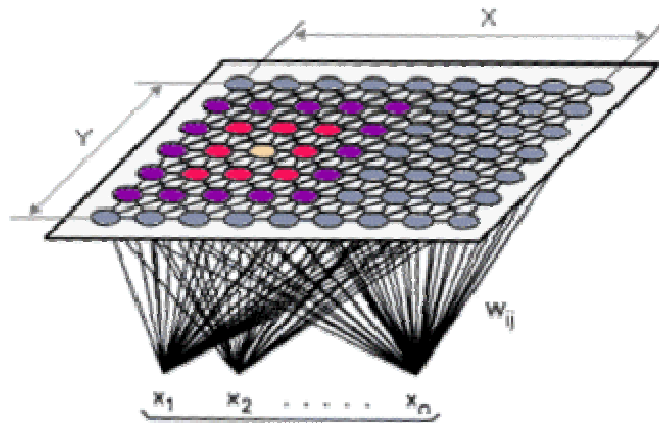




Πανεπιστήμιο Αιγαίου
Σχολή Περιβάλλοντος
Τμήμα Επιστημών της Θάλασσας

ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ ΓΙΑ ΤΗΝ ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΤΕΧΝΗΤΟΥ ΝΕΥΡΩΝΙΚΟΥ ΔΙΚΤΥΟΥ ΣΕ
ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΙΚΑ ΔΕΔΟΜΕΝΑ:
ΜΕΛΕΤΗ ΠΕΡΙΠΤΩΣΗΣ ΣΤΟ ΣΤΕΝΟ ΤΗΣ ΜΥΤΙΑΗΝΗΣ



ΑΡΗΣ ΚΑΛΑΜΑΡΑΣ – ΠΡΑΠΑΣ

ΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

ΕΠΙΒΛΕΠΟΥΣΑ ΚΑΘΗΓΗΤΡΙΑ: ΔΗΜΗΤΡΑ ΚΙΤΣΙΟΥ

ΜΥΤΙΑΗΝΗ, ΟΚΤΩΒΡΙΟΣ 2011

Εικόνα εξωφύλλου από: http://www.lohninger.com/helpsuite/kohonen_network_-_background_information.htm

Ευχαριστίες

Στο σημείο αυτό θα ήθελα να ευχαριστήσω όλους όσους βοήθησαν με τον ένα ή τον άλλο τρόπο στην ολοκλήρωση της παρούσας πτυχιακής εργασίας. Τους φίλους Δέσποινα, Άρη, Οδυσσέα, Χριστόφορο, Εύα, Άκη και Αντρέα για τη φιλία, φιλοξενία, και υποστήριξή τους. Την κα Δήμητρα Κίτσιου για την συνεργασία και την υπομονή της κατά την διάρκεια εκπόνησης και διόρθωσης της πτυχιακής εργασίας καθώς και για την ευκαιρία που μου έδωσε να ασχοληθώ με το συγκεκριμένο θέμα. Τέλος ευχαριστώ τον κ. Στράτη Γεωργακαράκο και τον κ. Γεώργιο Τσιρτσή για τον χρόνο που αφιέρωσαν στην ανάγνωση και αξιολόγηση της πτυχιακής εργασίας.

Περιεχόμενα

ΠΕΡΙΛΗΨΗ	6
1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ	7
1.1 <i>Ευτροφισμός</i>	7
1.2 <i>Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα</i>	8
1.2.1 Τύποι της Συνάρτησης Ενεργοποίησης	11
1.2.2 Αρχιτεκτονικές Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων	12
1.2.3 Αναπαράσταση της Γνώσης	15
1.2.4 Εκπαίδευση – Μάθηση	16
1.3 <i>Αυτο-οργάνωση</i>	17
1.3.1 Kohonen Self Organizing Map	19
1.4 <i>Σκοπός Εργασίας</i>	20
2 ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ	21
2.1 <i>Το Τεχνητό Νευρωνικό Δίκτυο Kohonen Self Organizing Map</i>	21
2.1.1 Αρχή Δημιουργίας του Τοπογραφικού Χάρτη Χαρακτηριστικών	21
2.1.2 Ο αλγόριθμος Kohonen Self Organizing Map	21
2.1.3 Η διαδικασία του Ανταγωνισμού	22
2.1.4 Διαδικασία Συνεργασίας	23
2.1.5 Διαδικασία Προσαρμογής	25
2.1.6 Οι δύο φάσεις της Διαδικασίας Προσαρμογής: Διάταξη και Σύγκλιση	26
2.1.7 Σύνοψη του αλγορίθμου Kohonen SOM	28
2.1.8 Ιδιότητες της απεικόνισης χαρακτηριστικών	29
2.1.9 Η μέθοδος οπτικοποίησης του ΤΝΔ KSOM, U-matrix	30
2.2 <i>Περιγραφή των Δεδομένων της Εργασίας και Προκαταρκτική Στατιστική Ανάλυση</i>	31
2.2.1 Σύνολα δεδομένων για τον έλεγχο της σωστής λειτουργίας του εργαλείου	31
2.2.3 Σύνολο δεδομένων της μορφής RGB	32
2.2.2 Δεδομένα πεδίου	33
2.3 <i>Μέθοδοι πολυδιάστατης στατιστικής ανάλυσης - Ανάλυση κατά Συστάδες (Cluster Analysis)</i>	38
2.4 <i>Μέθοδος κατηγοριοποίησης K-means</i>	38
2.5 <i>Εργαλεία – Λογισμικό</i>	38
3 ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ	40
3.1 <i>Περιγραφή Αποτελεσμάτων</i>	40
3.2 <i>Το Εργαλείο enviSOM, Περιγραφή και Λειτουργία</i>	40
3.4 <i>Αποτελέσματα Ελέγχου Ορθής Λειτουργίας της Εφαρμογής</i>	48
3.4.1 Αποτελέσματα για το Fisher's Iris dataset	48
3.4.2 Σύνολο δεδομένων RGB – οκτώ χρώματα.	49
3.5 <i>Εφαρμογή σε πραγματικά δεδομένα - Εκτίμηση του ευτροφισμού με χρήση του εργαλείου enviSOM</i>	50
3.6 <i>Εκτίμηση του ευτροφισμού με εφαρμογή της μεθόδου ανάλυσης κατά συστάδες</i>	58
4 ΣΥΖΗΤΗΣΗ – ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ	59
4.1 <i>Λειτουργικότητα της εφαρμογής</i>	59
4.2 <i>Παραδοχές</i>	60
4.3 <i>Αποτελεσματικότητα της Μεθόδου</i>	61

4.4	Σημεία Βελτίωσης	62
4.4.1	Σημεία βελτίωσης που αφορούν τον αλγόριθμο και τα δεδομένα	62
4.4.2	Σημεία βελτίωσης που αφορούν το εργαλείο ενviSOM	64
5	ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ	65
6	ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ	70
A.	<i>Σκελετός του προγράμματος ενviSOM</i>	70

Περίληψη

Η εργασία αυτή μπορεί να χωριστεί σε δύο μέρη. Το πρώτο μέρος περιλαμβάνει την ανάπτυξη του εργαλείου envSOM στην γλώσσα προγραμματισμού Python και τον έλεγχο της αξιοπιστίας του χρησιμοποιώντας συγκεκριμένα σετ δεδομένων αναφοράς. Το δεύτερο μέρος αφορά στην εφαρμογή του εργαλείου σε πραγματικά δεδομένα πεδίου που έχουν συλλεχθεί από την παράκτια ζώνη του Στενού της Μυτιλήνης. Η επιλογή της Python βασίστηκε στο ότι διαθέτει ενημερωμένες βιβλιοθήκες για την ανάπτυξη επιστημονικών εφαρμογών, είναι ιδιαίτερα εύκολη στην εκμάθησή της και διατίθεται δωρεάν. Το envSOM συνδέεται με το GIS μέσω των αρχείων δεδομένων (ascii). Η χρήση του envSOM σε περιβαλλοντικά δεδομένα από την περιοχή του Στενού Μυτιλήνης, ανέδειξε την ικανότητα του νευρωνικού δικτύου Kohonen Self-Organizing Map να παρουσιάζει τα πολυδιάστατα δεδομένα με απλό και κατανοητό (human readable) τρόπο, να αναγνωρίζει ομάδες (clusters) σε αυτά και βάσει συγκεκριμένης ανάλυσης να δημιουργεί κανόνες ταξινόμησης. Οι κανόνες ταξινόμησης κατόπιν εφαρμογής στα δεδομένα (στη περίπτωση μας δεδομένα χλωροφύλλης-α, φωσφορικών και νιτρικών αλάτων) επιτρέπουν την παραγωγή ενός τελικού χάρτη ευτροφισμού όπου είναι εμφανή τα όρια των επιπέδων ευτροφισμού. Η ανάπτυξη του εργαλείου envSOM αντί για την χρήση κάποιου έτοιμου λογισμικού πακέτου έγινε αφενός με σκοπό την κατανόηση του μηχανισμού εφαρμογής ενός νευρωνικού δικτύου και αφετέρου τη δημιουργία εξειδικευμένου λογισμικού για την παρουσίαση, ανάλυση και ταξινόμηση περιβαλλοντικών δεδομένων. Ο ήδη αναπτυγμένος κώδικας παρέχει την δυνατότητα βελτίωσης/τροποποίησής του για μελλοντικές ανάγκες της έρευνας και επέκτασής του και σε άλλες εφαρμογές (σύνδεση του με συστήματα GIS, αυτοματοποιημένων συστημάτων δειγματοληψίας κ.α.).

1 Εισαγωγή

1.1 Ευτροφισμός

Ο ευτροφισμός είναι μία φυσική διαδικασία η οποία χαρακτηρίζεται από υπερβολική ανάπτυξη αλγών λόγω της παροχής θρεπτικών αλάτων στα θαλάσσια συστήματα. Σε ένα «μη διαταραγμένο» σύστημα η ανάπτυξη των φυτικών οργανισμών περιορίζεται από τον παράγοντα που βρίσκεται σε μικρότερη αφθονία, συνήθως κάποιο από τα θρεπτικά άλατα (Kitsiou and Karydis, 2011).

Στα παράκτια συστήματα τα θρεπτικά που δρουν ως περιοριστικός παράγοντας είναι το άζωτο και ο φώσφορος. Οι ανθρωπογενείς δραστηριότητες αλλάζουν τη ροή των θρεπτικών αλάτων στο θαλάσσιο περιβάλλον (Crossland et al., 2005) είτε από σημειακές πηγές όπως αγωγοί λυμάτων (επεξεργασμένα ή μη) και απόβλητα βιομηχανικών μονάδων καθώς και από μη σημειακές πηγές κυρίως από την απορροή υδάτων που «ξεπλένουν» αγροτικές εκτάσεις με αποτέλεσμα να μεταφέρουν το επιφανειακό χώμα το οποίο περιέχει λιπάσματα. Η παροχή των θρεπτικών αυτών μπορεί να έχει ποικιλία επιπτώσεων: υψηλά επίπεδα χλωροφύλλης-α, υπερβολική ανάπτυξη φυκιών, ανθήσεις αλγών οι οποίες είναι πολλές φορές τοξικές, μείωση της αφθονίας και της βιοποικιλότητας και αύξηση της θολερότητας του νερού· σε πιο προχωρημένα στάδια παρατηρούνται υψηλά επίπεδα πληθυσμού βακτηριδίων και μυκήτων που οδηγούν στην δημιουργία υποξικών και ανοξικών συνθηκών (Ferreira et al., 2007). Οι συνθήκες αυτές μειώνουν δραματικά την ποιότητα των υδάτων κάνοντάς τα ακατάλληλα για οποιαδήποτε χρήση (οικονομική, αναψυχής κτλ.), αλλά και πολλές φορές επικίνδυνα για την ανθρώπινη υγεία. Γι' αυτόν το λόγο ο ευτροφισμός θεωρείται παγκόσμια ως ένα σημαντικό πρόβλημα και κρίνεται αναγκαία η ανάπτυξη μεθοδολογιών για την εκτίμηση του στο θαλάσσιο περιβάλλον.

Το φαινόμενο του ευτροφισμού εξαρτάται από πλήθος βιοτικών και αβιοτικών παραμέτρων, πέρα από τις συγκεντρώσεις αζώτου και φωσφόρου, που πρέπει να ληφθούν υπ' όψιν για να γίνει κατανοητό το φαινόμενο καθώς και οι οικολογικές διαδικασίες που αυτό ενεργοποιεί. Σύμφωνα με το πρόγραμμα MED POL (UNEP, 2003) οι παράμετροι που κάθε Μεσογειακή χώρα θα πρέπει να παρακολουθεί όσον αφορά στην ποιότητα των υδάτων είναι: θερμοκρασία, pH, θολερότητα, ορθοφωσφορικά (PO-PO₄, μg-at/l), ολικός φώσφορος (P, μg-at/l), πυριτικά (SiO₂, μg-at/l), διαλυμένο οξυγόνο (mg/l), χλωροφύλλη-α (μg/l), ολικό άζωτο (N, μg-at/l), νιτρικά (NO₃-N, μg-at/l), αμμωνιακά (NH₄-N, μg-at/l), νιτρώδη (NO₂-N, μg-at/l) και φυτοπλαγκτόν (αριθμός κυττάρων και σύνθεση ειδών). Συνεπώς, το φαινόμενο του ευτροφισμού είναι εν γένει ένα πολυπαραμετρικό φαινόμενο άρα και οι μέθοδοι που χρησιμοποιούνται για την εκτίμηση του θα πρέπει να είναι αντίστοιχα πολυπαραμετρικές.

Για την εκτίμηση της ποιότητας του θαλασσινού νερού με βάση τα επίπεδα ευτροφισμού έχει χρησιμοποιηθεί ένα πλήθος πολυπαραμετρικών μεθόδων όπως οι: Ανάλυση Κύριων Συνιστωσών (PCA) (Zitko, 1994), Ανάλυση κατά Συστάδες (Cluster Analysis) (Clarke, 1993), Multivariate Dimensional Scaling (Warwick et al. 1988), Διακριτική Ανάλυση (Anguilera et al., 2001), Ανάλυση Παραγόντων (Ignatiades et al. 1992).

Επίσης η ανάπτυξη των Γεωγραφικών Συστημάτων Πληροφοριών (GIS) την τελευταία δεκαετία καθώς και μία ποικιλία από μεθόδους χωρικής ανάλυσης, γεωστατιστικής ανάλυσης και τεχνικών χαρτογράφησης στα πλαίσια των GIS κάνουν δυνατή την ανάπτυξη χωρικών βάσεων δεδομένων και τη δημιουργία χαρτών συμβάλλοντας στην απεικόνιση επιπέδων ευτροφισμού στις παράκτιες περιοχές με εύκολα κατανοητό τρόπο (Xu et al., 2001).

Επίσης, ο συνδυασμός των μεθόδων εκτίμησης του ευτροφισμού με τις δυνατότητες διαχείρισης και παρουσίασης της χωρικής πληροφορίας ενός GIS έχουν βοηθήσει σημαντικά στην ανάπτυξη εργαλείων Ολοκληρωμένης Διαχώρισης της Παράκτιας Ζώνης (Kitsiou et al., 2002).

Πέρα από τις μεθόδους που αναφέρθηκαν, για την εκτίμηση αλλά και πρόβλεψη (Recknagel et al., 1997) των επιπέδων ευτροφισμού έχουν χρησιμοποιηθεί και Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα (ΤΝΔ). Πιο συγκεκριμένα έγινε χρήση ενός ΤΝΔ του τύπου Kohonen Self-Organizing Map (KSOM) για την εκτίμηση και πρόβλεψη της ποιότητας των υδάτων στην παράκτια περιοχή της Αλμέριας στην Ισπανία (Anguilera et al. 2001). Το ΤΝΔ εκπαιδεύτηκε με δεδομένα χρονοσειρών ενός έτους για τις συγκεντρώσεις τεσσάρων παραμέτρων (νιτρικά, νιτρώδη, αμμωνία και φωσφορικά) από 22 σταθμούς δειγματοληψίας και στην συνέχεια το εκπαιδευμένο ΤΝΔ χρησιμοποιήθηκε με επιτυχία για την εκτίμηση του επιπέδου ευτροφισμού σε τυχαίους σταθμούς δείχνοντας ότι το ΤΝΔ τύπου KSOM είναι ένα αποτελεσματικό εργαλείο για την αξιολόγηση και πρόβλεψη των επιπέδων ευτροφισμού στα παράκτια ύδατα. Επίσης, νευρωνικά δίκτυα τύπου feed-forward back propagation έχουν χρησιμοποιηθεί με επιτυχία για την εκτίμηση των πεδίων ευτροφισμού σε λίμνες τις Τουρκίας (Karul et al., 2000) και τις Κίνας (Jiang et al. 2006, Kuo et al., 2006).

1.2 Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα

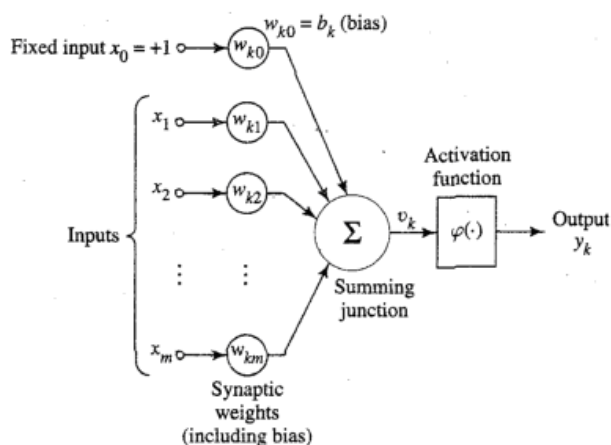
Τα ΤΝΔ είναι απλοποιημένα μοντέλα του Κεντρικού Νευρικού Συστήματος των βιολογικών οργανισμών, σχεδιασμένα να προσομοιάζουν τον τρόπο με τον οποίο ο εγκέφαλος πραγματοποιεί μια συγκεκριμένη εργασία ή λειτουργία. Αποτελούνται από πολλές απλές υπολογιστικές μονάδες τους *Νευρώνες* ή *Νευρώνια* τα οποία είναι διασυνδεδεμένα με πολύπλοκες αρχιτεκτονικές. Η υλοποίηση του ΤΝΔ πραγματοποιείται είτε με χρήση

διαφόρων ηλεκτρονικών εξαρτημάτων (Hardware) είτε προσομοιώνεται με λογισμικό σε ένα ψηφιακό υπολογιστή (Haykin, 1999).

Ο νευρώνας είναι η θεμελιώδης υπολογιστική μονάδα ενός ΤΝΔ και αποτελεί μια προσπάθεια μοντελοποίησης ενός γενικευμένου νευρικού κυττάρου. Μπορούμε να αναγνωρίσουμε τρία βασικά στοιχεία ενός μοντέλου τεχνητού νευρώνα:

1. Ένα σύνολο από *συνάψεις* ή *διασυνδέσεις* με συμβολισμό j , όπου η κάθε μία χαρακτηρίζεται από ένα *βάρος* ή *ισχύ* με συμβολισμό W_{kj} . Πιο συγκεκριμένα ένα σήμα x_j στην είσοδο της σύναψης j που είναι συνδεδεμένη στον νευρώνα k πολλαπλασιάζεται με το βάρος W_{kj} .
2. Έναν *αθροιστή* που αθροίζει το σήμα εισόδου (με συμβολισμό x_j) σταθμισμένο αντίστοιχα με τα βάρη των συνάψεων του νευρώνα. Οι διαδικασίες που περιγράφονται εδώ συνιστούν έναν *γραμμικό συνδυαστή*.
3. Μία *συνάρτηση ενεργοποίησης* η οποία περιορίζει (οριοθετεί) το εύρος της εξόδου του νευρώνα με συμβολισμό $\varphi(\cdot)$.

Μία ακόμα παράμετρος του μοντέλου αυτού είναι η εξωτερικά εφαρμοζόμενη *πόλωση* (*bias*) με συμβολισμό b_k που έχει ως επίδραση την αύξηση ή μείωση της καθαρής εισόδου στη συνάρτηση ενεργοποίησης, ανάλογα με το αν είναι θετική ή αρνητική. Η δομή του μοντέλου δίνεται στο Σχήμα 1.1.



Σχήμα 1.1 Ένα μη γραμμικό μοντέλο νευρώνα (Πηγή: Haykin, 1999).

Μπορούμε να εκφράσουμε μαθηματικά το μοντέλο αυτό με τις ακόλουθες εξισώσεις:

$$v_k = \sum_{j=0}^m w_{kj} \cdot x_j \quad (1.1)$$

και

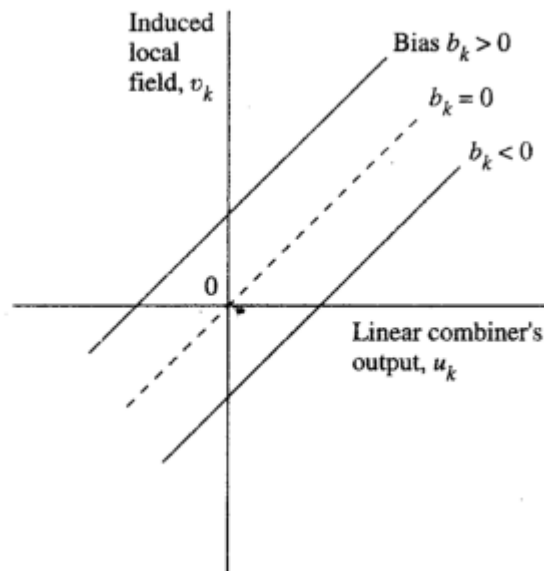
$$y_k = \varphi(v_k) \quad (1.2)$$

όπου x_1, x_2, \dots, x_m είναι τα σήματα εισόδου, $w_{k1}, w_{k2}, \dots, w_{km}$ είναι τα συναπτικά βάρη του νευρώνα k , u_k είναι το αποτέλεσμα του γραμμικού συνδυαστή για τα συγκεκριμένα σήματα εισόδου, $\varphi(\cdot)$ είναι η συνάρτηση ενεργοποίησης και y_k είναι το σήμα εξόδου του νευρώνα.

Στο συγκεκριμένο μοντέλο η πόλωση b_k εισάγεται σαν μία σύναψη με σταθερή τιμή εισόδου:

$$b_k = w_{k0} x_0$$

όπου b_k η πόλωση του νευρώνα k , w_{k0} το βάρος της πόλωσης και x_0 σταθερή τιμή +1. Η πόλωση b_k έχει ως αποτέλεσμα την εφαρμογή ενός συνεκτικού μετασχηματισμού στο αποτέλεσμα u_k του γραμμικού συνδυαστή του μοντέλου $v_k = u_k + b_k$. Πιο συγκεκριμένα, εάν η τιμή της πόλωσης b_k είναι θετική ή αρνητική η σχέση ανάμεσα στο παραγόμενο τοπικό πεδίο ή δυναμικό ενεργοποίησης v_k του νευρώνα k και του αποτελέσματος του γραμμικού συνδυαστή u_k τροποποιείται κατά τρόπο που παρουσιάζεται στο Σχήμα 1.2.



Σχήμα 1.2 Συσχετισμένος μετασχηματισμός ο οποίος προκύπτει εξαιτίας της πόλωσης, $v_k = b_k$ για $u_k = 0$ (Πηγή: Haykin, 1999).

1.2.1 Τύποι της Συνάρτησης Ενεργοποίησης

Η συνάρτηση ενεργοποίησης $\varphi(v)$, ορίζει το αποτέλεσμα του νευρώνα από πλευράς του παραγόμενου τοπικού πεδίου v . Για το σκοπό αυτό χρησιμοποιούνται διαφόρων τύπων συναρτήσεων, οι οποίες και θα παρουσιαστούν στη συνέχεια. Κοινό χαρακτηριστικό όλων των συναρτήσεων ενεργοποίησης, είναι η ιδιότητα να λαμβάνουν αυθαίρετες τιμές (όπως είναι τα σήματα εισόδου που προκύπτουν από μία πραγματική εφαρμογή, μετρήσεις δηλαδή του περιβάλλοντος που επιθυμούμε να εφαρμόσουμε στο νευρωνικό δίκτυο) σε ένα προκαθορισμένο εύρος τιμών (πεδίο τιμών της συνάρτησης):

1. Συνάρτηση κατωφλιού ή συνάρτηση βήματος.

$$\varphi(v) = \begin{cases} 1, & v \geq 0 \\ 0, & v < 0 \end{cases} \quad (1.3)$$

Αντίστοιχα η έξοδος του νευρώνα k ο οποίος εφαρμόζει μια τέτοιου τύπου συνάρτηση εκφράζεται ως

$$y_k = \begin{cases} 1, & v_k \geq 0 \\ 0, & v_k < 0 \end{cases} \quad (1.4)$$

όπου

$$v_k = \sum_{j=1}^m w_{kj} x_j + b_k \quad (1.5)$$

Οι νευρώνες αυτού του τύπου αναφέρονται στην βιβλιογραφία ως *McCulloch-Pitts model* (Haykin, 1999). Το μοντέλο αυτό έχει την ιδιότητα *όλα-ή-τίποτα* (*all-or-nothing*), καθώς η έξοδος του νευρώνα παίρνει την τιμή 1 εάν το v είναι θετικό και 0 σε κάθε άλλη περίπτωση.

2. Τμηματικά-γραμμική συνάρτηση.

$$\varphi(v) = \begin{cases} 1, & v \geq +\frac{1}{2} \\ v, & +\frac{1}{2} > v > -\frac{1}{2} \\ 0, & v \leq -\frac{1}{2} \end{cases} \quad (1.6)$$

3. Σιγμοειδής συνάρτηση, είναι η πιο συνηθισμένη συνάρτηση ενεργοποίησης.

Ορίζεται ως μια γνησίως αύξουσα συνάρτηση η οποία παρουσιάζει μια λεπτή ισορροπία μεταξύ γραμμικής και μη-γραμμικής συμπεριφοράς.

A. Λογιστική συνάρτηση (*logistic function*).

$$\varphi(v) = \frac{1}{1 + \exp(-\alpha v)} \quad (1.7)$$

όπου α είναι η κλίση του (προσεγγιστικά) γραμμικού τμήματος.

B. Συνάρτηση *signum*.

$$\varphi(v) = \begin{cases} 1, & v > 0 \\ 0, & v = 0 \\ -1, & v < 0 \end{cases} \quad (1.8)$$

η οποία δίνει τιμές -1, 0, 1.

Γ. Συνάρτηση υπερβολικής εφαπτομένης

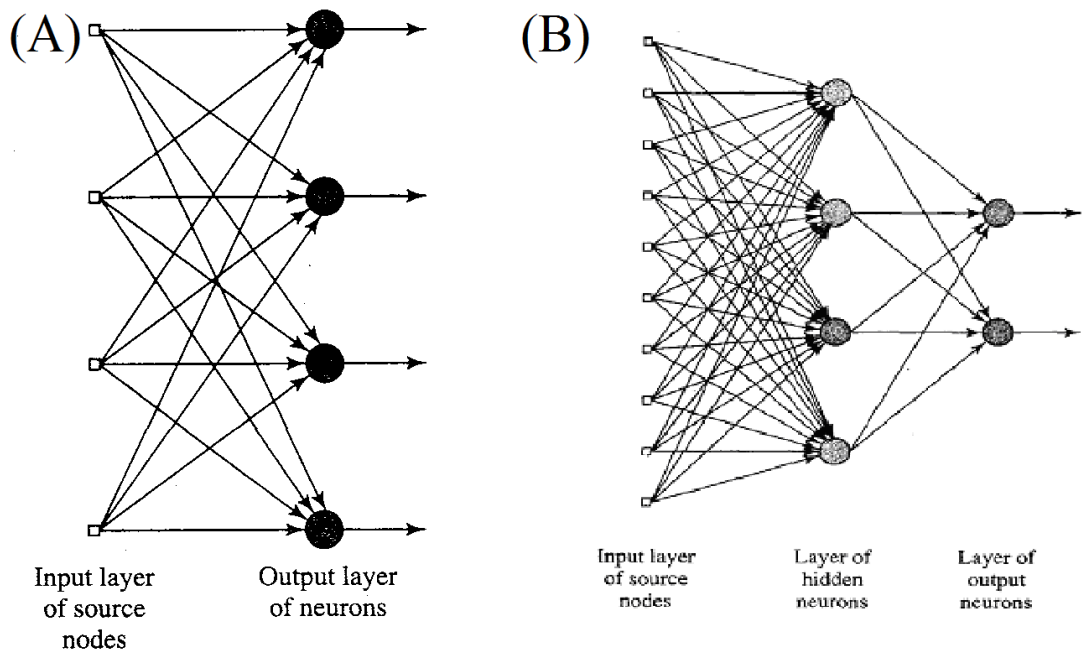
$$\varphi(v) = \tanh(v) \quad (1.9)$$

η οποία συνδέεται με την λογιστική συνάρτηση, και δίνει τιμές στο διάστημα -1 έως 1.

1.2.2 Αρχιτεκτονικές Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων

Ο τρόπος με το οποίο δομούνται οι νευρώνες στο ΤΝΔ είναι στενά συνδεδεμένος με τον αλγόριθμο που χρησιμοποιείται για την εκπαίδευση (αναλυτικότερα στην ενότητα 1.2.4) του. Γενικά μπορούμε να διακρίνουμε τρεις θεμελιώδεις διαφορετικές κλάσεις αρχιτεκτονικών δικτύων (Haykin, 1999, Kohonen, 1990):

Δίκτυα ενός επιπέδου, Εμπρός-Τροφοδότησης (Single-layer Feedforward Network). Σε ένα πολυεπίπεδο νευρωνικό δίκτυο οι νευρώνες είναι οργανωμένοι σε επίπεδα (Layers). Στην πιο απλή μορφή ενός πολυεπίπεδου δικτύου έχουμε ένα επίπεδο εισόδου (input layer) από πηγαίους κόμβους (source nodes) οι οποίοι προβάλλονται πάνω σε ένα στρώμα εξόδου (output layer) από νευρώνες (υπολογιστικοί κόμβοι, computational nodes), αλλά όχι το αντίστροφο. Είναι δηλαδή ένα αυστηρώς εμπρός-τροφοδότησης ή άκυκλο δίκτυο. Ονομάζεται δίκτυο ενός επιπέδου (single layer) λόγω του ότι έχει ένα επίπεδο με υπολογιστικούς κόμβους (computational nodes), δηλαδή σαν επίπεδα ενός δικτύου μετράμε μόνο αυτά στα οποία γίνεται κάποιος υπολογισμός (σχήμα 1.3Α).



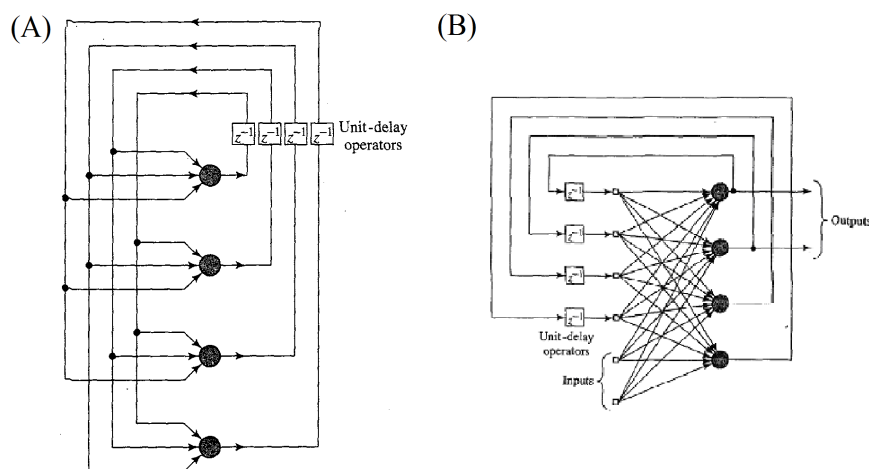
Σχήμα 1.3 (A) Δίκτυο Εμπρός τροφοδότησης ή άκυκλο δίκτυο, με ένα επίπεδο νευρώνων. (B) Πλήρως συνδεδεμένο δίκτυο εμπρός τροφοδότησης ή άκυκλο δίκτυο με ένα κρυφό επίπεδο και ένα επίπεδο εξόδου (Πηγή: Haykin, 1999).

Δίκτυα πολλαπλών επιπέδων Εμπρός τροφοδότησης (Multilayer Feedforward Network). Η δεύτερη κατηγορία διακρίνεται για την ύπαρξη ενός ή περισσότερων κρυφών επιπέδων (hidden layers). Η λειτουργία των κρυφών αυτών νευρώνων (hidden neurons or hidden units) είναι να παρεμβαίνουν με κάποιο χρήσιμο τρόπο μεταξύ της εξωτερικής εισόδου και της εξόδου του δικτύου. Με μία χαλαρή προσέγγιση το δίκτυο αποκτά μία ευρύτερη (global) αντίληψη παρόλη την τοπική συνδεσιμότητα χάρη σε ένα επιπλέον σύνολο συνοπτικών συνδέσεων και μιας επιπλέον διάστασης νευρωνικών αλληλεπιδράσεων (Churchland και Sejnowski, 1992). Οι πηγαίοι κόμβοι (source nodes) στο επίπεδο εισόδου (input layer) παρέχουν τα σχετικά στοιχεία του μοτίβου ενεργοποίησης (input vector) τα οποία συνιστούν τα σήματα εισόδου που εισέρχονται στους νευρώνες (computation nodes) του δεύτερου επιπέδου (π.χ. του πρώτου κρυφού επιπέδου). Τα σήματα εξόδου από το δεύτερο επίπεδο εισάγονται σαν είσοδος στο τρίτο και ούτω καθεξής για όλο το δίκτυο. Συνήθως οι νευρώνες ενός επιπέδου έχουν σαν είσοδο την έξοδο του προηγούμενου επιπέδου μόνο. Το σύνολο από τα σήματα εξόδου από τους νευρώνες του τελικού επιπέδου (output layer) συνιστά τη συνολική ανταπόκριση του δικτύου στο μοτίβο ενεργοποίησης (activation pattern) που παρέχεται από τους πηγαίους κόμβους (source nodes) στο 1ο επίπεδο (εισόδου) (input layer).

Για παράδειγμα ένα feedforward δίκτυο με m πηγαίους κόμβους (source nodes), h_1 νευρώνες στο πρώτο κρυφό επίπεδο, h_2 νευρώνες στο δεύτερο κρυφό επίπεδο και q νευρώνες στο επίπεδο εξόδου (output layer) αναφέρεται ως $m - h_1 - h_2 - q$ δίκτυο.

Ένα δίκτυο ονομάζεται πλήρως συνδεδεμένο (fully connected) όταν κάθε κόμβος ενός επιπέδου συνδέεται με κάθε κόμβο του επόμενου επιπέδου (σχήμα 1.3B) και μερικώς συνδεδεμένο (partially connected) όταν μερικές από τις συναπτικές συνδέσεις λείπουν.

Δίκτυα Ανάδρασης (Recurrent networks). Ένα δίκτυο ανάδρασης διαφοροποιείται από ένα εμπρός-τροφοδότησης στο ότι έχει τουλάχιστον ένα βρόχο ανάδρασης (feedback loop). Για παράδειγμα, ένα δίκτυο ανάδρασης μπορεί να συνίσταται από ένα μοναδικό επίπεδο από νευρώνες που ο καθένας τροφοδοτεί τους άλλους (Σχήμα 1.4A). Στη δομή που παρουσιάζεται στο σχήμα αυτό δεν υπάρχουν βρόχοι αυτο-ανάδρασης (self-feedback loops). Ως αυτο-ανάδραση αναφερόμαστε στη περίπτωση όπου ένας νευρώνας τροφοδοτεί την έξοδο του στην είσοδο του. Το δίκτυο ανάδρασης του σχήματος 1.4A επίσης δεν περιέχει κρυφούς νευρώνες, στο Σχήμα 1.4B παρουσιάζεται ένα δίκτυο ανάδρασης το οποίο περιέχει κρυφούς νευρώνες. Οι συνδέσεις ανάδρασης (feedback connections) του Σχήματος 1.4B ξεκινάνε και από τους κρυφούς νευρώνες και από τους νευρώνες εξόδου. Η παρουσία συνδέσεων ανάδρασης είτε σαν του Σχήματος 1.4A ή σαν του 1.4B έχουν ισχυρό αντίκτυπο στην ικανότητα του δικτύου να μαθαίνει καθώς και στην επίδοσή του. Επιπλέον, οι βρόχοι ανάδρασης περιλαμβάνουν τη χρήση συγκεκριμένων διακλαδώσεων από στοιχεία χρονικής καθυστέρησης (unit-delay elements) (με συμβολισμό z^{-1}) οι οποίες έχουν ως αποτέλεσμα μία μη-γραμμική δυναμική συμπεριφορά (nonlinear dynamical behavior), με την προϋπόθεση ότι το δίκτυο περιέχει μη-γραμμικούς νευρώνες.



Σχήμα 1.4. (A) Δίκτυο ανάδρασης το οποίο δεν περιέχει βρόγχους αυτο-ανάδρασης ούτε κρυφούς νευρώνες. (B) Δίκτυο ανάδρασης με κρυφούς νευρώνες (Πηγή: Haykin, 1999).

1.2.3 Αναπαράσταση της Γνώσης

Ως γνώση στα πλαίσια των νευρωνικών δικτύων χρησιμοποιούμε τον ακόλουθο ορισμό:

Με τον όρο «γνώση» αναφερόμαστε σε αποθηκευμένα δεδομένα ή μοντέλα τα οποία χρησιμοποιούνται από ένα άτομο ή μία μηχανή για να ερμηνεύσει, να προβλέψει και να ανταποκριθεί κατάλληλα στον εξωτερικό κόσμο (Fischler and Firschein, 1987).

Η βασική λειτουργία του νευρωνικού δικτύου είναι να μάθει ένα μοντέλο του περιβάλλοντος στο οποίο το ίδιο είναι ενσωματωμένο, λαμβάνοντας πληροφορίες για αυτό μέσω των αισθητήρων του (επίπεδο εισόδου του δικτύου) και να έχει τη δυνατότητα να προσαρμόσει το μοντέλο αυτό ώστε να παραμένει συνεπές με τις τυχόν αλλαγές στο περιβάλλον (Haykin, 1999).

Η γνώση που κατέχει το ΤΝΔ για το περιβάλλον του αποτελείται από δύο είδη πληροφορίας (Haykin, 1999):

Πληροφορία για την κατάσταση του περιβάλλοντος μέχρι την παρούσα χρονική στιγμή, η οποία αντιπροσωπεύεται από δεδομένα για το τι είναι και για το τι ήταν γνωστό στο δίκτυο. Αυτή η γνώση αναφέρεται ως εκ των προτέρων πληροφορία.

Παρατηρήσεις (μετρήσεις) του κόσμου όπως αυτές λαμβάνονται από «αισθητήρες» σχεδιασμένοι να εξετάζουν το περιβάλλον στο οποίο το νευρωνικό δίκτυο λειτουργεί. Συνήθως αυτές οι παρατηρήσεις περιέχουν εν γένει θόρυβο, λόγω λαθών στη λειτουργία των αισθητήρων ή και ατελειών του συστήματος. Οι παρατηρήσεις αυτές παρέχουν το απόθεμα της πληροφορίας από το οποίο αντλούνται τα παραδείγματα που χρησιμοποιούνται για την εκπαίδευση του νευρωνικού δικτύου.

Τα παραδείγματα αυτά μπορεί να είναι *χαρακτηρισμένα* ή *μη-χαρακτηρισμένα*. Στα χαρακτηρισμένα παραδείγματα το *σήμα εισόδου* είναι αντιστοιχισμένο με μια επιθυμητή ανταπόκριση (target output) από το δίκτυο. Τέτοιου είδους παραδείγματα χρησιμοποιούνται για την επιβλεπόμενη εκπαίδευση του δικτύου. Αντιθέτως τα παραδείγματα που δεν είναι χαρακτηρισμένα αποτελούνται από διαφορετικές υλοποιήσεις του σήματος εισόδου και στο ΤΝΔ δεν γνωστοποιείται κάποιο επιθυμητό αποτέλεσμα αλλά αυτό προκύπτει μέσω της μη-επιβλεπόμενης εκπαίδευσης του. Το σύνολο δεδομένων που θα χρησιμοποιηθεί για την εκπαίδευση του ΤΝΔ εξαρτάται άμεσα από τον αλγόριθμο με τον οποίο αυτό υλοποιείται.

Σε ένα ΤΝΔ συγκεκριμένης αρχιτεκτονικής, η γνώση του για το περιβάλλον του αντιπροσωπεύεται από τις τιμές που παίρνουν οι ελεύθερες παράμετροι του δικτύου, δηλαδή τα βάρη των συνάψεων και τα *biases*.

Σύμφωνα με τον Anderson (1988) μπορούμε να αναγνωρίσουμε τέσσερις γενικούς κανόνες σχετικά με την αναπαράσταση της γνώσης ενός ΤΝΔ (Haykin, 1999).

- Κανόνας 1. Σήματα εισόδου που είναι όμοια μεταξύ τους και ανήκουν σε παρόμοιες ομάδες θα πρέπει να δημιουργούν παρόμοιες αντιπροσωπεύσεις μέσα στο δίκτυο και συνεπώς να κατηγοριοποιούνται σαν να ανήκουν στην ίδια κατηγορία. Σαν κριτήριο ομοιότητας μεταξύ των διανυσμάτων εισόδου χρησιμοποιούμε μέτρα απόστασης όπως η Ευκλείδεια απόσταση ή το εσωτερικό γινόμενο.
- Κανόνας 2. Σήματα εισόδου που ανήκουν σε διαφορετικές ομάδες θα πρέπει να δημιουργούν ευρέως διαφορετικές αντιπροσώπευσης μέσα στο δίκτυο. Ο κανόνας αυτός είναι ο ακριβώς αντίθετος του κανόνα 1.
- Κανόνας 3. Εάν ένα συγκεκριμένο χαρακτηριστικό είναι σημαντικό θα πρέπει να συσχετιστεί με αυτό ένας μεγάλος αριθμός νευρώνων.
- Κανόνας 4. Για το σχεδιασμό του δικτύου θα πρέπει να λαμβάνονται υπόψη τυχόν προηγούμενες πληροφορίες (prior information), καθώς και αμετάβλητες παράμετροι (invariances) για την απλοποίηση του σχεδιασμού του δικτύου.

1.2.4 Εκπαίδευση – Μάθηση

Η ιδιότητα με τη μεγαλύτερη σημασία για ένα ΤΝΔ είναι η ικανότητά του να *μαθαίνει* από το περιβάλλον του και να βελτιώνει την απόδοσή του μέσω της διαδικασίας της εκπαίδευσης. Η βελτίωση στην απόδοση γίνεται με το πέρασμα του χρόνου σύμφωνα με ένα καθορισμένο μέτρο. Το νευρωνικό δίκτυο μαθαίνει για το περιβάλλον του μέσω μίας διαδραστικής διαδικασίας διορθώσεων που εφαρμόζονται στα συναπτικά βάρη. Κατά συνέπεια το νευρωνικό δίκτυο γίνεται πιο καταρτισμένο για το περιβάλλον του με κάθε επανάληψη της διαδικασίας εκπαίδευσης.

Για να ορίσουμε την μάθηση στα πλαίσια των τεχνικών νευρωνικών δικτύων χρησιμοποιούμε τον προσαρμοσμένο ορισμό των Mendel and McClaren (1970):

Μάθηση είναι μία διαδικασία κατά την οποία οι ελεύθερες παράμετροι ενός τεχνητού νευρωνικού δικτύου προσαρμόζονται μέσω μίας διαδικασίας διέγερσης από το περιβάλλον στο οποίο το δίκτυο είναι ενσωματωμένο. Ο τύπος της μάθησης καθορίζεται από τον τρόπο με τον οποίο λαμβάνουν χώρα οι αλλαγές στις παραμέτρους (Haykin, 1999).

Ο ορισμός αυτός υποδηλώνει την ακόλουθη αλληλουχία γεγονότων:

1. Το ΤΝΔ *διεγείρεται* από το περιβάλλον του.
2. Το ΤΝΔ *υφίσταται* αλλαγές στις ελεύθερες παραμέτρους του σαν αποτέλεσμα αυτής της διέγερσης.
3. Το ΤΝΔ *ανταποκρίνεται με έναν νέο τρόπο* στο περιβάλλον λόγω των αλλαγών αυτών που συνέβησαν στην εσωτερική του δομή.

Ένα προκαθορισμένο σύνολο καλά ορισμένων κανόνων για την επίλυση ενός προβλήματος εκμάθησης λέγεται *αλγόριθμος εκπαίδευσης*.

1.3 Αυτο-οργάνωση

Ο σκοπός ενός αλγορίθμου αυτο-οργανωμένης εκμάθησης είναι να ανακαλύψει σημαντικά πρότυπα (μοτίβα) ή χαρακτηριστικά στα δεδομένα εισόδου χωρίς την παρουσία δασκάλου. Για να το πραγματοποιήσει αυτό παρέχεται στον αλγόριθμο ένα σύνολο κανόνων τοπικού χαρακτήρα το οποίο του επιτρέπει να μάθει να υπολογίζει μια αντιστοίχιση εισόδου-εξόδου με συγκεκριμένες επιθυμητές ιδιότητες. Ο όρος τοπικός σημαίνει ότι η αλλαγή που εφαρμόζεται στα συναπτικά βάρη ενός νευρώνα περιορίζεται στην άμεση γειτονιά του.

Η αυτο-οργανωμένη (μη-επιβλεπόμενη) μάθηση συνίσταται από την επαναλαμβανόμενη τροποποίηση των συναπτικών βαρών του νευρωνικού δικτύου ως ανταπόκριση στα μοτίβα ενεργοποίησης και σύμφωνα με καθορισμένους κανόνες μέχρι να αναπτυχθεί ένας τελικός σχηματισμός.

Η απάντηση για την χρησιμότητα αυτού του σχηματισμού βρίσκεται στην εξής παρατήρηση του Alan Turing (1952) ενός φυσικού κατ' ουσία φαινομένου όπου:

Τάξη σε καθολικό επίπεδο είναι δυνατόν να προκύψει από τοπικές αλληλεπιδράσεις (“Global order can arise from local interaction”).

Δηλαδή ένα σύνολο σε μία αρχικά τυχαία κατάσταση, του οποίου τα στοιχεία αλληλεπιδρούν με τα γειτονικά τους (local interaction) μπορεί να οδηγηθεί σε μία καθολική διάταξη (global order).

Αυτή η παρατήρηση έχει εφαρμογή στα βιολογικά καθώς και στα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα. Η ουσία της αυτο-οργάνωσης είναι ότι πολλές αρχικά τυχαίες τοπικές αλληλεπιδράσεις μεταξύ γειτονικών νευρώνων ενός δικτύου μπορούν να ενωθούν προς καταστάσεις καθολικής τάξης του δικτύου και τελικά να οδηγήσουν σε συνεκτική συμπεριφορά με τη μορφή χωρικών μοτίβων.

Η οργάνωση του δικτύου λαμβάνει χώρα σε δύο διαφορετικά επίπεδα τα οποία αλληλεπιδρούν μεταξύ τους με τη μορφή ενός *βρόγχου ανάδρασης*. Τα δύο επίπεδα είναι :

-Δραστηριότητα. Συγκεκριμένα μοτίβα ενεργοποίησης παράγονται από ένα δίκτυο σε ανταπόκριση στα σήματα εισόδου.

-Συνδεσιμότητα. Η τροποποίηση της ισχύος των συνδέσεων (συναπτικά βάρη) εξαρτάται από την ανταπόκριση του δικτύου στα σήματα εισόδου.

Η ανατροφοδότηση μεταξύ των αλλαγών στα βάρη των συνάψεων και των αλλαγών στα μοτίβα ενεργοποίησης πρέπει να είναι θετική έτσι ώστε να επιτευχθεί αυτο-οργάνωση του δικτύου.

Οι βάσεις για την θεωρία της αυτο-οργάνωσης βασίζονται στην πρωτοποριακή εργασία του von der Malsburg (1973, 1990) από την οποία μπορούμε να διατυπώσουμε τέσσερις αρχές της αυτο-οργάνωσης (Haykin, 1999):

Αρχή 1. Οι αλλαγές στα βάρη των συνάψεων έχουν την τάση να αυτο-ενισχύονται. Η διαδικασία της αυτο-ενίσχυσης περιορίζεται από την προϋπόθεση ότι οι προσαρμογές στα διανύσματα βάρους των συνάψεων πρέπει να βασίζονται σε τοπικά διαθέσιμα σήματα, τα λεγόμενα προσυναπτικά και μετασυναπτικά σήματα. Οι προϋποθέσεις της αυτο-ενίσχυσης και της τοπικότητας καθορίζουν τον μηχανισμό σύμφωνα με τον οποίο μία ισχυρή σύναψη οδηγεί το προσυναπτικό και το μετασυναπτικό σήμα να συμπέσουν (δηλαδή το διάνυσμα βάρους της σύναψης είναι παρόμοιο με το διάνυσμα εισόδου). Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα να αυξηθεί η ισχύς της σύναψης εάν τα σήματα συμπίπτουν.

Αρχή 2. Περιορισμοί στους πόρους οδηγούν σε ανταγωνισμό μεταξύ των συνάψεων και κατά συνέπεια την επιλογή αυτών που αναπτύσσονται πιο δυναμικά εις βάρος των άλλων (fittest). Για να σταθεροποιηθεί το σύστημα θα πρέπει να υπάρχει κάποιου είδους ανταγωνισμός για έναν «περιορισμένο» πόρο (π.χ. αριθμός διανυσμάτων εισόδου). Συγκεκριμένα, μία αύξηση της ισχύος μερικών συνάψεων πρέπει να αντισταθμίζεται από μία μείωση της ισχύος σε άλλες. Συνεπώς, μόνο οι «επιτυχημένες» συνάψεις μπορούν να αυξηθούν, ενώ οι λιγότερο επιτυχημένες τείνουν να αποδυναμωθούν ή και να εξαφανιστούν.

Αρχή 3. Οι τροποποιήσεις στα συναπτικά βάρη έχουν την τάση να συνεργάζονται. Επισημάνεται ότι μια μοναδική σύναψη δεν μπορεί να παράγει αποτελεσματικά επιθυμητά αποτελέσματα, χρειάζεται η συνεργασία μεταξύ ενός συνόλου συνάψεων να συγκλίνουν προς ένα νευρώνα και να μεταφέρουν αρκετά συμπίπτοντα σήματα προς αυτόν για να τον ενεργοποιούν. Η παρουσία μίας πολύ ισχυρής σύναψης μπορεί να βελτιώσει την προσαρμογή άλλων συνάψεων, παρόλο τον συνολικό ανταγωνισμό.

Αρχή 4. Τάξη και δομή στα μοτίβα ενεργοποίησης αντιπροσωπεύουν πλεονάζουσες πληροφορίες τις οποίες το νευρωνικό δίκτυο έχει αποκτήσει με την μορφή γνώσης, που είναι απαραίτητη προϋπόθεση για την αυτο-οργανωμένη μάθηση. Για να πραγματοποιήσει μία

χρήσιμη λειτουργία επεξεργασίας-πληροφορίας, η αυτο-οργανωμένη μάθηση, θα πρέπει να υπάρχει πλεονασμός στα πρότυπα ενεργοποίησης που προμηθεύεται το δίκτυο από το περιβάλλον (σύνολο δεδομένων εκπαίδευσης).

1.3.1 Kohonen Self Organizing Map

Το ΤΝΔ τύπου Kohonen SOM αποτελείται από δύο επίπεδα, ένα επίπεδο εισόδου και ένα επίπεδο εξόδου. Οι νευρώνες στο επίπεδο εξόδου είναι διατεταγμένοι σε ένα πλέγμα μιας ή δύο (συνήθως) διαστάσεων. Ο αλγόριθμος εκπαίδευσης του ανήκει στους μη-επιβλεπόμενους. Οι νευρώνες του ρυθμίζονται μέσω μίας μεθόδου ανταγωνιστικής μάθησης (*competitive learning*) στο να ανταποκρίνονται σε συγκεκριμένα μοτίβα των σημάτων εισόδου. Οι νευρώνες στο επίπεδο εξόδου του δικτύου ανταγωνίζονται μεταξύ τους για το ποιος θα ενεργοποιηθεί με αποτέλεσμα μόνο ένας νευρώνας εξόδου να ενεργοποιείται ή ένας από κάθε ομάδα. Ένας νευρώνας εξόδου ο οποίος κερδίζει τον ανταγωνισμό ονομάζεται *νικητής-που-τα-παίρνει-όλα νευρώνας (winner-takes-all neuron)* ή απλά *νικητής νευρώνας (winner neuron)*.

Οι θέσεις των νικητών νευρώνων, τοποθετούνται κατά τέτοιο τρόπο σε σχέση με τους υπόλοιπους έτσι ώστε να δημιουργείται ουσιαστικά ένα σύστημα συντεταγμένων στο πλέγμα για τα διαφορετικά χαρακτηριστικά της εισόδου (Kohonen, 1990). Δηλαδή, συγκεκριμένα σήματα εισόδου ενεργοποιούν συγκεκριμένους νευρώνες του πλέγματος και όμοια σήματα ενεργοποιούν γειτονικούς ή και τους ίδιους νευρώνες, ενώ μη-όμοια ενεργοποιούν νευρώνες σε άλλη περιοχή του πλέγματος. Έτσι ένας αυτο-οργανωμένος χάρτης χαρακτηρίζεται από τη δημιουργία ενός *τοπογραφικού χάρτη* των προτύπων εισόδου στον οποίο οι *χωρικές θέσεις (συντεταγμένες) των νευρώνων στο πλέγμα είναι ενδεικτικές των εγγενών στατιστικών χαρακτηριστικών τα οποία περιέχονται στα μοτίβα εισόδου*.

Οι αυτο-οργανωμένοι χάρτες είναι εγγενώς μη γραμμικοί, έτσι μπορούν να θεωρηθούν σαν μία μη γραμμική γενίκευση της ανάλυσης κύριων συνιστωσών (PCA) (Walter and Ritter, 1996).

Η ανάπτυξη των αυτο-οργανωμένων χαρτών σαν νευρωνικά μοντέλα έχει ως βάση ένα ιδιαίτερο χαρακτηριστικό του ανθρώπινου εγκεφάλου. Πολλά μέρη του εγκεφάλου είναι οργανωμένα κατά τέτοιο τρόπο ώστε τα διάφορα σήματα από τα αισθητήρια όργανα να αντιπροσωπεύονται από *τοπολογικά διατεταγμένους υπολογιστικούς χάρτες*. Πιο συγκεκριμένα τα σήματα για αισθήσεις όπως η αφή (Kaas et al., 1983), η όραση (Hubel and Wiesel, 1962) και η ακοή (Suga, 1965) αντιστοιχίζονται σε διαφορετικές περιοχές του εγκεφαλικού φλοιού με τοπολογικά διατεταγμένο τρόπο. Συνεπώς ο υπολογιστικός χάρτης είναι ένα από τα βασικά δομικά στοιχεία της υπολογιστικής υποδομής του κεντρικού νευρικού συστήματος.

1.4 Σκοπός Εργασίας

Σκοπός της παρούσας πτυχιακής εργασίας είναι η ανάπτυξη ενός εργαλείου (enviSOM) το οποίο παρέχει μια φιλική προς το χρήστη διεπιφάνεια για την εφαρμογή του αλγορίθμου του μη-επιβλεπόμενου νευρωνικού δικτύου KSOM σε περιβαλλοντικά δεδομένα με σκοπό την ανάλυσή τους, την ομαδοποίησή τους σε συγκεκριμένες κατηγορίες και την παρουσίαση των αποτελεσμάτων με τη μορφή θεματικών χαρτών.

Πιο συγκεκριμένα το εργαλείο αυτό προσφέρει στο χρήστη τη δυνατότητα ρύθμισης των παραμέτρων του αλγορίθμου, την εισαγωγή δεδομένων (μορφή αρχείων: CSV, TSV, ascii, export αρχεία του λογισμικού ArcGIS). Στην παρούσα εργασία η χρησιμότητα του εργαλείου που αναπτύχθηκε αναδείχθηκε μέσω μίας μελέτης περίπτωσης η οποία αφορά στην ανίχνευση των επιπέδων ευτροφισμού σε μία παράκτια περιοχή της Λέσβου.

2 Μεθοδολογία

2.1 Το Τεχνητό Νευρωνικό Δίκτυο Kohonen Self Organizing Map

Το νευρωνικό δίκτυο αποτελείται από δύο επίπεδα, ένα επίπεδο εισόδου και ένα επίπεδο εξόδου. Σαν επίπεδο εξόδου χρησιμοποιούμε ένα πλέγμα με νευρώνες, η δομή του οποίου μπορεί να είναι ορθογώνια ή εξαγωνική. Όλοι οι νευρώνες στο επίπεδο εξόδου είναι συνδεδεμένοι με τους πηγαίους κόμβους στο επίπεδο εισόδου. Όλη η υπολογιστική δραστηριότητα λαμβάνει χώρα στο επίπεδο εξόδου το οποίο λειτουργεί και σαν ένας διακριτός χάρτης.

2.1.1 Αρχή Δημιουργίας του Τοπογραφικού Χάρτη Χαρακτηριστικών

Η αρχή αυτή ενέπνευσε δύο διαφορετικά μοντέλα αντιστοίχισης χαρακτηριστικών (feature-mapping models). Το πρώτο προτάθηκε από τους Willshaw και von der Malsburg το 1976 με σκοπό να εξηγήσει βιολογικά την προβολή του οπτικού ερεθίσματος από τον αμφιβληστροειδή χιτώνα στον οπτικό φλοιό στα ανώτερα σπονδυλωτά.

Το δεύτερο μοντέλο που προτάθηκε από τον Kohonen το 1982, δεν προσπάθησε να εξηγήσει κάποια νευροβιολογική διαδικασία αλλά χρησιμοποιεί τα βασικά χαρακτηριστικά των υπολογιστικών χαρτών στον εγκέφαλο παραμένοντας υπολογιστικά προσιτό, και είναι πιο γενικής μορφής από το πρώτο μοντέλο γιατί είναι ικανό να εκτελέσει συμπίεση των δεδομένων δηλαδή μείωση της διάστασης των δεδομένων.

Ο βασικός σκοπός του αυτο-οργανώμενου χάρτη είναι να μετασχηματίζει ένα εισερχόμενο σήμα αυθαίρετης διάστασης σε ένα διακριτό χάρτη μίας ή δύο διαστάσεων εκτελώντας το μετασχηματισμό με έναν τρόπο ο οποίος είναι τοπολογικά διατεταγμένος.

2.1.2 Ο αλγόριθμος Kohonen Self Organizing Map

Ο αλγόριθμος που είναι υπεύθυνος για τον σχηματισμό του αυτο-οργανώμενου χάρτη ξεκινάει με την προετοιμασία των συναπτικών βαρών. Αυτό μπορεί να γίνει δίνοντας τους μικρές τυχαίες αρχικές τιμές από μια γεννήτρια τυχαίων αριθμών, ώστε να μη δώσουμε στον χάρτη κάποια εκ των προτέρων τάξη. Μπορούμε να διακρίνουμε τρεις βασικές διαδικασίες που λαμβάνουν χώρα κατά την δημιουργία του αυτο-οργανώμενου χάρτη:

1. Ανταγωνισμός. Για κάθε πρότυπο εισαγωγής οι νευρώνες του δικτύου υπολογίζουν τις αντίστοιχες τιμές τους για μία συνάρτηση διάκρισης. Αυτή η συνάρτηση παρέχει την

βάση για τον ανταγωνισμό μεταξύ των νευρώνων. Ο νευρώνας με την μεγαλύτερη τιμή για την συνάρτηση αυτή ανακηρύσσεται νικητής.

2. Συνεργασία. Ο νικητής νευρώνας καθορίζει την θέση μίας τοπολογικής γειτονιάς διεγερμένων νευρώνων, παρέχοντας την βάση της συνεργασίας μεταξύ αυτών των γειτονικών νευρώνων.

3. Προσαρμογή των Συνάψεων. Ο τελευταίος αυτός μηχανισμός επιτρέπει στους διεγερμένους νευρώνες να αυξήσουν της ατομικές τους τιμές για την συνάρτηση διακριτοποίησης σε σχέση με το μοτίβο εισόδου μέσω κατάλληλων προσαρμογών στις τιμές των συναπτικών βαρών. Οι προσαρμογές γίνονται έτσι ώστε να ενισχυθεί η ανταπόκριση του νικητή νευρώνα σε ένα παρόμοιο πρότυπο εισόδου.

2.1.3 Η διαδικασία του Ανταγωνισμού

Έστω m η διάσταση του χώρου των δεδομένων και

$$\mathbf{x} = [x_1, x_2, \dots, x_m]^T \quad (2.1)$$

ένα διάνυσμα επιλεγμένο με τυχαίο τρόπο από τον χώρο εισόδου.

Το διάνυσμα που αντιστοιχεί στο συναπτικό βάρος κάθε νευρώνα του δικτύου είναι ίσης διάστασης με τον χώρο των δεδομένων. Έτσι για τον νευρώνα j έχουμε

$$\mathbf{w}_j = [w_{j1}, w_{j2}, \dots, w_{jm}]^T, \quad j = 1, 2, \dots, l \quad (2.2)$$

όπου l είναι το σύνολο του αριθμού των νευρώνων του δικτύου.

Για να εντοπίσουμε τον νικητή νευρώνα χρησιμοποιούμε τον δείκτη

$$i(\mathbf{x}) = \arg \min_j \|\mathbf{x} - \mathbf{w}_j\|, \quad j = 1, 2, \dots, l \quad (2.3)$$

ο οποίος συγκεντρώνει όλη την ουσία του ανταγωνισμού μεταξύ των νευρώνων, δηλαδή ο νευρώνας i που ικανοποιεί την (2.3) ονομάζεται *πιο-ταιριαστός (best matching unit)* ή *νικητής νευρώνας* για το διάνυσμα εισόδου \mathbf{x}

Ένας συνεχής χώρος εισόδου των μοτίβων ενεργοποίησης αντιστοιχίζεται σε έναν διακριτό χώρο εξόδου που αποτελείται από νευρώνες μέσω μιας διαδικασίας ανταγωνισμού μεταξύ των νευρώνων του δικτύου.

2.1.4 Διαδικασία Συνεργασίας

Ο νικητής νευρώνας γίνεται το κέντρο μίας τοπολογικής γειτονιάς από νευρώνες που συνεργάζονται. Για να ορίσουμε μία γειτονιά η οποία είναι νευροβιολογικά σωστή μπορούμε να βασιστούμε σε στοιχεία που δείχνουν ότι υπάρχει πλευρική αλληλεπίδραση μεταξύ ενός συνόλου από διεγερμένους νευρώνες. Πιο συγκεκριμένα, ο νευρώνας που ενεργοποιείται έχει την τάση να διεγείρει περισσότερο τους άμεσα γειτονικούς του νευρώνες από αυτούς που βρίσκονται πιο μακριά. Αυτό μας οδηγεί να επιλέξουμε μία τοπολογική γειτονιά η οποία να φθίνει ομαλά με την πλευρική απόσταση. Έστω $h_{j,i}$ η τοπολογική γειτονιά με κέντρο τον νικητή νευρώνα i και ένα σύνολο j διεγερμένων νευρώνων, έστω $d_{i,j}$ η απόσταση μεταξύ του νικητή νευρώνα i και του διεγερμένου νευρώνα j . Με αυτά τα δεδομένα μπορούμε να υποθέσουμε ότι η τοπολογική γειτονιά είναι μία συνάρτηση της απόστασης $d_{i,j}$ η οποία ικανοποιεί δύο προϋποθέσεις:

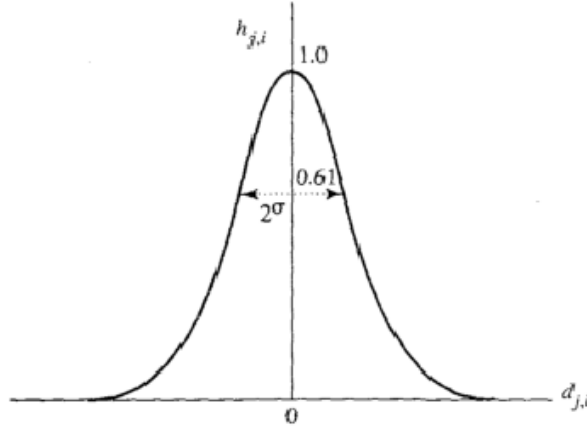
-Η $h_{j,i}$ είναι συμμετρική γύρω από το σημείο που παίρνει την μέγιστη τιμή της το οποίο βρίσκεται στο $d_{i,j} = 0$ δηλαδή στον νικητή νευρώνα i για τον οποίο η απόσταση είναι μηδενική.

-Η τιμή της συνάρτησης γειτονιάς $h_{j,i}$ μειώνεται μονοτονικά σε σχέση με την απόσταση $d_{i,j}$ τείνοντας στο μηδέν για $d_{i,j} \rightarrow \infty$, αυτή είναι μια απαραίτητη συνθήκη για την σύγκλιση.

Μία τυπική επιλογή η οποία ικανοποιεί αυτές της προϋποθέσεις είναι η Γκαουσιανή (*Gaussian*) συνάρτηση (Σχήμα 2.1)

$$h_{j,i(x)} = \exp\left(-\frac{d_{j,i}^2}{2\sigma^2}\right) \quad (2.4)$$

Όπου $d_{j,i}$ η απόσταση ανάμεσα στον νικητή νευρώνα i και τον διεγερμένο νευρώνα j . Η παράμετρος σ (διακύμανση) είναι το «αποτελεσματικό πλάτος» της γειτονιάς και μετράει τον βαθμό κατά τον οποίο οι γειτονικοί διεγερμένοι νευρώνες στον νικητή συμμετέχουν στην διαδικασία της μάθησης.



Σχήμα 2.1 Η Γκαουσιανή συνάρτηση γειτονιάς (Πηγή: Haykin, 1999).

Για να υπάρξει συνεργασία ανάμεσα στους γειτονικούς νευρώνες είναι αναγκαίο η συνάρτηση γειτονιάς να εξαρτάται από την απόσταση $d_{j,i}$ ανάμεσα στον νικητή νευρώνα i και τον διεγερμένο νευρώνα j στον χώρο εξόδου δηλαδή στο πλέγμα στο οποίο είναι διατεταγμένοι οι νευρώνες. Για την περίπτωση του μονοδιάστατου πλέγματος η απόσταση $d_{j,i}$ είναι ένας ακέραιος που ισούται με $|j-i|$, για την περίπτωση του δυσδιάστατου πλέγματος η απόσταση ορίζεται ως

$$d_{j,i}^2 = \|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i\|^2 \quad (2.5)$$

με \mathbf{r}_j δηλώνουμε το διάνυσμα θέσης του διεγερμένου νευρώνα j και με \mathbf{r}_i το διάνυσμα θέσης του νικητή νευρώνα i .

Ένα ακόμα μοναδικό χαρακτηριστικό του αλγορίθμου SOM είναι ότι το μέγεθος της συνάρτησης γειτονιάς μειώνεται με τον χρόνο, αυτό πραγματοποιείται με το να κάνουμε τη διακύμανση σ να μειώνεται ανάλογα με τον χρόνο. Μία συχνή επιλογή για την εξάρτηση του σ από τον διακριτό χρόνο n είναι η εκθετική μείωση όπως αυτή περιγράφεται από τους Ritter et al. (1992) και Obermayer et al. (1991)

$$\sigma(n) = \sigma_0 \exp\left(-\frac{n}{\tau_1}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.6)$$

σ_0 είναι η αρχική τιμή της παραμέτρου σ κατά την έναρξη του αλγορίθμου SOM και τ_1 είναι μία χρονική σταθερά. Συνεπώς μπορούμε να ξαναγράψουμε την συνάρτηση γειτονιάς σε μία μορφή που εξαρτάται από τον χρόνο n

$$h_{j,i(x)}(n) = \exp\left(-\frac{d_{j,i}^2}{2\sigma^2(n)}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.7)$$

όπου $\sigma(n)$ η διακύμανση όπως ορίζεται στην εξίσωση (2.6). Έτσι, καθώς ο χρόνος n αυξάνει, το $\sigma(n)$ μειώνεται εκθετικά και η τοπολογική γειτονιά συρρικνώνεται κατά αντίστοιχο τρόπο. Έτσι μπορούμε να αναφερόμαστε στην $h_{j,i(x)}(n)$ σαν την *συνάρτηση γειτονιάς*.

2.1.5 Διαδικασία Προσαρμογής

Η τελευταία διαδικασία είναι η προσαρμογή των συναπτικών βαρών κατά την διάρκεια του αυτο-οργανωμένου σχηματισμού του χάρτη χαρακτηριστικών. Για να υπάρξει αυτο-οργάνωση στο δίκτυο, το διάνυσμα του βάρους της σύναψης \mathbf{w}_j του νευρώνα j στο δίκτυο πρέπει να αλλάξει σε συνάρτηση με το διάνυσμα εισόδου \mathbf{x} . Για να διατυπώσουμε ένα κατάλληλο κανόνα για την ενημέρωση των συναπτικών βαρών στο αυτο-οργανωμένο σύστημα ξεκινάμε τροποποιώντας την υπόθεση του Hebb, προσθέτοντας σε αυτή έναν τον όρο $g(y_j)\mathbf{w}_j$ (*forgetting term*), όπου \mathbf{w}_j το διάνυσμα βάρους της σύναψης του νευρώνα j και $g(y_j)$ είναι μία θετική βαθμωτή συνάρτηση της ανταπόκρισης y_j . Η μοναδική προϋπόθεση που επιβάλλεται στην συνάρτηση $g(y_j)$ είναι ότι ο σταθερός όρος στο ανάπτυγμα της σειράς Taylor της $g(y_j)$ θα πρέπει να είναι ίσος με το μηδέν, έτσι μπορούμε να γράψουμε

$$g(y_j) = 0 \text{ για } y_j = 0 \quad (2.8)$$

Με βάση αυτή την συνάρτηση μπορούμε να εκφράσουμε την αλλαγή στο διάνυσμα βάρους του νευρώνα j του πλέγματος ως:

$$\Delta \mathbf{w}_j = \eta y_j \mathbf{x} - g(y_j) \mathbf{w}_j \quad (2.9)$$

όπου η είναι η *παράμετρος του ρυθμού μάθησης (learning-rate parameter)* του αλγορίθμου. Για να ικανοποιήσουμε την απαίτηση της (2.8) επιλέγουμε μία γραμμική συνάρτηση για $g(y_j)$:

$$g(y_j) = \eta y_j \quad (2.10)$$

Για να απλοποιήσουμε περαιτέρω την εξίσωση (2.9) θέτουμε

$$y_j = h_{j,i(x)} \quad (2.11)$$

Χρησιμοποιώντας τις (2.10) και (2.11) στην (2.9), έχουμε

$$\Delta \mathbf{w}_j = \eta h_{j,i(x)} (\mathbf{x} - \mathbf{w}_j) \quad (2.12)$$

Τέλος, χρησιμοποιώντας φορμαλισμό διακριτού-χρόνου, για το διάνυσμα βάρους $\mathbf{w}_j(n)$ της σύναψης του νευρώνα j την χρονική στιγμή n , η ενημερωμένη τιμή του διανύσματος βάρους $\mathbf{w}_j(n+1)$ την χρονική στιγμή $n+1$ ορίζεται από την εξίσωση (Kohonen, 1982; Ritter et al., 1992; Kohonen, 1997a):

$$\mathbf{w}_j(n+1) = \mathbf{w}_j(n) + \eta(n)h_{j,i(x)}(n)(\mathbf{x} - \mathbf{w}_j(n)) \quad (2.13)$$

η οποία εφαρμόζεται σε όλους του νευρώνες του πλέγματος που ανήκουν στην τοπολογική γειτονιά του νικητή νευρώνα i . Η εξίσωση (2.13) δρα μετακινώντας το διάνυσμα βάρους \mathbf{w}_i του νικητή νευρώνα i προς το διάνυσμα εισόδου \mathbf{x} . Έπειτα από επαναλαμβανόμενες παρουσιάσεις των δεδομένων του συνόλου εκπαίδευσης, τα διανύσματα βαρών των συνάψεων τείνουν να ακολουθήσουν την κατανομή των διανυσμάτων εισόδου λόγω της ενημέρωσης της τοπολογικής γειτονιάς. Ως εκ τούτου ο αλγόριθμος οδηγεί σε μια *τοπολογική διάταξη* του χάρτη των χαρακτηριστικών στον χώρο των διανυσμάτων εισόδου υπό την έννοια ότι νευρώνες που εφάπτονται μεταξύ τους θα τείνουν να έχουν παρόμοια διανύσματα βαρών των συνάψεων τους.

Όπως υποδεικνύεται από την εξίσωση (2.13) η παράμετρος του ρυθμού-μάθησης $\eta(n)$ μεταβάλλεται με τον χρόνο. Πιο συγκεκριμένα, θα πρέπει να ξεκινά από μία αρχική τιμή η_0 και έπειτα να μειώνεται σταδιακά καθώς αυξάνεται ο χρόνος n . Έτσι έχουμε

$$\eta(n) = \eta_0 \exp\left(-\frac{n}{\tau_2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.14)$$

όπου τ_2 είναι ακόμα μία σταθερά χρόνου του αλγορίθμου SOM. Η παράμετρος η φθίνει εκθετικά καθώς αυξάνεται ο χρόνος n .

2.1.6 Οι δύο φάσεις της Διαδικασίας Προσαρμογής: Διάταξη και Σύγκλιση

Ο αλγόριθμος SOM ξεκινώντας από μία κατάσταση πλήρους αταξίας οδηγεί βαθμιαία σε μία διατεταγμένη αναπαράσταση των προτύπων ενεργοποίησης που αντλούνται από τον χώρο των διανυσμάτων εισόδου. Μπορούμε να αναλύσουμε την προσαρμογή των βαρών του δικτύου όπως αυτή υπολογίζεται από την εξίσωση (2.13) σε δύο φάσεις: μία φάση διάταξης ή αυτο-οργάνωσης η οποία ακολουθείται από μία φάση σύγκλισης. Οι δύο αυτές φάσεις περιγράφονται από τον Kohonen (Kohonen, 1982, 1997):

1. *Φάση αυτο-οργάνωσης ή φάση διάταξης.* Σε αυτή την φάση της εκπαίδευσης του δικτύου λαμβάνει χώρα η τοπολογική διάταξη των διανυσμάτων βάρους. Η φάση της διάταξης συνήθως χρειάζεται περί τις 1000 επαναλήψεις του αλγορίθμου SOM.

- Η παράμετρος του ρυθμού μάθησης $\eta(n)$ θα πρέπει να ξεκινάει σε μια τιμή κοντά στο 0.1 και έπειτα να μειώνεται βαθμιαία αλλά να παραμένει πάνω από την τιμή 0.01. Συνεπώς για την εξίσωση (2.14) επιλέγουμε τις ακόλουθες τιμές:

$$\eta_0 = 0.1$$

$$\tau_2 = 1000$$

- Η συνάρτηση γειτονιάς $h_{j,i}(n)$ θα πρέπει αρχικά να περιλαμβάνει σχεδόν όλους τους νευρώνες του δικτύου με κέντρο τον νικητή νευρώνα i και να συρρικνώνεται αργά καθώς περνάει ο χρόνος. Πιο συγκεκριμένα κατά την διάρκεια της φάσης διάταξης, που μπορεί να απαιτεί 1000 ή και περισσότερες επαναλήψεις του αλγορίθμου, η $h_{j,i}(n)$ επιτρέπεται να μειωθεί σε μία μικρή τιμή λίγων γειτονικών νευρώνων γύρω από τον νικητή νευρώνα. Υποθέτοντας ότι χρησιμοποιούμε ένα δύο διαστάσεων χάρτη, θέτουμε ως αρχική τιμή της διακύμανσης της συνάρτησης γειτονιάς σ_0 το πλάτος διαμέρισης του πλέγματος στο οποίο βρίσκονται οι νευρώνες και αντίστοιχα την τιμή της σταθεράς χρόνου τ_1 στον τύπο της εξίσωσης (2.6) σαν:

$$\tau_1 = \frac{1000}{\log \sigma_0}$$

2. *Φάση σύγκλισης.* Η δεύτερη φάση της διαδικασίας προσαρμογής χρειάζεται για να ρυθμίσει με ακρίβεια την αντιστοίχιση των χαρακτηριστικών και έτσι να παρέχει μία ακριβή στατιστική ποσοτικοποίηση του χώρου των διανυσμάτων εισόδου. Κατά γενικό κανόνα, ο αριθμός των επαναλήψεων του αλγορίθμου σε αυτή την φάση πρέπει να είναι τουλάχιστον ίσος με 500 φορές τον αριθμό των νευρώνων του δικτύου.

- Για καλή στατιστική ακρίβεια, η παράμετρος του ρυθμού μάθησης $\eta(n)$ θα πρέπει να διατηρείται κατά την διάρκεια της φάσης σύγκλισης σε μικρή τιμή της τάξης του 0.01. Δεν θα πρέπει να επιτραπεί να μειωθεί στο μηδέν γιατί τότε το δίκτυο είναι πιθανό να ‘κολλήσει’ σε μία μετασταθή κατάσταση. Η μεταστάθης κατάσταση αντιστοιχεί σε μία διαμόρφωση του χάρτη με ένα τοπολογικό σφάλμα. Η εκθετική μείωση της εξίσωσης (2.14) εγγυάται έναντι της πιθανότητας δημιουργίας μετασταθών καταστάσεων.
- Η συνάρτηση γειτονιάς $h_{j,i(x)}$ θα πρέπει να περιέχει μόνο τους πολύ γειτονικούς νευρώνες στον νικητή, και τελικά να μειωθεί σε ένα ή μηδενικούς γείτονες νευρώνες.

2.1.7 Σύνοψη του αλγορίθμου Kohonen SOM

Τα βασικά μέρη και παράμετροι του αλγορίθμου είναι:

- Ένας συνεχής χώρος εισόδου από πρότυπα ενεργοποίησης τα οποία προκύπτουν σύμφωνα με μία συγκεκριμένη κατανομή πιθανότητας.
- Η τοπολογία του δικτύου με την μορφή ενός επιπέδου, πλέγματος από νευρώνες το οποίο ορίζει ένα διακριτό χώρο εξόδου.
- Μία συνάρτηση γειτονιάς $h_{j,i(\mathbf{x})}(n)$ η οποία μεταβάλλεται συναρτήσει του χρόνου και ορίζεται γύρω από έναν νικητή νευρώνα $i(\mathbf{x})$.
- Μία παράμετρο του ρυθμού εκμάθησης $\eta(n)$ η οποία έχει αρχική τιμή η_0 και μειώνεται ομαλά με τον χρόνο n , αλλά ποτέ δεν μηδενίζεται.

Για την συνάρτηση γειτονιάς και τον ρυθμό εκμάθησης χρησιμοποιούμε τις εξισώσεις (2.7) και (2.14).

1. *Προετοιμασία εκκίνησης* του αλγορίθμου. Επιλέγονται τυχαίες αρχικές τιμές για τα διανύσματα βάρους $\mathbf{w}_j(0)$. Ο μόνος περιοριστικός παράγοντας είναι ότι όλα τα $\mathbf{w}_j(0)$ πρέπει να είναι διαφορετικά για $j=1,2,\dots,l$, όπου l είναι ο αριθμός των νευρώνων στο πλέγμα.

2. *Δειγματοληψία*. Επιλέγεται ένα δείγμα \mathbf{x} από τον χώρο των εισόδων με μία συγκεκριμένη πιθανότητα. Το διάνυσμα \mathbf{x} αντιπροσωπεύει το πρότυπο ενεργοποίησης το οποίο εφαρμόζεται στο πλέγμα των νευρώνων. Η διάσταση του διανύσματος \mathbf{x} είναι ίση με m .

3. *Αντιστοίχιση Ομοιότητας*. Γίνεται εύρεση του πιο-ταιριαστού (νικητή) νευρώνα $i(\mathbf{x})$ την χρονική στιγμή n με κριτήριο ομοιότητας την ελάχιστη Ευκλείδεια απόσταση:

$$i(\mathbf{x}) = \arg \min_j \|\mathbf{x}(n) - \mathbf{w}_j\|, \quad j = 1, 2, \dots, l$$

4. *Ενημέρωση*. Γίνεται προσαρμογή των διανυσμάτων βάρους των συνάψεων όλων των νευρώνων σύμφωνα με την

$$\mathbf{w}_j(n+1) = \mathbf{w}_j(n) + \eta(n)h_{j,i(\mathbf{x})}(n)(\mathbf{x}(n) - \mathbf{w}_j(n))$$

όπου $\eta(n)$ είναι ο ρυθμός εκμάθησης και $h_{j,i(\mathbf{x})}(n)$ η συνάρτηση γειτονιάς με κέντρο τον νικητή νευρώνα $i(\mathbf{x})$

5. *Επανάληψη*. Συνέχεια από το βήμα 2 μέχρι να μην παρατηρούνται αλλαγές στην «απεικόνιση» των χαρακτηριστικών (feature map).

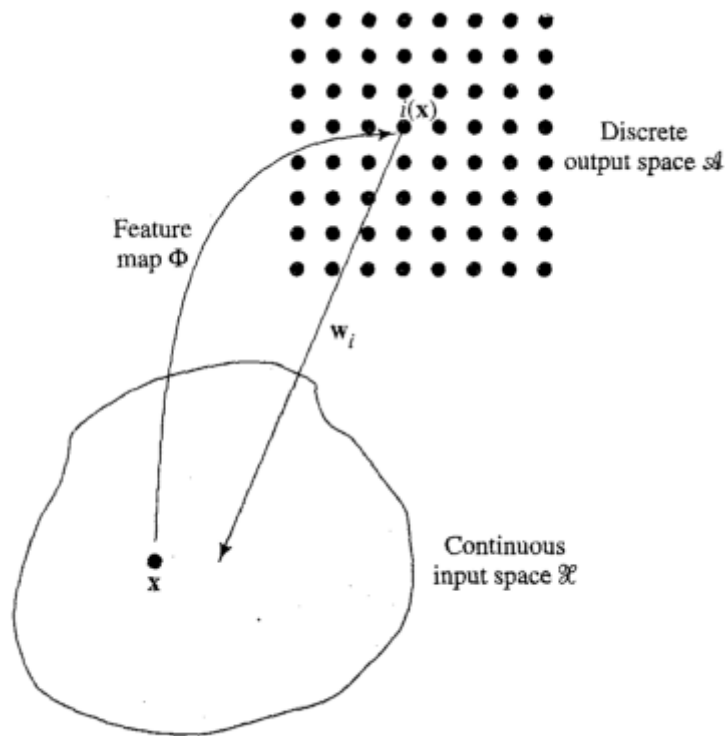
2.1.8 Ιδιότητες της απεικόνισης χαρακτηριστικών

Ο απεικόνιση των χαρακτηριστικών που υπολογίζεται από τον αλγόριθμο SOM παρουσιάζει σημαντικά στατιστικά χαρακτηριστικά του χώρου εισόδου, έχοντας την τάση να αναπαριστά την συνάρτηση πιθανότητας $p(x)$ των δεδομένων εισόδου.

Έστω \mathcal{X} ένας χωρικά συνεχής χώρος εισόδου (δεδομένων), η τοπολογία του οποίου ορίζεται από την μετρική σχέση μεταξύ των διανυσμάτων $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$. Έστω \mathcal{A} ένας χωρικά διακριτός χώρος εξόδου η τοπολογία του οποίου προκύπτει από την τοποθέτηση των νευρώνων σαν τους υπολογιστικούς κόμβους ενός πλέγματος. Έστω Φ ένας γραμμικός μετασχηματισμός που ονομάζουμε απεικόνιση των χαρακτηριστικών, ο οποίος αντιστοιχεί τον χώρο εισόδου \mathcal{X} στον χώρο εξόδου \mathcal{A} όπως φαίνεται από την εξ. (2.15):

$$\Phi: \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{A} \quad (2.15)$$

Η εξίσωση (2.15) μπορεί να θεωρηθεί ως μία αφηρημένη μορφή της εξίσωσης (2.3) που ορίζει την θέση του νικητή νευρώνα $i(\mathbf{x})$ που προκύπτει από την απόκριση του δικτύου στο διάνυσμα εισόδου \mathbf{x} .



Σχήμα 2.2 Παρουσίαση της σχέσης μεταξύ της απεικόνισης των χαρακτηριστικών Φ και του διανύσματος βάρους w_i του νικητή νευρώνα i (Πηγή: Haykin, 1999).

Δεδομένου ενός διανύσματος εισόδου \mathbf{x} ο αλγόριθμος SOM προχωρά πρώτα αναγνωρίζοντας τον πιο-ταιριαστό ή νικητή νευρώνα $i(\mathbf{x})$ στον χώρο εξόδου \mathcal{A} , σύμφωνα με την απεικόνιση

Φ . Το διάνυσμα βάρους της σύναψης w_i του νευρώνα $i(\mathbf{x})$ μπορεί να θεωρηθεί σαν ένας δείκτης για αυτόν τον νευρώνα στον χώρο εισόδου \mathcal{X} , δηλαδή τα στοιχεία του διανύσματος w_i μπορούν να θεωρηθούν ως οι συντεταγμένες της εικόνας του νευρώνα i προβαλλόμενη στον χώρο εισόδου.

Η απεικόνιση Φ έχει τις ακόλουθες σημαντικές ιδιότητες (Haykin, 1999):

Ιδιότητα 1. Προσέγγιση του Χώρου Εισόδου. Η απεικόνιση Φ η οποία αντιπροσωπεύεται από το σύνολο των διανυσμάτων βάρους των συνάψεων $\{w_j\}$ στον χώρο εξόδου \mathcal{A} παρέχει μία καλή προσέγγιση του χώρου εισόδου \mathcal{X} .

Ιδιότητα 2. Τοπολογική Διάταξη. Η απεικόνιση Φ είναι τοπολογικά διατεταγμένη υπό την έννοια ότι η θέση ενός νευρώνα στο πλέγμα ανταποκρίνεται σε ένα συγκεκριμένο τομέα των προτύπων εισόδου.

Ιδιότητα 3. Αντιστοιχία Πυκνότητας. Η απεικόνιση Φ εκφράζει μεταβολές στα στατιστικά χαρακτηριστικά της κατανομής της εισόδου: περιοχές του χώρου \mathcal{X} από όπου τα διανύσματα δείγματα \mathbf{x} εξάγονται με μεγάλη πιθανότητα εμφάνισης αντιστοιχούνται σε μεγαλύτερους τομείς του χώρου εξόδου \mathcal{A} και συνεπώς με μεγαλύτερη διακριτική ικανότητα από περιοχές του \mathcal{X} από όπου τα διανύσματα δείγματα \mathbf{x} εξάγονται με μικρή πιθανότητα εμφάνισης.

Ιδιότητα 4. Επιλογή χαρακτηριστικού. Έστω δεδομένα από τον χώρο εισόδου που ακολουθούν μία μη γραμμική κατανομή. Ο αυτο-οργανωμένος χάρτης είναι ικανός να επιλέξει ένα σύνολο από βέλτιστα χαρακτηριστικά για να προσεγγίσει την υποκείμενη κατανομή.

2.1.9 Η μέθοδος οπτικοποίησης του TNA KSOM, U-matrix

Ο πίνακας U-matrix (unified distance matrix) είναι μια απεικόνιση του SOM η οποία οπτικοποιεί τις αποστάσεις ανάμεσα στους νευρώνες. Η απόσταση ανάμεσα στους εφαπτόμενους νευρώνες υπολογίζεται και παρουσιάζεται με διαφορετικό χρωματισμό ανάμεσα στους γειτονικούς κόμβους. Ο σκούρος χρωματισμός αντιστοιχεί σε μεγάλη απόσταση και συνεπώς ένα κενό ανάμεσα στα διανύσματα βάρους. Ο ανοιχτός χρωματισμός αντιστοιχεί σε μικρή απόσταση και υποδηλώνει ότι τα διανύσματα βάρους είναι κοντά μεταξύ τους σε αυτή την περιοχή.

2.2 Περιγραφή των Δεδομένων της Εργασίας και Προκαταρκτική Στατιστική Ανάλυση

2.2.1 Σύνολα δεδομένων για τον έλεγχο της σωστής λειτουργίας του εργαλείου

Ο έλεγχος για την ορθή λειτουργία του αλγορίθμου έγινε με την βοήθεια 2 συνόλων δεδομένων από τα οποία το πρώτο χρησιμοποιείται ευρέως για την αξιολόγηση αλγορίθμων ταξινόμησης ενώ με το δεύτερο γίνεται σαφές πως ξεκινώντας από μία αρχικά τυχαία κατάσταση μέσω του αλγορίθμου KSOM προκύπτει ένας διατεταγμένος χάρτης χαρακτηριστικών. Πρόκειται για τα σύνολα Fisher's Iris flower (Fisher, 1936) και χρωματικών τιμών RGB.

Το σύνολο δεδομένων Fisher's Iris flower

Το σύνολο δεδομένων Fisher's Iris flower Dataset είναι ένα σύνολο δεδομένων πολλών παραμέτρων το οποίο προτάθηκε από τον Sir Roland Aylmer Fisher (1936) ως ένα παράδειγμα διακριτικής ανάλυσης, οι μετρήσεις έγιναν από τον Edgar Anderson στην χερσόνησο Gaspe του Καναδά. Το σύνολο αποτελείται από 50 δείγματα για καθένα από τα τρία είδη του φυτού Iris, τα *Iris setosa*, *Iris virginica* και *Iris versicolor*. Τέσσερα είναι τα χαρακτηριστικά τα οποία μετρήθηκαν, το μήκος και πλάτος του πέταλου και του σέπαλου του άνθους σε εκατοστά. Μία από τις κλάσεις είναι γραμμικώς διαχωριζόμενη από τις άλλες δύο, ενώ οι υπόλοιπες όχι.

Με βάση τον συνδυασμό των τεσσάρων αυτών χαρακτηριστικών ο Fisher ανέπτυξε ένα γραμμικό μοντέλο για να διαχωρίσει τα είδη μεταξύ τους. Με βάση το μοντέλο αυτό το σύνολο δεδομένων Iris έγινε μία τυπική περίπτωση έλεγχου για διάφορες τεχνικές ταξινόμησης στη μηχανική μάθηση (machine learning).

Πληροφορίες για τα χαρακτηριστικά του συνόλου δεδομένου Iris

1. Μήκος σέπαλου σε εκατοστά
2. Πλάτος σέπαλου σε εκατοστά
3. Μήκος πετάλου σε εκατοστά
4. Πλάτος πετάλου σε εκατοστά
5. Κλάση: Iris Setosa
Iris Versicolor
Iris Virginica

	Ελάχιστο	Μέγιστο	Μέση τιμή	Τυπική Απόκλιση
Μήκος σέπαλου	4.3	7.9	5.84	0.83
Πλάτος σέπαλου	2.0	4.4	3.05	0.43
Μήκος πέταλου	1.0	6.9	3.76	1.76
Πλάτος πέταλου	0.1	2.5	1.20	0.76

Έγινε εκπαίδευση του δικτύου με το Iris dataset και κατόπιν σύγκριση του αποτελέσματος με παραδείγματα τις βιβλιογραφίας (Fincke et al., 2008).

2.2.3 Σύνολο δεδομένων της μορφής RGB

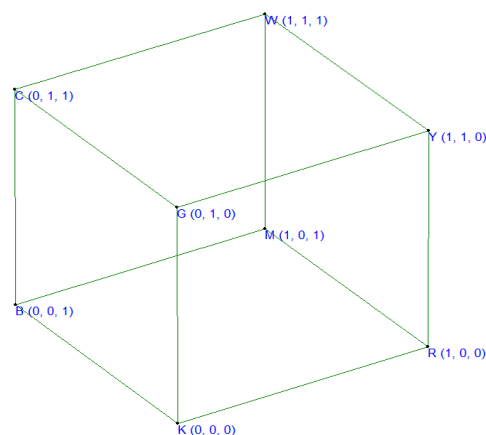
Το δεύτερο σύνολο δεδομένων που χρησιμοποιήθηκε είναι ένα σύνολο από διανύσματα 3^{ov} διαστάσεων με τιμές στο διάστημα 0, 1. Ένα χρώμα μπορεί να αναπαρασταθεί ως μία τριάδα αριθμών που παίρνουν τιμές από μηδέν μέχρι ένα και ο καθένας αντιστοιχεί σε ένα από τα 3 βασικά χρώματα. Ο πρώτος στο κόκκινο (R), ο δεύτερος στο πράσινο (G) και ο τρίτος στο μπλε (B). Με αυτό τον τρόπο μπορούμε να συγκρίνουμε εύκολα τις αρχικές τιμές του πίνακα των βαρών με τις τελικές.

Ένα χρώμα μπορούμε να το θεωρήσουμε σαν ένα πολυ-παραμετρικό «αντικείμενο» το οποίο μπορεί να γίνει εύκολα αντιληπτό από τον άνθρωπο και έτσι μπορούμε να το χρησιμοποιούμε για να παρουσιάσουμε σχέσεις μεταξύ των δεδομένων καθώς και διεργασίες που λαμβάνουν χώρα κατά την εκπαίδευση ενός νευρωνικού δικτύου.

Σύνολο δεδομένων για οχτώ χρώματα

Το σύνολο αποτελείται από οχτώ διανύσματα, έξι για τα χρώματα, ένα για το λευκό και ένα για το μαύρο.

Color	Red	Green	Blue
K (Μαύρο)	0	0	0
R (Κόκκινο)	1	0	0
G (Πράσινο)	0	1	0
B (Μπλε)	0	0	1
Υ (Κίτρινο)	1	1	0
M (Ματζέντα)	1	0	1
C (Κυανό)	0	1	1
W (Λευκό)	1	1	1



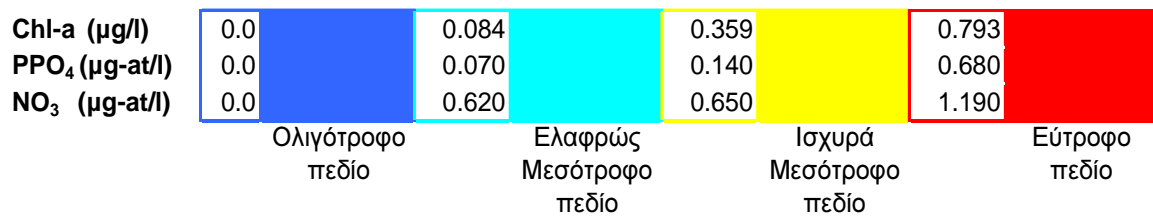
Σχήμα 2.3 Πίνακας δεδομένων και γραφική τους απεικόνιση (κύβος RGB).

2.2.2 Δεδομένα πεδίου

Τα δεδομένα πεδίου που χρησιμοποιήθηκαν σε αυτή την πτυχιακή εργασία προέρχονται από δειγματοληψίες που διεξήχθησαν στην περιοχή του Στενού της Μυτιλήνης το καλοκαίρι του 1994 σε 34 σταθμούς από τον Ιούλιο έως το Σεπτέμβριο. Συγκεκριμένα, περιλαμβάνουν τις διαμέσους των συγκεντρώσεων χλωροφύλλης-α, φωσφορικών και νιτρικών αλάτων τριών δειγματοληψιών. Οι τρεις αυτές παράμετροι είναι αντιπροσωπευτικές του θαλάσσιου ευτροφισμού (Κίτσιου, 1997).

Σταθμοί δειγματοληψίας	Χλωροφύλλη α ($\mu\text{g/L}$)	PO ₄ ($\mu\text{g-at/L}$)	NO ₃ ($\mu\text{g-at/L}$)
M5	0.20	0.159	2.385
M6	0.20	0.110	0.110
M8	0.10	0.328	2.870
M9	0.20	0.586	2.480
M11	0.10	0.080	1.650
M12	0.20	0.132	2.060
M15	0.10	0.229	1.830
M19	0.10	0.167	2.630
M40	0.30	0.009	0.080
M41	0.20	0.028	0.760
M42	0.20	0.027	0.510
M13	0.20	0.195	3.220
M14	0.20	0.326	3.380
M16	1.40	0.215	3.280
M17	0.50	0.148	1.910
M18	0.10	0.125	4.360
M20	3.00	0.755	3.080
M21	0.50	0.287	4.750
M22	0.30	0.852	3.730
M23	0.30	0.215	3.010
M24	0.40	0.236	1.210
M25	0.20	0.173	1.990
M26	0.20	0.125	0.760
M27	0.30	0.409	2.830
M29	0.10	0.059	0.740
M30	0.20	0.568	2.340
M31	0.30	0.103	1.810
M32	0.20	0.076	2.720
M33	0.10	0.169	0.805
M34	0.20	0.125	1.400
M35	0.10	0.286	0.695
M36	0.30	0.146	1.600
M37	0.20	0.146	1.960
M38	0.00	0.201	1.080

Σε μελέτες ευτροφισμού κρίνεται απαραίτητη η κατηγοριοποίηση των τιμών των παραμέτρων σύμφωνα με μία κλίμακα ευτροφισμού (Σχήμα 2.4).



Σχήμα 2.4 Κλίμακα ευτροφισμού (Kitsiou et al. 2002; Michelakaki and Kistiou, 2005).

Από την κλίμακα αυτή δημιουργούμε τους αντιπροσωπευτικούς σταθμούς τριών επιπέδων ευτροφισμού Εύτροφο (EUT), Μεσότροφο (MES) και Ολιγότροφο (OLI) :

EUT: Εύτροφο πεδίο με τιμές chl-a=1.9 μg/l, PO₄=0.852 μg-at/l, NO₃=2.90 μg-at/l. Οι τιμές επιλέχθηκαν ίσες με την διάμεσο μεταξύ του πάνω ορίου της κλίμακας ευτροφισμού και την αντίστοιχη μέγιστη τιμή της κάθε παραμέτρου από τα δεδομένα πεδίου.

MES: Μεσότροφο πεδίο με τιμές chl-a=0.359 μg/l, PO₄=0.14 μg-at/l, NO₃=0.65 μg-at/l. Οι τιμές επιλέχθηκαν ίσες με το όριο μεταξύ Ελαφρώς Μεσότροφου και Ισχυρά Μεσότροφου πεδίου για τις αντίστοιχες παραμέτρους.

OLI: Ολιγότροφο πεδίο με τιμές chl-a=0.042 μg/l, PO₄=0.035 μg-at/l, NO₃=0.31 μg-at/l. Οι τιμές επιλέχθηκαν ίσες με την διάμεσο μεταξύ του κάτω (μηδενικού) και του πάνω ορίου του Ολιγότροφου πεδίου της κλίμακας ευτροφισμού.

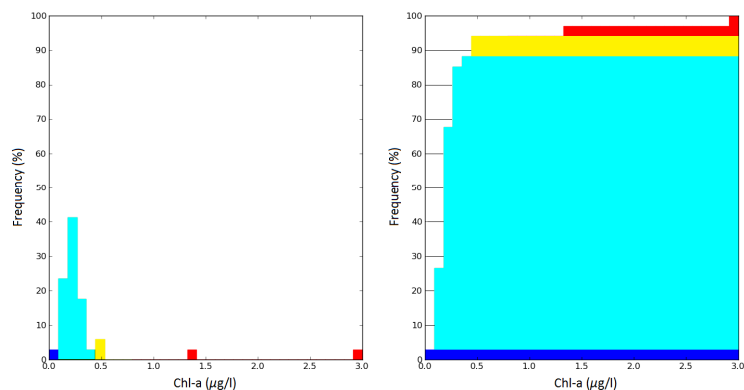
Οι σταθμοί αυτοί χρησιμοποιούνται για να χαρακτηρίσουμε τις ομάδες που προκύπτουν από τις μη επιβλεπόμενες μεθόδους ανάλυσης που χρησιμοποιήθηκαν (enviSOM, ανάλυση κατά συστάδες).

Στατιστικά χαρακτηριστικά των δεδομένων πεδίου

Χλωροφύλλη α (μg/l)

Πίνακας 2.1 Στατιστικά χαρακτηριστικά των δεδομένων συγκέντρωσης της χλωροφύλλης-α

Ελάχιστη τιμή	0,0000
Μέγιστη τιμή	3,0000
Μέση τιμή	0,3294
Διάμεσος	0,2000
Τυπική απόκλιση	0,5176



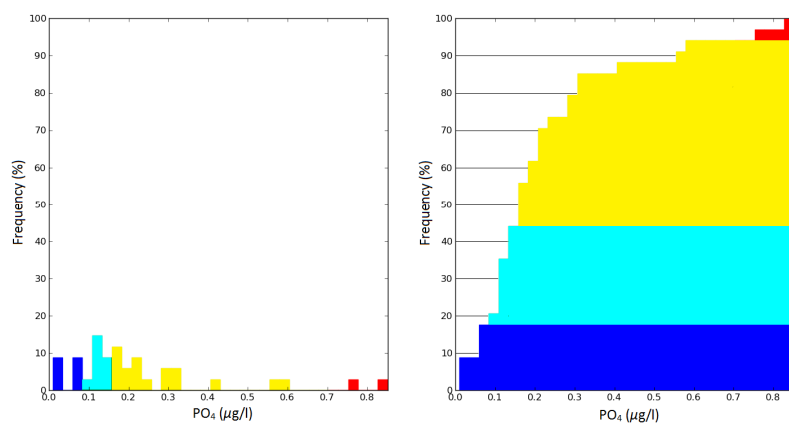
Σχήμα 2.5 Ιστόγραμμα συχνοτήτων και αθροιστικό ιστόγραμμα συχνοτήτων των τιμών συγκέντρωσης της χλωροφύλλης-α.

Από τα γραφήματα του σχήματος 2.5 προκύπτει ότι το μεγαλύτερο ποσοστό των τιμών της χλωροφύλλης-α βρίσκεται στο Ελαφρώς Μεσότροφο πεδίο.

Φωσφορικά (µg-at/l)

Πίνακας 2.2 Στατιστικά χαρακτηριστικά των δεδομένων συγκέντρωσης των φωσφορικών.

Ελάχιστη τιμή	0,0090
Μέγιστη τιμή	0,8520
Μέση τιμή	0,2293
Διάμεσος	0,1680
Τυπική απόκλιση	0,1940



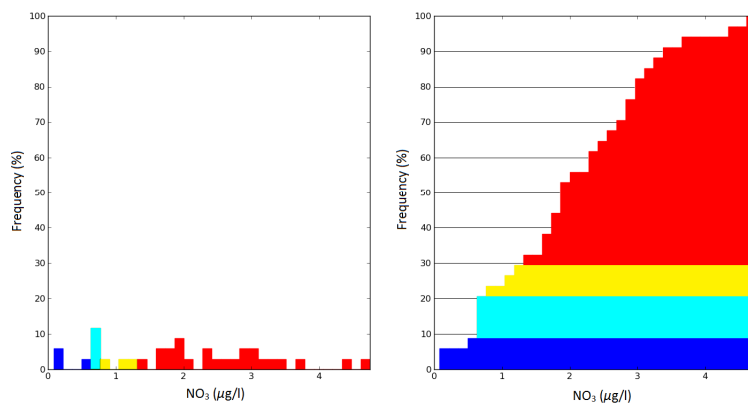
Σχήμα 2.6 Ιστόγραμμα συχνοτήτων και αθροιστικό ιστόγραμμα συχνοτήτων των τιμών ης συγκέντρωσης των φωσφορικών.

Από τα γραφήματα τους σχήματος 2.6 προκύπτει ότι το μεγαλύτερο ποσοστό των τιμών των φωσφορικών βρίσκεται στο Ισχυρά Μεσότροφο πεδίο.

Νιτρικά (μg-at/l)

Πίνακας 2.3 Στατιστικά χαρακτηριστικά των δεδομένων συγκέντρωσης των νιτρικών.

Ελάχιστη τιμή	0,0800
Μέγιστη τιμή	4,7500
Μέση τιμή	2,0596
Διάμεσος	1,9750
Τυπική απόκλιση	1,1573



Σχήμα 2.7 Ιστόγραμμα συχνοτήτων και αθροιστικό ιστόγραμμα συχνοτήτων των τιμών της συγκέντρωσης των νιτρικών.

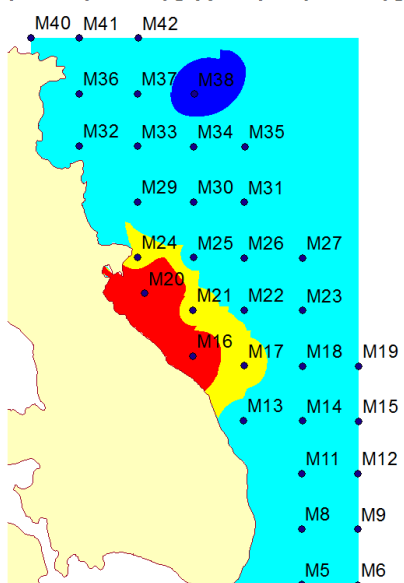
Από τα γραφήματα του σχήματος 2.7 προκύπτει ότι το μεγαλύτερο ποσοστό των τιμών των νιτρικών βρίσκεται στο Εύτροφο πεδίο.

Από την παραπάνω αρχική στατιστική ανάλυση των δεδομένων προκύπτει ότι οι σταθμοί αντιστοιχούν και στα τρία επίπεδα ευτροφισμού με μεγαλύτερο ποσοστό στο Μεσότροφο επίπεδο.

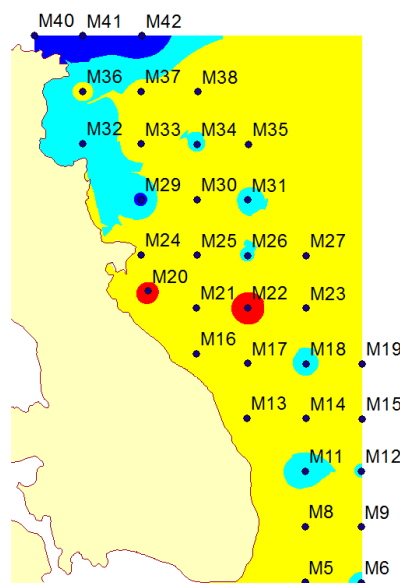
Χωρικές κατανομές των παραμέτρων

Στα δεδομένα χλωροφύλλης-*a*, φωσφορικών και νιτρικών που μετρήθηκαν στους σταθμούς δειγματοληψίας, εφαρμόστηκε η μέθοδος παρεμβολής της Αντιστρόφου Βαρόνουςας Απόστασης (Inverse Distance Weighting, IDW) και προέκυψαν οι παρακάτω θεματικοί χάρτες .

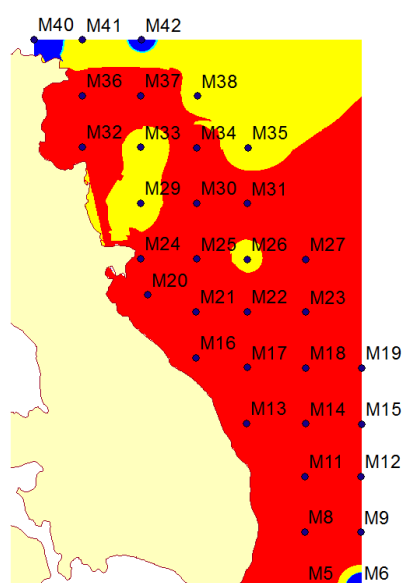
Χωρική κατανομή συγκέντρωσης χλωροφύλλης-*a*



Χωρική κατανομή συγκέντρωσης φωσφορικών

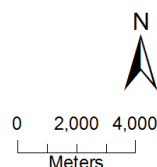


Χωρική κατανομή συγκέντρωσης νιτρικών



Legend

- Ολιγότροφο πεδίο
- Ελαφρώς Μεσότροφο πεδίο
- Ισχυρά Μεσότροφο πεδίο
- Εύτροφο πεδίο



Σχήμα 2.8 Θεματικοί χάρτες της χωρικής κατανομής των τριών παραμέτρων (χλωροφύλλης-*a*, φωσφορικών και νιτρικών) κατηγοριοποιημένοι σύμφωνα με την κλίμακα ευτροφισμού (σχήμα 2.4).

2.3 Μέθοδοι πολυδιάστατης στατιστικής ανάλυσης - Ανάλυση κατά Συστάδες (Cluster Analysis)

Για την αξιολόγηση των αποτελεσμάτων του προγράμματος enviSOM έγινε ανάλυση των ίδιων δεδομένων με την μέθοδο ανάλυσης κατά συστάδες.

Η Ανάλυση κατά Συστάδες ή ομαδοποίηση είναι μία μη επιβλεπόμενη τεχνική στατιστικής ανάλυσης δεδομένων. Λειτουργεί με τον διαχωρισμό ενός συνόλου από παρατηρήσεις (μετρήσεις) σε υποσύνολα (clusters). Οι παρατηρήσεις που ανήκουν στο ίδιο υποσύνολο είναι όμοιες μεταξύ τους σύμφωνα με κάποιο μέτρο ομοιότητας. Το τελικό προϊόν είναι ένα δενδρόγραμμα που παρουσιάζει τις σχέσεις των παρατηρήσεων. Η επιλογή του μέτρου ομοιότητας καθώς και του αλγορίθμου ομαδοποίησης είναι υποκειμενική και μπορεί να εισάγει διαφόρους βαθμούς πόλωσης (bias) στο αποτέλεσμα. Από την βιβλιογραφία επιλέχθηκε η μέθοδος του Ward σαν η πιο κατάλληλη για τον διαχωρισμό των σταθμών δειγματοληψίας που ανήκουν σε διαφορετικό επίπεδο ευτροφισμού (Kitsiou and Karydis, 2011).

2.4 Μέθοδος κατηγοριοποίησης K-means

Η μέθοδος κατηγοριοποίησης K-means ανήκει στις μεθόδους ανάλυσης κατά συστάδες και έχει ως σκοπό την κατηγοριοποίηση n παρατηρήσεων σε k ομάδες (clusters) στις οποίες κάθε μία παρατήρηση ανήκει στην ομάδα με την κοντινότερη σε αυτή μέση τιμή. Στο εργαλείο enviSOM δίνεται η δυνατότητα να εφαρμοστεί η μέθοδος K-means στα διανύσματα βάρους που έχουν προκύψει από την εκπαίδευση του αλγορίθμου (Pandit et al., 2010) σαν μια πρώτη κατηγοριοποίηση των νευρώνων για να βοηθήσει στην ανάλυση των δεδομένων και την τελική επιλογή των κλάσεων.

2.5 Εργαλεία – Λογισμικό

Στο πλαίσιο της πτυχιακής εργασίας αναπτύχθηκε ειδικό λογισμικό εργαλείο στη γλώσσα προγραμματισμού Python (έκδοση 2.6.5). Η γλώσσα προγραμματισμού Python είναι μια γενικής φύσης, υψηλού επιπέδου γλώσσα η οποία έχει ως φιλοσοφία την απλή και κατανοητή σύνταξη. Η Python ανήκει στις interpreted γλώσσες, ο πηγαίος κώδικας μεταφράζεται από ένα «ειδικό» πρόγραμμα, τον διερμηνέα (interpreter), σε μια περισσότερο αποδοτική μορφή (κώδικα) τον οποίο εκτελεί αμέσως. Η όλη χρήση του interpreter θυμίζει την shell του UNIX. Η χρήση του interpreter αυξάνει την ταχύτητα και ευελιξία στον προγραμματισμό καθώς μειώνει τον χρόνο του αντιστοίχου κύκλου developing, compiling, debugging άλλων

γλωσσών όπως η C. Η βασική βιβλιοθήκη της Python είναι εκτενής και περιλαμβάνει ρουτίνες για μαθηματικά, διαχείριση εικόνων κ.α.

Για την ανάπτυξη της εφαρμογής σε αυτή την πτυχιακή εργασία έγινε χρήση ειδικευμένων βιβλιοθηκών (modules). Συγκεκριμένα, χρησιμοποιήθηκε η βιβλιοθήκη numpy για αριθμητικά και διαχείριση πινάκων, η matplotlib για την παραγωγή γραφημάτων και της enthought TraitsUI για την δημιουργία interface οι οποίες περιέχονται στο «πακέτο» της Python(x,y).

Για την εφαρμογή της μεθόδου της ανάλυσης κατά συστάδες καθώς και για τα γραφηματά τους χρησιμοποιήθηκε το διαθέσιμο δωρεάν πακέτο PAST (Hammer et al. 2001) το οποίο είναι ένα εκτενές αλλά απλό στη χρήση λογισμικό που ενσωματώνει την εισαγωγή δεδομένων με μορφή πινάκων και τη δυνατότητα εξαγωγής πολυμεταβλητών στατιστικών, προσαρμογή καμπυλών, ανάλυσης χρονοσειρών και παραγωγή γραφημάτων.

3 Αποτελέσματα

3.1 Περιγραφή Αποτελεσμάτων

Τα αποτελέσματα της πτυχιακής εργασίας περιλαμβάνουν το εργαλείο ενviSOM που αναπτύχθηκε και τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή του σε διάφορα σετ δεδομένων, για την εκτίμηση των επιπέδων ευτροφισμού σε μία παράκτια περιοχή.

Η εφαρμογή του προγράμματος ενviSOM χωρίζεται σε τέσσερις φάσεις.

Πρώτα γίνεται η εισαγωγή του αρχείου δεδομένων στο πρόγραμμα και η ρύθμιση των παραμέτρων εκπαίδευσης του νευρωνικού δικτύου KSOM.

Δεύτερον, γίνεται η εκπαίδευση του νευρωνικού και παρουσίαση των γραφημάτων U-matrix στα οποία γίνονται εμφανείς οι δομές που υπάρχουν στα δεδομένα και οι ομάδες που αναγνωρίζει ο αλγόριθμος σε αυτά (clustering).

Τρίτον, γίνεται η δημιουργία του κανόνα ομαδοποίησης με την ανάλυση των γραφημάτων U-matrix. Αναγνωρίζονται και ταυτοποιούνται οι ομάδες αντιστοιχίζοντας τα ονόματα (labels) που τους δίνονται με τους νευρώνες που ανήκουν σε αυτές (classification). Αυτή η αντιστοίχιση μπορεί να γίνει αυτόματα μέσω του αλγόριθμου K-means ή χειροκίνητα από τον χρήστη σύμφωνα με την ερμηνεία και ανάλυση του U-matrix.

Τέταρτον, ο κανόνας ομαδοποίησης εφαρμόζεται στα «άγνωστα» διανύσματα που προκύπτουν από την υπέρθεση των θεματικών χαρτών. Η πληροφορία από τους θεματικούς χάρτες συντίθεται μέσω του αλγορίθμου KSOM και δημιουργείται ο τελικός χάρτης που παρουσιάζει την χωρική κατανομή του ευτροφισμού. Βασική προϋπόθεση είναι οι θεματικοί χάρτες να έχουν τα ίδια χαρακτηριστικά (μέγεθος κανάβου και κελιού), ώστε να είναι δυνατή η υπέρθεση τους. Επίσης, η υπέρθεση να γίνει με την ίδια σειρά για κάθε παράμετρο όπως αυτές βρίσκονται στα δεδομένα εκπαίδευσης, π.χ στη παρούσα πτυχιακή τα διανύσματα των σταθμών έχουν την εξής δομή:

[συγκέντρωση χλωροφύλλης-α, συγκέντρωση φωσφορικών, συγκέντρωση νιτρικών]

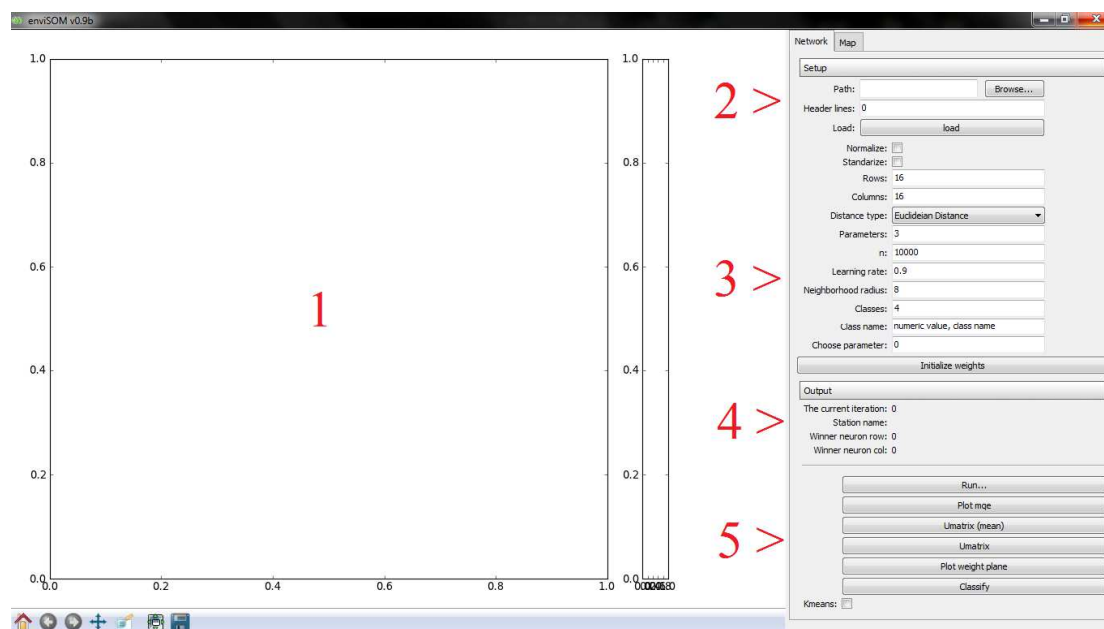
και αντίστοιχα για τους θεματικούς χάρτες

[χωρ. κατανομή χλωροφύλλης-α, χωρ. κατανομή φωσφορικών, χωρ. κατανομή νιτρικών] .

3.2 Το Εργαλείο ενviSOM, Περιγραφή και Λειτουργία

Το εργαλείο ενviSOM είναι μια διεπιφάνεια για την εύκολη εφαρμογή του αλγορίθμου KSOM σε περιβαλλοντικά δεδομένα, που παρέχει τη δυνατότητα συνδυασμού πολυδιάστατων σετ δεδομένων και απεικόνισης τους σε ένα διδιάστατο χάρτη στον οποίο είναι ευκρινείς οι σχέσεις των δεδομένων.

Περιοχή 1: Στο μέρος αυτό της διεπιφάνειας (interface) παρουσιάζονται τα διάφορα σχεδιαγράμματα και αποτελέσματα του νευρωνικού δικτύου. Πρακτικά είναι ένα figure object της matplotlib το οποίο το διαχειριζόμαστε με κατάλληλες ρουτίνες στον κώδικα για την παραγωγή γραφημάτων.



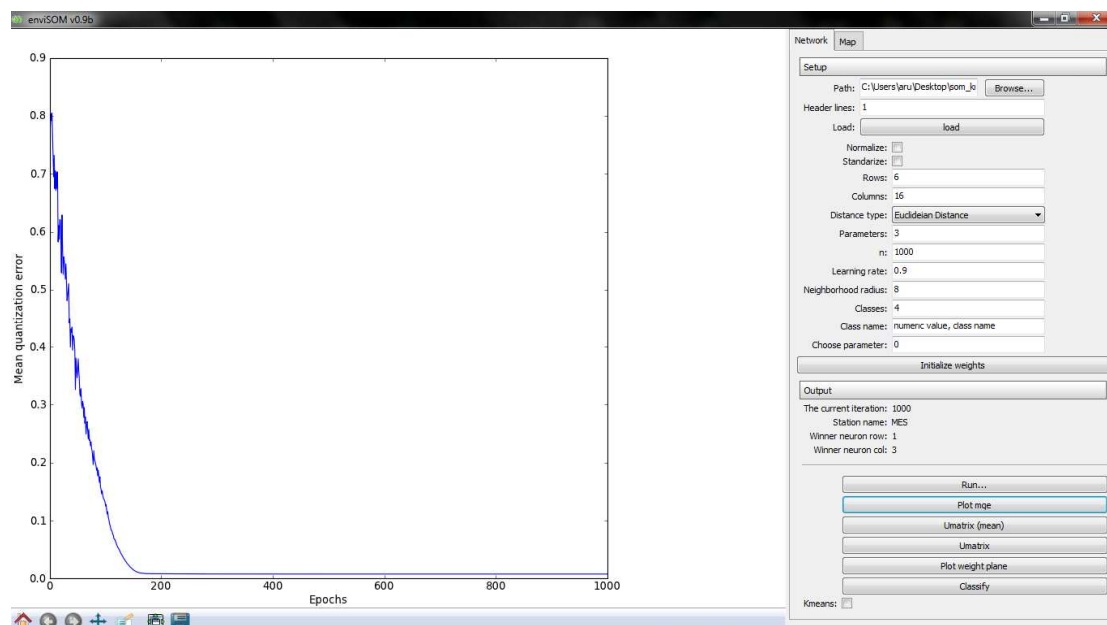
Εικόνα 3.1 Το βασικό παράθυρο της εφαρμογής.

Περιοχή 2: Γίνεται από τον χρήστη η εισαγωγή δεδομένων. Το κουμπί browse ανοίγει ένα διάλογο εξερεύνησης του συστήματος αρχείων από τον οποίο ο χρήστης μπορεί να περιηγηθεί στον φάκελο που περιέχει το αρχείο με τα δεδομένα που θέλει να εισάγει στο δίκτυο. Εναλλακτικά ο χρήστης μπορεί να πληκτρολογήσει την τοποθεσία του αρχείου στον χώρο εισαγωγής κειμένου με το όνομα Path. Τα αρχεία με τα δεδομένα μπορούν να περιέχουν στις πρώτες γραμμές πληροφορίες σχετικά με τα δεδομένα π.χ. ονόματα των στηλών κ.α. Ο χρήστης εισάγει στο πρόγραμμα τον αριθμό των γραμμών του header ώστε να είναι δυνατός ο διαχωρισμός τους από τα δεδομένα. Στη συνέχεια ο χρήστης μπορεί να επιλέξει αν τα δεδομένα θα εισαχθούν ως έχουν στο δίκτυο ή θα εισαχθούν κανονικοποιημένα. Δίνονται δύο επιλογές (i) normalize όπου κάθε παράμετρος διαιρείται με την μέγιστη τιμή της και (ii) standardize όπου από κάθε παράμετρο αφαιρείται η μέση τιμή της και διαιρείται με την τυπική απόκλισή της.

Περιοχή 3: Στο πεδίο αυτό γίνονται οι αρχικές ρυθμίσεις για το νευρωνικό δίκτυο. Στα πεδία Rows και Columns ο χρήστης εισάγει το μέγεθος του πλέγματος εξόδου σε αριθμό γραμμών και στηλών αντίστοιχα. Στο πεδίο Distance Type ο χρήστης επιλέγει το μέτρο ομοιότητας που

θα χρησιμοποιήσει ο αλγόριθμος του νευρωνικού δικτύου από μία λίστα, με προεπιλεγμένη την

Ευκλείδεια απόσταση. Στο πεδίο Parameters ο χρήστης εισάγει τον αριθμό παραμέτρων που περιέχονται στο αρχείο δεδομένων, δηλαδή την τιμή της διάστασης του χώρου των δεδομένων. Έπειτα στα πεδία n, Learning rate και Neighborhood radius ο χρήστης δίνει τον αριθμό των επαναλήψεων του αλγορίθμου και τις αρχικές τιμές της παραμέτρου, του ρυθμού εκπαίδευσης και του εύρους της συνάρτησης γειτονιάς αντίστοιχα. Στο επόμενο πεδίο, Classes εισάγεται ο επιθυμητός αριθμός ομάδων στις οποίες θέλουμε να χωρίσουμε τα δεδομένα. Εδώ ο αριθμός αυτός χρησιμοποιείται από τον αλγόριθμο K-means ώστε να αποδώσουμε labels (ετικέτες) στον τελικό χάρτη, εναλλακτικά ο χρήστης μπορεί να αποδώσει τις επιθυμητές ετικέτες στο πεδίο Class name με την μορφή ζεύγους (αριθμητική τιμή ετικέτα) (πχ: 3 EUT) και κάνοντας κλικ, πάνω στον νευρώνα που θέλει να κατηγοριοποιήσει στην περιοχή σχεδίασης. Η αριθμητική τιμή χρησιμοποιείται για τη γραφική απεικόνιση της ομάδας και η ετικέτα κειμένου για το χαρακτηρισμό της. Στο πεδίο Choose parameter ο χρήστης επιλέγει την παράμετρο που επιθυμεί για να δημιουργήσει το αντίστοιχο γράφημα των βαρών αυτής της παραμέτρου με το κουμπί Plot weight plane της περιοχής 5 (οι τιμές που λαμβάνει το Choose parameter είναι $\{0, 1, \dots, m-1\}$, όπου m το σύνολο των παραμέτρων). Τέλος το κουμπί Initialize weights δημιουργεί τον πίνακα των βαρών του δικτύου. Συγκεκριμένα, ο πίνακας έχει διαστάσεις (Rows, Columns, Parameters), ο κάθε νευρώνας αντιστοιχεί σε ένα διάνυσμα με μήκος ίσο με την τιμή του πεδίου Parameters και το σύνολο των νευρώνων ισούται με $Rows * Columns$.



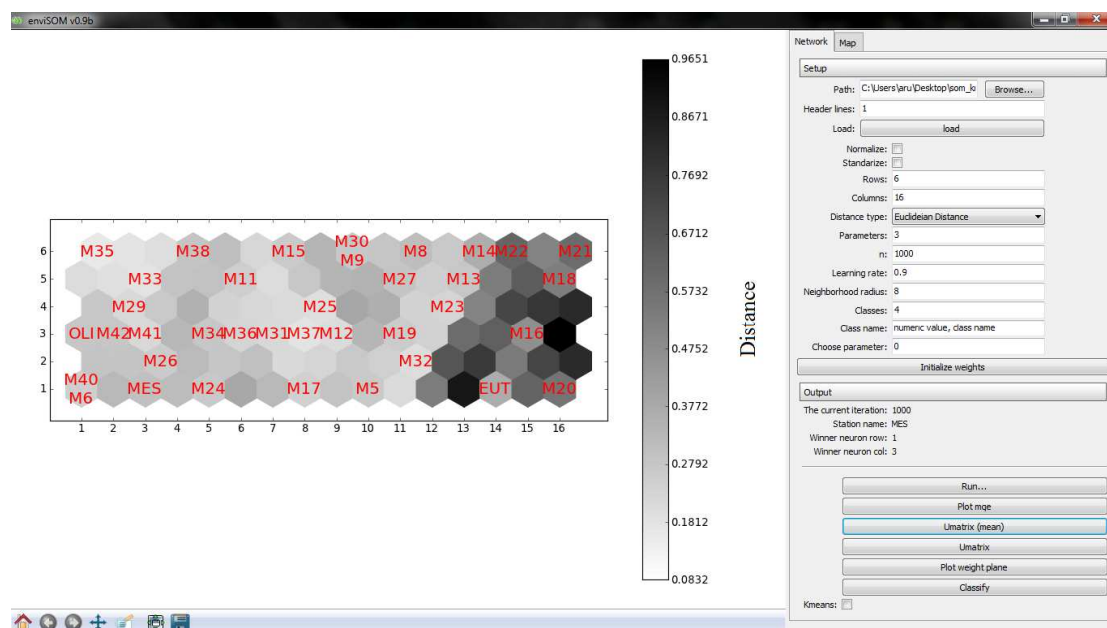
Εικόνα 3.2 Γράφημα MQE (παράδειγμα απεικόνισης).

Περιοχή 4: Σε αυτήν τη περιοχή το πρόγραμμα παρέχει πληροφορίες κατά την διάρκεια της εκπαίδευσης. Στο πεδίο The current iteration δείχνει τον αριθμό της επανάληψης την συγκεκριμένη χρονική στιγμή, στο πεδίο Station name το όνομα του σταθμού (ή πιο γενικά το όνομα του διανύσματος) που εισήχθηκε στην συγκεκριμένη επανάληψη και στα επόμενα δύο πεδία τις συντεταγμένες του νικητή νευρώνα για τον συγκεκριμένο σταθμό στο πλέγμα εξόδου σε γραμμή και στήλη αντίστοιχα.

Περιοχή 5: Το κουμπί Run ξεκινάει το τρέξιμο του αλγορίθμου. Το κουμπί Plot mqe δημιουργεί ένα γράφημα (Εικ. 3.2) του μέσου σφάλματος κβάντωσης (Peña et al. 2008) το οποίο αντιστοιχεί στην μέση απόσταση του κάθε διανύσματος εισόδου από την best-matching-unit (BMU) (νικητή νευρώνα) για κάθε επανάληψη n σύμφωνα με την (3.1):

$$q_e(n) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \|x_i - (BMU)(i, n)\| \quad (3.1)$$

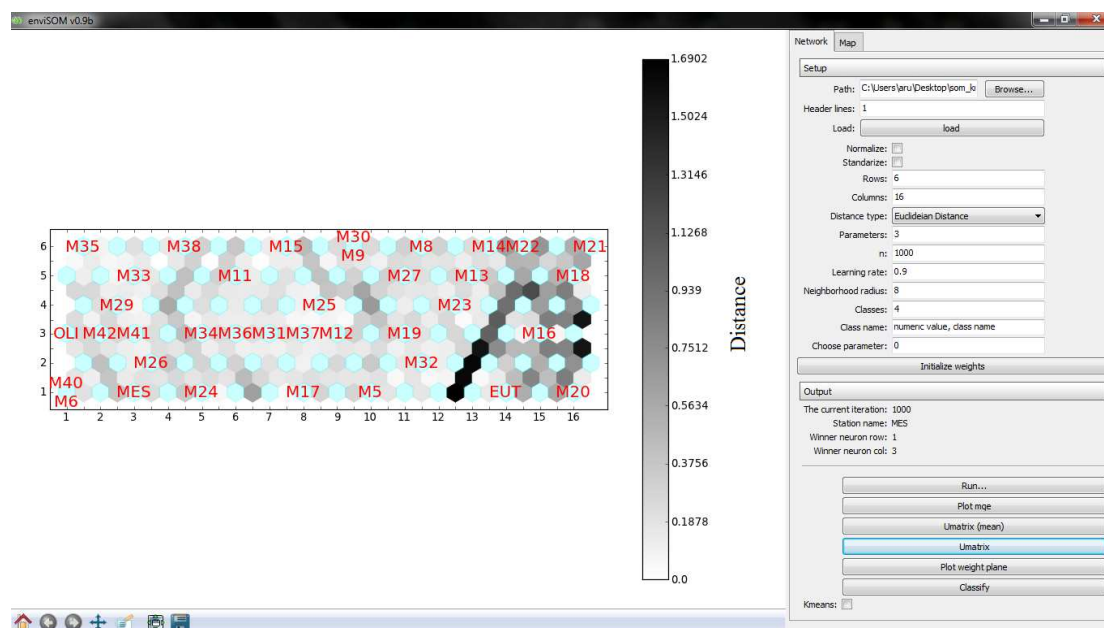
Το q_e είναι ένα μέτρο της ανάλυσης της απεικόνισης. Το κουμπί Umatrix (mean) δημιουργεί ένα γράφημα του U-matrix (Εικ. 3.3). Η μέση τιμή των αποστάσεων του κάθε νευρώνα από τους άμεσα γειτονικούς του νευρώνες παρουσιάζεται στη χρωματική κλίμακα του γκρι. Με λευκό είναι οι μικρές τιμές, άρα μεγάλη ομοιότητα και με πιο σκούρο οι μεγάλες τιμές που αντιστοιχούν σε μικρή ομοιότητα.



Εικόνα 3.3 Γράφημα του U-matrix μέσης τιμής (παράδειγμα απεικόνισης).

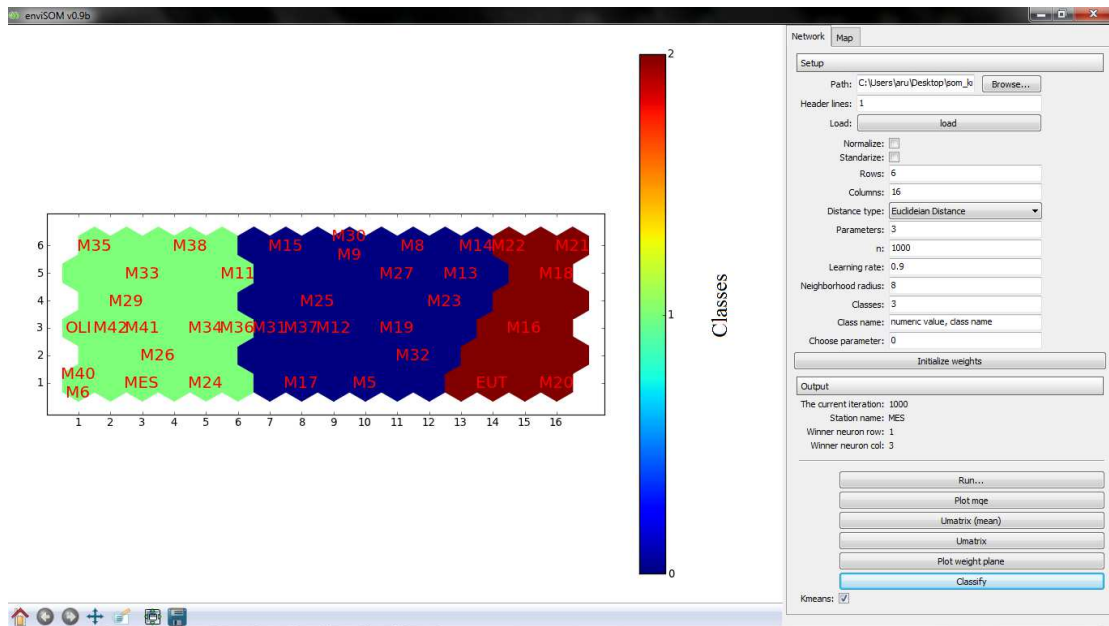
Το κουμπί Umatrix δημιουργεί ένα άλλου τύπου γράφημα του U-matrix (εικ. 3.4) όπου οι θέσεις των νευρώνων παρουσιάζονται σαν κύκλοι και το χρώμα των αναμεταξύ τους εξαγώνων αντιστοιχεί στην τιμή της απόστασης ανάμεσα σε δύο νευρώνες. Το κουμπί Plot weight plane δημιουργεί το γράφημα των βαρών που αντιστοιχούν στην επιλεγμένη

παράμετρο από το πεδίο Choose parameter της περιοχής 3. Το γράφημα αυτό δείχνει την χωρική κατανομή της παραμέτρου στον πίνακα των βαρών και είναι χρήσιμο στην παρουσίαση των δεδομένων.

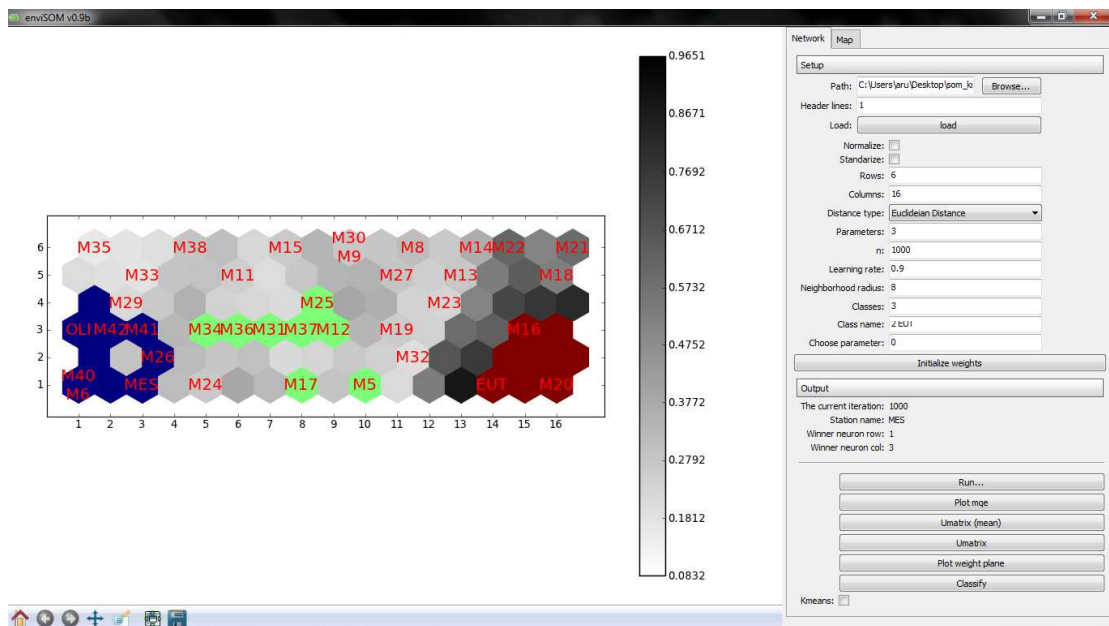


Εικόνα 3.4 Γράφημα U-matrix "κατευθυντικό" (παράδειγμα απεικόνισης).

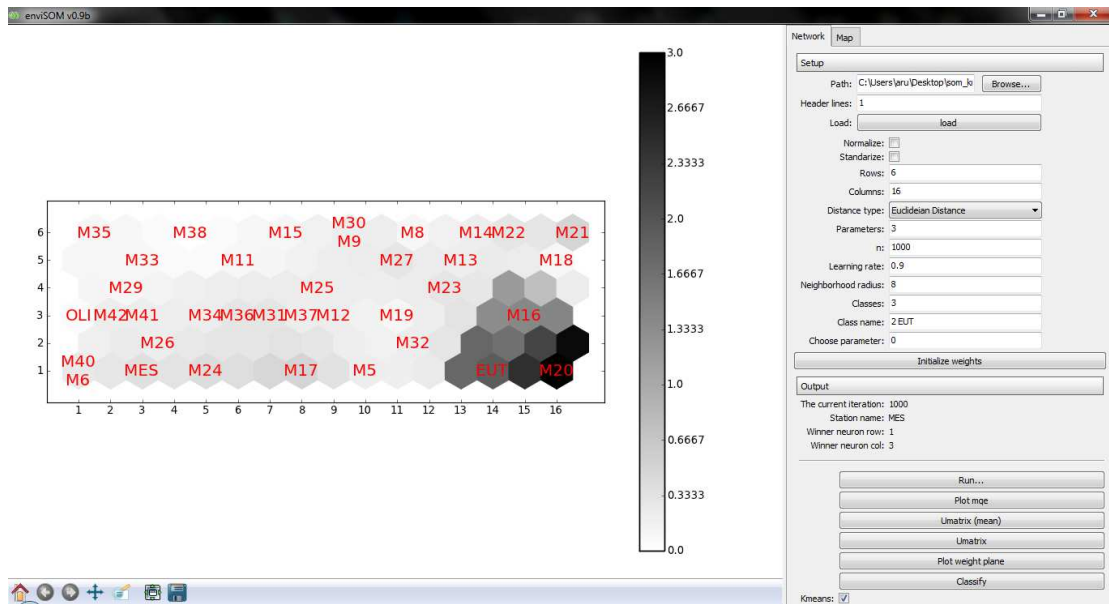
Το κουμπί Classify έχει δύο λειτουργίες, εάν το κουτί K-means είναι επιλεγμένο εκτελεί τον αλγόριθμο K-means (Pandit et al., 2010) με δεδομένα εισόδου τον πίνακα των βαρών του εκπαιδευμένου δικτύου και δημιουργεί ένα γράφημα που παρουσιάζονται οι νευρώνες και οι κλάσεις που τους κατηγοριοποιεί ο αλγόριθμος (Εικ. 3.5). Εάν ο χρήστης επιθυμεί να ομαδοποιήσει τους νευρώνες του δικτύου χειροκίνητα πρώτα πατάει το κουμπί Classify χωρίς να είναι επιλεγμένο το κουτί K-means και στη συνέχεια εισάγει τον αριθμό των ομάδων που θα εισάγει στο πεδίο Classes. Στη συνέχεια εισάγει έναν αύξων αριθμό, διαφορετικό για κάθε ομάδα, στο πεδίο Class name μαζί με την ετικέτα της αντίστοιχης ομάδας. Τέλος, κάνοντας κλικ στους νευρώνες που θέλει να κατηγοριοποιήσει αντιστοιχεί την ετικέτα της ομάδας με τους νευρώνες δημιουργώντας ένα ισοδύναμο πίνακα ομάδων, όπως ο αλγόριθμος K-means που χρησιμοποιείται από το πρόγραμμα για την δημιουργία του κανόνα ομαδοποίησης (Εικ. 3.6).



Εικόνα 3.5 Ομάδες στα δεδομένα όπως υπολογίστηκαν από τον αλγόριθμο K-means, εδώ για τρεις ομάδες (παράδειγμα απεικόνισης)..

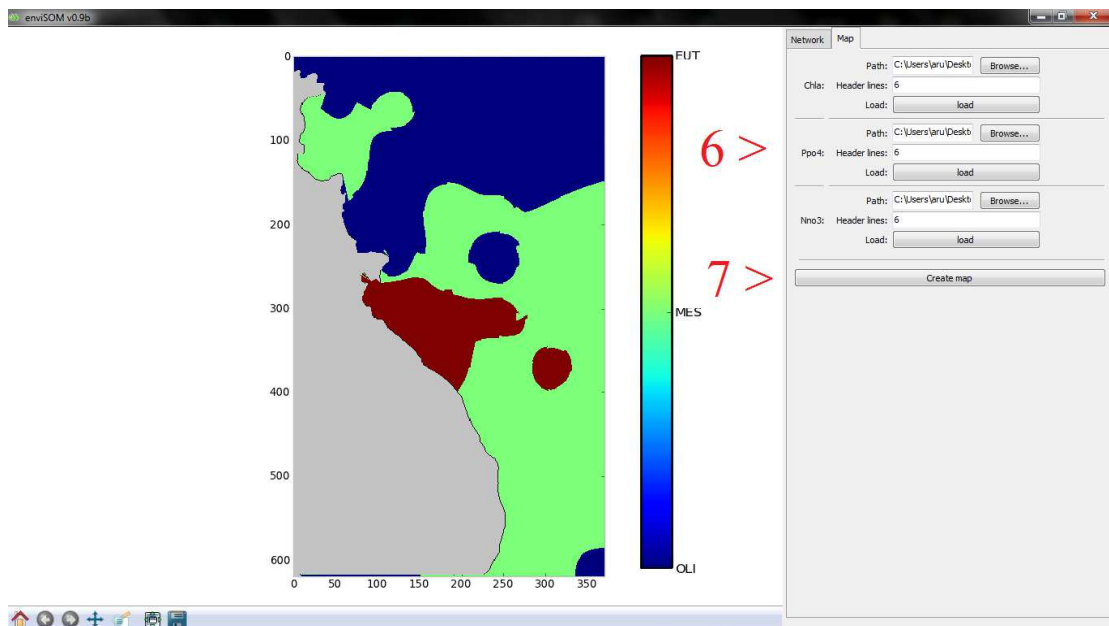


Εικόνα 3.6 Χειροκίνητη κατηγοριοποίηση των νευρώνων του KSOM (παράδειγμα απεικόνισης)..



Εικόνα 3.7 Γράφημα της χωρικής κατανομής της παραμέτρου θ (πρώτη), εδώ της συγκέντρωσης χλωροφύλλης- a . Από το γράφημα παρατηρούμε ότι οι σταθμοί με την υψηλή συγκέντρωση βρίσκονται στα δεξιά του γραφήματος και αυτοί με χαμηλή στα αριστερά (παράδειγμα απεικόνισης).

Περιοχή 6: Στην καρτέλα Map υπάρχουν παρόμοιοι διάλογοι εισαγωγής δεδομένων με την περιοχή 2. Από εδώ ο χρήστης εισάγει τα δεδομένα που θέλει να κατηγοριοποιήσει χρησιμοποιώντας τον πίνακα βαρών του δικτύου μετά την διαδικασία της εκπαίδευσης. Στην παρούσα εφαρμογή εισάγονται τρεις χάρτες που περιέχουν δεδομένα για τις ίδιες παραμέτρους για τις οποίες έγινε η εκπαίδευση του δικτύου τα οποία έχουν προκύψει από την μέθοδο παρεμβολής IDW για την περιοχή μελέτης (εικόνα 3.8).



Εικόνα 3.8 Στην καρτέλα Map, στην περιοχή σχεδίασης φαίνεται ένα τυχαίο παράδειγμα του τρόπου απεικόνισης του τελικού θεματικού χάρτη της χωρικής κατανομής του ευτροφισμού στην περιοχή μελέτης.

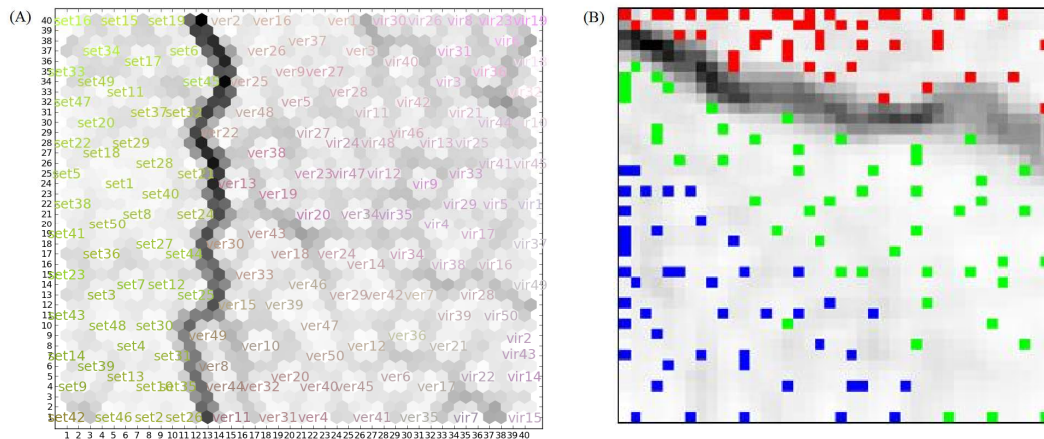
Περιοχή 7: Τέλος το κουμπί Create map συνθέτει την πληροφορία από τους θεματικούς χάρτες και χρησιμοποιεί τον πίνακα με τα labels που έχει προκύψει από την διαδικασία ομαδοποίησης για να αποδώσει ανάλογη τιμή σε κάθε στοιχείο (pixel) μίας εικόνας της περιοχής (εικόνα 3.8).

3.4 Αποτελέσματα Ελέγχου Ορθής Λειτουργίας της Εφαρμογής

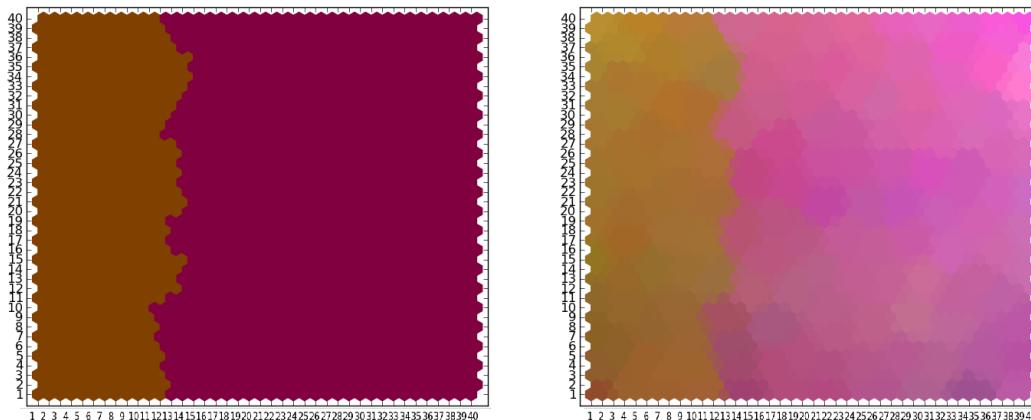
3.4.1 Αποτελέσματα για το Fisher's Iris dataset

Αποτελέσματα του προγράμματος enviSOM για τα σύνολα δεδομένων ελέγχου.

Για το Iris dataset.



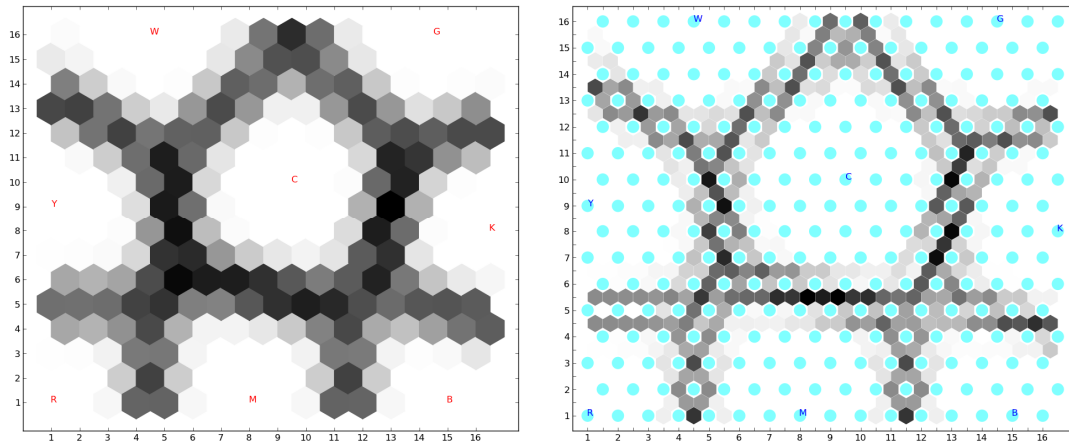
Σχήμα 3.1 (A) U-matrix, αποτέλεσμα του enviSOM μετά από 10000 επαναλήψεις. Το πλέγμα των νευρώνων είναι διάστασης 40x40. (B) Ο πίνακας U-Matrix για ένα 40x40 δίκτυο, κόκκινο: *I. setosa*, πράσινο: *I. vesicolor* και μπλε: *I. virginica* (RaolnWiki, 2010).



Σχήμα 3.2 Πίνακες των βαρών για τις πρώτες τρεις παραμέτρους σε τιμές RGB. Στην αριστερή εικόνα το 100% του χρώματος έχει δοθεί στην παράμετρο με την μεγαλύτερη τιμή.

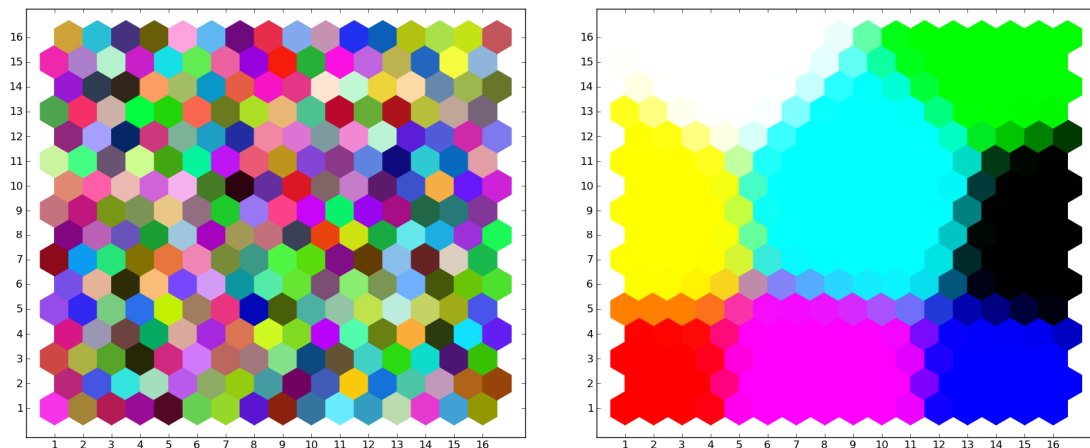
Στο σχήμα 3.1A γίνεται εμφανής μια ιδιότητα του U-matrix, την δημιουργία χαρακτηριστικών τα οποία χωρίζουν τις περιοχές που ανήκουν σε ξεχωριστές ομάδες. Εδώ παρατηρούμε στα αριστερά μία σκουρόχρωμη γραμμή που διαχωρίζει την ομάδα του είδους *I. setosa* από τις άλλες δύο. Το ίδιο χαρακτηριστικό παρατηρείται και στο σχήμα 3.1B που διαχωρίζει τις ίδιες ομάδες.

3.4.2 Σύνολο δεδομένων RGB – οκτώ χρώματα



Σχήμα 3.3 Γραφήματα των U-matrix.

Στα γραφήματα του σχήματος 3.3 παρατηρούνται οι διαχωριστικές δομές ανάμεσα στις διαφορετικές ομάδες.



Σχήμα 3.4 Αρχική και τελική κατάσταση του δικτύου για το RGB dataset.

Στο σχήμα 3.4, αριστερά βλέπουμε την αρχική τυχαία κατάσταση στην οποία βρισκόντουσαν οι νευρώνες του δικτύου και δεξιά πως μέσω του αλγορίθμου προκύπτει τελικά μια πιο τακτική κατάσταση όπου οι νευρώνες έχουν οργανωθεί σε «χρωματικές ομάδες». Παρατηρούμε επίσης ότι η σχετική θέση των ομάδων δεν είναι τυχαία αλλά τέτοια ώστε αν ξεκινήσουμε από ένα βασικό χρώμα πχ. το κόκκινο και κινηθούμε προς ένα άλλο πχ. μπλε το χρώμα που έχει τοποθετηθεί ανάμεσα είναι αυτό που προκύπτει από τον συνδυασμό τους.

3.5 Εφαρμογή σε πραγματικά δεδομένα - Εκτίμηση του ευτροφισμού με χρήση του εργαλείου ενviSOM

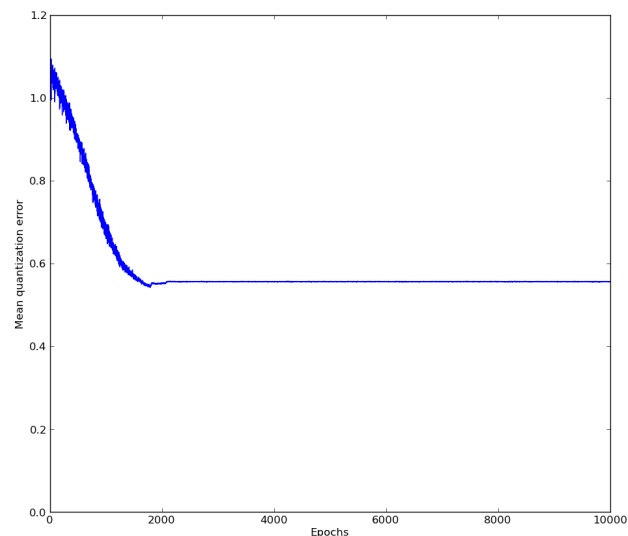
Το εργαλείο ενviSOM χρησιμοποιήθηκε για την εφαρμογή του αλγορίθμου KSOM δύο φορές στα δεδομένα πεδίου.

Δίκτυο 1 (3 νευρώνες)

Το πρώτο δίκτυο που επιλέχθηκε για εκπαίδευση είχε αριθμό νευρώνων 3 και δομή 1x3, δηλαδή οι νευρώνες ήταν διατεταγμένοι σε μία γραμμή και τρεις στήλες. Το Δίκτυο 1 είχε τις ακόλουθες αρχικές τιμές για τις παραμέτρους:

Επαναλήψεις:	10000
Ρυθμός εκμάθησης:	0.1
Διάμετρος της συνάρτησης γειτονιάς:	3
Μέτρο ομοιότητας:	Ευκλείδεια απόσταση

Από το γράφημα του μέσου κβαντισμένου σφάλματος (mean quantization error, mqe) (Σχήμα 3.5) παρατηρούμε τις δύο φάσεις εκπαίδευσης του TNA SOM. Αρχικά το σφάλμα είναι υψηλό (κατά τη φάση της διάταξης) και μειώνεται καθώς αυξάνεται ο χρόνος και οι νευρώνες πλησιάζουν τις τιμές των διανυσμάτων εισόδου. Τέλος, το σφάλμα σταθεροποιείται κατά την φάση της σύγκλισης όπου οι αλλαγές στα βάρη των νευρώνων ελαχιστοποιούνται.



Σχήμα 3.5 Γράφημα της αλλαγής του mean quantization error κατά την διάρκεια της εκπαίδευσης.

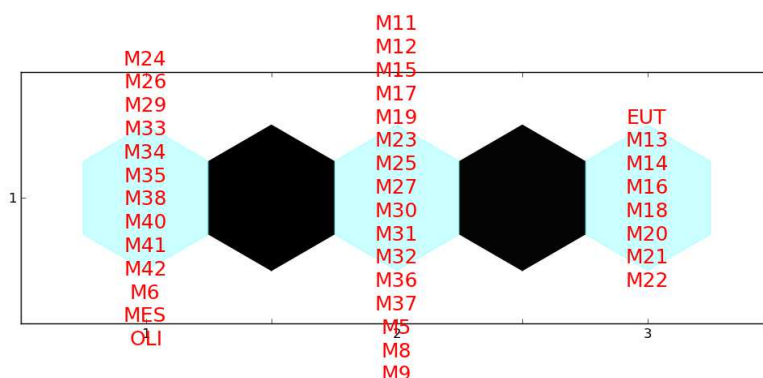
Από το γράφημα του U-matrix (Σχήμα 3.6) προκύπτουν οι ακόλουθες ομάδες στα δεδομένα:

Ομάδα 1. Σταθμοί: M6, M24, M26, M29, M33, M34, M35, M38, M40, M41, M42, OLI, MES.

Ομάδα 2. Σταθμοί: M5, M8, M9, M11, M12, M15, M17, M19, M23, M25, M27, M30, M31, M32, M36, M37.

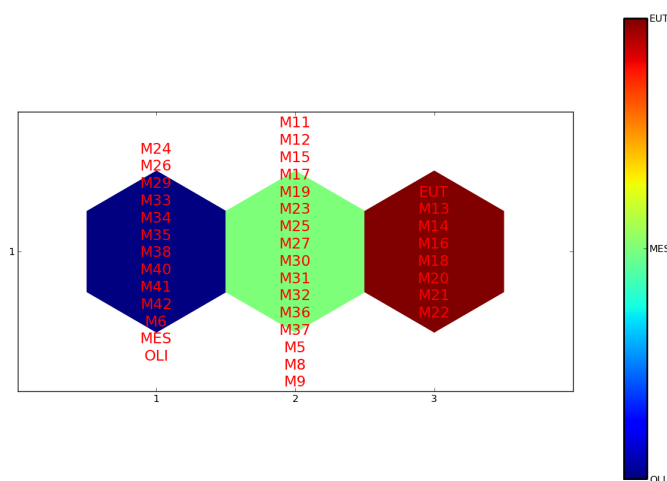
Ομάδα 3. Σταθμοί: M13, M14, M16, M18, M20, M21, M22, EUT.

Παρατηρείται ότι οι σταθμοί OLI και MES έχουν ομαδοποιηθεί μαζί. Από τη διάταξη του σχήματος 3.6 προκύπτει ότι η ομάδα 3 αντιστοιχεί σε Εύτροφο πεδίο, η 1 σε Μεσότροφο προς Ολιγότροφο και η 2 σε Μεσότροφο προς Εύτροφο.



Σχήμα 3.6 Συνδυασμός του U-matrix με τον χάρτη ενεργοποίησης, με γαλάζιο χρώμα παρουσιάζονται οι νευρώνες του δικτύου.

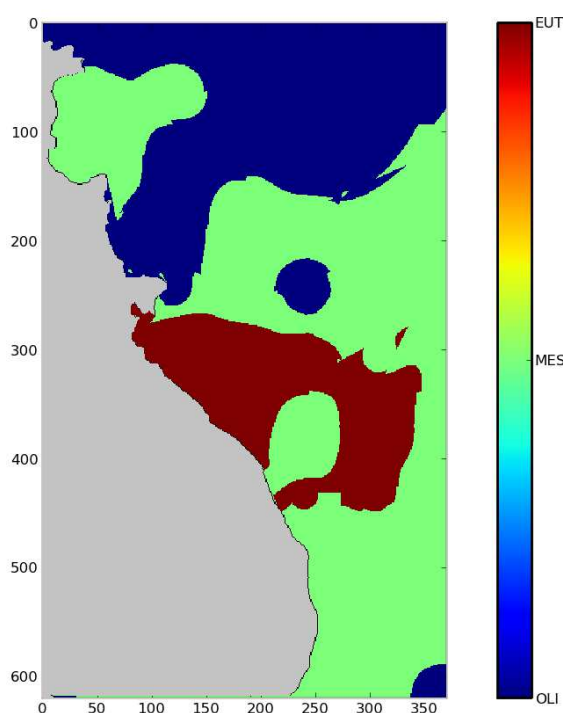
Οι κλάσεις που παρατηρήθηκαν συνδέονται με τους νευρώνες του δικτύου (Σχήμα 3.7) δημιουργώντας έναν κανόνα ταξινόμησης τον οποίο χρησιμοποιούμε για να υπολογίσουμε τον χάρτη κατανομής του ευτροφισμού μέσω των θεματικών χαρτών που παρουσιάστηκαν στο κεφ. 2.2.4



Σχήμα 3.7 Οι νευρώνες του δικτύου με χρωματισμό αντίστοιχο της κλάσης που ανήκουν.

Το τελικό αποτέλεσμα του λογισμικού εργαλείου ενviSOM είναι ο ακόλουθος χάρτης κατανομής του ευτροφισμού (Σχήμα 3.8) τα επίπεδα του οποίου παρουσιάζονται στην χρωματική κλίμακα του χάρτη.

Τα νερά έξω από το λιμάνι της πόλης της Μυτιλήνης χαρακτηρίζονται ως Εύτροφα, καθώς απομακρυνόμεστε τα νερά βρίσκονται σε μία μεταβατική κατάσταση μεταξύ του Ισχυρά Μεσότροφου και Εύτροφου πεδίου και τέλος βόρεια τα νερά χαρακτηρίζονται ως Ολιγότροφα προς το Ελαφρώς Μεσότροφο.



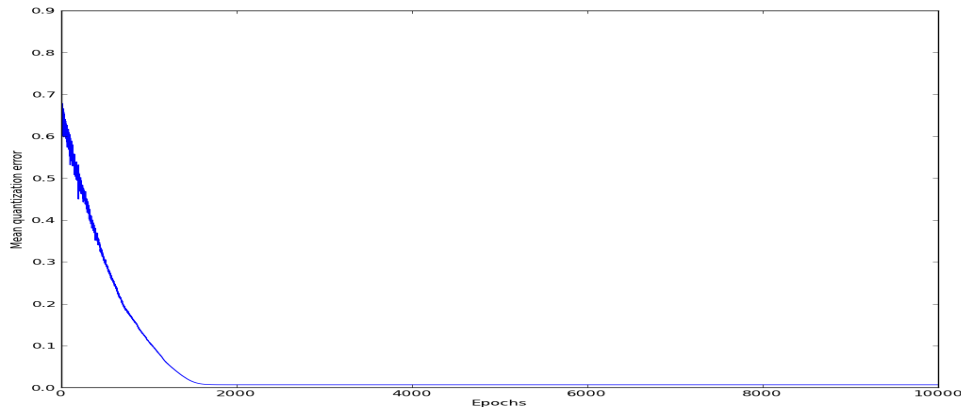
Σχήμα 3.8 Χωρική κατανομή ευτροφισμού στο Στενό της Μυτιλήνης σύμφωνα με το Δίκτυο 1.

Δίκτυο 2 (96 νευρώνες)

Το δεύτερο δίκτυο που τέθηκε προς εκπαίδευση είχε αριθμό 96 νευρώνων και δομή 6x16, δηλαδή οι νευρώνες ήταν διατεταγμένοι σε ένα πλέγμα με έξι γραμμές και 16 στήλες. Το Δίκτυο 2 είχε τις ακόλουθες αρχικές τιμές για τις παραμέτρους:

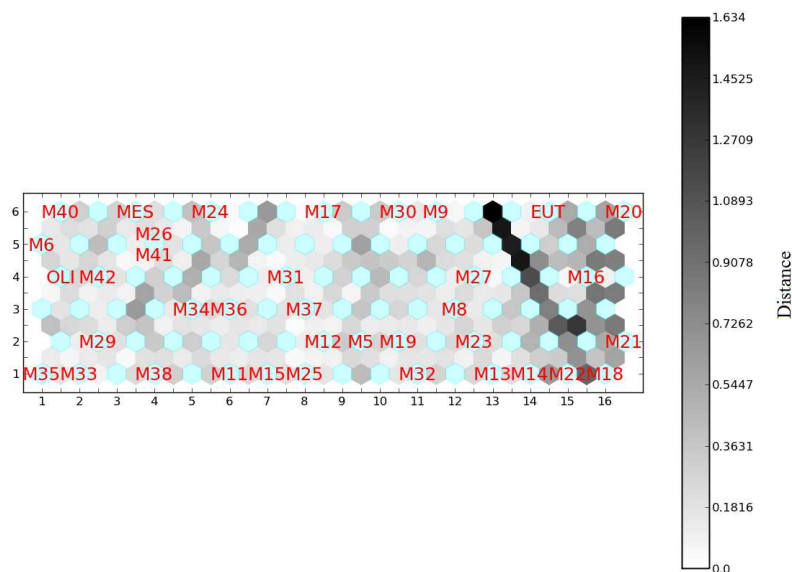
Επαναλήψεις:	10000
Ρυθμός εκμάθησης:	0.1
Διάμετρος της συνάρτησης γειτονιάς:	8
Μέτρο ομοιότητας:	Ευκλείδεια απόσταση

Το γράφημα μεταβολής του mqe (Σχήμα 3.9) δείχνει την ανάλυση του χάρτη. Αν και δεν είναι άμεσα συγκρίσιμος με το Δίκτυο 1 λόγω διαφορετικής δομής, το Δίκτυο 2 λόγω του μεγαλύτερου αριθμού νευρώνων παρουσιάζει καλύτερη ανάλυση. Το γράφημα του mqe είναι ένας τρόπος της σύγκρισης μεταξύ δικτύων του ίδιου μεγέθους και δομής για επιλογή αυτού με μικρότερο mqe.



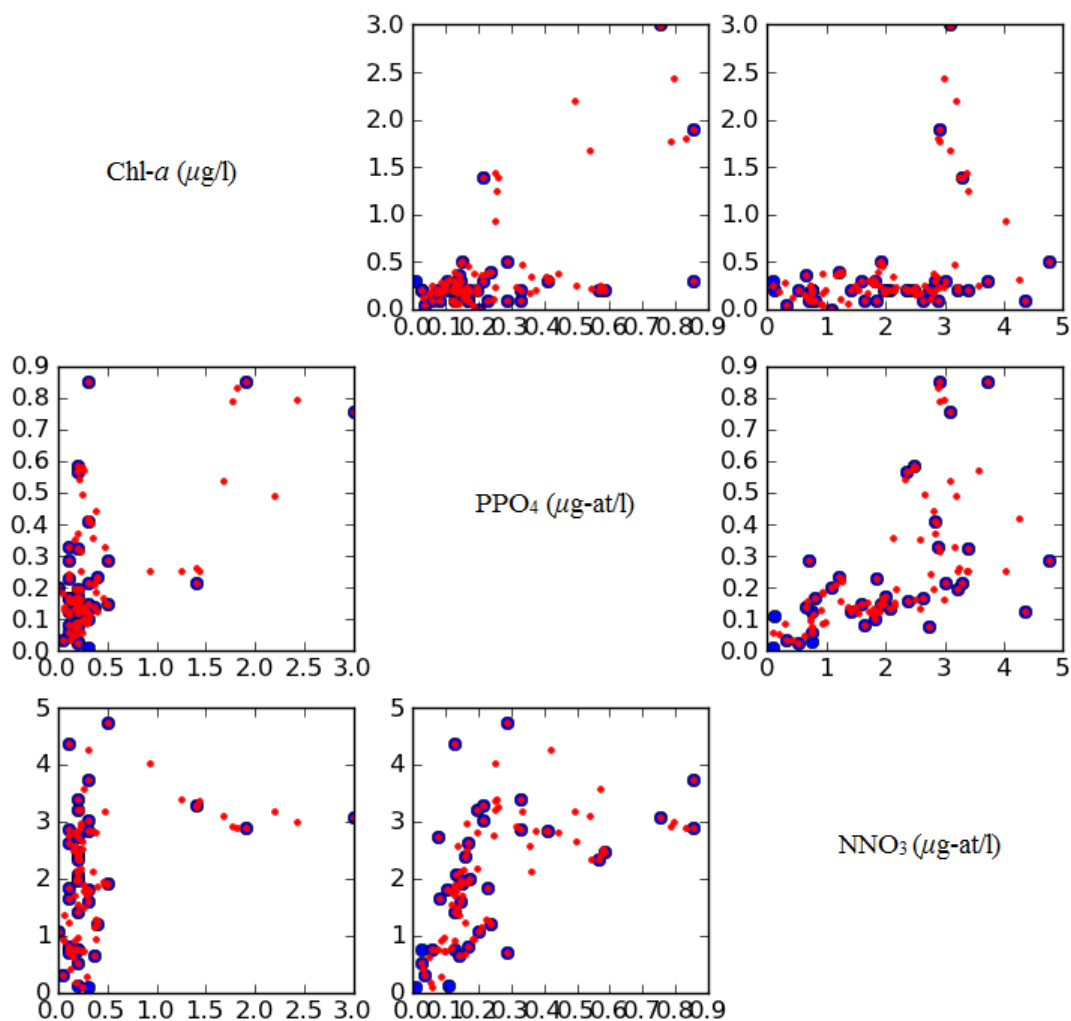
Σχήμα 3.9 Γράφημα του MQE για το δίκτυο δομής 6x16.

Από το γράφημα του Σχήματος 3.10 γίνεται η κατηγοριοποίηση των σταθμών δειγματοληψίας, σε ομάδες. Η σχετική θέση των σταθμών στο πλέγμα δηλώνει τον βαθμό ομοιότητας των σταθμών. Οι σταθμοί που βρίσκονται πιο κοντά στο πλέγμα είναι όμοιοι μεταξύ τους σύμφωνα με το μέτρο ομοιότητας που έχουμε επιλέξει (Ευκλείδεια απόσταση). Η απεικόνιση βελτιώνεται από τον συνδυασμό του χάρτη ενεργοποίησης με τον χάρτη του πίνακα U-matrix δίνοντας και το μέγεθος ομοιότητας (ανοιχτόχρωμες περιοχές) και ανομοιότητας (σκουρόχρωμες περιοχές).

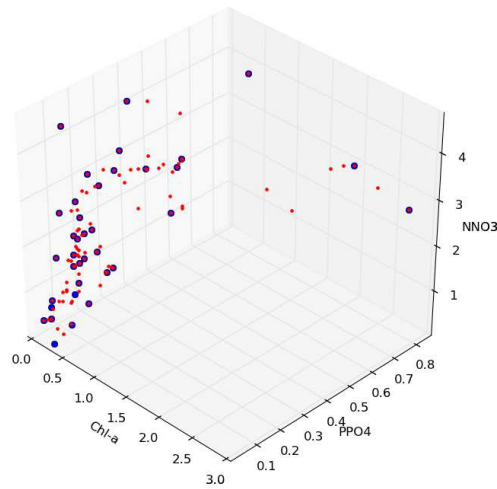


Σχήμα 3.10 Συνδυασμός του U-matrix με τον χάρτη ενεργοποίησης, με γαλάζιο χρώμα παρουσιάζονται οι νευρώνες του δικτύου.

Στα ακόλουθα γραφήματα (Σχήμα 3.11 και Σχήμα 3.12) παρουσιάζεται ο τρόπος με τον οποίο οι νευρώνες του δικτύου (με κόκκινο χρώμα) προσεγγίζουν τα διάνυσματα των σταθμών (με μπλε χρώμα) στον χώρο. Παρατηρούμε ότι σε κάθε σταθμό ένας από τους νευρώνες συντονίζεται πλήρως με το αντίστοιχο διάνυσμα σταθμού και χαρακτηρίζεται σαν BMU (best matching unit) για αυτό το διάνυσμα εισόδου. Οι νευρώνες που βρίσκονται ανάμεσα στις BMUs είναι υπεύθυνοι για την δημιουργία των ορίων που εμφανίζονται στο γράφημα του πίνακα U-matrix ανάμεσα στις ομάδες που αναγνωρίζει ο αλγόριθμος KSOM.

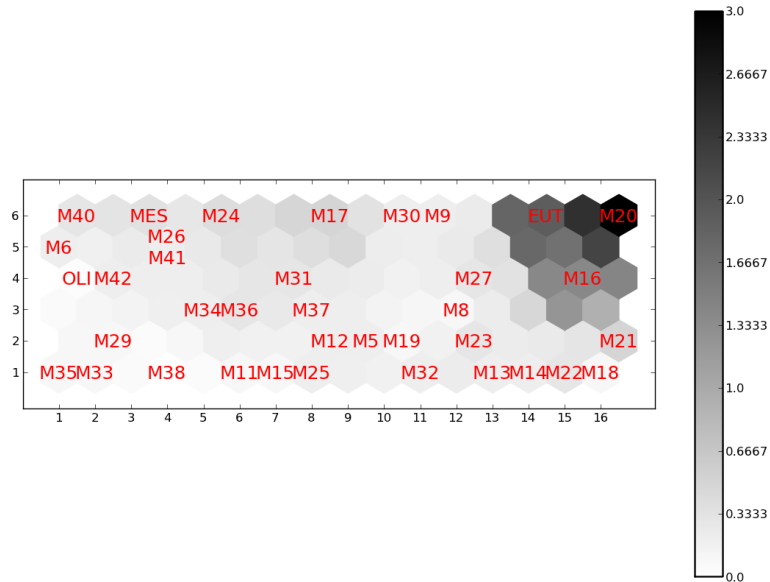


Σχήμα 3.11 Γράφημα των σταθμών (μπλε κύκλοι) και των νευρώνων του δικτύου (κόκκινες τελείες) ανά παράμετρο.

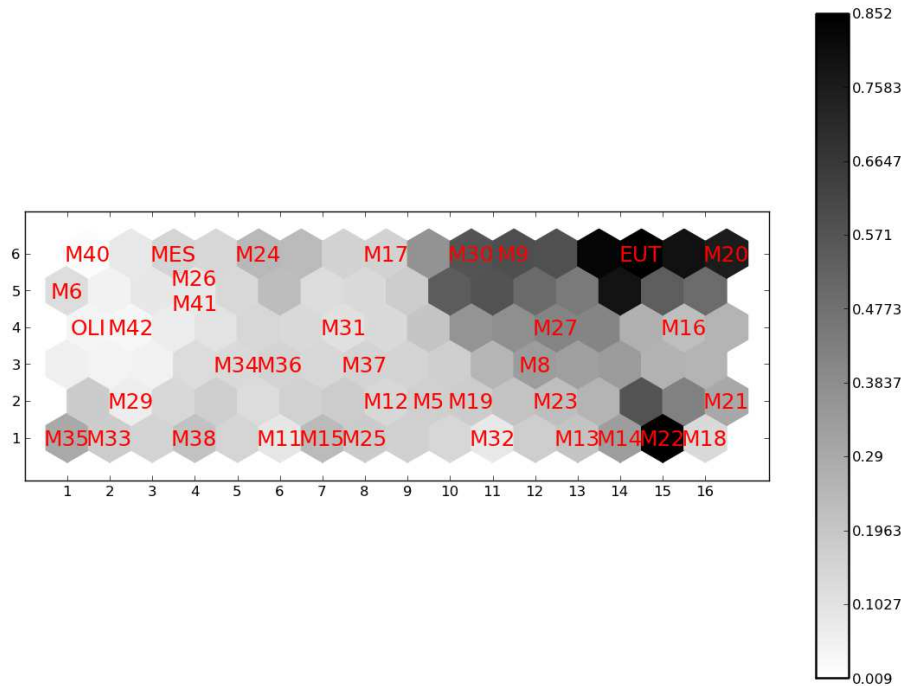


Σχήμα 3.12 Τρισδιάστατη απεικόνιση των νευρώνων του δικτύου και το πως αυτοί προσεγγίζουν τα διανύσματα εισόδου (σταθμοί).

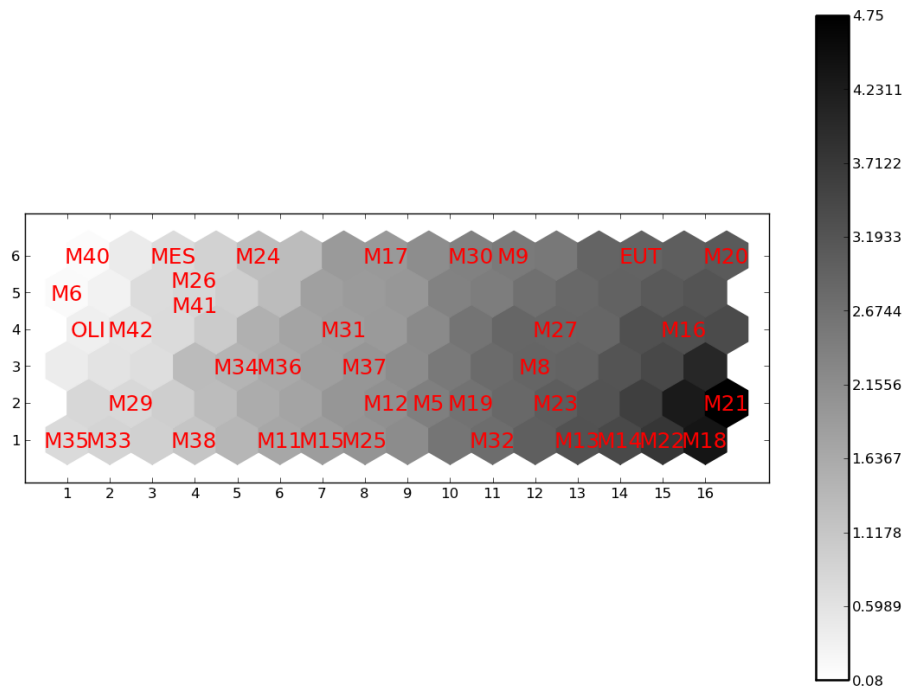
Τα γραφήματα χωρικής κατανομής των βαρών βοηθούν στην οπτικοποίηση της σχέσης μεταξύ των σταθμών δειγματοληψίας ανάλογα με την τιμή τους για κάθε παράμετρο.



Εικόνα 3.13 Χωρική κατανομή των βαρών που αντιστοιχούν στην χλωροφύλλη-α. Είναι εμφανής ο διαχωρισμός που έχει επιτύχει το νευρωνικό δίκτυο τοποθετώντας τους σταθμούς με υψηλή τιμή στα δεξιά και αυτούς με χαμηλή τιμή στα αριστερά του πλέγματος.



Εικόνα 3.14 Χωρική κατανομή των βαρών που αντιστοιχούν στα φωσφορικά. Είναι εμφανής ο διαχωρισμός που έχει επιτύχει το νευρωνικό δίκτυο τοποθετώντας τους σταθμούς με υψηλή τιμή στα δεξιά και αυτούς με χαμηλή τιμή στα αριστερά του πλέγματος.



Εικόνα 3.15 Χωρική κατανομή των βαρών που αντιστοιχούν στα νιτρικά. Είναι εμφανής ο διαχωρισμός που έχει επιτύχει το νευρωνικό δίκτυο τοποθετώντας τους σταθμούς με υψηλή τιμή στα δεξιά και αυτούς με χαμηλή τιμή στα αριστερά του πλέγματος.

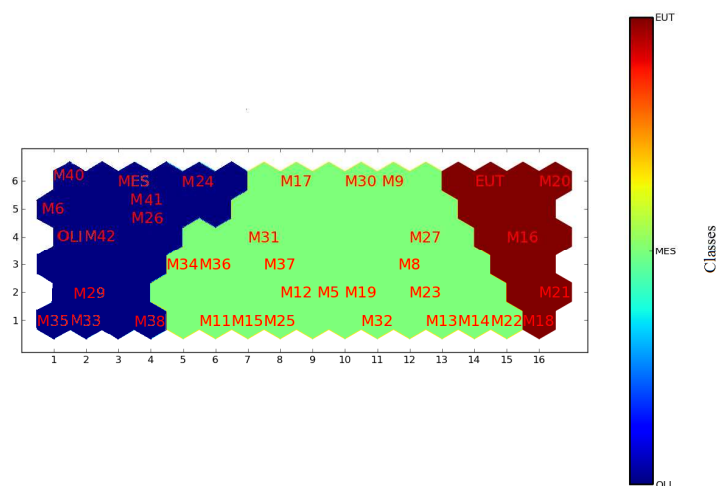
Από τον πίνακα U-matrix (Σχήμα 3.10) οι σταθμοί κατηγοριοποιούνται στις ακόλουθες ομάδες:

Ομάδα 1. Σταθμοί: M6, M24, M26, M29, M33, M35, M38, M40, M41, M42, OLI, MES.

Ομάδα 2. Σταθμοί: M5, M8, M9, M11, M12, M13, M14, M15, M17, M19, M22, M23, M25, M27, M30, M31, M32, M34, M36, M37.

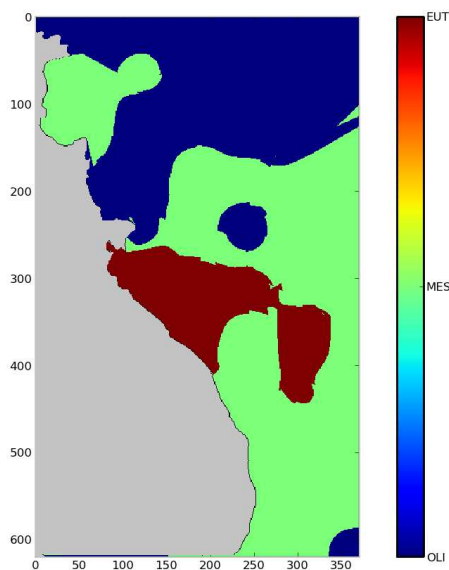
Ομάδα 3. Σταθμοί: M16, M18, M20, M21, EUT.

Και στην περίπτωση αυτή οι σταθμοί OLI και MES ομαδοποιήθηκαν μαζί.



Σχήμα 3.16 Ομάδες νευρώνων και τα επίπεδα ευτροφισμού στα οποία αντιστοιχούν.

Τέλος έγινε υπολογισμός της χωρικής κατανομής του ευτροφισμού με βάση την ομαδοποίηση των νευρώνων του δικτύου (Σχήμα 3.17).



Σχήμα 3.17 Χωρική κατανομή του ευτροφισμού για την θαλάσσια περιοχή του Στενού Μυτιλήνης όπως προέκυψε από τον κανόνα ομαδοποίησης που υπολογίστηκε από το Δίκτυο 2.

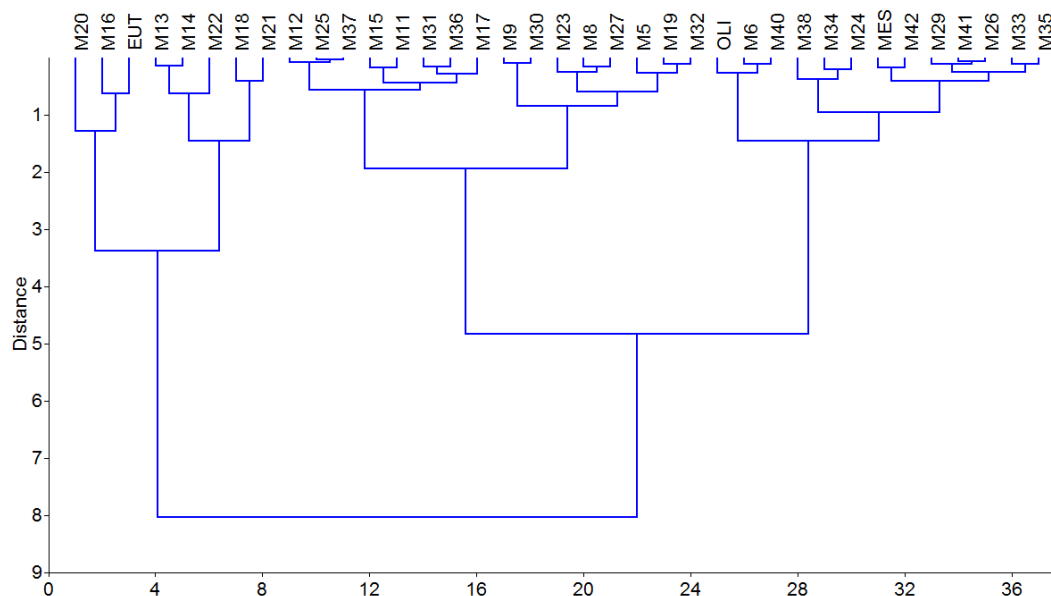
3.6 Εκτίμηση του ευτροφισμού με εφαρμογή της μεθόδου ανάλυσης κατά συστάδες

Από την εφαρμογή της ανάλυσης κατά συστάδες προέκυψε η ακόλουθη κατηγοριοποίηση των σταθμών σε τρεις ομάδες:

Ομάδα 1. Σταθμοί: M6, M24, M26, M29, M33, M34, M35, M38, M40, M41, M42, MES, OLI

Ομάδα 2. Σταθμοί: M5, M8, M9, M11, M12, M15, M17, M19, M23, M25, M27, M30, M31, M32, M36, M37

Ομάδα 3. Σταθμοί: M13, M14, M16, M18, M20, M21, M22, EUT



Σχήμα 3.18 Δενδρόγραμμα αποστάσεων, μέθοδος του Ward.

Οι σταθμοί της ομάδας 1 χαρακτηρίζονται ως ολιγότροφοι προς μεσότροφοι λόγω του ότι οι σταθμοί OLI και MES, χαρακτηριστικοί για τα πεδία ολιγότροφο και μεσότροφο αντίστοιχα ανήκουν στην ομάδα.

Οι σταθμοί της ομάδας 2 χαρακτηρίζονται ως μεσότροφοι προς εύτροφοι.

Οι σταθμοί της ομάδα 3 χαρακτηρίζονται ως εύτροφοι λόγω του ότι ο χαρακτηριστικός σταθμός EUT που αντιστοιχεί στο εύτροφο πεδίο είναι μέλος της ομάδας.

4 Συζήτηση – Συμπεράσματα

Το πρόγραμμα enviSOM που αναπτύχθηκε στα πλαίσια της παρούσας πτυχιακής εργασίας εφαρμόζει με επιτυχία τον αλγόριθμο Kohonen Self-Organizing Map σε περιβαλλοντικά δεδομένα.

Η αποτελεσματικότητα του λογισμικού, ελέγχθηκε με την εφαρμογή του στο Fischer's Iris και το RGB Dataset. Από αυτά, το πρώτο χρησιμοποιείται ευρέως για την αξιολόγηση αλγορίθμων ταξινόμησης και το δεύτερο περιέχει χρωματικά δεδομένα τα οποία είναι εύκολα κατανοητά από τον άνθρωπο.

Στη συνέχεια, το enviSOM χρησιμοποιήθηκε για την ανάλυση περιβαλλοντικών δεδομένων από τη θαλάσσια περιοχή της Λέσβου. Έγινε παρουσίαση των σχέσεων μεταξύ των πολυδιάστατων δεδομένων με ένα γράφημα δύο διαστάσεων. Σε συνδυασμό με τον πίνακα U-matrix έγινε δυνατή η ομαδοποίηση των σταθμών που ανήκουν στο ίδιο επίπεδο ευτροφισμού και η δημιουργία ενός κανόνα ταξινόμησης που εφαρμόστηκε στα άγνωστα δεδομένα των θεματικών χαρτών. Αυτοί περιέχουν την πληροφορία για την χωρική κατανομή της συγκέντρωσης των τριών παραμέτρων για τον υπολογισμό του τελικού θεματικού χάρτη της χωρικής κατανομής του ευτροφισμού.

Όπως έχει αναφερθεί και προηγουμένως, το νευρωνικό δίκτυο KSOM μέσω του μη-επιβλεπόμενου αλγόριθμου εκπαίδευσης αναγνωρίζει τις ομάδες που υπάρχουν στα δεδομένα εισόδου, εφαρμόζει δηλαδή *ομαδοποίηση (clustering)* των δεδομένων. Για να χαρακτηρίσουμε τις διαφορές ομάδες, δηλαδή να εφαρμόσουμε *ταξινόμηση (classification)* των δεδομένων, χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο KSOM εισάγουμε στα δεδομένα διανύσματα ελέγχου τα οποία είναι αντιπροσωπευτικά των ομάδων που επιθυμούμε να κατηγοριοποιήσουμε τα δεδομένα. Στη συνέχεια, εκπαιδεύουμε κανονικά το KSOM και παρατηρούμε σε ποιές συστάδες ομαδοποιούνται τα διανύσματα ελέγχου και συνεπώς τις χαρακτηρίζουν.

4.1 Λειτουργικότητα της εφαρμογής

Κατά την διάρκεια ανάπτυξης της εφαρμογής enviSOM χρησιμοποιήθηκαν τα σύνολα δεδομένων ελέγχου Iris και RGB Dataset, που παρουσιάστηκαν στην παράγραφο 2.2.1, ώστε να αναδειχθούν οι διάφορες διαδικασίες που λαμβάνουν χώρα κατά την εκπαίδευση του KSOM και να αναγνωριστούν τυχόν λάθη (debugging) στα αντίστοιχα μέρη του προγράμματος στα οποία αυτές υλοποιούνται. Το σύνολο δεδομένων Iris όπως αναφέρθηκε είναι ένα από τα κλασσικά σύνολα ελέγχου μεθόδων κατηγοριοποίησης, αναγνώρισης προτύπων και μηχανικής μάθησης. Στην παρούσα πτυχιακή εργασία

χρησιμοποιήθηκε για να ελεγχθεί η ορθότητα της υλοποίησης του αλγορίθμου KSOM με την γλώσσα προγραμματισμού Python, δηλαδή εάν είναι σε θέση να αναγνωρίσει τις τρεις ομάδες δεδομένων που υπάρχουν στο σετ δεδομένων. Το σύνολο δεδομένων RGB χρησιμοποιήθηκε για να δείξει την διαδικασία της αυτο-οργάνωσης που λαμβάνει χώρα κατά την διάρκεια της εκπαίδευσης του αλγορίθμου, όπου η αρχική τυχαία κατάσταση των διανυσμάτων βαρών οδηγείται σε μια οργανωμένη κατάσταση μικρής αταξίας. Και για τα δύο σύνολα δεδομένων η απόδοση της εφαρμογής στην τελική της μορφή θεωρείται ικανοποιητική. Για το σύνολο δεδομένων Iris στα σχήματα 3.1 και 3.2, βλέπουμε ότι το εννιSOM κατάφερε να ξεχωρίσει τις ομάδες που επιτυγχάνουν να διακρίνουν και οι άλλες μέθοδοι που χρησιμοποιούνται στην βιβλιογραφία. Επίσης, στο χρωματικό σύνολο δεδομένων, το σχήμα 3.4 δείχνει σαφώς ότι ο αλγόριθμος αυτο-οργάνωσης οδηγεί σε καταστάσεις μικρότερης αταξίας.

4.2 Παραδοχές

Η βασική παραδοχή που έγινε για τα δεδομένα είναι ότι θεωρούμε τις τιμές των παραμέτρων (συγκέντρωση χλωροφύλλης-α, φωσφορικών και νιτρικών αλάτων) σαν τα στοιχεία ενός τρισδιάστατου διανύσματος που χαρακτηρίζει τον κάθε σταθμό, π.χ. στον σταθμό M20 αντιστοιχεί το διάνυσμα [3.0, 0.755, 3.08]. Αυτά χρησιμοποιήθηκαν σαν διανύσματα εκπαίδευσης για το νευρωνικό δίκτυο KSOM. Η παραδοχή αυτή, έχει σαν αποτέλεσμα να δίνεται η «ίδια» βαρύτητα σε όλες τις παραμέτρους κατά την εκτέλεση του νευρωνικού δικτύου. Σημειώνεται ότι η παραδοχή αυτή είναι παραδοχή της συγκεκριμένης ανάλυσης και όχι του αλγορίθμου κατηγοριοποίησης. Σε περίπτωση που επιθυμούμε διαφορετική βαρύτητα ανά παράμετρο, αυτό μπορεί να επιτευχθεί με κατάλληλη προεπεξεργασία των δεδομένων εισόδου. Μία μέθοδος είναι να προστεθούν επιπλέον πλασματικές παράμετροι, οι οποίες είναι ρέπλικες της παραμέτρου την οποία θέλουμε να ευνοήσουμε.

Στη περίπτωση της ανάλυσης που έγινε, οι θεματικοί χάρτες για την κάθε παράμετρο έχουν ίδια χαρακτηριστικά όσον αφορά στο μέγεθος τους και στο μέγεθος του κάθε κελιού.

Πίνακας 4.1 Χαρακτηριστικά του αρχείου θεματικού χάρτη (header).

ncols	371
nrows	620
xllcorner	459206.7
yllcorner	4317779
cellsize	30
NODATA_value	-9999

Συνεπώς, συνδυάζοντας κατάλληλα τους τρεις θεματικούς χάρτες δημιουργήσαμε τα άγνωστα διανύσματα τα οποία ομαδοποιήθηκαν σύμφωνα με τον κανόνα κατηγοριοποίησης που προέκυψε από το νευρωνικό δίκτυο KSOM.

4.3 Αποτελεσματικότητα της Μεθόδου

Το Δίκτυο 1, με το μικρό του μέγεθος λειτουργεί σαν ταξινομητής. Βάζοντας τον αριθμό των νευρώνων ίσο με τον επιθυμητό αριθμό κλάσεων. Με αυτό τον τρόπο χάνεται πληροφορία σχετικά με πιο «λεπτές» σχέσεις μεταξύ των δεδομένων, αλλά κερδίζουμε σε ταχύτητα υπολογισμού. Συγκρίνοντας τα αποτελέσματα που απεικονίζονται στο Σχήμα 3.6 με αυτά της ανάλυσης κατά συστάδες (Σχήμα 3.18) παρατηρήθηκε ότι συμφωνούν απόλυτα, ομαδοποιώντας τα δεδομένα στις ίδιες ομάδες.

Το Δίκτυο 2 παρουσιάζει αναλυτικότερα τις σχέσεις μεταξύ των δεδομένων διαφοροποιώντας ελαφρώς την τελική ομαδοποίηση από το Δίκτυο 1 λόγω μεγαλύτερης ανάλυσης. Τα γραφήματα των χωρικών κατανομών των βαρών (σχήματα 3.13, 3.14 και 3.15) προσφέρουν μία απλή και κατανοητή παρουσίαση του συνόλου τιμών των παραμέτρων στο σετ. Από τα αποτελέσματα του Δικτύου 2 παρατηρήθηκε ότι οι σταθμοί M20 και M16 διαφέρουν σε μεγάλο βαθμό από τους υπόλοιπους (βλ. σχήμα 3.6) Οι τιμές των παραμέτρων για τους δύο αυτούς σταθμούς είναι:

Πίνακας 4.2 Τιμές των σταθμών M20 και M16.

NAME	CHLA (μg/l)	PPO4 (μg-at/l)	NNO3 (μg-at/l)
M20	3	0.755	3.08
M16	1.4	0.215	3.28

Συγκρίνοντας τις τιμές αυτές με τα υπόλοιπα δεδομένα, παρατηρήθηκε ότι οι σταθμοί M20 και M16 είναι αυτοί με την υψηλότερη συγκέντρωση χλωροφύλλης-α και μάλιστα όλες οι τιμές των παραμέτρων που μετρήθηκαν σε αυτούς βρίσκονται στο Εύτροφο πεδίο σύμφωνα με την κλίμακα ευτροφισμού (βλ. Σχήμα 2.3) και συνεπώς μπορούμε με ασφάλεια να τους χαρακτηρίσουμε ως Εύτροφους. Αντίθετα οι σταθμοί M6 και M40 με τιμές:

Πίνακας 4.3 Τιμές των σταθμών M6 και M40.

NAME	CHLA (μg/l)	PPO4 (μg-at/l)	NNO3 (μg-at/l)
M6	0.2	0.11	0.11
M40	0.3	0.009	0.08

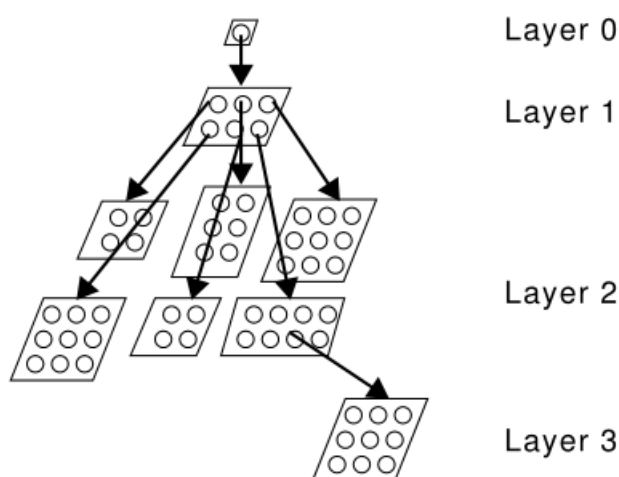
οι οποίοι τοποθετούνται στην άλλη άκρη του γραφήματος U-matrix (βλ. Σχήμα 3.10) έχουν τις χαμηλότερες τιμές που μετρήθηκαν και χαρακτηρίζονται ως Ολιγότροφοι. Συγκρίνοντας το γράφημα U-matrix με τις υπόλοιπες τιμές που χαρακτηρίζουν κάθε σταθμό δειγματοληψίας και λαμβάνοντας υπόψη την κλίμακα ευτροφισμού γίνεται σαφές ότι το

νευρωνικό δίκτυο KSOM έχει αναγνωρίσει ορθά τις σχέσεις μεταξύ των σταθμών και οι νευρώνες έχουν προσανατολιστεί κατά τέτοιο τρόπο ώστε στα αριστερά του γραφήματος να βρίσκονται οι ολιγότροφοι προς ελαφρώς μεσότροφοι σταθμοί, προς το κέντρο οι μεσότροφοι και δεξιά οι σταθμοί που αντιστοιχούν στο εύτροφο επίπεδο.

4.4 Σημεία Βελτίωσης

4.4.1 Σημεία βελτίωσης που αφορούν τον αλγόριθμο και τα δεδομένα

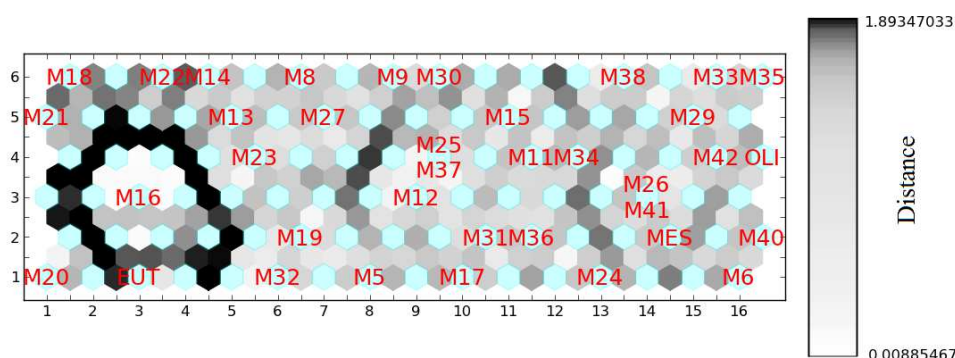
Τα βασικότερα προβλήματα στην χρήση του νευρωνικού δικτύου KSOM (καθώς και στα περισσότερα ΤΝΔ) είναι η επιλογή του μεγέθους του πλέγματος (αριθμός νευρώνων) και οι αρχικές τιμές των παραμέτρων. Το πρόβλημα της επιλογής του μεγέθους του ΤΝΔ μπορεί να λυθεί αντικαθιστώντας τον αλγόριθμο KSOM με τον αλγόριθμο *Growing hierarchical self-organizing map (GH-SOM)* (Dittenbach et al. 2000). Ο αλγόριθμος GH-SOM είναι ένα δυναμικά αναπτυσσόμενο μοντέλο νευρωνικού δικτύου το οποίο εξελίσσεται σε μία ιεραρχημένη δομή σύμφωνα με τις απαιτήσεις των δεδομένων εισόδου κατά την διάρκεια μιας μη-επιβλεπόμενης εκπαιδευτικής διαδικασίας (Dittenbach et al. 2000). Ο αλγόριθμος GH-SOM, αντίθετα με τον KSOM ο οποίος απαιτεί να προσδιορίσουμε αρχικά το μέγεθος του επιπέδου εξόδου του δικτύου, ξεκινάει με ένα νευρώνα και προσθέτει νευρώνες σύμφωνα με έναν κανόνα προς την κατάλληλη κατεύθυνση μέχρι η τιμή του MQE να γίνει μικρότερη από μια προκαθορισμένη τιμή κατωφλιού (threshold).



Σχήμα 4.1 Αρχιτεκτονική του δικτύου GH-SOM (Πηγή: Dittenbach et al. 2000).

Το νευρωνικό δίκτυο KSOM, όπως έχει αναφερθεί στην παράγραφο 2.1, έχει την τάση να αναπαριστά τη συνάρτηση πιθανότητας $p(x)$ των δεδομένων εισόδου. Ωστόσο, σε πολλές

πρακτικές εφαρμογές μπορεί να παρατηρηθούν σημαντικές περιπτώσεις (input data) με μικρή συχνότητα εμφάνισης, οι οποίες δεν θα αναπαρασταθούν από το SOM, Συνεπώς, τέτοιες σημαντικές περιπτώσεις μπορούν να ενισχυθούν κατά την διάρκεια της εκπαίδευσης είτε περνώντας μια μεγαλύτερη τιμή για την συνάρτηση γειτονιάς για αυτά τα δείγματα ή μέσω επαρκούς επανάληψης της εισόδου αυτών των δειγμάτων στο δίκτυο κατά την διάρκεια της εκπαίδευσης (Kohonen et al., 1995). Από τα δεδομένα πεδίου παρατηρήθηκε ότι οι σταθμοί M20 και M16 μπορούν να θεωρηθούν ως περιπτώσεις με μικρή συχνότητα εμφάνισης που θα πρέπει να τους δοθεί επιπλέον βαρύτητα.



Σχήμα 4.2 Γράφημα του πίνακα U-matrix, οι σταθμοί M20 και M16 παρουσιάζονται στο δίκτυο με αυξημένη βαρύτητα. Μπορεί να παρατηρηθεί βελτίωση στην απεικόνιση, κυρίως για τον σταθμό M16.

Είναι απαραίτητο να γίνει μία τελευταία παρατήρηση σχετικά με τα χαρακτηριστικά διανύσματα αναφοράς (EUT, MES, OLI) που χρησιμοποιήθηκαν για τον χαρακτηρισμό κάθε ομάδας δεδομένων. Βελτίωση σε αυτή την απεικόνιση και ομαδοποίηση θα μπορούσε να επιτευχθεί επιλέγοντας περισσότερα διανύσματα αναφοράς με πιο πολύπλοκη σύνθεση. Τα διανύσματα που επιλέχθηκαν στην παρούσα πτυχιακή είχαν το χαρακτηριστικό ότι και οι τρεις παράμετροι ανήκουν στο ίδιο επίπεδο στην κλίμακα ευτροφισμού, κάτι που δεν συμβαίνει στην πραγματικότητα σε δεδομένα που συλλέγονται από το πεδίο. Αν και η χρήση ακόμα και των τριών αυτών είναι επαρκής για να ταυτοποιήσει τα επίπεδα ευτροφισμού στα δεδομένα, διανύσματα αναφοράς παραπλήσια με αυτά που λαμβάνονται από τις δειγματοληψίες θα βελτιώναν τον αλγόριθμο κατηγοριοποίησης που προκύπτει από την εκπαίδευση του νευρωνικού δικτύου και κατά συνέπεια τον τελικό χάρτη χωρικής κατανομής ευτροφισμού της υπό μελέτη περιοχής.

4.4.2 Σημεία βελτίωσης που αφορούν το εργαλείο enviSOM

Το εργαλείο enviSOM στην παρούσα έκδοση του μπορεί να λειτουργήσει στα πλαίσια αυτής της πτυχιακής εργασίας λόγω του ότι είναι δομημένο έτσι ώστε να μπορούν να εισαχθούν μόνο 3 επίπεδα θεματικών χαρτών άρα περιορίζεται σε σετ δεδομένων τριών διαστάσεων. Συνεπώς μία βασική αλλαγή είναι ο αριθμός των εισαγόμενων επιπέδων να μην είναι στατικός αλλά να προσδιορίζεται από τον χρήστη σύμφωνα με τις απαιτήσεις της εφαρμογής που σχεδιάζει.

Όσον αφορά την υλοποίηση του αλγορίθμου, βελτιώσεις μπορούν να εισαχθούν αυξάνοντας τον αριθμό των διαθέσιμων κριτήριων ομοιότητας, υλοποιώντας επιπλέον αποστάσεις πέρα της Ευκλείδειας καθώς και αύξηση των διαθέσιμων συναρτήσεων γειτονίας. Σε επίπεδο προγραμματισμού το enviSOM μπορεί να βελτιωθεί σε σταθερότητα, ταχύτητα υπολογισμών και γραφικού περιβάλλοντος. Βασική βελτίωση είναι η διαφοροποίηση του thread που εφαρμόζει τον αλγόριθμο εκπαίδευσης από το thread που είναι υπεύθυνο για το γραφικό περιβάλλον, αυτό θα βελτιώσει την σταθερότητα καθώς και την υπολογιστική ταχύτητα του προγράμματος enviSOM εκμεταλλευόμενο τις σύγχρονες πολυπύρηνες αρχιτεκτονικές επεξεργαστών (multithreading, multicore CPU).

Κατά τη διάρκεια ανάπτυξης του εργαλείου enviSOM δημιουργήθηκαν και επιμέρους υποπρογράμματα όπως το πρόγραμμα για να διαβάζει τα αρχεία ascii των δεδομένων και των θεματικών χαρτών καθώς και μία έκδοση του enviSOM που δείχνει την αλλαγή των βαρών λόγω της εκπαίδευσης σε πραγματικό χρόνο δημιουργώντας ένα animation. Πέρα από τις βελτιώσεις που προτάθηκαν, σε μελλοντικές εκδόσεις του το εργαλείο enviSOM μπορεί να έχει δυνατότητα να τρέχει σε υπολογιστικό cluster κάνοντας χρήση επιπλέον υπολογιστικών πόρων, να είναι ενσωματωμένο σε ένα σύστημα GIS με την μορφή εργαλείου ανάλυσης ή ακόμα και να είναι συνδεδεμένο με ένα αυτόματο σύστημα για τη συλλογή δεδομένων σε πραγματικό χρόνο κάνοντας παρουσίαση της τρέχουσας χωρικής κατανομής ευτροφισμού σε ένα webGIS.

5 Βιβλιογραφία

- AGUILERA, P. A., GARRIDO FRENICH, A., TORRES, J. A., CASTRO, H., MARTINEZ VIDAL, J. L., CANTON, M., 2001. Application of the Kohonen neural network in coastal water management: Methodological development for the assessment and prediction of water quality. Elsevier, Wat. Res. Vol. 35, No. 17, pp. 4053-4062.
- ANDERSON, J.R., 1988. A rational analysis of human memory, H.L. Roediger, F.I.M. Craik, Editors , *Varieties of Memory and Consciousness: Essays in Honor of Endel Tulving*, Erlbaum, Hillsdale, NJ .
- BIERMAN, P., LEWIS, M., OSTENDORF, B., TANNER, J., 2011. A review of methods for analyzing spatial and temporal patterns in coastal water quality. Elsevier, Ecological Indicators, 11, pp. 103-114.
- CHON, T.S., 2011. Self-Organizing maps applied in ecological sciences. Elsevier, Ecological Informatics 6 (2011), pp. 50–61.
- CLARKE KR., 1993. Nonparametric multivariate analyses of changes in community structure. Aust J Ecol 18, pp. 117–143.
- CROSSLAND C.J., KREMER H.H., LINDEBOOM H.J., CROSSLAND J.I.M., LE TISSIER M.D.A., 2005. Coastal fluxes in the Anthropocene. Springer, Berlin.
- CÜNEYT KARUL, SELÇUK SOYUPAK, AHMET F. ÇİLESİZ, NİHAT AKBAY, EMİN GERMEN, 2000. Case studies on the use of neural networks in eutrophication modeling. Elsevier, Ecological Modeling 134 (2000), pp. 145-152.
- CHURCHLAND, P. S., SEJNOWSKI, T. J., 1992. The computational brain. Computational neuroscience. Cambridge, MA, US The MIT Press.
- DITTENBACH, M., MERKL, D., RAUBER, A., 2000. The Growing Hierarchical Self-Organizing Map. IEEE, Proceedings of the Int'l Joint Conference on Neural Networks, pp. VI-15-VI-19.
- FERREIRA, J G, BRICKER, S B, SIMAS, T. C., 2007. Application and sensitivity testing of a eutrophication assessment method on coastal systems in the United States and European Union. J Environ Manage 82, pp. 433–445.
- FINCKE, T., LOBO, V., BACAO, F., 2008. Visualizing self-organizing maps with GIS. GI days
- FISCHLER, M. A. AND FIRSCHEIN, O., 1987. Intelligence-The Eye, The Brain, and The Computer. Massachusetts, Addison - Wesley.
- FISHER, R.A., 1936. The use of multiple measurements in taxonomic problems. Annual Eugenics, 7, Part II, pp. 179-188.
- FORT, J.C. 2006. SOM's mathematics. Elsevier, Neural Networks 19 (2006), pp. 812-816.

- GIRAUDEL, J. L., LEK, S., 2001. A comparison of self-organizing map algorithm and some conventional statistical methods for ecological community ordination. Elsevier, Ecological Modelling 146, pp. 329-339.
- HAMMER, Ø., HARPER, D. A. T., RYAN, D. P., 2001. PAST: paleontological statistics software package for education and data analysis. Palaeontological Association 22.
- HARALABOUS, J., GEORGAKARAKOS, S., 1996. Artificial neural networks as a tool for species identification of fish schools. ICES, Journal of Marine Science, 53, pp. 173-180.
- HAYKIN, S., 1999. Neural networks - A comprehensive foundation (2nd ed.). Prentice-Hall.
- HUBEL D. H., WIESEL, T. N., 1962. Receptive fields, binocular interaction and functional architecture in the cat's visual cortex. Journal of Physiology 160, pp 106-154.
- IGNATIADES, L., KARYDIS, M., VOUNATSOU, P., 1992. A possible method for evaluating oligotrophy and eutrophication based on nutrient concentration scales. Mar Pollut Bull 24, pp, 238-243.
- JIANG, Y., XU, Z., YIN, H., 2006. Study on improved BP Artificial Neural Networks in Eutrophication assessment of China eastern lakes. Journal of Hydrodynamics, Vol. 18, pp. 528-532.
- KAAS J. H., MERZENICH M. M., KILLACKEY H. P., 1983. The reorganization of the somatosensory cortex peripheral nerve damage in adult and developing mammals. Annu. Re, Neurosci 6, pp. 325-356.
- KARUL, C., SOYUPAK, S., ÇİLESİZ, A. F., AKBAY, N., GERMEN, E., 2000. Case studies on use of neural networks in eutrophication modeling. Ecological Modeling Vol. 134, pp. 145-152.
- KALTEH, A.M., HJORTH, P., BERNDTSSON, R., 2008. Review of the self-organizing map (SOM) approach in water resources: Analysis, modelling and application. Elsevier, Modelling & Software 23 (2008), pp. 835-845.
- ΚΙΤΣΙΟΥ, Δ., 1997. Αξιολόγηση μεθόδων ανάλυσης για την ποσοτική εκτίμηση του θαλάσσιου ευτροφισμού. Τμήμα Περιβάλλοντος, Παν/μιο, Αιγαίου, Διδακτορική διατριβή.
- KITSIOU, D, COCCOSSIS H, KARYDIS M., 2002. Multi-dimensional evaluation and ranking of coastal areas using GIS and multiple criteria choice methods. Sci Total Environ 284, pp. 1-17.
- KITSIOU, D., KARYDIS, M., 2011. Coastal marine eutrophication assessment: A review on data analysis, Environ Int.
- KOHONEN, T., 1988. An Introduction to Neural Computing. Pergamon Journals, Neural Networks, Vol. 1, pp. 3-16.
- KOHONEN, T., 1990. The Self-Organizing Map. Proceedings of the IEEE, Vol. 78, No. 9, September 1990.

- KOHONEN, T., 1993. Physiological Interpretation of the Self-Organizing Map Algorithm. Pergamon Press, Neural Networks, Vol. 6, pp. 895-905.
- KOHONEN, T., 1998. The self-organizing map. Elsevier, Neurocomputing 21, pp. 1-6.
- KOHONEN, T., 2001. Self-Organizing Maps - 3rd edition. Springer.
- KOHONEN, T., HYNINEN, J., KANGAE, J., LAAKSONEN, J., 1995. SOM_PAK: The Self-Organizing Map Program Package. Helsinki University of Technology, Laboratory of Computer and Information Science, Finland.
- KOHONEN, T., KASKI, S., 1996. Exploratory data analysis by the self-organizing map: Structures of welfare and poverty in the world. World Scientific, Singapore, Proceedings of The Third International Conference on Neural Networks in the Capital Markets, London, England, 11-13 October 1995, pp. 498-507.
- KOHONEN, T., 1989. Self-Organization and Associative Memory, 3rd ed. Heidelberg: Springer.
- KUO, J. T., HSIEH, M. H., LUNG, W. S., SHE, N., 2007. Using artificial neural network for reservoir eutrophication prediction. Ecological Modelling Vol. 200, pp. 171-177.
- LEE, J.H.W., HUANG, Y., DICKMAN, M., JAYAWARDENA, A.W., 2003. Neural network modeling of coastal algal blooms. Elsevier, Ecological Modeling 159, pp. 179-201.
- LEK, S., GUÉGAN, J. F., 1999. Artificial neural networks as a tool in ecological modeling, an introduction. Elsevier, Ecological Modelling 120, pp. 65-73.
- MAS, J. F. AND FLORES, J. J., 2008. 'The application of artificial neural networks to the analysis of remotely sensed data', International Journal of Remote Sensing, 29, pp. 617-663
- MAYER, R., AZIZ, T.A., RAUBER, A.. Visualising Class Distribution on Self-Organising Maps.
- MENDEL, J. M., MCLAREN, R. W., 1970. Reinforcement-Learning Control and Pattern Recognition Systems. Mathematics in Science and Engineering Vol. 66, pp.287-318.
- MICHELAKAKI M. AND KITSIOU D., 2005. Estimation of anisotropies in chlorophyll-*a* spatial distributions based on satellite data and variography. Global NEST Journal, Vol. 7, pp. 204-211).
- MITRA, S., PAL, S.K., 1994. Self-Organizing Neural Network As A Fuzzy Classifier. IEEE, Transaction on Systems, Man and Cybernetics, Vol. 24, No. 3
- MORRILL, D. C., SWISHER, J. M., 2008. Traits 3 User Manual Release 3.2.1. Enthough.
- MURTAGH, F. 1995. Interpreting the Kohonen self-organizing feature map using contiguity-constrained clustering. Elsevier, Pattern Recognition Letters 16, pp. 399-408.
- OJA, E., KASKI, S., 1999. Kohonen Maps. Elsevier.

- PANDIT, Y. P., PADHE, Y. P., SHARMA, B. K., TAMBLE, S. S., KULKARNI, B. D., 2010. Classification of Indian power coals using K-means clustering and Self Organizing Map neural network. Elsevier, Fuel 90, pp. 339-347.
- PEÑA, M., GEORGAKARAKOS, S., BOYRA, G., 2008. Visualisation of the clustering of acoustic echotraces using Topology Preserving Mapping. Application to juvenile anchovy in the Bay of Biscay. *ICES CM2008/R:15*, 17 pp.
- PRIMPAS, I., KARYDIS, M., 2010. Improving statistical distinctness in assessing trophic levels: the development of simulated normal distributions. Springer, Environ Monit Assess, 169, pp. 353-365.
- PRIMPAS, I., TSIRTIS, G., KARYDIS, M., KOKKORIS, G.D., 2010. Principal component analysis: Development of a multivariate index of assessing eutrophication according to the European water framework directive. Elsevier, Ecological Indicators 10, pp. 178-183.
- PYTHON SOFTWARE FOUNDATION, 2011. Documentation of Python v2.7.2. <<http://docs.python.org/>>.
- RECKNAGEL, F., FRENCH, M., HARKONEN, P., YABUNAKA, K.I., 1997. Artificial neural network approach for modelling and prediction of algal blooms. Elsevier, Ecological Modelling 96, pp. 11-28.
- RICHARDSON, A. J., PFAFF, M. C., FIELD, J. G., SILULWAVE, N. F., SHILLINGTON, F. A., 2002. Identifying characteristic chlorophyll α profiles in the coastal domain using an artificial neural network. Oxford University Press, Journal of Plankton Research, Vol. 24, No. 12, pp. 1289-1303.
- RITTER, H., KOHONEN, T., 1989. Self-organizing semantic maps. Biological Cybernetics, 61:241-254.
- RITTER, H., MARTINETZ, T., AND SCHULTEN, K., 1992. Neural Computation and Self-Organizing Maps: An Introduction. Addison-Wesley, Reading, MA.
- ROJAS, R., 1996. Neural Networks: A Systematic Introduction. Springer-Verlag.
- RUSSEL, S., NORVIG, P., 2010. Artificial Intelligence, A Modern Approach 3rd edition. Pearson Education, Upper Saddle River, New Jersey, USA.
- SUGA N., 1965. Functional properties of auditory neurones in the cortex of echo-locating bats. J Physiol 181, pp. 671-700.
- SUGANTHAN, P.N., 2001. Pattern classification using multiple hierarchical overlapped self-organizing maps. Pergamon, Pattern Recognition 34 (2001), pp. 2173-2179.
- UNEP, 2003. Eutrophication monitoring and strategy of MED POL. Athens: UNEP(DEC)/MED. WG.231/14.
- VON DER MALSBURG, C., 1973. Self-organization of orientation sensitive cells in the striate cortex. Kybernetik, 14, pp. 85-100.

- VON DER MALSBERG, C., 1990. Network self-organization. In: An Introduction to Neural and Electronic Networks. S.F. Zornetzer, J. Davis and C. Lau, Eds., Academic Press, pp. 421-432.
- WALTER ,J. AND RITTER H., 1996. Rapid learning with parametrized self-organizing maps. Elsevier, Neurocomputing 12, pp. 131-153.
- WANG, Y., LI, S., 2011. Simulating multiple class urban land-use/cover changes by RBFN-based CA model. Elsevier, Computers and Geosciences 37, pp. 111-121.
- WARWICK R.M., CARR M.R., CLARKE K.R., GEE J.M., GREEN R.H.. 1988. A mesocosm experiment on the effects of hydrocarbon and copper pollution on a sublittoral soft-sediment meiobenthic community. Mar Ecol Prog 46, pp. 181–191.
- XU FL, TAO S, DAWSON RW, LI BG., 2001. A GIS-based method of lake eutrophication assessment. Ecol Model 144.
- ZIADÉ, T., 2008. EXPERT Python Programming. Packt Publishing, Burmingham, UK.
- ZITKO V., 1994. Principal component analysis in the evaluation of environmental data. Mar Pollut Bull 28, pp. 718–722.
- ZOU, R., LUNG, W. S., WU, J., 2009. Multiple-pattern parameter identification and uncertainty analysis approach for water quality modeling. Elsevier, Ecological Modelling 220, pp. 621-629.

6 Παράρτημα

A. Σκελετός του προγράμματος enviSOM

class Setup

σε αυτό το αντικείμενο γίνεται η εισαγωγή των αρχικών παραμέτρων του δικτύου από τον χρήστη

-*variables*-

normalize : τιμές **True** ή **False**, δηλώνει την επιλογή για το εάν θα κοινωνικοποιούν ή όχι τα δεδομένα που εισάγονται

standardize:τιμές **True** ή **False**, δηλώνει την επιλογή για το εάν θα στανταροποιηθούν ή όχι τα δεδομένα που εισάγονται

cols : τιμές ακέραιες, δηλώνει τον αριθμό στηλών που θα έχει το επίπεδο εξόδου του δικτύου

rows: τιμές ακέραιες, δηλώνει τον αριθμό στηλών που θα έχει το επίπεδο εξόδου του δικτύου

iterations: τιμές ακέραιες, δηλώνει τον αριθμό επαναλήψεων για τις οποίες θα εκτελεστεί ο αλγόριθμος εκπαίδευσης

param_num: τιμές ακέραιες, δηλώνει τον αριθμό παραμέτρων που εισάγονται

kmeans_cls: τιμές ακέραιες, δηλώνει τον αριθμό κλάσεων για τον αλγόριθμο kmeans

distance_t : δηλώνει τον τύπο του μέτρου απόστασης

class Output

σε αυτό το αντικείμενο το πρόγραμμα αποθηκεύει και προβάλλει κάποια στοιχεία κατά την διάρκεια της εκπαίδευσης

-*variables*-

station_name, win_row, win_col, current_iter

class ActivationMap

σε αυτό το αντικείμενο αποθηκεύεται η πληροφορία για το ποιους νευρώνες και πόσες φορές ενεργοποιεί κάθε διάνυσμα εισόδου

-*variables*-

activationmap, activationmapExpanded, station_names, row_even, col_even,

initialized

-*methods*-

initialize, write, findstation, expand

class Hexagon

αυτό το αντικείμενο ορίζει ένα εξάγωνο συναρτήσει του μήκους τις ακμής του

-*variables*-

sid, sin_yo, cos_yo, hei, rs

-*methods*-

[_get_hei](#), [_get_rs](#)

class HexGrid

αυτό το αντικείμενο δημιουργεί το πλέγμα στο οποίο είναι διατεταγμένοι οι νευρώνες

-*variables*-

hexagon

-*methods*-

[hexcord](#), [create_hexgrid](#), [create_expanded_hexgrid](#)

class Network

σε αυτό το αντικείμενο ορίζονται οι συναρτήσεις του αλγορίθμου KSOM καθώς και μερικές βοηθητικές συναρτήσεις

-*methods*-

x : η μέθοδος αυτή παίρνει με τυχαίο τρόπο ένα διάνυσμα από το σύνολο των δεδομένων και το επιστρέφει σαν είσοδο στο δίκτυο

a : η μέθοδος αυτή υπολογίζει την τιμή της παραμέτρου εκμάθησης για την χρονική στιγμή n

s : η μέθοδος αυτή υπολογίζει την τιμή του εύρους σ της συνάρτησης γειτονίας για την χρονική στιγμή n

h : η μέθοδος αυτή υπολογίζει την τιμή της συνάρτησης γειτονίας για κάθε νευρώνα στο πλέγμα με κέντρο τον νικητή νευρώνα

d : η μέθοδος αυτή υπολογίζει την τιμή του μέτρου απόστασης που έχει επιλεγεί από τον χρήστη μεταξύ του διανύσματος εισόδου και όλων των νευρώνων στο δίκτυο

r : η μέθοδος αυτή υπολογίζει την απόσταση μεταξύ του διανύσματος θέσης του νικητή νευρώνα με όλους τους υπόλοιπους στο πλέγμα εξόδου

reweight : η μέθοδος αυτή είναι υπεύθυνη για την προσαρμογή των βαρών του κάθε νευρώνα σύμφωνα με τις επιμέρους παραμέτρους

normalize : η μέθοδος αυτή κανονικοποιεί το σύνολο των δεδομένων

standardize : η μέθοδος αυτή στανταροποιεί το σύνολο των δεδομένων

mqrerr : μέθοδος αυτή υπολογίζει το μέσο κβαντισμένο σφάλμα (mean quantized error)

class Umatrix

οι μέθοδοι αυτού του αντικειμένου χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό 2 τύπων του Πίνακα Ενοποιημένης Απόστασης, μέσης τιμής και κατεύθυνσης

-*variables*-

uma, umatrix, h_row_str, h_col_str, col_even, row_even, distance_t, hexgrid, network, rs, hei, sid

-*methods*-

[initialize](#), [create](#), [r2](#), [createUmatrix](#)

class Plotter

στο αντικείμενο αυτό ορίζονται οι μέθοδοι που παράγουν τα διάφορα γραφήματα

-*variables*-

Win, winStr, sizer, iter_num, hexagon, size

-*methods*-

[initialize](#), [plotmqe](#), [createplot](#), [createmap](#)

class Mapper

το αντικείμενο αυτό δημιουργεί τον τελικό χάρτη της περιοχής μελέτης

-*variables*-

cover, land, nodata, nrows, ncols, tools, distance_t

-*methods*-

[initialize](#), [createmap](#)

class ControlPanel

το αντικείμενο αυτό συνθέτει γραφικά τα επιμέρους κομμάτια του προγράμματος και περιέχει μεθόδους για την λειτουργία του καθώς και για την εκτέλεση του αλγορίθμου KSOM

-*variables*-

setup, dataset, chla, ppo4, nno3, output, network, hexgrid, umatrix, activationmap, plotter, mapper, mplwidget, rows, columns, exprows, expcols, row_even, col_even, run, mqebut, initweights, plot, umat, kmeans, createmap, weights, stations, classes, mqe

-*methods*-

[_initweights_fired](#), [_run_fired](#), [_mqebut_fired](#), [_plot_fired](#), [_umat_fired](#), [_kmeans_fired](#), [_createmap_fired](#)

class MainWindow

αυτό είναι το αντικείμενο που δημιουργεί το τελικό παράθυρο της διεπαφής ενώνοντας το αντικείμενο ControlPanel και MPLwidget, το αντικείμενο MPLwidget δημιουργεί και διαχειρίζεται την περιοχή σχεδίασης

-*variables*-

Mplwidget, panel, ratio

-*methods*-

_create_lhs, _create_rhs, _on_close