



*Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο*

*Τμήμα Χημικών Μηχανικών*

*Τομέας Επιστήμης και Τεχνικής των Υλικών*

*Νασίκας Δημήτριος*

---

**Ανάπτυξη Αδροποιημένων  
Μοντέλων Μοριακής  
Προσομοίωσης με Χρήση  
Τεχνικών Μηχανικής  
Μάθησης**

---

*Διπλωματική Εργασία*

*Υπεύθυνος Καθηγητής:*

*Δώρος Θεοδώρου*

*Αθήνα, 2021*

Διπλωματική εργασία

**Ανάπτυξη Αδροποιημένων Μοντέλων Μοριακής  
Προσομοίωσης με Χρήση Τεχνικών Μηχανικής Μάθησης**

Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο

Σχολή Χημικών Μηχανικών

Δημήτριος Νασίκας, Προπτυχιακός Φοιτητής

AM:05115063

**Ακαδημαϊκός Υπεύθυνος:**

Καθηγητής Δώρος Θεοδώρου, Τομέας Επιστήμης και Τεχνικής των Υλικών,  
Σχολή Χημικών Μηχανικών, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο

**Επιστημονική Υπεύθυνη:**

Δρ. Νίκη Βέργαδου, Ερευνήτρια Γ', Εργαστήριο Μοριακής Θερμοδυναμικής  
και Μοντελοποίησης Υλικών, Ινστιτούτο Νανοεπιστήμης και  
Νανοτεχνολογίας, ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος»

**Τριμελής Εξεταστική Επιτροπή:**

Δώρος Θεοδώρου  
Χαράλαμπος Σαρίμβεης  
Δημήτριος Καρώνης

**Ημερομηνία Εξέτασης:**

07/10/2021

Diploma thesis

**Development of Coarse-Grained Molecular Simulation Models  
Using Machine Learning Techniques**

National Technical University of Athens

School of Chemical Engineering

Dimitrios Nasikas, Undergraduate Student

Student ID: 05115063

**Academic Supervisor:**

Professor Doros N.Theodorou, Department of Materials Science and  
Engineering, School of Chemical Engineering, National Technical University  
of Athens, Greece

**Scientific Supervisor:**

Dr. Niki Vergadou, Molecular Thermodynamics and Modeling of Materials  
Laboratory, Institute of Nanoscience and Nanotechnology, NCSR  
"Demokritos"

**Examining Committee:**

Prof. Doros N. Theodorou  
Prof. Haralambos Sarimveis  
Prof. Dimitrios Karonis

**Date of Examination:**

07/10/2021

## Ευχαριστίες

Η εκπόνηση της παρούσας διπλωματικής εργασίας πραγματοποιήθηκε στο Εργαστήριο Μοριακής Θερμοδυναμικής και Μοντελοποίησης Υλικών, στο Ινστιτούτο Νανοεπιστήμης και Νανοτεχνολογίας, του ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος» υπό την επίβλεψη της Δρος Νίκης Βέργαδου.

Αρχικά θα ήθελα να ευχαριστήσω τον καθηγητή της Σχολής Χημικών Μηχανικών Δώρο Θεοδώρου, που μου έδωσε την ευκαιρία να ασχοληθώ με ένα τόσο ενδιαφέρον θέμα. Κατά την διάρκεια της φοίτησής μου, η διδασκαλία του αποτελούσε για εμένα πηγή έμπνευσης και έπαιξε καθοριστικό ρόλο στην επιλογή μου να εμβαθύνω στον τομέα των Μοριακών Προσομοιώσεων.

Θα ήθελα να ευχαριστήσω ιδιαίτερα την Δρα Νίκη Βέργαδου για την υπομονετική καθοδήγησή της, καθώς και για την στήριξη που μου παρείχε καθόλη την διάρκεια της συνεργασίας μας. Η συμβολή της ήταν καθοριστική και όλες οι επιστημονικές επεξηγήσεις, συμβουλές και παρατηρήσεις της, πολύ κρίσιμες και εύστοχες.

Θα ήθελα να ευχαριστήσω επίσης, τον Δρ. Γιώργιο Γιαννακόπουλο από το Εργαστήριο Τεχνολογίας Γνώσεων και Λογισμικού του Ινστιτούτου Πληροφορικής και Τηλεπικοινωνιών του ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος». Οι γνώσεις του στον τομέα της Μηχανικής Μάθησης και η ικανότητά του να τις μεταφέρει με αποτελεσματικό και κατανοητό τρόπο, βοήθησαν στην ομαλή προσαρμογή και εξοικείωση όλων των μελών της ομάδας, στον επιστημονικό αυτόν τομέα. Επιπλέον, θα ήθελα να ευχαριστήσω την Dr. Eleonora Ricci από το Πανεπιστήμιο της Bologna η οποία υπήρξε πολύ ενεργό μέλος της ομάδας. Η ικανότητά της για επεξήγηση και υλοποίηση μεθοδολογιών έπαιξε καθοριστικό ρόλο στην πρόοδο τόσο της ομάδας μας, όσο και της παρούσας εργασίας.

Τέλος, θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τους συγγενείς μου και τους φίλους μου για την αμέριστη υποστήριξη και συμπαράστασή τους καθόλη την διάρκεια των σπουδών μου.

*στον πατέρα μου,  
Απόστολο Νασικά*

## Περίληψη

Η μελέτη πολύπλοκων χημικών συστημάτων με μεθόδους μοριακής προσομοίωσης καθιστά αναγκαία την ανάπτυξη ιεραρχικών μεθόδων τόσο για την δημιουργία ρεαλιστικών αρχικών δομών, όσο και για την υπολογιστική μελέτη των συστημάτων αυτών σε μεγάλο εύρος κλιμάκων μήκους και χρόνου. Οι μέθοδοι αυτές αφορούν στη μετάβαση από την ατομιστική αναπαράσταση σε μια αντίστοιχη αδροποιημένη και την προσομοίωση των συστημάτων στο επίπεδο αυτό είτε ως τελικό στόχο για την εξαγωγή αποτελεσμάτων, είτε ως ένα ενδιάμεσο στάδιο για την επίτευξη εξισορρόπησης, ακολουθούμενο από επιστροφή στην ατομιστική αναπαράσταση μέσω μιας διαδικασίας αντίστροφης απεικόνισης.

Οι μέθοδοι αδροποίησης στοχεύουν στην αντικατάσταση ομάδων ατόμων από ενιαία ισοδύναμα κέντρα αλληλεπίδρασης, μειώνοντας με αυτό τον τρόπο τον αριθμό των βαθμών ελευθερίας του συστήματος. Κατά την διαδικασία της αδροποίησης είναι κρίσιμο να διατηρηθούν οι βαθμοί ελευθερίας που είναι σημαντικοί για τη διεργασία ή τον μηχανισμό του φαινομένου που μας ενδιαφέρει. Οι μέθοδοι αδροποίησης που έχουν προταθεί ποικίλουν ως προς τον και τρόπο υλοποίησης, καθώς είναι άρρηκτα συνδεδεμένες με τη χημική δομή, τη μακρομοριακή αρχιτεκτονική και το επιστημονικό πρόβλημα υπό μελέτη και για το λόγο αυτό δεν υπάρχει μοναδικός τρόπος αδροποίησης.

Στο πλαίσιο της παρούσας διπλωματικής εργασίας διερευνάται η ανάπτυξη αδροποιημένων μοντέλων με τη βοήθεια εργαλείων Μηχανικής Μάθησης και πιο συγκεκριμένα με την χρήση Παραλλακτικών Αυτοκωδικοποιητών (VAEs). Συγκεκριμένα, μελετήθηκε αρχικά μια πρόσφατα ανεπτυγμένη μεθοδολογία, η οποία και δοκιμάστηκε σε διαφορετικά χημικά συστήματα. Στη συνέχεια, πραγματοποιήθηκαν βελτιώσεις και επεκτάσεις της μεθοδολογίας που σχετίζονται με την βελτιστοποίηση της εκπαίδευσης του μοντέλου (όπως για παράδειγμα μέσω του ορισμού επιπρόσθετων συναρτήσεων κόστους) αλλά και με την υλοποίηση διαδικασιών, η εφαρμογή των επιτρέπει την λεπτομερέστερη φυσικοχημική ερμηνεία των αποτελεσμάτων (π.χ. συνδέσεις μεταξύ αδροποιημένων μονάδων, τρισδιάστατη αναπαράσταση συστήματος κ.α.). Για το σκοπό αυτό, πραγματοποιήθηκαν υπολογισμοί και προσομοιώσεις στο ατομιστικό επίπεδο για τα συστήματα αιθάνιο, στυρένιο, πενταμερές πολυαιθυλενίου και μονομερές τριοξικής κυτταρίνης (CTA). Οι συντεταγμένες

και οι δυνάμεις από κάθε στιγμιότυπο της δυναμικής τους τροχιάς χρησιμοποιούνται ως δεδομένα εκπαίδευσης του μοντέλου μηχανικής μάθησης. Το μοντέλο μηχανικής μάθησης είναι υπεύθυνο για την εύρεση αντιστοιχίσεων στο αδροποιημένο επίπεδο, οι οποίες εμπεριέχουν όλη την απαραίτητη πληροφορία για την επιστροφή στο πλήρως ατομιστικό επίπεδο, ενώ ταυτόχρονα λαμβάνονται υπόψιν οι δυνάμεις που ασκούνται μεταξύ των αδροποιημένων μονάδων.

Η παρούσα διπλωματική εργασία εκπονήθηκε στο εργαστήριο Μοριακής Θερμοδυναμικής και Μοντελοποίησης Υλικών, στο Ινστιτούτο Νανοεπιστήμης και Νανοτεχνολογίας, στο Εθνικό Κέντρο Έρευνας Φυσικών Επιστημών «Δημόκριτος» υπό την επίβλεψη της Δρος Νίκης Βέργαδου, Ερευνήτριας Γ' και σε συνεργασία με τον Δρ. Γεώργιο Γιαννακόπουλο από το Εργαστήριο Τεχνολογίας Γνώσεων και Λογισμικού του Ινστιτούτου Πληροφορικής και Τηλεπικοινωνιών του ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος».

# Abstract

The study of complex chemical systems using molecular simulation methods demands the development of hierarchical multiscale modelling schemes for the creation of realistic initial structures (as for example for complex polymeric systems with high molecular weights), as well as for the computational study of these systems in a wide range of time and length scales. These methods implement a mapping from the atomistic representation to a coarse-grained representation and the simulation at the coarse-grained level, either in order to study specific properties directly from the coarse-grained simulations or to use it as an intermediate stage in order to reach equilibrium and then return back to the atomistic representation via a reverse mapping process.

Coarse-graining methods involve the substitution of groups of atoms by single interaction sites, thereby reducing the number of the system's degrees of freedom, while at the same time maintaining the ones that are important for the description of the mechanisms or processes under study. Over the past few years, many coarse-graining strategies have been proposed based on the chemical structure, the macromolecular architecture, and the scientific problem under study, as there is no unique way of coarse-graining.

Within the framework of the present diploma thesis, the development of coarse grained models using Machine Learning algorithms and more precisely Variational Autoencoders (VAEs), has been investigated. Thus, molecular simulations on the atomistic level were conducted for specific simple chemical compounds (such as ethane, styrene, five monomers polyethylene and the monomeric unit of cellulose triacetate) that constitute building blocks of polymeric systems. The coordinates and the forces of each snapshot of the trajectories were used as training data for the Machine Learning model. The Machine Learning model is trained to generate mappings at a coarse-grained level that maintain all the information required for the reverse mapping back to the atomistic level, while taking into account the forces between the coarse-grained moieties.

The outcome of the coarse-graining process is strongly linked to the efficiency of the model's training. In the present diploma thesis, some recent and innovative methodologies were applied to different chemical systems while further features and functionalities were developed and implemented in order to enrich and improve the obtained results. This



further development includes defining new functions that directly affect the model's results (cost functions). In addition, new methodologies were implemented that allow a more detailed physico-chemical description of the results such as coarse-grained particles connectivity info and three dimensional representation of the system.

The diploma thesis was held at the Molecular Thermodynamics and Modeling of Materials Laboratory of the Institute of Nanoscience and Nanotechnology at National Center of Scientific Research "Demokritos" under the supervision of Dr. Niki Vergadou and in collaboration with Dr. Georgios Giannakopoulos from Software and Knowledge Engineering Lab of the Institute of Informatics Telecommunications at NCSR "Demokritos".

# Περιεχόμενα

Περιεχόμενα	ii
Λίστα Εικόνων	vi
Λίστα Πινάκων	xiv
<b>1 Εισαγωγή</b>	<b>1</b>
1.1 Εισαγωγή στην Μοριακή Προσομοίωση . . . . .	1
1.1.1 Ο ορισμός και η σημασία της Μοριακής Προσομοίωσης .	1
1.1.2 Η ανάγκη για Αδροποίηση . . . . .	4
1.2 Εισαγωγή στη Μηχανική Μάθηση . . . . .	6
1.2.1 Ορισμός Μηχανικής Μάθησης . . . . .	6
1.2.2 Κατηγορίες Μηχανικής Μάθησης . . . . .	7
1.2.3 Νευρωνικά Δίκτυα . . . . .	8
1.3 Σκοπός εργασίας . . . . .	10
<b>2 Θεωρητικό Υπόβαθρο Μοριακών Προσομοιώσεων</b>	<b>12</b>
2.1 Χώρος Φάσεων . . . . .	13
2.2 Στατιστικά Σύνολα . . . . .	14
2.2.1 Μικροκανονικό Στατιστικό Σύνολο: . . . . .	14
2.2.2 Κανονικό Στατιστικό Σύνολο: . . . . .	15
2.3 Εργοδικό Θεώρημα . . . . .	16
2.4 Κλασικό Δυναμικό Αλληλεπίδρασης . . . . .	17

2.4.1	Μη δεσμικές αλληλεπιδράσεις . . . . .	17
2.4.2	Δεσμικές αλληλεπιδράσεις . . . . .	18
2.5	Μοριακή Δυναμική . . . . .	21
2.5.1	Η μέθοδος της Μοριακής Δυναμικής . . . . .	23
2.5.2	Αλγόριθμος Verlet . . . . .	24
2.5.3	Θερμοστάτης Nosé–Hoover . . . . .	25
2.6	Αδροποίηση . . . . .	27
2.6.1	Η διαδικασία της Αδροποίησης . . . . .	27
2.6.2	Μοριακές προσομοιώσεις στο αδροποιημένο επίπεδο και μέσες τιμές ιδιοτήτων . . . . .	28
2.6.3	Το πρόβλημα της αντίστροφης απεικόνισης . . . . .	30
<b>3</b>	<b>Νευρωνικά Δίκτυα</b>	<b>31</b>
3.1	Ο Νευρώνας . . . . .	31
3.2	Συναρτήσεις Ενεργοποίησης: . . . . .	32
3.3	Νευρωνικό Δίκτυο ενός κρυφού στρώματος . . . . .	36
3.4	Θεώρημα Καθολικής προσέγγισης . . . . .	38
3.5	Πολυστρωματικό Νευρωνικό Δίκτυο . . . . .	39
3.6	Εκπαίδευση Νευρωνικών Δικτύων . . . . .	40
3.6.1	Συναρτήσεις Κόστους . . . . .	41
3.6.2	$L_1$ και $L_2$ Κανονικοποίηση . . . . .	42
3.6.3	Βελτιστοποίηση Συναρτήσεων Κόστους . . . . .	44
<b>4</b>	<b>Παραλλακτικοί Αυτοκωδικοποιητές</b>	<b>51</b>
4.1	Εισαγωγή στους Παραλλακτικούς Αυτοκωδικοποιητές . . . . .	51
4.2	Η βασική λειτουργία ενός VAE . . . . .	52
4.3	Η δειγματοληψία στο λανθάνοντα χώρο . . . . .	54
4.4	Συνάρτηση Κόστους ενός VAE . . . . .	54
4.5	Τέχνασμα Επαναπαραμετροποίησης (Reparametrization Trick) . . . . .	59
<b>5</b>	<b>Μεθοδολογία</b>	<b>61</b>

---

5.1	Παραγωγή δεδομένων και συστήματα υπό μελέτη . . . . .	61
5.2	Η αδροποίηση με το μοντέλο μηχανικής μάθησης . . . . .	63
5.2.1	Η μείωση διαστάσεων μέσω του Κωδικοποιητή . . . . .	64
5.2.2	Οι παράμετροι του Κωδικοποιητή . . . . .	66
5.2.3	Η επιστροφή στις αρχικές συντεταγμένες μέσω του Αποκωδικοποιητή . . . . .	67
5.2.4	Η συνάρτηση κόστους . . . . .	69
5.3	Η μεθοδολογία εκπαίδευσης . . . . .	70
5.3.1	Υλοποίηση σχήματος βελτιστοποίησης υπερπαραμέτρων .	72
5.3.2	Υλοποίηση επεκτάσεων στην επαναληπτική διαδικασία .	74
5.4	Υλοποίηση προσθήκης πινάκων συνδεσιμότητας μεταξύ των αδροποιημένων μονάδων . . . . .	77
5.5	Προσθήκη περιστροφών στις απεικονίσεις της ατομιστικής αναπαράστασης . . . . .	80
<b>6</b>	<b>Αποτελέσματα</b>	<b>82</b>
6.1	Αιθάνιο . . . . .	83
6.2	Στυρένιο . . . . .	93
6.3	Πενταμερές πολυαιθυλενίου . . . . .	101
6.3.1	Συνάρτηση κόστους $\mathcal{L}_1$ . . . . .	101
6.3.2	Συνάρτηση κόστους $\mathcal{L}_2$ . . . . .	110
6.3.3	Συνάρτηση κόστους $\mathcal{L}_4$ . . . . .	113
6.3.4	Συνάρτηση κόστους $\mathcal{L}_5$ . . . . .	123
6.4	Μονομερές CTA . . . . .	131
6.4.1	Συνάρτηση κόστους $\mathcal{L}_1$ . . . . .	131
6.4.2	Συνάρτηση κόστους $\mathcal{L}_2$ . . . . .	137
6.4.3	Συνάρτηση κόστους $\mathcal{L}_4$ . . . . .	140
6.4.4	Συνάρτηση κόστους $\mathcal{L}_5$ . . . . .	147
<b>7</b>	<b>Συμπεράσματα και Μελλοντικές Επεκτάσεις</b>	<b>157</b>

Βιβλιογραφία

161

# Λίστα Εικόνων

1.1	Απεικόνιση της πλήρως ατομιστικής και της αδροποιημένης αναπαράστασης ενός συστήματος . . . . .	5
1.2	Παραλληλισμός ενός βιολογικού νευρώνα με έναν τεχνητό νευρώνα . . . . .	10
2.1	Απεικόνιση επιπέδων που ορίζουν μία κανονική διέδρη γωνία . .	20
2.2	Απεικόνιση επιπέδων που ορίζουν μία μη κανονική διέδρη γωνία	20
3.1	Παραλληλισμός λειτουργίας ενός τεχνητού με έναν βιολογικό νευρώνα (2) . . . . .	32
3.2	Γραφική παράσταση μίας σιγμοειδούς συνάρτησης στο διάστημα $[-6,6]$ . . . . .	34
3.3	Γραφική παράσταση της συνάρτησης $ReLU$ . . . . .	34
3.4	Γραφική παράσταση της συνάρτησης υπερβολικής εφαπτομένης στο διάστημα $[-2.5,2.5]$ . . . . .	35
3.5	Απεικόνιση ενός απλού νευρωνικού δικτύου ενός κρυφού στρώματος . . . . .	37
3.6	Απεικόνιση ενός νευρωνικού δικτύου δύο κρυφών στρωμάτων .	40
4.1	Απλή απεικόνιση της αρχιτεκτονικής ενός τυπικού VAE . . . . .	53
4.2	Σχηματική απεικόνιση του τεχνάσματος επαναπαραμετροποίησης	59
5.1	Χημικός τύπος αιθανίου . . . . .	61
5.2	Χημικός τύπος στυρενίου . . . . .	62
5.3	Χημικός τύπος πολυαιθυλενίου . . . . .	62

5.4	Χημικός τύπος μονομερούς του CTA . . . . .	62
5.5	Αδροποίηση συστήματος και επιστροφή στην ίδια ατομιστική αναπαράσταση[67] . . . . .	69
6.1	Κλίμακα χρωμάτων που χρησιμοποιείται για την απεικόνιση του πίνακα κωδικοποίησης . . . . .	83
6.2	Γραφική παράσταση του κόστους ανακατασκευής συναρτήσεων των επαναλήψεων για το αιθάνιο χωρίς περιστροφές (1) . . . . .	85
6.3	Γραφική παράσταση του κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσεων των επαναλήψεων για το αιθάνιο χωρίς περιστροφές (1) . . . . .	86
6.4	Γραφική παράσταση του συνολικού κόστους συναρτήσεων των επαναλήψεων για το αιθάνιο χωρίς περιστροφές (1) . . . . .	86
6.5	Πίνακας κωδικοποίησης για το αιθάνιο χωρίς περιστροφές . . . . .	87
6.6	Γραφική παράσταση του κόστους ανακατασκευής συναρτήσεων των επαναλήψεων για το αιθάνιο χωρίς περιστροφές(2) . . . . .	88
6.7	Γραφική παράσταση του κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσεων των επαναλήψεων για το αιθάνιο χωρίς περιστροφές(2) . . . . .	88
6.8	Γραφική παράσταση του συνολικού κόστους συναρτήσεων των επαναλήψεων για το αιθάνιο χωρίς περιστροφές(2) . . . . .	89
6.9	Πίνακας κωδικοποίησης για το αιθάνιο χωρίς περιστροφές στις 0 επαναλήψεις . . . . .	90
6.10	Πίνακας κωδικοποίησης για το αιθάνιο χωρίς περιστροφές (μαζί με τις μη χρησιμοποιούμενες αδροποιημένες μονάδες): . . . . .	90
6.11	Πίνακας κωδικοποίησης για το αιθάνιο χωρίς περιστροφές(2) . . . . .	90
6.12	Ταυτόχρονη απεικόνιση πλήρους ατομιστικού και αδροποιημένου συστήματος για το αιθάνιο χωρίς περιστροφές . . . . .	91
6.13	Γραφική παράσταση του κόστους ανακατασκευής συναρτήσεων των επαναλήψεων για το στυρένιο χωρίς περιστροφές . . . . .	94
6.14	Γραφική παράσταση του κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσεων των επαναλήψεων για το στυρένιο χωρίς περιστροφές . . . . .	94
6.15	Γραφική παράσταση του συνολικού κόστους συναρτήσεων των επαναλήψεων για το στυρένιο χωρίς περιστροφές . . . . .	95
6.16	Πίνακας κωδικοποίησης για το στυρένιο χωρίς περιστροφές . . . . .	96

6.17 Ταυτόχρονη απεικόνιση πλήρους ατομιστικού και αδροποιημένου συστήματος για το στυρένιο χωρίς περιστροφές .	96
6.18 Γραφική παράσταση του κόστους ανακατασκευής συναρτήσσει των επαναλήψεων για το στυρένιο χωρίς περιστροφές(2) . . . . .	97
6.19 Γραφική παράσταση του κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσσειτωνεπαναλήψεων για το στυρένιο χωρίς περιστροφές(2) . . . . .	97
6.20 Γραφική παράσταση του συνολικού κόστους συναρτήσσει των επαναλήψεων για το στυρένιο χωρίς περιστροφές(2) . . . . .	98
6.21 Πίνακας κωδικοποίησης για το στυρένιο χωρίς περιστροφές(2) .	98
6.22 Ταυτόχρονη απεικόνιση πλήρους ατομιστικού και αδροποιημένου συστήματος για το στυρένιο χωρίς περιστροφές(2) . . . . .	99
6.23 Γραφική παράσταση του κόστους ανακατασκευής συναρτήσσει των επαναλήψεων για το πενταμερές πολυαιθυλενίου χωρίς περιστροφές . . . . .	102
6.24 Γραφική παράσταση του κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσσει των επαναλήψεων για το πενταμερές πολυαιθυλενίου χωρίς περιστροφές . . . . .	103
6.25 Γραφική παράσταση του συνολικού κόστους συναρτήσσει των επαναλήψεων για το πενταμερές πολυαιθυλενίου χωρίς περιστροφές . . . . .	103
6.26 Πίνακας κωδικοποίησης για το πενταμερές του πολυαιθυλενίου χωρίς περιστροφές . . . . .	104
6.27 Ταυτόχρονη απεικόνιση πλήρους ατομιστικού και αδροποιημένου συστήματος για το πενταμερές πολυαιθυλενίου .	104
6.28 Γραφική παράσταση του κόστους ανακατασκευής συναρτήσσει των επαναλήψεων για το πενταμερές πολυαιθυλενίου χωρίς περιστροφές(2) . . . . .	105
6.29 Γραφική παράσταση του κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσσει των επαναλήψεων για το πενταμερές πολυαιθυλενίου χωρίς περιστροφές(2) . . . . .	105
6.30 Γραφική παράσταση του συνολικού κόστους συναρτήσσει τωνεπαναλήψεων για το πενταμερές πολυαιθυλενίου χωρίς περιστροφές(2) . . . . .	106



- 6.31 Πίνακας κωδικοποίησης για το πενταμερές του πολυαιθυλενίου χωρίς περιστροφές(2) . . . . . 106
- 6.32 Ταυτόχρονη απεικόνιση πλήρους ατομιστικού και αδροποιημένου συστήματος για το πενταμερές πολυαιθυλενίου χωρίς περιστροφές . . . . . 107
- 6.33 Γραφική παράσταση του κόστους ανακατασκευής συναρτήσσει των επαναλήψεων για το πενταμερές πολυαιθυλενίου για την δεύτερη συνάρτηση κόστους . . . . . 111
- 6.34 Πίνακας κωδικοποίησης για το πενταμερές του πολυαιθυλενίου για την δεύτερη συνάρτηση κόστους . . . . . 112
- 6.35 Ταυτόχρονη απεικόνιση πλήρους ατομιστικού και αδροποιημένου συστήματος για το πενταμερές πολυαιθυλενίου στις δοκιμές με χρήση της δεύτερης συνάρτησης κόστους . . . 113
- 6.36 Γραφική παράσταση του κόστους ανακατασκευής συναρτήσσει των επαναλήψεων για το πενταμερές πολυαιθυλενίου για την τέταρτη συνάρτηση κόστους . . . . . 114
- 6.37 Γραφική παράσταση του συνολικού κόστους συναρτήσσει των επαναλήψεων για το πενταμερές πολυαιθυλενίου για την τέταρτη συνάρτηση κόστους . . . . . 115
- 6.38 Γραφική παράσταση του κόστους ανακατασκευής συναρτήσσει των επαναλήψεων για το πενταμερές πολυαιθυλενίου για την τέταρτη συνάρτηση κόστους(2) . . . . . 116
- 6.39 Γραφική παράσταση του κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσσει των επαναλήψεων για το πενταμερές πολυαιθυλενίου για την τέταρτη συνάρτηση κόστους(2) . . . . . 117
- 6.40 Γραφική παράσταση του συνολικού κόστους συναρτήσσει των επαναλήψεων για το πενταμερές πολυαιθυλενίου για την τέταρτη συνάρτηση κόστους(2) . . . . . 117
- 6.41 Πίνακας κωδικοποίησης για το πολυαιθυλένιο πέντε μονομερών για την τέταρτη συνάρτηση κόστους . . . . . 118
- 6.42 Ταυτόχρονη απεικόνιση πλήρους ατομιστικού και αδροποιημένου συστήματος για το πενταμερές πολυαιθυλενίου στις δοκιμές με χρήση της τέταρτης συνάρτησης κόστους . . . 119
- 6.43 Γραφική παράσταση του κόστους ανακατασκευής συναρτήσσει των επαναλήψεων για το πενταμερές πολυαιθυλενίου για την τέταρτη συνάρτηση κόστους(3) . . . . . 120

- 6.44 Γραφική παράσταση του κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσει των επαναλήψεων για το πενταμερές πολυαιθυλενίου για την τέταρτη συνάρτηση κόστους(3) . . . . . 120
- 6.45 Γραφική παράσταση του συνολικού κόστους συναρτήσει των επαναλήψεων για το πενταμερές πολυαιθυλενίου για την τέταρτη συνάρτηση κόστους(3) . . . . . 121
- 6.46 Πίνακας κωδικοποίησης για το πολυαιθυλένιο πέντε μονομερών για την τέταρτη συνάρτηση κόστους (2) . . . . . 121
- 6.47 Ταυτόχρονη απεικόνιση πλήρους ατομιστικού και αδροποιημένου συστήματος για το πενταμερές πολυαιθυλενίου στις δοκιμές με χρήση της τέταρτης συνάρτησης κόστους(2) . . . . . 122
- 6.48 Γραφική παράσταση του κόστους ανακατασκευής συναρτήσει των επαναλήψεων για το πενταμερές πολυαιθυλενίου για την πέμπτη συνάρτηση κόστους . . . . . 124
- 6.49 Γραφική παράσταση του κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσει των επαναλήψεων για το πενταμερές πολυαιθυλενίου για την πέμπτη συνάρτηση κόστους . . . . . 125
- 6.50 Γραφική παράσταση του συνολικού κόστους συναρτήσει των επαναλήψεων για το πενταμερές πολυαιθυλενίου για την πέμπτη συνάρτηση κόστους . . . . . 125
- 6.51 Πίνακας κωδικοποίησης για το πολυαιθυλένιο πέντε μονομερών για την πέμπτη συνάρτηση κόστους . . . . . 126
- 6.52 Ταυτόχρονη απεικόνιση πλήρους ατομιστικού και αδροποιημένου συστήματος για το πενταμερές πολυαιθυλενίου στις δοκιμές με χρήση της τέταρτης συνάρτησης κόστους . . . . 127
- 6.53 Γραφική παράσταση του κόστους ανακατασκευής συναρτήσει των επαναλήψεων για το πενταμερές πολυαιθυλενίου για την πέμπτη συνάρτηση κόστους(2) . . . . . 128
- 6.54 Γραφική παράσταση του κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσει των επαναλήψεων για το πενταμερές πολυαιθυλενίου για την πέμπτη συνάρτηση κόστους(2) . . . . . 129
- 6.55 Γραφική παράσταση του συνολικού κόστους συναρτήσει των επαναλήψεων για το πενταμερές πολυαιθυλενίου για την πέμπτη συνάρτηση κόστους(2) . . . . . 129

- 6.56 Πίνακας κωδικοποίησης για το πολυαιθυλένιο πέντε μονομερών για την πέμπτη συνάρτηση κόστους(2) . . . . . 130
- 6.57 Ταυτόχρονη απεικόνιση πλήρους ατομιστικού και αδροποιημένου συστήματος για το πενταμερές πολυαιθυλενίου στις δοκιμές με χρήση της πέμπτης συνάρτησης κόστους(2) . 130
- 6.58 Γραφική παράσταση του κόστους ανακατασκευής συναρτήσσει των επαναλήψεων για το μονομερές του CTA για την πρώτη συνάρτηση κόστους . . . . . 132
- 6.59 Γραφική παράσταση του κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσσει των επαναλήψεων για το μονομερές του CTA για την πρώτη συνάρτηση κόστους . . . . . 132
- 6.60 Γραφική παράσταση του συνολικού κόστους συναρτήσσει των επαναλήψεων για το μονομερές του CTA για την πρώτη συνάρτηση κόστους . . . . . 133
- 6.61 Πίνακας κωδικοποίησης για το μονομερές του CTA για την πρώτη συνάρτηση κόστους . . . . . 133
- 6.62 Ταυτόχρονη απεικόνιση πλήρους ατομιστικού και αδροποιημένου συστήματος για το μονομερές του CTA στις δοκιμές με χρήση της πρώτης συνάρτησης κόστους . . . . . 134
- 6.63 Γραφική παράσταση του κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσσει των επαναλήψεων για το μονομερές του CTA για την πρώτη συνάρτηση κόστους(2) . . . . . 135
- 6.64 Ταυτόχρονη απεικόνιση πλήρους ατομιστικού και αδροποιημένου συστήματος για το μονομερές του CTA στις δοκιμές με χρήση της πρώτης συνάρτησης κόστους . . . . . 136
- 6.65 Πίνακας κωδικοποίησης για το μονομερές του CTA για την δεύτερη συνάρτηση κόστους . . . . . 138
- 6.66 Γραφική παράσταση του συνολικού κόστους συναρτήσσει των επαναλήψεων για το μονομερές του CTA για την δεύτερη συνάρτηση κόστους . . . . . 139
- 6.67 Ταυτόχρονη απεικόνιση πλήρους ατομιστικού και αδροποιημένου συστήματος για το μονομερές του CTA στις δοκιμές με χρήση της πρώτης συνάρτησης κόστους . . . . . 140
- 6.68 Γραφική παράσταση του κόστους ανακατασκευής συναρτήσσει των επαναλήψεων για το μονομερές του CTA για την τέταρτη συνάρτηση κόστους . . . . . 141

6.69	Γραφική παράσταση του κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσει των επαναλήψεων για το μονομερές του CTA για την τέταρτη συνάρτηση κόστους . . . . .	142
6.70	Γραφική παράσταση του συνολικού κόστους συναρτήσει των επαναλήψεων για το μονομερές του CTA για την τέταρτη συνάρτηση κόστους . . . . .	142
6.71	Πίνακας κωδικοποίησης για το μονομερές του CTA για την τέταρτη συνάρτηση κόστους . . . . .	143
6.72	Ταυτόχρονη απεικόνιση πλήρους ατομιστικού και αδροποιημένου συστήματος για το μονομερές του CTA στις δοκιμές με χρήση της τέταρτης συνάρτησης κόστους . . . . .	144
6.73	Γραφική παράσταση του κόστους ανακατασκευής συναρτήσει των επαναλήψεων για το μονομερές του CTA για την τέταρτη συνάρτηση κόστους(2) . . . . .	145
6.74	Γραφική παράσταση του κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσει των επαναλήψεων για το μονομερές του CTA για την τέταρτη συνάρτηση κόστους (2) . . . . .	145
6.75	Γραφική παράσταση του συνολικού κόστους συναρτήσει των επαναλήψεων για το μονομερές του CTA για την τέταρτη συνάρτηση κόστους(2) . . . . .	146
6.76	Πίνακας κωδικοποίησης για το μονομερές του CTA για την τέταρτη συνάρτηση κόστους(2) . . . . .	146
6.77	Ταυτόχρονη απεικόνιση πλήρους ατομιστικού και αδροποιημένου συστήματος για το μονομερές του CTA στις δοκιμές με χρήση της τέταρτης συνάρτησης κόστους(2) . . . . .	147
6.78	Γραφική παράσταση του κόστους ανακατασκευής συναρτήσει των επαναλήψεων για το μονομερές του CTA για την πέμπτη συνάρτηση κόστους . . . . .	148
6.79	Γραφική παράσταση του κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσει των επαναλήψεων για το μονομερές του CTA για την πέμπτη συνάρτηση κόστους . . . . .	149
6.80	Γραφική παράσταση του συνολικού κόστους συναρτήσει των επαναλήψεων για το μονομερές του CTA για την πέμπτη συνάρτηση κόστους . . . . .	149
6.81	Πίνακας κωδικοποίησης, 0 επαναλήψεις, μονομερές CTA,πέμπτη συνάρτηση κόστους . . . . .	150

6.82 Πίνακας κωδικοποίησης, 500 επαναλήψεις, μονομερές CTA,πέμπτη συνάρτηση κόστους . . . . .	150
6.83 Πίνακας κωδικοποίησης, 750 επαναλήψεις, μονομερές CTA,πέμπτη συνάρτηση κόστους . . . . .	150
6.84 Πίνακας κωδικοποίησης, 1000 επαναλήψεις, μονομερές CTA,πέμπτη συνάρτηση κόστους . . . . .	151
6.85 Πίνακας κωδικοποίησης, 1250 επαναλήψεις, μονομερές CTA,πέμπτη συνάρτηση κόστους . . . . .	151
6.86 Πίνακας κωδικοποίησης, τέλος βελτιστοποίησης , μονομερές CTA,πέμπτη συνάρτηση κόστους . . . . .	151
6.87 Γράφος γειτνίασης για την περιγραφή των συνδέσεων μεταξύ των αδροποιημένων μονάδων στο μονομερές του CTA για την πέμπτη συνάρτηση κόστους . . . . .	152
6.88 Ταυτόχρονη απεικόνιση πλήρους ατομιστικού και αδροποιημένου συστήματος για το μονομερές του CTA στις δοκιμές με χρήση της πέμπτης συνάρτησης κόστους . . . . .	152
6.89 Γραφική παράσταση του κόστους ανακατασκευής συναρτήσσει των επαναλήψεων για το μονομερές του CTA για την πέμπτη συνάρτηση κόστους(2) . . . . .	154
6.90 Γραφική παράσταση του κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσσει των επαναλήψεων για το μονομερές του CTA για την πέμπτη συνάρτηση κόστους(2) . . . . .	154
6.91 Γραφική παράσταση του συνολικού κόστους συναρτήσσει των επαναλήψεων για το μονομερές του CTA για την πέμπτη συνάρτηση κόστους(2) . . . . .	155
6.92 Πίνακας κωδικοποίησης για το μονομερές του CTA για την πέμπτη συνάρτηση κόστους . . . . .	155
6.93 Ταυτόχρονη απεικόνιση πλήρους ατομιστικού και αδροποιημένου συστήματος για το μονομερές του CTA στις δοκιμές με χρήση της πέμπτης συνάρτησης κόστους(2) . . . . .	156

## Λίστα Πινάκων

6.1	Πλέγμα υπερπαραμέτρων για την πρώτη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα αιθάνιο . . . . .	84
6.2	Αποτελέσματα και βέλτιστες τιμές υπερπαραμέτρων για την πρώτη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα αιθάνιο . . . . .	85
6.3	Αποτελέσματα και βέλτιστες τιμές υπερπαραμέτρων για την πρώτη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα αιθάνιο, με εφαρμογή περιστροφών . . . . .	92
6.4	Πλέγμα υπερπαραμέτρων για την πρώτη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα στυρένιο . . . . .	93
6.5	Αποτελέσματα και βέλτιστες τιμές υπερπαραμέτρων για την πρώτη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα στυρένιο . . . . .	93
6.6	Αποτελέσματα και βέλτιστες τιμές υπερπαραμέτρων για την πρώτη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα στυρένιο, με εφαρμογή περιστροφών . . . . .	99
6.7	Πλέγμα υπερπαραμέτρων για την πρώτη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα πολυαιθυλένιο πέντε μονομερών . . . . .	101
6.8	Αποτελέσματα και βέλτιστες τιμές υπερπαραμέτρων για την πρώτη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα πολυαιθυλένιο πέντε μονομερών . . . . .	102
6.9	Αποτελέσματα και βέλτιστες τιμές υπερπαραμέτρων για την πρώτη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα πολυαιθυλένιο πέντε μονομερών, με εφαρμογή περιστροφών . . . . .	107
6.10	Σταθερές τιμές υπερπαραμέτρων για την πρώτη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα πενταμερές πολυαιθυλενίου . . . . .	108
6.11	Αποτελέσματα για την πρώτη συνάρτηση κόστους στο σύστημα πενταμερές πολυαιθυλενίου . . . . .	108

6.12	Σταθερές τιμές υπερπαραμέτρων για την δεύτερη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα πενταμερές πολυαιθυλενίου (2) . . . . .	110
6.13	Αποτελέσματα για την δεύτερη συνάρτηση κόστους στο σύστημα πενταμερές πολυαιθυλενίου (2) . . . . .	110
6.14	Αποτελέσματα για την δεύτερη συνάρτηση κόστους στο σύστημα πενταμερές πολυαιθυλενίου (3) . . . . .	111
6.15	Σταθερές τιμές υπερπαραμέτρων για την τέταρτη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα πενταμερές πολυαιθυλενίου . . . . .	113
6.16	Αποτελέσματα για την τέταρτη συνάρτηση κόστους στο σύστημα πενταμερές πολυαιθυλενίου . . . . .	114
6.17	Σταθερές τιμές υπερπαραμέτρων για την τέταρτη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα πενταμερές πολυαιθυλενίου (2) . . . . .	115
6.18	Αποτελέσματα για την τέταρτη συνάρτηση κόστους στο σύστημα πενταμερές πολυαιθυλενίου (2) . . . . .	116
6.19	Σταθερές τιμές υπερπαραμέτρων για την τέταρτη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα πενταμερές πολυαιθυλενίου (3) . . . . .	119
6.20	Αποτελέσματα για την τέταρτη συνάρτηση κόστους στο σύστημα πενταμερές πολυαιθυλενίου (3) . . . . .	119
6.21	Σταθερές τιμές υπερπαραμέτρων για την πέμπτη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα πενταμερές πολυαιθυλενίου . . . . .	123
6.22	Αποτελέσματα για την πέμπτη συνάρτηση κόστους στο σύστημα πενταμερές πολυαιθυλενίου . . . . .	124
6.23	Σταθερές τιμές υπερπαραμέτρων για την πέμπτη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα πενταμερές πολυαιθυλενίου (2) . . . . .	127
6.24	Αποτελέσματα για την πέμπτη συνάρτηση κόστους στο σύστημα πενταμερές πολυαιθυλενίου (2) . . . . .	127
6.25	Σταθερές τιμές υπερπαραμέτρων για την πρώτη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα CTA . . . . .	131
6.26	Αποτελέσματα για την πρώτη συνάρτηση κόστους στο σύστημα CTA . . . . .	132
6.27	Σταθερές τιμές υπερπαραμέτρων για την πρώτη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα CTA (2) . . . . .	134
6.28	Αποτελέσματα για την πρώτη συνάρτηση κόστους στο σύστημα CTA (2) . . . . .	135

6.29 Σταθερές τιμές υπερπαραμέτρων για την δεύτερη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα CTA . . . . .	137
6.30 Αποτελέσματα για την δεύτερη συνάρτηση κόστους στο σύστημα CTA . . . . .	137
6.31 Αποτελέσματα για την δεύτερη συνάρτηση κόστους στο σύστημα CTA (2) . . . . .	137
6.32 Αποτελέσματα για την δεύτερη συνάρτηση κόστους στο σύστημα CTA (3) . . . . .	138
6.33 Σταθερές τιμές υπερπαραμέτρων για την τέταρτη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα CTA . . . . .	140
6.34 Αποτελέσματα για την τέταρτη συνάρτηση κόστους στο σύστημα CTA . . . . .	141
6.35 Σταθερές τιμές υπερπαραμέτρων για την τέταρτη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα CTA (2) . . . . .	144
6.36 Αποτελέσματα για την τέταρτη συνάρτηση κόστους στο σύστημα CTA (2) . . . . .	144
6.37 Σταθερές τιμές υπερπαραμέτρων για την πέμπτη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα CTA . . . . .	147
6.38 Αποτελέσματα για την πέμπτη συνάρτηση κόστους στο σύστημα CTA . . . . .	148
6.39 Σταθερές τιμές υπερπαραμέτρων για την πέμπτη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα CTA (2) . . . . .	153
6.40 Αποτελέσματα για την πέμπτη συνάρτηση κόστους στο σύστημα CTA (2) . . . . .	153



# Κεφάλαιο 1

## Εισαγωγή

### 1.1 Εισαγωγή στην Μοριακή Προσομοίωση

#### 1.1.1 Ο ορισμός και η σημασία της Μοριακής Προσομοίωσης

Ο όρος "Μοριακή Προσομοίωση" αναφέρεται στο σύνολο των μεθόδων με τις οποίες πραγματοποιείται αναπαραγωγή της συμπεριφοράς των μορίων και των μοριακών συστημάτων [1]. Συνήθως, οι μοριακές προσομοιώσεις χτίζονται με βάση περίπλοκα μαθηματικά μοντέλα που περιγράφουν τα φυσικοχημικά συστήματα που εξετάζονται. Στην πλειοψηφία των περιπτώσεων, όσο πιο λεπτομερής είναι η περιγραφή που δίνει ένα μοντέλο για ένα σύστημα, τόσο πιο εκτενείς υπολογισμοί είναι αναγκαίο να γίνουν κατά την διάρκεια της προσομοίωσής του. Έτσι, η πρόοδος στον τομέα της τεχνολογίας υπολογιστών, έχει παίξει σημαντικό ρόλο στην ανάπτυξη και εξέλιξη τις τελευταίες δεκαετίες του πεδίου των μοριακών προσομοιώσεων.

Οι δύο κατηγορίες μεθόδων που χρησιμοποιούνται για την διεξαγωγή μοριακών προσομοιώσεων είναι οι Κβαντομηχανικές μέθοδοι και οι μέθοδοι Κλασσικής Μηχανικής. Στις κβαντομηχανικές μεθόδους οι θεμελιώδεις μονάδες των συστημάτων είναι τα υποατομικά σωματίδια, ενώ στις μεθόδους κλασσικής μηχανικής οι θεμελιώδεις μονάδες των συστημάτων είναι τα άτομα. Βέβαια, σε κάποια συστήματα όταν είναι αναγκαίο χρησιμοποιείται συνδυασμός των δύο μεθόδων [2]. Επομένως, η επιλογή των μεθόδων προσομοίωσης σε ένα σύστημα, γίνεται με κριτήριο την κλίμακα μεγέθους και

την λεπτομέρεια στην οποία επιθυμούμε να εξετάσουμε τα φυσικοχημικά φαινόμενα που εξελίσσονται σε αυτό.

Σε συστήματα που υπακούουν στους νόμους της κλασσικής μηχανικής δύο από τις βασικότερες κατηγορίες μεθόδων που χρησιμοποιούνται για την εκτέλεση προσομοιώσεων, είναι η μέθοδος της Μοριακής Δυναμικής και οι μέθοδοι Monte Carlo. Η πρώτη είναι ντετερμινιστική μέθοδος και είναι χτισμένη πάνω στους θεμελιώδεις νόμους της Κλασσικής Μηχανικής. Η Μοριακή Δυναμική χρησιμοποιείται κυρίως όταν θέλουμε να δώσουμε έμφαση στην δυναμική εξέλιξη στον χρόνο, του συστήματος που εξετάζουμε. Από την άλλη, οι μέθοδοι Monte-Carlo είναι στοχαστικές και βασίζονται στην Θεωρία Πιθανοτήτων. Σε αντίθεση με την μοριακή δυναμική, με τις μεθόδους Monte-Carlo δεν προσομοιώνουμε την δυναμική εξέλιξη ενός συστήματος στον χρόνο, αλλά αναπαράγουμε για αυτό τυχαίες καταστάσεις χρησιμοποιώντας κατανομές πιθανοτήτων (όπως η κατανομή Boltzmann). Ο σκοπός και των δύο μεθόδων είναι η εξαγωγή φυσικοχημικών ιδιοτήτων για τα προς προσομοίωση συστήματα.

Οι μοριακές προσομοιώσεις, ανεξάρτητα από τις μεθόδους που χρησιμοποιούν, μας επιτρέπουν να κατανοήσουμε την συμπεριφορά και τις ιδιότητες μοριακών συστημάτων χρησιμοποιώντας ως μέσα πρόβλεψης την μικροσκοπική δομή τους και τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ατόμων που τα αποτελούν. Το γεγονός ότι εκτελούνται σε υπολογιστικό περιβάλλον επιτρέπει να πραγματοποιηθεί διερεύνηση κάποιων υλικών συστημάτων κάτω από συνθήκες οι οποίες δεν είναι "προσβάσιμες" με πειραματικές διαδικασίες σε πραγματικό εργαστηριακό περιβάλλον. Εν γένει, οι μοριακές προσομοιώσεις σαν επιστημονικό εργαλείο γεφυρώνουν τις κλίμακες μήκους και χρόνου του μικρόκοσμου με τις αντίστοιχες μακροσκοπικές κλίμακες [3] γεγονός που τις καθιστά ακόμη πιο χρήσιμες σε ποικίλες εφαρμογές .

Μία από τις εφαρμογές των μοριακών προσομοιώσεων που χρησιμοποιείται από τους σύγχρονους επιστήμονες είναι η επιβεβαίωση θεωριών [4]. Για παράδειγμα, σε περίπτωση που έχει προταθεί ένα καινούργιο Δυναμικό Αλληλεπίδρασης οι Μοριακές Προσομοιώσεις μας δίνουν την δυνατότητα να ελέγξουμε κατά πόσο ταιριάζει σε συγκεκριμένα χημικά συστήματα και κάτω από συγκεκριμένες συνθήκες. Η δυνατότητα αυτή είναι τεράστιας σημασίας, γιατί ανοίγει τον δρόμο για ρεαλιστικότερη και ακριβέστερη μοντελοποίηση συστημάτων στο μέλλον με χρήση κατάλληλων αλληλεπιδράσεων μεταξύ των ατόμων που τα αποτελούν. Η επιβεβαίωση θεωριών μπορεί να γίνει με σύγκριση των ιδιοτήτων που προβλέπονται από την προσομοίωση σε υπολογιστικό περιβάλλον με τις ιδιότητες που μετρούνται

πειραματικά σε εργαστηριακό περιβάλλον. Αν η εφαρμογή μίας νέας θεωρίας στην προσομοίωση ενός συστήματος οδηγήσει στην πρόβλεψη ρεαλιστικών ιδιοτήτων που έχουν επιβεβαιωθεί από εργαστηριακές μετρήσεις, τότε πιθανότατα επικυρώνεται η ισχύς της για τις συγκεκριμένες συνθήκες που χρησιμοποιήθηκαν [3].

Οι προβλέψεις ιδιοτήτων υλικών με τη διεξαγωγή μοριακών προσομοιώσεων είναι εξέχουσας σημασίας για τη σύγχρονη τεχνολογία και για τις βιομηχανίες κάθε είδους. Η συνεχώς αυξανόμενη δυνατότητα των μεθόδων που ακολουθούνται κατά τις μοριακές προσομοιώσεις για πρόβλεψη φυσικών και χημικών ιδιοτήτων υλικών συστημάτων έχουν οδηγήσει στην εφαρμογή τους για το σχεδιασμό νέων υλικών ή τη βελτίωση των τρόπων και των συνθηκών παραγωγής ήδη υπάρχοντων υλικών. Από την υπολογιστική μελέτη των υλικών με μεθόδους μοριακής προσομοίωσης μπορούν να υπολογιστούν ένα πολύ μεγάλο εύρος ιδιοτήτων όπως θερμοδυναμικές, δομικές, δυναμικές, ιδιότητες μεταφοράς, επιφανειακές και μηχανικές ιδιότητες, ιδιότητες ρόφησης και διαπερατότητας, ισορροπίας φάσεων κ.ά. . Πλέον υπάρχει η δυνατότητα πρόβλεψης των κινητικών παραμέτρων και γενικότερων μηχανισμών χημικών αντιδράσεων με χρήση υπολογιστικών μοντέλων [5], που επιτρέπει τον σχεδιασμό, την βελτίωση και την πρόβλεψη διεργασιών σύνθεσης χημικών/υλικών. Επίσης, από υπολογιστικά μοντέλα μπορεί να γίνει πρόβλεψη δυναμικών ιδιοτήτων για υλικά και κατ' επέκταση να εξαχθούν για αυτά ρεολογικές ιδιότητες [6], οι οποίες χρησιμοποιούνται για περαιτέρω προσομοιώσεις της ρεολογίας τους, για παράδειγμα σε έναν βιομηχανικό αντιδραστήρα ή έναν αγωγό. Ακόμη, η πρόβλεψη δυναμικών ιδιοτήτων όπως τα ρεολογικά χαρακτηριστικά ή ένας συντελεστής διάχυσης μπορούν να αξιοποιηθούν στην βιομηχανία φαρμάκων όπου δύναται να προβλεφθεί με τεχνικές μοριακών προσομοιώσεων ο τρόπος με τον οποίο ένα φάρμακο διαπερνάει μία κυτταρική μεμβράνη [7] και στην συνέχεια με βάση τις εκτιμήσεις που προαναφέρθηκαν για χημικούς μηχανισμούς και για κινητική, να προβλεφθεί ο τρόπος με τον οποίο το πολυμερές ενός φαρμάκου αλληλεπιδρά χημικά με τα βιολογικά μόρια [8]. Επιπροσθέτως, μπορούν να προβλεθούν ηλεκτρικές, θερμικές και μηχανικές ιδιότητες "θεωρητικών" υλικών που διερευνάται η κατασκευή τους ή ήδη υπάρχοντων υλικών κάτω από συγκεκριμένες συνθήκες. Σε πολλές περιπτώσεις, γίνεται χρήση των υλικών αυτών στις συνθήκες στις οποίες παρουσιάζουν τις βέλτιστες ιδιότητες . Μία πολύ σημαντική εφαρμογή της πρόβλεψης ιδιοτήτων υλικών ή του σχεδιασμού νέων υλικών με επιθυμητές ιδιότητες μέσω μοριακών προσομοιώσεων, αφορά την προστασία του περιβάλλοντος. Συγκεκριμένα, έχουν δημοσιευτεί αρκετές μελέτες όπου ακολουθούνται τεχνικές μοριακών προσομοιώσεων για τη μοντελοποίηση και την πρόβλεψη ιδιοτήτων συστημάτων βιοδιασπώμενων

πολυμερών [9][10], τα οποία αποτελούν το μέλλον στην -πολύ κρίσιμη για το περιβάλλον- ανακύκλωση πλαστικών. Είναι, λοιπόν, εμφανής η ανάμειξη και η σημασία των Μοριακών Προσομοιώσεων στην παραγωγή και στον χώρο της τεχνολογίας και οι εφαρμογές που μπορεί να σκεφτεί κανείς ατελείωτες. Πλέον οι τομείς αυτοί είναι άρρηκτα συνδεδεμένοι μεταξύ τους και η πρόοδος του ενός έχει σημαντική επιρροή στην πρόοδο του άλλου.

### 1.1.2 Η ανάγκη για Αδροποίηση

Οι μοριακές προσομοιώσεις, προκειμένου να είναι ρεαλιστικές, πραγματοποιούνται σε συστήματα τα οποία έχουν πολύ μεγάλο αριθμό ατόμων και ταυτόχρονα περίπλοκες και λεπτομερείς εκφράσεις για τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ τους. Έτσι, κατατάσσονται στην οικογένεια των προβλημάτων πολλών σωμάτων τα οποία είναι υπερβολικά περίπλοκα λόγω του τεράστιου αριθμού των βαθμών ελευθερίας που τα χαρακτηρίζουν. Σε πολλές περιπτώσεις κατά την προσομοίωση τέτοιων συστημάτων με ένα υπολογιστικό μοντέλο η πολυπλοκότητα και το υπολογιστικό κόστος είναι τόσο μεγάλα που απαιτείται πολύ εκτενές χρονικό διάστημα υπολογισμών. Το παραπάνω καθιστά πολύ δύσκολη έως και αδύνατη την προσομοίωση συγκεκριμένων συστημάτων σε μεγάλες κλίμακες μήκους και χρόνου [11].

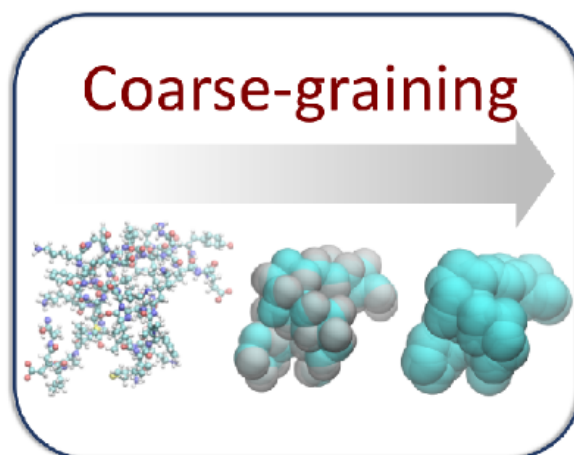
Τα προαναφερθέντα ανάγκασαν τους ερευνητές του τομέα να αναζητήσουν κάποιες πρακτικές λύσεις για το συγκεκριμένο πρόβλημα. Μία από τις πιο αξιόπιστες και καινοτόμες λύσεις αυτές είναι η αδροποίηση (coarse-graining). Η αδροποίηση επιτρέπει τη μείωση του αριθμού των βαθμών ελευθερίας του προς προσομοίωση πλήρους ατομιστικού συστήματος σε σημαντικό βαθμό με το μετασχηματισμό του σε ένα νέο και απλούστερο αδροποιημένο σύστημα [12]. Το νέο σύστημα αυτό είναι πολύ πιο εύκολο να προσομοιωθεί, αφού έχουμε μειώσει την ακρίβεια και τη λεπτομέρεια στην περιγραφή του, αλλά ταυτόχρονα δύναται να αναπαραγάγει, με κατάλληλο σχεδιασμό, τις σημαντικές για ένα συγκεκριμένο πρόβλημα υπό μελέτη, ιδιότητες, σε συμφωνία με το πλήρως ατομιστικό μοντέλο [13]. Για να επιτευχθεί το παραπάνω σε ένα χημικό σύστημα επιλέγουμε να ομαδοποιήσουμε ή να εξαιρέσουμε τους βαθμούς ελευθερίας οι οποίοι αντιστοιχούν σε γρήγορες και τοπικές κινήσεις ενώ ταυτόχρονα διατηρούμε τους υπόλοιπους βαθμούς ελευθερίας, οι οποίοι αντιστοιχούν σε πιο αργές και αντιπροσωπευτικές για μια συγκεκριμένη διεργασία του συστήματος [14].

Κατά τη διαδικασία της αδροποίησης, ομάδες ατόμων της πλήρως

ατομιστικής αναπαράστασης αντικαθίστανται από ισοδύναμα κέντρα αλληλεπίδρασης ή "ψευδοάτομα" ή "υπεράτομα" (superatoms) [11]. Τα ψευδοάτομα αυτά πολλές φορές επιλέγεται αυθαίρετα να έχουν σφαιρικό σχήμα και ονομάζονται αδροποιημένες μονάδες (coarse-grained units) ή χάντρες (beads) [15] και είναι πάντα λιγότερες στον αριθμό από τα άτομα της πλήρως ατομιστικής αναπαράστασης. Επομένως, επιτυγχάνεται η προαναφερθείσα μείωση στους βαθμούς ελευθερίας.

Μία εξαιρετικά χρήσιμη "ιδιότητα" της αδροποίησης είναι ότι μας επιτρέπει να "μεταπηδάμε" μεταξύ διαφόρων κλιμάκων μεγέθους. Για παράδειγμα, μπορούμε να εξάγουμε αδροποιημένα δυναμικά αλληλεπίδρασης για το ατομιστικό επίπεδο απο προσομοιώσεις σε χβαντικό επίπεδο [16]. Ή να εξάγουμε αδροποιημένα δυναμικά αλληλεπίδρασης πολύπλοκων χημικών συστημάτων, όπως είναι τα μακρομοριακά συστήματα (πολυμερή ή βιολογικά μόρια) από προσομοιώσεις στο ατομιστικό επίπεδο [17].

Στην εικόνα που ακολουθεί φαίνεται μία διαισθητική απεικόνιση για την διαδικασία της αδροποίησης σε ένα μοριακό σύστημα όπου παρουσιάζεται η αντικατάσταση ομάδων ατόμων με ισοδύναμα κέντρα αλληλεπίδρασης (απεικονιζόμενα ως σφαιρικού σχήματος), που είναι πλέον οι θεμελιώδεις μονάδες του νέου αδροποιημένου συστήματος.



Εικόνα 1.1: Απεικόνιση της πλήρως ατομιστικής και της αδροποιημένης αναπαράστασης ενός συστήματος

Τα τελευταία χρόνια έχουν προταθεί από ερευνητές ποικίλες μέθοδοι για να πραγματοποιηθεί αδροποίηση σε διάφορα συστήματα. Έχει δημιουργηθεί, όμως η ανάγκη για κάποιες νέες αποτελεσματικές μεθόδους αδροποίησης να μη βασίζονται απλά στη χημική διαίσθηση των ερευνητών. Επίσης εγείρεται η ανάγκη για εύρεση νέων γενικευμένων μεθόδων αδροποίησης οι οποίες να βρίσκουν εφαρμογή σε μία μεγάλη ποικιλία χημικών ειδών αλλά και κλιμάκων μεγέθους οι οποίες δεν απευθύνονται μόνο σε συγκεκριμένα συστήματα. Πρόσφατα, λόγω των προβληματισμών που διατυπώθηκαν, έχει γίνει από τους ερευνητές στροφή προς τον ολοένα και περισσότερο αναπτυσσόμενο και καινοτόμο τομέα της Μηχανικής Μάθησης (Machine Learning). Στην παρούσα εργασία θα εξεταστεί μία προτότυπη μέθοδος αδροποίησης που βασίζεται στην Μηχανική Μάθηση.

## 1.2 Εισαγωγή στη Μηχανική Μάθηση

Ο Helbert Simon -γνωστός επιστήμονας στον τομέα της γνωστικής ψυχολογίας- έδωσε τον εξής ορισμό για την μάθηση [18] :

*"Η μάθηση σηματοδοτεί προσαρμοστικές αλλαγές σε ένα σύστημα με την έννοια ότι αυτές του επιτρέπουν να κάνει την ίδια εργασία, ή εργασίες της ίδιας κατηγορίας, πιο αποδοτικά και αποτελεσματικά την επόμενη φορά"*

Η μάθηση αποτελεί τον κινητήριο μοχλό της προόδου της ανθρώπινης ύπαρξης και δραστηριότητας σε όλους τους τομείς της ζωής. Η διαδικασία της μάθησης βασίζεται στην παρατήρηση και την επεξεργασία δεδομένων και ερεθισμάτων από τον ανθρώπινο εγκέφαλο με τρόπο τέτοιο ώστε να γίνει πιο αποδοτικός όταν καλείται να εκτελέσει συγκεκριμένες διαδικασίες και να επιλύσει προβλήματα. Τα τελευταία χρόνια οι άνθρωποι, εκμεταλλευόμενοι τις εξαιρετικές δυνατότητες της τεχνολογίας, έχουν καταφέρει να προσδώσουν σε υπολογιστικά συστήματα την σπουδαία δυνατότητα της μάθησης με διάφορες τεχνικές που βασίζονται στα Μαθηματικά και την Επιστήμη Υπολογιστών.

### 1.2.1 Ορισμός Μηχανικής Μάθησης

Με τον όρο Μηχανική Μάθηση (Machine Learning) [19] αναφερόμαστε σε αλγόριθμους οι οποίοι συνθέτουν "έξυπνα" προβλεπτικά μοντέλα (παραμετρικές συναρτήσεις και παραμετρικούς αλγόριθμους απόφασης)

βασιζόμενοι σε σύνολα από δεδομένα. Η Μηχανική Μάθηση χρησιμοποιεί αυτά τα δεδομένα και τους αλγορίθμους κάνοντας μία προσπάθεια μίμησης του τρόπου με τον οποίο μαθαίνουν οι άνθρωποι. Η Μηχανική Μάθηση αποτελεί υποσύνολο ενός γενικότερου επιστημονικού τομέα που ονομάζεται Τεχνητή Νοημοσύνη (Artificial Intelligence).

### 1.2.2 Κατηγορίες Μηχανικής Μάθησης

Η Μηχανική Μάθηση χωρίζεται σε τέσσερις συνολικά κατηγορίες[20]: την Επιβλεπόμενη Μάθηση (Supervised Learning), την Μη Επιβλεπόμενη Μάθηση (Unsupervised Learning), την Ενισχυτική Μάθηση (Reinforcement Learning) και την Ημι-επιβλεπόμενη Μάθηση (Semi-Supervised Learning) οι οποίες αναλύονται παρακάτω[20].

- **Επιβλεπόμενη Μάθηση:** Κάθε μοντέλο Μηχανικής Μάθησης δέχεται στην είσοδο του ένα σύνολο δεδομένων και παράγει αποτελέσματα στην έξοδό του. Κατά την Επιβλεπόμενη Μάθηση χρησιμοποιούνται ως είσοδοι στο μοντέλο μας, δεδομένα τα οποία είναι συσχετισμένα με γνωστά αποτελέσματα. Το μοντέλο αρχικά παράγει κάποια αυθαίρετα αποτελέσματα για την εκάστοτε είσοδο και σταδιακά προσαρμόζει τις παραμέτρους του έτσι ώστε να αρχίζει να αναπαράγει τα γνωστά αυτά αποτελέσματα για την αντίστοιχη είσοδο. Τα δεδομένα, λοιπόν, χρησιμοποιούνται ως παραδείγματα για την εκπαίδευση ενός προβλεπτικού μοντέλου. Για παράδειγμα, μπορεί να διαθέτουμε πραγματικά δεδομένα από μετρήσεις που σχετίζουν ποσότητες όπως η ταχύτητα του ανέμου, το ποσοστό υγρασίας, το πόσα σύννεφα υπάρχουν στον ουρανό και τη θερμοκρασία του αέρα, με το αν θα βρέξει ή όχι. Ένα μοντέλο Επιβλεπόμενης Μάθησης όπως αυτό του παραδείγματος, μετά το πέρας της εκπαίδευσής του μπορεί να πραγματοποιήσει απλές προβλέψεις για το αν θα βρέξει ή όχι δεχόμενο ως είσοδο τα μεγέθη που αναφέρθηκαν.

Δύο βασικές κατηγορίες προβλημάτων Επιβλεπόμενης Μηχανικής Μάθησης είναι τα προβλήματα ταξινόμησης (classification) και εκτίμησης τιμής (regression/value estimation). Στα προβλήματα ταξινόμησης τα δεδομένα εισόδου κατηγοριοποιούνται σε κλάσεις στην έξοδο του μοντέλου, ενώ στα προβλήματα εκτίμησης τιμής στην έξοδο του μοντέλου προβλέπεται μία αριθμητική ποσότητα που αντιστοιχεί στα δεδομένα εισόδου. Με βάση τα προαναφερθέντα, το παράδειγμα της

προηγούμενης παραγράφου κατηγοριοποιείται στα προβλήματα ταξινόμησης (δύο πιθανές κατηγοριοποιήσεις: βροχή ή όχι βροχή)

- **Μη Επιβλεπόμενη Μάθηση:** Στην περίπτωση της Μη Επιβλεπόμενης Μάθησης, τα δεδομένα που χρησιμοποιούμε ως είσοδο για το μοντέλο μας δεν είναι συσχετισμένα με γνωστές εξόδους όπως στην περίπτωση της επιβλεπόμενης μάθησης. Επομένως, σε αυτή την περίπτωση δεν επιχειρούμε να εκπαιδεύσουμε ένα προβλεπτικό μοντέλο, αλλά ο σκοπός μας είναι να βρεθούν δομές, μοτίβα και συσχετίσεις μεταξύ των δεδομένων που διαθέτουμε.
- **Ενισχυτική Μάθηση:** Στην περίπτωση της Ενισχυτικής Μάθησης, η διαδικασία της εκπαίδευσης ενός συστήματος γίνεται μέσω της αλληλεπίδρασής του με το περιβάλλον του. Στην περίπτωση αυτή το εκπαιδευόμενο σύστημα μαθαίνει καλές στρατηγικές δράσης, με βάση το τι ανταμοιβή παίρνει με βάση τις δράσεις του μέσω μίας συνάρτησης ανταμοιβής. Η Ενισχυτική Μάθηση, όπως είναι αναμενόμενο, βρίσκει εφαρμογή σε διάφορες βιομηχανικές διεργασίες και στη ρομποτική. Ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα Ενισχυτικής Μάθησης, είναι η κίνηση ενός ρομπότ στο χώρο που θα επιβραβεύεται κάθε φορά που δεν θα προσκρούει σε επιφάνειες που βρίσκονται στο περιβάλλον του.
- **Ημι-επιβλεπόμενη Μάθηση:** Στην περίπτωση της Ημι-επιβλεπόμενης Μάθησης διαθέτουμε δεδομένα για τα οποία συσχετίζονται με γνωστά αποτελέσματα, αλλά και δεδομένα τα οποία δεν γνωρίζουμε αποτελέσματα. Επομένως, αποτελεί έναν συνδυασμό της Επιβλεπόμενης και της Μη-Επιβλεπόμενης Μάθησης. Επομένως ένα μοντέλο Ημι-επιβλεπόμενης Μάθησης, κατά την εκπαίδευσή του, μαθαίνει να προβλέπει τις εξόδους για το μέρος των δεδομένων που αυτές δεν είναι γνωστές, χρησιμοποιώντας ως παράδειγμα εκπαίδευσης το μέρος των δεδομένων στο οποίο οι σωστές έξοδοι είναι γνωστές.

### 1.2.3 Νευρωνικά Δίκτυα

Τα Νευρωνικά Δίκτυα (Neural Networks) ή αλλιώς Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα (Artificial Neural Networks) αποτελούν ένα υποσύνολο του τομέα της Μηχανικής Μάθησης και την ραχοκοκαλιά των αλγορίθμων Βαθιάς Μάθησης (Deep Learning). Τόσο το όνομά τους όσο και η σύλληψη και η δομή τους βασίζονται στη δομή και τη λειτουργία των νευρικών κυττάρων, που ονομάζονται και βιολογικοί νευρώνες, και πιο συγκεκριμένα στον τρόπο

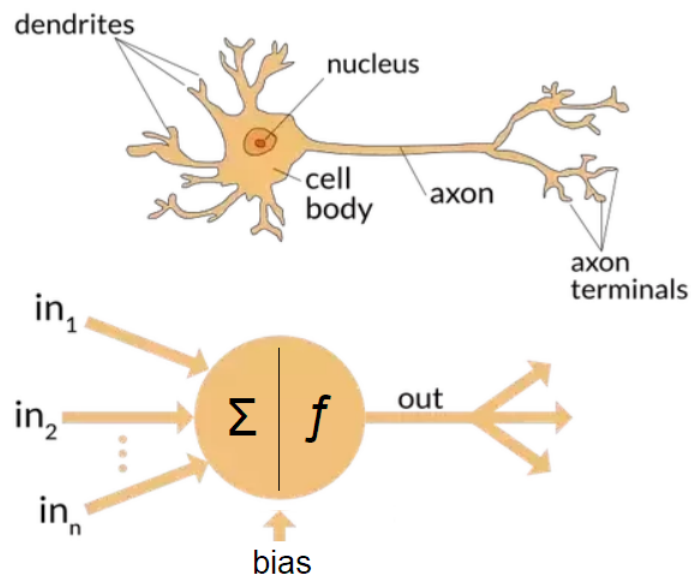


με τον οποίο μεταδίδεται η πληροφορία από τον έναν βιολογικό νευρώνα στον άλλο.

Οι βιολογικοί νευρώνες αποτελούν δομικά τμήματα και λειτουργικές μονάδες του νευρικού συστήματος και χωρίζονται σε τέσσερα βασικά μέρη: τους δενδρίτες, το κυτταρικό σώμα, τον νευράξονα και τις νευραξονικές απολήξεις. Οι δενδρίτες είναι μικρού μήκους προεκτάσεις ενός νευρώνα και χαρακτηρίζονται από πολλές διακλαδώσεις. Τα σήματα (νευρικές ώσεις) εισέρχονται στους νευρώνες μέσω των δενδριτών. Στη συνέχεια ακολουθεί το σώμα ενός νευρώνα, που είναι το κύριο μέρος του και περιλαμβάνει τον πυρήνα του κυττάρου. Το σώμα είναι συνδεδεμένο με ένα νευράξονα, μία λεπτή προέκτασή του που καταλήγει στο τελικό τμήμα του νευρώνα, που περιλαμβάνει τις νευρικές απολήξεις. Η κύρια λειτουργία του νευράξονα είναι να μεταδίδει πληροφορίες από το σώμα του κυττάρου με τη μορφή σήματος (επαλληλία των επιμέρους σημάτων από όλους τους δενδρίτες). Η πληροφορία αυτή καταλήγει στις νευρικές απολήξεις, οι οποίες περιέχουν συνάψεις που είναι υπεύθυνες για την απελευθέρωση χημικών ουσιών που ονομάζονται νευροδιαβιβαστές και μεταφέρουν την πληροφορία σε άλλους νευρώνες [21].

Οι τεχνητοί νευρώνες αποτελούν τις στοιχειώδεις δομικές μονάδες ενός Τεχνητού Νευρωνικού Δικτύου. Επομένως, πολλοί νευρώνες μαζί συνθέτουν ένα νευρωνικό δίκτυο. Τα νευρωνικά δίκτυα συνήθως αποτελούνται από στρώματα νευρώνων. Σε ένα νευρωνικό δίκτυο τα στρώματα λειτουργούν ως επίπεδα, ο αριθμός των οποίων καθορίζει το βάθος του νευρωνικού δικτύου. Κάθε στρώμα μπορεί να περιέχει έναν ή περισσότερους νευρώνες. Τα δεδομένα που εισέρχονται σε ένα νευρώνα ενός στρώματος, συνδέονται με τους νευρώνες με κάποιες συνδέσεις που ονομάζονται βάρη. Πριν τα δεδομένα εισέρθουν σε ένα νευρώνα πραγματοποιείται μία σταθμισμένη άθροισή τους, ανάλογη με αυτή που πραγματοποιείται στους δενδρίτες. Στην συνέχεια, ο νευρώνας που είναι ανάλογος του σώματος πραγματοποιεί έναν μετασχηματισμό των δεδομένων με αντικατάσταση σε μία συνάρτηση. Τέλος, τα δεδομένα που εξέρχονται συνδέονται ξανά μέσω βαρών (αντίστοιχες συνάψεις των νευρικών απολήξεων) με τους νευρώνες των επόμενων στρωμάτων. Στην παρακάτω εικόνα, δίνεται εποπτικά ο παραλληλισμός ενός τεχνητού νευρώνα με έναν βιολογικό νευρώνα[21].

Το κύριο πλεονέκτημα των νευρωνικών δικτύων που τα καθιστά πανίσχυρα εργαλεία στα χέρια των σύγχρονων ερευνητών είναι η εξαιρετική δυνατότητά τους να προσεγγίζουν οποιαδήποτε συνάρτηση (3.4). Έτσι, η χρήση των Νευρωνικών Δικτύων για την επίλυση σύνθετων επιστημονικών



Εικόνα 1.2: Παράλληλισμός ενός βιολογικού νευρώνα με έναν τεχνητό νευρώνα

προβλημάτων είναι ολοένα και πιο διαδεδομένα τα τελευταία χρόνια λόγω της ικανότητάς τους να δίνουν λύση σε πολύ σύνθετα προβλήματα μετά από την κατάλληλη εκπαίδευσή τους. Η εκπαίδευση των Νευρωνικών Δικτύων είναι μία διαδικασία κατά την οποία γίνεται συνεχώς ανανέωση των παραμέτρων τους με διάφορες μαθηματικές μεθόδους, μέχρι να βρεθούν αυτές οι οποίες δίνουν μία επιθυμητή λύση στο πρόβλημα που θέλουμε να λύσουμε σε κάθε περίπτωση. Για τους σκοπούς της συγκεκριμένης εργασίας, θα γίνει χρήση των Παραλλακτικών Αυτοκωδικοποιητών (Variational Autoencoders) που αποτελούνται από δύο Νευρωνικά Δίκτυα. Οι παραλλακτικοί Αυτοκωδικοποιητές θα αναλυθούν εις βάθος στο κεφάλαιο 4. Θα παρουσιαστεί μία καινοτόμος μεθοδολογία για να πραγματοποιηθεί η διαδικασία μετάβασης σε αδροποιημένη αναπαράσταση.

### 1.3 Σκοπός εργασίας

Σκοπός της διπλωματικής εργασίας είναι η ανάπτυξη και εφαρμογή νέων μεθοδολογιών αδροποίησης κάνονοντας χρήση αλγορίθμων μηχανικής μάθησης. Στο πλαίσιο της εργασίας διερευνάται η χρήση αυτόματων παραλλακτικών κωδικοποιητών (VAE) για την ανάδειξη της κατάλληλης

ομαδοποίησης για την μετάβαση από το ατομιστική σε μια αδροποιημένη αναπαράσταση διαφορετικών χημικών συστημάτων (αιθάνιο, στυρένιο, πενταμερές πολυαιθυλενίου, μονομερές CTA), τα οποία αποτελούν δομικές μονάδες πολυμερικών συστημάτων με ευρύ πεδίο έρευνας και εφαρμογών. Πρόκειται για μια διαδικασία κατά την οποία ο VAE εποπτεύεται καθώς στοχεύει να είναι σε θέση να αναδημιουργήσει τον αρχικό χώρο των θέσεων των ατόμων και βλέπει την ιδανική έξοδο, η οποία στη συγκεκριμένη περίπτωση ταυτίζεται με την είσοδο. Η εποπτεία, όμως, δεν σχετίζεται άμεσα με το κύριο στόχο, ο οποίος είναι η ανάθεση. Έτσι, η ομαδοποίηση είναι ουσιαστικά μια μη επιτηρούμενη διαδικασία, δεδομένου ότι το σύστημα δεν γνωρίζει την "ιδανική" αντιστοίχιση (mapping) ή οποιαδήποτε προτεινόμενη αντιστοίχιση, ή ακόμη και έναν προτεινόμενο αριθμό αδροποιημένων μονάδων. Στόχος της εργασίας είναι η εφαρμογή και επέκταση αυτής της διαδικασίας με τη διερεύνηση διαφόρων παραγόντων που επηρεάζουν το αποτέλεσμα της αδροποίησης, όπως είναι οι διαφορετικές θεωρήσεις για τη συνάρτηση κόστους, η επαναληψιμότητα των αποτελεσμάτων, η επιλογή των διαφόρων υπερ-παραμέτρων. Η διερεύνηση στο πλαίσιο της παρούσας εργασίας αποτελεί ένα θεμελιακό αφετηριακό βήμα για την ανάπτυξη γενικευμένων μεθοδολογιών προσομοίωσης πολλαπλών κλιμάκων υποβοηθούμενων από τη χρήση αλγορίθμων μηχανικής εκμάθησης, οι οποίες θα καταστήσουν δυνατή τη βαθύτερη κατανόηση των σχέσεων δομής-ιδιοτήτων σε πολύπλοκα χημικά συστήματα με τεράστιο εύρος εφαρμογών, όπως είναι τα πολυμερή και τα μακρομοριακά συστήματα γενικότερα.

## Κεφάλαιο 2

# Θεωρητικό Υπόβαθρο Μοριακών Προσομοιώσεων

Η μοριακή προσομοίωση βασίζεται στις θεμελιακές αρχές της Στατιστικής Φυσικής. Η Στατιστική Μηχανική είναι ένας επιστημονικός κλάδος που αποτελεί εφαρμογή της Θεωρίας Πιθανοτήτων για την περιγραφή συστημάτων μεγάλου "πληθυσμού" σωματιδίων ή αντικειμένων που βρίσκονται σε κίνηση και υπόκεινται σε δυνάμεις. Η Στατιστική Φυσική συνιστά τον σύνδεσμο μεταξύ της μικροσκοπικής περιγραφής της ύλης και της μακροσκοπικής θερμοδυναμικής περιγραφής, και αποτελεί απαραίτητο εργαλείο για τη μελέτη της φυσικής των ιδιοτήτων των υλικών [22].

Οι κλασικές προσομοιώσεις βασίζονται στην Κλασική Μηχανική η οποία αποτελεί τον κλάδο της Φυσικής που αφοσιώνεται στην μελέτη της ισορροπίας και της κίνησης σωμάτων που υπόκεινται σε δυνάμεις. Το κριτήριο διαχωρισμού της από την Σχετικιστική Μηχανική είναι ότι τα φαινόμενα που εξετάζει δεν περιλαμβάνουν σώματα τα οποία κινούνται με ταχύτητα κοντά σε αυτή του φωτός. Το κριτήριο διαχωρισμού της από την Κβαντομηχανική είναι ότι τα φαινόμενα που εξετάζει δεν εξελίσσονται στην υποατομική κλίμακα [23]. Η Κλασική Μηχανική έχει τις βάσεις της στους Νόμους του Νεύτωνα και πλαισιώνεται και ενισχύεται από δουλειές σπουδαίων μαθηματικών όπως ο Euler και ο Lagrange.

## 2.1 Χώρος Φάσεων

Έστω ότι έχουμε ένα υλικό σύστημα το οποίο αποτελείται από  $N$  σωματίδια το οποίο παρουσιάζει μία δυναμική εξέλιξη στον χρόνο λόγω αλληλεπιδράσεων μεταξύ των σωματιδίων. Με βάση την κλασική μηχανική, ένα τέτοιο σύστημα μπορεί να περιγραφεί πλήρως από τις συντεταγμένες και τις ορμές των σωματιδίων του που απαρτίζουν σύνολα ονομαζόμενα, αντίστοιχα, χώρος απεικονίσεων και χώρος ορμών.

Ο χώρος απεικονίσεων είναι:

$$\mathbf{q}^N = (\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N) \in \mathbb{R}^{3N}$$

Όπου  $\mathbf{q}_i \in \mathbb{R}^3$  με  $i = 1, \dots, N$  τα διανύσματα που περιγράφουν τις καρτεσιανές συντεταγμένες των σωματιδίων του συστήματος. Και ο χώρος ορμών του συστήματος:

$$\mathbf{p}^N = (\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N) \in \mathbb{R}^{3N}$$

Όπου  $\mathbf{p}_i \in \mathbb{R}^3$  με  $i = 1, \dots, N$  τα διανύσματα που περιγράφουν τις ορμές των σωματιδίων του συστήματος. Ο χώρος απεικονίσεων και ο χώρος ορμών του συστήματος συναποτελούν το χώρο φάσεων ο οποίος είναι  $6N$ -διάστατος.

$$\mathbf{X}^N = (\mathbf{q}^N, \mathbf{p}^N) \in \mathbb{R}^{6N}$$

Κάθε χρονική στιγμή  $t$ , η κατάσταση του συστήματος περιγράφεται από το σημείο  $\mathbf{X}^N(t)$  του  $6N$ -διάστατου χώρου. Αν γνωρίζουμε το σημείο αυτό σε μία χρονική στιγμή, τότε μπορούμε να προσδιορίσουμε το παραστατικό σημείο του συστήματος στο χώρο φάσεων κάθε άλλη χρονική στιγμή. Το σύνολο των σημείων  $\mathbf{X}^N(t)$ , όπως αυτά εξελίσσονται στον χρόνο, ορίζουν μία καμπύλη στο χώρο φάσεων, η οποία αποτελεί την τροχιά του συστήματος.

Σε αυτό το σημείο είναι χρήσιμο να αναφερθούμε στη Χαμιλτονιανή, η οποία είναι η ολική ενέργεια του συστήματος και είναι συνάρτηση του χώρου φάσεων. Εφόσον η Χαμιλτονιανή είναι η ολική ενέργεια του συστήματος, μπορεί να γραφτεί ως άθροισμα της κινητικής ( $K$ ) και της δυναμικής ενέργειας ( $V$ ) ως εξής:

$$\mathcal{H}(\mathbf{q}^N, \mathbf{p}^N) = K + V(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N) = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} + V(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N) \quad (2.1)$$

## 2.2 Στατιστικά Σύνολα

Με τον όρο στατιστικό σύνολο (ensemble) αναφερόμαστε σε μία συλλογή από μικροκαταστάσεις ενός συστήματος, οι οποίες υπόκεινται στους ίδιους μακροσκοπικούς περιορισμούς. Κάθε στατιστικό σύνολο περιγράφεται από μία συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας (σ.π.π.), η οποία είναι απόρροια των μακροσκοπικών περιορισμών που έχουν επιβληθεί σε ένα σύστημα. Η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας μας υποδεικνύει το πώς είναι κατανομημένα τα σημεία του στατιστικού συνόλου στον χώρο φάσεων. Με την βοήθεια της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας του στατιστικού συνόλου μπορούμε να υπολογίζουμε μέσες τιμές διαφόρων ιδιοτήτων του συστήματος. Αν  $\varrho(\mathbf{X}^N, t)$  η σ.π.π., τότε η μέση τιμή μίας ιδιότητας  $\mathcal{A}$  στο συγκεκριμένο στατιστικό σύνολο υπολογίζεται από την παρακάτω σχέση:

$$\langle \mathcal{A} \rangle = \int \mathcal{A} \cdot \varrho(\mathbf{X}^N, t) d\mathbf{X}^N \quad (2.2)$$

Όπου προφανώς η  $\varrho(\mathbf{X}^N, t)$  είναι κανονικοποιημένη στον χώρο φάσεων, δηλαδή ισχύει ότι:

$$\int \varrho(\mathbf{X}^N, t) d\mathbf{X}^N = 1 \quad (2.3)$$

Το παραπάνω ολοκλήρωμα υπολογίζεται πάνω σε όλο τον χώρο φάσεων. Δύο από τα βασικότερα στατιστικά σύνολα είναι το  $NVE$  (Μικροκανονικό Στατιστικό Σύνολο) και το  $NVT$  (Κανονικό Στατιστικό Σύνολο).

### 2.2.1 Μικροκανονικό Στατιστικό Σύνολο:

Το στατιστικό σύνολο  $NVE$  αποτελεί μία συλλογή μικροκαταστάσεων του συστήματος μας που υπόκεινται σε στατιστικούς περιορισμούς τέτοιους ώστε ο αριθμός των σωματιδίων ( $N$ ), ο όγκος του συστήματος ( $V$ ) και η συνολική ενέργεια του συστήματος ( $E$ ) να παραμένουν σταθερά. Θεωρούμε ότι το κουτί σταθερού όγκου  $V$  μέσα στο οποίο βρίσκεται το σύστημά μας είναι απομονωμένο έτσι ώστε να μην ανταλλάζει ενέργεια με το περιβάλλον του. Με βάση τους παραπάνω στατιστικούς περιορισμούς η σ.π.π. ισορροπίας που προκύπτει είναι [24][25]:

$$\varrho^{NVE}(\mathbf{q}^N, \mathbf{p}^N) = \frac{1}{\int d^{3N}q \cdot d^{3N}p} \quad , E - \delta E < \mathcal{H}(\mathbf{q}^N, \mathbf{p}^N) < E \quad (2.4)$$

Η σ.π.π. είναι μη μηδενική μόνο στο χωρίο  $E - \delta E < \mathcal{H}(\mathbf{q}^N, \mathbf{p}^N) < E$  και είναι μηδενική αλλού. Το γεγονός αυτό δηλώνει ότι είναι πιθανές μόνο οι καταστάσεις στις οποίες η ενέργεια διατηρείται πρακτικά σταθερή. Το  $\delta E$  εκφράζει μία αβεβαιότητα στην τιμή της ενέργειας. Εφόσον η ολική ενέργεια διατηρείται πρακτικά σταθερή, από την εξίσωση της Χαμιλτονιανής ορίζεται μία υπερεπιφάνεια σταθερής ενέργειας  $6N-1$  διαστάσεων με εξίσωση  $\mathcal{H}(\mathbf{q}^N, \mathbf{p}^N) = E$  πάνω στην οποία κινούνται τα σημεία του χώρου φάσεων. Μετά το πέρασ μεγάλου χρονικού διαστήματος τα σημεία της τροχιάς του χώρου φάσεων θα έχουν επισκεφτεί όλη την υπερεπιφάνεια σταθερής ενέργειας [26]. Επομένως, όλες οι μικροκαταστάσεις του συστήματος είναι ισοπίθανες και η παραπάνω κατανομή ομοιόμορφη. Το ολοκλήρωμα  $\int d^{3N}q \cdot d^{3N}p$  του παρονομαστή, εκφράζει τον όγκο του  $6N$ -διάστατου χωρίου που ορίζεται από τον χώρο φάσεων [24] [22].

### 2.2.2 Κανονικό Στατιστικό Σύνολο:

Το στατιστικό σύνολο  $NVT$  αποτελεί μία συλλογή μικροκαταστάσεων του συστήματός μας που υπόκεινται σε στατιστικούς περιορισμούς τέτοιους ώστε ο αριθμός των σωματιδίων ( $N$ ), ο όγκος του συστήματος ( $V$ ) και η θερμοκρασία του συστήματος ( $T$ ) να παραμένουν σταθερά. Θεωρούμε ότι το σύστημα μας, που είναι ένα κουτί σταθερού όγκου με  $N$  σωματίδια βρίσκεται σε επαφή με ένα πολύ μεγαλύτερο σύστημα, το οποίο αποκαλούμε "λουτρό". Το "λουτρό" είναι ένα απομονωμένο σύστημα θερμοκρασίας  $T$ . Το σύστημά μας μέσω των τοιχωμάτων του ανταλλάσσει ενέργεια με το λουτρό, αλλά τα τοιχώματα του είναι φτιαγμένα έτσι ώστε να μην επιτρέπεται να μετακινούνται σωματίδια μεταξύ των δύο συστημάτων, προκειμένου να διασφαλιστεί η διατήρηση των στατιστικών περιορισμών. Με βάση αυτούς τους στατιστικούς περιορισμούς, η σ.π.π. που προκύπτει από τη μεγιστοποίηση της συνάρτησης της εντροπίας του συστήματος [27] είναι:

$$\varrho^{NVT}(\mathbf{q}^N, \mathbf{p}^N) = \frac{e^{-\beta \cdot \mathcal{H}(\mathbf{q}^N, \mathbf{p}^N)}}{\int e^{-\beta \cdot \mathcal{H}(\mathbf{q}^N, \mathbf{p}^N)} d^{3N}q \cdot d^{3N}p} \quad (2.5)$$

Όπου  $\beta = \frac{1}{k_B \cdot T}$  και  $k_B$  η σταθερά του Boltzmann. Η παραπάνω σχέση είναι γνωστή και ως κατανομή Boltzmann. Η παραπάνω σχέση μας δείχνει ότι οι ενεργειακές καταστάσεις με ενέργεια η οποία είναι πολύ μεγαλύτερη από  $k_B \cdot T$  είναι πολύ λιγότερο πιθανές, επειδή το εκθετικό παίρνει πολύ μικρή τιμή.

## 2.3 Εργοδικό Θεώρημα

**Θεώρημα:** Έστω  $\mathbf{X}^N = (\mathbf{q}^N, \mathbf{p}^N)$  ο χώρος φάσεων ενός συστήματος,  $S_E$  η υπερεπιφάνεια σταθερής ενέργειας του συστήματος και  $\mathcal{A}$  μία συνάρτηση που περιγράφει μία ιδιότητα του συστήματος. Αν ο χώρος φάσεων  $\mathbf{X}^N$  είναι πυκνός πάνω στην υπερεπιφάνεια της ενέργειας  $S_E$  και η  $\mathcal{A}$  είναι συνεχής, τότε η μέση τιμή της ιδιότητας αυτής ως προς τον χρόνο είναι ίση με την μέση τιμή της ως προς το ensemble: [28] [24]

$$\langle \mathcal{A} \rangle_t = \langle \mathcal{A} \rangle_{\text{ensemble}} \Leftrightarrow$$

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \mathcal{A}(\mathbf{X}^N(t)) dt = \frac{1}{\Sigma(E)} \int_{S_E} \mathcal{A}(\mathbf{X}^N(t)) dX^{6N-1} \quad (2.6)$$

όπου  $\Sigma(E)$  είναι το εμβαδόν ολόκληρης της υπερεπιφάνειας σταθερής ενέργειας δηλαδή:

$$\Sigma(E) = \int_{S_E} dX^{6N-1} \quad (2.7)$$

Το ότι η τροχιά  $\mathbf{X}^N$  είναι πυκνή πάνω στην υπερεπιφάνεια της ενέργειας  $S_E$  σημαίνει πως πάνω σε οποιοδήποτε χωρίο της υπερεπιφάνειας υπάρχουν άπειρα σημεία της τροχιάς του χώρου φάσεων. Πρακτικά, το θεώρημα σημαίνει ότι με το πέρασ του χρόνου σχεδόν όλα τα σημεία του στατιστικού συνόλου θα επισκεφτούν σχεδόν ολόκληρη την υπερεπιφάνεια της ενέργειας.

Το εργοδικό θεώρημα βρίσκει εφαρμογή στην μοριακή δυναμική. Στα πρακτικά προβλήματα η ενέργεια είναι εν γένει αδύνατο να παραμείνει εντελώς σταθερή, επομένως δεν υφίσταται υπερεπιφάνεια σταθερής ενέργειας και επίσης τα σημεία του χώρου φάσεων που δειγματολειτουργούνται δεν καλύπτουν όλη την επιφάνεια. Επιπλέον, δεν υπάρχουν συνεχείς συναρτήσεις αλλά διακριτά σημεία. Λαμβάνοντας υπόψιν τα παραπάνω είναι πιο ορθό να χρησιμοποιείται ο όρος Εργοδική Υπόθεση όταν αναφερόμαστε στην εφαρμογή του προηγούμενου θεωρήματος σε πραγματικά συστήματα.

Στην περίπτωση της μεθόδου της μοριακής δυναμικής, τα σημεία της τροχιάς του χώρου φάσεων προκύπτουν από την επίλυση των διαφορικών εξισώσεων που περιγράφουν τη χρονική εξέλιξη του συστήματος. Σε αυτήν την περίπτωση, οι εξισώσεις δεν επιλύονται αναλυτικά, αλλά αριθμητικά.



Επομένως, λαμβάνοντας υπόψιν όλα τα παραπάνω, το χρονικό ολοκλήρωμα μετατρέπεται σε άθροισμα και αντί για τους απειροστούς χρόνους  $dt$  πλέον η ελάχιστη χρονική διαφορά είναι το βήμα ολοκλήρωσης που επιλέγεται για την επίλυση των διαφορικών εξισώσεων κίνησης. Θεωρώντας ότι ισχύει η εργοδική υπόθεση, η μέση τιμή μίας ποσότητας  $\mathcal{A}$  μετά από  $N$  χρονικά βήματα είναι:

$$\langle \mathcal{A}(\mathbf{X}(t)) \rangle = \frac{1}{N} \cdot \sum_{i=1}^N \mathcal{A}(\mathbf{X}(t_i)) \quad (2.8)$$

με  $\delta t = t_{i+1} - t_i$  το σταθερό βήμα ολοκλήρωσης που χρησιμοποιείται.

## 2.4 Κλασικό Δυναμικό Αλληλεπίδρασης

Το κλασικό δυναμικό ενός συστήματος είναι μία μαθηματική έκφραση που περιγράφει την εξάρτηση της δυναμικής ενέργειας από τις συντεταγμένες των σωματιδίων που αποτελούν το σύστημα αυτό. Οι συναρτήσεις ατομιστικού δυναμικού είναι εμπειρικές και ημι-εμπειρικές εκφράσεις, σκοπός των οποίων είναι η ρεαλιστικότερη δυνατή περιγραφή των αλληλεπιδράσεων μεταξύ των ατόμων ενός συστήματος [3]. Όλες οι δυνάμεις που ασκούνται στα άτομα ενός συστήματος προκύπτουν από την αρνητική βαθμίδα της συνάρτησης δυναμικού. Οι αλληλεπιδράσεις σε ένα σύστημα χωρίζονται σε δύο κατηγορίες: στις δεσμικές και στις μη δεσμικές. Το δυναμικό αλληλεπίδρασης ενός συστήματος γράφεται σαν άθροισμα του δεσμικού και του μη δεσμικού δυναμικού :

$$\mathcal{V}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \mathcal{V}_{\text{Non Bonded}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) + \mathcal{V}_{\text{Bonded}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (2.9)$$

### 2.4.1 Μη δεσμικές αλληλεπιδράσεις

Μη δεσμικές ονομάζουμε τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ ατόμων τα οποία δεν συνδέονται μεταξύ τους με κάποιον δεσμό. Στα κλασικά δυναμικά αλληλεπίδρασης θεωρούνται δύο όροι μη δεσμικών αλληλεπιδράσεων: οι ηλεκτροστατικές και οι Van der Waals. Van der Waals καλούμε όλες τις δυνάμεις μεταξύ φορτισμένων και μη σωματιδίων που παρουσιάζουν εξάρτηση από το αντίστροφο της απόστασης μεταξύ των σωματιδίων αυτών, υψωμένο στην έκτη δύναμη. Μία γενική έκφραση για τις μη δεσμικές αλληλεπιδράσεις μπορεί να γραφεί με τον παρακάτω τρόπο θεωρώντας άθροισμα όρων με βάση

τις αλληλεπιδράσεις δύο, τριών, τεσσάρων σωμάτων και ούτω καθεξής[3] [29]:

$$\mathcal{V}_{\text{Non-Bonded}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_i \mathcal{V}_1(\mathbf{r}_i) + \sum_i \sum_{j>i} \mathcal{V}_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) + \sum_i \sum_{j>i} \sum_{k>j} \mathcal{V}_3(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k) + \dots \quad (2.10)$$

Οι δύο πιο διαδεδομένες εκφράσεις για τις μη δεσμικές αλληλεπιδράσεις είναι το δυναμικό Coulomb και το δυναμικό Leonard-Jones, τα οποία ορίζονται ως εξής [30]:

$$\mathcal{V}^{\text{LJ}}(r_{ij}) = 4\epsilon_{ij} \cdot \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (2.11)$$

$$\mathcal{V}^{\text{Coulomb}}(r_{ij}) = k \cdot \frac{q_i \cdot q_j}{4\pi\epsilon_o r_{ij}} \quad (2.12)$$

όπου για το δυναμικό Leonard-Jones το  $\epsilon$  ονομάζεται βάθος πηγαδιού και αποτελεί ένα μέτρο για το πόσο ισχυρή είναι η σύνδεση μεταξύ δύο σωμάτων,  $\sigma$  είναι η απόσταση μεταξύ των δύο αλληλεπιδρώντων σωμάτων στην οποία το δυναμικό γίνεται μηδέν και  $r$  η απόσταση μεταξύ των αλληλεπιδρώντων σωμάτων. Αντίστοιχα για την έκφραση του δυναμικού Coulomb τα  $q_i$  και  $q_j$  είναι τα φορτία των αλληλεπιδρώντων σωμάτων,  $k$  η σταθερά Coulomb,  $\epsilon_o$  η διηλεκτρική σταθερά του κενού και  $r$  η απόσταση μεταξύ τους.

Επομένως, οι μη δεσμικές αλληλεπιδράσεις μπορούν να γραφούν σαν άθροισμα των αλληλεπιδράσεων Coulomb και Leonard-Jones για όλα τα άτομα:

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_{\text{Non-Bonded}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) &= \sum_i \sum_{j>i} \mathcal{V}^{\text{LJ}}(r_{ij}) + \sum_i \sum_{j>i} \mathcal{V}^{\text{Coulomb}}(r_{ij}) \Leftrightarrow \\ \mathcal{V}_{\text{Non-Bonded}}(\mathbf{r}^N) &= \sum_i \sum_{j>i} 4\epsilon \cdot \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \sum_i \sum_{j>i} k \cdot \frac{q_i \cdot q_j}{4\pi\epsilon_o r_{ij}} \end{aligned} \quad (2.13)$$

### 2.4.2 Δεσμικές αλληλεπιδράσεις

Οι δεσμικές αλληλεπιδράσεις είναι εκείνες οι οποίες προκύπτουν λόγω της ύπαρξης δεσμού μεταξύ των ατόμων, που συνθέτουν τα μόρια του συστήματος. Πολλές φορές ο υπολογισμός των εκφράσεων δυναμικού είναι αρκετά περίπλοκος και έχει μεγάλο υπολογιστικό κόστος. Έτσι είναι

διαδεδομένη η χρήση εκφράσεων για το δυναμικό που προκύπτουν από την αρμονική προσέγγιση, η οποία είναι αρκετά ικανοποιητική σε πολλές περιπτώσεις. Το δυναμικό δεσμικών αλληλεπιδράσεων υπολογίζεται σαν το άθροισμα των επιμέρους δυναμικών που οφείλονται στην έκταση/κάμψη δεσμών, στην παραμόρφωση των γωνιών των δεσμών και στην στρέψη γύρω από δεσμούς.

Το δυναμικό έκτασης δεσμών ακολουθεί συνήθως την αρμονική προσέγγιση, κατά την οποία ο δεσμός μεταξύ των ατόμων συμπεριφέρεται ως ελατήριο που εκτελεί απλή αρμονική ταλάντωση και επομένως περιγράφεται από τον νόμο του Hooke [3]:

$$\mathcal{V}_{\text{Bonds}}(r) = \frac{1}{2}k_b \cdot (r - r_o)^2 \quad (2.14)$$

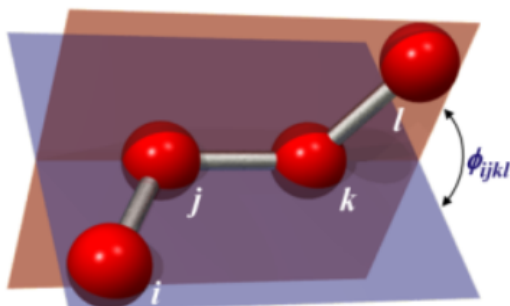
όπου  $r_o$  το σημείο ισορροπίας της ταλάντωσης και  $k_b$  η σταθερά της ταλάντωσης που λειτουργεί και ως σταθερά ελατηρίου. Ένας ακόμη όρος της συνάρτησης δυναμικού δεσμικών αλληλεπιδράσεων είναι αυτός που περιγράφει την παραμόρφωση των γωνιών των δεσμών που επίσης ακολουθεί την αρμονική προσέγγιση[3]:

$$\mathcal{V}_{\text{Angles}}(\theta) = \frac{1}{2}k_\theta \cdot (\theta - \theta_o)^2 \quad (2.15)$$

όπου  $\theta_o$  η γωνία ισορροπίας της ταλάντωσης και  $k_\theta$  η σταθερά της ταλάντωσης που αποτελεί μέτρο της δυσκαμψίας της δεσμικής γωνίας. Άλλες εκφράσεις που λαμβάνονται υπόψιν κατά υπολογισμό της συνάρτησης δυναμικού μη δεσμικών αλληλεπιδράσεων είναι αυτές που περιγράφουν την ενέργεια λόγω της στρέψης των δεσμών . Οι εν λόγω εκφράσεις αφορούν άτομα τα οποία δεν είναι συνεπίεδα. Από κάθε τριάδα διαδοχικών ατόμων μπορεί να διέλθει ένα επίπεδο επομένως για τον ορισμό της στρέψης δεσμού χρειαζόμαστε τέσσερα διαδοχικά άτομα, έστω  $i, j, k$  και  $l$ . Οι αλληλεπιδράσεις λόγω στρέψης δεσμών χωρίζονται σε δύο κατηγορίες: στις κανονικές (proper) και στις μη κανονικές (improper). Η γωνία στρέψης ή διέδρη γωνία για την proper περίπτωση ορίζεται ως η γωνία που σχηματίζεται μεταξύ του επιπέδου που ορίζεται από τα άτομα  $i, j$  και  $k$  και του επιπέδου που ορίζεται από τα άτομα  $j, k$  και  $l$ . Το δυναμικό αυτό μπορεί να οριστεί ως εξής[31]:

$$\mathcal{V}_{\text{Dihedrals}}(\phi_{ijkl}) = \frac{1}{2}k_\phi \cdot (1 - \cos[n(\phi_{ijkl} - \phi_o)]) \quad (2.16)$$

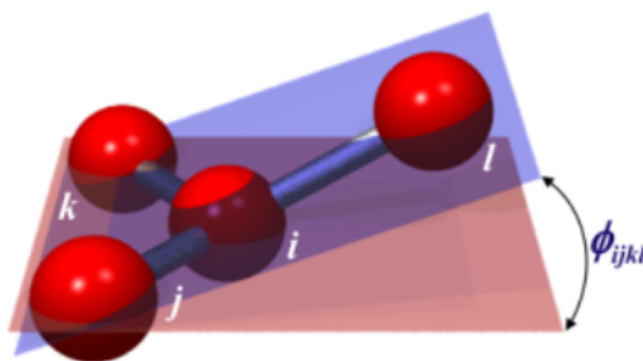
όπου  $\phi_{ijkl}$  η γωνία μεταξύ των επιπέδων και  $n$  το μέτρο του διανύσματος  $\mathbf{n} = \mathbf{r}_{lk} \times \mathbf{r}_{jk}$ , το οποίο έχει κατεύθυνση κάθετη στο επίπεδο που ορίζεται από τα  $\mathbf{r}_{jk}$  και  $\mathbf{r}_{lk}$ . Μία σχηματική απεικόνιση για τις γωνίες και τα επίπεδα που



Εικόνα 2.1: Απεικόνιση επιπέδων που ορίζουν μία κανονική διέδρη γωνία

χρησιμοποιήθηκαν κατά την περιγραφή των αλληλεπιδράσεων μεταξύ διεδρων γωνιών φαίνεται στο σχήμα 2.1 [31].

Τέλος, για την μη κανονική στρέψη η γωνία στρέψης που εξετάζουμε είναι αυτή μεταξύ του επιπέδου που ορίζεται από τα άτομα  $i$ ,  $j$  και  $k$  και του επιπέδου που ορίζεται από τα  $j$ ,  $k$  και  $l$  θεωρώντας όμως την εξής νέα διάταξη των ατόμων στον χώρο [3] [31]:



Εικόνα 2.2: Απεικόνιση επιπέδων που ορίζουν μία μη κανονική διέδρη γωνία

Μία έκφραση της ενέργειας που δύναται να χρησιμοποιηθεί για τις μη κανονικές διέδρες γωνίες στρέψης, ακολουθώντας την αρμονική προσέγγιση, γράφεται:

$$V_{\text{Improper}}(\phi_{ijkl}) = \frac{1}{2}k_{\phi} \cdot (\phi_{ijkl} - \phi_0)^2 \quad (2.17)$$

Η έκφραση για το μη-δεσμικό δυναμικό είναι άθροισμα των σχέσεων (2.14),

(2.15), (2.16) και (2.17) για όλο το σύστημα:

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_{\text{Bonded}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) &= \sum_{\text{Bonds}} \mathcal{V}_{\text{Bonds}} + \sum_{\text{Angles}} \mathcal{V}_{\text{Angles}} + \sum_{\text{Dihedrals}} \mathcal{V}_{\text{Dihedrals}} + \sum_{\text{Improvers}} \mathcal{V}_{\text{Improvers}} \Leftrightarrow \\ \mathcal{V}_{\text{Bonded}}(\mathbf{r}^N) &= \sum_{\text{Bonds}} \frac{1}{2} k_b \cdot (r - r_o)^2 + \sum_{\text{Angles}} \frac{1}{2} k_\theta \cdot (\theta - \theta_o)^2 + \sum_{\text{Dihedrals}} \frac{1}{2} k_\phi \cdot (1 - \cos[n(\phi_{ijkl} - \phi_o)]) + \\ &\quad + \sum_{\text{Improvers}} \frac{1}{2} k_\phi \cdot (\phi_{ijkl} - \phi_o)^2 \end{aligned} \quad (2.18)$$

Συνδυάζοντας τις εκφράσεις (2.9), (2.13) και (2.18), μία τυπική έκφραση για το συνολικό δυναμικό αλληλεπίδρασης είναι:

$$\begin{aligned} \mathbf{V}(\mathbf{r}^N) &= \sum_{\text{Bonds}} \frac{1}{2} k_b \cdot (r - r_o)^2 + \sum_{\text{Angles}} \frac{1}{2} k_\theta \cdot (\theta - \theta_o)^2 \\ &\quad + \sum_{\text{Dihedrals}} \frac{1}{2} k_\phi \cdot (1 - \cos[n(\phi_{ijkl} - \phi_o)]) + \sum_{\text{Improvers}} \frac{1}{2} k_\phi \cdot (\phi_{ijkl} - \phi_o)^2 \\ &\quad + \sum_i \sum_{j>i} 4\epsilon \cdot \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \sum_i \sum_{j>i} k \cdot \frac{q_i \cdot q_j}{4\pi\epsilon_o r_{ij}} \end{aligned} \quad (2.19)$$

Από την παρατήρηση της έκφρασης του δυναμικού είναι φανερός ο λόγος για τον οποίο καθίσταται εξαιρετικά δύσκολη η επίλυση των εξισώσεων κίνησης όπου η δύναμη είναι η αρνητική βαθμίδα του δυναμικού. Σημειώνεται πως στην έκφραση του δυναμικού μπορεί να υπάρχουν και άλλοι όροι ή να μην χρησιμοποιείται η αρμονική προσέγγιση επομένως επιλέχθηκαν και αναλύθηκαν κάποιες από τις πιο συνηθισμένες εκφράσεις.

## 2.5 Μοριακή Δυναμική

Για την προσομοίωση ενός συστήματος μορίων που διέπεται από τις αρχές της Κλασσικής Μηχανικής είναι αναγκαίος ο προσδιορισμός όλων των βαθμών ελευθερίας του. Ο προσδιορισμός αυτός γίνεται με την επίλυση των εξισώσεων κίνησης που περιγράφουν το σύστημα και έτσι προκύπτουν οι θέσεις και οι ορμές όλων των ατόμων δηλαδή ο χώρος φάσεων. Όλες οι μέσες τιμές των ιδιοτήτων ενός συστήματος υπολογίζονται με τη χρήση κατανομών πάνω στο χώρο φάσεων. Για τον υπολογισμό ολόκληρης της δυναμικής τροχιάς στο χώρο φάσεων, δηλαδή για τον υπολογισμό των θέσεων και των ορμών όλων

των ατόμων του συστήματος κάθε χρονική στιγμή, αρκεί να ξέρουμε τις ορμές και τις ταχύτητες μία μόνο χρονική στιγμή συν τις απαραίτητες συνοριακές και αρχικές συνθήκες που θα εφαρμοστούν κατά την επίλυση των εξισώσεων κίνησης. Με βάση την Κλασική Μηχανική για τον υπολογισμό των θέσεων και των ταχυτήτων ενός συστήματος σωματιδίων που βρίσκονται σε αλληλεπίδραση μεταξύ τους λόγω ενός δυναμικού αλληλεπίδρασης  $\mathcal{V}$ , αρκεί να επιλύσουμε τις εξισώσεις του Νεύτωνα. Για ένα σύστημα  $N$  σωματιδίων το οποίο περιγράφεται από Καρτεσιανές συντεταγμένες, οι εξισώσεις του Νεύτωνα γράφονται:

$$\mathbf{F}_i = m_i \cdot \ddot{\mathbf{r}}_i = m_i \cdot \dot{\mathbf{v}}_i = m_i \cdot \mathbf{a}_i, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (2.20)$$

όπου  $\mathbf{F}_i$  τα διανύσματα της δύναμης που δέχεται κάθε σωματίδιο  $i$ ,  $\mathbf{r}_i$  τα διανύσματα θέσεων των σωματιδίων του συστήματος,  $\mathbf{v}_i$  τα διανύσματα των ταχυτήτων και  $\mathbf{a}_i$  τα διανύσματα των επιταχύνσεων. Η ορμή ενός σωματιδίου  $i$  μπορεί να υπολογισθεί με βάση την ταχύτητά του:

$$\mathbf{p}_i = m_i \cdot \mathbf{v}_i = m_i \cdot \dot{\mathbf{r}}_i \quad (2.21)$$

Η δύναμη που δέχεται το  $i$ -στο από τα  $N$  σωματίδια ορίζεται ως η αρνητική βαθμίδα της συνάρτησης δυναμικού του συστήματος ως προς το διάνυσμα  $\mathbf{r}_i$  δηλαδή:

$$\mathbf{F}_i = -\nabla_{\mathbf{r}_i} \mathcal{V}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = -\frac{\partial \mathcal{V}}{\partial \mathbf{r}_i} = \left( -\frac{\partial \mathcal{V}}{\partial r_{ix}}, -\frac{\partial \mathcal{V}}{\partial r_{iy}}, -\frac{\partial \mathcal{V}}{\partial r_{iz}} \right) \quad (2.22)$$

Επομένως, καλούμαστε να λύσουμε ένα σύστημα πεπλεγμένων διαφορικών εξισώσεων δεύτερης τάξης που περιγράφεται από τις (2.20) και (2.21).

Σε πολλές περιπτώσεις κάποιες από τις  $6N$  μεταβλητές ( $3N$  ορμές και  $3N$  θέσεις) του χώρου φάσεων λόγω περιορισμών είναι συσχετισμένες μεταξύ τους. Σε τέτοιες περιπτώσεις μειώνουμε τον αριθμό τους έτσι ώστε να έχουμε ένα νέο σύστημα μόνο με ανεξάρτητες μεταβλητές. Για να το πετύχουμε αυτό εισάγουμε τις γενικευμένες συντεταγμένες  $\mathbf{q}$ , οι παράγωγοι  $\dot{\mathbf{q}}$  των οποίων μας δίνουν τις γενικευμένες ταχύτητες του νέου συστήματος. Σε αυτό το σημείο είναι χρήσιμο να εισαγάγουμε την Λαγκρανζιανή  $\mathcal{L}$  του συστήματος αυτού που ορίζεται ως  $\mathcal{L} = \mathcal{T} - \mathcal{V}$  όπου  $\mathcal{T}$  η κινητική ενέργεια σε αυτό το σύστημα συντεταγμένων και  $\mathcal{V}$  η δυναμική ενέργεια. Επομένως η  $\mathcal{L}$  είναι συνάρτηση όλου του νέου χώρου φάσεων αφού η  $\mathcal{V}$  ως δυναμική ενέργεια είναι συνάρτηση όλων των θέσεων και η  $\mathcal{T}$  ως κινητική ενέργεια είναι συνάρτηση όλων των ταχυτήτων. Ξεκινώντας από τις εξισώσεις Νεύτωνα αποδεικνύεται ότι ισχύει η εξής σχέση για την Λαγκρανζιανή [32]:

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{q}}_i} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{q}_i} = 0 \quad (2.23)$$

όπου  $\mathbf{q}_i$  η  $i$ -στη γενικευμένη συντεταγμένη. Η επίλυση της (2.23) οδηγεί στον πλήρη προσδιορισμό του χώρου φάσεων του συστήματος. Με βάση τον ορισμό της  $\mathcal{L}$  μπορούμε να εκφράσουμε τις ορμές με τον εξής τρόπο [32]:

$$\mathbf{p}_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{q}}_i} \quad (2.24)$$

Μία ακόμη πιο αποτελεσματική και ισχυρή μέθοδος προκύπτει με την εισαγωγή της συνάρτησης της Χαμιλτονιανής που ορίζεται ως  $\mathcal{H} = \sum_i \dot{\mathbf{q}}_i \cdot \mathbf{p}_i - \mathcal{L} = \mathcal{T} + \mathcal{V}$  η οποία είναι η ολική ενέργεια του συστήματος όπως ορίστηκε και σε προηγούμενο κεφάλαιο. Από τον ορισμό αυτόν προκύπτουν οι εξισώσεις Hamilton [32]:

$$\dot{\mathbf{q}}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}_i} \quad (2.25)$$

$$-\dot{\mathbf{p}}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}_i} \quad (2.26)$$

Η επίλυση των εξισώσεων κίνησης Hamilton είναι ισοδύναμη με την επίλυση της (2.23) με το τεράστιο όμως πλεονέκτημα ότι γίνεται υπολογισμός μόνο πρώτων παραγώγων.

### 2.5.1 Η μέθοδος της Μοριακής Δυναμικής

Για την εφαρμογή της μεθόδου της Μοριακής Δυναμικής πραγματοποιείται μία σειρά από βήματα που πρέπει να γίνουν για την επίλυση του περίπλοκου συστήματος διαφορικών εξισώσεων που περιγράφεται από τις (2.20) και (2.21). Οι εξισώσεις διακριτοποιούνται και σε ένα σύστημα που αποτελείται από  $N$  μόρια σε κάθε βήμα ολοκλήρωσης προκύπτουν  $N$  διανύσματα θέσεων και  $N$  διανύσματα ορμών. Συνοπτικά, τα γενικά βήματα που ακολουθούνται είναι [29]:

1. Καθορισμός των αρχικών συνθηκών του συστήματος (θερμοκρασία, συνδέσεις μεταξύ μορίων, δυναμικό, πυκνότητα κλπ.)
2. Κατασκευή μίας αρχικής δομής για το σύστημα και απόδοση αρχικών ταχυτήτων στα σωματίδια του συστήματος (συνήθως από μία κατανομή)
3. Σε κάθε χρονικό βήμα της προσομοίωσης γίνεται υπολογισμός της ενέργειας του συστήματος, των δυνάμεων του συστήματος, ολοκληρώνονται οι εξισώσεις κίνησης και υπολογίζονται ιδιότητες του

συστήματος ανάλογα μα το στατιστικό σύνολο το οποίο έχει επιλεγεί για την προσομοίωση.

4. Υπολογισμός μέσων όρων για τις ιδιότητες του συστήματος.

### 2.5.2 Αλγόριθμος Verlet

Ο αλγόριθμος Verlet χρησιμοποιείται για την ολοκλήρωση των εξισώσεων κίνησης του Νεύτωνα [33] ή ισοδύναμα της εξίσωσης (2.21) και υπολογίζονται οι θέσεις  $\mathbf{r}_i$  σε διάφορους χρόνους  $t$  με βήμα ολοκλήρωσης  $\Delta t$  κάνοντας χρήση του αναπτύγματος Taylor της συνάρτησης  $r(t + \Delta t)$  γύρω από το  $t$ . Το παραπάνω ανάπτυγμα γράφεται ως εξής:

$$r(t + \Delta t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{r^{(n)}(t) \cdot (\Delta t)^n}{n!} = r(t) + \Delta t \cdot r'(t) + \frac{1}{2!}(\Delta t)^2 \cdot r''(t) + \dots$$

όπου  $\mathbf{r}'(t) = \mathbf{v}(t)$  δηλαδή η ταχύτητα και  $\mathbf{r}''(t) = \mathbf{a}(t)$  δηλαδή η επιτάχυνση. Άρα η εξίσωση γράφεται [34]:

$$r(t + \Delta t) = r(t) + \Delta t \cdot v(t) + \frac{1}{2}(\Delta t)^2 \cdot a(t) + \dots \quad (2.27)$$

Και αντίστοιχα αν γίνει αντικατάσταση  $-\Delta t$  στην θέση του  $\Delta t$  παίρνουμε:

$$r(t - \Delta t) = r(t) - \Delta t \cdot v(t) + \frac{1}{2}(\Delta t)^2 \cdot a(t) + \dots \quad (2.28)$$

Θεωρούμε ικανοποιητική την προσέγγιση μέχρι την δεύτερη παράγωγο το οποίο σημαίνει ότι οι υπόλοιποι όροι του αναπτύγματος είναι αμελητέοι σε σχέση με τους πρώτους τρεις ή προσθέτουν ένα αρκετά μικρό αλλά υπολογίσιμο σφάλμα στην προσέγγιση που πραγματοποιείται. Προσθέτοντας κατά μέλη τις εξισώσεις (2.27) και (2.28) παίρνουμε:

$$r(t + \Delta t) = 2r(t) + (\Delta t)^2 \cdot a(t) - r(t - \Delta t) \quad (2.29)$$

Επίσης, αφαιρώντας κατά μέλη τις εξισώσεις (2.27) και (2.28) παίρνουμε:

$$r(t + \Delta t) - r(t - \Delta t) = 2\Delta t \cdot v(t) \Leftrightarrow v(t) = \frac{r(t + \Delta t) - r(t - \Delta t)}{2\Delta t} \quad (2.30)$$

Η εξίσωση (2.29) παρουσιάζει σφάλμα της τάξης  $\mathcal{O}((\Delta t)^4)$  ενώ η (2.30)  $\mathcal{O}((\Delta t)^2)$  [34]. Κατά τον υπολογισμό των θέσεων των μορίων κάνοντας



χρήση της (2.29) προκύπτουν κάποιες ανακρίβειες λόγω της μεγάλης διαφοράς του όρου δεύτερης τάξης από τους υπόλοιπους όρους. Προκειμένου να δοθεί λύση σε αυτό το πρόβλημα έχει προταθεί μία εκδοχή μισού βήματος του αλγορίθμου Verlet και ονομάζεται Leap-frog Verlet. Οι εξισώσεις του leap-frog Verlet γράφονται [34]:

$$r(t + \Delta t) = r(t) + \Delta t \cdot v(t + \frac{1}{2}\Delta t) \quad (2.31)$$

και:

$$v(t + \frac{\Delta t}{2}) = a(t)\Delta t + v(t - \frac{\Delta t}{2}) \quad (2.32)$$

Και οι ταχύτητες την χρονική στιγμή  $t$  με βάση τον leap-frog εκφράζονται συναρτήσει των μισών βημάτων:

$$v(t) = \frac{v(t + \frac{\Delta t}{2}) + v(t - \frac{\Delta t}{2})}{2} \quad (2.33)$$

### 2.5.3 Θερμοστάτης Nosé–Hoover

Κατά την προσομοίωση συστημάτων όπως για παράδειγμα στο Κανονικό Στατιστικό Σύστημα (NVT) δημιουργείται η ανάγκη να διατηρηθεί η θερμοκρασία του συστήματος σταθερή. Αρχικά, ο Nosé πρότεινε μία λύση στο συγκεκριμένο πρόβλημα [35], η οποία στην συνέχεια βελτιώθηκε από τον Hoover. Η τελική λύση στο συγκεκριμένο πρόβλημα συνοψίζεται από τον θερμοστάτη Nosé–Hoover. Ο θερμοστάτης Nosé–Hoover βασίζεται στις μεθόδους εκτεταμένης Λαγκρανζιανής όπου εισάγεται ένας επιπλέον βαθμός ελευθερίας  $s$  ο οποίος παίζει τον ρόλο ενός λουτρού θερμότητας. Το λουτρό θερμότητας αυτό βρίσκεται σε επαφή με το σύστημά μας και διατηρεί την θερμοκρασία του σταθερή [36].

Θεωρούμε ότι οι συντεταγμένες του εκτεταμένου συστήματος συμβολίζονται με  $\mathbf{q}_i$  και οι ορμές  $\mathbf{p}_i$ , ενώ για το αρχικό σύστημα οι συντεταγμένες συμβολίζονται ως  $\mathbf{q}'_i$  και οι ορμές  $\mathbf{p}'_i$ . Οι σχέσεις που ισχύουν μεταξύ τους είναι [35]:

$$\mathbf{q}_i = \mathbf{q}'_i \quad \mathbf{p}_i = s \cdot \mathbf{p}'_i \quad t = s \cdot t' \quad (2.34)$$

Με βάση αυτές τις σχέσεις μπορεί να εκφραστεί η ταχύτητα για το αρχικό σύστημα ως εξής:

$$\mathbf{v}'_i = \frac{d\mathbf{q}'_i}{dt'} = \frac{d\mathbf{q}'_i}{dt'/s} = s \cdot \dot{\mathbf{q}}'_i = s \cdot \dot{\mathbf{q}}_i \quad (2.35)$$

Το δυναμικό και η κινητική ενέργεια για τον βαθμό ελευθερίας  $s$  υπολογίζονται αντίστοιχα από τις σχέσεις:

$$\mathcal{V}_s = gk_B T \ln s \quad (2.36)$$

$$K_s = \frac{1}{2}Q \cdot \dot{s}^2 \quad (2.37)$$

όπου  $g$  ο αριθμός των ανεξάρτητων βαθμών ελευθερίας του χώρου ορμών του συστήματος και  $Q$  το μέτρο της αδράνειας για τον βαθμό ελευθερίας  $s$ . Η ολική Λαγκρανζιανή μπορεί να γραφτεί σαν το άθροισμα της Λαγκρανζιανής για το αρχικό σύστημα με την Λαγκρανζιανή για τον νέο βαθμό ελευθερίας. Επομένως [36]:

$$\mathcal{L}_N(\mathbf{q}_i, \dot{\mathbf{q}}_i, s, \dot{s}) = K' - \mathcal{V}' + K_s - \mathcal{V}_s = \frac{1}{2} \sum_i m_i s^2 \dot{\mathbf{q}}_i^2 - \mathcal{V}'(\mathbf{q}'_i) + \frac{1}{2}Q \cdot \dot{s}^2 - gk_B T \ln s \quad (2.38)$$

Από την εξίσωση (2.24) υπολογίζουμε τις ορμές για το εκτεταμένο σύστημα αλλά και για τον βαθμό ελευθερίας  $s$ :

$$\mathbf{p}_i = \frac{\partial \mathcal{L}_N}{\partial \dot{\mathbf{q}}_i} = m_i s^2 \dot{\mathbf{q}}_i \quad , \quad p_s = \frac{\partial \mathcal{L}_N}{\partial \dot{s}} = Q \dot{s} \quad (2.39)$$

Κι έτσι προκύπτει η Χαμιλτονιανή για το εκτεταμένο σύστημα [36] [35] :

$$\mathcal{H}_N(\mathbf{q}_i, \dot{\mathbf{q}}_i, s, \dot{s}) = \frac{1}{2} \sum_i \frac{m_i \dot{\mathbf{q}}_i^2}{s^2} + \mathcal{V}'(\mathbf{q}_i) + \frac{1}{2}Q \cdot \dot{s}^2 + gk_B T \ln s \quad (2.40)$$

Η Χαμιλτονιανή του εκτεταμένου συστήματος διατηρείται σταθερή. Επομένως, το εκτεταμένο σύστημα περιγράφεται από το μικροκανονικό στατιστικό σύνολο. Ο Hoover βασίστηκε στις παραπάνω εξισώσεις που πρότεινε ο Nosé και πρότεινε ένα ισοδύναμο μοντέλο που εξελίσσεται σε πραγματικό χρόνο [37]. Δηλαδή, διατηρούνται οι ιδιότητες του θερμοστάτη ενώ ταυτόχρονα γίνεται απαλλαγή από τον μετασχηματισμό της μεταβλητής του χρόνου. Η νέα Χαμιλτονιανή Nosé–Hoover που προκύπτει είναι: [37][38]

$$\mathcal{H}_{N-H}(\mathbf{q}_i, \dot{\mathbf{q}}_i, s, \dot{s}) = \frac{1}{2} \sum_i \frac{m_i \dot{\mathbf{q}}_i^2}{s^2} + \mathcal{V}'(\mathbf{q}_i) + \frac{1}{2}Q \cdot \dot{s}^2 + (g-1)k_B T \ln s \quad (2.41)$$

Όπου το  $\xi$  λειτουργεί σαν συντελεστής τριβής και εμφανίζεται σε όλες τις νέες εξισώσεις κίνησης. Η Χαμιλτονιανή του εκτεταμένου συστήματος διατηρείται και πάλι σταθερή.

## 2.6 Αδροποίησηση

Όπως αναφέρθηκε και στην εισαγωγή, κατά τη διαδικασία της αδροποίησης δημιουργούμε ισοδύναμα κέντρα αλληλεπίδρασης, τα οποία αντικαθιστούν ομάδες ατόμων της πλήρως ατομιστικής αναπαράστασης, τα οποία αποτελούν τα νέα κέντρα αλληλεπίδρασης του συστήματος και είναι πάντα λιγότερα στον αριθμό από τα άτομα της πλήρους ατομιστικής αναπαράστασης. Με τον τρόπο αυτόν καταφέρνουμε να μειώσουμε τους βαθμούς ελευθερίας του συστήματος.

### 2.6.1 Η διαδικασία της Αδροποίησησης

Μαθηματικά, η αδροποίηση είναι μία αντιστοίχιση (mapping) από έναν χώρο πολλών διαστάσεων σε έναν χώρο λιγότερων διαστάσεων. Ορίζουμε την αντιστοίχιση σε μια αδροποιημένη αναπαράσταση, ως εξής [39] [40] :

$$T : \mathbb{R}^{3N} \rightarrow \mathbb{R}^{3M}, \quad M < N, \quad M, N \in \mathbb{N}$$

Όπου  $N$  ο αριθμός των ατόμων στην πλήρη ατομιστική αναπαράσταση και  $M$  ο αριθμός των αδροποιημένων μονάδων στην coarse-grained αναπαράσταση. Το  $T$  λοιπόν λειτουργεί ως τανυστής προβολής από τον έναν χώρο στον άλλον. Έστω  $\mathbf{q}^N = (\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N) \in \mathbb{R}^{3N}$  ο χώρος απεικονίσεων στην ατομιστική αναπαράσταση. Ο τανυστής  $T$  δρα με τον εξής τρόπο πάνω στο  $\mathbf{q}^N$  [40]:

$$T : \mathbf{q}^N \mapsto T(\mathbf{q}^N) \equiv (T_1(\mathbf{q}^N), \dots, T_M(\mathbf{q}^N)) \in \mathbb{R}^M \quad (2.42)$$

Συνήθως ο τανυστής  $T$  είναι γραμμικός, επομένως ισχύει μία σχέση της μορφής [41]:

$$T_j(\mathbf{q}^N) = \sum_{i=1}^N t_{ij} \cdot \mathbf{q}_i, \quad j = 1, \dots, M \quad (2.43)$$

Όπου τα  $t_{ij}$  λειτουργούν ως συντελεστές συνεισφοράς ενός ατόμου  $i$  σε μία αδροποιημένη μονάδα  $j$ . Έστω  $m_i$ , οι μάζες των ατόμων στην πλήρη αναπαράσταση. Ονομάζουμε  $S_j$  το σύνολο των ατόμων, τα οποία ανήκουν σε μία αδροποιημένη μονάδα  $j$ . Ισχύει η παρακάτω σχέση:

$$t_{ij} = \begin{cases} \frac{m_i}{\sum_{k \in S_j} m_k} & \text{αν } i \in S_j \\ 0 & \text{αν } i \notin S_j \end{cases} \quad (2.44)$$

Προφανώς ισχύουν τα αντίστοιχα και για τον χώρο ορμών  $\mathbf{p}^N = (\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N) \in \mathbb{R}^{3N}$ . Πιο συγκεκριμένα :

$$T_j(\mathbf{p}^N) = M_j \cdot \sum_{i=1}^N \frac{t_{ij} \cdot \mathbf{p}_i}{m_i} \quad (2.45)$$

όπου  $M_j$  η μάζα μιας αδροποιημένης μονάδας  $j$  και  $m_i$  η μάζα ενός ατόμου  $i$ . Παρατηρούμε πως οι συντελεστές  $t_{ij}$  είναι κανονικοποιημένοι αν τους αθροίσουμε πάνω στα άτομα  $i$  διατηρώντας σταθερό το  $j$ . Δηλαδή, ισχύει [41] :

$$\sum_{i=1}^N t_{ij} = 1 \quad (2.46)$$

Το παραπάνω μας οδηγεί σε μία πιο διαισθητική ερμηνεία για αυτούς τους συντελεστές, αφού μπορούμε να τους ερμηνεύσουμε ως ποσοστά συμμετοχής του κάθε ατόμου  $i$  σε μία αδροποιημένη μονάδα  $j$  με κριτήριο την συνεισφορά του κάθε ατόμου στην συνολική μάζα της αδροποιημένης μονάδας .

## 2.6.2 Μοριακές προσομοιώσεις στο αδροποιημένο επίπεδο και μέσες τιμές ιδιοτήτων

Στην αδροποιημένη αναπαράσταση είναι αναγκαίο να οριστεί μία νέα συνάρτηση δυναμικού, η οποία περιγράφει τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των αδροποιημένων μονάδων. Όπως αναφέρθηκε και παραπάνω, η συνάρτηση αυτή λαμβάνει υπόψιν μόνο τους βαθμούς ελευθερίας που αντιστοιχούν σε πιο αργές και αντιπροσωπευτικές για το σύνολο του συστήματος κινήσεις, ενώ δεν λαμβάνει τόσο υπόψιν αυτούς, οι οποίοι αντιστοιχούν σε γρήγορες και τοπικές κινήσεις. Για ευκολία στον συμβολισμό ας θεωρήσουμε  $\mathbf{X}$  τους βαθμούς ελευθερίας που θέλουμε να διατηρήσουμε με βάση τον προηγούμενο μετασχηματισμό και  $\mathbf{x}$  τους βαθμούς ελευθερίας που θέλουμε να απαλείψουμε. Ένας τρόπος με τον οποίο μπορούμε να εκφράσουμε την συνάρτηση δυναμικού μέσης δύναμης στην αδροποιημένη αναπαράσταση είναι ο παρακάτω [39] [40] [42] :

$$U_{mf}(\mathbf{X}) = -\frac{1}{\beta} \cdot \ln \int \exp[-\beta \cdot U(\mathbf{X}, \mathbf{x})] d\mathbf{x} + c \quad (2.47)$$

Στη (2.47) πραγματοποιείται ολοκλήρωση πάνω σε όλους τους βαθμούς ελευθερίας που θέλουμε να απαλείψουμε με σκοπό το δυναμικό να είναι συνάρτηση μόνο των προς διατήρηση βαθμών ελευθερίας. Μία ιδιότητα  $\mathcal{A}$  στην αδροποιημένη αναπαράσταση μπορεί να γραφεί περίπου κατά ανάλογο τρόπο με το δυναμικό δηλαδή παίρνοντας ένα μέσο ως προς τους βαθμούς ελευθερίας που επιθυμούμε να αφαιρέσουμε. Αυτό μπορεί να γίνει ως εξής με την υπόθεση ότι ακολουθείται μία κατανομή τύπου Boltzmann [42]:

$$\mathcal{A}(\mathbf{X}) = \frac{\int \mathcal{A}(\mathbf{X}, \mathbf{x}) \cdot \exp[-\beta \cdot U(\mathbf{X}, \mathbf{x})] d\mathbf{x}}{\int \exp[-\beta \cdot U(\mathbf{X}, \mathbf{x})] d\mathbf{x}} \quad (2.48)$$

Η μέση τιμή της ιδιότητας  $\mathcal{A}$  στην αδροποιημένη αναπαράσταση μπορεί να γραφτεί ως εξής:

$$\langle \mathcal{A}(\mathbf{X}) \rangle_{\mathbf{x}} = \frac{\int \mathcal{A}(\mathbf{X}) \cdot \exp[-\beta \cdot U_{mf}(\mathbf{X}, \mathbf{x})] d\mathbf{X}}{\int \exp[-\beta \cdot U_{mf}(\mathbf{X}, \mathbf{x})] d\mathbf{X}} \quad (2.49)$$

Αν συνδυάσουμε την έκφραση (2.49) με την εξίσωση (2.47) για το δυναμικό στην αδροποιημένη αναπαράσταση παίρνουμε:

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{A}(\mathbf{X}) \rangle_{\mathbf{x}} &= \frac{\int \mathcal{A}(\mathbf{X}) \cdot \exp\left[-\beta \cdot \left(-\frac{1}{\beta}\right) \cdot \ln \int \exp[-\beta \cdot U(\mathbf{X}, \mathbf{x})] d\mathbf{x}\right] d\mathbf{X} d\mathbf{x}}{\int \exp\left[-\beta \cdot \left(-\frac{1}{\beta}\right) \cdot \ln \int \exp[-\beta \cdot U(\mathbf{X}, \mathbf{x})] d\mathbf{x}\right] d\mathbf{X} d\mathbf{x}} \Leftrightarrow \\ \langle \mathcal{A}(\mathbf{X}) \rangle_{\mathbf{x}} &= \frac{\int \mathcal{A}(\mathbf{X}) \cdot \exp[-\beta \cdot U(\mathbf{X}, \mathbf{x})] d\mathbf{x} d\mathbf{X}}{\int \exp[-\beta \cdot U(\mathbf{X}, \mathbf{x})] d\mathbf{X} d\mathbf{x}} \end{aligned} \quad (2.50)$$

Από την αρχική σχέση για το  $\mathcal{A}(\mathbf{X})$  (2.48) παίρνουμε :

$$\mathcal{A}(\mathbf{X}) \cdot \int \exp[-\beta \cdot U(\mathbf{X}, \mathbf{x})] d\mathbf{x} = \int \mathcal{A}(\mathbf{X}, \mathbf{x}) \cdot \exp[-\beta \cdot U(\mathbf{X}, \mathbf{x})] d\mathbf{x}$$

Και η ποσότητα  $\mathcal{A}(\mathbf{X})$  είναι ανεξάρτητη της μεταβλητής ολοκλήρωσης  $\mathbf{x}$  αφού είναι συνάρτηση μόνο του  $\mathbf{X}$ , επομένως μπορεί να μπει μέσα στο ολοκλήρωμα :

$$\int \mathcal{A}(\mathbf{X}) \cdot \exp[-\beta \cdot U(\mathbf{X}, \mathbf{x})] d\mathbf{x} = \int \mathcal{A}(\mathbf{X}, \mathbf{x}) \cdot \exp[-\beta \cdot U(\mathbf{X}, \mathbf{x})] d\mathbf{x} \quad (2.51)$$

Άρα η σχέση για την  $\langle \mathcal{A}(\mathbf{X}) \rangle_{\mathbf{x}}$  γράφεται :

$$\langle \mathcal{A}(\mathbf{X}) \rangle_{\mathbf{x}} = \frac{\int \mathcal{A}(\mathbf{X}, \mathbf{x}) \cdot \exp[-\beta \cdot U(\mathbf{X}, \mathbf{x})] d\mathbf{x}d\mathbf{X}}{\int \exp[-\beta \cdot U(\mathbf{X}, \mathbf{x})] d\mathbf{X}d\mathbf{x}} \Leftrightarrow$$

$$\langle \mathcal{A}(\mathbf{X}) \rangle_{\mathbf{x}} = \langle \mathcal{A}(\mathbf{X}, \mathbf{x}) \rangle_{\mathbf{x}, \mathbf{x}} \quad (2.52)$$

Επομένως δείξαμε ότι με μία κατάλληλη επιλογή συνάρτησης αδροποιημένου δυναμικού μπορούμε να υπολογίζουμε μέσες τιμές ιδιοτήτων που μας ενδιαφέρουν στην αδροποιημένη αναπαράσταση και αυτό να είναι ισοδύναμο με τον υπολογισμό τους στην πλήρως ατομιστική αναπαράσταση [42].

### 2.6.3 Το πρόβλημα της αντίστροφης απεικόνισης

Μετά την διαδικασία της αδροποίησης, πολλές φορές επιθυμούμε να επιστρέψουμε στην πλήρως ατομιστική αναπαράσταση. Επειδή έχουμε απαλείψει μεγάλο αριθμό βαθμών ελευθερίας, η διαδικασία της επιστροφής σε μία απεικόνιση που να είναι συμβατή προς την αδροποιημένη από την οποία ξεκινάμε καθίσταται εξαιρετικά σύνθετη. Εκτός από τη συμβατότητα που πρέπει να υπάρχει ανάμεσα στην αδροποιημένη απεικόνιση και την απεικόνιση στην πλήρως ατομιστική αναπαράσταση στην οποία επιστρέφουμε, είναι αναγκαίο, η δεύτερη να χαρακτηρίζεται από μεγάλη πυκνότητα πιθανότητας ως προς την κατανομή στατιστικού συνόλου που διέπει το λεπτομερές (ατομιστικό) μοντέλο. Για το πρόβλημα αυτό, της επιστροφής στην αρχική απεικόνιση, έχουν προταθεί αρκετές λύσεις [43]. Τα τελευταία χρόνια κάποιες από αυτές χρησιμοποιούν μεθόδους μηχανικής μάθησης. Μία από αυτές τις μεθόδους που κάνει χρήση μηχανικής μάθησης και επιτρέπει να γίνεται μετάβαση στην αδροποιημένη αναπαράσταση και επιστροφή στην λεπτομερή αναπαράσταση, θα αναλυθεί σε ένα από τα επόμενα κεφάλαια της εργασίας (5.2) .

## Κεφάλαιο 3

# Νευρωνικά Δίκτυα

Το τεχνητό νευρωνικό δίκτυο μαθηματικά μπορεί να ερμηνευτεί ως ένα κατευθυνόμενο γράφημα με κόμβους (nodes) οι οποίοι είναι οι νευρώνες και ακμές (edges) οι οποίες συνδέουν τους κόμβους μεταξύ τους με τα αντίστοιχα βάρη σύνδεσης. Η κεντρική ιδέα πίσω την λειτουργία ενός νευρωνικού δικτύου είναι να δέχεται στην είσοδό του μία πληροφορία εκφρασμένη ως ένα μαθηματικό αντικείμενο και, με το πέρας της εκπαίδευσής του, να την μετασχηματίζει με τρόπο τέτοιο ώστε να παίρνουμε ένα επιθυμητό αποτέλεσμα στην έξοδό του.

### 3.1 Ο Νευρώνας

Ο νευρώνας, λειτουργεί ως μαθηματική συνάρτηση που μετασχηματίζει την είσοδο που δέχεται. Έστω ότι εισάγουμε σε έναν νευρώνα δεδομένα με την μορφή ενός διανύσματος  $\mathbf{x}$   $m$  διαστάσεων:

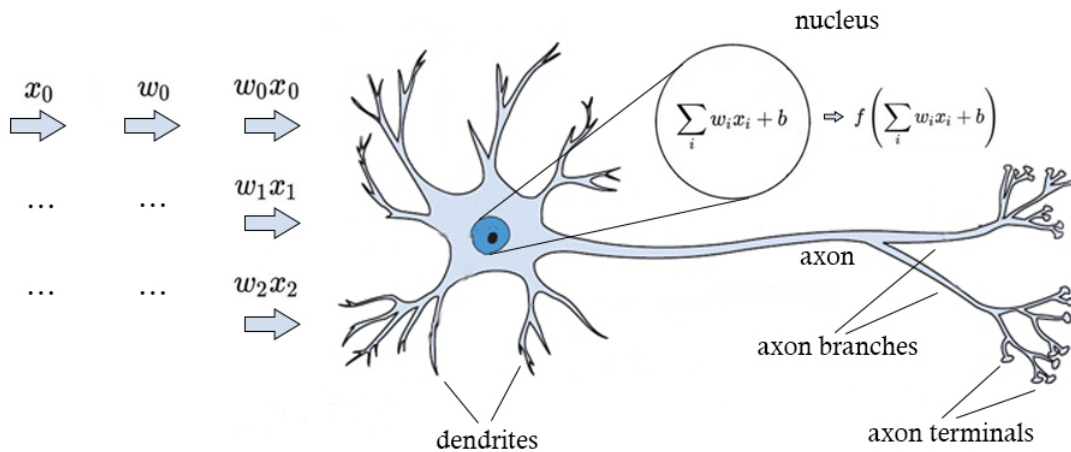
$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_m) \in \mathbb{R}^m$$

Τα δεδομένα που αναπαρίστανται από το διάνυσμα αυτό εισάγονται στον νευρώνα ως ένα σταθμισμένο άθροισμα. Κάθε συντεταγμένη του διανύσματος πολλαπλασιάζεται με το αντίστοιχο βάρος της ακμής, η οποία το συνδέει με τον νευρώνα. Το άθροισμα αυτό καλείται αθροιστής και δίνεται από την

σχέση[44]:

$$a(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T \cdot \mathbf{x} + b = \sum_{i=1}^m x_i \cdot w_i + b, a \in \mathbb{R} \quad (3.1)$$

Όπου  $\mathbf{w}^T$  το διάνυσμα με τα βάρη των ακμών που συνδέουν κάθε συντεταγμένη της εισόδου με τον νευρώνα και  $b$  ένας πραγματικός αριθμός που ονομάζεται πόλωση ή κατώφλι (bias). Το  $b$  είναι πάρα πολύ σημαντικό αφού εκφράζει την οριζόντια μετατόπιση των συναρτήσεων ενεργοποίησης και με κατάλληλη επιλογή της τιμής του επιτρέπει καλύτερη προσαρμογή των δεδομένων. Το  $a$  είναι η είσοδος που δέχεται η συνάρτηση του νευρώνα (pre-activation function). Στην παρακάτω εικόνα φαίνεται η σύγκριση της διαδικασίας διαχείρισης των δεδομένων-σημάτων σε έναν βιολογικό νευρώνα με την σταθμισμένη άθροιση δεδομένων σε έναν τεχνητό νευρώνα:



Εικόνα 3.1: Παράλληλισμός λειτουργίας ενός τεχνητού με έναν βιολογικό νευρώνα (2)

### 3.2 Συναρτήσεις Ενεργοποίησης:

Ο αθροιστής  $a(\mathbf{x})$  που αναφέρθηκε στην προηγούμενη ενότητα χρησιμοποιείται ως είσοδος για την συνάρτηση ενεργοποίησης του νευρώνα. Η έξοδος ενός νευρώνα είναι η τιμή της συνάρτησης ενεργοποίησης του



νευρώνα για το συγκεκριμένο  $a$  [45].

$$h(\mathbf{x}) = g(a(\mathbf{x})) \quad (3.2)$$

όπου  $h$  η έξοδος του νευρώνα και  $g$  η συνάρτηση ενεργοποίησης του νευρώνα. Οι συναρτήσεις ενεργοποίησης παίζουν καθοριστικό ρόλο στην αποτελεσματική λειτουργία ενός νευρωνικού δικτύου. Με την ποικιλία τους και την μη γραμμικότητά τους μας βοηθάνε στην προσέγγιση περίπλοκων συναρτησιακών σχέσεων μεταξύ των δεδομένων, οι οποίες δεν είναι προφανείς στην αναγνώριση τους με συμβατικό τρόπο. Η επιλογή των κατάλληλων συναρτήσεων ενεργοποίησης γίνεται εμπειρικά και ανάλογα με το πρόβλημα που καλούμαστε να αντιμετωπίσουμε. Κάποια πολύ χαρακτηριστικά παραδείγματα συναρτήσεων ενεργοποίησης των νευρώνων [45]:

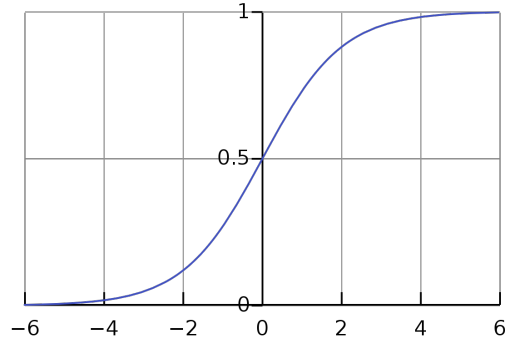
### 1) Η γραμμική συνάρτηση ενεργοποίησης:

$g(a) = a$ . Σε αυτή την περίπτωση η έξοδος είναι ίδια με την είσοδο. Η γραμμική συνάρτηση ενεργοποίησης δεν χρησιμοποιείται συχνά. Εξαιτίας της γραμμικότητάς της δεν είναι κατάλληλη για την προσέγγιση περίπλοκων συναρτησιακών σχέσεων μεταξύ των δεδομένων που εισάγονται στο νευρωνικό δίκτυο.

### 2) Η σιγμοειδής συνάρτηση ενεργοποίησης :

$$g(a) = \sigma(a) = \frac{1}{1 + e^{-a}}$$

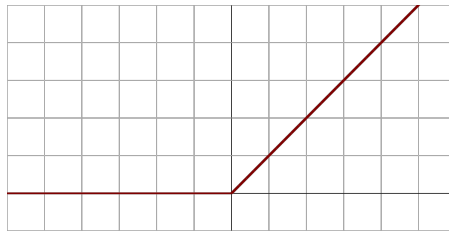
Η σιγμοειδής συνάρτηση έχει πεδίο ορισμού το  $\mathbb{R}$  και παρουσιάζει πολύ ξαφνική και απότομη μεταβολή (μεγάλη τιμή παραγώγου) στο διάστημα  $[-2,2]$ , σε σχέση με το υπόλοιπο πεδίο ορισμού της. Αυτό σημαίνει ότι μικρές αλλαγές στις τιμές στα  $a$  φέρνουν μεγάλες αλλαγές στην τιμή της  $g(a)$ . Πρακτικά "ωθεί" τις αρνητικές τιμές του  $a$  στο 0 και τις θετικές τιμές του  $a$  στο 1. Για αυτό χρησιμοποιείται πιο συχνά για την επίλυση προβλημάτων δυαδικής κατηγοριοποίησης.



Εικόνα 3.2: Γραφική παράσταση μίας σιγμοειδούς συνάρτησης στο διάστημα  $[-6,6]$

### 3) Rectified Linear Activation Function (ReLU):

$$g(a) = H(a) \cdot a = \begin{cases} 0, & a \leq 0 \\ a, & a > 0 \end{cases}$$

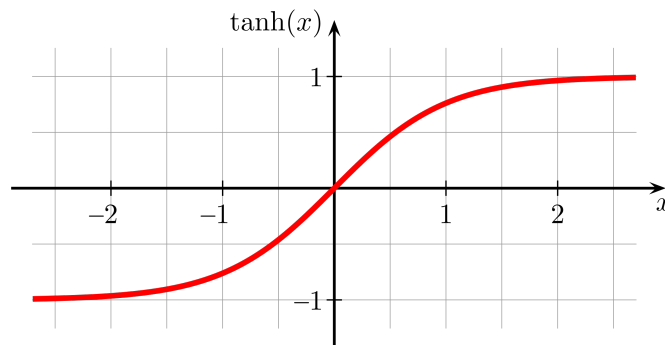


Εικόνα 3.3: Γραφική παράσταση της συνάρτησης  $ReLU$

Η συνάρτηση  $ReLU$  παίρνει την τιμή  $a$  για θετικές τιμές του  $a$  και την τιμή  $0$  για αρνητικές τιμές του  $a$ . Ορίζεται σε ολόκληρο το  $\mathbb{R}$  και έχει πεδίο τιμών το  $[0, +\infty)$ . Το μεγάλο της πλεονέκτημα, εκτός από το ότι ο υπολογισμός της τιμής της έχει πολύ μικρότερο υπολογιστικό κόστος από ό,τι στις  $\tanh$  και  $\sigma$ , είναι ότι, επειδή μηδενίζεται για τις αρνητικές τιμές των  $a$  έχουμε ενεργοποίηση λιγότερων νευρώνων, γεγονός που καθιστά το νευρωνικό δίκτυο πιο ικανό για υπολογισμούς, επειδή γίνεται πιο αραιό.

#### 4) Υπερβολική Εφαπτομένη:

$$g(a) = \tanh(a) = \frac{e^a - e^{-a}}{e^a + e^{-a}}$$



Εικόνα 3.4: Γραφική παράσταση της συνάρτησης υπερβολικής εφαπτομένης στο διάστημα  $[-2.5, 2.5]$

Η συνάρτηση της υπερβολικής εφαπτομένης είναι πολύ παρόμοια με την σιγμοειδή και μάλιστα συνδέονται με την σχέση  $\tanh(x) = 2 \cdot \sigma(2x) - 1$ . Έχει και αυτή πεδίο ορισμού το  $\mathbb{R}$  και παρουσιάζει απότομη μεταβολή (μεγάλη τιμή παραγώγου) στο διάστημα  $[-1, 1]$ . Πρακτικά "ωθεί" τους αριθμούς που εισάγονται στην συνάρτηση προς το  $-1$ , αν είναι αρνητικοί και προς το  $1$ , αν είναι θετικοί. Λειτουργεί καλύτερα από την σιγμοειδή συνάρτηση στην πλειοψηφία των περιπτώσεων. Χρησιμοποιείται κυρίως στα κρυφά στρώματα ενός νευρωνικού δικτύου (τα οποία θα αναλυθούν στις ενότητες 3.3 και 3.5). Η μεγάλη χρησιμότητα αυτής της συνάρτησης είναι ότι κατανέμει τα δεδομένα με τέτοιο τρόπο, ώστε ο μέσος τους να είναι κοντά στο μηδέν, γεγονός που ευνοεί σε τεράστιο βαθμό την μάθηση του επόμενου στρώματος.

#### 5) Η Συνάρτηση Softmax

Πολλές φορές στην έξοδο ενός νευρωνικού δικτύου επιθυμούμε να εκτιμήσουμε μία δεσμευμένη πιθανότητα της μορφής  $p(y_c | \mathbf{x})$ . Δηλαδή, την πιθανότητα να πάρουμε ένα αποτέλεσμα  $y$  το οποίο κατηγοριοποιείται σε μία κλάση  $c$ , ενώ έχουμε δώσει στο νευρωνικό δίκτυο ως είσοδο ένα διάνυσμα  $\mathbf{x}$ .

Η συνάρτηση softmax δέχεται ως είσοδο ένα διάνυσμα και δίνει στην έξοδο ένα διάνυσμα ίδιων διαστάσεων με το αρχικό. Το άθροισμα των στοιχείων του διανύσματος εξόδου είναι κανονικοποιημένο στην μονάδα και το κάθε στοιχείο του μπορεί να ερμηνευτεί ως μία πιθανότητα και έτσι δύναται να χρησιμοποιηθεί για προβλήματα κατηγοριοποίησης αποτελεσμάτων με βάση την πιθανότητα τους. Έστω  $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^n$  ένα διάνυσμα που χρησιμοποιείται ως είσοδος για την συνάρτηση softmax. Τότε έχουμε:

$$\text{softmax}(\mathbf{a}) = \left( \frac{e^{a_1}}{\sum_{i=1}^n e^{a_i}}, \dots, \frac{e^{a_n}}{\sum_{i=1}^n e^{a_i}} \right)$$

όπου  $a_i$  η  $i$ -στη συντεταγμένη του διανύσματος  $\mathbf{a}$ .

### 3.3 Νευρωνικό Δίκτυο ενός κρυφού στρώματος

Το Νευρωνικό Δίκτυο ενός κρυφού στρώματος (Single Hidden Layer Neural Network) αποτελείται μόνο από ένα κρυφό στρώμα νευρώνων και έναν ή περισσότερους νευρώνες οι οποίοι αποτελούν το στρώμα εξόδου αμέσως μετά το κρυφό στρώμα, προκειμένου να πραγματοποιείται ένας τελικός μετασχηματισμός των δεδομένων κατά την έξοδό τους από το δίκτυο. Κάθε συντεταγμένη του διανύσματος δεδομένων συνδέεται με όλους τους νευρώνες. Κάθε σύνδεση μεταξύ ενός νευρώνα και μίας συντεταγμένης του διανύσματος που εισάγεται στο νευρωνικό δίκτυο περιγράφεται από το βάρος της αντίστοιχης ακμής που δημιουργεί την σύνδεση. Έστω ότι το διάνυσμα είναι  $m$  διαστάσεων και ότι οι νευρώνες είναι  $n$  στον αριθμό. Πλέον τα βάρη του νευρωνικού δικτύου δεν καταχωρίζονται σε διάνυσμα, αλλά σε έναν πίνακα βαρών της μορφής [46] :

$$\mathbf{w} = \begin{pmatrix} w_{11} & w_{12} & \dots & \dots & w_{1m} \\ w_{21} & w_{22} & \dots & \dots & w_{2m} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ w_{n1} & \dots & \dots & \dots & w_{nm} \end{pmatrix}, \mathbf{w} \in \mathbb{R}^{n \times m}$$

όπου  $w_{ij}$  το βάρος της ακμής που συνδέει την  $j$ -στη συντεταγμένη της εισόδου με τον  $i$ -στο νευρώνα. Επίσης, κάθε νευρώνας έχει δικιά του πόλωση, επομένως ορίζεται το διάνυσμα της πόλωσης [46]:

$$\mathbf{b} = (b_1, \dots, b_n) \in \mathbb{R}^n$$

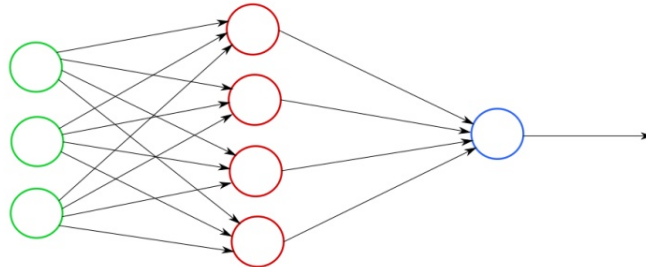
Η είσοδος του  $i$ -στου νευρώνα του στρώματος περιγράφεται από την σχέση:

$$a_i(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^m x_j \cdot w_{ij} + b_i \quad (3.3)$$

Η έξοδος της συνάρτησης ενεργοποίησης του  $i$ -στου νευρώνα ο οποίος δέχεται είσοδο  $a_i(\mathbf{x})$  είναι [46]:

$$h_i(\mathbf{x}) = g_i(a(\mathbf{x})) = g \left( \sum_{j=1}^m x_j \cdot w_{ij} + b_i \right) \quad (3.4)$$

Παρακάτω απεικονίζεται ένα παράδειγμα ενός νευρωνικού δικτύου ενός στρώματος:



Εικόνα 3.5: Απεικόνιση ενός απλού νευρωνικού δικτύου ενός κρυφού στρώματος

Παρατηρούμε ότι κάθε νευρώνας του μοναδικού κρυφού στρώματος (κόκκινο χρώμα) που βρίσκεται μεταξύ της εισόδου και της εξόδου συνδέεται με τον μοναδικό νευρώνα που υπάρχει στο στρώμα εξόδου (μπλε χρώμα). Τώρα πλέον οι έξοδοι του πρώτου στρώματος λειτουργούν ως δεδομένα εισόδου για τον μπλε νευρώνα. Η είσοδος γίνεται με βάση τον κανόνα που περιγράφηκε στο κεφάλαιο 3.1 για την λειτουργία ενός νευρώνα. Άρα, η

έξοδος του νευρωνικού δικτύου είναι :

$$f(\mathbf{x}) = g_1 \left( \sum_{i=1}^n w_i^{(1)} \cdot x_i + b^{(1)} \right) \quad (3.5)$$

όπου  $g_1$  η συνάρτηση ενεργοποίησης του τελευταίου νευρώνα,  $w_i$  τα στοιχεία του διανύσματος βαρών  $\mathbf{w}^{(1)}$  των ακμών που συνδέουν το στρώμα των νευρώνων με τον τελευταίο νευρώνα (όχι πίνακας διότι έχουμε σύνδεση με μόνο έναν νευρώνα) και  $b^{(1)}$  το bias του τελευταίου νευρώνα.

### 3.4 Θεώρημα Καθολικής προσέγγισης

Το κύριο πλεονέκτημα των νευρωνικών δικτύων, που τα καθιστά πανίσχυρα εργαλεία στα χέρια των σύγχρονων ερευνητών, είναι η εξαιρετική δυνατότητά τους να προσεγγίζουν οποιαδήποτε συνάρτηση. Η ικανότητα αυτή των νευρωνικών δικτύων έχει αποδειχθεί τις προηγούμενες δεκαετίες με χρήση αυστηρών μαθηματικών. Μετά από πολλές δημοσιεύσεις στον συγκεκριμένο μαθηματικό τομέα, η σπουδαία αυτή ιδιότητα των νευρωνικών δικτύων συνοψίστηκε με το "Θεώρημα Καθολικής Προσέγγισης" (Universal Approximation Theorem) [47]. Το θεώρημα αυτό περιγράφει ότι ένα νευρωνικό δίκτυο ενός μόνο στρώματος υπό κάποιες προϋποθέσεις, είναι ικανό να προσεγγίσει οποιαδήποτε πραγματική συνάρτηση. Το Θεώρημα Καθολικής Προσέγγισης διατυπώνεται ως εξής [48] :

**Θεώρημα:** Έστω  $g(\cdot)$  μία οποιαδήποτε συνεχής και μη πολυωνυμική συνάρτηση ενεργοποίησης. Έστω  $X \subseteq \mathbb{R}^m$  και  $X$  συμπαγής. Έστω ότι ο χώρος των συνεχών συναρτήσεων στον  $X$  συμβολίζεται με  $C(X)$ . Τότε  $\forall f \in C(X), \forall \varepsilon > 0 : \exists n \in \mathbb{N}, a_{ij}, b_i, w_i \in \mathbb{R}, i \in \{1, \dots, n\}, j \in \{1, \dots, m\}$ :

$$(A_n f)(x_1, \dots, x_m) = \sum_{i=0}^n w_i g \left( \sum_{j=1}^m a_{ij} x_j + b_i \right)$$

όπου η  $A_n f$  μπορεί να προσεγγίσει την συνάρτηση  $f(\cdot)$  έτσι ώστε:

$$\|A_n f - f\| < \varepsilon$$

όπου  $n$  ο αριθμός των νευρώνων του στρώματος.

Δηλαδή η συνάρτηση  $A_n f$  που βρίσκει το νευρωνικό δίκτυο μπορεί να προσεγγίσει οποιαδήποτε πραγματική συνάρτηση! Απαραίτητη προϋπόθεση στο συγκεκριμένο θεώρημα είναι οι συναρτήσεις ενεργοποίησης των νευρώνων να είναι φραγμένες, συνεχείς και να μην είναι πολυωνυμικές. Για τις συναρτήσεις ενεργοποίησης ισχύει ότι είναι φραγμένες και ότι πλησιάζουν ασυμπτωτικά πεπερασμένες τιμές στο  $-\infty$  και στο  $+\infty$ . Όταν λέμε ότι ο χώρος  $Q$  είναι συμπαγής εννοούμε ότι για κάθε άπειρη ακολουθία σημείων που δειγματοληπτούμε από τον συγκεκριμένο χώρο υπάρχει μία άπειρη υπακολουθία σημείων που συγκλίνει σε ένα σημείο του χώρου αυτού. Για έναν Ευκλείδειο χώρο, η ιδιότητα του συμπαγούς λόγω του Θεωρήματος Bolzano-Weirstrass μεταφράζεται στο ότι είναι κλειστός και φραγμένος. Για παράδειγμα το διάστημα  $[-1,0]$  είναι συμπαγές ως κλειστό και φραγμένο.

### 3.5 Πολυστρωματικό Νευρωνικό Δίκτυο

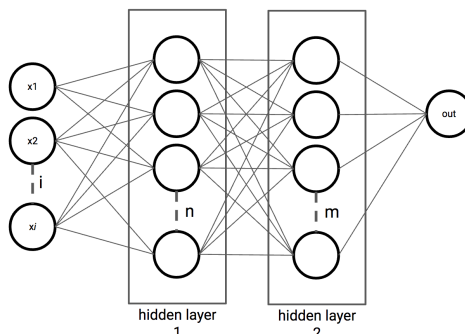
Ένα πολυστρωματικό νευρωνικό δίκτυο (Multilayer Neural Network) έχει τουλάχιστον δύο κρυφά στρώματα τα οποία βρίσκονται μεταξύ της εισόδου και του στρώματος εξόδου. Έστω ότι τα δεδομένα εισάγονται με ένα διάνυσμα  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m$ . Κάθε στρώμα θα χρησιμοποιεί ως δεδομένα εισόδου για τους νευρώνες του, τις εξόδους από τους νευρώνες από τα προηγούμενα στρώματα. Για κάθε στρώμα θα έχουμε έναν πίνακα βαρών που περιγράφει τις συνδέσεις μεταξύ των νευρώνων. Οι εισοδοί του  $k$ -στου στρώματος του νευρωνικού δικτύου θα περιγράφονται από ένα διάνυσμα του οποίου η  $i$ -στη συντεταγμένη θα αντιστοιχεί στην είσοδο του  $i$ -στου νευρώνα. Η έκφραση του διανύσματος αυτού είναι η εξής [46]:

$$\mathbf{a}^{(k)}(\mathbf{x}) = \mathbf{b}^{(k)} + \mathbf{w}^{(k)} \mathbf{h}^{(k-1)}(\mathbf{x}) \quad (3.6)$$

Και αντίστοιχα οι συναρτήσεις ενεργοποίησης του  $k$ -στου layer [46]:

$$\mathbf{h}^{(k)}(\mathbf{x}) = \mathbf{g}(\mathbf{a}^{(k)}(\mathbf{x})) \quad (3.7)$$

Τα  $\mathbf{h}^{(k)}(\mathbf{x})$  θα χρησιμοποιηθούν ως τα δεδομένα εισόδου για το επόμενο στρώμα  $(k+1)$  του νευρωνικού.



Εικόνα 3.6: Απεικόνιση ενός νευρωνικού δικτύου δύο κρυφών στρωμάτων

### 3.6 Εκπαίδευση Νευρωνικών Δικτύων

Κάθε πρόβλημα που επιλύουμε με χρήση νευρωνικών δικτύων ανάγεται στην αναζήτηση μίας πολύ πολύπλοκης συναρτησιακής σχέσης μεταξύ των δεδομένων που εισάγουμε σε αυτά και αντίστοιχων επιθυμητών εξόδων. Η εξαιρετική δυνατότητα νευρωνικών δικτύων για προσέγγιση περίπλοκων συναρτησιακών σχέσεων είναι αυτή που μας επιτρέπει να λύνουμε σύνθετα προβλήματα πολλών κατηγοριών με την χρήση τους. Όταν εισάγουμε για πρώτη φορά δεδομένα σε ένα νευρωνικό δίκτυο χωρίς να το έχουμε εκπαιδεύσει, έχει αυθαίρετες παραμέτρους και μετασχηματίζει τα δεδομένα χωρίς να υπάρχει κάποιο νόημα. Προκειμένου να αρχίσουν να αναπαράγονται αποτελέσματα με νόημα από ένα νευρωνικό δίκτυο πρέπει να ορίσουμε μία συνάρτηση κόστους, η οποία θα περιέχει όλη την απαραίτητη πληροφορία για το αποτέλεσμα στο οποίο θέλουμε να φτάσουμε. Όταν ελαχιστοποιηθεί η συνάρτηση κόστους, τότε θα έχουμε μία ικανοποιητική προσέγγιση της λύσης που ψάχνουμε. Οι μεταβλητές της συνάρτησης κόστους είναι οι παράμετροι του νευρωνικού δικτύου, οι οποίες κατά την εκπαίδευση ρυθμίζονται με τρόπο τέτοιο ώστε να ελαχιστοποιείται η τιμή αυτής της συνάρτησης. Για την ελαχιστοποίηση των συναρτήσεων κόστους ακολουθούμε διάφορες επαναληπτικές μεθόδους βελτιστοποίησης (π.χ. Στοχαστική Καταβύθιση Βαθμίδας, Adam, Adagrad κλπ). Σε κάθε επανάληψη των μεθόδων ανανεώνονται οι τιμές των παραμέτρων μέχρι να καταλήξουμε σε σύγκλιση. Επομένως, αλλάζουν συνεχώς τα χαρακτηριστικά ή οι παράμετροι του νευρωνικού δικτύου μέχρι να φτάσουμε σε αυτά τα οποία θα μας δώσουν την λύση που επιθυμούμε. Επομένως, η εκπαίδευση ενός νευρωνικού δικτύου είναι πρόβλημα βελτιστοποίησης συναρτήσεων πολλών μεταβλητών.



### 3.6.1 Συναρτήσεις Κόστους

Όπως προαναφέρθηκε, για την εκπαίδευση ενός νευρωνικού δικτύου πρέπει να γίνει επιλογή μίας συνάρτησης κόστους, τέτοια ώστε η ελαχιστοποίηση της να ισοδυναμεί με την επίλυση του προβλήματος που έχουμε θέσει ως στόχο. Οι συναρτήσεις κόστους ελαχιστοποιούνται ως προς τις παραμέτρους ενός νευρωνικού δικτύου. Έστω  $\theta$  το σύνολο των παραμέτρων του. Για ένα νευρωνικό δίκτυο με  $k$  κρυφά στρώματα, θα ορίζεται ένας πίνακας βαρών για κάθε στρώμα και ένα διάνυσμα πόλωσης για κάθε στρώμα. Οπότε, το σύνολο των παραμέτρων του νευρωνικού αυτού δικτύου θα είναι της μορφής :

$$\theta \equiv \{ \mathbf{w}^{(1)}, \mathbf{b}^{(1)}, \dots, \mathbf{w}^{(k)}, \mathbf{b}^{(k)} \}$$

Το σύνολο των παραμέτρων  $\theta$  είναι οι μεταβλητές ως προς τις οποίες καλούμαστε να βελτιστοποιήσουμε την συνάρτηση σφάλματος. Ακολουθούν κάποια πολύ χαρακτηριστικά παραδείγματα συναρτήσεων κόστους, οι οποίες χρησιμοποιούνται για την εκπαίδευση νευρωνικών δικτύων.

#### Συνάρτηση Κόστους Μέσου Τετραγωνικού Σφάλματος:

Η Συνάρτηση Κόστους Μέσου Τετραγωνικού Σφάλματος (Mean Squared Error) ορίζεται με τον εξής τρόπο:

$$\mathcal{L}(\theta) = MSE = \sum_{i=1}^m (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (3.8)$$

Όπου  $y_i$  το αποτέλεσμα που μας δίνει το νευρωνικό δίκτυο στην έξοδό του,  $\hat{y}_i$  το επιθυμητό αποτέλεσμα που θα θέλαμε να μας δίνει το νευρωνικό δίκτυο και  $m$  ο αριθμός των δειγμάτων με βάση τα οποία γίνεται η εκπαίδευση. Με την ελαχιστοποίηση της παραπάνω αντικειμενικής συνάρτησης καταλήγουμε σε ένα σύνολο παραμέτρων  $\theta$  για το νευρωνικό δίκτυο με βάση το συγκεκριμένο δείγμα δεδομένων. Οι παράμετροι αυτοί συνθέτουν μία περίπλοκη συνάρτηση που συσχετίζει τα δεδομένα που εισάγονται στο νευρωνικό δίκτυο με τέτοιο τρόπο ώστε να παίρνουμε κάθε φορά μία επιθυμητή τιμή στην έξοδο του (ή μία τιμή όσο πιο κοντά γίνεται σε αυτή) . Η παραπάνω αντικειμενική συνάρτηση χρησιμοποιείται πολύ συχνά σε προβλήματα παλινδρόμησης (regression) . Για προβλήματα παλινδρόμησης γίνεται επίσης χρήση των συναρτήσεων κόστους μέσου λογαριθμικού τετραγωνικού σφάλματος και μέσου απολύτου σφάλματος.

### Συνάρτηση Κόστους Διασταυρούμενης Εντροπίας:

Η συνάρτηση κόστους διασταυρούμενης εντροπίας (Cross-Entropy) ορίζεται με τον εξής τρόπο:

$$\mathcal{L}_{CE}(\theta) = - \sum_{i=1}^m t_{i,o} \cdot \log p_{i,o} \quad (3.9)$$

όπου  $t_{i,o}$  είναι μία δυαδική μεταβλητή (0 ή 1) που δείχνει αν η κλάση  $i$  είναι σωστή κατηγοριοποίηση για την παρατήρηση  $\mathbf{o}$  ή όχι. Και όπου  $p$  η πιθανότητα που προβλέπει το νευρωνικό δίκτυο (μέσω της συνάρτησης Softmax) η κλάση  $i$  να είναι η σωστή κατηγοριοποίηση για την παρατήρηση  $\mathbf{o}$ . Όπως είναι αναμενόμενο, η συνάρτηση κόστους διασταυρωμένης εντροπίας, χρησιμοποιείται για προβλήματα δυαδικής κατηγοριοποίησης. Άλλες συναρτήσεις που χρησιμοποιούνται για δυαδική κατηγοριοποίηση είναι η Hinge και η τετραγωνική Hinge [49].

### 3.6.2 $L_1$ και $L_2$ Κανονικοποίηση

Κατά την εκπαίδευση των νευρωνικών δικτύων, συχνά αντιμετωπίζεται ένα πρόβλημα γνωστό και ως υπερπροσαρμογή δεδομένων (overfitting). Με τον όρο υπερπροσαρμογή δεδομένων, εννοούμε την προσαρμογή του μοντέλου έτσι ώστε να αναπαράγει τέλεια αποτελέσματα για το σύνολο δεδομένων που χρησιμοποιείται ως σύνολο εκπαίδευσης, η οποία ωστόσο οδηγεί στην αδυναμία γενίκευσης και επίτευξης καλών αποτελεσμάτων για οποιοδήποτε σύνολο με άγνωστα δεδομένα. Η κανονικοποίηση είναι μία διαδικασία που μας επιτρέπει να περιορίζουμε το συχνό πρόβλημα αυτό. Η λύση αυτή επιτυγχάνεται επιβάλλοντας στα βάρη του νευρωνικού δικτύου να διατηρούν χαμηλές τιμές μέσω μίας διαδικασίας "ποινής" των βαρών που έχουν υψηλότερες τιμές [50]. Η συνάρτηση κόστους μετασχηματίζεται με την προσθήκη ενός όρου που μας επιτρέπει να πραγματοποιήσουμε την κανονικοποίηση [51] [50]:

$$\hat{\mathcal{L}}(\theta) = \mathcal{L}(\theta) + \lambda \cdot \Omega(\theta) \quad (3.10)$$

Ο όρος  $\Omega(\theta)$  ονομάζεται συνάρτηση ποινής και το  $\lambda$  είναι ένας πραγματικός αριθμός που ρυθμίζει πόσο πολύ ή λίγο αντίστοιχα παίζει ρόλο η συνάρτηση ποινής.

Οι πιο συχνές διαδικασίες κανονικοποίησης είναι η  $L_1$  και η  $L_2$  κανονικοποίηση.

### $L_2$ Κανονικοποίηση

Ο όρος της συνάρτησης ποινής σε αυτή την περίπτωση γράφεται ως εξής [51] :

$$\Omega(\theta) = \sum_k \sum_j \sum_i (w_{i,j}^{(k)})^2 \quad (3.11)$$

όπου το  $k$  είναι δείκτης άθροισης για όλα τα στρώματα και  $i$  και  $j$  για όλα τα βάρη σε κάθε στρώμα. Επομένως, προσθέτουμε τα τετράγωνα των βαρών ολόκληρου του νευρωνικού δικτύου. Ισοδύναμα, το  $\Omega(\theta)$  μπορεί να γραφεί σαν το άθροισμα των τετραγώνων των νορμών του πίνακα βαρών σε κάθε στρώμα:

$$\Omega(\theta) = \sum_k (\|\mathbf{w}^{(k)}\|_F)^2 \quad (3.12)$$

Για ικανοποιητικές τιμές της παραμέτρου  $\lambda$  μπορεί να αποφευχθεί η υπερπροσαρμογή δεδομένων [50]. Στα δεδομένα που δεν επηρεάζουν ή δεν είναι σημαντικά για το αποτέλεσμα (έξοδο) του νευρωνικού δικτύου με αυτή την μέθοδο, θα αποδοθούν αρκετά χαμηλές αλλά όχι μηδενικές τιμές στα αντίστοιχα βάρη.

### $L_1$ Κανονικοποίηση

Η συνάρτηση ποινής στην  $L_1$  κανονικοποίηση γράφεται ως εξής [51]:

$$\Omega(\theta) = \sum_k \sum_j \sum_i |w_{i,j}^{(k)}| \quad (3.13)$$

Στην κανονικοποίηση  $L_1$ , αθροίζονται οι απόλυτες τιμές των βαρών όλου του νευρωνικού δικτύου και επιβάλλεται στο νευρωνικό δίκτυο με τον τρόπο αυτό η προτίμηση σε μικρότερα βάρη. Η  $L_1$  κανονικοποίηση είναι πιθανό να κάνει τις τιμές κάποιων βαρών ακριβώς μηδενικές [50] και έχει αρκετά μεγαλύτερο υπολογιστικό κόστος σε σχέση με την προηγούμενη μέθοδο. Επίσης, πολλές φορές δεν είναι κατάλληλη για πολλά δεδομένα εισόδου στο νευρωνικό δίκτυο [51].

### 3.6.3 Βελτιστοποίηση Συναρτήσεων Κόστους

Οι μεταβλητές των συναρτήσεων κόστους είναι όλες οι παράμετροι ενός νευρωνικού δικτύου, δηλαδή όλα τα βάρη  $w_i$  και οι πολώσεις  $b_i$ , τα οποία, όπως αναφέρθηκε και στις προηγούμενες ενότητες συμβολίζουμε με  $\theta$ . Ο σκοπός είναι να βρεθεί ένα σύνολο παραμέτρων που ελαχιστοποιεί τις συναρτήσεις κόστους. Επομένως, η ελαχιστοποίηση μίας συνάρτησης κόστους ενός νευρωνικού δικτύου είναι ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης πολλών μεταβλητών. Οι περισσότερες μέθοδοι βελτιστοποίησης κάνουν χρήση της βαθμίδας της συνάρτησης κόστους προκειμένου να προσεγγίσουν ικανοποιητικά το ελάχιστο της. Η επιλογή της χρήσης της βαθμίδας για την προσέγγιση των ακρότατων συναρτήσεων με μεθόδους βελτιστοποίησης έχει τις βάσεις της στο ακόλουθο θεώρημα:

**Γενικευμένο Θεώρημα Fermat για τοπικά ακρότατα** [52]  
(Προσαρμοσμένο στο συμβολισμό που χρησιμοποιήθηκε στις προηγούμενες ενότητες)

Έστω μία διαφορίσιμη συνάρτηση κόστους  $\mathcal{L} : D \rightarrow \mathbb{R}$  με  $D \subseteq \mathbb{R}^n$  όπου το σύνολο  $D$  είναι ανοιχτό, η οποία παρουσιάζει τοπικό ακρότατο σε ένα σημείο  $\theta^* \in \mathbb{R}^n$ . Τότε ισχύει :

$$\nabla_{\theta} \mathcal{L}(\theta^*) = (0, 0, \dots, 0) \in \mathbb{R}^n$$

Επομένως για όλα τα ακρότατα μίας συνάρτησης κόστους ισχύει η συνθήκη  $\nabla_{\theta} \mathcal{L} = 0$ .

#### Καταβύθιση βαθμίδας:

Η πιο απλή μέθοδος που χρησιμοποιείται για την ελαχιστοποίηση συναρτήσεων πολλών μεταβλητών είναι η Καταβύθιση Βαθμίδας (Gradient Descent) [53]. Η κατεύθυνση της βαθμίδας μίας συνάρτησης σε ένα σημείο είναι τέτοια ώστε να δείχνει προς το κοντινότερο μέγιστο της συνάρτησης. Επομένως ακολουθώντας την κατεύθυνση που μας υποδεικνύει η βαθμίδα μιας συνάρτησης "ανεβαίνουμε" προς τα πάνω την υπερεπιφάνεια μίας συνάρτησης μέχρι την εύρεση ενός μεγίστου (τοπικού ή ολικού). Λαμβάνοντας υπόψιν το παραπάνω χαρακτηριστικό της βαθμίδας και δεδομένου ότι ο σκοπός είναι η ελαχιστοποίηση της συνάρτησης κόστους, ακολουθούμε κατεύθυνση αντίθετη από αυτή που μας υποδεικνύει η βαθμίδα προκειμένου να βρούμε ένα τοπικό ή ολικό ελάχιστο μιας συνάρτησης. Η αρνητική βαθμίδα σε ένα σημείο μίας συνάρτησης μας υποδεικνύει την κατεύθυνση που πρέπει να ακολουθηθεί

πάνω στην υπερεπιφάνεια της συνάρτησης αυτής προκειμένου να βρεθεί το κοντινότερο ελάχιστο. Με την Καταβύθιση βαθμίδας ακολουθούμε με μία επαναληπτική μέθοδο την κατεύθυνση της αρνητικής βαθμίδας μέχρι να συγκλίνουμε σε ένα ελάχιστο. Πρακτικά, είναι πολύ δύσκολο να γίνει σύγκλιση σε κάποιο ολικό ελάχιστο (global minimum). Αυτό συμβαίνει διότι σε πολύ περίπλοκες συναρτήσεις με πολλά τοπικά ελάχιστα, η πιθανότητα να γίνει σύγκλιση στο συγκεκριμένο που αντιστοιχεί στο ολικό ελάχιστο είναι πολύ μικρή.

Συνεχίζοντας, ακολουθεί περιγραφή του αλγορίθμου Καταβύθιση βαθμίδας. Αρχικά υποθέτουμε ένα σημείο  $\theta_0$  και ο αλγόριθμος αναπαράγει μία ακολουθία σημείων  $\theta_1, \theta_2, \theta_3, \dots$  στην κατεύθυνση της αρνητικής βαθμίδας. Ο  $k$ -στος όρος της μεθόδου καταβύθισης βαθμίδας θα είναι [53]:

$$\theta_k = \theta_{k-1} - \gamma_{k-1} \cdot \nabla_{\theta} \mathcal{L}(\theta_{k-1}) \quad (3.14)$$

Όπου ο όρος  $\gamma$  μας δείχνει το κατά πόσο πολύ ή λίγο επιθυμούμε να κινηθούμε στην κατεύθυνση της αρνητικής βαθμίδας. Η τιμή του  $\gamma$  μπορεί να είναι σταθερή αλλά και να αλλάζει σε κάθε επανάληψη. Όταν εφαρμόζουμε τον συγκεκριμένο αλγόριθμο είναι αναγκαίο να έχουμε ένα κριτήριο τερματισμού. Επομένως ορίζουμε έναν πραγματικό αριθμό  $\epsilon > 0$  και όταν η τιμή του μέτρου της βαθμίδας γίνει μικρότερη από την τιμή του τότε σταματάνε οι επαναλήψεις. Ο αριθμός αυτός ονομάζεται ανοχή της μεθόδου. Θεωρητικά αν ο αριθμός αυτός τείνει στο μηδέν έχουμε τέλεια σύγκλιση της μεθόδου. Σε αυτό το σημείο αξίζει να αναφερθούμε στο ότι ο τρόπος με τον οποίον γράφονται οι συναρτήσεις κόστους στα νευρωνικά δίκτυα είναι ο εξής:

$$\mathcal{L}(\theta) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m l_i(\theta) \quad (3.15)$$

όπου  $l_i$  η συνάρτηση κόστους του νευρωνικού δικτύου για κάθε δεδομένο  $i$ . Επομένως η καταβύθιση βαθμίδας γράφεται:

$$\theta_k = \theta_{k-1} - \frac{\gamma_{k-1}}{m} \cdot \sum_{i=1}^m \nabla_{\theta} l_i(\theta_{k-1}) \quad (3.16)$$

### Στοχαστική Καταβύθιση βαθμίδας:

Η Στοχαστική Καταβύθιση Βαθμίδας (Stochastic Gradient Descent ή SGD) είναι μία στοχαστική προσέγγιση του αλγορίθμου καταβύθισης

βαθμίδας. Στην SGD εκμεταλλευόμαστε τους νόμους των πιθανοτήτων για να υπολογίσουμε την ίδια βαθμίδα με την καταβύθιση βαθμίδας, χρησιμοποιώντας όμως πολύ λιγότερα δεδομένα και εκτελώντας λιγότερες πράξεις [53]. Έστω  $S$  το σύνολο των δεικτών του κάθε δεδομένου από το σύνολο δεδομένων που διαθέτουμε για την εκπαίδευση του νευρωνικού δικτύου. Αν τα δεδομένα δηλαδή είναι  $m$  στον αριθμό, το συγκεκριμένο σύνολο γράφεται:

$$S = \{1, 2, \dots, m\}$$

Σε κάθε επανάληψη  $k$  θα δειγματοληπτούμε ομοιόμορφα έναν τυχαίο δείκτη από το  $S$  ο οποίος θα συμβολίζεται με  $i(k)$  και υπολογίζουμε την βαθμίδα μόνο για το δεδομένο  $i$  αντί για όλα τα  $m$  δεδομένα [54]:

$$\theta_{k+1} = \theta_k - \gamma_k \cdot \nabla_{\theta} l_{i(k)}(\theta_k) \quad (3.17)$$

Παρατηρούμε ότι αντί για το άθροισμα βαθμίδων που είχαμε στην καταβύθιση βαθμίδας πλέον έχουμε μόνο μία βαθμίδα που πρέπει να υπολογιστεί. Επομένως, η διαδικασία είναι  $m$  φορές γρηγορότερη. Παρόλο που επιλέγουμε τυχαία το δείγμα σε κάθε επανάληψη, ο υπολογισμός της βαθμίδας είναι ισοδύναμος με τον υπολογισμό ολόκληρου του αθροίσματος όπως στην καταβύθιση βαθμίδας γιατί ισχύει η προσέγγιση [54]:

$$\mathbb{E} [\nabla l_{i(k)}(\theta)] = \nabla \mathcal{L}(\theta) = \frac{1}{m} \cdot \sum_{i=1}^m \nabla_{\theta} l_i(\theta_{k-1}) \quad (3.18)$$

Δηλαδή, η μέση τιμή των βαθμίδων, επιμέρους συναρτήσεων κόστους είναι ίδια με την τιμή της βαθμίδας της συνολικής συνάρτησης κόστους. Αυτό είναι απόρροια της ομοιόμορφης δειγματοληψίας που κάνουμε από το σύνολο των δεδομένων και η ισότητα αποδεικνύεται εύκολα με χρήση θεωρίας πιθανοτήτων. Είναι προφανές ότι όσες περισσότερες δειγματοληψίες κάνουμε τόσο καλύτερη προσέγγιση θα έχουμε.

### Mini-batch Stochastic Gradient Descent :

Στην μέθοδο αυτή, αντί σε κάθε βήμα να επιλέγεται μόνο ένα τυχαίο  $i(k)$ , δηλαδή ένα μόνο δεδομένο από το  $S$ , να επιλέγεται ένα σύνολο από δείκτες  $i(k)$  από το  $S$ , δηλαδή ένα μέρος από τα  $m$  συνολικά δεδομένα και να πραγματοποιείται άθροιση πάνω στις βαθμίδες που αντιστοιχούν σε αυτά όπως στην κανονική καταβύθιση βαθμίδας. Επομένως, ως διαδικασία είναι πολύ παρόμοια με την κλασική SGD με την διαφορά ότι αντί για την επιλογή ενός

μόνο δεδομένου για τον υπολογισμό της βαθμίδας σε κάθε επανάληψη γίνεται επιλογή περισσότερων δεδομένων. Αρχικά γίνεται επιλογή ενός τυχαίου υποσυνόλου από το  $S$ :

$$I_k \subseteq \{1, 2, \dots, m\}, \quad |I_k| = n < m$$

Και η επαναληπτική διαδικασία γράφεται ως εξής [54] :

$$\theta_{k+1} = \theta_k - \frac{\gamma^k}{n} \cdot \sum_{i \in I_k} \nabla_{\theta} l_i(\theta_k) \quad (3.19)$$

Και σε αυτή την διαδικασία όπως και στην κλασική SGD παρατηρείται αρκετά ικανοποιητική προσέγγιση της βαθμίδας. Δηλαδή, η μέση τιμή του αθροίσματος των βαθμίδων των συναρτήσεων κόστους  $l$  κάθε δεδομένου του mini-batch προσεγγίζει πολύ ικανοποιητικά την βαθμίδα της συνάρτησης κόστους. Μαθηματικά το παραπάνω διατυπώνεται ως εξής :

$$\mathbb{E} \left[ \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n \nabla_{\theta} l_i(\theta) \right] = \nabla_{\theta} \mathcal{L}(\theta) \quad (3.20)$$

Οι δύο τελευταίες στοχαστικές μέθοδοι παρουσιάζουν αρκετά καλή συμπεριφορά και για προβλήματα κυρτής αλλά και για προβλήματα μη κυρτής βελτιστοποίησης. Αυτό σημαίνει πως λειτουργούν καλά στο να βρίσκουν τοπικά ή και ολικά ελάχιστα και σε κυρτές αλλά και σε μη κυρτές συναρτήσεις, το οποίο τις καθιστά εξαιρετικά χρήσιμες. Σημειώνεται πως και οι δύο αυτές μέθοδοι έχουν την τάση να ταλαντώνονται γύρω από το ελάχιστο που έχουν προσεγγίσει. Τέλος, ένα σημαντικό πλεονέκτημα των μεθόδων αυτών είναι ότι, λόγω της τυχαιότητας που τις χαρακτηρίζει, έχουν την δυνατότητα ενώ βρίσκονται κοντά σε ένα τοπικό ελάχιστο, να μεταπηδήσουν σε ένα καλύτερο τοπικό ελάχιστο ή ακόμη και σε ένα ολικό ελάχιστο.

### Υπολογισμός της βαθμίδας $\nabla_{\theta} \mathcal{L}(\theta)$ :

Σε όλες τις περιπτώσεις βελτιστοποίησης μίας συνάρτησης κόστους στα νευρωνικά δίκτυα κάνει την εμφάνιση της η βαθμίδα  $\nabla_{\theta} \mathcal{L}(\theta)$ , η οποία είναι αναγκαίο να υπολογιστεί.

Έστω ότι έχουμε μία συνάρτηση κόστους Τετραγωνικού Σφάλματος (SE), η οποία γράφεται:

$$\mathcal{L}(\theta) = \sum_{i=1}^m (y_i - \hat{y}_i)^2$$

όπου  $y_i$  τα πραγματικά αποτελέσματα του νευρωνικού δικτύου και  $\hat{y}_i$  τα επιθυμητά αποτελέσματα. Προκειμένου να υπολογιστεί η βαθμίδα  $\nabla_{\theta}\mathcal{L}(\theta)$ , πρέπει να υπολογιστούν οι μερικές παράγωγοι της συνάρτησης κόστους ως προς όλες τις παραμέτρους του νευρωνικού δικτύου. Δηλαδή ως προς όλα τα βάρη και όλες τις πολώσεις. Η μερική παράγωγος της συνάρτησης κόστους ως προς τα βάρη του  $i$ -στου νευρώνα στο  $k$ -στο στρώμα του νευρωνικού δικτύου δίνεται από την σχέση με βάση τον κανόνα της αλυσίδας [55] [56]:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{w}_i^{(k)}} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial a_i^{(k)}} \frac{\partial a_i^{(k)}}{\partial \mathbf{w}_i^{(k)}} \quad (3.21)$$

όπου  $\mathbf{w}_i^{(k)}$  η  $i$ -στη στήλη του πίνακα βαρών του  $k$ -στου στρώματος. Θυμίζουμε ότι το  $a_i^{(k)}$  είναι η είσοδος του  $i$ -στού νευρώνα του  $k$ -στου στρώματος η οποία είναι συνάρτηση των βαρών και γράφεται :

$$a_i^{(k)}(\mathbf{x}) = b_i^{(k)} + \mathbf{w}_i^{(k)} \mathbf{h}^{(k-1)}(\mathbf{x}) \quad (3.22)$$

Όπου τα  $\mathcal{L}$  και  $a_i^{(k)}$  είναι βαθμωτά μεγέθη ενώ το  $\mathbf{w}_i^{(k)}$  διανυσματικό αφού αποτελεί την  $i$ -στη σειρά του πίνακα βαρών. Η παραγωγή λοιπόν γίνεται με τον εξής κανόνα με  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$  ένα διανυσματικό μέγεθος και  $y$  βαθμωτό:

$$\frac{\partial y}{\partial \mathbf{x}} = \left( \frac{\partial y}{\partial x_1}, \frac{\partial y}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial y}{\partial x_n} \right) \in \mathbb{R}^n$$

Η παράγωγος  $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial a_i^{(k)}}$  ονομάζεται ευαισθησία ή σφάλμα της συνάρτησης κόστους και συμβολίζεται με  $\delta_i^{(k)}$  και κατά αντιστοιχία το  $\delta^{(k)}$  είναι το διάνυσμα ευαισθησίας του στρώματος  $k$ . Από την σχέση (3.22) για το  $a_i^{(k)}$  φαίνεται εύκολα πως η παράγωγος  $\frac{\partial a_i^{(k)}}{\partial \mathbf{w}_i^{(k)}}$  είναι η εξής:

$$\frac{\partial a_i^{(k)}}{\partial \mathbf{w}_i^{(k)}} = \mathbf{h}^{(k-1)}(\mathbf{x}) \quad (3.23)$$

Επομένως συνδυάζοντας τις (3.21) , (3.23) και τον ορισμό των  $\delta_i$  η παράγωγος της συνάρτησης κόστους ως προς τα βάρη ενός νευρώνα  $i$  του  $k$ -στου στρώματος γράφεται:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{w}_i^{(k)}} = \delta_i^{(k)} \cdot \mathbf{h}^{(k-1)}(\mathbf{x}) \quad (3.24)$$

όπου το  $\delta_i^{(k)}$  δίνεται από την σχέση [55] :

$$\delta_i^{(k)} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial a_i^{(k)}} = h'^{(k)}(a_i^{(k)}) \sum_d w_{di}^{(k+1)} \cdot \delta_d^{(k+1)} \quad (3.25)$$



Η παραπάνω σχέση (3.25) για το  $\delta_i^{(k)}$  προκύπτει και αυτή από τον κανόνα της αλυσίδας:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial a_i^{(k)}} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial h_i^{(k)}} \frac{\partial h_i^{(k)}}{\partial a_i^{(k)}} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial h_i^{(k)}} \cdot h'^{(k)}(a_i^{(k)}) \quad (3.26)$$

όπου η παράγωγος  $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial h_i^{(k)}}$  υπολογίζεται κι αυτή με την σειρά της με τον κανόνα της αλυσίδας :

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial h_i^{(k)}} = \sum_d \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial a_d^{(k+1)}} \frac{\partial a_d^{(k+1)}}{\partial h_i^{(k)}} = \sum_d \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial a_d^{(k+1)}} w_{di}^{(k+1)} = \sum_d w_{di}^{(k+1)} \cdot \delta_d^{(k+1)} \quad (3.27)$$

Επομένως με συνδυασμό των σχέσεων (3.26) και (3.27) προκύπτει η αρχική έκφραση (3.25). Αντίστοιχα για τον  $i$ -στο νευρώνα του  $k$ -στου στρώματος του νευρωνικού δικτύου υπολογίζεται η παράγωγος της συνάρτησης κόστους ως προς την πόλωση με τον κανόνα της αλυσίδας:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial b_i^{(k)}} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial a_i^{(k)}} \frac{\partial a_i^{(k)}}{\partial b_i^{(k)}} \quad (3.28)$$

Και από την σχέση (3.22) για το  $a_i^{(k)}$  προκύπτει εύκολα ότι  $\frac{\partial a_i^{(k)}}{\partial b_i^{(k)}} = 1$ , επομένως:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial b_i^{(k)}} = \delta_i^{(k)} = h'^{(k)}(a_i^{(k)}) \sum_d w_{di}^{(k+1)} \cdot \delta_d^{(k+1)} \quad (3.29)$$

Έστω ότι έχουμε ένα νευρωνικό δίκτυο με  $n$  στρώματα. Το διάνυσμα της ευαισθησίας του στρώματος εξόδου  $\delta^{(n)}$  με βάση τον τύπο της συνάρτησης κόστους είναι:

$$\delta^{(n)} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{a}^{(n)}} = \frac{\partial \left( \sum_{i=1}^m (y_i - \hat{y}_i)^2 \right)}{\partial \mathbf{a}^{(n)}} \quad (3.30)$$

Όπου  $y$  η έξοδος του νευρωνικού δικτύου δηλαδή στρώματος εξόδου. Δηλαδή,  $y = h^{(n)}(\mathbf{a}^{(n)}(\mathbf{x}))$  Το άθροισμα μπορεί να γραφεί ως  $(\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}})(\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}) = (\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}})^2$  [46] όπου  $\mathbf{y}$  και  $\hat{\mathbf{y}}$  είναι διανύσματα  $m$  διαστάσεων με τις κανονικές εξόδους και τις επιθυμητές εξόδους του νευρωνικού δικτύου αντίστοιχα. Άρα [46]:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{a}^{(n)}} = 2(\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}) \frac{\partial \mathbf{h}^{(n)}}{\partial \mathbf{a}^{(n)}} \quad (3.31)$$

Η παραπάνω πράξη παραγωγίσις του διανύσματος  $\mathbf{h}^{(n)}$  ως προς το  $\mathbf{a}^{(n)}$  δεν είναι τίποτα άλλο παρά ο υπολογισμός του Ιακωβιανού πίνακα με την χρήση των δύο διανυσμάτων, κάθε στοιχείο του οποίου υπολογίζεται ως εξής:

$$J_{ij}(\mathbf{h}^{(n)}, \mathbf{a}^{(n)}) = \frac{\partial h_i^{(n)}}{\partial a_j^{(n)}} \quad (3.32)$$

Αποδεικνύεται τελικά ότι ο Jacobian είναι διαγώνιος και γράφεται [46]:

$$J_{ij}(\mathbf{h}^{(n)}, \mathbf{h}^{(n)}) = \text{diag}[h'^{(n)}(a^{(n)})] \quad (3.33)$$

Επομένως:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{a}^{(n)}} = 2(\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}})\text{diag}[h'^{(n)}(a^{(n)})] \quad (3.34)$$

Συμπερασματικά, είναι προφανές ότι ο υπολογισμός της βαθμίδας της συνάρτησης κόστους και κατ'επέκταση όλων των παραγώγων της συνάρτησης κόστους ως προς όλες τις παραμέτρους ενός νευρωνικού δικτύου ανάγεται στον υπολογισμό των  $\delta_i$ . Παρατηρούμε όμως ότι για να υπολογιστούν οι παράγωγοι των παραμέτρων σε ένα στρώμα  $k$  κάνοντας χρήση των τύπων που αποδείχτηκαν παραπάνω, πρέπει πρώτα να υπολογίσουμε το μέγεθος  $\delta_i^{(k+1)}$  που αντιστοιχεί στο αμέσως παραπάνω στρώμα. Ακολουθώντας αυτή την λογική είναι προφανές ότι ξεκινάμε από τον υπολογισμό των  $\delta_i$  και άρα και των παραγώγων από την έξοδο του νευρωνικού δικτύου και συνεχίζουμε τους υπολογισμούς μέχρι να φτάσουμε στο πρώτο στρώμα. Η παραπάνω μεθοδολογία ονομάζεται οπισθοδιάδοση (backpropagation) και αποτελεί τον πιο αποδοτικό τρόπο για τον υπολογισμό των παραγώγων συναρτήσεων κόστους στα νευρωνικά δίκτυα.

## Κεφάλαιο 4

# Παραλλακτικοί Αυτοκωδικοποιητές

### 4.1 Εισαγωγή στους Παραλλακτικούς Αυτοκωδικοποιητές

Οι Παραλλακτικοί Αυτοκωδικοποιητές (Variational Autoencoders ή VAEs) είναι ένας τύπος νευρωνικών δικτύων που ανήκουν στην οικογένεια των Αυτοκωδικοποιητών. Οι Αυτοκωδικοποιητές αποτελούνται από δύο συνδεδεμένα νευρωνικά δίκτυα, τον Κωδικοποιητή (Encoder) και τον Αποκωδικοποιητή (Decoder). Η δουλειά ενός Κωδικοποιητή είναι να δέχεται στην είσοδο του δεδομένα και να τα μετατρέπει σε ένα πιο πυκνό σε πληροφορία αλλά μικρότερο σε διαστάσεις σύνολο δεδομένων. Στην συνέχεια ο Αποκωδικοποιητής, χρησιμοποιώντας τα δεδομένα μικρότερης διάστασης, προσπαθεί να ανακατασκευάσει τα αρχικά δεδομένα (δηλαδή τα δεδομένα πριν εισέλθουν στον Κωδικοποιητή). Εν συντομία, ο Κωδικοποιητής κωδικοποιεί την αρχική πληροφορία με τρόπο τέτοιο ώστε να μειωθούν τα δεδομένα σε μία απεικόνιση λιγότερων διαστάσεων και αυτά αποκωδικοποιούνται από τον Αποκωδικοποιητή με τρόπο τέτοιο ώστε να παίρνουμε ξανά τα αρχικά δεδομένα. Επομένως η μείωση που πραγματοποιεί ο Κωδικοποιητής στην διαστατικότητα των αρχικών δεδομένων είναι αναγκαίο να γίνει με τρόπο τέτοιο ώστε να περιέχεται η αναγκαία πληροφορία κατά την αποκωδικοποίηση. Η εκπαίδευση ενός Αυτοκωδικοποιητή γίνεται ταυτόχρονα και για τα δύο νευρωνικά δίκτυα. Συνήθως, για την εκπαίδευσή τους χρησιμοποιούνται οι συναρτήσεις σφάλματος διασταυρούμενης εντροπίας και

Μέσου Τετραγωνικού Σφάλματος.

Το πρόβλημα με τους απλούς Αυτοκωδικοποιητές είναι ότι ο χώρος της ενδιάμεσης απεικόνισης λιγότερων διαστάσεων (δηλαδή η έξοδος του Κωδικοποιητή ή η είσοδος του Αποκωδικοποιητή), που αλλιώς ονομάζεται λανθάνων ή ενδιάμεσος χώρος, δεν είναι συνεχής. Σε αρκετές περιπτώσεις αυτό αποτελεί πρόβλημα επειδή σε πολλά μοντέλα που χτίζονται με Αυτοκωδικοποιητές θέλουμε να κάνουμε τυχαία δειγματοληψία από τον γενικότερο χώρο στον οποίο ανήκουν τα μειωμένης διάστασης δεδομένα. Το παραπάνω προφανώς δεν μπορεί να επιτευχθεί αν δεν υπάρχει συνέχεια. Ένα πολύ σημαντικό χαρακτηριστικό των Παραλλακτικών Αυτοκωδικοποιητών που τους ξεχωρίζει από τους υπόλοιπους Αυτοκωδικοποιητές είναι ότι διαθέτουν συνεχείς ενδιάμεσους χώρους, γεγονός που επιτρέπει να γίνονται τυχαίες δειγματοληψίες από αυτούς [57]. Έτσι, εκτός από την επανακατασκευή των αρχικών δεδομένων έχουν την επιπλέον δυνατότητα να αναπαράγουν νέα δεδομένα στην έξοδό τους.

## 4.2 Η βασική λειτουργία ενός VAE

Ένας VAE, όπως και όλοι οι υπόλοιποι Αυτοκωδικοποιητές, αποτελείται από έναν Κωδικοποιητή και έναν Αποκωδικοποιητή. Ο Κωδικοποιητής, κωδικοποιεί τα δεδομένα που δέχεται ως είσοδο σε έναν χώρο λιγότερων διαστάσεων και ο Αποκωδικοποιητής αποκωδικοποιεί την έξοδο του Κωδικοποιητή πίσω στον αρχικό χώρο προσπαθώντας να αναπαραγάγει με όσο μεγαλύτερη ακρίβεια γίνεται τα αρχικά δεδομένα. Αν "δώσουμε" στον Κωδικοποιητή σαν είσοδο ένα διάνυσμα  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m$  θα γίνει μία προβολή σε έναν χώρο λιγότερων διαστάσεων της μορφής  $\mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^n$  όπου προφανώς  $n < m$  και  $n, m \in \mathbb{N}$ . Ο χώρος λιγότερων διαστάσεων, από τον οποίο παίρνει τιμές το  $\mathbf{z}$ , λέγεται λανθάνων χώρος (latent space). Έστω  $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^n$  το διάνυσμα στον λανθάνοντα χώρο που προέκυψε από την κωδικοποίηση. Η προβολή που θα πραγματοποιεί ο Αποκωδικοποιητής αντίστοιχα είναι  $\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ . Έστω  $\mathbf{x}' \in \mathbb{R}^m$  το διάνυσμα που επιστρέφει ο Αποκωδικοποιητής. Ο σκοπός είναι το διάνυσμα  $\mathbf{x}'$  της εξόδου να είναι όσο πιο κοντά γίνεται με αυτό της εισόδου και ιδανικά μάλιστα να είναι ακριβώς ίδιο.

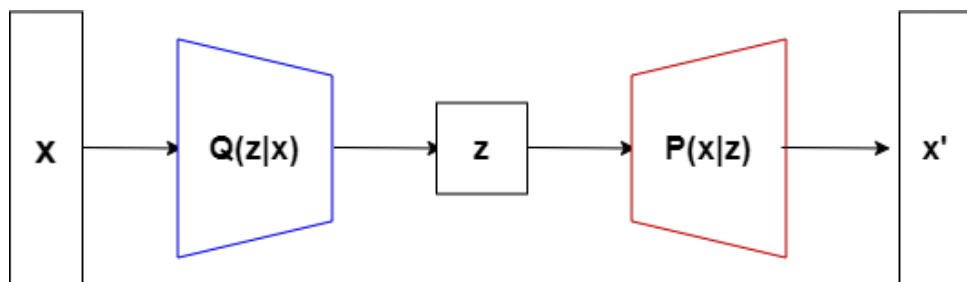
Η πιθανότητα ο Αποκωδικοποιητής να παραγάγει ένα διάνυσμα ακριβώς ίδιο με αυτό της εισόδου με βάση τον νόμο της ολικής πιθανότητας είναι [57]

[58]:

$$P(\mathbf{x}) = \int P(\mathbf{x}|\mathbf{z}) \cdot P(\mathbf{z})d\mathbf{z} \quad (4.1)$$

όπου η δεσμευμένη  $P(\mathbf{x}|\mathbf{z})$  εκφράζει την πιθανότητα ένα  $\mathbf{z}$  από τον λανθάνοντα χώρο να μπορεί να ανακατασκευάσει το  $\mathbf{x}$ . Με βάση τον νόμο της ολικής πιθανότητας πολλαπλασιάζεται με το πόσο πιθανό είναι αυτό το  $\mathbf{z}$  και πραγματοποιείται ολοκλήρωση ως προς  $\mathbf{z}$  για να σκανάρουμε ολόκληρο τον λανθάνοντα χώρο (σε διακριτή κατανομή πιθανότητας απλά πραγματοποιείται άθροιση πάνω σε όλα τα  $\mathbf{z}$ ). Όμως, ο υπολογισμός του παραπάνω ολοκληρώματος είναι πολύ σύνθετος. Αυτό συμβαίνει γιατί είναι άγνωστη η κατανομή  $P$  και επίσης το ολοκλήρωμα είναι πολυδιάστατο και στη γενική περίπτωση με πολύ μεγάλο αριθμό διαστάσεων. Πρακτικά, οι περισσότερες τιμές  $P(\mathbf{x}|\mathbf{z})$  είναι σχεδόν μηδενικές [57]. Επομένως, είναι μικρό το ποσοστό των  $\mathbf{z}$ , τα οποία είναι πιθανό να ανακατασκευάσουν το  $\mathbf{x}$ . Δεδομένου ότι η  $P$  είναι άγνωστη, γίνεται προσπάθεια προσέγγισης της κατανομής  $P(\mathbf{x})$  με μία συνάρτηση  $Q(\mathbf{z}|\mathbf{x})$ , η οποία θα δέχεται ένα  $\mathbf{x}$  και θα μας υποδεικνύει μία κατανομή πάνω στα  $\mathbf{z}$  τα οποία είναι πιθανό να κατασκευάσουν το  $\mathbf{x}$  [57].

Ένας VAE βασίζεται στην προαναφερθείσα ιδέα και πραγματοποιεί μία αντιστοίχιση των δεδομένων  $\mathbf{x}$  στον λανθάνοντα χώρο για την δημιουργία των  $\mathbf{z}$  μέσω της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας  $Q(\mathbf{z}|\mathbf{x})$  του Κωδικοποιητή. Στην συνέχεια, προβάλλει τα  $\mathbf{z}$  από τον λανθάνοντα χώρο πίσω στον αρχικό χώρο με την χρήση της κατανομής  $P(\mathbf{x}|\mathbf{z})$  του Αποκωδικοποιητή. Μετά το πέρας της εκπαίδευσης του VAE, η άγνωστη κατανομή  $P$  πρέπει να έχει προσεγγιστεί ικανοποιητικά από την κατανομή  $Q$  καθώς επίσης πρέπει τα  $\mathbf{x}'$  στην έξοδο του VAE να είναι όσο πιο κοντά γίνεται στα  $\mathbf{x}$  στην είσοδο του. Με βάση όλα τα παραπάνω η αρχιτεκτονική ενός VAE μοιάζει πολύ με αυτή που παρουσιάζεται στο παρακάτω σχήμα:



Εικόνα 4.1: Απλή απεικόνιση της αρχιτεκτονικής ενός τυπικού VAE

### 4.3 Η δειγματοληψία στο λανθάνοντα χώρο

Όπως αναφέρθηκε στην προηγούμενη ενότητα, η κατανομή  $P$  είναι άγνωστη και επομένως προσπαθούμε να την προσεγγίσουμε μέσω της κατανομής  $Q$ . Η κατανομή  $Q(\mathbf{z}|\mathbf{x})$  αντιστοιχεί στον Κωδικοποιητή και εκφράζει την πιθανότητα να πάρουμε ένα  $\mathbf{z}$  εισάγοντας στον Κωδικοποιητή ένα  $\mathbf{x}$  και η κατανομή  $P(\mathbf{x}|\mathbf{z})$  αντιστοιχεί στον Αποκωδικοποιητή και εκφράζει την πιθανότητα το  $\mathbf{x}$  να ακατασκευαστεί, όταν ο Αποκωδικοποιητής χρησιμοποιεί ως είσοδο ένα  $\mathbf{z}$ . Ακολουθώντας το συμβολισμό της προηγούμενης ενότητας,  $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^m$

Σε αρκετές περιπτώσεις ο Κωδικοποιητής λειτουργεί με τέτοιον τρόπο ώστε στην έξοδό του να δίνει παραμέτρους  $\mu_{\mathbf{z}|\mathbf{x}}$  και  $\sigma_{\mathbf{z}|\mathbf{x}}^2$  της κανονικής κατανομής. Στην συνέχεια γίνεται η υπόθεση ότι τα  $\mathbf{z}$  που προκύπτουν από την κωδικοποίηση των  $\mathbf{x}$  ακολουθούν την κανονική κατανομή δηλαδή [59]:

$$\mathbf{z}|\mathbf{x} \sim N(\mu_{\mathbf{z}|\mathbf{x}}, \Sigma_{\mathbf{z}|\mathbf{x}})$$

όπου το  $\mu$  είναι διάνυσμα  $m$ -διαστάσεων με μέσες τιμές της κανονικής κατανομής και  $\Sigma$  ο διαγώνιος πίνακας συνδιακύμανσης  $m \times m$  διαστάσεων.

$$\mu = (\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_m) \quad , \quad \Sigma = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \sigma_2^2 & 0 & \dots & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \sigma_m^2 \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

Επομένως, μέσω του Κωδικοποιητή δημιουργούνται δυάδες  $(\mu_i, \sigma_i^2)$ , εισάγονται στον τύπο της κανονικής κατανομής και τα  $\mathbf{z}$  δειγματοληπτούνται από τις τιμές της κανονικής κατανομής που προκύπτουν. Στην συνέχεια, μέσω των  $\mathbf{z}$  που δειγματοληπτούνται, γίνεται προσπάθεια ανακατασκευής του  $\mathbf{x}$  από τον Αποκωδικοποιητή.

### 4.4 Συνάρτηση Κόστους ενός VAE

Προκειμένου να πραγματοποιηθεί η διαδικασία της εκπαίδευσης ενός VAE, χρειάζεται να οριστεί μία συνάρτηση κόστους. Αρχικά θα γίνει ορισμός και υπενθύμιση κάποιων μαθηματικών εργαλείων που θα χρειαστούν παρακάτω.

**Θεώρημα του Bayes:** Έστω δύο ανεξάρτητα ενδεχόμενα  $A$  και  $B$  όπου για το  $B$  ισχύει  $P(B) \neq 0$ . Για τα  $A$  και  $B$  ισχύει η παρακάτω σχέση:

$$P(A|B) = \frac{P(B|A) \cdot P(A)}{P(B)}$$

**Απόκλιση κατά Kullback–Leibler:** Έστω δύο συνεχείς και κανονικοποιημένες συναρτήσεις πυκνότητας πιθανότητας  $P$  και  $Q$  ορισμένες στον ίδιο χώρο πιθανότητας  $\mathcal{X}$  με  $P(x), Q(x) > 0, \forall x \in \mathcal{X}$ . Η απόκλιση Kullback–Leibler (KL Divergence) για τις δύο κατανομές ορίζεται ως εξής: [60]

$$D_{KL}(P(x)||Q(x)) = \int_{\mathcal{X}} P(x) \log \frac{P(x)}{Q(x)} dx$$

και για διακριτές κατανομές αντίστοιχα:

$$D_{KL}(P(x)||Q(x)) = \sum_{x \in \mathcal{X}} P(x) \log \frac{P(x)}{Q(x)}$$

Πρακτικά η KL Divergence είναι ένα μέτρο της πληροφορίας που χάνεται όταν γίνεται προσέγγιση μίας κατανομής  $P$  από μία νέα κατανομή  $Q$ . Όσο πιο κοντά είναι μεταξύ τους δύο κατανομές τόσο πιο κοντά είναι στο μηδέν το μέγεθος  $D_{KL}$ .

Σε έναν VAE προσπαθούμε να προσεγγίσουμε την άγνωστη κατανομή  $P$  χρησιμοποιώντας μία κατανομή  $Q$ . Επομένως αρκεί να γίνει η ελαχιστοποίηση της Απόκλισης Kullback-Leibler:

$$\min D_{KL}(Q(\mathbf{z})||P(\mathbf{z}|\mathbf{x})) \quad (4.3)$$

όπου η  $Q(\mathbf{z})$  είναι ισοδύναμη με την  $Q(\mathbf{z}|\mathbf{x})$  και για το  $D_{KL}(Q(\mathbf{z})||P(\mathbf{z}|\mathbf{x}))$  ισχύει :

$$D_{KL}(Q(\mathbf{z})||P(\mathbf{z}|\mathbf{x})) = - \sum_{\mathbf{z}} Q(\mathbf{z}) \cdot \log \frac{P(\mathbf{z}|\mathbf{x})}{Q(\mathbf{z})} \quad (4.4)$$

Από την ελαχιστοποίηση της (4.4) θα προκύψει μία γενική μορφή της συνάρτησης κόστους ενός VAE [61] [62]. Όλες οι πράξεις για την εξαγωγή της τελικής έκφρασης της συνάρτησης σφάλματος γίνονται με χρήση αθροισμάτων πάνω στα  $\mathbf{z}$  για διακριτές κατανομές. Οι πράξεις αυτές είναι ισοδύναμες με τις αντίστοιχες για συνεχείς κατανομές αν αντικατασταθούν τα αθροίσματα με ολοκληρώματα ως προς  $\mathbf{z}$ . Από τον ορισμό της δεσμευμένης πιθανότητας η  $P(\mathbf{z}|\mathbf{x})$  μπορεί να γραφεί ως εξής:

$$P(\mathbf{z}|\mathbf{x}) = \frac{P(\mathbf{x}, \mathbf{z})}{P(\mathbf{x})} \quad (4.5)$$

όπου  $\mathbf{x}, \mathbf{z}$  η τομή των  $\mathbf{x}$  και  $\mathbf{z}$ . Με αντικατάσταση της (4.5) στην έκφραση (4.4) για την  $D_{KL}$  έχουμε:

$$\begin{aligned} D_{KL}(Q(\mathbf{z})||P(\mathbf{z}|\mathbf{x})) &= - \sum_{\mathbf{z}} Q(\mathbf{z}) \log \frac{P(\mathbf{x}, \mathbf{z})}{Q(\mathbf{z})} = \\ &= - \sum_{\mathbf{z}} Q(\mathbf{z}) \cdot \log \frac{P(\mathbf{x}, \mathbf{z})}{P(\mathbf{x})(\mathbf{z})} = - \sum_{\mathbf{z}} Q(\mathbf{z}) \cdot \left[ \log \frac{P(\mathbf{x}, \mathbf{z})}{Q(\mathbf{z})} - \log P(\mathbf{x}) \right] = \\ &= - \sum_{\mathbf{z}} Q(\mathbf{z}) \cdot \log \frac{P(\mathbf{x}, \mathbf{z})}{Q(\mathbf{z})} + \sum_{\mathbf{z}} \log P(\mathbf{x}) \cdot Q(\mathbf{z}) \end{aligned}$$

Στο δεύτερο άθροισμα ο όρος  $\log P(\mathbf{x})$  είναι ανεξάρτητος ως προς το  $\mathbf{z}$  επομένως:

$$D_{KL}(Q(\mathbf{z})||P(\mathbf{z}|\mathbf{x})) = - \sum_{\mathbf{z}} Q(\mathbf{z}) \cdot \log \frac{P(\mathbf{x}, \mathbf{z})}{Q(\mathbf{z})} + \log P(\mathbf{x}) \cdot \sum_{\mathbf{z}} Q(\mathbf{z}) \quad (4.6)$$

Επίσης η κατανομή  $Q$  είναι κανονικοποιημένη επομένως  $\sum_{\mathbf{z}} Q(\mathbf{z}) = 1$ , άρα :

$$D_{KL}(Q(\mathbf{z})||P(\mathbf{z}|\mathbf{x})) = - \sum_{\mathbf{z}} Q(\mathbf{z}) \cdot \log \frac{P(\mathbf{x}, \mathbf{z})}{Q(\mathbf{z})} + \log P(\mathbf{x}) \quad (4.7)$$

όπου η πιθανότητα  $P(\mathbf{x})$  είναι σταθερή. Επομένως, είναι φανερό από την εξίσωση (4.7) ότι το πρόβλημα της ελαχιστοποίησης της ποσότητας  $D_{KL}(Q(\mathbf{z})||P(\mathbf{z}|\mathbf{x}))$  ανάγεται στο πρόβλημα της μεγιστοποίησης του αθροίσματος. Το άθροισμα αυτό ονομάζεται Evidence Lower Bound ή αλλιώς ELBO.

$$\text{ELBO} = \sum_{\mathbf{z}} Q(\mathbf{z}) \cdot \log \frac{P(\mathbf{x}, \mathbf{z})}{Q(\mathbf{z})} \quad (4.8)$$

Για την  $P(\mathbf{x}, \mathbf{z})$  εφαρμόζουμε την εξίσωση για τις δεσμευμένες πιθανότητες που χρησιμοποιήθηκε και παραπάνω και στην συνέχεια το θεώρημα του Bayes :

$$P(\mathbf{x}, \mathbf{z}) = P(\mathbf{x}) \cdot P(\mathbf{z}|\mathbf{x}) = P(\mathbf{z}) \cdot P(\mathbf{x}|\mathbf{z}) \quad (4.9)$$

επομένως από τις (4.8) και (4.9) το  $\mathcal{L}$  γράφεται :

$$\begin{aligned} \text{ELBO} &= \sum_{\mathbf{z}} Q(\mathbf{z}) \cdot \log \frac{P(\mathbf{z}) \cdot P(\mathbf{x}|\mathbf{z})}{Q(\mathbf{z})} \Leftrightarrow \\ \text{ELBO} &= \sum_{\mathbf{z}} Q(\mathbf{z}) \cdot \left[ \log P(\mathbf{x}|\mathbf{z}) + \log \frac{P(\mathbf{z})}{Q(\mathbf{z})} \right] \Leftrightarrow \end{aligned}$$



$$\text{ELBO} = \sum_z Q(\mathbf{z}) \cdot \log P(\mathbf{x}|\mathbf{z}) + \sum_z Q(\mathbf{z}) \cdot \log \frac{P(\mathbf{z})}{Q(\mathbf{z})} \quad (4.10)$$

όπου:

$$\sum_z Q(\mathbf{z}) \cdot \log P(\mathbf{x}|\mathbf{z}) = \mathbb{E}_{Q(z)} [\log P(\mathbf{x}|\mathbf{z})] \quad , \quad \sum_z Q(\mathbf{z}) \cdot \log \frac{P(\mathbf{z})}{Q(\mathbf{z})} = -D_{KL}(Q(\mathbf{z})||P(\mathbf{z})) \quad (4.11)$$

άρα τελικά το ELBO μπορεί να γραφεί ως:

$$\text{ELBO} = \mathbb{E}_{Q(z)} [\log P(\mathbf{x}|\mathbf{z})] - D_{KL}(Q(\mathbf{z})||P(\mathbf{z})) \quad (4.12)$$

Όπως αναφέρθηκε και παραπάνω η μεγιστοποίηση της παραπάνω έκφρασης λύνει το πρόβλημα βελτιστοποίησης . Επομένως καλούμαστε να μεγιστοποιήσουμε την μέση τιμή της  $P(\mathbf{x}|\mathbf{z})$  ως προς την  $Q(\mathbf{z})$ , δηλαδή να μεγιστοποιήσουμε την πιθανότητα ένα  $\mathbf{z}$  να ανακατασκευάσει το  $\mathbf{x}$  , ενώ ταυτόχρονα προσεγγίζουμε όσο καλύτερα γίνεται την  $P(\mathbf{z})$  με την  $Q(\mathbf{z})$  ελαχιστοποιώντας την ποσότητα  $D_{KL}(Q(\mathbf{z})||P(\mathbf{z}))$ . Αν υποθέσουμε ότι η κατανομή  $P(\mathbf{x}|\mathbf{z})$  είναι κανονική της μορφής  $N(\mathbf{x}; \mu = \mathbf{x}', \sigma)$  [59] όπου  $\mathbf{x}'$  το ανακατασκευασμένο  $\mathbf{x}$  τότε με αντικατάσταση στην έκφραση  $\log P(\mathbf{x}|\mathbf{z})$  παίρνουμε :

$$\begin{aligned} \log P(\mathbf{x}|\mathbf{z}) &= \log \left[ \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \cdot \exp \left( -\frac{1}{2} \frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|^2}{\sigma^2} \right) \right] = \\ &= \log \left[ \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \right] + \log \left[ \exp \left( -\frac{1}{2} \frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|^2}{\sigma^2} \right) \right] \end{aligned} \quad (4.13)$$

όπου ο πρώτος λογάριθμος είναι σταθερός και ο δεύτερος λογάριθμος εκθετικού οπότε:

$$\log P(\mathbf{x}|\mathbf{z}) = -\frac{1}{2} \frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|^2}{\sigma^2} + c \quad (4.14)$$

Επομένως στην περίπτωση αυτή με την Κανονική Κατανομή ο όρος  $\mathbb{E}_{Q(z)} [\log P(\mathbf{x}|\mathbf{z})]$  του ELBO γράφεται :

$$\mathbb{E}_{Q(z)} [\log P(\mathbf{x}|\mathbf{z})] \simeq \mathbb{E}_{Q(z)} \left[ -\frac{1}{2} \frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|^2}{\sigma^2} \right] \quad (4.15)$$

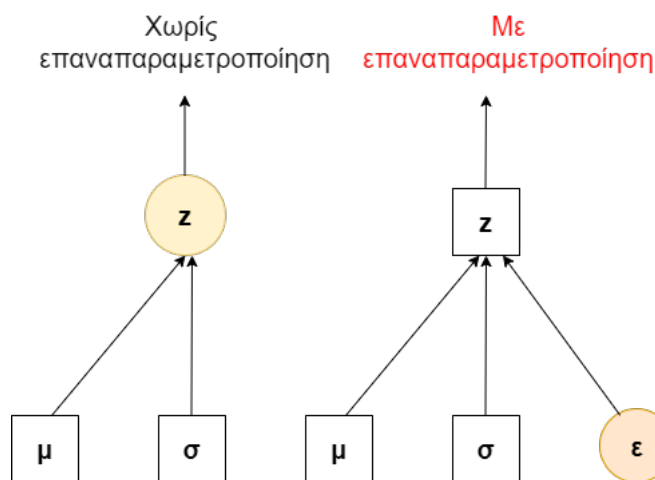
ο οποίος στην πραγματικότητα είναι σαν συνάρτηση Μέσου Τετραγωνικού Σφάλματος που αναφέρθηκε στην ενότητα (3.6.1). Επομένως η επιλογή της

Κανονικής Κατανομής μας δίνει την δυνατότητα κλειστής έκφρασης για τον πρώτο όρο του ELBO ενός VAE [63] [57]. Σε αυτή την περίπτωση, πρέπει να μεγιστοποιήσουμε την αρνητική αυτή ποσότητα που προκύπτει, το οποίο είναι ισοδύναμο με το να ελαχιστοποιήσουμε την ίδια ποσότητα αλλά με το αντίθετο πρόσημο. Δηλαδή ψάχνουμε λύσεις της μορφής:

$$z^* = \underset{z}{\operatorname{argmin}} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|^2 \quad (4.16)$$

## 4.5 Τέχνασμα Επαναπαραμετροποίησης (Reparameterization Trick)

Κατά την εκπαίδευση του VAE πρέπει να υπολογισθούν όλες οι παράγωγοι της συνάρτησης κόστους του ως προς όλες τις παραμέτρους του όπως αναλύθηκε στην ενότητα 3.6 . Η δειγματοληψία από την κανονική κατανομή για την επιλογή των  $\mathbf{z}$  που θα χρησιμοποιηθούν για την ανακατασκευή των  $\mathbf{x}$  καθιστά την διαδικασία στοχαστική. Το γεγονός αυτό δεν επιτρέπει την εφαρμογή της οπισθοδιάδοσης άρα είναι αδύνατο να υπολογισθούν κάποιες παράγωγοι και κατ' επέκταση δεν γίνεται να πραγματοποιηθεί η εκπαίδευση του νευρωνικού δικτύου. Η λύση δόθηκε από το Τέχνασμα Επαναπαραμετροποίησης (Reparameterization Trick) το οποίο χρησιμοποιεί τα  $\mu$  και  $\sigma$  της κανονικής κατανομής που παράγει ο Κωδικοποιητής και εκτελεί την παρακάτω διαδικασία που απεικονίζεται σχηματικά :



Εικόνα 4.2: Σχηματική απεικόνιση του τεχνάσματος επαναπαραμετροποίησης

Οι στρογγυλοί κόμβοι κίτρινου χρώματος είναι στοχαστικοί. Τα  $\mathbf{z}$  λοιπόν πριν την παραμετροποίηση δεν επιτρέπουν την εφαρμογή οπισθοδιάδοσης . Εισάγουμε λοιπόν την παράμετρο  $\epsilon$ . Έτσι πραγματοποιούμε μία ισοδύναμη με πριν δειγματοληψία από την κανονική κατανομή  $\epsilon \sim N(0, 1)$  και το  $\mathbf{z}$  που προκύπτει δίνεται από την εξίσωση  $\mathbf{z} = \mu + \sigma \odot \epsilon$  [58] αντί να του δίνουμε τις τιμές  $N(\mu, \sigma^2)$ . Όπου η πράξη  $\odot$  ονομάζεται γινόμενο Hadamard και δίνει ένα διάνυσμα, κάθε στοιχείο του οποίου, είναι το γινόμενο των αντίστοιχων στοιχείων των διανυσμάτων που πολλαπλασιάζονται . Απαραίτητη προϋπόθεση για να ισχύει το προαναφερθέν, είναι τα διανύσματα που

πολλαπλασιάζονται να είναι ίδιων διαστάσεων. Από την πράξη αυτή, παίρνουμε ισοδύναμα  $\mathbf{z}$ , τα οποία όμως, μετά την εφαρμογή της επαναπαραμετροποίησης, χωρίζονται σε ένα ντετερμινιστικό και ένα στοχαστικό μέρος όπως φαίνεται και στο σχήμα 4.2, γεγονός που επιτρέπει την περάτωση της διαδικασίας της οπισθοδιάδοσης.

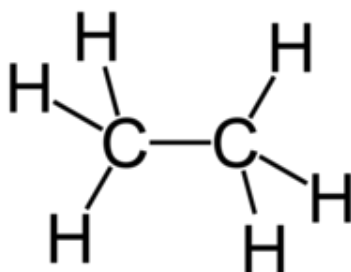
# Κεφάλαιο 5

## Μεθοδολογία

### 5.1 Παραγωγή δεδομένων και συστήματα υπό μελέτη

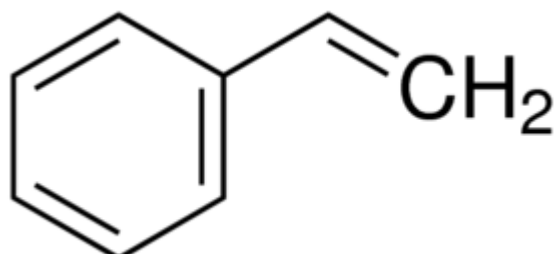
Τα δεδομένα που χρησιμοποιήθηκαν κατά την εκπαίδευση του νευρωνικού δικτύου της μεθοδολογίας που ακολουθήθηκε, παράχθηκαν από προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής στο ατομιστικό επίπεδο των συστημάτων υπό μελέτη. Τα συστήματα που επιλέχθηκε να μελετηθούν είναι το αιθάνιο, το στυρένιο το πενταμερές πολυαιθυλενίου και το μονομερές της τριοξεικής ή τριοξικής κυτταρίνης (CTA), τα οποία και αποτελούν δομικές μονάδες πολυμερικών συστημάτων με πολύ ευρύ πεδίο έρευνας και εφαρμογών. Τα συστήματα αυτά εξετάστηκαν ως μεμονωμένα μόρια.

Το μόριο του αιθανίου περιγράφεται από τον ακόλουθο χημικό τύπο:



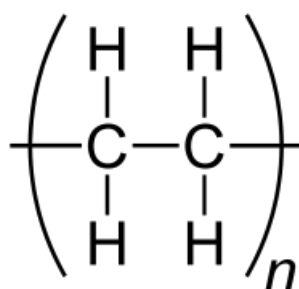
Εικόνα 5.1: Χημικός τύπος αιθανίου

Το μόριο του στυρενίου δίνεται από τον ακόλουθο τύπο:



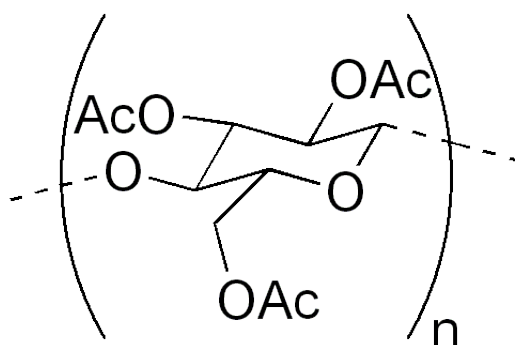
Εικόνα 5.2: Χημικός τύπος στυρενίου

Η επαναλαμβανόμενη δομική μονάδα του πολυαιθυλενίου περιγράφεται από τον ακόλουθο χημικό τύπο:



Εικόνα 5.3: Χημικός τύπος πολυαιθυλενίου

Και τέλος το μονομερές της τριοξικής κυταρρίνης δίνεται από τον παρακάτω τύπο:



Εικόνα 5.4: Χημικός τύπος μονομερούς του CTA

Αρχικά, κατασκευάστηκαν για τα συστήματα κάποιες αρχικές δομές με την βοήθεια του προγράμματος MAPS. Στην συνέχεια για κάθε σύστημα

επιλέχθηκε ένα κατάλληλο δυναμικό αλληλεπιδράσεων βάσει ερευνητικών πηγών. Για όλα τα συστήματα πραγματοποιήθηκε ελαχιστοποίηση της ενέργειας έτσι ώστε να χρησιμοποιηθεί μία εξισορροπημένη αρχική δομή για το επόμενο βήμα, στην οποία τα άτομα δεν βρίσκονται πολύ κοντά μεταξύ τους. Μετά την ελαχιστοποίηση της ενέργειας επιλέχθηκαν όλες οι υπόλοιπες απαραίτητες φυσικοχημικές παράμετροι για την προσομοίωση κάθε συστήματος.

Οι μοριακές προσομοιώσεις εκτελέστηκαν με την βοήθεια του προγράμματος LAMMPS. Το πεδίο δυνάμεων που επιλέχθηκε για το αιθάνιο είναι το Dreiding, το οποίο λειτουργεί αποτελεσματικά για τα αλκάνια [64]. Το Dreiding επιλέχθηκε επίσης για το πολυαιθυλένιο με τα πέντε μονομερή [65], καθώς και για το στυρένιο [64]. Το πεδίο δυνάμεων που επιλέχθηκε για το CTA είναι το Glycam06 [66]. Στη συνέχεια ακολούθησε για κάθε σύστημα ελαχιστοποίηση της ενέργειας με την μέθοδο της Απότομης Καθόδου (Steepest Descent). Πραγματοποιήθηκε προσομοίωση στο κανονικό στατιστικό σύνολο διατηρώντας την θερμοκρασία σταθερή με την χρήση του θερμοστάτη Nosé–Hoover. Η θερμοκρασία που επιλέχθηκε για όλα τα υπό μελέτη συστήματα είναι 300K. Το βήμα ολοκλήρωσης που επιλέχθηκε είναι 1 fs και ο συνολικός χρόνος της προσομοίωσης 1 ns. Έτσι προκύπτουν συνολικά  $10^6$  βήματα ολοκλήρωσης ( $\frac{1\text{ns}}{1\text{fs}} = 10^6$ ) των εξισώσεων κίνησης. Επιλέχθηκε στο LAMMPS να γίνεται αποθήκευση της τροχιάς κάθε 100 βήματα ολοκλήρωσης και να αποθηκεύονται οι συντεταγμένες, οι ταχύτητες και οι δυνάμεις του κάθε ατόμου σε καθένα από αυτά τα στιγμιότυπα. Έτσι προέκυψαν αρχεία με  $10^4$  στιγμιότυπα ( $\frac{10^6\text{steps}}{100\text{steps per snapshot saved}}$ ) από την συνολική τροχιά του κάθε συστήματος. Οι συντεταγμένες και οι δυνάμεις ανά άτομο αυτών των δυναμικών τροχιών χρησιμοποιήθηκαν αργότερα ως δεδομένα για την εκπαίδευση του μοντέλου μηχανικής μάθησης.

## 5.2 Η αδροποίηση με το μοντέλο μηχανικής μάθησης

Τα δεδομένα που παράγονται από τις προσομοιώσεις των συστημάτων στο ατομιστικό επίπεδο χρησιμοποιούνται ως είσοδοι σε έναν Variational Autoencoder. Η επιλογή του Variational Autoencoder ως μέσου αδροποίησης βασίζεται στην ιδιότητά του να μειώνει τις διαστάσεις των δεδομένων εισόδου σε έναν χώρο λιγότερων διαστάσεων και από αυτά μέσω του Αποκωδικοποιητή να επανακατασκευάζει τα αρχικά δεδομένα. Επομένως,

αν χρησιμοποιηθεί ως είσοδος του Variational Autoencoder ο χώρος απεικονίσεων (συντεταγμένες ατόμων) από τις προσομοιώσεις των χημικών συστημάτων που συζητήθηκαν στις προηγούμενες ενότητες, τότε ο Κωδικοποιητής τα αντιστοιχίζει σε έναν χώρο λιγότερων διαστάσεων, όπως ακριβώς συμβαίνει και στην διαδικασία της αδροποίησης[67]. Αλλά η αντιστοίχιση πρέπει να γίνει με τέτοιον τρόπο, ώστε ο μειωμένος σε διαστάσεις χώρος απεικονίσεων (που αποτελεί τον ενδιάμεσο χώρο του VAE) να μπορεί μέσω του Αποκωδικοποιητή να μας δώσει ξανά τον αρχικό χώρο. Δηλαδή μέσω του Κωδικοποιητή αναζητούμε έναν ταυστή ο οποίος μπορεί να προβάλλει τις συντεταγμένες των ατόμων σε έναν χώρο λιγότερων διαστάσεων και μέσω του Αποκωδικοποιητή έναν ταυστή που με βάση τα δεδομένα μειωμένων διαστάσεων μπορεί να επανακατασκευάσει τις αρχικές συντεταγμένες [67]. Επομένως, με το πέρας μίας επιτυχούς εκπαίδευσης του μοντέλου, θα έχει βρεθεί μία αντιστοίχιση και μία αντίστροφη αντιστοίχιση για το σύστημα που εξετάζουμε.

### 5.2.1 Η μείωση διαστάσεων μέσω του Κωδικοποιητή

Έστω  $\mathbf{E}$  ο ταυστής (συνάρτηση κωδικοποίησης) του Κωδικοποιητή. Ο ταυστής αυτός είναι γραμμικός και πραγματοποιεί μία προβολή της μορφής:

$$\mathbf{E} : \mathbb{R}^{3N} \rightarrow \mathbb{R}^{3n}, \quad n, N \in \mathbb{N}^*, \quad n < N \quad (5.1)$$

όπου  $N$  ο αριθμός των ατόμων στην πλήρως ατομιστική αναπαράσταση και  $n$  ο αριθμός των αδροποιημένων μονάδων που αντικαθιστούν τα άτομα στην αδροποιημένη αναπαράσταση. Προφανώς ο αριθμός των αδροποιημένων μονάδων είναι πάντα μικρότερος από τον αριθμό των ατόμων στην πλήρως ατομιστική αναπαράσταση, αφού με την αδροποίηση θέλουμε να πετύχουμε μείωση των βαθμών ελευθερίας. Ο  $\mathbf{E}$  μπορεί να γραφεί ισοδύναμα με τον εξής τρόπο με μορφή πίνακα:

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} E_{11} & E_{12} & \dots & \dots & E_{1N} \\ E_{21} & E_{22} & \dots & \dots & E_{2N} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ E_{n1} & \dots & \dots & \dots & E_{nN} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{E} \in \mathbb{R}^{n \times N}$$

Έστω ότι οι συντεταγμένες που εισάγουμε στον Κωδικοποιητή συμβολίζονται με  $\mathbf{x}$ . Αν έχουμε  $N$  άτομα, όπως υποτέθηκε και παραπάνω, τότε ισχύει ότι  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{3N}$ , αφού για κάθε άτομο έχουμε 3 καρτεσιανές συντεταγμένες. Έστω ότι



οι συντεταγμένες των αδροποιημένων μονάδων (ή του λανθάνοντος χώρου του VAE) συμβολίζονται με  $\mathbf{z}$ , όπου, αν ο αριθμός των αδροποιημένων μονάδων είναι  $n$ , τότε ισχύει  $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^{3n}$ . Η  $i$ -στη αδροποιημένη μονάδα έχει συντεταγμένες οι οποίες δίνονται από την σχέση:

$$\mathbf{z}_i = E(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^N E_{ij} \cdot \mathbf{x}_j, \quad \mathbf{z}_i \in \mathbb{R}^3 \quad (5.2)$$

όπου  $\mathbf{x}_i$  οι συντεταγμένες ή το διάνυσμα θέσης του  $i$ -στού ατόμου. Οι συντεταγμένες των  $N$  ατόμων αρχικά είναι:

$$\mathbf{x} = (x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \dots, x_N, y_N, z_N) = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) \in \mathbb{R}^{3N}$$

όπου με  $\mathbf{x}$  συμβολίζονται τα διανύσματα συντεταγμένων ενώ με  $x$  η πρώτη καρτεσιανή συντεταγμένη).

Προκειμένου να γίνει ο πολλαπλασιασμός με τον ταυστή του Κωδικοποιητή οι συντεταγμένες οργανώνονται σε έναν  $N \times 3$  πίνακα της μορφής:

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 & y_1 & z_1 \\ x_2 & y_2 & z_2 \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ x_N & y_N & z_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{x}_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \mathbf{x}_N \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{N \times 3} \quad (5.3)$$

Από τη σχέση (5.2) συμπεραίνουμε ότι, για να πάρουμε τις συντεταγμένες για την  $i$ -στη αδροποιημένη μονάδα, αρκεί να πολλαπλασιάσουμε την  $i$ -στη γραμμή του πίνακα  $\mathbf{E}$  με τον πίνακα  $\mathbf{x}$ :

$$\mathbf{z}_i = E(\mathbf{x}) = \mathbf{E}_i \cdot \mathbf{x}, \quad \mathbf{z}_i \in \mathbb{R}^3 \quad (5.4)$$

Ένα πολύ σημαντικό χαρακτηριστικό του πίνακα  $\mathbf{E}$  είναι ότι ικανοποιεί την εξής σχέση:

$$\sum_{j=1}^N E_{ij} = 1 \quad (5.5)$$

Δηλαδή, οι γραμμές του είναι κανονικοποιημένες στην μονάδα γεγονός που μας επιτρέπει να ερμηνεύουμε τα  $E_{ij}$  ως αριθμητικούς συντελεστές που επενεργούν στα διανύσματα θέσης των ατόμων, για να παραγάγουν τα διανύσματα θέσης των αδροποιημένων μονάδων και εκφράζουν το ποσοστό συνεισφοράς του κάθε ατόμου σε κάθε αδροποιημένη μονάδα. Επομένως, επιλέγεται μία γεωμετρική προσέγγιση για την διαδικασία της αδροποίησης, όπως αυτή που περιγράφεται στο υποκεφάλαιο 2.6.1.

Σημειώνεται, πως για την απεικόνιση των πινάκων κωδικοποίησης και την διεξαγωγή των πινάκων συνδεσιμότητας μεταξύ των αδροποιημένων μονάδων, χρησιμοποιείται ο πίνακας  $\mathbf{E}$ , αλλά με κανονικοποίηση με αντίστοιχη άθροιση πάνω στα  $i$ , γεγονός που μας επιτρέπει να ερμηνεύουμε τα  $E_{ij}$  ως πιθανότητες για ανάθεση ενός ατόμου  $j$  σε κάθε αδροποιημένη μονάδα  $i$ . Επίσης, μέσω της πιθανοτικής αυτής ερμηνείας των  $E_{ij}$ , μπορούμε να διασφαλίσουμε την ανάθεση κάθε ατόμου σε μία και μοναδική αδροποιημένη μονάδα, επιλέγοντας την ανάθεση του σε αυτήν, που αντιστοιχεί στην μεγαλύτερη πιθανότητα. Η συνθήκη κανονικοποίησης σε αυτή την περίπτωση είναι:

$$\sum_{i=1}^n E_{ij} = 1 \quad (5.6)$$

### 5.2.2 Οι παράμετροι του Κωδικοποιητή

Ο πίνακας  $\mathbf{E}$  λειτουργεί ως **πίνακας βαρών** για τον Κωδικοποιητή. Δηλαδή οι συντεταγμένες που εισάγονται στον Κωδικοποιητή ως δεδομένα συνδέονται με τους νευρώνες του Κωδικοποιητή με βάρη που δίνονται από τον  $\mathbf{E}$ . Ο αριθμός των νευρώνων του Κωδικοποιητή είναι ίσος με τον αριθμό των αδροποιημένων μονάδων. Αυτό μπορεί να γίνει κατανοητό και παρατηρώντας τις σχέσεις (5.2) και (5.4) οι οποίες αποτελούν χαρακτηριστικές εκφράσεις σταθμισμένης άθροισης των δεδομένων εισόδου πριν εισέλθουν σε έναν νευρώνα όπως περιγράφεται και από την εξίσωση (3.3). Ο Κωδικοποιητής που χρησιμοποιείται αποτελείται από ένα στρώμα νευρώνων. Οι τιμές των βαρών  $E_{ij}$  γράφονται με την βοήθεια κάποιων στοχαστικών παραμέτρων  $c_{ij}$  με τον τρόπο που ακολουθεί ώστε να διασφαλίζεται η συνθήκη κανονικοποίησης τους πάνω στα  $j$  :

$$E_{ij} = \frac{c_{ij}}{\sum_{i=1}^N c_{ij}} \quad (5.7)$$

Όπου τα  $c_{ij}$  λαμβάνονται μέσω της επαναπαραμετροποίησης Gumbel-Softmax και κανονικοποιούνται. Η επαναπαραμετροποίηση Gumbel-Softmax γίνεται επειδή οι παράμετροι που θα επιλεγόντουσαν θα ήταν καθαρά στοχαστικοί και ο πιθανοτικός τους χαρακτήρας δεν θα επέτρεπε

την διαδικασία της οπισθοδιάδοσης να λάβει μέρος και έτσι θα ήταν αδύνατη η εκπαίδευση του νευρωνικού δικτύου [68]. Πρόκειται περί ενός τεχνάσματος επαναπαραμετροποίησης που λειτουργεί με παρόμοια λογική με αυτό το οποίο αναλύθηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο. Ταυτόχρονα, επαναπαραμετροποίηση Gumbel-Softmax Οι παράμετροι  $c_{ij}$  γράφονται [67]:

$$c_{ij} = \frac{\exp \left[ \frac{\log \phi_{ij} + g_{ij}}{\tau} \right]}{\sum_{i=1}^n \exp \left[ \frac{\log \phi_{ij} + g_{ij}}{\tau} \right]} \quad (5.8)$$

όπου η παράμετρος  $\phi_{ij}$  σχετίζεται με την πιθανότητα ενός ατόμου  $j$  να ανήκει σε μία αδροποιημένη μονάδα  $i$ . Ωστόσο δεν είναι στοχαστική παράμετρος. Παίρνει μία τυχαία αρχική τιμή, όμως στην συνέχεια η τιμή της διαμορφώνεται κατά την εκπαίδευση έτσι ώστε να ελαχιστοποιείται η συνάρτηση κόστους. Το  $g_{ij}$  είναι μία παράμετρος η οποία ακολουθεί την κατανομή Gumbel. Η κατανομή Gumbel σχηματίζεται από την ομοιόμορφη κατανομή στο διάστημα  $(0,1)$  με τον παρακάτω τρόπο:

$$g_{ij} = -\log [-\log (u_{ij})] \quad (5.9)$$

όπου  $u_{ij}$  η ομοιόμορφη κατανομή στο διάστημα  $(0,1)$ . Η παράμετρος  $\tau$  χαρακτηρίζεται ως "παράμετρος θερμοκρασίας" και η τιμή της μικραίνει βημαστικά κατά την διάρκεια της εκπαίδευσης, καθιστώντας τις κατανομές των πιθανοτήτων συμμετοχής των ατόμων στις αδροποιημένες μονάδες (που ορίζονται από κάθε στήλη του πίνακα  $\mathbf{E}$ ) πιο στενές.

Σημειώνεται πως δεν γίνεται χρήση κάποιας συνάρτησης ενεργοποίησης από τον Κωδικοποιητή (ή ισοδύναμα γίνεται χρήση γραμμικής συνάρτησης ενεργοποίησης με κλίση 1,  $g(x) = x$ ).

### 5.2.3 Η επιστροφή στις αρχικές συντεταγμένες μέσω του Αποκωδικοποιητή

Μετά την κωδικοποίηση των ατομιστικών συντεταγμένων  $\mathbf{x}$  από τον Κωδικοποιητή, παίρνουμε τις συντεταγμένες των αδροποιημένων μονάδων  $\mathbf{z}$  στον λανθάνοντα χώρο. Ο Αποκωδικοποιητής, κάνοντας χρήση των  $\mathbf{z}$ , καλείται να ανακατασκευάσει τις αρχικές συντεταγμένες με όσο μεγαλύτερη ακρίβεια γίνεται. Επομένως, ο Αποκωδικοποιητής που θα συμβολίζουμε ως  $\mathbf{D}$  πραγματοποιεί μία αντίστροφη αντιστοίχιση σε σχέση με αυτή του

Κωδικοποιητή, η οποία είναι της μορφής:

$$D : \mathbb{R}^{3n} \rightarrow \mathbb{R}^{3N}$$

Ο τανυστής του Αποκωδικοποιητή μπορεί να γραφτεί και αυτός με την μορφή πίνακα ως εξής:

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} D_{11} & D_{12} & \dots & \dots & D_{1n} \\ D_{21} & D_{22} & \dots & \dots & D_{2n} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ D_{N1} & \dots & \dots & \dots & D_{Nn} \end{pmatrix}, \mathbf{D} \in \mathbb{R}^{N \times n}$$

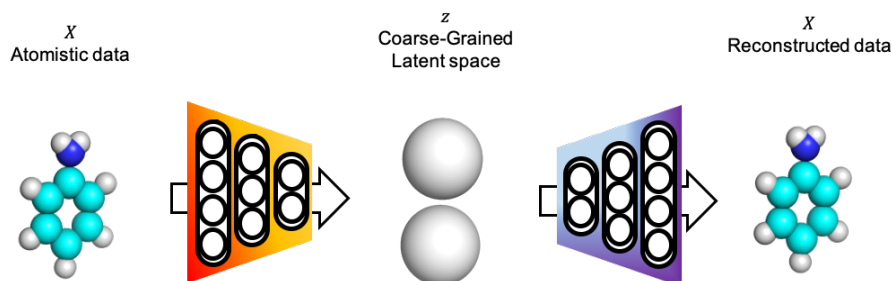
Η πράξη που πραγματοποιεί ο Αποκωδικοποιητής πάνω στις συντεταγμένες των αδροποιημένων μονάδων κατά αναλογία με τον Κωδικοποιητή και την εξίσωση (5.4) είναι:

$$\mathbf{x}'_i = \mathbf{D}(\mathbf{z}) = \sum_{j=1}^n D_{ij} \mathbf{z}_j = \mathbf{D}_i \cdot \mathbf{z}, \quad \mathbf{x}'_i \in \mathbb{R}^3 \quad (5.10)$$

όπου δηλαδή για να πάρουμε την επανακατασκευασμένη συντεταγμένη του  $i$ -στου ατόμου πρέπει να πολλαπλασιάσουμε την  $i$ -στη γραμμή του πίνακα  $\mathbf{D}$  με έναν πίνακα που είναι ανάλογος με την σχέσης (5.3) αλλά περιλαμβάνει τα διανύσματα συντεταγμένων της αδροποιημένης αναπαράστασης τοποθετημένα σε μία στήλη (άρα είναι  $n \times 3$  διαστάσεων). Επιθυμούμε μετά το πέρας της εκπαίδευσης του VAE οι συντεταγμένες -διανύσματα θέσης- στην έξοδο του Αποκωδικοποιητή να είναι ακριβώς ίδια με τα αρχικά. Έτσι θα έχουμε βρει μία αντιστοίχιση αδροποίησης που θα μειώνει τους βαθμούς ελευθερίας του αρχικού συστήματος με τρόπο τέτοιο ώστε να μπορούμε από την αδροποιημένη αναπαράσταση να αναπαράξουμε ακριβώς την πλήρη ατομιστική αναπαράσταση! Δηλαδή ταυτόχρονα με την αντιστοίχιση βρίσκουμε και μία κατάλληλη αντίστροφη αντιστοίχιση.

Προφανώς ο πίνακας  $\mathbf{D}$  λειτουργεί ως πίνακας βαρών για τον Αποκωδικοποιητή όπως και ο  $\mathbf{E}$  για τον Κωδικοποιητή. Με τα βάρη του συνδέει τις συντεταγμένες των αδροποιημένων μονάδων με τους νευρώνες, που είναι ίσοι σε αριθμό με τα άτομα της ατομιστικής αναπαράστασης. Όπως στον Κωδικοποιητή έτσι και στον Αποκωδικοποιητή δεν γίνεται χρήση κάποιας συνάρτησης ενεργοποίησης.

Συνοπτικά, η βασική λειτουργία του συγκεκριμένου μοντέλου μηχανικής μάθησης που αναλύθηκε στις τελευταίες ενότητες, μπορεί να περιγραφεί οπτικά και διαισθητικά από την παρακάτω εικόνα:



Εικόνα 5.5: Αδροποίηση συστήματος και επιστροφή στην ίδια ατομιστική αναπαράσταση[67]

### 5.2.4 Η συνάρτηση κόστους

Προκειμένου να πραγματοποιηθεί η εκπαίδευση του μοντέλου μας χρειάζεται να ορίσουμε μία συνάρτηση κόστους, η οποία θα περιέχει όλη την πληροφορία που χρειάζεται έτσι ώστε η ελαχιστοποίησή της να συνεπάγεται την επίλυση του προβλήματος που μας απασχολεί. Μία συνηθισμένη έκφραση συνάρτησης κόστους για τους VAEs είναι η MSE (3.8). Η επιλογή της είναι αρκετά διαισθητική αφού ο τελικός σκοπός μας είναι τα ανακατασκευασμένα  $\mathbf{x}'$  στην έξοδο να είναι όσο πιο κοντά γίνεται με τα  $\mathbf{x}$  που δίνουμε στην είσοδο. Οπότε μία ορθή επιλογή είναι η ελαχιστοποίηση της νόρμας της διαφοράς τους η οποία δεν είναι τίποτα άλλο παρά η συνάρτηση τετραγωνικού σφάλματος [67]. Επομένως η συνάρτηση κόστους για το σφάλμα επανακατασκευής (reconstruction loss) είναι:

$$\mathcal{L}_{\text{reconstruction}} = \mathbb{E}_{\mathbf{x}} \mathbb{E}_{g \sim \text{Gumbel}(0,1)} (D(E(\mathbf{x}, g, \tau)) - \mathbf{x})^2 = \mathbb{E}_{\mathbf{x}} \mathbb{E}_{g \sim \text{Gumbel}(0,1)} (\mathbf{x}' - \mathbf{x})^2 \quad (5.11)$$

Η παραπάνω έκφραση αφορά μόνο το μέρος της συνάρτησης κόστους που συνδέεται με την επανακατασκευή των ίδιων ακριβώς ατομιστικών συντεταγμένων που δίνουμε στην είσοδο. Όμως, στο πρόβλημά μας έχουμε να κάνουμε με χημικά συστήματα και από το μοντέλο πρέπει να διασφαλίζεται η ρεαλιστικότερη δυνατή περιγραφή από φυσικής άποψης. Επομένως, χρειάζεται ένας επιπλέον όρος στην συνάρτηση κόστους, ο οποίος σχετίζεται με τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ατόμων του συστήματος. Για τον σκοπό αυτό γίνεται χρήση των δυνάμεων, οι οποίες αποθηκεύτηκαν κατά την προσομοίωση των χημικών συστημάτων. Προηγούμενες δημοσιεύσεις έχουν δείξει ότι η μάθηση διευκολύνεται σε φυσικά συστήματα τα οποία έχουν ομαλές και λείες υπερεπιφάνειες δυνάμεων[69]. Λαμβάνοντας υπόψιν τα παραπάνω, στην έκφραση της συνάρτησης κόστους προστίθεται ένας όρος που περιλαμβάνει το τετράγωνο του μέτρου των δυνάμεων σε κάθε στιγμιότυπο

(κατ' αναλογία με την έκφραση κόστους για τις  $L_1$  και  $L_2$  κανονικοποιήσεις (3.8)). Η μορφή της συνολικής συνάρτησης κόστους μετά από την προσθήκη του όρου των δυνάμεων είναι:

$$\mathcal{L}_{\text{total}} = \mathcal{L}_{\text{reconstruction}} + \rho \mathcal{L}_{\text{forces}} = \frac{1}{N} \mathbb{E}_{\mathbf{x}} [(\mathbf{D}(\mathbf{E}(\mathbf{x})) - \mathbf{x})^2 + \rho \cdot F^2] \quad (5.12)$$

όπου το  $\rho \in [0, 1]$  είναι μία παράμετρος που ρυθμίζει το πόσο βάρος δίνουμε στον όρο των δυνάμεων. Όσο η τιμή της συνάρτησης κόστους μειώνεται τόσο πιο ακριβής είναι η επανακατασκευή των ατομιστικών συντεταγμένων  $\mathbf{x}$  στην έξοδο, ενώ ταυτόχρονα παίρνουμε μία διαμόρφωση στην οποία οι δυνάμεις είναι ομαλοποιημένες, δηλαδή έχουν λεία υπερεπιφάνεια. Επιπλέον, όσο η τιμή της συνάρτησης κόστους τείνει προς το μηδέν τόσο πιο ξεκάθαρη είναι η κατανομή των ατόμων σε αδροποιημένες μονάδες. Δηλαδή, για μηδενική τιμή της συνάρτησης κόστους, η τιμή  $E_{ij}$  του  $\mathbf{E}$  που εκφράζει την πιθανότητα ενός ατόμου  $j$  να ανήκει σε μία αδροποιημένη μονάδα  $i$  είναι ή 0 ή 1 για κάθε  $i$  και για κάθε  $j$ .

### 5.3 Η μεθοδολογία εκπαίδευσης

Το υπλογιστικό μοντέλο μηχανικής μάθησης που αναπτύχθηκε και εφαρμόστηκε, είχε ως βάση την διαδικασία της αδροποίησης που προτάθηκε πρόσφατα από τους Wang και Gómez-Bombarelli [67]. Στην μεθοδολογία που προτάθηκε στην εργασία αυτή, πραγματοποιήθηκαν ποικίλες προσθήκες και αλλαγές με σκοπό την αποτελεσματικότερη και πιο πρακτική λειτουργία του αλγορίθμου, τόσο στις τεχνικές που χρησιμοποιούνται όσο και στον εμπλουτισμό και στον τρόπο επεξεργασίας των αποτελεσμάτων που προκύπτουν. Πραγματοποιήθηκαν επίσης προσθήκες που ανοίγουν τον δρόμο για την γενίκευση της μεθοδολογίας και χρήση της σε περισσότερα χημικά είδη με μεγαλύτερη έμφαση στην λεπτομέρεια του κάθε συστήματος.

Συνεχίζοντας, θα γίνει μία σύντομη και γενική περιγραφή της μεθοδολογίας που ακολουθείται. Αρχικά, δίνονται αρχικές τιμές στα μεγέθη  $\tau$ ,  $D_{ij}$  και  $\phi_{ij}$ . Το μέγεθος  $\tau$  μειώνεται βηματικά κατά την διάρκεια της εκπαίδευσης του νευρωνικού δικτύου, επομένως επιλέγεται και το βήμα μείωσης του. Προχωρώντας γίνεται επιλογή τυχαίων στιγμιοτύπων του συστήματος από τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων και από το κάθε στιγμιότυπο χρησιμοποιούνται τα διανύσματα θέσεων και τα διανύσματα δυνάμεων. Στη συνέχεια, γίνεται μία δειγματοληψία για τις παραμέτρους  $g_{ij}$  από την κατανομή Gumbel στο διάστημα (0,1) ( $g_{ij} \sim \text{Gumbel}(0,1)$ ), οι

οποίες χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό των  $c_{ij}$  και κατ επέκταση των βαρών  $E_{ij}$  του Κωδικοποιητή. Στο επόμενο βήμα γίνεται υπολογισμός της βαθμίδας της συνάρτησης κόστους με την μέθοδο της οπισθοδιάδοσης ως προς τις παραμέτρους του Κωδικοποιητή και τον Αποκωδικοποιητή  $\nabla_{D_{ij}, \phi_{ij}} \mathcal{L}$ . Ο υπολογισμός της βαθμίδας είναι αναγκαίος για την εφαρμογή επαναληπτικών διαδικασιών που ελαχιστοποιούν την συνάρτηση κόστους. Τέλος, ανανεώνονται οι παράμετροι του Κωδικοποιητή και του Αποκωδικοποιητή με βάση την επαναληπτική διαδικασία που ακολουθείται και μειώνεται βηματικά η τιμή του  $\tau$ . Η διαδικασία που περιγράφηκε επαναλαμβάνεται μέχρι να επιτευχθεί τιμή συνάρτησης κόστους που να πληροί το κριτήριο σύγκλισης ή μέχρι να ικανοποιηθεί κάποια συνθήκη πρόωρου τερματισμού.

Χτίζοντας πάνω στην βάση που τέθηκε από την γενική μεθοδολογία που περιγράφηκε, μαζί με την ερευνητική ομάδα μας που συστάθηκε για την διερεύνηση του προβλήματος και αποτελείται από τους Δρ. Νίκη Βέργαδου, (Εργαστήριο Μοριακής Θερμοδυναμικής και Μοντελοποίησης Υλικών του ΕΚΕΦΕ "Δημόκριτος") Δρ. Γιώργο Γιαννακόπουλο (Ινστιτούτο Πληροφορικής Τηλεπικοινωνιών Δημόκριτος) και Dr Eleonora Ricci (University of Bologna), μετά από συζήτηση του προβλήματος και λήψη ομαδικών αποφάσεων, πραγματοποιήθηκαν οι ακόλουθες προσθήκες και τροποποιήσεις στην αρχική μεθοδολογία :

i. Προσθήκη δύο νέων σχημάτων βελτιστοποίησης υπερπαραμέτρων που επιτρέπουν την αναζήτηση πλέγματος με σκοπό την επιλογή των βέλτιστων τιμών (Βλ. εδάφιο 5.3.1).

ii. Ορισμός νέων συναρτήσεων κόστους και κριτηρίων τερματισμού με σκοπό την αποτελεσματικότερη πιο επιτυχημένη εκπαίδευση του VAE (Βλ. εδάφιο 5.3.2)

iii. Κατασκευή ενός random seed που ελέγχει αν θα πραγματοποιηθεί ή όχι τυχαία αρχικοποίηση των παραμέτρων του VAE με σκοπό τον έλεγχο της επίδρασης που έχει η τυχαιότητα στα τελικά αποτελέσματα που προκύπτουν. (Βλ. εδάφιο 5.3.2)

iv. Αλλαγή του αλγορίθμου βελτιστοποίησης από Adam σε mini-batch Stochastic Gradient Descent μετά από ενδελεχή διερεύνηση πολλών από τους διαθέσιμους αλγορίθμους. (Βλ. εδάφιο 5.3.2)

v. Υλοποίηση μίας μεθόδου για καθορισμό των συνδέσεων μεταξύ των αδροποιημένων μονάδων. (Βλ. εδάφιο 5.4)

vi. Προσθήκη περιστροφών στα αρχικά στιγμιότυπα που χρησιμοποιούνται για την εκπαίδευση του VAE με σκοπό την διερεύνηση της επιρροής τους στα τελικά αποτελέσματα. (Βλ. εδάφιο 5.5)

vii. Υλοποίηση μίας μεθόδου για έλεγχο της τυχαιότητας των περιστροφών σε κάθε νέα εκτέλεση του αλγορίθμου. (5.5)

Μέρος της υλοποίησης στον κώδικα των τροποποιήσεων πραγματοποιήθηκε και από την Δρ. Eleonora Ricci ( i. , ii. και vi. ) και από τον Δρ. Γεώργιο Γιαννακόπουλο ( ii. και iii. )

### 5.3.1 Υλοποίηση σχήματος βελτιστοποίησης υπερπαραμέτρων

Οι υπερπαραμέτροι ενός νευρωνικού δικτύου είναι το σύνολο των μεγεθών τα οποία ελέγχουν την διαδικασία της εκπαίδευσής του. Από την άλλη, οι παράμετροι ενός νευρωνικού δικτύου είναι τα μεγέθη των οποίων η τιμή ρυθμίζεται κατά την διάρκεια της εκπαίδευσης. Στην περίπτωση του μοντέλου που παρουσιάζεται σε αυτή την εργασία, οι υπερπαραμέτροι είναι ο ρυθμός μάθησης (learning rate), το μέγεθος παρτίδων (batch size), ο ρυθμός υποβάθμισης ή ρυθμός απόσβεσης (decay ratio), ο αριθμός των νευρώνων του Κωδικοποιητή , ο αριθμός των επαναλήψεων ή εποχών (epochs) και το  $\rho$  στην συνάρτηση κόστους (5.12).

Το learning rate είναι μία παράμετρος η οποία καθορίζει το μέγεθος του βήματος που θα γίνει προς την κατεύθυνση της βαθμίδας κατά την εκτέλεση ενός επαναληπτικού αλγορίθμου βελτιστοποίησης. Όσο μεγαλώνει η τιμή του τόσο πιο πολύ κινούμαστε προς την κατεύθυνση της βαθμίδας σε κάθε επανάληψη. Για παράδειγμα στην εξίσωση (3.17) που περιγράφει την επαναληπτική διαδικασία της Stochastic Gradient Descent, το learning rate αντιστοιχεί στο  $\gamma_k$ .

Το μέγεθος παρτίδας ή batch size αναφέρεται στον αριθμό των δεδομένων (από το σύνολο δεδομένων) χρησιμοποιούνται από το νευρωνικό δίκτυο για την διαδικασία της εκπαίδευσης σε ένα βήμα.

Το decay ratio είναι μία υπερπαραμέτρος που συνδέεται με το μέγεθος  $\tau$ . Η αύξηση του προκαλεί μείωση στο  $\tau$  και επομένως, όπως προκύπτει από τις εξισώσεις (5.7) και (5.8) κάνει την κατανομή πιθανοτήτων συμμετοχής των ατόμων στις αδροποιημένες μονάδες ( $E_{ij}$ ) στενότερη. Προφανώς, η μείωσή της



έχει αντίθετο αποτέλεσμα.

Τέλος η υπερπαράμετρος  $\rho$  εκφράζει το σχετικό βάρος που έχει ο όρος των δυνάμεων στην συνάρτηση κόστους. Όσο μεγαλύτερη είναι η τιμή της παραμέτρου αυτής, τόσο μεγαλύτερη είναι και η συνεισφορά των δυνάμεων στο συνολικό κόστος.

Ο κώδικας της παρούσας εργασίας διαμορφώθηκε έτσι ώστε, για κάθε υπερπαράμετρο, να μπορεί ο χρήστης να επιλέγει ένα διακριτό διάστημα με τιμές σε ένα εξωτερικό αρχείο οι οποίες διαβάζονται και χρησιμοποιούνται κατά την λειτουργία του βασικού αλγορίθμου. Η επιλογή ενός κατάλληλου συνόλου υπερπαραμέτρων σε ένα νευρωνικό δίκτυο είναι εξαιρετικά κρίσιμη για την διαδικασία της εκπαίδευσης του. Για τον σκοπό αυτό, έγινε χρήση δύο σχημάτων βελτιστοποίησης των έξι υπερπαραμέτρων του προβλήματος πραγματοποιώντας αναζήτηση πάνω σε ένα πλέγμα με βάση το εύρος των υπερπαραμέτρων (grid search).

Το πρώτο σχήμα βελτιστοποίησης, χωρίζει τις έξι υπερπαραμέτρους σε δύο τριάδες και έτσι η διαδικασία της εκπαίδευσης χωρίζεται σε δύο γύρους. Η πρώτη τριάδα περιλαμβάνει το learning rate, το batch size και το decay ratio και η δεύτερη τον αριθμό των νευρώνων του Κωδικοποιητή, τον αριθμό των επαναλήψεων και το  $\rho$ . Στον πρώτο από τους δύο γύρους της εκπαίδευσης, δοκιμάζονται όλοι οι συνδυασμοί μεταξύ των υπερπαραμέτρων της πρώτης τριάδας και επιλέγεται αυτή η οποία καταλήγει σε χαμηλότερη τιμή της συνάρτησης κόστους. Έπειτα, συνεχίζεται η εκπαίδευση δοκιμάζοντας όλους τους πιθανούς συνδυασμούς τιμών από την δεύτερη τριάδα, κρατώντας σταθερές τις βέλτιστες τιμές της πρώτης τριάδας. Τέλος, από όλους τους συνδυασμούς της δεύτερης τριάδας κρατάμε αυτόν ο οποίος ελαχιστοποιεί την συνάρτηση κόστους. Έτσι, διαθέτουμε πλέον βέλτιστες τιμές και για τις έξι υπερπαραμέτρους του νευρωνικού δικτύου.

Το δεύτερο σχήμα βελτιστοποίησης δοκιμάζει απευθείας όλους τους πιθανούς συνδυασμούς μεταξύ των έξι υπερπαραμέτρων, χωρίς να τις χωρίζει σε επιμέρους σύνολα. Προφανώς διατηρείται ο συνδυασμός ο οποίος δίνει την χαμηλότερη τιμή για τη συνάρτηση κόστους.

Το κύριο πλεονέκτημα του πρώτου από τα δύο σχήματα που περιγράφηκαν είναι ότι μας δίνει την δυνατότητα να εξερευνήσουμε περισσότερες υπερπαραμέτρους, κερδίζοντας αρκετό υπολογιστικό χρόνο. Βέβαια, βασίστηκε στην διαισθητική υπόθεση ότι οι παράμετροι της πρώτης τριάδας πιθανώς παρουσιάζουν μικρότερη στατιστική συσχέτιση με τις

παραμέτρους της δεύτερης τριάδας όσον αφορά την επίδρασή τους στην τιμή της συνάρτησης κόστους . Ακολουθεί ένα παράδειγμα που δικαιολογεί τον ισχυρισμό ότι με το πρώτο σχήμα βελτιστοποίησης γλυτώνουμε υπολογιστικό κόστος σε σχέση με το δεύτερο. Αν έχουμε δύο πιθανές τιμές για κάθε υπερπαραμέτρο, τότε με βάση το πρώτο σχήμα, οι έξι υπερπαραμέτροι χωρίζονται σε δύο τριάδες. Στον πρώτο γύρο δοκιμάζονται όλες οι τιμές τις πρώτης τριάδας μεταξύ τους. Οι πιθανοί συνδυασμοί τους είναι  $2 \times 2 \times 2 = 8$ . Το ίδιο ισχύει και για τον δεύτερο γύρο, επομένως όταν περνάμε σε αυτόν υπάρχουν άλλοι οκτώ συνδυασμοί. Άρα, στο σύνολο θα έχουμε δεκαέξι συνδυασμούς. Αν έχουμε δύο πιθανές τιμές για κάθε υπερπαραμέτρο με το δεύτερο σχήμα όλοι οι πιθανοί συνδυασμοί που προκύπτουν είναι  $2 \times 2 \times 2 \times 2 \times 2 \times 2 = 2^6 = 64$ . Άρα έχουμε 64 πιθανούς συνδυασμούς, δηλαδή αναμένεται η εκτέλεση του αλγορίθμου με το δεύτερο σχήμα να διαρκέσει τετραπλάσιο χρόνο. Ωστόσο, σε αντίθεση με το πρώτο σχήμα, το δεύτερο είναι απαλλαγμένο από το πρόβλημα των στατιστικών εξαρτήσεων μεταξύ των υπερπαραμέτρων αφού δοκιμάζει όλους τους πιθανούς τρόπους που συνδυάζονται όλες οι έξι υπερπαραμέτροι.

Ως συνέχεια των προηγούμενων τροποποιήσεων, το σύνολο δεδομένων που διαθέτουμε για την εκπαίδευση του μοντέλου χωρίζεται σε τρία επιμέρους σύνολα (sets): το training set, το dev set και το test set. Για κάθε συνδυασμό υπερπαραμέτρων, η βελτιστοποίηση του νευρωνικού δικτύου πραγματοποιείται αρχικά στο train set. Προχωρώντας, το εκπαιδευμένο νευρωνικό δίκτυο "δοκιμάζεται" αν λειτουργεί σωστά με τα δεδομένα του dev set, όπου γίνεται και η επιλογή του καλύτερου συνδυασμού υπερπαραμέτρων. Τέλος, με τις υπερπαραμέτρους που επιλέχθηκαν από το dev set, γίνεται μία τελευταία δοκιμή στο τρίτο σύνολο δεδομένων, το test set.

### 5.3.2 Υλοποίηση επεκτάσεων στην επαναληπτική διαδικασία

Για την εκπαίδευση του νευρωνικού δικτύου κατασκευάστηκε μία συνάρτηση που επιτελεί την λειτουργία ενός βρόγχου (λούπας) εκπαίδευσης. Στην κατασκευή μίας επαναληπτικής διαδικασίας εκπαίδευσης ενός νευρωνικού δικτύου, πρέπει να οριστεί μία συνάρτηση κόστους, καθώς επίσης να συμπεριληφθούν όλες οι απαραίτητες πληροφορίες για την αποτελεσματικότερη δυνατή ελαχιστοποίηση της.

Σαν πρώτο βήμα, είναι αναγκαίο να γίνει επιλογή μίας κλειστής έκφρασης

για την συνάρτηση κόστους. Στα πρώτα στάδια της έρευνας του προβλήματος χρησιμοποιήθηκε ως συνάρτηση κόστους η εξίσωση (5.12). Στην συνέχεια κρίθηκε σκόπιμο να επιλεγούν και άλλες μορφές συναρτήσεων κόστους οι οποίες βασίζονται στη συγκεκριμένη έκφραση, αλλά είτε εξετάζουν κάποιες ακραίες περιπτώσεις της, είτε διερευνούν την επίδραση που έχουν συγκεκριμένοι μετασχηματισμοί των όρων της στο τελικό αποτέλεσμα. Οι εκφράσεις που διερευνήθηκαν είναι πέντε στον αριθμό και παρατίθενται παρακάτω:

**Πρώτη συνάρτηση κόστους:**

$$\mathcal{L}_1 = \mathcal{L}_{\text{reconstruction}} + \rho \mathcal{L}_{\text{forces}} = \frac{1}{N} \mathbb{E}_{\mathbf{x}} [(D(E(\mathbf{x})) - \mathbf{x}))^2 + \rho \cdot F^2] \quad (5.13)$$

Πρόκειται για την εξίσωση (5.12). Ωστόσο λειτουργεί με βάση ένα κριτήριο. Μόλις ξεκινάει η εκπαίδευση του μοντέλου ο μόνος όρος ο οποίος είναι ενεργός είναι αυτός που αφορά την επανακατασκευή του  $\mathbf{x}$ , δηλαδή το  $\mathcal{L}_{\text{reconstruction}}$ . Το κριτήριο για να αρχίσει να λαμβάνει υπόψιν και τον όρο που σχετίζεται με τις δυνάμεις ποσοτικοποιείται με έναν αριθμό που ονομάζεται switch (έστω  $s$ ) και πιο συγκεκριμένα πρέπει να ισχύει  $\mathcal{L}_{\text{reconstruction},(i+1)} - \mathcal{L}_{\text{reconstruction},(i)} < s$ . Επομένως, όσο πιο μικρή τιμή επιλεγεί για το  $s$  τόσο πιο μικρό θα έχει γίνει το σφάλμα της επανακατασκευής του  $\mathbf{x}$  την στιγμή που προστίθεται ο όρος των δυνάμεων.

**Δεύτερη συνάρτηση κόστους:**

Η δεύτερη συνάρτηση κόστους εξετάζει την ακραία περίπτωση η παράμετρος  $\rho$  να είναι ίση με μηδέν, δηλαδή η συνάρτηση κόστους να είναι της μορφής :

$$\mathcal{L}_2 = \mathcal{L}_{\text{reconstruction}} = \frac{1}{N} \mathbb{E}_{\mathbf{x}} [(D(E(\mathbf{x})) - \mathbf{x})]^2 \quad (5.14)$$

**Τρίτη συνάρτηση κόστους:**

Η τρίτη μορφή της συνάρτησης κόστους που εξετάστηκε διερευνά ακόμη μία ακραία περίπτωση. Την περίπτωση που είναι ενεργές μόνο οι δυνάμεις. Δηλαδή:

$$\mathcal{L}_3 = \mathcal{L}_{\text{forces}} \quad (5.15)$$

**Τέταρτη συνάρτηση κόστους:**

Η τέταρτη έκφραση της συνάρτησης κόστους είναι παρόμοια με την πρώτη, με την διαφορά ότι πραγματοποιεί κανονικοποίηση και στους δύο όρους της

συνάρτησης κόστους.

$$\mathcal{L}_4 = (1-\rho) \cdot \frac{\mathcal{L}_{\text{reconstruction}}}{\max(\mathcal{L}_{\text{reconstruction},1}, \dots, \mathcal{L}_{\text{reconstruction},i})} + \rho \frac{\mathcal{L}_{\text{forces}}}{\max(\mathcal{L}_{\text{forces},1}, \dots, \mathcal{L}_{\text{forces},i})} \quad (5.16)$$

όπου  $\mathcal{L}_{\text{forces},i}$  και  $\mathcal{L}_{\text{reconstruction},i}$  η τιμή της συνάρτησης κόστους για τον όρο των δυνάμεων και τον όρο της επανακατασκευής αντίστοιχα, στην  $i$ -στη επανάληψη. Επομένως, η κανονικοποίηση γίνεται διαιρώντας και τους δύο όρους με την μεγαλύτερη τιμή που έχει εμφανιστεί για τον καθένα μέχρι την επανάληψη στην οποία βρισκόμαστε. Επίσης, όπως και στην περίπτωση της πρώτης συνάρτησης κόστους, υπάρχει ένα κριτήριο switch. Μέχρι να ικανοποιηθεί το κριτήριο αυτό, ο όρος των δυνάμεων είναι ίσος με το μηδέν. Αρχίζουμε να λαμβάνουμε υπόψιν τις δυνάμεις παραμόνο όταν ικανοποιηθεί το:  $\mathcal{L}_{\text{reconstruction},(i+1)} - \mathcal{L}_{\text{reconstruction},(i)} < s$ . Παρατηρούμε ότι σε αντίθεση με τις προηγούμενες εκφράσεις της συνάρτησης κόστους όπου ο παράγοντας  $\rho$  κάνει την εμφάνισή του μόνο σαν πολλαπλασιαστής του όρου των δυνάμεων, σε αυτή την περίπτωση υπάρχει και ένας παράγοντας  $(1 - \rho)$  που πολλαπλασιάζει την συνάρτηση κόστους του σφάλματος ανακατασκευής. Η κίνηση αυτή αποσκοπεί στην εύρεση μίας κατάλληλης ισορροπίας στο βάρος που δίνουμε σε καθέναν από τους δύο όρους της συνάρτησης κόστους. Για παράδειγμα, με επιλογή της τιμής  $\rho = 0.5$  ο όρος της ανακατασκευής και ο όρος των δυνάμεων θα έχουν ίδιο βάρους συνεισφοράς στο συνολικό κόστος (0.5 και 0.5).

#### Πέμπτη συνάρτηση κόστους:

Η πέμπτη συνάρτηση κόστους ορίζεται ακριβώς όπως και η τέταρτη (5.16), με την διαφορά ότι ο όρος των δυνάμεων υπάρχει από την αρχή και δεν χρειάζεται να ικανοποιηθεί κάποιο κριτήριο switch προκειμένου να ενεργοποιηθεί, όπως στις υπόλοιπες περιπτώσεις.

Αφού επιλεγεί μία επιθυμητή έκφραση για τη συνάρτηση κόστους γίνεται επιλογή ενός αλγορίθμου βελτιστοποίησης. Μετά από ενδελεχή έρευνα και μία πληθώρα δοκιμών διαπιστώθηκε ότι ο αλγόριθμος βελτιστοποίησης που ταιριάζει στις περισσότερες περιπτώσεις για το συγκεκριμένο μοντέλο μηχανικής μάθησης είναι η Στοχαστική Καταβύθιση Βαθμίδας με χρήση παρτίδων (3.19) (Mini-batch SGD). Το batch size και το learning rate για αυτήν την μέθοδο ανήκουν στις υπερπαραμέτρους του προβλήματος.

Είναι γνωστό ότι, κατά την εκτέλεση αλγορίθμων βελτιστοποίησης, οι παράμετροι (βάρη) ενός νευρωνικού δικτύου ανανεώνονται, μέχρι να βρεθεί ένας συνδυασμός τους ο οποίος ελαχιστοποιεί την συνάρτηση κόστους που

έχει οριστεί. Τα βάρη ενός νευρωνικού δικτύου αρχικοποιούνται τυχαία. Προκειμένου να ελεγχθεί κατά πόσο επηρεάζεται η διαδικασία της εκπαίδευσης, αλλά και τα αποτελέσματα του μοντέλου, από την τυχαία αρχικοποίηση παραμέτρων του νευρωνικού δικτύου, κατασκευάστηκε ένα random seed. Το random seed αυτό, δίνει την δυνατότητα επιλογής αν σε μία εκτέλεση του αλγορίθμου θα διατηρηθεί η ίδια αρχικοποίηση για τις παραμέτρους του νευρωνικού δικτύου ή αν θα γίνει νέα τυχαία αρχικοποίηση.

Στις επαναληπτικές διαδικασίες βελτιστοποίησης κάποιας συνάρτησης κόστους, συνήθως επιλέγεται ένα κριτήριο τερματισμού. Η βασική λογική πίσω από ένα κριτήριο τερματισμού είναι να σταματήσει η εκτέλεση ενός αλγορίθμου βελτιστοποίησης πριν την περάτωση όλων των επαναλήψεων, όταν έχουμε φτάσει σε μία περιοχή της υπερεπιφάνειας της συνάρτησης κόστους όπου δεν πραγματοποιούνται σημαντικές αλλαγές στην τιμή της. Επομένως, η συνέχιση των επαναλήψεων σε μία τέτοια περίπτωση συνεπάγεται επιπλέον υπολογιστικό κόστος χωρίς να βελτιώνεται το αποτέλεσμα. Λαμβάνοντας υπόψιν τα προαναφερθέντα, έγινε εισαγωγή δύο καινούργιων παραμέτρων στην επαναληπτική διαδικασία. Η πρώτη είναι μία παράμετρος ελάχιστης αλλαγής (minimum change) η οποία εκφράζει την διαφορά των τιμών της συνάρτησης κόστους μεταξύ δύο διαδοχικών επαναλήψεων. Η δεύτερη είναι μία παράμετρος υπομονής (patience). Αρχικά επιλέγεται μία τιμή για την παράμετρο της ελάχιστης αλλαγής και στην συνέχεια για την παράμετρο της υπομονής. Αν η συνθήκη  $\mathcal{L}_{i+1} - \mathcal{L}_i < \text{min.change}$  ισχύσει για έναν αριθμό διαδοχικών φορών ο οποίος ορίζεται από την παράμετρο της υπομονής, τότε γίνεται τερματισμός της επαναληπτικής διαδικασίας. Δηλαδή η παράμετρος της υπομονής υποδεικνύει τον μέγιστο αριθμό των επαναλήψεων που ο αλγόριθμος "είναι διατεθειμένος να περιμένει" αν η διαφορά μεταξύ διαδοχικών τιμών της συνάρτησης κόστους δεν υπερβαίνει την τιμή της παραμέτρου της ελάχιστης αλλαγής. Είναι προφανές ότι, όσο μειώνεται η παράμετρος της ελάχιστης αλλαγής ενώ ταυτόχρονα αυξάνονται οι επαναλήψεις, αυξάνεται η ακρίβεια της μεθόδου.

#### 5.4 Υλοποίηση προσθήκης πινάκων συνδεσιμότητας μεταξύ των αδροποιημένων μονάδων

Μετά το πέρας της εκπαίδευσης του συστήματος με την βελτιστοποίηση της συνάρτησης κόστους, από τον πίνακα  $\mathbf{E}$  (αλλά με την εφαρμογή της

κανονικοποίησης με άθροισμα πάνω στα  $i$ ), παίρνουμε τις πιθανότητες για την συμμετοχή του κάθε ατόμου σε κάθε αδροποιημένη μονάδα. Όμως, όπως αναφέρθηκε και σε προηγούμενο κεφάλαιο, κάθε άτομο επιτρέπεται να συνεισφέρει μόνο σε μία αδροποιημένη μονάδα. Υπενθυμίζουμε την μορφή του πίνακα  $\mathbf{E}$ :

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} E_{11} & E_{12} & \dots & \dots & E_{1N} \\ E_{21} & E_{22} & \dots & \dots & E_{2N} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ E_{n1} & \dots & \dots & \dots & E_{nN} \end{pmatrix}, \mathbf{E} \in \mathbb{R}^{n \times N}$$

Κάθε στήλη του πίνακα εκφράζει μία κατανομή πιθανοτήτων της συνεισφοράς ενός ατόμου στις αδροποιημένες μονάδες. Αφού πρόκειται για κατανομή πιθανοτήτων ισχύει η συνθήκη κανονικοποίησης που περιγράφεται από την (5.6). Τελικά, κάθε άτομο αντιστοιχίζεται στην αδροποιημένη μονάδα στην οποία έχει την μεγαλύτερη πιθανότητα συμμετοχής. Ένα απλό παράδειγμα είναι το εξής:

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} 0.8 & 0.1 \\ 0.2 & 0.9 \end{pmatrix}$$

Η πρώτη στήλη εκφράζει την πιθανότητα το πρώτο άτομο να ανήκει στην πρώτη και στην δεύτερη αδροποιημένη μονάδα αντίστοιχα. Έχει 0.8 πιθανότητα να ανήκει στην πρώτη αδροποιημένη μονάδα και 0.2 να ανήκει στην δεύτερη. Αντίστοιχα, το δεύτερο άτομο έχει 0.1 πιθανότητα να ανήκει στην πρώτη μονάδα και 0.9 να ανήκει στην δεύτερη. Επομένως, το πρώτο άτομο θα τοποθετηθεί στην πρώτη αδροποιημένη μονάδα ενώ το δεύτερο στην δεύτερη αδροποιημένη μονάδα όπου έχουν αντίστοιχα τις μεγαλύτερες πιθανότητες. Μία γενίκευση του τρόπου επιλογής της αδροποιημένης μονάδας στην οποία τοποθετείται ένα άτομο  $j$  είναι:

$$CG_j = \text{index}[\max_i(\mathbf{E}_j)] = \text{index}[\max_i(E_{1j}, E_{2j}, \dots, E_{nj})] \quad (5.17)$$

Δηλαδή ο δείκτης  $i$  που αντιστοιχεί στην μέγιστη πιθανότητα από αυτές της στήλης του ατόμου  $j$ .

Για τα συστήματα που εξετάζουμε, επιθυμούμε να βρούμε τις συνδέσεις μεταξύ των αδροποιημένων μονάδων. Για τον σκοπό αυτό έγινε χρήση της πληροφορίας για τις συνδέσεις μεταξύ των ατόμων στην ατομιστική αναπαράσταση η οποία παρέχεται σε ένα αρχείο κειμένου με δεδομένα για το κάθε σύστημα από το λογισμικό LAMMPS. Στο αρχείο αυτό κάθε άτομο του συστήματος έχει μία ταυτότητα (atom ID) που αντιστοιχεί σε έναν αριθμό (για παράδειγμα C:1,H:2,H:3,...κ.ο.κ.). Με την πληροφορία αυτή κατασκευάστηκε ένας πίνακας συνδέσεων για τα άτομα στην ατομιστική

αναπαράσταση. Αν τα άτομα είναι  $N$  στον αριθμό τότε ο πίνακας αυτός είναι της μορφής:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & A_{12} & \dots & \dots & A_{1N} \\ A_{21} & 0 & \dots & \dots & A_{2N} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ A_{N1} & \dots & \dots & \dots & 0 \end{pmatrix}, \mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$$

όπου ισχύει ότι αν ένα άτομο  $i$  είναι συνδεδεμένο με ένα άτομο  $j$  τότε  $A_{ij} = 1$  και αν ένα άτομο  $i$  δεν είναι συνδεδεμένο με ένα άτομο  $j$  τότε ισχύει  $A_{ij} = 0$ . Επιπλέον ο πίνακας είναι συμμετρικός αφού αν το άτομο  $i$  είναι συνδεδεμένο με το άτομο  $j$  τότε και το άτομο  $j$  είναι συνδεδεμένο με το  $i$  και αντίστοιχα για την περίπτωση μη σύνδεσης, άρα  $A_{ij} = A_{ji}$ . Προφανώς τα στοιχεία της διαγωνίου είναι όλα μηδενικά, αφού κανένα άτομο δεν είναι συνδεδεμένο με τον εαυτό του επομένως  $A_{ii} = 0, \forall i \in [1, N]$

Κάνοντας χρήση των πληροφοριών που υπάρχουν στους πίνακες  $\mathbf{A}$  και  $\mathbf{E}$  βρέθηκαν οι συνδέσεις μεταξύ των αδροποιημένων μονάδων στα συστήματα που εξετάστηκαν. Από τον πίνακα  $\mathbf{E}$  μπορεί να γίνει ομαδοποίηση των ατόμων σε αδροποιημένες μονάδες. Αν υπάρχει σύνδεση μεταξύ δύο ατόμων τα οποία ανήκουν σε δύο διαφορετικές αδροποιημένες μονάδες, τότε αυτές είναι συνδεδεμένες μεταξύ τους. Η ύπαρξη ή όχι σύνδεσης μεταξύ ατόμων τα οποία βρίσκονται σε διαφορετικές αδροποιημένες μονάδες ελέγχεται από τον πίνακα  $\mathbf{A}$ . Έτσι κατασκευάζεται ο συνεδεσιμότητας (connectivity matrix) για τις αδροποιημένες μονάδες.

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} 0 & C_{12} & \dots & \dots & C_{1n} \\ C_{21} & 0 & \dots & \dots & C_{2n} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ C_{n1} & \dots & \dots & \dots & 0 \end{pmatrix}, \mathbf{C} \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

όπου αντίστοιχα με τον  $\mathbf{A}$  ισχύει ότι αν υπάρχει σύνδεση μεταξύ δύο αδροποιημένων μονάδων  $i$  και  $j$  τότε  $C_{ij} = 1$  αλλιώς  $C_{ij} = 0$ . Είναι επίσης συμμετρικός ( $C_{ij} = C_{ji}$ ) για τον ίδιο λόγο που είναι και ο  $\mathbf{A}$  και τα στοιχεία της διαγωνίου του είναι μηδενικά  $C_{ii} = 0$  αφού μία αδροποιημένη μονάδα δεν γίνεται να είναι συνδεδεμένη με τον εαυτό της. Ένα παράδειγμα πίνακα σύνδεσης είναι το εξής:

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Στο συγκεκριμένο παράδειγμα έχουμε ένα σύστημα με δύο αδροποιημένες μονάδες οι οποίες είναι συνδεδεμένες μεταξύ τους ( $C_{21} = C_{12} = 1$ ).

Σημειώνεται σε αυτό το σημείο, πως οι πίνακες συνδέσεων ατόμων και αδροποιημένων μονάδων μπορούν να αναπαρασταθούν ισοδύναμα και με γράφους γειτνίασης (το οποίο μάλιστα υλοποιήθηκε).

## 5.5 Προσθήκη περιστροφών στις απεικονίσεις της ατομιστικής αναπαράστασης

Στα πλαίσια του προβλήματος της αδροποίησης με το μοντέλο της μηχανικής μάθησης που αναλύθηκε, εξετάστηκε η περίπτωση εφαρμογής περιστροφών στις ατομιστικές συντεταγμένες που χρησιμοποιούνται για την εκπαίδευση του νευρωνικού δικτύου. Στόχος της προσθήκης αυτής, είναι η διερεύνηση της επίδρασης που έχει η εφαρμογή περιστροφών στις ατομιστικές συντεταγμένες που χρησιμοποιούνται ως δεδομένα εκπαίδευσης, στα τελικά αποτελέσματα του μοντέλου. Για τον σκοπό αυτό, οι αρχικές απεικονίσεις του συστήματος αποθηκεύονται και δημιουργούνται αντίγραφά τους, σε καθένα από τα οποία εφαρμόζονται διαφορετικές περιστροφές. Αν, για παράδειγμα, γίνει επιλογή για τρία αντίγραφα, τότε τα συνολικά δεδομένα εκπαίδευσης θα περιλαμβάνουν την αρχική απεικόνιση και τρία νέα αντίγραφά της, στο καθένα από τα οποία έχει γίνει εφαρμογή διαφορετικών περιστροφών. Επομένως, στο συγκεκριμένο παράδειγμα θα έχουμε τετραπλασιασμό των δεδομένων εκπαίδευσης. Ο βασικός σκοπός της προσθήκης περιστροφών στις ατομιστικές συντεταγμένες είναι η διερεύνηση των συνεπειών που μπορεί να έχουν, στα τελικά αποτελέσματα του μοντέλου, αλλά και στην διαδικασία της εκπαίδευσής του. Με την ένταξή τους, αυξήθηκε η ποικιλία των δεδομένων εκπαίδευσης και πραγματοποιήθηκε ένα ακόμη βήμα προς την γενίκευση της μεθοδολογίας μηχανικής μάθησης για αδροποίηση συστημάτων.

Ο τρόπος με τον οποίο εφαρμόστηκαν οι περιστροφές βασίζεται στο [70] **Θεώρημα περιστροφών Euler:** "Κάθε αυθαίρετη περιστροφή δύναται να περιγραφεί από μόνο τρεις παραμέτρους." Μία από τις ονομασίες για τις παραμέτρους αυτές είναι "γωνίες Euler". Οι περιστροφές σε διανύσματα θέσης, συνήθως εφαρμόζονται με την βοήθεια πινάκων περιστροφών (rotation matrices). Ένας πίνακας περιστροφής  $R$  εφαρμόζεται σε ένα διάνυσμα  $x$  και το στρέφει με την πράξη:

$$x' = R \cdot x \quad (5.18)$$

Δηλαδή το μετασχηματισμένο διάνυσμα προκύπτει από τον πολλαπλασιασμό



του πίνακα στροφής με το αρχικό διάνυσμα. Στην περίπτωση μας εφαρμόστηκε μία  $zyx$  περιστροφή το οποίο σημαίνει ότι εκτελέστηκε πρώτα μία περιστροφή ως προς τον άξονα  $z$ , μετά ως προς τον άξονα  $y$  (του συστήματος μετά την πρώτη στροφή) και τέλος ως προς τον άξονα  $x$  (του συστήματος μετά την δεύτερη στροφή). Ο πίνακας αυτός είναι συνάρτηση των ημιτόνων και των συνημιτόνων των γωνιών Euler (έστω  $\alpha$ ,  $\beta$  και  $\gamma$  οι γωνίες Euler.). Για ευκολία το ημίτονο αντί για  $\sin$  θα συμβολίζεται ως  $s$  και το συνημίτονο αντί για  $\cos$  θα συμβολίζεται ως  $c$ . Ο εν λόγω πίνακας: [71]

$$\mathbf{R}_{ZYX} = \begin{pmatrix} c_\beta c_\alpha & c_\alpha s_\beta s_\gamma - c_\gamma s_\alpha & s_\alpha s_\gamma + c_\alpha c_\gamma s_\beta \\ c_\beta s_\alpha & c_\alpha c_\gamma + s_\alpha s_\beta s_\gamma & c_\gamma s_\alpha s_\beta - c_\alpha s_\gamma \\ -s_\beta & c_\alpha s_\gamma & c_\gamma c_\beta \end{pmatrix} \quad (5.19)$$

Επομένως, οι περιστροφές παράγονται από πολλαπλασιασμό του συγκεκριμένου πίνακα με τις ατομιστικές συντεταγμένες, για τις γωνίες Euler που επιλέγονται σε κάθε περίπτωση. Στην παρούσα εργασία έγινε κατασκευή ενός αλγορίθμου που παράγει τυχαίες γωνίες Euler. Την πρώτη φορά, ο αλγόριθμος τρέχει με βάση τις περιστροφές που προκύπτουν με χρήση αυτών των τυχαίων γωνιών. Από την επόμενη φορά ο χρήστης μπορεί να επιλέξει αν θέλει να διατηρήσει τις ίδιες περιστροφές με την πρώτη φορά ή αν θέλει εκ νέου τυχαίες περιστροφές. Με την επιλογή της παραγωγής νέων τυχαίων γωνιών Euler κάθε φορά που τρέχει ο αλγόριθμος, μπορεί να διερευνηθεί η επίδραση που έχουν οι διαφορετικές περιστροφές στο σύστημα σε σύγκριση με την διατήρηση ίδιων περιστροφών.

## Κεφάλαιο 6

### Αποτελέσματα

Σε αυτή την ενότητα θα αναλυθούν και θα συζητηθούν τα αποτελέσματα της μεθοδολογίας που περιγράφηκε, από την εφαρμογή της στα χημικά συστήματα αιθάνιο, στυρένιο, μονομερές CTA και πενταμερές πολυαιθυλενίου. Οι ενότητες που ακολουθούν αφορούν τα αποτελέσματα για καθένα από αυτά τα χημικά συστήματα χωριστά.

Τα αποτελέσματα που θα εξεταστούν, αφορούν τα διαγράμματα των τιμών του συνολικού κόστους σαν συνάρτηση των επαναλήψεων που εκτελέστηκαν σε κάθε περίπτωση, την απεικόνιση των πινάκων κωδικοποίησης (**E**) που δείχνουν την πιθανότητα ανάθεσης των ατόμων στις αδροποιημένες μονάδες, τους πίνακες σύνδεσης μεταξύ των μονάδων της αδροποιημένης αναπαράστασης και την οπτική απεικόνιση των χημικών συστημάτων στο ατομιστικό επίπεδο, όπου ταυτόχρονα γίνεται εμφανής και η νέα αδροποιημένη απεικόνιση.

Η οπτική αναπαράσταση των ατομιστικών συστημάτων στην ίδια εικόνα με τις αδροποιημένες μονάδες πραγματοποιήθηκε με χρήση του προγράμματος VMD. Για την συγκεκριμένη υλοποίηση, χρησιμοποιήθηκαν βιβλιοθήκες της python που επικοινωνούν με το VMD. Με την βοήθειά του, διαβάστηκαν αρχεία τύπου .pdb τα οποία περιέχουν πληροφορίες για την τοπολογία και τα χημικά συστατικά (τύποι ατόμων) του κάθε συστήματος και κατασκευάστηκαν έτσι τρισδιάστατες απεικονίσεις για το κάθε σύστημα. Στην συνέχεια, οι αδροποιημένες συντεταγμένες που προέκυψαν από την κωδικοποίηση των ατομιστικών συντεταγμένων στον Κωδικοποιητή αξιοποιήθηκαν για κατασκευή αρχείων .pdb. Στα αρχεία αυτά, τυπώθηκαν οι συντεταγμένες των κέντρων όλων των αδροποιημένων μονάδων οι οποίες ενώ

με βάση την αντιστοίχιση που πραγματοποιείται, είναι στη γενική περίπτωση ανόμοιες και μη σφαιρικές, στην εποπτική εικόνα που εξάγεται από το vmd φαίνονται ως σφαιρικές, ίδιας (αυθαίρετης) ακτίνας. Οι συντεταγμένες του κέντρου μίας αδροποιημένης μονάδας προκύπτουν από γραμμική υπέρθεση των συντεταγμένων των ατόμων που συνεισφέρουν στην αδροποιημένη μονάδα αυτή, αλλά σταθμισμένων ανάλογα με την πιθανότητα συνεισφοράς του κάθε ατόμου που δίνεται από τον πίνακα κωδικοποίησης. Τέλος, πραγματοποιήθηκε μία ρύθμιση έτσι ώστε το πλήρες ατομιστικό και το αδροποιημένο σύστημα να απεικονίζονται μαζί (το VMD διαβάζει και τα δύο pdb ταυτόχρονα).

Η απεικόνιση του πίνακα κωδικοποίησης με τις πιθανότητες ανάθεσης των ατόμων σε αδροποιημένες μονάδες γίνεται με την χρήση βιβλιοθηκών της python που επιτρέπουν την διαισθητική αναπαράσταση πινάκων με τιμές που αντιστοιχούν σε μία κλίμακα χρωμάτων. Το εύρος των τιμών είναι πάντα από 0 έως 1. Οι τιμή που αντιστοιχεί στην μέση της κλίμακας είναι το 0.5 . Σημειώνεται πως η κλίμακα δεν είναι γραμμική . Η κλίμακα χρωμάτων που πρόκειται να χρησιμοποιηθεί αναπαρίσταται από την παρακάτω εικόνα:



Εικόνα 6.1: Κλίμακα χρωμάτων που χρησιμοποιείται για την απεικόνιση του πίνακα κωδικοποίησης

Οι υπολογισμοί πραγματοποιήθηκαν είτε τρέχοντας παράλληλα σε 12 processors σε ένα τοπικό μηχάνημα του εργαστηρίου (με προδιαγραφές 2 x Intel Xeon X5675 [6 Cores /CPU, 12MB Cache, 3.06GHz, 6.40 GT/s QPI] Dell T7500 ) είτε σε κάρτα γραφικών NVIDIA Volta V100 GPU στο υπερυπολογιστικό κέντρο CINEA στην Ιταλία. Η χρήση της κάρτας γραφικών οδήγησε σε μεγάλη μείωση του υπολογιστικού κόστους των υπολογισμών, η οποία σε πολλές περιπτώσεις ήταν κατά ένα παράγοντα της τάξης του 40. .

## 6.1 Αιθάνιο

Όλα τα πειράματα που εκτελέστηκαν στο χημικό σύστημα αιθάνιο αφορούν το πρώτο σχήμα βελτιστοποίησης υπερπαραμέτρων κατά το οποίο οι υπερπαραμέτροι χωρίζονται σε δύο τριάδες. Υπενθυμίζουμε πως η πρώτη

τριάδα περιλαμβάνει τις υπερπαραμέτους batch size decay ratio και το learning rate, ενώ η δεύτερη τριάδα περιλαμβάνει τον αριθμό των νευρώνων του Κωδικοποιητή, την παράμετρο  $\rho$  και τον αριθμό επαναλήψεων (ή εποχών, epochs). Επίσης, για όλα τα πειράματα που εκτελέστηκαν για το αιθάνιο έγινε επιλογή της πρώτης συνάρτησης κόστους(5.13). Τα διαστήματα τιμών των υπερπαραμέτρων για τις οποίες διεξήχθησαν τα τεστ με βάση το σχήμα βελτιστοποίησης που περιγράφηκε ακολουθούν στον παρακάτω πίνακα:

Υπερπαραμέτρος	Αρχική τιμή	Τελική Τιμή	Μήκος Βήματος
Learning Rate	0.03	0.05	0.01
Batch size	20	100	40
Decay ratio	0.03	0.08	0.05
Encoder's neurons	1	4	1
Epochs	1000	1000	0
$\rho$	0.001	0.007	0.003

Πίνακας 6.1: Πλέγμα υπερπαραμέτρων για την πρώτη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα αιθάνιο

Η παράμετρος των νευρώνων του Encoder δείχνει τον αριθμό των νευρώνων με τους οποίους συνδέονται οι ατομιστικές συντεταγμένες. Επομένως είναι διαισθητικό ο αριθμός αυτός να ταυτίζεται με τον αριθμό των αδροποιημένων μονάδων. Αυτό όμως δεν συμβαίνει σε κάθε περίπτωση. Αρκετά συχνά κατά την διάρκεια της εκπαίδευσης πολλοί από τους νευρώνες δεν χρησιμοποιούνται καθόλου από το νευρωνικό δίκτυο. Δηλαδή οι τιμές των βαρών που τους συνδέουν με τις ατομιστικές συντεταγμένες μηδενίζονται κατά την διάρκεια της εκπαίδευσης. Παρόλα αυτά, το νευρωνικό δίκτυο μπορεί να "προτιμήσει" μία απεικόνιση με νευρώνες που δεν χρησιμοποιούνται έναντι μίας άλλης που περιλαμβάνει την χρήση του μέγιστου αριθμού διαθέσιμων νευρώνων. Σε αυτές τις περιπτώσεις, ο αριθμός των αδροποιημένων μονάδων δεν ταυτίζεται με τον αριθμό των νευρώνων του Encoder, αλλά είναι μικρότερος. Με αυτό τον τρόπο δημιουργείται ο διαχωρισμός μρταξύ του αριθμού των νευρώνων του Κωδικοποιητή (Neurons) και του αριθμού των αδροποιημένων μονάδων (CG moieties).

Τα αποτελέσματα που προέκυψαν από τις συγκεκριμένες υπερπαραμέτρους θα χωριστούν σε δύο κατηγορίες. Στα αποτελέσματα όπου δεν έχουν εφαρμοστεί περιστροφές στις συντεταγμένες που χρησιμοποιούνται ως δεδομένα εκπαίδευσης και σε εκείνα που έχουν εφαρμοστεί περιστροφές.

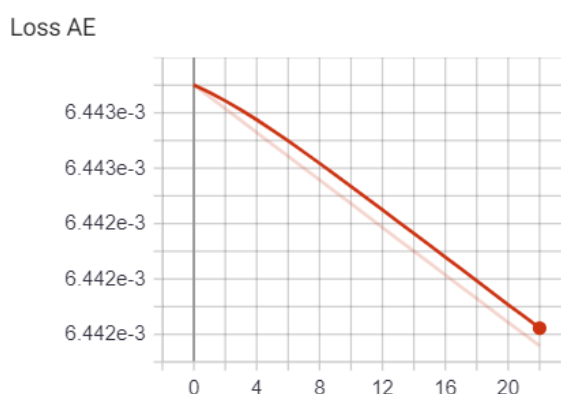
Αρχικά, θα ξεκινήσουμε με τη διερεύνηση των αποτελεσμάτων χωρίς την εφαρμογή περιστροφών. Πραγματοποιήθηκαν τέσσερις διαφορετικές

εκτελέσεις του αλγορίθμου, κάθε μία από τις οποίες είχε διαφορετικές αρχικές τυχαίες τιμές για τα βάρη του Encoder και του Αποκωδικοποιητή. Οι τιμές που επιλέχθηκαν για τις παραμέτρους `minimum change` και `patience` (κεφάλαιο 5.3.2) για την εκτέλεση των δοκιμών είναι 0.01 και 10 αντίστοιχα. Ακολουθεί ένας πίνακας που περιγράφει συνοπτικά τα αποτελέσματα για τις τέσσερις αυτές περιπτώσεις:

Runs	Learning Rate	Batch Size	Decay Ratio	Neurons	CG moieties	Rho	Total Loss
1	0.04	20	0.08	1	1	0.001	0.006
2	0.04	60	0.08	3	1	0.004	0.008
3	0.05	100	0.08	1	1	0.007	0.006
4	0.04	100	0.008	1	1	0.007	0.006

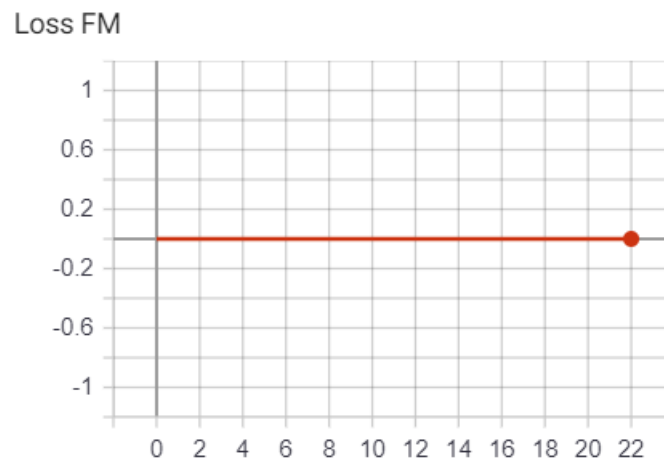
Πίνακας 6.2: Αποτελέσματα και βέλτιστες τιμές υπερπαραμέτρων για την πρώτη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα αιθάνιο

Σε όλες τις περιπτώσεις παρατηρούμε πολύ χαμηλές τιμές για την συνάρτηση κόστους και στις τρεις από τις τέσσερις (1,3 και 4) το μοντέλο κατέληξε σε αρχιτεκτονική με έναν μόνο νευρώνα στον Encoder. Στην περίπτωση 2 το μοντέλο κατέληξε σε αρχιτεκτονική με τρεις νευρώνες για τον Encoder, από τους οποίους όμως τελικά χρησιμοποιήθηκε μόνο ο ένας. Επομένως και στις δύο περιπτώσεις αποφασίστηκε από το μοντέλο να χρησιμοποιηθεί μόνο μία αδροποιημένη μονάδα. Ακολουθούν αντιπροσωπευτικά αποτελέσματα από κάθε περίπτωση. Το διάγραμμα του κόστους ανακατασκευής συναρτήσεων των επαναλήψεων για το πρώτο run (το οποίο είναι πλήρως αντιπροσωπευτικό και για τα runs 3,4):



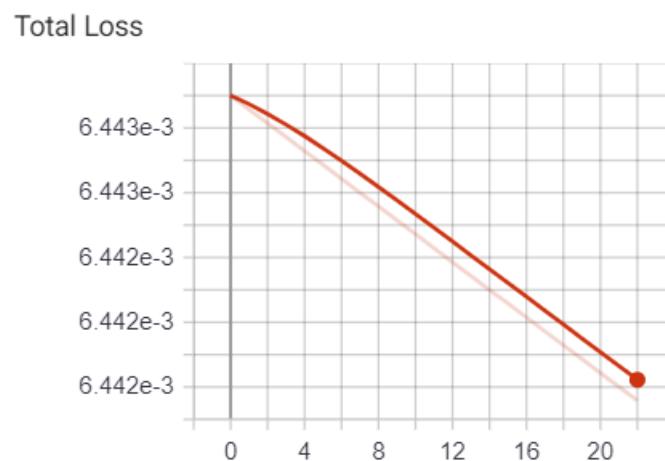
Εικόνα 6.2: Γραφική παράσταση του κόστους ανακατασκευής συναρτήσεων των επαναλήψεων για το αιθάνιο χωρίς περιστροφές (1)

Το διάγραμμα του κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσει των επαναλήψεων για την δοκιμή 1 (όπου πάλι είναι πλήρως αντιπροσωπευτικό για τις δοκιμές 3 και 4) :



Εικόνα 6.3: Γραφική παράσταση του κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσει των επαναλήψεων για το αιθάνιο χωρίς περιστροφές (1)

Και τέλος το διάγραμμα που προκύπτει για την συνολική συνάρτηση κόστους για την περίπτωση 1:



Εικόνα 6.4: Γραφική παράσταση του συνολικού κόστους συναρτήσει των επαναλήψεων για το αιθάνιο χωρίς περιστροφές (1)

Παρατηρούμε από το πρώτο διάγραμμα ότι το κόστος ανακατασκευής φθίνει γραμμικά συναρτήσει των επαναλήψεων. Παρατηρούμε επίσης, ότι δεν προλαβαίνει να ικανοποιηθεί το κριτήριο το οποίο ενεργοποιεί τον όρο των δυνάμεων στην συνάρτηση κόστους. Προτού ικανοποιηθεί το κριτήριο για την έναρξη της συνεισφοράς του όρου των δυνάμεων ικανοποιείται το κριτήριο τερματισμού που έχουμε θέσει και η βελτιστοποίηση σταματάει μετά από μόνο 22 επαναλήψεις. Προφανώς αφού δεν προλαβαίνει να ενεργοποιηθεί το μέρος της συνάρτησης κόστους που σχετίζεται με τις δυνάμεις το συνολικό κόστος ισούται με το κόστος ανακατασκευής. Αυτό συμβαίνει διότι με το που ξεκινάει η βελτιστοποίηση βρισκόμαστε ήδη σε πολύ χαμηλά επίπεδα τιμών της συνάρτησης κόστους ανακατασκευής. Λόγω της απλότητας του συστήματος το μοντέλο "δεν δυσκολεύεται" να αντιστοιχίσει τις ατομιστικές συντεταγμένες σε μία απεικόνιση λιγότερων διαστάσεων και με βάση αυτή να τις επανακατασκευάσει. Μάλιστα, βρίσκει μία απεικόνιση τριών μόνο διαστάσεων, αφού καταλήγουμε σε μία μόνο αδροποιημένη μονάδα. Ο πίνακας κωδικοποίησης, όπως είναι αναμενόμενο αποτελείται μόνο από μία γραμμή αφού έχουμε μόνο μία αδροποιημένη μονάδα. Ο εν λόγω πίνακας παρουσιάζεται παρακάτω:

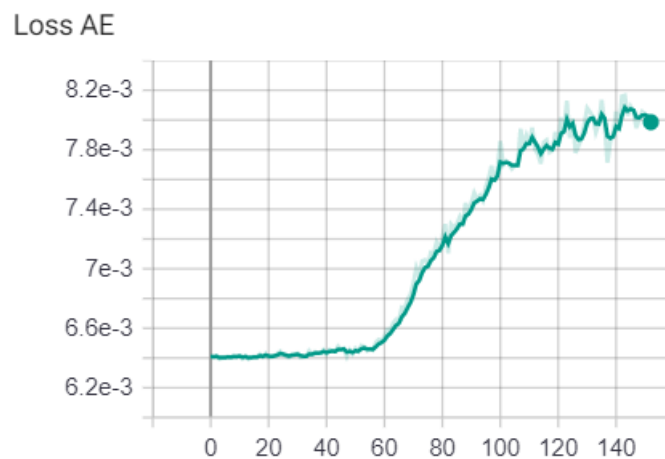


Εικόνα 6.5: Πίνακας κωδικοποίησης για το αιθάνιο χωρίς περιστροφές

Από τον πίνακα παρατηρούμε ότι το μοντέλο αντιστοιχίζει όλα τα άτομα του αιθανίου στην μία και μοναδική αδροποιημένη μονάδα του συστήματος με πιθανότητα 1. Ο παραπάνω πίνακας κωδικοποίησης δεν κάνει χρήση της κλίμακας των χρωμάτων όπως η κλίμακα περιγράφηκε στην εισαγωγή του κεφαλαίου όπου το μωβ χρώμα αντιστοιχεί στο μηδέν και στις τιμές κοντά σε αυτό. Όταν έχουμε μία μόνο αδροποιημένη μονάδα το μωβ αντιστοιχεί σε πιθανότητα 1.

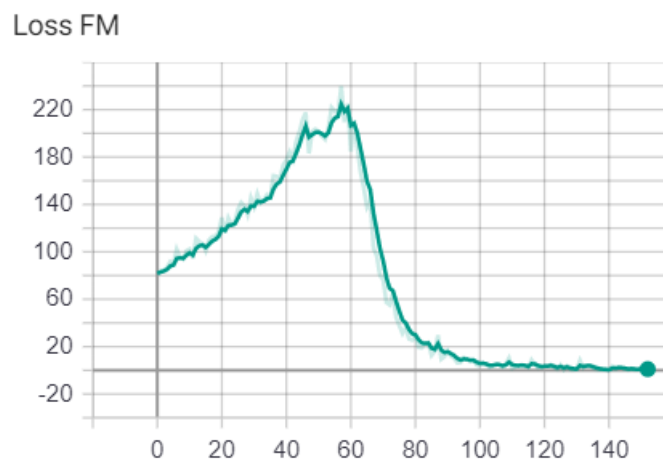
Όπως προαναφέρθηκε, η δοκιμή η οποία παρουσιάζει το μεγαλύτερο ενδιαφέρον είναι η δεύτερη όπου το νευρωνικό δίκτυο έχει επιλέξει μία αρχιτεκτονική με τρεις νευρώνες από τους οποίους όμως έχει μη μηδενικά βάρη μόνο ο ένας. Δηλαδή καταλήγουμε ξανά στην χρήση μίας αδροποιημένης μονάδας. Τα αποτελέσματα που προέκυψαν από το δεύτερο τεστ αναλύονται παρακάτω.

Το διάγραμμα που συσχετίζει το κόστος ανακατασκευής συναρτήσει των επαναλήψεων για την δοκιμή 2 είναι:



Εικόνα 6.6: Γραφική παράσταση του κόστους ανακατασκευής συναρτήσει των επαναλήψεων για το αιθάνιο χωρίς περιστροφές(2)

Το διάγραμμα του κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσει των επαναλήψεων για την δοκιμή 2:



Εικόνα 6.7: Γραφική παράσταση του κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσει των επαναλήψεων για το αιθάνιο χωρίς περιστροφές(2)



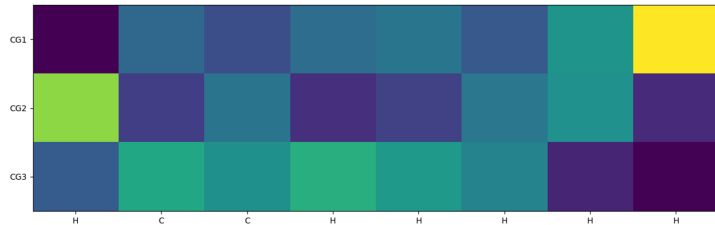
Και τέλος το διάγραμμα που προκύπτει για την συνολική συνάρτηση κόστους για την δοκιμή 2:



Εικόνα 6.8: Γραφική παράσταση του συνολικού κόστους συναρτήσει των επαναλήψεων για το αιθάνιο χωρίς περιστροφές(2)

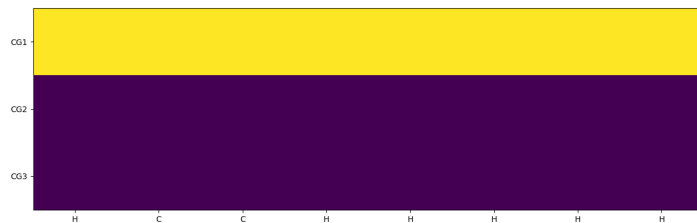
Στο πρώτο διάγραμμα φαίνεται ότι το κόστος ανακατασκευής αυξάνεται με το πέρας των επαναλήψεων, ωστόσο κινείται από την αρχή μέχρι το τέλος σε εύρος πολύ μικρών τιμών. Η συνεισφορά του στο συνολικό κόστος είναι ελάχιστη. Παρατηρούμε ότι το κόστος που σχετίζεται με τις δυνάμεις, παρόλο που είναι πολλαπλασιασμένο με την παράμετρο  $\rho$  που σε αυτή την περίπτωση είναι 0.004, υπερσχύει σε σχέση με το κόστος που προέρχεται από την ανακατασκευή των συντεταγμένων. Η παρατήρηση επιβεβαιώνεται και από την πολύ μεγάλη ομοιότητα μεταξύ του δεύτερου και του τρίτου διαγράμματος. Ο λόγος που σε αυτή την περίπτωση χρησιμοποιούνται περισσότερες επαναλήψεις είναι ότι κατά την εκπαίδευση επιλέγεται ως βέλτιστη αρχιτεκτονική μία που κάνει χρήση τριών νευρώνων. Έτσι δημιουργούνται τρεις αδροποιημένες μονάδες οι οποίες λόγω των αλληλεπιδράσεων μεταξύ τους αυξάνουν τον όρο της συνάρτησης κόστους που σχετίζεται με τις δυνάμεις. Στη συνέχεια της εκπαίδευσης, όμως, το μοντέλο "αντιλαμβάνεται" πως αν μηδενίσει τα βάρη σε δύο από τους τρεις νευρώνες που έχουν επιλεγεί, τότε θα μειωθεί και το κόστος λόγω των δυνάμεων αφού πλέον θα υπάρχει μόνο μία αδροποιημένη μονάδα η οποία δεν μπορεί να αλληλεπιδράσει με τον εαυτό της. Παρατηρούμε ότι μέχρι να ικανοποιηθεί το κριτήριο τερματισμού χρειάστηκαν 155 από το σύνολο των 1000 επαναλήψεων. Ακολουθούν αποτελέσματα του πίνακα κωδικοποίησης που αντιστοιχούν στην συγκεκριμένη δοκιμή:

Πίνακας κωδικοποίησης στις 0 επαναλήψεις :



Εικόνα 6.9: Πίνακας κωδικοποίησης για το αιθάνιο χωρίς περιστροφές στις 0 επαναλήψεις

Πίνακας κωδικοποίησης στο τέλος της βελτιστοποίησης (155 επαναλήψεις)



Εικόνα 6.10: Πίνακας κωδικοποίησης για το αιθάνιο χωρίς περιστροφές (μαζί με τις μη χρησιμοποιούμενες αδροποιημένες μονάδες):

Πίνακας κωδικοποίησης στο τέλος της βελτιστοποίησης μόνο με ενεργές αδροποιημένες μονάδες:

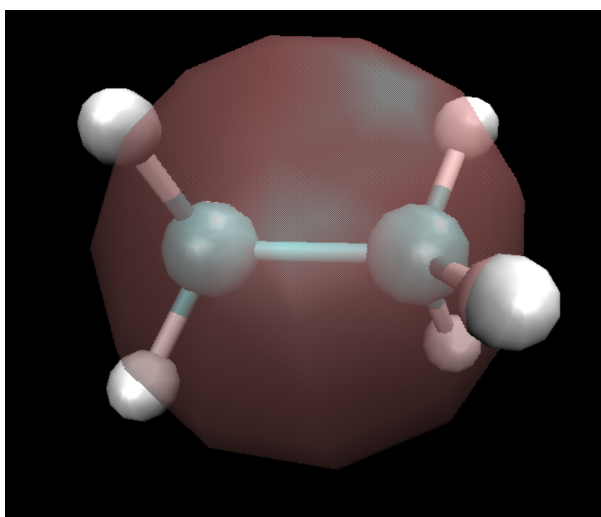


Εικόνα 6.11: Πίνακας κωδικοποίησης για το αιθάνιο χωρίς περιστροφές(2)

Στα παραπάνω σχήματα φαίνεται πως εξελίσσεται η κατανομή των ατόμων σε αδροποιημένες μονάδες όσο προχωράει η διαδικασία της βελτιστοποίησης. Πριν ξεκινήσει η επαναληπτική διαδικασία της

βελτιστοποίησης της συνάρτησης κόστους, οι πιθανότητες των ατόμων να ανήκουν σε κάποια από τις αδροποιημένες μονάδες είναι μοιρασμένες (όπως υποδηλώνουν και τα χρώματα). Υπενθυμίζουμε ότι το κίτρινο χρώμα ισοδυναμεί με πιθανότητα πολύ κοντά στο 1 και το μωβ σε πιθανότητα πολύ κοντά στο μηδέν (εκτός αν υπάρχει μία μόνο αδροποιημένη μονάδα, που το μωβ αντιστοιχεί στο 1). Φαίνεται διαισθητικά το φαινόμενο που εξηγήθηκε και παραπάνω, κατά το οποίο ο Κωδικοποιητής διαθέτει νευρώνες που δεν χρησιμοποιεί. Παρατηρούμε ότι από τους τρεις νευρώνες χρησιμοποιείται μόνο ο ένας. Από εδώ και στο εξής θα μας απασχολούν αποκλειστικά οι πίνακες κωδικοποίησης μόνο με ενεργές αδροποιημένες μονάδες.

Για τις δοκιμές 1,2,3 και 4 η αναπαράσταση του πλήρους ατομιστικού συστήματος και της αδροποιημένης μονάδας στην ίδια εικόνα (μέσω του λογισμικού VMD) είναι:



Εικόνα 6.12: Ταυτόχρονη απεικόνιση πλήρους ατομιστικού και αδροποιημένου συστήματος για το αιθάνιο χωρίς περιστροφές

Μετά την ολοκλήρωση των τεστ που αναλύθηκαν στο προηγούμενο κεφάλαιο, κρίθηκε σκόπιμο να διερευνηθεί η επίδραση που έχουν οι περιστροφές των αρχικών διαμορφώσεων που χρησιμοποιούνται ως δεδομένα εκπαίδευσης, στα τελικά αποτελέσματα του μοντέλου που χτίστηκε. Επομένως, εκτελέστηκαν δοκιμές διατηρώντας ακριβώς το ίδιο πλέγμα (grid) υπερπαραμέτρων αλλά με προσθήκη περιστροφών. Εφαρμόστηκαν τρεις διαφορετικές περιστροφές στην αρχική διαμόρφωση. Έτσι, σαν δεδομένα εκπαίδευσης έχουμε την αρχική διαμόρφωση εμπλουτισμένη με τρία αντίγραφα της, σε καθένα από τα οποία έχει εφαρμοστεί μια διαφορετική περιστροφή. Τα

αποτελέσματα που προέκυψαν παρουσιάζονται στον πίνακα που ακολουθεί:

Runs	Learning Rate	Batch Size	Decay Ratio	Neurons	CG moieties	Rho	Total Loss
1	0.05	20	0.08	1	1	0.001	0.006
2	0.03	100	0.08	1	1	0.007	0.006
3	0.03	100	0.08	4	1	0.004	0.007
4	0.04	20	0.03	3	1	0.009	0.008

Πίνακας 6.3: Αποτελέσματα και βέλτιστες τιμές υπερπαραμέτρων για την πρώτη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα αιθάνιο, με εφαρμογή περιστροφών

Παρατηρούμε πολύ παρόμοια αποτελέσματα ανάμεσα στην εφαρμογή και μη εφαρμογή περιστροφών στις ατομιστικές συντεταγμένες. Και στις δύο περιπτώσεις καταλήγουμε σε ίδιες τιμές για την συνάρτηση κόστους σε τρεις από τις τέσσερις δοκιμές και πάντα καταλήγουμε σε μία αδροποιημένη μονάδα. Στις δοκιμές 3 και 4 οι αδροποιημένες μονάδες που επιλέγονται από το νευρωνικό δίκτυο είναι 4 και 3, αντίστοιχα, αλλά τελικά οι ενεργή αδροποιημένη μονάδα είναι μία και στις δύο περιπτώσεις. Τα διαγράμματα για τα τεστ 1 και 2 συνοψίζονται από τα αντίστοιχα της προηγούμενης ενότητας για τις δοκιμές 1,3 και 4, ενώ τα διαγράμματα από τις δοκιμές 3 και 4 συνοψίζονται από το διάγραμμα του τεστ 2 της προηγούμενης ενότητας. Το ίδιο ισχύει και για όλα τα υπόλοιπα αποτελέσματα (πίνακας κωδικοποίησης, απεικόνιση μέσω VMD). Φαίνεται ξεκάθαρα ότι η εφαρμογή περιστροφών δεν έχει επιφέρει κάποιο διαφορετικό αποτέλεσμα στην περίπτωση του αιθανίου. Βέβαια, είναι αδύνατο να βγει κάποιο συμπέρασμα για την γενικότερη επίδραση των περιστροφών στην εκπαίδευση του μοντέλου, γιατί πρόκειται για ένα σύστημα που χαρακτηρίζεται από μεγάλη απλότητα.

Παρά τις ομοιότητες σε όλα τα αποτελέσματα, υπάρχει μεγάλη διαφορά στον χρόνο εκτέλεσης όταν εφαρμόζονται οι περιστροφές. Ο χρόνος εκτέλεσης των τεσσάρων δοκιμών με την εφαρμογή περιστροφών ανέρχεται στις 3 ώρες και 48 λεπτά, ενώ χωρίς εφαρμογή περιστροφών στην 1 ώρα και 26 λεπτά. Η διαφορά ανάμεσα στους χρόνους εκτέλεσης είναι αναμενόμενη, αφού στην περίπτωση των περιστροφών πραγματοποιείται τετραπλασιασμός των δεδομένων εκπαίδευσης.

## 6.2 Στυρένιο

Τα πειράματα για το χημικό σύστημα στυρένιο εκτελέστηκαν σχεδόν κάτω από τις ίδιες συνθήκες με τα πειράματα για το αιθάνιο. Πιο συγκεκριμένα χρησιμοποιήθηκε η  $\mathcal{L}_1$  (5.13) ως συνάρτηση κόστους και επιλέχθηκε ξανά το πρώτο σχήμα βελτιστοποίησης υπερπαραμέτρων και τα minimum change και patience έχουν τιμές 0.01 και 10 αντίστοιχα. Επίσης, όλα τα διακριτά διαστήματα τιμών των υπερπαραμέτρων ήταν ίδια, με τη διαφορά ότι στο στυρένιο ως διάστημα τιμών των νευρώνων του Encoder επιλέχθηκε το [3,8]. Η επιλογή αυτή βασίστηκε στην παρατήρηση ότι για το σύστημα του αιθανίου το μοντέλο με εξαιρετική συνέπεια επέλεγε κατ'επανάληψιν μία μόνο αδροποιημένη μονάδα. Η παρατήρηση αυτή συνδυάστηκε με το γεγονός ότι το αντίστοιχο διάστημα το οποίο είχε επιλεγεί για το αιθάνιο ήταν το [1,4]. Επιπλέον, η επιλογή αυτή υποκινήθηκε από τη σκέψη ότι, εφόσον δίνεται η δυνατότητα στο σύστημα να διαλέξει την μία αδροποιημένη μονάδα, έχει περισσότερες πιθανότητες να το κάνει, αφού με αυτόν τον τρόπο απαλλάσσει από τον όρο των δυνάμεων την συνάρτηση κόστους. Με τον αριθμό των ενδιάμεσων νευρώνων, όμως να ξεκινάει από την τιμή 3, ενδεχομένως να μην υπάρξει η ίδια προδιάθεση για τελική επιλογή μίας μόνο (ενεργής) αδροποιημένης μονάδας. Με βάση τα προαναφερθέντα το πλέγμα (grid) των υπερπαραμέτρων που χρησιμοποιήθηκε είναι:

Υπερπαραμέτρος	Αρχική τιμή	Τελική Τιμή	Μήκος Βήματος
Learning Rate	0.03	0.05	0.01
Batch size	20	100	40
Decay ratio	0.03	0.08	0.05
Encoder's neurons	3	8	1
Epochs	1000	1000	0
$\rho$	0.001	0.007	0.003

Πίνακας 6.4: Πλέγμα υπερπαραμέτρων για την πρώτη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα στυρένιο

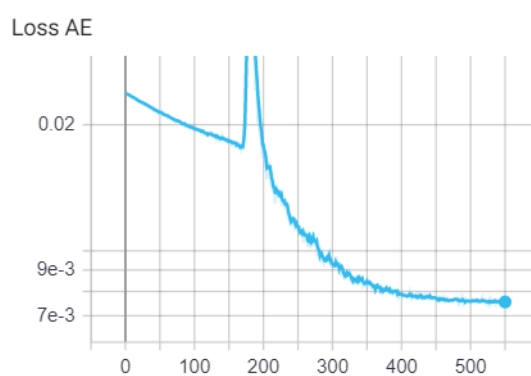
Τα αποτελέσματα από την εκτέλεση του αλγορίθμου 4 φορές για το παραπάνω πλέγμα υπερπαραμέτρων χωρίς την εφαρμογή περιστροφών είναι:

Runs	Learning Rate	Batch Size	Decay Ratio	Neurons	CG moieties	Rho	Total Loss
1	0.05	100	0.03	4	1	0.004	0.009
2	0.05	100	0.08	7	2	0.004	0.79
3	0.03	100	0.08	8	1	0.007	0.011
4	0.03	100	0.03	8	1	0.001	0.009

Πίνακας 6.5: Αποτελέσματα και βέλτιστες τιμές υπερπαραμέτρων για την πρώτη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα στυρένιο

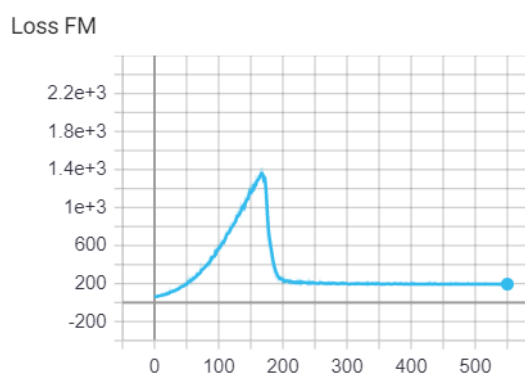
Παρατηρούμε ότι, παρόλο που αυξήθηκε ο αριθμός των νευρώνων του Encoder σε τρεις από τις τέσσερις εκτελέσεις του αλγορίθμου, ο αριθμός των "ενεργών" αδροποιημένων μονάδων είναι ξανά 1. Επίσης και στις τέσσερις περιπτώσεις η τιμή που επιλέχθηκε για την παράμετρο batch size είναι η μέγιστη δυνατή και στη συγκεκριμένη περίπτωση το 100. Για την περαιτέρω διερεύνηση των αποτελεσμάτων επιλέγονται οι αντιπροσωπευτικές περιπτώσεις 2 και 3. Αρχικά παρουσιάζονται τα αποτελέσματα από το δεύτερο τεστ.

Το διάγραμμα του κόστους ανακατασκευής συναρτήσει των επαναλήψεων για την δεύτερη δοκιμή είναι:



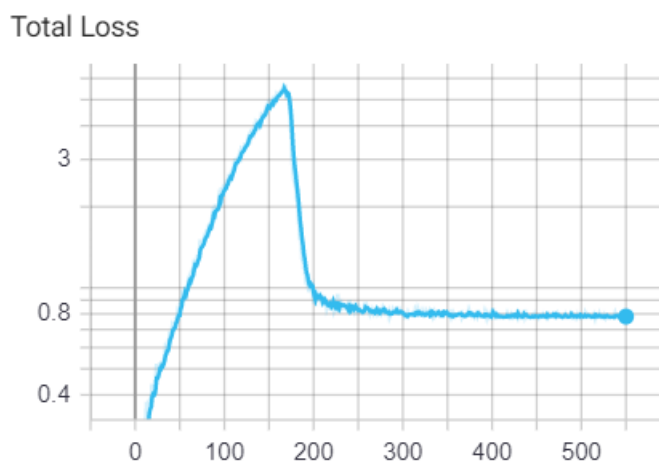
Εικόνα 6.13: Γραφική παράσταση του κόστους ανακατασκευής συναρτήσει των επαναλήψεων για το στρένιο χωρίς περιστροφές

Το διάγραμμα του κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσει των επαναλήψεων για την δεύτερη δοκιμή είναι:



Εικόνα 6.14: Γραφική παράσταση του κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσει των επαναλήψεων για το στρένιο χωρίς περιστροφές

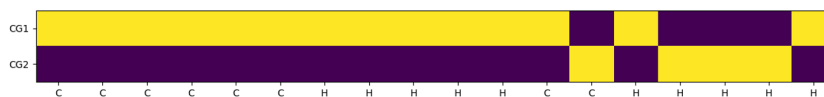
Και τέλος το διάγραμμα που προκύπτει για την συνολική συνάρτηση κόστους της δεύτερης δοκιμής είναι:



Εικόνα 6.15: Γραφική παράσταση του συνολικού κόστους συναρτήσεων των επαναλήψεων για το στυρένιο χωρίς περιστροφές

Από τα διαγράμματα φαίνεται πως υπάρχει αρκετά ικανοποιητική σύγκλιση του κόστους στις 550 επαναλήψεις. Το κριτήριο τερματισμού ικανοποιείται για ακόμη μία φορά προτού οι επαναλήψεις να φτάσουν στο τέλος τους. Επίσης, το κόστος που προέρχεται από τις δυνάμεις για ακόμη μία φορά υπερσχύει κατά πολύ έναντι του σφάλματος επανακατασκευής. Ακόμη και μετά από τον πολλαπλασιασμό με την υπερπαράμετρο  $\rho$ , το κόστος λόγω δυνάμεων είναι δύο τάξεις μεγέθους μεγαλύτερο και κυριαρχεί στην διαμόρφωση της τιμής της συνάρτησης κόστους. Όπως φαίνεται και στον πίνακα των αποτελεσμάτων, ο Encoder αρχικά έχει επιλέξει 7 νευρώνες. Τελικά από τους επτά νευρώνες γίνεται χρήση μόνο των δύο. Μία διαισθητική εξήγηση πίσω από αυτή την επιλογή είναι ότι κατά την διάρκεια της εκπαίδευσης μηδενίζονται πολλά από τα βάρη του Encoder, διότι οι δυνάμεις που προκαλούνται από τις αδροποιημένες μονάδες μεγαλώνουν όσο μεγαλώνει και ο αριθμός τους. Έτσι αναζητείται και επιτυγχάνεται ένα ικανοποιητικό ελάχιστο της συνάρτησης κόστους σε ένα σημείο που χρησιμοποιούνται μόνο δύο από τους επτά νευρώνες άρα έχουμε και μόνο δύο αδροποιημένες μονάδες.

Ο πίνακας κωδικοποίησης που προέκυψε από την συγκεκριμένη δοκιμή είναι:



Εικόνα 6.16: Πίνακας κωδικοποίησης για το στυρένιο χωρίς περιστροφές

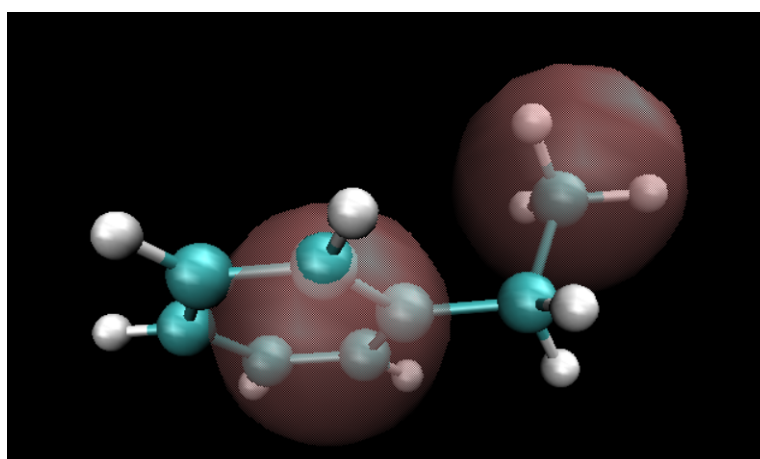
Από τον πίνακα κωδικοποίησης φαίνεται ότι τα άτομα τοποθετούνται στις αδροποιημένες μονάδες 1 και 2 με πιθανότητα 1. Οι κατανομές είναι αρκετά ξεκάθαρες και δεν εμφανίζονται ενδιάμεσες τιμές για τις πιθανότητες.

Οι συνδέσεις μεταξύ των αδροποιημένων μονάδων περιγράφονται από τον πίνακα συνδέσεων που ακολουθεί:

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Είναι η πιο απλή μορφή πίνακα σύνδεσης που υπάρχει, αφού έχουμε μόνο δύο αδροποιημένες μονάδες που είναι συνδεδεμένες μεταξύ τους.

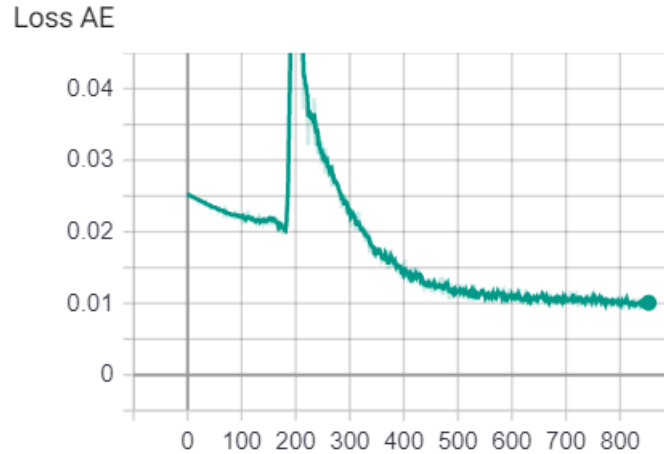
Η ταυτόχρονη αναπαράσταση της αδροποιημένης μονάδας και του συστήματος μέσω του VMD είναι:



Εικόνα 6.17: Ταυτόχρονη απεικόνιση πλήρους ατομιστικού και αδροποιημένου συστήματος για το στυρένιο χωρίς περιστροφές

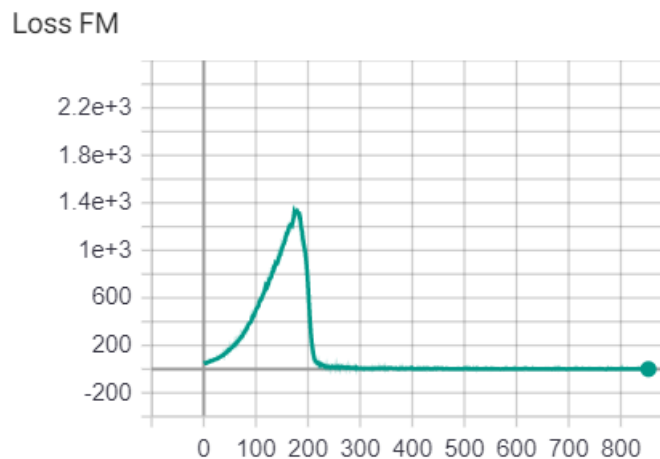


Συνεχίζουμε με την παρουσίαση των αποτελεσμάτων από το τρίτο τεστ. Το διάγραμμα του κόστους ανακατασκευής συναρτήσει των επαναλήψεων για της τρίτης δοκιμής είναι:



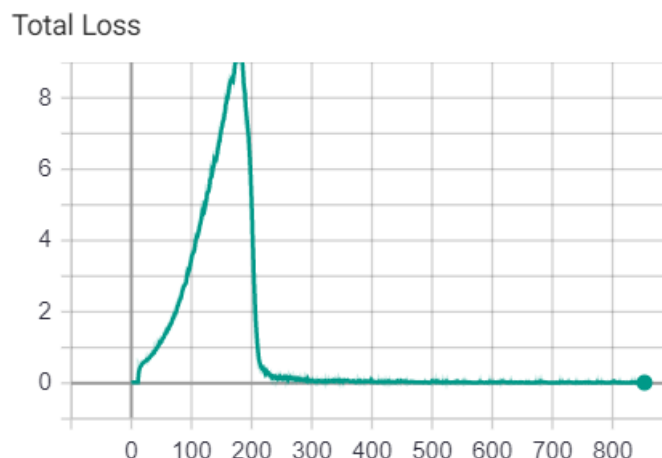
Εικόνα 6.18: Γραφική παράσταση του κόστους ανακατασκευής συναρτήσει των επαναλήψεων για το στυρένιο χωρίς περιστροφές(2)

Το διάγραμμα του κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσει των επαναλήψεων για το τρίτο τεστ είναι:



Εικόνα 6.19: Γραφική παράσταση του κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσει των επαναλήψεων για το στυρένιο χωρίς περιστροφές(2)

Και τέλος το διάγραμμα που προκύπτει για την συνολική συνάρτησή-κόστους του τρίτου τεστ είναι:



Εικόνα 6.20: Γραφική παράσταση του συνολικού κόστους συναρτήσει των επαναλήψεων για το στυρένιο χωρίς περιστροφές(2)

Από την παρατήρηση των γραφικών παραστάσεων φαίνεται πως υπάρχει σύγκλιση τόσο στο κόστος ανακατασκευής, όσο και στο κόστος που προέρχεται από τις δυνάμεις και κατ' επέκταση ίδια συμπεριφορά παρατηρείται και στο συνολικό κόστος. Παρατηρούμε ότι επιτυγχάνεται πολύ καλή σύγκλιση της συνάρτησης κόστους για ακόμη μία φορά. Στο μεγαλύτερο μέρος της βελτιστοποίησης το κόστος που προέρχεται από τις δυνάμεις κυριαρχεί. Στην συνέχεια κοντά στις 200 επαναλήψεις το μοντέλο οδηγείται στην επιλογή της χρήσης μίας μόνο αδροποιημένης μονάδας και η συνάρτηση κόστους φτάνει σε ένα πολύ ικανοποιητικό ελάχιστο στο οποίο και συγκλίνει. Σημειώνεται πως χρησιμοποιήθηκαν οι 860 από τις 1000 συνολικά επαναλήψεις.

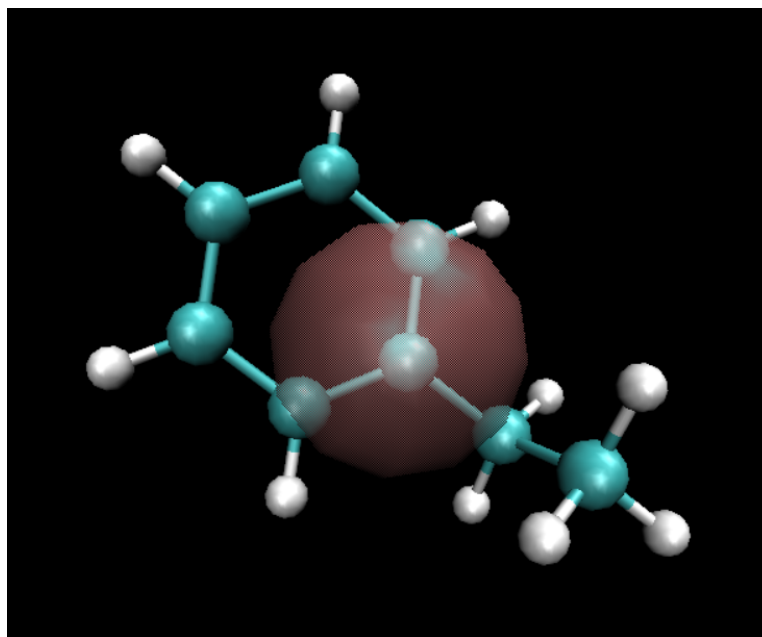
Όπως είναι αναμενόμενο από την στιγμή που χρησιμοποιείται μία μονο αδροποιημένη μονάδα, ο πίνακας κωδικοποίησης είναι ο παρακάτω:

cg1																			
	C	C	C	C	C	C	H	H	H	H	H	C	C	H	H	H	H	H	

Εικόνα 6.21: Πίνακας κωδικοποίησης για το στυρένιο χωρίς περιστροφές(2)

Όλα τα άτομα του στυρενίου αντιστοιχίζονται στην μία και μοναδική αδροποιημένη μονάδα με πιθανότητα 1.

Με βάση όσα αναφέρθηκαν παραπάνω η απεικόνιση μέσω VMD για το τρίτο τεστ του στυρενίου είναι:



Εικόνα 6.22: Ταυτόχρονη απεικόνιση πλήρους ατομιστικού και αδροποιημένου συστήματος για το στυρένιο χωρίς περιστροφές(2)

Τα αποτελέσματα που προέκυψαν από ακριβώς το ίδιο πλέγμα υπερπαραμέτρων και για το ίδιο σχήμα βελτιστοποίησης αλλά με προσθήκη τριών διαφορετικών περιστροφών στην αρχική διαμόρφωση είναι :

Runs	Learning Rate	Batch Size	Decay Ratio	Neurons	CG moieties	Rho	Total Loss
1	0.03	60	0.03	7	1	0.004	0.02
2	0.04	100	0.03	5	1	0.004	0.009
3	0.04	100	0.03	5	1	0.007	0.009
4	0.04	100	0.03	3	1	0.001	0.01

Πίνακας 6.6: Αποτελέσματα και βέλτιστες τιμές υπερπαραμέτρων για την πρώτη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα στυρένιο, με εφαρμογή περιστροφών

Παρατηρείται ότι σε όλες τις περιπτώσεις υπάρχει μόνο μία ενεργή αδροποιημένη μονάδα για όλα τα συστήματα, παρόλο που σε κάθε περίπτωση οι νευρώνες του Encoder είναι περισσότεροι. Οι τιμές των συναρτήσεων κόστους είναι σε πολύ χαμηλά επίπεδα γεγονός που είναι απολύτως αναμενόμενο, αφού χρησιμοποιείται μία αδροποιημένη μονάδα σε κάθε περίπτωση. Από αυτή την δοκιμή επίσης, επιβεβαιώνεται μία τάση για το

batch size να επιλέγει μεγαλύτερες δυνατές τιμές. Αν λάβουμε υπόψιν και τα δεδομένα από τον προηγούμενο πίνακα για το στυρένιο, φαίνεται ότι 7 στις 8 φορές έχει γίνει επιλογή της τιμής 100, 1 στις 8 έχει επιλεχθεί η τιμή 60 και καμία η τιμή 20. Η επιλογή μεγαλύτερης τιμής για το batch size είναι απολύτως λογικό να δίνει όσο χαμηλότερο κόστος γίνεται, αφού, όσο περισσότερα δεδομένα χρησιμοποιούνται από μία παρτίδα, τόσο καλύτερη προσέγγιση της βαθμίδας της συνάρτησης κόστους γίνεται κατά την εκτέλεση της μεθόδου mini-batch SGD.

Γενικότερα βγαίνει το συμπέρασμα πως για ακόμη μία φορά (όπως και στο αιθάνιο) οι περιστροφές δεν επηρέασαν τα τελικά αποτελέσματα του μοντέλου. Τα αποτελέσματα των δοκιμών που διεξήχθησαν με εφαρμογή περιστροφών είναι πολύ κοντά στα αποτελέσματα από τις αντίστοιχες δοκιμές χωρίς περιστροφές. Βέβαια, όπως και στην περίπτωση του αιθανίου, το σύστημα που εξετάστηκε είναι αρκετά απλό για να εξαχθούν γενικά συμπεράσματα σε σχέση με την επίδραση των περιστροφών στα τελικά αποτελέσματα του μοντέλου.

### 6.3 Πενταμερές πολυαιθυλενίου

Στο πενταμερές πολυαιθυλενίου εκτελέστηκαν τεστ που διερευνούν σχεδόν όλες τις περιπτώσεις των συναρτήσεων κόστους. Επίσης πραγματοποιήθηκαν δοκιμές και για τα δύο σχήματα υπερπαραμέτρων και εξετάστηκαν διαφορετικές τάξεις μεγέθους για τις σημαντικότερες από αυτές. Τα αποτελέσματα που ακολουθούν θα οργανωθούν με βάση την επιλογή συνάρτησης κόστους που έγινε σε κάθε περίπτωση.

#### 6.3.1 Συνάρτηση κόστους $\mathcal{L}_1$

Για τη συνάρτηση κόστους  $\mathcal{L}_1$  πραγματοποιήθηκαν δοκιμές χρησιμοποιώντας το πρώτο αλλά και το δεύτερο σχήμα βελτιστοποίησης, αντίστοιχα. Οι πρώτες δοκιμές που πραγματοποιήθηκαν έγιναν με το πρώτο σχήμα βελτιστοποίησης, κατά το οποίο οι υπερπαραμέτροι χωρίζονται σε δύο τριάδες με τον τρόπο που αναφέρθηκε σε προηγούμενα κεφάλαια. Ακολουθεί το πλέγμα που χρησιμοποιήθηκε για την περίπτωση του πρώτου σχήματος βελτιστοποίησης υπερπαραμέτρων:

Υπερπαραμέτρος	Αρχική τιμή	Τελική Τιμή	Μήκος Βήματος
Learning Rate	0.03	0.05	0.01
Batch size	20	100	40
Decay ratio	0.03	0.08	0.05
Encoder's neurons	5	10	1
Epochs	2000	2000	0
$\rho$	0.001	0.007	0.003

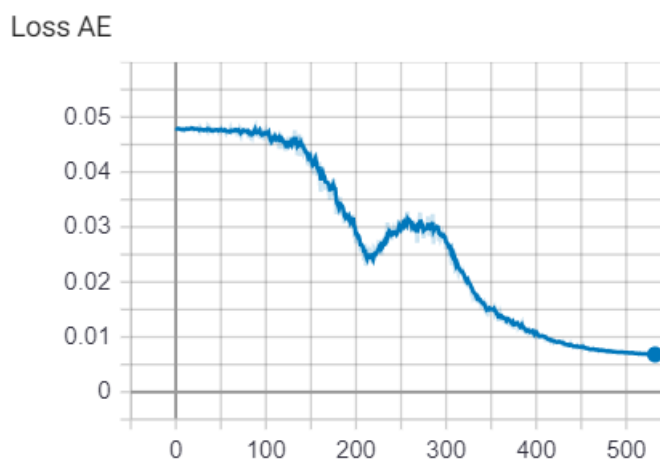
Πίνακας 6.7: Πλέγμα υπερπαραμέτρων για την πρώτη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα πολυαιθυλένιο πέντε μονομερών

Όπως φαίνεται από τον παραπάνω πίνακα, για το πολυαιθυλένιο σαν ελάχιστη τιμή για τον αριθμό νευρώνων του Encoder επιλέχτηκε το 5 και σαν μέγιστη τιμή το 10. Η επιλογή αυτή στηρίχτηκε στο γεγονός ότι το πολυαιθυλένιο με πέντε μονομερή που χρησιμοποιήθηκε αποτελείται από 32 άτομα, άρα έχει αρκετά περισσότερους βαθμούς ελευθερίας από τα προηγούμενα δύο συστήματα που εξετάστηκαν. Εκτελέστηκαν τέσσερις δοκιμές με διαφορετική αρχικοποίηση των βαρών του νευρωνικού δικτύου σε κάθε βήμα και το minimum change και το patience που χρησιμοποιήθηκαν είχαν τιμές 0.01 και 10, αντίστοιχα. Τα αποτελέσματα που προέκυψαν με βάση τα προαναφερθέντα συνοψίζονται στον παρακάτω πίνακα:

Runs	Learning Rate	Batch Size	Decay Ratio	Neurons	CG moieties	Rho	Total Loss
1	0.05	100	0.03	10	3	0.001	0.281
2	0.05	60	0.08	6	2	0.007	1.57
3	0.04	60	0.03	6	3	0.007	1.79
4	0.03	100	0.03	5	2	0.007	1.92

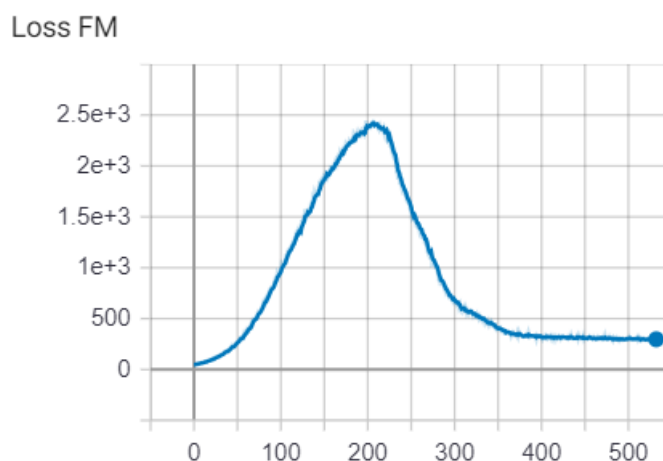
Πίνακας 6.8: Αποτελέσματα και βέλτιστες τιμές υπερπαραμέτρων για την πρώτη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα πολυαιθυλένιο πέντε μονομερών

Από την παρατήρηση του πίνακα αποτελεσμάτων φαίνεται ότι σε καμία από τις περιπτώσεις το μοντέλο δεν καταλήγει στην επιλογή μίας μόνο αδροποιημένης μονάδας. Σε 2 από τις 4 περιπτώσεις επιλέγονται 2 αδροποιημένες μονάδες, ενώ στις άλλες δύο επιλέγονται 3 αδροποιημένες μονάδες. Για άλλη μία φορά επιβεβαιώνεται η τάση επιλογής των μεγαλύτερων τιμών για το batch size για τον ίδιο λόγο που αναλύθηκε στην ενότητα για το στυρένιο. Όπως είναι επόμενο, επειδή το μοντέλο καταλήγει στην επιλογή περισσότερων αδροποιημένων μονάδων, αυξάνονται οι δυνάμεις και έχουμε μεγαλύτερες τιμές για την συνάρτηση κόστους. Από τα αποτελέσματα επιλέγονται να αναλυθούν ως πιο αντιπροσωπευτικά αυτά που αντιστοιχούν στις δοκιμές 1 και 4. Ακολουθεί το διάγραμμα κόστους ανακατασκευής συναρτήσεων των επαναλήψεων για την πρώτη δοκιμή:



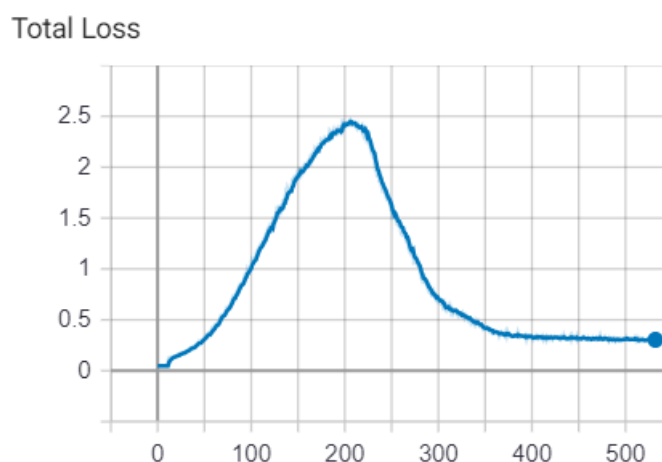
Εικόνα 6.23: Γραφική παράσταση του κόστους ανακατασκευής συναρτήσεων των επαναλήψεων για το πενταμερές πολυαιθυλενίου χωρίς περιστροφές

Συνεχίζοντας, ακολουθεί η γραφική παράσταση του κόστους που προέρχεται από τις δυνάμεις συναρτήσεων των επαναλήψεων:



Εικόνα 6.24: Γραφική παράσταση του κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσει των επαναλήψεων για το πενταμερές πολυαιθυλενίου χωρίς περιστροφές

Και τέλος το διάγραμμα που προκύπτει για την συνολική συνάρτηση κόστους της πρώτης δοκιμής είναι:



Εικόνα 6.25: Γραφική παράσταση του συνολικού κόστους συναρτήσει των επαναλήψεων για το πενταμερές πολυαιθυλενίου χωρίς περιστροφές

Η σύγκλιση και στις τρεις περιπτώσεις είναι αρκετά ικανοποιητική. Επισημαίνεται πως ο όρος των δυνάμεων παίζει για ακόμη μία φορά κυρίαρχο ρόλο στην διαμόρφωση της τελικής τιμής της συνάρτησης κόστους για αυτό και το δεύτερο και το τρίτο διάγραμμα είναι παρόμοια μεταξύ τους. Το κριτήριο τερματισμού ικανοποιείται αρκετά μακριά από το άνω όριο των 2000 επαναλήψεων που έχει τεθεί και συγκεκριμένα κοντά στις 550 επαναλήψεις.

Ο πίνακας κωδικοποίησης που προέκυψε για την συγκεκριμένη δοκιμή είναι είναι:



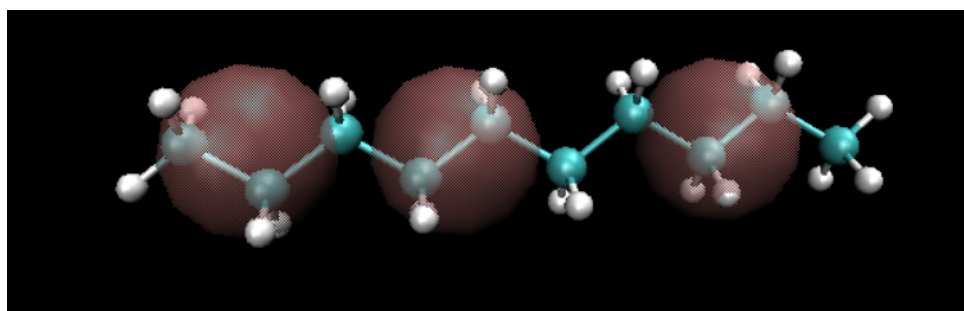
Εικόνα 6.26: Πίνακας κωδικοποίησης για το πενταμερές του πολυαιθυλενίου χωρίς περιστροφές

Ο πίνακας που υποδεικνύει τις συνδέσεις μεταξύ των αδροποιημένων μονάδων είναι:

$$C = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

που δείχνει ότι η αδροποιημένη μονάδα 1 είναι συνδεδεμένη με την αδροποιημένη μονάδα 2 και αυτή με την σειρά της είναι συνδεδεμένη με την 3. Γίνεται σαφές, πως η κατανομή των ατόμων σε αδροποιημένες μονάδες είναι ξεκάθαρη, αφού όλες οι πιθανότητες του πίνακα κωδικοποίησης είναι πολύ κοντά στο 0 και στο 1.

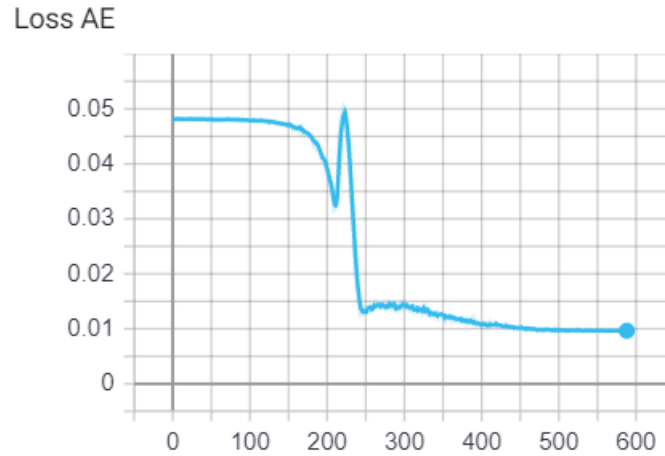
Μία σχηματική αναπαράσταση των παραπάνω μέσω του προγράμματος VMD είναι:



Εικόνα 6.27: Ταυτόχρονη απεικόνιση πλήρους ατομιστικού και αδροποιημένου συστήματος για το πενταμερές πολυαιθυλενίου

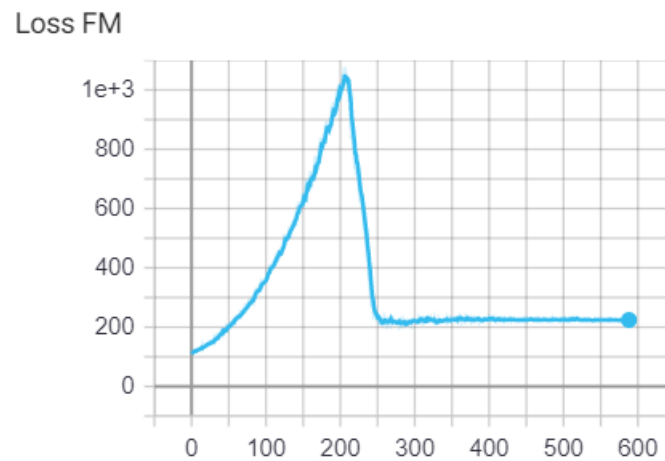


Ακολουθούν τα αποτελέσματα για τη δεύτερη δοκιμή. Το διάγραμμα της συνάρτησης κόστους ανακατασκευής συναρτήσει των επαναλήψεων είναι:



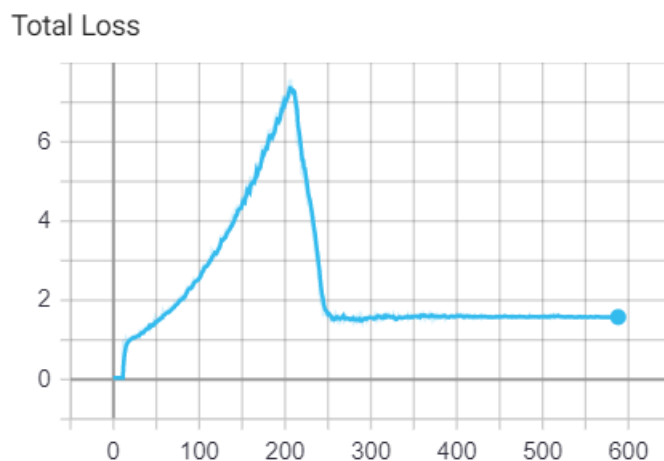
Εικόνα 6.28: Γραφική παράσταση του κόστους ανακατασκευής συναρτήσει των επαναλήψεων για το πενταμερές πολυαιθυλενίου χωρίς περιστροφές(2)

Συνεχίζοντας, ακολουθεί η γραφική παράσταση του κόστους που προέρχεται από τις δυνάμεις συναρτήσει των επαναλήψεων για την δεύτερη δοκιμή:



Εικόνα 6.29: Γραφική παράσταση του κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσει των επαναλήψεων για το πενταμερές πολυαιθυλενίου χωρίς περιστροφές(2)

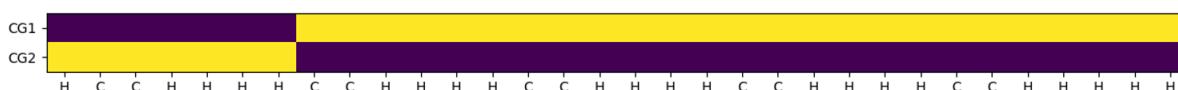
Και τέλος το διάγραμμα που προκύπτει για την συνολική συνάρτηση κόστους της δεύτερης δοκιμής είναι:



Εικόνα 6.30: Γραφική παράσταση του συνολικού κόστους συναρτήσει των επαναλήψεων για το πενταμερές πολυαιθυλενίου χωρίς περιστροφές(2)

Και οι δύο κατηγορίες των συνάρτησης κόστους συγκλίνουν και φτάνουν σε ικανοποιητικά ελάχιστα, ενώ η τιμή της συνάρτησης κόστους καθορίζεται σε μεγάλο ποσοστό από τον όρο των δυνάμεων για ακόμη μία φορά. Το κριτήριο τερματισμού ικανοποιείται κοντά στις 600 επαναλήψεις.

Ο πίνακας κωδικοποίησης που προκύπτει για το δεύτερο τεστ είναι:



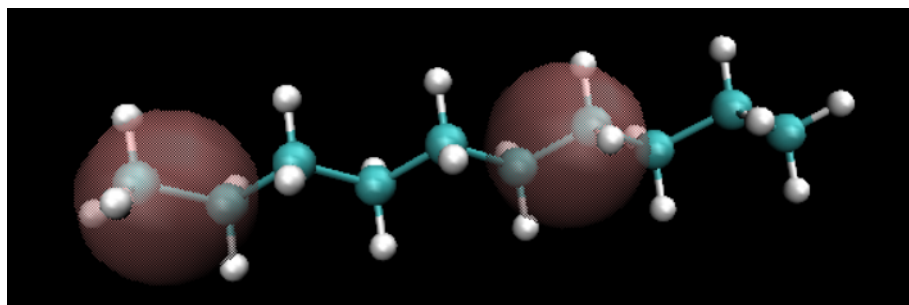
Εικόνα 6.31: Πίνακας κωδικοποίησης για το πενταμερές του πολυαιθυλενίου χωρίς περιστροφές(2)

Και ο πίνακας συνδέσεων μεταξύ των αδροποιημένων μονάδων:

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Έχουμε αρκετά ξεκάθαρη κατανομή των ατόμων στις 2 αδροποιημένες μονάδες οι οποίες προφανώς είναι συνδεδεμένες μεταξύ τους.

Η οπτική περιγραφή της αδροποίησης που πραγματοποιήθηκε στην δεύτερη δοκιμή συνοψίζεται από την αναπαράσταση μέσω του VMD που ακολουθεί:



Εικόνα 6.32: Ταυτόχρονη απεικόνιση πλήρους ατομιστικού και αδροποιημένου συστήματος για το πενταμερές πολυαιθυλενίου χωρίς περιστροφές

Προχωρώντας παρατίθενται τα αποτελέσματα από την εκτέλεση τεσσάρων δοκιμών σε ακριβώς ίδιες συνθήκες, αλλά με την εφαρμογή περιστροφών. Τα αποτελέσματα που προέκυψαν συνοψίζονται στον πίνακα που ακολουθεί:

Runs	Learning Rate	Batch Size	Decay Ratio	Neurons	CG moieties	Rho	Total Loss
1	0.04	20	0.03	10	2	0.001	0.14
2	0.04	100	0.03	7	2	0.007	1.36
3	0.03	100	0.08	6	2	0.007	1.64
4	0.03	100	0.03	6	2	0.004	0.94

Πίνακας 6.9: Αποτελέσματα και βέλτιστες τιμές υπερπαραμέτρων για την πρώτη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα πολυαιθυλένιο πέντε μονομερών, με εφαρμογή περιστροφών

Παρατηρούμε ότι σε όλες τις περιπτώσεις το μοντέλο καταλήγει στην επιλογή δύο αδροποιημένων μονάδων. Με βάση και τα αποτελέσματα από τις δοκιμές χωρίς περιστροφές, φαίνεται πως οι δύο αδροποιημένες μονάδες είναι μία επιλογή που προτιμάται για το πολυαιθυλένιο από το συγκεκριμένο μοντέλο. Οι τιμές της συνάρτησης κόστους κυμαίνονται σε παρόμοια επίπεδα με τις αντίστοιχες για την περίπτωση των περιστροφών, εκτός από την τιμή της συνάρτησης κόστους της πρώτης περιστροφής, που είναι αρκετά μικρότερη. Σε 3 από τις 4 δοκιμές για το batch size επιλέγεται η τιμή 100, ενώ σε μία περίπτωση επιλέγεται η τιμή 20. Λαμβάνοντας υπόψιν και τα αποτελέσματα από δοκιμές σε προηγούμενα συστήματα είναι αρκετά ασφαλές να υποτεθεί ότι η τιμή 100 είναι η ιδανικότερη από τις τρεις του πλέγματος με την συγκεκριμένη συνάρτηση κόστους στο συγκεκριμένο εύρος υπερπαραμέτρων και δεδομένης της επιλογής του πρώτου σχήματος βελτιστοποίησης, αφού το μοντέλο επιλέγει την συγκεκριμένη τιμή στην πλειοψηφία των περιπτώσεων.

Ο χρόνος εκτέλεσης για τις τέσσερις δοκιμές με χρήση περιστροφών ανέρχεται στις 11 ώρες και 21 λεπτά ενώ χωρίς, στις 7 ώρες και 18 λεπτά.

Στην συνέχεια ακολούθησαν δοκιμές δίχως περιστροφές και χωρίς να γίνει κατασκευή κάποιου πλέγματος. Δηλαδή, όλες οι τιμές των υπερπαραμέτρων διατηρήθηκαν σταθερές. Σκοπός ήταν η διερεύνηση της συμπεριφοράς του μοντέλου σε περίπτωση που η παράμετρος  $\rho$  έχει αρκετά μεγαλύτερη τιμή από αυτές που είχε σε προηγούμενα τεστ και μάλιστα δύο τάξεις μεγέθους μεγαλύτερη. Για τον σκοπό αυτό έγινε επιλογή των υπερπαραμέτρων που εμφανίζονται στον πίνακα που ακολουθεί:

Learning Rate	0.1
Batch size	25
Decay ratio	0.1
Encoder's neurons	19
Epochs	5000
$\rho$	0.5

Πίνακας 6.10: Σταθερές τιμές υπερπαραμέτρων για την πρώτη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα πενταμερές πολυαιθυλενίου

Ο αλγόριθμος επιλέχτηκε να τρέξει με τιμή minimum change 0.001 και τιμή υπομονής 10. Η επιλογές για τόσο μεγάλο αριθμό επαναλήψεων και τόσο μικρό min change βασίστηκαν στο γεγονός ότι η παράμετρος  $\rho$  λειτουργεί ως βάρος για τον όρο των δυνάμεων και με την αύξηση της τιμής της σε τόσο μεγάλο βαθμό καθιστά την διαδικασία της βελτιστοποίησης ακόμη πιο δύσκολη και χρονοβόρα. Εκτελέστηκαν τρεις δοκιμές με τυχαία αρχικοποίηση των παραμέτρων του νευρωνικού σε κάθε μία. Τα αποτελέσματα που προέκυψαν από την εκτέλεση των τριών δοκιμών είναι:

Runs	CG moieties	Total Loss
1	1	0.009
2	1	0.014
3	1	0.012

Πίνακας 6.11: Αποτελέσματα για την πρώτη συνάρτηση κόστους στο σύστημα πενταμερές πολυαιθυλενίου

Σε όλες τις περιπτώσεις παρόλο που το νευρωνικό έχει αρχικοποιηθεί με 19 νευρώνες καταλήγει σε μία αδροποιημένη μονάδα ως αποτέλεσμα ! Οι προηγούμενες δοκιμές που εκτελέστηκαν με την χρήση της συνάρτησης κόστους 1 για το πολυαιθυλένιο έδιναν σταθερά αποτελέσματα με

τουλάχιστον δύο αδροποιημένες μονάδες. Βέβαια στις προηγούμενες περιπτώσεις είχε γίνει χρήση μεγαλύτερης τιμής για το minimum change, γεγονός που μικραίνει την ακρίβεια της βελτιστοποίησης. Σε συνδυασμό με τις παρατηρήσεις που έγιναν στα συστήματα αιθάνιο και στυρένιο, βγαίνει το συμπέρασμα πως χρησιμοποιώντας την τρέχουσα μορφή συνάρτησης κόστους, αν πραγματοποιηθεί όσο αποτελεσματικότερη βελτιστοποίηση γίνεται σε ένα σύστημα όπου το κόστος λόγω δυνάμεων είναι πολύ μεγαλύτερο από το αντίστοιχο της ανακατασκευής, τότε αυτό θα καταλήξει με μία αδροποιημένη μονάδα, όσοι νευρώνες και να έχουν επιλεγεί για το νευρωνικό δίκτυο που χρησιμοποιείται. Μία πιθανή ερμηνεία είναι ότι το νευρωνικό δίκτυο κατά την διάρκεια της εκπαίδευσης "αντιλαμβάνεται" ότι ο μόνος τρόπος να "αντιμετωπίσει" τον όρο των δυνάμεων είναι να θέσει ίσα με μηδέν τα βάρη των περισσότερων νευρώνων, προκειμένου να σταματήσουν έτσι να ασκούνται δυνάμεις μεταξύ των αδροποιημένων μονάδων. Για αυτό τον λόγο στις προηγούμενες δοκιμές, όπου το  $\rho$  ήταν τάξης μεγέθους  $10^{-3}$  το μοντέλο κατέληγε συστηματικά σε περισσότερες από μία αδροποιημένες μονάδες, ενώ σε αυτή την περίπτωση όπου ήταν δύο τάξεις μεγέθους μεγαλύτερο το αποτέλεσμα ήταν πάντα μία αδροποιημένη μονάδα.

Προκειμένου να αντιμετωπιστεί το φαινόμενο που περιγράφηκε, κρίθηκε σκόπιμο να γίνουν δοκιμές και με τις συναρτήσεις κόστους  $\mathcal{L}_2, \mathcal{L}_4$  και  $\mathcal{L}_5$ . Θυμίζουμε ότι στην έκφραση  $\mathcal{L}_2$  απουσιάζουν πλήρως οι δυνάμεις, ενώ στις  $\mathcal{L}_4$  και  $\mathcal{L}_5$  και το κόστος ανακατασκευής και το κόστος λόγω των δυνάμεων είναι κανονικοποιημένα.

Επιστρέφοντας στον σχολιασμό των αποτελεσμάτων των τριών δοκιμών που εκτελέστηκαν, όλα τα διαγράμματα και τα αποτελέσματα που κατασκευάστηκαν, είναι παρόμοια με αυτά που προέκυψαν για το στυρένιο και το αιθάνιο στις περιπτώσεις της μίας αδροποιημένης μονάδας. Σημειώνεται, επίσης, πως πραγματοποιήθηκαν τρεις ακόμη δοκιμές με τις ίδιες έξι σταθερές τιμές για τις υπερπαραμέτρους, αλλά αυτή την φορά με  $\rho = 0.8$ , οι οποίες κατέληξαν σε αποτελέσματα που μοιάζουν σε μεγάλο βαθμό με αυτά που παρουσιάστηκαν παραπάνω. Πιο συγκεκριμένα, προέκυψαν πολύ μικρές τιμές για την συνάρτηση κόστους και κάθε φορά γινόταν επιλογή μίας αδροποιημένης μονάδας.

### 6.3.2 Συνάρτηση κόστους $\mathcal{L}_2$

Κάνοντας χρήση της συνάρτησης κόστους  $\mathcal{L}_2$  (5.14), εκτελέστηκαν για το πολυαιθυλένιο πέντε μονομερών τρεις διαφορετικές δοκιμές, όπου σε κάθε μία επιλέχτηκαν τυχαίες αρχικοποιήσεις για τα βάρη του νευρωνικού δικτύου. Υπενθυμίζουμε ότι η συνάρτηση κόστους  $\mathcal{L}_2$  περιλαμβάνει μόνο τον όρο της επανακατασκευής δυνάμεων επομένως είναι εντελώς απαλλαγμένη από δυνάμεις. Στις δοκιμές αυτές χρησιμοποιήθηκαν σταθερές τιμές και για όλες τις υπερπαραμέτρους. Εφόσον πρόκειται για περίπτωση όπου η συνεισφορά των δυνάμεων είναι μηδενική η υπερπαραμέτρος  $\rho$  δεν χρησιμοποιείται. Πραγματοποιήθηκαν δύο τριάδες δοκιμών, όπου κάθε μία εξέταζε διαφορετική τιμή για τον αριθμό των νευρώνων του Encoder. Για τους νευρώνες του Encoder επιλέχτηκαν οι τιμές 9 και 15. Η επιλογή τόσο υψηλών τιμών για την εκτέλεση των δοκιμών αποσκοπεί στην διερεύνηση του κατά πόσο θα βρίσκεται κοντά ο αριθμός των νευρώνων με τον αριθμό αδροποιημένων μονάδων απουσία δυνάμεων. Ο πίνακας με τις τιμές που επιλέχθηκαν και στις δύο τριάδες δοκιμών παρουσιάζεται παρακάτω:

Learning Rate	0.1
Batch size	100
Decay ratio	0.1
Encoder's neurons	9,15
Epochs	5000

Πίνακας 6.12: Σταθερές τιμές υπερπαραμέτρων για την δεύτερη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα πενταμερές πολυαιθυλενίου (2)

Σημειώνεται πως έγιναν δύο διαφορετικά σύνολα δοκιμών όπου η πρώτη είχε σαν τιμή νευρώνων του Encoder το 9 και η δεύτερη το 15. Δηλαδή δεν πραγματοποιήθηκε διαδικασία αναζήτησης πλέγματος και με τις δύο τιμές. Τα αποτελέσματα από την πρώτη και την δεύτερη τριάδα δοκιμών παρουσιάζονται παρακάτω:

Runs	CG moieties	Total Loss
1	9	0.025
2	9	0.013
3	9	0.005

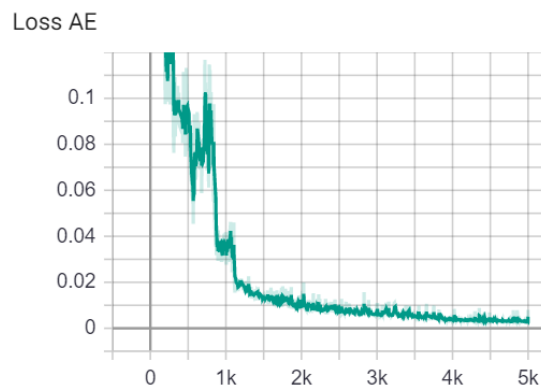
Πίνακας 6.13: Αποτελέσματα για την δεύτερη συνάρτηση κόστους στο σύστημα πενταμερές πολυαιθυλενίου (2)

Runs	CG moieties	Total Loss
1	15	0.048
2	15	0.055
3	15	0.057

Πίνακας 6.14: Αποτελέσματα για την δεύτερη συνάρτηση κόστους στο σύστημα πενταμερές πολυαιθυλενίου (3)

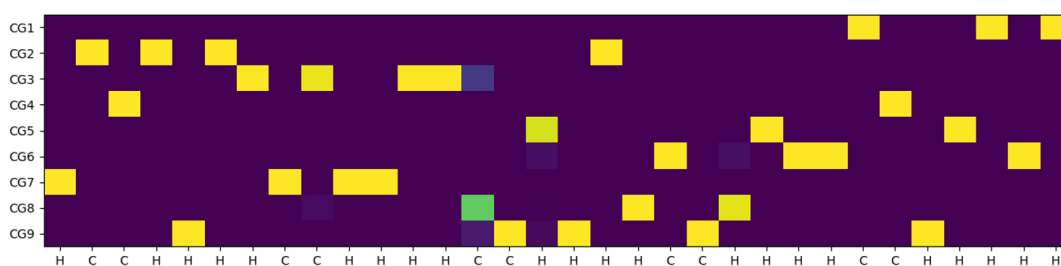
Παρατηρούμε ότι το μοντέλο σε κάθε δοκιμή επιλέγει αριθμό αδροποιημένων μονάδων ακριβώς ίδιο με τον αριθμό των νευρώνων του Encoder. Το παραπάνω φαινόμενο ερμηνεύεται από την απουσία του κόστους εξαιτίας των δυνάμεων. Από την στιγμή που δεν είναι ενεργός ο όρος του κόστους που σχετίζεται με τις δυνάμεις, όσο μεγάλος αριθμός νευρώνων και να επιλεγεί το μοντέλο μπορεί να προβεί σε ελαχιστοποίηση της συνάρτησης κόστους(μόνο κόστος ανακατασκευής) χρησιμοποιώντας όλους τους διαθέσιμους νευρώνες. Στις περιπτώσεις που υπάρχουν δυνάμεις είναι λογικό πως όσο περισσότεροι ενεργοί νευρώνες υπάρχουν τόσο περισσότερες είναι και οι αδροποιημένες μονάδες που αλληλεπιδρούν. Όταν το κόστος λόγω δυνάμεων είναι πολύ μεγάλο, ο μόνος τρόπος να το μειώσει το σύστημα είναι πραγματοποιώντας διαγραφή βαρών και έτσι καταλήγουμε πάντα σε μικρότερο αριθμό αδροποιημένων μονάδων από τον αριθμό των νευρώνων του Encoder.

Από τις έξι στο σύνολο δοκιμές θα γίνει ανάλυση των αποτελεσμάτων της τρίτης από την πρώτη τριάδα δοκιμών. Παρακάτω ακολουθεί το διάγραμμα του κόστους ανακατασκευής (ή ισοδύναμα το συνολικό κόστος) συναρτήσεως των επαναλήψεων για την δοκιμή αυτή:



Εικόνα 6.33: Γραφική παράσταση του κόστους ανακατασκευής συναρτήσεως των επαναλήψεων για το πενταμερές πολυαιθυλενίου για την δεύτερη συνάρτηση κόστους

Παρατηρούμε ότι το κόστος φτάνει πολύ κοντά στο μηδέν όταν εξαντλούνται οι 5000 επαναλήψεις. Παρόλο που η σύγκλιση είναι ικανοποιητική, παρατηρούνται ταλαντώσεις γύρω από τη βέλτιστη τιμή του κόστους. Στην συνέχεια, ακολουθεί ο πίνακας κωδικοποίησης που προέκυψε στο τέλος της διαδικασίας της βελτιστοποίησης για την τρίτη δοκιμή:



Εικόνα 6.34: Πίνακας κωδικοποίησης για το πενταμερές του πολυαιθυλενίου για την δεύτερη συνάρτηση κόστους

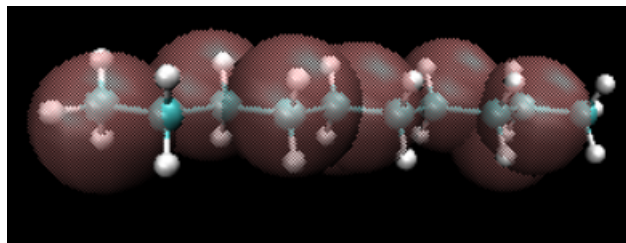
Παρατηρούμε ότι οι πιθανότητες ανάθεσης ενός από τους άνθρακες είναι μοιρασμένες ανάμεσα στις αδροποιημένες μονάδες 3 και 8. Ωστόσο τελικά ανατίθεται στην όγδοη αδροποιημένη μονάδα για την οποία εμφανίζει και την μεγαλύτερη πιθανότητα.

Παρακάτω ακολουθεί ο πίνακας που περιγράφει τις συνδέσεις μεταξύ των αδροποιημένων μονάδων:

$$C = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Τέλος ακολουθεί η ταυτόχρονη αναπαράσταση του ατομιστικού συστήματος με το αδροποιημένο με χρήση του προγράμματος VMD :





Εικόνα 6.35: Ταυτόχρονη απεικόνιση πλήρους ατομιστικού και αδροποιημένου συστήματος για το πενταμερές πολυαιθυλενίου στις δοκιμές με χρήση της δεύτερης συνάρτησης κόστους

### 6.3.3 Συνάρτηση κόστους $\mathcal{L}_4$

Με την χρήση της  $\mathcal{L}_4$  (5.16) ως συνάρτησης κόστους, πραγματοποιήθηκαν ποικίλες δοκιμές διατηρώντας σταθερό πλέγμα υπερπαραμέτρων σε κάθε περίπτωση. Πιο συγκεκριμένα, πραγματοποιήθηκαν τρεις τριάδες δοκιμών, όπου σε κάθε μία έγινε αλλαγή μόνο μίας ποσότητας με σκοπό τη διερεύνηση της επίδρασής της στα αποτελέσματα σε κάθε περίπτωση. Ο πίνακας με τις τιμές των υπερπαραμέτρων που χρησιμοποιήθηκαν στην πρώτη τριάδα δοκιμών ακολουθεί παρακάτω:

Learning Rate	0.1
Batch size	100
Decay ratio	0.1
Encoder's neurons	19
Epochs	2000
$\rho$	0.5

Πίνακας 6.15: Σταθερές τιμές υπερπαραμέτρων για την τέταρτη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα πενταμερές πολυαιθυλενίου

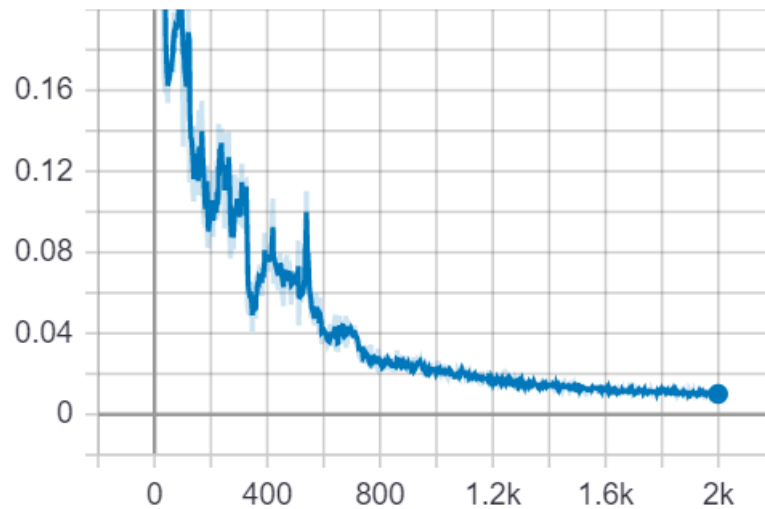
Με την επιλογή της τιμής 0.5 για το  $\rho$  δίνουμε ίδια βαρύτητα και στους δύο όρους της συνάρτησης κόστους. Σημειώνεται πως και για αυτή την τριάδα δοκιμών αλλά και για τις επόμενες δύο που έπονται χρησιμοποιήθηκε ως minimum change η τιμή 0.001 και ως υπομονή η τιμή 10. Για ακόμη μία φορά χρησιμοποιήθηκε μεγαλύτερη τιμή για τον αριθμό των νευρώνων του νευρωνικού δικτύου. Με τη χρήση της τέταρτης έκφρασης της συνάρτησης κόστους όπου οι δυνάμεις είναι κανονικοποιημένες, αναμένεται ο τελικός αριθμός των αδροποιημένων μονάδων να είναι πιο κοντά στον αριθμό των νευρώνων του Encoder. Τα αποτελέσματα που προέκυψαν με την χρήση της πρώτης τριάδας δοκιμών παρατίθενται παρακάτω:

Runs	CG moieties	Total Loss
1	17	0.01
2	16	0.39
3	19	0.41

Πίνακας 6.16: Αποτελέσματα για την τέταρτη συνάρτηση κόστους στο σύστημα πενταμερές πολυαιθυλενίου

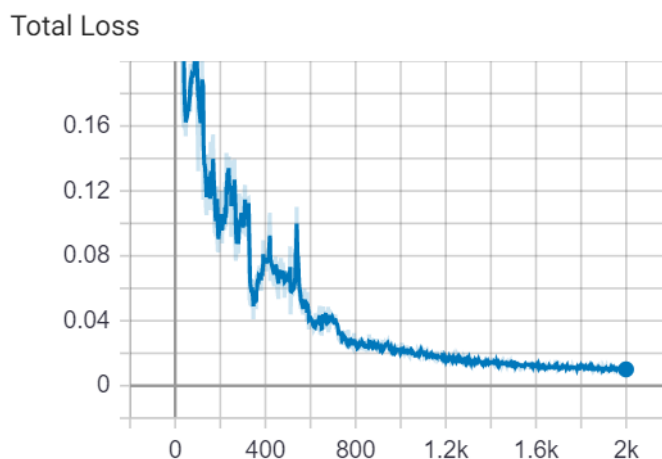
Παρατηρούμε ότι ο αριθμός των αδροποιημένων μονάδων βρίσκεται πράγματι πολύ κοντά στον αριθμό των νευρώνων του Encoder και μάλιστα στην τρίτη δοκιμή είναι ακριβώς ίδιος. Ωστόσο, κανένα από τα αποτελέσματα των τριών δοκιμών 2 και 3 δεν οδήγησε σε πλήρη σύγκλιση της συνάρτησης κόστους και στην περίπτωση 1 δεν πρόλαβαν να ενεργοποιηθούν οι δυνάμεις με βάση το κριτήριο που επεξηγήθηκε στο αντίστοιχο κεφάλαιο. Ακολουθούν τα διαγράμματα από την πρώτη δοκιμή ξεκινώντας από αυτό του κόστους ανακατασκευής συναρτήσει των επαναλήψεων:

Loss AE



Εικόνα 6.36: Γραφική παράσταση του κόστους ανακατασκευής συναρτήσει των επαναλήψεων για το πενταμερές πολυαιθυλενίου για την τέταρτη συνάρτηση κόστους

Το διάγραμμα του συνολικού κόστους συναρτήσει των επαναλήψεων για την πρώτη δοκιμή είναι:



Εικόνα 6.37: Γραφική παράσταση του συνολικού κόστους συναρτήσεων των επαναλήψεων για το πενταμερές πολυαιθυλενίου για την τέταρτη συνάρτηση κόστους

Η καμπύλη του συνολικού κόστους ταυτίζεται με την καμπύλη του κόστους ανακατασκευής. Επομένως, γίνεται εμφανές ότι εξαντλούνται όλες οι επαναλήψεις και δεν έχει ενεργοποιηθεί ακόμη ο όρος του κόστους που σχετίζεται με τις δυνάμεις. Σε συνδυασμό και με την μη σύγκλιση των δοκιμών 2 και 3 για την επόμενη τριάδα δοκιμών αυξάνεται ο αριθμός των επαναλήψεων και ταυτόχρονα μειώνεται ο αριθμός του batch size προκειμένου να πραγματοποιηθεί αποτελεσματικότερη βελτιστοποίηση και να αποφευχθεί το πρόβλημα που προαναφέρθηκε. Σημειώνεται, πως διατηρήθηκαν οι ίδιες τιμές για το minimum change και την υπομονή. Οι επόμενες τιμές υπερπαραμέτρων που επιλέχθηκαν είναι:

Learning Rate	0.1
Batch size	25
Decay ratio	0.1
Encoder's neurons	19
Epochs	5000
$\rho$	0.5

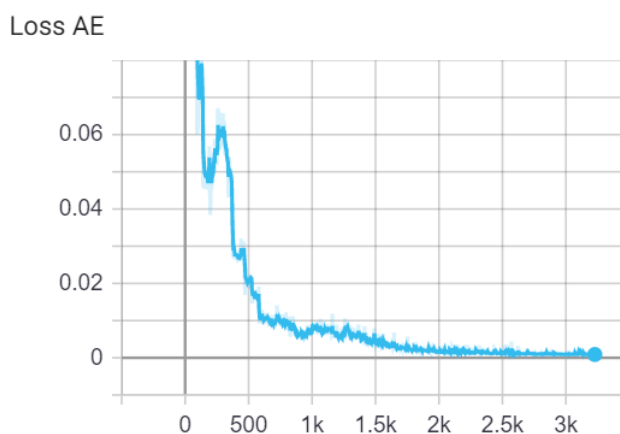
Πίνακας 6.17: Σταθερές τιμές υπερπαραμέτρων για την τέταρτη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα πενταμερές πολυαιθυλενίου (2)

Τα αποτελέσματα των τριών δοκιμών που προέκυψαν από την χρήση των παραπάνω 6 υπερπαραμέτρων είναι:

Runs	CG moieties	Total Loss
1	8	0.15
2	9	0.23
3	9	0.2

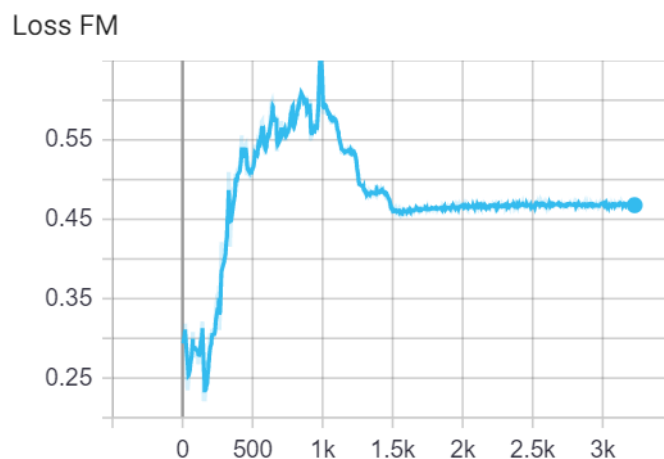
Πίνακας 6.18: Αποτελέσματα για την τέταρτη συνάρτηση κόστους στο σύστημα πενταμερές πολυαιθυλενίου (2)

Παρατηρούμε πως σε όλες τις περιπτώσεις ο αριθμός που επιλέχτηκε για τις αδροποιημένες μονάδες είναι αρκετά μικρότερος σε σχέση με τον αριθμό των νευρώνων που επιλέχτηκε για τον Encoder. Σημειώνεται πως στην πρώτη και στην δεύτερη περίπτωση υπήρξε πλήρης σύγκλιση του κόστους, ενώ στην τελευταία περίπτωση έγινε απότομος τερματισμός των επαναλήψεων λόγω του κριτηρίου τερματισμού που έχει τεθεί, ωστόσο σε πολύ χαμηλή τιμή της συνάρτησης κόστους. Και στις τρεις δοκιμές το κόστος των δυνάμεων πρόλαβε να ενεργοποιηθεί βάσει του κριτηρίου που έχει τεθεί πριν τον τερματισμό των επαναλήψεων. Επιπλέον, σε καμία από τις τρεις δοκιμές δεν αξιοποιήθηκαν όλες οι επαναλήψεις, ενώ στην πρώτη και στην τρίτη περίπτωση χρησιμοποιήθηκαν μέχρι 2000 επαναλήψεις. Επομένως διαπιστώνεται πως ο παράγοντας που έπαιξε τον πιο καθοριστικό ρόλο στην επιτυχή έκβαση της δεύτερης τριάδας δοκιμών είναι η μείωση του batch size από το 100 στο 25. Η ανάλυση που θα ακολουθήσει αφορά την δεύτερη από τις τρεις δοκιμές. Το διάγραμμα του κόστους ανακατασκευής συναρτήσεων των επαναλήψεων για την δεύτερη δοκιμή ακολουθεί παρακάτω:



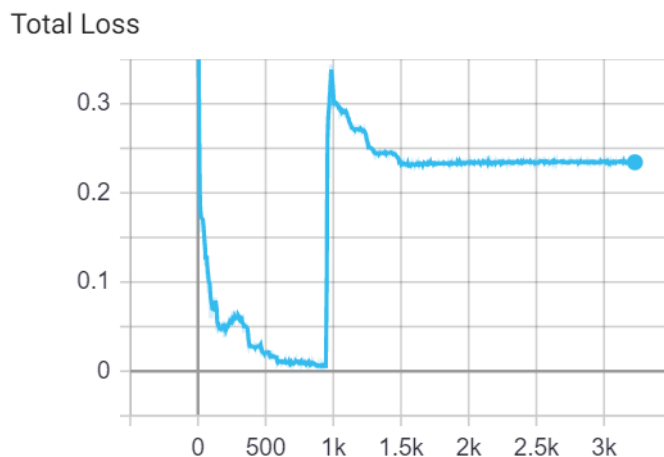
Εικόνα 6.38: Γραφική παράσταση του κόστους ανακατασκευής συναρτήσεων των επαναλήψεων για το πενταμερές πολυαιθυλενίου για την τέταρτη συνάρτηση κόστους(2)

Το διάγραμμα της συναρτήσεως κόστους λόγω δυνάμεων για την δεύτερη δοκιμή ακολουθεί παρακάτω:



Εικόνα 6.39: Γραφική παράσταση του κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσεως των επαναλήψεων για το πενταμερές πολυαιθυλενίου για την τέταρτη συνάρτηση κόστους(2)

Το διάγραμμα του συνολικού κόστους συναρτήσεως των επαναλήψεων για την δεύτερη δοκιμή είναι:

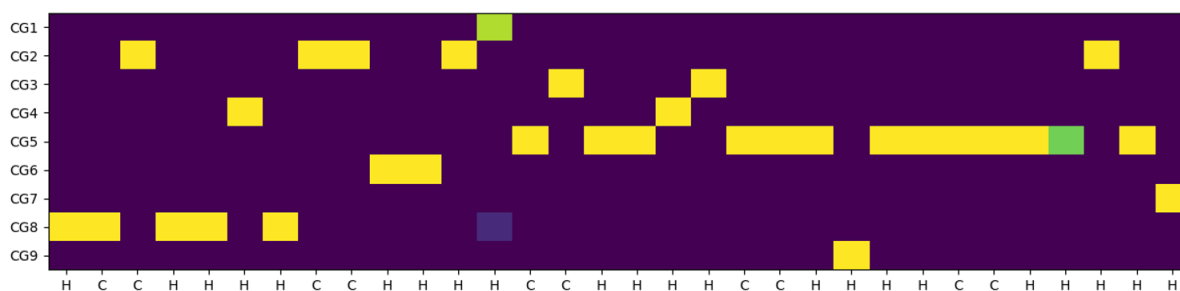


Εικόνα 6.40: Γραφική παράσταση του συνολικού κόστους συναρτήσεως των επαναλήψεων για το πενταμερές πολυαιθυλενίου για την τέταρτη συνάρτηση κόστους(2)

Στο διάγραμμα του κόστους των δυνάμεων φαίνεται πως υπάρχει μία συνεχόμενη αύξηση της τιμής του μέχρι να εξισορροπηθεί περίπου στις 1500

επανάληψεις. Από το διάγραμμα του συνολικού κόστους φαίνεται ότι το κόστος που προέρχεται από τις δυνάμεις ενεργοποιείται κοντά στην χιλιοστή επανάληψη, όπου υπάρχει μία πολύ μεγάλη αύξηση στην τιμή του. Στη συνέχεια σταθεροποιείται μέχρι να ικανοποιηθεί το κριτήριο τερματισμού της επαναληπτικής διαδικασίας στις 3200 επανάληψεις.

Ο πίνακας κωδικοποίησης που προέκυψε για την συγκεκριμένη δοκιμή είναι:

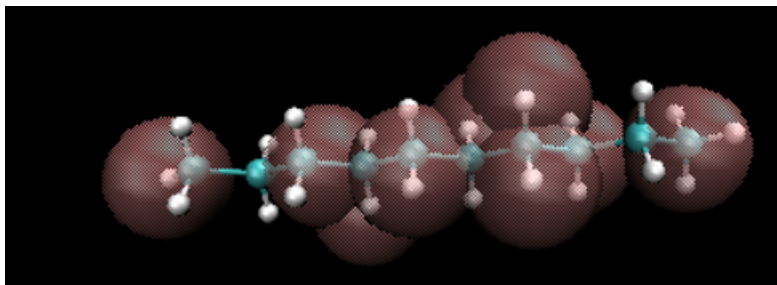


Εικόνα 6.41: Πίνακας κωδικοποίησης για το πολυαιθυλένιο πέντε μονομερών για την τέταρτη συνάρτηση κόστους

Παρατηρούμε ότι κάποια άτομα τοποθετούνται σε αδροποιημένες μονάδες με ενδιάμεσες πιθανότητες που δεν είναι τόσο κοντά στο 0 και στο 1 όπως σε προηγούμενες περιπτώσεις. Οι συνδέσεις μεταξύ των αδροποιημένων μονάδων αναπαρίστανται από τον πίνακα συνδέσεων που ακολουθεί:

$$C = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Τέλος, η αναπαράσταση του συστήματος που προέκυψε με την χρήση του προγράμματος VMD είναι:



Εικόνα 6.42: Ταυτόχρονη απεικόνιση πλήρους ατομιστικού και αδροποιημένου συστήματος για το πενταμερές πολυαιθυλενίου στις δοκιμές με χρήση της τέταρτης συνάρτησης κόστους

Στην συνέχεια ακολούθησαν δοκιμές χρησιμοποιώντας τις ίδιες τιμές για τις υπερπαραμέτρους αλλά διαφοροποιώντας την τιμή της υπερπαραμέτρου  $\rho$ . Οι υπερπαραμέτροι που χρησιμοποιήθηκαν είναι:

Learning Rate	0.1
Batch size	25
Decay ratio	0.1
Encoder's neurons	19
Epochs	5000
$\rho$	0.8

Πίνακας 6.19: Σταθερές τιμές υπερπαραμέτρων για την τέταρτη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα πενταμερές πολυαιθυλενίου (3)

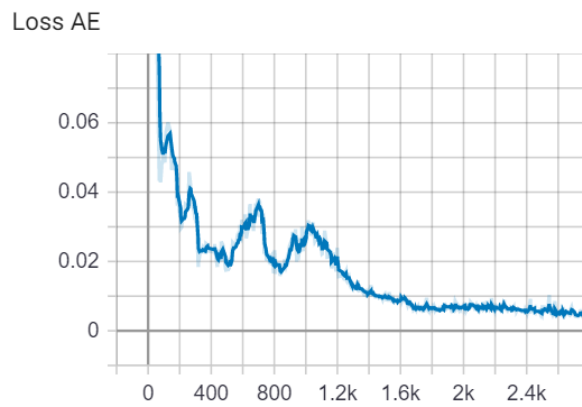
Η τιμή της παραμέτρου  $\rho$  αυξήθηκε προκειμένου να διερευνηθεί η επίδραση που έχει στα αποτελέσματα η μεταβολή της, η οποία προσδίδει ακόμη περισσότερο βάρος στο κόστος που γεννιάται από τις δυνάμεις. Τα αποτελέσματα που προέκυψαν καταγράφονται στον πίνακα που ακολουθεί:

Runs	CG moieties	Total Loss
1	8	0.27
2	8	0.21
3	8	0.27

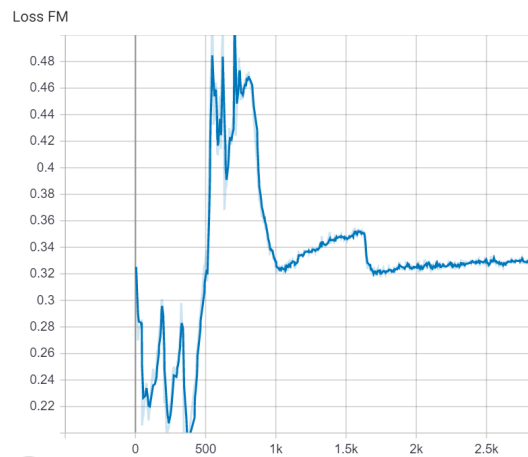
Πίνακας 6.20: Αποτελέσματα για την τέταρτη συνάρτηση κόστους στο σύστημα πενταμερές πολυαιθυλενίου (3)

Παρατηρούμε πως για ακόμη μία φορά ο αριθμός των αδροποιημένων μονάδων είναι στην ίδια περιοχή τιμών. Μάλιστα αυτή την φορά όλες οι

δοκιμές είχαν ως αποτέλεσμα 8 αδροποιημένες μονάδες. Επίσης οι τιμές του κόστους είναι εξαιρετικά κοντά μεταξύ τους αλλά και με τα κόστη που προέκυψαν από την προηγούμενη τριάδα δοκιμών. Η μικρή αυτή αλλαγή στην τιμή της παραμέτρου  $\rho$  φαίνεται να μην επηρεάζει σε μεγάλο βαθμό τα τελικά αποτελέσματα. Στην συνέχεια θα διερευνηθούν τα αποτελέσματα της πρώτης δοκιμής. Ακολουθούν τα διαγράμματα κόστους ανακατασκευής και κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσει των επαναλήψεων αντίστοιχα, για την πρώτη δοκιμή:



Εικόνα 6.43: Γραφική παράσταση του κόστους ανακατασκευής συναρτήσει των επαναλήψεων για το πενταμερές πολυαιθυλενίου για την τέταρτη συνάρτηση κόστους(3)



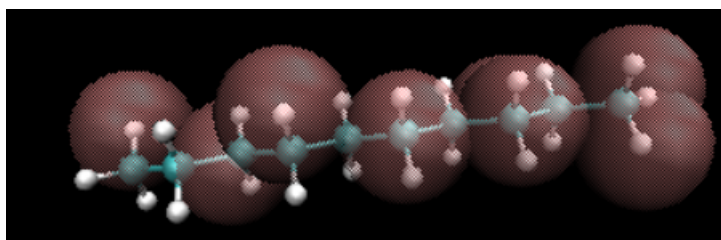
Εικόνα 6.44: Γραφική παράσταση του κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσει των επαναλήψεων για το πενταμερές πολυαιθυλενίου για την τέταρτη συνάρτηση κόστους(3)





$$C = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Τέλος, η ταυτόχρονη αναπαράσταση του ατομιστικού και του αδροποιημένου συστήματος είναι:



Εικόνα 6.47: Ταυτόχρονη απεικόνιση πλήρους ατομιστικού και αδροποιημένου συστήματος για το πενταμερές πολυαιθυλενίου στις δοκιμές με χρήση της τέταρτης συνάρτησης κόστους(2)

Συμπερασματικά, με την κανονικοποίηση του όρου του κόστους των δυνάμεων, πλέον δεν κυριαρχεί σε τόσο μεγάλο βαθμό όπως στις περιπτώσεις της συνάρτησης κόστους  $\mathcal{L}_1$ . Στην  $\mathcal{L}_1$  όπου ο όρος των δυνάμεων είχε την κύρια συνεισφορά στο κόστος, ο μόνος τρόπος με τον οποίο μπορούσε να "αντιμετωπιστεί" από το μοντέλο ήταν με την διαγραφή των βαρών που συνδέουν τις ατομιστικές συντεταγμένες με τους νευρώνες του Encoder. Με αυτόν τον τρόπο το μοντέλο κατέληγε συστηματικά σε διαμορφώσεις με 1 2 ή 3 αδροποιημένες μονάδες (ιδανικότερα με 1) οι οποίες είναι ευνοούμενες έναντι των μεγαλύτερων αριθμών, επειδή μειώνοντας τον αριθμό των αδροποιημένων μονάδων γίνεται μείωση και των δυνάμεων στο σύστημα και κατ'επέκταση του κόστους που προέρχεται από αυτές. Η κανονικοποίηση λοιπόν κατατάσσει τους δύο όρους της συνάρτησης κόστους σε παρόμοια τάξη μεγέθους και δεν είναι αναγκαίο κατά την διάρκεια της διαδικασίας της βελτιστοποίησης να πραγματοποιείται διαγραφή τόσων πολλών βαρών για να ελαχιστοποιηθεί η συνάρτηση κόστους. Έτσι με την κανονικοποίηση μας δίνεται η δυνατότητα να εξερευνήσουμε μεγαλύτερη ποικιλία αποτελεσμάτων ως προς τον αριθμό των αδροποιημένων μονάδων.

### 6.3.4 Συνάρτηση κόστους $\mathcal{L}_5$

Σε αυτό το υποκεφάλαιο θα αναλυθούν οι δοκιμές που πραγματοποιήθηκαν με την χρήση της συνάρτησης κόστους  $\mathcal{L}_5$ . Γίνεται υπενθύμιση πως η συνάρτηση κόστους  $\mathcal{L}_5$  ορίζεται ακριβώς όπως και η  $\mathcal{L}_4$  με την βασική διαφορά ότι στην  $\mathcal{L}_4$  το κόστος που σχετίζεται με τις δυνάμεις, ενεργοποιείται βάσει ενός κριτηρίου (βλέπε ορισμό συνάρτησης κόστους  $\mathcal{L}_4$ ) ενώ στην  $\mathcal{L}_5$  το κόστος των δυνάμεων συνεισφέρει από την αρχή στο συνολικό κόστος. Το προαναφερθέν αποτελεί σημαντικό πλεονέκτημα της  $\mathcal{L}_5$  έναντι της  $\mathcal{L}_4$  γιατί, όπως παρατηρήσαμε και στο προηγούμενο κεφάλαιο, σε κάποιες περιπτώσεις μπορεί να μην προλάβει να ικανοποιηθεί το κριτήριο ενεργοποίησης των δυνάμεων πριν την λήξη της βελτιστοποίησης και έτσι να καταλήξουμε σε ανεπιθύμητα αποτελέσματα (αντίστοιχα με την περίπτωση 2). Από την άλλη, στην περίπτωση της  $\mathcal{L}_4$  το κόστος των δυνάμεων ενεργοποιείται όταν το κόστος της ανακατασκευής έχει ήδη φτάσει σε έναν πολύ ικανοποιητικό βαθμό και έτσι η συνέχεια της βελτιστοποίησης καθίσταται πιο εύκολη. Στην έκφραση της  $\mathcal{L}_5$  ο τύπος της συνάρτησης που προκύπτει ως άθροισμα από τα δύο κόστη από την αρχή της βελτιστοποίησης, ενδεχομένως να αποτελεί μία υπερεπιφάνεια που είναι αρκετά πιο περίπλοκη και έτσι να αυξάνεται ο βαθμός δυσκολίας για την εύρεση τοπικών ελαχίστων ή και ολικού ελαχίστου.

Με την χρήση της  $\mathcal{L}_5$  πραγματοποιήθηκαν δύο σύνολα δοκιμών όπου κάθε ένα περιελάμβανε μία τριάδα δοκιμών. Σε κάθε δοκιμή -όπως κάθε άλλη φορά- έγινε τυχαία αρχικοποίηση των βαρών για τα νευρωνικά δίκτυα. Το minimum change και η υπομονή που χρησιμοποιήθηκαν είχαν τιμές 0.001 και 10 αντίστοιχα. Στην πρώτη τριάδα δοκιμών έγινε επιλογή των εξής υπερπαραμέτρων:

Learning Rate	0.1
Batch size	100
Decay ratio	0.1
Encoder's neurons	19
Epochs	2000
$\rho$	0.5

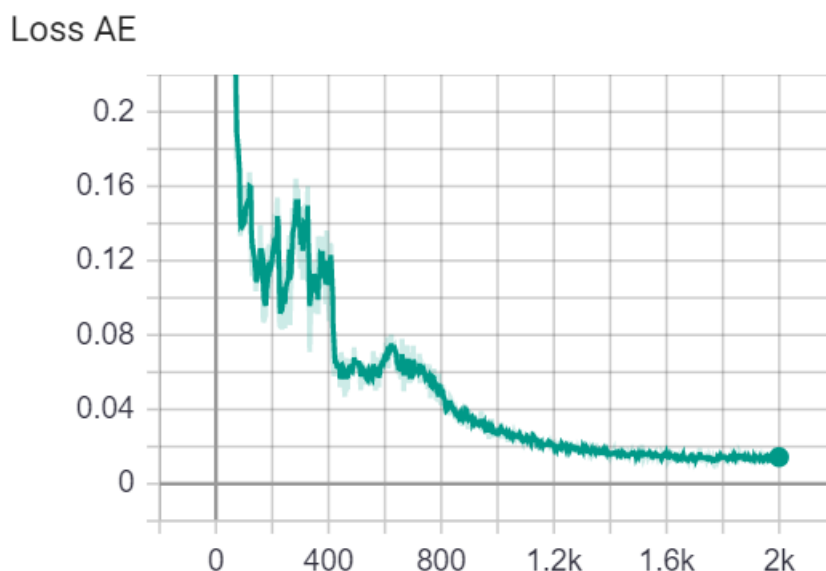
Πίνακας 6.21: Σταθερές τιμές υπερπαραμέτρων για την πέμπτη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα πενταμερές πολυαιθυλενίου

Τα αποτελέσματα από την πρώτη τριάδα δοκιμών συνοψίζονται από τον πίνακα που ακολουθεί:

Runs	CG moieties	Total Loss
1	14	0.27
2	10	0.26
3	13	0.3

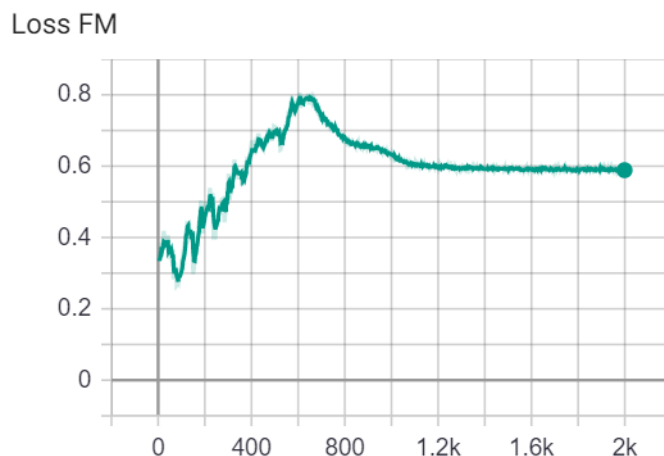
Πίνακας 6.22: Αποτελέσματα για την πέμπτη συνάρτηση κόστους στο σύστημα πενταμερές πολυαιθυλενίου

Και στις τρεις δοκιμές χρησιμοποιήθηκαν όλες οι επαναλήψεις και δεν προηγήθηκε πρόωρος τερματισμός της διαδικασίας της βελτιστοποίησης με ικανοποίηση του κριτηρίου σύγκλισης. Ωστόσο, και στις τρεις περιπτώσεις η σύγκλιση ήταν εξαιρετικά ικανοποιητική αν και χρησιμοποιήθηκαν λιγότερες επαναλήψεις από τις αντίστοιχες 5000 που χρησιμοποιήθηκαν στις τελευταίες δοκιμές με την συνάρτηση κόστους  $\mathcal{L}_4$ . Από τις τρεις δοκιμές, παρακάτω θα ακολουθήσει ανάλυση της τρίτης. Το διάγραμμα του κόστους ανακατασκευής συναρτήσει των επαναλήψεων για την τρίτη δοκιμή είναι:



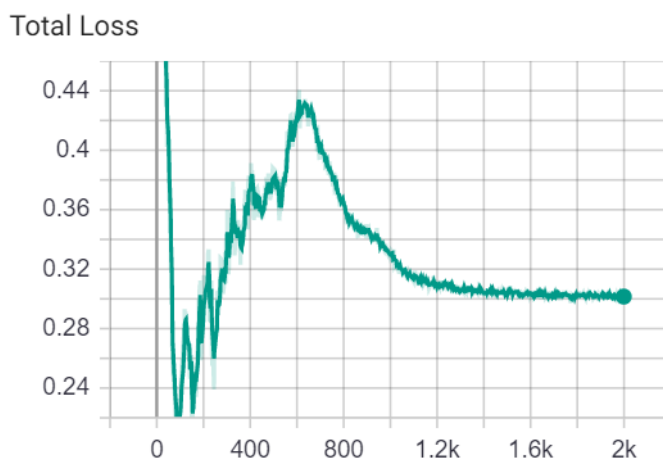
Εικόνα 6.48: Γραφική παράσταση του κόστους ανακατασκευής συναρτήσει των επαναλήψεων για το πενταμερές πολυαιθυλενίου για την πέμπτη συνάρτηση κόστους

Η καμπύλη του κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσει των επαναλήψεων είναι:



Εικόνα 6.49: Γραφική παράσταση του κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσει των επαναλήψεων για το πενταμερές πολυαιθυλενίου για την πέμπτη συνάρτηση κόστους

Η καμπύλη του συνολικού κόστους συναρτήσει των επαναλήψεων είναι:

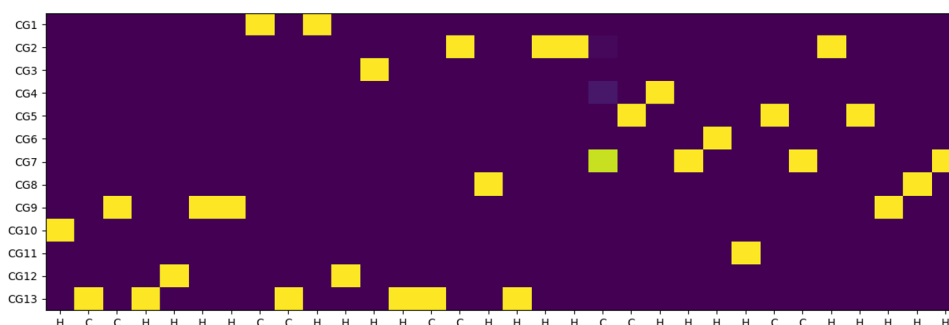


Εικόνα 6.50: Γραφική παράσταση του συνολικού κόστους συναρτήσει των επαναλήψεων για το πενταμερές πολυαιθυλενίου για την πέμπτη συνάρτηση κόστους

Από την παρατήρηση των διαγραμμάτων επιβεβαιώνονται τα σχόλια περί σύγκλισης της συνάρτησης κόστους. Το συνολικό κόστος σταθεροποιείται

περίπου στις 1600 επαναλήψεις και στην συνέχεια σταματάει η βελτιστοποίηση στις 2000 που είναι το άνω όριο. Το κριτήριο τερματισμού δεν ικανοποιείται επειδή γίνονται μικρές ταλαντώσεις γύρω από την βέλτιστη τιμή που έχουμε προσεγγίσει.

Ο πίνακας κωδικοποίησης που προέκυψε στο τέλος της διαδικασίας βελτιστοποίησης της τρίτης δοκιμής είναι:

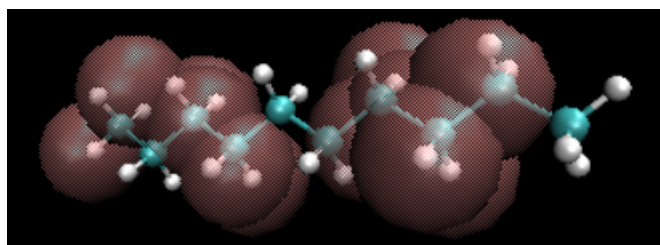


Εικόνα 6.51: Πίνακας κωδικοποίησης για το πολυαιθυλένιο πέντε μονομερών για την πέμπτη συνάρτηση κόστους

Παρατηρούμε ότι το ένα άτομο C δεν τοποθετείται στην αδροποιημένη μονάδα 7 με πιθανότητα 1 αλλά και πάλι η πιθανότητα αυτή έχει αρκετά υψηλότερη τιμή από την αντίστοιχη πιθανότητα τοποθέτησής του στην αδροποιημένη μονάδα 4. Οι συνδέσεις μεταξύ των αδροποιημένων μονάδων περιγράφονται από τον πίνακα που ακολουθεί:

$$C = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Τέλος, η ταυτόχρονη αναπαράσταση του ατομιστικού και του αδροποιημένου συστήματος είναι:



Εικόνα 6.52: Ταυτόχρονη απεικόνιση πλήρους ατομιστικού και αδροποιημένου συστήματος για το πενταμερές πολυαιθυλενίου στις δοκιμές με χρήση της τέταρτης συνάρτησης κόστους

Ακολούθησε μία τριάδα δοκιμών με τις ίδιες τιμές των υπερπαραμέτρων, διαφοροποιώντας όμως αυτή την φορά την τιμή της υπερπαραμέτρου  $\rho$ . Ο πίνακας με τις τιμές των υπερπαραμέτρων:

Learning Rate	0.1
Batch size	100
Decay ratio	0.1
Encoder's neurons	19
Epochs	2000
$\rho$	0.8

Πίνακας 6.23: Σταθερές τιμές υπερπαραμέτρων για την πέμπτη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα πενταμερές πολυαιθυλενίου (2)

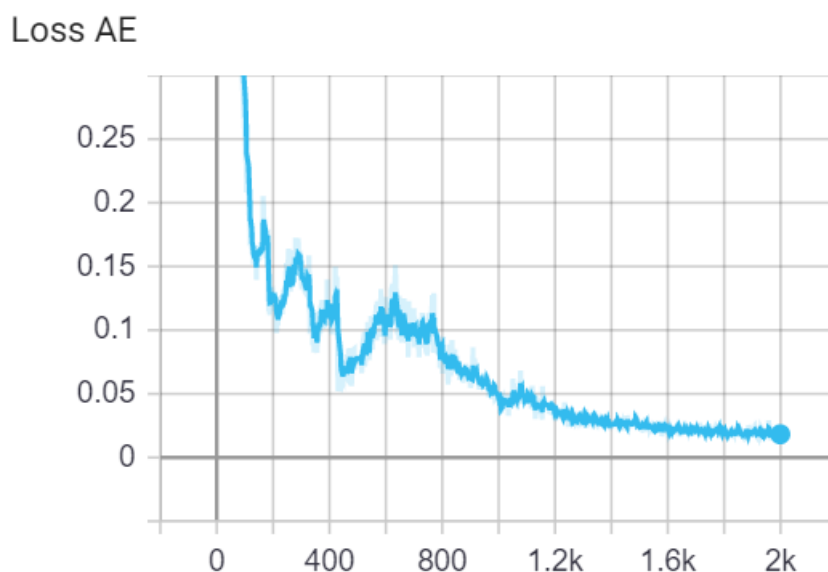
Τα αποτελέσματα που προέκυψαν από τις δοκιμές για τις συγκεκριμένες τιμές συνοψίζονται στον πίνακα που ακολουθεί:

Runs	CG moieties	Total Loss
1	13	0.48
2	7	0.38
3	10	0.29

Πίνακας 6.24: Αποτελέσματα για την πέμπτη συνάρτηση κόστους στο σύστημα πενταμερές πολυαιθυλενίου (2)

Συγκρίνοντας τα αποτελέσματα από τις δοκιμές που έγιναν για  $\rho = 0.8$  με τα αποτελέσματα του παραπάνω πίνακα φαίνεται να υπάρχει μία μικρή ανοδική τάση στις τιμές του συνολικού κόστους, η οποία είναι αναμενόμενη δεδομένου ότι δίνουμε περισσότερο βάρος στον όρο των δυνάμεων της συνάρτησης κόστους. Ωστόσο, παρατηρήθηκε σύγκλιση του συνολικού κόστους κάθε φορά και σε αυτή την περίπτωση. Συμβουλευόμενοι και τα αποτελέσματα των προηγούμενων τριών δοκιμών μπορούμε να συμπεράνουμε ότι με τις συγκεκριμένες επιλογές για τις υπερπαραμέτρους υπάρχει μεγάλη ποικιλία αποτελεσμάτων σχετικά με τον αριθμό των αδροποιημένων μονάδων. Πιο συγκεκριμένα οι τιμές του κυμαίνονται από 7 έως και 14. Από τις τρεις δοκιμές επιλέγεται η δεύτερη για ανάλυση των αποτελεσμάτων της, αφού έχει ως αποτέλεσμα αριθμό αδροποιημένων μονάδων που δεν έχει εμφανιστεί σε άλλη περίπτωση.

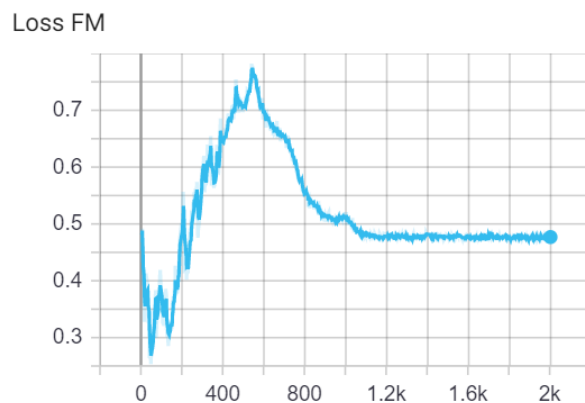
Ακολουθεί το διάγραμμα κόστους ανακατασκευής συναρτήσε των επαναλήψεων:



Εικόνα 6.53: Γραφική παράσταση του κόστους ανακατασκευής συναρτήσε των επαναλήψεων για το πενταμερές πολυαιθυλενίου για την πέμπτη συνάρτηση κόστους(2)

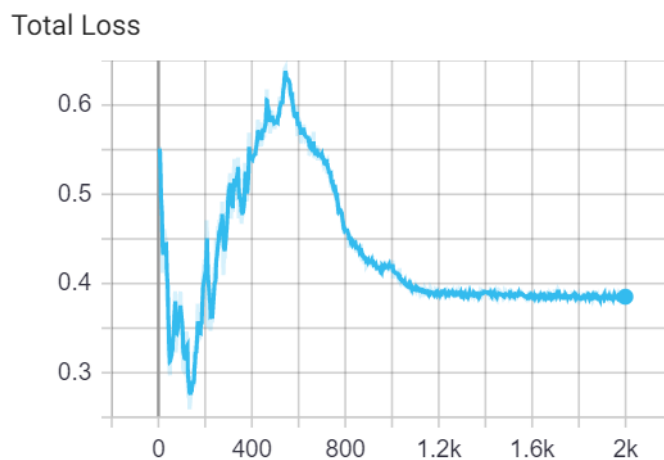
Στην συνέχεια, παρουσιάζεται το διάγραμμα κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσε των επαναλήψεων:





Εικόνα 6.54: Γραφική παράσταση του κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσεως των επαναλήψεων για το πενταμερές πολυαιθυλενίου για την πέμπτη συνάρτηση κόστους(2)

Και τέλος η καμπύλη του συνολικού κόστους συναρτήσεως των επαναλήψεων για την δεύτερη δοκιμή είναι:

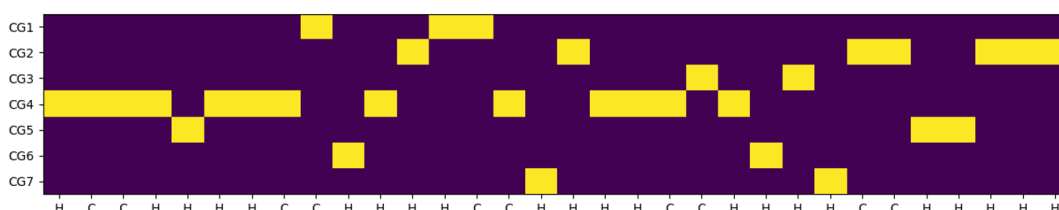


Εικόνα 6.55: Γραφική παράσταση του συνολικού κόστους συναρτήσεως των επαναλήψεων για το πενταμερές πολυαιθυλενίου για την πέμπτη συνάρτηση κόστους(2)

Παρατηρούμε ότι το διάγραμμα του συνολικού κόστους είναι πανομοιότυπο με το διάγραμμα του κόστους λόγω δυνάμεων. Το ίδιο ακριβώς φαινόμενο παρατηρήθηκε και στα διαγράμματα κόστους των άλλων δύο δοκιμών. Αν και το κόστος των δυνάμεων έχει την τάση να κυριαρχεί σε όλες τις περιπτώσεις που έχουν εξεταστεί μέχρι τώρα, στην περίπτωση του  $\rho = 0.5$  δεν παρατηρήθηκε τόσο έντονη επικράτηση του ενός όρου έναντι του άλλου.

Συμπεραίνουμε λοιπόν, πως το εν λόγω φαινόμενο είναι αποτέλεσμα της αύξησης της υπερπαραμέτρου  $\rho$ .

Ο πίνακας κωδικοποίησης του Encoder που προέκυψε από την δεύτερη δοκιμή είναι:

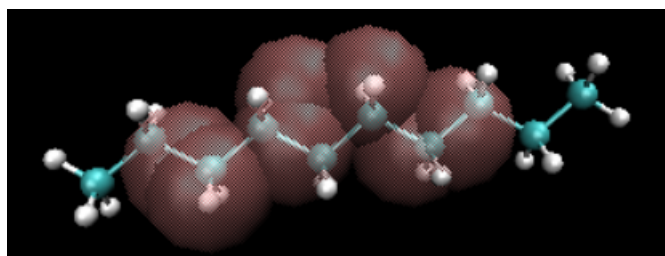


Εικόνα 6.56: Πίνακας κωδικοποίησης για το πολυαιθυλένιο πέντε μονομερών για την πέμπτη συνάρτηση κόστους(2)

Ο πίνακας που περιγράφει τις συνδέσεις μεταξύ των αδροποιημένων μονάδων του πενταμερούς του πολυαιθυλενίου για την δεύτερη δοκιμή είναι :

$$C = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Τέλος, η ταυτόχρονη αναπαράσταση του ατομιστικού και του αδροποιημένου συστήματος με την χρήση του προγράμματος VMD είναι:



Εικόνα 6.57: Ταυτόχρονη απεικόνιση πλήρους ατομιστικού και αδροποιημένου συστήματος για το πενταμερές πολυαιθυλενίου στις δοκιμές με χρήση της πέμπτης συνάρτησης κόστους(2)

## 6.4 Μονομερές CTA

Στο μονομερές του CTA ,εκτελέστηκαν τεστ που διερευνούν σχεδόν όλες τις περιπτώσεις των συναρτήσεων κόστους. Επίσης, πραγματοποιήθηκαν δοκιμές όπου εξετάστηκαν διαφορετικές τιμές για τις σημαντικότερες υπερπαραμέτρους.Τα αποτελέσματα που ακολουθούν θα οργανωθούν με βάση την επιλογή συνάρτησης της κόστους που έγινε σε κάθε περίπτωση

### 6.4.1 Συνάρτηση κόστους $\mathcal{L}_1$

Με την επιλογή της συνάρτησης κόστους  $\mathcal{L}_1$ , πραγματοποιήθηκαν τέσσερα διαφορετικά σύνολα δοκιμών όπου σε κάθε ένα έγιναν τρεις δοκιμές. Σε κάθε δοκιμή πραγματοποιήθηκε τυχαία αρχικοποίηση των βαρών του νευρωνικού δικτύου. Στην πρώτη δοκιμή οι τιμές της υπομονής και του minimum change τέθηκαν ίσες με 10 και 0.001 αντίστοιχα. Ακολουθεί ο πίνακας με τις τιμές των υπερπαραμέτρων για την πρώτη τριάδα:

Learning Rate	0.1
Batch size	100
Decay ratio	0.1
Encoder's neurons	19
Epochs	5000
$\rho$	0.001

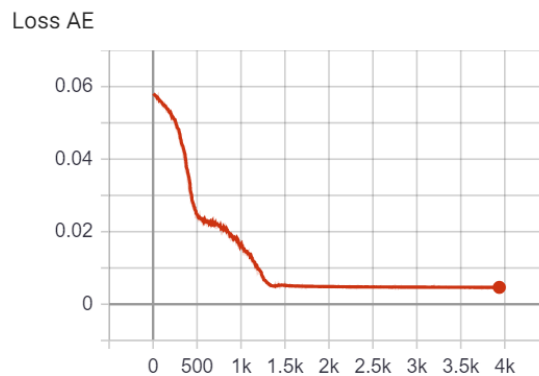
Πίνακας 6.25: Σταθερές τιμές υπερπαραμέτρων για την πρώτη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα CTA

Για την πρώτη τριάδα δοκιμών επιλέχθηκε χαμηλή τιμή για την υπερπαραμέτρο  $\rho$ . Δεδομένου ότι στην συνάρτηση κόστους  $\mathcal{L}_1$  η παράμετρος  $\rho$  πολλαπλασιάζει μόνο το κόστος που σχτίζεται με τις δυνάμεις, το οποίο είναι συνήθως πολύ μεγαλύτερο από το αντίστοιχο της ανακατασκευής, η συγκεκριμένη επιλογή φέρνει τους δύο όρους του κόστους πιο κοντά μεταξύ τους και καθιστά τον όρο των δυνάμεων πιο "διαχειρίσιμο". Επιπλέον, οι χαμηλές τιμές για την παράμετρο  $\rho$  έδωσαν ικανοποιητικά αποτελέσματα στην περίπτωση της  $\mathcal{L}_1$  από τις δοκιμές στο πενταμερές του πολυαιθυλενίου (με καλή σύγκλιση και περισσότερες από μία αδροποιημένες μονάδες). Τα αποτελέσματα που προέκυψαν για τις τρεις δοκιμές παρατίθενται στον πίνακα που ακολουθεί:

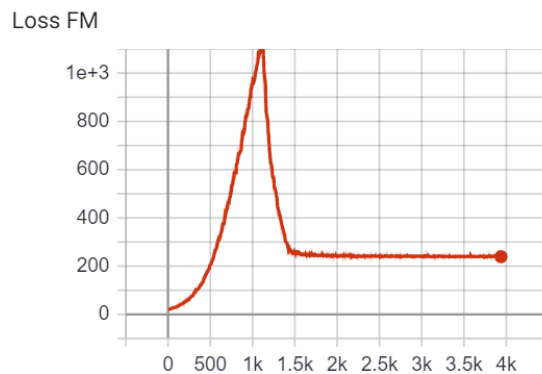
Runs	CG moieties	Total Loss
1	4	0.24
2	18	2.5
3	3	0.19

Πίνακας 6.26: Αποτελέσματα για την πρώτη συνάρτηση κόστους στο σύστημα CTA

Από τις τρεις αυτές δοκιμές που πραγματοποιήθηκαν παρατηρήθηκε σύγκλιση μόνο στην πρώτη και στην τρίτη. Παρακάτω ακολουθεί ανάλυση των αποτελεσμάτων από την πρώτη δοκιμή ξεκινώντας από τις γραφικές παραστάσεις του κόστους ανακατασκευής και του κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσεως των επαναλήψεων:

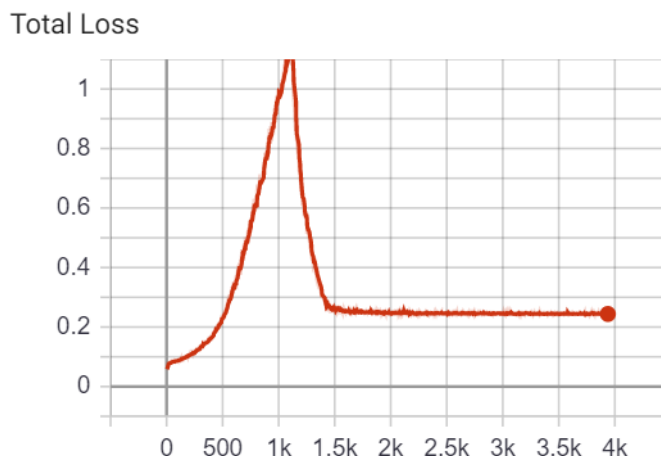


Εικόνα 6.58: Γραφική παράσταση του κόστους ανακατασκευής συναρτήσεως των επαναλήψεων για το μονομερές του CTA για την πρώτη συνάρτηση κόστους



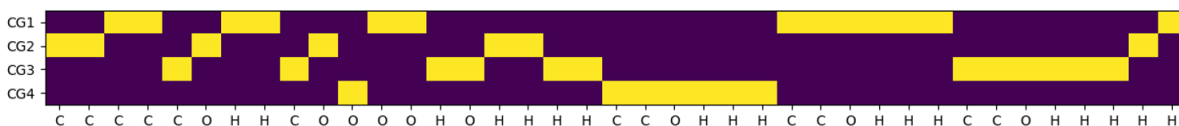
Εικόνα 6.59: Γραφική παράσταση του κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσεως των επαναλήψεων για το μονομερές του CTA για την πρώτη συνάρτηση κόστους

Και τέλος η γραφική παράσταση του συνολικού κόστους συναρτήσει των επαναλήψεων για την πρώτη δοκιμή:



Εικόνα 6.60: Γραφική παράσταση του συνολικού κόστους συναρτήσει των επαναλήψεων για το μονομερές του CTA για την πρώτη συνάρτηση κόστους

Η γραφική παράσταση του συνολικού κόστους είναι πανομοιότυπη με την γραφική παράσταση για το κόστος λόγω δυνάμεων. Επομένως παρόλο που επιλέχθηκε μικρή τιμή για τον παράγοντα  $\rho$  φαίνεται πως το κόστος ανακατασκευής είναι αμελητέο σε σχέση με αυτό των δυνάμεων. Ωστόσο, παρατηρείται πολύ ικανοποιητική σύγκλιση. Ο πίνακας κωδικοποίησης που προέκυψε για το CTA για την πρώτη δοκιμή ακολουθεί παρακάτω:

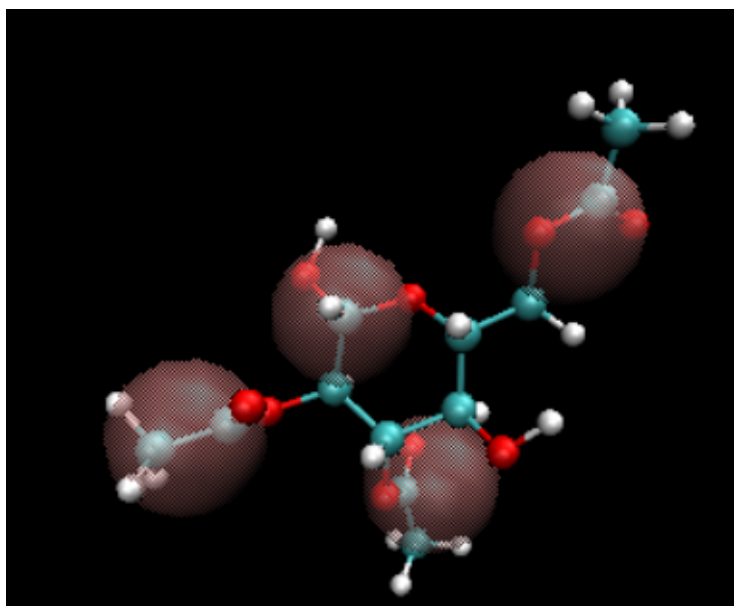


Εικόνα 6.61: Πίνακας κωδικοποίησης για το μονομερές του CTA για την πρώτη συνάρτηση κόστους

Παρατηρείται πολύ καθαρή ανάθεση των ατόμων του μονομερούς του CTA σε αδροποιημένες μονάδες, αφού οι αντίστοιχες πιθανότητες προσεγγίζουν το 0 και το 1. Ο πίνακας που περιγράφει τις δυνδέσεις μεταξύ των τεσσάρων αδροποιημένων μονάδων που προέκυψαν παρουσιάζεται παρακάτω:

$$C = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Τέλος η ταυτόχρονη απεικόνιση του ατομιστικού και του αδροποιημένου συστήματος για το μονομερές του CTA για την πρώτη δοκιμλή ακολουθεί παρακάτω:



Εικόνα 6.62: Ταυτόχρονη απεικόνιση πλήρους ατομιστικού και αδροποιημένου συστήματος για το μονομερές του CTA στις δοκιμές με χρήση της πρώτης συνάρτησης κόστους

Οι επόμενες δύο τριάδες δοκιμών που ακολούθησαν εξέτασαν περιπτώσεις για μεγαλύτερες σε τάξη μεγέθους τιμές της παραμέτρου  $\rho$ , προκειμένου να διερευνηθεί η επίδρασή του έχει στα τελικά αποτελέσματα. Οι υπερπαραμέτροι της πρώτης τριάδας :

Learning Rate	0.1
Batch size	25
Decay ratio	0.1
Encoder's neurons	19
Epochs	5000
$\rho$	0.5

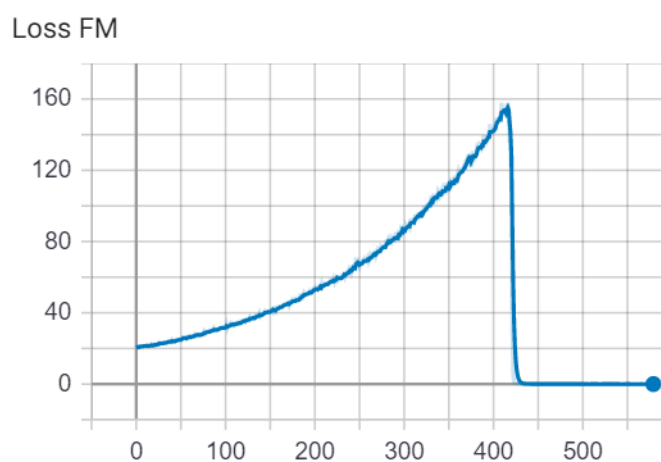
Πίνακας 6.27: Σταθερές τιμές υπερπαραμέτρων για την πρώτη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα CTA (2)

Σημειώνεται πως η υπομονή τέθηκε ίση με 10 ενώ το minimum change ίσο με 0.01. Με βάση τα παραπάνω προέκυψαν τα εξής αποτελέσματα:

Runs	CG moieties	Total Loss
1	1	0.038
2	1	0.031
3	1	0.049

Πίνακας 6.28: Αποτελέσματα για την πρώτη συνάρτηση κόστους στο σύστημα CTA (2)

Παρατηρούμε πως σε όλες τις περιπτώσεις ο αριθμός των αδροποιημένων μονάδων είναι ίσος με 1. Επαναλαμβάνεται το φαινόμενο που είχε παρατηρηθεί κατά την εφαρμογή του μοντέλου στα χημικά συστήματα στυρένιο και αιθάνιο που αναλύθηκαν στα πρώτα υποκεφάλαια. Θα ακολουθήσει ανάλυση του συγκεκριμένου φαινομένου παραθέτοντας την γραφική παράσταση του κόστους δυνάμεων συναρτήσει των επαναλήψεων για την πρώτη δοκιμή. Η εν λόγω γραφική παράσταση:



Εικόνα 6.63: Γραφική παράσταση του κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσει των επαναλήψεων για το μονομερές του CTA για την πρώτη συνάρτηση κόστους(2)

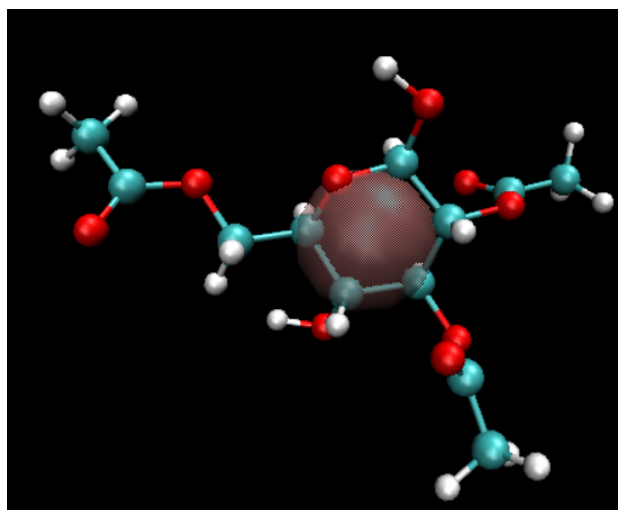
Επειδή η τιμή της παραμέτρου  $\rho$  έχει μεγάλη τιμή ο όρος του κόστους των δυνάμεων ασκεί μεγάλη επιρροή στην τιμή του συνολικού κόστους. Ο όρος των δυνάμεων είναι πολύ δύσκολα διαχειρίσιμος κι έτσι το μοντέλο αρχίζει να διαγράφει βάρη μέχρι να μείνει μόνο ένας νευρώνας ο οποίος χρησιμοποιείται. Το ότι υπάρχει ένας μόνο νευρώνας συνεπάγεται πως καταλήγουμε σε μία μόνο αδροποιημένη μονάδα και έτσι εξουδετερώνονται πλήρως οι δυνάμεις άρα και η

συνεισφορά τους στην συνολική συνάρτηση κόστους. Η μετάβαση στην χρήση ενός μόνο νευρώνα από τους συνολικούς 19 πραγματοποιείται κοντά στις 430 επαναλήψεις όπου παρατηρείται μία απότομη πτώση της συνάρτησης κόστους λόγω δυνάμεων από την τιμή 160 σχεδόν στο 0.

Η επόμενη τριάδα δοκιμών που ακολούθησε είχε ίδιες υπερπαραμέτρους με την δεύτερη δοκιμή με αλλαγμένο μόνο το batch size, που η τιμή του επιλέχθηκε ίση με 100. Τα αποτελέσματα ήταν πανομοιότυπα με την δεύτερη τριάδα δοκιμών. Δηλαδή, σε κάθε περίπτωση επιλέχθηκε μία μόνο αδροποιημένη μονάδα και τα κόστη διατηρήθηκαν στα ίδια πολύ χαμηλά επίπεδα.

Στην τέταρτη και τελευταία δοκιμή, χρησιμοποιήθηκαν ίδιες ακριβώς υπερπαραμέτροι με την τρίτη δοκιμή αλλά επιλέχθηκε χαμηλότερη τιμή για το minimum change και όπως είναι αναμενόμενο τα αποτελέσματα ήταν πανομοιότυπα με της τρίτης και της δεύτερης δοκιμής.

Οι πίνακες κωδικοποίησης έμοιζαν πολύ με τους αντίστοιχους της ενότητας του αιθανίου αφού υπήρξε μόνο μία αδροποιημένη μονάδα. Ακολουθεί μία ενδεικτική απεικόνιση του ατομιστικού συστήματος μαζί με την μία και μοναδική αδροποιημένη μονάδα για το δεύτερο το τρίτο και το τέταρτο σύνολο δοκιμών:



Εικόνα 6.64: Ταυτόχρονη απεικόνιση πλήρους ατομιστικού και αδροποιημένου συστήματος για το μονομέρες του CTA στις δοκιμές με χρήση της πρώτης συνάρτησης κόστους



### 6.4.2 Συνάρτηση κόστους $\mathcal{L}_2$

Με την χρήση της συνάρτησης κόστους  $\mathcal{L}_2$  (5.14) πραγματοποιήθηκαν τρεις διαφορετικές τριάδες δοκιμών για το μονομερές του CTA. Και στις τρεις τριάδες δοκιμών πραγματοποιήθηκαν τυχαίες αρχικοποιήσεις των βαρών του νευρωνικού δικτύου και δεν χρησιμοποιήθηκε κανένα κριτήριο τερματισμού, δηλαδή εξαντλήθηκαν όλες οι επαναλήψεις σε κάθε περίπτωση. Κάθε φορά η μόνη υπερπαράμετρος που άλλαζε ήταν ο αριθμός των νευρώνων του νευρωνικού δικτύου. Θυμίζουμε ότι από την στιγμή που στην  $\mathcal{L}_2$  δεν υπάρχει το κόστος δυνάμεων η υπερπαράμετρος  $\rho$  δεν χρησιμοποιείται ή ισοδύναμα είναι ίση με μηδέν. Ακολουθεί ο πίνακας που συνοψίζει τις τρεις τριάδες δοκιμών:

Learning Rate	0.1
Batch size	100
Decay ratio	0.1
Encoder's neurons	5,9,15
Epochs	5000

Πίνακας 6.29: Σταθερές τιμές υπερπαραμέτρων για την δεύτερη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα CTA

Ακολουθούν τα αποτελέσματα από την πρώτη τριάδα δοκιμών (5 νευρώνες):

Runs	CG moieties	Total Loss
1	5	0.02
2	5	0.013
3	5	0.021

Πίνακας 6.30: Αποτελέσματα για την δεύτερη συνάρτηση κόστους στο σύστημα CTA

Συνεχίζοντας ακολουθούν τα αποτελέσματα από την δεύτερη τριάδα δοκιμών (με εννιά νευρώνες) :

Runs	CG moieties	Total Loss
1	8	0.03
2	9	0.02
3	9	0.01

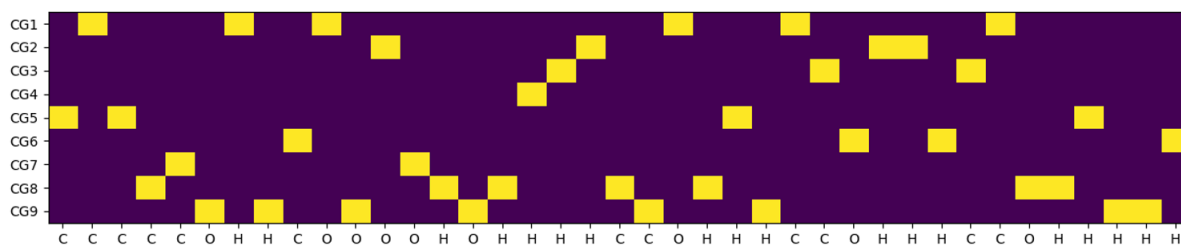
Πίνακας 6.31: Αποτελέσματα για την δεύτερη συνάρτηση κόστους στο σύστημα CTA (2)

Και τέλος από την τρίτη τριάδα δοκιμών (με δεκαπέντε νευρώνες):

Runs	CG moieties	Total Loss
1	15	0.03
2	15	0.01
3	15	0.01

Πίνακας 6.32: Αποτελέσματα για την δεύτερη συνάρτηση κόστους στο σύστημα CTA (3)

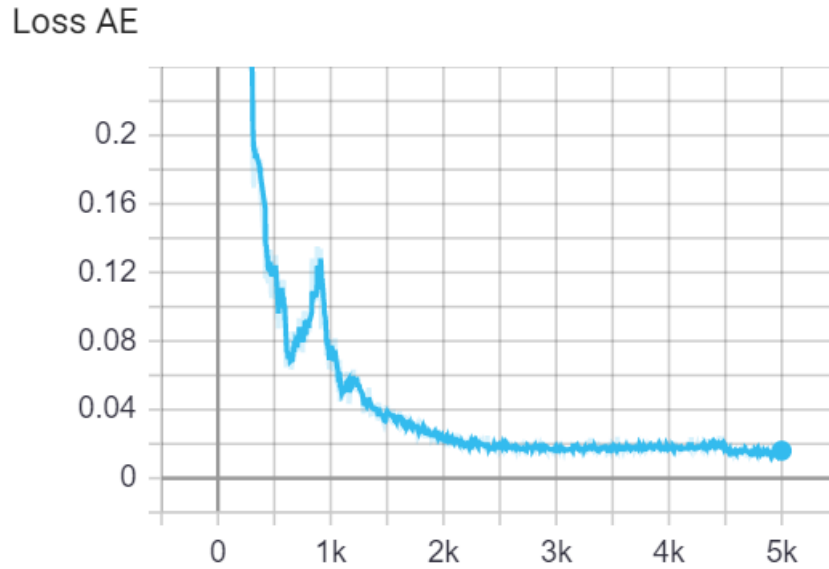
Και στις εννέα συνολικές δοκιμές πραγματοποιήθηκε σύγκλιση του συνολικού κόστους, δηλαδή του κόστους ανακατασκευής. Στην πρώτη και στην δεύτερη τριάδα δοκιμών οι πίνακες κωδικοποίησης είχαν πιο ξεκάθαρες αναθέσεις ατόμων σε αδροποιημένες μονάδες αφού οι αντίστοιχες πιθανότητες ήταν όλες κοντά στο 1 ή στο 0 αντίστοιχα. Στην τρίτη τριάδα δοκιμών οι αντίστοιχοι πίνακες δεν είχαν τόσο στενές κατανομές πιθανότητας ανάθεσης, αφού υπήρχαν και ενδιάμεσες τιμές για τις αντίστοιχες πιθανότητες. Παρατηρούμε ότι χωρίς την επίδραση δυνάμεων το μοντέλο έχει την τάση να επιλέγει ακριβώς τον αριθμό των νευρώνων του Encoder ως αριθμό αδροποιημένων μονάδων. Η μοναδική απόκλιση από αυτή την συμπεριφορά παρουσιάζεται στην πρώτη δοκιμή της δεύτερης τριάδας δοκιμών όπου έχουμε μία λιγότερη αδροποιημένη μονάδα από τους αντίστοιχους νευρώνες του νευρωνικού δικτύου. Συμπεραίνουμε πως απουσία κόστους λόγω δυνάμεων, το μοντέλο δεν αναγκάζεται να αναζητήσει κάποια λύση χρησιμοποιώντας λιγότερους νευρώνες. Αντιθέτως, με τις δυνάμεις όσο περισσότερους νευρώνες χρησιμοποιεί, τόσο περισσότερα κέντρα αλληλεπίδρασης υπάρχουν στο σύστημα. Η ύπαρξη δυνάμεων ωστόσο, προσφέρει περισσότερο ρεαλισμό στο μοντέλο. Από τις εννιά δοκιμές θα γίνει ανάλυση της δεύτερης από την δεύτερη τριάδα. Ακολουθεί ο πίνακας κωδικοποίησης της δεύτερης δοκιμής από την δεύτερη τριάδα δοκιμών:



Εικόνα 6.65: Πίνακας κωδικοποίησης για το μονομερές του CTA για την δεύτερη συνάρτηση κόστους

Η γραφική παράσταση του κόστους ανακατασκευής συναρτήσε των

επαναλήψεων είναι:

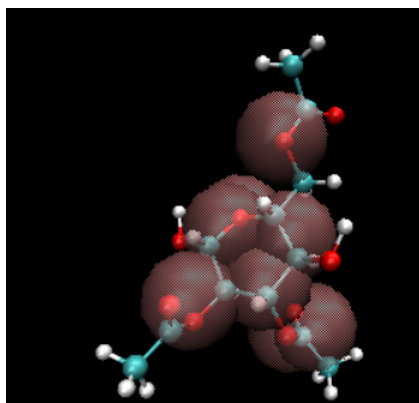


Εικόνα 6.66: Γραφική παράσταση του συνολικού κόστους συναρτήσεως των επαναλήψεων για το μονομερές του CTA για την δεύτερη συνάρτηση κόστους

Και ο αντίστοιχος πίνακας συνδέσεων μεταξύ των αδροποιημένων μονάδων:

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Τέλος, η απεικόνιση του πλήρους ατομιστικού συστήματος μαζί με το αδροποιημένο μέσω του προγράμματος VMD είναι:



Εικόνα 6.67: Ταυτόχρονη απεικόνιση πλήρους ατομιστικού και αδροποιημένου συστήματος για το μονομερές του CTA στις δοκιμές με χρήση της πρώτης συνάρτησης κόστους

### 6.4.3 Συνάρτηση κόστους $\mathcal{L}_4$

Με την χρήση της συνάρτησης κόστους  $\mathcal{L}_4$  (5.16) πραγματοποιήθηκαν τρεις τριάδες δοκιμών για το μονομερές του CTA. Σε όλες τις δοκιμές έγινε τυχαία αρχικοποίηση των βαρών του VAE. Στην πρώτη τριάδα δοκιμών επιλέχθηκαν οι ίδιες υπερπαραμέτροι με την δεύτερη τριάδα με την διαφορά ότι για το batch size επιλέχτηκε η τιμή 100 και για το minimum change η τιμή 0.01. Δεν επετεύχθη σύγκλιση σε καμία από τις τρεις αυτές δοκιμές. Στην συνέχεια, για τις υπερπαραμέτρους της δεύτερης τριάδας δοκιμών μειώθηκε η τιμή του batch size και του minimum change, αλλαγές που είχαν αποδειχτεί ευνοϊκές ως προς την σύγκλιση σε προηγούμενες περιπτώσεις. Οι τιμές των υπερπαραμέτρων που χρησιμοποιήθηκαν για το πρώτο σύνολο δοκιμών δίνονται από τον παρακάτω πίνακα:

Learning Rate	0.1
Batch size	25
Decay ratio	0.1
Encoder's neurons	19
Epochs	5000
$\rho$	0.5

Πίνακας 6.33: Σταθερές τιμές υπερπαραμέτρων για την τέταρτη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα CTA

Το  $\rho$  επιλέγεται ίσο με 0.5 προκειμένου να δοθεί ίση βαρύτητα στο κόστος

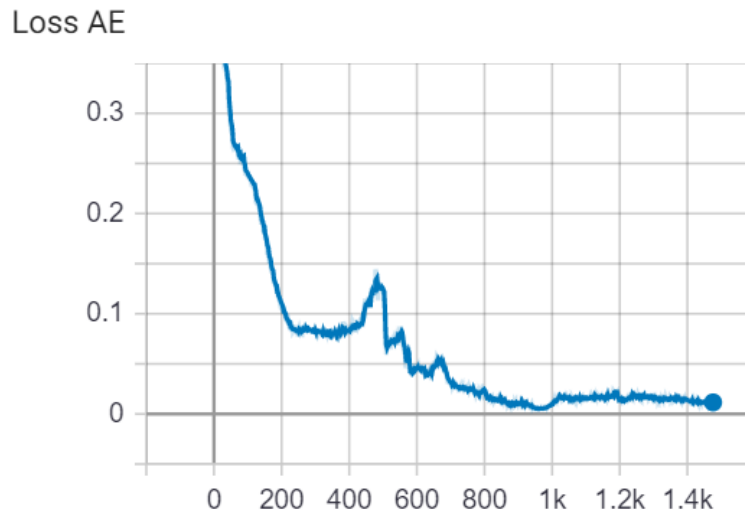
ανακατασκευής και στο κόστος λόγω δυνάμεων. Τα αποτελέσματα των τριών δοκιμών είναι :

Runs	CG moieties	Total Loss
1	9	0.14
2	10	0.13
3	7	0.13

Πίνακας 6.34: Αποτελέσματα για την τέταρτη συνάρτηση κόστους στο σύστημα CTA

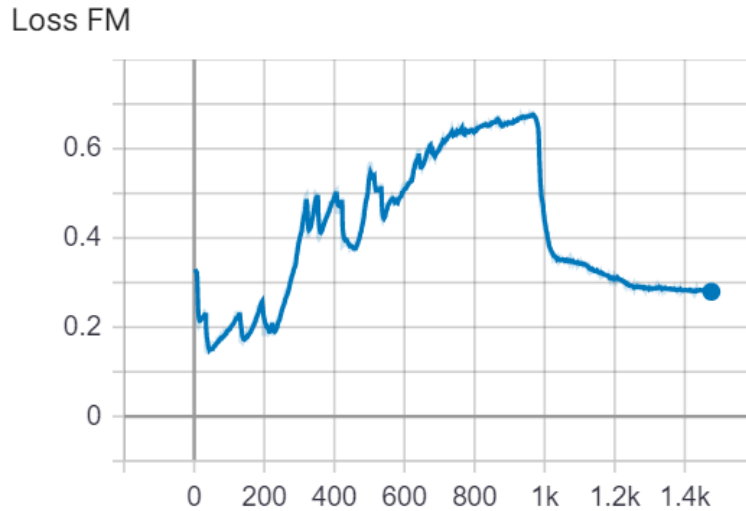
Σε όλες τις περιπτώσεις πραγματοποιήθηκε σύγκλιση της συνάρτησης κόστους επομένως οι αλλαγές των batch size και minimum change επηρέασαν θετικά την διαδικασία της βελτιστοποίησης. Παρατηρούμε πως, όπως και στην περίπτωση του πενταμερούς του πολυαιθυλενίου με τη χρήση της  $\mathcal{L}_4$  με ίδιες υπερπαραμέτρους οι αριθμοί των αδροποιημένων μονάδων κινούνται κοντά στο μέσο του αριθμού των νευρώνων. Επίσης οι τιμές του κόστους είναι πανομοιότυπες για τις τρεις δοκιμές . Παρακάτω θα αναλυθούν τα επιμέρους αποτελέσματα από την πρώτη δοκιμή.

Το διάγραμμα του κόστους ανακατασκευής συναρτήσει των επαναλήψεων για την πρώτη δοκιμή είναι:



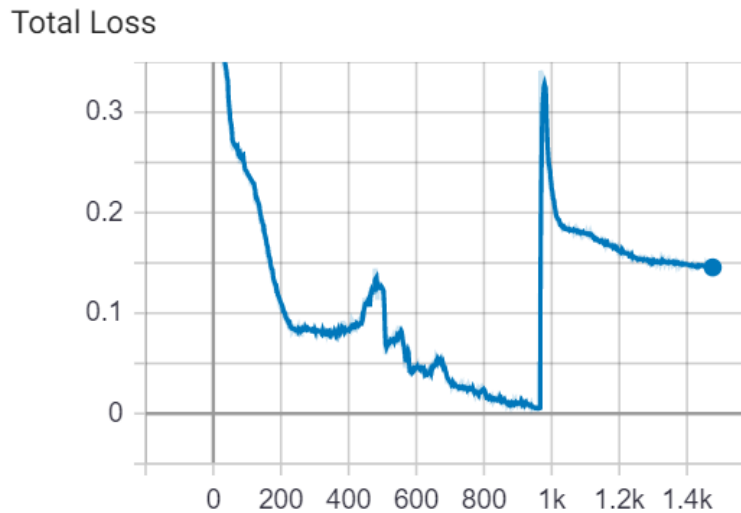
Εικόνα 6.68: Γραφική παράσταση του κόστους ανακατασκευής συναρτήσει των επαναλήψεων για το μονομερές του CTA για την τέταρτη συνάρτηση κόστους

Το διάγραμμα του κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσει των επαναλήψεων για την πρώτη δοκιμή είναι:



Εικόνα 6.69: Γραφική παράσταση του κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσει των επαναλήψεων για το μονομερές του CTA για την τέταρτη συνάρτηση κόστους

Τέλος, η καμπύλη του συνολικού κόστους συναρτήσει των επαναλήψεων για την πρώτη δοκιμή είναι:

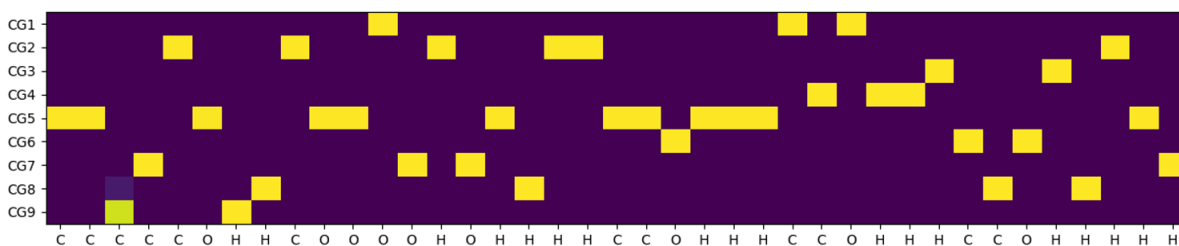


Εικόνα 6.70: Γραφική παράσταση του συνολικού κόστους συναρτήσει των επαναλήψεων για το μονομερές του CTA για την τέταρτη συνάρτηση κόστους

Παρατηρούμε ότι πραγματοποιείται πρόωρος τερματισμός των επαναλήψεων (χοντά στις 1500 από τις συνολικές 5000) επειδή ικανοποιείται

το κριτήριο σύγκλισης. Από το διάγραμμα του συνολικού κόστους μπορούμε να καταλάβουμε ότι το κόστος λόγω δυνάμεων ενεργοποιείται κοντά στην χιλιοστή επανάληψη, όπου και έχουμε μία πολύ μεγάλη αύξηση στην τιμή του.

Ο πίνακας κωδικοποίησης που προκύπτει για την πρώτη δοκιμή ακολουθεί παρακάτω:

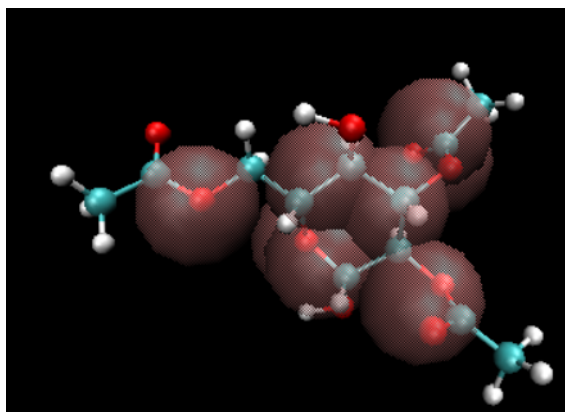


Εικόνα 6.71: Πίνακας κωδικοποίησης για το μονομερές του CTA για την τέταρτη συνάρτηση κόστους

Ο πίνακας συνδέσεων των αδροποιημένων μονάδων για την πρώτη δοκιμή είναι:

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Τέλος η απεικόνιση του πλήρους ατομιστικού συστήματος μαζί με το αδροποιημένο μέσω του προγράμματος VMD είναι:



Εικόνα 6.72: Ταυτόχρονη απεικόνιση πλήρους ατομιστικού και αδροποιημένου συστήματος για το μονομερές του CTA στις δοκιμές με χρήση της τέταρτης συνάρτησης κόστους

Στην συνέχεια, προκειμένου να διερευνηθεί η επίδραση της υπερπαραμέτρου  $\rho$  στα αποτελέσματα πραγματοποιήθηκε αύξηση στην τιμή της, ενώ ταυτόχρονα όλες οι άλλες τιμές των υπερπαραμέτρων διατηρήθηκαν σταθερές.

Οι υπερπαραμέτροι που χρησιμοποιήθηκαν για την εκτέλεση των επόμενων τριών δοκιμών παρατίθενται στον πίνακα που ακολουθεί :

Learning Rate	0.1
Batch size	25
Decay ratio	0.1
Encoder's neurons	19
Epochs	5000
$\rho$	0.8

Πίνακας 6.35: Σταθερές τιμές υπερπαραμέτρων για την τέταρτη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα CTA (2)

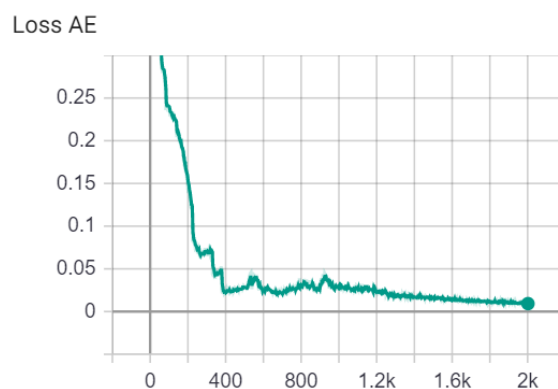
Τα αποτελέσματα που προέκυψαν με χρήση αυτών των υπερπαραμέτρων είναι:

Runs	CG moieties	Total Loss
1	15	0.34
2	10	0.22
3	6	0.13

Πίνακας 6.36: Αποτελέσματα για την τέταρτη συνάρτηση κόστους στο σύστημα CTA (2)

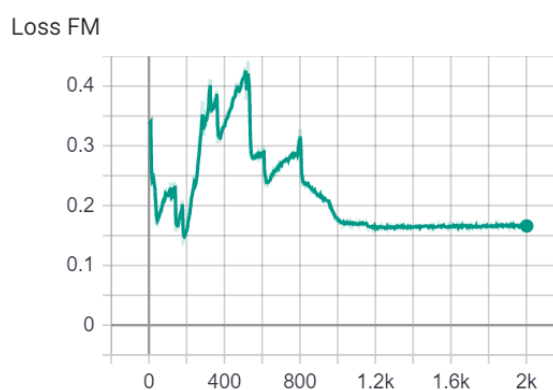


Παρατηρώντας τα αποτελέσματα φαίνεται πως υπάρχει μία ανοδική τάση στο συνολικό κόστος στις δύο από τις τρεις δοκιμές. Επίσης, σε σύγκριση με την προηγούμενη τριάδα δοκιμών το εύρος των αδροποιημένων μονάδων που προκύπτουν είναι πολύ μεγαλύτερο. Επισημαίνεται πως και στις τρεις περιπτώσεις επετεύχθη σύγκλιση. Παρακάτω θα αναλυθούν τα αποτελέσματα από την τρίτη δοκιμή ξεκινώντας με την γραφική παράσταση του κόστους ανακατασκευής συναρτήσει των επαναλήψεων:



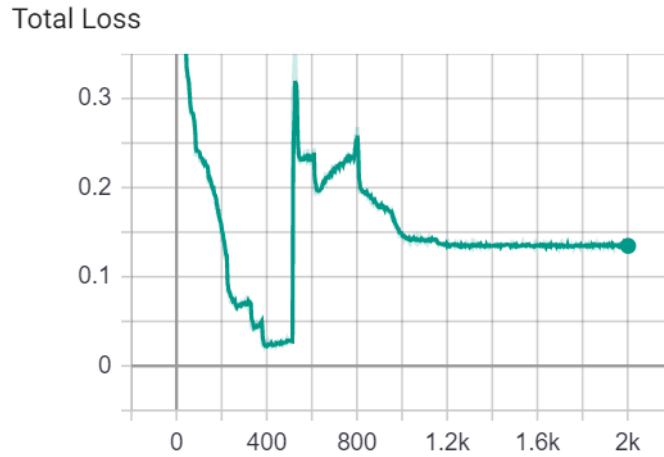
Εικόνα 6.73: Γραφική παράσταση του κόστους ανακατασκευής συναρτήσει των επαναλήψεων για το μονομερές του CTA για την τέταρτη συνάρτηση κόστους(2)

Ακολουθεί η γραφική παράσταση του κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσει των επαναλήψεων για την τρίτη δοκιμή:



Εικόνα 6.74: Γραφική παράσταση του κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσει των επαναλήψεων για το μονομερές του CTA για την τέταρτη συνάρτηση κόστους (2)

Τέλος, η καμπύλη του συνολικού κόστους συναρτήσει των επαναλήψεων για την τρίτη δοκιμή είναι:



Εικόνα 6.75: Γραφική παράσταση του συνολικού κόστους συναρτήσει των επαναλήψεων για το μονομερές του CTA για την τέταρτη συνάρτηση κόστους(2)

Ο πίνακας κωδικοποίησης που προκύπτει για την τρίτη δοκιμή ακολουθεί παρακάτω:

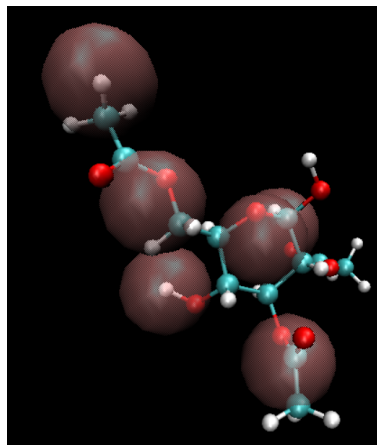


Εικόνα 6.76: Πίνακας κωδικοποίησης για το μονομερές του CTA για την τέταρτη συνάρτηση κόστους(2)

Ο πίνακας συνδέσεων των αδροποιημένων μονάδων για την τρίτη δοκιμή είναι:

$$C = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Τέλος η απεικόνιση του πλήρους ατομιστικού συστήματος μαζί με το αδροποιημένο μέσω του προγράμματος VMD είναι:



Εικόνα 6.77: Ταυτόχρονη απεικόνιση πλήρους ατομιστικού και αδροποιημένου συστήματος για το μονομερές του CTA στις δοκιμές με χρήση της τέταρτης συνάρτησης κόστους(2)

#### 6.4.4 Συνάρτηση κόστους $\mathcal{L}_5$

Με την χρήση της συνάρτησης κόστους  $\mathcal{L}_5$  πραγματοποιήθηκαν δύο τριάδες δοκιμών για το μονομερές του CTA. Σε κάθε τριάδα έγιναν τυχαίες αρχικοποιήσεις για τα βάρη του VAE. Οι τιμές που χρησιμοποιήθηκαν για το minimum change και την υπομονή ήταν 0.001 και 10 αντίστοιχα. Οι τιμές των υπερπαραμέτρων που χρησιμοποιήθηκαν για την πρώτη τριάδα δοκιμών δίνονται στον παρακάτω πίνακα:

Learning Rate	0.1
Batch size	25
Decay ratio	0.1
Encoder's neurons	19
Epochs	5000
$\rho$	0.5

Πίνακας 6.37: Σταθερές τιμές υπερπαραμέτρων για την πέμπτη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα CTA

Η τιμή 25 για το batch size επιλέχτηκε διότι από προηγούμενες δοκιμές φάνηκε ότι σε συνδυασμό με την τιμή minimum change 0.001 οδηγούν σε

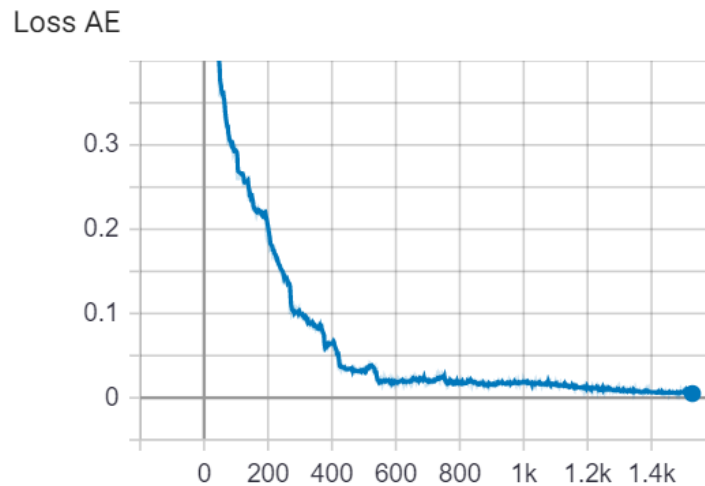
αποτελεσματικότερη βελτιστοποίηση. Η υπερπαράμετρος  $\rho$  τέθηκε ίση με 0.5, προκειμένου οι δύο όροι του κόστους να έχουν παρόμοια συνεισφορά στο συνολικό κόστος. Τα αποτελέσματα που προέκυψαν από την επιλογή των συγκεκριμένων υπερπαραμέτρων παρατίθενται στον πίνακα που ακολουθεί:

Runs	CG moieties	Total Loss
1	4	0.07
2	9	0.12
3	7	0.11

Πίνακας 6.38: Αποτελέσματα για την πέμπτη συνάρτηση κόστους στο σύστημα CTA

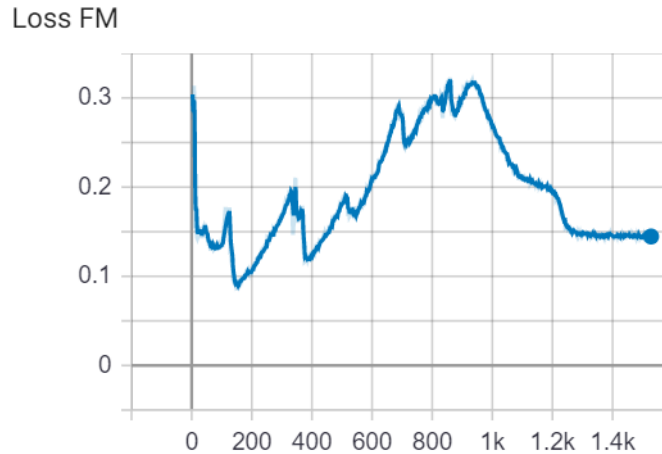
Παρατηρούμε πως και στις τρεις περιπτώσεις οι τιμές των συναρτήσεων είναι πολύ χαμηλές. Όπως και στην περίπτωση της συνάρτησης κόστους  $\mathcal{L}_4$  φαίνεται πως ο αριθμός των αδροποιημένων μονάδων εκτείνεται σε ένα μεγάλο εύρος. Μία ανάλογη συμπεριφορά είχε παρατηρηθεί και στα αποτελέσματα που προέκυψαν και στο πενταερές του πολυαιθυλενίου με την χρήση της πέμπτης συνάρτησης κόστους. Παραταύτα, επετεύχθη σύγκλιση και στις τρεις περιπτώσεις. Από τις τρεις αυτές περιπτώσεις επιλέχθηκε να αναλυθεί η πρώτη.

Η γραφική παράσταση του κόστους ανακατασκευής συναρτήσεω των επαναλήψεων για την πρώτη δοκιμή είναι:



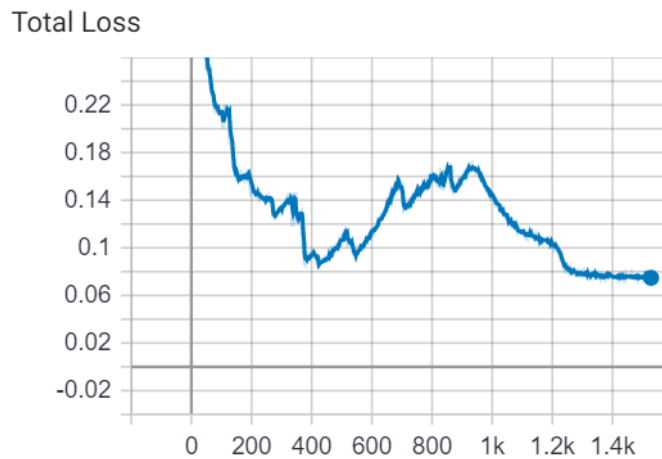
Εικόνα 6.78: Γραφική παράσταση του κόστους ανακατασκευής συναρτήσεω των επαναλήψεων για το μονομερές του CTA για την πέμπτη συνάρτηση κόστους

Συνεχίζοντας, η γραφική παράσταση του κόστους λόγω των δυνάμεων συναρτήσεως των επαναλήψεων είναι :



Εικόνα 6.79: Γραφική παράσταση του κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσεως των επαναλήψεων για το μονομερές του CTA για την πέμπτη συνάρτηση κόστους

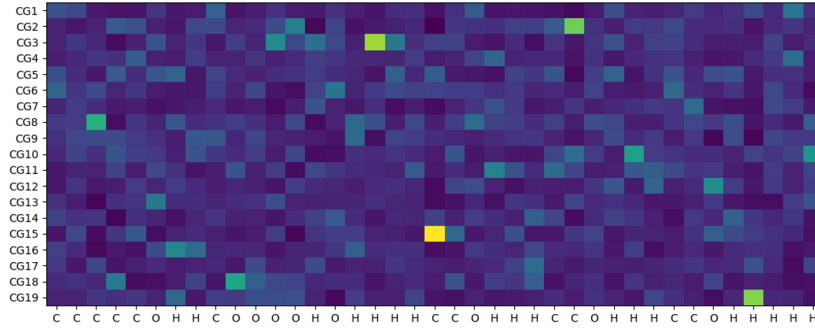
Τέλος, η γραφική παράσταση του συνολικού κόστους συναρτήσεως των επαναλήψεων είναι:



Εικόνα 6.80: Γραφική παράσταση του συνολικού κόστους συναρτήσεως των επαναλήψεων για το μονομερές του CTA για την πέμπτη συνάρτηση κόστους

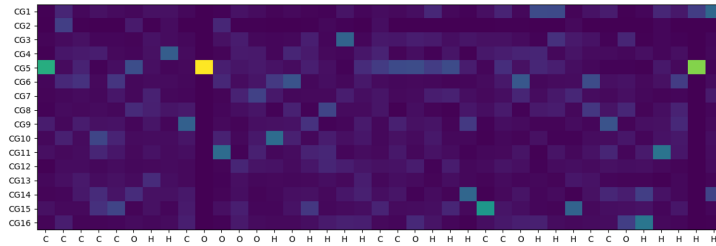
Παρακάτω θα εξεταστεί η μορφή του πίνακα κωδικοποίησης κατά την διάρκεια της διαδικασίας της βελτιστοποίησης. Προφανώς, παρόμοια λογική ισχύει και σε όλες τις υπόλοιπες περιπτώσεις.

Αρχή βελτιστοποίησης (τυχαία αρχικοποίηση βαρών):



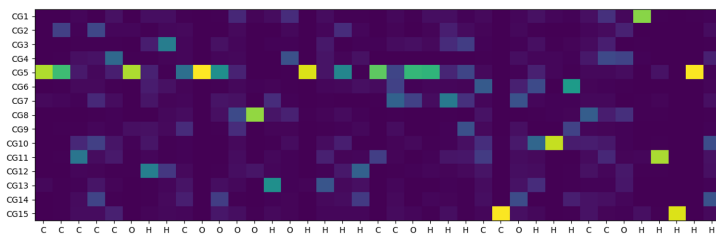
Εικόνα 6.81: Πίνακας κωδικοποίησης, 0 επαναλήψεις, μονομερές CTA, πέμπτη συνάρτηση κόστους

500 επαναλήψεις:



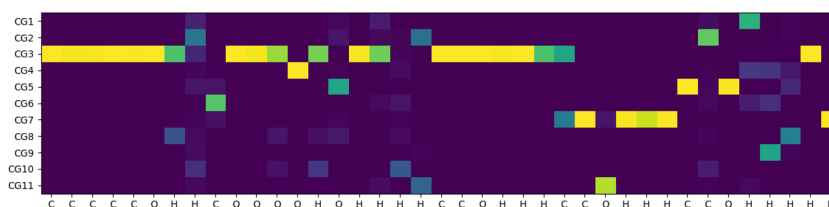
Εικόνα 6.82: Πίνακας κωδικοποίησης, 500 επαναλήψεις, μονομερές CTA, πέμπτη συνάρτηση κόστους

750 επαναλήψεις:



Εικόνα 6.83: Πίνακας κωδικοποίησης, 750 επαναλήψεις, μονομερές CTA, πέμπτη συνάρτηση κόστους

**1000 επαναλήψεις:**



Εικόνα 6.84: Πίνακας κωδικοποίησης, 1000 επαναλήψεις, μονομερές CTA, πέμπτη συνάρτηση κόστους

**1250 επαναλήψεις:**



Εικόνα 6.85: Πίνακας κωδικοποίησης, 1250 επαναλήψεις, μονομερές CTA, πέμπτη συνάρτηση κόστους

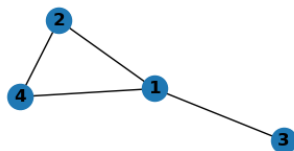
**Τέλος βελτιστοποίησης:**



Εικόνα 6.86: Πίνακας κωδικοποίησης, τέλος βελτιστοποίησης, μονομερές CTA, πέμπτη συνάρτηση κόστους

Παρατηρούμε ότι αρχικά φαίνεται η τυχαία αρχικοποίηση βαρών του πίνακα κωδικοποίησης. Στην συνέχεια όσο προχωράει η διαδικασία της βελτιστοποίησης οι κατακόρυφες κατανομές πιθανοτήτων του πίνακα, δηλαδή οι κατανομές με τις πιθανότητες ανάθεσης των ατόμων σε αδροποιημένες μονάδες γίνονται όλο και στενότερες μέχρι να σταματήσει η διαδικασία της βελτιστοποίησης. Στην συγκεκριμένη περίπτωση στο τέλος της βελτιστοποίησης κάθε άτομο συμμετέχει σε μία αδροποιημένη μονάδα με πιθανότητα 1. Στην συνέχεια, ακολουθεί ένας γράφος γειτνίασης που

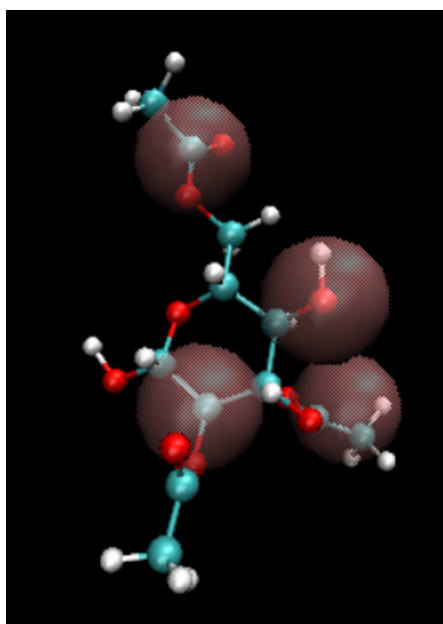
περιγράφει τις συνδέσεις μεταξύ των αδροποιημένων μονάδων: (ο οποίος είναι ισοδύναμος με τον πίνακα συνδέσεων)



Εικόνα 6.87: Γράφος γειτνίασης για την περιγραφή των συνδέσεων μεταξύ των αδροποιημένων μονάδων στο μονομερές του CTA για την πέμπτη συνάρτηση κόστους

Συνοπτικά περιγράφει πως η πρώτη αδροποιημένη μονάδα είναι συνδεδεμένη με όλες και η δεύτερη είναι συνδεδεμένη με την τέταρτη.

Τέλος η απεικόνιση του πλήρους ατομιστικού συστήματος μαζί με το αδροποιημένο μέσω του προγράμματος VMD είναι:



Εικόνα 6.88: Ταυτόχρονη απεικόνιση πλήρους ατομιστικού και αδροποιημένου συστήματος για το μονομερές του CTA στις δοκιμές με χρήση της πέμπτης συνάρτησης κόστους



Ακολουθεί η επόμενη τριάδα δοκιμών, όπου εξετάστηκε η επίδραση της αύξησης της τιμής της υπερπαραμέτρου  $\rho$  στα αποτελέσματα του μοντέλου. Οι τιμές των υπερπαραμέτρων που χρησιμοποιήθηκαν δίνονται στον παρακάτω πίνακα:

Learning Rate	0.1
Batch size	25
Decay ratio	0.1
Encoder's neurons	19
Epochs	5000
$\rho$	0.8

Πίνακας 6.39: Σταθερές τιμές υπερπαραμέτρων για την πέμπτη συνάρτηση κόστους, στο σύστημα CTA (2)

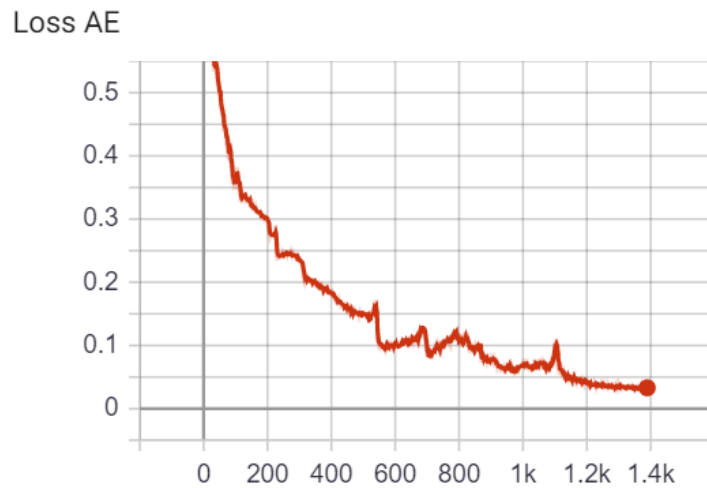
Με τις υπερπαραμέτρους του παραπάνω πίνακα προέκυψαν τα παρακάτω αποτελέσματα για τις τρεις δοκιμές που εκτελέστηκαν:

Runs	CG moieties	Total Loss
1	7	0.1
2	8	0.16
3	3	0.1

Πίνακας 6.40: Αποτελέσματα για την πέμπτη συνάρτηση κόστους στο σύστημα CTA (2)

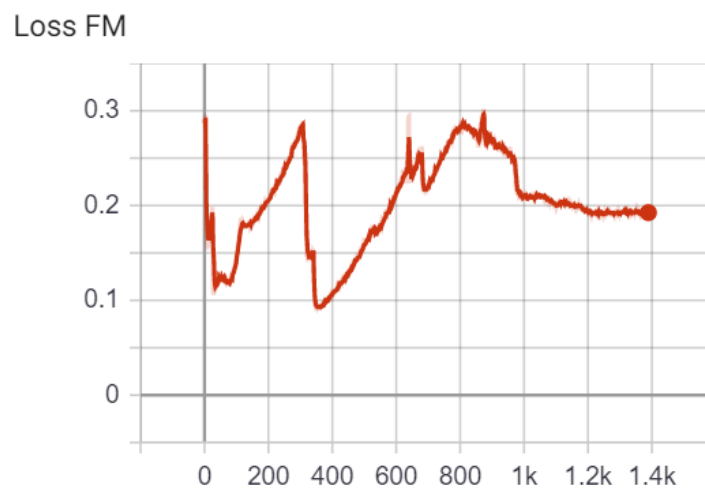
Από την παρατήρηση του παραπάνω πίνακα φαίνεται πως για ακόμη μία φορά οι αριθμοί των αδροποιημένων μονάδων βρίσκονται σε ένα εύρος τιμών. Επιπλέον, αν και κάθε δοκιμή κατέληξε σε χαμηλό κόστος η πρώτη και η τρίτη παρουσίασαν πολύ απότομη πτώση στην τιμή του συνολικού κόστους και τερματίστηκαν απότομα χωρίς να σταθεροποιηθεί η τιμή του. Παραταύτα, και οι τρεις δοκιμές παρουσιάζουν εξίσου χαμηλό κόστος. Παρακάτω ακολουθεί ανάλυση των αποτελεσμάτων της δεύτερης δοκιμής:

Ακολουθεί το γράφημα του κόστους ανακατασκευής συναρτήσεων των επαναλήψεων:



Εικόνα 6.89: Γραφική παράσταση του κόστους ανακατασκευής συναρτήσεως των επαναλήψεων για το μονομερές του CTA για την πέμπτη συνάρτηση κόστους(2)

Ακολουθεί το γράφημα του κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσεως των επαναλήψεων:



Εικόνα 6.90: Γραφική παράσταση του κόστους λόγω δυνάμεων συναρτήσεως των επαναλήψεων για το μονομερές του CTA για την πέμπτη συνάρτηση κόστους(2)

Τέλος, ακολουθεί το γράφημα του συνολικού κόστους συναρτήσεως των επαναλήψεων για την δεύτερη δοκιμή:



Εικόνα 6.91: Γραφική παράσταση του συνολικού κόστους συναρτήσεως των επαναλήψεων για το μονομερές του CTA για την πέμπτη συνάρτηση κόστους(2)

Παρατηρούμε και στα τρία διαγράμματα ότι η καμπύλη του κόστους δεν είναι λεία, αλλά παρουσιάζει πολλές απότομες μεταβολές στην τιμή της. Στις τελευταίες 200 επαναλήψεις ωστόσο αν και ταλαντώνεται ελαφρώς σταθεροποιείται και τελικά ικανοποιείται το κριτήριο σύγκλισης κοντά στις 1400 επαναλήψεις.

Ο πίνακας κωδικοποίησης που προκύπτει στο τέλος της βελτιστοποίησης είναι ο εξής:



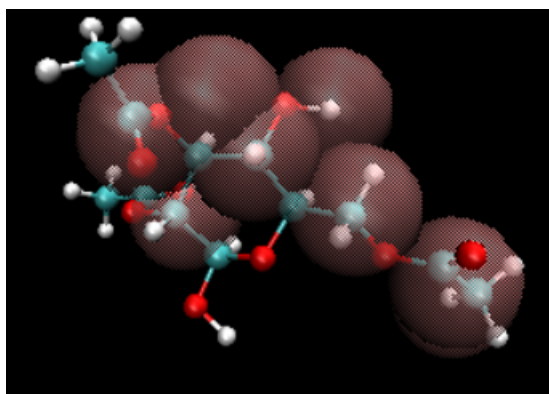
Εικόνα 6.92: Πίνακας κωδικοποίησης για το μονομερές του CTA για την πέμπτη συνάρτηση κόστους

Παρατηρούμε ότι για δύο από τα άτομα υδρογόνου του μονομερούς του CTA δεν υπάρχει ξεκάθαρη ανάθεση σε αδροποιημένες μονάδες και οι πιθανότητές τους είναι μοιρασμένες ανάμεσα σε δύο αδροποιημένες μονάδες. Βέβαια το πράσινο χρώμα αντιστοιχεί σε μεγαλύτερη πιθανότητα, επομένως η ανάθεση τους γίνεται στις αντίστοιχες αδροποιημένες μονάδες. Ο πίνακας

συνδέσεων μεταξύ των αδροποιημένων μονάδων που προκύπτει είναι:

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Τέλος η απεικόνιση του πλήρους ατομιστικού συστήματος μαζί με το αδροποιημένο μέσω του προγράμματος VMD είναι:



Εικόνα 6.93: Ταυτόχρονη απεικόνιση πλήρους ατομιστικού και αδροποιημένου συστήματος για το μονομερές του CTA στις δοκιμές με χρήση της πέμπτης συνάρτησης κόστους(2)

## Κεφάλαιο 7

# Συμπεράσματα και Μελλοντικές Επεκτάσεις

Στο πλαίσιο αυτής της εργασίας μελετήθηκε μία μεθοδολογία αδροποίησης χημικών συστημάτων με χρήση ενός εργαλείου μηχανικής μάθησης που βασίζεται στους παραλλακτικούς αυτοκωδικοποιητές (VAEs). Για τον σκοπό αυτό πραγματοποιήθηκαν υπολογισμοί και αναλύσεις των αποτελεσμάτων τεσσάρων διαφορετικών χημικών συστημάτων χρησιμοποιώντας το μοντέλο της μηχανικής μάθησης που κατασκευάστηκε, εξετάζοντας διαφορετικές περιοχές τιμών για τις υπερπαραμέτρους του και δοκιμάζοντας διαφορετικές εκφράσεις για τις συναρτήσεις κόστους που χρησιμοποιούνται κατά την εκπαίδευσή του. Επιπλέον, εφαρμόστηκαν περιστροφές στις ατομιστικές συντεταταγμένες που αποτελούν τα δεδομένα εκπαίδευσης του μοντέλου με σκοπό την διερεύνηση της επίδρασής της περιστροφής τους στα τελικά αποτελέσματα. Στις επόμενες παραγράφους ακολουθούν τα πορίσματα που προέκυψαν από το σύνολο των διερευνήσεων που προηγήθηκαν.

Αρχικά, κρίνεται σκόπιμο να σχολιαστούν τα αποτελέσματα του μοντέλου που χρησιμοποιήθηκε ως προς την συστηματικότητα τους στην επιλογή αριθμού αδροποιημένων μονάδων στα τέσσερα διαφορετικά χημικά είδη. Κατά την διερεύνηση του χημικού συστήματος του αιθανίου για την συγκεκριμένη περιοχή τιμών των υπερπαραμέτρων που επιλέχθηκε και για την επιλογή της συνάρτησης κόστους  $\mathcal{L}_1$ , παρατηρήθηκε με μεγάλη επαναληψιμότητα η επιλογή μίας μόνο αδροποιημένης μονάδας. Το ίδιο φαινόμενο, με μία μόνο εξαίρεση, παρατηρήθηκε και για το στυρένιο χρησιμοποιώντας ξανά την  $\mathcal{L}_1$ .

Σχετικά με το πενταμερές πολυαιθυλενίου, παρατηρήθηκε ότι με την χρήση της  $\mathcal{L}_1$  με το ίδιο πλέγμα υπερπαραμέτρων με τα προηγούμενα δύο συστήματα, το μοντέλο κατέληξε στην επιλογή δύο αδροποιημένων μονάδων σε 6 από τις 8 περιπτώσεις και σε επιλογή 3 αδροποιημένων μονάδων σε 2 από τις 8 περιπτώσεις. Επίσης στις δοκιμές που έγιναν για το πολυαιθυλένιο με χρήση της  $\mathcal{L}_4$  σε 4 από τις 6 περιπτώσεις, το μοντέλο επέλεξε 8 αδροποιημένες μονάδες, ενώ στις υπόλοιπες 2 κατέληξε σε 9 αδροποιημένες μονάδες. Με τη χρήση της συνάρτησης κόστους  $\mathcal{L}_5$ , αν και δεν υπήρξε κάποια σημαντική επαναληψιμότητα ως προς τον αριθμό αδροποιημένων μονάδων που επέλεγε το μοντέλο για κάθε σύστημα, παρατηρήθηκε πολύ ικανοποιητική σύγκλιση σε όλες τις περιπτώσεις με μεγάλη ποικιλία αποτελεσμάτων. Τέλος, σχετικά με την συνάρτηση κόστους  $\mathcal{L}_2$ , παρατηρήθηκε συστηματική συμπεριφορά σε όλα τα αποτελέσματά της, αφού λόγω της έλλειψης του κόστους λόγω δυνάμεων το μοντέλο κατέληγε με μεγάλη βεβαιότητα σε αριθμό αδροποιημένων μονάδων ίσο με τον αριθμό των νευρώνων του Encoder.

Η επιλογή των υπερπαραμέτρων και των κριτηρίων τερματισμού είχε πολύ μεγάλη επίδραση στην διεξαγωγή αποτελεσμάτων με σύγκλιση της συνάρτησης κόστους σε χαμηλές τιμές. Οι υπερπαραμέτροι που επιλέχτηκαν στις περισσότερες δοκιμές που αναλύθηκαν στα πλαίσια αυτής της εργασίας, οδήγησαν σε σύγκλιση του συνολικού κόστους. Ωστόσο σε κάποιες περιπτώσεις με χρήση των  $\mathcal{L}_4$  και  $\mathcal{L}_5$  στις οποίες δεν υπήρξε σύγκλιση της συνάρτησης κόστους διαπιστώθηκε πως ο υποτετραπλασιασμός της τιμής της υπερπαραμέτρου batch size (από 100 σε 25) και η μείωση του minimum change λειτούργησαν πολύ ευνοϊκά και έδωσαν λύση στο πρόβλημα της βελτιστοποίησης. Συμπληρώνοντας τα πορίσματα για το batch size, στις περισσότερες δοκιμές που εκτελέστηκαν με πλέγμα υπερπαραμέτρων με χρήση της  $\mathcal{L}_1$  για τα συστήματα αιθάνιο στυρένιο και πενταμερές πολυαιθυλενίου, διαπιστώθηκε πως έγινε επιλογή της τιμής 100 από το μοντέλο. Περνώντας και στις υπόλοιπες υπερπαραμέτρους, για το learning rate και το decay ratio διαπιστώθηκε πως δεν έχουν κάποια σημαντική επιρροή στο τελικό αποτέλεσμα επομένως οι τιμές τους επιλέχτηκαν ίσες με 0.1 και 0.1 αντίστοιχα, για τις οποίες τιμές παρατηρήθηκε ότι αύξαναν την ταχύτητα της βελτιστοποίησης. Η παράμετρος με την μεγαλύτερη επιρροή στην διαδικασία της βελτιστοποίησης για όλες τις συναρτήσεις κόστους (εκτός της  $\mathcal{L}_2$  που δεν περιλαμβάνει τον όρο των δυνάμεων) είναι το  $\rho$ , το οποίο υπενθυμίζουμε πως έχει διαφορετική λειτουργία στην  $\mathcal{L}_1$  από ότι στην  $\mathcal{L}_4$  και στην  $\mathcal{L}_5$ . Συμπεραίνουμε πως με επιλογή μεγαλύτερων τιμών για την υπερπαραμέτρο  $\rho$ , οδηγούμαστε σε δυσκολότερο πρόβλημα βελτιστοποίησης με μεγαλύτερα κόστη.

Ο σημαντικότερος όρος της συνάρτησης κόστους, που παίζει τον κυρίαρχο ρόλο στην διαδικασία της βελτιστοποίησης αλλά και στα αποτελέσματα, είναι το κόστος λόγω δυνάμεων. Από τη χρήση της συνάρτησης κόστους  $\mathcal{L}_1$  διαπιστώθηκε πως σε όλες τις περιπτώσεις που το σύστημα αδυνατεί να "διαχειριστεί" το κόστος λόγω δυνάμεων, το μοντέλο καταλήγει σε μία αδροποιημένη αναπαράσταση η οποία περιγράφεται από όσο το δυνατόν λιγότερους βαθμούς ελευθερίας και συγκεκριμένα τις περισσότερες φορές με μία μόνο αδροποιημένη μονάδα, "εξουδετερώνοντας" με αυτόν τον τρόπο τις δυνάμεις και το κόστος που προέχεται από αυτές. Εξού και η τεράστια σημασία της υπερπαραμέτρου  $\rho$  για την  $\mathcal{L}_1$ , που λειτουργεί ως βάρος του κόστους λόγω δυνάμεων και οι χαμηλότερες τιμές της που εξετάστηκαν (της τάξης του  $10^{-3}$ ) οδηγούν σε αποτελέσματα με περισσότερες από μία αδροποιημένες μονάδες για τα συστήματα πενταμερές πολυαιθυλενίου και μονομερές CTA, σε αντίθεση με τις υψηλότερες τιμές τιμές της (της τάξης του  $10^{-1}$ ) που οδηγούν με βεβαιότητα σε μία αδροποιημένη μονάδα. Με χρήση των συναρτήσεων κόστους  $\mathcal{L}_4$  και  $\mathcal{L}_5$ , όπου το κόστος λόγω δυνάμεων είναι κανονικοποιημένο οδηγούμαστε σε μεγαλύτερη ποικιλία αδροποιημένων αναπαραστάσεων όσον αφορά τον αριθμό των αδροποιημένων μονάδων, με χαμηλές τιμές για τα αντίστοιχα κόστη. Για την υπερπαραμέτρο  $\rho$  που στις  $\mathcal{L}_4$  και  $\mathcal{L}_5$  λειτουργεί ως μεταβλητή που εκφράζει την ισορροπία μεταξύ των δύο κατηγοριών κόστους, από τις δοκιμές στο πενταμερές πολυαιθυλενίου και το μονομερές του CTA, διαπιστώθηκε πως η τιμή 0.5 που δίνει ίδιο βάρος σε κάθε όρο, λειτουργεί καλύτερα από την τιμή 0.8 που προσδίδει περισσότερο βάρος στον όρο του κόστους λόγω δυνάμεων. Με την χρήση της δεύτερης, παρατηρήθηκε μεγαλύτερη κυριαρχία των δυνάμεων στο συνολικό κόστος το οποίο έδειξε μία ανοδική τάση. Ωστόσο, δεν υπήρξε μεγάλη διαφορά γιατί και στις δύο περιπτώσεις οι πολλαπλασιαστές και των δύο όρων του κόστους (0.2 για το κόστος ανακατασκευής και 0.8 για το κόστος λόγω δυνάμεων), παρέμειναν στην ίδια τάξη μεγέθους.

Συνεχίζοντας, με την παρατήρηση των αποτελεσμάτων από το σύνολο των δοκιμών, διαπιστώνεται πως σε όλες τις περιπτώσεις σύγκλισης των συναρτήσεων κόστους, οι περισσότερες κατανομές πιθανοτήτων ανάθεσης των ατόμων σε αδροποιημένες μονάδες ήταν αρκετά ξεκάθαρες. Στις περισσότερες από αυτές δηλαδή, γινόταν ανάθεση κάθε ατόμου σε μία αδροποιημένη μονάδα με πιθανότητα 1 και σε λίγες περιπτώσεις ένα πολύ μικρό ποσοστό των ατόμων είχε μοιρασμένες πιθανότητες ανάθεσης ανάμεσα σε δύο αδροποιημένες ομάδες. Επιπλέον, από την παρατήρηση των συνολικών αποτελεσμάτων προέκυψε το πόρισμα πως η τυχαία αρχικοποίηση των βαρών του νευρωνικού δικτύου επηρεάζει σημαντικά τα αποτελέσματα, αφού σε

πολλές περιπτώσεις επιλέγοντας το ίδιο σύνολο υπερπαραμέτρων καταλήγουμε σε διαφορετικά αποτελέσματα. Σε σχέση με την εφαρμογή περιστροφών, αν και στα συστήματα που εξετάστηκαν, δεν παρατηρήθηκε κάποια σημαντική διαφορά στα αποτελέσματα από την εφαρμογή τους πέρα από την αύξηση του χρόνου εκτέλεσης των δοκιμών, τα δεδομένα είναι ανεπαρκή προκειμένου να προκύψει κάποια ξεκάθαρη σχέση αιτίου και αιτιατού μεταξύ των δύο.

Καταλήγοντας, προκειμένου να πραγματοποιηθεί περαιτέρω πρόοδος στο πρόβλημα που μελετήθηκε στην παρούσα εργασία, έχουν τεθεί κάποιοι μελλοντικοί στόχοι. Ξεκινώντας, θα ήταν ωφέλιμο σε κάποιες περιπτώσεις να οριστούν νέες συναρτήσεις κόστους οι οποίες θα βασίζονται σε φυσικοχημικές περιγραφές-περιορισμούς έτσι ώστε να διασφαλιστεί η αναπαραγωγή αποτελεσμάτων με όσο το δυνατόν περισσότερο φυσικό νόημα. Επιπλέον θα βοηθούσε μία βελτιωμένη αναπαράσταση της ανάθεσης των ατόμων σε αδροποιημένες μονάδες, που θα μπορεί να τις απεικονίζει και σε περιπτώσεις που δεν έχουν σφαιρικό σχήμα. Επιπροσθέτως, θα ήταν πολύ χρήσιμη η διερεύνηση τρόπων με τους οποίους καθίσταται δυνατή η μείωση της επίδρασης της τυχαιότητας στα τελικά αποτελέσματα. Επίσης, αν και υπάρχουν ισχυρές υποψίες ότι η εφαρμογή περιστροφών στον αρχικό χώρο δεν αλλάζει τα τελικά αποτελέσματα της αδροποίησης, είναι επιτακτικό να βρεθεί μία μέθοδος που παρέχει μία σίγουρη απάντηση. Ένας ακόμη εξαιρετικά σημαντικός μελλοντικός στόχος είναι η επέκταση των μοντέλων σε συστήματα μεγαλύτερης κλίμακας που αποτελούνται από μεγάλο αριθμό μορίων και χαρακτηρίζονται από πολύ περισσότερους βαθμούς ελευθερίας. Τέλος, είναι επιτακτική ανάγκη η άμεση σύνδεση του προβλήματος με την μοριακή προσομοίωση, πραγματοποιώντας και εξαγωγή των αδροποιημένων δυναμικών αλληλεπίδρασης με ανάπτυξη γενικευμένων μεθόδων μηχανικής μάθησης. Τα δυναμικά αυτά θα πρέπει να μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την διεξαγωγή μοριακών προσομοιώσεων και η αποτελεσματικότητά τόσο των αδροποιημένων μοντέλων με βάση την μηχανική μάθηση όσο και των ίδιων των μηχανικά εξαγμένων δυναμικών, θα κρίνεται βάσει της ικανότητάς τους να αναπαράγουν ιδιότητες-στόχους σε σύγκριση με τις πλήρως ατομιστικές προσομοιώσεις των αντίστοιχων συστημάτων.



# Βιβλιογραφία

- [1] Andrew R. Leach. *Molecular Modelling: Principles and Applications*. 2nd ed.; Pearson Education Limited,2001.
- [2] R.A. Latour. *Comprehensive Biomaterials II*. 2017,Elsevier: Oxford; pp268-294.
- [3] Michael P. Allen. *Introduction to Molecular Dynamics Simulation*. John von Neumann Institute for Computing, Julich, NIC Series, Vol. 23, ISBN 3-00-012641-4, pp.1-28, 2004.
- [4] Jarosaw Meller. *Molecular Dynamics*. American Cancer Society, eLS, 2001.
- [5] Quan-De Wang et al. *Reactive molecular dynamics simulation and chemical kinetic modeling of pyrolysis and combustion of n-dodecane*. Combustion and Flame, March 2010; 217-226.
- [6] J.DAtkinson, AJabbarzadeh, and R.ITanner. *Rheological properties of thin liquid films by molecular dynamics simulations*. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, April 1997; 169-193.
- [7] Tommaso Casalini et al. *Molecular dynamics simulations and experimental studies reveal differential permeability of withaferin-A and withanone across the model cell membrane*. Front. Bioeng. Biotechnol., 30 June 2020.
- [8] Jodi A Hadden and Juan R Perilla. *Molecular Dynamics Simulations of Protein-Drug Complexes: A Computational Protocol for Investigating the Interactions of Small-Molecule Therapeutics with Biological Targets and Biosensors*. Front. Bioeng. Biotechnol., 30 June 2020.
- [9] Aneta Woźniak-Braszak et al. *Effect of Composition on the Molecular Dynamics of Biodegradable Isotactic Polypropylene/Thermoplastic Starch Blends*. ACS Sustainable Chemistry & Engineering , September 10, 2019;7, 16050-16059.

- [10] James H. McAliley and David A. Bruce. *Development of Force Field Parameters for Molecular Simulation of Polylactide*. J. Chem. Theory Comput. 2011;7(11),3756-3767.
- [11] Niki Vergadou and Doros N. Theodorou. *Molecular Modeling Investigations of Sorption and Diffusion of Small Molecules in Glassy Polymers*. (Basel). 2019 Aug 8;9(8).
- [12] Johannes Grotendorst et al. *Multiscale Simulation Methods in Molecular Sciences*. Institute for Advanced Simulation:Jülich Supercomputing Centre(Forschungszentrum Jülich), March 2009;42.
- [13] S. T. John and Gábor Csányi. *Many-Body Coarse-Grained Interactions using Gaussian Approximation Potentials*. The Journal of Physical Chemistry B, September 2016;121(48), 10934-10949.
- [14] Nicholas Guttenberg et al. *Minimizing memory as an objective for coarse-graining*. J. Chem. Phys. 2013;138, 094111.
- [15] Andrew Z. Summers et al. *A Transferable, Multi-Resolution Coarse-Grained Model for Amorphous Silica Nanoparticles*. J. Chem. Theory Comput. 2019;15(5), 3260-3271.
- [16] Steve Cranford and Markus J. Buehle. *Coarse-Graining Parameterization and Multiscale Simulation of Hierarchical Systems. Part I: Theory and Model Formulation*. Massachusetts Institute of Technology, 2010.
- [17] Helgi I.Ingólfsson et al. *The power of coarse graining in biomolecular simulations*. Wiley Interdiscip Rev Comput Mol Sci., 2014 May;4(3), 225-248.
- [18] HERBERT A. SIMON. *What We Know About Learning*. 1997 Frontiers in Education Conference Keynote Address sponsored by the Lockheed Martin Corporation, November 7, 1997;87(4), 343-348.
- [19] Nils J. Nilsson. *Introduction to Machine Learning*. Artificial Intelligence Laboratory, Department of Computer Science, November 3, 1998.
- [20] *What Is Machine Learning?* <https://ischoolonline.berkeley.edu/blog/what-is-machine-learning/>. Berkeley, June 26 2020.
- [21] John Bryden. *Biologically Inspired Computing: The Neural Network*. <https://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.113.4731&rep=rep1&type=pdf>. School of Computing, University of Leeds , 2019.
- [22] Piotr Drygaś et al. *Introduction to computational methods and theory of composites*. January 2021;1-56.

- [23] Danilo Capecchi. *The Foundation of Classical Mechanics*. Encyclopedia 2021;1(2), 482-495.
- [24] S. Hollands. *Lecture Notes on Statistical Mechanics and Thermodynamics*. <https://home.uni-leipzig.de/~tet/wp-content/uploads/2016/02/datei.pdf>. Universität Leipzig.
- [25] R.K.Pathria. *Statistical Mechanics*. 2nd ed;University of Waterloo, Department of Physics , 1996.
- [26] McGreevy. *Statistical Mechanics, via the counting of microstates of an isolated system (Microcanonical Ensemble)*. <https://mcgreevy.physics.ucsd.edu/s12/lecture-notes/chapter04.pdf>. University of California.
- [27] E.T.Jaynes. *Information Theory and Statistical Mechanics*. American Physical Society, March 4, 1957;106(4), 620-630.
- [28] Jos Uffink. *Compendium of the foundations of classical statistical physics*. .In *Philosophy of Physics*,Elsevier , February 2, 2007;923-1074.
- [29] Fredrik Heman. *Algorithms for Molecular Dynamics Simulations*. Stockholms Universitet Stockholm, 2006.
- [30] M.P.Allen and D.J.Tilesley. *Computer Simulation of Liquids*. Clarendon, Oxford, 1987.
- [31] *PumMa:Theory:Potentials*. <http://cbio.bmt.tue.nl/pumma/index.php/Theory/Potentials>.
- [32] L.D.Landau and E.M.Lifshitz. *Mechanics vol.1*. Pergamon Press, 1960.
- [33] Loup Verlet. *Computer "Experiments" on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules*. American Physical Society,Phys. Rev, 1967;159(1), 98-103.
- [34] Wei Cai. *An Overview of Molecular Simulation*. Stanford University, September 26, 2005.
- [35] Shuichi Nosé. *A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods*. J.Chem.Phys., July 1,1984;81(1), 511-519.
- [36] Yanxiang zhao. *Brief introduction to the thermostats*. <https://home.gwu.edu/~yxzhao/ResearchNotes/ResearchNote007Thermostat.pdf>. Stanford University, September 26, 2005.
- [37] William G. Hoover. *Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions*. Phys.Rev.A,American Physical Society, March 1985;31(3),1695-1697.

- [38] M. S. Shell. *Advanced molecular dynamics techniques*. [https://sites.engineering.ucsb.edu/~shell/che210d/Advanced\\_molecular\\_dynamics.pdf](https://sites.engineering.ucsb.edu/~shell/che210d/Advanced_molecular_dynamics.pdf). 2019.
- [39] Evangelia Kalligiannaki, Vagelis Harmandaris, and Markos Katsoulakis. *Systematic Coarse-Grained Models for Molecular Systems Using Entropy*. *Proceedings* 2020;46(1),27.
- [40] Anastasios Tsourtis, Vagelis Harmandaris, and Dimitrios Tsagkarogiannis. *Parameterization of Coarse-Grained Molecular Interactions through Potential of Mean Force Calculations and Cluster Expansion Techniques*. *Entropy*, August 2017;19(8),395.
- [41] Sebastian T.John and Gábor Csányi. *Many-Body Coarse-Grained Interactions Using Gaussian Approximation Potentials*. *J.Phys.Chem.*, 08 Nov 2017;121(48), 10934-10949.
- [42] Nikolas Zacharopoulos, Niki Vergadou, and Doros N. Theodorou. *Coarse graining using pretabulated potentials: Liquid benzene*. *J. Phys. Chem.*, 7 July 2005;122(24).
- [43] Theodora Spyriouni et al. *Coarse-Grained and Reverse-Mapped United-Atom Simulations of Long-Chain Atactic Polystyrene Melts: Structure, Thermodynamic Properties, Chain Conformation, and Entanglements*. *Macromolecules*, American Chemical Society, April 2007;40.
- [44] Ben Krose and Patrick van der Smagt. *An introduction to Neural Networks*. 8th ed; The University of Amsterdam, 1996.
- [45] Chigozie Enyinna Nwankpa an Winifred Ijomah, Anthony Gachagan, and Stephen Marshall. *Activation Functions: Comparison of Trends in Practice and Research for Deep Learning*. *ArXiv*, 8 Nov 2018;abs/1811.03378.
- [46] Howard B. Demuth, Mark Hudson Beale, and Orlando De Jesús. *Neural Network Design*. Martin Hagan,Stillwater, OK, USA,2nd ed.;2014.
- [47] Allan Pinkus. *Approximation theory of the MLP model in neural networks*. *Acta Numerica*,Cambridge University Press,1999;8,143-195.
- [48] Balázs Csanád Csáji. *Approximation with Artificial Neural Networks (MSc Thesis)*. Faculty of Sciences Eötvös Loránd University, 2001.
- [49] Junru Luo, Hong Qiao, and Bo Zhang. *Learning with Smooth Hinge Losses*. *arXiv:2103.00233v2* , March 16, 2021.
- [50] Yoshua Bengio. *Practical Recommendations for Gradient-Based Training of Deep Architectures*. *arXiv*, June 26, 2012.

- [51] Hugo Larochelle. *Neural networks: Training neural networks - regularization (Lecture Notes)*. [http://info.usherbrooke.ca/hlarochelle/ift725/2\\_08\\_regularization.pdf](http://info.usherbrooke.ca/hlarochelle/ift725/2_08_regularization.pdf).
- [52] Θεμιστοκλής Μ.Ρασιιάς. *Συναρτήσεις πολλών μεταβλητών και ολοκληρωτικός λογισμός*. Εκδόσεις Τσότρας,2014.
- [53] Ruder Sebastian. *An overview of gradient descent optimization algorithms*. arXiv,2016.
- [54] Ryan Tibshirani. *Convex Optimization (Lecture Notes)*. UC Berkeley,2018.
- [55] Michael Nielsen. *Neural Networks and Deep Learning*. Dec 2019.
- [56] David Kriesel. *A Brief Introduction to Neural Networks*. April 2005.
- [57] Carl Doersch. *Tutorial on Variational Autoencoders*. arXiv,January 2016.
- [58] Diederik P. Kingma and 2019 Max Welling. *An Introduction to Variational Autoencoders*. Foundations and Trends in Machine Learning,Now Publishers,January 2016;12(4), 307-392.
- [59] Laurent Girin et al. *Notes on the use of variational autoencoders for speech and audio spectrogram modeling*. 22nd International Conference on Digital Audio Effects, 2019.
- [60] Fernando Perez-Cruz. *Kullback-Leibler Divergence Estimation of Continuous Distributions*. In Proceedings of IEEE International Symposium on Information Theory,Princeton University Princeton, New Jersey,2008;1666-1670.
- [61] Diederik P. Kingma and Max Welling. *Auto-Encoding Variational Bayes*. arXiv,20 Dec 2013.
- [62] Lilian Weng. *From Autoencoder to Beta-VAE*. Aug 12, 2018.
- [63] Ashley Spindler, James E. Geach, and Michael J. Smith. *AstroVaDEr: Astronomical Variational Deep Embedder for Unsupervised Morphological Classification of Galaxies and Synthetic Image Generation*. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society,Oxford University Press,20 Nov 2020;502(1), 985–1007.
- [64] Stephen L. Mayo, Barry D. Olafson, and William A. Goddard III. *DREIDING: A Generic Force Field for Molecular Simulations*. J. Phys. Chem. 1990, 94, 8897-8909.
- [65] D. Hossain et al. *DREIDING: Molecular dynamics simulations of deformation mechanisms of amorphous polyethylene*. Polymer, 2010;51, 6071-6083.

- 
- [66] Karl N. Kirschner et al. *GLYCAM06: A generalizable biomolecular force field. Carbohydrates*. Journal of Computational Chemistry , 11 September 2007;29(4):622-655.
- [67] Wang, Wujie, and Rafael Gómez-Bombarelli. *Coarse-graining auto-encoders for molecular dynamics*. npj Computational Materials, Springer Science and Business Media LLC ,2019;5(1).
- [68] Eric Jang, Shixiang Gu, and Ben Poole. *CATEGORICAL REPARAMETERIZATION WITH GUMBEL-SOFTMAX*. International Conference on Learning Representations ,2017.
- [69] Stefan Chmiela et al. *Machine Learning of Accurate Energy-Conserving Molecular Force Fields*. Science Advances, American Association for the Advancement of Science (AAAS), 2017;3(5).
- [70] Weisstein and Eric W. *Euler's Rotation Theorem*. From MathWorld—A Wolfram Web Resource. <https://mathworld.wolfram.com/EulersRotationTheorem.html>.
- [71] Roithmayr et al. *Dynamics: Theory and Application of Kane's Method*. Cambridge University Press,2016.