

Ετφτη Στστηματά Κατέργασιων, μαθήμα 9^{ot} εξάμηνος

Εθνικό Μετσοβίο Πολυτέχνειο

ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

Τεχνητά Νευρωνικά Δ ίκτυα

Σπουδαστές: Λάζαρος Χριστοφορίδης (mc18012) Μιχάλης Παπαδάκης (mc18026)

Καθηγητής: Πανώριος Μπερνάρδος

19 Ιουλίου 2025

Περιεχόμενα

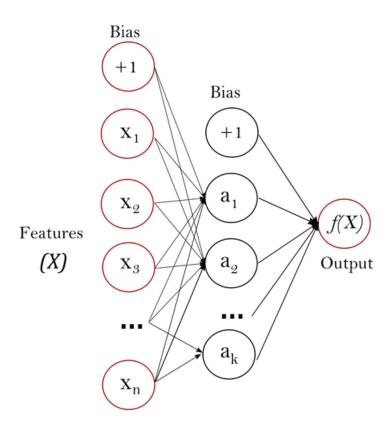
Π	εριεχόμενα	1
K	ατάλογος Σχημάτων	2
K	ατάλογος Πινάχων	2
1	Εισαγωγή	3
2	Προεπεξεργασία Δεδομένων	4
3	 Επιλογή δεδομένων 3.1 Επιλογή δεδομένων τραχύτητας 3.2 Επιλογή δεδομένων Ορίου διαρροής 3.3 Επιλογή δεδομένων παραμόρφωσης 	6
4	Βελτιστοποίηση Νευρωνικών δικτύων 4.1 Διαδικασία Βελτιστοποίησης	9 11
5	Αναφορές	16
6	Κώδικες	17

Κατάλογος Σχημάτων

1	Δομή του Multi-Layer Perceptron που χρησιμοποιείται στην συνάρτηση MLPregressor.	3
2	Κωδιχοποίησή των χατηγορηματιχών τιμών	4
3	Κανονιχοποίηση τιμών εισόδων	4
4	Σύγκριση στατιστικών δεικτών f_{test} και MI για την συνάρτηση $y=x_1+sin(6\pi x_2)+0.1N(0,1)$	5
5	Main effect plot για την μέση τραχύτητα από το άρθρο [3]	6
6	Εξάρτηση τραχύτητας από διάφορες παραμέτρους κατεργασίας σύμφωνα με [7]	6
7	Καμπύλες παραμόρφωσης-τάσης για διάφορες τιμές του Infill Density σύμφωνα με [4]	7
8	Αρχιτεκτονική Νευρωνικού Δ ικτύου της τραχύτητας	9
9	R^2 γράφημα για την τραχύτητα. Με κόκκινο είναι η γραμμή $y=x$	10
10	Αρχιτεκτονική Νευρωνικού Δ ικτύου του Ορίου Δ ιαρροής	11
11	R^2 γράφημα για το όριο διαρροής. Με κόκκινο είναι η γραμμή $y=x$	12
12	Αρχιτεκτονική Νευρωνικού Δ ικτύου της παραμόρφωσης	14
13	R^2 γράφημα για την παραμόρφωση. Με κόκκινο είναι η γραμμή $y=x\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots$	15
1700	άλογος Πινάκων	
1	Πίναχας συσχέτισης των παραμέτρων εισόδου	-
2	Πίνακας με τιμές $ftest$, MI για κάθε παράμετρο κατεργασίας σε σχέση με την τραχύτητα	6
3	Πίνακας με τιμές $ftest$, MI για κάθε παράμετρο κατεργασίας σε σχέση με την αντοχή του τεμαχίου	7
4	Πίνακας με τιμές $ftest$, MI για κάθε παράμετρο κατεργασίας σε σχέση με την αντοχή του τεμαχίου	7
5	Απόδοση νευρωνικού δικτύου εκτίμησης τραχύτητας με παραμέτρους εισόδου που αναφέρθηκαν 3	9
6	Απόδοση νευρωνικού δικτύου εκτίμησης τραχύτητας με προσθήκη στις παραμέτρους εισόδου το πάχος τοιχω-	
		9
7	μάτων και του υλικού	9 11
7 8	μάτων και του υλικού	
	μάτων και του υλικού	
	μάτων και του υλικού	11
8	μάτων και του υλικού	11 11
8	μάτων και του υλικού	11 11
8	μάτων και του υλικού	11 11 13

1. Εισαγωγή

Σκοπός της εργασίας ήταν η βελτιστοποίηση της αρχιτεκτονικής ενός νευρωνικού δικτύου για την πρόβλεψη της τραχύτητας και των μηχανικών ιδιοτήτων (Αντοχή και παραμόρφωση) τεμαχίων που παράχθηκαν με 3D printing. Συνολικά δημιουργήθηκαν 3 διαφορετικά νευρωνικά δίκτυα για καθένα χαρακτηριστικό. Παράγοντες διερεύνησης αποτελούν η επιλογή των παραμέτρων εισόδου, ο αριθμός των κρυμμένων επιπέδων και των κρυμμένων νευρώνων σε αυτά και τέλος το κριτήριο απόδοσης. Το νευρωνικό δίκτυο υλοποιήθηκε στην python με χρήση του πακέτου scikit-learn¹. Χρησιμοποιήθηκε το μοντέλο MLPregressor², το οποίο είναι ένα νευρωνικό πρόσθιας τροφοδότησης - οπισθόδρομης διάδοσης με δομή που παρουσιάζεται στην εικόνα 1.



Σχήμα 1: Δομή του Multi-Layer Perceptron που χρησιμοποιείται στην συνάρτηση MLPregressor.

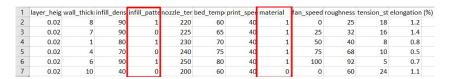
Το πρώτο βήμα ήταν η προ-επεξεργασία των δεδομένων. Ύστερα με διάφορους στατιστικούς δείκτες και από την βιβλιογραφία διερευνήθηκε ποιοι παράμετροι πρέπει να εισαχθούν σε καθένα από τα δίκτυα. Καθώς όμως η απόδοση του δικτύου εξαρτάται τόσο από τα δεδομένα εισόδου, από την αρχιτεκτονική του αλλά και από την αρχικοποίηση, δημιουργήθηκε ένα πρόγραμμα που ελέγχει διάφορους συνδυασμούς παραμέτρων με διαφορετικές αρχιτεκτονικές για πολλαπλές αρχικοποιήσεις. Λόγω της έμφυτης τυχαιότητας, το βέλτιστο δίκτυο προκύπτει χρησιμοποιώντας το Welch's t-test, ώστε τα συμπεράσματά ως προς την διαφορετικά απόδοση αρχιτεκτονικών να έχουν στατιστική σημαντικότητα.

¹https://scikit-learn.org/stable/

 $^{^2} https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.neural_network. MLPRegressor.html \# sklearn.neural_network. MLPRegressor.$

2. Προεπεξεργασία Δεδομένων

Το πρώτο βήμα ήταν η προ-επεξεργασία των δεδομένων. Αρχικά, οι κατηγορηματικές τιμές (Infill pattern, material) κωδικοποιήθηκαν σε αριθμητικές και αποθηκεύτηκαν σε ένα νέο αρχείο data.csv. Καθώς υπήρχαν μόνο 2 κατηγορίες σε κάθε feature, οι κατηγορίες αντιστοιχίθηκαν σε 0 και 1^{-3} .



Σχήμα 2: Κωδικοποίησή των κατηγορηματικών τιμών

Ύστερα, έγινε κανονικοποίηση (standardization) των υπόλοιπων μεταβλητών, καθώς είχαν διαφορετική τάξη μεγέθους. Για την κανονικοποίηση χρησιμοποιήθηκε η συνάρτηση $standard\ scaler^4$.

1 24002	0.960817	1.45767	1	-0.10224	-1.41421	-0.8165	- 1	-1.41421	25	18	1.2
-1.34903	0.900817	1.45/6/	1	-0.10224	-1.41421	-0.8103	1	-1.41421	25	10	1.2
-1.34903	0.615199	1.45767	-1	0.238559	-0.70711	-0.8165	1	-0.70711	32	16	1.4
-1.34903	-1.45851	1.059399	1	0.579358	0	-0.8165	1	0	40	8	0.8
-1.34903	-0.42165	0.661129	-1	1.260957	0.707107	-0.8165	1	0.707107	68	10	0.5
-1.34903	0.269582	1.45767	1	1.942555	1.414214	-0.8165	1	1.414214	92	5	0.7
-1.34903	1.652052	-0.53368	-1	-1.46544	-1.41421	-0.8165	-1	-1.41421	60	24	1.1

Σχήμα 3: Κανονικοποίηση τιμών εισόδων

Ύστερα, πρέπει να γίνει χωρισμός των δεδομένων σε train, validation και test υποσύνολα. Επειδή το dataset ήταν αρκετά μικρό, δεν υπήρξε υποσύνολο επικύρωσης. Ο χωρισμός έγινε με την συνάρτηση $train_test_split^5$, και το μέγεθος του υποσυνόλου . Για να μην βρεθεί κάποιο νευρωνικό δίκτυο το οποίο προσαρμόζεται σε συγκεκριμένα δεδομένα, κάθε φορά γίνεται διαφορετικός χωρισμός.

 $^{^3\}Sigma$ ε αυτή την περίπτωση το one hot encoding είναι ισοδύναμο με το label encoding.

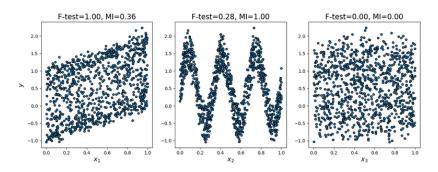
 $^{^4 \}texttt{https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.preprocessing.StandardScaler.html}$

 $^{^5} https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.model_selection.train_test_split.html$

3. Επιλογή δεδομένων

Το dataset αποτελείται από 9 παραμέτρους κατεργασίας, ωστόσο δεν είναι απαραίτητο ότι όλες οι παράμετροι επηρεάζουν όλα τα χαρακτηριστικά. Η μεθοδολογία που ακολουθήθηκε για την επιλογή των παραμέτρων εισόδου στο νευρωνικό δίκτυο είναι η εξής:

• Χρήση στατιστικών εργαλείων ώστε να εξετασθεί η συσχέτιση κάποιας παραμέτρου με κάθε χαρακτηριστικό. Συγκεκριμένα χρησιμοποιήθηκαν οι στατιστικοί δείκτες f-regression (f_{test}) και $mutual\ information(MI)$. Ο πρώτος δείκτης είναι παρόμοιος της γραμμικής συσχέτισης $(\rho_{x,y})$ και εξετάζει αν μια παράμετρος έχει γραμμική συσχέτιση με κάποιο χαρακτηριστικό. Ο δεύτερος δείκτης είναι ένα μέτρο της γενικότερης εξάρτησης των δυο μεταβλητών. Όπως φαίνεται από την εικόνα 4, ο δείκτης f_{test} πιάνει έντονα την γραμμική συσχέτιση ενώ ο δείκτης MI οποιαδήποτε σχέση6.



Σχήμα 4: Σύγκριση στατιστικών δεικτών f_{test} και MI για την συνάρτηση $y=x_1+sin(6\pi x_2)+0.1N(0,1)$

- Εύρεση βιβλιογραφίας που δείχνει εξάρτηση ενός χαρακτηριστικού από παραμέτρους κατεργασίας.
- Διερεύνηση της συσχέτισης των δεδομένων εισόδου. Ο πίνακας συσχέτισης φαίνεται στον πίνακα 1. Παρατηρείται πως η ταχύτητα του ανεμιστήρα ψύξης και η θερμοκρασία του κρεβατιού παρουσιάζουν έντονη συσχέτιση, και μεταβάλλονται με τον ίδιο ρυθμό (ρ_{bedtemperature, fanspeed} = 1). Έτσι, επιλέχθηκε η θερμοκρασία του κρεβατιού να αφαιρεθεί από τις παραμέτρους εισόδου, καθώς δεν θα πρόσθετε παραπάνω πληροφορία στο νευρωνικό δίκτυο. Όποιο δίκτυο εκπαιδευτεί με την ταχύτητα του ανεμιστήρα θα μπορούσε να εκπαιδευτεί με την θερμοκρασία κρεβατιού.

$\rho_{x,y}$	1	2	3	5	6	7	9
1	1	-1.93E-01	3.50E-03	9.79E-18	-7.39E-18	-5.55E-02	6.40E-18
2	-1.93E-01	1	1.03E-01	-1.18E-01	-2.93E-02	-4.20E-01	-2.93E-02
3	3.50E-03	1.03E-01	1	2.39E-01	1.60E-18	-9.43E-02	1.60E-18
5	9.79E-18	-1.18E-01	2.39E-01	1	6.02E-01	0	6.02E-01
6	-7.39E-18	-2.93E-02	1.60E-18	6.02E-01	1	0.00E+00	1
7	-5.55E-02	-4.20E-01	-9.43E-02	0	0.00E+00	1	0.00E+00
9	6.40E-18	-2.93E-02	1.60E-18	6.02E-01	1	0.00E+00	1

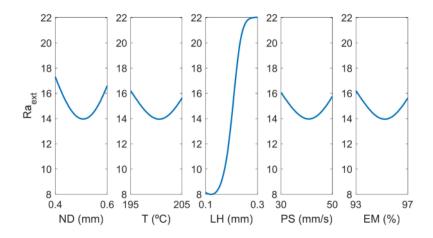
Πίνακας 1: Πίνακας συσχέτισης των παραμέτρων εισόδου

3.1 Επιλογή δεδομένων τραγύτητας

Αρχικά από την βιβλιογραφία, παρατηρήθηκε πως οι παράμετροι οι οποίοι επηρεάζουν την τραχύτητα είναι το layer height, η κλίση του τεμαχίου και η διάμετρος του nozzle [1], [2], [3] . Αυτό φαίνεται και στην εικόνα 5 από το [3]. Ωστόσο, στις παραμέτρους του datasheet δεν υπήρχε η διάμετρος του ακροφυσίου και η κλίση του τεμαχίου ούτε κάποιο άλλο παρεμφερές χαρακτηριστικό προς αυτά.

Ύστερα, υπολογίστηκαν οι στατιστικοί δείκτες ftest, MI για κάθε παράμετρο κατεργασίας και παρουσιάζονται στον πίνακα 2. Παρατηρείται πως η τραχύτητα έχει έντονη εξάρτηση από το layer height αλλά, και την θερμοκρασία του ακροφυσίου και της ταχύτητας εκτύπωσης. Διαισθητικά, η εξάρτηση από την θερμοκρασία του ακροφυσίου είναι λογική, αφού επηρεάζει τα

 $^{^6} https://scikit-learn.org/stable/auto_examples/feature_selection/plot_f_test_vs_mi.html \# sphx-glr-auto-examples-feature-selection-plot-f-test-vs-mi-py$



Σχήμα 5: Main effect plot για την μέση τραχύτητα από το άρθρο [3]

θερμοχρασιαχά πεδία χατά την στερεοποίηση του πλαστιχού και την ένωση με τα υπόλοιπα layers ενώ η ταχύτητα εκτύπωσης επηρεάζει και την θερμοχρασία, αλλά αυξημένη ταχύτητα οδηγεί και σε περισσότερες ταλαντώσεις στο σύστημα χίνησης που ενδέχεται να αυξάνουν την τραχύτητα. Παρατηρούνται σχετιχά αυξημένες τιμές και στο πάχος των τοιχωμάτων και το υλιχό. Αυτοί οι παράμετροι αρχιχά αγνοήθηχαν αλλά στη συνέχεια ελέγχθηχε αν βελτιώνουν την απόδοση του διχτύου.

Feature:	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Ftest	86.133	2.607	0.682	0.225	6.640	1.840	0.714	2.760	1.840
MI	0.744	0.002	0	0	0	0	0.339	0	0

Πίνακας 2: Πίνακας με τιμές ftest, MI για κάθε παράμετρο κατεργασίας σε σχέση με την τραχύτητα

3.2 Επιλογή δεδομένων Ορίου διαρροής

Στον παρακάτω πίνακα φαίνονται, οι συσχετίσεις των παραμέτρων εκτύπωσης με το όριο διαρροής (σ_{max}) , από πειράματα που έγιναν στο πανεπιστήμιο της Καταλωνίας (Ισπανία) [7]

	Elastic Pro	operties	Plastic Properties		
Factor	Young's Modulus (E)	Yield Strengt (Rp _{0.2})	Maximum Strength (σ _{max})	Maximum Deformation (ε)	
Layer orientation	111	111	111	111	
Layer Height	11	11	11	×	
Filament width	11	1	11	×	
Printing velocity	✓	1	✓	×	
Infill density	×	×	×	×	
Infill pattern	×	×	×	×	

Table 6. Significance value of the parameters with respect to the answers.

Σχήμα 6: Εξάρτηση τραχύτητας από διάφορες παραμέτρους κατεργασίας σύμφωνα με [7]

Βάση της παραπάνω δημοσίευσης, σημαντικότερη παράμετρος στην αντοχή του τελικού προϊόν είναι ο προσανατολισμός εκτύπωσης. Έπειτα ακολουθούν οι παράμετροι Layer Height και Flament width (Wall thickness) και σημαντικότερη συσχέτιση έχει το Printing Speed. Τέλος η συγκεκριμένη δημοσίευση καταλήγει στο συμπέρασμα ότι το Infill Density και Infill Pattern δεν έχουν συσχέτιση στο όριο διαρροής. Μια άλλη δημοσίευση [6] καταλήγει στο προφανές συμπέρασμα ότι το Infill Density και το Material έχουν επιρροή στη αντοχή του τεμαχίου. Τέλος μια ακόμα δημοσίευση [5] επιβεβαιώνει το γεγονός πως το Wall Thickness και το External (Nozzle) Temperature έχουν σημαντική συσχέτιση με το όριο διαρροής, το παρακάτω πόρισμα επιβεβαιώνεται και από τα στατιστικά τεστ που γίνονται παρακάτω.

Ύστερα, υπολογίστηκαν οι στατιστικοί δείκτες ftest, MI για κάθε παράμετρο κατεργασίας και παρουσιάζονται στον πίνακα 3. Παρατηρείται πως η αντοχή του τεμαχίου δεν εξαρτάται από το Infill Pattern καθώς και οι δύο δείκτες είναι αρκετά μικροί.

Επιπλέον, αρχικά αγνοήθηκε το printing speed καθώς και οι δύο δείκτες f_{test} , MI είναι σχετικά μικροί. Όμως, θα ελεγχθεί αν βελτιώνει την απόδοση, διότι σύμφωνα με την δημοσίευση [7] επιδρά στο όριο διαρροής.

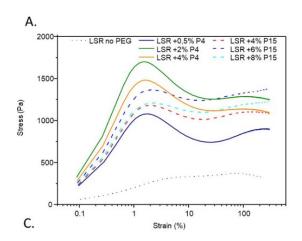
Feature:	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Ftest	6.2	9.135	7.077	0.004	9.469	3.279	3.613	4.398	3.279
MI	0.106	0.142	0.344	0	0.091	0.063	0.011	0.097	0.054

Πίνακας 3: Πίνακας με τιμές ftest, MI για κάθε παράμετρο κατεργασίας σε σχέση με την αντοχή του τεμαχίου

3.3 Επιλογή δεδομένων παραμόρφωσης

Από το σχήμα 6 παρατηρείται πως η παραμόρφωση εξαρτάται κυρίως από την διεύθυνση με την οποία τυπώνεται το εξάρτημα. Αυτό είναι αναμενόμενο, διότι η παραμόρφωση του τεμαχίου οφείλεται κυρίως στην παραμόρφωση των ινών του. Ωστόσο, δεν υπάρχει σχετική παράμετρος στο dataset.

 Ω ς γνωστόν, από την μηχανική, κάθε υλικό περιγράφεται από την χαρακτηριστική της καμπύλη παραμόρφωσης-τάσης $\epsilon-\sigma$. Στο παρακάτω σχήμα φαίνονται διάφορες χαρακτηριστικές υλικών για διάφορα ποσοστά Infill Density, και παρατηρείται πως η μέγιστη παραμόρφωση είναι ανεξάρτητη του παράγοντα αυτού [4].



Σχήμα 7: Καμπύλες παραμόρφωσης-τάσης για διάφορες τιμές του Infill Density σύμφωνα με [4]

Στον πίνακα 4 παρουσιάζονται τα στατιστικά τεστ συσχέτισης των εισόδων με την παραμόρφωση. Αμέσως παρατηρείται πως το Wall Thickness, το Infill Pattern και το Infill Density έχουν μηδενικές τιμές ΜΙ και χαμηλές τιμές Ftest. Μόνο το Layer Height και το Nozzle temperature έχουν υψηλές τιμές Ftest. Επιπλέον, είναι γνωστό από τη μηχανική πως το η παραμόρφωση εξαρτάται από το υλικό. Μάλιστα, η παραμόρφωση στα 3D prints οφείλεται στην παραμόρφωση των ινών. Οπότε, το υλικό είναι μια παράμετρος που θα εισαχθεί στα δεδομένα εισόδου. Τέλος, η ταχύτητα του ανεμιστήρα, επίσης επιλέχθηκε να εισαχθεί στα δεδομένα εισόδου.

Feature:	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Ftest	16.659	1.541	1.245	0.102	18.500	4.778	2.782	8.860	4.778
MI	0.180	0.060	0.000	0.003	0.201	0.101	0.077	0.074	0.105

Πίναχας 4: Πίναχας με τιμές ftest, MI για χάθε παράμετρο κατεργασίας σε σχέση με την αντοχή του τεμαχίου

4. Βελτιστοποίηση Νευρωνικών δικτύων

4.1 Διαδικασία Βελτιστοποίησης

Οι υποψήφιες αρχιτεκτονικές που εξετάζονται είναι οι ακόλουθες

- Ένα hidden layer με νευρώνες 1 έως 51 (50 συνδυασμοί)
- Δύο hidden layers με νευρώνες σε κάθε layer 1 έως 31 με βήμα 3 (10x10 συνδυασμοί)

Καθώς το dataset αποτελείται από 50 δείγματα, είναι επιθυμητό να μην ξεπεραστούν τα 100 βάρη, ώστε να μην γίνει overfitting και για να συγκλίνει καλύτερα το δίκτυο. Για να αξιολογηθεί το $N.\Delta$. ανεξάρτητα των τυχαίων training samples , εκπαιδεύονται k $N.\Delta$. ίδιας αρχιτεκτονικής με διαφορετικά κάθε φορά training samples (RandomFactor=i).

Η αξιολόγηση του κάθε νευρωνικό δικτύου, έγινε βάση του συντελεστή προσδιορισμού \mathbb{R}^2

$$R^{2} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n} (y_{target,i} - y_{predicted,i})^{2}}{\sum_{i=1}^{n} (y_{target,i} - \bar{y})^{2}}$$

$$\tag{1}$$

Ύστερα, υπολογίζεται η μέση τιμή (μ) και η τυπική απόκλιση (σ) των παραπάνω k δειγμάτων:

$$\mu = \frac{\sum_{i=1}^{k} R_i^2}{k}, \qquad \sigma = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n} (R_i^2 - \bar{R}^2)^2}{k - 1}}$$
 (2)

Το καλύτερο νευρωνικό δίκτυο είναι αυτό με την μεγαλύτερη μέση τιμή του συντελεστή R^2 $(R^2 \in (-\infty,1])$. Όμως οι μέσες τιμές δεν μπορούν να συγκριθούν απευθείας, λόγω της έμφυτης τυχαιότητας στην διαδικασία της εκπαίδευσης. Επειδή κάθε συνδυασμός-αρχιτεκτονική αναμένεται να έχει διαφορετική μέση τιμή και διαφορετική τυπική απόκλιση, επιλέχθηκε να χρησιμοποιηθεί το Welch's t-test⁷ για να συγκριθεί αν ένας συνδυασμός-αρχιτεκτονική έχει καλύτερη απόδοση με στατιστική σημαντικότητα. Στην πράξη, δημιουργείται ένας συγκεντρωτικός πίνακας με τις μέσες τιμές και την τυπική απόκλιση κάθε αρχιτεκτονικής και ξεκινώντας από τον πρώτο συνδυασμό, ελέγχεται αν κάθε επόμενος είναι καλύτερος με στατιστική σημαντικότητα. Αν είναι, τότε αποθηκεύται αυτός ως καλύτερος και οι επόμενες συγκρίσεις γίνονται με αυτόν. Το επίπεδο της σημαντικότητας τέθηκε αυθαίρετα στο 0.15%. Συνοπτικά, η διαδικασία της σύγκρισης παρουσιάζεται παρακάτω (Δείκτης τρέχοντα καλύτερου συνδυασμού: best, now, Δείκτης συνδυασμού υπό διερεύνηση: i):

- 1. $H_0 = \mu_i \mu_{Best,now} = 0$
- 2. $H_1 = \mu_i \mu_{Best,now} > 0$
- 3. Εύρεση του p-value από το Welch's t test. Χρήση της συνάρτησης $scipy.stats.ttest_ind_from_stats$ 9
- 4. Σύγκριση p-value < 0.15. Αν είναι μικρότερο, τότε απορρίπτεται η μηδενική υπόθεση και ο συνδυασμός i έχει καλύτερη απόδοση με στατιστική σημαντικότητα 15%.
- 5. Αλλαγή δεικτών: best, now = i

 $^{^7 {\}tt https://en.wikipedia.org/wiki/Welch\%27s_t-test}$

 $^{^8{}m T}$ α δεδομένα είναι λίγα για να απαιτηθεί ένα αυστηρό επίπεδο σημαντικότητα όπως το 0.05.

⁹Documentation βρίσχεται στη σελίδα: https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/generated/scipy.stats.ttest_ind_from_stats. html. Θέτοντας ως παράμετρο equal_var = False, και alternative='greater' επιλέγεται να γίνει το Welch's t -test που προαναφέρθηκε.

4.2 Βελτιστοποίηση Νευρωνικού δικτύου πρόβλεψης τραχύτητας

Αρχικά εκπαιδεύτηκε το Ν.Δ. με παραμέτρους εισόδους, που επιλέχθηκαν από τα στατιστικά τεστ συσχέτισης

$$arr = [1, 5, 7] = [layer_height, nozzle_temperature, print_speed]$$
 (3)

Στον παραχάτω πίναχα φαίνονται οι καλύτερες αρχιτεχτονικές κατά μέση τιμή, καθώς και η στατιστικά ισοδύναμη καλύτερη λύση.

Solutions	Layer1	Layer2	μ	σ					
	Κατάταξη κατά μέση τιμή								
#1	19	22	0.908	0.132					
#2	28	28	0.902	0.131					
#3	28	13	0.895	0.130					
#4	19	28	0.895	0.129					
#5	19	25	0.894	0.129					
Σ τατιστικά ισοδύναμη καλύτ ϵ ρη λύση									
#1	7	10	0.845	0.118					

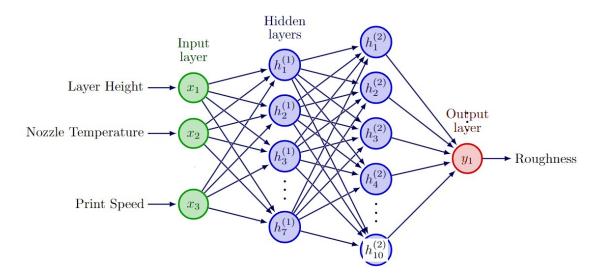
Πίνακας 5: Απόδοση νευρωνικού δικτύου εκτίμησης τραχύτητας με παραμέτρους εισόδου που αναφέρθηκαν 3

Έπειτα, έγινε πρόσθεση των παρακάτω παραμέτρων στις εισόδους, ώστε να γίνει έλεγχος αν γίνεται βελτίωση στην απόδοση του $N.\Delta$.

Solutions	Layer1	Layer2	μ	σ				
Στατιστικά ισοδύναμη καλύτερη								
λύση με προσθήκη wall thickness								
#1	4	7	0.500	0.064				
Στατιστικά ισοδύναμη καλύτερη								
λύση μ ϵ προσθήκη $material$								
#1	17	0	0.644	0.082				

Πίνακας 6: Απόδοση νευρωνικού δικτύου εκτίμησης τραχύτητας με προσθήκη στις παραμέτρους εισόδου το πάχος τοιχωμάτων και του υλικού

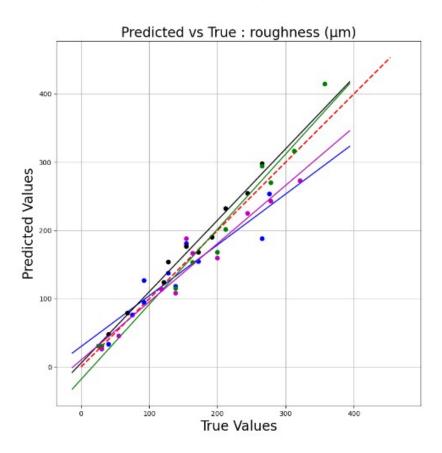
Συγκρίνοντας τους πίνακες 5 και 6 παρατηρείται πως η προσθήκη του πάχος τοιχώματος και του υλικού δεν βελτιώνει την εκτίμηση του νευρωνικού δικτύου. Επιπλέον, ως βέλτιστη αρχιτεκτονική επιλέγεται ένα δίκτυο με 2 layers τα οποία έχουν 7 και 10 κρυφούς νευρώνες το καθένα (Αρχιτεκτονική (7,10)).



Σχήμα 8: Αρχιτεκτονική Νευρωνικού Δικτύου της τραχύτητας

Αυτή η αρχιτεκτονική αντιστοιχεί σε 101 βάρη (3x7+7x10+10x1=101). Όπως φαίνεται στον πίνακα 5, υπήρξαν δίκτυα με $\bar{R}^2\approx 0.9$ (πχ. Αρχιτεκτονική (19,22)). Ωστόσο, αυτή η αρχιτεκτονική δεν είναι απαραίτητα καλύτερη από την (7,10), διότι δεν υπάρχει ο απαραίτητος αριθμός δειγμάτων για να προκύψει αυτό το συμπέρασμα με στατιστική σημαντικότητα. Επιπλέον, ο μεγάλος αριθμός βαρών (3x19+19x22+22=497) σε σχέση με τα δεδομένα αυξάνει σημαντικά την πιθανότητα overfitting.

Στο σχήμα 9 παρουσιάζεται ένα R^2 plot, στο οποίο συγκρίνονται οι πραγματικές (True) με τις εκτιμώμενες από το νευρωνικό δίκτυο (Predicted) τιμές τραχύτητας για παραμέτρους εισόδου από το υποσύνολο αξιολόγησης (test dataset). Για την γενίκευση των αποτελεσμάτων, παρουσιάζεται το γράφημα αυτό για τέσσερα νευρωνικά δίκτυα ίδιας αρχιτεκτονικής (Αρχιτεκτονική (7,10)) τα οποία έχουν εκπαιδευτεί σε διαφορετικό υποσύνολο παραμέτρων train dataset και συνεπώς αξιολογούνται στο συμπληρωματικό (test dataset). Η κόκκινη διακεκομμένη γραμμή αντιστοιχεί στην γραμμή y=x. Ένα τέλειο νευρωνικό δίκτυο που θα εκτιμούσε τις πραγματικές τιμές, θα είχε ένα R^2 plot με σημεία πάνω σε αυτή την ευθεία. Οι υπόλοιπες ευθείες έχουν προχύψει από γραμμική παλινδρόμηση των εκτιμώμενων και πραγματικών τιμών κάθε σετ αξιολόγησης. Παρατηρείται πως σε όλο το εύρος των τιμών τραχύτητας, οι εκτιμήσεις είναι κοντά στις πραγματικές τιμές. Στις πολύ μεγάλες τιμές υπάρχει μεγαλύτερη απόκλιση, η οποία είναι αναμενόμενη καθώς υπήρχαν και λιγότερα δεδομένα με μεγάλη τραχύτητα¹⁰.



Σχήμα 9: R^2 γράφημα για την τραχύτητα. Με κόκκινο είναι η γραμμή y=x

 $^{^{10}}$ Υπήρχαν συνολικά 6 tests με $(Ra>300\mu m$) ενώ υπήρχαν 15 tests με $(Ra<100\mu m$)

4.3 Βελτιστοποίηση Νευρωνικού δικτύου πρόβλεψης αντοχής

Αρχικά εκπαιδεύτηκε το Ν.Δ. με παραμέτρους εισόδους, που επιλέχθηκαν από τα στατιστικά τεστ συσχέτισης

 $arr = [1, 2, 3, 5, 8, 9] = [layer_height, wall_thickness, infill_density, nozzle_temperature, material, fan_speed] \tag{4}$

Στον Πίνακα 7 φαίνονται οι καλύτερες αρχιτεκτονικές κατά μέση τιμή, καθώς και η στατιστικά ισοδύναμη καλύτερη λύση.

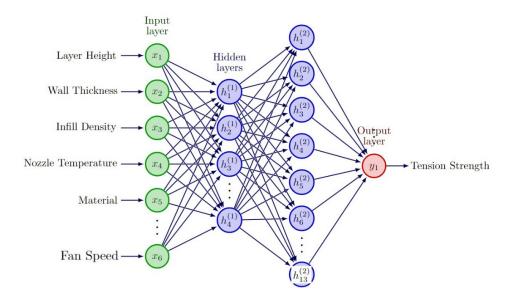
Solutions	Layer1	Layer2	μ	σ				
Κατάταξη κατά μέση τιμή								
#1	4	13	0.743	0.00897				
#2	4	7	0.698	0.0706				
#3	9	0	0.649	0.00473				
#4	4	16	0.647	0.0526				
#5	13	7	0.606	0.0412				
Στατιστικά ισοδύναμη καλύτερη λύση								
#1	4	13	0.743	0.00897				

Πίνακας 7: Απόδοση νευρωνικού δικτύου εκτίμησης ορίου διαρροής με παραμέτρους εισόδου που αναφέρθηκαν

Solutions	Layer1	Layer2	μ	σ			
Στατιστικά ισοδύναμη καλύτερη							
λύση με προσθήκη Infill Pattern							
#1	22	1	0.621	0.0162			
Στ	ατιστικά ισ	οδύναμη κ	ιλύτερη				
λύση μ ϵ προσθήκη $Print\ speed$							
#1	1	0	-1.757	10.04			

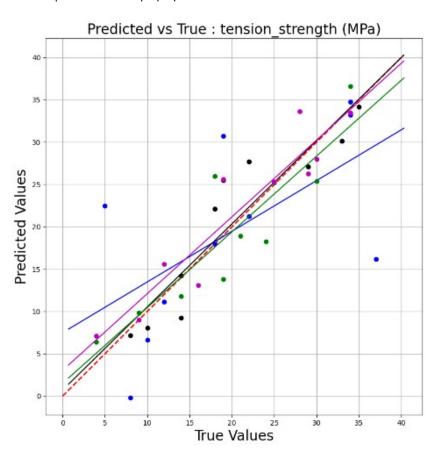
Πίνακας 8: Απόδοση νευρωνικού εκτίμησης ορίου διαρροής με προσθήκη στις παραμέτρους το Infill Pattern και το Print speed

Συγκρίνοντας του Πίνακες 7, 8 η προσθήκη παραπάνω μεταβλητών εισόδου, δεν βελτιώνει την απόδοση του Ν.Δ. Επομένως το βέλτιστο Ν.Δ. είναι αυτό που υπολογίστηκε αρχικά. Η αρχιτεκτονική του Ν.Δ. φαίνεται παρακάτω



Σχήμα 10: Αρχιτεκτονική Νευρωνικού Δικτύου του Ορίου Διαρροής

Στο σχήμα 11 παρουσιάζεται το R^2 plot. Πάλι, για την γενίχευση των αποτελεσμάτων, παρουσιάζεται το γράφημα αυτό για τέσσερα νευρωνικά δίκτυα ίδιας αρχιτεκτονικής (Αρχιτεκτονική (4,13)) τα οποία έχουν εκπαιδευτεί σε διαφορετικό υποσύνολο παραμέτρων train dataset και συνεπώς αξιολογούνται στο συμπληρωματικό (test dataset). Και σε αυτή την περίπτωση η κόκκινη διακεκομμένη γραμμή αντιστοιχεί στην γραμμή y=x, ενώ οι υπόλοιπες ευθείες έχουν προκύψει από γραμμική παλινδρόμηση των εκτιμώμενων και πραγματικών τιμών κάθε σετ αξιολόγησης. Παρατηρείται πως τα 3 dataset είχαν πολύ ικανοποιητική απόδοση και πλησιάζουν πολύ την ευθεία y=x. Αντίθετα το μπλε dataset δίνει κακές προβλέψεις. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι το νευρωνικό δίκτυο είναι κάπως ευαίσθητο στα δεδομένα εισόδου, το οποίο είναι λογικό καθώς το υποσύνολο εκπαίδευσης είναι πολύ περιορισμένο.



Σχήμα 11: R^2 γράφημα για το όριο διαρροής. Με κόκκινο είναι η γραμμή y=x

4.4 Βελτιστοποίηση Νευρωνικού δικτύου πρόβλεψης επιμήκυνσης

Αρχικά εκπαιδεύτηκε το Ν.Δ. με παραμέτρους εισόδους, που επιλέχθηκαν από τα στατιστικά τεστ συσχέτισης

$$arr = [1, 5, 8, 9] = [layer_height, nozzle_temperature, material, fan_speed]$$
 (5)

Στον παραχάτω πίναχα φαίνονται οι καλύτερες αρχιτεχτονικές κατά μέση τιμή, καθώς και η στατιστικά ισοδύναμη καλύτερη λύση.

Solutions	Layer1	Layer2	μ	σ			
Κατάταξη κατά μέση τιμή							
#1	37	0	0.562	0.00380			
#2	10	16	0.561	0.00552			
#3	23	0	0.558	0.00310			
#4	7	28	0.556	0.00310			
#5	25	16	0.551	0.00449			
Σ τατιστικά ισοδύναμη καλύτ ϵ ρη λύση							
#1	7	0	0.548	0.0137			

Πίνακας 9: Απόδοση νευρωνικού δικτύου εκτίμησης επιμήχυνσης με παραμέτρους εισόδου που αναφέρθηκαν

Στην συνέχεια, έγιναν επιπλέον τεστ βελτιστοποίησης, με επιπλέον εισόδους κάθε φορά τις παραμέτρους Wall Thickness το Infill Density το Infill Pattern και Print Speed. Οι παράμετροι αυτοί, υπενθυμίζεται πως δεν εξετάστηκαν αρχικά, καθώς από τον Πίνακα 4, οι τιμές ΜΙ είναι μηδενικές και οι τιμές Ftest σχετικά χαμηλές.

Solutions	Layer1	Layer2	μ	σ			
Σ τατιστικά ισοδύναμη καλύτ ϵ ρη							
λύση με προσθήκη wall thickness							
#1	22	7	0.627	0.0174			
Στατιστικά ισοδύναμη καλύτερη							
λύση με προσθήκη Infill Density							
#1	19	10	0.741	0.0229			
Στατιστικά ισοδύναμη καλύτερη							
λύση με προσθήκη Infill Pattern							
#1	19	13	0.551	0.0377			
Σ τατιστικά ισοδύναμη καλύτ ϵ ρη							
λύση μ ϵ προσθήκη $Print\ Speed$							
#1	23	0	0.517	0.0577			

Πίναχας 10: Απόδοση νευρωνικού δικτύου εκτίμησης επιμήκυνσης με προσθήκη στις παραμέτρους εισόδου το Wall Thickness το Infill Density και το Infill Pattern

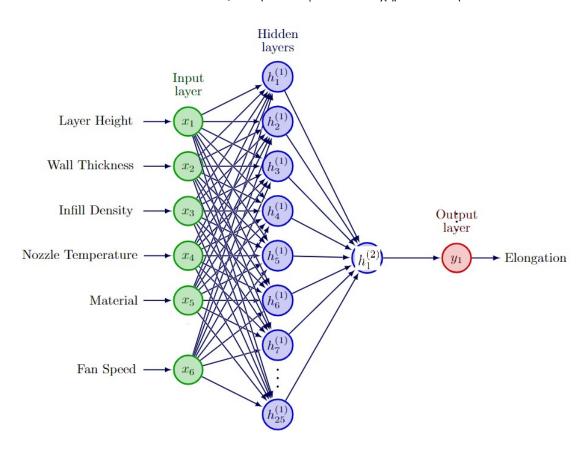
Συγκρίνοντας τους Πίνακες 9, 10, παρατηρείται πως η προσθήκη του Infill Density βελτιώνει σημαντικά την απόδοση του Ν.Δ., καθώς και η προσθήκη του Wall Thickness. Αντίθετα οι προσθήκη των άλλων παραμέτρων χειροτερεύει την απόδοση και για αυτό δεν εξετάζονται και περαιτέρω συνδυασμοί. Αξίζει σε αυτό το σημείο, να αξιολογήσουμε τα Ν.Δ. με την ταυτόχρονη προσθήκη των παραμέτρων Wall Thickness και Infill Density επομένως το διάνυσμα των μεταβλητών είσόδου είναι

 $arr = [1, 2, 3, 5, 8, 9] = [layer_height, wall_thickness, infill_density, nozzle_temperature, material, fan_speed]$ (6)

Solutions	Layer1	Layer2	μ	σ			
Σ τατιστικά ισοδύναμη καλύτ ϵ ρη							
λύση με προσθήκη Wall Thickness, Infill Density							
#1	25	1	0.758	0.00929			

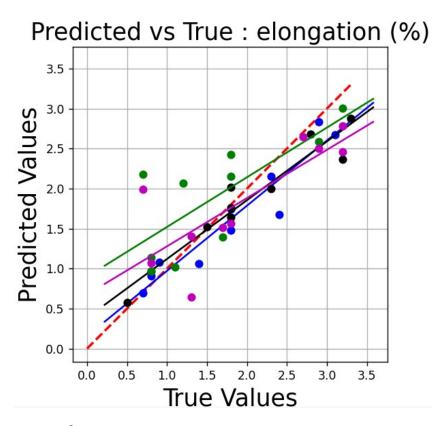
Πίναχας 11: Απόδοση νευρωνικού δικτύου εκτίμησης επιμήκυνσης με προσθήκη στις παραμέτρους εισόδου το Wall Thickness και το Infill Density

Συγκρίνοντας τους Πίνακες 10, 11 παρατηρείται ότι η μέση τιμή (μ) αξιολόγηση παραμένει σε παρόμοια επίπεδα, όπως και η τυπική απόκλιση (σ). Στην πρώτη περίπτωση (Πίνακας 10) ο αριθμός των βαρών είναι ($w_2 = 5x19 + 19x10 + 10x1 = 295$), ενώ στην δεύτερη περίπτωση είναι (Πίνακας 11) ο αριθμός των βαρών είναι ($w_3 = 6x25 + 25x1 + 1x1 = 176$). Για να αποφύγουμε την περίπτωση του Overfitting επιλέγουμε την περίπτωση όπου, τα βάρη είναι λιγότερα, επομένως γίνεται η προσθήκη του Wall Thickness και τουInfill Density. Παρακάτω φαίνεται το σχήμα του Νευρωνικού Δικτύου.



Σχήμα 12: Αρχιτεκτονική Νευρωνικού Δικτύου της παραμόρφωσης

Στο σχήμα 13 παρουσιάζεται το R^2 plot. Πάλι, για την γενίχευση των αποτελεσμάτων, παρουσιάζεται το γράφημα αυτό για τέσσερα νευρωνικά δίχτυα ίδιας αρχιτεκτονικής (Αρχιτεκτονική (25,1)) τα οποία έχουν εκπαιδευτεί σε διαφορετικό υποσύνολο παραμέτρων train dataset και συνεπώς αξιολογούνται στο συμπληρωματικό (test dataset). Και σε αυτή την περίπτωση η κόκκινη διακεκομμένη γραμμή αντιστοιχεί στην γραμμή y=x, ενώ οι υπόλοιπες ευθείες έχουν προκύψει από γραμμική παλινδρόμηση των εκτιμώμενων και πραγματικών τιμών κάθε σετ αξιολόγησης. Παρατηρείται πως οι ευθείες που προκύπτουν με γραμμική παλινδρόμηση έχουν μικρότερη κλίση από 1, που σημαίνει πως υπερεκτιμούν τις χαμηλές τιμές παραμόρφωσης ενώ υποεκτιμούν τις υψηλές τιμές της παραμόρφωσης. Το συγκεκριμένο χαρακτηριστικό ίσως χρειάζεται περισσότερα δεδομένα-τεστς ώστε το νευρωνικό δίκτυο να προσαρμοστεί καλύτερα.



Σχήμα 13: \mathbb{R}^2 γράφημα για την παραμόρφωση. Με κόκκινο είναι η γραμμή y=x

5. Αναφορές

- [1] Mohammad S. Alsoufi and Abdulrhman E. Elsayed. How surface roughness performance of printed parts manufactured by desktop fdm 3d printer with pla+ is influenced by measuring direction. *American Journal of Mechanical Engineering*, 5(5):211–222, 2017.
- [2] Christin Arnold, Delf Monsees, Jeremias Hey, and Ramona Schweyen. Surface quality of 3d-printed models as a function of various printing parameters. *Materials (Basel)*, 12(12):1970, June 2019.
- [3] Irene Buj-Corral, Xavier Sánchez-Casas, and Carmelo J. Luis-Pérez. Analysis of am parameters on surface roughness obtained in pla parts printed with fff technology. *Polymers*, 13(14), 2021.
- [4] Edwin-Joffrey Courtial, Clément Perrinet, Arthur Colly, David Mariot, Jean-Marc Frances, René Fulchiron, and Christophe Marquette. Silicone rheological behavior modification for 3d printing: Evaluation of yield stress impact on printed object properties. *Additive Manufacturing*, 28:50–57, 2019.
- [5] Damir Godec, Santiago Cano, Clemens Holzer, and Joamin Gonzalez-Gutierrez. Optimization of the 3d printing parameters for tensile properties of specimens produced by fused filament fabrication of 17-4ph stainless steel. *Materials*, 13(3), 2020.
- [6] Marco Leite, joão fernandes, Augusto Deus, Luis Reis, and M.F. Vaz. Study of the influence of 3d printing parameters on the mechanical properties of pla. 05 2018.
- [7] J.A. Travieso-Rodriguez, Ramon Jerez-Mesa, Jordi Llumà, Oriol Traver, Giovanni Gómez-Gras, Joan Josep, and Roa Rovira. Mechanical properties of 3d-printing polylactic acid parts subjected to bending stress and fatigue testing. *Materials*, 2019:3859, 11 2019.

6. Κώδικες

Παρουσιάζεται ο γενικός κώδικας:

```
import numpy as np
   import pandas as pd
   from sklearn.model_selection import train_test_split
   from sklearn.neural_network import MLPRegressor
   from sklearn.preprocessing import StandardScaler
   import matplotlib.pyplot as plt
   from scipy import stats as st
   scalerX = StandardScaler()
10
   df = pd.read_csv("Data.csv")
11
12
   #Targets = ['roughness (\mu m)', 'tension_strength (MPa)', 'elongation (%)']
13
   Targets = df.columns[-3:]
14
   ystring = Targets[0]
15
16
   #Number of trials -> statistical analysis
17
   ki=8
18
   r2_table = np.zeros(ki) #save the r2 value for statistical test
19
20
   #Check alternative models
21
   nkTable = [1]; specific = 1
22
23
24
   \#nkTable = [2,7]; specific = 0 \#Roughness
   \#nkTable = [3,6]; specific = 0 \#uts
26
   \#nkTable = [2]; specific = 0 \#elongation , 3
27
             = \operatorname{np.zeros}([5*\operatorname{nkTable.}\_len_{--}(),4])
   FinalST = np.zeros([nkTable._len_{-}(),4])
30
   ali = -1 #alternatives_index
31
32
   for nk in nkTable:# specific
33
     ali +=1
34
35
     if ystring = Targets [0]:
36
        if specific == 1:
37
           roughness
38
          arr = [0, 4, 6]
39
        else:
          arr = [0, nk, 6]
     if vstring = Targets[1]:
42
        if specific == 1:
43
         #----- MPA
44
          arr = [0, 1, 2, 4, 7, 8] \# > new = better
45
        else:
46
          arr = [0,1,2,nk,4,7,8] \#3 \longrightarrow bibliography, 6 \longrightarrow bibliography + ftest
47
     if ystring = Targets [2]:
       if specific == 1:
49
       # elognation
50
         arr = [0, 1, 4, 7, 8]
51
        else:
52
          arr = [0, 1, nk, 4, 7, 8] \# 2 \rightarrow fi test \rightarrow 2 \rightarrow 0.78
53
54
```

```
#Best, independent of nn architecture
55
     #region
56
     cn=0
57
     MATRIX=[]
58
     OBJ = []
59
     #maximum 2 layers
60
     for i in range (1,51,2):
61
       MATRIX. append ([i, 0])
62
        cn=cn+1
63
      for i in range (1,31,3):
        for j in range (1,31,3):
65
          MATRIX. append ([i, j])
66
          cn=cn+1
67
     OBJ = np.zeros(cn) #score
69
     SD = np.zeros(cn) #variance of score
70
71
     #endregion
73
     u = cn
74
     for j in range (0, u):
        print(j)
77
        R2=0
78
        for k in range(ki):
79
          train, test = train_test_split(df, test_size = 0.2) #different data
          X_train = train.iloc[:, arr]
81
          Y_train = train [ystring]
82
          X_{\text{-test}} = \text{test.iloc}[:, arr]
          Y_test = test[ystring]
84
85
          #Data Preprocess
86
          scaler = StandardScaler()
          scaler.fit(X_train)
88
89
          X_train = scaler.transform(X_train)
90
          X_test = scaler.transform(X_test)
92
          #Regression
93
          if MATRIX[j][1] == 0:
94
            MLP=MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(MATRIX[j][0]), max_iter=5000, random_state
          else:
96
            MLP=MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(MATRIX[j][0],MATRIX[j][1]), max_iter=5000,
97
                 random_state=1)
98
         MLP. fit (X_train, Y_train.values.ravel())
99
100
          \#R2 plot, scaled to 0-1
101
          y_pred = MLP. predict(X_test)
102
          y_true = Y_test.values
103
          y_t = y_t = y_t = max()
105
          y_pmax = y_pred.max()
106
107
          r2 = MLP.score(X_test, Y_test)
          R2=R2+r2/ki
109
```

```
print (r2)
110
          #Statistical Tets
111
          r2_table[k] = r2
113
114
        OBJ[j] = R2
115
        SD[j] = r2\_table.var()
116
117
        print('R2: {:4f}'.format(R2))
118
        print('SD: {:4f}'.format(SD[j]))
119
120
      #save all data
121
     TXT= np.zeros([cn, 4])
122
      for j in range (0, u):
123
        TXT[j,:] = [MATRIX[j][0], MATRIX[j][1], OBJ[j], SD[j]]
124
      #print (TXT)
125
126
      #Show best 5
127
      id = np.argsort (OBJ)
128
      # print (id[-5:]+1)
129
      print ( TXT[id[-5:],:] )
130
      Final[5*ali:(5*ali+5),:] = TXT[id[-5:],:]
      # print (Final)
132
133
     #statistic test
134
     \#\text{st\_id} = [0,0,0,0,0]
135
136
      best = 0
137
      for j in range (1, u):
138
               = TXT[best, 2]
        mu1
139
               = TXT[j, 2]
        mu2
140
        s1_2
              = TXT[best, 3]
141
        s2_2 = TXT[j,3]
142
143
        if (st.ttest_ind_from_stats(mu2, s2_2, ki, mu1, s1_2, ki, equal_var=False,
144
            alternative='greater').pvalue < 0.15 ):
          \#pvalue < 0.05 \rightarrow
          #the propability that mu2 > mu1 covers and area 1-pvalue
146
          #So if i want to be 95% sure that mu2>mu1, that means that:
147
          \# area > 0.95 \rightarrow 1-pvalue > 0.95 \rightarrow pvalue < 0.05
148
149
          best = j
150
          print("Best is : {:d}".format(best))
151
152
      FinalST [ali ,:] = TXT[best ,:]
153
154
    print(FinalST)
155
156
   print("Final best 5 table:")
   print (Final)
```

Παρουσιάζεται ο κώδικας υπολογισμού των στατιστικών δεικτών ftest, mi:

```
import numpy as np
  import pandas as pd
  import matplotlib.pyplot as plt
  from sklearn.preprocessing import StandardScaler
  from sklearn.decomposition import PCA
  scalerX = StandardScaler()
  #flags
  printData = 0
  selectY = 1 #0 for roughness, 1 for UTS, 2 for elongation
11
  selectBvF = 1
12
  ki = 10
13
  miTotal = np. zeros([ki, 9])
15
  FiTotal = np.zeros([ki, 9])
16
17
18
  miT = np.zeros(9)
19
  FiT = np.zeros(9)
20
                                          —————Data Import and preprocessing
  ###
22
  #region
23
                                                                    -Import
  Data = pd.read_excel('Data.xlsx')
  #print (Data.head())
  # for col in Data.columns:
27
  #
        print(col)
28
  # 3 targets.
30
  nset = len (Data.columns) - 3
31
32
                                                         Convert categorical to numeric
33
  StringArray = Data.dtypes == object
34
  StringArray = 1*StringArray.__array__()
35
  #print(StringArray)
  #infill pattern
38
  DifferentPatterns = Data['infill_pattern'].unique()
  nPatterns = len ( DifferentPatterns )
  Data ['infill_pattern'].replace (DifferentPatterns, range (nPatterns), inplace = True)
41
  #Data["infill_pattern"].replace(['grid','honeycomb'],[0,1],inplace=True)
42
43
  #print(Data['infill_pattern'])
44
45
  #materials
46
  DifferentMaterials = Data['material'].unique()
47
  nMaterials = len ( DifferentMaterials )
  #not the best way, if there were 3 categories, new features should be introduced
49
  Data ['material']. replace (Different Materials, range (n Materials), inplace = True)
50
51
  #print(Data['material'])
52
53
                                                                 -Separate Matrices
54
  #Target
  Y_df = Data.iloc[:, nset+selectY]
```

```
#print (Y_df)
57
  #drop other outputs
  X_df = Data.drop(Data.columns[[9,10,11]],axis=1)
60
  StringArray = np.delete(StringArray, range(nset, 12))
61
62
  Xnames= Data.columns
63
  #print(X_df.head())
64
65
                                                               -----Make nd arrays
67
  X = X_df.to_numpy()
68
  Y = Y_df.to_numpy()
69
  np.set_printoptions(formatter={'float': lambda x: "{0:0.3f}".format(x)})
71
72
   for k in range(ki):
73
       # #-
75
       from sklearn.feature_selection import SelectPercentile, f_regression,
76
          mutual_info_regression
       fi_{,-} = f_regression(X,Y)
78
       mi = mutual_info_regression(X,Y)
79
80
81
       FiT = FiT + fi/ki
82
       miT =miT+ mi/ki
83
       miTotal[k,:] = mi
85
       FiTotal[k,:] = fi
86
87
   print("Mutual Info Regression Total: ")
89
   print(miTotal)
90
   print('----
91
   print("Mutual Information Average: ")
   print (miT)
93
94
   print('_____')
print('____')
95
   print("F regression Total: ")
  print (FiTotal)
98
  print(',_____
99
   print("F regression Average: ")
  print (FiT)
```

Παρουσιάζεται ο κώδικας για την δημιουργία των R^2 γραφημάτων:

```
import numpy as np
  import pandas as pd
  from sklearn.model_selection import train_test_split
  from sklearn.neural_network import MLPRegressor
  from sklearn.preprocessing import StandardScaler
  import matplotlib.pyplot as plt
  from scipy import stats as st
  from sklearn.linear_model import LinearRegression
  np.set_printoptions(formatter={'float': lambda x: "{0:0.3f}".format(x)})
10
11
  scalerX = StandardScaler()
12
  df = pd.read_csv("Data.csv")
13
14
  #Targets = ['roughness (\mu m)', 'tension_strength (MPa)', 'elongation (%)']
15
  Targets = df.columns[-3:]
16
  ystring = Targets[0]
17
18
  #Number of trials -> statistical analysis
19
  ki=8
20
  r2_table = np.zeros(ki) #save the r2 value for statistical test
21
  printr2 = 1 \#r2 graph
22
23
24
                          -Check alternative models
  nkTable = [1]; specific = 1
26
  \#arr = [0, 1, 2, 4, 7, 8] \# elongation
27
  \#arr = [0, 1, 2, 4, 7, 8] \# -> MPA
  arr = [0,4,6] \# > roughness
30
  #put neural network architecture
31
  MATRIX = [[7, 10]]
                              #roughness
  \#MATRIX = [[4, 13]]
                              #uts
33
  \#MATRIX = [[25, 1]]
                              #elongation
34
35
                           nkTable.__len__(),4])
  Final
            = np.zeros([
  FinalST = np.zeros([
                           nkTable.__len__(),4])
37
38
39
  xx = np.zeros(ki*10)
  yy = np. zeros(ki*10)
41
  coeff = np.zeros(ki)
42
  inter = np. zeros(ki)
43
44
45
46
  j = 0 #in order to use older code, where there were a lot of combinations, we use j var
47
  R2=0
  for k in range (ki):
49
     train, test = train_test_split(df, test_size=0.2, random_state=k) #different data
50
     X_train = train.iloc[:, arr]
51
     Y_train = train [ystring]
52
     X_{test} = test.iloc[:,arr]
53
     Y_test = test[ystring]
54
55
    #Data Preprocess
```

```
scaler = StandardScaler()
57
      scaler.fit(X_train)
58
      X_train = scaler.transform(X_train)
60
      X_test = scaler.transform(X_test)
61
62
     #Regression
63
      if MATRIX[i][1] = 0:
64
       MLP=MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(MATRIX[j][0]), max_iter=5000,random_state=1)
65
      else:
66
       MLP=MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(MATRIX[j][0],MATRIX[j][1]), max_iter=5000,
67
           random_state=1)
68
     MLP. fit (X_train, Y_train.values.ravel())
70
     r2 = MLP. score (X_test, Y_test)
71
     R2=R2+r2/ki
72
      print (r2)
73
74
     #For variance
75
     r2_table[k] = r2
76
     #R2 plot
78
     y_pred = MLP.predict(X_test)
79
      y_true = Y_test.values
80
81
     #Regression for r2
82
            = LinearRegression(). fit (y_{true}.reshape(-1, 1), y_{pred}.reshape(-1, 1))
83
      coeff[k] = reg.coef_-
85
      inter[k] = reg.intercept_
86
87
     xx[10*k:10*(k+1)] = y_true
     yy[10*k:10*(k+1)] = y_pred
89
90
   SD = r2 table.var()
91
   print('R2: {:4f}'.format(R2))
93
   print ('SD: {:4f}'. format (SD))
94
95
   # Print Results
   RESULTS = [MATRIX [0] [0], MATRIX [0] [1], R2, SD]
   print("Results: ")
98
   print (RESULTS)
   #print calibration
101
   xmax = xx.max()
102
   xmin = xx.min()
   lx = 0.1*(xmax - xmin)
104
105
   ymax = yy.max()
106
   ymin = yy.min()
107
   ly = 0.1*(ymax - ymin)
108
109
   #plot only 4, in order for the graph to be clear
110
   colors = ['b', 'k', 'g', 'm']
112 | if printr2:
```

```
plt.figure(1)
113
        plt.plot([0,ymax+ly], [0,ymax+ly],'r--',linewidth = '2',label = 'y=x')
114
        for k in range (4):
115
116
          a = coeff[k]
117
          b = inter[k]
118
119
          \begin{array}{lll} plt.\ plot\left(xx[10*k:10*(k+1)] & , \ yy[10*k:10*(k+1)] \,,\,{}^{,}o\,{}^{,},color=colors\,[k] \\ plt.\ plot\left(np.\ array\left([xmin\ -\ lx\ ,xmax+lx\ ]\right),a*np.\ array\left([xmin\ -\ lx\ ,xmax+lx\ ]\right)+b\,,\,{}^{,}-\,{}^{,},color=colors\,[k] \\ \end{array}
120
121
               colors [k] )
122
        plt.xlabel('True Values', fontsize=20)
123
        plt.ylabel('Predicted Values', fontsize=20)
124
        titletxt = 'Predicted vs True : {:s}'.format(ystring)
        plt.title(titletxt, fontsize =20)
126
       #plt.ylim(ymin - ly,ymax+ly)
127
        plt.ylim(0,ymax+ly)
128
        plt.xlim(0,xmax+lx)
129
       plt.axis('square')
130
       #plt.legend(handles=[line1])
131
       plt.grid()
132
       plt.show()
133
```