



ΤΜΗΜΑ ΒΙΟΜΗΧΑΝΙΚΗΣ
ΔΙΟΙΚΗΣΗΣ & ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟΥ ΠΕΙΡΑΙΩΣ

ΤΜΗΜΑ ΧΗΜΙΚΩΝ
ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΕΘΝΙΚΟΥ
ΜΕΤΣΟΒΙΟΥ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟΥ



Διπλωματική
Εργασία με
Θέμα:

ΧΡΗΣΗ ΗΠΙΩΝ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΩΝ ΤΕΧΝΙΚΩΝ ΓΙΑ ΤΗ ΒΕΛΤΙΣΤΗ ΕΠΙΛΟΓΗ ΥΛΙΚΩΝ ΣΕ ΒΙΩΣΙΜΑ ΠΡΟΪΟΝΤΑ ΣΥΣΚΕΥΑΣΙΑΣ



Συγγραφή και Επιμέλεια:

ΝΙΚΟΛΑΟΣ Γ. ΜΟΥΣΤΑΚΑΣ

Επιβλέποντες Καθηγητές:

**ΤΑΤΙΑΝΑ ΤΑΜΠΟΥΡΑΤΖΗ
ΔΗΜΗΤΡΙΟΣ ΚΑΡΑΛΕΚΑΣ**

Μεταπτυχιακό Πρόγραμμα
Σπουδών

«ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΝΕΡΓΕΙΑΣ ΚΑΙ ΠΡΟΣΤΑΣΙΑΣ
ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΟΣ»



ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΣΠΟΥΔΩΝ
ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΒΙΟΜΗΧΑΝΙΚΗΣ ΔΙΟΙΚΗΣΗΣ ΚΑΙ
ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟΥ ΠΕΙΡΑΙΩΣ

&

ΣΧΟΛΗΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΕΘΝΙΚΟΥ ΜΕΤΣΟΒΙΟΥ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟΥ



ΧΡΗΣΗ ΗΠΙΩΝ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΩΝ ΤΕΧΝΙΚΩΝ ΓΙΑ ΤΗ ΒΕΛΤΙΣΤΗ ΕΠΙΛΟΓΗ ΥΛΙΚΩΝ ΣΕ ΒΙΩΣΙΜΑ ΠΡΟΪΟΝΤΑ ΣΥΣΚΕΥΑΣΙΑΣ

Διπλωματική Εργασία Μεταπτυχιακού Προγράμματος Σπουδών

ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ ΕΝΕΡΓΕΙΑΣ ΚΑΙ ΠΡΟΣΤΑΣΙΑΣ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΟΣ

Επιβλέποντες Καθηγητές: Τατιάνα Ταμπουρατζή

Δημήτριος Καραλέκας

Συγγραφή και Επιμέλεια: Μουστάκας Γ. Νικόλαος (Α.Μ.: ΜΠΣ/0804)

ΠΕΙΡΑΙΑΣ, 2011

РАНЕЕЗНАМО ПЕРПАА

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η επιλογή υλικών κατά τη διάρκεια του βιώσιμου σχεδιασμού προϊόντων αποτελεί μία δαπανηρή και χρονοβόρα διαδικασία. Στις περισσότερες περιπτώσεις υπάρχουν περισσότερα από ένα υλικά κατάλληλα για την εξεταζόμενη εφαρμογή και η τελική επιλογή αποτελεί μια συμβιβαστική λύση ανάμεσα σε πολλά πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα.

Η παρούσα εργασία έχει ως σκοπό την ανάπτυξη μιας μεθόδου προσδιορισμού του ιδανικού – από πλευράς περιβαλλοντικών επιπτώσεων – υλικού για την εκάστοτε υπό εξέταση εφαρμογή. Η μέθοδος αυτή κάνει χρήση (α) κλασικών και ήπιων υπολογιστικών τεχνικών (Πολυωνυμική Παλινδρόμηση – Polynomial Regression και Νευρωνικά Δίκτυα Γενικευμένης Παλινδρόμησης – General Regression Artificial Neural Networks – GRANNs–) για την προσέγγιση της σχέσης μεταξύ των ιδιοτήτων των υποψήφιων υλικών και των περιβαλλοντικών τους επιπτώσεων κατά τη διάρκεια του κύκλου ζωής τους και, (β) Γενετικών Αλγορίθμων για τον προσδιορισμό νέων «βέλτιστων» περιβαλλοντικών υλικών και για την παροχή πληροφοριών για τη βελτίωση των ήδη υπαρχόντων υλικών.

Μέσω της εφαρμογής των τεχνικών αυτών, επιχειρείται η σύνδεση των ιδιοτήτων των υποψήφιων υλικών με τις περιβαλλοντικές επιπτώσεις που προκαλούνται κατά τον κύκλο ζωής των υλικών. Τα υλικά κατατάσσονται βάσει των ιδιοτήτων τους χρησιμοποιώντας έναν αδιάστατο περιβαλλοντικό δείκτη ο οποίος κατατάσσει τα γνωστά υλικά βάσει του κατά πόσον είναι περιβαλλοντικά φιλικά, οπότε και τελικά επιλέγεται το «βέλτιστο περιβαλλοντικά υλικό».

Για την καλύτερη κατανόηση της μεθόδου, αυτή εφαρμόζεται στην επιλογή του καλύτερου περιβαλλοντικά πολυμερικού υλικού για την κατασκευή φιαλών αποθήκευσης υγρών ευρείας κατανάλωσης μέσω ενός υποσυνόλου των μηχανικών ιδιοτήτων των υλικών αυτών και μελετώντας έναν αριθμό περιβαλλοντικών επιπτώσεων κατά τη διάρκεια του κύκλου ζωής του προϊόντος. Η μέθοδος ισχυροποιείται με την εφαρμογή Πολυκριτηριακής Ανάλυσης και Ανάλυσης Ευαισθησίας.

Στο 1^ο Κεφάλαιο επιχειρείται μία σύντομη ανασκόπηση των εργασιών που έχουν πραγματοποιηθεί στον χώρο των μεθόδων αρχικής διαλογής και επιλογής υλικών ενώ γίνεται και μία σύντομη περιγραφή της μεθόδου που αναπτύσσεται στην παρούσα εργασία και των προβλημάτων που αυτή καλείται να αντιμετωπίσει. Στο 2^ο Κεφάλαιο περιγράφεται η έννοια της βιώσιμης ανάπτυξης και της σχέσης της με τον σχεδιασμό περιβαλλοντικά φιλικών προϊόντων. Επίσης γίνεται αναφορά σε συστήματα περιβαλλοντικής διαχείρισης και στην ανάλυση κύκλου ζωής.

Το 3^ο Κεφάλαιο ασχολείται με τη χημεία των πολυμερικών υλικών. Παρουσιάζονται βασικοί όροι της Οργανικής Χημείας, οι δυνατές διαμορφώσεις των μορίων καθώς η έννοια της ισομέρειας. Το 4^ο Κεφάλαιο πραγματεύεται τη μηχανική συμπεριφορά των πολυμερικών υλικών και περιγράφει

χαρακτηριστικές μηχανικές ιδιότητες μέρος των οποίων χρησιμοποιείται στη συνέχεια κατά την εφαρμογή της μεθόδου.

Στο *Κεφάλαιο 5* γίνεται μια περιγραφή των βασικών αρχών, των σταδίων εφαρμογής και των πλεονεκτημάτων και μειονεκτημάτων που εμφανίζει κάθε μία από τις μεθόδους που χρησιμοποιούνται στη παρούσα εργασία (Πολυωνυμικής Παλινδρόμησης, των Νευρωνικών Δικτύων και των Γενετικών Αλγορίθμων). Το *6^ο Κεφάλαιο* αποτελεί το κύριο μέρος της εργασίας αυτής. Παρουσιάζονται αναλυτικά τα βήματα της μεθόδου και τα αποτελέσματα της κατά την εφαρμογή της στο πρόβλημα που μελετάται ως παράδειγμα. Στο *7^ο Κεφάλαιο* παρατίθενται τα συμπεράσματα από την παρούσα έρευνα, κάποιες παρατηρήσεις καθώς και προτάσεις για περαιτέρω έρευνα.

Στο τέλος της διπλωματικής παρατίθεται μία επιστημονική εργασία με τίτλο: «Optimizing materials selection for sustainable packaging design via soft computing», η οποία βασίζεται στη προτεινόμενη μέθοδο. Η εργασία αυτή παρουσιάστηκε με τη μορφή poster στο συνέδριο «Eighth International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE 2010)» το οποίο πραγματοποιήθηκε στην Κω το διάστημα 03-08 Οκτωβρίου 2010.

Abstract

Material selection during sustainable product design is an expensive and time consuming process. In most cases there is more than one material suitable for the intended application and the final selection constitutes a compromise between numerous advantages and disadvantages. The aim of this research is to develop a method for determining the ideal – in terms of environmental impact – polymeric material for a specific application. The proposed method makes use of classical as well as soft computing prediction/interpolation techniques (Polynomial Regression and Curve Fitting – *PRCF* – and General Regression Artificial Neural Networks – *GRANNs* –) with optimization via Genetic Algorithms. Through the application of these techniques a link between the properties of the candidate materials and the environmental impact caused during their life is being attempted. The materials are classified based on their properties using an adimensional environmental indicator that assigns scores to each material (from the most to the least environmentally friendly) and ultimately proposes the «optimal» material. The method is illustrated on the problem of selecting the optimal (in terms of environmental impact) polymeric material for the manufacturing of liquid containers using a subset of the mechanical properties of some candidate materials which highlight a number of environmental impacts during the product's life cycle. The method is enhanced by the application of *Multicriteria* and *Sensitivity Analysis*.

The *First Chapter* is a brief review of the work performed at the initial screening and selection methods and briefly describes the method developed in this work as well as the relevant issues. The *Second Chapter* describes the concept of sustainable development and its relationship to the design of environmentally friendly products; this is followed by a brief reference to the Environmental Management Systems (*EMS*) and Life Cycle Analysis (*LCA*).

The *Third Chapter* deals with the chemistry of polymeric materials. Basic terms of Organic Chemistry are presented, including the molecules' possible shapes and the concept of isomerism. The *Fourth Chapter* presents the mechanical behavior of polymeric materials and describes typical mechanical properties some of which are used later in the implementation of the proposed method.

In *Chapter Five* the basic principles, the application stages and the advantages-disadvantages of each of the methods used in this work are described. *Chapter Six* constitutes the main part of this work. The steps of the method are thoroughly described and the results of the method's implementation on the case-study are presented. The *Seventh Chapter* presents the findings of this research, accompanied by some observations and suggestions for further research.

A paper entitled: «Optimizing materials selection for sustainable packaging design via soft computing» can be found at the end of this booklet. This paper is based on the aforementioned research

and was presented in poster format at the «Eighth International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering ICCMSE 2010» which was held in Kos during October 3rd-8th, 2010.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΠΕΡΠΑ

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

ΑΡΙΘΜΟΣ	ΤΙΤΛΟΣ ΠΑΡΑΓΡΑΦΟΥ	Σελίδα
	ΠΕΡΙΛΗΨΗ	IV
	ABSTRACT	VI
	ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ	VIII
	ΕΥΡΕΤΗΡΙΟ ΣΧΗΜΑΤΩΝ	XI
	ΕΥΡΕΤΗΡΙΟ ΠΙΝΑΚΩΝ	XIII
	ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ	XV
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1: ΕΙΣΑΓΩΓΗ		
1.1	ΕΙΣΑΓΩΓΗ	2
1.2	ΜΕΘΟΔΟΙ ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗΣ ΥΛΙΚΩΝ ΚΑΙ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΩΝ ΕΠΙΛΟΓΗΣ	3
1.2.1	ΜΕΘΟΔΟΙ ΑΡΧΙΚΗΣ ΕΠΙΛΟΓΗΣ ΥΛΙΚΩΝ	4
1.2.1.1	ΚΟΣΤΟΣ ΑΝΑ ΜΟΝΑΔΑ ΙΔΙΟΤΗΤΑΣ	5
1.2.1.2	ΜΕΘΟΔΟΣ ΤΩΝ ΔΙΑΓΡΑΜΜΑΤΩΝ	6
1.2.1.3	ΜΕΘΟΔΟΣ ΤΟΥ ΕΡΩΤΗΜΑΤΟΛΟΓΙΟΥ	6
1.2.1.4	ΜΕΘΟΔΟΙ ΤΕΧΝΗΤΗΣ ΝΟΗΜΟΣΥΝΗΣ	7
1.2.1.4.1	ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ ΕΠΙΛΟΓΗΣ ΥΛΙΚΩΝ ΥΠΟΒΟΗΘΟΥΜΕΝΑ ΑΠΟ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΟ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΗ	7
1.2.1.4.2	ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ ΒΑΣΙΣΜΕΝΑ ΣΤΗ ΓΝΩΣΗ	8
1.2.1.4.3	ΝΕΥΡΩΝΙΚΑ ΔΙΚΤΥΑ	9
1.2.2	ΜΕΘΟΔΟΙ ΣΥΓΚΡΙΣΗΣ ΚΑΙ ΕΠΙΛΟΓΗΣ ΥΛΙΚΩΝ	9
1.2.2.1	ΥΠΟΒΟΗΘΗΣΗ ΛΗΨΗΣ ΑΠΟΦΑΣΕΩΝ ΜΕΣΩ ΠΟΛΛΑΠΛΩΝ ΣΤΟΧΩΝ	10
1.2.2.1.1	ΜΕΘΟΔΟΣ T.O.P.S.I.S.	11
1.2.2.1.2	ΜΕΘΟΔΟΣ E.L.E.C.T.R.E.	11
1.2.2.1.3	ΑΝΑΛΥΤΙΚΗ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΑ ΙΕΡΑΡΧΙΑΣ	12
1.2.2.1.4	ΜΕΘΟΔΟΣ ΟΡΙΟΘΕΤΗΣΗΣ ΙΔΙΟΤΗΤΩΝ	12
1.2.2.2	ΜΕΘΟΔΟΙ ΠΟΛΥΚΡΙΤΗΡΙΑΚΗΣ ΛΗΨΗΣ ΑΠΟΦΑΣΕΩΝ ΜΕΣΩ ΑΣΑΦΟΥΣ ΛΟΓΙΚΗΣ	13
1.2.2.2.1	ΓΕΝΕΤΙΚΟΙ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΙ ΚΑΙ ΝΕΥΡΩΝΙΚΑ ΔΙΚΤΥΑ	13
1.2.3	ΜΕΘΟΔΟΙ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗΣ	14
1.2.3.1	ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΜΕΣΩ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΩΝ	14
1.2.3.2	ΓΕΝΕΤΙΚΟΙ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΙ	14
1.3	ΑΝΑΛΥΣΗ ΠΑΡΟΥΣΑΣ ΕΡΓΑΣΙΑΣ	14
1.4	ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ 1ΟΥ ΚΕΦΑΛΑΙΟΥ	16
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2: ΒΙΩΣΙΜΗ ΑΝΑΠΤΥΞΗ		
2.1	ΕΙΣΑΓΩΓΗ	19
2.2	ΒΙΩΣΙΜΗ ΑΝΑΠΤΥΞΗ	20
2.3	ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΙΚΗΣ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ	21
2.4	ΠΑΡΑΓΩΓΗ ΠΡΟΪΟΝΤΩΝ	22
2.4.1	ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΙΚΗ ΣΗΜΑΝΣΗ	23
2.4.2	ΕΠΙΛΟΓΗ ΥΛΙΚΩΝ	23
2.5	ΑΝΑΛΥΣΗ ΚΥΚΛΟΥ ΖΩΗΣ	25
2.6	ΟΙΚΟ-ΑΠΟΔΟΤΙΚΟΤΗΤΑ ΚΑΙ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΙΚΑ ΦΙΛΙΚΟΣ ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ	26
2.7	ΝΟΜΟΘΕΣΙΑ ΚΑΙ ΜΕΤΡΑ ΠΡΟΛΗΨΗΣ	26
2.8	ΑΝΑΚΥΚΛΩΣΗ	27
2.9	ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ 2ΟΥ ΚΕΦΑΛΑΙΟΥ	28
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3: ΠΟΛΥΜΕΡΗ		
3.1	ΕΙΣΑΓΩΓΗ	30

3.2	ΜΟΡΙΑ ΥΔΡΟΓΟΝΑΝΘΡΑΚΩΝ – ΟΡΓΑΝΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ	30
3.3	ΜΟΡΙΑ ΠΟΛΥΜΕΡΩΝ	32
3.4	Η ΧΗΜΕΙΑ ΤΩΝ ΠΟΛΥΜΕΡΙΚΩΝ ΜΟΡΙΩΝ	33
3.5	ΜΟΡΙΑΚΟ ΣΧΗΜΑ	35
3.6	ΜΟΡΙΑΚΗ ΔΟΜΗ	36
3.7	ΔΙΑΜΟΡΦΩΣΕΙΣ ΤΩΝ ΜΟΡΙΩΝ	38
3.7.1	ΣΤΕΡΕΟΪΣΟΜΕΡΕΙΑ	39
3.7.2	ΓΕΩΜΕΤΡΙΚΗ ΪΣΟΜΕΡΕΙΑ	40
3.8	ΣΥΜΠΟΛΥΜΕΡΗ	41
3.9	ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ 3ΟΥ ΚΕΦΑΛΑΙΟΥ	42
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4: ΜΗΧΑΝΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ		
4.1	ΕΙΣΑΓΩΓΗ	44
4.2	ΟΙ ΕΝΝΟΙΕΣ ΤΗΣ ΤΑΣΗΣ ΚΑΙ ΤΗΣ ΠΑΡΑΜΟΡΦΩΣΗΣ	44
4.2.1	ΔΟΚΙΜΗ ΕΦΕΛΚΥΣΜΟΥ	45
4.2.2	ΔΟΚΙΜΗ ΘΛΙΨΕΩΣ	46
4.2.3	ΔΟΚΙΜΕΣ ΔΙΑΤΜΗΣΗΣ ΚΑΙ ΣΤΡΕΨΗΣ	47
4.3	ΕΛΑΣΤΙΚΗ ΠΑΡΑΜΟΡΦΩΣΗ ΚΑΙ ΣΥΜΠΕΡΙΦΟΡΑ ΤΑΣΗΣ – ΠΑΡΑΜΟΡΦΩΣΗΣ	47
4.4	ΠΛΑΣΤΙΚΗ ΠΑΡΑΜΟΡΦΩΣΗ	48
4.5	ΕΦΕΛΚΥΣΤΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ	49
4.5.1	ΔΙΑΡΡΟΗ ΚΑΙ ΤΑΣΗ ΔΙΑΡΡΟΗΣ	49
4.5.2	ΑΝΤΟΧΗ ΣΕ ΕΦΕΛΚΥΣΜΟΥ	49
4.6	ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΣΥΜΠΙΕΣΗΣ	50
4.7	ΚΟΠΩΣΗ	50
4.7.1	ΚΑΜΠΥΛΗ S-N	51
4.8	ΜΗΧΑΝΙΚΑ ΚΑΙ ΘΕΡΜΟΜΗΧΑΝΙΚΑ ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΑ ΠΟΛΥΜΕΡΩΝ	52
4.8.1	ΜΑΚΡΟΣΚΟΠΙΚΗ ΠΑΡΑΜΟΡΦΩΣΗ	55
4.9	ΠΑΡΑΓΟΝΤΕΣ ΠΟΥ ΕΠΗΡΕΑΖΟΥΝ ΤΙΣ ΜΗΧΑΝΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΤΩΝ ΠΟΛΥΜΕΡΩΝ	56
4.9.1	ΜΟΡΙΑΚΟ ΒΑΡΟΣ	56
4.10	ΘΕΡΜΟΠΛΑΣΤΙΚΑ ΚΑΙ ΘΕΡΜΟΣΚΛΗΡΑΙΝΟΜΕΝΑ ΠΟΛΥΜΕΡΗ	57
4.11	ΑΝΑΚΥΚΛΩΣΗ ΠΟΛΥΜΕΡΩΝ	58
4.11.1	ΠΛΑΣΤΙΚΑ ΑΠΟΡΡΙΜΜΑΤΑ	58
4.11.2	ΣΤΟΧΟΙ ΣΤΗ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗ ΤΩΝ ΠΛΑΣΤΙΚΩΝ ΑΠΟΡΡΙΜΜΑΤΩΝ	58
4.11.3	ΣΥΛΛΟΓΗ ΚΑΙ ΔΙΑΧΩΡΙΣΜΟΣ ΠΛΑΣΤΙΚΩΝ ΑΠΟΡΡΙΜΜΑΤΩΝ	58
4.12	ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ 4ΟΥ ΚΕΦΑΛΑΙΟΥ	59
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5: ΤΕΧΝΙΚΕΣ ΠΑΛΙΝΔΡΟΜΗΣΗΣ ΚΑΙ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗΣ		
5.1	ΕΙΣΑΓΩΓΗ	61
5.2	ΠΑΛΙΝΔΡΟΜΗΣΗ	61
5.3	ΤΕΧΝΗΤΑ ΝΕΥΡΩΝΙΚΑ ΔΙΚΤΥΑ	62
5.3.1	ΕΙΣΑΓΩΓΗ	62
5.3.2	ΒΙΟΛΟΓΙΚΑ ΝΕΥΡΩΝΙΚΑ ΔΙΚΤΥΑ	64
5.3.3	ΤΕΧΝΗΤΑ ΝΕΥΡΩΝΙΚΑ ΔΙΚΤΥΑ ΓΕΝΙΚΕΥΜΕΝΗΣ ΠΑΛΙΝΔΡΟΜΗΣΗΣ	67
5.3.4	ΠΛΕΟΝΕΚΤΗΜΑΤΑ ΚΑΙ ΜΕΙΟΝΕΚΤΗΜΑΤΑ ΧΡΗΣΗΣ GRANNS	68
5.4	ΓΕΝΕΤΙΚΟΙ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΙ	69
5.4.1	ΕΙΣΑΓΩΓΗ	69
5.4.2	ΟΡΟΛΟΓΙΑ	71
5.4.3	ΠΛΕΟΝΕΚΤΗΜΑΤΑ ΓΕΝΕΤΙΚΩΝ ΑΛΓΟΡΙΘΜΩΝ ΚΑΙ ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΜΕ ΠΑΡΑΔΟΣΙΑΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΥΣ	72
5.4.4	ΣΤΑΔΙΑ ΕΦΑΡΜΟΓΗΣ ΓΕΝΕΤΙΚΩΝ ΑΛΓΟΡΙΘΜΩΝ	74
5.4.5	ΠΑΡΑΤΗΡΗΣΕΙΣ	78
5.4.6	ΜΕΙΟΝΕΚΤΗΜΑΤΑ	79

5.5	ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ 5ΟΥ ΚΕΦΑΛΑΙΟΥ	80
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6: ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΕΦΑΡΜΟΓΗΣ ΤΕΧΝΙΚΩΝ ΠΑΛΙΝΔΡΟΜΗΣΗΣ		
6.1	ΣΚΟΠΟΣ ΤΗΣ ΕΡΓΑΣΙΑΣ	82
6.2	ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΜΕΘΟΔΟΥ	82
6.3	ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΤΗΣ ΜΕΘΟΔΟΥ	83
6.3.1	ΒΗΜΑ 1Ο: ΚΑΘΟΡΙΣΜΟΣ ΕΦΑΡΜΟΓΗΣ	83
6.3.2	ΒΗΜΑ 2Ο: ΕΠΙΛΟΓΗ ΑΡΧΙΚΟΥ ΠΛΗΘΥΣΜΟΥ ΥΛΙΚΩΝ	84
6.3.3	ΒΗΜΑ 3Ο: ΟΡΙΣΜΟΣ ΙΔΙΟΤΗΤΩΝ	84
6.3.4	ΒΗΜΑ 4Ο: ΧΡΗΣΗ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΩΝ ΤΕΧΝΙΚΩΝ ΒΑΘΜΟΛΟΓΗΣΗΣ	88
6.3.4.1	ΘΕΩΡΗΤΙΚΗ ΒΑΘΜΟΛΟΓΗΣΗ	88
6.3.4.2	ΒΑΘΜΟΛΟΓΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΩΝ ΤΕΧΝΗΤΩΝ ΝΕΥΡΩΝΙΚΩΝ ΔΙΚΤΥΩΝ ΓΕΝΙΚΕΥΜΕΝΗΣ ΠΑΛΙΝΔΡΟΜΗΣΗΣ	90
6.3.4.3	ΒΑΘΜΟΛΟΓΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΠΟΛΥΩΝΥΜΙΚΗΣ ΠΑΛΙΝΔΡΟΜΗΣΗΣ	96
6.3.4.4	ΤΕΛΙΚΗ ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΤΕΧΝΙΚΩΝ	101
6.3.5	ΒΗΜΑ 5Ο: ΑΝΑΛΥΣΗ ΕΥΑΙΣΘΗΣΙΑΣ	103
6.3.6	ΒΗΜΑ 6Ο: ΕΥΡΕΣΗ ΒΕΛΤΙΣΤΟΥ ΥΛΙΚΟΥ	104
6.3.6.1	ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΓΕΝΕΤΙΚΩΝ ΑΛΓΟΡΙΘΜΩΝ ΣΤΗΝ ΠΑΛΙΝΔΡΟΜΗΣΗ ΜΕΣΩ ΠΟΛΥΩΝΥΜΩΝ	108
6.3.6.2	ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΓΕΝΕΤΙΚΩΝ ΑΛΓΟΡΙΘΜΩΝ ΣΤΗΝ ΠΑΛΙΝΔΡΟΜΗΣΗ ΜΕΣΩ ΝΕΥΡΩΝΙΚΩΝ ΔΙΚΤΥΩΝ	110
6.3.7	ΠΟΛΥΚΡΙΤΗΡΙΑΚΗ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ (MULTIOBJECTIVE OPTIMIZATION)	110
6.4	ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ 6ΟΥ ΚΕΦΑΛΑΙΟΥ	112
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 7: ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ – ΣΥΖΗΤΗΣΗ – ΠΡΟΤΑΣΕΙΣ		
7.1	ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ- ΣΥΖΗΤΗΣΗ-ΠΡΟΤΑΣΕΙΣ	114
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑΤΑ		
	ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ 1	118

ΕΥΡΕΤΗΡΙΟ ΣΧΗΜΑΤΩΝ

ΑΡΙΘΜΟΣ	ΤΙΤΛΟΣ	ΣΕΛΙΔΑ
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1: ΕΙΣΑΓΩΓΗ		
1.1	ΚΑΤΗΓΟΡΙΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕΘΟΔΩΝ ΑΡΧΙΚΗΣ ΔΙΑΛΟΓΗΣ ΥΛΙΚΩΝ	5
1.2	ΚΑΤΗΓΟΡΙΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕΘΟΔΩΝ ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗΣ ΚΑΙ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗΣ ΤΗΣ ΕΠΙΛΟΓΗΣ ΥΛΙΚΩΝ	10
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2: ΒΙΩΣΙΜΗ ΑΝΑΠΤΥΞΗ		
2.1	ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑΤΑ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΙΚΗΣ ΣΗΜΑΝΣΗΣ	23
2.2	ΑΛΥΣΙΔΩΤΟΣ ΚΥΚΛΟΣ ΒΙΩΣΙΜΟΤΗΤΑΣ	24
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3: ΠΟΛΥΜΕΡΗ		
3.1	ΟΜΟΙΟΠΟΛΙΚΟΙ ΔΕΣΜΟΙ ΣΤΟ ΜΟΡΙΟ ΤΟΥ ΜΕΘΑΝΙΟΥ	30
3.2	ΔΕΣΜΟΙ ΜΟΡΙΟΥ ΑΙΘΥΛΕΝΙΟΥ	31
3.3	ΤΡΙΠΛΟΣ ΔΕΣΜΟΣ ΣΤΟ ΑΚΕΤΥΛΕΝΙΟ	31
3.4	ΚΑΝΟΝΙΚΟ ΒΟΥΤΑΝΙΟ	31
3.5	ΙΣΟΒΟΥΤΑΝΙΟ	32
3.6	ΑΝΑΠΑΡΑΣΤΑΣΗ ΠΟΛΥΜΕΡΙΚΗΣ ΑΛΥΣΙΔΑΣ	32
3.7	(Α) ΜΟΡΙΟ ΑΙΘΥΛΕΝΙΟΥ, (Β) ΑΝΤΙΔΡΑΣΗ ΜΕΤΑΞΥ ΕΝΟΣ ΕΚΚΙΝΗΤΗ ΚΑΙ ΤΟΥ ΑΙΘΥΛΕΝΙΚΟΥ ΜΟΝΟΜΕΡΟΥΣ, (Γ) ΣΥΝΔΕΣΗ ΜΟΝΟΜΕΡΟΥΣ ΜΕ ΤΗΝ ΑΛΥΣΙΔΑ	33
3.8	ΜΟΡΙΟ ΠΟΛΥΑΙΘΥΛΕΝΙΟΥ (PE)	33
3.9	ΤΡΙΣΔΙΑΣΤΑΤΟ ΜΟΝΤΕΛΟ ΠΟΛΥΑΙΘΥΛΕΝΙΟΥ (PE)	34
3.10	ΠΟΛΥΤΕΤΡΑΦΘΟΡΟΑΙΘΥΛΕΝΙΟ Η ΤΕΦΛΟΝ (PTFE)	34
3.11	ΠΟΛΥΒΙΝΥΛΟΧΛΩΡΙΔΙΟ (PVC)	34
3.13	ΠΟΛΥΠΡΟΠΥΛΕΝΙΟ (PP)	34
3.14	ΠΕΡΙΣΤΡΟΦΗ ΠΟΛΥΜΕΡΙΚΩΝ ΑΛΥΣΙΔΩΝ ΣΤΙΣ ΤΡΕΙΣ ΔΙΑΣΤΑΣΕΙΣ	35
3.15	ΔΙΑΜΟΡΦΩΣΗ ΠΟΛΥΜΕΡΙΚΗΣ ΑΛΥΣΙΔΑΣ ΚΑΙ ΑΠΟΣΤΑΣΗ ΜΕΤΑΞΥ ΤΩΝ ΑΚΡΩΝ ΤΗΣ	36
3.16	ΤΥΠΟΙ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΟΜΗΣ ΠΟΛΥΜΕΡΩΝ	38
3.17	ΠΛΕΥΡΙΚΗ ΟΜΑΔΑ (R) ΣΕ ΜΟΝΟΜΕΡΕΣ	38
3.18	ΣΥΝΔΕΣΗ ΟΜΑΔΩΝ ΜΟΝΟΜΕΡΩΝ ΜΕ ΠΛΕΥΡΙΚΕΣ ΟΜΑΔΕΣ R ΜΕ ΕΝΑΛΛΑΣΣΟΜΕΝΑ ΑΤΟΜΑ	38
3.19	ΣΥΝΔΕΣΗ ΟΜΑΔΩΝ ΜΟΝΟΜΕΡΩΝ ΜΕ ΠΛΕΥΡΙΚΕΣ ΟΜΑΔΕΣ R ΜΕ ΓΕΙΤΟΝΙΚΑ ΑΤΟΜΑ	39
3.20	ΙΣΟΤΑΚΤΙΚΗ ΔΙΑΜΟΡΦΩΣΗ ΠΟΛΥΜΕΡΙΚΗΣ ΑΛΥΣΙΔΑΣ	39
3.21	ΣΥΝΔΙΟΤΑΚΤΙΚΗ ΔΙΑΜΟΡΦΩΣΗ ΠΟΛΥΜΕΡΙΚΗΣ ΑΛΥΣΙΔΑΣ	39
3.22	ΑΤΑΚΤΙΚΗ ΔΙΑΜΟΡΦΩΣΗ ΠΟΛΥΜΕΡΙΚΗΣ ΑΛΥΣΙΔΑΣ	40
3.23	CIS-ΙΣΟΠΡΟΠΕΝΙΟ	40
3.24	TRANS-ΙΣΟΠΡΟΠΕΝΙΟ	41
3.25	ΤΥΠΟΙ ΣΥΜΠΟΛΥΜΕΡΩΝ	41
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4: ΜΗΧΑΝΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ		
4.1	ΒΑΣΙΚΟΙ ΤΡΟΠΟΙ ΕΦΑΡΜΟΓΗΣ ΦΟΡΤΙΟΥ	45
4.2	ΜΗΧΑΝΗ ΔΟΚΙΜΗΣ ΕΦΕΛΚΥΣΜΟΥ ΚΑΙ ΘΛΙΨΗΣ	45
4.3	ΔΙΑΓΡΑΜΜΑ ΤΑΣΗΣ – ΠΑΡΑΜΟΡΦΩΣΗΣ	48
4.4	ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΑ ΣΗΜΕΙΑ ΔΙΑΓΡΑΜΜΑΤΟΣ ΤΑΣΗΣ – ΠΑΡΑΜΟΡΦΩΣΗΣ	50
4.5	ΔΙΑΤΑΞΗ ΓΙΑ ΔΟΚΙΜΕΣ ΚΟΠΩΣΗΣ ΥΛΙΚΩΝ	51
4.6	ΤΥΠΙΚΕΣ ΚΑΜΠΥΛΕΣ S-N (Α) ΕΝΟΣ ΥΛΙΚΟΥ ΠΟΥ ΕΜΦΑΝΙΖΕΙ ΟΡΙΟ ΚΟΠΩΣΗΣ ΚΑΙ (Β) ΕΝΟΣ ΥΛΙΚΟΥ ΠΟΥ ΔΕΝ ΕΜΦΑΝΙΖΕΙ ΟΡΙΟ ΚΟΠΩΣΗΣ	52
4.7	ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΑ ΕΙΔΗ ΣΥΜΠΕΡΙΦΟΡΑΣ ΤΑΣΗΣ – ΠΑΡΑΜΟΡΦΩΣΗΣ	53
4.8	ΑΝΤΟΧΗ ΔΙΑΡΡΟΗΣ ΚΑΙ ΑΝΤΟΧΗ ΣΕ ΕΦΕΛΚΥΣΜΟ	54
4.9	ΕΠΙΔΡΑΣΗ ΤΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ ΣΤΑ ΜΗΧΑΝΙΚΑ ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΑ	55
4.10	ΚΑΜΠΥΛΗ ΤΑΣΗΣ – ΠΑΡΑΜΟΡΦΩΣΗΣ ΓΙΑ ΕΝΑ ΑΡΧΙΚΑ ΑΠΡΟΣΑΝΑΤΟΛΙΣΤΟ ΗΜΙΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΟ ΠΟΛΥΜΕΡΕΣ	56

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5: ΤΕΧΝΙΚΕΣ ΠΑΛΙΝΔΡΟΜΗΣΗΣ ΚΑΙ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗΣ		
5.1	ΣΧΕΣΕΙΣ ΜΕΤΑΞΥ ΜΕΤΑΒΛΗΤΩΝ X ΚΑΙ Y: 1) ΓΡΑΜΜΙΚΗ ΣΧΕΣΗ, 2) ΑΝΤΙΓΡΑΜΜΙΚΗ ΣΧΕΣΗ, 3) ΜΗ ΓΡΑΜΜΙΚΗ ΣΧΕΣΗ, 4) ΚΑΜΙΑ ΣΧΕΣΗ 5) ΦΟΡΜΑΛΙΣΤΙΚΗ ΣΧΕΣΗ ΜΗ ΟΥΣΙΑΣΤΙΚΗ	62
5.2	ΈΝΑΣ ΝΕΥΡΩΝΑΣ (Ο ΚΥΚΛΟΣ) ΜΕ ΠΟΛΛΕΣ ΕΙΣΟΔΟΥΣ (S1, S2, S3, ...), ΑΝΤΙΣΤΟΙΧΑ ΒΑΡΗ (W1, W2, W3,...) ΚΑΙ ΜΙΑ ΕΞΟΔΟ	63
5.3	ΧΑΡΤΗΣ ΤΟΥ PENFIELD	65
5.4	ΣΧΗΜΑΤΙΚΗ ΑΠΕΙΚΟΝΙΣΗ ΕΝΟΣ ΤΥΠΙΚΟΥ ΝΕΥΡΩΝΑ	66
5.5	Η ΣΥΝΑΡΤΗΣΗ ΚΑΤΩΦΛΙΟΥ HEAVISIDE	67
5.6	ΒΑΣΙΚΟ GRANN ΤΕΣΣΑΡΩΝ ΕΠΙΠΕΔΩΝ (ΕΙΣΟΔΟΥ, ΚΡΥΦΟ, ΑΘΡΟΙΣΜΑΤΟΣ ΚΑΙ ΕΞΟΔΟΥ)	68
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6: ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΕΦΑΡΜΟΓΗΣ ΤΕΧΝΙΚΩΝ ΠΑΛΙΝΔΡΟΜΗΣΗΣ		
6.1	1-9-2-1 GRANN (YOUNG'S MODULUS – CO2 FOOTPRINT PRIMARY PRODUCTION)	91
6.2	1-9-2-1 GRANN (YOUNG'S MODULUS – WATER USAGE)	91
6.3	1-9-2-1 GRANN (YOUNG'S MODULUS – POLYMER MOLDING CO2 FOOTPRINT)	92
6.4	1-9-2-1 GRANN (YOUNG'S MODULUS – CO2 FOOTPRINT RECYCLING)	92
6.5	5-9-2-1 GRANN (Όλες οι εισοδοί– CO2 FOOTPRINT PRIMARY PRODUCTION, $\Sigma=0,15$)	93
6.6	5-9-2-1 GRANN (Όλες οι εισοδοί– WATER USAGE, $\Sigma=0,15$)	93
6.7	5-9-2-1 GRANN (Όλες οι εισοδοί– POLYMER MOLDING CO2 FOOTPRINT, $\Sigma=0,15$)	94
6.8	5-9-2-1 GRANN (Όλες οι εισοδοί– CO2 FOOTPRINT RECYCLING, $\Sigma=0,15$)	94
6.9	5-9-2-1 GRANN (Όλες οι εισοδοί– Όλες οι εξοδοί, $\Sigma=0,15$)	95
6.10	ΠΟΛΥΩΝΥΜΟ 5ΟΥ ΒΑΘΜΟΥ (Όλες οι εισοδοί– CO2 FOOTPRINT PRIMARY PRODUCTION)	98
6.11	ΠΟΛΥΩΝΥΜΟ 4ΟΥ ΒΑΘΜΟΥ (Όλες οι εισοδοί– WATER USAGE)	99
6.12	ΠΟΛΥΩΝΥΜΟ 3ΟΥ ΒΑΘΜΟΥ (Όλες οι εισοδοί– POLYMER MOLDING CO2 FOOTPRINT)	99
6.13	ΠΟΛΥΩΝΥΜΟ 4ΟΥ ΒΑΘΜΟΥ (Όλες οι εισοδοί– CO2 FOOTPRINT RECYCLING)	100
6.14	ΓΡΑΜΜΙΚΟΣ ΣΥΝΔΥΑΣΜΟΣ ΕΠΙΜΕΡΟΥΣ ΠΟΛΥΩΝΥΜΩΝ (Όλες οι εισοδοί – Όλες οι εξοδοί)	100
6.15	ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΤΕΛΙΚΗΣ ΚΑΤΑΤΑΞΗΣ ΥΛΙΚΩΝ ΓΙΑ ΚΑΘΕ ΜΕΘΟΔΟ	102
6.16	ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ ΣΦΑΛΜΑΤΟΣ ΚΑΤΑΤΑΞΗΣ ΜΕΘΟΔΩΝ ΠΑΛΙΝΔΡΟΜΗΣΗΣ ΚΑΙ ΤΥΠΙΚΗ ΑΠΟΚΛΙΣΗ	103
6.17	ΑΝΑΛΥΣΗ ΕΥΑΙΣΘΗΣΙΑΣ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ ΤΗΣ ΜΕΘΟΔΟΥ GRANN	104
6.18	ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝ ΕΡΓΑΣΙΑΣ ΠΑΚΕΤΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΩΝ GENETIC ALGORITHM AND DIRECT SEARCH	106
6.19	ΒΗΜΑΤΑ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΑΣ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗΣ ΜΕΣΩ ΓΕΝΕΤΙΚΩΝ ΑΛΓΟΡΙΘΜΩΝ	108
6.20	ΕΠΙΛΟΓΗ ΜΕΣΩ ΕΞΑΝΑΓΚΑΣΜΕΝΗΣ ΡΟΥΛΕΤΑΣ	109
6.21	ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΕΦΑΡΜΟΓΗΣ ΓΕΝΕΤΙΚΩΝ ΑΛΓΟΡΙΘΜΩΝ ΣΤΗΝ ΠΕΡΙΠΤΩΣΗ ΤΗΣ ΠΑΛΙΝΔΡΟΜΗΣΗΣ ΜΕΣΩ ΠΟΛΥΩΝΥΜΙΚΗΣ ΠΑΛΙΝΔΡΟΜΗΣΗΣ	109
6.22	ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΕΦΑΡΜΟΓΗΣ ΓΕΝΕΤΙΚΩΝ ΑΛΓΟΡΙΘΜΩΝ ΣΤΗΝ ΠΕΡΙΠΤΩΣΗ ΤΗΣ ΠΑΛΙΝΔΡΟΜΗΣΗΣ ΜΕΣΩ ΝΕΥΡΩΝΙΚΩΝ ΔΙΚΤΥΩΝ	110

ΕΥΡΕΤΗΡΙΟ ΠΙΝΑΚΩΝ

ΑΡΙΘΜΟΣ	ΤΙΤΛΟΣ	ΣΕΛΙΔΑ
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3: ΠΟΛΥΜΕΡΗ		
3.1	ΔΟΜΕΣ ΟΜΑΔΩΝ ΜΟΝΟΜΕΡΩΝ ΣΥΝΗΘΩΝ ΠΟΛΥΜΕΡΩΝ	35
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4: ΜΗΧΑΝΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ		
4.1	ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΟΙ ΚΩΔΙΚΟΙ ΑΝΑΓΝΩΡΙΣΗΣ ΠΟΛΥΜΕΡΙΚΩΝ ΥΛΙΚΩΝ	59
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6: ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΕΦΑΡΜΟΓΗΣ ΤΕΧΝΙΚΩΝ ΠΑΛΙΝΔΡΟΜΗΣΗΣ		
6.1	ΧΡΗΣΙΜΟΠΟΙΟΥΜΕΝΑ ΥΛΙΚΑ	84
6.2	ΤΕΛΙΚΑ ΧΡΗΣΙΜΟΠΟΙΟΥΜΕΝΕΣ ΕΙΣΟΔΟΙ ΚΑΙ ΕΞΟΔΟΙ	86
6.3	ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΕΣ ΣΥΣΧΕΤΙΣΗΣ ΜΕΤΑΞΥ ΕΙΣΟΔΩΝ ΚΑΙ ΕΞΟΔΩΝ	87
6.4	ΑΝΑΛΥΤΙΚΑ ΔΕΔΟΜΕΝΑ ΕΙΣΟΔΟΥ ΚΑΙ ΕΞΟΔΟΥ ΓΙΑ ΤΑ ΔΕΚΑ ΤΕΛΙΚΩΣ ΕΠΙΛΕΓΟΜΕΝΑ ΥΛΙΚΑ	88
6.5	ΘΕΩΡΗΤΙΚΗ ΒΑΘΜΟΛΟΓΗΣΗ ΠΟΛΥΜΕΡΙΚΩΝ ΥΛΙΚΩΝ	89
6.6	ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΘΕΩΡΗΤΙΚΗΣ ΒΑΘΜΟΛΟΓΗΣΗΣ ΚΑΙ ΒΑΘΜΟΛΟΓΗΣΗΣ ΜΕΣΩ GRANNs	95
6.7	ΒΕΛΤΙΣΤΟΣ ΣΥΝΔΥΑΣΜΟΣ ΒΑΘΜΩΝ ΠΟΛΥΩΝΥΜΩΝ	98
6.8	ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΘΕΩΡΗΤΙΚΗΣ ΒΑΘΜΟΛΟΓΗΣΗΣ ΚΑΙ ΒΑΘΜΟΛΟΓΗΣΗΣ ΜΕΣΩ ΠΟΛΥΩΝΥΜΙΚΗΣ ΠΑΛΙΝΔΡΟΜΗΣΗΣ	101
6.9	ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΒΑΘΜΟΛΟΓΗΣΗΣ ΤΕΧΝΙΚΩΝ ΠΑΛΙΝΔΡΟΜΗΣΗΣ	101
6.10	ΑΡΙΘΜΟΣ ΕΠΑΝΑΛΗΨΕΩΝ ΕΠΑΝΑΛΗΠΤΙΚΟΥ ΒΡΟΓΧΟΥ ΣΥΝΑΡΤΗΣΕΙ ΤΗΣ ΑΚΡΙΒΕΙΑΣ ΤΩΝ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ	105
6.11	ΕΠΙ ΤΟΙΣ ΕΚΑΤΟ ΜΕΤΑΒΟΛΗ ΤΩΝ ΚΑΤΗΓΟΡΙΩΝ ΤΩΝ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΙΚΩΝ ΕΠΙΠΤΩΣΕΩΝ ΓΙΑ ΤΗ ΒΕΛΤΙΩΣΗ ΤΟΥ ΚΑΤΑΛΛΗΛΟΤΕΡΟΥ (ΜΕΣΩ GRANNs) ΥΛΙΚΟΥ	

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΠΕΡΔΙΑ

Στους γονείς μου

ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

Αναγνώριση προσφοράς και ευχαριστίες εκφράζονται προς όλους όσους συνέβαλαν, άμεσα ή έμμεσα στη πραγματοποίηση της εργασίας αυτής, και ειδικότερα:

Προς τους επιβλέποντες καθηγητές μου Δρ. Τατιάνα Ταμπουρατζή και Δρ. Δημήτριο Καραλέκα, καθηγητές του Τμήματος Βιομηχανικής Διοίκησης και Τεχνολογίας του Πανεπιστημίου Πειραιά, για την ανάθεση του θέματος, τη συνεχή καθοδήγηση και τη συμπαράσταση που μου προσέφεραν καθ' όλη τη διάρκεια της εκτέλεσης της εργασίας αυτής. Η αгаσθή συνεργασία που είχα μαζί τους από την αρχή μέχρι και το τέλος και η διάθεση τους να μοιραστούν μαζί μου γνώσεις και πληροφορίες έκαναν εφικτή την επιτυχή υλοποίηση της παρούσας διπλωματικής εργασίας.

Εκφράζω τις ειλικρινείς μου ευχαριστίες προς τον διδάκτορα του Τμήματος Βιομηχανικής Διοίκησης και Τεχνολογίας του Πανεπιστημίου Πειραιά Βασίλειο Κανελλίδη για την υπομονή του και τη συμβολή του στην ολοκλήρωση της εργασίας αυτής.

Ιδιαίτερες ευχαριστίες αποδίδονται στον Δρ. Φραγκίσκο Μπατζιά καθώς και στους Δρ. Δημήτριο Σιδηρά και Δρ. Χριστίνα Σιοντόρου για την ευκαιρία που μου έδωσαν να παρουσιάσω μέρος της εργασίας μου με τη μορφή poster στο συνέδριο «Eighth International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE 2010)» που πραγματοποιήθηκε στην Κω το διάστημα 03-08 Οκτωβρίου 2010. Επίσης θα ήθελα να ευχαριστήσω το Τμήμα Βιομηχανικής Διοίκησης και Τεχνολογίας του Πανεπιστημίου Πειραιά για την χρηματοδότηση της συμμετοχής μου στο προαναφερθέν συνέδριο καθώς την γραμματέα του τμήματος κα.Αδαμαντία Γαλάνη για την πάντα άμεση εξυπηρέτηση σε όλα τα διαδικαστικά θέματα που προέκυψαν τα δύο αυτά χρόνια των σπουδών μου στο τμήμα.

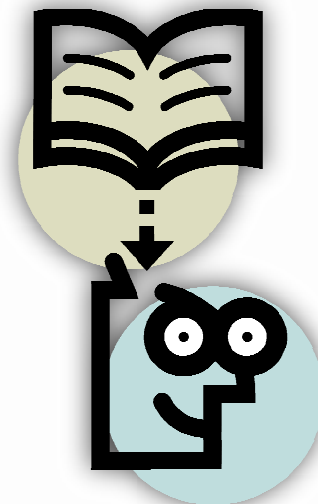
Τέλος, θέλω να εκφράσω την ευγνωμοσύνη μου στους «δικούς μου» ανθρώπους, την οικογένειά μου και τους φίλους μου, για την αμέριστη συμπαράσταση και κάθε είδους υποστήριξη που μου προσέφεραν χωρίς την οποία δε θα ήταν δυνατή η ολοκλήρωση της παρούσας διπλωματικής εργασίας.

Πειραιάς 2011

РАНЕЕЗНАМО ПЕРПАА

Περίληψη:

Στο κεφάλαιο αυτό επιχειρείται μία ανασκόπηση των εργασιών που έχουν πραγματοποιηθεί στον χώρο των μεθόδων αρχικής διαλογής και επιλογής υλικών. Στο τελευταίο μέρος του παρόντος κεφαλαίου γίνεται μία σύντομη περιγραφή της μεθόδου που αναπτύσσεται στην παρούσα εργασία και των προβλημάτων που καλείται να αντιμετωπίσει.



1.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Η επιλογή των υλικών αποτελεί μία εξαιρετικά σημαντική διαδικασία για ένα μεγάλο εύρος τομέων όπως είναι η παραγωγή προϊόντων, ο βιομηχανικός σχεδιασμός, ο κατασκευαστικός τομέας, η πυρηνική τεχνολογία, η επιστήμη μεμβρανών, η βίο-ιατρική κ.α.. Η επιλογή του καταλληλότερου υλικού για ένα συγκεκριμένο σκοπό είναι ένας κρίσιμος παράγοντας στον σχεδιασμό και στην ανάπτυξη των προϊόντων. Τα υλικά επηρεάζουν την λειτουργικότητα, τον κύκλο ζωής, το αγοραστικό κοινό, τη χρηστικότητα, τα χαρακτηριστικά, το κόστος και την περιβαλλοντική επίδοση των τελικών προϊόντων.

Ο μεγάλος αριθμός των διαθέσιμων υλικών με το πλήθος των χαρακτηριστικών του κάθε ενός, σε συνδυασμό με τις απαιτήσεις της εκάστοτε εφαρμογής, καθιστά την επιλογή του καταλληλότερου υλικού μια πολύ δύσκολη και χρονοβόρα διαδικασία. Στις περισσότερες περιπτώσεις η τελική επιλογή είναι ένας συμβιβασμός ο οποίος προσφέρει μεν τα περισσότερα πλεονεκτήματα αλλά χωρίς να εξαλείφει τα όποια μειονεκτήματα συνοδεύουν την επιλογή αυτή.

Οι κατασκευαστές προϊόντων και οι μηχανικοί προσπαθούν διαρκώς να αναπτύξουν νέα υλικά και βελτιωμένες διαδικασίες για την κατασκευή όσο το δυνατόν καλύτερων προϊόντων, διατηρώντας έτσι την ανταγωνιστικότητά τους και αυξάνοντας το περιθώριο κέρδους τους.

Τα τελευταία χρόνια, πολλά παραδοσιακά υλικά που έχουν χρησιμοποιηθεί εκτενώς σε διάφορες εφαρμογές αντικαθίστανται από «νέα υλικά», προκειμένου να ικανοποιηθούν οι απαιτήσεις για μείωση του βάρους και αύξηση της επίδοσης. Ο αριθμός και ο τύπος των διαθέσιμων υλικών αυξάνεται ραγδαία. Υπολογίζεται ότι υπάρχουν περισσότερα από 100.000 υλικά στο εμπόριο. Σ' αυτά περιλαμβάνονται τα μεταλλικά κράματα, τα μη μεταλλικά υλικά (πολυμερή, κεραμικά, ύαλοι), τα σύνθετα υλικά και οι ημιαγωγοί. Ο μεγάλος αυτός αριθμός υλικών, με τις σύνθετες σχέσεις μεταξύ των διαφορετικών παραμέτρων επιλογής, κάνει συχνά την επιλογή των υλικών για μία δεδομένη εφαρμογή ένα δύσκολο έργο.

Στην επιλογή των υλικών, οι σχεδιαστές και οι μηχανικοί πρέπει να λάβουν υπόψη έναν μεγάλο αριθμό παραγόντων οι οποίοι περιλαμβάνουν τις μηχανικές ιδιότητες (μέτρο ελαστικότητας, ελαστικότητα, κόπωση, σκληρότητα κ.α.), τις φυσικές ιδιότητες (κρυσταλλική δομή, πυκνότητα, σημείο τήξης, πορώδες κ.α.), τις μαγνητικές ιδιότητες, τις ηλεκτρικές ιδιότητες (διηλεκτρική σταθερά, αντίσταση κ.α.), τις θερμικές ιδιότητες και την ακτινοβολία (ειδική θερμότητα, αγωγιμότητα, ανακλαστικότητα κ.α.), τις επιφανειακές ιδιότητες (υφή, διάβρωση κ.α.), τις ιδιότητες μορφοποίησης, το κόστος του υλικού, την αξιοπιστία, την αντοχή, τη δυνατότητα ανακύκλωσης, την περιβαλλοντική επίδοση του υλικού, τα χαρακτηριστικά επίδοσης, τη διαθεσιμότητα, τις αγοραστικές συνήθειες των καταναλωτών, τις πολιτισμικές παραδόσεις κ.α..

Παλαιότερα η διαδικασία επιλογής ήταν προσανατολισμένη είτε στο σχεδιασμό του προϊόντος και την εμπορικότητα του, είτε στο κόστος του προϊόντος. Τα τελευταία χρόνια παρατηρείται μία στροφή προς τον περιβαλλοντικά φιλικό σχεδιασμό των προϊόντων. Γενικά, οι απαιτήσεις της επιλογής υλικών δεν περιλαμβάνουν μόνο τεχνικές και οικονομικές παραμέτρους, αλλά και περιβαλλοντικές. Έτσι γίνεται κατανοητό ότι η επιλογή των υλικών είναι μια πολυκριτηριακή διαδικασία.

Τα διαφορετικά αυτά κριτήρια όμως είναι συχνά αντικρουόμενα. Γενικά, σε εφαρμογές όπως είναι η επιλογή υλικών, η εμπειρία από τη χρήση κάποιου υλικού είναι ο συνηθέστερος τρόπος επιλογής παρά η επιλογή μέσω αριθμητικών και άλλων πολύπλοκων μεθόδων. Επειδή υπάρχουν πολυάριθμες επιλογές και πλήθος κριτηρίων που επηρεάζουν την επιλογή, απαιτείται συχνά μια προσέγγιση μεγαλύτερης ακρίβειας. Με τη συνεχή ανάπτυξη των υπολογιστών όλο και περισσότερες τεχνολογίες τεχνητής νοημοσύνης αναπτύσσονται και χρησιμοποιούνται. Το πρόβλημα της επιλογής υλικών έχει φτάσει σε μια ορισμένη ωριμότητα με τη βοήθεια του περίπλοκου λογισμικού των υπολογιστών.

1.2 ΜΕΘΟΔΟΙ ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗΣ ΥΛΙΚΩΝ ΚΑΙ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΩΝ ΕΠΙΛΟΓΗΣ [1]

Τα υλικά πολλές φορές επιλέγονται με τη μέθοδο της «δοκιμής και απόρριψης» (*trial and error*) ή απλά βάσει του ποιο υλικό χρησιμοποιείται συνήθως για την υπό εξέταση εφαρμογή. Μέχρι πρόσφατα η επιλογή των υλικών θεωρούνταν ένα μικρό μέρος της διαδικασίας σχεδιασμού του προϊόντος. Όπως έχει προαναφερθεί, η επιλογή υλικού για ένα συγκεκριμένο σκοπό είναι μια χρονοβόρα και πολυέξοδη διαδικασία.

Η επιλογή υλικών απαιτεί διεπιστημονική προσπάθεια και συχνά συνδυάζει διαφορετικά ερευνητικά πεδία όπως είναι η επιστήμη και η τεχνολογία των υλικών, η μηχανολογία, η χημεία, η φυσική κ.α.. Πολλές έρευνες έχουν διεξαχθεί για την ανάπτυξη μεθόδων επιλογής υλικών. Σε πολλές από αυτές προτείνονται στάδια ή βήματα ώστε να συστηματοποιηθεί η διαδικασία και η εφαρμογή των μεθόδων επιλογής υλικών. Ο Chiner [2] πρότεινε πέντε στάδια για την επιλογή των υλικών:

- 1) Ορισμός του σχεδιασμού του προϊόντος
- 2) Ανάλυση των ιδιοτήτων των υλικών
- 3) Έλεγχος των υποψήφιων υλικών
- 4) Αξιολόγηση των υλικών και λήψη βέλτιστης απόφασης
- 5) Δοκιμές επαλήθευσης.

Ο Farag [3] περιέγραψε τα διαφορετικά στάδια του σχεδιασμού του προϊόντος και των σχετικών με αυτόν διαδικασιών:

- 1) Αρχική εξέταση
- 2) Ανάπτυξη και τη σύγκριση των εναλλακτικών
- 3) Επιλογή της βέλτιστης λύσης.

Σύμφωνα με τον Ashby [4] η επίτευξη της συμφωνίας με τις απαιτήσεις του σχεδιασμού του προϊόντος προϋποθέτει τέσσερα θεμελιώδη βήματα:

- 1) Ανάπτυξη μίας μεθόδου για τη μεταφορά των σχεδιαστικών περιορισμών σε απαιτήσεις για τα υλικά και τις διαδικασίες παραγωγής
- 2) Διαλογή -από το σύνολο των υλικών- των υλικών που ικανοποιούν τις παραπάνω απαιτήσεις
- 3) Επιλογή των καταλληλότερων υλικών μέσω της βαθμολόγησης και της κατάταξης των προηγουμένως επιλεγμένων υλικών
- 4) Έρευνα για περισσότερες πληροφορίες για τις αντοχές, τις αδυναμίες, το ιστορικό χρήσης και τις πιθανές μελλοντικές εφαρμογές του υποσυνόλου των καταλληλότερων υλικών.

Επιπλέον, ο Van Kesteren [5] πρότεινε τις παρακάτω βασικές δραστηριότητες επιλογής υλικών:

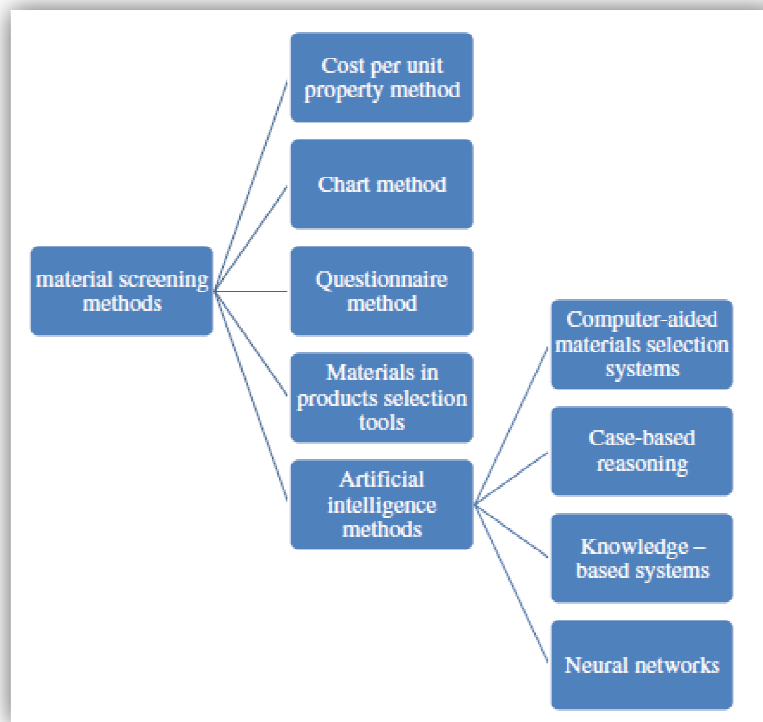
- 1) Διατύπωση των κριτηρίων επιλογής των υλικών
- 2) Παραγωγή ενός συνόλου υποψηφίων υλικών
- 3) Σύγκριση των υποψηφίων υλικών
- 4) Επιλογή του καταλληλότερου υλικού.

Όπως φαίνεται υπάρχουν ομοιότητες μεταξύ των βημάτων που εκφράζονται από τους Chiner, Farag, Ashby και Van Kesteren. Γενικά, ένα από τα ζητήματα που προκύπτει από αυτά τα συμπεράσματα είναι ότι, ανεξάρτητα από τη σχέση των σταδίων σχεδιασμού και της επιλογής διαδικασιών παραγωγής με την επιλογή των υλικών, η αρχική διαλογή και η αξιολόγηση είναι δύο ζωτικής σημασίας βήματα στην τελική επιλογή. Μία μεγάλη ποικιλία ποσοτικών και ποιοτικών μεθόδων επιλογής έχει αναπτυχθεί για την ανάλυση της διαδικασίας επιλογής του καταλληλότερου κάθε φορά υλικού. Στις επόμενες παραγράφους, παρουσιάζονται συνοπτικά κάποιες από τις πιο σημαντικές μεθόδους και προσεγγίσεις αρχικής διαλογής και αξιολόγησης υλικών. Οι τεχνικές των νευρωνικών δικτύων και των γενετικών αλγορίθμων αναπτύσσονται σε μεγαλύτερη έκταση στο κεφάλαιο 4. Ο αναγνώστης μπορεί να ανατρέξει στη βιβλιογραφία του κεφαλαίου για περισσότερες πληροφορίες πάνω στις μεθόδους διαλογής και αξιολόγησης υλικών.

1.2.1 ΜΕΘΟΔΟΙ ΑΡΧΙΚΗΣ ΔΙΑΛΟΓΗΣ ΥΛΙΚΩΝ

Αφότου έχουν προταθεί οι εναλλακτικές λύσεις (ένα σύνολο υλικών), τα υλικά που είναι σαφώς ακατάλληλα αποβάλλονται και η προσοχή επικεντρώνεται σε εκείνα που εκ πρώτης όψεως φαίνεται ότι

θα μπορούσαν να χρησιμοποιηθούν για την υπό εξέταση εφαρμογή. Στο παρακάτω σχήμα (σχήμα 1.1) παρουσιάζεται μία κατηγοριοποίηση των μεθόδων αρχικής διαλογής υλικών.



Σχήμα 1.1.: Κατηγοριοποίηση μεθόδων αρχικής διαλογής υλικών [1]

1.2.1.1 ΚΟΣΤΟΣ ΑΝΑ ΜΟΝΑΔΑ ΙΔΙΟΤΗΤΑΣ (COST PER UNIT PROPERTY METHOD)

Δεδομένου ότι το κόστος είναι ένα πολύ σημαντικό κριτήριο στην επιλογή των υλικών, είναι λογικό να εξετάζεται στην έναρξη της διαδικασίας επιλογής. Γενικά, τίθεται ένα όριο στο διαθέσιμο κεφάλαιο έτσι ώστε να εξαιρεθούν τα υλικά με πολύ υψηλό κόστος. Έτσι η τελική επιλογή προκύπτει μέσω ενός συμβιβασμού (*trade-off*) μεταξύ του κόστους και της επίδοσης. Το κόστος ανά μονάδα ιδιότητας είναι ένα κατάλληλο μέτρο για την αρχική διαλογή υλικών στις εφαρμογές όπου μια ιδιότητα ξεχωρίζει ως κρισιμότερη. Σε αυτήν την περίπτωση, είναι δυνατό να υπολογιστεί το κόστος ανά μονάδα της κρισιμότερης αυτής ιδιότητας για το σύνολο των υποψηφίων υλικών. Το κόστος ανά μονάδα αντοχής σε εφελκυσμό (π.χ. €/MPa) είναι συνήθως ένα από τα σημαντικότερα κριτήρια και τα υλικά με τη μικρότερη τιμή του παραπάνω λόγου είναι προτιμητέα. Εντούτοις ο κύριος περιορισμός αυτής της μεθόδου είναι ότι θεωρεί μόνο μια ιδιότητα ως κρισιμότερη και αγνοεί τις υπόλοιπες.

1.2.1.2 ΜΕΘΟΔΟΣ ΤΩΝ ΔΙΑΓΡΑΜΜΑΤΩΝ (CHART METHOD)

Η μέθοδος επιλογής υλικών που αναπτύχθηκε από τον Ashby [6] επικεντρώνεται στην μοντελοποίηση των δεδομένων του προβλήματος παρουσιάζοντας τα με τη μορφή διαγραμμάτων. Τα διαγράμματα επιλογής υλικών και διεργασιών του Ashby [6-8] είναι μια δοκιμασμένη και ελεγμένη μέθοδος επιλογής υλικών. Το πρόγραμμα *CES* (Cambridge Engineering Selector) του πανεπιστημίου του Cambridge είναι ένα ισχυρό εργαλείο επιλογής και ανάλυσης και βασίζεται στη μεθοδολογία επιλογής υλικών του Ashby. Στον τομέα του μηχανολογικού σχεδίου αυτά τα διαγράμματα είναι ένας απλός και γρήγορος τρόπος για τον έλεγχο της καταλληλότητας κάποιου υλικού.

Η μέθοδος των διαγραμμάτων επεκτάθηκε από τον Holloway [9] ώστε να λαμβάνονται υπόψη και περιβαλλοντικοί παράγοντες. Το όφελος αυτής της προσέγγισης είναι ότι είναι συστηματική και αμερόληπτη στην εστίασή της στους στόχους της κατασκευής των προϊόντων. Η μέθοδος των διαγραμμάτων είναι εύκολη όταν ο σχεδιασμός του προϊόντος (ή μέρους αυτού) επικεντρώνεται σε έναν απλό στόχο (όπως η ελαχιστοποίηση του βάρους) και σε έναν περιορισμό (όπως μια συγκεκριμένη τιμή για την ακαμψία, την θερμική αγωγιμότητα κ.α.). Ίσως ο πιο σοβαρός περιορισμός της μεθόδου αυτής είναι ότι τα διαγράμματα περιορίζουν τις μεταβλητές επιλογής των υλικών σε δύο ή τρεις.

1.2.1.3 ΜΕΘΟΔΟΣ ΤΟΥ ΕΡΩΤΗΜΑΤΟΛΟΓΙΟΥ (QUESTIONNAIRE METHOD)

Η μέθοδος του ερωτηματολογίου έχει προταθεί από διάφορους ερευνητές. Ο Farag [10] ταξινόμησε τις απαιτήσεις επίδοσης ενός υλικού σε δύο κύριες κατηγορίες: τις *άκαμπτες* και τις *σχετικές* (ή *μαλακές*) απαιτήσεις. Οι *άκαμπτες* απαιτήσεις πρέπει να καλύπτονται υποχρεωτικά από το υλικό για να θεωρηθεί υποψήφιο για χρήση σε κάποιο προϊόν. Τέτοιες απαιτήσεις μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την αρχική διαλογή υλικών σε κατάλληλα και μη-κατάλληλα. Για παράδειγμα, τα μεταλλικά υλικά αποβάλλονται από την αρχική διαλογή για χρήση σε έναν ηλεκτρικό μονωτή. Οι *σχετικές* ή *μαλακές*, απαιτήσεις υπόκεινται σε περαιτέρω συζήτηση και ανάλυση. Ο Edwards [11] πρότεινε ένα σύνολο ερωτήσεων για την βελτίωση της πιθανότητας εύρεσης του βέλτιστου υλικού κατά τον σχεδιασμό. Κάποιες από αυτές είναι:

- Έχουν ληφθεί και κατανοηθεί οι σχετικές ιδιότητες για όλα τα υλικά;
- Έχουν ληφθεί υπόψη όλες οι περιβαλλοντικές συνθήκες;
- Έχουν ληφθεί υπόψη οι οικονομικοί περιορισμοί;
- Οι συνθήκες και οι περιορισμοί του σχεδιασμού αλλάζουν με το χρόνο;
- Έχουν εξεταστεί οι επιπτώσεις της επεξεργασίας των υλικών;
- Έχουν εξεταστεί αποτελεσματικά οι επιπτώσεις της παραγόμενης ποσότητας και του ρυθμού παραγωγής;

- Έχει εξεταστεί η δυνατότητα μελλοντικής πρόσβασης στη πρώτη ύλη;

Επιπλέον, ο Van Kesteren [12] πρότεινε ένα εργαλείο ερωτήσεων για την εξέταση της σχέσης μεταξύ του χρήστη και της αλληλεπίδρασής του με το προϊόν-υλικό. Το εργαλείο αποτελείται από έναν κατάλογο ερωτήσεων για τις διαφορετικές φάσεις της αλληλεπίδρασης αυτής και από έναν πίνακα ελέγχου των *αισθητηριακών (sensorial)* ιδιοτήτων. Ο σχεδιαστής των προϊόντων και ο πελάτης εικάζουν και μιλούν για την αλληλεπίδραση που ο χρήστης θα αναπτύξει με ένα νέο προϊόν στις φάσεις της πρώτης επαφής, της δοκιμής, της μεταφοράς, της χρήσης, και της τελικής απόρριψης.

1.2.1.4 ΜΕΘΟΔΟΙ ΤΕΧΝΗΤΗΣ ΝΟΗΜΟΣΥΝΗΣ (ARTIFICIAL INTELLIGENCE METHODS)

Μέσω των μεθόδων τεχνητής νοημοσύνης γίνεται η προσπάθεια πραγματοποίησης – με τη βοήθεια ηλεκτρονικών υπολογιστών – νοήμονος επεξεργασίας μη δομημένων και διάσπαρτων πληροφοριών για την επίλυση σύνθετων προβλημάτων. Ένα από αυτά τα προβλήματα είναι και η επιλογή υλικών. Είναι αναμενόμενο για έναν μηχανικό ή σχεδιαστή να γνωρίζει μόνο ένα μικρό αριθμό πληροφοριών και ιδιοτήτων ώστε να επιλέξει το καταλληλότερο υλικό. Σε περίπτωση που τα υποψήφια υλικά είναι πολλά σε αριθμό η διαδικασία επιλογής γίνεται όλο και πιο δύσκολη για τον σχεδιαστή. Ο σχεδιαστής μπορεί να ανατρέξει σε βιβλία, σε βάσεις δεδομένων και σε συνδυασμό με την εμπειρία του, να επιλέξει το καταλληλότερο υλικό. Όμως πλέον, έχει καταστεί αναγκαία η ανάπτυξη συστηματικών τεχνικών για την διαχείριση και την ανάλυση μηχανολογικών δεδομένων για τον ολοένα αυξανόμενο αριθμό υλικών.

1.2.1.4.1 ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ ΕΠΙΛΟΓΗΣ ΥΛΙΚΩΝ ΥΠΟΒΟΗΘΟΥΜΕΝΑ ΑΠΟ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΟ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΗ (COMPUTER-AIDED MATERIALS SELECTION SYSTEMS)

Είναι προφανές ότι, λόγω του μεγάλου αριθμού διαθέσιμων υλικών, υπάρχει ανάγκη ανάπτυξης συστημάτων διαχείρισης πληροφοριών. Ο Hanley [13] περιέγραψε δύο αναλυτικές προσεγγίσεις για την επιλογή βιομηχανικών υλικών μέσω ηλεκτρονικού υπολογιστή. Ο Dargie [14] παρουσίασε ένα υπολογιστικό σύστημα σχεδιασμού το οποίο προτείνει υποψήφιους συνδυασμούς διαδικασιών παραγωγής και υλικών. Επιπλέον, οι Lai και Wilson [15] πρότειναν διαδραστικά υπολογιστικά προγράμματα και τεχνικές τεχνητής νοημοσύνης για την επιλογή συνδυασμών υποψήφιων υλικών και διαδικασιών για εξαρτήματα κατά τα αρχικά στάδια του σχεδιασμού του προϊόντος. Στη συνέχεια για κάθε συνδυασμό, αναπτύχθηκαν και βελτιστοποιήθηκαν δευτερεύουσες διαδικασίες επιλογής βασιζόμενες στο κριτήριο του κόστους.

Ο Pecht [16] ανέπτυξε ένα υπολογιστικό πρόγραμμα υποβοήθησης λήψης αποφάσεων με την ονομασία **MSP (Material Selection Program – Πρόγραμμα Επιλογής Υλικών)**. Το πρόγραμμα αυτό χρησιμοποιεί απλές τεχνικές λήψης αποφάσεων και περιορισμούς καθορισμένους από τον χρήστη για την

επιλογή ενός συνόλου υλικών από βάσεις δεδομένων που περιέχουν πληροφορίες και ιδιότητες υλικών. Το MSP πραγματοποιεί αναζήτηση στη βάση δεδομένων και παράγει μία λίστα αξιολόγησης των υλικών βάσει κριτηρίων διαφορετικής βαρύτητας. Ο Chen [17] παρουσίασε μία προσέγγιση μέσω της ανάπτυξης ενός υπολογιστικού προγράμματος για την επιλογή υλικών το οποίο συνδυάζει τις επιπτώσεις στο περιβάλλον σε όλο τον κύκλο ζωής του προϊόντος με τις παραδοσιακές τεχνικές επιλογής βιομηχανικών υλικών.

1.2.1.4.2 ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ ΒΑΣΙΣΜΕΝΑ ΣΤΗ ΓΝΩΣΗ (KNOWLEDGE-BASED SYSTEMS) [35]

Τα βασισμένα στη γνώση συστήματα είναι συστήματα που βασίζονται σε μεθόδους και τεχνικές τεχνητής νοημοσύνης. Τα συστήματα αυτά περιγράφονται σαν υπολογιστικά συστήματα σχεδιασμένα έτσι ώστε να μιμούνται τις ανθρώπινες μεθόδους επίλυσης προβλημάτων μέσω μεθόδων τεχνητής νοημοσύνης και αναζήτησης αναφορών σε βάσεις δεδομένων για ένα συγκεκριμένο πρόβλημα. Η γνώση αποκτάται και αναπαριστάται χρησιμοποιώντας διάφορες τεχνικές αναπαράστασης πληροφοριών. Τα βασικά μέρη από τα οποία αποτελούνται είναι τα εξής:

- Βάση αποθήκευσης γνώσεων
- Μηχανισμοί απόκτησης γνώσεων
- Μηχανισμοί εξαγωγής συμπερασμάτων.

Τα συστήματα αυτά περιλαμβάνουν πληροφορίες ικανές να βοηθήσουν τον χρήστη, μέσω μίας διαδραστικής μεθόδου, να επιλύσει προβλήματα και να απαντήσει ερωτήσεις. Το έμπειρο σύστημα λειτουργεί με έναν πλήρως διαδραστικό τρόπο και προβαίνει σε αμερόληπτες προτάσεις για την επιλογή υλικών και είναι σε θέση να πραγματοποιεί ταχύτατη αναζήτηση στις μεγάλες βάσεις δεδομένων για την εύρεση των βέλτιστων κάθε φορά λύσεων.

Τις τελευταίες δεκαετίες οι πληροφορίες πάνω στα υλικά χωρίζονται σε δύο κατηγορίες: στα δεδομένα και την εμπειρία. Ως δεδομένα χαρακτηρίζονται τα αποτελέσματα μετρήσεων τα οποία μπορούν να αναπαρασταθούν μέσω αριθμών, ενώ η εμπειρία αναπαριστά τις σχέσεις μεταξύ δεδομένων και συνήθως εκφράζεται σε απλή γλώσσα. Τα όρια μεταξύ των δύο κατηγοριών πολλές φορές είναι δυσδιάκριτα.

Οι Bamkin και Pearcey [18] δικαιολόγησαν την ανάπτυξη ενός βοηθητικού προγράμματος για σχεδιαστές (*Design Assistant*) για την επιλογή υλικών βάσει των έμπειρων συστημάτων. Επιπλέον, ο Chen [19] ενσωμάτωσε ένα έμπειρο σύστημα στη βάση δεδομένων για την παροχή υποστήριξης στη λήψη αποφάσεων για την επιλογή σύνθετων υλικών στο χώρο των κατασκευών.

1.2.1.4.3 ΝΕΥΡΩΝΙΚΑ ΔΙΚΤΥΑ (NEURAL NETWORKS)

Αν το σύνολο της σχετικής με τα υλικά γνώσης ήταν αποθηκευμένο σε ένα έμπειρο σύστημα αντί να αναζητείται σε βιβλία, εγχειρίδια και βάσεις δεδομένων, η επιλογή των υποψήφιων υλικών θα αποτελούσε μία πολύ πιο εύκολη διαδικασία. Οι Goel και Chen [20] παρουσίασαν μια εφαρμογή των έμπειρων συστημάτων στην επιλογή υποψήφιων υλικών βασισμένη στα ακόλουθα βήματα:

- Δημιουργία μιας λίστας υποψηφίων υλικών με τη χρήση νευρωνικών και έμπειρων συστημάτων
- Ταξινόμηση των υλικών από το υλικό που πλησιάζει περισσότερο τις επιθυμητές ιδιότητες για την εφαρμογή, προς αυτό με την μικρότερη συμβατότητα
- Έλεγχος της διαθεσιμότητας του υλικού (π.χ. στις αποθήκες της εταιρίας). Σε περίπτωση που το υλικό δεν είναι διαθέσιμο ελέγχεται το διάστημα που απαιτείται για την πρόμηθεια του
- Υπολογισμός του συνολικού κόστους.

Στην έρευνα των Goel και Chen τα νευρωνικά δίκτυα αποδείχτηκαν χρήσιμα στην επιλογή του καλύτερου υλικού από τη βάση δεδομένων, αλλά η χρήση μόνο των νευρωνικών δικτύων δεν επαρκεί λόγω του ότι σε πολλές περιπτώσεις δεν είναι δυνατή η επιλογή ενός και μόνου υλικού αφού υπάρχει περίπτωση τα νευρωνικά δίκτυα να περιοριστούν σε κάποια τοπικό ελάχιστο αντί κάποιου ολικού (περισσότερες πληροφορίες στο κεφάλαιο 5).

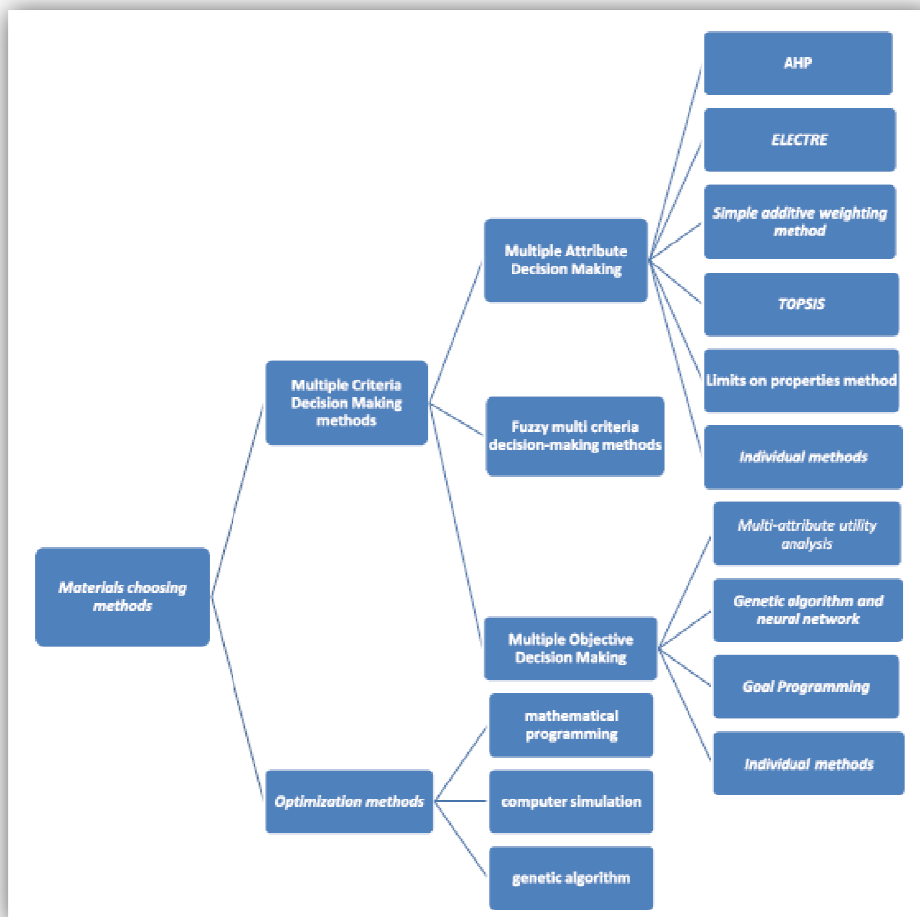
1.2.2 ΜΕΘΟΔΟΙ ΣΥΓΚΡΙΣΗΣ ΚΑΙ ΕΠΙΛΟΓΗΣ ΥΛΙΚΩΝ (MATERIALS COMPARING AND CHOOSING METHODS)

Η επιλογή του καταλληλότερου υλικού είναι μία πολύ δύσκολη διαδικασία η οποία απαιτεί τη διαχείριση ενός μεγάλου όγκου πληροφοριών σχετικών με τις ιδιότητες του κάθε υλικού. Αρκετές φορές υπάρχουν περισσότερα από ένα υλικά κατάλληλα για μια δεδομένη εφαρμογή.

Μετά τον περιορισμό του αριθμού των πιθανών υλικών με χρήση κάποιας από τις μεθόδους που περιγράφηκαν στις προηγούμενες παραγράφους, είναι απαραίτητη η εφαρμογή κάποιας μεθόδου βαθμολόγησης και ταξινόμησης των επικρατέστερων υλικών ώστε να επιτευχθεί ένας περαιτέρω περιορισμός σε ένα πολύ μικρό αριθμό υλικών τα οποία και έχουν τις περισσότερες πιθανότητες να χρησιμοποιηθούν στο τελικό προϊόν ή κατασκευή.

Στη βιβλιογραφία, χρησιμοποιούνται ευρέως μέθοδοι πολυκριτηριακής λήψης αποφάσεων (*Multi-Criteria Decision Making –MCDM–*) και προσεγγίσεις βελτιστοποίησης. Οι μέθοδοι MCDM χωρίζονται σε δύο κύριες ομάδες: *Υποβοήθηση Λήψης Αποφάσεων Μέσω Πολλαπλών Στόχων (Multiple Objective Decision Making –MODM–)* και *Υποβοήθηση Λήψης Αποφάσεων Μέσω Πολλαπλών Ιδιοτήτων (Multiple Attribute Decision Making –MADM–)*. Κάθε μία από τις παραπάνω κατηγορίες περιέχει πολλές μεθόδους. Κάθε μέθοδος έχει τα δικά της χαρακτηριστικά ενώ είναι δυνατός ο συνδυασμός πολλών

μεθόδων, είτε μεταξύ τους είτε με μεθόδους ασαφούς λογικής (*fuzzy logic*). Στο σχήμα 1.2 παρουσιάζεται μια κατηγοριοποίηση των μεθόδων αξιολόγησης και βελτιστοποίησης της διαδικασίας επιλογής των υποψηφίων υλικών.



Σχήμα 1.2.: Κατηγοριοποίηση μεθόδων αξιολόγησης και βελτιστοποίησης της επιλογής υλικών [1]

1.2.2.1 ΥΠΟΒΟΗΘΗΣΗ ΛΗΨΗΣ ΑΠΟΦΑΣΕΩΝ ΜΕΣΩ ΠΟΛΛΑΠΛΩΝ ΣΤΟΧΩΝ (MULTIPLE ATTRIBUTE DECISION MAKING –MADM–)

Στις σύγχρονες έρευνες, οι επιδόσεις των υλικών υπολογίζονται λαμβάνοντας υπόψη ένα σύνολο κριτηρίων και όχι έναν μόνο παράγοντα. Η επιλογή του βέλτιστου υλικού για κάποια εφαρμογή ανάμεσα σε δύο ή περισσότερα υποψήφια υλικά και βάσει δύο ή περισσότερων κριτηρίων είναι ένα πρόβλημα MADM. Οι μεταβλητές επιλογής μπορούν να είναι είτε ποσοτικές είτε ποιοτικές. Ένα σύνολο μεταβλητών (όπως είναι η πυκνότητα, η θερμική αγωγιμότητα κ.τ.λ.) μπορεί να εκφραστεί μέσω αριθμών. Κάποιες άλλες μεταβλητές είναι *δυαδικές (Boolean)* όπως η δυνατότητα ανακύκλωσης (NAI /

OXI), ενώ κάποιες άλλες – όπως είναι η αντίσταση στη διάβρωση για παράδειγμα – μπορούν να περιγραφούν λεκτικά μέσω μιας κλίμακας (π.χ. φτωχή, επαρκής, καλή, πολύ καλή κ.τ.λ.). Τέλος υπάρχουν μεταβλητές που μπορούν να περιγραφούν μόνο μέσω κειμένου και εικόνας.

1.2.2.1.1 ΜΕΘΟΔΟΣ T.O.P.S.I.S. (T.O.P.S.I.S. METHOD) [31]

Τα αρχικά **T.O.P.S.I.S.** προέρχονται από το «Technique for Order Preference by Similarity to Ideal Situation» που σε ελεύθερη απόδοση σημαίνει «Τεχνική Ταξινόμησης Βάσει της Ομοιότητας με την Ιδανική Κατάσταση». Η λογική πίσω από το T.O.P.S.I.S. είναι απλή: η επιλεγμένη εναλλακτική θα πρέπει να είναι όσο πιο κοντά στην ιδανική επιλογή και όσο πιο μακριά από την χειρότερη δυνατή επιλογή. Η ιδανική επιλογή προκύπτει από τον συνδυασμό της καλύτερης για κάθε μεταβλητή επίδοσης ανεξάρτητα από το ποιο υλικό προέρχεται αυτή. Αντίστοιχα η χειρότερη δυνατή επιλογή (ή αλλιώς ιδανικά χειρότερη) προέρχεται από τον συνδυασμό της χειρότερης για κάθε μεταβλητή επίδοσης. Η εγγύτητα κάθε εναλλακτικής σε κάθε έναν από τους δύο προαναφερθέντες πόλους (ιδανικά καλύτερη και ιδανικά χειρότερη επιλογή) υπολογίζεται μέσω της Ευκλείδειας γεωμετρίας (π.χ. η τετραγωνική ρίζα του αθροίσματος των τετραγώνων των αποστάσεων στον χώρο των μεταβλητών) με την δυνατότητα ορισμού συντελεστών βαρύτητας για κάθε μεταβλητή.

Ο Sharma [21] πρότεινε ένα έμπειρο σύστημα βασισμένο στη μέθοδο T.O.P.S.I.S. για την υποβοήθηση της διαδικασίας επιλογής υλικών. Οι Shanian και Savadogo [22] περιέγραψαν την εφαρμογή του T.O.P.S.I.S. σαν μια μέθοδο MADM για την επίλυση του προβλήματος επιλογής υλικών των μεταλλικών διπολικών πλακών για χρήση σε πολυμερικούς ηλεκτρολύτες κυψελών καυσίμου.

1.2.2.1.2 ΜΕΘΟΔΟΣ EL.E.C.T.RE. (EL.E.C.T.RE.METHOD) [33]

Η EL.E.C.T.RE. είναι μία οικογένεια μεθόδων πολυκριτηριακής ανάλυσης αποφάσεων που ξεκίνησε στην Ευρώπη στα μέσα της δεκαετίας του 1960. Το ακρωνύμιο **EL.E.C.T.RE** προέρχεται από τα αρχικά των λέξεων: «**EL**imination **Et** **Choix** Traduisant la **RE**alité» που μπορεί να αποδοθεί ως «Απαλοιφή και Επιλογή που Εκφράζουν την Πραγματικότητα».

Η μέθοδος προτάθηκε για πρώτη φορά από τον Bernard Roy και τους συναδέλφους του στη συμβουλευτική εταιρία SEMA. Μία ομάδα στην SEMA, ενώ εργάζονταν στο πολυκριτηριακό πρόβλημα του πως θα μπορούσε μία εταιρία να αποφασίσει για την ανάπτυξη νέων δραστηριοτήτων, αντιμετώπισε προβλήματα με τη χρήση μιας τεχνικής αθροισμάτων με συντελεστές βαρύτητας. Ο Bernard Roy κλήθηκε να βοηθήσει σαν σύμβουλος και η ομάδα ανέπτυξε την μέθοδο EL.E.C.T.RE. Η πρώτη εφαρμογή της μεθόδου έγινε το 1965 και είχε σαν σκοπό την επιλογή των καλύτερων δραστηριοτήτων. Σύντομα η μέθοδος εφαρμόστηκε σε τρία κύρια προβλήματα: επιλογή, βαθμολόγηση και κατάταξη. Η μέθοδος έγινε ευρέως γνωστή μέσω μιας εργασίας του Bernard Roy σε ένα Γαλλικό επιστημονικό

περιοδικό [32]. Από το 1965 η μέθοδος έχει εξελιχθεί σε ένα μεγάλο αριθμό εκδόσεων (EL.E.C.T.RE I, II, III, IV, IS, EL.E.C.T.RE TRI κ.α.).

1.2.2.1.3. ΑΝΑΛΥΤΙΚΗ ΙΕΡΑΡΧΙΚΗ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΑ (ANALYTICAL HIERARCHY PROCESS –A.H.P.–) [1,34]

Η Α.Η.Ρ. είναι μια καλά δομημένη τεχνική για την αντιμετώπιση πολύπλοκων προβλημάτων. Αντί να ορίζει μία «σωστή» απόφαση, η Α.Η.Ρ. βοηθά τους λήπτες των αποφάσεων να βρουν την λύση που εξυπηρετεί καλύτερα τους σκοπούς, τις απαιτήσεις και την κατανόηση των προβλημάτων που καλούνται να επιλύσουν. Βασισμένη στα μαθηματικά και την ψυχολογία, η Α.Η.Ρ. αναπτύχθηκε από τον Thomas L. Saaty τη δεκαετία του 1970 και από τότε έχει μελετηθεί και βελτιωθεί εκτενώς.

Παρέχει ένα κατανοητό, περιεκτικό και βασισμένο στη λογική πλαίσιο για την δόμηση του προβλήματος, για την αναπαράσταση και ποσοτικοποίηση των δομικών στοιχείων του προβλήματος, για την συσχέτιση των στοιχείων αυτών με τον επιθυμητό σκοπό και για την αξιολόγηση των εναλλακτικών λύσεων. Η μέθοδος αυτή, βρίσκει εφαρμογή σε πολλούς τομείς, όπως είναι η πολιτική, οι επιχειρήσεις, η βιομηχανία, η υγεία, η εκπαίδευση κ.α.. Οι χρήστες της Α.Η.Ρ. αρχικά αποδομούν το πρόβλημα σε μια ιεραρχία λιγότερο δύσκολων υπό-προβλημάτων, κάθε ένα εκ των οποίων αναλύεται ανεξάρτητα.

Τα υπό-προβλήματα της ιεραρχίας σχετίζονται με πολλούς τρόπους με το κυρίως πρόβλημα. Τα υπό-προβλήματα μπορεί να έχουν οποιαδήποτε μορφή: υλικά ή άυλα, προσεκτικά μετρημένα ή μετρημένα κατά προσέγγιση κ.α.. Αφού δημιουργηθεί η ιεραρχία, οι λήπτες των αποφάσεων συστηματικά υπολογίζουν τα υπό-προβλήματα με το να συγκρίνουν μεταξύ τους κάθε φορά δύο από αυτά, μελετώντας τις επιπτώσεις που έχουν αυτά σε ένα στοιχείο που βρίσκεται σε ένα ιεραρχικό επίπεδο πάνω από αυτά. Η Α.Η.Ρ. μετατρέπει τους υπολογισμούς αυτούς σε αριθμητικές τιμές οι οποίες μπορούν να επεξεργαστούν και να συγκριθούν σε όλη την έκταση του υπό εξέταση προβλήματος. Ένας αριθμητικός συντελεστής βαρύτητας ή προτεραιότητα παράγεται για κάθε στοιχείο της ιεραρχίας, επιτρέποντας ποικίλα και συχνά ανομοιογενή στοιχεία να συγκρίνονται μεταξύ τους με έναν λογικό και συστηματικό τρόπο. Η δυνατότητα αυτή ξεχωρίζει την Α.Η.Ρ. από τις υπόλοιπες τεχνικές λήψης αποφάσεων.

Στο τελευταίο στάδιο της διαδικασίας, υπολογίζονται αριθμητικές τιμές της σημαντικότητας για κάθε μία από τις εναλλακτικές λύσεις. Οι αριθμητικές τιμές αυτές αντιπροσωπεύουν την σχετική δυνατότητα κάθε εναλλακτικής να επιλύσει το εξεταζόμενο πρόβλημα.

1.2.2.1.4. ΜΕΘΟΔΟΣ ΟΡΙΟΘΕΤΗΣΗΣ ΙΔΙΟΤΗΤΩΝ (LIMITS ON PROPERTIES METHODS)

Στη μέθοδο που περιγράφεται από τον Farag [10], οι απαιτήσεις απόδοσης διαιρούνται σε τρεις κατηγορίες: *ιδιότητες χαμηλού ορίου*, *ιδιότητες υψηλού ορίου* και *ιδιότητες στόχοι*. Τα κάτω και άνω όρια μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την εξαρχής απαλοιφή των ακατάλληλων υλικών από μια βάση

δεδομένων. Μετά από το στάδιο της απαλοιφής, η μέθοδος οριοθέτησης ιδιοτήτων μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τη βελτιστοποίηση της επιλογής μεταξύ των υπόλοιπων υλικών.

1.2.2.2 ΜΕΘΟΔΟΙ ΠΟΛΥΚΡΙΤΗΡΙΑΚΗΣ ΛΗΨΗΣ ΑΠΟΦΑΣΕΩΝ ΜΕΣΩ ΑΣΑΦΟΥΣ ΛΟΓΙΚΗΣ (FUZZY MULTI-CRITERIA DECISION-MAKING METHODS)

Σε ιδιότητες υλικών όπως είναι η διάβρωση σπάνια αποδίδονται αριθμητικές τιμές και τα υλικά συνήθως χαρακτηρίζονται σχετικά με τις ιδιότητες αυτές σαν *πολύ καλά, καλά, επαρκή, φτωχά* κ.τ.λ..

Τα χαρακτηριστικά των διάφορων υλικών όπως αυτά αναφέρονται σε βιβλία και εγχειρίδια είναι πολυδιάστατα και ποσοτικά. Οι ιδιότητες των υλικών ανάλογα με την εφαρμογή αποκτούν διαφορετική σπουδαιότητα. Η επιθυμητή τιμή και η σπουδαιότητα της κάθε ιδιότητας του υλικού συνήθως περιγράφονται μέσω λέξεων και φράσεων. Για παράδειγμα είναι «πολύ σημαντικό» η αντοχή στην διάβρωση του επιλεγμένου υλικού να είναι «πολύ καλή» για την λειτουργία του σε ένα «έντονα οξειδωτικό» περιβάλλον. Είναι δύσκολο να ποσοτικοποιηθεί με ακρίβεια ο χαρακτηρισμός των ιδιοτήτων κάθε εναλλακτικού υλικού.

Η τελική επιλογή του υλικού εμπεριέχει σημαντικό ρίσκο λόγω της μη ολοκληρωμένης, προσεγγιστικής και πιθανότατα λανθασμένης πληροφόρησης. Σε τέτοιες περιπτώσεις, η ασαφής λογική μπορεί να αποδειχτεί πολύ χρήσιμη. Η μέθοδος της *ασαφούς λογικής* αναπτύχθηκε πάνω στην ιδέα ότι τα στοιχεία κλειδιά της ανθρώπινης σκέψης δεν είναι αριθμοί, αλλά λέξεις ή φράσεις. Η εφαρμογή της ασαφούς λογικής στα υλικά και στη διαδικασία επιλογής τους είναι εξαιρετικά χρήσιμη, αφού τέτοιες αποφάσεις λαμβάνονται κατά τη διάρκεια των προκαταρκτικών σταδίων του σχεδιασμού σε ένα περιβάλλον που χαρακτηρίζεται από ανακριβείς και αβέβαιες παραμέτρους και σχέσεις. Οι Wang και Chang [23] πρότειναν μία προσέγγιση λήψης αποφάσεων μέσω πολυκριτηριακής ασαφούς λογικής για την επιλογή υλικών για χαλύβδινα εργαλεία.

1.2.2.2.1 ΓΕΝΕΤΙΚΟΙ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΙ ΚΑΙ ΝΕΥΡΩΝΙΚΑ ΔΙΚΤΥΑ

Ο Smith [24] χρησιμοποίησε νευρωνικά δίκτυα για τον έλεγχο και την βελτίωση των διαδικασιών συμπύκνωσης και πυροσυσσωμάτωσης κόνεων. Σε σύγκριση με τη γραμμική παλινδρόμηση, το νευρωνικό δίκτυο βρέθηκε να παρέχει μια μείωση 36% στην τυπική απόκλιση των αποτελεσμάτων και συνεπώς προκάλεσε μείωση του χρόνου και του συνολικού κόστους. Ο Yang [25] χρησιμοποίησε νευρωνικά δίκτυα και γενετικούς αλγορίθμους για την επιλογή του βέλτιστου σύνθετου υλικού και των καταλληλότερων συνθηκών λειτουργίας. Ο Jarupan [26] παρουσίασε μία προσέγγιση βασισμένη στους γενετικούς αλγορίθμους για την εξέταση του προβλήματος επιλογής υλικού συσκευασίας μέσω της πολυκριτηριακής λήψης αποφάσεων. Στη συνέχεια, στην ίδια εργασία χρησιμοποιήθηκε ασαφής λογική

για την παρουσίαση και το χειρισμό των ασαφών και υποκειμενικών περιγραφών των επιδόσεων των υλικών συσκευασίας και των χαρακτηριστικών του σχεδιασμού.

Επιπλέον, ο Shi [27] ανέπτυξε ένα νευρωνικό δίκτυο οπισθοδιάδοσης για την επιλογή πολυμερικών υλικών. Η σχέση μεταξύ των απαιτήσεων επίδοσης και των ιδιοτήτων των μορφοποιημένων με έγχυση πολυμερικών υλικών αναλύθηκε και στη συνέχεια η επιλογή του υλικού πραγματοποιήθηκε μέσω μιας μαθηματικής μεθόδου ασαφούς λογικής. Ο Zhou [28] χρησιμοποίησε μία συνδυαστική προσέγγιση τεχνητών νευρωνικών δικτύων και γενετικών αλγορίθμων για τη βελτιστοποίηση της πολυκριτηριακής επιλογής υλικών για τη συσκευασία δοχείων υγρών. Διατυπώθηκαν στόχοι για, μείωση του βάρους των δοχείων και ελαχιστοποίηση των περιβαλλοντικών επιπτώσεων για επτά υποψήφια υλικά.

1.2.3. ΜΕΘΟΔΟΙ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗΣ

Εκτενείς προσεγγίσεις βελτιστοποίησης έχουν προταθεί για την επιλογή υλικών, όπως η προσομοίωση μέσω υπολογιστών και οι γενετικοί αλγόριθμοι.

1.2.3.1 ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΜΕΣΩ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΩΝ

Οι ενσωματωμένες βάσεις δεδομένων ιδιοτήτων υλικών με σχεδιαστικούς αλγορίθμους σε συνδυασμό με τα προγράμματα *Υπολογιστικά Υποβοηθούμενου Σχεδιασμού (Computer-Aided Design – CAD)* και *Υπολογιστικά Υποβοηθούμενης Παραγωγής (Computer-Aided Manufacturing –CAM–)* παρουσιάζουν πολλά πλεονεκτήματα συμπεριλαμβανομένης της ομογενοποίησης και της διανομής των στοιχείων στα διαφορετικά τμήματα, τον περιορισμό της προσπάθειας και το μειωμένο κόστος αποθήκευσης και ανάκτησης πληροφοριών.

1.2.3.2 ΓΕΝΕΤΙΚΟΙ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΙ

Οι Sadagopan και Pitchumanit [29] χρησιμοποίησαν τους γενετικούς αλγόριθμους στη βελτιστοποίηση του σχεδιασμού των σύνθετων υλικών και σύγκριναν τα αποτελέσματα με μία εναλλακτική προσέγγιση βασισμένη στη τεχνική προσομοιωμένης απόκτησης που είχε αναπτυχθεί παλαιότερα από τους ίδιους. Ο Zhang [30] χρησιμοποίησε τους γενετικούς αλγόριθμους για την επιλογή της βέλτιστης σύνθεσης και μικροδομής βάσει καθορισμένων ή βελτιστοποιημένων ιδιοτήτων υλικών.

1.3. ΑΝΑΛΥΣΗ ΠΑΡΟΥΣΑΣ ΕΡΓΑΣΙΑΣ

Στην παρούσα εργασία επιχειρείται η ανάπτυξη μιας μεθόδου επιλογής υλικών με τη βοήθεια κλασικών και ήπιων υπολογιστικών τεχνικών παλινδρόμησης και εύρεσης και ανάπτυξης νέων υλικών με βελτιωμένες περιβαλλοντικές επιδόσεις. Μέσω της εφαρμογής των τεχνικών αυτών, τα υλικά κατατάσσονται βάσει των ιδιοτήτων τους από το περισσότερο προς το λιγότερο περιβαλλοντικά φιλικό

υλικό και προσδιορίζονται οι ιδιότητες ενός υλικού το οποίο βάσει της ανάλυσης που λαμβάνει χώρα εμφανίζει ιδανική περιβαλλοντική συμπεριφορά. Πιο συγκεκριμένα αναπτύσσεται μια μέθοδος επτά διακριτών σταδίων στο τέλος της οποίας επιλέγεται το «βέλτιστο» περιβαλλοντικά υλικό για την εφαρμογή η οποία μελετάται.

Επιχειρείται δηλαδή η σύνδεση των ιδιοτήτων των υποψήφιων υλικών με τις περιβαλλοντικές επιπτώσεις που προκαλούνται κατά τον κύκλο ζωής του υλικού.

Τα επτά στάδια από τα οποία αποτελείται η μέθοδος είναι τα εξής:

- 1) Καθορισμός εφαρμογής
- 2) Επιλογή αρχικού πληθυσμού υλικών
- 3) Ορισμός ιδιοτήτων
- 4) Χρήση υπολογιστικών τεχνικών βαθμολόγησης
- 5) Ανάλυση ευαισθησίας
- 6) Εύρεση «βέλτιστου» υλικού
- 7) Πολυκριτηριακή ανάλυση.

Τα στάδια αυτά αναπτύσσονται αναλυτικά στο κεφάλαιο 6. Για τον έλεγχο της μεθόδου μελετάται η επιλογή του βέλτιστου περιβαλλοντικά πολυμερικού υλικού για την κατασκευή φιαλών αποθήκευσης υγρών ευρείας κατανάλωσης χρησιμοποιώντας ένα σύνολο πέντε μηχανικών ιδιοτήτων. Η συνολική περιβαλλοντική επιβάρυνση, προκύπτει από τον γραμμικό συνδυασμό τεσσάρων περιβαλλοντικών επιπτώσεων που καλύπτουν τον κύκλο ζωής του εκάστοτε υλικού.

Οι υπολογιστικές τεχνικές βαθμολόγησης που χρησιμοποιούνται στη μέθοδο αυτή (κατά το στάδιο 4) είναι η παλινδρόμηση μέσω πολυωνύμων και τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα (και πιο συγκεκριμένα τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα γενικευμένης παλινδρόμησης).

Οι δυο τεχνικές αυτές συνδυάζονται με την τεχνική των γενετικών αλγορίθμων στο στάδιο 6 ώστε να εξασφαλιστεί η βέλτιστη επιλογή. Μέσω των γενετικών αλγορίθμων, προσδιορίζονται οι μηχανικές ιδιότητες ενός «βέλτιστου» υλικού που είτε θα μπορεί να κατασκευαστεί είτε να δώσει τις κατευθυντήριες γραμμές που πρέπει να ακολουθήσουν οι σχεδιαστές και οι μηχανικοί των υλικών για τη βελτίωση των ήδη υπάρχοντων υλικών. Ακολουθεί σύγκριση των αποτελεσμάτων των δύο συνδυασμών για τον προσδιορισμό των βέλτιστων τεχνικών κατά την επίλυση της εξεταζόμενης εφαρμογής. Η μέθοδος ενισχύεται από την εφαρμογή της ανάλυσης ευαισθησίας (για την σταθερότητα της βέλτιστης λύσης) καθώς και από την πολυκριτηριακή ανάλυση κατά την οποία οι συντελεστές βαρύτητας των περιβαλλοντικών επιπτώσεων παίρνουν όλους τους δυνατούς συνδυασμούς.

1.4 ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ 1^{ΟΥ} ΚΕΦΑΛΑΙΟΥ

- [1] A.Jahan, M.Y. Ismail, S.M. Sapuan, F.Mustapha, Material screening and choosing methods – A review , *Materials and Design* 31 (2010) 696-705
- [2] Chiner M. Planning of expert systems for material selection. *Mater Des* 2008;9:195-203
- [3] Farag MM. Quantitative methods of materials selection. In: Kutz M, editor. *Handbook of materials selection*; 2002
- [4] Ashby MF, Brechet YJM, Cebon D, Salvo L. Selection strategies for materials and processes. *Mater Des* 2004;25:51-67
- [5] Van Kesteren IEH, Kandahar PV, Stappers PJ. Activities in selecting materials by product designers. In: *Proceedings of the international conference on advanced design and manufacture*. Harbin, China; 2006
- [6] Ashby MF. *Material Selection in mechanical design*. Cambridge, UK: Pergamon Press; 1992
- [7] Ashby MF. Performance indices. *Materials Park* (OH): ASM International; 1997.p.281-290
- [8] Ashby MF. Materials selection charts. In: Dieter, GE (volume chair), editor. *ASM Handbook, Materials Selection and Design*, vol.20; 2001.p.266-280
- [9] Holloway L. Materials selection for optimal environmental impact in mechanical design. *Mater Des* 1998; 19:133-143
- [10] Farag MM. *Materials and process selection in engineering*. Elsevier Science and Technology; 1979
- [11] Edwards KL. Selecting Materials for optimum use in engineering components. *Mater Des* 2005; 26: 469-43
- [12] Van Kesteren IEH, Stappers PJ, de Bruijn JCM. <http://www.nordes.org/data/uploads/papers/88.pdf> [accessed 2007]
- [13] Hanley DP, Hobson E. Computerized materials selection. *Trans ASME J Eng Mater Technol* 1973:197
- [14] Dargie PP, Parmeshwar K, Wilson WRD. MAPS 1: computer aided design system for preliminary material and manufacturing process selection. *Trans ASME J Mech Des* 1982; 104:126-136
- [15] Lai K, Wilson WRD. *Computer-aided material selection and process planning*. Manufacturing engineering transactions. Berkeley, CA, USA: SME, North American Manufacturing Research Inst; 1985. 635-637
- [16] Pecht M, Sawyer T, Dieter G, Pan Y. Material selection program. In: *ASEE annal conference proceedings*. Atlanta, GA, USA: ASEE; 1985.p.635-637
- [17] Chen RW, Navin-Chadra D, Nair I, Prinz F, Wadehra IL. ImSelection – an approach for material selection that integrates mechanical design and life cycle environmental burdens. In: Anon, editor. *IEEE international symposium on electronics and the environment*. Orlando, FL, USA: IEEE; 1995.p. 68-74
- [18] Bamkin RJ, Pearcey BJ. Knowledge-based material selection in design. *Mater Des* 1990;11:25–9.
- [19] Chen JL, Sun SH, Hwang WC. An intelligent database system for composite material selection in structural design. *Expert Syst Appl* 1993;6:159–68.
- [20] Goel V, Chen J. Application of expert network for material selection in engineering design. *Comput Ind* 1996;30:87–101.
- [21] Sharma PK, Aggarwal A, Gupta R, Suryanarayan D. Expert system for aid in material selection process. In: *IEEE international engineering management conference Delhi, India*. IEEE; 1993. p. 27–31.
- [22] Shanian A, Savadogo O, TOPSIS multiple-criteria decision support analysis for material selection of metallic bipolar plates for polymer electrolyte fuel cell. *J Power Sources* 2006;159:1095-104
- [23] Wang M-JJ, Chang T-C. Tool steel materials selection under fuzzy environment. *Fuzzy Sets and Systems* 1995;72:263–70.
- [24] Smith LN, German RM, Smith ML. A neural network approach for solution of the inverse problem for selection of powder metallurgy materials. *J Mater Process Tech* 2002;120:419-25.
- [25] Yang SY, Tansel IN, Kropas-Hughes CV. Selection of optimal material and operating conditions in composite manufacturing part I: computational tool. *Int J Machine Tools Manuf* 2003;43:169–73.
- [26] Jarupan L, Kamarthi SV, Gupta SM. Application of combinatorial approach in packaging material selection. In: Gupta SM, editor. *Proceedings of SPIE – the international society for optical engineering*. Philadelphia, PA; 2004. p. 207–23.

- [27] Shi P. Neural network approach to material selection for injection molded parts. Harbin Gongye Daxue Xuebao/J Harbin Inst Technol 2005:37.
- [28] Zhou CC, Yin GF, Hu XB. Multi-objective optimization of material selection for sustainable products: artificial neural networks and genetic algorithm approach. Mater Des 2009;30:1209–15.
- [29] Sadagopan D, Pitchumanit R. Application of genetic algorithms to optimal tailoring of composite materials. Compos Sci Technol 1998;58:571–89.
- [30] Zhang X. Improved genetic algorithm based on family tree used for the material selection optimization of components made of multiphase materials. Jixie Gongcheng Xuebao/Chin J Mech Eng 2008;44:220–7.
- [31] Hwang, C. and K.Yoon, 1981. Multiple Attribute Decision Making: Methods and Application, New York: Springer Publications
- [32] Roy Bernard : Classement et choix en présence de points de vue multiples (la methode ELECTRE). La Revue d'Informatique et de Recherche Opérationelle (RIPO) (8): 57-75 (1968)

Ιστοσελίδες:

- [33] <http://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Special:Search&redirs=1&search=ELECTRE&fulltext=Search&ns0=1> (μέθοδος *EL.E.C.T.RE.*)
- [34] http://en.wikipedia.org/wiki/Analytic_Hierarchy_Process (ανάλυτική διαδικασία ιεραρχίας - *A.H.P.*)
- [35] http://en.wikipedia.org/wiki/Knowledge-based_systems (Συστήματα βασισμένα στη γνώση - Knowledge-based systems)

Περίληψη:

Οι επιπτώσεις των ανθρώπινων δραστηριοτήτων στο περιβάλλον έχουν γίνει όλο και πιο σοβαρές και εμφανείς τα τελευταία χρόνια. Προσπάθειες καταβάλλονται από κρατικούς οργανισμούς και επιχειρήσεις αλλά και από απλούς καταναλωτές για να περιοριστούν οι επιπτώσεις στο περιβάλλον που προκαλούνται από τα παραγόμενα προϊόντα και τις παρεχόμενες υπηρεσίες.

Διάφορες μέθοδοι βιώσιμης διαχείρισης (ISO, EMAS) καθώς και μέθοδοι καταγραφής περιβαλλοντικών επιπτώσεων κατά τη διάρκεια του κύκλου ζωής των προϊόντων (Life Cycle Analysis) εφαρμόζονται για τον αποτελεσματικό έλεγχο της επίδοσης των προϊόντων και της συμπεριφοράς των εταιριών.



2.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ [1-2]

Κατά τη διάρκεια της επιλογής υλικών για μια δεδομένη εφαρμογή, οι σχεδιαστές και οι μηχανικοί πρέπει να λάβουν υπόψη τους έναν μεγάλο αριθμό – συχνά αλληλοσυγκρουόμενων – παραμέτρων. Οι παράμετροι αυτές περιλαμβάνουν, εκτός άλλων, τις μηχανικές και φυσικές ιδιότητες των υλικών, διάφορους κατασκευαστικούς περιορισμούς, το κόστος παραγωγής, την αντοχή του τελικού προϊόντος, τη δυνατότητα ανακύκλωσης και γενικά τη συνολική περιβαλλοντική επιβάρυνση του προϊόντος σε όλο τον κύκλο ζωής του. Η εξόρυξη, η επεξεργασία, η μεταφορά, το στάδιο χρήσης του τελικού προϊόντος, η ανακύκλωση ή η εναπόθεση είναι παραδείγματα διεργασιών και διαδικασιών που επιβαρύνουν το περιβάλλον. Λόγω της πολυκριτηριακής φύσης της επιλογής των υλικών σε συνδυασμό με την αφθονία των υλικών που μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την εκάστοτε εφαρμογή, τα τελευταία χρόνια έχουν προταθεί διάφορες τεχνικές υπολογιστικής νοημοσύνης για την υποβοήθηση της διαδικασίας επιλογής του βέλτιστου υλικού.

Κατά τη διάρκεια του τελευταίου αιώνα, τα προβλήματα του περιβάλλοντος πολλές φορές αντιμετωπίζονταν σαν τοπικά προβλήματα. Τα τελευταία χρόνια όμως έχει γίνει όλο και πιο εμφανές ότι τα προβλήματα αυτά είναι πολύ πιο πολύπλοκα και σχετίζονται με όλες τις φάσεις του κύκλου ζωής των προϊόντων, επηρεάζοντας το παγκόσμιο οικοσύστημα.

Η χρήση των υλικών σήμερα, τόσο για την παραγωγή ενέργειας όσο και για την συσκευασία αλλά και για τα ίδια τα προϊόντα, έχει αυξηθεί κατά είκοσι φορές ανά άτομο σε πολλές βιομηχανοποιημένες χώρες από τα τέλη του 19ου αιώνα.

Ο συνεχώς αυξανόμενος αριθμός εξαρτημάτων και υλικών σε πολλά προϊόντα, τα οποία απαιτούν μεταφορά για την διακίνηση τους προς τους ενδιαφερόμενους καταναλωτές, σε συνδυασμό με την ολοένα και μεγαλύτερη ενεργειακή κατανάλωση σε όλο τον κόσμο είναι χαρακτηριστικά παραδείγματα της υπερκατανάλωσης. Η φύση δε μπορεί να ακολουθήσει τον σύγχρονο ρυθμό ανάπτυξης (ακόμα και 5% σε αρκετές χώρες) χωρίς σημαντικές μακροπρόθεσμες επιπτώσεις στο περιβάλλον.

Η ραγδαία τεχνολογική πρόοδος των τελευταίων αιώνων έχει προκαλέσει σημαντικές περιβαλλοντικές επιπτώσεις και μπορεί να θεωρηθεί ως ένας μη-βιώσιμος τρόπος ζωής. Σήμερα υπάρχουν τέσσερα βασικά προβλήματα τα οποία παραμένουν (άλλα σε μικρό και άλλα σε μεγαλύτερο βαθμό) άλυτα:

- **Χρήση πρώτων υλών:** Η ανθρώπινη παραγωγικότητα δεν συνάδει με την φύση όσον αφορά στη βιωσιμότητα. Μόνο ένα μικρό ποσοστό των υλικών και της ενέργειας που απαιτούνται θεωρητικά για την παραγωγή του προϊόντος χρησιμοποιείται για αυτό καθεαυτό το προϊόν. Μεγάλο ποσό της ενέργειας και των υλικών χάνεται κατά τη διάρκεια της παραγωγής και της

διακίνησης, στάδια στα οποία παράγονται μεγάλες ποσότητες απορριμμάτων και αέριων εκπομπών ειδικά για τα μη ανακυκλώσιμα προϊόντα.

- **Ρύπανση:** Ακόμα και αν όλες οι βιομηχανίες επετύγχαναν να έχουν άμεσα μηδενικές εκπομπές, η γη θα συνέχιζε να επηρεάζεται σημαντικά από τις μέχρι τώρα εκπομπές.
- **Υπερπληθυσμός και Υπερκατανάλωση:** Μέχρι το 2025 πιθανολογείται ότι στον πλανήτη θα κατοικούν περισσότεροι από δέκα δισεκατομμύρια άνθρωποι. Είναι προφανές ότι η κατάσταση αυτή θα οδηγήσει τις ανθρώπινες κοινωνίες σε λιγότερο βιώσιμες συνθήκες και καταστάσεις με όλο και μεγαλύτερες περιβαλλοντικές επιπτώσεις. Ακόμα και αν πολλά προϊόντα όπως π.χ. τα αυτοκίνητα, έχουν γίνει πιο φιλικά προς το περιβάλλον κατά τις τελευταίες δεκαετίες δεν είναι δυνατή η μείωση της συνολικής χρησιμοποιούμενης ποσότητας υλικών και ενέργειας λόγω της αύξησης του παγκόσμιου πληθυσμού.

2.2 ΒΙΩΣΙΜΗ ΑΝΑΠΤΥΞΗ [2]

Οι παρακάτω πτυχές είναι παραδείγματα σημαντικών θεμάτων που συνδέονται με την βιώσιμη ανάπτυξη:

- **Περιβάλλον:** Το οικοσύστημα του πλανήτη θα πρέπει να διατηρείται έτσι ώστε να προστατεύεται η χλωρίδα και η πανίδα. Το περιβάλλον πρέπει να αντιμετωπίζεται ως μέρος της διαδικασίας ανάπτυξης και όχι σαν ανεξέλεγκτη πηγή προσφοράς πρώτων υλών.
- **Ισότητα:** Το θέμα της ανέχειας και της ίσης κατανομής και χρήσης των φυσικών πόρων θα πρέπει να επιλυθεί έτσι ώστε να διατηρηθούν ευσταθείς και δίκαιες κοινωνικές δομές.
- **Διαιώνιση:** Οι επιπτώσεις της ανάπτυξης θα πρέπει να υπολογιστούν σε βάθος χρόνου ώστε να ελαχιστοποιηθούν οι επιπτώσεις στις μελλοντικές γενιές. Μία νέα προσέγγιση για τον έλεγχο της βιωσιμότητας είναι η χρήση του όρου *Triple Bottom Line (TBL)*. Δημιουργημένος από τον John Elkington, «...ο όρος *triple bottom line* χρησιμοποιείται σαν πλαίσιο για την μέτρηση και την κοινοποίηση των εταιρικών επιδόσεων με βάση οικονομικές, κοινωνικές και περιβαλλοντικές παραμέτρους. Δηλαδή, ο όρος TBL περιλαμβάνει την παραδοσιακή βάση της οικονομίας σε συνδυασμό με την κοινωνία και το περιβάλλον.». Η παραπάνω τριάδα μπορεί να απεικονιστεί σαν ένα τρίγωνο με τις παρακάτω τρεις «γωνίες»:
 - Οικολογία (Ecology): Προστασία περιβάλλοντος
 - Ισότητα (Equity): Κοινωνική ισότητα
 - Οικονομία (Economy): Οικονομική ανάπτυξη

Όταν αναπτύσσεται ένα νέο προϊόν, θα πρέπει να γίνεται προσπάθεια να επιτευχθεί μια επιθυμητή ισορροπία έτσι ώστε να βελτιστοποιείται –όσο το δυνατόν– ταυτόχρονα κάθε μία από τις παραπάνω κατηγορίες.

Η πλευρά της *Οικολογίας* δίνει έμφαση σε τομείς όπως το καθαρό έδαφος, η καθαρή ατμόσφαιρα και οι υδατικοί πόροι ενώ η πλευρά της *Ισότητας* δίνει βάση στο αν, για παράδειγμα, ένα νέο προϊόν μπορεί να οδηγήσει σε κοινωνική ευημερία ανεξάρτητα από το υπόβαθρο των ανθρώπων και στο αν προάγει δικαιοσύνη, υγεία, ασφάλεια κ.α.. Τέλος, η πλευρά της *Οικονομίας* δίνει έμφαση στο αν είναι εφικτή η ύπαρξη κέρδους από την προώθηση του προϊόντος στην αγορά.

Συνοπτικά, τα κριτήρια βελτιστοποίησης της βιωσιμότητας των προϊόντων και των υπηρεσιών μπορούν να καταταχθούν στις παρακάτω κατηγορίες:

- Λειτουργικότητα
- Περιβαλλοντικές επιπτώσεις
- Κοινωνικές επιπτώσεις
- Οικονομικές επιπτώσεις
- Απαιτήσεις της αγοράς (έμποροι και καταναλωτές)
- Ποιότητα
- Δυνατότητα τεχνικής υλοποίησης
- Υπακοή στην νομοθεσία και σε διάφορους περιορισμούς

2.3 ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΙΚΗΣ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ [2]

Τις προηγούμενες δεκαετίες η βιώσιμη ανάπτυξη (η ανάπτυξη δηλαδή που λαμβάνει υπόψη της τα περιβαλλοντικά ζητήματα) πολύ συχνά αντιμετωπιζόταν σαν ανασταλτικός παράγοντας για την ανάπτυξη των εταιριών. Σήμερα, πολλές εταιρίες λαμβάνουν μεγάλα οφέλη από την εφαρμογή μιας περιβαλλοντικά φιλικής παραγωγής.

Η καλή φήμη και η αύξηση των κερδών της εταιρίας μέσω της αύξησης της χρήσης ανακυκλωμένων και ανακυκλώσιμων υλικών είναι μερικά από τα οφέλη αυτά. Ένας τρόπος για τη δημιουργία ενός συστηματικού περιβαλλοντικού σχεδίου για μια βιομηχανία παραγωγής προϊόντων είναι η χρήση των διεθνώς αναγνωρισμένων τυποποιημένων *Συστημάτων Περιβαλλοντικής Διαχείρισης* (Environmental Management Systems - EMSs). Η χρήση ενός τέτοιου συστήματος έχει γίνει εξαιρετικά σημαντική για πολλές εταιρίες παγκοσμίως. Τα Συστήματα Περιβαλλοντικής Διαχείρισης (Σ.Π.Δ.) μπορούν να χαρακτηριστούν σαν προαιρετικά. Μπορούν να χρησιμοποιηθούν σαν εργαλεία διαχείρισης τα οποία δίνουν τη δυνατότητα μεταβολής και ελέγχου της περιβαλλοντικής επίδοσης κάποιας εταιρίας. Κάθε εταιρία η οποία έχει λάβει κάποια μέτρα αντιμετώπισης των περιβαλλοντικών θεμάτων έχει στην πραγματικότητα εφαρμόσει ένα Σ.Π.Δ..

Ένα Σ.Π.Δ. μπορεί με απλό τρόπο να οριστεί σαν «ένα μέρος ενός ολικού συστήματος διαχείρισης που περιλαμβάνει την οργανωτική δομή, τον σχεδιασμό δράσεων, τις ευθύνες, τις πρακτικές,

τις διαδικασίες, τις διεργασίες και τους πόρους για την ανάπτυξη, την επίτευξη, την αναθεώρηση και την διατήρηση μιας περιβαλλοντικής πολιτικής».

Στις αρχές της δεκαετίας του 1990, το **World Business Council for Sustainable Development (WBCSD)** εξέδωσε μία διακήρυξη που αφορούσε την σύνδεση μεταξύ της προστασίας του περιβάλλοντος, της οικονομικής ανάπτυξης και της ικανοποίησης των ανθρώπινων αναγκών. Η διακήρυξη αυτή οδήγησε στην ανάπτυξη του διεθνούς προτύπου *ISO 14001*, το οποίο και εκδόθηκε επίσημα το 1996 από τον Διεθνή Οργανισμό Τυποποίησης (**International Standardization Organisation – ISO**) στην Ελβετία. Το ISO 14000 αποτελείται από μία σειρά περιβαλλοντικών προτύπων που βασίζονται στο πρότυπο 14001. Το 1993, η Ευρωπαϊκή Επιτροπή εξέδωσε έναν κανονισμό, με την ονομασία «*Eco Management and Audit Scheme*» ή **EMAS**. Ο κανονισμός αυτός είχε σαν σκοπό να δράσει κυρίως σαν ένα έγγραφο που περιγράφει έναν βιώσιμο τρόπο παραγωγής στην Ευρωπαϊκή Ένωση. Ο κανονισμός EMAS έγινε ένα σημαντικό και αναπόσπαστο μέρος της νομοθεσίας που αφορά την περιβαλλοντική επίδραση της Ευρωπαϊκής Ένωσης.

2.4 ΠΑΡΑΓΩΓΗ ΠΡΟΪΟΝΤΩΝ [3]

Σε ένα κόσμο με περιορισμένες πηγές πρώτων υλών και σοβαρά επιβαρυνόμενο περιβάλλον, είναι προφανές ότι ένας πιο βιώσιμος τρόπος ζωής γίνεται όλο και πιο σημαντικός. Τα περισσότερα προϊόντα έχουν περιορισμένη διάρκεια ζωής η οποία μπορεί να κατηγοριοποιηθεί σε διαφορετικές φάσεις: εισαγωγή, ανάπτυξη, ωρίμανση και πτώση.

Τα προϊόντα δεν πρέπει να εισάγονται στην αγορά όταν υπάρχει κίνδυνος γενικής αγοραστικής ύφεσης. Ένα βιώσιμο προϊόν είναι ένα προϊόν το οποίο επηρεάζει όσο το δυνατόν λιγότερο το περιβάλλον σε όλα τα στάδια του κύκλου ζωής του. Ο κύκλος ζωής περιλαμβάνει την εξόρυξη των πρώτων υλών, την παραγωγή, την χρήση και την τελική ανακύκλωση ή απόθεση. Τα υλικά του προϊόντος καθώς και τα υλικά που χρησιμοποιούνται για την παραγωγή της απαιτούμενης για την κατασκευή του προϊόντος ενέργεια περιλαμβάνονται στην ανάλυση του κύκλου ζωής (Βλέπε Κεφάλαιο 1.4.). Έτσι είναι λογικό να υπάρχουν παρεμφερή προϊόντα (λιγότερο ή περισσότερο βιώσιμα) τα οποία και μπορούν να συγκριθούν μεταξύ τους ως προς τις περιβαλλοντικές τους επιπτώσεις.

Ένα καλό και βιώσιμο προϊόν θα πρέπει να προσφέρει την μέγιστη ικανοποίηση των αναγκών του χρήστη. Σε αντίθετη περίπτωση το προϊόν αυτό (έστω και αν είναι βιώσιμο) μπορεί να μην έχει εμπορική επιτυχία και να προκαλέσει οικονομική ζημία στην εταιρία παραγωγής του. Υπάρχουν μελέτες που αναφέρουν ότι σχεδόν το 90% όλων των τεχνικώς καλών προϊόντων δεν θα έχουν εμπορική επιτυχία για διάφορους λόγους.

Είναι λογικό να υποτεθεί ότι η εισαγωγή βιώσιμων προϊόντων στην αγορά εγκυμονεί την ίδια πιθανότητα εμπορικής αποτυχίας με την αντίστοιχη των μη βιώσιμων προϊόντων. Είναι σημαντική η πληροφόρηση των καταναλωτών για το σε ποιους τομείς είναι βιώσιμο ένα προϊόν και για το αν θα πρέπει ή όχι να το αγοράσουν.

2.4.1 ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΙΚΗ ΣΗΜΑΝΣΗ [6]

Για την ενημέρωση των καταναλωτών σχετικά με το αν ένα προϊόν είναι περιβαλλοντικά φιλικό, έχει αναπτυχθεί ένα πλήθος *Συστημάτων Περιβαλλοντικής Σήμανσης* (Environmental Marking Systems). Τέτοια χαρακτηριστικά παραδείγματα είναι το *Ευρωπαϊκό Σήμα* (EU sign - σχήμα 2.1α) – ένα λουλούδι με δώδεκα αστέρια – και το *Ενεργειακό Αστéρι* (Energy Star - σχήμα 2.1β). Αυτού του είδους η σήμανση είναι προαιρετική για τις εταιρίες και μπορεί να χρησιμοποιηθεί όταν ένα προϊόν της εταιρίας πληροί συγκεκριμένες απαιτήσεις που θέτει ο οργανισμός απόδοσης του εκάστοτε περιβαλλοντικού σήματος. Άλλα παραδείγματα σήμανσης είναι το *Panda* (το σήμα της WWF - σχήμα 2.1γ) και το σήμα της *Ανακύκλωσης* με τα τρία κυκλικά βέλη (σχήμα 2.1δ). Το σήμα της WWF πληροφορεί τον καταναλωτή ότι έχουν δοθεί χρήματα υπέρ της WWF και τα τρία βέλη ότι η επιχείρηση που παράγει το προϊόν χρησιμοποιεί ανακυκλώσιμα υλικά.



Σχήμα 2.1.: Παραδείγματα Περιβαλλοντικής Σήμανσης [7]

Παρόλα αυτά η ανάγκη για την παραγωγή περιβαλλοντικά φιλικών προϊόντων δεν είναι ξεκάθαρη και ευκολονόητη για τον απλό καταναλωτή. Ακόμα και για κάποιον που είναι ειδικός μπορεί να είναι προβληματικός ή ακόμα και αδύνατος ο προσδιορισμός – ανάμεσα σε ένα μεγάλο αριθμό προϊόντων – του βέλτιστου προϊόντος.

2.4.2 ΕΠΙΛΟΓΗ ΥΛΙΚΩΝ [2]

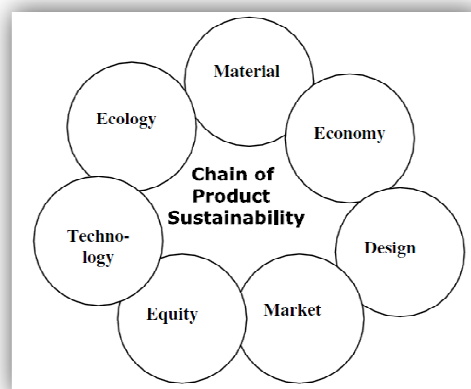
Η επιλογή των υλικών μπορεί να γίνει με πολλούς τρόπους. Όλοι όμως οι τρόποι έχουν κάποια κοινά στοιχεία. Στόχος όλων των μεθόδων είναι η βελτιστοποίηση του προϊόντος στους παρακάτω τομείς:

- Λειτουργικότητα και δομικές απαιτήσεις
- Απαιτήσεις της αγοράς και των καταναλωτών

- Σχεδιασμός
- Κόστος
- Περιβαλλοντικές επιπτώσεις
- Διάρκεια ζωής

Η βιώσιμη ανάπτυξη επιτυχημένων προϊόντων μπορεί να απλοποιηθεί και να περιγραφεί στο σχήμα 2.2. Στο σχήμα αυτό παρουσιάζεται ο αλυσιδωτός κύκλος βιωσιμότητας ο οποίος και αποτελείται από επτά δακτυλίους οι οποίοι αντιστοιχούν στους εξής τομείς:

- Υλικά (Materials): Ελαχιστοποίηση των υλικών που χρησιμοποιούνται και προσπάθεια χρήσης ανανεώσιμων υλικών. Αποφυγή χρήσης τοξικών ή επικίνδυνων υλικών. Ελαχιστοποίηση της καταναλισκόμενης ενέργειας σε όλα τα στάδια του κύκλου ζωής
- Οικονομία (Economy): Το προϊόν πρέπει να είναι οικονομικά αποδοτικό και συγκρίσιμο με παρόμοια προϊόντα. Στο συνολικό κόστος συμπεριλαμβάνεται το κόστος σε όλη τη διάρκεια ζωής του προϊόντος για την επαναφορά του περιβάλλοντος στην κατάσταση προ των επιπτώσεων που επέφερε το προϊόν
- Σχεδιασμός (Design): Σχεδιασμός για το περιβάλλον σε συνδυασμό με την χρηστικότητα για τον τελικό χρήστη
- Αγορά (Market): Ανάπτυξη και σχεδιασμός προϊόντων σύμφωνα με τις ανάγκες της αγοράς ή / και τις ανάγκες συγκεκριμένων ομάδων καταναλωτών
- Ισότητα (Equity): Ισότιμη διανομή και επιβάρυνση στην κοινωνία
- Τεχνολογία (Technology): Βελτιστοποίηση της εξόρυξης των πρώτων υλών, της παραγωγής, της διάρκειας ζωής και της ποιότητας και χρηστικότητας του προϊόντος
- Οικολογία (Ecology): Περιορισμός των εκπομπών και των απορριμμάτων και ελαχιστοποίηση των περιβαλλοντικών επιπτώσεων.



Σχήμα 2.2: Αλυσιδωτός κύκλος βιωσιμότητας [2]

2.5 ΑΝΑΛΥΣΗ ΚΥΚΛΟΥ ΖΩΗΣ [2-3,5,7]

Η *Ανάλυση του Κύκλου Ζωής* (**Life Cycle Assessment – LCA**) είναι ένα πολύ χρήσιμο εργαλείο για τον προσδιορισμό των περιβαλλοντικών επιπτώσεων ενός προϊόντος. Ένα προϊόν αξιολογείται σε κάθε στάδιο της ζωής του (από την «γέννηση» έως τον «θάνατο»), όπου το κόστος, οι επιπτώσεις, η προβλεπόμενη διάρκεια ζωής κ.τ.λ. μπορούν να υπολογιστούν με απλά σχετικά βήματα.

Ένας απλός τρόπος προσδιορισμού του κατά πόσο περιβαλλοντικά φιλική είναι μία μέθοδος παραγωγής είναι η απόδοση σε κάθε προϊόν ενός *Δείκτη Περιβαλλοντικής Επιβάρυνσης* (**Environmental Load Unit – ELU**). Ο *Δείκτης Περιβαλλοντικής Επιβάρυνσης* είναι το άθροισμα του περιβαλλοντικού φορτίου του προϊόντος στους τομείς της παραγωγής, των υλικών, της μεταφοράς κ.τ.λ. καθόλη τη διάρκεια της ζωής του. Ένας τρόπος να περιγραφεί ο δείκτης αυτός είναι ότι αντιπροσωπεύει το «κόστος» επαναφοράς του περιβάλλοντος στην κατάσταση πριν αυτό επιβαρυνθεί από τον κύκλο ζωής του προϊόντος στο οποίο αναφέρεται ο δείκτης.

Θα πρέπει να σημειωθεί όμως ότι η μέθοδος αυτή δεν είναι απόλυτα ακριβής όταν γίνεται σύγκριση μεταξύ διαφορετικών διαδικασιών παραγωγής ή ανακύκλωσης. Για παράδειγμα δεν είναι εύκολος ο προσδιορισμός με αυτή τη μέθοδο της πιο περιβαλλοντικά φιλικής συσκευασίας – π.χ. γυάλινων φιαλών και χάρτινων δοχείων – για την μεταφορά γάλακτος.

Η Ανάλυση Κύκλου Ζωής (A.K.Z.) είναι πιθανότατα η πιο διαδεδομένη τεχνική υπολογισμού των περιβαλλοντικών επιπτώσεων που σχετίζονται με τα υλικά προϊόντα. Στην A.K.Z. ακολουθούνται συνήθως έξι βήματα:

1. Εξόρυξη της πρώτης ύλης
2. Παρασκευή του προϊόντος
3. Συσκευασία
4. Μεταφορά υλικών και τελικού προϊόντος
5. Χρήση του προϊόντος από τον καταναλωτή
6. Απόθεση ή ανακύκλωση του προϊόντος.

Τα παραπάνω στάδια μπορούν να χωριστούν σε μικρότερα βήματα με αποτέλεσμα την πιο ακριβή περιγραφή του κύκλου ζωής του προϊόντος:

- Εξόρυξη πρώτων υλών
- Σχεδιασμός
- Έρευνα αγοράς και ανάπτυξη προϊόντος
- Σχεδιασμός διεργασιών
- Προμήθεια υλικών

- Παραγωγή και συναρμολόγηση
- Έλεγχος παραγωγής
- Επεξεργασία απορριμμάτων, εκπομπών και θορύβου
- Συσκευασία και αποθήκευση
- Μάρκετινγκ
- Πωλήσεις
- Μεταφορά
- Χρήση επισκευή και συντήρηση
- Ανακαίνιση / Αναβάθμιση
- Επαναχρησιμοποίηση / Ανακύκλωση.

2.6 ΟΙΚΟ-ΑΠΟΔΟΤΙΚΟΤΗΤΑ ΚΑΙ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΙΚΑ ΦΙΛΙΚΟΣ ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ [3]

Η *Οίκο-αποδοτικότητα* (Eco-efficiency) είναι μία μέθοδος διαχείρισης των πρώτων υλών, των διαδικασιών και των προϊόντων μιας βιομηχανίας / εταιρίας με έναν τρόπο πιο αποδοτικό και προσαρμοζόμενο στις επικρατούσες περιβαλλοντικές ανάγκες και απαιτήσεις. Η μέθοδος αυτή όμως δεν λαμβάνει υπόψη τις περιβαλλοντικές επιπτώσεις μετά την πώληση του προϊόντος. Η μέθοδος A.K.Z. είναι ένας πιο ολοκληρωτικός τρόπος προσδιορισμού της συνολικής περιβαλλοντικής επίπτωσης.

Οι στρατηγικές του όρου *Περιβαλλοντικά Φιλικός Σχεδιασμός* (Eco-Design) αναφέρονται στην χρήση υλικών χαμηλών περιβαλλοντικών επιπτώσεων, στην επιλογή οικολογικών μεθόδων παραγωγής, στη μη χρησιμοποίηση επικίνδυνων ή τοξικών υλικών, στη μεγιστοποίηση της απόδοσης της καταναλισκόμενης κατά την παραγωγή των προϊόντων ενέργειας και στο σχεδιασμό μεθόδων διαχείρισης απορριμμάτων και ανακύκλωσης.

2.7. ΝΟΜΟΘΕΣΙΑ ΚΑΙ ΜΕΤΡΑ ΠΡΟΛΗΨΗΣ [2]

Η παραγωγή και η διάθεση προϊόντων περιορίζεται από διάφορα νομοθετικά πλαίσια τα οποία ποικίλουν μεταξύ χωρών. Η είσοδος καινοτόμων περιβαλλοντικά φιλικών τεχνικών ή υλικών μπορεί να οδηγήσει σε διαδόχους παλαιότερων υλικών και ακόμα να προσφέρει λόγους απόρριψης παλαιότερων τεχνικών. Τόσο τα χρησιμοποιούμενα υλικά όσο και το τελικό προϊόν θα πρέπει να είναι όσο το δυνατόν πιο ασφαλή στη χρήση. Η ασφάλεια τις περισσότερες φορές καθορίζεται από εξειδικευμένους για κάθε περίπτωση νόμους.

Οι κατευθυντήριες νομοθετικές γραμμές για την ανάπτυξη περισσότερο βιώσιμων προϊόντων περιλαμβάνουν τα παρακάτω σημαντικά στοιχεία:

- Μείωση των υλικών και της καταναλισκόμενης ενέργειας για την παραγωγή των προϊόντων και την παροχή υπηρεσιών καθόλη τη διάρκεια ζωής τους
- Μείωση των εκπομπών, της διάχυσης και της δημιουργίας τοξικών παραπροϊόντων
- Αύξηση της χρήσης ανακυκλώσιμων υλικών
- Μεγιστοποίηση της βιώσιμης χρήσης ανανεώσιμων πηγών
- Επιμήκυνση του ωφέλιμου χρόνου ζωής του προϊόντος
- Καταγραφή και ελαχιστοποίηση των περιβαλλοντικών επιπτώσεων σε όλη τη διάρκεια του κύκλου ζωής
- Ύπαρξη μιας «Λειτουργικής Οικονομίας» που αντικαθιστά προϊόντα με υπηρεσίες
- Χρήση «Reverse Logistics» δηλαδή επικέντρωση όλων των προσπαθειών για την επαναχρησιμοποίηση προϊόντων και υλικών
- Αύξηση της απόδοσης του προϊόντος στη φάση της χρήσης του από τους καταναλωτές.

2.8. ΑΝΑΚΥΚΛΩΣΗ [2]

Τα τελευταία στάδια στην εφαρμογή της μεθόδου A.K.Z. αφορούν την ανακύκλωση και την τελική απόθεση των υλικών που χρησιμοποιήθηκαν στην παραγωγή. Παρόλα αυτά, από τα πρώτα στάδια της ανάπτυξης των προϊόντων θα πρέπει να λαμβάνεται υπόψη η ανακύκλωση ή η εναπόθεση για να επιτευχθεί η ελαχιστοποίηση των περιβαλλοντικών επιπτώσεων και συνεπώς η επιθυμητή βιωσιμότητα.

Σήμερα η επιλογή των υλικών οδηγείται στην παρασκευή ανακυκλώσιμων υλικών. Η ανακύκλωση μπορεί να επιτευχθεί με πολλούς διάφορους τρόπους:

- Ανακύκλωση ενέργειας: Τα υλικά καίγονται και η παραγόμενη ενέργεια χρησιμοποιείται για θέρμανση
- Ανακύκλωση Υλικών: Τα υλικά τήκονται και επαναμορφοποιούνται για την κατασκευή νέων προϊόντων
- Επαναχρησιμοποίηση: Το προϊόν ή μέρη αυτού μπορούν να επαναχρησιμοποιηθούν, πολλές φορές μετά από μερική αποκατάσταση. Τα προϊόντα ή τα μέρη (ανταλλακτικά) που προκύπτουν μετά την αποκατάσταση διατίθενται σε χαμηλότερες τιμές από αυτές ενός νέου προϊόντος
- Αποσύνθεση: Φυσικά οργανικά υλικά, πολλά πολυμερή και μερικά μέταλλα μπορούν να αποσυντεθούν με φυσικό ή χημικό τρόπο προς περιβαλλοντικά φιλικά προϊόντα ή χημικά. Τα υλικά αυτά συνήθως αναφέρονται σαν διασπώμενα ή βιοδιασπώμενα υλικά. Τυπικές διαδικασίες διάσπασης είναι η διάβρωση, η κομποστοποίηση και η σήψη.

Όταν δεν είναι δυνατή ή κατάλληλη η ανακύκλωση, η απόθεση μπορεί να αποτελεί την καλύτερη εναλλακτική μέθοδο διαχείρισης:

- **Απόθεση:** Η απόθεση είναι ένας τρόπος αποθήκευσης υλικών ο οποίος εξασφαλίζει την ελαχιστοποίηση των περιβαλλοντικών επιπτώσεων για ένα μεγάλο χρονικό διάστημα. Αν το υλικό είναι ραδιενεργό ή τοξικό, μπορεί να αποθεθεί μόνο σε συγκεκριμένες προστατευμένες περιοχές ή να θαφτεί σε κάποιο βάθος. Η απόθεση υλικών ελέγχεται και περιορίζεται από την περιβαλλοντική νομοθεσία. Οι περιορισμοί αυτοί είναι ένας τρόπος ελαχιστοποίησης της παραγωγής των τοξικών προϊόντων και / ή των αέριων εκπομπών, που μπορεί να αποβούν επιβαρυντικοί για τον αέρα και τον υδάτινο ορίζοντα και συνεπώς και των ανθρώπων, της χλωρίδας και της πανίδας.

2.9 ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ 2^{ΟΥ} ΚΕΦΑΛΑΙΟΥ

- [1] Chang-Chun Zhou, Guo-Fu Yin, Xiao-Bing Hu, Multi-objective optimization of material selection for sustainable products: Artificial neural networks and genetic algorithm approach, *Materials and Design* 30 (2009) 1209-1215
- [2] Lennart Y. Ljungberg, Materials selection and design for development of sustainable products, *Materials and Design* 28 (2007) 466-479
- [3] Lennart Y. Ljungberg, Kevin L. Edwards, Design, materials selection and marketing of successful products, *Materials and Design* 24 (2003) 519-529
- [4] M.D. Bovea, A. Gallardo, The influence of impact assessment methods on materials selection for eco-design, *Materials and Design* 27 (2006) 209-215
- [5] Rodney J. Perriman, A summary of SETAC guidelines for life cycle assessment, Brixham Environmental Laboratory, UK, *J. Cleaner Prod.* 1993 Volume 1 Number 3-4

Ιστοσελίδες:

- [6] <http://ec.europa.eu/environment/ecolabel/> (Οικολογική σήμανση)
- [7] http://en.wikipedia.org/wiki/Life_cycle_assessment (Ανάλυση κύκλου ζωής)

Περίληψη:

Τα πολυμερικά υλικά παρουσιάζουν μερικές εξαιρετικές και πολλές φορές μοναδικές ιδιότητες. Μερικές από τις ιδιότητες αυτές είναι το μικρό τους βάρος, η χημική τους αδράνεια, οι μηχανικές τους ιδιότητες και η συνεπαγόμενη μείωση στην κατανάλωση μη ανανεώσιμων φυσικών πόρων από την όλο και ευρύτερη χρήση τους. Τα πλαστικά αποτελούν πλέον την πιο δημοφιλή κατηγορία υλικών.

Η μεγάλη ποικιλία εφαρμογών αλλά και το εύρος ιδιοτήτων που παρουσιάζουν καθιστούν δύσκολη την επιλογή του βέλτιστου πολυμερικού υλικού για την υπό έκαστοτε εφαρμογή.

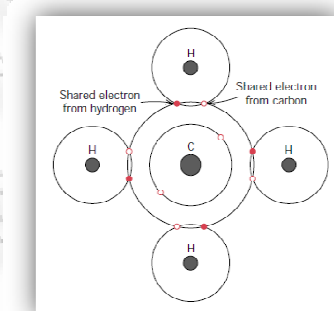


3.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ [1]

Τα πολυμερή που απαντώνται στη φύση – αυτά που προέρχονται από φυτά και ζώα – έχουν χρησιμοποιηθεί για πολλούς αιώνες. Τα υλικά αυτά περιλαμβάνουν το ξύλο, το καουτσούκ, το βαμβάκι, το μαλλί, το δέρμα και το μετάξι. Άλλα φυσικά πολυμερή όπως οι πρωτεΐνες, τα ένζυμα, το άμυλο και η κυτταρίνη (κελλουλόζη), είναι σημαντικά στις βιολογικές και φυσιολογικές διεργασίες στα φυτά και τα ζώα. Σύγχρονα επιστημονικά ερευνητικά εργαλεία έχουν κάνει δυνατή την εξακρίβωση της μοριακής δομής αυτής της ομάδας υλικών και την ανάπτυξη πολυάριθμων πολυμερών, τα οποία συντίθενται από μικρά οργανικά μόρια. Στην πραγματικότητα, από τη λήξη του Δεύτερου Παγκοσμίου Πολέμου, στο πεδίο των υλικών έχει ουσιαστικά σημειωθεί επανάσταση με την άφιξη των συνθετικών πολυμερών. Τα συνθετικά πολυμερή μπορούν να παραχθούν οικονομικά και οι ιδιότητές τους μπορούν να ελεγχθούν στο βαθμό που πολλά να είναι ανώτερα από τα αντίστοιχα φυσικά. Σε πολλές εφαρμογές εξαρτήματα από μέταλλο και ξύλο έχουν αντικατασταθεί από πλαστικά, τα οποία έχουν ικανοποιητικές ιδιότητες και μπορούν να παραχθούν με χαμηλό κόστος. Όπως με τα μέταλλα και τα κεραμικά, οι ιδιότητες των πολυμερών είναι περίπλοκα συνδεδεμένες με τα δομικά στοιχεία του υλικού.

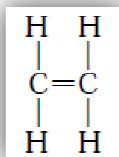
3.2 ΜΟΡΙΑ ΥΔΡΟΓΟΝΑΝΘΡΑΚΩΝ – ΟΡΓΑΝΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ [1]

Πολλά οργανικά υλικά είναι υδρογονάνθρακες, δηλαδή αποτελούνται από άνθρακα και υδρογόνο και οι ενδομοριακοί δεσμοί είναι ομοιοπολικοί. Κάθε άτομο άνθρακα έχει τέσσερα ηλεκτρόνια που μπορούν να πάρουν μέρος σε ομοιοπολικούς δεσμούς, ενώ κάθε άτομο υδρογόνου έχει μόνο ένα δεσμικό ηλεκτρόνιο. Ένας απλός ομοιοπολικός δεσμός υφίσταται όταν κάθε ένα από τα δύο συνδεδεμένα άτομα συνεισφέρει από ένα ηλεκτρόνιο όπως φαίνεται σχηματικά στο σχήμα 3.1 για το μόριο του μεθανίου.



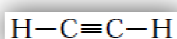
Σχήμα 3.1.: Ομοιοπολικοί δεσμοί στο μόριο του μεθανίου [1]

Στους διπλούς και τριπλούς δεσμούς μεταξύ δύο ατόμων άνθρακα υπεισέρχονται δύο και τρία ζεύγη ηλεκτρονίων αντίστοιχα. Για παράδειγμα στο αυθυλένιο, το οποίο έχει χημικό τύπο C_2H_4 , τα δύο άτομα άνθρακα είναι συνδεδεμένα με διπλό δεσμό μεταξύ τους και το κάθε ένα είναι επίσης συνδεδεμένο με δύο άτομα υδρογόνου όπως περιγράφεται από τον συντακτικό τύπο του σχήματος 3.2:



Σχήμα 3.2: Δεσμοί μορίου αιθυλενίου [1]

όπου τα – και = υποδηλώνουν απλούς και διπλούς ομοιοπολικούς δεσμούς, αντίστοιχα. Ένα παράδειγμα τριπλού δεσμού υπάρχει στο ακετυλένιο C_2H_2 (σχήμα 3.3):

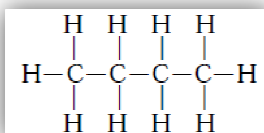


Σχήμα 3.3: Τριπλός δεσμός στο ακετυλένιο [1]

Τα μόρια που έχουν διπλούς και τριπλούς δεσμούς ονομάζονται *ακόρεστα*, δηλαδή κάθε άτομο άνθρακα δεν συνδέεται με το μέγιστο αριθμό (τέσσερα) άλλων ατόμων. Για ένα ακόρεστο άτομο, ένας διπλός δεσμός μπορεί να θεωρηθεί ότι αποτελείται από δύο απλούς δεσμούς. Η μετακίνηση ενός από τους δύο δεσμούς γύρω από το άτομο του άνθρακα επιτρέπει την προσθήκη ενός ακόμη ατόμου ή ομάδας ατόμων στο αρχικό μόριο. Φυσικά, σε έναν *κορεσμένο* υδρογονάνθρακα όλοι οι δεσμοί είναι απλοί (και κορεσμένοι) και κανένα νέο άτομο δεν μπορεί να συνδεθεί χωρίς τη μετακίνηση άλλων ήδη συνδεδεμένων.

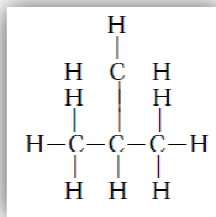
Μερικοί από τους πιο απλούς υδρογονάνθρακες ανήκουν στην οικογένεια των παραφινών. Τα μόρια των παραφινών που μοιάζουν με αλυσίδες περιλαμβάνουν το μεθάνιο (CH_4), το αιθάνιο (C_2H_6), το προπάνιο (C_3H_8) και το βουτάνιο (C_4H_{10}). Οι ομοιοπολικοί δεσμοί σε κάθε μόριο είναι ισχυροί αλλά μόνο ασθενείς δεσμοί υδρογόνου και δεσμοί van der Waals υπάρχουν μεταξύ μορίων και συνεπώς, οι υδρογονάνθρακες αυτοί έχουν σχετικά χαμηλά σημεία τήξης και βρασμού. Οι θερμοκρασίες βρασμού όμως αυξάνονται με την αύξηση του μοριακού βάρους.

Τα μόρια των υδρογονανθράκων με την ίδια σύσταση μπορούν να έχουν διαφορετική διευθέτηση των ατόμων τους, ένα φαινόμενο που ονομάζεται *ισομέρεια*. Για παράδειγμα, υπάρχουν δύο ισομερή του βουτανίου. Το κανονικό βουτάνιο έχει τη δομή:



Σχήμα 3.4.: Κανονικό βουτάνιο [1]

ενώ ένα μόριο ισοβουτανίου παριστάνεται ως εξής:



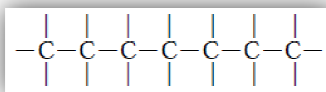
Σχήμα 3.5.: Ισοβουτάνιο [1]

Μερικές από τις φυσικές ιδιότητες των υδρογονανθράκων εξαρτώνται από την ισομέρεια. Για παράδειγμα, οι θερμοκρασίες βρασμού για το κανονικό βουτάνιο και το ισοβουτάνιο είναι -0.5 και -12.3°C αντίστοιχα.

Υπάρχουν πολυάριθμες άλλες οργανικές ομάδες, πολλές από τις οποίες υπεισέρχονται στις δομές των πολυμερών. Παραδείγματα ριζών που συνδέονται με απλούς δεσμούς είναι οι CH_3 (μεθυλ-), C_2H_5 (αιθυλ-) και C_6H_5 (φαινυλ-) ομάδες.

3.3 ΜΟΡΙΑ ΠΟΛΥΜΕΡΩΝ [1]

Τα μόρια στα πολυμερή είναι γιγαντιαία σε σύγκριση με τα μόρια των υδρογονανθράκων που έχουν συζητηθεί μέχρι τώρα. Λόγω του μεγέθους τους συχνά αναφέρονται σαν *μακρομόρια*. Σε κάθε μόριο, τα άτομα συνδέονται μεταξύ τους με ομοιοπολικούς δεσμούς μεταξύ ατόμων. Για τα περισσότερα πολυμερή, τα μόρια αυτά βρίσκονται στη μορφή μακριών και εύκαμπτων αλυσίδων, των οποίων ο σκελετός είναι μια ευθεία γραμμή από άτομα άνθρακα. Πολλές φορές κάθε άτομο άνθρακα συνδέεται με απλό δεσμό με δύο γειτονικούς άνθρακες στη κάθε πλευρά του, που παριστάνεται σχηματικά ως εξής:



Σχήμα 3.6.: Αναπαράσταση πολυμερικής αλυσίδας [1]

Κάθε ένα από τα δύο εναπομείναντα ηλεκτρόνια σθένους για κάθε άτομο άνθρακα μπορεί να υπεισέρχεται σε πλευρικούς δεσμούς με άτομα ή ρίζες που τοποθετούνται γειτονικά με την αλυσίδα. Φυσικά, τόσο οι αλυσίδες όσο και οι διπλοί δεσμοί είναι δυνατοί. Τα επιμήκη αυτά μόρια αποτελούνται από δομικές ομάδες που καλούνται ομάδες μονομερών και οι οποίες επαναλαμβάνονται διαδοχικά κατά μήκος της αλυσίδας. Μια μοναδική ομάδα μονομερούς καλείται απλά *μονομερές*. Ο όρος *πολυμερές* χρησιμοποιείται για να υποδηλώσει πολλές ομάδες μονομερών. Ο όρος «ομάδα μονομερούς» υποδηλώνει

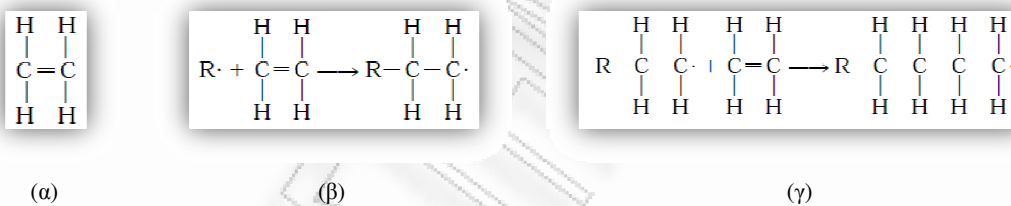
την επαναλαμβανόμενη ομάδα σε μια πολυμερική αλυσίδα ενώ ο απλός όρος «μονομερές» χρησιμοποιείται με την έννοια του μορίου που συγκροτεί μια ομάδα μονομερούς.

3.4 Η ΧΗΜΕΙΑ ΤΩΝ ΠΟΛΥΜΕΡΙΚΩΝ ΜΟΡΙΩΝ [1]

Έστω ο υδρογονάνθρακας αιθυλένιο (C_2H_4) ο οποίος βρίσκεται σε αέρια μορφή σε θερμοκρασία και πίεση περιβάλλοντος και έχει την μοριακή δομή του σχήματος 3.7.α.

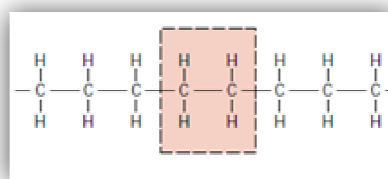
Εάν στο αέριο αιθυλένιο εφαρμοστούν κατάλληλες συνθήκες θερμοκρασίας και πίεσης, αυτό θα μετατραπεί σε πολύ-αιθυλένιο (PE), το οποίο είναι ένα στέρεο πολυμερικό υλικό. Η διαδικασία αυτή αρχίζει όταν σχηματίζεται ένα ενεργό μονομερές από την αντίδραση μεταξύ ενός εκκινητή ή καταλύτη (R') και του αιθυλενικού μονομερούς (σχήμα 3.7.β).

Η πολυμερική αλυσίδα τότε σχηματίζεται από τη διαδοχική προσθήκη μονομερών αιθυλενικών ομάδων σε αυτό το ενεργό κέντρο εκκινητή ομάδας μονομερούς. Το ενεργό κέντρο, ή ασύζευκτο ηλεκτρόνιο (συμβολίζεται με \cdot), μεταφέρεται στο εκάστοτε τελικό μονομερές καθώς συνδέεται με την αλυσίδα (σχήμα 3.7.γ).



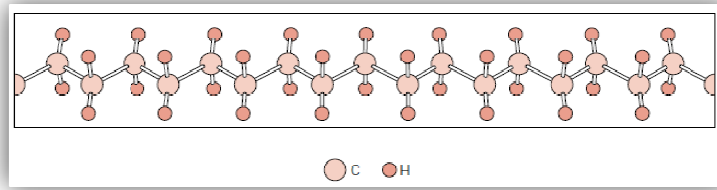
Σχήμα 3.7.: (α) Μόριο αιθυλενίου, (β) αντίδραση μεταξύ ενός εκκινητή και του αιθυλενικού μονομερούς, (γ) σύνδεση μονομερούς με την αλυσίδα [1]

Το τελικό αποτέλεσμα, μετά από την προσθήκη πολλών μονομερών ομάδων αιθυλενίου, είναι το μόριο του πολυαιθυλενίου, ένα τμήμα του οποίου φαίνεται στο σχήμα 3.8:



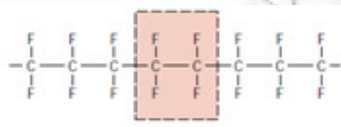
Σχήμα 3.8.: Μόριο πολυαιθυλενίου (PE) [1]

Η αναπαράσταση αυτή δεν είναι αυστηρά ορθή αφού η γωνία μεταξύ των συνδεδεμένων με απλό δεσμό ατόμων άνθρακα δεν είναι 180° όπως φαίνεται, αλλά 109° . Ένα πιο ακριβές τρισδιάστατο μοντέλο είναι εκείνο στο οποίο τα άτομα άνθρακα σχηματίζουν ένα μοτίβο ζιγκ-ζαγκ (σχήμα 3.9), όπου το μήκος του δεσμού C - C είναι 0,154nm.



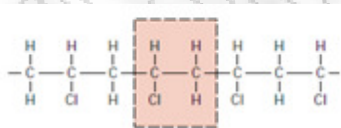
Σχήμα 3.9.: Τρισδιάστατο μοντέλο πολυαιθυλενίου (PE) [1]

Εάν όλα τα άτομα υδρογόνου στο πολυαιθυλένιο αντικατασταθούν από φθόριο, το πολυμερές που προκύπτει είναι το πολυτετραφθοροαιθυλένιο (PTFE). Το πολυτετραφθοροαιθυλένιο (γνωστό με το εμπορικό όνομα Teflon, σχήμα 3.10) ανήκει σε μια ομάδα πολυμερών που ονομάζονται φθοράνθρακες:



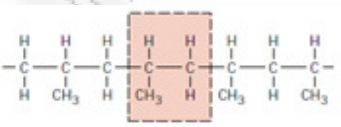
Σχήμα 3.10.: Πολυτετραφθοροαιθυλένιο ή Teflon (PTFE) [1]

Το πολυβινυλοχλωρίδιο (PVC), ένα άλλο συνήθες πολυμερές, έχει δομή που είναι ελαφρά παραλλαγή εκείνης του πολυαιθυλενίου, στην οποία το κάθε τέταρτο υδρογόνο αντικαθίσταται από ένα άτομο χλωρίου (σχήμα 3.11):



Σχήμα 3.11.: Πολυβινυλοχλωρίδιο (PVC) [1]

Επιπλέον, η αντικατάσταση κάθε ατόμου χλωρίου από μια μεθυλομάδα, δίνει σαν αποτέλεσμα το πολυπροπυλένιο (PP, σχήμα 3.12):



Σχήμα 3.12.: Πολυπροπυλένιο (PP) [1]

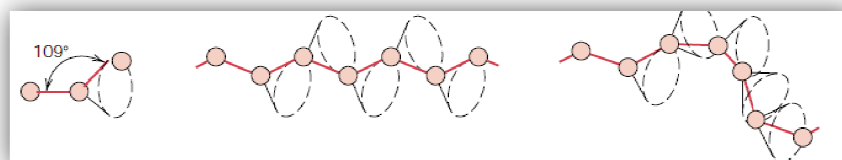
Ο πίνακας 3.1 απεικονίζει τις δομές μονομερών ορισμένων από τα πλέον συνήθη πολυμερή. Όταν όλες οι επαναλαμβανόμενες ομάδες κατά μήκος μιας αλυσίδας είναι του ίδιου είδους, το πολυμερές που προκύπτει λέγεται *ομοπολυμερές*. Δεν υπάρχουν περιορισμοί στη σύνθεση πολυμερών που να απαγορεύουν το σχηματισμό ενώσεων πέρα από τα ομοπολυμερή και, στην πραγματικότητα, οι αλυσίδες μπορούν να αποτελούνται από δύο ή περισσότερες ομάδες μονομερούς, σχηματίζοντας αυτό που καλείται *συμπολυμερές*.

Πολυμερές	Μονομερές	Πολυμερές	Μονομερές
PE		PMMA	
PVC		PET	
PP		PC	
PS		Όπου <i>b</i> :	

Πίνακας 3.1.: Δομές ομάδων μονομερών συνήθων πολυμερών [1]

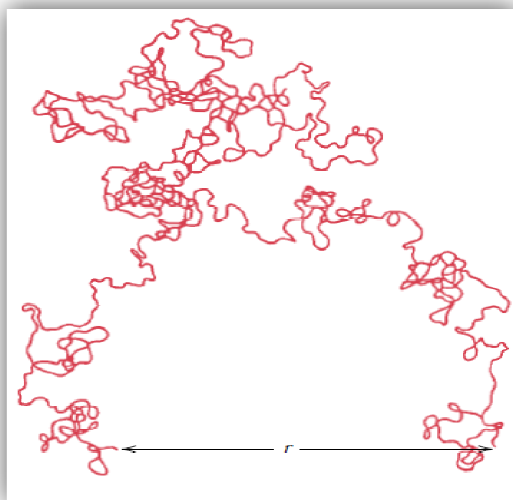
3.5 ΜΟΡΙΑΚΟ ΣΧΗΜΑ [1]

Δεν υπάρχει λόγος να υποθεθεί ότι τα μόρια των πολυμερικών αλυσίδων είναι αυστηρά ευθύγραμμα, αν παραβλεφτεί η διαμόρφωση ζιγκ – ζαγκ του σκελετού των ατόμων. Οι απλοί δεσμοί είναι ικανοί να περιστρέφονται και να κάμπτονται στις τρεις διαστάσεις. Έστω τα άτομα των αλυσίδων του σχήματος 3.13:



Σχήμα 3.13.: Περιστροφή πολυμερικών αλυσίδων στις τρεις διαστάσεις [1]

Ένα τρίτο άτομο άνθρακα μπορεί να βρίσκεται σε κάθε σημείο του κώνου περιστροφής και να εξακολουθεί να βρίσκεται σε γωνία 109° με το δεσμό μεταξύ των δύο άλλων ατόμων. Όταν τοποθετούνται διαδοχικά άτομα αλυσίδας όπως στο σχήμα 3.13 προκύπτει ένα τμήμα ευθείας αλυσίδας. Από την άλλη πλευρά, κάμψη και στρέψη είναι δυνατή όταν γίνεται περιστροφή των ατόμων των αλυσίδων σε άλλες θέσεις, όπως φαίνεται στο ίδιο σχήμα. Συνεπώς, ένα μόριο μιας αλυσίδας που αποτελείται από πολλά άτομα μπορούν να λαμβάνουν σχήμα παρόμοιο με εκείνο που σχηματικά αναπαριστάται στο σχήμα 3.14, έχοντας δηλαδή ένα πλήθος κάμψεων, στρέψεων και εκκεντροτήτων. Επίσης, στο σχήμα 3.14 φαίνεται η απόσταση μεταξύ των άκρων των πολυμερικών αλυσίδων, r . Η απόσταση αυτή είναι πολύ μικρότερη από το συνολικό μήκος της αλυσίδας.



Σχήμα 3.14.: Διαμόρφωση πολυμερικής αλυσίδας και απόσταση μεταξύ των άκρων της [1]

Τα πολυμερή αποτελούνται από έναν μεγάλο αριθμό μοριακών αλυσίδων, κάθε μία από τις οποίες μπορεί να κάμπτεται, να περιελίσσεται και να διπλώνεται. Αυτό οδηγεί σε εκτεταμένη αλληλοδιείσδυση και διαπλοκή μεταξύ των γειτονικών μοριακών αλυσίδων. Αυτές οι τυχαίες περιελίξεις και μοριακές διαπλοκές ευθύνονται για έναν αριθμό σημαντικών χαρακτηριστικών των πολυμερών, συμπεριλαμβανόμενων και των μεγάλων ελαστικών παραμορφώσεων που συναντώνται στα ελαστομερή. Μερικά από τα μηχανικά και θερμικά χαρακτηριστικά των πολυμερών είναι συνάρτηση της ικανότητας τμημάτων των αλυσίδων να υφίστανται περιστροφή αποκρινόμενα σε εφαρμοζόμενες μηχανικές τάσεις ή θερμικές δονήσεις. Η ευελιξία περιστροφής εξαρτάται από τη δομή και τη χημεία του εκάστοτε μονομερούς. Για παράδειγμα, η περιοχή ενός τμήματος αλυσίδας με διπλό δεσμό ($C=C$) είναι εντελώς άκαμπτη. Ομοίως, η εισαγωγή μιας ογκώδους (μεγάλης) πλευρικής ομάδας ατόμων περιορίζει την περιστροφική κίνηση.

3.6 ΜΟΡΙΑΚΗ ΔΟΜΗ [1]

Τα φυσικά χαρακτηριστικά των πολυμερών εξαρτώνται όχι μόνο από το μοριακό τους βάρος και σχήμα, αλλά και από τις διαφορές στη δομή των μοριακών αλυσίδων τους. Οι σύγχρονες τεχνικές σύνθεσης πολυμερών επιτρέπουν σημαντικό έλεγχο των διάφορων δυνατών δομών.

Γραμμικά Πολυμερή

Τα γραμμικά πολυμερή (σχήμα 3.15α) είναι εκείνα στα οποία οι ομάδες των μονομερών συνδέονται μεταξύ τους από τα άκρα σε απλές αλυσίδες. Αυτές οι μακριές αλυσίδες είναι αρκετά εύκαμπτες. Στα γραμμικά πολυμερή υπάρχουν σε μεγάλο βαθμό δυνάμεις van der Waals μεταξύ των αλυσίδων. Μερικά από τα συνήθη πολυμερή που σχηματίζουν γραμμικές δομές είναι το πολυαιθυλένιο,

το πολυβινυλοχλωρίδιο, το πολυστερένιο, ο πολυμεθακρυλικός μεθυλεστέρας, το Nylon και οι φθοράνθρακες.

Διακλαδωμένα Πολυμερή

Μπορούν να συντεθούν πολυμερή στα οποία πλευρικές αλυσίδες συνδέονται με τις κύριες, όπως φαίνεται στο σχήμα 3.15β. Αυτά ονομάζονται *διακλαδωμένα* πολυμερή. Οι πλευρικές αλυσίδες (κλάδοι), οι οποίες θεωρούνται μέρος του κυρίως σκελετού του μορίου, προέρχονται από πλευρικές αντιδράσεις που συμβαίνουν κατά τη σύνθεση του πολυμερούς. Η αποδοτικότητα στο πακετάρισμα των αλυσίδων μειώνεται με τον σχηματισμό των πλευρικών αλυσίδων, πράγμα που συνεπάγεται τη μείωση της πυκνότητας του πολυμερούς. Τα πολυμερή που σχηματίζουν γραμμικές δομές μπορούν επίσης να είναι διακλαδωμένα.

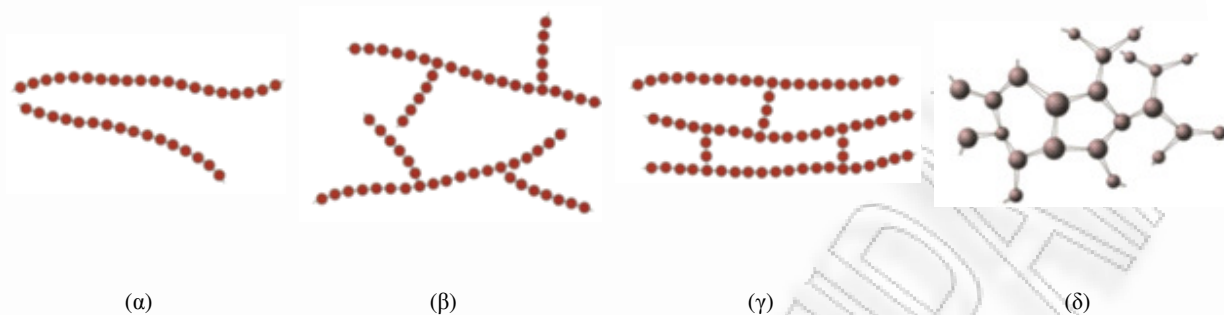
Διασταυρωμένα Πολυμερή

Στα *διασταυρωμένα* πολυμερή, οι γειτονικές πλευρικές αλυσίδες ενώνονται μεταξύ τους σε διάφορες θέσεις με ομοιοπολικούς δεσμούς, όπως παριστάνεται στο σχήμα 3.15γ. Η διαδικασία της διασταύρωσης επιτυγχάνεται με προστιθέμενα άτομα ή μόρια που είναι ομοιοπολικά συνδεδεμένα στην κύρια αλυσίδα. Πολλά από τα ελαστικά υλικά είναι διασταυρωμένα. Στα ελαστικά, αυτό ονομάζεται *βουλκανισμός*.

Δικτυωμένα Πολυμερή

Τριδραστικές ομάδες μονομερών, που διαθέτουν τρεις ενεργούς ομοιοπολικούς δεσμούς, σχηματίζουν τρισδιάστατα δίκτυα (σχήμα 3.15δ) και ονομάζονται *δικτυωμένα* πολυμερή. Στην πραγματικότητα, ένα πολυμερές που είναι πολύ διασταυρωμένο, μπορεί να ταξινομηθεί σαν ένα δικτυωμένο πολυμερές. Αυτά τα υλικά έχουν εξαιρετικές μηχανικές και θερμικές ιδιότητες. Τα εποξειδικά πολυμερή και τα πολυμερή φαινόλης - φορμαλδεΐδης ανήκουν σε αυτή την κατηγορία.

Πρέπει να τονιστεί, ότι τα πολυμερή συνήθως δεν έχουν ένα συγκεκριμένο είδος δομής. Για παράδειγμα, ένα κατά βάση γραμμικό πολυμερές μπορεί να έχει σε περιορισμένο βαθμό διακλάδωση και διασταυρώσεις.

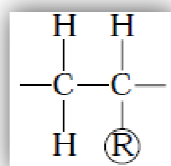


Σχήμα 3.15.: Τύποι μοριακής δομής πολυμερών [1]

3.7 ΔΙΑΜΟΡΦΩΣΕΙΣ ΤΩΝ ΜΟΡΙΩΝ [1]

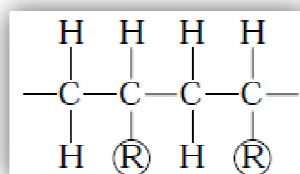
Οι ιδιότητες των πολυμερών, τα οποία έχουν περισσότερα από ένα πλευρικά άτομα ή ομάδες ατόμων που συνδέονται με την κύρια αλυσίδα, μπορούν να επηρεαστούν σημαντικά από την κανονικότητα και την συμμετρία της πλευρικής ομάδας.

Έστω η ομάδα μονομερούς (σχήμα 3.16):



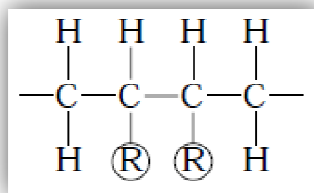
Σχήμα 3.16.: Πλευρική ομάδα (R) σε μονομερές [1]

στην οποία το R αναπαριστά ένα άτομο ή πλευρική ομάδα διαφορετική από υδρογόνο (π.χ. Cl, CH₃). Μία δυνατή διαμόρφωση είναι όταν οι πλευρικές ομάδες R των διαδοχικών ομάδων μονομερών συνδέονται με εναλλασσόμενα άτομα ως εξής (σχήμα 3.17):



Σχήμα 3.17.: Σύνδεση ομάδων μονομερών με πλευρικές ομάδες R με εναλλασσόμενα άτομα [1]

Αυτή χαρακτηρίζεται σαν διαμόρφωση αρχής – τέλους. Η συμπληρωματική της διαμόρφωση αρχής – αρχής σχηματίζεται όταν ομάδες R ενώνονται με γειτονικά άτομα αλυσίδων (σχήμα 3.18):

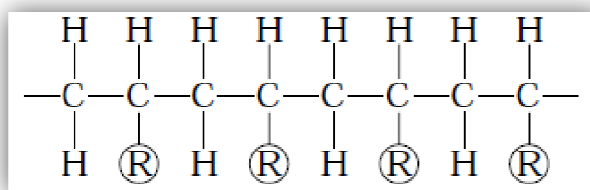


Σχήμα 3.18.: Σύνδεση ομάδων μονομερών με πλευρικές ομάδες R με γειτονικά άτομα [1]

Στα περισσότερα πολυμερή, η διαμόρφωση αρχής – τέλους είναι η κυρίαρχη. Στη διαμόρφωση αρχής – αρχής, συχνά υφίσταται μια πολική άπωση μεταξύ των ομάδων R. Ισομέρεια συναντάται επίσης στα πολυμερικά μόρια, όπου είναι δυνατές διάφορες ατομικές διαμορφώσεις για την ίδια σύσταση.

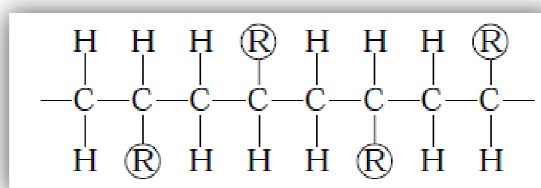
3.7.1 ΣΤΕΡΕΟΪΣΟΜΕΡΕΙΑ

Η στερεοϊσομέρεια υποδηλώνει την κατάσταση όπου τα άτομα συνδέονται μεταξύ τους με την ίδια τάξη (αρχή – τέλος), αλλά διαφέρουν στην τοποθέτησή τους στο χώρο. Για ένα στερεοϊσομερές, όλες οι ομάδες R βρίσκονται στην ίδια πλευρά της αλυσίδας. Αυτή η διαμόρφωση ονομάζεται *ισοτακτική* (σχήμα 3.19):



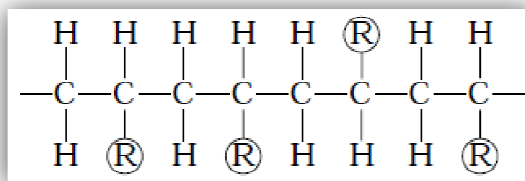
Σχήμα 3.19.: Ισοτακτική διαμόρφωση πολυμερικής αλυσίδας [1]

Στην συνδιοτακτική διαμόρφωση, οι ομάδες R εναλλάσσονται στις πλευρές γύρω από την αλυσίδα (σχήμα 3.20):



Σχήμα 3.20.: Συνδιοτακτική διαμόρφωση πολυμερικής αλυσίδας [1]

Τέλος για την τυχαία τοποθέτηση (σχήμα 3.21) χρησιμοποιείται ο όρος *ατακτική* διαμόρφωση:

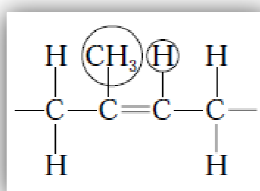


Σχήμα 3.21.: Ατακτική διαμόρφωση πολυμερικής αλυσίδας [1]

Η μετατροπή της μιας στερεοϊσομέρειας σε κάποια άλλη (π.χ. ισοτακτικό προς συνδιοτακτικό) δεν είναι δυνατή με απλή περιστροφή γύρω από απλούς δεσμούς αλυσίδων. Οι δεσμοί αυτοί πρέπει να διαρραγούν και στη συνέχεια, μετά την κατάλληλη περιστροφή, να ξανασηματιστούν. Στην πραγματικότητα, ένα συγκεκριμένο πολυμερές δεν έχει μόνο μία από αυτές τις διαμορφώσεις. Η κυρίαρχη μορφή εξαρτάται από τη μέθοδο της σύνθεσης.

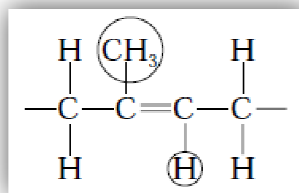
3.7.2 ΓΕΩΜΕΤΡΙΚΗ ΙΣΟΜΕΡΕΙΑ

Είναι δυνατές και άλλες σημαντικές διαμορφώσεις αλυσίδων (ή γεωμετρικών ισομερών) σε κάθε ομάδα μονομερούς, με διπλό δεσμό μεταξύ ατόμων άνθρακα της αλυσίδας. Συνδεδεμένο με κάθε ένα από τα άτομα άνθρακα που συμμετέχουν στο διπλό δεσμό υπάρχει ένα και μόνο πλευρικό άτομο ή ρίζα, η οποία μπορεί να βρίσκεται στη μία πλευρά της αλυσίδας ή στην αντίθετη. Έστω η ομάδα μονομερούς του ισοπροπενίου με τη δομή *cis* (σχήμα 3.22):



Σχήμα 3.22.: *cis*-Ισοπροπένιο [1]

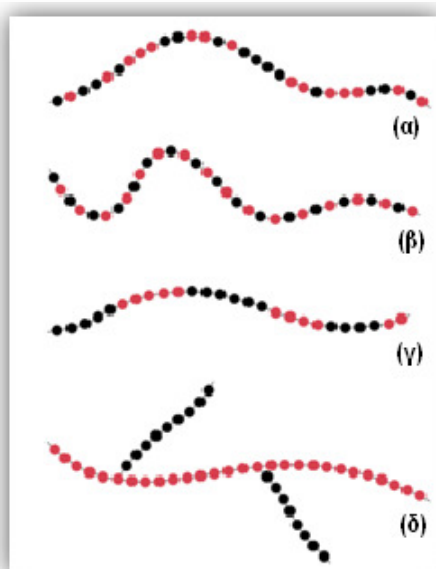
στην οποία η ομάδα CH_3 και το άτομο H τοποθετούνται στην ίδια πλευρά της αλυσίδας. Το πολυμερές που προκύπτει, το *cis*-πολυισοπρένιο είναι ένα φυσικό ελαστικό (καουτσούκ). Για την άλλη περίπτωση ισομερούς, την *trans* δομή (σχήμα 3.23), τα CH_3 και H βρίσκονται στις αντίθετες πλευρές της αλυσίδας. Το *trans*-πολυισοπρένιο, που συχνά ονομάζεται γουταπέρκα, έχει ιδιότητες που είναι ξεκάθαρα διαφορετικές από εκείνες του φυσικού καουτσούκ, ως αποτέλεσμα αυτής της εναλλαγής στη διαμόρφωση του. Μετατροπή του *trans* σε *cis*, ή και αντίθετα, δεν είναι δυνατή με απλή περιστροφή της αλυσίδας γύρω από τον δεσμό, επειδή ο διπλός δεσμός είναι εξαιρετικά ισχυρός.



Σχήμα 3.23.: *trans*-Ισοπροπένιο [1]

Συνοψίζοντας τις προηγούμενες ενότητες, φαίνεται ότι τα μόρια των πολυμερών μπορούν να χαρακτηρισθούν αναφορικά με το μέγεθος, το σχήμα και τη δομή τους. Το μοριακό μέγεθος καθορίζεται βάσει του μοριακού βάρους (ή του βαθμού πολυμερισμού). Το μοριακό σχήμα σχετίζεται με τον τρόπο που οι δομικές ομάδες ενώνονται μεταξύ τους. Γραμμικές, διακλαδωμένες, διάσταυρωμένες και δικτυακές δομές, είναι όλες δυνατές επιπλέον ορισμένων ισομερών διαμορφώσεων (ισοτακτικής, συνδιοτακτικής, *cis* και *trans*).

3.8 ΣΥΜΠΟΛΥΜΕΡΗ [1]



Σχήμα 3.24.: Τύποι συμπολυμερών [1]

Οι επιστήμονες και οι χημικοί των πολυμερών ερευνούν συνεχώς για νέα υλικά που να συντίθενται εύκολα και οικονομικά, με βελτιωμένες ιδιότητες ή καλύτερους συνδυασμούς ιδιοτήτων από εκείνες που έχουν τα ομοπολυμερή που αναφέρθηκαν έως τώρα. Μια ομάδα αυτών των πολυμερών είναι τα *συμπολυμερή*. Ανάλογα με τη διαδικασία πολυμερισμού και τα σχετικά κλάσματα του είδους των ομάδων μονομερών, είναι δυνατές διαφορετικές διευθετήσεις στην αλληλουχία κατά μήκος των πολυμερικών αλυσίδων. Για κάποια από αυτές, όπως φαίνεται στο σχήμα 3.24α, οι δύο διαφορετικές ομάδες διασπείρονται τυχαία κατά μήκος της αλυσίδας σε αυτό που ονομάζεται *συμπολυμερές τυχαίας δομής*. Σε ένα *εναλλασσόμενο συμπολυμερές*, όπως υποδηλώνει και το όνομα, οι δύο ομάδες μονομερούς εναλλάσσονται στις θέσεις της αλυσίδας, με τον τρόπο που φαίνεται στο σχήμα 3.24β. Ένα *συμπολυμερές μπλοκ* είναι εκείνο στο οποίο ομοειδείς ομάδες μονομερών συντάσσονται μαζί σε μεγάλα ομοιογενή τμήματα (μπλοκ) κατά μήκος της αλυσίδας (σχήμα 3.24γ). Τέλος, *πλευρικές αλυσίδες* ενός είδους ομοπολυμερούς μπορούν να εμβολιαστούν σε μια κύρια αλυσίδα ομοπολυμερούς διαφορετικής ομάδας μονομερούς. Ένα τέτοιο υλικό ονομάζεται *συμπολυμερές εμβολιασμού* (σχήμα 3.24δ).

Τα συνθετικά ελαστικά συχνά είναι συμπολυμερή. Το καουτσούκ στυρενίου-βουταδιενίου (SBR) είναι ένα κοινό συμπολυμερές τυχαίας δομής από το οποίο κατασκευάζονται τα ελαστικά των αυτοκινήτων. Το καουτσούκ νιτριλίου (NBR) είναι ένα ακόμα συμπολυμερές τυχαίας δομής αποτελούμενο από ακρυλονιτρίλιο και βουταδιένιο. Είναι επίσης πολύ ελαστικό και επιπλέον ανθεκτικό στη διόγκωση σε οργανικούς διαλύτες. Οι λαστιχένιοι σωλήνες της βενζίνης κατασκευάζονται από NBR.

3.9 ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ 3^{ΟΥ} ΚΕΦΑΛΑΙΟΥ

- [1] William D. Callister, Materials Science And Engineering: An Introduction, Seventh Edition John Willey and Sons, Inc, 2007

Περίληψη:

Για τις περισσότερες εφαρμογές, οι μηχανικές ιδιότητες παρέχουν τις πιο σημαντικές πληροφορίες για την συμπεριφορά των υλικών. Εκτεταμένες δοκιμές πραγματοποιούνται για την προσομοίωση των φορτίων και των περιβαλλοντικών συνθηκών κάτω από τις οποίες καλούνται να λειτουργήσουν τα υλικά ώστε να εξασφαλιστεί η ασφάλεια της κατασκευής.

Σε αυτό το κεφάλαιο γίνεται αναφορά των σημαντικότερων μηχανικών ιδιοτήτων των υλικών με ιδιαίτερη αναφορά στα πολυμερή και τα χαρακτηριστικά τους.



4.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ [1]

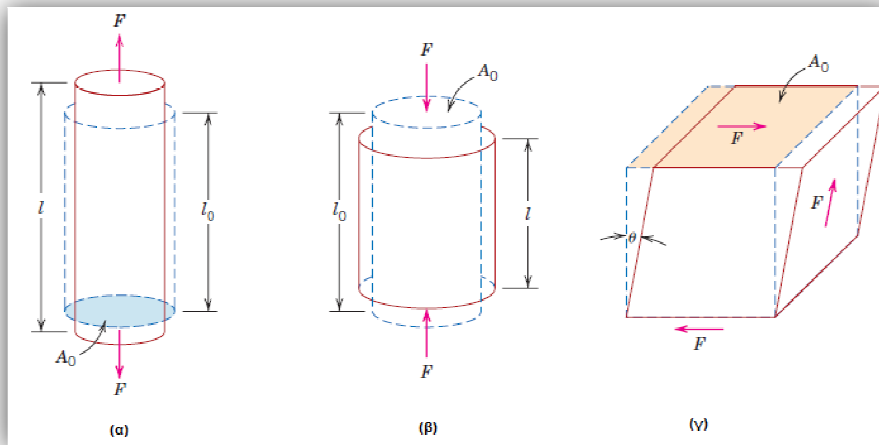
Τα υλικά κατά τη διάρκεια του λειτουργικού χρόνου ζωής τους υπόκεινται σε δυνάμεις ή φορτία. Σε αυτές τις περιπτώσεις είναι απαραίτητη η γνώση των χαρακτηριστικών και των ιδιοτήτων των υλικών και ο κατάλληλος σχεδιασμός του τμήματος της κατασκευής, έτσι ώστε οποιαδήποτε προκύπτουσα παραμόρφωση να μην είναι υπέρμετρη και να μην προκαλείται αστοχία ή θραύση. Η μηχανική συμπεριφορά των υλικών αντανακλά τη σχέση μεταξύ της απόκρισής τους (ή αλλιώς της παραμόρφωσης τους) και του εφαρμοζόμενου φορτίου ή δύναμης. Σημαντικές μηχανικές ιδιότητες είναι η αντοχή, η σκληρότητα, η ολκιμότητα και η δυσκαμψία.

Οι μηχανικές ιδιότητες των υλικών εξακριβώνονται εκτελώντας προσεκτικά σχεδιασμένα πειράματα στο εργαστήριο. Τα πειράματα αυτά προσομοιάζουν όσο το δυνατόν περισσότερο τις συνθήκες λειτουργίας. Στους παράγοντες που πρέπει να εξετάζονται περιλαμβάνονται η φύση του εφαρμοζόμενου φορτίου και η διάρκειά του, καθώς επίσης και οι περιβαλλοντικές συνθήκες. Είναι πιθανόν το φορτίο να είναι εφελκυστικό, θλιπτικό ή διατμητικό και το μέγεθός του να παραμένει σταθερό με το χρόνο ή να μεταβάλλεται. Ο χρόνος εφαρμογής μπορεί να είναι μόνο ένα κλάσμα του δευτερολέπτου ή να εκτείνεται σε μια ολόκληρη περίοδο πολλών ετών. Τέλος, η θερμοκρασία που επικρατεί κατά την λειτουργική ζωή του υλικού μπορεί να αποδειχθεί σημαντικός παράγοντας.

Οι μηχανικές ιδιότητες ενδιαφέρουν μία ποικιλία κατηγοριών (π.χ. παραγωγοί και καταναλωτές υλικών, ερευνητικοί οργανισμοί, κυβερνητικές υπηρεσίες κ.α.) με διαφορετικές επιδιώξεις. Συνεπώς είναι επιβεβλημένο να υπάρχει κάποια συμβατότητα στον τρόπο με τον οποίο διεξάγονται αυτές οι δοκιμές καθώς και στην ερμηνεία των αποτελεσμάτων τους. Η συμβατότητα αυτή επιτυγχάνεται χρησιμοποιώντας τυποποιημένες τεχνικές δοκιμών. Η καθιέρωση και η δημοσίευση τέτοιων προτύπων συνήθως συντονίζεται από επαγγελματικές ενώσεις. Στις Ηνωμένες Πολιτείες της Αμερικής ο πλέον ενεργός οργανισμός είναι η *American Society for Testing and Materials (ASTM)*. Η ετήσια έκδοση των προτύπων (*Annual Book of ASTM Standards*) περιλαμβάνει ένα μεγάλο αριθμό τόμων, με συνεχή ενημέρωση.

4.2 ΟΙ ΈΝΝΟΙΕΣ ΤΗΣ ΤΑΣΗΣ ΚΑΙ ΤΗΣ ΠΑΡΑΜΟΡΦΩΣΗΣ [1]

Όταν ένα φορτίο είναι στατικό ή μεταβάλλεται σχετικά αργά με τον χρόνο και εφαρμόζεται ομοιόμορφα σε μία κάθετη διατομή ή επιφάνεια ενός σώματος, η μηχανική του συμπεριφορά μπορεί να εξακριβωθεί με μία απλή δοκιμή τάσης – παραμόρφωσης. Οι βασικοί τρόποι με τους οποίους μπορεί να εφαρμοστεί είναι τρεις: ο εφελκυσμός (σχήμα 4.1α), η θλίψη (σχήμα 4.1β) και η διάτμηση (σχήμα 4.1γ).

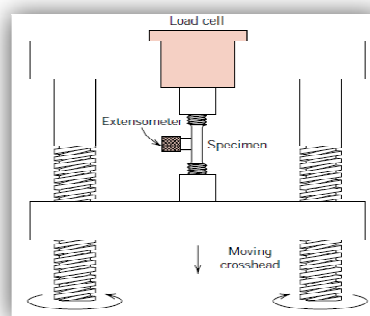


Σχήμα 4.1.: Βασικοί τρόποι εφαρμογής φορτίου [1]

Όπως προκύπτει από τις τεχνικές εφαρμογές, πολλά φορτία είναι στρεπτικά παρά καθαρώς διατμητικά.

4.2.1 ΔΟΚΙΜΗ ΕΦΕΛΚΥΣΜΟΥ

Μία από τις πιο συνηθισμένες μηχανικές δοκιμές τάσης – παραμόρφωσης είναι ο εφελκυσμός. Η δοκιμή εφελκυσμού μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την εύρεση διάφορων μηχανικών ιδιοτήτων των υλικών που θεωρούνται σημαντικές στη διαδικασία του σχεδιασμού. Συνήθως ένα δοκίμιο παραμορφώνεται μέχρι τη θραύση του, αυξάνοντας σταδιακά το εφελκυστικό φορτίο που εφαρμόζεται μονοαξονικά κατά μήκος του μεγάλου άξονα του δοκιμίου. Οι μηχανές δοκιμής (σχήμα 4.2) του εφελκυσμού σχεδιάζονται έτσι ώστε να επιμηκύνουν τα δοκίμια με σταθερό ρυθμό και να μετρούν συνεχώς και ταυτόχρονα το στιγμιαίο εφαρμοζόμενο φορτίο (με ένα κελί φόρτισης) και την προκύπτουσα επιμήκυνση (χρησιμοποιώντας ένα επιμηκυνσιόμετρο). Μία τυπική δοκιμή τάσης – παραμόρφωσης διαρκεί αρκετά λεπτά της ώρας και είναι καταστρεπτική, καθώς το δοκίμιο παραμορφώνεται μονίμως και συνήθως θραύεται.



Σχήμα 4.2.: Μηχανή δοκιμής εφελκυσμού και θλίψης [1]

Το αποτέλεσμα μίας τέτοιας δοκιμής εφελκυσμού καταγράφεται (με διάταξη καταγραφής ή υπολογιστή) σε διάγραμμα φορτίου ή δύναμης συναρτήσει της επιμήκυνσης. Η σχέση δύναμης – επιμήκυνσης εξαρτάται από τις διαστάσεις του δοκιμίου. Για την ελαχιστοποίηση της επίδρασης των γεωμετρικών παραγόντων, η δύναμη και η επιμήκυνση κανονικοποιούνται στις παραμέτρους *μηχανική τάση* (ή απλώς *τάση*) και *μηχανική παραμόρφωση* (ή απλώς *παραμόρφωση*) αντίστοιχα. Η μηχανική τάση ορίζεται από τη σχέση 4.1:

$$\sigma = \frac{F}{A_0} \quad (4.1)$$

όπου F είναι το στιγμιαίο φορτίο που εφαρμόζεται κάθετα στη διατομή του κάθε δοκιμίου, σε μονάδες newtons (N) ή pounds δύναμης (lbf) και A_0 είναι το αρχικό εμβαδόν της καθέτου διατομής πριν από την εφαρμογή οποιουδήποτε φορτίου σε m^2 ή in^2 . Οι μονάδες της τάσης στο Διεθνές Σύστημα Μονάδων (*Le Système International d'Unités, S.I.*) είναι τα MPa ($1 \text{ MPa} = 10^6 \text{ N/m}^2$).

Η μηχανική παραμόρφωση ορίζεται σύμφωνα με την σχέση 4.2:

$$\varepsilon = \frac{l_i - l_0}{l_0} = \frac{\Delta l}{l_0} \quad (4.2)$$

στην οποία l_0 είναι το αρχικό μήκος πριν την εφαρμογή οποιουδήποτε φορτίου και l_i είναι το στιγμιαίο μήκος. Μερικές φορές η ποσότητα $(l_i - l_0)$ σημειώνεται και ως Δl και αποτελεί την στιγμιαία παραμόρφωση επιμήκυνσης ή αλλιώς μεταβολή μήκους, με βάση αναφοράς το αρχικό μήκος. Η παραμόρφωση είναι αδιάστατο μέγεθος. Πολλές φορές η παραμόρφωση εκφράζεται σαν ποσοστό επί τοις εκατό.

4.2.2 ΔΟΚΙΜΗ ΘΛΙΨΕΩΣ

Θλιπτικές δοκιμές τάσης – παραμόρφωσης μπορούν να διεξαχθούν εφόσον οι εφαρμοζόμενες δυνάμεις είναι αυτού του είδους. Η δοκιμή θλίψεως διεξάγεται κατά τρόπο παρόμοιο της δοκιμής εφελκυσμού, εκτός του ότι η δύναμη είναι θλιπτική και το δοκίμιο συστέλλεται κατά μήκος της διεύθυνσης της τάσεως. Οι εξισώσεις 4.1 και 4.2 χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό της θλιπτικής τάσης και παραμόρφωσης, αντίστοιχα. Από σύμβαση, οι θλιπτικές δυνάμεις λαμβάνονται σαν αρνητικές, γεγονός που οδηγεί σε αρνητικές τάσεις. Επιπλέον, λόγω του ότι το l_0 είναι μεγαλύτερο από το l_i , οι θλιπτικές παραμορφώσεις που υπολογίζονται από την σχέση είναι επίσης αρνητικές. Οι δοκιμές εφελκυσμού είναι περισσότερο κοινές καθώς είναι ευκολότερες στη διεξαγωγή. Επιπλέον για τα περισσότερα υλικά που χρησιμοποιούνται σε δοκιμές εφαρμογές, πολύ λίγη επιπρόσθετη πληροφορία αποκτάται μέσω των θλιπτικών εφαρμογών. Οι δοκιμές θλίψεως χρησιμοποιούνται όταν η συμπεριφορά

ενός υλικού κάτω από μεγάλες και μόνιμες (π.χ. πλαστικές παραμορφώσεις) είναι επιθυμητή, όπως στις εφαρμογές βιομηχανικής παραγωγής ή όταν ένα υλικό είναι ψαθυρό σε εφελκυσμό.

4.2.3 ΔΟΚΙΜΕΣ ΔΙΑΤΜΗΣΗΣ ΚΑΙ ΣΤΡΕΨΗΣ

Για δοκιμές που διεξάγονται χρησιμοποιώντας μία καθαρά διατμητική δύναμη όπως φαίνεται στο σχήμα 4.1γ, η διατμητική τάση τ υπολογίζεται σύμφωνα με τη σχέση 4.3:

$$\tau = \frac{F}{A_0} \quad (4.3)$$

όπου F είναι το φορτίο που επιβάλλεται παράλληλα στην ανώτερη και κατώτερη πλευρά του δοκιμίου, η κάθε μία εκ των οποίων έχει εμβαδόν A_0 . Η διατμητική παραμόρφωση γ ορίζεται ως η εφαπτομένη της γωνίας παραμόρφωσης θ , όπως φαίνεται στο σχήμα 4.1γ. Οι μονάδες της διατμητικής τάσης και παραμόρφωσης είναι ίδιες με τα αντίστοιχα μεγέθη του εφελκυσμού.

Η στρέψη είναι μία παραλλαγή της καθαρής διάτμησης. Στρεπτικές δυνάμεις παράγουν μία περιστροφική κίνηση γύρω από τον διαμήκη άξονα, του ενός άκρου του σώματος ως προς το άλλο άκρο. Οι δοκιμές περιστροφής κανονικά διεξάγονται σε στερεούς κυλινδρικούς άξονες ή σωλήνες. Η διατμητική τάση τ είναι συνάρτηση της εφαρμοζόμενης ροπής T , ενώ η διατμητική παραμόρφωση γ σχετίζεται με την γωνία στρέψης φ .

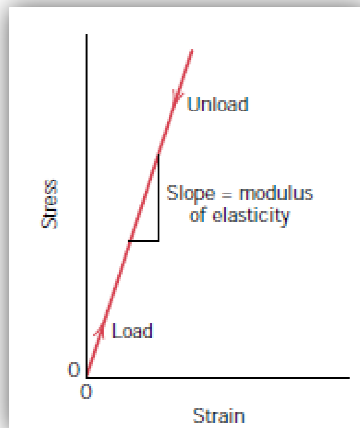
4.3 ΕΛΑΣΤΙΚΗ ΠΑΡΑΜΟΡΦΩΣΗ ΚΑΙ ΣΥΜΠΕΡΙΦΟΡΑ ΤΑΣΗΣ – ΠΑΡΑΜΟΡΦΩΣΗΣ [1]

Ο βαθμός κατά τον οποίο παραμορφώνεται μία κατασκευή εξαρτάται από την τάση στην οποία υπόκειται. Για τα περισσότερα υλικά όταν σε αυτά εξασκούνται εφελκυστικές τάσεις, σε σχετικά χαμηλά επίπεδα, η τάση και η παραμόρφωση είναι μεγέθη μεταξύ τους ανάλογα και συνδέονται μέσω της σχέσης 4.4:

$$\sigma = E \cdot \varepsilon \quad (4.4)$$

Αυτή η σχέση είναι γνωστή ως νόμος του *Hooke* και η σταθερά αναλογίας E (σε $\text{GPa}=10^9 \text{ n/m}^2=10^3 \text{ MPa}$) καλείται **Μέτρο Ελαστικότητας** ή **Μέτρο του Young** (*Young's Modulus*).

Οι μεταβολές των γεωμετρικών χαρακτηριστικών των σωμάτων κατά τις οποίες η τάση και η παραμόρφωση είναι μεγέθη ανάλογα ονομάζονται *ελαστικές παραμορφώσεις* και για αυτές το διάγραμμα της τάσης (τεταγμένη) συναρτήσει της παραμόρφωσης (τετμημένη) δίνει μία γραμμική σχέση, όπως φαίνεται και στο σχήμα 4.3:



Σχήμα 4.3.: Διάγραμμα τάσης – παραμόρφωσης [1]

Η κλίση του γραμμικού τμήματος αντιστοιχεί στο μέτρο ελαστικότητας E . Το μέτρο αυτό μπορεί να θεωρηθεί ως η δυσκαμψία του υλικού ή ως η αντίστασή του σε ελαστική παραμόρφωση. Όσο μεγαλύτερο είναι το μέτρο ελαστικότητας, τόσο πιο δύσκαμπτο είναι το υλικό, ή αλλιώς τόσο μικρότερη είναι η ελαστική παραμόρφωση που προκύπτει από την εφαρμογή μίας δεδομένης τάσης.

Η ελαστική παραμόρφωση είναι μη μόνιμη, πράγμα που σημαίνει ότι όταν το εφαρμοζόμενο φορτίο αίρεται το σώμα επιστρέφει στο αρχικό του σχήμα. Όπως φαίνεται και στο προηγούμενο διάγραμμα τάσης – παραμόρφωσης η εφαρμογή του φορτίου αντιστοιχεί σε μετακίνηση από την αρχή των αξόνων κατά μήκος της ευθείας γραμμής και προς τα πάνω. Μετά την αφαίρεση του φορτίου, η γραμμή διατρέχεται στην αντίθετη κατεύθυνση προς τα πίσω έως την αρχή των αξόνων.

Η άσκηση θλιπτικής διατμητικής ή στρεπτικής τάσης προκαλεί επίσης ελαστική συμπεριφορά. Τα χαρακτηριστικά τάσης – παραμόρφωσης, συμπεριλαμβανομένου και του μέτρου ελαστικότητας, σε χαμηλά επίπεδα τάσεων είναι ουσιαστικά τα ίδια τόσο για την εφελκυστική όσο και για την θλιπτική κατάσταση. Η διατμητική τάση και παραμόρφωση είναι ποσότητες αμοιβαίως ανάλογες μέσω της έκφρασης:

$$\tau = G \cdot \gamma \quad (4.5)$$

όπου G είναι το μέτρο διάτμησης, η κλίση δηλαδή της ελαστικής περιοχής της καμπύλης διατμητική τάση – παραμόρφωση.

4.4 ΠΛΑΣΤΙΚΗ ΠΑΡΑΜΟΡΦΩΣΗ [1]

Για τα περισσότερα μεταλλικά υλικά, η ελαστική περιοχή παραμόρφωσης περιορίζεται σε τιμές της τάξεως του 0.005. Καθώς το υλικό παραμορφώνεται πέραν αυτού του σημείου, η τάση δεν είναι

πλέον ανάλογη της παραμόρφωσης (ο νόμος του Hooke παύει να ισχύει) και εμφανίζεται μόνιμη, μη ανακτήσιμη, ή αλλιώς *πλαστική παραμόρφωση*. Η μετάβαση από την ελαστική στην πλαστική περιοχή είναι βαθμιαία για τα περισσότερα των μετάλλων, ενώ εμφανίζεται και κάποια καμπύλωση στο διάγραμμα τάσης – παραμόρφωσης με την έναρξη της πλαστικής παραμόρφωσης (σχήμα 4.4), που αυξάνεται γρηγορότερα με την αύξηση της τάσης.

Από την ατομική πλευρά, η πλαστική παραμόρφωση αντιστοιχεί στο σπάσιμο των δεσμών μεταξύ των αρχικά γειτονικών ατόμων και στον ανασχηματισμό δεσμών μεταξύ νέων γειτόνων, καθώς μεγάλος αριθμός ατόμων ή μορίων κινούνται το ένα σε σχέση με το άλλο. Μετά την αφαίρεση της τάσης, τα άτομα ή τα μόρια που μετακινήθηκαν δεν επιστρέφουν στις αρχικές τους θέσεις. Ο μηχανισμός της πλαστικής παραμόρφωσης είναι διαφορετικός στα κρυσταλλικά και στα άμορφα υλικά. Στα κρυσταλλικά στερεά η παραμόρφωση συντελείται μέσω μιας διεργασίας που ονομάζεται *ολίσθηση*, και εμπλέκει την κίνηση διαταραχών. Η πλαστική παραμόρφωση στα μη κρυσταλλικά υλικά (όπως και στα υγρά) εμφανίζεται με την μορφή μηχανισμού ιξώδους ροής.

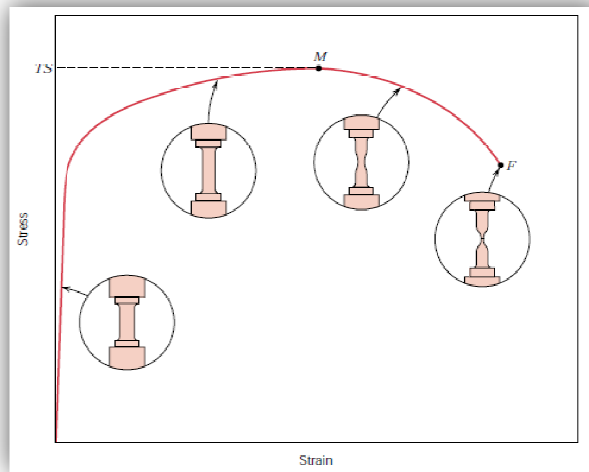
4.5 ΕΦΕΛΚΥΣΤΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ [1]

4.5.1 ΔΙΑΡΡΟΗ ΚΑΙ ΤΑΣΗ ΔΙΑΡΡΟΗΣ

Οι περισσότερες κατασκευές σχεδιάζονται με τέτοιον τρόπο ώστε να εξασφαλίζεται η ύπαρξη μόνο ελαστικών παραμορφώσεων κατά την εφαρμογή τάσεων. Ως εκ τούτου είναι επιθυμητό να είναι γνωστό το επίπεδο της τάσης στο οποίο ξεκινά η πλαστική παραμόρφωση, ή αλλιώς το σημείο όπου εμφανίζεται το φαινόμενο της *διαρροής*. Το σημείο που εμφανίζεται το φαινόμενο διαρροής ονομάζεται **τάση ή αντοχή διαρροής (Yield Strength)**.

4.5.2 ΑΝΤΟΧΗ ΣΕ ΕΦΕΛΚΥΣΜΟ

Μετά την διαρροή η τάση που απαιτείται για να συνεχιστεί η πλαστική παραμόρφωση αυξάνεται μέχρι ενός μεγίστου (σημείο *M* στο σχήμα 4.4), και στη συνέχεια μειώνεται μέχρι την εμφάνιση της θραύσεως (σημείο *F*). Η **αντοχή σε εφελκυσμό (Tensile Strength –TS–** σε MPa ή psi) είναι η τάση στο μέγιστο της καμπύλης μηχανικής τάσης – παραμόρφωσης (σχήμα 4.4). Αντιστοιχεί στη μέγιστη τάση που μπορεί να αντέξει ένα υλικό σε εφελκυσμό και αν αυτή η τάση εφαρμοστεί και διατηρηθεί θα επέλθει θραύση. Η παραμόρφωση μέχρι αυτού του σημείου είναι ομοιόμορφη σε όλη την στενή περιοχή των δοκιμών εφελκυσμού. Όμως σε αυτή την μέγιστη τιμή της τάσης, μία μικρή στένωση ή λαιμός αρχίζει να σχηματίζεται σε κάποιο σημείο και όλη η επακόλουθη παραμόρφωση περιορίζεται σε αυτόν τον λαιμό, όπως υποδεικνύεται από τη σχηματική απεικόνιση των ένθετων δοκιμών στο σχήμα 4.4. Το φαινόμενο αυτό ονομάζεται «*δημιουργία λαιμού*» ή στένωση και η θραύση επέρχεται τελικά εντός των ορίων του λαιμού.



Σχήμα 4.4.: Χαρακτηριστικά σημεία διαγράμματος τάσης – παραμόρφωσης [1]

4.6 ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΣΥΜΠΙΕΣΗΣ [1], [5]

Η **αντοχή σε θλίψη** (*Compressive Strength*) είναι η ικανότητα ενός υλικού ή μιας δομής να αντέχει αξονικά κατευθυνόμενες θλιπτικές δυνάμεις. Όταν επιτευχθεί το όριο της αντοχής σε θλίψη τα υλικά συνθλίβονται. Σε ατομικό επίπεδο, τα μόρια ή τα άτομα αναγκάζονται να απομακρυνθούν όταν ασκούνται σε αυτά εφελκυστικές τάσεις, ενώ αντίθετα αναγκάζονται να πλησιάσουν με την άσκηση θλιπτικών τάσεων. Δεδομένου ότι τα άτομα στα στερεά προσπαθούν πάντα να βρουν μια θέση ισορροπίας, μεταξύ των άλλων ατόμων προκύπτουν δυνάμεις σε όλο το υλικό που αντιτίθενται τόσο στην έκταση όσο και στη συμπίεση. Τα φαινόμενα που επικρατούν σε ατομικό επίπεδο κατά τη διάρκεια του εφελκυσμού και της θλίψης, είναι παρόμοια. Η κύρια διαφορά μεταξύ των δύο τύπων φόρτισης είναι η κατεύθυνση της εφαρμοζόμενης τάσης.

Η αντοχή σε θλίψη του υλικού μετράται συνήθως πειραματικά μέσω δοκιμών συμπίεσης. Η συσκευή που χρησιμοποιείται για αυτό το πείραμα είναι η ίδια με εκείνη που χρησιμοποιείται στη δοκιμή εφελκυσμού. Ωστόσο, αντί να εφαρμόζεται ένα μονοαξονικό φορτίο εφελκυσμού, εφαρμόζεται ένα μονοαξονικό φορτίο συμπίεσης. Όπως απεικονίζεται και στο σχήμα 4.1.β, το δείγμα (συνήθως κυλινδρικό) μικραίνει σε ύψος και μεγαλώνει η διάμετρος του.

4.7 ΚΟΠΩΣΗ [1],[4]

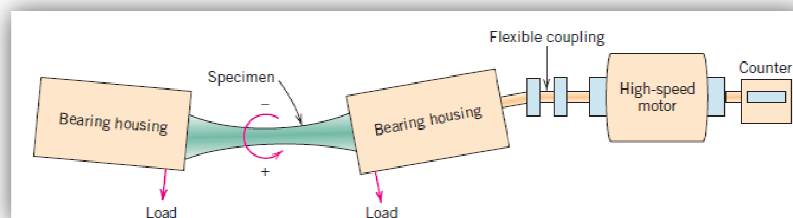
Η **κόπωση** είναι μια μορφή αστοχίας που εμφανίζεται σε δομές (και κατασκευές) κάτω από την επίδραση δυναμικών και κυμαινόμενων τάσεων. Κάτω από αυτές τις συνθήκες είναι πιθανό να εμφανιστεί αστοχία σε επίπεδα τάσεων σημαντικά χαμηλότερα από την αντοχή σε εφελκυσμό ή την αντοχή διαρροής σε στατική φόρτιση. Ο όρος «κόπωση» χρησιμοποιείται διότι αυτός ο τύπος αστοχίας

εμφανίζεται συνήθως μετά από μια μακρά περίοδο επαναλαμβανόμενων κυκλικών τάσεων ή παραμορφώσεων. Η κόπωση είναι σημαντική καθώς αποτελεί από μόνη της τον μεγαλύτερο λόγο αστοχίας στα μέταλλα (υπολογίζεται ότι συμμετέχει στο 90% των αστοχιών που εμφανίζονται σε αυτά). Τα πολυμερή και τα κεραμικά (με εξαίρεση τις υάλους) είναι επίσης επιδεκτικά αυτού του τύπου αστοχίας. Επιπλέον, η αστοχία είναι καταστρεπτική και εσωτερική, ενώ εμφανίζεται ξαφνικά χωρίς προειδοποίηση.

Η διαδικασία εμφανίζεται με τον σχηματισμό και τη διάδοση ρωγμών και συνήθως η επιφάνεια θραύσης είναι κάθετη στη διεύθυνση της εφαρμοζόμενης εφελκυστικής τάσεως. Η εφαρμοζόμενη τάση μπορεί να είναι αξονικής (εφελκυσμός-θλίψη), καμπτικής (λυγισμός) ή στρεπτικής (συστροφές) φύσεως.

4.7.1 ΚΑΜΠΥΛΗ S-N

Όπως και με τα άλλα μηχανικά χαρακτηριστικά, οι ιδιότητες της κόπωσης των υλικών μπορούν να προσδιορισθούν με εργαστηριακές δοκιμές προσομοίωσης. Η διάταξη δοκιμής πρέπει να σχεδιάζεται ώστε να αναπαράγει όσον το δυνατόν πιο πιστά τις συνθήκες λειτουργίας της τάσεως (επίπεδο τάσεως, χρόνος, συχνότητα, τύπος φάσεως, κ.τ.λ.). Στο σχήμα 4.5 παρουσιάζεται ένα σχηματικό διάγραμμα μίας διάταξης δοκιμής με περιστροφική κάμψη, που χρησιμοποιείται συνήθως για δοκιμές κόπωσης. Οι θλιπτικές και εφελκυστικές τάσεις επιβάλλονται στο δοκίμιο καθώς ταυτόχρονα κάμπτεται και περιστρέφεται. Συχνά διεξάγονται δοκιμές χρησιμοποιώντας εναλλασσόμενο μονοαξονικό κύκλο φόρτισης εφελκυσμού-θλίψης.



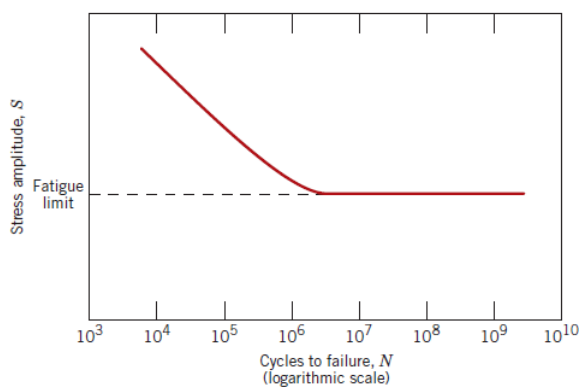
Σχήμα 4.5.: Διάταξη για δοκιμές κόπωσης υλικών [1]

Στα πειράματα αυτά καταγράφεται ο αριθμός των επαναλαμβανόμενων κύκλων μέχρι την αστοχία. Η διαδικασία επαναλαμβάνεται και σε άλλα δοκίμια μειώνοντας προοδευτικά το πλάτος της μέγιστης τάσεως. Τα δεδομένα απεικονίζονται σε διάγραμμα της τάσεως (S) συναρτήσεως του λογαρίθμου του αριθμού των κύκλων φόρτισης (N) μέχρι την αστοχία, για κάθε ένα από τα δοκίμια.

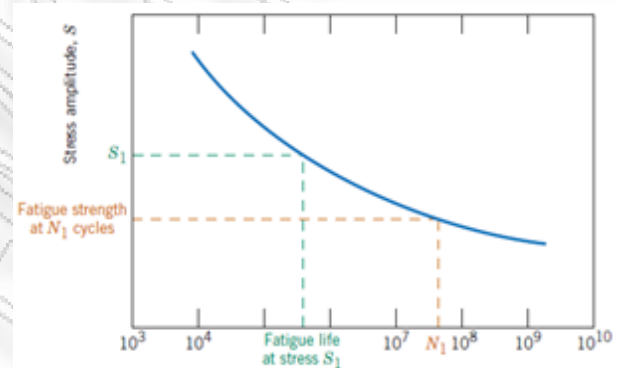
Δύο διακριτοί τύποι συμπεριφοράς παρατηρούνται στις καμπύλες S-N, όπως αναπαριστώνται στο σχήμα 4.6. Όπως υποδεικνύουν τα διαγράμματα, όσο υψηλότερο είναι το μέγεθος της τάσεως, τόσο μικρότερος είναι ο αριθμός των κύκλων φόρτισης - εκφόρτισης που είναι ικανό το υλικό να αντέξει πριν

την αστοχία. Σε ορισμένα κράματα σιδήρου και τιτανίου, η καμπύλη S-N (σχήμα 4.6α) γίνεται οριζόντια σε μεγαλύτερες τιμές του N, ή υπάρχει ένα οριακό επίπεδο τάσεως, που αποκαλείται *όριο κόπωσης* (καμιά φορά αναφέρεται και ως *όριο αντοχής*), κάτω από το οποίο δεν εμφανίζεται αστοχία λόγω κοπώσεως. Το όριο κόπωσης αντιστοιχεί στην μεγαλύτερη τιμή της κυμαινόμενης τάσης που δεν θα προκαλέσει αστοχία για έναν ουσιαστικά άπειρο αριθμό κύκλων. Σε πολλούς χάλυβες τα όρια κόπωσης κυμαίνονται μεταξύ 35 και 60% της αντοχής σε εφελκυσμό.

Τα περισσότερα υλικά και τα μη σιδηρούχα κράματα δεν επιδεικνύουν όριο κόπωσης. Με αυτή την έννοια η καμπύλη S-N συνεχίζει την πτωτική της τάση καθώς αυξάνονται οι τιμές του N (σχήμα 4.6β). Με αυτόν τον τρόπο, η κόπωση θα εμφανιστεί τελικά ανεξάρτητα από το μέγεθος της τάσης. Στα υλικά αυτά, η απόκριση σε κόπωση αναφέρεται ως *αντοχή σε κόπωση (Fatigue Strength)* και ορίζεται ως το επίπεδο της τάσης στο οποίο δεν εμφανίζεται αστοχία για κάποιον συγκεκριμένο αριθμό κύκλων.



(α)



(β)

Σχήμα 4.6.: Τυπικές καμπύλες S-N (α) ενός υλικού που εμφανίζει όριο κόπωσης και (β) ενός υλικού που δεν εμφανίζει όριο κόπωσης [1]

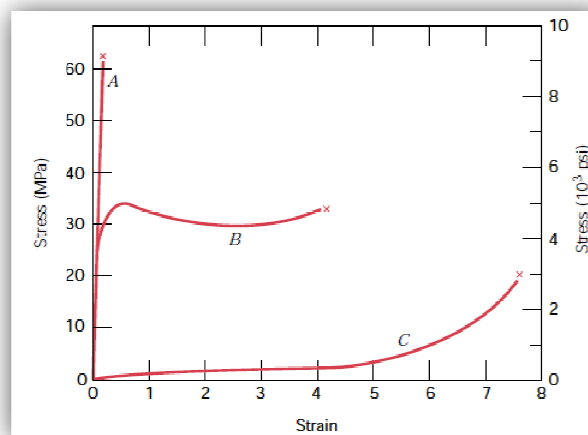
Μία ακόμη σημαντική παράμετρος που καθορίζει την συμπεριφορά των υλικών σε κόπωση είναι η *διάρκεια ζωής σε κόπωση N_f* , που είναι ο αριθμός των κύκλων που προκαλεί αστοχία σε ένα συγκεκριμένο επίπεδο τάσεως.

4.8 ΜΗΧΑΝΙΚΑ ΚΑΙ ΘΕΡΜΟΜΗΧΑΝΙΚΑ ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΑ ΠΟΛΥΜΕΡΩΝ [1]

Οι μηχανικές ιδιότητες των πολυμερών προσδιορίζονται με πολλές από τις παραμέτρους που χρησιμοποιούνται και στα μέταλλα, δηλαδή, από το μέτρο ελαστικότητας, την εφελκυστική αντοχή, την αντοχή στην κρούση και την κόπωση. Για τον χαρακτηρισμό πολλών πολυμερικών υλικών ως προς κάποιες από αυτές τις μηχανικές παραμέτρους, χρησιμοποιείται η απλή δοκιμή τάσης – παραμόρφωσης. Τα μηχανικά χαρακτηριστικά των πολυμερών, στην πλειονότητα τους, είναι πολύ ευαίσθητα στο ρυθμό παραμόρφωσης, τη θερμοκρασία και τη χημική φύση του περιβάλλοντος (την παρουσία νερού, οξυγόνου,

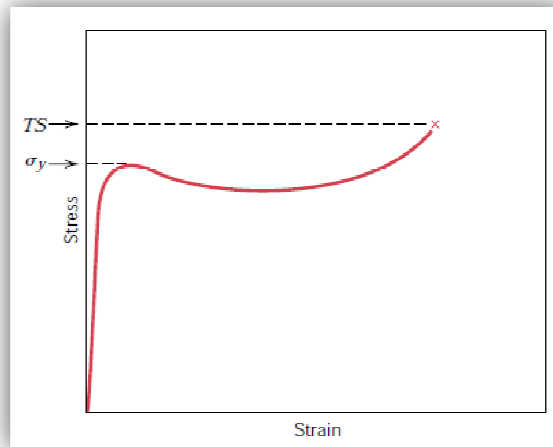
οργανικών διαλυτών, κλπ.). Για τα πολυμερή και ειδικά για τα πολύ ελαστικά υλικά, είναι αναγκαίο να τροποποιηθούν μερικώς οι τεχνικές ελέγχου και οι διαμορφώσεις των δειγμάτων σε σχέση με ό,τι ισχύει για τα μέταλλα.

Έχουν διαπιστωθεί τρία τυπικώς διαφορετικά είδη συμπεριφοράς τάσης – παραμόρφωσης στα πολυμερικά υλικά, όπως φαίνεται στο σχήμα 4.7. Η καμπύλη Α παρουσιάζει το χαρακτήρα τάσης – παραμόρφωσης ενός ψαθυρού πολυμερούς, μέχρι το σημείο θραύσης του, καθώς αυτό παραμορφώνεται ελαστικά. Η συμπεριφορά του πλαστικού υλικού στην καμπύλη Β, είναι παρόμοια με εκείνη που διαπιστώνεται σε πολλά μεταλλικά υλικά (σχήμα 4.4). Η αρχική παραμόρφωση είναι ελαστική και ακολουθείται από διαρροή και μια περιοχή πλαστικής παραμόρφωσης. Τελικά, η παραμόρφωση που φαίνεται στην καμπύλη C είναι τελείως ελαστική. Η ελαστικότητα αυτή, τύπου καουτσούκ (μεγάλες ανακτιήσιμες παραμορφώσεις που παράγονται σε χαμηλά επίπεδα τάσεων), εμφανίζεται σε μια τάξη πολυμερών που ονομάζονται *ελαστομερή*.



Σχήμα 4.7.: Χαρακτηριστικά είδη συμπεριφοράς τάσης – παραμόρφωσης [1]

Για τα πολυμερή, το μέτρο ελαστικότητας και η ολκιμότητα σε επί τοις εκατό επιμήκυνση, καθορίζονται με τον ίδιο τρόπο όπως και για τα μέταλλα (σχέσεις 4.1 και 4.2 αντίστοιχα). Για τα πλαστικά πολυμερή (καμπύλη Β, σχήμα 4.7) το σημείο διαρροής λαμβάνεται ως το μέγιστο στην καμπύλη, ακριβώς μετά από το τέλος της γραμμικά ελαστικής περιοχής. Η τάση σε αυτό το μέγιστο είναι η *αντοχή διαρροής* (σ_y). Επιπλέον, η αντοχή σε εφελκυσμό αντιστοιχεί στην τάση όπου πραγματοποιείται θραύση. Η αντοχή σε εφελκυσμό μπορεί να είναι μεγαλύτερη ή μικρότερη από την τιμή της σ_y . Ως αντοχή των πλαστικών πολυμερών, συνήθως εκλαμβάνεται η αντοχή στον εφελκυσμό.

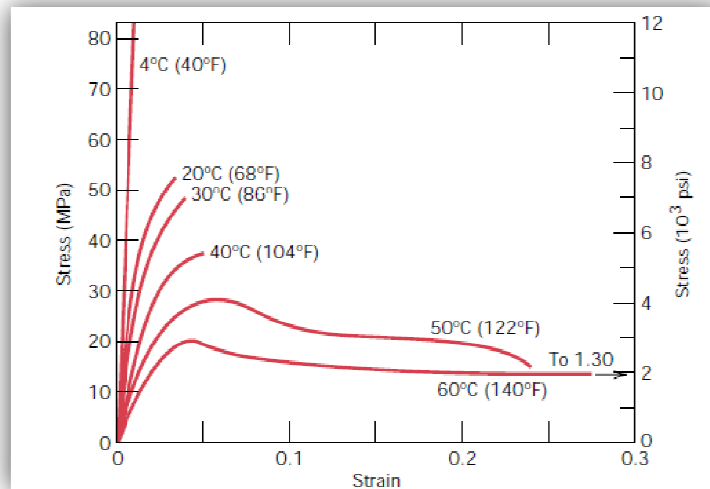


Σχήμα 4.8.: Αντοχή διαρροής και αντοχή σε εφελκυσμό [1]

Τα πολυμερή από πολλές απόψεις είναι μηχανικώς διαφορετικά από τα μέταλλα. Για παράδειγμα, το μέτρο εφελκυσμού για τα πολύ ελαστικά πολυμερή υλικά μπορεί να είναι τόσο μικρό, όσο τα 7 MPa, αλλά μπορεί να φτάσει και τα 4 GPa για μερικά από τα πλέον δύσκαμπτα πολυμερή. Οι τιμές του μέτρου ελαστικότητας για τα μέταλλα είναι πολύ μεγαλύτερες και κυμαίνονται από 48 έως 410 GPa. Οι μεγαλύτερες εφελκυστικές αντοχές στα πολυμερή είναι της τάξης των 100 MPa ενώ για μερικά κράματα μετάλλων 4100 MPa και ενώ τα μέταλλα σπάνια επιμηκύνονται πλαστικά περισσότερο από 100%, κάποια πολύ ελαστικά πολυμερή εμφανίζουν επιμήκυνση έως και 1000%.

Επιπλέον, τα μηχανικά χαρακτηριστικά των πολυμερών είναι πολύ πιο ευαίσθητα στις μεταβολές της θερμοκρασίας για θερμοκρασίες δωματίου. Το σχήμα 4.9 αναπαριστά τη συμπεριφορά τάσης – παραμόρφωσης για τον πολυμεθακρυλικό μεθυλεστέρα (πλεξιγκλάς) σε διάφορες θερμοκρασίες μεταξύ 4 και 60°C. Ορισμένα χαρακτηριστικά σε αυτό το σχήμα χρήζουν επισήμανσης: αυξάνοντας τη θερμοκρασία, παρατηρείται (1) μείωση του μέτρου ελαστικότητας, (2) μείωση της εφελκυστικής αντοχής και (3) αύξηση της ολκιμότητας - στους 4°C το υλικό είναι εντελώς ψαθυρό, ενώ διαπιστώνεται σημαντική πλαστική παραμόρφωση στους 50 και 60°C.

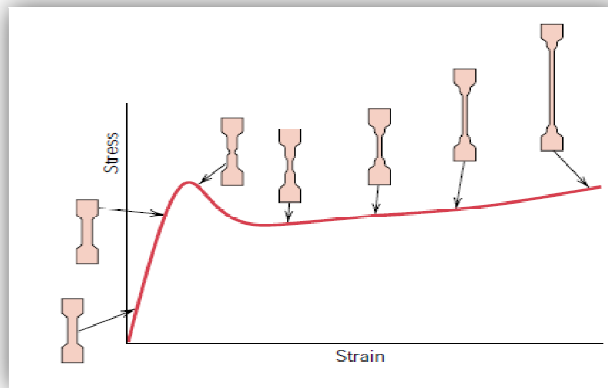
Η επίδραση του ρυθμού παραμόρφωσης στη μηχανική συμπεριφορά μπορεί επίσης να είναι σημαντική. Γενικά, η μείωση του ρυθμού παραμόρφωσης έχει την ίδια επίδραση, με την αύξηση της θερμοκρασίας στη σχέση τάσης – παραμόρφωσης: το υλικό γίνεται μαλακότερο και πιο όλκιμο.



Σχήμα 4.9.: Επίδραση της θερμοκρασίας στα μηχανικά χαρακτηριστικά [1]

4.8.1 ΜΑΚΡΟΣΚΟΠΙΚΗ ΠΑΡΑΜΟΡΦΩΣΗ

Στο σχήμα 4.10 παρουσιάζεται η καμπύλη τάσης – παραμόρφωσης για ένα ημικρυσταλλικό υλικό, το οποίο ήταν αρχικά απροσανατόλιστο. Επίσης στο ίδιο σχήμα περιλαμβάνονται σχηματικές αναπαραστάσεις του προφίλ του δείγματος σε διάφορα στάδια παραμόρφωσης. Στη καμπύλη είναι εμφανή τα άνω και κάτω σημεία διαρροής, τα οποία ακολουθούνται από μια σχεδόν οριζόντια περιοχή. Στο άνω σημείο διαρροής σχηματίζεται ένας μικρός λαιμός μέσα στην περιοχή σταθερής διατομής του δοκιμίου. Μέσα σε αυτό τον λαιμό οι αλυσίδες προσανατολίζονται (δηλ. οι διευθύνεις των αλυσίδων προσανατολίζονται παράλληλα με τη διεύθυνση παραμόρφωσης), γεγονός το οποίο οδηγεί σε τοπική ενδυνάμωση. Σαν συνέπεια, υπάρχει μια αντίσταση στη συνεχιζόμενη παραμόρφωση στο σημείο αυτό και η επιμήκυνση του δείγματος πραγματοποιείται με τη διάδοση αυτής της περιοχής λαιμού κατά μήκος του τμήματος του δείγματος που παραμορφώνεται. Το φαινόμενο του προσανατολισμού των αλυσίδων συνοδεύει την επέκταση αυτής της στένωσης. Η εφελκυστική αυτή συμπεριφορά μπορεί να έρχεται σε αντίθεση με εκείνη που διαπιστώνεται στα όλκιμα μέταλλα, όπου από τη στιγμή που δημιουργείται ο λαιμός, όλη η συνεπακόλουθη παραμόρφωση περιορίζεται στο εσωτερικό της περιοχής λαιμού (στένωσης).



Σχήμα 4.10.: Καμπύλη τάσης – παραμόρφωσης για ένα αρχικά απροσανατόλιστο ημικρυστάλλικο πολυμερές [1]

4.9 ΠΑΡΑΓΟΝΤΕΣ ΠΟΥ ΕΠΗΡΕΑΖΟΥΝ ΤΙΣ ΜΗΧΑΝΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΤΩΝ ΠΟΛΥΜΕΡΩΝ [1]

Τα μηχανικά χαρακτηριστικά των πολυμερικών υλικών επηρεάζεται από έναν αριθμό παραγόντων. Η αύξηση της θερμοκρασίας ή η ελάττωση του ρυθμού παραμόρφωσης οδηγεί στην ελάττωση του εφελκυστικού μέτρου αντοχής, στη μείωση της αντοχής στον εφελκυσμό και στην αύξηση της ολκιμότητας.

Επιπλέον, μερικοί παράγοντες δομής / επεξεργασίας επιδρούν αποφασιστικά στη μηχανική συμπεριφορά (δηλαδή στην αντοχή και στο μέτρο ελαστικότητας) των πολυμερικών υλικών.

Για παράδειγμα, εκτεταμένη διαπλοκή των αλυσίδων μεταξύ τους ή σημαντικός βαθμός διαμοριακών δεσμών, παρεμποδίζει τις σχετικές κινήσεις μεταξύ των αλυσίδων. Πρέπει να σημειωθεί ότι ακόμη και αν οι δευτερογενείς διαμοριακοί δεσμοί (π.χ. δεσμοί van der Waals) είναι πολύ ασθενέστεροι από τους ομοιοπολικούς δεσμούς, σημαντικές διαμοριακές δυνάμεις δημιουργούνται λόγω του μεγάλου αριθμού δεσμών van der Waals μεταξύ των αλυσίδων. Επιπλέον, το μέτρο ελαστικότητας αυξάνεται καθώς μεγαλώνει η ισχύς των δευτερευόντων δεσμών και η ευθυγράμμιση των αλυσίδων.

4.9.1 ΜΟΡΙΑΚΟ ΒΑΡΟΣ

Το μέγεθος του εφελκυστικού μέτρου ελαστικότητας δεν φαίνεται να επηρεάζεται άμεσα από το μοριακό βάρος. Αντίθετα για πολλά πολυμερή, η αντοχή στον εφελκυσμό αυξάνεται με την αύξηση του μοριακού βάρους. Μαθηματικά, το TS είναι συνάρτηση του μέσου κατ' αριθμό μοριακού βάρους σύμφωνα με την σχέση 4.6:

$$TS = TS_{\infty} - \frac{A}{M} \quad (4.6)$$

όπου T_{S_0} είναι η αντοχή στον εφελκυσμό σε «άπειρο» μοριακό βάρος και A είναι μία σταθερά που εξαρτάται από το υλικό. Η συμπεριφορά που περιγράφεται από την παραπάνω εξίσωση αυτή εξηγείται από την αυξημένη διαπλοκή των αλυσίδων με την αύξηση του μέσου κατ' αριθμό μοριακού βάρους.

4.10 ΘΕΡΜΟΠΛΑΣΤΙΚΑ ΚΑΙ ΘΕΡΜΟΣΚΛΗΡΑΙΝΟΜΕΝΑ ΠΟΛΥΜΕΡΗ [1]

Ένας τρόπος ταξινόμησης των πολυμερικών υλικών βασίζεται στη μηχανική ανταπόκρισή τους σε υψηλές θερμοκρασίες. Τα *θερμοπλαστικά πολυμερή* (ή απλά θερμοπλαστικά) και τα *θερμοσκληρυνόμενα πολυμερή* (ή απλά θερμοσκληρυνόμενα) αποτελούν δύο υποκατηγορίες. Τα θερμοπλαστικά πολυμερή γίνονται πιο μαλακά όταν θερμαίνονται (και κατά περίπτωση ρευστοποιούνται) και σκληρύνονται όταν ψύχονται – διαδικασίες οι οποίες είναι εντελώς αντιστρεπτές και μπορούν να επαναληφθούν. Τα υλικά αυτά μπορούν συνήθως να κατεργαστούν με παράλληλη εφαρμογή θερμότητας και πίεσης. Σε μοριακό επίπεδο, καθώς αυξάνεται η θερμοκρασία, οι δευτερογενείς διαμοριακές δυνάμεις μειώνονται (λόγω αυξημένης διαμοριακής κίνησης) έτσι ώστε η σχετική κίνηση μεταξύ γειτονικών αλυσίδων να μειώνεται με την εφαρμογή τάσης. Μη αντιστρεπτή υποβάθμιση λαμβάνει χώρα όταν η θερμοκρασία ενός τμήματος αυξηθεί σε τέτοιο βαθμό ώστε οι μοριακές κινήσεις να είναι αρκετά βίαιες με αποτέλεσμα να σπάζουν οι πρωτεύοντες ομοιοπολικοί δεσμοί. Επιπλέον, τα θερμοπλαστικά πολυμερή είναι σχετικά μαλακά και όλκιμα. Τα περισσότερα γραμμικά πολυμερή, καθώς και εκείνα που έχουν διακλαδωμένες δομές με ευέλικτες αλυσίδες είναι θερμοπλαστικά.

Τα θερμοσκληρυνόμενα πολυμερή γίνονται μονίμως σκληρά όταν εφαρμόζεται σε αυτά μια τάση και δεν μαλακώνουν εάν επακολουθήσει θέρμανση. Κατά την αρχική θερμική επεξεργασία, δημιουργούνται ομοιοπολικοί δεσμοί διασταυρώσεων μεταξύ των γειτονικών μοριακών αλυσίδων. Αυτοί οι δεσμοί συνδέουν τις αλυσίδες μεταξύ τους ώστε να αντιστέκονται στις δονητικές και περιστροφικές κινήσεις των αλυσίδων σε υψηλές θερμοκρασίες. Η δημιουργία διασταυρώσεων πραγματοποιείται συνήθως σε μεγάλη έκταση, ώστε να διασταυρώνεται το 10 έως 50% των ομάδων μονομερών. Μόνο η θέρμανση σε εξαιρετικά υψηλές θερμοκρασίες προκαλεί καταπόνηση αυτών των δεσμών διασταυρώσεων (σταυροδεσμών) και υποβάθμιση του πολυμερούς. Τα θερμοσκληρυνόμενα πολυμερή είναι γενικώς σκληρότερα, ισχυρότερα και πιο εύθραστα από τα θερμοπλαστικά και έχουν καλύτερη σταθερότητα στις διαστάσεις τους. Τα περισσότερα διασταυρωμένα και δικτυωμένα πολυμερή, στα οποία περιλαμβάνεται το βουλκανισμένο καουτσούκ, τα εποξειδικά, τα φαινολικά και κάποιες πολυεστερικές ρητίνες, είναι θερμοσκληρυνόμενα.

4.11 ΑΝΑΚΥΚΛΩΣΗ ΠΟΛΥΜΕΡΩΝ [2]

4.11.1 ΠΛΑΣΤΙΚΑ ΑΠΟΡΡΙΜΜΑΤΑ

Τα πλαστικά απορρίμματα αποτελούν ένα πολύ μικρό κατά βάρος ποσοστό του συνόλου των στερεών απορριμμάτων μιας χώρας (περίπου το 1%). Συνεπώς, το βασικό πρόβλημα της διάθεσης και της διαχείρισης των πλαστικών απορριμμάτων δεν είναι η μεγάλη τους ποσότητα αλλά ο μικρός κύκλος χρήσης των προϊόντων και η εντυπωσιακή τους σταθερότητα στις επιδράσεις του περιβάλλοντος. Αυτό οδηγεί στην εξαιρετικά αργή αποικοδόμηση των πλαστικών απορριμμάτων προκαλώντας μόνιμη πολλές φορές όχληση.

Ταυτόχρονα, η ύπαρξη χημικών προσθέτων στη σύσταση των πλαστικών απορριμμάτων, καθιστά σε πολλές περιπτώσεις απαγορευτική την αποτέφρωση (καύση) ορισμένων κατηγοριών πλαστικών, τα οποία όταν καίγονται εκλύουν τοξικές ουσίες οι οποίες είναι επικίνδυνες για την ατμόσφαιρα και την υγεία. Επίσης λόγω της μεγάλης ποικιλομορφίας των πλαστικών υλικών είναι εξαιρετικά δύσκολος και επίπονος ο διαχωρισμός των απορριμμάτων με συνέπεια να είναι δυσχερής και η αξιοποίηση τους μέσω της ανακύκλωσης.

4.11.2 ΣΤΟΧΟΙ ΣΤΗ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗ ΤΩΝ ΠΛΑΣΤΙΚΩΝ ΑΠΟΡΡΙΜΜΑΤΩΝ








Ένα σύγχρονο σύστημα διαχείρισης πλαστικών απορριμμάτων θα πρέπει να βασίζεται στην επίτευξη των παρακάτω στόχων:

- Περιορισμός των παραγόμενων πλαστικών απορριμμάτων, μέσω περιορισμού στις χρησιμοποιούμενες ποσότητες πλαστικών υλών, αλλά και με την εφαρμογή του συστήματος της επαναχρησιμοποίησης.
- Αποτελεσματική συλλογή και διαχωρισμός των πλαστικών από τα υπόλοιπα στερεά απορρίμματα.
- Μεγιστοποίηση της ανάκτησης και αξιοποίησης των πλαστικών απορριμμάτων με επιλογή της αποδοτικότερης μεθόδου ανακύκλωσης.

4.11.3 ΣΥΛΛΟΓΗ ΚΑΙ ΔΙΑΧΩΡΙΣΜΟΣ ΠΛΑΣΤΙΚΩΝ ΑΠΟΡΡΙΜΜΑΤΩΝ

Η *συλλογή* και ο *διαχωρισμός* (*collection and separation*) των πλαστικών από το ρεύμα των στερεών απορριμμάτων αποτελεί βασικό στόχο στο πλαίσιο της διαχείρισης των πλαστικών απορριμμάτων. Η συλλογή και ο επιτυχής διαχωρισμός των πλαστικών από τα υπόλοιπα στερεά απορρίμματα αποτελεί καθοριστικό παράγοντα επιτυχίας, για οποιαδήποτε επιλογή περαιτέρω αξιοποίησης τους.

Η συλλογή και ο διαχωρισμός των πλαστικών υλικών από διακριτές εφαρμογές καθώς και από την βιομηχανική παραγωγή είναι σχετικά εύκολη διαδικασία. Πριν την έναρξη της διαδικασίας ανακύκλωσης, τα πλαστικά απορρίμματα διαχωρίζονται βάσει του χαρακτηριστικού τους κωδικού αναγνώρισης (πίνακας 4.1).

			
PET	PE-HD	PVC	PE-LD
PET	HDPE	PVC	LDPE
			
PP	PS	07 O	
PP	PS	Λοιπά (Other)	

Πίνακας 4.1.: Χαρακτηριστικοί κωδικοί αναγνώρισης πολυμερικών υλικών [3]

Το παραπάνω σύστημα κατηγοριοποίησης εισήχθη το 1988 από την Society of the Plastics Industry. Τα απορρίμματα διαχωρίζονται επίσης βάσει του χρώματός τους. Στη συνέχεια τα πλαστικά τεμαχίζονται. Μετά τον τεμαχισμό τους τα πλαστικά τεμάχια υπόκεινται σε διάφορες διαδικασίες για την απομάκρυνση ακαθαρσιών όπως είναι οι χάρτινες ετικέτες. Το εναπομένον υλικό τήκεται και συχνά εξωθείται με τη μορφή σβόλων που χρησιμοποιούνται έπειτα για να κατασκευαστούν άλλα προϊόντα.

4.12 ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ 4^{ΟΥ} ΚΕΦΑΛΑΙΟΥ

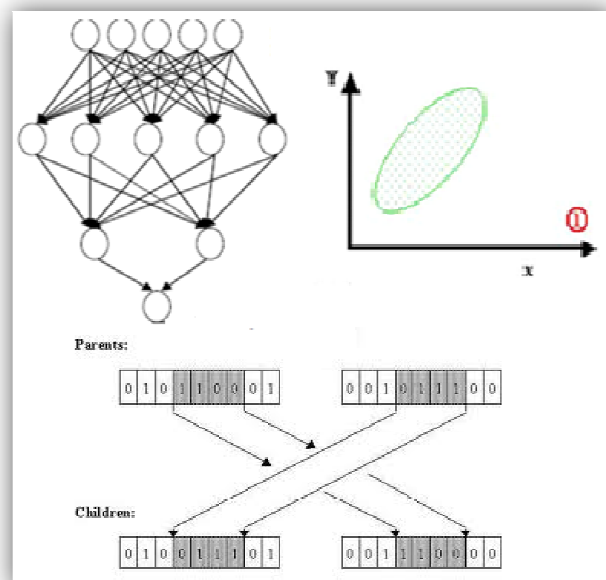
- [1] William D. Callister, Materials Science And Engineering: An Introduction, Seventh Edition John Willey and Sons, Inc, 2007
- [2] Κ.Δ. Παπασπυρίδης, Στοιχεία Ανακύκλωσης Πολυμερών, Σημειώσεις μαθήματος: Ανακύκλωση και Ενεργειακή Αξιοποίηση Υλικών, Μεταπτυχιακό Πρόγραμμα Σπουδών στην Οργάνωση και Διοίκηση Βιομηχανικών Συστημάτων. Ειδίκευση: Συστήματα Διαχείρισης της Ενέργειας και Προστασίας Περιβάλλοντος, Πειραιάς 2010

Ιστοσελίδες:

- [3] http://en.wikipedia.org/wiki/Plastic_recycling (Ανακύκλωση πλαστικών)
- [4] http://en.wikipedia.org/wiki/Fatigue_strength (Αντοχή σε κόπωση)
- [5] http://en.wikipedia.org/wiki/Compressive_strength (Αντοχή σε θλίψη)

Περίληψη:

Στο κεφάλαιο αυτό περιγράφονται οι βασικές αρχές, τα στάδια εφαρμογής και τα πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα που εμφανίζει κάθε μία από τις μεθόδους που χρησιμοποιήθηκαν στη παρούσα εργασία. Πιο συγκεκριμένα, αναλύονται οι τεχνικές της Πολυωνυμικής Παλινδρόμησης, των Νευρωνικών Δικτύων και των Γενετικών Αλγορίθμων.



5.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Όπως αναφέρθηκε και στο κεφάλαιο 1, στη μέθοδο που αναπτύσσεται στη παρούσα εργασία γίνεται χρήση δύο διαφορετικών τεχνικών παλινδρόμησης: η παλινδρόμηση μέσω πολυωνύμων και η παλινδρόμηση μέσω νευρωνικών δικτύων. Κατόπιν κάθε μία από τις παραπάνω μεθόδους συνδυάζεται με την μέθοδο των γενετικών αλγορίθμων ώστε να επιτευχθεί η βελτιστοποίηση των αποτελεσμάτων που προκύπτουν από την αντίστοιχη μέθοδο παλινδρόμησης. Στο κεφάλαιο αυτό περιγράφονται οι βασικές αρχές, τα στάδια εφαρμογής και τα πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα που εμφανίζει κάθε μία από τις προαναφερθείσες μεθόδους.

5.2 ΠΑΛΙΝΔΡΟΜΗΣΗ [3-4,12]

Η παλινδρόμηση μίας εξαρτημένης μεταβλητής, έστω Y , επί μίας ανεξάρτητης μεταβλητής, έστω X , συνίσταται στον υπολογισμό της πιο πιθανής τιμής της μεταβλητής Y για κάθε τιμή της μεταβλητής X βασιζόμενη σε ένα πεπερασμένο αριθμό ενδεχομένων θορυβωδών μετρήσεων της μεταβλητής X και της σχετιζόμενης με αυτή μεταβλητής Y . Οι μεταβλητές X και Y είναι συνήθως διανύσματα. Σε κάθε πρόβλημα παλινδρόμησης διακρίνουμε δύο είδη μεταβλητών: τις *ανεξάρτητες* ή *ελεγχόμενες* ή *επεξηγηματικές* (*independent, predictor* ή *explanatory*) και τις *εξαρτημένες* ή *απόκρισης* (*dependent* ή *response*) μεταβλητές. Στην αναγνώριση του συστήματος η εξαρτημένη μεταβλητή Y είναι η / οι έξοδος / οι του συστήματος και η ανεξάρτητη μεταβλητή X είναι η / οι είσοδος / οι του συστήματος. Με την εφαρμογή καθεμίας από τις δύο μεθόδους, δημιουργείται μία καμπύλη παλινδρόμησης η οποία και περιγράφει το σύστημα (δεδομένα εισόδου).

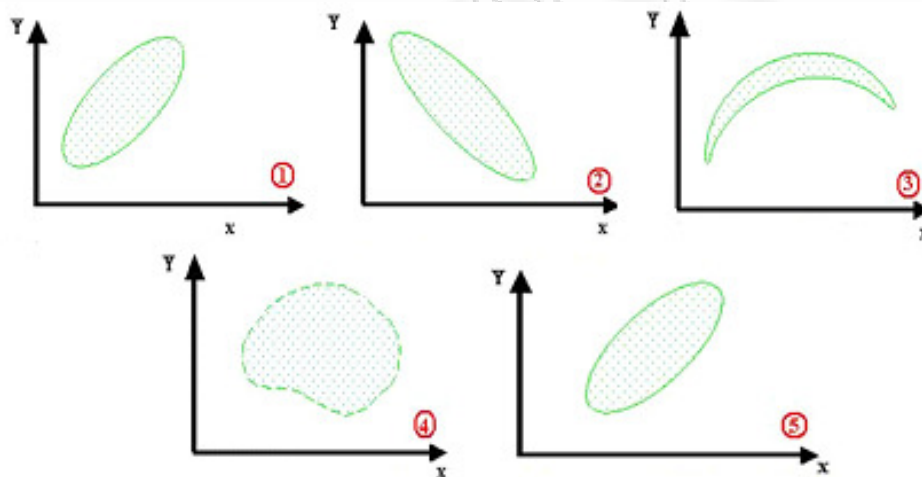
Αν οι μεταβλητές αυτές (X και Y) συνδέονται με μια σχέση της μορφής $Y = f(X)$ μέσω της οποίας για κάθε τιμή της X μπορούμε να προβλέψουμε ακριβώς την τιμή της Y , δηλαδή, αν οι τιμές της Y δεν υπόκεινται σε σφάλματα, τότε οι δύο μεταβλητές συνδέονται με τη *συναρτησιακή - προσδιοριστική* (*deterministic*) σχέση $Y = f(X)$.

Σε αυτές τις περιπτώσεις τα σημεία του διαγράμματος διασποράς βρίσκονται όλα πάνω στην καμπύλη που έχει εξίσωση $Y = f(X)$ και όσες φορές και αν επαναληφθεί το πείραμα θέτοντας $X = x_i$, το αποτέλεσμα θα είναι πάντα η ίδια τιμή του $Y = y_i$. Οι μη προσδιοριστικές σχέσεις μεταξύ μεταβλητών ονομάζονται *στοχαστικές - στατιστικές* (*stochastic - probabilistic*) σχέσεις. Στην περίπτωση αυτή, αν το πείραμα επαναληφθεί πολλές φορές θέτοντας $X = x_i$ τότε στην τιμή x_i της X δεν αντιστοιχεί μια μόνο τιμή y_i της Y αλλά, γενικά θα αντιστοιχεί ένα πλήθος διαφορετικών τιμών της Y .

Σε μια στοχαστική σχέση το διάγραμμα διασποράς είναι, γενικά, ένα νέφος σημείων το οποίο πολλές φορές καθορίζει μια ιδεατή γραμμή η οποία δίνει μια πρώτη εικόνα της σχέσης που συνδέει τις δύο μεταβλητές. Η σχέση μάλιστα μεταξύ των δύο μεταβλητών γίνεται ισχυρότερη όσο πιο κοντά στην

ιδεατή γραμμή βρίσκονται τα σημεία του διαγράμματος διασποράς. Για να περιγραφεί η στοχαστική εξάρτηση δύο μεταβλητών X και Y επιχειρείται η εύρεση, όπως και στην προσδιοριστική εξάρτηση, μιας σχέσης μεταξύ των X και Y η οποία όμως δε δίνει ακριβή αλλά προσεγγιστική μόνο εικόνα της εξάρτησης των X και Y και τα σημεία του διαγράμματος διασποράς των X και Y δεν βρίσκονται πάνω, αλλά, γύρω από μια καμπύλη. Μια μέθοδος που χρησιμοποιείται για την περιγραφή της στοχαστικής εξάρτησης δύο μεταβλητών είναι η γνωστή μέθοδος των ελαχίστων τετραγώνων που χρησιμοποιείται στη γραμμική στοχαστική εξάρτηση.

Η γραφική παράσταση των δειγματικών σημείων στο σύστημα καρτεσιανών συντεταγμένων ονομάζεται *διάγραμμα διασποράς* (*scatter diagram*) και δίνει χρήσιμες πληροφορίες για την ικανότητα αναπαράστασης της σχέσης μεταξύ των μεταβλητών του μοντέλου. Στο παρακάτω σχήμα (σχήμα 5.1) απεικονίζονται πέντε πιθανές σχέσεις μεταξύ της ανεξάρτητης μεταβλητής X και της εξαρτημένης μεταβλητής Y .



Σχήμα 5.1.: Σχέσεις μεταξύ μεταβλητών X και Y : 1) γραμμική σχέση, 2) αντιγραμμική σχέση, 3) μη γραμμική σχέση, 4) καμία σχέση 5) φορμαλιστική σχέση μη ουσιαστική [3]

5.3 ΤΕΧΝΗΤΑ ΝΕΥΡΩΝΙΚΑ ΔΙΚΤΥΑ [2,5,13]

5.3.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ

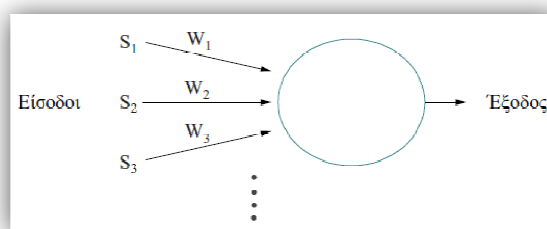
Τα *Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα* (*Artificial Neural Networks*) αποτελούν ένα χρήσιμο εργαλείο για την επίλυση ενός σημαντικού εύρους προβλημάτων με χρήση ηλεκτρονικού υπολογιστή. Παρουσιάζουν μία εκπληκτική προσαρμοστικότητα σε ένα πλήθος προβλημάτων προερχόμενων από πολλούς διαφορετικούς επιστημονικούς τομείς. Έχουν πολλές ομοιότητες με τα βιολογικά νευρωνικά δίκτυα και πολλά κοινά χαρακτηριστικά και λειτουργίες με το νευρικό σύστημα των ζώντων οργανισμών

συμπεριλαμβανομένου και του ανθρώπου. Τα νευρωνικά δίκτυα μιμούνται τον τρόπο με τον οποίο ο ανθρώπινος εγκέφαλος μαθαίνει (εκπαιδεύεται) από τα ερεθίσματα του περιβάλλοντος μετατρέποντας τις πληροφορίες σε δεδομένα έτσι ώστε να μπορεί να αντιδρά αποτελεσματικά σε κάθε μελλοντικό παρόμοιο ή μη ερέθισμα.

Έχει πλέον γίνει κατανοητό ότι ο τρόπος λειτουργίας ενός νευρωνικού δικτύου είναι διαφορετικός από αυτόν του κλασικού υπολογιστή, όχι μόνο ως προς τη φιλοσοφία που διέπει ένα νευρωνικό δίκτυο, αλλά ακόμη και ως προς την τεχνική. Τα νευρωνικά δίκτυα δεν είναι μόνο θεωρητικά μαθηματικά μοντέλα αλλά χρήσιμα εργαλεία τα οποία εφαρμόζονται σε πληθώρα σύγχρονων εφαρμογών σε όλους τους τομείς της ζωής, από τεχνικά προβλήματα στις φυσικές επιστήμες, την οικονομία, την εκπαίδευση, την ασφάλεια κτλ..

Σε αναλογία με τα βιολογικά νευρωνικά δίκτυα, κάθε νευρωνικό δίκτυο αποτελείται από έναν αριθμό νευρώνων. Σε κάθε νευρώνα εισάγεται ένας αριθμός σημάτων (δεδομένων) και μετά την επεξεργασία που υπόκειται στο εσωτερικό του νευρώνα, προκύπτει μια έξοδος η οποία με τη σειρά της μπορεί να εισαχθεί σε έναν άλλον νευρώνα. Κάθε σήμα που μεταδίδεται από έναν νευρώνα σε έναν άλλο μέσα στο νευρωνικό δίκτυο συνδέεται με την τιμή βάρους, w . Το πόσο στενά συνδέονται δύο νευρώνες του ίδιου ή διαφορετικού επιπέδου εξαρτάται από την τιμή του w . Με άλλα λόγια, το w καθορίζει το πόσο σημαντική είναι η συνεισφορά του σήματος στη διαμόρφωση της δομής του δικτύου. Τα νευρωνικά δίκτυα εμφανίζουν ένα παράλληλο τρόπο λειτουργίας. Κάθε διαδικασία μοιράζεται στα διάφορα τμήματα του δικτύου (νευρώνες). Τα νευρωνικά δίκτυα είναι συστήματα «παράλληλων κατανεμημένων διεργασιών» (*parallel distributed processing*). Ο χαρακτηριστικός αυτός τρόπος λειτουργίας σε συνδυασμό με τον τεράστιο αριθμό συνάψεων μεταξύ των νευρώνων, παρέχει εξαιρετικά μεγάλες ταχύτητες επεξεργασίας.

Η δομή ενός απλού νευρώνα παρουσιάζεται στο σχήμα 5.2.



Σχήμα 5.2.: Ένας νευρώνας (ο κύκλος) με πολλές εισόδους (s_1, s_2, s_3, \dots), αντίστοιχα βάρη (w_1, w_2, w_3, \dots) και μία έξοδος [2]

Τα σήματα που εισέρχονται σε έναν νευρώνα αθροίζονται, υπόκεινται σε μία διαδικασία, παράγεται ως αποτέλεσμα της διαδικασίας μία έξοδος και αυτό είναι το σήμα το οποίο μεταδίδεται στους επόμενους νευρώνες. Αντίστοιχα, ένας νευρώνας μπορεί να βρεθεί σε μία από δύο δυνατές καταστάσεις:

να είναι ενεργός ή να είναι αδρανής. Υπολογίζεται το άθροισμα των σημάτων και συγκρίνεται με την τιμή κατωφλίου (χαρακτηριστική του κάθε νευρώνα), θ . Αν η τιμή του αθροίσματος είναι μεγαλύτερη από την τιμή κατωφλίου, τότε ο νευρώνας ενεργοποιείται. Αν όμως το άθροισμα είναι μικρότερο του θ , τότε ο νευρώνας παραμένει αδρανής. Λόγω του ότι ο νευρώνας δρα ως δυαδικό στοιχείο, η έξοδος του, έστω $f(x)$ όπου x το άθροισμα των σημάτων εισόδου, θα είναι 1 όταν είναι ενεργοποιημένος και 0 όταν είναι αδρανής.

Βασικό χαρακτηριστικό των νευρωνικών δικτύων είναι η δυνατότητα τους να μαθαίνουν και εκπαιδεύονται. Στα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα (πάλι σε αναλογία με τα βιολογικά νευρωνικά δίκτυα) εισέρχονται δεδομένα (*inputs*) και δίνουν σαν αποτέλεσμα κάποιες εξόδους (*outputs*). Τα δεδομένα εισόδου αποτελούν κάποιο πρότυπο. Σε κάθε πρότυπο αντιστοιχεί μία «σωστή» έξοδος δηλαδή μια αναμενόμενη τιμή ή αλλιώς μία τιμή στόχος. Η εκπαίδευση του νευρωνικού δικτύου γίνεται με την τροφοδότηση του με δεδομένα εισόδου των οποίων είναι ήδη γνωστές οι «σωστές» εξοδοί οι οποίες επίσης παρέχονται στο δίκτυο. Το δίκτυο με τα δεδομένα-πρότυπα αυτά τροποποιεί την εσωτερική του δομή ώστε να προσαρμοστεί στις εισόδους και στις αντίστοιχες εξόδους μεταβάλλοντας τα βάρη των νευρώνων.

Μετά την εκπαίδευση του, το δίκτυο είναι σε θέση μέσω των διαδικασιών της παλινδρόμησης να επιλύει ανάλογα (παρόμοιας φύσης) προβλήματα με εισόδους των οποίων τις εξόδους δεν γνωρίζει εκ των προτέρων. Δηλαδή το δίκτυο αντιστοιχεί τις νέες εισόδους με άλλες παλαιότερες της ίδιας μορφής και μέσω παλινδρόμησης προβλέπει τις νέες εξόδους. Μια χαρακτηριστική και εξαιρετικά χρήσιμη ιδιότητα των νευρωνικών δικτύων είναι η ανοχή σφάλματος. Η ανοχή σφάλματος εξασφαλίζει την συνέχιση της λειτουργίας του δικτύου, με την επιβάρυνση όμως ενός μικρού σφάλματος, ακόμα και αν ένα τμήμα του δικτύου σταματήσει να λειτουργεί.

5.3.2 ΒΙΟΛΟΓΙΚΑ ΝΕΥΡΩΝΙΚΑ ΔΙΚΤΥΑ

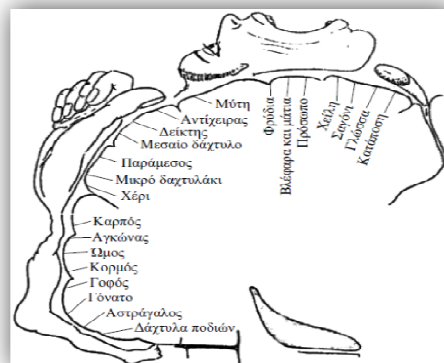
Τα βιολογικά νευρωνικά δίκτυα αποτελούν το πρότυπο πάνω στο οποίο οικοδομήθηκαν τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα. Τα βιολογικά νευρωνικά δίκτυα, παρόντα σε όλους τους ζώντες οργανισμούς, έχουν επιφορτιστεί με την εκτέλεση ενός μεγάλου αριθμού πολύπλοκων διεργασιών απαραίτητων για τους οργανισμούς αυτούς. Το νευρικό σύστημα, π.χ. του ανθρώπου, μπορεί να παρομοιαστεί με ένα ηλεκτρονικό υπολογιστικό σύστημα. Ο ανθρώπινος εγκέφαλος όμως μπορεί να εκτελέσει με μεγάλη ταχύτητα και ευκολία διεργασίες τις οποίες ακόμα και ένας σύγχρονος υπολογιστής αδυνατεί να φέρει εις πέρας, γεγονός που οφείλεται στην διαφορετική δομή του εγκεφάλου παρόλο που οι ηλεκτρονικοί υπολογιστές είναι σημαντικά γρηγορότεροι. Χαρακτηριστικά παραδείγματα είναι η αναγνώριση φωνής και εικόνας. Εκμεταλλευόμενοι τις παραπάνω παρατηρήσεις, οι επιστήμονες προσπάθησαν να

κατασκευάσουν τεχνητά νευρωνικά δίκτυα τα οποία θα μοντελοποιούσαν το ανθρώπινο νευρωνικό σύστημα για την υλοποίηση σε ηλεκτρονικό υπολογιστή των απλών –για τον εγκέφαλο- διεργασιών.

Η βασική μονάδα δόμησης του εγκεφάλου ονομάζεται *νευρώνας*. Ο ανθρώπινος εγκέφαλος αποτελείται από περίπου 10^{10} νευρώνες. Συνολικά έχουν καταγραφεί περίπου 100 διαφορετικοί τύποι νευρώνων. Οι νευρώνες αυτοί συνδέονται με άλλους νευρώνες δημιουργώντας συνάψεις. Υπολογίζεται ότι κατά μέσο όρο ο κάθε νευρώνας έχει 10^4 συνάψεις με εξαίρεση κάποιους νευρώνες τις παρεγκεφαλίδας στους οποίους εντοπίζονται μέχρι και 200.000 συνάψεις. Ομάδες νευρώνων με τις αντίστοιχες συνάψεις τους σχηματίζουν ένα νευρωνικό δίκτυο. Κάθε διαφορετική ομάδα νευρώνων του εγκεφάλου εξειδικεύεται σε διαφορετικές λειτουργίες (αισθήσεις). Το σύνολο των νευρωνικών δικτύων συνιστούν το κεντρικό νευρικό σύστημα το οποίο εκτείνεται σε όλο το μήκος του οργανισμού.

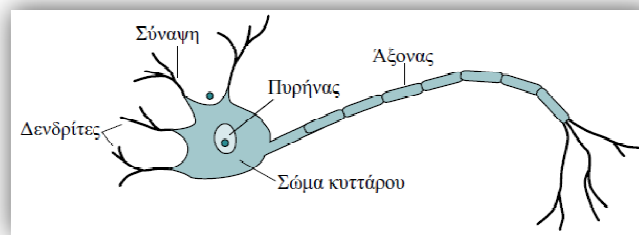
Οι νευρώνες δεν πολλαπλασιάζονται ούτε αναπαράγονται (την τελευταία δεκαετία υπάρχουν ενδείξεις πολύ περιορισμένης αναπαραγωγής). Ημερησίως ένας υγιής ενήλικας χάνει φυσιολογικά περίπου 1000 νευρώνες ενώ παράγοντες όπως το αλκοόλ και η ηλικία επιταχύνουν την καταστροφή των ανθρώπινων νευρώνων. Παρόλη την καταστροφή των νευρώνων, ο αριθμός των συνάψεων βρίσκεται σε ισορροπία. Συνάψεις δημιουργούνται καθώς ο εγκέφαλος αποκτά εμπειρίες από το εξωτερικό περιβάλλον ενώ άλλες καταστρέφονται κυρίως λόγω της μεγάλης ηλικίας προκαλώντας σοβαρές ασθένειες.

Όταν ένα σήμα – ερέθισμα (εκπεμπόμενο από κάποιον άλλο νευρώνα) ληφθεί από έναν νευρώνα, αυτό υπόκειται στην κατάλληλη επεξεργασία και στη συνέχεια μεταδίδεται στους επόμενους νευρώνες μέσω των συνάψεων. Τα σήματα που επεξεργάζεται ένας νευρώνας είναι ηλεκτρικής μορφής, τάσης μερικών mVolt. Η ταχύτητα των ηλεκτρικών παλμών κυμαίνεται στα 10 – 20 m/sec, ενώ υπάρχουν και νευρώνες στους οποίους η ταχύτητα φτάνει τα 100 m/sec. Το μήκος των νευρώνων ποικίλει από λίγα μικρόμετρα (μm) έως και 1 m. Το πάχος των νευρώνων είναι αντιστρόφως ανάλογο του μήκους. Στο σχήμα 5.3 παρουσιάζεται ένας χάρτης κατασκευασμένος από τον Penfield, όπου φαίνεται παραστατικά ο έλεγχος των διαφόρων τμημάτων του σώματος από τον εγκέφαλο.



Σχήμα 5.3.: Χάρτης του Penfield [2]

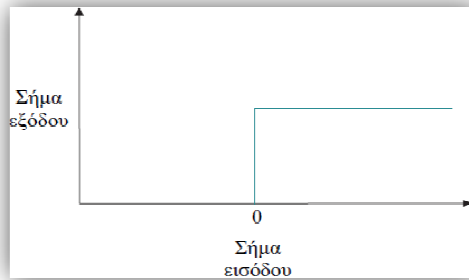
Ένας νευρώνας αποτελείται από το κυρίως σώμα, τον άξονα και τους δενδρίτες (σχήμα 5.4). Στο κυρίως σώμα (κορμός) βρίσκεται ο πυρήνας του κυττάρου ο οποίος περικλείει το γενετικό υλικό του οργανισμού. Ο άξονας αποτελεί μια επέκταση του σώματος και εφάπτεται με άλλους νευρώνες. Ο άξονας επιφορτίζεται με την μετάδοση του σήματος στους άλλους νευρώνες (κάθε νευρώνας έχει μόνο έναν άξονα). Οι δενδρίτες μοιάζουν με διακλαδώσεις δένδρου, βρίσκονται σε επαφή με άλλους νευρώνες και δέχονται τα εισερχόμενα σήματα.



Σχήμα 5.4.: Σχηματική απεικόνιση ενός τυπικού νευρώνα [2]

Οι συνδέσεις μεταξύ των νευρώνων, με τους άξονες και τους δενδρίτες, γίνονται στις επαφές που ονομάζονται συνάψεις. Οι νευρώνες μπορούν να βρεθούν σε δύο διακριτές καταστάσεις: την ενεργό και την μη-ενεργό κατάσταση. Στην ενεργό κατάσταση ο νευρώνας «πυροδοτεί», παράγει δηλαδή ένα ηλεκτρικό σήμα που κάθε φορά έχει τα ίδια χαρακτηριστικά, ενώ αντίθετα όταν ο νευρώνας είναι μη-ενεργός θεωρείται αδρανής. Ο νευρώνας δηλαδή είναι δυαδικό (binary) στοιχείο. Το κριτήριο που καθορίζει αν ένας νευρώνας είναι στην ενεργό ή στη μη-ενεργό κατάσταση είναι αν το άθροισμα των ηλεκτρικών δυναμικών των σημάτων που καταφθάνουν σε ένα νευρώνα σε μια δεδομένη στιγμή ξεπερνάει ή όχι αντίστοιχα τη δεδομένη τιμή κατωφλίου, θ .

Το εισερχόμενο σήμα μπορεί να είναι διεγερτικό ή ανασταλτικό. Όταν το εισερχόμενο σήμα είναι διεγερτικό αυτό σημαίνει ότι το σήμα αυτό είναι θετικό και κάνει το δυναμικό του νευρώνα να πλησιάσει κοντά στη τιμή θ . Αν είναι ανασταλτικό τότε συμβαίνει το αντίθετο, δηλ. το σήμα είναι αρνητικό και κάνει το δυναμικό να απομακρύνεται από τη τιμή θ . Το τελικό αποτέλεσμα εξαρτάται από την συνάρτηση του κατωφλίου, η οποία συνήθως είναι η συνάρτηση Heaviside, όπως φαίνεται στο σχήμα 5.5.



Σχήμα 5.5.: Η συνάρτηση κατωφλίου Heaviside [2]

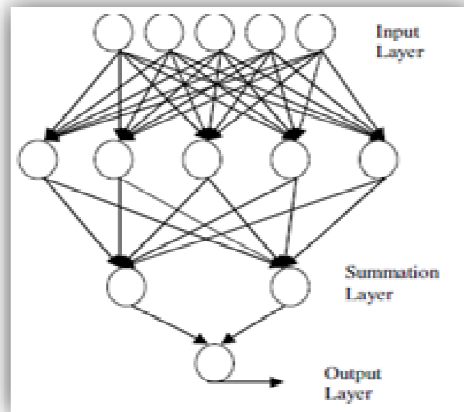
Είναι εμφανής η σημαντική αυτή ομοιότητα ανάμεσα στα βιολογικά και τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα.

5.3.3. ΤΕΧΝΗΤΑ ΝΕΥΡΩΝΙΚΑ ΔΙΚΤΥΑ ΓΕΝΙΚΕΥΜΕΝΗΣ ΠΑΛΙΝΔΡΟΜΗΣΗΣ (GRANNs) [6]

Τα *Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα Γενικευμένης Παλινδρόμησης (General Regression Artificial Neural Networks –GRNNs–)* είναι ένας από τους πιο δημοφιλείς τύπους νευρωνικών δικτύων. Έχουν μια παράλληλη δομή όπου η εκμάθηση γίνεται σε ένα στάδιο (*one shot*) και όχι μέσω επαναλήψεων, παρέχοντας έτσι άμεση υλοποίηση της παλινδρόμησης. Επίσης αποδίδουν καλά στα δεδομένα με θόρυβο υποβάθρου σε περιπτώσεις που ο αριθμός των διαθέσιμων στοιχείων είναι αρκετά μεγάλος. Αυτός είναι ένας από τους λόγους που τα GRANNs χρησιμοποιούνται στην ιατρική σε προβλήματα ταξινόμησης, πρόβλεψης και διάγνωσης όπου η ύπαρξη δεδομένων με θόρυβο υποβάθρου είναι πολύ συνηθισμένη. Τα GRANNs είναι επίσης μία μέθοδος με μεγάλη σταθερότητα και με την αύξηση του πλήθους των δεδομένων το σφάλμα προσεγγίζει το μηδέν. Τα GRANNs λειτουργούν με ικανοποιητική ακρίβεια ακόμα και όταν ο αριθμός των δεδομένων είναι περιορισμένος. Η δομή τους αποτελείται από τέσσερα επίπεδα:

- **Επίπεδο εισόδου (input layer):** Το επίπεδο εισόδου μεταφέρει τις ιδιότητες των στοιχείων στο επόμενο επίπεδο σε παράλληλη δομή
- **Κρυφό επίπεδο (hidden layer):** Το δεύτερο επίπεδο αποτελείται από όλα τα στοιχεία εκπαίδευσης του δικτύου
- **Επίπεδο αθροίσματος (summation layer):** Στο επίπεδο αθροίσματος οι μονάδες ή οι νευρώνες του δικτύου εκτελούν ένα γινόμενο μεταξύ των ιδιοτήτων και των συντελεστών βαρύτητας του προηγούμενου επιπέδου
- **Επίπεδο εξόδου (output layer):** Τέλος στο επίπεδο εξόδου τα αντίστοιχα τοπικά αποτελέσματα διαιρούνται για την εξαγωγή των επιδιωκόμενων προβλέψεων.

Στο ακόλουθο σχήμα (σχήμα 5.6) παρουσιάζεται ένα βασικό GRANN που αποτελείται από τα παραπάνω τέσσερα επίπεδα.



Σχήμα 5.6.: Βασικό GRANN τεσσάρων επιπέδων (εισόδου, κρυφό, αθροίσματος και εξόδου) [11]

Το μέγεθος του υποσυνόλου στο χώρο των δεδομένων εισόδου καθορίζεται από την τιμή της παραμέτρου σ . Η παράμετρος σ , η οποία παίρνει τιμές στο διάστημα $[0, 1]$, εκφράζει την «ακτίνα» του κύκλου επιρροής (σε όρους συναρτήσεων Gauss) κάθε προτύπου εκπαίδευσης στο χώρο των δεδομένων εισόδου κατάρτισης στο διάστημα εισαγωγής. Με άλλα λόγια, η παράμετρος σ ρυθμίζει την συνδυασμένη συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας των δεδομένων εισόδου και των εξόδων προτύπων εκπαίδευσης έτσι ώστε:

- για μικρές τιμές της σ , μόνο μερικά πρότυπα σε κοντινή γειτνίαση με τα νέα δεδομένα εισόδου λαμβάνονται υπόψη στη διαμόρφωση της πρόβλεψης (εμφάνιση παρέκτασης) οπότε η επιφάνεια παλινδρόμησης έχει μια τραχιά μορφή, και
- για μεγαλύτερες τιμές της παραμέτρου σ , περισσότερα πρότυπα εκπαίδευσης επηρεάζουν τις εξόδους (κάθε ένα αναλογικά με την απόστασή του από τα νέα δεδομένα εισόδου) με αποτέλεσμα να επιτυγχάνεται ομαλότερη παρεμβολή. Η επιλογή της κατάλληλης τιμής της παραμέτρου σ επιτρέπει στο GRANN να γενικεύσει, με άλλα λόγια να προβλέψει με ακρίβεια τις νέες εισόδους.

5.3.4. ΠΛΕΟΝΕΚΤΗΜΑΤΑ ΚΑΙ ΜΕΙΟΝΕΚΤΗΜΑΤΑ ΧΡΗΣΗΣ GRANNs

- Τα GRANNs έχουν μια ισχυρά παράλληλη δομή και γενικεύουν σχεδόν καλύτερα από οποιονδήποτε άλλο τύπο νευρωνικού δικτύου.
- Το GRANN είναι ένα μη επαναληπτικό νευρωνικό δίκτυο και έτσι καταναλώνει λιγότερη υπολογιστική ισχύ και μνήμη από τα επαναληπτικά νευρωνικά δίκτυα.
- Τα παραπάνω χαρακτηριστικά καθιστούν τα GRANNs μία πολύ εφικτή μέθοδο για χρήση σε εφαρμογές πραγματικού - χρόνου όπως είναι η αναγνώριση προσώπου.
- Έχουν μία πολύ γρήγορη (με μία μόνο επανάληψη) διαδικασία εκπαίδευσης.

- Δημιουργούν αυτόματα μια μη παραμετρική και μη-γραμμική επιφάνεια παλινδρόμησης μεταξύ των ευδιάκριτων κατηγοριών των στοιχείων εκπαίδευσης (δεν είναι απαραίτητος ο *a priori* ορισμός των παραμέτρων της παλινδρόμησης). Τέλεια προσαρμογή και ανάκληση για οποιοδήποτε αριθμό στοιχείων του συνόλου εκπαίδευσης (που κυμαίνεται από σποραδικά στοιχεία ως εκτενή σύνολα δεδομένων) ή πολυπλοκότητα ορίων.
- Παρέχει (σχεδόν) τέλεια πρόβλεψη των εξόδων των νέων δεδομένων εισόδου με τον υπολογισμό της στατιστικά πιο πιθανής εξόδου (υπό όρους μέσος όρος) από ένα (υπό-) σύνολο προτύπων εισόδου των δεδομένων εκπαίδευσης.
- Ένα πρόβλημα των GRANNs είναι ο καταναλισκόμενος χρόνος λόγω της παράλληλης δομής του που δεν το καθιστά το ταχύτερο νευρωνικό δίκτυο αλλά αυτό εξαρτάται επίσης από το πλήθος των δεδομένων εισόδου.

5.4 ΓΕΝΕΤΙΚΟΙ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΙ [1,7-9,11,14]

5.4.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Η μέθοδος των *Γενετικών Αλγορίθμων* (ΓΑ - Genetic Algorithms) βασίζεται στις αρχές της Γενετικής Εξέλιξης και της Κληρονομικότητας. Είναι μία σχετικά νέα μέθοδος η οποία αναπτύχθηκε και εφαρμόζεται από το 1950 αλλά με μεγαλύτερη συχνότητα τα τελευταία 30 χρόνια. Οι κλασικές μέθοδοι αναζήτησης και βελτιστοποίησης παρουσιάζουν σημαντικά μειονεκτήματα (βλέπε κεφάλαιο 1) και έτσι οι γενετικοί αλγόριθμοι κερδίζουν σημαντικό έδαφος στην επίλυση σχετικών προβλημάτων.

Η μέθοδος βελτιστοποίησης μέσω ΓΑ ξεκινά από έναν αρχικό πληθυσμό δεδομένων και εφαρμόζει σε αυτόν διάφορες διαδικασίες επιλογής του καλύτερου ατόμου, καθώς και διάφορους γενετικούς τελεστές. Οι τελεστές αυτοί αντιγράφουν τον τρόπο με τον οποίο αναπαράγονται και μεταλλάσσονται τα χρωμοσώματα των κυττάρων των ζωντανών οργανισμών. Έτσι, περνώντας από γενιά σε γενιά, τα συστήματα αυτά δημιουργούν συνεχώς νέους πληθυσμούς πιθανών λύσεων χρησιμοποιώντας, τόσο κομμάτια και στοιχεία από την προηγούμενη γενιά, όσο και εντελώς καινούρια κομμάτια που δοκιμάζονται για τυχόν καλή απόδοσή τους.

Η πρώτη εμφάνιση των ΓΑ χρονολογείται στις αρχές του 1950, όταν διάφοροι βιολόγοι επιστήμονες αποφάσισαν να χρησιμοποιήσουν υπολογιστές στην προσπάθειά τους να προσομοιώσουν πολύπλοκα βιολογικά συστήματα. Όμως η συστηματική ανάπτυξη των ΓΑ, που οδήγησε στη μορφή με την οποία είναι γνωστοί μέχρι και σήμερα, πραγματοποιήθηκε στις αρχές του 1970 από τον John Holland και τους συνεργάτες του στο Πανεπιστήμιο του Michigan. Οι ΓΑ χρησιμοποιούν ιδέες από τη θεωρία της Εξέλιξης των Ειδών (*The Origin Of The Species*) του Δαρβίνου που μπορούν να εφαρμοσθούν στην

επίλυση δύσκολων, από υπολογιστική άποψη, προβλημάτων. Αυτός είναι ο λόγος που οι ΓΑ στη διεθνή βιβλιογραφία αναφέρονται και ως Εξελικτικοί Αλγόριθμοι.

Σκοπός της θεωρίας της Εξέλιξης των Ειδών είναι να δώσει μια εξήγηση για το φαινόμενο της ζωής, την προέλευσή της και τις βασικές λειτουργίες της. Τα κυριότερα σημεία της, που σχετίζονται και ερμηνεύουν τον τρόπο λειτουργίας των γενετικών αλγορίθμων, είναι τα εξής:

- Δεν υπάρχει αντικειμενική βάση διαχωρισμού των ζωντανών οργανισμών σε ανώτερους και κατώτερους (εννοείται στο ίδιο βιολογικό είδος, π.χ. των ανθρώπων). Σε κάθε βιολογικό είδος, μερικά άτομα αφήνουν περισσότερους απογόνους σε σύγκριση με τα υπόλοιπα και έτσι τα κληροδοτούμενα χαρακτηριστικά των αναπαραγωγικά επιτυχημένων ατόμων γίνονται περισσότερα στην επόμενη γενιά. Οι δυσκολίες, τα εμπόδια και οι αντιξοότητες που παρουσιάζονται κατά τη διάρκεια της ζωής των οργανισμών είναι οι παράγοντες, που καθορίζουν ποιοι από αυτούς θα κατορθώσουν να ζήσουν και να πολλαπλασιαστούν. Έτσι, με την αλλαγή του περιβάλλοντος και των συνθηκών διαβίωσης, μόνο τα πιο κατάλληλα άτομα (τα άτομα δηλαδή που έχουν τα κατάλληλα χαρακτηριστικά) σε κάθε πληθυσμό επιβιώνουν και πολλαπλασιάζονται με αποτέλεσμα τελικά να αλλάζει και να βελτιώνεται ο τελικός πληθυσμός.
- Αυτή η αλλαγή, όμως, που συμβαίνει στα χαρακτηριστικά των ατόμων είναι αλλαγή στα χρωμοσώματά τους (chromosomes), που είναι πολύπλοκα οργανικά μόρια τα οποία κωδικοποιούν τη δομή και τα χαρακτηριστικά τους. Τα χρωμοσώματα αποτελούνται από μικρότερα μέρη, γνωστά ως γονίδια (genes). Το σύνολο της γενετικής πληροφορίας που είναι κωδικοποιημένο στα γονίδια ονομάζεται γονότυπος (genotype). Η δημιουργία ενός νέου οργανισμού περιλαμβάνει την αποκωδικοποίηση των χρωμοσωμάτων. Το σύνολο των «ορατών» χαρακτηριστικών του και της συμπεριφοράς του, που καθορίζονται από τις πληροφορίες των γονιδίων, συνιστούν το φαινότυπο (phenotype).
- Κυρίαρχες λειτουργίες του φαινομένου της εξέλιξης είναι η *επιλογή* (selection) και η *αναπαραγωγή* (reproduction). Τα κυριότερα στάδια της επιλογής είναι η *διασταύρωση* (crossover) και η *μετάλλαξη* (mutation). Κατά τη μετάλλαξη γίνεται με τυχαίο τρόπο η αλλαγή της δομής των χρωμοσωμάτων, συνήθως από λανθασμένη αντιγραφή βιολογικών μορίων ή από εξωγενείς παράγοντες (π.χ. ακτινοβολία), έχοντας ως άμεσο αποτέλεσμα την αλλαγή σε κάποιο χαρακτηριστικό. Η μετάλλαξη, μερικές φορές, μπορεί να προκαλέσει βελτιώσεις και, χωρίς αμφιβολία, μερικά λάθη που έγιναν αποτέλεσαν σημαντικό παράγοντα για την προοδευτική εξέλιξη της ζωής.
- Προϊόν της αναπαραγωγής είναι ένας νέος οργανισμός, τα χρωμοσώματά του οποίου αποτελούνται από γονίδια που προέρχονται ένα μέρος από τον πατέρα και τα υπόλοιπα από τη

μητέρα. Έτσι, για κάθε χαρακτηριστικό, το νέο άτομο έχει πάρει ένα γονίδιο από κάθε γονέα. Μερικές φορές, τα δύο αυτά γονίδια συμφωνούν μεταξύ τους ενώ άλλες φορές όχι. Στη δεύτερη περίπτωση, κυριαρχεί η «τιμή» ενός γονιδίου και αγνοείται η «τιμή» του άλλου, μολονότι το δεύτερο μπορεί να περάσει σε επόμενες γενιές. Το γονίδιο που τελικά καθορίζει το χαρακτηριστικό λέγεται *κυρίαρχο* ή *επικρατούν* (*dominant*) και το άλλο *υπολειπόμενο* (*recessive*). Γονίδια που διεκδικούν την ίδια θέση σε ένα χρωμόσωμα (δηλαδή που είναι υπεύθυνα για το ίδιο χαρακτηριστικό), λέγονται *αλληλόμορφα* (*alleles*).

5.4.2 ΟΡΟΛΟΓΙΑ

Όπως έχει ήδη αναφερθεί, οι ΓΑ χρησιμοποιούν ορολογία δανεισμένη από το χώρο της Γενετικής. Κατ' αναλογία με τα έμβια όντα, αναφέρονται σε άτομα ή γονότυπα μέσα σε έναν πληθυσμό. Πολύ συχνά αυτά τα άτομα καλούνται επίσης χρωμοσώματα. Οι ΓΑ αναφέρονται σχεδόν πάντα σε άτομα με ένα μόνο χρωμόσωμα. Τα χρωμοσώματα αποτελούνται από διάφορα στοιχεία που ονομάζονται γονίδια και είναι διατεταγμένα σε γραμμική ακολουθία. Κάθε γονίδιο επηρεάζει την κληρονομικότητα ενός ή περισσότερων χαρακτηριστικών. Τα γονίδια που επηρεάζουν συγκεκριμένα χαρακτηριστικά γνωρίσματα του ατόμου βρίσκονται και σε συγκεκριμένες θέσεις του χρωματοσώματος που καλούνται *τόποι* (*loci*).

Κάθε γονότυπος (που στις περισσότερες περιπτώσεις είναι ένα μόνο χρωμόσωμα) αναπαριστά μια πιθανή λύση σε ένα πρόβλημα. Το μεταφρασμένο περιεχόμενο ενός συγκεκριμένου χρωμοσώματος καλείται φαινότυπος και καθορίζεται από τον χρήστη, ανάλογα με τις ανάγκες και τις απαιτήσεις του εκάστοτε προβλήματος. Μια διαδικασία εξέλιξης που εφαρμόζεται πάνω σε έναν πληθυσμό χρωμοσωμάτων αντιστοιχεί σε μία εκτενή αναζήτηση μέσα σε ένα χώρο από πιθανές λύσεις. Απαραίτητη προϋπόθεση για την επιτυχημένη έκβαση μιας τέτοιου είδους αναζήτησης αποτελεί η εξισορρόπηση δύο διαδικασιών που είναι προφανώς αντικρουόμενες, της εκμετάλλευσης και διατήρησης των καλύτερων λύσεων και της όσο το δυνατόν καλύτερης εξερεύνησης όλου του χώρου του προβλήματος.

Ένας ΓΑ πραγματοποιεί αναζήτηση σε πολλές κατευθύνσεις με το να διατηρεί έναν πληθυσμό από πιθανές λύσεις και να υποστηρίζει καταγραφή και ανταλλαγή πληροφοριών μεταξύ αυτών των κατευθύνσεων. Ο πληθυσμός υφίσταται μια προσομοιωμένη γενετική εξέλιξη. Σε κάθε γενιά και βάσει πιθανοτήτων, οι σχετικά «καλές» λύσεις αναπαράγονται, ενώ οι σχετικά «κακές» αφαιρούνται. Ο διαχωρισμός και η αξιολόγηση των διαφόρων λύσεων γίνεται με την βοήθεια μιας *αντικειμενικής συνάρτησης* ή *συνάρτησης καταλληλότητας* (*objective* ή *fitness function*), η οποία παίζει το ρόλο του περιβάλλοντος μέσα στο οποίο εξελίσσεται ο πληθυσμός.

Η διαδικασία εύρεσης της λύσης ενός προβλήματος μέσω ΓΑ ξεκινά από έναν πληθυσμό τυχαία δημιουργούμενων στοιχείων και επαναλαμβάνεται η διαδικασία εύρεσης. Ο αριθμός των επαναλήψεων ονομάζονται γενεές (*generations*). Το κάθε στοιχείο του πληθυσμού αξιολογείται – μέσω της αντικειμενικής συνάρτησης – σε κάθε γενεά και τα πιο ικανά στοιχεία επιλέγονται και μεταβάλλονται ώστε να δημιουργήσουν έναν νέο πληθυσμό. Ο νέος πληθυσμός εισάγεται στον επαναληπτικό κύκλο του αλγορίθμου και η διαδικασία επαναλαμβάνεται μέχρι να επιτευχθεί είτε ένας μέγιστος – οριζόμενος από τον χρήστη – αριθμός γενεών, είτε ένα ικανοποιητικό αποτέλεσμα. Εάν ο αλγόριθμος τερματιστεί λόγω επίτευξης του μέγιστου βαθμού γενεών είναι πιθανό να μην έχει βρεθεί μια ικανοποιητική λύση για το πρόβλημα.

Ένας ΓΑ για ένα συγκεκριμένο πρόβλημα πρέπει να αποτελείται από τα παρακάτω πέντε τμήματα:

- 1) Μια γενετική αναπαράσταση των πιθανών λύσεων του προβλήματος. Μια συνηθισμένη αναπαράσταση των λύσεων είναι ένα διάνυσμα δυαδικών στοιχείων (0 ή 1). Το κύριο πλεονέκτημα των γενετικών αυτών αναπαραστάσεων είναι ότι λόγω του συγκεκριμένου μεγέθους των διανυσμάτων, είναι εύκολη η διαδικασία διασταύρωσης.
- 2) Ένα τρόπο δημιουργίας ενός αρχικού πληθυσμού των πιθανών λύσεων.
- 3) Μια αντικειμενική συνάρτηση αξιολόγησης που παίζει το ρόλο του περιβάλλοντος, κατατάσσοντας τις λύσεις με βάση την καταλληλότητά τους. Η συνάρτηση αυτή ορίζεται μέσω της γενετικής αναπαράστασης των λύσεων και υπολογίζει την ποιότητα της λύσης. Η αντικειμενική συνάρτηση εξαρτάται από το εκάστοτε πρόβλημα.
- 4) Γενετικούς τελεστές που μετατρέπουν τη σύνθεση των απογόνων.
- 5) Τιμές για διάφορες παραμέτρους του γενετικού αλγορίθμου (π.χ. μέγεθος πληθυσμού, πιθανότητες εφαρμογής των γενετικών τελεστών, κ.λπ.).

Οι ΓΑ βρίσκουν εφαρμογή σε ένα μεγάλο εύρος εφαρμογών και πεδίων όπως η βιο-πληροφορική και η επιστήμη των υπολογιστών, η μηχανική, τα οικονομικά, η χημεία, τα μαθηματικά και η φυσική.

5.4.3 ΠΛΕΟΝΕΚΤΗΜΑΤΑ ΓΕΝΕΤΙΚΩΝ ΑΛΓΟΡΙΘΜΩΝ ΚΑΙ ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΜΕ ΠΑΡΑΔΟΣΙΑΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΥΣ

Η χρήση των ΓΑ σε διάφορες εφαρμογές είναι ελκυστική για αρκετούς λόγους. Οι κυριότεροι είναι οι εξής:

1. Μπορούν να λύσουν δύσκολα προβλήματα γρήγορα και αξιόπιστα. Ένας από τους πιο σημαντικούς λόγους χρήσης των ΓΑ είναι η μεγάλη τους αποδοτικότητα. Προβλήματα που έχουν πολλές, δύσκολα προσδιοριζόμενες, λύσεις μπορούν να αντιμετωπιστούν καλύτερα από τους ΓΑ. Συναρτήσεις που παρουσιάζουν μεγάλες διακυμάνσεις και καθιστούν ανεπαρκείς άλλες μεθόδους

στην εύρεση των ακρότατων τους, για τους ΓΑ οι διακυμάνσεις αυτές δεν αποτελούν σημεία δυσχέρειας.

2. Μπορούν εύκολα να συνεργαστούν με τα υπάρχοντα μοντέλα και συστήματα. Οι ΓΑ προσφέρουν το σημαντικό πλεονέκτημα της χρήσης τους με προσθετικό τρόπο στα μοντέλα που χρησιμοποιούνται σήμερα, μη απαιτώντας την επανασχεδίαση τους. Μπορούν εύκολα να συνεργαστούν με τον υπάρχοντα κώδικα. Αυτό συμβαίνει διότι χρησιμοποιούν μόνο πληροφορίες της διαδικασίας ή της συνάρτησης που πρόκειται να βελτιστοποιηθεί, δίχως να ενδιαφέρει άμεσα το νόημα ή ο ρόλος της μέσα στο υπό εξέταση σύστημα. Επίσης είναι δυνατή η χρησιμοποίηση ενός υβριδικού σχήματος ενός ΓΑ με κάποια άλλη μέθοδο ή οποία μπορεί να προσφέρει υψηλή αποδοτικότητα λόγω εξειδίκευσης.
3. Εφαρμόζονται σε ένα μεγάλο εύρος επιστημονικών πεδίων. Το χαρακτηριστικό, που τους εξασφαλίζει αυτό το πλεονέκτημα, είναι η ελευθερία ορισμού των κριτηρίων που καθορίζουν την επιλογή μέσα στο τεχνικό περιβάλλον. Έτσι, ΓΑ μπορούν να χρησιμοποιηθούν στην οικονομία, στο σχεδιασμό μηχανών, στην επίλυση μαθηματικών εξισώσεων, στην εκπαίδευση Νευρωνικών Δικτύων και σε πολλούς άλλους τομείς.
4. Δεν απαιτούν περιορισμούς στις συναρτήσεις που επεξεργάζονται. Ο κύριος λόγος που καθιστά τις παραδοσιακές μεθόδους δύσκαμπτες και ακατάλληλες για πολλά προβλήματα είναι η απαίτησή τους για ύπαρξη περιορισμών, όπως ύπαρξη παραγώγων, συνέχεια, συναρτήσεις χωρίς απότομες αυξομειώσεις κ.τ.λ.. Τέτοιου είδους ιδιότητες είναι αδιάφορες για τους ΓΑ πράγμα που τους κάνει κατάλληλους για μεγάλο φάσμα προβλημάτων.
5. Δεν ενδιαφέρει η σημασία της υπό εξέταση πληροφορίας. Πολλές μέθοδοι αναζήτησης απαιτούν αρκετές βοηθητικές πληροφορίες για τη συνάρτηση που επεξεργάζονται. Η μόνη «επικοινωνία» του ΓΑ με το περιβάλλον του είναι η αντικειμενική συνάρτηση. Αυτό εγγυάται την επιτυχία του ανεξάρτητα από τη σημασία του προβλήματος. Βέβαια αυτό δε σημαίνει ότι δεν υπάρχουν άλυστα προβλήματα για τους ΓΑ. Όπου όμως, δεν τα καταφέρνουν, η αιτία είναι η φύση του χώρου που ερευνούν και όχι το πληροφοριακό περιεχόμενο του προβλήματος.
6. Έχουν από τη φύση τους το στοιχείο του παραλληλισμού. Οι ΓΑ σε κάθε τους βήμα επεξεργάζονται μεγάλες ποσότητες πληροφορίας και έτσι μπορούν να καλύψουν με αποδοτική αναζήτηση μεγάλους χώρους σε μικρούς χρόνους. Επίσης εύκολα μπορούν να δεχτούν παράλληλη υλοποίηση σε αντίθεση με άλλες ανταγωνιστικές μεθόδους.
7. Οι ΓΑ πραγματοποιούν αναζήτηση σε πολλά σημεία ταυτόχρονα και όχι μόνο σε ένα. Σε πολλές μεθόδους βελτιστοποίησης, η επεξεργασία γίνεται βήμα προς βήμα, πηγαίνοντας προσεκτικά από σημείο σε σημείο του πεδίου ορισμού του προβλήματος. Αυτό, το βήμα προς βήμα, ενέχει αρκετούς κινδύνους, ο κυριότερος από τους οποίους είναι να περιοριστεί η αναζήτηση σε μια

περιοχή τοπικού ακρότατου, που δεν είναι ολικό. Οι ΓΑ εξαλείφουν αυτόν τον κίνδυνο ενεργώντας ταυτόχρονα πάνω σε ένα ευρύ σύνολο σημείων (σύνολο από συμβολοσειρές). Έτσι μπορούν να «ανεβαίνουν» πολλούς λόφους (*hill-climbing*) την ίδια στιγμή, ελαχιστοποιώντας την πιθανότητα να βρουν μια λάθος κορυφή. Έπειτα, «τρέχοντας» ο αλγόριθμος δημιουργεί νέους πληθυσμούς, που σιγά - σιγά συγκλίνουν προς την επιθυμητή λύση. Διαλέγοντας έναν πληθυσμό που να καλύπτει αντιπροσωπευτικά ένα μεγάλο εύρος τιμών μπορούν να προκύψουν ικανοποιητικά αποτελέσματα.

Εν ολίγοις, το σημαντικότερο πλεονέκτημα των Γ.Α. είναι ότι *παρέχουν υψηλής ποιότητας λύσεις σε μικρό χρόνο.*

5.4.4 ΣΤΑΔΙΑ ΕΦΑΡΜΟΓΗΣ ΓΕΝΕΤΙΚΩΝ ΑΛΓΟΡΙΘΜΩΝ

Στην ουσία, ένας τυπικός ΓΑ περιλαμβάνει απλές λειτουργίες, που όμως κρύβουν μέσα τους μεγάλη ισχύ. Αυτός ο συνδυασμός απλοϊκότητας και ισχύος είναι το μεγαλύτερο θύελλο της τεχνικής τους. Στην παράγραφο αυτή παρουσιάζονται τα βασικά στοιχεία, που πρέπει να έχει ένας γενετικός αλγόριθμος.

Αρχικά σε έναν ΓΑ πρέπει να υπάρχουν στοιχεία που θα τον συνδέουν με το πρόβλημα που επιλύει. Η κωδικοποίηση και η αντικειμενική συνάρτηση επιτελούν αυτό το σκοπό και είναι απαραίτητα συστατικά για έναν ΓΑ.

1. Κωδικοποίηση:

Η κωδικοποίηση αφορά ένα σύνολο πιθανών λύσεων του προβλήματος. Η αναπαράσταση των λύσεων πρέπει να γίνει με ένα μαθηματικό, φορμαλιστικό τρόπο, ώστε να είναι δυνατή η επεξεργασία από τον υπολογιστή. Κύριος στόχος της κωδικοποίησης είναι να αναπαριστώνται με ικανοποιητικό τρόπο τα επιμέρους χαρακτηριστικά των λύσεων, ώστε να διευκολύνονται οι επόμενες λειτουργίες του αλγορίθμου (κυρίως η επιλογή). Αποτέλεσμα της κωδικοποίησης πρέπει να είναι η ύπαρξη ομοιοτήτων ανάμεσα στα άτομα με σκοπό την κατάλληλη εκμετάλλευσή τους, αφού οι ομοιότητες βοηθούν την κατεύθυνση της αναζήτησης.

2. Αντικειμενική συνάρτηση:

Το δεύτερο βασικό στοιχείο σύνδεσης ενός ΓΑ με το πρόβλημα που λύνει είναι η αντικειμενική συνάρτηση. Αυτή παίρνει ως είσοδο μια αποκωδικοποιημένη συμβολοσειρά και επιστρέφει μια τιμή (συνήθως πραγματική), που είναι ανάλογη του πόσο καλά λύνει το πρόβλημα η συγκεκριμένη συμβολοσειρά. Η τιμή αυτή αποτελεί και τον καθοριστικό παράγοντα επιβίωσης και πολλαπλασιασμού ή μη του ατόμου. Η αντικειμενική συνάρτηση παίζει το ρόλο του περιβάλλοντος στο τεχνικό μοντέλο. Ουσιαστικά, είναι η μόνη πληροφορία που δέχεται ο αλγόριθμος για το πρόβλημα που λύνει. Είναι

σημαντικό αυτή η συνάρτηση να είναι εύκολα υπολογίσιμη, ώστε να μην επιβραδύνει τους ρυθμούς της διαδικασίας. Σε κάθε λύση, δηλαδή σε κάθε πιθανή τιμή της μεταβλητής X , αντιστοιχεί μια *τιμή καταλληλότητας ή απόδοσης* (*fitness* ή *score*), μια τιμή που αξιολογεί το πόσο κατάλληλη είναι η λύση για τη μεγιστοποίηση της συνάρτησης. Με τον καθορισμό της κωδικοποίησης και της αντικειμενικής συνάρτησης, πλέον, ορίζεται το πρόβλημα και ολοκληρώνεται το πρώτο στάδιο εφαρμογής ενός ΓΑ. Η φάση ορισμού της κωδικοποίησης και της αντικειμενικής συνάρτησης υπάρχουν πάντα σε κάθε ΓΑ, ανεξαρτήτως του προβλήματος.

Στο επόμενο στάδιο περιλαμβάνονται λειτουργίες που ανήκουν στη φάση εκτέλεσης του ΓΑ. Εδώ γίνεται ο κύριος όγκος της εργασίας και παράγεται το αποτέλεσμα της βελτιστοποίησης. Η δομή ενός ΓΑ αποτελείται από τα παρακάτω βήματα:

- 1) Αρχικοποίηση (Initialization)
- 2) Αποκωδικοποίηση (Decoding)
- 3) Υπολογισμός καταλληλότητας ή αξιολόγηση (Fitness calculation ή evaluation)
- 4) Αναπαραγωγή (Reproduction)
 - i. Επιλογή (Selection)
 - ii. Διασταύρωση (Crossover ή mating)
 - iii. Μετάλλαξη (Mutation)
- 5) Επανάληψη από το βήμα (2) μέχρι να ικανοποιηθεί το κριτήριο τερματισμού του ΓΑ.

1. Αρχικοποίηση και αποκωδικοποίηση:

Η αρχικοποίηση είναι το βήμα στο οποίο ορίζεται ο αρχικός πληθυσμός, πάνω στον οποίο θα λάβουν χώρα οι λειτουργίες του ΓΑ. Ο πληθυσμός αυτός επιλέγεται με τυχαίο τρόπο ανάμεσα σε όλες τις δυνατές τιμές των μεταβλητών του προβλήματος, ενώ το μέγεθός του ορίζεται από το χρήστη (συνήθως όμως εξαρτάται από τους πόρους που αυτός έχει στη διάθεσή του) και εξαρτάται από την φύση του προβλήματος. Σε μερικές υλοποιήσεις, η επιλογή των αρχικών σημείων γίνεται με ευρετικές μεθόδους, δίνοντας εξαρχής ένα πλεονέκτημα στην αναζήτηση.

2. Υπολογισμός ικανότητας ή αξιολόγηση:

Στη συνέχεια, γίνεται ο υπολογισμός της ικανότητας κάθε λύσης. Το βήμα αυτό αποτελεί μια θεμελιώδη λειτουργία για τον ΓΑ. Για κάθε συμβολοσειρά του τρέχοντος πληθυσμού υπολογίζεται η απόδοσή της από την ήδη γνωστή αντικειμενική συνάρτηση.

3. Αναπαραγωγή:

Τη σκυτάλη στη συνέχεια παίρνει η σημαντικότερη λειτουργία του ΓΑ, η αναπαραγωγή. Εδώ λαμβάνει χώρα ο κύριος όγκος της εργασίας του αλγορίθμου. Η δομή της αναπαραγωγικής διαδικασίας είναι σύνθετη. Περιλαμβάνει τα εξής μέρη: *διασταύρωση* και *μετάλλαξη*. Πριν την αναπαραγωγή, εκτελείται η διαδικασία της επιλογής.

4. Επιλογή:

Με την επιλογή, βρίσκει εφαρμογή στα πλαίσια του αλγορίθμου, ο νόμος της επιβίωσης του ικανότερου. Μέσω της διαδικασίας αυτής καθορίζεται ποια άτομα από τον υπάρχοντα πληθυσμό θα έχουν την ευκαιρία να λάβουν μέρος στην αναπαραγωγή και να κληροδοτήσουν στην επόμενη γενιά μέρος ή το σύνολο των χαρακτηριστικών τους. Στόχος της λειτουργίας επιλογής είναι να επιτρέπει εκθετική αύξηση των ικανότερων ατόμων και τελικά, μετά από την αναπαραγωγή αρκετών γενεών, την επικράτησή τους. ΓΑ χωρίς επιλογή στην αναπαραγωγική του διαδικασία ισοδυναμεί με τυχαία αναζήτηση.

Υπάρχουν διάφοροι τρόποι υλοποίησης της επιλογής στα πλαίσια ενός ΓΑ. Δεδομένου ότι στη βασική μορφή του αλγορίθμου το μέγεθος του πληθυσμού από γενιά σε γενιά δεν αλλάζει, κάθε τεχνική επιλογής, οφείλει να δίνει με κάποιο τρόπο μεγαλύτερες πιθανότητες αναπαραγωγής σε άτομα που αξιολογούνται μέσα στο τεχνητό περιβάλλον ως τα πιο ικανά. Ο τελεστής αναπαραγωγής μπορεί να εκφραστεί σε αλγοριθμική βάση, με πολλούς τρόπους.

Ο προσωρινός πληθυσμός που προέκυψε από τη διαδικασία της επιλογής πρέπει να περάσει από τη διαδικασία διασταύρωσης για να πραγματοποιηθεί ένα είδος γονιμοποίησης, που συμβαίνει και στη φύση. Η νέα, λοιπόν, ομάδα ατόμων που προέκυψε από την επιλογή σχηματίζει με τυχαίο τρόπο ομάδες των δύο. Το ποιο άτομο θα διασταυρωθεί με ποιο, από τα άτομα του προσωρινού πληθυσμού, ίσως να επηρεάζει την ταχύτητα σύγκλισης του αλγορίθμου. Προς το παρόν αυτό αποτελεί αντικείμενο μελέτης και στη βιβλιογραφία σε εφαρμογές η διασταύρωση γίνεται με τυχαίο τρόπο.

Σε κάθε επανάληψη της γενετικής διαδικασίας, ένα ποσοστό του υπάρχοντος πληθυσμού επιλέγεται για την δημιουργία του νέου πληθυσμού. Οι πιθανές λύσεις επιλέγονται μέσω αξιολόγησης – όπως αυτή προκύπτει από την αντικειμενική συνάρτηση – και οι πιο ικανές έχουν μεγαλύτερες πιθανότητες να συμμετέχουν στη διαδικασία σχηματισμού του νέου πληθυσμού.

Υπάρχουν διάφορες μέθοδοι επιλογής του ποσοστού του αρχικού πληθυσμού. Άλλες μέθοδοι εξετάζουν ολόκληρο τον πληθυσμό (απαιτεί μεγάλη υπολογιστική ισχύ και χρόνο), ενώ άλλες μόνο ένα μέρος αυτού. Οι περισσότερες μέθοδοι είναι στοχαστικές και έχουν σχεδιαστεί έτσι ώστε ένα μικρό ποσοστό λιγότερο ικανών λύσεων να περιλαμβάνεται στον νέο πληθυσμό. Με τον προηγούμενο τρόπο

επιτυγχάνεται η εξασφάλιση της ποικιλότητας του πληθυσμού με αποτέλεσμα να αποφεύγεται μία πρόωρη σύγκλιση προς λανθασμένες λύσεις.

5. Διασταύρωση:

Σε κάθε ομάδα, τα δύο μέλη παίρνουν μέρος σε μια απλή λειτουργία ανταλλαγής γενετικού υλικού που ονομάζεται *διασταύρωση*. Η διασταύρωση είναι μια απαραίτητη λειτουργία που συμβάλει αποφασιστικά στην επίδοση ενός ΓΑ. Εξ' αιτίας αυτής της σπουδαιότητας, έχει γίνει αρκετή έρευνα και έχουν επινοηθεί πολλοί τρόποι υλοποίησης της. Μερικοί τρόποι μπορούν να εφαρμοστούν σε κάθε τύπο προβλήματος, ενώ άλλοι είναι πιο κατάλληλοι και εξειδικευμένοι για ειδικές περιπτώσεις. Στόχος της διασταύρωσης είναι η νέα γενιά που θα προκύψει μετά την εφαρμογή της να περιλαμβάνει άτομα που θα διαφέρουν από τους γονείς τους και θα φέρουν συνδυασμό των καλύτερων χαρακτηριστικών τους. Ερευνητές που ασχολούνται χρόνια με τους γενετικούς αλγόριθμους υποστηρίζουν ότι, αν αφαιρεθεί η διασταύρωση από έναν ΓΑ, τότε μειώνεται σημαντικά η απόδοσή του, αλλά αυτή δεν είναι μια άποψη με καθολική αποδοχή.

Ένα ενδεικτικό της χρησιμότητας της διασταύρωσης είναι η ανακατεύθυνση της νέες αναζήτησης σε νέες «απάτητες» περιοχές του χώρου αναζήτησης. Έτσι διευρύνεται το πεδίο δράσης του αλγορίθμου και αυξάνονται οι πιθανότητες επιτυχίας του. Επίσης, τα νέα άτομα περιλαμβάνουν συνδυασμούς χαρακτηριστικών των γονέων τους και με αυτό τον τρόπο μπορούν να προκύψουν επιτυχημένοι συνδυασμοί υψηλής ικανότητας. Υπάρχει βέβαια το ενδεχόμενο η διασταύρωση να δώσει χειρότερους απογόνους από τους γονείς, αλλά αυτοί δεν θα έχουν μεγάλη πιθανότητα πολλαπλασιασμού στον επόμενο αναπαραγωγικό κύκλο, λόγω μικρής απόδοσης. Στην πράξη, η διασταύρωση χρησιμοποιείται με παραμετροποιημένη μορφή, δηλαδή λαμβάνει χώρα με πιθανότητα, την λεγόμενη *πιθανότητα διασταύρωσης (crossover probability - pc)*, που καθορίζεται από το σχεδιαστή του ΓΑ. Συνήθως, αυτή η πιθανότητα ποικίλει από πρόβλημα σε πρόβλημα, ενώ είναι δυνατό και να αλλάζει κατά τη διάρκεια εκτέλεσης. Επίσης, θα πρέπει να αναφερθεί ότι η τιμή της πιθανότητας αυτής επηρεάζει το χρόνο εκτέλεσης του αλγορίθμου, δηλαδή τη σύγκλισή του. Η τιμή $pc=1$, σημαίνει συνεχή εφαρμογή του τελεστή διασταύρωσης, άρα η αναζήτηση γίνεται με μικρό βήμα. Αυτό θα έχει ως αποτέλεσμα η αναζήτηση να γίνει σε όλο το χώρο, άρα ο αλγόριθμος θα συγκλίνει στο βέλτιστο, αλλά πολύ αργά. Αντίθετα, χρησιμοποιώντας μικρές τιμές της pc η αναζήτηση κάνει άλματα, άρα ο αλγόριθμος είναι πιθανόν να συγκλίνει πιο γρήγορα. Χρησιμοποιώντας μεγάλο βήμα, υπάρχει ο κίνδυνος ο αλγόριθμος να μην συγκλίνει στο βέλτιστο και ακόμα και να αποκλίνει.

Έτσι, επιλέγεται συνήθως μεγάλο βήμα στην αρχή της αναζήτησης και στη συνέχεια, όταν ο αλγόριθμος προσεγγίσει την τιμή του βέλτιστου, χρησιμοποιείται μικρό βήμα αναζήτησης. Με αυτό τον

τρόπο, μπορεί να αυξηθεί η ταχύτητα αναζήτησης, χωρίς να υπάρχει κίνδυνος να αποκλίνει ο αλγόριθμος.

6. Μετάλλαξη:

Τελευταία στον κύκλο της αναπαραγωγικής διαδικασίας και ίσως λιγότερο σημαντική, αλλά πάντα χρήσιμη, είναι η *μετάλλαξη*. Είναι μια λειτουργία που συμβαίνει σχετικά σπάνια στη φύση και συνήθως δρα βελτιωτικά για τους οργανισμούς και γενικά για την εξέλιξη της ζωής. Όταν δεν δρα βελτιωτικά, τα αποτελέσματα της μετάλλαξης δεν επιβιώνουν στις επόμενες γενεές. Ανάλογος είναι ο ρόλος της και στα τεχνικά περιβάλλοντα. Η λειτουργία της είναι απλή: ενεργεί σε ένα μόνο οργανισμό κάθε φορά. Καθώς αντιγράφονται δυαδικά ψηφία από τον γονέα στον απόγονο, επιλέγεται τυχαία με μικρή πιθανότητα, τη λεγόμενη *πιθανότητα μετάλλαξης* (*mutation probability – pm*), ένα ψηφίο και αντιστρέφεται (από 0 σε 1 ή το αντίστροφο). Είναι πολύ σημαντικό η πιθανότητα να πραγματοποιηθεί η μετάλλαξη να είναι αρκετά μικρή (περίπου μία μετάλλαξη σε κάθε χίλια ψηφία που αντιγράφονται), γιατί σε αντίθετη περίπτωση ο ΓΑ εκφυλίζεται σε τυχαία αναζήτηση.

Αν και υπάρχει κάποια σύγχυση για το ρόλο της μετάλλαξης, τόσο φυσικής όσο και τεχνητής, το σίγουρο είναι πως είναι απαραίτητη. Η μετάλλαξη λειτουργεί ως ασφαλιστική δικλείδα για τις περιπτώσεις, κατά τις οποίες η επιλογή και η διασταύρωση, ενδεχομένως, χάσουν κάποιες πολύτιμες γενετικές πληροφορίες. Όταν συμβαίνει επιφέρει ποικιλία στον πληθυσμό, ανακατευθύνει την αναζήτηση προς περιοχές και άτομα με σχετικά υψηλή τιμή καταλληλότητας και εξασφαλίζει ότι κανένα σημείο του χώρου αναζήτησης δεν αποκλείεται από τη διαδικασία της αναζήτησης.

7. Τερματισμός:

Όπως έχει προαναφερθεί η γενετική διαδικασία επαναλαμβάνεται μέχρι να ικανοποιηθεί κάποια από τις συνθήκες τερματισμού. Τέτοιες συνθήκες είναι:

- 1) Εύρεση λύσης που ικανοποιεί τις ελάχιστες απαιτήσεις
- 2) Συμπλήρωση του αριθμού των επαναλήψεων
- 3) Πέρασ παρεχόμενου υπολογιστικού χρόνου
- 4) Η ικανότητα της βέλτιστης λύσης είναι σταθερή για μεγάλο χρονικό διάστημα με αποτέλεσμα η συνέχεια των επαναλήψεων να μην παράγει καλύτερα αποτελέσματα.

5.4.5 ΠΑΡΑΤΗΡΗΣΕΙΣ

Υπάρχουν αρκετές παρατηρήσεις σχετικά με την παραγωγή λύσεων μέσω ΓΑ:

1. Η επιλογή είναι ένας πολύ σημαντικός γενετικός τελεστής, αλλά υπάρχουν συζητήσεις για την σημαντικότητα της διασταύρωσης σε σχέση με της μετάλλαξης. Πολλοί υποστηρίζουν ότι η

μετάλλαξη είναι απαραίτητη μόνο για να εξασφαλιστεί ότι δεν θα χαθούν οι πιθανές λύσεις. Άλλοι υποστηρίζουν ότι η διασταύρωση σε έναν -σε μεγάλο βαθμό- ομοιογενή πληθυσμό παρέχει την ίδια διαφοροποίηση με την μετάλλαξη, ενώ σε έναν ανομοιογενή πληθυσμό παρέχει την ίδια διαφοροποίηση με μίας πολύ μεγάλης μετάλλαξης.

2. Όπως με όλες τις τεχνικές εύρεσης λύσεων είναι πολύ σημαντικός ο βέλτιστος προσδιορισμός των παραμέτρων που εμπλέκονται στη διαδικασία επίλυσης του προβλήματος που μελετάται. Τέτοιες παράμετροι είναι για παράδειγμα η πιθανότητα μετάλλαξης, η πιθανότητα διασταύρωσης, το μέγεθος του αρχικού πληθυσμού κ.α.. Ένας πολύ μικρός ρυθμός μετάλλαξης μπορεί οδηγήσει σε γενετική εκτροπή ενώ αντίθετα ένας πολύ μεγάλος ρυθμός μπορεί να οδηγήσει σε απώλεια καλών λύσεων. Ένας πολύ υψηλός ρυθμός διασταύρωσης μπορεί να οδηγήσει σε πρόωρη σύγκλιση της γενετικής διαδικασίας.

5.4.6 ΜΕΙΟΝΕΚΤΗΜΑΤΑ

Κάποια από τα μειονεκτήματα που αναφέρονται στη βιβλιογραφία για του ΓΑ είναι τα εξής:

1. Οι επαναλαμβανόμενοι υπολογισμοί μέσω της αντικειμενικής συνάρτησης για πολύπλοκα συστήματα είναι συχνά το πιο απαγορευτικό και περιοριστικό τμήμα των τεχνητών εξελικτικών αλγορίθμων. Ο προσδιορισμός της βέλτιστης λύσης πολύπλοκων πολυδιάστατων προβλημάτων συχνά απαιτεί πολύ μεγάλο αριθμό τέτοιων υπολογισμών και συνεπώς απαιτεί μεγάλη υπολογιστική ισχύ και χρόνο.
2. Σε πολλά προβλήματα, οι ΓΑ έχουν την τάση να συγκλίνουν προς τοπικά ελάχιστα ή ακόμα και τυχαία σημεία αντί για τα ολικά ελάχιστα. Η πιθανότητα να συμβεί κάτι τέτοιο εξαρτάται από το σχήμα της υπό εξέταση επιφάνειας. Το πρόβλημα αυτό μπορεί να ξεπεραστεί με τη χρήση κάποιας διαφορετικής αντικειμενικής συνάρτησης, με την αύξηση του ρυθμού μετάλλαξης ή με τη χρήση τεχνικών που διατηρούν την κατάλληλη ποικιλότητα των λύσεων. Η ποικιλότητα είναι πολύ σημαντική στους ΓΑ διότι η διασταύρωση ομοιογενών πληθυσμών δεν παράγει νέες λύσεις.
3. Οι ΓΑ δεν μπορούν να επιλύσουν αποτελεσματικά προβλήματα στα οποία η μόνη μεταβλητή απόφασης είναι μία μεταβλητή ΣΩΣΤΟ / ΛΑΘΟΣ (όπως ισχύει στα προβλήματα λήψης αποφάσεων), αφού δεν υπάρχει τρόπος να συγκλίνουν στην σωστή λύση. Παρόλα αυτά, αν η διαδικασία επιτρέπει την συνεχή επανάληψη της δοκιμής ΣΩΣΤΟ / ΛΑΘΟΣ παράγοντας πιθανώς διαφορετικά αποτελέσματα, τότε ο λόγος των επιτυχιών προς τις αποτυχίες μπορεί να παρέχει ένα επιθυμητό μέτρο αξιολόγησης.

5.5 ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ 5^{ΟΥ} ΚΕΦΑΛΑΙΟΥ

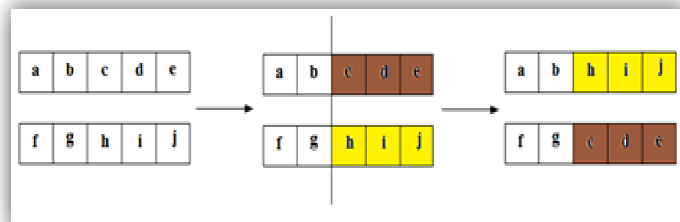
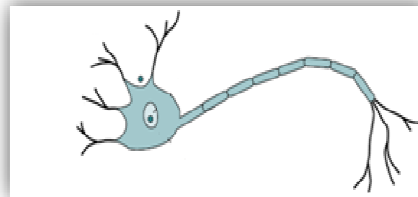
- [1] Σ.Λυκοθανάσης, Γενετικοί αλγόριθμοι και εφαρμογές, Ελληνικό Ανοικτό Πανεπιστήμιο, Σχολή Θετικών Επιστημών και Τεχνολογίας, Πρόγραμμα Σπουδών Πληροφορική, Θεματική Ενότητα Τεχνητή Νοημοσύνη και Εφαρμογές, Πάτρα 2000
- [2] Π.Αργυράκης, Νευρωνικά δίκτυα και εφαρμογές, Ελληνικό Ανοικτό Πανεπιστήμιο, Σχολή Θετικών Επιστημών και Τεχνολογίας, Πρόγραμμα Σπουδών Πληροφορική, Θεματική Ενότητα Τεχνητή Νοημοσύνη και Εφαρμογές, Πάτρα 2001
- [3] Α.Καμαρινόπουλος, Παλινδρόμηση και Συσχέτιση, Σημειώσεις μαθήματος: Στατιστική ΙΙ, Τμήμα Βιομηχανικής Διοίκησης και Τεχνολογίας, Πανεπιστήμιο Πειραιά
- [4] Γ.Παπαδόπουλος, Ανάλυση Παλινδρόμησης, Εργαστήριο, Μαθηματικών και Στατιστικής, Γεωπονικό Πανεπιστήμιο Αθηνών
- [5] J.J. Hopfield, Neural Networks and physical systems with emergent collective computational abilities, Proc. Natl. Acad. Sci. USA, Vol. 79, pp. 2554-2558, April 1982, Biophysics
- [6] Donald F. Specht, A General Regression Neural Network, IEEE Transactions on Neural Networks, Vol. 2, No.6, November 1991
- [7] John H. Holland, Genetic Algorithms: Computer programs that evolve in ways that resemble natural selection can solve complex problems even their creators do not fully understand, Scientific American July 1992
- [8] David E. Goldberg and Kalyanmoy Deb, A comparative analysis of selection schemes used in genetic algorithms, Department of General Engineering, University of Illinois at Urbana-Champaign
- [9] David E. Goldberg and Kalyanmoy Deb, James H.Clark, Genetic Algorithms, Noise and the sizing of populations, Department of General Engineering, University of Illinois at Urbana-Champaign, December 1991
- [10] Chipperfield, P. Fleming, H. Pohlheim, C. Fonseca, Genetic Algorithm TOOLBOX For Use with MATLAB: User's Guide V1.2, Department of automatic control and systems engineering, University of Sheffield
- [11] Tasweer Ahmad, Muhammad Umair, Face recognition using general regression neural network, KhalidMaster in Electrical Engg, UWT Lahore

Ιστοσελίδες:

- [12] http://en.wikipedia.org/wiki/Regression_analysis (Ανάλυση Παλινδρόμησης)
- [13] http://en.wikipedia.org/wiki/Neural_network (Νευρωνικά Δίκτυα)
- [14] http://en.wikipedia.org/wiki/Genetic_algorithm (Γενετικοί Αλγόριθμοι)

Περίληψη

Στο κεφάλαιο αυτό γίνεται ανάλυση της χρησιμοποιούμενης, για τον προσδιορισμό της περιβαλλοντικής συμπεριφοράς των υλικών, μεθόδου. Στη συνέχεια περιγράφονται οι μέθοδοι παλινδρόμησης που χρησιμοποιήθηκαν καθώς και η μέθοδος βελτιστοποίησης μέσω Γενετικών Αλγορίθμων. Σε κάθε στάδιο παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της έρευνας και ο σχολιασμός τους.



6.1 ΣΚΟΠΟΣ ΤΗΣ ΕΡΓΑΣΙΑΣ

Όπως αναφέρθηκε και στο κεφάλαιο 1, σκοπός της παρούσας εργασίας είναι η ανάπτυξη μίας μεθόδου βαθμολόγησης και κατάταξης μιας ομάδας διαθέσιμων υλικών ως προς την περιβαλλοντική τους επιβάρυνση σε μια δεδομένη εφαρμογή βάσει των ιδιοτήτων των υλικών αυτών και εύρεσης και ανάπτυξης νέων υλικών με βελτιωμένες περιβαλλοντικές επιδόσεις. Μετά την περιγραφή των βημάτων της χρησιμοποιούμενης μεθόδου παρουσιάζεται μια εφαρμογή που αφορά στην επιλογή του βέλτιστου υλικού για την κατασκευή φιαλών συσκευασίας υγρών ευρείας κατανάλωσης. Για τον σκοπό αυτόν επιλέχθηκαν δέκα πολυμερικά υλικά των οποίων η κατάταξη ως προς την περιβαλλοντική τους επιβάρυνση επιχειρείται με τη βοήθεια κλασικών και ήπιων υπολογιστικών τεχνικών παλινδρόμησης. Σε κάθε υλικό αποδίδεται ένας περιβαλλοντικός αδιάστατος δείκτης που περιγράφει τη συνολική περιβαλλοντική επιβάρυνση στα στάδια του κύκλου ζωής του. Ο περιβαλλοντικός αυτός δείκτης προκύπτει από τον γραμμικό συνδυασμό τεσσάρων περιβαλλοντικών επιπτώσεων στα διάφορα στάδια του κύκλου ζωής του προϊόντος. Μετά τον υπολογισμό του δείκτη αυτού τα υλικά κατατάσσονται από το λιγότερο επιβαρυντικό (μικρότερος περιβαλλοντικός δείκτης) προς το περισσότερο επιβαρυντικό (μεγαλύτερος περιβαλλοντικός δείκτης). Στο τελευταίο βήμα, με την εφαρμογή της μεθόδου των γενετικών αλγορίθμων, προσδιορίζονται τα ολικά ελάχιστα των καμπυλών παλινδρόμησης για τις δύο προαναφερθείσες τεχνικές παλινδρόμησης, τα οποία αντιστοιχούν σε δύο υλικά τα οποία βάσει της ανάλυσης του συστήματος εμφανίζουν τη βέλτιστη δυνατή περιβαλλοντική συμπεριφορά.

6.2 ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΜΕΘΟΔΟΥ

Η προτεινόμενη μέθοδος μπορεί να χωριστεί στα παρακάτω βήματα:

- 1) **Καθορισμός εφαρμογής:** Αρχικά καθορίζεται η εφαρμογή για την οποία αναζητείται το βέλτιστο περιβαλλοντικά υλικό.
- 2) **Επιλογή αρχικού πληθυσμού υλικών:** Μετά τον καθορισμό της εφαρμογής γίνεται μία αρχική επιλογή πιθανών υλικών τα οποία θα μπορούσαν να χρησιμοποιηθούν για την εφαρμογή αυτή.
- 3) **Ορισμός ιδιοτήτων:** Κάθε υλικό χαρακτηρίζεται από ένα πλήθος ιδιοτήτων. Οι ιδιότητες αυτές χωρίζονται σε πολλές διαφορετικές κατηγορίες: μηχανικές, θερμικές, ηλεκτρικές, μαγνητικές, οπτικές κ.α.. Στο στάδιο αυτό γίνεται η επιλογή των ιδιοτήτων μέσω των οποίων υλοποιείται η βαθμολόγηση των υλικών. Η εκάστοτε εφαρμογή μπορεί να καθορίσει τις κατηγορίες και τις ιδιότητες που θα χρησιμοποιηθούν για την εξαγωγή των αποτελεσμάτων.
- 4) **Χρήση υπολογιστικών τεχνικών βαθμολόγησης:** Στο στάδιο αυτό γίνεται χρήση υπολογιστικών τεχνικών παλινδρόμησης ώστε να υπολογιστεί ο περιβαλλοντικός δείκτης

και η βαθμολόγηση των υποψηφίων υλικών. Μετά την εξαγωγή των αποτελεσμάτων είναι δυνατή η σύγκριση έτσι ώστε να επιλεγεί η βέλτιστη υπολογιστική τεχνική. Σαν δεδομένα εισόδου των εφαρμοζόμενων τεχνικών παλινδρόμησης χρησιμοποιούνται οι ιδιότητες του υλικού και σαν έξοδοι οι περιβαλλοντικές επιπτώσεις του κάθε υλικού στα στάδια του κύκλου ζωής του. Από τις παραπάνω εξόδους προκύπτει -μέσω γραμμικού συνδυασμού- ο συνολικός περιβαλλοντικός δείκτης.

- 5) **Ανάλυση ευαισθησίας**: Το στάδιο μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τον έλεγχο της σταθερότητας της βέλτιστης επιλογής που προέκυψε από το βήμα 4 όταν μεταβάλλονται παράμετροι των μεταβλητών επιλογής (π.χ. συντελεστές βαρύτητας, αναλογίες κ.τ.λ.).
- 6) **Εύρεση βέλτιστου υλικού**: Με τον όρο αυτόν εννοείται η εύρεση ενός υλικού που θα μπορούσε να έχει βαθμολογία καλύτερη από την βαθμολογία των αρχικών υλικών. Το βέλτιστο αυτό υλικό προκύπτει από τα ολικά ελάχιστα των καμπυλών παλινδρόμησης που προέκυψαν από το βήμα 4. Μέσω των γενετικών αλγορίθμων, προσδιορίζονται οι μηχανικές ιδιότητες ενός «βέλτιστου» υλικού που είτε θα μπορεί να κατασκευαστεί είτε σε αντίθετη περίπτωση να δώσει χρήσιμες πληροφορίες για την κατεύθυνση προς την οποία θα πρέπει να κινηθούν οι σχεδιαστές και οι μηχανικοί των υλικών για να βελτιώσουν τα υλικά που έχουν στη διάθεσή τους.
- 7) **Πολυκριτηριακή ανάλυση**: Με την εύρεση του βέλτιστου υλικού γίνεται δυνατός ο υπολογισμός της επί τοις εκατό μεταβολής των αρχικών ιδιοτήτων του αρχικού πληθυσμού ώστε το βέλτιστο υλικό, όπως αυτό προέκυψε από τις υπολογιστικές μεθόδους του βήματος 4, να πλησιάσει τη βαθμολογία του βέλτιστου υλικού του βήματος 6. Έτσι γίνεται δυνατή η παροχή χρήσιμων πληροφοριών προς τον σχεδιαστή για την βελτίωση του τελικού προϊόντος.

6.3 ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΤΗΣ ΜΕΘΟΔΟΥ:

6.3.1 ΒΗΜΑ 1^ο: ΚΑΘΟΡΙΣΜΟΣ ΕΦΑΡΜΟΓΗΣ

Όπως προαναφέρθηκε, σαν εφαρμογή της παραπάνω μεθόδου επιλέχθηκε η εύρεση του βέλτιστου περιβαλλοντικά πολυμερικού υλικού για την κατασκευή δοχείων συσκευασίας υγρών ευρείας χρήσης (νερό, αναψυκτικά, χυμοί, γάλα κ.τ.λ.). Η όλη διερεύνηση του προβλήματος που μελετάται έγινε με χρήση του προγράμματος της εταιρείας *MathWorks, MATLAB R2009a* [4]. Στην παρούσα εργασία γίνονται οι παρακάτω παραδοχές:

- 1) Οι διαστάσεις των δοχείων συσκευασίας είναι ανεξάρτητες από το περιεχόμενο υγρό
- 2) Η ποσότητα του υλικού σε όλα τα στάδια του κύκλου ζωής παραμένει η ίδια ανεξάρτητα από το υλικό. Η παρούσα μελέτη έγινε χρησιμοποιώντας σαν ποσότητα αναφοράς το 1kg υλικού.

6.3.2 ΒΗΜΑ 2^ο: ΕΠΙΛΟΓΗ ΑΡΧΙΚΟΥ ΠΛΗΘΥΣΜΟΥ ΥΛΙΚΩΝ

Σαν βάση δεδομένων χρησιμοποιήθηκε το πρόγραμμα της εταιρείας *Granta Design*, *CES EduPack 2008* [5]. Τα υλικά τα οποία χρησιμοποιήθηκαν αναφέρονται στην βάση δεδομένων ως πιθανά για χρήση σε δοχεία αποθήκευσης υγρών. Τα πολυμερικά υλικά που επιλέχθηκαν είναι τα εξής:

Πολυμερικά Υλικά	
PE (Polyethylene)	PS (Polystyrene)
PEN (Polyethylene naphthalate)	PVC (Poly Vinyl Chloride)
PET (Polyethylene Terephthalate)	UHMW-HDPE
PMMA (Polymethylmethacrylate)	PA (Polyamide)
PP (Polypropylene)	PC (Polycarbonate)

Πίνακας 6.1.: Χρησιμοποιούμενα υλικά

6.3.3 ΒΗΜΑ 3^ο: ΟΡΙΣΜΟΣ ΙΔΙΟΤΗΤΩΝ

Στο στάδιο αυτό γίνεται η επιλογή των ιδιοτήτων των υλικών από τις οποίες θα εξαχθεί η τελική βαθμολογία τους. Η κατηγορία των ιδιοτήτων που επιλέχθηκε είναι οι μηχανικές ιδιότητες. Ο λόγος για τον οποίο επιλέχθηκε η κατηγορία αυτή είναι το ότι οι μηχανικές ιδιότητες αποτελούν τις κρίσιμότερες παραμέτρους για την δομική ακεραιότητα του τελικού προϊόντος. Η βάση δεδομένων παρέχει αριθμητικά στοιχεία για ένα πλήθος μηχανικών ιδιοτήτων. Από αυτές επιλέχθηκαν ως υποψήφιες οι εξής:

- Μέτρο Ελαστικότητας ή Μέτρο του Young (Young's Modulus)
- Τάση ή Αντοχή Διαρροής (Yield Strength)
- Αντοχή σε Εφελκυσμό (Tensile Strength)
- Αντοχή σε Συμπίεση (Compressive Strength)
- Αντοχή σε Κόπωση (Fatigue Strength)
- Αντοχή σε Θραύση (Fracture Toughness)

Οι παραπάνω ιδιότητες αποτελούν τις συχνότερα απαντόμενες μηχανικές ιδιότητες σε όλες τις μελέτες και σχέδια κατασκευής κάποιου προϊόντος και παρέχουν ένα πλήθος πληροφοριών στον σχεδιαστή για τη συμπεριφορά του προϊόντος σε όλες τις δυνατές συνθήκες μεταφοράς, συσκευασίας κ.λ.π.. Από τις παραπάνω μηχανικές ιδιότητες κάποιες θα χρησιμοποιηθούν σαν δεδομένα εισόδου για τις υπολογιστές τεχνικές του βήματος 4. Όπως έχει προαναφερθεί, για την εφαρμογή των τεχνικών παλινδρόμησης πέρα από τις μηχανικές ιδιότητες που θα χρησιμοποιηθούν σαν δεδομένα εισόδου, είναι απαραίτητος και ο προσδιορισμός των εξόδων του αρχικού πληθυσμού. Οι έξοδοι αυτές αναφέρονται στις περιβαλλοντικές επιπτώσεις των υλικών στα στάδια του κύκλου ζωής των υλικών. Από την ανάλυση του κύκλου ζωής επιλέχθηκαν τα παρακάτω τρία στάδια:

- Παραγωγή πρώτης ύλης (Primary material production)
- Επεξεργασία υλικού (Material processing)
- Ανακύκλωση υλικού (Material recycling)

Από τη βάση δεδομένων είναι δυνατή η επιλογή ενός μεγάλου αριθμού περιβαλλοντικών επιπτώσεων του κάθε υλικού για τις παραπάνω τρεις κατηγορίες. Από αυτές επιλέχθηκαν σαν υποψήφιες οι εξής:

- Στάδιο 1: Παραγωγή πρώτης ύλης
 - Ενσωματωμένη ενέργεια πρωτογενούς παραγωγής (Embodied Energy primary production)
 - Αποτύπωμα CO₂ πρωτογενούς παραγωγής (CO₂ footprint primary production)
 - Κατανάλωση νερού πρωτογενούς παραγωγής (Water Usage)
- Στάδιο 2: Επεξεργασία υλικού
 - Ενέργεια διαμόρφωσης πολυμερούς (Polymer Molding energy)
 - Αποτύπωμα CO₂ διαμόρφωσης πολυμερούς (Polymer Molding CO₂)
 - Ενέργεια κατεργασίας πολυμερούς (Polymer Machining energy)
 - Αποτύπωμα CO₂ κατεργασίας πολυμερούς (Polymer Machining CO₂)
- Στάδιο 3: Ανακύκλωση υλικού
 - Ενσωματωμένη ενέργεια ανακύκλωσης υλικού (Embodied Energy Recycling)
 - Αποτύπωμα CO₂ ανακύκλωσης υλικού (CO₂ footprint recycling)

Για την τελική επιλογή των δεδομένων υπολογίστηκαν οι *συντελεστές συσχέτισης (correlation coefficients)* μεταξύ όλων των παραπάνω εισόδων και εξόδων. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στον πίνακα 6.3.

Όπως είναι εμφανές από τον πίνακα 6.3, η μηχανική ιδιότητα *αντοχή σε θραύση (fracture toughness)* έχει πολύ χαμηλούς συντελεστές συσχέτισης τόσο με τις εισόδους όσο και με τις εξόδους συνεπώς δεν χρησιμοποιείται σαν μεταβλητή εισόδου (αφού λόγω χαμηλής συσχέτισης μπορεί να επηρεάσει αρνητικά την ακρίβεια της πρόβλεψης). Επίσης παρατηρείται πολύ υψηλή συσχέτιση μεταξύ των παρακάτω ζευγαριών εξόδων:

- Embodied energy primary production - CO₂ footprint, primary production
- Polymer molding energy - Polymer molding CO₂
- Polymer machining energy - Polymer machining CO₂
- Embodied energy, recycling - CO₂ footprint, recycling

δηλαδή γενικά εμφανίζεται υψηλή συσχέτιση μεταξύ των ενεργειών και των αντίστοιχων αποτυπωμάτων CO₂. Στην βάση δεδομένων αναφέρεται ότι ισχύει η παρακάτω σχέση (σχέση 6.1) για όλα τα παραπάνω ζευγάρια:

$$\text{CO}_2 \text{ footprint in kg} \approx 0.08 \times \text{Energy Consumption in MJ (6.1)}$$

οπότε η χρήση και των δύο μεταβλητών για κάθε ζευγάρι θεωρείται περιττή. Για την παρούσα εφαρμογή επιλέχθηκε να χρησιμοποιηθούν σαν μεταβλητές οι ποσότητες (για κάθε ζευγάρι) που αναφέρονται στο αποτύπωμα CO₂ (CO₂ footprint). Ο λόγος για την επιλογή αυτή είναι ότι πολλά πρωτόκολλα και οδηγίες (πρωτόκολλο του Κιότο (1997), Κοπεγχάγη (2009), έκθεση IPCC (2007)) ορίζουν ως κύρια αιτία αλλαγής κλίματος το CO₂ και θέτουν σαν κύριο στόχο τη μείωση των εκπομπών του. Τέλος, επιλέχθηκε να μην χρησιμοποιηθεί η ποσότητα «Αποτύπωμα CO₂ κατεργασίας πολυμερούς (Polymer Machining CO₂)» σαν μη σημαντική σε σχέση με τις υπόλοιπες μεταβλητές σε μια εφαρμογή παραγωγής απλών φιαλών.

Γενικά, προτιμήθηκαν μεταβλητές εισόδου με υψηλό συντελεστή συσχέτισης με τις εξόδους και χαμηλό συντελεστή συσχέτισης με τις υπόλοιπες εισόδους. Στη συνέχεια της ανάλυσης θα χρησιμοποιούνται οι αγγλικοί όροι των εισόδων και των εξόδων ώστε να μπορεί να υπάρχει άμεση αντιστοίχιση με τις τιμές της βάσης δεδομένων αλλά και για την ανάγνωση των σχημάτων που παράγονται από την *Matlab* [4].

Έτσι σαν εισοδοί και έξοδοι για τις υπολογιστικές τεχνικές παλινδρόμησης που θα αναλυθούν στο επόμενο βήμα χρησιμοποιήθηκαν οι ποσότητες που παρουσιάζονται στον παρακάτω πίνακα:

Είσοδοι	Έξοδοι
Young's Modulus (§4.3)	CO ₂ footprint primary production
Yield Strength (§4.5.1)	Water Usage
Tensile Strength (§4.5.2)	Polymer Molding CO ₂
Compressive Strength (§4.6)	CO ₂ footprint recycling
Fatigue Strength (§4.7.1)	

Πίνακας 6.2.: Τελικά χρησιμοποιούμενες εισοδοί και έξοδοι

Young's modulus	Yield strength	Tensile strength	Compressive strength	Fatigue strength	Fracture toughness	Embodied energy, primary production	CO2 footprint, primary production	Water usage	Polymer molding energy	Polymer machining energy	Polymer molding CO2	Polymer machining CO2	Embodied energy, recycling	CO2 footprint, recycling
1.000	0.736	0.920	0.768	0.898	0.454	0.527	0.536	0.489	0.802	0.707	0.802	0.724	0.546	0.535
0.736	1.000	0.859	0.576	0.800	0.508	0.668	0.672	0.627	0.761	0.978	0.761	0.981	0.677	0.671
0.920	0.859	1.000	0.836	0.934	0.453	0.731	0.730	0.674	0.732	0.852	0.731	0.865	0.753	0.730
0.768	0.576	0.836	1.000	0.697	-0.080	0.719	0.702	0.691	0.632	0.670	0.632	0.679	0.720	0.702
0.898	0.800	0.934	0.697	1.000	0.622	0.744	0.750	0.692	0.646	0.759	0.646	0.772	0.774	0.749
0.454	0.508	0.453	-0.080	0.622	1.000	0.146	0.167	0.074	0.216	0.331	0.216	0.346	0.199	0.166
0.527	0.668	0.731	0.719	0.744	0.146	1.000	0.998	0.990	0.440	0.743	0.440	0.736	0.997	0.998
0.536	0.672	0.730	0.702	0.750	0.167	0.998	1.000	0.993	0.436	0.741	0.436	0.733	0.993	1000
0.489	0.627	0.674	0.691	0.692	0.074	0.990	0.993	1.000	0.421	0.713	0.421	0.703	0.977	0.993
0.802	0.761	0.732	0.632	0.646	0.216	0.440	0.436	0.421	1.000	0.790	1000	0.793	0.439	0.435
0.707	0.978	0.852	0.670	0.759	0.331	0.743	0.741	0.713	0.790	1.000	0.789	0.999	0.743	0.740
0.802	0.761	0.731	0.632	0.646	0.216	0.440	0.436	0.421	1000	0.789	1.000	0.792	0.439	0.435
0.724	0.981	0.865	0.679	0.772	0.346	0.736	0.733	0.703	0.793	0.999	0.792	1.000	0.737	0.732
0.546	0.677	0.753	0.720	0.774	0.199	0.997	0.993	0.977	0.439	0.743	0.439	0.737	1.000	0.992
0.535	0.671	0.730	0.702	0.749	0.166	0.998	1.000	0.993	0.435	0.740	0.435	0.732	0.992	1.000
-0.129	-0.335	-0.126	-0.221	0.015	0.372	-0.277	-0.307	-0.375	-0.403	-0.426	0.403	-0.406	-0.207	-0.307

Πίνακας 6.3.: Συντελεστές συσχέτισης μεταξύ εισόδων και εξόδων

6.3.4 ΒΗΜΑ 4^ο: ΧΡΗΣΗ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΩΝ ΤΕΧΝΙΚΩΝ ΒΑΘΜΟΛΟΓΗΣΗΣ:

6.3.4.1 ΘΕΩΡΗΤΙΚΗ ΒΑΘΜΟΛΟΓΗΣΗ

Από την βάση δεδομένων είναι ήδη γνωστές οι τιμές των περιβαλλοντικών επιπτώσεων για κάθε υλικό. Στην εφαρμογή που μελετάται σε αυτή την εργασία οι τέσσερις περιβαλλοντικές επιπτώσεις (πίνακας 6.4.) θεωρούνται ισοδύναμες. Δηλαδή θεωρήθηκε ότι είναι το ίδιο σημαντικές στον υπολογισμό του τελικού βαθμού περιβαλλοντικής επιβάρυνσης. Γενικά, αν ονομαστεί $ΠΕ_{ij}$ η τιμή της περιβαλλοντικής επιβάρυνσης i για το υλικό j (για $i=1..4$ και $j=1..10$) τότε ο συνολικός περιβαλλοντικός δείκτης $ΣΠΔ_j$ για κάθε υλικό θα υπολογίζεται από το άθροισμα:

$$ΣΠΔ_j = a * ΠΕ_{1j} + b * ΠΕ_{2j} + c * ΠΕ_{3j} + d * ΠΕ_{4j} \quad (6.2)$$

Όπου τα a, b, c, d οι συντελεστές βαρύτητας των αντίστοιχων περιβαλλοντικών επιπτώσεων (προφανώς $a+b+c+d=1$ ή 100%). Στην εφαρμογή που παρουσιάζεται εδώ ισχύει ότι $a=b=c=d=0.25$ ή 25%. Στη συνέχεια παρουσιάζονται τα δεδομένα εισόδου (μηχανικές ιδιότητες) και εξόδου (περιβαλλοντικές επιπτώσεις) για τα δέκα υποψήφια υλικά:

Ιδιότητες (Είσοδοι)					
Υλικά	Young's Modulus (Pa)	Yield Strength (Pa)	Tensile Strength (Pa)	Compressive Strength (Pa)	Fatigue Strength 10 ⁷ cycles (Pa)
PE	9.380E+08	2.310E+07	2.340E+07	2.775E+07	9.500E+06
PEN	2.400E+09	8.140E+07	4.760E+07	3.640E+07	1.905E+07
PET	2.900E+09	5.250E+07	5.750E+07	5.500E+07	2.415E+07
PMMA	2.740E+09	6.310E+07	6.035E+07	9.820E+07	1.600E+07
PP	1.245E+09	2.525E+07	2.400E+07	3.025E+07	9.595E+06
PS	2.780E+09	3.505E+07	4.380E+07	8.615E+07	1.755E+07
PVC	2.890E+09	4.705E+07	4.705E+07	4.065E+07	1.885E+07
UHMW-HDPE	9.285E+08	2.450E+07	4.345E+07	2.940E+07	1.750E+07
PA	1.900E+09	6.750E+07	5.150E+07	8.100E+07	2.830E+07
PC	2.380E+09	6.215E+07	6.755E+07	7.760E+07	2.725E+07

Περιβαλλοντικές Επιβαρύνσεις (Εξόδοι)				
Υλικά	Primary material production		Material processing: CO2 footprint	
	CO ₂ footprint (kg/kg)	Water usage (m ³ /kg)	Polymer Molding CO ₂ (kg/kg)	Recycling CO ₂ footprint (kg/kg)
PE	3.150	0.205	0.517	1.325
PEN	3.935	0.263	0.860	1.650
PET	2.325	0.029	0.745	0.974
PMMA	3.590	0.216	0.838	1.505
PP	3.125	0.203	0.684	1.315
PS	3.000	0.216	0.786	1.260
PVC	1.945	0.064	0.738	0.816
UHMW-HDPE	3.325	0.217	0.517	1.395
PA	4.810	0.330	0.988	2.020
PC	5.645	0.284	0.856	2.370

Πίνακας 6.4.: Αναλυτικά δεδομένα εισόδου και εξόδου για τα δέκα τελικώς επιλεγόμενα υλικά

Θα πρέπει να σημειωθεί ότι οι παραπάνω τιμές είναι οι μέσοι όροι των τιμών που παρέχονται από την βάση δεδομένων. Στη βάση δεδομένων για κάθε ιδιότητα παρέχεται ένα εύρος τιμών το οποίο εξαρτάται από τις μεθόδους παρασκευής αλλά και από τις επίσημες τιμές των ιδιοτήτων που παρέχουν οι κατασκευαστές των υλικών. Γνωρίζοντας τις περιβαλλοντικές επιβαρύνσεις των υποψήφιων υλικών είναι εύκολη η κατάρτιση μιας πρώτης θεωρητικής βαθμολογίας η οποία και θα αποτελέσει το μέτρο σύγκρισης της αποτελεσματικότητας των τεχνικών παλινδρόμησης που θα μελετηθούν στη συνέχεια. Από την σχέση που υπολογίζει τον συνολικό περιβαλλοντικό δείκτη ΣΠΔ_j για κάθε υλικό προκύπτει ο παρακάτω πίνακας βαθμολογίας:

Κατάταξη	Υλικά	Τελική Βαθμολογία
1	PVC	0,891
2	PET	1,018
3	PE	1,299
4	PS	1,315
5	PP	1,332
6	UHMW-HDPE	1,363
7	PMMA	1,537
8	PEN	1,677
9	PA	2,037
10	PC	2,289

Πίνακας 6.5.: Θεωρητική βαθμολόγηση πολυμερικών υλικών

Παρατηρείται ότι σύμφωνα με την θεωρητική κατάταξη των υλικών το PVC θεωρείται το βέλτιστο περιβαλλοντικά υλικό.

Για την κατάταξη των υλικών χρησιμοποιήθηκαν οι δύο παρακάτω μέθοδοι:

- Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα Γενικευμένης Παλινδρόμησης (General Regression Artificial Neural Networks) και
- Πολυωνυμική Παλινδρόμηση και Προσαρμογή Καμπυλών (Polynomial Regression and Curve Fitting)

Στις επόμενες παραγράφους περιγράφεται η εφαρμογή των δύο τεχνικών παλινδρόμησης καθώς και τα αντίστοιχα με τον πίνακα 6.5 αποτελέσματα. Στο τέλος θα επιχειρηθεί σύγκριση μεταξύ των δύο εφαρμοζόμενων τεχνικών.

6.3.4.2 ΒΑΘΜΟΛΟΓΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΩΝ ΤΕΧΝΗΤΩΝ ΝΕΥΡΩΝΙΚΩΝ ΔΙΚΤΥΩΝ ΓΕΝΙΚΕΥΜΕΝΗΣ ΠΑΛΙΝΔΡΟΜΗΣΗΣ

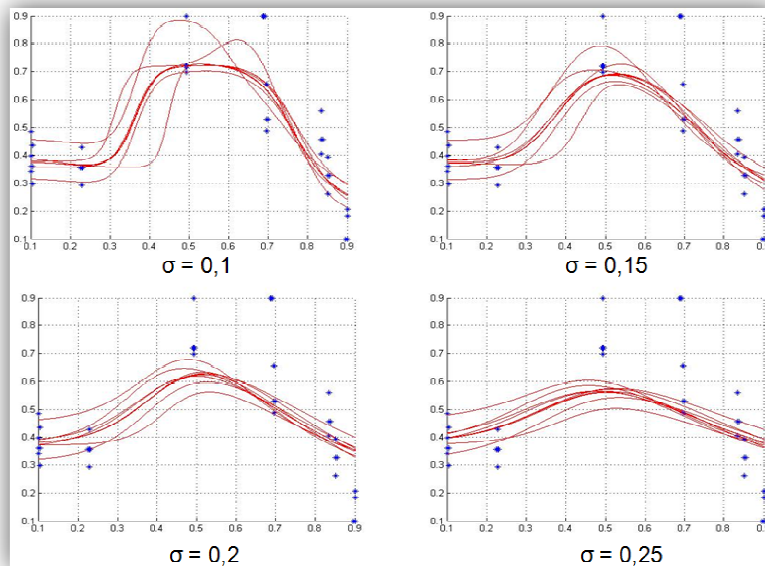
Οι εισόδοι και οι εξόδοι στην περίπτωση των νευρωνικών δικτύων γενικευμένης παλινδρόμησης είναι οι τιμές των μεταβλητών που αναφέρονται στον πίνακα 6.4. Πριν την υλοποίηση των νευρωνικών γίνεται κανονικοποίηση των τιμών στο κλειστό διάστημα $[0,1]$.

Αρχικά επιχειρήθηκε η υλοποίηση νευρωνικών δικτύων μίας εισόδου (μηχανικής ιδιότητας) – μίας εξόδου (περιβαλλοντική επιβάρυνση). Το νευρωνικό δίκτυο αυτό (εν συντομία 1-9-2-1 GRANN – συνολικά είκοσι νευρωνικά δίκτυα) μπορεί να αναπαρασταθεί γραφικά και έτσι καθίσταται εύκολη η παρατήρηση της συμπεριφοράς του δικτύου αλλά και ο προσδιορισμός μεταβλητών χαρακτηριστικών του νευρωνικού δικτύου. Μία χαρακτηριστική μεταβλητή των GRANNs είναι η μεταβλητή σ (*spread* ή *smoothing parameter*) και ορίζει το πόσο επηρεάζει το κάθε σημείο τη συμπεριφορά της καμπύλης παλινδρόμησης. Η μεταβλητή αυτή παίρνει τιμές στο κλειστό διάστημα $[0, 1]$. Μικρές τιμές της μεταβλητής σ οδηγεί σε *παρέκταση* (*extrapolation*) την καμπύλη ενώ αντίθετα μεγαλύτερες τιμές οδηγούν σε *interpolation* (*παρεμβολή*).

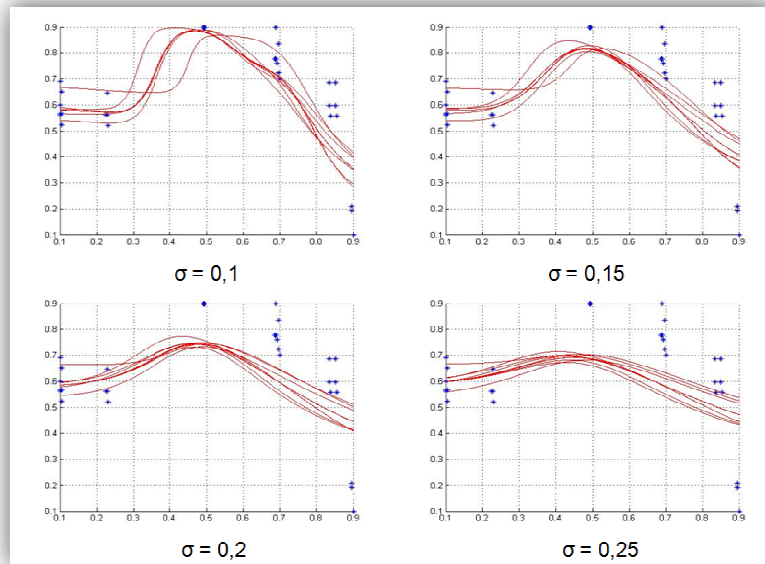
Μία πολύ χρήσιμη τεχνική προσδιορισμού της βέλτιστης τιμής της μεταβλητής σ είναι η **Leave-One-Out Cross-Validation (LOO-CV)**. Σε αυτή την τεχνική ένα από τα υλικά του αρχικού πληθυσμού κρατείται για έλεγχο και τα υπόλοιπα εννέα χρησιμοποιούνται για την εκπαίδευση του νευρωνικού δικτύου. Στη συνέχεια ελέγχεται η ακρίβεια της πρόβλεψης με το υλικό ελέγχου. Η παραπάνω διαδικασία επαναλαμβάνεται συνολικά δέκα φορές (όσος και ο αρχικός πληθυσμός δεδομένων) ώστε να χρησιμοποιηθούν όλα τα υλικά σαν υλικά ελέγχου αποθηκεύοντας τις αντίστοιχες προβλέψεις του υλικού που κάθε φορά κρατείται. Έτσι μπορεί να υπολογιστεί το μέσο τετραγωνικό σφάλμα ανάμεσα στις μετρηθείσες τιμές και στα αρχικά στοιχεία. Η τιμή της μεταβλητής σ που δίνει το ελάχιστο μέσο τετραγωνικό σφάλμα είναι αυτή που χρησιμοποιείται στο τελικό δίκτυο.

Ο τελικός στόχος της ανάλυσης μέσω GRANNs είναι η κατασκευή ενός νευρωνικού δικτύου πέντε εισόδων (μηχανικές ιδιότητες) και τεσσάρων εξόδων (περιβαλλοντικές επιπτώσεις). Η γραφική αναπαράσταση της συμπεριφοράς και των αποτελεσμάτων ενός τέτοιου νευρωνικού δικτύου απαιτεί την δημιουργία χώρων μεγαλύτερων των τριών διαστάσεων που μπορεί να αντιληφθεί ο άνθρωπος. Για τον σκοπό αυτόν, όπως αναφέρθηκε και στην αρχή της παραγράφου, πριν τη δημιουργία του τελικού νευρωνικού δικτύου θεωρείται θεμιτό η ανάλυση να ξεκινήσει με τη κατασκευή νευρωνικών δικτύων μίας εισόδου - μίας εξόδου. Όπως είναι προφανές για την πλήρη περιγραφή του συστήματος απαιτούνται είκοσι συνολικά νευρωνικά δίκτυα μίας εισόδου - μίας εξόδου.

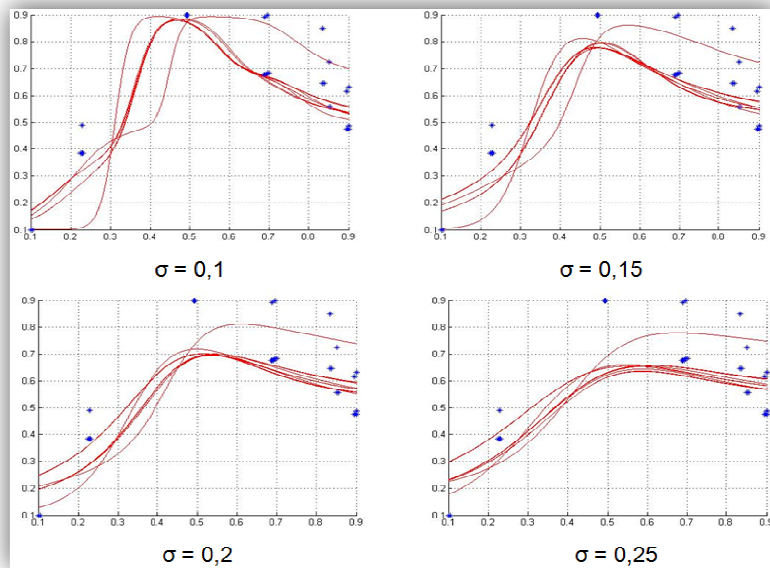
Στα επόμενα σχήματα παρουσιάζεται ένα παράδειγμα της παραπάνω διαδικασίας. Παρουσιάζονται τα τέσσερα 1-9-2-1 GRANNs για μεταβλητή εισόδου το Μέτρο Ελαστικότητας (*Young's Modulus*) και κάθε μία από τις εξόδους (σχήματα 6.1-6.4). Σε κάθε νευρωνικό δίκτυο μεταβάλλεται η τιμή της μεταβλητής σ .



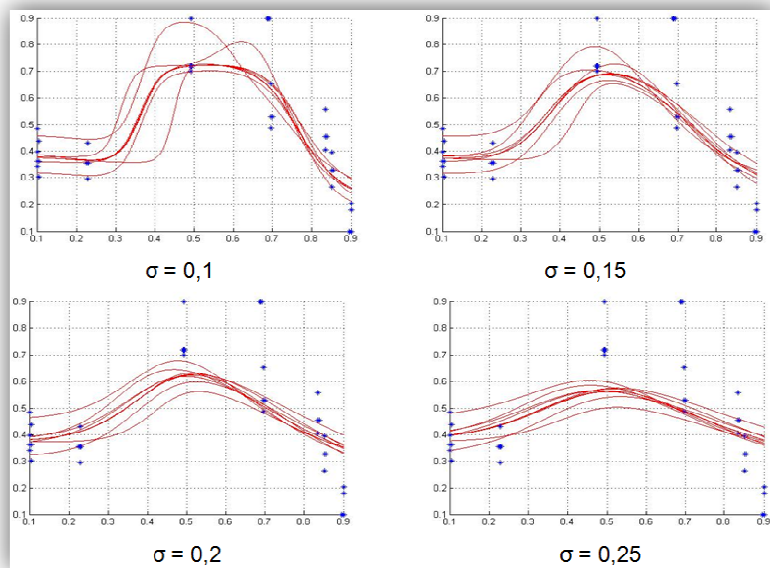
Σχήμα 6.1.: 1-9-2-1 GRANN (Young's Modulus – CO₂ footprint primary production)



Σχήμα 6.2.: 1-9-2-1 GRANN (Young's Modulus – Water Usage)



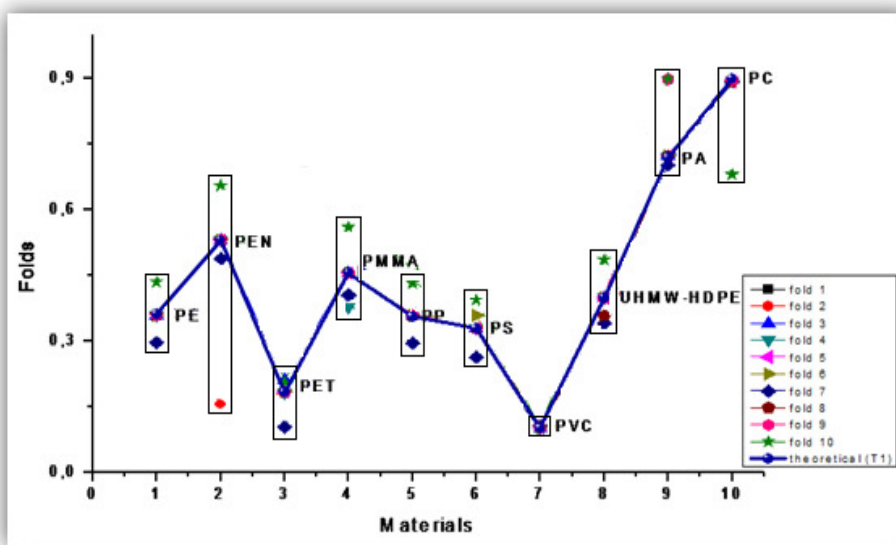
Σχήμα 6.3.: 1-9-2-1 GRANN (Young's Modulus – Polymer Molding CO₂ Footprint)



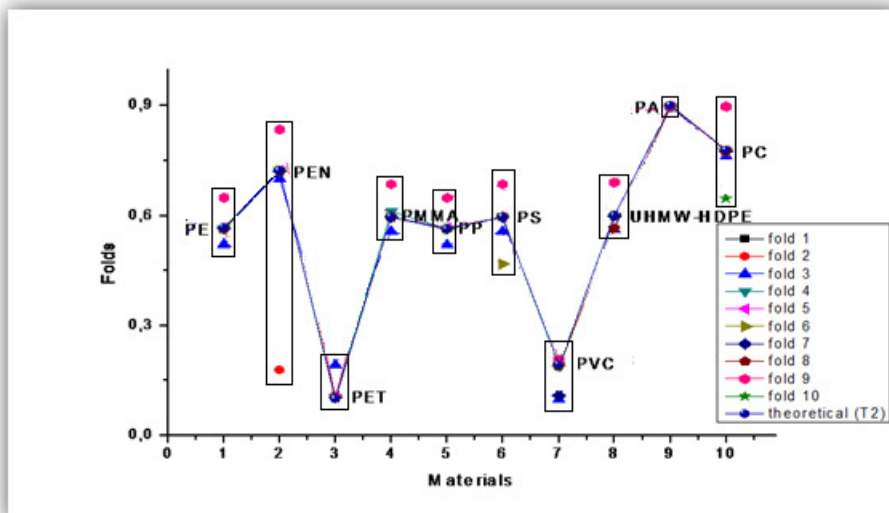
Σχήμα 6.4.: 1-9-2-1 GRANN (Young's Modulus – CO₂ Footprint Recycling)

Οι κόκκινες γραμμές αναπαριστούν τη συμπεριφορά του νευρωνικού δικτύου για κάθε επανάληψη της μεθόδου LOO-CV. Και στα τέσσερα σχήματα είναι εμφανής η τάση για παρεμβολή (*interpolation*) καθώς αυξάνεται η τιμή της μεταβλητής σ . Αντίθετα για την τιμή $\sigma=0,1$ η καμπύλη εμφανίζει έντονη συμπεριφορά παρέκτασης (*extrapolation*). Η τιμή που επιλέγεται για χρήση στα

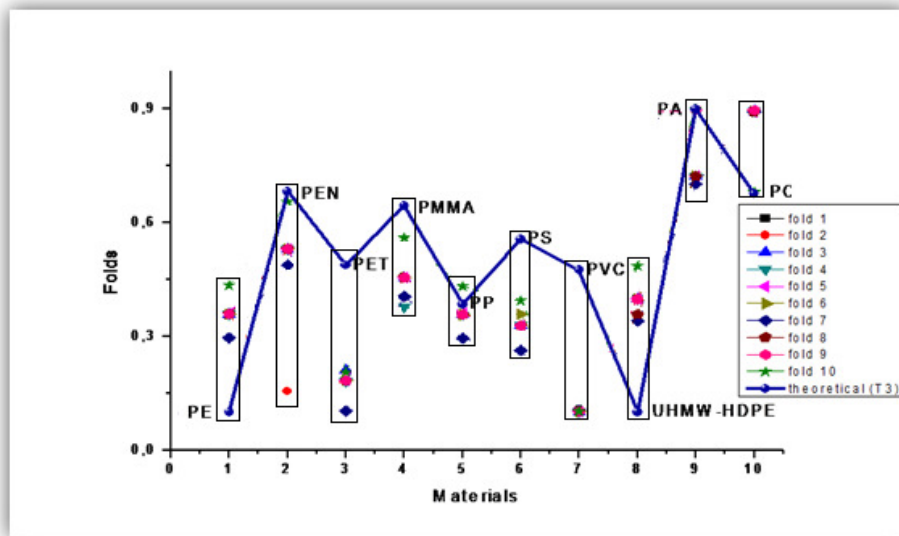
νευρωνικά δίκτυα που θα κατασκευαστούν για την επιλογή του βέλτιστου υλικού είναι η τιμή $\sigma=0,15$. Για την καλύτερη κατανόηση και μετά τον προσδιορισμό της μεταβλητής σ επιχειρείται μία γενίκευση των είκοσι 1-9-2-1 GRANNs με τη δημιουργία τεσσάρων νευρωνικών δικτύων 5 εισόδων – 1 εξόδου (εν συντομία 5-9-2-1 GRANN). Λόγω του ότι η γραφική αναπαράσταση μιας τέτοιας καμπύλης παλινδρόμησης δεν είναι δυνατή, δημιουργήθηκαν τέσσερα διαγράμματα (ένα για κάθε μία έξοδο) όπου στον άξονα των τεταγμένων παρουσιάζεται η τιμή της αντίστοιχης εξόδου και στον άξονα των τετμημένων το υλικό που σε κάθε επανάληψη της μεθόδου LOO-CV κρατείται σαν υλικό ελέγχου. Τα διαγράμματα αυτά παρουσιάζονται στη συνέχεια:



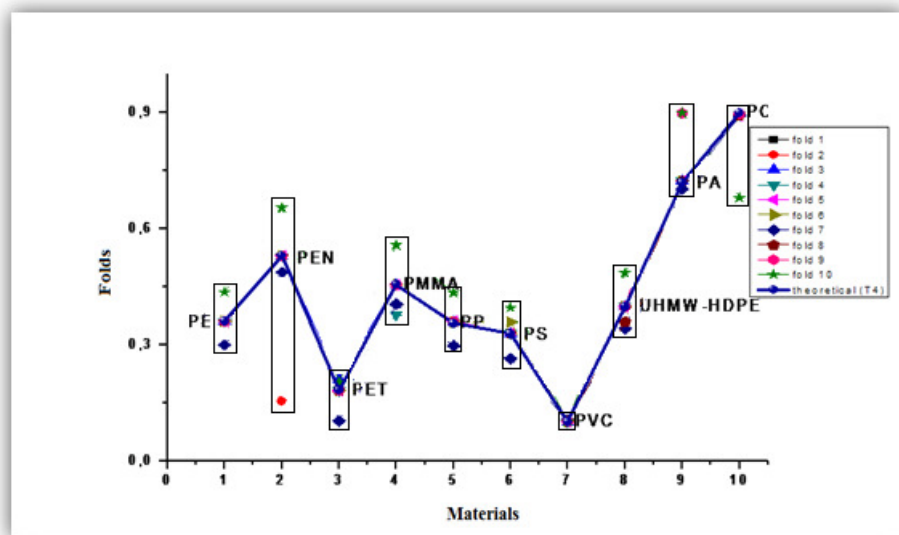
Σχήμα 6.5.: 5-9-2-1 GRANN (Όλες οι εισοδοί– CO₂ footprint primary production, $\sigma=0,15$)



Σχήμα 6.6.: 5-9-2-1 GRANN (Όλες οι εισοδοί– Water Usage, $\sigma=0,15$)

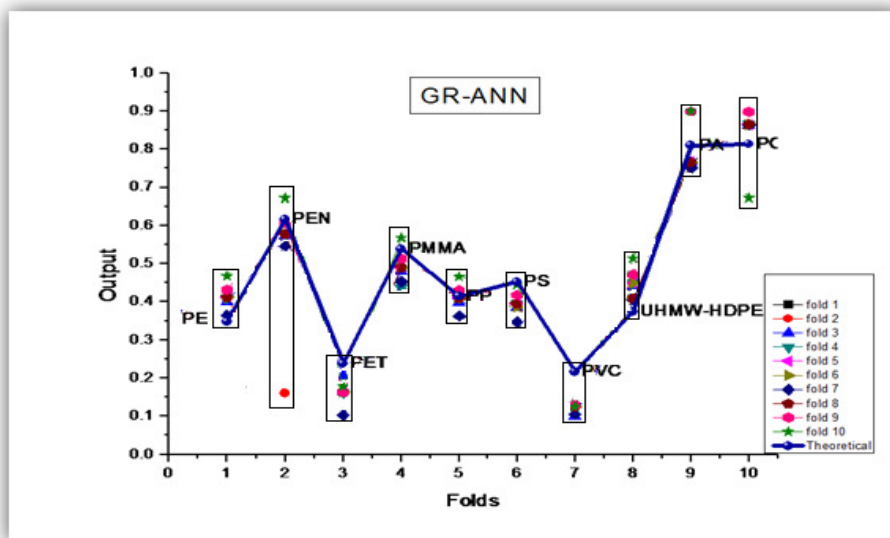


Σχήμα 6.7.: 5-9-2-1 GRANN (Όλες οι εισοδοί– Polymer Molding CO₂ Footprint, σ=0,15)



Σχήμα 6.8.: 5-9-2-1 GRANN (Όλες οι εισοδοί– CO₂ Footprint Recycling, σ=0,15)

Δεδομένου ότι η διαδικασία έχει γίνει πλέον κατανοητή, κατασκευάστηκε το τελικό νευρωνικό δίκτυο (5 εισοδοί – 4 εξοδοί) που επιτρέπει την εξαγωγή της τελική βαθμολογίας για τον αρχικό πληθυσμό των υλικών (εν συντομία 5-9-1-4 GRANN). Σε αντιστοιχία με τα τέσσερα 5-9-2-1 GRANNs κατασκευάστηκε το παρακάτω διάγραμμα:



Σχήμα 6.9.: 5-9-2-4 GRANN (Όλες οι εισοδοί-Όλες οι έξοδοι, $\sigma=0,15$)

Στον άξονα των τεταγμένων παρουσιάζεται η τελική βαθμολογία των υλικών (συνολικός δείκτης περιβαλλοντικών επιπτώσεων) για τα δέκα υλικά ενώ και πάλι στον άξονα των τετμημένων το υλικό που σε κάθε επανάληψη της μεθόδου LOO-CV κρατείται σαν υλικό ελέγχου. Με την παχιά μπλε γραμμή παρουσιάζονται γραφικά τα θεωρητικά αποτελέσματα (κανονικοποιημένες τιμές του πίνακα 6.5). Παρατηρείται ότι το 5-9-2-4 GRANN περιγράφει πολύ καλά το σύστημα. Το γεγονός αυτό φαίνεται πιο καθαρά στον παρακάτω πίνακα όπου και παρουσιάζεται η τελική κατάταξη των δέκα υλικών όπως αυτή προέκυψε από το 5-9-2-4 GRANN και συγκρίνεται με την αντίστοιχη κατάταξη του πίνακα 6.5.

Υλικά	Τελική Βαθμολογία Θεωρητική	Τελική Βαθμολογία Θεωρητική – Κανονικοποιημένη	Κατάταξη Θεωρητική	Τελική Βαθμολογία 5-9-2-4 GRANN	Κατάταξη 5-9-2-4 GRANN
PVC	0,891	0,100	1	0,217	1
PET	1,018	0,173	2	0,247	2
PE	1,299	0,334	3	0,410	3
PS	1,315	0,343	4	0,486	6
PP	1,332	0,346	5	0,427	5
UHMW-HDPE	1,363	0,355	6	0,418	4
PMMA	1,537	0,470	7	0,590	7
PEN	1,677	0,550	8	0,679	8
PA	2,037	0,756	9	0,900	10
PC	2,289	0,900	10	0,824	9

Πίνακας 6.6.: Σύγκριση θεωρητικής βαθμολόγησης και βαθμολόγησης μέσω GRANNs

Παρατηρείται ότι σε πολύ μεγάλο βαθμό η τελική κατάταξη που προκύπτει από το 5-9-2-4 GRANN είναι η ίδια με την αντίστοιχη θεωρητική.

6.3.4.3 ΒΑΘΜΟΛΟΓΗΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΠΟΛΥΩΝΥΜΙΚΗΣ ΠΑΛΙΝΔΡΟΜΗΣΗΣ

Η μέθοδος της παλινδρόμησης μέσω πολυωνύμων έγκειται στον προσδιορισμό ενός πολυωνύμου της μορφής,

$$F(X) = P(1) * X^N + P(2) * X^{N-1} + \dots + P(N) * X + P(N+1)$$

(όπου X η ανεξάρτητη μεταβλητή, N ο βαθμός του πολυωνύμου και $P(1), P(2), \dots, P(N)$ οι συντελεστές της ανεξάρτητης μεταβλητής), το οποίο συνδέει την ανεξάρτητη μεταβλητή X (τιμές εισόδου) με τις τιμές $F(X)$ (τιμές εξόδου). Έχοντας σαν δεδομένα εισόδου αντίστοιχες τιμές με αυτές που χρησιμοποιούνται σαν είσοδοι στα νευρωνικά δίκτυα (X) με γνωστές τις τιμές εξόδου ($F(X)$), το πρόβλημα της παλινδρόμησης έγκειται στον προσδιορισμό του βέλτιστου βαθμού του πολυωνύμου (N) και κατ' επέκταση των συντελεστών της ανεξάρτητης μεταβλητής.

Ο βέλτιστος βαθμός του εκάστοτε πολυωνύμου προσδιορίζεται από τους περιορισμούς (φυσικούς, μαθηματικούς κ.τ.λ.) ανάμεσα στις εισόδους και στις εξόδους όσο και από τον υπολογισμό του μέσου τετραγωνικού σφάλματος ανάμεσα στις ήδη γνωστές τιμές και στις τιμές που προέρχονται από το πολυώνυμο. Είναι προφανές ότι το βέλτιστο πολυώνυμο ικανοποιεί τους περιορισμούς και παρέχει το ελάχιστο μέσο τετραγωνικό σφάλμα.

Σημαντικό μειονέκτημα της παλινδρόμησης μέσω πολυωνύμων είναι ότι αφού γίνει ο προσδιορισμός του πολυωνύμου που περιγράφει με βέλτιστο τρόπο τα δεδομένα εισόδου και εξόδου, το πολυώνυμο αυτό περιορίζεται στην περιγραφή αυτού και μόνο του προβλήματος. Κάθε είσοδος νέων δεδομένων μπορεί εύκολα να μεταβάλει το επιλεγόμενο πολυώνυμο.

Για την βέλτιστη περιγραφή των δεδομένων θα πρέπει ο αριθμός των δεδομένων εισόδου να είναι πολύ μεγαλύτερος από τον βαθμό του πολυωνύμου. Σε αντίθετη περίπτωση (λίγα δεδομένα και μεγάλος βαθμός πολυωνύμου), θα πρέπει να γίνει ο προσδιορισμός μεγάλου αριθμού συντελεστών από πολύ λίγα δεδομένα με αποτέλεσμα να μην είναι εφικτή μία ικανοποιητική παλινδρόμηση.

Για την εξαγωγή αποτελεσμάτων αντίστοιχων με αυτά των νευρωνικών δικτύων, θα πρέπει να προσδιοριστεί η μορφή του πολυωνύμου που περιγράφει με βέλτιστο τρόπο τη σχέση ανάμεσα στις εισόδους (μηχανικές ιδιότητες) και στη κάθε έξοδο. Συνολικά δηλαδή θα πρέπει να προσδιοριστεί η μορφή τεσσάρων διαφορετικών πολυωνύμων (ένα για κάθε μία από τις τέσσερις εξόδους).

Όπως αναφέρθηκε και στην εισαγωγή η μορφή του κάθε πολυωνύμου θα είναι της μορφής:

$$F(X) = P(1) * X^N + P(2) * X^{N-1} + \dots + P(N) * X + P(N+1)$$

όπου $F(X)$ στη συγκεκριμένη περίπτωση είναι η εκάστοτε έξοδος και X (ανεξάρτητη μεταβλητή) ο πίνακας των μηχανικών ιδιοτήτων (πίνακας 6.4). Μέσω της Matlab [4] με την εντολή

polyfit είναι δυνατός ο προσδιορισμός των συντελεστών $P(1)...P(N)$ αν είναι γνωστές οι τιμές των $F(X)$ και X . Η εντολή *polyfit* συντάσσεται ως εξής:

$$P = \text{polyfit}(X,F,N)$$

Γνωρίζοντας τον βαθμό του πολυωνύμου (N) η Matlab [4] αποθηκεύει στην μεταβλητή P τους $N+1$ συντελεστές του ζητούμενου πολυωνύμου, οπότε το πρόβλημα περιορίζεται στον προσδιορισμό του βαθμού N του κάθε πολυωνύμου.

Για τον προσδιορισμό των βαθμών των τεσσάρων πολυωνύμων δημιουργήθηκε ένας τετραπλός επαναληπτικός βρόγχος (ένας βρόγχος για κάθε πολυώνυμο) της μορφής:

```
for i=N1, -1, 1
for j=N2, -1, 1
for k=N3, -1, 1
for l=N4, -1, 1

    P1=polyfit(X,F1,i)
    P2=polyfit(X,F2,j)
    P3=polyfit(X,F3,k)
    P4=polyfit(X,F4,l)

    results1=polyval(P1,X)
    results2=polyval(P2,X)
    results3=polyval(P3,X)
    results4=polyval(P4,X)

end
end
end
end
```

Η εντολή *polyval* υπολογίζει τις τιμές εξόδου (π.χ. *results1*) της μεταβλητής X (μηχανικές ιδιότητες) για το πολυώνυμο με συντελεστές π.χ. $P1$. Έτσι με τον παραπάνω βρόγχο μπορεί να υπολογιστεί το μέσο τετραγωνικό σφάλμα των γνωστών περιβαλλοντικών επιπτώσεων (πίνακας 6.4) σε σχέση με τις περιβαλλοντικές επιπτώσεις που προκύπτουν σαν αποτέλεσμα του πολυωνύμου (π.χ. *results1*). Θέτοντας ένα μεγάλο εύρος στις τιμές των i,j,k,l (στην συγκεκριμένη εφαρμογή $N_1=N_2=N_3=N_4=100$) μπορούν να μελετηθούν όλοι οι δυνατοί συνδυασμοί πολυωνύμων. Ο συνδυασμός συντελεστών με το μικρότερο μέσο τετραγωνικό σφάλμα είναι ο συνδυασμός που χρησιμοποιήθηκε για την εξαγωγή των αποτελεσμάτων.

Η επιλογή του τελικού συνδυασμού υπόκειται και σε κάποιους περιορισμούς του συστήματος. Στην συγκεκριμένη εφαρμογή όλες οι μεταβλητές εισόδου και εξόδου, είτε αυτές προέρχονται από τιμές του αρχικού πληθυσμού είτε προκύπτουν μέσω των τεχνικών παλινδρόμησης θα πρέπει να είναι θετικές και μεγαλύτερες του μηδενός λόγω της φυσικής σημασίας των μεγεθών (οι εισοδοί είναι ιδιότητες που δεν μπορούν να έχουν αρνητική ή μηδενική τιμή ενώ οι έξοδοι παριστούν ποσά ενέργειας που πρέπει να

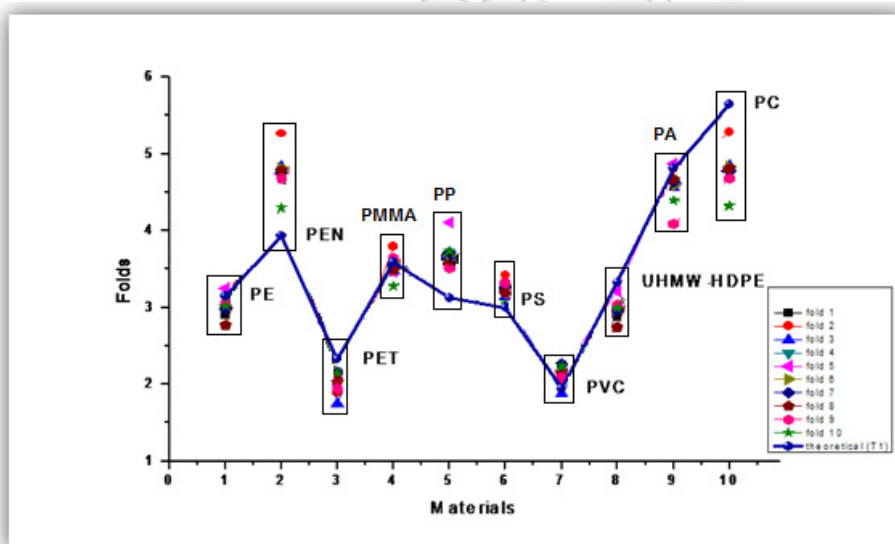
καταναλωθούν στα στάδια του κύκλου ζωής του προϊόντος με αποτέλεσμα το πρόσημό τους να είναι πάντα θετικό).

Μετά από τη μελέτη όλων των δυνατών συνδυασμών, βρέθηκε ότι ο βέλτιστος συνδυασμός βαθμών είναι ο εξής:

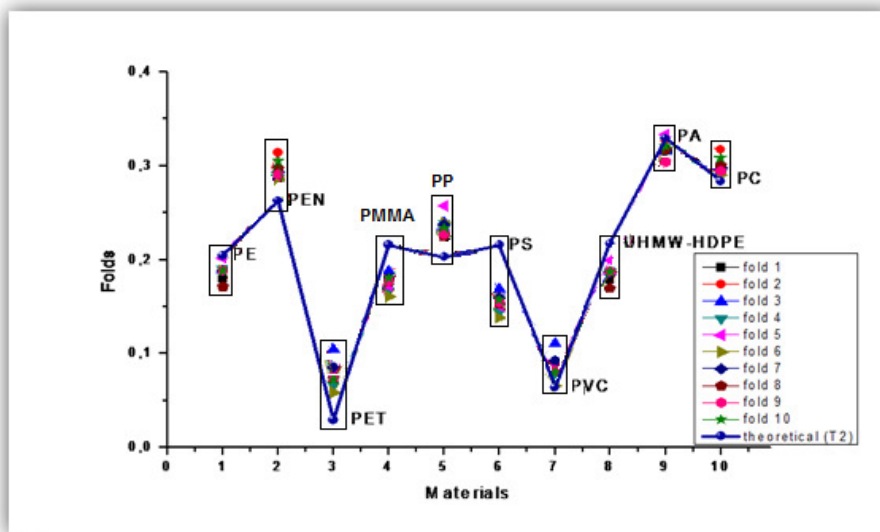
Πολυώνυμο	Βαθμός πολυωνύμου	P(6)	P(5)	P(4)	P(3)	P(2)	P(1)
1	5	-5.483e-46	3.614e-36	-8.648e-27	8.038e-18	7.528e-10	-0.047
2	4	0	-3.561e-38	1.518e-28	-2.489e-19	3.438e-10	-0.014
3	3	0	0	-6.833e-29	9.8564e-20	5.473e-10	-0.023
4	4	0	-1.455e-37	5.583e-28	-9.190e-19	1.858e-09	-0.0744

Πίνακας 6.7.: Βέλτιστος συνδυασμός βαθμών πολυωνύμων

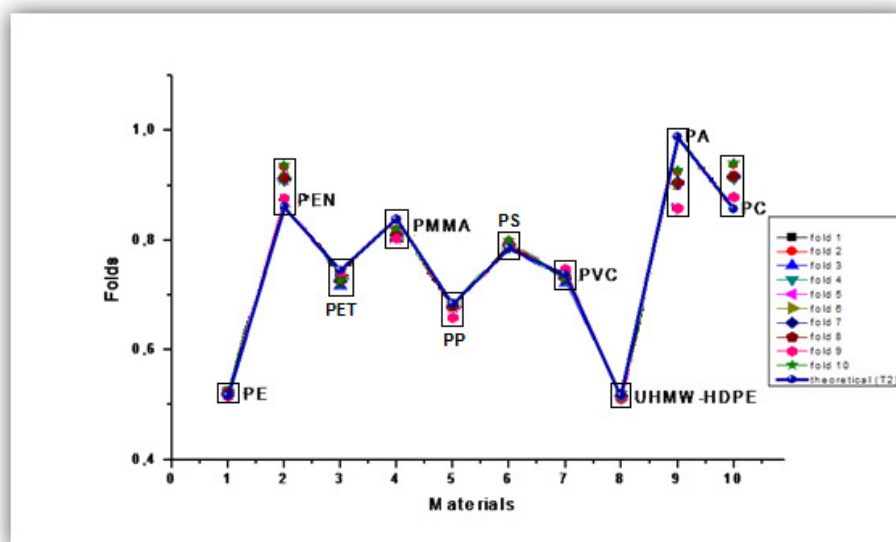
Και στην παλινδρόμηση μέσω πολυωνύμων χρησιμοποιήθηκε η μέθοδος LOO-CV. Τα αντίστοιχα με αυτά των νευρωνικών δικτύων διαγράμματα παρουσιάζονται στη συνέχεια:



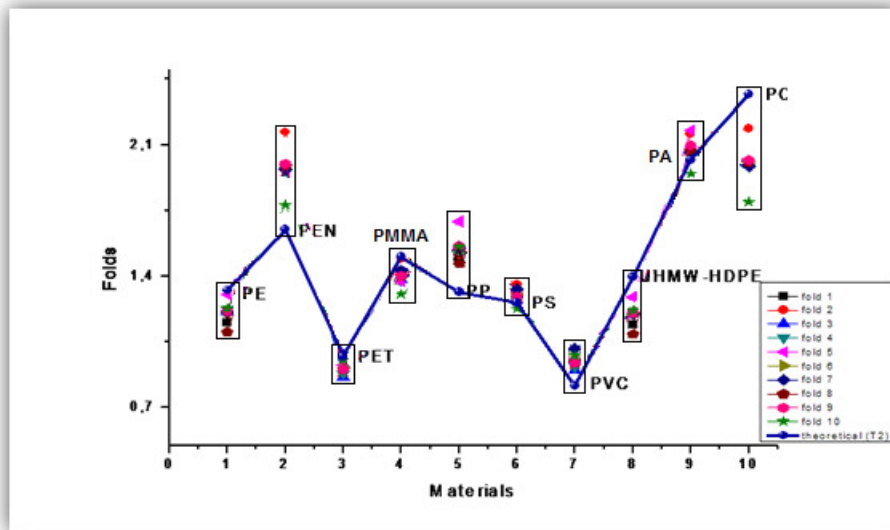
Σχήμα 6.10.: Πολυώνυμο 5^{ου} Βαθμού (Όλες οι εισόδοι- CO₂ footprint primary production)



Σχήμα 6.11.: Πολυώνυμο 4^{ου} Βαθμού (Όλες οι εισοδοί – Water Usage)

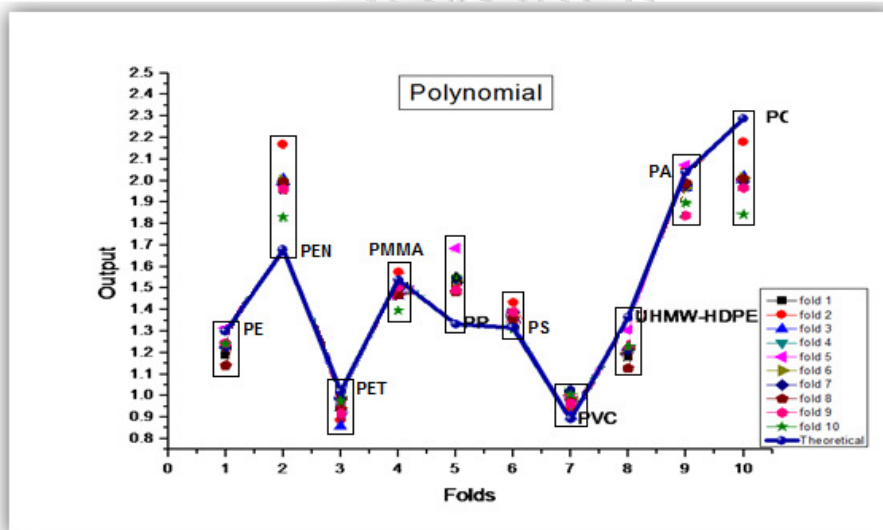


Σχήμα 6.12.: Πολυώνυμο 3^{ου} Βαθμού (Όλες οι εισοδοί – Polymer Molding CO₂ Footprint)



Σχήμα 6.13.: Πολυώνυμο 4^{ου} Βαθμού (Όλες οι εισοδοι – CO₂ Footprint Recycling)

Στο επόμενο διάγραμμα παρουσιάζονται τα τελικά αποτελέσματα τα οποία προκύπτουν και πάλι σαν γραμμικός συνδυασμός των επιμέρους αποτελεσμάτων.



Σχήμα 6.14.: Γραμμικός συνδυασμός επιμέρους πολυωνύμων (Όλες οι εισοδοι – Όλες οι έξοδοι)

Τέλος στον παρακάτω πίνακα παρουσιάζεται η τελική κατάταξη των δέκα υλικών όπως αυτή προέκυψε από την παλινδρόμηση μέσω πολυωνύμων και συγκρίνεται με την αντίστοιχη κατάταξη του πίνακα 6.5.

Υλικά	Τελική Βαθμολογία Θεωρητική	Τελική Βαθμολογία Θεωρητική Κανονικοποιημένη	Κατάταξη Θεωρητική	Τελική Βαθμολογία Πολυώνυμα	Τελική Βαθμολογία Πολυώνυμα Κανονικοποιημένη	Κατάταξη Πολυώνυμα
PVC	0,891	0,100	1	0,973	0,131	2
PET	1,018	0,173	2	0,931	0,100	1
PE	1,299	0,334	3	1,228	0,322	4
PS	1,315	0,343	4	1,364	0,423	5
PP	1,332	0,346	5	1,541	0,555	7
UHMW-HDPE	1,363	0,355	6	1,217	0,313	3
PMMA	1,537	0,470	7	1,478	0,508	6
PEN	1,677	0,550	8	1,992	0,892	9
PA	2,037	0,756	9	1,977	0,881	8
PC	2,289	0,900	10	2,003	0,900	10

Πίνακας 6.8.: Σύγκριση θεωρητικής βαθμολόγησης και βαθμολόγησης μέσω πολυωνυμικής παλινδρόμησης

6.3.4.4 ΤΕΛΙΚΗ ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΤΕΧΝΙΚΩΝ

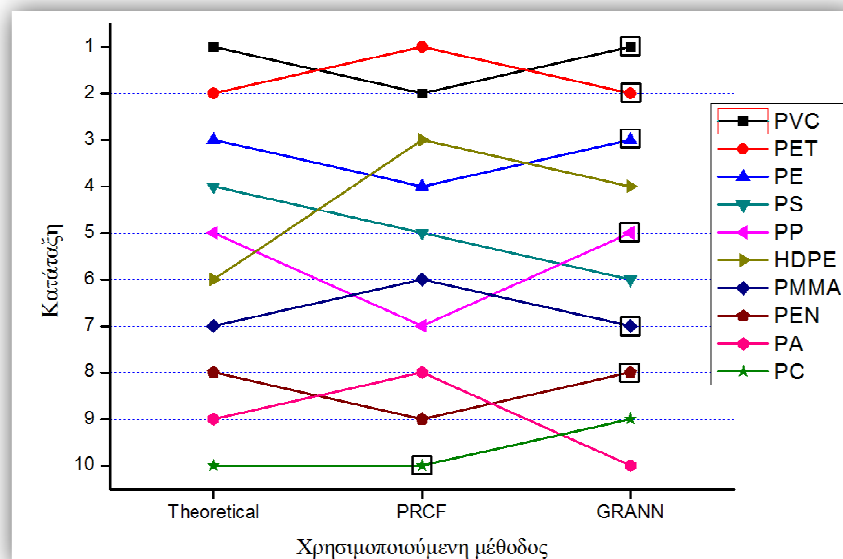
Στον παρακάτω πίνακα παρουσιάζονται συνολικά τα αποτελέσματα των δύο τεχνικών παλινδρόμησης καθώς και τα αντίστοιχα θεωρητικά:

Υλικά	Τελική Βαθμολογία Θεωρητική Κανονικοποιημένη	Κατάταξη Θεωρητική	Τελική Βαθμολογία Πολυώνυμα Κανονικοποιημένη	Κατάταξη Πολυώνυμα	Τελική Βαθμολογία 5-9-2-4 GRANN	Κατάταξη 5-9-2-4 GRANN
PVC	0,100	1	0,131	2	0,217	1
PET	0,173	2	0,100	1	0,247	2
PE	0,334	3	0,322	4	0,410	3
PS	0,343	4	0,423	5	0,486	6
PP	0,346	5	0,555	7	0,427	5
UHMW-HDPE	0,355	6	0,313	3	0,418	4
PMMA	0,470	7	0,508	6	0,590	7
PEN	0,550	8	0,892	9	0,679	8
PA	0,756	9	0,881	8	0,900	10
PC	0,900	10	0,900	10	0,824	9

Πίνακας 6.9.: Σύγκριση βαθμολόγησης τεχνικών παλινδρόμησης

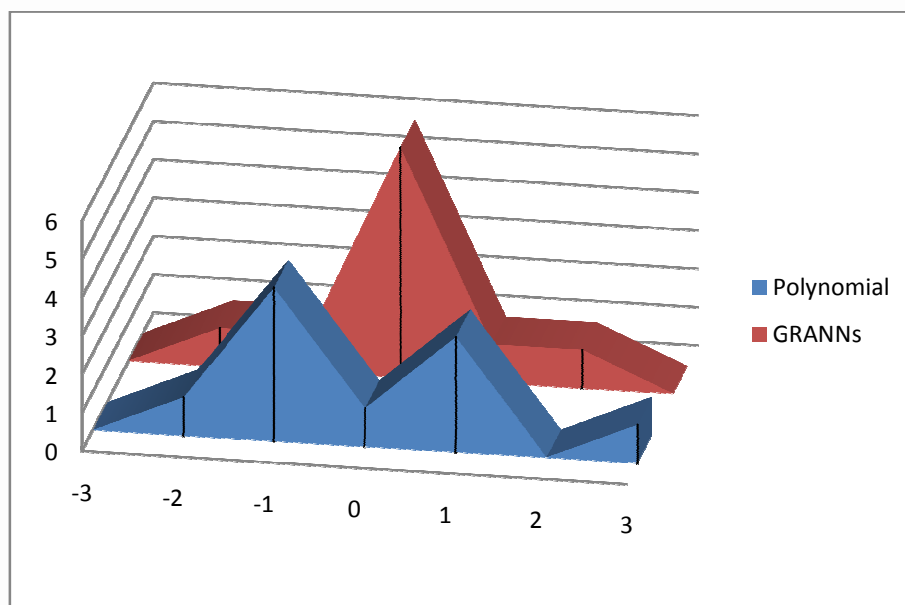
Συνολικά φαίνεται ότι η παλινδρόμηση μέσω νευρωνικών δικτύων παρέχει αποτελέσματα πιο κοντά στα αναμενόμενα θεωρητικά. Συγκρίνοντας τα διαγράμματα 6.9 και 6.14 φαίνεται ότι η μέθοδος της πολυωνυμικής παλινδρόμησης περιγράφει με μεγαλύτερη ακρίβεια τα δεδομένα, αλλά λόγω της εμφάνισης *παρέκτασης* (*extrapolation*) είναι πολύ δύσκολη η πρόβλεψη των αντίστοιχων δεικτών νέων υλικών τα οποία εισάγονται στο σύστημα. Όπως αναφέρεται και στη βιβλιογραφία, για να παρέχει αποτελεσματικές προβλέψεις η μέθοδος της πολυωνυμικής παλινδρόμησης θα πρέπει ο αρχικός πληθυσμός να είναι πολύ μεγαλύτερος από τον βαθμό του πολυωνύμου που περιγράφει το σύστημα. Κάτι τέτοιο δεν ισχύει στην παρούσα εφαρμογή αφού ο αρχικός πληθυσμός (10 υλικά) είναι πολύ κοντά στον

μέγιστο βαθμό των πολυωνύμων (5^{ου} βαθμού). Αντίθετα τα νευρωνικά δίκτυα παρέχουν καμπύλες οι οποίες μέσω της επιλογής της τιμής της μεταβλητής σ επιλέχθηκαν να περιγράφουν καλύτερα το σύνολο του συστήματος και όχι με πολύ μεγάλη ακρίβεια τα αρχικά δεδομένα. Το γεγονός αυτό επιτρέπει την άμεση μεταβολή της καμπύλης παλινδρόμησης με την εισαγωγή νέων υλικών-στοιχείων στο σύστημα παρέχοντας έτσι σωστές προβλέψεις. Με την επιλογή μικρότερης τιμής της μεταβλητής σ , η συμπεριφορά των GRANNs προσεγγίζει τα αποτελέσματα της πολυωνυμικής παλινδρόμησης. Στο παρακάτω σχήμα (σχήμα 6.15) παρουσιάζονται οι θέσεις που καταλαμβάνουν τα υλικά σε κάθε μία από τις τρεις μεθόδους βαθμολόγησης που ακολουθήθηκαν (θεωρητική, μέσω νευρωνικών δικτύων και μέσω πολυωνύμων). Στα σημεία που κάποια από τις τεχνικές συμπίπτει με την θεωρητική βαθμολόγηση έχει σχεδιαστεί ένα μαύρο πλαίσιο γύρω από το αντίστοιχο σημείο. Έτσι και πάλι είναι εμφανές ότι η παλινδρόμηση μέσω νευρωνικών δικτύων προσφέρει καλύτερες προβλέψεις από την παλινδρόμηση μέσω πολυωνύμων.



Σχήμα 6.15.: Σύγκριση τελικής κατάταξης υλικών για κάθε μέθοδο

Χρησιμοποιώντας τα αποτελέσματα του προηγούμενου σχήματος υπολογίστηκε το σφάλμα της κατάταξης της κάθε μεθόδου παλινδρόμησης σε σχέση με την ταξινόμηση που προέκυψε από την θεωρητική βαθμολόγηση καθώς και η τυπική απόκλιση της κάθε κατανομής. Η μέση τιμή της κατανομής των δύο μεθόδων είναι η ίδια και ισούται με μηδέν (0) αλλά διαφέρει η τυπική απόκλιση. Πιο συγκεκριμένα, για την μέθοδο της πολυωνυμικής παλινδρόμησης η τυπική απόκλιση έχει την τιμή 1,38 ενώ αντίστοιχα για την παλινδρόμηση μέσω GRANNs η τιμή αυτή είναι ίση με 1. Τα παραπάνω απεικονίζονται στο ακόλουθο σχήμα (σχήμα 6.16).



Σχήμα 6.16.: Υπολογισμός σφάλματος κατάταξης μεθόδων παλινδρόμησης και τυπική απόκλιση

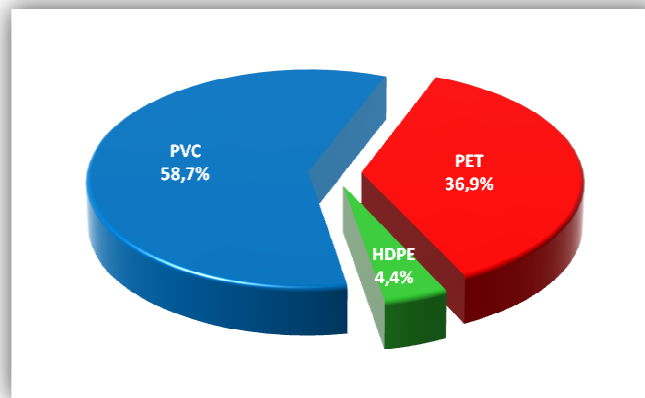
6.3.5 ΒΗΜΑ 5^ο: ΑΝΑΛΥΣΗ ΕΥΑΙΣΘΗΣΙΑΣ

Ένα σημαντικό βήμα της μεθόδου είναι η ανάλυση ευαισθησίας της βέλτιστης επιλογής υλικού. Όπως έχει ήδη αναφερθεί, κάθε μία από τις τέσσερις συνιστώσες (τομείς περιβαλλοντικών επιπτώσεων), συνεισφέρει κατά 25% στον τελικό περιβαλλοντικό δείκτη. Στην συγκεκριμένη εφαρμογή υπολογίστηκε για την μέθοδο GRANN το βέλτιστο υλικό για όλους τους δυνατούς συνδυασμούς των συντελεστών (είναι προφανές ότι το άθροισμα των τεσσάρων συντελεστών δίνει άθροισμα 1 ή αλλιώς 100%). Έτσι σε ένα σύνολο 455 δυνατών συνδυασμών συντελεστών (π.χ. (0,10 0,10 0,10 0,70), (0,10 0,10 0,15 0,65),..., (0,7 0,1 0,1 0,1)), στο 58,7% (267 συνδυασμοί) αυτών σαν βέλτιστο υλικό προτείνεται το PVC. Στο 36,9% (168 συνδυασμοί) το βέλτιστο υλικό εμφανίζεται να είναι το PET ενώ στους υπόλοιπους 20 συνδυασμούς (4,4%) προτείνεται το HDPE (σχήμα 6.17). Μετά από παρατήρηση των αποτελεσμάτων των συνδυασμών φαίνεται ότι όσο αυξάνεται το βάρος που αποδίδεται στο *Μέτρο Ελαστικότητας* (*Young's Modulus*) επικρατέστερο υλικό καθίσταται το PET, ενώ ο συνδυασμός μικρής βαρύτητας του μέτρου ελαστικότητας με ταυτόχρονη αύξηση της *Αντοχής Διαρροής* (*Yield Strength*) προκρίνει σαν βέλτιστο υλικό του PET.

Θα πρέπει να καταστεί σαφές ότι η ανάλυση ευαισθησίας υλοποιείται επειδή:

- 1) έχουν τεθεί ίσα βάρη και στις τέσσερις εξόδους καθότι δεν υπήρχε πληροφόρηση για κάποια άλλη ανάθεση των βαρών και

- 2) παραμένει το ενδιαφέρον για το κατά πόσον και πως μεταβάλλεται η βαθμολόγηση των υλικών (και κατ' επέκταση και οι καμπύλες παλινδρόμησης και η επιλογή του βέλτιστου υλικού) όταν η ανάθεση ίσων βαρών μεταβληθεί (π.χ. λόγω προτίμησης των κατασκευαστριών εταιριών, λόγω διεθνών προδιαγραφών κ.λ.π).



Σχήμα 6.17.: Ανάλυση ευαισθησίας αποτελεσμάτων της μεθόδου GRANN

Μετά τα παραπάνω βήματα όπου και έχει πραγματοποιηθεί η βαθμολόγηση των υλικών, ακολουθεί πιθανότατα το σημαντικότερο βήμα της μεθόδου. Στο επόμενο βήμα (Βήμα 6) ακολουθεί ο προσδιορισμός ενός ιδανικά βέλτιστου υλικού. Το υλικό αυτό μπορεί να αποτελέσει ένα υλικό πρότυπο, του οποίου τις ιδιότητες οι σχεδιαστές και οι μηχανικοί καλούνται να αναπαράγουν (στο μέτρο του δυνατού) στα υλικά τα οποία έχουν διαθέσιμα ώστε τα τελευταία να αποκτήσουν περιβαλλοντική συμπεριφορά που προσεγγίζει αυτή του βέλτιστου υλικού.

6.3.6 ΒΗΜΑ 6^ο: ΕΥΡΕΣΗ ΒΕΛΤΙΣΤΟΥ ΥΛΙΚΟΥ

Στόχος του βήματος αυτού είναι ο προσδιορισμός ενός υλικού που θα έχει μικρότερη συνολική περιβαλλοντική επίπτωση από τα υλικά του αρχικού πληθυσμού. Το υλικό αυτό προσδιορίζεται σαν το ολικό ελάχιστο της καμπύλης παλινδρόμησης όπως αυτή προκύπτει από τις τεχνικές παλινδρόμησης που περιγράφησαν στο τέταρτο βήμα της μεθόδου. Η μικρότερη συνολική περιβαλλοντική επίπτωση συνεπάγεται ένα βέλτιστο συνδυασμό μηχανικών ιδιοτήτων. Έτσι αν προσδιοριστεί το βέλτιστο αυτό υλικό είναι δυνατόν να εξαχθούν πληροφορίες χρήσιμες για τον σχεδιαστή και τον μηχανικό των υλικών προκειμένου να κατασκευάσουν το υλικό αυτό ή να βελτιώσουν (προς την κατεύθυνση του «βέλτιστου» αυτού υλικού) τα υλικά που έχουν στη διάθεσή τους ώστε να βελτιωθεί περαιτέρω η περιβαλλοντική συμπεριφορά τους.

Για την εύρεση του ολικού ελάχιστου θα πρέπει να γίνει έλεγχος όλων των σημείων της καμπύλης παλινδρόμησης. Η διαδικασία αυτή όμως μπορεί να αποδειχθεί εξαιρετικά απαιτητική σε

χρόνο και υπολογιστική ισχύ. Ο έλεγχος αυτός μέσω των δύο τεχνικών γίνεται με την εφαρμογή ενός πενταπλού επαναληπτικού βρόγχου. Στην περίπτωση των νευρωνικών δικτύων όπου οι τιμές είναι κανονικοποιημένες στο εύρος [0.1 0.9] για την εύρεση του ολικού ελάχιστου συντίθεται ένας βρόγχος που επαναλαμβάνεται για ακρίβεια ενός δεκαδικού $9^5=59049$ φορές (9 δυνατές τιμές της κάθε μεταβλητής στο εύρος αυτό) ψηφίου. Αναλυτικά ο αριθμός των επαναλήψεων που απαιτούνται καθώς αυξάνεται η ακρίβεια δίδεται στον παρακάτω πίνακα (πίνακας 6.10):

Αριθμός δεκαδικών ψηφίων	Αριθμός επαναλήψεων
1	$9 \times 9 \times 9 \times 9 \times 9 = 9^5 = 59,049$
2	$81 \times 81 \times 81 \times 81 \times 81 = 3,486,784,401$
3	$801 \times 801 \times 801 \times 801 \times 801 = 3,297,33E+14$

Πίνακας 6.10.: Αριθμός επαναλήψεων επαναληπτικού βρόγχου συναρτήσει της ακρίβειας των αποτελεσμάτων

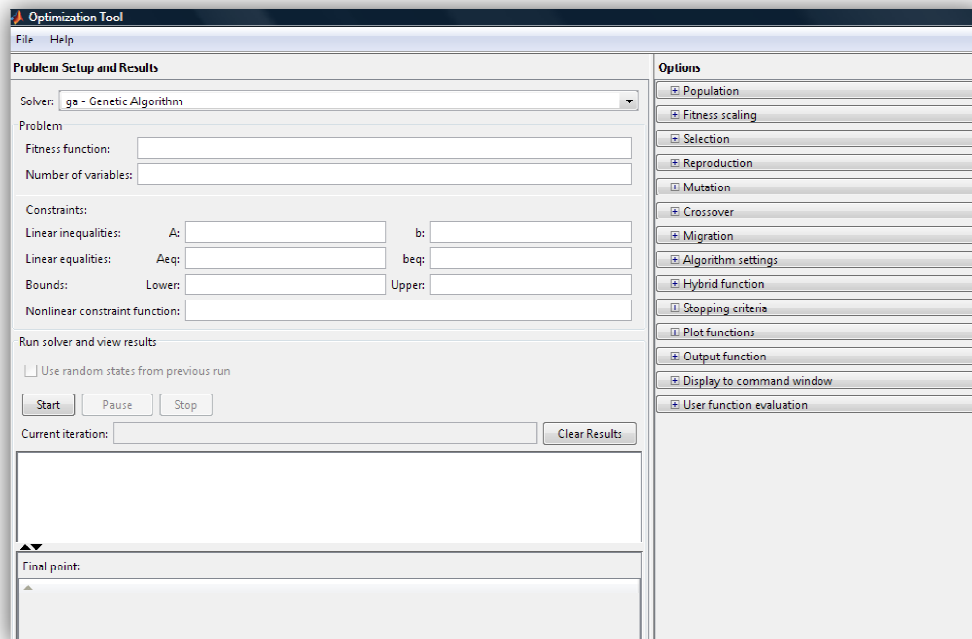
Όπως είναι εμφανές για ένα αποτέλεσμα με ακρίβεια τριών δεκαδικών ψηφίων απαιτείται ένας απαγορευτικός αριθμός επαναλήψεων.

Στην περίπτωση της πολυωνυμικής παλινδρόμησης, η εφαρμογή του επαναληπτικού βρόγχου αποδεικνύεται περισσότερο πολύπλοκη. Ο προσδιορισμός του εύρους τιμών του κάθε επαναληπτικού βρόγχου είναι δύσκολος τόσο λόγω της διαφορετικής τάξης μεγέθους των μεταβλητών εισόδου όσο και λόγω του προσδιορισμού της ακρίβειας των αποτελεσμάτων αφού οι είσοδοι είναι τιμές υψωμένες σε μεγάλες δυνάμεις. Επίσης, για τιμές μικρότερες ή μεγαλύτερες του εύρους του αρχικού πληθυσμού είναι πιθανό τα προηγούμενα προσδιοριζόμενα πολυώνυμα να μην πληρούν τους περιορισμούς του προβλήματος. Έτσι για κάθε περίπτωση θα πρέπει να γίνει από την αρχή ο προσδιορισμός των κατάλληλων πολυωνύμων.

Για την αντιμετώπιση των παραπάνω προβλημάτων στον προσδιορισμό των ολικών ελαχίστων των καμπυλών παλινδρόμησης χρησιμοποιήθηκε η μέθοδος των *Γενετικών Αλγορίθμων*.

Όπως έχει προαναφερθεί, η μέθοδος βελτιστοποίησης μέσω γενετικών αλγορίθμων προσφέρει έναν ευκολότερο τρόπο εύρεσης ολικών ελαχίστων της καμπύλης παλινδρόμησης σε σχέση με την εφαρμογή επαναληπτικών βρόγχων. Ειδικά σε περιπτώσεις που ο αριθμός των μεταβλητών είναι μεγάλος, με τις συμβατικές μεθόδους η εφαρμογή ενός επαναληπτικού βρόγχου έστω n αριθμού «υπό-βρόγχων» καθιστά τις μεθόδους αυτές απαγορευτικές.

Για τον προσδιορισμό των ελαχίστων για την εφαρμογή που μελετήθηκε σε αυτή την εργασία, χρησιμοποιήθηκε το πρόγραμμα *MATLAB R2009a* και συγκεκριμένα το πακέτο εργαλείων *Genetic Algorithm And Direct Search* [4] του προγράμματος. Το περιβάλλον εργασίας του παραπάνω πακέτου παρουσιάζεται στο σχήμα 6.18:



Σχήμα 6.18.: Περιβάλλον εργασίας πακέτου εργαλείων Genetic Algorithm And Direct Search [4]

Όπως φαίνεται στο παραπάνω σχήμα το περιβάλλον εργασίας του πακέτου εργαλείων αυτού χωρίζεται σε δύο μέρη. Στο πρώτο μέρος (*Problem Setup and Results*) γίνεται η εισαγωγή της αντικειμενικής συνάρτησης που καλείται ο γενετικός αλγόριθμος να επιλύσει (*Fitness Function*), του αριθμού των μεταβλητών της συνάρτησης αυτής (*Number of variables*) καθώς και των περιορισμών (*Constraints*) που διέπουν την αντικειμενική συνάρτηση. Στην κάτω αριστερή πλευρά του πρώτου μέρους γίνεται η εμφάνιση των αποτελεσμάτων της βελτιστοποίησης του γενετικού αλγορίθμου. Στο δεύτερο μέρος (*Options*) εισάγονται οι μεταβλητές που καθορίζουν τη συμπεριφορά του γενετικού αλγορίθμου (αρχικός πληθυσμός, επιλογή, αναπαραγωγή, μετάλλαξη, διασταύρωση κ.α.) καθώς και επιλογές που σχετίζονται με την εμφάνιση των τελικών αποτελεσμάτων της βελτιστοποίησης).

Ίσως το πιο σημαντικό στοιχείο στην βελτιστοποίηση μέσω γενετικών αλγορίθμων είναι ο σωστός ορισμός της αντικειμενικής συνάρτησης. Μια αντικειμενική συνάρτηση θα πρέπει να είναι όσο το δυνατόν καλύτερα ορισμένη έτσι ώστε να αποφεύγονται περιττά βήματα που θα μπορούσαν να καταστήσουν τη διαδικασία περισσότερο περίπλοκη και χρονοβόρα. Για την συγκεκριμένη εφαρμογή δημιουργήθηκαν δύο αντικειμενικές συναρτήσεις μία για κάθε μία από τις μεθόδους παλινδρόμησης που χρησιμοποιήθηκαν. Και για τις δύο περιπτώσεις η δομή της αντικειμενικής συνάρτησης είναι η ίδια. Αρχικά γίνεται ορισμός της συνάρτησης και το όνομα με το οποίο θα καλείται η συνάρτηση αυτή π.χ.:

```
function f = fitfunc(x)
```

Στη συνέχεια ακολουθεί ο ορισμός των μεταβλητών, των διαδικασιών υπολογισμού καθώς και των σταθερών τιμών που μπορεί να έχουν οι συντελεστές που χρησιμοποιεί η συνάρτηση. Τέλος προστίθεται η αντικειμενική συνάρτηση. Και στις δύο περιπτώσεις η αντικειμενική συνάρτηση είναι της μορφής (σχέση 6.2 σελ. 89):

$$\Sigma \Pi \Delta_j = a * \Pi E_{1j} + b * \Pi E_{2j} + c * \Pi E_{3j} + d * \Pi E_{4j}$$

Όπου τα a, b, c, d οι συντελεστές βαρύτητας των αντίστοιχων περιβαλλοντικών επιπτώσεων. Οι διαφορές ανάμεσα στις δύο μεθόδους εντοπίζονται στο κομμάτι της διαδικασίας υπολογισμού. Στην περίπτωση της παλινδρόμησης μέσω πολυωνύμων γίνεται αναφορά των συντελεστών των πολυωνύμων καθώς και της εντολής *polyval* ενώ στην παλινδρόμηση μέσω GRANNs αναφέρονται οι εντολές δημιουργίας του τελικού 5-9-2-4 GRANN.

Μετά την δημιουργία των αντικειμενικών συναρτήσεων (κάθε μία χρησιμοποιεί πέντε μεταβλητές – τις μεταβλητές εισόδου) γίνεται ορισμός των περιορισμών στους οποίους υπόκειται η κάθε συνάρτηση. Οι περιορισμοί και στις δύο περιπτώσεις είναι τα όρια της καμπύλης παλινδρόμησης μέσα στα οποία καλούνται οι γενετικοί αλγόριθμοι να δώσουν λύση. Για τα GRANNs οι περιορισμοί λαμβάνουν τις τιμές:

lower bound: [0.100 0.100 0.100 0.100 0.100]

upper bound: [0.900 0.900 0.900 0.900 0.900]

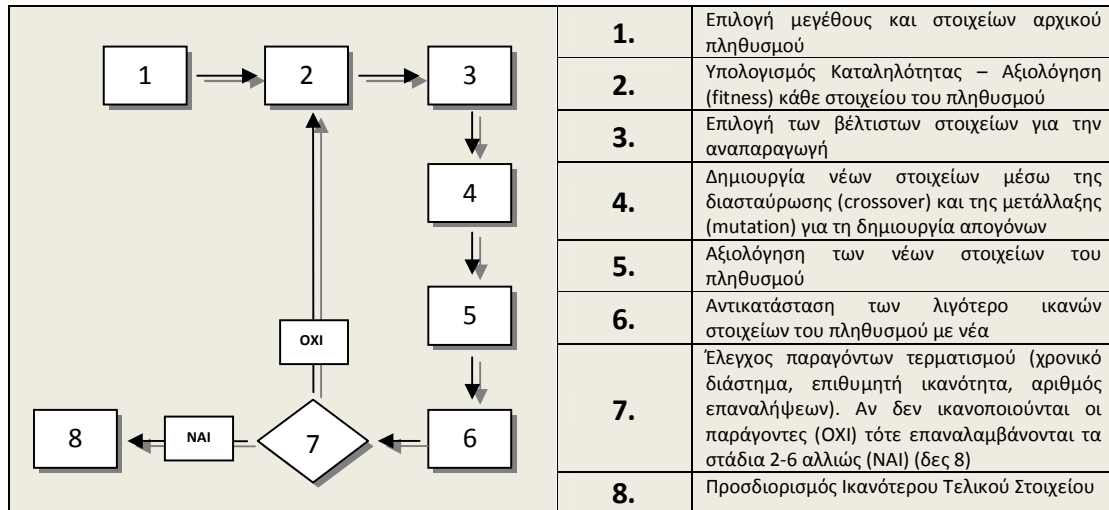
ενώ αντίστοιχα για την πολυωνυμική παλινδρόμηση οι περιορισμοί λαμβάνουν τις τιμές των ορίων των μηχανικών ιδιοτήτων των υλικών εισόδου:

lower bound: [9.285e8 2.310e7 2.340e7 2.775e7 9.5e6]

upper bound: [2.9e9 8.14e7 6.755e7 9.82e7 2.83e7]

Μετά τον ορισμό των αντικειμενικών συναρτήσεων και των αντίστοιχων περιορισμών επιλέγονται τα χαρακτηριστικά βάσει των οποίων να εφαρμοστεί η μέθοδος βελτιστοποίησης. Μετά από μελέτη των αποτελεσμάτων για πολλούς διαφορετικούς συνδυασμούς χαρακτηριστικών επιλέχθηκαν οι πλέον κατάλληλοι για κάθε μία μέθοδο.

Σχηματικά τα βήματα που ακολουθούνται στην διαδικασία βελτιστοποίησης μέσω γενετικών αλγορίθμων παρουσιάζονται στο παρακάτω σχήμα (σχήμα 6.19):



Σχήμα 6.19.: Βήματα διαδικασίας βελτιστοποίησης μέσω γενετικών αλγορίθμων

6.3.6.1 ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΓΕΝΕΤΙΚΩΝ ΑΛΓΟΡΙΘΜΩΝ ΣΤΗΝ ΠΑΛΙΝΔΡΟΜΗΣΗ ΜΕΣΩ ΠΟΛΥΩΝΥΜΩΝ

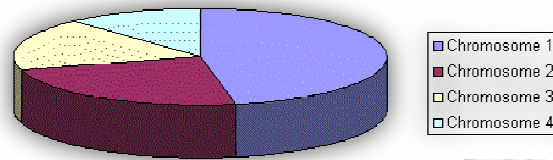
Ο περιορισμός του εύρους αναζήτησης βέλτιστων λύσεων οφείλεται στην μη προβλέψιμη συμπεριφορά των πολυωνύμων έξω από το εύρος αυτό. Τα πολυώνυμα είναι χαρακτηριστικά για κάθε εφαρμογή και για κάθε αρχικό πληθυσμό οπότε καθίσταται δύσκολη η γενίκευση τους σε μία επιφάνεια εύρους μεγαλύτερου από αυτό που ορίζεται αρχικά.

Μετά από διερεύνηση ο βέλτιστος συνδυασμός χαρακτηριστικών εφαρμογής των γενετικών αλγορίθμων είναι η επιλογή (*Selection*) μέσω εξαναγκασμένης ρουλέτας (*roulette wheel*), η διασταύρωση (*Crossover*) τέθηκε στο *scattered*, ενώ το *fitness scaling* στο *Proportional* (η πρόβλεψη είναι ανάλογη της τελικής αξιολόγησης κάθε στοιχείου). Τόσο για την πολυωνυμική παλινδρόμηση όσο και για την μέθοδο παλινδρόμησης μέσω νευρωνικών δικτύων ο αρχικός πληθυσμός και το σύνολο των γενεών τέθηκαν στο 100. Οι υπόλοιπες επιλογές των γενετικών αλγορίθμων αφέθηκαν ως είχαν οριστεί από το πρόγραμμα (*default*).

Η επιλογή *Scattered* ως μέθοδος διασταύρωσης, δημιουργεί ένα τυχαίο δυαδικό (στοιχεία 0 ή 1) διάνυσμα. Στη συνέχεια, επιλέγει τα χαρακτηριστικά (γονίδια) του πρώτου γονέα που το τυχαίο διάνυσμα ορίζει σαν 1 ενώ από τον δεύτερο επιλέγει τα γονίδια που το τυχαίο διάνυσμα δίνει τιμή 0. Παραδείγματος χάριν αν το τυχαίο διάνυσμα είναι το [1 1 0 0 1 0 0 0] ενώ οι γονείς $p1$ και $p2$ έχουν διανύσματα $p1 = [a b c d e f g h]$ και $p2 = [1 2 3 4 5 6 7 8]$ αντίστοιχα, τότε ο «απόγονος» που προκύπτει θα έχει χαρακτηριστικό διάνυσμα το [a b 3 4 e 6 7 8].

Η επιλογή μέσω εξαναγκασμένης ρουλέτας γίνεται με τον παρακάτω τρόπο. Οι «γονείς» επιλέγονται ανάλογα με την αξιολογούμενη μέσω της αντικειμενικής συνάρτησης ικανότητά τους. Όσο καλύτερα είναι τα χρωμοσώματα (τα στοιχεία κάθε μέλους του πληθυσμού), τόσο αυξάνονται οι πιθανότητες επιλογής τους. Η μέθοδος αυτή αναπαριστάται σαν μια ρουλέτα όπου τοποθετούνται τα

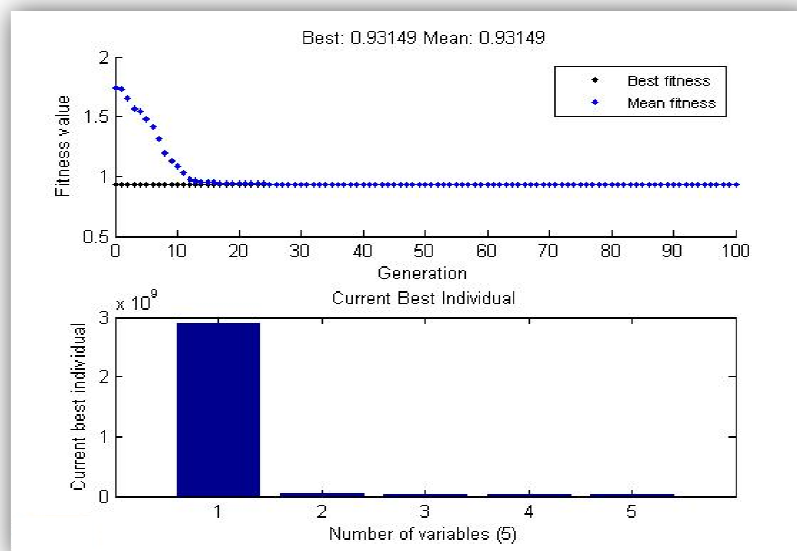
στοιχεία του πληθυσμού. Η έκταση της ρουλέτας την οποία καταλαμβάνει το κάθε στοιχείο είναι ανάλογη της ικανότητας του. Για παράδειγμα:



Σχήμα 6.20.: Επιλογή μέσω εξαναγκασμένης ρουλέτας

Αφού τοποθετηθούν τα στοιχεία στη ρουλέτα, ο αλγόριθμος χρησιμοποιεί έναν τυχαίο αριθμό για την επιλογή ενός από τα τμήματα με πιθανότητα ίση με την έκταση του τμήματος. Τα στοιχεία που καταλαμβάνουν μεγαλύτερη έκταση θα επιλεγθούν περισσότερες φορές.

Με αυτό τον τρόπο τα στοιχεία που έχουν τη μεγαλύτερη απόδοση, θα έχουν μεγαλύτερο πλήθος απογόνων στην επόμενη γενιά, ενώ αυτές που έχουν χαμηλή απόδοση δεν θα υπάρχουν. Όταν ένα στοιχείο επιλέγεται, δημιουργείται ένα ακριβές αντίγραφο του και μαζί με τα αντίγραφα άλλων ικανών στοιχείων, που παράγονται με τον ίδιο τρόπο, δημιουργείται ένας νέος ενδιαμέσος πληθυσμός, ο οποίος θα υποστεί περισσότερες γενετικές διαδικασίες. Αυτός ο νέος πληθυσμός αναφέρεται και σαν δεξαμενή «ζευγαρώματος» (*mating pool*). Μετά τον ορισμό όλων των μεταβλητών, εκτελείται ο γενετικός αλγόριθμος. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στο παρακάτω σχήμα (σχήμα 6.21):



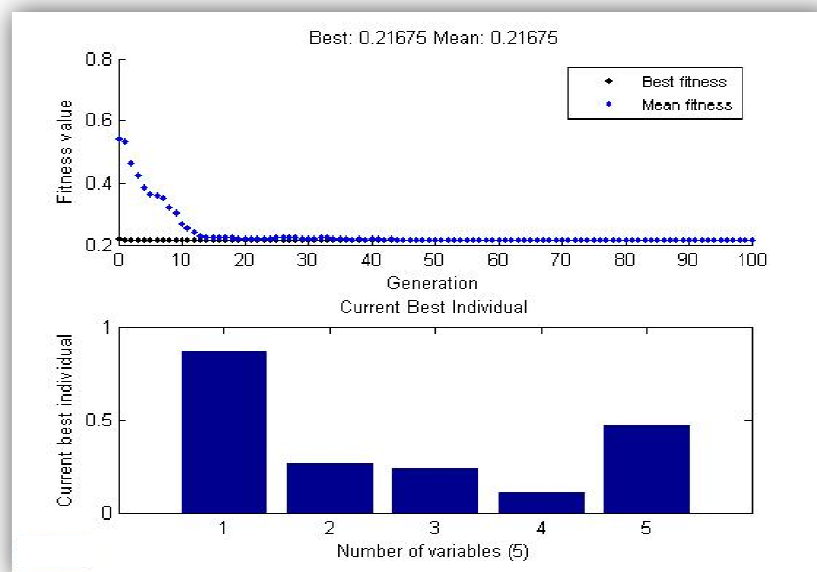
Σχήμα 6.21.: Αποτελέσματα εφαρμογής γενετικών αλγορίθμων στην περίπτωση της παλινδρόμησης μέσω πολυωνυμικής παλινδρόμησης

Ο γενετικός αλγόριθμος εντόπισε ένα σημείο με τελική βαθμολογία ίση με την βαθμολογία του καλύτερου υλικού όπως αυτή είχαν προκύψει μέσω της πολυωνυμικής παλινδρόμησης.

6.3.6.2 ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΓΕΝΕΤΙΚΩΝ ΑΛΓΟΡΙΘΜΩΝ ΣΤΗΝ ΠΑΛΙΝΔΡΟΜΗΣΗ ΜΕΣΩ ΝΕΥΡΩΝΙΚΩΝ ΔΙΚΤΥΩΝ

Η αναζήτηση της βέλτιστης λύσης για την περίπτωση των νευρωνικών δικτύων πραγματοποιείται σε όλο το δυνατό εύρος της καμπύλης παλινδρόμησης αντικαθιστώντας τον πενταπλό επαναληπτικό βρόγχο. Ο βέλτιστος συνδυασμός χαρακτηριστικών εφαρμογής των γενετικών αλγορίθμων είναι ο ίδιος με τον συνδυασμό που περιγράφηκε στην προηγούμενη παράγραφο.

Τα αποτελέσματα από την διαδικασία βελτιστοποίησης παρουσιάζονται στο σχήμα 6.22. Όπως είναι εμφανές ο γενετικός αλγόριθμος βρήκε ένα σημείο με καλύτερη αξιολόγηση («βέλτιστο» υλικό) από το υλικό που είχε οριστεί σαν καλύτερο μέσω των νευρωνικών δικτύων (PVC: 0.217). Έτσι όπως θα συζητηθεί και στην παράγραφο της πολυκριτηριακής βελτιστοποίησης είναι δυνατός ο προσδιορισμός βελτιώσεων των υλικών του αρχικού πληθυσμού ώστε να προσεγγίσει τις τιμές του βέλτιστου υλικού.



Σχήμα 6.22.: Αποτελέσματα εφαρμογής γενετικών αλγορίθμων στην περίπτωση της παλινδρόμησης μέσω νευρωνικών δικτύων

6.3.7 ΒΗΜΑ 7^ο: ΠΟΛΥΚΡΙΤΗΡΙΑΚΗ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ (MULTIOBJECTIVE OPTIMIZATION)

Η Πολυκριτηριακή Βελτιστοποίηση είναι η διαδικασία της ταυτόχρονης βελτιστοποίησης δύο ή περισσότερων αντικρουόμενων (ανταγωνιστικών) χαρακτηριστικών που υπόκεινται σε περιορισμούς. Σαν παραδείγματα αντικρουόμενων χαρακτηριστικών μπορούν να αναφερθούν η μεγιστοποίηση του κέρδους με μείωση του κόστους του προϊόντος, η μεγιστοποίηση των επιδόσεων με ελαχιστοποίηση της

κατανάλωσης καυσίμων κ.α.. Η Πολυκριτηριακή Βελτιστοποίηση βρίσκει εφαρμογή σε πολλά πεδία: στον σχεδιασμό προϊόντων και διαδικασιών, στα οικονομικά, στις κατασκευές κ.τ.λ..

Αν το πρόβλημα είναι καλά ορισμένο τότε η Πολυκριτηριακή Βελτιστοποίηση μπορεί να δώσει μία μοναδική λύση που ταυτόχρονα ικανοποιεί στον μέγιστο βαθμό τις αντικρουόμενες μεταβλητές. Σε κάθε περίπτωση είναι επιθυμητή μια λύση για την οποία κάθε εξεταζόμενη μεταβλητή βελτιστοποιείται μέχρι το σημείο που εάν επιχειρηθεί περαιτέρω βελτιστοποίηση της μίας μεταβλητής, η άλλη θα επιδεινωθεί. Η εύρεση μιας τέτοιας λύσης και η ποσοτικοποίηση του πόσο καλύτερη είναι αυτή η λύση σε σύγκριση (γενικά μπορούν να υπάρξουν πολλές τέτοιες λύσεις) είναι ο στόχος κατά τον ορισμό και την επίλυση ενός πολυκριτηριακού προβλήματος βελτιστοποίησης.

Έχοντας σαν δεδομένα τα αποτελέσματα που προέκυψαν από τον συνδυασμό των γενετικών αλγορίθμων με τις δύο εφαρμοζόμενες τεχνικές παλινδρόμησης, είναι δυνατός ο προσδιορισμός των απαιτούμενων μεταβολών των χαρακτηριστικών των υλικών έτσι ώστε να ελαχιστοποιηθεί η περιβαλλοντική επιβάρυνσή τους. Γνωρίζοντας τα χαρακτηριστικά του βέλτιστου υλικού από τα προηγούμενα βήματα της μεθόδου και χρησιμοποιώντας σαν μεταβλητές τις μηχανικές ιδιότητες των υλικών (από τις οποίες και εξαρτάται η περιβαλλοντική επίδοση) μπορούμε μέσω της εξίσωσης των περιβαλλοντικών επιδόσεων του κάθε υλικού με του βέλτιστου υλικού και διατηρώντας κάθε φορά κάποιες από τις ιδιότητες σταθερές να υπολογιστεί η απαιτούμενη μεταβολή των υπολοίπων ιδιοτήτων. Η πολυκριτηριακή βελτιστοποίηση είναι δυνατή και μεταξύ υλικών του αρχικού πληθυσμού με αποτέλεσμα να δίδονται πληροφορίες για να υπάρξει βελτίωση ενός υλικού σε σχέση με τα ανταγωνιστικά του.

Για παράδειγμα όπως αναφέρθηκε και στο Βήμα 6, με το συνδυασμό της μεθόδου της παλινδρόμησης μέσω GRANNs και των γενετικών αλγορίθμων προσδιορίστηκε ένα υλικό με καλύτερη περιβαλλοντική επίδοση (0,21675) σε σχέση με το βέλτιστο από τον αρχικό πληθυσμό υλικό δηλαδή το PVC με περιβαλλοντική επίδοση 0,217095. Έτσι υπολογίστηκε η επί τοις εκατό μεταβολή της κάθε μίας από τις τέσσερις περιβαλλοντικές επιπτώσεις του PVC έτσι ώστε η συνολική περιβαλλοντική επίδοση του να ισούται με 0,21675. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στον παρακάτω πίνακα (πίνακας 6.11):

Κατηγορία Περιβαλλοντικής Επιβάρυνσης	Επί τοις εκατό μεταβολή (%)
CO ₂ footprint primary production	-1,36979
Water Usage	-0,71908
Polymer Molding CO ₂	-0,29038
CO ₂ footprint recycling	-1,36989

Πίνακας 6.11.: Επί τοις εκατό μεταβολή των κατηγοριών των περιβαλλοντικών επιπτώσεων για τη βελτίωση του καταλληλότερου (μέσω GRANNs) υλικού

Η παραπάνω διαδικασία μπορεί να επαναληφθεί τόσο για ταυτόχρονη μεταβολή μίας ή περισσότερων περιβαλλοντικών επιπτώσεων όσο και για τον προσδιορισμό των ιδίων των ιδιοτήτων μέσω των προηγούμενων προσδιοριζόμενων μεταβολών.

6.4 ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ 6^{ΟΥ} ΚΕΦΑΛΑΙΟΥ

- [1] Τ. Ταμπουρατζή, Σημειώσεις μαθήματος: Διαχείριση Δεδομένων και Γλώσσες Προγραμματισμού, Τμήμα Βιομηχανικής Διοίκησης και Τεχνολογίας, Πανεπιστήμιο Πειραιά, Πειραιάς 2007
- [2] Φ. Μπατζιάς, Σημειώσεις μαθήματος: Ανακύκλωση και Ενεργειακή Αξιοποίηση Υλικών, Μεταπτυχιακό Πρόγραμμα Σπουδών στην Οργάνωση και Διοίκηση Βιομηχανικών Συστημάτων. Ειδικευση: Συστήματα Διαχείρισης της Ενέργειας και Προστασίας Περιβάλλοντος, Πειραιάς 2007
- [3] Μ.Μανδaráκα, Σημειώσεις μαθήματος: Συστήματα και Εργαλεία Περιβαλλοντικής Διαχείρισης, Μεταπτυχιακό Πρόγραμμα Σπουδών στην Οργάνωση και Διοίκηση Βιομηχανικών Συστημάτων. Ειδικευση: Συστήματα Διαχείρισης της Ενέργειας και Προστασίας Περιβάλλοντος, Πειραιάς 2007
- [4] The MathWorks, R2009a, Genetic Algorithm and Direct Search Toolbox, February 2009
- [5] Granta Design, CES EduPack 2008,

Ιστοσελίδες:

- [6] <http://en.wikipedia.org/wiki/Interpolation> (Παρεμβολή - Interpolation)
- [7] <http://en.wikipedia.org/wiki/Extrapolation> (Παρέκταση - Extrapolation)

Περίληψη

Στο τελευταίο αυτό κεφάλαιο γίνεται αναφορά στα κύρια αποτελέσματα της παρούσας εργασίας και στα συμπεράσματα που προκύπτουν από την επεξεργασία τους. Τέλος γίνονται προτάσεις για μελλοντική έρευνα πάνω στο ίδιο αντικείμενο βασιζόμενες σε παραμέτρους που δεν λήφθηκαν υπόψη στην εργασία αυτή.



7.1 ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ- ΣΥΖΗΤΗΣΗ-ΠΡΟΤΑΣΕΙΣ

Όπως έχει προαναφερθεί, οι επιπτώσεις των ανθρώπινων ενεργειών είναι εξαιρετικά επιβαρυντικές για το περιβάλλον. Οι επιπτώσεις αυτές έχουν γίνει εντονότερες την τελευταία δεκαετία λόγω κυρίως της αύξησης του βιοτικού επιπέδου με συνεπαγόμενη την αύξηση της ζήτησης καταναλωτικών προϊόντων. Η ένταση αυτή των περιβαλλοντικών επιπτώσεων έχει προκαλέσει την ευαισθητοποίηση και το ενδιαφέρον μεγάλης μερίδας καταναλωτών, οι οποίοι και απαιτούν την βιώσιμη χρήση πρώτων υλών και την ελαχιστοποίηση της καταναλισκόμενης ενέργειας που απαιτούνται για την παραγωγή των προϊόντων. Για τον σκοπό αυτό ασκείται πίεση στις επιχειρήσεις για την εφαρμογή «πράσινων» διαδικασιών παραγωγής χωρίς όμως οι διαδικασίες αυτές να οδηγούν σε προϊόντα κατώτερης ποιότητας. Έτσι καθίσταται προφανές ότι οι σχεδιαστές των προϊόντων θα πρέπει να βρουν την «χρυσή» τομή ανάμεσα στην ποιότητα, το κόστος παραγωγής και την περιβαλλοντική βιωσιμότητα, λαμβάνοντας υπόψη ένα τεράστιο όγκο – πολλές φορές αλληλοσυγκρουόμενων – πληροφοριών για τα υλικά που καλούνται να επιλέξουν για την παραγωγή των τελικών προϊόντων.

Στην παρούσα εργασία, αναπτύχθηκε μία μέθοδος αξιολόγησης της περιβαλλοντικής επιβάρυνσης υλικών μέσω των ιδιοτήτων τους. Η μέθοδος αυτή εφαρμόζεται στην επιλογή του καλύτερου υλικού για την κατασκευή πολυμερικών φιαλών συσκευασίας υγρών ευρείας κατανάλωσης. Η αξιολόγηση των υποψήφιων υλικών γίνεται μέσω ενός υποσυνόλου των μηχανικών ιδιοτήτων των υλικών αυτών. Οι μέθοδοι που χρησιμοποιούνται για την βαθμολόγηση των υλικών είναι τα Νευρωνικά Δίκτυα Γενικευμένης Παλινδρόμησης και η Πολυωνυμική Παλινδρόμηση.

Με τη χρήση των Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων Γενικευμένης Παλινδρόμησης επιβεβαιώθηκε σε μεγάλο βαθμό η θεωρητική βαθμολόγηση των υλικών όπως αυτή προέκυψε από την βάση δεδομένων. Θα πρέπει να σημειωθεί όμως το γεγονός ότι ένα υλικό χαρακτηρίζεται από το σύνολο των ιδιοτήτων του (μηχανικές, φυσικοχημικές, οπτικές, μαγνητικές, ηλεκτρικές κ.λ.π). Έτσι η θεωρητική βαθμολόγηση βασίζεται κατά κάποιο τρόπο στο σύνολο των ιδιοτήτων των υλικών και όχι μόνο στις μηχανικές. Παρόλα αυτά φαίνεται ότι ένα καλά ορισμένο υποσύνολο ιδιοτήτων μπορεί να παρέχει αντίστοιχη βαθμολόγηση.

Η χρήση των νευρωνικών δικτύων στην παρούσα εφαρμογή ήταν όχι μόνο πιο εύχρηστη από την χρήση της παλινδρόμησης μέσω πολυωνύμων αλλά έδωσε και καλύτερα αποτελέσματα. Το γεγονός αυτό οφείλεται στο ότι τα νευρωνικά δίκτυα γενικευμένης παλινδρόμησης πρακτικά απαιτούν τον προσδιορισμό μόνο μίας μεταβλητής (μεταβλητή σ) σε αντίθεση με τα πολυώνυμα που δεν έχουν την δυνατότητα άμεσης γενίκευσης με την είσοδο νέων υλικών αλλά επιπλέον απαιτούν τον προσδιορισμό ενός πλήθους μεταβλητών για την αποτελεσματική παλινδρόμηση. Με την ανάλυση των αποτελεσμάτων

φαίνεται ότι είναι πιθανός ο προσδιορισμός της περιβαλλοντικής επιβάρυνσης ενός υλικού μέσω των ιδιοτήτων του.

Ο βασικός στόχος της εργασίας αυτής, δηλαδή ο προσδιορισμός του βέλτιστου περιβαλλοντικά υλικού για την εκάστοτε εφαρμογή επετεύχθη με την εφαρμογή της μεθόδου των γενετικών αλγορίθμων. Η χρήση των γενετικών αλγορίθμων διευκόλυνε σημαντικά τον υπολογισμό των ολικών ελαχίστων των καμπυλών παλινδρόμησης που προέκυψαν από τις δύο μεθόδους. Όπως αναφέρθηκε και στο κεφάλαιο 6 (πίνακας 6.9) για αποτελέσματα με ακρίβεια τριών δεκαδικών ψηφίων με την μέθοδο των νευρωνικών δικτύων γενικευμένης παλινδρόμησης απαιτούνται περίπου 3.3×10^{14} επαναλήψεις. Τόσο από υπολογιστικό χρόνο όσο και από υπολογιστική ισχύ, οι γενετικοί αλγόριθμοι αποτελούν μία πολύ σημαντική μέθοδο βελτιστοποίησης αφού για την ίδια διαδικασία απαιτούνται μόλις λίγα δευτερόλεπτα.

Ο συνδυασμός των δύο μεθόδων παλινδρόμησης με τους γενετικούς αλγορίθμους έδωσε τη δυνατότητα προσδιορισμού δύο (ένα για κάθε συνδυασμό μεθόδου παλινδρόμησης – γενετικών αλγορίθμων) νέων «βέλτιστων» περιβαλλοντικά υλικών. Οι μηχανικές ιδιότητες των νέων αυτών υλικών περιγράφουν τη συμπεριφορά κάτω από την εφαρμογή μηχανικών τάσεων. Είναι πιθανό η κατασκευή ενός τέτοιου υλικού μέσω μόνο των μηχανικών ιδιοτήτων του να μην είναι εφικτή ή η κατασκευή του να μην εγγυάται την εμφάνιση άλλων κρίσιμων ιδιοτήτων του υλικού και συνεπώς του τελικού προϊόντος. Η εφαρμογή που αναπτύχθηκε στην εργασία αυτή είναι πιλοτική και έχει ως σκοπό την κατανόηση της μεθόδου που αναπτύχθηκε. Εφαρμόζοντας όμως τη μέθοδο αυτή σε ένα σύστημα το οποίο θα περιλαμβάνει περισσότερες ιδιότητες της ίδιας ή / και διαφορετικής κατηγορίας από την κατηγορία που χρησιμοποιήθηκε εδώ, αλλά ίσως και περισσότερα υλικά γίνεται δυνατός ο προσδιορισμός με μεγαλύτερη ακρίβεια και λεπτομέρεια ενός νέου υλικού. Όπως αναφέρθηκε και στο Κεφάλαιο 6, με την αύξηση του αριθμού των στοιχείων εισόδου οι καμπύλες παλινδρόμησης περιγράφουν το σύστημα με μεγαλύτερη ακρίβεια βελτιώνοντας έτσι και την ποιότητα των αποτελεσμάτων.

Εάν είναι γνωστοί εξ αρχής οι περιορισμοί τους οποίους θα πρέπει να πληρούν τα υποψήφια υλικά (π.χ. άνω και κάτω όριο στην αντοχή σε εφελκυσμό) είναι δυνατός ο περιορισμός του χώρου αναζήτησης του γενετικού αλγορίθμου έτσι ώστε το «βέλτιστο» υλικό (υπό περιορισμούς ελάχιστο της υπερκαμπύλης παλινδρόμησης) να ανταποκρίνεται άμεσα στις ανάγκες του σχεδιαστή και του μηχανικού. Σε κάθε περίπτωση όμως, ακόμα και αν το «βέλτιστο» υλικό δεν είναι δυνατό να κατασκευαστεί, ο προσδιορισμός του υλικού αυτού παρέχει χρήσιμες πληροφορίες για την κατεύθυνση προς την οποία θα πρέπει να κινηθεί η διαδικασία βελτίωσης του καταλληλότερου διαθέσιμου υλικού (όπως αυτό προσδιορίζεται κατά το στάδιο 4 της μεθόδου) ώστε αυτό να εμφανίσει βελτιωμένη περιβαλλοντική συμπεριφορά.

Η ύπαρξη στα στάδια εφαρμογής της μεθόδου των τεχνικών της ανάλυσης ευαισθησίας και της πολυκριτηριακής ανάλυσης ενισχύει την βέλτιστη επιλογή του υλικού και παρέχεται πληροφόρηση για την σταθερότητα της λύσης αυτής αλλά και για οποιοδήποτε συνδυασμό συντελεστών βαρύτητας.

Θα πρέπει να επισημανθεί ότι η βαθμολόγηση των υλικών έγινε καθαρά και μόνο χρησιμοποιώντας τις μηχανικές ιδιότητες των υποψηφίων υλικών. Δεν λήφθηκε υπόψη το αν ένα υλικό είναι επικίνδυνο ή όχι για την συσκευασία του περιεχόμενου προϊόντος λόγω της χημικής του σύστασης. Έτσι υλικά όπως για παράδειγμα το PVC μπορεί να είναι επικίνδυνο σε ένα ή περισσότερα στάδια του κύκλου ζωής του αλλά στην παρούσα εργασία δεν συμπεριλήφθηκε η συνιστώσα αυτή.

Σε μελλοντική έρευνα θα μπορούσαν να συμπεριληφθούν στην ανάλυση οι διαστάσεις του τελικού δοχείου και της μάζας του χρησιμοποιούμενου σε κάθε περίπτωση και στάδιο υλικού. Επίσης θα μπορούσαν να προστεθούν περισσότερες ιδιότητες από την ίδια ή και διαφορετική κατηγορία ιδιοτήτων και να γίνει τελική σύγκριση με τα αποτελέσματα της παρούσας εργασίας.

Περίληψη:

Στο τελευταίο αυτό μέρος παρατίθεται η εργασία που παρουσιάστηκε υπό μορφή πόστερ στο συνέδριο με τίτλο: «Optimizing materials selection for sustainable packaging design via soft computing» στο συνέδριο «Eighth International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE 2010) » που πραγματοποιήθηκε στην Κω το διάστημα 03-08 Οκτωβρίου 2010.





Optimizing Material Selection for Sustainable Packaging Design

Moustakas N.¹, Tambouratzis T.^{1,2} and Karalekas D.¹

¹ Department of Industrial Management & Technology, University of Piraeus,
107 Deligiorgi St, Piraeus 185 34, Greece

² Department of Nuclear Engineering, Chalmers University of Technology,
SE-412 Göteborg, Sweden

Scope & Objectives

Material selection during sustainable product design is a time consuming process. In most cases there is more than one material suitable for the intended application and the final selection constitutes a compromise between numerous advantages and disadvantages. This piece of research aims at determining the ideal – in terms of environmental impact – polymeric material(s) that can be used for manufacturing liquid containers; classical as well as soft computing prediction/interpolation methodologies are employed to this end. Each methodology maps a small set of mechanical properties of a limited number of candidate liquid-container materials (inputs) to a single index cumulatively expressing environmental impact (output). Following a comparison of the results afforded by the different methodologies, a few novel polymeric materials are put forward, with each novel material exhibiting a lower environmental impact than the original materials. It is anticipated that such a methodology will have widespread applications to the development of novel sustainable packaging materials based on desired properties as well as on problem-specific requirements.

Methodology

Two distinct methodologies are employed

- for mapping the mechanical properties of known polymeric materials to their environmental impact, and
- for discovering/developing materials that are superior to the original materials in terms of environmental impact.

Both methodologies use

- ten candidate polymeric materials (Table 1),
- five mechanical properties of the materials (Table 2), and
- the environmental impact index of the materials. This index constitutes the weighted linear combination of four environmental impact categories that are measured throughout the product's life cycle (Table 3); uniform weights of 0.25 are used for each category.

The leave-one-out cross-validation (LOOCV) technique is employed for validating the two methodologies.

Ten tests (as many as there are available candidate polymeric materials) are performed: for each test, nine materials of Table 1 are employed for training each methodology and the remaining material is used for testing.

Table 1. Materials

Polyethylene (PE)
Polyethylene naphthalate (PEN)
Polyethylene terephthalate (PET)
Polymethyl methacrylate (PMMA)
Polypropylene (PP)
Polystyrene (PS)
Polyvinyl Chloride (PVC)
Ultra-High Molecular Weight Polyethylene (UHMW-HDPE)
Polyamide (PA)
Polycarbonate (PC)

Table 2. Inputs

Young's Modulus
Yield Strength
Tensile Strength
Compressive Strength
Fatigue Strength

Table 3. Environmental Impact Categories

CO ₂ footprint, primary production
Water Usage, primary production
CO ₂ Footprint, Molding CO ₂
CO ₂ footprint, recycling

Regression and Curve Fitting

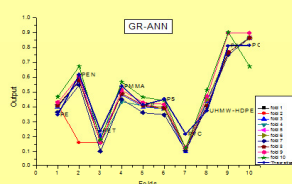


FIGURE 1. Environmental impact index; GRANN prediction.

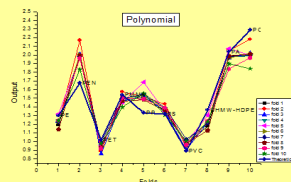


FIGURE 2. Environmental impact index; PRCF prediction.

Results

Materials	Theoretical		GRANN		PRCF	
	Values	Ranking	Values	Ranking	Values	Ranking
PE	1.299	3	0.410	3	1.228	4
PEN	1.677	8	0.679	8	1.992	9
PET	1.018	2	0.247	2	0.931	1
PMMA	1.537	7	0.590	7	1.478	6
PP	1.532	5	0.427	5	1.541	7
PS	1.315	4	0.486	6	1.364	5
PVC	0.891	1	0.217	1	0.973	2
UHMW-HDPE	1.363	6	0.418	4	1.217	3
PA	2.037	9	0.900	10	1.977	8
PC	2.289	10	0.824	9	2.003	10

Overall, the GRANN provides a more consistent as well as reliable prediction of the environmental impact of novel materials than PRCF. Furthermore, the ranking of the 10 materials provided by the GRANN is in better agreement with the theoretical ranking than that provided by the PRCF.

Evaluation of the total minima of the surfaces created by the two methodologies points towards novel liquid-container materials whose environmental impact index values are smaller than those of the original materials.

By mapping back to the mechanical properties of these materials and determining known materials that are very similar to these materials in terms of mechanical properties, improvements to the known materials can be implemented for the production of more environmentally friendly liquid containers.

ACKNOWLEDGMENTS: The authors wish to thank the "Energy and Environmental Management" Postgraduate Program, offered jointly by the Department of Industrial Management & Technology, University of Piraeus and the Department of Chemical Engineering, National Technical University of Athens, for funding the participation of Mr N. Moustakas to the ICCMSE 2010 Conference.

Optimizing Material Selection for Sustainable Packaging Design

Moustakas N.¹, Tambouratzis T.^{1,2} and Karalekas D.¹

¹ *Department of Industrial Management & Technology, University of Piraeus, 107 Deligiorgi St, Piraeus 185 34, Greece*

² *Department of Nuclear Engineering, Chalmers University of Technology, SE-412 Göteborg, Sweden*

Abstract. Material selection during sustainable product design is a time consuming process. In most cases there is more than one material suitable for the intended application and the final selection constitutes a compromise between numerous advantages and disadvantages. This piece of research aims at determining the ideal – in terms of environmental impact – polymeric material(s) that can be used for manufacturing liquid containers; classical as well as soft computing prediction/interpolation methodologies are employed to this end. Each methodology maps a small set of mechanical properties of a limited number of candidate liquid-container materials (inputs) to a single index cumulatively expressing environmental impact (output). Following a comparison of the results afforded by the different methodologies, a few novel polymeric materials are put forward, with each novel material exhibiting a lower environmental impact than the original materials. It is anticipated that such a methodology will have widespread applications to the development of novel sustainable packaging materials based on desired properties as well as on problem-specific requirements.

Keywords: material selection, sustainable product design, environmental impact, soft computing
PACS: 84.35; 07.05.Mb; 81.05.Lg

INTRODUCTION

During material selection, designers and engineers need to consider a non-negligible number of conflicting material parameters. These parameters include, among others, mechanical and physical properties, manufacturing aspects, cost, durability, recycling ability and impact on the environment. Owing to the multi-criteria nature of the material selection process as well as the wealth of candidate materials that can be used for the intended application, artificial and computational intelligence have been proposed in recent years for assisting as well as increasing the efficiency of optimal material selection. For instance, Bullinger et al. [1] developed a knowledge-based system for guiding design engineers through fiber-reinforced composite material selection/construction; Chen et al. [2] integrated an expert system with a decision-making support system for composite material selection in structural design, while, more recently, Zhou et al. [3] proposed a multi-objective optimization approach to material selection for sustainable products based on artificial neural networks and genetic algorithms.

In this piece of research, ideal – in terms of environmental impact – polymeric material(s) that can be used for manufacturing liquid containers are determined. Classical and soft computing prediction/interpolation methodologies are employed to this end, with a small set of mechanical properties of a limited number of candidate materials (inputs) being mapped to a single index cumulatively expressing environmental impact (output). Following a comparison of the results afforded by the different methodologies, a few novel polymeric materials are put forward, where each material exhibits lower environmental impact than the original materials.

METHODOLOGY

Two distinct methodologies are employed (a) for mapping the mechanical properties of known polymeric materials to their environmental impact, and (b) for discovering/developing materials that are superior to the original materials

in terms of environmental impact. These methodologies are General Regression Artificial Neural Networks (GRNN's) [4] and Polynomial Regression and Curve Fitting (PRCF) [5-6]. Both methodologies use

- ten candidate polymeric materials (Table 1),
- five mechanical properties of the materials (Table 2), and
- the environmental impact index of the materials. This index constitutes the weighted linear combination of four environmental impact categories that are measured throughout the product's life cycle (Table 3); uniform weights of 0.25 are used for each category.

Table 1. Materials

Polyethylene (PE)
Polyethylene naphthalate (PEN)
Polyethylene terephthalate (PET)
Polymethyl methacrylate (PMMA)
Polypropylene (PP)
Polystyrene (PS)
Polyvinyl Chloride (PVC)
Ultra-High Molecular Weight Polyethylene (UHMW-HDPE)
Polyamide (PA)
Polycarbonate (PC)

Table 2. Inputs

Young's Modulus
Yield Strength
Tensile Strength
Compressive Strength
Fatigue Strength

Table 3. Environmental Impact Categories

CO ₂ footprint, primary production
Water Usage, primary production
CO ₂ Footprint, Molding CO ₂
CO ₂ footprint, recycling

The leave-one-out cross-validation (LOOCV) [7] technique is employed for validating the two methodologies. Ten tests (as many as there are available candidate polymeric materials) are performed: for each test, nine materials of Table 1 are employed for training each methodology and the remaining material is used for testing.

General Regression Artificial Neural Networks

Artificial neural networks comprise densely interconnected nodes, partially simulating the structure (neurons, synapses etc.) of the brain. Artificial neural networks are especially adept at classification and prediction problems; they are capable of creating a model of the problem/system under investigation without the need to derive or mathematically describe the underlying (mathematical) relationships between the system inputs and outputs. Training consists of the repeated presentation of a sufficient number of representative input-output examples to the artificial neural network, during which the network weights are modified gradually until the correct outputs are derived from the corresponding inputs. A well-trained artificial neural network is capable of generalizing, i.e. providing correct outputs to novel inputs.

The GRANN is employed here. This comprises four layers of nodes (input, pattern, summation and output layers) whose size is fully determined by the problem characteristics (e.g. number of inputs, training patterns, outputs). For the present material selection task, four 5-9-2-1 GRNN's are created for every fold, with each GRNN receiving as inputs the values of the five mechanical properties of Table 2 normalized in the interval [0.1 0.9], and returning as output a single environmental impact category value (Table 3). The outputs of the four GRNN's are weighted and summed, thus providing the environmental impact index of the input material.

Polynomial Regression and Curve Fitting

Four polynomials are created, one for each environmental impact category. These take on the form

$$ENV_IMP_CAT(k) = P(1).X^N + P(2).X^{N-1} + \dots + P(N).X + P(N+1), \quad k = 1,2,3,4$$

where N is the degree (chosen such that ENV_IMP_CAT remains positive within the area defined by the nine materials of each fold) and $P(i)$, $i=1,2,\dots,N+1$ are the coefficients of the polynomial that best fits the data.

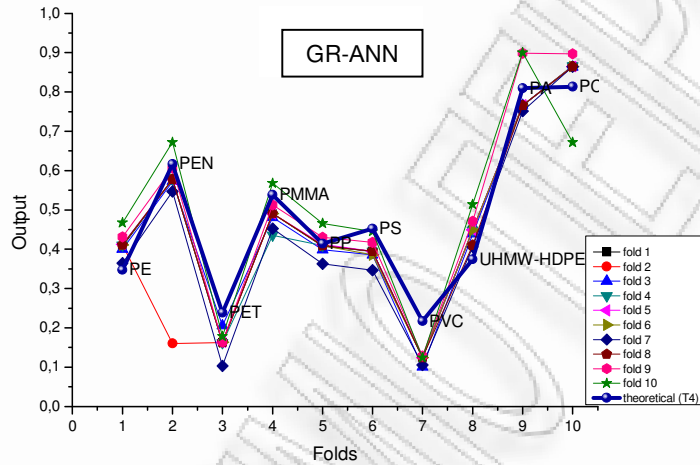


FIGURE 1. Environmental impact index; GRANN prediction.

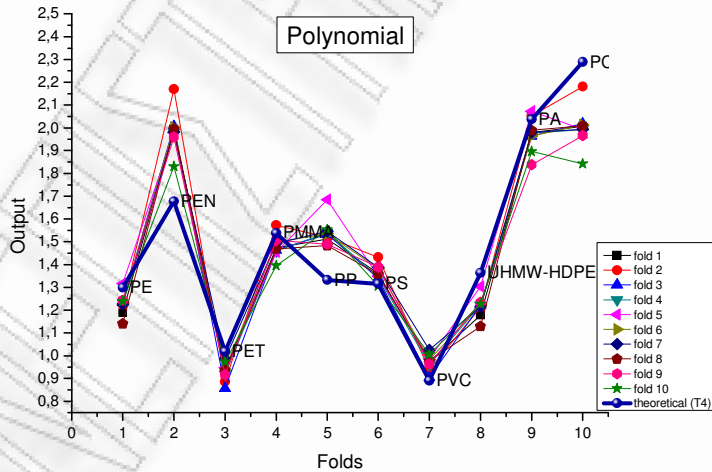


FIGURE 2. Environmental impact index; PRCF prediction.

RESULTS

Figures 1 and 2 illustrate the theoretical (according to CES Edu-Pack 2008 [8]) and predicted environmental impact indices of the ten materials, as output by the GRNN and the PRCF, respectively. The same results are quantified in Table 4, where the ranking afforded by the theoretical and predicted values are also shown.

TABLE 4. Final Material Rankings

Materials	Theoretical		GRANN		PRCF	
	Values	Ranking	Values	Ranking	Values	Ranking
PE	1.299	3	0.410	3	1.228	4
PEN	1.677	8	0.679	8	1.992	9
PET	1.018	2	0.247	2	0.931	1
PMMA	1.537	7	0.590	7	1.478	6
PP	1.532	5	0.427	5	1.541	7
PS	1.315	4	0.486	6	1.364	5
PVC	0.891	1	0.217	1	0.973	2
UHMW-HDPE	1.363	6	0.418	4	1.217	3
PA	2.037	9	0.900	10	1.977	8
PC	2.289	10	0.824	9	2.003	10

Overall, the GRNN provides a more consistent as well as reliable prediction of the environmental impact of novel materials than PRCF. Furthermore, the ranking of the 10 materials provided by the GRNN is in better agreement with the theoretical ranking than that provided by the PRCF (Table 4). As detailed in [9], “A classical polynomial regression surface may fit the n observed points very closely, but unless n is much larger than the number of coefficients in the polynomial, there is no assurance that the error for a new point taken randomly from the distribution $f(x,y)$ will be small”.

Evaluation of the total minima of the surfaces created by the two methodologies points towards novel liquid-container materials whose environmental impact index values are smaller than those of the original materials. By mapping back to the mechanical properties of these materials and determining known materials that are very similar to these materials in terms of mechanical properties, improvements to the known materials can be implemented for the production of more environmentally friendly liquid containers.

ACKNOWLEDGMENTS

The authors wish to thank the “Energy and Environmental Management” Postgraduate Program, offered jointly by the Department of Industrial Management & Technology, University of Piraeus and the Department of Chemical Engineering, National Technical University of Athens, for funding the participation of Mr N.Moustakas to the ICCMSE 2010 Conference.

REFERENCES

1. H. J. Bullinger, J. Warschat, D. Fischer, “Knowledge-based system for material selection for design with new materials”, *Knowledge-Based Systems*, vol 4, pp. 95–102, 1991.
2. J. L. Chen, S. H. Sun, W.C. Hwang, “An intelligent database system for composite material selection in structural design”, *Expert Systems with Applications*, vol. 6, pp. 159–68, 1993.
3. C. C. Zhou, G. F. Yin, X. B. Hu, “Multi-objective optimization of material selection for sustainable products: Artificial neural networks and generic algorithm approach”. *Materials and Design*, vol. 30, pp. 1209-1215, 2009.
4. D. F. Specht, “Probabilistic Neural Networks and the Polynomial Adaline as Complementary Techniques to Classification”, *IEEE Transactions on Neural Networks*, vol. 1, pp. 111-121, 1990.
5. N. R. Draper, H. Smith, “Applied Regression Analysis, 3rd Ed.”, John Wiley & Sons, New York, 1998.
6. C. Daniel, F. S. Wood, “Fitting Equations to Data”, John Wiley & Sons, New York, 1980.
7. R. Picard, D. Cook, “Cross-Validation of Regression Models”, *Journal of the American Statistical Association*, vol. 79, pp. 575–583, 1984.
8. CES Edu-Pack 2008, Granta Design Limited, Cambridge, United Kingdom, 2008.
9. D. F. Specht, “A General Regression Neural Network”. *IEEE Transactions on Neural Networks*, vol. 2, pp. 568-576, 1991.