



ΓΕΩΠΟΝΙΚΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΑΘΗΝΩΝ
ΤΜΗΜΑ ΕΠΙΣΤΗΜΗΣ ΤΡΟΦΙΜΩΝ & ΔΙΑΤΡΟΦΗΣ ΤΟΥ ΑΝΘΡΩΠΟΥ
ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΜΙΚΡΟΒΙΟΛΟΓΙΑΣ & ΒΙΟΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΤΡΟΦΙΜΩΝ

ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΣΠΟΥΔΩΝ
ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ ΑΣΦΑΛΕΙΑΣ & ΠΟΙΟΤΗΤΑΣ ΤΡΟΦΙΜΩΝ

Μεταπτυχιακή Διπλωματική Εργασία

Ανάπτυξη αλγορίθμου μηχανικής εκμάθησης για την ανάλυση εικόνων πολυφασματικής απεικόνισης με σκοπό την ταχεία εκτίμηση της μικροβιολογικής ποιότητας συσκευασμένων φυσικών μαύρων επιτραπέζιων ελιών και τεμαχίων στήθους κοτόπουλου

Αριστείδης Γ. Ναούμ

Επιβλέπων καθηγητής:
Ευστάθιος Πανάγου, Καθηγητής ΓΠΑ

ΑΘΗΝΑ
2023

ΓΕΩΠΟΝΙΚΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΑΘΗΝΩΝ
ΤΜΗΜΑ ΕΠΙΣΤΗΜΗΣ ΤΡΟΦΙΜΩΝ & ΔΙΑΤΡΟΦΗΣ ΤΟΥ ΑΝΘΡΩΠΟΥ
ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΜΙΚΡΟΒΙΟΛΟΓΙΑΣ & ΒΙΟΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΤΡΟΦΙΜΩΝ

Μεταπτυχιακή Διπλωματική Εργασία

Ανάπτυξη αλγορίθμου μηχανικής εκμάθησης για την ανάλυση εικόνων πολυφασματικής απεικόνισης με σκοπό την ταχεία εκτίμηση της μικροβιολογικής ποιότητας συσκευασμένων φυσικών μαύρων επιτραπέζιων ελιών και τεμαχίων στήθους κοτόπουλου

Development of machine learning algorithms to analyze multispectral images for the rapid assessment of the microbiological quality of packaged natural black table olives and chicken breast fillet samples

Αριστείδης Γ. Ναούμ

Εξεταστική Επιτροπή:

Ευστάθιος Ζ. Πανάγου, Καθηγητής Γ.Π.Α. (επιβλέπων)

Γεώργιος Παπαδόπουλος, Καθηγητής Γ.Π.Α.

Φώτιος Μηλιένος, Επίκουρος Καθηγητής, Πάντειο Πανεπιστήμιο

Ανάπτυξη αλγορίθμου μηχανικής εκμάθησης για την ανάλυση εικόνων πολυφασματικής απεικόνισης με σκοπό την ταχεία εκτίμηση της μικροβιολογικής ποιότητας συσκευασμένων φυσικών μαύρων επιτραπέζιων ελιών και τεμαχίων στήθους κοτόπουλου

*ΠΜΣ Συστήματα Διαχείρισης Ποιότητας & Ασφάλειας Τροφίμων
Τμήμα Επιστήμης Τροφίμων & Διατροφής του Ανθρώπου
Εργαστήριο Μικροβιολογίας & Βιοτεχνολογίας Τροφίμων*

Περίληψη

Η μεγαλύτερη πρόκληση που αντιμετωπίζει σήμερα η βιομηχανία τροφίμων είναι (α) η εξασφάλιση επαρκών ποσοτήτων προκειμένου να καλυφθούν οι ανάγκες του πληθυσμού σε παγκόσμιο επίπεδο (Food Security), και (β) η διασφάλιση της ποιότητας και της ασφάλειας των τροφίμων (Food Safety). Οι στόχοι αυτοί συνδέονται άμεσα με την δυνατότητα εκτίμησης της μικροβιολογικής ποιότητας των τροφίμων, και είναι δυνατόν να αποτελέσει παράγοντα κινδύνου σε ότι αφορά στην ασφάλεια του τρόφιμου για τον τελικό καταναλωτή, άλλα επίσης παράγοντα αλλοίωσης, αυξάνοντας τις απώλειες των τροφίμων σε παγκόσμια κλίμακα. Το πρόβλημα εντείνεται εάν συνυπολογίσουμε το γεγονός ότι έως τώρα η πλειοψηφία των τεχνικών που εφαρμόζονται για την εκτίμηση της ποιότητας των τροφίμων βασίζονται σε χημικές ή μικροβιολογικές αναλύσεις, που είναι χρονοβόρες, έχουν υψηλό κόστος, απαιτούν εξειδικευμένο προσωπικό για να πραγματοποιηθούν και παρέχουν ετεροχρονισμένα αποτελέσματα. Στο πλαίσιο αυτό, το ενδιαφέρον στρέφεται στην εκμετάλλευση των ραγδαία αναπτυσσόμενων νέων τεχνολογιών, με σκοπό την ανάπτυξη ταχέων, μη επεμβατικών τεχνικών για την εκτίμηση της ποιότητας των τροφίμων σε μικρότερο χρόνο συγκριτικά με τις κλασικές μικροβιολογικές τεχνικές. Στην παρούσα μελέτη, χρησιμοποιώντας αλγορίθμους επιβλεπόμενης μηχανικής μάθησης αναγνώρισης εικόνας, αλλά και παλινδρόμηση μερικών ελαχίστων τετραγώνων (Partial Least Squares Regression, PLSR) για την επεξεργασία πολυφασματικών δεδομένων από φυσικές μαύρες επιτραπέζιες ελιές και φιλέτα κοτόπουλου σε διαφορετικές συνθήκες συντήρησης, δημιουργήθηκαν μοντέλα κατηγοριοποίησης των τροφίμων με βάση τον διαχωρισμό τους σε φρέσκα ή αλλοιωμένα, αλλά και πρόβλεψης της ολικής μικροβιακής χλωρίδας (OMX) και του πληθυσμού των ψευδομονάδων. Τα αποτελέσματα έδειξαν ότι είναι δυνατή η ανάπτυξη ικανοποιητικών μοντέλων αναφορικά με την εκτίμηση της μικροβιολογικής ποιότητας σε φιλέτα κοτόπουλου με βάση την τιμή του συντελεστή προσδιορισμού ($R^2 = 0,89$), όχι όμως το ίδιο αποτελεσματικά για τις μαύρες επιτραπέζιες ελιές, όπου ο συντελεστής προσδιορισμού είχε μη ικανοποιητικές τιμές ($R^2 = 0,053$). Αυτό μας οδηγεί στο συμπέρασμα ότι ο συνδυασμός της παλινδρόμησης μερικών ελαχίστων τετραγώνων με πολυφασματικά δεδομένα ως μεταβλητές εισόδου και μικροβιακό πληθυσμό ως μεταβλητή εξόδου, μπορεί να είναι αρκετά αποτελεσματικός στην εκτίμηση της μικροβιολογικής ποιότητας των τροφίμων. Ειδικότερα στην περίπτωση της συσκευασμένης φυσικής μαύρης επιτραπέζιας ελιάς, η συσχέτιση των φασμάτων με τον πληθυσμό της ολικής μικροβιακής χλωρίδας δεν ήταν ικανοποιητική, πιθανότητα λόγω της φύσης του τρόφιμου, όπου ο μικροβιακός πληθυσμός παραμένει σταθερός ή παρουσιάζει μικρές μεταβολές κατά τη διάρκεια της συντήρησης, με αποτέλεσμα η συσχέτισή του με φασματικά δεδομένα να μην είναι ικανοποιητική.

Επιστημονική Περιοχή:

Λέξεις Κλειδιά: Προβλεπτική μικροβιολογία, μηχανική μάθηση, τεχνητά νευρωνικά δίκτυα, πολυφασματική απεικόνιση, μαύρες επιτραπέζιες ελιές, φιλέτα κοτόπουλο

Development of machine learning algorithms to analyze multispectral images for the rapid assessment of the microbiological quality of packaged natural black table olives and chicken breast fillet samples

*MSc Systems of Food Quality & Safety Management
Department of Food Science & Human Nutrition
Food Microbiology & Biotechnology Laboratory*

Abstract

One of the major challenges of the food industry today is (a) to ensure enough food quantities to cover the needs of the global population (Food Security) and (b) to ensure the quality and safety of food supply (Food Safety). These challenges are directly associated with the need for assessment of the microbiological quality in foods, that can not only be a risk factor regarding the safety of the consumer, but also result in food spoilage. This issue becomes more important taking into account that food quality and safety inspection requires microbiological analysis that is expensive, destructive to the sample, laborious, require skilled personnel and provide retrospective results. Consequently, there is need for rapid and non-invasive technologies for the assessment of the microbiological quality of foods in a short time. The purpose of this study was to develop models for the prediction of the total viable counts (TVCs) and the population of pseudomonads in selected foods (packaged natural black table olives and chicken breast fillets) using machine learning algorithms for image recognition, as well as partial least squares regression (PLSR). The results indicated that it was possible to develop sufficient predictive models for the assessment of the microbiological quality of chicken breast fillets, with R^2 value of 0.89. However, in the case of packaged natural black olives the results were not satisfactory, as the acquired spectra could not describe the changes in the evolution of microorganisms of the surface of olives ($R^2 = 0.053$). Consequently, coupling PLSR with multispectral data as input variables and TVC or *Pseudomonas* spp. counts as output variables can be a very effective technique that will allow the assessment of the microbiological quality of foods based on spectral data. It must be underlined, however, that the association between spectral data and microbial counts was not effective in the case of table olives. This could be attributed to the fact that the population of microorganisms on the surface of olives did not present a clear increasing or decreasing trend during storage, but it remained unchanged with slight changes, and thus no effective association of the microbial counts with spectral data could be established.

Scientific Area: Predictive Microbiology

Keywords: Predictive microbiology, machine learning, neural networks, multispectral imaging, Black table olives, chicken fillet

Περιεχόμενα

Εισαγωγή.....	7
1. CNN	10
1.1 Τα βασικά στοιχεία των CNN	13
1.2 Είσοδος δεδομένων (εικόνες)	13
1.3 Επίπεδο συνέλιξης (Convolutional Layer)	13
1.4 Βήμα (Stride)	16
1.5 Περιθώριο (Padding)	17
1.6 Υποδειγματοληψία/Συγκέντρωση (Pooling)	18
1.7 Μη Γραμμικότητα – Συνάρτηση Ενεργοποίησης (Non-Linearity – Function of Activation)	19
1.8 Εμπροσθοβαρές Τεχνητό Νευρωνικό Δίκτυο (Feed-forward ANN)	22
1.9 Συναρτήσεις απώλειας (loss functions)	23
1.10 Κανονικοποίηση του CNN	24
2. PLSR and Multispectral Data	26
3. Υλικά και μέθοδοι.....	28
3.1 Πειραματικό μέρος.....	28
3.2 Πολυφασματική απεικόνιση (Multispectral Imaging, MSI).....	28
4. Εφαρμογή CNN – Αποτελέσματα.....	32
4.1 Αναγνώριση και κατηγοριοποίηση εικόνων PNG-Υπολογιστική όραση	32
4.2 Εναλλακτική οργάνωση και προ-επεξεργασία των δεδομένων	34
4.3 Siamese neural network (SNN).....	35
5. Ανάπτυξη μοντέλου παλινδρόμησης μερικών ελαχίστων τετραγώνων (Partial Least Square Regression)	37
5.1 PLSR	37
5.2 PLSR μοντέλα με χρήση πολυφασματικών δεδομένων από φυσικές μαύρες επιτραπέζιες ελιές.....	38
5.2.1 Μοντέλο PLSR για την πρόβλεψη της OMX με χρήση πολυφασματικών δεδομένων ως ανεξάρτητων μεταβλητών	38
5.2.2 Βελτιστοποίηση μοντέλου PLSR για την πρόβλεψη της OMX με χρήση πολυφασματικών δεδομένων ως ανεξάρτητων μεταβλητών	40
5.2.3 Μοντέλο PLSR για την πρόβλεψη του χρόνου συντήρησης με τη χρήση πολυφασματικών δεδομένων και της OMX ως ανεξάρτητων μεταβλητών	43

5.2.4 Βελτιστοποίηση μοντέλου PLSR για την πρόβλεψη του χρόνου συντήρησης με τη χρήση πολυφασματικών δεδομένων και της OMX ως ανεξάρτητων μεταβλητών	44
5.3 Ανάλυση πολυφασματικών δεδομένων με χρήση αλγορίθμου PLSR από φιλέτα κοτόπουλου με επικάλυψη εδώδιμης μεμβράνης χιτοζάνης	45
5.3.1 PLSR μοντέλο για την πρόβλεψη της OMX με χρήση δεδομένων πολυφασματικής απεικόνισης ως ανεξάρτητων μεταβλητών	45
5.3.2 Βελτιστοποίηση Μοντέλου PLSR για πρόβλεψη της OMX με χρήση πολυφασματικών δεδομένων ως ανεξάρτητων μεταβλητών. Μέθοδος επιλογής ανεξάρτητων μεταβλητών.....	47
5.3.3 PLSR μοντέλο για πρόβλεψη του πληθυσμού των ψευδομονάδων με χρήση πολυφασματικών δεδομένων ως ανεξάρτητων μεταβλητών	49
5.3.4 Βελτιστοποίηση του μοντέλου PLSR για την πρόβλεψη του πληθυσμού των ψευδομονάδων με χρήση πολυφασματικών δεδομένων ως ανεξάρτητων μεταβλητών. Μέθοδος επιλογής ανεξάρτητων μεταβλητών	51
5.3.5 Μοντέλο PLSR για την πρόβλεψη του χρόνου συντήρησης των δειγμάτων φιλέτου κοτόπουλου με τη χρήση πολυφασματικών δεδομένων και του πληθυσμού της OMX ως ανεξάρτητων μεταβλητών	53
5.3.6 Βελτιστοποίηση του μοντέλου PLSR για την πρόβλεψη του χρόνου συντήρησης με χρήση πολυφασματικών δεδομένων και του πληθυσμού της OMX ως ανεξάρτητων μεταβλητών. Μέθοδος επιλογής ανεξάρτητων μεταβλητών	56
5.3.7 Μοντέλο PLSR για πρόβλεψη του χρόνου συντήρησης με χρήση πολυφασματικών δεδομένων και του πληθυσμού των ψευδομονάδων ως ανεξάρτητων μεταβλητών....	57
5.3.8 Βελτιστοποίηση του μοντέλου PLSR για την πρόβλεψη του χρόνου συντήρησης με χρήση πολυφασματικών δεδομένων και πληθυσμού ψευδομονάδων ως ανεξάρτητων μεταβλητών. Μέθοδος επιλογής ανεξάρτητων μεταβλητών.....	60
5.4 Ανάλυση πολυφασματικών δεδομένων με τη χρήση αλγορίθμου PLSR από φιλέτα κοτόπουλου που συντηρήθηκαν σε αερόβιες συνθήκες υπό ψύξη (4°C) χωρίς επικάλυψη εδώδιμης μεμβράνης χιτοζάνης	62
5.4.1 PLSR μοντέλο για την πρόβλεψη της OMX με χρήση δεδομένων πολυφασματικής απεικόνισης ως ανεξάρτητων μεταβλητών.....	62
5.4.2 Βελτιστοποίηση Μοντέλου PLSR για πρόβλεψη της OMX με χρήση πολυφασματικών δεδομένων ως ανεξάρτητων μεταβλητών. Μέθοδος επιλογής ανεξάρτητων μεταβλητών	65
5.4.3. PLSR μοντέλο για πρόβλεψη του πληθυσμού των ψευδομονάδων με χρήση πολυφασματικών δεδομένων ανάκλασης ως ανεξάρτητων μεταβλητών.....	67
5.4.4 Βελτιστοποίηση του μοντέλου PLSR για την πρόβλεψη του πληθυσμού των ψευδομονάδων με χρήση πολυφασματικών δεδομένων ως ανεξάρτητων μεταβλητών. Μέθοδος επιλογής ανεξάρτητων μεταβλητών.....	70
5.4.5 Μοντέλο PLSR για την πρόβλεψη του χρόνου συντήρησης των δειγμάτων φιλέτου κοτόπουλου με τη χρήση πολυφασματικών δεδομένων και του πληθυσμού της OMX ως ανεξάρτητων μεταβλητών.....	72

5.4.6 Βελτιστοποίηση του μοντέλου PLSR για την πρόβλεψη του χρόνου συντήρησης με χρήση πολυφασματικών δεδομένων και του πληθυσμού της OMX ως ανεξάρτητων μεταβλητών. Μέθοδος επιλογής ανεξάρτητων μεταβλητών	73
5.4.7 Μοντέλο PLSR για την πρόβλεψη του χρόνου συντήρησης με χρήση πολυφασματικών δεδομένων και του πληθυσμού των ψευδομονάδων ως ανεξάρτητων Μεταβλητών	75
5.4.8 Βελτιστοποίηση του μοντέλου PLSR για την πρόβλεψη του χρόνου συντήρησης με χρήση πολυφασματικών δεδομένων και του πληθυσμού των ψευδομονάδων ως ανεξάρτητων μεταβλητών. Μέθοδος επιλογής ανεξάρτητων μεταβλητών.....	76
Συζήτηση και συμπεράσματα.....	80
Βιβλιογραφία.....	82
Παράρτημα: PLSR παλινδρόμηση σε περιβάλλον Python	85

ΕΥΡΕΤΗΡΙΟ ΣΥΝΤΟΜΕΥΣΕΩΝ

PLS-R	Μέθοδος των Μερικών Ελαχίστων Τετραγώνων Γραμμικής Παλινδρόμηση
R^2	Τετραγωνικός συντελεστής παλινδρόμησης ή Συντελεστής προσδιορισμού
Root Mean	
Squared Error (RMSE),	Τετραγωνική ρίζα του μέσου τετραγωνικού σφάλματος
CV Cross-Validation,	Διασταυρούμενη επικύρωση
ROI Region of Interest,	Περιοχή ενδιαφέροντος
ANN	Τεχνητό Νευρωνικό Δίκτυο
CNN	Συνελκτικό Νευρωνικό Δίκτυο
Feed Forward CNN	Εμπροσθοβαρές Νευρωνικό Δίκτυο
Back propagation	Ανάδραση
MSI	Πολύ-φασματική απεικόνιση
SVM	Μηχανής Διανυσματικής Υποστήριξης
Input Layer	Επίπεδο Εισόδου
Output Layer	Επίπεδο Εξόδου
Supervised Learning	Επιβλεπόμενη Μάθηση
Machine Learning	Μηχανική Μάθηση
Deep Learning	Βαθιά Μάθηση
Bias Units	Μονάδες Πόλωσης
Stride	Βήμα
Loss Function	Συναρτήσεις Απώλειας
Activation Function	Συναρτήσεις Ενεργοποίησης
Padding	Περιθώριο
Pooling	Επίπεδο Συγκέντρωσης
Kernel	Φίλτρο/ Πυρήνας
ReLU	Ανορθωτική Γραμμική Συνάρτηση
Tanh	Υπερβολική Εφαπτομένη

Εισαγωγή

Ο καθορισμός της ποιότητας των τροφίμων αποτελεί μια από τις μεγαλύτερες προκλήσεις στη βιομηχανία τροφίμων. Η ποιότητα παίζει κομβικό ρόλο τόσο σε θέματα ασφάλειας των καταναλωτών, όσο και στην εμπορική επιτυχία του προϊόντος και κατ' επέκταση στην οικονομική βιωσιμότητα των βιομηχανιών.

Για τον λόγο αυτό, είναι διαρκής η προσπάθεια της βιομηχανίας τροφίμων να βελτιώσει τις ήδη υπάρχουσες τεχνικές και μεθόδους για τον προσδιορισμό της ποιότητας. Το πρόβλημα όμως έγκειται στο γεγονός ότι ο όρος «ποιότητα» και ο τρόπος με τον οποίο αυτή αξιολογείται, είναι υποκειμενικός στις περισσότερες περιπτώσεις και βασίζεται στην οργανοληπτική αξιολόγηση. Σήμερα, η εκτίμηση της ποιότητας των τροφίμων πραγματοποιείται με εργαστηριακές αναλύσεις, οι οποίες έχουν υψηλό κόστος, απαιτούν χημικά αντιδραστήρια και εξειδικευμένο προσωπικό, είναι χρονοβόρες και παρέχουν ετεροχρονισμένα αποτελέσματα. Συνεπώς, υπάρχει ολοένα και αυξανόμενο ενδιαφέρον από τη βιομηχανία για την εφαρμογή ταχέων και μη επεμβατικών τεχνικών για τον καθορισμό της ποιότητας των τροφίμων (Han et al., 2022, Kumar et al., 2022)

Μία υποσχόμενη τεχνική είναι η πολυφασματική απεικόνιση (Multispectral imaging, MSI) και η υπέρ-φασματική απεικόνιση (Hyperspectral Imaging, HSI). Οι μέθοδοι αυτές συνδυάζουν τα πλεονεκτήματα της φασματοσκοπίας και της απεικόνισης (χωρική πληροφορία) (Mahesh et al., 2015).

Τα πολυφασματικά δεδομένα ανάκλασης παράγονται από την εκπομπή φωτός σε ένα δείγμα τρόφιμου και τη μέτρηση της ποσότητας του φωτός που ανακλάται σε διαφορετικά μήκη κύματος. Η ποσότητα του φωτός που ανακλάται από ένα δείγμα τρόφιμου σε ένα συγκεκριμένο μήκος κύματος επηρεάζεται από τις ιδιότητες του δείγματος, συμπεριλαμβανομένης της χημικής του σύστασης και των επιφανειακών του χαρακτηριστικών. Η χρήση των πολυφασματικών δεδομένων ανάκλασης για την ανίχνευση της μικροβιολογικής ποιότητας στα τρόφιμα βασίζεται στο γεγονός ότι οι μικροοργανισμοί έχουν μοναδικές φασματικές υπογραφές που μπορούν να ανιχνευθούν και να ταυτοποιηθούν (Qin, et al., 2013).

Η συσχέτιση μεταξύ των πολυφασματικών δεδομένων ανάκλασης και του μικροβιακού φορτίου στα τρόφιμα βασίζεται στο γεγονός ότι η παρουσία μικροοργανισμών επηρεάζει τις ιδιότητες ανάκλασης του φωτός στην επιφάνεια των τροφίμων. Συγκεκριμένα, οι μικροοργανισμοί μπορούν να μεταβάλουν τα επιφανειακά χαρακτηριστικά των τροφίμων, τα οποία μπορούν στη συνέχεια να επηρεάσουν την ποσότητα του φωτός που ανακλάται σε διαφορετικά μήκη κύματος. Μέσω της μέτρησης της ποσότητας του φωτός που ανακλάται σε διαφορετικά μήκη κύματος, είναι δυνατόν να ανιχνευθεί η παρουσία μικροοργανισμών και να ποσοτικοποιηθεί ο πληθυσμός τους.

Μια από τις καινοτόμες εφαρμογές της πολυφασματικής απεικόνισης είναι ο συνδυασμός της με μεθόδους επεξεργασίας δεδομένων, με σκοπό τη δημιουργία προβλεπτικών μοντέλων του μικροβιακού πληθυσμού.

Δυστυχώς, ο περιορισμός σε υπολογιστικούς κυρίως πόρους, είναι αυτός που εμποδίζει την εφαρμογή των παραπάνω τεχνικών στη γραμμή παραγωγής και σε πραγματικό χρόνο (on-line).

Ένα από τα σημαντικότερα προβλήματα που θα πρέπει να αντιμετωπιστεί κατά την εφαρμογή της συγκεκριμένης τεχνικής είναι η 'μείωση της διάστασης των δεδομένων' (dimensionality reduction). Δεδομένου ότι η εξαγωγή των επιθυμητών πληροφοριών θα

πρέπει να πραγματοποιηθεί από δεδομένα πολλαπλών διαστάσεων, θα πρέπει να αναπτυχθούν αλγόριθμοι που θα εφαρμόσουν προ-επεξεργασία των δεδομένων, με σκοπό τη μείωση της αρχικής διάστασής τους, περιορίζοντας τον θόρυβο, διάφορες περιβαλλοντικές αλληλεπιδράσεις, καθώς επίσης και διάφορες άλλες «περιττές πληροφορίες» που δε σχετίζονται με τις ιδιότητες που προσπαθούμε να προσδιορίσουμε/προβλέψουμε. Το τελευταίο βήμα στην εφαρμογή αυτής της μεθόδου, είναι η προσπάθεια δημιουργίας και εκπαίδευσης ενός μοντέλου μηχανικής μάθησης.

Η μηχανική μάθηση αποτελεί ένα υποσύνολο του τομέα της τεχνητής νοημοσύνης, που περιέχει αλγορίθμους οι οποίοι εξάγουν συμπεράσματα από το διαθέσιμα δεδομένα και τα χρησιμοποιούν προκειμένου να αυτό-εκπαιδευτούν, έτσι ώστε να επιλύσουν επιτυχώς προβλήματα ταυτοποίησης και κατηγοριοποίησης. Οι αλγόριθμοι αυτοί κερδίζουν συνεχώς έδαφος, λόγω της ακρίβειας και της αποτελεσματικότητας που παρουσιάζουν. Πολλοί διαφορετικοί αλγόριθμοι όπως τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα (Artificial Neural Networks, ANN), οι μηχανές διανυσμάτων υποστήριξης (Support Vector Machines, SVMs), ομαδοποίηση K-μέσων (K-means Clustering), ο ταξινομητής κατά Bayes (Naïve Bayes Classifier), κλπ., έχουν χρησιμοποιηθεί τα τελευταία χρόνια για τον επιτυχή προσδιορισμό της ποιότητας αγροτικών προϊόντων και τροφίμων (Camps-Valls, Gómez-Chova, et al. 2003)). Η βαθιά μάθηση (deep learning), αποτελεί υποσύνολο της μηχανικής μάθησης και τα τελευταία χρόνια έχει σημειώσει ραγδαία ανάπτυξη στον τομέα της υπολογιστικής όρασης (computer vision), με σκοπό την ποσοτικοποίηση και κατηγοριοποίηση. Θα πρέπει να σημειωθεί ότι σε αρκετές περιπτώσεις, η ακρίβειά τους έφτασε να υπερβαίνει την ίδια την ανθρώπινη όραση (Chai et al., 2021).

Αυτό που χαρακτηρίζει τις τεχνικές μηχανικής μάθησης είναι ότι μπορούν να εξάγουν συμπεράσματα και να δημιουργούν μοντέλα πρόβλεψης με βάση τα δεδομένα εκπαίδευσης, χωρίς ιδιαίτερο προγραμματισμό. Οι τεχνικές μηχανικής μάθησης εφαρμόζονται όλο και περισσότερο σε προβλήματα που αφορούν στην ασφάλεια και την ποιότητα των τροφίμων, λόγω της ακρίβειας των προβλεπτικών τους μοντέλων, της ταχύτητάς τους και της μη επεμβατικής και καταστρεπτικής φύσης των αισθητήρων με τους οποίους συνδυάζονται για να δημιουργήσουν τα δεδομένα εκπαίδευσης. Μια από τις ολοένα αυξανόμενες εφαρμογές των τεχνικών αυτών είναι ο συνδυασμός τους με φασματοσκοπικές μεθόδους, όπως η φασματοσκοπία υπέρυθρου με μετασχηματισμό Fourier (FT-IR) και η φασματοσκοπία ορατού/εγγύς υπέρυθρου για την ανίχνευση της μικροβιακής αλλοίωσης σε χοιρινό κιμά (Fengou et al., 2019) και η δημιουργία μοντέλου για την εκτίμηση μικροβιακού φορτίου σε έτοιμες προς κατανάλωση πράσινες σαλάτες με τη χρήση φασματοσκοπικών δεδομένων (Tsakanikas et al., 2018).

Η μηχανική μάθηση μπορεί να διαχωριστεί σε 3 μεγάλες κατηγορίες: (α) την επιβλεπόμενη εκμάθηση (supervised learning), (β) την μη επιβλεπόμενη (unsupervised learning) και (γ) την ενισχυμένη εκμάθηση (reinforced learning).

Η επιβλεπόμενη μάθηση στηρίζεται στο γεγονός ότι ο αλγόριθμος εκπαιδεύεται με ένα ήδη κατηγοριοποιημένο σετ δεδομένων, όπου εκ των προτέρων είναι γνωστή η κλάση στην οποία ανήκει το εκάστοτε δείγμα. Σε αυτήν την κατηγορία ανήκουν οι αλγόριθμοι ANN, Naïve Bayes, Αλγόριθμοι παλινδρόμησης, κλπ. Παράδειγμα επιβλεπόμενης μάθησης αποτελούν τα ANN τα οποία δημιουργήθηκαν ώστε να μιμούνται την λειτουργία του ανθρώπινου εγκέφαλου βασισμένα στις βιολογικές αρχές που διέπουν την λειτουργία των νευρώνων.

Η μέθοδος μερικών ελαχίστων τετραγώνων αποτελεί μια ομάδα αλγορίθμων που ανήκουν στην κατηγορία της επιβλεπόμενης μάθησης και έχει τη δυνατότητα να επιλύσει προβλήματα τόσο δυαδικής όσο και πολλαπλής κατηγοριοποίησης. Λόγω της υπολογιστικής της αποτελεσματικότητας (έχει τη δυνατότητα να προβάλλει πολυάριθμα χαρακτηριστικά σε ένα χώρο λίγων διαστάσεων), αλλά και λόγω του γεγονότος ότι καταφέρνει να επιτύχει μείωση των ανωτέρω διαστάσεων ταυτόχρονα με την εκπαίδευση του μοντέλου, είναι ιδανική για τη δημιουργία προβλεπτικών μοντέλων. Θα πρέπει να σημειωθεί ότι οι αλγόριθμοι παλινδρόμησης μερικών ελαχίστων τετραγώνων (PLS-R) έχουν επιτυχώς χρησιμοποιηθεί στους τομείς της υπολογιστικής όρασης και σε σύνθετα προβλήματα που αφορούν στην επιστήμη τροφίμων, όπως η δημιουργία προβλεπτικού μοντέλου για τον προσδιορισμό των ελεύθερων λιπαρών οξέων σε ιχθυέλαια (Cozzolino et al., 2005).

Επιπλέον, η μέθοδος PLS-R έχει χρησιμοποιηθεί συχνά ως εργαλείο για την αξιοποίηση δεδομένων που προκύπτουν από φασματοσκοπικές μεθόδους, όπως η φασματοσκοπία FT-IR, η πολυ-φασματική και η υπερ-φασματική απεικόνιση. Ο τρόπος λειτουργίας τους και η χρήση τους αναφορικά με την ανάλυση εικόνας και την υπολογιστική όραση, αποτελούν μέρος της παρούσας μελέτης και θα αναπτυχθούν εκτενέστερα στην συνέχεια.

Τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα (ANN) είναι ένα σύνολο διασυνδεδεμένων νευρώνων (στρωμάτων) που χαρακτηρίζονται από κατώφλια (thresholds), βάρη (weights) και συναρτήσεις ενεργοποίησης (activation functions). Τα ANN έχουν συχνά χρησιμοποιηθεί για την ανάλυση πολυφασματικών εικόνων. Ο αλγόριθμος περιλαμβάνει την προεπεξεργασία των δεδομένων μέσω τεχνικών όπως το φίλτρο Savitzky-Golay πρώτης παραγώγου για την εξάλειψη του θορύβου και άλλων μη σχετικών πληροφοριών, ενώ στη συνέχεια εξάγονται τα χαρακτηριστικά της περιοχής ενδιαφέροντος (Region Of Interest, ROI). Ακολουθεί η πολλαπλή εφαρμογή ανάλυσης κυρίων συνιστωσών, για την επιλογή των σημαντικότερων μηκών κύματος που θα χρησιμοποιηθούν στη συνέχεια για τη δημιουργία μοντέλων πρόβλεψης. Σε πρόσφατη έρευνα, μελετήθηκε η εφαρμογή τεχνητών νευρωνικών δικτύων (ANN), σε συνδυασμό με αλγόριθμο κατηγοριοποίησης K-μέσων (K-means clustering), για την ανίχνευση της αλλοίωσης σε φρούτα (Megalingam et al., 2019).

Η βαθιά μάθηση (Deep Learning- DL) αποτελεί υποκατηγορία της επιβλεπόμενης μάθησης. Οι αλγόριθμοι DL χρησιμοποιούν βαθιά τεχνητά νευρωνικά δίκτυα, τα οποία αποτελούνται από πολλαπλούς νευρώνες διασυνδεδεμένους μεταξύ τους. Το αποτέλεσμα είναι ένα συνελκτικό νευρωνικό δίκτυο (Convolutional Neural Network, CNN). Ο τρόπος λειτουργίας τους και η χρήση τους αναφορικά με την ανάλυση εικόνας και την υπολογιστική όραση, αποτελούν μέρος της παρούσας μελέτης και θα αναπτυχθούν στην συνέχεια σε μεγαλύτερο βαθμό.

1. CNN

Υπάρχουν 2 μεγάλες κατηγορίες νευρωνικών δικτύων (ΝΔ) που περιλαμβάνουν τα Βιολογικά Νευρωνικά Δίκτυα (ΒΝΔ) και τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα (ΤΝΔ). Τα πρώτα αποτελούνται από ένα σύνολο βιολογικού ιστού, χημικών ουσιών και ηλεκτρικών σημάτων για τη μετάδοση της πληροφορίας, ενώ τα δεύτερα από ένα σύνολο ηλεκτρικών και μηχανολογικών συστημάτων. Για την καλύτερη κατανόηση των ΤΝΔ κρίνεται σκόπιμο να αναφερθούμε συνοπτικά στον τρόπο λειτουργίας των ΒΝΔ. Είναι γνωστό ότι ο ανθρώπινος εγκέφαλος αποτελείται από μεγάλο αριθμό νευρώνων. Οι νευρώνες, σε αντίθεση με τα άλλα κύτταρα του οργανισμού, αποτελούνται από εξειδικευμένα μέρη όπως οι δενδρίτες και οι άξονες. Οι πρώτοι μεταφέρουν ηλεκτρικά σήματα στον νευρώνα και οι δεύτεροι συνδέουν τον νευρώνα με κάποιο άλλο μέρος του εγκεφάλου. Οι επιμέρους νευρώνες επικοινωνούν μεταξύ τους μέσω ηλεκτροχημικών διεργασιών. Περιέχουν επιπλέον εξειδικευμένες δομές όπως τις συνάψεις και τους νευροδιαβιβαστές.

Τα ΤΝΔ προσπαθούν ουσιαστικά να μιμηθούν την λειτουργία του ανθρώπινου εγκεφάλου υιοθετώντας μια παρόμοια αρχιτεκτονική, ενώ εκπαιδεύονται με τον ίδιο τρόπο, μέσω δηλαδή ενός συνόλου παραδειγμάτων. Επιπρόσθετα, όπως ακριβώς και στις συνάψεις μεταξύ των νευρώνων, έτσι και τα συναπτικά βάρη στα ΤΝΔ χρησιμοποιούνται για την αποθήκευση της καινούργιας γνώσης.

Έτσι λοιπόν τα ΤΝΔ, όπως και τα ΒΝΔ αποτελούνται από ένα σύνολο νευρώνων, δηλαδή μια μονάδα αποθήκευσης και επεξεργασίας, η οποία αποτελείται από έναν αριθμό συνάψεων, έναν αθροιστή και μια συνάρτηση ενεργοποίησης. Ένας νευρώνας μπορεί να περιλαμβάνει μεγάλο αριθμό εισόδων (τροφοδοσία με δεδομένα), αλλά μία μόνο έξοδο, η οποία μπορεί να αποτελεί και είσοδο για άλλο νευρώνα. Η σημαντικότητα των συνάψεων, ή άλλως βάρη, διαφέρουν από νευρώνα σε νευρώνα, όπως συμβαίνει και στα ΒΝΔ. Συνεπώς, τα ΤΝΔ για να λειτουργήσουν σωστά θα πρέπει να εκπαιδευτούν. Η εκπαίδευση δεν είναι τίποτα περισσότερο από τον προσδιορισμό του συντελεστή βάρους μεταξύ των διαφορετικών συνάψεων και επιτελείται μέσω ειδικών αλγορίθμων, ενώ με κάθε επανάληψη της διαδικασίας το νευρωνικό δίκτυο αποκτά περισσότερη «γνώση», βελτιώνοντας την αποτελεσματικότητά του. Στην παρούσα μελέτη χρησιμοποιήσαμε τα ΤΝΔ για ταξινόμηση εικόνων. Αρχικά, οι εικόνες χρήζουν μιας επεξεργασίας για την αντικατάσταση ορισμένων ποσοτήτων της εικόνας, όπως ο κορεσμός των χρωμάτων, η φωτεινότητα, κλπ., αλλά και τη μεταβολή αυτών σε άλλες ποσότητες (αριθμητικές), οι οποίες θα είναι κατανοητές από τους αλγόριθμους. Αυτές οι ποσότητες ονομάζονται χαρακτηριστικά. Έπειτα, η ταξινόμηση μπορεί να γίνει είτε χρησιμοποιώντας τα φασματικά χαρακτηριστικά των εικόνων, οπότε αναφερόμαστε σε φασματική αναγνώριση προτύπων, είτε με τη χρήση γεωμετρικών χαρακτηριστικών του περιεχομένου της εικόνας, οπότε αναφερόμαστε σε χωρική αναγνώριση προτύπων. Σκοπός της διαδικασίας είναι η κατηγοριοποίηση όλων των εικονοστοιχείων (pixels) της εικόνας σε μια κλάση από ένα σύνολο δυνατών κατηγοριών. Τα κατηγοριοποιημένα pixels θα χρησιμοποιηθούν για την εξαγωγή θεματικών χαρτών κατηγοριών εικόνων ή στατιστικών χαρακτηριστικών σχετικών με κάθε κλάση, με σκοπό την αναγνώρισή τους σε άλλες εικόνες.

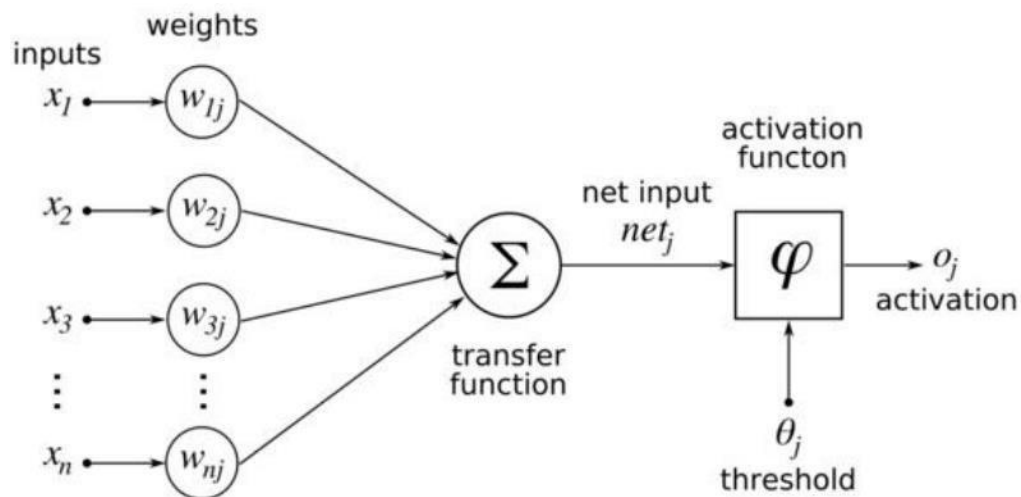
Ένα νευρωνικό δίκτυο μπορεί να δημιουργηθεί συνενώνοντας πολλούς νευρώνες ή αλλιώς units, έτσι ώστε η έξοδος του ενός να αποτελεί είσοδο σε κάποιον άλλο. Σε κάθε νευρώνα εισέρχεται ένας αριθμός διαφορετικών σημάτων/δεδομένων. Κάθε νευρώνας διαθέτει επίσης έναν αριθμό πιθανών καταστάσεων (όπως ενεργός ή ανενεργός) και τέλος μια έξοδο. Κάθε είσοδος σε έναν νευρώνα χαρακτηρίζεται από την παράμετρο W ή «βάρος». Το βάρος υποδηλώνει τη συσχέτιση που έχουν δύο νευρώνες μεταξύ τους και οι

τιμές του συνήθως κυμαίνονται από -1 έως +1. (Shah, 2020) Κατά την ενεργοποίησή του, ο νευρώνας χρησιμοποιεί τα δεδομένα εισόδου ως παραμέτρους μιας συνάρτησης χαρακτηριστικής για κάθε νευρώνα. Η συνάρτηση αυτή καλείται συνάρτηση ενεργοποίησης (activation function). Υπάρχουν αρκετές συναρτήσεις που μπορεί να επιτελέσουν αυτό τον σκοπό. Μια από τις πιο ευρέως χρησιμοποιούμενες είναι η σιγμοειδής συνάρτηση:

$$f(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}}$$

οπότε ο νευρώνας θα εκτελέσει μια μορφή λογιστικής παλινδρόμησης. Τα τελευταία χρόνια στις περισσότερες εφαρμογές νευρωνικών δικτύων έχει επικρατήσει να χρησιμοποιούνται ως συναρτήσεις ενεργοποίησης η σιγμοειδής, η υπερβολική εφαπτομένη (tanh) και η ανορθωτική γραμμική συνάρτηση (Rectified Linear Function ή ReLU).

Εάν το αποτέλεσμα είναι μεγαλύτερο από μια τιμή που χαρακτηρίζεται ως «τιμή κατωφλίου», τότε υπολογίζεται η τιμή εξόδου από τον νευρώνα και μεταδίδεται στον επόμενο. Μια τελευταία παράμετρος του νευρώνα, στην οποία θα ήταν σκόπιμο να αναφερθούμε, είναι η λεγόμενη πόλωση ή «bias». Πρόκειται για εισόδους στον νευρώνα με σταθερή τιμή (συνήθως +1 ή -1), που χρησιμοποιούνται για τη μετατόπιση της συνάρτησης ενεργοποίησης του νευρώνα.

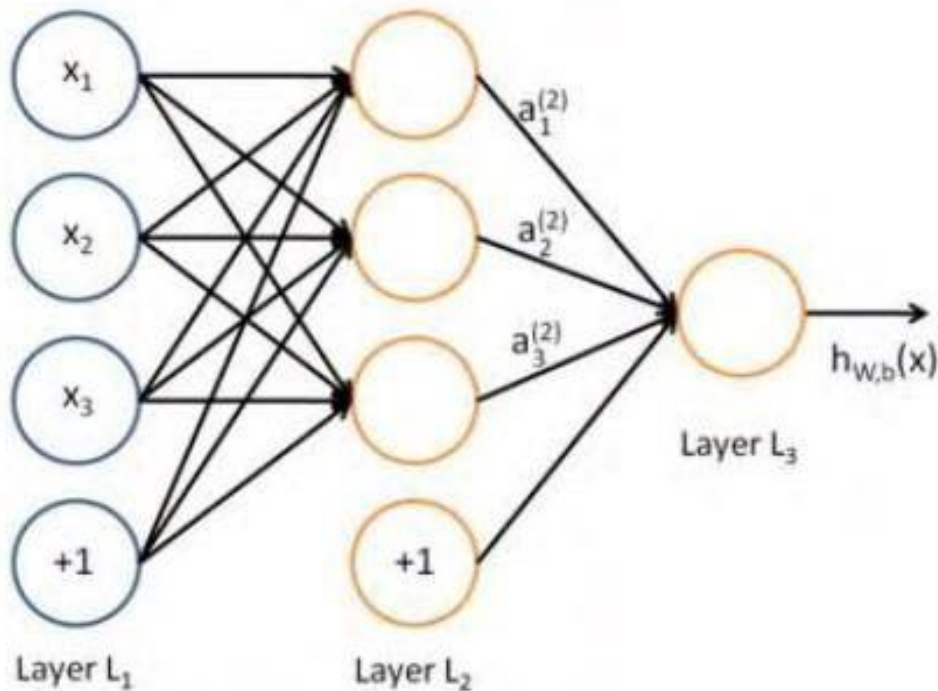


Εικόνα 1.1. Σχηματική απεικόνιση τεχνητού νευρώνα ως ένα σύνολο επιπέδων που περιλαμβάνει (α) το επίπεδο εισόδου, (β) το επίπεδο συνάρτησης μεταφοράς, (γ) το επίπεδο συνάρτησης ενεργοποίησης και (δ) το επίπεδο εξόδου.

Ένα νευρωνικό δίκτυο δημιουργείται όταν συνδέσουμε πολλαπλούς νευρώνες μεταξύ τους. Το τελικό επιθυμητό αποτέλεσμα του νευρώνα καλείται καμπύλη μάθησης:

$$h_{w,b}(x) = F(W^T x) = F(\sum_i^n W_i x_i + b).$$

Όπου W το βάρος, x οι είσοδοι στον νευρώνα και n τα επίπεδα του δικτύου.



Εικόνα 1.2. Τεχνητό Νευρωνικό Δίκτυο ως συνδυασμός ενός συνόλου νευρώνων, όπου L_1 το επίπεδο εισόδου (input layer), L_2 το κρυφό επίπεδο (hidden layer) και L_3 το επίπεδο εξόδου (output layer).

Το επίπεδο (layer) που βρίσκεται αριστερά του δικτύου ονομάζεται επίπεδο εισόδου (input layer) και το επίπεδο (layer) στην δεξιά πλευρά του δικτύου ονομάζεται επίπεδο εξόδου (output layer). Τα ενδιάμεσα επίπεδα, ένα σε αυτό το παράδειγμα, ονομάζονται κρυφά επίπεδα (hidden layers), γιατί οι τιμές τους δεν εμφανίζονται στα δεδομένα εκπαίδευσης (Rojas, 1996).

Τα συνελκτικά νευρωνικά δίκτυα (Convolutional Neural Networks, CNNs) είναι ένας από τους βασικούς τύπους νευρωνικών δικτύων που χρησιμοποιούνται για αναγνώριση και ταξινόμηση εικόνων. Τα CNN έχουν αρκετές χρήσεις, όπως η αναγνώριση αντικειμένων, η επεξεργασία εικόνας, η υπολογιστική όραση και η αναγνώριση προσώπων.

Τα τελευταία χρόνια παρατηρήθηκε σημαντική άνοδος στη χρήση της μηχανικής μάθησης (ML) (Du et al., 2019; Sarker, 2021), τόσο για ερευνητικούς σκοπούς όσο και σε πρακτικές εφαρμογές, συμπεριλαμβανομένης της ανάλυσης κειμένου, της ανίχνευσης

ανεπιθύμητων μηνυμάτων, της κατηγοριοποίησης εικόνων και της ανάκτησης πολυμέσων (Indrakumari et al., 2021).

1.1 Τα βασικά στοιχεία των CNN

Ένα CNN διαθέτει συνήθως δύο επιπλέον στρώματα σε σχέση με την κλασσική αρχιτεκτονική ενός ΤΝΔ που αναφέρθηκε παραπάνω. Αυτά είναι το επίπεδο συνέλιξης (convolutional layer) και το επίπεδο συγκέντρωσης (pooling layer).

Έτσι λοιπόν η βασική αρχιτεκτονική ενός τυπικού CNN αποτελείται από τέσσερις τύπους στρωμάτων:

- Συνελικτικό (Convolutional)
- Συγκέντρωσης (Pooling)
- Συνάρτησης ενεργοποίησης (Activation function)
- Πλήρως συνδεδεμένο Στρώμα (Fully Connected Layer).

Η λειτουργία του συνελικτικού και του επιπέδου συγκέντρωσης, εντοπίζεται στην προσπάθεια εκμετάλλευσης της δυσδιάστατης δομής της εικόνας, καθώς παρατηρείται υψηλή συσχέτιση μεταξύ γειτονικών pixels. Εκμεταλλευόμενοι την τοπική συσχέτιση, είναι δυνατό να εξαχθούν μικρά τοπικά χαρακτηριστικά (π.χ. ακμές, γωνίες, καμπύλες) τα οποία μπορούν να συνδυαστούν για την παραγωγή ενός χάρτη χαρακτηριστικών υψηλότερης τάξης (π.χ. φύλλο, στέλεχος, κλπ.). Τα τελευταία χρησιμοποιούνται για την ταυτοποίηση και κατηγοριοποίηση αντικειμένων και δομών στις εικόνες.

1.2 Είσοδος δεδομένων (εικόνες)

Τα βασικά στοιχεία μιας υπολογιστικής εικόνας ονομάζονται εικονοστοιχεία (pixels) και αποτελούν τη δυαδική αναπαράσταση των οπτικών δεδομένων. Στα pixels ανατίθενται τιμές ανάλογα με το χρώμα, την φωτεινότητα, τον κορεσμό κλπ. Οι τιμές κυμαίνονται από το 0-255 και τα pixels οργανώνονται σε πίνακα παρόμοιο με την ψηφιακή διάταξη της εικόνας. (Koushik, 2016). Όταν παρατηρούμε μια εικόνα για πρώτη φορά, ο ανθρώπινος εγκέφαλος δέχεται μια τεράστια ποσότητα πληροφοριών. Οι στρώσεις του CNN εκπαιδεύονται να αναγνωρίζουν πρώτα πιο βασικά μοτίβα, όπως γραμμές και καμπύλες, πριν προχωρήσουν σε πιο περίπλοκα μοτίβα, όπως πρόσωπα και αντικείμενα. Ως αποτέλεσμα, η χρήση ενός CNN θα μπορούσε να παρέχει στους υπολογιστές όραση (Koushik, 2016). Στην απλούστερη περίπτωση, έχουμε μια δυσδιάστατη εικόνα σε χρωματικές αποχρώσεις του γκρι (grayscale). Η συνηθέστερη περίπτωση όμως, και αυτή που μας ενδιαφέρει περισσότερο, είναι μια εικόνα με πλήρη χρωματισμό, η οποία θα αποτελείται από τρεις διαστάσεις $N \times N \times 3$, όπου η τρίτη διάσταση αναφέρεται στα τρία χρωματικά κανάλια (RED-GREEN-BLUE ή RGB) που χρησιμοποιούνται για να αποδώσουν τα χρώματα της εικόνας.

1.3 Επίπεδο συνέλιξης (Convolutional Layer)

Η συνελικτική στρώση είναι ένα κρίσιμο τμήμα της συνολικής δομής του CNN. Πρόκειται για ένα σύνολο φίλτρων ή πυρήνων (kernels), που εφαρμόζονται στα δεδομένα πριν αυτά χρησιμοποιηθούν. Το πλάτος, το ύψος και το βάρος κάθε πυρήνα χρησιμοποιούνται για την εξαγωγή χαρακτηριστικών από τα εισερχόμενα δεδομένα. Τα βάρη του πυρήνα αρχικά αποδίδονται τυχαία, αλλά σταδιακά προσαρμόζονται και γίνονται περισσότερο εξειδικευμένα μέσω της εκπαίδευσης.

Ο χάρτης των χαρακτηριστικών δημιουργείται συνδυάζοντας την εισαγωγική εικόνα, η οποία είναι ένας πίνακας της τάξης $N \times N \times 3$, με αυτά τα φίλτρα, τα οποία παρουσιάζονται ως πίνακας $k \times k \times 3$ ($k < N$) (Koushik, 2016).

Ο πυρήνας (kernel) επιτρέπει στο επίπεδο συνέλιξης να επιτελεί τη λειτουργία του σε έναν υψηλής διάστασης, ασαφή χώρο χαρακτηριστικών χωρίς να υπολογίζουν τις συντεταγμένες των δεδομένων σε αυτό τον χώρο. Αντί αυτού, υπολογίζουν το εσωτερικό γινόμενο όλων των συνδυασμών δεδομένων στον χώρο χαρακτηριστικών. Η διαδικασία της συνέλιξης γίνεται ως εξής:

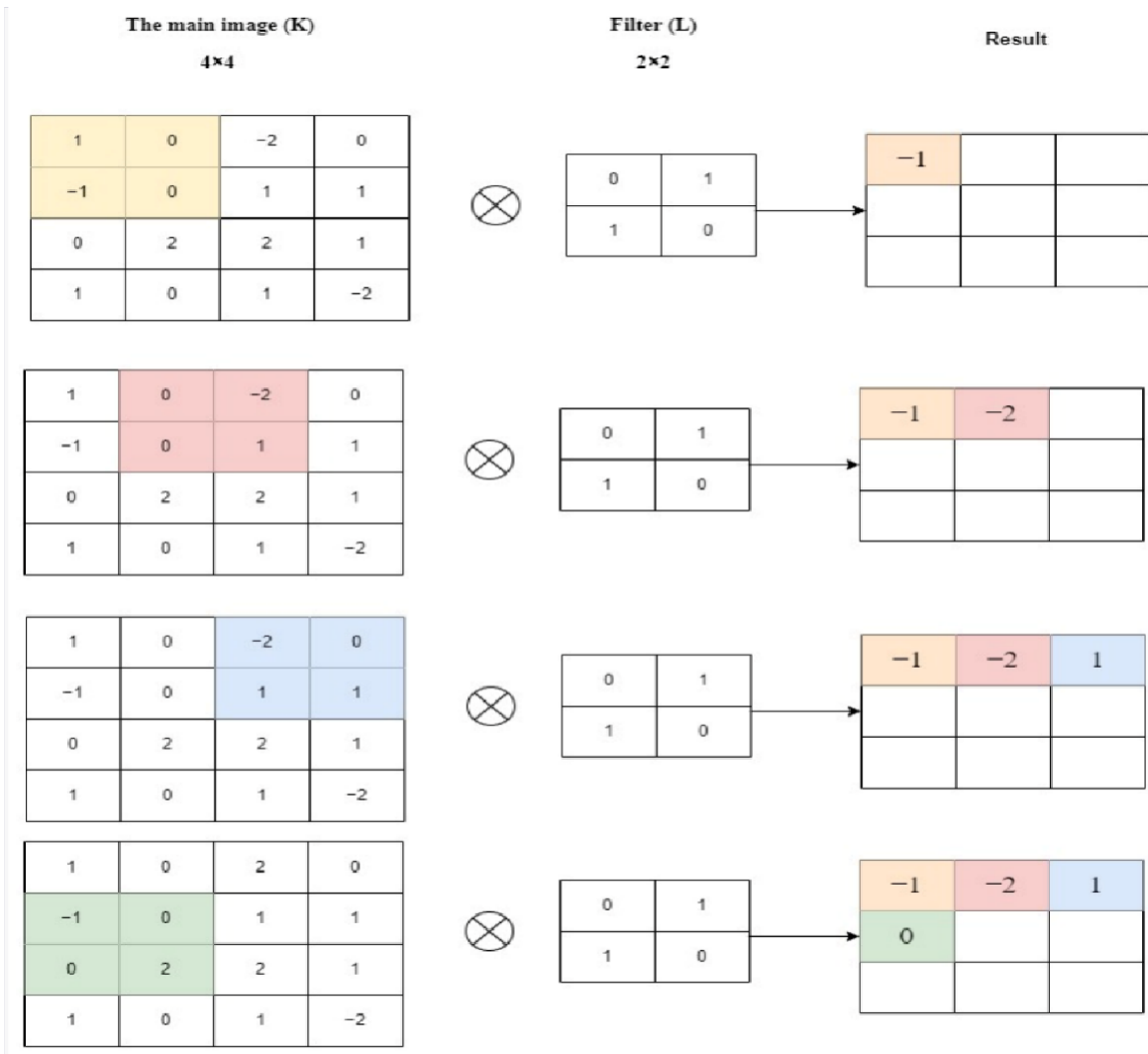
Αρχίζοντας από την επάνω αριστερή γωνία της εικόνας, ο πυρήνας κινείται από αριστερά προς τα δεξιά, με βήμα ενός pixel κάθε φορά. Για κάθε θέση στην οποία βρίσκεται ο πυρήνας, τα $k \times k \times 3$ στοιχεία του πυρήνα πολλαπλασιάζονται και αθροίζονται με τα $N \times N \times 3$ στοιχεία της εικόνας (Εικόνα 1.3.1). Αφού ολοκληρωθεί η διαδικασία, μια πόλωση (bias) προστίθεται σε κάθε στοιχείο του παραγόμενου χάρτη χαρακτηριστικών και το παραγόμενο αποτέλεσμα τροφοδοτείται σε μια συνάρτηση ενεργοποίησης. Στα CNN επικρατέστερη συνάρτηση ενεργοποίησης, λόγω τού όγκου των υπολογισμών που απαιτούνται, είναι η ReLU καθώς επιταχύνει τη διαδικασία σε μεγάλο βαθμό (Krizhevsky et al, 2012).

Στην Εικόνα 1.3.1 παρουσιάζεται η λειτουργία του πυρήνα (kernel) σε μια εικόνα 4×4 σε κλίμακα του γκρι, με τυχαία αρχικά βάρη (random weight-initialized kernel) 2×2 .

Ο πίνακας εξόδου βασίζεται στην εξίσωση:

$$(N - k + 1) \quad (1)$$

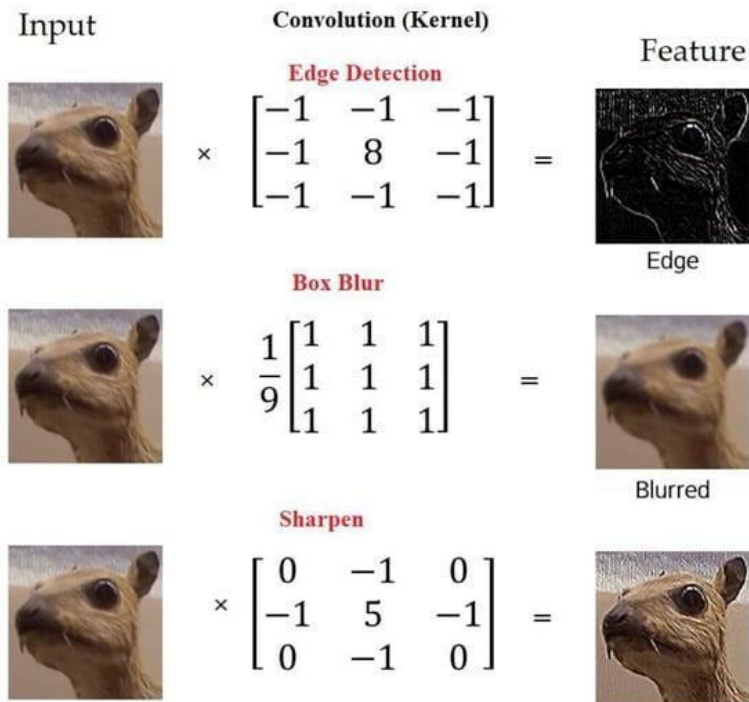
Όπου N κύρια εικόνα και k το φίλτρο. Συνεπώς, η έξοδος θα είναι μεγέθους 3×3 ($4 - 2 + 1 = 3$).



Εικόνα 1.3.1. Απεικόνιση της δράσης ενός πυρήνα (kernel) και ο υπολογισμός του εσωτερικού γινομένου.

Στο προηγούμενο παράδειγμα, στον πυρήνα έχει δοθεί ένα βήμα (stride) ίσο με 1, που καθορίζει το επιθυμητό μέγεθος βήματος για την κάθετη ή οριζόντια θέση.

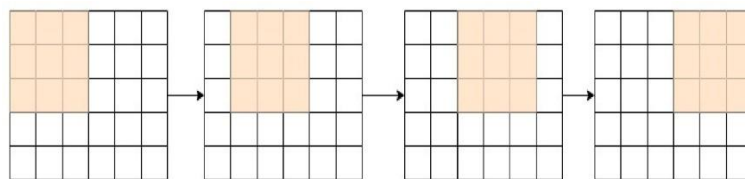
Η Εικόνα 1.3.2. παρουσιάζει τη διαμόρφωση του πυρήνα κατά την συνέλιξη, προκειμένου να προσδιοριστούν διαφορετικά χαρακτηριστικά των εικόνων.



Εικόνα 1.3.2. Η δράση όπως πυρήνα (kernel) ως πίνακα/φίλτρο για την αναγνώριση των άκρων των επιφανειών, την επικέντρωση στα αντικείμενα ενδιαφέροντος, την υφή των επιφανειών, κλπ.

1.4 Βήμα (Stride)

Στην πραγματικότητα, το CNN προσφέρει επιπλέον επιλογές για περαιτέρω βελτιστοποίηση των ρυθμίσεων και ταυτόχρονα μείωση ορισμένων από όπως ανεπιθύμητες επιπτώσεις. Μία από αυτές όπως επιλογές ονομάζεται βήμα. Πράγματι, μπορούμε να αντικαταστήσουμε την τιμή βήματος εάν το επιθυμούμε. Στην εικόνα 1.4.1. φαίνεται η διαφορετική επιλογή βήματος για κάθε σύνδεση μεταξύ των νευρώνων. Η αύξηση του βήματος θα είχε ως αποτέλεσμα τη μείωση των συνολικών παραμέτρων και συνεπώς τη μείωση του μεγέθους του χάρτη χαρακτηριστικών, με αποτέλεσμα την εξοικονόμηση υπολογιστικών πόρων, καθώς όπως και τη μεγαλύτερη ταχύτητα του δικτύου, εφόσον χρειάζεται μικρότερος αριθμός υπολογισμών. Αυτό όπως θα μπορούσε να οδηγήσει σε απώλεια πληροφορίας, αφού πλέον το νευρωνικό δίκτυο θα είναι λιγότερο ευαίσθητο όπως λεπτομέρειες όπως εικόνες και τείνει να επικεντρώνεται σε περισσότερο εμφανή χαρακτηριστικά. Επομένως, η επιλογή του βήματος εξαρτάται καθαρά από το πρόβλημα που έχουμε να επιλύσουμε κάθε φορά (Bezdan et al., 2019).

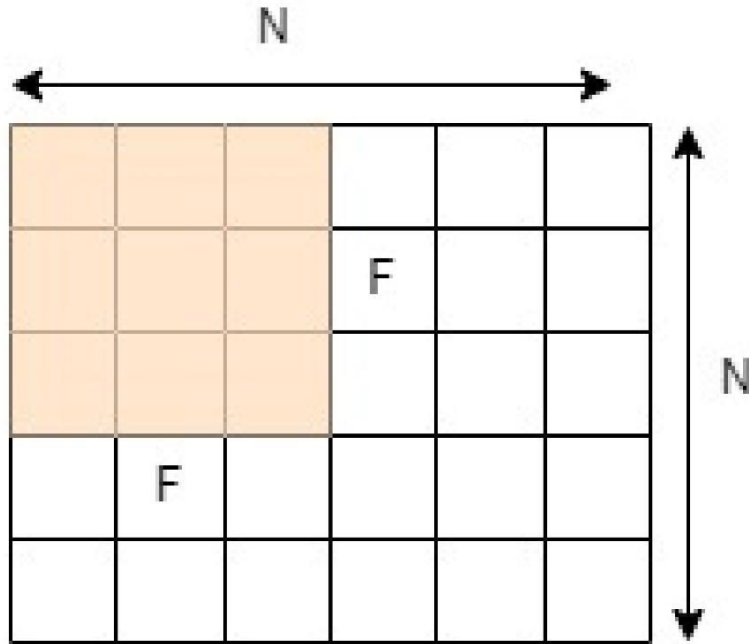


Εικόνα 1.4.1. Stride 1, τα παράθυρα του φίλτρου μετακινούνται μόνο μία φορά για κάθε σύνδεση.

Όπως προκύπτει από την Εικόνα 1.4.2, το μέγεθος εξόδου O μιας εικόνας διάστασης $N \times N$ και μεγέθους φίλτρου $F \times F$ δίνεται από την παρακάτω εξίσωση:

$$O = 1 + \frac{(N-k)}{s} \quad (2)$$

όπου N είναι το μέγεθος όπως εισόδου, k είναι το μέγεθος του φίλτρου και S είναι το μέγεθος του βήματος (stride).



Εικόνα 1.4.2. Η επίδραση του βήματος (stride) στην έξοδο.

1.5 Περιθώριο (Padding)

Ένα από τα μειονεκτήματα του βήματος συνέλιξης είναι η δυνητική απώλεια πληροφοριών στην άκρη όπως εικόνας. Μία εύκολη και πρακτική λύση για την αντιμετώπιση του προβλήματος είναι η εφαρμογή μηδενικού περιθωρίου (padding). Προσθέτουμε δηλαδή στον πίνακα εισόδου, ένα επιπλέον περιθώριο περιμετρικά του πίνακα και σε κάθε στοιχείο του αναθέτουμε την τιμή μηδέν. Μπορούμε όπως να διαχειριστούμε το μέγεθος εξόδου με τη βοήθεια του μηδενικού περιθωρίου (padding).

Στην Εικόνα 1.5.1. για παράδειγμα, η έξοδος θα είναι 4×4 (που μειώνεται από μια είσοδο 6×6) με $N = 6$, $k = 3$ και βήμα 1.

Ωστόσο, με τη εφαρμογή όπως επιπλέον περιθωρίου με μηδενικά, το αποτέλεσμα θα είναι 6×6 , που είναι ίδιο με την αρχική είσοδο (η υπολογιστική τιμή για το πραγματικό N είναι τώρα 9). Στην περίπτωση αυτή, το μέγεθος εξόδου O θα δίνεται από τη σχέση:

$$O = 1 + N + 2P - kS \quad (3)$$

όπου P είναι ο αριθμός των επιπέδων μηδενικής επέκτασης (π.χ. P = 1 στην Εικόνα 1.5.1). Με τον τρόπο αυτό μπορούμε να αποφύγουμε τη μείωση του μεγέθους εξόδου του δικτύου χρησιμοποιώντας αυτήν την έννοια όπως επικάλυψης με μηδενικά.

0	0	0	0	0	0	0	0
0							0
0							0
0							0
0							0
0							0
0							0
0	0	0	0	0	0	0	0

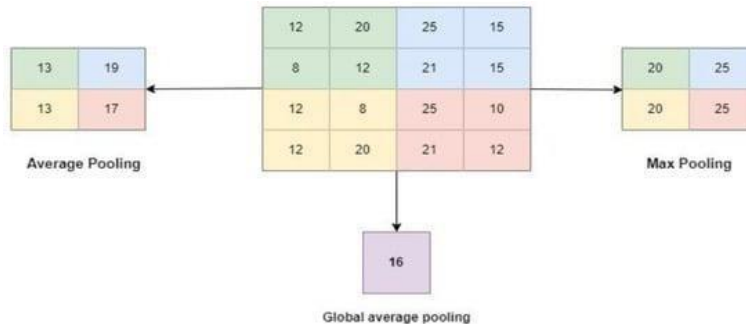
Εικόνα 1.5.1. Η εφαρμογή μηδενικού περιθωρίου για την διατήρηση όπως πληροφορίας στην άκρη όπως εικόνας.

1.6 Υποδειγματοληψία/Συγκέντρωση (Pooling)

Το επίπεδο όπως συγκέντρωσης (pooling layer), χρησιμοποιείται για τη μείωση των διαστάσεων των χαρτών χαρακτηριστικών (feature maps) και ταυτόχρονα διατηρεί όπως σημαντικότερες πληροφορίες. Ένα φίλτρο χρησιμοποιείται για τη συμπίεση των δεδομένων εισόδου του επιπέδου μετακινούμενο στη στρώση

Η ουσιαστική λειτουργία του επιπέδου συγκέντρωσης είναι η μείωση του παραγόμενου από το επίπεδο συνέλιξης πίνακα χαρακτηριστικών (down-sampling). Σε ότι αφορά στην επεξεργασία εικόνων, μπορεί να συγκριθεί με τη μείωση όπως ανάλυσης. Αφού έχει γίνει ο εντοπισμός των χαρακτηριστικών στα προηγούμενα επίπεδα, η σχετική θέση των χαρακτηριστικών δεν έχει πλέον μεγάλη σημασία. Για παράδειγμα ένα δίκτυο που έχει εκπαιδευτεί να αναγνωρίζει τα μάτια σε ένα ανθρώπινο πρόσωπο, μπορεί να τα αναγνωρίζει πλέον σε κάθε είδους πρόσωπο παρόλο που σχετική όπως απόσταση διαφέρει από πρόσωπο σε πρόσωπο. Με τον τρόπο αυτό μειώνουμε ακόμη περισσότερο τον αριθμό των παραμέτρων εκπαίδευσης και δυνητικά μπορούμε να αποφύγουμε το over fitting. Στο επίπεδο συγκέντρωσης ο εισερχόμενος χάρτης χαρακτηριστικών υποδιαιρείται σε

μικρότερους υπό-πίνακες $S \times S$ με $S < k$. Οι δύο πιο διαδεδομένες, αλλά όχι οι μοναδικές, τεχνικές συγκέντρωσης περιλαμβάνουν, είτε την επιλογή του μέσου όρου των δεδομένων του υπο-πίνακα (average pooling) είτε την επιλογή όπως μέγιστης τιμής (max pooling).



Εικόνα 1.6.1. Σχηματική απεικόνιση του επιπέδου συγκέντρωσης.

Ορισμένες μέθοδοι pooling περιλαμβάνουν την καθολική επίπεδη κανονικοποίηση (Global Average Pooling, GAP), τη καθολική μέγιστη κανονικοποίηση (Global Maximum Pooling, GMP), τη μέση κανονικοποίηση (Average Pooling), την ελάχιστη κανονικοποίηση (Minimum Pooling) και την επίπεδη κανονικοποίηση (). Στην Εικόνα 1.6.1. παρουσιάζονται αυτές οι τρεις τεχνικές pooling (Du et al, 2019). Το βασικό πρόβλημα με το επίπεδο pooling είναι ότι δεν βοηθά το CNN να καθορίσει εάν μια χαρακτηριστική ιδιότητα είναι παρούσα σε μια εικόνα εισόδου, αλλά μόνο πού βρίσκεται αυτή η ιδιότητα. Έτσι υπάρχει πιθανότητα, το μοντέλο CNN να αφήνει έξω απαραίτητες πληροφορίες (Boureau, et al., 2010).

1.7 Μη Γραμμικότητα – Συνάρτηση Ενεργοποίησης (Non-Linearity – Function of Activation)

Σε ένα CNN, η συνάρτηση ενεργοποίησης (activation function) εφαρμόζεται στην έξοδο των κρυφών επιπέδων (hidden layers) του δικτύου. Αναλαμβάνει να εισάγει μη γραμμικότητα στο μοντέλο και να επεξεργαστεί την έξοδο που παράγεται από όπως συνελιξεις (convolutions) και όπως λειτουργίες συγκέντρωσης. Η εφαρμογή μιας μη γραμμικής συνάρτησης ενεργοποίησης στην έξοδο είναι σημαντική για την εκμάθηση πιο πολύπλοκων συσχετίσεων και την ανάδειξη χαρακτηριστικών που δεν είναι γραμμικά διαχωρίσιμα.

Στην αρχιτεκτονική CNN, χρησιμοποιούνται μη γραμμικά επίπεδα ενεργοποίησης μετά από όλα τα επίπεδα με βάρη (γνωστά και ως μαθησιακά επίπεδα). Η προσθήκη όπως όπως μη-γραμμικότητας, επιτρέπει στο δίκτυο να μοντελοποιήσει πιο περίπλοκες και μη-γραμμικές σχέσεις μεταξύ των χαρακτηριστικών των εισόδων και των βαρών. Τα πραγματικά προβλήματα αναγνώρισης προτύπων είναι συχνά πολύπλοκα και περιέχουν μη-γραμμικές σχέσεις μεταξύ των χαρακτηριστικών. Η ύπαρξη μη-γραμμικών συναρτήσεων ενεργοποίησης επιτρέπει στο δίκτυο να προσεγγίζει καλύτερα όπως περίπλοκες αυτές σχέσεις (Zhang et al., 2019).

Επιπλέον, η ικανότητα διαφοροποίησης είναι απαραίτητη προϋπόθεση για τη συνάρτηση ενεργοποίησης. Η διαφοροποίηση είναι η ικανότητα όπως συνάρτησης να

ανταποκρίνεται διαφορετικά σε διαφορετικές εισόδους. Στο πλαίσιο όπως ενεργοποίησης σε ένα νευρωνικό δίκτυο, η ικανότητα διαφοροποίησης είναι σημαντική γιατί:

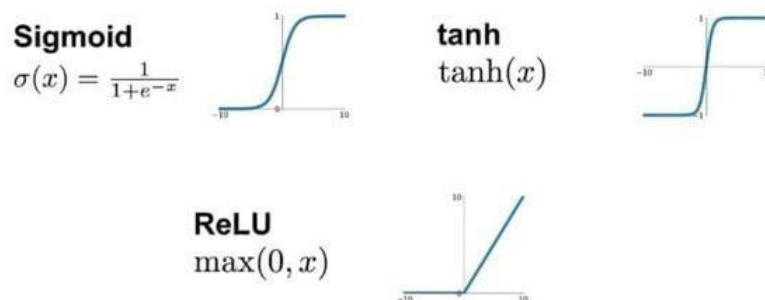
- Επιτρέπει την εκμάθηση διακριτικών χαρακτηριστικών: Με τη διαφοροποίηση, η συνάρτηση ενεργοποίησης μπορεί να μαθαίνει διακριτικά χαρακτηριστικά των δεδομένων εισόδου. Αυτό είναι καθοριστικό για τη δημιουργία αναπαραστάσεων που είναι ικανές να διαχωρίζουν διάφορες κατηγορίες.
- Δίνει δυνατότητες προσαρμογής στα δεδομένα: Η ικανότητα διαφοροποίησης επιτρέπει στη συνάρτηση ενεργοποίησης να προσαρμόζεται όπως διαφορετικές πτυχές των δεδομένων, βοηθώντας έτσι στη βελτιστοποίηση των βαρών του μοντέλου.
- Επιτρέπει τη χρήση όπως αναδρομικής διόρθωσης σφάλματος για την εκπαίδευση του δικτύου.

Οι πιο δημοφιλείς συναρτήσεις ενεργοποίησης στα CNN s και σε άλλα βαθιά νευρωνικά δίκτυα είναι οι παρακάτω:

- Σιγμοειδής (Sigmoidal): Αυτή η συνάρτηση ενεργοποίησης επιτρέπει μόνο τιμές εξόδου ανάμεσα σε 0 και 1 και δέχεται πραγματικούς αριθμούς ως είσοδο (Zhang et al., 2019) (Prakash, et al., 2021) .
- Υπερβολική εφαπτομένη (hyperbolic tangent, Tanh): Είναι συγκρίσιμη με τη σιγμοειδή συνάρτηση στο ότι δέχεται πραγματικούς αριθμούς ως είσοδο, αλλά η περιοχή τιμών όπως είναι μόνο από -1 έως 1.
- Η συνάρτηση Rectified Linear Unit (ReLU): Είναι η πιο δημοφιλής στο πλαίσιο των CNN. Όπως οι τιμές εισόδου μετατρέπονται στη θετική περιοχή. Το κύριο πλεονέκτημα όπως ReLU έναντι άλλων αλγορίθμων είναι ο χρόνος και οι πόροι που εξοικονομεί όταν χρησιμοποιείται.

Για μεγάλο χρονικό διάστημα, οι μη γραμμικές Tanh και sigmoid είναι οι πιο δημοφιλείς συναρτήσεις ενεργοποίησης και έχουν την ικανότητα να λαμβάνουν όπως μορφές, όπως φαίνεται στην Εικόνα 1.7.1. Για όπως όπως λόγους, η μονάδα γραμμικής ενεργοποίησης ReLU χρησιμοποιείται ευρύτατα τα τελευταία χρόνια.

Η ReLU παρέχει μη γραμμικότητα, και αυτό είναι σημαντικό για την ικανότητα του δικτύου να μάθει πιο πολύπλοκες συσχετίσεις και να αντιμετωπίσει προβλήματα που δεν είναι γραμμικά διαχωρίσιμα.



Εικόνα 1.7.1. Συνάρτηση Ενεργοποίησης (Function of Activation) (Nivesh, 2020).

Ο ορισμός όπως συνάρτησης και οι υπολογισμοί διαδοχικών μειούμενων τιμών χρησιμοποιώντας την ReLU είναι πιο απλοί. Η συνάρτηση αυτή, όπως η sigmoid και η tanh, έχουν προβλήματα με την οπισθοδρομική διάδοση του σφάλματος (backpropagation). Αυτό το φαινόμενο, γνωστό ως «εξαφάνιση του διαδοχικών τιμών» (vanishing gradient descent), συμβαίνει όταν το σήμα διαδοχικών τιμών μειώνεται σταδιακά καθώς αυξάνεται το βάθος όπως αρχιτεκτονικής του νευρωνικού δικτύου.

Η ReLU είναι απλή και υπολογιστικά αποδοτική συνάρτηση ενεργοποίησης. Η υπολογιστική όπως πολυπλοκότητα είναι χαμηλή και μπορεί να εφαρμοστεί εύκολα σε μεγάλους όγκους δεδομένων.

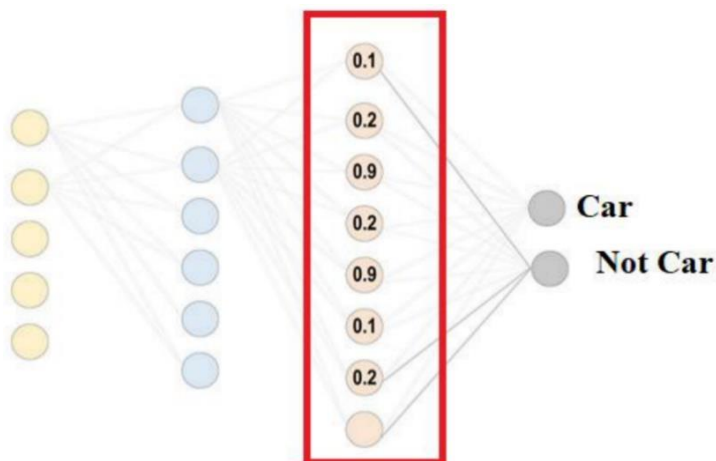
Όταν χρησιμοποιείται η συνάρτηση ReLU, μπορεί να προκύψουν ορισμένα σημαντικά προβλήματα, όπως η κατάσταση “dying ReLU”. Το «dying ReLU» είναι μια κατάσταση όπου η συνάρτηση ενεργοποίησης ReLU αποκτά αρνητική επίδραση σε ορισμένους νευρώνες κατά την εκπαίδευση όπως νευρωνικού δικτύου. Στην κατάσταση αυτή, οι νευρώνες που χρησιμοποιούν τη ReLU ως συνάρτηση ενεργοποίησης δεν ενεργοποιούνται και παράγουν πάντα μηδενικές εξόδους.

Ο λόγος που συμβαίνει αυτό είναι ότι κατά την εκπαίδευση, τα βάρη των νευρώνων ενημερώνονται μέσω όπως οπισθοδρομικής διάδοσης του σφάλματος (backpropagation). Όταν οι τιμές των βαρών προσαρμόζονται έτσι ώστε οι εισοδοί των νευρώνων να είναι συνεχώς αρνητικές, η έξοδος όπως ReLU γίνεται πάντα μηδενική. Στη συνέχεια, τα βάρη δεν ενημερώνονται πλέον κατά τη διάρκεια όπως εκπαίδευσης και ο νευρώνας παραμένει αδρανής.

Αυτό το φαινόμενο μπορεί να επηρεάσει την επίδοση του μοντέλου, καθώς οι αδρανείς νευρώνες δεν συνεισφέρουν στην εκπαίδευση και την λειτουργία του δικτύου (Krizhevsky et al., 2012).

Κατά την εκπαίδευση, οι πλήρως συνδεδεμένοι νευρώνες λαμβάνουν ως είσοδο την έξοδο από το τελευταίο συνελικτικό στρώμα ή το τελευταίο συγκεντρωτικό συνελικτικό στρώμα, ανάλογα με την αρχιτεκτονική του δικτύου. Στη συνέχεια, αυτοί οι νευρώνες εφαρμόζουν τη συνάρτηση ενεργοποίησης και εκτελούν όπως πράξεις πλήρως συνδεδεμένου επιπέδου (πολλαπλασιασμός βαρών με την είσοδο, προσθήκη πόλωσης, κ.λπ.).

Τα πλήρως συνδεδεμένα στρώματα είναι χρήσιμα για την συνεχή επεξεργασία και συνδυασμό των χαρακτηριστικών που έχουν εξαχθεί από τα προηγούμενα στρώματα του δικτύου. Αυτό το είδος στρώματος συχνά χρησιμοποιείται για την κατηγοριοποίηση των εισόδων σε διάφορες κατηγορίες, και συνήθως το τελευταίο πλήρως συνδεδεμένο στρώμα περιέχει τον αριθμό των κλάσεων όπως οποίες γίνεται η κατηγοριοποίηση (Du et al., 2019; Prakash et al., 2021).



Εικόνα 1.8.1. Πλήρως διασυνδεδεμένη στρώση (Fully-connected layer).

Το μεγαλύτερο μειονέκτημα όπως πλήρως συνδεδεμένου επιπέδου είναι ο μεγάλος αριθμός των παραμέτρων που απαιτούν δύσκολους υπολογισμούς σε κάθε κύκλο εκπαίδευσης. Επομένως, προσπαθούμε να ελαχιστοποιήσουμε τον αριθμό των συνδέσεων και των νευρώνων. Οι κόμβοι και οι συνδέσεις μπορούν να απορρίπτονται με τυχαίο τρόπο χρησιμοποιώντας την τεχνική dropout. Η τεχνική αυτή περιλαμβάνει την κατάργηση (ή απενεργοποίησης) τυχαίων νευρώνων κατά την εκπαίδευση όπως νευρωνικού δικτύου. Στην ουσία, κατά την εκπαίδευση, οι νευρώνες ενεργοποιούνται ή απενεργοποιούνται τυχαία με κάποια πιθανότητα. Η κύρια ιδέα είναι ότι η απενεργοποίηση τυχαίων νευρώνων κατανέμεται κατά την εκπαίδευση, επιτρέποντας στο δίκτυο να εκπαιδευτεί σε πιο γενικευμένα χαρακτηριστικά και να μειώσει τον κίνδυνο υπέρ-εκπαίδευσης. Η διαδικασία dropout εφαρμόζεται κατά τη διάρκεια όπως εκπαίδευσης και μπορεί να εφαρμοστεί σε διάφορα στρώματα του νευρωνικού δικτύου.

1.8 Εμπροσθοβαρές Τεχνητό Νευρωνικό Δίκτυο (Feed-forward ANN)

Το εμπροσθοβαρές νευρωνικό δίκτυο είναι όπως τύπος αρχιτεκτονικής νευρωνικού δικτύου που χρησιμοποιείται κυρίως για την επεξεργασία δομημένων πινάκων δεδομένων, όπως οι εικόνες. Σε ένα εμπροσθοβαρές νευρωνικό δίκτυο, η πληροφορία κινείται μόνο όπως μία κατεύθυνση, από το επίπεδο εισόδου όπως το επίπεδο εξόδου, χωρίς κύκλους ή βρόχους. Αυτή η αρχιτεκτονική επιτρέπει στα νευρωνικά δίκτυα να εκμεταλλεύονται τη δισδιάστατη δομή των δεδομένων εισόδου και να εφαρμόζουν φίλτρα (γνωστά και ως πυρήνες) για να ανιχνεύσουν τοπικά μοτίβα, όπως άκρες και σχήματα.

Ο όρος “εμπροσθοβαρές” δηλώνει ότι η ροή πληροφοριών του δικτύου γίνεται μόνο προς μια κατεύθυνση, όπου η έξοδος κάθε επιπέδου επεξεργασίας αποτελεί την είσοδο για το επόμενο επίπεδο. Από την άλλη πλευρά, η ανάδραση (backpropagation) είναι όπως αλγόριθμος εκπαίδευσης που χρησιμοποιείται για τα εμπροσθοβαρή νευρωνικά δίκτυα, όπου το σφάλμα διαδίδεται όπως τα πίσω μέσω του δικτύου για να ενημερωθούν τα βάρη. Αυτή η διαδικασία είναι επαναληπτική και συνεχίζεται μέχρι το δίκτυο να επιτύχει το επιθυμητό επίπεδο ακρίβειας (Sarker, 2021).

1.9 Συναρτήσεις απώλειας (loss functions).

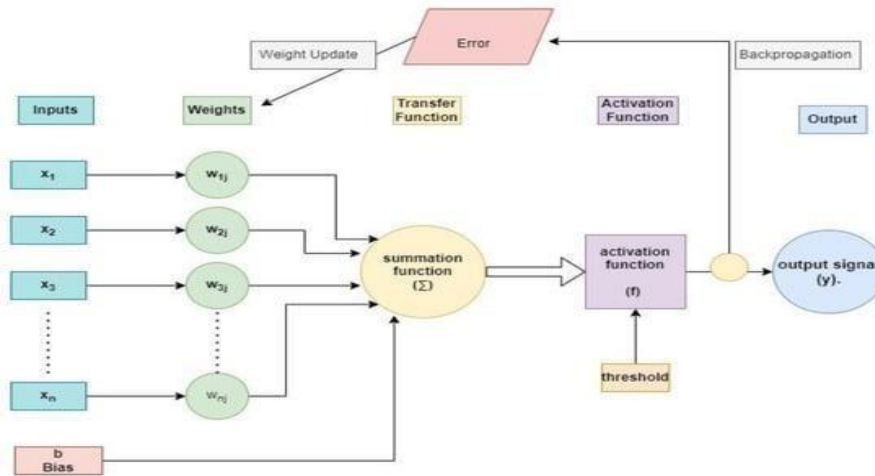
Η τελική κατηγοριοποίηση επιτυγχάνεται μέσω όπως εφαρμογής στο τελευταίο επίπεδο εξόδου, δηλαδή στο τελευταίου επιπέδου όπως αρχιτεκτονικής του CNN, όπως συναρτήσεως απώλειας. Στο μοντέλο CNN, χρησιμοποιούνται όπως συναρτήσεις απώλειας στο επίπεδο εξόδου, για να υπολογιστεί το σφάλμα το οποίο χαρακτηρίζει όπως προβλέψεις του δικτύου, και εκφράζει την απόκλιση όπως πρόβλεψης από την πραγματική τιμή.

Η συνάρτηση απώλειας, εκμεταλλεύεται δύο εισόδους για να εντοπίσει την πηγή του σφάλματος. Για το CNN, η πρώτη παράμετρος είναι η πρόβλεψη ή η εκτιμώμενη έξοδος. Οι συναρτήσεις απώλειας σε ένα Συνελεκτικό Νευρωνικό Δίκτυο (CNN) είναι κρίσιμες για την εκπαίδευση του μοντέλου, καθώς καθορίζουν τον τρόπο με τον οποίο το δίκτυο θα προσαρμόσει τα βάρη του για να μειώσει το σφάλμα όπως προβλέψεις του. Υπάρχουν διάφορες συναρτήσεις απώλειας που μπορούν να χρησιμοποιηθούν, ανάλογα με το είδος του προβλήματος που επιλύει το CNN, όπως ταξινόμηση ή παλινδρόμηση (Bhatt, et al., 2021).

Σε προβλήματα ταξινόμησης, μια συνηθισμένη συνάρτηση απώλειας είναι η Διασταυρούμενη Εντροπία (Cross-Entropy), η οποία μετρά τη διαφορά μεταξύ των πραγματικών και των προβλεπόμενων κατανομών πιθανότητας για όπως κλάσεις ταξινόμησης. Για προβλήματα παλινδρόμησης, μια συχνά χρησιμοποιούμενη συνάρτηση είναι το Μέσο Τετραγωνικό Σφάλμα (Mean Squared Error), το οποίο υπολογίζει τη μέση διαφορά μεταξύ των προβλεπόμενων και των πραγματικών τιμών. Όπως συναρτήσεις απώλειας περιλαμβάνουν την Απόλυτη Τιμή του Μέσου Σφάλματος (Mean Absolute Error), την Εντροπία Kullback-Leibler (KL Divergence) και την Απώλεια Hinge. Η επιλογή όπως κατάλληλης συνάρτησης απώλειας εξαρτάται από τη φύση του προβλήματος και όπως απαιτήσεις όπως εφαρμογής (Brownlee, 2020)

Εκπαίδευση: Η εκπαίδευση όπως μοντέλου CNN γίνεται χρησιμοποιώντας ένα σύνολο δεδομένων, που αποτελείται από μια συλλογή εικόνων και ετικετών (κλάσεις, οριοθετήσεις πλαισίων και μάσκες).

Η όπως τα πίσω διάδοση του σφάλματος (back-propagation of error) είναι μια διαδικασία εκπαίδευσης του CNN, που χρησιμοποιεί την τιμή σφάλματος με βάση την τιμή εξόδου του προηγούμενου επιπέδου. Κάθε βάρος των νευρώνων σε αυτό το επίπεδο ενημερώνεται χρησιμοποιώντας την τιμή σφάλματος. Για να υπολογίσει μια λανθασμένη τιμή και να διορθώσει τα παλιά βάρη, χρησιμοποιούνται νέα βάρη, όπως φαίνεται στην Εικόνα 1.10.1.

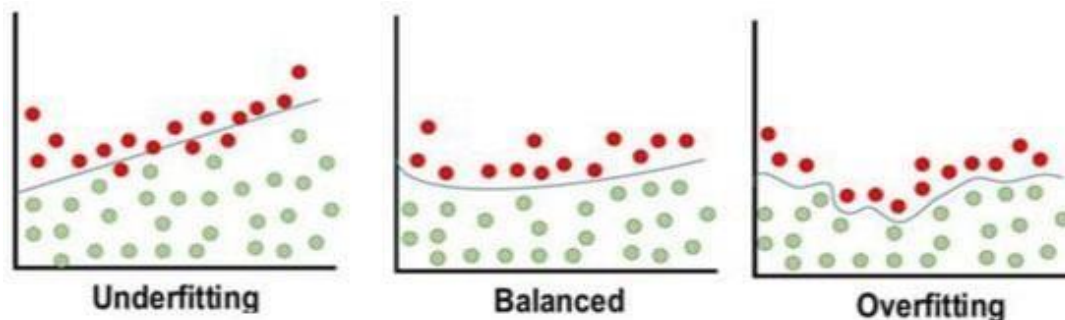


Εικόνα 1.10.1. Εμπροσθοβαρή επίπεδα και επίπεδα ανάδρασης ενός CNN.

Μέχρι να φτάσει στο πρώτο επίπεδο, ο αλγόριθμος επαναλαμβάνει τη διαδικασία. Όλες οι εισοδοι, συμπεριλαμβανομένης της μονάδας πόλωσης (bias), συγκλίνουν στην μονάδα ενεργοποίησης και στη συνέχεια χρησιμοποιείται η συνάρτηση ενεργοποίησης για τον υπολογισμό του αποτελέσματος. Ακολούθως, το δίκτυο θα υπολογίσει τη συνάρτηση απώλειας και θα στείλει το σφάλμα προς τα πίσω για να ενημερωθούν τα βάρη μέχρι να ελαχιστοποιηθεί το κόστος.

1.10 Κανονικοποίηση του CNN

Η κανονικοποίηση σε ένα Συνελικτικό Νευρωνικό Δίκτυο (CNN) είναι μια τεχνική που βοηθά στην επιτάχυνση της εκπαίδευσης και βελτιώνει την απόδοση του δικτύου. Όταν προσπαθούμε να βελτιώσουμε την επίδοση του μοντέλου μας, η υπερεκτίμηση (overfitting) είναι το κύριο εμπόδιο. Η υπερεκτίμηση περιγράφει μια κατάσταση στην οποία ένα μοντέλο αποδίδει καλά, δηλαδή υπερ-προσαρμόζεται, στα δεδομένα εκπαίδευσης, αλλά δεν παρουσιάζει καλή επίδοση στα δεδομένα ελέγχου (δεδομένα που δεν έχουν συμπεριληφθεί στη διαδικασία της εκπαίδευσης και παρουσιάζονται στο δίκτυο για πρώτη φορά). Όταν το μοντέλο δεν λαμβάνει αρκετές πληροφορίες από τα δεδομένα εκπαίδευσης, λέμε ότι υποεκτιμά (underestimate) (Prakash et al., 2021). Ένα μοντέλο θεωρείται "καλά εκπαιδευμένο" εάν παράγει ικανοποιητικά αποτελέσματα τόσο στα δεδομένα εκπαίδευσης όσο και στα δεδομένα ελέγχου. Αυτά τα τρία είδη επίδοσης των μοντέλων παρουσιάζονται στην Εικόνα 1.11.1.



Εικόνα 1.11.1. Σχηματική απεικόνιση της επίδοσης ενός CNN.

Μέσω της κανονικοποίησης πραγματοποιείται επίσης η επιτάχυνση της σύγκλισης του δικτύου CNN κατά την εκπαίδευση, επιτρέποντας τη χρήση υψηλότερων ρυθμών εκμάθησης. Τέλος, η κανονικοποίηση συμβάλλει στη μείωση της ευαισθησίας στις αρχικές τιμές των βαρών (Rosebrock, 2021).

Υπάρχουν πολλές εμπειρικές μέθοδοι κανονικοποίησης των δεδομένων, με σκοπό την αποτροπή της υπερεκτίμησης των προβλέψεων του μοντέλου CNN. Η εφαρμογή της μεθόδου της απόσπασης (drop-out), χρησιμοποιείται ευρέως ως στρατηγική για τη βελτίωση της γενίκευσης που μπορεί να επιτευχθεί από το CNN. Σύμφωνα με τη μέθοδο αυτή, οι νευρώνες απενεργοποιούνται τυχαία κατά τη διάρκεια κάθε κύκλου εκπαίδευσης, με αποτέλεσμα ο νευρώνας που απενεργοποιείται δεν συμμετέχει ούτε στην προώθηση, ούτε στη διάδοση του σφάλματος κατά τη διάρκεια της εκπαίδευσης (Huang et al., 2017). Σε περίπτωση όπου δε χρησιμοποιούμε τη μέθοδο της απόσπασης, τότε τα δεδομένα που εισάγονται πρώτα στο δίκτυο, επηρεάζουν σε δυσανάλογα μεγάλο βαθμό την εκπαίδευση του μοντέλου μας. Η χρήση της μεθόδου της απόσπασης, αποτρέπει την εξάρτηση της εκπαίδευσης του δικτύου από συγκεκριμένους νευρώνες για την εξαγωγή των χαρτών χαρακτηριστικών.

Η μέθοδος drop-weight είναι παρόμοια με τη στρατηγική drop-out και διαφέρει στο γεγονός ότι μόνο τα βάρη (συνδέσεις) μεταξύ των νευρώνων αποκλείονται μετά από επανάληψη του κύκλου εκπαίδευσης.

Ο εμπλουτισμός των δεδομένων μπορεί εύκολα να αποτρέψει την υπερ-εκτίμηση (over-fitting) στην επίδοση του δικτύου, γεγονός που παρατηρείται όταν το μοντέλο εκπαιδεύεται με μικρό πλήθος δεδομένων. Τέλος, υπάρχουν μερικές μέθοδοι που μπορεί να χρησιμοποιηθούν για την τεχνητή αύξηση του μεγέθους του συνόλου εκπαίδευσης.

Επιπλέον, μέσω της κανονικοποίησης των δεδομένων, μπορεί να εξασφαλιστεί ή ακόμα και να βελτιωθεί η αποδοτικότητα του μοντέλου. Η κανονικοποίηση των δεδομένων σε ένα CNN αναφέρεται στη διαδικασία εξασφάλισης ότι οι είσοδοι στο δίκτυο έχουν παρόμοια κλίμακα. Αυτό βοηθά στην πιο γρήγορη και αποτελεσματική εκπαίδευση του μοντέλου, καθώς και στην αποφυγή προβλημάτων, όπως οι πολύ μεγάλες ή πολύ μικρές τιμές βαρών που μπορεί να προκαλέσουν αστάθεια στην εκπαίδευση. Η κανονικοποίηση συνήθως περιλαμβάνει τον μετασχηματισμό των τιμών των δεδομένων, έτσι ώστε η μέση τιμή του συνόλου των δεδομένων να είναι μηδέν και η τυπική απόκλιση να είναι ένα. Στα CNN, η κανονικοποίηση συχνά γίνεται με τη χρήση της τεχνικής κανονικοποίησης παρτίδας (Batch Normalization), η οποία εφαρμόζεται σε υποσύνολα των δεδομένων κατά την εκπαίδευση, βελτιώνοντας τη σταθερότητα του δικτύου. Η μονοδιάστατη κανονική κατανομή χρησιμοποιείται συχνά για αυτήν την διαδικασία. Κατά την τελευταία, όταν γίνεται η κανονικοποίηση της εξόδου σε κάθε επίπεδο, θα αφαιρείται πρώτα τη μέση τιμή και έπειτα αυτή θα διαιρείται με την τυπική απόκλιση (Alzubaidi et al., 2021).

2. PLSR and Multispectral Data

Η μέθοδος παλινδρόμησης μερικών ελαχίστων τετραγώνων (Partial Least Squares Regression - PLSR) είναι μια από τις πιο συνηθισμένες τεχνικές ανάλυσης δεδομένων στην επιστήμη των τροφίμων. Ειδικότερα, η PLSR σε συνδυασμό με την πολυφασματική απεικόνιση (Multispectral Imaging, MSI) αποτελεί ένα πολύ χρήσιμο συνδυασμό για την εκτίμηση της μικροβιολογικής ποιότητας των τροφίμων. Η μέθοδος αυτή συσχετίζει τα δεδομένα από δύο σύνολα δεδομένων X (ανεξάρτητες μεταβλητές) και Y (μεταβλητές απόκρισης, εξαρτημένες μεταβλητές), μέσω ενός γραμμικού πολυπαραγοντικού μοντέλου. Στη συγκεκριμένη μελέτη, η εξαρτημένη μεταβλητή είναι ο πληθυσμός των μικροοργανισμών και οι ανεξάρτητες μεταβλητές είναι τα φασματικά δεδομένα. Σκοπός της ανάλυσης PLSR είναι η απεικόνιση των αρχικών δεδομένων σε ένα νέο χώρο μειωμένων διαστάσεων που ορίζεται από έναν αριθμό κύριων συνιστωσών (Latent Variables, LV) με ορθογώνια διάταξη (Wold et al., 2001).

Η πολυφασματική απεικόνιση είναι μία νέα, μη επεμβατική και ταχεία μέθοδος, που ενσωματώνει τη συμβατική απεικόνιση με τη φασματοσκοπία, για την ταυτόχρονη απόκτηση χωρικής και φασματικής πληροφορίας. Χρησιμοποιώντας πολυφασματικές εικόνες, είναι δυνατό να εκτιμηθούν τα φυσικά χαρακτηριστικά των τροφίμων, όπως το χρώμα, το μέγεθος, το σχήμα και η υφή. Κατά την εφαρμογή της τεχνικής αυτής, δεν απαιτείται προ-επεξεργασία του δείγματος, γεγονός που την καθιστά ιδανική για παρακολούθηση και έλεγχο σε πραγματικό χρόνο (on-line) της ποιότητας των τροφίμων (Feng et al., 2012). Το πιο σημαντικό χαρακτηριστικό της τεχνικής αυτής, είναι το μεγάλο δυναμικό της για τη ταυτόχρονη μέτρηση πολλών χαρακτηριστικών ιδιοτήτων των τροφίμων, διασφαλίζοντας έτσι την ποιότητά τους. Είναι μία μέθοδος φιλική προς το περιβάλλον, μη καταστροφική προς το προϊόν, ταχεία και μη τοξική διότι δεν απαιτεί τη χρήση χημικών αντιδραστηρίων. Η μέθοδος πολυφασματικής απεικόνισης παράγει μεγάλο όγκο δεδομένα που χαρακτηρίζονται από πληθώρα διαστάσεων, τα οποία απαιτούν τη χρήση ειδικών τεχνικών για την ανάλυσή τους (Daugaard et al., 2010).

Σε πρόσφατες μελέτες, ο αλγόριθμος PLSR, σε συνδυασμό με την φασματοσκοπία, έχει χρησιμοποιηθεί για την εκτίμηση του μικροβιακού φορτίου σε διάφορα τρόφιμα, όπως κρέας, ψάρια, λαχανικά και φρούτα. Χαρακτηριστικό παράδειγμα αποτελεί η δημιουργία μοντέλου για τον ταχύ και μη καταστρεπτικό προσδιορισμό του αερόβιου μικροβιακού πληθυσμού σε μαγειρεμένα χοιρινά λουκάνικα (Fei Ma et al., 2014).

Σημαντική είναι η πρόοδος που έχει σημειωθεί στον τομέα της ποιότητας τροφίμων, με τη μελέτη της αλλοίωσης βόειου κρέατος με την χρήση φασματοσκοπίας Raman και FT-IR, σε συνδυασμό με την ανάλυση φασματοσκοπικών δεδομένων μέσω του αλγόριθμου PLSR (Liu, et al., 2023). Με αυτόν τον τρόπο, μπορεί να γίνει εκτίμηση της μικροβιολογικής ποιότητας κρέατος και να προσδιοριστεί η διάρκεια ζωής των τροφίμων.

Επιπλέον, η ανάλυση φασματοσκοπικών δεδομένων μέσω του αλγορίθμου PLSR, μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την πρόβλεψη της ποιότητας των τροφίμων σε σχέση με άλλες παραμέτρους, όπως η περιεκτικότητα σε υγρασία, το περιεχόμενο σε λιπαρά και άλλα συστατικά. Σε πρόσφατη μελέτη χρησιμοποιήθηκε φασματοσκοπία εγγύς υπέρυθρου (Near Infra-red, NIR) και φασματοσκοπία υπεριώδους-ορατού (UV-VIS) για τη δημιουργία προβλεπτικού μοντέλου εκτίμησης των χημικών ιδιοτήτων των μυών ιχθυερών (Cheng et al., 2017). Η πρόβλεψη αυτή μπορεί να συμβάλει στην καλύτερη αξιολόγηση της ποιότητας των τροφίμων πριν φθάσουν στο ράφι του καταστήματος και να διορθώσουν ενδεχόμενα προβλήματα ποιότητας πριν το τελικό προϊόν φτάσει στον καταναλωτή.

Σκοπός της μελέτης

Σκοπός της μελέτης ήταν η εφαρμογή και επικύρωση αλγορίθμων μηχανικής εκμάθησης με/χωρίς επίβλεψη που θα βασίζονται σε μοντέλα παλινδρόμησης μερικών ελαχίστων τετραγώνων καθώς επίσης και σε τεχνητά νευρωνικά δίκτυα (artificial neural networks, ANN), για την ανάλυση:

1) Εικόνων πολυφασματικής απεικόνισης που ελήφθησαν κατά τη συντήρηση ζυμωμένου φυσικά μαύρου (ώριμου) ελαιοκάρπου ποικιλίας Καλαμάτα, σε αερόβιες συνθήκες και τροποποιημένες ατμόσφαιρες, με/χωρίς επικάλυψη του καρπού με εδώδιμες μεμβράνες, με σκοπό την ταχεία και μη επεμβατική εκτίμηση του πληθυσμού της ολικής μικροβιακής χλωρίδας (OMX) και των οξυγαλακτικών βακτηρίων.

2) Δεδομένων πολυφασματικής απεικόνισης που αφορούν στην OMX και στον πληθυσμό των ψευδομονάδων, σε φιλέτα κοτόπουλου επεξεργασμένα με εδώδιμη μεμβράνη χιτοζάνης συντηρούμενα υπό ψύξη σε αερόβιες συνθήκες.

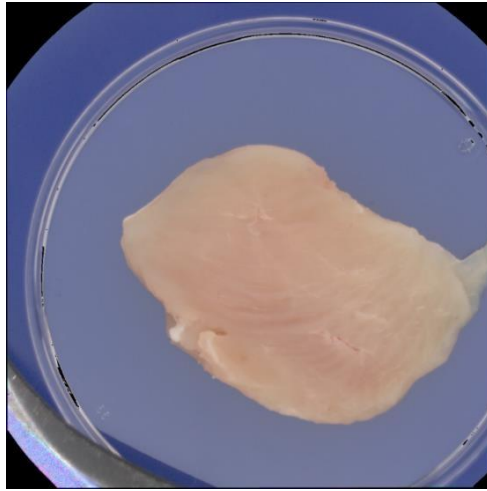
3. Υλικά και μέθοδοι

3.1 Πειραματικό μέρος

Τα πειραματικά δεδομένα που χρησιμοποιήθηκαν στην εν λόγω μεταπτυχιακή μελέτη ελήφθησαν από προηγούμενη πειραματική εργασία (Loukanari, 2022) με τίτλο «Μελέτη των μικροβιολογικών και φυσικοχημικών χαρακτηριστικών κατά την επικάλυψη της επιτραπέζιας ελιάς με εδώδιμες μεμβράνες και την περαιτέρω συντήρηση σε εύκαμπτους πολυστρωματικούς περιέκτες με τροποποιημένες ατμόσφαιρες». Συγκεκριμένα, φυσικές μαύρες ελιές ποικιλίας Καλαμάτα εμβαπτίστηκαν αρχικά σε υδατικό διάλυμα 1% (w/v) καρβοξυ-μέθυλο κυτταρίνης (CMC), 1% (w/v) αλγινικού νατρίου (SA) και 1% (w/v) γλυκερόλης και κατόπιν συσκευάστηκαν σε πολυστρωματικούς περιέκτες πολυαμιδίου (PA)/ πολυαιθυλενίου (PE) υπό αερόβιες συνθήκες και τροποποιημένες ατμόσφαιρες (100% N₂ και 70% N₂ / 30% CO₂). Επιπλέον, προετοιμάστηκαν δείγματα ελέγχου (μάρτυρες) επιτραπέζιας ελιάς χωρίς εδώδιμη επικάλυψη, τα οποία συσκευάστηκαν στις ίδιες συνθήκες. Όλες οι συσκευασίες αποθηκεύτηκαν σε θερμοκρασία δωματίου (20-22 °C) για 4 μήνες (120 ημέρες) και υποβλήθηκαν περιοδικά σε μικροβιολογικές αναλύσεις για τον προσδιορισμό του πληθυσμού των οξυγαλακτικών βακτηρίων και των ζυμών, καθώς επίσης και σε φυσικοχημικές αναλύσεις για την μέτρηση της τιμής του pH, της ογκομετρούμενης οξύτητας, της αλατότητας, της υγρασίας, της υφής και του χρώματος του καρπού. Στα ίδια χρονικά σημεία με τις παραπάνω αναλύσεις ελήφθησαν και φάσματα πολυφασματικής απεικόνισης όπως περιγράφεται στην Ενότητα 3.2.

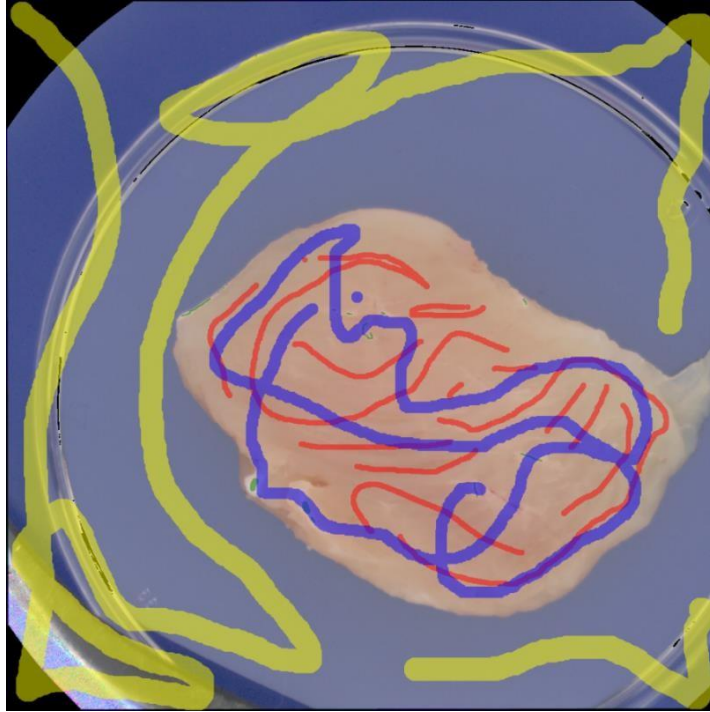
3.2 Πολυφασματική απεικόνιση (Multispectral Imaging, MSI)

Η πολυφασματική απεικόνιση των δειγμάτων της επιτραπέζιας ελιάς, κατά τη συντήρηση σε αερόβιες συνθήκες και τροποποιημένες ατμόσφαιρες με/χωρίς επικάλυψη εδώδιμης μεμβράνης, πραγματοποιήθηκε με τη χρήση του οργάνου Videometer-Lab (Videometer A/S, Videometer, 2019, Herlev, Δανία). Το Videometer-Lab καταγράφει την ανακλαστικότητα της επιφάνειας των δειγμάτων σε 18 διαφορετικά μήκη κύματος στην περιοχή από 405 έως 970 nm, και συγκεκριμένα σε: 405, 435, 450, 470, 505, 525, 570, 590, 630, 645, 660, 700, 850, 870, 890, 910, 940 και 970 nm. Η ανακλαστικότητα της επιφάνειας καταγράφεται από μια κάμερα υψηλής ανάλυσης. Το τρόφιμο τοποθετείται στο κέντρο μιας σφαίρας Ulbricht, η οποία έχει λευκή ματ επίστρωση εσωτερικά και φωτοδιόδους LED με στενή φασματική ακτινοβολία, τοποθετημένους περιφερειακά στην άκρη της σφαίρας. Ο σκοπός της επίστρωσης στη σφαίρα Ulbricht είναι να εξασφαλιστεί μια διαχυτική και χωρικά ομοιογενής ανακλαστικότητα του δείγματος. Κατά τη διάρκεια της λειτουργίας του οργάνου, οι διόδοι ανάβουν διαδοχικά, οδηγώντας σε μια μονόχρωμη εικόνα με ακρίβεια 32-bit floating-point για κάθε μήκος κύματος. Το τελικό αποτέλεσμα της ανάλυσης MSI είναι ένα κύβος χωρικών και φασματικών δεδομένων για κάθε δείγμα μεγέθους $m \times n \times 18$ (όπου $m \times n$ είναι το μέγεθος της εικόνας σε pixel) (International Bureau of the World Intellectual Property Organization Patent No. EP1051660, 2003)



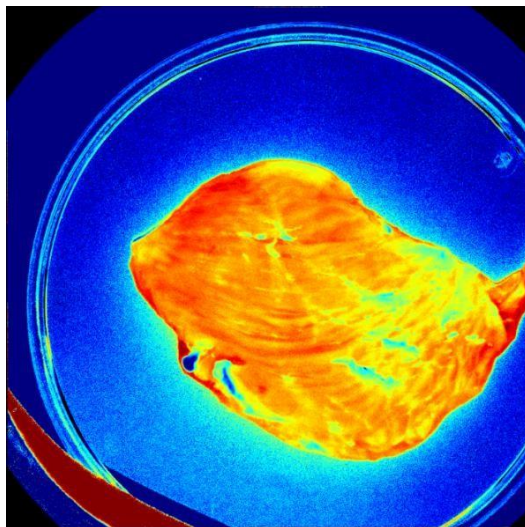
Εικόνα 3.2.1. Αρχική εικόνα δείγματος φιλέτου κοτόπουλου που ανήκει στον μάρτυρα (χωρίς επικάλυψη με εδώδιμη μεμβράνη) σε χρόνο $t=0$.

Ένα κρίσιμο σημείο κατά την εφαρμογή της πολυφασματικής απεικόνισης είναι η διασφάλιση ότι η ένταση των LEDs είναι σταθερή, προκειμένου να αποφύγουμε φαινόμενα όπως οι σκιές και οι παραμορφώσεις του αντικειμένου (τρόφιμο) [23,49]. Επομένως, κατά την έναρξη της διαδικασίας λήψης των εικόνων, χρησιμοποιούμε ένα δείγμα αναφοράς, μέσω του οποίου ρυθμίζουμε την ένταση των LEDs. Η διαδικασία αυτή καλείται *auto-light*. Στη συνέχεια, πραγματοποιείται γεωμετρική και ακτινομετρική βαθμονόμηση της συσκευής πολυφασματικής απεικόνισης. Μετά τη λήψη της εικόνας, θα πρέπει να πραγματοποιηθεί επεξεργασία προκειμένου να αφαιρεθούν από την εικόνα τα σημεία εκείνα που δεν περιέχουν χρήσιμες πληροφορίες για το μοντέλο (π.χ. η επιφάνεια του τρυβλίου, ο λιπώδης και συνδετικός ιστός του κρέατος, κλπ). Η απομόνωση της περιοχής ενδιαφέροντος (ROI) στο δείγμα και η απομάκρυνση των μη σχετικών πληροφοριών πραγματοποιείται με την εφαρμογή Κανονικής Διακριτικής Ανάλυσης (Canonical Discriminant Analysis, CDA), δίνοντας την τιμή 1 στις περιοχές του τροφίμου που θέλουμε να συμπεριληφθούν στην ανάλυση (π.χ. μυϊκός ιστός) και την τιμή 0 στις περιοχές που δεν περιέχουν χρήσιμη πληροφορία. Η εφαρμογή της ανάλυσης CDA στην εικόνα πραγματοποιείται μέσω του λογισμικού Videometer-Lab έκδοση 2.12.39 (Videometer A / S, Herlev, Δανία).



Εικόνα 3.2.2. Χρώση και οριοθέτηση των περιοχών ενδιαφέροντος (regions of interest, ROI).

Η εικόνα που προκύπτει μετά την ανάλυση CDA, παρουσιάζει με διαφορετικούς χρωματισμούς την κατηγοριοποίηση των pixels (Εικόνα 3.2.3).



Εικόνα 3.2.3. Κατάτμηση της εικόνας (Image segmentation) μετά την εφαρμογή της ανάλυσης CDA.

Τέλος, απορρίπτοντας τα pixels που συνδέονται με τις μη σχετικές περιοχές προκύπτει η παρακάτω Εικόνα 3.2.4, που παρουσιάζει μόνο την περιοχή ενδιαφέροντος, ενώ η περιοχή με τις μη σχετικές πληροφορίες παρουσιάζεται με μαύρο χρώμα.

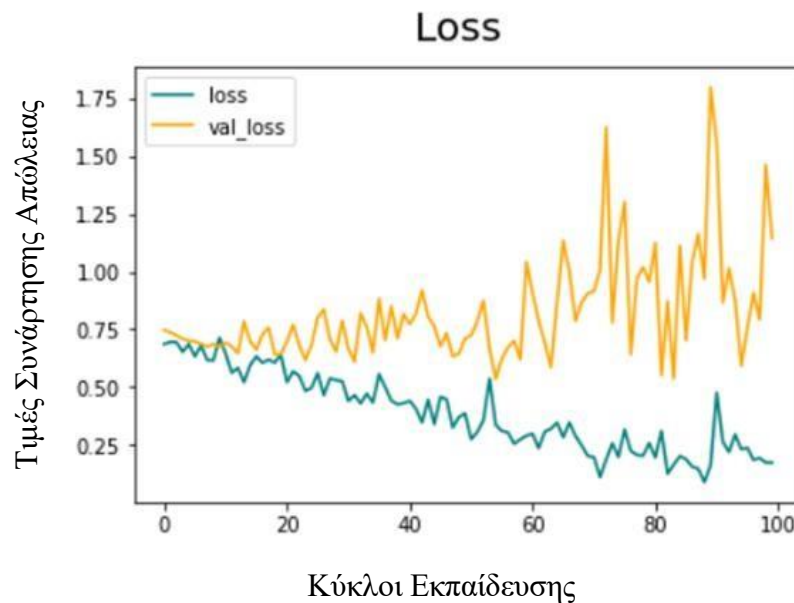


Εικόνα 3.2.4. Cropped Image. Απεικονίζει μονάχα τις περιοχές ενδιαφέροντος. Απεικονίζεται φιλέτο κοτόπουλου που ανήκει στον μάρτυρα σε χρόνο συντήρησης $t = 0$

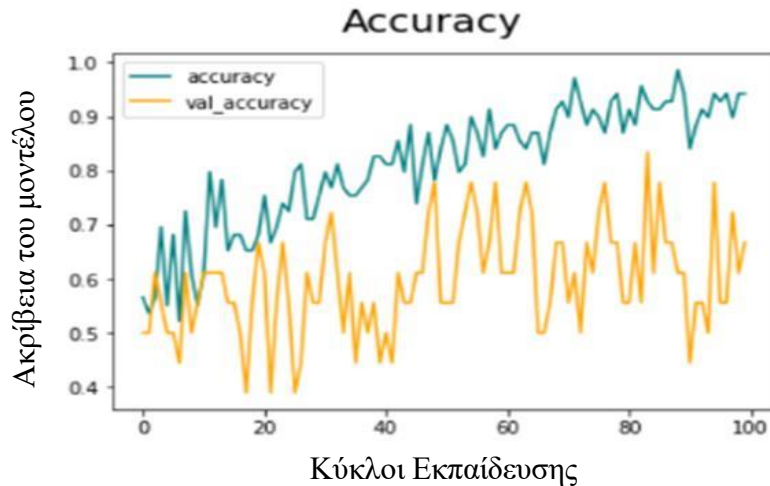
4. Εφαρμογή CNN – Αποτελέσματα

4.1. Αναγνώριση και κατηγοριοποίηση εικόνων PNG-Υπολογιστική όραση

Όπως συζητήθηκε παραπάνω, τα CNN αποτελούν εξαιρετικά εργαλεία για προβλήματα κατηγοριοποίησης και αναγνώρισης εικόνων. Έτσι η πρώτη πειραματική εφαρμογή που επιχειρήθηκε ήταν η σύνθεση ενός CNN το οποίο θα χρησιμοποιούσε σαν δεδομένα εισόδου, αρχεία εικόνων τύπου PNG από φυσικές μαύρες επιτραπέζιες ελιές κατά τη συντήρησή τους σε αερόβιες συνθήκες και τροποποιημένες ατμόσφαιρες με/χωρίς επικάλυψη με εδώδιμες μεμβράνες. Σκοπός του πειράματος αυτού ήταν να διαπιστωθεί εάν το CNN μπορεί να εξάγει έναν χάρτη χαρακτηριστικών βασισμένο στη διαφορετική χρωματική ένταση των διαφόρων περιοχών των ελιών στα δείγματα. Με αυτόν τον τρόπο θα μπορούσε θεωρητικά να επιτευχθεί ο διαχωρισμός και η κατηγοριοποίηση των δειγμάτων, σε δύο μικροβιολογικές κατηγορίες ποιότητας, μια εκ των οποίων θα περιλάμβανε χαμηλό μικροβιακό φορτίο (3-4 log CFU/g), και η δεύτερη υψηλό μικροβιακό φορτίο (5-6 log CFU/g). Η αξιολόγηση της επίδοσης του μοντέλου πραγματοποιήθηκε παρακολουθώντας και παραθέτοντας γραφικά την πορεία της ακρίβειας της πρόβλεψης κατά την εκπαίδευση του μοντέλου, αλλά και κατά την διάρκεια της επαλήθευσης. Τα αποτελέσματα της συγκεκριμένης ανάλυσης παρουσιάζονται παρακάτω.



Γράφημα 4.1.1 Γραφική αναπαράσταση των συναρτήσεων απώλειας για διαδικασία εκπαίδευσης (loss) και εσωτερικής επικύρωσης (val_loss)



Γράφημα 4.1.2 Γραφική παράσταση της ακρίβειας του μοντέλου μας κατά την εκπαίδευση και την εσωτερική επικύρωση.

Η επίδοση του συγκεκριμένου μοντέλου είναι αρκετά χαμηλή καθώς αποτυγχάνει εμφανώς να καταφέρει να καθιερώσει ένα ικανοποιητικό μοντέλο πρόβλεψης όπως φαίνεται και από το διάγραμμα.

Επιπλέον από την μεγάλη διακύμανση που παρατηρείται στο διάγραμμα ακρίβειας (Γράφημα 4.1.2) φαίνεται ότι το μοντέλο εκτελεί τις προβλέψεις με τυχαίο τρόπο. Η αξιολόγηση των προβλέψεων του μοντέλου και η κατασκευή του παραπάνω γραφήματος ακρίβειας έγινε με την χρήση της συνάρτησης απώλειας κατηγορικής εντροπίας, η οποία συχνά χρησιμοποιείται σε προβλήματα κατηγοριοποίησης με πολλαπλές κλάσεις. (Demirkaya et al. 2020). Η τελευταία μετρά την ανομοιογένεια μεταξύ της κανονικής κατανομής (Q) και της πραγματικής/ παρατηρούμενης κατανομής (P).

Η μαθηματική έκφραση για ένα δεδομένο σημείο στα δεδομένα μπορεί να οριστεί ως:

$$L = - \sum_{i=1}^c P_i \log(Q_i)$$

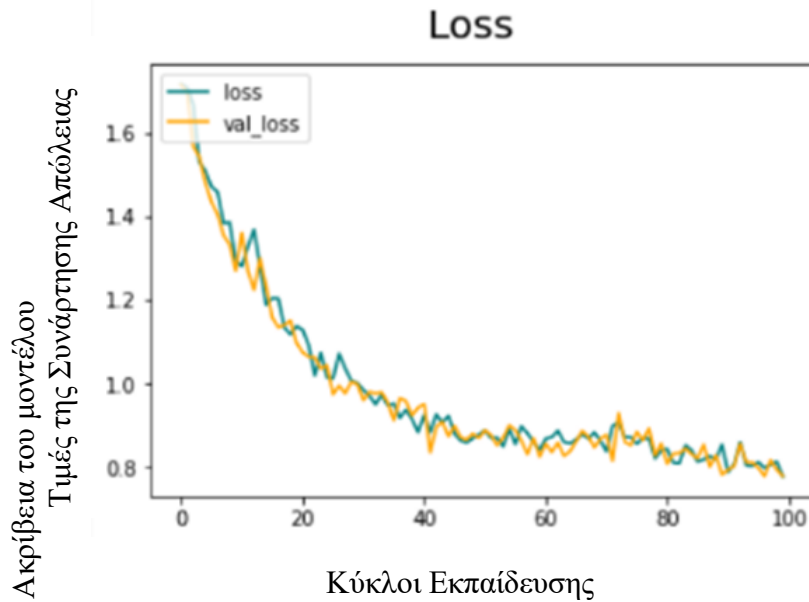
Όπου:

- C είναι ο αριθμός των κλάσεων.
- P_i η πραγματική πιθανότητα το σημείο να ανήκει στην κλάση i.
- Q_i η προβλεπόμενη πιθανότητα το σημείο να ανήκει στην κλάση i.

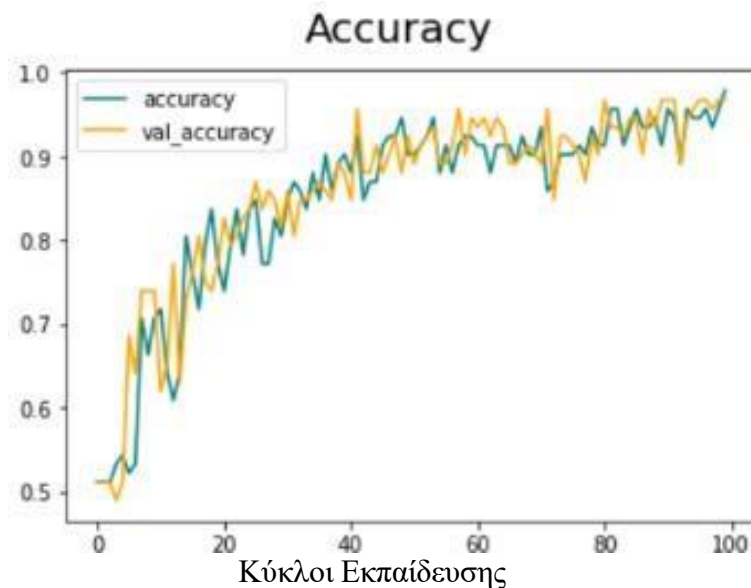
Στα πλαίσια των νευρωνικών δικτύων, η P_i αναφέρεται συνήθως στην κλάση στόχο της διαδικασίας αναγνώρισης την δεδομένη στιγμή και Q_i αναφέρεται στο αποτέλεσμα της συνάντησης απώλειας softmax για την i-οστή κλάση. Στόχος είναι η κατά τον δυνατόν μείωση της απώλειας που θα υποδείξει ότι η προβλεπόμενη κατανομή πλησιάζει την πραγματική.

4.2 Εναλλακτική οργάνωση και προ-επεξεργασία των δεδομένων.

Προκειμένου να βελτιωθεί η επίδοση του μοντέλου, επιχειρήθηκε η αύξηση των δεδομένων, αφού ο αριθμός των εικόνων ήταν μικρός (110) για τη σωστή εκπαίδευση ενός CNN. Για το σκοπό αυτό, χρησιμοποιήθηκε ειδική συνάρτηση, καλούμενη γεννήτορας (generator), η οποία τροφοδοτεί τις εικόνες στο CNN με αποσπασματικό τρόπο. Επίσης εφαρμόζει τυχαίους μετασχηματισμούς, όπως περικοπή εικόνας (cropping), θόλωμα (blurring), περιστροφή (rotation), αλλαγή κλίμακας (scaling).



Γράφημα 4.2.1 Γραφική παράσταση των συναρτήσεων απώλειας για την εκπαίδευση και την εσωτερική επικύρωση

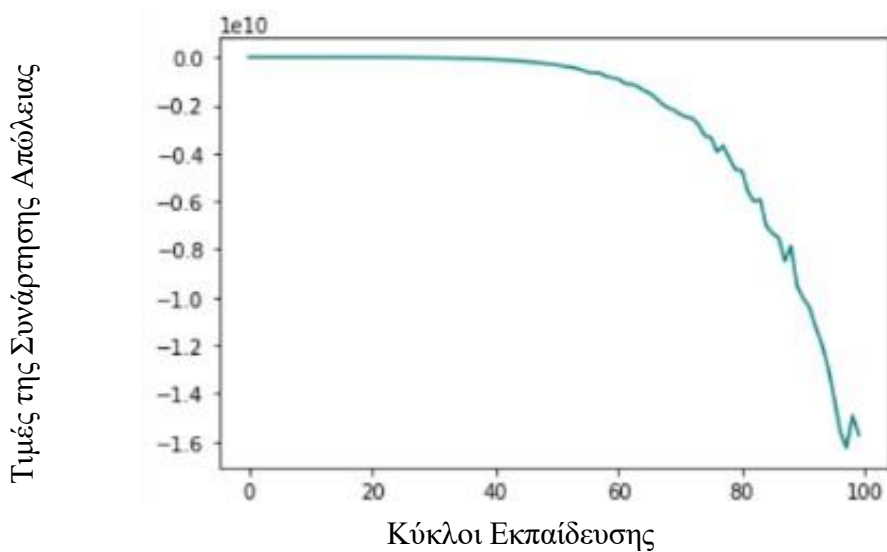


Γράφημα 4.2.2. Γραφική παράσταση της ακρίβειας του μοντέλου μας κατά τα στάδια της εκπαίδευσης και της εσωτερικής επικύρωσης

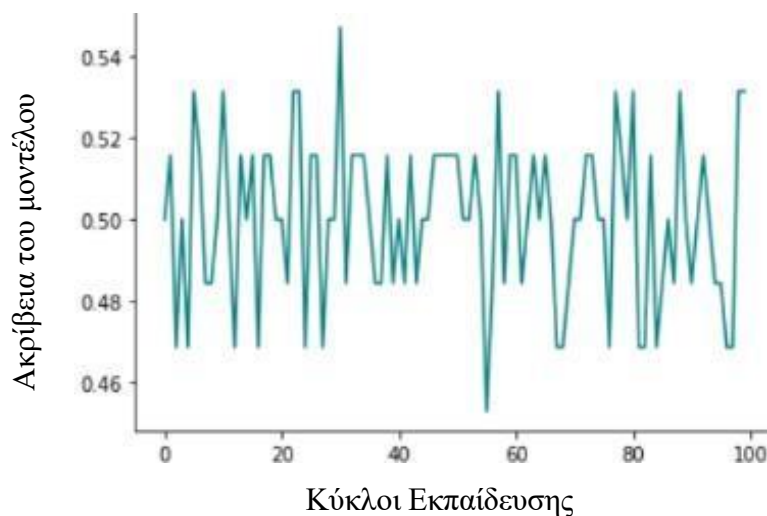
Το μοντέλο μας μετά από 100 κύκλους εκπαίδευσης κατάφερε να επιτύχει κατά την εκπαίδευσή του ακρίβεια που έφτασε το 97,83%, ενώ η ακρίβεια κατά την εσωτερική επικύρωση έφτασε το 96,74%. Η αποτελεσματικότητα του μπορεί επίσης να φανεί από τα διαγράμματα αξιολόγησης. Όπως μπορούμε να δούμε η συνάρτηση απώλειας φθίνει (Γράφημα 4.2.1) διαρκώς ενώ η ακρίβεια της πρόβλεψης κατά την εκπαίδευση και την επαλήθευση (Γράφημα 4.2.2) αυξάνεται σταδιακά μέχρι το 100% περίπου. Με βάση τα αποτελέσματα αυτά, το μοντέλο CNN είναι σε θέση να κατηγοριοποιήσει επιτυχώς τις εικόνες σε δύο κλάσεις μικροβιολογικής ποιότητας σύμφωνα με το μικροβιακό φορτίο των δειγμάτων των ελιών, όπως προέκυψε από τη μικροβιολογική ανάλυση. Ακολούθησε εξωτερική επικύρωση του μοντέλου, προκειμένου να διαπιστωθεί η επίδοσή του σε δεδομένα που δεν έχουν παρουσιαστεί στο στάδιο της εκπαίδευσης. Για τον σκοπό αυτό, χρησιμοποιήθηκαν 4 εικόνες οι οποίες επιλέχθηκαν τυχαία κατά τα πρώτα στάδια του αλγορίθμου και οι οποίες δεν τροφοδοτήθηκαν στον μοντέλο κατά την εκπαίδευση. Από τις 4 εικόνες τις οποίες το μοντέλο κλήθηκε να κατηγοριοποιήσει, κατέταξε μόνο 2 στη σωστή κλάση. Το γεγονός ότι έχουμε μόνο 50% επιτυχή πρόβλεψη, παρά την εξαιρετική επίδοση του επιδεικνύει το μοντέλο CNN κατά την εκπαίδευση και εσωτερική επικύρωση, μας οδηγεί στο συμπέρασμα ότι η επίδοση του μοντέλου αποτελεί μια περίπτωση υπερ-εκπαίδευσης (overfitting). Τα ίδια αποτελέσματα επαναλήφθηκαν και για διαφορετικές παραμέτρους του νευρωνικού δικτύου, όπως οι επαναλήψεις εκπαίδευσης, η συναρτήσεις απώλειας, το βήμα εκπαίδευσης κλπ. Πιθανότατα, ο λόγος για τη μη-ικανοποιητική επίδοση του μοντέλου κατά την εξωτερική επικύρωση οφείλεται στη χρήση της συνάρτησης generator. Η συνάρτηση επιλέγει με τυχαίο τρόπο κάθε φορά τις εικόνες στις οποίες εφαρμόζει μετασχηματισμούς, χωρίς όμως να μπορεί σε κάθε καινούργια επανάληψη να διασφαλίσει ότι η καινούργια προς επεξεργασία εικόνα, δεν ανήκει στην δεξαμενή αυτών που έχουν ήδη επιλεγεί πρωτότερα. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα, το μοντέλο να καταφέρνει να απομνημονεύει τις εικόνες και τις κλάσεις τους αντί να προσπαθήσει να φτιάξει ένα μοντέλο πρόβλεψης για κατηγοριοποίηση.

4.3 Siamese neural network (SNN).

Προκειμένου να βελτιωθεί η επίδοση του μοντέλου, χρησιμοποιήσαμε ένα δίκτυο SNN, το οποίο είναι ένα νευρωνικό δίκτυο μικτών εισόδων. Οι υπολογιστικοί μας επίσης είναι περιορισμένοι, οπότε για τον συγκεκριμένο αλγόριθμο, έπρεπε αρχικά να περιορίσουμε τον μεγάλο όγκο δεδομένων που περιέχονται στα csv αρχεία με τα φασματικά δεδομένα. Έτσι, τα συγκεκριμένα αρχεία μετατράπηκαν σε πίνακες υπό μορφή numpy, οι οποίοι είναι σημαντικά μικρότεροι σε μέγεθος. Η numpy αποτελεί βιβλιοθήκη της προγραμματιστικής γλώσσας python εξειδικευμένη στην διαχείριση πινάκων πολλαπλών διαστάσεων, που χρησιμοποιείται συχνά στην στατιστική επεξεργασία δεδομένων. Στο συγκεκριμένο νευρωνικό δίκτυο έχουμε 2 ειδών δεδομένα εισόδου. Μια είσοδος δέχεται εικόνες PNG ενώ η άλλη τροφοδοτείται με τα αντίστοιχα φασματικά δεδομένα υπό μορφή πίνακα numpy. Σκοπός του συγκεκριμένου νευρωνικού δικτύου είναι η διερεύνηση της δυνατότητας διασύνδεσης μεταξύ των εικόνων και των δεδομένων απορρόφησης. Τέλος, θέλουμε να διερευνήσουμε τη δυνατότητα γενίκευσης του δικτύου ώστε να χρησιμοποιηθεί για πρόβλεψη της κλάσης της μικροβιολογικής ποιότητας των δειγμάτων. Η τιμές της συνάρτησης απώλειας για το συγκεκριμένο μοντέλο φαίνονται στο γράφημα 4.3.1. ενώ η τιμές της ακρίβειας πρόβλεψης του μοντέλου μας στο γράφημα 4.3.2.



Γράφημα 4.3.1 Γραφική παράσταση της συνάρτησης απώλειας του μοντέλου μας κατά την πάροδο των κύκλων εκπαίδευσης.



Γράφημα 4.3.2 Γραφική παράσταση της ακρίβειας της πρόβλεψης κατά το στάδιο της εσωτερικής επικύρωσης

Παρατηρούμε ότι ενώ η συνάρτηση απώλειας του μοντέλου μειώνεται σταδιακά με την αύξηση των κύκλων εκπαίδευσης (Γράφημα 4.3.1), παρόλα αυτά, η ακρίβεια του μοντέλου παρουσιάζει μεγάλη διακύμανση (Γράφημα 4.3.2), γεγονός που μας οδηγεί στο συμπέρασμα ότι το μοντέλο εκτελεί τις προβλέψεις τυχαία. Συνεπώς, δεν είναι σε θέση να εξάγει χαρακτηριστικά που να εξηγούν τις σχέσεις μεταξύ των φασματικών δεδομένων και των εικόνων, ώστε να μπορέσει να τις κατηγοριοποιήσει σε ικανοποιητικό βαθμό.

5. Ανάπτυξη μοντέλου παλινδρόμησης μερικών ελαχίστων τετραγώνων (Partial Least Square Regression)

5.1 PLSR

Στην περίπτωση αυτή, αναπτύχθηκαν μοντέλα PLS-R προκειμένου να συσχετιστούν τα φασματοσκοπικά δεδομένα από τις εικόνες πολυφασματικής απεικόνισης, με: (α) το μικροβιακό πληθυσμό (OMX, *Pseudomonas spp.*) από φιλέτα στήθους κοτόπουλου, που συντηρήθηκαν σε θερμοκρασία 2°C με/χωρίς επικάλυψη εδώδιμης μεμβράνης από χιτοζάνη, και (β) το μικροβιακό πληθυσμό (OMX) από φυσικές μαύρες ελιές κατά τη συσκευασία σε αερόβιες συνθήκες και τροποποιημένη ατμόσφαιρα με/χωρίς την επικάλυψη εδώδιμων μεμβρανών.

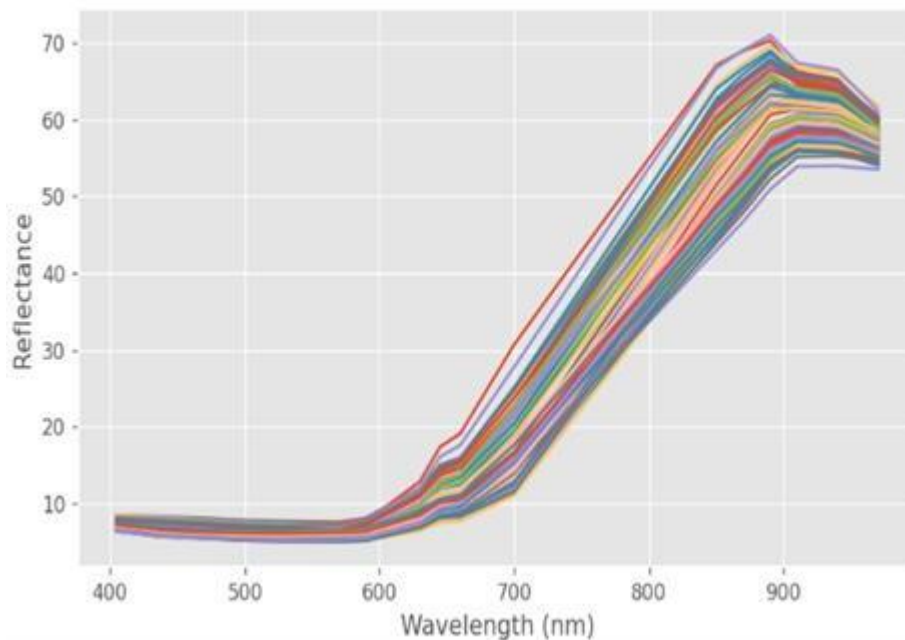
Τα μοντέλα PLS-R αναπτύχθηκαν σε γλώσσα προγραμματισμού Python και περιλάμβαναν τα ακόλουθα στάδια:

1. Εισαγωγή των απαραίτητων βιβλιοθηκών και πακέτων.
2. Φόρτωση δεδομένων από αρχείο CSV σε ένα DataFrame με τη χρήση της βιβλιοθήκης pandas.
3. Δημιουργία λιστών με τις τιμές χρόνου, τα φάσματα (spectra), και τις μήκη κύματος (wavelengths) από το DataFrame.
4. Υπολογισμός παραγώγων πρώτης δεύτερης τάξης των φασμάτων χρησιμοποιώντας τη συνάρτηση Savitsky_Golay (savgol_filter) από την βιβλιοθήκη scipy.
5. Δημιουργία αντικειμένου PLSRegression και εκπαίδευση του μοντέλου PLS με τη χρήση των παραγώγων των φασμάτων και των τιμών του χρόνου (εξαρτημένη μεταβλητή).
6. Γραφική απεικόνιση των προσαρμοσμένων φασμάτων και των απόλυτων τιμών των συντελεστών του PLS.
7. Υλοποίηση μιας συνάρτησης pls_variable_selection, η οποία εκτελεί την επιλογή μεταβλητών PLS (PLS variable selection) για τη βελτιστοποίηση του μοντέλου PLS και τη μείωση του αριθμού των μεταβλητών.
8. Υλοποίηση μιας συνάρτησης simple_pls_cv, η οποία εκτελεί την απλή διασταυρούμενη επικύρωση (cross-validation) του μοντέλου PLS και υπολογίζει τους δείκτες αξιολόγησης, όπως το συντελεστή προσδιορισμού R^2 και το μέσο τετραγωνικό σφάλμα (MSE) για τα δεδομένα εκπαίδευσης και επικύρωσης.
9. Εμφάνιση γραφήματος που παρουσιάζει τις προβλεπόμενες τιμές του μικροβιακού πληθυσμού (Predicted values) έναντι των παρατηρούμενων μετρήσεων (Observed values), καθώς και τη γραμμή παλινδρόμησης. Επίσης, παρουσιάζεται και η γραμμή ισοδυναμίας (line of equity, $y = x$), όπου ταυτίζονται οι προβλεπόμενες και οι παρατηρούμενες τιμές.
10. Κλήση της συνάρτησης pls_variable_selection για να βρεθεί η βέλτιστη αριθμητική ποσότητα των συνιστωσών PLS.
11. Εκτέλεση της συνάρτησης simple_pls_cv με τη χρήση των βέλτιστων μεταβλητών PLS, υπολογισμός των δεικτών αξιολόγησης και εμφάνιση των αποτελεσμάτων.

5.2 PLSR μοντέλα με χρήση πολυφασματικών δεδομένων από φυσικές μαύρες επιτραπέζιες ελιές

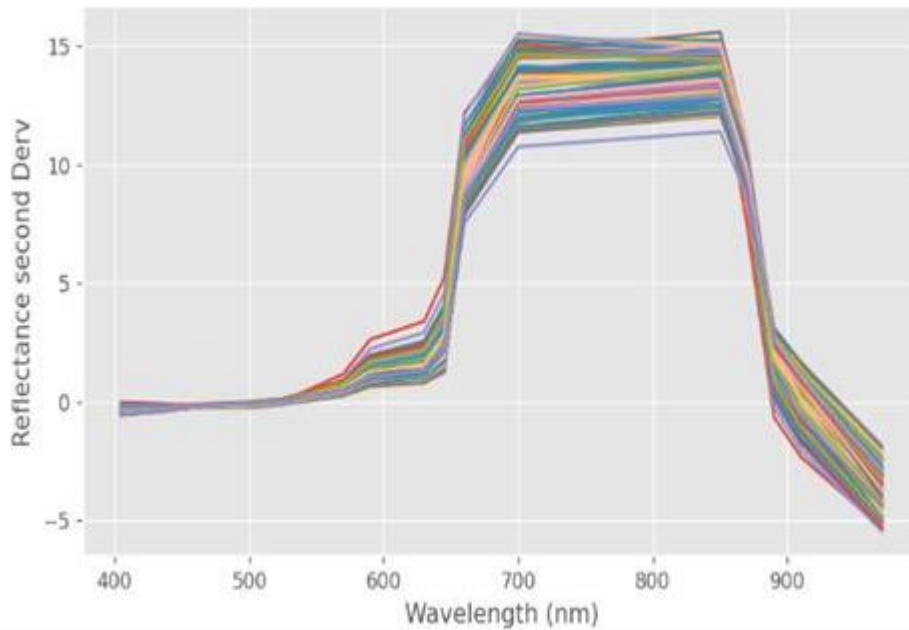
5.2.1 Μοντέλο PLSR για την πρόβλεψη της OMX με χρήση πολυφασματικών δεδομένων ως ανεξάρτητων μεταβλητών

Ακολουθεί η απεικόνιση των δεδομένων ανάκλασης σε 18 διαφορετικά μήκη κύματος

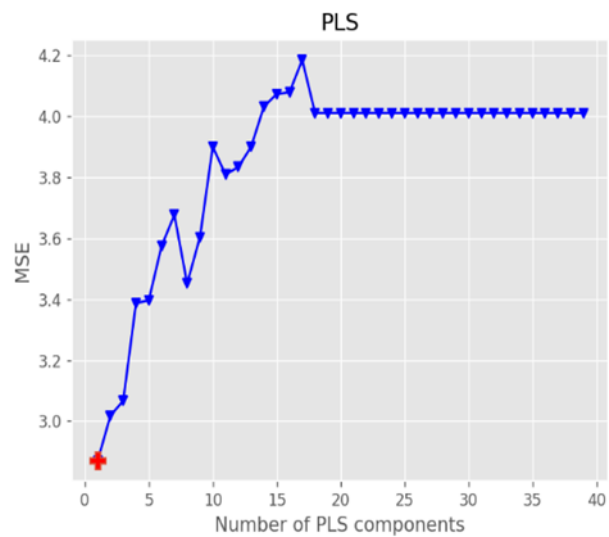


Γράφημα 5.2.1.1. Απεικόνιση των πολυφασματικών δεδομένων ανάκλασης δειγμάτων φυσικής μαύρης ελιάς κατά τη συντήρηση σε αερόβιες συνθήκες και τροποποιημένη ατμόσφαιρα με επικάλυψη με εδώδιμες μεμβράνες.

Ένα σύνηθες βήμα προ-επεξεργασίας στην ανάλυση δεδομένων είναι η εφαρμογή του φίλτρου Savitzky-Golay (Savgol filter). Ο σκοπός του συγκεκριμένου φίλτρου είναι η εξομάλυνση των δεδομένων. Η εφαρμογή του συγκεκριμένου φίλτρου έχει σαν αποτέλεσμα την μείωση του θορύβου, την επισήμανση τάσεων και την εμφάνιση πιθανών μοτίβων που μπορεί να υπάρχουν στα δεδομένα μας. Το SavGol filter βασίζεται σε πολυωνυμική παρεμβολή, όπου γίνεται παρεμβολή πολυωνύμου μικρού βαθμού σε μικρά αλληλεπικαλυπτόμενα διαστήματα δεδομένων. Στην παρούσα μελέτη χρησιμοποιήσαμε μια επέκταση του συγκεκριμένου φίλτρου η οποία υπολογίζει την 2η παράγωγο της εφαρμοσμένου στην παρεμβολή πολυωνύμου. Σκοπός αυτού είναι να γίνουν πιο εμφανείς η τάσεις που διέπουν τα δεδομένα μας.

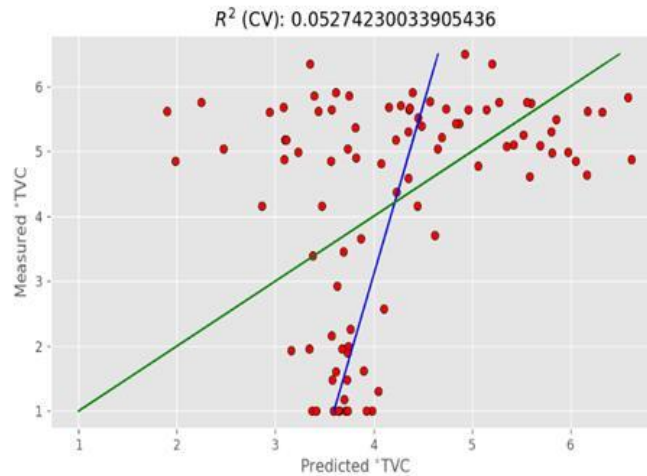


Γράφημα 5.2.1.2. Μετασχηματισμός των δεδομένων ανάκλασης των πολυφασματικών εικόνων με την εφαρμογή της 2^{ης} παραγώγου του φίλτρου Savitsky-Golay.



Γράφημα 5.2.1.3. Γραφική παράσταση της μεταβολής του μέσου τετραγωνικού σφάλματος με τον αριθμό των συστασών PLS, με σκοπό την εύρεση του βέλτιστου αριθμού συστασών παλινδρόμησης.

Ο αλγόριθμος πραγματοποιεί σε επανάληψη την εξής λειτουργία. Υπολογίζει την τιμή του μέσου τετραγωνικού σφάλματος (mean square error, MSE) για τον διαδοχικά αυξανόμενο αριθμό των συνιστωσών PLSR έτσι ώστε να μπορέσουμε να βρούμε τον βέλτιστο αριθμό συνιστωσών (Γράφημα 5.2.1.3). Με βάση την τιμή αυτή, ο βέλτιστος αριθμός συνιστωσών που ελαχιστοποιεί την τιμή του MSE ήταν 1.



Γράφημα 5.2.1.4 Γραφική παράσταση των προβλεπόμενων από το μοντέλο PLSR τιμών της OMX έναντι των παρατηρούμενων κατά τη συντήρηση δειγμάτων φυσικής μαύρης ελιάς. (Line of Equity, Line of Best Fit)

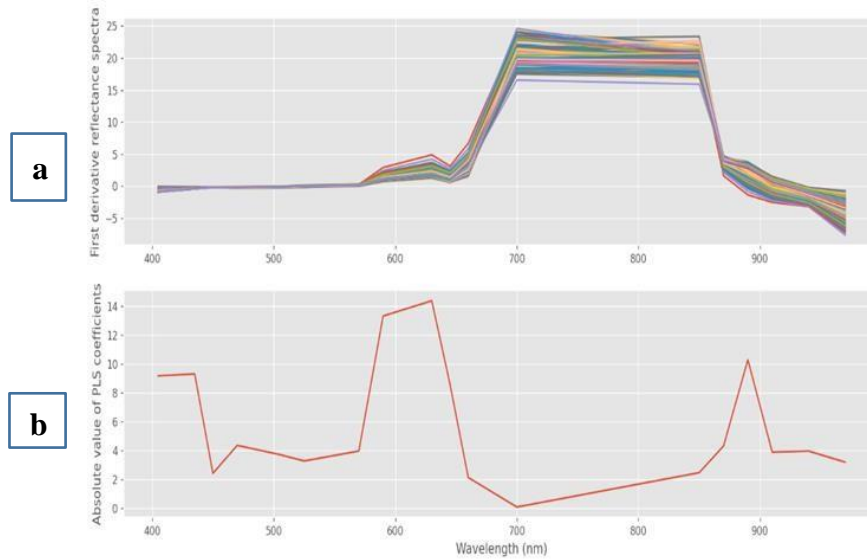
Η τιμή του συντελεστή προσδιορισμού (R^2) του μοντέλου κατά την εκπαίδευση και εσωτερική επικύρωση ήταν 0,301 και 0,053 αντίστοιχα. Αντίστοιχα, οι τιμές τετραγωνικής ρίζας του μέσου τετραγωνικού σφάλματος (RMSE) για την εκπαίδευση και εσωτερική επικύρωση του μοντέλου παλινδρόμησης ήταν 2,19 και 2,97 log CFU/g αντίστοιχα.

Όπως προκύπτει από τις χαμηλές τιμές του συντελεστή προσδιορισμού του μοντέλου παλινδρόμησης κατά την εκπαίδευση και εσωτερική επικύρωση, αλλά και από τις υψηλές τιμές RMSE, το μοντέλο δεν καταφέρνει να συσχετίσει σε ικανοποιητικό βαθμό τα φασματικά δεδομένα με τις μετρήσεις της OMX. Από το Γράφημα 5.2.1.4 προκύπτει ότι για παρατηρούμενες τιμές OMX από 1,0 έως 4,0 log CFU/g, το μοντέλο PLSR προβλέπει τιμές μεταξύ 3,0-4,0 log CFU/g. Αντίστοιχα, για παρατηρούμενες τιμές 4,0- 6,5 log CFU/g, οι προβλεπόμενες τιμές κυμαίνονται μεταξύ 2,0 και 6,5 log CFU/g. Είναι προφανές ότι και στις δύο περιπτώσεις οι προβλέψεις είναι τυχαίες και δεν ανταποκρίνονται στα πειραματικά δεδομένα.

5.2.2 Βελτιστοποίηση μοντέλου PLSR για την πρόβλεψη της OMX με χρήση πολυφασματικών δεδομένων ως ανεξάρτητων μεταβλητών

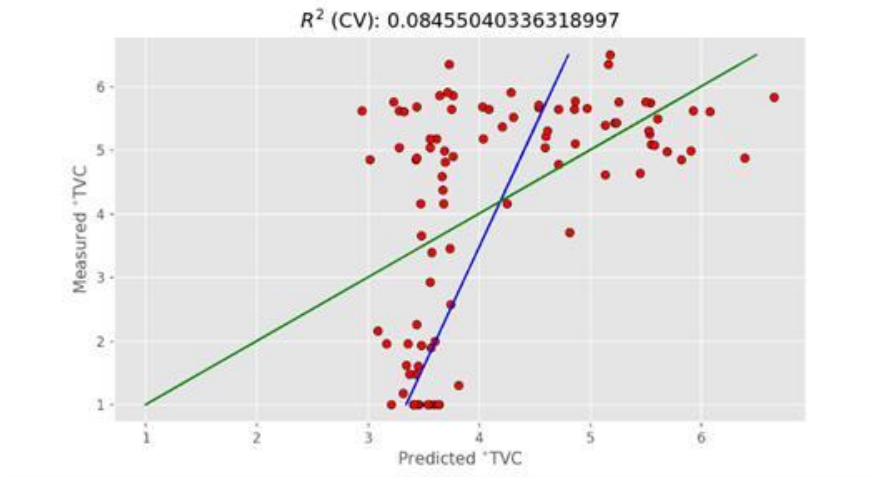
Η επιλογή μεταβλητών (feature extraction) βασίζεται στο γεγονός ότι όλα τα μήκη κύματος δεν έχουν την ίδια βαρύτητα στην πρόβλεψη της ανεξάρτητης μεταβλητής. Σε ορισμένες περιπτώσεις η χρήση όλων των μεταβλητών μπορεί να επηρεάσει αρνητικά

την επίδοση του μοντέλου μας. Για τον λόγο αυτό, τροποποιήσαμε τον αλγόριθμο ώστε μέσω διαδοχικών επαναλήψεων να απορρίψει τις μεταβλητές εκείνες για τις οποίες τελικά προκύπτουν υψηλότερες τιμές RMSE.



Γράφημα 5.2.2.1. Γραφική παράσταση της 1^{ης} παραγώγου των φασμάτων (a) και της απόλυτης τιμής (b) των συνιστωσών του μοντέλου παλινδρόμησης των εξομαλυνθέντων δεδομένων ανάκλασης και της OMX στα διαφορετικά μήκη κύματος (nm).

Για την παραγωγή του παραπάνω γραφήματος χρησιμοποιώντας την πρώτη παράγωγο των φασματικών δεδομένων ανάκλασης που προκύπτει από την εφαρμογή του φίλτρου SavGol. Με τη χρήση αυτών πραγματοποιούμε εκ νέου μια PLS. Στο διάγραμμα β, μπορούμε να δούμε τις τιμές των συντελεστών της παλινδρόμησης έναντι των αντίστοιχων μηκών κύματος. Οι συγκεκριμένοι συντελεστές των συνιστωσών της παλινδρόμησης είναι αυτοί που ποσοτικοποιούν τη σχέση μεταξύ του μήκους κύματος και του μικροβιακού πληθυσμού. Ενδιαφερόμαστε μόνο για την απόλυτη τιμή των συντελεστών, καθώς προσπαθούμε να αποκλείσουμε τιμές που βρίσκονται κοντά στο μηδέν και παρουσιάζουν μικρότερη συσχέτιση με την απόκριση (OMX). Έπειτα ο αλγόριθμος μας, μέσω διαδοχικών επαναλήψεων απορρίπτει, έναν κάθε φορά, τους συντελεστές παλινδρόμησης που παρουσιάζουν την μικρότερη συσχέτιση με την OMX. Στην συνέχεια πραγματοποιούμε εκ νέου μια PLS. Ο αλγόριθμος μας συνεχίζει να απορρίπτει τους συντελεστές παλινδρόμησης έως ότου επιτευχθεί η ελάχιστη τιμή RMSE. Το αποτέλεσμα για την βελτιωμένη PLS φαίνονται στο διάγραμμα 5.2.2.2.



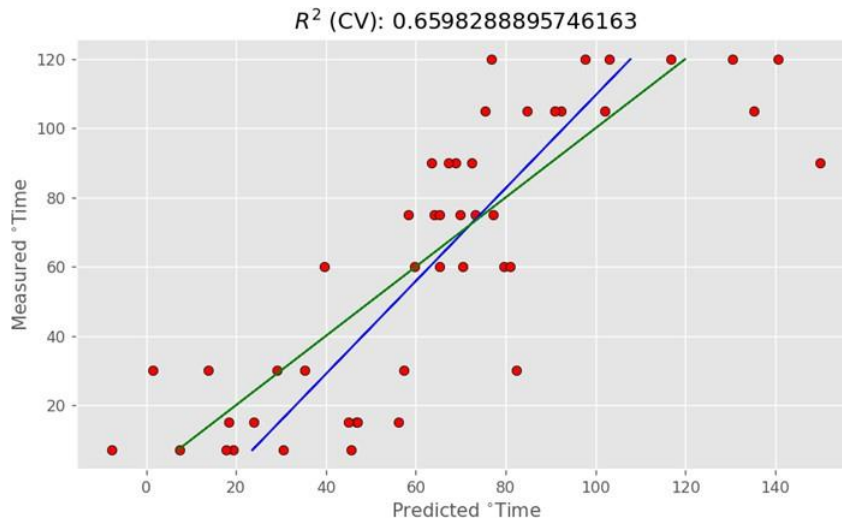
Γράφημα 5.2.2.2. Γραφική παράσταση των προβλεπόμενων από το μοντέλο PLSR έναντι των παρατηρούμενων τιμών της OMX κατά τη συντήρηση των δειγμάτων φυσικής μαύρης ελιάς. (— Line of Equity, — Line of Best Fit)

Για την ανάπτυξη και αξιολόγηση του μοντέλου, περίπου 20% από τα δεδομένα δεν τροφοδοτήθηκαν στο μοντέλο κατά την εκπαίδευση και χρησιμοποιήθηκαν για την επαλήθευσή του.

Η τιμή του συντελεστή προσδιορισμού (R^2) του μοντέλου κατά την εκπαίδευση και εσωτερική επικύρωση ήταν 0,301 και 0,08. Αντίστοιχα, οι τιμές τετραγωνικής ρίζας του μέσου τετραγωνικού σφάλματος (RMSE) για την εκπαίδευση και εσωτερική επικύρωση του μοντέλου παλινδρόμησης ήταν 2,19 και 2,80 log CFU/g αντίστοιχα.

Όπως προκύπτει από τις χαμηλές τιμές του συντελεστή προσδιορισμού του μοντέλου παλινδρόμησης κατά την εκπαίδευση και εσωτερική επικύρωση, αλλά και από τις υψηλές τιμές RMSE, το μοντέλο δεν καταφέρνει να συσχετίσει σε ικανοποιητικό βαθμό τα φασματικά δεδομένα με τις μετρήσεις της OMX. Ο αλγόριθμος βελτιστοποίησης δεν κατάφερε να βελτιώσει σημαντικά την επίδοση του μοντέλου παλινδρόμησης, καθώς η τιμή R^2 κατά την εσωτερική επικύρωση αυξήθηκε μόλις κατά 0,027, ενώ η τιμή RMSE μειώθηκε ελάχιστα κατά 0,17 log CFU/g. Είναι λοιπόν φανερό ότι το μοντέλο παλινδρόμησης μερικών ελαχίστων τετραγώνων δεν είναι κατάλληλο για να περιγράψει αποτελεσματικά την πιθανή συσχέτιση μεταξύ της OMX και την πολυφασματικών δεδομένων.

5.2.3 Μοντέλο PLSR για την πρόβλεψη του χρόνου συντήρησης με την χρήση πολυφασματικών δεδομένων και της OMX ως ανεξάρτητων μεταβλητών



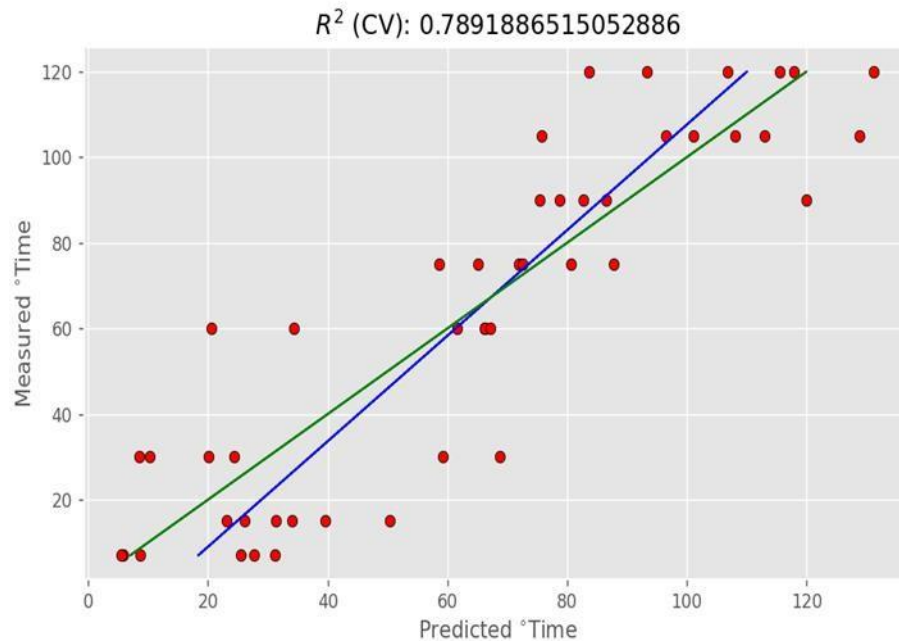
Γράφημα 5.2.3.1. Γραφική παράσταση των προβλεπόμενων έναντι των παρατηρούμενων τιμών του χρόνου συντήρησης των δειγμάτων φυσικής μαύρης ελιάς. (— Line of Equity, — Line of Best Fit)

Για την ανάπτυξη και αξιολόγηση του μοντέλου, περίπου 20% από τα δεδομένα δεν τροφοδοτήθηκαν στο μοντέλο κατά την εκπαίδευση και χρησιμοποιήθηκαν για την επαλήθευσή του. Η τιμή του συντελεστή προσδιορισμού (R^2) του μοντέλου κατά την εκπαίδευση και εσωτερική επικύρωση ήταν 0,854 και 0,660. Αντίστοιχα, οι τιμές τετραγωνικής ρίζας του μέσου τετραγωνικού σφάλματος (RMSE) για την εκπαίδευση και εσωτερική επικύρωση του μοντέλου παλινδρόμησης ήταν 229.2 και 534.0 ημέρες αντίστοιχα.

Από την ανάλυση αυτή, προκύπτει ικανοποιητική τιμή R^2 τόσο κατά την εκπαίδευση όσο και κατά την εσωτερική επικύρωση του μοντέλου. Όπως προκύπτει όμως από τις υψηλές τιμές RMSE, το μοντέλο δεν καταφέρνει να συσχετίσει σε ικανοποιητικό βαθμό τα φασματικά δεδομένα με τις μετρήσεις του χρόνου συντήρησης των δειγμάτων της επιτραπέζιας ελιάς. Πράγματι, το εύρος των προβλέψεων του χρόνου συντήρησης είναι πάρα πολύ μεγάλο σε ορισμένες περιπτώσεις. Για παράδειγμα, σε δείγματα ελιάς με παρατηρούμενο χρόνο συντήρησης 30 ημερών, οι προβλέψεις κυμαίνονται από 0 μέχρι 80 ημέρες. Επίσης σε δείγματα με παρατηρούμενο χρόνο συντήρησης 120 ημερών, ο προβλεπόμενος χρόνος κυμαίνεται από 80 έως 140 ημέρες. Είναι προφανές ότι τα πολυφασματικά δεδομένα παρουσιάζουν μεγάλη διακύμανση μεταξύ τους για τον ίδιο χρόνο συντήρησης των δειγμάτων, γεγονός που δεν επιτρέπει την αποτελεσματική ανάπτυξη ενός μοντέλου PLSR που να συσχετίζει ικανοποιητικά τα φάσματα με το χρόνο συντήρησης.

5.2.4 Βελτιστοποίηση μοντέλου PLSR για την πρόβλεψη του χρόνου συντήρησης με την χρήση πολυφασματικών δεδομένων και της OMX ως ανεξάρτητων μεταβλητών

Η επιλογή μεταβλητών (feature extraction) βασίζεται στο γεγονός ότι όλα τα μήκη κύματος δεν έχουν την ίδια βαρύτητα στην πρόβλεψη της ανεξάρτητης μεταβλητής. Σε ορισμένες περιπτώσεις η χρήση όλων των μεταβλητών μπορεί να επηρεάσει αρνητικά την επίδοση του μοντέλου μας. Για τον λόγο αυτό, τροποποιήσαμε τον αλγόριθμο ώστε μέσω διαδοχικών επαναλήψεων να απορρίπτει τις μεταβλητές εκείνες για τις οποίες τελικά προκύπτουν υψηλότερες τιμές RMSE.



Γράφημα 5.2.4.1.

Γραφική παράσταση των προβλεπόμενων έναντι των παρατηρούμενων τιμών του χρόνου συντήρησης των δειγμάτων φυσικής μαύρης ελιάς. (— Line of Equity, — Line of Best Fit)

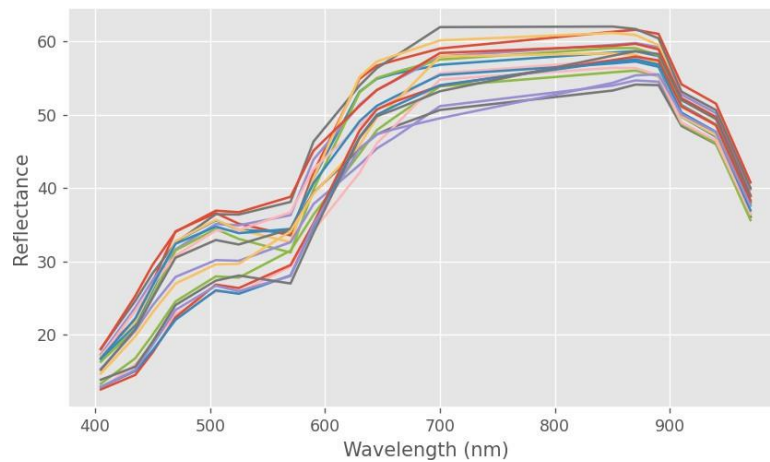
Η τιμή του συντελεστή προσδιορισμού (R^2) του μοντέλου κατά την εκπαίδευση και εσωτερική επικύρωση ήταν 0,887 και 0,789. Αντίστοιχα, οι τιμές τετραγωνικής ρίζας του μέσου τετραγωνικού σφάλματος (RMSE) για την εκπαίδευση και εσωτερική επικύρωση του μοντέλου παλινδρόμησης ήταν 177.6 και 330.9 ημέρες αντίστοιχα.

Παρά το γεγονός ότι όλες οι παράμετροι αξιολόγησης του μοντέλου μας βελτιώθηκαν αισθητά, από τις υψηλές τιμές RMSE συμπεραίνουμε ότι το μοντέλο δεν καταφέρνει να συσχετίσει σε ικανοποιητικό βαθμό τα φασματικά δεδομένα με τον χρόνο συντήρησης των δειγμάτων της ελιάς.

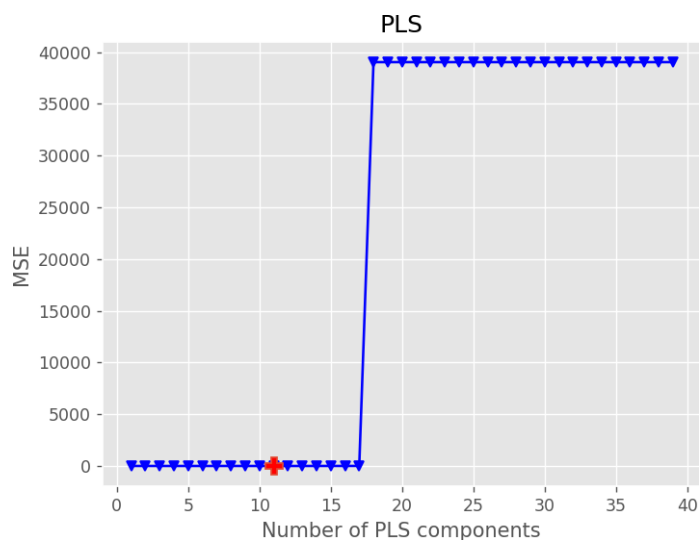
5.3 Ανάλυση πολυφασματικών δεδομένων με χρήση αλγορίθμου PLSR από φιλέτα κοτόπουλου με επικάλυψη εδώδιμης μεμβράνης χιτοζάνης

5.3.1 PLSR μοντέλο για την πρόβλεψη της OMX με χρήση δεδομένων πολυφασματικής απεικόνισης ως ανεξάρτητων μεταβλητών

Ακολουθεί η απεικόνιση των δεδομένων ανάκλασης σε 18 διαφορετικά μήκη κύματος



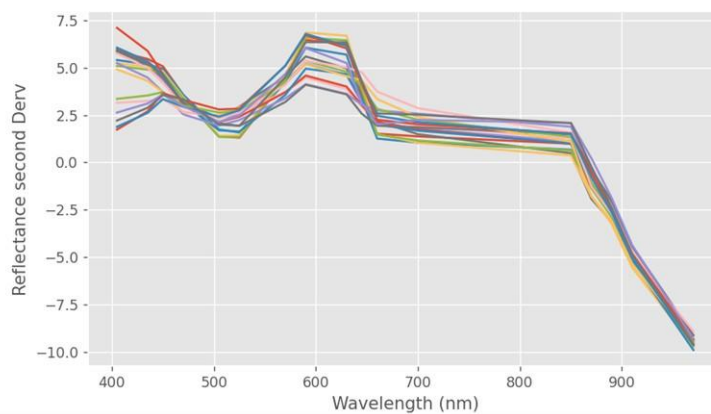
Γράφημα 5.3.1.1. Απεικόνιση των πολυφασματικών δεδομένων ανάκλασης δειγμάτων φιλέτου κοτόπουλου κατά τη συντήρησή τους σε θερμοκρασία 2°C με επικάλυψη με εδώδιμη μεμβράνη χιτοζάνης.



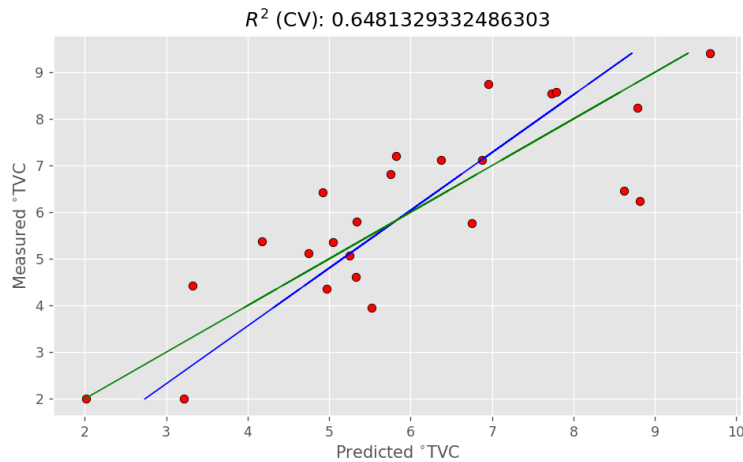
Γράφημα 5.3.1.2. Γραφική παράσταση της μεταβολής του μέσου τετραγωνικού σφάλματος έναντι του αριθμού συνιστωσών της παλινδρόμησης.

Ο αλγόριθμος πραγματοποιεί σε επανάληψη την εξής λειτουργία. Υπολογίζει την τιμή του μέσου τετραγωνικού σφάλματος για διαδοχικά αυξανόμενο αριθμό συνιστωσών PLSR, προκειμένου να προσδιορίσουμε τον βέλτιστο αριθμό συνιστωσών. Στο συγκεκριμένο μοντέλο φαίνεται ότι ο βέλτιστος αριθμός συνιστωσών είναι 11.

Όπως αναφέρθηκε προηγουμένως, ένα συχνά χρησιμοποιούμενο βήμα προεπεξεργασίας των δεδομένων μας είναι η εφαρμογή του φίλτρου Savgol. Τα αποτελέσματα του μετασχηματισμού των πολυφασματικών δεδομένων που προκύπτει από την εφαρμογή της επέκτασης του φίλτρου απεικονίζονται στο γράφημα 5.3.1.3. Σκοπός της συγκεκριμένης εφαρμογής είναι η επισήμανση των πιθανών τάσεων που υπάρχουν στα δεδομένα μας



Γράφημα 5.3.1.3. Μετασχηματισμός των δεδομένων ανάκλασης των πολυφασματικών εικόνων με την εφαρμογή της $2^{η}$ παραγώγου του φίλτρου Savitsky-Golay



Γράφημα 5.3.1.4.

Γραφική παράσταση των προβλεπόμενων από το μοντέλο PLSR τιμών της OMX έναντι των παρατηρούμενων κατά τη συντήρηση δειγμάτων φιλέτων κοτόπουλου σε θερμοκρασία 2°C με την επικάλυψη με εδώδιμη μεμβράνη χιτοζάνης. (— Line of Equity, — Line of Best Fiat)

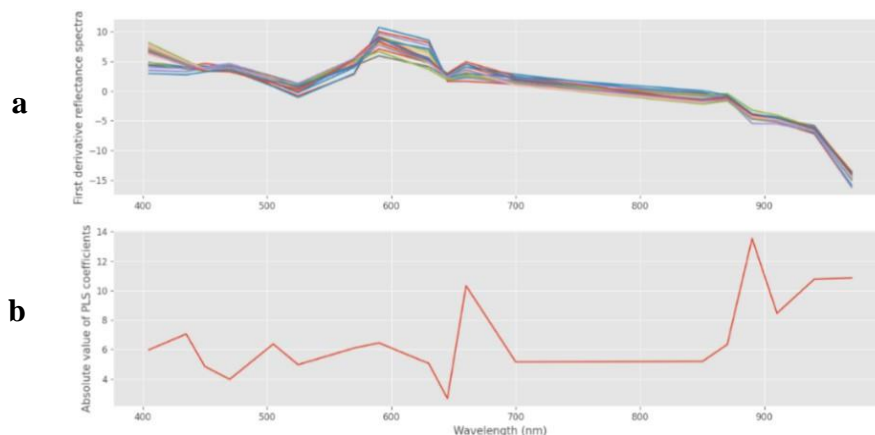
Η τιμή του συντελεστή προσδιορισμού (R^2) του μοντέλου κατά την εκπαίδευση και εσωτερική επικύρωση ήταν 0,914 και 0,648 αντίστοιχα. Οι τιμές της τετραγωνικής ρίζας του μέσου τετραγωνικού σφάλματος (RMSE) για την εκπαίδευση και εσωτερική επικύρωση του μοντέλου παλινδρόμησης ήταν 0,318 και 1,294 log CFU/g αντίστοιχα.

Παρά το γεγονός ότι οι τιμές του συντελεστή προσδιορισμού είναι χαμηλές η τιμή του μέσου τετραγωνικού σφάλματος που παρατηρούνται κατά την εσωτερική επικύρωση μπορεί να θεωρηθεί ικανοποιητική. μπορεί να εκτελέσει σε ικανοποιητικό βαθμό προβλέψεις για την εκτίμηση του πληθυσμού της OMX συναρτήσει των πολυφασματικών δεδομένων.

Από το Γράφημα 5.2.1.4 προκύπτει ότι για παρατηρούμενες τιμές OMX από 1,0 έως 4,0 log CFU/g, το μοντέλο PLSR προβλέπει τιμές μεταξύ 2,0-4,0 log CFU/g. Αντίστοιχα, για παρατηρούμενες τιμές 4,0-7,0 log CFU/g, οι προβλεπόμενες τιμές κυμαίνονται μεταξύ 4,0 και 6,0 log CFU/g. Φαίνεται λοιπόν ότι το μοντέλο μας αποτελεί μια ικανοποιητική προσέγγιση, και οι προβλέψεις του έρχονται σε συμφωνία με τα πειραματικά δεδομένα και δεν ανταποκρίνονται στα πειραματικά δεδομένα.

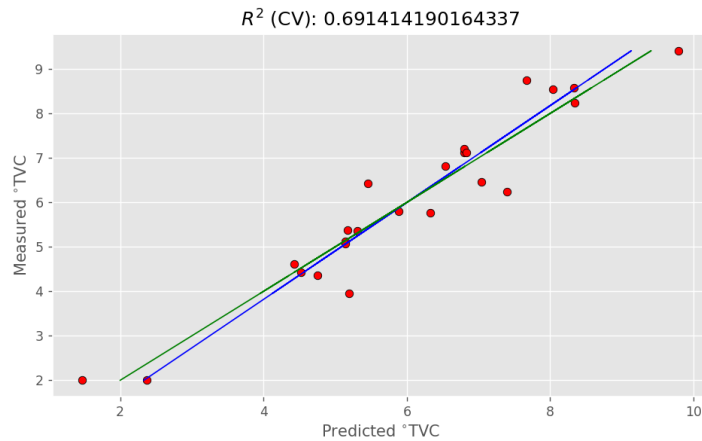
5.3.2 Βελτιστοποίηση Μοντέλου PLSR για πρόβλεψη της OMX με χρήση πολυφασματικών δεδομένων ως ανεξάρτητων μεταβλητών. Μέθοδος επιλογής ανεξάρτητων μεταβλητών

Όπως αναφέρθηκε προηγουμένως, η επιλογή μεταβλητών (feature extraction) βασίζεται στο γεγονός ότι όλα τα μήκη κύματος δεν έχουν την ίδια βαρύτητα στην πρόβλεψη της ανεξάρτητης μεταβλητής. Σε ορισμένες περιπτώσεις η χρήση όλων των μεταβλητών μπορεί να επηρεάσει αρνητικά την επίδοση του μοντέλου μας. Για τον λόγο αυτό, τροποποιήσαμε τον αλγόριθμο ώστε μέσω διαδοχικών επαναλήψεων να απορρίπτει τις μεταβλητές εκείνες για τις οποίες τελικά προκύπτουν υψηλότερες τιμές RMSE.



Γράφημα 5.3.2.1. α. Γραφική παράσταση της 1^{ης} παραγώγου των φασμάτων (α) και της απόλυτης τιμής (β) των συνιστωσών του μοντέλου παλινδρόμησης των εξομαλυνθέντων δεδομένων ανάκλασης και της OMX

Για την παραγωγή του παραπάνω γραφήματος χρησιμοποιώντας την πρώτη παράγωγο των φασματικών δεδομένων ανάκλασης που προκύπτει από την εφαρμογή του φίλτρου SavGol. Με τη χρήση αυτών πραγματοποιούμε εκ νέου μια PLS. Στο διάγραμμα β, μπορούμε να δούμε τις τιμές των συντελεστών της παλινδρόμησης έναντι των αντίστοιχων μηκών κύματος. Οι συγκεκριμένοι συντελεστές των συνιστωσών της παλινδρόμησης είναι αυτές που ποσοτικοποιούν την σχέση μεταξύ του μήκους κύματος και του μικροβιακού πληθυσμού. Ενδιαφερόμαστε μόνο στην απόλυτη τιμή των συντελεστών καθώς προσπαθούμε να αποκλείσουμε τιμές που βρίσκονται κοντά στο μηδέν. Αυτοί είναι οι συντελεστές που παρουσιάζουν την μικρότερη συσχέτιση με την απόκριση. Έπειτα ο αλγόριθμος μας, μέσω διαδοχικών επαναλήψεων απορρίπτει, έναν κάθε φορά, τους συντελεστές παλινδρόμησης που παρουσιάζουν την μικρότερη συσχέτιση με την OMX. Στην συνέχεια πραγματοποιούμε εκ νέου μια PLS. Ο αλγόριθμος μας συνεχίζει να απορρίπτει τους συντελεστές παλινδρόμησης έως ότου επιτευχθεί η ελάχιστη τιμή RMSE. Το αποτέλεσμα για την βελτιωμένη PLS φαίνονται στο διάγραμμα 5.3.2.2.

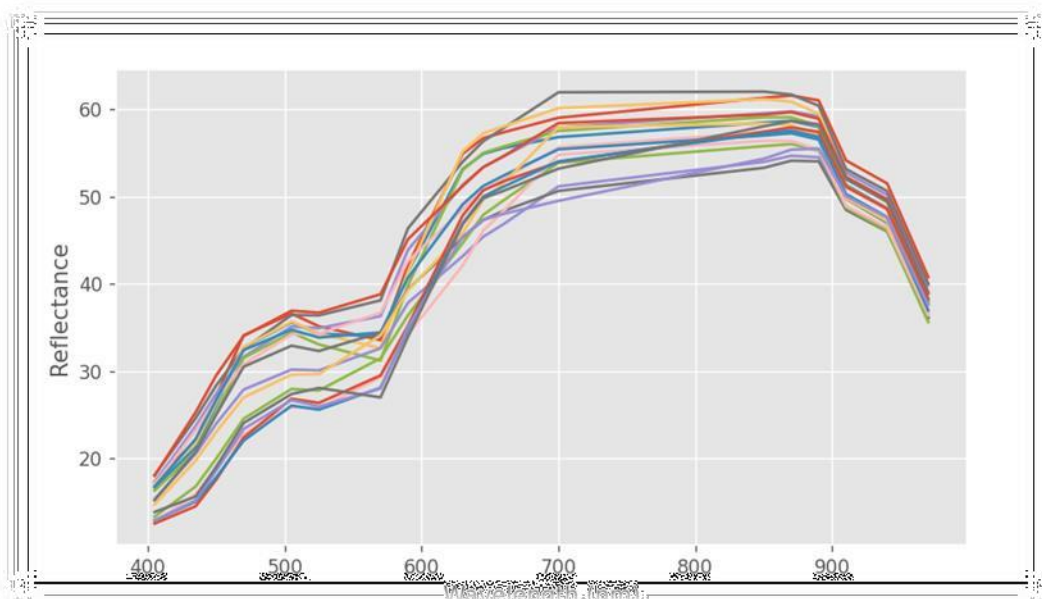


Γράφημα 5.3.2.2. Γραφική παράσταση των προβλεπόμενων τιμών της OMX από το βελτιωμένο μοντέλο PLSR, έναντι των παρατηρούμενων τιμών κατά τη συντήρηση φιλέτων κοτόπουλου σε θερμοκρασία 2°C με την επικάλυψη με εδώδιμη μεμβράνη χιτοζάνης. (— Line of Equity, — Line of Best Fit)

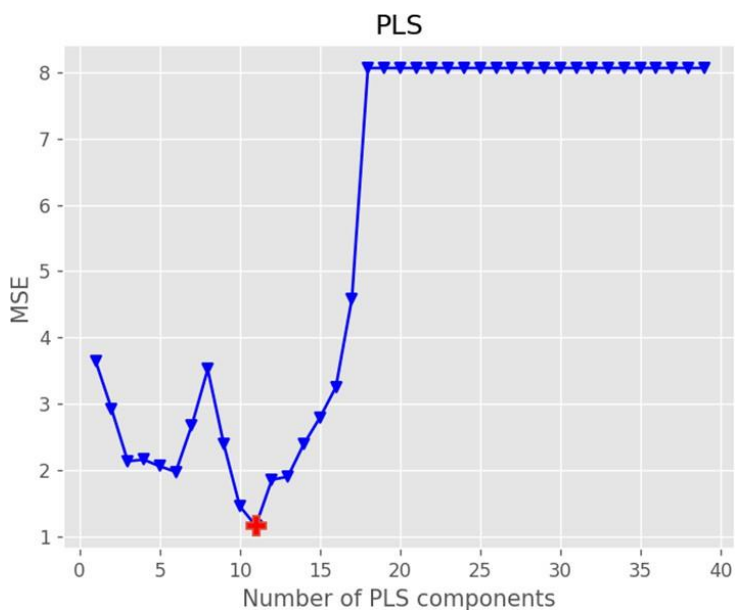
Η τιμή του συντελεστή προσδιορισμού (R^2) του μοντέλου κατά την εκπαίδευση και εσωτερική επικύρωση ήταν 0,918 και 0,641 αντίστοιχα. Αντίστοιχα, οι τιμές της τετραγωνικής ρίζας του μέσου τετραγωνικού σφάλματος (RMSE) του μοντέλου για την εκπαίδευση και την εσωτερική επικύρωση ήταν 0,30 και 1,13 log CFU/g αντίστοιχα (Γράφημα 5.3.2.2). Παρατηρούμε ότι οι παράμετροι αξιολόγησης της επίδοσης του μοντέλου βελτιώθηκαν και με βάση τις τιμές των δεικτών επίδοσης (R^2 και RMSE) το μοντέλο είναι σε θέση να εκτελέσει σε ικανοποιητικό βαθμό προβλέψεις για την εκτίμηση του πληθυσμού της OMX συναρτήσει των πολυφασματικών δεδομένων. Από το γράφημα 5.3.2.2 φαίνεται ότι για τιμές OMX από 1,0 έως 6,0 log CFU/g, το μοντέλο μας προβλέπει τιμές από 1,0 έως 6,5 log CFU/g, ενώ για παρατηρούμενες τιμές από 6,0 έως 8,0 log CFU/g, το μοντέλο μας προβλέπει τιμές από 6,0 έως 8,8 log CFU/g. Οι προβλέψεις λοιπόν συμφωνούν σε ικανοποιητικό βαθμό με τα πειραματικά δεδομένα.

5.3.3 PLSR μοντέλο για πρόβλεψη του πληθυσμού των ψευδομονάδων με χρήση πολυφασματικών δεδομένων ως ανεξάρτητων μεταβλητών

Ακολουθεί η απεικόνιση των δεδομένων ανάκλασης σε 18 διαφορετικά μήκη κύματος.



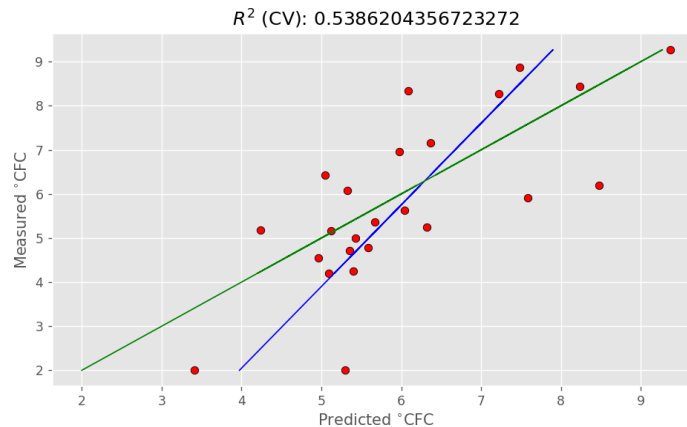
Γράφημα 5.3.3.1. Απεικόνιση των πολυφασματικών δεδομένων ανάκλασης δειγμάτων φιλέτου κοτόπουλου κατά τη συντήρησή τους σε θερμοκρασία 2°C με επικάλυψη εδώδιμης μεμβράνης χιτοζάνης.



Γράφημα 5.3.3.2

Γραφική παράσταση της μεταβολής του μέσου τετραγωνικού σφάλματος έναντι του αριθμού συνιστωσών της παλινδρόμησης.

Ο αλγόριθμος πραγματοποιεί σε επανάληψη την εξής λειτουργία. Υπολογίζει την τιμή του μέσου τετραγωνικού σφάλματος (mean square error, MSE) για τον διαδοχικά αυξανόμενο αριθμό των συνιστωσών PLSR έτσι ώστε να μπορέσουμε να βρούμε τον βέλτιστο αριθμό συνιστωσών (Γράφημα 5.3.3.2). Με βάση την τιμή αυτή, ο βέλτιστος αριθμός συνιστωσών που ελαχιστοποιεί την τιμή του MSE ήταν 11.

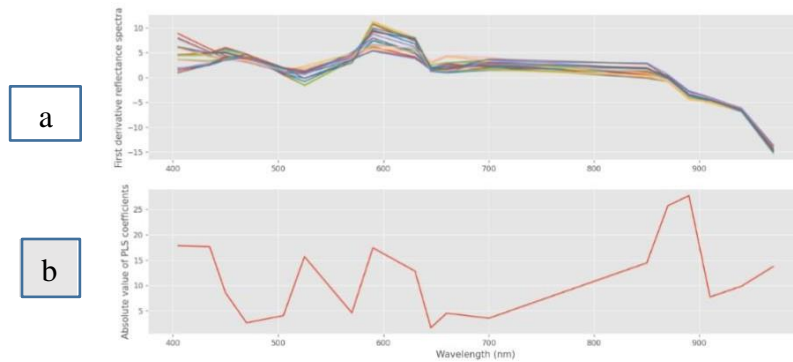


Γράφημα 5.3.3.3 Γραφική παράσταση των προβλεπόμενων τιμών του πληθυσμού των ψευδομονάδων από το βελτιωμένο μοντέλο PLSR, έναντι των παρατηρούμενων τιμών κατά τη συντήρηση φιλέτων κοτόπουλου σε θερμοκρασία 2°C με την επικάλυψη με εδώδιμη μεμβράνη χιτοζάνης. (— Line of Equity, — Line of Best Fit)

Η τιμή του συντελεστή προσδιορισμού (R^2) του μοντέλου κατά την εκπαίδευση και εσωτερική επικύρωση ήταν 0,932 και 0,539 αντίστοιχα. Οι τιμές του μέσου τετραγωνικού σφάλματος για το μοντέλο παλινδρόμησης και για την εσωτερική επικύρωση είχαν τιμές 0,237 και 1,156 log CFU/g αντίστοιχα. Το μοντέλο μας παρουσιάζει σχετικά υψηλές τιμές για το μέσο τετραγωνικό σφάλμα κατά την εξωτερική επικύρωση. Από το γράφημα 5.3.3.3 φαίνεται ότι για τιμές 1,0 έως 3,0 log CFU/g το μοντέλο μας προβλέπει τιμές 3,5 έως 5,2 log CFU/g, ενώ για τιμές 3,0 έως 7,0 το μοντέλο μας προβλέπει τιμές από 4,0 έως 6,5 log CFU/g. Φαίνεται ότι το μοντέλο μας δεν ασ εκτελεί σε ικανοποιητικό βαθμό προβλέψεις για την εκτίμηση του πληθυσμού των ψευδομονάδων συναρτήσει των πολυφασματικών δεδομένων ιδιαίτερα σε ότι αφορά στις χαμηλές συγκεντρώσεις πληθυσμού.

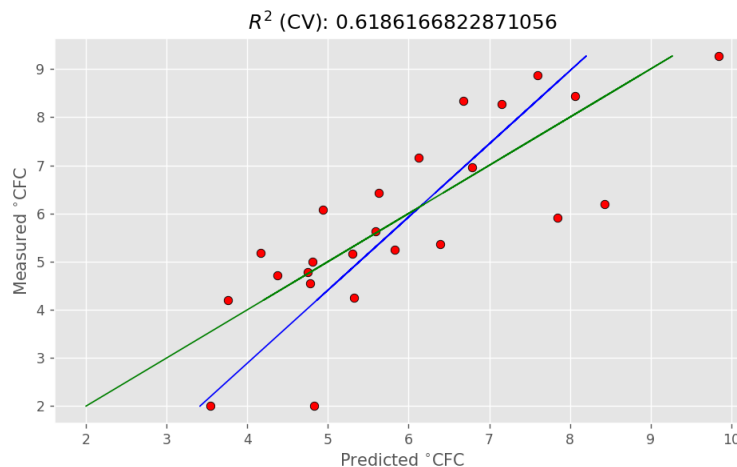
5.3.4 Βελτιστοποίηση του μοντέλου PLSR για την πρόβλεψη του πληθυσμού των ψευδομονάδων με χρήση πολυφασματικών δεδομένων ως ανεξάρτητων μεταβλητών. Μέθοδος επιλογής ανεξάρτητων μεταβλητών

Όπως αναφέρθηκε προηγουμένως, η επιλογή μεταβλητών (feature extraction) βασίζεται στο γεγονός ότι όλα τα μήκη κύματος δεν έχουν την ίδια βαρύτητα στην πρόβλεψη της ανεξάρτητης μεταβλητής. Σε ορισμένες περιπτώσεις η χρήση όλων των μεταβλητών μπορεί να επηρεάσει αρνητικά την επίδοση του μοντέλου μας. Για τον λόγο αυτό, τροποποιήσαμε τον αλγόριθμο ώστε μέσω διαδοχικών επαναλήψεων να απορρίπτει τις μεταβλητές εκείνες για τις οποίες τελικά προκύπτουν υψηλότερες τιμές RMSE.



Γράφημα 5.3.4.1. Γράφημα 5.2.2.1. a. Γραφική αναπαράσταση της 1^{ης} παραγώγου των μηκών κύματος έναντι του εύρους του μήκους κύματος των μετρήσεων. **b.** Γραφική αναπαράσταση της απόλυτης τιμής των συντελεστών του βελτιωμένου μοντέλου παλινδρόμησης έναντι του εύρους του μήκους κύματος των μετρήσεων.

Για την παραγωγή του παραπάνω γραφήματος χρησιμοποιώντας την πρώτη παράγωγο των φασματικών δεδομένων ανάκλασης που προκύπτει από την εφαρμογή του φίλτρου SavGol. Με τη χρήση αυτών πραγματοποιούμε εκ νέου μια PLS. Στο διάγραμμα β, μπορούμε να δούμε τις τιμές των συντελεστών της παλινδρόμησης έναντι των αντίστοιχων μηκών κύματος. Οι συγκεκριμένοι συντελεστές των συνιστωσών της παλινδρόμησης είναι αυτοί που ποσοτικοποιούν τη σχέση μεταξύ του μήκους κύματος και του μικροβιακού πληθυσμού. Ενδιαφερόμαστε μόνο για την απόλυτη τιμή των συντελεστών, καθώς προσπαθούμε να αποκλείσουμε τιμές που βρίσκονται κοντά στο μηδέν και παρουσιάζουν μικρότερη συσχέτιση με την απόκριση (πληθυσμός ψευδομονάδων). Έπειτα ο αλγόριθμος μας, μέσω διαδοχικών επαναλήψεων απορρίπτει, έναν κάθε φορά, τους συντελεστές παλινδρόμησης που παρουσιάζουν την μικρότερη συσχέτιση με τον πληθυσμό ψευδομονάδων. Στην συνέχεια πραγματοποιούμε εκ νέου μια PLS. Ο αλγόριθμος μας συνεχίζει να απορρίπτει τους συντελεστές παλινδρόμησης έως ότου επιτευχθεί η ελάχιστη τιμή RMSE. Το αποτέλεσμα για την βελτιωμένη PLS φαίνεται στο διάγραμμα 5.3.4.2.



Γράφημα 5.3.4.2.

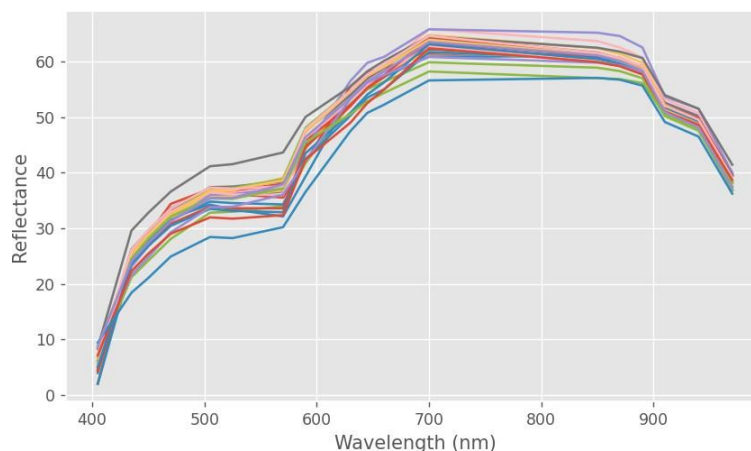
Γραφική παράσταση των προβλεπόμενων τιμών του πληθυσμού των ψευδομονάδων από το βελτιωμένο μοντέλο PLSR, έναντι των παρατηρούμενων τιμών κατά τη συντήρηση φιλέτων κοτόπουλου σε θερμοκρασία 2°C με την επικάλυψη με εδώδιμη μεμβράνη χιτοζάνης. (— Line of Equity, — Line of Best Fit)

Η τιμή του συντελεστή προσδιορισμού (R^2) του μοντέλου κατά την εκπαίδευση και εσωτερική επικύρωση ήταν 0,943 και 0,619 αντίστοιχα. Οι τιμές του μέσου τετραγωνικού σφάλματος για το μοντέλο παλινδρόμησης και για την εσωτερική επικύρωση είχαν τιμές 0,199 και 1,621 log CFU/g αντίστοιχα. Παρά το γεγονός ότι οι παράμετροι αξιολόγησης της επίδοσης του μοντέλου μας βελτιώθηκαν, από τις χαμηλές τιμές του συντελεστή προσδιορισμού καθώς επίσης και την υψηλή τιμή του μέσου τετραγωνικού σφάλματος που παρατηρούνται κατά την εσωτερική επικύρωση, είναι φανερό ότι το μοντέλο μας δεν μπορεί να εκτελέσει σε ικανοποιητικό βαθμό προβλέψεις για την εκτίμηση του πληθυσμού των ψευδομονάδων συναρτήσει των πολυφασματικών δεδομένων. Από το γράφημα 5.3.4.2. φαίνεται ότι για μετρούμενες τιμές του πληθυσμού των από 2 έως 3 log CFU/g, το μοντέλο μας προβλέπει τιμές από 3,1 έως 5 log CFU/ g, ενώ για τιμές από 5,0 έως 7,0 log CFU/ g, το μοντέλο προβλέπει τιμές σε ένα εύρος από 6 έως 9 log CFU/ g. Συμπεραίνουμε συνεπώς πως το συγκεκριμένο μοντέλο δεν καταφέρνει να συσχετίσει επιτυχώς τον πληθυσμό των ψευδομονάδων με τα φασματικά δεδομένα.

5.3.5 Μοντέλο PLSR για την πρόβλεψη του χρόνου συντήρησης των δειγμάτων φιλέτου κοτόπουλου με τη χρήση πολυφασματικών δεδομένων και του πληθυσμού της OMX ως ανεξάρτητων μεταβλητών

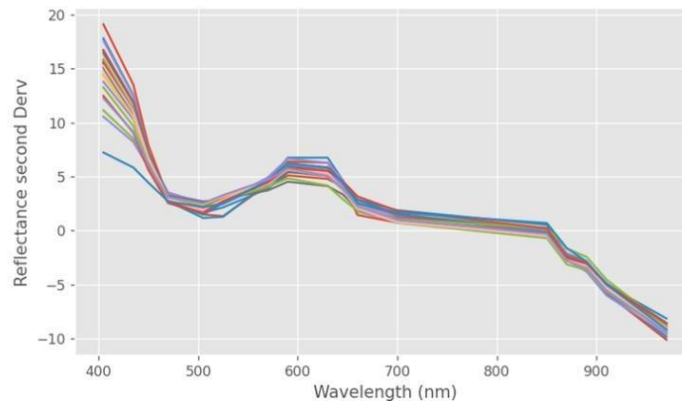
Στο συγκεκριμένο μοντέλο επιχειρήθηκε η εκτίμηση του χρόνου συντήρησης των δειγμάτων χρησιμοποιώντας ως ανεξάρτητες μεταβλητές τα δεδομένα ανάκλασης από τα 18 μήκη κύματος των φασμάτων, καθώς επίσης και τον πληθυσμό της OMX των φιλέτων κοτόπουλου κατά τη συντήρηση.

Ακολουθεί η απεικόνιση των δεδομένων ανάκλασης σε 18 διαφορετικά μήκη κύματος

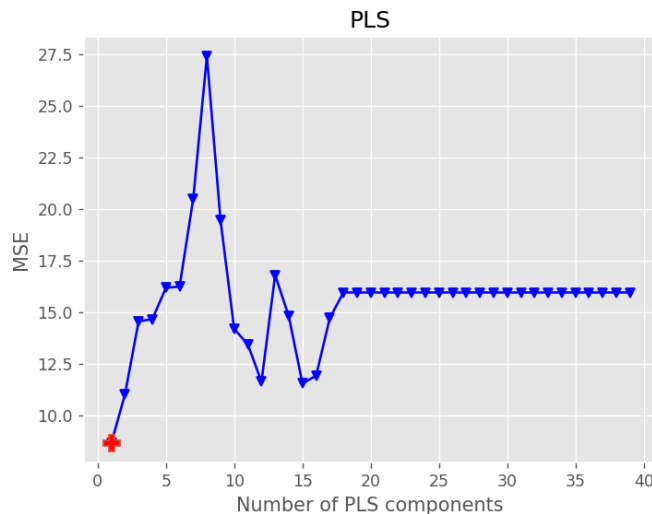


Γράφημα 5.3.5.1. Απεικόνιση των πολυφασματικών δεδομένων ανάκλασης δειγμάτων φιλέτου κοτόπουλου κατά τη συντήρησή τους σε θερμοκρασία 2°C με επικάλυψη με εδώδιμη μεμβράνη χιτοζάνης

Ένα σύνηθες βήμα προ-επεξεργασίας στην ανάλυση δεδομένων είναι η εφαρμογή του φίλτρου Savitzky-Golay (SavGol filter). Ο σκοπός της συγκεκριμένου φίλτρου είναι η εξομάλυνση των δεδομένων. Η εφαρμογή του συγκεκριμένου φίλτρου έχει σαν αποτέλεσμα την μείωση του θορύβου, την επισήμανση τάσεων και την εμφάνιση πιθανών μοτίβων που μπορεί να υπάρχουν στα δεδομένα μας. Το SavGol filter βασίζεται σε πολυωνμική παρεμβολή, όπου γίνεται παρεμβολή πολυωνύμου μικρού βαθμού σε μικρά αλληλεπικαλυπτόμενα διαστήματα δεδομένων. Στην παρούσα μελέτη χρησιμοποιήσαμε μια επέκταση του συγκεκριμένου φίλτρου η οποία υπολογίζει την 2η παράγωγο της εφαρμοσμένου στην παρεμβολή πολυωνύμου. Σκοπός αυτού είναι να γίνουν πιο εμφανείς η τάσεις που διέπουν τα δεδομένα

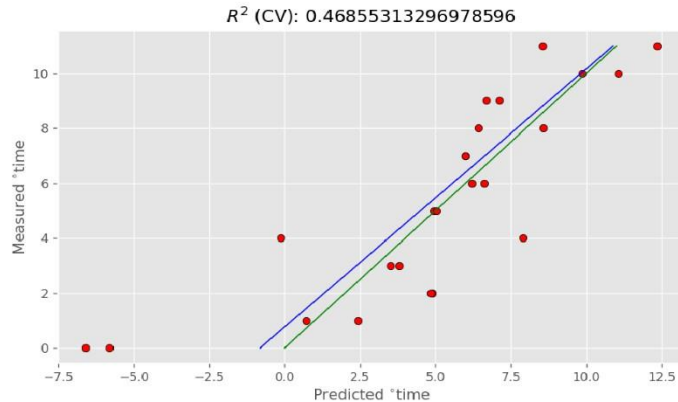


Γράφημα 5.3.5.2. Μετασχηματισμός των δεδομένων ανάκλασης των πολυφασματικών εικόνων με την εφαρμογή της 2^{ης} παραγώγου του φίλτρου Savitsky-Golay



Γράφημα 5.3.5.3. Γραφική παράσταση της μεταβολής του μέσου τετραγωνικού σφάλματος έναντι του αριθμού συνιστωσών της παλινδρόμησης.

Ο αλγόριθμος πραγματοποιεί σε επανάληψη την εξής λειτουργία. Υπολογίζει την τιμή του μέσου τετραγωνικού σφάλματος για διαδοχικά αυξανόμενο αριθμό συνιστωσών PLSR, προκειμένου να προσδιορίσουμε τον βέλτιστο αριθμό συνιστωσών. Στο συγκεκριμένο μοντέλο φαίνεται ότι ο βέλτιστος αριθμός συνιστωσών είναι 1. (Γράφημα 5.3.5.3.



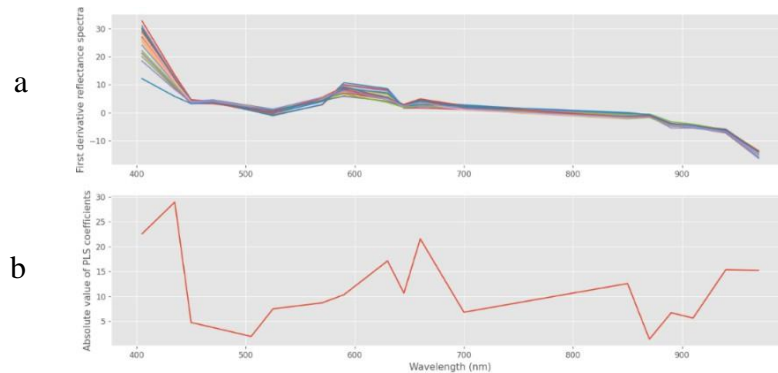
Γράφημα 5.3.5.4 .

Γραφική παράσταση των προβλεπόμενων τιμών χρόνου συντήρησης από το μοντέλο PLSR, έναντι των παρατηρούμενων τιμών κατά τη συντήρηση φιλέτων κοτόπουλου σε θερμοκρασία 2°C με την επικάλυψη με εδώδιμη μεμβράνη χιτοζάνης. (— Line of Equity, — Line of Best Fit)

Η τιμή του συντελεστή προσδιορισμού του μοντέλου μας είναι 0,958 και 0,469 αντίστοιχα. Οι τιμές του μέσου τετραγωνικού σφάλματος για το μοντέλο παλινδρόμησης και για την εσωτερική επικύρωση είχαν τιμές 0,4 και 6,3 ημέρες αντίστοιχα. Όπως προκύπτει από τις χαμηλές τιμές του συντελεστή προσδιορισμού του μοντέλου παλινδρόμησης αλλά και της εσωτερικής επικύρωσης, αλλά και από τις υψηλές τιμές του μέσου τετραγωνικού σφάλματος, το μοντέλο δεν καταφέρνει να συσχετίσει σε ικανοποιητικό βαθμό τα φασματικά δεδομένα και τον πληθυσμό της OMX με το χρόνο συντήρησης των δειγμάτων. Αυτό είναι ιδιαίτερα εμφανές από το γράφημα 5.3.5.4. ειδικά για τους μετρούμενους χρόνους συντήρησης από 0 έως 4 ημέρες, με το μοντέλο μας να προβλέπει τιμές από -7,5 έως 5 ημέρες.

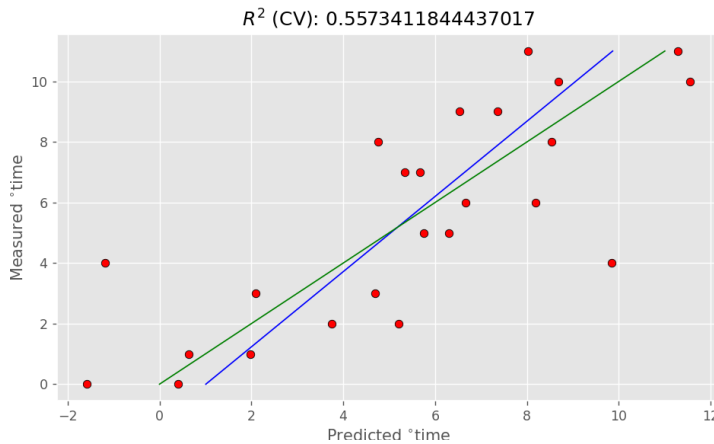
5.3.6 Βελτιστοποίηση του μοντέλου PLSR για την πρόβλεψη του χρόνου συντήρησης με χρήση πολυφασματικών δεδομένων και του πληθυσμού της OMX ως ανεξάρτητων μεταβλητών. Μέθοδος επιλογής ανεξάρτητων μεταβλητών.

Όπως αναφέρθηκε προηγουμένως, η επιλογή μεταβλητών (feature extraction) βασίζεται στο γεγονός ότι όλα τα μήκη κύματος δεν έχουν την ίδια βαρύτητα στην πρόβλεψη της ανεξάρτητης μεταβλητής. Σε ορισμένες περιπτώσεις η χρήση όλων των μεταβλητών μπορεί να επηρεάσει αρνητικά την επίδοση του μοντέλου μας. Για τον λόγο αυτό, τροποποιήσαμε τον αλγόριθμο ώστε μέσω διαδοχικών επαναλήψεων να απορρίπτει τις μεταβλητές εκείνες για τις οποίες τελικά προκύπτουν υψηλότερες τιμές RMSE.



Γράφημα 5.3.6.1. Γράφημα 5.2.2.1. a. Γραφική αναπαράσταση της 1^{ης} παραγώγου των μηκών κύματος έναντι του εύρους του μήκους κύματος των μετρήσεων.
b. Γραφική αναπαράσταση της απόλυτης τιμής των συνιστωσών του βελτιωμένου μοντέλου παλινδρόμησης έναντι του εύρους του μήκους κύματος των μετρήσεων.

Για την παραγωγή του παραπάνω γραφήματος χρησιμοποιώντας την πρώτη παράγωγο των φασματικών δεδομένων ανάκλασης που προκύπτει από την εφαρμογή του φίλτρου SavGol. Με τη χρήση αυτών πραγματοποιούμε εκ νέου μια PLS. Στο διάγραμμα β, μπορούμε να δούμε τις τιμές των συντελεστών της παλινδρόμησης έναντι των αντίστοιχων μηκών κύματος. Οι συγκεκριμένοι συντελεστές των συνιστωσών της παλινδρόμησης είναι αυτοί που ποσοτικοποιούν τη σχέση μεταξύ του μήκους κύματος και της απόκρισης. Ενδιαφερόμαστε μόνο για την απόλυτη τιμή των συντελεστών, καθώς προσπαθούμε να αποκλείσουμε τιμές που βρίσκονται κοντά στο μηδέν και παρουσιάζουν μικρότερη συσχέτιση με την απόκριση (χρόνος συντήρησης). Έπειτα ο αλγόριθμος μας, μέσω διαδοχικών επαναλήψεων απορρίπτει, έναν κάθε φορά, τους συντελεστές παλινδρόμησης που παρουσιάζουν την μικρότερη συσχέτιση με τον χρόνο συντήρησης. Στην συνέχεια πραγματοποιούμε εκ νέου μια PLS. Ο αλγόριθμος μας συνεχίζει να απορρίπτει τους συντελεστές παλινδρόμησης έως ότου επιτευχθεί η ελάχιστη τιμή RMSE. Το αποτέλεσμα για την βελτιωμένη PLS φαίνονται στο διάγραμμα 5.3.6.2.



Γράφημα 5.3.6.2.

Γραφική παράσταση των προβλεπόμενων τιμών χρόνου συντήρησης από το βελτιωμένο μοντέλο PLSR, έναντι των παρατηρούμενων τιμών κατά τη συντήρηση φιλέτων κοτόπουλου σε θερμοκρασία 2°C με την επικάλυψη με εδώδιμη μεμβράνη χιτοζάνης.

(— Line of Equity, — Line of Best Fit)

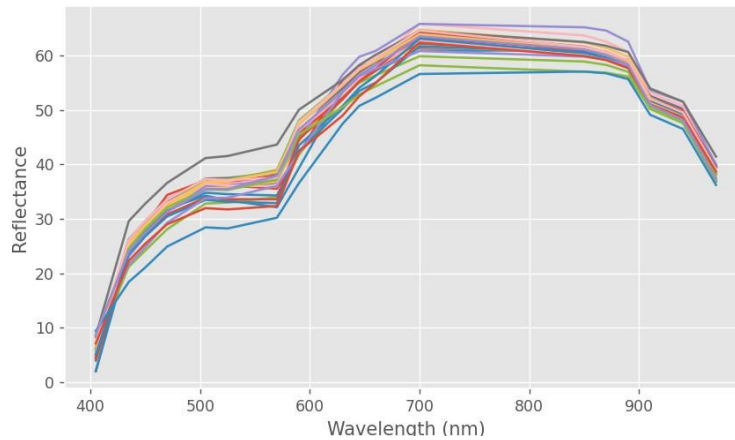
Η τιμή του συντελεστή προσδιορισμού του μοντέλου μας για την εκπαίδευση και την εσωτερική επικύρωση είναι 0,921 και 0,557 αντίστοιχα. Οι τιμές του μέσου τετραγωνικού σφάλματος για το μοντέλο παλινδρόμησης για την εκπαίδευση και για την εσωτερική επικύρωση είχαν τιμές 0,9 και 5,2 ημέρες αντίστοιχα.

Όπως προκύπτει από τις χαμηλές τιμές του συντελεστή προσδιορισμού του μοντέλου κατά την εσωτερική επικύρωση, αλλά και από τις υψηλές τιμές του μέσου τετραγωνικού σφάλματος, το μοντέλο δεν καταφέρνει να συσχετίσει σε ικανοποιητικό βαθμό τα φασματικά δεδομένα και του πληθυσμού της OMX με τον χρόνο συντήρησης.

Όπως φαίνεται και στο γράφημα 5.3.6.2. για τιμές χρόνου συντήρησης από 0 έως 4 το μοντέλο μας προβλέπει χρόνου συντήρησης που κυμαίνονται από -2 έως 5 ημέρες, ενώ για τιμές από 8 έως 10 το μοντέλο προβλέπει τιμές από 5 έως 12 ημέρες. Οι προβλέψεις φαίνεται να εκτελούνται με τρόπο τυχαίο και να μην έρχονται σε συμφωνία με τα πειραματικά δεδομένα.

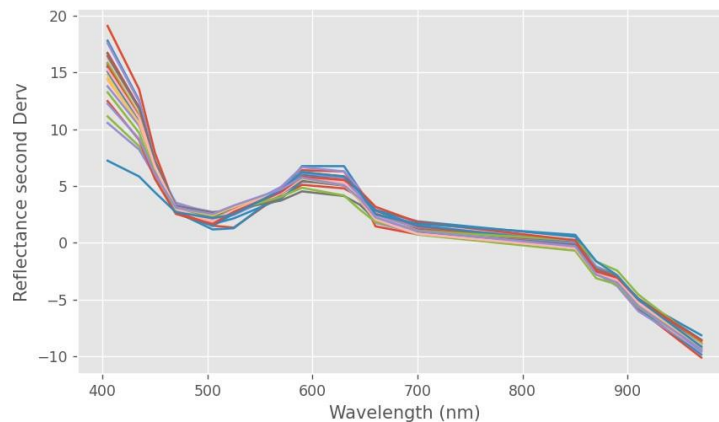
5.3.7 Μοντέλο PLSR για πρόβλεψη του χρόνου συντήρησης με χρήση πολυφασματικών δεδομένων και του πληθυσμού των ψευδομονάδων ως ανεξάρτητων μεταβλητών.

Ακολουθεί η απεικόνιση των δεδομένων ανάκλασης σε 18 διαφορετικά μήκη κύματος

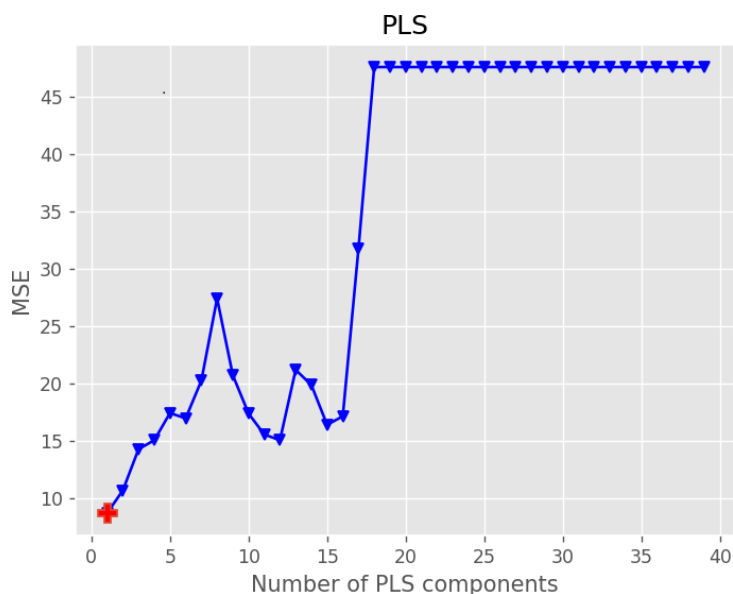


Γράφημα 5.3.7.1. Απεικόνιση των πολυφασματικών δεδομένων ανάκλασης δειγμάτων φιλέτου κοτόπουλου κατά τη συντήρησή τους σε θερμοκρασία 2°C με επικάλυψη με εδώδιμη μεμβράνη χιτοζάνης

Όπως έχουμε αναφέρει προηγουμένως, ένα σύνηθες βήμα προ-επεξεργασίας στην ανάλυση δεδομένων είναι η εφαρμογή του φίλτρου Savitzky-Golay (Savgol filter). Ο σκοπός της συγκεκριμένου φίλτρου είναι η εξομάλυνση των δεδομένων. Η εφαρμογή του συγκεκριμένου φίλτρου έχει σαν αποτέλεσμα την μείωση του θορύβου, την επισήμανση τάσεων και την εμφάνιση πιθανών μοτίβων που μπορεί να υπάρχουν στα δεδομένα μας. Το SavGol filter βασίζεται σε πολωνυμική παρεμβολή, όπου γίνεται παρεμβολή πολωνύμου μικρού βαθμού σε μικρά αλληλεπικαλυπτόμενα διαστημάτων δεδομένων μέσω της μεθόδου των ελαχίστων τετραγώνων. Στην παρούσα μελέτη χρησιμοποιήσαμε μια επέκταση του συγκεκριμένου φίλτρου η οποία υπολογίζει την 2η παράγωγο του εφαρμοσμένου στην παρεμβολή πολωνύμου. Σκοπός αυτού είναι να γίνουν πιο εμφανείς η τάσεις που διέπουν τα δεδομένα. Το αποτέλεσμα της διεργασίας αυτής αποτυπώνεται στο γράφημα 5.3.7.2

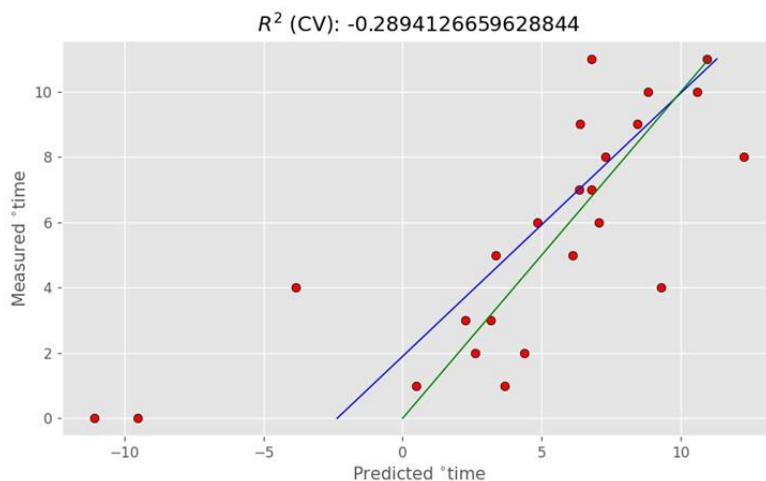


Γράφημα 5.3.7.2. Μετασηματισμός των δεδομένων ανάκλασης των πολυφασματικών εικόνων με την εφαρμογή της 2^{ης} παραγώγου του φίλτρου Savitsky-Golay



Γράφημα 5.3.7.3. Γραφική παράσταση της μεταβολής του μέσου τετραγωνικού σφάλματος έναντι του αριθμού συνιστωσών της παλινδρόμησης.

Όπως έχουμε προαναφέρει ο αλγόριθμος πραγματοποιεί σε επανάληψη την εξής λειτουργία. Υπολογίζει την τιμή του μέσου τετραγωνικού σφάλματος για διαδοχικά αυξανόμενο αριθμό συνιστωσών PLSR, προκειμένου να προσδιορίσουμε τον βέλτιστο αριθμό συνιστωσών. Στο συγκεκριμένο μοντέλο φαίνεται ότι ο βέλτιστος αριθμός συνιστωσών είναι 1. (γράφημα 5.3.7.3.)



Γράφημα 5.3.7.4.

Γραφική παράσταση των προβλεπόμενων τιμών χρόνου συντήρησης από το μοντέλο PLSR, έναντι των παρατηρούμενων τιμών κατά τη συντήρηση φιλέτων κοτόπουλου σε θερμοκρασία 2°C με την επικάλυψη με εδώδιμη μεμβράνη χιτοζάνης.

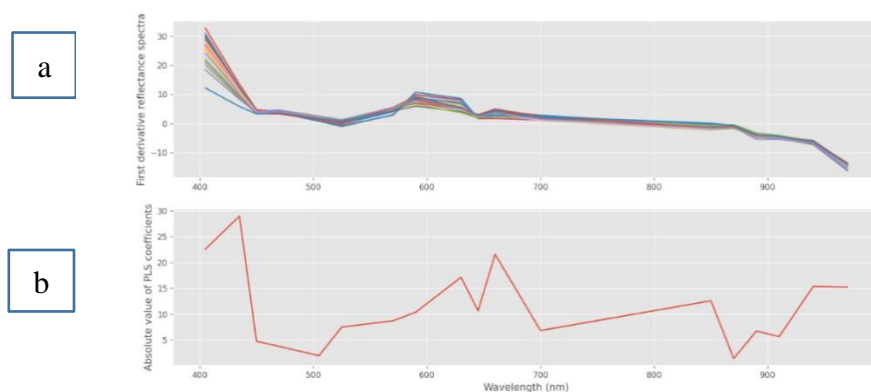
(— Line of Equity, — Line of Best Fit)

Η τιμή του συντελεστή προσδιορισμού του μοντέλου μας είναι 0,941 ενώ η τιμή του συντελεστή προσδιορισμού για την εσωτερική επικύρωση, -0,289. Οι τιμές του μέσου τετραγωνικού σφάλματος για το μοντέλο παλινδρόμησης και για την εσωτερική επικύρωση είχαν τιμές 0,7 και 15,3 ημέρες αντίστοιχα.

Όπως προκύπτει από τις χαμηλές τιμές του συντελεστή προσδιορισμού του μοντέλου παλινδρόμησης κατά την εσωτερική επικύρωση, αλλά και από τις υψηλές τιμές του μέσου τετραγωνικού σφάλματος, το μοντέλο δεν καταφέρνει να συσχετίσει σε ικανοποιητικό βαθμό τα φασματικά δεδομένα και τον πληθυσμό των ψευδομονάδων με τον χρόνο συντήρησης. Από το γράφημα 5.4.7.4. φαίνεται ότι το μοντέλο μας για μετρούμενες τιμές χρόνου συντήρησης 0 έως 4 ημέρες, προβλέπει τιμές από -12 έως 10 μέρες. Οι προβλέψεις λοιπόν εκτελούνται με τρόπο τυχαίο και δεν έρχονται σε συμφωνία με τα πειραματικά δεδομένα.

5.3.8 Βελτιστοποίηση του μοντέλου PLSR για την πρόβλεψη του χρόνου συντήρησης με χρήση πολυφασματικών δεδομένων και πληθυσμού ψευδομονάδων ως ανεξάρτητων μεταβλητών. Μέθοδος επιλογής ανεξάρτητων μεταβλητών.

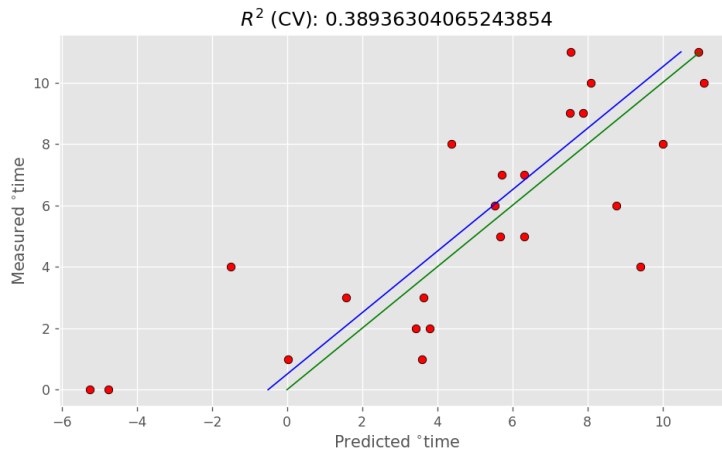
Όπως έχουμε ήδη αναφέρει, η επιλογή μεταβλητών (feature extraction) βασίζεται στο γεγονός ότι όλα τα μήκη κύματος δεν έχουν την ίδια βαρύτητα στην πρόβλεψη της ανεξάρτητης μεταβλητής. Σε ορισμένες περιπτώσεις η χρήση όλων των μεταβλητών μπορεί να επηρεάσει αρνητικά την επίδοση του μοντέλου μας. Για τον λόγο αυτό, τροποποιήσαμε τον αλγόριθμο ώστε μέσω διαδοχικών επαναλήψεων να απορρίψει τις μεταβλητές εκείνες για τις οποίες τελικά προκύπτουν υψηλότερες τιμές RMSE. Τα αποτελέσματα της συγκεκριμένης εφαρμογής απεικονίζονται στο γράφημα 5.3.8.1.



Γράφημα 5.3.8.1. Γράφημα 5.2.2.1. a. Γραφική αναπαράσταση της 1^{ης} παραγώγου των μηκών κύματος έναντι του εύρους του μήκους κύματος των μετρήσεων.

b. Γραφική αναπαράσταση της απόλυτης τιμής των συνιστωσών του βελτιωμένου μοντέλου παλινδρόμησης έναντι του εύρους του μήκους κύματος των μετρήσεων.

Για την παραγωγή του παραπάνω γραφήματος χρησιμοποιώντας την πρώτη παράγωγο των φασματικών δεδομένων ανάκλασης που προκύπτει από την εφαρμογή του φίλτρου SavGol. Με τη χρήση αυτών πραγματοποιούμε εκ νέου μια PLS. Στο διάγραμμα β, μπορούμε να δούμε τις τιμές των συντελεστών της παλινδρόμησης έναντι των αντίστοιχων μηκών κύματος. Οι συγκεκριμένοι συντελεστές των συνιστωσών της παλινδρόμησης είναι αυτοί που ποσοτικοποιούν τη σχέση μεταξύ του μήκους κύματος και της απόκρισης. Ενδιαφερόμαστε μόνο για την απόλυτη τιμή των συντελεστών, καθώς προσπαθούμε να αποκλείσουμε τιμές που βρίσκονται κοντά στο μηδέν και παρουσιάζουν μικρότερη συσχέτιση με την απόκριση (χρόνος συντήρησης). Έπειτα ο αλγόριθμος μας, μέσω διαδοχικών επαναλήψεων απορρίπτει, έναν κάθε φορά, τους συντελεστές παλινδρόμησης που παρουσιάζουν την μικρότερη συσχέτιση με τον χρόνο συντήρησης. Στην συνέχεια πραγματοποιούμε εκ νέου μια PLS. Ο αλγόριθμος μας συνεχίζει να απορρίπτει τους συντελεστές παλινδρόμησης έως ότου επιτευχθεί η ελάχιστη τιμή RMSE. Το αποτέλεσμα για την βελτιωμένη PLS φαίνεται στο διάγραμμα 5.3.8.2.



Γράφημα 5.3.8.2.

Γραφική παράσταση των προβλεπόμενων τιμών χρόνου συντήρησης από το βελτιωμένο μοντέλο PLSR, έναντι των παρατηρούμενων τιμών κατά τη συντήρηση φιλέτων κοτόπουλου σε θερμοκρασία 2°C με την επικάλυψη με εδώδιμη μεμβράνη χιτοζάνης.

(— Line of Equity, — Line of Best Fit)

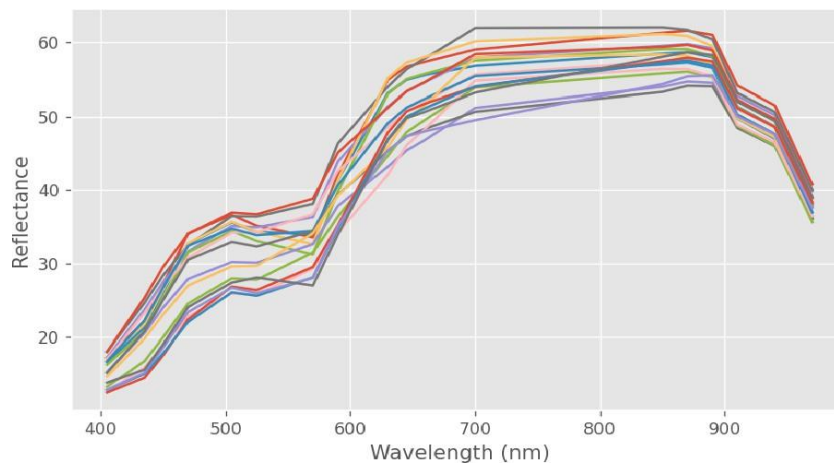
Η τιμή του συντελεστή προσδιορισμού του μοντέλου μας κατά την εκπαίδευση και κατά την εσωτερική επικύρωση είναι 0,909 και 0,389 αντίστοιχα. Οι τιμές του μέσου τετραγωνικού σφάλματος είναι 1,0 και 7,2 ημέρες αντίστοιχα. Παρά το γεγονός ότι οι παράμετροι αξιολόγησης της επίδοσης του μοντέλου μας βελτιώθηκαν, από τις χαμηλές τιμές του συντελεστή προσδιορισμού καθώς επίσης και την υψηλή τιμή του μέσου τετραγωνικού σφάλματος που παρατηρούνται κατά την εσωτερική επικύρωση, είναι φανερό ότι το μοντέλο μας δεν μπορεί να εκτελέσει σε ικανοποιητικό βαθμό προβλέψεις για την εκτίμηση του χρόνου συντήρησης συναρτήσει του πληθυσμού των ψευδομονάδων και των πολυφασματικών δεδομένων. Φαίνεται ότι η επιλογή να εξαιρέσουμε όλους τους άλλους πιθανούς μικροοργανισμούς πλην της ψευδομονάδας επηρέασε αρνητικά την αποτελεσματικότητα του μοντέλου και σε ότι αφορά την εκπαίδευση αλλά και την

γενίκευση. Από το γράφημα 5.3.8.2. φαίνεται ότι το μοντέλο μας για χρόνους συντήρησης 0 έως 4 ημέρες προβλέπει χρόνους συντήρησης από 4 έως - 6 ημέρες. Είναι προφανές ότι οι προβλέψεις είναι σε συμφωνία με τα πειραματικά δεδομένα και εκτελούνται με τυχαίο τρόπο.

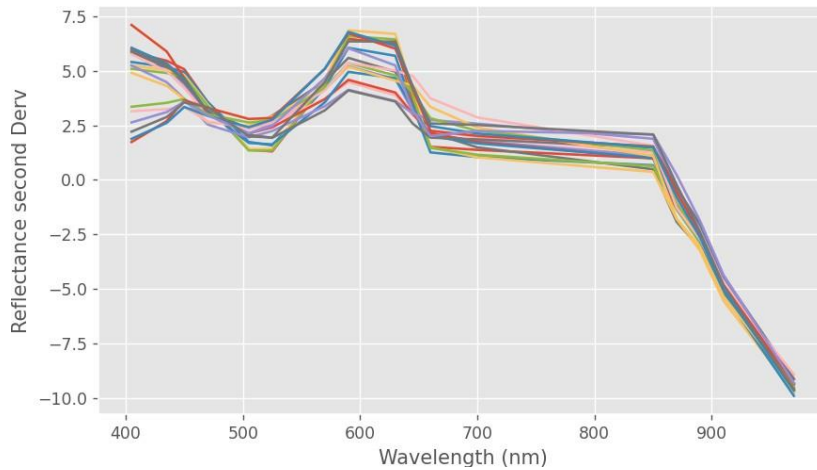
5.4 Ανάλυση πολυφασματικών δεδομένων με τη χρήση αλγορίθμου PLSR από φιλέτα κοτόπουλου που συντηρήθηκαν σε αερόβιες συνθήκες υπό ψύξη (4°C) χωρίς επικάλυψη εδώδιμης μεμβράνης χιτοζάνης

5.4.1 PLSR μοντέλο για την πρόβλεψη της OMX με χρήση δεδομένων πολυφασματικής απεικόνισης ως ανεξάρτητων μεταβλητών

Ακολουθεί η απεικόνιση των δεδομένων ανάκλασης σε 18 διαφορετικά μήκη κύματος



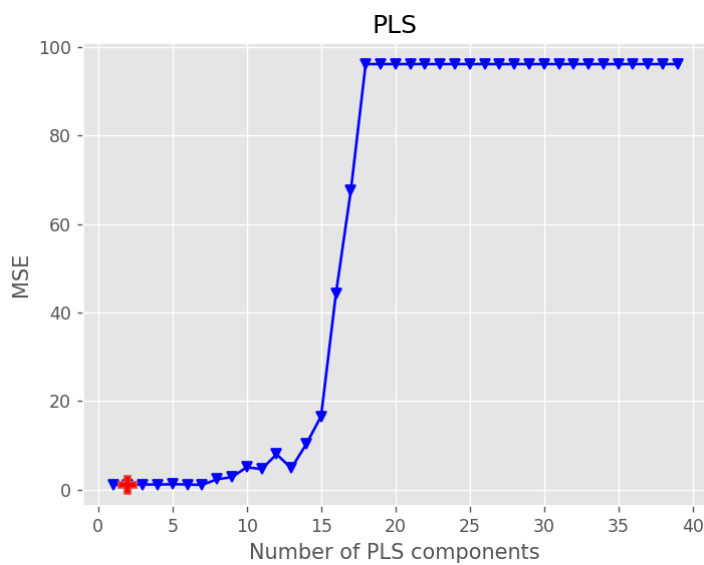
Γράφημα 5.4.1.1. Απεικόνιση των πολυφασματικών δεδομένων ανάκλασης δειγμάτων φιλέτου κοτόπουλου κατά τη συντήρησή τους σε θερμοκρασία 2°C χωρίς επικάλυψη με εδώδιμη μεμβράνη χιτοζάνης



Γράφημα 5.4.1.2.

Μετασηματισμός των δεδομένων ανάκλασης των πολυφασματικών εικόνων με την εφαρμογή της $2^{η}$ παραγώγου του φίλτρου Savitsky-Golay

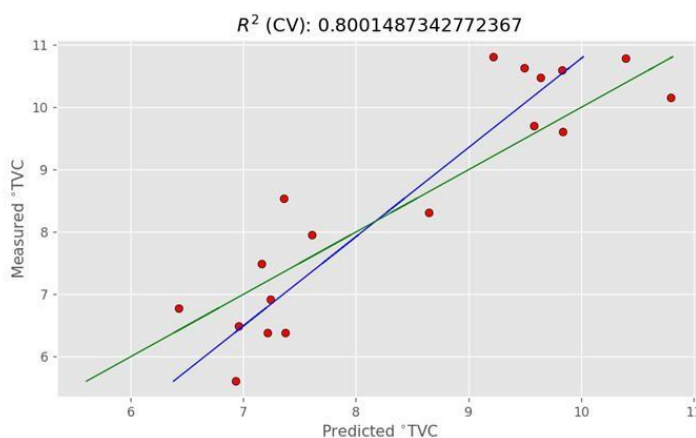
Όπως έχουμε αναφέρει πρωτότερα, ένα σύνηθες βήμα προ-επεξεργασίας στην ανάλυση δεδομένων είναι η εφαρμογή του φίλτρου Savitzky-Golay (Savgol filter). Ο σκοπός της συγκεκριμένου φίλτρου είναι η εξομάλυνση των δεδομένων. Η εφαρμογή του συγκεκριμένου φίλτρου έχει σαν αποτέλεσμα την μείωση του θορύβου, την επισήμανση τάσεων και την εμφάνιση πιθανών μοτίβων που μπορεί να υπάρχουν στα δεδομένα μας. Το SavGol filter βασίζεται σε πολυωνμική παρεμβολή, όπου γίνεται παρεμβολή πολυωνύμου μικρού βαθμού σε μικρά αλληλεπικαλυπτόμενα διαστήματα δεδομένων μέσω της μεθόδου των ελαχίστων τετραγώνων. Στην παρούσα μελέτη χρησιμοποιήσαμε μια επέκταση του συγκεκριμένου φίλτρου η οποία υπολογίζει την 2η παράγωγο του εφαρμοσμένου στην παρεμβολή πολυωνύμου. Σκοπός αυτού είναι να γίνουν πιο εμφανείς η τάσεις που διέπουν τα δεδομένα. Το αποτέλεσμα της διεργασίας αυτής αποτυπώνεται στο γράφημα 5.4.1.2.



Γράφημα 5.4.1.3.

Γραφική παράσταση της μεταβολής του μέσου τετραγωνικού σφάλματος έναντι του αριθμού συνιστωσών της παλινδρόμησης.

Ο αλγόριθμος πραγματοποιεί σε επανάληψη την εξής λειτουργία. Υπολογίζει την τιμή του μέσου τετραγωνικού σφάλματος (mean square error, MSE) για τον διαδοχικά αυξανόμενο αριθμό των συνιστωσών PLSR έτσι ώστε να μπορέσουμε να βρούμε τον βέλτιστο αριθμό συνιστωσών (Γράφημα 5.4.1.3). Με βάση την τιμή αυτή, ο βέλτιστος αριθμός συνιστωσών που ελαχιστοποιεί την τιμή του MSE ήταν 2.



Γράφημα 5.4.1.4.

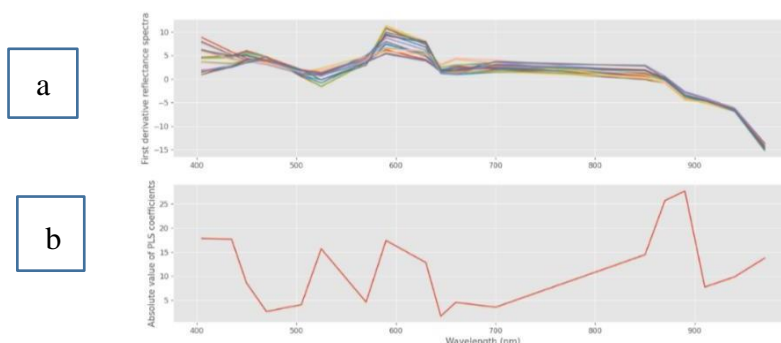
Γραφική παράσταση των προβλεπόμενων OMX από το μοντέλο PLSR, έναντι των παρατηρούμενων τιμών κατά τη συντήρηση φιλέτων κοτόπουλου σε θερμοκρασία 2°C χωρίς την επικάλυψη με εδώδιμη μεμβράνη χιτοζάνης. (— Line of Equity, — Line of Best Fit)

Η τιμή του συντελεστή προσδιορισμού του μοντέλου μας κατά την εκπαίδευση και την εσωτερική επικύρωση είναι 0,986 και 0,800. Οι τιμές του μέσου τετραγωνικού σφάλματος είναι 0,043 και 0,633 log CFU/g αντίστοιχα.

Όπως προκύπτει από τις υψηλές τιμές του συντελεστή προσδιορισμού του μοντέλου παλινδρόμησης αλλά και της εσωτερικής επικύρωσης, αλλά και από τις χαμηλές τιμές του μέσου τετραγωνικού σφάλματος, το μοντέλο καταφέρνει να συσχετίσει σε ικανοποιητικό βαθμό τα φασματικά δεδομένα με τις μετρήσεις της OMX. Πράγματι, όπως μπορούμε να δούμε από το διάγραμμα 5.4.1.4. για μετρούμενες τιμές OMX από μηδέν έως 7,0 log CFU/g, το μοντέλο μας προβλέπει τιμές από 0 έως 7,5 log CFU/g

5.4.2 Βελτιστοποίηση Μοντέλου PLSR για πρόβλεψη της OMX με χρήση πολυφασματικών δεδομένων ως ανεξάρτητων μεταβλητών. Μέθοδος επιλογής ανεξάρτητων μεταβλητών

Εδώ και πάλι θα εφαρμοστεί η μέθοδος επιλογής μεταβλητών. Η επιλογή μεταβλητών (feature extraction) βασίζεται στο γεγονός ότι όλα τα μήκη κύματος δεν έχουν την ίδια βαρύτητα στην πρόβλεψη της ανεξάρτητης μεταβλητής. Σε ορισμένες περιπτώσεις η χρήση όλων των μεταβλητών μπορεί να επηρεάσει αρνητικά την επίδοση του μοντέλου μας. Για τον λόγο αυτό, τροποποιήσαμε τον αλγόριθμο ώστε μέσω διαδοχικών επαναλήψεων να απορρίπτει τις μεταβλητές εκείνες για τις οποίες τελικά προκύπτουν υψηλότερες τιμές RMSE. Τα αποτελέσματα της συγκεκριμένης εφαρμογής απεικονίζονται στο γράφημα 5.4.2.1.

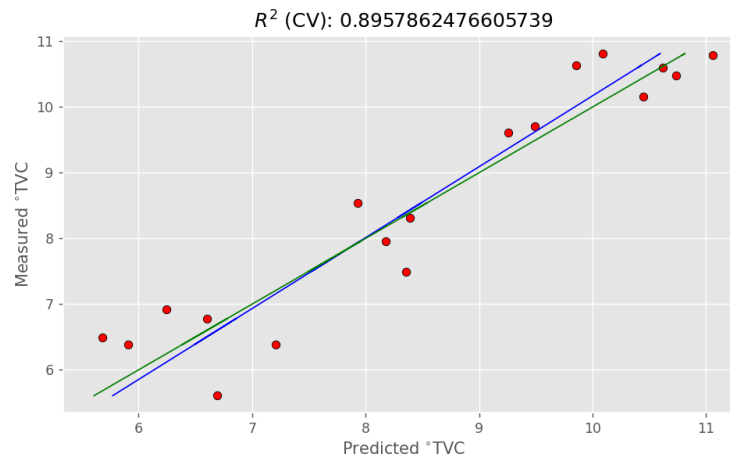


Γράφημα 5.4.2.1. a. Γραφική αναπαράσταση της 1^{ης} παραγώγου των μηκών κύματος έναντι του εύρους του μήκους κύματος των μετρήσεων.

b. Γραφική αναπαράσταση της απόλυτης τιμής των συνιστωσών του βελτιωμένου μοντέλου παλινδρόμησης έναντι του εύρους του μήκους κύματος των μετρήσεων.

Για την παραγωγή του παραπάνω γραφήματος χρησιμοποιώντας την πρώτη παράγωγο των δεδομένων ανάκλασης που προκύπτει από την εφαρμογή του φίλτρου SavGol και πραγματοποιούμε μια PLS. Στο διάγραμμα β, μπορούμε να δούμε του συντελεστές της παλινδρόμησης έναντι των αντίστοιχων μηκών κύματος. Οι συγκεκριμένοι συντελεστές των συνιστωσών της παλινδρόμησης είναι αυτοί που ποσοτικοποιούν τη σχέση μεταξύ του

μήκους κύματος και του μικροβιακού πληθυσμού. Ενδιαφερόμαστε μόνο για την απόλυτη τιμή των συντελεστών, καθώς προσπαθούμε να αποκλείσουμε τιμές που βρίσκονται κοντά στο μηδέν και παρουσιάζουν μικρότερη συσχέτιση με την απόκριση (OMX). Έπειτα ο αλγόριθμος μας, μέσω διαδοχικών επαναλήψεων απορρίπτει, έναν κάθε φορά, τους συντελεστές παλινδρόμησης που παρουσιάζουν την μικρότερη συσχέτιση με την OMX. Στην συνέχεια πραγματοποιούμε εκ νέου μια PLS. Ο αλγόριθμος μας συνεχίζει να απορρίπτει τους συντελεστές παλινδρόμησης έως ότου επιτευχθεί η ελάχιστη τιμή RMSE. Το αποτέλεσμα για την βελτιωμένη PLS φαίνονται στο διάγραμμα 5.4.2.2.



Γράφημα 5.4.2.2.

Γραφική παράσταση των προβλεπόμενων τιμών OMX από το βελτιωμένο μοντέλο PLSR, έναντι των παρατηρούμενων τιμών κατά τη συντήρηση φιλέτων κοτόπουλου σε θερμοκρασία 2°C χωρίς την επικάλυψη με εδώδιμη μεμβράνη χιτοζάνης.

(— Line of Equity, — Line of Best Fit)

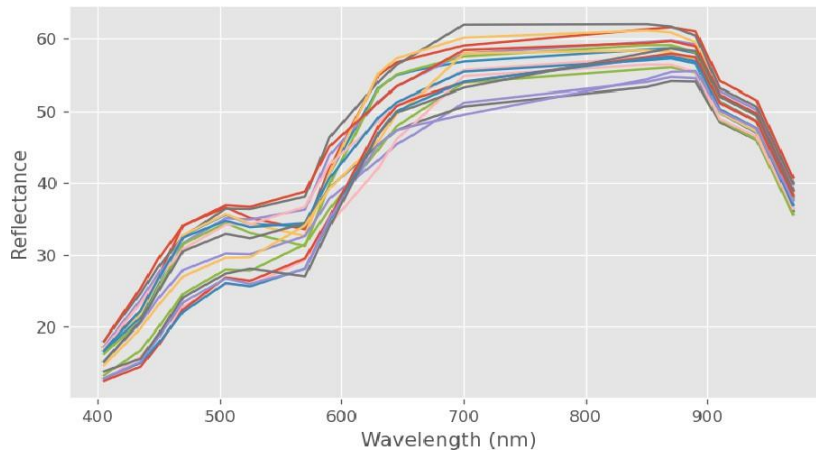
Η τιμή του συντελεστή προσδιορισμού του μοντέλου είναι 0,990 για την εκπαίδευση ενώ η τιμή του συντελεστή προσδιορισμού για την εσωτερική επικύρωση είναι 0,896. Οι τιμές του μέσου τετραγωνικού σφάλματος είναι 0,31 και 0,330 αντίστοιχα log CFU/g.

Όπως προκύπτει από τις υψηλές τιμές του συντελεστή προσδιορισμού του μοντέλου παλινδρόμησης αλλά και της εσωτερικής επικύρωσης, αλλά και από τις χαμηλές τιμές του μέσου τετραγωνικού σφάλματος, το μοντέλο καταφέρνει να συσχετίσει σε ικανοποιητικό βαθμό τα φασματικά δεδομένα με τις μετρήσεις της OMX.

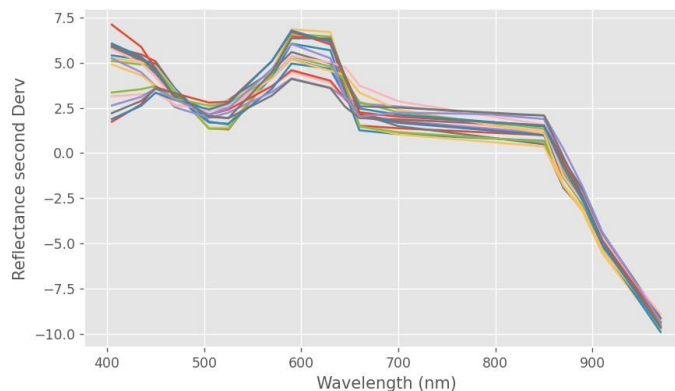
Από το γράφημα 5.4.2.2. φαίνεται ότι για μετρούμενες τιμές OMX από 0 έως 7,0 log CFU/g, το μοντέλο μας προβλέπει τιμές από 0 έως 7,2 log CFU/g. Αντίστοιχα για 8 έως 10,0 log CFU/g οι προβλέψεις του μοντέλου μας κυμαίνονται από 7,9 μέχρι 10,0 log CFU/g. Παρατηρούμε ότι οι προβλέψεις του μοντέλου μας έρχονται σε συμφωνία με τα πειραματικά δεδομένα.

5.4.3. PLSR μοντέλο για πρόβλεψη του πληθυσμού των ψευδομονάδων με χρήση πολυφασματικών δεδομένων ανάκλασης ως ανεξάρτητων μεταβλητών

Ακολουθεί η απεικόνιση των δεδομένων ανάκλασης σε 18 διαφορετικά μήκη κύματος



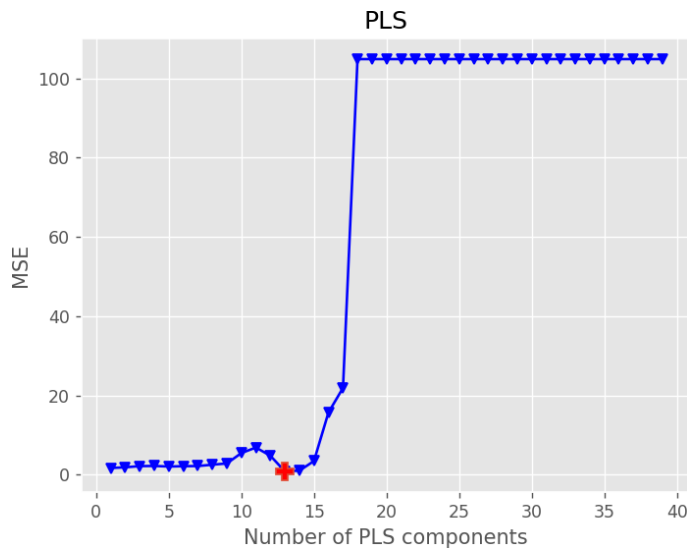
Γράφημα 5.4.3.1. Απεικόνιση των πολυφασματικών δεδομένων ανάκλασης δειγμάτων φιλέτου κοτόπουλου κατά τη συντήρησή τους σε θερμοκρασία 2°C χωρίς επικάλυψη με εδώδιμη μεμβράνη χιτοζάνης



Γράφημα 5.4.3.2. Μετασχηματισμός των δεδομένων ανάκλασης των πολυφασματικών εικόνων με την εφαρμογή της 2^{ης} παραγώγου του φίλτρου Savitsky-Golay

Στο παραπάνω γράφημα φαίνεται ο μετασχηματισμός των φασματικών μας δεδομένων που προκύπτει μετά από την εφαρμογή του φίλτρου Savitzky-Golay (SavGol filter). Ο σκοπός της συγκεκριμένου φίλτρου είναι η εξομάλυνση των δεδομένων. Η εφαρμογή του συγκεκριμένου φίλτρου έχει σαν αποτέλεσμα την μείωση του θορύβου, την επισήμανση τάσεων και την εμφάνιση πιθανών μοτίβων που μπορεί να υπάρχουν στα δεδομένα μας. Το SavGol filter βασίζεται σε πολωνυμική παρεμβολή, όπου γίνεται παρεμβολή πολωνύμου μικρού βαθμού σε μικρά αλληλεπικαλυπτόμενα διαστήματα δεδομένων μέσω της μεθόδου των ελαχίστων τετραγώνων. Στην παρούσα μελέτη χρησιμοποιήσαμε μια επέκταση του συγκεκριμένου φίλτρου η οποία υπολογίζει την 2η παράγωγο του εφαρμοσμένου στην

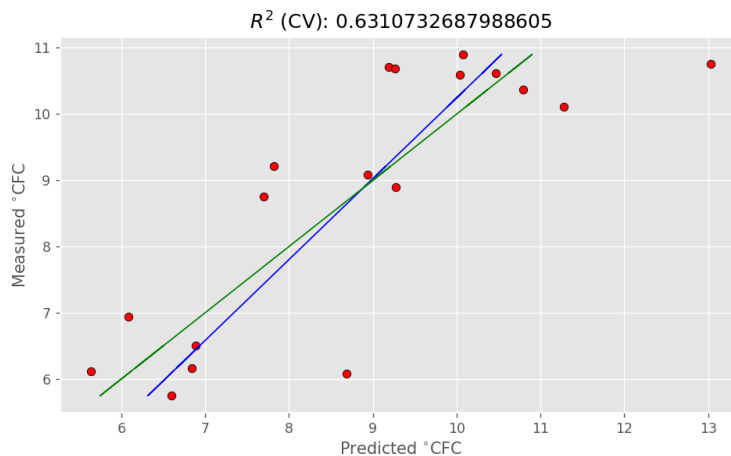
παρεμβολή πολυωνύμου. Σκοπός αυτού είναι να γίνουν πιο εμφανείς η τάσεις που διέπουν τα δεδομένα. Το αποτέλεσμα της διεργασίας αυτής αποτυπώνεται στο γράφημα 5.4.3.2.



Γράφημα 5.4.3.3.

Γραφική παράσταση της μεταβολής του μέσου τετραγωνικού σφάλματος έναντι του αριθμού συνιστωσών της παλινδρόμησης.

Ο αλγόριθμος πραγματοποιεί σε επανάληψη την εξής λειτουργία. Υπολογίζει την τιμή του μέσου τετραγωνικού σφάλματος (mean square error, MSE) για τον διαδοχικά αυξανόμενο αριθμό των συνιστωσών PLSR έτσι ώστε να μπορέσουμε να βρούμε τον βέλτιστο αριθμό συνιστωσών (Γράφημα 5.4.3.3). Με βάση την τιμή αυτή, ο βέλτιστος αριθμός συνιστωσών που ελαχιστοποιεί την τιμή του MSE ήταν 13.



Γράφημα 5.4.3.4.

Γραφική παράσταση των προβλεπόμενων τιμών του πληθυσμού των ψευδομονάδων από το μοντέλο PLSR, έναντι των παρατηρούμενων τιμών κατά τη συντήρηση φιλέτων κοτόπουλου σε θερμοκρασία 2°C χωρίς την επικάλυψη με εδώδιμη μεμβράνη χιτοζάνης. (— Line of Equity, — Line of Best Fit)

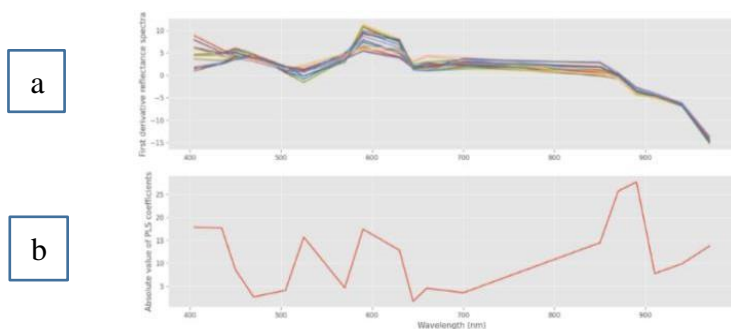
Η τιμή του συντελεστή προσδιορισμού του μοντέλου μας για την εκπαίδευση και την εσωτερική επικύρωση είναι 0,9750 και 0,6310 αντίστοιχα. Οι τιμές του μέσου τετραγωνικού σφάλματος είναι 0,090 και 1,3520 log CFU/g αντίστοιχα.

Όπως προκύπτει από τις χαμηλές τιμές του συντελεστή προσδιορισμού του μοντέλου παλινδρόμησης κατά την εσωτερικής επικύρωσης, αλλά και από τις υψηλές τιμές του μέσου τετραγωνικού σφάλματος, το μοντέλο καταφέρνει να συσχετίσει σε ικανοποιητικό βαθμό τα φασματικά δεδομένα με τις μετρήσεις της του πληθυσμού των ψευδομονάδων.

Πράγματι, όπως μπορούμε να δούμε από το γράφημα 5.4.3.4. για μετρούμενες τιμές του πληθυσμού των ψευδομονάδων από 6,0 έως 8,0 log CFU/g, το μοντέλο μας προβλέπει τιμές σε εύρος από 6,0 έως 8,7 log CFU/g. Μεγαλύτερη όμως απόκλιση ανάμεσα στις προβλέψεις και στα πειραματικά δεδομένα παρουσιάζεται σε υψηλότερες τιμές πληθυσμού αφού για μετρούμενες τιμές από 9,0 έως 11 log CFU/g το μοντέλο προβλέπει τιμές από 7,8 έως 11,2 log CFU/g.

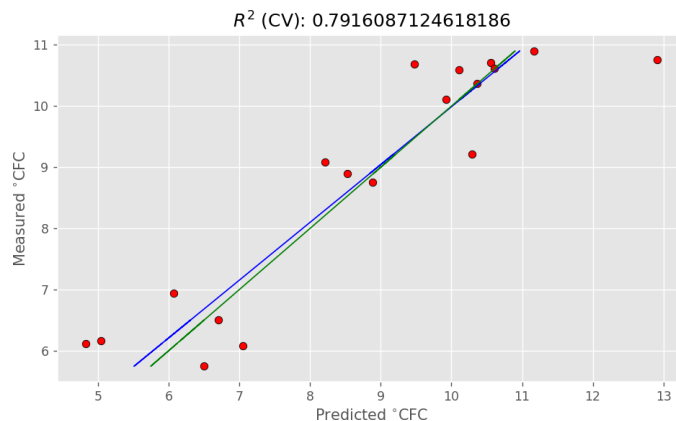
5.4.4 Βελτιστοποίηση του μοντέλου PLSR για την πρόβλεψη του πληθυσμού των ψευδομονάδων με χρήση πολυφασματικών δεδομένων ως ανεξάρτητων μεταβλητών. Μέθοδος επιλογής ανεξάρτητων μεταβλητών

Όπως και στις αντίστοιχες προηγούμενες ενότητες, έτσι και εδώ θα εφαρμόσουμε την ίδια μέθοδο επιλογής μεταβλητών. Το αποτέλεσμα της εφαρμογής αυτής φαίνεται στο γράφημα 5.4.4.1.



Γράφημα 5.4.4.1. **a.** Γραφική αναπαράσταση της 1^{ης} παραγώγου των μηκών κύματος έναντι του εύρους του μήκους κύματος των μετρήσεων.
b. Γραφική αναπαράσταση της απόλυτης τιμής των συνιστωσών του βελτιωμένου μοντέλου παλινδρόμησης έναντι του εύρους του μήκους κύματος των μετρήσεων.

Για την παραγωγή του παραπάνω γραφήματος χρησιμοποιώντας την πρώτη παράγωγο των δεδομένων ανάκλασης που προκύπτει από την εφαρμογή του φίλτρου SavGol και πραγματοποιούμε μια PLS. Στο διάγραμμα β, μπορούμε να δούμε του συντελεστές της παλινδρόμησης έναντι των αντίστοιχων μηκών κύματος. Οι συγκεκριμένοι συντελεστές των συνιστωσών της παλινδρόμησης είναι αυτοί που ποσοτικοποιούν τη σχέση μεταξύ του μήκους κύματος και του μικροβιακού πληθυσμού. Ενδιαφερόμαστε μόνο για την απόλυτη τιμή των συντελεστών, καθώς προσπαθούμε να αποκλείσουμε τιμές που βρίσκονται κοντά στο μηδέν και παρουσιάζουν μικρότερη συσχέτιση με την απόκριση (πληθυσμός ψευδομονάδων). Έπειτα ο αλγόριθμος μας, μέσω διαδοχικών επαναλήψεων απορρίπτει, έναν κάθε φορά, τους συντελεστές παλινδρόμησης που παρουσιάζουν την μικρότερη συσχέτιση με τον πληθυσμό ψευδομονάδων. Στην συνέχεια πραγματοποιούμε εκ νέου μια PLS. Ο αλγόριθμος μας συνεχίζει να απορρίπτει τους συντελεστές παλινδρόμησης έως ότου επιτευχθεί η ελάχιστη τιμή RMSE. Το αποτέλεσμα για την βελτιωμένη PLS φαίνονται στο διάγραμμα 5.4.4.2

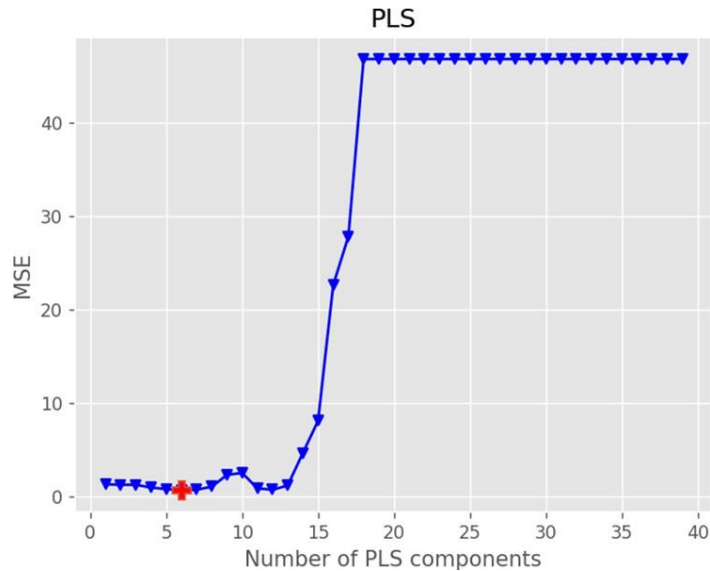


Γράφημα 5.4.4.2.

Γραφική παράσταση των προβλεπόμενων τιμών του πληθυσμού των ψευδομονάδων από το βελτιωμένο μοντέλο PLSR, έναντι των παρατηρούμενων τιμών κατά τη συντήρηση φιλέτων κοτόπουλου σε θερμοκρασία 2°C χωρίς την επικάλυψη με εδώδιμη μεμβράνη χιτοζάνης. (— Line of Equity, — Line of Best Fit)

Η τιμή του συντελεστή προσδιορισμού του μοντέλου για την εκπαίδευση είναι 0,9710 και 0,792 για την εσωτερική επικύρωση. Αντίστοιχα οι τιμές για εκπαίδευση και επικύρωση είναι 0,1060 και 0,7640 αντίστοιχα. Όπως προκύπτει από τις χαμηλές τιμές του συντελεστή προσδιορισμού του μοντέλου παλινδρόμησης κατά την εσωτερικής επικύρωσης, αλλά και από τις σχετικά υψηλές τιμές του μέσου τετραγωνικού σφάλματος, το μοντέλο καταφέρνει να συσχετίσει σε ικανοποιητικό βαθμό τα φασματικά δεδομένα με τις μετρήσεις της του πληθυσμού των ψευδομονάδων. Όπως φαίνεται και στο γράφημα 5.4.4.2. οι προβλέψεις του μοντέλου μας παρουσιάζουν απόκλιση από τα πειραματικά δεδομένα αφού για μετρούμενες τιμές από 6,0 έως 8,5 log CFU/g το μοντέλο μας προβλέπει τιμές από 6,5 έως 7,1 log CFU/g.

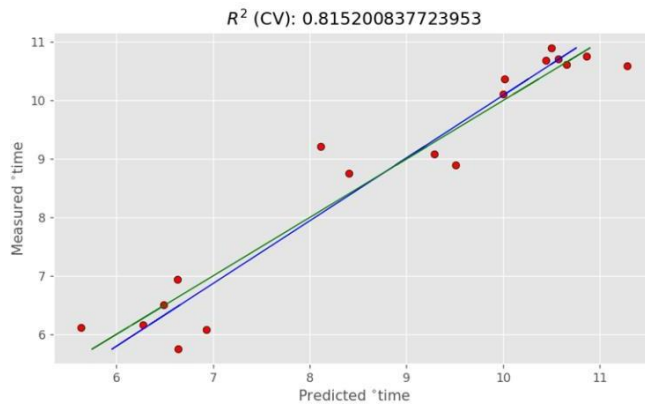
5.4.5 Μοντέλο PLSR για την πρόβλεψη του χρόνου συντήρησης των δειγμάτων φιλέτου κοτόπουλου με τη χρήση πολυφασματικών δεδομένων και του πληθυσμού της OMX ως ανεξάρτητων μεταβλητών



Γράφημα 5.4.5.1.

Γραφική παράσταση της μεταβολής του μέσου τετραγωνικού σφάλματος έναντι του αριθμού συνιστωσών της παλινδρόμησης.

Ο αλγόριθμος πραγματοποιεί σε επανάληψη την εξής λειτουργία. Υπολογίζει την τιμή του μέσου τετραγωνικού σφάλματος (mean square error, MSE) για τον διαδοχικά αυξανόμενο αριθμό των συνιστωσών PLSR έτσι ώστε να μπορέσουμε να βρούμε τον βέλτιστο αριθμό συνιστωσών (Γράφημα 5.4.5.1). Με βάση την τιμή αυτή, ο βέλτιστος αριθμός συνιστωσών που ελαχιστοποιεί την τιμή του MSE ήταν 6.



Γράφημα 5.4.5.2.

Γραφική παράσταση των προβλεπόμενων τιμών χρόνου συντήρησης από το μοντέλο PLSR, έναντι των παρατηρούμενων τιμών κατά τη συντήρηση φιλέτων κοτόπουλου σε θερμοκρασία 2°C χωρίς την επικάλυψη με εδώδιμη μεμβράνη χιτοζάνης.

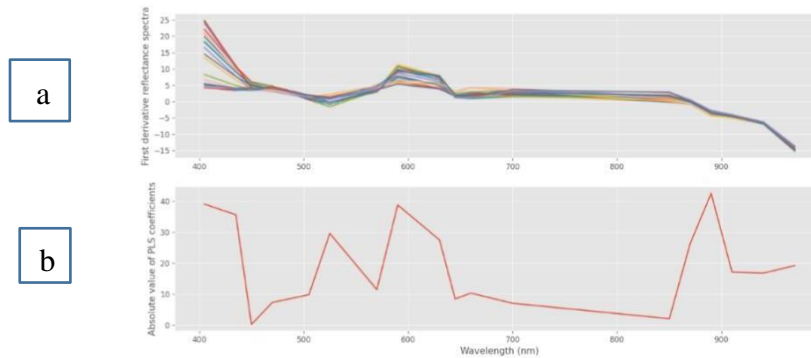
(— Line of Equity, — Line of Best Fit)

Η τιμή του συντελεστή προσδιορισμού του μοντέλου μας για την εκπαίδευση και την εσωτερική επικύρωση είναι 0,932 και 0,815 αντίστοιχα. Οι τιμές του μέσου τετραγωνικού σφάλματος για το μοντέλο παλινδρόμησης και για την εσωτερική επικύρωση είχαν τιμές 0,2 και 0,6 ημέρες αντίστοιχα.

Όπως προκύπτει από τις υψηλές τιμές του συντελεστή προσδιορισμού του μοντέλου παλινδρόμησης αλλά και της εσωτερικής επικύρωσης, αλλά και από τις υψηλές τιμές του μέσου τετραγωνικού σφάλματος, το μοντέλο καταφέρνει να συσχετίσει σε ικανοποιητικό βαθμό τα φασματικά δεδομένα με τις μετρήσεις της OMX. Πράγματι, όπως μπορούμε να δούμε από το γράφημα 5.4.5.2 για μετρούμενες τιμές από 6,0 έως 7,0 ημέρες συντήρησης, το μοντέλο μας προβλέπει 6,0 έως 7,0 ημέρες συντήρησης

5.4.6 Βελτιστοποίηση του μοντέλου PLSR για την πρόβλεψη του χρόνου συντήρησης με χρήση πολυφασματικών δεδομένων και του πληθυσμού της OMX ως ανεξάρτητων μεταβλητών. Μέθοδος επιλογής ανεξάρτητων μεταβλητών

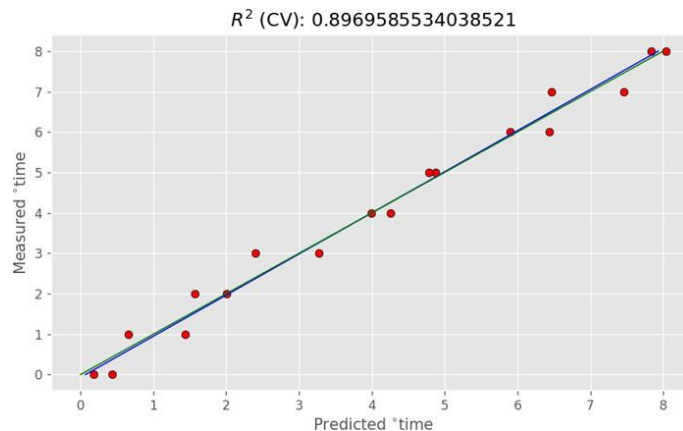
Η ιδέα πίσω από την μέθοδο επιλογής μεταβλητών είναι ότι δεν είναι όλα τα μήκη κύματος ίσης σημασίας ή βαρύτητας αναφορικά με την πρόβλεψη της ανεξάρτητης μεταβλητής. Μάλιστα η χρήση αυτών των μεταβλητών μπορεί να επηρεάζει αρνητικά την αποτελεσματικότητα του μοντέλου μας Έτσι τροποποιήσαμε τον αλγόριθμο έτσι ώστε μέσω ενός κύκλου επανάληψης να απορρίψει τις μεταβλητές εκείνες για τις οποίες τελικά προκύπτουν οι υψηλότερες τιμές για το RMSE.



Γράφημα 5.4.6.1. a. Γραφική αναπαράσταση της 1^{ης} παραγώγου των μηκών κύματος έναντι του εύρους του μήκους κύματος των μετρήσεων.

b. Γραφική αναπαράσταση της απόλυτης τιμής των συνιστωσών του βελτιωμένου μοντέλου παλινδρόμησης έναντι του εύρους του μήκους κύματος των μετρήσεων.

Για την παραγωγή του παραπάνω γραφήματος χρησιμοποιώντας την πρώτη παράγωγο των φασματικών δεδομένων ανάκλασης που προκύπτει από την εφαρμογή του φίλτρου SavGol. Με τη χρήση αυτών πραγματοποιούμε εκ νέου μια PLS. Στο διάγραμμα β, μπορούμε να δούμε τις τιμές των συντελεστών της παλινδρόμησης έναντι των αντίστοιχων μηκών κύματος. Οι συγκεκριμένοι συντελεστές των συνιστωσών της παλινδρόμησης είναι αυτοί που ποσοτικοποιούν τη σχέση μεταξύ του μήκους κύματος και της απόκρισης. Ενδιαφερόμαστε μόνο για την απόλυτη τιμή των συντελεστών, καθώς προσπαθούμε να αποκλείσουμε τιμές που βρίσκονται κοντά στο μηδέν και παρουσιάζουν μικρότερη συσχέτιση με την απόκριση (χρόνος συντήρησης). Έπειτα ο αλγόριθμος μας, μέσω διαδοχικών επαναλήψεων απορρίπτει, έναν κάθε φορά, τους συντελεστές παλινδρόμησης που παρουσιάζουν την μικρότερη συσχέτιση με τον χρόνο συντήρησης. Στην συνέχεια πραγματοποιούμε εκ νέου μια PLS. Ο αλγόριθμος μας συνεχίζει να απορρίπτει τους συντελεστές παλινδρόμησης έως ότου επιτευχθεί η ελάχιστη τιμή RMSE. Το αποτέλεσμα για την βελτιωμένη PLS φαίνονται στο διάγραμμα 5.4.6.2.



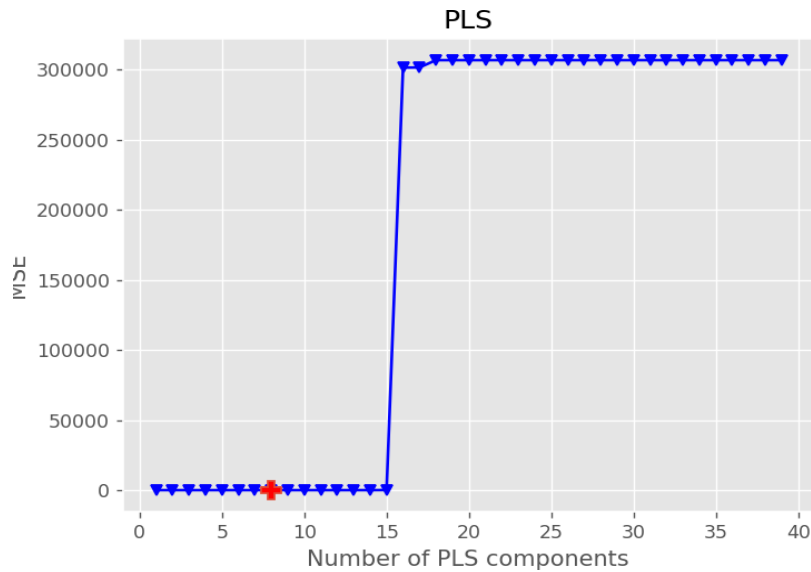
Γράφημα 5.4.6.2.

Γραφική παράσταση των προβλεπόμενων τιμών χρόνου συντήρησης από το βελτιωμένο μοντέλο PLSR, έναντι των παρατηρούμενων τιμών κατά τη συντήρηση φιλέτων κοτόπουλου σε θερμοκρασία 2°C χωρίς την επικάλυψη με εδώδιμη μεμβράνη χιτοζάνης. (— Line of Equity, — Line of Best Fit)

Η τιμή του συντελεστή προσδιορισμού του μοντέλου μας έφτασε το 0,983 ενώ η τιμή του συντελεστή προσδιορισμού για την εσωτερική επικύρωση είχε την τιμή 0,897. Οι τιμές του μέσου τετραγωνικού σφάλματος για το μοντέλο παλινδρόμησης και για την εσωτερική επικύρωση είχαν τιμές 0,1 και 0,6 ημέρες αντίστοιχα.

Όπως προκύπτει από τις υψηλές τιμές του συντελεστή προσδιορισμού του μοντέλου παλινδρόμησης αλλά και της εσωτερικής επικύρωσης, αλλά και από τις υψηλές τιμές του μέσου τετραγωνικού σφάλματος, το μοντέλο καταφέρνει να συσχετίσει σε ικανοποιητικό βαθμό τα φασματικά δεδομένα με τις μετρήσεις της OMX. Ο αλγόριθμος βελτιστοποίησης κατάφερε να βελτιώσει τις παραμέτρους αξιολόγησης του μοντέλου μας. Όπως μπορούμε να δούμε από το γράφημα 5.4.6.2. το μοντέλο μας για προβλεπόμενες τιμές χρόνου συντήρησης από 0 έως 4 ημέρες προβλέπει τιμές από 0 έως 4,3 ημέρες. Οι προβλέψεις του μοντέλου μας βρίσκονται σε συμφωνία με τα πειραματικά δεδομένα.

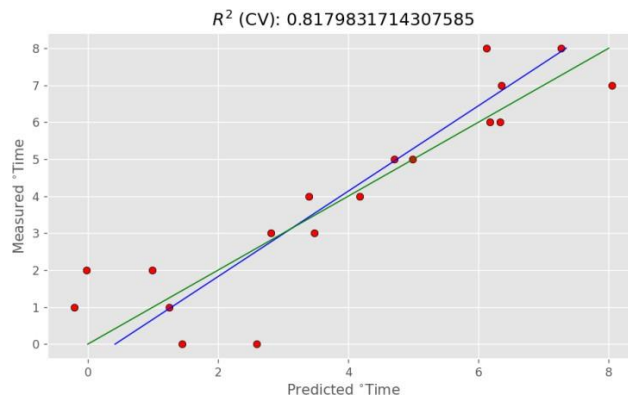
5.4.7 Μοντέλο PLSR για την πρόβλεψη του χρόνου συντήρησης με χρήση πολυφασματικών δεδομένων και του πληθυσμού των ψευδομονάδων ως ανεξάρτητων μεταβλητών



Γράφημα 5.5.7.1.

Γραφική παράσταση της μεταβολής του μέσου τετραγωνικού σφάλματος έναντι του αριθμού συνιστωσών της παλινδρόμησης.

Ο αλγόριθμος πραγματοποιεί σε επανάληψη την εξής λειτουργία. Υπολογίζει την τιμή του μέσου τετραγωνικού σφάλματος (mean square error, MSE) για τον διαδοχικά αυξανόμενο αριθμό των συνιστωσών PLSR έτσι ώστε να μπορέσουμε να βρούμε τον βέλτιστο αριθμό συνιστωσών (Γράφημα 5.5.7.1.). Με βάση την τιμή αυτή, ο βέλτιστος αριθμός συνιστωσών που ελαχιστοποιεί την τιμή του MSE ήταν 8.



Γράφημα 5.4.7.2.

Γραφική παράσταση των προβλεπόμενων τιμών χρόνου συντήρησης από το μοντέλο PLSR, έναντι των παρατηρούμενων τιμών κατά τη συντήρηση φιλέτων κοτόπουλου σε θερμοκρασία 2°C χωρίς την επικάλυψη με εδώδιμη μεμβράνη χιτοζάνης.

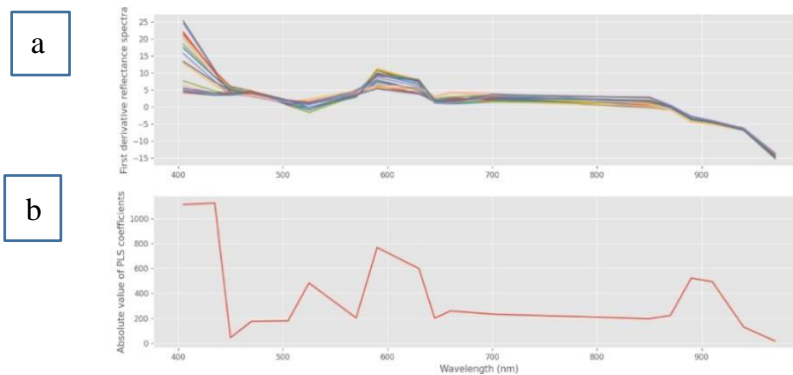
(— Line of Equity, — Line of Best Fit)

Η τιμή του συντελεστή προσδιορισμού του μοντέλου μας έφτασε το 0,986 ενώ η τιμή του συντελεστή προσδιορισμού για την εσωτερική επικύρωση είχε την τιμή 0,818. Οι τιμές του μέσου τετραγωνικού σφάλματος για το μοντέλο παλινδρόμησης και για την εσωτερική επικύρωση είχαν τιμές 0,0910 και 1,2130 ημέρες αντίστοιχα.

Όπως μπορούμε να δούμε από το γράφημα 5.4.7.2. το μοντέλο μας προβλέπει τιμές του χρόνου συντήρησης από 0 έως 4,1 ημέρες για μετρούμενες τιμές από 0 έως 4 ημέρες. Όπως όμως μπορούμε να δούμε από το συγκεκριμένο γράφημα αλλά και να συμπεράνουμε από τις παραμέτρους αξιολόγησης και ιδιαίτερα από την τιμή του μέσου τετραγωνικού σφάλματος του μοντέλου μας, υπάρχει σημαντική απόκλιση μεταξύ των προβλέψεων και των πειραματικών δεδομένων.

5.4.8 Βελτιστοποίηση του μοντέλου PLSR για την πρόβλεψη του χρόνου συντήρησης με χρήση πολυφασματικών δεδομένων και του πληθυσμού των ψευδομονάδων ως ανεξάρτητων μεταβλητών. Μέθοδος επιλογής ανεξάρτητων μεταβλητών.

Όπως και στις προηγούμενες ενότητες, έτσι και εδώ θα εφαρμόσουμε την μέθοδο επιλογής μεταβλητών, μέσω του τροποποιημένου αλγόριθμου ο οποίος θα απορρίπτει τις μεταβλητές εκείνες για τις οποίες τελικά προκύπτουν οι υψηλότερες τιμές για το RMSE.

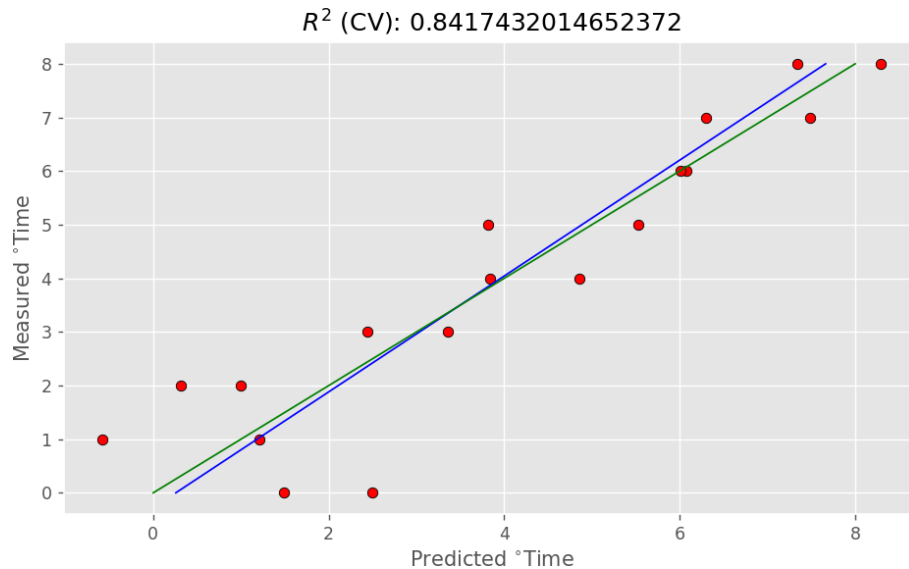


Γράφημα 5.4.8.1. a. Γραφική αναπαράσταση της 1^{ης} παραγώγου των μηκών κύματος έναντι του εύρους του μήκους κύματος των μετρήσεων.

b. Γραφική αναπαράσταση της απόλυτης τιμής των συνιστωσών του βελτιωμένου μοντέλου παλινδρόμησης έναντι του εύρους του μήκους κύματος των μετρήσεων.

Για την παραγωγή του παραπάνω γραφήματος χρησιμοποιώντας την πρώτη παράγωγο των φασματικών δεδομένων ανάκλασης που προκύπτει από την εφαρμογή του φίλτρου SavGol. Με τη χρήση αυτών πραγματοποιούμε εκ νέου μια PLS. Στο διάγραμμα β, μπορούμε να δούμε τις τιμές των συντελεστών της παλινδρόμησης έναντι των αντίστοιχων μηκών κύματος. Οι συγκεκριμένοι συντελεστές των συνιστωσών της παλινδρόμησης είναι αυτοί που ποσοτικοποιούν τη σχέση μεταξύ του μήκους κύματος και της απόκρισης. Ενδιαφερόμαστε μόνο για την απόλυτη τιμή των συντελεστών, καθώς προσπαθούμε να αποκλείσουμε τιμές που βρίσκονται κοντά στο μηδέν και παρουσιάζουν μικρότερη συσχέτιση με την απόκριση (χρόνος συντήρησης). Έπειτα ο αλγόριθμος μας, μέσω διαδοχικών επαναλήψεων απορρίπτει, έναν κάθε φορά, τους συντελεστές παλινδρόμησης που παρουσιάζουν την μικρότερη συσχέτιση με τον χρόνο συντήρησης. Στην συνέχεια

πραγματοποιούμε εκ νέου μια PLS. Ο αλγόριθμος μας συνεχίζει να απορρίπτει τους συντελεστές παλινδρόμησης έως ότου επιτευχθεί η ελάχιστη τιμή RMSE. Το αποτέλεσμα για την βελτιωμένη PLS φαίνεται στο διάγραμμα 5.3.8.2.



Γράφημα 5.4.8.2.

Γραφική παράσταση των προβλεπόμενων τιμών χρόνου συντήρησης από το βελτιωμένο μοντέλο PLSR, έναντι των παρατηρούμενων τιμών κατά τη συντήρηση φιλέτων κοτόπουλου σε θερμοκρασία 2°C χωρίς την επικάλυψη με εδώδιμη μεμβράνη χιτοζάνης. (— Line of Equity, — Line of Best Fit)

Η τιμή του συντελεστή προσδιορισμού του μοντέλου μας έφτασε το 0,9870 ενώ η τιμή του συντελεστή προσδιορισμού για την εσωτερική επικύρωση είχε την τιμή 0,842. Οι τιμές του μέσου τετραγωνικού σφάλματος για το μοντέλο παλινδρόμησης και για την εσωτερική επικύρωση είχαν τιμές 0,089 και 1,055 ημέρες αντίστοιχα. Όλες οι παράμετροι αξιολόγησης του μοντέλου μας βελτιώθηκαν. Όπως μπορούμε να δούμε από το γράφημα 5.4.8.2. για μετρούμενες τιμές χρόνου συντήρησης από μηδέν έως 2 ημέρες, το μοντέλο μας προβλέπει τιμές από μηδέν έως 2,3 ημέρες. Αντίστοιχα για μετρούμενες τιμές από 4 έως 8 ημέρες το μοντέλο μας προβλέπει τιμές από 4 έως 8,4 ημέρες. Οι προβλέψεις του μοντέλου μας βρίσκονται σε συμφωνία με τα πειραματικά δεδομένα.

Πίνακας 1. Αποτελέσματα των παραμέτρων αξιολόγησης των μοντέλων παλινδρόμησης για την πρόβλεψη της OMX σε συνάρτηση με πολυφασματικά δεδομένα ως ανεξάρτητες μεταβλητές.

Μοντέλα Πρόβλεψης OMX	R ² (CV)	RMSE(CV) log CFU/g	R ² (Test)	RMSE(Test) log CFU/g
5.2.1. Ε-ΦΔ-OMX	0.301	1.480	0.053	1.723
5.2.2. Ε-ΦΔ-OMX (B)	0.301	1.480	0.080	1.673
5.3.1. ΚΜ-ΦΔ-OMX	0.914	0.564	0.648	1.138
5.3.2. ΚΜ-ΦΔ-OMX (B)	0.918	0.550	0.641	1.065
5.4.1. ΚΧ-ΦΔ-OMX	0.986	0.207	0.800	0.796
5.4.2. ΚΧ-ΦΔ-OMX (B)	0.990	0.557	0.896	0.574

Ε: ελιές, **ΦΔ:** Φασματικά δεδομένα, **ΟΜΧ:** Ολική μικροβιακή χλωρίδα, **Ψ:** Πληθυσμό ψευδομονάδων, **ΚΜ:** Κοτόπουλο με επικάλυψη εδώδιμης μεμβράνης, **ΚΧ:** Κοτόπουλο χωρίς επικάλυψη εδώδιμης μεμβράνης, **CV:** Cross Validation

Πίνακας 2. Αποτελέσματα των παραμέτρων αξιολόγησης των μοντέλων παλινδρόμησης για την πρόβλεψη του πληθυσμού των ψευδομονάδων σε συνάρτηση με πολυφασματικά δεδομένα ως ανεξάρτητες μεταβλητές

Μοντέλα Πρόβλεψης Ψευδομονάδων	R ² (CV)	RMSE (CV) log CFU/g	R ² (Test)	RMSE (Test) log CFU/g
5.3.3. ΚΜ-ΦΔ-Ψ	0.932	0.487	0.539	1.075
5.3.4. ΚΜ-ΦΔ-Ψ (B)	0.943	0.446	0.619	1.273
5.4.3. ΚΧ-ΦΔ-Ψ	0.975	0.300	0.631	1.163
5.4.4. ΚΧ-ΦΔ-Ψ (B)	0.971	0.326	0.792	0.874

Ε: ελιές, **ΦΔ:** Φασματικά δεδομένα, **ΟΜΧ:** Ολική μικροβιακή χλωρίδα, **Ψ:** Πληθυσμός ψευδομονάδων, **ΚΜ:** Κοτόπουλο με επικάλυψη εδώδιμης μεμβράνης, **ΚΧ:** Κοτόπουλο χωρίς επικάλυψη εδώδιμης μεμβράνης, **CV:** Cross Validation

Πίνακας 3. Αποτελέσματα των παραμέτρων αξιολόγησης των μοντέλων παλινδρόμησης για την πρόβλεψη του χρόνου συντήρησης σε συνάρτηση με πολυφασματικά δεδομένα και τους πληθυσμούς της OMX και των ψευδομονάδων ως ανεξάρτητες μεταβλητές.

Μοντέλα Πρόβλεψης Χρόνου Συντήρησης	R ² (CV)	RMSE (CV) ημέρες	R ² (Test)	RMSE (Test) ημέρες
	5.2.3. Ε-ΦΔ-ΧΡ	0.854	15.1	0.660
5.2.4. Ε-ΦΔ -ΧΡ (B)	0.887	13.3	0.789	18.1
5.3.5. ΚΜ-ΦΔ-ΟΜΧ-ΧΡ	0.958	0.7	0.469	2.5
5.3.6. ΚΜ-ΦΔ-ΟΜΧ-ΧΡ (B)	0.921	0.9	0.557	2.2
5.3.5. ΚΜ-ΦΔ-Ψ-ΧΡ	0.941	0.8	-0.289	3.9
5.3.8 ΚΜ-ΦΔ-Ψ-ΧΡ (B)	0.909	1.0	0.389	2.6
5.4.5. ΚΧ-ΦΔ-ΟΜΧ-ΧΡ	0.932	0.4	0.815	0.823
5.4.6. ΚΧ-ΦΔ-ΟΜΧ-ΧΡ (B)	0.983	0.3	0.897	0.829
5.4.7 ΚΧ-ΦΔ-Ψ-ΧΡ	0.986	0.3	0.818	1.1
5.4.8 ΚΧ-ΦΔ-Ψ-ΧΡ (B)	0.987	0.2	0.842	1.0

Ε: ελιές, **ΦΔ:** Φασματικά δεδομένα, **ΟΜΧ:** Ολική μικροβιακή χλωρίδα, **Ψ:** Πληθυσμός ψευδομονάδων, **ΚΜ:** Κοτόπουλο με επικάλυψη εδώδιμης μεμβράνης, **ΚΧ:** Κοτόπουλο χωρίς επικάλυψη εδώδιμης μεμβράνης, **ΧΡ:** Χρόνος συντήρησης, **CV:** Cross Validation

Συζήτηση και συμπεράσματα

Η εφαρμογή των νευρωνικών δικτύων αποτελεί μια υποσχόμενη εφαρμογή της μηχανικής μάθησης, για την ανάλυση μεγάλου όγκου δεδομένων που προέρχονται από ταχείες, μη επεμβατικές και μη καταστρεπτικές μεθόδους ανάλυσης των τροφίμων. Μέχρι σήμερα έχουν αναφερθεί πολλές εφαρμογές των νευρωνικών δικτύων στη βιομηχανία τροφίμων. Χαρακτηριστικά παραδείγματα αποτελούν οι μελέτες για την ανίχνευση των ελαττωμάτων σε φρούτα, με τη χρήση υπολογιστικής όρασης, σε συνδυασμό με συνελκτικό νευρωνικό δίκτυο (Nithya, et al., 2022). Το συγκεκριμένο μοντέλο κατάφερε να κατηγοριοποιήσει επιτυχώς τα ελαττωματικά φρούτα με ακρίβεια που ανήλθε σε 98,5%.

Σε προηγούμενη μελέτη (Su et al., 2018), αναπτύχθηκε μοντέλο υπολογιστικής όρασης το οποίο χρησιμοποιήθηκε στην ταχεία αξιολόγηση της ποιότητας πατάτας, με ακρίβεια που υπολογίστηκε σε 90%. Οι εφαρμογές των νευρωνικών δικτύων δεν περιορίζονται μόνο σε συνδυασμό με την υπολογιστική όραση, αλλά χρησιμοποιούνται επίσης στην ανάλυση φασματοσκοπικών δεδομένων, όπως για παράδειγμα στη χρήση του φάσματος εγγύς υπερύθρου για την εκτίμηση του εσωτερικού τραυματισμού μύρτιλων (Fan et al., 2017), καθώς επίσης και στην ταυτοποίηση ελαττωματικών σκευών τροφίμων από διαφορετικούς επιμολυντές, με ακρίβεια μεγαλύτερη από 94% (Medus et al., 2021).

Η εφαρμογή των συνελκτικών νευρωνικών δικτύων για την αναγνώριση εικόνας που εφαρμόστηκε στη συγκεκριμένη μελέτη, δεν είχε την επιθυμητή ακρίβεια και αποτελεσματικότητα, τόσο στην σωστή κατηγοριοποίηση των δειγμάτων της επιτραπέζιας ελιάς, όσο και στη δημιουργία ενός ικανοποιητικού προβλεπτικού μοντέλου που θα μπορέσει να γενικεύσει και να εφαρμοστεί σε καινούργια δεδομένα. Ο λόγος που παρατηρείται αυτό σχετίζεται αφενός με τα δεδομένων εκπαίδευσης και αφετέρου με τη φύση του δείγματός μας. Συγκεκριμένα, στην πρώτη περίπτωση το πλήθος των δεδομένων για την εκπαίδευση του μοντέλου ήταν μικρό, δεδομένου ότι για την εκπαίδευση μοντέλων βαθιάς εκμάθησης, τα δεδομένα εκπαίδευσης πρέπει να είναι της τάξης των εκατοντάδων ή χιλιάδων δειγμάτων. Στην περίπτωσή μας όμως είχαμε συνολικά 89 εικόνες. Επιπλέον, η προσπάθεια εμπλουτισμού των δεδομένων μέσω των τυχαίων μετασχηματισμών, δεν κατάφερε να αυξήσει σημαντικά το πλήθος των δεδομένων εκπαίδευσης. Στη δεύτερη περίπτωση, αναφορικά με τη φύση του δείγματος, οι εικόνες προέρχονταν από επιτραπέζιες μαύρες ελιές και το νευρωνικό δίκτυο προσπαθούσε να εντοπίσει αλλοιώσεις στην πάροδο του χρόνου, οι οποίες θα συνοδεύονταν με αλλαγές που θα ήταν αντιληπτές στην επιφάνεια των καρπών (π.χ. εμφάνιση κηλίδων, μεταχρωματισμοί, κλπ). Οι ελιές όμως είναι ένα προϊόν που ελάχιστα αλλοιώνεται με την πάροδο του χρόνου, ιδιαίτερα στο περιορισμένο χρονικό διάστημα διεξαγωγής των μετρήσεων. Επιπρόσθετα, οι φυσικές μαύρες ελιές χαρακτηρίζονται ως μελανό σώμα, με αποτέλεσμα οποιαδήποτε αλλαγή συμβαίνει στην επιφάνεια του καρπού είναι πολύ δύσκολο να ανιχνευθεί οπτικά και συνεπώς να καταγραφεί μέσω της υπολογιστικής όρασης, ιδιαίτερα στην περιοχή του ορατού φάσματος, όπου η επιφάνεια της ελιάς απορροφά το σύνολο σχεδόν της προσπίπτουσας ακτινοβολίας. Προσπαθώντας να βελτιώσουμε την προβλεπτική ικανότητα του μοντέλου, τροφοδοτήσαμε το νευρωνικό δίκτυο με μια επιπλέον πηγή δεδομένων, από την οποία το νευρωνικό δίκτυο

θα μπορούσε να εξάγει επιπρόσθετες πληροφορίες που θα συνέβαλαν στην επιτυχή κατηγοριοποίηση των δειγμάτων. Ούτε όμως η δημιουργία ενός νευρωνικού δικτύου με μεικτά δεδομένα εισόδου ήταν επιτυχής στη συσχέτιση των φασματοσκοπικών δεδομένων με τις πολυφασματικές εικόνες.

Αντιθέτως, σε ότι αφορά στα μοντέλα PLSR που αναπτύχθηκαν με βάση τα φασματοσκοπικά δεδομένα και τις μετρήσεις του μικροβιακού πληθυσμού φιλέτων κοτόπουλου κατά τη αερόβια συντήρηση σε θερμοκρασία ψύξης (4°C) με/χωρίς επικάλυψη με εδώδιμη μεμβράνη από χιτοζάνη, η επίδοσή τους ήταν ικανοποιητική, τόσο κατά τη διαδικασία εκπαίδευσης του μοντέλου, όσο και κατά την εξωτερική επικύρωση. Συγκεκριμένα, το μοντέλο με την πιο ικανοποιητική επίδοση σχετικά με την εκτίμηση του πληθυσμού της OMX ήταν το μοντέλο που περιγράφεται στη παράγραφο 5.5.1, για το οποίο ο συντελεστής προσδιορισμού (R^2) κατά την επικύρωση ήταν 0,800, ενώ βελτιώθηκε στην τιμή 0,896 μετά την εφαρμογή του αλγορίθμου επιλογής μεταβλητών. Οι αντίστοιχες τιμές της τετραγωνικής ρίζας του μέσου τετραγωνικού σφάλματος (RMSE) ήταν 0,796 log CFU/g και 0,574 log CFU/g, αντίστοιχα. Τα αποτελέσματα αυτά βρίσκονται σε συμφωνία με αντίστοιχες μελέτες στις οποίες αναπτύχθηκαν και επικυρώθηκαν μοντέλα PLSR για την εκτίμηση της μικροβιολογικής ποιότητας χοιρινού κιμά, με τη χρήση πολυφασματικών δεδομένων. Τα αποτελέσματα της εσωτερικής επικύρωσης του μοντέλου έδειξαν ότι τιμές R^2 και RMSE ήταν 0,794 1,025 log CFU/g, αντίστοιχα (Fengou, et al., 2019).

Το μοντέλο με την πιο ικανοποιητική επίδοση σχετικά με την εκτίμηση του πληθυσμού των ψευδομονάδων ήταν το μοντέλο που περιγράφεται στην παράγραφο 5.5.3. και το αμέσως βελτιωμένο μέσω της μεθόδου επιλογής μεταβλητών που αναφέρεται στην παράγραφο 5.5.4. Οι τιμές των συντελεστών προσδιορισμού (R^2) για την επικύρωση των συγκεκριμένων μοντέλων ήταν 0,631 και 0,792 αντίστοιχα, ενώ οι τιμές RMSE ήταν 1,163 log CFU/g και 0,874 log CFU/g, αντίστοιχα. Αντίστοιχα αποτελέσματα έχουν δημοσιευθεί σε άλλες μελέτες που επικεντρώθηκαν στην εκτίμηση του πληθυσμού των ψευδομονάδων με τη χρήση πολυφασματικών δεδομένων. Σε πρόσφατη μελέτη (Spyrelli et al., 2021) σχετικά με την εκτίμηση της μικροβιολογικής ποιότητας σε φιλέτο κοτόπουλου με τη χρήση αισθητήρων και πολυμεταβλητής στατιστικής ανάλυσης, ο συντελεστής προσδιορισμού (R^2) ήταν 0,830 και η τιμή RMSE 0,886. (Spyrelli et al., 2021) Η επίδοση των μοντέλων που αναπτύχθηκαν στη συγκεκριμένη μελέτη, θα μπορούσε να βελτιωθεί περαιτέρω, εάν υπήρχε πρόσβαση στα πρωτότυπα φασματικά δεδομένα που προέκυψαν από τη λήψη των εικόνων με τη συσκευή πολυφασματικής απεικόνισης, καθώς στην περίπτωση μας είχαμε πρόσβαση μόνο στους μέσους όρους ανάκλασης για κάθε pixel στα 18 μήκη κύματος. Αυτό είχε ως αποτέλεσμα την απώλεια μεγάλου μέρους χωρικής και οπτικής πληροφορίας κατά τη διάρκεια της επεξεργασίας των εικόνων.

Τα αποτελέσματα των μοντέλων PLSR φαίνονται αρκετά ενθαρρυντικά σε ότι αφορά στα φιλέτα κοτόπουλου και ιδιαίτερα στα φιλέτα που δεν είχαν υποστεί επικάλυψη με εδώδιμη μεμβράνη και ήταν αποθηκευμένα σε αερόβιες συνθήκες. Αναφορικά με την επιτραπέζια ελιά, θα απαιτηθεί η λήψη μεγαλύτερου αριθμού εικόνων, αλλά και πρόσβαση στα επιμέρους εικονοστοιχεία της εικόνας, προκειμένου να αποτυπωθούν με μεγαλύτερη λεπτομέρεια οι μεταβολές που συμβαίνουν στην επιφάνεια της ελιάς κατά τη διάρκεια της συντήρησης.

Βιβλιογραφία

- Alzubaidi, L., Zhang, J., Humaidi, A.J., Al-Dujaili, A., Duan, Y., Al-Shamma, O., Santamaría, J., Fadhel, M.A., Al-Amidie, M., Farhan, L. (2021) Review of deep learning: concepts, CNN architectures, challenges, applications, future directions. *Journal of Big Data* 8(1), 53.
- Bezdan, T., Bacanin, N. (2019) Convolutional neural network layers and architectures. In M. Segedinac, Z. Budimac, & M. Ivanović (Eds.), *Sinteza: International Scientific Conference on Information Technology and Data Related Research*, (Belgrade), Serbia, (pp. 1-6).
- Blatt, D., Patel, C., Talsania, H., Patel, J., Vaghela, R., Pandya, S., Modi, K., Ghayvat, H. (2021) CNN variants for computer vision: history, application, architecture, application, challenges and future scope. *Electronics* 10(20), 2470.
- Boureau, Y.-L., Ponce, J., Lecun, Y. (2010) A theoretical analysis of feature pooling in visual recognition. In J. Fürnkranz & T. Joachims (Eds.), *Proceedings of the 27th International Conference on Machine Learning*. (Haifa), Israel (pp. 111-118).
- Brownlee, J. (2020) "How to choose loss functions when training deep learning neural networks": *Machine Learning Mastery*. <https://machinelearningmastery.com/how-to-choose-loss-functions-when-training-deep-learning-neural-networks/>
- Chai, J., Zeng, H., Anmng, L., Ngai, E. (2021) Deep learning in computer vision: A critical review of emerging techniques and application scenarios. *Machine Learning with Applications*. 6(1):100134.
- Cheng, J.-H., Sun, D.-W. (2017) Partial least squares regression (PLSR) applied to NIR and HSI spectral data modeling to predict chemical properties of fish muscle. *Food Engineering Reviews*. 9(4), 244-263.
- Cintra, R., Duffner, S., Garcia, C., Leite. (2018) A. Low-complexity approximate convolutional neural networks. *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems*. 29(12), 5981-5992.
- Cozzolino, D., Murray, I., Chree, A., Scaife, J. (2005) Multivariate determination of free fatty acids and moisture in fish oils by partial least-squares regression and near-infrared spectroscopy. *LWT - Food Science and Technology*, 38(8), 857-864
- Demirkaya A., Chen J., Oymak S. (2020) Exploring the Role of Loss Functions in Multiclass Classification, 54th Annual Conference on Information Sciences and Systems (CISS), (Princeton), NJ, USA, pp. 1-5.
- Dhillon, A., & Verma, G. K. (2019). Convolutional neural network: A review of models, methodologies, and applications to object detection. *Progress in Artificial Intelligence*, 9(2), 85-112
- Du, K.L.; Swamy, M.N. (2013). *Neural networks and statistical learning*; Springer Science & Business Media, DOI:10.1007/978-1-4471-5571-3.
- Fan, S., Li, C., Huang, W., Chen, L. (2017) Detection of blueberry internal bruising over time using NIR hyperspectral reflectance imaging with optimum wavelengths. *Postharvest Biology and Technology*, (134), pp.55-66.
- Ma, F., J. Y., Xie, T., Liu, C., Chen, W., Chen, C., Zheng, L. (2014) Multispectral imaging for rapid and non-destructive determination of aerobic plate count (APC) in cooked pork sausages. *Food Research International*, (62), pp.902-908.

- Fengou, L. C., Spyrelli, E., Lianou, A., Tsakanikas, P., Panagou, E. Z., Nychas, G. E. (2019) Estimation of Minced Pork Microbiological Spoilage through Fourier Transform Infrared and Visible Spectroscopy and Multispectral Vision Technology. *Foods*, 8(7), 238.
- Girshick, R., Donahue, J., Darrell, T., Malik, J. (2014) Rich Feature Hierarchies for Accurate Object Detection and Semantic Segmentation. *Proceedings of the IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*, (Columbus), OH, USA pp. 580-587
- Han, J., Li, T., He, Y., Gao, Q. (2022) Using Machine Learning Approaches for Food Quality Detection. *Mathematical Problems in Engineering*, (2022), pp.6852022-6852031.
- Huang, G., Liu, Z., Van Der Maaten, L., Weinberger, K. Q. (2017) Densely connected convolutional networks. *Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition*, (Honolulu), HI, USA, pp. 4700-4708
- Indrakumari, Poongodi, Singh. (2021) *Introduction to Deep Learning*. EAI/Springer Innov. Commun., pp.1-22.
- Kazou, M., Tzamourani, A., Panagou, E. Z., Tsakalidou, E. (2020) Unraveling the Microbiota of Natural Black cv. Kalamata Fermented Olives through 16S and ITS Metataxonomic Analysis. *Microorganisms*, 8(5), 672.
- Khan, A., Sohail, A., Zahoor, U., Qureshi, A. (2020) A survey of the recent architectures of deep convolutional neural networks. *Artificial Intelligence Review*, 53(8), 5455–5516.
- Koushik, J. (2016). *Understanding Convolutional Neural Networks*. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1605.09081>.
- Krizhevsky, A., Sutskever, I., Hinton, G. E. (2012) ImageNet Classification with Deep Convolutional Neural Networks. *Advances in Neural Information Processing Systems*, (Vancouver), Canada, (pp. 1097-1105).
- Kumar, T. B., Prashar, D., Vaidya, G., Kumar, V., Kumar, S. D., Sammy, F. (2022) A Novel Model to Detect and Classify Fresh and Damaged Fruits to Reduce Food Waste Using a Deep Learning Technique. *Journal of Food Quality*, (2022), pp.4661108-4661116.
- Liu, Q., Dong, P., Fengou, L. C., Nychas, G. J., Fowler, S. M., Mao, Y., Luo, X., & Zhang, Y. (2023) Preliminary investigation into the prediction of indicators of beef spoilage using Raman and Fourier transform infrared spectroscopy. *Meat science*, (200), 109168.
- Mahesh, S., Jayas, D., J. Paliwal a, N. W. (2015) Hyperspectral imaging to classify and monitor quality of agricultural materials. *Journal of Stored Products Research* (61), pp.17-26.
- Medus, L. D., Saban, M., Francés-Villora, J. V., Bataller-Mompeán, M., Rosado-Muñoz, A. (2021). Hyperspectral image classification using CNN: Application to industrial food packaging. *Food Control*, (125), 107962.
- Megalingam, R., Sree, G., Reddy, G., Krishna, I., Suriya, L. (2019) Food Spoilage Detection Using Convolutional Neural Networks and K Means Clustering. *3rd International Conference on Recent Developments in Control, Automation & Power Engineering* (Dubai), UAE, 488-493.
- Mishra, R.K., Reddy, G.Y., Pathak, H. (2021) *The Understanding of Deep Learning: A Comprehensive Review*. *Mathematical Problems in Engineering*, (2021), pp.1-15.
- Nithya, R., Santhi, B., Manikandan, R., Rahimi, M., Gandomi, A. H. (2022) Computer Vision System for Mango Fruit Defect Detection Using Deep Convolutional Neural Network. *Foods*, 11(21), 3483.
- Nivesh. (2020) "Forward and Back-Propagation in ANN-Neural Networks using Tensorflow 2.", *Medium*, <https://medium.com/@nivesh48/forward-and-back-propagation-in-an-ann-neural-networks-using-tensorflow-2-0-part-2-eb9894d9a0b1>

- Prakash, K.B.; Kannan, R.; Alexander, S.A.; Kanagachidambaresan, G.R. *Advanced Deep Learning for Engineers and Scientists: A Practical Approach*, EAI/Springer Innov. Commun.
- Qin, J., Chao, K., Kim, M. S., Lu, R., Burks, T. F. (2013) Hyperspectral and multispectral imaging for evaluating food safety and quality. *Journal of Food Engineering*, 2,(118), pp. 157-171.
- Rojas, R. (1996). *Neural Networks: A Systematic Introduction* . EAI/Springer Innov. Commun.
- Rosebrock, A. (2021) "Convolutional Neural Networks (CNNs) and Layer Types." *PyimageSearch*, <https://pyimageSearch.com/2021/05/14/convolutional-neural-networks-cnns-and-layer-types/>
- Sarker, I.H. (2021, March 22). *Machine Learning: Algorithms, Real-World Applications, and Research Directions*. *SN COMPUT. SCI.* (2), 160.
- Sonwani, E., Bansal, U., Alroobaea, R., Baqasah, A. M., Hedabou, M. (2022) An Artificial Intelligence Approach Toward Food Spoilage Detection and Analysis. *Frontiers in public health*, (9), 816226.
- Spyrelli, E.D., Doulgeraki, A.I., Argyri, A.A., Tassou, C.C., Panagou, E.Z., Nychas, G.E. (2020) Implementation of Multispectral Imaging (MSI) for Microbiological Quality Assessment of Poultry Products. *Microorganisms*, (8), 552.
- Spyrelli, E. D., Papachristou, C. K., Nychas, G. E., Panagou, E. Z. (2021) Microbiological Quality Assessment of Chicken Thigh Fillets Using Spectroscopic Sensors and Multivariate Data Analysis. *Foods*, 10(11), 2723.
- Su, Q., Kondo, N., al Riza, D.F., Habaragamuwa, H. (2020) Potato Quality Grading Based on Depth Imaging and Convolutional Neural Network. *Journal of Food Quality*, (2020),pp.1-9.
- Swapna, M.; Sharma, Y.K.; Prasad, B. (2020) CNN Architectures: Alex Net, Le Net, VGG, Google Net, Res Net. *International Journal of Recent Technology and Engineering*, 2020,(8), pp.953–959
- Tsakanikas, P., Fengou, L.-C., Manthou, E., Lianou, A., Panagou, E., Nychas, G.-J. (2018) A unified spectra analysis workflow for the assessment of microbial contamination of ready-to-eat green salads: Comparative study and application of non-invasive sensors. *Computers and Electronics in Agriculture*, (155), pp.212-219,
- Xiao, Y., Tian, Z., Yu, J., Zhang, Y., Liu, S., Du, S., Lan, X. (2020). A review of object detection based on deep learning. *Multimedia Tools and Applications*, (79), pp.3729 - 23791.
- Zhang, J., Huang, J., Chen, X., & Zhang, D. (2019) How to fully exploit the abilities of aerial image detectors. *Proceedings of the IEEE International Conference on Computer Vision Workshops*, (Seoul), South Korea, pp.1-8
- Zhang, Z., Cui, P., & Zhu, W. (2018). *Deep Learning on Graphs: A Survey*. *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, (34), pp.249-270.
- Βερούκιος Σ., Κωτσιαντής, Σ., Σταυρόπουλος Η., Τζαγκαράκης Μ., "Η Επιστήμη των Δεδομένων: Βασικές Αρχές, Θεωρία & Εφαρμογές με τη Γλώσσα R", Εκδόσεις Νέων Τεχνολογιών.

Παράρτημα

PLSR παλινδρόμηση σε περιβάλλον Python

Η γλώσσα προγραμματισμού Python διαθέτει ένα σύνολο πακέτων τα οποία ο χρήστης Έχει την επιλογή να εγκαταστήσει. Τα πακέτα αυτά περιέχουν μεγάλα σύνολα προ εγκατεστημένων συναρτήσεων. Για την παλινδρόμηση με την μέθοδο των ελαχίστων τετραγώνων, χρησιμοποιήθηκε το πακέτο στατιστικής ανάλυσης δεδομένων sklearn.

Παρακάτω δίνεται ενδεικτικά ο κώδικας που καλεί την συνάρτηση για την παλινδρόμηση, τα ορίσματα της και οι διαφορετικές παράμετροι που χρησιμοποιεί:

```
class sklearn.cross_decomposition.PLSRegression(n_components=2, *, scale=True, max_iter=500, tol=1e-06, copy=True)
```

Parameters: n_componentsint, default=2

Number of components to keep. Should be in [1, min(n_samples, n_features, n_targets)].

scalebool, default=True

Whether to scale X and Y.

max_iterint, default=500

The maximum number of iterations of the power method when algorithm='nipals'. Ignored otherwise.

tolfloat, default=1e-06

The tolerance used as convergence criteria in the power method: the algorithm stops whenever the squared norm of $u_i - u_{i-1}$ is less than tol, where u corresponds to the left singular vector.

copybool, default=True

Whether to copy X and Y in fit before applying centering, and potentially scaling. If False, these operations will be done inplace, modifying both arrays.

Attributes:

x_weights_ndarray of shape (n_features, n_components)

The left singular vectors of the cross-covariance matrices of each iteration.

y_weights_ndarray of shape (n_targets, n_components)

The right singular vectors of the cross-covariance matrices of each iteration.

x_loadings_ndarray of shape (n_features, n_components)

The loadings of X.

y_loadings_ndarray of shape (n_targets, n_components)

The loadings of Y.

x_scores_ndarray of shape (n_samples, n_components)

The transformed training samples.

y_scores_ndarray of shape (n_samples, n_components)

The transformed training targets.

`x_rotations_`ndarray of shape (n_features, n_components)
The projection matrix used to transform X.

`y_rotations_`ndarray of shape (n_features, n_components)
The projection matrix used to transform Y.

`coef_`ndarray of shape (n_features, n_targets)
The coefficients of the linear model.

`intercept_`ndarray of shape (n_targets,)
The intercepts of the linear model such that Y is approximated as $Y = X @ \text{coef}_ + \text{intercept}_$.

New in version 1.1.

`n_iter_list` of shape (n_components,)
Number of iterations of the power method, for each component.

`n_features_in_`int
Number of features seen during fit.

`feature_names_in_`ndarray of shape (n_features_in_,)
Names of feates seen during fit. Defined only when X has feature names that are all strings.