



## Προγραμματιστική άσκηση 4 - Radial Basis Function Network

Όνομα: Μιχαήλ-Παναγιώτης Μπόφος

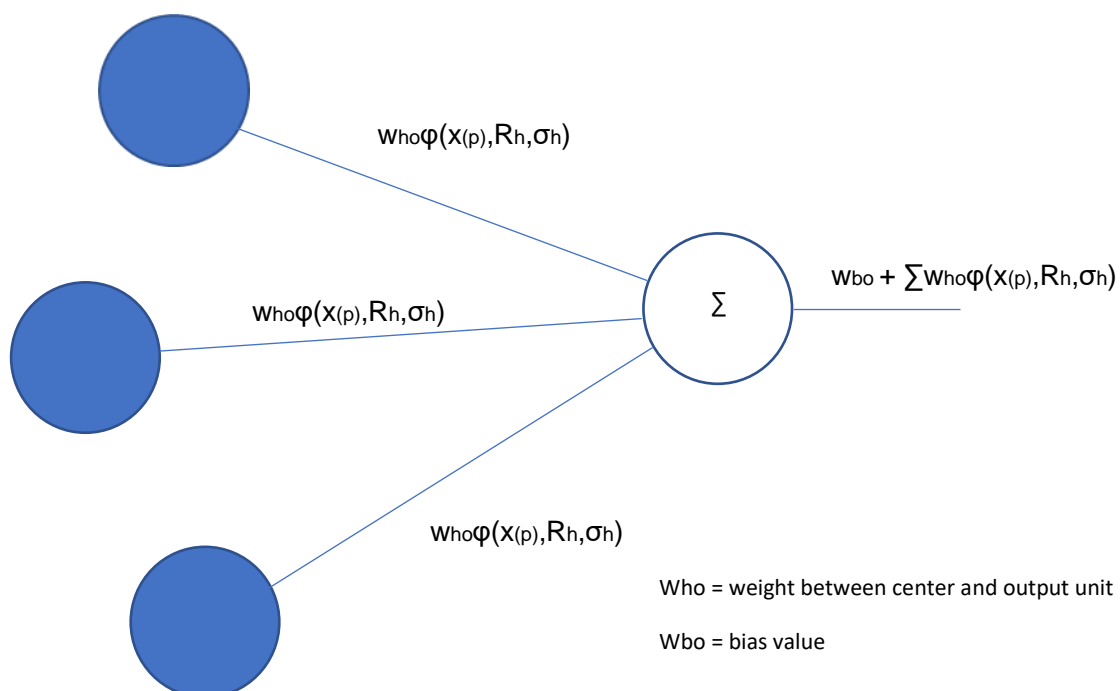
Ταυτότητα: ΑΟ082689

### Δομή Δικτύου

Η δομή του δικτύου μας καθορίζεται σε μεγάλο βαθμό από τη δομή των δεδομένων μας. Ο στόχος μας είναι με βάση τα πενήντα - τρία πειραματικά δεδομένα κάθε μορίου να μπορέσουμε να υπολογίσουμε τη βιολογική του δράση. Επομένως, το αποτέλεσμα του δικτύου μας είναι μια τιμή άρα θα χρειαστούμε μόνο ένα output unit. Όσο αφορά τον αριθμό των κέντρων θα το διερευνήσουμε παρακάτω. Ωστόσο, αυτό που ξέρουμε εξ αρχής είναι ότι κάθε διάνυσμα εισόδου έχει μέγεθος πενήντα - τρία, άρα η θέση κάθε κέντρου αποτελείται και αυτή από πενήντα τρεις τιμές. Ταυτόχρονα κάθε κέντρο έχει τη δική του τιμή  $\sigma$  (πλάτος γκαουσιανής συνάρτησης). Οι αρχικές θέσεις, το αρχικό  $\sigma$  και ο αριθμός των κέντρων καθορίζονται από τον χρήστη.

### Συνδεσμολογία & Λειτουργία

Το δίκτυό μας είναι πλήρως συνδεδεμένο από το επίπεδο των κέντρων (hidden layer) στο επίπεδο εξόδου (output layer). Την ένωση κάθε κέντρου με το output unit την ορίζει μία τιμή βάρους (η αρχικοποίηση της γίνεται με την `Math.random()` και η αρχική τιμή κυμαίνεται μεταξύ του -1 με το +1). Για τη μάθηση του δικτύου μας θα χρησιμοποιήσουμε τον αλγόριθμο των μεταβαλλόμενων κέντρων, άρα θα έχουμε έξι μεταβλητές (θέσεις κέντρων, πλάτος γκαουσιανής, ρυθμοί μάθησης και αριθμός επαναλήψεων). Βάσει της θεωρίας κάθε κέντρο αντικατοπτρίζει την κατανομή των δεδομένων εισόδου στο χώρο. Με τη χρήση της ευκλείδειας απόστασης μεταξύ της θέσης του και των δεδομένων εισόδου το κάθε κέντρο υπολογίζει την έξοδό του (γκαουσιανή ευκλείδεια επί βάρους κέντρου). Έπειτα, το output unit έχει ως τιμή εξόδου το άθροισμα των εξόδων των κέντρων συν μια τιμή bias.



## Επιλογή Μεταβλητών

Στην προκειμένη περίπτωση θέλουμε παλινδρόμηση κατά προσέγγιση και όχι παρεμβολή καθώς θέλουμε να γενικεύσουμε τη γνώση μας (πχ να υπολογίσουμε τη βιολογική δράση ενός καινούργιου μορίου. Ως εκ τούτου, σύμφωνα με τη θεωρία θέλουμε λίγα κέντρα (λιγότερα από τα δεδομένα εισόδου) και μεγάλο πλάτος γκαουσιανής (τι ορίζουμε ως μεγάλο και μικρό θα το εξερευνήσουμε αργότερα - πειραματικά). Η πειραματική μέθοδος που ακολουθήσαμε είναι απλή: δοκιμάσαμε πολλαπλούς συνδυασμούς από ρυθμούς μάθησης, πλήθος κέντρων, εποχών και πλάτους γκαουσιανών.