

ΤΑ ΤΕΧΝΗΤΑ ΝΕΥΡΩΝΙΚΑ ΔΙΚΤΥΑ ΣΤΗΝ ΕΠΙΣΤΗΜΗ ΤΗΣ ΜΕΤΡΟΛΟΓΙΑΣ ΤΟ ΠΑΡΟΝ ΚΑΙ ΤΟ ΜΕΛΛΟΝ

Αλεβιζάκου Ελένη-Γεωργία, Πανταζής Γεώργιος
Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο – Σχολή Αγρονόμων και Τοπογράφων Μηχανικών
e-mail: gpanta@central.ntua.gr

Περίληψη

Τα Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα (Artificial Neural Networks, ANNs) ανήκουν στην ευρύτερη κατηγορία της Υπολογιστικής Νοημοσύνης, η οποία αποτελεί σήμερα έναν από τους σημαντικότερους και ταχύτατα εξελισσόμενους κλάδους της πληροφορικής γενικότερα αλλά και της Τεχνητής Νοημοσύνης ειδικότερα. Παρόλο που αρχικά ξεκίνησε η χρήση τους μόνον στον τομέα της νευροεπιστήμης, εδώ και περίπου μισό αιώνα τα ΤΝΔ χρησιμοποιούνται ευρέως σε διάφορες επιστημονικές περιοχές όπως η ιατρική, η οικονομία, η άμυνα, η μετεωρολογία, οι κατασκευές, η βιολογία κ.ά.

Επιπλέον, τα ΤΝΔ εκτός από την εισαγωγή τους σε πολλές επιστημονικές περιοχές έχουν και πολλά πεδία εφαρμογής όπως είναι η ταξινόμηση, η ομαδοποίηση, η προσέγγιση συναρτήσεων κ.ά.

Στην παρούσα εργασία γίνεται μια συνοπτική παρουσίαση του τρόπου λειτουργίας των ΤΝΔ.

Πραγματοποιείται μια συστηματική έρευνα και καταγραφή της χρήσης τους στα διάφορα πεδία της επιστήμης της Μετρολογίας, τόσο στις φυσικές όσο και στις χημικές μετρήσεις και αναλύσεις. Διαπιστώνεται ότι η τεχνική των ΤΝΔ, χρησιμοποιείται τα τελευταία χρόνια στη νανομετρολογία, στη βελτίωση ειδικών συσκευών laser, για τη μέτρηση διαστάσεων μικροαντικειμένων. Χρησιμοποιείται επίσης για τον προσδιορισμό – πρόβλεψη των διορθώσεων που πρέπει να γίνονται στις τιμές του παγκόσμιου συντονισμένου χρόνου UTC. Επίσης η χρήση των ΤΝΔ συναντάται και στην επιστημονική περιοχή της κλινικής μετρολογίας, για τη βελτίωση της διαγνωστικής διαδικασίας, ενώ συστηματικά ενσωματώνονται με τη μορφή λογισμικών σε ειδικούς βιοαισθητήρες που χρησιμοποιούνται για την ανίχνευση των υπολειμμάτων φυτοφαρμάκων, βελτιώνοντας τα αποτελέσματα των μετρήσεων.

Τέλος, παρουσιάζονται τομείς της Μετρολογίας στους οποίους θα μπορούσε εναλλακτικά ή και συμπληρωματικά με άλλες μεθόδους, να χρησιμοποιηθεί η τεχνική των νευρωνικών δικτύων.

Λέξεις-Κλειδιά: Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα, νανομετρολογία, κλινική μετρολογία, ταξινόμηση

Ελένη – Γεωργία Αλεβιζάκου, Γεώργιος Πανταζής, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο – Σχολή Αγρονόμων και Τοπογράφων Μηχανικών
Τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα στην επιστήμη της Μετρολογίας. Το παρόν και το μέλλον

Abstract

Artificial Neural Networks (ANNs) are part of the wider category of Computational Intelligence, which today constitutes one of the most important and most rapid developing fields not only in the computer science in general but also in the Artificial Intelligence. Even if initially their use started only in the sector of neuroscience, now the ANNs are widely used in various scientific regions such as medicine, economy, defence, meteorology, manufactures, biology etc. Moreover ANNs except from their import in many different scientific regions, they also have many different applications such as classification, regrouping, approach of interrelations etc.

This study presents the main aspects of the ANNs' structure and their modus operenti. A systematic research of their use in various fields of Metrology, both in the fields of natural and chemical measurements and analyses, is performed.

After this research it was found that ANNs have already been used in nanometrology, and more specifically in the improvement of some special laser appliances which measures small objects' dimensions. Moreover, they have been already used in the determination - forecast of corrections in the values of the world coordinated time UTC. The use of ANNs is also met in the scientific region of clinical Metrology, for the improvement of diagnostics of process, while they are systematically incorporated as softwares in special biosensors, which are used in the detection of remains of pesticides improving the results of measurements. Finally, scientific areas of the Metrology, in which the technique of ANN could be used alternatively or complementary with other methods, are presented.

1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Μέσα σε μια περίοδο τεχνολογικής ανάπτυξης άρχισε να υλοποιείται και η ιδέα να κατασκευαστούν μηχανές, οι οποίες θα υιοθετούσαν ανθρώπινες συμπεριφορές και θα λειτουργούσαν με λογική σκέψη [Hassoun, 1995]. Εδώ και 70 χρόνια, ξεκίνησε η προσπάθεια κατανόησης και μοντελοποίησης του ανθρώπινου εγκεφάλου περνώντας από διάφορες φάσεις. Το πρώτο μοντέλο ενός νευρωνικού δικτύου δημιουργήθηκε το 1943 από τον ψυχίατρο και νευρολόγο Warren McCulloch και τον μαθηματικό Walter Pitts, οι οποίοι συνέταξαν μια εργασία για το πώς μπορεί να λειτουργούν οι νευρώνες του ανθρώπινου εγκεφάλου [McCulloch W.S. and Pitts W., 1943]. Αυτή θεωρείται ιστορικά η πρώτη εικόνα ενός νευρωνικού δικτύου. Από εκείνη την στιγμή και μετά ξεκίνησε η άνθηση του τομέα των Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων και η είσοδός τους σε έναν μεγάλο αριθμό άλλων επιστημών όπως η ιατρική, η οικονομία κ.ά.

Τεχνητό νευρωνικό δίκτυο (artificial neural network, ΤΝΔ) ονομάζεται μία αρχιτεκτονική δομή αποτελούμενη από ένα πλήθος διασυνδεδεμένων μονάδων (nodes). Κάθε μονάδα (τεχνητός νευρώνας) χαρακτηρίζεται από εισόδους και εξόδους και υλοποιεί τοπικά έναν απλό υπολογισμό. Κάθε σύνδεση μεταξύ δύο μονάδων χαρακτηρίζεται από μία τιμή βάρους. Οι τιμές των βαρών των συνδέσεων αποτελούν τη γνώση που είναι αποθηκευμένη στο δίκτυο και καθορίζουν τη λειτουργικότητά του. Η έξοδος κάθε μονάδας καθορίζεται από τον τύπο της μονάδας, τη διασύνδεση με τις υπόλοιπες μονάδες και πιθανώς κάποιες εξωτερικές εισόδους. Εκτός από μία πιθανή δεδομένη (εκ κατασκευής) λειτουργική ικανότητα ενός δικτύου, συνήθως ένα τεχνητό νευρωνικό δίκτυο αναπτύσσει μία συνολική λειτουργικότητα μέσω μίας μορφής εκπαίδευσης.

Ελένη – Γεωργία Αλεβιζάκου, Γεώργιος Πανταζής, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο – Σχολή Αγρονόμων και Τοπογράφων Μηχανικών

Τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα στην επιστήμη της Μετρολογίας. Το παρόν και το μέλλον

Είναι φρόνιμο εδώ να αναφερθεί πως τα ΤΝΔ δεν έχουν αντικαταστήσει ήδη υπάρχουσες τεχνολογίες και κλασσικές μεθόδους, αλλά δρουν συνδυαστικά με αυτές. Ωστόσο έχουν δημιουργήσει μεγάλες προσδοκίες, χωρίς να θεωρούνται η λύση των πάντων.

Τέλος, πρέπει να τονιστεί πως για τον σχεδιασμό και την υλοποίηση ενός ΤΝΔ δεν υπάρχουν σαφείς κανόνες, οι οποίοι πρέπει να ακολουθούνται, γεγονός που δημιουργεί μια δυσκολία στη χρήση τους, καθώς η εμπειρία του "σχεδιαστή" έχει σημαίνοντα ρόλο.

2. ΠΕΡΙ ΤΕΧΝΗΤΩΝ ΝΕΥΡΩΝΙΚΩΝ ΔΙΚΤΥΩΝ

Τα **Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα** (ΤΝΔ ή Artificial Neural Networks, ANNs), αποτελούν μια προσπάθεια προσέγγισης ή και προσομοίωσης (simulation) της λειτουργίας του ανθρώπινου εγκεφάλου από μια μηχανή. Ο τρόπος λειτουργίας τους βασίζεται στα βιολογικά νευρωνικά δίκτυα, στηρίζοντας τη φιλοσοφία τους σε αυτά, δημιουργώντας σήμερα μία ολόκληρη επιστήμη. Ανήκουν στην ευρύτερη κατηγορία της Υπολογιστικής Νοημοσύνης (Computational Intelligence) μαζί με την Λογική της Ασάφειας (Fuzzy Logic), τα Έμπειρα Συστήματα (Expert Systems) και τους Γενετικούς Αλγόριθμους (Genetic Algorithms).

Κίνητρο για την έρευνα αυτής της προσομοίωσης αποτέλεσαν οι βασικές ιδιότητες των βιολογικών συστημάτων και συγκεκριμένα η ανοχή στα λάθη, η ικανότητα αναγνώρισης από τα συμφοραζόμενα, η μεγάλη χωρητικότητα μνήμης και η ικανότητα επεξεργασίας μεγάλου όγκου πληροφοριών σε πολύ μικρό χρόνο.

Η μέθοδος της προσομοίωσης (simulation) προϋποθέτει τον προγραμματισμό ενός υπολογιστή ώστε να συμπεριφέρεται κατά το δυνατό πλησιέστερα προς ένα φυσικό σύστημα όπως ο εγκέφαλος. Το πρόγραμμα προσομοίωσης ονομάζεται και υπολογιστικό πρότυπο ή μοντέλο. Ένα υπολογιστικό πρότυπο μπορεί να προέρχεται από την υλοποίηση ενός μαθηματικού συστήματος εξισώσεων ή ενός αλγορίθμου. Ακολουθώντας τα παραπάνω πρότυπα έχουν γίνει διάφορες προσπάθειες κατασκευής ηλεκτρονικών συστημάτων που έχουν δομή ανάλογη με εκείνη του εγκεφάλου. Τα πλέον διαδεδομένα από αυτά τα συστήματα είναι τα ΤΝΔ [State L. Et al, 2002]. Συνεπώς *"Ένα τεχνητό νευρωνικό δίκτυο αποτελεί προσομοίωση του βιολογικού εγκεφάλου με στόχο να μαθαίνει να αναγνωρίζει μαθηματικά πρότυπα σε συγκεκριμένα δεδομένα. Είναι επομένως ένα υπολογιστικό σύστημα που εκτελεί ορισμένες από τις λειτουργίες των πραγματικών νευρωνικών δικτύων."* [Openshaw and Openshaw, 1997].

Τη βάση σχεδιασμού ενός ΤΝΔ αποτελεί ο *Τεχνητός Νευρώνας* (Artificial Neuron) καθώς αποτελεί τη βασική μονάδα επεξεργασίας των διαθέσιμων πληροφοριών. Οι νευρώνες αυτοί είναι οργανωμένοι σε επίπεδα με αποτέλεσμα κάθε ΤΝΔ να αποτελείται από :το *επίπεδο εισόδου* (input layer), τα *κρυφά επίπεδα* (hidden layers) και το *επίπεδο εξόδου* (output layer).

Για να χρησιμοποιηθεί ένα ΤΝΔ πρέπει πρώτα να εκπαιδευτεί για να μάθει. Η εκπαίδευση (training) πραγματοποιείται με τη βοήθεια αλγορίθμων που είναι γνωστοί ως κανόνες μάθησης ή αλγόριθμοι εκπαίδευσης. Χρησιμοποιούνται σύνολα δεδομένων: τα *δεδομένα εκπαίδευσης* (training data), *επαλήθευσης-αξιολόγησης* (validation data) και *εφαρμογής-δοκιμής* (test data).

Τα πλέον γνωστά και ευρέως χρησιμοποιούμενα ΤΝΔ είναι αυτά χωρίς ανατροφοδότηση π.χ. τα πρόσθιας τροφοδότησης (feed-forward networks) ΤΝΔ πολλών επιπέδων (feedforward multilayer Neural Networks, MLPs). Η εκπαίδευση τους βασίζεται στον αλγόριθμο οπισθοδιάδοσης του σφάλματος (error back propagation algorithm) [Werbos

Ελένη – Γεωργία Αλεβιζάκου, Γεώργιος Πανταζής, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο – Σχολή Αγρονόμων και Τοπογράφων Μηχανικών

Τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα στην επιστήμη της Μετρολογίας. Το παρόν και το μέλλον

1974, Rumelhart E. Et al 1986] και χρησιμοποιείται η διαδικασία εκπαίδευσης με επίβλεψη.

Η επιλογή του καταλληλότερου ΤΝΔ για την επίλυση ενός συγκεκριμένου προβλήματος πραγματοποιείται ύστερα από αρκετές δοκιμές και αλλαγές στον σχεδιασμό του έτσι ώστε τελικά να ικανοποιούνται κάποια κριτήρια. Οι δοκιμές αυτές μπορεί να αφορούν τόσο στην αρχιτεκτονική (δηλαδή δίκτυα πρόσθιας τροφοδότησης ή αναδρομικά δίκτυα) του δικτύου που θα επιλεγεί όσο και στον αριθμό των κρυφών επιπέδων, των κρυφών νευρώνων, τον αλγόριθμο εκπαίδευσης αλλά και την συνάρτηση ενεργοποίησης των κρυφών νευρώνων και των νευρώνων εξόδου. Τα κυριότερα κριτήρια τα οποία χρησιμοποιούνται για την αξιολόγηση ενός ΤΝΔ είναι το μέσο τετραγωνικό σφάλμα (MSE), η ρίζα του μέσου τετραγωνικού σφάλματος (RMSE) και ο συντελεστής συσχέτισης (R).

3. ΧΡΗΣΗ ΤΩΝ ΤΕΧΝΗΤΩΝ ΝΕΥΡΩΝΙΚΩΝ ΔΙΚΤΥΩΝ ΣΕ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΤΗΣ ΜΕΤΡΟΛΟΓΙΑΣ

Η χρήση των ΤΝΔ ξεκίνησε από τον τομέα της νευροεπιστήμης αλλά έχει πλέον επεκταθεί σε πολλές επιστημονικές περιοχές όπως η Ιατρική, η Οικονομία, τα Μαθηματικά, οι Φυσικές επιστήμες αλλά και οι επιστήμες των μηχανικών κ.α. Η ευρεία αυτή αξιοποίηση τους για την επίλυση διάφορων προβλημάτων σε διαφορετικούς επιστημονικούς τομείς, οδήγησε στην χρήση των ΤΝΔ και στην επιστημονική περιοχή της Μετρολογίας, γεγονός που παρουσιάζει ιδιαίτερο ενδιαφέρον για την έρευνα. Έτσι σήμερα τα ΤΝΔ χρησιμοποιούνται στην Νανομετρολογία, για τον προσδιορισμό – πρόβλεψη των διορθώσεων που πρέπει να γίνονται στις τιμές του παγκόσμιου χρόνου UTC, για τον προσδιορισμό της ποσότητας των φυτοφαρμάκων στο έδαφος αλλά και σε ευρύτερες περιοχές όπως ο προσδιορισμός της μσθ και ο έλεγχος μετακινήσεων του στερεού φλοιού της γης ή τεχνητών κατασκευών.

3.1. Τα ΤΝΔ στη Νανομετρολογία

Νανομετρολογία αποκαλείται η επιστήμη των μετρήσεων όταν αυτές αναφέρονται στην νανο-κλίμακα και περιλαμβάνει μετρήσεις μήκους όπου η αβεβαιότητα μέτρησης είναι συχνά μικρότερη από $\pm 1\text{nm}$, αλλά και μετρήσεις δύναμης, μάζας και ηλεκτρικών ιδιοτήτων, με αντίστοιχα συστήματα. Ωστόσο οι μετρήσεις με τέτοιες απαιτήσεις ακρίβειας επηρεάζονται από διάφορους εξωτερικούς παράγοντες όπως οι περιβαλλοντικές διακυμάνσεις δηλαδή οι δονήσεις και η θερμοκρασία. Η δυνατότητα μέτρησης των εξωτερικών επιδράσεων αλλά και η ελαχιστοποίησή τους έχει επομένως τεράστια σημασία.

Η ανάπτυξη της βιομηχανίας των ημιαγωγών για τη δημιουργία συσκευών και κυκλωμάτων σε μέγεθος νανόμετρου επιζητά τη βελτίωση της ακρίβειας. Το γεγονός αυτό αποτέλεσε το κίνητρο για την είσοδο των ΤΝΔ στην νανομετρολογία και συγκεκριμένα στα laser συμβολόμετρα (interferometers), τα οποία και χρησιμοποιούνται ευρέως σε μετρήσεις μετατοπίσεων μεγάλης ακρίβειας όπως στην προηγμένη κατασκευή ημιαγωγών για τη φωτολιθογραφία, στη μέτρηση μετατοπίσεων κ.α.

Τα συμβολόμετρα είναι διατάξεις στις οποίες μέσω μιας διαφοράς φάσης επιτυγχάνεται διαφοροποίηση του πλάτους του σήματος εξόδου σύμφωνα με το φαινόμενο της

Ελένη – Γεωργία Αλεβιζάκου, Γεώργιος Πανταζής, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο – Σχολή Αγρονόμων και Τοπογράφων Μηχανικών

Τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα στην επιστήμη της Μετρολογίας. Το παρόν και το μέλλον

συμβολής κυμάτων. [Μπίντζας Χ. Ε. κ.α. 2003, Torptchiyski G. O. 2002, Tajima K. et.al. 2001]

Ο σημαντικότερος παράγοντας είναι η περιοδική μη γραμμικότητά τους (periodic nonlinearity). Έτσι πραγματοποιείται η πρώτη είσοδος των ΤΝΔ στην νανομετρολογία και συγκεκριμένα στην μοντελοποίηση αυτής της μη γραμμικότητας.

Έχουν γίνει διάφορες προσπάθειες μοντελοποίησης της μη γραμμικότητας των laser συμβολόμετρων και συνεπώς της μοντελοποίησης και της διόρθωσης του σφάλματός της. Η πρώτη μοντελοποίηση με χρήση ΤΝΔ αναφέρεται σε ένα ομοδύναμο συμβολόμετρο (homodyne interferometer) [Li Z. et. al, 2003]. Αργότερα δημοσιεύθηκαν αρκετές εργασίες με αντικείμενο τη χρήση των ΤΝΔ σε διάφορα είδη συμβολόμετρων, καθώς διαπιστώθηκε πως χάρη σε αυτά προκύπτουν αξιόλογα αποτελέσματα χωρίς να είναι απαραίτητο να χρησιμοποιούνται πολύπλοκες υπολογιστικές διαδικασίες. Επιπλέον, διαπιστώθηκε πως τα ΤΝΔ συγκρινόμενα με τις συμβατικές μεθόδους οδηγούν στη δημιουργία μικρότερου θορύβου και λιγότερων πρόσθετων σφαλμάτων. Επίσης ένα ΤΝΔ εφαρμόστηκε για να αντισταθμίσει την μη γραμμικότητα σε ένα συμβατικό ετεροδύναμο (heterodyne) συμβολόμετρο [Heo et al, 2007]. Για ένα υψηλής ακρίβειας ετεροδύναμο laser συμβολόμετρο, μοντελοποιήθηκε η μη γραμμικότητα και η διόρθωση του σφάλματος που προκύπτει από αυτή. Στην περίπτωση αυτή χρησιμοποιήθηκε ένα πολυεπίπεδο δίκτυο με πρόσθια τροφοδότηση (Multilayer feed-back network, MLP), ένα δίκτυο ακτινικών συναρτήσεων βάσης (radial basis function networks, RBF) αλλά και μια μέθοδο συσσωρευμένης γενίκευσης (stacked generalization method) για την βελτίωση της απόδοσης των δύο προηγούμενων. [Olyee S., 2010]

Συγκεκριμένα στην περίπτωση του MLP χρησιμοποιήθηκε ως συνάρτηση ενεργοποίησης (activation function) ή αλλιώς συνάρτηση μεταφοράς (transfer function) η σιγμοειδής συνάρτηση (sigmoid function). Παρουσιάστηκαν τα αποτελέσματα ενός δικτύου αρχιτεκτονικής $2 \times 15 \times 6 \times 1$ (δηλαδή δύο νευρώνες εισόδου, δεκαπέντε στο πρώτο κρυφό επίπεδο έξι στο δεύτερο και ένας νευρώνας εξόδου) που εκπαιδεύτηκε σε 75 εποχές (epochs) και ενός δικτύου $2 \times 15 \times 9 \times 1$ που εκπαιδεύτηκε σε 100 εποχές.

Όσον αφορά το RBF (Radial Basis Function) αποτελεί μια ιδιαίτερη αρχιτεκτονική νευρωνικών δικτύων, η οποία χαρακτηρίζεται από δύο κύρια πλεονεκτήματα την απλότητα της δομής της και την ταχύτητα των αλγορίθμων εκμάθησης που υιοθετεί, για αυτό προφανώς και επιλέχθηκε να δοκιμαστεί και να υλοποιηθεί. Σε αυτή την περίπτωση έγιναν επίσης διάφορες δοκιμές για την επιλογή του καταλληλότερου ΤΝΔ όπως η χρήση 50 κρυφών νευρώνων στο μοναδικό κρυφό επίπεδο ή και 150 κρυφών νευρώνων.

Ωστόσο παρατηρώντας τα αποτελέσματα των παραπάνω δικτύων φάνηκε πως παρουσιάζουν μεγάλα σφάλματα για αυτό και αποφασίστηκε τελικά να ακολουθηθεί η μέθοδος συσσωρευμένης γενίκευσης. Αυτή η μέθοδος χρησιμοποιεί ήδη εκπαιδευμένα ΤΝΔ παρέχοντας τις περισσότερες φορές βελτιωμένα αποτελέσματα χωρίζοντας τα σε επίπεδα (level). Πρώτα εκπαιδεύονται τα δίκτυα του πρώτου επιπέδου (level-0) και στην συνέχεια τα αποτελέσματα τους εισάγονται ως είσοδοι στα ΤΝΔ του επόμενου επιπέδου (level-1).

Η αξιολόγηση των παραπάνω ΤΝΔ πραγματοποιήθηκε χρησιμοποιώντας ως κριτήριο το μέσο τετραγωνικό σφάλμα (MSE). Τελικά η αβεβαιότητα του προσδιορισμού της μη γραμμικότητας μειώθηκε από $\pm 1.3\text{nm}$ σε $\pm 7.8\text{pm}$.

Ελένη – Γεωργία Αλεβιζάκου, Γεώργιος Πανταζής, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο – Σχολή Αγρονόμων και Τοπογράφων Μηχανικών

Τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα στην επιστήμη της Μετρολογίας. Το παρόν και το μέλλον

3.2. ΤΝΔ στην πρόβλεψη της διόρθωσης του παγκόσμιου συντονισμένου χρόνου UTC

Η διόρθωση του Παγκόσμιου Συντονισμένου χρόνου UTC είναι ένας βασικός τομέας της μετρολογίας στον οποίο βρέθηκε πως έχει ξεκινήσει η έρευνα για την χρήση των ΤΝΔ.

Ερευνάται η χρήση των ΤΝΔ στον προσδιορισμό της διόρθωσης της Πολωνικής κλίμακας χρόνου UTC(PL), η οποία αποτελεί μια τοπική υλοποίηση του παγκόσμιου συντονισμένου χρόνου UTC. Ο UTC(PL) υλοποιείται από το Κεντρικό γραφείο Μετρήσεων (Główny Urząd Miar, GUM) με χρήση ενός ατομικού ρολογιού καισίου Cs2 και μιας συσκευής ελέγχου. [Miczulski W. and Sobolewski L. 2012, Luzar M. et. al 2013] Η ποιότητα της UTC(PL), όπως και όλων των UTC(k) για κάθε χώρα, αξιολογείται με ευθύνη του Διεθνούς γραφείου Μέτρων και Σταθμών (BIMP, Bureau International des Poids et Mesures). Κάθε μήνα το BIMP ορίζει τις διορθώσεις στην απόκλιση της εκάστοτε UTC(k) από την UTC και τις δημοσιεύει στο "Circular T" περίπου την 10^η μέρα του επόμενου μήνα. Η κάθε χώρα ανάλογα με την τάξη αυτής της διόρθωσης αξιολογείται και τοποθετείται σε μια ομάδα. Η καλύτερη ομάδα είναι εκείνη όπου η τιμή της διόρθωσης είναι της τάξης των $\pm 10\text{ns}$, ενώ στις άλλες ομάδες υπάρχουν χώρες όπου οι διορθώσεις είναι της τάξης των $\pm 20\text{ns}$ και $\pm 50\text{ns}$.

Ωστόσο επειδή η δημοσίευση των διορθώσεων αυτών στο "Circular T" πραγματοποιείται με μεγάλη καθυστέρηση η μόνη λύση για την εύρεση των διορθώσεων αυτών εγκαίρως είναι η πρόβλεψή τους. Η πρόβλεψη σήμερα γίνεται από ελάχιστα μετρολογικά εργαστήρια παγκοσμίως. Στην Πολωνία η πρόβλεψη αυτή γίνεται από την GUM και βασίζεται σε μεθόδους αναλυτικής γραμμικής παλινδρόμησης, η οποία απαιτεί πολύ έμπειρο προσωπικό και μεγάλο αριθμό πληροφοριών. Έτσι πραγματοποιήθηκε μια έρευνα για την χρήση ΤΝΔ για την πρόβλεψη της απόκλισης του UTC(PL) από τον UTC με σκοπό να μην ξεπερνά τα $\pm 10\text{ns}$ [Miczulski W. and Sobolewski L., 2012].

Γίνεται η χρήση ενός GMDH (Group Method of Data Handling) ΤΑΝ το οποίο προτιμήθηκε σε σχέση με άλλα περισσότερο ευρέως διαδεδομένα. Ο βασικότερος λόγος είναι ότι τέτοια νευρωνικά δίκτυα επεκτείνονται και εξελίσσονται μόνα τους μέχρι να ενισχυθεί η αποτελεσματικότητά και να επιτευχθεί το βέλτιστο αποτέλεσμα και ανήκουν στην κατηγορία των αυτό-οργανωμένων δικτύων. Η δυνατότητα αυτόματης ρύθμισης της δομής και του αριθμού των κρυφών νευρώνων τα ευνοούν σε σχέση με τα MLP και τα RBF. Επιπλέον σε αυτά εφαρμόζονται μέθοδοι εκπαίδευσης με πρόσθια τροφοδότηση.

Μεγάλη προσοχή δόθηκε στην προετοιμασία των δεδομένων τα οποία θα αποτελούσαν τις εισόδους του νευρωνικού δικτύου ενώ η μοναδική έξοδος είναι η διόρθωση του UTC(PL). Για την προετοιμασία των δεδομένων χρησιμοποιήθηκαν ήδη υπάρχουσες μετρήσεις του UTC(PL), του UTC αλλά και του Cs2 ρολογιού καισίου (clock). Έτσι οι εισοδοί του GMDH προέρχονται από την σχέση : $x(t) = UTC - clock$

Τελικά από την εκπαίδευση του GMDH επιτεύχθηκε πρόβλεψη της διόρθωσης της τάξης των $\pm 7\text{ns}$ πολύ μικρότερη από την πρόβλεψη που πραγματοποιείται από την GUM η οποία είναι της τάξης των $\pm 12\text{ns}$

3.3. Τα ΤΝΔ στην πρόβλεψη της μσθ

Η γνώση της μελλοντικής στάθμης της θάλασσας κοντά στις ακτές έχει μεγάλη σημασία για την προστασία των παράκτιων και χαμηλού υψομέτρου περιοχών, για την παρακολούθηση και πρόβλεψη των αλλαγών στα σύνθετα θαλάσσια οικοσυστήματα, καθώς επίσης και για τον σχεδιασμό και την κατασκευή παράκτιων και υπεράκτιων

Ελένη – Γεωργία Αλεβιζάκου, Γεώργιος Πανταζής, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο – Σχολή Αγρονόμων και Τοπογράφων Μηχανικών

Τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα στην επιστήμη της Μετρολογίας. Το παρόν και το μέλλον

δομών. Στην γεωδαισία ωστόσο η γνώση της είναι εξίσου σημαντική καθώς τα εθνικά υψομετρικά συστήματα είναι συνδεδεμένα με την τοπική μέση στάθμη της θάλασσας, η οποία προκύπτει ύστερα από μετρήσεις από έναν ή περισσότερους παλιρροιογράφους. Σχεδιάστηκε λοιπόν ένα ΤΝΔ [Makarynskiy O. et al., 2004] με σκοπό την πρόβλεψη της ωριαίας διακύμανσης της στάθμης της θάλασσας για ένα χρονικό διάστημα 24 ωρών, όπως επίσης και για ένα 12 ωρών, 5 και 10 ημερών. Οι μετρήσεις που χρησιμοποιήθηκαν για την εκπαίδευση και την αξιολόγηση του δικτύου προέρχονταν από έναν παλιρροιογράφο στην δυτική Αυστραλία και συγκεκριμένα στο Hillarys Boat Harbour για το χρονικό διάστημα από τον Δεκέμβριο του 1991 μέχρι τον Δεκέμβριο του 2002.

Το ΤΝΔ που χρησιμοποιήθηκε ήταν ένα δίκτυο με πρόσθια τροφοδότηση (feed-forward network), το οποίο αποτελείτο από ένα επίπεδο εισόδου, ένα κρυφό επίπεδο και ένα επίπεδο εξόδου. Για το κρυφό επίπεδο χρησιμοποιήθηκε ως συνάρτηση ενεργοποίησης μια διαφορίσιμη μη γραμμική σιγμοειδής συνάρτηση ενώ για το επίπεδο εξόδου μια γραμμική συνάρτηση. Τέλος χρησιμοποιήθηκε ως μέθοδος μάθησης ο αλγόριθμος ανάστροφης μετάδοσης του σφάλματος (back propagation algorithm) και πραγματοποιήθηκαν 200 κύκλοι εκπαίδευσης (epoch).

Η επίδοση του δικτύου αξιολογήθηκε χρησιμοποιώντας τον συντελεστή συσχέτισης R, τη ρίζα του μέσου τετραγωνικού σφάλματος RMSE και τον δείκτη διασποράς SI. Για την επιλογή της αρχιτεκτονικής του ΤΝΔ χρησιμοποιήθηκε η τεχνική της ανάλυσης προεξοχής (saliency analysis technique).

Στην πρώτη φάση της εφαρμογής, χρησιμοποιώντας την τεχνική ανάλυσης προεξοχής, έγιναν διάφορες δοκιμές αρχιτεκτονικής των δικτύων ξεκινώντας από δίκτυο με 72 εισόδους (δηλαδή δεδομένα τριών ημερών) και 145 νευρώνες στο κρυφό επίπεδο και φτάνοντας σε 12 νευρώνες εισόδου (δηλαδή δεδομένα μισής μέρας) και 25 κρυφούς νευρώνες. Σε όλες τις περιπτώσεις φυσικά υπήρχαν 24 νευρώνες εξόδου καθώς στόχος ήταν η πρόβλεψη της στάθμης της θάλασσας για 24 ώρες (μια ημέρα).

Η χρήση των ΤΝΔ οδήγησε στην πρόβλεψη της θέσης της μέσης στάθμης της θάλασσας με τιμές $R=0.874$, $RMSE=109mm$ και $SI=0.152$.

3.4. Πρόβλεψη του χρόνου συγκράτησης εντομοκτόνων (φυτοφάρμακα), με διαφορετική μοριακή σύσταση

Τα φυτοφάρμακα χρησιμοποιούνται σε μεγάλη κλίμακα κυρίως στη γεωργία. Τα δυσμενή αποτελέσματα της χρήσης τους τόσο στην ανθρώπινη υγεία όσο και στο περιβάλλον αποτελούν πάντοτε αντικείμενο μελέτης. Κατά συνέπεια η μετάβαση των υπολειμμάτων φυτοφαρμάκων στο νερό, στο χώμα και στα γεωργικά προϊόντα πρέπει να ελέγχεται συστηματικά. Οι συμβατικές μέθοδοι προετοιμασίας δειγμάτων που χρησιμοποιούνται για να αναλύσουν τα υπολείμματα φυτοφαρμάκων απαιτούν την ακριβή εντομολογία. Ο πειραματικός προσδιορισμός των χρωματογραφικών παραμέτρων διατήρησης των φυτοφαρμάκων είναι χρονοβόρος και ακριβός. Οι μελέτες QSRR άρχισαν από τον υπολογισμό και την επιλογή των περιγραφών, στην εύρεση της σχέσης τους με τους χρόνους διατήρησης και της παραγωγής των μαθηματικών προτύπων που περιλαμβάνουν αυτά τα πολλών μεταβλητών στοιχεία προκειμένου να χρησιμοποιηθούν για προφητικούς λόγους στο χρωματογραφικό σύστημα. Τα πολλών μεταβλητών στοιχεία αποτελούνται από τα αποτελέσματα των παρατηρήσεων πολλών διαφορετικών μεταβλητών (μοριακοί περιγραφείς) για διάφορα άτομα (μόρια). Οι γνωστές μέθοδοι πρόβλεψης του χρόνου συγκράτησης φυτοφαρμάκων με διαφορετική μοριακή σύσταση περιλαμβάνουν την

Ελένη – Γεωργία Αλεβιζάκου, Γεώργιος Πανταζής, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο – Σχολή Αγρονόμων και Τοπογράφων Μηχανικών

Τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα στην επιστήμη της Μετρολογίας. Το παρόν και το μέλλον

ανάλυση πολλαπλάσιας οπισθοδρόμησης, τις πειραματικές τεχνικές σχεδίου, και τη μη γραμμική οπισθοδρόμηση. Το μειονέκτημα, μερικές φορές, αυτών των πολύ δημοφιλών τεχνικών είναι η ανικανότητά τους να δώσουν μοντέλα πρόβλεψης λόγω της κρυμμένης μη γραμμικότητας μεταξύ των μεταβλητών. Για αυτόν τον σκοπό τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα (ANN) θα μπορούσαν να χρησιμοποιηθούν επιτυχώς στις μελέτες αυτές. Σήμερα τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα αποτελούν μια τεχνική διαμόρφωσης για QSAR και QSPR. Ένα ιδιαίτερο πλεονέκτημα των ΤΝΔ είναι η έμφυτη δυνατότητά τους να ενσωματώσουν τις μη γραμμικές εξαρτήσεις μεταξύ των εξαρτώμενων και ανεξάρτητων μεταβλητών χωρίς χρησιμοποίηση μιας ρητής μαθηματικής λειτουργίας. Σε μια μελέτη εφάρμοσαν ένα μη γραμμικό πρότυπο QSRR έξι παραμέτρων για να προβλέψουν τη συμπεριφορά διατήρησης 26 φυτοφαρμάκων στα οποία συμπεριλαμβάνονται χρησιμοποιημένα εντομοκτόνα, ζιζανιοκτόνα και μυκητοκτόνα. Μια άλλη εργασία χρησιμοποιήθηκε η τεχνική των ΤΝΔ προκειμένου να προβλεφθούν ακριβώς ο χρόνος συγκράτησης 300 φυτοφαρμάκων σε τέσσερις ομάδες με τις διαφορετικές μοριακές δομές. Αναπτύχθηκαν τεχνητά νευρωνικά δίκτυα με μεγάλη αξιοπιστία και χαμηλό σφάλμα πρόβλεψης το οποίο υπερτερεί σε σχέση με τις κλασσικές μεθόδους γραμμικής παλινδρόμησης που χρησιμοποιούνταν μέχρι τώρα. Κύριο χαρακτηριστικό αυτών ΤΝΔ είναι το μικρότερο μέσο τετραγωνικό σφάλμα. Χρησιμοποιήθηκε ένα $6 \times 7 \times 1$ back propagation ΤΝΔ με μέσο τετραγωνικό σφάλμα 1.559 για τα δεδομένα εκπαίδευσης, 1.517 για τα δεδομένα ελέγχου και 1.249 για τα δεδομένα αξιολόγησης, ενώ οι αντίστοιχες τιμές της γραμμικής παλινδρόμησης ήταν 1.402, 1.855 και 2.036. Έτσι αναδείχτηκε ως αξιόπιστη η μέθοδος των ΤΝΔ όσο και αυτής της γραμμικής παλινδρόμησης και μάλιστα καλύτερη από αυτή [Konoz E. et al, 2013].

3.5. Αποτελεσματικότητα της εξάλειψης της μόλυνσης από το νερό

Η προσρόφηση είναι μια από τις καθιερωμένες διαδικασίες μονάδων που χρησιμοποιούνται για την επεξεργασία του μολυσμένου ύδατος δηλ., του ακατέργαστου ύδατος ή/και του απόβλητου ύδατος. Υπάρχουν διάφοροι τρόποι για τον προσδιορισμό της προσρόφησης. Η τεχνική οπισθοδρόμησης χρησιμοποιείται ευρέως, όμως έχει αποδειχθεί ότι η τεχνική αυτή αποτυγχάνει να αντιπροσωπεύσει το μηχανισμό της προσρόφησης. Κατέληξαν στο συμπέρασμα ότι το πρότυπο ΤΝΔ δίνει τα καλύτερα αποτελέσματα για την πρόβλεψη των αποτελεσμάτων (παραγωγή) από τη βάση δεδομένων προσρόφησης.

Τα ΤΝΔ δίνουν καλύτερα αποτελέσματα στην πρόβλεψη της προσρόφησης του νερού με ετερογενή δεδομένα, τα οποία χρησιμοποιήθηκαν συστηματικά για την εκπαίδευση και τον έλεγχο του ΤΝΔ 25 διαφορετικά υλικά με 8 διαφορετικούς ρυπαντές. Χρησιμοποιήθηκε ένα ΤΝΔ οπισθοδιάδοσης back – propagation με 1 κρυφό επίπεδο και 14 νευρώνες, 7 παραμέτρους εισόδου και 440 δεδομένα, ενώ 73 δεδομένα παρέμειναν για τον έλεγχο και το μέσο τετραγωνικό σφάλμα που προέκυψε ήταν 1.58 [B.V Badu et al, 2003].

3.6. Τα ΤΝΔ στις ιατρικές διαγνώσεις

Μεγάλη είναι η συμβολή των ΤΝΔ για τη βελτίωση των ιατρικών διαγνώσεων και την αποφυγή μοιραίων λαθών. Είναι ένα ισχυρό εργαλείο στην υπηρεσία των ιατρών αφού πλεονεκτεί γιατί:

- Έχει την ικανότητα να περιλαμβάνει μεγάλη ποσότητα δεδομένων
- Ελαχιστοποιεί την πιθανότητα παράβλεψης σημαντικών πληροφοριών
- Ελαχιστοποιεί το χρόνο διάγνωσης

Έχει αποδειχτεί ότι κάνουν επιτυχείς διαγνώσεις σε διάφορες ασθένειες και η χρήση τους κάνει τη διάγνωση πιο αξιόπιστη και ικανοποιεί τον ασθενή [Amato et al,2013]. Τα ΤΝΔ έχουν μεγάλη διαγνωστική ευαισθησία, της τάξης 99-100% στον καρκίνο του προστάτη, ενώ οι άλλες μέθοδοι φθάνουν στο 70-80%. [Peterson et al,2005]

4. ΤΟ ΜΕΛΛΟΝ ΤΩΝ ΤΝΔ ΣΤΗΝ ΜΕΤΡΟΛΟΓΙΑ

Από την έρευνα που προηγήθηκε διαπιστώθηκε ότι υπάρχουν θεματικές – επιστημονικές περιοχές της Μετρολογίας, στις οποίες τα τελευταία χρόνια επιχειρείται η ανάλυση, η επεξεργασία και η προβολή στο μέλλον χρησιμοποιώντας την τεχνική των Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων.

Σίγουρα όμως υπάρχουν και επιστημονικές περιοχές στις οποίες θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί η τεχνική των ΤΝΔ. Τέτοιες είναι:

- τα πεδία των ηλεκτρικών δοκιμών, όπως για παράδειγμα στις διεργαστηριακές μετρήσεις ηλεκτρομαγνητικού πεδίου υψηλών συχνοτήτων
- στο προσδιορισμό κυανοτοξίνων σε περιβαλλοντικά δείγματα
- στον τομέα των κλινικών δοκιμών

5. ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

1. Μπίντζας Χ. Ε., "Αμιγώς Οπτική Μεταγωγή και Δρομολόγηση Δεδομένων σε Ψηφιακά Τηλεπικοινωνιακά Δίκτυα", Διδακτορική Διατριβή, Ε.Μ.Π., Αθήνα, 2003
2. Alevizakou, E. G., "The use of Artificial Neural networks in the Field of Geodesy with an Emphasis on the Prediction of Vertical Displacements", MSc thesis, National Technical University of Athens, 2012
3. Amato F., López A., Peña-Méndez E., Vañhara P., Hampl A., Havel J., "Artificial neural networks in medical diagnosis", Journal of Applied Biomedicine, p.p 47–58, 2013, DOI 10.2478/v10136-012-0031-x
4. Babu B.V., V. Ramakrishna and K. Kalyan Chakravarthy, "Artificial Neural Networks for Modeling of Adsorption", Second International Conference on Computational Intelligence, Robotics, and Autonomous Systems (CIRAS-2003), Singapore, December 15-18, 2003.
5. Konož E., Sarrafi A., Feizbakhsh A., Dashtbozorgi Z., "Prediction of gas chromatography-mass spectrometry retention times of pesticide residues by chemometrics methods", Journal of Chemistry, <http://dx.doi.org/10.1155/2013/908586>, 2013
6. Hassoun M., "Fundamentals of Artificial neural Network", MIT Press, 1995
7. Heo G., Lee W., Choi S., Lee J. and You K., "Adaptive neural network approach for nonlinearity in laser interferometer", Springer Press, pp. 251-258, 2007

Ελένη – Γεωργία Αλεβιζάκου, Γεώργιος Πανταζής, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο – Σχολή Αγρονόμων και Τοπογράφων Μηχανικών

Τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα στην επιστήμη της Μετρολογίας. Το παρόν και το μέλλον

8. Li Z., Herrmann K. and Pohlenz F., "A neural network approach to correcting nonlinearity in optical interferometers", *Meas. Sci. Technol.*, Vol. 14, pp. 376-381, 2003
9. Luzar M., Sobolewski L., Miczulski W. and Korbicz J., "Prediction of corrections for the Polish time scale UTC(PL) using artificial neural networks", *Bulletin of the Polish Academy of sciences, Technical sciences*, Vol. 61, No. 3, doi : 10.2478/bpasts-2013-0060, 2013
10. Makarynskyy O., Makarynska D., Kuhn K., Featherstone W.E., "Predicting sea level variations with artificial neural networks at Hillarys Boat Harbour Western Australia", *Estuarine Coastal and Shelf Science*, doi : 10.1016/j.ecss.2004.06.004, 2004
11. McCulloch and Pitts W., "A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity", *Bulletin of Mathematical Biophysics*, volume 5, 115–133, 1943
12. Miczulski W. and Sobolewski L., "Influence of the GMDH Neural Network data preparation method on UTC(PL) correction prediction results", *Metrology and Measurement Systems*, Vol. XIX, No. 1, pp.123-132, 2012
13. Olyee S., Ebrahimpour R., Hamedi S., "Modeling and compensation of periodic nonlinearity in two-mode interferometer using neural networks", *IETE Journal of research*, Vol. 56, Issue 2, Mar-Apr 2010.
14. Openshaw S. and Openshaw C., "Artificial Intelligence in Geography", England : John Wiley & Sons Ltd., 1997
15. Peterson L., Ozen M., Erdem H., Amini A., Gomez L, Nelson C., Ittmann M., "Artificial Neural Network Analysis of DNA Microarray-based Prostate Cancer Recurrence", *Proceedings of the 2005 IEEE Symposium on Computational Intelligence in Bioinformatics and Computational Biology*, 2005.
16. Rumelhart D.E., Hinton G.E., and Williams R.J., "Learning Representation of backpropagation errors", *Nature (London)*, volume 323, 533–536, 1986
17. State L., Cocianu C., Vlamos P., and Miroiu M., "A specialized Neural Network for implementing the HMM approach in Learning the Bayesian Procedure", 4th International Workshop on Symbolic and Numeric Algorithms for Scientific Computing (SYNASC 02), 2002
18. Tajima K., Nakamura S. and Ueno Y., "Ultrafast all-optical signal processing with Symmetric Mach-Zehnder type all-optical switches", *Opt. Quantum Electron.*, pp. 875-897, Vol. 33, 2001.
19. Toptchiyski G. O., "Analysis of All-Optical Interferometric Switches Based on Semiconductor Optical Amplifiers", *Dissertation, Techn. Univ., Berlin*, 2002.
20. Veronez M.R., de Souza S.F., Matsuoka M.T., Reinhardt A. and de Silva R.M., "Regional Mapping of the Geoid Using GNSS (GPS) Measurements and an Artificial Neural Network", *Remote Sensing*, 3, 668-683, doi : 10.3390/rs3040668, 2011.
21. Werbos P.J., "Beyond regression: New tools for prediction and analysis in the behavioral science", *Ph.D. Thesis, Harvard University, Cambridge*, 1974.