Rede Neural de Kohonen e Aprendizado Não-Supervisionado

1	Organiz	zação e Ordem	2
2	Organização e Ordem		3
		ão pará treinamento não-supervisionado: clusterização	
	3.1	Modelo simples de classificação para dados rotulados	8
	3.2	Modelo composto de classificação para dados rotulados	9
	3.3	Modelo composto de classificação para dados não-rotulados	
	3.4	Comparação com o k-means	. 12
4	Uma vis	são mais abrangente para Aprendizado de Máquina	. 13
5 Treinamento não-supervisionado		nento não-supervisionado	. 16
6 Mapas Auto-Organizáveis de Kohonen		Auto-Organizáveis de Kohonen	. 18
	6.1	Arranjo unidimensional	. 19
	6.2	Arranjo bidimensional	. 23
	6.3	Fase de competição	. 27
	6.4	Fase de aprendizado não-supervisionado	. 28
	6.5	Algoritmo de ajuste dos pesos	. 30
	6.6	Ajuste de pesos com restrição de vizinhança	. 31
	6.7	Discriminação dos agrupamentos	. 32
	6.8	Aplicação	. 33
	6.9	Agrupamento de dados (Clusterização)	
	6.10	Ferramentas de visualização e discriminação	
	6.11	Comparação com PCA e Análise por Componentes Curvos (CCA)	
	6.12	Ordenamento de pontos em espaços multidimensionais	
	6.13	Roteamento de veículos (múltiplos mapas auto-organizáveis)	. 54
	6.14	Mapas auto-organizáveis construtivos	
	6.15	Questões a serem melhor investigadas	
	6.16	Extensões	
7 Referências		. 57	

Tópico 8 – Rede Neural de Kohonen e Aprendizado Não-Supervisionado

IA353 – Profs. Fernando J. Von Zuben & Romis R. F. Attux DCA/FEEC/Unicamp & DECOM/FEEC/Unicamp

1 Organização e Ordem

- um cristal tende a apresentar mais ordem que uma célula. No entanto, a célula tende a apresentar mais organização.
- um papel de parede que apresenta um padrão de repetição tende a apresentar mais ordem espacial que uma pintura. No entanto, a pintura tende a apresentar mais organização espacial.
- um som de alarme tende a apresentar mais ordem temporal que uma música. No entanto, a música tende a apresentar mais organização temporal.
- objetos estão dispostos no tempo e/ou no espaço de forma ordenada se eles seguem um regra específica de disposição temporal e/ou espacial.
- objetos estão dispostos no tempo e/ou no espaço de forma organizada se eles contribuem em conjunto para produzir alguma funcionalidade.
- Idéias podem estar logicamente ordenadas (para efeito de apresentação) ou logicamente organizadas (para efeito de argumentação).

1

2 Auto-Organização

- o estudo de sistemas auto-organizados é recente, embora a humanidade tenha sempre se ocupado com questões vinculadas à origem de sistemas organizados.
- as formas que podem ser observadas no mundo à nossa volta representam apenas uma pequena parcela de todas as formas possíveis. Logo, por que não existe mais variedade?
- para procurar respostas a questões como esta é que se estuda sistemas autoorganizados e teoria da complexidade.
- exemplos de sistemas naturais que apresentam organização: galáxias, planetas, componentes químicos, células, organismos, sociedades.
- existem campos de atuação científica que procuram explicar a auto-organização recorrendo a propriedades e leis aplicáveis às partes constituintes (componentes) de um sistema organizado específico.

Tópico 8 – Rede Neural de Kohonen e Aprendizado Não-Supervisionado

3

- no entanto, a auto-organização pode ser abordada de modo completamente distinto, recorrendo-se às propriedades e leis comuns a todos os sistemas organizados, independente de suas particularidades.
- neste caso, a atual disponibilidade de recursos computacionais é fundamental para viabilizar a investigação dos processos envolvidos, através de simulações que envolvem um grande número de etapas e uma grande variedade de parâmetros e condições iniciais.
- mesmo assim, o estudo está restrito a fenômenos (concretos ou abstratos) que são facilmente reprodutíveis, os quais certamente representam um subconjunto de todos os fenômenos possíveis.
- a reprodução em computador de fenômenos auto-organizados tem levado à geração de teorias que procuram descrever sistemas complexos e sua organização espontânea (sistemas parcialmente decomponíveis).

- um <u>sistema complexo</u> pode ser caracterizado como o resultado da autoorganização de componentes sob forte interação, produzindo estruturas sistêmicas cujas propriedades geralmente não estão presentes em nenhum de seus componentes, já que estas dependem de níveis mais elevados de organização.
- um <u>sistema</u>, por sua vez, pode ser definido como um agrupamento coerente de componentes que operam como um todo e que apresentam uma individualidade, ou seja, se distinguem de outras entidades por fronteiras reconhecíveis. Há muitas variedades de sistemas, as quais podem ser classificadas em 3 grandes grupos:
- 1. quando as interações de seus componentes são fixas. Ex: máquina.
- 2. quando as interações de seus componentes são irrestritas. Ex: gás.
- 3. quando existem interações fixas e variáveis de seus componentes. Ex: célula.
- os sistemas de maior interesse são aqueles pertencentes à classe 3, já que dependem da natureza e forma das interações de seus componentes ao longo de sua existência. Assim, o sistema vai apresentar um novo comportamento sempre

5

IA353 – Profs. Fernando J. Von Zuben & Romis R. F. Attux DCA/FEEC/Unicamp & DECOM/FEEC/Unicamp

que componentes forem adicionados, removidos ou rearranjados, ou então sempre que houver modificação nas interações.

- a essência da <u>auto-organização</u> está no surgimento de estrutura (formas restritas) e organização sem que estas sejam impostas de fora do sistema. Isto implica que este fenômeno é interno ao sistema, resulta da interação de seus componentes e, em essência, não depende da natureza física destes componentes.
- a organização pode se dar no espaço, no tempo, ou em ambos.
- o que se busca são regras gerais para o crescimento e evolução de estruturas sistêmicas. Com isso, espera-se poder prever a organização futura que irá resultar de alterações promovidas junto aos componentes de um dado sistema, além de poder estender estes resultados a outros sistemas semelhantes.
- em geral, os mecanismos estabelecidos pelos componentes de um dado sistema capaz de expressar auto-organização são: realimentação positiva, realimentação negativa e interação local.

- é importante buscar respostas (direta ou indiretamente) para as seguintes questões:
 - ➤ uma vez caracterizadas as regras de interação que irão definir o comportamento individual de cada componente de um sistema, ao longo do tempo, e que supostamente permitem desenvolver e manter um processo auto-organizado, ocorrerá efetivamente algum tipo de auto-organização do comportamento espaço-temporal?
 - > se a resposta à questão acima for afirmativa, qual será o padrão emergente, ou seja, o resultado final da auto-organização?
 - ➤ dado que existe, na natureza, a formação de padrões espaço-temporais não devidos a processos auto-organizados, como diferenciar de um processo autoorganizado?
 - ➤ qual é o nível de complexidade local que cada componente deve apresentar para permitir a emergência da complexidade global observada no sistema?
 - ➤ o quanto do comportamento observado no agregado é devido ao efeito da ação individual de cada componente e o quanto é devido à dinâmica do meio?

7

IA353 – Profs. Fernando J. Von Zuben & Romis R. F. Attux DCA/FEEC/Unicamp & DECOM/FEEC/Unicamp

3 Motivação para treinamento não-supervisionado: clusterização

- dados rotulados são aqueles que assumem valores em um mesmo espaço vetorial multidimensional e que vêm acompanhados da classe a que cada um pertence (rótulo), podendo haver múltiplas classes, com variâncias e número de dados distintos ou não para cada classe.
- dados não-rotulados são aqueles que assumem valores em um mesmo espaço vetorial multidimensional, e que não se conhece a priori a classe a que cada um pertence, embora cada um pertença a uma classe específica. O número de classes pode ser conhecido a priori ou não. A variância e o número de dados de cada classe pode diferir ou não.

3.1 Modelo simples de classificação para dados rotulados

- ➢ <u>hipótese</u>: as classes apresentam propriedades distintas (seus elementos pertencem a regiões distintas do espaço vetorial multidimensional);
- ➤ <u>modelagem</u>: um representante para cada classe;

- ➤ <u>objetivo</u>: minimizar o somatório das distâncias entre os dados e o respectivo representante da classe a que pertencem;
- ➤ aplicação: após finalizar o posicionamento de todos os representantes, definir o rótulo de cada novo dado não-rotulado como aquele associado ao representante que possuir a menor distância ao dado.
- trata-se, portanto, de um problema de otimização, que pode ser resolvido por intermédio de técnicas de treinamento supervisionado.
- no caso, basta dividir o presente problema em *C* problemas distintos, sendo *C* o número de classes.
- exemplos gráficos e análise topológica.
- limitações.

3.2 Modelo composto de classificação para dados rotulados

➤ <u>hipótese</u>: as classes apresentam propriedades distintas (seus elementos pertencem a regiões distintas do espaço vetorial multidimensional);

Tópico 8 – Rede Neural de Kohonen e Aprendizado Não-Supervisionado

9

- ➤ <u>modelagem</u>: múltiplos representantes para cada classe;
- ➤ <u>objetivo</u>: minimizar o somatório da distância entre cada dado e o representante mais próximo da classe a que pertence;
- ➤ aplicação: após finalizar o posicionamento de todos os representantes, definir o rótulo de cada novo dado não-rotulado como aquele associado ao representante que possuir a menor distância ao dado.
- trata-se também de um problema de otimização, mas neste caso técnicas de treinamento não-supervisionado devem ser empregadas, pois os representantes de cada classe devem se <u>auto-organizar</u> no espaço de acordo com a distribuição apresentada pelos dados da respectiva classe.
- como no caso anterior, pode-se dividir o presente problema em *C* problemas distintos.
- exemplos gráficos e análise topológica.

3.3 Modelo composto de classificação para dados não-rotulados

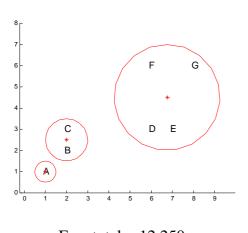
- ➢ <u>hipótese</u>: não se conhece o número de classes, mas sabe-se que elas apresentam propriedades distintas (seus elementos pertencem a regiões distintas do espaço vetorial multidimensional);
- ➤ modelagem: múltiplos representantes não-rotulados;
- ➤ <u>objetivo</u>: minimizar o somatório da distância entre cada dado e o representante não-rotulado mais próximo.
- ➤ <u>rotulagem</u>: após finalizar o posicionamento de todos os representantes (também por auto-organização), aplicar alguma técnica de discriminação que agrupe representantes de acordo com as posições relativas entre eles. A seguir, atribuir um rótulo diferente a cada grupo de representantes.
- ➤ <u>aplicação</u>: definir o rótulo de cada novo dado não-rotulado como aquele associado ao representante que possuir a menor distância ao dado.
- exemplos gráficos e análise topológica.

Tópico 8 – Rede Neural de Kohonen e Aprendizado Não-Supervisionado

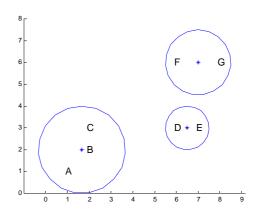
11

IA353 – Profs. Fernando J. Von Zuben & Romis R. F. Attux DCA/FEEC/Unicamp & DECOM/FEEC/Unicamp

3.4 Comparação com o k-means



Erro total = 12,250



Erro total = 5,167

- figuras extraídas de ZUCHINI (2003) e baseadas em JAIN et al. (1999)
- sensibilidade à condição inicial
- ausência de vizinhança topológica

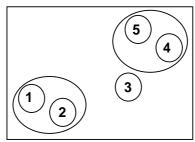
4 Uma visão mais abrangente para Aprendizado de Máquina

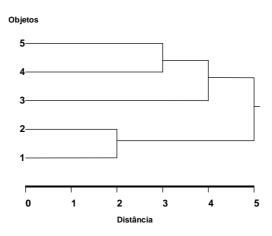
- aprendizado de máquina envolve as técnicas computacionais que visam ampliar a automatização e eficiência de processos de aquisição de conhecimento por um computador, a partir da exposição a eventos, manipulação de bases de dados ou qualquer outra forma de transmissão de informação ou processamento de dados.
- <u>aquisição de conhecimento</u>: geração de modelos do mundo, descoberta de regularidades e outras propriedades estatísticas presentes nos dados (associações espaciais e temporais), geração de leis de discriminação para efeito de classificação, realização de agrupamento de dados (previamente não-rotulados) em classes.
- métodos de agrupamento (JAIN & DUBES, 1988; EVERITT, 1993; JAIN et al., 1999):
 - ✓ hierárquicos: aglomerativos, divisivos;
 - ✓ particionais: k-means, *Minimum Spanning Tree* (MST);

Tópico 8 – Rede Neural de Kohonen e Aprendizado Não-Supervisionado

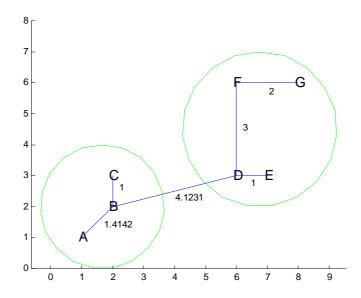
13

IA353 – Profs. Fernando J. Von Zuben & Romis R. F. Attux DCA/FEEC/Unicamp & DECOM/FEEC/Unicamp





Agrupamento hierárquico (figuras extraídas de ZUCHINI, 2003)



Minimum Spanning Tree (MST) (figura extraída de ZUCHINI, 2003)

• arcos com 'comportamento inconsistente' são eliminados, formando os grupos.

Tópico 8 – Rede Neural de Kohonen e Aprendizado Não-Supervisionado

15

IA353 – Profs. Fernando J. Von Zuben & Romis R. F. Attux DCA/FEEC/Unicamp & DECOM/FEEC/Unicamp

5 Treinamento não-supervisionado

- como aprender a representar padrões de entrada de modo a refletir a estrutura estatística de toda a coleção de dados de entrada? Que aspectos da entrada devem ser reproduzidos na saída?
- em contraposição ao treinamento supervisionado e ao treinamento por reforço, não há aqui nenhuma saída desejada explícita ou avaliação externa da saída produzida para cada dado de entrada.
- o treinamento não-supervisionado é predominante no cérebro humano. É sabido que as propriedades estruturais e fisiológicas das sinapses no córtex cerebral são influenciadas pelos padrões de atividade que ocorrem nos neurônios sensoriais.
 No entanto, em essência, nenhuma informação prévia acerca do conteúdo ou significado do fenômeno sensorial está disponível.
- sendo assim, a implementação de modelos computacionais para ajuste de pesos sinápticos via treinamento não-supervisionado deve recorrer apenas aos dados de

entrada, tomados como amostras independentes de uma distribuição de probabilidade desconhecida.

- duas abordagens têm sido propostas para aprendizado não-supervisionado:
 - técnicas para estimação de densidades de probabilidade, que produzem modelos estatísticos explícitos para descrever os fenômenos responsáveis pela produção dos dados de entrada. Ex: redes bayesianas.
 - técnicas de extração de regularidades estatísticas diretamente dos dados de entrada. Ex: redes de Kohonen.
- a história do aprendizado não-supervisionado é longa e diversificada:
 - (BARLOW, 1989), HEBB (1949), HINTON & SEJNOWSKI (1986), MACKAY (1956), MARR (1970);
 - BECKER & PLUMBLEY (1996), HINTON (1989), LINSKER (1988), KOHONEN (1989), KOHONEN (1997);

Tópico 8 – Rede Neural de Kohonen e Aprendizado Não-Supervisionado

17

IA353 – Profs. Fernando J. Von Zuben & Romis R. F. Attux DCA/FEEC/Unicamp & DECOM/FEEC/Unicamp

6 Mapas Auto-Organizáveis de Kohonen

- um mapa de Kohonen é um arranjo de neurônios, geralmente restrito a espaços de dimensão 1 ou 2, que procura estabelecer e preservar noções de <u>vizinhança</u> (preservação topológica).
- se estes mapas apresentarem propriedades de <u>auto-organização</u>, então eles podem ser aplicados a problemas de clusterização e ordenação espacial de dados.
- neste caso, vai existir um mapeamento do espaço original (em que os dados se encontram) para o espaço em que está definido o arranjo de neurônios.
- como geralmente o arranjo de neurônios ocorre em espaços de dimensão reduzida (1 ou 2), vai existir uma redução de dimensionalidade sempre que o espaço original (em que os dados se encontram) apresentar uma dimensão mais elevada.
- toda redução de dimensionalidade (relativa à dimensionalidade intrínseca dos dados) pode implicar na perda de informação (por exemplo, violação topológica).
 Sendo assim, este mapeamento deve ser tal que minimiza a perda de informação.

- a informação é uma medida da redução da incerteza, sobre um determinado estado de coisas. Neste sentido, a informação não deve ser confundida com o dado ou seu significado, e apresenta-se como função direta do grau de originalidade, imprevisibilidade ou valor-surpresa do dado (ou conjunto de dados).
- espaços normados são aqueles que permitem o estabelecimento de propriedades topológicas entre seus elementos. Ex: medida de distância (fundamental para a definição do conceito de vizinhança), ordenamento.

6.1 Arranjo unidimensional

- um mapa de Kohonen unidimensional é dado por uma seqüência ordenada de neurônios lineares, sendo que o número de pesos é igual ao número de entradas.
- há uma relação de vizinhança entre os neurônios (no espaço unidimensional vinculado ao arranjo), mas há também uma relação entre os pesos dos neurônios no espaço de dimensão igual ao número de entradas. Para entender a funcionalidade dos mapas de Kohonen, é necessário considerar ambas as relações.

Tópico 8 – Rede Neural de Kohonen e Aprendizado Não-Supervisionado

19

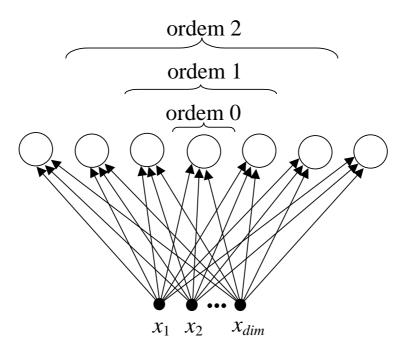
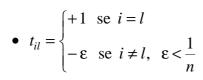


Figura 1 - Rede de Kohonen em arranjo unidimensional: ênfase na vizinhança



- $\vec{y}(0) = \mathbf{W}\vec{x}$
- $y_i(k+1) = \max \left\{ 0, \sum_{l=1}^n t_{il} y_l(k) \right\}$

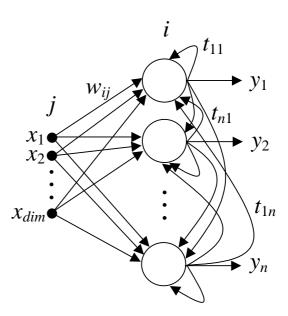


Figura 2 - Rede de Kohonen em arranjo unidimensional: ênfase nas conexões

21

IA353 – Profs. Fernando J. Von Zuben & Romis R. F. Attux DCA/FEEC/Unicamp & DECOM/FEEC/Unicamp

Exemplo: Para dim = 2, considere n = 4, sendo que os vetores de pesos são dados na forma:

$$\mathbf{w}_1 = \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{w}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{w}_3 = \begin{bmatrix} -3 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \mathbf{e} \quad \mathbf{w}_4 = \begin{bmatrix} 3 \\ -2 \end{bmatrix}$$

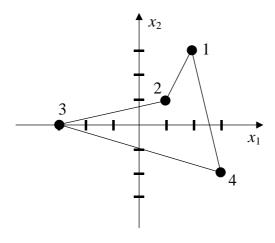


Figura 3 - Mapa de Kohonen em arranjo unidimensional (nesta caso, existe vizinhança entre primeiro e último neurônios)

6.2 Arranjo bidimensional

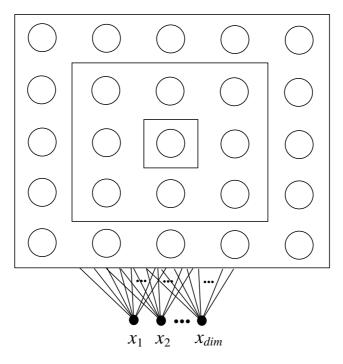
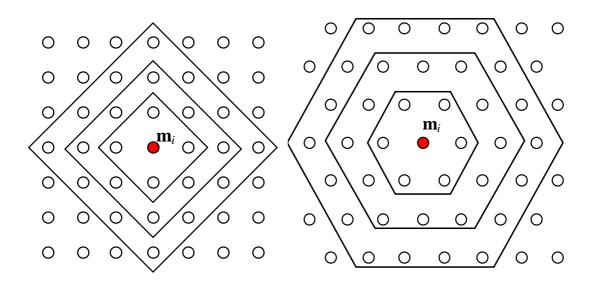


Figura 4 - Rede de Kohonen em arranjo bidimensional: ênfase na vizinhança

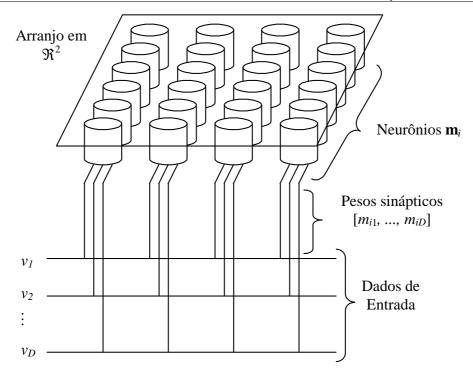
Tópico 8 – Rede Neural de Kohonen e Aprendizado Não-Supervisionado

23

IA353 – Profs. Fernando J. Von Zuben & Romis R. F. Attux DCA/FEEC/Unicamp & DECOM/FEEC/Unicamp

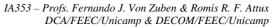


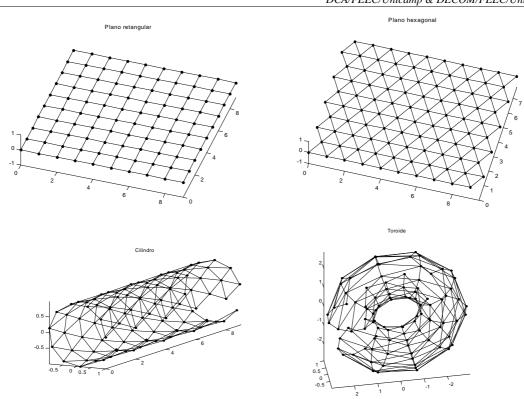
Outras configurações de mapas e de vizinhança (figuras extraídas de ZUCHINI, 2003)



Outra perspectiva para arranjo 2D (figura extraída de ZUCHINI, 2003)

Tópico 8 – Rede Neural de Kohonen e Aprendizado Não-Supervisionado

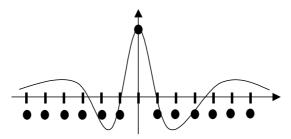




Arranjos com vizinhança nos extremos (figuras extraídas de ZUCHINI, 2003)

6.3 Fase de competição

- três elementos básicos em uma lei de aprendizado competitivo:
 - 1. um conjunto de neurônios similares, exceto pelo valor de seus pesos;
 - 2. um limite imposto ao valor que os pesos podem atingir;
 - 3. um mecanismo de competição.
- a competição vai produzir um único neurônio ativo para cada entrada (winner-takes-all)
- como implementar? → definindo uma regra de influência da ativação de um neurônio junto a todos os demais.



Tópico 8 – Rede Neural de Kohonen e Aprendizado Não-Supervisionado

IA353 – Profs. Fernando J. Von Zuben & Romis R. F. Attux DCA/FEEC/Unicamp & DECOM/FEEC/Unicamp

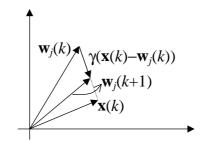
6.4 Fase de aprendizado não-supervisionado

- se os pesos se mantiverem com norma unitária, então a definição do neurônio vencedor pode se dar de duas formas:
 - 1. produto escalar;
 - 2. norma euclidiana (é a única válida também no caso de pesos não-normalizados).
- seja *j* o neurônio vencedor:

Alternativa 1

• somente o neurônio *j* é ajustado na forma:

$$\mathbf{w}_{j}(k+1) = \mathbf{w}_{j}(k) + \gamma (\mathbf{x}(k) - \mathbf{w}_{j}(k))$$

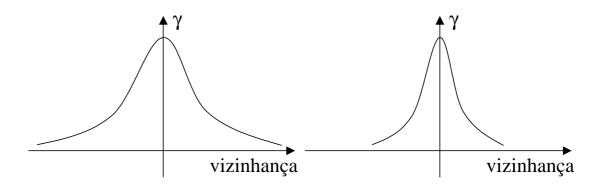


27

Alternativa 2

• caso existam múltiplos representantes para cada agrupamento de dados, então é interessante ajustar o neurônio vencedor e seus vizinhos mais próximos.

Implementação



• é importante que a influência de cada neurônio vencedor seja ampla no início do processo e sofra uma redução continuada com o decorrer das iterações.

Tópico 8 – Rede Neural de Kohonen e Aprendizado Não-Supervisionado

29

IA353 – Profs. Fernando J. Von Zuben & Romis R. F. Attux DCA/FEEC/Unicamp & DECOM/FEEC/Unicamp

6.5 Algoritmo de ajuste dos pesos

while <condição de parada> é falso,

ordene aleatoriamente os N padrões de entrada;

for i=1 até N,

$$j = \arg\min_{j} \left\| \mathbf{x}_{i} - \mathbf{w}_{j} \right\|$$

 $\forall J \in \text{Viz}(j)$ do:

$$\mathbf{w}_{J} = \mathbf{w}_{J} + \gamma (dist(j, J)) (\mathbf{x}_{i} - \mathbf{w}_{J});$$

end do

end for

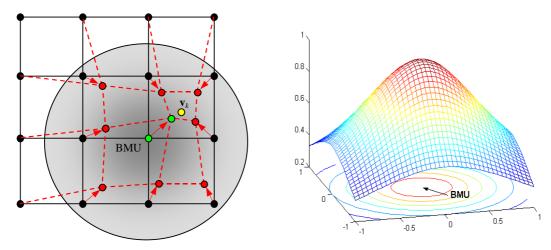
atualize a taxa de aprendizado γ ;

atualize a vizinhança;

avalie a condição de parada;

end while

6.6 Ajuste de pesos com restrição de vizinhança



Figuras extraídas de ZUCHINI (2003)

 o neurônio que venceu para uma dada amostra é o que sofre o maior ajuste. No entanto, dentro de uma vizinhança, todos os neurônios vizinhos também sofrerão um ajuste de pesos, embora de menor intensidade.

Tópico 8 – Rede Neural de Kohonen e Aprendizado Não-Supervisionado

31

IA353 – Profs. Fernando J. Von Zuben & Romis R. F. Attux DCA/FEEC/Unicamp & DECOM/FEEC/Unicamp

6.7 Discriminação dos agrupamentos

- dada a conformação final de neurônios (não rotulados), como realizar a clusterização, ou seja, definição de agrupamentos e atribuição do mesmo rótulo a todos os neurônios pertencentes a um dado agrupamento?
- solução: matriz(vetor)-U (ULTSCH, 1993; COSTA, 1999)
- aspecto a ser explorado: após o processo de auto-organização, dados de entrada com características semelhantes passam a promover reações semelhantes da rede neural.
- assim, comparando-se as reações da rede neural treinada, é possível agrupar os dados pela análise do efeito produzido pela apresentação de cada um à rede.
- a matriz-U é uma ferramenta que permite realizar a discriminação dos agrupamentos, a partir de uma medida do grau de similaridade entre os pesos de neurônios adjacentes na rede. O perfil apresentado pelas distâncias relativas entre neurônios vizinhos representa uma forma de visualização de agrupamentos.

- recebeu a denominação de matriz por ter sido proposta no caso de mapas bidimensionais, sendo que o grau de similaridade é plotado na terceira dimensão gerando uma superfície em relevo em 3D.
- para o caso de mapas unidimensionais, tem-se o vetor-U.
- topologicamente, as distâncias entre neurônios vizinhos refletem os agrupamentos, pois uma "depressão" ou um "vale" da superfície de relevo representa neurônios pertencentes a um mesmo agrupamento. Neurônios que têm uma distância grande em relação ao neurônio adjacente, a qual é representada por um pico da superfície de relevo, são neurônios discriminantes de agrupamentos.

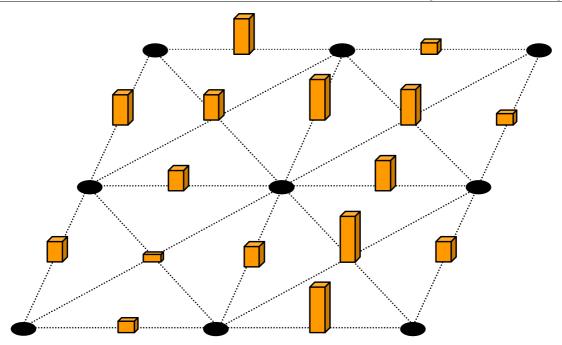
6.8 Aplicação

- como utilizar o mapa de Kohonen, após a fase de treinamento não-supervisionado e depois de ter as classes devidamente discriminadas, para classificação de padrões?
- exemplos de aplicação

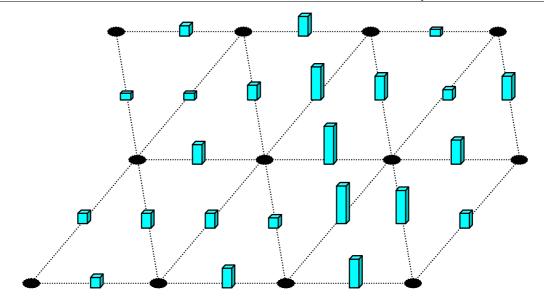
Tópico 8 – Rede Neural de Kohonen e Aprendizado Não-Supervisionado

33

IA353 – Profs. Fernando J. Von Zuben & Romis R. F. Attux DCA/FEEC/Unicamp & DECOM/FEEC/Unicamp



Exemplo de matriz-U para arranjo retangular (figura extraída de ZUCHINI, 2003)



Exemplo de matriz-U para arranjo hexagonal (figura extraída de ZUCHINI, 2003)

Tópico 8 – Rede Neural de Kohonen e Aprendizado Não-Supervisionado

35

IA353 – Profs. Fernando J. Von Zuben & Romis R. F. Attux DCA/FEEC/Unicamp & DECOM/FEEC/Unicamp

6.9 Agrupamento de dados (Clusterização)

Caso 1: Ausência de agrupamentos

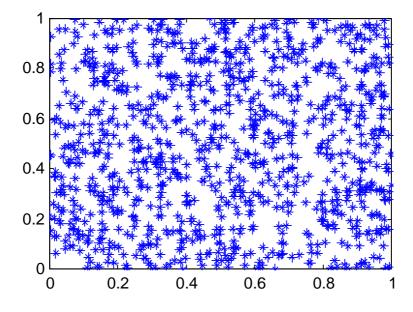


Figura 5 – Padrões de entrada com distribuição uniforme

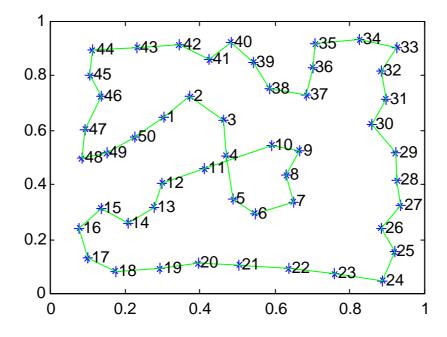


Figura 6 – Configuração final de 50 neurônios em um arranjo unidimensional

37

Caso 2: Presença de agrupamentos bem distintos

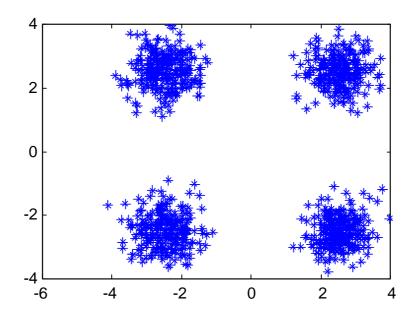


Figura 7 – Padrões de entrada com 4 agrupamentos

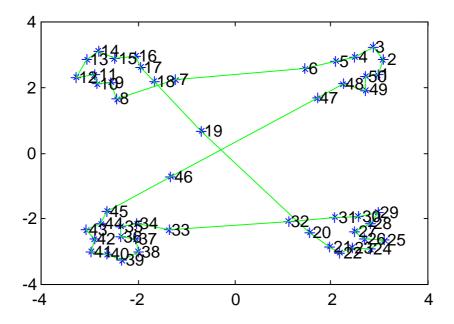


Figura 8 – Configuração final de 50 neurônios em um arranjo unidimensional

39

Caso 3: Presença de agrupamentos pouco distintos

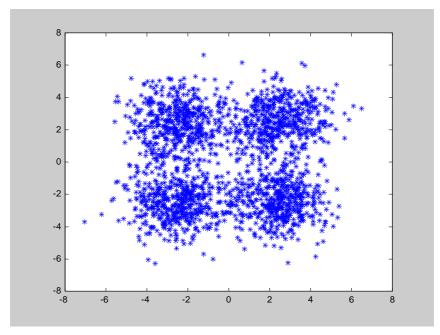


Figura 9 — Quatro agrupamentos de dados não-rotulados distribuídos no \Re^2

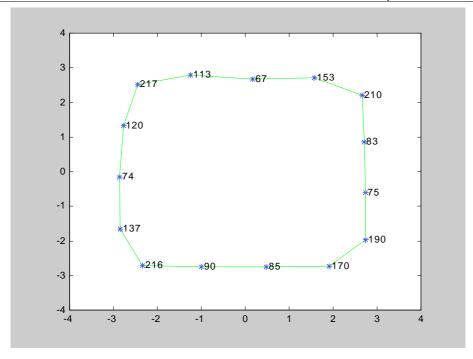
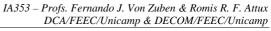


Figura 10 – Configuração final de 15 neurônios em um arranjo unidimensional e estatística dos vencedores

41



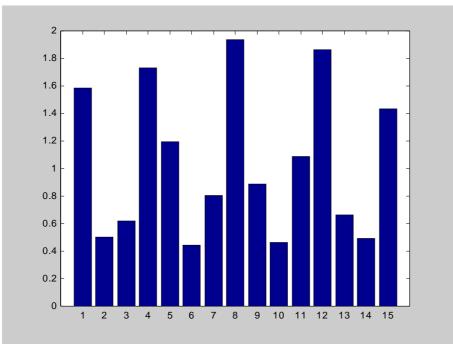


Figura 11 – Vetor-U levando em conta a estatística dos vencedores

6.10 Ferramentas de visualização e discriminação

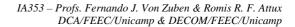


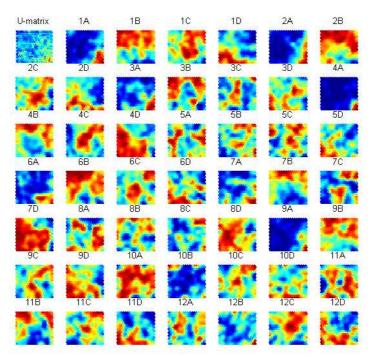
SOM 10-Jan-2002

Interpretação do mapa após auto-organização (figura extraída de ZUCHINI, 2003)

Tópico 8 – Rede Neural de Kohonen e Aprendizado Não-Supervisionado

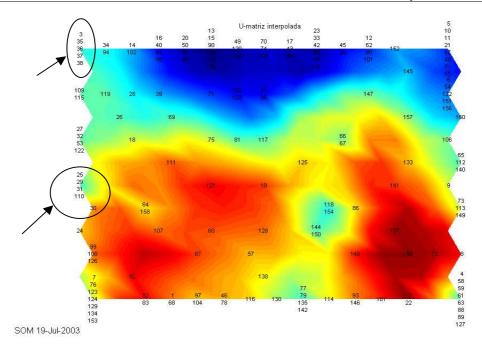
43





SOM 04-Apr-2002

Interpretação do mapa após auto-organização (figura extraída de ZUCHINI, 2003)

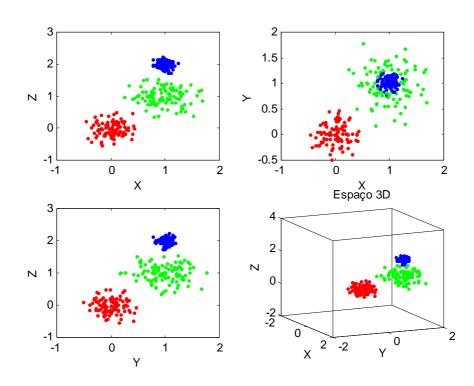


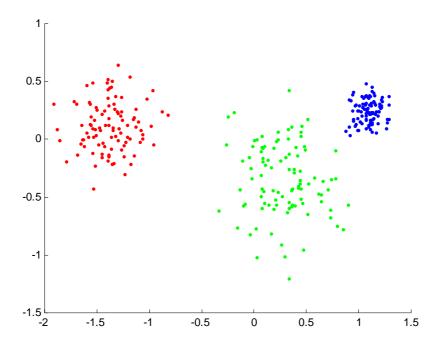
Interpretação do mapa após auto-organização (figura extraída de ZUCHINI, 2003)

Tópico 8 – Rede Neural de Kohonen e Aprendizado Não-Supervisionado

IA353 – Profs. Fernando J. Von Zuben & Romis R. F. Attux DCA/FEEC/Unicamp & DECOM/FEEC/Unicamp

6.11 Comparação com PCA e Análise por Componentes Curvos (CCA)

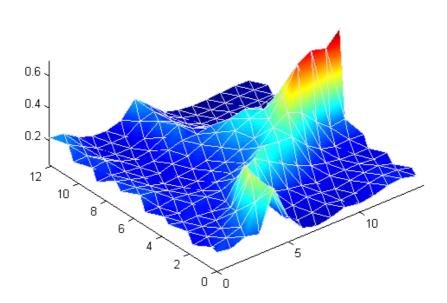




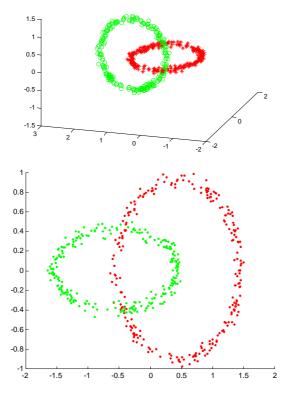
Projeção PCA (figuras extraídas de ZUCHINI, 2003)

Tópico 8 – Rede Neural de Kohonen e Aprendizado Não-Supervisionado

Matriz de Distancia

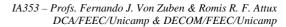


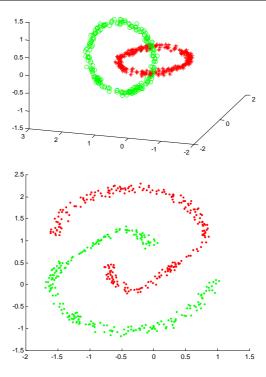
Matriz-U para grid hexagonal (figura extraída de ZUCHINI, 2003)



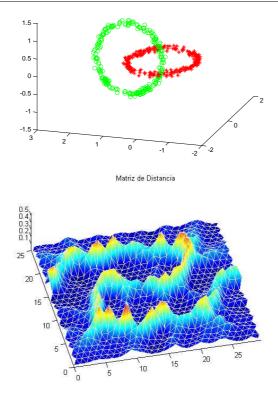
Projeção PCA (figuras extraídas de ZUCHINI, 2003)

Tópico 8 – Rede Neural de Kohonen e Aprendizado Não-Supervisionado





CCA (figuras extraídas de ZUCHINI, 2003)



Matriz-U para grid hexagonal (figuras extraídas de ZUCHINI, 2003)

Tópico 8 – Rede Neural de Kohonen e Aprendizado Não-Supervisionado

IA353 – Profs. Fernando J. Von Zuben & Romis R. F. Attux DCA/FEEC/Unicamp & DECOM/FEEC/Unicamp

6.12 Ordenamento de pontos em espaços multidimensionais

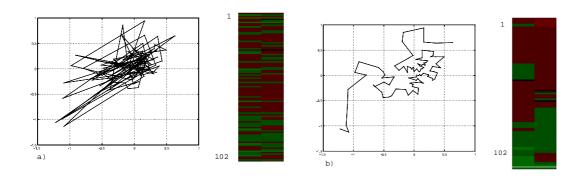
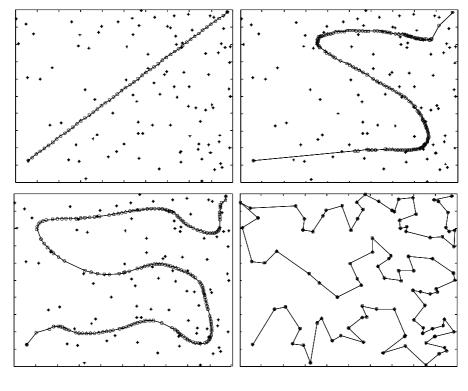


Figura 12 – Situação anterior (esquerda) e situação posterior (direita) ao ordenamento de pontos no \Re^2 (GOMES *et al.*, 2004).

 a extensão para pontos em espaços de maior dimensão é imediata (generalização do problema do caixeiro viajante)



Modo de operação (GOMES et al., 2004)

Tópico 8 – Rede Neural de Kohonen e Aprendizado Não-Supervisionado

53

IA353 – Profs. Fernando J. Von Zuben & Romis R. F. Attux DCA/FEEC/Unicamp & DECOM/FEEC/Unicamp

6.13 Roteamento de veículos (múltiplos mapas auto-organizáveis)

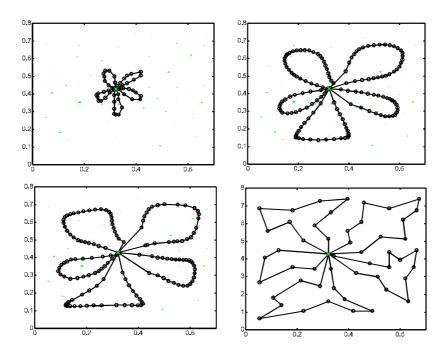
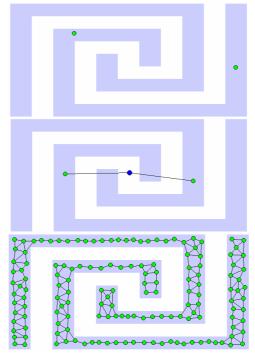


Figura 13 – Várias etapas do processo de auto-organização (GOMES & VON ZUBEN, 2002)

6.14 Mapas auto-organizáveis construtivos



Growing Neural Gas (FRITZKE, 1995)

Tópico 8 – Rede Neural de Kohonen e Aprendizado Não-Supervisionado

55

IA353 – Profs. Fernando J. Von Zuben & Romis R. F. Attux DCA/FEEC/Unicamp & DECOM/FEEC/Unicamp

6.15 Questões a serem melhor investigadas

- sintonia de parâmetros
- neurônios que não vencem nunca (devem ser podados para aumentar eficiência)
- neurônios que vencem sempre
- dimensão do arranjo para uma dada aplicação
- número de neurônios, uma vez definido o arranjo
- inicialização dos pesos
- apresentação dos dados à rede (padrão-a-padrão ou em batelada?)
- interpretação do mapa resultante (análise discriminante)
- métodos construtivos e de poda
- outras aplicações e múltiplos mapeamentos simultâneos
- comparações com ferramentas similares

6.16 Extensões

• Learning Vector Quantization (LVQ)

$$\Delta \mathbf{w}_{j} = \begin{cases} \gamma(\mathbf{x}_{i} - \mathbf{w}_{j}) & \text{se a classe for correta} \\ -\gamma(\mathbf{x}_{i} - \mathbf{w}_{j}) & \text{se a classe for incorreta} \end{cases}$$

7 Referências

ANGÉNIOL, B., VAUBOIS, C. & LE TEXIER, J.Y. "Self-organizing feature maps and the travelling salesman problem", *Neural Networks*, 1, 289-293, 1988.

ARAS, N., OOMMEN, B.J. & ALTINEL, I.K. "The Kohonen Network Incorporating Explicit Statistics and its Application to The Travelling Salesman Problem", *Neural Networks*, 12, 1273-1284, 1999.

BARLOW, H. B. "Unsupervised learning", Neural Computation, 1: 295-311, 1989.

BAK, P. "How Nature Works: The Science of Self-Organized Criticality", Copernicus, 1996.

BECKER, S. & PLUMBLEY, M. "Unsupervised neural network learning procedures for feature extraction and classification", International Journal of Applied Intelligence, 6: 185-203, 1996.

BUSHEV, M. "Synergetics: Chaos, Order, Self-Organization", World Scientific, 1994.

Costa, J.A.F. "Classificação Automática e Análise de Dados por Redes Neurais Auto-Organizáveis", Tese de Doutorado, Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação (FEEC/Unicamp), Dezembro 1999.

COVENEY, P. & HIGHFIELD, R. "Frontiers of Complexity: The Search for Order in a Chaotic World", Fawcett Columbine, 1995.

Tópico 8 – Rede Neural de Kohonen e Aprendizado Não-Supervisionado

57

IA353 – Profs. Fernando J. Von Zuben & Romis R. F. Attux DCA/FEEC/Unicamp & DECOM/FEEC/Unicamp

COWAN, G.A., PINES, D. & MELTZER, D. (eds.) "Complexity: Metaphors, Models, and Reality", Proceedings Volume XIX, Santa Fe Institute Studies in the Sciences of Complexity, Perseus Books, 1994.

DE CASTRO, L.N. & VON ZUBEN, F.J. An Improving Pruning Technique with Restart for the Kohonen Self-Organizing Feature Map. *Proceedings of the IEEE International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN'99)*, vol. 3, pp. 1916-1919, July 1999.

DE CASTRO, L.N. & VON ZUBEN, F.J. A Pruning Self-Organizing Algorithm to Select Centers of Radial Basis Function Neural Networks. in Kurková, V., Steele, N.C., Neruda, R., Kárný, M. (eds.) Proceedings of the International Conference of Artificial Neural Networks and Genetic Algorithms (ICANNGA'01), pp. 114-117, Prague, Czech Republic, April 22-25, 2001.

EVERITT, B. "Cluster Analysis", 3rd. edition, John Wiley, 1993.

FAQ: The self-organized systems (http://www.calresco.org/sos/sosfaq.htm)

FAVATA, F. & WALKER, R. "A Study of the Application of Kohonen-Type Neural Networks to the Traveling Salesman Problem", *Biological Cybernetics* 64, 463-468, 1991.

FORT, J.C. "Solving a Combinatorial Problem via Self-Organizing Maps", Biological Cybernetics, 59, 33-40, 1988.

FRITZKE, B. "A Growing Neural Gas Network Learns Topologies", *in* Tesauro, G., Touretzky, D.S., and Leen, T.K. (eds.). Advances in Neural Information Processing Systems 7, The MIT Press, pp. 625-632, 1995.

GOMES, L.C.T. & VON ZUBEN, F.J. A Neuro-Fuzzy Approach to the Capacitated Vehicle Routing Problem. *Proceedings of the IEEE International Joint Conference on Neural Networks* (IJCNN'2002), vol. 2, pp. 1930-1935, Honolulu, Hawaii, May 12-17, 2002.

GOMES, L.C.T. & VON ZUBEN, F.J. Vehicle Routing Based on Self-Organization With and Without Fuzzy Inference. Proceedings of the IEEE International Conference on Fuzzy Systems (FUZZ-IEEE'2002), vol. 2, pp. 1310-1315, Honolulu, Hawaii, May 12-17, 2002.

- GOMES, L.C.T., VON ZUBEN, F.J. & MOSCATO, P.A. "A Proposal for Direct-Ordering Gene Expression Data by Self-Organising Maps", International Journal of Applied Soft Computing, vol. 5, pp. 11-21, 2004.
- HEBB, D. O. "The Organization of Behavior", Wiley, 1949.
- HINTON, G.E. "Connectionist learning procedures", Artificial Intelligence, 40: 185-234, 1989.
- HINTON, G. E. & SEJNOWSKI, T.J. "Learning and relearning in Boltzmann machines", in D. E. Rumelhart, J. L. McClelland & The PDP Research Group (eds.) *Parallel Distributed Processing: Explorations in the Microstructure of Cognition*, MIT Press, vol. 1, pp. 282-317, 1986.
- JAIN, A.K. & DUBES, R.C. "Algorithms for Clustering Data", Prentice-Hall, 1988.
- JAIN, A.K., MURTY, M.N. & FLYNN, P.J. "Data Clustering: A Review", ACM Computing Surveys, vol. 31, no. 3, pp. 264-323, 1999.
- KASKI, S. "Data Exploration Using Self-Organizing Maps", Ph.D. Thesis, Helsinki University of Technology, Neural Networks Research Centre, 1997.
- KAUFFMAN, S. "At Home in the Universe: The Search for the Laws of Self-Organization and Complexity", Oxford University Press, 1995.
- KOHONEN, T. "Self-organized formation of topologically correct feature maps", Biological Cybernetics, 43:59-69, 1982.
- KOHONEN, T. "Self-Organization and Associative Memory", 3rd. edition, Springer, 1989 (1st. edition, 1984).
- KOHONEN, T. "The Self-Organizing Map", Proceedings of the IEEE, 78:1464-1480, 1990.
- KOHONEN, T., OJA, E., SIMULA, O., VISA, A. & KANGAS, J. "Engineering applications of the self-organizing map", *Proceedings of the IEEE*, 84:1358-1384, 1996.
- KOHONEN, T. "Self-Organizing Maps", 2nd. edition, Springer, 1997.
- LINSKER, R. "Self-organization in a perceptual network", Computer, 21: 105-128, 1988.

59

- MACKAY, D. M. "The epistemological problem for automata", in C. E. Shannon & J. McCarthy (eds.) Automata Studies, Princeton University Press, pp. 235-251, 1956.
- MARR, D. "A theory for cerebral neocortex", Proceedings of the Royal Society of London, Series B, 176: 161-234, 1970.
- MATSUYAMA, Y. "Self-Organization via Competition, Cooperation and Categorization Applied to Extended Vehicle Routing Problems", *Proc. International Joint Conference on Neural Networks*, 1, 385-390, 1991.
- MODARES, A., SOMHOM, S. & ENKAWA, T. "A Self-Organizing Neural Network Approach for Multiple Traveling Salesman and Vehicle Routing Problems", *Int. Transactions in Operational Research*, 6, 591-606, 1999.
- POTVIN, J.-I. & ROBILLARD, C. "Clustering for Vehicle Routing wih a Competitive Neural Network", *Neurocomputing*, 8, 125-139, 1995.
- SMITH, K.A. "Neural Networks for Combinatorial Optimization: A Review of More than a Decade of Research", *INFORMS Journal on Computing*, 11, 1, 15-34, 1999.
- $Toolbox: \underline{http://www.cis.hut.fi/projects/somtoolbox/}$
- ULTSCH, A. "Knowledge Extraction from Self-Organizing Neural Networks", in O. Opitz et al. (eds.) Information and Classification, Springer, pp. 301-306, 1993.
- VAKHUTINSKY, A. I. & GOLDEN, B. L. "Solving Vehicle Routing Problems Using Elastic Nets", *Proc. IEEE International Conference on Neural Networks*, 7, 4535-4540, 1994.
- WILSON, R.A. & KEIL, F.C. (eds.) "The MIT Encyclopedia of the Cognitive Sciences", MIT Press, 1999.
- ZUCHINI, M.H. "Aplicações de Mapas Auto-Organizáveis em Mineração de Dados e Recuperação de Informação", Tese de Mestrado, Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação (FEEC/Unicamp), Setembro 2003.