



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ  
ΣΧΟΛΗ ΗΛΕΚΤΡΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ  
ΚΑΙ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΩΝ  
ΤΟΜΕΑΣ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ ΜΕΤΑΔΟΣΗΣ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΑΣ  
ΚΑΙ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΥΛΙΚΩΝ

**Ανασκόπηση της Εφαρμογής των Μεθόδων Μηχανικής Μάθησης  
στη Βιοπληροφορική**

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

Χαρίδημος Ε. Τζεδάκης

**Επιβλέπων:** Δημήτριος – Διονύσιος Κουτσούρης  
Καθηγητής Ε. Μ. Π.

Αθήνα, Ιανουάριος 2014





ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ  
ΣΧΟΛΗ ΗΛΕΚΤΡΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ  
ΚΑΙ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΩΝ  
ΤΟΜΕΑΣ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ ΜΕΤΑΔΟΣΗΣ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΑΣ  
ΚΑΙ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΥΛΙΚΩΝ

**Ανασκόπηση της Εφαρμογής των Μεθόδων Μηχανικής Μάθησης  
στη Βιοπληροφορική**

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

Χαρίδημος Ε. Τζεδάκης

**Επιβλέπων:** Δημήτριος – Διονύσιος Κουτσούρης  
Καθηγητής Ε. Μ. Π.

Εγκρίθηκε από την τριμελή εξεταστική επιτροπή την 14<sup>η</sup> Ιανουαρίου 2014

.....  
Δ. Δ. Κουτσούρης  
Καθηγητής Ε.Μ.Π.

.....  
Γ. Ματσόπουλος  
Επ. Καθηγητής Ε.Μ.Π.

.....  
Α. Πρέντζα  
Επ. Καθηγήτρια Παν. Πειραιώς

Αθήνα, Ιανουάριος 2014

.....

Χαρίδημος Ε. Τζεδάκης

Διπλωματούχος Ηλεκτρολόγος Μηχανικός και Μηχανικός Υπολογιστών Ε.Μ.Π.

Copyright © Χαρίδημος Ε. Τζεδάκης, 2014

Με επιφύλαξη παντός δικαιώματος. All rights reserved.

Απαγορεύεται η αντιγραφή, αποθήκευση και διανομή της παρούσας εργασίας, εξ ολοκλήρου ή τμήματος αυτής, για εμπορικό σκοπό. Επιτρέπεται η ανατύπωση, αποθήκευση και διανομή για σκοπό μη κερδοσκοπικό, εκπαιδευτικής ή ερευνητικής φύσης, υπό την προϋπόθεση να αναφέρεται η πηγή προέλευσης και να διατηρείται το παρόν μήνυμα. Ερωτήματα που αφορούν την χρήση της εργασίας για κερδοσκοπικό σκοπό πρέπει να απευθύνονται προς τον συγγραφέα.

Οι απόψεις και τα συμπεράσματα που περιέχονται σε αυτό το έγγραφο εκφράζουν τον συγγραφέα και δεν πρέπει να ερμηνευθεί ότι αντιπροσωπεύουν τις επίσημες θέσεις του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου.

*« Εάν ταις γλώσσαις των ανθρώπων λαλώ και των αγγέλων,  
αγάπην δε μη έχω, γέγονα χαλκός ηχών  
ή κύμβαλον αλαλάζον.»*

*Απ. Παύλος, προς Κορινθίους Α΄  
κεφ. 13, 1:13*



## Περίληψη

Η παρούσα εργασία αποσκοπεί στο να συγκεντρώσει και να παρουσιάσει μεθόδους Μηχανικής Μάθησης που βρίσκουν εφαρμογή στη Βιοπληροφορική, καθώς και συγκεκριμένες εφαρμογές των τεχνικών αυτών. Οι τεχνικές που παρουσιάζονται ανήκουν στο ευρύτερο επιστημονικό πεδίο της Τεχνητής Νοημοσύνης.

Η Τεχνητή Νοημοσύνη διαθέτει διάφορες διαδικασίες αυτοματοποίησης των δραστηριοτήτων που συσχετίζονται με την ανθρώπινη σκέψη, όπως η λήψη αποφάσεων, η επίλυση προβλημάτων, η μάθηση. Η Μηχανική Μάθηση εκφράζει την προσπάθεια δημιουργίας συστημάτων που έχουν τη δυνατότητα να μαθαίνουν από την ήδη υπάρχουσα γνώση, να συλλέγουν γνώση από το περιβάλλον τους και να αξιοποιούν τη γνώση αυτή για τη λήψη αποφάσεων και την εξαγωγή συμπερασμάτων.

Η Μηχανική Μάθηση χρησιμοποιείται σε πολλές εφαρμογές Βιοπληροφορικής και είναι ένα πολύτιμο εργαλείο στη διάθεση των ειδικών, για τη διαχείριση της πολυπλοκότητας και του τεράστιου όγκου των δεδομένων που προκύπτουν σε διάφορες εφαρμογές Ιατρικής, Βιοϊατρικής και Βιολογίας. Μέθοδοι Μηχανικής Μάθησης έχουν χρησιμοποιηθεί για διάγνωση και πρόγνωση ασθενειών, για διαχείριση ασθενών, για την υποστήριξη λήψης ιατρικών αποφάσεων, για επεξεργασία και ανάλυση βιοϊατρικών σημάτων, για διαχείριση βιολογικών, κυτταρικών δεδομένων και για εξαγωγή μοντέλων και συμπερασμάτων από τα δεδομένα αυτά.

Η πολυπλοκότητα και το μέγεθος της πληροφορίας που είναι διαθέσιμη για αξιοποίηση ολοένα και αυξάνει, επομένως είναι μεγαλύτερη η ανάγκη για αποδοτικότερη χρήση των διαθέσιμων δεδομένων και για αυτόματη εξαγωγή συμπερασμάτων. Τα δεδομένα που σχετίζονται με εφαρμογές Βιοπληροφορικής εξαρτώνται από πολλούς παράγοντες και έχουν πολλές παραμέτρους – πολλές φορές ο άνθρωπος-ειδικός αδυνατεί να βρει κρυμμένα πρότυπα που υπάρχουν ή να εντοπίσει τις παραμέτρους στις οποίες θα πρέπει να εστιάσει. Για το λόγο αυτό έχουν αναπτυχθεί κατάλληλες τεχνικές προεπεξεργασίας δεδομένων, ώστε να απομακρυνθεί ο θόρυβος και η πληροφορία που δεν είναι χρήσιμη. Με αυτόν τον τρόπο, επιλέγονται οι παράμετροι που θα οδηγήσουν επιτυχώς στη δημιουργία του μοντέλου και στην εξαγωγή των συμπερασμάτων.

Στις περισσότερες εφαρμογές προκύπτει το πρόβλημα της Ταξινόμησης, δηλαδή η εύρεση των κατηγοριών/κλάσεων στις οποίες ανήκουν τα δεδομένα, με βάση τις τιμές σε συγκεκριμένα χαρακτηριστικά τους. Η ταξινόμηση επιτυγχάνεται με τη βοήθεια κάποιου μοντέλου το οποίο μπορεί να σχηματιστεί από μια διαδικασία εκμάθησης, χρησιμοποιώντας δεδομένα για τα οποία οι κλάσεις είναι γνωστές εκ των προτέρων. Αφού δημιουργηθεί το σύστημα ταξινόμησης, θα πρέπει στη συνέχεια να αξιολογηθεί η ικανότητά του να προβλέπει σωστά τις κλάσεις για νέα δεδομένα του προβλήματος.

Στην εργασία αυτή, αρχικά παρουσιάζονται απλές μέθοδοι ταξινόμησης, όπως η Γραμμική Διαχωριστική Ανάλυση, οι Ταξινομητές Κοντινότερου Γείτονα και ο Απλοϊκός Μπεϋζιανός Ταξινομητής. Έπειτα, σταδιακά γίνεται αναφορά σε περισσότερο σύνθετες μεθόδους: Μπεϋζιανά Δίκτυα, Δέντρα Απόφασης, Νευρωνικά Δίκτυα και Μηχανές Διανυσμάτων Υποστήριξης. Στη συνέχεια γίνεται μια περιγραφή των υβριδικών συστημάτων ταξινόμησης που μπορεί να προκύψουν με συνδυασμό διάφορων μεθόδων και παρουσιάζονται οι βασικότερες μέθοδοι σχεδίασης συλλογικών ταξινομητών. Για τα Μπεϋζιανά Δίκτυα, τα Δέντρα Απόφασης, τα Νευρωνικά δίκτυα, τις Μηχανές Διανυσμάτων Υποστήριξης, τα υβριδικά συστήματα και τους συλλογικούς ταξινομητές παρατίθεται μια ανασκόπηση των εφαρμογών τους στη Βιοπληροφορική.

**Λέξεις Κλειδιά:** Τεχνητή Νοημοσύνη, Μηχανική Μάθηση, Προεπεξεργασία Δεδομένων, Επιλογή Χαρακτηριστικών, Παραγωγή Χαρακτηριστικών, Καμπύλες ROC, Στατιστικός Έλεγχος Υπόθεσης, Ταξινόμηση, Γραμμική Διαχωριστική Ανάλυση, Ταξινομητές Κοντινότερου Γείτονα, Μπεϋζιανοί Ταξινομητές, Μπεϋζιανά Δίκτυα, Δέντρα Απόφασης, Νευρωνικά Δίκτυα, Νευρωνικά Δίκτυα Εμπρόσθιας Τροφοδότησης, Νευρωνικά Δίκτυα Ακτινικής Βάσης, Πιθανοτικά Νευρωνικά Δίκτυα, Νευρωνικά Δίκτυα Ανατροφοδότησης, Μηχανές Διανυσμάτων Υποστήριξης, Γενετικοί Αλγόριθμοι, Νευρο-Ασαφή Συστήματα, Συλλογική Μάθηση, Συλλογικοί Ταξινομητές, Bagging, Συλλογικός Ταξινομητής Random Forest, Boosting, Αλγόριθμος AdaBoost



## Abstract

The purpose of this thesis is to collect, review and present Machine Learning methods that are commonly applied in Bioinformatics and also to provide indicative examples of such specific applications. The techniques presented emerge from the field of Machine Learning, which is part of the broader scientific field of Artificial Intelligence.

Artificial Intelligence employs several procedures that automate activities of human cognition and reasoning, such as decision making, problem solving and learning. Machine Learning expresses the need to design systems that are able to learn from the available knowledge, acquire knowledge from their environment and utilize that knowledge for decision making and induction.

Machine Learning is used in numerous applications regarding Bioinformatics and constitutes an invaluable tool at the experts' disposal, for managing the complexity and the vast amount of information gathered in various applications in Medicine, Biomedicine and Biology. Methods of Machine Learning have been practiced to produce diagnosis and prognosis of diseases, support medical decisions, process and analyze biomedical signals, handle biological and cytological data and create models to induce conclusions.

The complexity and the amount of information available for exploitation is continuously increasing and as a result there is a demand for efficient use of data and automatic conclusion induction. The data that refers to applications in Bioinformatics usually is dependent on many conditions and includes a large number of parameters and features. In most of the cases, human experts are unable to identify hidden patterns or pinpoint the most important features of the data set. For this reason, there have been developed techniques for data preprocessing, in order to remove noise from data as well as any irrelevant information. In this way, only the parameters that will successfully lead to the creation of the model and to the inference of conclusions are selected.

The classification problem arises in many applications, in which it is required to arrange the data in specific categories/classes, based on the values of certain features. Classification is achieved through a model, which is developed during a learning process from data that their classes are already known. After the classification system has been created, its ability to predict the classes of newly acquired data should be tested and validated.

In this thesis, simple classification methods are initially presented, such as Linear Discriminant Analysis, Closest Neighbor Classifiers and the Naïve Bayes Classifier. Following those classifiers, more complex methods are described: Bayesian Networks, Decision Trees, Neural Networks and Support Vector Machines. There is also a description of hybrid classification systems that could be derived from combinations of the aforementioned

techniques and a presentation of designing Ensemble Classifiers. The applications of Bayesian Networks, Decision Trees, Neural Networks, Support Vector Machines, hybrid systems and Ensemble Classifiers in Bioinformatics are reviewed, after the presentation of each technique.

**Key words:** Artificial Intelligence, Machine Learning, Data Preprocessing, Feature Selection, Feature Generation, ROC Curves, Statistical Hypothesis Testing, Classification, Linear Discriminant Analysis, Closest Neighbor Classifiers, Bayesian Classifiers, Bayesian Networks, Decision Trees, Neural Networks, Feedforward Neural Networks, Radial Basis Function Neural Networks, Probabilistic Neural Networks, Feedback Neural Networks, Support Vector Machines, Genetic Algorithms, Neuro-Fuzzy Systems, Ensemble Learning, Bagging, Random Forest Classifier, Boosting, AdaBoost Algorithm

# Πρόλογος

Η παρούσα διπλωματική εργασία εκπονήθηκε στο Εργαστήριο Βιοϊατρικής Τεχνολογίας της Σχολής Ηλεκτρολόγων Μηχανικών και Μηχανικών Υπολογιστών του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου.

Θα ήθελα να εκφράσω τις θερμές ευχαριστίες μου προς τον επιβλέποντα καθηγητή, κ. Δημήτριο Κουτσούρη για την ολοκλήρωση της εργασίας αυτής, καθώς επίσης και για την προσφορά της δυνατότητας ενασχόλησής μου με αυτό το τόσο ενδιαφέρον θέμα που παρουσιάζει μεγάλο εύρος εφαρμογών στη Βιοπληροφορική. Ευχαριστώ ιδιαίτερα τη Δρα. Μαρία Χαρίτου για τις χρήσιμες συμβουλές της και την υποστήριξή της για την περάτωση της παρούσας εργασίας. Θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμότατα τον υποψήφιο Δρα. Παναγιώτη Μπούντρη, για τη συνεχή και λεπτομερέστατη καθοδήγησή του σε όλες τις φάσεις εκπόνησης της εργασίας αυτής. Η στήριξη που παρείχε σε επιστημονικό και ψυχολογικό επίπεδο, καθώς επίσης και η διάθεση παροχής συμβουλών και διορθώσεων υπήρξε καταλυτικής σημασίας για την επιτυχή ολοκλήρωσή της. Επίσης, ευχαριστώ ιδιαίτερα τα υπόλοιπα μέλη της τριμελούς επιτροπής, κύριο Γιώργο Ματσόπουλο, Επίκουρο Καθηγητή της Σχολής των Ηλεκτρολόγων Μηχανικών και Μηχανικών Υπολογιστών του Ε.Μ.Π. και την κα. Ανδριάννα Πρέντζα, Επίκουρη Καθηγήτρια του Πανεπιστημίου Πειραιώς. Τέλος, θα ήθελα να ευχαριστήσω από τα βάθη της καρδιάς μου, τον π. Σάββα Γεωργιάδη, την ενορία του Αγίου Γερασίμου, τους γονείς μου και όλη την οικογένειά μου, για την αγάπη τους, τη συμπαράσταση και την ανεξάντλητη υπομονή τους, και τον φίλο μου, Χρήστο Καραθάνο, για το αναγνωστήριο, τη βιβλιοθήκη και όλες τις στιγμές κατά τη διάρκεια των σπουδών μας.

Θέμα της διπλωματικής εργασίας είναι η παρουσίαση των κυριότερων μεθόδων Μηχανικής Μάθησης που χρησιμοποιούνται στη Βιοπληροφορική, με ιδιαίτερη έμφαση στο πρόβλημα της Ταξινόμησης. Ο στόχος της εργασίας αυτής είναι να παραθέσει συνοπτικά τόσο τη θεωρία των μεθόδων αυτών, όσο και μια ανασκόπηση των εφαρμογών τους στη Βιοπληροφορική.

Στο πρώτο κεφάλαιο γίνεται μια συνοπτική παρουσίαση της Τεχνητής Νοημοσύνης και της Μηχανικής Μάθησης, καθώς και των πεδίων της Βιοπληροφορικής στα οποία αυτές εφαρμόζονται. Στο δεύτερο κεφάλαιο πραγματοποιείται μια εισαγωγή στις βασικές έννοιες που θα χρησιμοποιηθούν και στη συνέχεια γίνεται αναφορά σε μεθόδους προεπεξεργασίας των δεδομένων. Επίσης, ορίζεται το πρόβλημα της Ταξινόμησης και παρουσιάζεται ένας απλός ταξινομητής με βάση τη Γραμμική Διαχωριστική Ανάλυση. Στο τρίτο κεφάλαιο παρουσιάζονται οι τεχνικές ταξινόμησης, καθώς επίσης και κάποιες εφαρμογές τους στη Βιοπληροφορική. Τέλος, το τέταρτο κεφάλαιο αναφέρεται στους συλλογικούς ταξινομητές και στο πώς αυτοί βελτιώνουν την απόδοση της ταξινόμησης, καθώς επίσης και σε εφαρμογές τους στη Βιοπληροφορική.



## ΠΙΝΑΚΑΣ ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΩΝ

Περίληψη .....	7
Abstract .....	9
Πρόλογος.....	11
Κατάλογος Εικόνων .....	17
Κατάλογος Πινάκων .....	20
<b>ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1: Εισαγωγή: Η Τεχνητή Νοημοσύνη στη Βιοπληροφορική.....</b>	<b>21</b>
1.1 Τεχνητή Νοημοσύνη.....	21
1.1.1 Εισαγωγή .....	21
1.1.2 Τι είναι η Τεχνητή Νοημοσύνη.....	22
1.1.3 Τρόποι προσέγγισης της Τεχνητής Νοημοσύνης .....	23
1.1.3.1 Ανθρώπινη δράση: Δοκιμασία Turing.....	23
1.1.3.2 Ανθρώπινη σκέψη: Γνωστικά Μοντέλα .....	24
1.1.3.3 Ορθολογική σκέψη: Οι νόμοι της σκέψης .....	25
1.1.3.4 Ορθολογική δράση: Ορθολογικοί πράκτορες.....	25
1.2 Μηχανική Μάθηση .....	26
1.2.1 Εισαγωγή .....	26
1.2.2 Ορισμοί και Ορολογία.....	27
1.2.3 Σενάρια Μάθησης .....	30
1.2.4 Εφαρμογές Μηχανικής Μάθησης.....	31
1.3 Μηχανική Μάθηση στα πλαίσια της Ιατρικής και της Βιοπληροφορικής.....	33
1.3.1 Εφαρμογές στην Ιατρική .....	33
1.3.1.1 Διάγνωση και Πρόγνωση .....	33
1.3.1.2 Επεξεργασία και Ανάλυση Βιοϊατρικών σημάτων .....	34
1.3.1.3 Ερμηνεία Ιατρικής Εικόνας.....	35
1.3.1.4 Παραδοσιακή Κινέζικη Ιατρική .....	36
1.3.2 Εφαρμογές στη Βιοπληροφορική.....	36
1.3.2.1 Γονιδιωματική .....	37
1.3.2.2 Πρωτεομική.....	37
1.3.2.3 Ανάλυση Δεδομένων Έκφρασης Γονιδίων .....	37
1.3.2.4 Συστημική Βιολογία .....	38
1.3.2.5 Επιλογή χαρακτηριστικών για αναγνώριση βιοδεικτών.....	38
1.3.2.6 Οπτικοποίηση για ανακάλυψη γνώσης στη Βιοϊατρική .....	39

1.3.2.7 Διαχείριση Δεδομένων.....	39
<b>ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2: Προεπεξεργασία Δεδομένων και το Πρόβλημα της Ταξινόμησης.....</b>	<b>41</b>
2.1 Δεδομένα και Χαρακτηριστικά .....	41
2.2 Προεπεξεργασία Δεδομένων .....	44
2.2.1 Απομάκρυνση Ακραίων Τιμών .....	44
2.2.2 Κανονικοποίηση Δεδομένων.....	44
2.2.3 Ελλιπή Δεδομένα.....	45
2.3 Επιλογή και Παραγωγή Χαρακτηριστικών .....	46
2.3.1 Επιλογή Χαρακτηριστικών.....	47
2.3.1.1 Μέτρα διαχωρισιμότητας των Κλάσεων.....	48
2.3.1.2 Βαθμωτή Επιλογή Χαρακτηριστικών – Προσέγγιση Φίλτρου (Filter Approach) .....	53
2.3.1.3 Εύρεση Βέλτιστου Υποσυνόλου Χαρακτηριστικών με χρήση Ταξινομητών - Προσέγγιση Περιτύλιξης (Wrapper approach).....	53
2.3.2 Παραγωγή Χαρακτηριστικών .....	54
2.4 Το πρόβλημα της Ταξινόμησης.....	55
2.5 Αποτίμηση απόδοσης Ταξινομητών .....	57
2.6 Γραμμική Διαχωριστική Ανάλυση .....	61
<b>ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3: Τεχνικές Ταξινόμησης και εφαρμογή αυτών στη Βιοπληροφορική.....</b>	<b>66</b>
3.1 Ταξινομητές Κοντινότερου Γείτονα.....	66
3.1.1 Μέτρα Απόστασης Δειγμάτων .....	66
3.1.2 Ταξινομητής Κοντινότερου Γείτονα .....	68
3.1.3 Ταξινομητής k Κοντινότερων Γειτόνων .....	69
3.2 Μπεϋζιανοί Ταξινομητές.....	72
3.2.1 Μπεϋζιανή Θεωρία Απόφασης.....	72
3.2.2 Απλοϊκός Μπεϋζιανός Ταξινομητής.....	74
3.2.3 Μπεϋζιανά Δίκτυα.....	75
3.2.4 Εφαρμογές των Μπεϋζιανών Δικτύων στη Βιοπληροφορική .....	82
3.3 Δέντρα Απόφασης.....	87
3.3.1 Περιγραφή Μοντέλου .....	87
3.3.2 Τεχνικές Εκμάθησης .....	88
3.3.2.1 Αλγόριθμος ID3 Εκμάθησης δέντρων αποφάσεων .....	88
3.3.2.2 Επιλογή Χαρακτηριστικών .....	90
3.3.2.3 Υπερπροσαρμογή.....	94
3.3.2.4 Τυχαία Δέντρα Απόφασης.....	96

3.3.2.5 Πλεονεκτήματα και Μειονεκτήματα .....	97
3.3.3 Εφαρμογές των Δέντρων Αποφάσεων στη Βιοπληροφορική.....	98
3.4 Νευρωνικά Δίκτυα .....	105
3.4.1 Εισαγωγή .....	105
3.4.2 Νευρωνικά Δίκτυα Εμπρόσθιας Τροφοδότησης.....	106
3.4.2.1 Περιγραφή Νευρώνα .....	106
3.4.2.2 Πολυεπίπεδα Perceptrons .....	111
3.4.2.3 Νευρωνικά Δίκτυα Ακτινικής Βάσης .....	117
3.4.2.4 Σύγκριση πολυεπίπεδων Perceptrons με Δίκτυα Ακτινικής Βάσης .....	126
3.4.2.5 Πιθανοτικά Νευρωνικά Δίκτυα .....	127
3.4.2.6 Άλλες Κατηγορίες Νευρωνικών Δικτύων Εμπρόσθιας Τροφοδότησης .....	133
3.4.3 Νευρωνικά Δίκτυα Ανατροφοδότησης .....	140
3.4.3.1 Γενική Περιγραφή .....	140
3.4.3.2 Δίκτυα Ανατροφοδότησης με μάθηση υπό επίβλεψη .....	141
3.4.3.3 Δίκτυα Ανατροφοδότησης με μάθηση χωρίς επίβλεψη.....	148
3.4.3.4 Εξειδικευμένες κατηγορίες Νευρωνικών Δικτύων .....	151
3.4.4 Εφαρμογές των Νευρωνικών Δικτύων στη Βιοπληροφορική.....	173
3.5 Μηχανές Διανυσμάτων Υποστήριξης.....	180
3.5.1 Εισαγωγή .....	180
3.5.2 Γραμμικώς Διαχωρίσιμα Δεδομένα .....	181
3.5.3 Δυσικό Πρόβλημα Βελτιστοποίησης.....	183
3.5.4 Βελτιστοποίηση Χαλαρού Περιθωρίου.....	185
3.5.5 Συναρτήσεις Πυρήνα.....	187
3.5.6 Πλεονεκτήματα και Μειονεκτήματα.....	191
3.5.7 Εφαρμογές των Μηχανών Διανυσμάτων Υποστήριξης στη Βιοπληροφορική .....	193
3.6 Σύνθετα - Υβριδικά Συστήματα .....	196
3.6.1 Γενετικοί Αλγόριθμοι και Νευρωνικά Δίκτυα .....	196
3.6.1.1 Εισαγωγή.....	196
3.6.1.2 Προεπεξεργασία και ερμηνεία δεδομένων .....	197
3.6.1.3 Εκπαίδευση Νευρωνικών Δικτύων .....	198
3.6.1.4 Κατασκευή Νευρωνικών Δικτύων.....	200
3.6.2 Ασαφής Συλλογιστική και Νευρωνικά Δίκτυα .....	201
3.6.2.1 Εισαγωγή.....	201
3.6.2.2 Συνεργαζόμενα και Παράλληλα Νευρο-Ασαφή Συστήματα .....	203

3.6.2.3 Συγχωνευμένα Νευρο-Ασαφή Συστήματα.....	203
3.6.2.4 Μάθηση στα Νευρο-Ασαφή Συστήματα.....	206
3.6.3 Εφαρμογές των Υβριδικών Συστημάτων στη Βιοπληροφορική.....	207
<b>ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4: Τεχνικές Συλλογικής Ταξινόμησης και εφαρμογή αυτών στη Βιοπληροφορική...</b>	<b>208</b>
4.1 Συλλογική Ταξινόμηση .....	209
4.1.1 Εισαγωγή .....	209
4.1.1.1 Γενική Περιγραφή .....	209
4.1.1.2 Μοντέλο Συλλογικών Ταξινομητών .....	211
4.1.2 Μοντέλα Συλλογικής Ταξινόμησης χωρίς εξάρτηση.....	212
4.1.2.1 Μέθοδος Bagging .....	213
4.1.2.2 Μέθοδος Wagging.....	214
4.1.2.3 Συλλογικός Ταξινομητής Random Forest.....	214
4.1.3 Μοντέλα Συλλογικής Ταξινόμησης με εξάρτηση.....	216
4.1.3.1 Μέθοδος Boosting .....	217
4.1.3.2 Συλλογικός Ταξινομητής με αλγόριθμο AdaBoost.....	218
4.1.3.3 Εναλλακτικές μέθοδοι Boosting.....	225
4.1.3.4 Συνδυασμός επιμέρους ταξινομητών και ποικιλομορφία .....	225
4.1.4 Εφαρμογές της Συλλογικής Ταξινόμησης στη Βιοπληροφορική .....	227
<b>ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ .....</b>	<b>230</b>
<b>ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ .....</b>	<b>232</b>



## ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΕΙΚΟΝΩΝ

<b>Εικόνα 1.1:</b> Η τεθλασμένη γραμμή στα αριστερά είναι συνεπής ως προς το σύνολο εκπαίδευσης, αλλά είναι μια πολύπλοκη επιφάνεια απόφασης η οποία δεν παράγει καλές προβλέψεις για νέα δεδομένα. Αντιθέτως, η επιφάνεια απόφασης στο σχήμα δεξιά είναι πιο απλή και παρέχει καλύτερες προβλέψεις, παρά την λανθασμένη ταξινόμηση λίγων δειγμάτων του συνόλου εκπαίδευσης.....	29
<b>Εικόνα 2.1:</b> Αριστερά: Επικαλυπτόμενες Κατανομές πυκνότητας πιθανότητας δυο κλάσεων Δεξιά: Αντίστοιχη καμπύλη ROC .....	49
<b>Εικόνα 2.2:</b> Καμπύλη Μάθησης για δεδομένα που εμφανίζουν πρότυπο .....	58
<b>Εικόνα 2.3:</b> Γραμμική Διαχωριστική Ανάλυση: Τα δείγματα δυο διαστάσεων προβάλλονται σε ένα χώρο χαμηλότερων διαστάσεων (ευθεία γραμμή). Η ευθεία θα πρέπει να επιλεγεί έτσι ώστε η προβολή να μεγιστοποιεί τη διαχωριστικότητα των προβαλλόμενων δειγμάτων .....	62
<b>Εικόνα 3.1:</b> Ψηφίδωση Voronoi σε δισδιάστατο διανυσματικό χώρο, χρησιμοποιώντας Ευκλείδεια απόσταση .....	69
<b>Εικόνα 3.2:</b> Ταξινόμηση με $k=5$ κοντινούς γείτονες. Οι 3 κοντινότεροι γείτονες ανήκουν στην κλάση $K_2$ επομένως το δείγμα $p$ ταξινομείται σε αυτήν [19].....	70
<b>Εικόνα 3.3:</b> Συναρτήσεις πυκνότητας υπο συνθήκης πιθανότητας για δυο κλάσεις $\omega_1$ και $\omega_2$ και οι δυο περιοχές $R_1$ και $R_2$ που σχηματίζονται με βάση το κατώφλι $x_0$ .....	73
<b>Εικόνα 3.4:</b> Γραφικό Μοντέλο, το οποίο απεικονίζει τις εξαρτήσεις υπο συνθήκη μεταξύ των χαρακτηριστικών.....	76
<b>Εικόνα 3.5:</b> Απλό Μπεϋζιανό Δίκτυο, στο οποίο οι υπο συνθήκη εξαρτήσεις έχουν περιοριστεί σε μια μόνο μεταβλητή.....	77
<b>Εικόνα 3.6:</b> Μπεϋζιανό Δίκτυο το οποίο μοντελοποιεί τις υπο συνθήκη εξαρτήσεις για ένα παράδειγμα που αφορά καπνιστές (S), τάση ανάπτυξης καρκίνου (C) και καρδιοπάθειας (H), μαζί με μεταβλητές που αφορούν ιατρικά διαγνωστικά τεστ καρδιοπάθειας (H1, H2) και καρκίνου (C1, C2). .....	78
<b>Εικόνα 3.7:</b> Μπεϋζιανό Δίκτυο με δενδρική δομή .....	79
<b>Εικόνα 3.8:</b> Τμήμα από το Μπεϋζιανό Δίκτυο που μοντελοποιεί την εξέλιξη του ρινοφαρυγγικού καρκίνου.....	84
<b>Εικόνα 3.9:</b> Μπεϋζιανό Δίκτυο του συστήματος PATHFINDER. Ο κόμβος DISEASE περιέχει πάνω από 60 ασθένειες λεμφικών κόμβων. Οι συνδέσεις από τον κόμβο DISEASE προς τους υπόλοιπους κόμβους δεν έχουν σημειωθεί, για επισημανθούν καλύτερα οι υπό συνθήκη εξαρτήσεις μεταξύ των χαρακτηριστικών.....	86
<b>Εικόνα 3.10:</b> Δέντρο Απόφασης.....	88
<b>Εικόνα 3.11:</b> Μέτρα αξιολόγησης διαμέρισης παραδειγμάτων με βάση κάποιο χαρακτηριστικό ..	92
<b>Εικόνα 3.12:</b> Δέντρο απόφασης πριν την αντικατάσταση υποδέντρου .....	95
<b>Εικόνα 3.13:</b> Δέντρο απόφασης μετά την αντικατάσταση υποδέντρου .....	95
<b>Εικόνα 3.14:</b> Δέντρο απόφασης πριν την ανύψωση υποδέντρου .....	96
<b>Εικόνα 3.15:</b> Δέντρο απόφασης μετά την ανύψωση υποδέντρου.....	96
<b>Εικόνα 3.16:</b> Παράδειγμα απλού δέντρου απόφασης που μπορεί να χρησιμοποιηθεί στη διάγνωση και στη θεραπεία του καρκίνου του μαστού. Το δέντρο αυτό μπορεί να προκύψει από κάποιον ειδικό στο συγκεκριμένο πεδίο ή από αλγόριθμο μάθησης. ....	98

<b>Εικόνα 3.17:</b> Δέντρο Απόφασης του (sCD23, CD23+ ,CD4+ CD45RA+ ,aCD4+ CD45RO+ RA+) προγνωστικού διανύσματος. Οι αριθμοί σε κάθε κλάδο του δέντρου αναπαριστούν τιμές ελέγχου που χρησιμοποιούνται στον κανόνα απόφασης και εφαρμόζονται στον κατάλληλο κόμβο του δέντρου. Οι συνιστώσες του προγνωστικού διανύσματος είναι οι εξής: συγκέντρωση πρωτεΐνης sCD23, ποσοστά των CD23+ λεμφοκυττάρων, ποσοστά των CD4+ κυττάρων που εκφράζουν παράλληλα την CD45RA+, και ο απόλυτος αριθμός των CD4+ κυττάρων που παράλληλα εκφράζουν την CD45RO+ RA+.....	103
<b>Εικόνα 3.18:</b> Δέντρο Απόφασης για διάγνωση καρδιοπάθειας στους ασθενείς [103] .....	104
<b>Εικόνα 3.19:</b> Νευρωνικό Δίκτυο Εμπρόσθιας Τροφοδότησης με γενική τοπολογία .....	106
<b>Εικόνα 3.20:</b> Μοντέλο Νευρώνα .....	107
<b>Εικόνα 3.21:</b> Αφινικός μετασχηματισμός που προκύπτει από το <i>bk</i> .....	108
<b>Εικόνα 3.22:</b> Αρχιτεκτονική μοντέλου Perceptron πολλαπλών επιπέδων.....	111
<b>Εικόνα 3.23:</b> Ροές σήματος στο Perceptron πολλαπλών επιπέδων.....	112
<b>Εικόνα 3.24:</b> Μοντέλο Νευρωνικού Δικτύου Ακτινικής Βάσης .....	118
<b>Εικόνα 3.25:</b> Διάγραμμα ροής σήματος για τον αλγόριθμο Ελαχίστου Μέσου Τετραγώνου .....	123
<b>Εικόνα 3.26:</b> Μοντέλο Πιθανοτικού Νευρωνικού Δικτύου .....	130
<b>Εικόνα 3.27:</b> Νευρώνας εξόδου σε πιθανοτικό νευρωνικό δίκτυο .....	130
<b>Εικόνα 3.28:</b> Αρχιτεκτονική Δικτύου ADALINE .....	133
<b>Εικόνα 3.29:</b> Δίκτυο MADALINE με δυο κρυφά ADALINES και ένα ADALINE εξόδου .....	134
<b>Εικόνα 3.30:</b> Αρχιτεκτονική Δικτύου LVQ, με επίπεδο εισόδου, επίπεδο Kohonen και επίπεδο εξόδου .....	136
<b>Εικόνα 3.31:</b> Δομή Νευρωνικού Δικτύου Γενικευμένης Παλινδρόμησης .....	137
<b>Εικόνα 3.32:</b> Αρχιτεκτονική Σιγμοειδούς Δικτύου Πεποιήσης .....	139
<b>Εικόνα 3.33:</b> Ιεραρχική Δομή με Νευρωνικά Δίκτυα Ακτινικής Βάσης .....	139
<b>Εικόνα 3.34:</b> Νευρωνικό Δίκτυο Ανατροφοδότησης με κρυφούς νευρώνες.....	140
<b>Εικόνα 3.35:</b> Αρχιτεκτονική Νευρωνικού Δικτύου Elman .....	142
<b>Εικόνα 3.36:</b> Αρχιτεκτονική Νευρωνικού Δικτύου Jordan.....	143
<b>Εικόνα 3.37:</b> Για την αντιμετώπιση της δυναμικής συμπεριφοράς του δικτύου ανατροφοδότησης, το δίκτυο αντιγράφεται πολλές φορές και τα αντίγραφα αυτά συνδέονται για να σχηματίσουν ένα δίκτυο εμπρόσθιας τροφοδότησης. Κάθε υπο-δίκτυο αναπαριστά ένα χρονικό βήμα. Τα σφάλματα ( $T_i - O_i$ ) πρέπει να συγκεντρωθούν για κάθε χρονικό βήμα (δηλαδή για κάθε υπο-δίκτυο) και στη συνέχεια χρησιμοποιούνται για την ενημέρωση των βαρών. ....	144
<b>Εικόνα 3.38:</b> Δίκτυο Echo State .....	145
<b>Εικόνα 3.39:</b> Ιεραρχικό Νευρωνικό Δίκτυο Ανατροφοδότησης .....	146
<b>Εικόνα 3.40:</b> Γενική Αρχιτεκτονική Δικτύου Ανατροφοδότησης Διπλής Κατεύθυνσης, αναπτυγμένη στο χρόνο για τρία χρονικά βήματα .....	147
<b>Εικόνα 3.41:</b> Ένα απλό δίκτυο Hopfield με 3 κόμβους.....	149
<b>Εικόνα 3.42:</b> Δομή Μοντέλου ART1.....	150
<b>Εικόνα 3.43:</b> Μηχανή Boltzmann με L κρυφούς και K ορατούς Νευρώνες.....	151
<b>Εικόνα 3.44:</b> Αρχιτεκτονική Μηχανής Helmholtz .....	153
<b>Εικόνα 3.45:</b> Τα δείγματα εισόδου κατανέμονται σε υπο-λίστες στα μοντέλα που ταιριάζουν καλύτερα και στη συνέχεια τα καινούργια μοντέλα προσδιορίζονται ως γενικευμένοι μέσοι (generalized medians) των υπο-λιστών στις γειτονιές $N_i$ .....	154
<b>Εικόνα 3.46:</b> Αυτο-οργανούμενος χάρτης Kohonen.....	155

<b>Εικόνα 3.47:</b> Ενημέρωση της μονάδας που ταιριάζει καλύτερα (Best Matching Unit -BMU) και των γειτόνων της προς το δείγμα εισόδου που έχει σημειωθεί με $x$ .....	155
<b>Εικόνα 3.48:</b> Οπτικοποίηση αποτελεσμάτων: Παράδειγμα χρήσης ετικετών και χρωματικού κώδικα .....	156
<b>Εικόνα 3.49:</b> Τυπικά σχήματα συναρτήσεων απόκρισης (EPSP και IPSP) βιολογικού νευρώνα ....	157
<b>Εικόνα 3.50:</b> Μοντέλο Νευρώνα Συνδυασμένου Παλμού (PCNN).....	158
<b>Εικόνα 3.51:</b> Δίκτυο LSTM με μπλοκ μνήμης στο κρυφό επίπεδο (φαίνεται μόνο ένα μπλοκ στην εικόνα).....	160
<b>Εικόνα 3.52:</b> Νευρωνικό Δίκτυο Στιγμιαίας Εκπαίδευσης.....	164
<b>Εικόνα 3.53:</b> Απλοποιημένο Counterpropagation Νευρωνικό Δίκτυο.....	167
<b>Εικόνα 3.54:</b> Εκτίμηση συνάρτησης με Counterpropagation Νευρωνικό Δίκτυο .....	168
<b>Εικόνα 3.55:</b> Counterpropagation Νευρωνικό Δίκτυο με επέκταση στο κρυφό επίπεδο.....	169
<b>Εικόνα 3.56:</b> Εκτίμηση συνάρτησης με γραμμικούς συσχετιστές .....	169
<b>Εικόνα 3.57:</b> Μια συνάρτηση και η αντίστοιχη διαφορική δειγματοληψία του χώρου εισόδου ..	170
<b>Εικόνα 3.58:</b> Γράφημα Σύνθεσης Συναρτήσεων. Το γράφημα προσδιορίζει τις συνδέσεις μεταξύ των συναρτήσεων. Οι συνδέσεις έχουν τέτοια βάρη ώστε η έξοδος κάθε συνάρτησης πολλαπλασιάζεται με το βάρος της σύνδεσης εξόδου που διαθέτει. ....	171
<b>Εικόνα 3.59:</b> Μια συνάρτηση παράγει ένα φαινότυπο. Η συνάρτηση $f$ παίρνει ως είσοδο τα ορίσματα $x, y$ τα οποία είναι συντεταγμένες σε έναν δισδιάστατο χώρο. Όλες οι συντεταγμένες σχεδιάζονται με ένταση ανάλογη με την έξοδο της $f$ , οπότε σχηματίζεται ένα πρότυπο, το οποίο μπορεί να θεωρηθεί ως φαινότυπος με γενότυπο την συνάρτηση $f$ . Σε αυτό το παράδειγμα παράγεται ένας τριγωνικός φαινότυπος. ....	172
<b>Εικόνα 3.60:</b> Νευρωνικό Δίκτυο και Υβριδικό σύστημα για τη ταξινόμηση βλαβών σε εικόνες μαστογραφίας - Huo et al. (1999)[90] .....	176
<b>Εικόνα 3.61:</b> Μέγιστο Περιθώριο και Βέλτιστο Υπερεπίπεδο .....	181
<b>Εικόνα 3.62:</b> Μη γραμμική αντιστοίχιση χώρου εισόδου σε χώρο χαρακτηριστικών.....	188
<b>Εικόνα 3.63:</b> Μετασχηματισμός σε διανυσματικό χώρο υψηλότερης διάστασης ώστε να γίνει εφικτός ο διαχωρισμός .....	188
<b>Εικόνα 3.64:</b> Μη γραμμικώς διαχωρίσιμα δεδομένα που απαιτούν Πολυωνυμική συνάρτηση Πυρήνα.....	190
<b>Εικόνα 3.65:</b> Απλό Νευρωνικό Δίκτυο Εμπρόσθιας Τροφοδότησης. Η αναδιάταξη των θέσεων των κρυφών νευρώνων δεν αλλάζει την λειτουργικότητα του δικτύου. ....	199
<b>Εικόνα 3.66:</b> Γενικό Μοντέλο Νευρο-Ασαφούς Συστήματος Mamdani.....	204
<b>Εικόνα 3.67:</b> Γενικό Μοντέλο Νευρο-Ασαφούς Συστήματος Takagi Sugeno .....	205
<b>Εικόνα 4.1:</b> Μοντέλο Συλλογικής Ταξινόμησης χωρίς εξάρτηση .....	212
<b>Εικόνα 4.2:</b> Μοντέλο Συλλογικής Ταξινόμησης με εξάρτηση, επιλογή δειγμάτων καθοδηγούμενη από μοντέλο .....	216
<b>Εικόνα 4.3:</b> Τρόπος λειτουργίας της μέθοδου boosting. Κάθε σκιασμένο ορθογώνιο αντιστοιχεί σε ένα δείγμα. Το ύψος του ορθογωνίου αντιστοιχεί στην βαρύτητά του. Τα σημάδια αποδοχής και άρνησης δείχνουν αν το δείγμα ταξινομήθηκε σωστά από την τρέχουσα υπόθεση. Το μέγεθος του δέντρου αποφάσεων υποδηλώνει τη βαρύτητα της υπόθεσης στη τελική συλλογή.....	218

## ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΠΙΝΑΚΩΝ

<b>Πίνακας 1.1:</b> Ορισμοί της Τεχνητής Νοημοσύνης, οργανωμένοι σε τέσσερις κατηγορίες. ....	22
<b>Πίνακας 2.1:</b> Παράδειγμα Χαρακτηριστικών Δειγμάτων .....	41
<b>Πίνακας 2.2:</b> Πίνακας Σύγκρισης και Αντίστοιχα Σύνολα.....	60
<b>Πίνακας 3.1:</b> Δείγματα Εκπαίδευσης Δέντρου Απόφασης.....	87
<b>Πίνακας 3.2:</b> Σύγκριση μεταξύ Νευρωνικών Δικτύων και Συστημάτων Ασαφούς Εξαγωγής Συμπερασμάτων.....	202

# Κεφάλαιο 1

## Εισαγωγή: Η Τεχνητή Νοημοσύνη στη Βιοπληροφορική

### 1.1 Τεχνητή Νοημοσύνη

#### 1.1.1 Εισαγωγή

Ονομάζουμε το είδος μας *homo sapiens* (άνθρωπος ο σοφός) επειδή οι νοητικές μας ικανότητες είναι πολύ σημαντικές για εμάς. Για χιλιάδες χρόνια προσπαθούμε να κατανοήσουμε το πώς σκεπτόμαστε, δηλαδή πώς ο άνθρωπος μπορεί να αντιλαμβάνεται, να κατανοεί, να προβλέπει και να χειρίζεται ένα κόσμο πολύ μεγαλύτερο και πολύ πιο πολύπλοκο από τον εαυτό του. Το πεδίο της **Τεχνητής Νοημοσύνης (Artificial Intelligence)**, ή για συντομία **TN**, προχωρεί ακόμη περισσότερο: επιχειρεί όχι μόνο να κατανοήσει αλλά και να κατασκευάσει νοήμονες οντότητες.

Η Τεχνητή Νοημοσύνη είναι μια από τις νεότερες επιστήμες. Η σοβαρή δουλειά άρχισε να γίνεται λίγο μετά από το Δεύτερο Παγκόσμιο Πόλεμο, και ο όρος εμφανίστηκε για πρώτη φορά το 1956. Σήμερα, η Τεχνητή Νοημοσύνη συνδυάζει μια τεράστια ποικιλία επιμέρους πεδίων, τα οποία καλύπτουν ένα φάσμα που ξεκινά από γενικούς τομείς, όπως η μάθηση και η αντίληψη, και φτάνει σε συγκεκριμένες εργασίες όπως το σκάκι, η απόδειξη μαθηματικών θεωρημάτων, η συγγραφή ποίησης και η διάγνωση ασθενειών. Η Τεχνητή Νοημοσύνη συστηματοποιεί και αυτοματοποιεί τις διανοητικές εργασίες, γι' αυτό και μπορεί να έχει εφαρμογή σε οποιαδήποτε σφαίρα της ανθρώπινης διανοητικής δραστηριότητας. Με αυτή την έννοια, είναι πραγματικά ένα οικουμενικό πεδίο [1].

Το επιστημονικό πεδίο της Τεχνητής Νοημοσύνης διαθέτει μεγάλο εύρος τεχνικών και εφαρμογών. Στις επόμενες υποενότητες παρουσιάζεται μια εισαγωγική περιγραφή του πεδίου και στη συνέχεια γίνεται μια γενική ανασκόπηση στη Μηχανική Μάθηση, οι τεχνικές της οποίας θα μας απασχολήσουν στα επόμενα κεφάλαια.

### 1.1.2 Τι είναι η Τεχνητή Νοημοσύνη

Αρχικά, για μια σύντομη εισαγωγή στο πεδίο, θα πρέπει να αναφερθούν διάφοροι ορισμοί της Τεχνητής Νοημοσύνης. Στον Πίνακα 1.1 [1] παρουσιάζονται οι ορισμοί από οκτώ διαφορετικά εγχειρίδια. Οι ορισμοί αυτοί έχουν διαφορές σε δυο κύριες διαστάσεις. Χονδρικά, οι επάνω ορισμοί ενδιαφέρονται περισσότερο για τις διαδικασίες σκέψης και τη συλλογιστική, ενώ οι κάτω ορισμοί με τη συμπεριφορά. Οι ορισμοί στα αριστερά μετρούν την επιτυχία με βάση την εγγύτητα προς τις ανθρώπινες επιδόσεις, ενώ οι ορισμοί στα δεξιά τη μετρούν σε σχέση με μια ιδανική έννοια νοημοσύνης, η οποία ονομάζεται ορθολογικότητα (rationality). Ένα σύστημα είναι ορθολογικό αν κάνει «το σωστό», με δεδομένα όσα γνωρίζει.

**Πίνακας 1.1:** Ορισμοί της Τεχνητής Νοημοσύνης, οργανωμένοι σε τέσσερις κατηγορίες.

<b>Συστήματα που σκέπτονται σαν τον άνθρωπο</b>	<b>Συστήματα που σκέπτονται ορθολογικά</b>
«Η συναρπαστική νέα προσπάθεια για να κάνουμε τους υπολογιστές να σκέπτονται ... μηχανές με νόηση, με την πλήρη και κυριολεκτική έννοια.» (Haugeland, 1985)	«Η μελέτη των νοητικών ικανοτήτων με τη χρήση υπολογιστικών μοντέλων.» (Charniak και McDermott, 1985)
«Η διαδικασία αυτοματοποίησης των δραστηριοτήτων που συσχετίζουμε με την ανθρώπινη σκέψη, όπως η λήψη αποφάσεων, η επίλυση προβλημάτων, η μάθηση...» (Bellman, 1978)	«Η μελέτη των υπολογιστικών εργασιών που μας δίνουν τη δυνατότητα να αντιλαμβανόμαστε, να συλλογίζομαστε, και να ενεργούμε.» (Winston, 1992)
<b>Συστήματα που ενεργούν σαν τον άνθρωπο</b>	<b>Συστήματα που ενεργούν ορθολογικά</b>
«Η τέχνη της δημιουργίας μηχανών που πραγματοποιούν λειτουργίες οι οποίες απαιτούν νοημοσύνη όταν πραγματοποιούνται από ανθρώπους.» (Kurzweil, 1990)	«Υπολογιστική Νοημοσύνη είναι η μελέτη της σχεδίασης ευφυών πρακτόρων.» (Poole et al., 1998)»
«Η μελέτη του πώς μπορούμε να κάνουμε τους υπολογιστές να κάνουν πράγματα στα οποία, προς το παρόν, οι άνθρωποι είναι καλύτεροι.» (Rich και Knight, 1991)	«Η Τεχνητή Νοημοσύνη ασχολείται με την ευφυή συμπεριφορά των τεχνουργημάτων.» (Nilsson, 1998)

Ιστορικά, έχουν ακολουθηθεί και οι τέσσερις προσεγγίσεις στην Τεχνητή Νοημοσύνη. Όπως θα περίμενε κανείς, υπάρχει κάποια διένεξη ανάμεσα στις προσεγγίσεις που εστιάζονται στον άνθρωπο και τις προσεγγίσεις που εστιάζονται στην ορθολογικότητα. Μια ανθρωποκεντρική προσέγγιση θα πρέπει να είναι εμπειρική επιστήμη, με υποθέσεις

και με πειραματική επιβεβαίωση. Μια ορθολογιστική (rationalist) προσέγγιση περιλαμβάνει ένα συνδυασμό μαθηματικών και μηχανικής. Η κάθε ομάδα έχει αμφισβητήσει αλλά και έχει βοηθήσει την άλλη [1].

### 1.1.3 Τρόποι προσέγγισης της Τεχνητής Νοημοσύνης

Ανάλογα με τον τρόπο προσέγγισης του πεδίου, προκύπτουν διαφορετικές μεθοδολογίες και διαφορετικοί στόχοι. Οι τρόποι προσέγγισης που αναφέρονται παρακάτω δίνουν μια συνοπτική εικόνα των υπο-προβλημάτων που προκύπτουν κατά τη διερεύνηση του πεδίου και των λύσεων που έχουν δοθεί.

#### 1.1.3.1 Ανθρώπινη δράση: Δοκιμασία Turing

Η **δοκιμασία Turing (Turing Test)**, η οποία προτάθηκε από τον Alan Turing (1950), σχεδιάστηκε για να παρέχει έναν ικανοποιητικό επιχειρησιακό ορισμό της νοημοσύνης. Αντί να προτείνει μια εκτεταμένη και ενδεχομένως αντιφατική λίστα γνωρισμάτων που απαιτούνται για τη νοημοσύνη, ο Turing πρότεινε μια δοκιμασία που βασιζόταν στην αδυναμία να γίνει διάκριση από τις αναμφίβολα νοήμονες οντότητες – τους ανθρώπους. Ο υπολογιστής περνά τη δοκιμασία αν ένας άνθρωπος εξεταστής, αφού θέσει μερικές γραπτές ερωτήσεις, δεν μπορεί να συμπεράνει αν οι γραπτές απαντήσεις προέρχονται από άνθρωπο ή όχι. Για να μπορέσει ο υπολογιστής να περάσει επιτυχώς τη δοκιμασία, θα πρέπει να έχει τις εξής ικανότητες [1]:

- **Επεξεργασία φυσικής γλώσσας**, ώστε να μπορεί να επικοινωνεί ικανοποιητικά σε μια γλώσσα όπως η Αγγλική.
- **Αναπαράσταση γνώσης**, ώστε να αποθηκεύει αυτά που ακούει.
- **Αυτοματοποιημένη συλλογιστική**, ώστε να χρησιμοποιεί τις αποθηκευμένες πληροφορίες για να απαντά ερωτήσεις και να παράγει συμπεράσματα.
- **Μηχανική μάθηση**, ώστε να προσαρμόζεται σε νέες περιστάσεις και να εντοπίζει ή να συμπεραίνει πρότυπα.

Η δοκιμασία Turing απέφευγε εσκεμμένα την άμεση φυσική αλληλεπίδραση μεταξύ του εξεταστή και του υπολογιστή, επειδή η φυσική προσομοίωση ενός ανθρώπου δεν είναι απαραίτητη για τη νοημοσύνη. Όμως, η λεγόμενη πλήρης δοκιμασία Turing (total Turing Test) περιλαμβάνει οπτικό σήμα, ώστε να μπορεί ο εξεταστής να εξετάσει τις αντιληπτικές ικανότητες του υποκειμένου και να έχει τη δυνατότητα να του δίνει φυσικά αντικείμενα «από το παραθυράκι». Για να περάσει την πλήρη δοκιμασία Turing, ο υπολογιστής θα χρειαστεί [1]:

- **Μηχανική όραση**, ώστε να αντιλαμβάνεται αντικείμενα.
- **Ρομποτική**, ώστε να χειρίζεται αντικείμενα και να μετακινείται.

Αυτά τα έξι πεδία αποτελούν το μεγαλύτερο μέρος της Τεχνητής Νοημοσύνης. Οι ερευνητές της Τεχνητής Νοημοσύνης έχουν αφιερώσει ελάχιστη προσπάθεια στη δημιουργία μηχανών που μπορούν να περάσουν τη δοκιμασία Turing, καθώς πίστευαν ότι είναι πιο σημαντικό να μελετήσουν τις αρχές στις οποίες βασίζεται η νοημοσύνη παρά να αντιγράψουν ένα πρωτότυπο. Η έρευνα για την «τεχνητή πτήση» έφτασε στην επιτυχία όταν οι αδελφοί Wright και άλλοι σταμάτησαν να προσπαθούν να μιμηθούν τα πουλιά και έμαθαν την αεροδυναμική. Τα εγχειρίδια αεροναυπηγικής δεν ορίζουν ως σκοπό του πεδίου τους την κατασκευή «μηχανών που πετούν τόσο όμοια με τα περιστέρια ώστε να μπορούν να ξεγελάσουν ακόμα και τα ίδια τα περιστέρια».

Η Μηχανική Μάθηση, δίνει τη δυνατότητα στον υπολογιστή να προσαρμόζεται και να μαθαίνει σε άγνωστα δεδομένα και περιβάλλοντα, καθώς και να ανακαλύπτει πρότυπα και μοντέλα στα δεδομένα αυτά. Η ιδιότητα αυτή είναι απαραίτητη σε εφαρμογές με υψηλή πολυπλοκότητα πληροφορίας, όπως είναι οι εφαρμογές στο πεδίο της Βιοπληροφορικής.

### 1.1.3.2 Ανθρώπινη σκέψη: Γνωστικά Μοντέλα

Για να ειπωθεί ότι ένα δεδομένο πρόγραμμα σκέπτεται σαν άνθρωπος, θα πρέπει να υπάρχει κάποιος τρόπος προσδιορισμού του μηχανισμού σκέψης του ανθρώπου, στο εσωτερικό της λειτουργίας του ανθρώπινου νου. Υπάρχουν δυο τρόποι για να γίνει αυτό: με την ενδοσκόπηση των σκέψεων και με ψυχολογικά πειράματα. Από τη στιγμή που θα υπάρξει μια αρκετά ακριβής θεωρία της νόησης, θα είναι δυνατό να εκφραστεί ως πρόγραμμα υπολογιστή.

Αν οι συμπεριφορές εισόδου-εξόδου και χρονισμού του προγράμματος συμφωνούν με τις αντίστοιχες ανθρώπινες συμπεριφορές, αυτό είναι τεκμήριο ότι μερικοί από τους μηχανισμούς του προγράμματος μπορεί να λειτουργούν όμοια και στον άνθρωπο. Για παράδειγμα, οι Allen Newell & Herbert Simon (1961) [1], οι οποίοι ανέπτυξαν το γενικό λύτη προβλημάτων (General Problem Solver - GPS) δεν αρκέστηκαν στο να λύνει το πρόγραμμά τους σωστά τα προβλήματα. Τους ενδιέφερε περισσότερο η σύγκριση της ακολουθίας συλλογιστικών βημάτων του με την αντίστοιχη ακολουθία συλλογιστικών βημάτων των ανθρώπων που έλυναν το ίδιο πρόβλημα. Το διεπιστημονικό πεδίο της γνωστικής επιστήμης (cognitive science) φέρνει στον ίδιο χώρο υπολογιστικά μοντέλα της Τεχνητής Νοημοσύνης και πειραματικές τεχνικές της ψυχολογίας, με σκοπό τη δημιουργία ακριβών και πειραματικά επαληθεύσιμων θεωριών για τον τρόπο λειτουργίας του ανθρώπινου νου.



### 1.1.3.3 Ορθολογική σκέψη: Οι νόμοι της σκέψης

Ο Έλληνας φιλόσοφος Αριστοτέλης ήταν από τους πρώτους που επιχείρησαν να κωδικοποιήσουν τη «σωστή σκέψη», δηλαδή τις αδιάψευστες διαδικασίες συλλογιστικής. Οι αριστοτέλειοι **συλλογισμοί (syllogisms)** παρείχαν πρότυπα δομής επιχειρημάτων που έδιναν πάντα σωστά συμπεράσματα όταν ξεκινούσαν από σωστές υποθέσεις – για παράδειγμα, «Ο Σωκράτης είναι άνθρωπος· όλοι οι άνθρωποι είναι θνητοί· επομένως, ο Σωκράτης είναι θνητός». Θεωρήθηκε ότι αυτοί οι νόμοι της σκέψης κυβερνούν τη λειτουργία της νόησης· από τη μελέτη τους ξεκίνησε το πεδίο που ονομάζεται **λογική (logic)**.

Οι ερευνητές της λογικής του 19ου αιώνα ανέπτυξαν μια ακριβή σημειογραφία για τις προτάσεις που αναφέρονται σε όλα τα είδη πραγμάτων που υπάρχουν στον κόσμο και για τις σχέσεις μεταξύ τους. Το 1965, υπήρχαν ήδη προγράμματα που μπορούσαν θεωρητικά να λύνουν οποιοδήποτε πρόβλημα ήταν δυνατό να λυθεί, αρκεί να ήταν διατυπωμένο με τη λογική σημειογραφία αλλά στην περίπτωση που δεν υπάρχει λύση, το πρόγραμμα μπορεί να μην σταματήσει ποτέ να ψάχνει για λύση. Η λεγόμενη **λογικιστική (logicist)** παράδοση στο χώρο της Τεχνητής Νοημοσύνης ελπίζει να οικοδομήσει με βάση τέτοια προγράμματα προκειμένου να δημιουργήσει ευφυή συστήματα [1].

### 1.1.3.4 Ορθολογική δράση: Ορθολογικοί πράκτορες

**Πράκτορας (agent)** είναι απλώς κάτι που «πράττει» (ο αγγλικός όρος agent επίσης προέρχεται από το λατινικό agere, που σημαίνει «πράττω»). Όμως, οι πράκτορες των υπολογιστών θα πρέπει να έχουν και κάποια άλλα γνωρίσματα που να τους κάνουν να ξεχωρίζουν από τα απλά «προγράμματα», όπως το να λειτουργούν κάτω από αυτόνομο έλεγχο, να αντιλαμβάνονται το περιβάλλον τους, να διατηρούνται για ένα παρατεταμένο χρονικό διάστημα, να προσαρμόζονται στις αλλαγές και να έχουν την ικανότητα να αναλαμβάνουν τους στόχους κάποιου άλλου. **Ορθολογικός πράκτορας (rational agent)** είναι ένας πράκτορας που ενεργεί έτσι ώστε να επιτυγχάνει το καλύτερο αποτέλεσμα ή, όταν υπάρχει αβεβαιότητα, το καλύτερο αναμενόμενο αποτέλεσμα.

Στην προσέγγιση της Τεχνητής Νοημοσύνης με τους νόμους της σκέψης, η έμφαση δινόταν στη σωστή εξαγωγή συμπερασμάτων (συμπερασμός). Ο σωστός συμπερασμός μερικές φορές είναι μέρος του να είναι ένας πράκτορας ορθολογικός, επειδή ένας τρόπος να ενεργεί κανείς ορθολογικά είναι να συλλογίζεται πρώτα λογικά για να καταλήξει στο συμπέρασμα ότι μια δεδομένη ενέργεια θα επιτύχει τους σκοπούς του, και έπειτα να ενεργεί σύμφωνα με αυτό το συμπέρασμα. Από την άλλη, ο σωστός συμπερασμός δεν είναι το παν στην ορθολογικότητα, επειδή υπάρχουν συχνά καταστάσεις όπου καμία ενέργεια δεν μπορεί να αποδειχθεί σωστή και παρ' όλα αυτά κάτι πρέπει να γίνει. Υπάρχουν επίσης

τρόποι να ενεργεί κανείς ορθολογικά οι οποίοι δεν περιλαμβάνουν συμπερασμό. Για παράδειγμα, η αναπήδηση μακριά από μια καυτή θερμάστρα είναι μια αντανακλαστική ενέργεια η οποία είναι συνήθως πιο επιτυχημένη από μια αργή ενέργεια που γίνεται μετά από προσεκτική σκέψη.

Η επίτευξη της τέλει ορθολογικότητας δεν είναι εφικτή σε πολύπλοκα περιβάλλοντα. Οι υπολογιστικές απαιτήσεις είναι υπερβολικά υψηλές. Η **περιορισμένη ορθολογικότητα (limited rationality)** αναφέρεται στην πραγματοποίηση της κατάλληλης ενέργειας, όταν δεν υπάρχει αρκετός χρόνος για να γίνουν όλοι οι υπολογισμοί για την πλήρη αξιολόγησή της [1].

## 1.2 Μηχανική Μάθηση

Η παρούσα εργασία επικεντρώνεται στις τεχνικές και μεθοδολογίες της Μηχανικής Μάθησης. Στη συνέχεια ακολουθεί μια σύντομη εισαγωγή, με την παρουσίαση του ορισμού, της ορολογίας που χρησιμοποιείται, των διάφορων τύπων Μάθησης καθώς και κάποιων παραδειγμάτων εφαρμογής της Μηχανικής Μάθησης σε πραγματικά προβλήματα. Οι έννοιες και οι τεχνικές που παρουσιάζονται αναπτύσσονται αναλυτικά στα επόμενα κεφάλαια.

### 1.2.1 Εισαγωγή

Η **Μηχανική Μάθηση (Machine Learning)** είναι ένας κλάδος της Τεχνητής Νοημοσύνης που μπορεί να οριστεί ως οι υπολογιστικές μέθοδοι που χρησιμοποιούν εμπειρία για να βελτιώσουν την απόδοση ενός συστήματος ή να πραγματοποιήσουν ακριβείς προβλέψεις [2]. Η έννοια της **εμπειρίας (experience)** αναφέρεται στην πληροφορία του παρελθόντος η οποία είναι διαθέσιμη στο σύστημα μάθησης, η οποία συνήθως παίρνει την μορφή ηλεκτρονικών δεδομένων που έχουν συλλεχθεί και είναι διαθέσιμα για ανάλυση. Τα δεδομένα αυτά μπορεί να έχουν την μορφή συνόλων εκπαίδευσης τα οποία έχουν χαρακτηριστεί και ταξινομηθεί κατάλληλα από ανθρώπους ή να προέρχονται από την αλληλεπίδραση με το περιβάλλον. Σε κάθε περίπτωση, η ποιότητα και το μέγεθος του συνόλου δεδομένων είναι κρίσιμος παράγοντας για την επιτυχία των προβλέψεων του συστήματος μάθησης.

Η Μηχανική Μάθηση περιλαμβάνει τη σχεδίαση αποδοτικών αλγορίθμων οι οποίοι παράγουν ακριβείς προβλέψεις. Όπως και σε άλλα πεδία της επιστήμης των υπολογιστών, δυο κρίσιμα μέτρα της ποιότητας των αλγορίθμων αυτών είναι η χρονική και χωρική πολυπλοκότητά τους. Στη Μηχανική Μάθηση απαιτείται επιπλέον η έννοια της

**πολυπλοκότητας δείγματος (sample complexity)**, για την αξιολόγηση του μεγέθους του δείγματος που χρειάζεται ο αλγόριθμος για να μάθει μια οικογένεια εννοιών. Οι θεωρητικές εγγυήσεις για την αποτελεσματικότητα ενός αλγορίθμου μάθησης εξαρτώνται από την πολυπλοκότητα των εννοιών – κλάσεων και από το μέγεθος του συνόλου των δειγμάτων εκπαίδευσης.

Από τη στιγμή που η επιτυχία ενός αλγορίθμου μάθησης εξαρτάται από τα δεδομένα που χρησιμοποιούνται, η Μηχανική Μάθηση σχετίζεται άμεσα με την ανάλυση δεδομένων και την στατιστική. Οι τεχνικές εκμάθησης βασίζονται στα δεδομένα και συνδυάζουν βασικές έννοιες της επιστήμης υπολογιστών με ιδέες από στατιστική, πιθανότητες και από τεχνικές βελτιστοποίησης [2].

### 1.2.2 Ορισμοί και Ορολογία

Θεωρώντας το πρόβλημα της αυτόματης ταξινόμησης ανθρώπων σε πάσχοντες και μη πάσχοντες ως προς κάποια ασθένεια, γίνεται μια πρώτη αναφορά σε βασικές έννοιες και στη χρήση των αλγορίθμων μάθησης στην πράξη [2].

- **Δείγματα (Samples).** Αντικείμενα ή στιγμιότυπα δεδομένων που χρησιμοποιούνται για εκμάθηση ή αξιολόγηση. Στο πρόβλημα ταξινόμησης ως προς κάποια ασθένεια τα δείγματα αυτά αντιστοιχούν σε ένα σύνολο ανθρώπων, από τους οποίους θα συλλεχθούν δεδομένα που θα χρησιμοποιηθούν για την εκμάθηση και για τον έλεγχο αποτελεσματικότητας της αυτόματης ταξινόμησης.
- **Χαρακτηριστικά (Features).** Το σύνολο των γνωρισμάτων (attributes) που σχετίζονται με ένα δείγμα, σχηματίζοντας συνήθως ένα διάνυσμα. Στο συγκεκριμένο παράδειγμα ταξινόμησης, κάποια χαρακτηριστικά θα μπορούσαν να είναι τα αποτελέσματα συγκεκριμένων εργαστηριακών ιατρικών εξετάσεων (διάφοροι ιατρικοί δείκτες), η ηλικία, το φύλο, το ιατρικό ιστορικό ως προς τη συγκεκριμένη ασθένεια αλλά και γενικότερα, καθώς επίσης και δείκτες που προκύπτουν από κλινική εξέταση.
- **Κατηγορίες ή Κλάσεις (Categories, Classes).** Οι κατηγορίες ή οι κλάσεις που έχουν ανατεθεί στα δείγματα. Στα προβλήματα ταξινόμησης, κάθε δείγμα κατηγοριοποιείται σε συγκεκριμένες κλάσεις, όπως είναι οι κλάσεις «πάσχοντες» και «μη πάσχοντες».
- **Σύνολο Εκπαίδευσης (Training Set).** Δείγματα που χρησιμοποιούνται για την εκπαίδευση ενός αλγορίθμου εκμάθησης. Για το παράδειγμα της ταξινόμησης ως προς κάποια ασθένεια, το σύνολο εκπαίδευσης αποτελείται από ένα σύνολο ανθρώπων μαζί με τις κατηγορίες στις οποίες έχουν ταξινομηθεί (πάσχοντες ή μη πάσχοντες). Το σύνολο εκπαίδευσης διαφέρει, ανάλογα με το σενάριο μάθησης.
- **Σύνολο Επικύρωσης (Validation Set).** Δείγματα με γνωστές τις κατηγορίες στις οποίες ανήκουν, για τη ρύθμιση των παραμέτρων του αλγορίθμου εκμάθησης. Οι αλγόριθμοι

εκμάθησης διαθέτουν συνήθως μια ή περισσότερες ελεύθερες παραμέτρους και το σύνολο επικύρωσης χρησιμοποιείται για την επιλογή κατάλληλων τιμών για αυτές.

- **Σύνολο Ελέγχου (Test Set).** Δείγματα για την αξιολόγηση της απόδοσης του αλγόριθμου εκμάθησης. Το σύνολο ελέγχου είναι διαφορετικό από το σύνολο εκπαίδευσης και το σύνολο επικύρωσης, και δεν είναι διαθέσιμο κατά την φάση της εκπαίδευσης. Για το παράδειγμα ταξινόμησης που έχει θεωρηθεί, το σύνολο ελέγχου αποτελείται από ένα σύνολο ανθρώπων, για τους οποίους ο αλγόριθμος εκμάθησης θα πρέπει να προβλέψει τις κλάσεις στις οποίες ανήκουν (πάσχων ή μη πάσχων), με βάση τα διαθέσιμα χαρακτηριστικά τους. Στη συνέχεια οι προβλέψεις αυτές συγκρίνονται με τις πραγματικές κλάσεις του συνόλου ελέγχου για τη μέτρηση της απόδοσης του αλγόριθμου.
- **Συνάρτηση Σφάλματος (Error Function).** Μια συνάρτηση που μετράει τη διαφορά, ή το σφάλμα, μεταξύ της προβλεπόμενης κλάσης και της πραγματικής κλάσης για κάποιο δείγμα. Θεωρώντας το σύνολο όλων των κλάσεων ως το  $Y$  και το σύνολο όλων των πιθανών προβλέψεων ως το  $Y'$ , η συνάρτηση σφάλματος είναι η αντιστοίχιση  $L: Y \times Y' \rightarrow \mathbb{R}_+$ . Στις περισσότερες περιπτώσεις ισχύει ότι  $Y = Y'$  και η συνάρτηση σφάλματος είναι φραγμένη. Κοινά δείγματα συναρτήσεων σφάλματος είναι η συνάρτηση σφάλματος μηδέν – ένα (zero-one loss) που ορίζεται στο  $\{-1, +1\} \times \{-1, +1\}$  ως  $L(y, y') = 1_{y \neq y'}$  και η τετραγωνική συνάρτηση σφάλματος που ορίζεται στο  $I \times I$  ως  $L(y, y') = (y' - y)^2$ , όπου  $I \subseteq \mathbb{R}$  είναι ένα φραγμένο διάστημα.
- **Σύνολο Υποθέσεων (Hypothesis set).** Ένα σύνολο συναρτήσεων, οι οποίες αντιστοιχίζουν διανύσματα χαρακτηριστικών (feature vectors) στο σύνολο των κλάσεων  $Y$ . Στο παράδειγμα της ταξινόμησης των ανθρώπων ως πάσχοντες ή μη πάσχοντες, οι συναρτήσεις αυτές αντιστοιχίζουν τα χαρακτηριστικά του συνόλου των ανθρώπων στο σύνολο  $Y = \{\text{πάσχων}, \text{μη πάσχων}\}$ . Σε γενικές γραμμές οι υποθέσεις μπορεί να είναι συναρτήσεις που αντιστοιχίζουν τα χαρακτηριστικά σε ένα διαφορετικό σύνολο  $Y'$ . Μπορεί να είναι γραμμικές συναρτήσεις που αντιστοιχίζουν τα διανύσματα χαρακτηριστικών του συνόλου των ανθρώπων σε πραγματικές τιμές, οι οποίες ερμηνεύονται ως βαθμολογίες (scores) ( $Y' = \mathbb{R}$ ), με τις υψηλότερες βαθμολογίες να είναι περισσότερο αντιπροσωπευτικές των ατόμων που πάσχουν από την ασθένεια.

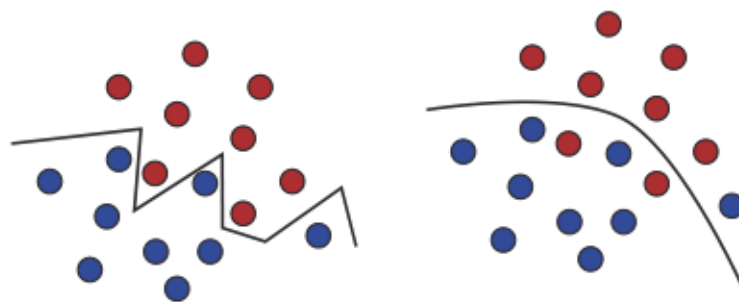
Στη συνέχεια περιγράφονται εν συντομία οι διαφορετικές φάσεις εκμάθησης για το πρόβλημα της ταξινόμησης ανθρώπων ως πάσχοντες ή μη πάσχοντες, για κάποια συγκεκριμένη ασθένεια. Το πρόβλημα αυτό ανήκει στην κατηγορία προβλημάτων ταξινόμησης με μάθηση υπό επίβλεψη. Η διαδικασία ξεκινάει με το διαθέσιμο σύνολο δειγμάτων με γνωστές κλάσεις, το οποίο διαχωρίζεται τυχαία σε ένα σύνολο εκπαίδευσης, ένα σύνολο επικύρωσης και ένα σύνολο ελέγχου. Το μέγεθος των συνόλων αυτών εξαρτάται από ένα σύνολο παραγόντων. Για παράδειγμα, το πλήθος των δεδομένων επικύρωσης εξαρτάται από τον αριθμό των ελεύθερων παραμέτρων του αλγόριθμου. Επίσης, όταν το πλήθος των δεδομένων με γνωστές κλάσεις είναι μικρό, τα δεδομένα

εκπαίδευσης θα πρέπει να είναι περισσότερα από τα δεδομένα ελέγχου, για να επιτευχθεί καλύτερη απόδοση.

Έπειτα, γίνεται επιλογή των κατάλληλων χαρακτηριστικών που θα χρησιμεύσουν στη διαδικασία εκπαίδευσης. Το βήμα αυτό είναι ιδιαίτερα κρίσιμο, καθώς χρήσιμα χαρακτηριστικά οδηγούν σωστά τον αλγόριθμο εκμάθησης ενώ μια λανθασμένη επιλογή χαρακτηριστικών με άσχετη πληροφορία θα έχει ως αποτέλεσμα πολύ χαμηλή απόδοση. Η επιλογή των χαρακτηριστικών αντικατοπτρίζει την εκ των προτέρων γνώση (prior knowledge) που υπάρχει σχετικά με το πρόβλημα μάθησης και επηρεάζει ιδιαίτερα την απόδοση του συστήματος μάθησης.

Τα χαρακτηριστικά που έχουν επιλεγεί χρησιμοποιούνται για την εκπαίδευση του συστήματος μάθησης. Για κάθε τιμή των παραμέτρων του συστήματος, ο αλγόριθμος επιλέγει μια διαφορετική υπόθεση από το σύνολο των υποθέσεων. Από τις υποθέσεις αυτές επιλέγεται εκείνη που δίνει μεγαλύτερη απόδοση στο σύνολο επικύρωσης. Η απόδοση του αλγορίθμου υπολογίζεται χρησιμοποιώντας την συνάρτηση σφάλματος που σχετίζεται με το πρόβλημα. Για παράδειγμα, για το πρόβλημα της ταξινόμησης ανθρώπων ως προς κάποια ασθένεια, χρησιμοποιείται η συνάρτηση σφάλματος μηδέν-ένα για τη σύγκριση των προβλεπόμενων κλάσεων με τις πραγματικές κλάσεις.

Η απόδοση ενός αλγορίθμου υπολογίζεται με βάση τα λάθη του στο σύνολο ελέγχου και όχι στο σύνολο εκπαίδευσης. Ένας αλγόριθμος μπορεί να είναι συνεπής ως προς το σύνολο εκπαίδευσης, αλλά να μην αποδίδει καλά στο σύνολο ελέγχου. Αυτό το φαινόμενο παρουσιάζεται σε συστήματα μάθησης με πολύπλοκες επιφάνειες απόφασης, όπως αυτή στην Εικόνα 1.1, η οποία τείνει να απομνημονεύει ένα σχετικά μικρό δείγμα δεδομένων αντί να έχει καλή απόδοση πρόβλεψης σε νέα δεδομένα. Το παράδειγμα αυτό δείχνει τον **διαχωρισμό μεταξύ της απομνημόνευσης και της ικανότητας πρόβλεψης**, η οποία είναι η βασική ιδιότητα που θα πρέπει να έχει ένα σύστημα μάθησης [2].



**Εικόνα 1.1:** Η τεθλασμένη γραμμή στα αριστερά είναι συνεπής ως προς το σύνολο εκπαίδευσης, αλλά είναι μια πολύπλοκη επιφάνεια απόφασης η οποία δεν παράγει καλές προβλέψεις για νέα δεδομένα. Αντιθέτως, η επιφάνεια απόφασης στο σχήμα δεξιά είναι πιο απλή και παρέχει καλύτερες προβλέψεις, παρά την λανθασμένη ταξινόμηση λίγων δειγμάτων του συνόλου εκπαίδευσης.

### 1.2.3 Σενάρια Μάθησης

Στη συνέχεια παρουσιάζονται τα περισσότερο διαδεδομένα σενάρια μάθησης. Τα σενάρια αυτά διαφέρουν ως προς τον τύπο των διαθέσιμων δεδομένων, τη μέθοδο με την οποία λαμβάνονται τα δεδομένα εκπαίδευσης και τα δεδομένα ελέγχου για την αξιολόγηση του συστήματος [2].

- **Μάθηση υπό επίβλεψη (supervised learning).** Το σύστημα μάθησης λαμβάνει ένα σύνολο από δείγματα κατηγοριοποιημένα σε κλάσεις ως δεδομένα εκπαίδευσης και πραγματοποιεί προβλέψεις για νέα δεδομένα. Αυτό είναι το πιο κοινό σενάριο που σχετίζεται με προβλήματα όπως ταξινόμηση, πρόβλεψη τιμής συνάρτησης και ταξινόμηση με βάση κάποιο κριτήριο.
- **Μάθηση χωρίς επίβλεψη (unsupervised learning).** Το σύστημα μάθησης λαμβάνει δεδομένα εκπαίδευσης για τα οποία δεν είναι γνωστές οι κλάσεις τους και παράγει προβλέψεις για νέα δεδομένα. Επειδή δεν υπάρχουν δεδομένα με γνωστές κλάσεις είναι δύσκολο να γίνει ποσοτική αξιολόγηση της απόδοσης του συστήματος. Δυο παραδείγματα προβλημάτων μάθησης χωρίς επίβλεψη είναι η ομαδοποίηση (clustering) και ελάττωση διαστάσεων (dimensionality reduction).
- **Μάθηση υπό μερική επίβλεψη (Semi-supervised learning).** Το σύστημα μάθησης λαμβάνει ένα σύνολο εκπαίδευσης που αποτελείται από δεδομένα με γνωστές τις κλάσεις τους και δεδομένα χωρίς γνωστές κλάσεις και στη συνέχεια παράγει προβλέψεις για νέα δεδομένα. Η μάθηση υπό μερική επίβλεψη εφαρμόζεται συχνά σε προβλήματα όπου είναι εύκολη η συλλογή δεδομένων χωρίς να είναι γνωστές οι κλάσεις, ενώ τα δεδομένα με γνωστές κλάσεις κοστίζουν υπολογιστικά για να αποκτηθούν. Διάφοροι τύποι προβλημάτων όπως η ταξινόμηση, η πρόβλεψη τιμής, η ταξινόμηση με βάση κριτήριο μπορούν να αντιμετωπιστούν ως προβλήματα μάθησης υπό μερική επίβλεψη. Η κατανομή των δεδομένων χωρίς γνωστές κλάσεις μπορεί να βοηθήσει στην επίτευξη καλύτερης απόδοσης από την μάθηση με επίβλεψη. Η ανάλυση για τις συνθήκες κάτω από τις οποίες συμβαίνει η βελτίωση αυτή είναι αντικείμενο θεωρητικής και εφαρμοσμένης έρευνας στο πεδίο της Μηχανικής Μάθησης.
- **Μεταβιβαστικός συμπερασμός (Transductive inference).** Όπως και στο προηγούμενο σενάριο, το σύστημα μάθησης τροφοδοτείται με ένα σύνολο εκπαίδευσης για το οποίο είναι γνωστές οι κλάσεις, μαζί με ένα σύνολο από δεδομένα ελέγχου χωρίς κλάσεις. Αυτό το είδος μάθησης παράγει προβλέψεις μόνο για τα συγκεκριμένα δεδομένα ελέγχου. Αυτός ο τρόπος εκμάθησης είναι ευκολότερος και συναντάται σε διάφορες σύγχρονες εφαρμογές. Οι συνθήκες κάτω από τις οποίες παράγει υψηλή απόδοση είναι αντικείμενο έρευνας.
- **Μάθηση με απευθείας σύνδεση (On-line learning).** Σε αντίθεση με τα προηγούμενα σενάρια μάθησης, το σενάριο αυτό περιλαμβάνει πολλές επαναλήψεις στις οποίες οι φάσεις εκπαίδευσης και ελέγχου εναλλάσσονται. Σε κάθε επανάληψη, το σύστημα

μάθησης λαμβάνει ένα σύνολο εκπαίδευσης χωρίς τιμές χαρακτηριστικών, παράγει μια πρόβλεψη για αυτό, λαμβάνει τις πραγματικές τιμές και υπολογίζει το σφάλμα. Ο στόχος σε αυτό το σενάριο είναι η ελαχιστοποίηση του συσσωρευτικού σφάλματος για όλες τις επαναλήψεις. Στη μάθηση με απευθείας σύνδεση δεν γίνεται κάποια υπόθεση ως προς την κατανομή των δεδομένων.

- **Μάθηση με ενίσχυση (Reinforcement learning).** Οι φάσεις εκπαίδευσης και ελέγχου εναλλάσσονται σε αυτό το σενάριο μάθησης. Για τη συλλογή πληροφορίας, το σύστημα μάθησης αλληλεπιδρά ενεργά με το περιβάλλον και σε κάποιες περιπτώσεις το επηρεάζει, λαμβάνοντας άμεση επιβράβευση για κάθε ενέργεια που πραγματοποιεί. Ο στόχος του συστήματος μάθησης είναι να μεγιστοποιήσει τις επιβραβεύσεις για τις ενέργειες που πραγματοποιεί κατά την αλληλεπίδρασή του με το περιβάλλον. Παρόλα αυτά, δεν παρέχεται μακροπρόθεσμη ανάδραση ως προς τις επιβραβεύσεις, οπότε το σύστημα αντιμετωπίζει το δίλλημα της εξερεύνησης ή εκμετάλλευσης (exploration versus exploitation) διότι θα πρέπει να επιλέξει μεταξύ της εξερεύνησης άγνωστων ενεργειών για να λάβει περισσότερη πληροφορία και της εκμετάλλευσης της ήδη υπάρχουσας πληροφορίας.
- **Ενεργή μάθηση (Active learning).** Το σύστημα μάθησης συλλέγει με δυναμικό τρόπο, ανάλογα με τις ανάγκες, δείγματα εκπαίδευσης με ερωτήσεις προς κάποιο άλλο σύστημα για τις κλάσεις των δειγμάτων και τις τιμές των χαρακτηριστικών τους. Ο στόχος σε αυτό το σενάριο μάθησης είναι να επιτευχθεί απόδοση η οποία θα είναι συγκρίσιμη με το σενάριο μάθησης υπό επίβλεψη, αλλά με λιγότερα κατηγοριοποιημένα δείγματα. Η ενεργή μάθηση χρησιμοποιείται σε περιπτώσεις όπου η κατηγοριοποίηση των δειγμάτων κοστίζει υπολογιστικά, όπως σε εφαρμογές υπολογιστικής βιολογίας.
- **Μάθηση βασισμένη σε δείγματα (Instance-based learning).** Σε αυτό το σενάριο μάθησης, το οποίο ονομάζεται και μάθηση βασισμένη σε μνήμη (memory-based learning), αντί να παράγονται άμεσα προβλέψεις, τα νέα δεδομένα συγκρίνονται με τα δεδομένα που έχει συναντήσει το σύστημα κατά την εκπαίδευση, τα οποία έχουν αποθηκευτεί στην μνήμη. Το σενάριο αυτό ανήκει στην κατηγορία της οκνηρής μάθησης (lazy learning), στην οποία η διαδικασία μάθησης γίνεται κατά το χρόνο εκτέλεσης του συστήματος (δεν προηγείται κάποια διαδικασία εκπαίδευσης). Το σενάριο αυτό ονομάζεται μάθηση βασισμένη σε δείγματα διότι δημιουργεί υποθέσεις απευθείας από τα δείγματα εκπαίδευσης που διαθέτει.

#### 1.2.4 Εφαρμογές Μηχανικής Μάθησης

Η Μηχανική Μάθηση βρίσκει εφαρμογή σε ένα μεγάλο εύρος προβλημάτων. Παρακάτω παρουσιάζονται επιγραμματικά γενικές εφαρμογές και οι βασικές κατηγορίες προβλημάτων. Στην ενότητα 1.3 γίνεται μια εισαγωγή στις εφαρμογές της Μηχανικής

Μάθησης στη Βιοπληροφορική, οι οποίες θα παρουσιαστούν αναλυτικότερα σε επόμενα κεφάλαια, μαζί με τις αντίστοιχες τεχνικές που χρησιμοποιούνται.

Οι μέθοδοι της Μηχανικής Μάθησης έχουν εφαρμοστεί επιτυχώς σε μία μεγάλη ποικιλία εφαρμογών όπως [2]:

- **Ταξινόμηση κειμένου ή εγγράφων (Text or document classification)**, όπως για παράδειγμα εύρεση ανεπιθύμητης αλληλογραφίας (spam detection).
- **Επεξεργασία φυσικής γλώσσας (Natural language processing)**, και πιο συγκεκριμένα μορφολογική ανάλυση (morphological analysis), εύρεση ετικετών για διάφορα μέρη του λόγου (part-of-speech tagging), στατιστική ανάλυση (statistical parsing), αναγνώριση συγκεκριμένης οντότητας (named-entity recognition).
- **Αναγνώριση φωνής (Speech recognition)**, σύνθεση φωνής (speech synthesis), επαλήθευση ταυτότητας ομιλητή (speaker verification).
- **Οπτική αναγνώριση χαρακτήρων (Optical Character Recognition - OCR)**.
- **Εφαρμογές υπολογιστικής βιολογίας (Computational biology applications)**, λειτουργίες πρωτεϊνών ή προβλέψεις σχετικά με τη δομή τους.
- **Υπολογιστική Όραση (Computer vision)**, αναγνώριση εικόνας (image recognition), ανίχνευση προσώπου (face detection).
- **Ανίχνευση απάτης και εισβολής σε δίκτυο (Fraud detection and Network intrusion)**.
- **Παιχνίδια**, όπως σκάκι, τάβλι.
- **Μη υποβοηθούμενος έλεγχος οχήματος (Unassisted vehicle control)**, ρομπότ και πλοήγηση.
- **Ιατρική Διάγνωση**.
- **Συστήματα παροχής συμβουλών (Recommendation systems)**, μηχανές αναζήτησης (search engines), συστήματα εξαγωγής πληροφορίας (information extraction systems).

Η λίστα αυτή δεν είναι εξαντλητική καθώς προκύπτουν συνεχώς νέες εφαρμογές. Οι εφαρμογές αυτές αντιστοιχούν σε ένα ευρύ φάσμα προβλημάτων τα οποία αντιμετωπίζει η Μηχανική Μάθηση. Κάποιες από τις κατηγορίες των προβλημάτων αυτών είναι οι εξής [2]:

- **Ταξινόμηση (Classification)**. Ανάθεση κατηγορίας σε κάθε αντικείμενο. Για παράδειγμα, η ταξινόμηση εγγράφων μπορεί να αναθέτει στα αντικείμενα (έγγραφα) κατηγορίες όπως πολιτική, επιχειρήσεις, αθλητικά, καιρός ενώ η ταξινόμηση ανθρώπων ως προς κάποια ασθένεια αναθέτει κατηγορίες όπως πάσχων, μη πάσχων. Ο αριθμός των κατηγοριών είναι συνήθως μικρός αλλά ενδεχομένως να είναι αρκετά μεγάλος για κάποια δύσκολα προβλήματα ή και μη φραγμένος, όπως στην οπτική αναγνώριση χαρακτήρων, στην ταξινόμηση κειμένου ή στην αναγνώριση φωνής.



- **Παλινδρόμηση (Regression).** Πρόβλεψη μιας πραγματικής τιμής για κάθε αντικείμενο. Κάποια παραδείγματα παλινδρόμησης είναι η πρόβλεψη τιμών μετοχών ή των διακυμάνσεων διάφορων οικονομικών μεταβλητών. Σε αυτό το πρόβλημα, το σφάλμα για μια λανθασμένη πρόβλεψη εξαρτάται από το μέγεθος της διαφοράς μεταξύ της πραγματικής και της προβλεπόμενης τιμής, σε αντίθεση με το πρόβλημα ταξινόμησης όπου δεν υπάρχει η έννοια της σχετικής απόστασης μεταξύ των διάφορων κατηγοριών.
- **Βαθμονόμηση (Ranking).** Ταξινόμηση των αντικειμένων με βάση κάποιο κριτήριο. Ένα παράδειγμα του προβλήματος αυτού είναι η αναζήτηση ιστοσελίδων, η οποία επιστρέφει ιστοσελίδες που είναι σχετικές με μια ερώτηση αναζήτησης. Παρόμοια προβλήματα προκύπτουν στο πλαίσιο της σχεδίασης συστημάτων εξαγωγής πληροφορίας και συστημάτων επεξεργασίας φυσικής γλώσσας.
- **Ομαδοποίηση (Clustering).** Διαμέριση αντικειμένων σε ομογενείς περιοχές. Η ομαδοποίηση εφαρμόζεται συνήθως για την ανάλυση πολύ μεγάλων συνόλων δεδομένων. Για παράδειγμα, στο πλαίσιο της ανάλυσης κοινωνικών δικτύων, οι αλγόριθμοι ομαδοποίησης προσπαθούν να εντοπίσουν κοινότητες σε μεγάλα σύνολα ανθρώπων.
- **Ελάττωση διαστάσεων (Dimensionality reduction).** Μετασχηματισμός μιας αρχικής αναπαράστασης αντικειμένων σε μια αναπαράσταση με μικρότερο αριθμό διαστάσεων, διατηρώντας κάποιες από τις ιδιότητες της αρχικής αναπαράστασης. Ένα παράδειγμα του προβλήματος αυτού είναι η προ-επεξεργασία ψηφιακών εικόνων σε εφαρμογές όρασης υπολογιστών.

## 1.3 Μηχανική Μάθηση στα πλαίσια της Ιατρικής και της Βιοπληροφορικής

### 1.3.1 Εφαρμογές στην Ιατρική

#### 1.3.1.1 Διάγνωση και Πρόγνωση

Η Μηχανική Μάθηση παρέχει μεθόδους, τεχνικές και εργαλεία που μπορούν να βοηθήσουν στην επίλυση διαγνωστικών και προγνωστικών προβλημάτων σε ένα ευρύ φάσμα ιατρικών πεδίων γνώσης. Οι μέθοδοι Μηχανικής Μάθησης χρησιμοποιούνται για την ανάλυση της σημαντικότητας των κλινικών παραμέτρων και των συνδυασμών τους στις προγνώσεις, όπως για παράδειγμα πρόγνωση για την πορεία μιας ασθένειας, την εξαγωγή ιατρικής γνώσης για τα αποτελέσματα ερευνών, τον σχεδιασμό θεραπείας και ιατρικής υποστήριξης και γενικότερα για την διαχείριση των ασθενών. Η Μηχανική Μάθηση επίσης χρησιμοποιείται για ανάλυση δεδομένων, όπως ανίχνευση ανωμαλιών στα δεδομένα και

κατάλληλους χειρισμούς των δεδομένων αυτών, ερμηνεία των συνεχών δεδομένων που λαμβάνονται από την Μονάδα Εντατικής Θεραπείας καθώς και για ευφυή συστήματα έγκυρης ειδοποίησης κατά την παρακολούθηση ασθενών. Υποστηρίζεται ότι η επιτυχής εφαρμογή μεθόδων Μηχανικής Μάθησης μπορεί να συμβάλει στην ομαλή ένταξη και λειτουργία των υπολογιστικών συστημάτων στο περιβάλλον της υγείας, παρέχοντας ευκαιρίες για βελτίωση της αποτελεσματικότητας των ειδικών του τομέα και γενικότερα για βελτίωση της ποιότητας των υπηρεσιών υγείας [3].

Η **ιατρική διαγνωστική συλλογιστική (medical diagnostic reasoning)** είναι ένας ιδιαίτερα σημαντικός κλάδος των υπολογιστικών συστημάτων. Σε αυτό το πλαίσιο, έμπειρα συστήματα (expert systems) και σχήματα βασισμένα σε μοντέλα (model schemes) παρέχουν μηχανισμούς για την παραγωγή υποθέσεων από τα δεδομένα ασθενών. Σε πολλές περιπτώσεις, οι ειδικοί δεν γνωρίζουν ή δεν είναι σε θέση να συμπεράνουν τι γνώση θα πρέπει να χρησιμοποιηθεί για την επίλυση κάποιου προβλήματος. Οι συμβολικές μέθοδοι εκμάθησης (symbolic learning techniques) χρησιμοποιούνται για να προσθέσουν γνώση και δυνατότητες διαχείρισης γνώσης στα έμπειρα συστήματα. Δεδομένου ενός συνόλου κλινικών περιπτώσεων, οι οποίες λειτουργούν ως δείγματα εκπαίδευσης, η εκμάθηση στα ευφυή συστήματα μπορεί να επιτευχθεί χρησιμοποιώντας μεθόδους Μηχανικής Μάθησης. Οι μέθοδοι αυτοί μπορούν να παράγουν μια συστηματική περιγραφή των κλινικών χαρακτηριστικών που χαρακτηρίζουν μοναδικά τις κλινικές συνθήκες. Η γνώση αυτή μπορεί να εκφραστεί ως απλοί κανόνες ή συχνά ως ένα δέντρο απόφασης (decision tree). Ένα κλασικό παράδειγμα αυτού του τύπου συστήματος είναι το σύστημα KARDIO, το οποίο είχε αναπτυχθεί για να ερμηνεύει ηλεκτροκαρδιογραφήματα (Bratko et al., 1989) [3].

Η εκμάθηση από δεδομένα ασθενών παρουσιάζει αρκετές δυσκολίες, διότι αυτά τα σύνολα δεδομένων χαρακτηρίζονται από πολλές ελλείψεις τιμών, λανθασμένες τιμές (συστηματικός ή τυχαίος θόρυβος στα δεδομένα), αραιώση δεδομένων (λίγα αρχεία ασθενών ή μη κωδικοποιήσιμα) και ανακρίβειες (λανθασμένες επιλογές παραμέτρων). Η Μηχανική Μάθηση παρέχει εργαλεία για την αντιμετώπιση των προβλημάτων που παρουσιάζουν τα σύνολα ιατρικών δεδομένων. Υπό-συμβολικές μέθοδοι μάθησης, όπως τα νευρωνικά δίκτυα, μπορούν να διαχειριστούν τα δεδομένα αυτά και χρησιμοποιούνται κυρίως για τη δυνατότητα αναγνώρισης και συσχέτισης προτύπων (pattern matching), για τη δυνατότητα πρόβλεψης και για την ευρωστία στο θόρυβο. Η χρήση των μεθόδων αυτών στοχεύει στη βελτίωση της λήψης ιατρικών αποφάσεων [3].

### 1.3.1.2 Επεξεργασία και Ανάλυση Βιοϊατρικών σημάτων

Ένα άλλο πεδίο εφαρμογής είναι η επεξεργασία βιοϊατρικών σημάτων (biomedical signal processing). Στα σήματα που προέρχονται από βιολογικά συστήματα υπάρχουν κρυμμένα βασικά χαρακτηριστικά και πληροφορίες τα οποία δεν είναι προφανή, αφού η

γνώση που υπάρχει για τον τρόπο λειτουργίας των συστημάτων αυτών δεν είναι πλήρης. Επίσης, η αλληλεπιδράσεις μεταξύ των διαφόρων υποσυστημάτων δεν είναι εύκολα ανιχνεύσιμες. Τα βιολογικά σήματα χαρακτηρίζονται από σημαντική μεταβλητότητα, η οποία προκαλείται είτε από εσωτερικούς μηχανισμούς που λειτουργούν αυθόρμητα, είτε από εξωτερικά ερεθίσματα.

Οι συσχετίσεις μεταξύ των παραμέτρων ενδεχομένως να είναι ιδιαίτερα πολύπλοκες και να μην είναι δυνατό να επιλυθούν με συμβατικές τεχνικές. Οι μέθοδοι της Μηχανικής Μάθησης βασίζονται σε σύνολα δεδομένων, τα οποία μπορούν να συλλεχθούν ευκολότερα και βοηθούν στη μοντελοποίηση μη γραμμικών σχέσεων. Επίσης, τα δεδομένα αυτά συμβάλουν στην εξαγωγή παραμέτρων και χαρακτηριστικών που μπορούν να βελτιώσουν τις παρεχόμενες υπηρεσίες υγείας [3].

### 1.3.1.3 Ερμηνεία Ιατρικής Εικόνας

**Τα Υπολογιστικά Συστήματα Υποστήριξης Διάγνωσης (Computer Aided Diagnosis systems - CAD)** αποτελούν ένα πολύ σημαντικό πεδίο εφαρμογής της Μηχανικής Μάθησης και παρέχουν πολύτιμη βοήθεια στη διαδικασία της ιατρικής διάγνωσης. Στις περισσότερες περιπτώσεις, η ανάπτυξη των συστημάτων αυτών θεωρείται ως μια προσπάθεια εξομοίωσης της εμπειρογνωμοσύνης του ιατρού.

Τα συστήματα αυτά χρησιμοποιούνται για ανίχνευση ανωμαλιών, όπως για παράδειγμα στένωση αρτηνών ή για κακοήθεις περιοχές, σε εικόνες που έχουν προκύψει από ελάχιστα επεμβατικές μεθόδους (υπολογιστική τομογραφία, υπερηχογράφημα, ενδοσκόπηση, ομοεστιακά μικροσκόπια, υπολογιστική ραδιογραφία, απεικόνιση μαγνητικού συντονισμού). Ο στόχος σε αυτή την περίπτωση είναι η βελτίωση της δυνατότητας του ειδικού να εντοπίζει παθολογικές περιοχές και παράλληλα η μείωση της ανάγκης για επέμβαση και η διατήρηση της ικανότητας για ακριβή διάγνωση. Επίσης ίσως υπάρχει η δυνατότητα εξέτασης μιας μεγαλύτερης περιοχής, ή μελέτης ζωντανού ιστού in vivo, από απόσταση. Επομένως, ελαχιστοποιείται η ανάγκη χρήσης επεμβατικών μεθόδων εξέτασης (για παράδειγμα βιοψίες) και μειώνεται η ταλαιπωρία του ασθενή, η καθυστέρηση στη διάγνωση και ο περιορισμένος αριθμός των δειγμάτων ιστού. Η ανάγκη για πιο αποτελεσματικές μεθόδους έγκαιρης διάγνωσης είναι προφανής, και τα συστήματα αυτά στοχεύουν στο να παρέχουν ακριβώς αυτή τη δυνατότητα στους ειδικούς της υγείας.

Σε γενικές γραμμές, το περιβάλλον της ιατρικής περίθαλψης βασίζεται ολοένα και περισσότερο στην τεχνολογία υπολογιστών. Η χρήση των μεθόδων Μηχανικής Μάθησης παράγει χρήσιμα εργαλεία για την βοήθεια των ιατρών σε πολλές περιπτώσεις, ελαχιστοποιεί προβλήματα που σχετίζονται με την κούραση και τα ανθρώπινα σφάλματα, παρέχει άμεση αναγνώριση ανωμαλιών και διάγνωση σε πραγματικό χρόνο [3].

### 1.3.1.4 Παραδοσιακή Κινέζικη Ιατρική

Η παραδοσιακή Κινέζικη ιατρική είναι ένα σύστημα θεραπείας και νοσηλείας με αρκετά μεγάλη παράδοση στην Κινέζικη κοινωνία. Το σύστημα αυτό, σε αντίθεση με την σύγχρονη βιοϊατρική, είναι κυρίως εμπειρικό και αναπτύχθηκε από την παρατήρηση των ασθενών και την επίδραση των φυσικών δυνάμεων και προϊόντων στην ανθρώπινη υγεία. Η κλινική άσκηση συμβάλει άμεσα στην εξάσκηση και την προώθηση αυτού του συστήματος.

Κατά τη διάρκεια των προηγούμενων ετών πολλοί επιστήμονες στην Κίνα έχουν συμμετάσχει σε διάφορα προγράμματα εκμοντερνισμού της παραδοσιακής Κινέζικης ιατρικής. Κάποια από τα προγράμματα αυτά περιλαμβάνουν την ψηφιοποίηση των δεδομένων, όπως αρχαίων κειμένων, κλινικών δεδομένων και διάφορων ερευνών. Η οργάνωση όλων αυτών των ετερογενών δεδομένων αποτελεί μια ιδιαίτερη πρόκληση. Έχουν αναπτυχθεί αποθήκες κλινικών δεδομένων (Clinical Data Warehouses - CDW) οι οποίες βασίζονται σε δεδομένα ηλεκτρονικών φακέλων ασθενών, με στόχο την ανακάλυψη ιατρικής γνώσης και την βελτίωση της λήψης κλινικών αποφάσεων. Τα αρχικά αποτελέσματα αυτής της προσπάθειας δείχνουν ότι ανοίγονται νέες προοπτικές για το συγκεκριμένο σύστημα ιατρικής αλλά και για την ανακάλυψη περισσότερης ιατρικής γνώσης [4].

### 1.3.2 Εφαρμογές στη Βιοπληροφορική

Η αντιμετώπιση τεράστιων ποσοτήτων δεδομένων τα οποία παράγονται από τις διάφορες μεθόδους της Βιοπληροφορικής απαιτούν προχωρημένες τεχνικές διαχείρισης δεδομένων για αποδοτική αποθήκευση και ανάκτηση πληροφορίας, καθώς επίσης και για εξόρυξη και μοντελοποίηση γνώσης από τα δεδομένα αυτά.

Η **Υπολογιστική Νοημοσύνη (Computational Intelligence - CI)** και η Μηχανική Μάθηση (Machine learning) εφαρμόζονται ευρέως για την εξαγωγή χρήσιμης βιολογικής γνώσης από τα βιομοριακά δεδομένα, για την δημιουργία μοντέλων που αναπαριστούν τη γνώση αυτή και που προβλέπουν τα χαρακτηριστικά των βιολογικών συστημάτων. Είναι άξιο αναφοράς ότι Νευρωνικά Δίκτυα ήδη είχαν χρησιμοποιηθεί από την δεκαετία του '80 για να διακρίνουν θέσεις έναρξης μετάφρασης σε προκαρυωτικούς οργανισμούς. Αρκετές μέθοδοι Μηχανικής Μάθησης έχουν εφαρμοστεί σε ένα ευρύ φάσμα προβλημάτων στη Γονιδιωματική (Genomics), στη Πρωτεομική (Proteomics), στην ανάλυση έκφρασης γονιδίων (gene expression analysis), στη βιολογική εξέλιξη (biological evolution), στη συστημική βιολογία (systems biology) και σε άλλα σχετικά πεδία της Βιοπληροφορικής [5].

### 1.3.2.1 Γονιδιωματική

Η Γονιδιωματική (Genomics) μελετάει βιολογικές ακολουθίες σε επίπεδο γονιδίων. Μέθοδοι Υπολογιστικής Νοημοσύνης και Μηχανικής Μάθησης έχουν εφαρμοστεί για την ανακατασκευή και ρύθμιση της ακολουθίας των γονιδίων σε ολόκληρα γονιδιώματα, για την εξαγωγή και αναγνώριση της δομής των γονιδίων, για την αναγνώριση και ανάλυση ρυθμιστικών στοιχείων DNA που δεν εμπεριέχουν κάποια κωδικοποίηση (non coding DNA elements), για την αναγνώριση γονιδίων τα οποία προκαλούν γενετικές ασθένειες, για την πρόβλεψη των φαινοτύπων μη συνώνυμων απλών νουκλεοτιδικών πολυμορφισμών (non synonymous single nucleotide polymorphisms), για την αναγνώριση δομικών στοιχείων RNA, για την μοντελοποίηση μπλοκ απλοτύπων (haplotype blocks), για την πρόβλεψη του σημείου συναρμογής (splice site prediction), για τον εντοπισμό γονιδίων και αλληλεπιδράσεων γονιδίων σε μελέτες ανθρωπίνων ασθενειών, για την πολλαπλή ευθυγράμμιση βιοακολουθιών στην φυλογονιδιωματική (phylogenomics) και σε πολλά άλλα σχετικά προβλήματα γονιδιωματικής [5].

### 1.3.2.2 Πρωτεομική

Στην Πρωτεομική (Proteomics), ένα από τα βασικά προβλήματα που αντιμετωπίζονται είναι η πρόβλεψη της δευτεροταγούς και της τριτοταγούς δομής των πρωτεϊνών, η οποία αποτελεί μια από τις βασικές προκλήσεις των μεθόδων της Μηχανικής Μάθησης και της Υπολογιστικής Νοημοσύνης στη Βιοπληροφορική. Ένα άλλο σπουδαίο πρόβλημα στην Πρωτεομική αλλά και στην Γονιδιωματική είναι η πρόβλεψη της λειτουργίας των πρωτεϊνών και των γονιδίων και η εύρεση των ιδιοτήτων τους. Πολλά άλλα προβλήματα στο πεδίο αυτό έχουν περιγραφεί ως προβλήματα Μηχανικής Μάθησης, όπως είναι η αναγνώριση αναδίπλωσης (fold recognition), η πρόβλεψη χαρτών επαφής (contact maps) και ο υποκυτταρικός εντοπισμός πρωτεϊνών (protein sub-cellular localization) [5].

### 1.3.2.3 Ανάλυση Δεδομένων Έκφρασης Γονιδίων

Η ανάλυση δεδομένων έκφρασης γονιδίων (gene expression data analysis) αποτελεί άλλο ένα πεδίο εφαρμογής της Μηχανικής Μάθησης και της Υπολογιστικής Νοημοσύνης και παρέχει σημαντικά αποτελέσματα για την μοριακή βιολογία και την ιατρική. Τρία είδη προβλημάτων έχουν μελετηθεί από τους ερευνητές της Βιοπληροφορικής, για να απαντήσουν σε τρεις βασικές ερωτήσεις [5]:

- **Πρόβλεψη κλάσης.** Ο προσδιορισμός της λειτουργικής κατάστασης ενός κυττάρου ή ιστού με βάση τον βαθμό έκφρασης των γονιδίων του.

- **Επιλογή γονιδίων.** Η αναγνώριση γονιδίων τα οποία σχετίζονται με τη λειτουργική κατάσταση που διερευνάται.
- **Ανακάλυψη κλάσης.** Ανάλυση των ομάδων των γονιδίων που συσχετίζονται ως προς την λειτουργία τους και την έκφρασή τους.

#### 1.3.2.4 Συστημική Βιολογία

Η Συστημική βιολογία (Systems biology) είναι ένας ανερχόμενος κλάδος της Βιοπληροφορικής στον οποίο η Μηχανική Μάθηση και η Υπολογιστική Νοημοσύνη διαδραματίζουν κεντρικό ρόλο. Η μοντελοποίηση των βιολογικών διαδικασιών που λαμβάνουν χώρα μέσα στα κύτταρα και γενικότερα στα βιολογικά συστήματα απαιτεί την ανάπτυξη μαθηματικών μοντέλων και τεχνικών εκμάθησης για την εκπαίδευση των μοντέλων και την αφομοίωση των βιολογικών δεδομένων. Πιο συγκεκριμένα, χρησιμοποιούνται πιθανοτικά γραφικά μοντέλα για την μοντελοποίηση των γενετικών δικτύων, των μεταβολικών δικτύων, των δικτύων μετάδοσης και μετασχηματισμού βιοσημάτων και γενικότερα των βιολογικών δικτύων [5].

Η προσέγγιση με βιολογικά δίκτυα έχει παρουσιάσει ιδιαίτερες προοπτικές στη συστημική βιολογία. Οι Zhang et al.[4] κατασκεύασαν γενετικά ρυθμιστικά δίκτυα από χρονικές ακολουθίες δεδομένων έκφρασης γονιδίων και στη συνέχεια χρησιμοποίησαν μια μέθοδο πολλαπλής παλινδρόμησης για τη μοντελοποίηση της αλληλεπίδρασης των γονιδίων. Στη συνέχεια έγιναν πειράματα που επιβεβαιώνουν την αποτελεσματικότητα της μεθόδου. Οι Lin et al.[4] δημιούργησαν ένα μοντέλο δικτύου για την αλληλεπίδραση των φαρμάκων, βασισμένο στα δεδομένα της FDA (US Food and Drug Administration) και σχεδίασαν ένα σύστημα για την ανάλυση των περιπτώσεων δυσμενών αντιδράσεων σε φάρμακα (adverse drug reaction - ADR) που έχουν αναφερθεί στην FDA.

#### 1.3.2.5 Επιλογή χαρακτηριστικών για αναγνώριση βιοδεικτών

Ένα από τα μεγαλύτερα προβλήματα για την ανάπτυξη υπολογιστικών μεθόδων για την ανάλυση των βιοϊατρικών δεδομένων είναι ο πολύ μεγάλος αριθμός μεταβλητών σε σύγκριση με τον μικρό αριθμό των διαθέσιμων δειγμάτων. Το πρόβλημα αυτό αντιμετωπίζεται με την επιλογή χαρακτηριστικών, κατά την οποία οι μεταβλητές – χαρακτηριστικά περιορίζονται σε ένα μικρότερο υποσύνολο, επιλέγοντας τις περισσότερο σημαντικές και σχετικές με την εκάστοτε εφαρμογή. Οι Wang και Chen[4] ανέπτυξαν την μέθοδο επιλογής χαρακτηριστικών GMM-IG (Gaussian Mixture Modeling coupled Information Gain) και την εφάρμοσαν στην αναγνώριση γονιδίων ως υποψήφιους βιοδείκτες. Τα γονίδια που επιλέγονται ως βιοδείκτες μπορούν να χρησιμοποιηθούν ως

ενδείξεις για την ύπαρξη μιας συγκεκριμένης κατάστασης. Μια άλλη μέθοδος επιλογής χαρακτηριστικών που ονομάζεται FS-MLP (Kim & Lim, 2010)[4] επιλέγει χαρακτηριστικά από μη γραμμικά πεδία χαρακτηριστικών υψηλών διαστάσεων. Οι Damelin et al. (2010)[4] δημιούργησαν μια μέθοδο επιλογής χαρακτηριστικών δυο βημάτων από δεδομένα έκφρασης γονιδίων. Η τεχνική αυτή εξάγει ένα υποσύνολο γονιδίων με βάση τα στατιστικά χαρακτηριστικά των αντίστοιχων επιπέδων έκφρασης και στη συνέχεια χρησιμοποιείται η μέθοδος χαρτών διάχυσης (diffusion maps method) για την εξαγωγή δεδομένων ως προς τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά και για περαιτέρω μείωση των μεταβλητών του προβλήματος.

Η αξιοπιστία και η αποτελεσματικότητα των βιοδεικτών είναι ένα από τα βασικά θέματα στο πεδίο της αναγνώρισης βιοδεικτών (biomarker identification). Οι Sun et al.[4] ανέλυσαν ένα αριθμό μελετών που αφορούσαν τον προσδιορισμό σημαντικών γονιδίων που σχετίζονται με την εμφάνιση σχιζοφρένειας και έδειξαν ότι κάποιοι από τους βιοδείκτες αυτούς είναι αξιόπιστοι. Επίσης, η ομάδα αυτή ανέπτυξε μια μέθοδο για βαθμονόμηση των γονιδίων, ώστε να εξεταστούν μόνο τα γονίδια που εμφανίζουν τη μεγαλύτερη αποτελεσματικότητα ως υποψήφιοι βιοδείκτες.

#### **1.3.2.6 Οπτικοποίηση για ανακάλυψη γνώσης στη Βιοϊατρική**

Η Οπτικοποίηση (Visualization) των δεδομένων είναι μια πολύ αποδοτική προσέγγιση, διότι συμβάλει στην καλύτερη κατανόηση του προβλήματος από τους επιστήμονες κατά τη διαδικασία ανακάλυψης γνώσης από τα βιοϊατρικά δεδομένα. Οι Tsay et al.[4] ανέπτυξαν τον αλγόριθμο HOLY για την οπτικοποίηση της καθολικής δομής μιας πολύπλοκης βιολογικής διαδικασίας. Ο αλγόριθμος αυτός διαχωρίζει την πολύπλοκη διαδικασία σε απλούστερες υπο-διαδικασίες και στη συνέχεια τις ομαδοποιεί με ιεραρχική οργάνωση. Πειραματικά δεδομένα δείχνουν ότι ο αλγόριθμος HOLY μπορεί να οπτικοποιήσει ιδιαίτερα πολύπλοκες βιολογικές διεργασίες και δομές.

#### **1.3.2.7 Διαχείριση Δεδομένων**

Από την έλευση της σύγχρονης μοριακής βιολογίας, οι επιστήμονες έχουν χτίσει διάφορες βάσεις δεδομένων για να αναλύσουν και να καταγράψουν κάθε δυνατή πτυχή των δεδομένων. Οι περισσότερες από αυτές τις βάσεις δεδομένων έχουν διατηρηθεί σε κάποιο βαθμό. Με τις πρόσφατες εξελίξεις στη μοριακή βιολογία, έχουν υλοποιηθεί αυτοματοποιημένες μέθοδοι οι οποίες παράγουν τεράστιους όγκους πειραματικών ακατέργαστων δεδομένων. Το πιο αντιπροσωπευτικό παράδειγμα του φαινομένου αυτού είναι η ανάλυση και ο σχολιασμός ακολουθιών DNA (DNA sequencing). Η Μηχανική

Μάθηση και γενικότερα η Υπολογιστική Νοημοσύνη συμβάλει στην διαχείριση και εκμετάλλευση αυτού του όγκου της πληροφορίας, αν και η ανθρώπινη ευφυΐα διαδραματίζει ακόμη ένα πολύ σημαντικό ρόλο στην ανάλυση των δεδομένων [6].

Η μοριακή βιολογία διαθέτει μια πληθώρα κατανεμημένων βάσεων δεδομένων. Η εξόρυξη δεδομένων από τις βάσεις αυτές αντιμετωπίζει πολλές προκλήσεις επειδή οι γενικές μέθοδοι εξόρυξης δεδομένων θα πρέπει να συνδυαστούν με τα βιολογικά μοντέλα. Οι πολύ μεγάλες βάσεις δεδομένων ενδεχομένως να απαιτούν αρκετό χρόνο επεξεργασίας και ισχυρά υπολογιστικά συστήματα. Οι βάσεις με δεδομένα Βιοπληροφορικής αποθηκεύουν ακολουθίες κειμένου, δομές πρωτεϊνών και γενικότερα δεδομένα που ενδεχομένως να μην είναι αριθμητικά. Επομένως, υπάρχει η ανάγκη για εξελιγμένες τεχνικές εξόρυξης δεδομένων και Μηχανικής Μάθησης ώστε να σχεδιαστούν αποδοτικά και αποτελεσματικά ευφυή συστήματα Βιοπληροφορικής.

Εξαιτίας του μεγάλου όγκου των ακατέργαστων βιολογικών δεδομένων που είναι διαθέσιμα μέσω Internet, κάποιοι ερευνητές πρότειναν τη χρήση ενός **συστήματος πολυ-πράκτορα (multi-agent system- MAS)** ώστε να αντιμετωπιστεί αυτή η πολυπλοκότητα. Οι Decker et al.(2001)[6] σχεδίασαν και υλοποίησαν το σύστημα MAS ως ένα εργαλείο συλλογής πληροφορίας το οποίο χρησιμοποιείται για να αναλύει δεδομένα και να παρέχει χρήσιμη γνώση στους επιστήμονες. Οι Bryson et al.(2000)[6] ανέπτυξαν το σύστημα GeneWeaver, ένα σύστημα MAS που εφαρμόζεται σε πραγματικά και απαιτητικά προβλήματα ανάλυσης γονιδιώματος και πρόβλεψης της δομής διάφορων πρωτεϊνών. Επίσης, τα συστήματα MAS έχουν χρησιμοποιηθεί για προσομοιώσεις βιολογικών δικτύων.



## Κεφάλαιο 2

# Προεπεξεργασία Δεδομένων και το Πρόβλημα της Ταξινόμησης

### 2.1 Δεδομένα και Χαρακτηριστικά

Τα δεδομένα αποτελούν βασικό συστατικό για την σχεδίαση και υλοποίηση μεθόδων Μάθησης υπό επίβλεψη, καθώς είναι απαραίτητα για την διαδικασία εκπαίδευσης των συστημάτων Μάθησης. Συλλέγονται με διάφορες τεχνικές από το περιβάλλον του προβλήματος, είτε παρέχονται ως γνώση από ειδικούς στο εκάστοτε επιστημονικό πεδίο. **Δείγμα** ονομάζεται ένα συγκεκριμένο στιγμιότυπο του προβλήματος. Τα δείγματα συνήθως θα πρέπει να ταξινομηθούν, να συσχετισθούν ή να ομαδοποιηθούν. Επίσης μπορεί να λειτουργούν ως δεδομένα εκπαίδευσης για τα συστήματα Μάθησης. Οι κατηγορίες στις οποίες ανήκουν τα δεδομένα ονομάζονται **κλάσεις**.

Κάθε ξεχωριστό, ανεξάρτητο δείγμα, το οποίο χρησιμοποιείται ως είσοδος σε συστήματα Μηχανικής Μάθησης χαρακτηρίζεται από τις τιμές του σε ένα συγκεκριμένο **σύνολο χαρακτηριστικών (features, attributes)**. Τα χαρακτηριστικά αυτά μπορούν να θεωρηθούν ως μεταβλητές, οι οποίες παίρνουν συγκεκριμένες τιμές.

Πίνακας 2.1: Παράδειγμα Χαρακτηριστικών Δειγμάτων

Δείγμα	Χαρακτηριστικά Δειγμάτων				
	Κατάσταση	Θερμοκρασία	Υγρασία (%)	Άνεμος	Χρόνος Παιχνιδιού (min)
1	Ηλιοφάνεια	Ζέστη	85	Όχι	5
2	Ηλιοφάνεια	Ζέστη	90	Ναι	0
3	Νεφελώδης	Ζέστη	86	Όχι	55
4	Βροχερός	Κανονική	96	Όχι	40
5	Βροχερός	Κανονική	80	Όχι	65
6	Βροχερός	Κρύο	70	Ναι	45
7	Νεφελώδης	Κρύο	65	Ναι	60
8	Ηλιοφάνεια	Κανονική	95	Όχι	0

Συνήθως τα δεδομένα σε ένα πρόβλημα Μηχανικής Μάθησης παρουσιάζονται χρησιμοποιώντας πίνακες, με τις γραμμές του πίνακα να αποτελούν τα διαθέσιμα δείγματα και τις στήλες του πίνακα τις τιμές των χαρακτηριστικών που ενδιαφέρουν για το εκάστοτε πρόβλημα, όπως φαίνεται στον Πίνακα 2.1 [7].

Η τιμή ενός χαρακτηριστικού για ένα συγκεκριμένο δείγμα αποτελεί μια μέτρηση της πληροφορίας την οποία αναπαριστά το χαρακτηριστικό αυτό. Οι τιμές των χαρακτηριστικών μπορούν να είναι είτε **αριθμητικές (numeric)** είτε **κατηγορικές (categorical)**, οπότε προκύπτουν οι εξής κατηγορίες χαρακτηριστικών [7]:

- **Αριθμητικά χαρακτηριστικά (arithmetic attributes).**

Τα χαρακτηριστικά αυτά, τα οποία ονομάζονται και συνεχή, παίρνουν αριθμητικές τιμές, είτε πραγματικούς αριθμούς είτε ακεραίους. Ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα της κατηγορίας αυτής είναι η Θερμοκρασία σε βαθμούς Κελσίου, σε αντίθεση με την μέτρηση ως «Ζέστη», «Κανονική», «Κρύο» στον Πίνακα 2.1. Θα πρέπει να σημειωθεί ότι γίνεται κατάχρηση του όρου «συνεχής», διότι μια συνεχής μεταβλητή δεν μπορεί να λαμβάνει μόνο ακέραιες τιμές.

- **Κατηγορικά χαρακτηριστικά (categorical attributes).**

Τα χαρακτηριστικά αυτά παίρνουν τιμές από ένα προκαθορισμένο, πεπερασμένο σύνολο. Τα χαρακτηριστικά αυτά διαχωρίζονται περαιτέρω, σύμφωνα με τον τρόπο που μετρούν την πληροφορία την οποία αναπαριστούν, σε: ονομαστικά (nominal attributes), τακτικά (ordinal attributes), με διαστήματα (interval attributes) και με αναλογία (ratio attributes).

- **Τα ονομαστικά χαρακτηριστικά (nominal attributes)** παίρνουν ως τιμές διακριτά σύμβολα και λειτουργούν ως απλές ετικέτες ή ονόματα. Για παράδειγμα, στον Πίνακα 2.1 το χαρακτηριστικό «Κατάσταση» παίρνει τιμές, στις οποίες δεν μπορεί να θεωρηθεί κάποια σχέση ή διάταξη μεταξύ τους, ούτε να οριστεί κάποιο μέτρο απόστασης μεταξύ των τιμών.

- **Τα τακτικά χαρακτηριστικά (ordinal attributes)** διαθέτουν συσχετίσεις μικρότερου/μεγαλύτερου. Παρόλο όμως που υπάρχει σχέση διάταξης, δεν μπορεί να οριστεί η έννοια της απόστασης για αυτή τη κατηγορία τιμών. Στον Πίνακα 2.1 το χαρακτηριστικό «Θερμοκρασία» παίρνει τις τιμές «Ζέστη», «Κανονική», «Κρύο». Από τις τιμές αυτές μπορεί να προκύψει διάταξη, με δύο πιθανούς τρόπους: Ζέστη > Κανονική > Κρύο ή Ζέστη < Κανονική < Κρύο. Η επιλογή μιας από τις δυο διαθέσιμες διατάξεις είναι θέμα σύμβασης – δεν έχει σημασία ποια θα χρησιμοποιηθεί, αρκεί η επιλογή αυτή να διατηρηθεί με συνέπεια. Θα πρέπει να αναφερθεί ότι η διάκριση μεταξύ των ονομαστικών και των τακτικών ποσοτήτων δεν είναι πάντοτε προφανής. Για παράδειγμα, το χαρακτηριστικό «Κατάσταση» του Πίνακα 2.1, θα μπορούσε να προταθεί ως τακτικό, θεωρώντας μια διάταξη ως εξής: Ηλιοφάνεια > Νεφελώδης > Βροχερός.

- **Τα χαρακτηριστικά με διαστήματα (interval attributes)** παίρνουν τιμές που είναι διατεταγμένες, με συγκεκριμένες και ίσες μονάδες μέτρησης. Ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα της κατηγορίας αυτής είναι οι ημερομηνίες. Για αυτά τα χαρακτηριστικά μπορεί να οριστεί η διαφορά δυο τιμών, καθώς και να συγκριθούν δυο διαφορές μεταξύ τους. Υπάρχει νόημα στο να θεωρηθεί η διαφορά των ετών 1939 και 1945 ( 6 χρόνια) αλλά δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί το άθροισμα ή ο πολλαπλασιασμός των τιμών αυτών, επειδή το σημείο αναφοράς ( το έτος 0) έχει οριστεί εντελώς αυθαίρετα.
- **Τα χαρακτηριστικά με αναλογία (ratio attributes)** αναφέρονται σε ποσότητες, των οποίων η μέθοδος μέτρησης ορίζει ρητά το σημείο αναφοράς (μηδενικό σημείο). Για παράδειγμα, κατά τη μέτρηση της απόστασης ενός αντικειμένου από άλλα αντικείμενα, η απόσταση του αντικειμένου από τον εαυτό του ορίζει το μηδενικό σημείο. Ο χειρισμός των τιμών αυτών των χαρακτηριστικών είναι όμοιος με τους πραγματικούς αριθμούς, δηλαδή επιτρέπεται οποιαδήποτε μαθηματική πράξη. Το μηδενικό σημείο ενδεχομένως να υπαγορεύεται από το πρόβλημα, χωρίς όμως αυτό να είναι απαραίτητο.

Όσον αφορά τα κατηγορικά χαρακτηριστικά, συνήθως στην πράξη χρησιμοποιούνται τα ονομαστικά και τα τακτικά χαρακτηριστικά. Τα ονομαστικά χαρακτηριστικά επίσης μπορεί να αναφέρονται ως κατηγορικά (categorical), διακριτά (discrete) ή αριθμήσιμα (enumerated). Μια ειδική κατηγορία των ονομαστικών χαρακτηριστικών είναι η **διχοτομία (dichotomy)**, στην οποία το χαρακτηριστικό παίρνει δυο μόνο τιμές, συνήθως ναι/όχι ή αληθές/ψευδές.

Τα συστήματα Μηχανικής Μάθησης μπορούν να χρησιμοποιήσουν διάφορες επιπλέον πληροφορίες για τα χαρακτηριστικά. Για παράδειγμα, περιορισμοί στις διαστάσεις χρησιμοποιούνται για να περιορίσουν τις αναζητήσεις και τις συγκρίσεις, ώστε τα αποτελέσματα να έχουν τη σωστή διάσταση. Επίσης μπορεί να γίνει χρήση πληροφορίας σχετικά με την διάταξη. Αν η διάταξη των δεδομένων είναι κυκλική μπορεί να επηρεάσει τη διαδικασία ελέγχου. Αν για παράδειγμα πρέπει να γίνουν έλεγχοι σε ένα χαρακτηριστικό που αναφέρεται σε μια ημέρα, τα τεστ ίσως περιλαμβάνουν την επόμενη ημέρα, την προηγούμενη, την επόμενη ημέρα τις εβδομάδας ή την ίδια ημέρα την επόμενη εβδομάδα. Σε πρακτικές εφαρμογές συχνά παρουσιάζονται μερικές διατάξεις και σχέσης γενίκευσης/ειδίκευσης. Οι πληροφορίες αυτού του είδους ονομάζονται **μεταδεδομένα (metadata)**, διότι είναι δεδομένα για τα δεδομένα του προβλήματος. Τα μεταδεδομένα μπορούν να αξιοποιηθούν στη φάση της **προεπεξεργασίας** για τη κατάλληλη προετοιμασία των δεδομένων, πριν την εφαρμογή των αλγορίθμων εκπαίδευσης. Η διαδικασία της προεπεξεργασίας είναι ιδιαίτερα σημαντική, διότι εάν δεν διασφαλιστεί η ποιότητα των δεδομένων εκπαίδευσης, η απόδοση των συστημάτων Μάθησης δεν θα είναι καθόλου ικανοποιητική [7].

## 2.2 Προεπεξεργασία Δεδομένων

Η προεπεξεργασία των δεδομένων αποσκοπεί στην αντιμετώπιση διάφορων προβλημάτων που προκύπτουν κατά τη διαδικασία συλλογής τους, όπως οι ακραίες τιμές και τιμές που λείπουν για κάποια δείγματα. Επίσης, τα δεδομένα συνήθως μετασχηματίζονται σε κατάλληλη μορφή, ώστε να μπορέσουν να αποτελέσουν κατάλληλη είσοδο για τους αλγορίθμους εκμάθησης. Υπάρχει πλήθος τεχνικών οι οποίες μπορούν να μετασχηματίσουν τα δεδομένα σε κατάλληλη μορφή, όπως μαθηματικοί ή λογικοί μετασχηματισμοί ή μετασχηματισμοί βασισμένοι στην γνώση του εκάστοτε πεδίου.

### 2.2.1 Απομάκρυνση Ακραίων Τιμών

Η ακραία τιμή (outlier) ορίζεται ως ένα σημείο το οποίο βρίσκεται πολύ μακριά από τη μέση τιμή της αντίστοιχης τυχαίας μεταβλητής που αναπαριστά κάποιο χαρακτηριστικό. Η απόσταση μετριέται σε σχέση με κάποιο κατώφλι, το οποίο συνήθως είναι ένα πολλαπλάσιο της τυπικής απόκλισης. Για μια τυχαία μεταβλητή που ακολουθεί κανονική κατανομή, μια απόσταση ίση με δυο φορές την τυπική απόκλιση καλύπτει το 95% των σημείων και μια απόσταση ίση με τρεις φορές την τυπική απόκλιση καλύπτει το 99% των σημείων.

Δείγματα με τιμές χαρακτηριστικών πολύ διαφορετικές από την μέση τιμή παράγουν σημαντικά σφάλματα κατά τη διαδικασία εκπαίδευσης και έχουν καταστροφικά αποτελέσματα. Η επίδραση αυτή γίνεται ακόμα χειρότερη εάν οι ακραίες τιμές είναι αποτέλεσμα θορύβου κατά τη διαδικασία των μετρήσεων των χαρακτηριστικών. Αν ο αριθμός των ακραίων τιμών είναι μικρός τότε συνήθως τα δείγματα αυτά απλώς απορρίπτονται. Σε διαφορετική περίπτωση, οι ακραίες τιμές ενδέχεται να προκύπτουν εξαιτίας κάποιας κατανομής επομένως ο σχεδιαστής του συστήματος θα πρέπει να χρησιμοποιήσει συναρτήσεις κόστους οι οποίες δεν είναι ευαίσθητες στις τιμές αυτές. Για παράδειγμα, το κριτήριο των ελαχίστων τετραγώνων είναι πολύ ευαίσθητο σε ακραίες τιμές επειδή μεγάλα σφάλματα κυριαρχούν στην συνάρτηση κόστους αφού οι όροι της συνάρτησης υψώνονται στο τετράγωνο [8].

### 2.2.2 Κανονικοποίηση Δεδομένων

Σε πολλές πρακτικές εφαρμογές θα πρέπει να αντιμετωπιστούν χαρακτηριστικά τα οποία έχουν διαφορετικό εύρος τιμών. Τα χαρακτηριστικά τα οποία παίρνουν μεγαλύτερες τιμές επηρεάζουν περισσότερο την συνάρτηση κόστους σε σχέση με τα χαρακτηριστικά με μικρότερες τιμές, χωρίς όμως αυτό να σημαίνει ότι είναι όντως πιο σημαντικά για το

πρόβλημα. Αυτή η δυσκολία μπορεί να ξεπεραστεί με την κανονικοποίηση των χαρακτηριστικών, έτσι ώστε οι τιμές τους να βρίσκονται στο ίδιο εύρος.

Μια άμεση τεχνική για να επιτευχθεί αυτό είναι η **κανονικοποίηση με χρήση εκτιμήσεων για τη μέση τιμή και την διακύμανση**. Για  $N$  διαθέσιμα δεδομένα, η κανονικοποίηση του  $k$  χαρακτηριστικού γίνεται ως εξής [8]:

$$\bar{x}_k = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_{ik} , \quad k = 1, 2, \dots, l \quad (2.1)$$

$$\sigma_k^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (x_{ik} - \bar{x}_k)^2 \quad (2.2)$$

$$\hat{x}_{ik} = \frac{x_{ik} - \bar{x}_k}{\sigma_k} \quad (2.3)$$

Μετά από αυτόν το μετασχηματισμό, όλα τα κανονικοποιημένα χαρακτηριστικά θα έχουν μηδενική μέση τιμή και μοναδιαία διακύμανση. Η παραπάνω μέθοδος είναι γραμμική. Άλλες γραμμικές τεχνικές περιορίζουν τις τιμές των χαρακτηριστικών στο εύρος  $[0,1]$  ή στο  $[-1,1]$  με κατάλληλη κλιμάκωση (scaling). Εκτός από τις γραμμικές μεθόδους, μπορούν να εφαρμοστούν και μη γραμμικές μέθοδοι σε περιπτώσεις στις οποίες τα δεδομένα δεν είναι εξίσου κατανομημένα γύρω από τη μέση τιμή. Μετασχηματισμοί βασισμένοι σε μη γραμμικές συναρτήσεις (πχ σιγμοειδείς ή λογαριθμικές) χρησιμοποιούνται για να αντιστοιχήσουν τα δεδομένα με συγκεκριμένα διαστήματα. Ένα ευρέως διαδεδομένο παράδειγμα μη γραμμικής μεθόδου είναι η **κλιμάκωση Softmax (Softmax scaling)**, η οποία αποτελείται από τα εξής δυο βήματα [8]:

$$y = \frac{x_{ik} - \bar{x}_k}{r\sigma_k} , \quad \hat{x}_{ik} = \frac{1}{1 + \exp(-y)} \quad (2.4)$$

Αυτή η συνάρτηση στην ουσία περιορίζει τα δεδομένα στο διάστημα  $[0,1]$ . Για μικρές τιμές του  $y$  είναι κατά προσέγγιση γραμμική συνάρτηση ως προς  $x_{ik}$ . Το εύρος των τιμών του  $x_{ik}$  που αντιστοιχούν στη γραμμική περιοχή εξαρτάται από την τυπική απόκλιση και την παράμετρο  $r$ , η οποία καθορίζεται εκ των προτέρων. Τιμές που διαφέρουν πολύ από τη μέση τιμή μετασχηματίζονται εκθετικά.

### 2.2.3 Ελλιπή Δεδομένα

Σε πρακτικές εφαρμογές, για κάποια δείγματα ενδεχομένως να λείπουν κάποιες τιμές από συγκεκριμένα χαρακτηριστικά. Αυτό πολλές φορές οφείλεται στη διαδικασία συλλογής των δεδομένων, όπως για παράδειγμα στις κοινωνικές επιστήμες κατά τη

συλλογή δεδομένων από απαντήσεις σε ερωτηματολόγια ή σε δεδομένα που προκύπτουν από καταναμημένα δίκτυα αισθητήρων.

Οι πιο παραδοσιακές **τεχνικές αντιμετώπισης ελλιπών δεδομένων** περιλαμβάνουν σχήματα τα οποία συμπληρώνουν τις τιμές αυτές [8]:

- **Με μηδενικά.**
- **Με την αδέσμευτη μέση τιμή** (unconditional mean) η οποία έχει υπολογιστεί από τις υπόλοιπες τιμές που υπάρχουν για το χαρακτηριστικό.
- **Με τη δεσμευμένη μέση τιμή** (conditional mean), αν υπάρχει η εκτίμηση της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας για τις ελλιπείς τιμές, με δεδομένες τις υπόλοιπες τιμές που έχουν παρατηρηθεί.

Μια άλλη αντιμετώπιση είναι η αφαίρεση των δειγμάτων με ελλιπείς τιμές. Η λύση αυτή θα μπορούσε να εφαρμοστεί σε μεγάλα σύνολα δεδομένων αλλά συνήθως αποτελεί πολυτέλεια η μη αξιοποίηση όλης της διαθέσιμης πληροφορίας.

Από τα μέσα της δεκαετίας του 1970 έχει γίνει ιδιαίτερη ερευνητική προσπάθεια ώστε να αντιμετωπιστεί αποδοτικά το πρόβλημα των ελλιπών δεδομένων, οπότε και έχουν προκύψει διάφορες προχωρημένες τεχνικές. Μια δημοφιλής τεχνική που αποφεύγει την χρήση των παραπάνω απλοϊκών λύσεων είναι η απόδοση των ελλιπών τιμών από μια δεσμευμένη κατανομή πιθανότητας. Η ιδέα είναι να γίνει η συμπλήρωση των τιμών χωρίς να αλλάξει η στατιστική συμπεριφορά τους. Με αυτό το σκεπτικό, οι τιμές δεν αντικαθίστανται από μέσες τιμές ή μηδενικά αλλά από τυχαία δείγματα μιας κατανομής [8].

## 2.3 Επιλογή και Παραγωγή Χαρακτηριστικών

Ο **διανυσματικός χώρος των χαρακτηριστικών (feature space)** είναι ο χώρος  $n$  διαστάσεων που σχηματίζεται από τα  $n$  χαρακτηριστικά που χρησιμοποιούνται για την περιγραφή ενός προβλήματος. Το **διάνυσμα χαρακτηριστικών (feature vector)** είναι το διάνυσμα που σχηματίζεται από τα  $n$  χαρακτηριστικά, και περιγράφει ένα συγκεκριμένο δείγμα, δηλαδή εμπεριέχει τις τιμές του δείγματος για όλα τα χαρακτηριστικά.

Στις περισσότερες περιπτώσεις ο σχεδιαστής ενός συστήματος Μηχανικής Μάθησης έχει στην διάθεσή του πάρα πολλά χαρακτηριστικά. Αν και εκ πρώτης όψευς αυτό μπορεί να φαίνεται επιθυμητό, δημιουργεί προβλήματα διότι εισάγει θόρυβο και μειώνει την απόδοση του συστήματος. Κάποια από τα χαρακτηριστικά ενδεχομένως να συσχετίζονται μεταξύ τους, ενώ άλλα χαρακτηριστικά μπορεί να παρέχουν πληροφορία άσχετη προς το συγκεκριμένο πρόβλημα. Επίσης, εάν ο διανυσματικός χώρος των χαρακτηριστικών έχει πολλές διαστάσεις (δηλαδή πολλά χαρακτηριστικά), ο όγκος του χώρου αυτού αυξάνει

ιδιαίτερα γρήγορα, οπότε τα δεδομένα για το πρόβλημα θα είναι αραιά κατανεμημένα (sparse), δημιουργώντας προβλήματα στις μεθόδους που προσπαθούν να επιτύχουν στατιστική σημαντικότητα. Το πλήθος των δεδομένων που χρειάζονται ώστε αυτά να θεωρούνται πυκνά αυξάνει εκθετικά σε σχέση με την διάσταση του χώρου χαρακτηριστικών. Το φαινόμενο αυτό είναι γνωστό ως «**η κατάρα της διαστασιμότητας**» (**curse of dimensionality**). Θα πρέπει ακόμη να αναφερθεί ότι ένας μεγάλος αριθμός χαρακτηριστικών αυξάνει τον αριθμό των παραμέτρων του συστήματος Μάθησης, επομένως και την πολυπλοκότητά του, χωρίς αυτό να σημαίνει ότι θα έχει καλύτερη απόδοση [8].

Εξαιτίας των παρατηρήσεων αυτών, ο αριθμός των χαρακτηριστικών θα πρέπει να διατηρηθεί όσο το δυνατό μικρότερος ώστε να επιτευχθεί υψηλή απόδοση του συστήματος Μάθησης.

### 2.3.1 Επιλογή Χαρακτηριστικών

Το πρόβλημα που θα πρέπει να επιλυθεί περιγράφεται ως εξής: δοθέντος ενός αριθμού από χαρακτηριστικά, πως μπορεί κανείς να επιλέξει τα πιο σημαντικά από αυτά ώστε να μειώσει τον αριθμό τους και παράλληλα να διατηρήσει όσο το δυνατό περισσότερη χρήσιμη πληροφορία. Η διαδικασία αυτή ονομάζεται **επιλογή χαρακτηριστικών (feature selection)** ή αλλιώς **ελάττωση χαρακτηριστικών (feature reduction)**. Το βήμα αυτό είναι κρίσιμο διότι αν επιλεχθούν χαρακτηριστικά με μικρή διαχωριστική ικανότητα, το σύστημα Μάθησης που θα προκύψει δεν θα έχει ικανοποιητική απόδοση. Αν όμως επιλεχθούν χαρακτηριστικά που παρέχουν χρήσιμη πληροφορία, το σύστημα που θα σχεδιαστεί θα είναι απλό και αποτελεσματικό.

Μια από τις στρατηγικές που μπορεί να ακολουθηθεί είναι να εξεταστούν τα χαρακτηριστικά ένα προς ένα μέσω ενός μέτρου διαχωρισιμότητας των κλάσεων και να απορριφθούν εκείνα που διαθέτουν μικρή διαχωριστική ικανότητα. Ο στόχος είναι η επιλογή των χαρακτηριστικών αυτών που οδηγούν σε μεγάλες αποστάσεις μεταξύ των ομάδων των δειγμάτων και μικρή διακύμανση μεταξύ της ίδιας ομάδας. Αυτό σημαίνει ότι τα χαρακτηριστικά θα πρέπει να παίρνουν μακρινές τιμές για διαφορετικές κλάσεις και κοντινές τιμές για την ίδια κλάση. Η στρατηγική αυτή είναι γνωστή ως «**Βαθμωτή επιλογή χαρακτηριστικών**» ή «**φιλτράρισμα**» (**Filtering**). Μια καλύτερη εναλλακτική λύση είναι να εξεταστούν διάφοροι συνδυασμοί χαρακτηριστικών [8] και να ελεγχθεί ποιοι συνδυασμοί οδηγούν σε καλύτερη απόδοση, ανεξαρτήτως της ποιότητας των επιμέρους χαρακτηριστικών. Η προσέγγιση αυτή ονομάζεται «**προσέγγιση περιτύλιξης**» (**Wrapping**). Στη συνέχεια παρουσιάζονται ορισμένα μέτρα διαχωρισιμότητας και εν συνεχεία οι τεχνικές επιλογής χαρακτηριστικών φιλτραρίσματος και περιτύλιξης.

### 2.3.1.1 Μέτρα διαχωρισιμότητας των Κλάσεων

#### α) Στατιστικός Έλεγχος Υπόθεσης μέσω t-Test

Ένα πρώτο βήμα στην επιλογή χαρακτηριστικών είναι να εξεταστούν ανεξάρτητα, ένα προς ένα και να ελεγχθεί η διαχωριστική τους ικανότητα στα δεδομένα του προβλήματος. Αν και αυτή η στρατηγική δεν είναι η βέλτιστη, βοηθάει στο να απορρίπτονται γρήγορα κακές επιλογές και απαλλάσσει από περεταίρω υπολογιστικό φόρτο τις πιο εξελιγμένες τεχνικές. Η πιο απλή τεχνική επιλογής χαρακτηριστικών με βάση τη διαχωριστική τους ικανότητα, είναι η χρήση του στατιστικού ελέγχου υπόθεσης t-Test.

Έστω  $x$  τυχαία μεταβλητή που αναπαριστά κάποιο συγκεκριμένο χαρακτηριστικό. Θα εξεταστεί εάν οι τιμές που παίρνει από δυο διαφορετικές κλάσεις, έστω  $\omega_1, \omega_2$ , διαφέρουν σημαντικά. Η απάντηση στο ερώτημα αυτό εκφράζεται μέσω του πλαισίου του στατιστικού ελέγχου υπόθεσης (statistical hypothesis testing). Επομένως προκύπτουν οι εξής υποθέσεις:

$H_1$ : Οι τιμές του χαρακτηριστικού διαφέρουν σημαντικά

$H_0$ : Οι τιμές του χαρακτηριστικού δεν διαφέρουν σημαντικά

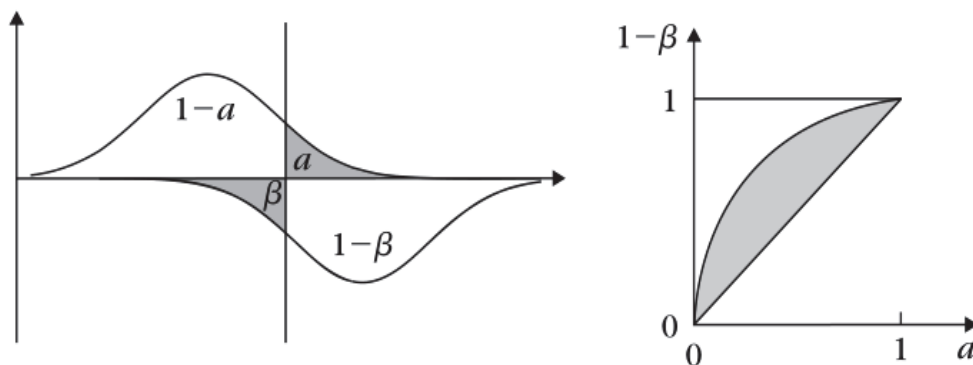
Η υπόθεση  $H_0$  είναι γνωστή και ως μηδενική υπόθεση (null hypothesis) και η  $H_1$  ως εναλλακτική υπόθεση (alternative hypothesis). Η απόφαση λαμβάνεται εξετάζοντας πειραματικά αν θα απορριφθεί η όχι η  $H_0$ . Αυτό επιτυγχάνεται με την αξιοποίηση στατιστικής πληροφορίας, οπότε η οποιαδήποτε απόφαση ενέχει μια πιθανότητα σφάλματος. Στον έλεγχο t-test υπολογίζονται οι διαφορές από τις μέσες τιμές που αντιστοιχούν σε κάποιο χαρακτηριστικό στις διάφορες κλάσεις και ελέγχεται εάν οι τιμές αυτές είναι σημαντικά διαφορετικές από το μηδέν. Η τιμή του t-test αποτελεί ένα μέτρο της διαχωριστικής ικανότητας των χαρακτηριστικών [8].

#### β) Καμπύλες ROC

Οι έλεγχοι υποθέσεων που παρουσιάστηκαν παρέχουν στατιστικά στοιχεία σχετικά με τις διαφορές των μέσων τιμών ενός μόνο χαρακτηριστικού στις διάφορες κλάσεις. Αν και αυτή η πληροφορία είναι χρήσιμη, σε περίπτωση που οι αντίστοιχες μέσες τιμές είναι κοντά, δεν επαρκεί για να εγγυηθεί καλή διαχωριστική ικανότητα για ένα χαρακτηριστικό που δεν θα απορριφθεί από τον έλεγχο. Επίσης, υπάρχει η περίπτωση όπου οι μέσες τιμές μπορεί να διαφέρουν σημαντικά αλλά η διασπορά γύρω από αυτές να είναι μεγάλη, οπότε δεν μπορεί να γίνει εύκολη διάκριση των κλάσεων.



Στην Εικόνα 2.1 [8], στη γραφική παράσταση αριστερά παρουσιάζεται ένα παράδειγμα δυο επικαλυπτόμενων συναρτήσεων πυκνότητας πιθανότητας που περιγράφουν την κατανομή ενός χαρακτηριστικού σε δύο κλάσεις, μαζί με ένα κατώφλι (η μια συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας σχεδιάστηκε ανάστροφα για να είναι περισσότερο ευδιάκριτη). Οι τιμές αριστερά του κατωφλίου ανήκουν στην κλάση  $\omega_1$  και οι τιμές δεξιά στην κλάση  $\omega_2$ . Αυτή η απόφαση μπορεί να είναι **λανθασμένη με πιθανότητα  $a$** , παράγοντας λανθασμένο συμπέρασμα για την κλάση  $\omega_1$  (η πιθανότητα μιας σωστής απόφασης θα είναι  $1 - a$ ). Η πιθανότητα της λανθασμένης απόφασης είναι γραμμοσκιασμένη κάτω από την αντίστοιχη καμπύλη. Ομοίως, έστω  $\beta$  η πιθανότητα λανθασμένης απόφασης σχετικά με την κλάση  $\omega_2$  και  **$1 - \beta$  η πιθανότητα σωστής απόφασης** σχετικά με την κλάση  $\omega_2$ .



**Εικόνα 2.1:** Αριστερά: Επικαλυπτόμενες Κατανομές πυκνότητας πιθανότητας δυο κλάσεων.  
Δεξιά: Αντίστοιχη καμπύλη ROC

Αν οι δύο κατανομές επικαλύπτονται πλήρως, τότε για οποιαδήποτε θέση του κατωφλίου θα ισχύει ότι  $a = 1 - \beta$ . Αυτή η περίπτωση αντιστοιχεί στην ευθεία γραμμή, στο δεξιό σχήμα της Εικόνας 2.1, όπου οι δυο άξονες είναι το  $a$  και το  $1 - \beta$ . Καθώς οι δυο κατανομές απομακρύνονται, η αντίστοιχη καμπύλη στο δεξί σχήμα διαφοροποιείται από την ευθεία. Όσο λιγότερο επικαλύπτονται οι κλάσεις τόσο μεγαλύτερο είναι το εμβαδόν της περιοχής μεταξύ της καμπύλης και της ευθείας γραμμής. Στην άλλη ακραία περίπτωση όπου οι δυο κατανομές είναι πλήρως διαχωρισμένες, αν το κατώφλι μετακινείται ώστε να καλύψει όλο το εύρος των τιμών του  $a$  στο  $[0,1]$ , το  $1 - \beta$  παραμένει ίσο με τη μονάδα. Επομένως, το εμβαδόν της περιοχής της καμπύλης του δεύτερου σχήματος θα κυμαίνεται από μηδέν για κατανομές που επικαλύπτονται πλήρως έως  $1/2$  για πλήρη διαχωρισμό (το εμβαδό του τριγώνου που σχηματίζεται), και είναι ένα μέτρο της διαχωριστικής ικανότητας του συγκεκριμένου χαρακτηριστικού που εξετάζεται. Η καμπύλη αυτή ονομάζεται **καμπύλη ROC (Receiver Operating Characteristic)** και σχεδιάζεται εύκολα στην πράξη μετακινώντας το κατώφλι για τις πιθανότητες των σωστών και λανθασμένων αποφάσεων για όλα τα χαρακτηριστικά του συνόλου εκπαίδευσης [8].

### γ) Άλλα μέτρα διαχωρισιμότητας των Κλάσεων

Κατά την αξιολόγηση των χαρακτηριστικών, θα πρέπει να ληφθεί υπόψη η συσχέτιση που υπάρχει μεταξύ τους, η οποία επηρεάζει τη διαχωριστική τους ικανότητα ως προς τις κλάσεις. Υπάρχουν μέτρα που μπορούν να μετρήσουν την παραπάνω επίδραση. Επιτρέπουν το συνδυασμό διαφόρων χαρακτηριστικών, ώστε να βρεθεί το βέλτιστο διάνυσμα χαρακτηριστικών για συγκεκριμένο αριθμό διάστασης. Επίσης, τα μέτρα αυτά μπορούν να μετασχηματίσουν τα αρχικά δεδομένα με βάση κάποιο βέλτιστο κριτήριο ώστε να βρεθούν χαρακτηριστικά που μπορούν να συμβάλουν ιδιαίτερα στην ταξινόμηση.

Ένα μέτρο που μπορεί να χρησιμοποιηθεί είναι η **απόκλιση (divergence)**. Δοσμένων δυο κλάσεων  $\omega_1, \omega_2$  και ενός χαρακτηριστικού  $\mathbf{x}$ , η κλάση  $\omega_1$  επιλέγεται εάν:

$$P(\omega_1|\mathbf{x}) > P(\omega_2|\mathbf{x}) \quad (2.5)$$

Η πιθανότητα σφάλματος ταξινόμησης εξαρτάται από την διαφορά των  $P(\omega_1|\mathbf{x})$  και  $P(\omega_2|\mathbf{x})$ . Επομένως, ο λόγος  $\frac{P(\omega_1|\mathbf{x})}{P(\omega_2|\mathbf{x})}$  παρέχει χρήσιμη πληροφορία σχετικά με τη διαχωριστική ικανότητα του χαρακτηριστικού  $\mathbf{x}$  ως προς τις κλάσεις  $\omega_1$  και  $\omega_2$ . Εναλλακτικά, η ίδια πληροφορία παρέχεται από τον λόγο  $\frac{P(\mathbf{x}|\omega_1)}{P(\mathbf{x}|\omega_2)} = D_{12}(\mathbf{x})$  δοθέντος των τιμών των  $P(\omega_1)$  και  $P(\omega_2)$ , και αυτό μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως μέτρο της πληροφορίας που συμβάλει στη διάκριση της κλάσης  $\omega_1$  από την κλάση  $\omega_2$ . Για πλήρως επικαλυπτόμενες κλάσεις θα ισχύει ότι  $D_{12}(\mathbf{x}) = 0$ . Αφού το χαρακτηριστικό  $\mathbf{x}$  παίρνει διάφορες τιμές, θα πρέπει να υπολογιστεί η μέση τιμή για όλη την κλάση  $\omega_1$ , η οποία θα είναι:

$$D_{12} = \int_{-\infty}^{+\infty} p(\mathbf{x}|\omega_1) \ln \frac{p(\mathbf{x}|\omega_1)}{p(\mathbf{x}|\omega_2)} d\mathbf{x} \quad (2.6)$$

Ομοίως, για την κλάση  $\omega_2$  ορίζεται:

$$D_{21} = \int_{-\infty}^{+\infty} p(\mathbf{x}|\omega_2) \ln \frac{p(\mathbf{x}|\omega_2)}{p(\mathbf{x}|\omega_1)} d\mathbf{x} \quad (2.7)$$

Το άθροισμα  $d_{12} = D_{12} + D_{21}$  είναι γνωστό ως **Απόκλιση (Divergence)** και μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως μέτρο διαχωρισιμότητας των κλάσεων  $\omega_1$  και  $\omega_2$ , ως προς το χαρακτηριστικό  $\mathbf{x}$  [8].

Ένα άλλο μέτρο διαχωρισιμότητας είναι η **απόσταση Bhattacharyya**. Θεωρώντας Γκαουσιανές κατανομές για τις κλάσεις  $\omega_1$  και  $\omega_2$ ,  $N(\boldsymbol{\mu}_i, \Sigma_i)$  και  $N(\boldsymbol{\mu}_j, \Sigma_j)$  αντίστοιχα, η απόσταση αυτή ορίζεται ως:

$$B = \frac{1}{8} (\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu}_j)^T \left( \frac{\Sigma_i + \Sigma_j}{2} \right)^{-1} (\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu}_j) + \frac{1}{2} \ln \frac{\left| \frac{\Sigma_i + \Sigma_j}{2} \right|}{\sqrt{|\Sigma_i| |\Sigma_j|}} \quad (2.8)$$

όπου  $|\cdot|$  δηλώνει την ορίζουσα του αντίστοιχου πίνακα [8].

Ως μέτρο διαχωρισιμότητας μπορούν να χρησιμοποιηθούν διάφοροι **Πίνακες Διασποράς (Scatter Matrices)**. Τα μέτρα αυτά είναι απλούστερα, όμως είναι εύκολο να υπολογιστούν, ακόμη και αν δεν θεωρηθεί ότι τα δεδομένα ακολουθούν Γκαουσιανή κατανομή. Προκύπτουν από πληροφορίες σχετικά με τον τρόπο διασποράς των δειγμάτων στον  $l$ -διάστατο διανυσματικό χώρο. Ορίζονται οι εξής πίνακες [8]:

- **Πίνακας Διασποράς εντός της κλάσης (Within-class Scatter Matrix):**

$$S_w = \sum_{i=1}^M P_i \Sigma_i \quad (2.9)$$

όπου  $\Sigma_i$  ο πίνακας συνδιακύμανσης (covariance matrix) για την κλάση  $\omega_i$ :

$$\Sigma_i = E[(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_i)(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_i)^T] \quad (2.10)$$

και  $P_i$  η εκ των προτέρων πιθανότητα για την κλάση  $\omega_i$ , για την οποία θα ισχύει ότι  $P_i \cong n_i/N$ , όπου  $n_i$  ο αριθμός των δειγμάτων στη κλάση  $\omega_i$  από σύνολο  $N$  δειγμάτων. Το ίχνος (trace)  $\{S_w\}$  αποτελεί μέτρο του μέσου όρου (ως προς όλες τις κλάσεις) της διακύμανσης των χαρακτηριστικών.

- **Πίνακας Διασποράς μεταξύ των κλάσεων (Between-class Scatter Matrix):**

$$S_b = \sum_{i=1}^M P_i (\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu}_0)(\boldsymbol{\mu}_i - \boldsymbol{\mu}_0)^T \quad (2.11)$$

όπου  $\boldsymbol{\mu}_0$  είναι το διάνυσμα καθολικής μέσης τιμής (global mean vector):

$$\boldsymbol{\mu}_0 = \sum_i^M P_i \boldsymbol{\mu}_i \quad (2.12)$$

Το ίχνος  $\{S_b\}$  αποτελεί μέτρο του μέσου όρου (ως προς όλες τις κλάσεις) της απόστασης της μέσης τιμής κάθε κλάσης από την καθολική μέση τιμή.

- **Πίνακας Διασποράς Ανάμιξης (Mixture Scatter Matrix):**

$$S_m = E[(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_0)(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_0)^T] \quad (2.13)$$

Ο  $S_m$  είναι ο πίνακας συνδιακύμανσης του διανύσματος χαρακτηριστικού ως προς την καθολική μέση τιμή. Ισχύει ότι:

$$S_m = S_w + S_b \quad (2.14)$$

Με βάση τα παραπάνω μπορεί να οριστεί το εξής κριτήριο:

$$J_1 = \frac{\text{ίχνος}\{S_m\}}{\text{ίχνος}\{S_w\}} \quad (2.15)$$

Το κριτήριο αυτό παίρνει μεγάλες τιμές όταν τα δείγματα στον  $l$ -διάστατο διανυσματικό χώρο είναι ομαδοποιημένα γύρω από το μέσο κάθε κλάσης, και οι ομάδες των διαφορετικών κλάσεων μπορούν να διαχωριστούν. Κάποιες φορές χρησιμοποιείται το  $S_b$  αντί του  $S_m$ . Χρησιμοποιώντας οριζουσες, προκύπτει το κριτήριο:

$$J_2 = \frac{|S_m|}{|S_w|} = |S_w^{-1}S_m| \quad (2.16)$$

Μια παραλλαγή του κριτηρίου  $J_2$  που χρησιμοποιείται συχνά είναι η:

$$J_3 = \text{ίχνος}\{S_w^{-1}S_m\} \quad (2.17)$$

Τα κριτήρια  $J_2$  και  $J_3$  παραμένουν αμετάβλητα όταν εφαρμόζονται γραμμικοί μετασχηματισμοί και μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την εύρεση βέλτιστων χαρακτηριστικών. Διάφοροι συνδυασμοί των  $S_w$ ,  $S_b$  και  $S_m$  μπορούν να χρησιμοποιηθούν για το σχηματισμό κριτηρίων. Τα κριτήρια αυτά παίρνουν ειδική μορφή, σε μονοδιάστατα προβλήματα δυο κλάσεων. Σε αυτή την περίπτωση, για ισοπίθανες κλάσεις η  $|S_w|$  είναι ανάλογη με το  $\sigma_1^2 + \sigma_2^2$  και η  $|S_b|$  είναι ανάλογη με το  $(\mu_1 - \mu_2)^2$ . Συνδυάζοντας τα  $S_w$  και  $S_b$ , προκύπτει το **κριτήριο FDR (Fisher's Discriminant Ratio)**:

$$FDR = \frac{(\mu_1 - \mu_2)^2}{\sigma_1^2 + \sigma_2^2} \quad (2.18)$$

Το κριτήριο FDR χρησιμοποιείται για να μετράει τη διαχωριστική ικανότητα των χαρακτηριστικών. Για τα προβλήματα πολλαπλών κλάσεων μπορούν να χρησιμοποιηθεί η εξής μορφή:

$$FDR_1 = \sum_i^M \sum_{j \neq i}^M \frac{(\mu_i - \mu_j)^2}{\sigma_i^2 + \sigma_j^2} \quad (2.19)$$

Όπου οι δείκτες  $i$  και  $j$  αναφέρονται στην μέση τιμή και διακύμανση που αντιστοιχούν στο υπο εξέταση χαρακτηριστικό για τις κλάσεις  $\omega_i$  και  $\omega_j$  αντίστοιχα [8].

### 2.3.1.2 Βαθμωτή Επιλογή Χαρακτηριστικών – Προσέγγιση Φίλτρου (Filter Approach)

Στην προσέγγιση αυτή τα χαρακτηριστικά αντιμετωπίζονται χωριστά. Μπορεί να χρησιμοποιηθεί οποιοδήποτε από τα κριτήρια που μετρούν τη διαχωριστική ικανότητα των χαρακτηριστικών όπως οι καμπύλες ROC, το κριτήριο FDR, η μονοδιάστατη απόκλιση (Divergence) και τα υπόλοιπα που παρουσιάστηκαν παραπάνω. Η τιμή  $C(k)$  για το κάθε κριτήριο υπολογίζεται για κάθε χαρακτηριστικό  $k$ , με  $k = 1, 2, \dots, m$  και στη συνέχεια τα κριτήρια ταξινομούνται σε φθίνουσα σειρά ως προς  $C(k)$ . Τα  $l$  χαρακτηριστικά που αντιστοιχούν στις  $l$  καλύτερες τιμές του  $C(k)$  επιλέγονται ώστε να σχηματιστεί το υποσύνολο χαρακτηριστικών [8]. Η τεχνική αυτή είναι γνωστή ως φιλτράρισμα (filtering). Σύμφωνα με αυτή τη προσέγγιση, η επιλογή των χαρακτηριστικών είναι ανεξάρτητη από το είδος του συστήματος Μάθησης.

Τα περισσότερα κριτήρια που αναφέρθηκαν σε προηγούμενες ενότητες μετρούν την ικανότητα ταξινόμησης των χαρακτηριστικών για προβλήματα δυο κλάσεων. Σε περιπτώσεις που υπάρχουν πολλές κλάσεις, χρησιμοποιείται κάποια μορφή μέσου όρου ή καθολικής τιμής ως προς όλες τις κλάσεις, για να υπολογιστεί το  $C(k)$ . Εναλλακτικά, μπορεί να χρησιμοποιηθεί η μονοδιάστατη απόκλιση  $d_{ij}$ , η οποία υπολογίζεται για κάθε ζευγάρι κλάσεων και στη συνέχεια για κάθε χαρακτηριστικό η τιμή του  $C(k)$  γίνεται:

$$C(k) = \min_{i,j} d_{ij} \quad (2.20)$$

οπότε επιλέγεται η ελάχιστη απόκλιση από όλα τα ζεύγη των κλάσεων και όχι ο μέσος όρος. Επομένως, η επιλογή χαρακτηριστικών με τις μεγαλύτερες τιμές  $C(k)$  ισοδυναμεί με την επιλογή χαρακτηριστικών με την καλύτερη «χειρότερη περίπτωση» για τη διαχωριστική ικανότητα, εισάγοντας με αυτό τον τρόπο την τεχνική μεγίστου-ελαχίστου (maxmin) στη διαδικασία επιλογής χαρακτηριστικών. Αυτή η προσέγγιση μπορεί σε κάποιες περιπτώσεις να οδηγήσει σε περισσότερο εύρωστη απόδοση.

Το μεγαλύτερο πλεονέκτημα που παρέχει η βαθμωτή επιλογή χαρακτηριστικών είναι οι απλοί υπολογισμοί, χωρίς όμως να λαμβάνει υπόψη τις συσχετίσεις που υπάρχουν μεταξύ των χαρακτηριστικών. Υπάρχουν τεχνικές που μπορούν να εισάγουν πληροφορίες συσχέτισης για τη βαθμωτή επιλογή χαρακτηριστικών [8].

### 2.3.1.3 Εύρεση Βέλτιστου Υποσυνόλου Χαρακτηριστικών με χρήση Ταξινομητών - Προσέγγιση Περιτύλιξης (Wrapper approach)

Στην προσέγγιση περιτύλιξης η επιλογή χαρακτηριστικών σχετίζεται με το είδος του συστήματος Μάθησης, σε αντίθεση με την προσέγγιση φιλτραρίσματος. Με βάση την προσέγγιση αυτή, αντί να αξιολογούνται τα χαρακτηριστικά βάση κριτηρίων, αξιολογούνται

οι συνδυασμοί τους με βάση την απόδοση ενός ταξινομητή ο οποίος εκπαιδεύεται με τον εκάστοτε συνδυασμό χαρακτηριστικών. Επομένως, για κάθε συνδυασμό χαρακτηριστικών θα πρέπει να υπολογιστεί η συνάρτηση σφάλματος του συστήματος Μάθησης και ο συνδυασμός που θα επιλεγεί θα πρέπει να ελαχιστοποιεί αυτή τη συνάρτηση. Ανάλογα με το είδος του συστήματος που χρησιμοποιείται, αυτό μπορεί να αυξήσει ακόμα περισσότερο την υπολογιστική πολυπλοκότητα.

Ιδανικά, για να βρεθεί το βέλτιστο υποσύνολο χαρακτηριστικών, θα πρέπει να σχηματιστούν όλοι οι δυνατοί συνδυασμοί των  $l$  χαρακτηριστικών από το σύνολο των  $m$  χαρακτηριστικών που είναι διαθέσιμα. Ο συνολικός αριθμός των διανυσμάτων χαρακτηριστικών που θα πρέπει να εξεταστεί θα είναι:

$$\binom{m}{l} = \frac{m!}{l!(m-l)!} \quad (2.21)$$

Ο αριθμός αυτός είναι αρκετά μεγάλος, ακόμα και για μικρές τιμές των  $m$  και  $l$ . Επίσης, για πολλές εφαρμογές, ο αριθμός  $l$  (πλήθος χαρακτηριστικών στο βέλτιστο υποσύνολο) δεν είναι γνωστός εκ των προτέρων. Συνεπώς, θα πρέπει να δοκιμαστούν συνδυασμοί χαρακτηριστικών για διαφορετικές τιμές του  $l$  και στη συνέχεια να επιλεγεί το βέλτιστο πλήθος χαρακτηριστικών (όπου περαιτέρω αύξηση του  $l$  δεν βελτιώνει την απόδοση), καθώς και το βέλτιστο  $l$ -διάστατο διάνυσμα χαρακτηριστικών. Το υπολογιστικό βάρος αυτής της μεθόδου είναι ιδιαίτερα αυξημένο. Για το λόγο αυτό, έχουν προταθεί αποδοτικές τεχνικές αναζήτησης ώστε να μειωθεί η υπολογιστική πολυπλοκότητα. Κάποιες από τις τεχνικές αυτές είναι βέλτιστες, όπως η χρήση αλγορίθμων δυναμικού προγραμματισμού (dynamic programming), η έκφραση του προβλήματος ως πρόβλημα συνδυαστικής βελτιστοποίησης (combinatorial optimization) και στη συνέχεια χρήση της τεχνικής επέκτασης και οριοθέτησης (branch and bound). Οι τεχνικές αυτές υπολογίζουν τη βέλτιστη τιμή χωρίς να κάνουν εξαντλητική αναζήτηση όλων των συνδυασμών. Επίσης χρησιμοποιούνται και υποβέλτιστες τεχνικές (sequential backward selection, sequential forward selection, floating search methods) [8]. Μια άλλη κατηγορία αλγορίθμων που χρησιμοποιείται για επιλογή χαρακτηριστικών είναι οι γενετικοί αλγόριθμοι (ενότητα 3.6.1.2).

### 2.3.2 Παραγωγή Χαρακτηριστικών

Η παραγωγή χαρακτηριστικών (Feature Generation) είναι καθοριστικής σημασίας κατά την εκπαίδευση ενός συστήματος Μάθησης. Δοσμένου ενός συνόλου μετρήσεων, ο στόχος είναι η **εύρεση συμπαγών αναπαραστάσεων των δεδομένων**, οι οποίες παρέχουν τη μέγιστη ποσότητα πληροφορίας. Μια παρόμοια διαδικασία συμβαίνει και στο ανθρώπινο σύστημα αντίληψης. Η αναπαράσταση του κόσμου στον εγκέφαλο του

ανθρώπου βασίζεται σε ένα σχετικά μικρό αριθμό χαρακτηριστικών που αφορούν την αντίληψη και σχετίζονται μεταξύ τους. Αυτά τα χαρακτηριστικά παράγονται, αφού γίνει επεξεργασία ενός μεγάλου αριθμού δεδομένων από τις αισθήσεις, όπως η ένταση του χρώματος των pixels των εικόνων που εκλαμβάνονται από τα μάτια και το φασματικό περιεχόμενο των ηχητικών σημάτων που λαμβάνονται από τα αυτιά [8].

Η προσέγγιση που ακολουθείται για την παραγωγή χαρακτηριστικών είναι ο μετασχηματισμός ενός δοσμένου συνόλου μετρήσεων σε ένα νέο σύνολο χαρακτηριστικών. Αν ο μετασχηματισμός αυτός έχει επιλεγεί κατάλληλα, τα χαρακτηριστικά στο μετασχηματισμένο πεδίο μπορούν να εμφανίσουν συμπαγή παρουσίαση πληροφορίας σε σχέση με τα αρχικά. Αυτό σημαίνει ότι η χρήσιμη πληροφορία για την κατηγοριοποίηση σε κλάσεις περικλείεται σε ένα σχετικά μικρό αριθμό χαρακτηριστικών, οπότε μειώνεται η διάσταση του διανυσματικού χώρου χαρακτηριστικών. Πολλές φορές αυτές οι διεργασίες ονομάζονται **τεχνικές μείωσης διάστασης**.

Η βασική ιδέα πίσω από την παραγωγή χαρακτηριστικών με μετασχηματισμούς είναι ότι ένας κατάλληλα επιλεγμένος μετασχηματισμός μπορεί να εκμεταλλευτεί και να απομακρύνει πλεονασμούς πληροφορίας που συνήθως υπάρχουν κατά τη λήψη των δεδομένων. Έχουν προταθεί πολλές μέθοδοι και τεχνικές, όπως: Μετασχηματισμοί Karhunen – Loève, Διάσπαση Ιδιόμορφων Τιμών (Singular Value Decomposition), Ανάλυση Ανεξάρτητων Συνιστωσών (Independent Component Analysis), Παραγοντοποίηση Μη Αρνητικά Ορισμένων Πινάκων (Nonnegative Matrix Factorization), Μη Γραμμική Ελάττωση Διαστάσεων (Nonlinear Dimensionality Reduction), Διακριτός Μετασχηματισμός Fourier (Discrete Fourier Transformation), Διακριτοί Μετασχηματισμοί Ημιτόνου και Συνημιτόνου (Discrete Cosine and Sine Transforms), Μετασχηματισμός Hadamard, Μετασχηματισμός Haar, Μετασχηματισμός Κυματίων Διακριτού Χρόνου (Discrete Time Wavelet Transform) καθώς και πληθώρα τεχνικών που εφαρμόζονται σε εξειδικευμένες εφαρμογές [8].

## 2.4 Το πρόβλημα της Ταξινόμησης

Μια υποκατηγορία προβλημάτων με τα οποία ασχολείται η Μηχανική Μάθηση είναι τα προβλήματα Ταξινόμησης (Classification Problems). Στα προβλήματα αυτά το σχήμα μάθησης τροφοδοτείται με ένα σύνολο από δείγματα (δεδομένα εκπαίδευσης) τα οποία έχουν εκ των προτέρων καταταχθεί σε συγκεκριμένες κατηγορίες. Από την πληροφορία αυτή, το σύστημα μάθησης θα πρέπει να εξάγει τη δυνατότητα ταξινόμησης νέων δεδομένων που αφορούν το πρόβλημα σε κατηγορίες. Τα νέα δεδομένα δεν ανήκουν στο σύνολο των δεδομένων εκπαίδευσης [7].

Η μάθηση Ταξινόμησης αρκετές φορές αποτελεί μάθηση υπό επίβλεψη, διότι για να λειτουργήσει προϋποθέτει ένα σύνολο ταξινομημένων δειγμάτων, αλλά υπάρχουν και περιπτώσεις με μάθηση χωρίς επίβλεψη. Οι **κλάσεις** του προβλήματος είναι οι διαφορετικές κατηγορίες στις οποίες μπορούν ανήκουν τα δεδομένα. Τα συστήματα μάθησης που έχουν εκπαιδευτεί ώστε να επιλύουν κάποιο πρόβλημα ταξινόμησης ονομάζονται **Ταξινομητές (Classifiers)**. Διακρίνονται δυο κατηγορίες προβλημάτων Ταξινόμησης, ανάλογα με το πλήθος των κλάσεων στις οποίες θα πρέπει να καταταχθούν τα δεδομένα:

- **Διαδικά προβλήματα Ταξινόμησης (Binary Classification)**. Τα δεδομένα θα πρέπει να καταταχθούν σε δυο κλάσεις, συνήθως με βάση το αν έχουν ή όχι κάποια συγκεκριμένη ιδιότητα.
- **Προβλήματα Ταξινόμησης Πολλών Κλάσεων (Multi-class Classification)**. Στην περίπτωση αυτή τα δεδομένα κατηγοριοποιούνται σε περισσότερες από δυο κλάσεις.

Αρκετοί αλγόριθμοι που χρησιμοποιούνται για την κατασκευή ταξινομητών έχουν σχεδιαστεί ώστε να επιλύουν αποκλειστικά δυαδικά προβλήματα ταξινόμησης. Παρόλο που υπάρχουν αλγόριθμοι που μπορούν να χειριστούν απευθείας προβλήματα ταξινόμησης πολλών κλάσεων, πολλές φορές είναι αναγκαίο ένα πρόβλημα πολλών κλάσεων να μετασχηματιστεί σε δυαδικό πρόβλημα ταξινόμησης, ώστε να εφαρμοστεί επιτυχώς η αντίστοιχη τεχνική επίλυσης του. Έχουν αναπτυχθεί διάφορες στρατηγικές για τον μετασχηματισμό των προβλημάτων αυτών σε δυαδική ταξινόμηση, από τις οποίες οι κυριότερες είναι οι εξής:

- **Ταξινόμηση Ενός εναντίον Όλων (One-vs-All Classification - OVA)**. Σε αυτή τη στρατηγική ταξινόμησης, για ένα πρόβλημα πολλών κλάσεων με  $K$  κλάσεις δημιουργούνται  $K - 1$  δυαδικοί ταξινομητές οι οποίοι συνδέονται σε σειρά. Ο πρώτος Ταξινομητής εκπαιδεύεται ώστε να διαχωρίζει την 1<sup>η</sup> κλάση από τις υπόλοιπες. Αν το δείγμα που εισέρχεται στον πρώτο ταξινομητή δεν ανήκει στην 1<sup>η</sup> κλάση, προωθείται στον επόμενο ταξινομητή, ο οποίος διαχωρίζει την 2<sup>η</sup> κλάση από τις υπόλοιπες. Σύμφωνα με αυτό το σχήμα, ο τελευταίος ταξινομητής θα αποφανθεί για τις τελευταίες δυο κλάσεις που απομένουν. Τα διαθέσιμα δεδομένα εκπαίδευσης για κάθε ταξινομητή θα πρέπει να φιλτραριστούν κατάλληλα, ώστε να περιέχουν μόνο τις κλάσεις για τις οποίες αποφαινεται. Μια άλλη υλοποίηση της μεθόδου αυτής είναι η εκπαίδευση  $K$  ταξινομητών, με τον κάθε ταξινομητή να αναγνωρίζει τα δεδομένα μιας κλάσης ως θετικά και όλων των υπόλοιπων κλάσεων ως αρνητικά. Το νέο δείγμα θα ταξινομηθεί στην κλάση, για την οποία ο αντίστοιχος ταξινομητής έχει την μεγαλύτερη εμπιστοσύνη ως προς το αποτέλεσμα [9],[10].
- **Ταξινόμηση Όλων εναντίον Όλων (All-vs-All Classification – AVA)**. Η μέθοδος αυτή αναφέρεται και ως ταξινόμηση ενός εναντίον ενός (One-vs-One Classification) ή



μέθοδος όλων των ζευγαριών (All-Pairs Classification). Σε αυτή τη περίπτωση εκπαιδεύεται ένας ταξινομητής για κάθε ζεύγος κλάσεων, επομένως για  $K$  κλάσεις θα χρειαστούν  $K(K - 1)/2$  ταξινομητές. Για κάθε νέο δείγμα, όλοι οι ταξινομητές προβλέπουν την κλάση του και στη συνέχεια επιλέγεται η κλάση που παρουσιάζεται συχνότερα ως αποτέλεσμα. Τα δεδομένα εκπαίδευσης διαμορφώνονται κατάλληλα για κάθε ταξινομητή, έτσι ώστε να αναφέρονται μόνο στις κλάσεις που ανήκουν στο εκάστοτε ζεύγος [9],[10].

- **Διόρθωση Σφαλμάτων με Κωδικούς Εξόδου (Error-Correcting Output Codes).** Αναπτύχθηκε από τους Dietterich και Bakiri (1995)[11]. Σε κάθε κλάση ανατίθεται μια ακολουθία δυαδικών ψηφίων μήκους  $n$  η οποία ονομάζεται κωδική λέξη. Κάθε θέση bit αναφέρεται στην έξοδο ενός ταξινομητή, οπότε θα πρέπει να εκπαιδευτούν  $n$  ταξινομητές, ένας για κάθε θέση bit. Για την ταξινόμηση ενός νέου δείγματος ενεργοποιούνται όλοι οι ταξινομητές ώστε να υπολογιστεί η νέα κωδική λέξη. Το δείγμα ανατίθεται στην κλάση με κωδική λέξη πλησιέστερη σε αυτή που υπολόγισαν οι ταξινομητές.

Η επιλογή της κατάλληλης μεθόδου εξαρτάται από την εκάστοτε εφαρμογή και ελέγχεται πειραματικά. Στις επόμενες ενότητες θα παρουσιαστούν οι διάφορες κατηγορίες Ταξινομητών που χρησιμοποιούνται στα προβλήματα ταξινόμησης.

## 2.5 Αποτίμηση απόδοσης Ταξινομητών

Ένας ταξινομητής έχει σχεδιαστεί επιτυχώς όταν παράγει υποθέσεις που αποδίδουν καλά στην πρόβλεψη της ταξινόμησης δειγμάτων τα οποία δεν έχουν εμφανιστεί ξανά στο παρελθόν, ούτε υπάρχουν στο σύνολο εκπαίδευσης.

Μια πρόβλεψη είναι καλή αν αποδεικνύεται αληθής. Έτσι η ποιότητα μιας υπόθεσης μπορεί να αξιολογηθεί ελέγχοντας τις προβλέψεις της σε σύγκριση με τη σωστή ταξινόμηση, μόλις αυτή γίνει γνωστή. Αυτό εφαρμόζεται σε ένα σύνολο δειγμάτων που είναι γνωστό ως **σύνολο ελέγχου (test set)**. Αν όλα τα διαθέσιμα δείγματα τα οποία έχουν γνωστή ταξινόμηση χρησιμοποιηθούν κατά την εκπαίδευση, τότε θα πρέπει να βρεθούν επιπλέον δείγματα για τη διαδικασία ελέγχου, οπότε συχνά υιοθετείται η εξής μεθοδολογία [1]:

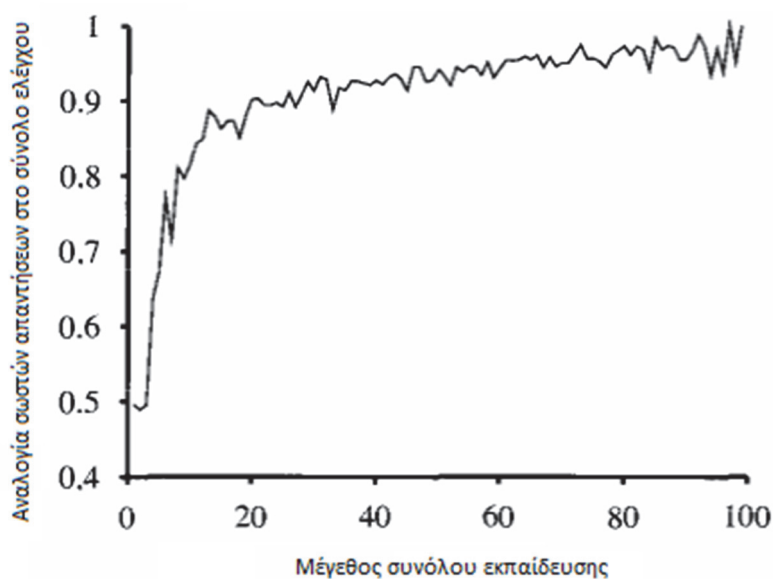
1. Συλλογή επαρκώς μεγάλου πλήθους δειγμάτων.
2. Διαίρεση συνόλου δειγμάτων σε δυο υποσύνολα: **το σύνολο εκπαίδευσης (training set)** και **το σύνολο ελέγχου (test set)**.
3. Εφαρμογή διαδικασίας μάθησης στο σύνολο εκπαίδευσης δημιουργώντας μια υπόθεση  $h$ .

4. Μέτρηση ποσοστού των δειγμάτων του συνόλου ελέγχου που ταξινομούνται σωστά από την υπόθεση  $h$ .
5. Επανάληψη βημάτων 2 έως 4 για διαφορετικά μεγέθη συνόλων εκπαίδευσης και διαφορετικά, τυχαία επιλεγμένα, σύνολα εκπαίδευσης κάθε μεγέθους.

Το αποτέλεσμα αυτής της διαδικασίας είναι ένα σύνολο δεδομένων που μπορεί να υποστεί επεξεργασία για να δώσει τη μέση ποιότητα πρόβλεψης ως συνάρτηση του μεγέθους του συνόλου εκπαίδευσης. Αυτή η συνάρτηση μπορεί να σχεδιαστεί σε γράφημα το οποίο δίνει τη **καμπύλη μάθησης (learning curve)** για τον αλγόριθμο που εφαρμόζεται στο συγκεκριμένο πεδίο.

Στην Εικόνα 2.2 φαίνεται ένα παράδειγμα καμπύλης μάθησης. Για το συγκεκριμένο πρόβλημα, καθώς μεγαλώνει το σύνολο εκπαίδευσης βελτιώνεται η ποιότητα της πρόβλεψης – για αυτό το λόγο οι παραπάνω καμπύλες ονομάζονται **χαρούμενα γραφήματα (happy graphs)**. Αυτό αποτελεί μια καλή ένδειξη ότι πράγματι υπάρχει πρότυπο στα δεδομένα και ο αλγόριθμος μάθησης το κατανοεί [1].

Είναι προφανές ότι κατά τη διαδικασία μάθησης δεν επιτρέπεται να χρησιμοποιηθούν τα δεδομένα ελέγχου, για να είναι αντικειμενική η διαδικασία αξιολόγησης του ταξινομητή. Αν ο αλγόριθμος λάβει υπόψη του τα δεδομένα αυτά κατά τη διάρκεια της εκπαίδευσης, τότε λέγεται ότι **κρυφοκοιτάζει** τα δεδομένα ελέγχου (peeking). Το κρυφοκοίταγμα μπορεί να συμβεί ως εξής: ένας αλγόριθμος μάθησης μπορεί να έχει διάφορους «μοχλούς» που ρυθμίζουν τη συμπεριφορά του. Μπορεί να δημιουργηθούν υποθέσεις για διάφορες ανόμοιες ρυθμίσεις των μοχλών, να μετρηθεί η απόδοσή τους σε ένα σύνολο ελέγχου και να αναφερθεί η προβλεπόμενη απόδοση της καλύτερης υπόθεσης. Η μέθοδος αυτή αποτελεί κρυφοκοίταγμα, διότι η υπόθεση επιλέχθηκε με βάση την απόδοση στο σύνολο ελέγχου της [1].



**Εικόνα 2.2:** Καμπύλη Μάθησης για δεδομένα που εμφανίζουν πρότυπο

Υπάρχουν διάφορες τεχνικές σύμφωνα με τις οποίες μπορεί να προκύψει το σύνολο εκπαίδευσης και το σύνολο ελέγχου. Μια από αυτές τις τεχνικές είναι ο διαχωρισμός των διαθέσιμων δειγμάτων, επιλέγοντας τα  $2/3$  για εκπαίδευση και το  $1/3$  για έλεγχο.

Η πιο διαδεδομένη τεχνική είναι η  **$k$  φορές αναδιπλωμένη διασταυρωμένη επικύρωση ( $k$ -fold cross-validation)**. Το σύνολο των δειγμάτων διαμερίζεται σε  $k$  αμοιβαίως αποκλειόμενα υποσύνολα ίδιου μεγέθους και για κάθε υποσύνολο, ο ταξινομητής εκπαιδεύεται με δείγματα εκπαίδευσης που προκύπτουν από την ένωση όλων των υπόλοιπων  $k - 1$  υποσυνόλων και το υποσύνολο που μένει χρησιμοποιείται ως σύνολο ελέγχου. Η διαδικασία αυτή επαναλαμβάνεται  $k$  φορές μέχρι να χρησιμοποιηθούν όλα τα υποσύνολα ως σύνολα ελέγχου. Στη συνέχεια, υπολογίζεται ο μέσος όρος από τους  $k$  ρυθμούς σφάλματος και έτσι προκύπτει η εκτίμηση του ρυθμού σφάλματος για τον ταξινομητή.

Η **επικύρωση με αποκλεισμό ενός δείγματος (leave-one-out validation)** είναι μια ειδική κατηγορία της διασταυρωμένης επικύρωσης, όπου τα  $k$  υποσύνολα ελέγχου αποτελούνται από ένα μόνο δείγμα. Το υπολογιστικό φορτίο αυτού του τρόπου αξιολόγησης είναι μεγαλύτερο, αλλά παράγεται μια πιο ακριβής εκτίμηση του ρυθμού σφάλματος του ταξινομητή.

Αν η διαδικασία αξιολόγησης δείχνει ότι ο ταξινομητής δεν είναι αποδοτικός, θα πρέπει να εξεταστούν μια σειρά από παράγοντες. Ενδεχομένως να μην χρησιμοποιούνται χαρακτηριστικά που είναι σχετικά με το πρόβλημα, να απαιτείται μεγαλύτερο σύνολο εκπαίδευσης, η διάσταση του προβλήματος να είναι ιδιαίτερα μεγάλη, ο επιλεγμένος ταξινομητής να είναι ακατάλληλος για το συγκεκριμένο πρόβλημα ή χρειάζεται διαφορετική ρύθμιση στις παραμέτρους.

Ένας κοινός τρόπος για σύγκριση της απόδοσης αλγορίθμων Μηχανικής Μάθησης είναι η πραγματοποίηση στατιστικών συγκρίσεων των ταξινομητών σε συγκεκριμένα σύνολα δεδομένων. Έχουν αναπτυχθεί διάφορες ευριστικές εκδόσεις του στατιστικού t-test ώστε να επιτελούν αυτές τις συγκρίσεις. Επίσης, υπάρχουν τεχνικές εκ των προτέρων αποτίμησης της ποιότητας της πρόβλεψης με χρήση της θεωρίας υπολογιστικής μάθησης [12],[1].

Το πιο απλό μέτρο για την έκφραση της απόδοσης ενός ταξινομητή είναι η **ακρίβεια (accuracy)**. Το μέτρο αυτό είναι το συνολικό ποσοστό των ορθών ταξινομήσεων του ταξινομητή. Δυο στατιστικά μέτρα που χρησιμοποιούνται συχνά για την αξιολόγηση ενός δυαδικού ταξινομητή, ο οποίος κατηγοριοποιεί τα δεδομένα σε θετικά και αρνητικά αποτελέσματα ως προς κάποια υπόθεση, είναι η **ευαισθησία (sensitivity)** και η **ειδικότητα (specificity)**. Η ευαισθησία (η οποία ονομάζεται και ρυθμός αληθινών θετικών αποτελεσμάτων – true positive rate) μετράει την αναλογία των θετικών αποτελεσμάτων που ανιχνεύει ο ταξινομητής, τα οποία είναι αληθώς θετικά, από το σύνολο των θετικών δειγμάτων ενώ η ειδικότητα η οποία ονομάζεται και ρυθμός αληθινών αρνητικών αποτελεσμάτων – true negative rate) μετράει την αναλογία των αρνητικών αποτελεσμάτων

που ανιχνεύει ο ταξινομητής, τα οποία είναι αληθώς αρνητικά, από το σύνολο των αρνητικών δειγμάτων. Ο ιδανικός ταξινομητής θα είχε 100% ευαισθησία, επομένως όλες του οι θετικές προβλέψεις θα ήταν σωστές, και 100% ειδικότητα οπότε όλες οι αρνητικές προβλέψεις του θα ήταν επίσης σωστές [13],[14].

Η ευαισθησία και η ειδικότητα σχετίζονται με τα **στατιστικά σφάλματα τύπου I και τύπου II**. Το σφάλμα τύπου I είναι η λανθασμένη απόρριψη της μηδενικής υπόθεσης και το σφάλμα τύπου II είναι η αποτυχία απόρριψης μιας ψευδούς μηδενικής υπόθεσης. Δυο επιπλέον χρήσιμα μέτρα είναι η **Τιμή Θετικής Πρόβλεψης** (Positive Predictive Value – PPV) και η **Τιμή Αρνητικής Πρόβλεψης** (Negative Predictive Value - NPV). Η τιμή θετικής πρόβλεψης είναι η πιθανότητα ένα αποτέλεσμα που έχει προβλεφθεί θετικό να είναι αληθώς θετικό, και η Τιμή Αρνητικής Πρόβλεψης η πιθανότητα ένα αποτέλεσμα που έχει προβλεφθεί αρνητικό να είναι αληθώς αρνητικό. Τα μετρά αυτά εξαρτώνται από την ειδικότητα και την ευαισθησία του ταξινομητή που χρησιμοποιείται αλλά και από την επικράτηση (prevalence) του υπο εξέταση χαρακτηριστικού στον πληθυσμό.

Αφού ολοκληρωθεί η διαδικασία ελέγχου ενός ταξινομητή, τα αποτελέσματα που προκύπτουν μπορούν να παρουσιαστούν χρησιμοποιώντας τον **Πίνακα Σύγχυσης (Confusion Matrix)**. Στον πίνακα αυτόν, οι στήλες περιέχουν την πρόβλεψη του ταξινομητή για τα δείγματα ενώ οι γραμμές τις πραγματικές κλάσεις των δειγμάτων. Το όνομα του Πίνακα προέρχεται από το ότι μπορεί εύκολα να διαπιστωθεί από αυτόν εάν ο Ταξινομητής δεν διακρίνει σωστά τις κλάσεις του προβλήματος.

Στον παρακάτω Πίνακα (Πίνακας 2.2) παρατίθεται ένα παράδειγμα Πίνακα Σύγχυσης για ένα ταξινομητή που προβλέπει εάν κάποιος ασθενής έχει μια συγκεκριμένη ασθένεια ή όχι [15].

**Πίνακας 2.2:** Πίνακας Σύγχυσης και Αντίστοιχα Σύνολα

		Πρόβλεψη Ταξινομητή		Σύνολα
		Θετικό	Αρνητικό	
Πραγματική Κλάση	Ασθένεια	<b>A</b> (True Positive)	<b>C</b> (False Negative)	<b>T<sub>D</sub></b> (Σύνολο Ασθένειας)
	Απουσία Ασθένειας	<b>B</b> (False Positive)	<b>D</b> (Tue Negative)	<b>T<sub>ND</sub></b> (Σύνολο Απουσία Ασθένειας)
Σύνολα		<b>T<sub>TP</sub></b> (Σύνολο Test Positive)	<b>T<sub>TN</sub></b> (Σύνολο Test Negative)	<b>T</b> (Σύνολο)

Από τον Πίνακα προκύπτουν οι εξής σχέσεις:

$$T_{TP} = A + B \text{ και } T_{TN} = C + D \quad (2.22)$$

$$T_D = A + C \text{ και } T_{ND} = B + D \quad (2.23)$$

$$T = T_{TP} + T_{TN} = T_D + T_{ND} = A + B + C + D \quad (2.24)$$

Για τα μέτρα που ορίσαμε παραπάνω ισχύει:

$$\text{Ακρίβεια: } P = (A + D)/T \times 100 \quad (2.25)$$

$$\text{Ευαισθησία: } S = A/(A + C) \times 100 \quad (2.26)$$

$$\text{Ειδικότητα: } E = D/(D + B) \times 100 \quad (2.27)$$

$$\text{Επικράτηση χαρακτηριστικού: } D = T_D/T \times 100 \quad (2.28)$$

$$\text{Τιμή Θετικής Πρόβλεψης: } PPV = A/(A + B) \times 100 \quad (2.29)$$

$$\text{Τιμή Αρνητικής Πρόβλεψης: } NPV = D/(D + C) \times 100 \quad (2.30)$$

Η Τιμή Θετικής Πρόβλεψης και η Τιμή Αρνητικής Πρόβλεψης εξαρτάται από την ειδικότητα, την ευαισθησία και την επικράτηση ως εξής [14]:

$$PPV = \frac{SD}{SD + (1 - E)(1 - D)} \quad (2.31)$$

$$NPV = \frac{E(1 - D)}{E(1 - D) + (1 - S)D} \quad (2.32)$$

Στη συνέχεια παρουσιάζεται η πιο βασική μέθοδος ταξινόμησης που είναι η Γραμμική Διαχωριστική Ανάλυση. Στα επόμενα Κεφάλαια θα παρουσιαστούν διάφορα είδη ταξινομητών που χρησιμοποιούνται στην πράξη, καθώς και συγκεκριμένα προβλήματα στα οποία έχουν εφαρμοστεί.

## 2.6 Γραμμική Διαχωριστική Ανάλυση

Η Γραμμική Διαχωριστική Ανάλυση (Linear Discriminant Analysis – LDA) είναι μια βασική μέθοδος ταξινόμησης η οποία προτάθηκε από τον R. Fisher [16]. Η βασική ιδέα της τεχνικής αυτής είναι ο προσδιορισμός ενός διανυσματικού υποχώρου μικρότερης διάστασης από τον αρχικό διανυσματικό χώρο των δειγμάτων, στον οποίο τα δεδομένα του προβλήματος είναι γραμμικώς διαχωρίσιμα. Η Διαχωριστικότητα ορίζεται και παρατηρείται με τη βοήθεια στατιστικών μέτρων όπως η μέση τιμή και η διακύμανση.

Ένα από τα πλεονεκτήματα της μεθόδου είναι ότι η λύση προκύπτει επιλύοντας ένα γενικευμένο πρόβλημα ιδιοτιμών, επιτρέποντας τη γρήγορη και μαζική επεξεργασία των δειγμάτων του προβλήματος. Επίσης, υπάρχει η δυνατότητα επέκτασης σε μη Γραμμική Διαχωριστική Ανάλυση, χρησιμοποιώντας συναρτήσεις Πυρήνα. Ο αρχικός αλγόριθμος της

μεθόδου είχε σχεδιαστεί για δυαδικά προβλήματα ταξινόμησης αλλά στη συνέχεια προτάθηκαν διάφορες γενικεύσεις που αντιμετωπίζουν προβλήματα με πολλές κλάσεις [16].

Έστω  $x_1, \dots, x_p \in \mathbb{R}^m$  ένα σύνολο από  $p$  δείγματα, τα οποία μπορούν να ανήκουν σε δυο διαφορετικές κλάσεις,  $A$  και  $B$ . Για κάθε κλάση ορίζεται η μέση τιμή των δειγμάτων:

$$\bar{x}_A = \frac{1}{N_A} \sum_{x \in A} x \quad \bar{x}_B = \frac{1}{N_B} \sum_{x \in B} x \quad (2.33)$$

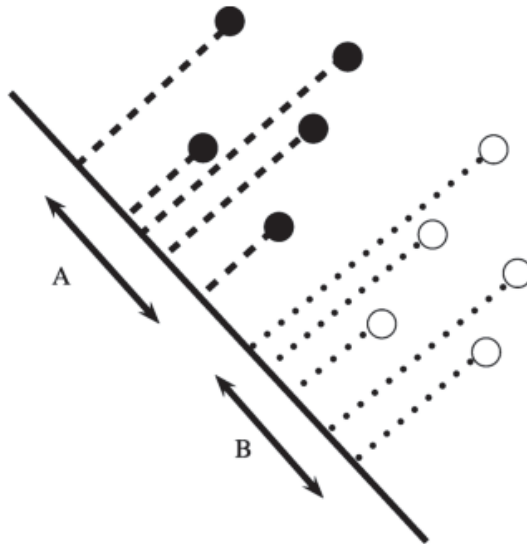
όπου  $N_A, N_B$  το πλήθος των δειγμάτων στην κλάση  $A$  και  $B$  αντίστοιχα. Για κάθε κλάση μπορούν να οριστούν οι θετικά ημι-ορισμένοι Πίνακες Διασποράς (Scatter Matrices), οι οποίοι περιγράφονται από τις εξισώσεις:

$$S_A = \sum_{x \in A} (x - \bar{x}_A)(x - \bar{x}_A)^T \quad (2.34)$$

$$S_B = \sum_{x \in B} (x - \bar{x}_B)(x - \bar{x}_B)^T \quad (2.35)$$

Οι Πίνακες  $S_A$  και  $S_B$  εκφράζουν την μεταβλητότητα στην αντίστοιχη κλάση. Ιδανικά, θα πρέπει να βρεθεί **ένα υπερεπίπεδο**, το οποίο ορίζεται από το διάνυσμα  $\varphi$ , **στο οποίο οι προβολές των δειγμάτων έχουν την ελάχιστη διακύμανση**. Αυτό μπορεί να εκφραστεί μαθηματικά ως εξής [16]:

$$\min_{\varphi} (\varphi^T S_A \varphi + \varphi^T S_B \varphi) = \min_{\varphi} \varphi^T (S_A + S_B) \varphi = \min_{\varphi} \varphi^T S \varphi \quad (2.36)$$



**Εικόνα 2.3:** Γραμμική Διαχωριστική Ανάλυση: Τα δείγματα δυο διαστάσεων προβάλλονται σε ένα χώρο χαμηλότερων διαστάσεων (ευθεία γραμμή). Η ευθεία θα πρέπει να επιλεγεί έτσι ώστε η προβολή να μεγιστοποιεί τη διαχωριστικότητα των προβαλλόμενων δειγμάτων

όπου  $S = S_A + S_B$ . Ο Πίνακας Διασποράς μεταξύ των δυο κλάσεων δίνεται από την εξίσωση:

$$S_{AB} = (\bar{x}_A - \bar{x}_B)(\bar{x}_A - \bar{x}_B)^T \quad (2.37)$$

Σύμφωνα με την ιδέα του Fisher, θα πρέπει να βρεθεί ένα υπερεπίπεδο έτσι ώστε να μεγιστοποιηθεί η απόσταση μεταξύ των μέσων των δυο κλάσεων και ταυτόχρονα να ελαχιστοποιηθεί η διακύμανση σε κάθε κλάση. Η μαθηματική έκφραση αυτής της ιδέας είναι το κριτήριο μεγιστοποίησης του Fisher:

$$\max_{\varphi} \mathcal{F}(\varphi) = \max_{\varphi} \frac{\varphi^T S_{AB} \varphi}{\varphi^T S \varphi} \quad (2.38)$$

Αυτό το πρόβλημα βελτιστοποίησης μπορεί να έχει άπειρο πλήθος λύσεων με την ίδια τιμή αντικειμενικής συνάρτησης, αφού για μια λύση  $\varphi^*$  όλα τα διανύσματα  $c \cdot \varphi^*$  έχουν την ίδια τιμή. Αν, χωρίς απώλεια της γενικότητας, αντικατασταθεί ο παρανομαστής με ένα περιορισμό ισότητας ώστε να επιλεγεί μια μόνο λύση, το πρόβλημα θα είναι:

$$\max_{\varphi} \varphi^T S_{AB} \varphi \quad (2.39)$$

$$\text{με τον περιορισμό: } \varphi^T S \varphi = 1 \quad (2.40)$$

Η συνάρτηση Lagrange για το συγκεκριμένο πρόβλημα βελτιστοποίησης είναι η εξής:

$$\mathcal{L}_{LDA}(x, \lambda) = \varphi^T S_{AB} \varphi - \lambda(\varphi^T S \varphi - 1) \quad (2.41)$$

όπου  $\lambda$  είναι ο πολλαπλασιαστής Lagrange που σχετίζεται με τον περιορισμό. Αφού ο  $S_{AB}$  είναι θετικά ημι-ορισμένος το πρόβλημα βελτιστοποίησης είναι κυρτό, οπότε το ολικό μέγιστο θα είναι στο σημείο όπου ισχύει [16]:

$$\frac{\partial \mathcal{L}_{LDA}(x, \lambda)}{\partial x} = 0 \Leftrightarrow S_{AB} \varphi - \lambda S \varphi = 0 \quad (2.42)$$

Το βέλτιστο  $\varphi$  μπορεί να προκύψει ως το **ιδιοδιάνυσμα που αντιστοιχεί στη μικρότερη ιδιοτιμή** του παρακάτω γενικευμένου ιδιοσυστήματος:

$$S_{AB} \varphi = \lambda S \varphi \quad (2.43)$$

Η Γραμμική Διαχωριστική Ανάλυση **για προβλήματα πολλών κλάσεων** είναι μια επέκταση της περίπτωσης που αναλύθηκε. Θα πρέπει να οριστούν οι Πίνακες Διασποράς για τις  $n$  διαθέσιμες κλάσεις. Το άθροισμα με τους Πίνακες Διασποράς των κλάσεων είναι:

$$S = S_1 + S_2 + \dots + S_n \quad (2.44)$$

ενώ ο Πίνακας Διασποράς που ορίζεται μεταξύ των κλάσεων θα είναι ο εξής:

$$S_{1,\dots,n} = \sum_{i=1}^n p_i (\bar{x}_i - \bar{x}) (\bar{x}_i - \bar{x})^T \quad (2.45)$$

όπου  $p_i$  είναι ο αριθμός των δειγμάτων στην  $i$ -στη κλάση,  $\bar{x}_i$  είναι ο μέσος όρος κάθε κλάσης, και  $\bar{x}$  ο καθολικός μέσος όρος ο οποίος υπολογίζεται ως εξής:

$$\bar{x} = \frac{1}{p} \sum_{i=1}^n p_i \bar{x}_i \quad (2.46)$$

Ο γραμμικός μετασχηματισμός  $\varphi$  που πρέπει να βρεθεί προκύπτει λύνοντας το γενικευμένο πρόβλημα ιδιοτιμής:

$$S_{1,\dots,n} \varphi = \lambda S \varphi \quad (2.47)$$

Η Γραμμική Διαχωριστική Ανάλυση μπορεί να χρησιμοποιηθεί για ανίχνευση των πιο σημαντικών χαρακτηριστικών, με τη βοήθεια του αντίστοιχου συντελεστή στο υπερεπίπεδο προβολής και να ταξινομήσει νέα δείγματα. Εφόσον βρεθεί ο μετασχηματισμός  $\varphi$ , η ταξινόμηση μπορεί να γίνει στον μετασχηματισμένο χώρο χαμηλότερων διαστάσεων με τη χρήση κάποιου μέτρου απόστασης  $d$ . Η κλάση κάποιου νέου σημείου  $z$  προσδιορίζεται ως εξής:

$$\text{κλάση}(z) = \arg \min_n \{d(z\varphi, \bar{x}_n \varphi)\} \quad (2.48)$$

όπου  $\bar{x}_n$  το κέντρο της  $n$ -στης κλάσης. Συνεπώς, πρώτα θα πρέπει να προβληθούν τα κέντρα όλων των κλάσεων και τα άγνωστα σημεία στον υποχώρο που ορίζεται από τον  $\varphi$  και στη συνέχεια τα σημεία αυτά αναθέτονται στην πλησιέστερη κλάση ως προς  $d$  [16].

Η μέθοδος της Γραμμικής Διαχωριστικής Ανάλυσης παράγει το πολύ  $m - 1$  προβολές χαρακτηριστικών ( όπου  $m$  η διάσταση του χώρου εισόδου). Εάν το σφάλμα ταξινόμησης υποδεικνύει ότι θα πρέπει να χρησιμοποιηθούν επιπλέον χαρακτηριστικά, θα πρέπει να εφαρμοστεί κάποια άλλη μέθοδος ώστε να τα παρέχει. Επίσης, η μέθοδος αυτή είναι παραμετρική, καθώς υποθέτει μονοτροπικές, Γκαουσιανές συναρτήσεις Πιθανοφάνειας (unimodal Gaussian likelihoods). Επομένως, εάν οι κατανομές των δειγμάτων είναι σημαντικά μη-Γκαουσιανές, οι προβολές που θα προκύψουν ενδεχομένως να μην διατηρήσουν την περίπλοκη δομή της κατανομής των δειγμάτων, η οποία είναι απαραίτητη για την ταξινόμησή τους. Εάν η πληροφορία για τον διαχωρισμό των κλάσεων βασίζεται στην διακύμανση και όχι στο μέσο όρο, η Γραμμική Διαχωριστική Ανάλυση ενδεχομένως να μην αποδώσει σε αυτό το πρόβλημα [17].

Υπάρχουν διάφορες παραλλαγές της Γραμμικής Διαχωριστικής Ανάλυσης. Κάποιες από αυτές είναι οι εξής [17]:



- **Μη παραμετρική (non-parametric) LDA.** Δεν υποθέτει μονοτροπική Γκαουσιανή συνάρτηση Πιθανοφάνειας και υπολογίζει τον Πίνακα Διασποράς μεταξύ των κλάσεων χρησιμοποιώντας τοπική πληροφορία. Μπορεί να εξάγει παραπάνω από  $m - 1$  χαρακτηριστικά και οι προβολές στο υπερεπίπεδο διατηρούν καλύτερα την δομή των αρχικών δεδομένων.
- **Ορθοκανονική (Orthonormal ) LDA.** Υπολογίζει προβολές οι οποίες μεγιστοποιούν το κριτήριο του Fisher, και οι προβολές ανά ζεύγη είναι ορθοκανονικές. Και αυτή η μέθοδος μπορεί να εξάγει παραπάνω από  $m - 1$  χαρακτηριστικά.
- **Γενικευμένη (Generalized) LDA.** Γενικεύει το κριτήριο του Fisher συμπεριλαμβάνοντας μια συνάρτηση κόστους. Επομένως, η μέθοδος αυτή μπορεί να παράγει προβολές επηρεασμένες από τη συνάρτηση κόστους. Κλάσεις με υψηλότερο κόστος  $C_{ij}$  θα τοποθετηθούν περισσότερο απομακρυσμένα στο διανυσματικό χώρο της προβολής.

## Κεφάλαιο 3

# Τεχνικές Ταξινόμησης και εφαρμογή αυτών στη Βιοπληροφορική

### 3.1 Ταξινομητές Κοντινότερου Γείτονα

Η Ταξινόμηση Κοντινότερου Γείτονα είναι μια στατιστική μέθοδος επιβλεπόμενης ταξινόμησης. Οι στατιστικές προσεγγίσεις θεωρούν ότι στο πρόβλημα υπάρχει μια συγκεκριμένη στατιστική κατανομή στην οποία υπακούουν τα δεδομένα, οπότε παράγουν μια πιθανότητα σύμφωνα με την οποία ένα δείγμα ανήκει σε κάποια κλάση. Ο αλγόριθμος της μεθόδου ταξινομεί ένα νέο άγνωστο δείγμα σε εκείνη την κατηγορία από την οποία απέχει λιγότερο, με βάση μία απόσταση. Η βασική ιδέα της μεθόδου είναι η ταξινόμηση των δειγμάτων με βάση την κλάση των πλησιέστερων γειτόνων τους. Κατά την ταξινόμηση ενός δείγματος μπορεί να λαμβάνονται περισσότεροι από έναν γείτονες υπόψη για την κατηγοριοποίησή του. Επειδή τα δείγματα εκπαίδευσης χρειάζονται κατά το χρόνο εκτέλεσης του ταξινομητή και πρέπει να βρίσκονται στη μνήμη, η μέθοδος πολλές φορές ονομάζεται «**Ταξινόμηση Βασιζόμενη σε Μνήμη**» (**Memory Based Classification**) και ανήκει στην κατηγορία των τεχνικών **οκνηρής μάθησης (Lazy Learning)** επειδή δεν υπάρχει διαδικασία εκπαίδευσης και όλοι οι υπολογισμοί που χρειάζονται πραγματοποιούνται κατά την εκτέλεση της ταξινόμησης. Επίσης, επειδή η ταξινόμηση προκύπτει μόνο από τη χρήση των δειγμάτων η τεχνική είναι γνωστή και ως **Ταξινόμηση βασιζόμενη σε δείγματα (Example Based/Case Based/Instance Classification)** [18],[19].

#### 3.1.1 Μέτρα Απόστασης Δειγμάτων

Μπορούν να οριστούν διάφορα **μέτρα ομοιότητας (similarity measures)** ή **μέτρα απόστασης (distance measures)** μεταξύ των δειγμάτων, τα οποία αναφέρονται στην εγγύτητά τους. Το μέτρο, σύμφωνα με το μαθηματικό ορισμό του θα πρέπει να ικανοποιεί τέσσερα κριτήρια (όπου  $d(x, y)$  αναφέρεται στην απόσταση μεταξύ των δυο δειγμάτων  $x$  και  $y$ ) [18]:

1.  $d(x, y) \geq 0$  (μη αρνητικές τιμές)
2.  $d(x, y) = 0$  μόνο εάν  $x = y$  (ταυτότητα)
3.  $d(x, y) = d(y, x)$  (συμμετρία)
4.  $d(x, z) \geq d(x, y) + d(y, z)$  (τριγωνική ανισότητα)

Υπάρχει η δυνατότητα να σχεδιαστεί ένας ταξινομητής κοντινότερου γείτονα με μετρική απόστασης που δεν υπακούει στον αυστηρό ορισμό του μέτρου, αλλά δεν θα είναι δυνατό να εφαρμοστούν διάφορες βελτιώσεις της απόδοσης που είναι διαθέσιμες για τους ταξινομητές με μέτρα που ακολουθούν τον ορισμό.

Υπάρχουν δυο βασικές κατηγορίες μέτρων που μπορούν να χρησιμοποιηθούν [18]:

- $L_1$  και  $L_2$  Απόσταση Minkowski:

$$MD_p(\mathbf{q}, x_i) = \left( \sum_{f \in F} |q_f - x_{if}|^p \right)^{\frac{1}{p}} \quad (3.1)$$

όπου  $f$  ένα χαρακτηριστικό από το σύνολο των χαρακτηριστικών  $F$ ,  $q_f$  η τιμή του άγνωστου δείγματος για το χαρακτηριστικό  $f$  και  $x_{if}$  η τιμή του δείγματος εκπαίδευσης  $x_i$  για το χαρακτηριστικό αυτό. Η παράμετρος  $p$  καθορίζεται εκ των προτέρων.

Η  $L_1$  απόσταση Minkowski (1- νόρμα) είναι η **απόσταση Manhattan** και η  $L_2$  απόσταση Minkowski είναι η **Ευκλείδεια απόσταση**. Μεγαλύτερες τιμές του  $p$  δίνουν μεγαλύτερο βάρος στα χαρακτηριστικά στα οποία τα δείγματα διαφέρουν περισσότερο αλλά τιμές πάνω από τη τιμή  $p = 2$  δεν χρησιμοποιούνται στην πράξη.

- $L_\infty$  Απόσταση Minkowski:

$$MD_\infty(\mathbf{q}, x_i) = \max_{f \in F} |q_f - x_{if}| \quad (3.2)$$

Η απόσταση αυτή είναι γνωστή και ως απόσταση Chebyshev. Εκφράζει την απόσταση των δειγμάτων σε μια συγκεκριμένη διάσταση, στην οποία παρουσιάζουν τη μεγαλύτερη διαφορά [18].

Μπορούν να χρησιμοποιηθούν και άλλες αποστάσεις, όπως η απόσταση Hamming και η απόσταση Mahalanobis. Αφού οριστεί η απόσταση ή η ομοιότητα μεταξύ των δειγμάτων, στη συνέχεια μπορεί να γίνει χρήση αλγορίθμων κοντινής γειτονίας [19].

### 3.1.2 Ταξινομητής Κοντινότερου Γείτονα

Ο ταξινομητής που χρησιμοποιεί αλγόριθμο Κοντινότερου Γείτονα (Nearest Neighbor) απλώς αναθέτει σε κάποιο άγνωστο δείγμα την κλάση του κοντινότερου δείγματος εκπαίδευσης σε αυτό. Έστω ότι υπάρχουν  $N$  δείγματα εκπαίδευσης,  $(\mathbf{x}_1, \theta_1), (\mathbf{x}_2, \theta_2), \dots, (\mathbf{x}_N, \theta_N)$ , όπου το  $\mathbf{x}_i$  είναι διάστασης  $l$  και το  $\theta_i$  η κλάση του  $i$ -στού δείγματος. Αν το άγνωστο δείγμα είναι το  $\mathbf{P}$ , τότε [20]:

$$d(\mathbf{P}, \mathbf{x}_k) = \min\{d(\mathbf{P}, \mathbf{x}_i)\}, i = 1, \dots, N \quad (3.3)$$

$$(\mathbf{P}, \theta_p) = (\mathbf{P}, \theta_k) \quad (3.4)$$

Ο ταξινομητής Κοντινότερου Γείτονα, ο οποίος ονομάζεται και ταξινομητής 1<sup>ου</sup> Κοντινότερου Γείτονα (1-NN, 1 Nearest Neighbor), είναι απλός, δεν χρειάζεται διαδικασία εκμάθησης και μπορεί να χρησιμοποιηθεί ακόμα και όταν το πλήθος των διαθέσιμων δειγμάτων εκπαίδευσης είναι πολύ μικρό. Αποδίδει πολύ καλά σε χαμηλές διαστάσεις, για πολύπλοκες επιφάνειες απόφασης, αλλά η διαδικασία ταξινόμησης είναι αργή. Επίσης, η αποτελεσματικότητά του μειώνεται αρκετά καθώς αυξάνουν οι διαστάσεις του προβλήματος [21].

Μπορεί να δειχθεί ότι καθώς  $N \rightarrow \infty$ , η πιθανότητα σφάλματος ταξινόμησης του ταξινομητή 1-NN,  $P_{NN}$ , είναι φραγμένη ως εξής [8]:

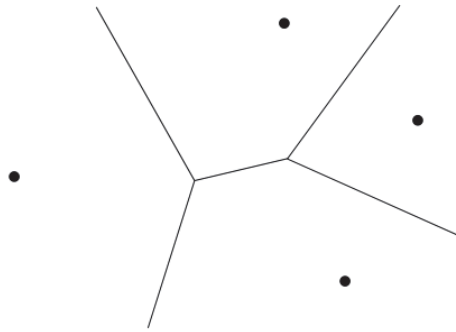
$$P_B \leq P_{NN} \leq P_B \left( 2 - \frac{M}{M-1} P_B \right) \leq 2P_B \quad (3.5)$$

όπου  $P_B$  η πιθανότητα σφάλματος του βέλτιστου ταξινομητή Bayes. Επομένως, η πιθανότητα σφάλματος του ταξινομητή 1-NN μπορεί να είναι ασυμπτωτικά το πολύ διπλάσια από αυτή του βέλτιστου ταξινομητή.

Κατά τη χρήση του Ταξινομητή 1-NN, τα δείγματα εκπαίδευσης  $X_i, i = 1, \dots, N$  ορίζουν μια διαμέριση του  $l$ -διάστατου διανυσματικού χώρου σε  $N$  περιοχές  $R_i$ , οι οποίες ορίζονται ως εξής [8]:

$$R_i = \{\mathbf{x}: d(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i) < d(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j), i \neq j\} \quad (3.6)$$

Η περιοχή  $R_i$  περιέχει όλα τα σημεία του χώρου τα οποία είναι πλησιέστερα στο  $\mathbf{x}_i$  από οποιοδήποτε άλλο σημείο του συνόλου εκπαίδευσης, ως προς την απόσταση  $d$ . Αυτή η διαμέριση του διανυσματικού χώρου χαρακτηριστικών είναι γνωστή ως **ψηφίδωση Voronoi (Voronoi tessellation)** (Εικόνα 3.1).



**Εικόνα 3.1:** Ψηφίδωση Voronoi σε δισδιάστατο διανυσματικό χώρο, χρησιμοποιώντας Ευκλείδεια απόσταση

### 3.1.3 Ταξινομητής $k$ Κοντινότερων Γειτόνων

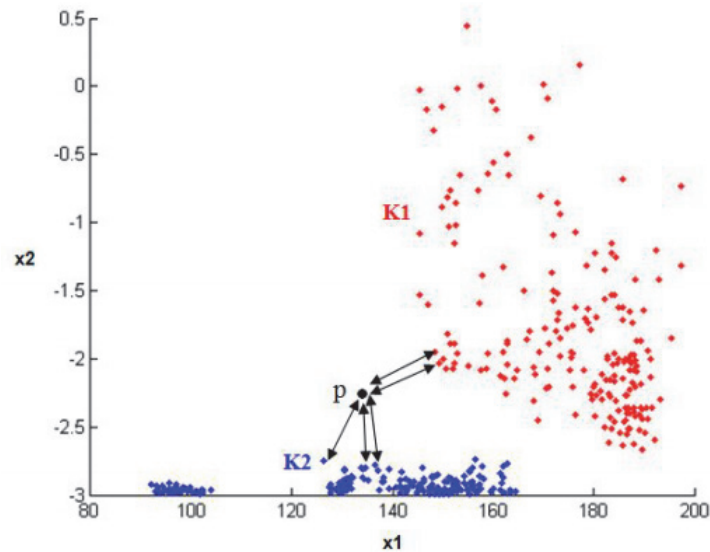
Ο Ταξινομητής  $k$  Κοντινότερων Γειτόνων ( $k$  Nearest Neighbors,  $k$ -NN) χωρίς να αποτελεί μια βέλτιστη μέθοδο, είναι ιδιαίτερα δημοφιλής στην πράξη. Δοθέντος ενός διανύσματος χαρακτηριστικών  $x$  και ενός μέτρου απόστασης, ο κανόνας των κοντινότερων γειτόνων συνοψίζεται ως εξής [8]:

- Από το σύνολο των  $N$  δεδομένων εκπαίδευσης, προσδιορίζονται οι  $k$  πλησιέστεροι γείτονες, ανεξάρτητα από την κλάση τους. Ο αριθμός  $k$  επιλέγεται ώστε να είναι περιττός για προβλήματα ταξινόμησης με δυο κλάσεις και γενικώς αποφεύγεται να είναι πολλαπλάσιο του αριθμού των κλάσεων  $M$ .
- Από το σύνολο των  $k$  δειγμάτων, προσδιορίζεται ο αριθμός των διανυσμάτων  $k_i$  που ανήκουν στην κλάση  $\omega_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, M$ . Προφανώς ισχύει ότι  $\sum_i k_i = k$ .
- Το διάνυσμα χαρακτηριστικών  $x$  ανατίθεται στην κλάση  $\omega_i$  με τον μέγιστο αριθμό  $k_i$  δειγμάτων.

Καθώς  $N \rightarrow \infty$ , η πιθανότητα σφάλματος ταξινόμησης του  $k$ -NN ταξινομητή,  $P_{kNN}$ , είναι φραγμένη [8]:

$$P_B \leq P_{kNN} \leq P_B + \frac{2P_{NN}}{k} \quad (3.7)$$

όπου  $P_B$  η πιθανότητα σφάλματος του βέλτιστου ταξινομητή Bayes. Από τη σχέση (3.7) αυτή προκύπτει ότι για  $k \rightarrow \infty$  η απόδοση του  $k$ -NN είναι η βέλτιστη.



**Εικόνα 3.2:** Ταξινόμηση με  $k=5$  κοντινούς γείτονες. Οι 3 κοντινότεροι γείτονες ανήκουν στην κλάση  $K2$  επομένως το δείγμα  $p$  ταξινομείται σε αυτήν [19].

Ένα σημαντικό μειονέκτημα των  $k$ -NN ταξινομητών είναι η πολυπλοκότητα της διαδικασίας αναζήτησης γειτόνων από το σύνολο των  $N$  δειγμάτων εκπαίδευσης. Αλγόριθμοι αναζήτησης Brute-force χρειάζονται υπολογιστικό χρόνο της τάξης του  $kN$  ( $O(kN)$ ). Το πρόβλημα αυτό εντείνεται σε διανυσματικούς χώρους χαρακτηριστικών υψηλότερων διαστάσεων. Για να μειωθεί η πολυπλοκότητα των υπολογισμών, έχουν προταθεί περισσότερο αποδοτικά σχήματα αναζήτησης με βελτιώσεις, όπως για παράδειγμα κάποια στάδια προεπεξεργασίας.

Ο Ταξινομητής  $k$ -NN επιτυγχάνει ικανοποιητική απόδοση όταν το πλήθος των δεδομένων εκπαίδευσης είναι μεγάλο και η απόδοση μπορεί να μειωθεί δραματικά σε περιπτώσεις όπου το πλήθος δεδομένων εκπαίδευσης είναι μικρό. Επειδή στην πράξη ενδεχομένως να χρειαστεί η ελάττωση του πλήθους των δειγμάτων εξαιτίας των περιορισμών που ίσως υπάρχουν σχετικά με τους διαθέσιμους υπολογιστικούς πόρους, έχουν αναπτυχθεί διάφορες τεχνικές για την βελτίωση της απόδοσης σε αυτές τις περιπτώσεις, όπως η επεξεργασία πρωτοτύπου (prototype editing) και η συμπύκνωση (condensing). Η ιδέα των τεχνικών αυτών είναι η μείωση του αριθμού των δειγμάτων εκπαίδευσης με τέτοιο τρόπο ώστε να βελτιστοποιείται μια συνάρτηση κόστους που σχετίζεται με την απόδοση του ταξινομητή. Μια προσεκτική μείωση του αριθμού των δειγμάτων εκπαίδευσης μπορεί επίσης να θωρακίσει τον ταξινομητή ως προς τις επιδράσεις ακραίων τιμών που ενδεχομένως να υπάρχουν [8].

Ένας άλλος τρόπος βελτίωσης της απόδοσης του ταξινομητή είναι η εύρεση κατάλληλων μέτρων απόστασης για το εκάστοτε σύνολο δεδομένων. Ο στόχος είναι να βρεθεί ένα παραμετροποιημένο μέτρο απόστασης προσαρμοσμένο κατάλληλα στα

δεδομένα, το οποίο οδηγεί σε βέλτιστη απόδοση σύμφωνα με μια συγκεκριμένη συνάρτηση κόστους. Τα μέτρα αυτά μπορεί να είναι καθολικά (τα ίδια για κάθε δείγμα), εξαρτώμενα από το είδος της κλάσης ή μπορεί να έχουν τοπικό χαρακτήρα (διαφέρουν ανάλογα με τη θέση του δείγματος στον διανυσματικό χώρο των χαρακτηριστικών) [8].

Υπάρχουν διάφορες παραλλαγές του ταξινομητή  $k$ -NN [20],[21]:

- **Ταξινομητής  $k$ -NN με βάρη (weighted k-Nearest Neighbour – Wk-NN).** Λειτουργεί όπως ο ταξινομητής  $k$ -NN, λαμβάνοντας υπόψη μόνο τους  $k$  κοντινότερους γείτονες. Η διαφορά έγκειται στο ότι στον συγκεκριμένο ταξινομητή οι  $k$  κοντινότεροι γείτονες σταθμίζονται σύμφωνα με την απόστασή τους από νέο δείγμα που πρόκειται να ταξινομηθεί. Στη συνέχεια τα βάρη αυτά λαμβάνονται υπόψη κατά την επιλογή της κλάσης, επομένως μειώνεται η επίδραση των ακραίων τιμών.
- **Ταξινομητής  $k$ -NN με ασαφείς κλάσεις (Fuzzy k-NN).** Οι κλάσεις των δειγμάτων θεωρούνται ως ασαφή σύνολα. Κάθε δείγμα συμμετέχει σε μια κλάση με βάση κάποιο βαθμό συμμετοχής, ο οποίος εξαρτάται από τις κλάσεις των  $k$  γειτόνων. Ο βαθμός συμμετοχής είναι ένας πραγματικός αριθμός στο διάστημα  $[0,1]$ .
- **$r$  Κοντινότεροι Γείτονες ( $r$  Near Neighbours).** Αντί να εξετάζονται οι  $k$  κοντινότεροι γείτονες, λαμβάνονται υπόψη όλοι οι γείτονες εντός μιας απόστασης  $r$  από το δείγμα προς ταξινόμηση. Συνοπτικά, αποτελείται από τρία βήματα:
  - Βήμα 1:** Δοθέντος ενός σημείου  $P$ , προσδιορίζεται το υποσύνολο των δεδομένων που βρίσκεται σε υπερ-σφαίρα ακτίνας  $r$ , με κέντρο το  $P$ :
 
$$B_r(P) = \{x_i \in X, \|P - x_i\| \leq r\}$$
  - Βήμα 2:** Εάν το  $B_r(P)$  είναι άδειο, η έξοδος είναι η κλάση της πλειοψηφίας όλου του συνόλου δεδομένων.
  - Βήμα 3:** Εάν το  $B_r(P)$  δεν είναι άδειο, τότε η έξοδος είναι η κλάση της πλειοψηφίας των δειγμάτων του  $B_r(P)$ .
- **(k-l) NN Ταξινομητής.** Προτάθηκε από τον Hellman (1970)[21]. Πραγματοποιεί ταξινόμηση μόνο εάν τουλάχιστον  $l > k/2$  κοντινότεροι γείτονες ανήκουν στην ίδια κλάση αλλιώς αρνείται να ταξινομήσει το δείγμα.

## 3.2 Μπεϋζιανοί Ταξινομητές

### 3.2.1 Μπεϋζιανή Θεωρία Απόφασης

Με δεδομένο ένα πρόβλημα ταξινόμησης  $M$  κλάσεων,  $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_M$ , και ένα άγνωστο δείγμα με διάνυσμα χαρακτηριστικών  $\mathbf{x}$ , σχηματίζονται  $M$  υπο συνθήκη πιθανότητες  $P(\omega_i|\mathbf{x}), i = 1, 2, \dots, M$ , οι οποίες ονομάζονται **εκ των υστέρων πιθανότητες (a posteriori probabilities)**. Κάθε  $P(\omega_i|\mathbf{x})$  αναπαριστά την πιθανότητα ένα άγνωστο δείγμα να ανήκει στην κλάση  $\omega_i$ , δεδομένου του γεγονότος ότι το διάνυσμα χαρακτηριστικών του δείγματος παίρνει την τιμή  $\mathbf{x}$ .

Θεωρώντας ένα πρόβλημα ταξινόμησης με δυο κλάσεις, έστω  $\omega_1$  και  $\omega_2$  οι δυο κλάσεις στις οποίες μπορούν να ανήκουν τα δείγματα. Γίνεται η υπόθεση ότι οι μη δεσμευμένες, εκ των προτέρων πιθανότητες (a priori probabilities) να ανήκει ένα δείγμα σε μια κλάση,  $P(\omega_1)$  και  $P(\omega_2)$ , είναι γνωστές. Αν δεν είναι γνωστές, μπορεί εύκολα να προκύψει μια εκτίμησή τους από τα διαθέσιμα δείγματα εκπαίδευσης, αφού αν  $N$  είναι ο συνολικός αριθμός των δειγμάτων εκπαίδευσης και  $N_1, N_2$  από αυτά ανήκουν στις κλάσεις  $\omega_1, \omega_2$  αντίστοιχα, τότε  $P(\omega_1) \approx N_1/N$  και  $P(\omega_2) \approx N_2/N$  [8].

Εκτός από τις εκ των προτέρων πιθανότητες, επίσης θεωρούνται γνωστές οι συναρτήσεις πυκνότητας υπο συνθήκης πιθανότητας  $p(\mathbf{x}|\omega_i), i = 1, 2, \dots, M$ , οι οποίες περιγράφουν την κατανομή των διανυσμάτων χαρακτηριστικών σε κάθε μια από τις κλάσεις. Αν δεν είναι γνωστές μπορούν να υπολογιστούν από τα διαθέσιμα δεδομένα. Η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας  $p(\mathbf{x}|\omega_i)$  πολλές φορές αναφέρεται και ως συνάρτηση πιθανοφάνειας (likelihood function) των  $\omega_i$  ως προς  $\mathbf{x}$ . Στα παραπάνω έχει γίνει η υπόθεση ότι τα διανύσματα χαρακτηριστικών μπορούν να πάρουν οποιαδήποτε τιμή στον  $l$ -διάστατο διανυσματικό χώρο χαρακτηριστικών. Αν τα διανύσματα χαρακτηριστικών παίρνουν διακριτές τιμές, οι συναρτήσεις  $p(\mathbf{x}|\omega_i)$  γίνονται πιθανότητες και σημειώνονται ως  $P(\mathbf{x}|\omega_i)$  [8].

Ο **κανόνας του Bayes** χρησιμοποιεί τις παραπάνω πιθανότητες, και είναι ο εξής [8]:

$$P(\omega_i|\mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x}|\omega_i)P(\omega_i)}{p(\mathbf{x})} \quad (3.8)$$

όπου  $p(\mathbf{x})$  η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας για την οποία ισχύει:

$$p(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^2 p(\mathbf{x}|\omega_i)P(\omega_i) \quad (3.9)$$

Επομένως, ο **κανόνας ταξινόμησης του Bayes** μπορεί να εκφραστεί ως εξής:



$$\begin{aligned} \text{Αν } P(\omega_1|\mathbf{x}) > P(\omega_2|\mathbf{x}), \text{ το } x \text{ ταξινομείται στην } \omega_1 \\ \text{Αν } P(\omega_1|\mathbf{x}) < P(\omega_2|\mathbf{x}), \text{ το } x \text{ ταξινομείται στην } \omega_2 \end{aligned} \quad (3.10)$$

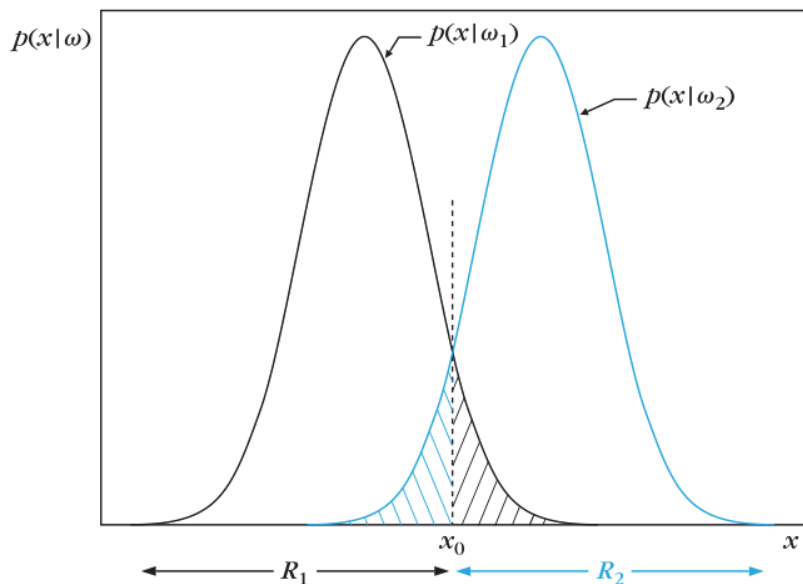
Η περίπτωση της ισότητας είναι τετριμμένη, και το δείγμα μπορεί να ταξινομηθεί σε οποιαδήποτε από τις δυο κλάσεις. Χρησιμοποιώντας την εξίσωση (3.8), η απόφαση ταξινόμησης μπορεί να βασιστεί στις ανισότητες:

$$p(\mathbf{x}|\omega_1)P(\omega_1) \geq p(\mathbf{x}|\omega_2)P(\omega_2) \quad (3.11)$$

Το  $p(\mathbf{x})$  δεν λαμβάνεται υπόψη, διότι είναι το ίδιο για όλες τις κλάσεις και δεν επηρεάζει την απόφαση. Αν οι εκ των προτέρων πιθανότητες για τις δυο κλάσεις είναι ίδιες, δηλαδή  $P(\omega_1) = P(\omega_2) = 1/2$ , οι ανισότητες (3.11) γίνονται:

$$p(\mathbf{x}|\omega_1) \geq p(\mathbf{x}|\omega_2) \quad (3.12)$$

Επομένως, θα πρέπει να γίνει αναζήτηση της μέγιστης τιμής των συναρτήσεων πυκνότητας της υπο συνθήκης πιθανότητας υπολογισμένη στο σημείο  $x$ . Η Εικόνα 3.3 παρουσιάζει ένα δείγμα δυο ισοπίθανων κλάσεων και δείχνει τις δυο συναρτήσεις  $p(x|\omega_i)$   $i = 1, 2$  για διάφορες τιμές του  $x$  για την απλή περίπτωση ενός χαρακτηριστικού ( $l = 1$ ). Η διακεκομμένη γραμμή  $x_0$  ορίζει ένα κατώφλι διαχωρισμού, το οποίο χωρίζει τον διανυσματικό χώρο χαρακτηριστικών σε δυο περιοχές, την  $R_1$  και την  $R_2$ . Σύμφωνα με τον κανόνα ταξινόμησης του Bayes, για όλες τις τιμές του  $x$  στην περιοχή  $R_1$  ο ταξινομητής επιλέγει την κλάση  $\omega_1$  και για τις τιμές του  $x$  στην περιοχή  $R_2$  επιλέγει την κλάση  $\omega_2$ . Παρόλα αυτά, από το διάγραμμα αυτό είναι προφανές ότι τα σφάλματα ταξινόμησης δεν είναι δυνατό να αποφευχθούν [8].



**Εικόνα 3.3:** Συναρτήσεις πυκνότητας υπο συνθήκης πιθανότητας για δυο κλάσεις  $\omega_1$  και  $\omega_2$  και οι δυο περιοχές  $R_1$  και  $R_2$  που σχηματίζονται με βάση το κατώφλι  $x_0$

Υπάρχει μια πεπερασμένη πιθανότητα για ένα διάνυσμα  $x$  να βρίσκεται στην περιοχή  $R_2$  αλλά να ανήκει στην κλάση  $\omega_1$ , οπότε σε αυτή την περίπτωση θα υπάρξει σφάλμα ταξινόμησης. Το ίδιο θα συμβεί και για σημεία της περιοχής  $R_1$  με κλάση  $\omega_2$ . Η **συνολική πιθανότητα σφάλματος ταξινόμησης**  $P_e$ , στην περίπτωση δυο ισοπίθανων κλάσεων δίνεται από την εξίσωση:

$$P_e = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{x_0} p(x|\omega_2) dx + \frac{1}{2} \int_{x_0}^{+\infty} p(x|\omega_1) dx \quad (3.13)$$

το οποίο ισούται με την συνολική γραμμοσκιασμένη περιοχή στην Εικόνα 3.3.

Μπορεί να αποδειχθεί ότι ο κανόνας ταξινόμησης του Bayes είναι βέλτιστος ως προς την ελαχιστοποίηση της πιθανότητας σφάλματος ταξινόμησης. Αυτό μπορεί να φανεί εμπειρικά από την Εικόνα 3.3, αφού αν μετακινηθεί το κατώφλι διαχωρισμού από την θέση  $x_0$ , το εμβαδόν της γραμμοσκιασμένης περιοχής αυξάνεται [8].

### 3.2.2 Απλοϊκός Μπεϋζιανός Ταξινομητής

Για να εφαρμοστεί ο κανόνας ταξινόμησης του Bayes, θα πρέπει να προσδιοριστούν οι συναρτήσεις πυκνότητας πιθανότητας  $p(x|\omega_i)$ ,  $i = 1, 2, \dots, M$  χρησιμοποιώντας το διαθέσιμο σύνολο δεδομένων εκπαίδευσης. Επομένως, το πλήθος των δειγμάτων εκπαίδευσης  $N$  θα πρέπει να είναι αρκετά μεγάλο, ώστε να προκύψουν ασφαλείς εκτιμήσεις των συναρτήσεων πυκνότητας πιθανότητας, όμως η ανάγκη για επιπλέον δεδομένα εκπαίδευσης αυξάνει εκθετικά σε σχέση με την διάσταση  $l$  του χώρου των χαρακτηριστικών. Αν από  $N$  δείγματα εκπαίδευσης μπορούν να προκύψουν επαρκώς ακριβείς εκτιμήσεις μιας συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας για διανυσματικό χώρο μιας διάστασης, θα χρειαστούν  $N^l$  δείγματα εκπαίδευσης για ένα διανυσματικό χώρο  $l$  διαστάσεων. Επομένως, μεγάλες τιμές του  $l$  δεν επιτρέπουν την εκτίμηση της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας με μεγάλη ακρίβεια αφού είναι πολύ δύσκολο να συγκεντρωθεί ένας πολύ μεγάλος αριθμός δεδομένων εκπαίδευσης. Θα πρέπει να γίνει συμβιβασμός ως προς το βαθμό ακρίβειας της εκτίμησης των συναρτήσεων πυκνότητας πιθανότητας.

Μια προσέγγιση που χρησιμοποιείται συχνά είναι η υπόθεση ότι τα χαρακτηριστικά  $x_j$ ,  $j = 1, 2, \dots, l$  του προβλήματος είναι **στατιστικώς ανεξάρτητα**. Με δεδομένη την υπόθεση αυτή, ισχύει ότι [8]:

$$p(x|\omega_i) = \prod_{j=1}^l p(x_j|\omega_i), \quad i = 1, 2, \dots, M \quad (3.14)$$

Σε αυτή την περίπτωση, για τον υπολογισμό  $l$  συναρτήσεων πυκνότητας πιθανότητας μίας διάστασης, χρειάζονται  $lN$  δείγματα εκπαίδευσης και όχι  $N^l$ . Ο **Απλοϊκός Μπεϋζιανός Ταξινομητής (Naïve Bayes Classifier)** χρησιμοποιεί αυτή την παραδοχή, και αναθέτει ένα άγνωστο δείγμα με διάνυσμα χαρακτηριστικών  $x = [x_1, x_2, \dots, x_l]^T$  στην κλάση:

$$\omega_m = \arg \max_{\omega_i} \prod_{j=1}^l p(x_j | \omega_i), \quad i = 1, 2, \dots, M \quad (3.15)$$

Ο Απλοϊκός Μπεϋζιανός Ταξινομητής μπορεί να είναι εύρωστος σε παραβιάσεις της υπόθεσης της ανεξαρτησίας των χαρακτηριστικών και αποδίδει καλά για διάφορα πρακτικά προβλήματα [8].

Μια παραλλαγή του Απλοϊκού Μπεϋζιανού Ταξινομητή είναι ο **Επαυξημένος Απλοϊκός Μπεϋζιανός Ταξινομητής με δενδρική δομή (Tree Augmented Naive Bayes - TAN)**. Ο ταξινομητής αυτός επεκτείνει τον Απλοϊκό Μπεϋζιανό Ταξινομητή με το να επιτρέπει στα χαρακτηριστικά να σχηματίζουν δομή δέντρου, οπότε μοντελοποιεί συγκεκριμένου είδους συσχετίσεις μεταξύ των χαρακτηριστικών [22].

### 3.2.3 Μπεϋζιανά Δίκτυα

Ο Απλοϊκός Μπεϋζιανός Ταξινομητής είναι ένας τρόπος αντιμετώπισης της ανάγκης για μεγάλο πλήθος δεδομένων εκπαίδευσης. Εκμεταλλεύεται περισσότερο αποδοτικά τα διαθέσιμα δεδομένα εκπαίδευσης, όμως αποτελεί μια ακραία θεώρηση, διότι υποθέτει ότι όλα τα χαρακτηριστικά είναι εντελώς ανεξάρτητα μεταξύ τους. Επομένως, θα πρέπει να βρεθεί μια λύση που θεωρεί την ανεξαρτησία των χαρακτηριστικών όπου αυτή χρειάζεται.

Τα Μπεϋζιανά Δίκτυα (Bayesian Networks) εισάγουν μια μεθοδολογία δημιουργίας μοντέλων τα οποία μπορούν να εκφράσουν **υποθέσεις ανεξαρτησίας για συγκεκριμένα χαρακτηριστικά**  $x_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, l$ . Ο κανόνας αλυσίδας για τις πιθανότητες είναι ο εξής:

$$p(x_1, x_2, \dots, x_l) = p(x_l | x_{l-1}, \dots, x_1) p(x_{l-1} | x_{l-2}, \dots, x_l) \dots p(x_2 | x_1) p(x_1) \quad (3.16)$$

Ο κανόνας αυτός εφαρμόζεται πάντα και δεν εξαρτάται από την σειρά με την οποία παρουσιάζονται τα χαρακτηριστικά, δηλώνοντας ότι η από κοινού συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας μπορεί να εκφραστεί ως γινόμενο συναρτήσεων πυκνότητας υπο συνθήκη πιθανότητας. Αξιοποιώντας τον κανόνα αυτό, η υπο συνθήκη εξάρτησης για κάθε χαρακτηριστικό  $x_i$  θα περιοριστεί σε ένα υποσύνολο χαρακτηριστικών τα οποία θα εμφανίζονται σε κάθε όρο των γινομένων του κανόνα αλυσίδας. Έτσι, η εξίσωση (3.16) μπορεί να γραφεί ως εξής [8]:

$$p(\mathbf{x}) = p(x_1) \prod_{i=2}^l p(x_i | A_i) \quad (3.17)$$

$$A_i \subseteq \{x_{i-1}, x_{i-2}, \dots, x_1\} \quad (3.18)$$

Μπορεί να θεωρηθεί για παράδειγμα  $l = 6$  και:

$$p(x_6 | x_5, \dots, x_1) = p(x_6 | x_5, x_4) \quad (3.19)$$

$$p(x_5 | x_4, \dots, x_1) = p(x_5 | x_4) \quad (3.20)$$

$$p(x_4 | x_3, x_2, x_1) = p(x_4 | x_2, x_1) \quad (3.21)$$

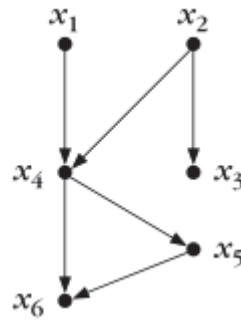
$$p(x_3 | x_2, x_1) = p(x_3 | x_2) \quad (3.22)$$

$$p(x_2 | x_1) = p(x_2) \quad (3.23)$$

Οπότε,

$$A_6 = \{x_5, x_4\}, A_5 = \{x_4\}, A_4 = \{x_2, x_1\}, A_3 = \{x_2\}, A_2 = \emptyset \quad (3.24)$$

Αυτές οι εξαρτήσεις μπορούν να απεικονιστούν με τη βοήθεια του παρακάτω σχήματος (Εικόνα 3.4) [8]:



*Εικόνα 3.4: Γραφικό Μοντέλο, το οποίο απεικονίζει τις εξαρτήσεις υπο συνθήκη μεταξύ των χαρακτηριστικών*

Οι κόμβοι του γραφήματος αυτού αντιστοιχούν στα χαρακτηριστικά. Οι γονείς ενός χαρακτηριστικού  $x_i$  είναι εκείνα τα χαρακτηριστικά που έχουν άμεση σύνδεση με το  $x_i$  και ανήκουν στο σύνολο  $A_i$ . Επομένως, **το χαρακτηριστικό  $x_i$ , δεδομένου των γονέων του, είναι υπο συνθήκη ανεξάρτητο από οποιοδήποτε συνδυασμό χαρακτηριστικών που δεν είναι απόγονοί του.** Από την πρόταση  $p(x_3 | x_2, x_1) = p(x_3 | x_2)$  δεν μπορεί να βγει το συμπέρασμα ότι τα  $x_1$  και  $x_3$  είναι ανεξάρτητα. Μπορεί να υπάρχει εξάρτηση μεταξύ των  $x_1$  και  $x_3$  καθώς το  $x_2$  δεν είναι γνωστό, αλλά να γίνονται ανεξάρτητα όταν η τιμή του  $x_2$  γίνεται γνωστή.

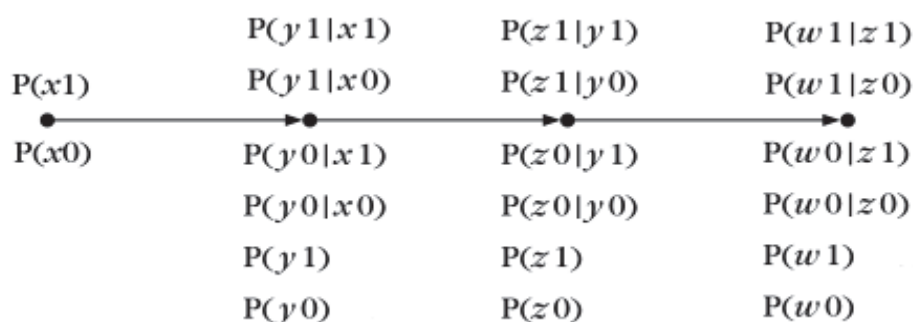
Με βάση τις παραπάνω παραδοχές, η εκτίμηση της κοινής συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας προκύπτει από το γινόμενο απλούστερων όρων. Κάθε όρος περιλαμβάνει σε γενικές γραμμές μικρότερο αριθμό χαρακτηριστικών σε σχέση με απλούστερους όρους, όπως για παράδειγμα οι εξισώσεις (3.19)-(3.23), στις οποίες δεν περιλαμβάνονται πάνω από τρία χαρακτηριστικά. Επομένως, ο υπολογισμός κάθε όρου της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας γίνεται σε διανυσματικό χώρο χαμηλότερων διαστάσεων, μειώνοντας την ανάγκη για περισσότερα δεδομένα εκπαίδευσης. Στη συνέχεια θα οριστεί η έννοια του Μπεϋζιανού Δικτύου, θεωρώντας χαρακτηριστικά που παίρνουν διακριτές τιμές, οπότε οι συναρτήσεις πυκνότητας πιθανότητας γίνονται απλές πιθανότητες.

Ένα **Μπεϋζιανό Δίκτυο (Bayesian Network)** είναι ένα **κατευθυνόμενο ακυκλικό γράφημα (directed acyclic graph - DAG)** όπου οι κόμβοι αναφέρονται σε τυχαίες μεταβλητές (χαρακτηριστικά). Κάθε κόμβος σχετίζεται με ένα σύνολο υπο συνθήκη πιθανοτήτων  $P(x_i|A_i)$  (θεωρώντας χαρακτηριστικά που παίρνουν διακριτές τιμές), όπου  $x_i$  είναι η μεταβλητή που αναπαριστά ο κόμβος και  $A_i$  είναι το σύνολο των γονέων του κόμβου στο γράφημα [8].

Για τον πλήρη προσδιορισμό ενός Μπεϋζιανού Δικτύου θα πρέπει να προσδιοριστούν:

- Οι περιθώριες πιθανότητες (marginal probabilities) των ριζών του δικτύου (δηλαδή των κόμβων που δεν έχουν γονέα)
- Οι υπο συνθήκη πιθανότητες για τους κόμβους που δεν είναι ρίζες, δεδομένου των γονέων τους, για όλους τους δυνατούς συνδυασμούς των τιμών τους.

Η από κοινού πιθανότητα κάθε μεταβλητής μπορεί να υπολογιστεί πολλαπλασιάζοντας όλες τις υπο συνθήκη πιθανότητες με τις περιθώριες πιθανότητες των ριζών. Αυτό μπορεί να γίνει πραγματοποιώντας πρώτα **τοπολογική ταξινόμηση (topological sorting)** των τυχαίων μεταβλητών (διάταξη των μεταβλητών έτσι ώστε κάθε μεταβλητή να έχει θέση πριν τους απογόνους της). Για παράδειγμα, αν θεωρηθεί το απλό Μπεϋζιανό Δίκτυο της Εικόνας 3.5, το οποίο περιέχει τις δυαδικές μεταβλητές  $x, y, w, z$ , η από κοινού πιθανότητα για τη μεταβλητή  $y$  μπορεί να υπολογιστεί ως εξής [8]:



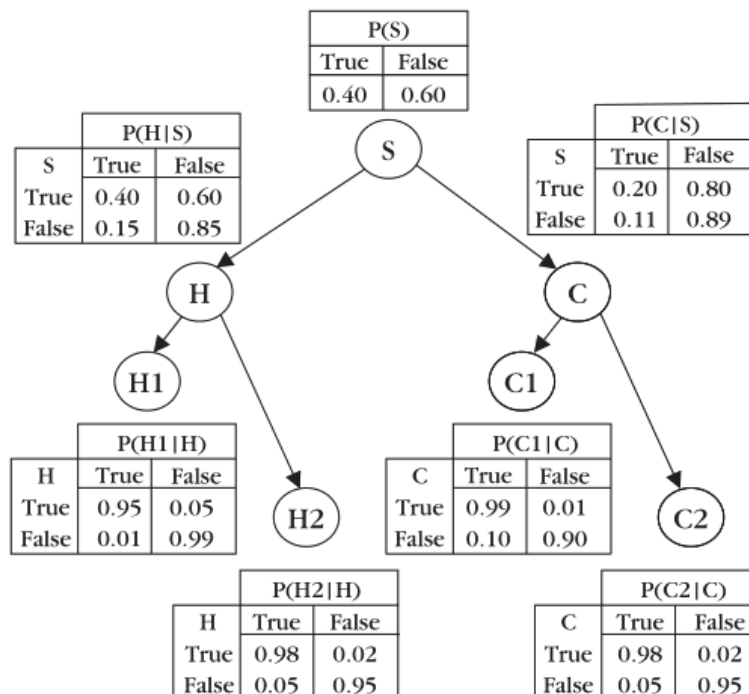
**Εικόνα 3.5:** Απλό Μπεϋζιανό Δίκτυο, στο οποίο οι υπο συνθήκη εξαρτήσεις έχουν περιοριστεί σε μια μόνο μεταβλητή

$$P(y1) = P(y1|x1)P(x1) + P(y1|x0)P(x0) \quad (3.25)$$

$$P(y0|x1) = 1 - P(y1|x1) \quad (3.26)$$

όπου  $y1, x1$  συμβολίζει τα  $y = 1, x = 1$  και  $y0, x0$  συμβολίζει τα  $y = 0, x = 0$ .

Άλλο ένα παράδειγμα Μπεϋζιανού Δικτύου από το πεδίο της ιατρικής διάγνωσης παρουσιάζεται στην Εικόνα 3.6 [8]. Η μεταβλητή  $S$  αναφέρεται στους καπνιστές, η  $C$  στον καρκίνο του πνεύμονα, η  $H$  σε καρδιοπάθεια, οι  $H1, H2$  είναι ιατρικά τεστ για διάγνωση καρδιοπάθειας και οι  $C1, C2$  είναι ιατρικά τεστ για διάγνωση καρκίνου.



**Εικόνα 3.6:** Μπεϋζιανό Δίκτυο το οποίο μοντελοποιεί τις υπο συνθήκη εξαρτήσεις για ένα παράδειγμα που αφορά καπνιστές ( $S$ ), τάση ανάπτυξης καρκίνου ( $C$ ) και καρδιοπάθειας ( $H$ ), μαζί με μεταβλητές που αφορούν ιατρικά διαγνωστικά τεστ καρδιοπάθειας ( $H1, H2$ ) και καρκίνου ( $C1, C2$ ).

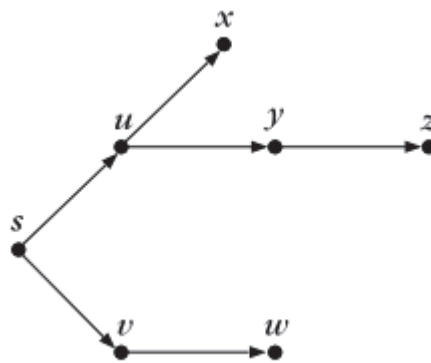
Ο πίνακας που βρίσκεται στον κόμβο-ρίζα δείχνει το ποσοστό των καπνιστών στον πληθυσμό, ενώ οι πίνακες στους κόμβους του δέντρου είναι οι αντίστοιχες υπο συνθήκη πιθανότητες. Για παράδειγμα,  $P(C: True|S: True)$  είναι η πιθανότητα ένας καπνιστής να αναπτύξει καρκίνο.

Από τη στιγμή που θα κατασκευαστεί το κατευθυνόμενο ακυκλικό γράφημα, το Μπεϋζιανό Δίκτυο δίνει τη δυνατότητα για αποδοτικό υπολογισμό της υπό συνθήκης πιθανότητας οποιουδήποτε κόμβου στο γράφημα, με δεδομένο το γεγονός ότι κάποιοι από τους κόμβους έχουν παρατηρηθεί, επομένως μπορούν να εξαχθούν συμπεράσματα σχετικά

με τις πιθανότητες (probability inference). Με δεδομένες τιμές για κάποιες μεταβλητές (που ονομάζονται και στοιχεία - evidence), ο στόχος είναι να υπολογιστούν οι υπο συνθήκη πιθανότητες για κάποιες ή όλες τις υπόλοιπες μεταβλητές του γραφήματος.

Για Μπεϋζιανά Δίκτυα με δομή δέντρου, η εξαγωγή συμπερασμάτων σχετικά με τις πιθανότητες μπορεί να πραγματοποιηθεί με ένα συνδυασμό υπολογισμών προς τα κάτω (top-down) και προς τα πάνω (bottom-up) στο δέντρο. Με βάση αυτή την ιδέα, έχουν προταθεί διάφοροι αλγόριθμοι. Για την περίπτωση απλά συνδεδεμένων γραφημάτων (γραφήματα που δεν έχουν πάνω από ένα μονοπάτι μεταξύ δυο κόμβων), οι αλγόριθμοι αυτοί έχουν γραμμική πολυπλοκότητα ως προς τον αριθμό των κόμβων [8].

Στο κατευθυνόμενο ακυκλικό γράφημα της Εικόνας 3.7 οι κόμβοι αντιστοιχούν στις μεταβλητές  $s, u, v, x, y, w, z$ , με από κοινού πιθανότητα  $P(s, u, v, x, y, w, z)$ .



**Εικόνα 3.7:** Μπεϋζιανό Δίκτυο με δενδρική δομή

Η πιθανότητα  $P(s, u, v, x, y, w, z)$  μπορεί να προκύψει ως το γινόμενο όλων των υπο συνθήκη πιθανοτήτων που καθορίζουν το δίκτυο. Έστω ότι θα πρέπει να υπολογιστεί η πιθανότητα  $P(s|z = z_0)$ , όπου  $z = z_0$  είναι η πληροφορία που έχει παρατηρηθεί. Από τον κανόνα του Bayes προκύπτει ότι:

$$P(s|z = z_0) = \frac{P(s, z = z_0)}{P(z = z_0)} = \frac{P(s, z = z_0)}{\sum_s P(s, z = z_0)} \quad (3.27)$$

Για να βρεθεί η  $P(s, z = z_0)$  θα πρέπει να «περιθωριοποιηθεί» η από κοινού πιθανότητα ως προς όλες τις δυνατές τιμές των  $u, v, x, y, w$ , δηλαδή [8]:

$$P(s|z = z_0) = \sum_{u,v,x,y,w} P(s, u, v, x, y, w, z = z_0) \quad (3.28)$$

Υποθέτοντας ότι κάθε μια από τις διακριτές μεταβλητές μπορεί να πάρει  $L$  τιμές, θα πρέπει να γίνουν  $L^5$  πράξεις, για τον υπολογισμό της  $P(s|z = z_0)$ . Για περισσότερες μεταβλητές και μεγαλύτερο σύνολο τιμών  $L$ , ο αριθμός των υπολογισμών που χρειάζονται είναι απαγορευτικά μεγάλος. Για να ελαττωθεί το υπολογιστικό φορτίο θα πρέπει να αξιοποιηθεί η δομή του Μπεϋζιανού Δικτύου. Λαμβάνοντας υπόψη τις σχέσεις που προκύπτουν από

την τοπολογία του γραφήματος (Εικόνα 3.7), με χρήση του κανόνα της αλυσίδας για τις πιθανότητες (εξίσωση 3.16) προκύπτει ότι:

$$\sum_{u,v,x,y,w} P(s, u, v, x, y, w, z = z_0) = \quad (3.29)$$

$$\sum_{u,v,x,y,w} P(s)P(u|s)P(v|s)P(w|v)P(x|u)P(y|u)P(z = z_0|y) =$$

$$P(s) \underbrace{\sum_{u,v} P(u|s)P(v|s)}_v \underbrace{\sum_w P(w|v)}_u \underbrace{\sum_x P(x|u)}_u \underbrace{\sum_y P(y|u)P(z = z_0|y)}_u$$

ή διαφορετικά:

$$\sum_{u,v,x,y,w} P(s, u, v, x, y, w, z = z_0) = \quad (3.30)$$

$$P(s) \sum_{u,v} P(u|s)P(v|s)\varphi_1(v)\varphi_2(u)\varphi_3(u)$$

όπου οι ορισμοί των συναρτήσεων  $\varphi_i(\cdot), i = 1, 2, 3$  είναι οι αντίστοιχοι όροι που έχουν σημειωθεί στην εξίσωση (3.29). Για να προκύψει η  $\varphi_3(u)$  για μια τιμή της  $u$ , θα πρέπει να γίνουν  $L$  πράξεις (αθροίσεις και πολλαπλασιασμοί). Επομένως, θα χρειαστούν  $L^2$  πράξεις για τον υπολογισμό της  $\varphi_3(u)$  για όλες τις τιμές της  $u$ . Το ίδιο ισχύει και για τις συναρτήσεις  $\varphi_1(v), \varphi_2(u)$ . Ο συνολικός αριθμός πράξεων που θα χρειαστούν θα είναι της τάξης του  $L^2$ , σε αντίθεση με την περίπτωση του brute-force υπολογισμού, όπου χρειαζόταν υπολογισμοί της τάξης του  $L^5$ . Γενικότερα, για πολλαπλά συνδεδεμένα δίκτυα το πρόβλημα της εξαγωγής συμπερασμάτων πιθανότητας είναι NP-δύσκολο, οπότε η προσπάθεια επικεντρώνεται στην εύρεση προσεγγιστικών λύσεων.

**Η εκπαίδευση ενός Μπεϋζιανού Δικτύου** αποτελείται από δυο στάδια. Το πρώτο στάδιο είναι η εκμάθηση της τοπολογίας του δικτύου, η οποία μπορεί να προκύψει από κάποιον ειδικό στο συγκεκριμένο πεδίο γνώσης ή από τεχνικές βελτιστοποίησης με χρήση δεδομένων εκπαίδευσης. Αφού ολοκληρωθεί η εκμάθηση της τοπολογίας, το δεύτερο στάδιο είναι ο υπολογισμός των άγνωστων παραμέτρων (υπο συνθήκη και περιθώριες πιθανότητες) από τα διαθέσιμα δεδομένα εκπαίδευσης [8].

Διάφορες παραλλαγές των Μπεϋζιανών Δικτύων είναι οι εξής ταξινομητές [22]:

- **Μπεϋζιανά πολυ-Δίκτυα (Bayesian Multi-net).** Αποτελούνται από την εκ των προτέρων κατανομή πιθανότητας του κόμβου-ρίζα (ο οποίος αναπαριστά την κλάση και έχει ιδιαίτερη αντιμετώπιση) μαζί με ένα σύνολο τοπικών δικτύων, κάθε ένα από



τα οποία αντιστοιχεί σε μια τιμή που μπορεί να πάρει ο κόμβος ρίζα (κόμβος κλάσης). Τα δίκτυα αυτά μπορούν να θεωρηθούν ως γενίκευση των Μπεϋζιανών Δικτύων. Ο ταξινομητής BN εξαναγκάζει τις σχέσεις μεταξύ των χαρακτηριστικών να είναι οι ίδιες για όλες τις τιμές του κόμβου ρίζα που αντιπροσωπεύει την κλάση σε αντίθεση με τα Μπεϋζιανά πολυ-Δίκτυα, τα οποία επιτρέπουν να υπάρχουν διαφορετικές συσχετίσεις μεταξύ των χαρακτηριστικών, αφού για διάφορες τιμές του κόμβου κλάσης μπορούν να υπάρχουν διαφορετικά τοπικά δίκτυα με διαφορετική δομή. Ο κόμβος κλάσης λειτουργεί ως κόμβος γονέας για όλους τους κόμβους χαρακτηριστικών, αφού κάθε τοπικό δίκτυο σχετίζεται με μια τιμή του κόμβου κλάσης. Οι πολύ-δικτυακές αυτές δομές κοστίζουν περισσότερο ως προς τους υπολογισμούς από τον απλοϊκό Μπεϋζιανό Ταξινομητή, ή τις δομές του Δενδρικού/Επαυξημένου Απλοϊκού Μπεϋζιανού Ταξινομητή (TAN, BN). Αν και τα Μπεϋζιανά πολυ-Δίκτυα είναι περισσότερο γενικευμένα από τους ταξινομητές BN, συνήθως τα τοπικά τους δίκτυα έχουν πιο απλή δομή αφού αναφέρονται σε διαφορετικές περιπτώσεις του προβλήματος.

- **Γενικευμένα Μπεϋζιανά Δίκτυα (General Bayesian Networks - GBN).** Τα δίκτυα αυτά χειρίζονται τους κόμβους – ρίζες που αναπαριστούν την κλάση ως ένα κοινό κόμβο του δικτύου σε αντίθεση με τις προηγούμενες κατηγορίες δικτύων όπου υπήρχε ειδική μεταχείριση του κόμβου αυτού. Στα Γενικευμένα Μπεϋζιανά Δίκτυα ο κόμβος κλάσης δεν είναι απαραίτητα ο κόμβος-γονέας όλων των κόμβων των χαρακτηριστικών. Αποδίδουν καλύτερα όταν υπάρχει ένα συγκεκριμένο μοντέλο που διέπει τα δεδομένα, ενώ αν υπάρχουν διάφορες συσχετίσεις των χαρακτηριστικών για διαφορετικές κλάσεις τα Μπεϋζιανά πολυ-Δίκτυα λειτουργούν περισσότερο αποτελεσματικά.

Το πιο ενδιαφέρον χαρακτηριστικό των Μπεϋζιανών Δικτύων, σε σύγκριση με άλλες μεθόδους ταξινόμησης όπως τα Δέντρα Απόφασης ή τα Νευρωνικά Δίκτυα, είναι η **δυνατότητα αξιοποίησης της πληροφορίας που υπάρχει εκ των προτέρων** για ένα δεδομένο πρόβλημα με τη μοντελοποίηση των συσχετίσεων μεταξύ των χαρακτηριστικών. Η πληροφορία αυτή σχετικά με τη δομή ενός Μπεϋζιανού Δικτύου, η οποία προέρχεται από γνώση του πεδίου του προβλήματος και από αξιοποίηση της γνώσης ειδικών, μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως εξής [12]:

- Δήλωση κόμβου ως κόμβο-ρίζα, δηλαδή ότι δεν έχει κόμβους γονείς
- Δήλωση κόμβου ως κόμβο-φύλλο, δηλαδή ότι δεν έχει κόμβους παιδιά
- Δήλωση ότι κάποιος κόμβος είναι άμεσο αίτιο ή άμεσο αποτέλεσμα κάποιου άλλου κόμβου
- Δήλωση ότι κάποιος κόμβος δεν συνδέεται άμεσα με κάποιον άλλο κόμβο
- Δήλωση ότι δυο κόμβοι είναι ανεξάρτητοι, δεδομένου ενός συνόλου συνθηκών

- Προσδιορισμός μερικής διάταξης των κόμβων, δηλαδή δήλωση ότι ένας κόμβος εμφανίζεται νωρίτερα από ένα άλλο κόμβο στη διάταξη.

Ένα πρόβλημα των Μπεϋζιανών Δικτύων είναι ότι δεν είναι κατάλληλα για σύνολα δεδομένων με πολλά χαρακτηριστικά επειδή θα πρέπει να κατασκευαστεί ένα πολύ μεγάλο δίκτυο το οποίο δεν θα είναι αποδοτικό ως προς το χρόνο εκτέλεσης και τον χώρο αποθήκευσης. Επίσης, τις περισσότερες φορές αν τα χαρακτηριστικά είναι αριθμητικά θα πρέπει να διακριτοποιηθούν πριν τη χρήση των Μπεϋζιανών Δικτύων [12].

### 3.2.4 Εφαρμογές των Μπεϋζιανών Δικτύων στη Βιοπληροφορική

Τα Μπεϋζιανά Δίκτυα, μαζί με τις σχετικές τους μεθόδους είναι κατάλληλα για την έκφραση συλλογιστικών διαδικασιών που εμπεριέχουν την έννοια της αβεβαιότητας. Έχουν χρησιμοποιηθεί αρκετά για εφαρμογές που αφορούν την Υγεία και είναι ιδιαίτερα δημοφιλείς για τον χειρισμό γνώσης με αβεβαιότητα, η οποία προκύπτει από διαγνώσεις ασθενειών, από τη διαδικασία επιλογής βέλτιστων μεθόδων θεραπείας και από προβλέψεις του αποτελέσματος της θεραπείας, σε διάφορες περιπτώσεις ασθενών. Επίσης, τα Μπεϋζιανά Δίκτυα χρησιμοποιούνται σε εφαρμογές που δεν σχετίζονται άμεσα με τη διαχείριση δεδομένων για παθήσεις συγκεκριμένων ασθενών. Παραδείγματα εφαρμογών περιλαμβάνουν τη χρήση των Μπεϋζιανών Δικτύων στην κλινική επιδημιολογία για την κατασκευή μοντέλων για συγκεκριμένες ασθένειες και για την ερμηνεία δεδομένων από μικροσυστοιχίες γενετικής έκφρασης (microarray gene expression data) [23].

Τα Μπεϋζιανά Δίκτυα έχουν χρησιμοποιηθεί σε πολλές εφαρμογές σχεδίασης **ιατρικών εμπειρων συστημάτων (medical expert systems)**. Κάποια από τα καινοτόμα ιατρικά συστήματα που έχουν σχεδιαστεί είναι το σύστημα NESTOR [24] για τη διάγνωση ενδοκρινολογικών διαταραχών, το σύστημα MUNIN [24] για διάγνωση νευρο-μυϊκών διαταραχών, και το σύστημα ALARM [24] για την παρακολούθηση ασθενών σε Μονάδες Εντατικής Θεραπείας.

**Το σύστημα PATHFINDER** [24] έχει χρησιμοποιηθεί για τη διάγνωση ασθενειών του λεμφικού συστήματος και σχεδιάστηκε με σκοπό να βοηθήσει τους παθολόγους ως προς την διάγνωση στο πεδίο της αιματοπαθολογίας. Το σύστημα αυτό επιτρέπει στο χρήστη να εισάγει τιμές για ένα ή περισσότερα εξέχοντα χαρακτηριστικά μιας περιοχής ενός λεμφικού κόμβου (lymph-node section). Οι κατηγορίες χαρακτηριστικών που χρησιμοποιούνται είναι οι εξής: διακριτικά χαρακτηριστικά, ανοσολογία, φλεγμονώδεις συνιστώσες, εργαστηριακά τεστ, λεμφικά κύτταρα, μεταστατικά κύτταρα, μορφολογία, μοριακή βιολογία, άλλες διαγνώσεις, πρότυπα (patterns), σφαιρικές δομές, ειδικές κηλίδες. Κάθε μια από τις

κατηγορίες αυτές ομαδοποιεί ένα σύνολο χαρακτηριστικών, για τα οποία ο χρήστης μπορεί να εισάγει κάποια πληροφορία. Δεδομένου αυτών ζευγών χαρακτηριστικού – τιμής, το σύστημα εμφανίζει μια διαφορική διάγνωση, στην οποία ταξινομεί τις διάφορες ασθένειες με βάση την πιθανότητα εμφάνισής τους. Στην Εικόνα 3.9 φαίνεται το συνολικό Μπεϋζιανό δίκτυο που χρησιμοποιείται. Η απόδοση του συστήματος αξιολογήθηκε από ειδικούς, σε κλίμακα από 0-10 και ο μέσος όρος απόδοσης ήταν 7.99 (για ανεξάρτητα δεδομένα) και 8.94 (για εξαρτημένα δεδομένα).

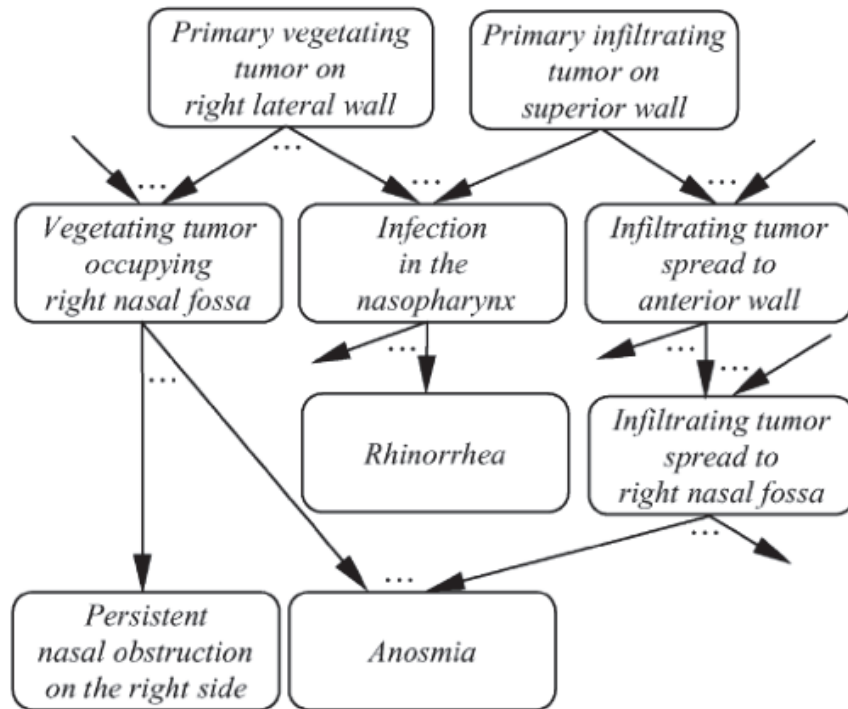
**Το σύστημα QMR (Quick Medical Reference)**[24] χρησιμοποιείται για διάγνωση στην Εσωτερική Παθολογία (Internal Medicine) και βασίζεται στο μοντέλο CPCS (Computer based Patient Case Simulation system). Το σύστημα QMR-DT είναι μια διαφορετική έκδοση του συστήματος αυτού, η οποία εξάγει θεωρητικές αποφάσεις χρησιμοποιώντας αναπαράσταση γνώσης με Μπεϋζιανά Δίκτυα. Το QMR-DT θεωρεί ένα σύνολο από  $d_i$  ασθένειες και ένα σύνολο ευρημάτων  $F$ , τα οποία εισάγει ο χρήστης στο σύστημα και υπολογίζει τις εκ των υστέρων περιθώριες πιθανότητες  $P(d_i^+|F)$ , όπου  $d_i^+$  είναι το γεγονός της παρουσίας της ασθένειας  $d_i$ . Το σύνολο των ευρημάτων προέρχονται από δεδομένα κλινικών εξετάσεων. Ο χρήστης καλείται να επιλέξει τα κατάλληλα ευρήματα από αυτά που υπάρχουν διαθέσιμα, ώστε να περιγράψει καλύτερα την υπό εξέταση περίπτωση. Για παράδειγμα, για να καταγραφεί ένα μη φυσιολογικό επίπεδο χοληστερόλης, ο χρήστης θα πρέπει να επιλέξει μεταξύ των δυο δυαδικών ευρημάτων: *CHOLESTEROL\_BLOOD\_INCREASED* ή *CHOLESTEROL\_BLOOD\_DECREASED* ενώ για να προσδιοριστεί ένα μη φυσιολογικό επίπεδο τρανσαμινάσης (glutamic oxaloacetic transaminase - SGOT) θα πρέπει να γίνει επιλογή μεταξύ τριών χαρακτηριστικών: *SGOT\_40\_TO\_119*, *SGOT\_120\_TO\_400*, ή *SGOT\_GTR\_THAN\_400*. Για ένα δείγμα ελέγχου 23 περιπτώσεων ασθένειας, οι 5 πιο πιθανές ασθένειες που προτάθηκαν από το σύστημα ήταν όντως οι 5 πιο πιθανές, στις 21 από τις 23 περιπτώσεις (απόδοση 91%).

Άλλες ιατρικές εφαρμογές που θα πρέπει να σημειωθούν είναι το σύστημα DIAVAL [24], το οποίο είναι ένα διαγνωστικό έμπειρο σύστημα για ηχοκαρδιογραφία (echocardiography) και ένα μοντέλο που έχει αναπτυχθεί για να περιγράψει τον καρκίνο οισοφάγου, το οποίο βασίζεται σε Μπεϋζιανά Δίκτυα [24].

**Τα δυναμικά Μπεϋζιανά Δίκτυα (Dynamic Bayesian Networks)**, τα οποία είναι μια επέκταση των Μπεϋζιανών Δικτύων ως προς τη παράμετρο του χρόνου συσχετίζοντας μεταβλητές ως προς διαφορετικά χρονικά βήματα, βρίσκουν αρκετές εφαρμογές στην Ιατρική.

**Το σύστημα NasoNet** [24] έχει σχεδιαστεί για διάγνωση και πρόγνωση του ρινοφαρυγγικού καρκίνου (nasopharyngeal cancer). Η εξάπλωση του καρκίνου είναι μια μη-ντετερμινιστική, δυναμική διεργασία. Το σύστημα αυτό χρησιμοποιεί δίκτυα πιθανοτικών γεγονότων σε διακριτό χρόνο (network of probabilistic events in discrete time - NPEDT), τα οποία είναι δυναμικά Μπεϋζιανά Δίκτυα που μοντελοποιούν την εξέλιξη μιας διεργασίας στο χρόνο. Ένας αρχικός όγκος σε κάποιο από τα ρινοφαρυγγικά τείχη μπορεί να εξαπλωθεί

και να εισβάλει γειτονικές περιοχές. Η διαδικασία εξάπλωσης χαρακτηρίζεται από ένα σύνολο γεγονότων. Στο σύστημα NasoNet, όλα τα γεγονότα που σχετίζονται με την εξάπλωση του ρινοφαρυγγικού καρκίνου αναπαριστώνται ως κόμβοι ενός Μπεϋζιανού Δικτύου. Το σύστημα συλλέγει δεδομένα για τα γεγονότα αυτά και προσπαθεί να προβλέψει την κατεύθυνση εξέλιξης του καρκίνου, ώστε να καθοδηγήσει τους ογκολόγους για την εφαρμογή κατάλληλης θεραπείας. Στην Εικόνα 3.8 παρουσιάζεται ένα μέρος από το Μπεϋζιανό Δίκτυο που μοντελοποιεί την εξέλιξη του ρινοφαρυγγικού καρκίνου. Το σύστημα αυτό εμφανίζει απόδοση πάνω από 82.7%, στο σύνολο ελέγχου που χρησιμοποιήθηκε.



**Εικόνα 3.8:** Τμήμα από το Μπεϋζιανό Δίκτυο που μοντελοποιεί την εξέλιξη του ρινοφαρυγγικού καρκίνου

Τα δυναμικά Μπεϋζιανά Δίκτυα έχουν επίσης χρησιμοποιηθεί για την περιγραφή διάφορων κυτταρικών συστημάτων και για τη μοντελοποίηση δυναμικής συμπεριφοράς κατά την αποτυχία κάποιου οργάνου ασθενή σε Μονάδες Εντατικής Θεραπείας [24].

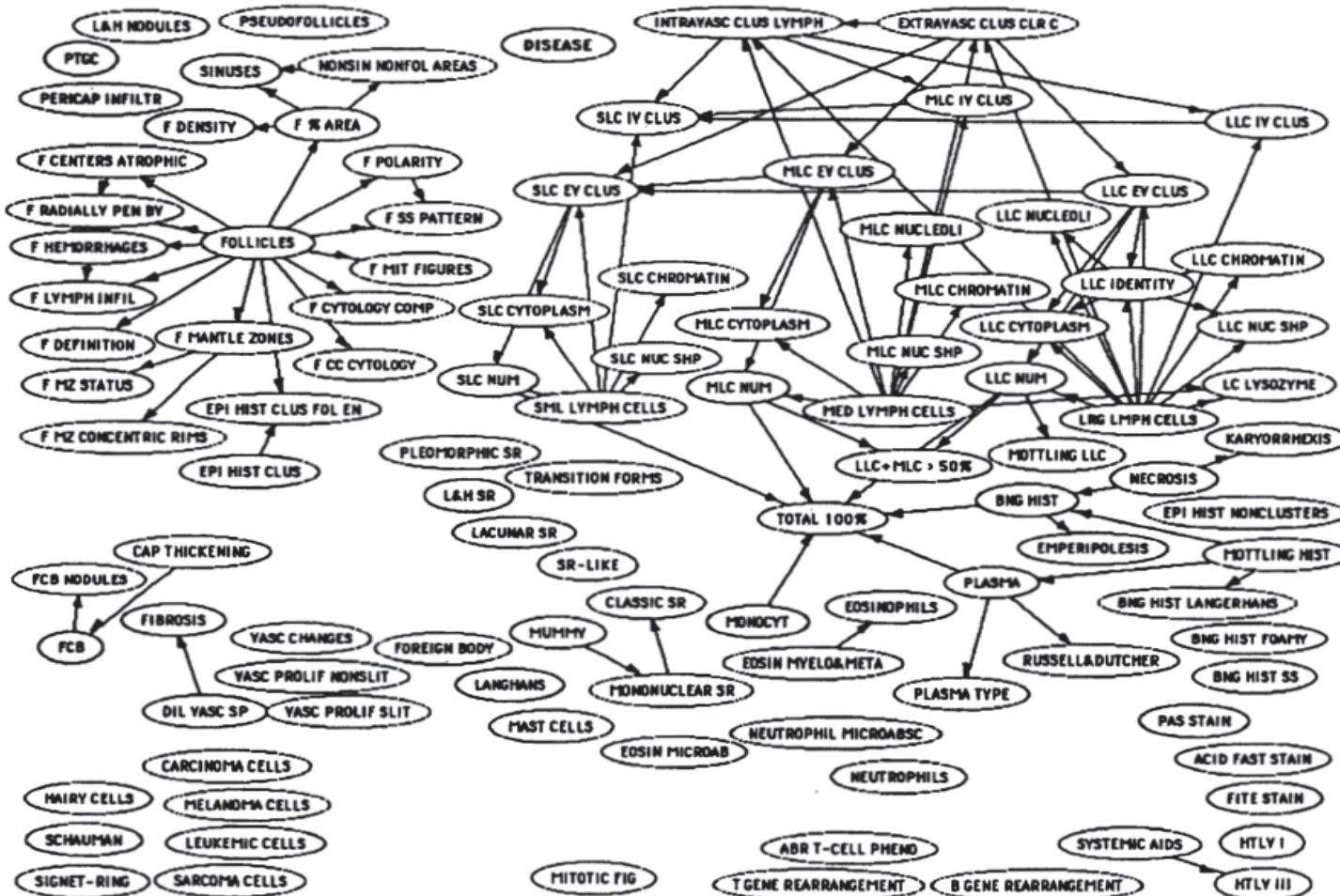
Μια νέα τεχνική στην ιατρική είναι τα **προγνωστικά Μπεϋζιανά Δίκτυα**, για την πρόγνωση της μελλοντικής κατάστασης των ασθενών και των αποτελεσμάτων από διάφορες θεραπείες. Οι ερευνητές έχουν ξεκινήσει να αναπτύσσουν Μπεϋζιανά Δίκτυα για αυτό το σκοπό στους τομείς της ογκολογίας και των λοιμωδών νοσημάτων [23]. Κατά τη διαδικασία αυτή γίνεται προσπάθεια ενσωμάτωσης των εννοιών από την παραδοσιακή ανάλυση θνησιμότητας και επιβίωσης [25] σε μεθόδους που χρησιμοποιούν Μπεϋζιανά Δίκτυα [23].

Το **σύστημα CAALYX** (Complete Ambient Assisted Living eXperiment)[26] στοχεύει στην παροχή καινοτόμων ιατρικών υπηρεσιών, με χρήση σύγχρονων μεθόδων

τηλεϊατρικής, με ενίσχυση της δυνατότητας των ηλικιωμένων ομάδων να ζουν αυτόνομα, αξιοποιώντας τη βάση γνώσης των περισσότερο διαδεδομένων διαταραχών υγείας και αλλαγών στα βιοσήματα αυτής της ηλικιακής ομάδας. Το σύστημα αυτό εμπεριέχει ένα υποσύστημα τεχνητής νοημοσύνης, το οποίο βασίζεται σε ένα Μπεϋζιανό Δίκτυο για την εκμάθηση από τους συναγερμούς που προκύπτουν κατά την παρακολούθηση των ασθενών και την κατηγοριοποίηση των νέων περιπτώσεων.

Τα Μπεϋζιανά Δίκτυα βρίσκουν εφαρμογή στη διαχείριση των λοιμωδών νοσημάτων στις Μονάδες Εντατικής Θεραπείας (ΜΕΘ)[24]. Επίσης, χρησιμοποιούνται για τη μοντελοποίηση των υπηρεσιών υγείας για επείγοντα περιστατικά (emergency medical services) εξαιτίας της αβεβαιότητας που εμπεριέχουν πολλοί παράγοντες σε αυτές τις κατηγορίες υπηρεσιών [27]. Μια άλλη εφαρμογή των Μπεϋζιανών Δικτύων είναι η ανάπτυξη κλινικών μοντέλων για την ταξινόμηση όγκων στις ωοθήκες (ovarian tumors)[28], για περιπτώσεις που τα δεδομένα μπορεί να είναι ελλιπή ή να περιέχουν πολύ θόρυβο.

Άλλες εφαρμογές των Μπεϋζιανών Δικτύων είναι η ταξινόμηση δευτεροταγών δομών πρωτεϊνών [29], η μοντελοποίηση των ευρημάτων από μικροσυστοιχίες (microarrays) και η επικύρωσή τους με τη μέθοδο RT-PCR (real time reverse transcriptase-polymerase chain reaction)[30], η πρόβλεψη ανασταλτικών παραγόντων για τον Ιό Ανθρώπινης Ανοσοανεπάρκειας (HIV virus) [31] και η ανακάλυψη των κατευθύνσεων μετάλλαξής του [32], η μοντελοποίηση για την συνύπαρξη παθολογίας μαστού [33] και η δημιουργία προγνωστικών μοντέλων για διαχείριση ασθενών [34].



Εικόνα 3.9: Μπεϋζιανό Δίκτυο του συστήματος PATHFINDER. Ο κόμβος DISEASE περιέχει πάνω από 60 ασθένειες λεμφικών κόμβων. Οι συνδέσεις από τον κόμβο DISEASE προς τους υπόλοιπους κόμβους δεν έχουν σημειωθεί, για επισημανθούν καλύτερα οι υπό συνθήκη εξαρτήσεις μεταξύ των χαρακτηριστικών.

### 3.3 Δέντρα Απόφασης

#### 3.3.1 Περιγραφή Μοντέλου

Τα **δέντρα αποφάσεων** (decision trees) είναι δενδρικές δομές, οι οποίες χρησιμοποιούνται για να κατηγοριοποιούν δεδομένα, τα οποία ταξινομούν με βάση τις τιμές τους σε διάφορα χαρακτηριστικά (attributes) [35].

Ένα δέντρο αποφάσεων λαμβάνει ως είσοδο ένα αντικείμενο ή μια κατάσταση που περιγράφεται από ένα σύνολο χαρακτηριστικών και επιστρέφει μια απόφαση, την προβλεπόμενη τιμή εξόδου για την είσοδο [1]. Τα χαρακτηριστικά εισόδου μπορεί να είναι διακριτά ή συνεχή. Διακρίνονται δυο κατηγορίες δέντρων αποφάσεων, ανάλογα με το αν η τιμή εξόδου είναι συνεχής η διακριτή:

- **Δέντρα ταξινόμησης**, όπου η έξοδος έχει διακριτές τιμές.
- **Δέντρα παλινδρόμησης**, όπου η έξοδος έχει συνεχή τιμή.

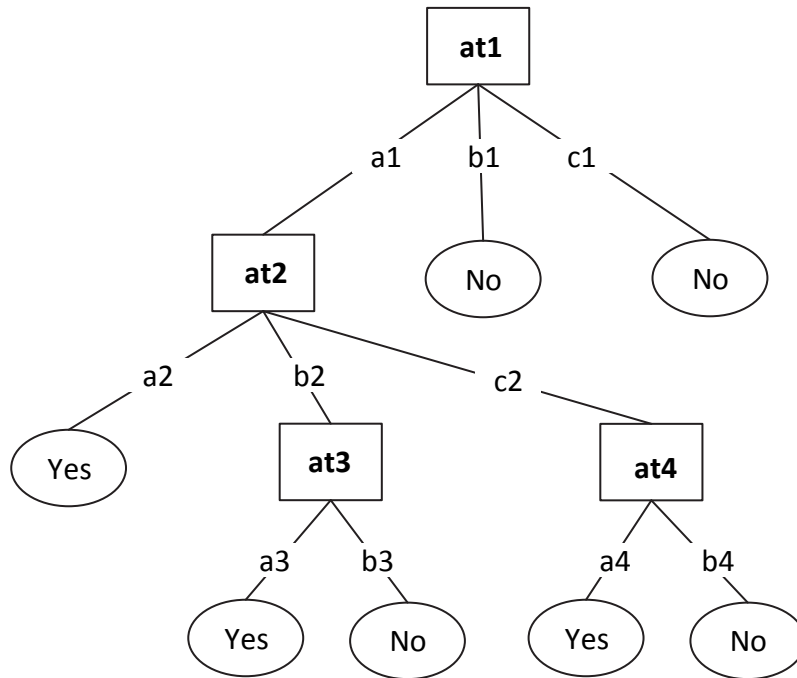
Τα δέντρα αποφάσεων εξάγουν τις αποφάσεις τους εκτελώντας μια **ακολουθία ελέγχων**. Κάθε εσωτερικός κόμβος στο δέντρο αντιστοιχεί σε έναν έλεγχο τιμής για ένα από τα χαρακτηριστικά, ενώ οι διακλαδώσεις από κάθε κόμβο λαμβάνουν ως ετικέτα τις δυνατές τιμές του χαρακτηριστικού αυτού. Κάθε κόμβος-φύλλο στο δέντρο προσδιορίζει την τιμή που θα επιστραφεί ως έξοδος όταν η προσπέλαση φτάσει μέχρι το συγκεκριμένο φύλλο. Τα δείγματα κατατάσσονται σε κατηγορίες ξεκινώντας από τον κόμβο-ρίζα και καταλήγοντας σε κάποιο κόμβο-φύλλο [1],[35].

Υποθέτουμε τον παρακάτω πίνακα δεδομένων εκπαίδευσης, με τέσσερα χαρακτηριστικά, at1, at2, at3 και at4 και οκτώ δείγματα εκπαίδευσης [35]:

**Πίνακας 3.1:** Δείγματα Εκπαίδευσης Δέντρου Απόφασης

at1	at2	at3	at4	Class
a1	a2	a3	a4	Yes
a1	a2	a3	b4	Yes
a1	b2	a3	a4	Yes
a1	b2	b3	b4	No
a1	c2	a3	a4	Yes
a1	c2	a3	b4	No
b1	b2	b3	b4	No
c1	b2	b3	b4	No

Για αυτό το σύνολο δεδομένων εκπαίδευσης, ένα δέντρο απόφασης είναι το παρακάτω (Εικόνα 3.10):



*Εικόνα 3.10: Δέντρο Απόφασης*

Χρησιμοποιώντας το παραπάνω δέντρο απόφασης για την κατηγοριοποίηση του νέου δείγματος  $\langle at1=a1, at2=b2, at3=a3, at4=b4 \rangle$  θα προκύψει η εξής ακολουθία κόμβων: at1, at2 και τελικώς at3, ο οποίος θα κατατάξει το δείγμα ως θετικό (Yes).

Το πρόβλημα της εύρεσης του βέλτιστου δυαδικού δέντρου απόφασης είναι NP-πλήρες, οπότε έχει γίνει προσπάθεια για εύρεση αποδοτικών ευριστικών μεθόδων για την κατασκευή δέντρων απόφασης που πλησιάζουν τη βέλτιστη λύση [35].

### 3.3.2 Τεχνικές Εκμάθησης

#### 3.3.2.1 Αλγόριθμος ID3 Εκμάθησης δέντρων αποφάσεων

Στην ρίζα του δέντρου απόφασης θα πρέπει να τοποθετηθεί το χαρακτηριστικό που διαχωρίζει με τον πιο αποδοτικό τρόπο τα δεδομένα, ώστε να ελαχιστοποιηθεί το βάθος του τελικού δέντρου. Η ιδέα είναι να επιλέγεται το χαρακτηριστικό που προχωρά όσο το δυνατόν περισσότερο στην παροχή ακριβούς ταξινόμησης των δεδομένων. Η ίδια διαδικασία επαναλαμβάνεται για κάθε διαμέριση των δεδομένων, δημιουργώντας με αυτόν τον τρόπο υπο-δέντρα, μέχρι τα δεδομένα εκπαίδευσης να έχουν διαιρεθεί σε υποσύνολα της ίδιας κλάσης.



Ο αλγόριθμος εκμάθησης δέντρων αποφάσεων ID3 (Iterative Dichotomiser 3) είναι ένας αλγόριθμος που προτάθηκε από τον Ross Quinlan (1979)[35] και μπορεί να παρουσιαστεί ως εξής [1]:

**function** DECISION-TREE-LEARNING (*δείγματα, χαρακτηριστικά, προεπιλογή*)  
**returns** δένδρο αποφάσεων

**inputs:** *δείγματα*, ένα σύνολο δειγμάτων εκπαίδευσης  
*χαρακτηριστικά*, ένα σύνολο χαρακτηριστικών  
*προεπιλογή*, προεπιλεγμένη κλάση

**if** *δείγματα* είναι κενό **then return** *προεπιλογή*  
**else if** όλα στο *δείγματα* έχουν ίδια ταξινόμηση **then return** την ταξινόμηση  
**else if** *χαρακτηριστικά* είναι κενό **then return** MAJORITY-VALUE (*δείγματα*)  
**else**  
     *καλύτερο* ← CHOOSE-ATTRIBUTE(*χαρακτηριστικά, δείγματα*)  
     *δέντρο* ← νέο δέντρο αποφάσεων με έλεγχο ρίζας *καλύτερο*  
     *m* ← MAJORITY-VALUE (*δείγματα*)  
  
     **for each** τιμή  $v_i$  του *καλύτερο* **do**  
         *δείγματα<sub>i</sub>* ← {στοιχεία από τα *δείγματα* με καλύτερο= $v_i$ }  
         *υποδέντρο* ← DECISION-TREE-LEARNING (*δείγματα<sub>i</sub>, καλύτερο, m*)  
         προσθήκη διακλάδωσης στο *δέντρο* με ετικέτα  $v_i$  και *υποδέντρο*  
     **return** *δέντρο*

Στον παραπάνω αλγόριθμο, η συνάρτηση MAJORITY-VALUE(*δείγματα*) επιστρέφει την κλάση της πλειοψηφίας των δειγμάτων τα οποία βρίσκονται στο σύνολο *δείγματα*. Η λειτουργία αυτή χρειάζεται, όταν πλέον δεν έχουν απομείνει χαρακτηριστικά που να μην έχουν χρησιμοποιηθεί για διαμέριση των δειγμάτων και τα δείγματα που έχουν απομείνει δεν ανήκουν όλα στην ίδια κλάση. Η MAJORITY-VALUE(*δείγματα*) προσδιορίζει την προεπιλεγμένη κλάση *m*, όταν η συνάρτηση DECISION-TREE-LEARNING καλείται αναδρομικά για τις διαμερίσεις των δειγμάτων που έχουν προκύψει.

Η συνάρτηση CHOOSE-ATTRIBUTE(*χαρακτηριστικά, δείγματα*) επιλέγει το χαρακτηριστικό από το σύνολο *χαρακτηριστικά* που παρέχει την βέλτιστη διαμέριση του συνόλου *δείγματα*. Για την επιλογή των χαρακτηριστικών, έχουν προταθεί διάφορα μέτρα αξιολόγησης, τα οποία αναφέρονται στην επόμενη ενότητα.

### 3.3.2.2 Επιλογή Χαρακτηριστικών

Υπάρχουν διάφοροι μέθοδοι για την εύρεση του χαρακτηριστικού που διαχωρίζει βέλτιστα τα δεδομένα, όπως είναι το **κέρδος πληροφορίας** (Hunt et al., 1966)[1], [35],[36] ο **δείκτης Gini** (Gini index – Breiman et al., 1984)[35],[36] και το **σφάλμα ταξινόμησης** [36]. Ενώ τα μυωπικά μέτρα υπολογίζουν κάθε χαρακτηριστικό ξεχωριστά, ο αλγόριθμος ReliefF (Kononenko, 1994)[35] υπολογίζει κάποιο χαρακτηριστικό στο γενικό πλαίσιο των υπόλοιπων χαρακτηριστικών, συμπεριλαμβάνοντας την επίδρασή τους σε αυτό. Παρόλα αυτά, αρκετές μελέτες έχουν καταλήξει στο συμπέρασμα ότι δεν υπάρχει κάποια συγκεκριμένη μέθοδος που υπερτερεί (Murthy, 1998)[35]. Για το λόγο αυτό θα πρέπει να γίνεται σύγκριση διάφορων μεθόδων για να αποφασιστεί ποια μέθοδος θα χρησιμοποιηθεί για ένα συγκεκριμένο πρόβλημα.

Ένα από τα κατάλληλα μέτρα είναι η **αναμενόμενη ποσότητα πληροφορίας** που παρέχεται από το χαρακτηριστικό [1]. Η θεωρία της πληροφορίας ορίστηκε από τους Shannon και Wiener (1949)[1] και μετρά το περιεχόμενο πληροφορίας σε δυαδικά ψηφία (bit). Ένα δυαδικό ψηφίο πληροφορίας αρκεί για να απαντηθεί μια ερώτηση ναι/όχι για την οποία δεν υπάρχει καμία σχετική γνώση. Αν οι δυνατές απαντήσεις  $v_i$  έχουν πιθανότητες  $P(v_i)$  τότε το περιεχόμενο πληροφορίας  $I$  της πραγματικής απάντησης δίνεται από τον τύπο:

$$I(P(v_1), \dots, P(v_n)) = \sum_{i=1}^n -P(v_i) \log_2 P(v_i) \quad (3.31)$$

Για την μάθηση του δέντρου αποφάσεων, η ερώτηση που χρειάζεται απάντηση είναι η εξής: για ένα δεδομένο δείγμα, ποια είναι η σωστή ταξινόμηση; Μια εκτίμηση των πιθανοτήτων των δυνατών απαντήσεων πριν από τον έλεγχο οποιουδήποτε από τα χαρακτηριστικά δίνεται από τις αναλογίες των θετικών και των αρνητικών δειγμάτων στο σύνολο εκπαίδευσης. Έστω ότι το σύνολο εκπαίδευσης περιέχει  $p$  θετικά δείγματα και  $n$  αρνητικά δείγματα. Στην περίπτωση αυτή, μια εκτίμηση της πληροφορίας που περιέχεται σε μια σωστή απάντηση είναι η εξής:

$$I\left(\frac{p}{p+n}, \frac{n}{p+n}\right) = -\frac{p}{p+n} \log_2 \frac{p}{p+n} - \frac{n}{p+n} \log_2 \frac{n}{p+n} \quad (3.32)$$

Κάθε χαρακτηριστικό  $A$  διαιρεί το σύνολο εκπαίδευσης  $E$  σε υποσύνολα  $E_1, \dots, E_v$  σύμφωνα με τις τιμές τους για το  $A$ , όπου το  $A$  μπορεί να έχει  $v$  διαφορετικές τιμές. Κάθε υποσύνολο  $E_i$  έχει  $p_i$  θετικά δείγματα και  $n_i$  αρνητικά δείγματα. Αν διαιρεθούν τα δείγματα εκπαίδευσης με βάση αυτό το χαρακτηριστικό, θα χρειαστούν  $I(p_i/(p_i + n_i), n_i/(p_i + n_i))$  δυαδικά ψηφία πληροφορίας, για την  $E_i$  τιμή του χαρακτηριστικού. Ένα τυχαία επιλεγμένο δείγμα από το σύνολο εκπαίδευσης έχει

την  $i$ -στη τιμή του χαρακτηριστικού με πιθανότητα  $(p_i + n_i)/(p + n)$  οπότε κατά μέσο όρο αν γίνει διαμέριση με βάση το χαρακτηριστικό  $A$  θα χρειαστούν:

$$\text{Υπόλοιπο}(A) = \sum_{i=1}^v \frac{p_i + n_i}{p + n} I\left(\frac{p_i}{p_i + n_i}, \frac{n_i}{p_i + n_i}\right) \quad (3.33)$$

δυναμικά ψηφία πληροφορίας για να ταξινομήσουμε το δείγμα.

Το **κέρδος πληροφορίας** (information gain)[1] από την διαίρεση με βάση αυτό το χαρακτηριστικό είναι η διαφορά μεταξύ της πληροφορίας που απαιτούνταν αρχικά και της πληροφορίας που απαιτείται μετά την επιλογή του:

$$\text{Κέρδος}(A) = I\left(\frac{p}{p+n}, \frac{n}{p+n}\right) - \text{Υπόλοιπο}(A) \quad (3.34)$$

Η ευρετική μέθοδος που μπορεί να χρησιμοποιηθεί είναι η απλή επιλογή του χαρακτηριστικού με το μεγαλύτερο κέρδος πληροφορίας. Το κέρδος πληροφορίας χρησιμοποιείται στους αλγόριθμους εκμάθησης ID3 και C 4.5. Το μειονέκτημά του είναι ότι τείνει να προτιμά σύνολα χαρακτηριστικών που καταλήγουν σε μεγάλο αριθμό διαμερίσεων, κάθε μια από τις οποίες είναι μικρή σε μέγεθος αλλά αρκετά ομογενής [36].

Ένας άλλος δείκτης που μπορεί να χρησιμοποιηθεί αντί του κέρδους πληροφορίας είναι ο **δείκτης Gini** [36]:

$$\text{GINI}(t) = 1 - \sum_j [p(j|t)]^2 \quad (3.35)$$

όπου  $p(j|t)$  είναι η σχετική συχνότητα της κλάσης  $j$  στον κόμβο  $t$ .

Ο δείκτης παίρνει την μέγιστη τιμή  $(1 - 1/n_c)$  όταν τα δείγματα έχουν κατανεμηθεί ομοιόμορφα στις κλάσεις, υπονοώντας ότι η πληροφορία που παρέχεται δεν είναι χρήσιμη. Η ελάχιστη τιμή του δείκτη είναι 0.0 και προκύπτει όταν όλα τα δείγματα κατανέμονται σε μια κλάση, οπότε και η πληροφορία έχει ιδιαίτερη σημασία.

Όταν ένας κόμβος  $p$  διαιρείται σε  $k$  διαμερίσεις, η ποιότητα της διαμέρισης υπολογίζεται ως εξής:

$$\text{GINI}_{split} = \sum_{i=1}^k \frac{n_i}{n} \text{GINI}(i) \quad (3.36)$$

όπου  $n_i$  το πλήθος των δειγμάτων στον κόμβο-παιδί  $i$  και  $n$  ο αριθμός δειγμάτων στον κόμβο-γονέα  $p$ .

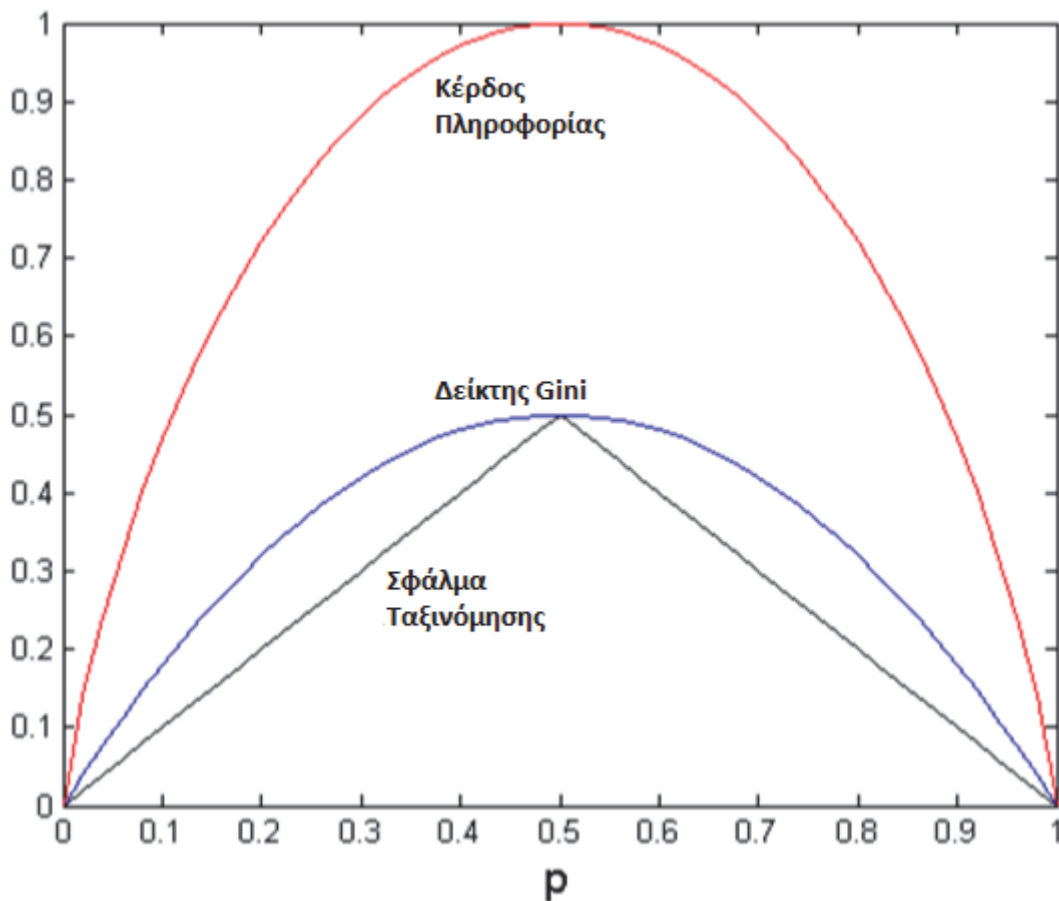
Εκτός από τους παραπάνω δείκτες, μπορεί να γίνει διαμέριση με κριτήριο **το σφάλμα ταξινόμησης** σε έναν κόμβο  $t$  [36]:

$$Error(t) = 1 - \max_i p(i|t) \quad (3.37)$$

όπου  $p(i|t)$  είναι η σχετική συχνότητα της κλάσης  $j$  στον κόμβο  $t$ .

Όπως και με τον δείκτη Gini, ο δείκτης αυτός παίρνει την μέγιστη τιμή ( $1 - 1/n_c$ ) όταν τα δείγματα έχουν κατανεμηθεί ομοιόμορφα στις κλάσεις και η ελάχιστη τιμή του δείκτη είναι 0.0 η οποία προκύπτει όταν όλα τα δείγματα κατανέμονται σε μια κλάση οπότε και η πληροφορία είναι σημαντική [36].

Στο διάγραμμα (Εικόνα 3.11)[36] που ακολουθεί φαίνεται η συμπεριφορά των παραπάνω δεικτών για τις διάφορες τιμές της σχετικής συχνότητας μιας κλάσης σε ένα κόμβο (παράμετροι  $p_i/p_i + n_i$ ,  $n_i/p_i + n_i$  για το κέρδος πληροφορίας,  $p(j|t)$  για το δείκτη Gini,  $p(i|t)$  για το σφάλμα ταξινόμησης):



**Εικόνα 3.11:** Μέτρα αξιολόγησης διαμέρισης παραδειγμάτων με βάση κάποιο χαρακτηριστικό

Ο πιο γνωστός αλγόριθμος εκμάθησης στην βιβλιογραφία για την κατασκευή δέντρων απόφασης είναι ο αλγόριθμος C4.5 (Quinlan, 1993)[35]. Ο αλγόριθμος C4.5 είναι μια επέκταση του αλγορίθμου ID3. Ακολουθεί την στρατηγική κατασκευής κατά βάθος του δέντρου, χρησιμοποιεί ως μέτρο επιλογής χαρακτηριστικών το κέρδος πληροφορίας και

ταξινομεί χαρακτηριστικά που παίρνουν συνεχείς τιμές σε κάθε κόμβο. Ο Αλγόριθμος απαιτεί το σύνολο των δεδομένων να βρίσκεται στην μνήμη, οπότε δεν είναι κατάλληλος για μεγάλα σύνολα δεδομένων [36]. Ο αλγόριθμος C4.5 κατασκευάζει δένδρα απόφασης **έλεγχου μίας μεταβλητής** (univariate trees). Υπάρχουν άλλοι αλγόριθμοι με στρατηγική επαγωγής δέντρων από πάνω προς τα κάτω (Top-Down Induction of Decision Trees) που μπορούν να κατασκευάσουν δένδρα με **έλεγχο πολλών μεταβλητών** (multivariate trees), όπως για παράδειγμα ο αλγόριθμος CART (Classification and Regression Tree) [37].

Τα δέντρα απόφασης συνήθως πραγματοποιούν έλεγχο μιας μεταβλητής, χρησιμοποιώντας ένα χαρακτηριστικό σε κάθε κόμβο, για διαίρεση των δειγμάτων, όμως έχουν αναπτυχθεί μέθοδοι που κατασκευάζουν δέντρα απόφασης με έλεγχο πολλών μεταβλητών. Ένα παράδειγμα τέτοιας μεθόδου είναι η μέθοδος του Zheng (1998)[35], ο οποίος βελτίωσε την ακρίβεια ταξινόμησης των δέντρων απόφασης με το να δημιουργήσει νέα δυαδικά χαρακτηριστικά, χρησιμοποιώντας τις λογικές πράξεις της σύζευξης, διάζευξης και άρνησης. Οι Gama και Brazdil (1999)[35] συνδύασαν ένα δέντρο απόφασης με γραμμική διαχωριστική ανάλυση (linear discriminant analysis) ώστε να κατασκευάσουν δέντρα με έλεγχο πολλών μεταβλητών. Σε αυτό το μοντέλο, καινούργια χαρακτηριστικά προκύπτουν ως γραμμικοί συνδυασμοί των προηγούμενων χαρακτηριστικών.

Αν προκύψει κάποιο χαρακτηριστικό με άγνωστη τιμή, αντιμετωπίζεται με την προώθηση του συγκεκριμένου δείγματος προς όλα τα κλαδιά του κόμβου του συγκεκριμένου χαρακτηριστικού και κάθε κλαδί εξάγει μια κατανομή κλάσης. Η έξοδος είναι συνδυασμός των διαφορετικών κατανομών κλάσης, οι οποίες έχουν συνολικό άθροισμα ίσο με 1 [35].

Τα δέντρα απόφασης ενδεχομένως να έχουν αρκετά πολύπλοκες δομές εξαιτίας του προβλήματος της εμφάνισης επαναλαμβανόμενων υποδέντρων. Μια λύση στο πρόβλημα αυτό είναι η υλοποίηση σύνθετων χαρακτηριστικών ώστε να αποφευχθούν τα επαναλαμβανόμενα τμήματα. Οι Markovitch και Rosenstein (2002)[35] παρουσίασαν τον αλγόριθμο FICUS για την κατασκευή δέντρων απόφασης, ο οποίος χρησιμοποιεί μάθηση υπό επίβλεψη και ένα συγκεκριμένο τρόπο αναπαράστασης χαρακτηριστικών για να παράγει ένα σύνολο νέων χαρακτηριστικών. Ο αλγόριθμος FICUS έχει αρκετά κοινά σημεία με τους υπόλοιπους αλγόριθμους κατασκευής, αλλά παρέχει γενικότητα και ευελιξία. Είχε αρχικά σχεδιαστεί για να παράγει χαρακτηριστικά, δεχόμενος ως είσοδο σύνολα χαρακτηριστικών σε αναπαράσταση συμβατή με την γραμματική γενικού σκοπού που υποστηρίζει.

### 3.3.2.3 Υπερπροσαρμογή

Όποτε υπάρχει ένα μεγάλο σύνολο δυνατών υποθέσεων, υπάρχει ο κίνδυνος να βρεθεί κανονικότητα στα δεδομένα άνευ νοήματος. Το πρόβλημα αυτό ονομάζεται **υπερπροσαρμογή** (overfitting)[1]. Ένα δέντρο απόφασης, το οποίο έχει μάθει μια υπόθεση  $h$ , έχει υπερπροσαρμοστεί στα δεδομένα εκπαίδευσης αν υπάρχει μια άλλη υπόθεση  $h'$ , η οποία εμφανίζει μεγαλύτερο σφάλμα από την  $h$  όταν ελέγχεται στα δεδομένα εκπαίδευσης, αλλά παρουσιάζει μικρότερο σφάλμα από την  $h$  όταν δοκιμάζεται σε δεδομένα ελέγχου. Υπάρχουν δυο κοινές προσεγγίσεις για αποφυγή της υπερπροσαρμογής [35]:

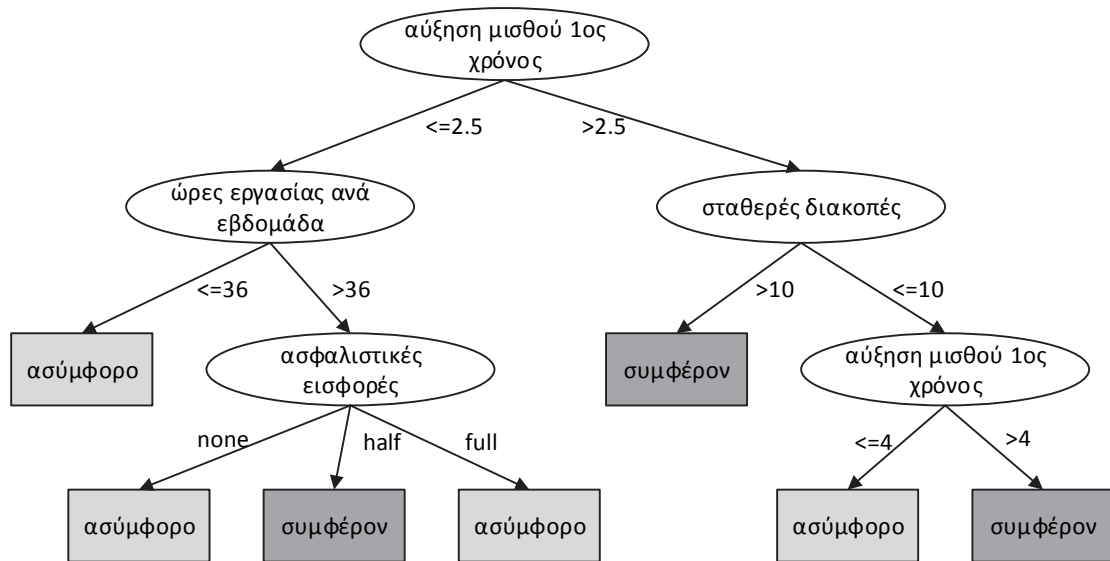
- **Διακοπή του αλγορίθμου εκμάθησης** πριν φθάσει ένα σημείο στο οποίο έχει προσαρμοστεί τέλεια στα δεδομένα εκπαίδευσης.
- **Κλάδεμα του δέντρου απόφασης**. Συγκεκριμένα υπάρχουν δυο στρατηγικές, το **μετακλάδεμα** (postpruning) και το **προκλάδεμα** (prepruning). Με το μετακλάδεμα γίνεται αποκοπή περιττών τμημάτων ενός ήδη ολοκληρωμένου δέντρου ενώ με το προκλάδεμα διακοπή της ανάπτυξης κάποιου κλαδιού, κατά τη διάρκεια της εκπαίδευσης [37].

Αν δυο δέντρα εμφανίζουν τα ίδια αποτελέσματα με την ίδια απόδοση κατά την ταξινόμηση, επιλέγεται το δέντρο με τον μικρότερο αριθμό φύλλων.

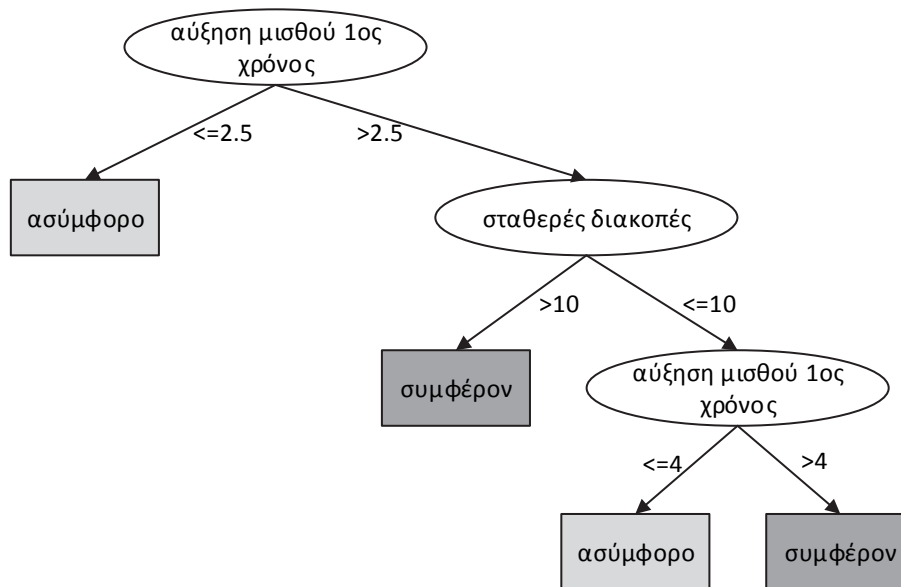
Ο πιο άμεσος τρόπος για αποφυγή του προβλήματος της υπερπροσαρμογής είναι το **προκλάδεμα** του δέντρου απόφασης, ώστε να μην αναπτυχθεί πλήρως. Αυτό μπορεί να επιτευχθεί με ένα κριτήριο τερματισμού, όπως ένα τεστ κατωφλιού για το μέτρο της ποιότητας του χαρακτηριστικού. Οι ταξινομητές δέντρων απόφασης εφαρμόζουν τεχνικές μετακλαδέματος, οι οποίες υπολογίζουν την απόδοση των δέντρων καθώς αυτά κλαδεύονται, χρησιμοποιώντας ένα σύνολο δεδομένων επικύρωσης. Οποιοσδήποτε κόμβος μπορεί να αφαιρεθεί, και να θεωρηθεί ότι τα δεδομένα που ταξινομούνται από αυτόν ανήκουν στην πιο κοινή κλάση των δεδομένων αυτών. Μελέτες έχουν δείξει ότι δεν υπάρχει κάποια μοναδική βέλτιστη μέθοδος προκλαδέματος ή μετακλαδέματος [35].

Η τεχνική του **μετακλαδέματος** αναφέρεται κυρίως σε δυο λειτουργίες:

- **Αντικατάσταση υποδέντρου:** Η προσέγγιση σε αυτή την περίπτωση είναι από κάτω προς τα πάνω (Bottom-up). Ένα (υπο)δέντρο θεωρείται προς αντικατάσταση μόνο εάν δεν αντικαθίσταται κάποιο από τα υποδέντρα του. Στις Εικόνες 3.12 και 3.13 υπάρχει ως παράδειγμα ένα δέντρο απόφασης που έχει υποστεί αντικατάσταση υποδέντρου [37].

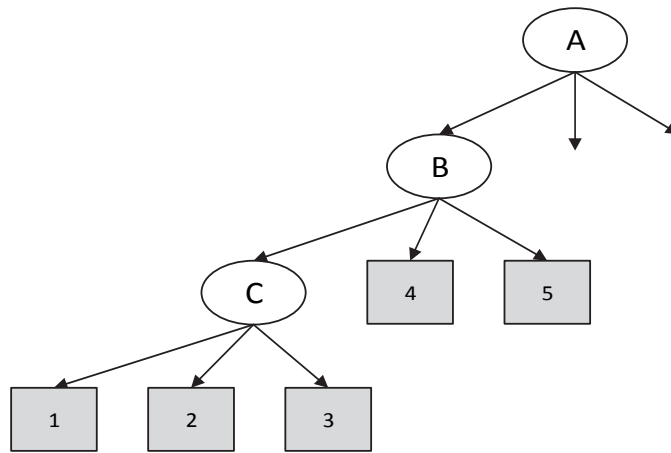


**Εικόνα 3.12:** Δέντρο απόφασης πριν την αντικατάσταση υποδέντρου

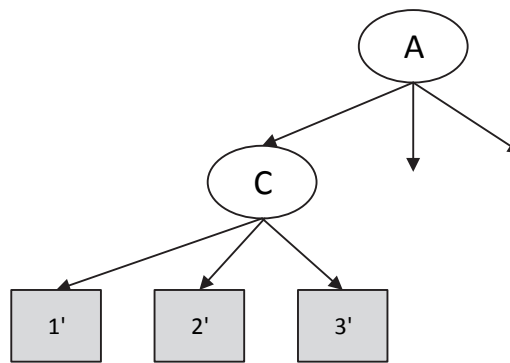


**Εικόνα 3.13:** Δέντρο απόφασης μετά την αντικατάσταση υποδέντρου

- **Ανύψωση υποδέντρου:** Σε αυτή την περίπτωση γίνεται αποκοπή φύλλων και αναδιανομή των δειγμάτων. Κοστίζει περισσότερο υπολογιστικά σε σχέση με την αντικατάσταση. Στις Εικόνες 3.14 και 3.15 υπάρχει ως παράδειγμα δέντρο που έχει υποστεί ανύψωση υποδέντρου [37].



Εικόνα 3.14: Δέντρο απόφασης πριν την ανύψωση υποδέντρου



Εικόνα 3.15: Δέντρο απόφασης μετά την ανύψωση

### 3.3.2.4 Τυχαία Δέντρα Απόφασης

Το **τυχαίο δέντρο απόφασης** (Random Decision Tree – RDT) προκύπτει εάν κατά την κατασκευή του δέντρου απόφασης ο αλγόριθμος **επιλέγει τυχαία ένα χαρακτηριστικό για να δημιουργήσει έναν κόμβο απόφασης**, χωρίς να χρησιμοποιεί κάποιο δείκτη αξιολόγησης των χαρακτηριστικών (κέρδος πληροφορίας, δείκτης Gini, σφάλμα ταξινόμησης). Η διαμέριση που θα γίνει σε κάποιο κόμβο επιλέγεται τυχαία ανάμεσα από τις  $K$  καλύτερες διαμερίσεις (Dietterich, 1998)[38].

Σε κάθε κόμβο, η τυχαία επιλογή γίνεται από σύνολο χαρακτηριστικών που δεν έχουν χρησιμοποιηθεί προηγουμένως σε κάποιο μονοπάτι του δέντρου, από τη ρίζα μέχρι τον συγκεκριμένο κόμβο. Από την στιγμή που έχει επιλεγεί ένα χαρακτηριστικό με κατηγορικές τιμές, δεν θα πρέπει να χρησιμοποιηθεί ξανά στο ίδιο μονοπάτι, διότι θα έχει πάλι την ίδια τιμή. Σε περίπτωση που το χαρακτηριστικό είναι αριθμητικό, μπορεί να επιλεγεί ξανά.



Το δέντρο σταματάει να αναπτύσσεται αν κάποιος κόμβος προκύψει άδειος, δεν υπάρχουν δείγματα ώστε να γίνουν επιπλέον διαμερίσεις ή αν το βάθος του δέντρου έχει περάσει κάποιο όριο.

Τα δέντρα αυτά μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την κατασκευή ενός **συνόλου (ensemble) δέντρων απόφασης**, τα οποία μπορούν να λειτουργήσουν συλλογικά για βελτίωση της ταξινόμησης (κεφ. 4) [38].

### 3.3.2.5 Πλεονεκτήματα και Μειονεκτήματα

Η χρήση των δέντρων απόφασης έχει αρκετά πλεονεκτήματα. Τα αποτελέσματα μπορούν εύκολα να ερμηνευτούν και να εξαχθεί η συλλογιστική πορεία για τις ταξινομήσεις που προκύπτουν. Τα δεδομένα του προβλήματος δεν χρειάζονται ιδιαίτερη προεπεξεργασία για να λειτουργήσει σωστά η μέθοδος. Τα δέντρα απόφασης έχουν την δυνατότητα να χειρίζονται πολλά είδη δεδομένων, όπως κατηγορικά (categorical), αριθμητικά (numeric), ονομαστικά (nominal) και παράγουν εύρωστους ταξινομητές. Η διαδικασία εκμάθησης είναι αποδοτική και μπορεί να ελεγχθεί χρησιμοποιώντας διάφορα στατιστικά τεστ.

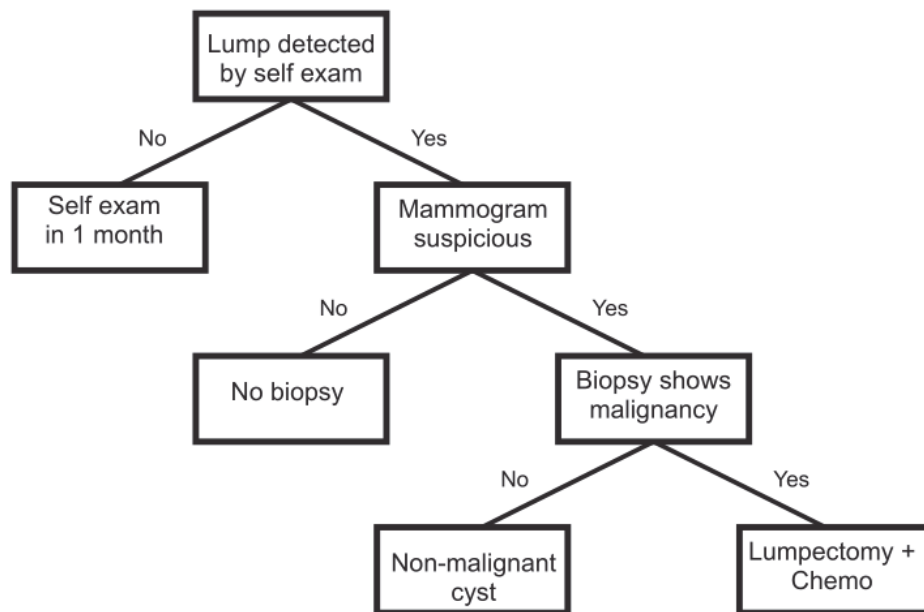
Μια από τις πιο χρήσιμες ιδιότητες των δέντρων απόφασης είναι η ευκολία στην κατανόηση της διαδικασίας ταξινόμησης. Μπορεί εύκολα κανείς να κατανοήσει γιατί ένα δέντρο απόφασης κατατάσσει ένα δείγμα σε κάποια συγκεκριμένη κλάση [35].

Μια παραδοχή που γίνεται κατά τη χρήση των δέντρων απόφασης είναι ότι τα δείγματα που ανήκουν σε διαφορετικές κλάσεις έχουν διαφορετικές τιμές τουλάχιστον σε ένα από τα χαρακτηριστικά τους. Τα δέντρα αποδίδουν καλύτερα όταν τα χαρακτηριστικά του προβλήματος είναι διακριτά/κατηγορικά. Αν και ο αλγόριθμος διαίρει και βασίλευε είναι αποδοτικός, η ταχύτητα εκτέλεσης αποτελεί κρίσιμο σημείο για προβλήματα με εκατοντάδες χιλιάδες δείγματα.

Οι περισσότεροι αλγόριθμοι εκμάθησης δέντρων απόφασης δεν μπορούν να αποδώσουν καλά με προβλήματα που απαιτούν διαγώνια διαμέριση των δεδομένων. Η διαίρεση του χώρου των δειγμάτων είναι ορθογώνια ως προς τον άξονα μιας μεταβλητής και παράλληλη ως προς όλους τους υπόλοιπους άξονες. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα όλες οι περιοχές που προκύπτουν από τις διαμερίσεις να είναι υπερ-ορθογώνια. Τα δέντρα απόφασης δεν μπορούν να αποδώσουν όπως τα νευρωνικά δίκτυα σε πολύπλοκα προβλήματα ταξινόμησης (Atlas et al. 1990)[35].

### 3.3.3 Εφαρμογές των Δέντρων Απόφασεων στη Βιοπληροφορική

Τα δέντρα απόφασης χρησιμοποιούνται εδώ και πολλά έτη από τους επιστήμονες (ιδιαίτερα στην ταξινόμια) και αποτελούν βασικό συστατικό για πολλά **πρωτόκολλα ιατρικής διάγνωσης**. Στις εφαρμογές αυτές, αξιοποιείται η γνώση που έχει αποκτηθεί από τους ειδικούς επιστήμονες του εκάστοτε πεδίου στον τομέα της υγείας, ώστε να παράγονται δέντρα απόφασης που είναι κλινικώς κατανοητά και ορθά [39]. Στην Εικόνα 3.16 παρουσιάζεται ένα παράδειγμα δέντρου απόφασης για τη διάγνωση καρκίνου του μαστού [40].



**Εικόνα 3.16:** Παράδειγμα απλού δέντρου απόφασης που μπορεί να χρησιμοποιηθεί στη διάγνωση και στη θεραπεία του καρκίνου του μαστού. Το δέντρο αυτό μπορεί να προκύψει από κάποιον ειδικό στο συγκεκριμένο πεδίο ή από αλγόριθμο μάθησης.

Δεδομένου ενός συνόλου κλινικών περιπτώσεων που λειτουργούν ως δείγματα εκμάθησης, **παράγεται μια συστηματική περιγραφή των κλινικών χαρακτηριστικών** που χαρακτηρίζουν μοναδικά τις διάφορες κλινικές περιπτώσεις. Η γνώση αυτή μπορεί να αναπαρασταθεί με τη μορφή απλών κανόνων, οι οποίοι συχνά παίρνουν τη μορφή ενός δέντρου απόφασης. Ένα παράδειγμα αυτής της μεθόδου είναι το σύστημα KARDIO, το οποίο αναπτύχθηκε για την ερμηνεία ηλεκτροκαρδιογραφημάτων (Bratko et al., 1989)[3].

Οι Alexopoulos et al.(1999)[3] χρησιμοποίησαν δέντρα απόφασης για την ιατρική διάγνωση εγκεφαλικών επεισοδίων. Η προτεινόμενη προσέγγιση βασίζεται στον αλγόριθμο See5, ο οποίος είναι μια ενημερωμένη έκδοση του αλγορίθμου C4.5. Δίνεται ιδιαίτερη προσοχή στον προσδιορισμό της πολυπλοκότητας και της δυνατότητας κατανόησης των κανόνων απόφασης, σε συνεργασία με τους ειδικούς του τομέα. Οι Zelic et al., 1999 [3] αξιοποίησαν τα Mangus-assistant [41] δέντρα απόφασης για την πρόγνωση και διάγνωση του πρώτου εγκεφαλικού παροξυσμού (first cerebral paroxysm). Δεδομένα και

χαρακτηριστικά που θεωρήθηκαν από ειδικούς νευρολόγους ότι είναι προφανή και ασήμαντα αποδείχθηκαν πολύ σημαντικά για την αυτόματη διάγνωση και πρόγνωση [3].

Στην ιατρική υπάρχουν διαφορετικές κατηγορίες διαδικασιών απόφασης, οι οποίες επιτελούν διαφορετικούς σκοπούς, όπως για παράδειγμα διάγνωση, πρόγνωση, πρόληψη και ιατρική παρακολούθηση, χορηγία φαρμάκων και θεραπείας [39]. Σε περισσότερο γενικά άρθρα οι Cremilleux και Robert παρουσιάζουν το γενικό πλαίσιο χρήσης των δέντρων απόφασης στην ιατρική [42]. Οι Kokol et al. παρουσιάζουν διάφορους περιορισμούς στις ιατρικές εφαρμογές των δέντρων απόφασης [42]. Οι Zorman et al. αξιολογούν διάφορες τεχνικές κατασκευής δέντρων απόφασης σε δεδομένα ορθοπεδικών καταγμάτων από 2637 περιπτώσεις [42].

Σε πιο εξειδικευμένες εργασίες, οι Tsien et al. [42] δείχνουν ότι τα δέντρα απόφασης μπορούν να υποστηρίξουν έγκαιρη και ακριβή διάγνωση εμφράγματος του μυοκαρδίου (myocardial infarction). Για το συγκεκριμένο πρόβλημα έχουν αναπτυχθεί διάφορα συστήματα υποστήριξης απόφασης αλλά δεν έχει επιτευχθεί γενική χρήση κάποιου συγκεκριμένου συστήματος. Παρόλα αυτά, η χρήση μεθόδων μηχανικής μάθησης, όπως τα δέντρα απόφασης, μπορεί να οδηγήσει σε απλά αλλά αποδοτικά συστήματα υποστήριξης αποφάσεων.

Η χρήση δέντρων απόφασης στην αναγνώριση συμπτωμάτων για πιθανές δυσμενείς αντιδράσεις σε φάρμακα πραγματοποιείται από τον Jones (2001)[42]. Η ύπαρξη μεγάλων βάσεων δεδομένων που περιέχουν δεδομένα για δυσμενείς αντιδράσεις και η ανάγκη αναγνώρισης συμπτωμάτων για νέα φάρμακα, οδήγησε στην εφαρμογή μεθόδων εξόρυξης δεδομένων για την εύρεση νέων συσχετίσεων στις βάσεις. Ο Jones καταλήγει στο ότι η χρήση δέντρων απόφασης μπορεί να συμβάλει αρκετά στην εύρεση νέων άγνωστων σημάτων για δυσμενείς αντιδράσεις σε φάρμακα.

Ο υψηλός ρυθμός εμφάνισης λανθασμένων συναγερμών στις Μονάδες Εντατικής Θεραπείας (ΜΕΘ) δημιουργεί την ανάγκη ανάπτυξης περισσότερο εξελιγμένων τεχνικών ανίχνευσης γεγονότων και ειδοποίησης. Οι Tsien et al. (2000)[42] πραγματοποίησαν μια μελέτη με σκοπό την ανίχνευση ελλαττωματικών προτύπων (artifact patterns) σε σήματα φυσιολογίας (physiologic signal data) από μια Μονάδα Εντατικής Θεραπείας νεογνών. Έγινε ανάλυση δεδομένων από 200 ώρες νοσηλείας από ειδικούς του τομέα και στη συνέχεια από τα δεδομένα αυτά προέκυψαν τα μοντέλα ταξινόμησης των ροών δεδομένων σε ελλαττωματικές και μη ελλαττωματικές.

Έχουν γίνει προσπάθειες εφαρμογής των δέντρων απόφασης σε περιπτώσεις λήψης αποφάσεων στην παροχή υπηρεσιών ψυχικής υγείας (Bonner, 2001)[42]. Αν και η διάγνωση σε αυτές τις περιπτώσεις είναι ιδιαίτερα πολύπλοκη και οι απόψεις των ειδικών συχνά δεν συμφωνούν, η εργασία του Bonner δείχνει ότι υπάρχει η δυνατότητα συνεργασίας πολλών ειδικών για τη δημιουργία ενός συστήματος υποστήριξης διαγνώσεων στον τομέα της ψυχιατρικής.

Οι Letourneau et al. χρησιμοποίησαν δέντρα απόφασης για τη διαδικασία λήψης αποφάσεων σε περιπτώσεις περίθαλψης χρόνιων πληγών (Letourneau, 1998)[42]. Πραγματοποιήθηκε συλλογή δεδομένων και αναπτύχθηκε το δέντρο απόφασης για τη διαχείριση χρόνιων πληγών, χρησιμοποιώντας και διάφορες μελέτες περιπτώσεων. Το συμπέρασμα είναι ότι τα δέντρα απόφασης μπορούν να υποστηρίξουν το νοσηλευτικό προσωπικό στην αξιολόγηση της εκάστοτε περίπτωσης και στην επιλογή κατάλληλης μεθόδου θεραπείας. Ο Sims πραγματοποίησε μια μελέτη για τη δυνατότητα πρόβλεψης της ανάγκης για καισαρική τομή (Sims, 2000)[42].

Τα δέντρα απόφασης που έχουν αναπτυχθεί συχνά δεν είναι διαθέσιμα στο ιατρικό προσωπικό, επειδή δεν υπάρχει διαθέσιμο λογισμικό ανεξάρτητο πλατφόρμας, το οποίο θα μπορεί να χρησιμοποιηθεί από τους καταναλωτές στις διάφορες γεωγραφικές περιοχές. Για την αντιμετώπιση των περιορισμών αυτών οι Sanders et al. [42] ανέπτυξαν ένα web interface το οποίο παρέχει τη δυνατότητα στους χρήστες να αλληλεπιδρούν με τα δέντρα απόφασης. Επίσης το interface αυτό μπορεί να παρέχει επεξηγήσεις και σημειώσεις για τα μοντέλα αυτά. Συνεπώς, παρέχεται παγκόσμια πρόσβαση σε μοντέλα απόφασης και καταναλωμένη υποστήριξη αποφάσεων σε αναλυτές απόφασης και σε ιατρούς.

Τα δέντρα απόφασης έχουν επίσης χρησιμοποιηθεί για τη διάγνωση και πρόγνωση καρκίνου. Οι Delen et al. (2005)[40] πραγματοποίησαν μελέτη επιβίωσης και θνησιμότητας για τον καρκίνο του μαστού, χρησιμοποιώντας κλινικά δεδομένα. Μετά από μια διαδικασία καθαρισμού και προεπεξεργασίας των δεδομένων, προέκυψαν 16 μεταβλητές πρόβλεψης και 202,932 δείγματα στο σύνολο δεδομένων. Οι κατηγορικές μεταβλητές της μελέτης αυτής είναι οι εξής: φυλή (28 δυνατές τιμές), οικογενειακή κατάσταση (6 δυνατές τιμές), κωδικός αρχικής ανατομικής περιοχής εμφάνισης του καρκίνου (9 δυνατές τιμές), ιστολογία (91 διαφορετικές τιμές), συμπεριφορά του όγκου (2 δυνατές τιμές), βαθμός βλάβης (με 5 δυνατές τιμές), εξάπλωση της ασθένειας (29 διαφορετικές τιμές), εμπλοκή λεμφικού κόμβου (10 διαφορετικές τιμές), ακτινοβολία (10 διαφορετικές τιμές), στάδιο του καρκίνου (5 διαφορετικές τιμές), κωδικός ανατομικής περιοχής που έχει χειρουργηθεί (11 δυνατές τιμές). Οι συνεχείς μεταβλητές που χρησιμοποιήθηκαν είναι οι εξής: ηλικία, μέγεθος όγκου, πλήθος θετικών λεμφικών κόμβων, πλήθος λεμφικών κόμβων, πλήθος αρχικών περιοχών. Στη μελέτη αυτή χρησιμοποιήθηκε ο αλγόριθμος C5 για την κατασκευή του δέντρου απόφασης, ο οποίος είναι μια βελτιωμένη έκδοση του αλγορίθμου C4.5 και ID3. Τα αποτελέσματα της μελέτης έδειξαν ότι η μέθοδος των δέντρων απόφασης έδωσε την υψηλότερη ακρίβεια (93.6%). Επίσης, χρησιμοποιήθηκαν νευρωνικά δίκτυα (πολυεπίπεδα perceptrons, τα οποία θα αναλυθούν στην επόμενη ενότητα) τα οποία είχαν ακρίβεια ταξινόμησης 91.2%, καθώς επίσης και ένα μοντέλο λογιστικής παλινδρόμησης του οποίου η ακρίβεια ήταν 89.2%.

Οι Kukar et al. (1997)[40] μελέτησαν με κλινικά δεδομένα τον καρκίνο του θυρεοειδούς. Το αναπλαστικό καρκίνωμα του θυρεοειδούς αδένου είναι μια σπάνια αλλά πολύ επιθετική μορφή καρκίνου. Πολλοί παράγοντες έχουν προταθεί που ενδεχομένως

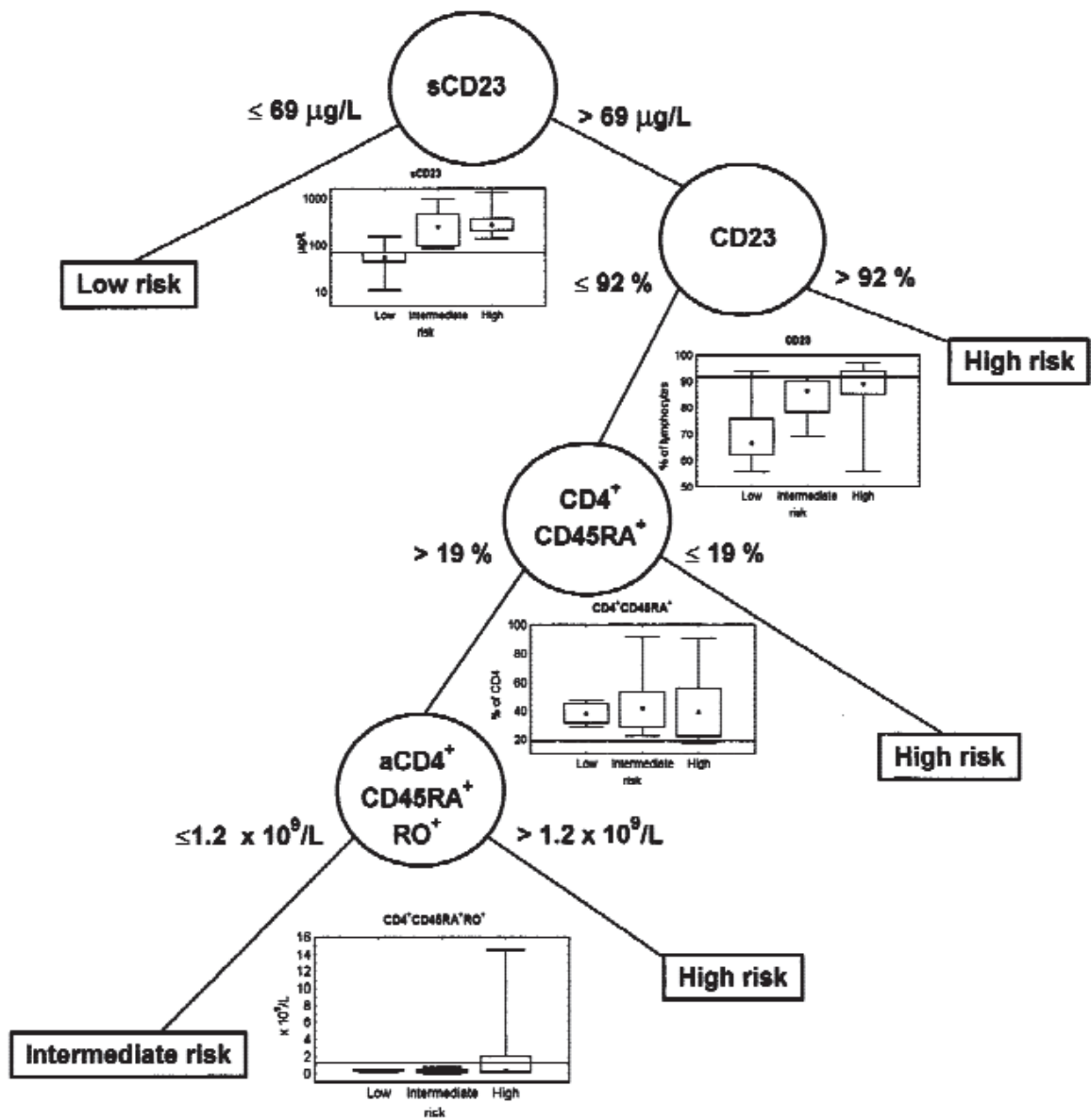
επηρεάζουν τη δυνατότητα επιβίωσης των ασθενών. Ο στόχος της μελέτης είναι να προσδιοριστούν ποιοι από τους παράγοντες που είναι γνωστοί κατά την εισαγωγή του ασθενούς στο νοσοκομείο μπορούν να προβλέψουν την επιβίωση των ασθενών με το συγκεκριμένο είδος καρκίνου και να γίνει αξιολόγηση της σχετικής σημαντικότητας των παραγόντων αυτών με χρήση δέντρων απόφασης.

Τα δέντρα απόφασης βρίσκουν εφαρμογές στη Γονιδιωματική και στη Πρωτεομική [43], όπως για παράδειγμα η σχεδίαση ενός έμπειρου συστήματος για κατηγοριοποίηση των δεδομένων από μικροσυστοιχίες για έκφραση γονιδίων χρησιμοποιώντας επιλογή γονιδίων από δέντρο απόφασης [44]. Επίσης, έχει εξεταστεί η δυνατότητα τοπικού προσδιορισμού πρωτεϊνών σε κύτταρα χρησιμοποιώντας δέντρα απόφασης [45]. Επειδή πολλές λειτουργίες του κυττάρου επιτελούνται σε συγκεκριμένα σημεία του, η πρόβλεψη της θέσης κάποιας πρωτεΐνης μέσα στο κύτταρο σχετίζεται με την αναγνώριση της λειτουργίας στην οποία συμμετέχει ή από την οποία παράγεται.

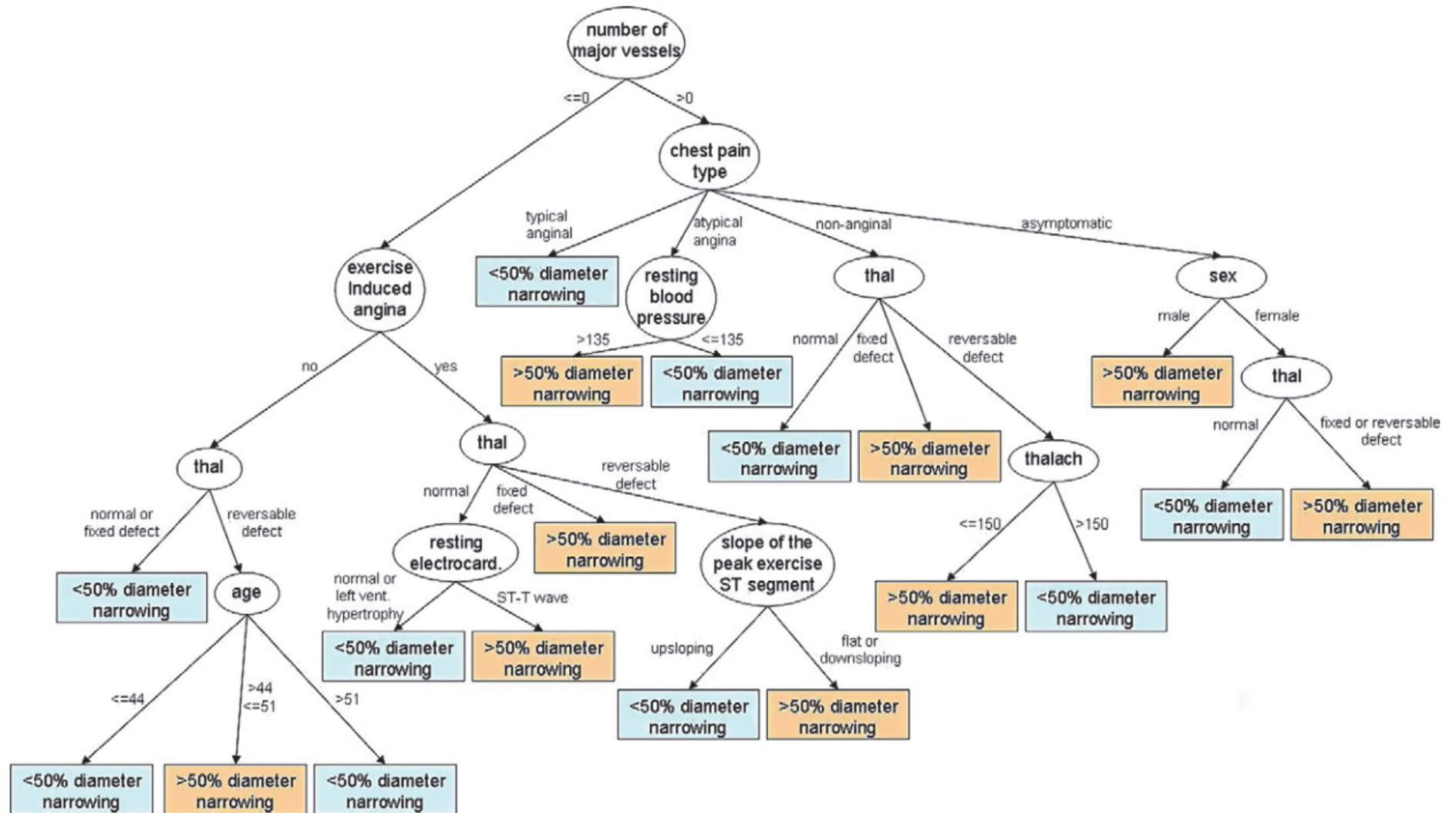
Οι Masic et al. (1998)[40] μελέτησαν την επανεμφάνιση λευχαιμίας με πρωτεομικά δεδομένα. Συνολικά χρησιμοποιήθηκαν 33 μεταβλητές, που σχετίζονται με την ανίχνευση συγκεκριμένων πρωτεϊνών στο αίμα και στη λέμφο. Έγινε μέτρηση των επιπέδων της πρωτεΐνης sCD23 (σε mg/L) και χρησιμοποιήθηκαν μονοκλωνικά αντισώματα για ανοσοφαινοτυπική ανάλυση (Immunophenotypic Analysis) με κυτταρομετρία ροής τριών χρωμάτων (Three-Color Flow Cytometry). Τα αποτελέσματα των κυτταρικών μετρήσεων εκφράζονται ως ποσοστά απλών θετικών (CD19+, CD20+, CD21+, CD23+, CD72+, CD5+, CD3+, CD4+) ή διπλών θετικών (CD19+ CD5+, CD19+ CD23+, CD19+ CD21+) κυττάρων στην λεμφοκυτταρική πύλη. Επιπλέον αναλύσεις έγιναν για ποσοστά κυττάρων CD19+, που εκφράζουν μαζί τις πρωτεΐνες CD5, CD23, CD21, ή CD72, για ποσοστά CD4+ κυττάρων που εκφράζουν μαζί τις CD45RO ή CD45RA, για ποσοστά CD4+ κυττάρων με φαινότυπο CD45RA+ RO-, CD45RA+ RO+, CD45RA- RO+, για ποσοστά CD19+ κυττάρων με φαινότυπο CD21+ CD23-, CD21+ CD23+, CD21- CD23+, CD5+ CD72-, CD5+ CD72+, CD5- CD72+ και για ποσοστά κυττάρων με CD19+ CD5+, CD19+ CD5-, CD19+ CD21+ ή CD19+ CD21- που εκφράζουν παράλληλα την CD23. Τέλος, υπολογίστηκε ο απόλυτος αριθμός των δεικτών CD4+ CD45RO+ RA+ και CD4+ CD45RA+ /CD4+ CD45RO+. Το δέντρο απόφασης προέκυψε χρησιμοποιώντας τις 33 μεταβλητές, με τον αλγόριθμο C4.5. Στην Εικόνα 3.17 φαίνεται το δέντρο απόφασης για το (sCD23, CD23+, CD4+ CD45RA+ , aCD4+ CD45RO+ RA+) προγνωστικό διάνυσμα. Στη μελέτη αυτή συμμετείχαν 34 ασθενείς με χρόνια λεμφοκυτταρική λευχαιμία (Chronic Lymphocytic Leukemia - CLL). Ένα διάνυσμα πρόβλεψης που περιέχει τέσσερις συνενωμένες μεταβλητές δίνει ακρίβεια 83% για την ομάδα χαμηλού ρίσκου, 100% για τις περιπτώσεις μεσαίου ρίσκου και 89% για την ομάδα υψηλού ρίσκου επανεμφάνισης.

Οι Seiwert et al. (2000)[40] πραγματοποίησαν μελέτη επιβίωσης και θνησιμότητας με πρωτεομικά δεδομένα για τον καρκίνο του λάρυγγα. Συγκεκριμένα, η μελέτη αυτή ασχολήθηκε με την ανοσο-ιστοχημική θετικότητα (immunohistochemical positivity) της πρωτεΐνης καθεψίνης D (cathepsin D) στο επιθήλιο και στο στρώμα του όγκου 61

χειρουργικών δειγμάτων πλακώδων καρκινικών κυττάρων του λάρυγγα. Η ανοσο-ιστοχημική αντίδραση αξιολογήθηκε ποσοτικά με ανάλυση εικόνας από υπολογιστή, με το σύστημα SFORM-VAMS. Τα αποτελέσματα συσχετίστηκαν με κλινικές και μορφολογικές παραμέτρους, αλλά και με τη θνησιμότητα. Ανοσο-ιστοχημική θετικότητα παρατηρήθηκε στα νεοπλασματικά κύτταρα και στο στρώμα του όγκου. Σημαντικά προγνωστικής αξίας αποτελέσματα για την καθεψίνη D προέκυψαν χωριστά για το επιθήλιο και το στρώμα του όγκου, χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο C4.5 για τη δημιουργία δέντρων απόφασης. Οι ασθενείς με καθεψίνη D που υπερβαίνει τη διάμεσο, εμφάνισαν σημαντικά χαμηλότερο χρόνο επιβίωσης. Ο αλγόριθμος C4.5 παρήγαγε ένα δέντρο απόφασης που καθορίζει τις πιθανότητες των ασθενών για επιβίωση και θνησιμότητα, με υψηλή ευαισθησία (92.8% για επιβίωση και 73.6% για θνησιμότητα), με 100% ειδικότητα και 86.9% ακρίβεια. Επομένως, ο ανοσο-ιστοχημικός υπολογισμός της καθεψίνης D αποτελεί μια ανεξάρτητη προγνωστική παράμετρο για τα καρκινώματα του λάρυγγα, εντός μιας περιόδου 5 ετών αφότου χειρουργήθηκε ο όγκος.



**Εικόνα 3.17:** Δέντρο Απόφασης του (sCD23, CD23+, CD4+ CD45RA+, αCD4+ CD45RO+ RA+) προγνωστικού διανύσματος. Οι αριθμοί σε κάθε κλάδο του δέντρου αναπαριστούν τιμές ελέγχου που χρησιμοποιούνται στον κανόνα απόφασης και εφαρμόζονται στον κατάλληλο κόμβο του δέντρου. Οι συνιστώσες του προγνωστικού διανύσματος είναι οι εξής: συγκέντρωση πρωτεΐνης sCD23, ποσοστά των CD23+ λεμφοκυττάρων, ποσοστά των CD4+ κυττάρων που εκφράζουν παράλληλα την CD45RA+, και ο απόλυτος αριθμός των CD4+ κυττάρων που παράλληλα εκφράζουν την CD45RO+ RA+.



Εικόνα 3.18: Δέντρο Απόφασης για διάγνωση καρδιοπάθειας στους ασθενείς [103]



## 3.4 Νευρωνικά Δίκτυα

### 3.4.1 Εισαγωγή

Τα **Νευρωνικά Δίκτυα** είναι συστήματα που έχουν σχεδιαστεί ώστε να μοντελοποιούν τον τρόπο με τον οποίο ο ανθρώπινος εγκέφαλος πραγματοποιεί μια συγκεκριμένη λειτουργία ή εργασία. Για να επιτύχουν υψηλή απόδοση, τα νευρωνικά δίκτυα εμπεριέχουν διασυνδέσεις απλούστερων υπολογιστικών κυττάρων, τα οποία ονομάζονται **νευρώνες** (neurons) ή μονάδες επεξεργασίας (processing units) [46]. Εξαιτίας της αναλογίας τους με τον ανθρώπινο εγκέφαλο, για την περιγραφή τους χρησιμοποιούνται όροι από το επιστημονικό πεδίο της Νευροβιολογίας.

Μπορούμε να υιοθετήσουμε τον παρακάτω ορισμό για το Νευρωνικό Δίκτυο, θεωρώντας το ως **μια μηχανή που έχει την δυνατότητα να προσαρμόζεται** (adaptive machine) [46]:

Ένα Νευρωνικό Δίκτυο είναι ένας επεξεργαστής που λειτουργεί παράλληλα και κατανεμημένα σε ευρεία κλίμακα. Έχει προκύψει από απλούστερες μονάδες επεξεργασίας, και έχει την δυνατότητα να αποθηκεύει εμπειρική γνώση και να την διαθέτει προς χρήση. Φέρει ομοιότητες με τον ανθρώπινο εγκέφαλο στα εξής σημεία:

1. Το δίκτυο αποκτά γνώση από το περιβάλλον του μέσω μιας διαδικασίας εκμάθησης.
2. Οι συνδέσεις μεταξύ των νευρώνων χαρακτηρίζονται από το πόσο ισχυρές είναι. Αυτό εκφράζεται αναθέτοντας στις συνδέσεις αυτές βάρη, που ονομάζονται **συναπτικά βάρη** (synaptic weights). Αυτή η παράμετρος των νευρωνικών συνδέσεων χρησιμοποιείται για να καταστεί δυνατή η αποθήκευση της προσλαμβανόμενης γνώσης.

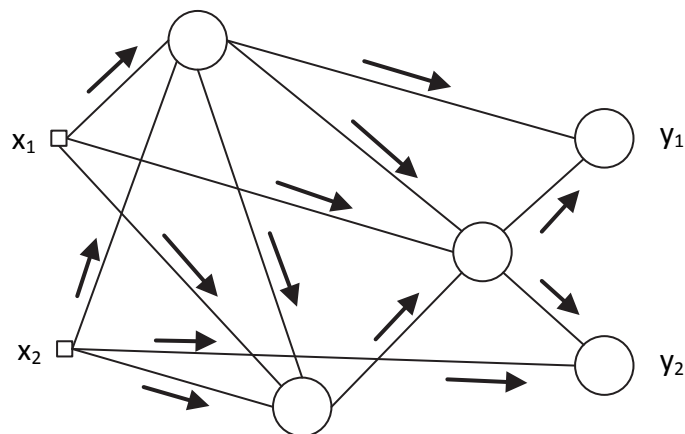
Μια μεγάλη κατηγορία νευρωνικών δικτύων έχει τη δυνατότητα να πραγματοποιεί χρήσιμους υπολογισμούς μέσω διαδικασιών εκμάθησης, οι οποίες υλοποιούνται με τον **αλγόριθμο εκμάθησης** (learning algorithm). Ο αλγόριθμος εκμάθησης τροποποιεί τα συναπτικά βάρη των συνδέσεων του δικτύου με συγκεκριμένο τρόπο για να επιτύχει ένα συγκεκριμένο στόχο σχεδίασης για το δίκτυο.

Η τροποποίηση των συναπτικών βαρών είναι η παραδοσιακή προσέγγιση για την σχεδίαση των νευρωνικών δικτύων. Αυτή η μέθοδος προσεγγίζει την θεωρία των γραμμικών προσαρμοστικών φίλτρων (linear adaptive filter theory), η οποία ήδη έχει εδραιωθεί και εφαρμοστεί επιτυχώς σε διάφορα επιστημονικά πεδία [47],[48]. Ωστόσο, ένα νευρωνικό δίκτυο έχει την δυνατότητα να τροποποιεί την τοπολογία του, όπως ακριβώς

συμβαίνει και με τον ανθρώπινο εγκέφαλο, όπου κάποιοι νευρώνες πεθαίνουν και νέες συνδέσεις μεταξύ των νευρώνων μπορούν να αναπτυχθούν.

### 3.4.2 Νευρωνικά Δίκτυα Εμπρόσθιας Τροφοδότησης

**Τα Νευρωνικά Δίκτυα Εμπρόσθιας Τροφοδότησης (Feedforward Neural Networks)** αποτελούν μια μεγάλη κατηγορία δικτύων, τα οποία δεν περιέχουν βρόχους ανατροφοδότησης. Το χαρακτηριστικό αυτό διασφαλίζει ότι οι έξοδοι του δικτύου μπορούν να εκφραστούν ως συνάρτηση των εισόδων και των συναπτικών βαρών του δικτύου. Ένα παράδειγμα νευρωνικού δικτύου εμπρόσθιας τροφοδότησης παρουσιάζεται στην Εικόνα 3.19, όπου φαίνεται ότι δεν υπάρχουν βρόχοι ανατροφοδότησης του σήματος, καθώς αυτό διαδίδεται από την είσοδο προς την έξοδο του δικτύου [49]. Σε αυτή τη κατηγορία ανήκουν Νευρωνικά Δίκτυα που χρησιμοποιούνται σε ένα μεγάλο εύρος εφαρμογών, όπως τα Πολυεπίπεδα Perceptrons, τα Νευρωνικά Δίκτυα Ακτινικής Βάσης και τα Πιθανοτικά Νευρωνικά Δίκτυα.

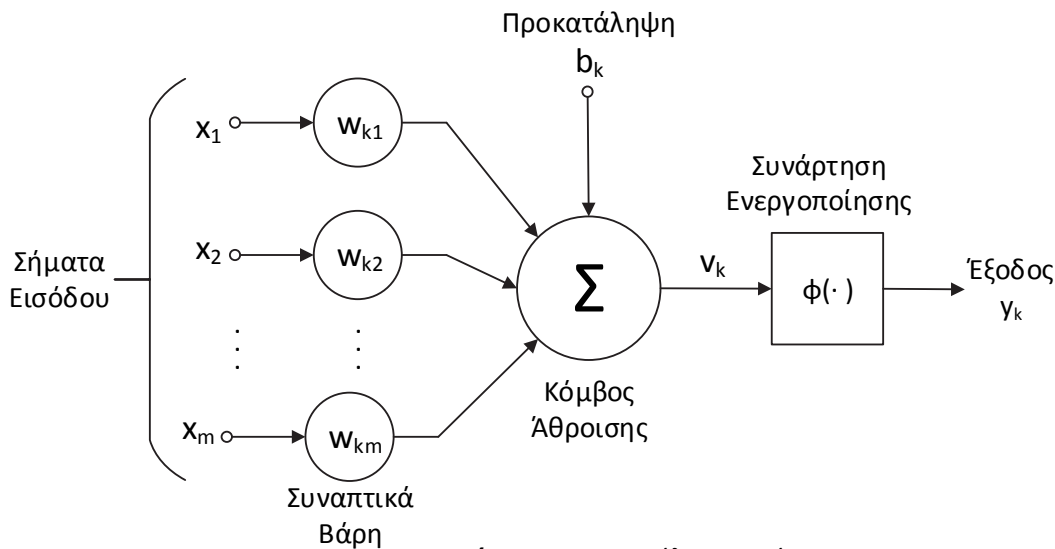


**Εικόνα 3.19:** Νευρωνικό Δίκτυο Εμπρόσθιας Τροφοδότησης με γενική τοπολογία

#### 3.4.2.1 Περιγραφή Νευρώνα

##### α) Μοντέλο Νευρώνα

Ο νευρώνας είναι η βασική μονάδα επεξεργασίας και είναι απαραίτητος για τη λειτουργία του νευρωνικού δικτύου. Στο παρακάτω σχήμα (Εικόνα 3.20) βλέπουμε το μοντέλο ενός νευρώνα, το οποίο αποτελεί την βάση για τον σχεδιασμό των νευρωνικών δικτύων [46]:



Εικόνα 3.20: Μοντέλο Νευρώνα

Όπως φαίνεται και στο παραπάνω σχήμα, τα βασικά στοιχεία ενός νευρώνα είναι τα εξής [46]:

1. Το σύνολο των συνδέσεων των σημάτων εισόδου  $x_i$ ,  $i = 1..m$  με τον νευρώνα  $k$ , οι οποίες χαρακτηρίζονται από τα βάρη  $w_{kj}$ . Το βάρος  $w_{kj}$  αναφέρεται στην σύνδεση του σήματος εισόδου  $x_j$  με τον νευρώνα  $k$ . Τα βάρη μπορούν να πάρουν θετικές και αρνητικές τιμές.
2. Ο αθροιστής που αθροίζει τα σήματα εισόδου, όπως αυτά προκύπτουν μετά από τον πολλαπλασιασμό τους με τα αντίστοιχα βάρη. Ο αθροιστής αυτός σχηματίζει έναν γραμμικό συνδυαστή (linear combiner).
3. Η συνάρτηση ενεργοποίησης  $\phi(\cdot)$  (activation function), η οποία καθορίζει την έξοδο του νευρώνα  $k$  και περιορίζει το εύρος της εξόδου σε πεπερασμένες τιμές. Το κανονικοποιημένο εύρος τιμών εξόδου είναι το κλειστό διάστημα  $[0, 1]$  ή το  $[-1, 1]$ .

Από το παραπάνω μοντέλο προκύπτουν οι παρακάτω εξισώσεις [46]:

$$u_k = \sum_{j=1}^m w_{kj} x_j \quad (3.38)$$

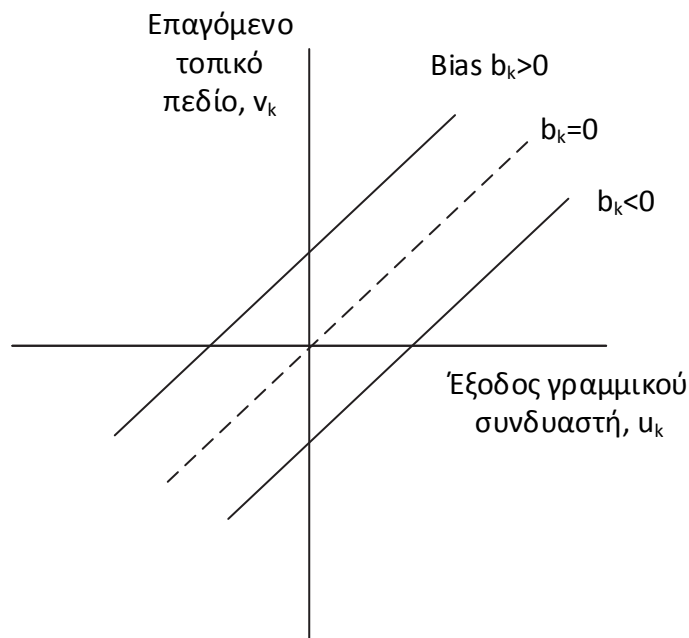
$$y_k = \varphi(u_k + b_k) \quad (3.39)$$

όπου  $x_1, x_2, \dots, x_m$  είναι τα σήματα εισόδου,  $w_{k1}, w_{k2}, \dots, w_{km}$  τα βάρη του νευρώνα  $k$ ,  $u_k$  είναι η έξοδος του γραμμικού συνδυαστή (γραμμικός συνδυασμός των σημάτων εξόδου),  $b_k$  η προκατάληψη (bias) του μοντέλου,  $\varphi(\cdot)$  είναι η συνάρτηση ενεργοποίησης και  $y_k$  το σήμα εξόδου του νευρώνα.

Η προκατάληψη (bias)  $b_k$  του μοντέλου προκαλεί ένα συγγενή μετασχηματισμό (affine transformation) στην έξοδο του γραμμικού συνδυαστή του μοντέλου, ως εξής:

$$v_k = u_k + b_k \quad (3.40)$$

Το σήμα  $v_k$  αποτελεί την είσοδο της συνάρτησης ενεργοποίησης και ονομάζεται επαγόμενο τοπικό πεδίο (induced local field) ή δυναμικό ενεργοποίησης (activation potential). Στο παρακάτω σχήμα (Εικόνα 3.21) παρουσιάζεται το πως επηρεάζει η προκατάληψη  $b_k$  του μοντέλου τη σχέση μεταξύ του δυναμικού ενεργοποίησης και του γραμμικού συνδυασμού των σημάτων εισόδου  $u_k$  [46].



**Εικόνα 3.21:** Αφινικός μετασχηματισμός που προκύπτει από το  $b_k$

### **β) Τύποι Συναρτήσεων Ενεργοποίησης**

Η συνάρτηση ενεργοποίησης  $\varphi(v_k)$  καθορίζει την έξοδο του νευρώνα, σε συνάρτηση με το επαγόμενο τοπικό πεδίο  $v_k$ . Παρακάτω παρουσιάζουμε τρεις βασικούς τύπους συναρτήσεων ενεργοποίησης [46]:

### 1. Συνάρτηση Κατωφλίου (Threshold Function)

$$\varphi(v) = \begin{cases} 1 & \text{αν } v \geq 0 \\ 0 & \text{αν } v < 0 \end{cases} \quad (3.41)$$

Αυτό το είδος συνάρτησης αναφέρεται στη βιβλιογραφία και ως συνάρτηση Heaviside [46]. Για αυτή την συνάρτηση ενεργοποίησης η έξοδος του νευρώνα θα είναι αντίστοιχα:

$$y_k = \begin{cases} 1 & \text{αν } v_k \geq 0 \\ 0 & \text{αν } v_k < 0 \end{cases} \quad (3.42)$$

Όπου  $v_k$  είναι το επαγόμενο τοπικό πεδίο του νευρώνα, το οποίο είναι:

$$v_k = \sum_{j=1}^m w_{kj} x_j + b_k \quad (3.43)$$

Ο νευρώνας με αυτή την συνάρτηση ενεργοποίησης αναφέρεται στην βιβλιογραφία ως το μοντέλο McCulloch-Pitts (1943)[46]. Η έξοδος του νευρώνα παίρνει την τιμή 1 αν το επαγόμενο τοπικό πεδίο είναι μη αρνητικό, αλλιώς παίρνει την τιμή 0. Αυτό εκφράζει την ιδιότητα της μορφής όλα-η-τίποτα που χαρακτηρίζει το μοντέλο.

### 2. Τμηματικά Γραμμική Συνάρτηση (Piecewise – Linear Function)

$$\varphi(v) = \begin{cases} 1, & v \geq 1/2 \\ v, & -1/2 < v < 1/2 \\ 0, & v \leq -1/2 \end{cases} \quad (3.44)$$

Ο νευρώνας που προκύπτει είναι ένας γραμμικός συνδυαστής, εξαιτίας της γραμμικής περιοχής της συνάρτησης. Αν θεωρήσουμε ένα συντελεστή ενίσχυσης  $a$  στην γραμμική περιοχή  $-1/2 < v < 1/2$  και θεωρήσουμε ότι τείνει στο άπειρο, τότε προκύπτει η Συνάρτηση Κατωφλίου.

### 3. Σιγμοειδής συνάρτηση (Sigmoid Function)

Η σιγμοειδής συνάρτηση παίρνει την ονομασία της από τη γραφική της παράσταση, η οποία έχει το σχήμα του χαρακτήρα S. Είναι η συνηθέστερη μορφή που χρησιμοποιείται

για συνάρτηση ενεργοποίησης στα νευρωνικά δίκτυα. Είναι μια γνησίως αύξουσα συνάρτηση που εμφανίζει ιδιαίτερη ισορροπία μεταξύ γραμμικής και μη γραμμικής συμπεριφοράς. Μια συνάρτηση που ανήκει σε αυτή την κατηγορία είναι η λογιστική συνάρτηση (logistic function), η οποία ορίζεται ως εξής [46]:

$$\varphi(v) = \frac{1}{1 + \exp(-av)} \quad (3.45)$$

όπου  $a$  είναι η παράμετρος που καθορίζει την κλίση της σιγμοειδούς συνάρτησης. Οριακά καθώς η παράμετρος αυτή πλησιάζει το άπειρο, η σιγμοειδής συνάρτηση γίνεται μια απλή συνάρτηση Κατωφλίου. Η τιμές της συνάρτησης κυμαίνονται στο συνεχές διάστημα  $[0,1]$  και σε αντίθεση με την συνάρτηση Κατωφλίου, η logistic συνάρτηση είναι διαφορίσιμη.

Μια άλλη συνάρτηση που ανήκει σε αυτή την κατηγορία και χρησιμοποιείται ως συνάρτηση ενεργοποίησης είναι η υπερβολική εφαπτομένη (hyperbolic tangent function), η οποία ορίζεται ως εξής:

$$\varphi(v) = \tanh(v) = \frac{e^{2v} - 1}{e^{2v} + 1} \quad (3.46)$$

### γ) Στοχαστικό Μοντέλο Νευρώνα

Το μοντέλο που περιγράψαμε παραπάνω είναι ντετερμινιστικό, αφού η έξοδος του είναι επακριβώς ορισμένη για όλες τις πιθανές εισόδους. Σε κάποιες εφαρμογές όμως των νευρωνικών δικτύων είναι επιθυμητό να βασίσουμε την ανάλυσή μας σε ένα στοχαστικό μοντέλο νευρώνα. Για να το επιτύχουμε εισάγουμε την έννοια της πιθανότητας στην συνάρτηση ενεργοποίησης Κατωφλίου, την οποία χρησιμοποιεί το μοντέλο McCulloch-Pits [46].

Έστω  $x$  η κατάσταση του νευρώνα, και  $P(v)$  την πιθανότητα ενεργοποίησης του, όπου  $v$  είναι το επαγόμενο τοπικό πεδίο του νευρώνα. Θεωρούμε ότι:

$$x = \begin{cases} +1 & \text{με πιθανότητα } P(v) \\ -1 & \text{με πιθανότητα } 1 - P(v) \end{cases} \quad (3.47)$$

Μια τυπική επιλογή για την πιθανότητα  $P(v)$  είναι η σιγμοειδής συνάρτηση:

$$P(v) = \frac{1}{1 + \exp(-v/T)} \quad (3.48)$$

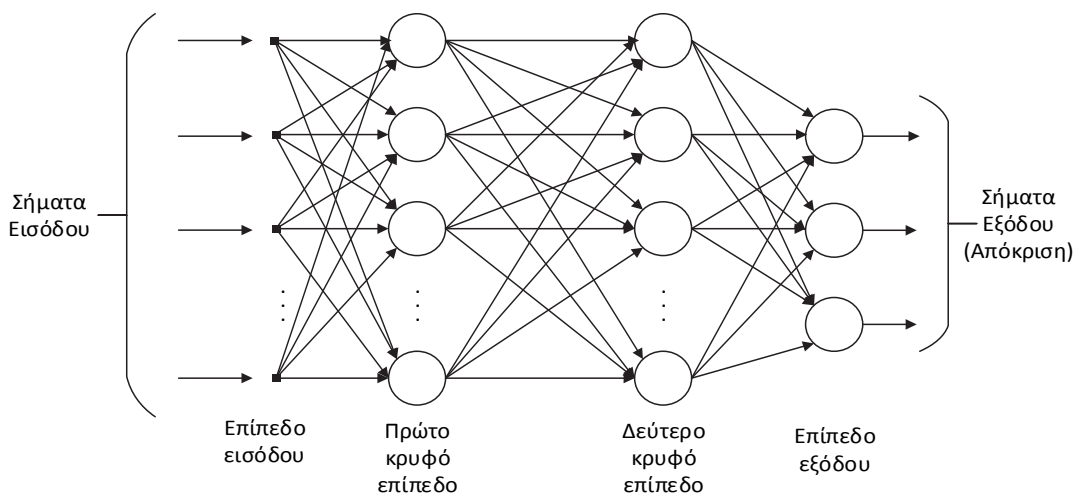
όπου  $T$  είναι μια παράμετρος που ονομάζεται ψευδο-θερμοκρασία και χρησιμεύει στη ρύθμιση του επιπέδου θορύβου και κατά συνέπεια στον έλεγχο του βαθμού της αβεβαιότητας ενεργοποίησης του νευρώνα. Όταν η παράμετρος  $T$  τείνει στο μηδέν το μοντέλο μας μετατρέπεται σε ντετερμινιστικό [46].

### 3.4.2.2 Πολυεπίπεδα Perceptrons

#### α) Περιγραφή Μοντέλου

Το μοντέλο νευρώνα που παρουσιάστηκε στην προηγούμενη ενότητα με συνάρτηση ενεργοποίησης την συνάρτηση Κατωφλίου αποτελεί το μοντέλο McCulloch-Pitts, και διαφορετικά ονομάζεται perceptron ενός επιπέδου (single layer perceptron). Οι νευρώνες όμως μπορούν να συνδυαστούν, σε διαφορετικά επίπεδα, και σε διάφορες συνδεσμολογίες, σχηματίζοντας δίκτυα νευρώνων. Τα **πολυ-επίπεδα Perceptrons (Multilayer Perceptrons, MLPs)** είναι δίκτυα που αποτελούνται από ένα σύνολο κόμβων εισόδου, οι οποίοι αποτελούν το **επίπεδο εισόδου (input layer)**, από ένα ή περισσότερα **κρυφά επίπεδα νευρώνων (hidden layers)** που περιέχουν νευρώνες για την ολοκλήρωση των υπολογισμών και ένα **επίπεδο εξόδου (output layer)** που περιέχει τους νευρώνες που δίνουν την έξοδο του δικτύου [46].

Η αρχιτεκτονική του δικτύου φαίνεται στο παρακάτω σχήμα (Εικόνα 3.22)[46]:



**Εικόνα 3.22:** Αρχιτεκτονική μοντέλου Perceptron πολλαπλών επιπέδων

Σε αυτό το δίκτυο υπάρχουν δυο είδη σημάτων:

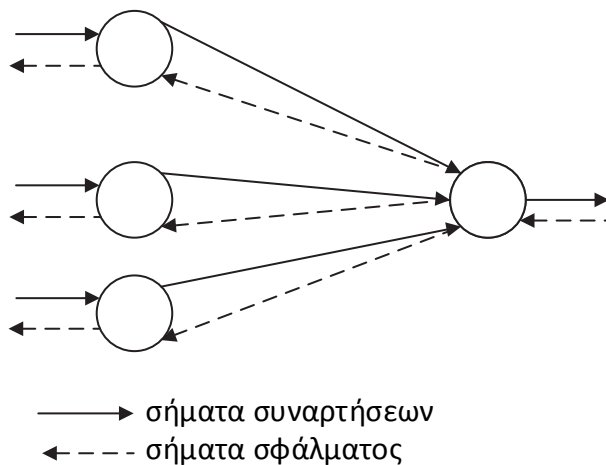
### 1. Σήματα Συναρτήσεων

Το σήμα συνάρτησης είναι ένα σήμα εισόδου το οποίο εφαρμόζεται στην είσοδο του δικτύου, διαδίδεται προς τα εμπρός στο δίκτυο, από επίπεδο σε επίπεδο μέσω των νευρώνων και εμφανίζεται στην έξοδο του δικτύου ως σήμα εξόδου. Ονομάζεται σήμα συνάρτησης επειδή γίνεται η υπόθεση ότι υλοποιεί μια χρήσιμη συνάρτηση στην έξοδο του δικτύου. Επίσης, σε κάθε νευρώνα από τον οποίο περνάει το σήμα, υπολογίζεται ως μια συνάρτηση των εισόδων και των σχετικών βαρών που εφαρμόζονται στον συγκεκριμένο νευρώνα. Τα σήματα συνάρτησης επίσης αναφέρονται και ως σήματα εισόδου.

### 2. Σήματα σφάλματος

Το σήμα σφάλματος παράγεται στην έξοδο του δικτύου και διαδίδεται προς τα πίσω από επίπεδο σε επίπεδο στο δίκτυο. Ονομάζεται σήμα σφάλματος διότι ο υπολογισμός του σε κάθε νευρώνα του δικτύου συμπεριλαμβάνει κάποια συνάρτηση που εξαρτάται από τη διαφορά της εξόδου του δικτύου από την επιθυμητή απόκριση (σφάλμα).

Οι ροές των παραπάνω σημάτων στο δίκτυο φαίνονται στο παρακάτω σχήμα (Εικόνα 3.23) [46]:



**Εικόνα 3.23:** Ροές σήματος στο Perceptron πολλαπλών επιπέδων

Κάθε νευρώνας σε ένα perceptron πολλαπλών επιπέδων, που βρίσκεται σε κρυφό επίπεδο ή στο επίπεδο εξόδου, έχει σχεδιαστεί ώστε να πραγματοποιεί δυο ειδών υπολογισμούς:

1. Τον υπολογισμό του σήματος συνάρτησης που εμφανίζεται στην έξοδο του νευρώνα, το οποίο εκφράζεται ως μια συνεχής μη γραμμική συνάρτηση του σήματος εισόδου και των βαρών που σχετίζονται με αυτόν τον νευρώνα.



2. Τον υπολογισμό μιας εκτίμησης του διανύσματος κλίσης (πχ την κλίση της επιφάνειας του σφάλματος σε σχέση με τα βάρη που συνδέονται στην είσοδο του νευρώνα), ο οποίος δημιουργεί μια προς τα πίσω ροή σήματος στο δίκτυο.

### **β) Αλγόριθμος Ανάστροφης Μετάδοσης Σφάλματος**

Τα νευρωνικά δίκτυα πολλαπλών επιπέδων εκπαιδεύονται με εκμάθηση επίβλεψης, χρησιμοποιώντας τον **αλγόριθμο ανάστροφης μετάδοσης σφάλματος (error back-propagation algorithm)**. Ο αλγόριθμος αυτός επιτυγχάνει την **εύρεση κατάλληλων συντελεστών βάρους** για το νευρωνικό δίκτυο, διαδίδοντας το σφάλμα προς τα πίσω (από το επίπεδο εξόδου προς το επίπεδο εισόδου). Η εκμάθηση με βάση τον αλγόριθμο αυτό συμπεριλαμβάνει δυο στάδια σε αντιστοιχία με την ροή των σημάτων, τον υπολογισμό σε ευθεία κατεύθυνση και τον υπολογισμό σε ανάστροφη κατεύθυνση [46].

Στον υπολογισμό ευθείας κατεύθυνσης, ένα διάνυσμα εισόδου εφαρμόζεται στο επίπεδο εισόδου του δικτύου, και με βάση αυτό σταδιακά υπολογίζονται οι έξοδοι των νευρώνων, επίπεδο προς επίπεδο, μέχρι και το επίπεδο εξόδου, όπου και παράγεται η απόκριση του δικτύου. Κατά τους υπολογισμούς αυτούς οι τιμές των βαρών του δικτύου είναι σταθερές.

Στον υπολογισμό ανάστροφης κατεύθυνσης, οι τιμές των βαρών του δικτύου ρυθμίζονται, με βάση κάποιο κανόνα που διορθώνει το σφάλμα. Πιο συγκεκριμένα, η απόκριση του δικτύου αφαιρείται από την επιθυμητή απόκριση (την οποία γνωρίζουμε εφόσον έχουμε μάθηση υπό επίβλεψη), παράγοντας με αυτόν τον τρόπο ένα σήμα σφάλματος. Το σήμα αυτό διαδίδεται αντίθετα προς την κατεύθυνση των συνδέσεων του δικτύου, για αυτό και αναφέρεται ως αλγόριθμος ανάστροφης μετάδοσης σφάλματος (error back-propagation). Η ρύθμιση των βαρών γίνεται ώστε να φέρει την απόκριση του δικτύου πιο κοντά στη γνωστή επιθυμητή τιμή.

Η διόρθωση βαρών που πραγματοποιείται κατά το δεύτερο στάδιο του αλγορίθμου είναι η εξής [46]:

$$\begin{pmatrix} \text{Διόρθωση} \\ \text{βάρους} \\ \Delta w_{ji}(n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{παράμετρος} \\ \text{ρυθμού μάθησης} \\ \eta \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \text{τοπική} \\ \text{κλίση} \\ \delta_j(n) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \text{σήμα εισόδου} \\ \text{νευρώνα } i \\ y_i(n) \end{pmatrix} \quad (3.49)$$

Στο παραπάνω τύπο, θεωρούμε ότι ο νευρώνας  $i$  βρίσκεται σε προηγούμενο επίπεδο από το επίπεδο του νευρώνα  $j$ . Ο τύπος αυτός υπολογίζει την διόρθωση του βάρους  $w_{ji}$  του συνδέσμου μεταξύ του νευρώνα  $i$  και  $j$ .

Η τιμή της τοπικής κλίσης  $\delta_j(n)$  (local gradient) εξαρτάται από το αν ο νευρώνας  $j$  βρίσκεται στο επίπεδο εξόδου ή σε κρυφό επίπεδο.

- Αν βρίσκεται στο επίπεδο εξόδου, η τοπική κλίση  $\delta_j(n)$  δίνεται από την εξίσωση:

$$\delta_j(n) = e_j(n)\varphi'_j(v_j(n)) \quad (3.50)$$

όπου  $e_j(n)$  το σφάλμα που υπολογίζεται ως εξής:

$$e_j(n) = d_j(n) - y_j(n) \quad (3.51)$$

δηλαδή είναι η διαφορά της επιθυμητής απόκρισης  $d_j(n)$  του νευρώνα  $j$  (η οποία είναι γνωστή) από το σήμα εξόδου  $y_j(n)$  του νευρώνα  $j$ , στο επίπεδο εξόδου. Το  $\varphi'_j(v_j(n))$  είναι η παράγωγος της συνάρτησης ενεργοποίησης (που έχει ως όρισμα το τοπικά επαγόμενο πεδίο  $v_j(n)$  του νευρώνα  $j$ ) [46].

- Αν ο νευρώνας  $j$  βρίσκεται σε κρυφό επίπεδο, τότε η τοπική κλίση  $\delta_j(n)$  δίνεται από την εξίσωση:

$$\delta_j(n) = \varphi'_j(v_j(n)) \sum_k \delta_k(n)w_{kj}(n) \quad (3.52)$$

Το  $\delta_k(n)$  είναι η τοπική κλίση νευρώνα  $k$ , που βρίσκεται σε μεταγενέστερο επίπεδο από τον νευρώνα  $j$ , οπότε το  $\delta_k(n)$  έχει υπολογιστεί ήδη από προηγούμενη επανάληψη του αλγορίθμου. Το  $w_{kj}(n)$  είναι το βάρος του συνδέσμου μεταξύ του νευρώνα  $j$  και του νευρώνα  $k$ . Όλες οι ποσότητες είναι εκφρασμένες συναρτήσει του  $n$ , το οποίο δηλώνει ποια είναι η τρέχουσα επανάληψη του αλγορίθμου [46].

Η παράμετρος ρυθμού μάθησης  $\eta$  (learning-rate parameter) είναι μια θετική σταθερά που καθορίζει το μέγεθος του βήματος κατά την αναζήτηση της λύσης με τη μέθοδο καθόδου κλίσης (gradient descent). Η μέθοδος αυτή είναι μια τεχνική βελτιστοποίησης που αναζητά μια κατεύθυνση στο διανυσματικό χώρο που σχηματίζουν τα βάρη του δικτύου, έτσι ώστε να μειώνεται το σφάλμα [46]. Η κλίση μιας συνάρτησης και στην περίπτωσή μας η κλίση της συνάρτησης σφάλματος με μεταβλητές τα βάρη του δικτύου, δίνει την κατεύθυνση στην οποία η συνάρτηση αυξάνει με πιο γρήγορο ρυθμό ενώ η αρνητική κλίση δίνει την κατεύθυνση στην οποία η συνάρτηση ελαττώνεται με γρηγορότερο ρυθμό [50]. Η μέθοδος αυτή είναι γνωστή και ως μέθοδος απότομης καθόδου (steepest decent).

Μια μεγάλη τιμή στην παράμετρο ρυθμού μάθησης δίνει την δυνατότητα στον αλγόριθμο να κινηθεί πιο γρήγορα προς την εύρεση των κατάλληλων βαρών [12]. Μικρότερες τιμές της παραμέτρου  $\eta$ , έχουν ως αποτέλεσμα μικρότερες αλλαγές στα βάρη των συνδέσμων του δικτύου σε κάθε επανάληψη του αλγορίθμου, και κατά συνέπεια πιο αργή σύγκλιση αλλά ομαλότερη μετάβαση προς την τελική λύση. Αν αυξήσουμε την τιμή της παραμέτρου πάρα πολύ για να επιτύχουμε ταχύτερη εκμάθηση, τα βάρη θα λάβουν τέτοια μορφή, ώστε να καταστήσουν το δίκτυο ασταθές [46].

Σύμφωνα με την παραπάνω περιγραφή, ο αλγόριθμος ανάστροφης μετάδοσης του σφάλματος είναι ο εξής [50]:

**Βήμα 0.** Αρχικοποίηση των βαρών.

(αρχικοποίηση με μικρές, τυχαίες τιμές)

**Βήμα 1.** Ενόσω η συνθήκη τερματισμού είναι ψευδής, κάνε τα βήματα 2-9.

**Βήμα 2.** Για κάθε δείγμα από το σύνολο εκπαίδευσης, κάνε τα βήματα 3-8.

*Κανονική μετάδοση:*

**Βήμα 3.** Κάθε μονάδα εισόδου  $X_i, i = 1, \dots, n$  δέχεται ένα σήμα εισόδου  $x_i$  και το εκπέμπει προς όλες τις μονάδες (νευρώνες) στο επόμενο επίπεδο.

**Βήμα 4.** Κάθε μονάδα  $Z_j, i = 1, \dots, p$  στο κρυφό επίπεδο, αθροίζει τα σήματα εισόδου, με βάση τα βάρη των συνδέσμων:

$$v_j = w_{j0} + \sum_1^n x_i w_{ji}$$

Στη συνέχεια εφαρμόζει την συνάρτηση ενεργοποίησης για να υπολογίσει την έξοδό της:

$$z_j = \varphi(v_j)$$

και στέλνει την έξοδο της σε όλες τις μονάδες στο επόμενο επίπεδο, με τις οποίες υπάρχει σύνδεση.

**Βήμα 5.** Κάθε μονάδα εξόδου ( $O_k, k = 1, \dots, m$ ) αθροίζει τα σήματα εισόδου της, με βάση τα βάρη:

$$y_k = w_{k0} + \sum_1^p z_j w_{kj}$$

και στη συνέχεια εφαρμόζει την συνάρτηση ενεργοποίησης για να υπολογίσει το σήμα εξόδου  $O_k$ :

$$o_k = \varphi(y_k)$$

*Ανάστροφη μετάδοση σφάλματος:*

**Βήμα 6.** Κάθε μονάδα εξόδου  $O_k, k = 1, \dots, m$  λαμβάνει την επιθυμητή απόκριση  $d_k$  σύμφωνα με το αντίστοιχο σήμα εισόδου εκπαίδευσης και υπολογίζει την τοπική κλίση  $\delta_k$  (εξίσωση 3.50):

$$\delta_k = (d_k - o_k) \varphi'_j(y_k)$$

Στην συνέχεια κάθε μονάδα εξόδου υπολογίζει την διόρθωση των βαρών  $w_{kj}$  των συνδέσμων που καταλήγουν σε αυτήν, σύμφωνα με την εξίσωση (3.49):

$$\Delta w_{kj} = \eta \delta_k z_j$$

Η διόρθωση για το  $w_{k0}$  προκύπτει με  $z_j = 1$  (το  $w_{k0}$  είναι η προκατάληψη (bias) του νευρώνα). Τα  $\delta_k$  θα χρειαστούν στο επόμενο βήμα.

**Βήμα 7.** Κάθε μονάδα  $Z_j, i = 1, \dots, p$  στο κρυφό επίπεδο, υπολογίζει την τοπική κλίση  $\delta_j$ , σύμφωνα με την εξίσωση (3.52):

$$\delta_j = \varphi'_j(v_j) \sum_k \delta_k w_{kj}$$

Το  $\delta_k$  είναι γνωστό από το βήμα 6, και το  $v_j$  είναι η είσοδος του νευρώνα που έχει υπολογιστεί στο προηγούμενο στάδιο. Στην συνέχεια κάθε μονάδα υπολογίζει τη διόρθωση των βαρών  $w_{ji}$  των συνδέσμων που καταλήγουν σε αυτήν σύμφωνα με την εξίσωση (3.49):

$$\Delta w_{ji} = \eta \delta_j x_i$$

Η διόρθωση για το  $w_{j0}$  προκύπτει με  $x_i = 1$ .

*Ενημέρωση βαρών και προκαταλήψεων:*

**Βήμα 8.** Κάθε μονάδα εξόδου  $O_k, k = 1, \dots, m$  ενημερώνει την προκατάληψή της  $w_{k0}$  και τα βάρη  $w_{kj}$  των συνδέσμων που καταλήγουν σε αυτήν ( $j = 0, \dots, p$ ):

$$w_{kj}(new) = w_{kj}(old) + \Delta w_{kj}$$

Κάθε μονάδα  $Z_j, i = 1, \dots, p$  στο κρυφό επίπεδο ενημερώνει την προκατάληψή της  $w_{j0}$  και τα βάρη  $w_{ji}$  των συνδέσμων που καταλήγουν σε αυτήν ( $i = 0, \dots, n$ ):

$$w_{ji}(new) = w_{ji}(old) + \Delta w_{ji}$$

**Βήμα 9.** Έλεγχος συνθήκης τερματισμού.

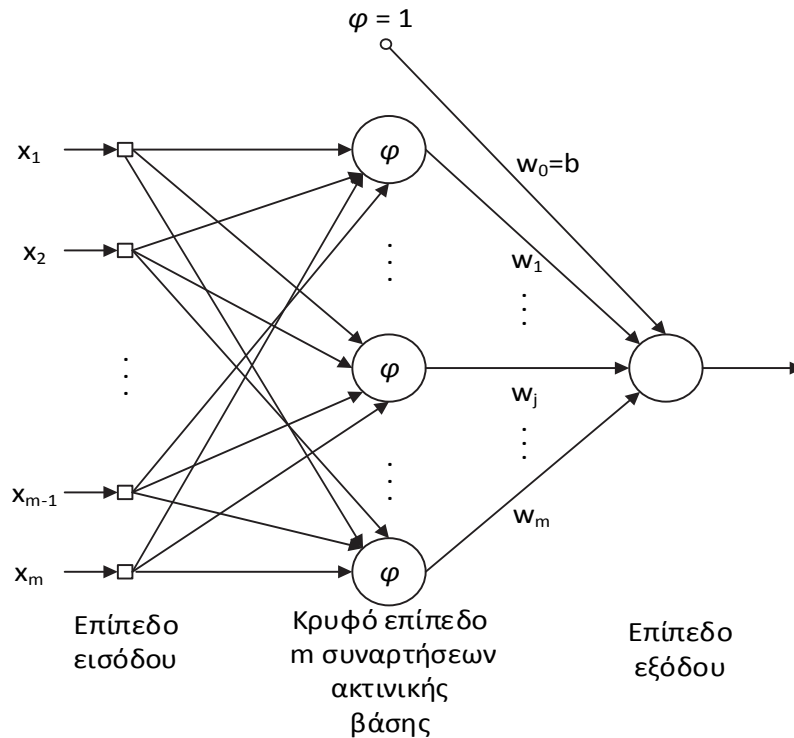
Μια επανάληψη του αλγορίθμου για ολόκληρο το σύνολο των δεδομένων εκπαίδευσης ονομάζεται **εποχή (epoch)**. Στις περισσότερες περιπτώσεις χρειάζονται πολλές εποχές για να ολοκληρωθεί η εκπαίδευση ενός νευρωνικού δικτύου με τον αλγόριθμο ανάστροφης μετάδοσης σφάλματος. Οι νέες τιμές των βαρών ενημερώνονται για κάθε δείγμα εκπαίδευσης, οπότε έχουμε διαδοχική ενημέρωση (sequential updating). Μια παραλλαγή του αλγορίθμου είναι η χρήση συνολικής ενημέρωσης (batch updating), στην οποία ο αλγόριθμος ενημερώνει τις νέες τιμές των βαρών στο τέλος κάθε εποχής ή μετά από ένα συγκεκριμένο αριθμό δειγμάτων εκπαίδευσης [50].

### 3.4.2.3 Νευρωνικά Δίκτυα Ακτινικής Βάσης

#### α) Περιγραφή Μοντέλου

Τα **Νευρωνικά Δίκτυα Ακτινικής Βάσης** (Radial Basis Function Networks) ακολουθούν διαφορετική προσέγγιση, θεωρώντας την σχεδίαση ενός νευρωνικού δικτύου ως ένα πρόβλημα εκτίμησης της βέλτιστης καμπύλης σε διανυσματικό χώρο πολλών διαστάσεων. Σύμφωνα με αυτή τη μέθοδο, η διαδικασία εκπαίδευσης ισοδυναμεί με την εύρεση μιας επιφάνειας σε έναν πολυδιάστατο διανυσματικό χώρο, η οποία «ταιριάζει» όσο το δυνατό περισσότερο στα δεδομένα εκπαίδευσης. Το πόσο ταιριάζει η επιφάνεια αυτή μπορεί να μετρηθεί με κάποιο στατιστικό κριτήριο. Αντίστοιχα με την διαδικασία εκπαίδευσης, η γενίκευση, δηλαδή η διαδικασία κατηγοριοποίησης ή πρόβλεψης τιμής για νέα δεδομένα (δεδομένα ελέγχου) εκτός του συνόλου εκπαίδευσης, ισοδυναμεί με την χρήση μιας πολυδιάστατης επιφάνειας η οποία θα παρεμβάλει τα νέα δεδομένα [46].

Σε αυτήν την κατηγορία Νευρωνικών Δικτύων, οι νευρώνες που βρίσκονται σε κρυφό επίπεδο χρησιμοποιούν συναρτήσεις ενεργοποίησης, οι οποίες παρέχουν μια αυθαίρετη βάση, με την οποία μπορούν να εκφραστούν τα διανύσματα εισόδου, όταν αυτά επεκτείνονται στον διανυσματικό χώρο του κρυφού επιπέδου. Αυτές οι συναρτήσεις ονομάζονται συναρτήσεις Ακτινικής Βάσης. Στο παρακάτω σχήμα παρουσιάζεται το μοντέλο που περιγράφει το Νευρωνικό Δίκτυο Ακτινικής Βάσης (Εικόνα 3.24) [46]:



**Εικόνα 3.24:** Μοντέλο Νευρωνικού Δικτύου Ακτινικής Βάσης

Οι συναρτήσεις Ακτινικής Βάσης παίρνουν πραγματικές τιμές, οι οποίες εξαρτώνται μόνο από την απόσταση του σημείου από ένα σημείο που έχει οριστεί ως κέντρο [7][51]:

$$\varphi(x_k, v_i) = \varphi(\|x_k - v_i\|), i = 1, 2, \dots, c, k = 1, 2, \dots, N \quad (3.53)$$

Αν συνδυαστούν κατάλληλα, οι συναρτήσεις αυτές μπορούν να λειτουργήσουν ως **εκτιμητές συναρτήσεων** [51]:

$$y_k(x) = \sum_{j=1}^c w_{kj} \varphi(\|x - v_i\|) + w_{k0} \quad (3.54)$$

Όπως φαίνεται από την εξίσωση (3.54), η συνάρτηση  $y_k(x)$  εκφράζεται ως το άθροισμα  $c$  συναρτήσεων ακτινικής βάσης. Κάθε συνάρτηση ακτινικής βάσης έχει διαφορετικό κέντρο  $v_i$  και διαφορετικό συντελεστή βάρους  $w_{kj}$ .

Οι συνηθέστερες συναρτήσεις Ακτινικής Βάσης που χρησιμοποιούνται για τον σχεδιασμό νευρωνικών δικτύων είναι οι εξής [49]:

- Γραμμική:  $\varphi(r) = r$  (3.55)

- Κυβική:  $\varphi(r) = r^3$  (3.56)

- Γκαουσιανή (Gaussian):

$$\varphi(r) = e^{-r^2/2\sigma^2} \quad (3.57)$$

- Πολυ-δευτεροβάθμια (Multi-Quadratic):

$$\varphi(r) = \sqrt{r^2 + \sigma^2}, \sigma > 0 \quad (3.58)$$

- Γενικευμένη Πολυ-δευτεροβάθμια (Generalized Multi-Quadratic):

$$\varphi(r) = (r^2 + \sigma^2)^\beta, \quad 0 < \beta < 1 \quad (3.59)$$

- Αντίστροφη Πολυ-δευτεροβάθμια (Inverse Multi-Quadratic):

$$\varphi(r) = (r^2 + \sigma^2)^{-1/2} \quad (3.60)$$

- Γενικευμένη Αντίστροφη Πολυ-δευτεροβάθμια (Generalized Inverse Multi-Quadratic):

$$\varphi(r) = (r^2 + \sigma^2)^{-a}, \quad a > 0 \quad (3.61)$$

- Spline Λεπτού Στρώματος (Thin Plate Spline):

$$\varphi(r) = r^2 \ln(r) \quad (3.62)$$

- Μετατοπισμένη Λογαριθμική (Shifted Logarithm):

$$\varphi(r) = \log(r^2 + \sigma^2) \quad (3.63)$$

- Πολυ-αρμονική Spline (Polyharmonic spline):

$$\varphi(r) = r^{-l} \quad l = 1, 3, 5, \dots \quad (3.64)$$

όπου  $r = \|x_k - v_i\|$ .

Η Γκαουσιανή και η αντίστροφη πολυ-δευτεροβάθμια έχουν τοπικό χαρακτήρα, αφού ισχύει ότι  $\varphi(r) \rightarrow 0$  καθώς  $\|r\| \rightarrow \infty$ . Για όλες τις υπόλοιπες συναρτήσεις ισχύει ότι  $\varphi(r) \rightarrow \infty$  καθώς  $\|r\| \rightarrow \infty$ .

Τα νευρωνικά δίκτυα Ακτινικής Βάσης αποτελούνται από τρία επίπεδα [46],[51]:

#### 1. Το επίπεδο εισόδου

Το επίπεδο αυτό αποτελείται από μονάδες εισόδου, που η μοναδική τους λειτουργία είναι η διασύνδεση του δικτύου με το εξωτερικό περιβάλλον του, για τη λήψη των σημάτων εισόδου. Ο αριθμός των μονάδων είναι ίσος με τον αριθμό της διάστασης του διανύσματος εισόδου.

## 2. Το κρυφό επίπεδο

Σε αυτό το επίπεδο υπάρχουν νευρώνες με μη γραμμική συνάρτηση ενεργοποίησης, η οποία ανήκει στην οικογένεια των συναρτήσεων Ακτινικής Βάσης. Το επίπεδο αυτό εφαρμόζει ένα μη γραμμικό μετασχηματισμό στα δεδομένα της εισόδου, και τα προωθεί στο επόμενο επίπεδο. Ο αριθμός των νευρώνων του κρυφού επιπέδου αποφασίζεται κατά την σχεδίαση του δικτύου.

## 3. Το επίπεδο εξόδου

Ο νευρώνας σε αυτό το επίπεδο έχει γραμμική συνάρτηση ενεργοποίησης, και δίνει την έξοδο ως γραμμικό συνδυασμό των εισόδων από το κρυφό επίπεδο, σύμφωνα με τα βάρη των συνδέσμων του.

### **β) Τεχνικές Εκμάθησης**

Ένα σημαντικό στοιχείο των νευρωνικών δικτύων Ακτινικής Βάσης είναι η διάκριση των ρόλων των βαρών, μεταξύ του πρώτου και του δεύτερου επιπέδου. Οι παράμετροι του μοντέλου στο πρώτο επίπεδο μπορούν να προσδιοριστούν με τεχνικές μάθησης χωρίς επίβλεψη, ενώ στο για το δεύτερο επίπεδο χρησιμοποιούνται τεχνικές μάθησης με επίβλεψη. Αυτό οδηγεί σε μια διαδικασία δυο σταδίων για την εκπαίδευση των νευρωνικών δικτύων Ακτινικής Βάσης. Στο πρώτο στάδιο το σύνολο δεδομένων εκπαίδευσης χρησιμοποιείται για να προσδιοριστούν οι παράμετροι των συναρτήσεων ακτινικής βάσης. Στη συνέχεια, οι παράμετροι των συναρτήσεων διατηρούνται σταθερές, ώστε να υπολογιστούν τα βάρη του δεύτερου επιπέδου [49].

Υπάρχουν διαφορετικές στρατηγικές εκπαίδευσης κατά την σχεδίαση ενός δικτύου Ακτινικής Βάσης, ανάλογα με τον τρόπο προσδιορισμού των κέντρων των συναρτήσεων [46],[49]:

### 1. Τυχαία σταθερά Κέντρα

Η πιο απλή προσέγγιση είναι να θεωρηθεί ότι τα κέντρα των συναρτήσεων είναι σταθερά και η θέση τους μπορεί να επιλεγεί τυχαία από το σύνολο δεδομένων εκπαίδευσης. Αυτή η μεθοδολογία μπορεί να εφαρμοστεί, δεδομένου ότι τα δεδομένα εκπαίδευσης είναι κατανεμημένα με αντιπροσωπευτικό τρόπο για το προς μελέτη πρόβλημα, δεν είναι όμως η βέλτιστη τεχνική, και μπορεί να οδηγήσει στη χρήση ενός μεγάλου αριθμού συναρτήσεων Ακτινικής Βάσης για να επιτευχθεί επαρκής απόδοση του μοντέλου στα δεδομένα εκπαίδευσης, χωρίς αυτό να είναι απαραίτητο.



## 2. Αυτο-οργανούμενη επιλογή Κέντρων

Το κυρίως πρόβλημα με την προηγούμενη μέθοδο επιλογής κέντρων έγκειται στο γεγονός ότι χρειάζεται μεγάλο σύνολο δεδομένων εκπαίδευσης για να αποδώσει ικανοποιητικά. Ένας τρόπος για να ξεπεραστεί αυτό είναι η χρήση μιας υβριδικής μεθόδου εκμάθησης δυο σταδίων [46]:

- Αυτο-οργανούμενο στάδιο, ο σκοπός του οποίου είναι να υπολογίσει τις κατάλληλες θέσεις για τα κέντρα των συναρτήσεων Ακτινικής Βάσης στο κρυφό επίπεδο.
- Στάδιο εκμάθησης υπό επίβλεψη, το οποίο ολοκληρώνει την διαδικασία σχεδίασης του δικτύου με τον υπολογισμό των γραμμικών βαρών του επιπέδου εξόδου.

Για την υλοποίηση της αυτό-οργανούμενης διαδικασίας γίνεται χρήση αλγορίθμου ομαδοποίησης (clustering) για να επιτευχθεί η διαμέριση του συνόλου των δεδομένων εκπαίδευσης σε όσο το δυνατό περισσότερο ομογενείς ομάδες. Ένας αλγόριθμος που μπορεί να το επιτύχει αυτό είναι ο αλγόριθμος ομαδοποίησης k-μέσων (k-means clustering), ο οποίος τοποθετεί τα κέντρα των συναρτήσεων Ακτινικής Βάσης αποκλειστικά σε περιοχές του διανυσματικού χώρου εισόδου στις οποίες υπάρχουν σημαντικά δεδομένα.

Έστω ότι  $m_1$  είναι το πλήθος των συναρτήσεων που θα χρησιμοποιηθούν. Η κατάλληλη τιμή για την παράμετρο αυτή προκύπτει μέσω πειραματικής διαδικασίας. Έστω ότι  $\{t_k(n)\}_{k=1}^{m_1}$  δηλώνουν τα κέντρα των συναρτήσεων στην n-στη επανάληψη του αλγορίθμου. Ο αλγόριθμος k-μέσων λειτουργεί ως εξής [46]:

- *Αρχικοποίηση.* Διάλεξε τυχαίες τιμές για τα αρχικά κέντρα  $t_k(0)$ . Ο μοναδικός περιορισμός είναι ότι οι αρχικές τιμές πρέπει να είναι μεταξύ τους διαφορετικές. Επίσης είναι ίσως επιθυμητό να διατηρηθεί σε μικρές τιμές η Ευκλείδεια νόρμα των Κέντρων.
- *Δειγματοληψία.* Επέλεξε με συγκεκριμένη πιθανότητα ένα διάνυσμα-δείγμα  $x$  από τον διανυσματικό χώρο εισόδου  $X$ . Το διάνυσμα  $x$  είναι η είσοδος του αλγορίθμου στην n-στη επανάληψη.
- *Έλεγχος ομοιότητας.* Έστω  $k(x)$  ο δείκτης του κέντρου που ταιριάζει περισσότερο στο διάνυσμα εισόδου  $x$ . Υπολογίζουμε το  $k(x)$  στην n-στη επανάληψη χρησιμοποιώντας το κριτήριο ελάχιστης Ευκλείδειας απόστασης:

$$k(x) = \arg \min_k \|x(n) - t_k(n)\|, k = 1, 2, \dots, m_1 \quad (3.65)$$

όπου  $t_k(n)$  το κέντρο της k-στης συνάρτησης Ακτινικής Βάσης στην n-στη επανάληψη.

- *Ενημέρωση.* Τροποποίησε τα κέντρα των συναρτήσεων Ακτινικής Βάσης χρησιμοποιώντας τον ακόλουθο κανόνα:

$$\mathbf{t}_k(n+1) = \begin{cases} \mathbf{t}_k(n) + \eta[\mathbf{x}(n) - \mathbf{t}_k(n)], & k = k(\mathbf{x}) \\ \mathbf{t}_k(n), & \text{αλλιώς} \end{cases} \quad (3.66)$$

Όπου  $\eta$  είναι παράμετρος ρυθμού μάθησης, με εύρος τιμών  $0 < \eta < 1$ .

- *Επανάληψη διαδικασίας.* Αύξησε το  $n$  κατά 1, πήγαινε στο βήμα 2 και συνέχισε την διαδικασία μέχρι να μην υπάρχουν σημαντικές αλλαγές στα κέντρα  $\mathbf{t}_k$ .

Ο αλγόριθμος  $k$ -μέσων μπορεί να πετύχει τοπικά βέλτιστη λύση, η οποία εξαρτάται από τις τιμές των κέντρων κατά την αρχικοποίηση. Αυτό μπορεί να έχει ως αποτέλεσμα κάποια από τα κέντρα να κολλήσουν σε συγκεκριμένες περιοχές του διανυσματικού χώρου εισόδου, στις οποίες υπάρχει έλλειψη σημείων εισόδου και έτσι δεν θα έχουν ποτέ την δυνατότητα να μετακινηθούν σε περιοχές που όντως χρειάζεται να τοποθετηθούν. Κατά συνέπεια, το μέγεθος του δικτύου μπορεί να γίνει αρκετά μεγάλο. Για να αντιμετωπιστεί το πρόβλημα αυτό έχει προταθεί μια τροποποίηση του αλγορίθμου, η οποία βασίζεται σε ένα μέτρο της διαφοροποίησης των ομάδων, το οποίο βοηθάει τον αλγόριθμο να συγκλίνει σε βέλτιστη λύση ανεξάρτητα από την επιλογή των αρχικών τιμών των Κέντρων.

Αφού υπολογιστούν τα κέντρα των συναρτήσεων Ακτινικής Βάσης, θα πρέπει να προσδιοριστούν τα βάρη του επιπέδου εξόδου. Μια απλή μέθοδος για των υπολογισμό των βαρών είναι ο αλγόριθμος Ελαχίστου Μέσου Τετραγώνου (Least Mean Square - LMS). Το διάνυσμα εξόδου που παράγεται από το κρυφό επίπεδο αποτελεί το διάνυσμα εισόδου για τον αλγόριθμο ελαχίστων τετραγώνων.

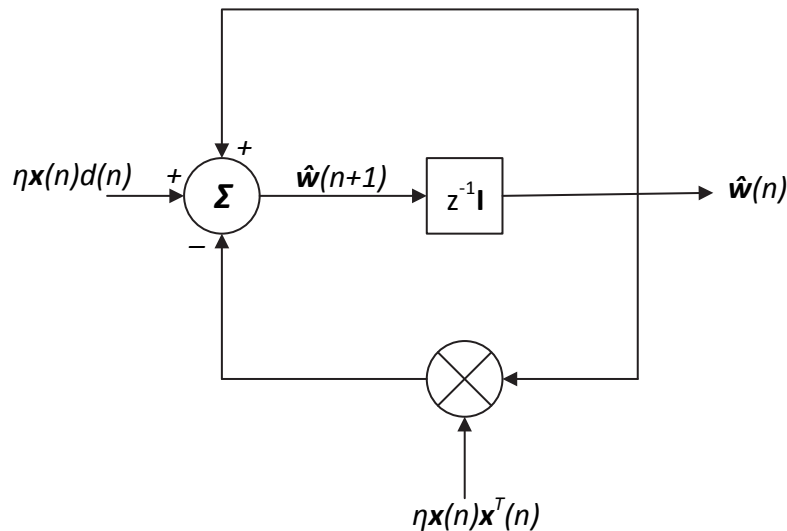
Ο αλγόριθμος Ελαχίστου Μέσου Τετραγώνου λειτουργεί ως εξής [46]:

- *Σύνολο εκπαίδευσης:* Διάνυσμα σήματος εισόδου =  $\mathbf{x}(n)$   
Επιθυμητή απόκριση =  $d(n)$
- *Παράμετρος επιλεγμένη από τον χρήστη:*  $\eta$
- *Αρχικοποίηση:* Θέτει  $\hat{\mathbf{w}}(n) = \mathbf{0}$ .
- *Υπολογισμός:* Για  $n=1, 2, \dots$ , υπολόγισε  
 $e(n) = d(n) - \hat{\mathbf{w}}^T(n)\mathbf{x}(n)$   
 $\hat{\mathbf{w}}(n+1) = \hat{\mathbf{w}}(n) + \eta\mathbf{x}(n)e(n)$

Αν αναλύσουμε περαιτέρω τις εξισώσεις του αλγορίθμου προκύπτει η εξής σχέση:

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{w}}(n+1) &= \hat{\mathbf{w}}(n) + \eta \mathbf{x}(n)e(n) \\ &= \hat{\mathbf{w}}(n) + \eta \mathbf{x}(n)[d(n) - \mathbf{x}^T(n)\hat{\mathbf{w}}(n)] \\ &= [\mathbf{I} - \eta \mathbf{x}(n)\mathbf{x}^T(n)]\hat{\mathbf{w}}(n) + \eta \mathbf{x}(n)d(n)\end{aligned}\quad (3.67)$$

όπου  $\mathbf{I}$  είναι ο μοναδιαίος πίνακας. Από αυτή τη σχέση μπορεί να προκύψει το διάγραμμα ροής σήματος του αλγορίθμου (Εικόνα 3.25) [46]:



**Εικόνα 3.25:** Διάγραμμα ροής σήματος για τον αλγόριθμο Ελαχίστου Μέσου Τετραγώνου

Από την εξίσωση (3.67) προκύπτει ότι:

$$\hat{\mathbf{w}}(n) = z^{-1}[\hat{\mathbf{w}}(n+1)] \quad (3.68)$$

όπου  $z^{-1}$  είναι ο μοναδιαίος τελεστής καθυστέρησης, η ύπαρξη του οποίου δηλώνει διαδικασία αποθήκευσης. Από το διάγραμμα ροής σήματος φαίνεται ότι ο αλγόριθμος ελαχίστων τετραγώνων είναι ένα παράδειγμα συστήματος με στοχαστική ανάδραση. Η παράμετρος ρυθμού εκμάθησης  $\eta$  έχει καθοριστικό ρόλο στην σύγκλιση του αλγορίθμου.

Ο Αλγόριθμος Ελαχίστου Μέσου Τετραγώνου βασίζεται στις στιγμιαίες τιμές της συνάρτησης κόστους  $\mathcal{E} = \frac{1}{2}e^2(n)$ . Ο βρόχος ανάδρασης γύρω από το διάνυσμα  $\hat{\mathbf{w}}(n)$  δρα ως ένα βαθυπερατό φίλτρο, το οποίο επιτρέπει την διέλευση των συνιστωσών του σήματος σφάλματος με χαμηλές συχνότητες και αποκόπτει τις συνιστώσες με υψηλές συχνότητες. Η μέση σταθερά χρόνου αυτής της διαδικασίας είναι αντιστρόφως ανάλογη με την παράμετρο ρυθμού μάθησης  $\eta$  οπότε αναθέτοντας μια μικρή τιμή στην παράμετρο  $\eta$ , η προσαρμοστική διαδικασία θα προχωρήσει με αργό ρυθμό. Σε αυτή την περίπτωση ο αλγόριθμος ανακαλεί περισσότερα δεδομένα, με αποτέλεσμα να παράγει πιο ακριβές

αποτέλεσμα φιλτραρίσματος. Επομένως η παράμετρος  $1/\eta$  αποτελεί μέτρο της «μνήμης» του αλγορίθμου ελαχίστων τετραγώνων [46].

Η χρήση του συμβόλου  $\hat{\mathbf{w}}(n)$  αντί του  $\mathbf{w}(n)$  τονίζει το γεγονός ότι ο αλγόριθμος παράγει μια εκτίμηση των τιμών των βαρών, οι οποίες θα προέκυπταν από την μέθοδο της απότομης καθόδου (καθόδου κλίσης). Στην μέθοδο απότομης καθόδου το διάνυσμα  $\mathbf{w}(n)$  ακολουθεί μια καλώς ορισμένη τροχιά στον διανυσματικό χώρο των βαρών, για συγκεκριμένο  $\eta$ , σε αντίθεση με το διάνυσμα  $\hat{\mathbf{w}}(n)$  το οποίο ακολουθεί τυχαία τροχιά. Για αυτό το λόγο, ο αλγόριθμος ελαχίστων τετραγώνων αναφέρεται και ως στοχαστικός αλγόριθμος κλίσης. Καθώς ο αριθμός των επαναλήψεων του αλγορίθμου τείνει στο άπειρο, το διάνυσμα  $\hat{\mathbf{w}}(n)$  ακολουθεί έναν τυχαίο περίπατο (κίνηση Brown) γύρω από την λύση  $\mathbf{w}_0$  η οποία είναι η λύση που δίνει το φίλτρο Wiener. Όμως ο αλγόριθμος ελαχίστων τετραγώνων δεν χρειάζεται να γνωρίζει την στατιστική συμπεριφορά του περιβάλλοντος στο οποίο λειτουργεί, σε αντίθεση με την μέθοδο απότομης καθόδου [46].

### 3. Επιλογή των Κέντρων με επίβλεψη

Σε αυτή την προσέγγιση τα κέντρα των συναρτήσεων καθώς και κάθε άλλη παράμετρος του δικτύου υπολογίζονται με μάθηση υπό επίβλεψη, οπότε το νευρωνικό δίκτυο Ακτινικής Βάσης παίρνει την πιο γενικευμένη του μορφή. Μια στρατηγική που μπορεί να εφαρμοστεί είναι η **μάθηση με διόρθωση σφάλματος** (error-correction learning) η οποία υλοποιείται με την τεχνική καθόδου κλίσης (gradient descent) που αντιπροσωπεύει μια γενίκευση του αλγορίθμου Ελαχίστου Μέσου Τετραγώνου.

Το πρώτο βήμα για την ανάπτυξη αυτής της διαδικασίας είναι ο ορισμός της στιγμιαίας τιμής της συνάρτησης κόστους [46]:

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N e_j^2 \quad (3.69)$$

όπου  $N$  το μέγεθος του συνόλου των δειγμάτων εκπαίδευσης, και  $e_j$  το σήμα σφάλματος το οποίο ορίζεται ως:

$$e_j = d_j - \sum_{i=1}^{m_1} w_i G(\|x_j - t_i\|_{C_i}) \quad (3.70)$$

με την συνάρτηση  $G$  να έχει οριστεί ως:

$$\varphi_i(\mathbf{x}) = G(\|\mathbf{x} - \mathbf{t}_i\|), i = 1, 2, \dots, m_1 \quad (3.71)$$

όπου  $\varphi_i(\mathbf{x})$  οι συναρτήσεις Ακτινικής Βάσης.

Η τετραγωνική μορφή της γενικευμένης σταθμισμένης νόρμας ορίζεται ως εξής:

$$\|\mathbf{x}\|_C^2 = (\mathbf{C}\mathbf{x})^T (\mathbf{C}\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{C}^T \mathbf{C} \mathbf{x} \quad (3.72)$$

όπου  $C$  είναι μια μήτρα στάθμισης νόρμας διαστάσεων  $m_0 \times m_0$  και  $m_0$  είναι η διάσταση του διανύσματος εισόδου  $x$ . Η νόρμα αυτή αποδίδει καλύτερα από την Ευκλείδεια, όταν τα διάφορα στοιχεία του διανύσματος εισόδου ανήκουν σε διαφορετικές κλάσεις.

Το ζητούμενο είναι να υπολογιστούν οι παράμετροι  $w_i$ ,  $t_i$ , και  $\Sigma_i^{-1}$  έτσι ώστε να ελαχιστοποιηθεί η συνάρτηση κόστους  $\mathcal{E}$ . Η τελευταία παράμετρος σχετίζεται με την μήτρα  $C_i$  της γενικευμένης σταθμισμένης νόρμας που χρησιμοποιείται, αντί της Ευκλείδειας νόρμας.

Η αντίστροφη μήτρα  $\Sigma_i^{-1}$  ορίζεται ως εξής:

$$\frac{1}{2} \Sigma_i^{-1} = C^T C \quad (3.73)$$

Οι εξισώσεις που προκύπτουν από την εφαρμογή της μεθόδου καθόδου κλίσης για την ελαχιστοποίηση της συνάρτησης κόστους είναι οι εξής [46]:

- Γραμμικά Βάρη (επίπεδο εξόδου):

$$\frac{\partial \mathcal{E}(n)}{\partial w_i(n)} = \sum_{j=1}^N e_j(n) G(\|\mathbf{x}_j - \mathbf{t}_i(n)\|_{C_i}) \quad (3.74)$$

$$w_i(n+1) = w_i(n) - \eta_1 \frac{\partial \mathcal{E}(n)}{\partial w_i(n)}, i = 1, 2, \dots, m_1 \quad (3.75)$$

- Θέσεις των κέντρων (κρυφό επίπεδο):

$$\frac{\partial \mathcal{E}(n)}{\partial \mathbf{t}_i(n)} = 2w_i(n) \sum_{j=1}^N e_j(n) G'(\|\mathbf{x}_j - \mathbf{t}_i(n)\|_{C_i}) \Sigma_i^{-1} [\mathbf{x}_j - \mathbf{t}_i(n)] \quad (3.76)$$

$$\mathbf{t}_i(n+1) = \mathbf{t}_i(n) - \eta_2 \frac{\partial \mathcal{E}(n)}{\partial \mathbf{t}_i(n)}, i = 1, 2, \dots, m_1 \quad (3.77)$$

- Έκταση των κέντρων (κρυφό επίπεδο):

$$\frac{\partial \mathcal{E}(n)}{\partial \Sigma_i^{-1}(n)} = -w_i(n) \sum_{j=1}^N e_j(n) G'(\|\mathbf{x}_j - \mathbf{t}_i(n)\|_{C_i}) Q_{ji}(n) \quad (3.78)$$

$$Q_{ji}(n) = [\mathbf{x}_j - \mathbf{t}_i(n)][\mathbf{x}_j - \mathbf{t}_i(n)]^T \quad (3.79)$$

$$\Sigma_i^{-1}(n+1) = \Sigma_i^{-1}(n) - \eta_3 \frac{\partial \mathcal{E}(n)}{\partial \Sigma_i^{-1}(n)}, i = 1, 2, \dots, m_1 \quad (3.80)$$

Η συνάρτηση κόστους  $\mathcal{E}$  είναι κυρτή ως προς τις γραμμικές παραμέτρους  $w_i$  αλλά μη κυρτή ως προς τα κέντρα  $t_i$  και την μήτρα  $\Sigma_i^{-1}$ . Επομένως, η αναζήτηση για βέλτιστες τιμές των  $t_i$  και  $\Sigma_i^{-1}$  ενδέχεται να περιοριστεί σε κάποιο τοπικό ελάχιστο.

Στις εξισώσεις ενημέρωσης για τα  $w_i$ ,  $t_i$ , και  $\Sigma_i^{-1}$  έχουν χρησιμοποιηθεί διαφορετικοί παράμετροι ρυθμού μάθησης,  $\eta_1, \eta_2, \eta_3$ . Σε αντίθεση με τον αλγόριθμο ανάστροφης μετάδοσης σφάλματος, η διαδικασία καθόδου κλίσης (gradient descent) για

τα νευρωνικά δίκτυα Ακτινικής Βάσης δεν περιλαμβάνει προς τα πίσω μετάδοση του σφάλματος στο δίκτυο.

Για την αρχικοποίηση της διαδικασίας καθόδου κλίσης, η αναζήτηση είναι σκόπιμο να ξεκινήσει με βάση μια δομημένη αρχική συνθήκη, η οποία περιορίζει την περιοχή αναζήτησης του παραμετρικού χώρου σε μια εκ των προτέρων γνωστή χρήσιμη περιοχή. Με αυτόν τον τρόπο, μειώνεται η πιθανότητα σύγκλισης σε κάποιο μη επιθυμητό τοπικό ελάχιστο. Για παράδειγμα, η διαδικασία μπορεί να ξεκινήσει θεωρώντας έναν Γκαουσιανό ταξινομητή (Gaussian classifier), ο οποίος υποθέτει ότι κάθε δείγμα από κάθε κλάση προέρχεται από μια Γκαουσιανή κατανομή [46].

#### 3.4.2.4 Σύγκριση πολυεπίπεδων Perceptrons με Δίκτυα Ακτινικής Βάσης

Τα νευρωνικά δίκτυα Ακτινικής Βάσης και τα πολυ-επίπεδα Perceptrons διαφέρουν ως προς την δομή αλλά και τα δυο είδη δικτύων παρέχουν τεχνικές για τον προσεγγιστικό υπολογισμό μη γραμμικών αντιστοιχίσεων μεταξύ πολυδιάστατων χώρων. Και στις δυο περιπτώσεις, οι αντιστοιχίσεις αυτές εκφράζονται ως παραμετροποιημένοι συνδυασμοί συναρτήσεων μεταβλητών. Οι βασικές διαφορές τους είναι οι εξής [49]:

1. Οι αναπαραστάσεις των πολυ-επίπεδων Perceptrons στο κρυφό επίπεδο εξαρτώνται από τα γραμμικά αθροίσματα των εισόδων, τα οποία είναι μετασχηματισμένα από μονότονες συναρτήσεις ενεργοποίησης. Επομένως, η ενεργοποίηση ενός νευρώνα στο κρυφό επίπεδο ενός πολυ-επίπεδου Perceptron είναι σταθερή σε επιφάνειες που αποτελούνται από παράλληλα  $(d-1)$ -διάστατα υπερεπίπεδα σε  $d$ -διάστατο διανυσματικό χώρο εισόδου. Σε αντίθεση με τα παραπάνω, οι νευρώνες του κρυφού επιπέδου σε ένα νευρωνικό δίκτυο Ακτινικής Βάσης χρησιμοποιούν την απόσταση από ένα πρότυπο διάνυσμα (το κέντρο της συνάρτησης ακτινικής βάσης), η οποία μετασχηματίζεται τοπικά από μια συνάρτηση. Επομένως, η ενεργοποίηση μιας συνάρτησης ακτινικής βάσης είναι σταθερή σε ομοκεντρικές  $(d-1)$ -διάστατες υπερ-σφαίρες ( η γενικότερα σε  $(d-1)$ -διάστατα υπερ-ελλειψοειδή).

2. Ένα πολυ-επίπεδο Perceptron σχηματίζει μια κατανεμημένη αναπαράσταση στον χώρο των τιμών ενεργοποίησης των νευρώνων στο κρυφό επίπεδο, αν για ένα δεδομένο διάνυσμα εισόδου πολλοί νευρώνες κρυφού επιπέδου συνεισφέρουν στον προσδιορισμό της τιμής εξόδου. Κατά τη διάρκεια της εκπαίδευσης, οι συναρτήσεις που αναπαρίστανται από τους νευρώνες στο κρυφό επίπεδο όταν συνδυάζονται από το επίπεδο εξόδου πρέπει να παράγουν τις σωστές εξόδους για ένα εύρος πιθανών τιμών εισόδου. Ο μεγάλος αριθμός διασυνδέσεων μεταξύ των νευρώνων στα κρυφά επίπεδα έχει ως αποτέλεσμα την σε μεγάλο βαθμό μη-γραμμική συμπεριφορά του δικτύου σε προβλήματα με τοπικά ελάχιστα

ή με σχεδόν επίπεδες περιοχές στη συνάρτηση σφάλματος που προκύπτουν από αλληλεξουδετερώσεις μεταξύ των βαρών. Αυτό μπορεί να οδηγήσει σε πολύ αργή σύγκλιση της διαδικασίας εκπαίδευσης, ακόμα και αν χρησιμοποιηθούν προχωρημένες τεχνικές βελτιστοποίησης. Σε αντίθεση με τα παραπάνω, ένα νευρωνικό δίκτυο Ακτινικής Βάσης με τοπικές συναρτήσεις βάσης σχηματίζει μια αναπαράσταση στον διανυσματικό χώρο των κρυφών νευρώνων, ο οποίος είναι τοπικός σε σχέση με τον χώρο εισόδου επειδή για ένα συγκεκριμένο διάνυσμα εισόδου, τυπικά μόνο ένας μικρός αριθμός νευρώνων στο κρυφό επίπεδο θα ενεργοποιηθεί.

3. Ένα πολυ-επίπεδο Perceptron συνήθως διαθέτει πολλά επίπεδα νευρώνων, πολύπλοκη συνδεσμολογία και ενδεχομένως να μην υπάρχουν όλα τα πιθανά βάρη σε κάποιο επίπεδο. Επίσης μπορεί να χρησιμοποιεί μια ποικιλία συναρτήσεων ενεργοποίησης στο ίδιο δίκτυο. Σε ένα νευρωνικό δίκτυο Ακτινικής Βάσης, η αρχιτεκτονική του δικτύου είναι απλή και αποτελείται από τρία επίπεδα, το επίπεδο εισόδου, το κρυφό επίπεδο με τις συναρτήσεις βάσης και το επίπεδο εξόδου που πραγματοποιεί γραμμικούς συνδυασμούς των εξόδων από την ενεργοποίηση αυτών των συναρτήσεων για να παραχθεί η απόκριση του δικτύου.

4. Όλοι οι παράμετροι σε ένα πολυ-επίπεδο Perceptron συνήθως υπολογίζονται μαζί, κατά τη διάρκεια της διεργασίας μάθησης υπό επίβλεψη, για όλο το δίκτυο. Ένα δίκτυο Ακτινικής Βάσης, εκπαιδεύεται σε δυο στάδια. Οι συναρτήσεις βάσης προσδιορίζονται στο πρώτο στάδιο με τεχνικές μάθησης χωρίς επίβλεψη και στη συνέχεια τα βάρη στο επίπεδο εξόδου υπολογίζονται με γρήγορες γραμμικές μεθόδους μάθησης υπό επίβλεψη.

### 3.4.2.5 Πιθανοτικά Νευρωνικά Δίκτυα

#### α) Εκτιμητής Συνάρτησης Κατανομής Πιθανότητας

Τα πιθανοτικά νευρωνικά δίκτυα προτάθηκαν για πρώτη φορά από τον Donald F. Specht [52] στις αρχές του 1990, με σκοπό τη καλύτερη απόδοση σε σχέση με τον αλγόριθμο ανάστροφης μετάδοσης σφάλματος όσο αφορά την ταχύτητα σύγκλισης και την αποφυγή λανθασμένων τοπικών ελαχίστων. Τα δίκτυα αυτά αποτελούνται από τέσσερα επίπεδα, και βασίζονται στην Μπεϋζιανή στρατηγική λήψης αποφάσεων ταξινόμησης [52].

Έχει αποδειχθεί από τον Parzen (1962)[52] ότι υπάρχει η δυνατότητα κατασκευής μιας οικογένειας εκτιμητών μιας συνάρτησης κατανομής πιθανότητας  $f(X)$  ως εξής:

$$f_n(\mathbf{X}) = \frac{1}{n\lambda} \sum_{i=1}^n W \left( \frac{\mathbf{X} - \mathbf{X}_{Ai}}{\lambda} \right) \quad (3.81)$$

η οποία είναι συνεπής για όλα τα σημεία  $\mathbf{X}$  στα οποία η  $f(\mathbf{X})$  είναι συνεχής. Έστω  $\mathbf{X}_{A1}, \dots, \mathbf{X}_{Aj}, \dots, \mathbf{X}_{An}$  ανεξάρτητες τυχαίες μεταβλητές που έχουν την ίδια κατανομή

πιθανότητας με την τυχαία μεταβλητή  $X$ , της οποίας η συνάρτηση κατανομής είναι απολύτως συνεχής. Οι συνθήκες του Parzen για την συνάρτηση  $W(y)$  είναι οι παρακάτω [52]:

$$\sup_{-\infty < y < +\infty} |W(y)| < \infty, \int_{-\infty}^{+\infty} |W(y)| dy < \infty \quad (3.82)$$

$$\lim_{y \rightarrow \infty} |yW(y)| = 0, \int_{-\infty}^{+\infty} W(y) dy = 1 \quad (3.83)$$

Στην εξίσωση (3.81) η παράμετρος  $\lambda = \lambda(n)$  έχει επιλεγεί ως συνάρτηση του  $n$ , έτσι ώστε:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \lambda(n) = 0, \lim_{n \rightarrow \infty} n\lambda(n) = \infty \quad (3.84)$$

Ο Parzen έδειξε ότι ο εκτιμητής  $f_n(X)$  είναι συνεπής, επειδή ισχύει:

$$E|f_n(X) - f(X)|^2 \rightarrow 0 \text{ καθώς } n \rightarrow \infty \quad (3.85)$$

Από την εξίσωση (3.85) βλέπουμε ότι καθώς το μέγεθος του συνόλου εκπαίδευσης αυξάνει, το σφάλμα του εκτιμητή μειώνεται.

Αν θεωρηθεί Γκαουσιανή συνάρτηση πυρήνα, τότε ο εκτιμητής  $f_n(X)$  για μια συγκεκριμένη κατηγορία  $A$  παίρνει την μορφή [52]:

$$f_n(X) = \frac{1}{(2\pi)^{p/2} \sigma^p} \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \exp \left[ -\frac{(X - X_{A_i})^T (X - X_{A_i})}{2\sigma^2} \right] \quad (3.86)$$

όπου  $i$  ο αριθμός του τρέχοντος δείγματος,  $m$  ο συνολικός αριθμός των δειγμάτων εκπαίδευσης,  $X_{A_i}$  το  $i$ -στο δείγμα από την κατηγορία  $A$ ,  $\sigma$  η παράμετρος εξομάλυνσης,  $p$  ο αριθμός των διαστάσεων των δεδομένων εισόδου.

Ο εκτιμητής  $f_n(X)$  είναι το άθροισμα μικρών Γκαουσιανών κατανομών πολλών μεταβλητών με κέντρο το εκάστοτε δείγμα εκπαίδευσης. Το άθροισμα τους όμως δεν προκύπτει αποκλειστικά ως Γκαουσιανή κατανομή, αλλά μπορεί να προσεγγίσει οποιαδήποτε ομαλή πυκνότητα πιθανότητας.

Η παράμετρος  $\sigma$  ρυθμίζεται πειραματικά. Μικρές τιμές της παραμέτρου έχουν ως αποτέλεσμα η πυκνότητα πιθανότητας να έχει διακριτά τμήματα στις περιοχές των δειγμάτων εκπαίδευσης και όταν  $\sigma \rightarrow 0$  το όριο απόφασης του Μπεϋζιανού ταξινομητή που θα χρησιμοποιηθεί γίνεται μη γραμμικό, αναπαριστώντας τον ταξινομητή πλησιέστερου γείτονα (nearest neighbor classifier). Μεγάλες τιμές προκαλούν μεγαλύτερη παρεμβολή μεταξύ των κατανομών στα σημεία των δειγμάτων και όταν  $\sigma \rightarrow \infty$  το όριο απόφασης του Μπεϋζιανού ταξινομητή είναι ένα υπερ-επίπεδο.



Η εξίσωση (3.86) μπορεί να χρησιμοποιηθεί με τον κανόνα απόφασης των Μπεϋζιανών ταξινομητών. Η διαδικασία υλοποίησης όμως δεν είναι αποδοτική, διότι θα πρέπει ολόκληρο το σύνολο εκπαίδευσης να αποθηκευτεί και να χρησιμοποιηθεί κατά τον έλεγχο του ταξινομητή. Επίσης το υπολογιστικό φορτίο που προκύπτει για την ταξινόμηση ενός άγνωστου νέου δείγματος είναι ανάλογο με το μέγεθος του συνόλου δεδομένων εκπαίδευσης [52].

### **β) Περιγραφή Μοντέλου**

Η παραπάνω διαδικασία υπολογισμού μπορεί να υλοποιηθεί αποδοτικά, χρησιμοποιώντας νευρωνικά δίκτυα. Το μοντέλο του Πιθανοτικού Νευρωνικού Δικτύου (Εικόνα 3.26) αποτελείται από τέσσερα επίπεδα, το επίπεδο εισόδου (input layer), το επίπεδο προτύπων (pattern layer), το επίπεδο άθροισης (summation layer) και το επίπεδο εξόδου (output layer)[52]:

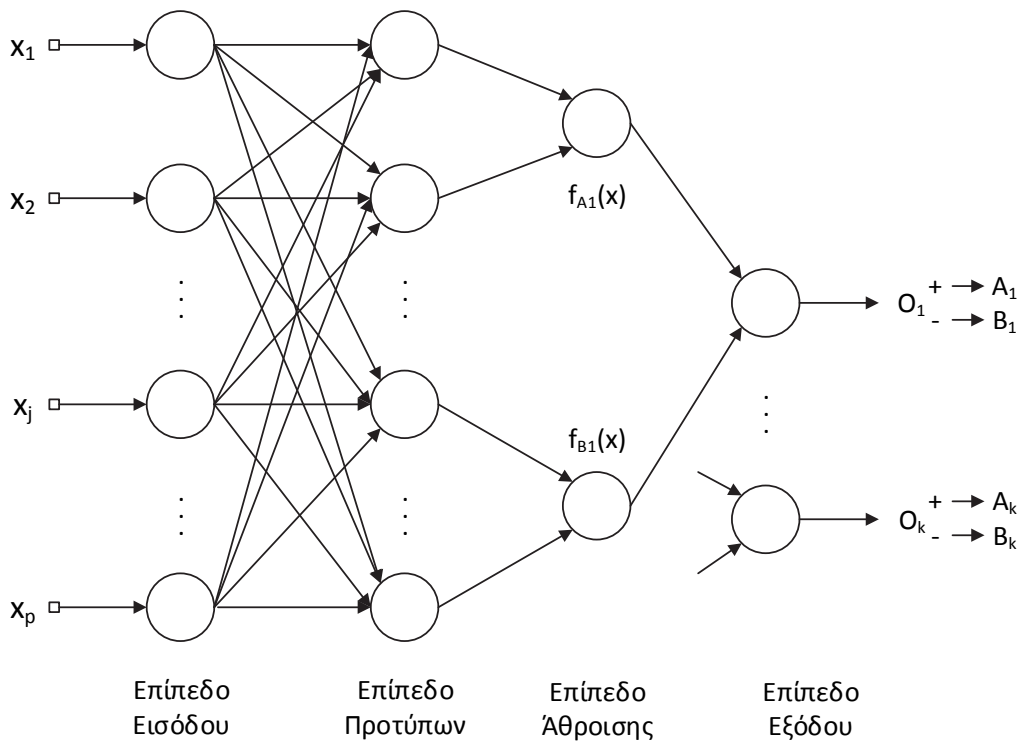
- Στο επίπεδο εισόδου οι μονάδες απλώς μεταφέρουν τα σήματα εισόδου σε όλους τους νευρώνες του επιπέδου προτύπων.
- Στο επίπεδο προτύπων κάθε νευρώνας σχηματίζει το εσωτερικό γινόμενο του σήματος εισόδου  $X$  με ένα διάνυσμα βάρους  $W_i$

$$Z_i = X \cdot W_i \quad (3.87)$$

και στη συνέχεια εφαρμόζει μια μη γραμμική συνάρτηση ενεργοποίησης στο σήμα  $Z_i$ , πριν αυτό προχωρήσει στο επόμενο επίπεδο. Αντί της σιγμοειδούς συνάρτησης ενεργοποίησης που χρησιμοποιείται συνήθως με τον αλγόριθμο ανάστροφης μετάδοσης σφάλματος, χρησιμοποιείται εκθετική συνάρτηση ενεργοποίησης  $\exp[(Z_i - 1)/\sigma^2]$ . Υποθέτοντας ότι Τα  $X$  και  $W_i$  είναι κανονικοποιημένα σε μοναδιαίο μήκος, η συνάρτηση αυτή ισοδυναμεί με χρήση της:

$$\exp[-(W_i - X)^T (W_i - X)/\sigma^2] \quad (3.88)$$

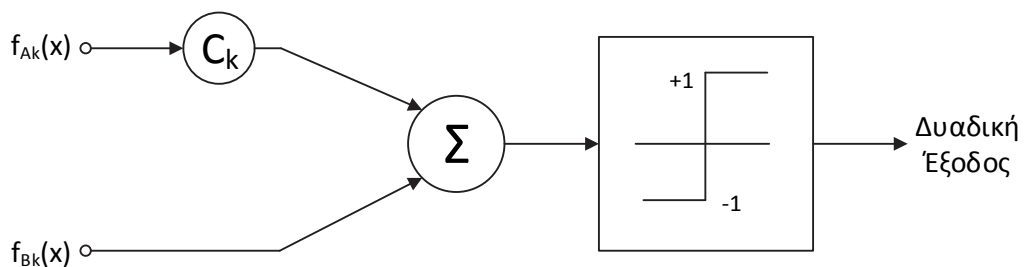
η οποία έχει την μορφή του εκτιμητή  $f_n(\mathbf{X})$  (εξίσωση 3.86).



**Εικόνα 3.26:** Μοντέλο Πιθανοτικού Νευρωνικού Δικτύου

- Οι νευρώνες στο επίπεδο άθροισης αθροίζουν τα σήματα που λαμβάνουν από το επίπεδο προτύπων, τα οποία αντιστοιχούν σε μια συγκεκριμένη κατηγορία (σύμφωνα με τα δεδομένα εκπαίδευσης).
- Στο επίπεδο εξόδου, οι νευρώνες δέχονται δυο εισόδους και παράγουν δυαδική έξοδο. Έχουν μόνο μια μεταβλητή βάρους, την  $C_k$  (Εικόνα 3.27) [52]:

$$C_k = - \frac{h_{B_k} I_{B_k} n_{A_k}}{h_{A_k} I_{A_k} n_{B_k}} \quad (3.89)$$



**Εικόνα 3.27:** Νευρώνας εξόδου σε πιθανοτικό νευρωνικό δίκτυο

όπου:

$n_{A_k}$ : ο αριθμός των δειγμάτων εκπαίδευσης που ανήκουν στην κατηγορία A

$n_{B_k}$ : ο αριθμός των δειγμάτων εκπαίδευσης που ανήκουν στην κατηγορία B

$h_{A_k}$ : η a-priori πιθανότητα ένα δείγμα να ανήκει στην κατηγορία A

$h_{B_k}$ : η a-priori πιθανότητα ένα δείγμα να ανήκει στην κατηγορία B

$I_{A_k}$ : η συνάρτηση απωλειών που σχετίζονται με την απόφαση ότι το  $X$  ανήκει στην κατηγορία B ενώ ανήκει στην κατηγορία A

$I_{B_k}$ : η συνάρτηση απωλειών που σχετίζονται με την απόφαση ότι το  $X$  ανήκει στην κατηγορία A ενώ ανήκει στην κατηγορία B

έχοντας υποθέσει δυαδικό πρόβλημα ταξινόμησης με δυο κατηγορίες A και B.

Το δίκτυο εκπαιδεύεται θέτοντας το διάνυσμα βάρους  $W_i$  κάθε νευρώνα στο επίπεδο προτύπων ίσο με κάθε ένα από τα  $X$  δείγματα στο σύνολο δεδομένων εκπαίδευσης και έπειτα συνδέοντας την έξοδο του νευρώνα στο κατάλληλη μονάδα αθροιστή στο επόμενο επίπεδο. Κάθε δείγμα του συνόλου δεδομένων εκπαίδευσης απαιτεί από ένα νευρώνα στο επίπεδο προτύπων. Οι ίδιοι νευρώνες στο επίπεδο προτύπων μπορούν να συνδεθούν σε διαφορετικές μονάδες άθροισης ώστε το δίκτυο να παρέχει επιπλέον ζεύγη κατηγοριών και περισσότερα bits πληροφορίας στο διάνυσμα εξόδου [52].

Εκτός από τον εκτιμητή της εξίσωσης (3.86), υπάρχουν και εναλλακτικοί εκτιμητές προς χρήση. Οι Casoulllos (1966) και Parzen (1962) έχουν προτείνει για την συνάρτηση βάρους  $W(y)$  τις εξής εναλλακτικές λύσεις [52]:

$$\bullet \quad W(y) = \begin{cases} 1, & y \leq 1 \\ 0, & y \geq 1 \end{cases} \quad (3.90)$$

$$\bullet \quad W(y) = \begin{cases} 1 - y, & y \leq 1 \\ 0, & y \geq 1 \end{cases} \quad (3.91)$$

$$\bullet \quad W(y) = e^{-1/2y^2} \quad (3.92)$$

$$\bullet \quad W(y) = e^{-|y|} \quad (3.93)$$

$$\bullet \quad W(y) = \frac{1}{1+y^2} \quad (3.94)$$

$$\bullet \quad W(y) = \left( \frac{\sin(y/2)}{y/2} \right)^2 \quad (3.95)$$

και ο εκτιμητής έχει την μορφή:

$$f_A(\mathbf{X}) = \frac{1}{n\lambda^p} K_p \sum_{i=1}^n W(y) \quad (3.96)$$

$$y = \frac{1}{\lambda} \sqrt{\sum_{j=1}^p (\mathbf{X}_i - \mathbf{X}_{A_{ij}})^2} \quad (3.97)$$

όπου  $K_p$  μια σταθερά, τέτοια ώστε να ισχύει:

$$K_p = \int K_p W(y) dy = 1 \quad (3.98)$$

Ισχύει όπως και πριν ότι  $Z_i = \mathbf{X} \cdot \mathbf{W}_i$ , με τα  $\mathbf{X}$  και  $\mathbf{W}_i$  να είναι κανονικοποιημένα σε μοναδιαίο μήκος, οπότε το  $Z_i$  κυμαίνεται από -1 έως +1.

Υπάρχουν εναλλακτικοί εκτιμητές οι οποίοι αποτελούν παραλλαγές της μορφής εσωτερικού γινομένου του εκτιμητή (εξίσωση 3.87) και για να υλοποιηθούν απαιτείται αλλαγή στη δομή του δικτύου. Δεν έχει αποδειχθεί ότι κάποιος συγκεκριμένος εκτιμητής είναι ο βέλτιστος και η επιλογή του εξαρτάται από την απόδοση στο εκάστοτε πρόβλημα, καθώς και από την ταχύτητα που απαιτείται στους υπολογισμούς [52].

Εκτός από τις λειτουργίες ταξινόμησης, τα πιθανοτικά νευρωνικά δίκτυα μπορούν να επιτύχουν ανίχνευση της τιμής σε ελλιπή δεδομένα, λειτουργώντας ως συνειρμική μνήμη (associative memory). Οι έξοδοι  $f_A(\mathbf{X})$  και  $f_B(\mathbf{X})$  μπορούν επίσης να χρησιμοποιηθούν για τον υπολογισμό a-posteriori πιθανοτήτων. Για παράδειγμα, θα μπορούσαν να υπολογίσουν την a-posteriori πιθανότητα το σήμα εισόδου  $\mathbf{X}$  να ανήκει στη κατηγορία A,  $P[A|\mathbf{X}]$  [52].

Ένα από τα σημαντικότερα πλεονεκτήματα των πιθανοτικών νευρωνικών δικτύων είναι η ταχύτητά τους σε σχέση με τη χρήση του αλγορίθμου ανάστροφης μετάδοσης σφάλματος. Αυτό παρατηρείται σε προβλήματα στα οποία η σταδιακή προσαρμογή των βαρών με τον αλγόριθμο ανάστροφης μετάδοσης καταλαμβάνει σημαντικό ποσοστό του συνολικού χρόνου υπολογισμού για την επίλυση του προβλήματος.

Η εκπαίδευση των πιθανοτικών νευρωνικών δικτύων είναι εύκολη και άμεση. Μπορούν να χρησιμοποιηθούν σε εφαρμογές πραγματικού χρόνου, αφού εάν ένα δείγμα από κάθε κατηγορία έχει παρατηρηθεί από το δίκτυο, αυτό μπορεί να ξεκινήσει την διαδικασία γενίκευσης σε νέα δεδομένα. Καθώς επιπλέον δείγματα παρατηρούνται και αποθηκεύονται στο δίκτυο, η γενίκευση βελτιώνεται και η επιφάνεια απόφασης γίνεται περισσότερο πολύπλοκη. Άλλα πλεονεκτήματα των δικτύων αυτών είναι τα εξής [52]:

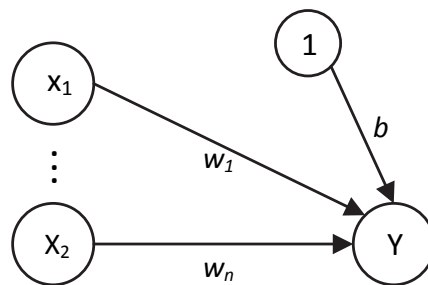
- Η μορφή της επιφάνειας απόφασης μπορεί να γίνει όσο πολύπλοκη ή όσο απλή είναι απαραίτητο, με την επιλογή της κατάλληλης τιμής για την παράμετρο εξομάλυνσης  $\sigma$ .
- Οι επιφάνειες απόφασης που προκύπτουν μπορούν να προσεγγίσουν τη βέλτιστη Μπεϋζιανή επιφάνεια απόφασης.
- Δείγματα εκπαίδευσης με λανθασμένες τιμές χαρακτηριστικών είναι ανεκτά.
- Αραιά κατανεμημένα δείγματα εκπαίδευσης από τον χώρο εισόδου μπορούν να οδηγήσουν σε ικανοποιητική απόδοση του δικτύου.
- Η παράμετρος εξομάλυνσης  $\sigma$  μπορεί να ελαττωθεί καθώς αυξάνει το πλήθος των δειγμάτων  $n$ , χωρίς να χρειαστεί επανεκπαίδευση.
- Αν η στατιστική του προβλήματος εξαρτάται από τον χρόνο, τα παλιότερα δείγματα μπορούν να αντικατασταθούν με νεότερα.

- Το συγκεκριμένο δίκτυο, σε αντίθεση με άλλα δίκτυα, λειτουργεί παράλληλα χωρίς να υπάρχει η ανάγκη ανάδρασης στην είσοδο του. Το γεγονός αυτό διευκολύνει την υλοποίηση απευθείας σε υλικό.

### 3.4.2.6 Άλλες Κατηγορίες Νευρωνικών Δικτύων Εμπρόσθιας Τροφοδότησης

#### α) Νευρωνικά Δίκτυα Adaline, Madaline

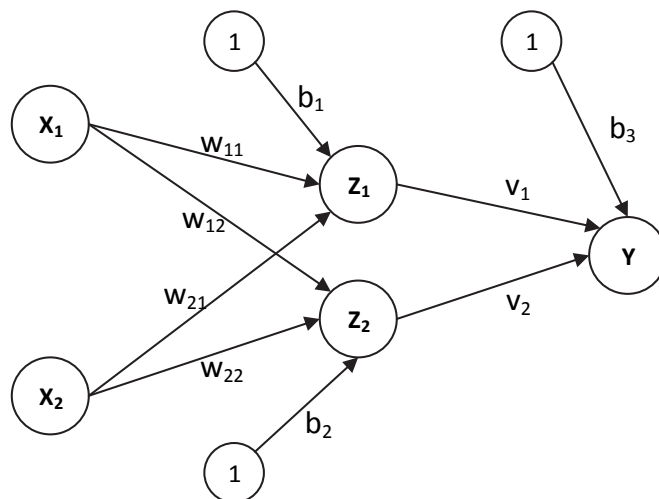
**Το Νευρωνικό Δίκτυο Adaline (Adaptive Linear Neuron)** προτάθηκε από τους Widrow & Hoff (1960)[50]. Αποτελείται από ένα μόνο Νευρώνα, ο οποίος δέχεται εισόδους από πολλές μονάδες (Εικόνα 3.28). Χρησιμοποιεί διπολικές ενεργοποιήσεις (1 ή -1) για τα σήματα εισόδου και για τις εξόδους του δικτύου. Τα βάρη μπορούν να ρυθμιστούν και επίσης υπάρχει η παράμετρος της προκατάληψης (bias), η οποία λειτουργεί ως ένα ρυθμιζόμενο βάρος σε μια σύνδεση μιας μονάδας, της οποίας η ενεργοποίηση είναι πάντα 1. Πολλά δίκτυα Adaline μπορούν να συνδυαστούν σε ένα δίκτυο ενός επιπέδου [50].



**Εικόνα 3.28:** Αρχιτεκτονική Δικτύου ADALINE

Το δίκτυο Adaline μπορεί να εκπαιδευτεί χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο Ελαχίστου Μέσου Τετραγώνου (Least Mean Square - LMS), ο οποίος μπορεί να χρησιμοποιηθεί και για δίκτυα ενός επιπέδου με πολλές μονάδες εξόδου. Μετά την ολοκλήρωση της διαδικασίας εκπαίδευσης, το δίκτυο μπορεί να χρησιμοποιηθεί για ταξινόμηση δειγμάτων, δίνοντας αποτέλεσμα -1 ή +1. Οποιοδήποτε πρόβλημα στο οποίο τα δεδομένα είναι γραμμικώς διαχωρίσιμα, μπορεί να μοντελοποιηθεί χρησιμοποιώντας δίκτυο Adaline.

**Το Νευρωνικό Δίκτυο Madaline (Many Adaptive Linear Neurons)** αποτελείται από πολλούς Adaline Νευρώνες, διατεταγμένους σε δίκτυο πολλαπλών επιπέδων. Η αρχιτεκτονική ενός απλού δικτύου Madaline παρουσιάζεται στην Εικόνα 3.29 [50].



**Εικόνα 3.29:** Δίκτυο MADALINE με δυο κρυφά ADALINES και ένα ADALINE εξόδου

Οι έξοδοι των δυο κρυφών Adaline,  $Z_1$  και  $Z_2$  προσδιορίζονται από σήματα που προέρχονται από τις ίδιες μονάδες εισόδου,  $X_1$  και  $X_2$ . Το σήμα εξόδου προκύπτει εφαρμόζοντας μια συνάρτηση κατωφλιού στο σήμα εισόδου. Επομένως, η έξοδος  $y$  είναι μια μη γραμμική συνάρτηση του διανύσματος εισόδου  $(x_1, x_2)$ . Η ύπαρξη των κρυφών μονάδων  $Z_1$  και  $Z_2$  δίνουν στο δίκτυο νέες υπολογιστικές δυνατότητες, όμως η εκπαίδευσή τους γίνεται περισσότερο πολύπλοκη. Για την εκπαίδευση των δικτύων αυτών έχουν προταθεί οι αλγόριθμοι MRI (Widrow & Hoff, 1960)[50] και MRIL (Widrow et al. 1987)[50].

### **β) Νευρωνικά Δίκτυα Hebbian**

Τα Νευρωνικά Δίκτυα που ανήκουν σε αυτή την κατηγορία εκπαιδεύονται χρησιμοποιώντας τον κανόνα του νευροψυχολόγου Hebb (1949), ο οποίος μπορεί να εκφραστεί ως εξής [46]:

- Αν δυο νευρώνες σε οποιαδήποτε πλευρά μιας συναπτικής σύνδεσης ενεργοποιηθούν ταυτόχρονα τότε η συγκεκριμένη σύνδεση ενισχύεται.
- Αν δυο νευρώνες σε οποιαδήποτε πλευρά μιας συναπτικής σύνδεσης ενεργοποιηθούν ασύγχρονα τότε η συγκεκριμένη σύνδεση αποδυναμώνεται ή και εξαφανίζεται.

Αυτού του είδους η σύνδεση ονομάζεται σύναψη Hebbian (Hebbian synapse) και ο συγκεκριμένος τρόπος εκμάθησης μάθηση Hebbian (Hebbian Learning). Η μάθηση Hebbian είναι μια τεχνική μάθησης χωρίς επίβλεψη (unsupervised learning).

Η μάθηση Hebbian μπορεί να παρασταθεί μαθηματικά θεωρώντας ένα συναπτικό βάρος  $w_{kj}$  ενός νευρώνα  $k$  με σήματα εισόδου και εξόδου  $x_j, y_k$  αντίστοιχα. Η ρύθμιση που γίνεται στο βάρος  $w_{kj}$  στην επανάληψη  $n$  εκφράζεται γενικά ως:

$$\Delta w_{kj}(n) = F(y_k(n), x_j(n)) \quad (3.99)$$

Η εξίσωση (3.99) παίρνει διάφορες μορφές, οι οποίες εκφράζουν τη μάθηση Hebbian. Δυο από αυτές παρουσιάζονται παρακάτω [46]:

- Υπόθεση Hebb (Hebb's hypothesis). Είναι η πιο απλή μορφή Hebbian μάθησης και εκφράζεται ως εξής:

$$\Delta w_{kj}(n) = \eta y_k(n) x_j(n) \quad (3.100)$$

όπου  $\eta$  μια θετική σταθερά που προσδιορίζει τον ρυθμό μάθησης. Η εξίσωση (3.100) τονίζει τον συσχετιστικό χαρακτήρα μίας Hebbian σύναψης και ονομάζεται κανόνας δραστηριότητας γινομένου (activity product rule).

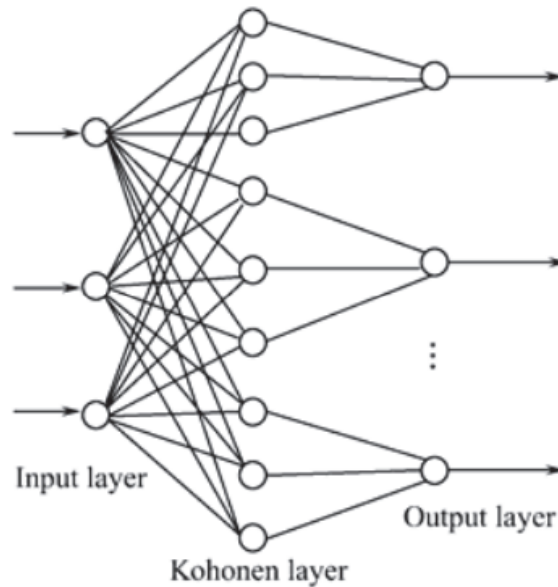
- Υπόθεση Συνδιακύμανσης (Covariance hypothesis). Προτάθηκε από τον Sejnowski (1977). Τα σήματα  $x_j, y_k$  με την διαφορά τους από τις αντίστοιχες μέσες τιμές  $\bar{x}, \bar{y}$  οι οποίες έχουν υπολογιστεί για ένα συγκεκριμένο χρονικό διάστημα:

$$\Delta w_{kj} = \eta (x_j - \bar{x})(y_k - \bar{y}) \quad (3.101)$$

### γ) Νευρωνικά Δίκτυα Διακριτοποίησης Διανύσματος Εκμάθησης

**Τα Νευρωνικά Δίκτυα Διακριτοποίησης Διανύσματος Εκμάθησης (Learning Vector Quantization Neural Network – LVQ)** προτάθηκαν από τον Kohonen και είναι ταξινομητές κοντινότερου γείτονα, οι οποίοι βασίζονται στην τεχνική της ανταγωνιστικής μάθησης (competitive learning) [53]. Η ανταγωνιστική μάθηση είναι μια τεχνική μάθησης σύμφωνα με την οποία οι νευρώνες εξόδου ενός νευρωνικού δικτύου ανταγωνίζονται μεταξύ τους για το ποιος νευρώνας θα βρεθεί σε κατάσταση ενεργοποίησης. Σε αντίθεση με την μάθηση Hebbian, όπου πολλοί νευρώνες εξόδου μπορούν ταυτόχρονα να είναι ενεργοί, στην ανταγωνιστική μάθηση μόνο ένας νευρώνας μπορεί να είναι ενεργός κάθε χρονική στιγμή. Αυτός ο τρόπος εκμάθησης βοηθάει στην εύρεση στατιστικά σημαντικών χαρακτηριστικών, τα οποία μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την ταξινόμηση δειγμάτων.

Η αρχιτεκτονική των Νευρωνικών Δικτύων LVQ παρουσιάζεται στην Εικόνα 3.30 [53]. Τα δίκτυα αυτά περιλαμβάνουν το επίπεδο εισόδου, το επίπεδο Kohonen, στο οποίο πραγματοποιείται η εκμάθηση και η διαδικασία ταξινόμησης και το επίπεδο εξόδου. Το επίπεδο εισόδου περιλαμβάνει ένα κόμβο για κάθε χαρακτηριστικό εισόδου και το επίπεδο Kohonen ίδιο αριθμό κόμβων για κάθε κλάση. Στο επίπεδο εξόδου κάθε κόμβος αναπαριστά μια συγκεκριμένη κλάση.



**Εικόνα 3.30:** Αρχιτεκτονική Δικτύου LVQ, με επίπεδο εισόδου, επίπεδο Kohonen και επίπεδο εξόδου

Η βασική ιδέα είναι να γίνει διαμέριση του διανυσματικού χώρου εισόδου  $\mathbb{R}^n$  σε ένα πλήθος διαφορετικών περιοχών, οι οποίες ονομάζονται περιοχές απόφασης, και για κάθε περιοχή ορίζεται ένα διάνυσμα αναφοράς. Η ταξινόμηση βασίζεται στην εγγύτητα του διανύσματος εισόδου με τα διανύσματα αναφοράς. Το δείγμα θα ταξινομηθεί στην κλάση του κοντινότερου γείτονα από το σύνολο των διανυσμάτων αναφοράς. Κατά τη διάρκεια της εκπαίδευσης, τα διανύσματα αναφοράς, οπότε και τα όρια των περιοχών απόφασης ρυθμίζονται κατάλληλα με μια επαναληπτική διαδικασία.

Έστω  $x$  ένα διάνυσμα εισόδου (από το σύνολο εκπαίδευσης) και  $w_i$  το  $i$ -στο διάνυσμα αναφοράς:  $w_i \in \mathbb{R}^n$ . Ο αλγόριθμος εκπαίδευσης του δικτύου LVQ είναι ο εξής [53]:

- Εύρεση της νικητριάς μονάδας  $c$  της ανταγωνιστικής διαδικασίας με τη βοήθεια της εξίσωσης:

$$\|x - w_c\| = \min_i (\|x - w_i\|) \quad (3.102)$$

- Ρύθμιση  $w_c$ :

$$w_c(t+1) = \begin{cases} w_c(t) + s(t)\alpha(t)[x - w_c(t)] & \text{για } i = c \\ w_i(t) & \text{για } i \neq c \end{cases} \quad (3.103)$$

$$s(t) = \begin{cases} 1, & \text{αν η ταξινόμηση είναι σωστή} \\ -1, & \text{αν η ταξινόμηση είναι λάθος} \end{cases} \quad (3.104)$$

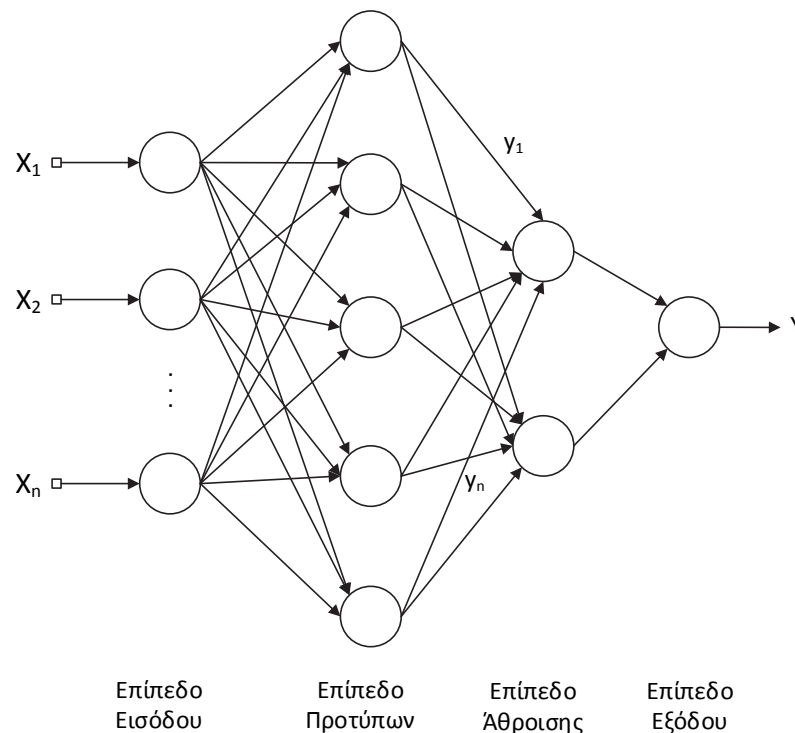
όπου  $\alpha(t)$  είναι ο ρυθμός μάθησης. Θεωρείται ότι  $\alpha(t) = \alpha_0(1 - t/T)$ , όπου  $0 < \alpha_0 < 1$ ,  $T$  ο συνολικός αριθμός των επαναλήψεων του αλγορίθμου μάθησης και  $w_c(t)$  οι διάφορες τιμές του  $w_c$  στο διακριτό πεδίο χρόνου ( $t = 0, 1, 2, \dots$ ). Ο στόχος του αλγορίθμου εκπαίδευσης των δικτύων LVQ είναι η παραγωγή διανυσμάτων αναφοράς υψηλής διακριτικής ικανότητας ως προς τις κλάσεις των δεδομένων.



### δ) Νευρωνικά Δίκτυα Γενικευμένης Παλινδρόμησης

Τα Νευρωνικά Δίκτυα Γενικευμένης Παλινδρόμησης (**General Regression Networks - GRNN**), τα οποία προτάθηκαν για πρώτη φορά από τον Sprech [54], είναι μια παραλλαγή των Νευρωνικών Δικτύων Ακτινικής Βάσης, ενώ η δομή τους ομοιάζει με αυτή των Πιθανοτικών Νευρωνικών Δικτύων. Τα δίκτυα GRNN δεν χρειάζονται επαναληπτική διεργασία εκπαίδευσης, όπως χρειάζονται τα δίκτυα που χρησιμοποιούν τον αλγόριθμο ανάστροφης μετάδοσης σφάλματος. Προσεγγίζουν τη συνάρτηση-σχέση που υπάρχει μεταξύ των διανυσμάτων εισόδου και των διανυσμάτων εξόδου, η εκτίμηση της οποίας γίνεται απευθείας από τα δεδομένα εκπαίδευσης. Καθώς αυξάνει το μέγεθος του συνόλου εκπαίδευσης το σφάλμα εκτίμησης προσεγγίζει το μηδέν.

Ένα δίκτυο GRNN αποτελείται από τέσσερα επίπεδα, το επίπεδο εισόδου (input layer), το επίπεδο προτύπων (pattern layer), το επίπεδο άθροισης (summation layer) και το επίπεδο εξόδου (output layer), όπως φαίνεται στην Εικόνα 3.31 [55].



**Εικόνα 3.31:** Δομή Νευρωνικού Δικτύου Γενικευμένης Παλινδρόμησης

Το πρώτο επίπεδο συνδέεται με το επίπεδο προτύπων, στο οποίο κάθε νευρώνας αναπαριστά ένα δείγμα εκπαίδευσης. Στη συνέχεια, το επίπεδο προτύπων συνδέεται με το επίπεδο άθροισης το οποίο διαθέτει δυο μονάδες άθροισης, τη μονάδα άθροισης  $D$  και τη μονάδα άθροισης  $S$ . Το επίπεδο άθροισης μαζί με το επίπεδο εξόδου κανονικοποιούν την έξοδο του δικτύου, ενώ συναρτήσεις ακτινικής βάσης και γραμμικές συναρτήσεις

χρησιμοποιούνται ως συναρτήσεις ενεργοποίησης στα κρυφά επίπεδα και στο επίπεδο εξόδου.

Κάθε μονάδα στο επίπεδο προτύπων συνδέεται με δυο νευρώνες στο επίπεδο άθροισης, όπως φαίνεται στην Εικόνα 3.31, τους νευρώνες  $S$  και  $D$ . Ο νευρώνας  $S$  υπολογίζει το άθροισμα των σταθμισμένων αποκρίσεων του επιπέδου προτύπων, ενώ ο νευρώνας  $D$  χρησιμοποιείται για να υπολογίζει το άθροισμα των αποκρίσεων του επιπέδου προτύπων, χωρίς να λαμβάνει υπόψη τα βάρη. Στη συνέχεια, το επίπεδο εξόδου απλώς διαιρεί την έξοδο του νευρώνα  $S$  με την έξοδο από τον νευρώνα  $D$ , οπότε προκύπτει η προβλεπόμενη τιμή  $Y$  για ένα άγνωστο διάνυσμα  $x$  [55]:

$$Y = \frac{\sum_{i=1}^n y_i \exp\{-D(x, x_i)\}}{\sum_{i=1}^n \exp\{-D(x, x_i)\}} \quad (3.105)$$

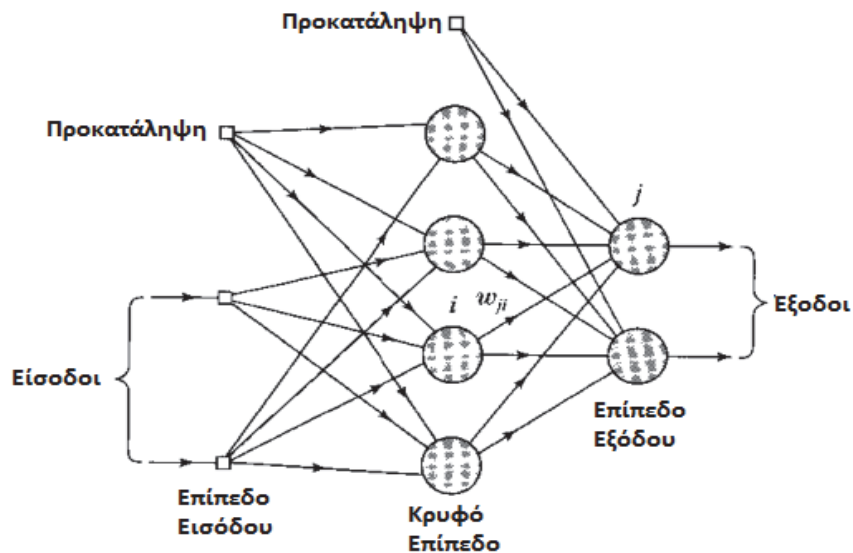
$$D(x, x_i) = \sum_{k=1}^m \left( \frac{x_k - x_{ik}}{\sigma} \right)^2 \quad (3.106)$$

όπου  $y_i$  είναι το βάρος της σύνδεσης μεταξύ του  $i$ -στου νευρώνα στο επίπεδο προτύπων και του νευρώνα άθροισης  $S$ ,  $n$  το πλήθος των δειγμάτων εκπαίδευσης,  $D$  η Γκαουσιανή συνάρτηση,  $m$  η διάσταση του διανύσματος εισόδου και  $\sigma$  η παράμετρος εξάπλωσης (spread parameter), η οποία προσδιορίζεται πειραματικά.

### ε) Σιγμοειδή Δίκτυα Πεποίθησης

**Τα Σιγμοειδή Δίκτυα Πεποίθησης (Sigmoid Belief Networks)** αναπτύχθηκαν από τον Neal (1992)[46] σε μια προσπάθεια εύρεσης μιας στοχαστικής μηχανής (ενός δικτύου με στοχαστικούς νευρώνες), η οποία όπως η Μηχανή Boltzmann, θα μπορούσε να μαθαίνει κατανομές πιθανότητας από δυαδικά διανύσματα αλλά η διαδικασία εκπαίδευσής της θα ήταν απλούστερη. Η ιδέα ήταν να γίνει αντικατάσταση των συμμετρικών συνδέσεων της μηχανής Boltzmann με απευθείας συνδέσεις, οι οποίες σχηματίζουν ακυκλικό γράφημα. Πιο συγκεκριμένα, ένα σιγμοειδή δίκτυο πεποίθησης αποτελείται από μια αρχιτεκτονική πολλών επιπέδων με δυαδικούς στοχαστικούς νευρώνες, όπως φαίνεται στην Εικόνα 3.32 [46].

Η ακυκλική αρχιτεκτονική της μηχανής δίνει τη δυνατότητα να γίνονται εύκολα υπολογισμοί σχετικά με τις πιθανότητες. Χρησιμοποιείται σιγμοειδής συνάρτηση για τον υπολογισμό της υπο συνθήκη πιθανότητας να ενεργοποιηθεί ένας νευρώνας ως απόκριση στην είσοδό του [46].

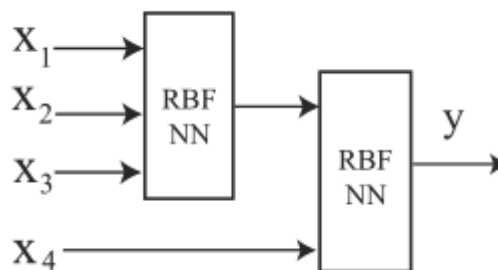


Εικόνα 3.32: Αρχιτεκτονική Σιγμοειδούς Δικτύου Πεποίθησης

### στ) Ιεραρχικά Νευρωνικά Δίκτυα

Τα **Ιεραρχικά Νευρωνικά Δίκτυα (Hierarchical Neural Networks)** συνδυάζουν διάφορα είδη δικτύων για να δημιουργήσουν περισσότερο πολύπλοκες και εξυπνότερες δομές, οι οποίες εκμεταλλεύονται τα πλεονεκτήματα διάφορων τεχνικών.

Υπάρχουν τρεις βασικές πολύ-επίπεδες δομές για τα ιεραρχικά μοντέλα: η αυξητική (incremental) δομή, η συγκεντρωτική (aggregated) δομή και η κλιμακωτή (cascaded) δομή. Κατά την σχεδίαση των μοντέλων αυτών αντιμετωπίζονται αρκετές δυσκολίες, όπως ο ακριβής προσδιορισμός της κατάλληλης ιεραρχικής δομής, ο υπολογισμός των παραμέτρων και οι μεταβλητές εισόδου για κάθε υπο-δίκτυο. Ένα απλό παράδειγμα ιεραρχικής δομής φαίνεται στην Εικόνα 3.33 [56]:

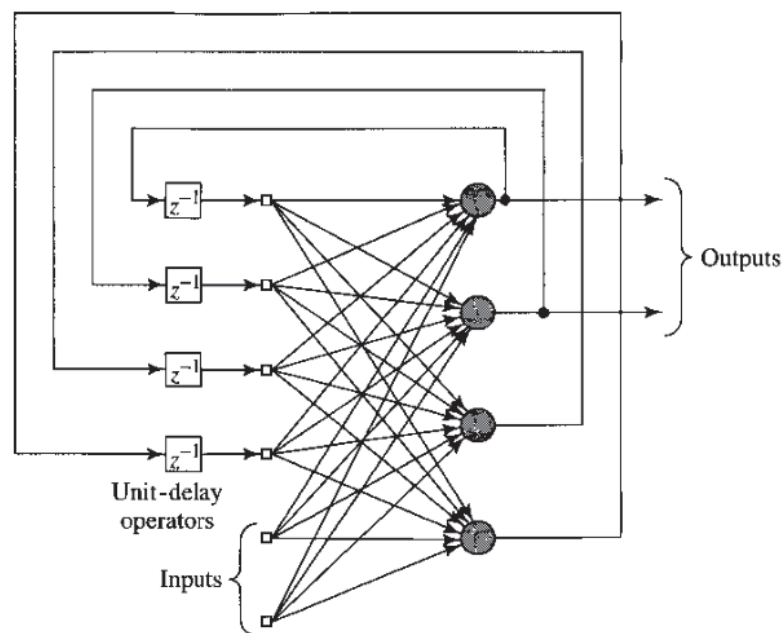


Εικόνα 3.33: Ιεραρχική Δομή με Νευρωνικά Δίκτυα Ακτινικής Βάσης

### 3.4.3 Νευρωνικά Δίκτυα Ανατροφοδότησης

#### 3.4.3.1 Γενική Περιγραφή

Τα Νευρωνικά Δίκτυα με Ανατροφοδότηση (Feedback/Recurrent Neural Networks) διαφέρουν από τα Δίκτυα Εμπρόσθιας Τροφοδότησης στο ότι διαθέτουν τουλάχιστον ένα βρόχο ανάδρασης. Για παράδειγμα, ένα δίκτυο με ανατροφοδότηση μπορεί να αποτελείται από ένα επίπεδο νευρώνων, με κάθε νευρώνα να ανατροφοδοτεί το σήμα εξόδου του στις εισόδους όλων των υπόλοιπων νευρώνων, όπως φαίνεται στην Εικόνα 3.34[46]. Σε αυτή τη συγκεκριμένη δομή δεν υπάρχουν βρόχοι αυτό-ανατροφοδότησης και οι συνδέσεις ανατροφοδότησης προέρχονται από τους κρυφούς νευρώνες και τους νευρώνες εξόδου. Η αυτο-ανατροφοδότηση αναφέρεται σε νευρώνα ο οποίος τροφοδοτεί την έξοδό του ξανά στην είσοδό του. Η ύπαρξη βρόχων ανατροφοδότησης επηρεάζει άμεσα την μαθησιακή ικανότητα του δικτύου, καθώς και την απόδοσή του. Οι βρόχοι ανατροφοδότησης του δικτύου της Εικόνας 3.34 περιλαμβάνουν στοιχεία μοναδιαίας καθυστέρησης (unit-delay elements) τα οποία συμβολίζονται με  $z^{-1}$  το οποίο έχει ως αποτέλεσμα μη γραμμική, δυναμική συμπεριφορά του δικτύου, υποθέτοντας ότι αποτελείται από μη γραμμικές μονάδες [46].



**Εικόνα 3.34:** Νευρωνικό Δίκτυο Ανατροφοδότησης με κρυφούς νευρώνες

Η κλασική διαδικασία εκπαίδευσης των νευρωνικών δικτύων με ανατροφοδότηση αποτελείται από δυο στάδια. Αρχικά επιλέγεται η κατάλληλη δομή του δικτύου για κάποιο συγκεκριμένο πρόβλημα, το οποίο σημαίνει ότι θα πρέπει να προσδιοριστούν ο αριθμός των κρυφών επιπέδων, ο αριθμός των νευρώνων σε κάθε κρυφό επίπεδο και το σχήμα

διασύνδεσης των νευρώνων. Το δεύτερο στάδιο είναι η ρύθμιση των παραμέτρων σύνδεσης του δικτύου. Σε γενικές γραμμές, για κάποια συγκεκριμένη εφαρμογή ή δομή του δικτύου επιλέγεται είτε με βάση την εμπειρία του χρήστη, είτε με κάποια διαδικασία δοκιμών. Έχουν αναπτυχθεί διάφοροι αλγόριθμοι για την ρύθμιση των παραμέτρων, κάποιοι από τους οποίους χρησιμοποιούν μεθόδους βασισμένες στον υπολογισμό της κλίσης (gradient) έχοντας ως αρνητικές συνέπειες τα τοπικά ελάχιστα και την αργή σύγκλιση. Άλλες μέθοδοι χρησιμοποιούν γενετικούς αλγορίθμους, βελτιστοποίηση σμήνους σωματιδίων (particle swarm optimization) και διάφορες άλλες παραλλαγές των τεχνικών αυτών. Παρόλα αυτά, πολλές μέθοδοι υπολογίζουν τις παραμέτρους χωρίς να λαμβάνουν υπόψη τους τη βελτιστοποίηση της δομής του δικτύου [57].

Παρακάτω παρουσιάζονται διάφορες κατηγορίες νευρωνικών δικτύων με ανατροφοδότηση, τα οποία χρησιμοποιούν επιβλεπόμενη ή μη επιβλεπόμενη μάθηση.

### 3.4.3.2 Δίκτυα Ανατροφοδότησης με μάθηση υπό επίβλεψη

#### α) Δίκτυα Brain-State-in-a-Box

Το μοντέλο **Brain-State-in-a-Box (BSB)**, το οποίο προτάθηκε από τον Anderson et al. (1977)[58] κατά την μελέτη της ανθρώπινης γνωστικής υπολογιστικής ικανότητας, είναι ένα αφηρημένο μοντέλο νευρικού συστήματος το οποίο έχει χρησιμοποιηθεί για τη μελέτη διάφορων ψυχολογικών συμπεριφορών. Το μοντέλο αυτό είναι εμπνευσμένο από την εξής φυσική διεργασία: Έστω μια ομάδα που αποτελείται από  $N$  νευρώνες συνδεδεμένους σε υψηλό βαθμό μεταξύ τους, οι οποίοι διαθέτουν αυτο-ανατροφοδότηση. Η πληροφορία σε αυτό το σύστημα αναπαρίσταται από ένα  $N$ -διάστατο διάνυσμα κατάστασης που δείχνει τις συχνότητες ενεργοποίησης των νευρώνων. Το σύστημα των νευρώνων δέχεται ένα πρότυπο νευρικής δραστηριότητας και το ενισχύει χρησιμοποιώντας θετική ανάδραση. Στην τελική κατάσταση όλοι οι νευρώνες του συστήματος θα έχουν κορεστεί. Επομένως, αν και το αρχικό πρότυπο ενεργοποίησης ήταν αναλογικό αφού ο ρυθμός ενεργοποίησης κάθε νευρώνα είναι μια μεταβλητή που παίρνει πραγματικές τιμές, το τελικό πρότυπο ενεργοποίησης είναι διακριτό, αφού όλοι οι νευρώνες έχουν κορεστεί. Σχετικά με τις ψυχολογικές συμπεριφορές, το μοντέλο αυτό αποτελεί έναν μηχανισμό κατηγοριοποίησης [58].

Μια πιθανή εφαρμογή του μοντέλου BSB είναι η αναγνώριση κάποιου προτύπου, δοθέντος μιας θορυβώδους έκδοσής του. Για το λόγο αυτό, το μοντέλο BSB συχνά αναφέρεται ως συσχετιστική μνήμη (associative memory) και μπορεί να θεωρηθεί ως ένα διακριτό δυναμικό σύστημα. Η δυναμική συμπεριφορά του μοντέλου μπορεί να περιγραφεί από τη διαφορική εξίσωση [59]:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{g}(\mathbf{x}_k + a\mathbf{W}\mathbf{x}_k) \quad (3.107)$$

$$\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0 \quad (3.108)$$

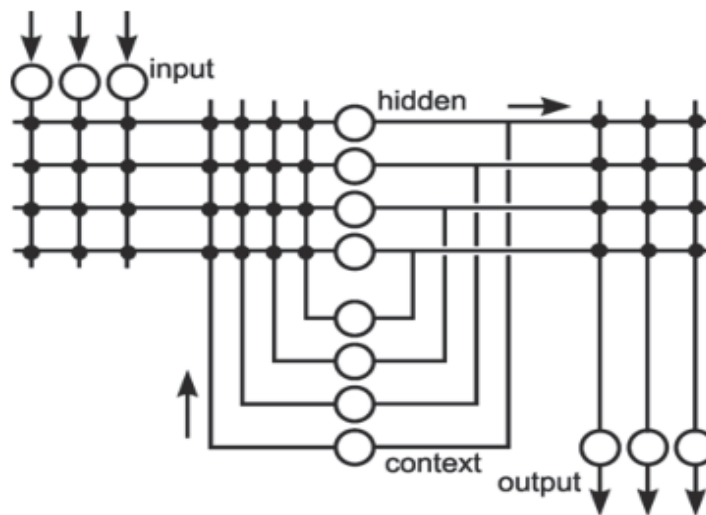
όπου  $\mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^n$  είναι η κατάσταση του συστήματος τη χρονική στιγμή  $k$ ,  $a$  είναι το μέγεθος του βήματος της επανάληψης και  $\mathbf{W} \in \mathbb{R}^{n \times n}$  ο συμμετρικός πίνακας βαρών, ο οποίος προσδιορίζεται κατά τη διαδικασία εκπαίδευσης. Η συνάρτηση  $\mathbf{g}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$  είναι μια διανυσματική συνάρτηση, τις οποίας η  $i$ -στη συνιστώσα ορίζεται ως εξής [59]:

$$(\mathbf{g}(\mathbf{y}))_i = \begin{cases} +1 & \text{αν } y_i \geq 1 \\ y_i & \text{αν } -1 < y_i < 1 \\ -1 & \text{αν } y_i \leq -1 \end{cases} \quad (3.109)$$

Το μοντέλο Brain-Sate-in-a-Box πήρε την ονομασία του από το γεγονός ότι οι καταστάσεις του συστήματος θα πρέπει να βρίσκονται εντός του υπερ-κύβου  $H_n = [-1,1]^n$ .

### β) Δίκτυα Elman και Δίκτυα Jordan

**Τα Δίκτυα Elman** είναι ένα μοντέλο δικτύου με ανατροφοδότηση, το οποίο προτάθηκε από τον Elman (1990)[57]. Το δίκτυο αποτελείται από ένα επίπεδο εισόδου (input layer), ένα κρυφό επίπεδο (hidden layer), ένα επίπεδο γενικού πλαισίου (context layer) και ένα επίπεδο εξόδου (output layer) (Εικόνα 3.35) [57], [60].



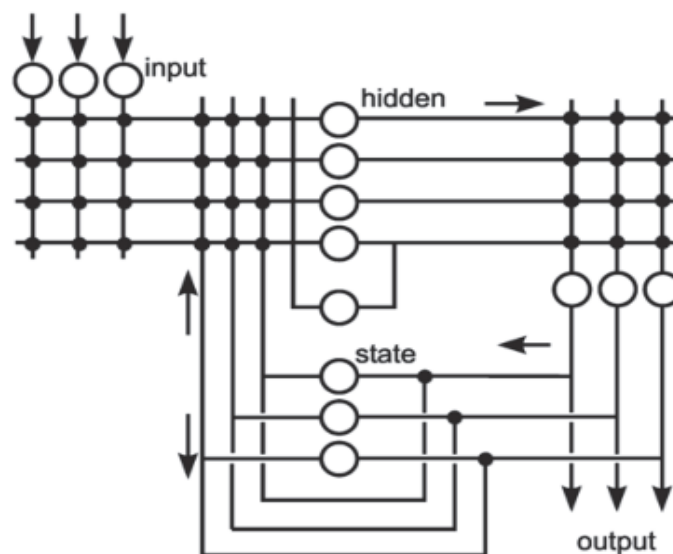
**Εικόνα 3.35:** Αρχιτεκτονική Νευρωνικού Δικτύου Elman

Οι έξοδοι των νευρώνων στο επίπεδο γενικού πλαισίου καθώς και οι έξοδοι των νευρώνων στο επίπεδο εισόδου προωθούνται στο κρυφό επίπεδο. Οι νευρώνες στο επίπεδο γενικού πλαισίου ονομάζονται μονάδες μνήμης επειδή αποθηκεύουν τις τιμές των εξόδων των νευρώνων του κρυφού επιπέδου, από το προηγούμενο χρονικό βήμα.

Επομένως, δημιουργείται μια μνήμη η οποία εξαρτάται από τις προηγούμενες καταστάσεις αλλά η επίδραση αυτή εξαλείφεται σταδιακά με την πάροδο του χρόνου. Τα βάρη των συνδέσεων από το κρυφό επίπεδο στο επίπεδο γενικού πλαισίου είναι σταθερά και ίσα με τη μονάδα ενώ όλα τα υπόλοιπα βάρη μπορούν να ρυθμιστούν κατάλληλα.

Κατά τη διάρκεια της λειτουργίας του δικτύου, στην είσοδο παρέχονται μια χρονική σειρά διανυσμάτων εισόδου. Για τη ρύθμιση των βαρών η έξοδος συγκρίνεται με ένα διάνυσμα επιθυμητής απόκρισης και στη συνέχεια εφαρμόζεται κάποια μέθοδο κλίσης. Επομένως, το σύστημα μαθαίνει να συνδέει μια έξοδο με μια χρονική ακολουθία πολλών διανυσμάτων εισόδου [57].

**Τα Νευρωνικά Δίκτυα Jordan** προτάθηκαν από τον Jordan(1986)[57] και είναι σε γενικές γραμμές όμοια με τα δίκτυα Elman. Διαφέρουν στο ότι οι συνδέσεις ανατροφοδότησης ξεκινούν από το επίπεδο εξόδου και όχι από το κρυφό επίπεδο. Στα δίκτυα Jordan το επίπεδο γενικού πλαισίου ονομάζεται επίπεδο κατάστασης (state layer), το οποίο αποτελεί ένα ξεχωριστό υπο-δίκτυο ανάδρασης, αφού ανατροφοδοτεί την έξοδό του στην είσοδό του, έχει 1:1 συνδέσεις και σταθερά βάρη (Εικόνα 3.36)[57].



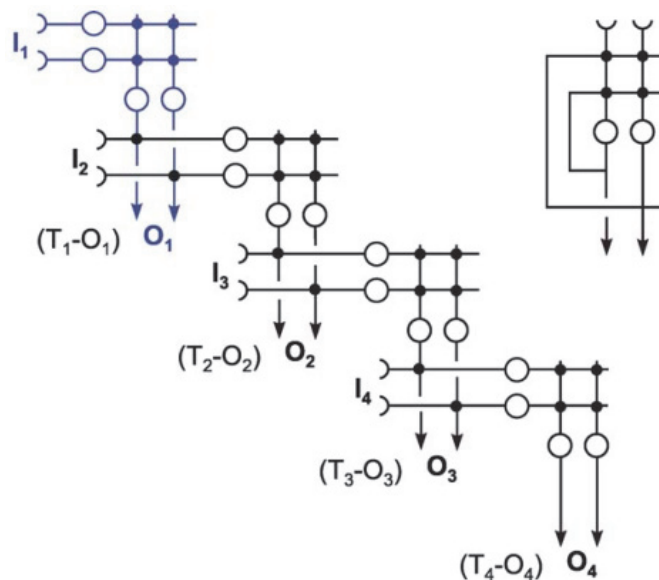
**Εικόνα 3.36:** Αρχιτεκτονική Νευρωνικού Δικτύου Jordan

Στο δίκτυο αυτό παρέχεται ένα σταθερό διάνυσμα εισόδου ενώ στην έξοδο παράγεται μια χρονική ακολουθία διανυσμάτων. Η διαφοροποίηση στο χρόνο προκαλείται από τις δυο διαφορετικές αναδράσεις, από το επίπεδο εξόδου στο επίπεδο κατάστασης και τις αναδράσεις εντός του επιπέδου κατάστασης. Για κάθε διάνυσμα εισόδου παράγεται μια διαφορετική χρονική ακολουθία διανυσμάτων εξόδου.

Τα δίκτυα Elman και τα δίκτυα Jordan έχουν αρκετές ομοιότητες οπότε μπορούν να χρησιμοποιηθούν σε παρόμοιες εφαρμογές. Και οι δυο κατηγορίες δικτύων έχουν το

πλεονέκτημα ότι μόνο τα βάρη στην εμπρόσθια τροφοδότηση μπορούν να τροποποιηθούν οπότε η διαδικασία εκπαίδευσης είναι απλούστερη [57].

Τα δίκτυα αυτά μπορούν να εκπαιδευτούν με τον αλγόριθμο ανάστροφης μετάδοσης σφάλματος δια μέσου του χρόνου (Back Propagation Through Time). Τα δίκτυα ανατροφοδότησης «ξεδιπλώνονται» σε πολλά όμοια δίκτυα εμπρόσθιας τροφοδότησης. Κάθε δίκτυο αντιπροσωπεύει μια διαφορετική επανάληψη στη διάρκεια του χρόνου («ξεδίπλωμα στο χρόνο» – unfolding in time). Αυτό σημαίνει ότι η μέθοδος ανάστροφης μετάδοσης σφάλματος θα πρέπει να εφαρμοστεί με τέτοιο τρόπο ώστε αφού έχει δοθεί η είσοδος στο πρώτο δίκτυο, η έξοδος κάθε δικτύου συγκρίνεται με την επιθυμητή απόκριση που αναμένεται στην αντίστοιχη χρονική στιγμή. Όλα τα σφάλματα για ένα συγκεκριμένο βάρος συγκεντρώνονται και χρησιμοποιούνται για τη κατάλληλη ρύθμισή του (Εικόνα 3.37). Η μέθοδος αυτή διαφέρει από την ανάστροφη μετάδοση σφάλματος για δίκτυα εμπρόσθιας τροφοδότησης επειδή μπορεί να παρουσιάσει πολύπλοκη δυναμική συμπεριφορά και να μην οδηγήσει σε μια βέλτιστη λύση [57].

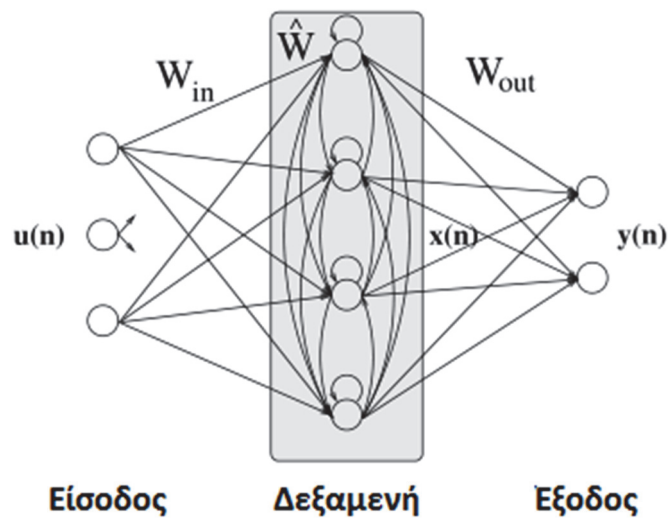


**Εικόνα 3.37:** Για την αντιμετώπιση της δυναμικής συμπεριφοράς του δικτύου ανατροφοδότησης, το δίκτυο αντιγράφεται πολλές φορές και τα αντίγραφα αυτά συνδέονται για να σχηματίσουν ένα δίκτυο εμπρόσθιας τροφοδότησης. Κάθε υπο-δίκτυο αναπαριστά ένα χρονικό βήμα. Τα σφάλματα  $(T_i - O_i)$  πρέπει να συγκεντρωθούν για κάθε χρονικό βήμα (δηλαδή για κάθε υπο-δίκτυο) και στη συνέχεια χρησιμοποιούνται για την ενημέρωση των βαρών.



### γ) Δίκτυα Echo State

Ένα **Νευρωνικό Δίκτυο Echo State** αποτελείται από δυο μέρη: ένα δίκτυο ανατροφοδότησης με σταθερά βάρη, το οποίο ονομάζεται δυναμική δεξαμενή (dynamic reservoir) και από μονάδες εισόδου και εξόδου, οι οποίες είναι συνδεδεμένες στους νευρώνες που έχουν δυναμική συμπεριφορά (Εικόνα 3.38) [57],[61].



**Εικόνα 3.38:** Δίκτυο Echo State

Η δυναμική δεξαμενή αποτελείται από αραιά συνδεδεμένες μονάδες με ανάδραση, οι οποίες χρησιμοποιούν λογιστικές συναρτήσεις (logistic functions) ενεργοποίησης. Τα βάρη των συνδέσεων είναι τυχαία επιλεγμένα και θα πρέπει να είναι αρκετά μικρά ώστε να αποφευχθούν τυχόν ενισχύσεις ταλαντώσεων στις τιμές τους, κατά τη διαδικασία της εκπαίδευσης. Για να ελεγχθεί αυτό αποτελεσματικά, η δυναμική δεξαμενή αφού διεγερθεί από ένα σήμα εισόδου υπό τη μορφή ώθησης θα έχει μια πολύπλοκη δυναμική συμπεριφορά, η οποία θα πρέπει να ελαττώνεται και εν τέλει να σταματήσει, με την πάροδο του χρόνου. Οι μονάδες εξόδου εκμεταλλεύονται αυτή τη δυναμική συμπεριφορά. Ρυθμίζονται μόνο τα βάρη που αφορούν τις συνδέσεις από τη δυναμική δεξαμενή προς τις μονάδες εξόδου και όλα τα υπόλοιπα βάρη προσδιορίζονται στην αρχή της διαδικασίας εκπαίδευσης και παραμένουν σταθερά.

Για να μάθει το δίκτυο μια δεδομένη δυναμική συμπεριφορά, οι μονάδες εξόδου λαμβάνουν την αντίστοιχη δυναμική συνάρτηση από μια εξωτερική είσοδο, η οποία εφαρμόζεται μόνο κατά τη διαδικασία εκπαίδευσης. Εξαιτίας των αναδράσεων, η δυναμική δεξαμενή δείχνει μια πολύπλοκη δυναμική συμπεριφορά. Η περίπλοκη αυτή συμπεριφορά της δεξαμενής ανιχνεύεται από τις μονάδες εξόδου, των οποίων τα βάρη αλλάζουν με τέτοιο τρόπο ώστε να παράγουν ακριβώς την επιζητούμενη συμπεριφορά [57].

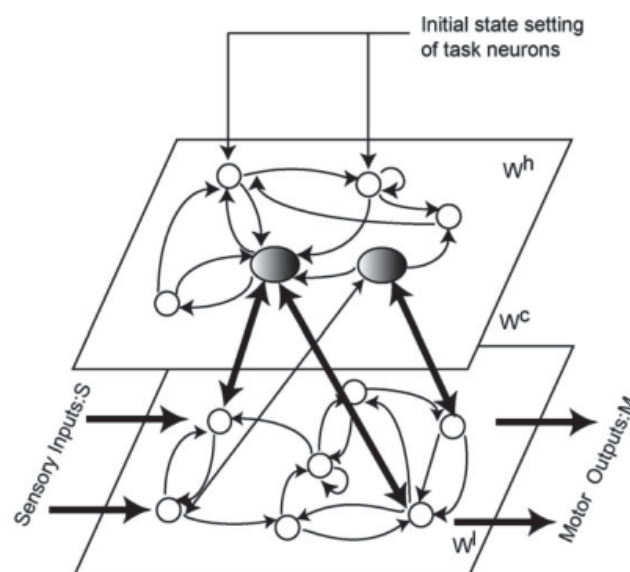
Η μέθοδος που ακολουθεί το Νευρωνικό Δίκτυο Echo State αποτελεί μια ιδιαίτερη κατηγορία νευρωνικών δικτύων με ανατροφοδότηση, η οποία ονομάζεται υπολογιστική δεξαμενή (Reservoir Computing - RC). Τα μοντέλα που ανήκουν σε αυτή τη κατηγορία χαρακτηρίζονται από τη εξής δομή [61]:

- Δυναμικό μέρος δικτύου που χρησιμοποιεί ανατροφοδότηση.
- Απλό μέρος δικτύου που χρησιμοποιείται ως εργαλείο για την παραγωγή του σήματος εξόδου.

Το σημαντικό πλεονέκτημα που προσφέρει αυτή η σχεδίαση είναι ότι το μέρος του δικτύου που χρησιμοποιεί ανατροφοδότηση μπορεί να παραμείνει ανεκπαίδευτο μετά την αρχικοποίησή του, αρκεί να πληροί κάποιες ιδιότητες, οι οποίες είναι πολύ εύκολο να ελεγχθούν. Η διαδικασία μάθησης περιορίζεται στο μέρος της εξόδου, το οποίο δεν χρησιμοποιεί ανάδραση. Άλλες κατηγορίες νευρωνικών δικτύων που χρησιμοποιούν αυτή την τεχνική είναι οι Μηχανές Liquid State (Liquid State Machines - LSMs) και άλλες προσεγγίσεις όπως η Ανάστροφη Μετάδοση με Αποσυσχέτιση (Back Propagation Decorrelation - BPDC) [61].

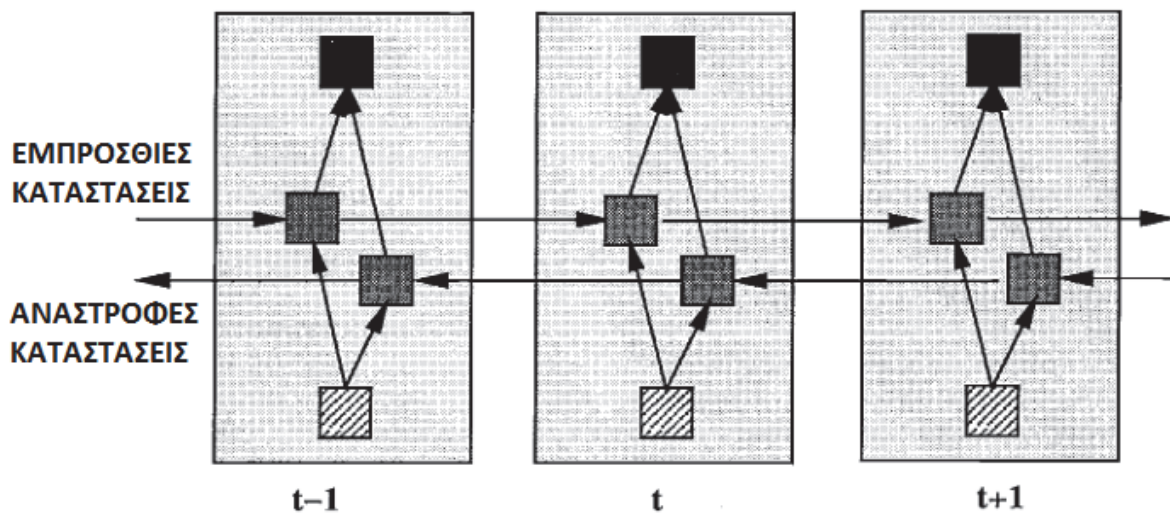
#### δ) Ιεραρχικά Δίκτυα Ανατροφοδότησης και Δίκτυα Ανατροφοδότησης Διπλής Κατεύθυνσης

**Τα Ιεραρχικά Νευρωνικά Δίκτυα Ανατροφοδότησης (Hierarchical Recurrent Neural Networks)** συνδυάζουν διάφορες δομές νευρωνικών δικτύων ανατροφοδότησης, δημιουργώντας περισσότερο πολύπλοκες δομές. Οι δομές αυτές χρησιμεύουν για την μοντελοποίηση και περιγραφή πολύπλοκων προβλημάτων όπως φαίνεται στο παράδειγμα της Εικόνας 3.39 [62]:



**Εικόνα 3.39:** Ιεραρχικό Νευρωνικό Δίκτυο Ανατροφοδότησης

**Τα Νευρωνικά Δίκτυα Ανατροφοδότησης Διπλής Κατεύθυνσης (Bidirectional Recurrent Neural Networks - BRNN)[63]** μπορούν να εκπαιδευτούν χρησιμοποιώντας όλη τη διαθέσιμη πληροφορία στο παρελθόν και στο μέλλον ενός συγκεκριμένου χρονικού πλαισίου. Η βασική ιδέα είναι να γίνει ένας διαχωρισμός των νευρώνων ενός κανονικού δικτύου ανατροφοδότησης σε ένα μέρος το οποίο θα είναι υπεύθυνο για την θετική χρονική κατεύθυνση (εμπρόσθιες καταστάσεις – forward states) και ένα μέρος για την αρνητική χρονική κατεύθυνση (ανάστροφες καταστάσεις – backward states). Οι έξοδοι από τις εμπρόσθιες καταστάσεις δεν συνδέονται στις εισόδους των ανάστροφων καταστάσεων και αντιστρόφως. Αυτό οδηγεί στην γενική δομή που παρουσιάζεται στην Εικόνα 3.40 [63]:



**Εικόνα 3.40:** Γενική Αρχιτεκτονική Δικτύου Ανατροφοδότησης Διπλής Κατεύθυνσης, αναπτυγμένη στο χρόνο για τρία χρονικά θήματα

Χωρίς τις ανάστροφες καταστάσεις, η δομή αυτή απλοποιείται σε ένα κανονικό νευρωνικό δίκτυο εμπρόσθιας κατεύθυνσης με ανατροφοδότηση ενώ αν αφαιρεθούν οι εμπρόσθιες καταστάσεις, το δίκτυο μετατρέπεται σε ένα απλό RNN με ανάστροφο χρονικό άξονα. Και με τις δυο χρονικές κατευθύνσεις στο ίδιο δίκτυο η πληροφορία εισόδου στο παρελθόν και στο μέλλον του τρέχοντος χρονικού πλαισίου μπορεί να χρησιμοποιηθεί απευθείας για την ελαχιστοποίηση της αντικειμενικής συνάρτησης χωρίς να υπάρχει ανάγκη χρήσης καθυστέρησης για να αξιοποιηθεί η μέλλουσα πληροφορία.

Για την εκπαίδευση των δικτύων ανατροφοδότησης διπλής κατεύθυνσης μπορούν να χρησιμοποιηθούν οι ίδιοι αλγόριθμοι που χρησιμοποιούνται και για τα δίκτυα ανατροφοδότησης μονής κατεύθυνσης, διότι δεν υπάρχουν αλληλεπιδράσεις μεταξύ των νευρώνων διαφορετικού τύπου, οπότε μπορούν να ξεδιπλωθούν σε ένα γενικό δίκτυο εμπρόσθιας τροφοδότησης. Παρόλα αυτά, αν για παράδειγμα χρησιμοποιηθεί ο αλγόριθμος ανάστροφης μετάδοσης σφάλματος δια μέσου του χρόνου (Back Propagation Through Time), η διαδικασία είναι ελαφρώς πιο πολύπλοκη. Το εμπρόσθιο και ανάστροφο πέρασμα του αλγορίθμου στο ανεπτυγμένο BRNN γίνονται με τον ίδιο τρόπο, όπως και σε ένα πολυ-επίπεδο perceptron. Απλώς χρειάζεται κάποια ειδική μεταχείριση στην αρχή και στο τέλος των δεδομένων εκπαίδευσης, αφού οι εισοδοί των εμπρόσθιων καταστάσεων για

$t = 1$  και των ανάστροφων καταστάσεων για  $t = T$  δεν είναι γνωστές. Η επιλογή των εισόδων αυτών μπορεί να ενσωματωθεί στη διαδικασία εκμάθησης, η να επιλεγθεί μια αυθαίρετη τιμή. Επίσης, στα ίδια σημεία δεν είναι γνωστές οι τοπικές παράγωγοι των καταστάσεων (για τις εμπρόσθιες καταστάσεις στο  $t = T$  και για τις ανάστροφες στο  $t = 1$ ) και μπορούν να θεωρηθούν ίσες με το μηδέν, υποθέτοντας ότι η πληροφορία μετά τα σημεία αυτά δεν είναι σημαντική για την τρέχουσα ενημέρωση, κάτι που ισχύει για τα συγκεκριμένα όρια [63].

Η διαδικασία εκμάθησης για το αναπτυγμένο νευρωνικό δίκτυο διπλής κατεύθυνσης μπορεί να παρουσιαστεί συνοπτικά ως εξής [63]:

- Εμπρόσθιο πέρασμα.  
Εφαρμογή όλων των δεδομένων εισόδου για ένα παράθυρο χρόνου  $1 \leq t \leq T$  στο δίκτυο BRNN και προσδιορισμός όλων των προβλεπόμενων εξόδων.  
α) Πραγματοποίηση εμπρόσθιου περάσματος μόνο για εμπρόσθιες καταστάσεις (από  $t = 1$  σε  $t = T$ ) και ανάστροφες καταστάσεις (από  $t = T$  σε  $t = 1$ ).  
β) Πραγματοποίηση ανάστροφου περάσματος για τους νευρώνες εξόδου.
- Οπίσθιο πέρασμα.  
Υπολογισμός της παραγώγου της αντικειμενικής συνάρτησης για το παράθυρο χρόνου  $1 \leq t \leq T$  το οποίο χρησιμοποιείται για το εμπρόσθιο πέρασμα.  
α) Πραγματοποίηση ανάστροφου περάσματος για τους νευρώνες εξόδου  
β) Πραγματοποίηση ανάστροφου περάσματος μόνο για τις εμπρόσθιες καταστάσεις (από  $t = T$  σε  $t = 1$ ) και τις ανάστροφες καταστάσεις (από  $t = 1$  σε  $t = T$ ).
- Ενημέρωση Βαρών.

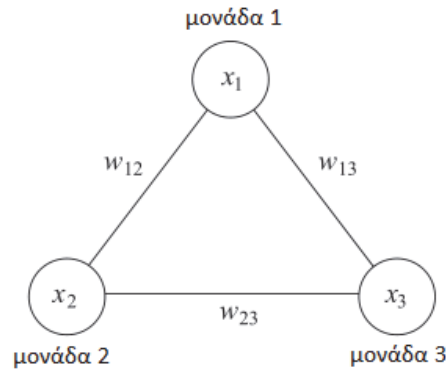
### 3.4.3.3 Δίκτυα Ανατροφοδότησης με μάθηση χωρίς επίβλεψη

#### α) Δίκτυα Hopfield

Ένα **δίκτυο Hopfield** (Hopfield 1982)[64] είναι ένα πλήρως συνδεδεμένο μοντέλο Ising με συμμετρικό πίνακα βαρών,  $W = W^T$ . Το μοντέλο Ising είναι ένα παράδειγμα Μαρκοβιανού Τυχαίου Πεδίου (Markov Random Field – MRF). Τα Μαρκοβιανά Τυχαία Πεδία είναι μοντέλα που προκύπτουν με μη κατευθυνόμενα γραφήματα. Δεν απαιτούν τον καθορισμό κατευθύνσεων στις ακμές και είναι ιδιαίτερα κατάλληλα για κάποια προβλήματα όπως η ανάλυση εικόνας (image analysis) και η χωρική στατιστική ανάλυση (spatial statistics) [64].

Οι μονάδες στα δίκτυα Hopfield είναι δυαδικές μονάδες κατωφλίου, δηλαδή μονάδες που παίρνουν δυο μόνο διαφορετικές τιμές για τις καταστάσεις τους και η τιμή τους εξαρτάται από το αν η είσοδός τους έχει υπερβεί ή όχι το κατώφλι που έχει καθοριστεί. Κάθε δυο μονάδες  $i$  και  $j$  έχουν μια σύνδεση, η οποία περιγράφεται από το βάρος  $w_{ij}$ .

Οπότε, το δίκτυο Hopfield μπορεί να περιγραφεί ως ένα πλήρες μη συνδεδεμένο γράφημα  $G = \langle V, f \rangle$ , όπου  $V$  είναι ένα σύνολο νευρώνων McCulloch-Pitts και  $f: V^2 \rightarrow R$  είναι μια συνάρτηση που συνδέει ζεύγη κόμβων  $i, j$  με μια πραγματική τιμή (το βάρος  $w_{ij}$ ). Οι συνδέσεις είναι συμμετρικές και δεν υπάρχουν βρόχοι αυτο-ανατροφοδότησης για τους κόμβους (Εικόνα 3.41)[65].



**Εικόνα 3.41:** Ένα απλό δίκτυο Hopfield με 3 κόμβους

Οι ενημερώσεις των καταστάσεων των κόμβων μπορούν να γίνουν με δυο τρόπους [66]:

- Ασύγχρονα. Μόνο μια μονάδα ενημερώνεται τη χρονική στιγμή ενημέρωσης. Η μονάδα αυτή μπορεί να επιλεγεί τυχαία, ή με βάση κάποια προκαθορισμένη σειρά.
- Συγχρονισμένα. Όλες οι μονάδες ενημερώνονται τη χρονική στιγμή ενημέρωσης. Αυτό απαιτεί την ύπαρξη κεντρικού ρολογιού στο σύστημα, για να διατηρηθεί ο συγχρονισμός. Η μέθοδος αυτή είναι λιγότερο ρεαλιστική, αφού τα βιολογικά ή τα φυσικά συστήματα δεν έχουν κάποιο κεντρικό ρολόι για συγχρονισμό.

Τα δίκτυα Hopfield έχουν μια τιμή συνδεδεμένη με κάθε κατάσταση του δικτύου, η οποία ονομάζεται «ενέργεια». Διάφορα είδη μάθησης μπορούν να χρησιμοποιηθούν, όπως η Hebbian μάθηση και η μάθηση Storkey [66].

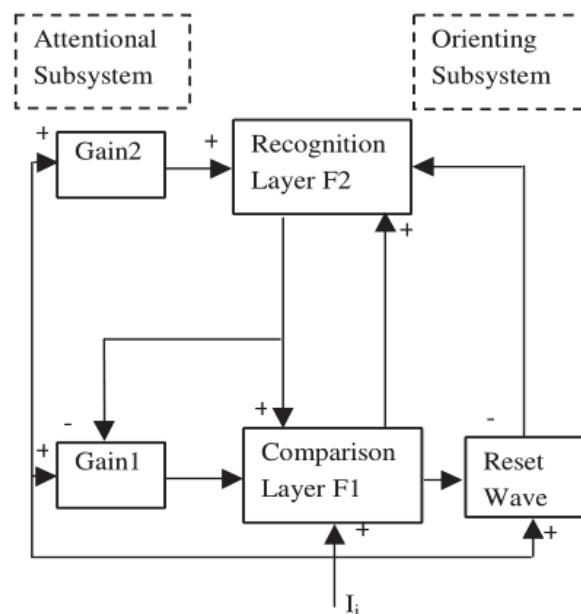
Η βασική εφαρμογή των δικτύων Hopfield είναι η συσχετιστική μνήμη (associative memory) ή μνήμη αναφοράς περιεχομένου (content addressable memory). Τα δίκτυα αυτά συγκλίνουν σε ένα τοπικό ελάχιστο, το οποίο όμως μπορεί να μην είναι το επιθυμητό. Επίσης, παρέχουν ένα μοντέλο για την κατανόηση της ανθρώπινης μνήμης. Μια μαθηματική περιγραφή των δικτύων Hopfield μπορεί να βρεθεί στο [67].

### **6) Δίκτυα ART**

**Τα Νευρωνικά Δίκτυα Adaptive Resonance Theory (ART)** προτάθηκαν από τον Grossberg το 1976 για να αντιμετωπίσουν το δίλημμα πλαστικότητας –σταθερότητας (stability – plasticity dilemma) [68],[69]. Το δίλημμα αυτό περιγράφει τη γενικότερη

δυσκολία που υπάρχει για κάθε ταξινομητή να διαχωρίζει μεταξύ των δυο μορφών νέας γνώσης: τη νέα γνώση που ταιριάζει στην υπάρχουσα δομή του ταξινομητή και στη νέα γνώση που δεν ταιριάζει σε αυτή. Η πρώτη μορφή γνώσης απαιτεί ένα συγκεκριμένο είδος ευελιξίας από τον ταξινομητή, για παράδειγμα προσαρμοστικότητα κάποιων συντελεστών (βάρη του νευρωνικού δικτύου) ενώ η δεύτερη μορφή γνώσης επιβάλλει προσαρμοστικότητα όχι μόνο στα βάρη, αλλά και στη δομή του ταξινομητή.

Συγκεκριμένα, ο αλγόριθμος ART1 είναι ένα μοντέλο εκμάθησης ειδικά σχεδιασμένο για αναγνώριση δυαδικών προτύπων. Αποτελείται από ένα υποσύστημα προσοχής (attentional subsystem) και ένα υποσύστημα προσανατολισμού (orienting subsystem), όπως φαίνεται στην Εικόνα 3.42 [70]:



Εικόνα 3.42: Δομή Μοντέλου ART1

Επίσης, το σύστημα περιέχει μια παράμετρο εγρήγορσης (vigilance parameter) και μια μονάδα επανεκκίνησης (reset module). Η παράμετρος εγρήγορσης επηρεάζει ιδιαίτερα το σύστημα καθώς υψηλότερη τιμή της παραμέτρου παράγει αναμνήσεις μεγαλύτερης λεπτομέρειας (περισσότερο λεπτομερείς κατηγορίες) ενώ χαμηλότερες τιμές έχουν ως αποτέλεσμα περισσότερο γενική μνήμη. Το υποσύστημα προσοχής περιέχει δυο ανταγωνιστικά δίκτυα, το πεδίο σύγκρισης επιπέδου F1 και το πεδίο αναγνώρισης επιπέδου F2, με δυο ρυθμίσεις για τα κέρδη τα Gain1 και Gain2, τα οποία βοηθούν στη διάκριση των διαφορετικών σταδίων κατά την λειτουργία του αλγορίθμου. Επίσης υπάρχουν δυο στάδια βραχυχρόνιας μνήμης (STM –Short Term Memory), F1 και F2.

Το επίπεδο σύγκρισης λαμβάνει τη δυαδική εξωτερική είσοδο και την προωθεί στο επίπεδο αναγνώρισης, το οποίο θα πρέπει να την αντιστοιχίσει σε κάποια κατηγορία. Το αποτέλεσμα αυτό επιστρέφεται πίσω στο επίπεδο σύγκρισης για να διαπιστωθεί κατά πόσο η κατηγορία που επιλέχθηκε συμπίπτει με την πραγματική κατηγορία του διανύσματος εισόδου. Εάν θεωρηθεί ότι δεν έγινε σωστή πρόβλεψη, το σύστημα προσανατολισμού

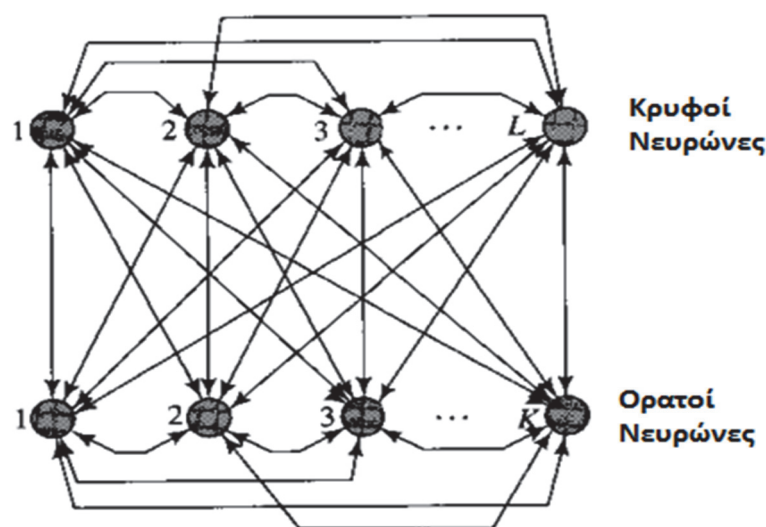
ακυρώνει την προηγούμενη κατηγορία και αναζητεί μια νέα κατηγορία στο επίπεδο αναγνώρισης. Οι ρυθμίσεις των κερδών ελέγχουν τη δραστηριότητα του επιπέδου αναγνώρισης και του επιπέδου σύγκρισης [70].

Τα δίκτυα ART χρησιμοποιούν μεθόδους μη επιβλεπόμενης μάθησης. Για παράδειγμα, οι αλγόριθμοι ART-1, ART-2, ART-2a, ART-3 και FuzzyART είναι τεχνικές για ομαδοποίηση  $n$  διανυσμάτων  $X$  (η διάσταση είναι  $n \times m$ ) μήκους  $m$  σε  $c$  ομάδες. Οι διαφορές για τις πρώτες τέσσερις τεχνικές ART που αναφέρθηκαν αφορούν τον τύπο των δεδομένων εισόδου (δυαδικά δεδομένα, πραγματικοί αριθμοί), την προεπεξεργασία των δεδομένων (είδος κλιμάκωσης δεδομένων, τύπος συνάρτησης μεταφοράς), την ταχύτητα εκπαίδευσης και το είδος του κριτηρίου ομοιότητας που χρησιμοποιείται (βασισμένο σε Ευκλείδεια γωνία ή βασισμένο σε θεωρία ασαφών συνόλων). Οι ομάδες  $l = 1 \dots c$  παράγονται κατά τη διαδικασία εκπαίδευσης και περιγράφονται από  $l = 1 \dots c$  διαφορετικά διανύσματα  $w$  (διάστασης  $1 \times m$ ), τα οποία σχηματίζουν τον πίνακα βαρών  $W$  διάστασης  $c \times m$  [71].

### 3.4.3.4 Εξειδικευμένες κατηγορίες Νευρωνικών Δικτύων

#### α) Μηχανή Boltzmann

Η **Μηχανή Boltzmann (Boltzmann Machine - BM)** είναι μια στοχαστική μηχανή που αποτελείται από στοχαστικούς νευρώνες. Όπως έχει αναφερθεί στην ενότητα 3.4.2.1.γ, ο στοχαστικός νευρώνας μπορεί να βρίσκεται με κάποια πιθανότητα σε μια εκ των δυο διαθέσιμων καταστάσεων, οι οποίες συμβολίζονται με +1 και -1 ή 1 και 0.



Εικόνα 3.43: Μηχανή Boltzmann με  $L$  κρυφούς και  $K$  ορατούς Νευρώνες

Ένα άλλο χαρακτηριστικό της Μηχανής Boltzmann είναι οι συμμετρικές συνδέσεις μεταξύ των νευρώνων. Η συγκεκριμένη δομή του δικτύου προκύπτει από ιδέες που προέρχονται από την Στατιστική Φυσική [46].

Όπως φαίνεται στην Εικόνα 3.43, οι στοχαστικοί νευρώνες χωρίζονται σε δύο ομάδες, τους ορατούς και τους κρυφούς. Οι ορατοί νευρώνες παρέχουν μια διεπαφή μεταξύ του δικτύου και του περιβάλλοντος λειτουργίας. Κατά τη διαδικασία εκπαίδευσης, στους ορατούς νευρώνες επιβάλλονται συγκεκριμένες καταστάσεις που προέρχονται από το περιβάλλον, ενώ οι κρυφοί νευρώνες πάντοτε λειτουργούν ελεύθερα και χρησιμοποιούνται για να εξηγήσουν διάφορους περιορισμούς που ενδεχομένως υπάρχουν στα διανύσματα εισόδου που προέρχονται από το περιβάλλον. Αυτή τη λειτουργία επιτυγχάνεται από τους κρυφούς νευρώνες με τη σύλληψη υψηλής τάξης στατιστικών συσχετίσεων μεταξύ των επιβαλλόμενων διανυσμάτων εισόδου.

Ο βασικός στόχος της μάθησης Boltzmann είναι να παράγει ένα νευρωνικό δίκτυο το οποίο θα μοντελοποιεί σωστά τα δεδομένα εισόδου, χρησιμοποιώντας κατανομή Boltzmann. Κατά την εφαρμογή αυτού του είδους της μάθησης, γίνονται δυο υποθέσεις [46]:

- Κάθε διάνυσμα εισόδου προερχόμενο από το περιβάλλον παραμένει αρκετό χρόνο ώστε να επιτρέψει στο δίκτυο να φθάσει σε «θερμική ισορροπία».
- Δεν υπάρχει κάποια δομή στη σειρά με την οποία τα διανύσματα εισόδου επιβάλλονται στους ορατούς νευρώνες του δικτύου.

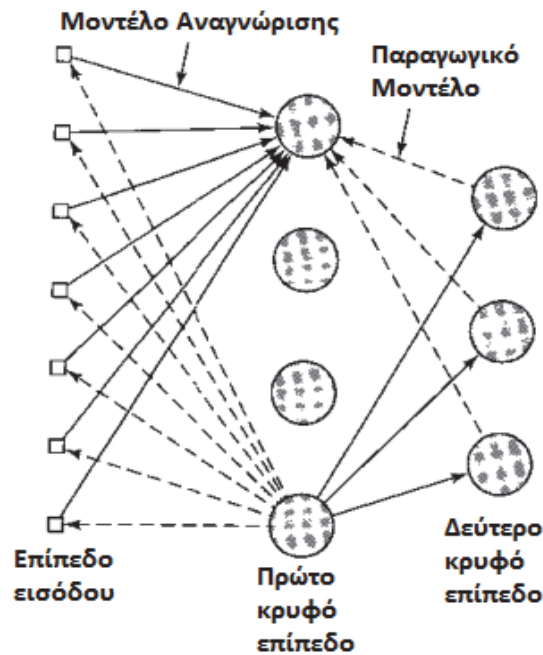
Ένα συγκεκριμένο σύνολο συναπτικών βαρών σχηματίζει τέλειο μοντέλο του περιβάλλοντος εάν οδηγεί σε ακριβώς ίδια κατανομή πιθανότητας των καταστάσεων των ορατών μονάδων (όταν το δίκτυο λειτουργεί ελεύθερα) με την κατανομή πιθανότητας των καταστάσεων όταν στις ορατές μονάδες έχουν επιβληθεί διανύσματα εισόδου από το περιβάλλον. Σε γενικές γραμμές, αν ο αριθμός των κρυφών μονάδων δεν είναι εκθετικά μεγαλύτερος από τον αριθμό των ορατών μονάδων είναι αδύνατο να επιτευχθεί το τέλειο μοντέλο. Αν το περιβάλλον έχει κανονική δομή και το δίκτυο χρησιμοποιήσει τους κρυφούς νευρώνες ώστε να συλλάβει τις κανονικότητες αυτές, τότε μπορεί να πετύχει ένα υψηλό βαθμό ομοιότητας με τη συμπεριφορά του περιβάλλοντος με χρήση διαχειρίσιμου πλήθους κρυφών νευρώνων.

Οι Μηχανές Boltzmann μπορούν να χρησιμοποιηθούν για συμπλήρωση ελλιπών προτύπων (pattern completion). Πιο συγκεκριμένα, όταν ένα διάνυσμα που φέρει ελλιπή πληροφορία επιβάλλεται σε ένα υποσύνολο των ορατών νευρώνων, το δίκτυο συμπληρώνει τους υπόλοιπους ορατούς νευρώνες, εάν έχει μάθει σωστά την κατανομή πιθανότητας κατά τη διαδικασία μάθησης [46].



### β) Μηχανή Helmholtz

Η **Μηχανή Helmholtz**, η οποία προτάθηκε από τους Dayan et al. (1995)[46] και Hinton et al. (1995)[46] παρέχει μια αρχιτεκτονική πολλών επιπέδων για την αναπαράσταση και εκμάθηση υψηλής τάξης στατιστικών συσχετίσεων μεταξύ των εισόδων. Το δίκτυο αυτό χρησιμοποιεί δυο εντελώς διαφορετικά σύνολα συνδέσεων, όπως φαίνεται στην Εικόνα 3.44 [46]:



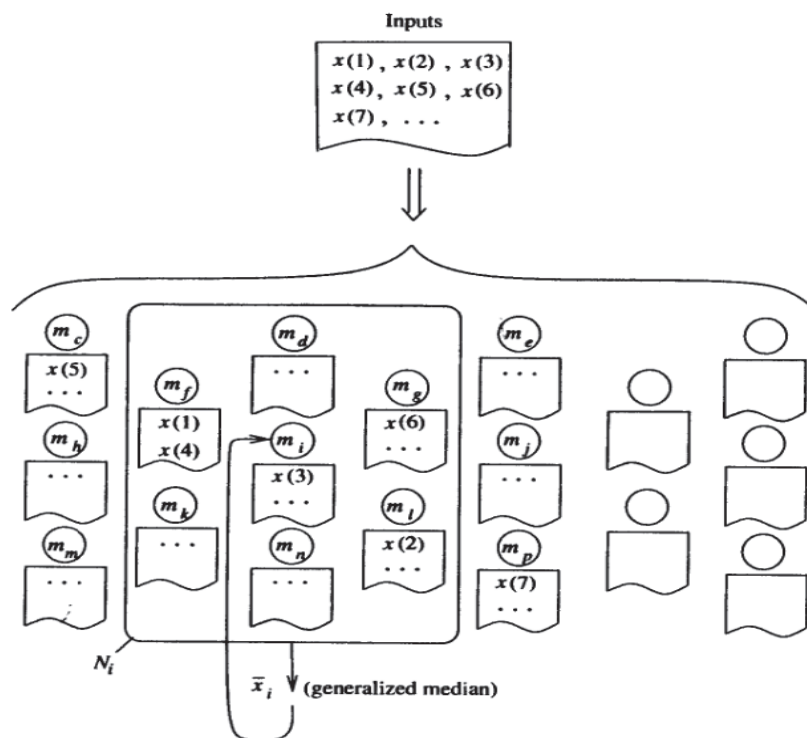
**Εικόνα 3.44:** Αρχιτεκτονική Μηχανής Helmholtz

Οι εμπρόσθιες συνδέσεις, οι οποίες φαίνονται ως συνεχείς γραμμές στην Εικόνα 3.44, σχηματίζουν το μοντέλο αναγνώρισης (recognition model). Ο σκοπός του μοντέλου αυτού είναι να εξαγάγει μια κατανομή πιθανότητας από τα διανύσματα εισόδου. Οι ανάστροφες συνδέσεις, οι οποίες φαίνονται ως διακεκομμένες γραμμές στην Εικόνα 3.44 σχηματίζουν το παραγωγικό μοντέλο (generative model), το οποίο ανακατασκευάζει μια εκτίμηση του αρχικού διανύσματος εισόδου από τις αναπαραστάσεις που έχουν συλλάβει τα κρυφά επίπεδα του δικτύου, δίνοντάς του τη δυνατότητα να λειτουργεί με ένα τρόπο αυτό-επίβλεψης (self-supervised). Τα δύο αυτά μοντέλα λειτουργούν αυστηρά με εμπρόσθια τροφοδότηση, και αλληλεπιδρούν μεταξύ τους μέσω της διαδικασίας μάθησης [46].

### γ) Αυτο-οργανούμενος χάρτης Kohonen

Ο αυτο-οργανούμενος χάρτης Kohonen (Self-Organizing Map - SOM), ο οποίος προτάθηκε από τον Kohonen (1982)[72], είναι μια μη γραμμική, διατεταγμένη, ομαλή αντιστοίχιση των δεδομένων πολλών διαστάσεων σε στοιχεία ενός κανονικού πίνακα χαμηλότερης διάστασης. Η αντιστοίχιση αυτή θυμίζει την μέθοδο κβαντοποίησης διανυσμάτων (vector quantization). Έστω ένα σύνολο μεταβλητών εισόδου  $\{\xi_j\}$  το οποίο ορίζεται ως ένα πραγματικό διάνυσμα  $x = [\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n]^T \in \mathbb{R}^n$ . Σε κάθε στοιχείο του πίνακα SOM αντιστοιχίζεται ένα παραμετρικό πραγματικό διάνυσμα  $m_i = [\mu_{i1}, \mu_{i2}, \dots, \mu_{in}]^T \in \mathbb{R}^n$ , το οποίο ονομάζεται μοντέλο. Υποθέτοντας ότι υπάρχει ένα γενικό μέτρο απόστασης μεταξύ των  $x$  και  $m_i$  το οποίο συμβολίζεται ως  $d(x, m_i)$ , η εικόνα ενός διανύσματος εισόδου  $x$  στον πίνακα SOM ορίζεται ως το στοιχείο  $m_c$  του πίνακα, το οποίο ταιριάζει καλύτερα με το  $x$ , δηλαδή έχει τον δείκτη (Εικόνα 3.45, 3.46, 3.47) [46], [72], [73]:

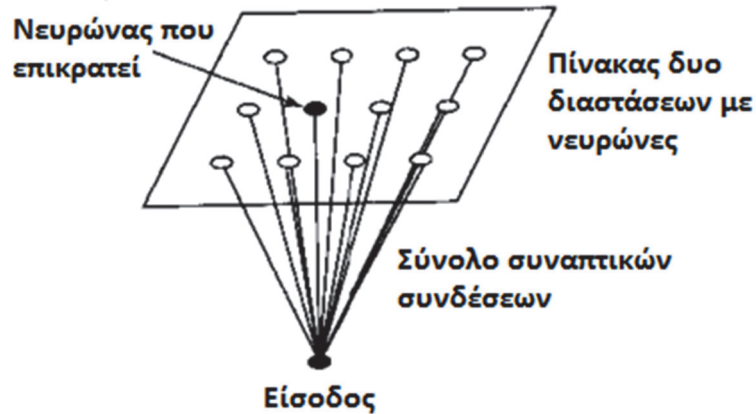
$$c = \arg \min_i \{d(x, m_i)\} \quad (3.110)$$



**Εικόνα 3.45:** Τα δείγματα εισόδου κατανέμονται σε υπο-λίστες στα μοντέλα που ταιριάζουν καλύτερα και στη συνέχεια τα καινούργια μοντέλα προσδιορίζονται ως γενικευμένοι μέσοι (generalized medians) των υπο-λιστών στις γειτονιές  $N_i$

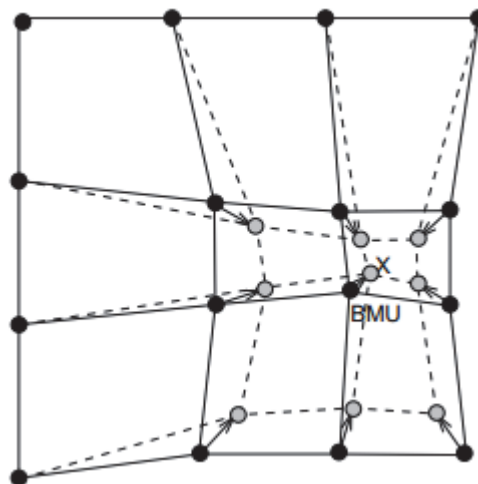
Ο αυτο-οργανούμενος χάρτης Kohonen αποτελείται από ένα σύνολο στοιχείων τα οποία ονομάζονται κόμβοι ή νευρώνες. Κάθε κόμβος σχετίζεται με ένα διάνυσμα βάρους, το οποίο είναι της ίδιας διάστασης με τα διανύσματα εισόδου, και με μια θέση στον

διανυσματικό χώρο αντιστοίχισης. Όπως τα περισσότερα νευρωνικά δίκτυα, ο χάρτης SOM λειτουργεί σε δυο καταστάσεις: κατάσταση εκπαίδευσης και κατάσταση αντιστοίχισης. Στην κατάσταση εκπαίδευσης ο χάρτης κατασκευάζεται χρησιμοποιώντας δείγματα εισόδου ενώ η κατάσταση αντιστοίχισης αυτόματα ταξινομεί ένα νέο διάνυσμα εισόδου.



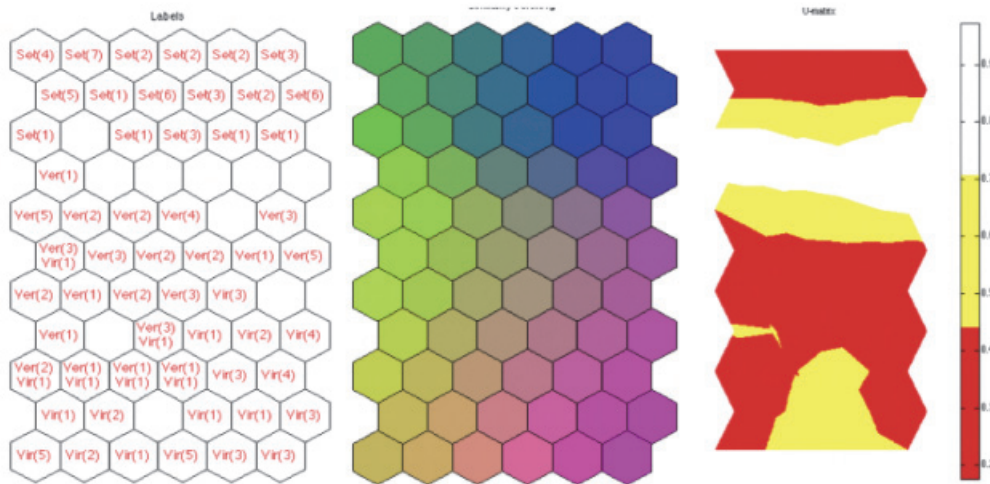
**Εικόνα 3.46:** Αυτο-οργανούμενος χάρτης Kohonen

Ο χάρτης SOM είναι ένα αποδοτικό εργαλείο για την οπτικοποίηση δεδομένων πολλών διαστάσεων. Στη βασική του μορφή, παράγει ένα γράφημα ομοιότητας για τα δεδομένα εισόδου. Μετατρέπει τις μη γραμμικές στατιστικές σχέσεις μεταξύ των δεδομένων πολλών διαστάσεων σε απλές γεωμετρικές σχέσεις των σημείων που αντιπροσωπεύουν τα δεδομένα αυτά σε μια χαμηλότερων διαστάσεων εικόνα, η οποία είναι συνήθως ένα εξαγωνικό ή ορθογώνιο πλέγμα κόμβων δυο διαστάσεων. Επομένως, το μοντέλο SOM συμπιέζει την διαθέσιμη πληροφορία αλλά διατηρεί τις πιο σημαντικές τοπολογικές ή μετρικές σχέσεις των βασικών στοιχείων των δεδομένων στην εικόνα και παράγει κάποιου είδους αφαιρέσεις για τα δεδομένα. Η οπτικοποίηση και η αφαίρεση που παρέχεται από το μοντέλο μπορεί να χρησιμοποιηθεί με διάφορους τρόπους σε πολύπλοκα προβλήματα όπως ανάλυση διεργασιών, αντίληψη μηχανής, έλεγχος και επικοινωνίες [72].



**Εικόνα 3.47:** Ενμέρωση της μονάδας που ταιριάζει καλύτερα (Best Matching Unit - BMU) και των γειτόνων της προς το δείγμα εισόδου που έχει σημειωθεί με x.

Υπάρχουν διάφορες τεχνικές οπτικοποίησης των αποτελεσμάτων της μεθόδου, όπως είναι εισαγωγή ετικετών κατηγορίας για κάθε κόμβο (SOM Labeling), το ιστόγραμμα επιτυχιών (hit histogram), το οποίο δείχνει την κατανομή του συνόλου δεδομένων στο χάρτη, ο πίνακας-U (U-matrix) που δείχνει τις αποστάσεις μεταξύ των γειτονικών μονάδων (οπτικοποιεί την δομή των ομάδων), ο χρωματισμός ομοιομορφίας (similarity coloring), όπου χρησιμοποιείται χρωματικός κώδικας για τις όμοιες μονάδες του χάρτη, τα επίπεδα συνιστωσών (Component Planes) όπου παρουσιάζονται οι τιμές των μοντέλων για κάθε χαρακτηριστικό, το διάγραμμα σχετικής σημαντικότητας κάθε χαρακτηριστικού σε κάθε μονάδα του χάρτη, η ακρίβεια ομαδοποίησης και οι τροχιές των δεδομένων στον χάρτη σε περίπτωση που υπάρχει διάταξη στα δεδομένα [74].

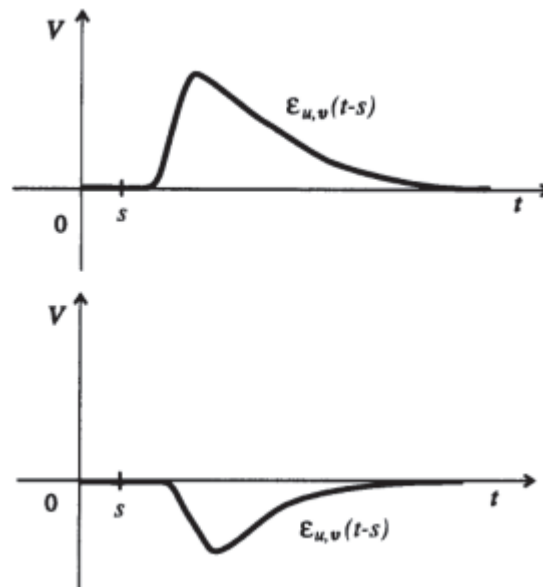


**Εικόνα 3.48:** Οπτικοποίηση αποτελεσμάτων: Παράδειγμα χρήσης ετικετών και χρωματικού κώδικα

### δ) Spiking και Pulse-Coupled Νευρωνικά Δίκτυα

Τα **Spiking Neural Networks (SNNs)** αποτελούν την τρίτη γενιά νευρωνικών δικτύων, καθώς έχουν προχωρήσει ακόμη περισσότερο στην προσομοίωση της λειτουργίας του εγκεφάλου. Αυτή η κατηγορία νευρωνικών δικτύων περιέχει νευρώνες, οι οποίοι ακολουθούν τη μέχρι τώρα γνωστή συμπεριφορά των βιολογικών νευρώνων και την ανταλλαγή παλμικών σημάτων μεταξύ τους. Τα μαθηματικά μοντέλα της τρίτης γενιάς μοντέλων δεν μπορούν να περιγράψουν εξ ολοκλήρου τη συμπεριφορά του βιολογικού νευρώνα αλλά εν τούτοις είναι περισσότερο ρεαλιστικά από τα προγενέστερα μοντέλα, διότι περιγράφουν καλύτερα την έξοδο του νευρώνα επομένως δίνουν τη δυνατότητα εκμετάλλευσης του χρόνου ως πόρου επικοινωνίας και υπολογισμών. Στα συγκεκριμένα μοντέλα νευρώνων, ο χρόνος και τα θέματα συγχρονισμού των σημάτων έχουν ιδιαίτερη σημασία για τους υπολογισμούς. Η έξοδος ενός spiking νευρώνα  $v$  αποτελείται από το σύνολο  $F_v \subseteq \mathbb{R}^+$  σημείων στο χρόνο, όταν ο  $v$  ενεργοποιείται ( $\mathbb{R}^+ = \{x \in \mathbb{R}: x \geq 0\}$ ) [75].

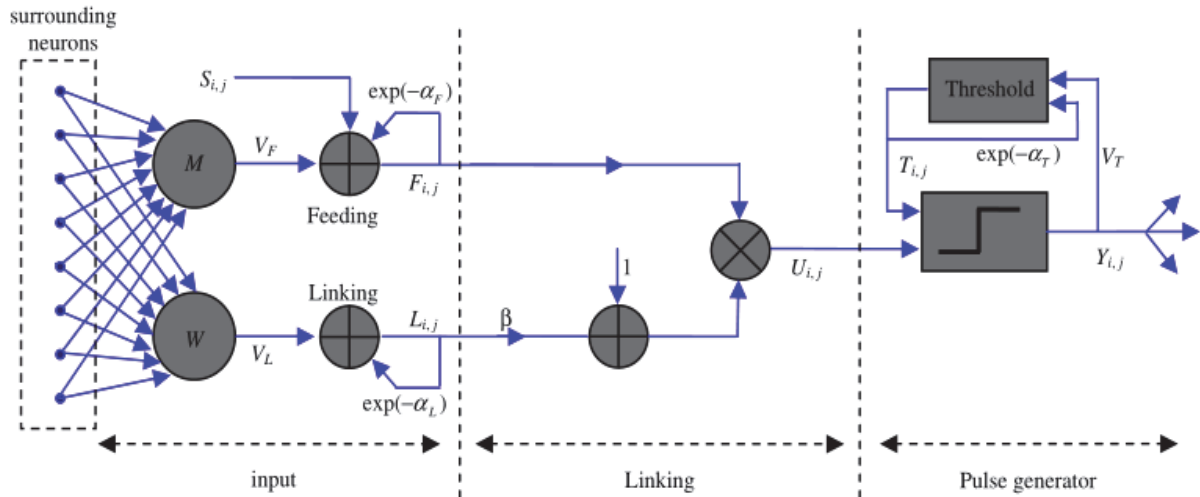
Το απλούστερο μοντέλο ενός spiking νευρώνα υποθέτει ότι ένας νευρώνας  $v$  ενεργοποιείται όταν «το δυναμικό»  $P_v$  (το οποίο μοντελοποιεί το δυναμικό της ηλεκτρικής μεμβράνης στην ζώνη ενεργοποίησης του νευρώνα  $v$ ) φθάνει ένα συγκεκριμένο κατώφλι  $\theta_v$ . Το δυναμικό  $P_v$  είναι το άθροισμα των διεγερτικών μετα-συναπτικών δυναμικών (excitatory postsynaptic potentials - EPSPs) και των αποτρεπτικών μετα-συναπτικών δυναμικών (inhibitory postsynaptic potentials - IPSPs), τα οποία προκύπτουν από την ενεργοποίηση διαφορετικών νευρώνων  $u$ , οι οποίοι είναι συνδεδεμένοι με τον νευρώνα  $v$ . Οι συναρτήσεις απόκρισης EPSP και IPSP παρουσιάζονται στην Εικόνα 3.49 [75]:



**Εικόνα 3.49:** Τυπικά σχήματα συναρτήσεων απόκρισης (EPSP και IPSP) βιολογικού νευρώνα

Έχουν αναπτυχθεί διάφορα μοντέλα για τους spiking νευρώνες και για τα νευρωνικά δίκτυα SNN. Κάποια από τα είναι το μοντέλο Hodgkin–Huxley’s (Hodgkin & Huxley, 1952)[76], τα μοντέλα Spike Response από τους Gerstner(1995)[76], Gerstner & Kistler (2002)[76], το μοντέλο Izhikevich (Izhikevich, 2004, 2007; Izhikevich & Edelman, 2008)[76], το Μοντέλο Νευρώνα Φλοιού (Cortical Neuron Model), (Erisir et al., 1999)[77]. Τα μοντέλα αυτά είναι ντετερμινιστικά και παρόλο που έχουν χρησιμοποιηθεί για να μοντελοποιήσουν βιολογικούς νευρώνες, έχουν περιορισμένη δυνατότητα εφαρμογής σε σύνθετα προβλήματα που καλούνται να αντιμετωπίσουν οι μηχανικοί. Εκτός από τα ντετερμινιστικά μοντέλα, υπάρχουν και στοχαστικά μοντέλα για τα συγκεκριμένα είδη νευρώνων [76],[77].

Τα **Pulse-Coupled Νευρωνικά Δίκτυα (PCNNs)** αποτελούν μια κατηγορία Spiking νευρωνικών δικτύων και χρησιμοποιούν το μοντέλο Νευρώνα Φλοιού (Cortical Neuron Model). Είναι δίκτυα ενός επιπέδου, δυο διαστάσεων, πλευρικής συνδεδεμένα και αποτελούνται από pulse-coupled νευρώνες, οι οποίοι συνδέονται με τα pixels μια εικόνας. Η δομή ενός pulse-coupled νευρώνα παρουσιάζεται στην Εικόνα 3.50 [78]. Ο Νευρώνας λαμβάνει τα σήματα εισόδου από την είσοδο διασύνδεσης(linking) και την είσοδο τροφοδότησης (feeding). Η είσοδος τροφοδότησης είναι η βασική είσοδος για την δεκτική περιοχή του νευρώνα, η οποία αποτελείται από τα γειτονικά pixels του pixel με το οποίο είναι συνδεδεμένος ο νευρώνας στην εικόνα εισόδου. Η είσοδος διασύνδεσης είναι η δευτερεύουσα είσοδος των πλευρικών συνδέσεων με γειτονικούς νευρώνες. Η διαφορά μεταξύ αυτών των εισόδων είναι ότι οι συνδέσεις τροφοδότησης έχουν αργότερη σταθερά χρόνου απόκρισης από τις συνδέσεις διασύνδεσης.



**Εικόνα 3.50:** Μοντέλο Νευρώνα Συνδυασμένου Παλμού (PCNN)

Το βασικό μοντέλο PCNN περιγράφεται ως επαναληπτική διαδικασία των παρακάτω εξισώσεων [78]:

$$F_{i,j}[n] = e^{-a_F} F_{i,j}[n-1] + V_F \sum_{k,l} w_{i,j,k,l} Y_{i,j}[n-1] + S_{i,j} \quad (3.111)$$

$$L_{i,j}[n] = e^{-a_L} L_{i,j}[n-1] + V_L \sum_{k,l} w_{i,j,k,l} Y_{i,j}[n-1] \quad (3.112)$$

$$U_{i,j}[n] = F_{i,j}[n](1 + \beta L_{i,j}[n]) \quad (3.113)$$

$$Y_{i,j}[n] = \begin{cases} 1 & U_{i,j}[n] > T_{i,j}[n] \\ 0 & \text{διαφορετικά} \end{cases} \quad (3.114)$$

$$T_{i,j}[n] = e^{-a_T} T_{i,j}[n-1] + V_T Y_{i,j}[n] \quad (3.115)$$

Τα Νευρωνικά Δίκτυα PCNN χρησιμοποιούνται σε εφαρμογές επεξεργασίας εικόνας, όπως για παράδειγμα υψηλής απόδοσης βιομετρική επεξεργασία εικόνων. Πιο συγκεκριμένα μπορούν να επιτελέσουν λειτουργίες κατάτμησης εικόνας, αφαίρεσης θορύβου, ανίχνευσης αντικειμένων και ακμών, εξαγωγή χαρακτηριστικών και ανίχνευση προτύπων, δημιουργίας χρονικής υπογραφής (time signature), υπολογισμού ακολουθίας εντροπίας εικόνας, βελτίωσης ποιότητας εικόνας, συγχώνευσης εικόνας. Επίσης τα δίκτυα αυτά βρίσκουν εφαρμογές σε προβλήματα βελτιστοποίησης διαδρομής (path optimization) και αναγνώρισης φωνής [78].

### **ε) Συσχετιστικές Μνήμες**

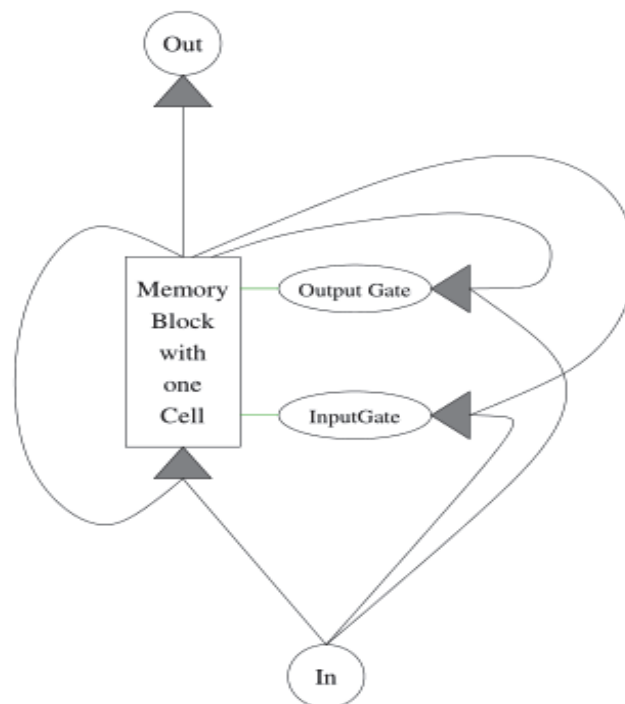
**Οι συσχετιστικές μνήμες (Associative Memories)** αναφέρονται κυρίως στη διαδικασία αναγνώρισης κάποιου προτύπου, έχοντας ως είσοδο μια θορυβώδης μορφή του προτύπου αυτού. **Οι αυτο-συσχετιστικές μνήμες (Autoassociative Memories)** έχουν τη δυνατότητα αναγνώρισης προτύπων, με είσοδο μια ελλιπή μορφή των προτύπων αυτών, οπότε μπορούν να πραγματοποιούν συμπλήρωση ελλιπών προτύπων (pattern completion). Παρακάτω αναφέρονται κάποιες από τις διαθέσιμες κατηγορίες συσχετιστικής μνήμης που έχουν αναπτυχθεί.

**Τα Νευρωνικά Δίκτυα Μακράς Βραχυχρόνιας μνήμης (Long Short Term Memory - LSTM)**, τα οποία προτάθηκαν από τους Hochreiter & Schmidhuber (1997)[79], αποτελούν μια αρχιτεκτονική νευρωνικού δικτύου με ανατροφοδότηση, η οποία συνδυάζει την γρήγορη εκπαίδευση με την αποδοτική μάθηση ενεργειών που απαιτούν ακολουθιακή βραχυχρόνια μνήμη για πολλά χρονικά βήματα. Το μοντέλο αυτό στη συνέχεια βελτιώθηκε με πύλες λήθης (forget gates) (Gers & Cummins, 2000)[79] και συνδέσεις reephole (reephole connections) (Gers & Schmidhuber, 2000)[79].

Παρόλα αυτά, η χρησιμότητα των δικτύων αυτών είναι περιορισμένη καθώς μπορεί να εκπαιδευτεί μόνο ένα μικρό σύνολο νευρωνικών δικτύων ανατροφοδότησης δεύτερης τάξης. **Τα νευρωνικά δίκτυα δεύτερης τάξης (second-order neural networks)** επιτρέπουν συνδέσεις δεύτερης τάξης, δηλαδή συνδέσεις με βάρη από δυο μονάδες αποστολής σε μια μονάδα λήψης, όπου το σήμα που λαμβάνεται εξαρτάται από το γινόμενο της δραστηριότητας μεταξύ των μονάδων αποστολής και από το βάρος της σύνδεσης. Όταν τα δίκτυα LSTM περιγράφονται ως προς τις πύλες σύνδεσης, οι μονάδες που λειτουργούν ως πύλες δρουν ως επιπλέον μονάδες αποστολής για τις συνδέσεις δεύτερης τάξης.

**Τα νευρωνικά δίκτυα LSTM** διαθέτουν ένα επίπεδο εισόδου, ένα κρυφό επίπεδο το οποίο αποτελείται από συνδεσμολογίες μπλοκ μνήμης και ένα επίπεδο εξόδου, όπως φαίνεται στην Εικόνα 3.51 [80]. Κάθε μπλοκ μνήμης αποτελείται από μονάδες μνήμης οι οποίες διατηρούν την κατάστασή τους για έναν αριθμό χρονικών βημάτων και από τρεις διαφορετικούς τύπους μονάδων πύλης (gate units), οι οποίες μαθαίνουν να προστατεύουν,

να χρησιμοποιούν και να καταστρέφουν τις καταστάσεις των μονάδων μνήμης ανάλογα με την περίπτωση [79].



**Εικόνα 3.51:** Δίκτυο LSTM με μπλοκ μνήμης στο κρυφό επίπεδο (φαίνεται μόνο ένα μπλοκ στην εικόνα)

Ο αλγόριθμος εκπαίδευσης των LSTM δικτύων μεταδίδει ανάστροφα τα σφάλματα από τις μονάδες εξόδου προς τα μπλοκ μνήμης, ρυθμίζοντας τις εισερχόμενες συνδέσεις όλων των μονάδων στα μπλοκ, αλλά στη συνέχεια τα σφάλματα που έχουν μεταδοθεί ανάστροφα περικόπτονται. Επομένως ο αλγόριθμος LSTM δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί αποτελεσματικά για να εκπαιδεύσει δίκτυα δεύτερης τάξης με μονάδες τοποθετημένες ανάμεσα στα μπλοκ μνήμης και στο επίπεδο εισόδου. Επειδή η μετάδοση του σφάλματος και η ενημέρωση των βαρών εξαρτώνται από την συγκεκριμένη αρχιτεκτονική του δικτύου, ο αλγόριθμος αυτός δεν μπορεί να γενικευθεί για αυθαίρετα δίκτυα ανατροφοδότησης δεύτερης τάξης [79].

Ένα διαφορετικό μοντέλο συσχετιστικής μνήμης είναι η **Ολογραφική Συσχετιστική Μνήμη (Holographic Associative Memory)**, η οποία προτάθηκε από τον Sutherland (1990)[81]. Η μνήμη αυτή πέτυχε αρκετά μεγάλη βελτίωση στη μνήμη και στη χωρητικότητα με διάφορα πειράματα να δείχνουν αύξηση της ταχύτητας κατά ένα παράγοντα 10 με 100 σε σύγκριση με άλλα μοντέλα. Πολλαπλές συσχετίσεις δεδομένων με σχεδόν αυθαίρετη πολυπλοκότητα, χωρίς να εμποδίζονται από το πρόβλημα του γραμμικού διαχωρισμού των



δεδομένων, μπορούν να πραγματοποιηθούν με τη χρήση Ολογραφικής Συσχετιστικής Μνήμης. Η μνήμη αυτή λειτουργεί στο πεδίο των μιγαδικών αριθμών, οπότε μπορεί να θεωρηθεί ως ένα Νευρωνικό Δίκτυο με μιγαδικές τιμές, το οποίο λειτουργεί σε τρεις διαστάσεις. Οι δυο πρώτες διαστάσεις συμπεριλαμβάνουν τα πρότυπα διέγερσης και απόκρισης ενώ η τρίτη διάσταση αναπαριστά τα bits που χρειάζονται για να αποθηκευτεί κάθε στοιχείο συσχέτισης [81].

Ένα άλλο μοντέλο συσχετιστικής μνήμης είναι η **Αραιά Κατανεμημένη Συσχετιστική Μνήμη (Sparse Distributed Associative Memory - SDM)**, η οποία προτάθηκε από τον Kanerva (1988)[82]. Η βασική ιδέα του μοντέλου αυτού είναι ότι οι αποστάσεις μεταξύ των εννοιών στον ανθρώπινο εγκέφαλο αντιστοιχούν σε αποστάσεις μεταξύ σημείων ενός υψηλών διαστάσεων διανυσματικού χώρου. Οι διαστάσεις των χώρων που θεωρεί το μοντέλο είναι της τάξης των εκατοντάδων διαστάσεων.

Αν μια έννοια, ένα πρότυπο, μια εμπειρία ή ένα τμήμα πληροφορίας σε μια μνήμη αναπαρίσταται από ένα διάνυσμα υψηλών διαστάσεων, η αναπαράσταση δεν είναι ανάγκη να είναι ακριβής. Αυτό προκύπτει από την κατανομή των σημείων σε ένα υψηλών διαστάσεων διανυσματικό χώρο, αφού κάθε σημείο στο χώρο που ενδεχομένως να είναι σημείο ενδιαφέροντος απέχει πολύ από τα υπόλοιπα σημεία ενδιαφέροντος. Επομένως, μπορεί να υπάρξει αρκετή απόκλιση στην αναπαράσταση ενός σημείου, χωρίς σύγχυση με άλλα σημεία ενδιαφέροντος. Για το λόγο αυτό τα διανύσματα υψηλών διαστάσεων είναι ανεκτά στα σφάλματα και εύρωστα. Αυτός ο τρόπος λειτουργίας αντικατοπτρίζει την λειτουργία του εγκεφάλου των ζώων και του ανθρώπου. Τα σήματα που λαμβάνει ο εγκέφαλος δεν είναι ποτέ ακριβώς ίδια, όμως η ταυτοποίηση και αναγνώριση αντικειμένων είναι δυνατή [82].

Μια άλλη ιδιότητα των διανυσματικών χώρων υψηλών διαστάσεων έχει να κάνει με την απόσταση μεταξύ των σημείων. Αν θεωρηθούν τυχαία δυο σημεία ενδιαφέροντος, θα είναι σχετικά μακριά μεταξύ τους, κατά μέσο όρο, οπότε είναι ασυσχέτιστα. Παρόλα αυτά, υπάρχουν πολλά σημεία μεταξύ τους που είναι κοντά και στα δυο σημεία ενδιαφέροντος, υπό την έννοια ότι ο χώρος, που περικλείεται σε μια υπερ-σφαίρα γύρω από ένα ενδιαμέσο σημείο η οποία περιέχει και τα δυο σημεία ενδιαφέροντος, είναι πολύ μικρός. Αυτό εξηγεί τη σχετική ευκολία με την οποία μπορεί να βρεθεί μια έννοια που σχετίζεται με τις δυο ασυσχέτιστες έννοιες.

Ένας μαθηματικός χώρος δεν είναι απαραίτητο να είναι ένας διανυσματικός χώρος υψηλών διαστάσεων για να έχει τις παραπάνω επιθυμητές ιδιότητες. Χρειάζεται να είναι ένας τεράστιος χώρος με κατάλληλη μετρική ομοιότητας για ζεύγη σημείων, χωρίς η μετρική αυτή να πρέπει να ορίσει κάποιο μέτρο στο χώρο. Οι σημαντικές ιδιότητες των διανυσματικών χώρων υψηλών διαστάσεων είναι εμφανείς ακόμη και όταν οι διαστάσεις είναι δυαδικές. Η Αραιά Κατανεμημένη μνήμη αναπτύχθηκε χρησιμοποιώντας υψηλών διαστάσεων δυαδικά διανύσματα ή λέξεις. Η μνήμη λειτουργεί με βάση αυτές τις λέξεις και οι λέξεις αυτές αποθηκεύονται και ανακτώνται ως δεδομένα [82].

Ένα άλλο είδος συσχετιστικής μνήμης που έχει αναπτυχθεί είναι η **Ασαφής Συσχετιστική Μνήμη (Fuzzy Associative Memory - FAM)**. Η πρώτη προσπάθεια που έγινε προς αυτή την κατεύθυνση ήταν από τον Kosko (1992)[83]. Η FAM μνήμη του Kosko είναι ένα νευρωνικό δίκτυο εμπρόσθιας τροφοδότησης, ενός επιπέδου και περιγράφεται με ένα γινόμενο πινάκων, το οποίο ονομάζεται σύνθεση μεγίστου γινομένου (max – product composition) ή σύνθεση μεγίστου – ελαχίστου (max-min composition). Ο πίνακας των συναπτικών βαρών προκύπτει από μια διαδικασία ασαφούς Hebbian μάθησης (fuzzy Hebbian learning). Το μοντέλο του Kosko παρουσιάζει μεγάλο βαθμό παρεμβολών, οπότε έχει μικρή δυνατότητα αποθήκευσης, για παράδειγμα έναν κανόνα ανά πίνακα FAM. Στη συνέχεια αναπτύχθηκαν διάφορες βελτιώσεις του μοντέλου αυτού, όπως η Generalized Fuzzy Associative Memory (GFAM) από τον Chung & Lee (1996)[83], η Implicative Fuzzy Associative Memory (IFAM) και η Autoassociative Fuzzy Implicative Memory (AFIM) από τους Peter Sussner et al.(2006)[83].

Τέλος θα πρέπει να γίνει μια αναφορά στις Συσχετιστικές Μνήμες εκμάθησης μιας προσπάθειας (One-shot Associative Memories). Οι μνήμες αυτές λειτουργούν με βάση το σχήμα εκμάθησης μίας προσπάθειας (one-shot learning), σύμφωνα με το οποίο η εκμάθηση για συγκεκριμένες κατηγορίες γίνεται από όσο το δυνατό λιγότερα δείγματα ή και ακόμη από ένα μόνο δείγμα. Η βασική ιδέα αυτής της τεχνικής είναι ότι υπάρχει αξιοποίηση της πληροφορίας από κατηγορίες που έχουν ήδη προσδιοριστεί ασχέτως με το πόσο διαφορετικές μπορεί να είναι. Για να υλοποιηθεί η συγκεκριμένη ιδέα χρησιμοποιούνται διάφορα πιθανοτικά μοντέλα. Η μέθοδος της εκμάθησης μιας προσπάθειας προέκυψε από την ανάγκη εξαγωγής χρήσιμης πληροφορίας για προβλήματα στα οποία δεν υπάρχει η δυνατότητα συλλογής μεγάλου πλήθους δειγμάτων [84].

### **στ) Νευρωνικά Δίκτυα Στιγμαϊαίας Εκπαίδευσης**

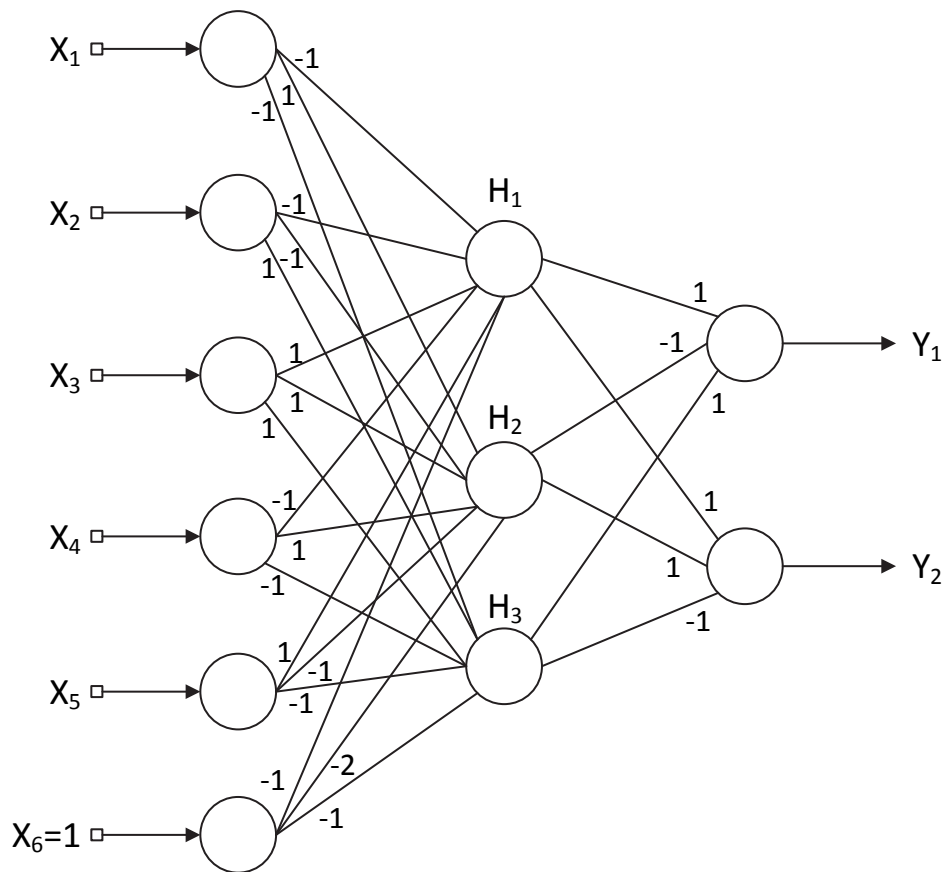
**Τα Νευρωνικά Δίκτυα Στιγμαϊαίας Εκπαίδευσης (Instantaneously Trained Neural Network - ITNN)** αναπτύχθηκαν για να αντιμετωπίσουν το πρόβλημα της έλλειψης ταχύτητας των περισσότερο διαδεδομένων τεχνικών αναγνώρισης προτύπων (όπως για παράδειγμα ο αλγόριθμος αναστροφής μετάδοσης σφάλματος στα νευρωνικά δίκτυα και οι αυτο-οργανούμενοι χάρτες). Τα δίκτυα αυτά μοντελοποιούν την λειτουργία της λειτουργικής μνήμης (working memory) του εγκεφάλου, η οποία έχει τη δυνατότητα να μαθαίνει και να γενικεύει άμεσα [85].

Το μοντέλο ITNN προκύπτει από την ύπαρξη υλικού ειδικού σκοπού (dedicated hardware) στον εγκέφαλο για το μέρος της λειτουργικής μνήμης που ασχολείται με την ακουστική και φωνητική πληροφορία (phonological loop) ή για το μέρος που διατηρεί την οπτική πληροφορία (visio-spatial sketchpad). Το σύστημα της λειτουργικής μνήμης για την οπτική πληροφορία παράγει μια πιστή αναπαράσταση όλων των δειγμάτων εκπαίδευσης με το να αναθέτει ένα μοναδικό νευρώνα για κάθε δείγμα. Αυτή η κατανομή νευρώνων

υπονοεί ότι η μνήμη θα περιορίζεται από το μέγεθος του συστήματος για την οπτική πληροφορία (sketchpad). Για να επιτευχθεί η κατανομή αυτή, απαιτείται ένα νευρωνικό δίκτυο στο οποίο κάθε κρυφός κόμβος λειτουργεί ως ακριβές φίλτρο για το δείγμα που αντιπροσωπεύει. Η έξοδος του κόμβου αυτού θα πρέπει να συσχετιστεί με το δείγμα αυτό και να απο-συσχετιστεί με όλα τα υπόλοιπα δείγματα.

Έστω η αντιστοίχιση  $Y = f(X)$ , όπου  $X$  και  $Y$  είναι  $n$  και  $m$  διάστατα δυαδικά διανύσματα. Θεωρούνται δυαδικοί νευρώνες οι οποίοι δίνουν έξοδο 1 αν και μόνο αν το άθροισμα των εισόδων τους υπερβαίνει το 0. Το φίλτρο αυτό λειτουργεί ως ένα υπερεπίπεδο, το οποίο διαχωρίζει μια γωνία σε ένα  $n$  διάστατο υπερ-κύβο, η οποία αναπαριστά ένα διάνυσμα εκπαίδευσης. Για το λόγο αυτό η τεχνική ονομάζεται ταξινόμηση γωνίας (corner-classification - CC) [85].

Υπάρχουν διάφορες εκδόσεις της μεθόδου, με την πιο αποτελεσματική να είναι η CC4. Τα βάρη έχουν την τιμή -1 εάν η είσοδος είναι 0 και +1 εάν η είσοδος είναι 1. Επίσης, θεωρείται μια επιπλέον είσοδος στο μοντέλο, η  $x_{n+1} = 1$ . Το βάρος της σύνδεσης από τον επιπλέον κόμβο σε ένα κρυφό νευρώνα είναι  $r - s + 1$ , όπου  $r$  είναι η ακτίνα της γενίκευσης και  $s$  ο αριθμός των μονάδων στην ακολουθία εισόδου. Τα βάρη σύνδεσης στο επίπεδο εξόδου είναι 1 εάν η τιμή εξόδου είναι 1 και -1 εάν η τιμή εξόδου είναι 0, οπότε γίνεται εκμάθηση της κλάσης εισόδου και της συμπληρωματικής της κλάσης. Αναθέτοντας ένα κρυφό νευρώνα για κάθε δείγμα εκπαίδευσης, θεωρείται ότι ο κρυφός νευρώνας αποθηκεύει το διάνυσμα εκπαίδευσης. Ένα παράδειγμα αυτής της μεθόδου φαίνεται στην Εικόνα 3.52, όπου διανύσματα εισόδου πέντε χαρακτηριστικών αντιστοιχίζονται σε διανύσματα εξόδου με δυο χαρακτηριστικά [85].



Input	s	Weights	Input to			Output of			Input to		Output	
			$H_1$	$H_2$	$H_3$	$H_1$	$H_2$	$H_3$	$Y_1$	$Y_2$	$Y_1$	$Y_2$
001011	2	-1 -1 1 -1 1 -1	1	-2	-1	1	0	0	1	1	1	1
101101	3	1 -1 1 1 -1 -2	-2	1	-2	0	1	0	-1	1	0	1
011001	2	-1 1 1 -1 -1 -1	-1	-2	1	0	0	1	1	-1	1	0

Εικόνα 3.52: Νευρωνικό Δίκτυο Στιγμαίας Εκπαίδευσης

Τα Νευρωνικά Δίκτυα Στιγμαίας Εκπαίδευσης αναμένονται να έχουν ολοένα και περισσότερες εφαρμογές σε προβλήματα που καλούνται να αντιμετωπίσουν οι μηχανικοί και οι επιχειρήσεις. Ως μοντέλα λειτουργικής και βραχυχρόνιας μνήμης, τα δίκτυα αυτά μπορούν να βοηθήσουν στην εύρεση μιας κοντινότερης σύνδεσης μεταξύ των συμπερασμάτων της Ψυχολογίας και της Νευρο-επιστήμης, επαληθεύοντας ότι μέθοδοι Τεχνητής Νοημοσύνης οι οποίες συνδυάζουν γρήγορη γενίκευση με επεξεργασία βασισμένη σε κανόνες είναι αρκετά ισχυρές και ευέλικτες [85].

### ζ) Modular Νευρωνικά Δίκτυα

**Τα Modular νευρωνικά δίκτυα** είναι μοντέλα που συνδυάζουν διάφορες τεχνικές νευρωνικών δικτύων. Κάθε δίκτυο αποτελεί μια δομική μονάδα, η οποία μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε συνδυασμό με μονάδες άλλων τύπων. Το μοντέλο αυτό προσπαθεί να εκμεταλλευτεί τα πλεονεκτήματα διάφορων αρχιτεκτονικών και τεχνικών, όπως τα γραμμικά νευρωνικά δίκτυα, τα νευρωνικά δίκτυα με ανατροφοδότηση, τη μάθηση με και χωρίς επίβλεψη, τα αυτό-οργανούμενα νευρωνικά δίκτυα. Τα βιολογικά νευρωνικά δίκτυα λειτουργούν με παρόμοιο τρόπο, καθώς αποτελούνται από ιεραρχίες δικτύων, οι οποίες χτίζονται από στοιχεία εξειδικευμένα για διαφορετικές ενέργειες [65].

Κάποιοι από τους λόγους που οδήγησαν στην ανάπτυξη αυτού του μοντέλου είναι οι εξής [65]:

- Μείωση της πολυπλοκότητας των μοντέλων. Ένας τρόπος ελάττωσης του χρόνου εκπαίδευσης είναι ο έλεγχος των βαθμών ελευθερίας του συστήματος.
- Ενσωμάτωση γνώσης. Οι χρήση νευρωνικών δικτύων ως μονάδων που σχηματίζουν ένα σύστημα είναι μια επέκταση της μεθόδου εκμάθησης με υπαινιγμούς (learning with hints).
- Συγχώνευση δεδομένων και υπολογισμός μέσου όρου πρόβλεψης. Οι επιτροπές δικτύων (Committees of networks) μπορούν να θεωρηθούν ως σύνθετα συστήματα τα οποία αποτελούνται από όμοιες μονάδες (modules).
- Συνδυασμός τεχνικών. Περισσότερες από μια μεθόδους ή κλάσεις δικτύων μπορούν να χρησιμοποιηθούν ως δομική μονάδα για το σύστημα.
- Ταυτόχρονη εκμάθηση διαφορετικών ενεργειών. Οι εκπαιδευμένες μονάδες μπορούν να χρησιμοποιηθούν ταυτόχρονα από διάφορα συστήματα, τα οποία έχουν σχεδιαστεί για διαφορετικές ενέργειες.
- Ευρωστία και Κλιμάκωση. Τα συνδυασμένα δίκτυα μπορούν σταδιακά να αυξήσουν το μέγεθός τους και να είναι ανθεκτικά σε σφάλματα.

Έχουν αναπτυχθεί αλγόριθμοι και τεχνικές για την σχεδίαση της δομής των μονάδων, όπως για παράδειγμα η επιλογή του πλήθους των κρυφών νευρώνων. Μια από αυτές τις τεχνικές είναι η συσχέτιση αλληλουχίας (cascade correlation), η οποία προτάθηκε από τους Fahlman & Lebiere (1990)[65]. Ο αλγόριθμος αυτός επιτυγχάνει την εύρεση δομής για το δίκτυο και την ελάττωση του χρόνου εκπαίδευσης, προσλαμβάνοντας νέους νευρώνες ανάλογα με το σφάλμα εκτίμησης που προκύπτει.

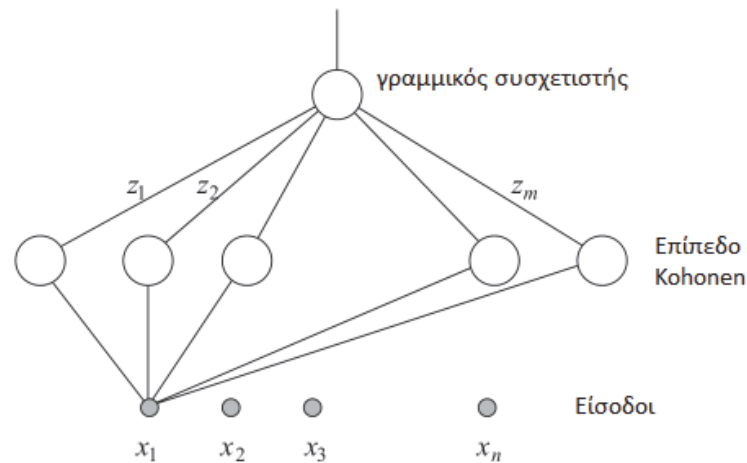
Μια γενικότερη στρατηγική από την συσχέτιση αλληλουχίας είναι η εκπαίδευση εξειδικευμένων μονάδων (modules) ώστε να επιτελέσουν κάποια συγκεκριμένη ενέργεια. Αν οι μονάδες αυτές παράγουν συνεχείς και διαφορίσιμες συναρτήσεις μπορούν να χρησιμοποιηθούν σε δίκτυα ανάστροφης μετάδοσης σφάλματος. Ο αλγόριθμος εκμάθησης μπορεί να εφαρμοστεί με τις παραμέτρους των δομικών μονάδων να παραμένουν σταθερές. Μια παρόμοια προσέγγιση είναι η δημιουργία βέλτιστων, ανεξάρτητων ταξινομητών για δυο κλάσεις (δυναμικοί ταξινομητές) οι οποίοι μπορούν να χρησιμοποιηθούν ως δομικά μπλοκ για ένα μεγαλύτερο δίκτυο [65].

Μια άλλη μέθοδος σχεδίασης, η οποία προτάθηκε από τους Jacobs et al. (1991) [65] είναι η ανάμιξη ειδικών (mixture of experts). Δεδομένου ενός συνόλου εκπαίδευσης, το οποίο αποτελείται από  $p$  ζεύγη  $(x_1, y_1), \dots, (x_p, y_p)$ , το συνολικό δίκτυο κατασκευάζεται χρησιμοποιώντας έναν αριθμό υποδικτύων – ειδικών (expert subnetworks). Κάθε ένα από τα υπο-δίκτυα αυτά λαμβάνει μια είσοδο  $x$  και παράγει την έξοδο  $y$  με πιθανότητα  $P(y|x, \theta_i)$ , όπου  $\theta_i$  είναι το διάνυσμα παραμέτρων του  $i$ -στού ειδικού. Η έξοδος κάθε υποδικτύου – ειδικού ζυγίζεται από ένα υπο-δίκτυο πύλης, το οποίο επιθεωρεί την είσοδο  $x$  και παράγει για τα  $m$  υπο-δίκτυα ειδικών το σύνολο των τιμών πύλης  $g_1, g_2, \dots, g_m$ . Οι τιμές αυτές αντιπροσωπεύουν την πιθανότητα το αντίστοιχο υπο-δίκτυο – ειδικός να παράγει το σωστό αποτέλεσμα. Η τελική πιθανότητα να παραχθεί το  $y$  δίνεται από το γινόμενο της εκτίμησης κάθε ειδικού με την αντίστοιχη τιμή πύλης. Οι παράμετροι του σύνθετου μοντέλου που προκύπτει μπορούν να προσδιοριστούν από τη μέθοδο καθόδου κλίσης (gradient descent) ή από τον αλγόριθμο Μεγιστοποίησης Προσδοκώμενης Τιμής (Expectation Maximization - EM), ο οποίος προτάθηκε από τους Jordan et al. (1994)[65]. Η ανάμιξη ειδικών μπορεί να οργανωθεί σε διαφορετικά επίπεδα, όπως ένα βέλτιστο δέντρο απόφασης, οπότε προκύπτει μια Ιεραρχική Ανάμιξη Ειδικών (Hierarchical Mixture of Experts - HME) [65].

Μια εφαρμογή της μεθόδου αυτής μπορεί να βρεθεί στο [86], όπου προτείνεται μια μέθοδος ταξινόμησης των σημάτων ηλεκτροκαρδιογραφήματος για περιπτώσεις καρδιακής αρρυθμίας. Για την ταξινόμηση χρησιμοποιείται νευρωνικό δίκτυο αποτελούμενο από δομικές μονάδες (modular neural network) το οποίο προκύπτει από την τεχνική ανάμιξης ειδικών και από μάθηση αρνητικής συσχέτισης (Negative Correlation Learning).

### η) Counterpropagation Νευρωνικά Δίκτυα

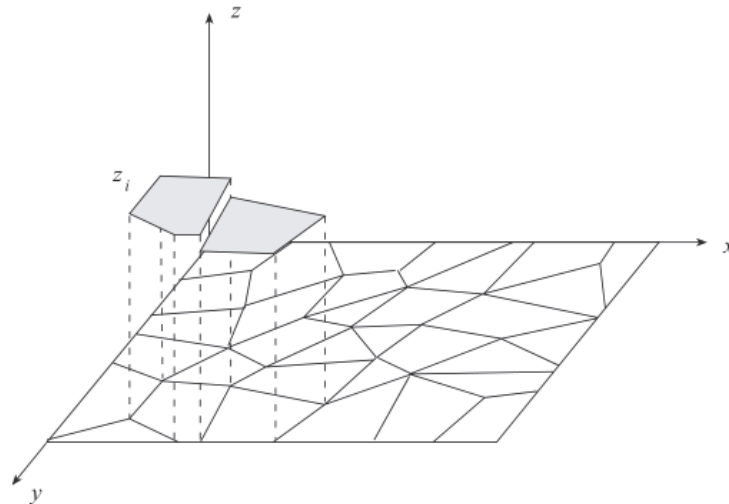
Τα Counterpropagation νευρωνικά δίκτυα είναι υβριδικά μοντέλα, τα οποία προτάθηκαν από τους Hecht & Nielsen (1987)[65]. Αρχικά, τα δίκτυα αυτά είχαν σχεδιαστεί για να προσεγγίζουν μια συνεχής συνάρτηση  $f$  και την αντίστροφή της  $f^{-1}$ , χρησιμοποιώντας συμμετρικές συναρτήσεις. Η αρχιτεκτονική του δικτύου αυτού παρουσιάζεται στην Εικόνα 3.53 [65]:



**Εικόνα 3.53:** Απλοποιημένο Counterpropagation Νευρωνικό Δίκτυο

Η είσοδος του δικτύου αποτελείται από ένα  $n$ -διάστατο διάνυσμα, το οποίο τροφοδοτείται σε ένα κρυφό επίπεδο που περιέχει  $h$  διανύσματα ομάδων. Το επίπεδο εξόδου διαθέτει έναν γραμμικό συσχετιστή (linear associator), όταν μαθαίνει μια συνάρτηση της μορφής  $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ . Τα βάρη μεταξύ του κρυφού επιπέδου και του επιπέδου εξόδου ρυθμίζονται χρησιμοποιώντας μάθηση υπο επίβλεψη.

Η εκπαίδευση των δικτύων αυτών πραγματοποιείται σε δυο φάσεις. Αρχικά το κρυφό επίπεδο εκπαιδεύεται χρησιμοποιώντας διανύσματα τα οποία επιλέγονται στοχαστικά από τον διανυσματικό χώρο εισόδου. Το κρυφό επίπεδο παράγει μια ομαδοποίηση του χώρου εισόδου η οποία αντιστοιχεί σε μια  $n$ -διάστατη ψηφίδωση Voronoi, όπως φαίνεται στην Εικόνα 3.54 [65].



**Εικόνα 3.54:** Εκτίμηση συνάρτησης με Counterpropagation Νευρωνικό Δίκτυο

Μετά το βήμα αυτό, κάθε στοιχείο του κρυφού επιπέδου έχει ειδικευτεί στο να αντιδρά για μια συγκεκριμένη περιοχή του χώρου εισόδου. Η στρατηγική εκπαίδευσης μπορεί να είναι μια οποιαδήποτε τεχνική κβαντοποίησης διανύσματος (vector quantization) και οι νευρώνες του κρυφού επιπέδου μπορούν να τοποθετηθούν σε διάταξη πλέγματος (επίπεδο Kohonen) ή ως μεμονωμένα στοιχεία. Η έξοδος του κρυφού επιπέδου μπορεί να ελεγχθεί με τέτοιο τρόπο ώστε να ενεργοποιείται μόνο το στοιχείο με τη μεγαλύτερη τιμή ενεργοποίησης. Το κρυφό επίπεδο λειτουργεί στην πράξη ως ένα δίκτυο ταξινόμησης [65].

Η εκτίμηση συνάρτησης υλοποιείται με την ανάθεση τιμών για κάθε βάρος  $z_1, z_2, \dots, z_m$  στο δίκτυο της Εικόνας 3.53, οπότε συγκεκριμενοποιείται η τιμή της εκτίμησης για κάθε περιοχή στην Εικόνα 3.54, όπου το πολύγωνο με ύψος  $z_i$  αντιστοιχεί στην εκτίμηση της τιμής της συνάρτησης για τη συγκεκριμένη περιοχή. Το δεύτερο βήμα της εκπαίδευσης είναι η υπο επίβλεψη μάθηση των τιμών  $z_i$ . Ένα μια μονάδα κρυφού επιπέδου ενεργοποιείται όταν εμφανίζεται το διάνυσμα εισόδου  $x$ , το τετραγωνικό σφάλμα της εκτίμησης θα είναι [65]:

$$E = \frac{1}{2}(z_i - f(x))^2 \quad (3.116)$$

Η μέθοδος καθόδου κλίσης (gradient descent) με χρήση της ως συνάρτηση κόστους παρέχει την ενημέρωση βαρών για το δίκτυο:

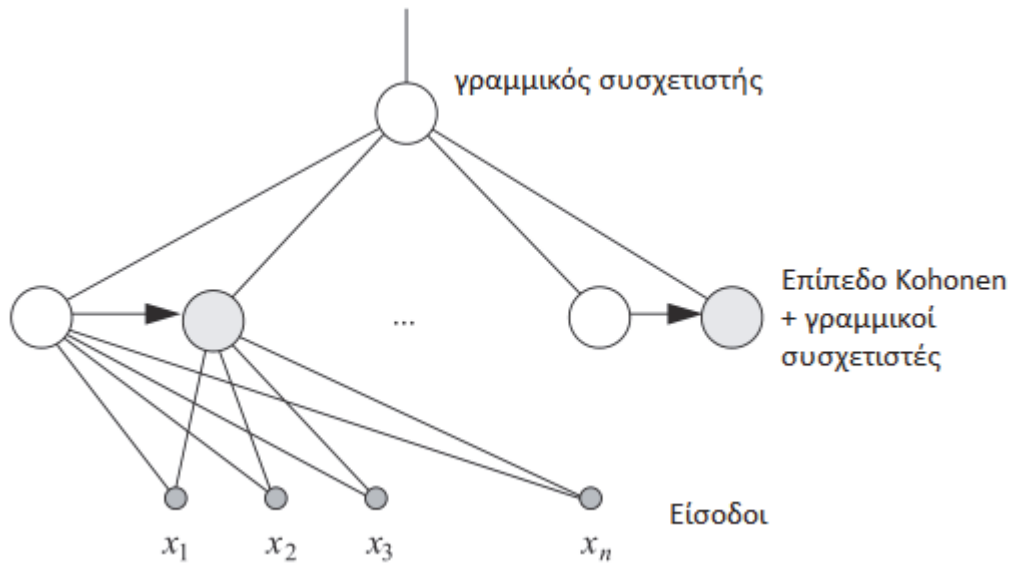
$$\Delta z_i = -\frac{dE}{dz_i} = \gamma(f(x) - z_i) \quad (3.117)$$

όπου  $\gamma$  μια σταθερά μάθησης. Μετά από αρκετές επαναλήψεις θα πρέπει να βρεθεί μια καλή εκτίμηση της συνάρτησης  $f$ . Η εκπαίδευση του κρυφού επιπέδου και του επιπέδου εξόδου μπορεί να είναι ανάμικτη ή ακολουθιακή, δηλαδή πρώτα το ένα επίπεδο και μετά το άλλο. Το δίκτυο αυτό μπορεί εύκολα να επεκταθεί με περισσότερες μονάδες εξόδου [65].



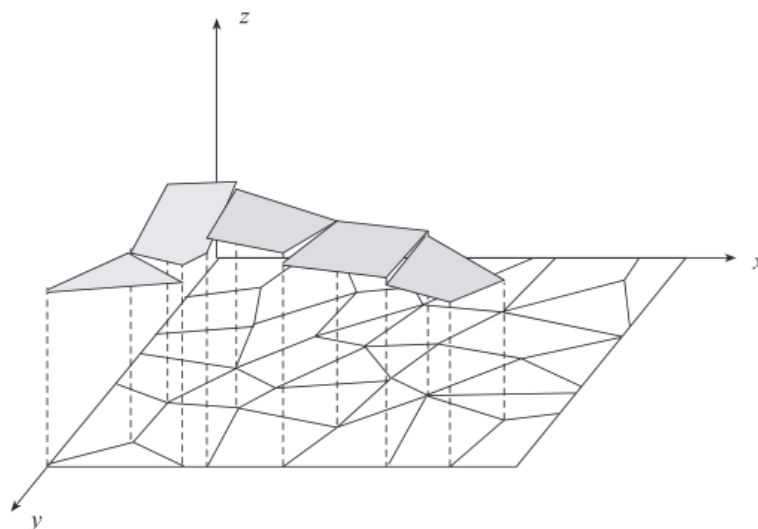
### θ) Spline Νευρωνικά Δίκτυα

Η εκτίμηση συνάρτησης που παρέχεται από ένα δίκτυο με επίπεδο ομαδοποίησης (clustering layer) μπορεί να βελτιωθεί υπολογίζοντας μια τοπική γραμμική εκτίμηση της αντικειμενικής συνάρτησης. Στην Εικόνα 3.55 παρουσιάζεται ένα δίκτυο το οποίο έχει επεκταθεί με ένα κρυφό επίπεδο γραμμικών συσχετιστών (linear associators). Κάθε μονάδα ομαδοποίησης χρησιμοποιείται για να ενεργοποιήσει ή να αναστείλει τον αντίστοιχο γραμμικό συσχετιστή, ο οποίος είναι συνδεδεμένος με όλες τις εισόδους [65].



**Εικόνα 3.55:** Counterpropagation Νευρωνικό Δίκτυο με επέκταση στο κρυφό επίπεδο

Τα στοιχεία ομαδοποίησης στο κρυφό επίπεδο εκπαιδεύονται όπως και στα Counterpropagation Νευρωνικά Δίκτυα. Η ψηφίδωση Voronoi που προκύπτει από τα δίκτυα με την επέκταση που αναφέρθηκε παρουσιάζεται στην Εικόνα 3.56 [65]:



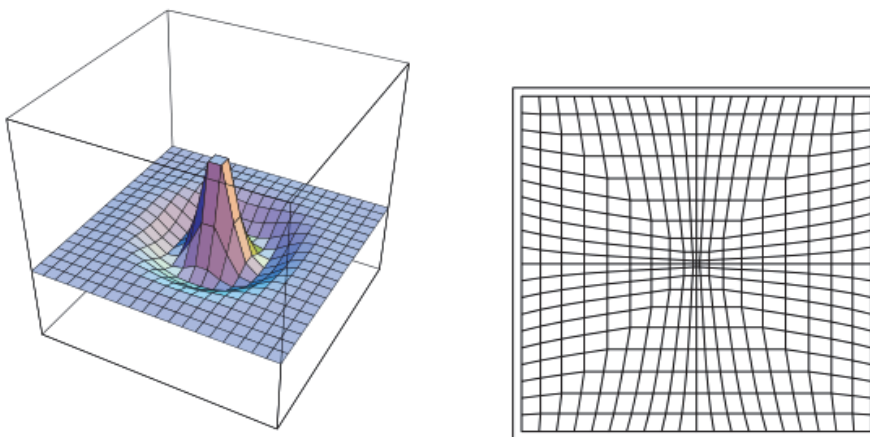
**Εικόνα 3.56:** Εκτίμηση συνάρτησης με γραμμικούς συσχετιστές

Οι γραμμικοί συσχετιστές στο κρυφό επίπεδο εκπαιδεύονται με χρήση του αλγορίθμου ανάστροφης μετάδοσης σφάλματος. Για κάθε επιλεγμένη είσοδο, αποκλειστικά μια από τις ομάδες ενεργοποίησης ενεργοποιεί τον αντίστοιχο γραμμικό συσχετιστή και εκπαιδεύονται μόνο τα αντίστοιχα βάρη. Το δίκτυο δημιουργεί ένα σύνολο από γραμμικές εκτιμήσεις της αντικειμενικής συνάρτησης, οι οποίες είναι τοπικά έγκυρες.

Από την Εικόνα 3.56 φαίνεται ότι η εκτίμηση συνάρτησης που προκύπτει αποτελείται από πολύγωνα διαφορετικού προσανατολισμού. Η νέα επιφάνεια έχει μικρότερο τετραγωνικό σφάλμα από την εκτίμηση με οριζόντιες ψηφίδες. Η εκτίμηση συνάρτησης μπορεί να γίνει περισσότερο ακριβής με την προσθήκη νέων μονάδων στο κρυφό επίπεδο εκλεπτύνοντας την ψηφίδωση Voronoi [65].

Έχει προταθεί η χρήση spline συναρτήσεων στη ψηφίδωση Voronoi ως βασικά δομικά στοιχεία για την εκτίμηση συνάρτησης. Η ιδέα αυτή αποτελεί γενίκευση της προηγούμενης μεθόδου και απαιτεί πολύ λιγότερες μονάδες στο κρυφό επίπεδο για εκτίμηση συναρτήσεων με ομαλή συμπεριφορά. Τα Spline Νευρωνικά Δίκτυα που προκύπτουν από την τεχνική αυτή έχουν χρησιμοποιηθεί σε διάφορα προβλήματα αναγνώρισης προτύπων και στην ρομποτική [65].

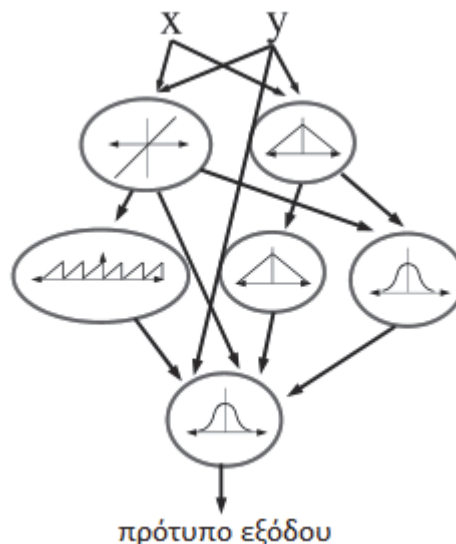
Ένα πρόβλημα που θα πρέπει να αντιμετωπιστεί όταν επιχειρείται συνδυασμός ενός αυτο-οργανούμενου κρυφού επιπέδου με ένα συμβατικό επίπεδο εξόδου είναι η αλληλεπίδραση μεταξύ των δυο αυτών δομών. Στην Εικόνα 3.57 φαίνεται ένα παράδειγμα όπου η συνάρτηση που θα πρέπει να εκτιμηθεί εμφανίζει μεταβάλλεται περισσότερο σε μια συγκεκριμένη περιοχή του χώρου. Εάν η δειγματοληψία του χώρου εισόδου είναι ομοιόμορφη, το μέσο σφάλμα στο κέντρο του χώρου θα είναι πολύ μεγαλύτερο από ότι στην περιφέρεια, όπου η συνάρτηση είναι περισσότερο ομαλή. Η λύση στο πρόβλημα αυτό είναι η δειγματοληψία του χώρου σύμφωνα με το ρυθμό μεταβολής της συνάρτησης, δηλαδή σύμφωνα με την κλίση της. Στην περίπτωση του παραδείγματος, εάν το πλέγμα καθορίζεται από ένα δισδιάστατο δίκτυο Kohonen, είναι πυκνότερο στο κέντρο από ότι στην περιφέρεια. Παρόλα αυτά, αφού η συνάρτηση δεν είναι γνωστή εκ των προτέρων παρά μόνο ένα σύνολο από δεδομένα εκπαίδευσης, θα πρέπει να γίνει χρήση ευριστικών μεθόδων για την επίλυση αυτού του προβλήματος [65].



**Εικόνα 3.57:** Μια συνάρτηση και η αντίστοιχη διαφορετική δειγματοληψία του χώρου εισόδου

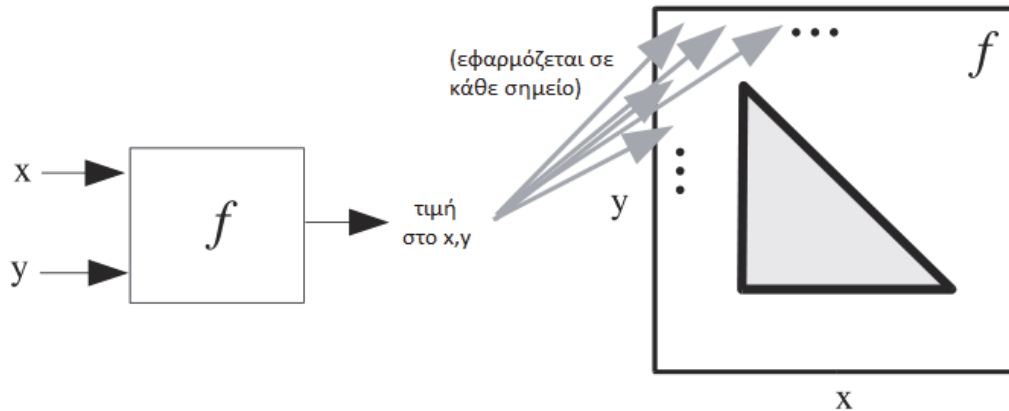
### ι) Δίκτυα Παραγωγής Προτύπων

**Τα Δίκτυα Παραγωγής Προτύπων (Compositional Pattern Producing Networks - CPPN)** είναι γραφήματα σύνθεσης συνάρτησης (function composition graphs) τα οποία φέρουν πολύ μεγάλη ομοιότητα στην τοπολογία των νευρωνικών δικτύων, όπως φαίνεται στην Εικόνα 3.58 [87]. Η μόνη διαφορά τους είναι ότι τα νευρωνικά δίκτυα γενικότερα χρησιμοποιούν σιγμοειδείς συναρτήσεις ή Γκαουσιανές συναρτήσεις ενεργοποίησης σε κάθε κόμβο ενώ ένα γράφημα σύνθεσης συνάρτησης μπορεί να χρησιμοποιήσει μια ποικιλία κανονικών συναρτήσεων σε κάθε κόμβο. Εάν κάποια συνάρτηση τροφοδοτείται από πολλαπλές συναρτήσεις στο γράφημα, τότε παίρνει ως είσοδο το άθροισμα των σταθμισμένων εξόδων των συναρτήσεων αυτών. Η τοπολογία δεν έχει κάποιο περιορισμό και μπορεί να αναπαραστήσει όλες τις πιθανές συσχετίσεις συναρτήσεων [87].



**Εικόνα 3.58:** Γράφημα Σύνθεσης Συναρτήσεων. Το γράφημα προσδιορίζει τις συνδέσεις μεταξύ των συναρτήσεων. Οι συνδέσεις έχουν τέτοια βάρη ώστε η έξοδος κάθε συνάρτησης πολλαπλασιάζεται με το βάρος της σύνδεσης εξόδου που διαθέτει.

Τα Δίκτυα Παραγωγής Προτύπων αναφέρονται σε γραφήματα που περιγράφουν συνθέσεις συναρτήσεων, οι οποίες μπορούν να παράγουν συγκεκριμένα πρότυπα. Με επερωτήσεις ενός CPPN ξεχωριστά και ανεξάρτητα για κάθε σημείο στον Καρτεσιανό χώρο συντεταγμένων, μπορεί να περιγραφεί ένα πρότυπο (ένας φαινότυπος) χωρίς τοπική αλληλεπίδραση ή ανάγκη για χρονική ανάπτυξη. Οι συντεταγμένες κάθε σημείου είναι η είσοδος ενός CPPN και η έξοδος του δείχνει τι θα πρέπει να υπάρχει σε αυτό το σημείο στο χώρο, όπως φαίνεται στην Εικόνα 3.59 [87].



**Εικόνα 3.59:** Μια συνάρτηση παράγει ένα φαινόμενο. Η συνάρτηση  $f$  παίρνει ως είσοδο τα ορίσματα  $x$ ,  $y$  τα οποία είναι συντεταγμένες σε έναν δισδιάστατο χώρο. Όλες οι συντεταγμένες σχεδιάζονται με ένταση ανάλογη με την έξοδο της  $f$ , οπότε σχηματίζεται ένα πρότυπο, το οποίο μπορεί να θεωρηθεί ως φαινόμενο με γενότυπο την συνάρτηση  $f$ . Σε αυτό το παράδειγμα παράγεται ένας τριγωνικός φαινόμενο.

### ια) Δίκτυα Κυματιδίων

**Τα Δίκτυα Κυματιδίων (Wavelet networks)** είναι μια καινούργια κλάση δικτύων που συνδυάζει τα κλασικά νευρωνικά δίκτυα με σιγμοειδείς συναρτήσεις ενεργοποίησης και την Ανάλυση Κυματιδίων (wavelet Analysis - WA).

Ένα Δίκτυο Κυματιδίων αποτελείται συνήθως από τρία επίπεδα, το επίπεδο εισόδου, το κρυφό επίπεδο και το επίπεδο εξόδου. Το επίπεδο εισόδου εισάγει στο δίκτυο τις μεταβλητές, ενώ το κρυφό επίπεδο αποτελείται από τις κρυφές μονάδες στις οποίες οι μεταβλητές εισόδου μετασχηματίζονται σε μια διεσταλμένη και μετασχηματισμένη έκδοση του μητρικού κυματιδίου (mother wavelet). Στο επίπεδο εξόδου υπολογίζονται οι εκτιμήσεις των τιμών στόχων [88].

Η ιδέα των δικτύων αυτών είναι να προσαρμόσουν την κυματιδιακή βάση (wavelet basis) στα δεδομένα εκπαίδευσης. Οι αρχικές τιμές των παραμέτρων, σε αντίθεση με τα νευρωνικά δίκτυα σιγμοειδών συναρτήσεων, δεν θα πρέπει να επιλέγονται τυχαία. Ένα κυματίδιο (wavelet) είναι μια κυματομορφή συγκεκριμένης διάρκειας, η οποία έχει μηδενική μέση τιμή και ιδιότητες τοπικού χαρακτήρα. Επίσης, υπάρχουν κατάλληλες μεθοδολογίες για την επιλογή της βέλτιστης τοπολογίας του δικτύου. Το πλήθος των κρυφών μονάδων πρέπει να είναι το ελάχιστο δυνατό, εξηγώντας παράλληλα όσο το δυνατό καλύτερα τη μεταβλητότητα των δεδομένων εκπαίδευσης. Μικρότερος αριθμός μονάδων από τις απαιτούμενες δεν θα επιτρέψει στο δίκτυο την ορθή εκμάθηση ενώ αριθμός μεγαλύτερος από τις απαιτούμενες θα οδηγήσει σε υπερπροσαρμογή (overfitting) [88].

### 3.4.4 Εφαρμογές των Νευρωνικών Δικτύων στη Βιοπληροφορική

Τα Νευρωνικά Δίκτυα χρησιμοποιούνται ευρέως για την υποστήριξη ιατρικής απόφασης σε διάφορες περιπτώσεις καρκίνου. Το γεγονός αυτό προκύπτει από τον αυξανόμενο αριθμό των ιατρικών υπηρεσιών που υπάρχουν διαθέσιμες, οι οποίες εμπεριέχουν συστήματα με αλγόριθμους Τεχνητής Νοημοσύνης και από τον επιταχυνόμενο ρυθμό δημοσιεύσεων σε ιατρικά περιοδικά [89],[90].

Το σύστημα PAPNET [90] αποτελείται από δυο νευρωνικά δίκτυα τα οποία έχουν τη δυνατότητα να αναγνωρίζουν τα μη φυσιολογικά ευρήματα σε ένα τεστ Παπανικολάου. Τα πρώιμα στάδια του καρκίνου του τραχήλου της μήτρας (cervical cancer) είναι θεραπεύσιμα και το τεστ Παπανικολάου δίνει τη δυνατότητα έγκαιρης διάγνωσης, η οποία οδηγεί σε θεραπεία. Τα εθνικά προγράμματα για προληπτικούς ελέγχους με τεστ Παπανικολάου δημιουργούν τεράστιο φόρτο εργασίας στα εργαστήρια κυτταρολογίας, τα οποία θα πρέπει να προσλάβουν ένα πολύ μεγάλο αριθμό τεχνικών. Η δουλειά του τεχνικού είναι να εξετάσει κάθε κύτταρο σε κάθε δείγμα του τεστ και να εντοπίσει εκείνα που έχουν χαρακτηριστικά κυττάρων σε πρώιμο στάδιο καρκίνου. Η διαδικασία αυτή είναι χρονοβόρα και ιδιαίτερα κουραστική. Το σύστημα PAPNET έχει σχεδιαστεί έτσι ώστε να παίρνει ως είσοδο τα δείγματα του τεστ και να εξάγει τα αποτελέσματα για το αν τα κύτταρα αυτά είναι φυσιολογικά ή όχι. Στη συνέχεια, αν έχουν εντοπισθεί μη φυσιολογικά κύτταρα, αυτές οι περιοχές φωτογραφίζονται μαζί με τις συντεταγμένες τους. Το σύστημα PAPNET είναι από τα λίγα συστήματα με νευρωνικά δίκτυα που έχει την έγκριση της FDA (Food and Drug Administration) για κλινική χρήση.

Οι Parakattil et al. (2003)[89] έδειξαν σε μια κλινική δοκιμή για τον καρκίνο της ουροδόχου κύστης ότι το μοντέλο που είχαν αναπτύξει χρησιμοποιώντας νευρωνικά δίκτυα ήταν ακριβές στο να αναγνωρίζει ασθενείς που θα πρέπει να κάνουν κυστεοσκόπηση. Ο στόχος της μελέτης αυτής είναι η ανάπτυξη ενός νευρωνικού δικτύου, το οποίο θα αναγνωρίζει ασθενείς με καρκίνο της ουροδόχου κύστης περισσότερο αποτελεσματικά από το τεστ αιματοουρίας και μεθόδους κυτταρολογίας. Ο αλγόριθμος βασίζεται στο συνδυασμό των επιπέδων της πυρηνικής πρωτεΐνης-22 (nuclear matrix protein-22), της μονοκυτταρικής πρωτεΐνης-1 (monocyte chemoattractant protein-1) και του διακυτταρικού μορίου-1 προσκόλλησης (urinary intercellular adhesion molecule-1). Στην κλινική δοκιμή συμμετείχαν 253 ασθενείς, από τους οποίους οι 27 είχαν καρκίνο ουροδόχου κύστης και οι 5 εισβολή των μυών του κυστικού τοιχώματος. Ο αλγόριθμος σχεδιάστηκε με τέτοιο τρόπο ώστε να παρουσιάζει είτε μέγιστη ευαισθησία είτε μέγιστη ειδικότητα. Για το λόγο αυτό τα δείγματα χωρίστηκαν σε 3 υποσύνολα. Για το πρώτο υποσύνολο, το σύστημα παρουσίασε ευαισθησία 100%, ειδικότητα 75.7%, θετική προγνωστική αξία 32.9% και αρνητική προγνωστική αξία 100%, όσον αφορά την ανίχνευση καρκίνου ουροδόχου κύστης. Για το δεύτερο υποσύνολο, το σύστημα παρουσίασε ευαισθησία 22.2%, ειδικότητα 100%, θετική

προγνωστική αξία 100% και αρνητική προγνωστική αξία 91.5%, όσον αφορά την ανίχνευση καρκίνου ουροδόχου κύστης. Τέλος, στο τρίτο υποσύνολο, το οποίο αφορούσε την ανίχνευση καρκίνου με εισβολή των μυών του κυστικού τοιχώματος το σύστημα παρουσίασε ευαισθησία 80%, ειδικότητα 100%, θετική προγνωστική αξία 100% και αρνητική προγνωστική αξία 99.6%. Σημειώνεται πως όπως αναφέρουν οι συγγραφείς, η ευαισθησία, η ειδικότητα και οι θετικές και αρνητικές τιμές πρόβλεψης για το τεστ αιματοουρίας είναι 92.6%, 51.8%, 18.7% και 98.2% αντίστοιχα, ενώ η ευαισθησία, η ειδικότητα και η θετικές και αρνητικές τιμές πρόβλεψης για την άτυπη κυτταρολογία είναι 66.7%, 81%, 29.5% και 95.3% αντίστοιχα. Η κλασική μέθοδος αξιολόγησης όγκου για καρκίνο της ουροδόχου κύστης, για τους 253 ασθενείς, κοστίζει \$61,054 ενώ η μέθοδος που προτείνεται με τα νευρωνικά δίκτυα κοστίζει \$36,450.

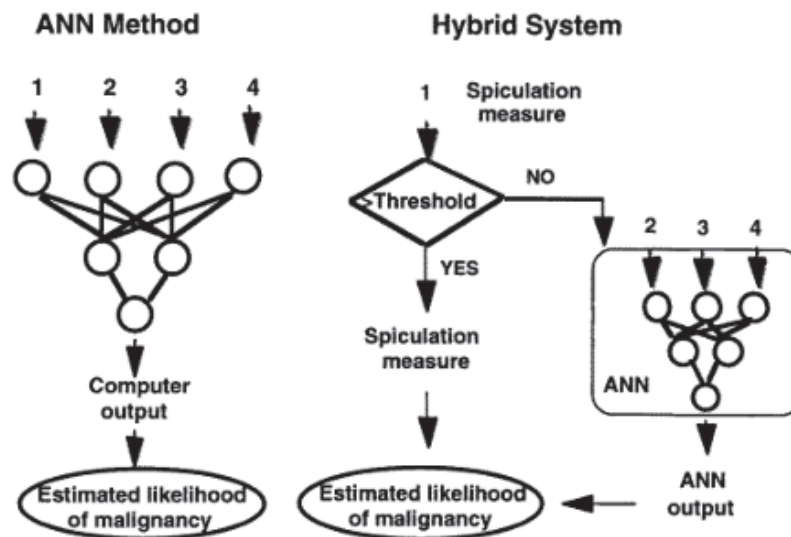
Η πρόβλεψη της επανεμφάνισης του καρκίνου της ουροδόχου κύστης από κλινικοπαθολογικά και μοριακά δεδομένα μελετήθηκε επίσης από τους Qureshi et al. (2000)[90]. Τα αρχικά χαρακτηριστικά εισόδου είναι το στάδιο του καρκίνου (με τιμές T/T1), ο βαθμός της βλάβης (με τιμές 1/2/3), το μέγεθος του όγκου (<5cm, ≥5cm), ο αριθμός των όγκων (μονός/πολλαπλός), το φύλο (άνδρας/γυναίκα) και η κατάσταση πρωτεΐνης EGFR (+/-). Για την πρόβλεψη επανεμφάνισης όγκου εντός 6 μηνών για 56 T/T1 όγκους και για την πρόβλεψη επιβίωσης 12 μηνών για 40 T2-T4 όγκους χρησιμοποιήθηκαν επιπλέον χαρακτηριστικά, όπως η συνήθεια καπνίσματος (ναι/όχι), η ιστολογία βλεννογόνων βιοψιών (ήπια, μέτρια, σοβαρή δυσπλασία), η ταυτόχρονη παρουσία cis (carcinoma in situ) (ναι/όχι), η μεταπλασία όγκου (ναι/όχι), η αρχιτεκτονική όγκου (θηλοειδής/στέρα), η περιοχή όγκου (πλευρικά, πριν/μετά τα τοιχώματα της κύστης, θόλος, τρίγωνο, στόμιο ουρήθρας, εξαπλωμένη ασθένεια), η κατάσταση πρωτεΐνης c-erbB2 (+/-) και η κατάσταση πρωτεΐνης p53 (+/-). Σύμφωνα με τα αποτελέσματα της εργασίας αυτής, τα νευρωνικά δίκτυα εμφάνισαν μεγαλύτερη απόδοση στις προβλέψεις από ότι η αξιολόγηση των περιπτώσεων από το ιατρικό προσωπικό. Η ακρίβεια του νευρωνικού δικτύου για την πρόβλεψη της πορείας των σταδίων του καρκίνου, για την πρόβλεψη επανεμφάνισης εντός 6 μηνών για όγκους T/T1 και για την πρόβλεψη επιβίωσης 12 μηνών για καρκίνους T2-T4 είναι 80%, 75% και 82% αντίστοιχα, ενώ του ιατρικού προσωπικού 74%, 79% και 65% αντίστοιχα.

Οι Ronco et al. (1999)[90] μελέτησαν την πρόβλεψη του καρκίνου του προστάτη με νευρωνικά δίκτυα, χρησιμοποιώντας κλινικά δεδομένα και δεδομένα από υπερήχους. Μετά από μια διαδικασία επιλογής των περισσότερο σημαντικών χαρακτηριστικών, επιλέχθηκε ένα σύνολο 16 χαρακτηριστικών. Τα χαρακτηριστικά που σχετίζονται με τα υπερηχογραφικά δεδομένα είναι τα εξής: εγκάρσιος άξονας (Transverse axis), προσθιοπίστιος άξονας (Anteroposterior axis), διαμήκης άξονας (Longitudinal axis), όγκος προστάτη (Prostatic volume), κεντρική ζώνη (Central zone), επίπεδο ηχούς (Echoic level), όγκος παθολογικής περιοχής, μείζων διάμετρος παθολογικής περιοχής, ελάσσων διάμετρος παθολογικής περιοχής, παρουσία/απουσία ασβεστοποιήσεων (calcifications), βαθμός καθίζησης ουροδόχου κύστης, πυκνότητα/όγκος ενζύμου PSA (Prostate Specific Antigen),

υπερηχογραφική διάγνωση. Τα υπόλοιπα χαρακτηριστικά που χρησιμοποιήθηκαν είναι τα εξής: ηλικία, προηγούμενη κλινική διάγνωση, επίπεδα ενζύμου PSA, αριθμός βιοψιών. Τα νευρωνικά δίκτυα, τα οποία εκπαιδεύτηκαν με βελτιστοποιημένο αλγόριθμο αναστροφής μετάδοσης σφάλματος, εμφάνισαν τιμή θετικής πρόβλεψης έως και 81.82% και τιμή αρνητικής πρόβλεψης έως και 96.95%, σε αντίθεση με την μέθοδο λογιστικής παλινδρόμησης που χρησιμοποιείται ευρέως και η οποία εμφανίζει 67.18% και 90.97% αντίστοιχα.

Στην εργασία των Potter et al. (1999)[90] μελετάται η πρόβλεψη επανεμφάνισης καρκινώματος του προστάτη μετά από προστατεκτομή, με χρήση ιστολογικών και κλινικών δεδομένων. Στη μελέτη αυτή χρησιμοποιήθηκαν δημογραφικά και κλινικά δεδομένα όπως η ηλικία, ο χρόνος παρακολούθησης μετά από την προστατεκτομή, ο χρόνος μέχρι την επανεμφάνιση, ο χρόνος που έχει παρέλθει χωρίς επανεμφάνιση, το κλινικό στάδιο καρκίνου προστάτη (T1b-T1c, T2a, T2b, T2c), καθώς και τα Gleason scores για την προστατεκτομή (με τιμές 5,6,7). Η αρχιτεκτονική των νευρωνικών δικτύων προέκυψε δυναμικά από τα δεδομένα, με χρήση γενετικών αλγορίθμων (genetically engineered neural networks - GENNs), μια τεχνική που αναλύεται στην ενότητα 3.6. Αναπτύχθηκαν 3 διαφορετικά GENNs – η πρώτη κατηγορία GENNs αναπτύχθηκε χρησιμοποιώντας παθολογικά ευρήματα (Gleason score, εξωπροστατική επέκταση, κατάσταση χειρουργικού περιθωρίου) και την ηλικία του ασθενούς. Η δεύτερη κατηγορία GENNs αναπτύχθηκε με χρήση του ποσοτικού πυρηνικού βαθμού (quantitative nuclear grade - QNG) και της πλοειδίας του DNA (DNA ploidy) και η τρίτη κατηγορία GENNs συνδυάζει όλες τις προηγούμενες μεταβλητές. Τα νευρωνικά δίκτυα που χρησιμοποιήθηκαν εμφάνισαν μεγαλύτερη απόδοση από άλλες στατιστικές μεθόδους (λογιστική παλινδρόμηση, παλινδρόμηση Cox), με τις τρεις κατηγορίες GENNs να δίνουν ακρίβεια 74.3%, 80.0%, και 78.1% αντίστοιχα στα σύνολα ελέγχου.

Οι Huo et al. (1999)[90] πραγματοποίησαν ταξινόμηση των βλαβών που παρουσιάζονται στις εικόνες που προκύπτουν με μαστογραφία, σε καλοήθειες και κακοήθειες. Τα νευρωνικά δίκτυα που χρησιμοποιήθηκαν βασίζουν την ταξινόμηση σε ένα συγκεκριμένο ραδιογραφικό χαρακτηριστικό, το κατά πόσο ο ιστός είναι ακανθώδης (speculation measure), δηλαδή το κατά πόσο παρουσιάζει ακίδες ή κηλίδες. Άλλα χαρακτηριστικά που χρησιμοποιήθηκαν κατά την ανάλυση των εικόνων είναι η οξύτητα (sharpness), μέσος όρος επιπέδου γκρι (average grey level), και η μέτρηση υφής (texture measure). Η απόδοση αυξήθηκε όταν τα νευρωνικά δίκτυα συνδυάστηκαν με μια υβριδική μέθοδος ενός βήματος, βασισμένη σε κανόνες (rule-based), όπως φαίνεται στην Εικόνα 3.60.



**Εικόνα 3.60:** Νευρωνικό Δίκτυο και Υβριδικό σύστημα για τη ταξινόμηση βλαβών σε εικόνες μαστογραφίας - Huo et al. (1999)[90]

Η απόδοση των δυο μεθόδων αξιολογείται με βάση το εμβαδόν  $A_z$  κάτω από την καμπύλη ROC, το οποίο χρησιμοποιείται και ως δείκτης αξιολόγησης της διακριτικής ικανότητας των τεσσάρων χαρακτηριστικών που χρησιμοποιήθηκαν. Το νευρωνικό δίκτυο εμφανίζει  $A_z = 0.90$  ενώ το υβριδικό σύστημα  $A_z = 0.94$ , άρα το υβριδικό σύστημα διαθέτει καλύτερη διακριτική ικανότητα. Επίσης, οι Lo et al. (1999)[90] μελέτησαν τη δυνατότητα πρόβλεψης καρκινώματος του μαστού από δεδομένα μαστογραφίας και από το ιστορικό των ασθενών.

Οι Pedreira et al. (2009)[91] ακολούθησαν μεθοδολογία βασισμένη σε νευρωνικά δίκτυα για να δημιουργήσουν ένα εργαλείο υποστήριξης απόφασης για την επιλογή της έντασης θεραπείας σε παιδιατρικές περιπτώσεις οξείας λεμφοβλαστικής λευχαιμίας. Το σύνολο δεδομένων που χρησιμοποιήθηκε περιέχει 189 πιθανά χαρακτηριστικά εισόδου, για τις 168 περιπτώσεις παιδιών που εξετάστηκαν. Τα χαρακτηριστικά οργανώθηκαν σε τρεις βασικές κατηγορίες. Η πρώτη κατηγορία είναι τα κλινικά χαρακτηριστικά που προκύπτουν κατά τη διάγνωση, όπως για παράδειγμα φύλο, φυλή, ημερομηνία διάγνωσης, ημερομηνία γέννησης, παρουσία/απουσία απώλειας βάρους, πυρετός, αναιμία, αρθρίτιδα, αιμορραγία, διογκωμένοι λεμφικοί κόμβοι, διογκωμένο ήπαρ και σπλήνα, λοιμώδης εστίαση, κοιλιακό άλγος, άλγος οστών, μεσοθωράκιος μάζα, και κοιλιακή μάζα. Η δεύτερη κατηγορία είναι τα εργαστηριακά χαρακτηριστικά που προκύπτουν από τη διάγνωση, όπως το πλήθος ερυθρών αιμοσφαιρίων, η συγκέντρωση αιμοσφαιρίνης, ο αιματοκρίτης, πλήθος λευκών αιμοσφαιρίων και η τρίτη κατηγορία είναι χαρακτηριστικά που σχετίζονται με την θεραπεία όπως για παράδειγμα πλήρη ανάκαμψη στην 33ή ημέρα θεραπείας, συνολικός αριθμός μυελοβλαστοκυττάρων στο αίμα την 8ή ημέρα θεραπείας. Το προτεινόμενο σύστημα κατάφερε να ανιχνεύσει καλύτερα τις περιπτώσεις που χρειάζονται εντατική



θεραπεία, επιδεικνύοντας καλύτερη απόδοση ανίχνευσης των περιπτώσεων αυτών συγκριτικά με το χρησιμοποιούμενο πρωτόκολλο θεραπείας των γιατρών.

Σε μια άλλη εργασία οι Glass et al. (1998)[89] χρησιμοποιούν ένα υβριδικό σύστημα, το οποίο συνδυάζει αυτο-οργανούμενους χάρτες Kohonen (Self-Organizing Maps - SOMs) με πολυ-επίπεδα Perceptrons για να μελετήσει την απόκριση του παιδιατρικού οστεοσαρκώματος (pediatric osteosarcoma) στη χημειοθεραπεία με χρήση εικόνων μαγνητικής τομογραφίας.

Οι Dua et al. (2004)[89] χρησιμοποίησαν τα νευρωνικά δίκτυα ως μια μέθοδο επικύρωσης μιας άλλης τεχνικής, της φασματοσκοπίας ηλεκτρικής εμπέδησης (electrical impedance spectroscopy) για το διαχωρισμό του βασικοκυτταρικού καρκινώματος (basal cell carcinoma - BCC) από της κακοήθεις βλάβες του δέρματος (benign skin lesion).

Μια άλλη εφαρμογή των νευρωνικών δικτύων είναι η ταξινόμηση των περιπτώσεων απόρριψης μοσχευμάτων νεφρού με χρήση ιστολογικών χαρακτηριστικών από τους Furness et al. (1999)[90]. Σε σύγκριση με τη λογιστική παλινδρόμηση (logistic regression) και τις συμβατικές ιστοπαθολογικές αναφορές από ειδικούς, τα νευρωνικά δίκτυα προέβλεψαν καλύτερα τις περιπτώσεις απόρριψης.

Οι Mobley et al. (2000)[90] χρησιμοποίησαν νευρωνικά δίκτυα για την πρόβλεψη της στένωσης στεφανιαίας αρτηρίας από αγγειογραφικά δεδομένα. Η τεχνική αυτή αναγνώρισε επιπλέον ασθενείς, ο οποίοι φαινόταν ότι δεν χρειάζονται αγγειογραφία.

Οι Campana et al. (1999)[90] πραγματοποίησαν μια μελέτη στην οποία γίνεται πρόβλεψη της εμφάνισης σχιζοφρένειας από δυσλειτουργίες στη δυνατότητα εντοπισμού που διαθέτει το ανθρώπινο σύστημα όρασης (eye-tracking dysfunction). Μελετήθηκαν οι ομαλές κινήσεις των οφθαλμών για την παρακολούθηση κάποιου στόχου (Smooth pursuit eye movements - SPEM), χρησιμοποιώντας τα εξής χαρακτηριστικά: μέγιστη ταχύτητα οφθαλμών (Peak eye velocity - PV) σε μοίρες/δευτερόλεπτο, μέγιστο κέρδος (Peak gain - pGA), το οποίο προκύπτει διαιρώντας το PV του οφθαλμού με το PV του ερεθίσματος (η τιμή αυτή δείχνει την ικανότητα του ατόμου να ταιριάζει την ταχύτητα του οφθαλμού με την ταχύτητα του στόχου – για παράδειγμα τιμή 1.00 σημαίνει τέλεια ικανότητα παρακολούθησης), συνολική αρμονική παραμόρφωση (total harmonic distortion - THD) η οποία εκφράζεται σε ποσοστό (τιμή πάνω από 20% σημαίνει ότι το άτομο δεν μπορεί να παρακολουθήσει περιοδικές κινήσεις του ερεθίσματος), πλήθος σακκαδικών κινήσεων (number of saccades - SACC), οι οποίες είναι απότομες σπασμωδικές κινήσεις των οφθαλμών, όταν αλλάζει το σημείο προσήλωσης. Σε σύγκριση με τη διαχωριστική ανάλυση (Discriminant analysis), η ανάλυση της απόδοσης εντοπισμού του συστήματος όρασης από νευρωνικά δίκτυα ταξινομεί επιτυχώς ως σχιζοφρενείς περισσότερους ασθενείς (76.9% σε αντίθεση με 66.2% με διαχωριστική ανάλυση).

Τα νευρωνικά δίκτυα ανάστροφης μετάδοσης σφάλματος εφαρμόστηκαν επιτυχώς από τους Modai et al. (1999)[90] για την πρόβλεψη σοβαρών τάσεων προς αυτοκτονία και

απομόνωσαν πολλά χαρακτηριστικά διαχωρισμού των περιπτώσεων αυτών τα οποία δεν είχαν ανιχνευτεί από τη χρήση λογιστικής παλινδρόμησης.

Οι Lindahl et al. (1999)[90] μελέτησαν την περιγραφή της έκτασης και του βαθμού σοβαρότητας των ελαττωμάτων κατά την αιμάτωση του μυοκαρδίου (myocardial perfusion defects) με χρήση SPET (single photon emission tomography) σπινθηρογραφημάτων. Τα νευρωνικά δίκτυα εμφάνισαν όμοια απόδοση με την κλινική αξιολόγηση (70% επιτυχής ταξινόμηση).

Οι Li et al. (2000)[90] αξιολόγησαν την ανάγκη για νευροχειρουργική επέμβαση σε τραύματα, με χρήση νευρωνικών δικτύων. Τα νευρωνικά δίκτυα παρήγαγαν καλύτερα αποτελέσματα από την λογιστική παλινδρόμηση. Επίσης, τα πολύ-επίπεδα Perceptrons εμφάνισαν καλύτερη απόδοση από τα δίκτυα Συναρτήσεων Ακτινικής Βάσης.

Ο Scott (1999) [90] μελέτησε την πιθανότητα πνευμονικής εμβολής από σαρώσεις αερισμού-αιμάτωσης (ventilation-perfusion scans) χρησιμοποιώντας νευρωνικά δίκτυα. Οι Cerrito et al. (1999) [90] ασχολήθηκαν με την ανίχνευση μη ορατών χειρουργικών σφαλμάτων αναστόμωσης σε στεφανιαία αρτηρία από δεδομένα ροής εμβολίων σε σκύλους διάφορων διασταυρώσεων.

Σε μια άλλη εφαρμογή, οι Edwards et al. (1999)[90] μελέτησαν τη δυνατότητα πρόβλεψης θνησιμότητας μετά από ενδοεγκεφαλική αιμορραγία. Τα νευρωνικά δίκτυα ταξινόμησαν με πλήρη επιτυχία (100% ακρίβεια) τους ασθενείς ως προς την θνησιμότητα χρησιμοποιώντας χαρακτηριστικά όπως: ηλικία, φύλο, φυλή, ύπαρξη υδροκεφάλου (hydrocephalus), μέση αρτηριακή πίεση, παλμική πίεση, σκορ σε κλίμακα Glasgow Coma, ενδοκοιλιακή αιμορραγία, μέγεθος αιματώματος, περιοχή αιματώματος, μετατόπιση επίφυσης, ιστορικό διαβήτη, ιστορικό υπέρτασης. Το μοντέλο λογιστικής παλινδρόμησης πέτυχε ακρίβεια 85%.

Οι Herman et al. (1999)[90] εφάρμοσαν τα νευρωνικά δίκτυα για την πρόβλεψη του δείκτη «κάθαρση κρεατινίνης (creatinine clearance)» σε ασθενείς που είναι φορείς του ιού HIV, χρησιμοποιώντας κλινικά και εργαστηριακά δεδομένα. Τα κλινικά χαρακτηριστικά που χρησιμοποιήθηκαν είναι τα εξής: ηλικία, ιδανικό βάρος σώματος, πραγματικό βάρος σώματος, επιφάνεια σώματος, ύψος. Επίσης χρησιμοποιήθηκαν και τα εξής εργαστηριακά χαρακτηριστικά: συγκέντρωση νατρίου, καλίου, ασπαρτικής αμινοτρανσφεράσης (aspartate aminotransferase), αμινοτρανσφεράσης της αλανίνης (alanine aminotransferase), πλήθος ερυθρών αιμοσφαιρίων, αριθμός αιμοπεταλίων, πλήθος λευκών αιμοσφαιρίων, συγκέντρωση γλυκόζης, συγκέντρωση κρεατινίνης στον ορό, επίπεδα αζώτου ουρίας αίματος, επίπεδα λευκωματίνης (αλβουμίνη). Η μόνη μεταβλητή εξόδου του νευρωνικού δικτύου είναι η κάθαρση κρεατινίνης. Τα νευρωνικά δίκτυα εμφάνισαν μεγαλύτερη ακρίβεια συγκριτικά με το ευρέως χρησιμοποιούμενο κλινικό πρωτόκολλο.

Οι Kirby et al. (1999)[90] χρησιμοποίησαν νευρωνικά δίκτυα για την πρόβλεψη της άπνοιας ύπνου (obstructive sleep apnea - OSA) από 23 κλινικά κριτήρια. Τα κριτήρια αυτά είναι δημογραφικά (ηλικία, φύλο, δείκτης μάζας σώματος, περιφέρεια λαιμού), κλινικά (όπως για παράδειγμα υπέρταση, κατανάλωση αλκοόλ, χρόνιο ροχαλητό) είτε προέρχονται από φυσική εξέταση (διόγκωση μαλακής υπερώας, συνωστισμός στοματοφάρυγγα).

Οι Chen et al. (1999)[90] πραγματοποίησαν πρόβλεψη των επιπέδων της ουσίας τακρόλιμους (tacrolimus) σε ασθενείς με μεταμόσχευση. Τα νευρωνικά δίκτυα που χρησιμοποιήθηκαν πέτυχαν ακρίβεια 91.3%.

Τα νευρωνικά δίκτυα έχουν χρησιμοποιηθεί επίσης για την αξιοποίηση κυτταρικών και γενετικών δεδομένων. Οι Makoto Takahashi et al. (2010)[92] πραγματοποίησαν διαγνωστική ταξινόμηση περιπτώσεων σχιζοφρένειας, με ανάλυση υπογραφών έκφρασης γονιδίων στο αίμα (blood-based gene expression signatures) χρησιμοποιώντας νευρωνικά δίκτυα. Οι Narayanan et al. (2003)[93] χρησιμοποίησαν νευρωνικά δίκτυα ενός επιπέδου για ανάλυση της έκφρασης γονιδίων. Το πρόβλημα που αντιμετωπίζει η ανάλυση έκφρασης γονιδίων, δεδομένου της αναντιστοιχίας μεταξύ του αριθμού των γονιδίων (συνήθως χιλιάδων) και του αριθμού των ατόμων στο δείγμα (συνήθως μερικών δεκάδων), είναι η αναγνώριση των συγκεκριμένων γονιδίων που βοηθούν (χωριστά ή σε συνδυασμούς) στην ταξινόμηση των ατόμων. Οι προηγούμενες προσεγγίσεις, για να αντιμετωπίσουν το πρόβλημα των υψηλών διαστάσεων, χρησιμοποιούν τεχνικές μάθησης με επίβλεψη ή χωρίς επίβλεψη που δίνουν ως αποτέλεσμα μικρότερες ομάδες γονιδίων, αλλά από τις ομάδες αυτές δεν προκύπτουν κανόνες ταξινόμησης. Αυτό παρατηρείται κυρίως όταν υπάρχουν χρονικά δεδομένα μικροσυστοιχιών, τα οποία αναπαριστούν τη δραστηριότητα των γονιδίων σε ένα κύτταρο, ιστό ή οργανισμό με την πάροδο του χρόνου. Στην εργασία αυτή παρουσιάζονται μέθοδοι που χρησιμοποιούν νευρωνικά δίκτυα ενός επιπέδου για τη μοντελοποίηση μη χρονικών και χρονικών δεδομένων από μικροσυστοιχίες.

Οι Lancashire et al.(2008)[94] μελέτησαν με προσέγγιση νευρωνικών δικτύων τη δυνατότητα αναγνώρισης των υπογραφών μετάφρασης γονιδίων, οι οποίες είναι ενδεικτικές για τους υποδοχείς οιστρογόνων και της κατάστασης των λεμφαδένων. Σε μια άλλη εφαρμογή οι Huang et al.(2003)[95] πραγματοποίησαν ομαδοποίηση των προτύπων έκφρασης των γονιδίων και εξαγωγή σχέσεων σε δίκτυα γονιδίων, με χρήση νευρωνικών δικτύων.

## 3.5 Μηχανές Διανυσμάτων Υποστήριξης

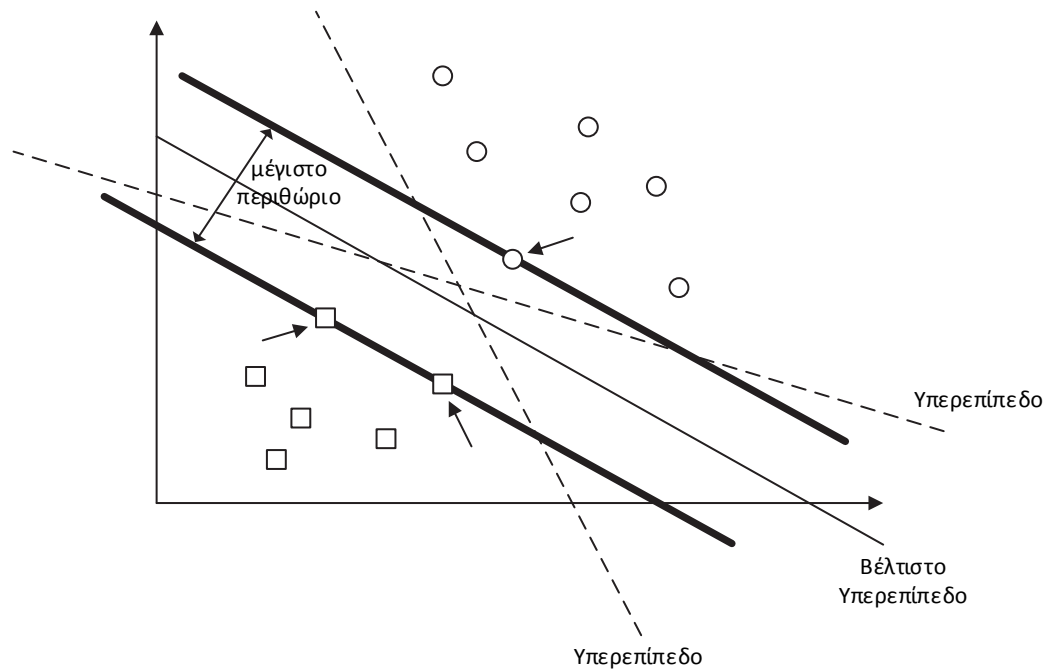
### 3.5.1 Εισαγωγή

Οι **μηχανές διανυσμάτων υποστήριξης** (Support Vector Machines - SVMs) είναι από τις νεότερες τεχνικές μάθησης υπό επίβλεψη. Η μεθοδολογία αυτή προτάθηκε από τον Vapnik (Boser et. al. 1992, Cortes et al. 1995, Vapnik 1995, 1998)[46] και μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε προβλήματα ταξινόμησης και μη γραμμικής παλινδρόμησης.

Η βασική ιδέα των μηχανών διανυσμάτων υποστήριξης είναι η **κατασκευή ενός υπερ-επιπέδου**, το οποίο θα αποτελέσει την επιφάνεια απόφασης, με τέτοιο τρόπο ώστε να **μεγιστοποιείται η απόσταση** που διαχωρίζει τα πλησιέστερα δείγματα που ανήκουν σε διαφορετικές κλάσεις [46].

Ο στόχος της ταξινόμησης με διανύσματα υποστήριξης είναι η σχεδίαση ενός υπολογιστικά αποδοτικού τρόπου για την εκμάθηση κατάλληλων διαχωριστικών υπερεπιπέδων, τα οποία βρίσκονται σε έναν υψηλών διαστάσεων διανυσματικό χώρο. Τα κατάλληλα υπερ-επίπεδα είναι εκείνα που βελτιστοποιούν τα φράγματα στο σφάλμα γενίκευσης. Όπως έχει αναφερθεί, η γενίκευση (generalization) είναι η διαδικασία ταξινόμησης νέων δεδομένων, τα οποία δεν υπάρχουν στο σύνολο δεδομένων εκπαίδευσης. Για να είναι υπολογιστικά αποδοτικοί, οι αλγόριθμοι εκπαίδευσης που θα χρησιμοποιηθούν θα πρέπει να μπορούν να χειριστούν σύνολα δεδομένων της τάξης των 100000 δειγμάτων [96].

Η βασική ιδέα της μεθοδολογίας αυτής μπορεί να δειχθεί, αν θεωρήσουμε δυο κλάσεις και δυο χαρακτηριστικά για ένα σύνολο δεδομένων, όπως φαίνεται στην Εικόνα 3.57 [35]. Οι δυο ομάδες που σχηματίζουν τα δεδομένα είναι εμφανείς. Σε αυτή την περίπτωση, οι μηχανές διανυσμάτων υποστήριξης θα υπολογίσουν την εξίσωση της ευθείας που θα διαχωρίζει τις δυο ομάδες με τη μέγιστη δυνατή απόσταση, το οποίο σημαίνει ότι η απόσταση μεταξύ της ευθείας και των πλησιέστερων δειγμάτων (σημείων) μεγιστοποιείται. Αν το πλήθος των χαρακτηριστικών ήταν μεγαλύτερο, τότε οι διαστάσεις του χώρου θα ήταν περισσότερες και επομένως προκύπτει ένα υπερεπίπεδο αντί της ευθείας. Το υπερεπίπεδο αυτό ορίζεται από ένα υποσύνολο των σημείων των δυο κλάσεων, τα οποία ονομάζονται **Διανύσματα Υποστήριξης (Support Vectors)**. Τα σημεία αυτά έχουν σημειωθεί με βέλη στο συγκεκριμένο παράδειγμα (Εικόνα 3.61) [35].



**Εικόνα 3.61:** Μέγιστο Περιθώριο και Βέλτιστο Υπερεπίπεδο

Οι Μηχανές Διανυσμάτων Υποστήριξης μπορούν να χρησιμοποιηθούν για μη γραμμική ταξινόμηση, χρησιμοποιώντας **μη γραμμικές συναρτήσεις πυρήνα** (non-linear kernel). Η μη γραμμική συνάρτηση πυρήνα είναι μια μαθηματική συνάρτηση η οποία μετασχηματίζει τα δεδομένα από τον γραμμικό διανυσματικό χώρο των χαρακτηριστικών (linear feature space) σε μη γραμμικό διανυσματικό χώρο. Διαφορετικές συναρτήσεις πυρήνα θα πρέπει να εφαρμοστούν σε κάθε σύνολο δεδομένων προβλήματος, ώστε να βρεθεί μια συνάρτηση αποδίδει καλύτερα για το εκάστοτε πρόβλημα [35],[97].

### 3.5.2 Γραμμικώς Διαχωρίσιμα Δεδομένα

Το πιο απλό μοντέλο των Μηχανών Διανυσμάτων Υποστήριξης είναι ο **Ταξινομητής Μέγιστου Περιθωρίου (Maximal Margin Classifier)**, το οποίο μπορεί να λειτουργήσει μόνο σε δεδομένα που είναι γραμμικώς διαχωρίσιμα, οπότε και δεν μπορεί να εφαρμοστεί σε πραγματικές εφαρμογές. Με βάση όμως το μοντέλο αυτό συνθέτονται περισσότερο πολύπλοκες Μηχανές Διανυσμάτων Υποστήριξης.

Θεωρούμε πρόβλημα ταξινόμησης με δυο κλάσεις,  $P$  και  $N$ . Αν τα δεδομένα του προβλήματος είναι διαχωρίσιμα, τότε υπάρχει  $(w, b)$  τέτοιο ώστε [35],[96]:

$$w^T x_i^+ + b \geq 1, \text{ για κάθε } x_i^+ \in P \quad (3.118)$$

$$\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i^- + b \leq -1, \text{ για κάθε } \mathbf{x}_i^- \in N \quad (3.119)$$

Το διάνυσμα των βαρών  $\mathbf{w}$  είναι κάθετο στο υπερεπίπεδο. Είναι εύκολο να δειχθεί ότι όταν είναι δυνατό να διαχωριστούν γραμμικά δυο κλάσεις, μπορεί να βρεθεί ένα βέλτιστο υπερεπίπεδο το οποίο διαχωρίζει τις κλάσεις αυτές. Το υπερεπίπεδο προκύπτει από την ελαχιστοποίηση του τετραγώνου της νόρμας του. Το συγκεκριμένο πρόβλημα ελαχιστοποίησης μπορεί να εκφραστεί ως ένα **πρόβλημα Κυρτού Τετραγωνικού Προγραμματισμού** (Convex Quadratic Programming QP) [35],[96]:

$$\min_{\mathbf{w}, b} \Phi(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2 \quad (3.120)$$

$$\text{με τον περιορισμό: } y_i(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + b) \geq 1, i = 1, \dots, l \quad (3.121)$$

Ορίζουμε το **συναρτησιακό περιθώριο (functional margin)** του δείγματος  $(\mathbf{x}_i, y_i)$  σε σχέση με ένα υπερεπίπεδο  $(\mathbf{w}, b)$  ως την ποσότητα:

$$\gamma_i = y_i(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + b) \quad (3.122)$$

καθώς επίσης και το **γεωμετρικό περιθώριο (geometrical margin)** ως το συναρτησιακό περιθώριο της κανονικοποιημένης γραμμικής συνάρτησης  $\frac{\mathbf{w}^T}{\|\mathbf{w}\|} \mathbf{x}_i + \frac{b}{\|\mathbf{w}\|}$ :

$$\rho_i = y_i \left( \frac{\mathbf{w}^T}{\|\mathbf{w}\|} \mathbf{x}_i + \frac{b}{\|\mathbf{w}\|} \right) \quad (3.123)$$

Αν  $\gamma_i > 0$  τότε το δείγμα  $(\mathbf{x}_i, y_i)$  έχει ταξινομηθεί σωστά. Η κατανομή του συναρτησιακού περιθωρίου του υπερεπιπέδου  $(\mathbf{w}, b)$  ως προς ένα σύνολο δεδομένων εκπαίδευσης  $S$  είναι η κατανομή των περιθωρίων στο  $S$ . Σε κάποιες περιπτώσεις γίνεται αναφορά στην ελάχιστη κατανομή περιθωρίου του υπερεπιπέδου  $(\mathbf{w}, b)$  ως προς ένα σύνολο δεδομένων εκπαίδευσης  $S$ . Αν αντικατασταθεί το συναρτησιακό περιθώριο με το γεωμετρικό περιθώριο παίρνουμε την γραμμική κανικοποιημένη συνάρτηση  $\left( \frac{\mathbf{w}^T}{\|\mathbf{w}\|}, \frac{b}{\|\mathbf{w}\|} \right)$ , η οποία μετράει τις Ευκλείδειες αποστάσεις των σημείων από το όριο απόφασης στο διανυσματικό χώρο εισόδου. Το **περιθώριο ενός συνόλου εκπαίδευσης  $S$**  ορίζεται ως το μέγιστο γεωμετρικό περιθώριο, από τα γεωμετρικά περιθώρια όλων των υπερεπιπέδων. Το γεωμετρικό περιθώριο ενός γραμμικά διαχωρίσιμου συνόλου δεδομένων θα είναι θετικό [35],[96],[97].

Το γεωμετρικό περιθώριο του υπερεπιπέδου που προκύπτει στο πρόβλημα ταξινόμησης που έχουμε θεωρήσει θα είναι [96]:

$$\rho = \frac{1}{2} \left( \frac{\mathbf{w}^T}{\|\mathbf{w}\|} \mathbf{x}^+ - \frac{\mathbf{w}^T}{\|\mathbf{w}\|} \mathbf{x}^- \right) = \frac{1}{2} \frac{1}{\|\mathbf{w}\|} (\mathbf{w}^T \mathbf{x}^+ - \mathbf{w}^T \mathbf{x}^-) = \frac{1}{\|\mathbf{w}\|} \quad (3.124)$$

Στην περίπτωση των γραμμικά διαχωρίσιμων δεδομένων, κατά την εύρεση του βέλτιστου επιπέδου που διαχωρίζει τις κλάσεις τα σημεία που βρίσκονται πάνω στο περιθώριο του υπερεπιπέδου ονομάζονται **Διανύσματα Υποστήριξης (Support Vectors)**. Η λύση του προβλήματος βελτιστοποίησης εκφράζεται ως γραμμικός συνδυασμός των Διανυσμάτων Υποστήριξης. Όλα τα υπόλοιπα σημεία αγνοούνται, καθώς δεν συνεισφέρουν στον υπολογισμό της λύσης. Επομένως, η πολυπλοκότητα του μοντέλου μιας Μηχανής Διανυσμάτων Υποστήριξης δεν επηρεάζεται από το πλήθος των χαρακτηριστικών του συνόλου δεδομένων εκπαίδευσης (το πλήθος των Διανυσμάτων Υποστήριξης που προκύπτουν συνήθως είναι μικρό). Συνεπώς, η μέθοδος αυτή μπορεί να αντιμετωπίσει προβλήματα στα οποία το πλήθος των χαρακτηριστικών είναι μεγάλο σε σχέση με το πλήθος των δειγμάτων [35].

### 3.5.3 Δυϊκό Πρόβλημα Βελτιστοποίησης

Ο μετασχηματισμός του προβλήματος κυρτής βελτιστοποίησης που ορίσαμε παραπάνω, χρησιμοποιώντας τους **πολλαπλασιαστές Lagrange** οδηγεί σε μια εναλλακτική δυϊκή περιγραφή η οποία μπορεί να επιλυθεί ευκολότερα από το αρχικό πρόβλημα, αφού ο άμεσος χειρισμός των περιορισμών με ανισότητες είναι ιδιαίτερα δύσκολος. Οι πολλαπλασιαστές Lagrange ονομάζονται δυϊκές μεταβλητές. Η δυϊκή μέθοδος βασίζεται στην ιδέα ότι οι πολλαπλασιαστές Lagrange είναι οι βασικοί άγνωστοι του προβλήματος που θα πρέπει να υπολογιστούν.

Υπάρχει η δυνατότητα μετατροπής του αρχικού προβλήματος στο δυϊκό του με το να τεθούν ίσες με το μηδέν όλες οι παράγωγοι της συνάρτησης Lagrange ως προς τις αρχικές μεταβλητές, οπότε και αφαιρείται η επίδρασή τους. Αυτό αντιστοιχεί στον υπολογισμό της συνάρτησης:

$$\theta(\alpha, b) = \inf_{\mathbf{w} \in \Omega} L(\mathbf{w}, b, \alpha) \quad (3.125)$$

Η συνάρτηση που προκύπτει περιέχει μόνο δυϊκές μεταβλητές και θα πρέπει να μεγιστοποιηθεί, με απλούστερους περιορισμούς [96].

Η συνάρτηση Lagrange για το αρχικό πρόβλημα θα είναι η εξής:

$$L(\mathbf{w}, b, \alpha) = \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2 - \sum_{i=1}^l \alpha_i [y_i(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + b) - 1] \quad (3.126)$$

όπου  $\alpha_i$  είναι οι πολλαπλασιαστές Lagrange.

Το αντίστοιχο δυαδικό πρόβλημα προκύπτει παραγωγίζοντας ως προς  $\mathbf{w}$  και  $b$  και θεωρώντας στατικότητα, με τις παραγώγους αυτές να ισούται με μηδέν:

$$\frac{\partial L(\mathbf{w}, b, \alpha)}{\partial \mathbf{w}} = \mathbf{w} - \sum_{i=1}^l y_i \alpha_i \mathbf{x}_i = 0 \quad (3.127)$$

$$\frac{\partial L(\mathbf{w}, b, \alpha)}{\partial b} = \sum_{i=1}^l y_i \alpha_i = 0 \quad (3.128)$$

Με αντικατάσταση των εξισώσεων (3.127) και (3.128) στην εξίσωση (3.126) προκύπτει:

$$L(\mathbf{w}, b, \alpha) = \sum_{i=1}^l \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^l \sum_{j=1}^l y_i y_j \alpha_i \alpha_j \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j \quad (3.129)$$

οπότε το αρχικό πρόβλημα μετασχηματίζεται στο **δυϊκό** του, το οποίο είναι το εξής [96],[97]:

$$\max_a W(a) = \sum_{i=1}^l \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^l \sum_{j=1}^l y_i y_j \alpha_i \alpha_j \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j \quad (3.130)$$

$$\text{με τον περιορισμό: } \sum_{i=1}^l y_i \alpha_i = 0, \alpha_i \geq 0, i = 1, \dots, l \quad (3.131)$$

Έστω ότι οι παράμετροι  $\alpha^*$  επιλύουν το **πρόβλημα τετραγωνικής βελτιστοποίησης** που περιγράφεται από τις εξισώσεις (3.130) και (3.131), δοθέντος ενός γραμμικά διαχωρίσιμου συνόλου δεδομένων εκπαίδευσης  $D = \{(\mathbf{x}_i, y_i)\}_{i=1}^l$ . Τότε, το **διάνυσμα βάρους  $\mathbf{w}^*$**  [96],[97]:

$$(3.132)$$

$$\mathbf{w}^* = \sum_{i=1}^l \alpha_i^* y_i \mathbf{x}_i$$

δημιουργεί το **υπερεπίπεδο μεγίστου περιθωρίου**, με γεωμετρικό περιθώριο  $\rho = 1/\|\mathbf{w}^*\|$ .

Η τιμή της παραμέτρου  $b$  δεν εμφανίζεται στο δυϊκό πρόβλημα, οπότε το  $b^*$  θα πρέπει να υπολογιστεί χρησιμοποιώντας τους αρχικούς περιορισμούς [96]:

$$b^* = -\frac{\max_{y_i=-1}(\mathbf{w}^{*T} \mathbf{x}_i) + \min_{y_i=1}(\mathbf{w}^{*T} \mathbf{x}_i)}{2} \quad (3.133)$$



Οι συμπληρωματικές συνθήκες Karush-Kuhn-Tycker από την θεωρία βελτιστοποίησης εφαρμόζονται στο πρόβλημα αυτό και δίνουν χρήσιμες πληροφορίες για την μορφή της λύσης. Για τις βέλτιστες λύσεις  $\alpha^*$ ,  $(\mathbf{w}^*, b)$  ισχύει [96]:

$$\alpha_i^* [y_i (\mathbf{w}^{*T} \mathbf{x}_i + b^*) - 1] = 0, i = 1, \dots, l \quad (3.134)$$

Από την εξίσωση (3.134) προκύπτουν οι εξής παρατηρήσεις:

- Αν  $y_i (\mathbf{w}^{*T} \mathbf{x}_i + b^*) \neq 1$ , οπότε το  $\mathbf{x}_i$  δεν είναι Διάνυσμα Υποστήριξης, τότε  $\alpha_i^* = 0$ .
- Αν  $\alpha_i^* \neq 0$  τότε  $y_i (\mathbf{w}^{*T} \mathbf{x}_i + b^*) = 1$  οπότε το  $\mathbf{x}_i$  είναι Διάνυσμα Υποστήριξης.

Μόνο τα Διανύσματα Υποστήριξης συμμετέχουν στον υπολογισμό του διανύσματος βάρους  $\mathbf{w}^*$  και κατά συνέπεια στο βέλτιστο υπερεπίπεδο [96].

### 3.5.4 Βελτιστοποίηση Χαλαρού Περιθωρίου

Ο Ταξινομητής Μεγίστου Περιθωρίου (Maximal Margin Classifier) αποτελεί σημαντική έννοια και είναι το σημείο εκκίνησης για την ανάλυση και κατασκευή των Μηχανών Διανυσμάτων Υποστήριξης, όμως δεν μπορεί να εφαρμοστεί σε πρακτικά προβλήματα. Εάν τα δεδομένα του προβλήματος εμπριέχουν **θόρυβο**, τότε δεν θα είναι γραμμικώς διαχωρίσιμα στον διανυσματικό χώρο των χαρακτηριστικών. Το βασικό πρόβλημα του συγκεκριμένου ταξινομητή είναι ότι προσπαθεί να παράγει μια υπόθεση που είναι πάντα συνεπής, χωρίς να υπάρχει η δυνατότητα εμφάνισης σφάλματος εκπαίδευσης. Η συμπεριφορά αυτή προκύπτει από την έννοια του περιθωρίου, το οποίο παίρνει πάντα αρνητικές τιμές αν τα δεδομένα δεν διαχωρίζονται επακριβώς [96].

Η εξάρτηση από μια ποσότητα όπως το περιθώριο, ενέχει τον κίνδυνο εγκλωβισμού του συστήματος στις **ιδιοσυγκρασίες συγκεκριμένων δειγμάτων** που δεν είναι αντιπροσωπευτικά της συμπεριφοράς των δεδομένων. Σε δεδομένα πρακτικών εφαρμογών όπου περιέχουν θόρυβο, το γεγονός αυτό μπορεί να επηρεάσει σημαντικά την απόδοση του ταξινομητή.

Επίσης, στην περίπτωση που **τα δεδομένα δεν είναι γραμμικώς διαχωρίσιμα**, το πρόβλημα βελτιστοποίησης δεν μπορεί να επιλυθεί καθώς η περιοχή των ενδεχόμενων λύσεων είναι κενή και το δυϊκό πρόβλημα έχει μη-φραγμένη αντικειμενική συνάρτηση.

Για να αποφευχθεί το συγκεκριμένο πρόβλημα, θα πρέπει να χρησιμοποιηθούν περισσότερο εύρωστα μέτρα της κατανομής του περιθωρίου. Τα μέτρα αυτά μπορούν να ανεχθούν θόρυβο, ακραίες τιμές (outliers) και λαμβάνουν υπόψη τις θέσεις περισσότερων σημείων και όχι μόνο αυτών πλησιέστερα στο όριο. Σύμφωνα με αυτή τη στρατηγική,

εισάγονται **οι μεταβλητές χαλάρωσης (slack variables)  $\xi_i \geq 0$** , οι οποίες αλλάζουν τους περιορισμούς του προβλήματος [96]:

$$y_i(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + b) \geq 1 - \xi_i, i = 1, \dots, l \quad (3.135)$$

$$\xi_i \geq 0, i = 1, \dots, l \quad (3.136)$$

Με την εισαγωγή των μεταβλητών χαλάρωσης, η αντικειμενική συνάρτηση θα πρέπει να τροποποιηθεί ανάλογα, οπότε το πρόβλημα βελτιστοποίησης θα είναι:

$$\min_{\mathbf{w}, b, \xi} T(\mathbf{w}, \xi) = \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2 + C \sum_{i=1}^l \xi_i^2 \quad (3.137)$$

$$\begin{aligned} y_i(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + b) &\geq 1 - \xi_i, i = 1, \dots, l \\ \xi_i &\geq 0 \end{aligned} \quad (3.138)$$

Το πρόβλημα αυτό ονομάζεται **βελτιστοποίηση χαλαρού περιθωρίου (soft margin optimization)**. Στην πράξη η παράμετρος  $C$  παίρνει διάφορες τιμές και η απόδοση για κάθε τιμή της εξετάζεται με πειραματικές μεθόδους, χρησιμοποιώντας ξεχωριστό σύνολο δεδομένων για έλεγχο ή το σύνολο εκπαίδευσης με διασταυρωμένη επικύρωση (cross-validation) [96],[97].

Χρησιμοποιώντας τους πολλαπλασιαστές Lagrange, με όμοιο τρόπο όπως την ανάλυση που παρουσιάστηκε για τον Ταξινομητή Μεγίστου Περιθωρίου, μετασχηματίζουμε το πρόβλημα βελτιστοποίησης στο αντίστοιχο δυϊκό:

$$\max_a G(a) = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^l \sum_{j=1}^l \alpha_i \alpha_j y_i y_j \left( x_i^T x_j + \frac{1}{C} \delta_{ij} \right) + \sum_{i=1}^l a_i \quad (3.139)$$

$$\text{με τους περιορισμούς: } \sum_{i=1}^l a_i y_i = 0 \quad (3.140)$$

$$0 \leq a_i \leq C, i = 1, \dots, l \quad (3.141)$$

όπου  $\delta_{ij}$  είναι το  $\delta$  του Kronecker που ορίζεται να είναι 1 αν  $i = j$  και 0 διαφορετικά.

Οι συμπληρωματικές συνθήκες Karush-Kuhn-Tycker από την θεωρία βελτιστοποίησης σε αυτή τη περίπτωση θα έχουν ως εξής [96],[97]:

$$\alpha_i^* [y_i(\mathbf{w}^{*T} \mathbf{x}_i + b^*) - 1 + \xi_i] = 0, i = 1, \dots, l \quad (3.142)$$

Τότε, το διάνυσμα βάρους  $w^*$  που δίνει το βέλτιστο υπερεπίπεδο υπολογίζεται ομοίως ως εξής:

$$w^* = \sum_{i=1}^l a_i^* y_i x_i \quad (3.143)$$

Ομοίως σε αυτή την περίπτωση, **το  $x_i$  θα είναι Διάνυσμα Υποστήριξης** αν  $a_i^* \neq 0$  οπότε θα ισχύει  $y_i(w^{*T} x_i + b^*) + \xi_i = 1$ .

Θα πρέπει να επισημανθεί ότι οι μεταβλητές χαλάρωσης  $\xi_i$  και οι πολλαπλασιαστές Lagrange αυτών δεν εμφανίζονται στο δυϊκό πρόβλημα. Τα δυϊκά προβλήματα στις περιπτώσεις των γραμμικών και μη γραμμικών διαχωρίσιμων δεδομένων μοιάζουν σε αρκετά σημεία. Οι αντικειμενικές συναρτήσεις θα πρέπει να μεγιστοποιηθούν. Όμως στην περίπτωση των μη γραμμικών διαχωρίσιμων δεδομένων έχουμε τον πιο αυστηρό περιορισμό  $0 \leq a_i \leq C$  [1] [46].

### 3.5.5 Συναρτήσεις Πυρήνα

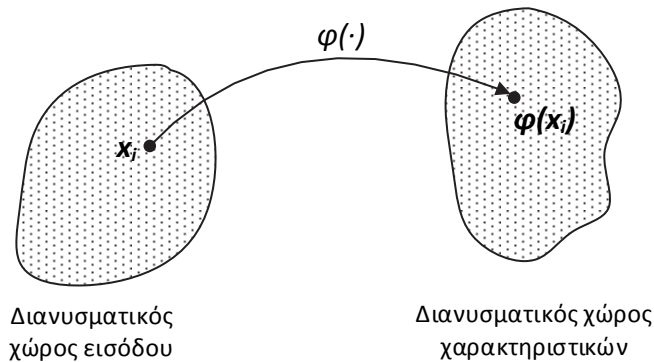
Τα περισσότερα προβλήματα σε πραγματικές εφαρμογές περιέχουν μη γραμμικές διαχωρίσιμα δεδομένα, για τα οποία δεν υπάρχει υπερεπίπεδο που να διαχωρίζει επιτυχώς τις δυο κλάσεις. Η λύση που παρέχουν οι Μηχανές Διανυσμάτων Υποστήριξης είναι η αντιστοίχιση των δεδομένων σε ένα διανυσματικό χώρο υψηλότερων διαστάσεων και στη συνέχεια εύρεση του βέλτιστου διαχωριστικού υπερεπιπέδου σε αυτόν το διανυσματικό χώρο [35].

Η ιδέα της Μηχανής Διανυσμάτων Υποστήριξης βασίζεται σε δυο μαθηματικές λειτουργίες οι οποίες συνοψίζονται ως εξής [46]:

1. Μη γραμμική αντιστοίχιση του διανύσματος εισόδου σε ένα υψηλών διαστάσεων διανυσματικό χώρο χαρακτηριστικών (feature space), ο οποίος διατηρείται κρυφός από την είσοδο και την έξοδο (Εικόνα 3.63)[98].
2. Εύρεση του βέλτιστου υπερεπιπέδου που διαχωρίζει τα δεδομένα, όπως αυτά έχουν μεταφερθεί στο διανυσματικό χώρο χαρακτηριστικών.

Η πρώτη λειτουργία βασίζεται στο **θεώρημα του Cover**, σχετικά με την διαχωρισιμότητα των δειγμάτων. Έστω ένας διανυσματικός χώρος εισόδου ο οποίος περιέχει μη γραμμικά διαχωρίσιμα δείγματα. Το θεώρημα του Cover αναφέρει ότι ο πολυδιάστατος διανυσματικός χώρος εισόδου μπορεί να μετασχηματιστεί σε ένα νέο

διανυσματικό χώρο, όπου τα δείγματα εκπαίδευσης μπορεί να είναι με υψηλή πιθανότητα γραμμικώς διαχωρίσιμα (Εικόνα 3.62) [46].

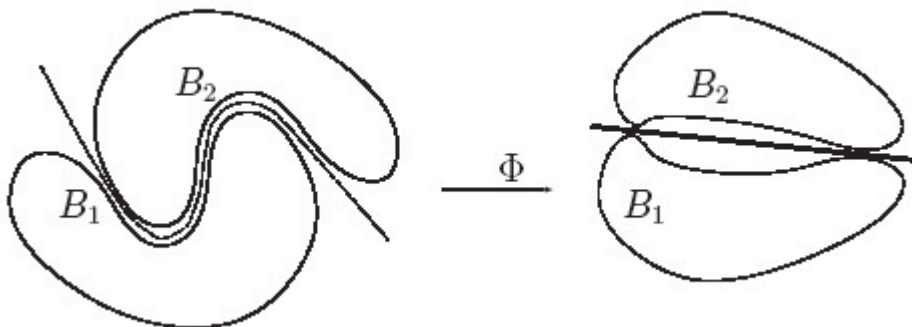


**Εικόνα 3.62:** Μη γραμμική αντιστοίχιση χώρου εισόδου σε χώρο χαρακτηριστικών

Για μπορεί να εφαρμοστεί το θεώρημα του Cover θα πρέπει να ικανοποιούνται **δύο συνθήκες** [46]:

1. Ο μετασχηματισμός να είναι μη γραμμικός.
2. Η διάσταση του διανυσματικού χώρου χαρακτηριστικών να είναι επαρκώς μεγάλη.

Το θεώρημα του Cover αναφέρεται αποκλειστικά στην πρώτη μαθηματική λειτουργία. Στη συνέχεια, θα πρέπει να βρεθεί το βέλτιστο υπερεπίπεδο που διαχωρίζει τα δεδομένα. Η δεύτερη μαθηματική λειτουργία εκμεταλλεύεται την ιδέα της εύρεσης του βέλτιστου διαχωριστικού επιπέδου, το οποίο ορίζεται ως γραμμική συνάρτηση διανυσμάτων από τον διανυσματικό χώρο των χαρακτηριστικών και όχι από τον διανυσματικό χώρο εισόδου [46].



**Εικόνα 3.63:** Μετασχηματισμός σε διανυσματικό χώρο υψηλότερης διάστασης ώστε να γίνει εφικτός ο διαχωρισμός

Έστω  $x$  διάνυσμα από τον διανυσματικό χώρο εισόδου, το οποίο έχει διάσταση  $m_0$ . Έστω  $\{\varphi_j(x)\}_{j=1}^{m_1}$  ένα σύνολο μη γραμμικών μετασχηματισμών από τον χώρο εισόδου στον χώρο χαρακτηριστικών. Θεωρείται ότι οι μετασχηματισμοί  $\varphi_j(x)$  έχουν οριστεί εκ των

προτέρων για όλα τα  $j$ . Με φάση τους μετασχηματισμούς αυτούς, ορίζουμε το υπερεπίπεδο που λειτουργεί ως επιφάνεια απόφασης ως εξής [46]:

$$\sum_{i=1}^{m_1} w_j \varphi_j(\mathbf{x}) + b = 0 \quad (3.144)$$

όπου το  $\{w_j\}_{j=1}^{m_1}$  δηλώνει ένα σύνολο από γραμμικά βάρη τα οποία συνδέουν των χώρο χαρακτηριστικών με τον διανυσματικό χώρο εξόδου (output space). Η εξίσωση (3.144) μπορεί να απλοποιηθεί θεωρώντας:

$$\sum_{i=1}^{m_1} w_j \varphi_j(\mathbf{x}) = 0 \quad (3.145)$$

όπου θεωρείται ότι  $\varphi_0(\mathbf{x}) = 1$  για όλα τα  $\mathbf{x}$ , έτσι ώστε το  $w_0$  να δηλώνει την παράμετρο  $b$ . Κατά συνέπεια, ορίζεται το διάνυσμα [46]:

$$\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}) = [\varphi_0(\mathbf{x}), \varphi_1(\mathbf{x}), \dots, \varphi_{m_1}(\mathbf{x})] \quad (3.146)$$

Το διάνυσμα  $\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x})$  αναπαριστά την «εικόνα» που παράγεται στον διανυσματικό χώρο χαρακτηριστικών από το διάνυσμα εισόδου  $\mathbf{x}$  (Εικόνα 3.62). Σε συνεπτυγμένη μορφή, η επιφάνεια απόφασης θα είναι:

$$\mathbf{w}^T \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}) = 0 \quad (3.147)$$

Οπότε, για το διάνυσμα  $\mathbf{w}$  θα ισχύει:

$$\mathbf{w} = \sum_{i=1}^l a_i y_i \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}_i) \quad (3.148)$$

όπου το διάνυσμα  $\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x})$  του χώρου χαρακτηριστικών αντιστοιχεί στο διάνυσμα εισόδου  $\mathbf{x}_i$ , στο  $i$ -στο δείγμα, με  $l$  το πλήθος των δειγμάτων. Γίνεται αντικατάσταση της εξίσωσης (3.148) στην εξίσωση (3.147):

$$\sum_{i=1}^l a_i y_i \boldsymbol{\varphi}^T(\mathbf{x}_i) \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}) = 0 \quad (3.149)$$

Ο όρος  $\boldsymbol{\varphi}^T(\mathbf{x}_i) \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x})$  αναπαριστά το εσωτερικό γινόμενο δυο διανυσμάτων, τα οποία παράγονται στο χώρο χαρακτηριστικών από το διάνυσμα εισόδου  $\mathbf{x}$  και το διάνυσμα εισόδου  $\mathbf{x}_i$  από το  $i$ -στο δείγμα.

Μπορούμε επομένως να εισάγουμε την **συνάρτηση Πυρήνα Εσωτερικού Γινομένου (Inner Product Kernel)**  $K(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i)$  [46]:

$$\mathbf{K}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i) = \boldsymbol{\varphi}^T(\mathbf{x}_i) \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}) = \sum_{j=0}^{m_1} \varphi_j(\mathbf{x}) \varphi_j(\mathbf{x}_i) \text{ για } i = 1, 2, \dots, l \quad (3.150)$$

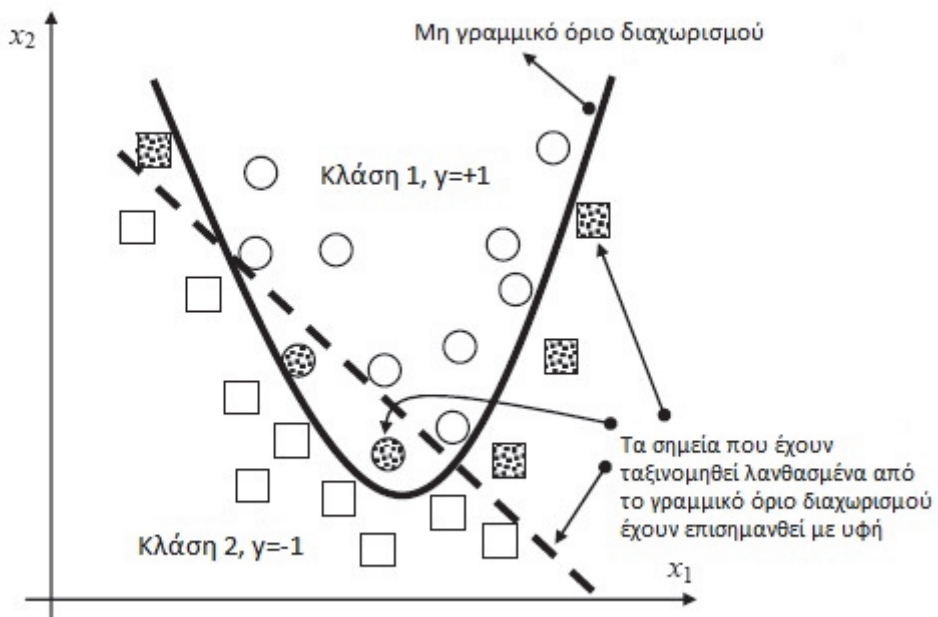
Από τον παραπάνω ορισμό προκύπτει ότι η **συνάρτηση Πυρήνα Εσωτερικού Γινομένου είναι συμμετρική ως προς τα ορίσματά της:**

$$K(x, x_i) = K(x_i, x) \text{ για όλα τα } i \quad (3.151)$$

Η συνάρτηση Πυρήνα Εσωτερικού Γινομένου  $K(x, x_i)$  μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την εύρεση του βέλτιστου υπερεπιπέδου στο διανυσματικό χώρο των χαρακτηριστικών χωρίς να χρειάζεται επακριβής έκφραση για το χώρο χαρακτηριστικών. Αυτό φαίνεται από την εξίσωση που καθορίζει το βέλτιστο υπερεπίπεδο [46]:

$$\sum_{i=1}^l a_i y_i K(x, x_i) = 0 \quad (3.152)$$

Η επιλογή της **κατάλληλης συνάρτησης Πυρήνα** για το εκάστοτε πρόβλημα είναι ιδιαίτερα σημαντική (Εικόνα 3.64 [98]), δεδομένου ότι καθορίζει το διανυσματικό χώρο χαρακτηριστικών που προκύπτει από τον μετασχηματισμό και στον οποίο θα πραγματοποιηθεί η ταξινόμηση των δεδομένων. Είναι κοινή πρακτική να δοκιμάζονται διάφορες μορφές συναρτήσεων Πυρήνα Εσωτερικού Γινομένου. Η απόδοσή τους υπολογίζεται πειραματικά, με τεχνικές επικύρωσης (για παράδειγμα διασταυρωμένη επικύρωση) και με βάση την απόδοση επιλέγεται η κατάλληλη συνάρτηση Πυρήνα. Για αυτό το λόγο ένας από τους περιορισμούς των Μηχανών Διανυσμάτων Υποστήριξης είναι η αργή διαδικασία εκπαίδευσης.



**Εικόνα 3.64:** Μη γραμμικώς διαχωρίσιμα δεδομένα που απαιτούν Πολυωνυμική συνάρτηση Πυρήνα

Η διαδικασία επιλογής της συνάρτησης Πυρήνα και των κατάλληλων τιμών για τις παραμέτρους της μπορεί να παρομοιαστεί με την επιλογή του πλήθους των κόμβων για ένα νευρωνικό δίκτυο. Εάν η συνάρτηση Πυρήνα είναι έγκυρη, η Μηχανή Διανυσμάτων Υποστήριξης θα λειτουργήσει σωστά, ακόμη και αν ο σχεδιαστής του συστήματος δεν γνωρίζει ακριβώς ποια χαρακτηριστικά των δεδομένων εκπαίδευσης χρησιμοποιούνται στον νέο διανυσματικό χώρο που προκύπτει [35].

Οι συναρτήσεις Πυρήνα  $K(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i)$ ,  $i = 1, 2, \dots, N$  που χρησιμοποιούνται συχνά στις διάφορες εφαρμογές είναι οι εξής [46],[35]:

- Πολυωνυμική Συνάρτηση: 
$$K(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i) = (\mathbf{x}^T \mathbf{x}_i + 1)^p \quad (3.153)$$

- Συνάρτηση Ακτινικής Βάσης: 
$$K(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i) = \exp\left(-\frac{1}{\sigma^2} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|^2\right) \quad (3.154)$$

- Υπερβολική Εφαπτομένη: 
$$K(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i) = \tanh(\beta_0 \mathbf{x}^T \mathbf{x}_i + \beta_1) \quad (3.155)$$

Η δύναμη  $p$  στην Πολυωνυμική Συνάρτηση, καθώς και οι παράμετροι  $\sigma^2$ ,  $\beta_0$  και  $\beta_1$  θα πρέπει να καθοριστούν εκ των προτέρων από τον σχεδιαστή του συστήματος.

### 3.5.6 Πλεονεκτήματα και Μειονεκτήματα

Οι Μηχανές Διανυσμάτων Υποστήριξης, παρέχουν ικανοποιητική απόδοση, σε προβλήματα που είναι δυνατόν να εφαρμοστούν. Παρακάτω παραθέτονται τα πλεονεκτήματά τους, συγκρίνοντάς τα παράλληλα με τα Νευρωνικά Δίκτυα [99]:

**1. Μεγιστοποίηση της δυνατότητας Γενίκευσης.** Κατά την διαδικασία εκπαίδευσης ενός ταξινομητή με νευρωνικά δίκτυα, το άθροισμα των τετραγώνων των σφαλμάτων μεταξύ των εξόδων και των επιθυμητών αποκρίσεων ελαχιστοποιείται. Συνεπώς, τα όρια των κλάσεων αλλάζουν καθώς μεταβάλλονται τα αρχικά βάρη, άρα αλλάζει και η ικανότητα γενίκευσης. Σε περίπτωση που τα δεδομένα είναι αραιά και γραμμικώς διαχωρίσιμα, η ικανότητα γενίκευσης επιδεινώνεται αρκετά. Αντιθέτως, η Μηχανή Διανυσμάτων Υποστήριξης εκπαιδεύεται ώστε να μεγιστοποιεί το περιθώριο, επομένως η ικανότητα γενίκευσης διατηρείται ακόμα σε περιπτώσεις αραιών και γραμμικώς διαχωρίσιμων δεδομένων.

**2. Αποφυγή τοπικών ελαχίστων.** Οι Μηχανές Διανυσμάτων Υποστήριξης αποφεύγουν τα τοπικά ελάχιστα διότι διατυπώνονται ως προβλήματα τετραγωνικού προγραμματισμού (Quadratic Programming), οπότε η μέθοδος καταλήγει σε γενική βέλτιστη λύση. Άλλες κατηγορίες ταξινομητών, όπως τα νευρωνικά δίκτυα, ενδεχομένως να παγιδεύονται σε τοπικά ελάχιστα και το γεγονός αυτό απαιτεί ειδική μέριμνα για την αποφυγή τους κατά την διάρκεια της εκπαίδευσης.

**3. Ευρύ φάσμα εφαρμογών.** Η ικανότητα γενίκευσης των Μηχανών Διανυσμάτων Υποστήριξης ρυθμίζεται αλλάζοντας τη συνάρτηση Πυρήνα, μια παράμετρος της ή αλλάζοντας το περιθώριο. Πέρα από τις συνηθέστερες συναρτήσεις Πυρήνα, υπάρχει η δυνατότητα ανάπτυξης συνάρτησης Πυρήνα συγκεκριμένα για μια δοσμένη εφαρμογή, βελτιώνοντας με αυτό τον τρόπο την ικανότητα γενίκευσης. Τα νευρωνικά δίκτυα είναι περισσότερο περιορισμένα σε σιγμοειδείς συναρτήσεις και σε συναρτήσεις Ακτινικής Βάσης ως συναρτήσεις ενεργοποίησης για τους νευρώνες.

**4. Ευρωστία σε ακραίες τιμές δεδομένων.** Το σφάλμα λανθασμένης ταξινόμησης στις Μηχανές Διανυσμάτων Υποστήριξης μπορεί να ελεγχθεί από την παράμετρο  $C$ . Αν η παράμετρος αυτή πάρει μεγάλες τιμές, η λανθασμένη ταξινόμηση μπορεί να περιοριστεί και αν οι τιμές της είναι μικρές δεδομένα εκπαίδευσης που απέχουν πολύ από τα δεδομένα που έχουν συλλεχθεί επιτρέπεται στο μοντέλο να τα ταξινομήσει εσφαλμένα. Συνεπώς, θέτοντας μια κατάλληλη τιμή στην παράμετρο  $C$  περιορίζονται οι ακραίες τιμές των δεδομένων εκπαίδευσης (outliers). Επίσης, με αυτό τον τρόπο μπορεί να περιοριστεί το πρόβλημα της υπερπροσαρμογής. Αντιθέτως, τα νευρωνικά δίκτυα είναι ευαίσθητα σε ακραίες τιμές δεδομένων επειδή βασίζονται στην ελαχιστοποίηση του αθροίσματος των τετραγώνων των σφαλμάτων. Επομένως για να αποφευχθεί η συμμετοχή των ακραίων τιμών στη διαδικασία εκπαίδευσης θα πρέπει να γίνει ειδική προεργασία των δεδομένων ώστε να απομακρυνθούν οι τιμές αυτές.

Σχετικά με τα μειονεκτήματα που παρουσιάζει η μέθοδος των Μηχανών Διανυσμάτων Υποστήριξης σε σύγκριση με τα νευρωνικά δίκτυα, αναφέρονται τα εξής [99]:

**1. Επέκταση σε προβλήματα ταξινόμησης πολλών κλάσεων.** Οι Μηχανές Διανυσμάτων Υποστήριξης είναι δυαδικοί ταξινομητές. Σε αντίθεση με τα πολύ-επίπεδα νευρωνικά δίκτυα, χρησιμοποιούν άμεσες συναρτήσεις απόφασης, επομένως η επέκταση σε προβλήματα ταξινόμησης πολλών κλάσεων δεν μπορεί να πραγματοποιηθεί απευθείας. Μπορεί να γίνει χρήση τεχνικών για τη μετατροπή προβλημάτων ταξινόμησης πολλών κλάσεων σε προβλήματα δυαδικής ταξινόμησης (One-Against-All, All-Pairs, Error-Correcting Output Codes).



**2. Μεγάλη διάρκεια διαδικασίας εκπαίδευσης.** Δεδομένου ότι η διαδικασία εκπαίδευσης μιας Μηχανής Διανυσμάτων Υποστήριξης πραγματοποιείται επιλύοντας το αντίστοιχο δυϊκό πρόβλημα βελτιστοποίησης, ο αριθμός των μεταβλητών ισούται με το πλήθος των δειγμάτων εκπαίδευσης. Συνεπώς για ένα μεγάλο πλήθος δεδομένων εκπαίδευσης, η λύση του δυϊκού προβλήματος απαιτεί αρκετή μνήμη και χρόνο εκτέλεσης για τους υπολογισμούς.

**3. Επιλογή παραμέτρων.** Κατά την εκπαίδευση μιας Μηχανής Διανυσμάτων Υποστήριξης θα πρέπει να επιλεγεί η κατάλληλη συνάρτηση Πυρήνα και στη συνέχεια οι τιμές των παραμέτρων της. Έπειτα, θα πρέπει να προσδιοριστεί η κατάλληλη τιμή για την παράμετρο  $C$ . Η εύρεση των βέλτιστων παραμέτρων για ένα πρόβλημα ονομάζεται **επιλογή μοντέλου**. Ομοίως, στους ταξινομητές νευρωνικών δικτύων θα πρέπει να βρεθούν οι βέλτιστες τιμές για το πλήθος των κρυφών νευρώνων, για τις αρχικές τιμές των βαρών και για όλες υπόλοιπες παραμέτρους που πρέπει να καθοριστούν από τον σχεδιαστή του συστήματος. Για τις Μηχανές Διανυσμάτων Υποστήριξης η επιλογή μοντέλου γίνεται εκπαιδύοντας διαρκώς ταξινομητές με διαφορετικές τιμές παραμέτρων. Στη συνέχεια αξιολογείται η ικανότητα γενίκευσής τους πειραματικά και επιλέγονται οι βέλτιστες τιμές. Επομένως, η επιλογή παραμέτρων απαιτεί αρκετό χρόνο εκτέλεσης και για το λόγο αυτό έχουν προταθεί δείκτες για τον υπολογισμό της απόδοσης μιας συγκεκριμένης επιλογής παραμέτρων, δίχως να απαιτείται η εκπαίδευση και ο έλεγχος απόδοσης του ταξινομητή.

### 3.5.7 Εφαρμογές των Μηχανών Διανυσμάτων Υποστήριξης στη Βιοπληροφορική

Οι Μηχανές Διανυσμάτων Υποστήριξης βρίσκουν σύγχρονες εφαρμογές που αφορούν ιατρικά ή βιολογικά δεδομένα, σε κλινικό ή εργαστηριακό επίπεδο. Υπάρχουν κάποιες εφαρμογές που αφορούν την διάγνωση και πρόγνωση καρκίνου, αν και σε μεγαλύτερο ποσοστό για το πρόβλημα αυτό έχουν χρησιμοποιηθεί κυρίως τα νευρωνικά δίκτυα [40].

Οι Listgarten et al. (2004)[40] μελέτησαν την πιθανότητα εμφάνισης καρκίνου του μαστού, εξετάζοντας πολλαπλούς απλούς πολυμορφισμούς νουκλεοτιδίων. Για να μελετηθεί η επίδραση των γενετικών πολυμορφισμών στην πιθανότητα εμφάνισης καρκίνου, έγινε μέτρηση 98 απλών νουκλεοτιδικών πολυμορφισμών (single nucleotide polymorphisms –SNPs) κατανεμημένων σε 45 γονίδια που πιθανότατα σχετίζονται με τον καρκίνο του μαστού σε 174 περιπτώσεις ασθενών και έγινε σύγκριση με τις αντίστοιχες φυσιολογικές καταστάσεις. Από τη μελέτη αυτή προέκυψε ότι ένα υποσύνολο τριών SNPs λειτουργούν ως κύριοι παράγοντες διαχωρισμού μεταξύ της φυσιολογικής κατάστασης και

του καρκίνου του μαστού. Οι Μηχανές Διανυσμάτων Υποστήριξης πέτυχαν την υψηλότερη ακρίβεια (69%) σε σύγκριση με δέντρα απόφασης και τον απλοϊκό Μπεϋζιανό ταξινομητή.

Οι Lee et al. (2000)[40] μελέτησαν την πιθανότητα επιβίωσης και ανάγκης χημειοθεραπείας σε περιπτώσεις καρκίνου του μαστού. Από ένα σύνολο 31 χαρακτηριστικών, με τη βοήθεια γραμμικής Μηχανής Διανυσμάτων Υποστήριξης επιλέχθηκαν τα εξής έξι χαρακτηριστικά: μέση περιοχή, τυπική απόκλιση περιοχής, χειρότερη περιοχή, χειρότερη υφή, χειρότερη περίμετρος. Τα χαρακτηριστικά αυτά προέκυψαν από την μέση τιμή, την τυπική απόκλιση και την χειρότερη τιμή δέκα κυτταρολογικών πυρηνικών μετρήσεων μεγέθους, σχήματος και υφής, οι οποίες πραγματοποιήθηκαν στους μαστούς των ασθενών με μια μη χειρουργική διαδικασία λεπτής βελόνας αναρρόφησης (needle aspirate procedure). Επίσης χρησιμοποιήθηκε το μέγεθος όγκου, το οποίο προκύπτει κατά τη διάρκεια του χειρουργείου αφαίρεσης του όγκου. Χρησιμοποιώντας μη γραμμική Μηχανή Διανυσμάτων Υποστήριξης, οι ασθενείς ταξινομούνται σε τρεις ομάδες: η πρώτη ομάδα είναι οι ασθενείς με καλή πρόγνωση, δηλαδή ασθενείς στους οποίους δεν έχει γίνει μετάσταση στους λεμφικούς κόμβους, η δεύτερη ομάδα είναι οι ασθενείς με μέτρια πρόγνωση, όπου έχει γίνει μετάσταση σε 1 έως 4 λεμφικούς κόμβους και η τρίτη ομάδα είναι οι ασθενείς με άσχημη διάγνωση, όπου έχει γίνει μετάσταση σε παραπάνω από 4 λεμφικούς κόμβους. Το 72.8% των ασθενών με καλή διάγνωση δεν χρειάστηκαν χημειοθεραπεία μετά την επέμβαση και το 87.5% των ασθενών με άσχημη διάγνωση όντως χρειάστηκαν χημειοθεραπεία. Επίσης, σε κάθε μια από τις ομάδες αυτές αντιστοιχεί μια καμπύλη επιβίωσης Kaplan-Meier (Kaplan-Meier survival curves).

Σε μια άλλη εργασία, οι Hayashida et al. (2005)[40] ασχολήθηκαν με την απόκριση των ασθενών στη θεραπεία σε περιπτώσεις καρκίνου του οισοφάγου, με χρήση πρωτεομικών δεδομένων εκπαίδευσης. Οι Lizuka et al. (2003)[40] μελέτησαν την πιθανότητα επανεμφάνισης καρκίνου του ήπατος, χρησιμοποιώντας γενετικά δεδομένα εκπαίδευσης. Συγκεκριμένα έγινε εξερεύνηση διάφορων προφίλ έκφρασης mRNA σε δείγματα ιστών με ηπατοκυτταρικό καρκίνωμα, χρησιμοποιώντας υψηλής πυκνότητας μικροσυστοιχίες ολιγονουκλεοτιδίων, οι οποίες αναπαριστούν περίπου 6000 γονίδια. Για το σύνολο εκπαίδευσης της Μηχανής Διανυσμάτων Υποστήριξης χρησιμοποιήθηκαν κλινικά και παθολογικά χαρακτηριστικά, όπως φύλο, ηλικία, ύπαρξη ιογενών λοιμώξεων (με τιμές HBV/HCV/non-B non-C), ιστολογική βαθμονόμηση (με τιμές G1/G2/G3), εμφάνιση κίρρωσης (ναι/όχι), ηπατεκτομή (μικρή/μεγάλη). Οι Μηχανές Διανυσμάτων Υποστήριξης δεν εμφάνισαν υψηλή ακρίβεια στη συγκεκριμένη εφαρμογή (60%), σε αντίθεση με το γραμμικό αναλυτή Fisher, που δίνει ακρίβεια 93%.

Οι Ehlers et al. (2005)[40] ασχολήθηκαν με τη δυνατότητα πρόβλεψης του οφθαλμικού καρκίνου με χρήση γενετικών δεδομένων. Οι Man et al. (2005)[40] μελέτησαν την πρόβλεψη της απόκρισης σε θεραπεία για περιπτώσεις οστεοσαρκώματος (osteosarcoma), χρησιμοποιώντας γενετικά δεδομένα. Τέλος, οι Teverovskiy et al.

(2004)[40] μελέτησαν την πιθανότητα επανεμφάνισης του καρκίνου του προστάτη με χρήση κλινικών δεδομένων.

Πέρα από τις εφαρμογές διάγνωσης και πρόγνωσης καρκίνου οι Μηχανές Διανυσμάτων Υποστήριξης χρησιμοποιούνται για την διάγνωση και πρόγνωση διάφορων παθολογικών περιπτώσεων. Οι Çomak et al. [100] σχεδίασαν ένα σύστημα υποστήριξης απόφασης βασισμένο σε Μηχανές Διανυσμάτων Υποστήριξης για την διάγνωση ασθενειών των καρδιακών βαλβίδων. Το σύστημα αυτό ταξινομεί τα σήματα Doppler των βαλβίδων της καρδιάς σε δυο κατηγορίες: φυσιολογικά και μη φυσιολογικά ώστε να παρέχει υποστήριξη στον καρδιολόγο.

Οι Yu et al. (2010)[101] ασχολήθηκαν με την εφαρμογή των Μηχανών Διανυσμάτων Υποστήριξης για την μοντελοποίηση της πρόβλεψης κοινών ασθενειών, μελετώντας την περίπτωση εμφάνισης προ-διαβήτη και σακχαρώδους διαβήτη. Μια άλλη εφαρμογή των Μηχανών Διανυσμάτων Υποστήριξης προτάθηκε από τους Sarthagirivasan et al. (2013)[102] για την διάγνωση οστεοπόρωσης με εξαγωγή σπογγωδών χαρακτηριστικών (trabecular features) από ραδιογραφήματα ισχίου.

Οι Μηχανές Διανυσμάτων Υποστήριξης έχουν χρησιμοποιηθεί επίσης σε γενετικά και πρωτεομικά δεδομένα. Ο Valentini (2002)[103] χρησιμοποίησε Μηχανές Διανυσμάτων Υποστήριξης για να πραγματοποιήσει ανάλυση δεδομένων έκφρασης γονιδίων σε περιπτώσεις ανθρώπινου λεμφώματος. Τα δεδομένα που αναλύονται έχουν παραχθεί από μικροσυστοιχίες DNA (DNA microarrays). Σε μια άλλη εφαρμογή, οι Cai et al. (2003)[104] μελέτησαν την ταξινόμηση των λειτουργιών που επιτελούν οι πρωτεΐνες με χρήση Μηχανών Διανυσμάτων Υποστήριξης. Η μελέτη ασχολείται με διάφορες κατηγορίες πρωτεϊνών, όπως πρωτεΐνες δέσμευσης RNA, ομοδιμερή πρωτεϊνών, πρωτεΐνες υπεύθυνες για την απορρόφηση φαρμάκων, πρωτεΐνες που συμμετέχουν στην κατανομή και στην απέκκριση φαρμάκων, ένζυμα για το μεταβολισμό φαρμάκων.

Οι Cai et al. (2002)[105] εφάρμοσαν τις Μηχανές Διανυσμάτων Υποστήριξης για την πρόβλεψη της ειδικότητας (specificity) του πολυπεπτιδίου GalNAc-transferase. Οι Zhang et al. (2013)[106] μελέτησαν τη δυνατότητα διάκρισης μεταξύ των αλόφιλων και μη αλόφιλων πρωτεϊνών (halophilic and non-halophilic proteins) με χρήση Μηχανών Διανυσμάτων Υποστήριξης. Οι Hua et al.(2001)[107] εφάρμοσαν τις Μηχανές Υποστήριξης Διανυσμάτων για την πρόβλεψη του υποκυτταρικού εντοπισμού των πρωτεϊνών. Ο υποκυτταρικός εντοπισμός (subcellular localization) αποτελεί ένα από τα βασικά λειτουργικά χαρακτηριστικά των πρωτεϊνών. Ένα πλήρως αυτοματοποιημένο και αξιόπιστο σύστημα για την πρόβλεψη του υποκυτταρικού εντοπισμού είναι απαραίτητο, ειδικά για εφαρμογές ανάλυσης γονιδιακών ακολουθιών μεγάλης κλίμακας.

## 3.6 Σύνθετα - Υβριδικά Συστήματα

### 3.6.1 Γενετικοί Αλγόριθμοι και Νευρωνικά Δίκτυα

#### 3.6.1.1 Εισαγωγή

Οι γενετικοί αλγόριθμοι είναι μια προσαρμοζόμενη τεχνική αναζήτησης η οποία αρχικά προτάθηκε από τον Holland [108]. Η τεχνική αυτή είναι μια στοχαστική μέθοδος αναζήτησης για την εύρεση βέλτιστων λύσεων σε μεγάλους και πολύπλοκους διανυσματικούς χώρους αναζήτησης. Ο Γενετικός αλγόριθμος εφαρμόζεται σε ένα σύνολο από στιγμιότυπα τα οποία ονομάζονται **πληθυσμός**. Κάθε στιγμιότυπο είναι αποτελεί μια κωδικοποίηση των δεδομένων εισόδου του προβλήματος και ονομάζεται **χρωμόσωμα**. Κάθε χρωμόσωμα αποτελείται από **γονίδια**, κάθε ένα από τα οποία έχει μια δυαδική τιμή που δείχνει την παρουσία ή όχι ενός συγκεκριμένου στοιχείου. Η αναζήτηση για την καλύτερη λύση καθοδηγείται από μια αντικειμενική συνάρτηση, η οποία ονομάζεται **συνάρτηση καταλληλότητας (fitness function)**. Οι λύσεις που επιλέγονται με υψηλότερη τιμή συνάρτησης καταλληλότητας έχουν την ικανότητα να αναπαράγουν νέες λύσεις σε αντίθεση με τις λύσεις που έχουν χαμηλές τιμές συνάρτησης καταλληλότητας, ο οποίες σταδιακά εξαλείφονται. Η συνάρτηση καταλληλότητας ελέγχει την επιλογή των καλύτερων λύσεων και παρέχει τα κριτήρια για την αξιολόγηση των υποψήφιων προς επιλογή στιγμιότυπων. Σε γενικές γραμμές, οι γενετικοί αλγόριθμοι περιλαμβάνουν τρεις βασικούς τελεστές: **επιλογή, διασταύρωση και μετάλλαξη** εντός των χρωμοσωμάτων. Ένας πληθυσμός δημιουργείται με ένα σύνολο από τυχαία επιλεγμένα στιγμιότυπα. Στη συνέχεια, τα στιγμιότυπα αυτά αξιολογούνται με κριτήριο τη συνάρτηση καταλληλότητας. Δυο στιγμιότυπα επιλέγονται για την επόμενη γενιά, σύμφωνα με την καταλληλότητά τους.

**Η διασταύρωση (crossover)** είναι μια διαδικασία που παράγει ανα-συνδιασμούς ακολουθιών bits, οι οποίοι προκύπτουν με ανταλλαγή τμημάτων μεταξύ ζευγών χρωμοσωμάτων για τη δημιουργία νέων στιγμιότυπων. Η διαδικασία της **μετάλλαξης (mutation)** εξασφαλίζει ότι όλα τα πιθανά χρωμοσώματα είναι δυνατό να προκύψουν ή ότι έχει περάσει ένας συγκεκριμένος αριθμός γενεών. Το υπολογιστικό μοντέλο των γενετικών αλγορίθμων έχει σχεδιαστεί για να προσομοιώνει τις εξελικτικές διαδικασίες στη φύση [108].

Οι γενετικοί αλγόριθμοι και τα νευρωνικά δίκτυα προέρχονται ως ιδέες από τους υπολογισμούς στα βιολογικά συστήματα. Ένα μεγάλο μέρος της αρχιτεκτονικής των βιολογικών νευρώνων καθορίζεται γενετικά, επομένως οι ερευνητές εξερεύνησαν τον τρόπο με τον οποίο θα μπορούσαν να αναπτυχθούν γενετικά εξελισσόμενες αρχιτεκτονικές δικτύων με τη χρήση γενετικών αλγορίθμων.

Οι γενετικοί αλγόριθμοι έχουν χρησιμοποιηθεί σε συνδυασμό με τα νευρωνικά δίκτυα με τρεις βασικούς τρόπους [109]:

- **Προεπεξεργασία και ερμηνεία δεδομένων.** Χρησιμοποιούνται για την εύρεση ενός κατάλληλου υποσυνόλου χαρακτηριστικών ώστε να ελαττωθεί το πλήθος τους, καθώς επίσης και για επεξήγηση της απόκρισης των νευρωνικών δικτύων.
- **Ρύθμιση των βαρών σε προκαθορισμένες αρχιτεκτονικές.** Η ρύθμιση των βαρών από γενετικούς αλγόριθμους μπορεί να γίνει σε εφαρμογές με μάθηση υπο επίβλεψη αλλά και με μάθηση ενίσχυσης. Επίσης, οι γενετικοί αλγόριθμοι έχουν χρησιμοποιηθεί για ρύθμιση του ρυθμού μάθησης και έχουν συνδυαστεί με πιο παραδοσιακές μεθόδους αναζήτησης βέλτιστης λύσης με βάση την κλίση (gradient based search).
- **Εκμάθηση τοπολογιών νευρωνικών δικτύων.** Οι γενετικοί αλγόριθμοι εξελίσσουν τοπολογίες νευρωνικών δικτύων για εκτίμηση συναρτήσεων, συμπεριλαμβανόμενου του προβλήματος της εύρεσης του πλήθους των κρυφών νευρώνων και της εύρεσης των συνδέσεων.

### 3.6.1.2 Προεπεξεργασία και ερμηνεία δεδομένων

Υπάρχουν αρκετά παραδείγματα εφαρμογών, όπου οι γενετικοί αλγόριθμοι χρησιμοποιούνται επιτυχώς στο πρόβλημα της **επιλογής χαρακτηριστικών (feature selection)** για να ελαττώσουν το πλήθος τους και να βρεθούν τα περισσότερο σημαντικά χαρακτηριστικά, ώστε να είναι περισσότερο αποδοτική η διαδικασία εκμάθησης [109].

Υπάρχουν εφαρμογές όπου οι γενετικοί αλγόριθμοι χρησιμοποιήθηκαν για επεξήγηση της εξόδου των νευρωνικών δικτύων. Οι Eberhart (1992)[109] και Dobbins (1991)[109] χρησιμοποίησαν γενετικό αλγόριθμο για να αναζητήσουν την επιφάνεια απόφασης που αναγνωρίζει της οριακές περιπτώσεις φλεγμονής της σκωληκοειδούς απόφυσης, όπως αυτές προβλέπονται από ένα νευρωνικό δίκτυο. Για παράδειγμα, με χρήση γενετικών αλγορίθμων μπορεί να βρεθεί ποιες από τις εισόδους οδηγούν σε μια ταξινόμηση με τιμή εξόδου 0.5 από το νευρωνικό δίκτυο, όπου το 0.5 υποδεικνύει μια οριακή περίπτωση, δηλαδή μια περίπτωση που βρίσκεται στο όριο μεταξύ των περιοχών απόφασης που κατηγοριοποιούν τα δείγματα σε θετικά και αρνητικά, ως προς την φλεγμονή της σκωληκοειδούς απόφυσης. Ένα άλλο ερώτημα που μπορεί να τεθεί είναι ποιες εισοδοί δίνουν έξοδο 1.0 στο νευρωνικό δίκτυο.

Η αναζήτηση για εισόδους που δίνουν μια συγκεκριμένη έξοδο είναι μια μορφή ανάστροφης χρήσης του δικτύου. Με ανάστροφη μετάδοση των σημάτων, υπάρχει η δυνατότητα αναζήτησης κρυφών νευρώνων και ενεργοποιήσεων νευρώνων εισόδου που δίνουν την επιθυμητή έξοδο, όμως η διαδικασία είναι ιδιαίτερα αργή και δεν εγγυάται

αποτέλεσμα, αφού η ταξινόμηση που παρέχει ένα νευρωνικό δίκτυο συνήθως είναι μια μη αντιστρέψιμη συνάρτηση με πολλές μεταβλητές. Οι γενετικοί αλγόριθμοι μπορούν να αναζητήσουν το διανυσματικό χώρο εισόδου ώστε να βρεθούν οι είσοδοι που δίνουν μια συγκεκριμένη έξοδο.

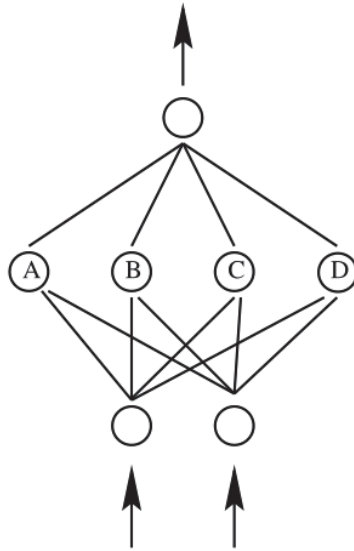
Η εύρεση των εισόδων που δίνουν συγκεκριμένες εξόδους, όπως για παράδειγμα οι οριακές περιπτώσεις, μπορεί να χρησιμεύσει για την επεξήγηση της ταξινόμησης που παρέχει ένα νευρωνικό δίκτυο. Επίσης χρησιμεύει στην αξιολόγηση της μάθησης του δικτύου και της ορθότητας των ταξινομήσεων [109].

### 3.6.1.3 Εκπαίδευση Νευρωνικών Δικτύων

Οι Γενετικοί Αλγόριθμοι χρησιμεύουν στη **ρύθμιση των παραμέτρων** του δικτύου, για αρχιτεκτονικές που έχουν καθοριστεί εκ των προτέρων από τον σχεδιαστή, όπως η ρύθμιση των βαρών και ο προσδιορισμός του **βέλτιστου ρυθμού μάθησης** για τη διαδικασία εκπαίδευσης. Οι ρυθμίσεις των παραμέτρων μπορούν να γίνονται σε συνδυασμό με άλλες επιλογές, όπως η **αρχικοποίηση των βαρών ή αλλαγές στην τοπολογία**. Επίσης, αρκετοί ερευνητές δοκίμασαν να εκπαιδεύσουν νευρωνικά δίκτυα εμπρόσθιας τροφοδότησης χρησιμοποιώντας γενετικούς αλγόριθμους. Ο Rogers (1990) [109] χρησιμοποίησε γενετικούς αλγόριθμους για να βελτιστοποιήσει τις αντιστοιχίσεις του επιπέδου εισόδου με τις κρυφές μονάδες σε μια Αραιά Κατανεμημένη Συσχετιστική Μνήμη (Sparse Distributed Associative Memory).

Η εφαρμογή των γενετικών αλγορίθμων στην εκπαίδευση των βαρών για τα νευρωνικά δίκτυα δεν έχει προχωρήσει για δυο βασικούς λόγους. Πρώτον, οι μέθοδοι κλίσης έχουν αναπτυχθεί για να είναι αποδοτικοί στην εκπαίδευση βαρών για εφαρμογές μάθησης υπο επίβλεψη, στις οποίες τα δεδομένα εκπαίδευσης είναι διαθέσιμα και το νευρωνικό δίκτυο είναι ένα απλό δίκτυο εμπρόσθιας τροφοδότησης. Ο δεύτερος λόγος είναι ότι το πρόβλημα της εκπαίδευσης ενός νευρωνικού δικτύου εμπρόσθιας τροφοδότησης δεν είναι κατάλληλο για να εφαρμοστούν οι γενετικοί αλγόριθμοι, οι οποίοι βασίζονται στον επαναληπτικό συνδυασμό για την εύρεση λύσης [109].

Οι γενετικοί αλγόριθμοι δεν μπορούν να εφαρμοστούν επιτυχώς για την βελτιστοποίηση των βαρών ενός νευρωνικού δικτύου, εξαιτίας της ύπαρξης του **Προβλήματος Ανταγωνιστικών Συμβάσεων (Competing Conventions Problem)**. Η πηγή του προβλήματος είναι ότι μπορεί να υπάρχουν πάρα πολλές ισοδύναμες συμμετρικές λύσεις για ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης βαρών ενός νευρωνικού δικτύου.



**Εικόνα 3.65:** Απλό Νευρωνικό Δίκτυο Εμπρόσθιας Τροφοδότησης. Η αναδιάταξη των θέσεων των κρυφών νευρώνων δεν αλλάζει την λειτουργικότητα του δικτύου.

Η Εικόνα 3.65[109] παρουσιάζει ένα απλό νευρωνικό δίκτυο. Έστω ότι το διάνυσμα  $(w_{a,1}, w_{a,2}, w_{a,3}, w_{b,1}, w_{b,2}, w_{b,3}, w_{c,1}, w_{c,2}, w_{c,3}, w_{d,1}, w_{d,2}, w_{d,3})$  αποτελεί μια αυθαίρετη διάταξη των βαρών του νευρωνικού δικτύου, όπου  $w_{a,i}$  περνάει από τον κρυφό κόμβο  $a$  με  $i = 1, 2$  να είναι οι συνδέσεις εισόδου και  $i = 3$  η σύνδεση εξόδου. Για κάθε διάνυσμα αυτής της μορφής υπάρχουν  $4! = 24$  ισοδύναμα διανύσματα που αναπαριστούν ακριβώς την ίδια λύση, αφού η αλλαγή της σειράς των κρυφών κόμβων δεν επηρεάζει τη λειτουργία του δικτύου. Επομένως, για  $H$  το πλήθος κρυφές μονάδες σε ένα απλό πλήρες συνδεδεμένο νευρωνικό δίκτυο εμπρόσθιας τροφοδότησης υπάρχουν  $H!$  συμμετρίες με ως και  $H!$  ισοδύναμες λύσεις.

Αν ο γενετικός αλγόριθμος χρησιμοποιεί απλούς ανα-συνδιασμούς, δημιουργείται πρόβλημα. Αν για παράδειγμα γίνει μια απλή διασταύρωση μεταξύ των ισοδύναμων διατάξεων  $[A B C D]$  και  $[D C B A]$  τότε οι απόγονοι θα αναπαράγουν κάποιους από τους κόμβους της διάταξης και θα παραλείψουν άλλους. Για παράδειγμα, οι απόγονοι μπορεί να είναι  $[A B B A]$  ή  $[D C C D]$ . Αυτό το αποτέλεσμα δεν είναι επιθυμητό διότι οι απόγονοι έχουν κληρονομήσει δυο φορές τους ίδιους νευρώνες και επίσης έχουν χάσει το 50% της λειτουργικότητας των γονέων οπότε δεν είναι πιθανό να εμφανίσουν στη συνέχεια περεταίρω βελτίωση στην απόδοση [109],[110].

Για το Πρόβλημα των Ανταγωνιστικών Συμβάσεων έχουν προταθεί διάφορες λύσεις. Οι Montana et al. (1989)[109] έκαναν μια προσπάθεια εύρεσης των λειτουργικών χαρακτηριστικών των κρυφών νευρώνων κατά τη διάρκεια του ανα-συνδιασμού, ώστε να

πραγματοποιηθεί μια πιο έξυπνη διασταύρωση. Ο Radcliffe (1991)[109] πρότεινε μια λύση όπου οι κρυφές μονάδες αντιμετωπίζονται ως ένα πολυ-σύνολο: οι κρυφές μονάδες με την ίδια συνδεσιμότητα θεωρούνται ίδιες, αλλά οι κρυφές μονάδες μπορούν να έχουν διαφορετικές συνδεσιμότητες. Κατά τον ανα-συνδυασμό, μπορεί να γίνει αναζήτηση στις κρυφές μονάδες για να βρεθεί ποιες είναι όμοιες, ώστε να γίνει καθοδήγηση των διασταυρώσεων. Ο Hancock (1992)[109] υλοποίησε την ιδέα αυτή και την επέκτεινε με τρόπους εύρεσης της ομοιότητας των κρυφών νευρώνων. Παρόλα αυτά, είναι δύσκολο να βρεθούν περιπτώσεις όπου οι γενετικοί αλγόριθμοι δίνουν καλύτερα αποτελέσματα από τις μεθόδους εκπαίδευσης κλίσης για μάθηση υπό επίβλεψη.

Μια άλλη στρατηγική είναι η χρήση γενετικών και εξελικτικών αλγορίθμων για βελτιστοποίηση των βαρών σε περιπτώσεις όπου οι μέθοδοι κλίσης δεν μπορούν να εφαρμοστούν άμεσα ή είναι λιγότερο αποτελεσματικές. Μια τέτοια περίπτωση είναι η χρήση των γενετικών αλγορίθμων για εκπαίδευση νευρωνικών δικτύων με μάθηση ενίσχυσης. Στη μάθηση ενίσχυσης δεν είναι γνωστές εκ των προτέρων οι επιθυμητές έξοδοι για συγκεκριμένες εισόδους αλλά η εκπαίδευση βασίζεται στην αξιολόγηση του δικτύου ως προς την απόδοση. Οι γενετικοί αλγόριθμοι μπορούν να εφαρμοστούν στην μάθηση ενίσχυσης αφού δεν χρησιμοποιούν πληροφορία κλίσης αλλά μια μετρική της απόδοσης για κάθε σύνολο διανυσμάτων βάρους που αξιολογείται [109].

#### 3.6.1.4 Κατασκευή Νευρωνικών Δικτύων

Κάποιες από τις πρώτες προσπάθειες κωδικοποίησης των αρχιτεκτονικών των νευρωνικών δικτύων υπέθεταν ότι ο αριθμός των κρυφών μονάδων είναι περιορισμένος. Με βάση αυτή την υπόθεση, ο γενετικός αλγόριθμος μπορεί να προσδιορίσει ποιους συνδυασμούς βαρών ή κρυφών νευρώνων βελτίωναν την υπολογιστική συμπεριφορά, για ένα πεπερασμένο εύρος αρχιτεκτονικών. Οι αρχιτεκτονικές αυτές εκπαιδευόνταν με ανάστροφη μετάδοση σφάλματος. Μια μετρική της απόδοσης που χρησιμοποιείται συχνά είναι ο χρόνος εκπαίδευσης των δικτύων, ώστε να βρεθούν τοπολογίες δικτύων που εκπαιδεύονται γρήγορα [109].

Ένα πρόβλημα που παρουσιάζει η μέθοδος αυτή είναι το μεγάλο υπολογιστικό κόστος για κάθε μια αξιολόγηση των τοπολογιών που προκύπτουν από τις διασταυρώσεις, αφού θα πρέπει να εκτελείται ο αλγόριθμος ανάστροφης μετάδοσης σφάλματος. Το γεγονός αυτό περιορίζει την πρακτική εφαρμογή των γενετικών αλγορίθμων σε μικρές τοπολογίες.

Μια άλλη προσέγγιση είναι οι κατασκευαστικοί αλγόριθμοι, όπως ο **αλγόριθμος Κλιμακωτής Συσχετιστικής Εκμάθησης Αρχιτεκτονικών (Cascade Correlation Learning Architecture)**, ο οποίος σταδιακά προσθέτει κρυφές μονάδες στο δίκτυο, καθώς προχωράει η διαδικασία μάθησης. Οι Angeline et al. (1994)[109] ανέπτυξαν τον αλγόριθμο



**Γενικευμένης Απόκτησης Συνδέσεων Ανάδρασης (Generalized Acquisition of Recurrent Links - GNARL)**, ο οποίος χρησιμοποιεί επιλογές και μεταλλάξεις για να αναζητήσει τον χώρο των πιθανών αρχιτεκτονικών νευρωνικών δικτύων με ανατροφοδότηση. Ο αλγόριθμος GNARL προσπαθεί ταυτόχρονα να μάθει τις τιμές των βαρών και την τοπολογία του δικτύου.

Η **Νευρο-γένεση (Neurogenesis)**[109] είναι η διαδικασία ανάπτυξης των νευρωνικών δικτύων. Όπως ο αλγόριθμος GNARL, τα βάρη και οι τοπολογίες αναπτύσσονται ταυτόχρονα με τη χρήση γενετικού προγραμματισμού. Έχουν αναπτυχθεί περιγραφές αρχιτεκτονικών που βασίζονται σε Γραμματικές ώστε να παρέχουν καλύτερη κλιμάκωση των αποτελεσμάτων και επαναχρησιμοποίηση των αρχιτεκτονικών. Ο στόχος είναι η εύρεση κανόνων για την παραγωγή δικτύων, τα οποία θα είναι χρήσιμα για τον ορισμό αρχιτεκτονικών για γενικές κλάσεις προβλημάτων. Οι σχεδιαστές μπορούν με αυτόν τον τρόπο να ορίσουν δομές για μικρότερα προβλήματα, οι οποίες μπορούν να επαναχρησιμοποιηθούν ως δομικά μπλοκ για την επίλυση πιο σύνθετων προβλημάτων.

Ο Gruau (1992)[109] ανέπτυξε ένα κυτταρικό μοντέλο ανάπτυξης (cellular development model) για την ανάπτυξη νευρωνικών δικτύων, το οποίο ονομάζεται **κυτταρική κωδικοποίηση (cellular encoding)**. Κάθε κύτταρο διαθέτει ένα διπλό αντίγραφο του «γενετικού κώδικα» και διαβάσει τον κώδικα αυτόν σε διαφορετική θέση. Ανάλογα με τη πληροφορία που θα διαβάσει από τον κώδικα, ένα κύτταρο μπορεί να διαιρεθεί, να αλλάξει τις εσωτερικές του παραμέτρους και τελικά να μετατραπεί σε έναν νευρώνα. Ο Gruau χρησιμοποίησε γενετικό αλγόριθμο για να ανα-συνδυάσει δέντρα γραμματικής που αναπαριστούν κυτταρικές κωδικοποιήσεις.

### 3.6.2 Ασαφής Συλλογιστική και Νευρωνικά Δίκτυα

#### 3.6.2.1 Εισαγωγή

Ο Zadeh (1965)[108] εισήγαγε την έννοια της **ασαφούς λογικής (fuzzy logic)** για να παρουσιάσει την ασάφεια που υπάρχει στη γλωσσολογία και επίσης για να υλοποιήσει και να εκφράσει την ανθρώπινη συλλογιστική και την ανθρώπινη γνώση με ένα φυσικό τρόπο. Η ασαφής λογική ξεκινάει με την έννοια των ασαφών συνόλων. Ένα **ασαφές σύνολο (fuzzy set)** είναι ένα σύνολο χωρίς ευκρινή, ξεκάθαρα ορισμένα όρια και μπορεί να περιέχει στοιχεία με ένα μερικό βαθμό συμμετοχής. Μια **συνάρτηση συμμετοχής (membership function)** καθορίζει με ποιο τρόπο κάθε σημείο στο διανυσματικό χώρο εισόδου αντιστοιχίζεται με μια τιμή συμμετοχής (ή αλλιώς βαθμό συμμετοχής – grade of membership) μεταξύ 0 και 1.

Έστω  $X$  ο διανυσματικός χώρος εισόδου και  $x$  ένα στοιχείο του  $X$ . Ένα κλασσικό σύνολο  $A$  ορίζεται ως μια συλλογή από στοιχεία ή αντικείμενα  $x \in X$ , τέτοια ώστε κάθε  $x$  μπορεί είτε να ανήκει ή να μην ανήκει στο σύνολο  $A$ ,  $A \subseteq X$ . Ορίζοντας μια συνάρτηση συμμετοχής για κάθε στοιχείο  $x$  στο  $X$ , το κλασσικό σύνολο  $A$  μπορεί να περιγραφεί από ένα σύνολο διατεταγμένων ζευγών  $(x, 0)$  ή  $(x, 1)$ , όπου το 1 δείχνει συμμετοχή και το 0 μη συμμετοχή στο σύνολο. Σε αντίθεση με τα συμβατικά σύνολα, ένα ασαφές σύνολο εκφράζει το βαθμό στον οποίο ένα στοιχείο ανήκει στο σύνολο. Επομένως, η συνάρτηση συμμετοχής σε ένα ασαφές σύνολο μπορεί να παίρνει τιμές από 0 ως 1, δηλώνοντας το βαθμό συμμετοχής ενός στοιχείου σε ένα δεδομένο σύνολο [108].

**Η Νεύρο-ασαφής υπολογιστική (Neuro-fuzzy computing)** παρέχει τη δυνατότητα αποδοτικής επεξεργασίας της πληροφορίας με τον σχεδιασμό μεθοδολογιών και αλγορίθμων για την μοντελοποίηση της αβεβαιότητας και της ανακριβούς πληροφορίας. **Ένα Νευρο-ασαφές σύστημα (Neuro-fuzzy system)** είναι ένα σύστημα ασαφούς εξαγωγής συμπερασμάτων (Fuzzy Inference System - FIS), το οποίο εκπαιδεύεται από αλγόριθμο εκπαίδευσης νευρωνικών δικτύων. Το Νεύρο-ασαφές μοντέλο εκμεταλλεύεται τα συμπληρωματικά πλεονεκτήματα των νευρωνικών δικτύων και των μοντέλων FIS, και στις περισσότερες περιπτώσεις τα αποτελέσματα που προκύπτουν είναι καλύτερα από τη μεμονωμένη χρήση των δυο αυτών μοντέλων [111].

**Το Σύστημα Ασαφούς Εξαγωγής Συμπερασμάτων (Fuzzy Inference System - FIS)** είναι ένα δημοφιλές υπολογιστικό πλαίσιο, το οποίο βασίζεται στις έννοιες της θεωρίας ασαφών συνόλων (fuzzy set theory), των ασαφών κανόνων εάν-τότε (fuzzy if-then rules) και της ασαφούς συλλογιστικής (fuzzy reasoning). Το σύστημα FIS υλοποιεί μια μη γραμμική αντιστοίχιση του χώρου εισόδου με τον χώρο εξόδου, χρησιμοποιώντας κανόνες εάν-τότε, οι οποίοι έχουν οριστεί κατάλληλα ώστε να ακολουθούν ασαφή λογική. Για την κατασκευή ενός συστήματος FIS θα πρέπει να προσδιοριστούν τα ασαφή σύνολα (fuzzy sets), οι ασαφείς τελεστές (fuzzy operators) και η βάση γνώσης (knowledge base). Στον Πίνακα 3.2[111] παρουσιάζεται μια αντιπαραβολή κάποιων χαρακτηριστικών των νευρωνικών δικτύων και των συστημάτων FIS.

**Πίνακας 3.2:** Σύγκριση μεταξύ Νευρωνικών Δικτύων και Συστημάτων Ασαφούς Εξαγωγής Συμπερασμάτων

Νευρωνικά Δίκτυα	Συστήματα Ασαφούς Εξαγωγής Συμπερασμάτων
Δεν μπορούν να χρησιμοποιήσουν εκ των προτέρων γνώση βασισμένη σε κανόνες	Μπορούν να ενσωματώσουν εκ των προτέρων γνώση βασισμένη σε κανόνες
Εκμάθηση από μηδενική βάση	Δεν μπορεί να γίνει εκμάθηση (χρησιμοποιείται γλωσσολογική γνώση)
Λειτουργία ως μαύρο κουτί	Ερμηνεύσιμη λειτουργία (κανόνες εάν-τότε)
Περίπλοκοι αλγόριθμοι εκμάθησης	Απλή υλοποίηση και επεξήγηση αποτελεσμάτων
Δύσκολη εξαγωγή γνώσης	Η γνώση πρέπει να είναι διαθέσιμη

Υπάρχουν διάφοροι τρόποι συνδυασμού των νευρωνικών δικτύων με τα συστήματα FIS, με τους βασικότερους να είναι οι εξής [112]:

- Συνεργαζόμενα Νευρο-Ασαφή Συστήματα (Cooperative Neuro –Fuzzy Systems).
- Παράλληλα Νευρο-Ασαφή Συστήματα (Concurrent Neuro-Fuzzy Systems).
- Συγχωνευμένα Νευρο-Ασαφή Συστήματα (Fused Neuro-Fuzzy Systems).

### 3.6.2.2 Συνεργαζόμενα και Παράλληλα Νευρο-Ασαφή Συστήματα

**Στα συνεργαζόμενα Νευρο-Ασαφή συστήματα (Cooperative Neuro-Fuzzy Systems)**, ο μηχανισμός εκμάθησης που διαθέτουν τα νευρωνικά δίκτυα προσδιορίζει τις συναρτήσεις συμμετοχής του συστήματος FIS ή τους ασαφείς κανόνες, από τα δεδομένα εκπαίδευσης. Εφόσον προσδιοριστούν οι παράμετροι του FIS μοντέλου, το νευρωνικό δίκτυο έχει ολοκληρώσει την λειτουργία του. Οι κανόνες προσδιορίζονται από κάποια μέθοδο ομαδοποίησης (για παράδειγμα με αυτο-οργανούμενους χάρτες) ή από ασαφείς αλγορίθμους ομαδοποίησης (fuzzy clustering).

**Στα Παράλληλα Νευρο-Ασαφή Συστήματα (Concurrent Neuro-Fuzzy Systems)**, το νευρωνικό δίκτυο βοηθάει συνεχώς το σύστημα FIS για τον προσδιορισμό των παραμέτρων. Σε κάποιες περιπτώσεις οι FIS έξοδοι δεν μπορούν να αξιοποιηθούν άμεσα, οπότε το νευρωνικό δίκτυο μπορεί να λειτουργήσει ως μετα-επεξεργαστής για τις εξόδους του συστήματος FIS [112].

### 3.6.2.3 Συγχωνευμένα Νευρο-Ασαφή Συστήματα

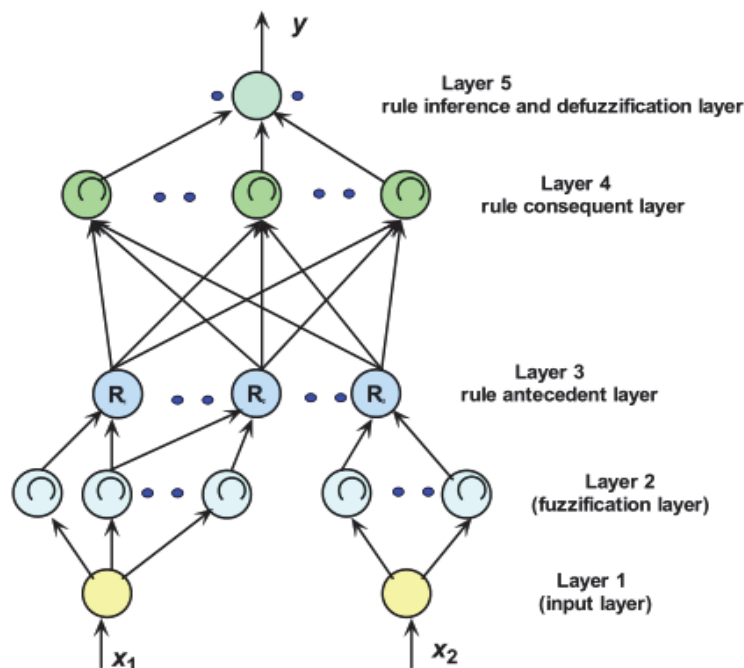
**Στα Συγχωνευμένα Νευρο-Ασαφή Συστήματα (Fused Neuro-Fuzzy Systems)** τα νευρωνικά δίκτυα και τα συστήματα FIS διαμοιράζονται τις ίδιες δομές δεδομένων και τις ίδιες αναπαραστάσεις γνώσης. Ένας κοινός τρόπος εφαρμογής αλγορίθμου εκμάθησης σε ένα ασαφές σύστημα είναι η αναπαραστάσή του με αρχιτεκτονική νευρωνικού δικτύου. Οι συμβατικοί αλγόριθμοι εκπαίδευσης νευρωνικών δικτύων (αλγόριθμοι καθόδου κλίσης) δεν μπορούν να εφαρμοστούν άμεσα σε ένα ασαφές σύστημα, διότι οι συναρτήσεις που χρησιμοποιούνται για συλλογιστική και εξαγωγή συμπερασμάτων δεν είναι διαφορίσιμες. Το πρόβλημα αυτό μπορεί να αντιμετωπιστεί χρησιμοποιώντας διαφορίσιμες συναρτήσεις ή μη συμβατικούς αλγορίθμους εκμάθησης [112].

Ανάλογα με τον τύπο της ασαφούς εξαγωγής συμπερασμάτων που χρησιμοποιείται, τα συγχωνευμένα Νευρο-Ασαφή συστήματα χωρίζονται σε δυο βασικές κατηγορίες: **Mamdani Νευρο-Ασαφή Συστήματα**, τα οποία ενσωματώνουν συστήματα FIS τύπου Mamdani και **Takagi Sugeno Νευρο-Ασαφή συστήματα** τα οποία ενσωματώνουν

συστήματα FIS τύπου Takagi Sugeno. Με βάση τα δυο αυτά γενικά μοντέλα έχουν αναπτυχθεί διάφορα συστήματα, όπως τα: GARIC, FALCON, ANFIS, NEFCON, FUN, SONFIN, FINEST, EFuNN, dmEFuNN [111],[112].

### α) Νευρο-Ασαφές σύστημα Mamdani

Η γενική αρχιτεκτονική του Νευρο-Ασαφούς συστήματος Mamdani παρουσιάζεται στην Εικόνα 3.66 [111].



Εικόνα 3.66: Γενικό Μοντέλο Νευρο-Ασαφούς Συστήματος Mamdani

Οι λειτουργίες που επιτελούν τα διάφορα επίπεδα είναι οι εξής [111]:

- **Layer 1: Επίπεδο εισόδου (input layer).** Σε αυτό το επίπεδο δεν γίνονται υπολογισμοί. Κάθε κόμβος του επιπέδου αυτού, ο οποίος αντιστοιχεί σε μια μεταβλητή εισόδου, απλώς μεταφέρει τις τιμές εισόδου απευθείας στο επόμενο επίπεδο. Το βάρος των συνδέσεων σε αυτό το επίπεδο ισούται με 1.

- **Layer 2: Επίπεδο ασαφοποίησης (fuzzification layer).** Κάθε κόμβος στο επίπεδο αυτό αντιστοιχεί σε ένα γλωσσολογικό χαρακτηρισμό (για παράδειγμα «καλό», «μέτριο», κλπ), για κάθε μια από τις μεταβλητές του προηγούμενου επιπέδου. Η σύνδεση εξόδου του δεύτερου επιπέδου αντιπροσωπεύει την τιμή της συνάρτησης συμμετοχής που υπολογίστηκε για τον αντίστοιχο χαρακτηρισμό, η οποία καθορίζει τον βαθμό στον οποίο μια τιμή εισόδου ανήκει σε ένα ασαφές σύνολο.

- **Layer 3: Επίπεδο υποθετικού μέρους κανόνα (rule antecedent layer).** Ένας κόμβος στο επίπεδο αυτό αναπαριστά το υποθετικό μέρος κάποιου κανόνα. Συνήθως

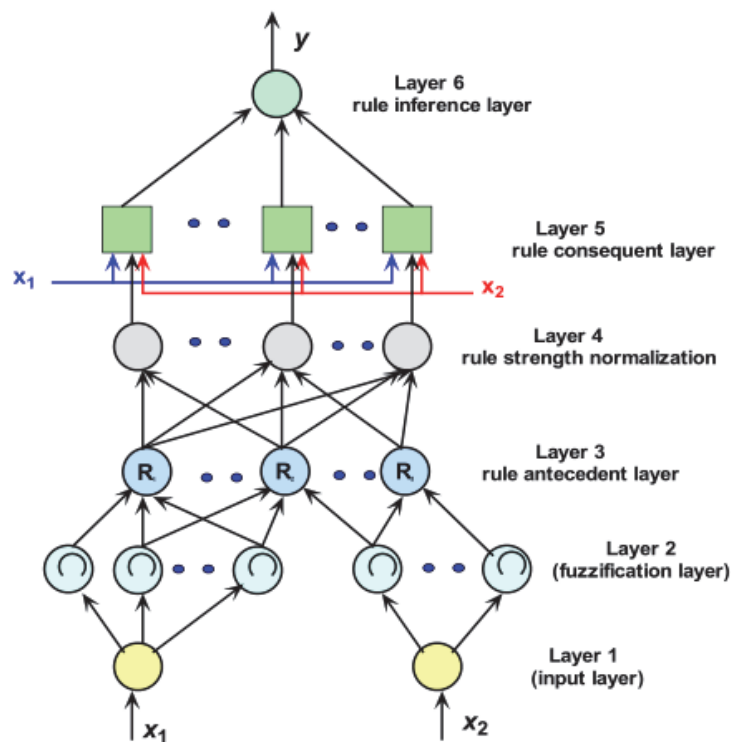
χρησιμοποιείται μια T-νόρμα στον κόμβο αυτό. Η έξοδος του 3<sup>ου</sup> επιπέδου αναπαριστά την δυναμική ενεργοποίησης του αντίστοιχου ασαφούς κανόνα.

- **Layer 4: Επίπεδο συμπερασματικού μέρους κανόνα (rule consequent layer).** Οι κόμβοι αυτού του επιπέδου συνδυάζουν τα υποθετικά μέρη και προσδιορίζουν το βαθμό στον οποίο ανήκουν σε κάποιο γλωσσολογικό χαρακτηρισμό. Ο αριθμός των κόμβων στο επίπεδο αυτό ισούται με τον αριθμό των κανόνων.

- **Layer 5: Επίπεδο Συνδυασμού και απο-ασαφοποίησης (Combination and defuzzification layer).** Οι κόμβοι σε αυτό το επίπεδο συνδυάζουν όλα τα συμπερασματικά μέρη των κανόνων χρησιμοποιώντας έναν τελεστή S-νόρμας και στη συνέχεια υπολογίζουν την έξοδο του συστήματος, μετά την διαδικασία της απο-ασαφοποίησης.

### β) Νευρο-Ασαφές σύστημα Takagi Sugeno

Η γενική αρχιτεκτονική του Νευρο-Ασαφούς συστήματος Takagi Sugeno παρουσιάζεται στην Εικόνα 3.67 [111].



**Εικόνα 3.67:** Γενικό Μοντέλο Νευρο-Ασαφούς Συστήματος Takagi Sugeno

Τα επίπεδα 1,2 και 3 λειτουργούν όπως τα αντίστοιχα επίπεδα του Νευρο-Ασαφούς Συστήματος Mamdani. Οι λειτουργίες που επιτελούν τα επίπεδα 4,5 και 6 είναι οι εξής [111]:

- **Layer 4: Επίπεδο κανονικοποίησης δυναμικής κανόνα (rule strength normalization layer).** Κάθε κόμβος του επιπέδου αυτού υπολογίζει τον λόγο του  $i$ -στου βάρους που

αντιπροσωπεύει τη δυναμική ενεργοποίησης του κανόνα προς το άθροισμα όλων των βαρών:

$$\bar{w}_i = \frac{w_i}{\sum_i w_i}, i = 1, 2, \dots$$

- **Layer 5: Επίπεδο συμπερασματικού μέρους κανόνα (rule consequent layer).** Κάθε κόμβος  $i$  στο επίπεδο αυτό έχει συνάρτηση κόμβου:

$$\bar{w}_i f_i = \bar{w}_i (p_i x_1 + q_i x_2 + r_i) \quad (3.157)$$

όπου  $\bar{w}_i$  η έξοδος του επιπέδου 4 και  $\{p_i, q_i, r_i\}$  είναι το σύνολο των παραμέτρων. Ο προσδιορισμός των παραμέτρων πραγματοποιείται με τον αλγόριθμο ελαχίστων μέσων τετραγώνων.

- **Layer 6: Επίπεδο εξαγωγής συμπερασμάτων από κανόνες (rule inference layer).** Στο επίπεδο αυτό υπάρχει μόνο ένας κόμβος ο οποίος υπολογίζει τη συνολική έξοδο ως άθροισμα όλων των εισερχόμενων σημάτων:

$$\text{έξοδος συστήματος} = \sum_i \bar{w}_i f_i = \frac{\sum_i w_i f_i}{\sum_i w_i} \quad (3.158)$$

#### 3.6.2.4 Μάθηση στα Νευρο-Ασαφή Συστήματα

Τα Νευρο-Ασαφή Συστήματα Takagi Sugeno κάνουν χρήση αλγορίθμου ο οποίος είναι ένας συνδυασμός ανάστροφης μετάδοσης σφάλματος για την εκμάθηση των συναρτήσεων συμμετοχής και εκτίμησης μέσου ελαχίστου τετραγώνου για τον προσδιορισμό των συντελεστών των γραμμικών συνδυασμών στα συμπεράσματα του κανόνα.

Κάθε βήμα στη διαδικασία εκμάθησης αποτελείται από δυο στάδια. Στο πρώτο στάδιο αρχικά διαδίδονται τα πρότυπα εισόδου και έπειτα υπολογίζονται οι βέλτιστες παράμετροι των συμπερασμάτων (conclusion parameters) με μια επαναληπτική διαδικασία μέσου ελαχίστου τετραγώνου, καθώς οι παράμετροι των υποθέσεων (antecedent parameters), δηλαδή οι συναρτήσεις συμμετοχής, θεωρούνται σταθερές στον συγκεκριμένο κύκλο για όλο το σύνολο εκπαίδευσης. Στο δεύτερο στάδιο τα πρότυπα εισόδου διαδίδονται ξανά και έπειτα χρησιμοποιείται ανάστροφη μετάδοση σφάλματος για την ρύθμιση των παραμέτρων των υποθέσεων, καθώς οι παράμετροι των συμπερασμάτων παραμένουν σταθεροί. Στη συνέχεια η διαδικασία αυτή επαναλαμβάνεται [111]. Τα Νευρο-Ασαφή Συστήματα Mamdani χρησιμοποιούν μάθηση υπό επίβλεψη με ανάστροφη μετάδοση σφάλματος για την εκμάθηση των συναρτήσεων συμμετοχής.

### 3.6.3 Εφαρμογές των Υβριδικών Συστημάτων στη Βιοπληροφορική

Τα υβριδικά συστήματα που προκύπτουν από συνδυασμό νευρωνικών δικτύων και ασαφούς λογικής έχουν χρησιμοποιηθεί σε διάφορες εφαρμογές Βιοπληροφορικής. Επίσης, σε άλλες εφαρμογές έχουν χρησιμοποιηθεί νευρωνικά δίκτυα με γενετικούς αλγορίθμους, για το προσδιορισμό της αρχιτεκτονικής του δικτύου ή και για την εκπαίδευσή του.

Οι Wang et al.(2006)[113] σχεδίασαν ένα νευρο-ασαφή συλλογικό ταξινομητή για την ανάλυση δεδομένων έκφρασης γονιδίων καρκίνου από μικροσυστοιχίες DNA. Οι συλλογικοί ταξινομητές και οι μέθοδοι σχεδιασμού τους αναλύονται στο κεφάλαιο 4. Στην συγκεκριμένη εφαρμογή, ως απλοί ταξινομητές χρησιμοποιούνται νευρο-ασαφή συστήματα ANFIS, τα οποία αποτελούν μια υλοποίηση του νευρο-ασαφούς συστήματος Takagi Sugeno. Τα δεδομένα που χρησιμοποιήθηκαν χωρίζονται σε τρεις κατηγορίες. Το πρώτο σύνολο δεδομένων αφορά τον καρκίνο του παχέος εντέρου και συλλέχθηκε από βιοψίες. Σε κάθε δείγμα, από ένα αριθμό 6000 γονιδίων επιλέχθηκαν 2000 γονίδια για τη συγκεκριμένη εφαρμογή. Το δεύτερο σύνολο δεδομένων σχετίζεται με λευχαιμία, και περιέχει 7129 γονίδια υπό εξέταση ενώ το τρίτο σύνολο δεδομένων αναφέρεται σε λέμφωμα, με 4026 γονίδια. Για κάθε περίπτωση καρκίνου χωριστά, με βάση μια διαδικασία επιλογής γονιδίων, αφού επιλεγούν τα 20 περισσότερο σημαντικά γονίδια, γίνεται η εκπαίδευση του ταξινομητή και έπειτα πραγματοποιείται ο έλεγχος για το αν μπορεί να διαχωρίσει τις παθολογικές από τις υγιείς περιπτώσεις. Για τον καρκίνο του παχέος εντέρου το νευρο-ασαφές σύστημα εμφάνισε ακρίβεια 100%, για την λευχαιμία 95.85% και για το λέμφωμα 95.65%.

Οι Tan et al. (2008) [114] μελέτησαν τη δυνατότητα έγκαιρης διάγνωσης του καρκίνου των ωοθηκών χρησιμοποιώντας νευρο-ασαφή σύστημα τύπου FALCON-AART. Τα δεδομένα που χρησιμοποιήθηκαν είναι έκφρασης γονιδίων από μικροσυστοιχίες, από τεστ αίματος και δεδομένα ανίχνευσης πρωτεϊνών. Για ένα συγκεκριμένο σύνολο χαρακτηριστικών που επιλέχθηκαν, επιτεύχθηκε απόδοση 91.10%, για ταξινόμηση σε τρεις κλάσεις: καλοήθης, τύπου I&II, τύπου III&IV.

Ο Sengur(2008) [115] χρησιμοποίησε νευρο-ασαφές σύστημα ANFIS, για τη διάγνωση ασθενειών της καρδιακής βαλβίδας. Τα δεδομένα που αναλύονται από το σύστημα είναι καρδιακοί ήχοι Doppler (Doppler Heart Sounds – DHS), και επιτυγχάνεται ακρίβεια 94.7% κατά την ταξινόμηση σε φυσιολογική και μη φυσιολογική μιτροειδής καρδιακή βαλβίδα.

Οι Ritchie et al. (2004)[116] μελέτησαν τη δυνατότητα χρήσης νευρωνικών δικτύων με γενετικό προγραμματισμό (genetic programming neural networks - GPNNs) ως εργαλείο για την αναγνώριση συνδυασμών γονιδίων που σχετίζονται με την εμφάνιση ασθενειών.

Χρησιμοποιήθηκε μια προσομοίωση 100 διαφορετικών συνόλων δεδομένων, με διάφορες συνθήκες όπως το πλήθος των γονιδίων που αλληλεπιδρούν και η κληρονομικότητα.

Ο Η. Α. Abbass (2002) [117] χρησιμοποίησε εξελικτικά νευρωνικά δίκτυα (evolutionary neural networks) για τη μελέτη της δυνατότητας διάγνωσης καρκίνου του μαστού. Χρησιμοποιήθηκαν κυτταρολογικά δεδομένα με 9 χαρακτηριστικά, όπως μίτωση, σχήμα και μέγεθος κυττάρων.



## Κεφάλαιο 4

# Τεχνικές Συλλογικής Ταξινόμησης και εφαρμογή αυτών στη Βιοπληροφορική

### 4.1 Συλλογική Ταξινόμηση

#### 4.1.1 Εισαγωγή

##### 4.1.1.1 Γενική Περιγραφή

Πολλοί ερευνητές έχουν διερευνήσει την τεχνική συνδυασμού των προβλέψεων πολλών ταξινομητών για τη δημιουργία ενός ενιαίου ταξινομητή (Breiman-1996, Clemen-1989, Perrone-1993, Wolpert-1992)[118]. Ο ταξινομητής που προκύπτει ονομάζεται **συλλογικός ταξινομητής (ensemble classifier)** και είναι γενικά περισσότερο ακριβής από κάθε ταξινομητή που συμμετέχει στην ομάδα σχηματισμού του. Θεωρητικές και εμπειρικές μελέτες έχουν δείξει ότι ένας αποτελεσματικός συλλογικός ταξινομητής αποτελείται από ταξινομητές οι οποίοι είναι αποδοτικοί και τα σφάλματά τους βρίσκονται σε διαφορετικά σημεία του διανυσματικού χώρου εισόδου. Οι δύο περισσότερο δημοφιλείς μέθοδοι δημιουργίας συλλογικών ταξινομητών είναι η **μέθοδος Bagging** και η **μέθοδος Boosting**. Οι τεχνικές αυτές βασίζονται στην δειγματοληψία του συνόλου εκπαίδευσης για να προκύψουν διαφορετικά σύνολα εκπαίδευσης για κάθε ταξινομητή του συνολικού συστήματος ταξινόμησης [118].

Σε ένα τυπικό σενάριο μάθησης υπό επίβλεψη ένα σύνολο από δείγματα είναι διαθέσιμα, τα οποία ονομάζονται σύνολο εκπαίδευσης. Οι κλάσεις των δειγμάτων αυτών είναι γνωστές και ο στόχος είναι να κατασκευαστεί ένα μοντέλο το οποίο θα ταξινομεί τα νέα δείγματα σε κλάσεις. Ο αλγόριθμος εκμάθησης που κατασκευάζει το μοντέλο ονομάζεται **επαγωγέας (inducer)**.

Η βασική ιδέα της συλλογικής ταξινόμησης είναι η στάθμιση διαφορετικών ταξινομητών και ο συνδυασμός τους σε ένα ενιαίο ταξινομητή, ο οποίος αποδίδει καλύτερα από κάθε ένα από τους επιμέρους ταξινομητές. Κατά τη λήψη μιας απόφασης οι άνθρωποι ακολουθούν την ίδια τεχνική, παίρνοντας διάφορες απόψεις και στη συνέχεια αξιολογώντας τις απόψεις αυτές για τη λήψη της τελικής απόφασης [119].

Για να παράγει ένας πληθυσμός σωστές αποφάσεις, θα πρέπει να πληροί τα ακόλουθα κριτήρια (Surowiecki) [119]:

- **Ποικιλομορφία απόψεων (Diversity of opinion).** Κάθε μέλος του πληθυσμού θα πρέπει να έχει ιδιωτική πληροφορία, ακόμα και αν είναι μια υποκειμενική ερμηνεία των γεγονότων.
- **Ανεξαρτησία (Independence).** Οι απόψεις των μελών δεν θα πρέπει να επηρεάζονται από άλλα μέλη του πληθυσμού.
- **Αποκέντρωση (Decentralization).** Τα μέλη θα πρέπει να έχουν τη δυνατότητα να καταλήγουν σε συμπεράσματα χρησιμοποιώντας τοπική γνώση.
- **Συνυπολογισμός (Aggregation).** Υπάρχει κάποιος μηχανισμός για τη μετατροπή των επιμέρους αποφάσεων σε μια συλλογική απόφαση.

Ο συνδυασμός των εξόδων των ταξινομητών είναι χρήσιμος μόνο όταν υπάρχει διαφωνία μεταξύ τους. Όταν συνδυαστούν όμοιοι ταξινομητές που παράγουν όμοια αποτελέσματα, δεν υπάρχει κάποιο κέρδος ως προς την πληροφορία ταξινόμησης. Οι Hansen et al.(1990)[118] απέδειξαν ότι εάν ο μέσος ρυθμός σφάλματος για ένα δείγμα είναι λιγότερο από 50% και οι επιμέρους ταξινομητές είναι ανεξάρτητοι στην παραγωγή των σφαλμάτων τους, το αναμενόμενο σφάλμα για ένα δείγμα μπορεί να ελαττωθεί στο μηδέν καθώς το πλήθος των επιμέρους ταξινομητών τείνει στο άπειρο. Παρόλα αυτά αυτές οι υποθέσεις σπάνια ισχύουν σε πραγματικές εφαρμογές. Οι Krogh et al. (1995)[118] απέδειξαν ότι **το σφάλμα του συλλογικού ταξινομητή** μπορεί να διαιρεθεί σε δυο όρους, έναν που μετράει το μέσο σφάλμα γενίκευσης κάθε επιμέρους ταξινομητή και έναν δεύτερο όρο που μετράει το βαθμό ασυμφωνίας μεταξύ των επιμέρους ταξινομητών. Αυτό που έδειξαν με επίσημο τρόπο είναι ότι ένας ιδανικός συλλογικός ταξινομητής αποτελείται από πολύ αποτελεσματικούς επιμέρους ταξινομητές που διαφέρουν στις ταξινομήσεις τους όσο το δυνατό περισσότερο. Οι Oritz et al.[118] εμπειρικά επιβεβαίωσαν ότι αυτού του είδους οι συλλογικοί ταξινομητές γενικεύουν αποτελεσματικά.

Επομένως, οι μέθοδοι κατασκευής συλλογικών ταξινομητών έχουν ως κεντρική ιδέα τη χρήση ταξινομητών που διαφέρουν στις προβλέψεις τους. Αυτό επιτυγχάνεται με διάφορες τροποποιήσεις κατά τη διαδικασία εκπαίδευσης, ώστε να προκύψουν επιμέρους ταξινομητές με διαφορετικά αποτελέσματα. Για παράδειγμα, τεχνικές που χρησιμοποιούν νευρωνικά δίκτυα για την κατασκευή συλλογικών ταξινομητών εκπαιδεύουν νευρωνικά δίκτυα με διαφορετικές τοπολογίες, αρχικά βάρη, παραμέτρους και σε ένα μόνο μέρος του συνόλου εκπαίδευσης για κάθε επιμέρους ταξινομητή [118].

#### 4.1.1.2 Μοντέλο Συλλογικών Ταξινομητών

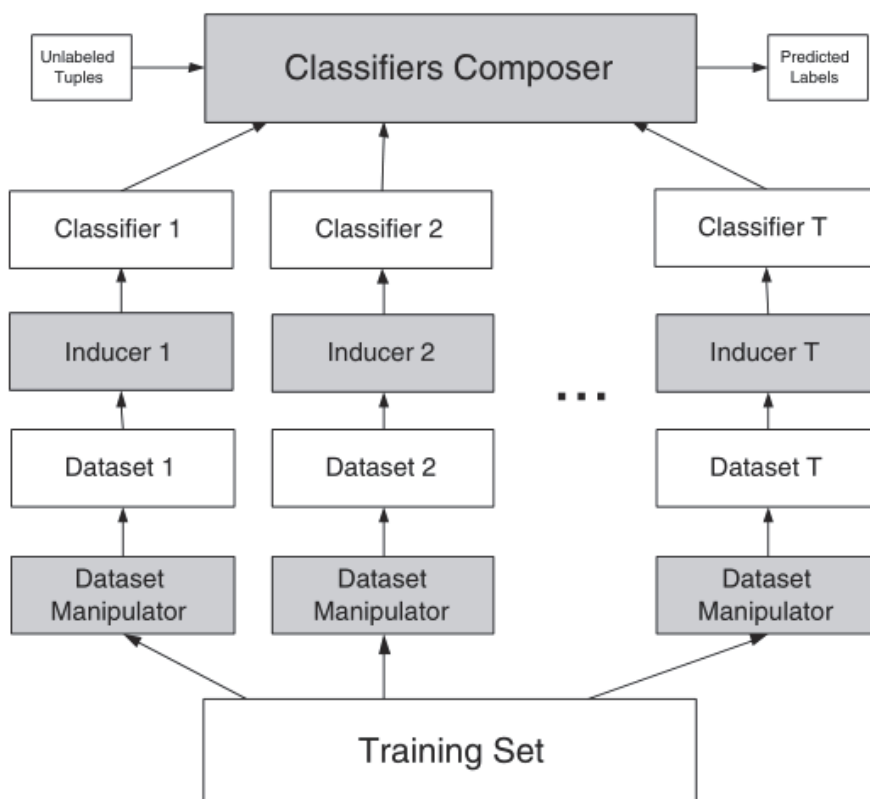
Μια τυπική μέθοδος κατασκευής συλλογικού ταξινομητή περιέχει τα εξής δομικά στοιχεία [119]:

- **Σύνολο εκπαίδευσης (Training set).** Ένα σύνολο δεδομένων με κλάσεις για την εκπαίδευση του συλλογικού ταξινομητή. Τα δεδομένα εκπαίδευσης μπορούν να εκφραστούν με διάφορους τρόπους αλλά συνήθως εκφράζονται ως διανύσματα με συγκεκριμένες τιμές στα διάφορα χαρακτηριστικά. Χρησιμοποιείται ο συμβολισμός  $A$  για την αναπαράσταση του συνόλου των μεταβλητών εισόδου με  $n$  χαρακτηριστικά:  $A = \{a_1, \dots, a_i, \dots, a_n\}$  και  $y$  για την αναπαράσταση της κλάσης ή του χαρακτηριστικού-στόχου.
- **Επαγωγέας βάσης (Base Inducer).** Ο επαγωγέας είναι ένας αλγόριθμος επαγωγής, ο οποίος λαμβάνει ως είσοδο το σύνολο εκπαίδευσης και κατασκευάζει ένα ταξινομητή που αναπαριστά τη γενικευμένη σχέση μεταξύ των χαρακτηριστικών εισόδου και του χαρακτηριστικού-στόχου. Έστω ότι ο συμβολισμός  $I$  αναπαριστά έναν επαγωγέα. Χρησιμοποιείται η έκφραση  $M = I(S)$  για την αναπαράσταση ενός ταξινομητή  $M$  ο οποίος προέκυψε από τον επαγωγέα  $I$  στο σύνολο εκπαίδευσης  $S$ .
- **Γεννήτρια ποικιλομορφίας (Diversity Generator).** Το στοιχείο αυτό είναι υπεύθυνο για τη διαφοροποίηση των επιμέρους ταξινομητών ώστε να είναι αποδοτικό το συλλογικό σύστημα.
- **Συνδυαστής (Combiner).** Το στοιχείο αυτό συνδυάζει τις ταξινομήσεις των επιμέρους ταξινομητών για την παραγωγή της συλλογικής απόφασης.

Είναι χρήσιμο να γίνει διάκριση μεταξύ των **εξαρτημένων μοντέλων συλλογικών ταξινομητών και των ανεξάρτητων μοντέλων**. Στα εξαρτημένα μοντέλα η έξοδος του κάθε επιμέρους ταξινομητή χρησιμοποιείται ως είσοδος για τον επόμενο επιμέρους ταξινομητή, επομένως υπάρχει η δυνατότητα εκμετάλλευσης της γνώσης που παράγεται σε προηγούμενες επαναλήψεις για την καθοδήγηση της μάθησης στις επόμενες επαναλήψεις. Στα ανεξάρτητα μοντέλα οι επιμέρους ταξινομητές εκπαιδεύονται αυτόνομα και στη συνέχεια οι έξοδοί τους συνδυάζονται.

### 4.1.2 Μοντέλα Συλλογικής Ταξινόμησης χωρίς εξάρτηση

Στην Εικόνα 4.1[119] παρουσιάζεται η γενική μορφή των μοντέλων συλλογικής ταξινόμησης χωρίς εξάρτηση. Σε αυτή τη μεθοδολογία από το αρχικό σύνολο εκπαίδευσης προκύπτουν νέα σύνολα εκπαίδευσης τα οποία χρησιμοποιούνται για την εκπαίδευση των επιμέρους ταξινομητών. Τα σύνολα εκπαίδευσης που προκύπτουν από το αρχικό μπορεί να είναι επικαλυπτόμενα ή αμοιβαίως αποκλειόμενα. Στη συνέχεια εφαρμόζεται κάποια μέθοδος συνδυασμού των αποτελεσμάτων για την παραγωγή της τελικής απόφασης. Επειδή η μέθοδος που χρησιμοποιείται για τον συνδυασμό των επιμέρους αποφάσεων είναι συνήθως ανεξάρτητη από τους αλγορίθμους επαγωγής που χρησιμοποιούνται, υπάρχει η δυνατότητα χρήσης διαφορετικού αλγορίθμου σε κάθε σύνολο δεδομένων. Επίσης, στη διαδικασία αυτή μπορούν εύκολα να χρησιμοποιηθούν παράλληλοι υπολογισμοί. Τα μοντέλα συλλογικής ταξινόμησης χωρίς εξάρτηση στοχεύουν στη βελτίωση της ικανότητας πρόβλεψης των ταξινομητών και στη μείωση του συνολικού χρόνου εκτέλεσης [119].



Εικόνα 4.1: Μοντέλο Συλλογικής Ταξινόμησης χωρίς εξάρτηση

#### 4.1.2.1 Μέθοδος Bagging

Η πιο δημοφιλής μέθοδος κατασκευής μοντέλων συλλογικής ταξινόμησης χωρίς εξάρτηση είναι η **μέθοδος Bagging** ή αλλιώς **Bootstrap Aggregating**. Η μέθοδος αυτή στοχεύει στη βελτίωση της ακρίβειας πρόβλεψης με την κατασκευή ενός βελτιωμένου σύνθετου ταξινομητή  $I^*$  με τη συγχώνευση των εξόδων των επιμέρους ταξινομητών σε μία ενιαία πρόβλεψη. Ο ψευδο-κώδικας του αλγορίθμου που υλοποιεί την μέθοδο bagging είναι ο εξής (Breiman 1996)[119]:

**Input:** αλγόριθμος επαγωγής  $I$ , αριθμός επαναλήψεων  $T$ , σύνολο εκπαίδευσης  $S$   
μέγεθος υποσυνόλων εκπαίδευσης  $\mu$

**Output:** Ταξινομητές  $M_t, t = 1, \dots, T$

$t \leftarrow 1$

**Repeat**

$S_t \leftarrow$  Δειγματοληψία  $\mu$  στιγμιοτύπων από το  $S$  με επανατοποθέτηση

Κατασκευή Ταξινομητή  $M_t$  χρησιμοποιώντας τον  $I$  στο  $S_t$

$t \leftarrow t + 1$

**Until**  $t > T$

Όπως φαίνεται από τον ψευδο-κώδικα του αλγορίθμου, κάθε ταξινομητής εκπαιδεύεται σε δείγματα από το σύνολο εκπαίδευσης, τα οποία έχουν προκύψει από **δειγματοληψία με επανατοποθέτηση**. Το μέγεθος κάθε υποσυνόλου εκπαίδευσης επιλέγεται να είναι ίσο με το μέγεθος του αρχικού συνόλου. Θα πρέπει να σημειωθεί ότι εφόσον η δειγματοληψία γίνεται με επανατοποθέτηση, υπάρχει το ενδεχόμενο κάποια δείγματα από το αρχικό σύνολο εκπαίδευσης  $S$  να εμφανιστούν παραπάνω από μια φορά στο σύνολο  $S_t$  και κάποια δείγματα να μην συμπεριληφθούν καθόλου. Επομένως, αν και τα σύνολα εκπαίδευσης  $S_t$  διαφέρουν μεταξύ τους, δεν είναι στατιστικά ανεξάρτητα [119].

Για την ταξινόμηση ενός νέου δείγματος, κάθε ταξινομητής επιστρέφει την πρόβλεψη κλάσης για το άγνωστο δείγμα. Ο σύνθετος ταξινομητής  $I^*$  που εφαρμόζει την μέθοδο bagging επιστρέφει την κλάση που έχει προβλεφθεί από **την πλειοψηφία των επιμέρους ταξινομητών (μέθοδος ψηφοφορίας)**. Το αποτέλεσμα είναι ότι η μέθοδος bagging παράγει ένα σύνθετο μοντέλο που αρκετές φορές αποδίδει καλύτερα από τους απλούς ταξινομητές από τους οποίους αποτελείται. Ο Breiman (1996)[119] σημειώνει ότι αυτό ισχύει κυρίως για τους ασταθείς επαγωγικούς αλγορίθμους επειδή η μέθοδος bagging μπορεί να εξαλείψει την αστάθεια που παρουσιάζουν. Ένας επαγωγικός αλγόριθμος θεωρείται ασταθής εάν διαταραχές στο σύνολο εκμάθησης μπορούν να προκαλέσουν σημαντικές αλλαγές στον ταξινομητή που θα προκύψει.

#### 4.1.2.2 Μέθοδος Wagging

Η μέθοδος Wagging είναι μια παραλλαγή της μεθόδου Bagging (Bauer et al., 1999)[119] στην οποία κάθε επιμέρους ταξινομητής εκπαιδεύεται σε ολόκληρο το σύνολο εκπαίδευσης, αλλά σε κάθε δείγμα έχει στοχαστικά ανατεθεί ένα βάρος. Ο ψευδο-κώδικας του αλγορίθμου είναι ο εξής [119]:

**Input:** αλγόριθμος επαγωγής  $I$ , αριθμός επαναλήψεων  $T$ , σύνολο εκπαίδευσης  $S$   
κατανομή βαρών  $d$

**Output:** Ταξινομητές  $M_t, t = 1, \dots, T$

$t \leftarrow 1$

**Repeat**

$S_t \leftarrow S$  με τυχαία βάρη που προκύπτουν από την κατανομή  $d$

Κατασκευή Ταξινομητή  $M_t$  χρησιμοποιώντας τον  $I$  στο  $S_t$

$t \leftarrow t + 1$

**Until**  $t > T$

#### 4.1.2.3 Συλλογικός Ταξινομητής Random Forest

Ο συλλογικός ταξινομητής Τυχαίου Δάσους (Random Forest) (Breiman 2001)[119], ο οποίος ονομάζεται και τυχαίος υπο-χώρος (random subspace) χρησιμοποιεί ένα μεγάλο αριθμό ανεξάρτητων δέντρων απόφασης, τα οποία δεν έχουν υποστεί κλάδεμα. Τα ανεξάρτητα αυτά δέντρα κατασκευάζονται χρησιμοποιώντας τον εξής αλγόριθμο [119]:

**Input:** αλγόριθμος επαγωγής  $IDT$  για δέντρο απόφασης, αριθμός επαναλήψεων  $T$   
σύνολο εκπαίδευσης  $S$ , μέγεθος υποσυνόλων εκπαίδευσης  $\mu$ ,  
αριθμός χαρακτηριστικών που χρησιμοποιούνται σε κάθε κόμβο  $N$

**Output:** Ταξινομητές  $M_t, t = 1, \dots, T$

$t \leftarrow 1$

**Repeat**

$S_t \leftarrow$  Δειγματοληψία  $\mu$  στιγμιοτύπων από το  $S$  με επανατοποθέτηση

Κατασκευή Ταξινομητή  $M_t$  χρησιμοποιώντας τον  $IDT(N)$  στο  $S_t$

$t \leftarrow t + 1$

**Until**  $t > T$

Η **παράμετρος εισόδου  $N$**  αναπαριστά τον αριθμό των μεταβλητών εισόδου που θα χρησιμοποιηθούν για να προσδιορίσουν την απόφαση σε κάποιο κόμβο του δέντρου. Ο αριθμός αυτός θα πρέπει να είναι αρκετά μικρότερος από τον αριθμό των χαρακτηριστικών του συνόλου εκπαίδευσης.

Ο **αλγόριθμος επαγωγής IDT** στον ψευδο-κώδικα που παρουσιάστηκε μπορεί να είναι οποιοσδήποτε αλγόριθμος επαγωγής δέντρου απόφασης που λειτουργεί από πάνω προς τα κάτω (top-down), με την εξής τροποποίηση: το δέντρο απόφασης δεν κλαδεύεται και σε κάθε κόμβο, αντί να επιλέγεται ο καλύτερος διαχωρισμός των δεδομένων από όλα τα χαρακτηριστικά, επιλέγονται τυχαία  $N$  χαρακτηριστικά και από αυτά στη συνέχεια γίνεται η επιλογή του καλύτερου διαχωρισμού των δεδομένων. Η ταξινόμηση ενός νέου δείγματος γίνεται συνδυάζοντας τις ταξινομήσεις των δέντρων απόφασης με τη μέθοδο της ψηφοφορίας [119].

Υπάρχουν και άλλοι εναλλακτικοί τρόποι για τη δημιουργία ενός συλλογικού ταξινομητή Random Forest. Για παράδειγμα, αντί να χρησιμοποιούνται όλα τα δείγματα εκπαίδευσης για τον προσδιορισμό του καλύτερου σημείου διαχωρισμού για κάθε χαρακτηριστικό, ένα υποσύνολο των δειγμάτων και μια τιμή διαχωρισμού που βελτιστοποιεί το κριτήριο διαχωρισμού ορίζεται ως η απόφαση στον εκάστοτε κόμβο. Επειδή ο διαχωρισμός σε κάθε κόμβο θα διαφέρει ανάλογα με το δείγμα που επιλέγεται, παράγονται διαφορετικά δέντρα τα οποία μπορούν να συνδυαστούν αποδοτικά σε συλλογικούς ταξινομητές.

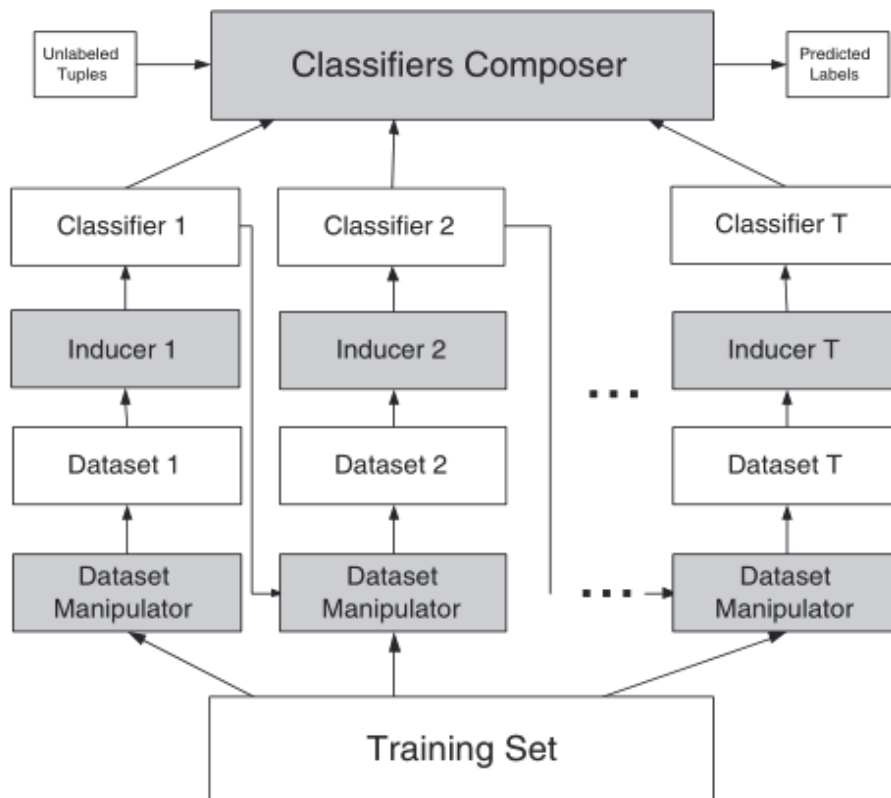
Μια άλλη μέθοδος για την παραγωγή τυχαίων δέντρων απόφασης με τη χρήση ιστογραμμάτων προτάθηκε από τους Kamath et al. (2002) [119]. Η χρήση ιστογραμμάτων έχει προταθεί ως μια μέθοδος διακριτοποίησης των χαρακτηριστικών και μείωσης του χρόνου που απαιτείται για τον χειρισμό συνόλων δεδομένων μεγάλου μεγέθους. Ένα ιστόγραμμα δημιουργείται για κάθε χαρακτηριστικό και τα όρια των διαστημάτων που παράγουν τις αντιπροσωπευτικές τιμές στο ιστόγραμμα (bin boundaries) μπορούν να χρησιμοποιηθούν ως πιθανά σημεία διαχωρισμού. Τα τυχαία δέντρα προκύπτουν με την επιλογή τυχαίου σημείου διαχωρισμού σε ένα διάστημα γύρω από το καλύτερο bin boundary.

Αν και ο συλλογικός ταξινομητής Random Forest έχει οριστεί για δέντρα απόφασης, η προσέγγιση αυτή μπορεί να εφαρμοστεί σε όλα τα είδη ταξινομητών. Ένα σημαντικό πλεονέκτημα της μεθόδου Random Forest είναι η ικανότητά της να χειρίζεται μεγάλο αριθμό χαρακτηριστικών εισόδου και έχει μικρούς χρόνους εκτέλεσης.

### 4.1.3 Μοντέλα Συλλογικής Ταξινόμησης με εξάρτηση

Για τα μοντέλα συλλογικής ταξινόμησης με εξάρτηση υπάρχουν δυο κύριες προσεγγίσεις [119]:

- **Αυξητική Συνολική Μάθηση (Incremental Batch Learning).** Στη μέθοδο αυτή η ταξινόμηση που προκύπτει σε κάθε επανάληψη δίνεται ως εκ των προτέρων γνώση στον αλγόριθμο εκμάθησης για την επόμενη επανάληψη. Ο αλγόριθμος εκμάθησης χρησιμοποιεί το σύνολο εκπαίδευσης μαζί με την ταξινόμηση του προηγούμενου ταξινομητή για την κατασκευή του επόμενου ταξινομητή. Ο ταξινομητής που κατασκευάζεται στην τελευταία επανάληψη επιλέγεται ως ο τελικός ταξινομητής.
- **Επιλογή Δειγμάτων καθοδηγούμενη από μοντέλο (Model-guided Instance Selection).** Σύμφωνα με αυτή την προσέγγιση, οι ταξινομητές που κατασκευάστηκαν σε προηγούμενες επαναλήψεις χρησιμοποιούνται για τον καθορισμό του συνόλου εκπαίδευσης που θα χρησιμοποιηθεί στην επόμενη επανάληψη, όπως φαίνεται και στην Εικόνα 4.2. Αυτή η διαδικασία μπορεί να ενσωματωθεί με τον βασικό αλγόριθμο εκμάθησης. Οι συγκεκριμένες μέθοδοι συνήθως αγνοούν όλα τα δείγματα στα οποία ο αρχικός ταξινομητής είναι ορθός και μαθαίνουν μόνο από δείγματα που έχουν αρχικά ταξινομηθεί λανθασμένα.



**Εικόνα 4.2:** Μοντέλο Συλλογικής Ταξινόμησης με εξάρτηση, επιλογή δειγμάτων καθοδηγούμενη από μοντέλο



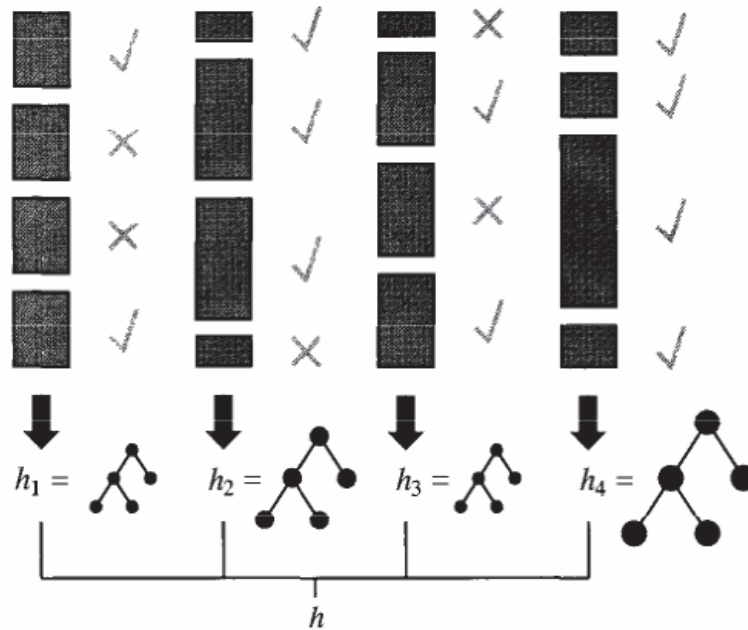
#### 4.1.3.1 Μέθοδος Boosting

Η περισσότερο διαδεδομένη μέθοδος επιλογής δειγμάτων καθοδηγούμενης από μοντέλο (**Model-guided Instance Selection**) είναι η μέθοδος **Boosting**. Η μέθοδος Boosting, η οποία ονομάζεται και *arcing* (Adaptive Resampling and Combining), είναι μια γενική μέθοδος βελτίωσης της απόδοσης ενός ασθενούς συστήματος μάθησης (**weak learner**). Τα ασθενή συστήματα μάθησης επιτυγχάνουν απόδοση καλύτερη από την τυχαία ταξινόμηση αλλά συνήθως δεν καταφέρουν να προσεγγίσουν σε πολύ μεγάλο βαθμό την αληθινή ταξινόμηση. Η μέθοδος λειτουργεί με επαναληπτική εκτέλεση ενός ασθενούς ταξινομητή σε διάφορα καταναμημένα δεδομένα εκπαίδευσης. Οι ταξινομητές που παράγονται από τα ασθενή συστήματα μάθησης συνδυάζονται σε ένα σύνθετο ισχυρό ταξινομητή για την επίτευξη μεγαλύτερης ακρίβειας [119].

Η μέθοδος boosting χρησιμοποιεί την έννοια του **σταθμισμένου συνόλου εκπαίδευσης (weighted training set)**. Σε ένα τέτοιο σύνολο εκπαίδευσης, κάθε δείγμα έχει μια σχετική βαρύτητα  $w_j \geq 0$ . Όσο υψηλότερη είναι η βαρύτητα ενός δείγματος, τόσο υψηλότερη είναι η σημασία που του αποδίδεται κατά τη μάθηση μιας υπόθεσης. Αρχικά, όλα τα δείγματα εκπαίδευσης ξεκινούν με την τιμή  $w_j = 1$ . Από το σύνολο αυτό δημιουργείται η πρώτη υπόθεση  $h_1$ . Αυτή η υπόθεση θα ταξινομήσει μερικά από τα δείγματα εκπαίδευσης σωστά και μερικά εσφαλμένα. Η δεύτερη υπόθεση θα πρέπει να αποδώσει καλύτερα στα δείγματα με εσφαλμένη ταξινόμηση οπότε αυξάνεται η βαρύτητα τους και μειώνεται η βαρύτητα των δειγμάτων που έχουν ταξινομηθεί σωστά. Από αυτό το νέο σταθμισμένο σύνολο εκπαίδευσης δημιουργείται η υπόθεση  $h_2$ . Η διεργασία συνεχίζεται με αυτόν τον τρόπο μέχρι τη δημιουργία  $M$  υποθέσεων, όπου  $M$  είναι η είσοδος στον αλγόριθμο boosting [1].

Η τελική συλλογική υπόθεση είναι **ένας σταθμισμένος πλειοψηφικός συνδυασμός όλων των υποθέσεων  $M$** , κάθε μια από τις οποίες είναι σταθμισμένη σύμφωνα με το πόσο καλά απέδωσε το σύνολο εκπαίδευσης. Η βασική ιδέα της μεθόδου παρουσιάζεται στην Εικόνα 4.3. Υπάρχουν πολλές παραλλαγές της βασικής ιδέας αυτής με διαφορετικούς τρόπους προσαρμογής των βαρών και συνδυασμού των υποθέσεων [1].

Η μέθοδος boosting όπως και η μέθοδος bagging, βελτιώνει την ακρίβεια ενός ταξινομητή με το να παράγει ένα σύνθετο μοντέλο το οποίο συνδυάζει πολλαπλούς ταξινομητές. Και οι δύο μέθοδοι ακολουθούν την προσέγγιση της ψηφοφορίας, η οποία υλοποιείται με διαφορετικό τρόπο σε κάθε περίπτωση, για να συνδυάσουν τις εξόδους των επιμέρους ταξινομητών. Σε αντίθεση με τη μέθοδο bagging, στη μέθοδο boosting κάθε ταξινομητής επηρεάζεται από την απόδοση των ταξινομητών που έχουν κατασκευαστεί πριν από αυτόν. Πιο συγκεκριμένα, ο νέος ταξινομητής προσέχει περισσότερο τα σφάλματα ταξινόμησης που έχουν γίνει από ταξινομητές που κατασκευάστηκαν πριν από αυτόν, και ο βαθμός προσοχής στα σφάλματα αυτά καθορίζεται από την απόδοσή τους.



**Εικόνα 4.3:** Τρόπος λειτουργίας της μέθοδου boosting. Κάθε σκιασμένο ορθογώνιο αντιστοιχεί σε ένα δείγμα. Το ύψος του ορθογωνίου αντιστοιχεί στην βαρύτητά του. Τα σημάδια αποδοχής και άρνησης δείχνουν αν το δείγμα ταξινομήθηκε σωστά από την τρέχουσα υπόθεση. Το μέγεθος του δέντρου αποφάσεων υποδηλώνει τη βαρύτητα της υπόθεσης στη τελική συλλογή.

Στη μέθοδο bagging, κάθε δείγμα επιλέγεται με ίση πιθανότητα ενώ στη μέθοδο boosting τα δείγματα επιλέγονται με μια πιθανότητα ανάλογη με το βάρος τους. Επίσης, η μέθοδο bagging απαιτεί έναν ασταθή αλγόριθμο επαγωγής ως επαγωγέα βάσης, κάτι το οποίο δεν είναι απαραίτητο στη μέθοδο boosting παρά μόνο η διατήρηση του ρυθμού σφάλματος σε κάθε επιμέρους ταξινομητή κάτω από 0.5 [119].

#### 4.1.3.2 Συλλογικός Ταξινομητής με αλγόριθμο AdaBoost

**Ο Αλγόριθμος AdaBoost (Adaptive Boosting)**, ο οποίος προτάθηκε για πρώτη φορά από τους Freund & Schapire (1996)[119], είναι ένας δημοφιλής αλγόριθμος κατασκευής συλλογικών ταξινομητών ο οποίος βελτιώνει τους ασθενείς ταξινομητές μέσω μιας επαναληπτικής διαδικασίας. Η βασική ιδέα είναι να δοθεί περισσότερο προσοχή σε δείγματα που είναι δυσκολότερο να ταξινομηθούν. Ο βαθμός της προσοχής που δίνεται ποσοτικοποιείται με την αντιστοίχιση βαρών σε κάθε δείγμα του συνόλου εκπαίδευσης.

Αρχικά το ίδιο βάρος αντιστοιχίζεται σε όλα τα δείγματα. Σε κάθε επανάληψη τα βάρη από όλα τα δείγματα που δεν ταξινομήθηκαν σωστά αυξάνονται και παράλληλα μειώνονται τα βάρη από τα δείγματα που ταξινομήθηκαν σωστά. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα ο ασθενής ταξινομητής να επικεντρώνεται στα δείγματα από το σύνολο εκπαίδευσης που είναι δύσκολο να ταξινομηθούν, με το να γίνονται επιπλέον επαναλήψεις και να δημιουργούνται περισσότεροι ταξινομητές [119].

Επίσης, σε κάθε επιμέρους ταξινομητή αντιστοιχίζεται ένα βάρος, το οποίο μετράει την συνολική ακρίβεια του ταξινομητή και είναι συνάρτηση του συνολικού βάρους των σωστά ταξινομημένων δειγμάτων. Επομένως, υψηλότερα βάρη δίνονται στους περισσότερο ακριβείς ταξινομητές. Τα βάρη αυτά χρησιμοποιούνται κατά την ταξινόμηση των νέων δειγμάτων. Η επαναληπτική αυτή διαδικασία παρέχει μια ομάδα ταξινομητών που αλληλοσυμπληρώνονται. Συγκεκριμένα έχει δειχθεί ότι ο αλγόριθμος AdaBoost προσεγγίζει ένα ταξινομητή μεγάλου περιθωρίου, όπως ο ταξινομητής SVM (Rudin et al. 2004)[119].

Ο ψευδο-κώδικας του **αλγορίθμου AdaBoost** είναι ο εξής [119]:

**Input:** αλγόριθμος ασθενούς επαγωγής  $I$ , αριθμός επαναλήψεων  $T$   
 σύνολο εκπαίδευσης  $S$

**Output:** Ταξινομητές  $M_t$ , βάρη  $a_t$ ,  $t = 1, \dots, T$

$t \leftarrow 1$

$D_1(i) \leftarrow 1/m, i = 1, \dots, m$

**Repeat**

Κατασκευή Ταξινομητή  $M_t$  χρησιμοποιώντας τον  $I$  και την κατανομή  $D_t$

$$\varepsilon_t \leftarrow \sum_{i: M_t(x_i) \neq y_i} D_t(i)$$

**if**  $\varepsilon_t > 0.5$  **then**

$T \leftarrow t - 1$

Έξοδος από τον βρόχο.

**end if**

$$a_t \leftarrow \frac{1}{2} \ln \left( \frac{1 - \varepsilon_t}{\varepsilon_t} \right)$$

$$D_{t+1}(i) = D_t(i) e^{-a_t y_i M_t(x_i)}$$

Κανονικοποίηση  $D_{t+1}$  ώστε να εκφράζει κατανομή.

$t \leftarrow t + 1$

**Until**  $t > T$

Ο αλγόριθμος υποθέτει ότι το σύνολο εκπαίδευσης αποτελείται από  $m$  δείγματα τα οποία ανήκουν στην κλάση  $+1$  ή στην κλάση  $-1$ . Η ταξινόμηση ενός νέου δείγματος πραγματοποιείται με ψηφοφορία όλων των ταξινομητών  $\{M_t\}$ , ο καθένας από τους οποίους έχει βάρος  $a_t$ . Μαθηματικά αυτό μπορεί να γραφτεί ως εξής:

$$H(x) = \text{sign} \left( \sum_{t=1}^T a_t M_t(x) \right) \quad (4.1)$$

Ο αλγόριθμος **Arc-x4** είναι ένας απλός αλγόριθμος που ακολουθεί την μέθοδο arcing (Breiman 1998)[119] και στοχεύει στο να δείξει ότι ο αλγόριθμος AdaBoost είναι αποτελεσματικός εξαιτίας της προσαρμοστικής δειγματοληψίας και όχι εξαιτίας της συγκεκριμένης μορφής της συνάρτησης στάθμισης. Στον αλγόριθμο Arc-x4 οι ταξινομητές συνδυάζονται με αστάθμητη ψηφοφορία και η ενημέρωση των πιθανοτήτων γίνεται ως εξής:

$$D_{t+1}(i) = 1 + m_{t_i}^4 \quad (4.2)$$

όπου  $m_{t_i}$  ο αριθμός των λανθασμένων ταξινομήσεων στο  $i$ -στο δείγμα από τους πρώτους  $t$  ταξινομητές.

Ο βασικός αλγόριθμος AdaBoost που παρουσιάστηκε παραπάνω αντιμετωπίζει **προβλήματα δυαδικής ταξινόμησης**. Οι Freund & Schapire [120] περιγράφουν δυο εκδόσεις του αλγορίθμου **AdaBoost (AdaBoost.M1, AdaBoost.M2)** οι οποίες είναι ισοδύναμες μεταξύ τους ως προς τα προβλήματα δυαδικής ταξινόμησης αλλά ο αλγόριθμος AdaBoost.M2 μπορεί επιπλέον να χειριστεί προβλήματα ταξινόμησης πολλών κλάσεων [119].

Ο ψευδο-κώδικας για τον **αλγόριθμο AdaBoost.M1** είναι ο εξής [120]:

**Input:** σειρά από  $m$  δείγματα  $\langle (x_1, y_1), \dots, (x_m, y_m) \rangle$  με κατηγορίες εκπαίδευσης  $y_i \in Y = \{1, \dots, k\}$ , αλγόριθμος ασθενούς μάθησης  $I$ , αριθμός επαναλήψεων  $T$

**Αρχικοποίηση**  $D_1(i) = 1/m, i = 1, \dots, m$

**Do for**  $t = 1, 2, \dots, T$

*Χρήση αλγορίθμου  $I$  ο οποίος τροφοδοτείται με την κατανομή  $D_t$*

*Λήψη υπόθεσης  $h_t: X \rightarrow Y$*

*Υπολογισμός του σφάλματος της υπόθεσης  $h_t$ :*

$$\varepsilon_t = \sum_{i: h_t(x_i) \neq y_i} D_t(i)$$

**If**  $\varepsilon_t > 0.5$  **then**

$T \leftarrow t - 1$

*Έξοδος από τον βρόχο.*

**end If**

*Θεωρείται ότι  $\beta_t = \varepsilon_t / (1 - \varepsilon_t)$*

*Ενημέρωση κατανομής  $D_t$ :*

$$D_{t+1}(i) = \frac{D_t(i)}{Z_t} \times \begin{cases} \beta_t & \text{αν } h_t(x_i) = y_i \\ 1 & \text{αλλιώς} \end{cases}$$

*όπου το  $Z_t$  είναι μια σταθερά κανονικοποίησης (επιλεγμένη έτσι ώστε το  $D_{t+1}(i)$  να εκφράζει κατανομή).*

**Output:** Η τελική υπόθεση:

$$h_{fin}(x) = \operatorname{argmax}_{y \in Y} \sum_{t: h_t(x)=y} \log \frac{1}{\beta_t} \quad (4.3)$$

Ο αλγόριθμος boosting λαμβάνει ως είσοδο ένα σύνολο εκπαίδευσης με  $m$  δείγματα  $S = \langle (x_1, y_1), \dots, (x_m, y_m) \rangle$ , όπου  $x_i$  είναι ένα δείγμα που προέρχεται από ένα χώρο  $X$ , το οποίο αναπαρίσταται με κάποιο τρόπο (συνήθως ως ένα διάνυσμα με τιμές για διάφορα χαρακτηριστικά) και όπου  $y_i \in Y$  είναι η κατηγορία στην οποία ανήκει το δείγμα  $x_i$ . Υπάρχει η θεώρηση ότι το σύνολο των πιθανών κατηγοριών  $Y$  έχει πεπερασμένη πληθικότητα ίση με  $k$ .

Επίσης, ο αλγόριθμος boosting έχει πρόσβαση σε κάποιον αλγόριθμο μάθησης, ο οποίος ονομάζεται **αλγόριθμος ασθενούς μάθησης (weak learning algorithm)**. Ο αλγόριθμος αυτός καλείται από τον αλγόριθμο boosting επανειλημμένα σε μια σειρά από επαναλήψεις. Στην επανάληψη  $t$ , ο αλγόριθμος boosting παρέχει στον ασθενή ταξινομητή μια κατανομή  $D_t$  που αφορά το σύνολο εκπαίδευσης  $S$ . Ο ασθενής ταξινομητής υπολογίζει μια υπόθεση  $h_t: X \rightarrow Y$  η οποία θα ταξινομήσει λανθασμένα ένα μέρος των δειγμάτων εκπαίδευσης. Ο στόχος του ασθενούς ταξινομητή είναι να βρει μια υπόθεση  $h_t$  η οποία ελαχιστοποιεί το σφάλμα εκπαίδευσης  $\varepsilon_t = \Pr_{i \sim D_t}[h_t(x_i) \neq y_i]$ . Θα πρέπει να σημειωθεί ότι το σφάλμα αυτό μετρείται ως προς την κατανομή  $D_t$  που έχει δοθεί στον ασθενή ταξινομητή. Η διαδικασία αυτή συνεχίζει για  $T$  επαναλήψεις και στο τέλος ο αλγόριθμος boosting συνδυάζει τις ασθενείς υποθέσεις  $h_1, h_2, \dots, h_T$  σε μια τελική υπόθεση  $h_{fin}$  [120].

Ο τρόπος με τον οποίο υπολογίζονται σε κάθε επανάληψη η κατανομή  $D_t$  και η τελική υπόθεση  $h_{fin}$  διαφέρει ανάλογα με τον αλγόριθμο boosting που χρησιμοποιείται. Στον αλγόριθμο Adaboost.M1, η αρχική κατανομή  $D_t$  είναι ομοιόμορφη σε όλο το  $S$ , αφού είναι  $D_1(i) = 1/m$  για όλα τα  $i$ . Για τον υπολογισμό της  $D_{t+1}$  από την  $D_t$  και από την  $h_t$  πολλαπλασιάζεται το βάρος του δείγματος  $i$  με κάποιο αριθμό  $\beta_t \in [0,1)$  εάν η  $h_t$  ταξινομεί σωστά το  $x_i$ , αλλιώς το βάρος στα αριστερά δεν αλλάζει. Στη συνέχεια τα βάρη κανονικοποιούνται ξανά με διαίρεση με τη σταθερά κανονικοποίησης  $Z_t$ . Δείγματα τα οποία ταξινομούνται εύκολα από πολλές προηγούμενες υποθέσεις παίρνουν χαμηλότερα βάρη ενώ τα δύσκολα δείγματα που ταξινομούνται λανθασμένα περισσότερες φορές παίρνουν υψηλότερα βάρη. Επομένως, ο αλγόριθμος AdaBoost επικεντρώνει το περισσότερο βάρος στα δείγματα που είναι δυσκολότερο να ταξινομηθούν από τον ασθενή ταξινομητή [120].

Ο αριθμός  $\beta_t$  υπολογίζεται ως συνάρτηση του  $\varepsilon_t$ . Η τελική υπόθεση  $h_{fin}$  είναι μια σταθμισμένη ψηφοφορία των ασθενών υποθέσεων. Για ένα συγκεκριμένο δείγμα  $x$  η υπόθεση  $h_{fin}$  δίνει ως έξοδο την κατηγορία  $y$  η οποία μεγιστοποιεί το άθροισμα των βαρών των ασθενών υποθέσεων που προβλέπουν αυτή την κατηγορία. Το βάρος της υπόθεσης  $h_t$

ορίζεται να είναι  $\ln(1/\beta_t)$  έτσι ώστε να δίνεται περισσότερο βάρος στις υποθέσεις με μικρότερο σφάλμα.

Ο ψευδο-κώδικας για τον **αλγόριθμο AdaBoost.M2** είναι ο εξής [120]:

**Input:** σειρά από  $m$  δείγματα  $\langle (x_1, y_1), \dots, (x_m, y_m) \rangle$  με κατηγορίες εκπαίδευσης  $y_i \in Y = \{1, \dots, k\}$ , αλγόριθμος ασθενούς μάθησης  $I$ , αριθμός επαναλήψεων  $T$

Θεωρείται ότι  $B = \{(i, y) : i \in \{1, \dots, m\}, y \neq y_i\}$

**Αρχικοποίηση**  $D_1(i, y) = 1/|B|$  για  $(i, y) \in B$ .

**Do for**  $t = 1, 2, \dots, T$

Χρήση αλγορίθμου  $I$  ο οποίος τροφοδοτείται με κατανομή λανθασμένων ταξινομήσεων  $D_t$

Λήψη υπόθεσης  $h_t : X \times Y \rightarrow [0, 1]$

Υπολογισμός της ψευδο-απώλειας της υπόθεσης  $h_t$ :

$$\varepsilon_t = \frac{1}{2} \sum_{(i,y) \in B} D_t(i, y) (1 - h_t(x_i, y_i) + h_t(x_i, y))$$

Θεωρείται ότι  $\beta_t = \varepsilon_t / (1 - \varepsilon_t)$

Ενημέρωση  $D_t$ :

$$D_{t+1}(i, y) = \frac{D_t(i, y)}{Z_t} \beta_t^{(1/2)(1+h_t(x_i, y_i)-h_t(x_i, y))}$$

όπου το  $Z_t$  είναι μια σταθερά κανονικοποίησης (επιλεγμένη έτσι ώστε το  $D_{t+1}$  να εκφράζει κατανομή)

**Output:** Η υπόθεση:

$$h_{fin}(x) = \operatorname{argmax}_{y \in Y} \sum_{t=1}^T \left( \log \frac{1}{\beta_t} \right) h_t(x, y) \quad (4.4)$$

Η δεύτερη έκδοση του αλγορίθμου AdaBoost επεκτείνει την επικοινωνία μεταξύ του αλγορίθμου boosting και του αλγορίθμου ασθενούς μάθησης. Αρχικά, ο αλγόριθμος ασθενούς μάθησης παράγει πιο εκφραστικές υποθέσεις των οποίων η έξοδος είναι ένα διάνυσμα στο  $[0, 1]^k$  αντί μια συγκεκριμένη κλάση/κατηγορία στο  $Y$ . Το  $y$ -στο στοιχείο του διανύσματος αυτού αναπαριστά ένα βαθμό εμπιστοσύνης ότι η σωστή κατηγορία είναι η  $y$ . Στοιχεία με τιμές κοντά στο 1 ή στο 0 αντιστοιχούν σε πολύ πιθανές ή απίθανες κατηγορίες αντίστοιχα.

Αν και ο αλγόριθμος ασθενούς μάθησης έχει μεγαλύτερη εκφραστική δύναμη, υπάρχει μια περισσότερο πολύπλοκη απαίτηση σχετικά με την απόδοση των ασθενών υποθέσεων. Αντί να γίνει χρήση του σφάλματος πρόβλεψης, οι ασθενείς υποθέσεις θα πρέπει να έχουν υψηλή απόδοση ως προς ένα πιο πολύπλοκο μέτρο σφάλματος το οποίο ονομάζεται **ψευδο-απώλεια (pseudo-loss)**. Σε αντίθεση με το κανονικό μέτρο σφάλματος το οποίο υπολογίζεται ως προς μια κατανομή των δειγμάτων, η ψευδο-απώλεια υπολογίζεται ως προς μια κατανομή του συνόλου όλων των ζευγαριών των δειγμάτων και των λανθασμένων κατηγοριών. Με το να τροποποιεί την κατανομή αυτή, ο αλγόριθμος boosting επικεντρώνει τον ασθενή ταξινομητή όχι μόνο σε δείγματα που είναι δύσκολο να ταξινομηθούν αλλά ειδικότερα σε λανθασμένες προβλέψεις κατηγοριών των οποίων η διάκριση είναι δυσκολότερη. Ο αλγόριθμος AdaBoost.M2 επιτυγχάνει εάν κάθε ασθενής υπόθεση είναι ελαφρώς καλύτερη από την τυχαία πρόβλεψη [120].

Μια **λανθασμένη εκτίμηση (mislabel)** είναι ένα ζεύγος  $(i, y)$ , όπου  $i$  είναι ο δείκτης ενός δείγματος εκπαίδευσης και  $y$  είναι μια λανθασμένη κατηγορία που σχετίζεται με το δείγμα  $i$ . Έστω  $B$  το σύνολο όλων των λανθασμένων εκτιμήσεων:

$$B = \{(i, y): i \in \{1, \dots, m\}, y \neq y_i\} \quad (4.5)$$

Μια **κατανομή λανθασμένων εκτιμήσεων (mislabel distribution)** είναι μια κατανομή που ορίζεται ως προς το σύνολο  $B$  όλων των λανθασμένων εκτιμήσεων. Σε κάθε επανάληψη  $t$  του αλγορίθμου boosting, ο AdaBoost.M2 παρέχει στον ασθενή ταξινομητή μια κατανομή λανθασμένων εκτιμήσεων  $D_t$ . Ο ασθενής ταξινομητής υπολογίζει μια υπόθεση  $h_t$  της μορφής  $h_t: X \times Y \rightarrow [0,1]$ .

Κάθε λανθασμένη εκτίμηση  $(i, y)$  ερμηνεύεται ως μια αναπαράσταση μιας δυαδικής ερώτησης της μορφής: «Προβλέπεται ότι η κατηγορία που σχετίζεται με το δείγμα  $x_i$  είναι η  $y_i$  (σωστή κατηγορία) ή είναι η κατηγορία  $y$  (κάποια από τις λανθασμένες κατηγορίες);». Με βάση αυτή την ερμηνεία, το βάρος  $D_t(i, y)$  που σχετίζεται με μια λανθασμένη εκτίμηση αναπαριστά την σημαντικότητα της διάκρισης μιας λανθασμένης κατηγορίας  $y$  για το δείγμα  $x_i$  [120].

Μια ασθενής υπόθεση  $h_t$  ερμηνεύεται ως εξής: Εάν  $h_t(x_i, y_i) = 1$  και  $h_t(x_i, y) = 0$  τότε η  $h_t$  έχει ορθώς προβλέψει ότι η κατηγορία του δείγματος  $x_i$  είναι η  $y_i$  και όχι η  $y$  (αφού η  $h_t$  θεωρεί πολύ πιθανή την  $y_i$  και πολύ απίθανη την  $y$ ). Ομοίως εάν  $h_t(x_i, y_i) = 0$  και  $h_t(x_i, y) = 1$  τότε η  $h_t$  έχει λανθασμένα παράγει την αντίθετη πρόβλεψη. Αν  $h_t(x_i, y_i) = h_t(x_i, y)$  τότε η πρόβλεψη της  $h_t$  είναι μια τυχαία πρόβλεψη (οι τιμές για την  $h_t$  στο  $(0,1)$  ερμηνεύονται πιθανοτικά).

Αυτή η ερμηνεία οδηγεί στον ορισμό της ψευδο-απώλειας για την υπόθεση  $h_t$  ως προς την κατανομή λανθασμένων εκτιμήσεων  $D_t$  από την εξίσωση:

$$\varepsilon_t = \frac{1}{2} \sum_{(i,y) \in B} D_t(i, y) (1 - h_t(x_i, y_i) + h_t(x_i, y)) \quad (4.6)$$

Η ψευδο-απώλεια ελαχιστοποιείται όταν οι σωστές κατηγορίες  $y_i$  παίρνουν τιμές κοντά στο 1 και οι λανθασμένες κατηγορίες  $y \neq y_i$  παίρνουν τιμές κοντά στο 0. Η τιμή  $1/2$  για την ψευδο-απώλεια επιτυγχάνεται στην τετριμμένη περίπτωση υποθέσεων  $h_t$  που παίρνουν μια συγκεκριμένη σταθερή τιμή και επίσης μια υπόθεση  $h_t$  με ψευδο-απώλεια μεγαλύτερη από  $1/2$  μπορεί να αντικατασταθεί με την υπόθεση  $1 - h_t$ , της οποίας η ψευδο-απώλεια είναι λιγότερη από  $1/2$ .

Ο στόχος του ασθενούς ταξινομητή είναι η εύρεση μια ασθενούς υπόθεσης  $h_t$  με μικρή τιμή ψευδο-απώλειας. Επομένως, οι τυπικές μέθοδοι μάθησης ενδεχομένως να χρειάζονται τροποποιήσεις ώστε να χρησιμοποιηθούν με αυτόν τον τρόπο. Μετά τη λήψη της υπόθεσης  $h_t$  η κατανομή λανθασμένων εκτιμήσεων  $D_t$  ενημερώνεται χρησιμοποιώντας ένα κανόνα όμοιο με αυτόν που χρησιμοποιείται στον AdaBoost.M1. Η τελική υπόθεση  $h_{fin}$  δίνει ως έξοδο, για ένα δείγμα  $x$  την κατηγορία  $y$  που μεγιστοποιεί ένα σταθμισμένο μέσο όρο των τιμών των ασθενών υποθέσεων  $h_t(x, y)$  [120].

Οι αλγόριθμοι boosting που παρουσιάστηκαν παραπάνω υποθέτουν ότι όλοι οι ασθενείς ταξινομητές που χρησιμοποιούνται μπορούν να αντιμετωπίσουν δείγματα στα οποία έχουν ανατεθεί κάποια βάρη. Εάν δεν ισχύει αυτό τότε από το σταθμισμένο σύνολο εκπαίδευσης μπορεί να προκύψει ένα σύνολο εκπαίδευσης χωρίς βάρη χρησιμοποιώντας κάποια τεχνική δειγματοληψίας. Τα δείγματα επιλέγονται με βάση κάποια πιθανότητα, η οποία καθορίζεται από τα βάρη τους, μέχρι το νέο σύνολο εκπαίδευσης να έχει το ίδιο μέγεθος με το σταθμισμένο σύνολο [119].

Ο αλγόριθμος AdaBoost βελτιώνει την απόδοση των ταξινομητών κυρίως για δυο λόγους [119]:

- Παράγει έναν τελικό ταξινομητή, του οποίου ο ρυθμός σφάλματος μπορεί να μειωθεί με τον συνδυασμό πολλών ταξινομητών με ενδεχομένως υψηλούς ρυθμούς σφάλματος.
- Ο τελικός ταξινομητής έχει αρκετά μικρότερη διακύμανση από τις διακυμάνσεις που προκύπτουν από τους ασθενείς ταξινομητές.

Παρόλα αυτά, ο αλγόριθμος AdaBoost σε κάποιες περιπτώσεις αδυνατεί να βελτιώσει την απόδοση των ασθενών ταξινομητών. Σύμφωνα με τον Quinlan (1996)[119], ο βασικός λόγος για την αποτυχία του αλγορίθμου AdaBoost είναι η υπερπροσαρμογή. Ο στόχος του αλγορίθμου boosting είναι η κατασκευή ενός σύνθετου ταξινομητή που αποδίδει καλά στα δεδομένα με το να βελτιώνει την ακρίβεια της ταξινόμησης μέσω κάποιων επαναλήψεων. Παρόλα αυτά, ένας μεγάλος αριθμός επαναλήψεων μπορεί να έχει ως αποτέλεσμα έναν υπερ-πολύπλοκο, σύνθετο ταξινομητή, ο οποίος είναι σημαντικά λιγότερο ακριβής από τον απλό ταξινομητή. Ένας πιθανός τρόπος αποφυγής του προβλήματος της υπερπροσαρμογής είναι η πραγματοποίηση όσο το δυνατόν λιγότερων επαναλήψεων [119].



#### 4.1.3.3 Εναλλακτικές μέθοδοι Boosting

Οι Friedman et al. (1998)[119] παρουσίασαν μια αναθεωρημένη έκδοση του αλγορίθμου AdaBoost, η οποία ονομάζεται **Real AdaBoost**. Ο αλγόριθμος αυτός στοχεύει στο να συνδυάσει τις πιθανότητες να ανήκει κάποιο δείγμα σε μια κλάση, οι οποίες προκύπτουν ως έξοδος από τους ταξινομητές βάσης, χρησιμοποιώντας προσθετική λογιστική παλινδρόμηση (additive logistic regression). Η αναθεωρημένη αυτή έκδοση μειώνει το υπολογιστικό κόστος και μπορεί να οδηγήσει σε καλύτερη επίδοση.

Εκτός από την μέθοδο AdaBoost, έχουν προταθεί και άλλες εναλλακτικές μέθοδοι boosting, όπως οι εξής: **BrownBoost** [121], **LPBoost** [122], **GentleBoost** [123], **RankBoost** [124], **Gradient boosting** [125], **LogitBoost** [126], **RobustBoost** [127], **TotalBoost** [128], **RUSBoost** [129], **LSBoost** [130].

Η μέθοδος **lvoting**, η οποία προτάθηκε από τον Breiman (1999)[119], αποτελεί μια βελτίωση της μεθόδου boosting με μεγαλύτερη αντοχή στο θόρυβο και στην υπερπροσαρμογή. Επίσης, επειδή δεν χρειάζεται να σταθμίσει τους ταξινομητές βάσης, η μέθοδος αυτή μπορεί να χρησιμοποιηθεί με παράλληλο τρόπο, όπως έχει δειχθεί από τους Charnes et al. (2004) [119].

#### 4.1.3.4 Συνδυασμός επιμέρους ταξινομητών και ποικιλομορφία

Υπάρχουν δυο κύριες μέθοδοι συνδυασμού των εξόδων των ταξινομητών βάσης: **οι μέθοδοι στάθμισης** και **οι μέθοδοι μετά-μάθησης (meta-learning)**. Οι μέθοδοι στάθμισης είναι χρήσιμοι εάν οι ταξινομητές βάσης πραγματοποιούν τις ίδιες ενέργειες και έχουν παραπλήσιο βαθμό επιτυχίας. Οι μέθοδοι μετά-μάθησης είναι κατάλληλοι για περιπτώσεις στις οποίες συγκεκριμένοι ταξινομητές συνεχώς ταξινομούν σωστά ή λανθασμένα συγκεκριμένα δείγματα.

Όταν γίνεται συνδυασμός των ταξινομητών με βάρη, η ταξινόμηση κάποιου επιμέρους ταξινομητή έχει επιρροή στην τελική απόφαση ανάλογη με το βάρος που έχει ανατεθεί στον ταξινομητή. Το βάρος αυτό μπορεί να είναι σταθερό ή να προσδιοριστεί δυναμικά από το συγκεκριμένο δείγμα που πρόκειται να ταξινομηθεί. Κάποιες από τις μεθόδους στάθμισης είναι οι εξής [119]: ψηφοφορία πλειοψηφίας (majority voting), στάθμιση απόδοσης (performance weighting), άθροιση κατανομής (distribution summation), Μπεϋζιανός συνδυασμός (Bayesian combination), συνδυασμός Dempster-Shafer, μέθοδος bagging με βελτιστοποίηση διακύμανσης (Variance Optimized Bagging), χρήση της ιδέας του απλοϊκού Μπεϋζιανού ταξινομητή για τον συνδυασμό των επιμέρους ταξινομητών, στάθμιση εντροπίας (entropy weighting), στάθμιση βασισμένη στην πυκνότητα (density-based weighting), μεθοδολογία DEA (data envelop analysis), πηγή

λογαριθμικής άποψης (logarithmic opinion pool), δίκτυο πύλης (Gating network), στατιστική τάξης (order statistics).

Η μετα-μάθηση σημαίνει μάθηση από τους ταξινομητές που παράγονται από τους αλγορίθμους επαγωγής και από τις ταξινομήσεις των δεδομένων εκπαίδευσης από τους ταξινομητές αυτούς. Κάποιες από τις διαθέσιμες μεθόδους μετα-μάθησης είναι οι εξής [119]: μέθοδος συσσώρευσης (stacking), δέντρα διαιτησίας (arbiter trees), δέντρα συνδυαστών (combiner trees), βαθμονόμηση (grading).

**Η ποικιλομορφία** είναι μια κρίσιμη προϋπόθεση για την παραγωγή αποδοτικών συλλογικών ταξινομητών (Turner et al. 1996, Krogh et al. 1995, Kuncheva 2005, Kuncheva et al. 2003)[119]. Σύμφωνα με τον Hu [119], οι διαφοροποιημένοι ταξινομητές οδηγούν σε ασυσχέτιστες ταξινομήσεις, οι οποίες βελτιώνουν την απόδοση. Παρόλα αυτά, δεν υπάρχει κάποια ολοκληρωμένη και ευρέως αποδεκτή θεωρία που να εξηγεί γιατί και πως η διαφοροποίηση των επιμέρους μοντέλων βοηθάει στην βελτίωση της συλλογικής απόδοσης (Brown et al. 2005 [119]).

Οι Brown et al. (2005)[119] πρότειναν μια κατηγοριοποίηση των μεθόδων που χρησιμοποιούνται για την δημιουργία ποικιλομορφίας στους επιμέρους ταξινομητές. Η ποικιλομορφία αυτή επιτυγχάνεται με διαφοροποίηση των αρχικών σημείων έναρξης στον χώρο των υποθέσεων, με διαφοροποίηση του συνόλου των υποθέσεων που είναι προσβάσιμες από τους επιμέρους ταξινομητές (για παράδειγμα με διαφοροποίηση του συνόλου εκπαίδευσης) και με διαφοροποίηση του τρόπου με τον οποίο κάθε ταξινομητής διασχίζει το χώρο των υποθέσεων. Με βάση αυτούς τους τρόπους διαφοροποίησης προκύπτουν οι εξής προσεγγίσεις [119]:

- **Διαφοροποίηση των δειγμάτων εκπαίδευσης.** Γίνεται διαφοροποίηση των εισόδων που χρησιμοποιεί ο αλγόριθμος επαγωγής για την εκπαίδευση του ταξινομητή. Κάθε επιμέρους ταξινομητής εκπαιδεύεται από ένα διαφορετικό σύνολο εκπαίδευσης.
- **Διαφοροποίηση του αλγορίθμου επαγωγής.** Διαφοροποιείται ο τρόπος με τον οποίο χρησιμοποιείται ο αλγόριθμος επαγωγής για την παραγωγή των επιμέρους ταξινομητών.
- **Αλλαγή της αναπαράστασης του χαρακτηριστικού-στόχου (target attribute).** Κάθε ταξινομητής αναφέρεται με διαφορετικό τρόπο στο χαρακτηριστικό εξόδου ως προς το οποίο θα πρέπει να γίνει η ταξινόμηση.
- **Διαμέριση του διανυσματικού χώρου αναζήτησης.** Κάθε επιμέρους ταξινομητής εκπαιδεύεται σε διαφορετικό υποχώρο αναζήτησης.
- **Υβριδοποίηση.** Η ποικιλομορφία επιτυγχάνεται με τη χρήση διάφορων αλγορίθμων επαγωγής και διάφορων στρατηγικών κατασκευής συλλογικών ταξινομητών.

#### 4.1.4 Εφαρμογές της Συλλογικής Ταξινόμησης στη Βιοπληροφορική

Η συλλογική ταξινόμηση, εξαιτίας των βελτιώσεων που παρέχει στην απόδοση των ταξινομητών, χρησιμοποιείται ευρύτατα σε διάφορες εφαρμογές της Βιοπληροφορικής. Πέρα από τα δέντρα απόφασης, χρησιμοποιούνται και άλλοι ταξινομητές για να σχηματίσουν τον συλλογικό ταξινομητή, όπως Μηχανές Διανυσμάτων Υποστήριξης και νευρωνικά δίκτυα.

Οι Eom et al. (2008)[129] ανέπτυξαν το σύστημα υποστήριξης κλινικής απόφασης (clinical decision support system) ArtaCDSS-E, το οποίο βασίζεται σε συλλογικό ταξινομητή για την πρόβλεψη του επιπέδου των καρδιαγγειακών παθήσεων. Το σύστημα αυτό αναλύει δεδομένα από απταμερή βιοσίπ (artamer chip), τα οποία συλλέγονται από το αίμα του ασθενούς. Τα απταμερή είναι μονόκλιωνα μόρια που ονομάζονται νουκλεοτίδια και έχουν την ικανότητα να προσκολλώνται σε ένα ειδικό μόριο του οργανισμού. Η ανάλυση του συστήματος ArtaCDSS-E πραγματοποιείται σε παράγωγα του αίματος και συγκεκριμένα στο υγρό που απομένει αφού οι πρωτεΐνες θρόμβωσης (clotting proteins) αφαιρεθούν από το πλάσμα. Επίσης, εκτός από τα δεδομένα που σχετίζονται με τις καρδιαγγειακές παθήσεις, χρησιμοποιήθηκαν δεδομένα από τρεις ασθένειες: πνευμονικές δυσλειτουργίες, φυματίωση και δεδομένα από γενικές περιπτώσεις καρκίνου (general cancer - GC). Τα επιπλέον δεδομένα χρησιμοποιήθηκαν για να αντιμετωπιστεί η έλλειψη επαρκούς πληροφορίας και για να αξιολογηθεί η ακρίβεια γενίκευσης του συστήματος για διάφορες ασθένειες. Για τις καρδιαγγειακές παθήσεις και τις πνευμονικές δυσλειτουργίες τα δεδομένα διαθέτουν 3000 χαρακτηριστικά, ενώ για την φυματίωση και τις περιπτώσεις γενικού καρκίνου 1000 χαρακτηριστικά. Με κατάλληλη επιλογή χαρακτηριστικών, επιλέχθηκαν 250 χαρακτηριστικά (ύπαρξη ή όχι συγκεκριμένων πρωτεϊνών) για τη σχεδίαση του τελικού ταξινομητή. Ως απλοί ταξινομητές χρησιμοποιήθηκαν SVMs, νευρωνικά δίκτυα, δέντρα απόφασης, Μπεϋζιανά δίκτυα και ο συνδυασμός τους σε συλλογικό ταξινομητή έγινε με μέθοδο ψήφου πλειοψηφίας, ζυγίσματος ελαχίστου τετραγωνικού σφάλματος (LSE-based weighing) και με ιεραρχική δομή. Το σύστημα αυτό υπερβαίνει τις αποδόσεις των απλών ταξινομητών και τα αποτελέσματα από πειράματα δείχνουν ότι επιτυγχάνει απόδοση ταξινόμησης πάνω από 94%, παρέχοντας σημαντική βοήθεια στη διαδικασία της διάγνωσης.

Ο Ohlsson (2004)[129] κατασκεύασε ένα συλλογικό ταξινομητή με νευρωνικά δίκτυα για να δημιουργήσει ένα σύστημα υποστήριξης απόφασης σχετικά με την αιμάτωση του μυοκαρδίου και οι Yang et al. (2004)[129] δημιούργησαν ένα συλλογικό ταξινομητή με νευρωνικά δίκτυα για πρόβλεψη του καρκίνου του μαστού και παθήσεων του ήπατος.

Οι West et al. (2005)[129] σχεδίασαν ένα σύστημα υποστήριξης ιατρικής απόφασης (Medical Decision Support System - MDSS), το οποίο χρησιμοποιεί συλλογικό ταξινομητή με διάφορους απλούς ταξινομητές για διάγνωση και πρόγνωση παθήσεων του μαστού. Ο σκοπός της μελέτης είναι να εξερευνήσει τη δυνατότητα που έχουν οι bootstrap συλλογικοί

ταξινομητές να ελαττώνουν τα σφάλματα των συστημάτων υποστήριξης ιατρικής απόφασης για την έγκαιρη ανίχνευση και διάγνωση του καρκίνου του μαστού. Μελετάται η επίδραση της ποικιλομορφίας του μοντέλου (το πλήθος των διαφορετικών μοντέλων που λειτουργούν ως απλοί ταξινομητές στον συλλογικό ταξινομητή) στην ακρίβεια γενίκευσης του συλλογικού ταξινομητή. Οι στρατηγικές συλλογικού ταξινομητή που μελετώνται περιλαμβάνουν ένα συλλογικό ταξινομητή bagging (με διαφορετικά στιγμιότυπα του ίδιου μοντέλου), ένα συλλογικό ταξινομητή με ελεγχόμενα επίπεδα ποικιλομορφίας και ένα συλλογικό ταξινομητή που σχηματίζεται με συγκεκριμένα κριτήρια επιλογής. Οι συλλογικοί ταξινομητές συγκρίνονται με την απόδοση του καλύτερου δυνατού απλού ταξινομητή (single best model). Τα δεδομένα που χρησιμοποιούνται είναι κυτταρολογικά, και περιέχουν πυρηνικά χαρακτηριστικά των κυττάρων τα οποία έχουν αποκτηθεί με χρήση μη χειρουργικής διαδικασίας λεπτής βελόνας αναρρόφησης (needle aspirate procedure). Επίσης χρησιμοποιήθηκαν τα χαρακτηριστικά: πάχος, μέγεθος και σχήμα του κυττάρου. Το αποτέλεσμα της μελέτης είναι ότι οι συλλογικοί ταξινομητές που προκύπτουν από συγκεκριμένα κριτήρια επιλογής απλών ταξινομητών, ελαττώνουν κατά 14.1% τα σφάλματα στη πρόγνωση των παθήσεων του μαστού (ελάττωση σφάλματος γενίκευσης από 0.226 σε 0.194 – στατιστικά σημαντική ελάττωση με τιμή  $p$  λιγότερη από 0.05). Τα κριτήρια αυτά είναι εκτός από την ακρίβεια, τα χαμηλά επίπεδα συσχέτισης και η υψηλή σχετική αστάθεια των απλών ταξινομητών.

Οι Bacauskiene et al. (2012)[130] χρησιμοποιούν ταξινομητή random forest για να παρακολουθήσουν την κατάσταση του ανθρώπινου λάρυγγα, χρησιμοποιώντας δεδομένα από ερωτηματολόγιο. Το ερωτηματολόγιο αυτό συλλέγει χαρακτηριστικά που αφορούν διάφορους παράγοντες επιβάρυνσης του λάρυγγα, όπως για παράδειγμα: κάπνισμα (ναι/όχι), διάρκεια καπνίσματος (σε χρόνια), επίπεδα χρήσης φωνής, υποκειμενική αξιολόγηση «αδύναμης φωνής» σε μια κλίμακα από 0 (καθόλου αδύναμη φωνή) έως 100 (σίγουρα αδύναμη φωνή), υποκειμενική αξιολόγηση επαναληπτικής «απώλειας φωνής» σε μια κλίμακα από 0 έως 100. Με βάση τα δεδομένα αυτά γίνεται ταξινόμηση σε διάφορες κλάσεις παθολογίας όπως καρκινικός, μη καρκινικός, διάχυτος (diffuse), οζώδης (nodular), παράλυση και μια γενικότερη κλάση παθολογίας. Για την ταξινόμηση της εκάστοτε περίπτωσης σε υγιής, καρκινική και μη καρκινική (τρεις κλάσεις) επιτυγχάνεται ακρίβεια 80.7%. Για τις κλάσεις υγιής, οζώδης, διάχυτος, παράλυση επιτυγχάνεται ακρίβεια 74.4%.

Ο Ozcift (2011)[131] χρησιμοποίησε συλλογικό ταξινομητή random forest με στρατηγική επαναληπτικής δειγματοληψίας για τη βελτίωση της διάγνωσης καρδιακής αρρυθμίας. Οι Das et al.(2010)[132] διερευνούν τη χρήση συλλογικών ταξινομητών για τη βελτίωση της απόδοσης κατά τη διάγνωση πάθησης στις καρδιακές βαλβίδες.

Οι Das et al.(2009)[133] χρησιμοποίησαν συλλογικούς ταξινομητές από νευρωνικά δίκτυα για τη διάγνωση παθήσεων στις καρδιακές βαλβίδες. Σε μια διαφορετική εφαρμογή, οι Koley et. al(2012)[134] ανέπτυξαν ένα σύστημα για την αυτόματη ταξινόμηση των σταδίων του ύπνου, χρησιμοποιώντας σήμα ηλεκτροεγκεφαλογραφήματος ενός καναλιού. Αφού γίνει μια διαδικασία προεπεξεργασίας των δεδομένων, η ταξινόμηση

πραγματοποιείται με τον συνδυασμό της ταξινόμησης από ένα σύνολο από Μηχανές Διανυσμάτων Υποστήριξης. Οι Hojin et al. (2007)[135] πρότειναν μεθόδους ταξινόμησης ασθενών για την παροχή εξατομικευμένων υπηρεσιών υγείας, χρησιμοποιώντας συλλογικούς ταξινομητές.

Οι Συλλογικοί Ταξινομητές έχουν χρησιμοποιηθεί επιτυχώς και σε άλλου είδους εφαρμογές, εκτός από την ιατρική διάγνωση και πρόγνωση. Οι Chou et al. (2006)[136] σχεδίασαν το σύστημα Hum-PLoc, έναν νέο συλλογικό ταξινομητή για την πρόβλεψη του υποκυτταρικού εντοπισμού των πρωτεϊνών. Το σύστημα αυτό συνδυάζει πολλούς βασικούς ταξινομητές με μια μέθοδο που χρησιμοποιεί ψηφοφορία και επιτυγχάνει απόδοση 81.1% στο σύνολο διασταυρωμένης επικύρωσης και 85% σε ένα ανεξάρτητο σύνολο δεδομένων που χρησιμοποιήθηκε.

Οι Huang et al. (2010)[137] πρότειναν έναν συλλογικό ταξινομητή, ο οποίος αποτελείται από δέντρα απόφασης, για την ταξινόμηση δεδομένων έκφρασης γονιδίων χρησιμοποιώντας την τεχνολογία μικροσυστοιχιών DNA. Στη μελέτη αυτή γίνεται προσπάθεια για περεταίρω βελτίωση του ταξινομητή και αποφυγή του προβλήματος των πολλών διαστάσεων (curse of dimensionality).

Οι Pierre Geurts et al. (2005)[138] χρησιμοποίησαν συλλογικούς ταξινομητές αποτελούμενους από δέντρα απόφασης για την ταξινόμηση του φάσματος πρωτεομικής μάζας (proteomic mass spectra classification). Η σύγχρονη φασματομετρία μάζας (mass spectrometry) επιτρέπει τον προσδιορισμό πρωτεομικών αποτυπωμάτων σε υγρά του σώματος όπως ούρα, σίελος, ορός. Οι μετρήσεις αυτές μπορούν στη συνέχεια να χρησιμοποιηθούν σε πολλές ιατρικές εφαρμογές για τη διάγνωση της φάσης κάποιας ασθένειας ή για την πρόβλεψη της εξέλιξής της.

Οι Tan et al.(2003)[139] αναφέρονται στη δυνατότητα χρήσης μεθόδων με συλλογικούς ταξινομητές για ταξινόμηση περιπτώσεων καρκίνου, με χρήση δεδομένων έκφρασης γονιδίων.

Ο Peng (2006)[140] προτείνει ένα διαφορετικό τρόπο κατασκευής συλλογικού ταξινομητή για την ταξινόμηση δεδομένων από μικροσυστοιχίες. Η μέθοδος που προτείνεται προσπαθεί να δημιουργήσει ένα σύνολο υποψήφιων ταξινομητών βάσης, σύμφωνα με τη δειγματοληψία των γονιδίων, και στη συνέχεια γίνεται η επιλογή ενός υπο-συνόλου ταξινομητών που θα χρησιμοποιηθούν. Έτσι, για το συγκεκριμένο πρόβλημα επιτυγχάνεται βελτίωση σε σχέση με τις συμβατικές μεθόδους bagging και boosting για τη δημιουργία συλλογικού ταξινομητή.

## Συμπεράσματα

Σε μια εποχή όπου παρατηρείται εκθετική αύξηση των διαθέσιμων δεδομένων προς επεξεργασία σε όλους τους τομείς, η Μηχανική Μάθηση παρέχει τεχνικές για την καλύτερη αξιοποίηση των δεδομένων αυτών, σε περιβάλλοντα ιδιαίτερα υψηλής πολυπλοκότητας όπου ο ανθρώπινος παράγοντας και οι κλασικές προσεγγίσεις με μαθηματικά μοντέλα δεν μπορούν να αποδώσουν ικανοποιητικά.

Στις εφαρμογές της Βιοπληροφορικής, εξαιτίας του μεγάλου αριθμού των διαθέσιμων κλινικών, εργαστηριακών, γενετικών και παθολογικών χαρακτηριστικών, οι μέθοδοι της Μηχανικής Μάθησης αποτελούν πλέον ένα από τα βασικά εργαλεία για τη διαχείριση των αποτελεσμάτων και την εξαγωγή συμπερασμάτων.

Το πρόβλημα της ταξινόμησης εμφανίζεται σε μεγάλο αριθμό εφαρμογών της Βιοπληροφορικής, στις οποίες πρέπει να γίνει κατηγοριοποίηση της κατάστασης των ασθενών ως προς κάποια ασθένεια ή κατάταξη των δεδομένων σε συγκεκριμένες κατηγορίες. Από τη δεκαετία του 1990 και έπειτα, παρατηρείται αύξηση στις μελέτες που εφαρμόζουν τεχνικές Μηχανικής Μάθησης, για τη σχεδίαση συστημάτων υποστήριξης ιατρικής απόφασης αλλά και για τον προσδιορισμό της επίδρασης διάφορων παραγόντων στην εμφάνιση παθολογικών καταστάσεων. Μετά την πάροδο δυο δεκαετιών, πλέον υπάρχει αρκετό υπόβαθρο ώστε στο μέλλον να σχεδιάζονται ακόμα πιο αποδοτικά συστήματα υποστήριξης ιατρικής απόφασης, χτίζοντας στην εμπειρία που ήδη έχει αποκτηθεί. Για το λόγο αυτό, ήδη παρατηρείται αύξηση της χρήσης των μεθόδων Μηχανικής Μάθησης για το σχεδιασμό συστημάτων αυτού του είδους.

Σταδιακά παρατηρείται μια αυξημένη προσπάθεια αξιοποίησης των δεδομένων από νέες μεθόδους ιατρικών εξετάσεων, που παρέχουν πολύ μεγάλο αριθμό εργαστηριακών, απεικονιστικών, γονιδιωματικών και πρωτεομικών δεδομένων. Σε αυτές τις εφαρμογές, ο όγκος των δεδομένων και το πλήθος των χαρακτηριστικών είναι απαγορευτικά μεγάλος, ώστε οι ειδικοί του εκάστοτε πεδίου αναγκαστικά καταφεύγουν σε μεθόδους Μηχανικής Μάθησης.

Επίσης, υπάρχει μια τάση εξειδικευμένης μελέτης κάθε ασθένειας και εξέτασης ενός μεγάλου πλήθους παραγόντων. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα να προκύπτουν περισσότερο εξειδικευμένα συστήματα διάγνωσης και πρόγνωσης, που μπορούν να λειτουργήσουν περισσότερο αποδοτικά αλλά σε περιορισμένο εύρος περιπτώσεων. Οι ερευνητές καταβάλλουν προσπάθεια για να συνδυάσουν όλους τους τύπους των διαθέσιμων δεδομένων, όπως κλινικά με γενετικά και εργαστηριακά δεδομένα, ώστε να προκύψει καλύτερη συνολική εικόνα για το εκάστοτε πρόβλημα, κάτι που στο παρελθόν δεν ήταν ιδιαίτερα εύκολο λόγω της πολυπλοκότητας των προβλημάτων.

Η εφαρμογή μεθόδων Μηχανικής Μάθησης στη Βιοπληροφορική, εκτός από την εξαγωγή χρήσιμων συμπερασμάτων και την ανίχνευση χρήσιμης πληροφορίας σχετικά με το εκάστοτε πρόβλημα, έχει συμβάλει σε σημαντική εξοικονόμηση πόρων, σε εξοπλισμό, χρήματα, χρόνο νοσηλείας και ενασχόλησης των ειδικών. Με χρήση των τεχνικών Μηχανικής Μάθησης, σχεδιάζονται συστήματα διάγνωσης και πρόγνωσης, οπότε γίνεται αποδοτικότερη κατανομή των διαγνωστικών μέσων και των διαθέσιμων πόρων θεραπείας. Επίσης, υπάρχει η δυνατότητα ανακάλυψης νέων χαρακτηριστικών που μπορούν να δώσουν ασφαλέστερη διάγνωση, οπότε αποφεύγονται άσκοπες θεραπείες και εξετάσεις, αυξάνεται η ποιότητα των παρεχόμενων υπηρεσιών υγείας και μειώνεται η ταλαιπωρία των ασθενών.

Συνεπώς, οι μέθοδοι Μηχανικής Μάθησης στη Βιοπληροφορική προσφέρουν αρκετά πλεονεκτήματα, ώστε στο μέλλον να διαφαίνεται περαιτέρω αύξηση των εφαρμογών αυτών για τη βελτίωση των υπηρεσιών υγείας αλλά και για την ανακάλυψη νέας γνώσης στο πεδίο αυτό.

## Βιβλιογραφία

- [1] Stuart Russell, Peter Norvig, *Τεχνητή Νοημοσύνη Μια σύγχρονη προσέγγιση*, 2<sup>η</sup> Αμερικάνικη έκδοση, εκδόσεις Κλειδάριθμος, 2005
- [2] Mehryar Mohri, Afshin Rostamizadeh, Ameet Talwalkar, *Foundations of Machine Learning*, MIT Press, 2012
- [3] George D. Magoulas, Andriana Prentza, *Machine Learning in Medical Applications, Proceeding Machine Learning and Its Applications, Advanced Lectures*, Pages 300-307, Springer-Verlag London, 2001
- [4] Yonghong Peng, Yufeng Zhang, Lipo Wang, *Artificial intelligence in biomedical engineering and informatics: An introduction and review*, *Artificial Intelligence in Medicine* 48 (2010) 71–73
- [5] Giorgio Valentini, Roberto Tagliaferri, Francesco Masulli, *Computational intelligence and machine learning in bioinformatics*, *Artificial Intelligence in Medicine* (2009) 45, 91–96
- [6] Zoheir Ezziane, *Applications of artificial intelligence in bioinformatics: A review*, *Expert Systems with Applications* 30 (2006) 2–10
- [7] Ian H. Witten, Eibe Frank, *Data Mining*, 2<sup>nd</sup> edition, Morgan Kaufmann Publishers, Elsevier, 2005
- [8] Sergios Theodoridis, Konstantinos Koutroumbas, *Pattern Recognition*, Academic Press, Elsevier, 2008
- [9] Fradkin Dmitriy, Ilya Muchnik, *Support vector machines for classification*, *Discrete methods in epidemiology* 70 (2006): 13-20
- [10] Διαφάνειες Διαλέξεων Μαθήματος “*Advanced Statistical Methods in Natural Language Processing*”, Gina-Anne Levow, Washington University, 2012
- [11] Dietterich, Bakiri, *Solving Multiclass Learning Problems via Error-Correcting Output Codes*, *Journal of Artificial Intelligence Research* 2 (1995) 263-286
- [12] S. B. Kotsiantis, I. D. Zaharakis, P. E. Pintelas, *Machine learning: a review of classification and combining techniques*, *Artif Intell Rev* (2006) 26:159–190
- [13] H. Kelly, A. Bull, P. Russo, E.S. McBryde, *Estimating sensitivity and specificity from positive predictive value, negative predictive value and prevalence: application to*



- surveillance systems for hospital-acquired infections*, Journal of Hospital Infection (2008) 69, 164-168
- [14] Martin Bland, *An Introduction to Medical Statistics*, 3<sup>rd</sup> edition, OUP Oxford, 2000
- [15] Σύνδεσμος: <https://onlinecourses.science.psu.edu/stat507/node/71>  
Ηλεκτρονικές Σημειώσεις Μαθήματος “*Epidemiological Research Methods*”,  
Department of Statistics, Pennsylvania State University
- [16] Petros Xanthopoulos, Panos M. Pardalos, Theodore B. Trafalis, *Robust Data Mining*, Springer, 2013
- [17] Διαφάνειες Διαλέξεων Μαθήματος “*Pattern Analysis*”, Ricardo Gutierrez-Osuna,  
Department of Computer Science and Engineering, Texas A&M University
- [18] Pádraig Cunningham, Sarah Jane Delany, *k-Nearest Neighbour Classifiers*, Technical Report UCD-CSI-2007-4, March 27, 2007
- [19] Δημήτριος Κουτσούρης, Κωνσταντίνα Νικήτα, Εργαστηριακές Ασκήσεις για το Μάθημα «*Εργαστήριο Βιοϊατρικής Τεχνολογίας*», Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, 2013
- [20] M. Narasimha Murty, V. Susheela Devi, *Pattern Recognition: An Algorithmic Approach*, Springer, 2011
- [21] Σύνδεσμος: [http://www.ee.columbia.edu/~vittorio/ELEN\\_E6880\\_2003.html](http://www.ee.columbia.edu/~vittorio/ELEN_E6880_2003.html)  
Σημειώσεις Διαλέξεων Μαθήματος “*Statistical Pattern Recognition*”, Vittorio Castelli, department of electrical engineering, Columbia University ,2003
- [22] Jie Cheng, Russell Greiner, *Learning Bayesian Belief Network Classifiers: Algorithms and System*, Advances in Artificial Intelligence, 14th Biennial Conference of the Canadian Society for Computational Studies of Intelligence, AI 2001
- [23] Peter J.F. Lucas, Linda C. van der Gaag, Ameen Abu-Hanna, *Bayesian networks in biomedicine and health-care*, Artificial Intelligence in Medicine 30 (2004) 201–214
- [24] A. Onisko, M. J. Druzdzal, *Impact of precision of Bayesian network parameters on accuracy of medical diagnostic systems*, Artificial Intelligence in Medicine 57 (2013) 197–206
- [25] I. Stajduhar, B. Dalbelo-Basic, *Learning Bayesian networks from survival data using weighting censored instances*, Journal of Biomedical Informatics 43 (2010) 613–622
- [26] Artur Rocha et al., *Innovations in health care services: The CAALYX system*, international journal of medical informatics 82 (2013) e307–e320

- [27] S. Acid, L. M. de Campos, J. M. Fernandez-Luna, S. Rodriguez, J. M. Rodriguez, J. L. Salcedo, *A comparison of learning algorithms for Bayesian networks: a case study based on data from an emergency medical service*, *Artificial Intelligence in Medicine* 30 (2004) 215–232
- [28] P. Antal, G. Fannes, D. Timmerman, Y. Moreau, B. de Moor, *Using literature and data to learn Bayesian networks as clinical models of ovarian tumors*, *Artificial Intelligence in Medicine* 30 (2004) 257–281
- [29] V. Robles, P. Larranaga, J. M. Pena, E. Menasalvas, M. S. Perez, V. Herves, A. Wasilewska, *Bayesian network multi-classifiers for protein secondary structure prediction*, *Artificial Intelligence in Medicine* (2004) 31, 117–136
- [30] S. B. English, S. C. Shih, M. F. Ramoni, L. E. Smith, Atul J. Butte, *Use of Bayesian networks to probabilistically model and improve the likelihood of validation of microarray findings by RT-PCR*, *Journal of Biomedical Informatics* 42 (2009) 287–295
- [31] H. Borchani, C. Bielza, C. Toro, P. Larranaga, *Predicting human immunodeficiency virus inhibitors using multi-dimensional Bayesian network classifiers*, *Artificial Intelligence in Medicine* 57 (2013) 219–229
- [32] P. Hernandez-Leal et al., *Discovering human immunodeficiency virus mutational pathways using temporal Bayesian networks*, *Artificial Intelligence in Medicine* 57 (2013) 185–195
- [33] S. M. Maskery, H. Hu, J. Hooke, C. D. Shriver, M. N. Liebman, *A Bayesian derived network of breast pathology co-occurrence*, *Journal of Biomedical Informatics* 41 (2008) 242–250
- [34] Marcel A. J. van Gerven, B. G. Taal, Peter J.F. Lucas, *Dynamic Bayesian networks as prognostic models for clinical patient management*, *Journal of Biomedical Informatics* 41 (2008) 515–529
- [35] S. B. Kotsiantis, *Supervised Machine Learning: A review of Classification techniques*, *Informatica* 31 249-268, 2007
- [36] Διαφάνειες διαλέξεων Μαθήματος “Data Mining”, Ruoming Jin, Computer Science Kent State University, 2007
- [37] Διαφάνειες διαλέξεων μαθήματος «Αλγόριθμοι Εξόρυξης Πληροφορίας», Τζιραλής Γεώργιος, Διατμηματικό Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών «Εφαρμοσμένες Μαθηματικές Επιστήμες», Τομέας Μαθηματικών ΕΜΠ, 2006
- [38] Thomas G. Dietterich, *An Experimental Comparison of Three Methods for Constructing Ensembles of Decision Trees: Bagging, Boosting, and Randomization*, *Machine Learning*, 40, 139–157, 2000

- [39] J. A. Lopez-Vallverdu, D. Riano, J. A. Bohada, *Improving medical decision trees by combining relevant health-care criteria*, Expert Systems with Applications 39 (2012) 11782–11791
- [40] Joseph A. Cruz, David S. Wishart, *Applications of Machine Learning in Cancer Prediction and Prognosis*, Cancer Informatics 2006:2 59–77
- [41] D. Mladenic, *Machine learning system Magnus Assistant*, Unpublished BSc Thesis, University of Ljubljana, Faculty of Electrical Engineering and Computer Science, 1990
- [42] V. Podgorelec, P. Kokol, B. Stiglic, I. Rozman, *Decision trees: an overview and their use in medicine*, Journal of Medical Systems, Kluwer Academic/Plenum Press, Vol. 26, Num. 5, pp. 445-463, October 2002
- [43] J. C. Wiemer, A. Prokudin, *Bioinformatics in proteomics: application, terminology, and pitfalls*, Pathology – Research and Practice 200 (2004) 173–178
- [44] J. T. Horng, L. C. Wu, B. J. Liu, J. L. Kuo, W. H. Kuo, J. J. Zhang, *An expert system to classify microarray gene expression data using gene selection by decision tree*, Expert Systems with Applications 36 (2009) 9072–9081
- [45] A. C. Lorena, A. de Carvalho, *Protein cellular localization prediction with Support Vector Machines and Decision Trees*, Computers in Biology and Medicine 37 (2007) 115–125
- [46] Simon Haykin, *Neural Networks, A Comprehensive Foundation*, 2<sup>nd</sup> Edition, Prentice Hall International, 1999
- [47] Widrow, B., and S.D. Stearns, *Adaptive Signal Processing*, Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall, 1985
- [48] Haykin, S., *Adaptive Filter Theory*, 3<sup>rd</sup> edition, Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall, 1996
- [49] Christopher M. Bishop, *Neural Networks for Pattern Recognition*, Clarendon Press, Oxford, 1995
- [50] Laurene Fausett, *Fundamentals of Neural Networks*, 1<sup>st</sup> edition, Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall, 1993
- [51] Διαφάνειες διαλέξεων μαθήματος «Εξόρυξη Δεδομένων», Τμήμα Πολιτισμικής Τεχνολογίας και Επικοινωνίας, Παν. Αιγαίου, 2012-13
- [52] Donald F. Specht, *Probabilistic Neural Networks*, Pergamon Press, Neural Networks, Vol. 3. pp. 109 118, 1990

- [53] Yang Degang, Chen Guo, Wang Hui, Liao Xiaofeng, *Learning Vector Quantization Neural Network Method for Network Intrusion Detection*, Wuhan University Journal of Natural Sciences, Vol.12 No.1 2007 147-150
- [54] Donald F. Specht, *A General Regression Neural Network*, IEEE Transactions on Neural Networks. vol. 2. No. 6. November 1991
- [55] Shaikh Abdul Hannan, R. R. Manza, R. J. Ramteke, *Generalized Regression Neural Network and Radial Basis Function for Heart Disease Diagnosis*, International Journal of Computer Applications (0975 – 8887) Volume 7– No.13, October 2010
- [56] Yuehui Chen, Ajith Abraham, *Tree-Structure Based Hybrid Computational Intelligence Theoretical Foundations and Applications*, Intelligent Systems Reference Library, Volume 2, Springer, 2010
- [57] Holk Cruse, *Neural Networks as Cybernetic Systems*, 2<sup>nd</sup> edition, Brains, Minds & Media, 2006
- [58] Richard M. Golden, *The “Brain-State-in-a-Box” Neural Model Is a Gradient Descent Algorithm*, Journal of Mathematical Psychology 30, 73-80, 1986
- [59] Stanislaw H. Zak, Walter E. Lillo, Stefen Hui, *Learning and Forgetting in Generalized Brain-state-in-a-box (BSB) Neural Associative Memories*, Pergamon, Elsevier Science, Neural Networks, Vol. 9, No. 5, pp. 845-854, 1996
- [60] Xiaoxia Wang, Liangyu Ma, Bingshu Wang, Tao Wang, *A hybrid optimization-based recurrent neural network for real-time data prediction*, Neurocomputing 120 547–559, Elsevier, 2013
- [61] Claudio Gallicchio, Alessio Micheli, *Architectural and Markovian factors of echo state networks*, Neural Networks 24 (2011) 440–456, Elsevier
- [62] Rainer W. Paine, Jun Tani, *Motor primitive and sequence self-organization in a hierarchical recurrent neural network*, Neural Networks 17 1291–1309, Elsevier, 2004
- [63] Mike Schuster, Kuldip K. Paliwal, *Bidirectional Recurrent Neural Networks*, IEEE Transactions on Signal Processing, vol. 45, no. 11, November 1997
- [64] Kevin P. Murphy, *Machine Learning: A Probabilistic Perspective*, The MIT Press, 2012
- [65] Raul Rojas, *Neural Networks: A Systematic Introduction*, Springer, 1996
- [66] Amos J. Storkey, Romain Valabregue, *The Basins of Attraction of a New Hopfield Learning Rule*, Elsevier, Neural Networks 12.6 (1999): 869-876

- 
- [67] John Hertz, Andres Krogh, Richard G. Palmer, *Introduction to the theory of Neural Computation*, Addison-Wesley, 1990
- [68] S. Grossberg, *Adaptive Pattern Classification and Universal Recoding: I. Parallel Development and Coding of Neural Feature Detectors*, Springer, Biol. Cybernetics 23, 121-134 (1976)
- [69] S. Grossberg, *Adaptive Pattern Classification and Universal Recoding: II. Feedback, Expectation, Olfaction, Illusions*, Springer, Biol. Cybernetics 23, 187-202 (1976)
- [70] Mbaitiga Zacharie, *Adaptive Resonance Theory 1 (ART1) Neural Network Based Horizontal and Vertical Classification of 0-9 Digits Recognition*, Journal of Computer Science 3(11): 869-873, 2007
- [71] Dietrich Wienke, Lutgarde Buydens, *Adaptive resonance theory based neural network for supervised chemical pattern recognition (FuzzyARTMAP) Part 1: Theory and network properties*, Elsevier, Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems 32 (1996) 151-164
- [72] Teuvo Kohonen, *Self-Organizing Maps*, 3<sup>rd</sup> edition, Springer, 2001
- [73] Juha Vesanto, Johan Himberg, Esa Alhoniemi, Juha Parhankangas, *Self-Organizing Map in Matlab: the SOM Toolbox*, Laboratory of Computer and Information Science, Helsinki University of Technology, 2000
- [74] Διαφάνειες Διαλέξεων Μαθήματος “*Methods of Computational Science*”, Ciro Donalek, California Institute Of Technology ,2011
- [75] Wolfgang Maass, *Networks of Spiking Neurons: The Third Generation of Neural Network Models*, Elsevier Science, Neural Networks, Vol. 10, No. 9, pp. 1659-1671, 1997
- [76] Nikola Kasabov, *To spike or not to spike: A probabilistic spiking neuron model*, Elsevier, Neural Networks 23 (2010) 16–19
- [77] Wulfram Gerstner, Werner M. Kistler, *Spiking Neuron Models*, Cambridge University Press, 2002
- [78] Zhaobin Wang, Yide Ma, Feiyan Cheng, Lizhen Yang, *Review of pulse-coupled neural networks*, Elsevier, Image and Vision Computing 28 (2010) 5–13
- [79] Derek D. Monner, James A. Reggia, *A generalized LSTM-like training algorithm for second-order recurrent neural networks*, Department of Computer Science, University of Maryland, USA

- [80] Felix Gers, *Long Short-Term Memory in Recurrent Neural Networks*, Thèse 2366, Département d'Informatique, Polytechnique Fédérale de Lausanne, 2001
- [81] Javed I. Khan, D. Y. Y. Yun, Feature based Contraction of Sparse Holographic Associative Memory, Department of Electrical Engineering, University of Hawaii
- [82] Pentti Kanerva, *Sparse Distributed Memory and Related Models*, Chapter 3 in *Associative Neural Memories: Theory and Implementation*, pp. 50–76. New York: Oxford University Press, 1993
- [83] Peter Sussner, Marcos Eduardo Valle, *Implicative Fuzzy Associative Memories*, IEEE transactions on fuzzy systems, Vol. 14, No. 6, December 2006
- [84] Li Fei-Fei, Rob Fergus, Pietro Perona, *One-Shot Learning of Object Categories*, IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, Vol. 28, No. 4, April 2006
- [85] Subhash Kak, *Better Web Searches and Prediction with Instantaneously Trained Neural Networks*, IEEE Intelligent Systems Vol. 14, Issue 6, pp. 78-81, 1999
- [86] Mehrdad Javadi, Seyed Ali Asghar Abbaszadeh Arani, Atena Sajedin, Reza Ebrahimpour, *Classification of ECG arrhythmia by a modular neural network based on Mixture of Experts and Negatively Correlated Learning*, Biomedical Signal Processing and Control 8 (2013) 289–296
- [87] Kenneth O. Stanley, *Compositional pattern producing networks: A novel abstraction of development*, Genetic Programming and Evolvable Machines (2007) 8:131–162
- [88] Antonios K. Alexandridis, Achilleas D. Zaprakis, *Wavelet neural networks: A practical guide*, Elsevier, Neural Networks 42 (2013) 1-27
- [89] P. J. Lisboa, A. Taktak, *The use of artificial neural networks in decision support in cancer: A systematic review*, Neural Networks 19 (2006) 408–415
- [90] R. Dybowski, V. Gant, *Clinical applications of artificial neural networks*, Cambridge University Press, 2001
- [91] C. E. Pedreira, *New Decision Support Tool for Treatment Intensity Choice in Childhood Acute Lymphoblastic Leukemia*, IEEE Transactions On Information Technology In Biomedicine, VOL. 13, NO. 3, May 2009
- [92] M. Takahashi, *Diagnostic classification of schizophrenia by neural network analysis of blood-based gene expression signatures*, Schizophrenia Research 119 (2010) 210–218
- [93] A. Narayanan, E.C. Keedwell, J. Gamalielsson, S. Tatineni, Single-layer artificial neural networks for gene expression analysis, Neurocomputing 61 (2004) 217–240

- [94] L. J. Lancashire, R. C. Rees, G. R. Ball, *Identification of gene transcript signatures predictive for estrogen receptor and lymph node status using a stepwise forward selection artificial neural network modelling approach*, *Artificial Intelligence in Medicine* (2008) 43, 99–111
- [95] J. Huang, H. Shimizu, S. Shioya, *Clustering Gene Expression Pattern and Extracting Relationship in Gene Network Based on Artificial Neural Networks*, *Journal of Bioscience and Bioengineering*, Vol. 96, No. 5, 421–428. 2003
- [96] Nello Cristianini, John Shawe-Taylor, *Introduction to Support Vector Machines*, Cambridge University Press, 2000
- [97] Διαφάνειες Διαλέξεων Μαθήματος “*Machine Learning*”, Seungjin Choi, Department of Computer Science, Pohang University of Science and Technology, Korea
- [98] Σύνδεσμος: <http://www.dtreg.com/svm.htm> DTREG: Software For Predictive Modeling and Forecasting
- [99] Shigeo Abe, *Support Vector Machines for Pattern Classification*, 2<sup>nd</sup> edition, Springer, 2010
- [100] E. Comak, A. Arslan, I. Turkoglu, *A decision support system based on support vector machines for diagnosis of the heart valve diseases*, *Computers in Biology and Medicine* 37 (2007) 21–27
- [101] W. Yu, T. Liu, R. Valdez, M. Gwinn, M. J. Khoury, *Application of support vector machine modeling for prediction of common diseases: the case of diabetes and pre-diabetes*, *BMC Medical Informatics and Decision Making* 2010, 10:16
- [102] V. Sapthagirivasan, M. Anburajan, *Diagnosis of osteoporosis by extraction of trabecular features from hip radiographs using support vector machine: An investigation panorama with DXA*, *Computers in Biology and Medicine* 43 (2013) 1910–1919
- [103] G. Valentini, *Gene expression data analysis of human lymphoma using support vector machines and output coding ensembles*, *Artificial Intelligence in Medicine* 26 (2002) 281–304
- [104] C. Z. Cai, W. L. Wang, L. Z. Sun, Y. Z. Chen, *Protein function classification via support vector machine approach*, *Mathematical Biosciences* 185 (2003) 111–122
- [105] Y. D. Cai, X. J. Liu, X. B. Xu, K. C. Chou, *Support vector machines for predicting the specificity of GalNAc-transferase*, *Peptides* 23 (2002) 205–208

- [106] G. Zhang, H. Ge, *Support vector machine with a Pearson VII function kernel for discriminating halophilic and non-halophilic proteins*, Computational Biology and Chemistry 46 (2013) 16–22
- [107] S. Hua, Z. Sun, *Support vector machine approach for protein subcellular localization prediction*, Bioinformatics Vol. 17 no. 8 (2001), Pages 721-728
- [108] A. E. Hassanien, E. T. Al-Shammari, N. I. Ghali, *Computational intelligence techniques in bioinformatics*, Computational Biology and Chemistry 47 (2013) 37–47
- [109] D. Whitley, *Genetic Algorithms and Neural Networks*, Chapter 11, Genetic Algorithms in Engineering and Computer Science, John Wiley & Sons, 1995
- [110] Mat Buckland, *AI Techniques for Game Programming*, Premier Press, 2002
- [111] Ajith Abraham, *Beyond integrated Neuro-fuzzy systems: reviews, prospects, perspectives and directions*, Seventh International Mendel Conference on Soft Computing, Brno, MENDEL 2001, Matousek Radek et al (Eds.), pp. 376-372, 2001
- [112] Ajith Abraham, *Neuro fuzzy systems: State-of-the-art modeling techniques*, Connectionist models of neurons, learning processes, and artificial intelligence, Springer Berlin Heidelberg, 269-276, 2001
- [113] Zhenyu Wang, Vasile Palade, Yong Xu, *Neuro-Fuzzy Ensemble Approach for Microarray Cancer Gene Expression Data Analysis*, Evolving Fuzzy Systems, International Symposium on. IEEE, 2006
- [114] Tuan Zea Tan, Chai Quek, Geok See Ng, Khalil Razvi, *Ovarian cancer diagnosis with complementary learning fuzzy neural network*, Artificial Intelligence in Medicine (2008) 43, 207–222
- [115] Abdulkadir Sengur, *An expert system based on linear discriminant analysis and adaptive neuro-fuzzy inference system to diagnosis heart valve diseases*, Expert Systems with Applications 35 (2008) 214–222
- [116] Marylyn D. Ritchie, Christopher S. Coffey, Jason H. Moore, *Genetic Programming Neural Networks as a Bioinformatics Tool for Human Genetics*, Genetic and Evolutionary Computation—GECCO 2004. Springer Berlin Heidelberg, 2004
- [117] Hussein A. Abbass, *An evolutionary artificial neural networks approach for breast cancer diagnosis*, Artificial Intelligence in Medicine 25.3 (2002): 265-281
- [118] David Opitz, Richard Maclin, *Popular Ensemble Methods: An Empirical Study*, Journal of Artificial Intelligence Research 11 (1999) 169-198, AI Access Foundation and Morgan Kaufmann



- 
- [119] Lior Rokach, *Ensemble-based classifiers*, Artif Intell Rev (2010) 33:1–39, Springer Science & Business Media
- [120] Yoav Freund, Robert E. Schapire, *Experiments with a new boosting algorithm*, International Conference on Machine Learning Vol. 96, pp. 148-156, 1996
- [121] Yoav Freund, *An Adaptive Version of the Boost by Majority Algorithm*, Machine Learning, 43, 293–318, Kluwer Academic Publishers, 2001
- [122] Ayhan Demiriz, Kristin P. Bennett, John Shawe – Taylor, *Linear Programming Boosting via Column Generation*, Machine Learning, 46, 225–254, Kluwer Academic Publishers, 2002
- [123] Jerome Friedman, Trevor Hastie, Robert Tibshirani, *Additive Logistic Regression: A Statistical View Of Boosting*, The Annals of Statistics 2000, Vol. 28, No. 2, 337–407
- [124] Yoav Freund, Raj Iyer, Robert E. Schapire, Yoram Singer, *An Efficient Boosting Algorithm for Combining Preferences*, Journal of Machine Learning Research 4 (2003) 933-969
- [125] Jerome H. Friedman, *Greedy Function Approximation: A Gradient Boosting Machine*, The Annals of Statistics 2001, Vol. 29, No. 5, 1189-1232
- [126] Yoav Freund, *A more robust boosting algorithm*, arXive, 2009: Arxiv/0905.2138
- [127] Manfred K. Warmuth, Jun Liao, Gunnar Rätsch, *Totally Corrective Boosting Algorithms that Maximize the Margin*, Proceedings of the 23rd International Conference on Machine Learning, pages 1001-1008, ACM Press, 2006
- [128] Chris Seiffert, Taghi M. Khoshgoftaar, Jason Van Hulse, Amri Napolitano, *RUSBoost: Improving Classification Performance when Training Data is Skewed*, 19th International Conference on Pattern Recognition (pp. 1-4), IEEE, 2008
- [129] J. H. Eom, S. C. Kim, B. T. Zhang, *AptaCDSS-E: A classifier ensemble-based clinical decision support system for cardiovascular disease level prediction*, Expert Systems with Applications 34 (2008) 2465–2479
- [130] M. Bacauskiene, A. Verikas, A. Gelzinis, A. Vegiene, *Random forests based monitoring of human larynx using questionnaire data*, Expert Systems with Applications 39 (2012) 5506–5512
- [131] Akin Ozcift, *Random forests ensemble classifier trained with data resampling strategy to improve cardiac arrhythmia diagnosis*, Computers in Biology and Medicine 41 (2011) 265–271
- [132] R. Das, A. Sengur, *Evaluation of ensemble methods for diagnosing of valvular heart disease*, Expert Systems with Applications 37 (2010) 5110–5115

- [133] R. Das, I. Turkoglu, A. Sengur, Diagnosis of valvular heart disease through neural networks ensembles, *Computer Methods and Programs in Biomedicine* 93 (2009) 185–191
- [134] B. Koley, D. Dey, *An ensemble system for automatic sleep stage classification using single channel EEG signal*, *Computers in Biology and Medicine* 42 (2012) 1186–1195
- [135] H. Moon et al, *Ensemble methods for classification of patients for personalized medicine with high-dimensional data*, *Artificial Intelligence in Medicine* (2007) 41, 197–207
- [136] K. C. Chou, H. B. Shen, *Hum-PLoc: A novel ensemble classifier for predicting human protein subcellular localization*, *Biochemical and Biophysical Research Communications* 347 (2006) 150–157
- [137] J. Huang, H. Fang, X. Fan, *Decision forest for classification of gene expression data*, *Computers in Biology and Medicine* 40 (2010) 698–704
- [138] P. Geurts et al., *Proteomic mass spectra classification using decision tree based ensemble methods*, *Bioinformatics* Vol. 21 no.152005, pages 3138–3145
- [139] A. C. Tan, D. Gilbert, *Ensemble machine learning on gene expression data for cancer classification*, *Applied Bioinformatics* 2003:2 (3 Suppl)
- [140] Y. Peng, *A novel ensemble machine learning for robust microarray data classification*, *Computers in Biology and Medicine* 36 (2006) 553–573