

# ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑΣ ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗΣ ΝΕΥΡΩΝΙΚΩΝ ΔΙΚΤΥΩΝ ΓΙΑ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΗ ΓΡΑΜΜΙΚΩΝ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ ΜΕ ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΣΤΗΝ ΠΡΟΒΛΕΨΗ ΤΟΥ ΔΕΙΚΤΗ ΔΙΑΘΛΑΣΗΣ ΥΛΙΚΩΝ

ΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ  
ΧΟΝΔΡΟΔΗΜΑ ΕΥΑΓΓΕΛΙΑ

Επιβλέπων: Αλεξανδρίδης Αλέξανδρος, Επίκουρος Καθηγητής

## ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα (Artificial Neural Networks, ANN) αποτελούν ένα σύνολο από ισχυρά μαθηματικά εργαλεία που ανήκουν στις τεχνικές της τεχνητής νοημοσύνης και μπορούν να μοντελοποιήσουν οποιοδήποτε άγνωστο μη γραμμικό σύστημα χρησιμοποιώντας μόνο δεδομένα εισόδου-εξόδου από αυτό (Haykin, 1999). Αυτή η τεχνική ονομάζεται «black box» όπου το σύστημά μας παρουσιάζεται ως ένα μαύρο κουτί όπου μπορούμε να δούμε τα σήματα εισόδου και εξόδου από αυτό, αλλά δε μπορούμε να δούμε στο εσωτερικό του, δηλαδή δε γνωρίζουμε τους μηχανισμούς που το διέπουν.

Ανάλογα με το είδος των συνδέσεων των νευρώνων που απαρτίζουν ένα νευρωνικό δίκτυο, διακρίνουμε διαφορετικές αρχιτεκτονικές από τις οποίες οι πιο γνωστές είναι τα εμπροσθοτροφοδοτούμενα νευρωνικά δίκτυα (Feedforward Neural Networks, FFN), τα παλινδρομικά νευρωνικά δίκτυα (Recurrent Neural Networks, RNN), τα δίκτυα Kohonen και τα νευρωνικά δίκτυα ακτινικής συνάρτησης βάσης (Radial Basis Function networks, RBF). Τα δίκτυα RBF αποτελούν μια ιδιαίτερη αρχιτεκτονική νευρωνικών δικτύων, η οποία χαρακτηρίζεται από δύο κύρια πλεονεκτήματα: Την απλότητα της δομής της και την ταχύτητα των αλγορίθμων εκμάθησης που υιοθετεί.

Η διαδικασία μέσω της οποίας τα νευρωνικά δίκτυα μαθαίνουν τη σχέση ανάμεσα στην είσοδο και στην έξοδο ονομάζεται εκπαίδευση. Η διαδικασία εκπαίδευσης ενός δικτύου RBF χωρίζεται σε δύο φάσεις. Σε πρώτη φάση καθορίζεται η δομή του δικτύου. Σε δεύτερη φάση υπολογίζονται οι παράμετροι του δικτύου που

σχετίζονται με τις συναπτικές συνδέσεις ανάμεσα στους νευρώνες της κρυφής στοιβάδας και στους νευρώνες της στοιβάδας εξόδου χρησιμοποιώντας τη μέθοδο της γραμμικής παλινδρόμησης (linear regression) (Leonard & Kramer, 1991, Powell, 1987). Η τυπική μεθοδολογία εκπαίδευσης δικτύων RBF η οποία χρησιμοποιείται στον καθορισμό της δομής του δικτύου, δηλαδή στον υπολογισμό των θέσεων των κέντρων των νευρώνων της κρυφής στοιβάδας είναι μία επαναληπτική διαδικασία που ονομάζεται αλγόριθμος *k*-means (Darken & Moody, 1990, Macqueen, 1967, Moody & Darken, 1989). Ο αλγόριθμος αυτός παρουσιάζει δύο βασικά μειονεκτήματα: Δεν έχει τη δυνατότητα να επιλέξει αυτόματα τον κατάλληλο αριθμό κέντρων των νευρώνων της κρυφής στοιβάδας και απαιτεί μεγάλους υπολογιστικούς χρόνους.

Προκειμένου να αποφευχθούν τα παραπάνω προβλήματα, σε μία πρόσφατη δημοσίευση, προτάθηκε μια νέα μέθοδος η οποία καθορίζει τη δομή του δικτύου και βασίζεται στην ασαφή διαμέριση του χώρου των μεταβλητών εισόδου (Sarimveis et al., 2002). Η μέθοδος αυτή, η οποία ονομάζεται αλγόριθμος των ασαφών μέσων, παρουσιάζει πολλά πλεονεκτήματα σε σχέση με τις συμβατικές μεθόδους εκπαίδευσης νευρωνικών δικτύων RBF και έχει αποδειχθεί ότι είναι πιο αποδοτική στη μοντελοποίηση μη γραμμικών συστημάτων. Ο αλγόριθμος αυτός ξεκινώντας από μία ασαφή διαμέριση του χώρου των μεταβλητών εισόδου, επιλέγει τη δομή και τα κέντρα των νευρώνων σε ένα μόνο βήμα κάνοντας μόνο ένα πέρασμα από τα δεδομένα εκπαίδευσης, ενώ ολοκληρώνει τη διαδικασία της εκπαίδευσης σε πολύ μικρούς υπολογιστικούς χρόνους.

Στην εργασία αυτή, χρησιμοποιείται μία παραλλαγή της μεθόδου των ασαφών μέσων που ονομάζεται μη συμμετρικός αλγόριθμος των ασαφών μέσων, ο οποίος έχει τα ίδια πλεονεκτήματα με τον συμμετρικό αλγόριθμο, αλλά υπερτερεί στο ότι έχει μεγαλύτερη ευελιξία, γεγονός που οδηγεί σε καλύτερα δίκτυα υπό την έννοια της ακρίβειας ή και της πολυπλοκότητας του μοντέλου. Εκπαιδεύοντας νευρωνικά δίκτυα τύπου RBF σε συνδυασμό με τον αλγόριθμο των ασαφών μέσων μπορούμε να μοντελοποιήσουμε οποιοδήποτε μη γραμμικό σύστημα χρησιμοποιώντας μόνο δεδομένα εισόδου-εξόδου από αυτό.

Ένα πρόβλημα το οποίο θα ήταν δύσκολο να μοντελοποιηθεί χρησιμοποιώντας βασικές εξισώσεις (first principle equations) είναι και το πρόβλημα της πρόβλεψης του δείκτη διάθλασης υλικών. Ο δείκτης διάθλασης αποτελεί μια θεμελιώδη ιδιότητα της ύλης που έχει μεγάλη σημασία, που δε περιορίζεται μόνο σε

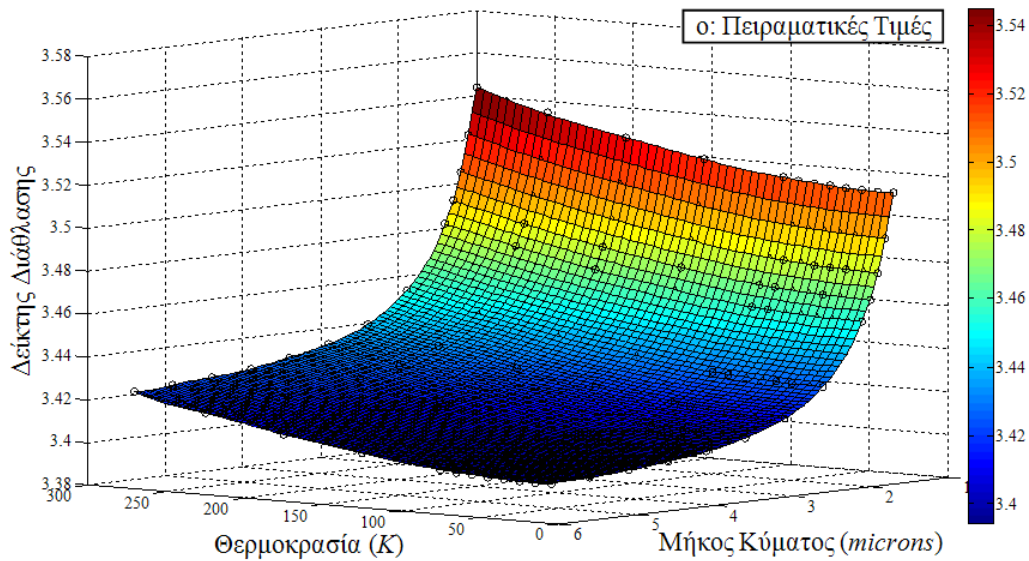
εφαρμογές οπτικής, δεδομένου ότι συνδέεται και με άλλες ηλεκτρικές, μαγνητικές, θερμικές, κτλ. ιδιότητες. Για παράδειγμα, ο δείκτης διάθλασης μπορεί να χρησιμοποιηθεί προκειμένου να αναγνωριστεί ένα συγκεκριμένο υλικό, να επιβεβαιωθεί η καθαρότητά του ή να μετρηθεί η συγκέντρωσή του.

Σε αυτήν την εργασία εκπαιδεύτηκαν νευρωνικά δίκτυα τύπου RBF υιοθετώντας τον μη συμμετρικό αλγόριθμο των ασαφών μέσων χρησιμοποιώντας σαν μεταβλητές εισόδου δεδομένα που μετρούνται πειραματικά όπως το μήκος κύματος, η θερμοκρασία και η συγκέντρωση, έτσι ώστε να μοντελοποιηθεί ο δείκτης διάθλασης ορισμένων υλικών (Alexandridis et al., 2011). Συγκεκριμένα, εξετάστηκαν δύο περιπτώσεις, που περιλαμβάνουν την πρόβλεψη του δείκτη διάθλασης για δύο κρυστάλλους ημιαγωγών (πυριτίου και γερμανίου) και ενός μίγματος νερού-αιθανόλης.

Όσον αφορά στην περίπτωση του πυριτίου και του γερμανίου, στόχος ήταν να προβλεφθεί ο δείκτης διάθλασης για κάθε κρύσταλλο ημιαγωγού χρησιμοποιώντας ως εισόδους το μήκος κύματος και τη θερμοκρασία (Frey et al., 2006). Τα μοντέλα που εκπαιδεύτηκαν με το μη συμμετρικό αλγόριθμο των ασαφών μέσων έδωσαν καλύτερα αποτελέσματα τόσο σε σχέση με άλλες μεθοδολογίες εκπαίδευσης νευρωνικών δικτύων, όσο και σε σχέση με εμπειρικές εξισώσεις που έχουν κατασκευαστεί ειδικά για τη συγκεκριμένη εφαρμογή. Στο σχήμα 1 παρουσιάζεται ένα τρισδιάστατο γράφημα της επιφάνειας που προβλέπεται από το δίκτυο RBF που εκπαιδεύτηκε με το μη συμμετρικό αλγόριθμο, μαζί με τα πειραματικά δεδομένα, όπου βλέπουμε ότι οι πειραματικές τιμές συμπίπτουν με τις προβλεπόμενες. Η σημασία του παραγόμενου μοντέλου είναι μεγάλη, αφού μας παρέχει στην ουσία ένα νομογράφημα μέσω του οποίου μπορούμε να βρούμε το δείκτη διάθλασης για κάθε συνδυασμό μήκους κύματος και θερμοκρασίας, ενώ οι μετρήσεις μας δίνουν τις τιμές του δείκτη διάθλασης μόνο σε πολύ συγκεκριμένες τιμές μήκους κύματος και θερμοκρασίας.

Υιοθετώντας μια παρόμοια διαδικασία με την περίπτωση του πυριτίου, εκπαιδεύτηκαν μοντέλα RBF με το μη συμμετρικό αλγόριθμο των ασαφών μέσων και για το γερμάνιο, δίνοντας για μια ακόμη φορά αποτελέσματα που υπερέχουν σε σχέση με άλλους αλγόριθμους εκπαίδευσης νευρωνικών δικτύων και με εμπειρικές εξισώσεις.

Προκειμένου να αποδειχθεί η γενικευμένη φύση των νευρωνικών δικτύων, εξετάστηκε και μια διαφορετική περίπτωση, που περιελάμβανε την πρόβλεψη του

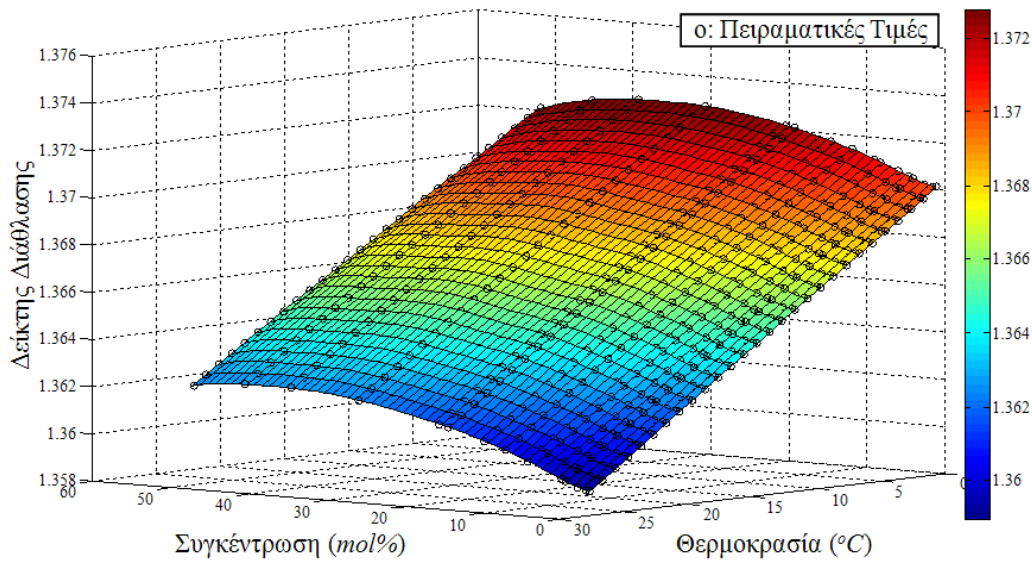


**Σχήμα 1. Νομογράφημα με βάση τις προβλέψεις δικτύου RBF για το πυρίτιο.**

δείκτη διάθλασης σε μίγματα δύο συστατικών και συγκεκριμένα για το μίγμα νερού-αιθανόλης. Η μελέτη του δείκτη διάθλασης αυτού του διμερούς μίγματος παρουσιάζει ιδιαίτερο ενδιαφέρον, δεδομένου ότι ακολουθεί έναν μη γραμμικό νόμο μίξης (Riobo et al., 2009). Για την συγκεκριμένη εφαρμογή, εκπαιδεύτηκαν μοντέλα νευρωνικών δικτύων ώστε να μπορούν να προβλέψουν το δείκτη διάθλασης ενός μίγματος αιθανόλης-νερού, χρησιμοποιώντας ως εισόδους τη συγκέντρωση του μίγματος σε νερό και τη θερμοκρασία. Το σχήμα 2 απεικονίζει την επιφάνεια του δείκτη διάθλασης που προβλέπεται από το δίκτυο σε σχέση με τη συγκέντρωση και τη θερμοκρασία, μαζί με τα πειραματικά δεδομένα. Παρατηρούμε ότι η επιφάνεια που παράγεται από το δίκτυο RBF περιγράφει πολύ ικανοποιητικά τα πειραματικά δεδομένα.

Σε όλες τις περιπτώσεις που εξετάστηκαν, τα αποτελέσματα έδειξαν ότι τα παραχθέντα μοντέλα νευρωνικών δικτύων παρέχουν μια ακρίβεια αρκετών δεκαδικών ψηφίων που στις περισσότερες περιπτώσεις είναι πολύ κοντά στην ακρίβεια των πειραματικών μετρήσεων. Τα νευρωνικά δίκτυα λόγω της γενικής τους φύσης μπορούν να εφαρμοστούν σε παρόμοιες προβλέψεις για όλα τα είδη υλικών, μοντελοποιώντας την επίδραση οποιασδήποτε μεταβλητής επηρεάζει το δείκτη διάθλασης.

Τα αποτελέσματα που προέκυψαν από αυτή την εργασία, στάλθηκαν προς δημοσίευση στο επιστημονικό περιοδικό *Materials Science and Engineering: B*.



**Σχήμα 2. Νομογράφημα με βάση τις προβλέψεις δικτύου RBF για το μίγμα αιθανόλη-νερό.**

## **ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ**

- Alexandridis, A., E. Chondrodima, K. Moutzouris, D. Triantis, 2011. "A neural network approach for the prediction of the refractive index based on experimental data", *Materials Science and Engineering: B*, Submitted.
- Darken, C., J. Moody, 1990. "Fast Adaptive K-Means Clustering: Some Empirical Results", *IEEE INNS International Joint Conference On Neural Networks, San Diego, CA*, **2**, pp. 233-238.
- Frey, B. J., B. D. Leviton, T. J. Madison, 2006 "Temperature-dependent refractive index of silicon and germanium", *SPIE*, **6273**,
- Haykin, S., 1999. *Neural Networks: A comprehensive foundation*, 2<sup>nd</sup> Edition, Upper Saddle River, NJ: Prentice Hall.
- Leonard, J. A., M. A. Kramer, 1991. "Radial basis function networks for classifying process faults", *IEEE Control Systems*, pp. 31–38.
- MacQueen, J., 1967. "Some Methods for Classification and Analysis of Multivariate Observations", *Fifth Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability*, pp. 281.
- Moody, J., C. Darken, 1989. "Fast learning in networks of locally-tuned processing units", *Neural Computation*, **2**, pp. 281-294.
- Powell, M. J. D., 1987. "Radial basis functions for multivariable interpolation: a review", in *Algorithms for approximation*, J.C. Mason, M.G. Cox, eds., pp. 143–167. Oxford.
- Rioboo, J., M. P. R.J., M. A. Ramos, J. K. Kruger, 2009. "Concentration and temperature dependence of the refractive index of ethanol-water mixtures: Influence of intermolecular interactions", *The European Physical Journal E*, **30**, pp. 19-26.
- Sarimveis, H., A. Alexandridis, G. Tsekouras, G. Bafas, 2002. "A fast and efficient algorithm for training radial basis function neural networks based on a fuzzy partition of the input space", *Industrial and Engineering Chemistry Research*, **41**, pp. 751-759.