

Višeparameterska i višeskalarna tribološka analiza tankih filmova primjenom pretražne mikroskopije i strojnog učenja

Božičević, Dorotea

Master's thesis / Diplomski rad

2024

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **University of Rijeka, Faculty of Engineering / Sveučilište u Rijeci, Tehnički fakultet**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://um.nsk.hr/um:nbn:hr:190:303814>

Rights / Prava: [Attribution 4.0 International](#) / [Imenovanje 4.0 međunarodna](#)

Download date / Datum preuzimanja: **2024-08-28**



Repository / Repozitorij:

[Repository of the University of Rijeka, Faculty of Engineering](#)



SVEUČILIŠTE U RIJECI

TEHNIČKI FAKULTET

Sveučilišni diplomski studij strojarstva

Diplomski rad

**VIŠEPARAMETARSKA I VIŠESKALARNA TRIBOLOŠKA
ANALIZA TANKIH FILMOVA PRIMJENOM PRETRAŽNE
MIKROSKOPIJE I STROJNOG UČENJA**

Rijeka, srpanj 2024.

Dorotea Božičević

0316000935

SVEUČILIŠTE U RIJECI

TEHNIČKI FAKULTET

Sveučilišni diplomski studij strojarstva

Diplomski rad

**VIŠEPARAMETARSKA I VIŠESKALARNA TRIBOLOŠKA
ANALIZA TANKIH FILMOVA PRIMJENOM PRETRAŽNE
MIKROSKOPIJE I STROJNOG UČENJA**

Mentor: prof. dr. sc. Saša Zelenika

Komentor: dr. sc. Marko Perčić

Rijeka, srpanj 2024.

Dorotea Božičević

0316000935

Zavod: Zavod za konstruiranje
Predmet: Precizne konstrukcije i tehnologija mikrosustava

ZADATAK ZA DIPLOMSKI RAD

Pristupnik: **Dorotea Božičević (0316000935)**
Studij: Sveučilišni diplomski studij strojarstva (2100)
Modul: Konstruiranje i mehatronika (2111)
Zadatak: **Višeparameterska i višeskalarna tribološka analiza tankih filmova primjenom pretražne mikroskopije i strojnog učenja / Multiparametric and multiscale tribological analyses of thin films by using scanning probe microscopy and machine learning**

Opis zadatka:

Na temelju dostupne literature istražiti i opisati eksperimentalne metode mjerenja trenja na nano- i mikrometarskoj razini. Detaljno opisati i primijeniti metode kalibracije osjetnika pretražnog mikroskopa (engl. Scanning Probe Microscopy - SPM) za potrebe dobivanja vrijednosti sile trenja u tim područjima korištenjem metode mjerenja poprečne sile (engl. Lateral Force Microscopy - LFM). Opisati i primijeniti metode dizajna eksperimenta (engl. Design of Experiments - DoE) za određivanje mjernih točaka u višedimenzijском eksperimentalnom prostoru određenom granicama varijabilnosti promjenjivih procesnih parametara: normalne sile, brzine klizanja i temperature. Na uzorcima tankih filmova dobivenim taloženjem pulsirajućim laserom (Pulsed Laser Deposition - PLD) i/ili taloženjem atomskih slojeva (Atomic Layer Deposition - ALD), izmjeriti silu trenja u nano- i mikrometarskom području u točkama dobivenim DoE metodom. Dobivene rezultate obraditi korištenjem strojnog učenja, detaljno opisati relevantne statističke pokazatelje kvalitete dobivenih rezultata te na neovisnom skupu mjernih točaka vrednovati prediktivne mogućnosti korištenih modela.

Rad mora biti napisan prema Uputama za pisanja diplomskih / završnih radova koje su objavljene na mrežnim stranicama studija.

Zadatak uručen pristupniku: 20.03.2024.

Mentor:
prof. dr. sc. Saša Zelenika

Komentor:
dr. sc. Marko Perčić

Predsjednik povjerenstva za
diplomski ispit:
izv. prof. dr. sc. Igor Bonefačić

IZJAVA

Izjavljujem da sam diplomski rad „Višeparametarska i višeskalarna analiza triboloških svojstava tankih filmova primjenom pretražne mikroskopije i strojnog učenja“ izradila samostalno te sukladno članku 9. „Pravilnika o diplomskom radu, diplomskom ispitu i završetku sveučilišnih diplomskih studija“ i sukladno „Uputama za izradu i samoarhiviranje završnog/diplomskog rada“ Tehničkog fakulteta Sveučilišta u Rijeci.

Rijeka, srpanj 2024.

Dorotea Božičević

Zahvaljujem se mentoru prof. dr. sc. Saši Zeleniki na svim stručnim savjetima koji su mi pomogli u izradi ovog rada. Također, hvala na svim ispravcima i komentarima koji su doprinijeli kvaliteti ovog rada.

Isto tako, zahvaljujem se komentoru dr. sc. Marku Perčiću na svom prenesenom znanju koje mi je pomoglo u izradi ovog rada, kao i na strpljenju i vremenu za moje brojne upite.

Najveću i posebnu zahvalnost upućujem svojoj majci Senki, koja je uvijek bila uz mene, koja me je uvijek podržavala i upućivala na pravi put. Hvala ti što si mi pomogla postati osobom kakva sam danas.

I na kraju, beskrajno hvala upućujem svojem Karlu, na svoj pruženoj ljubavi, razumijevanju i podršci. Hvala ti na radosti i smijehu kojim si me svakodnevno ispunjavao u lijepim, ali i u teškim trenucima tijekom studija i što si me bodrio kada mi je bilo najpotrebnije.

SADRŽAJ

1.	UVOD.....	1
2.	EKSPERIMENTALNE METODE MJERENJA TRENJA NA MIKRO- I NANORAZINI	3
2.1.	SPM metode mjerenja trenja na mikro- i nanorazini.....	4
2.1.1.	Mikroskopija atomskih sila	4
2.1.2.	Mikroskopija poprečnih sila.....	6
2.2.	Alternativne metode mjerenja trenja na mikro i nanorazini.....	9
2.2.1.	Nanoindenter	9
2.2.2.	Mikrotribometar.....	10
3.	METODE DIZAJNA EKSPERIMENTA.....	11
3.1.	Centroidalna Voronoijska teselacija (CVT).....	12
3.2.	Latinizirana centroidalna Voronoijska teselacija	13
3.3.	Monte Carlo	14
4.	OPIS EKSPERIMENTA	15
4.1.	Osjetnik.....	16
4.2.	Kalibracija normalne sile	20
4.3.	Kalibracija poprečne sile.....	27
4.4.	Sila adhezije	36
5.	REZULTATI EKSPERIMENTALNIH MJERENJA	37
5.1.	Kalibracijska mjerenja	37
5.2.	Mjerenje adhezije	40
5.3.	Sila trenja	41
6.	ANALIZA PODATAKA EKSPERIMENTALNIH MJERENJA	44
6.1.	Testni podatci – eksperimentalna mjerenja.....	47
6.2.	Priprema podataka za strojno učenje i umjetnu inteligenciju.....	50
6.2.1.	Distribucija mjerenja.....	52
6.2.2.	Binarno kodiranje	53
6.3.	Metrike.....	54
6.5.	Modeli strojnog učenja	56
6.5.1.	Linearna regresija (engl. <i>Linear Regression</i>)	56
6.5.2.	Višeslojni perceptron (engl. <i>Multilayer Perceptron</i>).....	57
6.5.3.	Šuma i stabla nasumičnog odlučivanja (engl. <i>Random Decision Trees and Forest</i>).....	57
6.5.4.	Metoda potpornih vektora (engl. <i>Support Vector Machines - SVM</i>).....	58
6.5.5.	Usporedba modela strojnog učenja	58
6.6.	Modeli umjetne inteligencije.....	64
6.6.1.	Genetsko programiranje – simbolička regresija (engl. <i>Genetic programming - symbolic regression</i>)	65

6.6.2.	Gramatička evolucija (engl. <i>Grammatical evolution</i>).....	66
6.6.3.	Selekcija potomaka (engl. <i>Offspring selection genetic programming</i>).....	66
6.6.4.	Dobno slojevita struktura populacije (engl. <i>Age-layered population structure - ALPS</i>).....	66
6.6.5.	Usporedba modela umjetne inteligencije	67
7.	REZULTATI ANALIZE PODATAKA EKSPERIMENTALNIH MJERENJA.....	70
7.1.	Modeli strojnog učenja	70
7.2.	Modeli umjetne inteligencije.....	74
8.	ZAKLJUČAK.....	78
	LITERATURA.....	80
	POPIS SLIKA	85
	POPIS TABLICA.....	88
	SAŽETAK.....	90
	SUMMARY	91

1. UVOD

Trenje, sila koja se opire relativnom gibanju tijela u kontaktu i povezani fenomeni opsežno se istražuju zbog svoje važnosti, ne samo u svakodnevnom životu, nego i u naprednim tehnologijama. Na makroskopskoj razini sila trenja između kliznih tijela ovisi o njihovoj površinskoj hrapavosti. Međutim, istraživanja površina na atomskoj razini ukazuju na stvarno podrijetlo sile trenja, odnosno da na silu trenja utječu adhezijske sile, kapilarne sile, elastičnost površina u dodiru, topografija, temperatura i mnogi drugi čimbenici [1].

Proučavanje interakcija između dviju površina u kontaktu i relativnom gibanju datira još od najranijih civilizacija, od kamenog doba, zatim egipatskog, rimskog i grčkog razdoblja sve do civilizacija dalekog istoka i Južne Amerike. Čovjek je od trljanja dvaju komada drveta, preko izuma kotača i podmazivanja kliznih staza za velike kamene blokove u Egiptu, pa sve do sustavnijeg pogleda na trenje kod renesansnog mislioca Leonarda da Vincija, koji je prvi put uveo koncept koeficijenta trenja kao omjera sile trenja i normalnog opterećenja, zatim Amontosa, koji je otkrio da je sila trenja izravno proporcionalna normalnom opterećenju te da ne ovisi o prividnoj površini kontakta, došao do spoznaje o važnosti trenja za ekonomiju i potrošnju energije [2]. Od početka 20. stoljeća, odnosno od ogromnog industrijskog rasta koji je doveo do potražnje za boljom tribologijom¹, znanje u svim područjima tribologije se iznimno proširilo. Iako npr. bez trenja ne bi funkcionirale kočnice, kvačila, pogonski kotači na vlakovima i automobilima, zbog trenja se zupčanci, ležajevi i brtve kvare i troše. Prema statistikama, trenje, a time i inducirano trošenje, čine veliki udio globalne potrošnje energije i kvarova komponenti; trenje troši otprilike jednu trećinu svjetske primarne energije, trošenje uzrokuje kvar na približno 80% dijelova strojeva, a svake godine ekonomski gubici uzrokovani s ova dva čimbenika iznose otprilike 2-7% bruto domaćeg proizvoda (BDP) različitih država [3].

Cilj istraživanja u tribologiji je smanjenje i eliminacija gubitaka kao rezultat trenja i trošenja na svim razinama tehnologije gdje je uključeno trljanje površina s ciljem veće učinkovitosti postrojenja, boljih radnih svojstava, manje kvarova i značajnih ušteda [2].

Nadalje, mehanizme međudjelovanja dvaju čvrstih tvari u kontaktu tijekom relativnog kretanja, u rasponu od atomske do mikroskale, treba razumjeti kako bi se razvilo temeljno razumijevanje adhezije, trenja, trošenja, udubljenja i procesa podmazivanja. Zahvaljujući novijim

¹ Tribologija - znanstvena disciplina koja proučava zbivanja na površinama dvaju tijela u dodiru ili relativnom gibanju (triboelementi), ponajprije trenje, trošenje materijala i učinke podmazivanja [4].

eksperimentalnim metodama poput uređaja površinskih sila (engl. „SFA“ – *Surface Force Apparatus*), mikroskopa atomskih sila (engl. „AFM“ – *Atomic Force Microscope*), te mikroskopa sile trenja (engl. „FFM“ – *Friction Force Microscope*) dobivaju se podatci o stanju površine materijala na mikro- i nanorazini [2].

Ovaj je rad podijeljen u dva dijela; prvi dio predstavlja eksperimentalni dio koji započinje u sljedećem poglavlju gdje su opisane neke od eksperimentalnih metoda mjerenja trenja na mikro- i nanorazini. Zatim je detaljnije opisana mikroskopija atomskih sila u modalitetu rada mjerenja poprečne sile jer je ta metoda korištena u eksperimentalnim mjerenjima. Također je detaljno opisana metoda kalibracije osjetnika pretražnog mikroskopa koja je potrebna za dobivanje kvantitativnih vrijednosti signala, odnosno sile trenja. Eksperimentalna mjerenja sile trenja na mikro- i nanorazini vršena su na dvama uzorcima tankih filmova: aluminijevom oksidu (Al_2O_3) te nehrđajućem čeliku (SS) u eksperimentalnim točkama definiranim trima promjenjivim parametrima: normalnom silom $F_N = 10 \dots 2800$ nN, brzinom klizanja $v = 5 \dots 3000$ nm/s i temperaturom $t = 20 \dots 80$ °C. Pedeset mjernih točaka definirano je centroidalnom Voronoijevom teselacijskom (CVT) DoE metodom u višedimenzijском prostoru promjenjivih parametara, a mjerenje u svakoj točki ponovljeno je pet puta, što sveukupno daje 500 mjerenja.

Drugi dio rada započinje u šestom poglavlju i odnosi se na analizu podataka dobivenih eksperimentalnim mjerenjima. Nakon definiranja postupaka i pripreme korištenja eksperimentalno dobivenih podataka u modelima strojnog učenja i umjetne inteligencije, definirani su metrički parametri ocjenjivanja koji su korišteni za usporednu procjenu i validaciju kvalitete korištenih prediktivnih modela. To je dalo osnovu za implementaciju razmatranih modela strojnog učenja i umjetne inteligencije za određivanje funkcijskih korelacija između vrijednosti sile trenja na nanorazini i odgovarajućih utjecajnih parametara. Doista, iz razmatranog 4D eksperimentalnog prostora ne može se inače dobiti strukturni uvid u analizirani fenomen.

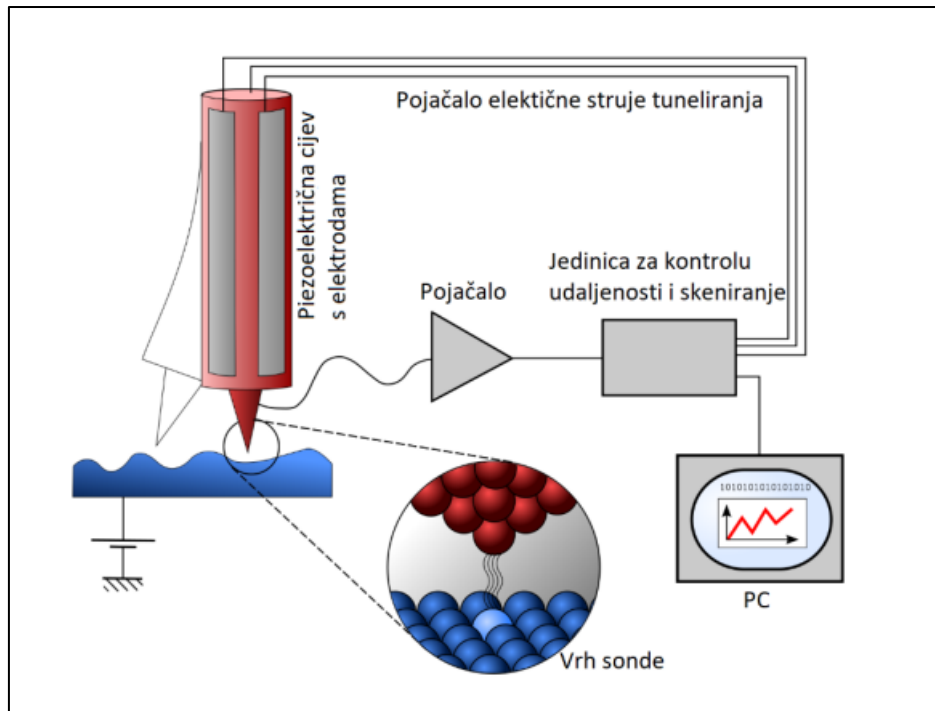
2. EKSPERIMENTALNE METODE MJERENJA TRENJA NA MIKRO- I NANORAZINI

Mikro/nanotribološke studije potrebne su za razvoj temeljnog razumijevanja fenomena između površina u malom mjerilu (mikro- i nanorazina) i za proučavanje međufaznih fenomena u mikro- i nanostrukturama koje se koriste u sustavima magnetske pohrane, MEMS-ima, NEMS-ima i drugim industrijskim primjenama. Komponente koje se koriste u mikro- i nanostrukturama su vrlo lagane (veličine nekoliko mikrograma) i rade pod vrlo malim opterećenjima (reda od nekoliko mikrograma do nekoliko miligrama). Kao rezultat toga, trenje i trošenje (na nanoskali) malo opterećenih mikro/nanokomponentata jako ovise o površinskim interakcijama (nekoliko atomskih slojeva) [2].

Proučavanje mikro/nanotribologije u velikoj mjeri primjenjuje nove metode temeljene na pretražnoj mikroskopiji s osjetnikom (engl. *Scanning Probe Microscope* – SPM). Pretražni mikroskop s osjetnikom (SPM) je instrument koji se koristi za proučavanje površina na mikro- i nanorazini. SPM oblikuje slike površina pomoću fizičke sonde koja dodiruje i pretražuje („skenira“) površinu uzorka uz istovremeno prikupljanje podataka, obično dobivenih kao dvodimenzijaska mreža točaka podataka prikazanih kao računalna slika. Prvi SPM bio je pretražni tunelirajući mikroskop (STM) koji su razvili Gerd Binnig i Heinrich Rohrer u IBM-ovom istraživačkom laboratoriju u Zürichu 1982. godine. Bila je to prva tehnologija za koju je prepoznato da omogućuje atomske razlučivosti te je 1986. godine nagrađena Nobelovom nagradom iz fizike [5].

Pretražni tunelirajući mikroskop

Pretražni tunelirajući mikroskop (engl. *Scanning tunneling microscope* – STM) zasniva se na električnoj interakciji između dvije metalne elektrode (osjetnika/sonde i uzorka), kako je prikazano na Slici 2.1. Kada se između osjetnika i uzorka narine napon ($U < 1$ V), mala električna struja ($I < 1$ nA) prolazi kroz veoma mali vakuumski prostor (< 1 nm), a njezin se iznos bilježi preko vrha sonde te prosljeđuje pojačalu električne struje. Tako pojačani signal se obrađuje, a konačna slika vidljiva je na zaslonu računala. Protjecanje struje događa se zbog kvantno- mehaničkog efekta tuneliranja elektrona. Nažalost, to znači da površina uzorka mora biti vodljiva ili poluvodička, što ograničava materijale koji se mogu proučavati. Međutim, upravo to ograničenje dovelo je do izuma prvog mikroskopa atomske sile (AFM) [6].

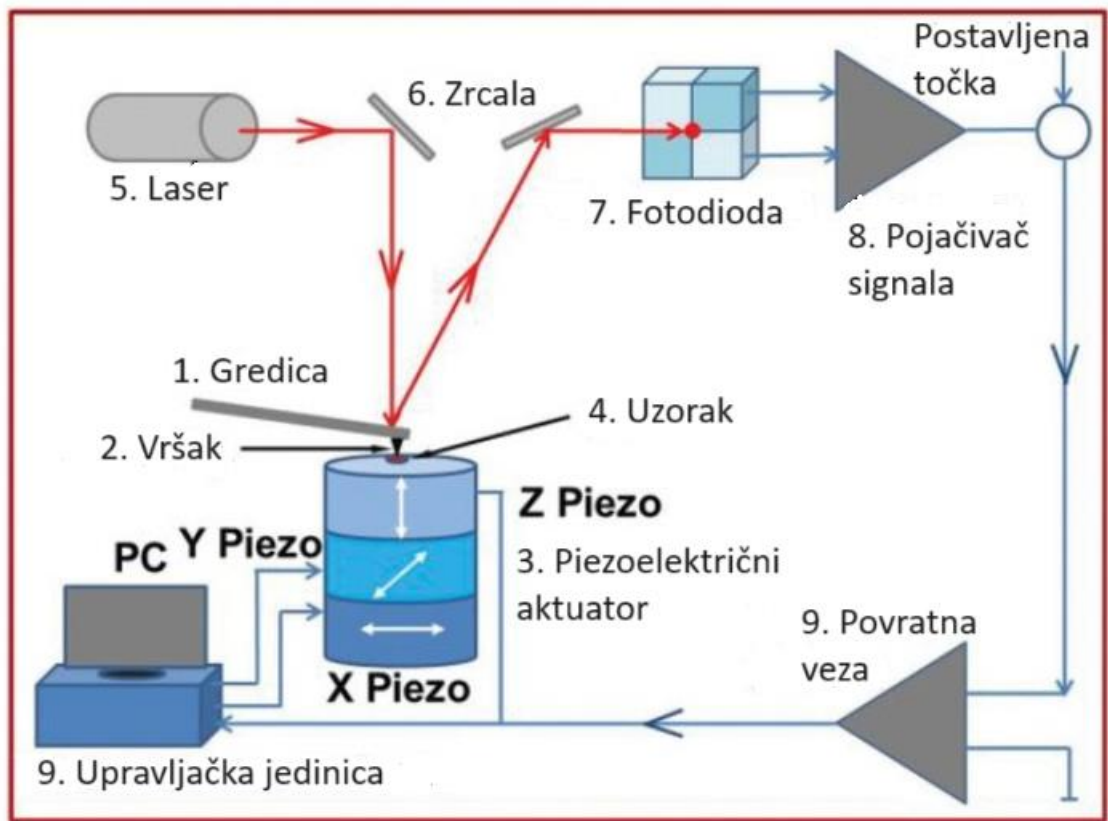


Slika 2.1: Princip rada pretražnog tunelirajućeg mikroskopa [6].

2.1. SPM metode mjerenja trenja na mikro- i nanorazini

2.1.1. Mikroskopija atomskih sila

Mikroskopija atomskih sila (engl. *Atomic force microscopy* - AFM), kao i većina konstrukcijskih inačica SPM-a, koristi vrlo oštar vršak za ispitivanje i mapiranje topologije površine. Kod AFM-a nema zahtjeva da uzorak bude vodljiv, niti je potrebno mjeriti struju između osjetnika i uzorka da bi se proizvela slika. Doista, AFM koristi vršak na kraju mikroproizvedene konzole s niskom konstantom opruge za mjerenje sila između osjetnika i uzorka dok osjetnik pritišće (bilo kontinuirano ili povremeno) uzorak (Slika 2.2). Sile između osjetnika i površine uzorka uzrokuju savijanje ili otklon konzole dok osjetnik prelazi preko uzorka, a to se sve prati laserskom zrakom koja se reflektira sa stražnje strane osjetnika. Reflektirani laserski snop se prati fotodetektorom koji prati bočno i vertikalno gibanje osjetnika. Osjetljivost detektora se mora kalibrirati nanometarskom točnošću kako bi gibanje osjetnika odgovaralo naponu koji se mjeri detektorima [5]. Kalibracija osjetnika detaljno je opisana u potpoglavljima 4.2 i 4.3.



Slika 2.2: Pojednostavljeni prikaz dijelova AFM-a [7]

Nadalje, AFM ima tri režima rada: kontaktni, vibrirajući i beskontaktni. U kontaktnom modu osjetnik je cijelo vrijeme skeniranja u dodiru s uzorkom, kako je prikazano na Slici 2.3.



Slika 2.3: Kontaktni režim rada AFM-a [8]

U vibrirajućem režimu rada osjetnik oscilira amplitudom od 20-100 nm pri svojoj rezonantnoj frekvenciji te lagano „lupka“ po površini uzorka tijekom skeniranja, kako je prikazano na Slici 2.4.



Slika 2.4: Vibrirajući (engl. Tapping) režim rada AFM-a [8]

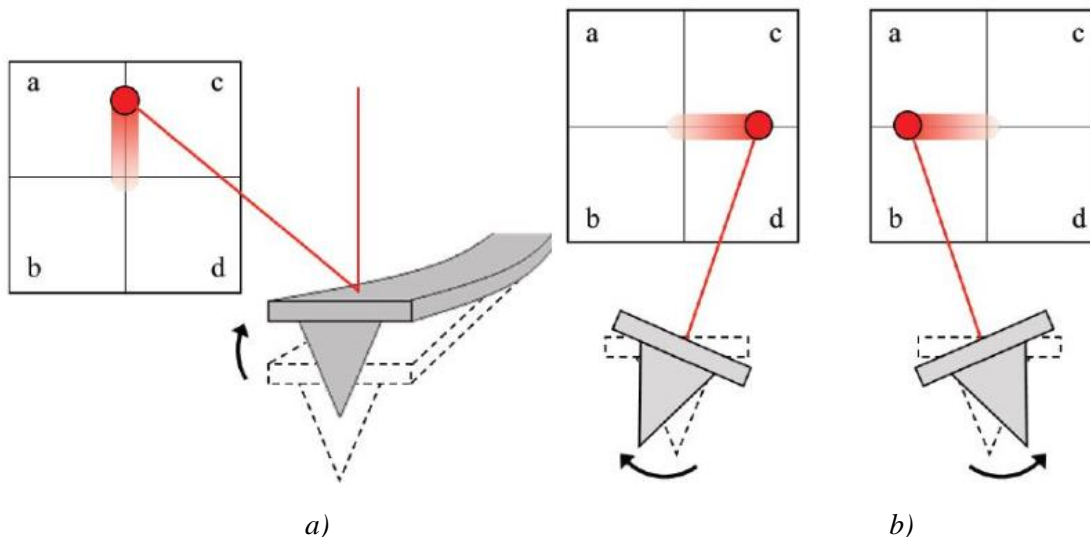
Tijekom beskontaktnog režima rada osjetnik ne dolazi u kontakt s površinom uzorka, već tijekom skeniranja oscilira iznad sloja adsorbirane tekućine na površini uzorka (Slika 2.5).



Slika 2.5: Beskontaktni režim rada AFM-a [8]

2.1.2. Mikroskopija poprečnih sila

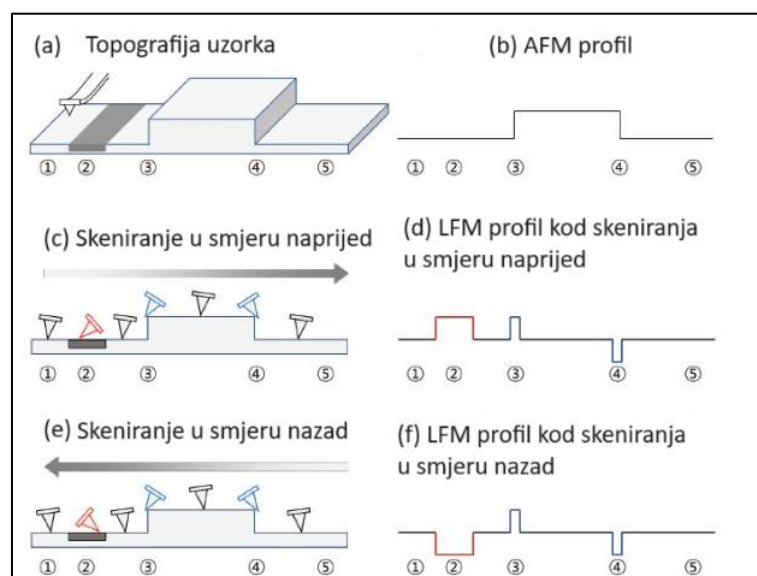
Princip rada mikroskopije poprečnih sila (engl. *Lateral Force Microscopy* – LFM) temelji se na kontaktnom režimu rada AFM-a. Međutim, dok se u kontaktnom načinu rada mjeri savijanje osjetnika u normalnom (okomitom) smjeru za prikupljanje topografskih podataka, LFM snima normalni otklon za topografske podatke te torziju osjetnika u poprečnom smjeru za podatke o trenju (Slika 2.6). Torzija osjetnika rezultat je sile trenja koja djeluje na osjetnik dok on pretražuje površinu uzorka [9].



Slika 2.6: Shematski prikaz položaja točke laserske zrake na fotodetektoru zbog a) normalnog otklona osjetnika za topografsko snimanje i b) torzije osjetnika za LFM snimanje [9].

Nadalje, Slika 2.7 prikazuje ravni uzorak s okomitom izbočinom kao jedinom topografskom značajkom na inače glatkoj površini. Rubovi izbočine označeni su s (3) i (4). Sivo osjenčano područje označeno brojem (2) predstavlja drugačiji sastav materijala s relativno visokim koeficijentom trenja. Visinski profil AFM-a koji odgovara vertikalnom otklonu osjetnika

prikazan je na Slici 2.7 (b). Slike 2.7 (c) i (e) prikazuju ponašanje osjetnika dok nailazi na izbočinu, kao i područje s različitim skeniranjem slijeva na desno, tj. naprijed (engl. *Trace*) odnosno zdesna nalijevo, tj. natrag (engl. *Retrace*). Profili LFM signala u smjeru skeniranja naprijed i natrag prikazani su na Slici 2.7 (d) odnosno (f). Promjene u torziji osjetnika zbog promjene u sili trenja između AFM vrška i uzorka označene su crvenom bojom u području (2). Ovo područje (2) ne razlikuje se fizički od područja (1) u signalu AFM-a. Međutim, postoji jasna razlika u LFM signalu. Prilikom skeniranja prema naprijed, povećanje relativnog koeficijenta trenja uzrokovat će nagninjanje konzole na desnu stranu, čime će se povećati LFM signal. Nasuprot tome, kada je smjer skeniranja obrnut, konzola će se nagnuti na lijevu stranu, što dovodi do smanjenja LFM signala u ovom području. Nadalje, područja (3) i (4) na Slici 2.7 označavaju rubove izbočine, koja utječe na LFM signal zbog promjene visine površine uzorka. Tijekom skeniranja, izbočina sa strmim rubom će uvrnuti konzolu. Ovo uvijanje rezultira povećanjem bočnog signala kao što se vidi u točki (3) na Slici 2.7 (d) i (f). Slično, LFM signal se smanjuje kada osjetnik skenira unatrag, kao što je prikazano u točki (4). Međutim, treba napomenuti da LFM signal induciran topografijom u područjima (3) i (4), označenim plavom bojom, ima isti smjer nagiba osjetnika bez obzira na smjer skeniranja, što rezultira vrijednostima signala (*Trace* i *Retrace*) koje su zrcaljane oko signala vrijednosti nula. Stoga je moguće razlikovati LFM signal uzrokovan topografskim značajkama i LFM signal uzrokovan trenjem usporedbom LFM skeniranja naprijed i nazad. Štoviše, učinak topografije može se minimizirati oduzimanjem LFM signala naprijed od LFM signala unatrag ili obrnuto [9].



Slika 2.7: Prikaz pomaka konzole i LFM signala uzrokovanog topografskim značajkama i promjenom materijala [9]

Uz navedene tehnološke značajke, važno je još ovdje sažeti i opće prednosti i nedostatke SPM tehnologija.

Prednosti pretražne mikroskije s osjetnikom su [10]:

- razlučivost na mikro/nanorazini;
- nedestruktivna eksperimentalna metoda;
- omogućuje stvaranje topografije površine uzorka;
- stvara slike u stvarnom vremenu;
- ima široku primjenu: inženjerstvo materijala, nanotehnologija, kemija površina, itd.

Nedostatci pretražne mikroskije s osjetnikom su [10]:

- osjetljivost na vibracije i vanjske utjecaje;
- vršak osjetnika se s vremenom troši;
- potrebna je priprema uzoraka za ispitivanje;
- dugotrajan proces dobivanja slike;
- za korištenje zahtijeva određenu razinu znanja i iskustva;
- visoka cijena instrumenata.

2.2. Alternativne metode mjerenja trenja na mikro i nanorazini

Alternativne metode mjerenja trenja na mikro- i nanorazini su metode koje ne koriste osjetnik pretražnog mikroskopa (SPM). U nastavku su navedene dvije metode, a to su metoda mjerenja trenja pomoću nanoindentera (nanoutiskivača) te metoda mjerenja trenja pomoću mikrotribometra.

2.2.1. Nanoindenter

Nanoindenter je uređaj koji koristi nanoutiskivanje, odnosno nedestruktivnu tehniku za procjenu mehaničkih svojstava vrlo malog volumena materijala deformirajući ga utiskivačem. Glavna komponenta nanoindentera je mala sonda koja sadrži kalibrirani vrh utiskivača. Vrh utiskivača obično je izrađen od dijamanta, koji ima različite oblike, uključujući ravne, sferne, piramidalne i klinaste. Većina konvencionalnih nanoindentera su instrumenti s kontrolom opterećenja, pri čemu se vrh dovodi u kontakt s površinom u prisutnosti unaprijed definiranog opterećenja. Nakon kontakta s uzorkom, opterećenje se povećava i vrh prodire u materijal. Mehanička svojstva materijala mjere se na temelju kontaktne površine između vrha i uzorka, primijenjene sile nanoindentera i dubine utiskivanja [11].

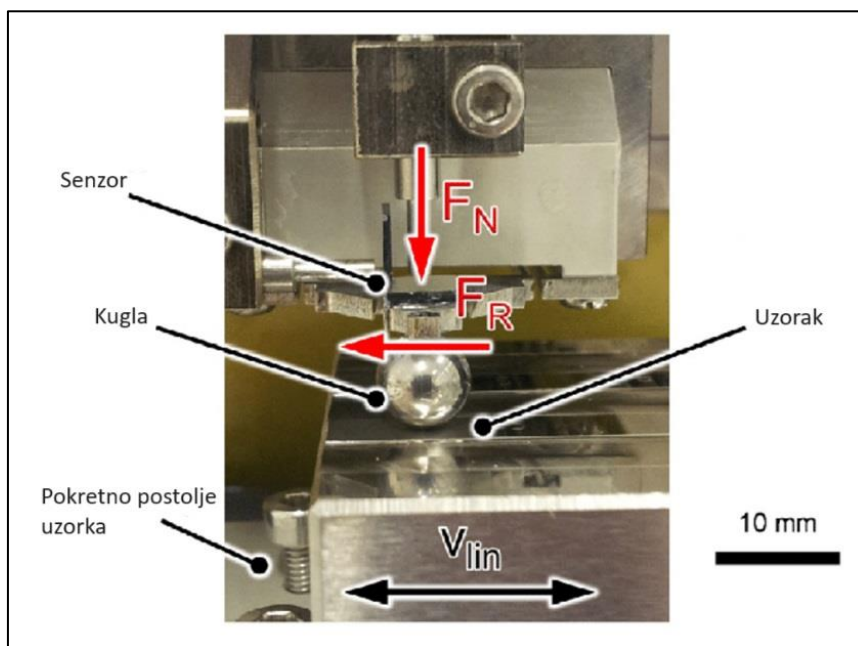
Jedan takav uređaj nalazi se i u Laboratoriju za precizno inženjerstvo i tehnologiju mikro- i nanosustava Centra za mikro- i nanoznanosti i tehnologije Sveučilišta u Rijeci, a to je Nanoindenter G200, proizvođača Keysight Technologies (Slika 2.8). Nanoindenter G200 je jedan od najpreciznijih uređaja na svijetu za provođenje mehaničkih eksperimenata na mikrometarskoj razini te ima opciju mjerenja u modalitetu poprečne sile (LFM modu). Za ispitivanje sile trenja na površinama uređaj ima razlučivost od 2 mN, te može narinuti maksimalnu bočnu silu od 500 mN [12].



Slika 2.8: Nanoindenter Keysight G200 [12]

2.2.2. Mikrotribometar

Središnji aspekt mikrotribologije je mjerenje trenja karakterizacijom sile između dvije površine u relativnom gibanju. Mikrotribometrija uključuje klizanje sferne ili cilindrične sonde preko površine materijala i mjerenje sile trenja i zakretnog momenta. Na Slici 2.9 prikazan je mikrotribometar TETRA BASALT u konfiguraciji s kuglom na ploči (uzorku). Relativno gibanje između sfere i površine uzorka osigurava se klipnim kretanjem motoriziranog postolja koje nosi uzorak. Instrument omogućuje istovremeno bilježenje primijenjene normalne sile F_N i sile trenja F_R koja je rezultat relativnog gibanja kugle i površine koja se ispituje, pri čemu se F_N i F_R neizravno određuju mjerenjem otklona konzole pomoću optičkih senzora [13].



Slika 2.9: TETRA BASALT mikrotribometar [13]

Prednosti alternativnih metoda mjerenja trenja na mikro- i nanorazini su [15]:

- razlučivost na mikrorazini;
- može se proučavati tribologija raznih materijala.

Nedostatci alternativnih metoda mjerenja trenja na mikro- i nanorazini su [15]:

- visoka cijena instrumenata;
- osjetljivost na vanjske utjecaje;
- mala kontaktna površina za ispitivanje.

3. METODE DIZAJNA EKSPERIMENTA

Nakon što su u prethodnom poglavlju opisane eksperimentalne metode mjerenja sile trenja na mikro- i nanorazini, u ovom će se poglavlju opisati metode dizajna eksperimenta unutar zadanih granica pojedinih promjenjivih parametara mjerenja: normalne sile, brzine klizanja i temperature.

Dizajn eksperimenta (engl. *Design of Experiments* - DoE) je matematička metodologija koja se koristi za planiranje i provođenje eksperimenata kao i analiziranje i tumačenje podataka dobivenih eksperimentima. To je grana primijenjene statistike koja se koristi za provođenje znanstvenih istraživanja sustava, procesa ili proizvoda u kojima se manipulira ulaznim (kontrolnim) varijablama kako bi se istražili njihovi učinci na izmjerene izlazne (zavisne) varijable [16].

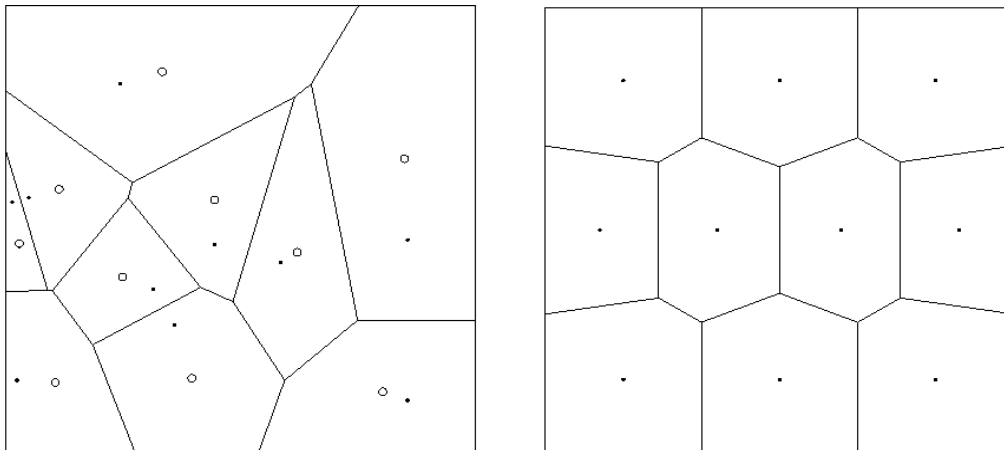
S obzirom da je trenje nelinearna stohastička pojava s izraženom vremenskom, prostornom i temperaturnom varijabilnošću, u ovom je radu pomoću pristupa strukturiranog dizajna eksperimenata (DoE) određena raspodjela mjernih točaka u razmatranom eksperimentalnom prostoru. Nadalje, parametri koji utječu na trenje na mikro- i nanorazini koji se istodobno razmatraju u ovom radu i njihovi rasponi vrijednosti su:

- normalna sila $F_N = 10 \dots 2800$ nN
- brzina klizanja $v = 5 \dots 3000$ nm/s
- temperatura $t = 20 \dots 80$ °C.

Standardne DoE metode kao što su faktorski dizajn, linearna regresija, Monte Carlo itd. nisu prikladne da bi se dobio detaljan uvid u proučavani višedimenzijski stohastički fenomen [17]. Doista, ti su pristupi obično usmjereni na konvencionalne industrijske prakse gdje su rezultati općenito ograničeni na vrijednosti kontrolnih varijabli koje izazivaju lokalne ekstreme zavisne varijable. Međutim, nedavna istraživanja ukazuju na značajne prednosti u pogledu svojstava popunjavanja prostora pristupa gdje se DoE provodi korištenjem uzorkovanja centroidalne Voronoijeve teselacije (CVT) [17]. U nastavku je, stoga, opisana CVT metoda dizajna eksperimenta. Također su opisane i latinizirana CVT DoE metoda te Monte Carlo DoE metoda radi usporedbe dobivenih mjernih točaka u razmatranom eksperimentalnom prostoru.

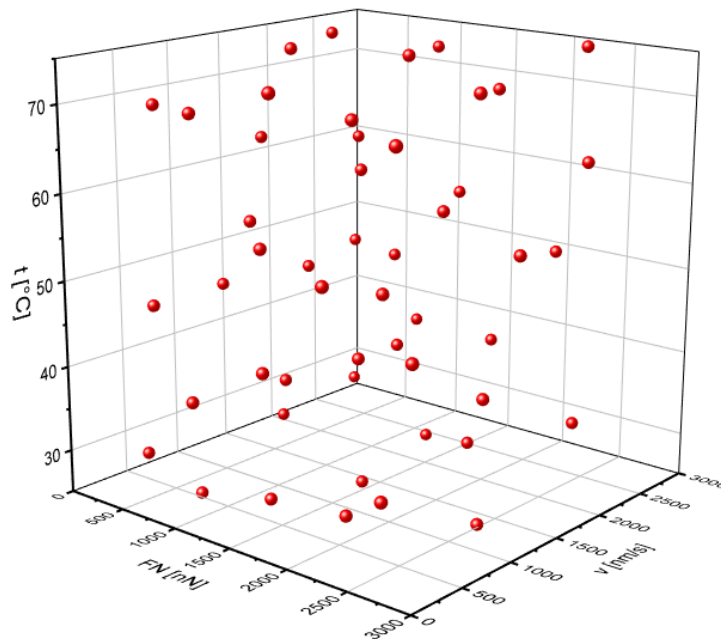
3.1. Centroidalna Voronoijska teselacija (CVT)

Voronoijska teselacija² je podjela prostora na geometrijska područja temeljena na udaljenosti do k unaprijed određenih točaka koji se često nazivaju „generatori“. Ako su „generatori“ također središta svake regije (i prostora koji je ograničen), tada je Voronoijska teselacija CVT. Nadalje, Voronoijske teselacije predstavljaju raspodjelu eksperimentalnog prostora. Slika 3.1 a) prikazuje Voronoijsku teselaciju, a b) centroidalnu Voronoijsku teselaciju [18].



Slika 3.1: a) Voronoijska teselacija; b) centroidalna Voronoijska teselacija [19]

Nadalje, na Slici 3.2 prikazano je 50 mjernih točaka u prostoru promjenjivih parametara dobivenih CVT DoE metodom [20], [21], [22].



Slika 3.2: 50 mjernih točaka – CVT DoE metoda

² Teselacija - mozaična podjela ravnine u diskretne plošne elemente koji se dodiruju i prekrivaju ravninu [23].

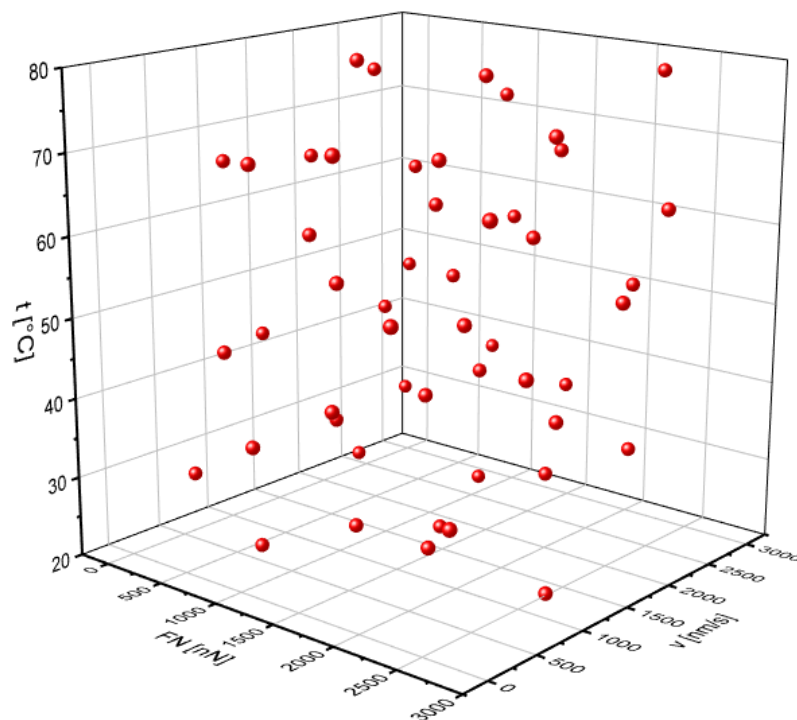
3.2. Latinizirana centroidalna Voronoijeva teselacija

Latinizirana centroidalna Voronoijeva teselacija predstavlja podjelu prostora na hiperkocke (engl. *Latin Hypercubes*) na način da je skup podataka obično dvodimenzionalni skup podataka od N točaka u jediničnom kvadratu (engl. *Latin square*), sa svojstvom da, ako su obje osi x i y podijeljene na N jednakih podintervala, točno jedna točka skupa podataka ima x ili y koordinatu u svakom podintervalu. Latinizirani kvadrati se lako mogu proširiti na slučaj od M dimenzija, te se u tom slučaju zovu hiperkvadrati ili hiperkocke [24].

Latinizirana centroidalna Voronoijeva teselacija pokazuje se kao atraktivna značajka za mnoge upotrebe zbog činjenice da je projekcija skupa podataka latiniziranog kvadrata na bilo koju koordinatnu os točno ravnomjerno raspoređena [24].

Pristup koji se ovdje koristi prilično je jednostavan. Prvo se izračunava CVT u M dimenzijama, koji se sastoji od N točaka, gdje se pretpostavlja da je granično područje jedinična hiperkocka. Zatim se prilagođavaju koordinate točaka kako bi se postiglo svojstvo latinizirane hiperkocke te se za svaki koordinatni smjer sortiraju točke prema toj koordinati i prepisuju izvorne vrijednosti vrijednostima koje se očekuju da će se dobiti za CVT [24].

Na Slici 3.3 prikazano je 50 mjernih točaka u prostoru promjenjivih parametara dobivenih latiniziranom CVT DoE metodom [25].

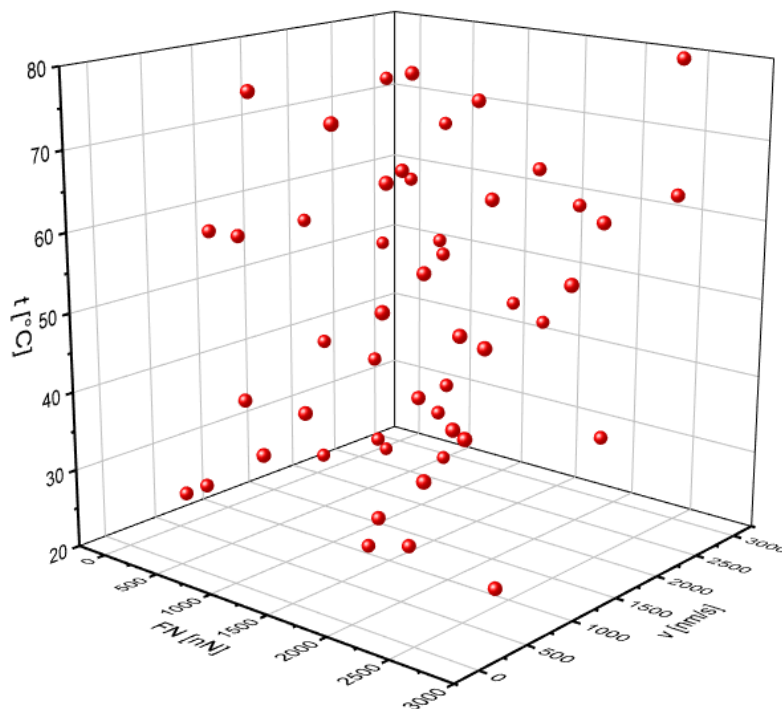


Slika 3.3: 50 mjernih točaka – Latinizirana CVT DoE metoda

3.3. Monte Carlo

Monte Carlo DoE metoda je numerička metoda rješavanja matematičkih problema simulacijom slučajnih varijabli. Riječ "slučajna varijabla", u uobičajenoj laičkoj upotrebi, znači da se ne zna koju će vrijednost određena varijabla poprimiti. Međutim, za matematičare i statističare izraz "slučajna varijabla" ima točno značenje: iako nije poznata vrijednost ove varijable, ipak je poznata vrijednost koju ona može poprimiti i vjerojatnosti tih vrijednosti. Stoga, da bi se definirala slučajna varijabla, moraju se navesti vrijednosti koje ona može poprimiti i vjerojatnosti tih vrijednosti [26]. Dakle, Monte Carlo DoE metodom odabire se slučajni broj koji se nalazi u intervalu $[x_L, x_U]$ jednodimenzijskog prostora. Također, ovaj se pristup lako proširuje i na n -dimenzijski prostor gdje se slučajni brojevi nalaze u intervalu $[x_L, x_U]^n$ [27]. Iako je Monte Carlo DoE metoda jednostavna za implementaciju, ipak neki dijelovi uzorkovanja prostora ostaju neistraženi.

Slika 3.4 prikazuje 50 mjernih točaka u prostoru promjenjivih parametara dobivenih Monte Carlo DoE metodom [27], [28].

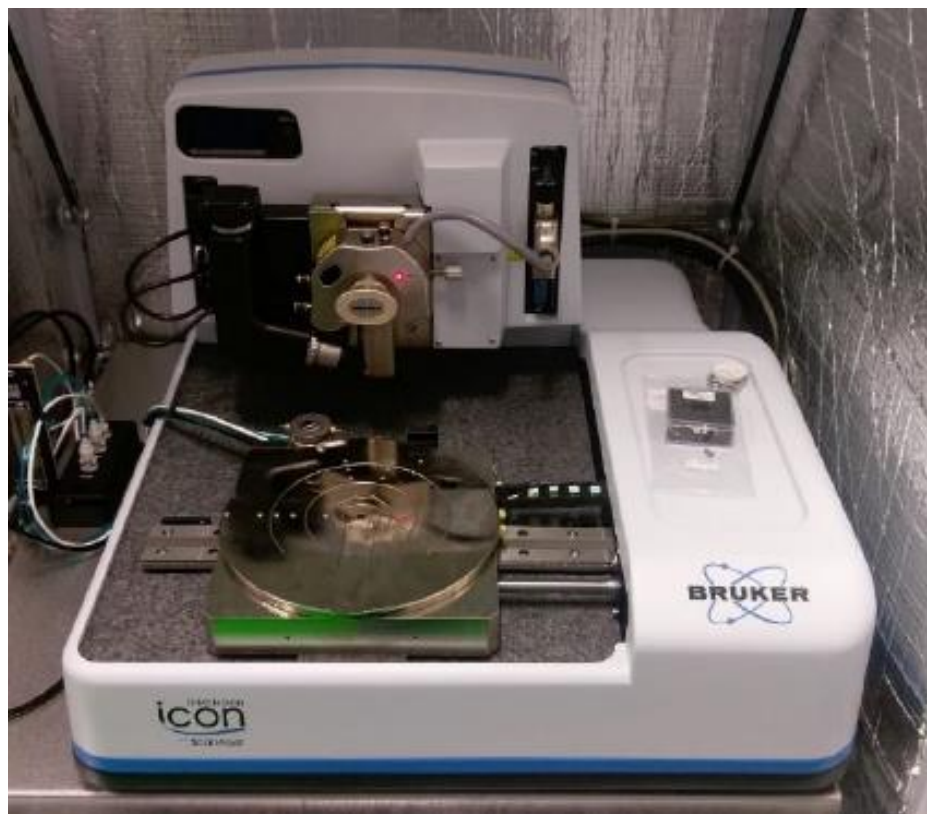


Slika 3.4: 50 mjernih točaka – Monte Carlo DoE metoda

Iz prethodne tri slike koje prikazuju 50 mjernih točaka u prostoru promjenjivih parametara dobivenih različitim DoE metodama može se zaključiti razlog odabira CVT DoE metode, a to je zato što ima najbolju prekrivenost razmatranog eksperimentalnog prostora.

4. OPIS EKSPERIMENTA

U ovom je radu, za potrebe mjerenja trenja na mikro- i nanorazini na uzorcima tankih filmova korišten pretražni mikroskop s osjetnikom (SPM) *Bruker Dimension Icon* prikazan na Slici 4.1, koji se nalazi u Laboratoriju za precizno inženjerstvo i tehnologiju mikro- i nanosustava u sklopu Centra za mikro- i nanoznanosti i tehnologije Sveučilišta u Rijeci (NANORI) [17].

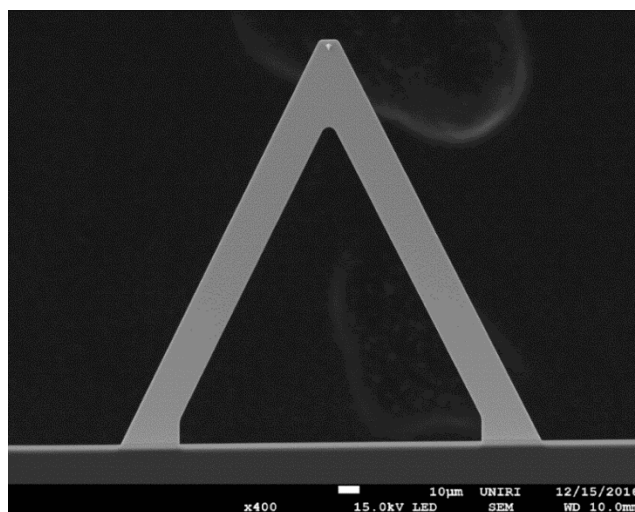


Slika 4.1: Bruker Dimension Icon pretražni mikroskop s osjetnikom u NANORI laboratoriju

Za dobivanje mjerljivih podataka iz provedenih LFM mjerenja, potrebna je pažljiva kalibracija krutosti osjetnika i u normalnom i u poprečnom smjeru. Doista, slike i mjerenje sile dobiveni mikroskopom atomske sile (AFM) u modalitetu poprečne sile (LFM) uvelike ovise o svojstvima osjetnika koji se koriste za ispitivanje površine uzorka [17].

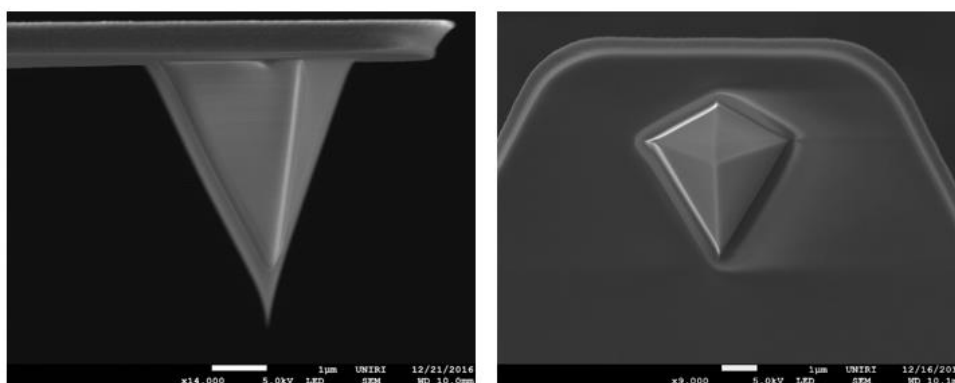
4.1. Osjetnik

Osjetnik se sastoji od gredice na čijem je kraju vršak (Slika 4.2).



Slika 4.2: Slika SPM osjetnika s trokutastom gredicom i vrškom dobivena na pretražnom elektronskom mikroskopu (Scanning Electron Microscope – SEM)

Taj vršak (Slika 4.3) je najčešće piramidalnog ili tetraedarskog oblika i obično je izrađen od silicija ili silicijevog nitrida. Geometrija vrška uvelike utječe na poprečnu razlučivost AFM-a, budući da područje međudjelovanja vrška i uzorka ovisi o polumjeru vrška. Kada vršak skenira površinu uzorka, polumjer vrška mora biti manji od veličine mjerenih površinskih značajki kako bi se one mogle pravilno odrediti. To znači da vršak koji ima zakrivljenost manju od površinskih značajki, točnije iscrtava topografiju jer skenira svaku značajku. U slučaju kada je polumjer zakrivljenosti vrška veći od površinskih značajki, značajke će se činiti većima nego što one to jesu u stvarnosti. Općenito, što je vrh oštrije, to je veća razlučivost AFM slike [29].



a)

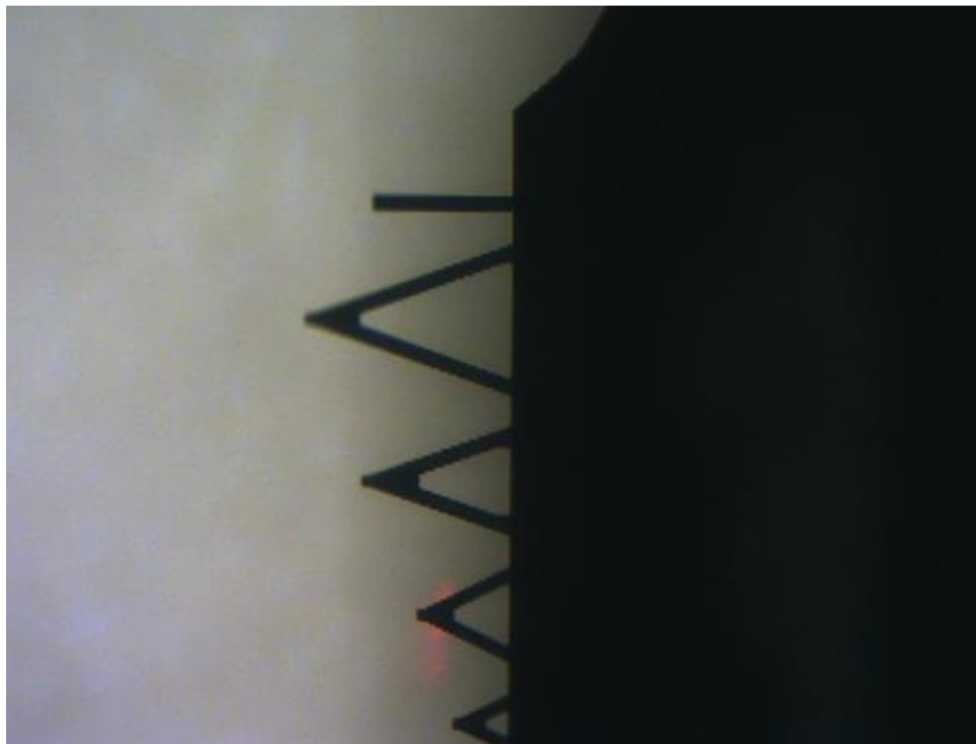
b)

Slika 4.3: a) Bočni pogled na vršak osjetnika te b) pogled na tetraedarski oblik vrška osjetnika

U kontaktnom modalitetu rada AFM-a, gredica osjetnika mora reflektirati laserski snop koji pogađa njezinu gornju stranu bez da vršak osjetnika oštećuje površinu promatranog uzorka. Stoga gredica osjetnika treba imati nisku krutost, što se postiže tako da ona bude tanka (0,3 – 2 μm). Također je potrebno da osjetnik ima visoku rezonantnu frekvenciju kako bi se izbjegla vibracijska nestabilnost, radi čega je osjetnik kratak (100–200 μm). Iako je koeficijent krutosti osjetnika dan od strane proizvođača, ipak postoji velika mogućnost odstupanja od tako danih vrijednosti uslijed proizvodnog procesa [29].

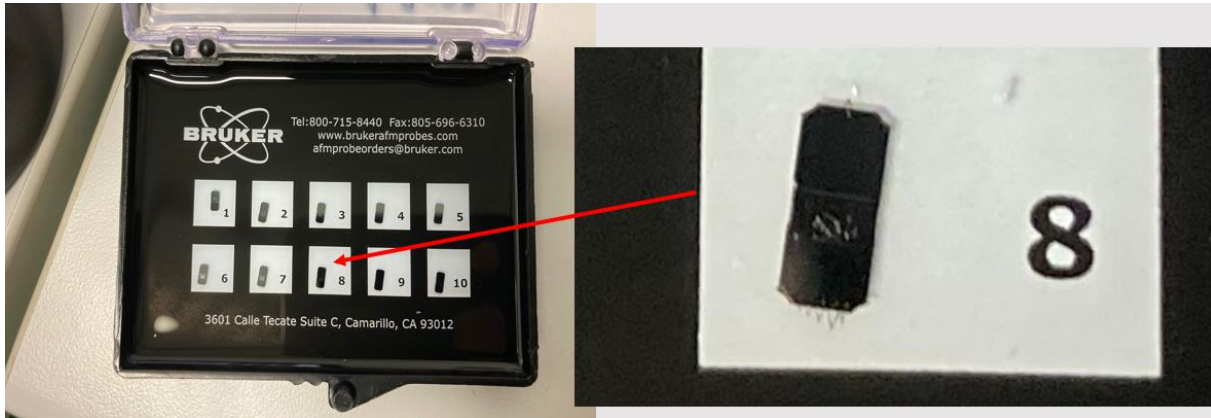
Nadalje, postoje dvije najčešće geometrije gredice osjetnika: trokutasta i pravokutna. Prikaz tih dviju najčešćih geometrija vidi se na Slici 4.4. Osjetnici trokutastog oblika često se koriste za kontaktni modalitet rada jer mogu pružiti mali otpor okomitom otklonu, dok se odupiru torziji. Osim trokutastog oblika, gredice mogu biti i pravokutnog oblika, koji se češće koriste u vibracijskom (engl. *tapping*) modalitetu rada AFM-a [29].

Najčešći materijali za izradu osjetnika su DLC (engl. *diamond like carbon*), silicij te silicijev nitrid [29].



Slika 4.4: Nosač s MSNL-10 (engl. *Micro Silicone Nitride Lever*) osjetnicima različitih geometrija

Na Slici 4.5 može se vidjeti deset Brukerovih nosača s osjetnicima, dok je nosač broj osam uvećan kako bi se bolje uočili osjetnici. Budući da se osjetnici se razlikuju po geometriji, oni imaju različite vlastite frekvencije i koeficijente krutosti (Slika 4.6).



Slika 4.5: Brukerovi MSNL-10 (engl. Micro Silicone Nitride Lever) osjetnici

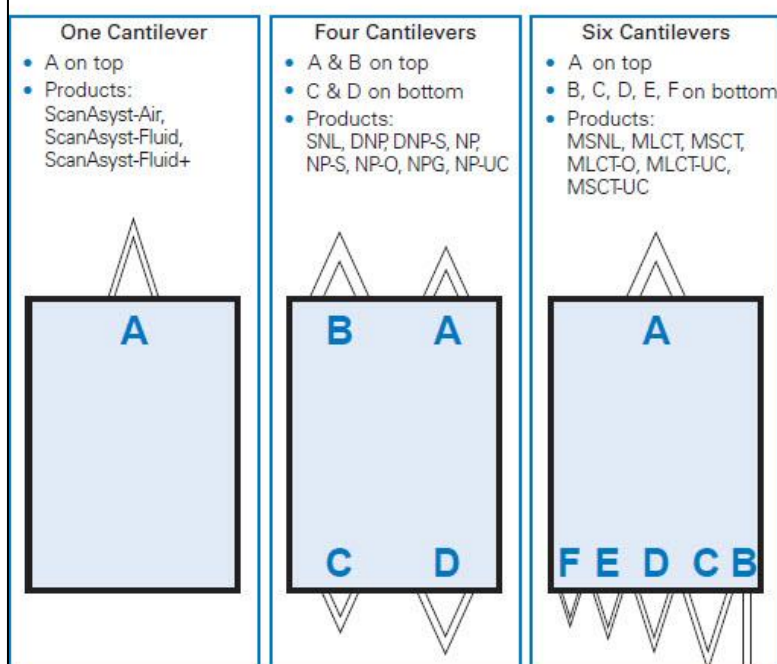


Slika 4.6: Nominalne vlastite frekvencije i krutosti MSNL-10 osjetnika dane od strane proizvođača

Oznake A do F na pakiranju osjetnika označavaju određeni osjetnik na nosaču koji se određuje prema Slici 4.7.

Bruker's Silicon Nitride Probe Cantilever Layouts

The cantilever orientation of Bruker's Silicon Nitride probe 10-packs is indicated below, with "top" indicating upward in the box, and "bottom" indicating downward in the box.

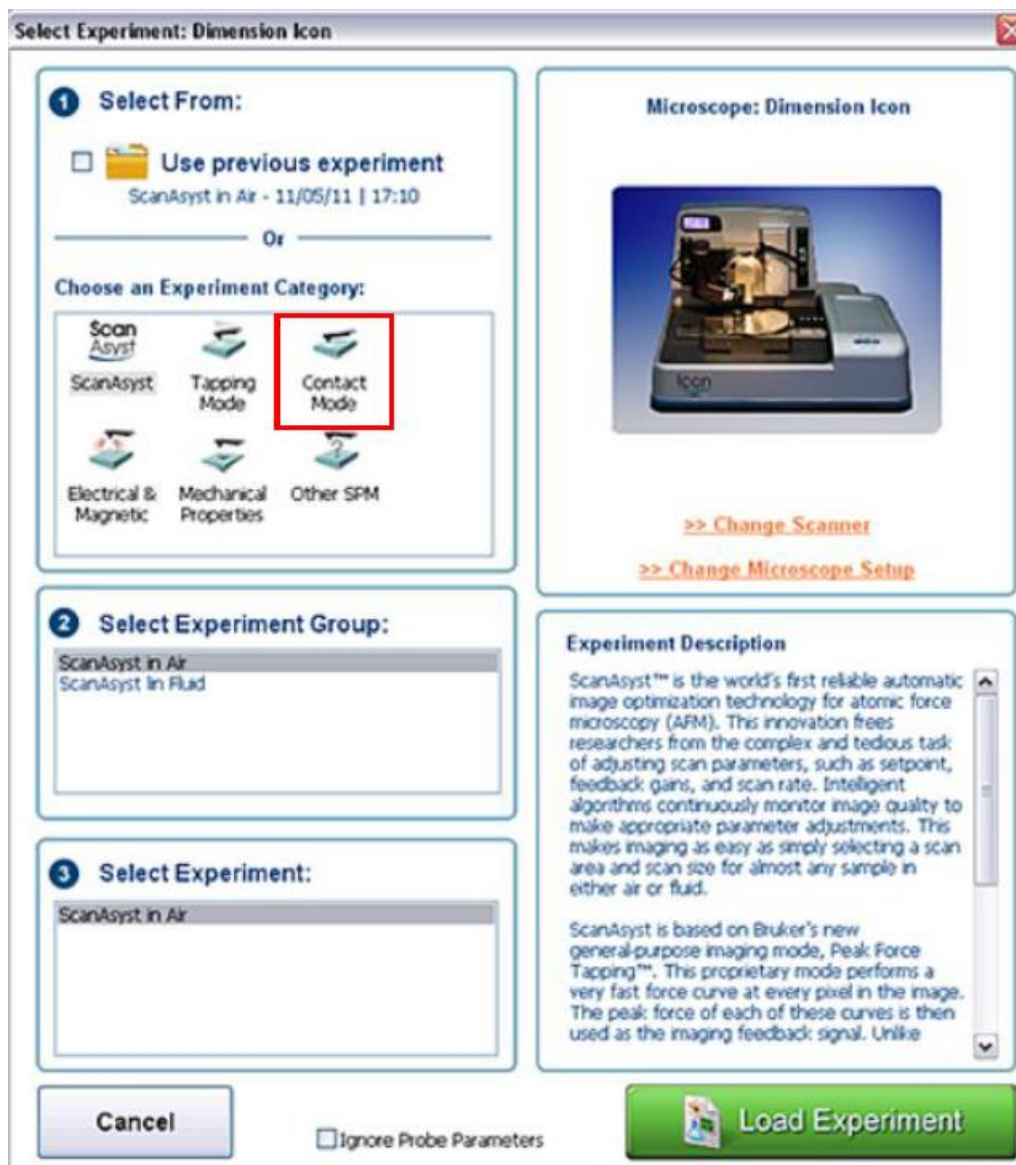


Slika 4.7: Oznake osjetnika [30]

U eksperimentalnim mjerenjima provedenima u ovome radu korišteno je šest osjetnika različitih geometrija i različitih proizvođača, od čega su MSNL-10E i MSNL-10F oni tvrtke Bruker [30], Aio-Al A, Aio-Al B te Aio-Al C osjetnici tvrtke BudgetSensors [31] te PPP-LFMR-10 osjetnik tvrtke Nanosensors [32]. Za svih šest osjetnika napravljena je kalibracija normalne sile koja je opisana u idućem potpoglavlju.

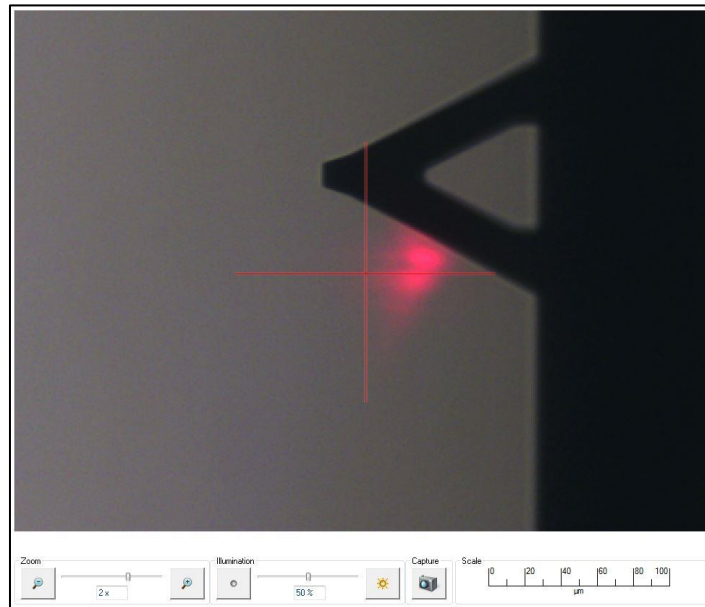
4.2. Kalibracija normalne sile

Normalna sila je produkt savojne krutosti osjetnika i progiba gredice osjetnika pa je kalibracija krutosti osjetnika važna za dobivanje točne vrijednosti normale sile koje djeluju na uzorke, a kasnije i za određivanje poprečne sile. Odgovarajuća kalibracija je u ovome radu napravljena u programu Nanoscope tvrtke Bruker koji je dio softverskog paketa na korištenom SPM uređaju Bruker Dimension Icon [33]. Prilikom pokretanja Nanoscope programa pojavljuje se prozor u kojem se odabire metoda mjerenja, odnosno režima rada AFM-a, a to je kontaktni režim rada (Slika 4.8).



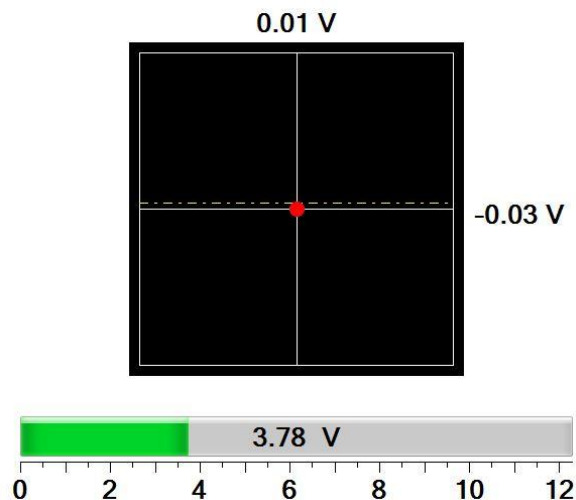
Slika 4.8: Program Nanoscope

U kontaktnom režimu rada AFM-a, osjetnik mora reflektirati laserski snop koji pogađa stražnju stranu gredice bez da oštećuje površinu promatranog uzorka. Stoga je sljedeći korak za pravilnu kalibraciju postavljanje laserskog snopa na način da se što više svjetlosti reflektira sa stražnje površine gredice osjetnika na fotodiodu. Na Slici 4.9 vidi se postavljanje laserskog snopa na sjenu osjetnika. Bitno je da se vidi sjena osjetnika kako bi se mogao vidjeti i laser.



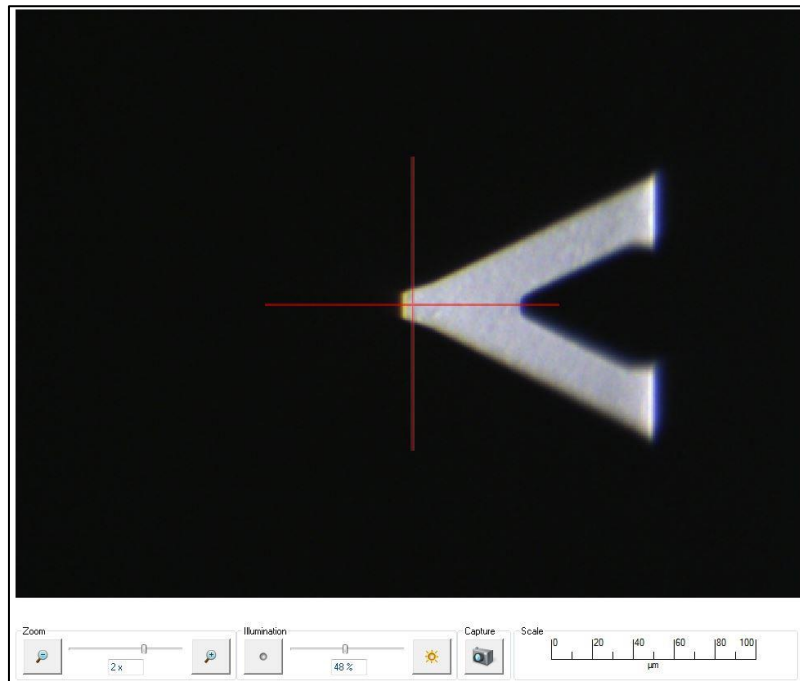
Slika 4.9: Postavljanje lasera na sjenu osjetnika

Laser se usmjerava zrcalima na način da reflektirani napon na fotiododi bude 0 V (Slika 4.10) što predstavlja nulti položaj. Maksimalna refleksija postiže se pomicanjem lasera tako da se dobije maksimalna suma svih napona na 4 kvadranta fotiodode. Što je veća suma napona, to je više energije lasera reflektirano od gredice osjetnika u fotiododu te se dobiva snažniji signal.



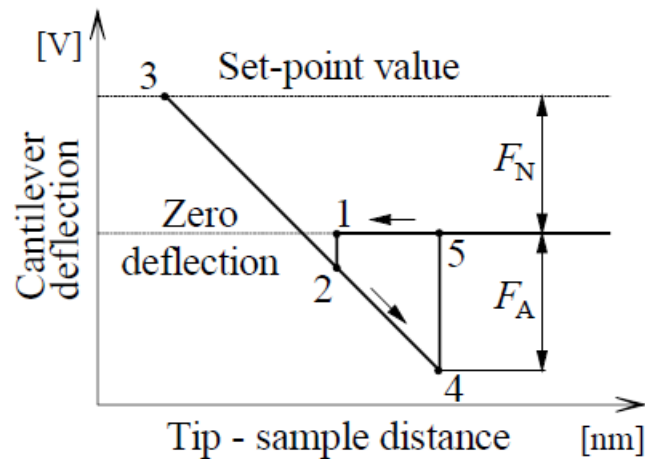
Slika 4.10: Zbroj signala lasera i fotiodode

Potrebno je pritom namjestiti pogled odozgo na osjetnik tako da se vrh osjetnika najjasnije vidi, odnosno fokus mora biti postavljen na osjetnik kako bi se definirala udaljenost između osjetnika i uzorka (Slika 4.11). U suprotnom, osjetnik može doći preblizu uzorku te oštetiti njegovu površinu.



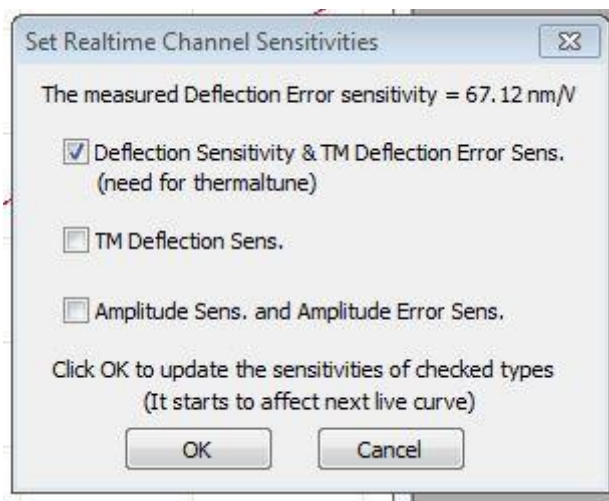
Slika 4.11: Pogled odozgo na osjetnik

Zatim se koristi kalibracijski uzorak, odnosno Brukerovo kalibracijsko staklo te započinje pretraživanje površine uzorka. Jednom kada je započelo pretraživanje, odabire se naredba „Ramp“. Pomoću ove naredbe dobiva se graf sila-udaljenost (Slika 4.12) na kojemu se vidi trenutak kada se osjetnik približava površini uzorka (točka 1). Od točke 1 do točke 2 djeluje sila adhezije koja privlači vršak osjetnika na površinu uzorka. Zatim osjetnik pomoću piezoaktuatora pritišće uzorak te se nosiva gređica osjetnika savija (točka 3). Udaljavanjem osjetnika od uzorka, on se vraća u prvobitni položaj prolazeći kroz točku 2 sve do točke 4, jer mu adhezija ne dozvoljava odvajanje od površine uzorka. Tek u točki 4 dolazi do naglog odvajanja vrška osjetnika od površine uzorka, te točka 5 predstavlja nulti položaj osjetnika. Trenutak na grafu kada osjetnik prestaje biti u kontaktu s površinom uzorka nije na istom mjestu kao i kada je kontakt inicijalno ostvaren. Razlog tome je sila adhezije koja djeluje na vršak osjetnika i privlači ga na površinu uzorka te mu prilikom pretraživanja površine ne dozvoljava odvajanje od površine uzorka na istom mjestu gdje je došlo do privlačenja [17]. U posljednjem koraku kalibracije normalne sile potrebno je odvojiti osjetnik od površine uzorka pomoću naredbe *Withdraw*.



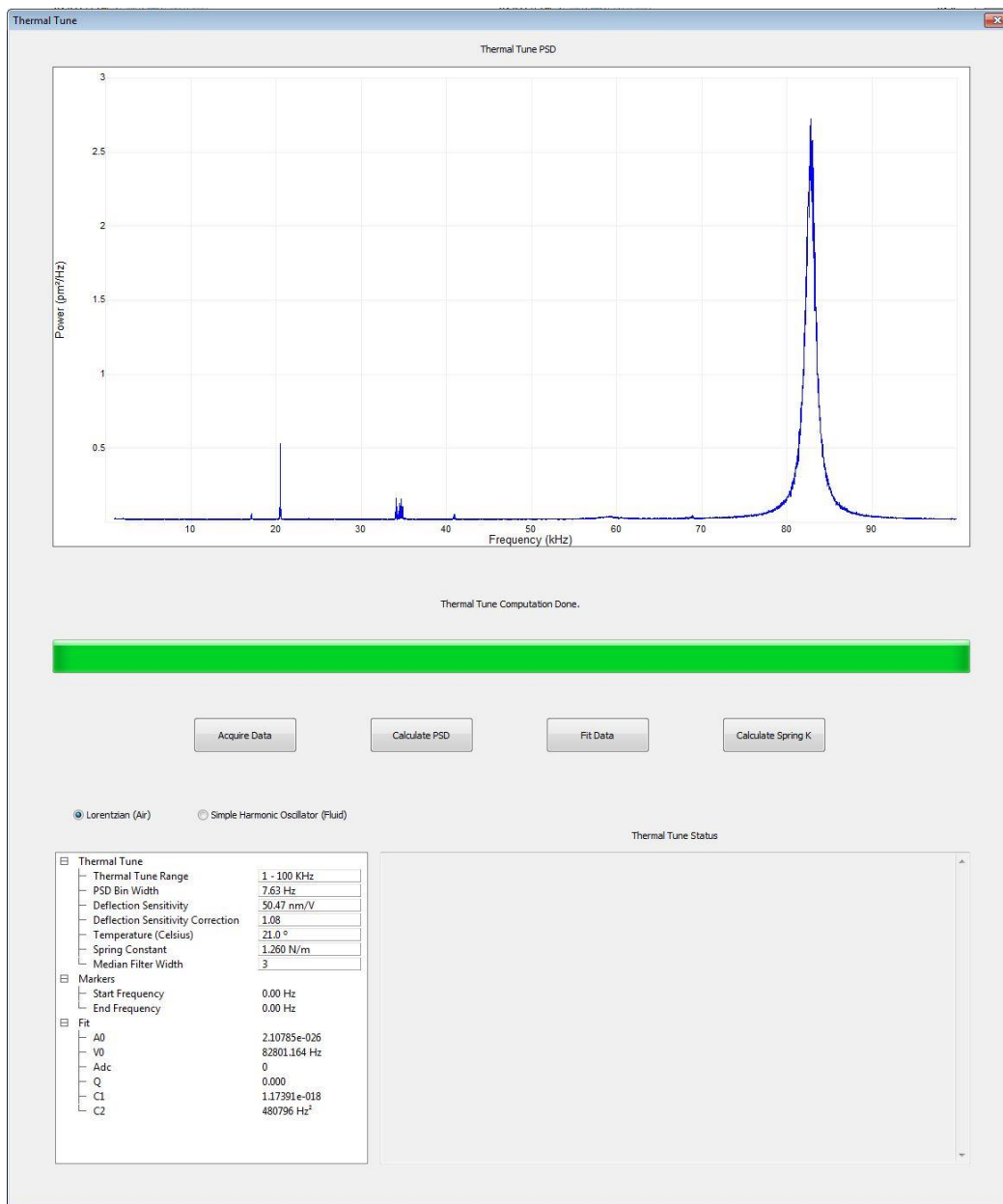
Slika 4.12: Graf sila-udaljenost osjetnika [17]

Kada se završi proces prikazan na Slici 4.12, moguće je dobiti osjetljivost očitavanja progiba osjetnika s na fotodetektoru izraženu u nm/V . U ovom radu kalibrirano je šest različitih osjetnika, od kojih svaki ima različita mehaničkih svojstava te je dobiven od različitih proizvođača. Slika 4.13 prikazuje eksperimentalno dobivenu osjetljivost osjetnika MSNL-10F, tvrtke Bruker.



Slika 4.13: Osjetljivost osjetnika MSNL-10F

Nadalje, pritiskom na *Thermal Tune* naredbu otvara se novi prozor u kojem je moguće odabrati raspon frekvencija u kojemu će se vršiti ispitivanje dinamičkog odziva osjetnika te time i same krutosti osjetnika. Slika 4.14 prikazuje naredbu *Thermal Tune*.



Slika 4.14: Thermal tune MSNL-10F osjetnika

Doista, opcijom *Thermal Tune* traži se vlastita frekvencija osjetnika te je važno paziti u kojem se mediju nalazi osjetnik. S obzirom da se svih šest osjetnika ispituje u zraku, u upravljačkom se softveru odabire *Lorentzian* mod koji se preklapa s najvišom vršnom vrijednošću frekvencije. Na kraju se pritiskom na *Calculate Spring K* odredi konstanta krutosti osjetnika k . Slika 4.15 prikazuje konstantu krutosti osjetnika MSNL-10F.



Slika 4.15: Konstanta krutosti osjetnika MSNL-10F

Kada su određene vrijednosti osjetljivosti očitavanja progiba osjetnika kao i konstante krutosti istoga, moguće je izračunati normalnu krutost osjetnika prema formuli [17]:

$$k_N \left[\frac{\text{N}}{\text{V}} \right] = s \left[\frac{\text{nm}}{\text{V}} \right] \cdot k \left[\frac{\text{N}}{\text{nm}} \right] \quad (4.1)$$

gdje je:

- k_N – normalna (savojna) krutost osjetnika [N/V]
- s – osjetljivost očitavanja progiba osjetnika [nm/V]
- k – koeficijent krutosti osjetnika [N/nm]

Nadalje, množenjem normalne krutosti osjetnika s naponom za određeni progib gredice kada je ona u dodiru i opterećuje normalno površinu uzorka, dobiva se vrijednost odgovarajuće normalne sile F_N [17]:

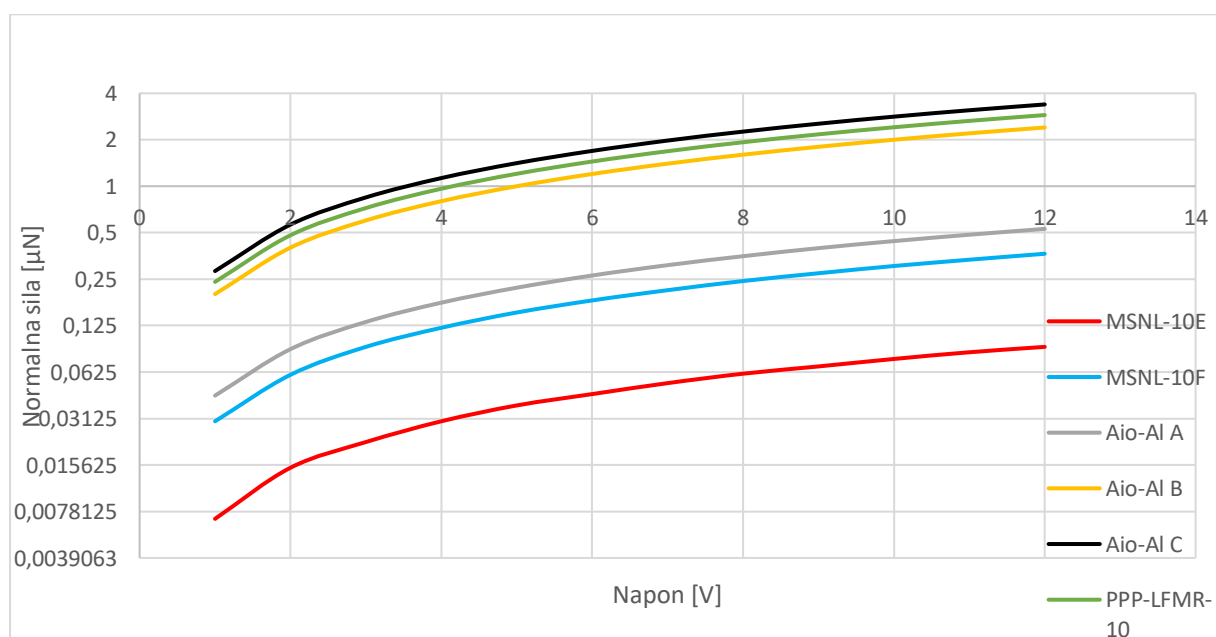
$$F_N [\text{N}] = k_N \left[\frac{\text{N}}{\text{V}} \right] \cdot U [\text{V}] \quad (4.2)$$

Za svaki osjetnik dobiven je gore objašnjeni ramp dijagram iz kojeg je očitana osjetljivost očitavanja progiba osjetnika te je napravljen *Thermal tune* proces pomoću kojeg se dobila vrijednost koeficijenta krutosti osjetnika. Zatim se normalna krutost svih šest osjetnika pomnožila s naponom od 1 do 12 V kako bi se dobila normalna sila kojom osjetnik djeluje u normalnom smjeru na površinu uzorka. Vrijednosti od 1 do 12 V odabrane su iz razloga što piezoaktuator radi pri naponu do 12 V. Rezultati kalibracije normalne sile svih šest osjetnika prikazani su u Tablici 4.1.

Tablica 4.1: Raspon normalne sile osjetnika različitih geometrija u ovisnosti o naponu piezoaktuatora

Napon piezoaktuatora [V]	Normalna sila F_N [μN] za različite vrste osjetnika					
	MSNL-10E	MSNL-10F	Aio-Al A	Aio-Al B	Aio-Al C	PPP-LFMR-10
1	0,007	0,03	0,044	0,2	0,282	0,24
2	0,015	0,06	0,088	0,4	0,564	0,481
3	0,022	0,091	0,132	0,6	0,846	0,722
4	0,03	0,121	0,176	0,8	1,129	0,963
5	0,038	0,152	0,22	1	1,411	1,204
6	0,045	0,182	0,264	1,2	1,693	1,445
7	0,053	0,212	0,308	1,4	1,976	1,686
8	0,061	0,243	0,352	1,6	2,258	1,927
9	0,068	0,273	0,397	1,8	2,54	2,168
10	0,076	0,304	0,441	2	2,823	2,409
11	0,084	0,334	0,485	2,201	3,105	2,65
12	0,091	0,365	0,529	2,401	3,387	2,891

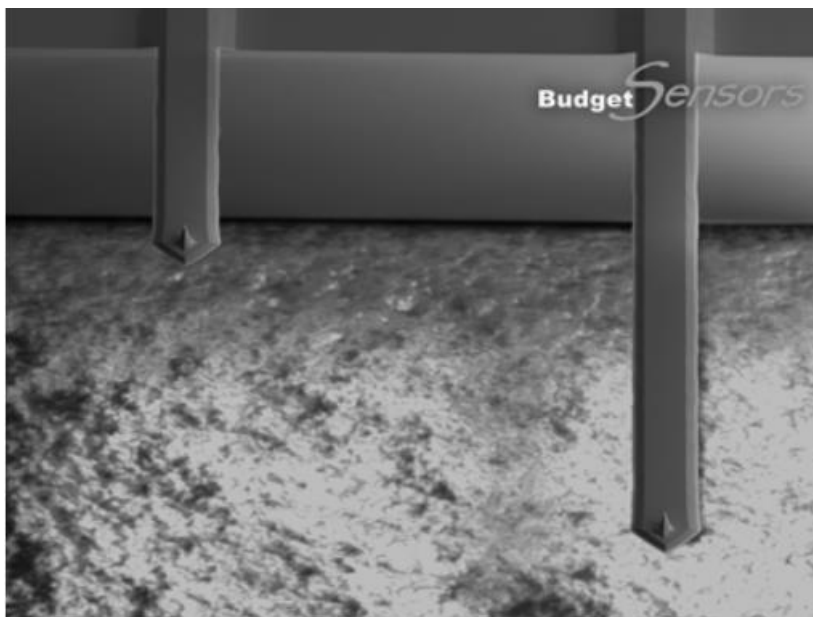
Na Slici 4.16 prikazane su vrijednosti iz Tablice 4.1. Na x osi nalaze se vrijednosti napona s kojim se produljenjem piezoaktuatora ostvaruje normalna sila (y os) s kojom osjetnik pritišće uzorak u normalnom smjeru. Vrijednost normalne sile je potrebna kako bi se dalje moglo napraviti eksperimentalno mjerenje poprečne sile. Na osnovu tako dobivenih rezultata, odlučeno je da će se za potrebe ovog rada, odnosno za mjerenje sile trenja, koristiti osjetnici Aio-Al A za mikropodručje i Aio-Al B za nanopodručje. Još jedna prednost Aio-Al A i Aio-Al B osjetnika je što se nalaze na istom nosaču, što olakšava mjerenja jer nema potrebe za mijenjanjem osjetnika.



Slika 4.16: Logaritamska ovisnost normalne sile šest osjetnika u ovisnosti o naponu piezoaktuatora

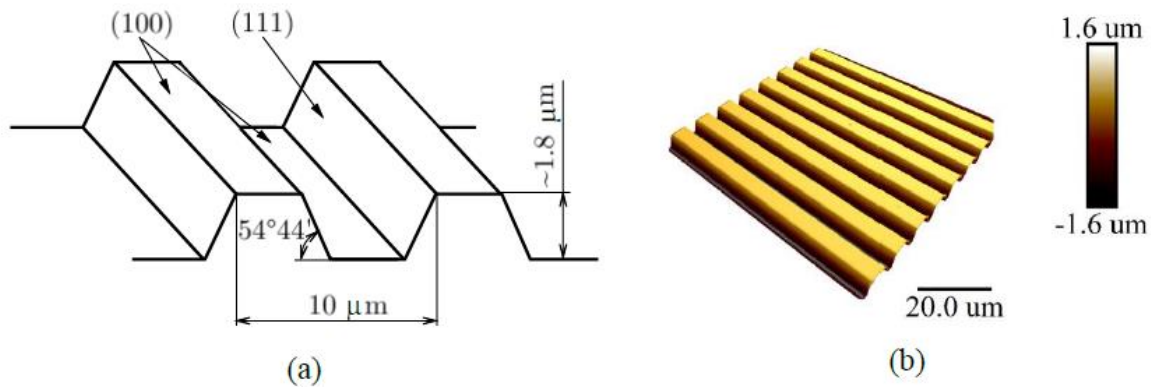
4.3. Kalibracija poprečne sile

Kalibracija poprečne sile još uvijek je u fazi istraživanja, tj. nije standardizirana. Postoji nekoliko metoda kalibracije poprečne krutosti iz koje se izračuna sila trenja, a neke od njih su: kalibracija pomoću kalibracijskog uzorka, kalibracija dodavanjem poznate mase osjetniku, kalibracija pomoću referentne sonde s poznatom krutošću te kalibracija preko određivanja krutosti gredice numeričkom metodom [17]. U ovom radu odabrana je metoda po Varenbergu pomoću kalibracijskog uzorka [34]. Nadalje, kako je spomenuto u prethodnom potpoglavlju 4.2, odabrani su osjetnici Aio-Al A i Aio-Al B koji će se koristiti za daljnju kalibraciju i mjerenje sile trenja. Osjetnici Aio-Al A i Aio-Al B prikazani su na Slici 4.17.



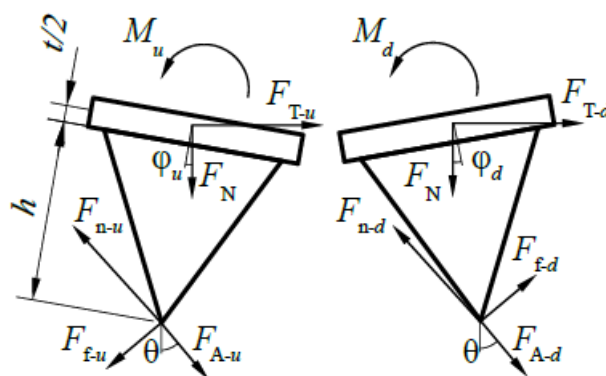
Slika 4.17: Geometrija osjetnika Aio-Al A (lijevo) i Aio-Al B (desno) [31]

Postupak kalibracije poprečne sile pomoću kalibracijskog uzorka vrlo je sličan postupku kalibracije normalne krutosti. Pri pokretanju Nanoscope programa odabire se kontaktni režim rada te opcija *Lateral Force*. Zatim se laser zrcalima usmjerava na način da reflektirani napon na fotiododi bude 0 V. Nakon što se izvršilo podešavanje osjetnika, započinje spuštanje gredice do uzorka i dolazak u dodir s njegovom površinom. Kalibracija poprečne sile vrši se na uzorku TGF11 [17] (Slika 4.18) jer je on potreban za metodu po Varenbergu.



Slika 4.18: Shematski prikaz (a) i stvarna topologija TGF11 uzorka (b) [17]

Za kalibraciju je dovoljno da osjetnik prijeđe preko dvije doline i dva brijega TGF11 uzorka na način da vršak okomito prelazi preko stranice, odnosno kristalografske ravnine (100), zatim se spušta okomito po stranici (111), okomito prelazi preko stranice (100) te se podiže okomito preko stranice (111) i zatim ponovno okomito prelazi preko stranice (100). Slika 4.19 prikazuje sile i momente koji djeluju na vršak osjetnika koji se koristi prilikom pretraživanja topologije uzorka TGF11 [17]. Sa Slike 4.19 vidi se kako na vršak osjetnika djeluje normalna sila F_N , orijentirana prema dolje, vučna sila F_T , koja djeluje poprečno, sila adhezije F_A , sila trenja F_f i reakcijska normalna sila F_n . Na osjetniku se javlja i torzijski moment zbog sila adhezije, trenja i reakcijske normalne sile. Oznake d i u odnose se na smjer gibanja osjetnika; d – downward (prema dolje) i u – upward (prema gore).

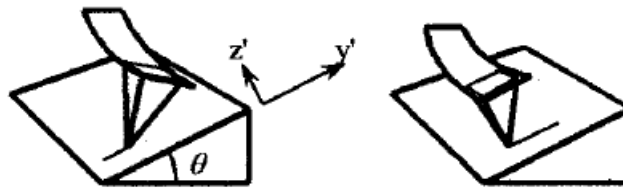


Slika 4.19: Ravnoteža sile koje djeluju na vrh sonde tijekom mjerenja [17]

Kako bi se mogla izmjeriti sila trenja, eksperimentom dobivene rezultate potrebno je obraditi matematičkim proračunom, tj. metodom po Varenbergu [34].

Prema toj metodi, a kako je vidljivo na Slici 4.19, potrebno je promatrati dva slučaja. Jedan je slučaj kada se osjetnik podiže po nagnutoj površini prema gore, a drugi kada se vraća, tj. kada se po nagnutoj površini spušta u smjeru prema dolje. Uzimajući to u obzir, na vršak osjetnika u svakome trenutku djeluje kontaktna sila F_n , sila adhezije F_A , i sila trenja F_f . Te sile moraju biti u ravnoteži s opterećenjem (normalnom silom) F_N , vučnom silom F_T i momentom torzije M [34].

Na Slici 4.20 prikazan je koordinatni sustav korišten u Varenbergovoj metodi kada se osjetnik kreće po površini uzorka [34].



Slika 4.20: Koordinatni sustav korišten u Varenbergovom proračunu [34]

Kako vršak osjetnika kliže po površini, sve su sile u ravnoteži i ovise o smjeru kretanja osjetnika. Kada se osjetnik kreće prema gore, tada u smjeru osi y' vrijedi [34]:

$$F_{T-u} \cdot \cos \theta - F_N \cdot \sin \theta - F_{f-u} = 0 \quad (4.3)$$

gdje je:

- θ – kut nagiba površine [rad]
- F_{T-u} – vučna sila [nN]
- F_N – sila opterećenja [nN]
- F_{f-u} – sila trenja u smjeru kretanja osjetnika prema gore [nN]

Nadalje, ravnoteža svih sila kada se osjetnik kreće prema gore u smjeru osi z' biti će [34]:

$$-F_{T-u} \cdot \sin \theta - F_N \cdot \cos \theta + F_{n-u} - F_{A-u} = 0 \quad (4.4)$$

gdje je:

- F_{n-u} – kontaktna sila [nN]
- F_{A-u} – sila adhezije [nN]

Slično vrijedi i za kretanje osjetnika prema dolje. Ravnoteža sila kada se osjetnik kreće prema dolje u smjeru osi y' prikazana je jednadžbom (4.5), a ravnoteža sila kada se osjetnik kreće prema dolje u smjeru osi z' prikazana je jednadžbom (4.6).

$$F_{T-d} \cdot \cos \theta - F_N \cdot \sin \theta + F_{f-d} = 0 \quad (4.5)$$

$$-F_{T-d} \cdot \sin \theta - F_N \cdot \cos \theta + F_{n-d} - F_{A-d} = 0 \quad (4.6)$$

gdje je:

- F_{T-d} – vučna sila [nN]
- F_{n-d} – kontaktna sila [nN]
- F_{f-d} – sila trenja u smjeru kretanja osjetnika prema dolje [nN]
- F_{A-d} – sila adhezije [nN]

Uz pretpostavku da je sila trenja $F_f = \mu F_N$, gdje je μ konstanta (koeficijent trenja) i da vrijedi $F_{A-u} = F_{A-d} = F_A$ u rasponu od F_{n-u} do F_{n-d} te kombinacijom jednadžbi (4.3) i (4.4) dobije se vučna sila kada se osjetnik kreće prema gore [34]:

$$F_{T-u} = \frac{F_N \cdot \sin \theta + \mu(F_N \cdot \cos \theta + F_A)}{\cos \theta - \mu \sin \theta} \quad (4.7)$$

Slično kako se dobila jednadžba (4.7), tako se iz jednadžbi (4.5) i (4.6) može izraziti vučna sila kada se osjetnik kreće prema dolje [34]:

$$F_{T-d} = \frac{F_N \cdot \sin \theta - \mu(F_N \cdot \cos \theta + F_A)}{\cos \theta + \mu \sin \theta} \quad (4.8)$$

Nadalje, uz pretpostavku malog torzijskog kuta φ ($\sin \varphi = \varphi$, $\cos \varphi = 1$), slijede jednačbe ravnoteže momenata oko vrška osjetnika. Kada se osjetnik kreće prema gore, jednačba glasi [34]:

$$M_u + F_N \cdot [R \cdot \sin \theta - (h - R + \frac{t}{2}) \cdot \varphi_u] - F_{T-u} \cdot (R \cdot \cos \theta + h - R + t/2) = 0 \quad (4.9)$$

Kada se osjetnik kreće prema dolje, jednačba glasi [34]:

$$M_d + F_N \cdot [R \cdot \sin \theta - (h - R + \frac{t}{2}) \cdot \varphi_d] - F_{T-d} \cdot (R \cdot \cos \theta + h - R + t/2) = 0 \quad (4.10)$$

gdje je:

- R – radijus vrška osjetnika [nm]
- h – visina vrška [nm]
- t – debljina gredice [nm]
- F_T – vučna sila koja se javlja u središtu vrška [N]
- M – moment torzije [Nm]
- φ – kut torzije [rad]

Odnos između momenta torzije i kuta torzije dan je sljedećom jednačbom [34]:

$$\varphi = \frac{Ml}{GJ} \quad (4.11)$$

gdje je:

- l – duljina gredice osjetnika [m]
- G – modul smicanja [N/m^2]
- J – torzijski moment tromosti (inercije) ovisan o geometriji poprečnog presjeka gredice [m^4]

Daljnjom transformacijom jednačbi (4.9) i (4.10) dobivaju se novi izrazi za momentne jednačbe za oba smjera kretanja osjetnika [34]:

$$M_u + F_N \cdot R \cdot \sin \theta - F_{T-u} \cdot (R \cdot \cos \theta + h - R + t/2) = 0 \quad (4.12)$$

$$M_d + F_N \cdot R \cdot \sin \theta - F_{T-d} \cdot (R \cdot \cos \theta + h - R + t/2) = 0 \quad (4.13)$$

Ovom analizom definira se odnos između poprečne sile (sile trenja) na vršku osjetnika dok on pretražuje ravnu površinu, i rezultirajućeg momenta M , koji se mjeri preko AFM-a, odnosno mjerenjem torzijskog kuta osjetnika. Izmjereni izlazni napon M_o (indeks „o“ označava moment mjeren u voltima) povezan je s momentom M preko kalibracijske konstante β , a njihova veza glasi $\beta \cdot M_o = M$. Kalibracijska konstanta β je produkt svih faktora koji utječu na sustav, a njezina mjerna jedinica glasi Nm/V. Nadalje, kombinacijom jednadžbi (4.3) i (4.12) za ravnu površinu, gdje je $\theta = 0$, dobiva se jednadžba za silu trenja [34]:

$$F_f^{\text{flat}} = F_T^{\text{flat}} = \frac{M^{\text{flat}}}{h+t/2} = \alpha \cdot M_o^{\text{flat}} \quad (4.14)$$

gdje je α kalibracijska konstanta u njutnima po voltu [N/V]:

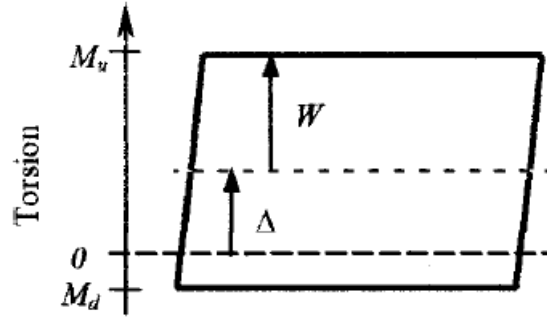
$$\alpha = \frac{\beta}{h+t/2} \quad (4.15)$$

Kalibracijska konstanta α pretvara moment izražen u voltima M_o u silu trenja F_f^{flat} . Određivanje kalibracijske konstante ovisi o obliku vrška osjetnika, te su u Varenbergovoj metodi opisana dva načina određivanja kalibracijske konstante: jedan za vršak u obliku piramide, a drugi za vršak u obliku kuglice. U ovom radu korišteni su osjetnici s vrškom u obliku piramide pa se za takav vršak može pretpostaviti da je njegova visina puno veća od njegovog polumjera, odnosno da je $h \gg R$. S obzirom na tu pretpostavku te kombinacijom jednadžbi (4.12) i (4.13) dobivaju se momentne jednadžbe za oba smjera gibanja osjetnika [34]:

$$M_u = F_{T-u} \left(h + \frac{t}{2} \right) \quad (4.16)$$

$$M_d = F_{T-d} \left(h + \frac{t}{2} \right) \quad (4.17)$$

Nadalje, torzijska petlja prikazana na Slici 4.21, predstavlja jedan ciklus dobivanja momenta torzije kada osjetnik pretražuje po površini u smjeru prema gore (engl. *trace*), te kad se vraća u početni položaj, odnosno kada skenira površinu u smjeru prema dolje (engl. *retrace*).



Slika 4.21: Shematski prikaz torzijske petlje [34]

W ovdje predstavlja polovinu širine petlje [34]:

$$W = \frac{M_u - M_d}{2} \text{ [Nm]} \quad (4.18)$$

dok Δ predstavlja pomak od petlje [34]:

$$\Delta = \frac{M_u + M_d}{2} \text{ [Nm]} \quad (4.19)$$

S obzirom da se izlazni napon veže uz kalibracijsku konstantu β , i polovina širine petlje i pomak od petlje mogu se prikazati pomoću kalibracijske konstante, pri čemu vrijedi $\beta \cdot W_o = W$ i $\beta \cdot \Delta_o = \Delta$.

Eksperimentalno, zbog odstupanja signala, pa čak i male neusklađenosti lasera u odnosu na fotodiodu, nije moguće odrediti točnu nulu torzijskog signala, tj. nije moguće odrediti stvarni pomak Δ_o . Međutim, stvarna polovina širine petlje W_o je neosjetljiva na ovaj problem.

Kako je već rečeno, da bi se prevladao problem s određivanjem točne nule torzijskog signala korištena je kalibracijska površina s ravnim i kosim površinama uzorka TGF11 (Slika 4.18). Budući da je pomak torzijske petlje jednak nuli na ravnoj površini, može se ispraviti netočno izmjereni pomak torzijske petlje Δ_o^* , na način da se od njega oduzme pomak torzijske petlje na ravnoj površini. Ovim postupkom dobiva se točan pomak torzijske petlje $\Delta_o = \Delta_o^* - \Delta_o^{\text{flat}}$ [34].

Sada, uvrštavanjem jednadžbi (4.7), (4.8), (4.15), (4.16) i (4.17) u jednadžbu (4.18) dobiva se [34]:

$$\frac{\mu(F_N + F_A \cdot \cos \theta)}{\cos^2 \theta - \mu^2 \sin^2 \theta} = \frac{W}{h+t/2} = \alpha \cdot W_o \quad (4.20)$$

Slično kao u prethodnom postupku, iz jednadžbe (4.19) te uz korekciju $\Delta = \beta(\Delta_o^* - \Delta_o^{\text{flat}})$ dobiva se sljedeća jednadžba [34]:

$$\frac{\mu^2 \sin \theta \cdot (F_N \cdot \cos \theta + F_A) + F_N \cdot \sin \theta \cdot \cos \theta}{\cos^2 \theta - \mu^2 \sin^2 \theta} = \frac{\Delta}{h+t/2} = \alpha(\Delta_o^* - \Delta_o^{\text{flat}}) \quad (4.21)$$

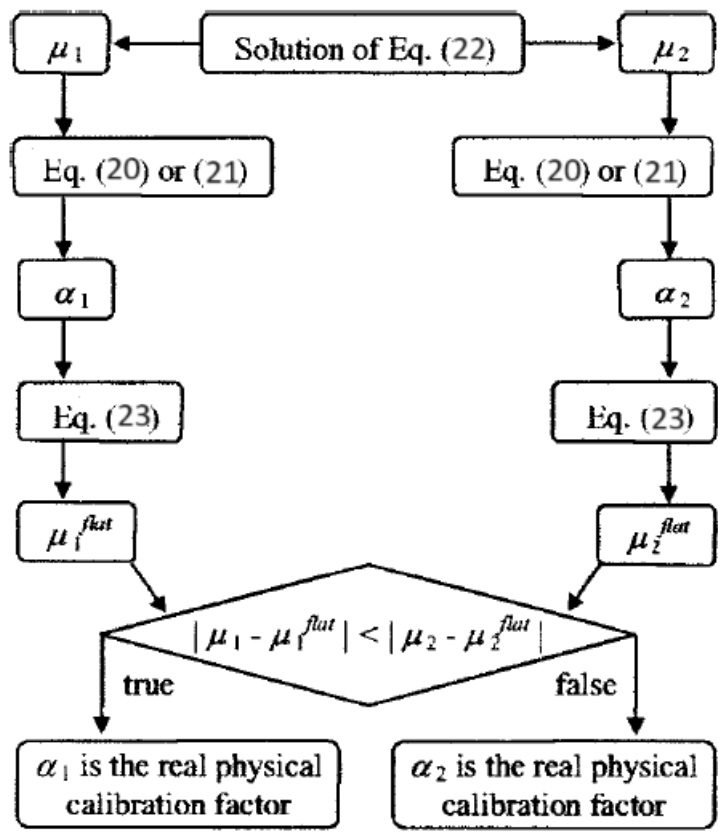
Zatim, podjelom jednadžbe (4.21) s jednadžbom (4.20) dobije se kvadratna jednadžba s nepoznanicom μ [34]:

$$\sin \theta \cdot (F_N \cdot \cos \theta + F_A) \cdot \mu^2 - \frac{\Delta_o^* - \Delta_o^{\text{flat}}}{W_o} \cdot (F_N + F_A \cdot \cos \theta) \cdot \mu + F_N \cdot \sin \theta \cdot \cos \theta = 0 \quad (4.22)$$

Jednadžba (4.22) sadrži poznati nagib površine kalibracijskog uzorka TGF11, θ u radijanima, normalnu silu F_N , silu adhezije F_A , izmjereni stvarni pomak torzijske petlje $(\Delta_o^* - \Delta_o^{\text{flat}})$ i polovinu širine torzijske petlje W_o . Jednadžba (4.22) daje dva rješenja koeficijenta trenja μ , međutim samo jedno rješenje je točno. Točno rješenje je manje od $1/\text{tg } \theta$ jer se u suprotnom kada se μ uvrsti u jednadžbu (4.20) ili (4.21), dobije negativna kalibracijska konstanta α . Ako i μ_1 i μ_2 zadovoljavaju uvjet da su manji od $1/\text{tg } \theta$, potrebno je koristiti metodu prikazanu na Slici 4.22 kako bi se odredila kalibracijska konstanta α . Svako od dva rješenja, kada se uvrste u jednadžbu (4.20), daju dvije vrijednosti kalibracijske konstante, α_1 i α_2 . Budući da kalibracijske konstante moraju biti jednake i na nagibu i na ravnoj površini uzorka, α_1 i α_2 uvrštavaju se i u sljedeću jednadžbu [34]:

$$\mu^{\text{flat}} = \frac{\alpha W_o^{\text{flat}}}{(F_N + F_A)} \quad (4.23)$$

kako bi se odredili koeficijenti trenja na ravnoj površini, μ_1^{flat} i μ_2^{flat} . Dakle, za svaku od dvije vrijednosti kalibracijske konstante postoje dvije vrijednosti koeficijenta trenja, μ i μ^{flat} . Prava vrijednost μ i μ^{flat} na različitim kristalografskim ravninama, odnosno na kosoj i ravnoj površini kalibracijskog uzorka TGF11, možda nije jednaka, ali bi trebala biti približno jednaka. Odabirom kalibracijske konstante, α_1 ili α_2 , koja daje manju razliku između μ i μ^{flat} određuje se realna kalibracijska konstanta α pomoću koje se dobiva sila trenja.

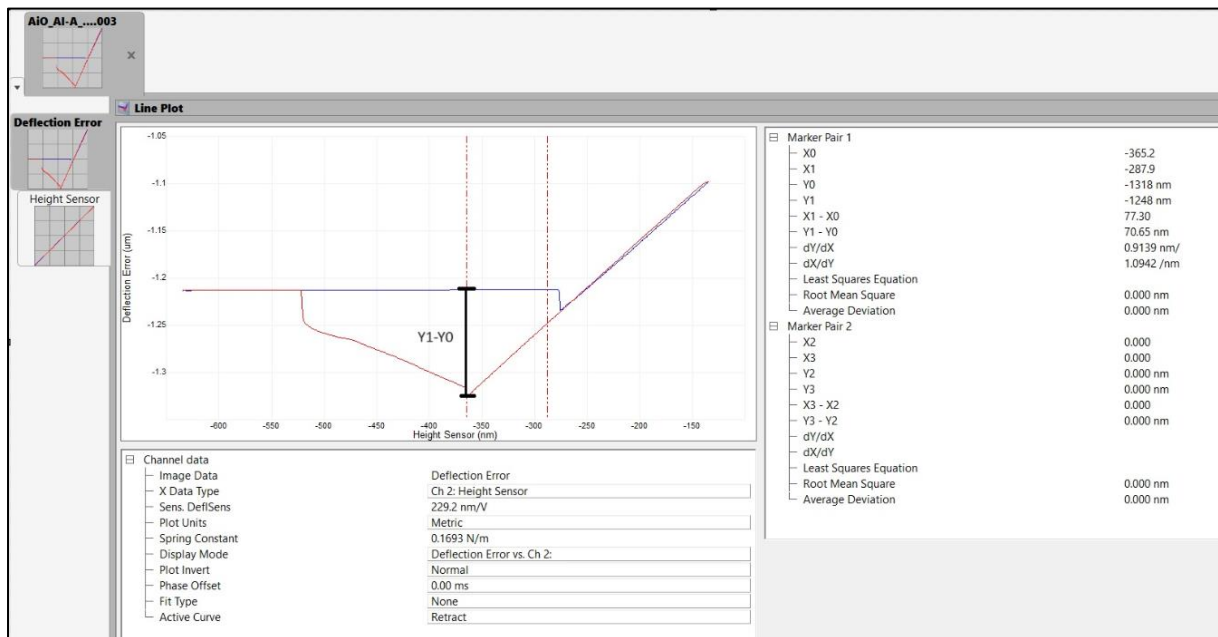


Slika 4.22: Postupak za određivanje kalibracijske konstante α [34]

4.4. Sila adhezije

Kako bi se mogla odrediti kalibracijska konstanta α , a posljedično i sila trenja, prema Varenbergovom proračunu [34] potrebno je poznavati vrijednost normalne sile F_N , vrijednost sile adhezije F_A te nagib kalibracijskog uzorka TGF11 koji iznosi $54^\circ 44'$, odnosno $0,955$ rad. Kako je već objašnjeno u potpoglavlju 4.2, sila adhezije ima veliki utjecaj na mikro- i nanorazini te je ista izmjerena prilikom kalibracije normalne sile. Na Slici 4.23 prikazan je onda dijagram pomoću kojeg je određena sila adhezije za osjetnik Aio-Al A. Na slici se mogu vidjeti i dvije okomite isprekidane crvene linije koje predstavljaju progib osjetnika kada on dođe u kontakt s materijalom, odnosno te dvije linije predstavljaju vrijednosti Y_0 i Y_1 , tj. utjecaj adhezije na progib osjetnika. Nadalje, određeno je da $Y_1 - Y_0$ iznosi $70,65$ nm, a potrebno je odrediti vrijednost sile adhezije u nanonjutnima. S obzirom da je izmjerena osjetljivost progiba osjetnika Aio-Al A $s = 229,2$ nm/V, te dijeljenjem $Y_1 - Y_0$ s tom osjetljivošću dobiva se iznos napona koji iznosi $0,31$ V koji se zatim množi s normalnom konstantom krutosti osjetnika $k_N = 38,80356$ nN/V što daje vrijednost sile adhezije $F_A = 12,03$ nN.

Ista je vrijednost sile adhezije analogno dobivena i za osjetnik Aio-Al B.



Slika 4.23: Sila adhezije za osjetnik Aio-Al A

U dosadašnjem dijelu rada opisane su metode kalibracije osjetnika pretražnog mikroskopa kao i utjecaj adhezije na mikro- i nanorazini što su sve važni čimbenici za dobivanje krajnjeg rezultata, a to je izmjerena sila trenja. U sljedećem su poglavlju opisani rezultati eksperimentalnih mjerenja.

5. REZULTATI EKSPERIMENTALNIH MJERENJA

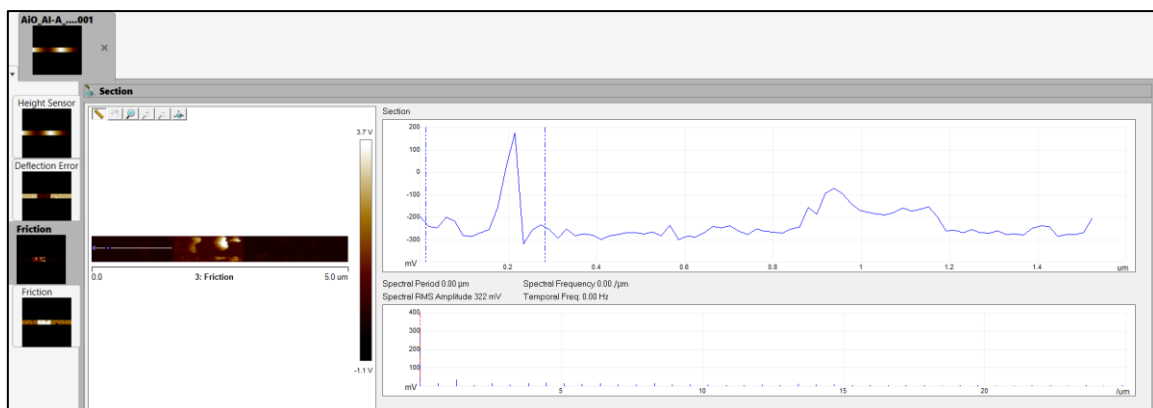
Nakon što je napravljena kalibracija normalne sile svih šest osjetnika te kalibracija poprečne sile osjetnika Aio-Al A i Aio-Al B, koja je objašnjena u potpoglavlju 5.1, odrađena su eksperimentalna mjerenja sile trenja u 50 eksperimentalnih točaka dobivenih CVT DoE metodom na dvama uzorcima tankih filmova: aluminijevom oksidu (Al_2O_3) te nehrđajućem čeliku (SS). Mjerenja u svakoj točki ponovljena su pet puta, što sveukupno daje 500 mjerenja. Rezultati eksperimentalnih mjerenja sile adhezije prikazani su u potpoglavlju 5.2, a način eksperimentalnog mjerenja sile trenja opisan je u potpoglavlju 5.3.

5.1. Kalibracijska mjerenja

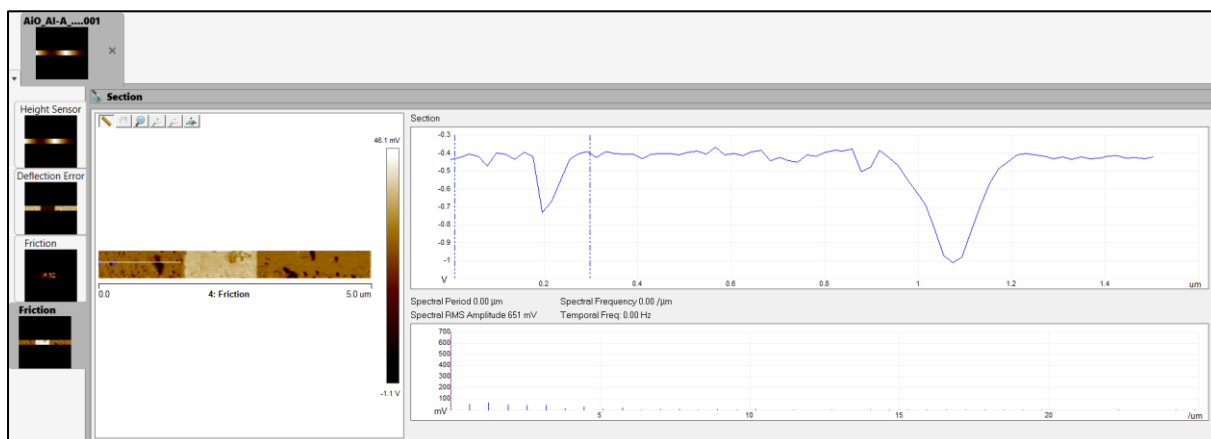
Kalibracija poprečne sile važna je kako bi se odredila kalibracijska konstanta α pomoću koje se određuje sila trenja. Na Slici 5.1 prikazana je topologija kalibracijskog uzorka TGF11. Topologija kalibracijskog uzorka TGF11 je povoljna radi svoje geometrije, gdje ravnina (100) predstavlja ravnu površinu, a ravnina (111) nagib, odnosno kosu površinu preko kojih prelazi/pretražuje osjetnik. Nadalje, na Slici 5.1 u lijevom gornjem kutu nalaze se četiri slike:

- prva je *Height Sensor* koji predstavlja topologiju uzorka, tj. signal lasera u normalnom smjeru;
- druga je *Deflection Error* koji predstavlja kašnjenje signala radi greške;
- treći je *Trace Friction* koji predstavlja signal lasera u bočnom smjeru prema naprijed;
- četvrti je *Retrace Friction* koji predstavlja signal lasera u bočnom smjeru prema nazad.

Dijagram na Slici 5.1 desno prikazuje signal u mV kada osjetnik prelazi preko ravne površine (100) kalibracijskog uzorka (*Trace signal*) koji mora biti jednak zrcaljenim vrijednostima signala u mV kada se osjetnik vraća (*Retrace signal*). Zrcaljeni signal prikazan je na Slici 5.2.



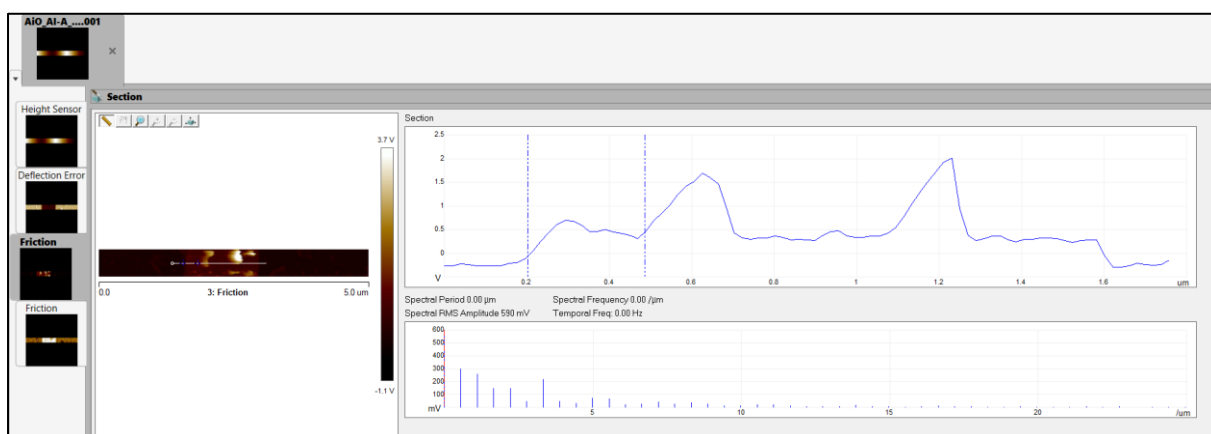
Slika 5.1: TGF11 (100) Trace signal – osjetnik Aio-Al A



Slika 5.2: TGF11 (100) Retrace signal – osjetnik Aio-AI A

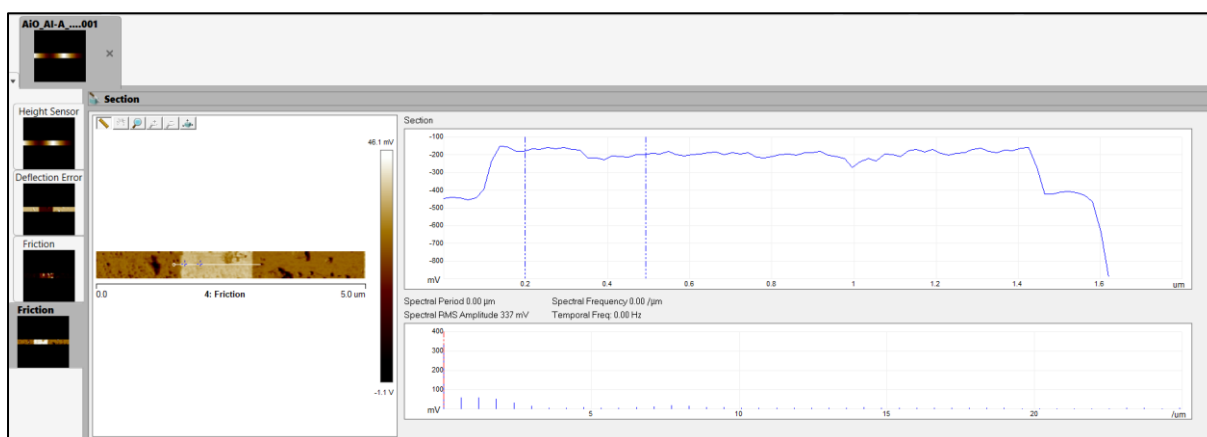
Iz Slika 5.1 te 5.2 može se primijetiti da signali nisu u potpunosti zrcaljeni radi vanjskih utjecaja i osjetljivosti samog instrumenta na vlagu, temperaturu, itd. Nadalje, *Trace* i *Retrace* signali daju vrijednosti Δ_o^{flat} prema Varenbergu [34] koji bi se trebali nalaziti oko 0 mV. Kada je na osjetnik Aio-AI A djelovala sila od 100 nN, dobila se vrijednost Δ_o^{flat} od - 2 mV.

Isti je proces potrebno napraviti i za skeniranje osjetnika po kosoj površini (111) TGF11 uzorka. Na Slici 5.3 prikazan je signal u mV kada osjetnik prelazi preko kose površine (111) kalibracijskog uzorka (*Trace signal*).



Slika 5.3: TGF11 (111) trace signal – osjetnik Aio-AI A

Slika 5.4 prikazuje, pak, vrijednosti signala u mV kada se osjetnik vraća (*Retrace signal*) po kosoj površini (111) kalibracijskog uzorka i kada na njega djeluje normalna sila od 100 nN.



Slika 5.4: TGF11 (111) retrace signal – osjetnik Aio-Al A

Pomoću signala dobivenih na kosoj površini kalibracijskog uzorka TGF11 moguće je odrediti Δ_o^* i W_o . W_o predstavlja srednju vrijednost signala između *Trace* i *Retrace* (111) signala, dok Δ_o^* predstavlja vrijednost kojom je graf kalibracije pomaknut od x-osi, tj. od vrijednosti 0. Kada na kalibracijski uzorak TGF11 djeluje sila od 100 nN, dobije se $\Delta_o^* = 682,5$ mV te $W_o = 155$ mV. Budući da su poznate vrijednosti Δ_o^{flat} , Δ_o^* i W_o te uz $F_N = 100$ nN, $F_A = 12,03$ nN te $\theta = 0,955$ rad, moguće je riješiti kvadratnu jednadžbu (4.22). Važno je napomenuti da su sve veličine uvrštene u njutnima ili voltima. Rješenje kvadratne jednadžbe (4.22) su koeficijenti trenja $\mu_1 = 8,19$ i $\mu_2 = 0,101$. Sljedeći korak je provjera koji od ta dva koeficijenta zadovoljava uvjet da je manji od $\frac{1}{\tan \theta} = 0,707$. Jasno je da taj uvjet zadovoljava koeficijent trenja $\mu_2 = 0,101$. Nadalje, kalibracijska konstanta α dobije se iz jednadžbe (4.20) uvrštavanjem koeficijent trenja μ_2 te dijeljenjem s W_o te ista iznosi $\alpha = 0,2134$ $\mu\text{N/V}$. Zatim je isti postupak napravljen i za određivanje kalibracijske konstante α kada na kalibracijski uzorak djeluje normalna sila od 200 nN te je tada dobivena vrijednost kalibracijske konstante $\alpha = 0,1942$ $\mu\text{N/V}$. Za kalibracijsku konstantu koja će se koristiti za izračun sile trenja korištena je srednja vrijednost dviju izmjerenih kalibracijskih konstanti te ona iznosi $\alpha = 0,2038$ $\mu\text{N/V}$. Za osjetnik Aio-Al B napravljen je isti postupak određivanja kalibracijske konstante α kao i za osjetnik Aio-Al A. Dobivena vrijednost kalibracijske konstante za osjetnik Aio-Al B iznosi $\alpha = 1,18$ $\mu\text{N/V}$.

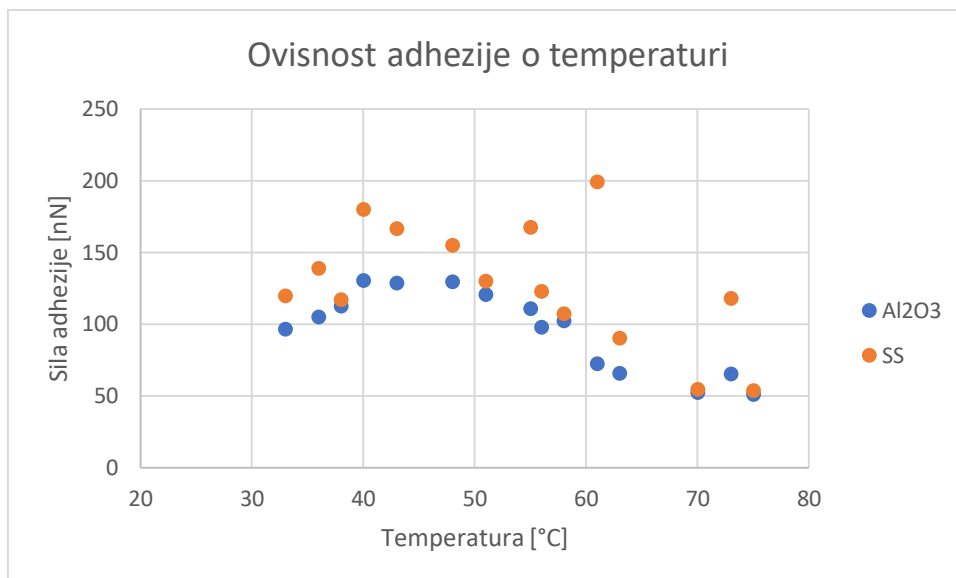
5.2. Mjerenje adhezije

Budući da adhezija ima veliki utjecaj na mikro- i nanorazini, a kako na nju utječe temperatura, u ovom je eksperimentu promatran i utjecaj temperature na adheziju. Tijekom eksperimentalnog mjerenja uzorci se nalaze na grijaču kako je prikazano na Slici 5.5. Temperatura se povećavala od 33°C do 75°C. Adhezija je mjerena u točkama CVT-a (Slika 3.2) gdje je različita temperatura, a na način opisan u potpoglavlju 4.4.



Slika 5.5: Uzorci aluminijevog oksida i nehrđajućeg čelika na grijaču

Slika 5.6 prikazuje na taj način eksperimentalno utvrđenu ovisnost adhezije o temperaturi za oba uzorka, Al_2O_3 i nehrđajući čelik SS.



Slika 5.6: Ovisnost adhezije o temperaturi za oba uzorka

Utjecaj temperature na adheziju je (većinski) uslijed smanjenja adsorbiranog sloja vode, koji s porastom temperature hlapi. Iz dijagrama sa Slike 5.6 može se zaključiti da se na uzorku nehrđajućeg čelika javlja veća sila adhezije. Nadalje, sila adhezije u ovisnosti o temperaturi na uzorku Al₂O₃ ima približan oblik parabole, te maksimalnu vrijednost od 130,4 nN pri temperaturi od 40 °C. S druge strane, sila adhezije jako varira u ovisnosti o temperaturi na uzorku nehrđajućeg čelika (SS).

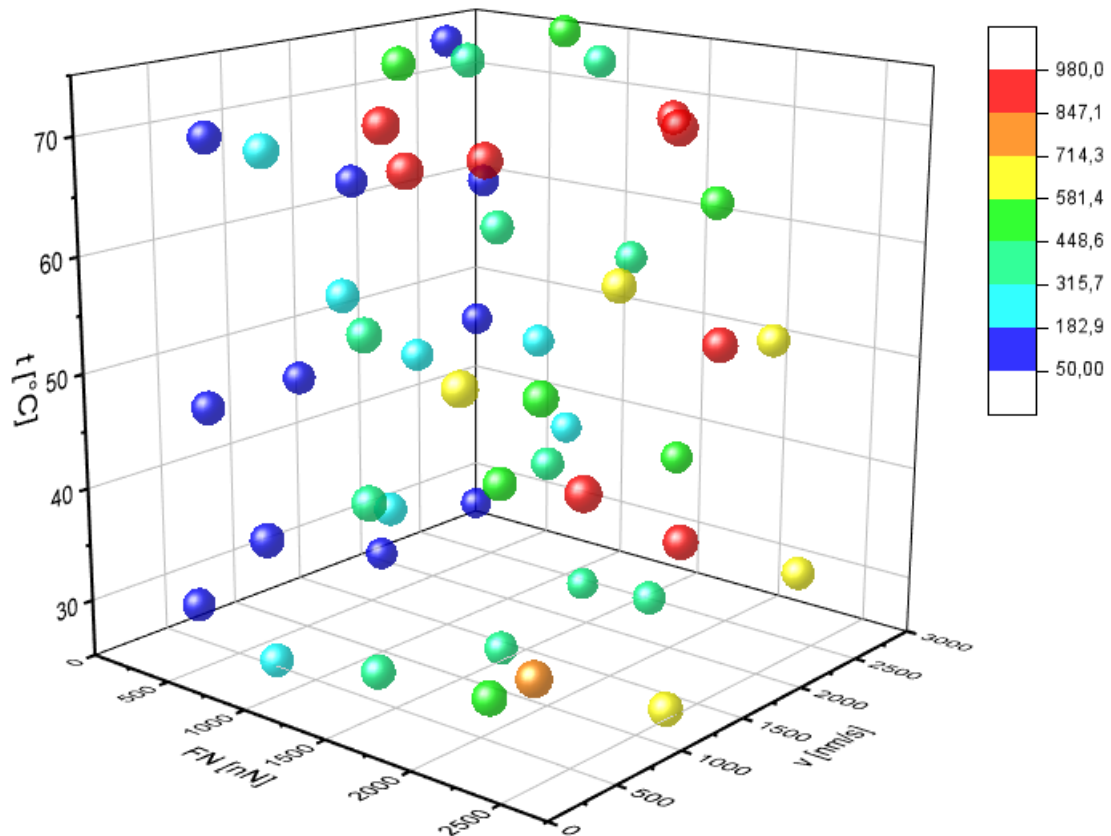
5.3. Sila trenja

Da bi se odredila vrijednost sile trenja F_{tr} na uzorcima tankih filmova (aluminijevog oksida i nehrđajućeg čelika), najprije je potrebno, kako je objašnjeno u potpoglavlju 2.1.2, od *Trace Friction* signala oduzeti *Retrace Friction signal* i podijeliti ga s 2 da bi se dobila srednja vrijednost signala po površini uzorka, a zatim dobivenu vrijednost pomnožiti s kalibracijskom konstantom α :

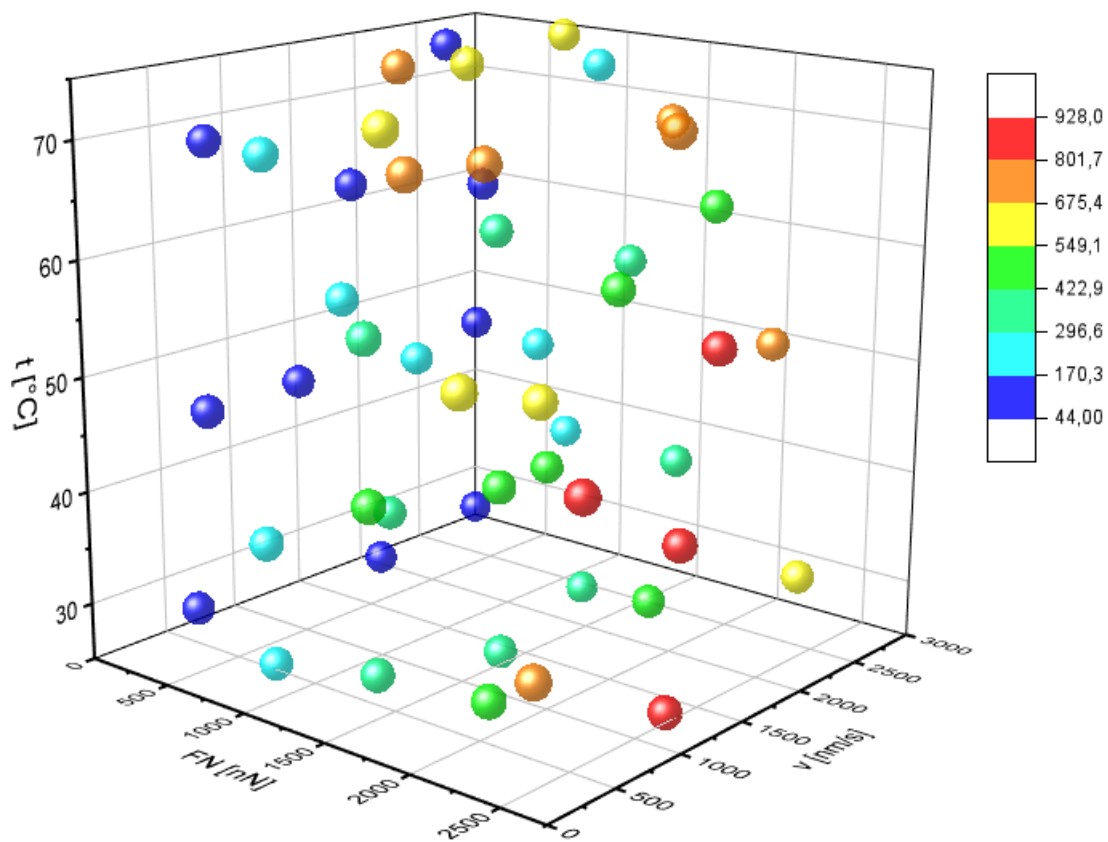
$$\frac{trace-retrace}{2} [V] \cdot \alpha \left[\frac{\mu N}{V} \right] = F_{tr} [\mu N] \quad (5.1)$$

Trace i *Retrace* signali iščitani su pomoću softvera *Gwyddion* [35].

Na Slici 5.6 prikazana je sila trenja izmjerena na uzorku aluminijevog oksida, dok Slika 5.7 prikazuje silu trenja izmjerenu na uzorku nehrđajućeg čelika za pedeset mjernih točaka dobivenih DoE CVT metodom u višedimenzijском prostoru promjenjivih parametara. Izmjerena sila trenja na uzorku aluminijevog oksida iznosi 52,488 ... 979,369 nN, dok izmjerena sila trenja na uzorku nehrđajućeg čelika iznosi 45,242 ... 926,559 nN.



Slika 5.7: Bojama označena distribucija eksperimentalno određenih vrijednosti sile trenja F_{tr} za mjerne točke na uzorku Al_2O_3 u odnosu na promatrane parametre



Slika 5.8: Bojama označena distribucija eksperimentalno određenih vrijednosti sile trenja F_{tr} za mjerne točke na uzorku nehrđajućeg čelika u odnosu na razmatrane parametre

Iz dijagrama na Slikama 5.7 i 5.8 može se zaključiti da je sila trenja veća kod većih vrijednosti normalne sile i manjih brzina klizanja, dok je sila trenja manja kod manjih vrijednosti normalne sile i većih brzina klizanja.

Budući da se iz rezultata prikazanih na Slikama 5.7 i 5.8 ne može jednoznačno odrediti korelacija između sile trenja i tri ulazna parametra (temperature, brzine klizanja i normalne sile), u sljedećem je poglavlju opisana analiza podataka eksperimentalnih mjerenja pomoću strojnog učenja i umjetne inteligencije s ciljem dobivanja statističkih modela ovisnosti trenja na nanoskali u višedimenzionalnom prostoru definiranom trima ulaznim parametrima

6. ANALIZA PODATAKA EKSPERIMENTALNIH MJERENJA

Kao početni korak prije analize podataka eksperimentalnih mjerenja, a da bi se dobio uvid u osjetljivost sile trenja o ulaznim parametrima napravljena je statistička analiza, odnosno matrica korelacije pomoću softvera *OriginPro* [36]. Matrica korelacije je statistički alat koji pokazuje u kojoj su mjeri promjene vrijednosti jedne varijable povezane s promjenama vrijednosti druge varijable. Korelacijska matrica izračunava linearni odnos između dvije varijable. Matrica se konstruira izračunavanjem Pearsonovog koeficijenta korelacije za svaki par varijabli i njegovim umetanjem u odgovarajuću ćeliju matrice [37].

Općenito, Pearsonov koeficijent korelacije r računa se prema formuli [37]:

$$r = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}} \quad (6.1)$$

gdje su x_i i y_i varijable koje treba povezati, dok su \bar{x} i \bar{y} njihove pojedinačne srednje vrijednosti u cijelom nizu od n podataka. U jednadžbi (6.1) brojnik predstavlja kovarijancu dviju varijabli, dok je nazivnik umnožak korijena varijanci svake varijable. Nadalje, vrijednost Pearsonovog koeficijenta korelacije je broj iz intervala $[-1, 1]$. Što je r bliže 1 ili -1, to je jača linearna korelacija (proporcionalna, odnosno obrnuto proporcionalna) ovisne varijable o promatranom parametru. Ako je vrijednost nula ili blizu nule, nema korelacije [37].

U Tablicama 6.1 i 6.2 prikazane su matrice korelacije između sile trenja, sile adhezije, temperature, normalne sile i brzine klizanja za uzorke tankih filmova aluminijskog oksida i nehrđajućeg čelika u mjernim točkama dobivenim CVT DoE metodom. Može se zaključiti da na silu trenja F_{tr} za oba uzorka, od svih utjecajnih parametara, najveću pozitivnu korelaciju ima normalna sila F_N , s vrijednostima Pearsonovog koeficijenta u rasponu od 0,86 za Al_2O_3 do 0,89 za SS (nehrđajući čelik). To bi značilo da s povećanjem normalne sile raste i sila trenja, i obrnuto. Nadalje, korelacija temperature t sa silom trenja F_{tr} je također pozitivna, ali s puno manjim vrijednostima Pearsonovog koeficijenta, točnije 0,229 za Al_2O_3 te 0,156 za SS. Rastuća temperatura potiče relativno smanjenje sile adhezije F_A , što uzrokuje i smanjeni utjecaj na silu trenja (0,001 za Al_2O_3 i 0,05 za SS). Kada se, pak, promatra korelacija trenja s brzinom klizanja v , evidentne su negativne vrijednosti korelacije od - 0,15 i - 0,119 za Al_2O_3 i SS, što znači da se s povećanjem brzine klizanja smanjuje sila trenja.

Tablica 6.1: Matrica korelacije s Pearsonovim korelacijskim koeficijentima za silu trenja i utjecajne parametre u mjernim točkama dobivenim CVT DoE metodom za uzorak od aluminijevog oksida

Al ₂ O ₃		t	F_N	v	F_{tr}	F_A
	t	1	-0,060	0,042	0,229	0,028
	F_N	-0,060	1	-0,110	0,857	0,102
	v	0,042	-0,110	1	-0,150	0,043
	F_{tr}	0,229	0,857	-0,150	1	0,001
	F_A	0,028	0,102	0,043	0,001	1

Tablica 6.2: Matrica korelacije s Pearsonovim korelacijskim koeficijentima za silu trenja i utjecajne parametre u mjernim točkama dobivenim CVT DoE metodom za uzorak od nehrđajućeg čelika

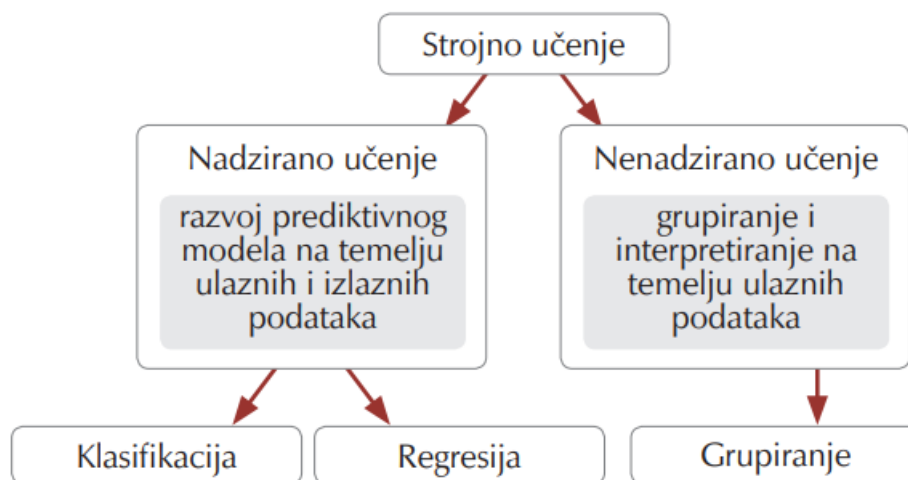
SS		t	F_N	v	F_{tr}	F_A
	t	1	-0,060	0,042	0,156	0,058
	F_N	-0,060	1	-0,110	0,888	0,093
	v	0,042	-0,110	1	-0,119	0,035
	F_{tr}	0,156	0,888	-0,119	1	0,050
	F_A	0,058	0,093	0,035	0,050	1

Međutim, kao što je gore navedeno, korelacije prikazane u Tablici 6.1 i Tablici 6.2, unatoč pružanju važnih uvida, samo su linearne statističke aproksimacije prvog reda generaliziranih trendova proučavane ovisnosti trenja na nanorazini u višedimenzijском prostoru definiranom trima ulaznim parametrima i utjecajem adhezije, pa su podatci dobiveni eksperimentalnim mjerenjima analizirani zatim korištenjem različitih metoda strojnog učenja i umjetne inteligencije kako bi se dobili prediktivni modeli koji povezuju ulazne parametre (temperatura, brzina klizanja i normalna sila) s vrijednošću sile trenja na mikro- i nanorazini. Ovi uvidi pružaju temelj za dubinsko razumijevanje nanotribološkog ponašanja svakog od analiziranih uzoraka u razmatranom rasponu vrijednosti utjecajnih parametara i omogućuju kvantitativnu i kvalitativnu karakterizaciju utjecaja svakog od tih parametra [17].

Strojno učenje je grana umjetne inteligencije koja se bavi oblikovanjem algoritama koji svoju učinkovitost poboljšavaju na temelju empirijskih podataka, tj. algoritmi strojnog učenja „uče“ računala da rade ono što je ljudima prirodno: uče iz iskustva. Algoritmi strojnog učenja koriste računalne metode za "učenje" izravno iz podataka, bez oslanjanja na unaprijed određenu jednadžbu kao model. Algoritmi prilagodljivo (adaptivno) poboljšavaju svoje performanse

povećava broj uzoraka dostupnih za učenje, a njihov je zadatak pronaći uzorke i poveznice u podacima te na temelju toga steći uvid i zatim odlučiti i predviđati [38].

Strojno učenje koristi dvije tehnike za učenje: nadzirano učenje (kao što su klasifikacija³ i regresija⁴), koje trenira model na poznatim ulaznim i izlaznim podacima tako da može predvidjeti buduće rezultate, i nenadzirano učenje (kao što je grupiranje), koje pronalazi skrivene uzorke ili intrinzične strukture u ulaznim podacima. Podjela strojnog učenja s obzirom na tehnike za učenje prikazana je na Slici 6.1 [38].



Slika 6.1: Podjela strojnog učenja [39]

Općenito, algoritmi strojnog učenja za regresijske probleme daju takozvano rješenje crne kutije (engl. *Black box*) koje daje prediktivne rezultate, ali, nažalost, ne daje nikakav funkcionalni matematički oblik temeljnih odnosa u podacima [17]. Algoritmi strojnog učenja korišteni u ovom radu su linearna regresija (engl. *Linear regression*), višeslojni perceptron (engl. *Multilayer perceptron*), šuma nasumičnog odlučivanja (engl. *Random forest*), stabla nasumičnog odlučivanja (engl. *Random trees*) i metoda potpornih vektora (engl. *Support Vector Machines - SVM*). Svi su oni korišteni za razvoj modela pripremom podataka, treniranjem algoritama s podacima i optimizacijom svakog od njihovih parametara, kako bi se razvili modeli, čiji su najbolji dobiveni rezultati prikazani u sljedećim poglavljima.

³ Klasifikacija ili razvrstavanje je postupak u kojem se ulazni podatci razvrstavaju u kategorije (klase) [39].

⁴ Regresija je postupak u kojem se na temelju ulaznih podataka predviđaju kontinuirane vrijednosti izlaznih varijabli [39].

Nadalje, osim algoritama strojnog učenja, u ovom su radu korišteni i algoritmi umjetne inteligencije koji osiguravaju evolucijski pristup razvoju računalnih programa ili matematičkih izraza koji su, u usporedbi s modelima crne kutije izvedenih iz strojnog učenja, izravno upotrebljivi i razumljivi ljudima u matematičkom ili algoritamskom obliku [17]. Algoritmi umjetne inteligencije korišteni u ovom radu su dobno slojevita struktura populacije (engl. *Age-layered population structure*), gramatička evolucija (engl. *Grammatical evolution*), genetičko programiranje – simbolička regresija (engl. *Genetic programming - symbolic regression*) te selekcija potomaka (engl. *Offspring selection genetic programming*).

Kvaliteta rezultata provedene numeričke analize procijenjena je putem usporedne statističke validacije svakog od korištenih algoritama, i to posebno za modele strojnog učenja i posebno za modele umjetne inteligencije.

6.1. Testni podatci – eksperimentalna mjerenja

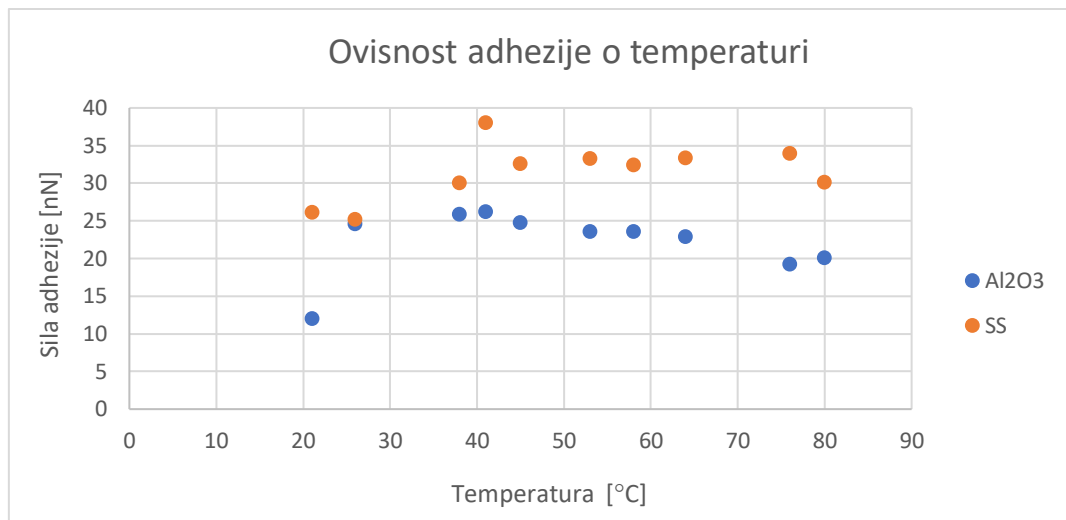
Testni podatci predstavljaju neviđeni skup podataka čije rezultate razvijeni model treba predvidjeti na najbolji mogući način. Ovaj skup podataka pruža referentnu vrijednost za sve razvijene modele, omogućujući temeljito testiranje njihove prediktivne izvedbe. Prediktivna izvedba svakog modela pomno je ispitana na temelju predviđanja sile trenja iz ulaznih parametara testnog skupa podataka. Pritom su mjerenja provedena korištenjem opisane metodologije iz ranijih poglavlja, uključujući opisane korekcije faktora kalibracije [17].

Testni su podatci (vrijednosti sile trenja) izmjereni u 20 mjernih točaka dobivenih DoE Monte Carlo metodom u višedimenzijском prostoru promjenjivih parametara. Generator slučajnih brojeva (Monte Carlo - MC) implementiran je u GoSumD⁵ softveru [17] za jednostavno slučajno uzorkovanje u granicama razmatranih varijabli koje utječu na parametre F_N , ν i t . Generator slučajnih brojeva je podskup statističke populacije u kojoj svaki član podskupa ima jednaku vjerojatnost da bude izabran, odnosno Monte Carlo metodom generira se zadani skup slučajnih brojeva od 0 do 1, nakon čega se skaliraju u raspon definiranih varijabli u ovisnosti o broju dimenzija, tj. koordinata promatranog višedimenzijского prostora [40].

Nadalje, i za testna mjerenja promatran je utjecaj temperature na silu adhezije. Iz dijagrama sa Slike 6.2 može se zaključiti da se na uzorku nehrđajućeg čelika javlja veća sila adhezije te da se maksimalna vrijednost sile adhezije postiže pri temperaturi od 41 °C za oba uzorka, nakon

⁵ GoSumD je komercijalni softver razvijen za analizu podataka, modeliranje dinamičkih i višedimenzijских sustava i strojno učenje [17].

čega dolazi do stabilizacije. U svakom slučaju, može se zaključiti da, iako polazeći od različitih vrijednosti, trend varijabilnosti sile adhezije s temperaturom sličan je u oba skupa mjerenja (na temelju CVT-a i oni koje se razmatraju u ovom skupu testnih podataka temeljenom na MC-u).

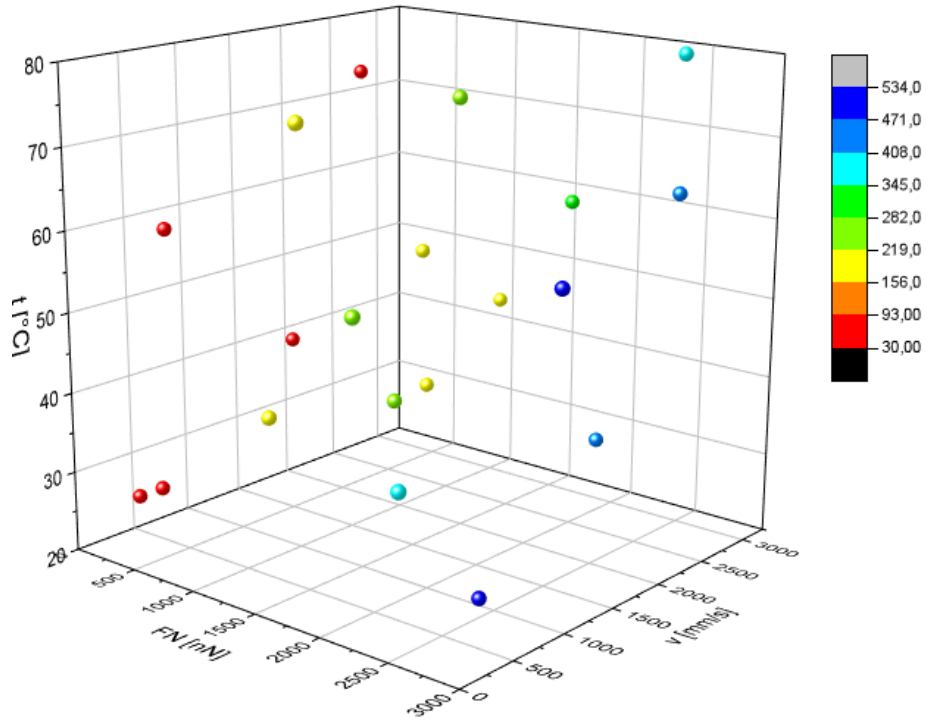


Slika 6.2: Ovisnost adhezije o temperaturi za oba uzorka - testni skup podataka

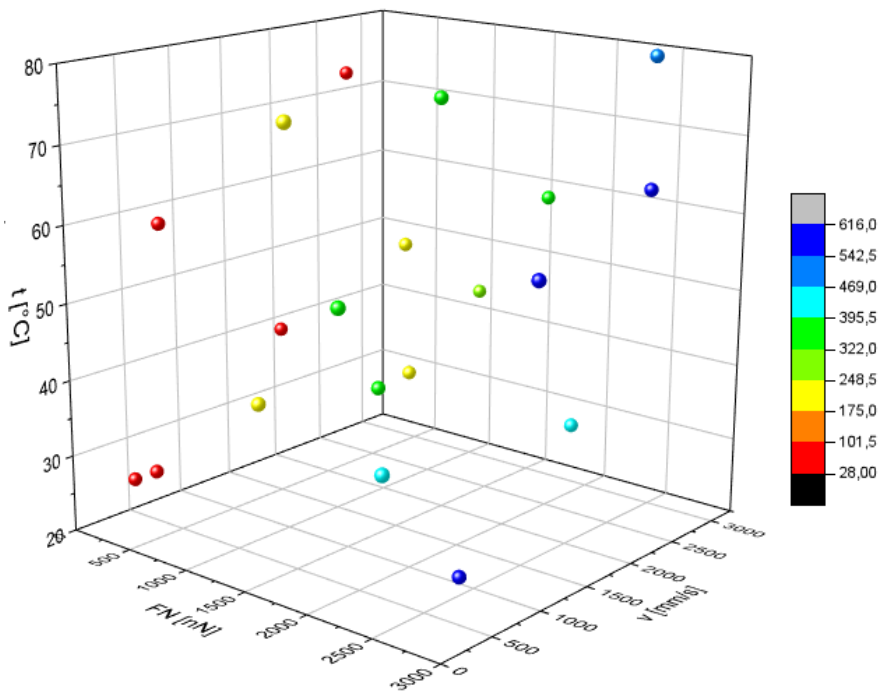
Na Slici 6.3 prikazana je sila trenja izmjerena na uzorku aluminijevog oksida, dok Slika 6.4 prikazuje izmjerenu silu trenja na uzorku nehrđajućeg čelika za 20 mjernih točaka (testni skup podataka) dobivenih DoE Monte Carlo metodom u višedimenzijском prostoru promjenjivih parametara.

Izmjerena sila trenja na uzorku aluminijevog oksida iznosi 30,18 ... 533,95 nN, dok izmjerena sila trenja na uzorku nehrđajućeg čelika iznosi 28,36 ... 615,37 nN. I za izmjerenu silu trenja na 20 testnih točaka ne može se odrediti korelacija s trima ulaznim parametrima, već se samo može reći da je sila trenja veća pri većoj vrijednosti normalne sile te manja pri manjoj vrijednosti normalne sile.

Nadalje, da bi se i za 20 testnih točaka dobivenih MC DoE metodom dobio uvid u osjetljivost sile trenja o normalnoj sili, temperaturi, brzini klizanja i sili adhezije (utjecajni parametri), također je napravljena matrica korelacije. U Tablicama 6.3 i 6.4 prikazane su matrice korelacije za uzorke aluminijevog oksida i nehrđajućeg čelika. Najveću korelaciju s trenjem ima normalna sila F_N , i to s vrijednošću Pearsonovog koeficijenta od 0,947 za Al₂O₃ te 0,972 za SS. Za razliku od CVT mjernih točaka, kod MC mjernih točaka puno je veća korelacija sile adhezije F_A sa silom trenja, što za posljedicu ima smanjenje utjecaja temperature t na silu trenja. Kada se, pak, promatra korelacija sile trenja i brzine klizanja v , utjecaj za oba uzroka je također pozitivan, što znači da s povećanjem brzine raste sila trenja.



Slika 6.3: Bojama označena distribucija eksperimentalno određenih vrijednosti sile trenja F_{tr} za mjerne točke (testni skup podataka) na uzorku Al_2O_3 u odnosu na promatrane parametre



Slika 6.4: Bojama označena distribucija eksperimentalno određenih vrijednosti sile trenja F_{tr} za mjerne točke (testni skup podataka) na uzorku nehrđajućeg čelika u odnosu na razmatrane parametre

Tablica 6.3: Matrica korelacije s Pearsonovim korelacijskim koeficijentima za silu trenja i utjecajne parametre u mjernim točkama dobivenim MC DoE metodom za uzorak od aluminijevog oksida

Al ₂ O ₃		t	F_N	ν	F_{tr}	F_A
	t	1	0,187	0,343	0,035	-0,001
	F_N	0,187	1	0,200	0,947	0,303
	ν	0,343	0,200	1	0,281	0,051
	F_{tr}	0,035	0,947	0,281	1	0,294
	F_A	-0,001	0,303	0,051	0,294	1

Tablica 6.4: Matrica korelacije s Pearsonovim korelacijskim koeficijentima za silu trenja i utjecajne parametre u mjernim točkama dobivenim MC DoE metodom za uzorak od nehrđajućeg čelika (SS)

SS		t	F_N	ν	F_{tr}	F_A
	t	1	0,187	0,343	0,138	0,063
	F_N	0,187	1	0,200	0,972	0,395
	ν	0,343	0,200	1	0,307	0,112
	F_{tr}	0,138	0,972	0,307	1	0,449
	F_A	0,063	0,395	0,112	0,449	1

6.2. Priprema podataka za strojno učenje i umjetnu inteligenciju

Nakon što je napravljena početna statistička analiza eksperimentalnih podataka pomoću matrice korelacije i nakon što je izmjerena sila trenja za testiranje modela strojnog učenja i umjetne inteligencije (testni skup podataka), u ovom je potpoglavlju opisana priprema podataka za strojno učenje i umjetnu inteligenciju. Ulazni podatci grupirani su u tri skupa podataka kako bi se spriječio *overfitting*, odnosno nepoželjno ponašanje strojnog učenja koje se događa kada model strojnog učenja daje točna predviđanja za podatke koje je „naučio“, ali ne i za nove podatke. Model prvo uči na poznatom skupu podataka i zatim, na temelju tih informacija, model pokušava predvidjeti ishode za nove skupove podataka. *Overfit* model može dati netočna predviđanja i ne može dobro funkcionirati za sve vrste novih podataka [41].

Tri korištena skupa podataka su:

1. skup podataka za učenje;
2. skup podataka za validaciju;
3. skup podataka za testiranje.

Skup podataka za učenje daje ulazne informacije za proces učenja i zahtijeva najveću dostupnu količinu podataka (teoretski, ako bi se algoritam mogao uvježbati na svim mogućim ishodima, imao bi savršenu prediktivnu izvedbu), skup podataka za provjeru valjanosti (validaciju) potreban je za optimizaciju parametara algoritma testiranjem naučenog modela na ovom skupu nakon svake iteracije učenja, te, na kraju, skup podataka za testiranje je potpuno izostavljen iz bilo kakve interakcije s algoritmom tijekom faze učenja i koristi se samo kao neovisna, realna prezentacija scenarija stvarnog svijeta za testiranje izvedbe razvijenog modela. Općenito, omjeri između ovih skupova podataka koriste se kao 2/3 cijelog skupa podataka za učenje i 1/3 za skupove podataka za validaciju [17]. To bi značilo da algoritam uči na 2/3 od 50 mjernih točaka dobivenih CVT DoE metodom kako za uzorak aluminijevog oksida tako i za uzorak nehrđajućeg čelika, dok preostala 1/3 od 50 mjernih točaka svakog od uzorka služi za validaciju. Skup podataka za testiranje sastoji se od 20 mjernih točaka dobivenih MC DoE metodom koji je opisan u prethodnom potpoglavlju.

S obzirom da ulazni podatci (temperatura, normalna sila i brzina klizanja) imaju različite raspone vrijednosti, priprema podataka prethodi strojnom učenju, što uključuje korištenje tehnika za promjenu veličine ulaznih i izlaznih parametara, kao što su tehnike normalizacije i standardizacije⁶. Normalizacija obično znači skaliranje vrijednosti parametra između 0 i 1, dok standardizacija transformira podatke tako da imaju srednju vrijednost nula i standardnu devijaciju jedan. Zapravo, neskaliрани ulazni parametri mogu rezultirati sporim ili nestabilnim procesom učenja [17]. Ovisno o korištenoj metodi strojnog učenja/umjetne inteligencije, podatci u ovom radu su stoga standardizirani ili normalizirani.

Normalizacija podataka se izračunava kao [43]:

$$x_{norm} = \frac{x - x_{min}}{x_{max} - x_{min}} \quad (6.2)$$

gdje je x_{norm} normalizirana vrijednost varijable x , a x_{min} i x_{max} su minimalna i maksimalna vrijednost varijable x .

Standardizacija podataka računa se prema izrazu [43]:

$$z_i = \frac{x_i - \bar{x}}{\sigma} \quad (6.3)$$

⁶ Standardizacija je statistička tehnika koja se koristi u pretprocesiranju podataka kako bi se različite varijable učinile usporedivima [42].

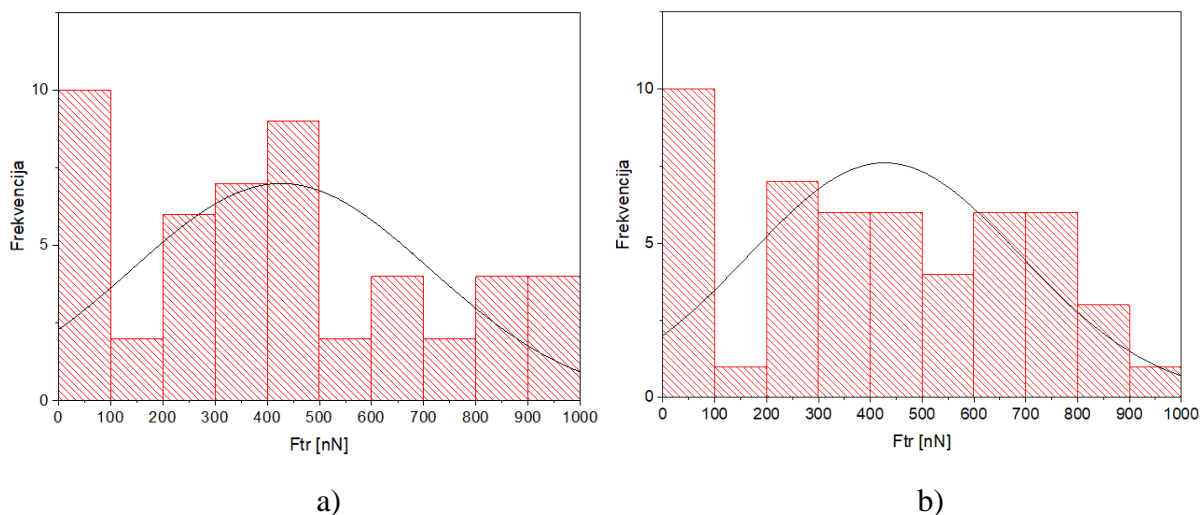
gdje je x_i mjerna točka, \bar{x} srednja vrijednost izmjerene vrijednosti u mjernoj točki te σ standardna devijacija. Standardna devijacija označava mjeru raspršenosti podataka skupa od n podataka, a interpretira se kao odstupanje od prosjeka. Formula prema kojoj se računa standardna devijacija glasi [43]:

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n}} \quad (6.4)$$

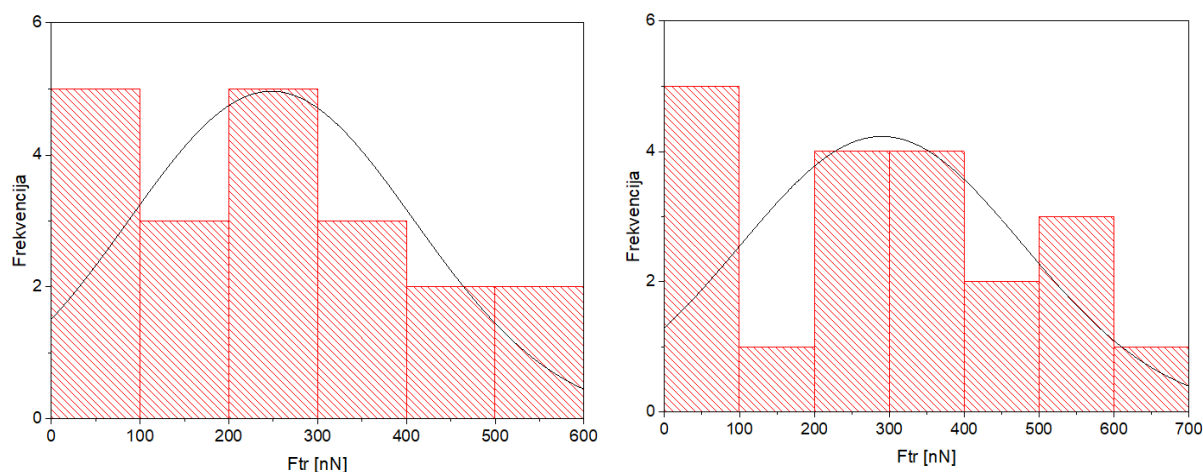
6.2.1. Distribucija mjerenja

Budući da raspon vrijednosti neobrađenih podataka uvelike varira, većina algoritama strojnog učenja, odnosno umjetne inteligencije, neće ispravno raditi bez normalizacije. Eksperimentalni podatci korišteni za strojno učenje također se moraju procijeniti u smislu odgovarajućih karakteristika normalnosti definiranih parametrima zakrivljenosti i kurtoze [44]. Zakrivljenost je mjera simetrije, točnije, nedostatka simetrije. Distribucija ili skup podataka je simetričan ako izgleda isto i lijevo i desno od središnje točke [45]. Simetrična normalna distribucija ima svojstvo da sadrži srednje vrijednosti i medijane distribucije na vrhu 'zvonolike krivulje'. Asimetrija za normalnu distribuciju je nula, a svi simetrični podaci trebaju imati asimetriju blizu nule. Negativne vrijednosti za asimetriju označavaju podatke koji su zakošeni ulijevo, a pozitivne vrijednosti za asimetriju označavaju podatke koji su zakošeni udesno. Pod zakrivljenim ulijevo, misli se na to je li lijevi rep duži u odnosu na desni rep. Slično tome, zakošeno udesno znači da je desni rep duži u odnosu na lijevi rep. Duljina repova opisuje se vrijednostima kurtoze [45].

Na Slikama 6.5 i 6.6 prikazani su histogrami za oba korištena uzorka te prosječna vrijednost, s pridruženim prilagođenim normalnim distribucijama izmjerenih vrijednosti sile trenja za skupove podataka za učenje (CVT DoE mjerne točke) i testiranje (MC DoE mjerne točke). Prilagođene krivulje normalne distribucije vizualno opisuju odgovarajuće razine zakrivljenosti i kurtoze za svako mjerenje. U prikazu CVT podataka na Slici 6.5, oba uzorka pokazuje veliku količinu pozitivne asimetrije. Na Slici 6.6 prikazani su histogrami i distribucije mjerenja za skup podataka za testiranje (MC), koji također pokazuju relativno visoku pozitivnu asimetriju za oba uzorka.



Slika 6.5: Histogrami i normalna distribucija izmjerene sile trenja u mjernim točkama dobivenim CVT DoE metodom na uzorcima Al₂O₃ a) i nehrđajućeg čelika b)



Slika 6.6: Histogrami i normalna distribucija izmjerene sile trenja u testnim mjernim točkama dobivenim MC DoE metodom na uzorcima Al₂O₃ a) i nehrđajućeg čelika b)

6.2.2. Binarno kodiranje

Binarno kodiranje također je jedan od postupaka pripreme podataka za strojno učenje kada se radi o skupnim ulaznim podacima (50 mjernih točaka izmjerenih na uzorku Al₂O₃ i 50 mjernih točaka izmjerenih na uzorku nehrđajućeg čelika, kao i 20 testnih mjernih točaka izmjerenih na uzorku Al₂O₃ i 20 testnih mjernih točaka izmjerenih na uzorku nehrđajućeg čelika). Budući da se radi o dva uzorka, odnosno materijala na kojem se računalo uči, važno je opisati svaku vrstu materijala koja ulazi u proces učenja. Binarno kodiranje preslikava svaku kategoriju u jedinstveni cijeli broj pomoću kodiranja oznake, a zatim taj cijeli broj pretvara u binarni prikaz

(0 ili 1). Jedinica označava prisutnost varijable, a nula odsutnost varijable [46]. Ovaj postupak dodaje korištenim modelima strojnog učenja još dvije varijable x_1 i x_2 , kako je prikazano u Tablici 6.5.

Tablica 6.5: Binarno kodiranje za korištene uzorke materijala tankih filmova u modelima skupnih podataka

	x_1	x_2
Al_2O_3	1	0
SS	0	1

6.3. Metrike

Odluka o odabiru najboljeg modela nije tako jednostavna kao što se može činiti, budući da se najbolja prilagodba i prediktivna izvedba određenog modela ne mogu procijeniti samo na temelju jedne metrike, već putem analize izlaza modela (uključujući grafički prikaz rezultata), pogrešaka i distribucije predviđanja. U ovom su radu, radi usporedbe modela strojnog učenja i umjetne inteligencije odnosno procjene pogreške pojedinog modela, korištene tri metrike: srednja apsolutna pogreška (engl. *Mean Absolute Error – MAE*), korijen srednje kvadratne pogreške (engl. *Root Mean Square Error – RMSE*) te koeficijent određenosti (engl. *R squared – R²*). Ove metrike govore koliko su točna predviđanja i kolika je količina odstupanja od stvarnih vrijednosti (eksperimentalno izmjerenih vrijednosti).

Srednja apsolutna pogreška (MAE) je jedna od najčešćih procjena pogreške koja predstavlja prosjek apsolutne vrijednosti razlika između predviđene i izmjerene veličine. Promjene kod MAE su linearne, pa su stoga i intuitivne. Nadalje, u MAE se različite pogreške ne ponderiraju, ali rezultati rastu linearno s povećanjem pogrešaka [47].

Srednja apsolutna pogreška računa se prema formuli [47]:

$$\text{MAE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - x_i| \quad (6.5)$$

gdje je y_i predviđena, a x_i eksperimentalno izmjerena veličina u skupu podataka koji se sastoji od n članova.

Korijen srednje kvadratne pogreške (RMSE) predstavlja standardnu devijaciju pogreške predviđanja koja predstavlja mjeru koliko su podatkovne točke udaljene od regresijske linije,

odnosno RMSE predstavlja raspršenost pogrešaka. Drugim riječima RMSE je korijen srednje apsolutne pogreške i računa se prema formuli [47]:

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - x_i)^2} \quad (6.6)$$

Budući da se pogreške kvadriraju prije nego što se izračuna prosjek, RMSE daje relativno visoku težinu za velike pogreške i stoga je najkorisniji kada su nepoželjne velike pogreške [43]. Nadalje, MAE i RMSE mogu se koristiti zajedno za procjenu pogrešaka, ali će vrijednost RMSE uvijek biti veća ili jednaka MAE. Što je razlika između njih veća, veća je i varijanca u pojedinačnim pogreškama u skupu podataka. U slučaju da je RMSE jednak MAE, sve su pogreške iste veličine.

Treća korištena metrika je R^2 , koja mjeri varijancu jedne varijable u odnosu na varijancu druge varijable. Koeficijent određenosti koristi se da izrazi koliko varijabilnost jednog faktora može biti uzrokovana njegovim odnosom prema drugom faktoru. Predstavlja se kao vrijednost između 0 i 1; što je vrijednost bliža 1, to bolje odgovara odnos između dva čimbenika [43]. Također se naziva i koeficijent određenja (determinacije) i izračunava se po formuli [47]:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - x_i)^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_1)^2} \quad (6.7)$$

gdje je \bar{x}_1 srednja vrijednost eksperimentalno izmjerene veličine x_i , a y_i predviđena veličina.

6.4. Unakrsna provjera valjanosti (engl. Cross validation)

Unakrsna provjera valjanosti je statistička metoda koja se koristi za određivanje točnosti metoda strojnog učenja i umjetne inteligencije, odnosno kako bi se procijenila kakva se učinkovitost modela očekuje kada se koristi za predviđanje podataka koji se ne koriste tijekom učenja [48]. Iz tog razloga se prvenstveno koristi za procjenu razine pouzdanosti modela na neviđenim podacima. Unakrsna provjera valjanosti je tehnika koja se koristi za procjenu prediktivnih modela dijeljenjem izvornog uzorka (CVT skup podataka) u skup za učenje modela i skup za provjeru valjanosti za procjenu optimalnih parametara. U obliku ovog postupka, poznatog kao k -struka unakrsna provjera valjanosti, izvorni skup podataka se, stoga, nasumično dijeli na k podskupina jednake veličine. Od k podskupina, jedna podskupina se zadržava kao validacijski skup podataka za testiranje modela, dok se preostali $k - 1$ podskupovi koriste kao podatci za učenje. Proces unakrsne validacije zatim se ponavlja k puta, pri čemu se svaki od k podskupova

koristi točno jednom kao validacijski podatak. Iz tako dobivenih k rezultata može se izračunati prosjek kako bi se proizvela jedna procjena (metrika) kvalitete modela. Prednost ove metode je što se sva promatranja (svi izmjereni odnosno svi ulazni podatci) koriste i za učenje i za validaciju, a svako promatranje se koristi za validaciju točno jednom [17]. Izbor vrijednosti k je obično 5 ili 10, iako za to ne postoji formalno pravilo.

Općenito, k -struka unakrsna provjera valjanosti se sastoji od sljedećih koraka [48]:

1. ulazni skup podataka se nasumično izmiješa;
2. ulazni skup podataka se podijeli u k podskupova;
3. za svaki podskup pojedinačno:
 - uzme se taj podskup i koristi se kao validacijski podskup;
 - ostali podskupovi koriste se kao skupovi za učenje;
 - model se prilagodi prema podskupovima za učenje i razvija se na podskupu za testiranje;
 - razvijeni rezultat se zadrži i model se odbaci;
4. točnost modela jest srednja vrijednost točnosti pojedinog podskupa.

6.5. Modeli strojnog učenja

Na temelju pretpostavki iz potpoglavlja 6.2, 6.3 i 6.4 te pomoću eksperimentalnih podataka izmjerenih u točkama određenim CVT i MC DoE metodom, u ovom se potpoglavlju primjenjuje strojno učenje kako bi se dobila ovisnost sile trenja na nanorazini o temperaturi, brzini klizanja i normalnoj sili. Predstavljani modeli dobiveni su korištenjem softvera *Weka* [49] i opisani u sljedećim potpoglavljima. U svim su modelima korišteni nadzirani algoritmi strojnog učenja (oni treniraju model na poznatim ulaznim i izlaznim podacima tako da isti može predvidjeti buduće rezultate). U ovom procesu oblik korelacijske funkcije je nepoznat, tj. ne postoji unaprijed definirani oblik koji bi odgovarao parametrima, ali unatoč tome, ovi su alati snažni prediktivni algoritmi koji predstavljaju najsuvremenije primijenjeno strojno učenje [17].

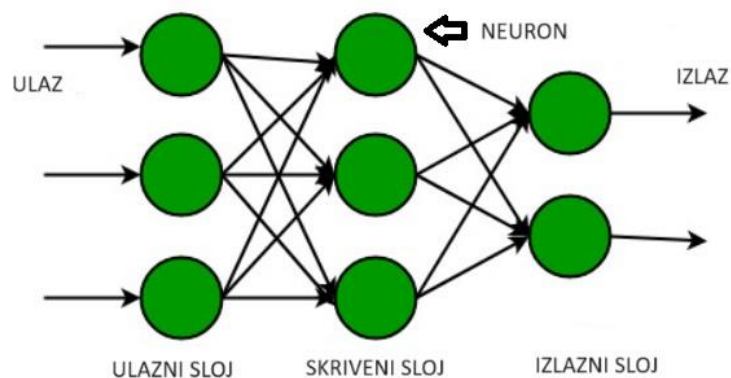
6.5.1. Linearna regresija (engl. *Linear Regression*)

Linearna regresija je metoda nadziranog strojnog učenja u kojoj se izračunava linearni odnos između zavisne varijable i jednog ili više neovisnih parametara prilagođavanjem linearne jednadžbe promatranim podacima. Kada postoji samo jedan neovisni parametar, tada se koristi jednostavna linearna regresija, a kada postoji više od jednog parametra, onda se koristi

višestruka linearna regresija. S obzirom da je linearna regresija vrlo jednostavna za implementaciju, ona predstavlja osnovu za složenije algoritme. Tako se metoda potpornih vektora temelji na linearnoj regresiji proširujući njezine pretpostavke predviđanja [50].

6.5.2. Višeslojni perceptron (engl. *Multilayer Perceptron*)

Višeslojni perceptron (MLP) je umjetna neuronska mreža koja se sastoji od više od dva sloja perceptrona, odnosno algoritama koji se koriste za nadzirano učenje funkcija, koji daju rezultate u obliku odluke pripada li ulaz određenoj klasi ili ne pripada. Višeslojni perceptroni se sastoje od ulaznog sloja koji prima signal, izlaznog sloja koji procjenjuje ili predviđa ulaz i, između ta dva, proizvoljnog broja skrivenih slojeva koji su pravi računalni motor MLP algoritma. MLP-ovi s jednim skrivenim slojem mogu aproksimirati bilo koju kontinuiranu funkciju [51]. Na Slici 6.7 prikazan je shematski dijagram višeslojnog perceptrona.



Slika 6.7: Shematski dijagram višeslojnog perceptrona [51]

Na dijagramu se može vidjeti da u ovom primjeru postoje tri ulaza, a time i tri ulazna neurona, dok skriveni sloj ima također tri neurona. Izlazni sloj daje dva izlaza, pa postoje dva izlazna neurona. Neuroni u ulaznom sloju prosljeđuju svoj izlaz svakome od tri neurona u skrivenom sloju, a na isti način skriveni sloj obrađuje informacije i prosljeđuje ih izlaznom sloju [51].

6.5.3. Šuma i stabla nasumičnog odlučivanja (engl. *Random Decision Trees and Forest*)

Šuma nasumičnog odlučivanja je jedna od najpopularnijih i najmoćnijih metoda strojnog učenja. Djeluje tako da stvara nekoliko stabla odlučivanja tijekom faze učenja u jedan jači prediktor. Svako stablo neovisno uči (kako bi se smanjio rizik da na model pretjerano utječu nijanse jednog stabla) s nasumično odabranim podskupom razmatranih ulaznih podataka (tj.

eksperimentalnih podataka). Rezultirajuće predviđanje je prosjek višestrukih predviđanja [52]. Nadalje, najčešći prikaz modela stabla nasumičnog odlučivanja jest binarno stablo. Svaki čvor toga stabla predstavlja jednu ulaznu varijablu (x) i točku razdvajanja, tj. rascjep u strukturi stabla s ciljem postizanja optimalnije vrijednosti rezultantne varijable (tj. što bliže stvarnom rezultatu). Čvorovi listova stabla sadrže izlaznu varijablu (y) koja se koristi za izradu predviđanja. Predviđanja se, stoga, rade "hodanjem" po dijelovima stabla dok se ne dođe do listnog čvora i dobivanja vrijednosti izlaza klase u tom listnom čvoru. Stabla nasumičnog odlučivanja brzo uče i vrlo brzo predviđaju. Također su često točna za širok raspon problema i ne zahtijevaju nikakvu posebnu pripremu podataka [53].

6.5.4. Metoda potpornih vektora (engl. *Support Vector Machines - SVM*)

Metoda potpornih vektora je metoda nadziranog strojnog učenja koja se koristi i za klasifikaciju i za regresiju. Glavni cilj SVM algoritma je pronaći optimalnu hiperravninu u N -dimenzijskom prostoru koja će najbolje odvojiti točke u prostoru ulaznih parametara, prema njihovoj klasi, odnosno klasi 0 ili klasi 1. Algoritam učenja SVM-a traži koeficijente koji rezultiraju najboljim odvajanjem klasa hiperravninom, dok hiperravnina nastoji da margina (udaljenost između hiperravnine i najbližih podatkovnih točaka) između točaka različitih klasa bude što je moguće veća. Dimenzija hiperravnine ovisi o broju parametara. Ako je broj ulaznih parametara dva, tada je hiperravnina samo linija. Ako je broj ulaznih parametara tri, tada hiperravnina postaje 2D ravnina. Najbolja ili optimalna hiperravnina koja može razdvojiti dvije klase je ona koja ima najveću marginu. Ove klase točaka se stoga nazivaju potporni vektori, budući da "podupiru" ili definiraju hiperravninu [54].

6.5.5. Usporedba modela strojnog učenja

Svi navedeni modeli strojnog učenja su procijenjeni i uspoređeni na temelju metrike opisane u potpoglavlju 6.3. Razmatrani su prediktivni rezultati koji su dobiveni na skupu podataka za učenje (50 točaka dobivenih CVT DoE metodom za Al_2O_3 uzorak i 50 točaka dobivenih CVT DoE metodom za SS uzorak), zatim na testnom skupu podataka (20 točaka dobivenih MC DoE metodom za Al_2O_3 uzorak i 20 točaka dobivenih MC DoE metodom za SS uzorak) te zajedničkom skupu podataka (oba uzorka i na skupu podataka za učenje i na testnom skupu podataka). Vrijednosti postignutih rezultata na ispitivanju skupa podataka za učenje za svaki uzorak zasebno prikazani su u Tablici 6.6, dok Tablica 6.7 prikazuje vrijednosti postignutih

rezultata na zajedničkom skupu podataka za učenje (50 točaka za uzorak Al_2O_3 i 50 točaka za uzorak nehrđajućeg čelika). Vrijednost R^2 je uzeta kao najdominantnija metrika zbog usporedbe trenda.

Tablica 6.6: Usporedba prediktivnih svojstava korištenih modela strojnog učenja na skupu podataka za učenje (CVT DoE mjerne točke) za svaki uzorak zasebno

Algoritam strojnog učenja (model)	Uzorak	RMSE	MAE	R^2
Linearna regresija (LinReg)	Al_2O_3	121,74	93,29	0,902
	SS	106,09	78,88	0,913
Višeslojni perceptron (MLP)	Al_2O_3	139,41	115,97	0,935
	SS	148,14	120,57	0,903
Šuma nasumičnog odlučivanja (RF)	Al_2O_3	35,33	28,07	0,995
	SS	42,04	30,7	0,989
Stabla nasumičnog odlučivanja (RT)	Al_2O_3	4,83	2,95	0,999
	SS	4,37	2,33	0,999
Metoda potpornih vektora (SVM)	Al_2O_3	123,899	84,851	0,808
	SS	105,597	79,811	0,834

Tablica 6.7: Usporedba prediktivnih svojstava korištenih modela strojnog učenja obučenih na zajedničkom skupu podataka za učenje (CVT DoE mjerne točke)

Algoritam strojnog učenja (model)	Uzorak	RMSE	MAE	R^2
Linearna regresija (LinReg)	Oba uzorka	115,024	85,726	0,906
Višeslojni perceptron (MLP)	Oba uzorka	111,239	89,392	0,928
Šuma nasumičnog odlučivanja (RF)	Oba uzorka	26,743	20,611	0,996
Stabla nasumičnog odlučivanja (RT)	Oba uzorka	3,278	1,769	0,999
Metoda potpornih vektora (SVM)	Oba uzorka	108,467	80,187	0,840

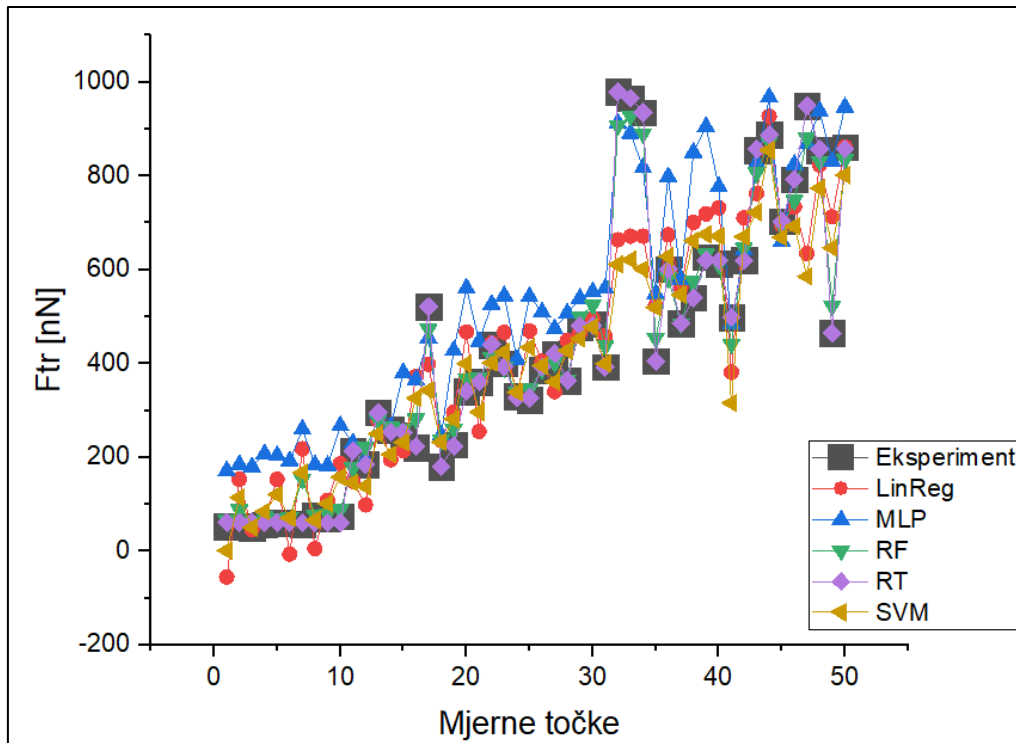
Iz podataka prikazanih u Tablicama 6.6 i 6.7, može se uočiti da se s modelom šuma i stabala nasumičnog odlučivanja postižu najveće vrijednosti R^2 , i to za uzorak Al_2O_3 vrijednost od 0,995 odnosno 0,999, za uzorak SS vrijednost od 0,989 odnosno 0,999, te za zajednički skup podataka vrijednost od 0,996, odnosno 0,999, čineći ga modelom s najboljim prediktivnim svojstvima. Također, kod modela šuma i stabala nasumičnog odlučivanja varijanca metrike RMSE-MAE je najniža.

Svi ostali modeli strojnog učenja imaju približno jednaka predviđanja kao i model šume i stabala nasumičnog odlučivanja, osim metode potpornih vektora koja ima najmanju vrijednost R^2 , i to za uzorak Al_2O_3 vrijednost od 0,808, za uzorak SS vrijednost od 0,834 te za zajednički skup podataka vrijednost od 0,840. Općenito, može se zaključiti da svi modeli strojnog učenja imaju dobre prediktivne performanse na skupu podataka za učenje (CVT DoE mjerne točke), budući da se algoritam učio na tim podatcima.

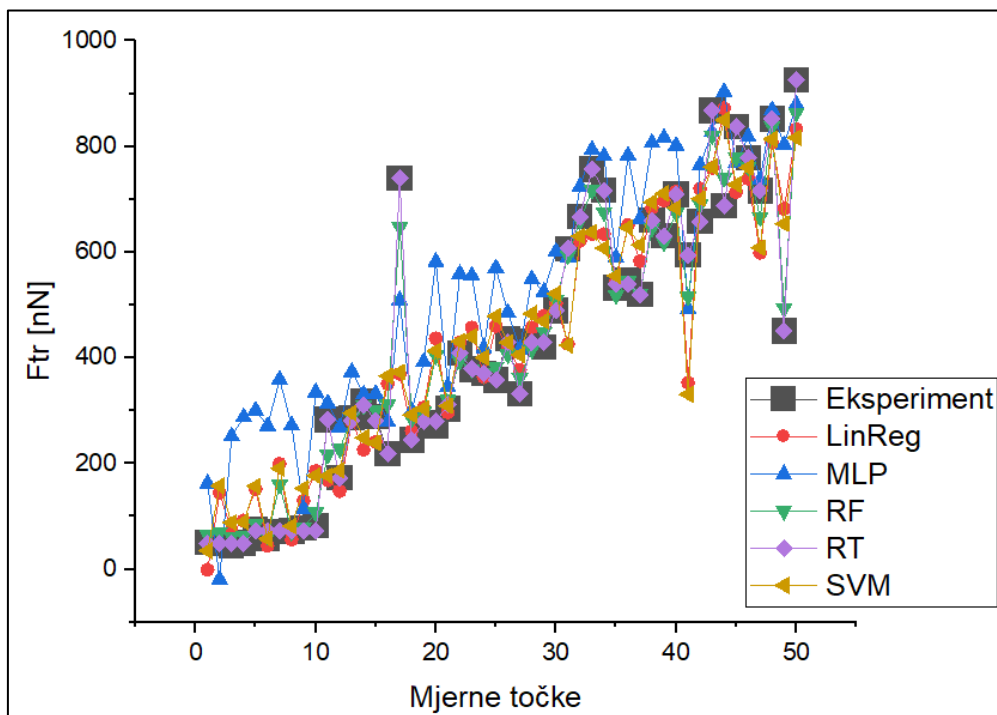
Međutim, kako bi se odredila njihova pouzdanost u predviđanju sile trenja na nanoskali u ovisnosti o razmatranim procesnim parametrima F_N , v i t , svi analizirani modeli strojnog učenja su također dodatno grafički pregledani, u obliku prikaza predviđanja u odnosu na podatke eksperimentalnog ispitivanja. Na Slici 6.8 je tako prikazan rezultirajući grafikon za 50 CVT DoE mjernih točaka u kojima je eksperimentalno izmjerena sila trenja, kao i prediktivne vrijednosti sile trenja dobivene modelima strojnog učenja na uzorku aluminijevog oksida.

Na Slici 6.9 prikazan je rezultirajući grafikon za 50 CVT DoE mjernih točaka u kojima je eksperimentalno izmjerena sila trenja, kao i prediktivne vrijednosti sile trenja dobivene modelima strojnog učenja na uzorku nehrđajućeg čelika.

Iz podataka prikazanih na Slikama 6.8 i 6.9 može se zaključiti da model stabala nasumičnog odlučivanja ima najbolje prediktivne performanse za oba uzorka, budući da se eksperimentalne vrijednosti sile trenja preklapaju s predviđenim vrijednostima sile trenja u svih 50 CVT DoE mjernih točkaka.



Slika 6.8: Prediktivne izvedbe razmatranih modela strojnog učenja na skupu podataka za učenje (CVT DoE mjerne točke) za uzorak Al_2O_3



Slika 6.9: Prediktivne izvedbe razmatranih modela strojnog učenja na skupu podataka za učenje (CVT DoE mjerne točke) za uzorak nehrđajućeg čelika

Nadalje, vrijednosti postignutih rezultata na ispitivanju testnog skupa podataka za svaki uzorak zasebno prikazani su u Tablici 6.8, dok Tablica 6.9 prikazuje vrijednosti postignutih rezultata na zajedničkom testnom skupu podataka. Vrijednost R^2 je također uzeta kao najdominantnija metrika.

Model linearne regresije pokazuje najbolje prediktivne performanse s najvećom vrijednošću R^2 od svih metoda strojnog učenja, i to s vrijednošću od 0,877 za uzorak aluminijevog oksida te 0,945 za uzorak nehrđajućeg čelika, kao i za zajednički skup podataka s vrijednošću od 0,905.

Model potpornih vektora pokazuje najlošija prediktivna svojstva za oba uzorka s vrijednošću R^2 od 0,660 za uzorak aluminijevog oksida i 0,395 za uzorak nehrđajućeg čelika, a za zajednički skup podataka 0,592.

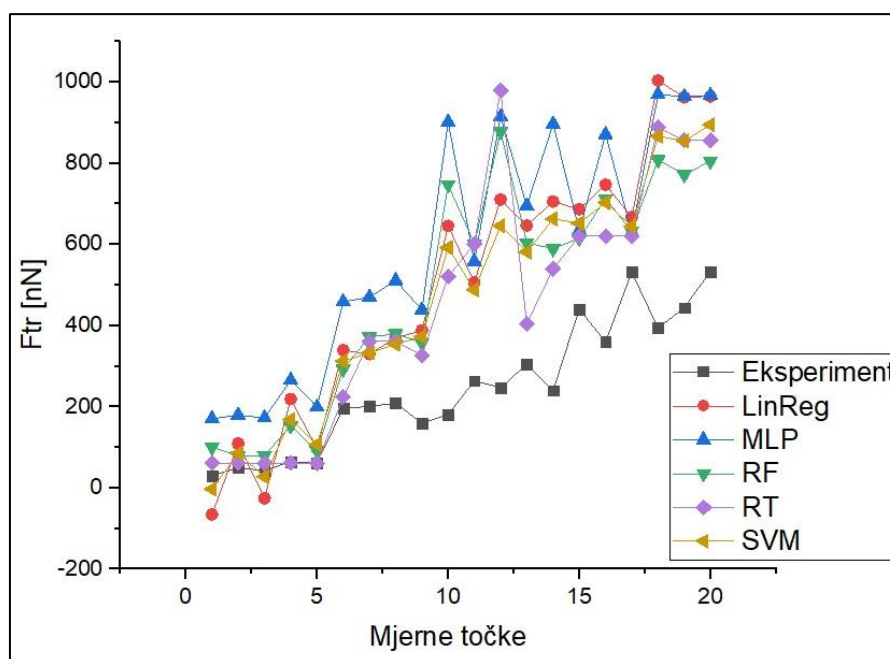
Tablica 6.8: Usporedba prediktivnih svojstava korištenih modela strojnog učenja na testnom skupu podataka (MC DoE mjerne točke) za svaki uzorak zasebno

Algoritam strojnog učenja (model)	Uzorak	RMSE	MAE	R^2
Linearna regresija (LinReg)	Al ₂ O ₃	319,17	269,06	0,877
	SS	245,3	211,03	0,945
Višeslojni perceptron (MLP)	Al ₂ O ₃	397,35	345,66	0,765
	SS	313,89	285,23	0,901
Šuma nasumičnog odlučivanja (RF)	Al ₂ O ₃	290,48	235,97	0,814
	SS	203,23	175,17	0,934
Stabla nasumičnog odlučivanja (RT)	Al ₂ O ₃	280,36	207,12	0,827
	SS	227,64	183,94	0,934
Metoda potpornih vektora (SVM)	Al ₂ O ₃	170,008	89,703	0,660
	SS	149,451	82,295	0,395

Tablica 6.9: Usporedba prediktivnih svojstava korištenih modela strojnog učenja obučenih na zajedničkom testnom skupu podataka (MC DoE mjerne točke)

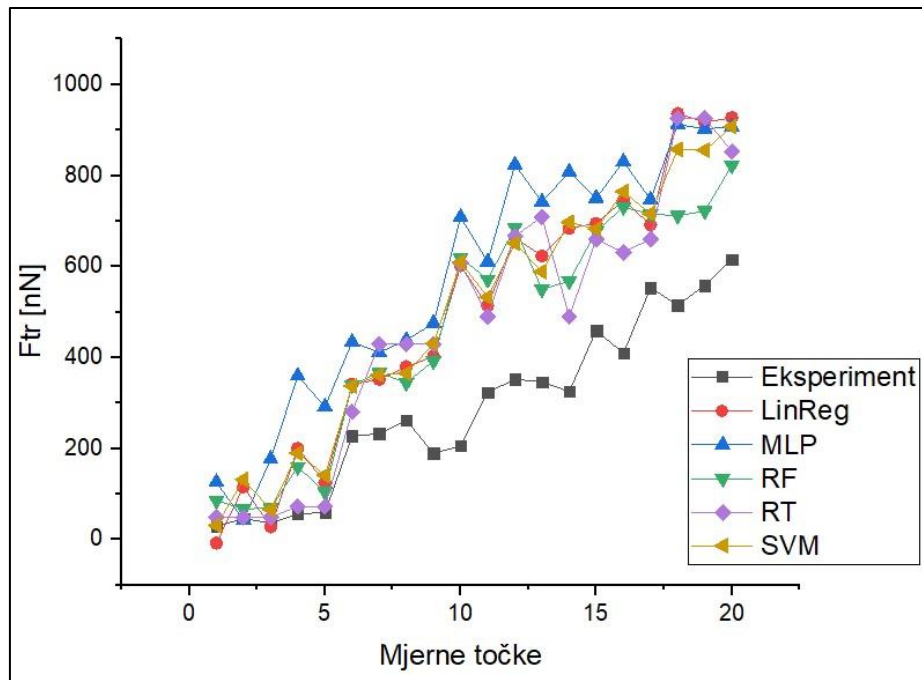
Algoritam strojnog učenja (model)	Uzorak	RMSE	MAE	R ²
Linearna regresija (LinReg)	Oba uzorka	283,132	240,041	0,905
Višeslojni perceptron (MLP)	Oba uzorka	397,345	345,663	0,765
Šume nasumičnog odlučivanja (RF)	Oba uzorka	244,232	201,148	0,871
Stabla nasumičnog odlučivanja (RT)	Oba uzorka	218,461	162,714	0,845
Metoda potpornih vektora (SVM)	Oba uzorka	269,550	223,200	0,592

Također, kako bi se zaključila njihova pouzdanost u predviđanju sile trenja na nanoskali u ovisnosti o razmatranim procesnim parametrima F_N , v i t , svi analizirani modeli strojnog učenja su dodatno grafički pregledani. Na Slici 6.10 je tako prikazan rezultirajući grafikon za 20 MC DoE mjernih točaka u kojima je eksperimentalno izmjerena sila trenja, kao i prediktivne vrijednosti sile trenja dobivene modelima strojnog učenja na uzorku aluminijevog oksida.



Slika 6.10: Prediktivne izvedbe razmatranih modela strojnog učenja na testnom skupu podataka (MC DoE mjerne točke) za uzorak Al_2O_3

Na Slici 6.11 prikazan je, pak, rezultirajući grafikon za 20 MC DoE mjernih točaka u kojima je eksperimentalno izmjerena sila trenja, kao i prediktivne vrijednosti sile trenja dobivene modelima strojnog učenja na uzorku nehrđajućeg čelika.



Slika 6.11: Prediktivne izvedbe razmatranih modela strojnog učenja na testnom skupu podataka (MC DoE mjerne točke) za uzorak nehrđajućeg čelika

Za razliku od rezultata prikazanih na Slikama 6.8 i 6.9, gdje modeli strojnog učenja prikazuju odlične prediktivne vrijednosti sile trenja u mjernim točkama na kojima su se učili, na testnim podacima, koji su im nepoznati, to nije slučaj. Na testnom skupu podataka, modeli strojnog učenja imaju najbolje prediktivne izvedbe za silu trenja do 200 nN, dok za manje vrijednosti sile trenja dolazi do većeg odstupanja između prediktivnih i eksperimentalnih vrijednosti.

6.6. Modeli umjetne inteligencije

Do sada korišteni modeli strojnog učenja, unatoč visokim mogućnostima prediktivnih alata, ne mogu se koristiti u praksi za dubinske analize, numeričko modeliranje i sl. jer daju samo „modele crne kutije“. Stoga je u ovom dijelu rada, s ciljem postizanja barem slične razine prediktivnih svojstava, razvijen i opisan simbolički matematički izraz temeljen na evolucijskim algoritmima. Razvijeni matematički izraz, u odnosu na prethodno razvijene modele crne kutije, izravno je razumljiv i upotrebljiv ljudima zbog svoje jednostavne matematičke formulacije i

malog broja uključenih parametara. Doista, evolucijski algoritmi obično se koriste za pružanje dobrih približnih rješenja za probleme koji se ne mogu jednostavno riješiti drugim tehnikama. Mnogi problemi optimizacije spadaju u ovu kategoriju. Zapravo, u ovom slučaju može biti previše računalno zahtjevno pronaći točno rješenje razmatranog problema, ali ponekad je dovoljno optimalno rješenje. Zbog svoje nasumične prirode, evolucijski algoritmi nikada ne jamče da će pronaći optimalno rješenje za bilo koji problem, ali će često pronaći vrlo dobro rješenje, ako ono postoji. To je prikladno za ovdje razmatranu svrhu određivanja funkcijske ovisnosti više varijabilnih parametara o sili trenja na nanoskali, budući da bilo koja vrsta izražajnog oblika dotične ovisnosti nije unaprijed poznata [17]. Predstavljeni modeli umjetne inteligencije dobiveni su korištenjem softvera *HeuristicLab* [55] i opisani su u sljedećim potpoglavljima.

6.6.1. Genetsko programiranje – simbolička regresija (engl. *Genetic programming - symbolic regression*)

Genetsko programiranje oblik je umjetne inteligencije koji oponaša prirodnu selekciju kako bi se postigao optimalan rezultat. Genetsko programiranje je iterativan proces i u svakoj novoj fazi algoritma odabire samo najsposobnijeg od "potomaka" za križanje i reprodukciju u sljedećoj generaciji, što se ponekad naziva funkcijom prikladnosti. Baš kao u biološkoj evoluciji, evolucijski algoritmi ponekad mogu imati nasumično mutirajuće potomke ali, budući da se reproduciraju samo oni potomci koji imaju najveću mjeru sposobnosti, sposobnost će se gotovo uvijek poboljšavati tijekom generacija. Genetsko programiranje općenito će se prekinuti kada dosegne unaprijed definiranu mjeru prikladnosti [56].

Simbolička regresija (SR) je regresijska metoda koja se temelji na principima genetskog programiranja koja integrira tehnike i procese iz heterogenih znanstvenih područja i omogućuje dobivanje analitičke jednadžbe isključivo iz podataka. Simbolička regresija je vrsta regresijske analize u kojoj se izvodi matematička funkcija koja opisuje dani skup podataka. Dok konvencionalne regresijske metode (npr. linearna, kvadratna, itd.) imaju svoje nezavisne varijable unaprijed određene i pokušavaju prilagoditi niz numeričkih koeficijenata kako bi se postiglo savršeno poklapanje, SR pokušava istovremeno pronaći parametre i jednadžbe. Ova izvanredna karakteristika umanjuje potrebu za uključivanjem prethodnog znanja o ispitivanom sustavu. SR može razjasniti dvosmislene odnose koji mogu biti primjenjivi, objašnjivi i obuhvaćaju većinu znanstvenih, tehnoloških, ekonomskih i društvenih načela [57].

6.6.2. Gramatička evolucija (engl. *Grammatical evolution*)

Gramatička evolucija (GE) vrsta je genetskog programiranja koja primjenjuje genetičke operatore na cjelobrojni niz, naknadno preslikan u program pomoću gramatičkog formalizma, koji predstavlja skup sintaksi većine trenutno korištenih programskih jezika, što omogućuje genetsku evoluciju rješenja koja se ne sastoje samo od standardnih matematičkih terminala (operacija i varijabli), već i od petlji, logičkih operatora itd. Jedna od prednosti GE-a je ta što ovo mapiranje pojednostavljuje primjenu procesa pretraživanja na različite programske jezike i druge strukture [17].

6.6.3. Selekcija potomaka (engl. *Offspring selection genetic programming*)

Selekcija potomaka (OS) je genetičko proširenje općeg koncepta evolucijskih algoritama. Za razliku od križanja i mutacije, selekcija je potpuno genetička, tj. neovisna o stvarno korištenom problemu i njegovoj zastupljenosti. Selekcija potomaka (OS) obično se provodi kao selekcija za reprodukciju (selekcija roditelja). Ovaj samoprilagođavajući selekcijski mehanizam usko je povezan s općim selekcijskim modelom populacijske genetike. Selekcija potomaka pokazala se vrlo prikladnom u raznim područjima primjene i daje rezultate konkurentne rezultatima koje proizvodi čovjek. Uspjeh ove metode potvrđen je u poljima kao što su kvantno računalstvo, mehanički sustavi, i sl. [58].

6.6.4. Dobno slojevita struktura populacije (engl. *Age-layered population structure - ALPS*)

Kako bi se smanjio problem preuranjene konvergencije, definirana je nova metoda za mjerenje dobi pojedinca koja se naziva dobno slojevita struktura stanovništva (ALPS). Ova mjera starosti mjeri koliko je dugo genetski materijal evoluirao u populaciji: mladi, umjesto da počinju s dobi od 0 godina kao kod tradicionalnih mjera starosti, počinju s dobi od 1 godine plus dob svog najstarijeg roditelja. ALPS se razlikuje od tipičnog evolucijskog algoritma razdvajanjem pojedinaca u različite dobne slojeve prema njihovoj dobi i redovitim uvođenjem novih, nasumično generiranih pojedinaca u najmlađi sloj. Uvođenje nasumično generiranih jedinki u redovitim razmacima rezultira evolucijskim algoritmom koji nikada u potpunosti nije konvergirao i koji uvijek istražuje nove dijelove krajolika prirode, a korištenjem dobi za ograničavanje konkurencije i razmnožavanja, mlađe jedinke mogu se razvijati bez dominacije starijih jedinki [59].

6.6.5. Usporedba modela umjetne inteligencije

Za temeljitu prediktivnu procjenu izvedbi modela umjetne inteligencije, metrike razvijenih modela još jednom su dobivene testiranjem modela na neviđenom (testnom) skupu podataka. Svi prikazani parametri izvedbe modela dobiveni su nakon njihove obuke s 10-strukom unakrsnom provjerom na eksperimentalnim podacima izmjerenim u CVT DoE mjernim točkama, gdje se 30 % podataka koristi kao validacijski skup za optimizaciju parametara.

U Tablici 6.10 prikazani su rezultati metrika za sve modele umjetne inteligencije za svaki uzorak zasebno, dok su u Tablici 6.11 prikazane metrike svih modela umjetne inteligencije obučenih na zajedničkom skupu podataka za učenje dobivenih u CVT DoE mjernim točkama. Vrijednost R^2 je uzeta kao najdominantnija metrika zbog usporedbe trenda. Iz rezultata prikazanih u Tablicama 6.10 i 6.11 može se zaključiti da za uzorak Al_2O_3 najbolje prediktivne izvedbe ima model selekcije potomaka s vrijednošću R^2 od 0,978 dok je za uzorak nehrđajućeg čelika to model simboličke regresije s vrijednošću R^2 od 0,964. Za zajednički skup podataka (oba uzorka) najbolje prediktivne izvedbe ima model selekcije potomaka s vrijednošću R^2 od 0,95.

Tablica 6.10: Usporedba prediktivnih svojstava korištenih modela umjetne inteligencije na skupu podataka za učenje (CVT DoE mjerne točke) za svaki uzorak zasebno

Algoritam umjetne inteligencije (model)	Uzorak	RMSE	MAE	R^2
Simbolička regresija (SR)	Al_2O_3	3036,456	41,848	0,941
	SS	1452,574	26,685	0,964
Gramatička evolucija (GE)	Al_2O_3	3784,464	50,833	0,927
	SS	33430,699	96,661	0,471
Selekcija potomaka (OS)	Al_2O_3	1140,659	23,206	0,978
	SS	2373,296	36,712	0,941
Dobno slojevita struktura populacije (ALPS)	Al_2O_3	3491,251	42,031	0,933
	SS	2548,013	37,879	0,937

Tablica 6.11: Usporedba prediktivnih svojstava korištenih modela umjetne inteligencije obučenih na zajedničkom skupu podataka za učenje (CVT DoE mjerne točke)

Algoritam umjetne inteligencije (model)	Uzorak	RMSE	MAE	R ²
Simbolička regresija (SR)	Oba uzorka	5437,783	53,198	0,931
Gramatička evolucija (GE)	Oba uzorka	9337,612	71,059	0,881
Selekcija potomaka (OS)	Oba uzorka	3930,123	47,871	0,95
Dobno slojevita struktura populacije (ALPS)	Oba uzorka	6864,633	62,403	0,912

Nadalje, vrijednosti postignutih rezultata na ispitivanju testnog skupa podataka (MC DoE mjerne točke) za svaki uzorak zasebno prikazani su u Tablici 6.12, dok Tablica 6.13 prikazuje vrijednosti postignutih rezultata na zajedničkom skupu podataka. Vrijednost R² je još jednom uzeta kao najdominantnija metrika.

Tablica 6.12: Usporedba prediktivnih svojstava korištenih modela umjetne inteligencije na testnom skupu podataka (MC DoE mjerne točke) za svaki uzorak zasebno

Algoritam umjetne inteligencije (model)	Uzorak	RMSE	MAE	R ²
Simbolička regresija (SR)	Al ₂ O ₃	118987,975	258,067	0,264
	SS	25247,166	115,166	0,186
Gramatička evolucija (GE)	Al ₂ O ₃	490309,005	612,256	0,306
	SS	300219,240	320,023	0,011
Selekcija potomaka (OS)	Al ₂ O ₃	40463,339	168,375	0,273
	SS	29072,179	124,376	0,189
Dobno slojevita struktura populacije (ALPS)	Al ₂ O ₃	106956,835	239,423	0,320
	SS	15151,606	96,415	0,353

Tablica 6.13: Usporedba prediktivnih svojstava korištenih modela umjetne inteligencije obučenih na zajedničkom testnom skupu podataka (MC DoE mjerne točke)

Algoritam umjetne inteligencije (model)	Uzorak	RMSE	MAE	R ²
Simbolička regresija (SR)	Oba uzorka	17060,729	89,786	0,581
Gramatička evolucija (GE)	Oba uzorka	23229,543	110,571	0,574
Selekcija potomaka (OS)	Oba uzorka	16581,576	90,220	0,614
Dobno slojevita struktura populacije (ALPS)	Oba uzorka	19875,301	95,934	0,560

Iz podataka prikazanih u Tablicama 6.12 i 6.13 može se zaključiti da modeli umjetne inteligencije imaju puno lošije prediktivne izvedbe na testnom skupu podataka, za razliku od prediktivnih izvedbi dobivenih na skupu podataka za učenje, što je vidljivo i iz velikih vrijednosti RMSE. Tako je dobno slojevita strukturalna populacija model s najboljom prediktivnom izvedbom i za uzorak Al₂O₃ i za uzorak nehrđajućeg čelika, iako ima poprilično nisku vrijednost R² od 0,320, odnosno 0,353. Međutim, na zajedničkom testnom skupu podataka (oba uzorka) modeli umjetne inteligencije daju veće vrijednosti R² u rasponu od 0,574 do 0,614, gdje se ističe metoda selekcije potomaka kao metoda s najboljom prediktivnom izvedbom.

U ovom su poglavlju sažeto prikazani modeli strojnog učenja i umjetne inteligencije te su izvedeni zaključci o njihovim prediktivnim svojstvima što stvara preduvjete da se u sljedećem poglavlju detaljnije opišu i analiziraju modeli strojnog učenja i umjetne inteligencije s najboljim prediktivnim svojstvima.

7. REZULTATI ANALIZE PODATAKA EKSPERIMENTALNIH MJERENJA

U ovom su poglavlju prikazani modeli strojnog učenja, odnosno umjetne inteligencije s najboljim predviđanjem vrijednosti sile trenja na nanorazini u ovisnosti o normalnoj sili, temperaturi i brzini klizanja. Prikazani su samo rezultati predviđanja sile trenja dobiveni na testnom skupu podataka (MC DoE mjerne točke), odnosno neviđenom skupu podataka jer on predstavlja pravu prediktivnu izvedbu modela strojnog učenja.

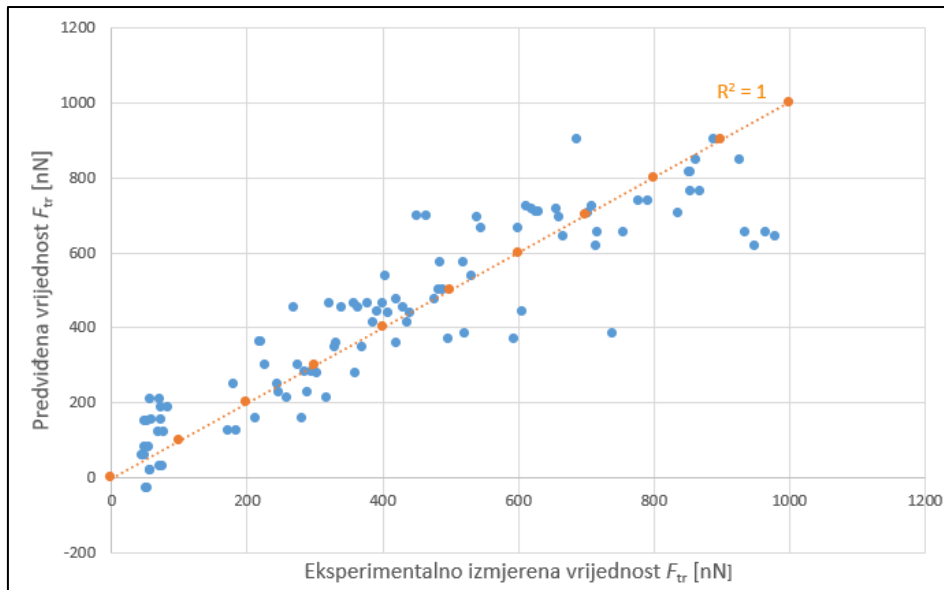
7.1. Modeli strojnog učenja

Prema prethodno prikazanim metrikama pojedinog modela strojnog učenja može se zaključiti da model linearne regresije ima najbolju prediktivnu izvedbu i na uzorku Al_2O_3 i na uzorku SS, kao i za oba uzorka zajedno zbog najveće vrijednosti R^2 . U Tablici 7.1 prikazane su, stoga, još jednom vrijednosti metrika najboljeg modela strojnog učenja.

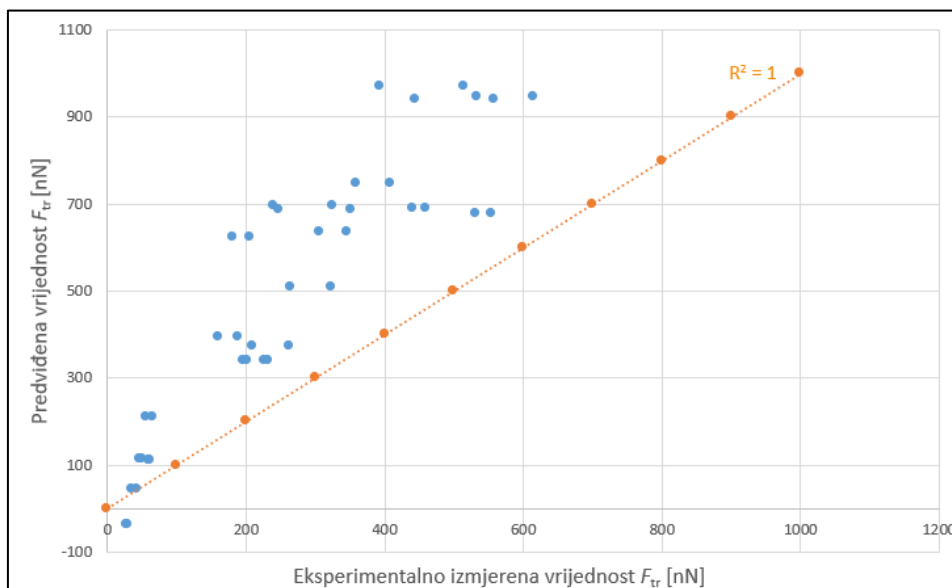
Tablica 7.1: Metrike najboljeg prediktivnog modela strojnog učenja - linearne regresije

Uzorak	RMSE	MAE	R^2
Al_2O_3	319,17	269,06	0,877
SS	245,3	211,03	0,945
Oba uzorka	283,132	240,041	0,905

Važno je prvo istražiti, kao što je prikazano na Slici 7.1 i Slici 7.2, raspršenost predviđenih vrijednosti sile trenja u odnosu na stvarne (eksperimentalne) podatke. Dobra prilagodba modela bi se trebala približavati vrijednosti $R^2 = 1$, koja je prikazana na Slici 7.1 i Slici 7.2 kao ravna linija pod kutem od 45° , na kojoj bi bila sva eksperimentalna mjerenja kada ne bi bilo odstupanja mjerenja, a model bi savršeno predvidio razmatrani fizikalni fenomen. Razvijeni model prikazuje relativno malu raspršenost predviđanja na skupu podataka za učenje (Slika 7.1), dok je puno veća raspršenost podataka na testnom skupu podataka (Slika 7.2). Međutim, važnije je predviđanje vrijednosti sile trenja na testnom skupu podataka jer ono predstavlja pravu prediktivnu izvedbu modela strojnog učenja s obzirom da testni skup podataka nije vidljiv, tj. ne koristi se za učenje i stoga ga ne karakterizira pristranost. Prilagodba predviđenih i eksperimentalnih (izmjerenih) vrijednosti sile trenja pokazuju najmanju raspršenost podataka za vrijednosti sile trenja do 200 nN, dok za manje vrijednosti sile trenja dolazi do veće raspršenosti podataka.



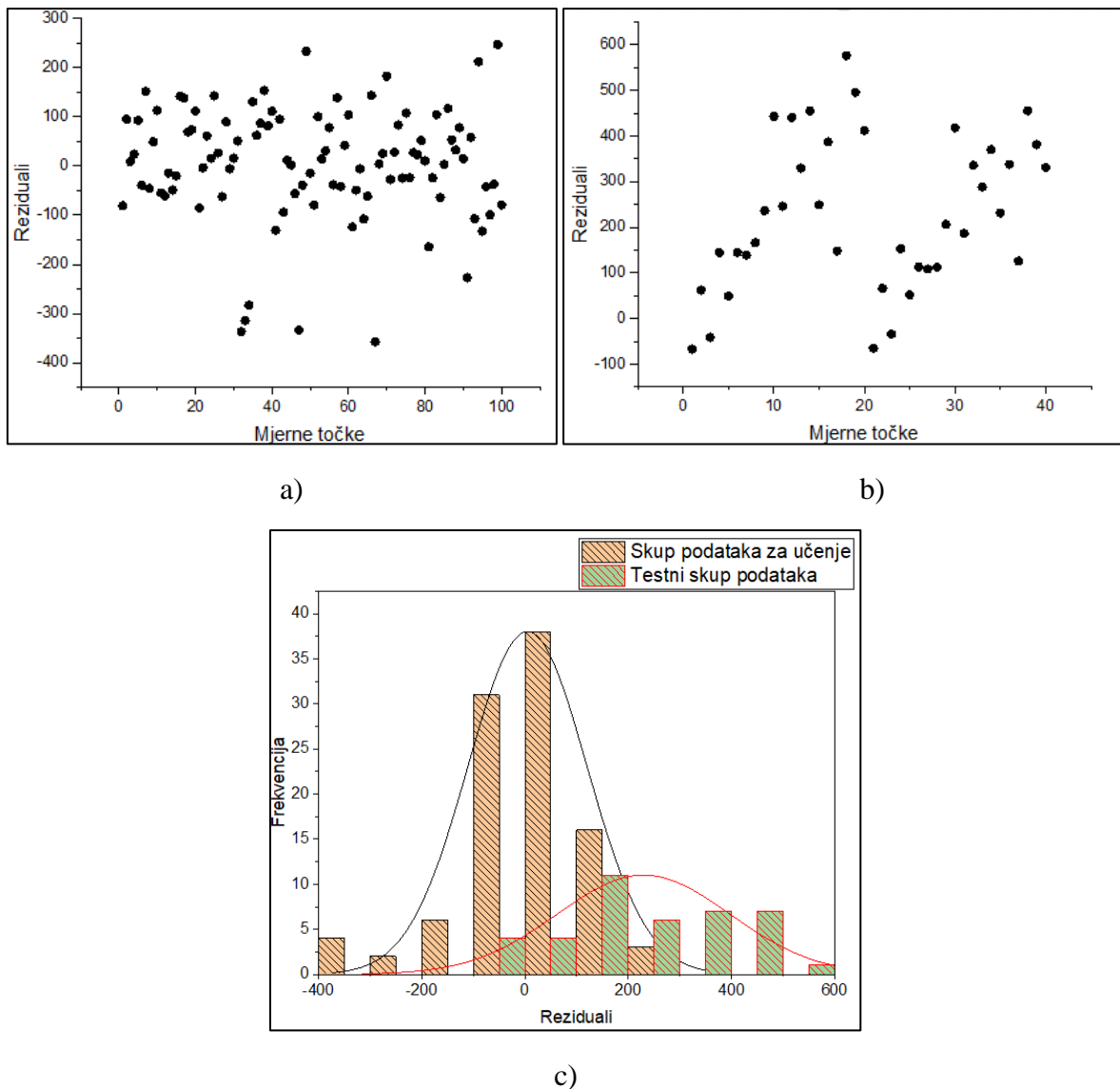
Slika 7.1: Prilagodba predviđenih vrijednosti sile trenja dobivenih linearnom regresijom u odnosu na eksperimentalno izmjerene vrijednosti sile trenja za oba uzorka na skupu podataka za učenje (CVT DoE mjerne točke)



Slika 7.2: Prilagodba predviđenih vrijednosti sile trenja dobivenih linearnom regresijom u odnosu na eksperimentalno izmjerene vrijednosti sile trenja za oba uzorka na testnom skupu podataka (MC DoE mjerne točke)

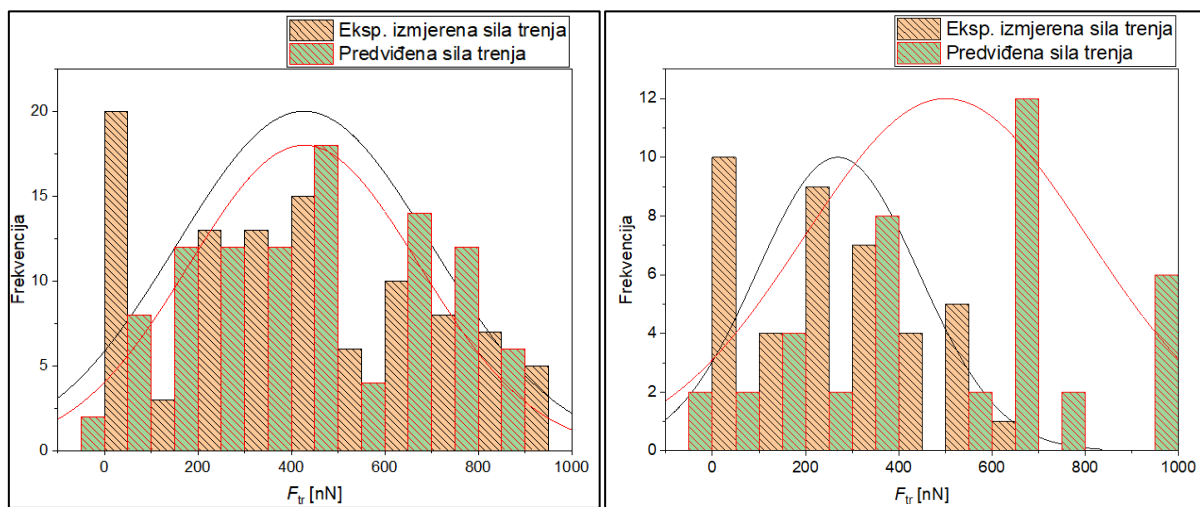
Nadalje, da bi se mogli uspješno predvidjeti budući izmjereni podatci, razvijeni model također mora prikazati i stohastička svojstva [17]. Ovo je statistički ispitano analizom dijagrama ostataka, odnosno reziduala (razlike između predviđenih i eksperimentalno izmjerenih vrijednosti) i prikazano na Slici 7.3. Cilj je promatrati stohastičku, slučajnu distribuciju tih

točaka. U slučaju da postoje bilo koje pravilnosti, u obliku krivulje ili linearnog odnosa, model se ne bi mogao koristiti, budući da ova vrsta prediktivnih reziduala ukazuje na veliku pristranost u modelu [17]. Sa Slike 7.3 a), gdje su prikazani reziduali za skup podataka za učenje, te sa Slike 7.3 b), gdje su prikazani reziduali za testni skup podataka, može se zaključiti da su se s linearnom regresijom postigla dobra stohastička i slučajna svojstva. Kada se uzme u obzir distribucija reziduala za oba skupa podataka prikazana na Slici 7.3 c), normalna distribucija reziduala je potvrđena za skup podataka za učenje, pokazujući dobru normalizaciju, dok za testni skup podataka to nije slučaj.



Slika 7.3: Dijagram reziduala najboljeg modela strojnog učenja na skupu podataka za učenje a) i testnom skupu b). Distribucija reziduala za oba skupa podataka c).

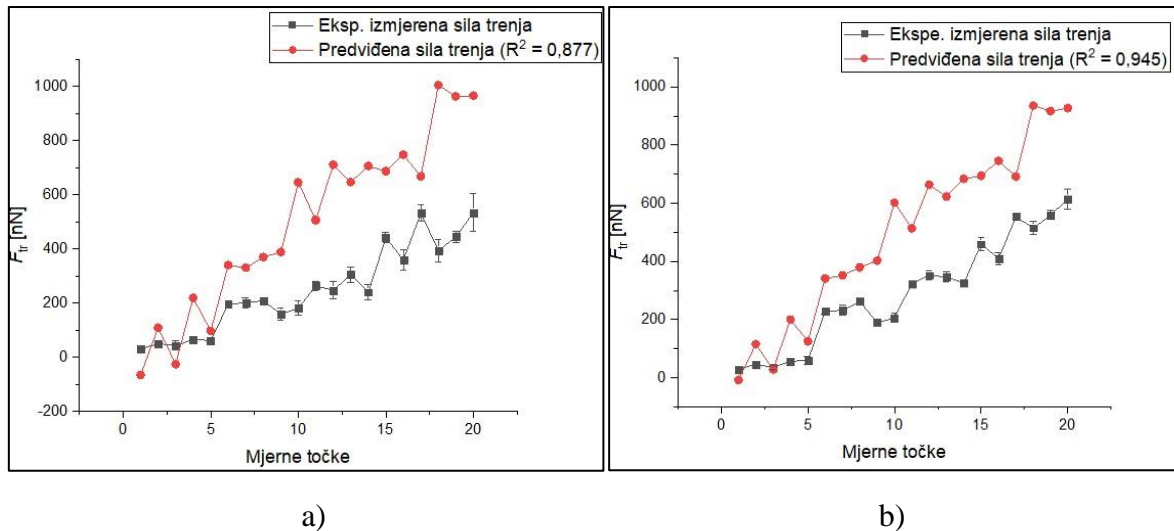
Performanse razvijenog modela mogu se ocijeniti i analizom distribucije predviđenih vrijednosti uspoređujući ih s eksperimentalno dobivenom distribucijom podataka [17]. Preklopljene distribucije predviđenih i eksperimentalnih podataka prikazane su na Slici 7.4 za skup podataka za učenje i testni skup podataka (pravokutnici u histograma široki su 50 nN). Distribucije pokazuju jednaku srednju vrijednost za skup podataka za učenje (Slika 7.4 a)), što potvrđuje izuzetno dobru prilagodbu, odnosno predviđanje. S druge strane, na testnom skupu podataka (Slika 7.4 b)) postoji pomak srednje vrijednosti distribucije predviđanja, što je uzrokovano precijenjenim vrijednostima predviđanja.



Slika 7.4: Distribucije predviđenih i eksperimentalnih podataka za skup podataka za učenje a) i za skup za testiranje b)

Nadalje, kako bi se potvrdile izvedbe predviđanja u odnosu na nesigurnost podataka, razmatrana je i prilagodba modela na svakom uzorku zasebno u testnim točkama (MC DoE mjerne točke), tj. njegova sposobnost predviđanja nevidenih eksperimentalnih podataka. Na Slici 7.5 a) i b) su tako prikazane predviđene i eksperimentalne vrijednosti sile trenja za uzorke Al_2O_3 i SS. Eksperimentalno izmjereni podatci prikazani su sa standardnom devijacijom $\pm\sigma$. Iz dijagrama prikazanih na Slici 7.5 može se uočiti da model linearne regresije ima velika odstupanja u predviđanju stvarne vrijednosti sile trenja za oba uzroka, međutim zbog velike vrijednosti R^2 dobro prati trend rasta sile trenja.

Najbolji model strojnog učenja promatran je samo u odnosu na R^2 i predstavlja preliminarno modeliranje, a da bi bio jednostavniji i s boljom predikcijom potrebno ga je dublje razvijati, što zahtijeva puno više vremena nego što je predviđeno za izradu ovog diplomskog rada.



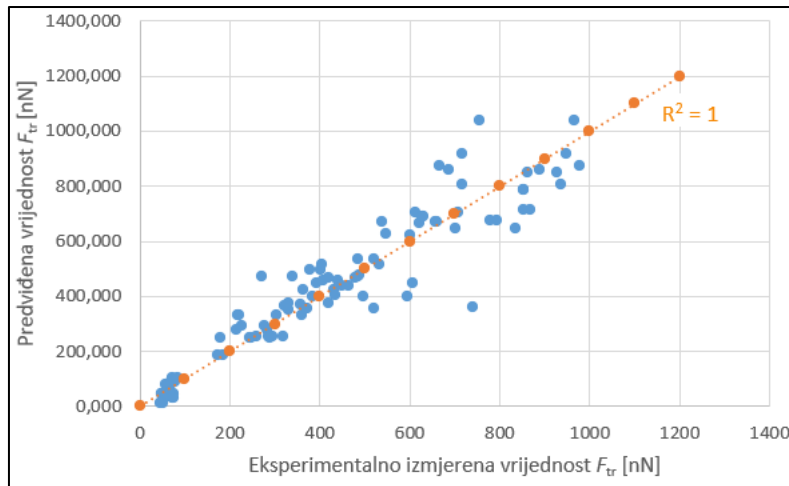
Slika 7.5: Prediktivne izvedbe najboljeg modela strojnog učenja na testnom skupu podataka (MC DoE mjerne točke) za uzorak Al_2O_3 a) i SS b)

7.2. Modeli umjetne inteligencije

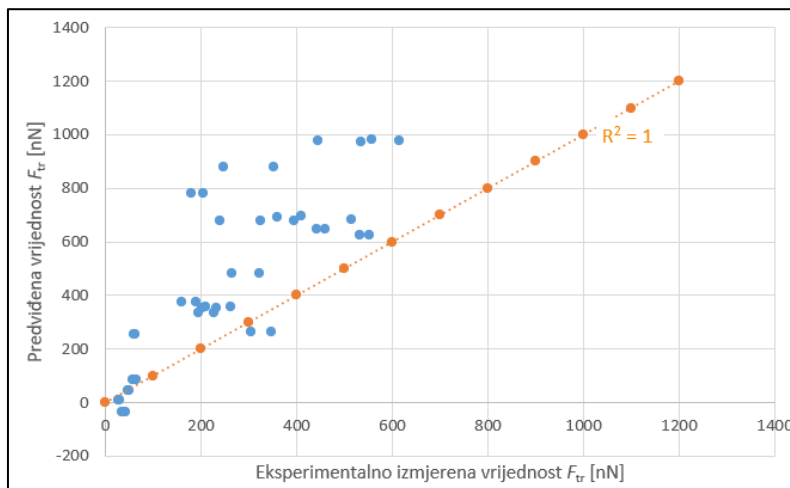
Prema prethodno prikazanim metrikama pojedinog modela umjetne inteligencije može se zaključiti kako, zbog najveće vrijednosti R^2 model selekcije potomaka (OS) ima najbolju prediktivnu izvedbu i na uzorku Al_2O_3 i na uzorku SS, kao i za oba uzorka zajedno.

Iako modeli umjetne inteligencije daju matematičke izraze, odnosno jednadžbe koje povezuje vrijednosti sile trenja F_{tr} na nanorazini u ovisnosti o temperaturi, brzini klizanja i normalnoj sili, u ovom se radu one neće navoditi radi njihove složenosti [17].

Postupak analize najboljeg modela umjetne inteligencije isti je kao i kod modela strojnog učenja. Također je važno istražiti raspršenost predviđenih vrijednosti sile trenja u odnosu na stvarne (eksperimentalne) podatke, kao što je prikazano na Slikama 7.6 i 7.7. Dobra prilagodba modela bi se trebala približavati vrijednosti $R^2 = 1$, koja je prikazana na Slikama 7.6 i 7.7 kao ravna linija pod kutem od 45° , na kojoj bi bila sva eksperimentalna mjerenja kada ne bi bilo odstupanja mjerenja, a model bi savršeno predvidio razmatrani fizikalni fenomen. Razvijeni model prikazuje relativno malu raspršenost predviđanja na skupu podataka za učenje (Slika 7.6), dok je raspršenost podataka na testnom skupu podataka puno veća (Slika 7.7).



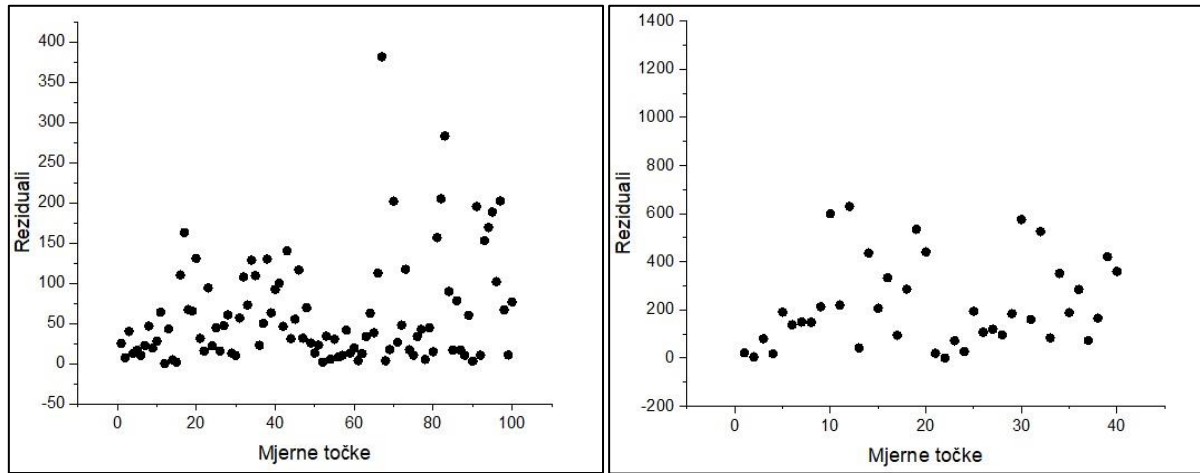
Slika 7.6: Prilagodba predviđenih vrijednosti sile trenja dobivenih modelom selekcije potomaka u odnosu na eksperimentalno izmjerene vrijednosti sile trenja za oba uzorka na skupu podataka za učenje (CVT DoE mjerne točke)



Slika 7.7: Prilagodba predviđenih vrijednosti sile trenja dobivenih modelom selekcije potomaka u odnosu na eksperimentalno izmjerene vrijednosti sile trenja za oba uzorka na testnom skupu podataka (MC DoE mjerne točke)

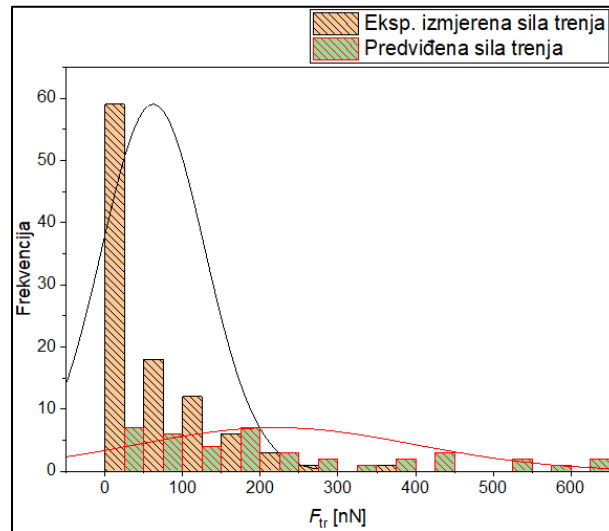
Nadalje, da bi se mogli uspješno predvidjeti budući izmjereni podatci, razvijeni model također mora prikazati i stohastička svojstva [17]. Ovo je statistički ispitano analizom dijagrama reziduala (razlike između predviđenih i eksperimentalno izmjerenih vrijednosti) i prikazano na Slici 7.8. Sa Slike 7.8 a), gdje su prikazani reziduali za skup podataka za učenje, te sa Slike 7.8 b), gdje su prikazani reziduali za testni skup podataka, može se zaključiti da su se modelom selekcije potomaka postigla dobra stohastička i slučajna svojstva, iako je vrijednosti sile trenja precijenjena za testni skup podataka. Kada se uzme u obzir distribucija reziduala za oba skupa podataka prikazana na Slici 7.8 c), normalna distribucija reziduala je potvrđena za skup

podataka za učenje, pokazujući dobru normalizaciju, dok za testni skup podataka to nije slučaj, već je distribucija pomaknuta u desno zbog precijenjenih vrijednosti sile trenja.



a)

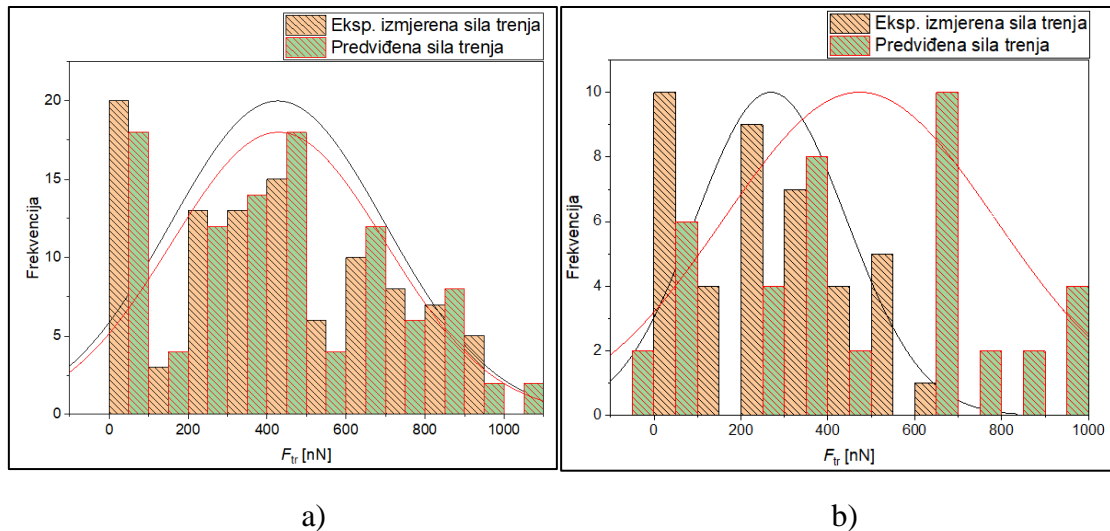
b)



c)

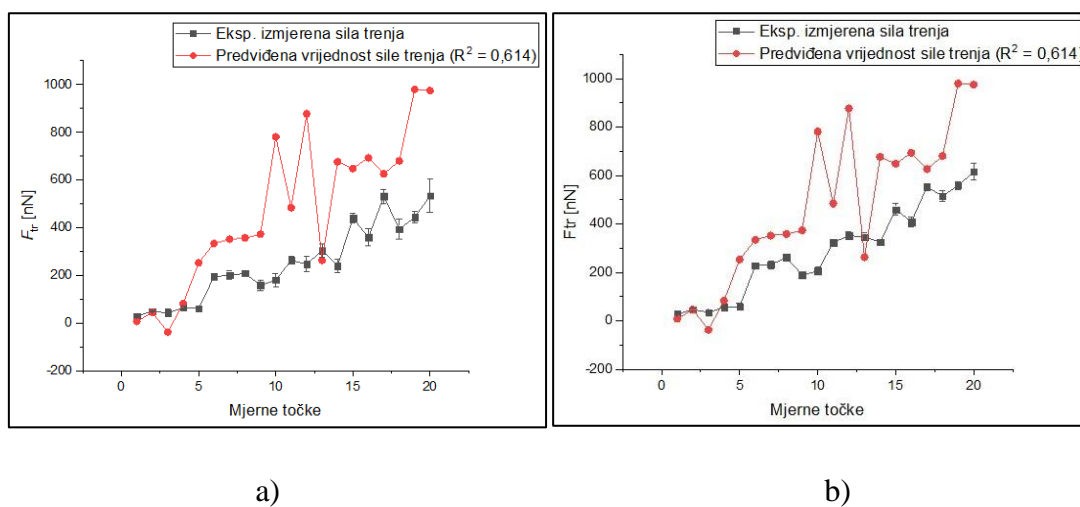
Slika 7.8: Dijagram reziduala najboljeg modela umjetne inteligencije na skupu podataka za učenje a) i testnom skupu b). Distribucija reziduala za oba skupa podataka c).

Performanse razvijenog modela mogu se ocijeniti i analizom distribucije predviđenih vrijednosti uspoređujući ih s eksperimentalno dobivenom distribucijom podataka [17]. Preklapljenе distribucije predviđenih i eksperimentalnih podataka prikazane su na Slici 7.9 za skup podataka za učenje i testni skup podataka (pravokutnici u histograma široki su 50 nN). Distribucije pokazuju jednaku srednju vrijednost za skup podataka za učenje (Slika 7.9 a)), što potvrđuje izuzetno dobru prilagodbu, odnosno predviđanje. S druge strane, na testnom skupu podataka (Slika 7.9 b)), postoji pomak srednje vrijednosti distribucije predviđanja, što je uzrokovano precijenjenim vrijednostima predviđanja, iako je distribucija i dalje normalna.



Slika 7.9: Distribucije predviđenih i eksperimentalnih podataka za skup podataka za učenje a) i za skup za testiranje b) za najbolji model umjetne inteligencije

Nadalje, kako bi se potvrdile izvedbe predviđanja u odnosu na nesigurnost podataka, razmatrana je i prilagodba modela na svakom uzorku zasebno u testnim točkama (MC DoE mjerne točke), tj. njegova sposobnost predviđanja neviđenih eksperimentalnih podataka. Na Slici 7.10 a) i b) su tako prikazane predviđene i eksperimentalne vrijednosti sile trenja za uzorke Al_2O_3 i SS. Eksperimentalno izmjereni podatci prikazani su standardnom devijacijom $\pm\sigma$. Iz dijagrama prikazanih na Slici 7.10 može se uočiti da model selekcije potomaka ima velika odstupanja u predviđanju stvarne vrijednosti sile trenja za oba uzroka, iz razloga što ima vrijednosti R^2 od 0,614 te iz razloga što nije bilo dovoljno vremena za daljnji razvoj ovog modela kako bi se on poboljšao i mogao bi predviđati točnije vrijednosti sile trenja.



Slika 7.10: Prediktivne izvedbe najboljeg modela umjetne inteligencije na testnom skupu podataka (MC DoE mjerne točke) za uzorak Al_2O_3 a) i SS b)

8. ZAKLJUČAK

Iako je trenje na makroskali podrobno opisano, na mikro- i nanoskali je ono, zbog složenosti eksperimenata i modeliranja, još u fazi istraživanja. Međutim, proučavanje mikro/nanotribologije pomaže u razumijevanju međupovršinskih fenomena u makrostrukturama – te predstavlja most između znanosti i inženjerstva.

Razvoj eksperimentalnih (SPM) i teorijskih istraživanja procesa trenja proveden u ovome radu, od atomske i molekulske razine do mikrorazine, omogućio je analizu procesa do kojih dolazi za vrijeme adhezije, trenja, trošenja i podmazivanja u tankom filmu na kliznim ploham.

Doista, na temelju proučene literature i članaka vezanih uz istraživanje i mjerenje trenja i triboloških svojstava na mikro- i nanorazini, može se zaključiti da je SPM (engl. *Scanning Probe Microscopy*) metoda na tom području najzastupljenija eksperimentalna metoda, pa je ona korištena i u ovome radu.

Za potrebe eksperimentalnog mjerenja trenja na mikro- i nanorazini na uzorcima tankih filmova aluminijevog oksida (Al_2O_3) te nehrđajućeg čelika (SS) korišten je pritom pretražni mikroskop s osjetnikom (AFM) *Bruker Dimension Icon* u modalitetu mjerenja poprečne sile (LFM). Najprije je napravljena kalibracija normalne sile šest osjetnika: MSNL-10E i MSNL-10F tvrtke Bruker [30], Aio-Al A, Aio-Al B te Aio-Al C tvrtke BudgetSensors [31] te PPP-LFMR-10 tvrtke Nanosensors [32]. Kalibracijom normalne sile određena je savojna krutost svih šest osjetnika, iz čega je dobivena vrijednost normalne sile svakog osjetnika u ovisnosti o narinutom naponu na piezoaktuatoru. Iz podataka dobivenih kalibracijom normalne sile, zaključeno je da će se za kalibraciju poprečne sile, odnosno mjerenje sile trenja, koristiti osjetnici Aio-Al A za nanopodručje te Aio-Al B za mikropodručje. Prilikom mjerenja sile trenja uzeta je u obzir i kompenzacija utjecaja adhezije, a također je promatran i utjecaj temperature na adheziju.

Pedeset mjernih točaka definirano je centroidalnom Voronoijevom teselacijskom (CVT) DoE metodom u višedimenzijском prostoru promjenjivih parametara: normalnom silom $F_N = 10 \dots 2800$ nN, brzinom klizanja $v = 5 \dots 3000$ nm/s i temperaturom $t = 20 \dots 80$ °C. Mjerenja u svakoj točki ponovljena su pet puta, a s obzirom da su promatrana dva uzorka, analizom je sveukupno napravljeno 500 mjerenja. Na uzorku aluminijevog oksida izmjerena sila trenja F_{tr} je u rasponu 52,488 ... 979,369 nN, a na uzorku nehrđajućeg čelika je to u rasponu 45,242 ... 926,559 nN, pri čemu su sile trenja veće kod većih vrijednosti normalne sile i manjih brzina klizanja.

S obzirom da se samim eksperimentalnim mjerenjem sile trenja ne može utvrditi kompleksna ovisnost sile trenja o istovremenom utjecaju normalne sile, brzine klizanja i temperature na nanorazini, dobiveni rezultati obrađeni su korištenjem metoda strojnog učenja, odnosno umjetne inteligencije. Metodom strojnog učenja i umjetne inteligencije razvijeni su, stoga, prediktivni modeli koji povezuju trenje s trima ulaznim parametrima. Općenito, algoritmi strojnog učenja daju takozvano rješenje crne kutije koje daje prediktivne rezultate, ali, nažalost, ne daje nikakav funkcionalni matematički oblik temeljnih odnosa u podacima, dok algoritmi umjetne inteligencije omogućuju razvoj odgovarajućih matematičkih formula koje opisuju rezultirajuće funkcijske ovisnosti.

Prediktivna izvedba svakog modela pomno je ispitana na temelju predviđanja sile trenja iz ulaznih parametara testnog skupa podataka. Testni skup podataka predstavlja dvadeset mjernih točaka dobivenih Monte Carlo DoE metodom u kojima je eksperimentalno izmjerena sila trenja.

Svi su modeli strojnog učenja i umjetne inteligencije statistički uspoređeni na temelju metrika (srednja apsolutna pogreška, korijen srednje kvadratne pogreške i koeficijent određenosti) koje govore koliko su točna predviđanja i kolika je veličina odstupanja od stvarnih vrijednosti (eksperimentalno izmjerenih vrijednosti). Koeficijent određenosti R^2 odabran je kao najdominantnija metrika za usporedbu modela, što znači da model s R^2 što bliže vrijednosti 1 ima bolju prediktivnu izvedbu.

Zaključeno je tako da, iako model linearne regresije ima najveću vrijednost R^2 te dobro prati trend sile trenja, tako dobivene predviđene vrijednosti sile trenja su poprilično precijenjene. Također, model selekcije potomaka, iako ima najveću vrijednost R^2 , ima velika odstupanja između predviđenih i stvarnih vrijednosti sile trenja.

Da bi se razvio model s boljom i točnijom prediktivnom izvedbom, potrebno je još puno rada i još više eksperimentalnih mjerenja nego što je bilo moguće provesti pri izradi ovog diplomskog rada koji, ipak, predstavlja jako dobru osnovu za taj daljnji rad.

LITERATURA

- [1] Vanossi, A. i dr.: „Recent highlights in nanoscale and mesoscale friction“, *Biestal Journal on Nanotechnology*“, Vol. 9, pp. 1995 - 2014, 2018.
- [2] Bhushan, B.: „Springer Handbook of Nanotechnology“, 3. izdanje, Springer-Verlag, Berlin (D), 2010.
- [3] Luo, J., Liu, M., Ma, L.: „Origin of friction and the new frictionless technology— Superlubricity: Advancements and future outlook“, *Nano Energy*, Vol. 86, 2021.
- [4] „Tribologija“, s Interneta, <https://www.enciklopedija.hr/natuknica.aspx?id=62238>, 24. listopada 2023.
- [5] „What is an SPM?“, s Interneta, <https://www.bruker.com/en/products-and-solutions/microscopes/materials-afm/what-is-an-spm.html> , 07. studenog 2023.
- [6] Matekalo, J.: „Moderni mikroskopi“, Završni rad, Sveučilište Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku, Odjel za fiziku, 2020.
- [7] Wang, W. i dr.: „The heterogeneity and electro-mechanical characteristics of coal at the micro- and nanoscale“, *Journal of Geophysics and Engineering*, Vol. 16, No.4, 2019.
- [8] Atomic Force Microscopy, s Interneta, https://asdlib.org/onlineArticles/ecourseware/Bullen/SPMModule_BasicTheoryAFM.pdf , 12. studenoga 2023.
- [9] Lateral Force Microscopy (LFM), s Interneta, <https://www.parksystems.com/index.php/park-spm-modes/standard-imaging-mode/222-lateral-force-microscopy-lfm> , 12. studenoga 2023.
- [10] Scanning probe microscope (SPM), s Interneta, <https://www.microscopemaster.com/scanning-probe-microscope.html> , 11. studenoga 2023.
- [11] „Nanoindenters“, s Interneta, <https://www.azonano.com/article.aspx?ArticleID=6524>, 11. studenoga 2023.
- [12] Keysight G200 Nanoindenter, s Interneta, <https://nanori.uniri.hr/lpemnt/hr/keysight-g200-nanoindenter/>, 11. studenoga 2023.

- [13] Böhmermann, F., Riemer, O.: „Methodology for Reliable Tribological Investigations Applying a Micro Tribometer in Ball-on-Plate Configuration“, MATEC Web of Conferences, Vol. 190, 2018.
- [14] Force Measurement Instruments, Torque Measurement Instruments, s Interneta, <https://ritmindustry.com/catalog/force-measurement-instruments-torque-measurement-instruments/tribometer-2/>, 11. studenoga 2023.
- [15] Micro Tribology for analysis of friction properties, s Interneta <https://susos.com/analyseservice/reibungseigenschaften/mikro-tribologie/>, 11. studenoga 2023.
- [16] Durakovic, B.: „Design of Experiments Application, Concepts, Examples: State of the Art“, Periodicals of Engineering and Natural Sciences, Vol. 5, No. 3, pp. 421- 439, 2017.
- [17] Perčić, M.: „Characterization of parameters influencing friction in the nanometric domain“, Doktorska disertacija, Sveučilište u Rijeci, Tehnički fakultet, 2020.
- [18] Vassiliades, V., Chatzilygeroudis, K., Mouret, J.B.: „Using Centroidal Voronoi Tessellations to Scale Up the Multi-dimensional Archive of Phenotypic Elites Algorithm“, IEEE Transactions on Evolutionary Computation, Vol. 22, No. 4, pp. 623 - 630, 2018.
- [19] Centroidal Voronoi Tessellations: Applications and Algorithms, s Interneta <https://www.semanticscholar.org/paper/Centroidal-Voronoi-Tessellations%3A-Applications-and-Du-Faber/f9f5729473bd3aa9468b90ae55d5f09409543b76>, 15. studenoga 2023.
- [20] Hateley, J. C., Wei, H., Chen, L.: „Fast Methods for Computing Centroidal Voronoi Tessellations“, Journal of scientific computing, Vol. 63, pp. 185 - 212, 2015.
- [21] Fu, L., Hu, X. Y., and Adams, N. A.: „A physics-motivated Centroidal Voronoi Particle domain decomposition method“, Journal of Computational Physics, Vol. 335, pp. 718 – 735, 2017.
- [22] Romero, V. J., Burkardt, J. V., Gunzburger, M. D., and Peterson, J. S.: „Comparison of pure and “Latinized” centroidal Voronoi tessellation against various other statistical sampling methods“, Reliability Engineering & System Safety, Vol. 91, No. 10, pp. 1266 – 1280, 2006.

- [23] Teselacija, s Interneta, <http://struna.ihjj.hr/naziv/teselacija/21789/>, 15. studenoga 2023.
- [24] LCVT – Latin Centroidal Voronoi Tessellations, s Interneta, https://people.math.sc.edu/Burkardt/m_src/lcvt/lcvt.html, 29. lipnja 2024.
- [25] Alam, F. M., McNaught, K. R., and Ringrose, T. J.: „A comparison of experimental designs in the development of a neural network simulation metamodel“, Simulation Modelling Practice and Theory, Vol. 12, No. 7–8, pp. 559–578, 2004.
- [26] Sobol, I. M.: A Primer for the Monte Carlo Method, CRC Press, New York, 1994.
- [27] Giunta, A. A., Wojtkiewicz Jr., S. F., Eldred, M. S.: „Overview of modern design of experiments methods for computational simulation“, 41st AIAA aerospace sciences meeting and exhibit, Nevada, 2003.
- [28] Gentle, J. E.: „Random Number Generation and Monte Carlo Methods“, 1. izdanje, Springer-Verlag, New York, 1998.
- [29] Tip and cantilever, s Interneta, <https://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/afm/cantilever.php>, 11. studenoga 2023.
- [30] Bruker AFM Probes, s Interneta, <https://www.brukerafmprobes.com/p-3710-msnl-10.aspx>, 15. studenoga 2023.
- [31] All-In-One-AFM Probe, s Interneta, <https://www.budgetsensors.com/multipurpose-afm-probe-aluminum-all-in-one-al>, 15. studenoga 2023.
- [32] PPP-LFMR-10 AFM Probe, s Interneta, <https://www.nanosensors.com/pointprobe-plus-lateral-force-microscopy-reflex-coating-afm-tip-PPP-LFMR>, 15. studenoga 2023.
- [33] Bruker Dimension Icon, s Interneta, <https://www.bruker.com/en/products-and-solutions/microscopes/materials-afm/dimension-icon-afm.html>, 31. listopada 2023
- [34] Varenberg, M., Etsion, I., Halperin, G.: „An improved wedge calibration method for lateral force in atomic force microscopy“, AIP Publishing, Review of Scientific Instruments, Vol. 74, No. 7, 2003.
- [35] Gwyddion, s Interneta, <http://gwyddion.net/>, 27. prosinca 2023.
- [36] OriginPro, s Interneta, <https://www.originlab.com/>, 15. travnja 2024.

- [37] Korelacija, s Interneta, <https://web.math.pmf.unizg.hr/~rus/nastava/stat/SLAJD/7-korelacija.pdf>, 15. travnja 2024.
- [38] Machine Learning in MATLAB, s Interneta <https://www.mathworks.com/help/stats/machine-learning-in-matlab.html>, 15. travnja 2024.
- [39] Bolf, N.: „Strojno učenje“, Osvježimo znanje, Kem. Ind. 70, (9-10), pp. 591–593, 2021., <https://hrcak.srce.hr/file/382926> , s Interneta, 15. travnja 2024.
- [40] Kroese, D. P., Taimre, T., and Botev, Z. I.: „Handbook of Monte Carlo Methods“, John Wiley & Sons, New York, 2011
- [41] What is overfitting?, s Interneta, <https://aws.amazon.com/what-is/overfitting/>, 15. travnja 2024.
- [42] Standardize Data: Why It Matters & How to Do It Effectively!, s Interneta, <https://atlan.com/standardize-data/>, 15. travnja 2024.
- [43] Hastie, T., Tibshirani, R., and Friedman, J.:“ The Elements of Statistical Learning: Data Mining, Inference, and Prediction“, 2.izdanje, Springer-Verlag, New York, 2009.
- [44] Mandel, J.: „The Statistical Analysis of Experimental Data“, Dover Publications Inc, New York, 1964.
- [45] Measures of Skewness and Kurtosis, s Interneta, <https://www.itl.nist.gov/div898/handbook/eda/section3/eda35b.htm>, 15. travnja 2024.
- [46] Useful Encoding Techniques in Machine Learning, s Interneta, <https://www.linkedin.com/pulse/useful-encoding-techniques-machine-learning-heba-al-haddad>, 25. travnja 2024.
- [47] Tatachar, A.V.: „Comparative Assessment of Regression Models Based On Model Evaluation Metrics“, International Research Journal of Engineering and Technology (IRJET), Vol. 8, No. 9, pp. 853 – 860, 2021.
- [48] Lovrić, I: „Klasifikator pojačanja gradijenta kod procjene mogućnosti preživljavanja putnika na Titaniku“, Završni rad, Sveučilište u Zagrebu, Fakultet strojarstva i brodogradnje, 2022.
- [49] Weka, s Interneta, <https://waikato.github.io/weka-site/index.html>, 20. ožujka 2024.

- [50] Linear Regression in Machine learning, s Interneta, <https://www.geeksforgeeks.org/ml-linear-regression/>, 2. svibnja 2024.
- [51] Multi-Layer Perceptron Learning in Tensorflow, s Interneta, <https://www.geeksforgeeks.org/multi-layer-perceptron-learning-in-tensorflow/> , 2. svibnja 2024.
- [52] Random Forest Algorithm in Machine Learning, s Interneta, <https://www.geeksforgeeks.org/random-forest-algorithm-in-machine-learning/> , 2. svibnja 2024.
- [53] Zhang, C. and Ma, Y.: „Ensemble Machine Learning: Methods and Applications“, Springer-Verlag, New York, 2012.
- [54] Support Vector Machine (SVM) Algorithm, s Interneta, <https://www.geeksforgeeks.org/support-vector-machine-algorithm/> , 2. svibnja 2024.
- [55] HeuristicLab, s Interneta, <https://dev.heuristiclab.com/trac.fcgi/>, 20. ožujka 2024.
- [56] Genetic Programming, s Interneta, <https://www.virtusa.com/digital-themes/genetic-programming>, 5. svibnja 2024.
- [57] Angelis, D., Sofos, F., Karakasidis, T. E.: „Artificial Intelligence in Physical Sciences: Symbolic Regression Trends and Perspectives“, Archives of Computational Methods in Engineering, Vol.30, pp. 3845 – 3865, 2023.
- [58] Affenzeller, M. i dr.:“ Offspring Selection Genetic Algorithm Revisited:Improvements in Efficiency by Early Detectionof Unsuccessful Individuals“, Computer Aided Systems Theory – EUROCAST 2017, Lecture Notes in Computer Science, Las Palmas de Gran Canaria, Španjolska, 19. – 24.02., pp. 424 – 431, 2018.
- [59] Hornby, G.S.: „ALPS: The age-layered population structure for reducing the problem of premature convergence“, GECCO 2006: Proceedings of the 8th Annual Conference on Genetic and Evolutionary Computation, Seattle Washington, SAD, 08. - 12.07. 2006., pp. 815 – 822, 2006.

POPIS SLIKA

Slika 2.1: Princip rada pretražnog tunelirajućeg mikroskopa [6].	4
Slika 2.2: Pojednostavljeni prikaz dijelova AFM-a [7].	5
Slika 2.3: Kontaktni režim rada AFM-a [8].	5
Slika 2.4: Vibrirajući (engl. Tapping) režim rada AFM-a [8]	5
Slika 2.5: Beskontaktni režim rada AFM-a [8].	6
Slika 2.6: Shematski prikaz položaja točke laserske zrake na fotodetektoru zbog a) normalnog otklona osjetnika za topografsko snimanje i b) torzije osjetnika za LFM snimanje [9].	6
Slika 2.7: Prikaz pomaka konzole i LFM signala uzrokovanog topografskim značajkama i promjenom materijala [9]	7
Slika 2.8: Nanoindenter Keysight G200 [12]	9
Slika 2.9: TETRA BASALT mikrotribometar [13]	10
Slika 3.1: a) Voronoijeva teselacija; b) centroidalna Voronoijeva teselacija [19].	12
Slika 3.2: 50 mjernih točaka – CVT DoE metoda.	12
Slika 3.3: 50 mjernih točaka – Latinizirana CVT DoE metoda	13
Slika 3.4: 50 mjernih točaka – Monte Carlo DoE metoda.	14
Slika 4.1: Bruker Dimension Icon pretražni mikroskop s osjetnikom u NANORI laboratoriju	15
Slika 4.2: Slika SPM osjetnika s trokutastom gređicom i vrškom dobivena na pretražnom elektronskom mikroskopu (Scanning Electron Microscope – SEM).	16
Slika 4.3: a) Bočni pogled na vršak osjetnika te b) pogled na tetraedarski oblik vrška osjetnika	16
Slika 4.4: Nosač s MSNL-10 (engl. Micro Silicone Nitride Lever) osjetnicima različitih geometrija	17
Slika 4.5: Brukerovi MSNL-10 (engl. Micro Silicone Nitride Lever) osjetnici	18
Slika 4.6: Nominalne vlastite frekvencije i krutosti MSNL-10 osjetnika dane od strane proizvođača	18
Slika 4.7: Oznake osjetnika [30]	19
Slika 4.8: Program Nanoscope	20
Slika 4.9: Postavljanje lasera na sjenu osjetnika	21
Slika 4.10: Zbroj signala lasera i fotodiode	21
Slika 4.11: Pogled odozgo na osjetnik.	22
Slika 4.12: Graf sila-udaljenost osjetnika [17].	23

Slika 4.13: Osjetljivost osjetnika MSNL-10F.....	23
Slika 4.14: Thermal tune MSNL-10F osjetnika.....	24
Slika 4.15: Konstanta krutosti osjetnika MSNL-10F	25
Slika 4.16: Logaritamska ovisnost normalne sile šest osjetnika u ovisnosti o naponu piezoaktuatora	26
Slika 4.17: Geometrija osjetnika Aio-Al A (lijevo) i Aio-Al B (desno) [31].....	27
Slika 4.18: Shematski prikaz (a) i stvarna topologija TGF11 uzorka (b) [17]	28
Slika 4.19: Ravnoteža sile koje djeluju na vrh sonde tijekom mjerenja [17]	28
Slika 4.20: Koordinatni sustav korišten u Varenbergovom proračunu [34].....	29
Slika 4.21: Shematski prikaz torzijske petlje [34].....	33
Slika 4.22: Postupak za određivanje kalibracijske konstante α [34].....	35
Slika 4.23: Sila adhezije za osjetnik Aio-Al A	36
Slika 5.1: TGF11 (100) Trace signal – osjetnik Aio-Al A	37
Slika 5.2: TGF11 (100) Retrace signal – osjetnik Aio-Al A	38
Slika 5.3: TGF11 (111) trace signal – osjetnik Aio-Al A.....	38
Slika 5.4: TGF11 (111) retrace signal – osjetnik Aio-Al A.....	39
Slika 5.5: Uzorci aluminijevog oksida i nehrđajućeg čelika na grijaču	40
Slika 5.6: Ovisnost adhezije o temperaturi za oba uzorka	41
Slika 5.7: Bojama označena distribucija eksperimentalno određenih vrijednosti sile trenja F_{tr} za mjerne točke na uzorku Al_2O_3 u odnosu na promatrane parametre	42
Slika 5.8: Bojama označena distribucija eksperimentalno određenih vrijednosti sile trenja F_{tr} za mjerne točke na uzorku nehrđajućeg čelika u odnosu na razmatrane parametre	43
Slika 6.1: Podjela strojnog učenja [39].....	46
Slika 6.2: Ovisnost adhezije o temperaturi za oba uzorka - testni skup podataka	48
Slika 6.3: Bojama označena distribucija eksperimentalno određenih vrijednosti sile trenja F_{tr} za mjerne točke (testni skup podataka) na uzorku Al_2O_3 u odnosu na promatrane parametre	49
Slika 6.4: Bojama označena distribucija eksperimentalno određenih vrijednosti sile trenja F_{tr} za mjerne točke (testni skup podataka) na uzorku nehrđajućeg čelika u odnosu na razmatrane parametre	49
Slika 6.5: Histogrami i normalna distribucija izmjerene sile trenja u mjernim točkama dobivenim CVT DoE metodom na uzorcima Al_2O_3 a) i nehrđajućeg čelika b).....	53
Slika 6.6: Histogrami i normalna distribucija izmjerene sile trenja u testnim mjernim točkama dobivenim MC DoE metodom na uzorcima Al_2O_3 a) i nehrđajućeg čelika b).....	53
Slika 6.7: Shematski dijagram višeslojnog perceptrona [51].....	57

Slika 6.8: Prediktivne izvedbe razmatranih modela strojnog učenja na skupu podataka za učenje (CVT DoE mjerne točke) za uzorak Al_2O_3	61
Slika 6.9: Prediktivne izvedbe razmatranih modela strojnog učenja na skupu podataka za učenje (CVT DoE mjerne točke) za uzorak nehrđajućeg čelika	61
Slika 6.10: Prediktivne izvedbe razmatranih modela strojnog učenja na testnom skupu podataka (MC DoE mjerne točke) za uzorak Al_2O_3	63
Slika 6.11: Prediktivne izvedbe razmatranih modela strojnog učenja na testnom skupu podataka (MC DoE mjerne točke) za uzorak nehrđajućeg čelika.....	64
Slika 7.1: Prilagodba predviđenih vrijednosti sile trenja dobivenih linearnom regresijom u odnosu na eksperimentalno izmjerene vrijednosti sile trenja za oba uzorka na skupu podataka za učenje (CVT DoE mjerne točke)	71
Slika 7.2: Prilagodba predviđenih vrijednosti sile trenja dobivenih linearnom regresijom u odnosu na eksperimentalno izmjerene vrijednosti sile trenja za oba uzorka na testnom skupu podataka (MC DoE mjerne točke).....	71
Slika 7.3: Dijagram reziduala najboljeg modela strojnog učenja na skupu podataka za učenje a) i testnom skupu b). Distribucija reziduala za oba skupa podataka c).....	72
Slika 7.4: Distribucije predviđenih i eksperimentalnih podataka za skup podataka za učenje a) i za skup za testiranje b).....	73
Slika 7.5: Prediktivne izvedbe najboljeg modela strojnog učenja na testnom skupu podataka (MC DoE mjerne točke) za uzorak Al_2O_3 a) i SS b)	74
Slika 7.6: Prilagodba predviđenih vrijednosti sile trenja dobivenih modelom selekcije potomaka u odnosu na eksperimentalno izmjerene vrijednosti sile trenja za oba uzorka na skupu podataka za učenje (CVT DoE mjerne točke)	75
Slika 7.7: Prilagodba predviđenih vrijednosti sile trenja dobivenih modelom selekcije potomaka u odnosu na eksperimentalno izmjerene vrijednosti sile trenja za oba uzorka na testnom skupu podataka (MC DoE mjerne točke).....	75
Slika 7.8: Dijagram reziduala najboljeg modela umjetne inteligencije na skupu podataka za učenje a) i testnom skupu b). Distribucija reziduala za oba skupa podataka c).....	76
Slika 7.9: Distribucije predviđenih i eksperimentalnih podataka za skup podataka za učenje a) i za skup za testiranje b) za najbolji model umjetne inteligencije.....	77
Slika 7.10: Prediktivne izvedbe najboljeg modela umjetne inteligencije na testnom skupu podataka (MC DoE mjerne točke) za uzorak Al_2O_3 a) i SS b)	77

POPIS TABLICA

Tablica 4.1: Raspon normalne sile osjetnika različitih geometrija u ovisnosti o naponu piezoaktuatora.....	26
Tablica 6.1: Matrica korelacije s Pearsonovim korelacijskim koeficijentima za silu trenja i utjecajne parametre u mjernim točkama dobivenim CVT DoE metodom za uzorak od aluminijevog oksida.....	45
Tablica 6.2: Matrica korelacije s Pearsonovim korelacijskim koeficijentima za silu trenja i utjecajne parametre u mjernim točkama dobivenim CVT DoE metodom za uzorak od nehrđajućeg čelika.....	45
Tablica 6.3: Matrica korelacije s Pearsonovim korelacijskim koeficijentima za silu trenja i utjecajne parametre u mjernim točkama dobivenim MC DoE metodom za uzorak od aluminijevog oksida.....	50
Tablica 6.4: Matrica korelacije s Pearsonovim korelacijskim koeficijentima za silu trenja i utjecajne parametre u mjernim točkama dobivenim MC DoE metodom za uzorak od nehrđajućeg čelika (SS).....	50
Tablica 6.5: Binarno kodiranje za korištene uzorke materijala tankih filmova u modelima skupnih podataka.....	54
Tablica 6.6: Usporedba prediktivnih svojstava korištenih modela strojnog učenja na skupu podataka za učenje (CVT DoE mjerne točke) za svaki uzorak zasebno.....	59
Tablica 6.7: Usporedba prediktivnih svojstava korištenih modela strojnog učenja obučenih na zajedničkom skupu podataka za učenje (CVT DoE mjerne točke).....	59
Tablica 6.8: Usporedba prediktivnih svojstava korištenih modela strojnog učenja na testnom skupu podataka (MC DoE mjerne točke) za svaki uzorak zasebno.....	62
Tablica 6.9: Usporedba prediktivnih svojstava korištenih modela strojnog učenja obučenih na zajedničkom testnom skupu podataka (MC DoE mjerne točke).....	63
Tablica 6.10: Usporedba prediktivnih svojstava korištenih modela umjetne inteligencije na skupu podataka za učenje (CVT DoE mjerne točke) za svaki uzorak zasebno.....	67
Tablica 6.11: Usporedba prediktivnih svojstava korištenih modela umjetne inteligencije obučenih na zajedničkom skupu podataka za učenje (CVT DoE mjerne točke).....	68
Tablica 6.12: Usporedba prediktivnih svojstava korištenih modela umjetne inteligencije na testnom skupu podataka (MC DoE mjerne točke) za svaki uzorak zasebno.....	68
Tablica 6.13: Usporedba prediktivnih svojstava korištenih modela umjetne inteligencije obučenih na zajedničkom testnom skupu podataka (MC DoE mjerne točke).....	69

Tablica 7.1: Metrike najboljeg prediktivnog modela strojnog učenja - linearne regresije.....70

SAŽETAK

Tribološka svojstva poput trenja i trošenja još se uvijek smatraju problemom u mnogim inženjerskim i znanstvenim područjima. Dok se trenje na makroskali može dobro opisati odgovarajućim jednadžbama i modelima, za trenje na mikro- i nanoskali to nije slučaj. S obzirom da je trenje nelinearni stohastički fenomen koji ovisi o više parametara, eksperimentalna mjerenja su složenija, kao što je i razvoj modela koji opisuje taj fenomen. Ovisnost trenja na nanoskali o više parametara proučavana je u ovom radu pomoću pretražnog mikroskopa s osjetnikom u modalitetu rada mjerenja poprečne sile. Eksperimentalna mjerenja sile trenja na mikro- i nanoskali vršena su na dvama uzorcima tankih filmova: aluminijskom oksidu (Al_2O_3) te nehrđajućem čeliku (SS) u eksperimentalnim točkama definiranim trima promjenjivim parametrima: normalnom silom $F_N = 10 \dots 2800$ nN, brzinom klizanja $v = 5 \dots 3000$ nm/s i temperaturom $t = 20 \dots 80$ °C. Pedeset mjernih točaka definirano je centroidalnom Voronojjevom teselacijskom (CVT) DoE metodom u višeskalarnom prostoru promjenjivih parametara. Budući da iz eksperimentalnih mjerenja sile trenja nije moguće odrediti ovisnost iste o trima parametrima, podatci dobiveni eksperimentalnim mjerenjima analizirani su korištenjem različitih metoda strojnog učenja i umjetne inteligencije kako bi se dobili prediktivni modeli koji povezuju ulazne parametre (brzinu klizanja, temperaturu i normalnu silu) s vrijednošću sile trenja na mikro- i nanoskali. Statističkom usporedbom razvijenih modela strojnog učenja i umjetne inteligencije pokazalo se da od svih modela strojnog učenja linearna regresija ima najbolju prediktivnu izvedbu, dok od svih modela umjetne inteligencije najbolja svojstva ima selekcija potomaka.

Ključne riječi: tribologija, sila trenja, pretražna mikroskopija, mikroskopija atomske sile, strojno učenje, umjetna inteligencija

SUMMARY

Tribological properties such as friction and wear are still considered a problem in many engineering and scientific fields. While friction on the macroscale can be well described with appropriate equations and models, this is not the case for friction on the micro- and nanoscale. Given that the friction is a non-linear stochastic phenomenon that depends on several parameters, experimental measurements are more complex, as is the development of models that describe this phenomenon. The dependence of nanofriction on several parameters was thus studied in this work by using a scanning probe microscope. Experimental measurements of the friction force on the micro- and nanoscale were hence performed on two samples of thin films: aluminum oxide (Al_2O_3) and stainless steel (SS) in the experimental points defined by three variable parameters: normal force $F_N = 10 \dots 2800$ nN, sliding velocity $v = 5 \dots 3000$ nm/s and temperature $t = 20 \dots 80$ °C. Fifty measurement points were defined by employing the Centroidal Voronoi Tessellation (CVT) Design of Experiment (DoE) method in the multiscale space of variable parameters. From the experimental measurements of the friction force itself, it is not possible to determine its dependence on the three input parameters, and therefore the data obtained from the experimental measurements were analyzed by using different machine learning and artificial intelligence algorithms in order to obtain predictive models that connect the input parameters (sliding velocity, temperature and normal force) with the value of the friction force on the micro- and nanoscale. A statistical comparison of the developed machine learning and artificial intelligence models showed that of all machine learning models, linear regression has the best predictive performance, while of all artificial intelligence models, offspring selection has the best performances.

Key words: tribology, friction force, scanning probe microscopy, atomic force microscopy, machine learning, artificial intelligence