



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ

ΤΟΜΕΑΣ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ

Διπλωματική Εργασία

*Νευρωνικά δίκτυα και το μοντέλο του Cox στην ανάλυση
δεδομένων με αποκομμένες παρατηρήσεις και εφαρμογές*

ΚΥΡΙΑΚΟΥ ΑΝΘΗ

Επιβλέπων: Κουκουβίνος Χρήστος, Καθηγητής Ε.Μ.Π.

Αθήνα, Μάρτιος 2012

Νευρωνικά δίκτυα και το μοντέλο του Cox στην ανάλυση δεδομένων με αποκομμένες παρατηρήσεις και εφαρμογές

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η τεχνολογία του data mining είναι μια σχετικά καινούρια περιοχή η οποία περιλαμβάνει τεχνικές επεξεργασίας και ανάλυσης μεγάλων βάσεων δεδομένων. Ο στόχος αυτών των τεχνικών, είναι η ανακάλυψη νέων προτύπων μεταξύ των δεδομένων και η εξαγωγή χρήσιμων πληροφοριών. Στη παρούσα διπλωματική εργασία, μελετώ τη τεχνολογία των Τεχνητών Νευρωνικών Δικτύων (ΤΝΔ) και ιδιαίτερα τις δύο πιο συνηθισμένες κλάσεις, το Perceptron πολλών στρωμάτων (MLP) και τα δίκτυα συναρτήσεων βάσης ακτινικού τύπου (RBFN).

Το πρώτο κεφάλαιο περιέχει μια εισαγωγή στις τεχνικές του data mining η οποία περιλαμβάνει τους σκοπούς και τη διαδικασία του, καθώς επίσης και τους τομείς στους οποίους εφαρμόζεται. Στη συνέχεια, αναλύονται τα κύρια χαρακτηριστικά των Νευρωνικών Δικτύων. Οι μαζικοί αυτοί παράλληλοι επεξεργαστές, έχουν εμπνευστεί από τη δομή και τη λειτουργία του ανθρώπινου εγκεφάλου. Οι αντιστοιχίες μεταξύ των τεχνητών νευρωνικών δικτύων και του βιολογικού εγκεφάλου, οι κύριες τοπολογίες των δικτύων, μορφές της συνάρτησης ενεργοποίησης, κανόνες εκπαίδευσης καθώς και το μαθηματικό μοντέλο του βασικού νευρώνα, παρουσιάζονται στο κεφάλαιο αυτό.

Το δεύτερο κεφάλαιο ασχολείται με τα δύο κύρια μοντέλα των τεχνητών νευρωνικών δικτύων, τα δίκτυα MLP και RBFN. Το δίκτυο Perceptron πολλών στρωμάτων, είναι ένα εμπρόσθιας τροφοδότησης νευρωνικό δίκτυο, το οποίο εκπαιδεύεται μετά από μια διαδικασία η οποία παρουσιάζει στο δίκτυο σετ δεδομένων εισόδου και εξόδου-στόχους. Ο πιο διαδεδομένος κανόνας εκπαίδευσης για τα δίκτυα MLP, είναι ο back-propagation, και σε αυτό το κεφάλαιο αναλύεται ο αλγόριθμος και η λειτουργία του. Τα δίκτυα συναρτήσεων βάσης ακτινικού τύπου (RBFN), έχουν αρκετές ομοιότητες με τα MLP δίκτυα, αλλά η βασική τους διαφορά συναντάται στο γεγονός ότι τα πρώτα χρησιμοποιούν μη γραμμικές συναρτήσεις ενεργοποίησης (συναρτήσεις βάσης ακτινικού τύπου). Οι υπόλοιπες διαφορές των RBFN από τα δίκτυα MLP

αναφέρονται στη συνέχεια, καθώς επίσης και η αρχιτεκτονική τους και οι βασικοί κανόνες εκπαίδευσής τους.

Στο τρίτο κεφάλαιο παρουσιάζονται οι βασικές έννοιες της ανάλυσης επιβίωσης και κυρίως το φαινόμενο της αποκοπής στα δεδομένα διάρκειας ζωής. Αναλύεται, επίσης, το μοντέλο αναλογικής διακινδύνευσης του Cox και τα βασικά χαρακτηριστικά του.

Το τέταρτο κεφάλαιο περιλαμβάνει μια εφαρμογή, στην οποία αξιολογούνται οι στρατηγικές που έχουν αναπτυχθεί για την επέκταση της τεχνολογίας πρόβλεψης των νευρωνικών δικτύων ώστε να επεξεργάζονται δεδομένα με δεξιά αποκομμένες παρατηρήσεις. Η απόδοση των μεθόδων αυτών, συγκρίνεται με αυτή του μοντέλου παλινδρόμησης του Cox σε μια Monte Carlo μελέτη προσομοίωσης για εννιά διαφορετικούς σχεδιασμούς.

ABSTRACT

Data mining is a relatively new field which includes techniques for processing and analyzing large databases. The goal of these techniques is the discovering of new patterns among the data and extract useful knowledge. In my diploma dissertation, I am studying the technology of Artificial Neural Networks (ANNs) and especially the two most common classes of ANNs; the Multilayer Perceptrons (MLPs) and the Radial Basis Function Networks (RBFNs).

The first chapter contains an introduction to the data mining techniques which includes their purposes, the general data mining procedure and their applications. The main features of Artificial Neural Networks are also mentioned in a throughout analysis. These massively parallel processors are inspired by the structure and functional aspects of the human brain. The correspondences between artificial and biological neuron networks, the main topologies of ANNs, types of activation functions, training rules and the mathematical model of the basic neural unit are presented in this chapter as well.

The second chapter deals with the two main models of ANNs; MLPs and RBFNs. Multilayer Perceptron is a feed forward artificial neural network which is being trained after a process in which sets of inputs and target outputs are provided to the network. The most popular training rule for MLPs is the back-propagation, and in this chapter I analyze the algorithm and its functionality. Radial Basis Function Networks have a lot in common with MLPs, but the main difference is that they use nonlinear activation functions (radial basis functions). Other differences from the MLPN are mentioned, as well as the architecture and the main training rules.

The third chapter introduces the basic notions of survival analysis, and mainly the phenomenon of censoring on lifetime data. Moreover, the Cox's proportional hazards model and its main attributes are analysed.

In the last part of my diploma dissertation, I present an application in which the strategies developed for expanding the neural network's forecasting technology in

order to process right-censored data, are evaluated. The performances of those methods are compared with that of Cox's regression model, using a Monte Carlo simulation study for nine different designs.

ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

Η παρούσα διπλωματική εργασία δεν θα μπορούσε να ολοκληρωθεί χωρίς τη βοήθεια και την συμπαράσταση πολλών ανθρώπων. Αισθάνομαι πρωτίστως την ανάγκη να ευχαριστήσω θερμά τον Καθηγητή του Ε.Μ.Π., κ. Χρήστο Κουκουβίνο, για την δυνατότητα που μου προσέφερε να ασχοληθώ με το θέμα αυτό, καθώς επίσης και για την επίβλεψη και καθοδήγηση του.

Ιδιαίτερες ευχαριστίες θα ήθελα να εκφράσω στους υποψήφιους διδάκτορες Χριστίνα Παρπούλα και Εμμανουήλ Ανδρουλάκη, για την πολύτιμη βοήθεια τους και το συνεχές ενδιαφέρον κατά τη διάρκεια εκπόνησης της διπλωματικής μου εργασίας.

Θα ήθελα επίσης να ευχαριστήσω την οικογένεια μου για την υπομονή και την αμέριστη υποστήριξή τους. Τέλος αισθάνομαι την ανάγκη να ευχαριστήσω τους φίλους και συμφοιτητές μου, για τη βοήθεια και τη συμπαράσταση τους.

Ανθή Κυριάκου

Αθήνα, 2012

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

	Σελίδες
ΠΕΡΙΛΗΨΗ.....	3
ABSTRACT.....	5
ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ.....	7

ΚΕΦΑΛΑΙΑ

1 Εισαγωγή.....	11
1.1 Data Mining.....	11
1.1.1 Εισαγωγή – Τι είναι το Data Mining;	11
1.1.2 Διαδικασία του Data Mining.....	12
1.1.3 Εφαρμογές.....	15
1.2 Νευρωνικά Δίκτυα.....	16
1.2.1 Εισαγωγή.....	16
1.2.2 Η βιολογική βάση των νευρωνικών δικτύων – Ο ανθρώπινος εγκέφαλος.....	16
1.2.3 Το μαθηματικό μοντέλο – Ο βασικός νευρώνας.....	18
1.2.4 Η συνάρτηση ενεργοποίησης.....	20
1.2.5 Τοπολογίες νευρωνικών δικτύων.....	22
1.2.6 Εκπαίδευση νευρωνικών δικτύων.....	25
1.2.7 Perceptrons.....	26
1.2.8 Παράδειγμα του αλγόριθμου μάθησης στον απλό perceptron.....	30
2 Δίκτυα MLP και RBFN.....	34
2.1 Perceptron πολλών στρωμάτων (MLP).....	34
2.1.1 Εισαγωγή.....	34
2.1.2 Συνάρτηση ενεργοποίησης.....	38
2.1.3 Ο κανόνας εκπαίδευσης back-propagation.....	39
2.1.4 Εφαρμογές.....	47

2.2 Δίκτυα συναρτήσεων βάσης ακτινικού τύπου (RBFN)	48
2.2.1 Συναρτήσεις βάσης ακτινικού τύπου.....	48
2.2.2 Αρχιτεκτονική δικτύων RBF.....	49
2.2.3 Εκπαίδευση δικτύου.....	51
2.2.4 Εκπαίδευση κρυφού στρώματος – Μέθοδος k-μέσων.....	52
2.2.5 Εκπαίδευση εξωτερικού στρώματος.....	54
2.2.6 Κανονικοποίηση του RBFN.....	54
2.2.7 Εφαρμογές RBFN.....	55
2.2.8 Διαφορές δικτύων MLP και RBFN.....	56
3 Ανάλυση επιβίωσης – Μοντέλο Cox.....	58
3.1 Ανάλυση επιβίωσης.....	58
3.1.1 Εισαγωγή.....	58
3.1.2 Αποκομμένες παρατηρήσεις.....	58
3.1.3 Παράδειγμα αποκοπής δεδομένων.....	61
3.1.4 Βασικές έννοιες.....	62
3.2 Μοντέλο αναλογικής διακινδύνευσης του Cox.....	64
3.2.1 Εισαγωγή.....	64
3.2.2 Το βασικό μοντέλο του Cox.....	65
3.2.3 Παράδειγμα μοντέλου αναλογικής διακινδύνευσης του Cox.....	67
3.2.4 Εκτίμηση των συντελεστών παλινδρόμησης.....	75
3.2.5 Ισόπαλοι χρόνοι διακοπής.....	77
3.2.6 Ελεγχοι υποθέσεων.....	78
4 Εφαρμογή.....	79
4.1 Περιγραφή της εφαρμογής.....	79
4.1.1 Εισαγωγή.....	79
4.1.2 Νευρωνικά Δίκτυα.....	80
4.1.3 Αρχιτεκτονική των νευρωνικών δικτύων και παράμετροι.....	82
4.1.4 Μοντέλο παλινδρόμησης του Cox.....	83
4.1.5 Προσομοίωση.....	83
4.1.6 Ο δείκτης C.....	86
4.1.7 Λογισμικό.....	87
4.2 Εφαρμογή – Συμπεράσματα.....	87

4.2.1	Αποτελέσματα.....	91
4.2.2	Απόδοση των μεθόδων.....	92
4.2.3	Αλληλεπιδράσεις στην ανάλυση παλινδρόμησης του Cox.....	93
4.2.4	Αλλαγή του αριθμού διαστημάτων στη μέθοδο Liestol- Andersen-Andersen.....	94
4.2.5	Αρχιτεκτονική των νευρωνικών δικτύων.....	95
4.2.6	Περιορισμός εφαρμογής.....	96
4.2.7	Πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα των νευρωνικών δικτύων.....	96
4.2.8	Περίληψη.....	97
ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ.....		98

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

1.1 DATA MINING

1.1.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ – ΤΙ ΕΙΝΑΙ ΤΟ DATA MINING;

Η τεράστια ανάπτυξη των ηλεκτρονικών υπολογιστών και των εργαλείων αυτοματοποιημένης συλλογής δεδομένων, είχε σαν αποτέλεσμα τη διόγκωση των βάσεων δεδομένων, κάνοντας έτσι δύσκολη και χρονοβόρα την εξαγωγή συμπερασμάτων και χρήσιμων πληροφοριών βάση αυτών. Σε επιχειρήσεις και οργανισμούς, υπάρχει σαφής ανάγκη να αναλυθούν οι όγκοι των δεδομένων ώστε να γίνουν σωστοί προγραμματισμοί και να υποστηριχθούν διάφορες λειτουργίες.

Εξόρυξη δεδομένων (data mining) είναι η διαδικασία που περιλαμβάνει τη συλλογή, εξερεύνηση και μοντελοποίηση μεγάλων παρατηρούμενων συνόλων δεδομένων με σκοπό την εύρεση συνθηκών και συσχετισμών που θα οδηγήσουν σε εμφανή, κατανοητά και χρήσιμα αποτελέσματα για τους κατόχους των δεδομένων (Thuraisingham, 1999).

Ο κύριος στόχος του data mining είναι η εξαγωγή νέων πληροφοριών από τα δεδομένα. Η ανακάλυψη της γνώσης γίνεται με δύο τρόπους: μάθηση με επίβλεψη (supervised learning) και μάθηση χωρίς επίβλεψη (unsupervised). Κάποιες από τις μεθόδους που χρησιμοποιούνται στην εξόρυξη δεδομένων είναι ο λογικός προγραμματισμός, η μηχανική μάθηση, τα νευρωνικά δίκτυα αλλά και κλασικά στατιστικά μοντέλα όπως τα γραμμικά και λογιστικά μοντέλα παλινδρόμησης.

Τα έξι βασικά αποτελέσματα που αναμένεται να λάβουμε ανάλογα με τους στόχους που έχουμε θέσει (tasks) είναι:

- *Ταξινόμηση* (classification): εξέταση των χαρακτηριστικών ενός νέου αντικειμένου, και ταξινόμησή του σε ήδη προκαθορισμένες κλάσεις.
- *Εκτίμηση* (estimation): εύρεση τιμών για μια άγνωστη μεταβλητή, με δεδομένα κάποια δεδομένα εισόδου.
- *Πρόβλεψη* (prediction): παρόμοια με τη ταξινόμηση και την εκτίμηση, αλλά οι εγγραφές ταξινομούνται με βάση κάποιων προβλεπόμενων μελλοντικών τάσεων ή εκτιμώμενων μελλοντικών τιμών.
- *Ομαδοποίηση* (grouping): καθορισμός των αντικειμένων που ανήκουν σε συγκεκριμένη ομάδα.
- *Συσταδοποίηση* (clustering): κατάτμηση ενός πληθυσμού σε ένα αριθμό υποομάδων ή συστάδων.
- *Περιγραφή και οπτικοποίηση* (description and visualization): διερευνητικό ή οπτικό data mining.

1.1.2 ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΑ ΤΟΥ DATA MINING

Το data mining (που συναντάται και με τον όρο knowledge discovery in databases-KDD) αποτελείται από μια σειρά διαδικασιών όπως περιγράφονται παρακάτω.

➤ Ορισμός των στόχων και των προς ανάλυση αντικειμένων.

Η αρχική αυτή φάση εστιάζει στη κατανόηση των στόχων και των απαιτήσεων μιας εργασίας και βάση αυτών γίνεται ο ορισμός ενός προβλήματος data mining. Είναι απαραίτητο τα αντικείμενα (στόχοι) να είναι σαφή, χωρίς αβεβαιότητες, αφού αυτά θα καθορίσουν το πώς θα οργανωθούν οι μέθοδοι που θα χρησιμοποιηθούν.

➤ Κατανόηση δεδομένων.

Η φάση αυτή ξεκινά με μια αρχική συλλογή δεδομένων και συνεχίζει με διεργασίες στις οποίες γίνεται εξοικείωση με τα δεδομένα, αναγνώριση ποιοτικών προβλημάτων σ' αυτά κ.λπ. Εξάγονται οι πρώτες ιδέες για τα δεδομένα καθώς επίσης μπορεί να εντοπιστούν ενδιαφέρον υποσύνολα και έτσι σχηματίζονται οι υποθέσεις για κρυμμένες πληροφορίες.

➤ Προετοιμασία δεδομένων.

Η φάση της προετοιμασίας των δεδομένων, καλύπτει όλες τις δραστηριότητες που γίνονται για να κατασκευαστεί το τελικό σύνολο δεδομένων (το οποίο θα τροφοδοτήσει τα εργαλεία επεξεργασίας που θα χρησιμοποιηθούν στη συνέχεια) από την αρχική συλλογή. Οι εργασίες αυτές είναι δυνατόν να επαναληφθούν αρκετές φορές και χωρίς συγκεκριμένη σειρά. Τα δεδομένα μπορεί να μειωθούν και να τροποποιηθούν κατάλληλα έτσι ώστε να είναι έτοιμα για επεξεργασία στα διάφορα εργαλεία.

➤ Μοντελοποίηση.

Στη φάση αυτή επιλέγονται και εφαρμόζονται οι τεχνικές του data mining στα δεδομένα και επιπλέον προσαρμόζονται οι παράμετροι αυτών για τη βελτιστοποίηση των αποτελεσμάτων. Κάποιες τεχνικές έχουν συγκεκριμένες απαιτήσεις ως προς τον τύπο των δεδομένων, γι' αυτό η επιστροφή στη προετοιμασία των δεδομένων είναι συχνά αναγκαία.

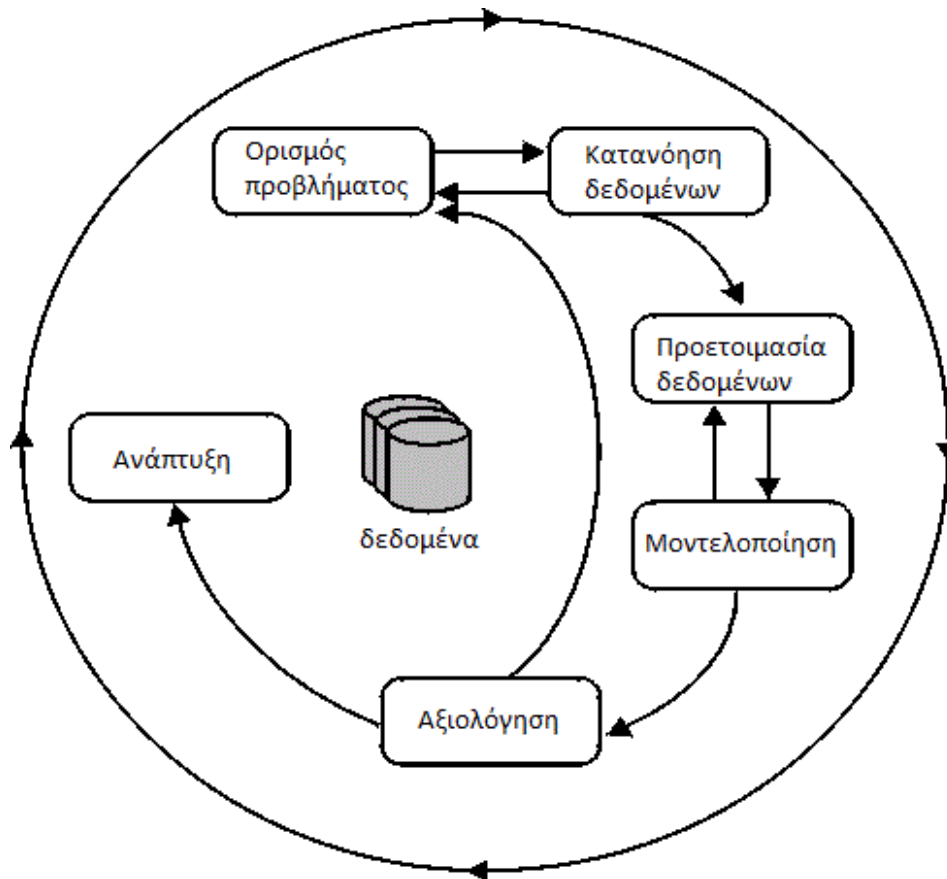
➤ Αξιολόγηση.

Στο στάδιο αυτό έχει ήδη εξαχθεί ένα μοντέλο (ή μοντέλα) που φαίνεται να προσαρμόζεται στα δεδομένα. Προτού υποβληθεί η τελική απόφαση, είναι απαραίτητο να αξιολογηθεί το μοντέλο και να αναθεωρηθούν οι μέθοδοι που εκτελέστηκαν για να κατασκευαστεί. Στη περίπτωση που οι μέθοδοι που χρησιμοποιήθηκαν δεν επιτρέπουν σε ικανοποιητικό βαθμό την επίτευξη των στόχων, είναι απαραίτητος ο ορισμός μιας νέας μεθόδου κατάλληλης για ανάλυση.

➤ Ανάπτυξη.

Η κατασκευή του μοντέλου δεν αποτελεί πάντα το τέλος της εργασίας του data mining. Ακόμα κι αν ο σκοπός του μοντέλου είναι να αυξήσει τη γνώση για τα δεδομένα, η γνώση αυτή είναι απαραίτητο να οργανωθεί και να παρουσιαστεί με τον ανάλογο τρόπο ώστε να μπορεί να χρησιμοποιηθεί. Ανάλογα με τις απαιτήσεις, η φάση αυτή μπορεί να είναι απλή όπως η δημιουργία μιας αναφοράς,

ή αρκετά περίπλοκη όπως η εφαρμογή μιας επαναληπτικής διαδικασίας data mining σε όλη την επιχείρηση. Σε πολλές περιπτώσεις, είναι ο ίδιος ο πελάτης και όχι ο αναλυτής των δεδομένων που εκτελεί το βήμα της ανάπτυξης. Ακόμα όμως κι αν ο αναλυτής δεν έχει την ευθύνη της ανάπτυξης, είναι σημαντικό για τον πελάτη να κατανοήσει ακριβώς τις ενέργειες που πρέπει να γίνουν έτσι ώστε να μπορεί να χρησιμοποιήσει τα μοντέλα που κατασκευάστηκαν.



Διάγραμμα 1.1.2.1: Η διαδικασία του Data Mining

1.1.3 ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ

Το data mining είναι μια τεχνολογία που αναπτύσσεται και επεκτείνεται συνεχώς, αφού η συμβολή της στην εξόρυξη χρήσιμης γνώσης από τεράστια σύνολα δεδομένων είναι σημαντική και αναγκαία σε πολλούς τομείς. Χαρακτηριστικές εφαρμογές του data mining είναι:

- **Marketing** - Πολλές εταιρίες έχουν να διαχειριστούν τεράστιες βάσεις δεδομένων με σκοπό την έρευνα των αναγκών των πελατών. Ο τομέας του data mining έχει συνεισφέρει αρκετά σ' αυτή την κατεύθυνση με την ανάλυση δεδομένων μιας επιχείρησης και την εξαγωγή χρήσιμων πληροφοριών για τη συμπεριφορά των πελατών και τις μελλοντικές τάσεις της αγοράς.
- **Επιστήμη και τεχνολογία** – Σε πολλούς επιστημονικούς κλάδους (όπως η φυσική, η αστρονομία, η χημεία κ.λπ.) η συγκέντρωση τεράστιων όγκων δεδομένων, έχουν στρέψει το ενδιαφέρον των επιστημόνων και των μηχανικών στις τεχνικές του data mining ώστε να διαχειριστούν αποτελεσματικά τα δεδομένα αυτά.
- **Ιατρική** – Στην ιατρική, οι δύο πιο διαδεδομένες εφαρμογές του data mining είναι η διάγνωση και η πρόγνωση. Στη διάγνωση γίνεται συλλογή και επιλογή πληροφοριών που αφορούν κάποιο ασθενή ώστε να ερμηνευτούν με βάση προηγούμενες εγγραφές και να αξιολογηθούν με σκοπό το καθορισμό της ύπαρξης ή της απουσίας κάποιας ασθένειας. Στη διαδικασία της πρόγνωσης, οι πληροφορίες για τους ασθενείς συλλέγονται και επεξεργάζονται με σκοπό τη πρόβλεψη της μελλοντικής εξέλιξης της κατάστασης του ασθενή.
- **Ασφαλιστικές εταιρίες** – Στις διάφορες ασφαλιστικές εταιρίες, συλλέγονται μεγάλες ποσότητες δεδομένων για τον κάθε πελάτη. Με την επεξεργασία των δεδομένων αυτών, οι εταιρίες μπορούν για παράδειγμα να προβλέψουν ποιοι πελάτες ή πιθανοί πελάτες μπορεί να διαπράξουν απάτη, ή παρουσιάζουν υψηλό δείκτη επικινδυνότητας.

1.2 ΝΕΥΡΩΝΙΚΑ ΔΙΚΤΥΑ (NEURAL NETWORKS)

1.2.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Τα νευρωνικά δίκτυα είναι ένα εργαλείο που προτιμάται σε πολλές εφαρμογές του data mining και αυτό λόγω της δυναμικής τους, της ευελιξίας τους και της ευκολίας στη χρήση τους. Ο όρος νευρωνικά δίκτυα χρησιμοποιείται για μια αόριστη οικογένεια μοντέλων, που χαρακτηρίζονται από ένα μεγάλο χώρο παραμέτρων και εύελικτη δομή και τα οποία προέρχονται από μελέτες της λειτουργίας του ανθρώπινου εγκεφάλου. Οι ορισμοί για τα νευρωνικά δίκτυα, ποικίλουν όσο και οι τομείς στους οποίους χρησιμοποιούνται. Καθότι δεν υπάρχει ένας συγκεκριμένος ορισμός που να καλύπτει απόλυτα ολόκληρη την οικογένεια των μοντέλων, προς το παρών, θεωρούμε την ακόλουθη περιγραφή (Haykin, 1998):

Νευρωνικό δίκτυο είναι ένας μαζικός παράλληλος διανεμημένος επεξεργαστής ο οποίος εκ φύσεως αποθηκεύει εμπειρική γνώση και την καθιστά διαθέσιμη για χρήση. Προσομοιάζει τον ανθρώπινο εγκέφαλο σε δύο τομείς:

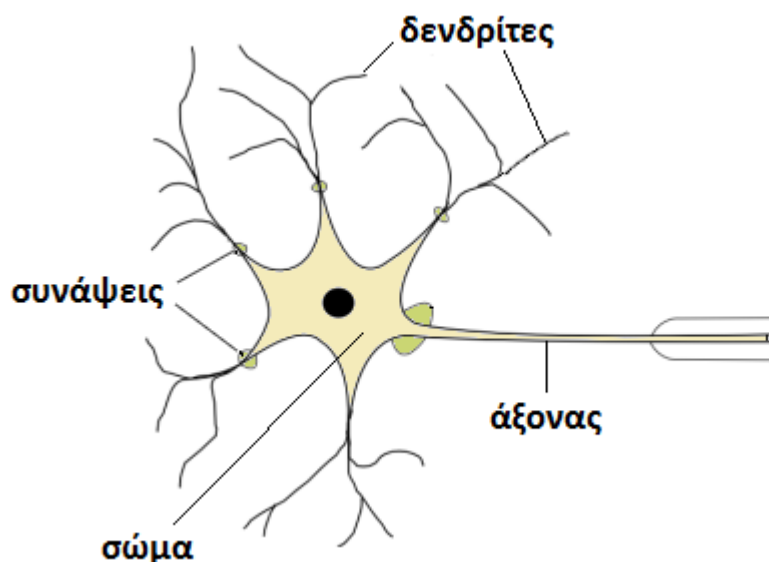
- Η γνώση αποκτάται από το δίκτυο μέσω μιας διαδικασίας μάθησης
- Οι ενδονευρωνικές συνδέσεις, γνωστές και ως συναπτικά βάρη, χρησιμοποιούνται για τη φύλαξη της γνώσης.

1.2.2 Η ΒΙΟΛΟΓΙΚΗ ΒΑΣΗ ΤΩΝ ΝΕΥΡΩΝΙΚΩΝ ΔΙΚΤΥΩΝ – Ο ΑΝΘΡΩΠΙΝΟΣ ΕΓΚΕΦΑΛΟΣ

Η ιδέα για την μελέτη και την ανάπτυξη των νευρωνικών δικτύων, προήλθε από τη λειτουργία και τη δομή του εγκεφάλου και των διαδικασιών του σχετικά με τη μάθηση, τη μνήμη, τη γενίκευση, την ομαδοποίηση προτύπων κ.λπ. Ο άνθρωπος

εγκέφαλος αποτελείται από περίπου 10 δισεκατομμύρια νευρικά κύτταρα ή νευρώνες. Ο **νευρώνας** είναι ένα μεγάλο κύτταρο του οποίου η δομή περιλαμβάνει τέσσερα κύρια τμήματα που λειτουργικά παίζουν διαφορετικούς ρόλους:

- Το **σώμα**, που περιέχει τον πυρήνα και αποτελεί τη καρδιά του κυττάρου.
- Οι **δενδρίτες**, που είναι οι πύλες εισόδου του νευρώνα και δέχονται ηλεκτρικά σήματα από άλλους νευρώνες.
- Ο **άξονας**, που είναι η πύλη εξόδου του νευρώνα. Μοιάζει με μακρόστενη κλωστή και ο σκοπός του είναι να μεταδώσει τα ηλεκτρικά σήματα, που δημιουργούνται στο νευρώνα, στους άλλους νευρώνες.
- Οι **συνάψεις** οι οποίες αποτελούν την περιοχή της σύνδεσης μεταξύ δύο νευρώνων. Είναι τα σημεία ένωσης των διακλαδώσεων του άξονα ενός νευρώνα-αποστολέα, και των δενδριτών των νευρώνων-παραληπτών.



Εικόνα 1.2.2.1: Ο Βιολογικός Νευρώνας

Φορείς πληροφορίας στους βιολογικούς νευρώνες, είναι ηλεκτρικοί παλμοί. Ένας νευρώνας συλλέγει το εισερχόμενο ηλεκτρικό φορτίο που δέχεται από τους δενδρίτες και όταν το φορτίο αυτό υπερβεί ένα κατώτατο όριο (κατώφλι) τότε λέμε ότι ο νευρώνας πυροβολεί, δηλαδή παράγει ηλεκτρικούς παλμούς με μεγάλη συχνότητα. Αν όμως το φορτίο δεν υπερβεί το κατώφλι, τότε ο νευρώνας παράγει πολύ αραιά παλμούς σε τυχαίες στιγμές και τότε λέμε ότι ο νευρώνας είναι αδρανής. Η ισχύς του

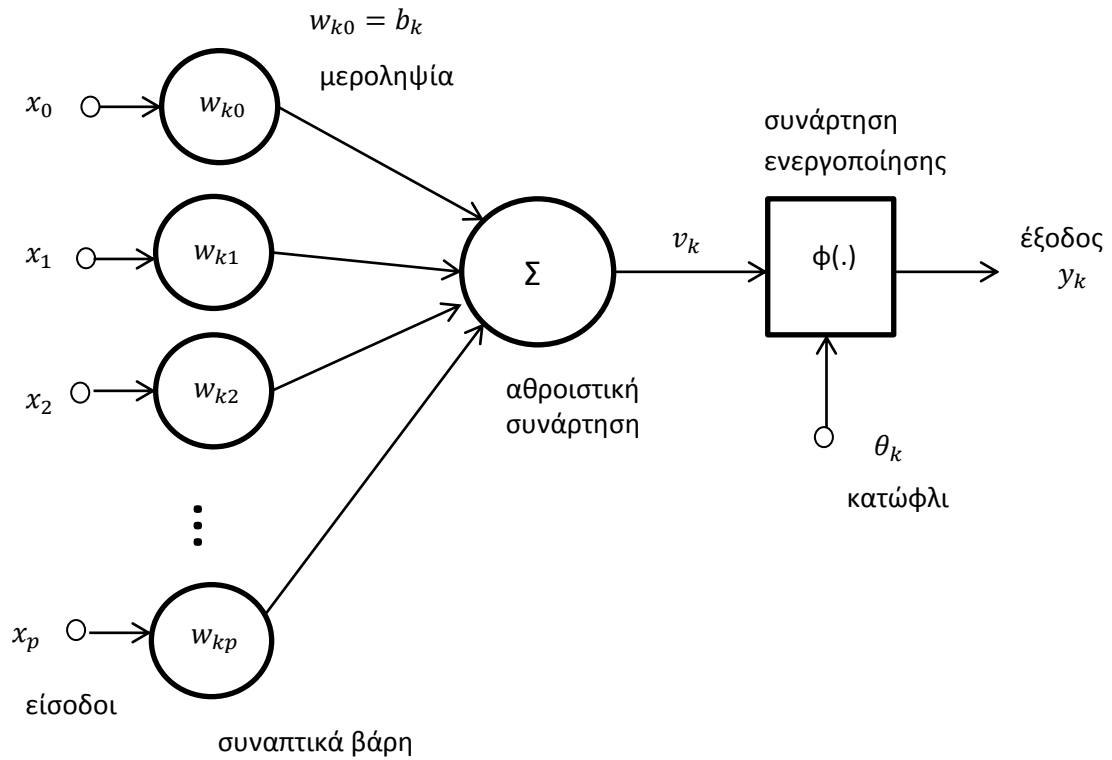
σήματος που λαμβάνει ένας νευρώνας, εξαρτάται από την αποτελεσματικότητα των συνάψεων. Το πλάτος της σύναψης, η απόστασή της από τον δενδρίτη και η πυκνότητα του ηλεκτροχημικού υλικού επηρεάζουν την ευκολία με την οποία μεταδίδεται η ηλεκτρική δραστηριότητα από τον άξονα στο δενδρίτη. Η ικανότητα της μάθησης συνίσταται κυρίως από τη μεταβολή της ισχύος των συναπτικών συνδέσμων.

1.2.3 ΤΟ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΟ ΜΟΝΤΕΛΟ – Ο ΒΑΣΙΚΟΣ ΝΕΥΡΩΝΑΣ

Κατ'αρχάς είναι αδύνατο για τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα να προσομοιώσουν πλήρως τη πολυπλοκότητα του ανθρώπινου εγκεφάλου. Τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα αποτελούνται το πολύ από μερικές εκατοντάδες (ή χιλιάδες) νευρώνες και περιορισμένο αριθμό συνδέσεων μεταξύ τους. Παρόλα αυτά κάποια δίκτυα έχουν χρησιμοποιηθεί για την επίλυση αρκετά περίπλοκων υπολογιστικών προβλημάτων.

Για τη μοντελοποίηση ενός βιολογικού νευρώνα σε ένα μαθηματικό μοντέλο, πρέπει να ληφθούν υπόψιν τρεις βασικές συνιστώσες. Αρχικά, οι συνάψεις των βιολογικών νευρώνων μοντελοποιούνται σαν **συναπτικά βάρη (synaptic weights)**. Ας θυμηθούμε πως οι συνάψεις των βιολογικών νευρώνων είναι υπεύθυνες για τη διασύνδεση του νευρωνικού δικτύου και δίνουν τη δύναμη των συνδέσεων. Για ένα τεχνητό νευρώνα, τα βάρη είναι πραγματικοί αριθμοί και αντιπροσωπεύουν τις συνάψεις. Ένα αρνητικό βάρος εκφράζει μια ανασταλτική σύνδεση, ενώ ένα θετικό μια διεγερτική σύνδεση. Πολλά μοντέλα νευρώνων περιλαμβάνουν επίσης και ένα εξωτερικό βάρος, που ονομάζεται **μεροληψία (bias)**. Σκοπός της μεροληψίας είναι η αύξηση ή η μείωση της τιμής που δίνει σαν είσοδο το δίκτυο στη συνάρτηση ενεργοποίησης ανάλογα με το αν είναι αρνητικό ή θετικό.

Οι υπόλοιπες συνιστώσες του μοντέλου αντιπροσωπεύουν την δραστηριότητα του νευρώνα. Οι **είσοδοι (inputs)** του νευρώνα αθροίζονται και τροποποιούνται από τα συναπτικά βάρη. Τέλος, μια **συνάρτηση ενεργοποίησης (activation function)** ελέγχει το εύρος του εξερχόμενου φορτίου.



Διάγραμμα 1.2.3.1: Ο Τεχνητός Νευρώνας

Παρακάτω, περιγράφεται μαθηματικά η πιο πάνω διαδικασία. Έστω $w_{k1}, w_{k2}, \dots, w_{kp}$ είναι τα συναπτικά βάρη, x_1, \dots, x_p οι είσοδοι του νευρώνα k και b_k η μεροληψία. Τότε το άθροισμα v_k του φορτίου που δέχεται ο νευρώνας εκφράζεται ως (Ρίζος, 1996):

$$v_k = \sum_{j=1}^p w_{kj} x_j$$

Η έξοδος του νευρώνα y_k , θα είναι το αποτέλεσμα της εφαρμογής μιας συνάρτησης ενεργοποίησης $\varphi(\cdot)$ στη τιμή του v_k :

$$y_k = \varphi(v_k - b_k).$$

Η μεροληψία b_k είναι μια εξωτερική παράμετρος του νευρώνα που δεν εξαρτάται από καμιά τιμή εισόδου, και μπορούμε να την εντάξουμε στο μοντέλο του νευρώνα ως

μια νέα σύναψη που έχει σαν είσοδο $x_0 = \pm 1$ (ανάλογα αν αυξάνει ή μειώνει τη τιμή εισόδου στο δίκτυο) και βάρος $w_{k0} = b_k$. Έτσι θέτοντας: $u_k = v_k - b_k$ οι εξισώσεις που περιγράφουν το νευρώνα γίνονται τελικά:

$$u_k = \sum_{j=0}^p w_{kj} x_j$$

$$y_k = \varphi(u_k).$$

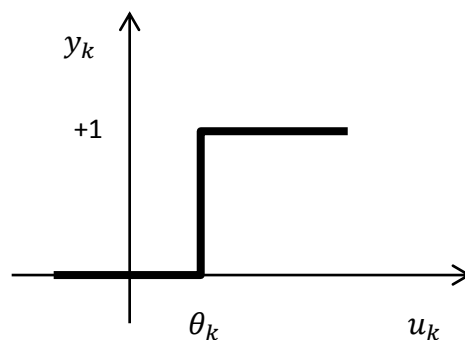
1.2.4 Η ΣΥΝΑΡΤΗΣΗ ΕΝΕΡΓΟΠΟΙΗΣΗΣ

Η συνάρτηση ενεργοποίησης λειτουργεί σαν συμπιεστική συνάρτηση, ώστε η έξοδος του νευρώνα σε ένα νευρωνικό δίκτυο να είναι μεταξύ συγκεκριμένων τιμών (συνήθως μεταξύ 0 και 1, ή -1 και 1). Γενικά, υπάρχουν τρεις τύποι συναρτήσεων ενεργοποίησης $\varphi(\cdot)$:

- Η **συνάρτηση κατώφλι (threshold function)** η οποία έχει σαν έξοδο 0 αν το εισερχόμενο άθροισμα είναι μικρότερο από μια καθορισμένη τιμή-κατώφλι θ_k , και 1 αν είναι μεγαλύτερο ή ίσο με αυτό.

$$v = u_k - \theta_k$$

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

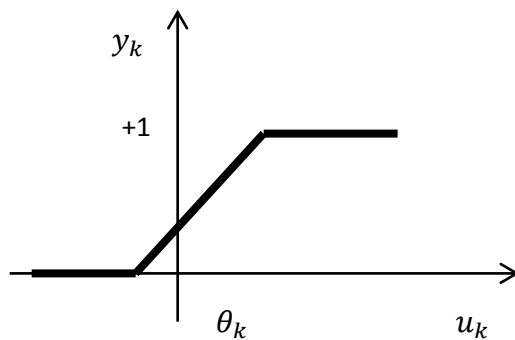


Γράφημα 1.2.3.1: Συνάρτηση κατώφλι

- Η **τμηματική γραμμική συνάρτηση (pricewise-linear function)**. Όπως και η συνάρτηση κατώφλι έχει σαν έξοδο 0 ή 1, καθώς επίσης και τιμές μεταξύ αυτών που εξαρτώνται από τον παράγοντα ενίσχυσης μέσα στη γραμμική περιοχή της συνάρτησης.

$$v = u_k - \theta_k$$

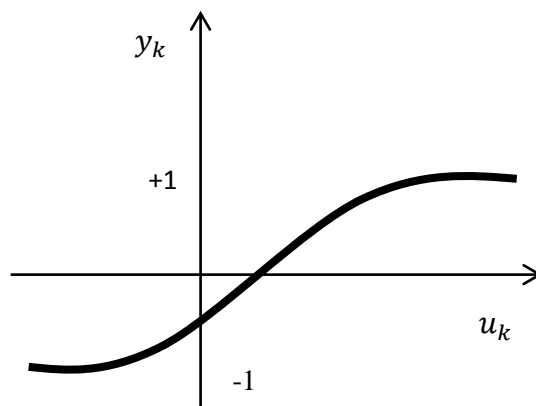
$$\varphi(v) = \begin{cases} 1, & \text{αν } v \geq \frac{1}{2} \\ v, & \text{αν } \frac{1}{2} > v > -\frac{1}{2} \\ 0, & \text{αν } v \leq -\frac{1}{2} \end{cases}$$



Γράφημα 1.2.3.2: Τμηματική γραμμική συνάρτηση

- Η **σιγμοειδής συνάρτηση (sigmoid function)**. Είναι μια γνησίως αύξουσα συνάρτηση που είναι ομαλή και ασυμπτωτική. Αντίθετα με τη συνάρτηση κατώφλι είναι διαφορίσιμη και είναι η πλέον χρησιμοποιούμενη συνάρτηση ενεργοποίησης για τα νευρωνικά δίκτυα. Ένα παράδειγμα της σιγμοειδής συνάρτησης είναι η υπερβολική εφαπτόμενη:

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



Γράφημα 1.2.3.3: Σιγμοειδής συνάρτηση

1.2.5 ΤΟΠΟΛΟΓΙΕΣ ΝΕΥΡΩΝΙΚΩΝ ΔΙΚΤΥΩΝ

Μέχρι τώρα είδαμε τη δομή και τις ιδιότητες της βασικής μονάδας επεξεργασίας σε ένα τεχνητό νευρωνικό δίκτυο. Παρακάτω θα επικεντρωθούμε σε πρότυπα των συνδέσεων μεταξύ των μονάδων και της διάδοσης των δεδομένων. Μπορούμε να πούμε ότι υπάρχουν δύο διαφορετικές κλάσεις αρχιτεκτονικών δικτύου:

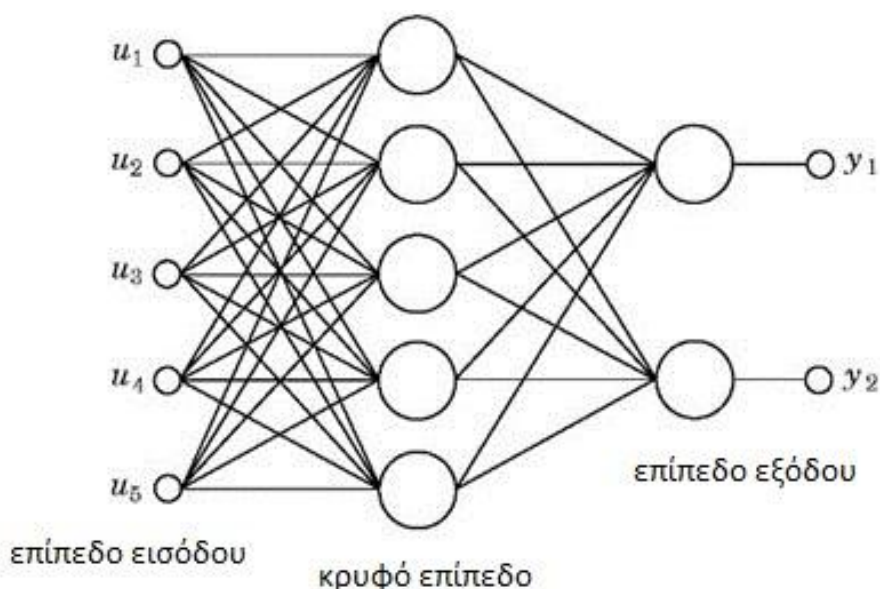
Εμπρόσθιας Τροφοδότησης Νευρωνικά Δίκτυα (Feed-forward neural networks).

Τα νευρωνικά δίκτυα εμπρόσθιας τροφοδότησης είναι ο πρώτος και ο πιο απλός τύπος νευρωνικών δικτύων που έχουν σχεδιαστεί. Στα δίκτυα αυτά, η πληροφορία κινείται μόνο προς μια κατεύθυνση, εμπρόσθια, από τους κόμβους εισόδου, διαμέσο κάποιων κρυφών νευρώνων (εφόσον υπάρχουν) και καταλήγει στους κόμβους εξόδου. Οι κρυφοί νευρώνες είναι κόμβοι που παρεμβάλλονται μεταξύ των κόμβων εισόδου και εξόδου του δικτύου και χρησιμοποιούνται σε δίκτυα τα οποία απαιτούν την προσέγγιση συναρτήσεων μεγάλης πολυπλοκότητας.

Στα δίκτυα εμπρόσθιας τροφοδότησης δεν υπάρχουν κύκλοι ή βρόγχοι. Μπορούμε να εντάξουμε τους κόμβους του δικτύου σε τρία είδη επιπέδων. Στο **επίπεδο εισόδου (input layer)** εισέρχονται τα στοιχεία των προτύπων εισόδου στο δίκτυο με τη μορφή

διανυσμάτων. Στη συνέχεια, αυτά γίνονται είσοδοι για τους νευρώνες των **κρυφών επιπέδων (hidden layers)**, και συγκεκριμένα, αρχικά στο πρώτο κρυφό επίπεδο. Οι έξοδοι των νευρώνων του πρώτου κρυφού επιπέδου γίνονται είσοδοι στο δεύτερο κρυφό επίπεδο και η διαδικασία αυτή συνεχίζεται μεταξύ των επιπέδων του δικτύου, μέχρι να φτάσουν στο **επίπεδο εξόδου (output layer)**. Η έξοδος του επιπέδου αυτού, είναι και η απάντηση του δικτύου για τα δεδομένα που είχαν εισαχθεί στους κόμβους εισόδου.

Κλασικά παραδείγματα δικτύων εμπρόσθιας τροφοδότησης είναι τα Adaline και τα Perceptron τα οποία θα δούμε πιο αναλυτικά στη συνέχεια.



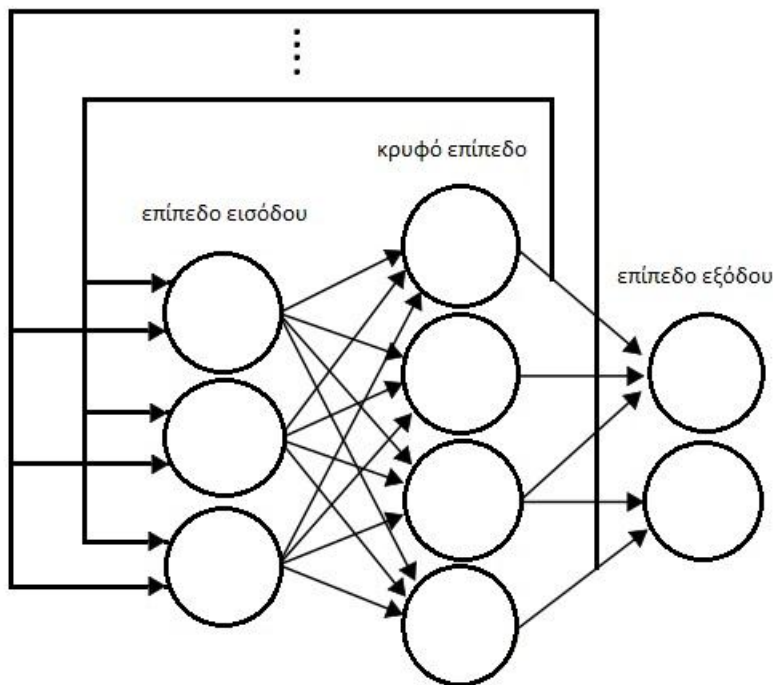
Διάγραμμα 1.2.5.1: Νευρωνικό δίκτυο εμπρόσθιας τροφοδότησης

Στο Διάγραμμα 1.2.5.1, φαίνεται ένα παράδειγμα νευρωνικού δικτύου εμπρόσθιας τροφοδότησης με ένα κρυφό επίπεδο. Στο δίκτυο βλέπουμε ότι κάθε κόμβος σε κάθε επίπεδο είναι συνδεδεμένος με κάθε κόμβο του επόμενου επιπέδου του δικτύου και γι' αυτό λέγεται **πλήρως διασυνδεδεμένο (fully connected)** δίκτυο. Τα δίκτυα στα οποία κάποιες συνδέσεις δεν υπάρχουν ονομάζονται **μερικώς διασυνδεδεμένα (partially connected)**. Επίσης το πιο πάνω δίκτυο αναφέρεται σαν ένα 5-5-2 δίκτυο, και αυτό γιατί έχει 5 κόμβους εισόδου, 5 κόμβους στο κρυφό επίπεδο και 2 κόμβους εξόδου. Γενικά λέμε $m - h_1 - h_2 - \dots - h_n - q$ δίκτυο, ένα δίκτυο με m κόμβους

εισόδου, h_1 κόμβους στο πρώτο κρυφό επίπεδο, h_n κόμβους στο n -οστό κρυφό επίπεδο και q κόμβους στο επίπεδο εξόδου.

Αναδραστικά Νευρωνικά Δίκτυα (Recurrent Neural Networks-RNN).

Στα αναδραστικά νευρωνικά δίκτυα υπάρχουν συνδέσεις μεταξύ των κόμβων, οι οποίοι σχηματίζουν κύκλους, δηλαδή σε τουλάχιστον έναν νευρώνα το σήμα εξόδου του επηρεάζει το σήμα που έρχεται στην είσοδο του νευρώνα. Αυτό δημιουργεί μια εσωτερική κατάσταση του δικτύου, που επιτρέπει στο δίκτυο να ανατροφοδοτείται. Σε αντίθεση με τα δίκτυα εμπρόσθιας τροφοδότησης, τα αναδραστικά δίκτυα μπορούν να χρησιμοποιήσουν την εσωτερική τους μνήμη για να επεξεργαστούν αυθαίρετες ακολουθίες εισόδου.



Διάγραμμα 1.2.5.2: Αναδραστικό νευρωνικό δίκτυο

Στα δίκτυα αυτά, οι δυναμικές ιδιότητες είναι σημαντικές. Σε κάποιες περιπτώσεις, οι παράμετροι του δικτύου τροποποιούνται έτσι ώστε το δίκτυο να φτάσει σε μια σταθερή και μόνιμη κατάσταση. Σε άλλες περιπτώσεις όμως, η αλλαγή των

παραμέτρων στους νευρώνες εξόδου είναι σημαντική. Έτσι για τα δίκτυα αυτά, πολλές φορές χρειάζεται η θεωρία των δυναμικών συστημάτων για να τα αναλύσει.

1.2.6 ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΝΕΥΡΩΝΙΚΩΝ ΔΙΚΤΥΩΝ

Ένα νευρωνικό δίκτυο είναι απαραίτητο να ρυθμιστεί έτσι ώστε όταν ένα σετ δεδομένων δοθεί σαν είσοδος, να παράγει το επιθυμητό σετ δεδομένων εξόδου. Υπάρχουν διάφοροι μέθοδοι για τη προσαρμογή των δυνάμεων των συνδέσεων σε ένα δίκτυο. Ένας τρόπος για να επιτευχθεί η μάθηση του δικτύου, είναι η ρύθμιση των συναπτικών βαρών, χρησιμοποιώντας μια *a priori* γνώση. Μια άλλη μέθοδος είναι η εκπαίδευση του νευρωνικού δικτύου τροφοδοτώντας το πρότυπα διδασκαλίας και επιτρέποντάς του να αλλάξει τα συναπτικά βάρη ανάλογα με κάποιο διδακτικό κανόνα.

Μπορούμε να κατηγοριοποιήσουμε τις διαδικασίες μάθησης σε τρεις κλάσεις:

- **Μάθηση με επίβλεψη (supervised learning).** Τα δίκτυα εκπαιδεύονται παρέχοντάς τους πρότυπα εισόδου καθώς και τις αντίστοιχες εξόδους. Αυτά τα ζεύγη εισόδου-εξόδου δίνονται από έναν εξωτερικό "δάσκαλο", ή από ένα σύστημα στο οποίο περιέχεται το νευρωνικό δίκτυο (self-supervised).
- **Μάθηση χωρίς επίβλεψη (unsupervised learning) ή Μάθηση με αυτο-οργάνωση (self-organization).** Στη περίπτωση αυτή δεν υπάρχουν παραδείγματα εισόδων-εξόδων της συνάρτησης που πρέπει να μάθει το δίκτυο, αλλά το σύστημα πρέπει να αναπτύξει τη δική του αναπαράσταση των εισόδων. Ένα ανεξάρτητο μέτρο, μετράει την ποιότητα της αναπαράστασης που πρέπει να μάθει το δίκτυο και οι ελεύθερες παράμετροι του δικτύου βελτιστοποιούνται με βάση αυτό το μέτρο.

- **Ενισχυτική μάθηση (reinforcement learning)**. Αυτός ο τύπος μάθησης θεωρείτε μια ενδιάμεση μορφή των δύο προηγούμενων τύπων. Εδώ, το σύστημα μάθησης αξιολογεί τις ενέργειές του ως καλές (επιβράβευση) ή κακές (αξιοποίηση) βασισμένο σε κάποιες αντιδράσεις από το περιβάλλον και ανάλογα προσαρμόζει τις παραμέτρους του δικτύου. Γενικά, η προσαρμογή των παραμέτρων συνεχίζεται μέχρι να επιτευχθεί μια κατάσταση ισορροπίας, στη οποία αν εφαρμοστεί ο μηχανισμός μάθησης δεν θα υπάρξουν περαιτέρω αλλαγές στις παραμέτρους. Η μάθηση με αυτοοργάνωση μπορεί να κατηγοριοποιηθεί σε αυτό τον τύπο μάθησης.

1.2.7 PERCEPTRONS

Ο όρος “Perceptrons” επινοήθηκε από τον Frank Rosenblatt το 1962, και χρησιμοποιείται για να περιγράψει τη σύνδεση των απλών νευρώνων σε ένα δίκτυο. Αυτά τα δίκτυα είναι απλοποιημένες μορφές του βιολογικού νευρικού συστήματος, όπου όμως κάποιες ιδιότητες του μεγαλοποιούνται και κάποιες αγνοούνται. Προς το παρόν θα επικεντρωθούμε στο Perceptron ενός στρώματος (Single Layer Perceptrons), δηλαδή το δίκτυο Perceptron όπου δεν υπάρχουν κρυφά επίπεδα νευρώνων. Η λέξη δίκτυο εδώ χρησιμοποιείται καταχρηστικά, αφού δεν υπάρχουν περισσότεροι από ένας νευρώνες για να συνδεθούν μεταξύ τους, παρά μόνο υπάρχουν οι συνδέσεις μεταξύ των εισόδων του νευρώνα.

Γενικά τα δεδομένα εισάγονται στο στρώμα εισόδου, και το δίκτυο στη συνέχεια τα επεξεργάζεται πολλαπλασιάζοντας τα με τα συναπτικά βάρη. Το αποτέλεσμα αυτού του πολλαπλασιασμού, μεταβάλλεται από το τελικό στρώμα, το στρώμα εξόδου, χρησιμοποιώντας μια συνάρτηση που καθορίζει καταπόσον ο κόμβος εξόδου «πυροβολά» ή όχι.

Η διαδικασία κατά την οποία το δίκτυο εκπαιδεύεται, ο κανόνας εκπαίδευσης δηλαδή, περιλαμβάνει την εύρεση των σωστών τιμών των συναπτικών βαρών. Πρώτα όμως, ο πίνακας των βαρών αρχικοποιείται με τυχαίους αριθμούς μεταξύ -1 και +1. Έπειτα όσο το δίκτυο «μαθαίνει», αυτές οι τιμές μεταβάλλονται μέχρι να

αποφασιστεί ότι το δίκτυο έχει επιλύσει το πρόβλημα. Για να εκπαιδευτεί το δίκτυο χρησιμοποιούνται set δεδομένων ως πρότυπα εισόδου για τα οποία οι σωστοί έξοδοι είναι γνωστοί. Ξεκινώντας από τυχαία συναπτικά βάρη, ένα πρότυπο εισόδου παρουσιάζεται στο δίκτυο, το οποίο κάνει μια αρχική υπόθεση για το ποια πρέπει να είναι η σωστή έξοδος.

Κατά τη διάρκεια της φάσης εκπαίδευσης, η διαφορά μεταξύ της υπόθεσης που κάνει το δίκτυο και της σωστής τιμής της εξόδου αξιολογείται, και τα συναπτικά βάρη αλλάζουν έτσι ώστε το λάθος να ελαχιστοποιηθεί.

Το απλό perceptron υλοποιείται όπως το βασικό μοντέλο που περιγράφεται πιο πάνω και έχει σαν συνάρτηση ενεργοποίησης μια απλή συνάρτηση κατώφλι:

$$f(x) = \begin{cases} 1, & x > t \\ 0, & \text{διαφορετικά} \end{cases}$$

, όπου x είναι η έξοδος του νευρώνα και t μια σταθερά-κατώφλι (threshold).

Αν συμβολίσουμε τα συναπτικά βάρη με τον πίνακα W_{ij} , όπου i είναι ο αριθμός των εισόδων, και j ο αριθμός των εξόδων, και το διάνυσμα εισόδου με I τότε η έξοδος O του νευρώνα υπολογίζεται ως εξής:

$$O = f(IW_{ij})$$

Ο κανόνας εκπαίδευσης του απλού perceptron είναι σχετικά απλός. Ξεκινώντας από ένα πίνακα από τυχαία συναπτικά βάρη, παρουσιάζουμε στο δίκτυο ένα πρότυπο εκπαίδευσης, και υπολογίζουμε την έξοδο του δικτύου όπως πιο πάνω. Καθορίζουμε έτσι μια **συνάρτηση λάθους E**:

$$E(O) = (T - O)$$

Όπου σ' αυτή την περίπτωση, το T είναι το επιθυμητό διάνυσμα εξόδου για την είσοδο του προτύπου εκπαίδευσης. Για να καθορίσουμε λοιπόν το πώς πρέπει να προσαρμοστούν τα συναπτικά βάρη ώστε το δίκτυο να παράγει την επιθυμητή έξοδο για τη συγκεκριμένη είσοδο, θα πρέπει η συνάρτηση λάθους να ελαχιστοποιηθεί.

Στα νευρωνικά δίκτυα, ο στόχος είναι να εκτιμηθεί η επίδραση των συναπτικών βαρών στην ολική συνάρτηση λάθους. Συνδυάζοντας τα πιο πάνω έχουμε ότι η συνάρτηση λάθους εκφράζεται:

$$E(O) = (T - O) = T - f(IW_{ij})$$

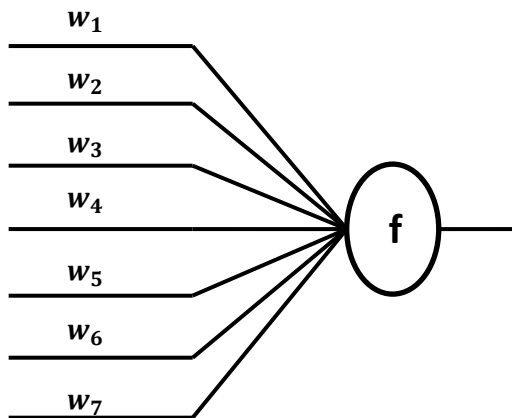
Στη συνέχεια παραγωγίζουμε τη συνάρτηση αυτή και εκτιμούμε έτσι το πίνακα συναπτικών βαρών που την ελαχιστοποιεί. Η διαδικασία αυτή θα περιγραφεί εκτενέστερα στα επόμενα κεφάλαια και συγκεκριμένα στα δίκτυα Perceptron πολλαπλών στρωμάτων (MLP). Η συνάρτηση που ελαχιστοποιεί το λάθος στον αλγόριθμο του Perceptron ενός στρώματος είναι ιδιαίτερα απλή. Σε κάθε κόμβο εξόδου, υπολογίζεται το λάθος και προστίθεται στο συναπτικό βάρος που τροφοδοτεί αυτό τον κόμβο.

Αλγόριθμος μάθησης:

Για να περιγραφεί ο αλγόριθμος μάθησης του απλού perceptron, πρέπει να οριστούν κάποιες μεταβλητές:

- $y = f(z)$ είναι η έξοδος του δικτύου για ένα διάνυσμα εισόδου z
- b είναι η μεροληψία, η οποία στο παράδειγμα παρακάτω θεωρείται 0
- $D = \{(x_1, d_1), \dots, (x_s, d_s)\}$ είναι το σετ δεδομένων εκπαίδευσης που αποτελείται από s δυάδες προτύπων:
 - x_j είναι ένα n -διάστατο διάνυσμα εισόδου
 - d_j είναι η επιθυμητή έξοδος του δικτύου για αυτή την είσοδο
- $x_{j,i}$ είναι η τιμή του i -οστού κόμβου του j -οστού διανύσματος εισόδου εκπαίδευσης ($x_{j,0} = 1$)
- w_i είναι η i -οστή τιμή του διανύσματος συναπτικών βαρών, που θα πολλαπλασιαστεί με την i -οστή τιμή του διανύσματος εισόδου
- Για τη χρονική εξάρτηση του w θεωρούμε $w_i(t)$ το i -συναπτικό βάρος τη χρονική στιγμή t
- Τέλος α είναι μια σταθερά που ονομάζεται ρυθμός μάθησης

Μπορούμε επίσης να προσθέσουμε μια επιπλέον διάσταση, με δείκτη $n + 1$, τέτοια ώστε $x_{j,n+1} = 1$ και $w_{n+1} = b$ και με το τρόπο αυτό εισάγεται η μεροληψία στο δίκτυο.



Διάγραμμα 1.2.7.1: Απλό Perceptron

Ο αλγόριθμος εκτελεί τα πιο κάτω βήματα:

- 1) Αρχικοποίησε τα συναπτικά βάρη και το κατώφλι στη συνάρτηση ενεργοποίησης. Τα βάρη μπορούν να αρχικοποιηθούν θέτοντας τα $w_i(0) = 0$ ή κάποια μικρή τυχαία τιμή
- 2) Για κάθε πρότυπο j στο σετ εκπαίδευσης D , εκτέλεσε τα πιο κάτω βήματα για τη είσοδο x_j και την επιθυμητή έξοδο d_j :

- Υπολόγισε την έξοδο:

$$y_j(t) = f[w(t) \cdot x_j] = f[w_0(t) + w_1(t)x_{j,1} + w_2(t)x_{j,2} + \dots + w_n(t)x_{j,n}]$$

- Προσάρμοσε τα συναπτικά βάρη ως εξής:

$$w_i(t + 1) = w_i(t) + a(d_j - y_i(t))x_{j,i} \quad , \quad \text{για όλους τους κόμβους}$$
$$0 \leq i \leq n$$

- Το βήμα 2 επαναλαμβάνεται μέχρι το λάθος $d_j - y_j(t)$ να είναι μικρότερο από μια προκαθορισμένη τιμή γ , ή όταν συμπληρωθεί ένας προκαθορισμένος αριθμός επαναλήψεων.

Αυτός είναι ο γενικός αλγόριθμος του perceptron. Μπορεί ναδειχθεί ότι αυτή η τεχνική ελαχιστοποιεί τη συνάρτηση λάθους. Ο χρόνος που χρειάζεται για να καταλήξουμε σε λύση (ο χρόνος δηλαδή για να βρεθεί η ελάχιστη τιμή του λάθους) μπορεί να είναι απρόβλεπτος. Αυτό συμβαίνει γιατί, αν η συνάρτηση λάθους προσεγγίζεται με μεγάλα βήματα, η ελάχιστη τιμή ενδέχεται να βρεθεί πιο αργά. Αν γίνονται μικρότερα βήματα είναι πιο πιθανόν να χτυπήσουμε την ελάχιστη τιμή της συνάρτησης. Έτσι λοιπόν, για να ελέγξουμε τον ρυθμό σύγκλισης, και να μειώσουμε τον αριθμό των βημάτων που γίνονται, χρησιμοποιούμε τη παράμετρο που ονομάζεται **ρυθμός μάθησης (learning rate) α** . Αυτή η παράμετρος ορίζεται στο διάστημα $[0,1]$ και έτσι τα συναπτικά βάρη αλλάζουν με μικρότερα βήματα.

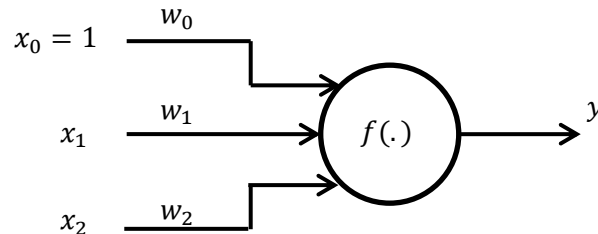
1.2.8 ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ ΤΟΥ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΥ ΜΑΘΗΣΗΣ ΣΤΟΝ ΑΠΛΟ PERCEPTRON

Στο παράδειγμα αυτό, θα δούμε πώς ένας απλός perceptron με μια διαδικασία μάθησης μπορεί να χρησιμοποιηθεί ώστε να μιμείται τη λογική πύλη AND. Στο πιο κάτω πίνακα φαίνονται όλες οι πιθανές εισοδοί και η αντίστοιχη επιθυμητή έξοδος που θέλουμε να παράγει το δίκτυο.

x_1	x_2	z
0	0	0
0	1	0
1	0	0
1	1	1

Πίνακας 1.2.8.1: Η λογική πύλη AND

Τα δεδομένα που φαίνονται στον πίνακα αποτελούν το set εκπαίδευσης, και δείχνουν τη τοπολογία που πρέπει να έχει το δίκτυο. Αυτό θα περιέχει τρεις κόμβους εισόδου (δύο για τα x_1, x_2 και ένα για το $x_0 = 0$) και έναν κόμβο εξόδου.



Διάγραμμα 1.2.8.1: Διάταξη νευρωνικού δικτύου που υλοποιεί τη λογική πύλη AND

Είσοδοι: x_0, x_1, x_2 όπου η είσοδος x_0 παραμένει σταθερή και ίση με 1

Κατώφλι συνάρτησης ενεργοποίησης: $t = 0.5$

Μεροληψία: $b = 0$

Ρυθμός μάθησης: $\alpha = 0.1$

Η αθροιστική συνάρτηση υπολογίζεται ως: $s = x_0 w_0 + x_1 w_1 + x_2 w_2$

Η έξοδος του δικτύου: $n = \begin{cases} 1, & s > t \\ 0, & \text{αλλιώς} \end{cases}$

Η συνάρτηση λάθους: $e = z - n$

Η τελική διόρθωση στα συναπτικά βάρη: $d = \alpha * e$

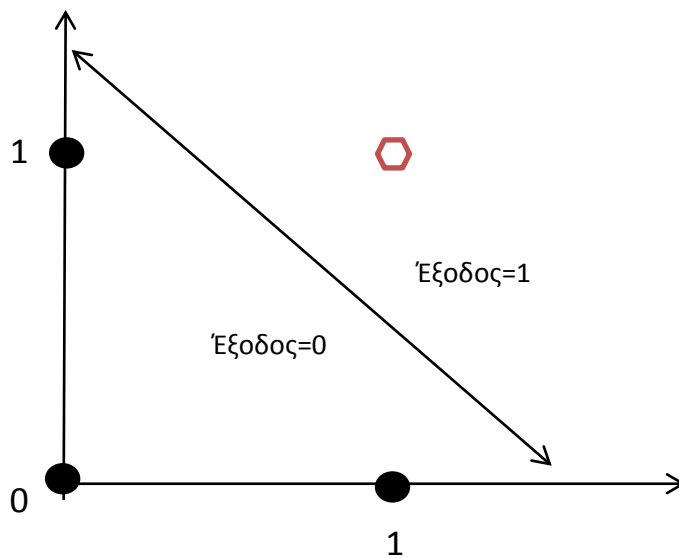
είσοδος				αρχικά βάρη			έξοδος		λάθος	διόρθωση	τελικά βάρη		
x_0	x_1	x_2	z	w_0	w_1	w_2	s	n	e	d	w_0	w_1	w_2
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	1	1	1	0	0	0	0	0	1	+0.1	0.1	0.1	0.1
1	0	0	0	0.1	0.1	0.1	0.1	0	0	0	0.1	0.1	0.1
1	0	1	0	0.1	0.1	0.1	0.2	0	0	0	0.1	0.1	0.1
1	1	0	0	0.1	0.1	0.1	0.2	0	0	0	0.1	0.1	0.1
1	1	1	1	0.1	0.1	0.1	0.3	0	1	+0.1	0.2	0.2	0.2
1	0	0	0	0.2	0.2	0.2	0.2	0	0	0	0.2	0.2	0.2
1	0	1	0	0.2	0.2	0.2	0.4	0	0	0	0.2	0.2	0.2
1	1	0	0	0.2	0.2	0.2	0.4	0	0	0	0.2	0.2	0.2
1	1	1	1	0.2	0.2	0.2	0.6	1	0	0	0.2	0.2	0.2

Πίνακας 1.2.8.2: Βήματα αλγορίθμου μάθησης του δικτύου για τη λογική πύλη AND

Ο αλγόριθμος τερματίζει, αφού μετά τη τρίτη είσοδο των δεδομένων εκπαίδευσης, το λάθος μηδενίζεται. Τελικά τα συναπτικά βάρη με τα οποία το δίκτυο μας προσομοιάζει τη λογική πύλη AND είναι: $w_0, w_1, w_2 = 0.2$.

Μπορούμε να δούμε και γραφικά το πιο πάνω πρόβλημα. Στο Γράφημα 1.2.8.1 φαίνεται η χωρική διάταξη των δεδομένων εισόδου. Παρατηρούμε ότι είναι δυνατόν να σχεδιάσουμε μια ευθεία γραμμή μεταξύ των συντεταγμένων των τιμών εισόδου

που έχουν σαν έξοδο τη τιμή 1 και αυτών των οποίων απαιτείται έξοδος ίση με 0. Τα προβλήματα που έχουν την ιδιότητα αυτή ονομάζονται **γραμμικά διαχωρίσιμα**.



Γράφημα 1.2.8.1: Χωρική διάταξη δεδομένων εισόδου για τη λογική πύλη AND

Το απλό δίκτυο perceptron με ένα νευρώνα και μια συνάρτηση ενεργοποίησης/κατώφλι, μπορεί μόνο να λύσει προβλήματα που είναι γραμμικά διαχωρίσιμα. Τα περισσότερα όμως προβλήματα που καλούνται να λύσουν τα νευρωνικά δίκτυα δεν είναι της κλάσης αυτής, και γι' αυτό το απλό δίκτυο perceptron δεν μπορεί φυσικά να αντεπεξέλθει στις απαιτήσεις για τις οποίες η τεχνολογία των νευρωνικών δικτύων αναπτύχθηκε.

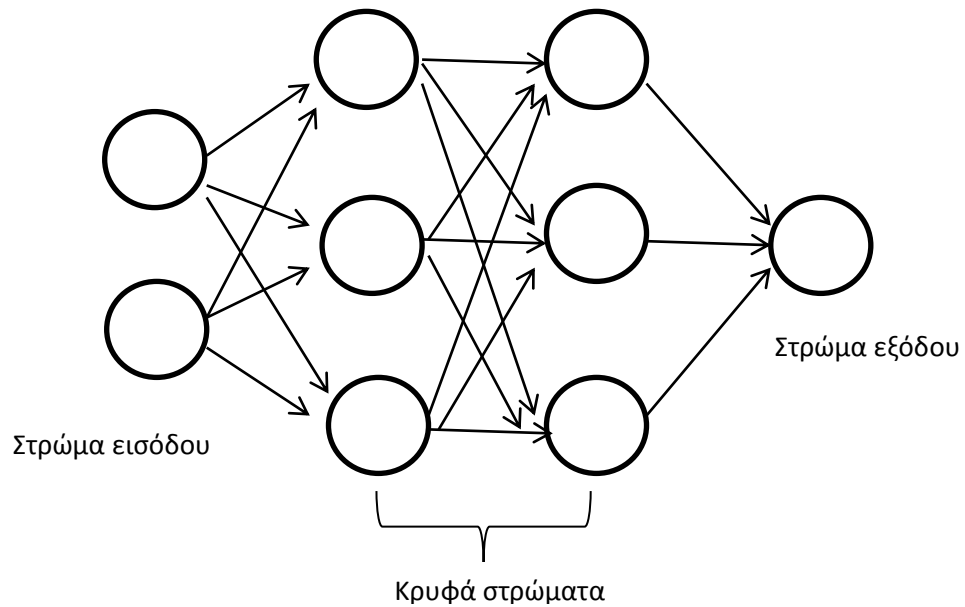
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2

2.1 PERCEPTRON ΠΟΛΛΩΝ ΣΤΡΩΜΑΤΩΝ (MULTILAYER PERCEPTRONS – MLP)

2.1.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Τα περισσότερα προβλήματα που καλούνται να επιλύσουν τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα, δεν ανήκουν στην κλάση των γραμμικά διαχωρίσιμων, τα οποία το απλό perceptron ενός νευρώνα μπορεί να επιλύσει. Έτσι γύρω στο 1986 αναπτύχθηκαν τα **perceptron πολλών στρωμάτων** ή αλλιώς **multilayer perceptrons (MLP)**. Όπως υποδηλώνει η ονομασία των δικτύων αυτών, ένα MLP είναι ένα δίκτυο αποτελούμενο από πολλούς νευρώνες, κατανεμημένους σε στρώματα (layers). Τα στρώματα αυτά χωρίζονται ως εξής:

- Το **στρώμα εισόδου (input layer)**, από όπου εισέρχονται τα δεδομένα στο δίκτυο. Ο αριθμός των νευρώνων από τους οποίους αποτελείται το στρώμα αυτό, εξαρτάται από τον αριθμό των εισόδων που θέλουμε να πάρει το δίκτυο.
- Ένα ή περισσότερα **κρυφά στρώματα (hidden layers)**. Αυτά τα στρώματα, παρεμβάλλονται μεταξύ του στρώματος εισόδου και εξόδου και ο αριθμός τους ποικίλει. Η λειτουργία των κρυφών στρωμάτων είναι να κωδικοποιούν τις εισόδους και να καθορίζουν τις εξόδους του δικτύου. Έχει αποδειχθεί ότι ένα MLP δίκτυο μπορεί να προσεγγίσει οποιαδήποτε συνάρτηση που συνδέει τις εισόδους της με τις εξόδους της, δεδομένου ότι μια τέτοια συνάρτηση υπάρχει.
- Το **στρώμα εξόδου (output layer)** στο οποίο παρουσιάζεται η έξοδος του δικτύου. Ο αριθμός των νευρώνων στο στρώμα αυτό, εξαρτάται από το πρόβλημα που θέλουμε να μάθει το κάθε δίκτυο.

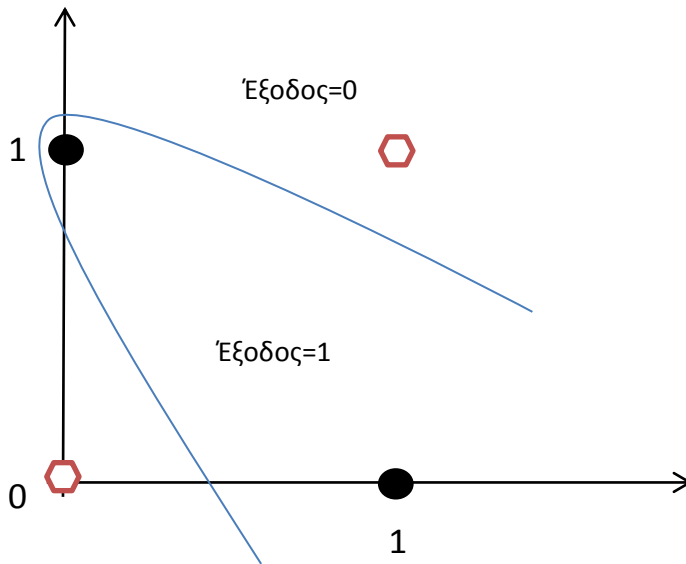


Διάγραμμα 2.1.1.1: MLP δίκτυο

Έστω ότι ενδιαφερόμαστε να υλοποιήσουμε τη λογική πύλη XOR, ένα πρόβλημα το οποίο δεν είναι γραμμικά διαχωρίσιμο όπως φαίνεται και στο Γράφημα 2.1.1.1.

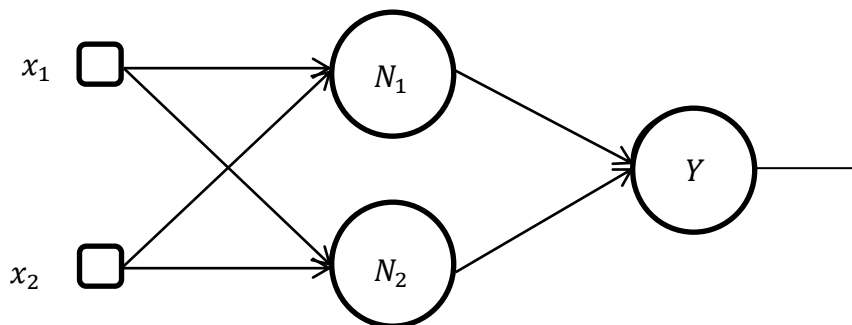
x_1	x_2	z
0	0	0
0	1	1
1	0	1
1	1	0

Πίνακας 2.1.1.1: Λογική πύλη XOR



Γράφημα 2.1.1.1: Χωρική διάταξη δεδομένων εισόδου για τη λογική πύλη XOR

Το γράφημα, που δείχνει τη διάταξη των προτύπων, υποδεικνύει πως για το διαχωρισμό αυτών είναι απαραίτητη μια καμπύλη και όχι ευθεία γραμμή. Γι' αυτό και ο αλγόριθμος του απλού perceptron δεν μπορεί να εφαρμοστεί αποτελεσματικά στο συγκεκριμένο πρόβλημα. Θεωρούμε λοιπόν τη διάταξη ενός MLP δικτύου όπως φαίνεται στο σχήμα.



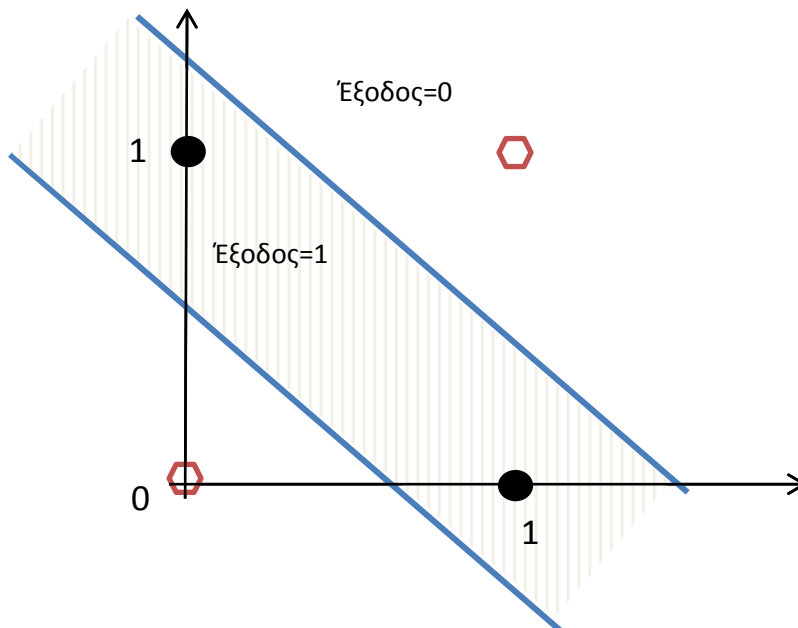
Διάγραμμα 2.1.1.2: Διάταξη MLP δικτύου που υλοποιεί τη λογική πύλη XOR

Οπότε, εφαρμόζοντας τον αλγόριθμο του perceptron χρησιμοποιώντας μια κλασική βηματική συνάρτηση μπορούμε να επιτύχουμε τις εξόδους που φαίνονται στον Πίνακα 2.1.1.2 για τους τρεις νευρώνες του δικτύου.

είσοδοι		N_1	N_2	Y
x_1	x_2			
0	0	0	0	0
0	1	1	0	1
1	0	1	0	1
1	1	1	1	0

Πίνακας 2.1.1.2: Έξοδοι των νευρώνων

Από το πίνακα μπορούμε να δούμε, ότι οι κρυφοί νευρώνες N_1, N_2 υλοποιούν τις λογικές πύλες AND και OR αντίστοιχα και ο νευρώνας εξόδου Y συνδυάζει τις εξόδους τους δίνοντας το επιθυμητό αποτέλεσμα του δικτύου. Σχηματικά, το πιο πάνω φαίνεται με το Γράφημα 2.1.1.2.



Γράφημα 2.1.1.2: Χωρική διάταξη των εισόδων για τη λογική πύλη XOR και οι έξοδοι του MLP δικτύου

Στα προβλήματα που απαιτούνται περισσότερες διαχωριστικές γραμμές, χρησιμοποιούνται και περισσότεροι κρυφοί νευρώνες. Συνδυάζοντας τις ευθείες, μπορούμε να πάρουμε μια μεγάλη ποικιλία περιοχών τις οποίες τα δίκτυα MLP μπορούν να διαχωρίσουν.

2.1.2 ΣΥΝΑΡΤΗΣΗ ΕΝΕΡΓΟΠΟΙΗΣΗΣ

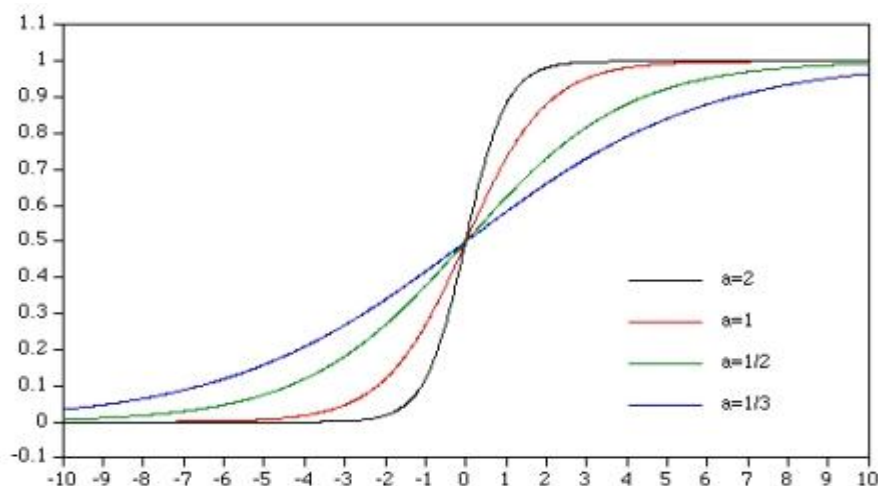
Τα δίκτυα MLP μπορούν, επομένως, χρησιμοποιώντας την απλή βηματική συνάρτηση:

$$f(x) = \begin{cases} 1, & x > t \\ 0, & \text{διαφορετικά} \end{cases}$$

να προσομοιώσουν συναρτήσεις που δεν μπορεί ένα απλό δίκτυο perceptron. Στη πράξη όμως, η βηματική συνάρτηση δεν προτιμάται στο είδος αυτό των νευρωνικών δικτύων. Στους περισσότερους κανόνες εκπαίδευσης, η προσαρμογή των συναπτικών βαρών γίνεται με μεθόδους βελτιστοποίησης, κάτι το οποίο απαιτεί ομαλές και παραγωγίσιμες συναρτήσεις. Η βηματική συνάρτηση δεν ανήκει στη κατηγορία αυτή των συναρτήσεων και γι' αυτό προτιμάται η χρήση της σιγμοειδούς συνάρτησης:

$$f_a(x) = \frac{1}{1 + e^{-ax}}$$

Η συνάρτηση αυτή μοιάζει πολύ με τη βηματική συνάρτηση, αλλά είναι ομαλή και παραγωγίσιμη. Η σταθερά a αλλάζει το σχήμα του γραφήματος της συνάρτησης και μπορεί να επιλεγθεί αυθαίρετα, ανάλογα με το πρόβλημα. Στο Γράφημα 2.1.2.1 φαίνεται η σιγμοειδής συνάρτηση για τέσσερις διαφορετικές τιμές του a .



Γράφημα 2.1.2.1: Σιγμοειδής συνάρτηση για τέσσερις διαφορετικές τιμές του α

Η παράγωγος της σιγμοειδούς συνάρτησης για $\alpha = 1$ είναι:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} f(x) &= \frac{e^{-x}}{(1 + e^{-x})^2} = \left(\frac{1}{1 + e^{-x}} \right) \left(\frac{e^{-x}}{1 + e^{-x}} \right) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \left[1 - \frac{1}{1 + e^{-x}} \right] \\ &= f(x)[1 - f(x)]. \end{aligned}$$

Εναλλακτικά, μπορεί να χρησιμοποιηθεί και η υπερβολική εφαπτομένη:

$$f(x) = \tanh(u) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}$$

2.1.3 Ο ΚΑΝΟΝΑΣ ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗΣ BACK-PROPAGATION

Η εκπαίδευση των νευρωνικών δικτύων γίνεται, όπως είδαμε, με την αλλαγή των συναπτικών βαρών και τη προσαρμογή τους ανάλογα με το πρόβλημα που θέλουμε να προσομοιώνει το δίκτυο. Η διαδικασία αυτή, βασίζεται στη ποσότητα λάθους στην έξοδο του δικτύου σε σύγκριση με το αναμενόμενο αποτέλεσμα. Έχουμε δει τον αλγόριθμο που υλοποιεί ένα απλό δίκτυο perceptron ενός νευρώνα. Για τα δίκτυα πολλών επιπέδων (MLP) αντιμετωπίζουμε μια δυσκολία: δεν έχουμε τιμές-στόχους

για τους κρυφούς νευρώνες. Αυτό το αρχικά άλυτο πρόβλημα ήταν ο λόγος που η τεχνολογία των νευρωνικών δικτύων εγκαταλείφθηκε για λίγο, μετά από μια αρχική περίοδο μεγάλης αποδοχής τους. Στη συνέχεια όμως, και όταν προτάθηκε ο **αλγόριθμος back-propagation**, τα νευρωνικά δίκτυα έγιναν και πάλι δημοφιλή και οδηγήθηκαν σε ένα νέο κύμα μελέτης και ανάπτυξης.

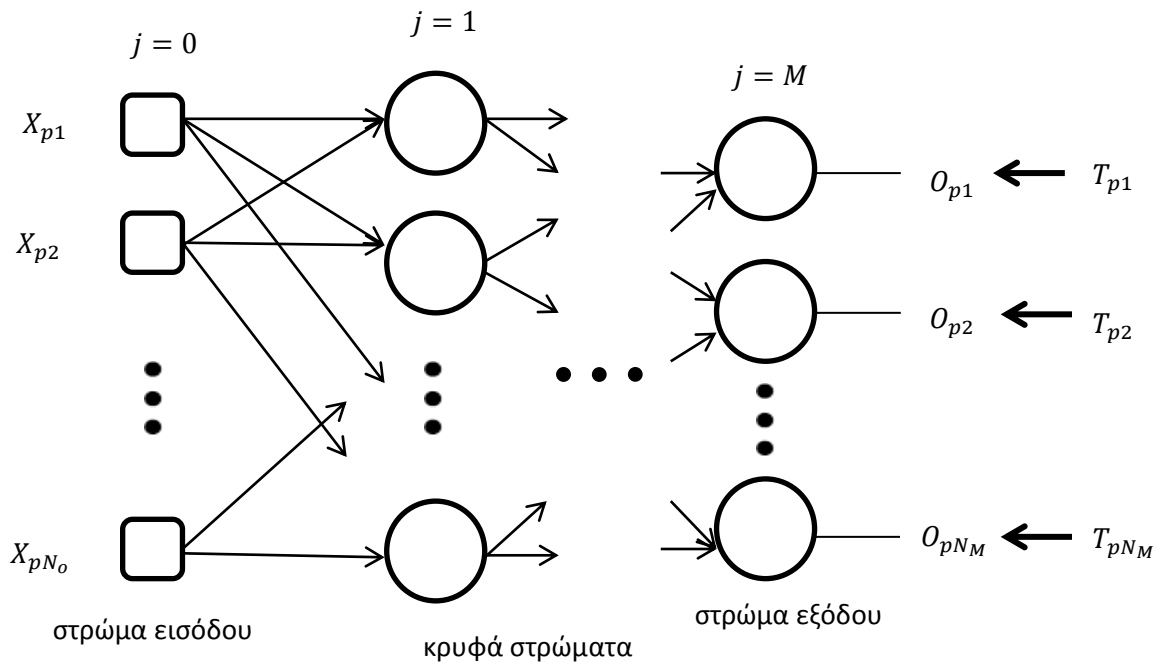
Ο αλγόριθμος back-propagation αποτελεί τον πιο διαδεδομένο αλγόριθμο εκπαίδευσης και εφαρμόζεται μόνο στα εμπρόσθιας τροφοδότησης (feed-forward) MLP δίκτυα. Ανήκει στη κατηγορία των διαδικασιών μάθησης με επίβλεψη, αφού όπως και στο απλό δίκτυο perceptron χρησιμοποιούνται δεδομένα-πρότυπα που καθοδηγούν τη μάθηση. Όταν ένα σετ δεδομένων εκπαίδευσης εισαχθεί στο δίκτυο, αυτό υπολογίζει την έξοδο στη συγκεκριμένη είσοδο. Η έξοδος αυτή συγκρίνεται με τη δεδομένη και επιθυμητή έξοδο και έτσι υπολογίζεται μια τιμή λάθους. Με βάση το λάθος αυτό, οι παράμετροι του δικτύου (τα συναπτικά βάρη δηλαδή) προσαρμόζονται ανάλογα. Ο αλγόριθμος του back-propagation βασίζεται στον λεγόμενο "Γενικευμένο Κανόνα Δέλτα" κατά τον οποίο τα συναπτικά βάρη μεταβάλλονται με κριτήριο το μέσο τετραγωνικό σφάλμα της εξόδου του δικτύου. Τα σετ των δεδομένων εκπαίδευσης, εισάγονται στο δίκτυο, μέχρι η τιμή του λάθους να ελαχιστοποιηθεί.

Ο αλγόριθμος

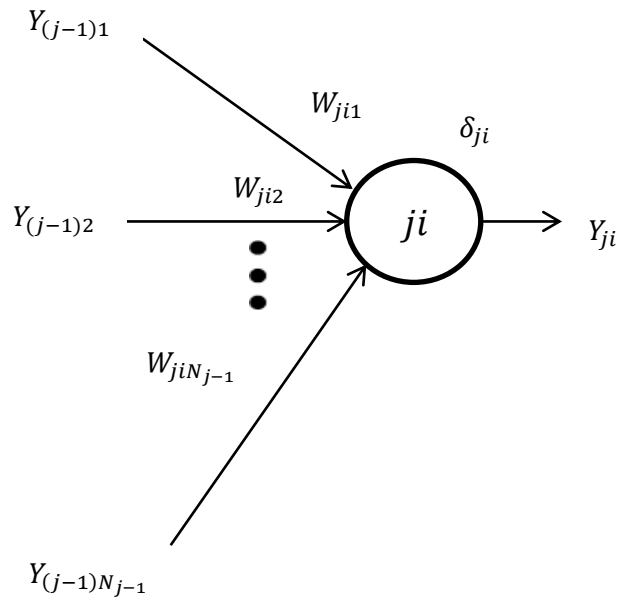
Παρακάτω, περιγράφεται ο αλγόριθμος του back-propagation για ένα MLP δίκτυο με τα εξής χαρακτηριστικά:

- M στρώματα.
- N_j νευρώνες στο j -οστό στρώμα.
- N_o η διάσταση της εισόδου $X_{p1}, X_{p2}, \dots, X_{pN_o}$ του p -οστού πρότυπου στο σετ εκπαίδευσης.
- N_M η διάσταση της εξόδου $T_{p1}, T_{p2}, \dots, T_{pN_M}$ του p -οστού πρότυπου στο σετ εκπαίδευσης.
- $O_{p1}, O_{p2}, \dots, O_{pN_M}$ η έξοδος που δίνει το δίκτυο για την είσοδο του p -οστού προτύπου στο σετ εκπαίδευσης.
- Y_{ji} η έξοδος του i -οστού νευρώνα στο j -στρώμα για το p -οστό πρότυπο.

- W_{jik} το συναπτικό βάρος μεταξύ του k -οστού νευρώνα στο στρώμα $(j - 1)$ και του i -οστού νευρώνα στο στρώμα j .
- δ_{ji} η τιμή του λάθους στον i νευρώνα του στρώματος j .



Διάγραμμα 2.1.2.1: Το υπό εκπαίδευση MLP δίκτυο



Διάγραμμα 2.1.2.2: Ο i -οστός νευρώνας του στρώματος j

Συνοπτικά τα βήματα του αλγορίθμου εκπαίδευσης είναι:

1. Αρχικοποίησε τα συναπτικά βάρη με τυχαίες μικρές τιμές.
2. Εισήγαγε το p -οστό διάνυσμα εισόδου του σετ προτύπων $X_p = (X_{p1}, X_{p2}, \dots, X_{pN_0})$, και το αντίστοιχο διάνυσμα της επιθυμητής εξόδου $T_p = (T_{p1}, T_{p2}, \dots, T_{pN_M})$ στο δίκτυο.
3. Πέρασε τις εισόδους στο πρώτο στρώμα, το στρώμα 1. Για κάθε νευρώνα εισόδου i στο επίπεδο 0, εκτέλεσε:

$$Y_{0i} = X_{pi}$$

4. Για κάθε νευρώνα i σε κάθε στρώμα $j = 1, 2, \dots, M$, από το στρώμα εισόδου μέχρι το στρώμα εξόδου, υπολόγισε την έξοδο από κάθε νευρώνα:

$$Y_{ji} = f \left(\sum_{k=1}^{N_{j-1}} Y_{(j-1)k} W_{jik} \right),$$

όπου $f(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$.

5. Αφού υπολογιστούν οι τιμές εξόδου του δικτύου, για κάθε νευρώνα εξόδου i στο στρώμα M , εκτέλεσε:

$$O_{pi} = Y_{Mi}$$

6. Υπολόγισε τη τιμή λάθους δ_{ji} για κάθε νευρώνα i σε κάθε στρώμα με αντίστροφη σειρά (από το στρώμα εξόδου στο στρώμα εισόδου) $j = M, M - 1, \dots, 2, 1$, μεταβάλλοντας αντίστοιχα τα συναπτικά βάρη. Για το στρώμα εξόδου η τιμή του λάθους είναι:

$$\delta_{Mi} = Y_{Mi}(1 - Y_{Mi})(T_{pi} - Y_{Mi})$$

και για τα κρυφά στρώματα:

$$\delta_{ji} = Y_{ji}(1 - Y_{ji}) \sum_{k=1}^{N_{j+1}} \delta_{(j+1)k} W_{(j+1)ki}$$

Η προσαρμογή των συναπτικών βαρών γίνεται για κάθε σύνδεση από το νευρώνα k στο στρώμα $(i - 1)$ σε κάθε νευρώνα i σε κάθε στρώμα j :

$$W_{jik}^+ = W_{jik} + \beta \delta_{ji} Y_{ji}$$

Όπου το β είναι μια σταθερά που αποτελεί τον παράγοντα κανονικοποίησης της προσαρμογής των συναπτικών βαρών και παίρνει τιμές από 0 έως 1.

Τα βήματα 2 έως 6 επαναλαμβάνονται για κάθε πρότυπο εκπαίδευσης p , μέχρι το μέσο τετραγωνικό σφάλμα της εξόδου να ελαχιστοποιηθεί.

Οι εξισώσεις λάθους και μεταβολής των συναπτικών βαρών

Ο πιο πάνω αλγόριθμος βασίζει τη λειτουργικότητά του στην ελαχιστοποίηση του μέσου τετραγωνικού σφάλματος. Άρα ζητάμε τη παράγωγο αυτού ως προς τα συναπτικά βάρη, αφού είναι οι παράμετροι που μεταβάλλονται ώστε να πετύχουμε το αναμενόμενο αποτέλεσμα του δικτύου. Η εξίσωση του σφάλματος στο στρώμα εξόδου δίνεται από την έκφραση:

$$E_p = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N_M} (T_{pj} - O_{pj})^2,$$

για το p -οστό πρότυπο στο σετ εκπαίδευσης. Στον γενικευμένο κανόνα δέλτα, η τιμή τους σφάλματος δ_{ji} που αφορά τον i -οστό νευρώνα στο στρώμα j , είναι ο βαθμός της αλλαγής του μέσου τετραγωνικού σφάλματος E_p σε σχέση με τη λεγόμενη **δικτυακή διέγερση** του νευρώνα που είναι το άθροισμα των διεγέρσεων των νευρώνων του προηγούμενου στρώματος συνδυασμένο με τα συναπτικά βάρη. Η δικτυακή διέγερση δίνεται, λοιπόν, από τη σχέση:

$$u_{ji} = \sum_{l=1}^{N_j} Y_{(j-1)l} W_{(j-1)il}$$

και η τιμή του σφάλματος δ_{ji} είναι:

$$\delta_{ji} = -\frac{\partial E_p}{\partial u_{ji}}.$$

Με τον κανόνα αλυσίδας, μπορούμε να βρούμε τη ζητούμενη παράγωγο του μέσου τετραγωνικού σφάλματος ως προς τα συναπτικά βάρη ως εξής:

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_p}{\partial W_{jik}} &= \frac{\partial E_p}{\partial u_{ji}} \frac{\partial u_{ji}}{\partial W_{jik}} = \\ &= -\delta_{ji} \frac{\partial}{\partial W_{jik}} [Y_{(j-1)0} W_{(j-1)io} + \dots + Y_{(j-1)k} W_{(j-1)ik} + \dots] \\ &= -\delta_{ji} \frac{\partial}{\partial W_{jik}} Y_{(j-1)k} W_{(j-1)ik} \end{aligned}$$

$$= -\delta_{ji}Y_{(j-1)k}.$$

Μπορούμε λοιπόν να πούμε ότι η αλλαγή των συναπτικών βαρών, δίνεται από τη παρακάτω σχέση:

$$\Delta W_{jik} = \beta \delta_{ji}Y_{(j-1)k},$$

όπου β μια σταθερά.

Έτσι η αλλαγή των συναπτικών βαρών πραγματοποιείται ως εξής:

$$W_{jik}^+ = W_{jik} + \Delta W_{jik},$$

όπως δηλαδή γίνεται στον αλγόριθμο πιο πάνω.

Τώρα για να βρούμε μια τιμή λάθους για κάθε νευρώνα, χρησιμοποιούμε και πάλι τον κανόνα αλυσίδας όπως πιο κάτω:

$$\delta_{ji} = -\frac{\partial E_p}{\partial Y_{ji}} \frac{\partial Y_{ji}}{\partial u_{ji}}$$

Έτσι για το στρώμα εξόδου όπου έχουμε $j = M$ και $Y_{Mi} = O_{pi}$ παίρνουμε:

$$\begin{aligned} \delta_{Mi} &= -\frac{\partial E_p}{\partial O_{pi}} \frac{\partial Y_{Mi}}{\partial u_{Mi}} \\ &= -\frac{\partial}{\partial O_{pi}} \left[\frac{1}{2} \left[(T_{p1} - O_{p1})^2 + \dots + (T_{pi} - O_{pi})^2 + \dots \right] \right] \frac{\partial}{\partial u_{Mi}} f(u_{Mi}) \\ &= -\frac{\partial}{\partial O_{pi}} \left[\frac{1}{2} (T_{pi} - O_{pi})^2 \right] f'(u_{Mi}). \end{aligned}$$

και χρησιμοποιώντας την έκφραση για τη παράγωγο της σιγμοειδούς συνάρτησης, όπως είδαμε πριν, έχουμε:

$$\begin{aligned} \delta_{Mi} &= (T_{pi} - O_{pi}) [f(u_{Mi}) [1 - f(u_{Mi})]] \\ &= (T_{pi} - O_{pi}) (O_{pi}) (1 - O_{pi}), \end{aligned}$$

το οποίο συμφωνεί με την έκφραση για τη τιμή λάθους στον αλγόριθμο για το στρώμα εξόδου.

Για τον υπολογισμό του λάθους στους κρυφούς νευρώνες δεν μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τιμές-στόχους όπως πιο πάνω. Για το λόγο αυτό, η ποσότητα $\frac{\partial E_p}{\partial Y_{ji}}$ θα πρέπει να υπολογιστεί χρησιμοποιώντας μια άλλη προσέγγιση. Χρησιμοποιούμε το κανόνα αλυσίδας εφαρμοσμένο στη δικτυακή διέγερση των νευρώνων στο εμπρός επίπεδο ($j + 1$):

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_p}{\partial Y_{ji}} &= \frac{\partial E_p}{\partial u_{(j+1)1}} \frac{\partial u_{(j+1)1}}{\partial Y_{ji}} + \frac{\partial E_p}{\partial u_{(j+1)2}} \frac{\partial u_{(j+1)2}}{\partial Y_{ji}} + \dots \\ &= \sum_{a=1}^{N_{j+1}} \left[\frac{\partial E_p}{\partial u_{(j+1)a}} \frac{\partial u_{(j+1)a}}{\partial Y_{ji}} \right] \\ &= \sum_{a=1}^{N_{j+1}} \left[-\delta_{(j+1)a} \frac{\partial}{\partial Y_{ji}} (W_{(j+1)a0} Y_{j0} + \dots + W_{(j+1)ai} Y_{ji} + \dots) \right] \\ &= \sum_{a=1}^{N_{j+1}} [-\delta_{(j+1)a} \frac{\partial}{\partial Y_{ji}} (W_{(j+1)ai} Y_{ji})] = \sum_{a=1}^{N_{j+1}} [-\delta_{(j+1)a} W_{(j+1)ai}]. \end{aligned}$$

Τέλος, συνδυάζοντας το με τη παράγωγο $\frac{\partial Y_{ji}}{\partial u_{ji}}$ παίρνουμε την έκφραση για το σφάλμα στους κρυφούς νευρώνες που περιέχεται στον αλγόριθμο:

$$\delta_{ji} = - \sum_{a=1}^{N_{j+1}} [-\delta_{(j+1)a} W_{(j+1)ai}] \frac{\partial Y_{ji}}{\partial u_{ji}} = Y_{ji} (1 - Y_{ji}) \sum_{a=1}^{N_{j+1}} [\delta_{(j+1)a} W_{(j+1)ai}].$$

Ο τελευταίος τύπος δικαιολογεί και την ονομασία του αλγορίθμου “Back-propagation”. Το σφάλμα δ σε κάθε νευρώνα υπολογίζεται συναρτήσει των σφαλμάτων του ακριβώς επόμενου στρώματος. Τα σφάλματα δηλαδή, προωθούνται από το τελευταίο στρώμα προς τα πίσω, και καταλήγουν στο πρώτο στρώμα.

Ένα συχνό **πρόβλημα** που συναντάται στον αλγόριθμο αυτό, είναι η πιθανότητα να καταλήξουμε σε τοπικά ελάχιστα της συνάρτησης λάθους, κατά τη προσπάθεια ελαχιστοποίησης της. Τα τοπικά ελάχιστα αποτελούν υποδεέστερες λύσεις του προβλήματος σε σχέση με το ολικό ελάχιστο και γι’ αυτό είναι ανεπιθύμητα. Το πρόβλημα αυτό είναι ιδιαίτερα δύσκολο να αντιμετωπιστεί και είναι σημαντικό να δίνονται σωστές αρχικές τιμές στα συναπτικά βάρη. Γενικά, το να καταλήξει ο

αλγόριθμος σε τοπικό ελάχιστο εξαρτάται από το πρόβλημα, και η πιθανότητα για κάτι τέτοιο μπορεί να φτάσει το 10%.

Ένα άλλο μειονέκτημα του αλγορίθμου, είναι η αργή σύγκλιση. Έχουν όμως αναπτυχθεί διάφορες μέθοδοι με στόχο την επιτάχυνση όπως η χρήση της ορμής (momentum), η αναζήτηση σε μια ευθεία γραμμή (line search), η συζυγής κατάβαση δυναμικού (conjugate gradient) και άλλες.

2.1.4 ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ

Τα δίκτυα MLP που εκπαιδεύονται με τον αλγόριθμο του back-propagation, είναι ο πιο συνηθισμένος αλγόριθμος νευρωνικών δικτύων για προβλήματα ταξινόμησης προτύπων και εκτίμησης συναρτήσεων. Ενδεικτικά κάποιοι τομείς που μπορούν να εφαρμοστούν τα συγκεκριμένα δίκτυα είναι οι εξής:

- Στην ιατρική (διάγνωση ασθενειών, βιοπληροφορική, κ.λπ.)
- Στους ηλεκτρονικούς υπολογιστές (ασφάλεια, ηλεκτρονικά παιχνίδια, αναγνώριση προτύπων, κ.λπ.)
- Στην βιομηχανία (βιομηχανικός έλεγχος, ρομποτική, κ.λπ.)
- Στην οικονομία και το εμπόριο (πρόβλεψη οικονομικών μεγεθών, εκτίμηση αξίας ακινήτων, κ.λπ.).

2.2 ΔΙΚΤΥΑ ΣΥΝΑΡΤΗΣΕΩΝ ΒΑΣΗΣ ΑΚΤΙΝΙΚΟΥ ΤΥΠΟΥ (RBFN)

Τα δίκτυα συναρτήσεων βάσης ακτινικού τύπου, ή απλά τα δίκτυα RBF, ανήκουν στη κατηγορία των τεχνητών νευρωνικών δικτύων από τα τέλη της δεκαετίας του 80, παρότι έχουν τις ρίζες τους σε παλιότερες τεχνικές αναγνώρισης προτύπων. Έχει δειχθεί πως τα δίκτυα αυτά, τα οποία αποτελούνται από τρία μόνο στρώματα, μπορούν να προσεγγίσουν οποιαδήποτε συνεχή συνάρτηση.

2.2.1 ΣΥΝΑΡΤΗΣΕΙΣ ΒΑΣΗΣ ΑΚΤΙΝΙΚΟΥ ΤΥΠΟΥ

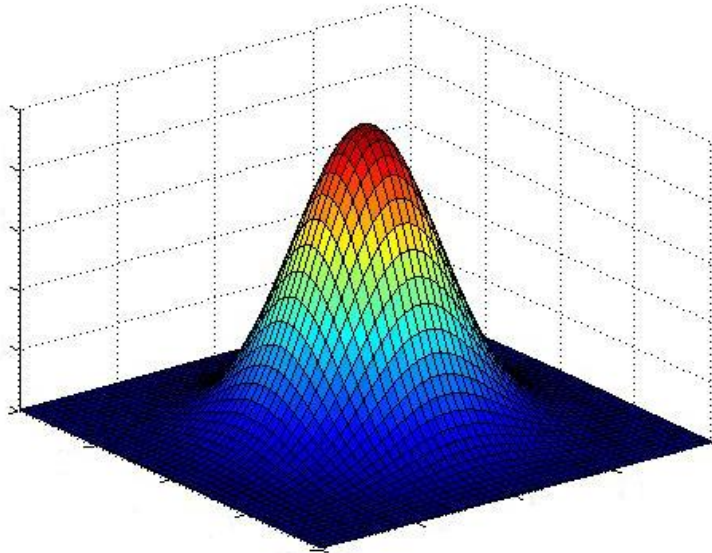
Λέγοντας **συνάρτηση βάσης ακτινικού τύπου (radial function)**, εννοούμε μια συνάρτηση $\varphi(x)$ για την οποία υπάρχει κάποιο διάνυσμα c το οποίο καλούμε **κέντρο (center or centroid)**, και η τιμή της συνάρτησης εξαρτάται μόνο από την απόσταση του x από το κέντρο αυτό (Ρίζος, 1996). Δηλαδή:

$$\varphi(x) = \varphi(\|x - c\|)$$

όπου με τη νόρμα, εννοούμε την ευκλείδεια απόσταση.

Κάθε κρυφός νευρώνας, υλοποιεί διαφορετική συνάρτηση με δικό του κέντρο c_i και εύρος συνάρτησης σ_i . Η πιο συχνά χρησιμοποιούμενη συνάρτηση βάσης ακτινικού τύπου στα δίκτυα RBF είναι η **συνάρτηση Gauss**:

$$\varphi(x) = e^{-\frac{\|x-c\|^2}{\sigma^2}}$$



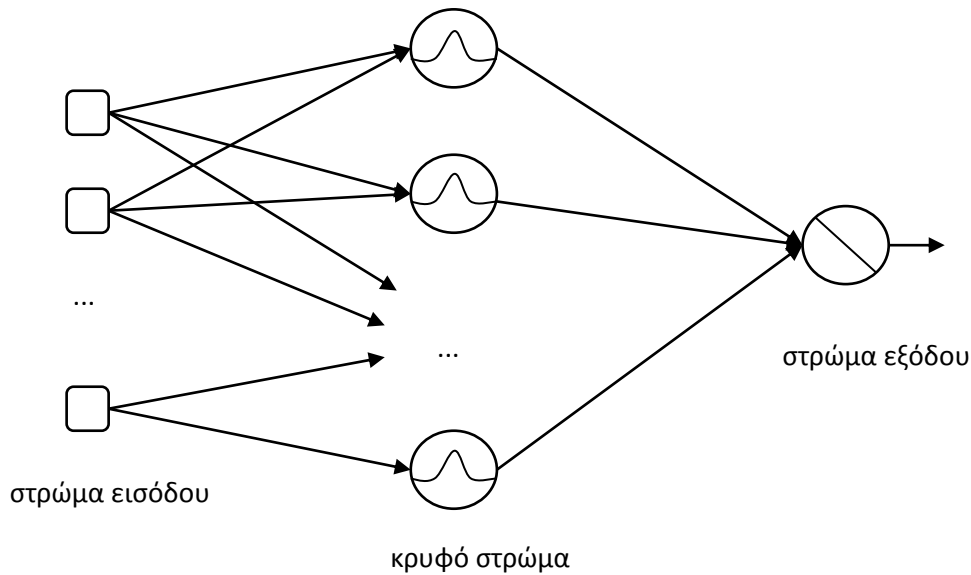
Γράφημα 2.2.1.1: Η συνάρτηση Gauss

Η συνάρτηση Gauss είναι «τοπική» με την έννοια ότι, για τιμές εισόδου σε ένα νευρώνα, που είναι μακριά από το κέντρο του, η αλλαγή που γίνεται στις παραμέτρους του νευρώνα είναι πολύ μικρές.

2.2.2 ΑΡΧΙΤΕΚΤΟΝΙΚΗ ΔΙΚΤΥΩΝ RBF

Στα δίκτυα RBF οι συναρτήσεις ακτινικού τύπου, ενσωματώνονται σε ένα εμπρόσθιας τροφοδότησης νευρωνικό δίκτυο δύο στρωμάτων, το στρώμα εισόδου και το στρώμα εξόδου. Ανάμεσα στα στρώματα αυτά, περιέχεται **ένα μόνο κρυφό στρώμα**, το οποίο αποτελείται από νευρώνες που υλοποιούν τις ακτινικού τύπου συναρτήσεις.

Η τοπολογία των δικτύων συναρτήσεων ακτινικής βάσης, που χρησιμοποιούνται για την αναγνώριση προτύπων, είναι όπως φαίνεται στο σχήμα:



Διάγραμμα 2.2.1.1: Τοπολογία RBFN

Οι εισοδοί του δικτύου, προωθούνται από το στρώμα εισόδου στους νευρώνες του κρυφού στρώματος, οι οποίοι υλοποιούν συναρτήσεις ακτινικής βάσης. Στις συνδέσεις του στρώματος εισόδου με το κρυφό στρώμα, δεν υπάρχουν συναπτικά βάρη. Στη συνέχεια τα σήματα στις εξόδους των νευρώνων του κρυφού στρώματος συνδυάζονται με συναπτικά βάρη, μέσω μιας γραμμικής συνάρτησης ενεργοποίησης στο στρώμα εξόδου.

Τα δίκτυα RBF, υλοποιούν μια μη γραμμική χαρτογράφηση εισόδων-εξόδων, συνδυάζοντας τις μη γραμμικές εξόδους των νευρώνων στο κρυφό στρώμα, σύμφωνα με την εξίσωση (Ταο, 1993):

$$y = \sum_{i=1}^m w_i \varphi_i(x),$$

Όπου x είναι το διάνυσμα εισόδου, y το διάνυσμα εξόδου και w_i είναι τα συναπτικά βάρη με τα οποία συνδυάζονται γραμμικά οι εξοδοί.

Στο κρυφό στρώμα, οι παράμετροι που πρέπει να εκπαιδευτούν είναι τα κέντρα c_i και τα εύρη σ_i των συναρτήσεων φ_i . Στο στρώμα εξόδου θα πρέπει να εκπαιδευτούν τα

συναπτικά βάρη w_i . Τα δύο προβλήματα εκπαίδευσης (των παραμέτρων c_i, σ_i και των συναπτικών βαρών) αντιμετωπίζονται ξεχωριστά.

Η φιλοσοφία της ανάπτυξης των δικτύων RBF, και βασικό πλεονέκτημα τους έναντι των δικτύων MLP, είναι ότι δεν γενικεύουν σε μεγάλο βαθμό τη κατηγοριοποίηση των προτύπων σε περίπτωση που δέχονται σαν είσοδο πρότυπα εκτός κάποιας κατηγορίας. Ένα MLP δίκτυο, μπορεί να εκπαιδευτεί για να έχει μεγάλη ακρίβεια στη κατηγοριοποίηση από ένα σετ γνωστών κατηγοριών, αλλά ταυτόχρονα κατηγοριοποιεί κάθε πρότυπο που δεν ανήκει σε κάποια κατηγορία εκπαίδευσης. Αυτό δημιουργεί διάφορα προβλήματα στις πραγματικές εφαρμογές.

Αντίθετα, ένα RBF δίκτυο με kernel τη συνάρτηση Gauss, εκπαιδεύεται βάση της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας των προτύπων, αντί να διαιρεί το χώρο όπως τα MLP δίκτυα. Έτσι όταν αντιμετωπίζουν ένα πρότυπο εκτός κάποιας κατηγορίας, είναι πιθανόν να το εντάξουν σε κάποια κατηγορία αγνώστων. Γενικά μπορούμε να πούμε ότι έχουν λιγότερη ανοχή στις λάθος τιμές, από τα δίκτυα MLP.

2.2.3 ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΔΙΚΤΥΟΥ

Ένας γενικός αλγόριθμος κατασκευής ενός δικτύου RBF είναι ο εξής:

1. Χρησιμοποίησε τα εισερχόμενα δεδομένα εκπαίδευσης ως κέντρα των RBF kernels.
2. Έστω χρησιμοποιούμε σαν kernel τη συνάρτηση Gauss. Προσδιόρισε τα εύρη των συναρτήσεων σ_i , είτε με δοκιμές στο σετ δεδομένων για καλύτερα αποτελέσματα, είτε χρησιμοποιώντας κάποιο είδος εσωτερικής απόστασης πυρήνα.
3. Βρες τα βέλτιστα συναπτικά βάρη w_i , επιλύοντας ένα πρόβλημα ελαχιστοποίησης του μέσου τετραγωνικού σφάλματος.

Όταν όλα τα δεδομένα εκπαίδευσης που εισάγονται, «απομνημονευθούν» στα kernels του δικτύου, και το πρόβλημα ελαχιστοποίησης του μέσου τετραγωνικού σφάλματος

καθοριστεί, το RBF δίκτυο μπορεί να υλοποιήσει τη χαρτογράφηση όπως και στα πρότυπα που του παρουσιάστηκαν.

2.2.4 ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΡΥΦΟΥ ΣΤΡΩΜΑΤΟΣ – ΜΕΘΟΔΟΣ Κ-ΜΕΣΩΝ

Έχουν προταθεί διάφορες μέθοδοι για την εκπαίδευση των νευρώνων του κρυφού στρώματος, ο πιο διαδεδομένος ωστόσο είναι η μέθοδος των **k-μέσων (k-means clustering algorithm)**.

Ο αλγόριθμος αυτός είναι ο απλούστερος αλγόριθμος εκπαίδευσης χωρίς επίβλεψη που λύνει το πρόβλημα της ομαδοποίησης. Δοθέντος ενός σετ δεδομένων και ενός συγκεκριμένου αριθμού κλάσεων (ας υποθέσουμε k κλάσεις) ο οποίος δίνεται εκ των προτέρων. Η κεντρική ιδέα είναι να καθοριστούν k κέντρα, ένα για κάθε κλάση, τα οποία στα δίκτυά μας έχουν το ρόλο του κέντρου των νευρώνων στο κρυφό στρώμα. Η αρχική τοποθέτηση των κέντρων θα πρέπει να γίνει προσεκτικά, αφού διαφορετική τοποθέτηση κάποιου κέντρου, προκαλεί διαφορετικό αποτέλεσμα. Έτσι η καλύτερη επιλογή είναι να καθοριστούν ως κέντρα, σημεία μακριά το ένα από το άλλο. Στο επόμενο βήμα, κάθε άλλο διάνυσμα του συνόλου τοποθετείτε σε μια κλάση με βάση την απόστασή του από τα κέντρα (στη κλάση της οποίας το κέντρο είναι πιο κοντά από το διάνυσμα). Όταν όλα τα διανύσματα τοποθετηθούν σε κλάσεις, το πρώτο βήμα συμπληρώνεται και γίνεται μια αρχική ομαδοποίηση. Στη συνέχεια υπολογίζονται ξανά τα σημεία που αποτελούν τα κέντρα των κλάσεων. Αυτά πλέον είναι τα κέντρα βάρους των κλάσεων που δημιουργήθηκαν στο προηγούμενο βήμα. Και πάλι αφού τα κέντρα έχουν μεταβληθεί, τα υπόλοιπα διανύσματα του συνόλου των δεδομένων ενδέχεται να αλλάξουν κλάση με βάση την απόσταση από τα κέντρα. Έτσι έχει δημιουργηθεί μια επαναληπτική διαδικασία, η οποία οδηγεί στη συνεχόμενη αλλαγή των k κέντρων και την ομαδοποίηση των δεδομένων, μέχρι τη σταθεροποίηση αυτών και τη τελική σύσταση των ομάδων.

Γενικά, ο αλγόριθμος των k-μέσων ελαχιστοποιεί μια συνάρτηση κόστους, στη προκειμένη περίπτωση μια συνάρτηση τετραγωνικού σφάλματος:

$$J = \sum_{j=1}^k \sum_{i=1}^n \|x_i^{(j)} - c_j\|^2,$$

όπου $\|x_i^{(j)} - c_j\|^2$ είναι κάποιο μέτρο απόστασης μεταξύ ενός διανύσματος του σετ δεδομένων $x_i^{(j)}$ και κάποιου κέντρου c_j .

Συνοπτικά ο αλγόριθμος αποτελείται από τα εξής βήματα:

1. Όρισε k σημεία των δεδομένων ως αρχικούς αντιπροσώπους των ομάδων.
2. Τοποθέτησε το κάθε διάνυσμα από τα δεδομένα, στην ομάδα της οποίας το κέντρο είναι το πλησιέστερο σ' αυτό.
3. Όταν όλα τα διανύσματα ομαδοποιηθούν, υπολόγισε ξανά τα k κέντρα.
4. Επανάλαβε τα βήματα 2 και 3 μέχρι τα κέντρα να σταματήσουν να μετακινούνται. Έτσι δημιουργείται ένας διαχωρισμός των διανυσμάτων σε ομάδες των οποίων η μετρική που ελαχιστοποιείται, μπορεί να υπολογιστεί.

Στα RBF δίκτυα που εξετάζουμε, η παράμετρος του εύρους στους νευρώνες του κρυφού δικτύου δεν υπολογίζεται άμεσα από τον πιο πάνω αλγόριθμο, αλλά λαμβάνεται ως το γενικότερο μέγεθος της περιοχής του χώρου που λαμβάνει η κάθε ομάδα. Όταν όλα τα κέντρα των κρυφών νευρώνων υπολογιστούν, το εύρος του i-οστού κέντρου στο κρυφό στρώμα υπολογίζεται σύμφωνα με την εξίσωση:

$$\sigma_i = \left[\frac{1}{h} \sum_{j=1}^h \sum_{k=1}^n (\|c_{ki} - c_{kj}\|) \right]^{\frac{1}{2}}$$

Όπου c_{ki}, c_{kj} είναι η k-οστή τιμή των κέντρων του i-οστού και j-οστού νευρώνα του κρυφού στρώματος αντίστοιχα, και h ο αριθμός των κρυφών νευρώνων.

2.2.5 ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΕΞΩΤΕΡΙΚΟΥ ΣΤΡΩΜΑΤΟΣ

Αφού με κάποια μέθοδο εκπαιδευτεί το κρυφό στρώμα, στη συνέχεια εκπαιδεύεται το μοναδικό στρώμα εξόδου. Η εκπαίδευση του στρώματος αυτού ακολουθεί διαφορετική διαδικασία από το προηγούμενο. Έστω a_1, a_2, \dots, a_k οι τιμές ενεργοποίησης που έχουν σαν έξοδο οι νευρώνες του κρυφού στρώματος για κάθε πρότυπο εισόδου. Έχουμε ουσιαστικά ένα πρόβλημα εκπαίδευσης ενός δικτύου με ένα μόνο στρώμα. Έτσι όπως και στα δίκτυα perceptron, η έξοδος του νευρώνα (υποθέτοντας ότι υπάρχει ένας μόνο νευρώνας εξόδου) δίνεται από την εξίσωση:

$$y = \sum_{i=0}^k w_i a_i.$$

Η εκπαίδευση των συναπτικών βαρών γίνεται με βάση την εξίσωση:

$$w_i^{p+1} = w_i^p + \beta(d^p - y^p) * a_i^p$$

Όπου d^p είναι η τιμή στόχου για την έξοδο του διανύσματος προτύπου $a^p = [a_1^p, a_2^p, \dots, a_k^p]^T$.

Αντίστοιχα οι εξισώσεις αν έχουμε περισσότερους από έναν νευρώνα εξόδου.

2.2.6 ΚΑΝΟΝΙΚΟΠΟΙΗΣΗ ΤΟΥ RBFN

Ένα πρόβλημα του βασικού δικτύου RBF εντοπίζεται όταν εισέρχονται σ' αυτό δεδομένα μακριά από το σετ εκπαίδευσης, αφού όταν χρησιμοποιείται το γκαουσιανό kernel οι έξοδοι μικραίνουν. Τα δίκτυα RBF βασίζονται στη μνήμη και την οικειότητα και γι' αυτό όταν έχουν να αντιμετωπίσουν καταστάσεις που τους είναι ξένες, μένουν απαθή κατατάσσοντας τα «ξένα» δεδομένα σε ομάδες «αγνώστων». Αν όμως το δίκτυο χαρακτηρίσει πολλά δεδομένα ως «άγνωστα» υπάρχει κίνδυνος να

χαθεί κάποια ομάδα προτύπων που μπορεί να μας ενδιαφέρει, ειδικά όταν τα δεδομένα εκπαίδευσης δεν διαχωρίζουν επαρκώς το χώρο των προτύπων.

Έτσι σε πρακτικές εφαρμογές, είναι επιθυμητό να έχουμε κάποιες «εκπαιδευμένες προβλέψεις» (Ταο, 1993). Αυτό μπορεί να επιτευχθεί χρησιμοποιώντας την επιλογή της κανονικοποίησης. Οι εξισώσεις για την έξοδο του δικτύου γίνονται:

$$y = \sum_{i=1}^m \frac{w_i \varphi_i(x)}{sum(x)}$$

$$sum(x) = \sum_{i=1}^m \varphi_i(x)$$

Με τη κανονικοποίηση, το RBF δίκτυο ανταποκρίνεται πιο ρεαλιστικά σε ξένες καταστάσεις, όπως για παράδειγμα τιμές μακριά από τα δεδομένα εκπαίδευσης, ενώ εξακολουθεί να παρέχει το σχετικό μέτρο εμπιστοσύνης το οποίο εμπεριέχεται στον όρο του $sum(x)$. Το δίκτυο έτσι γενικεύει ομαλά με βάση τον κοντινότερο γείτονα.

2.2.7 ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ RBFN

Τα δίκτυα συναρτήσεων βάσης ακτινικού τύπου έχουν αρκετά εκλυστικές ιδιότητες όπως η προσέγγιση συναρτήσεων, η παρεμβολή, η ομαδοποίηση και ο εντοπισμός. Αυτές οι ιδιότητες κάνουν τα δίκτυα αυτά ελκυστικά σε μια ποικιλία περιοχών εφαρμογής όπως:

- Τηλεπικοινωνίες
- Αναγνώριση σήματος και εικόνας
- Μοντελοποίηση χαοτικών χρονοσειρών
- Αναγνώριση ομιλίας
- Μοντελοποίηση τρισδιάστατων αντικειμένων
- Μηχανικός έλεγχος
- Αποκατάσταση εικόνας

- Συγχώνευση δεδομένων

Κ.λπ.

2.2.8 ΔΙΑΦΟΡΕΣ ΔΙΚΤΥΩΝ MLP ΚΑΙ RBFN

Τα δίκτυα perceptron πολλών στρωμάτων (MLP) και τα δίκτυα συναρτήσεων ακτινικού τύπου (RBF) είναι οι δύο πιο συχνά χρησιμοποιούμενοι τύποι νευρωνικών δικτύων εμπρόσθιας τροφοδότησης. Παρότι δεν αναφέρεται συχνά στη βιβλιογραφία, τα δύο δίκτυα έχουν αρκετά κοινά στοιχεία. Πάντα μπορεί να βρεθεί ένα δίκτυο RBF που να μιμείται τη συμπεριφορά ενός δοσμένου δικτύου MLP, και αντίστροφα.

Η βασική διαφορά των δύο είναι ο τρόπος με τον οποίο οι κρυφοί νευρώνες συνδυάζουν τις εξόδους των προηγούμενων στρωμάτων στο δίκτυο. Συνοπτικά κάποιες από τις διαφορές των δύο τύπων νευρωνικών δικτύων είναι οι εξής:

1. Στα δίκτυα RBF οι νευρώνες του κρυφού στρώματος διαφέρουν δομικά και λειτουργικά από τους νευρώνες του στρώματος εξόδου. Οι πρώτοι μέσω συναρτήσεων ακτινικής βάσης υλοποιούν μη γραμμικούς μετασχηματισμούς των εισόδων σε χώρους μεγαλύτερης διάστασης, ενώ οι δεύτεροι υλοποιούν γραμμικούς μετασχηματισμούς. Στη περίπτωση των MLP δικτύων δεν συμβαίνει κάτι αντίστοιχο, αλλά όλοι οι νευρώνες του δικτύου εφαρμόζουν κοινή συνάρτηση ενεργοποίησης.
2. Σε όλες τις συνδέσεις των διαφόρων στρωμάτων στα δίκτυα MLP υπάρχουν συναπτικά βάρη τα οποία συνδυάζονται με τις εισόδους των νευρώνων. Στα δίκτυα RBF δεν υπάρχουν συναπτικά βάρη στις συνδέσεις μεταξύ των εισόδων και του κρυφού στρώματος, παρά μόνο μεταξύ του κρυφού στρώματος και των νευρώνων εξόδου.
3. Τα δίκτυα RBF, όπως έχουμε δει, έχουν ένα μόνο κρυφό στρώμα του οποίου η συνάρτηση ενεργοποίησης βασίζεται στην ευκλείδεια απόσταση μεταξύ του

διανύσματος εισόδου και του κέντρου της συνάρτησης του νευρώνα. Αντίθετα, τα δίκτυα MLP μπορούν να αποτελούνται από ένα ή περισσότερα κρυφά στρώματα και το όρισμα της συνάρτησης ενεργοποίησης των νευρώνων είναι το εσωτερικό γινόμενο της εισόδου και των συναπτικών βαρών που αφορούν τον συγκεκριμένο νευρώνα.

4. Τα δίκτυα RBF δεν έχουν κάτι που να αντιστοιχεί ακριβώς στον όρο της μεροληψίας όπως στα MLP δίκτυα. Παρόλο που κάποιοι τύποι δικτύων RBF έχουν το εύρος που σχετίζεται με κάθε κρυφό νευρώνα ξεχωριστά ή με όλο το κρυφό στρώμα, αλλά αντί να προστίθεται στη συνάρτηση ενεργοποίησης όπως η μεροληψία, διαχωρίζει την ευκλείδεια απόσταση.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3

3.1 ΑΝΑΛΥΣΗ ΕΠΙΒΙΩΣΗΣ

3.1.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Ο όρος **ανάλυση επιβίωσης (survival analysis)** χρησιμοποιείται για να περιγράψει τη περιοχή εκείνη της στατιστικής που ασχολείται με **δεδομένα διάρκειας ζωής**. Τα δεδομένα αυτά αποτελούν δεδομένα που αφορούν το χρόνο μέχρι να συμβεί ένα γεγονός, όπως για παράδειγμα ο θάνατος ενός ασθενή, η ανάπτυξη κάποιου όγκου, η αστοχία κάποιας δοκού κ.λπ. Η ανάλυση επιβίωσης χρησιμοποιείται ευρέως σε βιοϊατρικές εφαρμογές και κλινικές μελέτες όπου ενδέχεται να συγκρίνονται δύο ή περισσότερες θεραπείες. Ο χρόνος που παρατηρείται στις περιπτώσεις αυτές, μπορεί να αφορά τη διάγνωση κάποιας ασθένειας, την ανταπόκριση του ασθενή στη θεραπεία ή την εμφάνιση κάποιας παρενέργειας.

Για τα δεδομένα διάρκειας ζωής δεν εφαρμόζονται οι συνήθεις στατιστικές μέθοδοι που χρησιμοποιούνται στην ανάλυση δεδομένων. Ένας λόγος για τον οποίο συμβαίνει αυτό, αποτελεί το γεγονός ότι τα δεδομένα επιβίωσης γενικά δεν έχουν συμμετρικές κατανομές. Ένα τυπικό ιστόγραμμα αυτού του είδους δεδομένων, θα έδειχνε μια μακρύτερη «ουρά» στο δεξί του μέρος, όπου και θα περιέχονται οι περισσότερες παρατηρήσεις. Έτσι δεν θα ήταν λογικό να θεωρήσουμε ότι τα δεδομένα ακολουθούν κανονική κατανομή.

3.1.2 ΑΠΟΚΟΜΜΕΝΕΣ ΠΑΡΑΤΗΡΗΣΕΙΣ

Ένα άλλο χαρακτηριστικό των δεδομένων επιβίωσης και το οποίο δεν επιτρέπει στις κλασικές στατιστικές μεθόδους να εφαρμοστούν σ' αυτά, είναι το γεγονός ότι πολλές φορές τα δεδομένα αποτελούνται από ένα μεγάλο αριθμό αποκομμένων παρατηρήσεων (censored data). Αποκομμένες ονομάζονται οι παρατηρήσεις εκείνες

για τις οποίες δεν έχει καταγραφεί η ακριβής χρονική στιγμή για την οποία επέρχεται το αναμενόμενο γεγονός.

Αυτό συμβαίνει συχνά σε περιπτώσεις όπου για παράδειγμα ο στόχος είναι η μελέτη του χρόνου θανάτου κάποιων ασθενών σε μια κλινική μελέτη. Η διάρκεια κατά την οποία καταγράφονται οι χρόνοι επιβίωσης, για λειτουργικούς λόγους, είναι προκαθορισμένη. Έτσι, μετά το πέρας της διάρκειας της μελέτης, ενδέχεται πολλοί από τους ασθενείς να είναι ακόμα εν ζωή, με αποτέλεσμα για τους ασθενείς αυτούς να μην λαμβάνεται η μέτρηση της χρονικής στιγμής του θανάτου τους, παρά μόνο η χρονική στιγμή στην οποία ήταν ακόμα εν ζωή και οπότε ο θάνατος επέρχεται σε κάποιο χρόνο πέραν του σημείου αυτού.

Μια άλλη περίπτωση στη οποία μπορεί να έχουμε αποκομμένη πληροφορία, είναι όταν κάποια παρατηρούμενη μονάδα χαθεί από τη μελέτη, όπως για παράδειγμα όταν κάποιος ασθενής μετακομίζει σε άλλη χώρα με αποτέλεσμα να καθιστά αδύνατη την καταγραφή του χρόνου θανάτου του (lost to follow-up). Εντούτοις παραμένει στη μελέτη η καταγραφή της τελευταίας χρονικής στιγμής που ο ασθενής αυτός ήταν γνωστό ότι ήταν εν ζωή. Επίσης κάποιες φορές μπορεί να θεωρηθεί αποκομμένη παρατήρηση ο χρόνος θανάτου ενός ασθενή, όταν ο θάνατος προέλθει από κάποια αιτία που δεν σχετίζεται με τη μελέτη, όπως για παράδειγμα κάποιο τροχαίο ατύχημα ή λόγω της εμφάνισης κάποιας άλλης ασθένειας η οποία όμως δεν σχετίζεται σε κανένα βαθμό με την υπο εξέταση ασθένεια.

Γενικά λοιπόν, ένας ασθενής εισέρχεται στη μελέτη τη χρονική στιγμή t_0 και πεθαίνει τη στιγμή $t_0 + t$. Όταν όμως το t είναι άγνωστο, είτε γιατί ο ασθενής μετά το πέρας της μελέτης είναι ακόμα εν ζωή, είτε γιατί χάθηκε από τη μελέτη, καταγράφεται η τελευταία χρονική στιγμή $t + c$ κατά την οποία είναι γνωστό ότι ο ασθενής ζει. Ο χρόνος c αποτελεί **δεξιά αποκομμένη παρατήρηση**, αφού εκφράζει κάποια προηγούμενη χρονική στιγμή από τη πραγματική και άγνωστη χρονική στιγμή του θανάτου.

Όταν μιλάμε για αποκομμένα δεδομένα, σχεδόν πάντα εννοούμε δεξιά αποκομμένα δεδομένα. Παρόλ'αυτά υπάρχουν περιπτώσεις όπου υπάρχουν και **αριστερά αποκομμένες παρατηρήσεις**. Περιπτώσεις αυτών, εμφανίζονται για παράδειγμα σε μια μελέτη που καταγράφεται ο χρόνος υποτροπής κάποιου καρκίνου σε ένα σύνολο

ασθενών στους οποίους ο καρκίνος έχει αφαιρεθεί χειρουργικά. Η εξέταση για τον έλεγχο αυτό γίνεται τρεις μήνες μετά το πέρας της εγχείρησης. Έτσι αν στο σημείο αυτό ο καρκίνος κάποιων ασθενών υποτροπιάσει, δεν γνωρίζουμε την ακριβή χρονική στιγμή που το συμβάν επήλθε, αφού ενδέχεται να έγινε νωρίτερα στο διάστημα των τριών μηνών. Τέλος, υπάρχει και η περίπτωση της **αποκοπής εντός διαστήματος**, στην οποία γνωρίζουμε μόνο ένα χρονικό διάστημα στο οποίο επήλθε το γεγονός που θέλουμε να καταγράψουμε.

Η σπουδαιότητα του φαινομένου της αποκοπής δεδομένων είναι σημαντική σε βιοϊατρικές εφαρμογές. Θα μπορούσαμε απλά να αποκλείσουμε τα δεδομένα της μορφής αυτής από κάποια μελέτη κάνοντας την επεξεργασία των δεδομένων απλούστερη, αλλά κάτι τέτοιο εκτός του ότι θα μείωνε κατά πολύ τη βάση δεδομένων μας, θα επηρέαζε σημαντικά την αξιοπιστία των αποτελεσμάτων. Επίσης, οι αποκομμένες παρατηρήσεις εμπεριέχουν σημαντικές πληροφορίες που είναι χρήσιμες σε μελέτες ανάλυσης επιβίωσης. Βασική όμως προϋπόθεση για την επεξεργασία των δεδομένων αυτών, είναι ότι η αποκοπή πρέπει να είναι ανεξάρτητη. Δηλαδή το γεγονός ότι μια μονάδα είναι αποκομμένη δεν πρέπει να σχετίζεται με τη πιθανότητα επιβίωσης σε κάποιο χρόνο. Για παράδειγμα, όταν κάποιος ασθενής αποχωρεί από τη μελέτη για κάποιο προσωπικό του λόγο άσχετο με την κατάσταση της υγείας του, τότε η αποκοπή είναι ανεξάρτητη. Όταν όμως αποχωρεί λόγω επιδείνωσης της κατάστασης του και αναγκαστικής μετακόμισης του σε άλλο μέρος, τότε η αποκοπή δεν είναι τυχαία.

Η ανεξάρτητη αποκοπή δεδομένων μπορεί να γίνει με δύο διαφορετικούς μηχανισμούς. Ο πιο συνηθισμένος είναι όταν η χρονική διάρκεια της παρακολούθησης των μονάδων σε μια μελέτη επιβίωσης είναι προκαθορισμένη, με αποτέλεσμα οι μονάδες στις οποίες δεν επήλθε το αναμενόμενο γεγονός μετά το πέρας του χρόνου αυτού να αποτελούν αποκομμένες παρατηρήσεις (Αποκοπή Τύπου I). Ένας άλλος μηχανισμός αποκοπής είναι όταν η χρονική διάρκεια παρακολούθησης δεν είναι προκαθορισμένη, αλλά διακόπτεται όταν το αναμενόμενο γεγονός συμβεί για προκαθορισμένο αριθμό μονάδων. Έτσι οι υπόλοιπες μονάδες της μελέτης δίνουν αποκομμένα δεδομένα (Αποκοπή Τύπου II).

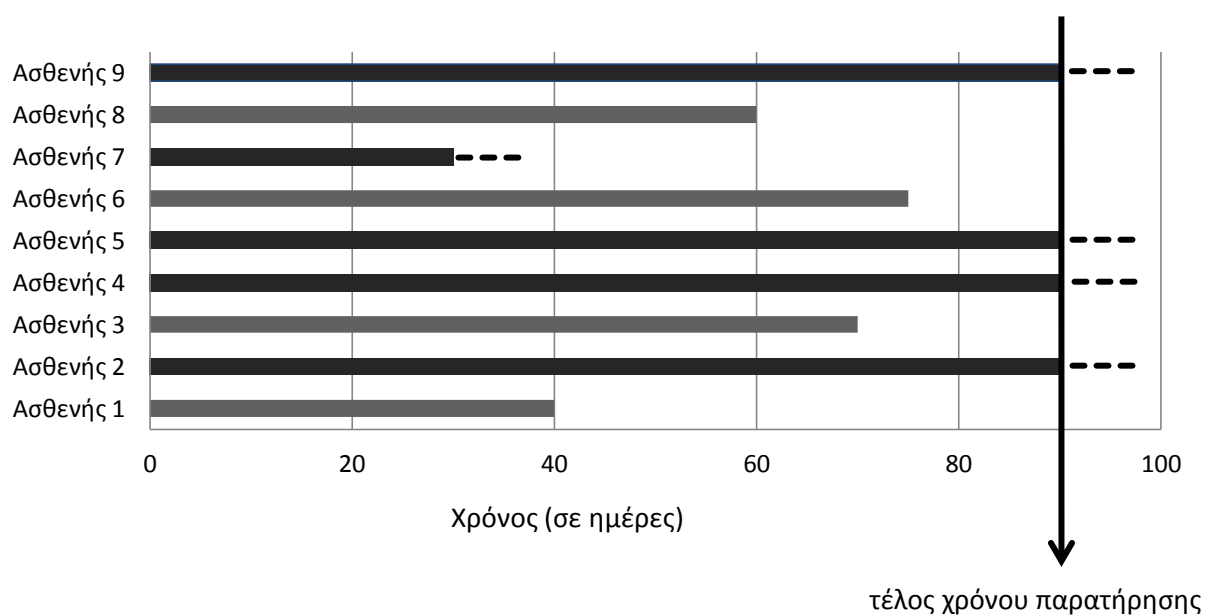
3.1.3 ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ ΑΠΟΚΟΠΗΣ ΔΕΔΟΜΕΝΩΝ

Έστω ο Πίνακας 3.1.3.1, που δίνει το χρόνο (σε μέρες) μέχρι την εμφάνιση κάποιας επιπλοκής σε 9 ασθενείς που υποβλήθηκαν σε κάποια θεραπεία. Η παρακολούθηση των ασθενών για τη μελέτη, σταματά σε 90 μέρες μετά την έναρξη της θεραπείας.

Ασθενής	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Χρόνος	40	90*	70	90*	90*	75	30*	60	90*

Πίνακας 3.1.3.1: Χρόνος (σε μέρες) μέχρι την εμφάνιση επιπλοκής

Οι ασθενείς 2,4,5 και 9, δεν εμφάνισαν κάποια επιπλοκή μετά το πέρας των 90 ημερών, άρα αποτελούν δεξιά αποκομμένες παρατηρήσεις, και σημειώνονται με αστερίσκο. Ο ασθενής 7, 30 ημέρες μετά τη θεραπεία, αποχωρεί από τη μελέτη για προσωπικούς λόγους. Έτσι η μέτρηση των 30 ημερών για τον συγκεκριμένο αποτελεί επίσης αποκομμένη παρατήρηση αφού δεν γνωρίζουμε το πότε εμφανίζει επιπλοκή, παρά μόνο το γεγονός ότι μέχρι και τη 30ή ημέρα δεν έχει εμφανίσει.



Γράφημα 3.1.3.1: Χρόνος (σε μέρες) παρατήρησης των ασθενών

3.1.4 ΒΑΣΙΚΕΣ ΕΝΟΙΕΣ

Στην ανάλυση επιβίωσης υπάρχουν δύο βασικές συναρτήσεις, η συνάρτηση επιβίωσης (survival function) και η συνάρτηση διακινδύνευσης (hazard function), ο ορισμός των οποίων δίνεται παρακάτω (Collett, 2003).

Έστω συμβολίζουμε με $T > 0$ τον χρόνο επιβίωσης μιας υπό μελέτης μονάδας t . Ο χρόνος T ανάλογα με το πρόβλημα μπορεί να εκφράζει για παράδειγμα τη διάρκεια παραμονής ενός ασθενή στο νοσοκομείο, το χρόνο μέχρι την εμφάνιση κάποιου όγκου σε έναν ασθενή ή το ασκούμενο φορτίο σε μια δοκό της οποίας η αντοχή εξετάζεται κ.λπ. Η μεταβλητή T μπορεί να πάρει οποιαδήποτε μη-αρνητική τιμή, και έτσι τη καλούμε τυχαία μεταβλητή η οποία σχετίζεται με το χρόνο επιβίωσης της μονάδας t . Έστω $f(t)$ η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας (σ.π.π.) της T . Η συνάρτηση κατανομής (distribution function) της T είναι τότε:

$$F(t) = P[T \leq t] = \int_0^t f(u) du$$

και εκφράζει τη πιθανότητα ο χρόνος επιβίωσης να είναι μικρότερος ή ίσος από μια τιμή t .

Ονομάζουμε **συνάρτηση επιβίωσης (survival function) $S(t)$** , μια συνάρτηση η οποία εκφράζει τη πιθανότητα ο χρόνος επιβίωσης να είναι μεγαλύτερος από μια τιμή t . Δηλαδή θα έχουμε:

$$S(t) = P[T > t] = 1 - F(t) = \int_t^{\infty} f(u) du.$$

Και επίσης έχουμε:

$$f(t) = \frac{d}{dt} F(t) = -\frac{d}{dt} S(t)$$

Μια άλλη πολύ βασική συνάρτηση στην ανάλυση επιβίωσης, είναι η **συνάρτηση διακινδύνευσης (hazard function) $h(t)$** , η οποία εκφράζει τον κίνδυνο να επέλθει η διακοπή σε κάποιο χρόνο t . Είναι δηλαδή η δεσμευμένη πιθανότητα να πεθάνει μια

μονάδα σε χρόνο t , δεδομένου ότι έχει επιβιώσει μέχρι εκείνη τη στιγμή. Η συνάρτηση διακινδύνευσης ορίζεται ως:

$$h(t) = \lim_{\delta t \rightarrow 0} \left\{ \frac{P[t \leq T < t + \delta t | T \geq t]}{\delta t} \right\}$$

Από τη δεσμευμένη πιθανότητα στον πιο πάνω ορισμό παίρνουμε:

$$P[t \leq T < t + \delta t | T \geq t] = \frac{P[t \leq T < t + \delta t]}{P[T \geq t]} = \frac{F(t + \delta t) - F(t)}{S(t)}$$

Όπου $F(t)$ είναι η σ.κ. του T .

Έτσι έχουμε:

$$h(t) = \lim_{\delta t \rightarrow 0} \left\{ \frac{F(t + \delta t) - F(t)}{\delta t} \right\} \left(\frac{1}{S(t)} \right)$$

και επειδή:

$$f(t) = \lim_{\delta t \rightarrow 0} \left\{ \frac{F(t + \delta t) - F(t)}{\delta t} \right\}$$

έχουμε τελικά ότι:

$$h(t) = \frac{f(t)}{S(t)}$$

Μια άλλη χρήσιμη συνάρτηση στην ανάλυση επιβίωσης, είναι η **σωρευτική συνάρτηση διακινδύνευσης (cumulative hazard function) $H(t)$** , η οποία ορίζεται ως:

$$H(t) = \int_0^t h(u) du.$$

Από τα πιο πάνω βρίσκεται η σχέση της συνάρτησης με τα υπόλοιπα μεγέθη:

$$H(t) = \int_0^t \frac{f(u)}{S(u)} du = \int_0^t -\frac{S'(u)}{S(u)} du = [-\ln S(u)]_0^t = -\ln S(t)$$

και άρα:

$$S(t) = \exp\{-H(t)\}.$$

Γενικά, όπως φαίνεται και από τις σχέσεις μεταξύ τους, οι συναρτήσεις: $h(t), f(t), S(t), F(t), H(t)$ είναι μαθηματικά ισοδύναμες, αφού αν ξέρουμε μια από αυτές, οι υπόλοιπες μπορούν να υπολογιστούν.

3.2 ΜΟΝΤΕΛΟ ΑΝΑΛΟΓΙΚΗΣ ΔΙΑΚΙΝΔΥΝΕΥΣΗΣ ΤΟΥ COX

3.2.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Το 1972 ο Άγγλος στατιστικολόγος David Cox, παρουσίασε ένα μοντέλο παλινδρόμησης το οποίο αποτελεί σήμερα ένα από τα πιο διαδεδομένα μοντέλα στην ανάλυση δεδομένων διάρκειας ζωής με αποκομμένες παρατηρήσεις. Το μοντέλο χρησιμοποιείται ευρέως για τον προσδιορισμό διαφορών στην επιβίωση παρατηρούμενων μονάδων που υποβάλλονται σε διάφορες θεραπείες, προγνωστικούς παράγοντες σε κλινικές μελέτες, καθώς και σε πολλά άλλα προβλήματα βιοϊατρικής.

Πολλές φορές στην ανάλυση επιβίωσης, έχουμε να κάνουμε με μεγάλες βάσεις δεδομένων αποτελούμενες από χρόνους επιβίωσης, από τις οποίες χρειάζεται να προσαρμόσουμε ένα παραμετρικό μοντέλο. Όταν όμως τα δεδομένα αφορούν τον άνθρωπο, το γεγονός ότι κάθε πληθυσμός είναι διαφορετικός, καθιστά δύσκολο το να υιοθετήσουμε ένα γνωστό παραμετρικό μοντέλο. Έτσι υποθέτουμε ένα μεγάλο σύνολο παραγόντων που μπορεί να επηρεάζουν την επιβίωση σε κάθε μελέτη, και ακολούθως υπολογίζουμε την επίδραση του κάθε παράγοντα καταλήγοντας έτσι σε ένα μοντέλο που εκφράζει τα δεδομένα.

3.2.2 ΤΟ ΒΑΣΙΚΟ ΜΟΝΤΕΛΟ ΤΟΥ COX

Έστω N ο αριθμός των μονάδων σε μια μελέτη στην οποία χρειάζεται να εκτιμηθεί η επίδραση κάποιων μεταβλητών $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_p)$ στη διάρκεια ζωής τους. Το μοντέλο αναλογικής διακινδύνευσης του Cox υποθέτει ότι η συνάρτηση διακινδύνευσης στο χρόνο t μιας παρατηρούμενης μονάδας i με διάνυσμα συμμεταβλητών $\mathbf{x}'_i = (x_{1i}, x_{2i}, \dots, x_{pi})$ δίνεται από τη σχέση (Marubini, Valecchi, 2004):

$$h(t, \mathbf{x}) = h_0(t)e^{\boldsymbol{\beta}'\mathbf{x}_i} \quad (1)$$

για $i = 1, 2, \dots, N$.

Η διακινδύνευση εξαρτάται από το χρόνο και τις συμμεταβλητές, αλλά μέσω δύο διαφορετικών παραγόντων. Η ποσότητα $h_0(t)$ είναι γνωστή ως βασική συνάρτηση διακινδύνευσης στο χρόνο t . Είναι μια αυθαίρετη συνάρτηση του χρόνου, η οποία θεωρείται σταθερή για όλες τις μονάδες. Για $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ προκύπτει:

$$h(t, \mathbf{0}) = h_0(t)$$

Έτσι, μπορούμε να ορίσουμε την $h_0(t)$ ως τη συνάρτηση διακινδύνευσης ενός ατόμου όταν οι τιμές όλων των συμμεταβλητών είναι μηδενικές ($\mathbf{x}_i = \mathbf{0}$, $i = 1, 2, \dots, p$).

Η δεύτερη ποσότητα στην έκφραση (1), εξαρτάται από τις συμμεταβλητές μέσω ενός διανύσματος p συντελεστών παλινδρόμησης $\boldsymbol{\beta}'$. Οι συντελεστές αυτοί εκφράζουν το πόσο κάθε μια συμμεταβλητή επηρεάζει το τελικό μοντέλο. Βασικός στόχος είναι η εκτίμηση αυτών των συντελεστών αφού έτσι καταλήγουμε στο ποιοι είναι οι σημαντικοί παράγοντες για το μοντέλο που εξετάζουμε. Οι παράγοντες για τους οποίους ο συντελεστής παλινδρόμησης υπολογίζεται ίσος με μηδέν, δεν επηρεάζουν τη διακινδύνευση του μοντέλου, και άρα ούτε την επιβίωση. Επίσης, οι συμμεταβλητές θεωρούνται σταθερές στο χρόνο, όπως άλλωστε συμβαίνει όταν σε μια κλινική μελέτη εκφράζουν ηλικία, φύλο, θεραπεία ή άλλα κλινικά και βιοχημικά χαρακτηριστικά.

Το μοντέλο του Cox δεν αποτελεί ένα πλήρως παραμετρικό μοντέλο και χαρακτηρίζεται ως ημι-παραμετρικό. Αυτό συμβαίνει γιατί το κύριο χαρακτηριστικό του μοντέλου, είναι ότι η μορφή της συνάρτησης $h_0(t)$ δεν καθορίζεται. Καθορίζεται όμως η αναλογία της διακινδύνευσης για δύο οποιεσδήποτε μονάδες με διανύσματα συμμεταβλητών \mathbf{x}_1 και \mathbf{x}_2 αντίστοιχα:

$$\frac{h(t, \mathbf{x}_1)}{h(t, \mathbf{x}_2)} = \frac{h_0(t)e^{\beta' \mathbf{x}_1}}{h_0(t)e^{\beta' \mathbf{x}_2}} = e^{\beta'(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)} \quad (2)$$

Όπως βλέπουμε, η αναλογία αυτή δεν εξαρτάται από τη συνάρτηση $h_0(t)$. Έτσι λέμε ότι το μοντέλο του Cox είναι ένα μοντέλο παλινδρόμησης αναλογικής διακινδύνευσης, αφού υποθέτει ότι το ποσοστό αποτυχίας δύο οποιονδήποτε μονάδων είναι αναλογικό, δεδομένου ότι ο λόγος (2) δεν εξαρτάται από το χρόνο. Αν επιπλέον λογαριθμίσουμε το λόγο αυτό, έχουμε:

$$\ln h(t, \mathbf{x}_1) - \ln h(t, \mathbf{x}_2) = \beta'(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \quad (3)$$

Και άρα φαίνεται ότι το μοντέλο υποθέτει μια σταθερή διαφορά μεταξύ των λογαρίθμων της διακινδύνευσης δύο μονάδων.

Το μοντέλο του Cox κάνει και μια δεύτερη υπόθεση, που συνεπάγει τη χρήση της εκθετικής συνάρτησης για τη σύνδεση των συμμεταβλητών στη διακινδύνευση. Η υπόθεση αυτή είναι ότι οι ανεξάρτητες συμμεταβλητές επηρεάζουν τη διακινδύνευση πολλαπλασιαστικά, ή ισοδύναμα το λογάριθμο της διακινδύνευσης προσθετικά.

Η συνάρτηση επιβίωσης στο μοντέλο του Cox υπολογίζεται ως εξής (Καρώνη, 2005):

Από τη σχέση:

$$H(t) = \int_0^t h(u) du$$

και τον ορισμό της συνάρτησης διακινδύνευσης στο μοντέλο του Cox (1), παίρνουμε:

$$H(t, \mathbf{x}) = \int_0^t h_0(u) e^{\beta' \mathbf{x}_i} du = H_0(t) e^{\beta' \mathbf{x}_i}$$

Και από τη σχέση $S(t) = e^{-H(t)}$ έχουμε:

$$S(t, \mathbf{x}) = e^{-H(t, \mathbf{x})} = e^{-H_0(t) e^{\beta' \mathbf{x}_i}} = \{S_0(t)\} e^{\beta' \mathbf{x}_i}$$

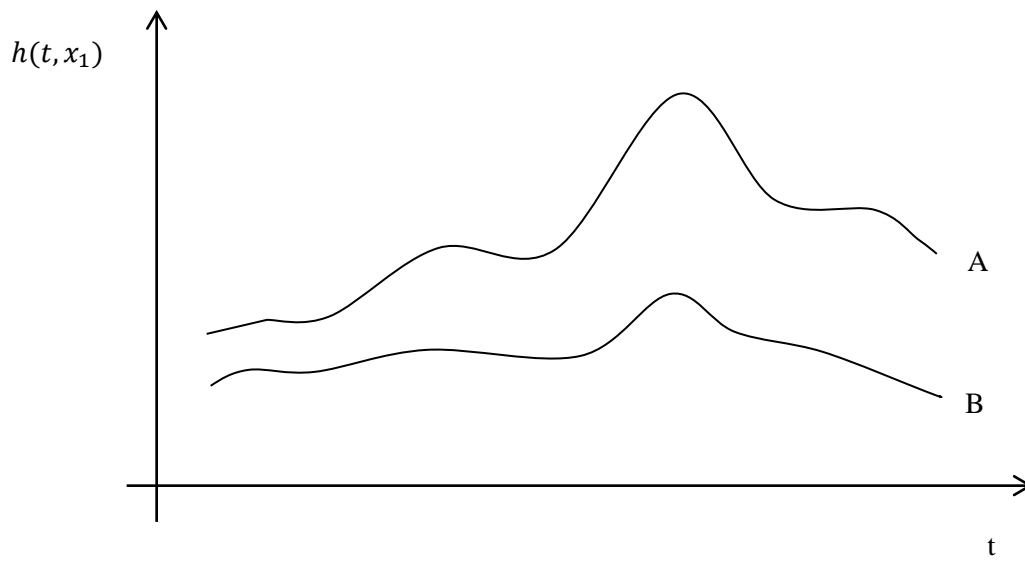
3.2.3 ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΑΝΑΛΟΓΙΚΗΣ ΔΙΑΚΙΝΔΥΝΕΥΣΗΣ ΤΟΥ COX

Έστω διεξάγεται μια κλινική μελέτη στην οποία συγκρίνονται δύο θεραπείες για μια ασθένεια: η καθιερωμένη θεραπεία A και η πειραματική θεραπεία B (Marubini, Valecchi, 2004). Το διάνυσμα x των συμμεταβλητών, περιέχει δείκτες για τις θεραπείες καθώς και άλλες μεταβλητές που αντιπροσωπεύουν άλλα χαρακτηριστικά που ενδέχεται να επηρεάζουν την επιβίωση. Προς το παρόν, έστω ότι το διάνυσμα x περιέχει μια μόνο μεταβλητή x_1 για τις θεραπείες όπου με $x_1 = 0$ υποδηλώνεται η θεραπεία A και με $x_1 = 1$ η θεραπεία B. Το μοντέλο του Cox υποθέτει ότι οι συναρτήσεις διακινδύνευσης είναι $h_0(t)$ και $h_0(t)e^{\beta_1}$ για τους ασθενείς που λαμβάνουν τη θεραπεία A και B αντίστοιχα. Δηλαδή σε κάθε χρονική στιγμή, το ποσοστό θανάτου στην ομάδα B είναι όσο στην ομάδα A πολλαπλασιασμένο με ένα σταθερό παράγοντα e^{β_1} , οποιαδήποτε και αν είναι η μορφή της συνάρτησης $h_0(t)$ ή ισοδύναμα ο λογάριθμος των συναρτήσεων διακινδύνευσης στις δύο ομάδες έχει σταθερή απόσταση β_1 . Αρνητική τιμή του συντελεστή β_1 δείχνει ότι η θεραπεία B έχει μικρότερη πιθανότητα θανάτου, ή ισοδύναμα, μεγαλύτερη πιθανότητα επιβίωσης. Τα παραπάνω φαίνονται και στο Γράφημα 3.2.3.1.

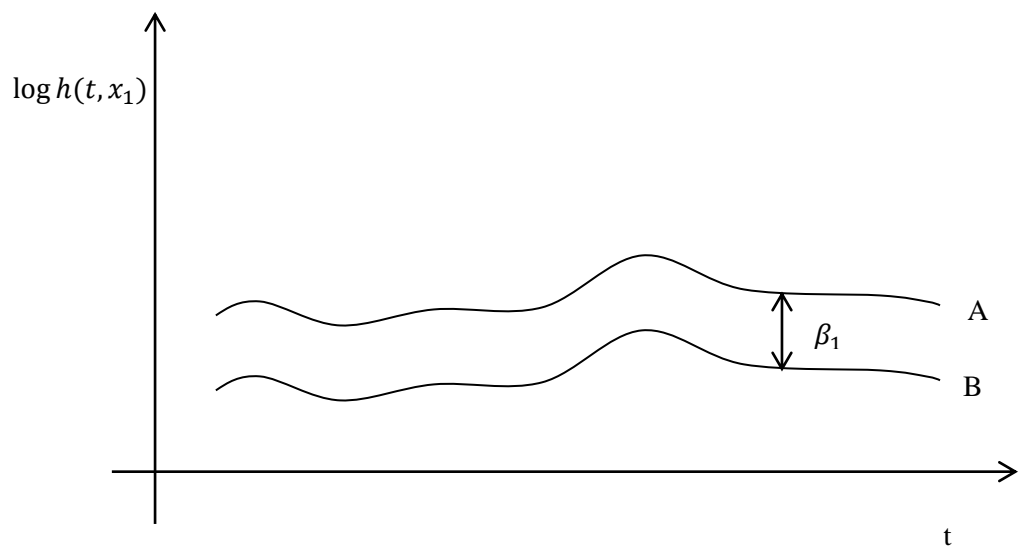
Μοντέλο 1:

Θεραπεία	x_1	$h(t, x_1) = h_0(t)e^{\beta_1 x_1}$
A	0	$h_0(t)$
B	1	$e^{\beta_1 x_1}$

Πίνακας 3.2.3.1



(α)



(β)

Γράφημα 3.2.3.1: (α) συναρτήσεις διακινδύνευσης, (β) ο λογάριθμος της συνάρτησης διακινδύνευσης σύμφωνα με το μοντέλο του Cox με μια συμμεταβλητή ($x_1 = 0$ για τη θεραπεία A και $x_2 = 1$ για τη θεραπεία B) και $\beta_1 < 0$

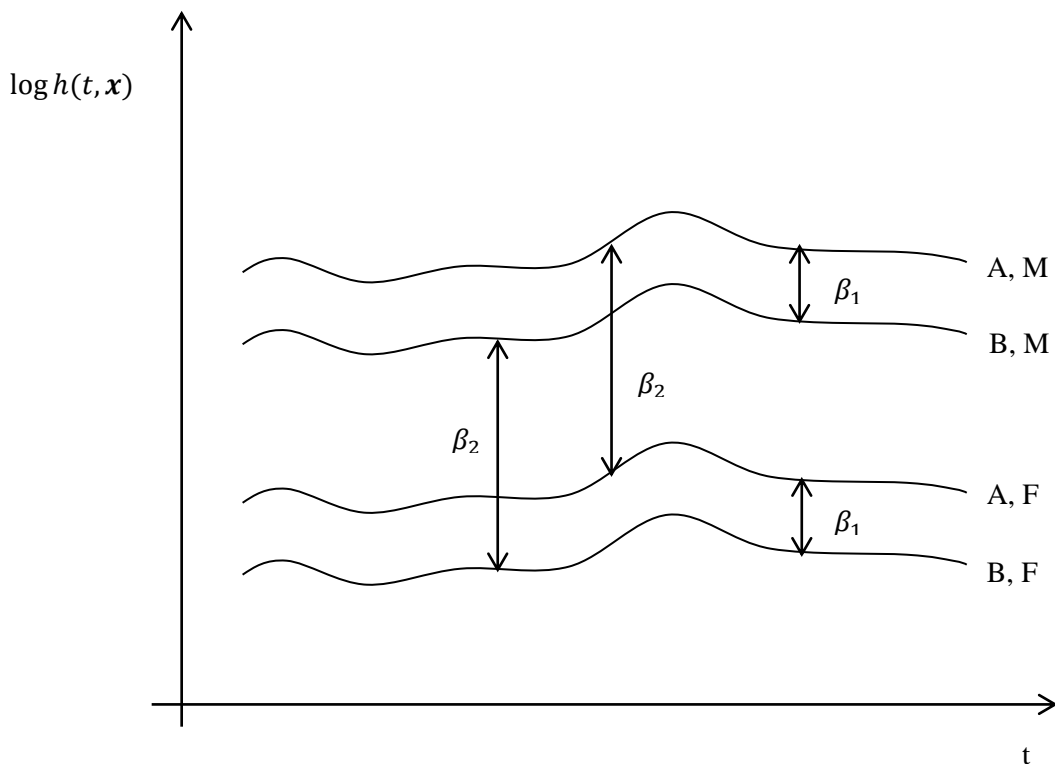
Έστω τώρα, εισάγουμε στο μοντέλο ακόμα μια κατηγορική μεταβλητή x_2 που εκφράζει κάποιο χαρακτηριστικό των ασθενών, για παράδειγμα το φύλο (Μοντέλο 2). Το διάνυσμα των συμμεταβλητών είναι επομένως $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$ και η συνάρτηση διακινδύνευσης $h(t, \mathbf{x}) = h_0(t)e^{\beta_1 x_1 + \beta_2 x_2}$. Έστω αναπαριστούμε με $x_2 = 0$ τις γυναίκες (F) και με $x_2 = 1$ τους άντρες (M) και ότι ο συντελεστής β_2 είναι θετικός.

Σε λογαριθμική κλίμακα, οι συναρτήσεις διακινδύνευσης βάση της θεραπείας x_1 έχουν σταθερή απόσταση β_1 , αλλά ταυτόχρονα σε κάθε ομάδα θεραπείας η διακινδύνευση των ασθενών διαφορετικού φύλου είναι σε σταθερή απόσταση β_2 όπως φαίνεται και στο Γράφημα 3.2.3.2 όπου φαίνονται οι συναρτήσεις διακινδύνευσης για τις τέσσερις ομάδες που προσδιορίζονται συνδυάζοντας τις πιθανές τιμές των μεταβλητών x_1 και x_2 .

Μοντέλο 2:

Ομάδα	$\mathbf{x} = (x_1, x_2)$	$h(t, \mathbf{x}) = h_0(t)e^{\beta_1 x_1 + \beta_2 x_2}$
A, F	0, 0	$h_0(t)$
B, F	1, 0	$h_0(t)e^{\beta_1}$
A, M	0, 1	$h_0(t)e^{\beta_2}$
B, M	1, 1	$h_0(t)e^{\beta_1 + \beta_2}$

Πίνακας 3.2.3.2



Γράφημα 3.2.3.2: λογάριθμος των συναρτήσεων διακινδύνευσης σύμφωνα με το μοντέλο του Cox με δύο συμμεταβλητές ($x_1 = 0$ για τη θεραπεία A και $x_2 = 1$ για τη θεραπεία B) και ($x_2 = 0$ για τις γυναίκες και $x_2 = 1$ για τους άντρες) και με $\beta_1 < 0$, $\beta_2 > 0$

Το συγκεκριμένο μοντέλο υποθέτει ότι οι δύο συμμεταβλητές x_1 και x_2 έχουν ανεξάρτητες επιδράσεις στο βαθμό διακινδύνευσης, δηλαδή δεν υπάρχει αλληλεπίδραση μεταξύ x_1 και x_2 αφού θεωρεί ότι οι θεραπείες έχουν την ίδια επίδραση σε άντρες και γυναίκες. Στο παράδειγμα αυτό, ο συντελεστής β_2 έχει θετική τιμή και αυτό δείχνει ότι γενικά οι άντρες διατρέχουν μεγαλύτερο κίνδυνο θανάτου στη συγκεκριμένη ασθένεια από τις γυναίκες.

Έστω τώρα ότι θέλουμε να εξετάσουμε αν υπάρχει αλληλεπίδραση των δύο παραγόντων δηλαδή του τύπου της θεραπείας και του φύλου (Μοντέλο 3). Για το σκοπό αυτό, προσθέτουμε στο μοντέλο του Cox μια ψευδομεταβλητή, έστω z , η οποία εκφράζει το γινόμενο των δύο συμμεταβλητών x_1 και x_2 . Δηλαδή η συνάρτηση διακινδύνευσης γίνεται:

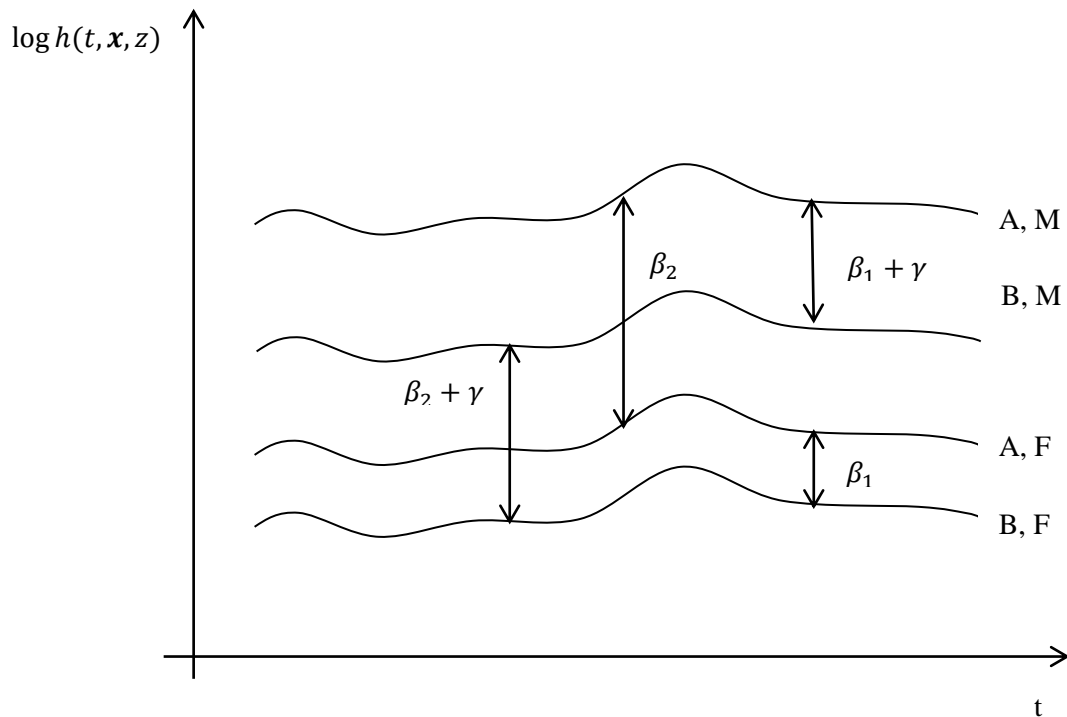
$$h(t, \mathbf{x}, z) = h_0(t)e^{\beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \gamma z}$$

όπου $z = x_1x_2$ και παίρνει τη τιμή 1 όταν $x_1 = x_2 = 1$ και τη τιμή 0 διαφορετικά. Έστω ότι ο συντελεστής γ της ψευδομεταβλητής z είναι αρνητικός. Τότε οι συναρτήσεις διακινδύνευσης παίρνουν τη μορφή όπως στο Γράφημα 3.2.3.3.

Μοντέλο 3:

Ομάδα	$\mathbf{x} = (x_1, x_2, z)$	$h(t, \mathbf{x}) = h_0(t)e^{\beta_1x_1+\beta_2x_2+\gamma z}$
A, F	0, 0, 0	$h_0(t)$
B, F	1, 0, 0	$h_0(t)e^{\beta_1}$
A, M	0, 1, 0	$h_0(t)e^{\beta_2}$
B, M	1, 1, 1	$h_0(t)e^{\beta_1+\beta_2+\gamma}$

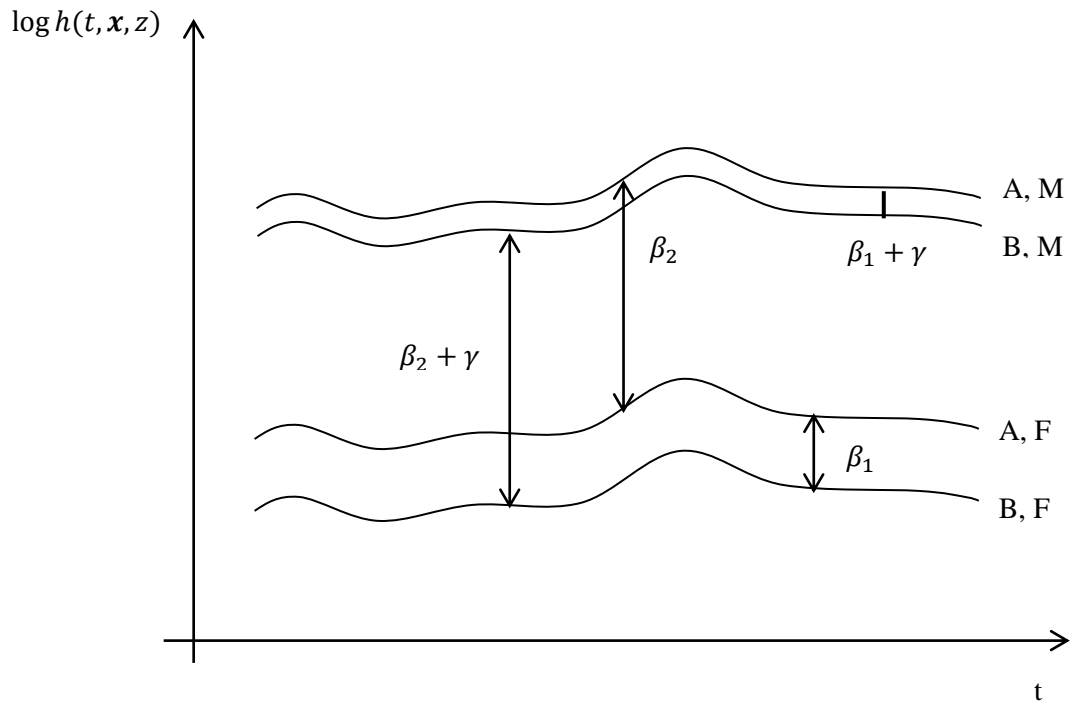
Πίνακας 3.2.3.3



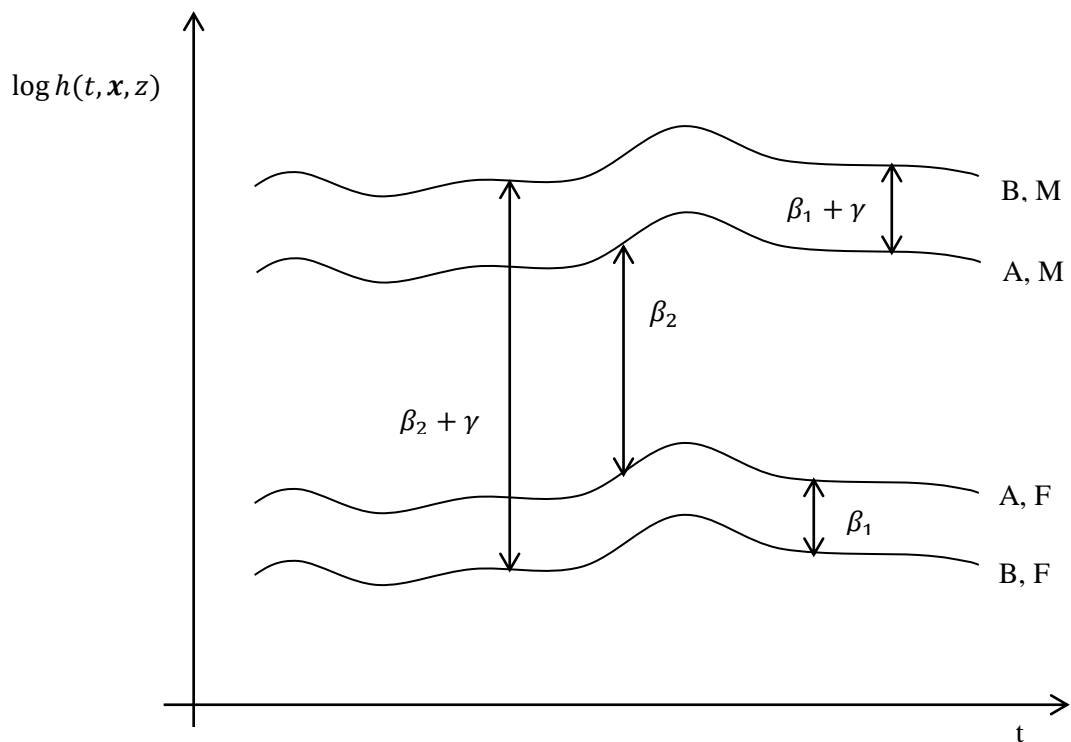
Γράφημα 3.2.3.3: λογάριθμος των συναρτήσεων διακινδύνευσης σύμφωνα με το μοντέλο του Cox με δύο συμμεταβλητές x_1, x_2 και μια ψευδομεταβλητή $z = x_1x_2$ με $\beta_1 < 0, \beta_2 > 0$ και $\gamma < 0$

Στη περίπτωση αυτή υπάρχει μια ποσοτική αλληλεπίδραση των δύο παραγόντων, αφού φαίνεται και από το διάγραμμα των συναρτήσεων διακινδύνευσης ότι η θεραπεία B είναι πιο ευεργετική στους άντρες, όπου η αρνητική ποσότητα γ προστίθεται στον αρνητικό συντελεστή β_1 .

Στη περίπτωση που ο συντελεστής γ της ψευδομεταβλητής z είναι θετικός τότε υπάρχουν δύο πιθανές καταστάσεις για το μοντέλο που φαίνονται στα Γραφήματα 3.2.3.4, 3.2.3.5. Αν για παράδειγμα έχουμε $\beta_1 = -0.7$ και $\gamma = +0.5$, οι λογαριθμημένες συναρτήσεις διακινδύνευσης θα ήταν όπως στο Γράφημα 3.2.3.4 όπου και εδώ υπάρχει ποσοτική αλληλεπίδραση των παραγόντων. Ενώ η θεραπεία B είναι ευεργετική και για τα δύο φύλα, στους άντρες φαίνεται να έχει λιγότερη επίδραση. Αν όμως οι συντελεστές παλινδρόμησης ήταν $\beta_1 = -0.7$ και $\gamma = +2$ τότε θα έχουμε τη περίπτωση του Γραφήματος 3.2.3.5 όπου παρατηρούμε μια ποιοτική αλληλεπίδραση αφού η θεραπεία B είναι ευεργετική για τις γυναίκες, αλλά επιβλαβής για τους άντρες.



Γράφημα 3.2.3.4: λογάριθμος των συναρτήσεων διακινδύνευσης σύμφωνα με το μοντέλο του Cox με δύο συμμεταβλητές x_1, x_2 και μια ψευδομεταβλητή $z = x_1 x_2$ με $\beta_1 < 0, \beta_2 > 0$ και $0 < \gamma < -\beta_1$



Γράφημα 3.2.3.5: λογάριθμος των συναρτήσεων διακινδύνευσης σύμφωνα με το μοντέλο του Cox με δύο συμμεταβλητές x_1, x_2 και μια ψευδομεταβλητή $z = x_1 x_2$ με $\beta_1 < 0, \beta_2 > 0$ και $\gamma > -\beta_1$

Γενικά, το μοντέλο αναλογικής διακινδύνευσης του Cox προσδιορίζει τη μορφή της συνάρτησης διακινδύνευσης η οποία περιέχει τους συντελεστές παλινδρόμησης β μόνο ως άγνωστους παράγοντες. Ο Cox εισήγαγε μια μέθοδο εκτίμησης των β (και άρα και της διακινδύνευσης), η οποία βασίζεται στη «μερική πιθανοφάνεια» και φαίνεται στη συνέχεια του κεφαλαίου. Η εκτίμηση των συντελεστών αυτών, μας επιτρέπει να προσδιορίσουμε ποσοτικά το σχετικό βαθμό αποτυχίας μιας μονάδας με διάνυμα συμμεταβλητών x_1 σε σχέση με μια άλλη μονάδα με διάνυμα συμμεταβλητών x_2 , και όχι τον απόλυτο βαθμό για κάθε μονάδα ξεχωριστά. Η ανάλυση του Cox επομένως, χρησιμοποιείται ευρέως σε συγκριτικές μελέτες θεραπειών και σε μελέτες επίδρασης κάποιου επικίνδυνου παράγοντα. Για παράδειγμα, στο Μοντέλο 1 της πιο πάνω εφαρμογής, μια εκτίμηση $\hat{\beta}_1$ του συντελεστή β_1 ίση με -0.7 σημαίνει ότι η πιθανότητα θανάτου για τους ασθενείς που δέχονται τη θεραπεία Β είναι περίπου η μισή ($e^{\hat{\beta}_1} = e^{-0.7} = 0.497$) σε σχέση με την αντίστοιχη των ασθενών που δέχονται τη θεραπεία Α, σε κάθε χρονική στιγμή. Στο δεύτερο μοντέλο του παραδείγματος, η εκτίμηση της επίδρασης της θεραπείας, προσαρμόζεται από τον παράγοντα του φύλου, δηλαδή $e^{\hat{\beta}_1}$ είναι η εκτιμώμενη αναλογία μεταξύ των ασθενών που λαμβάνουν τη θεραπεία Α και των ασθενών που λαμβάνουν τη θεραπεία Β, με την άλλη συμμεταβλητή να μένει σταθερή (δηλαδή ίδιο φύλο).

3.2.4 ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΤΩΝ ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΩΝ ΠΑΛΙΝΔΡΟΜΗΣΗΣ

Έστω έχουμε ένα σύνολο δεδομένων επιβίωσης N μονάδων από τις οποίες J μονάδες αποτυγχάνουν. Γενικά, το J είναι μικρότερο από το N λόγω της παρουσίας αποκομμένων παρατηρήσεων στα δεδομένα επιβίωσης. Έστω επίσης ότι $t_{(1)} < t_{(2)} < \dots < t_{(J)}$ είναι οι J χρονικές στιγμές κατά τις οποίες παρατηρείται η διακοπή των μονάδων, και έστω $R(t)$ είναι το σύνολο των μονάδων σε κίνδυνο σε χρόνο t , οι μονάδες δηλαδή, που είναι ζωντανές και υπό παρακολούθηση ακριβώς πριν τη χρονική στιγμή t . Συμβολίζουμε με j τη μονάδα που αποτυγχάνει σε χρόνο $t_{(j)}$, και η οποία έχει διάνυσμα συμμεταβλητών \mathbf{x}_j . Γενικά όπως είδαμε, \mathbf{x}_i είναι το διάνυσμα των συμμεταβλητών για τη i -οστή μονάδα, και οι συμμεταβλητές έχουν σταθερή τιμή στο χρόνο. Η πιθανότητα μια μονάδα με συμμεταβλητές \mathbf{x} να αποτύχει σε ένα διάστημα $(t, t + dt)$, δεδομένου των μονάδων σε ρίσκο τη χρονική στιγμή t , είναι $h(t, \mathbf{x})dt$. Έτσι, δοθέντος ότι παρατηρείται διακοπή μιας μονάδας σε χρόνο $t_{(j)}$, η πιθανότητα να είναι η μονάδα με διάνυσμα συμμεταβλητών \mathbf{x}_j είναι:

$$\frac{h(t_{(j)}, \mathbf{x}_j)dt}{\sum_{i \in R(t_{(j)})} h(t_{(j)}, \mathbf{x}_i)dt}$$

Έτσι, η συνάρτηση πιθανοφάνειας για τα δεδομένα εκφράζεται ως (Marubini, Valecchi, 2004):

$$L(h_0(t), \boldsymbol{\beta}) = \prod_{j=1}^J \frac{h(t_{(j)}, \mathbf{x}_j)dt}{\sum_{i \in R_j} h(t_{(j)}, \mathbf{x}_i)dt}$$

Όπου $R_j = R(t_{(j)})$.

Και τελικά, από τον ορισμό της συνάρτησης διακινδύνευσης στο μοντέλο του Cox ($h(t, \mathbf{x}) = h_0(t)e^{\boldsymbol{\beta}'\mathbf{x}_i}$), η συνάρτηση πιθανοφάνειας απλοποιείται σε:

$$L = L(\boldsymbol{\beta}) = \prod_{j=1}^J \frac{e^{\boldsymbol{\beta}'\mathbf{x}_j}}{\sum_{i \in R_j} e^{\boldsymbol{\beta}'\mathbf{x}_i}} \quad (4)$$

Οι συντελεστές παλινδρόμησης $\boldsymbol{\beta}$ εκτιμώνται από τις τιμές $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ οι οποίες μεγιστοποιούν τη συνάρτηση πιθανοφάνειας ή ισοδύναμα το λογάριθμό της. Το διάνυσμα $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ ονομάζεται εκτιμήτρια μέγιστης πιθανοφάνειας της $\boldsymbol{\beta}$. Ο λογάριθμος της συνάρτησης πιθανοφάνειας είναι:

$$LL(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{j=1}^J \left\{ \boldsymbol{\beta}' \mathbf{x}_j - \log \left[\sum_{i \in R_j} e^{\boldsymbol{\beta}' \mathbf{x}_i} \right] \right\} = \sum_{j=1}^J I_j \quad (5)$$

Όπου I_j είναι η συνεισφορά στη λογαριθμημένη πιθανοφάνεια που αντιστοιχεί στο χρόνο αποτυχίας $t_{(j)}$. Οι τιμές $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2, \dots, \hat{\beta}_K)$ υπολογίζονται μηδενίζοντας τις K μερικές παραγώγους της $LL(\boldsymbol{\beta})$ ως προς β_k ($k = 1, \dots, K$) δηλαδή:

$$\frac{\partial LL}{\partial \beta_k} = 0, \quad k = 1, \dots, K$$

Το πιο πάνω σύστημα εξισώσεων λύνεται ως προς $\boldsymbol{\beta}$ με αριθμητικές μεθόδους όπως για παράδειγμα η μέθοδος Newton-Raphson. Αν η k -οστή τιμή του διανύσματος \mathbf{x}_i είναι η x_{ki} , τότε η k -οστή παράγωγος της συνεισφοράς I_j στην εξίσωση (5) είναι:

$$\frac{\partial I_j}{\partial \beta_k} = x_{kj} - \frac{\sum_{i \in R_j} x_{ki} e^{\boldsymbol{\beta}' \mathbf{x}_i}}{\sum_{i \in R_j} e^{\boldsymbol{\beta}' \mathbf{x}_i}} \quad (6)$$

Και αυτή η παράγωγος εκφράζει τη διαφορά μεταξύ τις τιμής της k -οστής συμμεταβλητής της μονάδας που αποτυγχάνει σε χρόνο $t_{(j)}$ και του μέσου σταθμισμένου όρου των συμμεταβλητών στα δεδομένα σε κίνδυνο R_j με εκθετικά βάρη $\exp(\boldsymbol{\beta}' \mathbf{x}_i)$. Αυτή η έκφραση μπορεί να δείξει διαισθητικά τη λειτουργία της πιθανοφάνειας: Αν για παράδειγμα, κάποιος ασθενής που πεθαίνει, τείνει να έχει ψηλότερες τιμές στη k -οστή συμμεταβλητή, η τιμή β_k θα πρέπει να είναι αρκετά μεγάλη, έτσι ώστε να μειώνει τη παράγωγο στο μηδέν.

Παίρνοντας τη δεύτερη παράγωγο της ποσότητας I_j , μπορούν να προσδιοριστούν εκτιμήσεις των διασπορών των $\hat{\boldsymbol{\beta}}$. Για παράδειγμα, η παράγωγος της (6) ως προς β_k είναι:

$$\frac{\partial^2 I_j}{\partial \beta_k^2} = - \left[\frac{\sum_{i \in R_j} x_{ki}^2 e^{\beta' x_i}}{\sum_{i \in R_j} e^{\beta' x_i}} - \left(\frac{\sum_{i \in R_j} x_{ki} e^{\beta' x_i}}{\sum_{i \in R_j} e^{\beta' x_i}} \right)^2 \right] \quad (7)$$

Γενικά στα παραπάνω, η συνάρτηση πιθανοφάνειας (4) ονομάστηκε από τον Cox ως «μερική πιθανοφάνεια», γιατί η έκφραση $h_0(t)$ δεν εμφανίζεται σε αυτή την ανάλυση.

3.2.5 ΙΣΟΠΑΛΟΙ ΧΡΟΝΟΙ ΔΙΑΚΟΠΗΣ

Ο χρόνος στη θεωρία είναι μια συνεχή μεταβλητή. Στην πιο πάνω ανάλυση, ο χρόνος θεωρήθηκε συνεχής και σε κάθε χρόνο διακοπής αντιστοιχεί μια μόνο αποτυχία μονάδας. Στη πράξη όμως ισοδύναμοι χρόνοι αποτυχίας των μονάδων μπορεί να παρατηρηθούν λόγω του τρόπου μέτρησής του. Με δεδομένο ότι οι ισοπαλίες αυτές των χρόνων είναι λίγες, το πρόβλημα μπορεί να αντιμετωπιστεί ικανοποιητικά μεταβάλλοντας τη συνάρτηση πιθανοφάνειας (4). Η προσέγγιση που προτιμάται είναι αυτή που πρότεινε ο Breslow (1974):

Έστω d_j ο αριθμός των μονάδων που αποτυγχάνουν στο χρόνο $t_{(j)}$ και \mathbf{s}_j το άθροισμα των διανυσμάτων των συμμεταβλητών των d_j μονάδων που αποτυγχάνουν. Ο λογάριθμος της μερικής πιθανοφάνειας γράφεται όπως θα γραφόταν αν οι d_j αποτυχίες γίνονται με οποιαδήποτε σειρά και αγνοώντας το γεγονός ότι το σύνολο των μονάδων σε κίνδυνο πρέπει διαδοχικά να μειώνεται κατά μια μονάδα. Έχουμε δηλαδή:

$$LL(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{j=1}^J \left\{ \boldsymbol{\beta}' \mathbf{s}_j - d_j \log \left[\sum_{i \in R_j} e^{\beta' x_i} \right] \right\} = \sum_{j=1}^J I_j \quad (8)$$

Η εξίσωση (8), δίνει την αντίστοιχη (5) στις περιπτώσεις που δεν υπάρχουν ισόπαλοι χρόνοι ($d_j = 1$ και $\mathbf{s}_j = \mathbf{x}_j$). Οι εξισώσεις (6), (7) για τη πρώτη και δεύτερη παράγωγο του I_j αντίστοιχα, γίνονται:

$$\frac{\partial I_j}{\partial \beta_k} = s_{kj} - d_j \frac{\sum_{i \in R_j} x_{ki} e^{\beta' x_i}}{\sum_{i \in R_j} e^{\beta' x_i}} \quad (9)$$

$$\frac{\partial^2 I_j}{\partial \beta_k^2} = -d_j \left[\frac{\sum_{i \in R_j} x_{ki}^2 e^{\beta' x_i}}{\sum_{i \in R_j} e^{\beta' x_i}} - \left(\frac{\sum_{i \in R_j} x_{ki} e^{\beta' x_i}}{\sum_{i \in R_j} e^{\beta' x_i}} \right)^2 \right] \quad (10)$$

Όπου s_{kj} είναι το k -οστό στοιχείο του διανύσματος \mathbf{s}_j .

3.2.6 ΕΛΕΓΧΟΙ ΥΠΟΘΕΣΕΩΝ

Στο μοντέλο αναλογικής διακινδύνευσης του Cox, οι εκτιμήσεις των συντελεστών παλινδρόμησης ακολουθούν προσεγγιστικά μια κανονική κατανομή όταν υπάρχει ένας επαρκής αριθμός δεδομένων στο δείγμα. Έτσι μπορούμε να διεξάγουμε έλεγχους υποθέσεων, με βάση τις εκτιμήσεις των συντελεστών και τα τυπικά τους σφάλματα, για κάθε μοντέλο που προσαρμόζουμε.

Ο πιά σύνηθες τρόπος, είναι ο **έλεγχος του λόγου των πιθανοφανειών** (likelihood ratio test) κατά τον οποίο μπορούν να ελεγχθούν υποθέσεις όπως η $\beta_i = 0$, δηλαδή το κατά πόσον η διακινδύνευση, και επομένως η διάρκεια ζωής, εξαρτάται από τη συμμεταβλητή x_i . Συγκεκριμένα, το μοντέλο προσαρμόζεται δύο φορές: με τη συμμεταβλητή x_i ($\beta_i \neq 0$), και χωρίς ($\beta_i = 0$). Έστω \hat{l}_1 η μεγιστοποιημένη τιμή του λογαρίθμου της μερικής πιθανοφάνειας του μοντέλου που περιλαμβάνει την x_i , και \hat{l}_0 το αντίστοιχο για το μοντέλο χωρίς την x_i . Κατά τον έλεγχο αυτό, συγκρίνεται η τιμή της $-2(\hat{l}_0 - \hat{l}_1)$ με τη χ_1^2 κατανομή.

Εναλλακτικά, χρησιμοποιείται ο **έλεγχος του Wald**. Έστω πάλι θέλουμε να ελέγξουμε την υπόθεση $\beta_i = 0$, και προσαρμόζοντας το μοντέλο που συμπεριλαμβάνει τη συμμεταβλητή x_i παίρνουμε την εκτίμηση $\hat{\beta}_i$ του συντελεστή παλινδρόμησης. Η ελεγχοσυνάρτηση Wald εκφράζεται ως $\left\{ \frac{\hat{\beta}_i}{se(\hat{\beta}_i)} \right\}^2$ και η τιμή της συγκρίνεται με την κατανομή χ_1^2 . Ισοδύναμα, μπορεί να συγκριθεί η τιμή της $\left\{ \frac{\hat{\beta}_i}{se(\hat{\beta}_i)} \right\}$ με την κατανομή $N(0,1)$.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4 - ΕΦΑΡΜΟΓΗ

ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΤΗΣ ΑΠΟΔΟΣΗΣ ΜΕΘΟΔΩΝ ΝΕΥΡΩΝΙΚΩΝ ΔΙΚΤΥΩΝ ΜΕ ΤΟ ΜΟΝΤΕΛΟ ΠΑΛΙΝΔΡΟΜΗΣΗΣ ΤΟΥ COX ΓΙΑ ΔΕΔΟΜΕΝΑ ΕΠΙΒΙΩΣΗΣ ΜΕ ΑΠΟΚΟΜΜΕΝΕΣ ΠΑΡΑΤΗΡΗΣΕΙΣ.

(Xiang et al., 1999)

4.1 ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΤΗΣ ΕΦΑΡΜΟΓΗΣ

4.1.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Στην εφαρμογή που περιγράφεται στο κεφάλαιο αυτό, παρουσιάζονται στρατηγικές που έχουν αναπτυχθεί για την επέκταση της τεχνολογίας πρόβλεψης των νευρωνικών δικτύων ώστε να επεξεργάζονται δεδομένα με δεξιά αποκομμένες παρατηρήσεις. Συγκεκριμένα, χρησιμοποιούνται τρεις μέθοδοι: η μέθοδος των Faraggi-Simon (1995), των Liestol-Andersen-Andersen (1994), και μια τροποποίηση της μεθόδου των Buckley-James (1979). Σε μια Monte Carlo μελέτη προσομοίωσης, αξιολογούνται οι επιδόσεις των τριών αυτών μεθόδων με νευρωνικά δίκτυα, σε σχέση με την απόδοση του μοντέλου παλινδρόμησης του Cox και το οποίο περιλαμβάνει κύριες επιδράσεις καθώς και αλληλεπιδράσεις όταν αυτές υπάρχουν. Για την επεξεργασία των δεδομένων χρησιμοποιήθηκε το βοηθητικό πρόγραμμα EPILOG PLUS® PROC NEURAL, το οποίο αναπτύχθηκε από την ερευνητική ομάδα. Εξετάζονται δίκτυα εμπρόσθιας τροφοδότησης που χρησιμοποιούν τον αλγόριθμο back-propagation, σε εννιά διαφορετικούς σχεδιασμούς που αντιπροσωπεύουν μια ποικιλία πειραματικών συνθηκών, στις οποίες μεταβάλλονται:

- Ο αριθμός των εισόδων και των αλληλεπιδράσεων
- Ο βαθμός της αποκοπής
- Αναλογική / Μη-αναλογική διακινδύνευση
- Το μέγεθος του δείγματος.

Επιπλέον, χρησιμοποιήθηκαν μέθοδοι ελαχιστοποίησης έτσι ώστε να καθοριστούν αποτελεσματικότερα οι βέλτιστοι παράμετροι. Για την αξιολόγηση της απόδοσης των μεθόδων που χρησιμοποιούν τα νευρωνικά δίκτυα σε σχέση με αυτή του μοντέλου παλινδρόμησης του Cox, έγινε χρήση μιας γενικευμένης εκδοχής των καμπυλών ROC, ο δείκτης C.

4.1.2 ΝΕΥΡΩΝΙΚΑ ΔΙΚΤΥΑ

Τα νευρωνικά δίκτυα βρίσκουν σήμερα εφαρμογή στις περιοχές της πρόβλεψης και ταξινόμησης αποτελεσμάτων στην ιατρική, περιοχές στις οποίες παραδοσιακά χρησιμοποιούνταν μοντέλα παλινδρόμησης. Στις περισσότερες εφαρμογές των νευρωνικών δικτύων, οι έξοδοι χαρακτηρίζονται από τη παρουσία ή την απουσία κάποιου γεγονότος. Σε αυτή τη περίπτωση το νευρωνικό δίκτυο θεωρείται ως εναλλακτική στις παραδοσιακές λογιστικές μεθόδους παλινδρόμησης. Ωστόσο στη περίπτωση όπου οι έξοδοι πρέπει να αναπαριστούν το χρόνο μέχρι ένα γεγονός, η εφαρμογή των νευρωνικών δικτύων για τη πρόβλεψη κλινικών γεγονότων απαιτεί την ανάπτυξη μιας στρατηγικής ώστε να αναπαρασταθεί η πορεία του χρόνου, για παράδειγμα μιας ασθένειας. Παράλληλα είναι αναγκαίο να ληφθούν υπόψιν οι αποκομμένες παρατηρήσεις που πολύ συχνά αποτελούν μεγάλο μέρος των δεδομένων σε ιατρικές εφαρμογές. Τυχόν αποκλεισμός τους από το δείγμα μιας μελέτης, οδηγεί σε σημαντικό περιορισμό των δεδομένων που είναι διαθέσιμα για την ανάπτυξη του δικτύου, και έτσι οδηγούμαστε σε αξιοσημείωτες μεροληψίες στη πρόβλεψη των γεγονότων.

Διάφορες στρατηγικές έχουν αναπτυχθεί για να επεκτείνουν τις μεθόδους πρόβλεψης στα νευρωνικά δίκτυα ώστε να περιλάβουν και δεξιά αποκομμένα δεδομένα, τρεις από τις οποίες παρουσιάζονται παρακάτω.

Μέθοδος των Faraggi - Simon

Η μέθοδος που αναπτύχθηκε το 1995 από τους Faraggi και Simon, γενικεύει το μοντέλο παλινδρόμησης του Cox ώστε να επιτρέπει την αντικατάσταση μη γραμμικών συναρτήσεων στη θέση των συνηθισμένων γραμμικών συνδυασμών των συμμεταβλητών. Ένα νευρωνικό δίκτυο μπορεί μαθηματικά να αναπαρασταθεί ως

μια μη γραμμική συνάρτηση των συμμεταβλητών, και γι' αυτό πρότειναν ένα μοντέλο παρόμοιο με αυτό του Cox που όμως χρησιμοποιούνται έξοδοι ενός νευρωνικού δικτύου στη θέση της γραμμικής συνάρτησης. Αυτή η μέθοδος διατηρεί τη φύση της αναλογικής διακινδύνευσης που έχει το μοντέλο του Cox, αλλά παράλληλα παρέχει τη δυνατότητα να μοντελοποιεί πολυπλοκότητες και αλληλεπιδράσεις των δεδομένων εισόδου τις οποίες το απλό μοντέλο του Cox παραλείπει. Η μέθοδος των Faraggi και Simon επιτρέπει τη χρήση των συνηθισμένων στατιστικών μεθόδων για την αξιολόγηση των συμμεταβλητών, και επομένως η επιλογή του βέλτιστου μοντέλου για τα δεδομένα είναι άμεση.

Μέθοδος των Liestol – Andersen – Andersen

Για τη μέθοδο αυτή, οι χρόνοι επιβίωσης ομαδοποιούνται σε χρονικά διαστήματα κατά τα οποία η διακινδύνευση θεωρείται σταθερή και κάθε κόμβος εξόδου στο νευρωνικό δίκτυο καθορίζεται ως ένα από αυτά τα διαστήματα. Το δίκτυο έχει δύο βασικά χαρακτηριστικά: δεν υπάρχουν κρυφοί νευρώνες και τα συναπτικά βάρη που ενώνουν ίδιο κόμβο εισόδου με όλους τους κόμβους εξόδου είναι ίδια. Το νευρωνικό δίκτυο εκπαιδεύεται με στόχο να προβλέπει την πιθανότητα αποτυχίας για κάθε μονάδα, έτσι ώστε για κάθε ομάδα να επιτυγχάνονται ίδια αποτελέσματα με την ανάλυση παλινδρόμησης του Cox για τα ίδια δεδομένα. Οι μη σταθερές διακινδυνεύσεις στο χρόνο μοντελοποιούνται όταν τα συναπτικά βάρη για κάθε κόμβο εξόδου επιτρέπεται να μεταβληθούν. Αν προστεθεί ένα κρυφό στρώμα, τότε παράγεται ένα υβριδικό μοντέλο του Cox με το νευρωνικό δίκτυο με μη γραμμικές επιδράσεις των συμμεταβλητών. Ο βαθμός της μη γραμμικότητας εξαρτάται από τον αριθμό των κρυφών νευρώνων και την επιλογή της συνάρτησης ενεργοποίησης.

Τροποποιημένη μέθοδος των Buckley – James

Στη πρωτότυπη μέθοδο των Buckley και James, όπως γίνεται και στη γραμμική παλινδρόμηση, οι αποκομμένοι χρόνοι επιβίωσης αντικαθίστανται με τις αναμενόμενες τιμές τους με βάση τις συμμεταβλητές και την κατανομή Kaplan-Meier των υπολοίπων για την προσαρμοσμένη ευθεία παλινδρόμησης. Επειδή η κατανομή των υπολοίπων είναι μια συνάρτηση των παραμέτρων, η μέθοδος εκτίμησης είναι επαναληπτική και οι αναμενόμενες τιμές σε κάθε επανάληψη βασίζονται στην εκτίμηση των παραμέτρων του προηγούμενου βήματος.

Στη τροποποιημένη μέθοδο, και η οποία χρησιμοποιείται στην εφαρμογή, χρησιμοποιούνται οι έξοδοι του νευρωνικού δικτύου αντί της προσαρμοσμένης ευθείας παλινδρόμησης, και τα υπόλοιπα από την εκτίμηση της Kaplan-Meier κατανομής είναι απλά η διαφορά μεταξύ των παρατηρούμενων αποτελεσμάτων και των εξόδων του νευρωνικού δικτύου. Έτσι, η πρωτότυπη προσέγγιση των Buckley και James γενικεύεται, με τη τοποθέτηση νευρωνικού δικτύου, ώστε να προσδιορίζει την αναμενόμενη επιβίωση για όλες τις αποκομμένες παρατηρήσεις (με βάση τον τρέχων πίνακα βαρών) αλλά και να αντικαθιστά την αναμενόμενη τιμή για την αποκοπή, αφού προσδιορίσει το σφάλμα. Συγκεκριμένα, σε κάθε επανάληψη στο δίκτυο, οι προβλέψεις συγκρίνονται με τις πραγματικές τιμές, και οι διαφορές (υπόλοιπα) χρησιμοποιούνται στον υπολογισμό μιας καμπύλης τύπου Kaplan-Meier. Με βάση τη κατανομή των υπολοίπων (όπως αυτή φαίνεται από τη καμπύλη Kaplan-Meier), υπολογίζεται ο αναμενόμενος χρόνος επιβίωσης για κάθε μονάδα της οποίας η αποκοπή εκτιμάται χρησιμοποιώντας την ίδια προσέγγιση με τη πρωτότυπη μέθοδο των Buckley και James.

4.1.3 ΑΡΧΙΤΕΚΤΟΝΙΚΗ ΤΩΝ ΝΕΥΡΩΝΙΚΩΝ ΔΙΚΤΥΩΝ ΚΑΙ ΠΑΡΑΜΕΤΡΟΙ

Για τις τρεις μεθόδους που χρησιμοποιούν νευρωνικά δίκτυα και αξιολογούνται σε αυτή την εφαρμογή, η αρχιτεκτονική των δικτύων αποτελείται από το στρώμα εισόδου, ένα κρυφό στρώμα και το στρώμα εξόδου. Το στρώμα εισόδου περιέχει δύο ή τέσσερις νευρώνες εισόδου (όσες οι συμεταβλητές) και επιπλέον έναν ακόμα κόμβο για τη μεροληψία με είσοδο τη τιμή 1. Το κρυφό στρώμα περιέχει δύο κρυφούς κόμβους και έναν ειδικό κόμβο που έχει ρόλο παρόμοιο με το σταθερό όρο στη γραμμική παλινδρόμηση. Για τη μέθοδο των Faraggi-Simon, αυτός ο κόμβος δεν χρησιμοποιήθηκε γιατί η επίδρασή του ενσωματώνεται στη βασική διακινδύνευση. Το στρώμα εξόδου περιέχει έναν νευρώνα εξόδου στις μεθόδους των Faraggi-Simon και Buckley-James. Στη μέθοδο των Liestol-Andersen-Andersen, το στρώμα εξόδου αποτελείται από πολλούς κόμβους, ο αριθμός των οποίων αντιστοιχεί στον αριθμό των διαστημάτων χρόνου που είχε καθοριστεί. Για τη προσομοίωση, χρησιμοποιήθηκε η γενική μορφή της μεθόδου των Liestol-Andersen-Andersen, έτσι

ώστε να μην υποτεθεί το κριτήριο της αναλογικής διακινδύνευσης. Επιπλέον, καθορίστηκαν τρία χρονικά διαστήματα, με το σημείο αποκοπής να λαμβάνει χώρα όταν οι πιθανότητες επιβίωσης προσέγγιζαν το 35% και 65%.

Για όλες τις μεθόδους των νευρωνικών δικτύων, χρησιμοποιήθηκε η λογιστική συνάρτηση (η οποία είναι ειδική περίπτωση σιγμοειδούς συνάρτησης) σαν συνάρτηση ενεργοποίησης στην έξοδο του κρυφού στρώματος. Επίσης σε όλες τις μεθόδους, εκτός αυτής των Faraggi-Simon, εφαρμόστηκε η λογιστική συνάρτηση ενεργοποίησης και στην έξοδο του στρώματος εξόδου. Για τη μέθοδο των Faraggi-Simon, δεν χρησιμοποιήθηκε συνάρτηση ενεργοποίησης στην έξοδο του δικτύου. Οι συναρτήσεις λάθους που απαιτούσαν ελαχιστοποίηση ήταν: η αρνητική μερική πιθανοφάνεια για τη μέθοδο των Faraggi-Simon, η αρνητική λογαριθμημένη πιθανοφάνεια για τα δυαδικά δεδομένα στη μέθοδο των Liestol-Andersen-Andersen, και η τετραγωνική συνάρτηση λάθους με έναν κόμβο εξόδου για τη μέθοδο των Buckley-James. Ο αρχικός βαθμός της εκπαίδευσης των δικτύων ορίστηκε 0.05 και μεταβαλλόταν χρησιμοποιώντας έναν αλγόριθμο «γραμμικής αναζήτησης». Το κριτήριο για τη σύγκλιση, ήταν το να είναι μικρότερο από 10^{-6} η απόλυτη μεταβολή της συνάρτησης λάθους.

4.1.4 ΜΟΝΤΕΛΟ ΠΑΛΙΝΔΡΟΜΗΣΗΣ ΤΟΥ COX

Για τη σύγκριση των αποτελεσμάτων των πιο πάνω μεθόδων νευρωνικών δικτύων, εφαρμόστηκε το τυπικό μοντέλο παλινδρόμησης του Cox, με εισόδους ίσες με τις συμμεταβλητές, και αλληλεπιδράσεις μεταξύ των συμμεταβλητών, όταν υπήρχαν στο πραγματικό μοντέλο.

4.1.5 ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ

Στην εφαρμογή, πραγματοποιήθηκε μια Monte Carlo προσομοίωση έτσι ώστε να αξιολογηθεί η ακρίβεια πρόβλεψης των τριών μεθόδων νευρωνικών δικτύων και της

παλινδρόμησης του Cox όταν διαχειρίζονται δεδομένα με αποκοπή. Προσομοιώθηκαν δεδομένα με δύο ή τέσσερις εισόδους (συμμεταβλητές), διάφορα μοτίβα αποκοπής, αλληλεπιδράσεις μεταξύ των συμμεταβλητών καθώς επίσης αναλογικές και μη αναλογικές διακινδυνεύσεις. Για τα μοντέλα αναλογικής διακινδύνευσης, θεωρήθηκε μια εκθετική κατανομή επιβίωσης.

Έστω η συνάρτηση διακινδύνευσης σε κάθε χρονική στιγμή t , με p συμμεταβλητές x είναι η εξής:

$$h(t, x) = \exp \left\{ \sum_{i=1}^p \beta_i(t)x_i + \sum_{i \neq j} \gamma_{ij}(t)x_i x_j + \sum_{i \neq j \neq k} \gamma_{ijk}(t)x_i x_j x_k + \sum_{i \neq j \neq k \neq l} \gamma_{ijkl}(t)x_i x_j x_k x_l \right\}$$

Τότε οι χρόνοι επιβίωσης παράγονται χρησιμοποιώντας αντίστροφους μετασχηματισμούς πιθανοτήτων (Newman, Odell, 1971).

Στην εφαρμογή πραγματοποιήθηκαν οι ακόλουθοι εννιά σχεδιασμοί:

- Σχεδιασμός 1: $p = 2$ συμμεταβλητές με συντελεστές $\beta_1 = 1, \beta_2 = 0.25$ και χωρίς αλληλεπιδράσεις (δηλαδή οι συντελεστές γ ίσοι με 0). Οι κατανομές των συμμεταβλητών είναι: η x_1 ακολουθεί κατανομή Bernoulli με πιθανότητα 0.5, η x_2 ακολουθεί κανονική κατανομή με μέσο 0 και τυπική απόκλιση 1, και οι x_1, x_2 είναι ανεξάρτητες. Όλες οι μονάδες παρατηρούνταν μέχρι την εξάλειψη (δηλαδή δεν υπήρχαν αποκομμένες παρατηρήσεις).
- Σχεδιασμός 2: Ίδιος με τον Σχεδιασμό 1, με τη διαφορά ότι εφαρμόστηκε ένα ποσοστό αποκοπής 20%, υπό την υπόθεση ότι ο χρόνος αποκοπής είναι εκθετικά κατανομημένος και ανεξάρτητος από το χρόνο επιβίωσης.
- Σχεδιασμός 3: Ίδιος με τον Σχεδιασμό 2, με τη διαφορά ότι θεωρήθηκε αλληλεπίδραση μεταξύ των δύο συμμεταβλητών x_1, x_2 ($\gamma_{12} = 0.2$).
- Σχεδιασμός 4: $p = 4$ συμμεταβλητές με μέτριες αλληλεπιδράσεις μεταξύ δύο συμμεταβλητών, και μικρές μεταξύ τριών και τεσσάρων (σε σχέση με τις κύριες επιδράσεις): $\beta_1 = \beta_2 = 2, \beta_3 = 0.5, \beta_4 = 1.0$ και $\gamma_{12} = \gamma_{13} = 1.0$ και τα υπόλοιπα $\gamma = 0.5$. Οι κατανομές των συμμεταβλητών είναι: οι x_1, x_2

ακολουθούν κατανομή Bernoulli με πιθανότητες 0.25 και 0.5 αντίστοιχα, και οι συμμεταβλητές x_3, x_4 ακολουθούν κανονική κατανομή με μέσο 0 και τυπική απόκλιση 1. Όλες οι μεταβλητές είναι ανεξάρτητες, και εφαρμόστηκε ένα ποσοστό αποκοπής 30%.

- Σχεδιασμός 5: Ίδιος με τον Σχεδιασμό 4, με τη διαφορά ότι το ποσοστό αποκοπής αυξήθηκε σε 70%.
- Σχεδιασμός 6: $p = 4$ συμμεταβλητές με σημαντική αλληλεπίδραση μεταξύ τριών συμμεταβλητών (σε σχέση με τις κύριες επιδράσεις): $\beta_1 = \beta_2 = 0.5, \beta_3 = \beta_4 = 0.25, \gamma_{123} = \gamma_{124} = \gamma_{234} = 3.0$ και τα υπόλοιπα $\gamma = 0.0$. Οι κατανομές των συμμεταβλητών είναι: οι x_1, x_2 ακολουθούν κατανομή Bernoulli με πιθανότητες 0.25 και 0.5 αντίστοιχα, και οι συμμεταβλητές x_3, x_4 ακολουθούν κανονική κατανομή με μέσο 0 και τυπική απόκλιση 1. Όλες οι μεταβλητές είναι ανεξάρτητες, και εφαρμόστηκε ένα ποσοστό αποκοπής 50%.
- Σχεδιασμός 7: Τροποποιημένος Σχεδιασμός 2, έτσι ώστε η διακινδύνευση να μην είναι αναλογική: $\beta_1 = 1.0$ και $\beta_2 = 0.25$ για τις x_1 και x_2 πριν το χρονικό σημείο με πιθανότητα επιβίωσης 70%. Στη συνέχεια, $\beta_1 = \beta_2 = 0$ για τις x_1 και x_2 (δηλαδή η πιθανότητα επιβίωσης ήταν ανεξάρτητη των x_1, x_2).
- Σχεδιασμός 8: Ίδιος με τον Σχεδιασμό 3 αλλά με $n = 200$.
- Σχεδιασμός 9: Ίδιος με τον Σχεδιασμό 5 αλλά με $n = 200$.

Για τους Σχεδιασμούς 1-7, δημιουργήθηκε μια βάση δεδομένων 200 περιπτώσεων. Η βάση αυτή, διαχωρίστηκε τυχαία σε 100 περιπτώσεις εκπαίδευσης και 100 περιπτώσεις ελέγχου. Για τους Σχεδιασμούς 8 και 9, δημιουργήθηκε μια βάση δεδομένων 400 περιπτώσεων που διαχωρίστηκε τυχαία σε 200 περιπτώσεις εκπαίδευσης και 200 περιπτώσεις ελέγχου. Η απόδοση για κάθε από τις τέσσερις μεθόδους νευρωνικών δικτύων και της παλινδρόμησης του Cox, καθορίστηκε από τον δείκτη C και για τα δύο σετ δεδομένων (εκπαίδευσης και ελέγχου). Η διαδικασία της προσομοίωσης επαναλήφθηκε στη συνέχεια 50 φορές.

4.1.6 Ο ΔΕΙΚΤΗΣ C

Ο δείκτης C μπορεί να θεωρηθεί ως μια γενίκευση της περιοχής κάτω από τη καμπύλη ROC για αποκομμένα δεδομένα. Παρόλο που υπάρχουν άλλα μέτρα διάκρισης, ο δείκτης C είναι ο πιο συχνά χρησιμοποιούμενος σε δεδομένα επιβίωσης. Ο δείκτης υπολογίζεται παίρνοντας όλα τα πιθανά ζεύγη ασθενών. Για κάθε ζεύγος, η πρόβλεψη του μοντέλου θεωρείται «σύμφωνη» με την έξοδο όταν ο ασθενής με τη ψηλότερη εκτιμώμενη πιθανότητα επιβίωσης, έζησε περισσότερο. Αν οι χρόνοι επιβίωσης και για τους δύο ασθενείς είναι αποκομμένοι, ή αν μόνο ένας πέθανε και ο χρόνος παρακολούθησης του δεύτερου ήταν λιγότερος από το χρόνο επιβίωσης του πρώτου, τότε το ζεύγος δεν συνυπολογίζεται. Ο δείκτης C είναι η αναλογία των προβλέψεων που είναι σύμφωνες από όλα τα ζεύγη ασθενών από τα οποία μπορεί να καθοριστεί η διάταξη ή οι χρόνοι επιβίωσης. Τιμές του δείκτη C κοντά στο 0.5 δείχνουν ότι το μοντέλο δεν είναι προγνωστικό. Τιμές του δείκτη κοντά στο 1 υποδεικνύουν ότι τα δεδομένα εισόδου σχεδόν πάντα προσδιορίζουν ποιος ασθενής έχει καλύτερη πρόγνωση.

Για τη μέθοδο των Liestol-Andersen-Andersen με τρία διαστήματα, οι προβλεπόμενες πιθανότητες επιβίωσης υπολογίζονται ως εξής: αν και οι δύο ασθενείς στο ζεύγος εμπίπτουν στο ίδιο διάστημα, τότε οι προβλεπόμενες πιθανότητες επιβίωσης υπολογίζονται μέχρι αυτό το διάστημα και η κατάσταση συμφωνίας καθορίζεται όπως πιο πάνω. Αντίθετα αν οι δύο ασθενείς είναι σε διαφορετικό διάστημα, τότε οι πιθανότητες επιβίωσης υπολογίζονται μέχρι το πρώτο διάστημα, και οι προβλέψεις θεωρούνται σύμφωνες αν ο ασθενής με χρόνο στο πρώτο διάστημα είχε επίσης τη μικρότερη προβλεπόμενη πιθανότητα επιβίωσης.

Για σκοπούς σύγκρισης συνοψίστηκαν οι μέσοι των δεικτών C (\pm τυπική απόκλιση sd) στους Πίνακες (1) μέχρι (9) για κάθε Σχεδιασμό. Χρησιμοποιήθηκαν επαναλαμβανόμενα μέτρα Anova για τη σύγκριση των μέσων όρων των δεικτών C μεταξύ όλων των μεθόδων. Επιπλέον χρησιμοποιήθηκε ο έλεγχος Tukey για τις ανά ζεύγη συγκρίσεις μεταξύ των μεθόδων. Η σημαντικότητα ορίστηκε στο 0.05.

4.1.7 ΛΟΓΙΣΜΙΚΟ

Η ανάλυση παλινδρόμησης του Cox έγινε σε SAS (Cary, NC) και οι μέθοδοι νευρωνικών δικτύων στο λογισμικό EPILOG PLUS® (Pasadena CA), ένα ολοκληρωμένο στατιστικό πακέτο για επιδημιολογικές εφαρμογές και κλινικές μελέτες.

4.2 ΕΦΑΡΜΟΓΗ - ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Σχεδιασμός 1:

Μέθοδος	Σετ εκπαίδευσης	Σετ ελέγχου
COX	$0.650 \pm 0.028a$	$0.647 \pm 0.029a$
FS	$0.655 \pm 0.027a$	$0.642 \pm 0.035a$
Liestol	$0.634 \pm 0.031b$	$0.600 \pm 0.041b$
Buckley	$0.650 \pm 0.029a$	$0.648 \pm 0.039a$

Πίνακας 1

Σχεδιασμός 2:

Μέθοδος	Σετ εκπαίδευσης	Σετ ελέγχου
COX	$0.645 \pm 0.030b$	$0.652 \pm 0.035a$
FS	$0.650 \pm 0.033a, b$	$0.648 \pm 0.034a$
Liestol	$0.655 \pm 0.038a$	$0.620 \pm 0.051b$
Buckley	$0.644 \pm 0.032b$	$0.646 \pm 0.043a$

Πίνακας 2

Σχεδιασμός 3:

Μέθοδος	Σετ εκπαίδευσης	Σετ ελέγχου
COX	$0.672 \pm 0.029b$	$0.650 \pm 0.037a$
FS	$0.671 \pm 0.032b$	$0.648 \pm 0.041a$
Liestol	$0.679 \pm 0.030a$	$0.635 \pm 0.037b$
Buckley	$0.667 \pm 0.037b$	$0.647 \pm 0.042a$

Πίνακας 3

Σχεδιασμός 4:

Μέθοδος	Σετ εκπαίδευσης	Σετ ελέγχου
COX	$0.842 \pm 0.030a$	$0.824 \pm 0.028a$
FS	$0.825 \pm 0.032b$	$0.801 \pm 0.032b$
Liestol	$0.823 \pm 0.031b$	$0.775 \pm 0.044c$
Buckley	$0.803 \pm 0.033c$	$0.786 \pm 0.034c$

Πίνακας 4

Σχεδιασμός 5:

Μέθοδος	Σετ εκπαίδευσης	Σετ ελέγχου
COX	$0.916 \pm 0.030a$	$0.870 \pm 0.041a$
FS	$0.904 \pm 0.032a$	$0.863 \pm 0.043a$
Liestol	$0.906 \pm 0.034a$	$0.827 \pm 0.051b$
Buckley	$0.861 \pm 0.066b$	$0.842 \pm 0.071b$

Πίνακας 5

Σχεδιασμός 6:

Μέθοδος	Σετ εκπαίδευσης	Σετ ελέγχου
COX	$0.749 \pm 0.041a$	$0.697 \pm 0.050a$
FS	$0.683 \pm 0.050b$	$0.613 \pm 0.075b$
Liestol	$0.701 \pm 0.055b$	$0.601 \pm 0.050b$
Buckley	$0.551 \pm 0.100c$	$0.519 \pm 0.086c$

Πίνακας 6

Σχεδιασμός 7:

Μέθοδος	Σετ εκπαίδευσης	Σετ ελέγχου
COX	$0.604 \pm 0.028b$	$0.592 \pm 0.038a$
FS	$0.609 \pm 0.029b$	$0.587 \pm 0.041a$
Liestol	$0.623 \pm 0.031a$	$0.583 \pm 0.038a$
Buckley	$0.597 \pm 0.043b$	$0.580 \pm 0.059a$

Πίνακας 7

Σχεδιασμός 8:

Μέθοδος	Σετ εκπαίδευσης	Σετ ελέγχου
COX	$0.662 \pm 0.023a, b$	$0.661 \pm 0.025a$
FS	$0.662 \pm 0.026a, b$	$0.662 \pm 0.025a$
Liestol	$0.664 \pm 0.022a$	$0.651 \pm 0.029b$
Buckley	$0.661 \pm 0.024b$	$0.661 \pm 0.026a$

Πίνακας 8

Σχεδιασμός 9:

Μέθοδος	Σετ εκπαίδευσης	Σετ ελέγχου
COX	$0.902 \pm 0.022a$	$0.886 \pm 0.026a$
FS	$0.889 \pm 0.025a$	$0.875 \pm 0.027a, b$
Liestol	$0.890 \pm 0.030a$	$0.857 \pm 0.042b, c$
Buckley	$0.858 \pm 0.084b$	$0.847 \pm 0.076c$

Πίνακας 9

* Οι τιμές σε κάθε στήλη που μοιράζονται το ίδιο γράμμα (a,b,c), στατιστικά δεν διαφέρουν. Διαφορετικά γράμματα, υποδηλώνουν σημαντικές διαφορές στον έλεγχο Tukey.

4.2.1 ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Τα αποτελέσματα της μελέτης προσομοίωσης παρουσιάζονται στους Πίνακες (1) μέχρι (9). Για τη **φάση εκπαίδευσης**, η μέθοδος Faraggi-Simon είχε παρόμοια απόδοση με τη παλινδρόμηση Cox σε 7 από τους 9 σχεδιασμούς (Σχεδιασμοί 1-3,5,7-9), και είχε χειρότερη απόδοση για δύο σχεδιασμούς (Σχεδιασμοί 4 και 6). Η μέθοδος Liestol-Andersen-Andersen ξεπέρασε σε απόδοση την παλινδρόμηση του Cox σε τρεις σχεδιασμούς (Σχεδιασμοί 2,3, και 7), είχαν παρόμοια απόδοση σε τρεις σχεδιασμούς (Σχεδιασμοί 5,8, και 9), και είχε χειρότερη απόδοση για τρεις σχεδιασμούς (Σχεδιασμοί 1,4, και 6). Η μέθοδος Buckley-James παρουσίασε την ίδια απόδοση με αυτή της παλινδρόμησης του Cox για πέντε σχεδιασμούς (Σχεδιασμοί 1-3,7,8), αλλά χειρότερη στους τέσσερις υπόλοιπους σχεδιασμούς.

Για τη **φάση ελέγχου**, παρατηρήθηκε ένα διαφορετικό μοτίβο στην απόδοση των μεθόδων νευρωνικών δικτύων. Στη περίπτωση όπου δεν υπήρχαν αποκοπές αλλά ούτε αλληλεπιδράσεις (Σχεδιασμός 1), οι μέθοδοι Faraggi-Simon και Buckley-James είχαν παρόμοια απόδοση με αυτή της παλινδρόμησης Cox. Αντίθετα, η μέθοδος Liestol-Andersen-Andersen υστερούσε σημαντικά από την παλινδρόμηση Cox ($p < 0.05$). Ένα παρόμοιο μοτίβο στις μεθόδους των νευρωνικών δικτύων παρατηρήθηκε στις περιπτώσεις όπου υπήρχε μερική αποκοπή δεδομένων (περίπου 20%) με ή χωρίς αλληλεπιδράσεις μεταξύ των δύο εισόδων (Σχεδιασμοί 2 και 3).

Στη περίπτωση (Σχεδιασμός 4) με τέσσερις εισόδους, μικρές ή μέτριες αλληλεπιδράσεις, και μερική αποκοπή (περίπου 30%), η παλινδρόμηση Cox ξεπέρασε σε απόδοση τη μέθοδο Faraggi-Simon, η οποία με τη σειρά της ξεπέρασε σημαντικά σε απόδοση τις μεθόδους Liestol-Andersen-Andersen και Buckley-James ($p < 0.05$). Για τον Σχεδιασμό 5, που είναι παρόμοιος με τον Σχεδιασμό 4 εκτός από το γεγονός ότι το ποσοστό αποκοπής αυξήθηκε από 30% σε 70%, η μέθοδος Faraggi-Simon παρουσίασε παρόμοια απόδοση με αυτή της παλινδρόμησης του Cox, και ξεπέρασε σημαντικά σε απόδοση τις άλλες δύο μεθόδους νευρωνικών δικτύων ($p < 0.05$). Για τη περίπτωση με μεγάλες αλληλεπιδράσεις τριών συμμεταβλητών (Σχεδιασμός 6), η παλινδρόμηση του Cox είχε καλύτερη απόδοση από τις μεθόδους Faraggi-Simon και Liestol-Andersen-Andersen, και οι οποίες με τη σειρά τους ξεπέρασαν σημαντικά σε απόδοση τη μέθοδο Buckley-James. Στη περίπτωση του μη

αναλογικού μοντέλου διακινδύνευσης (Σχεδιασμός 7), όλες οι μέθοδοι νευρωνικών δικτύων παρουσίασαν το ίδιο καλές αποδόσεις με αυτή της παλινδρόμησης Cox.

Στη συνέχεια αξιολογήθηκε η επίδραση της αύξησης του αριθμού των μονάδων από $n = 100$ σε $n = 200$ (Σχεδιασμοί 8 και 9). Η αύξηση του μεγέθους του δείγματος, γενικά αύξησε και την απόδοση της παλινδρόμησης Cox αλλά και των τριών μεθόδων νευρωνικών δικτύων. Η παλινδρόμηση Cox και δύο από τις μεθόδους νευρωνικών δικτύων (Faraggi-Simon και Buckley-James) είχαν παρόμοιες αποδόσεις για τον Σχεδιασμό 8, ενώ για τον Σχεδιασμό 9 μια μέθοδος νευρωνικών δικτύων (Faraggi-Simon) είχε παρόμοια απόδοση με αυτή της παλινδρόμησης Cox.

4.2.2 ΑΠΟΔΟΣΗ ΤΩΝ ΜΕΘΟΔΩΝ

Τα τελευταία χρόνια, έχουν προταθεί διάφορες μέθοδοι που να επιτρέπουν στην ανάλυση επιβίωσης τη χρήση νευρωνικών δικτύων. Αυτές οι μέθοδοι εφαρμόστηκαν στη συγκεκριμένη εφαρμογή με τη χρήση του στατιστικού πακέτου EPILOG PLUS® NEURAL, και αξιολογήθηκαν σε μια Monte Carlo προσομοίωση. Οι προσομοιώσεις στην εφαρμογή αυτή αντικατοπτρίζουν ένα αντιπροσωπευτικό δείγμα από δυνατά μοντέλα και μεθόδους. Βασιζόμενοι στον δείκτη C, τα συνολικά ευρήματα της φάσης ελέγχου για τους Σχεδιασμούς 1 μέχρι 9 είναι ως ακολούθως.

Καμία μέθοδος νευρωνικών δικτύων δεν παρουσίασε καλύτερη απόδοση από την παλινδρόμηση του Cox όταν αυτή εφαρμόστηκε βέλτιστα (δηλαδή οι αλληλεπιδράσεις συμπεριλήφθηκαν στο μοντέλο όταν αυτές υπήρχαν). Σε σύγκριση με την παλινδρομηση Cox, η μέθοδος Faraggi-Simon είχε την ίδια απόδοση σε 7 από τους 9 σχεδιασμούς. Η απόδοση ήταν παρόμοια γιατί η μέθοδος Faraggi-Simon διατήρησε τη φύση της αναλογικής διακινδύνευσης που έχει το μοντέλο του Cox ενώ παράλληλα παρείχε τη δυνατότητα να μοντελοποιεί τις πολυπλοκότητες και τις αλληλεπιδράσεις στα δεδομένα εισόδου.

Η μέθοδος Liestol-Andersen-Andersen είχε παρόμοια απόδοση με αυτή της παλινδρόμησης Cox στη περίπτωση της μη αναλογικής διακινδύνευσης (Σχεδιασμός

7). Αυτά τα αποτελέσματα οφείλονται πιθανότατα στη χρήση της γενικής μορφής της μεθόδου Liestol-Andersen-Andersen, η οποία επιτρέπει τη μοντελοποίηση της μη αναλογικής διακινδύνευσης. Συνολικά, η μέθοδος Liestol-Andersen-Andersen είχε χαμηλή απόδοση, γεγονός το οποίο μπορεί να οφείλεται στην απώλεια πληροφοριών όταν οι χρόνοι επιβίωσης ομαδοποιούνται σε μικρό αριθμό διαστημάτων. Επιπλέον, η γενική μορφή της μεθόδου αυτής έχει περισσότερες παραμέτρους προς εκτίμηση από τις άλλες δύο μεθόδους νευρωνικών δικτύων.

Τέλος, η μέθοδος Buckley-James απέδωσε το ίδιο καλά με τη παλινδρόμηση Cox για 5 από τους 9 σχεδιασμούς, συμπεριλαμβανομένου του σχεδιασμού με τη μη αναλογική διακινδύνευση (Σχεδιασμός 7). Εν τούτοις, η μέθοδος αυτή παρουσίασε μειωμένη απόδοση σε σχέση με τη παλινδρόμηση Cox στις περιπτώσεις μοντέλων υψηλού βαθμού με αλληλεπιδράσεις (Σχεδιασμοί 4-6 και 9). Αυτό το αποτέλεσμα οφείλεται πιθανόν στη μορφή της μεθόδου ή/και στην επιλογή της συνάρτησης λάθους.

4.2.3 ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΕΙΣ ΣΤΗΝ ΑΝΑΛΥΣΗ ΠΑΛΙΝΔΡΟΜΗΣΗΣ ΤΟΥ COX

Στην εφαρμογή αυτή, συμπεριλήφθηκαν οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ όλων των ζευγών συμμεταβλητών στην παλινδρόμηση του Cox, όταν ο σχεδιασμός είχε κάποια αλληλεπίδραση (Σχεδιασμός 3-6, 8 και 9). Αν οι αλληλεπιδράσεις δεν συνυπολογίζονταν στο μοντέλο του Cox, τότε οι σχετικές αποδόσεις των μεθόδων νευρωνικών δικτύων θα ήταν καλύτερες. Για παράδειγμα, η μέθοδος Faraggi-Simon θα παρουσίαζε αρκετά καλύτερη απόδοση από τη παλινδρόμηση του Cox για τον Σχεδιασμό 6 (σημαντική αλληλεπίδραση τριών συμμεταβλητών), και θα είχε επίσης ισοδύναμες δυνατότητες με τη παλινδρόμηση του Cox για όλους τους υπόλοιπους σχεδιασμούς που περιλαμβάνουν αλληλεπιδράσεις (Σχεδιασμοί 3-5, 8 και 9). Η μέθοδος Liestol-Andersen-Andersen θα είχε παρόμοια απόδοση με τη παλινδρόμηση Cox για δύο σχεδιασμούς που περιελάμβαναν αλληλεπιδράσεις (Σχεδιασμοί 6 και 9). (Δεν σημειώθηκε βελτίωση στη μέθοδο Buckley-James). Αυτά τα αποτελέσματα

υποδεικνύουν ότι τα νευρωνικά δίκτυα, σχεδιασμένα για δεδομένα επιβίωσης, μπορούν αυτόματα να συμπεριλάβουν τις αλληλεπιδράσεις, κάτι για το οποίο στην παλινδρόμηση του Cox απαιτεί την επίγνωση και την εμπειρία του αναλυτή δεδομένων.

4.2.4 ΑΛΛΑΓΗ ΤΟΥ ΑΡΙΘΜΟΥ ΔΙΑΣΤΗΜΑΤΩΝ ΣΤΗ ΜΕΘΟΔΟ LIESTOL-ANDERSEN-ANDERSEN

Ένας παράγοντας που είχε άμεση επίδραση στην απόδοση της μεθόδου Liestol-Andersen-Andersen ήταν το γεγονός ότι οι χρόνοι επιβίωσης ομαδοποιήθηκαν σε μόνο τρία διαστήματα. Για παράδειγμα, έστω στη περίπτωση που ένα δεδομένο διάστημα ήταν αρκετά μεγάλο (π.χ. 2-5 χρόνια), και δύο μονάδες αποτύχουν στο ίδιο διάστημα, η μια στα 2.5 χρόνια, η άλλη στα 4.5 χρόνια. Στη μέθοδο Liestol-Andersen-Andersen, η παρατηρούμενη έξοδος και για τις δύο μονάδες στο κόμβο-στόχο θα ήταν ίση με 1, και έτσι η πληροφορία ότι η δεύτερη μονάδα είχε μεγαλύτερη επιβίωση δεν χρησιμοποιείται. Αντίθετα, οι μέθοδοι Faraggi-Simon και Buckley-James χρησιμοποιούν αυτή τη πληροφορία στη συνάρτηση λάθους.

Μελετήθηκε όμως το αποτέλεσμα της αύξησης του αριθμού των διαστημάτων (και ως εκ τούτου η μείωση της διάρκειας κάθε διαστήματος), για τη μέθοδο Liestol-Andersen-Andersen. Όταν αυξήθηκε ο αριθμός των διαστημάτων από 3 σε 5 για τον Σχεδιασμό 4, παρατηρήθηκε μια μέση αύξηση του δείκτη C από 0.775 σε 0.781 (μια διαφορά 0.006) για το σετ ελέγχου. Περαιτέρω αύξηση του αριθμού των διαστημάτων από 5 σε 9 οδήγησε σε αύξηση του δείκτη C σε 0.782 (μια διαφορά 0.007).

4.2.5 ΑΡΧΙΤΕΚΤΟΝΙΚΗ ΤΩΝ ΝΕΥΡΩΝΙΚΩΝ ΔΙΚΤΥΩΝ

Επιπλέον διερευνήθηκε το αποτέλεσμα της αλλαγής στην αρχιτεκτονική των νευρωνικών δικτύων, με την αύξηση του αριθμού των κρυφών νευρώνων από 2 σε 5 για τους Σχεδιασμούς 4 και 6 (Πίνακες 10,11). Για τον Σχεδιασμό 4, η αύξηση των αριθμών των κρυφών νευρώνων βελτίωσε την απόδοση των νευρωνικών δικτύων για τις μεθόδους Faraggi-Simon και Liestol-Andersen-Andersen για το σετ εκπαίδευσης, αλλά όχι για το σετ ελέγχου. Όταν όμως η αλληλεπίδραση ήταν σημαντική (Σχεδιασμός 6), η αύξηση των κρυφών νευρώνων βελτίωσε την απόδοση των μεθόδων Faraggi-Simon και Liestol-Andersen-Andersen και για το σετ εκπαίδευσης, αλλά και το σετ ελέγχου. Μια καλή προσαρμογή στα δεδομένα εκπαίδευσης ήταν εμφανές και για τους δύο σχεδιασμούς. Στη μέθοδο Buckley-James σημειώθηκε μια αμελητέα αύξηση στην απόδοση της κάτι το οποίο δείχνει ότι η μέθοδος αυτή δεν αποδίδει καλά στις περιπτώσεις με σύνθετες αλληλεπιδράσεις.

Μέθοδος	Κρυφοί νευρώνες	Σετ εκπαίδευσης	Σετ ελέγχου
FS	2	0.825 ± 0.032	0.801 ± 0.032
FS	5	0.839 ± 0.032	0.794 ± 0.032
Liestol	2	0.823 ± 0.031	0.775 ± 0.044
Liestol	5	0.872 ± 0.022	0.744 ± 0.042
Buckley	2	0.803 ± 0.033	0.786 ± 0.034
Buckley	5	0.805 ± 0.034	0.787 ± 0.035

Πίνακας 10

Μέθοδος	Κρυφοί νευρώνες	Σετ εκπαίδευσης	Σετ ελέγχου
FS	2	0.683 ± 0.050	0.613 ± 0.075
FS	5	0.761 ± 0.046	0.651 ± 0.049
Liestol	2	0.701 ± 0.055	0.601 ± 0.050
Liestol	5	0.849 ± 0.030	0.643 ± 0.055
Buckley	2	0.551 ± 0.100	0.519 ± 0.086
Buckley	5	0.558 ± 0.106	0.521 ± 0.078

Πίνακας 11

4.2.6 ΠΕΡΙΟΡΙΣΜΟΣ ΕΦΑΡΜΟΓΗΣ

Ένας περιορισμός αυτής της εφαρμογής ήταν η χρήση προσομοιωμένων δεδομένων. Παρόλο που αυτή η προσέγγιση επέτρεψε μια συστηματική αξιολόγηση της απόδοσης των μοντέλων, τα δεδομένα ακολουθούσαν μοτίβα τα οποία είναι περισσότερο ευνοϊκά για το μοντέλο παλινδρόμησης του Cox. Οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ των συμμεταβλητών ήταν μόνο πολλαπλασιαστικές και οι μεταβλητές ακολουθούσαν είτε κανονική κατανομή είτε κατανομή Bernoulli. Επομένως θα ήταν αναμενόμενο μια παλινδρόμηση Cox με αλληλεπιδράσεις να παρουσιάζει υψηλή απόδοση με τις πιο πάνω συνθήκες. Κάποιες κλινικές βάσεις δεδομένων θα μπορούσαν να έχουν αλληλεπιδράσεις και άλλα χαρακτηριστικά τα οποία δεν μπορούσαν να μοντελοποιηθούν εύκολα από μια προσέγγιση της παλινδρόμησης Cox.

4.2.7 ΠΛΕΟΝΕΚΤΗΜΑΤΑ ΚΑΙ ΜΕΙΟΝΕΚΤΗΜΑΤΑ ΤΩΝ ΝΕΥΡΩΝΙΚΩΝ ΔΙΚΤΥΩΝ

Η τεχνολογία των νευρωνικών δικτύων έχει κινήσει ιδιαίτερα το ενδιαφέρον τα τελευταία χρόνια, εν μέρει γιατί μπόρεσε αποτελεσματικά να εισάγει προηγμένα εργαλεία μοντελοποίησης σε ηλεκτρονικούς υπολογιστές. Ένα από τα πλεονεκτήματα των νευρωνικών δικτύων είναι το ότι μπορούν να αναγνωρίσουν πολύπλοκα πρότυπα μεταξύ των εισόδων.

Αντίθετα, ένα μειονέκτημα των νευρωνικών δικτύων, είναι ότι σε κάποιες εφαρμογές ενδέχεται να μοντελοποιούν «ιδιότυπα» χαρακτηριστικά του σετ εκπαίδευσης. Όταν συμβαίνει αυτό, λέμε ότι τα νευρωνικά δίκτυα «έμαθαν υπερβολικά» (overlearned), και ενώ εμφανίζονται να αποδίδουν υπερβολικά καλά στο σετ εκπαίδευσης, εντούτοις επιπλέον έλεγχος τους σε νέα δεδομένα θα ήταν γενικά κατά πολύ μικρότερης επιτυχίας. Το γεγονός αυτό ήταν εμφανές στην εφαρμογή αυτή. Για παράδειγμα, συγκρίνοντας τα αποτελέσματα για το σετ εκπαίδευσης και το σετ ελέγχου στο

Σχεδιασμό 5, οι αποδόσεις στις μεθόδους Faraggi-Simon, Liestol-Andersen-Andersen και Buckley-James, μειώθηκαν κατά 0.041, 0.079 και 0.019 αντίστοιχα (Πίνακας 5).

Ένα ακόμα μειονέκτημα των νευρωνικών δικτύων αποτελεί το γεγονός ότι είναι «υπολογιστικά πολύπλοκα» και είναι πιθανόν να χρειάζονται πολύ χρόνο ώστε να εκπαιδευτούν και να συγκλίνουν σε μια λύση. Με κάποιους εναλλακτικούς αλγόριθμους ελαχιστοποίησης που χρησιμοποιήθηκαν, οι μέθοδοι Liestol-Andersen-Andersen και Buckley-James συνέκλιναν σε λύση αρκετά γρήγορα. Αντίθετα, η μέθοδος Faraggi-Simon που χρησιμοποιεί τον απλό αλγόριθμο κλίσης για ελαχιστοποίηση, χρειάστηκε πολύ περισσότερο χρόνο για να εκπαιδευτεί. Επιπλέον, τα νευρωνικά δίκτυα ενδέχεται να μην συγκλίνουν στη βέλτιστη λύση, αλλά σε κάποιο τοπικό ελάχιστο, και αυτό οδηγεί στο να αποδίδουν μη ιδανικά. Κάποιοι μέθοδοι, όπως για παράδειγμα ο γενετικός αλγόριθμος, μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την αποφυγή των τοπικών ελαχίστων. Ωστόσο, ο αλγόριθμος αυτός δεσμεύει μεγάλη μνήμη στον υπολογιστή και είναι αργός στη σύγκλιση.

Ένα πλεονέκτημα της παλινδρομησης Cox, είναι το γεγονός ότι οι συντελεστές παλινδρόμησης μπορούν να ερμηνευτούν ως η πιθανοφάνεια ενός αποτελέσματος, δεδομένων κάποιων τιμών του παράγοντα ρίσκου (π.χ. ποσοστά πιθανοτήτων ή αναλογικά ρίσκα). Τα συναπτικά βάρη των νευρωνικών δικτύων συνήθως δεν έχουν παρόμοια ερμηνεία. Οι μέθοδοι που χρησιμοποιούν νευρωνικά δίκτυα και παρουσιάστηκαν σ' αυτή την εφαρμογή, είναι μόνο μερικές από τις πολλές επιλογές στην ανάλυση επιβίωσης.

4.2.8 ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Συνοπτικά, τα αποτελέσματα της μελέτης έδειξαν τα συγκριτικά πλεονεκτήματα των μεθόδων με νευρωνικά δίκτυα. Γενικά λοιπόν, η τεχνολογία των νευρωνικών δικτύων μπορεί να υπάρξει ως μια αποτελεσματική μέθοδος μοντελοποίησης δεξιών-αποκομμένων δεδομένων. Ωστόσο, η απόδοσή τους είναι κάπως ευμετάβλητη, ανάλογα με τη μέθοδο στην οποία χρησιμοποιούνται.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

1. Androulakis, E., Koukouvinos, C., Mylona, K. and Vonta F. (2010). A real survival analysis application via variable selection methods for Cox's proportional hazards model. *Journal of Applied Statistics*, **37**, pp. 1399-1406.
2. Bishop, C.M. (1995). *Neural Networks for Pattern Recognition*. Oxford: Oxford University Press.
3. Bors, G.A. (2001). *Introduction of the Radial Basis Function (RBF) Networks* Department of Computer Science, University of York.
4. Buckley, J. and James I. (1979). *Linear regression with censored data*.
5. Collet, D. (2003). *Modelling Survival Data in Medical Research*. Chapman & Hall/CRC, Boca Raton.
6. Cox, D.R. (1972). *Regrassion models and life-tables*.
7. Faraggi, D. and Simon, R. (1995). A Neural Network Model for Survival Data. *Statistics in medicine*, **14**, pp. 73-82.
8. Fieller, N. (2007). *Medical Statistics: Survival Data, Course Booklet*. Department of Probability & Statistics, University of Sheffield.
9. Galuchkin, I.A. (2007). *Neural Network Theory*.
10. Gurney, K. (1997). *An introduction to Neural Networks*. University of Sheffield.

11. Haykin, S. (1999). *Neural Networks, a comprehensive foundation*. Second edition, McMaster University Hamilton, Ontario, Canada.
12. Kamath, C. (2009). *Scientific Data Mining, a Practical Perspective*. Philadelphia: Society for Industrial and Applied Mathematics.
13. Kawaguchi, K. (2000). *A multithreaded software model for backpropagation neural network applications*.
14. Liestol, K, Andersen, P.K. and Andersen, U. (1994). *Survival analysis and neural nets*. *Statist. Med*, **13**, pp. 1189-1200.
15. Marubini, E. and Valecchi, G.M. (2004). *Analysing Survival Data from Clinical Trials and Observational Studies*.
16. Noriega, L. (2005). *Multilayer Perceptron Tutorial*. School of Computing, Staffordshire University.
17. Ohno-Machado, L. (1997). A Comparison of Cox Proportional Hazards and Artificial Neural Network Models for Medical Prognosis. *Comput. Biol. Med.*, **27**, No. 1, pp. 55-65.
18. Rojas, R. (1996). *Neural Networks*. Springer-Verlag, Berlin.
19. Suka, M., Shinichi, O., Ichimura, T., Yoshida, K. and Takezawa J. (2004). Comparison of Proportional Hazard Model and Neural Network Models in a real data set of intensive care unit patients. *Studies in Health Technology and Informatics*, **107**, pp. 741-745.

20. Tao, K.M. (1993). A Closer Look at the Radial Basis Function (RBF) Networks. *Signals, Systems and Computers, 1993, Conference Record of The Twenty-Seventh Asilomar Conference*, **1**, pp. 401-405.
21. Thuraisingham, B. (1999). *Data Mining, Technologies, Techniques, Tools and Trends*.
22. Warren, S. (1994). *Neural Networks and Statistical Models*. Proceedings of the Nineteenth Annual SAS Users Group International Conference, April, 1994.
23. Weiss, M.S. and Indurkha, N., (1997). *Predictive Data Mining, a Practical Guide*.
24. Xiang, A., Lapuerta, P., Ryutov, A., Buckley, J., Azen, S. (2000). Comparison of the performance of neural network methods and Cox regression for censored survival data. *Computational Statistics & Data Analysis*, **34**, pp. 243-257.
25. Καρώνη, Χ., (2005). *Μοντέλα Αξιοπιστίας και Επιβίωσης*. Ε.Μ.Π.
26. Ρίζος, Γ., (1996). *Τεχνητά νευρωνικά δίκτυα*. Αθήνα: Εκδόσεις Νέων Τεχνολογιών.
27. Real Intelligence, Multi-layer Perceptron Tutorial by Iefteris http://www.realintelligence.net/tut_mlp.
28. Wells, T., “Neural networks tutorial, the single layer perceptron and multilayer perceptron”, <http://sydney.edu.au/engineering/it/~irena/ai01/nn/travtute.htm>.

29. Schraudolph, N. and Cummins, F., “Introduction to neural networks”, <http://www.csi.ucd.ie/staff/fcummins/NNcourse/intro.html>.
30. NeuroAI, Artificial Neural Networks, Digital Signal Processing – Intelligent systems and Neural Networks <http://www.learnartificialneuralnetworks.com/>.