen different architectures were assessed, with number of nodes varying from one to fifteen. To eliminate any bias induced by the initial weight selection, each architecture was initialised to fifteen different random initial weights. The objective function was computed, and the five architectures with lowest median value of objective function were then selected to form the final model.

The proposed methodology was then assessed by performance metrics, and it was compared with the performance of two other methodologies. Firstly, it was compared with a single architecture model, where only one architecture is selected based on the minimum median value of objective function. Secondly, the proposed methodology was compared with the scenario of using all the architectures that were considered for the ensemble, without any filtering by the objective function. The results obtained showed that the proposed methodology performs better than selecting a single architecture and slightly better than selecting all the architectures considered.

Περίληψη

Τα δοχεία πίεσης και άλλα εξαρτήματα της σημερινής βιομηχανίας που η λειτουργία τους είναι κρίσιμη για την ασφάλεια, απαιτούν προσεγγισμένη αξιολόγηση της κατασκευαστικής τους αρτιότητας. Ένας παράγοντας που πρέπει να λαμβάνεται υπόψη κατά την αξιολόγηση της κατασκευαστικής ακεραιότητας και της διάρκειας ζωής αυτών των εξαρτημάτων είναι οι παραμένουσες τάσεις. Οι παραμένουσες τάσεις απαντώνται στην περιοχή συγκόλλησης αυτών των εξαρτημάτων, λόγω της ανομοιόμορφης κατανομής της θερμοκρασίας κατά τη διάρκεια της συγκόλλησης. Η μέτρηση των παραμενουσών τάσεων μπορεί να επιτευχθεί με χρήση διαφόρων τεχνικών, που όμως έχουν μειονεκτήματα, για παράδειγμα κόστος, μη ικανοποιητική ακρίβεια και το ότι κάποιες από αυτές απαιτούν την αφαίρεση υλικού. Η πρόβλεψη των παραμενουσών τάσεων δύναται να γίνει υπολογιστικά, με Προσομοίωση Πεπερασμένων Στοιχείων, αλλά και πάλι υπάρχουν μειονεκτήματα, όπως η αβεβαιότητα κατά την υπόθεση των παραμέτρων της συγκόλλησης και το υπολογιστικό κόστος. Μια άλλη μέθοδος που έχει προταθεί τα τελευταία χρόνια για την πρόβλεψη των παραμενουσών τάσεων είναι η μηχανική μάθηση, η οποία είναι υπολογιστικά αποδοτική και φαίνεται πολλά υποσχόμενη όσον αφορά την ακρίβεια των προβλέψεών της. Σύμφωνα με τη βιβλιογραφία, η μηχανική μάθηση έχει χρησιμοποιηθεί για την πρόβλεψη των αποτελεσμάτων Προσομοιώσεων Πεπερασμένων Στοιχείων, όπως επίσης και για την πρόβλεψη αποτελεσμάτων μετρήσεων.

Στην παρούσα εργασία, γίνεται πρόβλεψη των παραμενουσών τάσεων συγκολλήσεων, με χρήση συνόλου Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων. Τα χρησιμοποιούμενα δεδομένα αφορούν μετρήσεις της παραμένουσας τάσης ανά μονάδα βάθους τοιχώματος ωστενιτικών ανοξειδωτων χαλύβδινων σωλήνων στις περιοχές Κεντρικής Γραμμής Συγκόλλησης και Θερμικά Επηρεασμένης Ζώνης. Για την αξιολόγηση της αρχιτεκτονικής των Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων (ΤΝΔ), θεωρήθηκε αντικειμενική συνάρτηση η οποία βασίζεται σε τέσσερα κριτήρια, τα οποία λαμβάναν υπόψη τους τα σφάλματα εκπαίδευσης και ελέγχου, τη συνέπεια των προβλέψεων και την απλότητα της αρχιτεκτονικής. Επιλέχθηκε ένα κρυμμένο επίπεδο λόγω της απλότητας του προβλήματος, και δεκαπέντε διαφορετικές αρχιτεκτονικές αξιολογήθηκαν, με αριθμό κόμβων από ένα έως δεκαπέντε. Με σκοπό την εξάλειψη της προκατάληψης εξαιτίας της επιλογής αρχικών βαρών, κάθε μία αρχιτεκτονική αρχικοποιήθηκε με δεκαπέντε διαφορετικά τυχαία αρχικά βάρη. Η αντικειμενική συνάρτηση υπολογίσθηκε και οι πέντε αρχιτεκτονικές με τη χαμηλότερη ενδιάμεση τιμή αντικειμενικής συνάρτησης επιλέχθηκαν για να αποτελέσουν το τελικό μοντέλο.

Η προτεινόμενη μεθοδολογία έπειτα αξιολογήθηκε από μετρικές επίδοσης και συγκρίθηκε με την επίδοση δύο άλλων μεθοδολογιών. Πρώτον, συγκρίθηκε με ένα μοντέλο μίας αρχιτεκτονικής, κατά το οποίο μόνο μία αρχιτεκτονική επιλέχθηκε με βάση την ελάχιστη ενδιάμεση τιμή αντικειμενικής συνάρτησης. Δεύτερον, η προτεινόμενη μεθοδολογία συγκρίθηκε με το σενάριο κατά το οποίο επιλέγονται όλες οι υπό εξέταση αρχιτεκτονικές, χωρίς αξιολόγηση από την αντικειμενική συνάρτηση. Τα αποτελέσματα που προέκυψαν έδειξαν ότι η προτεινόμενη μεθοδολογία έχει καλύτερη επίδοση σε σχέση με την επιλογή μίας μόνο αρχιτεκτονικής και ελαφρώς κλύτερη επίδοση σε σχέση με την επιλογή όλων των υπό εξέταση αρχιτεκτονικών.

Declaration of originality

I have read and understood the rules that are included in the Guide for Dissertations Writing and concern plagiarism and correct way of referencing the sources used. I declare that, as far as I am aware, the current dissertation is result of my own work and all the sources used have been referenced. The opinions and conclusions of this Dissertation are of the author, and it should not be considered that they represent the official statements of the Faculty of Mechanical Engineering or of the National Technical University of Athens.

Dimitra Rissaki

Υπεύθυνη δήλωση για λογοκλοπή και κλοπή πνευματικής ιδιοκτησίας

Έχω διαβάσει και κατανοήσει τους κανόνες για τη λογοκλοπή και τον τρόπο σωστής αναφοράς των πηγών που περιέχονται στον Οδηγό συγγραφής Διπλωματικών Εργασιών. Δηλώνω ότι, από όσα γνωρίζω, το περιεχόμενο της παρούσας εργασίας είναι προϊόν δικής μου δουλειάς και υπάρχουν αναφορές σε όλες τις πηγές που χρησιμοποίησα. Οι απόψεις και τα συμπεράσματα που περιέχονται σε αυτή τη Διπλωματική εργασία είναι του συγγραφέα και δεν πρέπει να ερμηνευθεί ότι αντιπροσωπεύουν τις επίσημες θέσεις της Σχολής Μηχανολόγων Μηχανικών ή του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου.

Δήμητρα Ρισσάκη

Acknowledgements

I would like to thank my supervisor, Assistant Professor Panorios Benardos, as well as Dr Anastasia Vasileiou and Professor Georgios-Christoforos Vosniakos, for their guidance and support throughout this project.

1 Introduction

1.1 Background

Critical for safety components, such as pressure vessels and piping systems in nuclear plants, should be carefully assessed in terms of structural integrity to prevent failure. Welding is commonly used to construct these components, due to its superiority over riveted structures in a variety of aspects, such as tightness and weight saving. The welding region should be carefully assessed since it is a potential area of failure, due to the residual stresses that are formed during welding.

A detailed examination of residual stress induced by welding and their consequences in the structural integrity is provided by Masubuchi (1980). According to his book, residual stresses are defined as the stresses of a body when there is no external load. Thus, the resultant force and resultant moment produced by the residual stresses are zero. High tensile residual stresses may cause brittle fracture, fatigue, and stress corrosion cracking whilst compressive residual stresses may reduce buckling strength. Also, it is worth mentioning, that the effect of residual stresses depends on the material, and more specifically, their effects are worse in brittle materials than in ductile.

According to Rossini et al. (2012) residual stresses are defined as the stresses of a body when there is no external load and there is no thermal gradient. The residual stresses can be classified as macrostresses or microstresses; macro residual stresses develop on a scale larger than material's grain size, whilst micro residual stresses have the size of an individual grain or less. Manufacturing processes that generate residual stresses involve material deformation, heat treatment, machining or processing operations that transform the shape or change the material's properties. In welding, residual stresses are induced due to the weld metal's differential contractions as it solidifies and cools to ambient temperature. By contrast to tensile residual stresses, compressive ones can be beneficial, as they prevent origination and propagation of fatigue cracks and they increase wear and corrosion resistance.

Rossini et al. (2012) provide a comprehensive review of current methods for residual stresses measurement, along with their advantages and disadvantages. According to their paper, despite the progress in residual stresses' management, further effort is required to develop cost-effective methods for their measurement and analysis. Current measuring techniques of residual stresses can be classified as destructive, semi destructive and non-destructive. Destructive and semi destructive techniques require the removal of material from the specimen and calculation of residual stress is made based on the part's displacement due to the occurred stress relief; examples of destructive or semi destructive techniques are sectioning contour, hole drilling, ring-core and deep-hole. Non-destructive techniques include X-ray or neutron diffraction, ultrasonic and magnetic methods, and they usually measure some related to stress parameters. Non-destructive methods have the advantage of specimen preservation. They are useful for the measurement of valuable specimens and for the fatigue assessment of structural components that need to be inspected periodically to prevent damage or even failure, e.g., bridges, aircraft structures or offshore platforms. However, they commonly require detailed

calibrations on representative specimen material, and methods such as X-ray and neutron diffraction cannot be used for large welds; neutron diffraction technique is capable of larger penetration depth than X-ray, but it has significantly higher cost. Contour method can be used in large components and to a variety of materials, it has high resolution, but it's a destructive method. Among semi destructive techniques, hole and deep hole drilling are easy and fast but have limited strain sensitivity and resolution.

Numerical Finite Element Analysis (FEA) has been commonly used to predict the residual stresses that are induced by welding. According to Mathew et al. (2018), two disadvantages of FEA are that it is computationally expensive and that mechanical analysis is based on uncertain assumptions, which should be made by the modeler. In a study by Vasileiou et al. (2017) three different approaches of mechanical modelling were assessed by experimental measurements, and invalid modelling assumptions were consequently removed. According to Smith et al. (2018), both experimental measurements and FEA have significant uncertainties. Thereby, for safety-critical assessments, measurements and FEA are used in conjunction and are approved when they show sufficient agreement with each other.

Standard Procedures are used to define the integrity of structures, one of them being the R6 Defect Assessment Procedure. As described by Bouchard (2007), the R6 procedure accounts for residual stresses at various accuracy levels. The Level 1 of the R6 procedure is the simplest and most conservative approach since it assumes a uniformly distributed tensile residual stress equal in magnitude to the mean material yield strength. The Level 2 of the procedure defines a bounding through-wall residual stress profile by considering the category of each weld. The Level 3 provides details of the magnitude and spatial distribution of weld residual stress and requires analytical modelling of the welding as well as validation by experimental measurements. The level of accuracy chosen to assess the residual stresses depends on the engineering context. The most used is Level 2 procedure since it provides a conservative residual stress assessment for minimum effort.

The integrity assessment procedures concerning residual stresses in powerplants are highly conservative to ensure their safe operation. A more accurate estimate of residual stresses would lead to lifetime extension of power plants, thereby saving a lot of money. A program with aim to extend the lifetime of power plants to more than 60 years was the New Nuclear Manufacturing (NNUMAN) program, that was established in UK in late 2012. In a paper by Jeyaganesh et al. (2014) an overview of this 5-year program is provided, explaining that the goal of the program was to manage the weld-induced residual stresses of the next generation's circumferentially but-welded reactor pressure vessels (RPV) in order to extend their lifetime. To achieve this, the welding parameters for minimisation of residual stresses were investigated by gathering and analysing both experimental and numerical modelling data.

According to Mathew et al. (2018), while a substantial amount of experimental data of residual stresses' measurement in weldments are becoming available in recent years, they can be utilised to construct data-driven models for the prediction of residual stresses; thereby potentially assist structural integrity assessment. Machine learning might be less computationally expensive than FEA

and seems to obtain good accuracy according to previously published literature. It has been used for both predicting the results of FEA and the results of measurements. The latter is the approach followed by the current study, where experimental data of residual stress profiles of girth welded pipes were used to train and assess the performance of an ensemble of Artificial Neural Networks model.

1.2 Research Objectives

The present study concerns the prediction of residual stresses induced by girth welding in the Weld Centre Line (WCL) and Heat Affected Zone (HAZ) regions by using experimental data of through-thickness residual stress profiles of austenitic stainless steel pipes. The examined predictive model is based on Artificial Neural Networks. The research objectives are formed as follows:

- Present a novel model of an ensemble of ANNs, which accurately predicts the residual stresses induced by welding, in both the WCL and HAZ regions, by using experimental data.
- Assess the model by using previously unknown by the model data.
- Evaluate the proposed methodology by conducting case studies concerning the benefit from the ensemble approach and the impact of objective function in architecture selection.
- Identify the advantages and limitations of the proposed methodology.

1.3 Research Structure

This section provides the structure of the dissertation which consists of the following chapters.

Chapter 2 reviews the existing literature and it consists of three subsections. The first one provides an overview of machine learning techniques. The second subsection describes how machine learning has been used to predict residual stress in welding. The third one provides theory of Artificial Neural Networks since they were selected as the predictive model in the current study.

Chapter 3 describes the proposed methodology. The algorithm used in this study is presented step-by-step.

Chapter 4 concerns the implementation of the proposed methodology for the current data. Also, the obtained results are presented and the model's performance is evaluated by metrics.

Chapter 5 presents the interpretation of results regarding the objective function value and the best architecture selection. Also, the model's performance is compared with the performance of two other methods and insights for the results obtained are provided.

Chapter 6 summarises the research outcomes and presents the proposed method's limitations, the theoretical contribution of this dissertation and opportunities for further research.

2 Literature Review

2.1 Overview of Machine Learning Techniques

Machine learning is a method of simulating a system by using data of the model's behaviour. According to Praveena and Jaiganesh (2017), machine learning can be classified in three categories, namely supervised, unsupervised and reinforcement learning. In supervised learning each observation of the data is related to a label and there is a clear division between model's inputs and outputs. In unsupervised learning the model is constructed from unlabelled data. In reinforcement learning the model has a specific goal and it learns through its actions. In the following paragraphs most popular machine learning algorithms are reviewed.

A common supervised learning algorithm is Support Vector Machines (SVM). According to Fletcher (2008), SVM can be used for classification for linearly separable data by the concept of margin maximisation. In addition, the methodology of SVM can be extended to not fully linearly separable data, by utilising the trade-off between maximising the margin of the classes and minimising the number of misclassified variables. Also, by utilising the Kernel Trick, SVM can classify and regress nonlinear data. The kernel might be able to map the non-linearly separable data into a feature space where it is linearly separable. Examples of kernels are Radial Basis, Polynomial and Sigmoidal.

Random Forest is another popular machine learning algorithm used for both classification and regression. According to Breiman (2001), Random Forests are a combination of tree predictors, and their generalisation error depends on the strength of the individual trees as well as their correlation. In his paper, by utilising the Strong Law of Large Numbers it is demonstrated that the algorithm always converges and thus overfitting is avoided.

In a book edited by Zhang and Ma (2012), Artur J. Ferreira states that boosting algorithms are based on the concept of using an ensemble of weak predictors instead of a single strong predictor. Schapire (1990) first proved that weak learners can be equivalent to strong learners. There are a lot of variations of boosting algorithms. According to Robi Polikar, in the book of Zhang and Ma (2012), for binary class problems, a boosting algorithm could be created as follows. Three different classifiers are created. The first classifier is trained on a random subset of training data. The second classifier is trained on a different subset than the first, precisely half of which is correctly classified by the first classifier. And the third classifier is trained with instances for which the first and second classifier disagree. A three-way majority vote of the three classifiers is then considered. In AdaBoost algorithm, which is a variation of boosting, instances are drawn into the subsequent datasets from an iteratively updated sample distribution of the training data and classifiers are combined through weighted majority voting, based on their training errors. In the book of Zhang and Ma (2012), Artur J. Ferreira also states that the use of weighted versions of the same training data makes AdaBoost to not need very large training set as earlier boosting methods required. Moreover, Gradient Boosting Machine (GBM) is a powerful predictive tool based on boosting, according to Friedman (2001). Mazumder (2020)

proposed Randomised Gradient Boosting Machine (RGBM), which is less computationally expensive compared to GBM, as it uses a randomised scheme to reduce search in the space of weak learners. CatBoost is a successful implementation of gradient boosting algorithms introduced by Dorogush, Ershov, and Gulin (2018). According to Ke et al. (2017), Gradient Boosting Decision Trees is another popular machine learning algorithm, with effective implementations such as XGBoost and pGBRT. Ke et al. (2017) further developed this algorithm by introducing LightGBM, which speeds up the learning process by up to over 20 times, while achieving almost the same accuracy.

A simple yet effective machine learning technique is regression. According to Maulud and Abdulazeez (2020), Simple Linear Regression can be used in order to express an dependant variable in terms of an independent variable by the formula: $y = \beta_0 + \beta_1x + \varepsilon$. Multivariate Linear Regression (MLR) can be used when there are more than one independent variables and the basic model is: $y = \beta_0 + \beta_1x + \dots + \beta_mx_m + \varepsilon$. Polynomial is another type of Regression, where the dependent variable is described by a polynomial expression of independent variables. A common method to find the best fit line or curve is Least Square Method (LSM). According to this method, best coefficients of polynomials are found based on the minimisation of sum of squares of distances of the data points with the polynomial curve.

K-Nearest Neighbours (k-NN) is a supervised algorithm that can be used for both classification and regression. According to Rodrigues (2018), it is a very simple algorithm and has only two parameters; the one parameter is the number k and the other the distance measurement method (e.g. Euclidean distance). After determining the two parameters, the k observations with less distance of the observation that will be labelled are found. These k neighbouring observations can be used to predict the label of the observation by for example finding their mean value for regression or implement majority voting for classification.

K-means is an unsupervised learning algorithm used for clustering. This method is based on the hypothesis that two observations are similar if the distance between them is small. Firstly, points called centroids are randomly assumed. The number of centroids equals the number of clusters. The distance between each point and each centroid is then calculated and each point is assigned to the cluster of the closest centroid. Then new centroids are assigned, based on the average position of the points of its cluster, and the algorithm proceeds iteratively. According to Likas, Vlassis, and Verbeek (2002), the main disadvantage of this method is the sensitivity in the positions of initial centroids. A novel algorithm, called global k-means, was proposed by Likas, Vlassis, and Verbeek (2002) to overcome this problem. According to this method, instead of selecting the initial centroids randomly, new clusters are incrementally added.

Additional literature reviews on machine learning have been conducted by Oke (2002), and by Praveena and Jaiganesh (2017). The latter provides an extensive literature review on supervised machine learning and boosting process. Artificial Neural Network is another powerful tool of machine learning, and it is discussed separately, in section 2.3.

2.2 Machine Learning for Residual Stress Prediction

In the recent years, machine learning has been implemented to predict residual stress in welding. Predictive models have been constructed from either experimental data or data from finite element simulations. Various machine learning techniques that have been used for this purpose are listed below.

Klein et al. (2003) demonstrated that an ANN can predict the results of a Finite Element Simulation in welding. The simulation of the welding response by using the ANN instead of Finite Element Analysis has the advantage of lower computational cost. The ANN was trained with data obtained from Finite Element Simulation for a wide range of parameters. Two types of ANN were examined, namely MLP (Multi-Layer Perceptron) and RBF (Radial Basis Function). The MLP proved to have slightly better predictability than the RBF.

Na, Kim, and Lim (2007) predicted the residual stress for dissimilar metal welding by using a Fuzzy Neural Network (FNN) model that was optimised by a hybrid learning method of genetic algorithm and least squares. The data used for their study were acquired by Finite Element Analysis (FEA) and the results obtained from this study demonstrated that the FNNs model's predictions were of RMS error level of about five percent.

Kumanan, Kumar, and Dhas (2007) used an ANN trained by a genetic algorithm in order to predict the residual stresses in butt-welding of finite element simulations. Instead of using a back-propagation learning algorithm for training, the ANN's weights were encoded in chromosomes. A random initial population is then selected and based on an objective function criterion the population evolves driven by genetic operations, namely selection, crossover, and mutation. The obtained results showed this methodology is competent, fast and easy to implement.

Na et al. (2008) used support vector regression (SVR) to predict residual stress for dissimilar metal welding. The SVR model was optimised by a genetic algorithm. The data used for this study were from Finite Element Analysis (FEA). The results obtained were of RMS error level of about 2.66 percent.

Lim et al. (2010) implemented support vector regression (SVR), fuzzy neural networks (FNN) as well as their combination in order to predict the weld-induced residual stress of dissimilar materials. The acquired data were of Finite Element Analysis (FEA) and a Subtractive Clustering (SC) method was used to select adequately informative data for training. The results showed that the combination of SVR and FNN had the best performance.

Dhas and Kumanan (2011) implemented and compared neurohybrid models for residual stress prediction in butt-welding by using finite element modelling data for training. The process parameters were arc efficiency, welding speed, arc voltage and welding current. The assessed models were three neural networks trained with different algorithms, namely genetic algorithm (NNGA), particle swarm optimisation (NNPSO) and adaptive neuro fuzzy inference system (ANFIS). It was concluded that the

ANFIS model was superior in terms of computational speed and accuracy.

Ahmadzadeh et al. (2012) constructed a feed forward back propagation neural network, trained by the Levenberg-Marquardt method, for prediction of maximum residual stress in gas arc welding. The data were obtained from Finite Element Analysis (FEA). Two input selection scenarios were examined. In the first one, the input parameters used were thickness of plate, electrode size, welding speed and current/voltage intensity. In the second one, two input parameters were used, namely, allowable residual stress and plate thickness, and a non-dimensional number as an output which depends on heat input, welding speed, electrode size and density. According to the results obtained, the first scenario showed good agreement with FEA results, reaching correlation coefficient of about 99 percent. The results of the second scenario demonstrated that, the best combination of welding parameters can be determined with reasonable accuracy.

Koo, Yoo, and Na (2017) implemented a cascaded support vector regression (CSVR) model to predict the residual stresses of welding zone with data obtained from Finite Element Analysis (FEA). The predictability of the CSVR model was better compared to a classic support vector regression (SVR) model.

Mathew et al. (2017) used Artificial Neural Networks (ANNs) trained by a Scaled Conjugate Gradient (SCG) algorithm to predict the through-wall residual stress profile in austenitic stainless steel pipes. The data used to train and validate the model were a set of experimental measurements. An ensemble of ANNs was formed, with each ANN starting from different initial weights. The ANNs that were selected for the final model were the ones with lowest Bayesian error objective function.

Mathew et al. (2018) have used Artificial Neural Networks (ANN) and Fuzzy Neural Networks (FNN) to predict weld-induced residual stresses from experimental data. They compared the two models based on statistical indicators such as root mean square error (RMSE), absolute fraction of variance (R²) and mean absolute percentage error (MAPE). The FNN model, which was optimised by a hybrid technique, performed better than the Levenberg-Marquardt trained ANN, primarily because the ANN cannot give conservative estimates of residual stresses, as it is required by critically for safety structural integrity assessments.

The ability to predict weld residual stress profiles with probabilistic kernel machines was examined by Alamaniotis et al. (2018) and more particularly, Gaussian Processes (GP) equipped with various kernels were used. The data used were experimental and the predictions obtained were in the form of predictive distribution (mean and variance values). In the same study, performance of GP was compared to a non-probabilistic kernel machine, such as support vector regression (SVR) equipped with the same kernels, and to multivariate linear regression (MLR). GP was proved to be superior in most of the predictions.

A number of machine learning algorithms namely M5 algorithm-based Model Trees Regression, Random Forest, Support Vector Regression, Reduced Error Pruning Tree, Multi-layer perceptron, Instance based k-nearest neighbour algorithm and Locally weighted learning have been examined by Das et al.

(2020). The data used in this study were experimental and the results showed that the Support Vector Regression and Locally weighted learning were found to perform consistently good and bad, respectively.

Bhardwaj et al. (2020) used machine learning to estimate residual stress in girth welds of topside piping. They used experimental data and they compared the performance of twelve different algorithms, namely, multi-linear regression (MLR), Random Forest (RF), Gaussian process regression (GPR), support vector machines (SVR), Gradient boosting (GB) etc. The metrics used to assess the accuracy of the algorithms were Root Mean Square Error (RMSE), Estimated Variance Score (EVS), Maximum Absolute Error (AAE) and Coefficient of Determination (R square). The Gradient boosting algorithm was found to have the best performance.

Kulkarni (2021) implemented an artificial neural network (ANN) to predict residual stress in welding based on Finite Element Analysis (FEA) data. The hyperparameters of ANN were found by extensive trial and error procedure. By using the best hyperparameters that were found, the model achieved about 93.5 percent accuracy of predictions.

2.3 Artificial Neural Networks (ANNs)

Artificial Neural Network (ANN) is a powerful predictive tool inspired by the biological brain. It was proved by Hornik, Stinchcombe, and White (1989) that a standard multilayer feedforward network is capable of predicting accurately the outputs of any relationship providing adequate training, sufficient number of hidden units and the relationship being deterministic.

2.3.1 Structure of ANNs

Artificial Neural Networks (ANNs) were first proposed by McCulloch and Pitts (1943), in a simplistic yet fundamental form. Today, there are many structures of ANNs with feedforward being the most common. It consists of an input and an output layer as well as at least one hidden layer. Each layer has nodes that are connected to each node of the neighbouring layers. The signal passing through these connections is subjected to multiplication by a number called weight, which has been assigned to each node, and the result forms an input signal for the node. Upon entering a node, all the input signals are added together. In addition, each node has a bias, which is a number that is added to the sum of input signals of the node.

A non-linear activation function is then applied to the sum of input signals and bias of each node, and the result forms the output signal of the node. According to Gurney (1997), an example of a non-linear function used in ANNs is logistic sigmoid, which is expressed by the equation

$$y = \sigma(\alpha) \equiv 1/(1 + e^{-(\alpha-\theta)/\rho})$$

where ρ determines the steepness of the function and θ the threshold, specifically $\sigma(\theta)=0.5$.

A representation of artificial neuron and an ANN structure are illustrated in Figures 1 and 2 respectively. The number of hidden layers and nodes in each layer influences the performance of ANNs. In a study by Chauvin (1990) it was found that the generalisation and interpolation capabilities of ANN were improved by reducing its size. Also, as it is stated by Gurney (1997), increased number of hidden nodes may lead to poor generalisation.

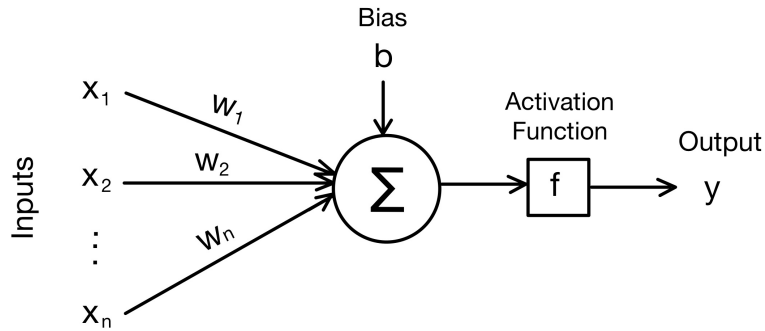


Fig. 1. Representation of operations performed in an artificial neuron

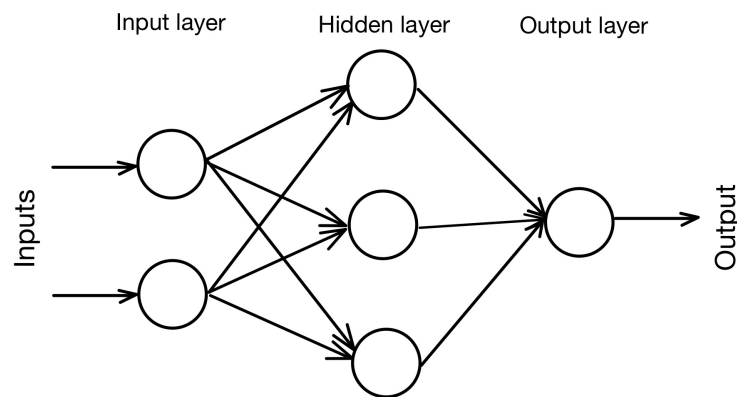


Fig. 2. Visualisation of a feedforward ANN structure with two inputs, one hidden layer with three nodes and one output

2.3.2 Feature Selection and Pre-Processing of data in ANNs

According to Leray and Gallinari (1999), not all features are informative about a phenomenon; some of them might be noisy, other correlated or irrelevant. In their study, methods to select features as inputs of ANNs by trial and error procedures are demonstrated. Another method for feature selection is to calculate the correlation between the variables by using statistical metrics, since the correlation of inputs of ANNs might degrade their generalisation capability. Also, a popular technique is principal component analysis (PCA), which according to Kuźniar and Zajac (2015) can be used for feature reduction.

According to Nawi, Atomi, and Rehman (2013), the pre-processing techniques highly influence the performance of Multi-layer Perceptrons (MLP) trained with backpropagation algorithm. In their study,

normalisation techniques such as Min-Max, Z-score and Decimal Scaling Normalisation increased the robustness and the training efficacy of the MLP's. In a study by Kuźniar and Zając (2015), the scaling of the neural network input was found to increase the accuracy of the ANN. In a later study by Nawi et al. (2017), it was shown that the Z-score normalisation outperformed the other techniques.

2.3.3 Training of ANNs

To train ANNs successfully, a sufficient amount of data is required. As stated by Mathew (2015), the adequate size of training set is exponentially increased by the dimensionality of the inputs; this phenomenon is called curse of dimensionality.

As stated by Hernandez-Lobato and Adams (2015), the backpropagation method is the most common training algorithm for ANNs. According to Gurney (1997), the backpropagation algorithm consists of the following steps. Initially, the weights of the ANN are randomly selected. Then, each training vector is presented to the inputs of the ANN and the output is estimated. The output is then compared with the target value and based on their difference, the weights are readjusted to reach an error minimum. This procedure is repeated many times, till a termination criterion is reached. Each training loop is called epoch. Variations of backpropagation algorithm include the addition of penalty terms in the error function. For instance, the sum of weights can be added to favour smaller weights during training.

A parameter used by backpropagation algorithms is the learning rate. Each time the weights of the ANN are updated while training to minimise an error function, the amount of change is determined by the learning rate, symbolised by the letter α . According to Gurney (1997), if the learning rate is too much, then the value of the error function might oscillate around a local minimum. On the other hand, a small learning rate will increase the time of convergence. One problem of the backpropagation algorithm is that it may stuck in local minimum of the error function instead of finding the global minimum. One way to overcome this problem is to use a momentum term. Another way is to present the training data in a different sequence in each epoch.

There are plenty of training algorithms that can be used to adjust the weights during training, with the most popular being Scaled Conjugate Gradient and Levenberg Marquardt. The choice of training algorithm is proved to influence the generalisation ability of ANNs. In a study by Lawrence and Giles (2000) it is demonstrated that some training algorithms are more prone to overfitting than others.

Overfitting is a fundamental issue during training. It occurs when the trained network predicts very well the data that has been trained with but predicts poorly previously unseen data. In fact, the training error is usually higher than the generalisation error, but according to Salman and Liu (2019), a big difference in these indicates overfitting. On the other hand, underfitting is the opposite of overfitting, and it occurs when the model hasn't been adequately trained and thus the training error is large. As it is stated by Cheng and Titterington (1994), a compromise should be found between

overfitting and underfitting. Overfitting can be caused by excessive training, for example too many epochs. It is influenced also by the ANN's architecture. According to Ying (2019), other reasons could be the presence of noise and inadequate training size.

According to Ying (2019), a method to avoid overfitting is 'early stopping', which stops the training when a validation error reaches a minimum. 'Early stopping' however reduces the training set since the validation set used for stopping cannot be used for training, and thus it is not practical in small datasets, as stated by Reed (1993). By contrast, there are methods that utilise only the training data to estimate the generalisation ability of the ANN. For example Levin, Tishby, and Solla (1990) proposed a statistical measure of generalisation of ANN based on the free energy of the network, by using only training data. As it is reported by Reed (1993), another technique is pruning algorithms which train a network that is larger than necessary and then remove the parts that are not needed to avoid overfitting. For instance, a method to avoid overfitting in deep neural networks is dropout. This technique was proposed by Srivastava et al. (2014) and involves random drop of neural network's nodes during training.

According to Gurney (1997), a stopping criterion that could be used for training could be to reach a small, predefined error. Another stopping criterion is to stop training when the error does not change much. When 'early stopping' is used, the stopping occurs when the validation error reaches a minimum.

2.3.4 Ensemble of ANNs

An ensemble of ANNs combines the predictions of different ANN models. According to a study by Perrone and Cooper (1992), different selection of validation sets may lead to different decisions on what is the best model, and thus it is not efficient to select only one model. To account for this ambiguity, different models can be combined, for instance ANNs with different architecture, or ANNs that are trained with different algorithms or different datasets. Furthermore, with this method, the problem of 'early stopping', which is that all the data cannot be used for training, can be solved. That is because, each ANN of the ensemble can be trained with different training and hold-out data, therefore the model as an ensemble have seen all the training data. Moreover, it is stated that, the ensemble process will deal with any overfitting even if we do not use 'early stopping'. Perrone and Cooper (1992) highlight that, an ensemble of ANN has superiority over single predictors only if single predictors are sufficiently uncorrelated and their mean of error distribution is close to zero. That is because, if two or more predictors are all biased towards the same side of error (positive or negative error), then their average prediction cannot be considered as better compared to the individual component predictors. Overall, it is considered beneficial to utilise the ensemble method in ANNs, because their trapping in a variety of local minima assigns a different perspective to each ANN.

Bayesian techniques have been used in conjunction with ensemble method. As stated by Cheng and Titterington (1994), the weight selection approaches are based on assumptions about the noise of

the data, and therefore it is natural to use Bayesian methods. Hernandez-Lobato and Adams (2015) claims that with Bayesian techniques the uncertainty of prediction can be calculated based on the uncertainty of parameter estimates. An easily implementable method of utilising Bayesian principles in an ensemble of Neural Networks has been proposed by Pearce et al. (2018). An ensemble learning approach extended to full-covariance Gaussian distributions has been proposed by Barber and Bishop (1998).

3 Methodology

3.1 Understanding the Domain

In the current research, the model selected to predict welding residual stress is feedforward Artificial Neural Networks (ANNs). According to the literature, ANNs have been demonstrated to be a powerful predictive tool, and they have been successfully implemented to predict welding residual stress of both finite element analysis (FEA) and experimental measurement data.

Predictions of welding residual stress profiles were made for both the Weld Centre Line (WCL) and Heat Affected Zone (HAZ) regions in the current study. According to Bouchard (2007), the reasons for residual stress generation in these two regions differ; in the WCL the residual stresses are induced mainly due to thermal contraction of melted material, while in the non-melted material of the HAZ region are induced by the transient thermal cyclic loading. Since the reason for residual stresses formation is different in the two regions, two separate models were constructed to predict the residual stresses in WCL and HAZ. Similarly, two separate models were constructed for each direction, one for the hoop and the other for the axial direction since the profiles of residual stresses vary significantly across different directions.

3.2 Data

3.2.1 Data Selection

The amount and quality of acquired data are important to construct a good model. To predict the residual stress profile in welding either finite element simulation data or experimental data could be obtained.

The data used in the current study are experimental data which concern residual stresses of austenitic stainless steel girth welded pipes. The dataset includes measurements of both Weld Centre Line (WCL) and Heat Affected Zone (HAZ) regions, and for both hoop and axial directions for each region. The residual stresses of radial direction are not included in the dataset. According to Mathew (2015), this is because radial residual stresses are of low magnitude in pipe girth welds and thus they are of no significant importance in defect tolerance assessments of conventional welds.

A major part of this dataset is previously reported by Bouchard (2007). According to their paper, most of the data were collected by the UK nuclear industry in the period 1995-2000 and were project managed by British Energy. Residual stress measurements were conducted by using diverse methods including neutron diffraction (ND), deep hole drilling (DH), surface centre-hole drilling (SH) and block removal splitting and layering (BRSL).

Another part of the dataset used in the current study is previously reported by Mathew (2015). The mock-ups¹ included in this part of the dataset were fabricated with the purpose of validating the predictive model of their study. These welds were manufactured by the University of Manchester. The measurements of residual stress were conducted by neutron diffraction and contour method by ILL in France and by The Open University in UK respectively.

The provided data hold a significant amount of uncertainty. According to Bouchard (2007), residual stress measurements do not accurately reflect the actual residual stress distribution because of complex local and global distributions of residual stress, the innate variability of residual stress fields (even in welds with identical parameters) and also because measurement techniques have their own limitations. As stated by Mathew et al. (2017), the measurements are judged to have uncertainty of about ± 50 MPa. Specifically for the contour measurement technique, according to Olson et al. (2015), the estimated uncertainty of measurements is up to 10 MPa. Since measurements are not completely accurate, the final prediction does not have only the error of its own, but also the error of the data that the model was trained, which is the error of the measurements. The purpose of this study is not to address the uncertainty of the measurements, but in a real integrity assessment this should be considered.

3.2.2 Feature Selection

Feature selection can be conducted based on correlation matrix of inputs, the literature, trial and error or more sophisticated techniques for measuring the significance of each input in the correct prediction of an algorithm.

The acquired data of the current research include information about the radius (R - mm) of the welded pipes, the thickness (t - mm) of their walls, and the heat input rate (Q - kJ/mm) and the corresponding through-thickness residual stress value (σ - MPa). These parameters can be used as inputs, except for the residual stress that will form the model's output. The R/t ratio has been used as an input parameter instead of R in previous work with similar dataset by Mathew (2015) and by Alamaniotis et al. (2018) because it has been demonstrated to be a key parameter for prediction of residual stresses by Song, Dong, and Pei (2015). The same approach was followed in the current study, because according to Song, Dong, and Pei (2015) the R/t is a significant factor for residual stress profile. The correlation matrices along with the pairplots of each for the four datasets were calculated and can be found in Appendix. There was not observed any large enough correlation between the inputs to discard any of them.

To summarise, the features selected in the current study were the radius to thickness ratio (R/t), the thickness (t) and the heat input rate (Q). The through-wall position is also considered a model's input.

¹Mock-ups are structures used for experimentation. In the present case, mock-ups are welded pipes.

3.2.3 Data Pre-Processing

The pre-processing of the data includes identification of outliers, interpolation of inputs, examination of parameter space and normalisation of data.

Outliers are data that clearly do not depict the reality. The acquired data were visualised with plots, and there was not any measurement observed that it was clearly incompatible with the rest. Some profiles though were not very smooth, but whether this is due to inaccuracy of measurement or due to the number of measured points is not clear, so it was decided not to smooth the acquired profiles.

Some mock-ups have been measured with one or more techniques and in more than one location. For the training, one measured profile was selected, either the average of the profiles or the most representative of them. The various measurements have different amount of data. For the ANN to not be biased towards any measurement with more or less data than another, the measurements were interpolated to their median number of points.

The parameter space was examined to identify mock-ups with extreme values of inputs. That is because, according to Mathew (2015), it is considered that the ANNs are not very successful in extrapolation, which means that they cannot predict well cases with input values out of the interval that they were trained with. The cases with extreme values were therefore identified and used only for training purposes.

The normalisation of data prior training can improve the performance of ANNs. That is because the weights of ANNs are influenced by the magnitude of inputs. In the current study, the 'mapminmax' normalisation of Matlab was used for inputs and outputs, which maps the inputs and outputs in the interval [-1,1]. This function is described by the following formula:

$$y = (y_{max} - y_{min})(x - x_{min}) / (x_{max} - x_{min}) + y_{min}$$

where $y_{max} = 1$ and $y_{min} = -1$.

3.3 Modelling Techniques

3.3.1 Predictive Model

The predictive model chosen for this study is an ensemble of Artificial Neural Networks (ANNs), with each ANN of the ensemble having a different architecture. The proposed methodology is described in this section, as follows.

To determine the architecture of the ANNs of the ensemble, an objective function is selected based on the hypothesis that its value reflects the performance of the ANN. For instance, a common objective

function used is mean squared error, which is a measurement of the difference of the predictions of the model and the real output of a validation set. The objective function of this study is customised, and it is based on a study by Benardos and Vosniakos (2007). Four criteria and a penalty value are assigned to the objective function used in the current study, and they are analysed in detail in section 3.3.2. The assessed architectures are all of one hidden layer due to the simplicity of the problem, and of 1-15 nodes in the hidden layer. The transfer function of hidden layer and of output layer were chosen to be the hyperbolic tangent sigmoid and the linear transfer function respectively.

The different architectures are then assessed based on their objective function value. Initial weights influence the performance of ANNs because the error function may be minimised in different local minima depending on the initial conditions. Because the objective function selected does not consider the influence of initial weights, the random selection of initial weights might lead to bad architecture choices. To eliminate the bias induced by random initial weight selection, the different architectures are assessed in 15 different randomly selected initial weight vectors. Then, the 15x15 architectures are trained, using early stopping to avoid overfitting, and their objective function value is calculated based on their performance in an independent from training validation set. The number of different initial weight vectors could be more than 15 to have a broader view of the capabilities of each architecture, but then the computational time would increase. The training algorithm for this study was selected to be Levenberg-Marquardt backpropagation, as it is considered one of the fastest algorithms.

Consequently, the best architectures are selected, based on our initial hypothesis, that the value of the objective function reflects the suitability of the model. Since the objective function value has a variation across each architecture, depending on the initial weights that are selected, it was decided to select for the final ensemble the architectures with lowest median value of objective function. It was decided to use the median instead of average, because it is more robust to outliers. Thus, the 5 architectures with minimum median number of objective function value are selected. The selection of 5 architectures instead of another number is rather arbitrary. The selection of many architectures is good from the ensemble perspective, but it was considered that not all architectures are able to successfully learn a function, and therefore it is essential to discard some.

The 5 selected architectures are then trained by using all the data. Since some data are left out for early stopping, the early stopping dataset will change across the different architectures. This is because, in that way, the final ensemble model would have seen all the data, despite that the individual ANNs would have seen only a part of the training data. The fact that we can use all the training data and utilise early stopping at the same time is an advantage of the ensemble approach. For the training of the 5 architectures, it was kept in mind that they were selected based on their small median value of the objective function. Therefore, there is no guarantee that their objective function will be small in a random selected initial weight vector. To account for the variability of the objective function value, and thereby of their performance, across different initial weight selection, the 5 architectures are initialised and trained at 15 different randomly selected initial weights each, and their median prediction is calculated. Finally, the median predictions of each of the 5 architectures are collected and their average is calculated to form the final prediction.

The final model is then assessed with a completely unknown dataset to evaluate its generalisation ability. The steps of the proposed methodology are schematically presented in Figure 3.

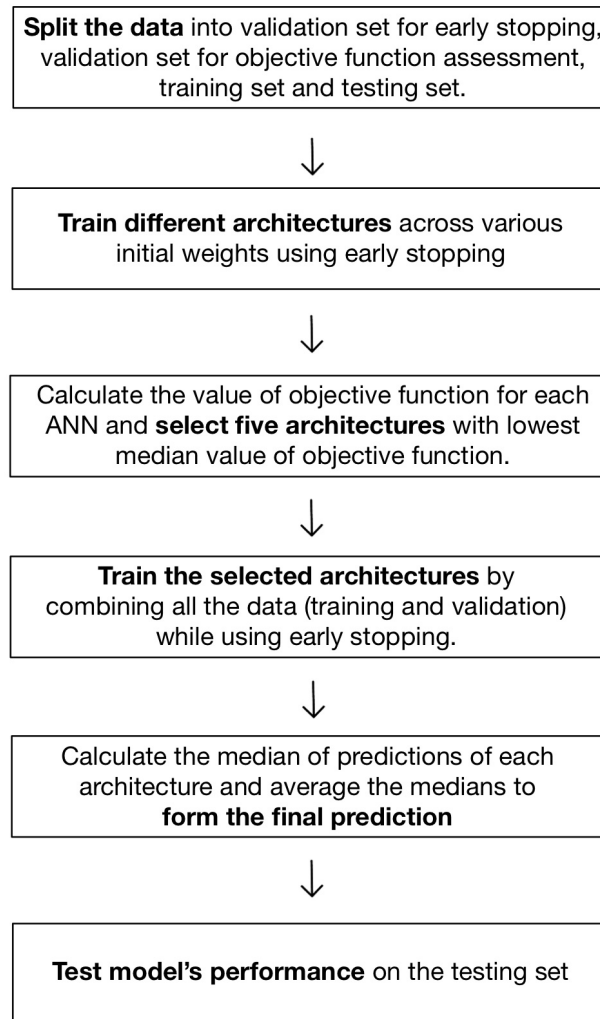


Fig. 3. Representation of steps of proposed methodology

3.3.2 Objective Function for Architecture Selection

The objective function of the current research is based on a study by Benardos and Vosniakos (2007). According to their paper, the objective function consists of four criteria. To implement these criteria, apart from the training set, a validation set should be defined. The four criteria are as follows.

The Generalization Error criterion accounts for the generalisation ability of the ANN, thereby enables the architecture to be assessed in its ability to predict previously unknown data. The formula of this criterion is the mean absolute value of relative generalisation error:

$$E_{generalisation} = \frac{\sum_{i=1}^n |(Y_{oi} - Y_i)/Y_{oi}|}{n}$$

where $E_{generalisation}$ is the generalisation error, Y_{oi} is target value of the i^{th} testing data vector, Y_i is ANN's predicted value for the i^{th} testing data vector and n is number of testing data.

The Training Error criterion assess the ability of the ANN to remember the data that was trained with. In the current study, the training error criterion is particularly important because the validation set is rather small, and thereby only the generalisation error would not be adequate to fully assess the performance of the ANN. The formula for this criterion is the mean absolute value of relative training error:

$$E_{training} = \frac{\sum_{i=1}^n |(Y_{oi} - Y_i)/Y_{oi}|}{n}$$

where $E_{training}$ is the training error, Y_{oi} is target value of the i^{th} training data vector (the one the ANN must learn), Y_i is ANN's response to the i^{th} training data vector (the one the ANN has learned) and n is the number of training data.

The Solution Space Consistency criterion accounts for the consistency of the ANNs predictions. To be more specific, an ANN may have good mean generalisation error, but for some data might make very wrong predictions. This might be problematic in many aspects of engineering where safety issues are of particular concern. In the current study, in which upper bounds of predictions are expected to assist in structural integrity assessments, solution space consistency is of major importance. The formula of this criterion is as follows:

$$solspc = 1 + x0.33 + y$$

where x is the number of test cases that have poor relative generalisation error and y is the number of cases that have very poor relative generalisation error.

From the formula of this criterion, it can be seen that a penalty is gradually applied depending on the severity of the relative generalization error. If all the predictions for the previously unknown dataset are good, then the solution space criterion just takes the value of 1. If some of the predictions are a bit off the target, a penalty of 33 percent of their number is applied. Finally, if there are predictions completely irrelevant to the target, a 100 percent penalty of their number is applied. Therefore, this criterion takes into account both the severity and the number of poor predictions. The thresholds of the absolute value of relative generalisation error for the calculation of numbers x and y are user defined, thereby depend on the problem at hand. In the current study, these values were assigned a priori, without any calibration from the validation set, although a calibration would be useful to ensure their optimal performance.

The Feedforward Architecture criterion (FFAC) favours smaller architectures in an exponential to the complexity of the architecture fashion. Complexity of ANN is considered the number of connections that it has, thereby it increases with the number of nodes and layers. It is considered better to choose a simpler architecture than a more complex one, when they both seem to perform well. This is because complex architectures have many degrees of freedom and thus are more prone to overfitting

than simple. The formula for this criterion that is used in the current study is as follows:

$$FFAC = e^{\alpha f(x)}$$

where α is a user defined constant and $f(x)$ is a function of the total number of weights and biases.

Apart from these criteria, Benardos and Vosniakos (2007) proposed in their paper the employment of a genetic algorithm to search in the solution space for architectures with small value of objective function. In the current study the genetic algorithm approach was not followed due to the simplicity of the problem, and the best architectures were found by assessing a small number of predefined architectures.

In the present study, it was observed that, sometimes architectures had lower mean absolute value of relative generalisation error than mean absolute value of relative training error. The absolute value of relative generalisation error should normally be larger than the absolute value of relative training error. This shows that the validation set sometimes happened to favour an underfitted architecture. Underfitting usually occurs in small architectures which cannot adequately learn from training data. The validation set was rather small, due to the small dataset that was used and thus some architectures happened to achieve very good generalisation performance although having poor training memory. The architectures with low mean absolute value of relative generalisation error and large mean absolute value of relative training error were excelling in the generalisation error and solution space consistency criteria, while having disadvantage in only one criterion, the training error. The mean absolute value of relative generalisation error has greater influence in the objective function than the mean absolute value of relative training error since it is assessed by two out of the four criteria. This is beneficial since overfitting is of concern but can sometimes be misleading when small datasets are encountered. To address this issue, the obviously underfitted ANNs were penalised, by applying a penalty given to the cases where the mean absolute value of relative generalisation error was smaller than the mean absolute value of relative training error.

With the addition of the penalty term, the objective function accounts for five criteria, and the objective function value is calculated as follows:

$$ObjVal = pFFACsolspc(E_{training} + E_{generalisation})$$

where p is the penalty value for underfitted cases, $FFAC$ the feedforward architecture criterion, $E_{training}$ and $E_{generalisation}$ the training and generalisation error criteria respectively.

3.4 Tools

Popular tools for artificial intelligence are Python and Matlab. In this study Matlab was used for the main code and has proved to be sufficient tool for Artificial Neural Network modelling. Furthermore,

its documentation provides well-written information for its commands and a variety of examples to better understand their implementation. Python was also used in this study, for the construction of pair plots and correlation matrices. Python has a lot of sophisticated tools for machine learning and it is very easy to use.

4 Implementation

4.1 Data

4.1.1 Feature Selection

The acquired data consist of four datasets in total, which concern the Weld Centre Line (WCL) and the Heat Affected Zone (HAZ) region, and both axial and hoop residual stress directions. The features of the raw data that can serve as inputs of the model are the radius (R - mm) of the welded pipes, the thickness (t - mm) of their walls, the heat input rate (Q - kJ/mm) and the through-thickness position (x/t). As described in section 3.2.2, the radius to thickness ratio (R/t) is considered an influential parameter for residual stress formation by the literature and therefore it is decided to be used instead of the radius (R) as an input in the current study.

The correlation matrices and correlation plots were constructed to investigate correlation among inputs, of each one of the four datasets, and can be found in the Appendix. To find the correlations, the rows of the data that referred to different measurements of the same mock-up were neglected to avoid any bias towards mock-ups that were measured with more than one technique.

Overall, from the correlation matrices it is observed that the stress is correlated the most with the through-thickness position. The highest correlation of inputs is between the radius and the thickness. Nevertheless, the correlations between inputs were not so high to justify the discard of an input.

To conclude, the inputs selected for the four models were radius to thickness ratio (R/t), thickness (t -mm), heat input rate (Q -kJ/mm) and through-thickness position (x/t). The output is magnitude of residual stress.

4.1.2 Data Interpolation

As explained in section 3.2.3, outliers were not observed in the data. Of concern were the measurements of mock-up SP19 in the WCL region because they consist of only a few measured points, and they appear unsmooth in the WCL region. The ambiguity of the SP19 residual stress profile might mislead the validation and training process when it is subjected to interpolation. For that reason, SP19 mock-up was decided to be used only for testing in the two models of WCL region.

The residual stress profile of some mock-ups had been measured multiple times, with different measurement techniques and in different positions. The profile and the number of points of each measurement for the same mock-up might differ. For training and validation purposes (not testing), only one profile was selected of each mock-up, that was either the average of all measurements or that was the most representative profile.

All mock-ups should have the same number of points in the training set, to eliminate any bias in the training of the ANN towards cases that have larger or smaller number of points than others. Thus, interpolation is used, for all the cases to have the same number of points. Another reason to use interpolation is that the measurement points of the raw data are not equally distanced across the through-thickness position, thereby producing potential bias towards regions of through-thickness position with more number of points. The number of points selected for interpolation was the median number of points of each dataset, as shown in table of Figure 4

	Sample name	number of points			
		WCL-hoop	WCL-axial	HAZ-hoop	HAZ-axial
1	Weld C	8	9	-	-
2	SP19	6	6	7	7
3	SP37	32	32	33	33
4	S5VOR	32	32	32	32
5	S5Old	32	32	-	-
6	S5New	32	32	-	32
7	S5NG	32	32	33	33
8	RR	33	33	-	-
9	MU4-1	32	9	-	-
10	MU4-3	24	14	-	-
11	Esshete	31	19	-	-
12	H1-1	13	12	-	-
13	H1-2	15	12	-	-
14	H1-3	13	12	-	-
15	OU20	-	-	9	9
16	CaseY	-	-	-	33
Median number of points for interpolation		32 (without SP19)	19 (without SP19)	32	32

Fig. 4. Number of measured points of each case and number of interpolation points for each of the four datasets

4.1.3 Selection of Training, Validation and Testing Sets

Each dataset was split into four sets. The first set was the training set, which was used for training during the architecture assessment procedure and for training of the final model. The training set was also used by the objective function to account for the training error criterion.

In addition, two validation sets were used. Initially, the one validation set was used for evaluating the different architectures, by computing the generalisation error and solution space consistency

criteria based on it, and the other validation set was used for early stopping during the training for the assessment of architectures. Afterwards, while training the ANNs for the ensemble model, parts of both validation sets were utilised for early stopping. That is because, if only one validation set was used for early stopping for all ANNs in the ensemble, then this set would be left out, since it would not be utilised at all for training. By choosing another validation set for early stopping for some of the ANNs of the ensemble, we ensure that, even though the individual ANNs haven't seen all the data, the ensemble has.

The fourth set is the testing one, which is only utilised when the final model is constructed, and it is used to assess the generalisation ability of the ANN in previously completely unknown data.

A common rule for splitting ratios of the datasets is 70 percent for training, 15 percent for validation and the other 15 percent left for testing. This partition ratio was approximately followed in the current research.

Due to the rather small dataset of the present study, the stochasticity of results due to data partition was of concern. To acquire a broader view of the capabilities and limitations of the proposed model, independent training sessions were conducted, with each time different partition of data. The mock-ups assigned to each set were randomly selected with respect to the poor extrapolation capability of ANNs. Thus, mock-ups with extreme values of parameters were not selected for validation nor testing sets but only for training sets. The parameter space of the mock-ups is illustrated in Figures 5 and 6. Figures 7 and 8 show the mock-ups with extreme values in the input space for the WCL and HAZ region respectively.

	Sample name	Hoop	Axial	R/t	t [mm]	Q [kJ/mm]	x/t -hoop	x/t-axial
1	Weld C	✓	✓	25	15.9	2.2	0.18-0.99	0.1-1
2	SP19	✓	✓	10.5	19.6	1.12	0.1-0.78	0.1-0.78
3	SP37	✓	✓	5.3	37	1.68	0.03-0.96	0.03-0.96
4	S5VOR	✓	✓	2.8	65	1.92	0.03-0.96	0.03-0.96
5	S5Old	✓	✓	2.8	65	1.12	0.04-0.97	0.04-0.97
6	S5New	✓	✓	2.8	65	0.8	0.03-0.96	0.03-0.96
7	S5NG	✓	✓	3	62	1.32	0.03-0.96	0.03-0.96
8	RR	✓	✓	1.8	110	1.8	0.01-0.97	0.01-0.97
9	MU4-1	✓	✓	4.5	25	0.8	0.06-0.91	0.08-0.93
10	MU4-3	✓	✓	4.5	25	1.5	0.07-0.92	0.04-0.96
11	Esshete	✓	✓	2.1	35	1.6	0.05-0.94	0.04-0.96
12	H1-1	✓	✓	10	12.7	0.7	0.06-0.93	0.08-0.92
13	H1-2	✓	✓	10	12.7	1	0.08-0.92	0.08-0.92
14	H1-3	✓	✓	10	12.7	1.2	0.07-0.93	0.08-0.92

Fig. 5. Parameter values of cases of Weld Center Line (WCL) dataset

	Sample name	Hoop	Axial	R/t	t mm	Q kJ/mm	x/t-hoop	x/t-axial
1	SP19	✓	✓	10.5	19.6	1.12	0.11-0.88	0.11-0.88
2	OU20	✓	✓	3.8	20	1.36	0.1-0.9	0.1-0.9
3	SP37	✓	✓	5.3	37	1.68	0.03-0.99	0.02-0.98
4	S5VOR	✓	✓	2.8	65	1.92	0.02-0.95	0.03-0.96
5	S5NEW	✗	✓	2.8	65	0.8	-	0.03-0.96
6	S5NG	✓	✓	3	62	1.32	0.01-0.97	0.01-0.97
7	CaseY	✗	✓	10.3	22.6	1.4	-	0.02-0.98

Fig. 6. Parameter values of cases of Heat Affected Zone (HAZ) dataset

Due to their extreme parameter values, the mock-ups RR, Weld C and H1-1 will not be used for validation or testing purposes for hoop and axial models of the WCL; they will be used only for training. Similarly, for the hoop and axial models of the HAZ, the SP19, S5New, S5VOR mock-ups will only be used for training. In the parameter space evaluation of the mock-ups the through-thickness position was not considered since the variations on its values are negligible and also the extrapolated areas could be discarded if necessary. In other respects, the data was randomly split into training, validation and testing sets, with different partition in each independent session, as it is illustrated in Figures 9 to 12.

The validation set used for objective function evaluation was larger than the validation set used for early stopping were possible, because its size is crucial for the reliability of assessment of objective function values.

	cases with lowest	cases with highest
R/t	RR	Weld C
t	H1-1, H1-2, H1-3	RR
Q	H1-1	Weld C
x/t-hoop	RR	Weld C
x/t-axial	RR	Weld C

Fig. 7. Cases with extreme values of inputs of Weld Center Line (WCL)

	cases with lowest	cases with highest
R/t	S5New, S5VOR	SP19
t	SP19	S5VOR, S5New
Q	S5New	S5VOR
x/t-hoop	S5NG	SP37
x/t-axial	S5NG	SP37, CaseY

Fig. 8. Cases with extreme values of inputs of Heat Affected Zone (HAZ)

	1 st session	2 nd session	3 rd session	4 th session	5 th session
Training set	Esshete	Esshete	Esshete	H1-1	H1-1
	H1-3	H1-3	H1-1	H1-2	H1-2
	H1-1	H1-1	MU4-3	MU4-3	MU4-3
	H1-2	MU4-1	RR	RR	RR
	MU4-1	RR	S5Old	S5New	S5NG
	RR	S5New	S5VOR	S5NG	S5VOR
	S5NG	S5Old	SP37	SP37	SP37
	WeldC	WeldC	WeldC	WeldC	WeldC
Validation sets	S5Old	SP37	S5New	S5VOR	MU4-3
	S5VOR	H1-2	MU4-1	Esshete	SP37
	MU4-3	S5NG	H1-3	S5Old	S5New
Testing set	S5New	MU4-3	H1-2	MU4-1	Esshete
	SP37	S5VOR	S5NG	H1-3	S5Old SP19

Fig. 9. Partition of data in each of the independent sessions for Weld Centre Line (WCL) model of hoop direction

	1 st session	2 nd session	3 rd session	4 th session	5 th session
Training set	Esshete	Esshete	Esshete	H1-1	H1-3
	H1-3	H1-3	H1-1	H1-2	H1-1
	H1-1	H1-1	MU4-3	MU4-3	H1-2
	H1-2	MU4-1	RR	RR	MU4-1
	MU4-1	RR	S5Old	S5New	RR
	RR	S5New	S5VOR	S5NG	S5NG
	S5NG	S5Old	SP37	SP37	S5VOR
	WeldC	WeldC	WeldC	WeldC	WeldC
Validation sets	S5Old	SP37	S5New	S5VOR	MU4-3
	S5VOR	H1-2	H1-3	Esshete	S5New
	MU4-3	S5NG	MU4-1	S5Old	SP37
Testing set	S5New	MU4-3	H1-2	H1-3	Esshete
	SP37	S5VOR	S5NG	MU4-1	S5Old SP19

Fig. 10. Partition of data in each of the independent sessions for Weld Centre Line (WCL) model of axial direction

	1 st session	2 nd session	3 rd session
Training set	S5VOR, SP19		
Validation sets	SP37	S5NG	OU20
	OU20	SP37	S5NG
Testing set	S5NG	OU20	SP37

Fig. 11. Partition of data in each of the independent sessions for Heat Affected Zone (HAZ) model of hoop direction

	1 st session	2 nd session	3 rd session	4 th session
Training set	S5New, S5VOR, SP19			
Validation sets	S5NG	SP37	OU20	CaseY
	CaseY	CaseY	S5NG	OU20
	OU20	S5NG	SP37	SP37
Testing set	SP37	OU20	CaseY	S5NG

Fig. 12. Partition of data in each of the independent sessions for Heat Affected Zone (HAZ) model of hoop direction

4.2 Modelling

The four models were constructed following the methodology described in section 3.3. The customised values of the objective function were set a priori, without calibration from the validation set, and were the same for the four models. For the Solution Space Consistency criterion, the thresholds were set to 1 and 5 for variables x and y of the criterion respectively. As regards the Feedforward Architecture criterion, its variable α was set to 0.001, with aim to favour simple architectures but only if they have similar performance to more complex ones. The number 10 was assigned to the underfitting penalty if the mean absolute value of relative generalisation error was smaller than the mean absolute value of relative training error, and the number 1 was assigned otherwise.

4.3 Results

After the methodology of the proposed algorithm was followed, the testing set was used to assess the generalisation ability of the four models. Due to the various independent sessions conducted, predictions were obtained for almost all the mock-ups in the datasets. The exceptions were the mock-ups with extreme values of parameters, which were used only for training purposes.

The results obtained are illustrated in Figures 13 to 41. The final predictions were plotted as the mean value of predictions of the ANNs' ensemble and the standard deviation of the model's individual predictions.

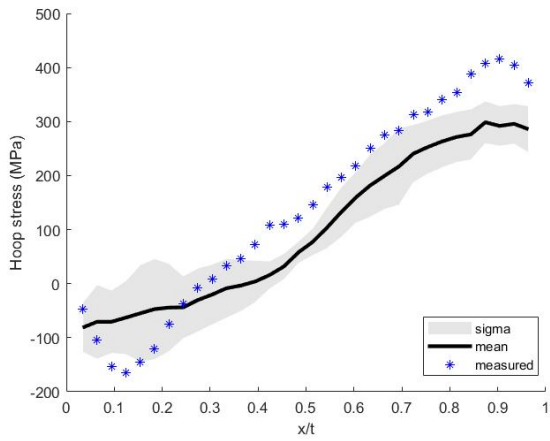


Fig. 13. Prediction of WCL hoop model for S5New mock-up

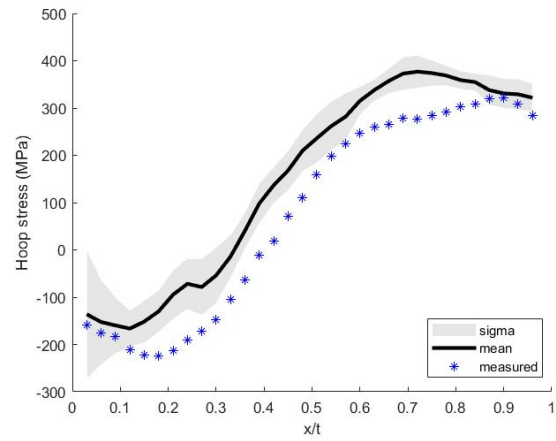


Fig. 14. Prediction of WCL hoop model for SP37 mock-up

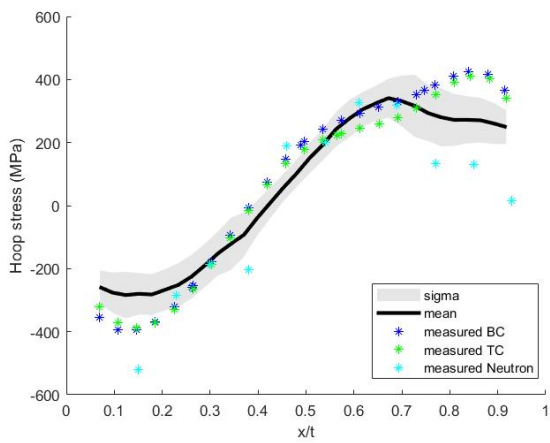


Fig. 15. Prediction of WCL hoop model for MU4-3 mock-up

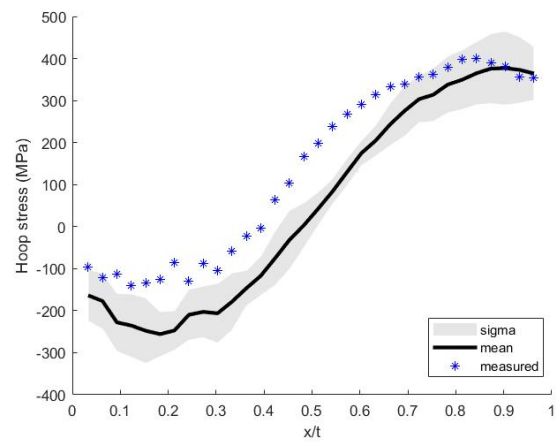


Fig. 16. Prediction of WCL hoop model for S5VOR mock-up

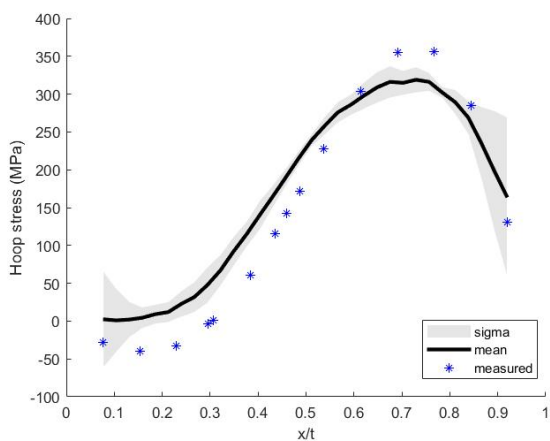


Fig. 17. Prediction of WCL hoop model for H1-2 mock-up

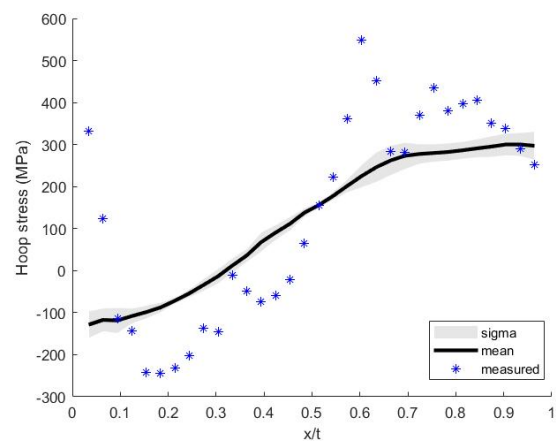


Fig. 18. Prediction of WCL hoop model for S5NG mock-up

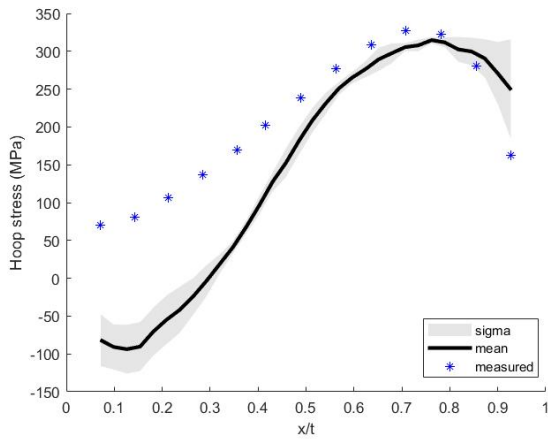


Fig. 19. Prediction of WCL hoop model for H1-3 mock-up

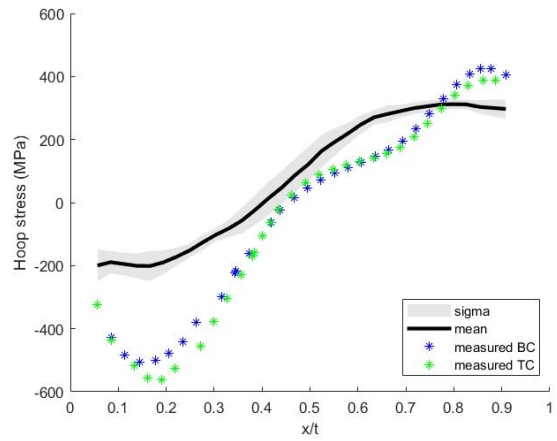


Fig. 20. Prediction of WCL hoop model for MU4-1 mock-up

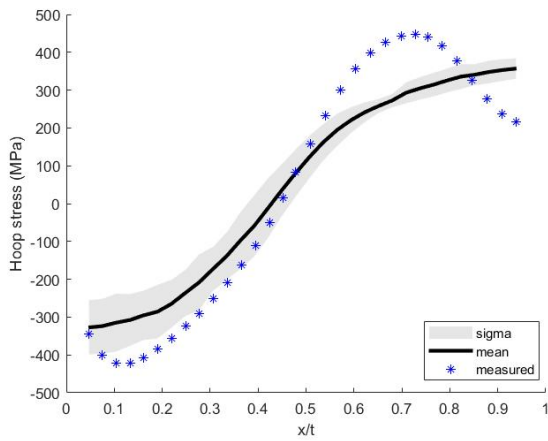


Fig. 21. Prediction of WCL hoop model for Esshete mock-up

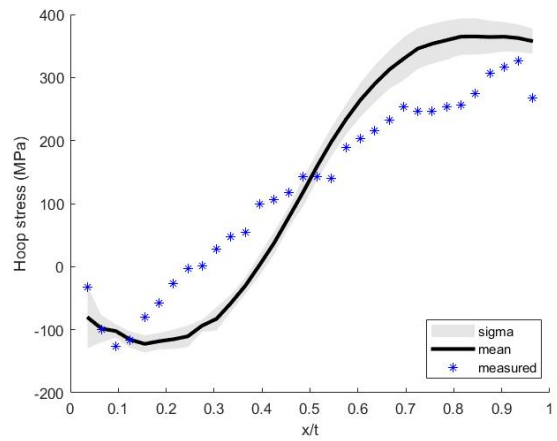


Fig. 22. Prediction of WCL hoop model for S5Old mock-up

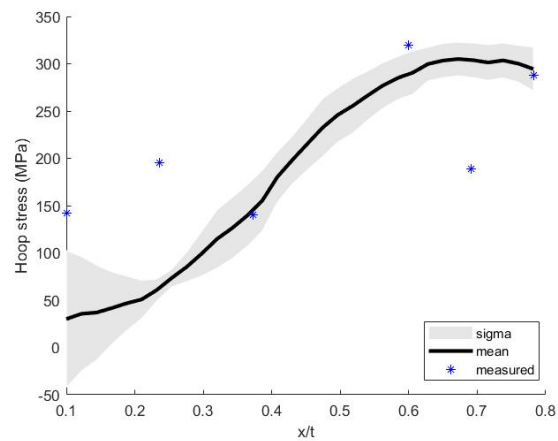


Fig. 23. Prediction of WCL hoop model for SP19 mock-up

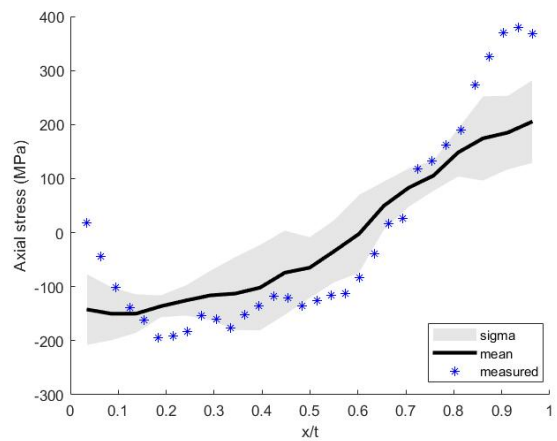


Fig. 24. Prediction of WCL axial model for S5NEW mock-up

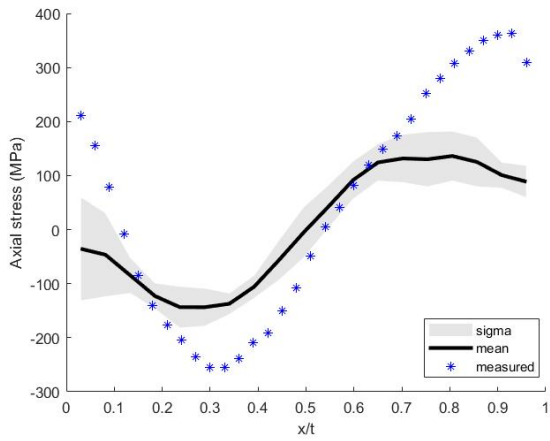


Fig. 25. Prediction of WCL axial model for SP37 mock-up

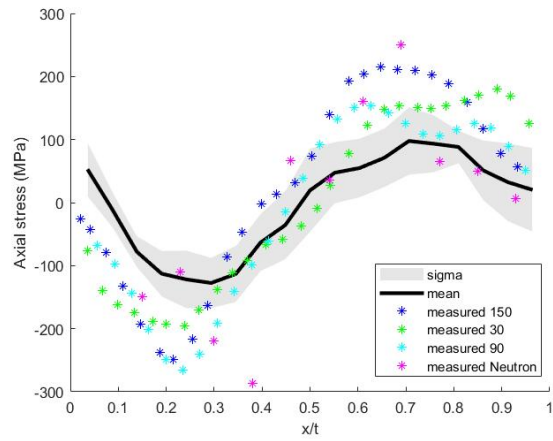


Fig. 26. Prediction of WCL axial model for MU4-3 mock-up

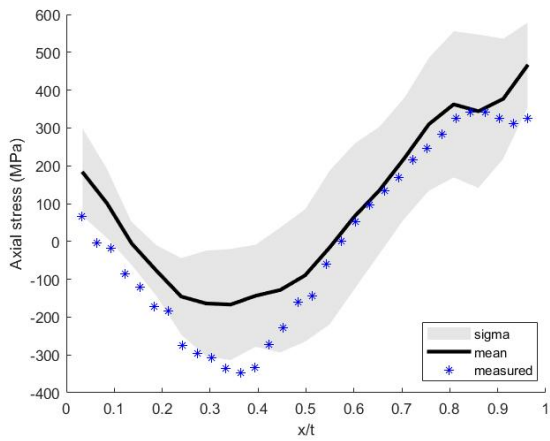


Fig. 27. Prediction of WCL axial model for S5VOR mock-up

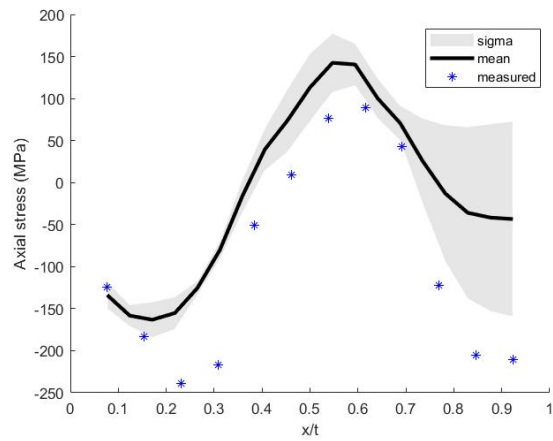


Fig. 28. Prediction of WCL axial model for H1-2 mock-up

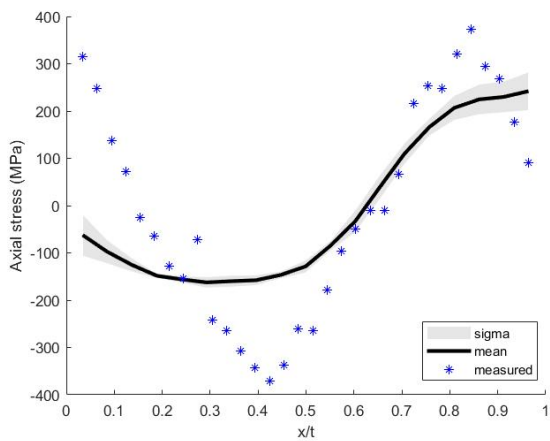


Fig. 29. Prediction of WCL axial model for S5NG mock-up

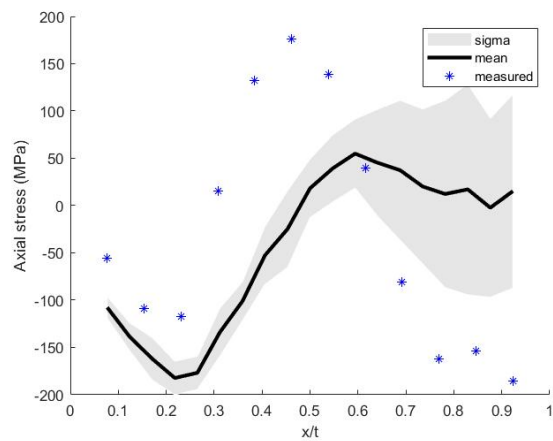


Fig. 30. Prediction of WCL axial model for H1-3 mock-up

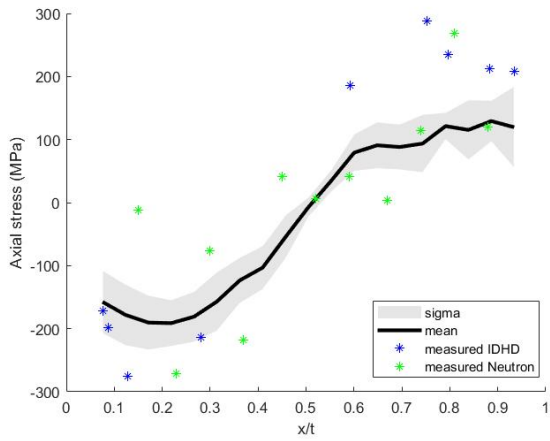


Fig. 31. Prediction of WCL axial model for MU4-1 mock-up

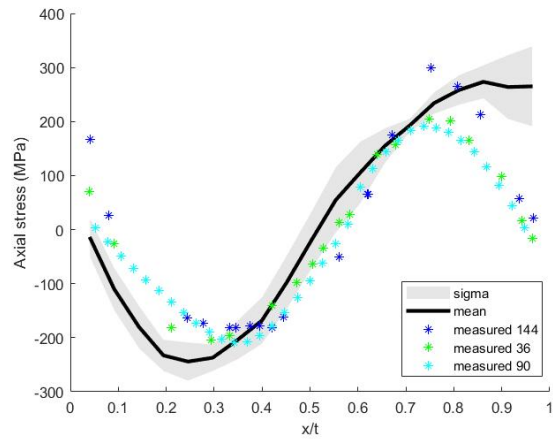


Fig. 32. Prediction of WCL axial model for Eshete mock-up

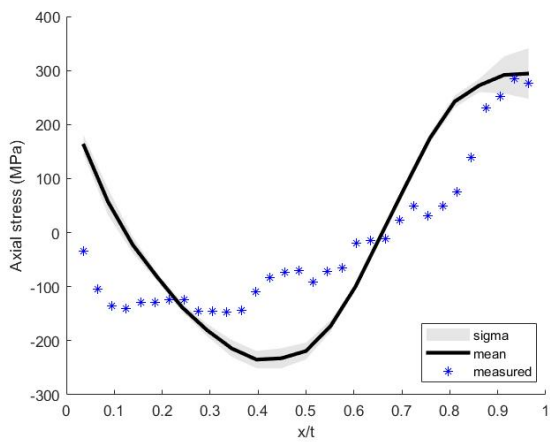


Fig. 33. Prediction of WCL axial model for S5Old mock-up

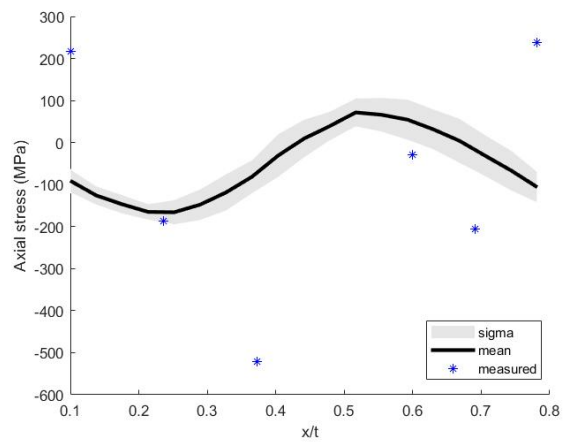


Fig. 34. Prediction of WCL axial model for SP19 mock-up

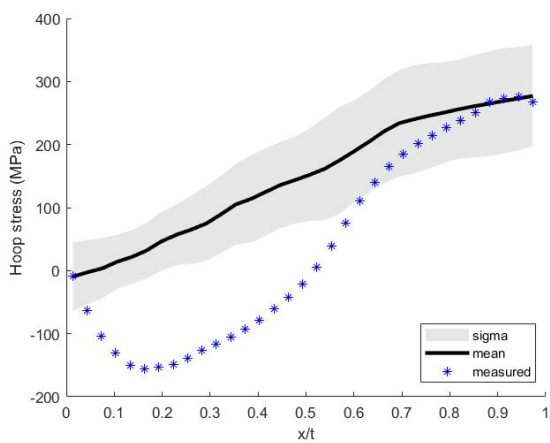


Fig. 35. Prediction of HAZ hoop model for S5NG mock-up

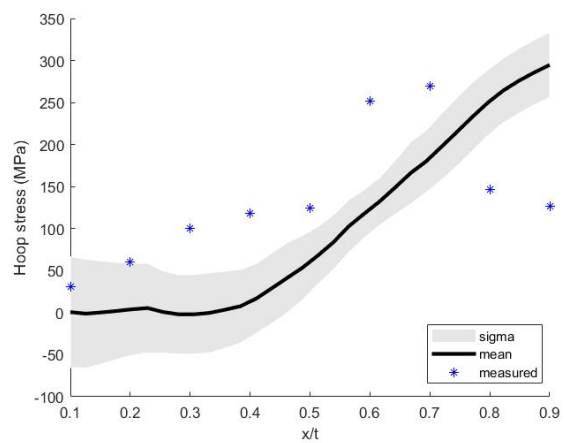


Fig. 36. Prediction of HAZ hoop model for OU20 mock-up

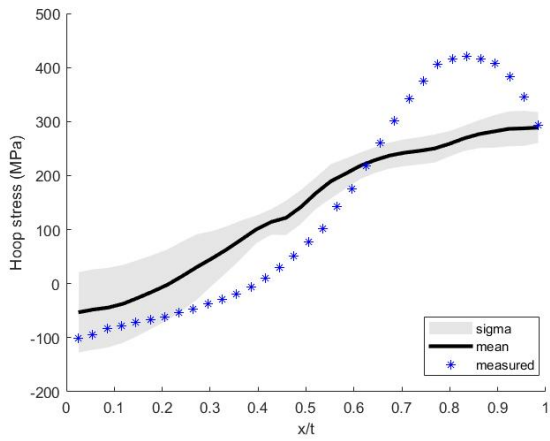


Fig. 37. Prediction of HAZ hoop model for SP37 mock-up

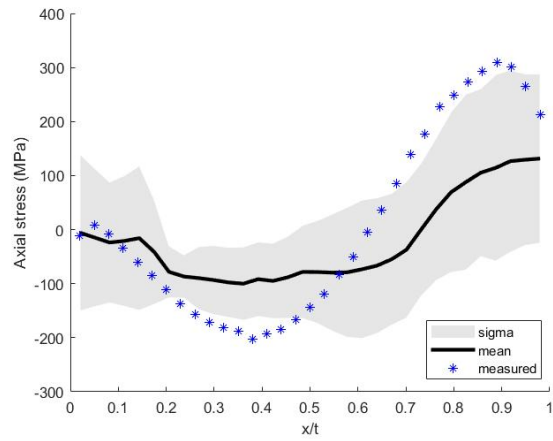


Fig. 38. Prediction of HAZ axial model for SP37 mock-up

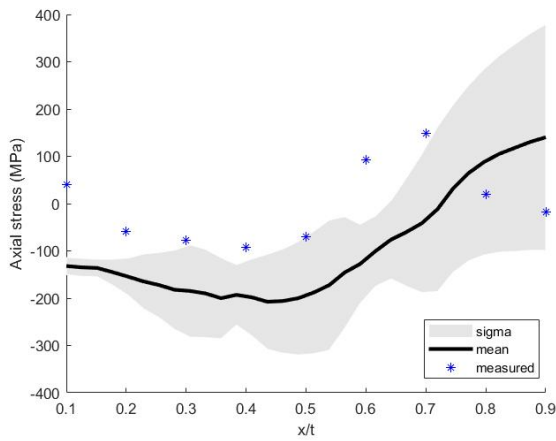


Fig. 39. Prediction of HAZ axial model for OU20 mock-up

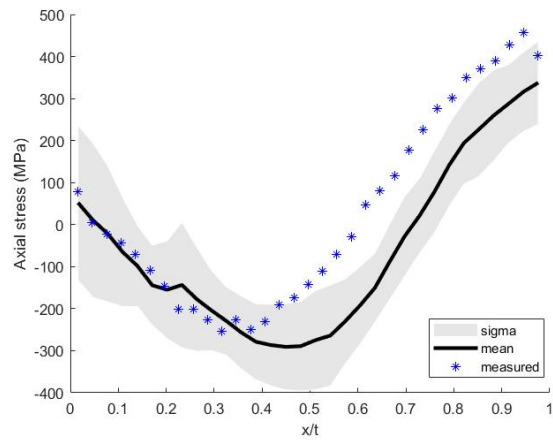


Fig. 40. Prediction of HAZ axial model for CaseY mock-up

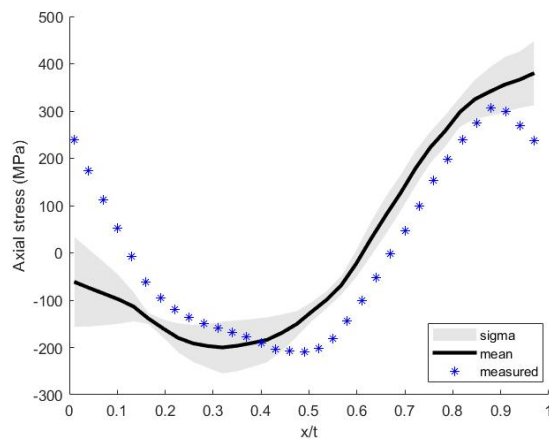


Fig. 41. Prediction of HAZ axial model for S5NG mock-up

The accuracy of predictions was evaluated by performance metrics, as it can be seen in figures 42 and 43, for the WCL and HAZ region respectively. The metrics used were coefficient of determination R^2 , mean absolute error (MAE) and mean square error (MSE). In addition, the mean standard deviation of the median of the predictions of the five selected architectures was reported.

WCL	R^2		MAE		MSE		Mean Standard Deviation of individual predictions	
	Hoop	Axial	Hoop	Axial	Hoop	Axial	Hoop	Axial
S5New	84.1%	77.5%	68.9	71.8	5491.7	7657.9	51.5	55.1
SP37	85.8%	57.9%	72.2	111.1	6275.6	18335	44.2	41.2
MU4-3	93.0%	66.4%	65.2	64.3	5474.3	5264.1	67.2	46.5
S5VOR	75.9%	82.0%	91.5	84.7	10561	10023	60.0	146.8
H1-2	92.6%	33.2%	36.6	79.2	1586.7	8653.2	24.5	41.2
S5NG	62.0%	57.0%	114.8	112.7	22289	21527	21.4	20.5
H1-3	-34.4%	-34.5%	80.6	123.0	10088	18746	20.7	48.7
MU4-1	71.3%	76.7%	144	83.4	27936	9162.5	34.9	38.0
Esshete	91.0%	49.0%	86.7	70.4	9313	9410.7	52.0	40.9
S5Old	70.9%	30.0%	67.3	92.7	5562.9	12166	23.2	16.7
SP19	-112.6%	-48%	56.9	222.2	5529.2	63618	27.3	38.9

Fig. 42. Performance metrics and mean standard deviation of the proposed method’s predictions for Weld Centre Line (WCL)

HAZ	R^2		MAE		MSE		Mean Standard Deviation of individual predictions	
	Hoop	Axial	Hoop	Axial	Hoop	Axial	Hoop	Axial
S5NG	26.7%	95.6%	109.5	39.4	17979	2273.2	69.4	43.6
OU20	-88.1%	-234.5%	88.3	128.5	9068.1	18394	43.0	112.6
SP37	79.6%	60.2%	76.7	91.5	7405.5	11807	41.4	112.1
Case Y	-	70%	-	100.8	-	15378	-	109.1

Fig. 43. Performance metrics and mean standard deviation of the proposed method’s predictions for Heat Affected Zone (HAZ)

According to the results, the predictions were good overall, with their majority achieving coefficient of determination (R^2) more than 70 percent and mean absolute error (MAE) less than 90 MPa. The predictions in the hoop direction were in general slightly better than the ones in the axial direction. The standard deviation of individual predictions was examined in case it could form an indicator of reliability of predictions, but there was no correlation observed between the standard deviation of predictions and performance of the model.

5 Interpretation of Results

5.1 Objective Function Value

The objective function value was found to vary across different selections of initial weight vector. In Figures 44 to 47 it can be seen the distribution of the objective function value for different number of nodes across various random initialisations.

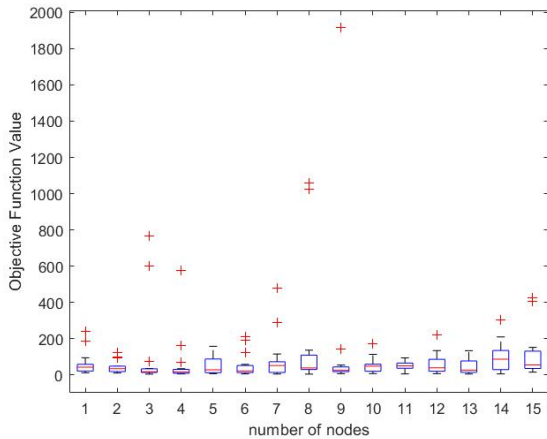


Fig. 44. Boxplot of model of WCL region and hoop direction in session 1

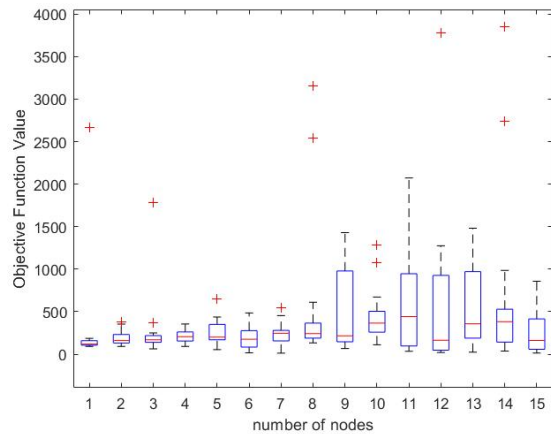


Fig. 45. Boxplot of model of WCL region and axial direction in session 1

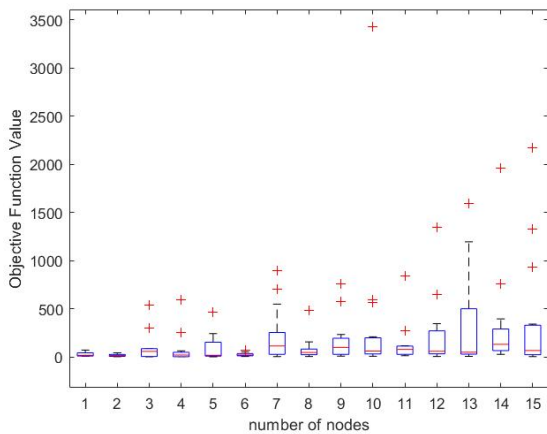


Fig. 46. Boxplot of model of HAZ region and hoop direction in session 1

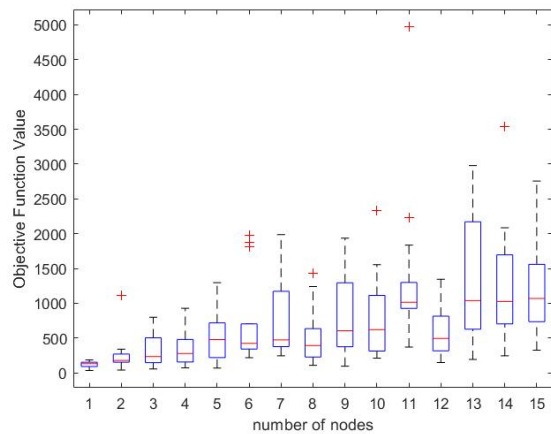


Fig. 47. Boxplot of model of HAZ region and axial direction in session 1

It is apparent from the boxplots that, there is a lot of scatter in the values of objective function for each architecture across different initial weights and there are many outliers observed. Thus, only one initialization is not adequate to assess the capability of each architecture since the results could be misleading. For instance, in Figure 45, the architecture of 15 nodes has achieved the lowest objective function value compared to the other architectures, but there is no guarantee that it will perform well in another initial weight selection. This is because, although it appears to have achieved the lowest

value of objective function, it has a lot of scatter in objective function value across different initial weights. That is why, to account for this variation in objective function value, the median value of objective function was assessed instead of the lowest.

Another noticeable fact is that, some architectures seem to respond well regardless the initial weights selection whilst others have very different values of objective function for different initial weights. The scatter among the value of objective function is in general larger in architectures of many nodes than it is in simpler architectures.

5.2 Architecture Selection

The architectures with lowest median number of objective function value found to be different in each independent session. The number of hidden nodes of the 5 architectures with the lowest value of objective function for each independent session are illustrated in Figures 48 to 51.

Session 1		Session 2		Session 3		Session 4		Session 5	
Selected architectures	Median Objective Fuction Value	Selected architectures	Median Objective Fuction Value	Selected architectures	Median Objective Fuction Value	Selected architectures	Median Objective Fuction Value	Selected architectures	Median Objective Fuction Value
4	16.4	10	27.3	9	16.6	6	17.0	4	24.3
3	17.6	9	27.3	12	20.8	4	17.6	5	26.3
6	22.4	14	32.1	7	23.1	3	18.0	3	30.4
9	25.6	6	33.6	4	24.1	5	18.1	9	32.8
13	26.5	13	33.7	14	26.6	10	18.5	7	33.0

Fig. 48. Architectures with lowest value of objective function in each of the independent sessions for WCL hoop dataset

Session 1		Session 2		Session 3		Session 4		Session 5	
Selected architectures	Median Objective Fuction Value	Selected architectures	Median Objective Fuction Value	Selected architectures	Median Objective Fuction Value	Selected architectures	Median Objective Fuction Value	Selected architectures	Median Objective Fuction Value
1	119	15	75	4	90	5	19	9	49
2	160	14	124	2	91	3	21	8	53
15	162	10	186	5	98	6	26	12	64
12	164	8	225	6	102	4	29	6	66
3	170	11	230	3	104	2	29	11	88

Fig. 49. Architectures with lowest value of objective function in each of the independent sessions for WCL axial dataset

Session 1		Session 2		Session 3	
Selected architectures	Median Objective Fuction Value	Selected architectures	Median Objective Fuction Value	Selected architectures	Median Objective Fuction Value
2	15.0	1	81.5	2	27.6
5	17.1	2	87.5	1	29.7
1	17.6	4	179.7	3	43.3
6	19.2	3	188.8	4	43.7
4	19.3	6	196.1	5	80.6

Fig. 50. Architectures with lowest value of objective function in each of the independent sessions for HAZ hoop dataset

Session 1		Session 2		Session 3		Session 4	
Selected architectures	Median Objective Fuction Value	Selected architectures	Median Objective Fuction Value	Selected architectures	Median Objective Fuction Value	Selected architectures	Median Objective Fuction Value
1	132	1	29.7	3	102.6	1	143.7
2	178	3	31.2	4	112.9	3	226.8
3	235	2	38.7	5	114.9	2	265.8
4	278	4	52.8	8	168.4	4	340.8
8	392	6	78.2	1	170.1	5	424.5

Fig. 51. Architectures with lowest value of objective function in each of the independent sessions for HAZ axial dataset

It is observed that there is a lot of scatter in the selection of best architectures across the independent sessions. The reason for this is that, the value of objective function is driven by the validation set, which was different in each independent session. The validation set was small, as it contained only two mock-ups for WCL and axial HAZ validation sets and only one in hoop HAZ validation set, and therefore, the evaluation of objective function was rather subjective. The similarities observed across the independent sessions are that all the architectures selected for the HAZ region have small number of hidden nodes (8 or below), while for the WCL region the most frequently selected architectures have 2 to 9 hidden nodes.

The influence of the four criteria is investigated for each of the four models as it is shown in Figures 52 to 55. The most dominant criterion appears to be the solution space consistency one, with a general trend of its value to increase with the number of nodes. The generalisation and training criteria values vary across the number of nodes and are usually minimised in not a small or a large number of nodes, but somewhere in the middle. As regards the feedforward architecture criterion (ffac), its value slightly increases with the number of nodes, as it was designed for this purpose, to favour smaller architectures.

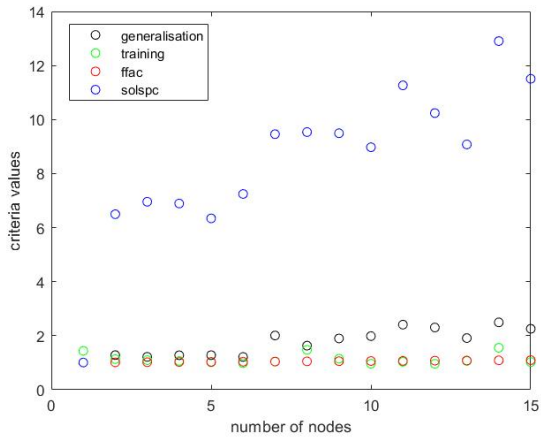


Fig. 52. Criteria values in session 1 of model WCL hoop

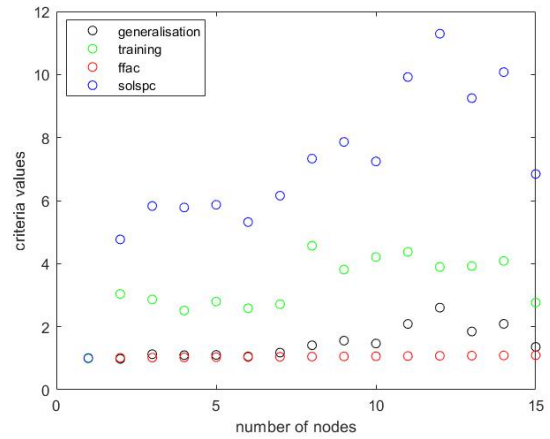


Fig. 53. Criteria values in session 1 of model WCL axial

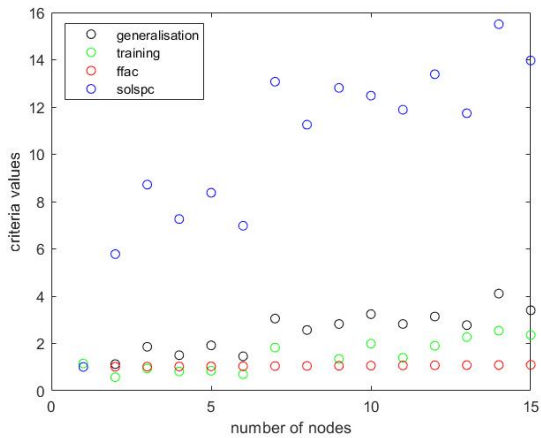


Fig. 54. Criteria values in session 1 of model HAZ hoop

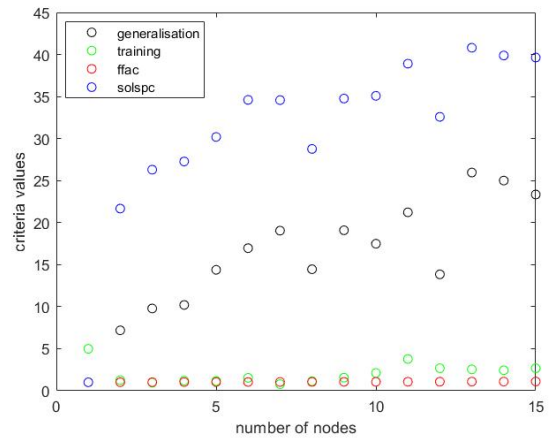


Fig. 55. Criteria values session 1 of model HAZ axial

The value of underfitting penalty was also examined. Figures 56 to 59 show its mean value across different number of nodes. In the HAZ region the penalty does not show any clear preference across number of nodes, while in the WCL larger architectures tend to have lower number of mean penalty value. This result was expected because it is known that smaller architectures tend to underfit more than larger.

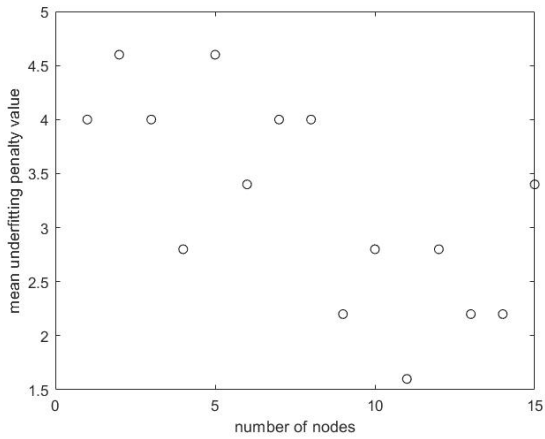


Fig. 56. Underfitting penalty mean value per number of nodes in session 1 of model WCL hoop

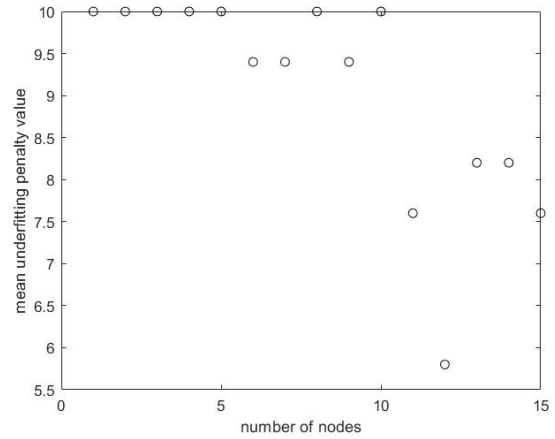


Fig. 57. Underfitting penalty mean value per number of nodes in session 1 of model WCL axial

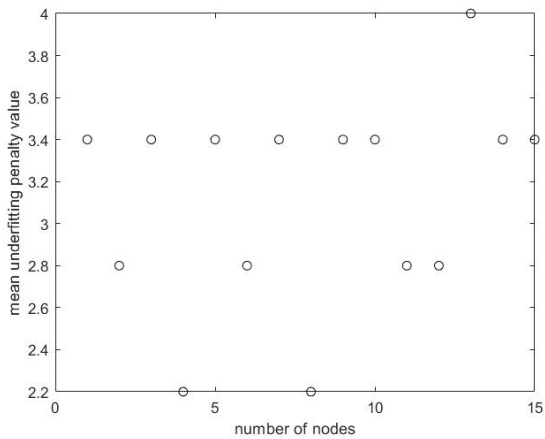


Fig. 58. Underfitting penalty mean value per number of nodes in session 1 of model HAZ hoop

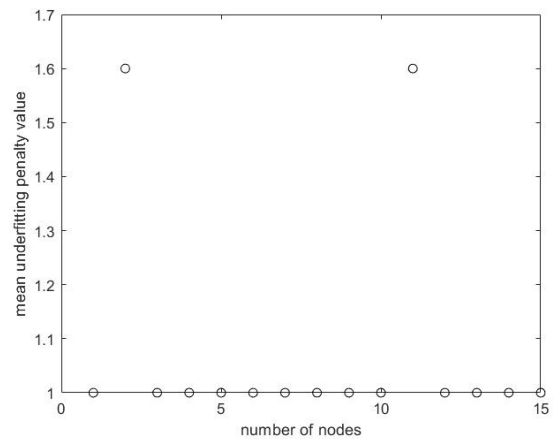


Fig. 59. Underfitting penalty mean value per number of nodes in session 1 of model HAZ axial

5.3 Comparison with Other Methods

5.3.1 Comparison with Using One Architecture

In this section the results obtained by following the proposed methodology are compared with the scenario of making predictions with only the best architecture, based on the minimisation of median value of the objective function. The same metrics that were used to assess the ensemble of ANNs are now used to assess the single architecture model. Also, the mean standard deviation of the prediction of the best architecture is reported, which is generated from the scatter of the predictions of the best architecture in different initialisations. The results of the performance assessment of the single best architecture method are illustrated in Figures 60 and 61.

WCL	R^2		MAE		MSE		Mean Standard Deviation	
	Hoop	Axial	Hoop	Axial	Hoop	Axial	Hoop	Axial
S5New	91.3%	60.2%	46.5	88.5	2986.7	13542	58.5	55.5
SP37	84.2%	40.6%	76.4	135.4	6995.5	25849	116.0	50.1
MU4-3	90.2%	50.3%	74.8	76.3	7724.2	7786.6	451.1	198.4
S5VOR	72.4%	68.6%	93.9	111.0	12080	17447	562.2	593.8
H1-2	92.5%	44.3%	36.8	73.4	1619.3	7208.2	79.6	88.2
S5NG	58.6%	61.0%	126.1	110.1	24265	19525	133.9	63.7
H1-3	-32.0%	-52.2%	76.5	127.6	9902.6	21214	62.9	79.4
MU4-1	64.9%	64.2%	160.7	105.3	34222	14057	171.0	107.4
Esshete	88.6%	-4.9%	96.7	102.7	11792	19335	133.6	158.6
S5Old	77.9%	16.7%	58.0	99.3	4217	14070	53.3	73.2
SP19	-140.9%	-35.5%	60.8	215.9	6265	58382	101.3	131.8

Fig. 60. Metrics of one architecture selection scenario in WCL region

HAZ	R^2		MAE		MSE		Mean Standard Deviation	
	Hoop	Axial	Hoop	Axial	Hoop	Axial	Hoop	Axial
S5NG	2.3%	79.8	132.6	91.7	23960	10498	142.1	45.8
OU20	-298.4%	-336.4%	133.8	130.2	19210	24001	77.7	49.8
SP37	60.2%	86.1%	109.5	54.5	14433	4116.5	128.6	75.3
Case Y	-	62%	-	134	-	19797	-	146.7

Fig. 61. Metrics of one architecture selection scenario in HAZ region

It can be observed that, 22 out of the 29 predictions performed better by the ensemble of ANNs compared to the single prediction of the ANN with the lowest median value of objective function, excelling in all metrics (R^2 , MAE, MSE). That forms evidence that the ensemble of predictors has superiority over the single predictor. The interpretation of these results is that the validation set used for assessing the performance of the ANNs was rather small, and thus a best architecture was not clearly observed. Moreover, it is possible that there is not one best architecture and more can be combined to give a better perspective. In addition, the hypothesis that the objective function value reflects the best performance is subjective itself.

A visual representation of the ensemble of predictions of the five best architectures and of the prediction of the one best architecture is provided in Figures 62 and 63

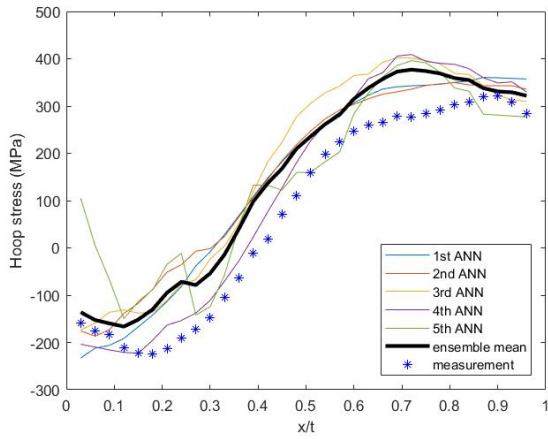


Fig. 62. Individual predictions of final ensemble for SP37 WCL hoop residual stress

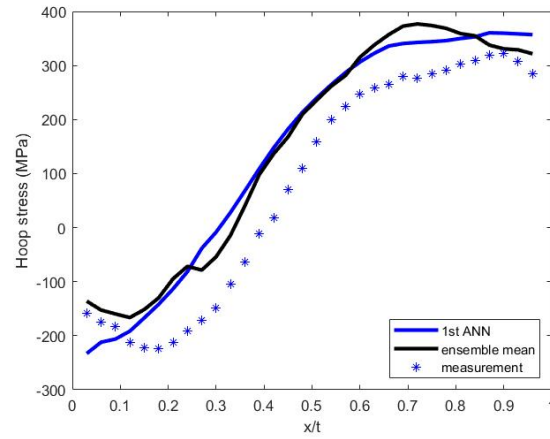


Fig. 63. Predictions of best ANN and mean of ensemble for SP37 WCL hoop residual stress

5.3.2 Comparison with Using All the Architectures

To provide evidence that the use of an objective function to find the most suitable architectures made sense overall, the methodology proposed is compared to the scenario of selecting all the architectures examined (one hidden layer, 1-15 hidden nodes) to construct the ensemble.

According to this scenario, all the architectures (one hidden layer, 1-15 hidden nodes) were trained with 15 different random initialisations each. The median of the predictions of each architecture was then calculated and then the average and standard deviation of the medians was found. Early stopping was again used for training, with the validation set for early stopping changing across the ANNs, so for the ensemble to utilise all the data for training.

The metrics used to assess this scenario were the same as before, to compare it directly with the proposed model, and the results are shown in the Figures 64 and 65.

WCL	R ²		MAE		MSE		Mean Standard Deviation	
	Hoop	Axial	Hoop	Axial	Hoop	Axial	Hoop	Axial
S5New	82.3%	80.4%	69.9	65.9	6134.3	6668.2	37.4	38.4
SP37	86.4%	53.3%	70.2	120.7	6017.9	20328	39.4	34.4
MU4-3	91.5%	76.3%	64.9	53	6653.5	3711.6	29.0	33.17
S5VOR	88.9%	77.0%	58.0	98.0	4883.9	12795	46.2	69.8
H1-2	88.6%	26.4%	42.6	79.5	2459.2	9522.8	30.3	43.2
S5NG	63.5%	29.9%	108.3	155.3	21444	35080	22.2	67.2
H1-3	-35.9%	-23.1%	85.2	118.3	10191	17159	27.7	46.0
MU4-1	58.2%	67.3%	170.5	101.7	40779	12851	34.4	37.7
Esshete	86.8%	65.9%	101.3	63.7	13673	6291.3	37.6	36.0
S5Old	79.1%	80.6%	56.1	47.1	3985.3	3273	22.9	49.0
SP19	-161.5%	-44.5%	61.7	218.1	6802.8	62231	25.5	31.8

Fig. 64. Metrics of all architecture selection scenario in WCL region

HAZ	R ²		MAE		MSE		Mean Standard Deviation	
	Hoop	Axial	Hoop	Axial	Hoop	Axial	Hoop	Axial
S5NG	35.2%	94.3%	105.3	48.2	15885	2971	96.2	57.2
OU20	35.5%	0.4%	42.4	60.0	3108.4	5477.4	105.3	119.1
SP37	57.1%	52.8%	107.6	103.8	15589	13988	83.5	107.4
Case Y	-	68.3%	-	105.2	-	16489	-	86.5

Fig. 65. Metrics of all architecture selection scenario in HAZ region

It can be observed that, in 16 out of the 29 predictions the proposed methodology performed better compared to the scenario of using all the architectures. This is an indication that using more ANNs in an ensemble is not always useful, and that the use of an objective function to select best architectures improves the ensemble's performance. The interpretation of these results is as follows. On the one hand, the selection of some architectures and discard of others is beneficial because not all architectures perform equally well. In the current study the preference of the objective function was to select rather simple architectures, over complex ones. On the other hand, the small validation set size might be inadequate to reveal the best architectures, and this can be observed from the scatter in the selection of best architectures among the independent sessions. Furthermore, the selected best architectures based on a small validation set, have been subjectively selected, and that might generate correlation among their predictions, while as stated by Perrone and Cooper (1992), ensembles of ANNs are likely to perform better when predictions are uncorrelated.

6 Conclusion

6.1 General Summary

This research presented a methodology to predict weld-induced residual stress profiles using Artificial Neural Networks (ANNs). The proposed model is an ensemble of ANNs of different architectures, which also deploys the scatter generated by the random initial weight selection. The architectures were selected based on an objective function value, according to the hypothesis that this value reflects the architecture's performance. The results obtained showed that the model achieves good accuracy of predictions in most cases and that it performs better compared to the scenarios of using only one predictor and using many random architectures.

6.2 Theoretical Contribution

The current research proposed a new methodology for approaching the problem of residual stress prediction, by utilising a customised objective function for architecture selection and combining more than one architecture in the final predictive model. Furthermore, useful insights have been provided on how to handle the ambiguity of ANN initialisation when assessing models, and on the utilisation of this variation to enhance the final model's predictions.

6.3 Limitations

In the present study, limitations of the proposed methodology were identified. Firstly, the selection of best architectures was found to vary depending on the partition of data. However, this could be attributed to the limited size of dataset available, and the selection of best architectures would be more consistent if cross validation was used. In addition, the objective function used to assess the architectures consists of user-defined parameters, which require calibration to work optimally.

Another drawback of the proposed method is that it does not provide an estimation of accuracy of prediction. The standard deviation of the model was not found to be an indication of model's performance. A predictive distribution would have been very helpful for the implementation of the algorithm in critically for safety assessments, where reliable upper bounds are required. Therefore, this method is not yet adequately reliable since a few cases are mispredicted and a realistic prediction interval is not provided.

Also, the ensemble method of this study does not consider the correlation among the predictors. It is claimed that uncorrelated predictors are likely to give more accurate results than correlated ones. The

best architectures of this study are selected based on a small validation set, and thus their predictions might be quite correlated.

6.4 Future Research

The feature selection of the proposed model was based on indications by the literature. More sophisticated techniques could be used to potentially find better transformations of the input data.

Moreover, to improve the proposed methodology, cross validation could be used for more objective selection of best architectures. According to this method, the partition of training and validation data changes in every loop, so that the objective function is assessed by various validation sets. As a result, a broader view of best architectures is acquired since their selection is not biased by the validation set selected.

Furthermore, the selection of less correlated predictors might improve the performance of the ANN ensemble. The selection of five architectures based on one validation set, as it was conducted in this study, might lead to correlated architecture choices. On the other hand, if cross validation was used and the best architectures of each fold were combined within an ensemble, the results might be improved. That is because, bad architectures would be filtered out and the selected architectures would be less correlated since they excelled in different validation sets. The potentially optimal number of selected architectures is something that could also be investigated.

Last but not least, when predicting experimental measurements with machine learning, the error of the measured data should be considered. To further develop the predictive model, methods that account for the uncertainty of inputs can be used, for example Bayesian techniques.

7 Εισαγωγή

7.1 Θεωρητικό Υπόβαθρο

Τα εξαρτήματα των οποίων η λειτουργία απαιτεί ύψιστη ασφάλεια, για παράδειγμα δοχεία πίεσης και συστήματα σωληνώσεων σε πυρηνικές εγκαταστάσεις, θα πρέπει να αξιολογούνται με προσοχή όσον αφορά την κατασκευαστική τους αρτιότητα ώστε να αποτραπεί ενδεχόμενη αστοχία. Οι συγκολλήσεις χρησιμοποιούνται ευρέως για την κατασκευή τέτοιων εξαρτημάτων, καθώς υπερτερούν σε σχέση με τις ηλωτές κατασκευές σε πολλούς τομείς, όπως η στεγανότητα και το μειωμένο βάρος. Η περιοχή συγκόλλησης πρέπει να αξιολογείται προσεκτικά καθώς αποτελεί περιοχή ενδεχόμενης αστοχίας, λόγω των παραμενουσών τάσεων που δημιουργούνται κατά τη συγκόλληση.

Μία λεπτομερής ανάλυση των παραμενουσών τάσεων λόγω συγκολλήσεων και των συνεπειών τους στην ακεραιότητα των κατασκευών παρατίθεται από τον Masubuchi (1980). Σύμφωνα με το βιβλίο του, οι παραμένουσες τάσεις ορίζονται ως οι τάσεις ενός σώματος όταν δεν ασκείται σε αυτό εξωτερικό φορτίο. Επομένως, οι συνισταμένες των δυνάμεων και των ροπών λόγω των παραμενουσών τάσεων είναι μηδενικές. Υψηλές εφελκυστικές παραμένουσες τάσεις μπορεί να προκαλέσουν ψαθυρότητα, κόπωση και ρωγμάτωση, ενώ οι θλιπτικές τάσεις ενδέχεται να μειώσουν την αντοχή σε λυγισμό. Επίσης, αξίζει να αναφερθεί, ότι η επίδραση των παραμενουσών τάσεων εξαρτάται από το εκάστοτε υλικό, και πιο συγκεκριμένα, η επίδραση είναι χειρότερη σε ψαθυρά υλικά από ότι σε ελατά.

Σύμφωνα με τους Rossini et al. (2012), οι παραμένουσες τάσεις ορίζονται ως οι τάσεις ενός σώματος όταν δεν υπάρχουν εξωτερικό φορτίο και θερμοκρασιακή ανομοιομορφία. Οι παραμένουσες τάσεις κατηγοριοποιούνται ως μακροτάσεις και μικροτάσεις· οι παραμένουσες μακροτάσεις αναπτύσσονται σε κλίμακα μεγαλύτερη του μεγέθους κόκκων του υλικού, ενώ οι παραμένουσες μικροτάσεις έχουν το μέγεθος ενός κόκκου ή μικρότερο. Οι κατεργασίες που δημιουργούν παραμένουσες τάσεις μπορεί να περιλαμβάνουν παραμόρφωση υλικού, θερμικές διεργασίες, εργαλειομηχανές ή μεταβολή του σχήματος του υλικού ή των ιδιοτήτων του. Κατά τις συγκολλήσεις, οι παραμένουσες τάσεις προκαλούνται εξαιτίας των διαφορικών συστολών του υλικού συγκόλλησης καθώς πήζει και κρύνει στη θερμοκρασία περιβάλλοντος. Σε αντίθεση με τις εφελκυστικές παραμένουσες τάσεις, οι θλιπτικές τάσεις μπορεί να είναι ευεργετικές, καθώς αποτρέπουν τη δημιουργία και διάδοση ρηγματώσεων κόπωσης και βελτιώνουν την αντοχή σε φθορά και διάβρωση.

Οι Rossini et al. (2012) παραθέτουν μια ενδελεχή ανασκόπηση των σύγχρονων μεθόδων μέτρησης παραμενουσών τάσεων, συμπεριλαμβανομένων των πλεονεκτημάτων και μειονεκτημάτων τους. Σύμφωνα με τη δημοσίευσή τους, παρά την πρόοδο στη διαχείριση των παραμενουσών τάσεων, απαιτείται περισσότερη προσπάθεια ώστε να αναπτυχθούν μη δαπανηρές μέθοδοι μέτρησης και ανάλυσής τους. Οι σύγχρονες μέθοδοι μέτρησης παραμενουσών τάσεων μπορούν να κατηγοριοποιηθούν ως παρεμβατικές, ημιπαρεμβατικές και μη παρεμβατικές. Οι παρεμβατικές και ημιπαρεμβατικές τεχνικές απαιτούν την αποκοπή υλικού από το δοκίμιο και ο υπολογισμός των παραμενουσών

τάσεων γίνεται με βάση τη μετατόπιση του κομματιού που συμβαίνει λόγω της απελευθέρωσής του από την τάση· παραδείγματα παρεμβατικών και ημιπαρεμβατικών τεχνικών είναι οι τομή περιγράμματος (sectioning contour), διάνοιξη οπής (hole drilling), διάνοιξη αυλάκωσης (ring-core) και βαθιάς οπής (deep-hole). Οι μη παρεμβατικές τεχνικές περιλαμβάνουν τη μέτρηση μέσω δέσμης ακτινών Χ ή νετρονίων, υπερηχητικές ή μαγνητικές μεθόδους, και συνήθως μετράνε κάποια σχετική με την τάση παράμετρο. Οι μη παρεμβατικές μέθοδοι έχουν το πλεονέκτημα της διατήρησης της ακεραιότητας του δοκιμίου. Είναι χρήσιμες για τη μέτρηση δοκιμίων υψηλής αξίας και για την αξιολόγηση της κόπωσης εξαρτημάτων κατασκευών που απαιτούν τακτική επιθεώρηση για την αποφυγή βλάβης ή ακόμα και αστοχίας, για παράδειγμα γέφυρες, εξαρτήματα αεροσκαφών ή ενδοθαλάσσιες πλατφόρμες. Ωστόσο, συνήθως απαιτούν λεπτομερείς προσαρμογές σε αντιπροσωπευτικό υλικό δοκιμίου, και οι μέθοδοι όπως οι ακτίνες Χ και η περίθλαση νετρονίων δεν μπορούν να χρησιμοποιηθούν για μεγάλες συγκολλήσεις· η τεχνική περίθλασης νετρονίων μπορεί να διεισδύσει σε μεγαλύτερο βάθος από ότι η δέσμη ακτινών Χ, αλλά έχει αρκετά μεγαλύτερο κόστος. Η μέθοδος περιγράμματος μπορεί να χρησιμοποιηθεί για μεγάλα εξαρτήματα και πολλά υλικά, έχει μεγάλη ακρίβεια, αλλά είναι παρεμβατική μέθοδος. Από τις ημιπαρεμβατικές τεχνικές, η διάνοιξη οπής και βαθιάς οπής είναι εύκολες και γρήγορες αλλά έχουν περιορισμένη ευαισθησία παραμόρφωσης και ακρίβεια.

Η ανάλυση πεπερασμένων στοιχείων χρησιμοποιείται ευρύτατα για την πρόβλεψη των παραμενουσών τάσεων συγκολλήσεων. Σύμφωνα με τον Mathew et al. (2018) δύο μειονεκτήματα της ανάλυσης πεπερασμένων στοιχείων είναι το υπολογιστικό κόστος και το ότι η μηχανική ανάλυση είναι βασισμένη σε αβέβαιες παραδοχές που πρέπει να ληφθούν από τον αναλυτή. Στην εργασία των Vasileiou et al. (2017), τρεις διαφορετικές προσεγγίσεις μηχανικής μοντελοποίησης αξιολογήθηκαν με βάση πειραματικές μετρήσεις, και εν συνεχεία απορρίφθηκαν οι μη αποδεκτές παραδοχές. Σύμφωνα με τους Smith et al. (2018), τόσο οι πειραματικές μετρήσεις όσο και η ανάλυση πεπερασμένων στοιχείων ενέχουν αρκετή ανακρίβεια. Επομένως, σε σημαντικές για ασφάλεια αξιολογήσεις, χρησιμοποιούνται οι πειραματικές μετρήσεις σε συνδυασμό με την ανάλυση πεπερασμένων στοιχείων και εγκρίνονται αν συμφωνούν επαρκώς μεταξύ τους.

Προκαθορισμένα πρωτόκολλα ακολουθούνται για την αξιολόγηση της ακεραιότητας κατασκευών, με ένα από αυτά να είναι η αξιολόγηση ακεραιότητας κατασκευών R6. Όπως περιγράφεται από τον Bouchard (2007), το πρωτόκολλο R6 διαχειρίζεται τις παραμένουσες τάσεις ανάλογα με το επιθυμητό επίπεδο ακριβείας. Το Επίπεδο 1 του πρωτοκόλλου αποτελεί την απλούστερη και πιο συντηρητική προσέγγιση καθώς υποθέτει ομοιόμορφη κατανομή εφελκυστικών παραμενουσών τάσεων και με μέτρο ίσο με το μέσο όριο διαρροής του υλικού. Το Επίπεδο 2 του πρωτοκόλλου καθορίζει ένα ανώτατο όριο για την κατανομή της παραμένουσας τάσης ανά βάθος τοιχώματος, λαμβάνοντας υπόψη την κατηγορία της εκάστοτε συγκόλλησης. Το επίπεδο 3 παρέχει λεπτομέρειες για το μέτρο και τη χωρική κατανομή των παραμενουσών τάσεων συγκόλλησης και απαιτεί αναλυτική μοντελοποίηση της συγκόλλησης όπως και επικύρωση με πειραματικές μετρήσεις. Το Επίπεδο ακριβείας για την αξιολόγηση των παραμενουσών τάσεων επιλέγεται ανάλογα με το εκάστοτε πρόβλημα. Το Επίπεδο 2 έχει την πιο ευρεία χρήση καθώς παρέχει μία συντηρητική αξιολόγηση των

παραμενουσών τάσεων με τη λιγότερη προσπάθεια.

Οι αξιολογήσεις ακεραιότητας που αφορούν τις παραμένουσες τάσεις σε σταθμούς ηλεκτροπαραγωγής είναι πολύ συντηρητικές ώστε να διασφαλίζουν την ασφαλή λειτουργία τους. Μία πιο ακριβής εκτίμηση των παραμενουσών τάσεων θα μπορούσε να οδηγήσει σε επέκταση λειτουργίας αυτών των εγκαταστάσεων και επομένως σε εξοικονόμηση. Ένα πρόγραμμα που έχει ως στόχο την επέκταση της διάρκειας ζωής των σταθμών ηλεκτροπαραγωγής είναι το NNUMAN, το οποίο καθιερώθηκε στο Ηνωμένο Βασίλειο στα τέλη του 2012. Σε δημοσίευση των Jeyaganesh et al. (2014) παρατίθεται μια επισκόπηση του πενταετούς αυτού προγράμματος, η οποία εξηγεί ότι ο σκοπός του προγράμματος ήταν η διαχείριση των παραμενουσών τάσεων συγκολλήσεων περιφερειακά συγκολλημένων αντιδραστήρων νέας γενιάς ώστε να επεκταθεί η διάρκεια ζωής τους. Για την επίτευξη αυτού του στόχου, διερευνήθηκαν οι παράμετροι συγκόλλησης για ελαχιστοποίηση των παραμενουσών τάσεων συλλέγοντας και αναλύοντας δεδομένα από πειράματα και προσομοιώσεις.

Σύμφωνα με τον Mathew et al. (2018), καθώς πολλά πειραματικά δεδομένα παραμενουσών τάσεων συγκολλήσεων γίνονται διαθέσιμα τα τελευταία χρόνια, δύναται να χρησιμοποιηθούν για την κατασκευή μοντέλων βασιζόμενων σε δεδομένα για την πρόβλεψη των παραμενουσών τάσεων, οπότε ενδεχομένως να εξυπηρετήσουν τις αξιολογήσεις ακεραιότητας κατασκευών. Η μηχανική μάθηση μπορεί να κοστίζει λιγότερο υπολογιστικά από ότι η ανάλυση πεπερασμένων στοιχείων και σύμφωνα με την έως τώρα βιβλιογραφία φαίνεται να έχει καλή ακρίβεια. Έχει χρησιμοποιηθεί για την πρόβλεψη αποτελεσμάτων ανάλυσης πεπερασμένων στοιχείων και πειραματικών μετρήσεων. Η δεύτερη προσέγγιση ακολουθήθηκε στην παρούσα εργασία, στην οποία, πειραματικά δεδομένα κατανομών παραμενουσών τάσεων περιφερειακά συγκολλημένων σωλήνων χρησιμοποιήθηκαν για εκπαίδευση και αξιολόγηση της επίδοσης ενός μοντέλου συνόλου Τεχνικών Νευρωνικών Δικτύων.

7.2 Στόχοι Έρευνας

Η προκείμενη εργασία αφορά την πρόβλεψη των παραμενουσών τάσεων λόγω περιφερειακής συγκόλλησης στις περιοχές Κεντρικής Γραμμής Συγκόλλησης (ΚΓΣ) και Θερμικά Επηρεασμένης Ζώνης (ΘΕΖ) χρησιμοποιώντας πειραματικά δεδομένα δια πάχους κατανομών παραμενουσών τάσεων ωστενιτικών χαλύβδινων σωλήνων. Το υπό εξέταση προβλεπτικό μοντέλο βασίζεται στα Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα (ΤΝΔ). Οι στόχοι της έρευνας είναι διαμορφωμένοι ως εξής:

- Να παρουσιαστεί ένα καινούριο μοντέλο συνόλου ΤΝΔ, το οποίο να προβλέπει με ακρίβεια τις παραμένουσες τάσεις συγκολλήσεων, στις περιοχές ΚΓΣ και ΘΕΖ, αξιοποιώντας πειραματικά δεδομένα.
- Να αξιολογηθεί το μοντέλο χρησιμοποιώντας άγνωστα προηγουμένως για αυτό δεδομένα
- Να αποτιμηθεί η προτεινόμενη μεθοδολογία μέσω μελετών περίπτωσης για το όφελος της χρήσης παραπάνω από ενός ΤΝΔ και για την επίδραση της αντικειμενικής συνάρτησης στην επιλογή αρχιτεκτο-

νικής.

- Να προσδιοριστούν τα πλεονεκτήματα και τα μειονεκτήματα της προτεινόμενης μεθοδολογίας.

7.3 Δομή Έρευνας

Αυτή η ενότητα περιγράφει τη δομή της εργασίας, η οποία αποτελείται από τα εξής κεφάλαια.

Το Κεφάλαιο 2 περιλαμβάνει ανασκόπηση της υπάρχουσας βιβλιογραφίας και αποτελείται από τρεις ενότητες. Η πρώτη, παραθέτει μια γενική ανασκόπηση των τεχνικών μηχανικής μάθησης. Η δεύτερη περιγράφει πώς η μηχανική μάθηση έχει χρησιμοποιηθεί για την πρόβλεψη των παραμενουσών τάσεων συγκολλήσεων. Η τρίτη ενότητα περιλαμβάνει θεωρία για τα ΤΝΔ, καθώς αυτά επιλέχθηκαν ως το προβλεπτικό μοντέλο στην παρούσα εργασία.

Το Κεφάλαιο 3 περιγράφει την προτεινόμενη μεθοδολογία. Ο αλγόριθμος που χρησιμοποιήθηκε σε αυτήν την εργασία παρουσιάζεται βήμα-βήμα.

Το Κεφάλαιο 4 αφορά την εφαρμογή της προτεινόμενης μεθοδολογίας για τα προκείμενα δεδομένα. Επιπλέον, παρουσιάζονται τα προκύπτοντα αποτελέσματα και η επίδοση του μοντέλου αξιολογείται από δείκτες επίδοσης.

Το Κεφάλαιο 5 παρουσιάζει την ερμηνεία των αποτελεσμάτων όσον αφορά την τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης και την επιλογή των καλύτερων αρχιτεκτονικών. Επιπροσθέτως, η επίδοση του μοντέλου συγκρίνεται με την επίδοση δύο άλλων μεθόδων και παρατίθενται παρατηρήσεις για τα αποτελέσματα.

Το Κεφάλαιο 6 συνοψίζει τα αποτελέσματα της έρευνας και παρουσιάζει τους περιορισμούς της προτεινόμενης μεθοδολογίας, τη θεωρητική συμβολή της εργασίας και ενδεχόμενες μελλοντικές μελέτες επί του θέματος.

8 Βιβλιογραφική Ανασκόπηση

8.1 Ανασκόπηση Τεχνικών Μηχανικής Μάθησης

Η μηχανική μάθηση είναι μία μέθοδος προσομοίωσης ενός συστήματος χρησιμοποιώντας δεδομένα της συμπεριφοράς του. Σύμφωνα με τους Praveena and Jaiganesh (2017), η μηχανική μάθηση μπορεί να κατηγοριοποιηθεί σε τρεις κατηγορίες, συγκεκριμένα, επιτηρούμενη, μη επιτηρούμενη και ενισχυτική μάθηση. Στην επιτηρούμενη μάθηση κάθε μία παρατήρηση στα δεδομένα αντιστοιχίζεται σε έναν χαρακτηρισμό και υπάρχει σαφής διαχωρισμός των εισόδων και εξόδων του μοντέλου. Στη μη επιτηρούμενη μάθηση το μοντέλο κατασκευάζεται από σύνολο δεδομένων δίχως χαρακτηρισμό. Στην ενισχυτική μάθηση το μοντέλο έχει συγκεκριμένο στόχο και μαθαίνει μέσα από τη συμπεριφορά του. Στις επόμενες παραγράφους παρατίθενται οι πιο δημοφιλείς αλγόριθμοι μηχανικής μάθησης.

Ένας συνήθης αλγόριθμος μηχανικής μάθησης είναι οι Μηχανές Διανυσμάτων Υποστήριξης (Support Vector Machines - SVM). Σύμφωνα με τον Fletcher (2008), οι SVM μπορούν να χρησιμοποιηθούν για κατηγοριοποίηση γραμμικά χωριζόμενων δεδομένων μέσω της μεθόδου μεγιστοποίησης περιθωρίου. Επιπροσθέτως, η μεθοδολογία των SVM μπορεί να επεκταθεί σε μη πλήρως γραμμικά χωριζόμενα δεδομένα, χρησιμοποιώντας έναν συμβιβασμό ανάμεσα στη μεγιστοποίηση του περιθωρίου των κλάσεων και στην ελαχιστοποίηση του αριθμού λανθασμένης κατηγοριοποίησης μεταβλητών. Επίσης χρησιμοποιώντας την Τεχνική του Πυρήνα, οι SVM μπορούν να χρησιμοποιηθούν για κατηγοριοποίηση και για παλινδρόμηση μη γραμμικών δεδομένων. Ο πυρήνας δύναται να απεικονίσει τα μη γραμμικά διαχωριζόμενα δεδομένα σε χώρο στον οποίον είναι γραμμικά χωριζόμενα. Παραδείγματα πυρήνων είναι οι Ακτινικής Βάσης, Πολυωνυμικοί και Σιγμωειδείς.

Το Τυχαίο Δάσος (Random Forest) είναι άλλος ένας δημοφιλής αλγόριθμος μηχανικής μάθησης που χρησιμοποιείται για κατηγοριοποίηση και παλινδρόμηση. Σύμφωνα με τον Breiman (2001), τα Τυχαία Δάση αποτελούν έναν συνδυασμό από δεντρικά προβλεπτικά μοντέλα και το σφάλμα γενίκευσής τους εξαρτάται από την ικανότητα των ατομικών δέντρων όπως επίσης και από τη συσχέτισή τους. Στη δημοσίευσή τους, χρησιμοποιώντας τον Ισχυρό Νόμο των Μεγάλων Αριθμών αποδεικνύουν ότι ο αλγόριθμος πάντα συγκλίνει και έτσι αποφεύγεται η υπερπροσαρμογή.

Σε ένα βιβλίο επιμελημένο από τους Zhang and Ma (2012), ο Artur J. Ferreira παραθέτει ότι οι αλγόριθμοι ενδυνάμωσης (boosting) είναι βασισμένοι στη μέθοδο συνένωσης αδύναμων προβλεπτικών μοντέλων αντί για τη χρήση ενός ισχυρού προβλεπτικού μοντέλου. Ο Schapire (1990) πρώτος απέδειξε ότι τα αδύναμα προβλεπτικά μοντέλα μπορούν να ισοδυναμίσουν με ισχυρά. Υπάρχουν πολλές παραλλαγές αλγορίθμων ενδυνάμωσης. Σύμφωνα με τον Robi Polikar, στο βιβλίο των Zhang and Ma (2012), για δυαδικής κατηγοριοποίησης προβλήματα, ένας αλγόριθμος ενδυνάμωσης μπορεί να δημιουργηθεί ως εξής. Τρεις διαφορετικοί κατηγοριοποιητές δημιουργούνται. Ο πρώτος εκπαιδεύεται με ένα τυχαίο μέρος των δεδομένων εκπαίδευσης. Ο δεύτερος κατηγοριοποιητής εκπαιδεύεται σε διαφορετικό υποσύνολο από τον πρώτο, του οποίου ακριβώς οι μισές παρατηρήσεις κατηγοριοποιούνται σωστά από τον πρώτο κατηγοριοποιητή. Ο τρίτος κατηγοριοποιητής εκπαιδεύεται

με παρατηρήσεις στις οποίες ο πρώτος και ο δεύτερος κατηγοριοποιητής διαφωνούν. Έπειτα λαμβάνεται η πλειοψηφική κατηγοριοποίηση των τριών κατηγοριοποιητών. Ο AdaBoost είναι ένα είδος αλγόριθμου ενδυνάμωσης, στον οποίο οι παρατηρήσεις που ενσωματώνονται στα υποσύνολα διαλέγονται από μία συνεχώς ανανεούμενη κατανομή και οι κατηγοριοποιητές συνδιάζονται μέσω πλειοψηφικής με βάρη απόφασης, με βάση τα σφάλματα εκπαίδευσης τους.

Στο βιβλίο των Zhang and Ma (2012), ο Artur J. Ferreira δηλώνει ότι η χρήση παραλλαγών με βάρη του ίδιου συστήματος εκπαίδευσης κάνει τον αλγόριθμο AdaBoost να μην απαιτεί πολύ μεγάλο σύνολο εκπαίδευσης όπως απαιτούσαν προηγούμενοι αλγόριθμοι ενδυνάμωσης. Επιπροσθέτως, ο αλγόριθμος Μεταβολικής Ενδυνάμωσης Μηχανής (Gradient Boosting Machine-GBM) είναι ένα ισχυρό προβλεπτικό εργαλείο βασισμένο στην ενδυνάμωση (boosting), σύμφωνα με τον Friedman (2001). Ο Mazumder (2020) πρότεινε τον Τυχαίο αλγόριθμος Μεταβολικής Ενδυνάμωσης Μηχανής (Randomised Gradient Boosting Machine -RGBM)), ο οποίος είναι λιγότερο υπολογιστικά δαπανηρός από ότι ο GBM καθώς χρησιμοποιεί μία μέθοδο τύχης για τη μείωση της αναζήτησης στο χώρο των αδύναμων προβλεπκών μοντέλων. Ο Catboost είναι μία επιτυχημένη εφαρμογή των GBM η οποία προτάθηκε από τους Doroogush, Ershov, and Gulin (2018). Σύμφωνα με τους Ke et al. (2017), ο αλγόριθμος Μεταβολικής Ενδυνάμωσης Δέντρων Απόφασης (Gradient Boosting Decision Trees) είναι ακόμη ένας δημοφιλής αλγόριθμος μηχανικής μάθησης, με επιτυχημένες εφαρμογές όπως οι αλγόριθμοι XGBoost και rGBRT. Οι Ke et al. (2017) ανέπτυξαν περαιτέρω αυτόν τον αλγόριθμο εφευρίσκοντας τον LightGBM, ο οποίος επιταχύνει τη διαδικασία μάθησης παραπάνω από 20 φορές, ενώ πετυχαίνει σχεδόν την ίδια ακρίβεια.

Μια απλή και αποδοτική τεχνική μηχανικής μάθησης είναι η Παλινδρόμηση (Regression). Σύμφωνα με τους Maulud and Abdulazeez (2020), η Απλή Γραμμική Παλινδρόμηση (Simple Linear Regression) μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να εκφραστεί μία εξαρτημένη μεταβλητή συναρτήσει μιας ανεξάρτητης σύμφωνα με τη σχέση: $y = \beta_0 + \beta_1 x + \varepsilon$. Η γραμμική παλινδρόμηση πολλών μεταβλητών (Multivariate Linear Regression - MLR) μπορεί να χρησιμοποιηθεί όταν υπάρχουν παραπάνω από μία ανεξάρτητες μεταβλητές και το βασικό μοντέλο είναι ως εξής: $y = \beta_0 + \beta_1 x + \dots + \beta_m x_m + \varepsilon$. Η πολυωνυμική είναι ένας άλλος τύπος Παλινδρόμησης, κατά τον οποίο η εξαρτημένη μεταβλητή περιγράφεται από μία πολυωνυμική έκφραση ανεξάρτητων μεταβλητών. Μία συνήθης μέθοδος εύρεσης της καλύτερα προσαρμοσμένης καμπύλης είναι η Μέθοδος Ελαχίστων Τετραγώνων (Least Square Method - LSM). Σύμφωνα με αυτήν τη μέθοδο, οι καλύτεροι συντελεστές του πολυωνύμου βρίσκονται με βάση την ελαχιστοποίηση του αθροίσματος των τετραγώνων των αποστάσεων των σημείων των δεδομένων από την πολυωνυμική καμπύλη.

Οι k-Πλησιέστεροι Γείτονες (K-Nearest Neighbours - k-NN) είναι ένας αλγόριθμος επιτηρούμενης μάθησης που μπορεί να χρησιμοποιηθεί για κατηγοριοποίηση και για παλινδρόμηση. Σύμφωνα με τον Rodrigues (2018), είναι ένας πολύ απλός αλγόριθμος και έχει μόνο δύο παραμέτρους· η μία παράμετρος είναι ο αριθμός k και η άλλη είναι ο ορισμός της απόστασης (π.χ. Ευκλείδεια απόσταση). Αφότου ορισθούν οι δύο αυτές παράμετροι, ευρίσκονται οι k σε αριθμό παρατηρήσεις με τη μικρότερη απόσταση από την παρατήρηση που πρόκειται να κατηγοριοποιηθεί. Αυτές οι k παρατηρήσεις μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την πρόβλεψη της κατηγορίας μιας παρατήρησης,

για παράδειγμα βρίσκοντας τη μέση τιμή τους για παλινδρόμηση ή εφαρμόζοντας πλειοψηφισμό για κατηγοριοποίηση.

Οι k-μέσοι (k-means) είναι ένας αλγόριθμος ανεπιτήρητης μάθησης για ομαδοποίηση (clustering). Η μέθοδος αυτή είναι βασισμένη στην υπόθεση ότι δύο παρατηρήσεις είναι όμοιες αν η μεταξύ τους απόσταση είναι μικρή. Καταρχήν, ορίζονται τυχαία σημεία που ονομάζονται βαρύκεντρα (centroids). Ο αριθμός των βαρυκέντρων ισούται με τον αριθμό των ομάδων. Έπειτα υπολογίζεται η απόσταση μεταξύ κάθε σημείου και κάθε βαρύκεντρου και κάθε σημείο αντιστοιχίζεται στην ομάδα του κοντινότερου βαρύκεντρου. Νέα βαρύκεντρα βρίσκονται, με βάση τη μέση απόσταση των σημείων μιας ομάδας, και ο αλγόριθμος συνεχίζει επαναληπτικά. Σύμφωνα με τους Likas, Vlassis, and Verbeek (2002), το βασικό μειονέκτημα αυτής της μεθόδου είναι η ευαισθησία στην επιλογή των αρχικών βαρυκέντρων. Ένας νέος αλγόριθμος, που ονομάζεται καθολικοί k-μέσοι (global k-means), προτάθηκε από τους Likas, Vlassis, and Verbeek (2002) ώστε να ξεπεραστεί αυτό το πρόβλημα. Σύμφωνα με αυτή τη μέθοδο, αντί να επιλεγθούν τα αρχικά βαρύκεντρα τυχαία, νέες ομάδες προστίθενται προοδευτικά.

Περαιτέρω βιβλιογραφικές ανασκοπήσεις στη μηχανική μάθηση έχουν γραφτεί από τους Oke (2002) και από τους Praveena and Jaiganesh (2017). Οι τελευταίοι παραθέτουν μία ενδελεχή βιβλιογραφική ανασκόπηση σχετικά με την επιτηρούμενη μάθηση και τη διαδικασία ενδυνάμωσης (boosting). Τα Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα είναι άλλο ένα ισχυρό εργαλείο μηχανικής μάθησης, και παρατίθεται ξεχωριστά, στην ενότητα 2.3.

8.2 Μηχανική Μάθηση στην Πρόβλεψη Παραμενουσών Τάσεων

Τα τελευταία χρόνια η μηχανική μάθηση έχει εφαρμοστεί για την πρόβλεψη των παραμενουσών τάσεων συγκολλήσεων. Προβλεπτικά μοντέλα έχουν φτιαχτεί από πειραματικά δεδομένα είτε από δεδομένα ανάλυσης πεπερασμένων στοιχείων. Παρακάτω παρατίθενται διάφορες τεχνικές που έχουν χρησιμοποιηθεί για αυτόν τον σκοπό.

Οι Klein et al. (2003) έδειξαν ότι ένα Τεχνητό Νευρωνικό Δίκτυο (ΤΝΔ) μπορεί να προβλέψει τα αποτελέσματα συγκολλήσεων Ανάλυσης Πεπερασμένων Στοιχείων. Η προσομοίωση των ιδιοτήτων συγκόλλησης με χρήση ΤΝΔ αντί για Ανάλυσης Πεπερασμένων Στοιχείων έχει το πλεονέκτημα χαμηλότερου υπολογιστικού κόστους. Το ΤΝΔ εκπαιδεύτηκε με δεδομένα από προσομοίωση πεπερασμένων στοιχείων για ένα μεγάλο εύρος παραμέτρων. Εξετάστηκαν δύο είδη ΤΝΔ, συγκεκριμένα Πολυεπίπεδου Αντιλήπτρου (Multi-Layer Perceptron - MLP) και Συνάρτησης Ακτινικής Βάσης (Radial Basis Function - RBF). Απεδείχθη ότι το MLP έχει ελαφρώς καλύτερη προβλεψιμότητα από ότι η RBF.

Οι Na, Kim, and Lim (2007) προέβλεψαν την παραμένουσα τάση συγκόλλησης ανόμοιων υλικών χρησιμοποιώντας μοντέλο Ασαφούς Λογικής Νευρωνικών Δικτύων (Fuzzy Neural Network - FNN) βελτιστοποιημένο με μία υβριδική μέθοδο μάθησης γενετικού αλγορίθμου και ελαχίστων τετραγώνων. Τα δεδομένα που χρησιμοποιήθηκαν στην εργασία τους λήφθηκαν από Ανάλυση Πεπερασμένων

Στοιχείων και τα αποτελέσματα που λήφθηκαν από αυτήν τη μελέτη έδειξαν ότι οι προβλέψεις του FNN μοντέλου είχαν RMS σφάλμα μικρότερο από 5 τοις εκατό.

Οι Kumanan, Kumar, and Dhas (2007) χρησιμοποίησαν ένα ΤΝΔ εκπαιδευμένο με γενετικό αλγόριθμο για την πρόβλεψη των παραμενουσών τάσεων αντικριστής συγκόλλησης (butt-welding) προσομοιώσεων πεπερασμένων στοιχείων. Αντί να χρησιμοποιήσουν αλγόριθμο οπισθόδρομης διάδοσης για την εκπαίδευση, τα βάρη των ΤΝΔ κωδικοποιήθηκαν σε χρωμοσώματα. Έπειτα επιλέχθηκε ένας τυχαίος αρχικός πληθυσμός και με βάση ενός κριτηρίου αντικειμενικής συνάρτησης ο πληθυσμός εξελίχθηκε μέσω γενετικών τελεστών, συγκεκριμένα την επιλογή, τη διασταύρωση και τη μετάλλαξη. Τα αποτελέσματα που προέκυψαν έδειξαν ότι η μεθοδολογία είναι ικανοποιητική, γρήγορη και εύκολη στην εφαρμογή της.

Οι Na et al. (2008) χρησιμοποίησαν μοντέλο Υποστήριξης Διανυσμάτων Παλινδρόμησης (Support Vector Regression - SVR) για να προβλέψουν την παραμένουσα τάση συγκόλλησης ανόμοιων μετάλλων. Το SVR μοντέλο βελτιστοποιήθηκε μέσω γενετικού αλγορίθμου. Τα δεδομένα που χρησιμοποιήθηκαν για αυτή τη μελέτη προήλθαν από Ανάλυση Πεπερασμένων Στοιχείων. Τα προκύπτοντα αποτελέσματα είχαν επίπεδο RMS σφάλματος περίπου 2,66 τοις εκατό.

Οι Lim et al. (2010) εφάρμοσαν Παλινδρόμηση Διανυσμάτων Υποστήριξης (Support Vector Regression - SVR), Ασαφή Νευρωνικά Δίκτυα (Fuzzy Neural Networks - FNN), όπως επίσης και τον συνδυασμό αυτών των δύο για να προβλέψουν τις παραμένουσες τάσεις συγκόλλησης ανόμοιων υλικών. Τα αποκτηθέντα δεδομένα προέρχονται από Ανάλυση Πεπερασμένων Στοιχείων και για τη συλλογή δεδομένων επαρκούς πληροφορίας για την εκπαίδευση χρησιμοποιήθηκε μία μέθοδος Αφαιρετικής Ομαδοποίησης (Subtractive Clustering - SC). Τα αποτελέσματα έδειξαν ότι ο συνδυασμός των μοντέλων SVR και FNN είχε την καλύτερη επίδοση.

Οι Dhas and Kumanan (2011) εφάρμοσαν και συνέκριναν Νευρωβριδικά (Neurohybrid) μοντέλα για την πρόβλεψη παραμενουσών τάσεων αντικριστής συγκόλλησης χρησιμοποιώντας δεδομένα εκπαίδευσης από ανάλυση πεπερασμένων στοιχείων. Ως παράμετροι κατεργασίας λήφθηκαν η απόδοση του τόξου, η ταχύτητα συγκόλλησης, η τάση τόξου και το ρεύμα συγκόλλησης. Τα μοντέλα που αξιολογήθηκαν ήταν τρία Νευρωνικά Δίκτυα εκπαιδευμένα με διαφορετικούς αλγορίθμους, συγκεκριμένα με Γενετικό Αλγόριθμο (NNGA), Βελτιστοποίηση Σμήνους Σωματιδίων (Particle Swarm Optimisation - NNPSO) και Προσαρμοσμένο Νευροασαφών Συμπερασμάτων Σύστημα (Adaptive Neuro Fuzzy Inference System - ANFIS). Συμπερασματικά προέκυψε ότι το μοντέλο ANFIS ήταν ανώτερο από άποψη ταχύτητας και ακρίβειας.

Οι Ahmadzadeh et al. (2012) κατασκεύασαν ένα εμπρόσθιας τροφοδότησης οπισθόδρομης διάδοσης (feed forward back propagation) Νευρωνικό Δίκτυο, εκπαιδευμένο με τη μέθοδο Levenberg-Marquardt, για την πρόβλεψη της μέγιστης παραμένουσας τάσης σε συγκόλληση τόξου με αέριο. Τα αποκτηθέντα δεδομένα προήλθαν από Ανάλυση Πεπερασμένων Στοιχείων. Εξετάστηκαν δύο σενάρια για την επιλογή των εισόδων του μοντέλου. Στο πρώτο, η παράμετροι που χρησιμοποιήθηκαν ως εισοδοί ήταν το πάχος του δοκιμίου, το μέγεθος του ηλεκτροδίου, η ταχύτητα συγκόλλησης και η ένταση του

ρεύματος και της τάσης. Κατά το δεύτερο σενάριο, δύο παράμετροι χρησιμοποιήθηκαν ως είσοδοι, συγκεκριμένα, η επιτρεπόμενη παραμένουσα τάση και το πάχος δοκιμίου και ένας αδιάστατος αριθμός ως έξοδος ο οποίος είναι συνάρτηση της προσδιδόμενης θερμότητας, της ταχύτητας συγκόλλησης, του μεγέθους του ηλεκτροδίου και της πυκνότητας. Σύμφωνα με τα προκύπτοντα αποτελέσματα, κατά το πρώτο σενάριο υπήρξε καλή συσχέτιση με τα αποτελέσματα προσομοίωσης πεπερασμένων στοιχείων, έχοντας συντελεστή συσχέτισης περίπου 99 τοις εκατό. Τα αποτελέσματα του δεύτερου σεναρίου έδειξαν ότι ο καλύτερος συνδυασμός των παραμέτρων συγκόλλησης μπορεί να προσδιοριστεί με αποδεκτή ακρίβεια.

Οι Koo, Yoo, and Na (2017) εφάρμοσαν ένα μοντέλο Μεταδοτικής Υποστήριξης Διανυσμάτων Παλινδρόμησης (Cascaded Support Vector Regression - CSV) για την πρόβλεψη των παραμενουσών τάσεων της περιοχής συγκόλλησης χρησιμοποιώντας δεδομένα από Ανάλυση Πεπερασμένων Στοιχείων. Η προβλεψιμότητα του CSV μοντέλου ήταν καλύτερη σε σχέση με το κλασικό μοντέλο Υποστήριξης Διανυσμάτων Παλινδρόμησης (Support Vector Regression - SVR)

Οι Mathew et al. (2017) χρησιμοποίησαν ΤΝΔ εκπαιδευμένα με τον Κλιμακωτής Κλίσης Μεταβολής (Scaled Conjugate Gradient - SCG) αλγόριθμο για την πρόβλεψη της κατανομής παραμένουσας τάσης δια του πάχους δοκιμίου σε σωλήνες ανοξείδωτου ωστενιτικού χάλυβα. Τα δεδομένα που χρησιμοποιήθηκαν για την εκπαίδευση και επικύρωση του μοντέλου προήλθαν από πειραματικές μετρήσεις. Κατασκευάστηκε ένα σύνολο από ΤΝΔ, με κάθε ΤΝΔ να αρχικοποιείται από διαφορετικά βάρη. Τα ΤΝΔ που επιλέχθηκαν να αποτελέσουν το τελικό μοντέλο ήταν εκείνα με τη χαμηλότερη τιμή αντικειμενικής συνάρτησης Bayesian σφάλματος.

Οι Mathew et al. (2018) χρησιμοποίησαν Τεχνητά και Ασαφή Νευρωνικά Δίκτυα για την πρόβλεψη παραμενουσών τάσεων συγκολλήσεων με χρήση πειραματικών δεδομένων. Συνέκριναν τα δύο μοντέλα με βάση στατιστικούς δείκτες όπως το σφάλμα ρίζας μέσω των τετραγώνων (root mean square error - RMSE), το απόλυτο κλάσμα διακύμανσης (absolute fraction of variance - R2) και το μέσο απόλυτο ποσοστιαίο σφάλμα (mean absolute percentage error - MAPE). Το μοντέλο Ασαφούς Νευρωνικού Δικτύου, το οποίο βελτιστοποιήθηκε με μία υβριδική τεχνική, είχε καλύτερη επίδοση από το εκπαιδευμένο με τη μέθοδο Levenberg-Marquardt ΤΝΔ, κυρίως επειδή το δεύτερο δεν απέδωσε συντηρητικές προβλέψεις των παραμενουσών τάσεων, όπως απαιτείται από τις σημαντικές για την ασφάλεια αξιολογήσεις κατασκευαστικής ακεραιότητας.

Η ικανότητα πρόβλεψης κατανομών παραμενουσών τάσεων με Μηχανές Πιθανοτικών Πυρήνων (Probabilistic Kernel Machines) μελετήθηκε από τους Alamaniotis et al. (2018) και πιο συγκεκριμένα, χρησιμοποιήθηκε η μέθοδος Γκαουσιανών Διεργασιών (Gaussian Processes - GP) εξοπλισμένη με διάφορους πυρήνες. Τα δεδομένα που χρησιμοποιήθηκαν ήταν πειραματικά και οι τελικές προβλέψεις είχαν τη μορφή διαστήματος (μέση τιμή και διακύμανση). Στην ίδια μελέτη, η επίδοση του GP συγκρίθηκε με αυτήν μιας Μηχανής Μη Πιθανοτικού Πυρήνα (Non-probabilistic Kernel Machine), όπως Παλινδρόμηση Διανυσμάτων Υποστήριξης (Support Vector Regression - SVR) οπλισμένα με τους ίδιους πυρήνες και με Γραμμική Παλινδρόμηση Πολλών Μεταβλητών (Multivariate Linear Regression - MLR). Ο GP απεδείχθη να υπερτερεί στις περισσότερες περιπτώσεις προβλέψεων.

Ένα πλήθος αλγορίθμων μηχανικής μάθησης, συγκεκριμένα ο M5 Αλγόριθμος Δέντρων Παλινδρόμησης (M5 algorithm-base Model Trees Regression), Τυχαίο Δάσος (Random Forest), Παλινδρόμηση Διανυσμάτων Υποστήριξης (Support Vector Regression), Κλαδεμένο Δέντρο Μειωμένου Σφάλματος (Reduced Error Pruning Tree), Πολυεπίπεδο Αντίληπτρο (Multi-layer perceptron), Περιστασιακά Βασισμένος αλγόριθμος k-Πλησιέστερου Γείτονα (Instance Based k-Nearest Neighbour) και η Τοπικά Σταθμισμένη Μάθηση (Locally Weighted Learning) έχουν εξεταστεί από τους Das et al. (2020). Τα δεδομένα που χρησιμοποιήθηκαν σε αυτή τη μελέτη ήταν πειραματικά και τα αποτελέσματα έδειξαν ότι η Παλινδρόμηση Διανυσμάτων Υποστήριξης (Support Vector Regression) και η Τοπικά Σταθμισμένη Μάθηση (Locally Weighted Learning) βρέθηκαν να έχουν με συνέπεια καλή και κακή επίδοση αντίστοιχα.

Οι Bhardwaj et al. (2020) χρησιμοποίησαν μηχανική μάθηση για να εκτιμήσουν την παραμένουσα τάση σε περιφερειακές συγκολλήσεις σωλήνων. Χρησιμοποίησαν πειραματικά δεδομένα και συνέκριναν την επίδοση δώδεκα διαφορετικών αλγορίθμων, συγκεκριμένα, Πολυγραμμική Παλινδρόμηση (Multi-linear Regression - MLR), Τυχαίο Δάσος (Random Forest - RF), Παλινδρόμηση Γκαουσιανής Διεργασίας (Gaussian Process Regression - GPR), Μηχανές Διανυσματικής Υποστήριξης (Support Vector Machines - SVR), Μεταβολική Ενδυνάμωση (Gradient Boosting - GB) κ.λπ. Οι δείκτες που χρησιμοποιήθηκαν για την αξιολόγηση της ακρίβειας των αλγορίθμων ήταν η ρίζα του μέσου τετραγωνικού σφάλματος (Root Mean Square Error - RMSE), η εκτιμώμενη βαθμολόγηση διακύμανσης (Estimated Variance Score - EVS), το Μέγιστο Απόλυτο Σφάλμα (Maximum Absolute Error -AAE) και Συντελεστής Προσδιορισμού (Coefficient of Determination - R square)). Ο αλγόριθμος GB βρέθηκε να έχει την καλύτερη επίδοση.

Ο Kulkarni (2021) εφάρμοσε ένα τεχνητό νευρωνικό δίκτυο (ΤΝΔ) για την πρόβλεψη της παραμένουσας τάσης συγκόλλησης βασισμένο σε δεδομένα ανάλυσης πεπερασμένων στοιχείων. Οι υπερπαραμέτροι του ΤΝΔ βρέθηκαν μέσα από εκτεταμένη διαδικασία δοκιμής και σφάλματος. Χρησιμοποιώντας τις καλύτερες υπερπαραμέτρους που βρέθηκαν, το μοντέλο πέτυχε περίπου 93,5 τοις εκατό ακρίβεια προβλέψεων.

8.3 Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα (ΤΝΔ)

Τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα (ΤΝΔ) είναι ένα ισχυρό εργαλείο πρόβλεψης εμπνευσμένο από τον βιολογικό εγκέφαλο. Αποδείχθηκε από τους Hornik, Stinchcombe, and White (1989) ότι ένα τυπικό πολυστρωματικό ευθείας τροφοδότησης δίκτυο (standard multilayer feedforward network) είναι σε θέση να προβλέψει με ακρίβεια τα αποτελέσματα οποιασδήποτε σχέσης υπό την προϋπόθεση επαρκούς εκπαίδευσης, επαρκούς αριθμού κρυμμένων κόμβων και ντετερμινιστικότητας της συνάρτησης προς μοντελοποίηση.

8.3.1 Δομή ΤΝΔ

Τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα (ΤΝΔ) προτάθηκαν για πρώτη φορά από τους McCulloch and Pitts (1943), σε μια απλοϊκή αλλά θεμελιώδη μορφή. Σήμερα, υπάρχουν πολλές δομές ΤΝΔ με τα πρόσθιας τροφοδότησης (feedforward) να είναι τα πιο κοινά. Αποτελούνται από ένα επίπεδο εισόδου και εξόδου καθώς και ένα τουλάχιστον κρυμμένο επίπεδο. Κάθε επίπεδο έχει κόμβους που συνδέονται με κάθε κόμβο των γειτονικών επιπέδων. Το σήμα που διέρχεται από αυτές τις συνδέσεις υποβάλλεται σε πολλαπλασιασμό με έναν αριθμό που ονομάζεται βάρος, ο οποίος έχει εκχωρηθεί σε κάθε κόμβο και το αποτέλεσμα αποτελεί ένα σήμα εισόδου για τον κόμβο. Κατά την εισαγωγή σε ένα κόμβο, όλα τα σήματα εισόδου προστίθενται μαζί. Επιπλέον, κάθε κόμβος έχει μία πόλωση (bias), η οποία είναι ένας αριθμός που προστίθεται στο άθροισμα των σημάτων εισόδου του κόμβου.

Στη συνέχεια, μια μη γραμμική συνάρτηση ενεργοποίησης εφαρμόζεται στο άθροισμα των σημάτων εισόδου και της πόλωσης (bias) κάθε κόμβου, και το αποτέλεσμα αποτελεί το σήμα εξόδου του κόμβου. Σύμφωνα με τον Gurney (1997), ένα παράδειγμα μη γραμμικής συνάρτησης που χρησιμοποιείται στα ΤΝΔ είναι η σιγμοειδής (logistic sigmoid), η οποία εκφράζεται με την εξίσωση

$$y = \sigma(\alpha) \equiv 1/(1 + e^{-(\alpha-\theta)/\rho})$$

όπου το ρ καθορίζει την κλίση της συνάρτησης και θ το κατώφλι, συγκεκριμένα $\sigma(\theta) = 0,5$.

Μια αναπαράσταση τεχνητού νευρώνα και μια δομή ΤΝΔ απεικονίζονται στα Σχήματα 1 και 2 αντίστοιχα. Ο αριθμός των κρυμμένων επιπέδων και κόμβων σε κάθε επίπεδο επηρεάζει την επίδοση των ΤΝΔ. Σε μια μελέτη του Chauvin (1990) διαπιστώθηκε ότι οι δυνατότητες γενίκευσης και παρεμβολής των ΤΝΔ βελτιώνονται μειώνοντας το μέγεθός τους. Επίσης, όπως αναφέρεται από τον Gurney (1997), αυξημένος αριθμός κρυμμένων κόμβων μπορεί να οδηγήσει σε κακή ικανότητα γενίκευσης.

8.3.2 Επιλογή Εισόδων και Προεπεξεργασία δεδομένων σε ΤΝΔ

Σύμφωνα με τους Leray and Gallinari (1999), δεν είναι όλα τα χαρακτηριστικά ενημερωτικά για ένα φαινόμενο. Μερικά μπορεί να είναι θορυβώδη, άλλες συσχετισμένα ή άσχετα. Στη μελέτη τους, παρουσιάζονται μέθοδοι για την επιλογή χαρακτηριστικών ως εισόδων ΤΝΔ μέσω διαδικασιών δοκιμής και σφάλματος. Μια άλλη μέθοδος για την επιλογή εισόδων είναι να υπολογιστεί η συσχέτιση μεταξύ των μεταβλητών χρησιμοποιώντας στατιστικούς δείκτες, καθώς ο συσχετισμός μεταξύ των εισόδων των ΤΝΔ μπορεί να υποβαθμίσει την ικανότητά τους για γενίκευση. Επίσης, μια δημοφιλής τεχνική είναι η ανάλυση κύριων συνιστωσών (principal component analysis - PCA), η οποία σύμφωνα με τους Kuźniar and Zając (2015) μπορεί να χρησιμοποιηθεί για μείωση των εισόδων.

Σύμφωνα με τους Nawī, Atomī, and Rehman (2013), οι τεχνικές προεπεξεργασίας επηρεάζουν ιδιαίτερα την επίδοση των Πολυεπίδεδων Αντιλήπτρων (Multi-layer Perceptrons - MLP) που είναι

εκπαιδευμένα με αλγόριθμο οπισθόδρομης διάδοσης (backpropagation). Στη μελέτη τους, τεχνικές κανονικοποίησης όπως ελαχίστου-μεγίστου (Min-Max), Z-βαθμολόγησης (Z-score) και δεκαδικής κλίμακας κανονικοποίηση (Decimal Scaling Normalization) αύξησαν την ευρωστία και την αποτελεσματικότητα της εκπαίδευσης των MLP. Σε μια μελέτη των Kuznjar and Zajac (2015), η κανονικοποίηση των εισόδων νευρωνικού δικτύου βρέθηκε ότι αυξάνει την ακρίβεια του ΤΝΔ. Σε μεταγενέστερη μελέτη των Nawil et al. (2017), αποδείχθηκε ότι η κανονικοποίηση Z-βαθμολόγησης (Z-score) είχε καλύτερη επίδοση σε σχέση τις άλλες τεχνικές.

8.3.3 Εκπαίδευση ΤΝΔ

Για την επιτυχή εκπαίδευση των ΤΝΔ, απαιτείται επαρκής ποσότητα δεδομένων. Όπως παρατέθηκε από τον Mathew (2015), το επαρκές μέγεθος του συνόλου εκπαίδευσης αυξάνεται εκθετικά με τη διάσταση των εισόδων. Αυτό το φαινόμενο ονομάζεται κατάρα των διαστάσεων (curse of dimensionality).

Όπως αναφέρεται από τους Hernandez-Lobato and Adams (2015), η μέθοδος οπισθόδρομης διάδοσης (backpropagation) είναι ο πιο κοινός αλγόριθμος εκπαίδευσης ΤΝΔ. Σύμφωνα με τον Gurney (1997), ο αλγόριθμος οπισθόδρομης διάδοσης (backpropagation) αποτελείται από τα παρακάτω βήματα. Αρχικά, τα βάρη του ΤΝΔ επιλέγονται τυχαία. Στη συνέχεια, κάθε διάνυσμα εκπαίδευσης παρουσιάζεται στις εισόδους του ΤΝΔ και υπολογίζεται η έξοδος. Έπειτα, συγκρίνεται η έξοδος με την τιμή-στόχο και με βάση τη διαφορά τους, τα βάρη αναπροσαρμόζονται ώστε να φτάσουν σε ελάχιστο σφάλμα. Αυτή η διαδικασία επαναλαμβάνεται πολλές φορές, μέχρι να επιτευχθεί ένα κριτήριο τερματισμού. Κάθε επανάληψη εκπαίδευσης ονομάζεται εποχή. Οι παραλλαγές του αλγορίθμου οπισθόδρομης διάδοσης περιλαμβάνουν την προσθήκη όρων ποινής στη συνάρτηση σφάλματος. Για παράδειγμα, το άθροισμα των βαρών μπορεί να προστεθεί για να ευνοήσει τα μικρότερα βάρη κατά τη διάρκεια της εκπαίδευσης.

Μια παράμετρος που χρησιμοποιείται από αλγόριθμους οπισθόδρομης διάδοσης είναι ο ρυθμός μάθησης. Κάθε φορά που τα βάρη του ΤΝΔ ενημερώνονται κατά την εκπαίδευση για την ελαχιστοποίηση της συνάρτησης σφάλματος, το ποσό της αλλαγής καθορίζεται από το ρυθμό μάθησης, που συμβολίζεται με το γράμμα α . Σύμφωνα με τον Gurney (1997), εάν το ποσοστό μάθησης είναι μεγάλο, τότε η τιμή της συνάρτησης σφάλματος μπορεί να ταλαντεύεται γύρω από ένα τοπικό ελάχιστο. Από την άλλη πλευρά, ένα μικρό ποσοστό μάθησης θα αυξήσει τον χρόνο σύγκλισης. Ένα πρόβλημα του αλγορίθμου οπισθόδρομης διάδοσης είναι ότι μπορεί να παγιδευτεί σε τοπικό ελάχιστο της συνάρτησης σφάλματος αντί να βρει το ολικό ελάχιστο. Ένας τρόπος για να ξεπεραστεί αυτό το πρόβλημα είναι να χρησιμοποιηθεί ένας όρος ορμής. Ένας άλλος τρόπος είναι η παρουσίαση των δεδομένων εκπαίδευσης με διαφορετική σειρά σε κάθε εποχή.

Υπάρχουν πολλοί αλγόριθμοι εκπαίδευσης που μπορούν να χρησιμοποιηθούν για να διαμορφώσουν τα βάρη κατά τη διάρκεια της εκπαίδευσης, με τους πιο δημοφιλείς να είναι οι Κλιμακωτής Κλίσης Μεταβολή (Scaled Conjugate Gradient) και Levenberg Marquardt. Η επιλογή του αλγορίθμου εκπαίδευ-

σης έχει αποδειχθεί ότι επηρεάζει την ικανότητα γενίκευσης των ANN. Σε μια μελέτη των Lawrence and Giles (2000) αποδεικνύεται ότι ορισμένοι αλγόριθμοι εκπαίδευσης είναι πιο επιρρεπείς στην υπερπροσαρμογή από άλλους.

Η υπερπροσαρμογή είναι ένα σημαντικό ζήτημα κατά τη διάρκεια της εκπαίδευσης. Εμφανίζεται όταν το εκπαιδευμένο δίκτυο προβλέπει πολύ καλά τα δεδομένα με τα οποία έχει εκπαιδευτεί αλλά προβλέπει ανεπαρκώς προηγουμένως άγνωστα δεδομένα. Πράγματι, το σφάλμα εκπαίδευσης είναι συνήθως υψηλότερο από το σφάλμα γενίκευσης, αλλά σύμφωνα με τους Salman and Liu (2019), μια μεγάλη διαφορά σε αυτά αποτελεί ένδειξη υπερπροσαρμογής. Από την άλλη πλευρά, η υποπροσαρμογή είναι το αντίθετο της υπερπροσαρμογής και συμβαίνει όταν το μοντέλο δεν έχει εκπαιδευτεί επαρκώς και έτσι το σφάλμα εκπαίδευσης είναι μεγάλο. Όπως αναφέρεται από τους Cheng and Titterton (1994), θα πρέπει να βρεθεί ένας συμβιβασμός μεταξύ της υπερπροσαρμογής και υποπροσαρμογής. Η υπερπροσαρμογή μπορεί να προκληθεί από υπερβολική εκπαίδευση, για παράδειγμα πάρα πολλές εποχές. Επηρεάζεται επίσης από την αρχιτεκτονική του ΤΝΔ. Σύμφωνα με τον Ying (2019), άλλοι λόγοι θα μπορούσαν να είναι η παρουσία θορύβου και το ανεπαρκές μέγεθος συνόλου εκπαίδευσης.

Σύμφωνα με τον Ying (2019), μια μέθοδος για την αποφυγή υπερπροσαρμογής είναι η πρόωρη διακοπή (early stopping), η οποία σταματά την εκπαίδευση όταν το σφάλμα επικύρωσης φτάσει σε ένα ελάχιστο. Η πρόωμη διακοπή ωστόσο μειώνει το υποσύνολο εκπαίδευσης αφού το υποσύνολο επικύρωσης που χρησιμοποιείται για την πρόωμη διακοπή δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί για εκπαίδευση, και επομένως δεν είναι πρακτικό για μικρά σύνολα δεδομένων, όπως αναφέρεται από τον Reed (1993). Αντιθέτως, υπάρχουν μέθοδοι που χρησιμοποιούν μόνο τα δεδομένα εκπαίδευσης για την εκτίμηση της ικανότητας γενίκευσης του ΤΝΔ. Για παράδειγμα, οι Levin, Tishby, and Solla (1990) πρότειναν ένα στατιστικό δείκτη της ικανότητας γενίκευσης των ΤΝΔ με βάση την ελεύθερη ενέργεια του δικτύου, χρησιμοποιώντας μόνο δεδομένα του υποσυνόλου εκπαίδευσης. Όπως έχει αναφερθεί από τον Reed (1993), μια άλλη τεχνική είναι οι αλγόριθμοι περικοπής (pruning algorithms) που εκπαιδεύουν ένα δίκτυο που είναι μεγαλύτερο από ότι είναι απαραίτητο και στη συνέχεια αφαιρούν τα μέρη που δεν χρειάζονται για την αποφυγή υπερπροσαρμογής. Για παράδειγμα, μια τέτοια μέθοδος για την αποφυγή υπερπροσαρμογής σε βαθιά νευρωνικά δίκτυα (deep neural networks) είναι η απόσυρση (dropout). Αυτή η τεχνική προτάθηκε από τους Srivastava et al. (2014) και περιλαμβάνει τυχαία απόρριψη κόμβων των νευρωνικών δικτύων κατά τη διάρκεια της εκπαίδευσης.

Σύμφωνα με τον Gurney (1997), ένα κριτήριο διακοπής που θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί κατά την εκπαίδευση είναι η επίτευξη ενός μικρού, προκαθορισμένου σφάλματος. Ένα άλλο κριτήριο διακοπής είναι το σταμάτημα της εκπαίδευσης όταν το σφάλμα δεν αλλάζει πολύ. Όταν χρησιμοποιείται η πρόωρη διακοπή, το σταμάτημα συμβαίνει όταν το σφάλμα επικύρωσης φτάσει ένα ελάχιστο.

8.3.4 Σύνολο από ΤΝΔ

Ένα σύνολο Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων (ΤΝΔ) συνδυάζει τις προβλέψεις διαφορετικών μοντέλων ΤΝΔ. Σύμφωνα με μελέτη των Perrone and Cooper (1992), διαφορετική επιλογή συνόλων επικύρωσης μπορεί να οδηγήσει σε διαφορετικές αποφάσεις για το ποιο είναι το καλύτερο μοντέλο, και ως εκ τούτου δεν είναι αποδοτική η επιλογή μόνο ενός μοντέλου. Για να ξεπεράσουμε αυτή την ασάφεια, διαφορετικά μοντέλα μπορούν να συνδυαστούν, για παράδειγμα ΤΝΔ με διαφορετική αρχιτεκτονική ή ΤΝΔ που εκπαιδεύονται με διαφορετικούς αλγόριθμους ή διαφορετικά σύνολα δεδομένων. Επιπλέον, με αυτή τη μέθοδο, μπορεί να λυθεί το πρόβλημα της μεθόδου πρόωρης διακοπής, το οποίο είναι ότι δεν επιτρέπει να χρησιμοποιηθούν όλα τα δεδομένα για εκπαίδευση. Αυτό συμβαίνει επειδή, κάθε ΤΝΔ του συνόλου μπορεί να εκπαιδευτεί με διαφορετικά δεδομένα εκπαίδευσης και επικύρωσης και επομένως, το μοντέλο ως σύνολο έχει εκπαιδευτεί με όλα τα δεδομένα. Επιπλέον, αναφέρεται ότι, η χρήση συνόλου ΤΝΔ θα αντιμετωπίσει οποιαδήποτε υπερπροσαρμογή, ακόμη και αν δεν χρησιμοποιήσουμε πρόωρη διακοπή. Οι Perrone and Cooper (1992) τονίζουν ότι, ένα σύνολο ANN έχει υπεροχή έναντι των μεμονωμένων προβλεπτικών μοντέλων μόνο εάν τα μεμονωμένα προβλεπτικά μοντέλα είναι αρκετά μη συσχετισμένα μεταξύ τους και ο μέσος όρος κατανομής σφαλμάτων τους είναι κοντά στο μηδέν. Αυτό συμβαίνει επειδή, εάν δύο ή περισσότερα προβλεπτικά μοντέλα είναι όλα προκατειλημμένα προς την ίδια πλευρά του σφάλματος (θετικό ή αρνητικό σφάλμα), τότε η μέση πρόβλεψή τους δεν μπορεί να θεωρηθεί καλύτερη σε σύγκριση με των μεμονωμένων προβλεπτικών μοντέλων. Γενικά, θεωρείται ωφέλιμη η χρήση της μεθόδου συνόλου σε ΤΝΔ, επειδή η παγίδευση τους σε μια ποικιλία τοπικών ελάχιστων αποδίδει διαφορετική οπτική σε καθένα ΤΝΔ.

Οι Bayesian τεχνικές έχουν χρησιμοποιηθεί σε συνδυασμό με τη μέθοδο του συνόλου. Όπως ανέφεραν οι Cheng and Titterton (1994), οι μέθοδοι επιλογής βαρών βασίζονται σε υποθέσεις σχετικά με τον θόρυβο των δεδομένων, και ως εκ τούτου είναι φυσικό να χρησιμοποιούμε Bayesian μεθόδους. Οι Hernandez-Lobato and Adams (2015) ισχυρίζονται ότι με Bayesian τεχνικές η αβεβαιότητα της πρόβλεψης μπορεί να υπολογιστεί με βάση την αβεβαιότητα των εκτιμήσεων των παραμέτρων. Μια εύκολα εφαρμόσιμη μέθοδος αξιοποίησης των Bayesian αρχών σε ένα σύνολο νευρωνικών δικτύων έχει προταθεί από τους Pearce et al. (2018). Μια μέθοδος συνόλου που επεκτείνεται σε πλήρους συνδυακύμανσης Gaussian κατανομών (full-covariance Gaussian distributions) έχει προταθεί από τους Barber and Bishop (1998).

9 Ερμηνεία αποτελεσμάτων

9.1 Τιμή Αντικειμενικής Συνάρτησης

Η τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης βρέθηκε να ποικίλλει για διαφορετικές επιλογές του αρχικών βαρών. Στα Σχήματα 44 και 45 απεικονίζεται η κατανομή της τιμής αντικειμενικής συνάρτησης για διαφορετικό αριθμό κόμβων για διάφορες τυχαίες εκκινήσεις.

Είναι φανερό από τα διαγράμματα κουτιού (boxplots) ότι, υπάρχει πολλή διασπορά στις τιμές της αντικειμενικής συνάρτησης για την κάθε αρχιτεκτονική σε διαφορετικά αρχικά βάρη και παρατηρούνται πολλές ακραίες τιμές (outliers). Έτσι, μόνο μία αρχικοποίηση δεν είναι επαρκής για την αξιολόγηση της ικανότητας κάθε αρχιτεκτονικής, καθώς τα αποτελέσματα θα μπορούσαν να είναι αποπλανητικά. Για παράδειγμα, στο Σχήμα 45, η αρχιτεκτονική 15 κόμβων έχει την χαμηλότερη τιμή αντικειμενικής συνάρτησης σε σύγκριση με τις άλλες αρχιτεκτονικές, αλλά δεν υπάρχει εγγύηση ότι θα αποδώσει καλά σε άλλη επιλογή αρχικών βαρών. Αυτό συμβαίνει γιατί, αν και φαίνεται να έχει επιτύχει το χαμηλότερη τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης, έχει μεγάλη διασπορά η τιμή της σε διαφορετικά αρχικά βάρη. Αυτός είναι ο λόγος για τον οποίο, για να ληφθεί υπόψη αυτή η διακύμανση στην τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης, αξιολογήθηκε η ενδιάμεση τιμή αντικειμενικής συνάρτησης αντί της χαμηλότερης.

Ένα άλλο αξιοσημείωτο γεγονός είναι ότι, ορισμένες αρχιτεκτονικές φαίνεται να ανταποκρίνονται καλά, ανεξάρτητα από την επιλογή αρχικών βαρών ενώ άλλες έχουν πολύ διαφορετικές τιμές αντικειμενικής συνάρτησης για διαφορετικά αρχικά βάρη. Η διασπορά στη τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης είναι γενικά μεγαλύτερη σε αρχιτεκτονικές πολλών κόμβων από ότι είναι σε απλούστερες αρχιτεκτονικές.

9.2 Επιλογή Αρχιτεκτονικής

Οι αρχιτεκτονικές με τον χαμηλότερο διάμεσο αριθμό αντικειμενικής τιμής συνάρτησης βρέθηκαν να διαφέρουν σε κάθε ανεξάρτητη εκπαίδευση. Ο αριθμός των κρυμμένων κόμβων των 5 αρχιτεκτονικών με τη χαμηλότερη τιμή αντικειμενικής συνάρτησης για κάθε ανεξάρτητη εκπαίδευση απεικονίζεται στα Σχήματα 48 έως 51.

Παρατηρείται ότι υπάρχει μεγάλη διασπορά στην επιλογή των καλύτερων αρχιτεκτονικών στις ανεξάρτητες εκπαιδεύσεις. Ο λόγος για αυτό είναι ότι, η τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης καθορίζεται από το υποσύνολο επικύρωσης, το οποίο ήταν διαφορετικό σε κάθε ανεξάρτητη εκπαίδευση. Το σύνολο επικύρωσης ήταν μικρό, καθώς περιείχε μόνο δύο δοκίμια για τις περιπτώσεις περιοχής Κεντρικής Γραμμής Συγκόλλησης (Weld Center Line - WCL) και περιοχής Θερμικά Επηρρεασμένης Ζώνης (Heat Affected Zone - HAZ) ακτινικής κατεύθυνσης και μόνο ένα δοκίμιο για την περίπτωση περιοχής HAZ περιφερειακής κατεύθυνσης, και ως εκ τούτου, η αξιολόγηση της αντικειμενικής

συνάρτησης ήταν κάπως υποκειμενική. Οι ομοιότητες που παρατηρούνται μεταξύ των ανεξάρτητων εκπαιδεύσεων είναι ότι όλες οι αρχιτεκτονικές που επιλέχθηκαν για την περιοχή HAZ έχουν μικρό αριθμό κρυμμένων κόμβων (8 ή λιγότερους), ενώ για την περιοχή WCL οι πιο συχνά επιλεγμένες αρχιτεκτονικές έχουν 2 έως 9 κρυμμένους κόμβους.

Η επίδραση των τεσσάρων κριτηρίων διερευνάται για καθένα από τα τέσσερα μοντέλα όπως φαίνεται στα Σχήματα 52 έως 55. Το πιο κυρίαρχο κριτήριο φαίνεται να είναι αυτό της συνέπειας χώρου λύσεων (solution space consistency), με γενική τάση η τιμή του να αυξάνεται με τον αριθμό των κόμβων. Οι τιμές των κριτηρίων γενίκευσης και εκπαίδευσης διαφέρουν με τον αριθμό των κόμβων και συνήθως ελαχιστοποιούνται όχι σε μικρό ή μεγάλο αριθμό κόμβων, αλλά κάπου στη μέση. Όσον αφορά το κριτήριο αρχιτεκτονικής πρόσθιας τροφοδότησης (feedforward architecture - ffac), η τιμή του αυξάνεται ελαφρώς με τον αριθμό των κόμβων, καθώς σχεδιάστηκε για το σκοπό αυτό, να ευνοεί δηλαδή μικρότερες αρχιτεκτονικές.

Εξετάστηκε επίσης η τιμή ποινής (penalty) υποπροσαρμογής. Τα Σχήματα 56 έως 59 δείχνουν τη μέση τιμή της για διαφορετικό αριθμό κόμβων. Στην περιοχή HAZ, η τιμή της ποινής δεν δείχνει σαφή προτίμηση αναλογικά με τον αριθμό κόμβων, ενώ στην περιοχή WCL οι μεγαλύτερες αρχιτεκτονικές τείνουν να έχουν μικρότερο αριθμό μέσης τιμής ποινής. Αυτό το αποτέλεσμα ήταν αναμενόμενο επειδή είναι γνωστό ότι οι μικρότερες αρχιτεκτονικές τείνουν να είναι πιο επιρρεπείς σε υποπροσαρμογή από ότι οι μεγαλύτερες.

9.3 Σύγκριση με Άλλες Μεθόδους

9.3.1 Σύγκριση με τη Χρήση Μίας Αρχιτεκτονικής

Σε αυτήν την ενότητα τα αποτελέσματα που λήφθηκαν ακολουθώντας την προτεινόμενη μεθοδολογία συγκρίνονται με το σενάριο πρόβλεψης μόνο με την καλύτερη αρχιτεκτονική, βασισμένο στην ελαχιστοποίηση της ενδιάμεσης τιμής αντικειμενικής συνάρτησης. Οι ίδιοι δείκτες που χρησιμοποιήθηκαν για την αξιολόγηση του μοντέλου συνόλου TND χρησιμοποιούνται τώρα για την αξιολόγηση του μοντέλου μίας αρχιτεκτονικής. Επίσης, καταγράφεται η μέση τυπική απόκλιση των προβλέψεων της καλύτερης αρχιτεκτονικής, η οποία υπολογίζεται από τις προβλέψεις της καλύτερης αρχιτεκτονικής σε διαφορετικές αρχικοποιήσεις. Τα αποτελέσματα της αξιολόγησης της επίδοσης της μεθόδου επιλογής μίας αρχιτεκτονικής απεικονίζονται στα Σχήματα 60 και 61.

Μπορεί να παρατηρηθεί ότι, 22 από τις 29 προβλέψεις είχαν καλύτερη επίδοση χρησιμοποιώντας το μοντέλο συνόλου TND σε σύγκριση με τη μεμονωμένη πρόβλεψη ενός TND με τη χαμηλότερη ενδιάμεση τιμή αντικειμενικής συνάρτησης, υπερéχοντας σε όλους τους δείκτες (R^2 , MAE, MSE). Αυτό αποτελεί απόδειξη ότι το μοντέλο συνόλου TND υπερéχει έναντι του μοντέλου μοναδικού TND. Η ερμηνεία αυτών των αποτελεσμάτων είναι ότι το σύνολο επικύρωσης που χρησιμοποιήθηκε για την αξιολόγηση της επίδοσης των TND ήταν κάπως μικρό και επομένως δεν παρατηρήθηκε

σαφώς μία καλύτερη αρχιτεκτονική. Επιπλέον, ίσως να μην υπάρχει μία καλύτερη αρχιτεκτονική και περισσότερες από μία μπορούν να συνδυαστούν για να αποδώσουν μια καλύτερη οπτική. Επιπλέον, η υπόθεση ότι η αντικειμενική συνάρτηση αντικατοπτρίζει την καλύτερη επίδοση είναι υποκειμενική από μόνη της.

Στα Σχήματα 62 και 63 παρέχεται αναπαράσταση του των προβλέψεων των πέντε καλύτερων αρχιτεκτονικών και της πρόβλεψης της μίας καλύτερης αρχιτεκτονικής.

9.3.2 Σύγκριση με τη Χρήση Όλων των Αρχιτεκτονικών

Για την παροχή ενδείξεων ότι η χρήση μιας αντικειμενικής συνάρτησης για την εύρεση των καταλληλότερων αρχιτεκτονικών είχε νόημα, η προτεινόμενη μεθοδολογία συγκρίνεται με το σενάριο επιλογής όλων των υπό εξέταση αρχιτεκτονικών (ένα κρυμμένο επίπεδο, 1-15 κρυμμένοι κόμβοι) για την κατασκευή του συνόλου.

Σύμφωνα με αυτό το σενάριο, όλες οι αρχιτεκτονικές (ένα κρυφό στρώμα, 1-15 κρυμμένοι κόμβοι) εκπαιδεύτηκαν με 15 διαφορετικές τυχαίες αρχικοποιήσεις η καθεμία. Έπειτα υπολογίστηκε η ενδιάμεση τιμή των προβλέψεων κάθε αρχιτεκτονικής και στη συνέχεια βρέθηκε η μέση και τυπική απόκλιση των ενδιάμεσων αυτών τιμών. Και πάλι χρησιμοποιήθηκε πρόωρη διακοπή για την εκπαίδευση, με το υποσύνολο επικύρωσης να μεταβάλλεται για κάθε ΤΝΔ, έτσι ώστε να χρησιμοποιηθούν όλα τα δεδομένα εκπαίδευσης από το σύνολο των ΤΝΔ.

Οι δείκτες που χρησιμοποιήθηκαν για την αξιολόγηση αυτού του σεναρίου ήταν οι ίδιες με πριν, ώστε να συγκριθεί άμεσα με το προτεινόμενο μοντέλο και τα αποτελέσματα φαίνονται στα Σχήματα 64 και 65.

Μπορεί να παρατηρηθεί ότι, σε 16 από τις 29 προβλέψεις, η προτεινόμενη μεθοδολογία είχε καλύτερη επίδοση σε σύγκριση με το σενάριο χρήσης όλων των αρχιτεκτονικών. Αυτό είναι μια ένδειξη ότι η χρήση περισσότερων ΤΝΔ δεν είναι πάντα χρήσιμη και ότι η χρήση αντικειμενικής συνάρτησης για την επιλογή του καλύτερης αρχιτεκτονικής βελτιώνει την επίδοση του συνόλου. Η ερμηνεία αυτών των αποτελεσμάτων έχει ως εξής. Από τη μία πλευρά, η επιλογή ορισμένων αρχιτεκτονικών και η απόρριψη άλλων είναι επωφελής γιατί όλες οι αρχιτεκτονικές δεν αποδίδουν εξίσου καλά. Στην προκείμενη μελέτη, η προτίμηση της αντικειμενικής συνάρτησης ήταν να επιλέξει σχετικά απλές αρχιτεκτονικές, και όχι πολύπλοκες. Από την άλλη πλευρά, το μικρό μέγεθος του συνόλου επικύρωσης είναι ενδεχομένως ανεπαρκές για να αποκαλύψει τις καλύτερες αρχιτεκτονικές, και αυτό μπορεί να παρατηρηθεί από τη διασπορά στην επιλογή των καλύτερων αρχιτεκτονικών ανάμεσα στις ανεξάρτητες εκπαιδεύσεις. Επιπλέον, οι καλύτερες αρχιτεκτονικές που επιλέχθηκαν με βάση ένα μικρό σύνολο επικύρωσης, έχουν επιλεγεί υποκειμενικά και αυτό μπορεί δημιουργήσει συσχέτιση μεταξύ των προβλέψεών τους, ενώ όπως ανέφεραν οι Perrone and Cooper (1992), τα σύνολα των ΤΝΔ πιθανώς αποδίδουν καλύτερα όταν οι προβλέψεις δεν σχετίζονται μεταξύ τους.

10 Συμπεράσματα

10.1 Γενική Περίληψη

Αυτή η έρευνα παρουσίασε μια μεθοδολογία για την πρόβλεψη της κατανομής παραμένουσας τάσης συγκόλλησης χρησιμοποιώντας Τεχνικά Νευρωνικά Δίκτυα (ΤΝΔ). Το προτεινόμενο μοντέλο είναι ένα σύνολο ΤΝΔ διαφορετικών αρχιτεκτονικών, που αξιοποιεί επίσης τη διασπορά που δημιουργείται από την τυχαία επιλογή αρχικών βαρών. Οι αρχιτεκτονικές επιλέχθηκαν με βάση την τιμή μίας αντικειμενικής συνάρτησης, σύμφωνα με την υπόθεση ότι αυτή η τιμή αντικατοπτρίζει την επίδοση της αρχιτεκτονικής. Τα αποτελέσματα που προέκυψαν έδειξαν ότι το μοντέλο επιτυγχάνει καλή ακρίβεια προβλέψεων στις περισσότερες περιπτώσεις και ότι αποδίδει καλύτερα σε σύγκριση με το σενάριο χρήσης μόνο μίας αρχιτεκτονικής και με το σενάριο χρήσης πολλών τυχαίων αρχιτεκτονικών.

10.2 Θεωρητική Συμβολή

Η τρέχουσα έρευνα πρότεινε μια νέα μεθοδολογία για την προσέγγιση του προβλήματος πρόβλεψης παραμενουσών τάσεων, κάνοντας χρήση μίας προσαρμοζόμενης αντικειμενικής συνάρτησης για την επιλογή αρχιτεκτονικών και συνδυάζοντας περισσότερες από μία αρχιτεκτονικές στο τελικό προβλεπτικό μοντέλο. Επιπλέον, παρέχονται χρήσιμες παρατηρήσεις σχετικά με τον τρόπο χειρισμού της ασάφειας λόγω τυχαίας αρχικοποίησης των Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων (ΤΝΔ) κατά την αξιολόγηση μοντέλων και σχετικά με την αξιοποίηση αυτής της ασάφειας για τη βελτίωση των προβλέψεων του τελικού μοντέλου.

10.3 Περιορισμοί

Στην παρούσα μελέτη, εντοπίστηκαν περιορισμοί της προτεινόμενης μεθοδολογίας. Καταρχήν, διαπιστώθηκαν διαφορές στην επιλογή των καλύτερων αρχιτεκτονικών ανάλογα με τον χωρισμό των δεδομένων σε υποσύνολα. Ωστόσο, αυτό θα μπορούσε να αποδοθεί στο μικρό μέγεθος του συνόλου δεδομένων και η επιλογή των καλύτερων αρχιτεκτονικών θα ήταν πιο συνεπής αν χρησιμοποιούνταν διασταυρούμενη επικύρωση (cross validation). Επιπλέον, η αντικειμενική συνάρτηση που χρησιμοποιείται για την αξιολόγηση των αρχιτεκτονικών αποτελείται από ορισμένες παραμέτρους που καθορίζονται από τον χρήστη και απαιτούν διακρίβωση για να λειτουργήσει βέλτιστα.

Ένα άλλο μειονέκτημα της προτεινόμενης μεθόδου είναι ότι δεν παρέχει εκτίμηση της ακρίβειας της πρόβλεψης. Η τυπική απόκλιση του μοντέλου δεν βρέθηκε να είναι ένδειξη της επίδοσης του μοντέλου. Μία κατανομή πρόβλεψης θα ήταν πολύ χρήσιμη για την εφαρμογή του αλγορίθμου σε κρίσιμες για ασφάλεια αξιολογήσεις, στις οποίες απαιτούνται αξιόπιστα άνω όρια. Επομένως, αυτή η μέθοδος δεν είναι ακόμη επαρκώς αξιόπιστη, καθώς σε μερικές περιπτώσεις οι προβλέψεις είναι

ανακριβείς και δεν παρέχεται ένα ρεαλιστικό διάστημα πρόβλεψης.

Επίσης, η μέθοδος συνόλου αυτής της μελέτης δεν λαμβάνει υπόψη τη συσχέτιση μεταξύ των προβλεπτικών μοντέλων. Υποστηρίζεται ότι τα μη συσχετιζόμενα προβλεπτικά μοντέλα είναι πιθανό να δώσουν πιο ακριβή αποτελέσματα από ότι τα συσχετιζόμενα. Οι καλύτερες αρχιτεκτονικές της προκείμενης μελέτης επιλέγονται με βάση ένα μικρό σύνολο επικύρωσης, και επομένως οι προβλέψεις τους είναι ενδεχομένως κάπως συσχετισμένες.

10.4 Μελλοντική Έρευνα

Η επιλογή εισόδων για το προτεινόμενο μοντέλο βασίστηκε σε ενδείξεις από τη βιβλιογραφία. Πιο προσεγμένες τεχνικές θα μπορούσαν να χρησιμοποιηθούν για να βρεθούν ενδεχομένως καλύτεροι μετασχηματισμοί των δεδομένων εισόδου.

Επιπλέον, για τη βελτίωση της προτεινόμενης μεθοδολογίας, θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί διασταυρούμενη επικύρωση (cross validation) για την πιο αντικειμενική επιλογή των καλύτερων αρχιτεκτονικών. Σύμφωνα με αυτήν τη μέθοδο, η διαμέριση των δεδομένων σε υποσύνολα εκπαίδευσης και της επικύρωσης αλλάζει σε κάθε βρόγχο, έτσι ώστε η αντικειμενική συνάρτηση να αξιολογείται από διάφορα σύνολα επικύρωσης. Ως εκ τούτου, αποκτάται μια ευρύτερη άποψη για τις καλύτερες αρχιτεκτονικές αφού η επιλογή τους δεν είναι προκατειλημμένη από το επιλεγμένο σύνολο επικύρωσης.

Επιπροσθέτως, η επιλογή λιγότερο συσχετισμένων προβλεπτικών μοντέλων μπορεί να βελτιώσει την επίδοση του συνόλου TND. Η επιλογή πέντε αρχιτεκτονικών με βάση ένα σύνολο επικύρωσης, όπως πραγματοποιήθηκε από αυτήν τη μελέτη, μπορεί να οδηγήσει σε επιλογή συσχετιζόμενων αρχιτεκτονικών. Από την άλλη πλευρά, εάν εφαρμοζόταν διασταυρούμενη επικύρωση και οι καλύτερες αρχιτεκτονικές συνδυάζονταν σε ένα σύνολο, τα αποτελέσματα θα μπορούσαν ενδεχομένως να βελτιωθούν. Αυτό συμβαίνει επειδή, οι κακές αρχιτεκτονικές θα φιλτράρονταν και οι επιλεγμένες αρχιτεκτονικές θα ήταν λιγότερο συσχετισμένες αφού υπερέχουν σε διαφορετικά σύνολα επικύρωσης. Ο ενδεχομένως βέλτιστος αριθμός επιλεγμένων αρχιτεκτονικών είναι κάτι που θα μπορούσε επίσης να διερευνηθεί.

Τέλος, κατά την πρόβλεψη πειραματικών μετρήσεων με μηχανική μάθηση, τα σφάλματα των πειραματικών δεδομένων θα πρέπει να λαμβάνονται υπόψη. Για την περαιτέρω ανάπτυξη του προγνωστικού μοντέλου, μπορούν να χρησιμοποιηθούν μέθοδοι που λαμβάνουν υπόψη την αβεβαιότητας των εισόδων, όπως για παράδειγμα Bayesian τεχνικές.

References

- [1] M. Ahmadzadeh et al. "Prediction of residual stresses in gas arc welding by backpropagation neural network". In: *NDTE International* 52 (2012), pp. 136–143.
- [2] Miltiadis Alamaniotis et al. "Probabilistic kernel machines for predictive monitoring of weld residual stress in energy systems". In: *Engineering Applications of Artificial Intelligence* 71 (2018), pp. 138–154.
- [3] David Barber and Christopher M. Bishop. "Ensemble Learning in Bayesian Neural Networks". In: *Neural Networks and Machine Learning* (1998), pp. 215–237.
- [4] P.G. Benardos and G.-C. Vosniakos. "Optimizing feedforward artificial neural network architecture". In: *Engineering Applications of Artificial Intelligence* (2007).
- [5] Sachin Bhardwaj et al. "Machine Learning Approach for Estimating Residual Stresses in Girth Welds of Topside Piping". In: *39th International Conference on Ocean, Offshore and Arctic Engineering* (2020).
- [6] P.J. Bouchard. "Validated residual stress profiles for fracture assessments of stainless steel pipe girth welds". In: *Engineering Applications of Artificial Intelligence* 84 (2007), pp. 195–222.
- [7] Leo Breiman. "Random Forests". In: *Machine Learning* 45 (2001), pp. 5–32.
- [8] Yves Chauvin. "Generalization performance of overtrained back-propagation networks". In: (1990).
- [9] Bing Cheng and D. M. Titterton. "Neural Networks: A Review from a Statistical Perspective". In: *Statistical Science* 9 (1994), pp. 2–54.
- [10] Debasish Das et al. "Prediction of residual stress in electron beam welding of stainless steel from process parameters and natural frequency of vibrations using machine-learning algorithms". In: *Journal of Mechanical Engineering Science* (2020).
- [11] J. Edwin Raja Dhas and Somasundaram Kumanan. "Modeling of Residual Stress in Butt Welding". In: *Materials and Manufacturing Processes* 26 (2011), pp. 942–947.
- [12] Anna Veronika Dorogush, Vasily Ershov, and Andrey Gulin. "CatBoost: gradient boosting with categorical features support". In: (2018).
- [13] Tristan Fletcher. "Support Vector Machines Explained". In: (2008).
- [14] Jerome H. Friedman. "Greedy Function Approximation: A Gradient Boosting Machine". In: *The Annals of Statistics* 29 (2001), pp. 1189–1232.

- [15] Kevin Gurney. "An introduction to neural networks". In: *Engineering Applications of Artificial Intelligence* (1997).
- [16] Jose Miguel Hernandez-Lobato and Ryan P. Adams. "Probabilistic Backpropagation for Scalable Learning of Bayesian Neural Networks". In: (2015).
- [17] Kurt Hornik, Maxwell Stinchcombe, and Halbert White. "Multilayer Feedforward Networks are Universal Approximators". In: *Neural Networks 2* (1989), pp. 359–366.
- [18] B. Jeyaganesh et al. "Overview of welding research under the New Nuclear Manufacturing (NNUMAN) program." In: *Proceedings of the ASME 2014 Pressure Vessels Piping Conference* (2014).
- [19] Guolin Ke et al. "LightGBM: A Highly Efficient Gradient Boosting Decision Tree". In: (2017).
- [20] R. L. Klein et al. "Use of ANN to Simulate the Effects of Welding Process Parameters in Curved Steel Plates: Residual Stresses, Strains and Distortions". In: (2003).
- [21] Young Do Koo, Kwae Hwan Yoo, and Man Gyun Na. "Estimation of residual stress in welding of dissimilar metals at nuclear power plants using cascaded support vector regression". In: *Nuclear Engineering and Technology* 49 (2017), pp. 817–824.
- [22] Kaushal A. Kulkarni. "Prediction of welding residual stresses using Artificial Neural Network (ANN)". In: *Materials Today: Proceedings* 46 (2021), pp. 1366–1370.
- [23] S. Kumanan, R. Ashok Kumar, and J. Edwin Raja Dhas. "Development of a welding residual stress predictor using a function-replacing hybrid system". In: *Int J Adv Manuf Technol* 31 (2007), pp. 1083–1091.
- [24] Krystyna Kuźniar and Maciej Zajęc. "Some methods of pre-processing input data for neural networks". In: *Computer Assisted Methods in Engineering and Science* 22 (2015), pp. 141–151.
- [25] Steve Lawrence and C. Lee Giles. "Overfitting and Neural Networks: Conjugate Gradient and Backpropagation". In: (2000).
- [26] Philippe Leray and Patrick Gallinari. "Feature Selection with Neural Networks". In: (1999).
- [27] Esther Levin, Naftali Tishby, and Sara A. Solla. "A Statistical Approach to Learning and Generalization in Layered Neural Networks". In: *PROCEEDINGS OF THE IEEE* 78 (1990).
- [28] Aristidis Likas, Nikos Vlassis, and Jakob J. Verbeek. "The global k-means clustering algorithm". In: *Pattern Recognition* 36 (2002), pp. 451–461.

- [29] Dong Hyuk Lim et al. "Prediction of residual stress in the welding zone of dissimilar metals using data-based models and uncertainty analysis". In: *Nuclear Engineering and Design* 240 (2010), pp. 2555–2564.
- [30] Koichi Masubuchi. "Analysis of Welded Structures Residual Stresses, Distortion, and their Consequences". In: *Materials Science and Technology* 33 (1980).
- [31] J. Mathew et al. "Prediction of residual stresses in girth welded pipes using an artificial neural network approach". In: *International Journal of Pressure Vessels and Piping* 150 (2017), pp. 89–95.
- [32] J. Mathew et al. "Prediction of welding residual stresses using machine learning: Comparison between neural networks and neuro-fuzzy systems". In: *Applied Soft Computing* 70 (2018), pp. 131–146.
- [33] Jino Mathew. "Weld Residual Stress Profiles for Structural Integrity Assessment". PhD thesis. The Open University, 2015.
- [34] Dastan Hussen Maulud and Adnan Mohsin Abdulazeez. "A Review on Linear Regression Comprehensive in Machine Learning". In: *Journal of Applied Science and Technology Trends* 1 (2020), pp. 140–147.
- [35] Haihao Lu Rahul Mazumder. "Randomized Gradient Boosting Machine". In: (2020).
- [36] Warren S. McCulloch and Walter H. Pitts. "A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity". In: *Bulletin of Mathematical Biophysics* 5 (1943), pp. 115–133.
- [37] Man Gyun Na, Jin Weon Kim, and Dong Hyuk Lim. "Prediction of residual stress for dissimilar metals welding at nuclear power plants using fuzzy neural network models". In: (2007).
- [38] Man Gyun Na et al. "Residual stress prediction of dissimilar metals welding at NPPs using support vector regression". In: *Nuclear Engineering and Design* 238 (2008), pp. 1503–1510.
- [39] Nazri Mohd Nawi, Walid Hasen Atomi, and M. Z. Rehman. "The Effect of Data Pre-Processing on Optimized Training of Artificial Neural Networks". In: *The 4th International Conference of Electrical Engineering and Informatics* (2013).
- [40] Nazri Mohd Nawi et al. "The Effect of Pre-Processing Techniques and Optimal Parameters selection on Back Propagation Neural Networks". In: *International Journal on Advanced Science Engineering Information Technology* 7 (2017).
- [41] S. A. Oke. "A Literature Review on Artificial Intelligence". In: *International Journal of Information and Management Sciences* 19 (2002), pp. 535–570.

- [42] M.D. Olson et al. "Estimation of Uncertainty for Contour Method Residual Stress Measurements". In: *Experimental Mechanics* 55 (2015), pp. 577–585.
- [43] Tim Pearce et al. "Uncertainty in Neural Networks: Bayesian Ensembling". In: (2018).
- [44] Michael P. Perrone and Leon N Cooper. "When Networks Disagree: Ensemble Methods for Hybrid Neural Networks". In: (1992).
- [45] M. Praveena and V. Jaiganesh. "Literature Review on Supervised Machine Learning Algorithms and Boosting Process". In: *International Journal of Computer Applications* 169 (2017), pp. 140–147.
- [46] Russell Reed. "Pruning Algorithms - A Survey". In: *IEEE Transactions on Neural Networks* 4 (1993).
- [47] É.O. Rodrigues. "Combining Minkowski and Chebyshev: New distance proposal and survey of distance metrics using k-nearest neighbours classifier". In: *Pattern Recognition Letters* 110 (2018), pp. 66–71.
- [48] N.S. Rossini et al. "Methods of measuring residual stresses in components". In: *Materials and Design* 35 (2012), pp. 572–588.
- [49] Shaeke Salman and Xiuwen Liu. "Overfitting Mechanism and Avoidance in Deep Neural Networks". In: (2019).
- [50] Robert E. Schapire. "The Strength of Weak Learnability". In: *Machine Learning* 5 (1990), pp. 197–227.
- [51] Mike C. Smith et al. "The NeT Task Group 4 residual stress measurement and analysis round robin on a three-pass slot-welded plate specimen". In: *International Journal of Pressure Vessels and Piping* 164 (2018), pp. 3–21.
- [52] Shaopin Song, Pingsha Dong, and Xianjun Pei. "A full-field residual stress estimation scheme for fitness-for-service assessment of pipe girth welds: Part I e Identification of key parameters". In: *International Journal of Pressure Vessels and Piping* 126-127 (2015), pp. 58–70.
- [53] Nitish Srivastava et al. "Dropout: A Simple Way to Prevent Neural Networks from Overfitting". In: *Journal of Machine Learning Research* 15 (2014).
- [54] Anastasia N. Vasileiou et al. "The impact of transformation plasticity on the electron beam welding of thick-section ferritic steel components". In: *Nuclear Engineering and Design* 323 (2017), pp. 309–316.

- [55] Xue Ying. "An Overview of Overfitting and its Solutions". In: *IOP Conf. Series: Journal of Physics* (2019).
- [56] Cha Zhang and Yunqian Ma. "Ensemble Machine Learning". In: *Springer* (2012).

Appendix

Correlation Matrices and Pairplots

	R	T	Q	x/T	σ	R/T
R	1.000000	0.360377	0.368382	0.033026	0.200112	0.424699
T	0.360377	1.000000	0.325402	0.002152	-0.004693	-0.588170
Q	0.368382	0.325402	1.000000	0.016138	0.048916	0.012974
x/T	0.033026	0.002152	0.016138	1.000000	0.811377	0.022339
σ	0.200112	-0.004693	0.048916	0.811377	1.000000	0.174395
R/T	0.424699	-0.588170	0.012974	0.022339	0.174395	1.000000

Fig. 66. Correlation table of parameters in WCL region and hoop direction

	R	T	Q	x/T	σ	R/T
R	1.000000	0.240163	0.390777	-0.010258	0.019239	0.486373
T	0.240163	1.000000	0.267551	-0.017960	-0.025635	-0.627252
Q	0.390777	0.267551	1.000000	0.011102	0.048610	0.071796
x/T	-0.010258	-0.017960	0.011102	1.000000	0.557034	0.011683
σ	0.019239	-0.025635	0.048610	0.557034	1.000000	-0.014541
R/T	0.486373	-0.627252	0.071796	0.011683	-0.014541	1.000000

Fig. 67. Correlation matrix of parameters in WCL region and axial direction

	R	T	Q	x/T	σ	R/T
R	1.000000	0.317653	0.152799	0.005254	-0.015313	0.255808
T	0.317653	1.000000	0.341199	-0.034513	-0.215728	-0.769333
Q	0.152799	0.341199	1.000000	-0.021436	0.022349	-0.350798
x/T	0.005254	-0.034513	-0.021436	1.000000	0.890921	0.037824
σ	-0.015313	-0.215728	0.022349	0.890921	1.000000	0.211061
R/T	0.255808	-0.769333	-0.350798	0.037824	0.211061	1.000000

Fig. 68. Correlation matrix of parameters in HAZ region and hoop direction

	R	T	Q	x/T	σ	R/T
R	1.000000	-0.213328	0.046492	-0.000454	0.036794	0.626878
T	-0.213328	1.000000	-0.094885	-0.008411	-0.027941	-0.863994
Q	0.046492	-0.094885	1.000000	-0.001136	0.020741	0.016935
x/T	-0.000454	-0.008411	-0.001136	1.000000	0.676615	0.007679
σ	0.036794	-0.027941	0.020741	0.676615	1.000000	0.029156
R/T	0.626878	-0.863994	0.016935	0.007679	0.029156	1.000000

Fig. 69. Correlation matrix of parameters in HAZ region and axial direction

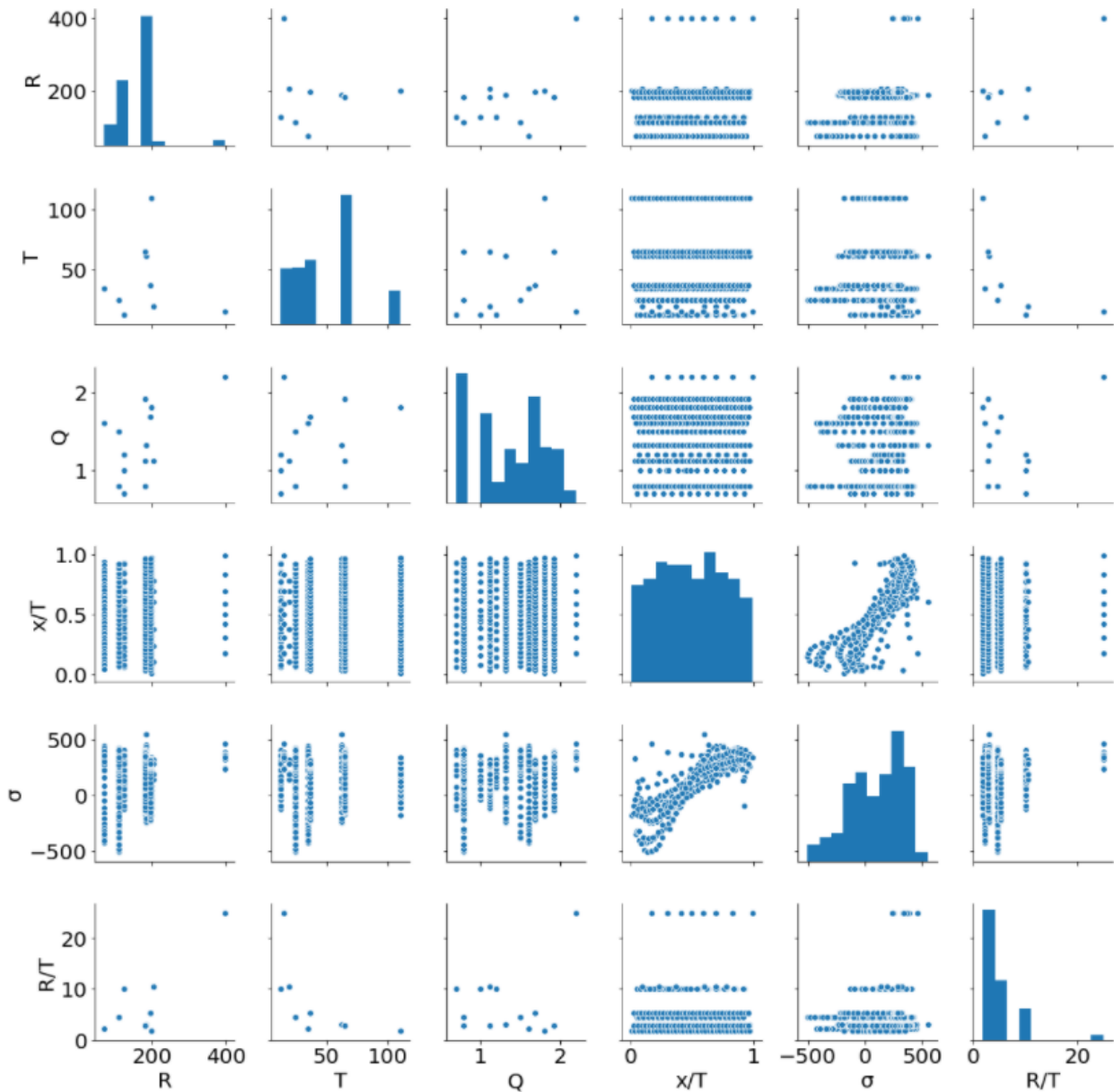


Fig. 70. Pairplot of parameters in WCL region and hoop direction

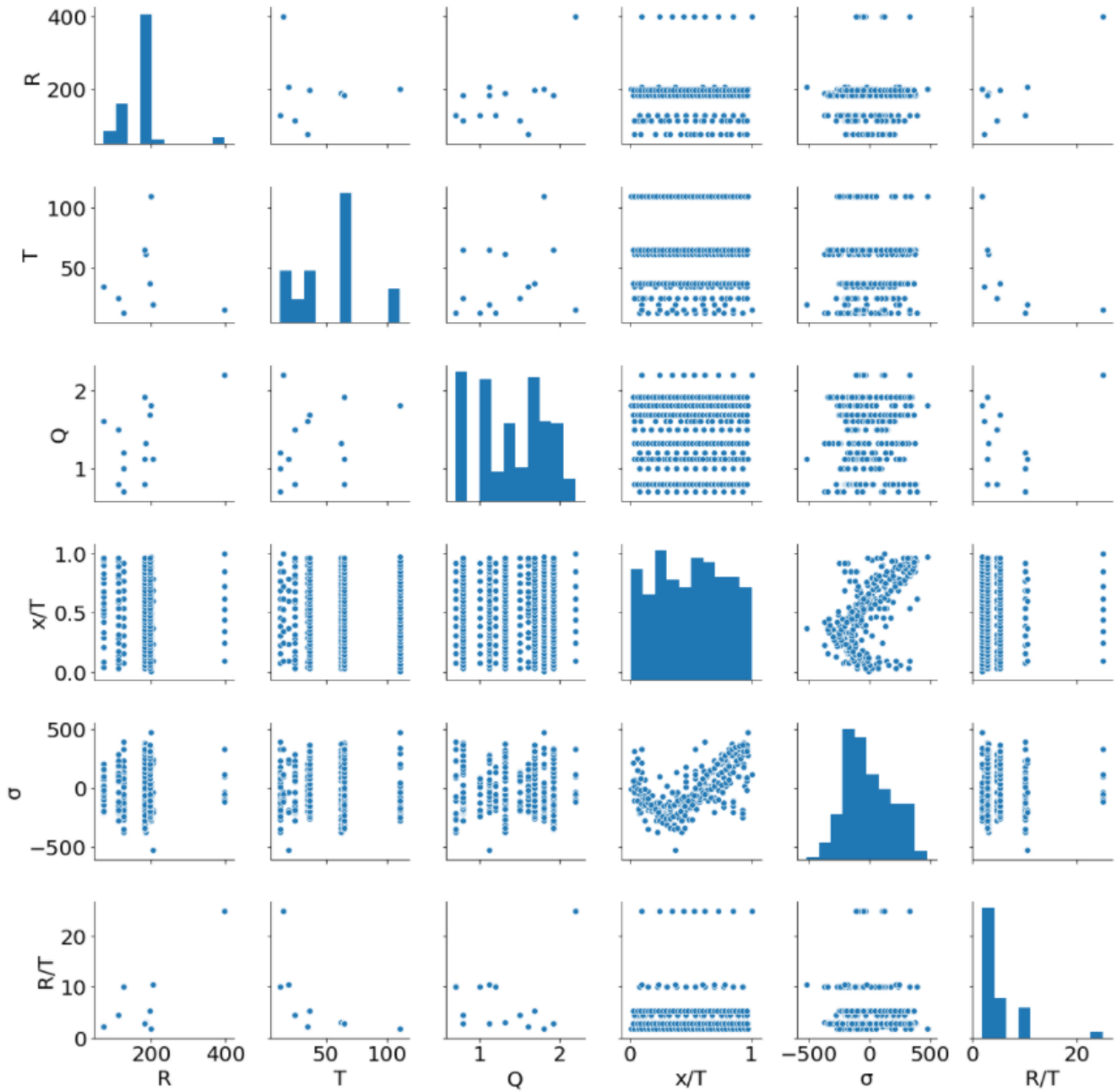


Fig. 71. Pairplot of parameters in WCL region and axial direction

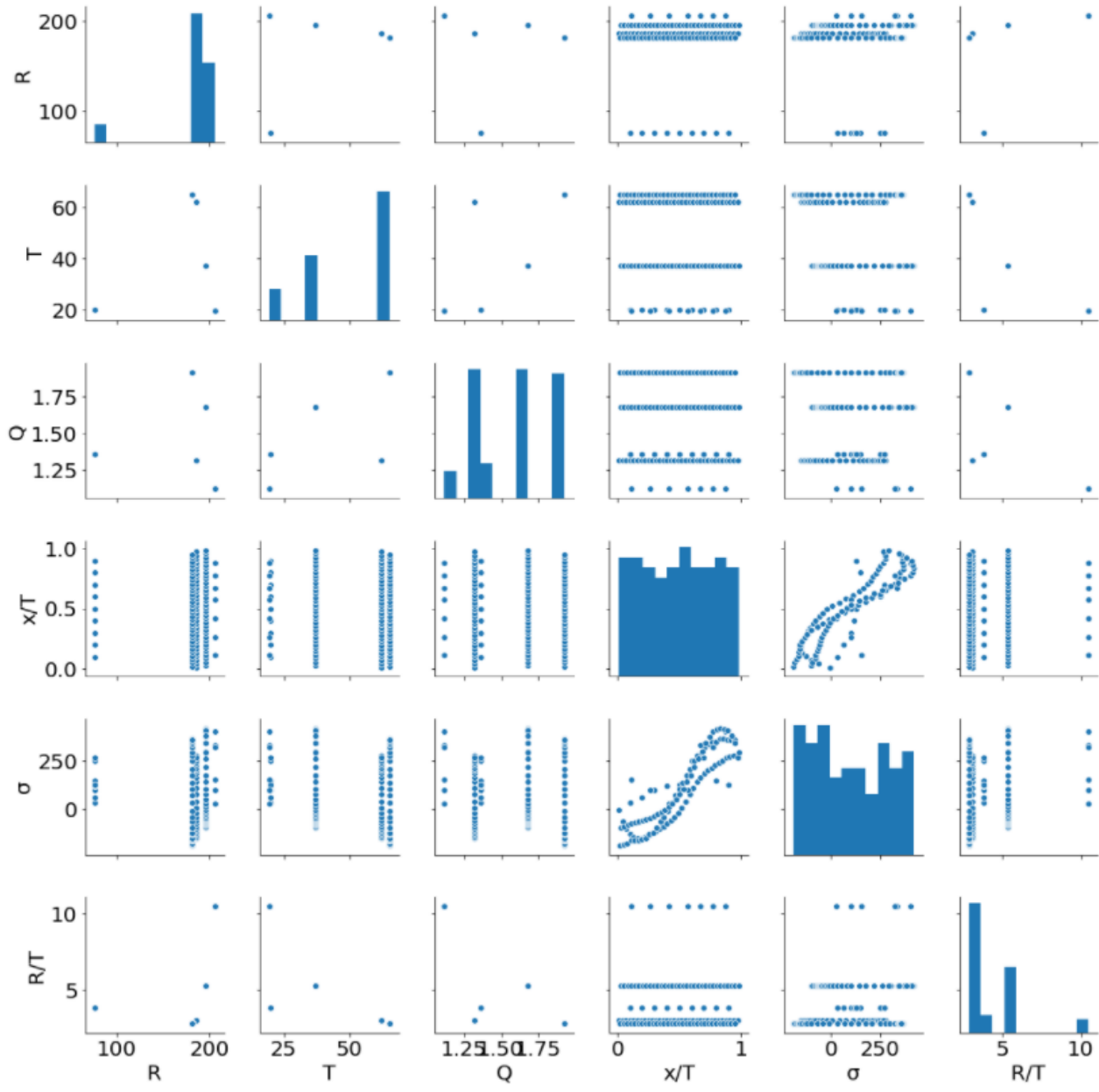


Fig. 72. Pairplot of parameters in HAZ region and hoop direction

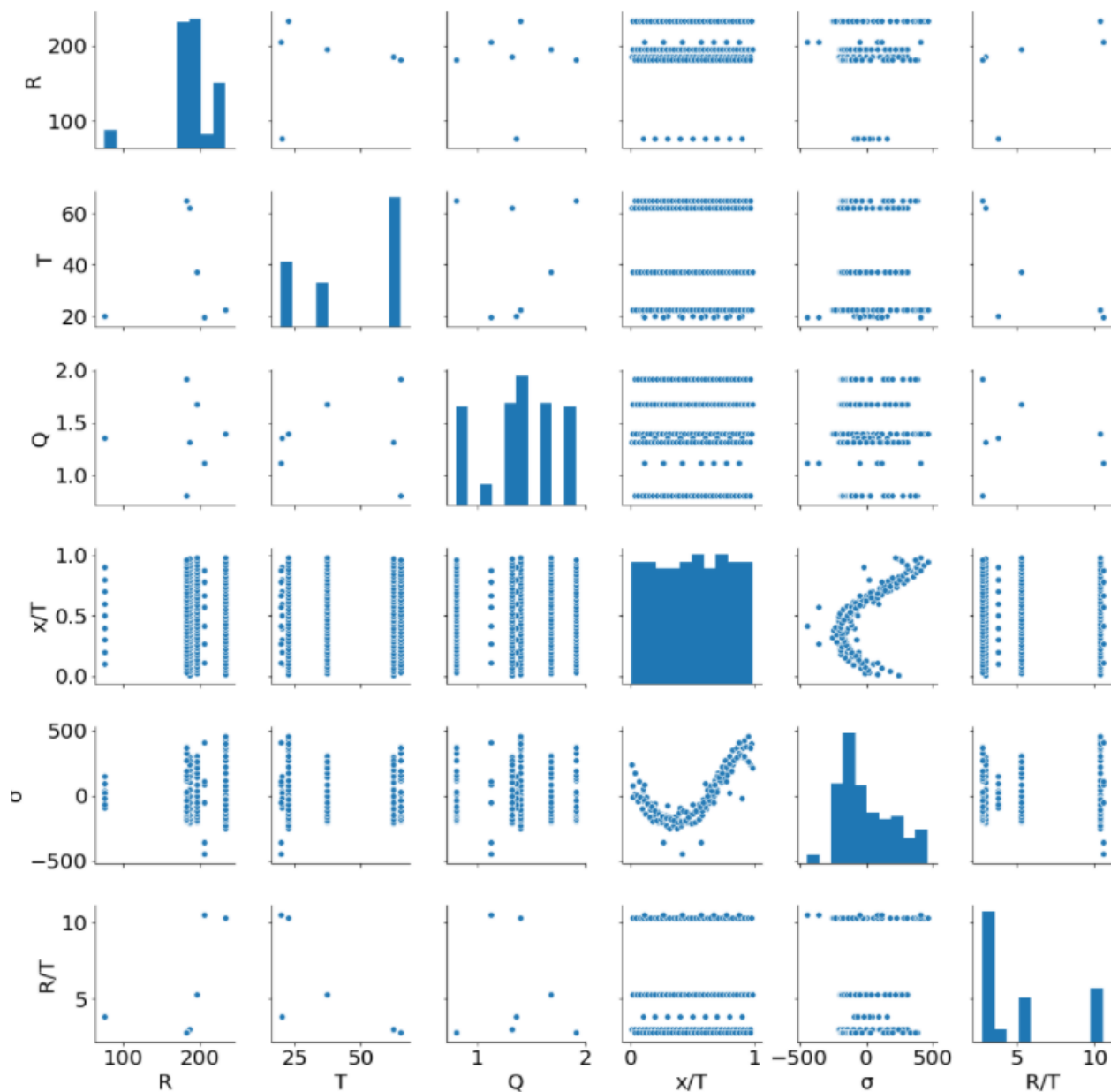


Fig. 73. Pairplot of parameters in HAZ region and axial direction