Avaliação da rede SOM

Prof. Dr. Marcos G. Quiles

November 2022

Este documento introduz algumas medidas e abordagens comumente utilizadas para avaliar o treinamento e o resultado da rede SOM (Self-Organizing Maps).

Por se tratar de uma técnica não-supervisionada, não podemos avaliar o resultado da rede SOM utilizando medidas como a acurácia, como nos casos supervisionados. Para isso, outras medidas de qualidade e outras abordagens podem ser utilizadas. As medidas apresentadas abaixo possuem como finalidade avaliar o mapa gerado pelo treinamento, bem como a formação de agrupamentos e distribuição dos exemplos no grid.

Cabe destacar que a rede SOM, após um pós-processamento de rotulação dos neurônios, pode ser usada para classificação de dados. Neste caso, a acurácia de classificação pode ser calculada utilizando uma abordagem tradicional do paradigma supervisionado. Não trataremos esse caso nesse documento.

1 Erro Topográfico

Uma característica fundamental da rede SOM está na formação do mapa topográfico, no qual exemplos similares são mapeados em neurônios próximos no grid. Para avaliar a formação do mapa topográfico podemos fazer uso da medida denominada Erro Topográfico (ET). Sejam $\mu(x)$ e $\mu'(x)$ o primeiro e o segundo neurônio vencedor para o padrão x, respectivamente. O ET é definido pela seguinte equação:

$$ET(m) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} t(x)$$
 (1)

no qual m representa o mapa treinado, n o número de exemplos no conjunto de treinamento e t(x) é definido por:

$$t(x) = \begin{cases} 0 \text{ se } \mu(x) \text{ e } \mu'(x) \tilde{\text{sao}} \text{ vizinhos no grid} \\ 1 \text{ caso contrário} \end{cases}$$
 (2)

Essa medida avalia se neurônios próximos no grid representam padrões similares.

2 Erro de Quantização

Uma outra medida comumente utilizada para avaliar a rede SOM é o Erro de Quantização (EQ). Esta medida avalia a distância média entre os exemplos do conjunto de treinamento e seus respectivos neurônios representantes na rede. A EQ é definida pela seguinte equação:

$$EQ(m) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \|\phi(x) - x_i\|$$
 (3)

no qual $\phi(x)$ representa o conjunto de pesos do neurônio vencedor para o padrão x e $\| \|$ consiste na distância Euclidiana.

Quanto menor o erro de quantização, melhor ajustado está o mapa, porém, no caso extremo, no qual cada neurônio representa seu próprio exemplo, o erro é zero. Entretanto, isso não indica que o mapa está bem formado. A avaliação do mapa SOM depende de diversos fatores, bem como a avaliação do especialista.

No geral, buscamos por um mapa com baixo erro de quantização e baixo erro topográfico.

3 U-Matrix

A U-Matrix pode ser utilizada para avaliar a formação de agrupamentos no mapa. Cada neurônio representa um micro-cluster (ou protótipo) de uma dada região do espaço de atributos. Porém, considerando que neurônios próximos podem ser semelhantes, macro-clusters podem ser formados a partir da composição de neurônios. Nesse caso, a principal observação é que neurônios com pesos (características) similares devem estar agrupados em um mesmo cluster. A U-Matrix, definida pela equação abaixo, associa um valor a cada neurônio de acordo com a similaridade de sua vizinhança.

$$U(i) = \sum_{j \in \Delta_i} \|w_i - w_j\| \tag{4}$$

em que Δ_i representa os vizinhos do neurônio i no grid. A equação ilustra o cálculo com a distância Euclidiana, entretanto, outras medidas de distância podem ser consideradas.

Neurônios i que apresentam baixo valor de U(i), estão posicionados em regiões homogêneas do grid. Por outro lado, valores altos de U(i) indicam que o neurônio está em uma região heterogênea (grande diferença entre os vizinhos e pode fazer parte de uma fronteira entre agrupamentos distintos. Logo, avaliando os neurônios com alto valor de U(i) é possível separar os neurônios do grid em macro-clusters.

A Figura 1 apresenta a U-Matrix para o conjunto de dados Iris com um grid de 10×10 .

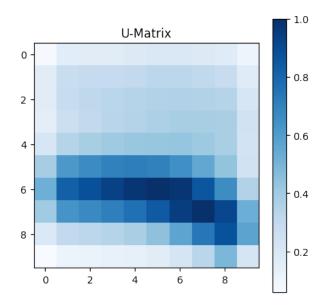


Figure 1: Exemplo de U-Matrix para uma rede SOM com grid 10×10

4 Hit Map

A distribuição dos exemplos no grid bem como a representatividade dos neurônios pode ser visualizada a partir do Hit map. O Hit map consiste numa matriz na qual cada célula representa um neurônio e o seu valor indica quantos exemplos possuem aquele neurônio como vencedor.

As Figuras 2(a) e 2(b) apresentam, respectivamente, exemplos de Hit Maps para o conjunto de dados Iris utilizando redes com grid 10×10 e 20×20 .

5 Heat Map

Os Heat Maps se apresentam como uma importante ferramenta para se avaliar a distribuição dos atributos ao longo do mapa. Ao avaliar esse mapa, é possível encontrar correlações e tendências para cada dimensão do problema.

Basicamente, cada célula num Heat Mapa indica o valor do peso de uma dada dimensão associado àquela célula.

Os Heat Maps para os quatro atributos do dataset Iris são apresentados na Figura 3.

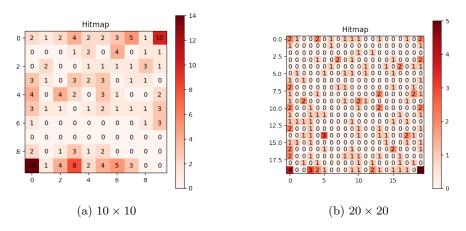


Figure 2: Exemplos de Hit Maps

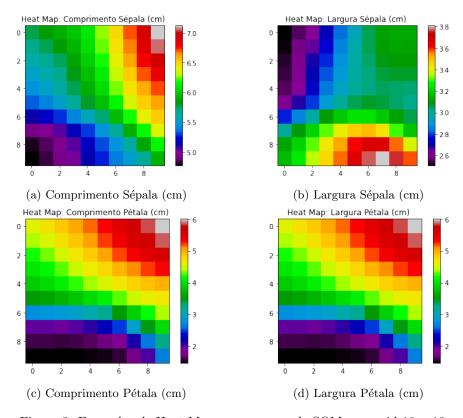


Figure 3: Exemplos de Heat Maps para uma rede SOM com grid 10×10