EDSON CAORU KITANI

MAPEAMENTO E VISUALIZAÇÃO DE DADOS EM ALTA DIMENSÃO COM MAPAS AUTO-ORGANIZADOS

São Paulo
2013

EDSON CAORU KITANI

MAPEAMENTO E VISUALIZAÇÃO DE DADOS EM ALTA DIMENSÃO COM MAPAS AUTO-ORGANIZADOS

Tese apresentada à Escola Politécnica da Universidade de São Paulo para obtenção do Título de Doutor em Ciências.

Área de concentração:
Sistemas Eletrônicos

Orientador: Prof. Dr. Livre Docente
Emilio Del Moral Hernandez

São Paulo
2013

Este exemplar foi revisado e alterado em relação à versão original, sob a responsabilidade única do autor e com a anuência de seu orientador.

São Paulo, 20 de setembro de 2013.

Assinatura do autor _____

Assinatura do orientador _____

FICHA CATALOGRÁFICA

Kitani, Edson Caoru
Mapeamento e visualização de dados em alta dimensão com mapas auto-organizados / E.C. Kitani. Versão corr.-- São Paulo, 2013.
181 p.

Tese (Doutorado) - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. Departamento de Engenharia de Sistemas Eletrônicos.

1. Redes neurais 2. Mineração de dados 3. Mapas auto-organizados 4. Redução de dimensionalidade 5. Algoritmos para imagens 6. Aprendizagem I. Universidade de São Paulo. Escola Politécnica. Departamento de Engenharia de Sistemas Eletrônicos II. t.

À Yara, Gizele e Adriano, sem os quais nada do que realizei até hoje seria possível.

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Dr. Carlos Thomaz que desde o Mestrado sempre me incentivou a seguir em frente dando apoio, inspirações científicas e grandes colaborações. Ao Prof. Dr. Gilson Giraldi, por apresentar diferentes caminhos a partir das colaborações em vários trabalhos.

Ao Prof. Dr. Emilio Del Moral Hernandez, meu orientador, que sempre acreditou e principalmente, me apoiou ao longo desses anos, me dando a oportunidade de explorar autonomamente os caminhos científicos. Entretanto, nos momentos necessários esteve sempre presente para corrigir, sugerir, orientar e mostrar outros pontos de vista. Os novos caminhos que ele apresentou me permitirão ir mais longe ainda. Muito obrigado Prof. Emilio!

Aos amigos que eu fiz no Grupo ICONE, que apesar dos poucos momentos ao longo dos anos, deixaram muitas lembranças. Ao Dr. Itamar, à Dra Priscila, ao Dr. Antonio Timoszcuk, ao inquieto, mas sempre prestativo Dr. Humberto Sandmann, ao reservado, mas sempre presente Dr. Eduardo Akira e ao companheiro de vários cursos Msc. Julio Pumarica. Aos novos membros que conheci recentemente, porque agora sou veterano. À Raquel e à Msc. Elia Matsumoto. Ao amigo e colaborador que muito me ajudou durante as finalizações deste texto, Prof. Dr. Leandro Silva. Ao Prof. Dr. João Kogler que sempre apontou possibilidades e aberturas para discussões científicas para o meu aprimoramento. Ao Prof. Dr. Francisco Javier Ropero por compartilhar suas visões biológicas sobre vários temas e me mostrar a importância da vida. A todos os funcionários da Escola Politécnica, do LSI e Professores da POLI.

Ao Prof. Dr. Armando Laganá e ao Prof. Marcos Fróes que me abriram novas oportunidades acadêmicas de maneira que eu possa dividir os meus conhecimentos. Aos amigos da Fatec, Prof. Dr. Alexsander Tressino e Prof. Carlos Morioka, às amigas e amigos da secretaria acadêmica e de serviços e aos amigos Professores da Fatec Santo André.

À Mahle por apoiar e compreender as minhas ausências, aos amigos da Mahle e, principalmente ao Marcos Piccilli e Mauro Prado pelo apoio incondicional ao longo desses anos.

À minha amada esposa Yara que se sacrificou muito com as minhas ausências para ver o meu sonho realizado! Aos meus filhos Gizele e Adriano, sem os quais nada disso teria sentido. Creio que eles sempre compreenderam o pai que eles têm, com muitos defeitos, mas que os ama muito. A toda minha família e amigos de longa data.

Aos membros da banca, Profa Dra Sarajame, Prof. Dr. Adrião, Prof. Dr. Javier, Prof. Dr. Ademar e Prof. Dr. Emilio pelas valiosas contribuições durante a defesa.

À USP e, principalmente a Deus por estar sempre ao meu lado, mesmo que eu nem sempre me lembre disso.

RESUMO

Os seres vivos têm uma impressionante capacidade de lidar com ambientes complexos com grandes quantidades de informações de forma muito autônoma. Isto os torna um modelo ideal para o desenvolvimento de sistemas artificiais bioinspirados. A rede neural artificial auto-organizada de Kohonen é um excelente exemplo de um sistema baseado nos modelos biológicos. Esta tese discutirá ilustrativamente o reconhecimento e a generalização de padrões em alta dimensão nos sistemas biológicos e como eles lidam com redução de dimensionalidade para otimizar o armazenamento e o acesso às informações memorizadas para fins de reconhecimento e categorização de padrões, mas apenas para contextualizar o tema com as propostas desta tese. As novas propostas desenvolvidas nesta tese são úteis para aplicações de extração não supervisionada de conhecimento a partir dos mapas auto-organizados. Trabalha-se sobre o modelo da Rede Neural de Kohonen, mas algumas das metodologias propostas também são aplicáveis com outras abordagens de redes neurais auto-organizadas.

Será apresentada uma técnica de reconstrução visual dos neurônios do Mapa de Kohonen gerado pelo método híbrido PCA+SOM. Essa técnica é útil quando se trabalha com banco de dados de imagens. Propõe-se também um método para melhorar a representação dos dados do mapa SOM e discute-se o resultado do mapeamento SOM como uma generalização das informações do espaço de dados. Finalmente, apresenta-se um método de exploração de espaço de dados em alta dimensão de maneira auto-organizada, baseado no *manifold* dos dados, cuja proposta foi denominada *Self Organizing Manifold Mapping* (SOMM). São apresentados os resultados computacionais de ensaios realizados com cada uma das propostas acima e eles são avaliados as com métricas de qualidade conhecidas, além de uma nova métrica que está sendo proposta neste trabalho.

Palavras chaves: Mapas auto-organizados, SOM, Aprendizado de Variedades, Redução de Dimensionalidade.

ABSTRACT

Living beings have an amazing capacity to deal with complex environments with large amounts of information autonomously. They are the perfect model for bioinspired artificial system development. The artificial neural network developed by Kohonen is an excellent example of a system based on biological models. In this thesis, we will discuss illustratively pattern recognition and pattern generalization in high dimensional data space by biological system. Then, a brief discussion of how they manage dimensionality reduction to optimize memory space and speed up information access in order to categorize and recognize patterns. The new proposals developed in this thesis are useful for applications of unsupervised knowledge extraction using self-organizing maps. The proposals use Kohonen's model. However, any self-organizing neural network in general can also use the proposed techniques.

It will be presented a visual reconstruction technique for Kohonen's neurons, which was generated by hybrid method PCA+SOM. This technique is useful when working with images database. It is also proposed a method for improving the representation of SOM's map and discussing the result of the SOM's mapping as a generalization of the information data space. Finally, it is proposed a method for exploring high dimension data space in a self-organized way on the data manifold. This new proposal was called Self Organizing Manifold Mapping (SOMM). We present the results of computational experiments on each of the above proposals and evaluate the results using known quality metrics, as well as a new metric that is being proposed in this thesis.

Key words: Self Organizing Maps, SOM, Manifold Learning, Dimensionality Reduction.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS 11

LISTA DE TABELAS 19

LISTA DE ABREVIATURAS 20

CONVENÇÕES E LISTA DE SÍMBOLOS 21

1 INTRODUÇÃO 22

1.1. Motivação 23

1.2. Objetivos 24

1.3. Contribuições Esperadas 24

1.4. Organização do Trabalho 25

2 FUNDAMENTAÇÃO BIOLÓGICA 26

2.1 Objetivos do Capítulo 27

2.2 Memória 27

2.3 Aprendizado de Categorização e Abstração de Protótipos 28

2.4 Representações no Cérebro 30

2.5 Mapas Corticais Somatotópicos 31

2.6 Considerações Finais 34

3. EXPLORAÇÃO DE ESPAÇOS DE DADOS EM ALTA DIMENSÃO 35

3.1 Objetivos do Capítulo 36

3.2 Objetivos da Exploração de Dados em Espaços de Alta Dimensão 36

3.2.1 O Processo de Descobrir Padrões 37

3.2.2 Redução da Dimensionalidade e Dimensionalidade Intrínseca 39

3.3 Métodos de Exploração dos Espaços de Dados em Alta Dimensão 41

3.3.1 Análise de Componentes Principais 42

3.3.2 Multidimensional Scaling - MDS 45

3.3.3 Projeção de Sammon 47

3.3.4 ISOMAP – Mapeamento de Características Isométricas 49

3.3.5 Outras Abordagens de Exploração de Espaços Multidimensionais 52

3.4 Considerações Finais 53

4. MAPAS AUTO-ORGANIZÁVEIS 55

4.1 Objetivos do Capítulo 55

4.2 Auto-organização Baseada em Modelos Biológicos 56

4.2.1 Mapas Auto-Organizávies de Kohonen 57

4.3 Plausibilidade Biológica dos Mapas Auto-Organizáveis 62

4.4 Processo de Redução de Dimensionalidade nos Mapas Auto-Organizáveis 66

4.5 Métodos de Visualização dos Mapas Auto-Organizáveis 68

4.6 Métodos de Avaliação da Preservação Topológica e Relação de Vizinhança 72

4.6.1 Produto Topográfico 75

4.6.2 Função Topográfica 77

4.6.3 Erro Topográfico 78

4.6.4 Medida de Distorção Ed 79

4.7 Considerações Finais 82

5. INTERPRETAÇÃO VISUAL DOS MAPAS SOM 84

5.1 Objetivos do Capítulo 84

5.2 Análise Visual do Mapa SOM em Baixa Dimensão 85

5.3 Proposta para Melhorar o Mapeamento do Mapa SOM 89

5.4 Análise Visual do Mapa SOM com Dados em Alta Dimensão 99

5.5 Proposta de Visualização dos Neurônios do Mapa SOM 101

5.5.1 SOM no Espaço PCA com Imagens de Face 104

5.5.2 SOM no Espaço PCA com Imagens de MRI do Cérebro Humano 112

5.6 Considerações Finais 115

6. SELF-ORGANIZED MANIFOLD MAPPING – SOMM 116

6.1 Objetivos do Capítulo 116

6.2 Componentes Principais e Categorização de Padrões na Biologia 117

6.3 Curvas Principais e a Relação com o SOM 118

6.4 Self Organized Manifold Mapping - SOMM 121
6.5 Comparação do SOMM com MST (*Minimum Spanning Three*) 128
6.6 Medidas de Qualidade do SOMM 131
6.6.1 Índice Silhouette 132
6.6.2 Coeficiente de Correlação de Spearman 135
6.6.3 Erro Topográfico do SOMM 137
6.6.4 Erro de Quantização Local 138
6.7 Considerações Finais 139
7. ENSAIOS COMPUTACIONAIS COM O SOMM 140
7.1 Objetivos do Capítulo 141
7.2 Experimentos com o SOMM e Imagens de Faces Femininas 142
7.3 Experimentos com o SOMM e Banco de Faces FERET 151
7.4 Experimentos com o SOMM e Banco de Faces ISOMAP 154
7.5 Experimento com o SOMM e Imagens de Sequências de Vídeo 158
7.6 Considerações Finais 159
8. DISCUSSÕES FINAIS E CONCLUSÃO 161
8.1 Áreas de Aplicação das Contribuições desta Tese 162
8.2 Propostas Futuras de Pesquisa 163
9. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS 164
APÊNDICE A – LISTA DE PUBLICAÇÕES 175
APÊNDICE B – MANIFOLD LEARNING 176
APÊNDICE C – MALDIÇÃO DA DIMENSIONALIDADE 178

Lista de Figuras

Figura 1 – No grupo (a) têm-se amostras do conjunto de treinamento do experimento de categorização e no grupo (b) amostras do conjunto de teste com características distintas e que são distorções do "Protótipo". Acima de cada figura do grupo (b) destaca-se a informação qualitativa do grau de distorção imposta no protótipo. Pode-se observar em (a) amostras do conjunto de 40 padrões visuais apresentadas durante a fase de treinamento e em (b) amostras do conjunto de 84 padrões de teste. [Extraída e adaptada de (SQUIRE e KNOWLTON, 1995)]. 29

Figura 2 – Ilustração de uma possível generalização de um espaço visual em coordenadas fictícias. Na figura estão representadas apenas 3 eixos $x1, x2, x3$ [Extraída de (SEUNG e LEE, 2000)]. 30

Figura 3 – Em (a) ilustram-se as regiões corticais responsáveis pela percepção de tato de cada região do corpo e em (b) a ilustração de um homúnculo representando a importância dada no córtex para cada região mapeada [Extraída de (PURVES, AUGUSTINE, *et al.*, 2005) página 204]. 32

Figura 4 – Três fases do desenvolvimento pré-natal de um bebê, representando como as mãos e os pés estão próximos à boca e genitália, respectivamente [Extraída de (FARAH, 1998)]. 33

Figura 5 – Ilustração do mapa do córtex auditivo primário e secundário. A figura em destaque indica como as frequências estão divididas por faixas no córtex auditivo primário [Extraída de (BEAR, CONNORS e PARADISO, 2001) página 373]. 33

Figura 6 – Duas sequências de cenas de vídeo (A e B) de um diálogo entre um paciente e um médico [Extraída e adaptada de (ZHU, AREF, *et al.*, 2003)]. 38

Figura 7 – Distribuição de 1000 imagens de faces no espaço bidimensional. Os pontos marcados em vermelho são os que representam as imagens de faces mostradas na figura [Extraída de (WEINBERGER e SAUL, 2004)]. 39

Figura 8 – Amostras de imagens de um conjunto de 400 fotos de um pote de chá sendo girado em torno de seu eixo. As diferentes posições representariam os graus de liberdade da câmera e não do objeto. As imagens foram manualmente posicionadas sobre a linha circular pelos autores do artigo apenas para ilustrar a ideia da dimensionalidade intrínseca [Extraída de (WEINBERGER e SAUL, 2004)]. 40

Figura 9- Representação do espaço de imagens e o subespaço e a trilha (*Manifold*) onde recaem as amostras de entrada [Extraída e adaptada de (BRANSON, 2001)]. 41

Figura 10 – Ilustração de uma base vetorial e dois pontos distribuídos nessa base. Os pontos que caem no eixo $\varphi 3$ são nulos [Adaptada e ampliada de (KITANI, 2007) página 59]. 44

Figura 11 – Em (a) a representação de um conjunto de pontos conhecidos como Rolo Suíço (*Swiss Roll)* e em destaque os pontos $x1$ e $x2$ indicando um segmento de reta pontilhado como a distância Euclidiana entre eles. Em (b) a superfície 3D mapeada pelo ISOMAP e o caminho a ser seguido entre os pontos x_1 e x_2. Em (c) a estrutura planificada em 2D para visualização do caminho mais curto sobre a superfície $\mathcal{M}$ [Extraída de (TENENBAUM, SILVA e LANGFORD, 2000)]. 50

Figura 12 – Exemplo de pontos distribuídos no espaço 2D e desdobrados para o espaço unidimensional. A linha cheia em azul representa o espaço geodésico, a linha em verde indica as arestas do grafo que ligam os pontos xi, a linha pontilhada indica o comprimento de cada aresta e a linha vermelha indica a distância Euclidiana entre os pontos x1 e x7 [Extraída e adaptada de (LEE e VERLEYSEN, 2010) página 103]. 50

Figura 13 – Representação das possíveis ações de colaboração e competição sináptica entre grupos de neurônios. Em (a) as excitações dos neurônios x e y da camada pré-sináptica são colaborativas e reforçam as conexões colaborativas da camada pós-sináptica. Em (b), apesar da sobreposição das excitações os neurônios da camada pós-sináptica não ocupam a mesma região e não compartilham as sinapses. Finalmente, em (c) apesar das excitações não estarem próximas, o resultado da excitação ocorre no mesmo grupo da camada pós-sináptica, reforçando essa ligação [Extraída de (WILLSHAW e VON DER MALSBURG, 1976)]. 56

Figura 14 – Na coluna (a) no alto tem-se o mapa dos caminhos percorridos por um rato após ter aprendido os locais de visitação. Na coluna (a) embaixo a área do córtex entorrinal que era estimulada quando o rato caminhava pela ambiente. Em (b) quando as luzes eram apagadas e em (c) quando eram acesas novamente. Os pontos vermelhos nas figuras da primeira fila indicam a preferência de visitação dos locais geográficos [Extraída de (HAFTING, FYHN, *et al.*, 2005)]. 65

Figura 15 – Reprodução da ilustração criada por Edgar Rubin conhecido como Vaso de Rubin, utilizada para demonstrar o conceito de WTA, criando uma ilusão entre a imagem do vaso em preto e duas faces de perfil no plano de fundo [Extraída de (KANDEL, SCHWARTZ e JESSELL, 2000) página 494]..... 66

Figura 16 – Em (a) a representação de um espaço de dados distribuídos de forma não linear (Rolo Suíço) e em (b) como o SOM mapeia esse espaço, ocupando regiões que não necessariamente representam os dados da distribuição original [Extraída de (TENENBAUM, 1998)]. 67

Figura 17 – Em (a) um mapa com dimensão 1D representando o espaço de entrada 2D, em (b) um mapa 2D representando um espaço 2D e em (c) um mapa 2D representando um espaço 3D [Figuras extraídas de (KOHONEN, 1990)]. 68

Figura 18 – Em (a) o exemplo da distribuição de pontos no formato *Twin Peaks*, em (b) os pontos vermelhos são os neurônios do mapa SOM e as linhas em azul representam as relações de vizinhança na grade bidimensional. As imagens foram obtidas com auxílio da ferramenta SOM *Toolbox* para Matlab® disponível

em (http://www.cis.hut.fi/somtoolbox/download/) e acessado em 07/05/2008, juntamente com o código MANI.m disponibilizado por Todd Wittman, disponível em (http://www.math.ucla.edu/~wittman/mani/#downloads, acessado em 09/07/2011). 69

Figura 19 – Exemplo de um mapa SOM rotulado (A, B, C) treinado com dados artificiais e com os valores de votação entre parênteses de cada neurônio [Extraída de (SILVA, 2009) página 43]. 70

Figura 20 – Em (a) reprodução da imagem em tons de cinza de um mapa SOM com 100X100 neurônios representando a distribuição de dois aglomerados bem separados. Em (b) a reprodução da imagem de um mapa SOM com 100X100 neurônios representando a distribuição de dois conjuntos de pontos no formato esférico, sendo um menor dentro de um maior [Extraída de (KRAAIJVELD, MAO e JAIN, 1992)]. 71

Figura 21 – Um mapa de neurônios com tamanho 16×16 sobre uma superfície esférica. [Extraída de (BAUER, HERRMANN e VILLMANN, 1999)]..... 73

Figura 22 – Ilustração de mapeamentos ponto a ponto do espaço de entrada $\mathcal{A}$ para o espaço de saída $\mathcal{V}$. Os elementos do espaço $\mathcal{A}$ estão numerados como 1, 2, 3, 4 e os elementos ou projeções no espaço de saída como $w1, w2, w3$ e $w4$. As figuras ilustram diferentes violações topológicas por ordenamento, vizinhança ou ambas. Veja o texto para maiores detalhes. [Extraída e adaptada de (BAUER, HERRMANN e VILLMANN, 1999)]... 74

Figura 23 – Representação de uma projeção de pontos do espaço 2D para um espaço 1D na qual não está preservada a topologia [Extraída de (BAUER e PAWELZIK, 1992)]. 75

Figura 24 – Três mapas SOM treinados com um conjunto de pontos uniformemente distribuídos num espaço de entrada bidimensional. Em (a) o resultado do mapeamento do espaço de entrada com um mapa de dimensão 64×4, em (b) o resultado do mapeamento com um mapa SOM de dimensão 16×16. Finalmente em (c), um mapa SOM tridimensional com 6×6×6 neurônios. [Extraídas de (BAUER e PAWELZIK, 1992)]. 77

Figura 25 – Perspectiva tridimensional na qual, em (a) ilustra-se o conjunto de treinamento em formato de Rolo Suíço com 900 pontos distribuídos aleatoriamente com média zero. Em (b) o resultado do mapa SOM após 11000 iterações. Os círculos em verde representam os neurônios que tiveram votação e os círculos em vermelho os neurônios que não tiveram votação durante a fase de treinamento. 86

Figura 26 – Duas perspectivas dos neurônios do mapa SOM treinados com a estrutura do Rolo Suíço. Em (a) uma perspectiva de topo, na qual não se observa claramente onde começa e termina a estrutura. Em (b) o Rolo Suíço visto em 3D. Nota-se que o mapa se dobra bastante para tentar representar a estrutura de entrada. 87

Figura 27 – Ilustração representando o processo de atualização do neurônio vencedor mc (circulo vermelho), que está mais próximo do vetor de entrada xi (triângulo preto), e também a atualização do peso dos neurônios vizinhos na grade. Neste exemplo, o mapa é formado por uma grade de 16 neurônios (círculos pretos) com

topologia retangular e a relação de vizinhança é representada pelas linhas tracejadas em cinza claro [Extraída e adaptada de (VESANTO, 2002)]..... 90

Figura 28 – Na figura (a) ilustra-se uma perspectiva em três dimensões de um mapa SOM de dimensão 20×20 treinado sobre a estrutura do Rolo Suíço. Em (c) uma perspectiva do plano xy do mapa SOM. Em (b) a perspectiva em três dimensões do mapa SOM com os neurônios reposicionados e em (d) uma perspectiva do plano xy do mapa SOM com os neurônios reposicionados. As linhas pretas dentro do rolo representam as conexões entre os neurônios na grade do mapa..... 92

Figura 29 – Gráficos dos componentes da medida de distorção Ed dos mapas SOM treinados em modo batelada ($Batch$). Em (a) apresentam-se os resultados sobre os mapas SOM Original para cada configuração de mapa. Em (b) os resultados dos mapas SOM Reposicionado. Os agrupamentos nos eixos x dos dois gráficos indicam a mesma quantidade de neurônios para diferentes formatos de mapas. 94

Figura 30 – Gráficos dos componentes da medida de distorção Ed com os mapas SOM treinados no modo Batch. Em (a) os resultados sobre os mapas SOM Original para cada configuração de mapa. Em (b) os resultados sobre os mapas SOM Reposicionado..... 95

Figura 31 - Gráficos dos componentes da medida de distorção Ed com mapas SOM treinados no modo Sequencial. Em (a) os resultados sobre os mapas SOM Original para cada configuração de mapa. Em (b) os resultados sobre os mapas SOM Reposicionado..... 96

Figura 32 - Gráficos dos componentes da medida de distorção Ed com os mapas SOM treinados no modo Sequencial. Em (a) os resultados sobre os mapas SOM Original para cada configuração de mapa. Em (b) os resultados sobre os mapas SOM Reposicionado. 97

Figura 33 - Na figura (a) ilustra-se uma perspectiva do plano xy de um mapa SOM Original de dimensão 1×900 treinado sobre a estrutura do Rolo Suíço. Em (b) uma perspectiva do plano xy do mapa SOM Reposicionado. . 98

Figura 34 – Mapa SOM unifilar sobreposto na estrutura de dados do Rolo Suíço. Os pontos em azul claro são os dados do Rolo Suíço, os círculos vermelhos são os neurônios sem votação e os círculos verdes são os neurônios que representam o espaço de dados da entrada..... 98

Figura 35 –Mapa *U-Matrix* resultante do treinamento de um mapa SOM 20×20 sobre o Rolo Suíço..... 100

Figura 36 – Plataforma de projeção e visualização dos neurônios do SOM para espaço visual. A figura foi extraída da apresentação do artigo (KITANI, DEL-MORAL-HERNANDEZ, *et al.*, 2010). 102

Figura 37 – Em (a) tem-se a representação da *U-Matrix* do mapa SOM da figura (b), cujos rótulos são indicações de quais classes foram mais votadas durante o treinamento. Os rótulos foram definidos no início do treinamento. O mapa é formado de 70 neurônios numa configuração de 10×7. Os números entre parênteses representam a quantidade de votações associadas a cada neurônio durante a fase de treinamento. 105

Figura 38 – Reconstrução visual dos neurônios do Mapa SOM da Figura 36, cujo conjunto de treinamento era formado por imagens de faces de 100 mulheres com expressão neutra e as mesmas 100 com expressão sorrindo. As imagens dentro dos retângulos em vermelho indicam os neurônios que não representam amostras do conjunto de entrada. Em (a) reconstrução visual das imagens do mapa SOM com as posições originais e em (b) a reconstrução visual das imagens do mapa SOM reposicionado (centrado). 107

Figura 39 – Imagens de faces do Banco de Faces FEI cuja semelhança com as imagens reconstruídas do mapa SOM Reposicionado é muito próxima. 108

Figura 40 – Gráficos dos componentes da medida de distorção ($Eqx,\ Env,\ Enb$) dos mapas SOM treinados no modo *Batch*. Em (a) apresentam-se os resultados das três medidas de distorção sobre os mapas SOM Original para cada configuração de mapa. Em (b) os resultados das medidas de distorção sobre os mapas SOM Reposicionado. 109

Figura 41 - Reconstrução visual dos neurônios do Mapa SOM 10×10 treinados com o banco de faces FERET parcial. As imagens dentro dos retângulos em vermelho indicam os neurônios que não representam amostras do conjunto de entrada. Em (a) reconstrução visual das imagens do mapa SOM com as posições originais e em (b) a reconstrução visual das imagens do mapa SOM Reposicionado. 110

Figura 42 – Mapa *U-Matrix* do mapa SOM 10×10 treinados com o banco de faces parcial FERET..... 111

Figura 43 – Amostras do conjunto de imagens médicas de um crânio em cortes coronais obtidas pela técnica de MRI (*Magnetic Resonance Imaging*) (Extraída de (SUDHEIMER, WINN, *et al.*). 112

Figura 44 – Em (a) o mapa U *Matrix* e em (b) o mapa SOM do conjunto de imagens de cérebro. O grande espaço sem rótulos no mapa SOM é resultado do número reduzido de amostras no conjunto de treinamento..... 113

Figura 45 – Reconstrução visual dos neurônios do mapa SOM de imagens do cérebro da Figura 42. As imagens dentro dos retângulos em vermelho representam os neurônios que não receberam votação e são extrapolações criadas pelo SOM. 114

Figura 46 – Imagem ampliada da cabeça de uma abelha e sobreposta sobre ela um mapa glomerular dos receptores da antena e sua localização no sistema nervoso. Cada cor representa um receptor olfativo sensível a um conjunto de odores [Extraída de (CHITTKA e BROCKMANN, 2005)]. 117

Figura 47 – Mapa tridimensional dos fatores de decomposição de odores no sistema olfativo das abelhas [Extraída de (GUERRIERI, SCHUBERT, *et al.*, 2005)]..... 118

Figura 48 – Distribuição não linear de pontos no espaço bidimensional. Em (a) uma reta que coincide com a primeira componente principal extraída pelo PCA. Em (b) uma curva suave que minimiza a soma dos erros quadráticos das distâncias dos pontos à curva (Extraída e adaptada de (HASTIE, 1984)). 119

Figura 49 – Representação de uma curva $f(s)$ que passa pelo centro de gravidade da densidade de distribuição $P(V)$. O centro de gravidade da região definida entre as duas retas ortogonais infinitesimalmente separadas encontra-se no sobre a curva $f(s)$ que passa nessa região [Extraída de (RITTER, MARTINETZ e SCHULTEN, 1992) página 232]. 119

Figura 50 - A figura representa uma grade discreta bidimensional de um mapa SOM em treinamento onde o cruzamento das linhas representa a posição atual do vetor de peso $\mathbf{w}j$. Um volume parcial da densidade de distribuição dos dados está representado na figura por Vj.A grade SOM possuirá propriedade da superfície principal se cada neurônio $\mathbf{w}j$ for o centro de gravidade da densidade local definida pelo volume Vj [Extraída de (RITTER, MARTINETZ e SCHULTEN, 1992) pág. 234]. 120

Figura 51 – Em (a) algumas imagens de faces do conjunto de treinamento, em (b) a reconstrução visual dos neurônios treinados com as imagens de faces femininas, conforme discutido na seção 5.5.1. As setas indicam algumas direções nas quais pode-se observar transições de características das imagens de face. 121

Figura 52 – Árvore formada pelo SOMM mostrando que o vértice 11 é o mais próximo dos vértices 2 e 23. 125

Figura 53 – Distribuição das imagens de faces femininas do Banco de Faces FEI (OLIVEIRA JR. e THOMAZ, 2006) a partir das duas primeiras componentes principais. Os círculos em vermelho representam os neurônios após o treinamento. As linhas azuis indicam a relação de vizinhança entre os neurônios. 128

Figura 54 – Em (a) tem-se um grafo parcialmente conectado com pesos ponderados iguais e em (b) a árvore formada pelo algoritmo SOMM. 129

Figura 55 – Exemplos de formação de árvores a partir do grafo em (a), em (b) uma árvore genérica em (c) duas árvores formadas pelo algoritmo SOMM e em (d) uma árvore MST [As figuras (a), (b) e (d) foram extraídas e a figura (c) foi adaptada de (ZAHN, 1971)]. 130

Figura 56 – Representação de dois agrupamentos formados pelo SOMM em (a) e em (b) os mesmos agrupamentos ligados por um arco "inconsistente" pelo algoritmo MST [A figura (b) foi extraída e a figura (a) foi adaptada de (ZAHN, 1971)]. 130

Figura 57 – Contra exemplo de um arco (A-B) Gestalticamente inconsistente conforme (ZAHN, 1971) e que pode não ser removido pelo SOMM [Extraída e adaptada de (ZAHN, 1971)]. 131

Figura 58 – Gráfico Silhoutte representando quatro agrupamentos a partir do conjunto de treinamento de Faces Femininas. O eixo x representa o valor do índice Silhouette para cada imagem de face e no eixo y a separação e ordenamento decrescente de cada imagem por grupo. 135

Figura 59 – Projeção em duas dimensões de uma massa de dados (círculos pretos) e duas imagens $\mathbf{x}_i$ e $\mathbf{x}_j$ próximas entre si separadas pelo hiperplano ortogonal à segunda componente principal. O círculo vermelho sobre o eixo da PC1 é apenas ilustrativo, representando a projeção ortogonal do ponto $\mathbf{x}_j$ sobre esse eixo..... 136

Figura 60 – Mapa SOMM com dados do mapa SOM Original 10×7 sobrepostos sobre as projeções das duas primeiras componentes principais do conjunto de treinamento com faces femininas. Os pontos azuis representam as faces femininas sorrindo, os pontos roxos representam as faces com expressão neutra, os círculos vermelhos são os neurônios de interpolação e os círculos verdes são os neurônios com votação. As raízes das árvores estão indicadas por uma circunferência preta envolvendo um círculo verde..... 143

Figura 61 - Mapa SOMM com dados do mapa SOM Reposicionado 10×7 sobrepostos sobre as projeções das duas primeiras componentes principais do conjunto de treinamento com faces femininas. As convenções de cores seguem as mesmas definições da Figura 60. 144

Figura 62 – Mapa SOMM com os neurônios originais. Observa-se a formação de sete árvores sobre todo espaço de entrada. Os círculos vermelhos são neurônios que não receberam votação. As letras em vermelho indicam onde se encontram as raízes das árvores. As convenções de cores seguem as mesmas definições da Figura 60.144

Figura 63 – Imagens reconstruídas dos neurônios que formam as árvores do SOMM. As imagens pontilhadas em verde representam as raízes das árvores e os números sobre as imagens correspondem aos neurônios das árvores do mapa SOMM. 145

Figura 64- Imagens reconstruídas dos neurônios reposicionados que formam as árvores do SOMM. As imagens pontilhadas em verde representam as raízes das árvores e os números sobre as imagens correspondem aos neurônios das árvores do mapa SOMM..... 147

Figura 65 – Gráficos dos índices de correlação Silhouette, Spearman e Erro Topológico TE_SOMM para mapas quadrados. Estão diferenciados por cores os mapas SOM Original e SOM Reposicionado. 148

Figura 66 - Gráficos dos índices de correlação Silhouette, Spearman e Erro Topológico TE-SOMM para mapas retangulares com 70 neurônios no total. Estão diferenciados por cores os mapas SOM Original e SOM Reposicionado. 148

Figura 67 – Projeção das árvores SOMM sobre as duas primeiras componentes principais do conjunto de treinamento com faces femininas. Os neurônios são do mapa SOM Original. As convenções de cores seguem as mesmas definições da Figura 60. 149

Figura 68 - Projeção das árvores SOMM das duas primeiras componentes principais do conjunto de treinamento com faces femininas. Os neurônios são do mapa SOM Reposicionado. As convenções de cores seguem as mesmas definições da Figura 60..... 150

Figura 69 – Amostras do Banco de Faces FEI. Grupos de faces femininas com expressão sorrindo..... 151

Figura 70 - Gráficos dos índices de correlação Silhouette, Spearman e Erro Topológico TE-SOMM para mapas retangulares com 100 neurônios no total. Estão diferenciados por cores os mapas SOM Original e SOM Reposicionado. 152

Figura 71 – Projeções, nas duas componentes principais, das árvores SOMM com neurônios nas posições originais. Os pontos roxos representam as imagens do Banco de Faces FERET parcial. 153

Figura 72 - Projeções, nas duas componentes principais, das árvores SOMM com neurônios reposicionados. Os pontos roxos representam as imagens do Banco de Faces FERET parcial. 153

Figura 73 – Reconstrução visual de quatro árvores SOMM geradas a partir de um mapa SOM Original modelando a base de dados do Banco de Faces FERET parcial. 154

Figura 74 – Os círculos numerados indicam os neurônios da árvore SOMM gerada de um mapa SOM Original treinado com as imagens do Banco ISOMAP. 155

Figura 75 – Projeção das árvores SOMM nas duas primeiras componentes principais. As imagens de faces acrescentadas à figura são as mais próximas dos neurônios correspondentes e foram dispostas manualmente. 157

Figura 76 – Amostras dos quadros de vídeo de uma pessoa conversando em frente a uma câmera [Extraída de (COOTES, Acessado em 03/01/2013). 158

Figura 77 – Mapas SOMM e árvores geradas com o conjunto de treinamento de *frames* de vídeo. As imagens de faces reconstruídas foram colocadas manualmente próximas ao neurônio que as representam. Os quadros de vídeo foram disponibilizados por Tim Cootes em: http://personalpages.manchester.ac.uk/staff/timothy.f.cootes/tfc_software.html. Acessado em 03/01/2013. 160

Figura 78 – Representação de três *manifolds* unidimensionais [Extraída de (LEE, 2000) página 2]. 176

Figura 79 – Representação de um *manifold* bidimensional [Extraída de (LEE, 2000), página 3]. 177

Figura 80 – Ilustração de um conjunto de pontos nos espaço de vetorial de duas dimensões e a possível curva original onde os dados poderiam estar contidos [Adaptada de (FUKUNAGA, 1990), página 281] 177

Figura 81 – Dado um ponto Q no espaço de pontos H, define-se $Dmax$ como a maior distância e $Dmim$ como a menor distância em relação ao ponto Q. Os pontos que caem no espaço expandido por um fator de ganho ε, que define uma região de incerteza em relação ao ponto Q, podem não ser corretamente diferenciados como os vizinhos mais próximos [Extraída de (BEYER, GOLDTEIN, *et al.*, 1999)]. 180

Lista de Tabelas

Tabela 1 – Algoritmo incremental para treinamento dos Mapas Auto-Organizáveis - SOM 59

Tabela 2 – Algoritmo em Batelada para treinamento dos Mapas Auto-organizáveis – SOM 61

Tabela 3 – Algoritmo de Reposicionamento dos Neurônios 91

Tabela 4 – Resultado das medidas de qualidade do mapa treinado com imagens de faces. 108

Tabela 5 – Algoritmo SOMM (Conforme notação e simbologia definidas anteriormente) 126

Tabela 6 – Tabela de Avaliação Subjetiva do Índice Silhouette global..... 134

Tabela 7 – Tabela dos índices de qualidade, erro de distorção e quantização para o Mapa SOM Original.. 146

Tabela 8 – Tabela dos índices de qualidade, erro de distorção e quantização para o Mapa SOM Reposicionado 146

Tabela 9 - Resultado de qualidade do mapeamento com as imagens ISOMAP. 156

Tabela 10 – Resultado de qualidade do mapeamento com as imagens de *frames* de vídeo. 158

Lista de Abreviaturas

ANN	*Artificial Neural Network*
BMU	*Best Match Unit*
DFFS	Dimensão Fractal Fuzzy Significativa
DNA	*Deoxyribonucleic Acid*
FERET	*Face Recognition Technology*
IJCNN	*International Joint Conference on Neural Networks*
KDD	*Knowledge Discovery in Database*
KMM	*Kernel Map Manifold*
ICANN	*International Conference on Artificial Neural Networks*
ISOMAP	*Isometric feature Mapping*
LLE	*Local Linear Embedding*
MLP	*Multi-Layer Perceptron*
MD	Mineração de Dados
MDS	*Multi-Dimensional Scaling*
MRI	*Magnetic Resonance Imaging*
NLM	*NonLinear Mapping*
PCA	*Principal Components Analisys*
PEPS	Potencial Excitatório Pré-Sináptico
PPS	*Probabilistic Principal Surface*
PPS-I	*Probabilistic Principal Surface with ISOMAP*
QE	*Quantization Error*
RBF	*Radial Basis Function*
RNA	Redes Neurais Artificiais
SDE	*Semidefinite Embedding*
SOM	*Self-Organizing Map*
SOMM	*Self-Organized Manifold Mapping*
TE	*Topologycal Error*
VQ	*Vector Quantization*
WSOM	*Workshop on Self Organizing Maps*
WTA	*Winner-Takes-All*

Convenções e Lista de Símbolos

Na notação das equações ao longo do texto adotam-se as seguintes convenções:

a, b	Escalares
c	índice do neurônio vencedor (BMU)
i	i-ésimo elemento de um vetor
j	j-ésimo linha de uma matriz
d_{ij}	Distância Euclidiana entre amostras i e j
δ_{ij}	Dissimilaridade entre amostras i e j
l	Número de linhas de uma matriz de imagem
p	p-ésima componente principal
n	Dimensionalidade de um vetor ou matriz
d	Dimensionalidade de um vetor tal que $d < n$
k	Número de neurônios do mapa SOM
m_j	j-ésimo neurônio do mapa SOM
N	Número de amostras do conjunto de treinamento
q	Número de amostras tal que $q \ll N$
φ_i	Autovetor de uma matriz
λ_i	Autovalor de uma matriz
$\mathbf{x} = [x_1, x_2 \dots x_n]^T$	Vetores e coordenadas (características)
$\mathbf{X} = [\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \dots \mathbf{x}_n]^T$	Matriz de vetores aleatórios
$\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}, \mathbf{S}, \mathbf{U}, \mathbf{Y}, \mathbf{Z}$	Matrizes
$\mathbf{\Sigma}_{\mathrm{x}}$	Matriz de covariância
$\mathbf{\Phi}$	Matriz de autovetores
$\mathbf{\Lambda}$	Matriz de autovalores
$\bar{\mathbf{x}} = E(\mathbf{X})$	Vetor média
$\mathcal{M}$	Subespaço que contém um *manifold*
Γ	Função Gama
$\#\{.\}$	Indica a cardinalidade do conjunto
$\lVert \mathbf{a} - \mathbf{b} \rVert$	É a métrica Euclidiana entre o vetor **a** e **b**

Nota: Informa-se que todos os vetores e matrizes neste trabalho serão representados em letras minúsculas em negrito e letras maiúsculas em negrito, respectivamente, sejam letras latinas ou gregas.

1 Introdução

"In order to control behavior, the biological brain must be able to form internal models of the sensory environment and its history. Such a miniature environment to which all decisions are related is provided by memory"

Teuvo Kohonen

Em 1943, quando McCulloch e Pitts (MCCULLOCH e PITTS, 1943) publicaram o pioneiro trabalho sobre redes neurais artificiais binárias, os autores, possivelmente, não imaginariam os inúmeros desdobramentos que se seguiriam nessa área científica. O trabalho de McCulloch e Pitts foi considerado pioneiro ao apresentar um modelo matemático formal de um neurônio baseado no conceito de sinapses excitatórias e inibitórias. Posteriormente, Donald Hebb (HEBB, 1949) propôs as bases formais do mecanismo do aprendizado, descrevendo como as sinapses biológicas aumentariam sua força em função de um aprendizado. A combinação dos dois trabalhos influenciou várias gerações de pesquisadores na área das redes neurais artificiais (KUMAR, 2004).

Atualmente, grandes avanços na pesquisa da Neurociência associados à tecnologia de sensoriamento e coleta de imagens do sistema nervoso de maneira não invasiva permitiram expandir o conhecimento sobre o funcionamento de certas regiões do cérebro, tais como o Lobo Temporal Medial (BAKKER, KIRWAN, *et al.*, 2008), e dessa maneira realimentar as pesquisas com redes neurais artificiais. Outras áreas muito distintas entre si têm contribuído significativamente no desenvolvimento das redes neurais artificiais, tais como: Psicologia Cognitiva, Neurociência Molecular e Ciência da Computação. Esta última, inclusive, tem auxiliado muito no desenvolvimento de modelos computacionais e de simulação de sistemas neurais biológicos com um alto grau de realismo. Nesta categoria cita-se o programa GENESIS (*General Neural Simulation System*) (GENESIS, 2011), que é capaz de simular o comportamento de um único neurônio até grandes redes neurais baseado em comportamentos subcelulares e de reações bioquímicas. Estão também disponíveis via *internet* simulações remotas de redes de motoneurônios para estudar o comportamento do sistema neuromuscular, por exemplo: (CISI e KOHN, 2008).

As conferências sobre redes neurais têm crescido, não somente no aspecto do número de participantes, mas também com propostas de novos temas. A edição de 2011 do IJCNN –

International Joint Conference on Neural Networks – (IJCNN, 2011) abordou desde temas clássicos como Redes Neurais Recorrentes, Redes SOM (*Self Organizing Maps*), Redes RBF (*Radial Basis Functions*) e MLP (*Multi-Layer Perceptron*), até temas mais recentes como Redes Dinâmicas, Redes Neurais Pulsadas e Engenharia Neuromórfica. Deseja-se destacar que os trabalhos relacionados com Aprendizado Não Supervisionado têm crescido bastante e, principalmente, quando são inspirados em algum modelo biológico ou cognitivo.

1.1. Motivação

Uma das motivações deste trabalho está baseada no fato de que os sistemas biológicos, por mais simples que sejam, apresentam uma autonomia de ações e comportamentos que superam muitos programas e modelos computacionais dos mais complexos. Apesar de um ser invertebrado possuir uma rede neural muito pequena, comparada com a dos vertebrados, eles apresentam capacidades adaptativas surpreendentes. E o que mais chama a atenção é a alta otimização, tanto em espaço ocupado quanto em energia consumida para desempenhar suas funções básicas.

Olhando para este cenário, entende-se que metodologias que emulem o comportamento e funcionalidades biológicas poderiam permitir a criação de sistemas artificiais mais autônomos e funcionais. Mais autônomos porque poderiam se adaptar mais rapidamente às mudanças impostas pelo ambiente nos quais estão inseridos e, funcionais porque poderiam criar sistemas e equipamentos que auxiliariam o dia a dia humano em tarefas consideradas perigosas, repetitivas ou que exigissem um alto grau de coordenação e atenção.

Uma dessas metodologias artificiais que mais se aproxima dos modelos biológicos é a rede neural SOM (*Self Organizing Maps*), cujas características funcionais têm permitido a aplicação em diversas áreas. Dentre as áreas de aplicação podem se destacar: análise de imagens médicas, máquinas de visão artificial, reconhecimento de caracteres, reconhecimento de voz, análise de falhas em sistemas de transmissão elétrica e etc. (KOHONEN, 2001). Dessa forma, a motivação principal deste trabalho constitui-se na possibilidade de explorar e estender as capacidades funcionais das redes neurais SOM com aspectos que não foram cobertos até o momento ou que são pouco destacados na literatura científica.

1.2. Objetivos

Baseado nas motivações discutidas na seção 1.1, entende-se como objetivo principal desta tese o desenvolvimento de uma metodologia não supervisionada que possa extrair informações, a partir dos mapas auto-organizáveis, como aquelas geradas pelos mapas SOM de Kohonen. Esta tese discutirá que os mapas SOM contêm inúmeras informações capturadas pelos neurônios, mas que ainda exigem um pós-processamento para extração de informação. E essa extração estará relacionada com análise de agrupamentos, redução de dimensionalidade e generalização da informação obtida de maneira não supervisionada. Um dos objetivos é facilitar a análise visual de imagens. Todos esses aspectos têm inspiração biológica, e o agrupamento das técnicas citadas visa obter um sistema que realize a exploração do espaço de dados de maneira não supervisionada.

1.3. Contribuições

As contribuições estão relacionadas com os objetivos descritos na subseção 1.2 e são elas:

a) Revisão bibliográfica atualizada com resgate dos conceitos biológicos mais relevantes que inspiraram as redes neurais artificiais e especificamente o SOM;
b) Utilização do PCA (*Principal Components Analysis*) para redução de dimensionalidade em aplicações relacionadas com imagens e mapas SOM. Descrição metodológica da visualização dos neurônios do mapa SOM quando se trabalha com base de imagens e PCA;
c) Uma nova proposta para reduzir o erro de quantização dos mapas SOM após o treinamento;
d) Uma nova proposta de visualização dos resultados dos mapas SOM e o desenvolvimento de um algoritmo, denominado SOMM (*Self-Organizined Manifold Mapping*), que constrói um novo mapa a partir dos neurônios de um mapa SOM treinado sobre a estrutura dos dados de entrada;
e) Adaptação e aplicação dos índices de correlação estatística (Silhouette e Spearman) para avaliação dos mapas SOMM proposto nesta tese;
f) Adaptação e aplicação de uma métrica para determinar o erro topológico dos mapas criados pelo novo algoritmo SOMM.

Junto com as contribuições listadas acima foram publicados 4 artigos em conferências e 1 capítulo de livro cujas referências encontram-se no Apêndice A.

1.4. Organização do Trabalho

Este trabalho está organizado de maneira que se possa conectar as inspirações biológicas com os mapas auto-organizáveis e também na perspectiva de uma visão diferenciada dos resultados de um mapa SOM.

No capítulo 2 (Fundamentação Biológica) descrevem-se as principais inspirações biológicas que levaram ao desenvolvimento dos mapas auto-organizáveis e da própria área de redes neurais artificiais. Procura-se destacar os elementos biológicos que são utilizados como modelos para as redes neurais artificiais e também para a proposta deste trabalho. No capítulo 3 (Exploração dos Espaços Multidimensionais) são apresentados aspectos gerais para se compreender a problemática de se trabalhar em espaços multidimensionais, nos quais estão inseridos muitos dos problemas frequentes tais como: redundâncias, ruídos e dados esparsos. No capítulo 4 (Mapas Auto-Organizáveis), apresenta-se resumidamente o conceito e o princípio dos mapas auto-organizáveis, uma breve descrição histórica do seu desenvolvimento e a fundamentação biológica que inspirou a criação dos mapas auto-organizáveis. São também apresentadas e discutidas as ferramentas de visualização dos mapas, os efeitos da redução da dimensionalidade do espaço de entrada, a preservação topológica e algumas métricas para avaliação da qualidade dos mapas.

O capítulo 5 (Interpretação Visual dos Mapas Auto-Organizáveis) discute o resultado dos mapas SOM e possíveis falhas de interpretação desses mapas e suas causas. Apresenta-se uma proposta que busca minimizar o erro de quantização sem criar muito impacto na preservação topológica do mapa. No capítulo 6 discute-se a principal contribuição deste trabalho, cuja metodologia foi denominada SOMM (*Self Organized Manifold Mapping*). A nova proposta propõe a visualização dos dados do mapa SOM a partir de recortes que são realizados sobre a estrutura dos dados de entrada. Em seguida, no capítulo 7 são apresentados os resultados da aplicação do SOMM em conjuntos de treinamento formados por imagens. O resultado dos recortes pode produzir a descoberta de agrupamentos e generalização dos dados, baseado nos resultados do mapa de Kohonen. Finalmente, no capítulo 8 apresentam-se as conclusões obtidas com o desenvolvimento desta tese, possibilidades de aplicações e propostas futuras de pesquisa..

2 Fundamentação Biológica

"The world that animals perceive is not an objective, veridical representation of physical world, but is instead a product of the particular sense organs that each species has acquired in its evolutionary history."

Jacob Von Uexkull

O encéfalo humano é uma estrutura biológica complexa e altamente organizada. Ele é formado por bilhões de neurônios conectados entre si, em grupos ou em áreas conforme suas especializações e, principalmente, com capacidade de se comunicarem. Outra característica dominante nos sistemas encefálicos é a plasticidade neural. É através desse mecanismo que os neurônios alteram a sua atividade sináptica e se adaptam conforme os diferentes estímulos a que são submetidos no dia a dia (PURVES, AUGUSTINE, *et al.*, 2005).

Estudar o mecanismo da plasticidade neural é o primeiro passo para compreender como os sistemas biológicos aprendem com o ambiente, como processam novas informações e as memorizam. Esta é uma das inspirações biológicas que conduziram as primeiras pesquisas na área de RNAs (Redes Neurais Artificiais), cujo propósito é emular os diversos comportamentos do sistema nervoso biológico.

Em virtude da importância do tema, discutem-se neste capítulo os principais aspectos e as estruturas biológicas que são de interesse para compreender como funcionam as RNAs e, particularmente, as Redes Auto-Organizáveis (KOHONEN, 2001). Entretanto, não se pretende discutir a estrutura celular do neurônio. Existem inúmeros trabalhos e obras que discorrem detalhadamente sobre o tema. Sugere-se ao leitor interessado consultar (KANDEL, SCHWARTZ e JESSELL, 2000) e (BEAR, CONNORS e PARADISO, 2001) para uma visão biológica do tema, e (HAYKIN, 2001) como um introdutório de como os neurônios biológicos são compreendidos sob o ponto de vista das RNAs. Outra importante referência sobre a modelagem artificial dos neurônios biológicos pode ser encontrada em (GERSTENER e KISTLER, 2002), que propõe uma visão mais próxima dos neurônios biológicos, visto que o processamento ocorre na forma pulsada, carregando não somente informações de magnitude, mas também de tempo.

Os modelos biológicos abordados nesta tese tem apenas o objetivo de ilustrar certa similaridade com os modelos artificiais, mas não se pretende aprofundar essa discussão.

2.1 Objetivos do Capítulo

As seções seguintes discutem a relação entre memória e aprendizado, tentando descrever o funcionamento e interação entre os dois mecanismos. Este capítulo discute dois tipos de memória humana e como ocorre a gênese do aprendizado a partir da formação da memória. Apresenta-se também o aprendizado por categorização e a abstração de protótipos. Finalmente, na seção 2.4, descrevem-se os mapas corticais que foram objeto de inspiração para o desenvolvimento das RNAs baseadas em SOM.

2.2 Memória

Na fase pré-natal, a formação do encéfalo humano apresenta muitas similaridades entre os diferentes indivíduos. Contudo, ao longo do crescimento pós-natal, influências culturais e ambientais vão formando indivíduos diferentes. A gênese dessas transformações psicológicas e comportamentais está associada ao processo de aprendizado e memorização. Em sistemas biológicos, memorizar não é apenas guardar uma informação, é reter um conhecimento extraído ou influenciado pelo ambiente. Assim, não é possível separar a memória do aprendizado.

Basicamente, definem-se para humanos dois tipos de memória: declarativa e não declarativa. As memórias declarativas estão associadas à recordação de eventos, fatos, conhecimento explícito e acessível verbalmente. As memórias não declarativas são aquelas relacionadas com habilidades motoras e sensações emocionais e que não são acessíveis explicitamente. Em outras palavras, não se descreve verbalmente determinados conhecimentos adquiridos, tais como andar de bicicleta, nadar, tocar um instrumento, descrição de emoções e sentimentos, aprender padrões e etc.

Os estudos em Neurociência indicam que determinadas estruturas encefálicas estão relacionadas e orientadas para os processos de memorização e aprendizado de alto nível, tais como os de eventos e fatos. A importância em discutir memória e aprendizado está muito bem descrita em (KANDEL, SCHWARTZ e JESSELL, 2000), em que *"O aprendizado é o processo pela qual nós adquirimos conhecimento sobre o mundo, enquanto a memória é o processo na qual o conhecimento é codificado, memorizado e depois recuperado"*.

Observa-se que toda extração de conhecimento do ambiente é uma interação entre o sistema biológico e os estímulos que se recebe do ambiente. Os diferentes estímulos podem

chegar de diferentes fontes, mas são codificados e eventualmente armazenados para uso posterior. O processo conjunto de aprender e memorizar melhora o desempenho dos sistemas biológicos com o passar do tempo, e as reações aos estímulos do ambiente, favoráveis ou não, tornam-se mais rápidas. Compreender como o processo de aprendizado e consolidação (memorização) da informação ocorre nos sistemas biológicos pode contribuir para o desenvolvimento de novos algoritmos e heurísticas em sistemas auto-organizáveis artificiais. Imitar um ou mais aspectos da inteligência biológica tem sido uma das estratégias utilizadas na área da Inteligência Computacional (IC) para resolver problemas complexos do mundo real (EBERHART e SHI, 2007) e os Mapas Auto-Organizadas de Kohonen são um exemplo clássico dessa abordagem. Os temas apresentados nas próximas seções são apenas descrições temáticas e não foram realizadas analises ou comparações com os modelos artificiais discutidos nesta tese.

2.3 Aprendizado de Categorização e Abstração de Protótipos

Humanos têm uma capacidade inata para categorizar o universo que os rodeia. Sem esforço ou conhecimento *a priori*, as pessoas tendem a classificar tudo que veem, tocam, cheiram, ouvem, comem, gostam, percebem, vivem e conhecem. Esse processo é diário e, muitas vezes inconsciente, e resulta da necessidade do cérebro em criar *representações econômicas* dos estímulos que recebe (ASHBY e WALDRON, 2000), (ZEITHAMOVA e MADDOX, 2006).

Estudos com pacientes amnésicos têm demonstrado que o aprendizado de categorização se processa por mecanismos que não estão associados à memória declarativa. Em outras palavras, o processo de categorização seria um processo não consciente e, portanto, associado à memória não declarativa e sem uma descrição formal de como ocorreu. Em (SQUIRE e KNOWLTON, 1995) os autores descrevem um experimento com um paciente amnésico e quatro voluntários saudáveis que são instruídos a observar 40 diferentes padrões de treinamento. Após a apresentação dos padrões o paciente e os voluntários foram informados de que os padrões pertenciam a uma determinada categoria. Em seguida, foram apresentados 84 novos padrões e solicitado que os voluntários indicassem, a cada apresentação, se o novo padrão pertencia ou não à categoria do conjunto de treinamento anteriormente apresentado. O paciente amnésico apresentou desempenho semelhante aos voluntários de controle, indicando que a capacidade de categorização não foi prejudicada pela amnésia. No entanto, na tarefa de reconhecimento, quando foi solicitado que a cada apresentação dos 84 novos padrões, os

participantes respondessem se um determinado padrão, previamente apresentado, foi visto no conjunto de treinamento, o desempenho do paciente amnésico ficou abaixo da média do controle. Os autores discutem que no processo de reconhecimento, a memória declarativa exerce um papel fundamental. Como no caso do paciente amnésico não ocorre a consolidação da memória, ele fica prejudicado nas tarefas em que necessita evocar lembranças (SQUIRE e KNOWLTON, 1995), (SQUIRE e ZOLA, 1996).

O experimento de (SQUIRE e KNOWLTON, 1995) procurou dissociar qualquer conhecimento prévio dos voluntários em relação aos padrões apresentados e também não deveria exigir esforço cognitivo. O experimento procurou compreender como os humanos conseguem categorizar, por exemplo cachorros, mesmo não tendo conhecido previamente todas as raças de cachorros. Para gerar o conjunto de testes, um padrão protótipo foi gerado na tela de um computador numa área de 12×12 centímetros na qual foram dispostos aleatoriamente nove pontos pretos, e que está reproduzido na Figura 1 (b) no alto. Tanto os padrões de treinamento quanto os de teste são distorções desse padrão protótipo em menor ou maior grau. Em outras palavras, os pontos pretos estão deslocados em direções aleatórias, mas mantendo-se certo padrão de distância entre os pontos. Nas avaliações de aprendizado por categorização pretendeu-se identificar os circuitos cerebrais que estão envolvidos nesse tipo de aprendizado.

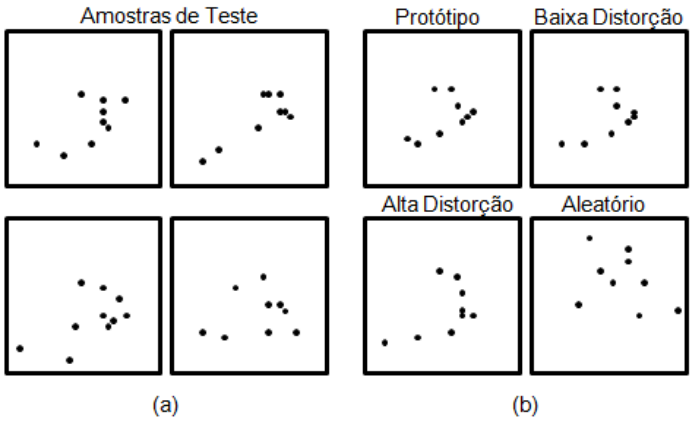


Figura 1 – No grupo (a) têm-se amostras do conjunto de treinamento do experimento de categorização e no grupo (b) amostras do conjunto de teste com características distintas e que são distorções do "Protótipo". Acima de cada figura do grupo (b) destaca-se a informação qualitativa do grau de distorção imposta no protótipo. Pode-se observar em (a) amostras do conjunto de 40 padrões visuais apresentadas durante a fase de treinamento e em (b) amostras do conjunto de 84 padrões de teste. [Extraída de (SQUIRE e KNOWLTON, 1995)].

2.4 Representações no Cérebro

Apesar de o cérebro humano ter uma enorme capacidade de processamento paralelo, a imensa quantidade de informações que chega pelos diferentes sistemas sensoriais pode dificultar esse processamento. Há uma estimativa de que o sistema auditivo é composto por 35000 a 50000 neurônios, enquanto que no sistema visual há aproximadamente 125 milhões de fotorreceptores que se afunilam para se ligarem a um milhão de células ganglionares, cuja saída é o feixe de nervos óticos (BEAR, CONNORS e PARADISO, 2001). Nota-se que no início do estágio do sistema visual já há uma *redução de dimensionalidade*, que no entanto ainda permanece muito grande. A questão que se abre é se o cérebro trabalha efetivamente com toda informação que chega pelas vias aferentes ou se de alguma maneira pré-processa essa massa de informações.

Um exemplo dessa complexidade no tamanho da informação associado com a real necessidade de se tratar esse volume de dados pode ser visto na Figura 2. Suponha que cada célula fotorreceptora na retina fornecesse um valor sobre um sistema de coordenadas fictício. As imagens que chegam na retina poderiam ser compreendidas como um ponto num sistema de coordenadas com milhões de eixos. Na Figura 2 estão representados apenas três desses possíveis eixos do sistema de coordenadas. À medida que as faces giram elas descreveriam uma curva suave não linear de dimensão menor do que o espaço das imagens. Entretanto, se o cérebro faz esse tipo de redução e como trata essas reduções ainda é desconhecido (SEUNG e LEE, 2000).

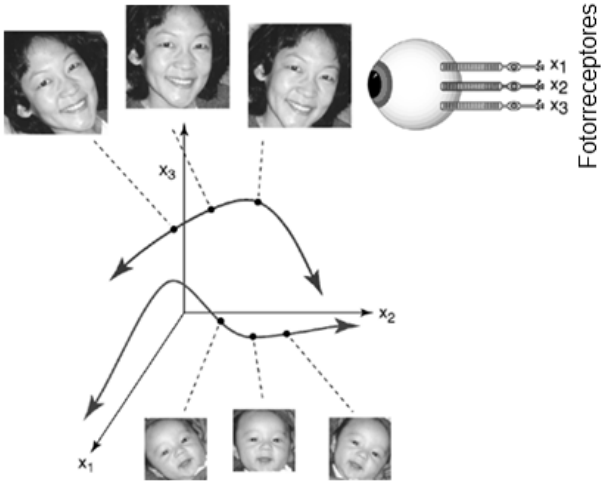


Figura 2 – Ilustração de uma possível generalização de um espaço visual em coordenadas fictícias. Na figura estão representadas apenas 3 eixos x_1, x_2, x_3 [Extraída de (SEUNG e LEE, 2000)].

Uma pesquisa conduzida por Sereno & Lehky (SERENO e LEHKY, 2011) com macacos indicou que uma população de neurônios do córtex visual na região denominada Córtex Intraparietal Lateral, a despeito da grande quantidade de neurônios, trabalha com representação visual em *baixa dimensão*. Em outras palavras, as imagens nessa região do córtex são tratadas como informação espacial em três dimensões, assim como apresentada na Figura 2 e que poderia ser entendida como uma *dimensionalidade intrínseca*, na qual informações de baixa dimensão estariam embutidas em dados alta dimensionalidade, como no caso das imagens. Por outro lado, a região denominada Córtex Inferotemporal Anterior processa as imagens de maneira topológica, categorizando a informação visual ao invés de defini-las espacialmente em um sistema de coordenadas, o que seria útil para reconhecer objetos ou cenas. A pesquisa de (SERENO e LEHKY, 2011) indica que em primatas o sistema visual trataria as informações coletadas como representações isomórficas de baixa dimensão e também como representações categorizadas desse espaço, por exemplo: acima ou abaixo.

2.5 Mapas Corticais Somatotópicos

Um aspecto fascinante do cérebro é a organização topográfica dos sensores primários, usualmente conhecido como mapa somatotópico e também do córtex motor associado à musculatura geral. Os mapas somatotópicos foram inicialmente descobertos na década de 30 por Penfield (KANDEL, SCHWARTZ e JESSELL, 2000) em pacientes que foram submetidos a cirurgias cranianas. Enquanto os pacientes estavam apenas com anestesia local, ele estimulava as regiões do córtex e perguntava a eles qual era a sensação. Os pacientes respondiam que a sensação era de que ele estava tocando em certas regiões do corpo. Após várias coletas, Penfield produziu um mapa cortical que representava as diversas regiões táteis do corpo.

A Figura 3 (a) ilustra a seção do córtex somatotópico e as regiões táteis que são representadas no córtex. Em (b) tem-se a representação do homúnculo (homem pequeno), uma abstração figurativa do tamanho da sensibilidade de cada região tátil.

A desproporcionalidade das partes do corpo representadas na Figura 3 (b) é relativa ao tamanho da região representada no córtex da Figura 3 (a), e indica que essas regiões exigem mais circuitos neurais para serem controladas de maneira adequada. Penfield não somente mapeou o córtex somatosensorial, mas também o córtex motor, comprovando o que já se conhecia nos grandes primatas. Após a descoberta de Penfield uma nova questão surgiu. Qual a razão da existência desses mapas corticais? A compreensão exata da existência dos mapas

corticais ainda é um mistério. No início imaginou-se que o córtex motor executaria um controle mais fino dos músculos. Entretanto, experimentos recentes mostram que um único músculo é representado por uma região muito grande do córtex. Atualmente, considera-se que essa região é muito mais complexa do se pensava quando Penfield fez o mapeamento (PURVES, AUGUSTINE, *et al.*, 2005).

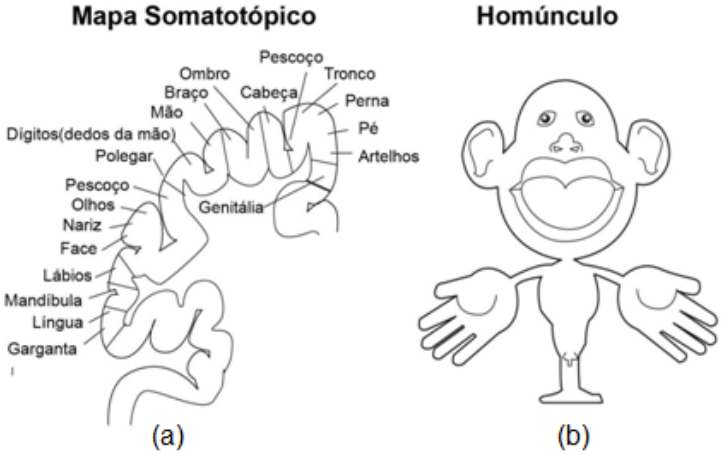


Figura 3 – Em (a) ilustram-se as regiões corticais responsáveis pela percepção de tato de cada região do corpo e em (b) a ilustração de um homúnculo representando a importância dada no córtex para cada região mapeada [Extraída de (PURVES, AUGUSTINE, *et al.*, 2005) página 204].

Este fenômeno se repete em outros mamíferos, cujas áreas de representação no cérebro são proporcionais às necessidades anatômicas e funcionais. Nos ratos, as vibrissas faciais têm uma área grande voltada para sua representação. Um fato curioso sobre os mapas corticais humanos é que eles são descontínuos. Em outras palavras, existem duas regiões que não são continuidades lineares em termos de representação do corpo humano. Observa-se que as regiões do córtex que representam as mãos e a face estão próximas e, da mesma maneira, as regiões que representam a genitália e os pés também são vizinhas. Entretanto, o restante das representações está condizente com a anatomia humana.

Farah (FARAH, 1998) propõe que possivelmente a posição como o feto se desenvolve ao longo da gestação faz com que as áreas corticais cresçam associando essas regiões e correlacionando os estímulos como sendo os mais próximos. Farah considera que essa hipótese está relacionada com o processo de formação *auto-organizado* do córtex, segundo o qual, áreas com maior estímulo e similaridades produzem relações e agrupamentos. A Figura 4 ilustra a posição fetal em diferentes períodos gestatórios. Solicita-se ao leitor que compare a posição das mãos e dos pés com as regiões corticais sensoriais representadas na Figura 3.

Figura 4 – Três fases do desenvolvimento pré-natal de um bebê, representando como as mãos e os pés estão próximos à boca e genitália, respectivamente [Extraída de (FARAH, 1998)].

Além do mapa sensorial somatotópico, mapas mais especializados são encontrados no cérebro. Podem-se destacar os mapas visual, olfativo, gustativo e auditivo, sendo que este último pode ser observado na Figura 5.

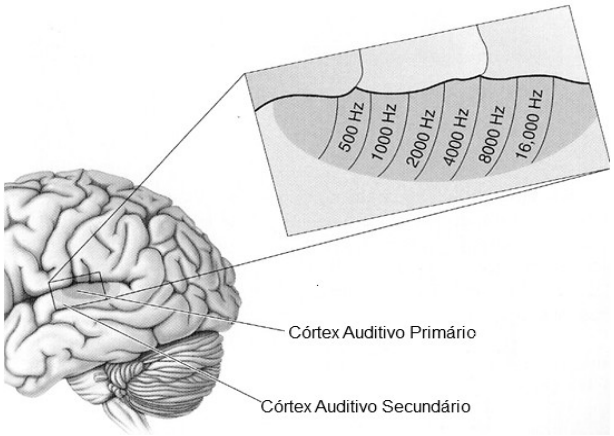


Figura 5 – Ilustração do mapa do córtex auditivo primário e secundário. A figura em destaque indica como as frequências estão divididas por faixas no córtex auditivo primário [Extraída de (BEAR, CONNORS e PARADISO, 2001) página 373].

Nota-se a grande especialização e organização desse córtex, no qual os sinais auditivos são percebidos conforme sua frequência formando uma espécie de decompositor espectral. Nesse mapa, conhecido também como mapa tonotópico, os neurônios são dispostos numa ordem topológica que reflete uma escala tonal do sinal sonoro. Os neurônios dispostos na área do córtex primário são altamente organizados, como apresentado em destaque na Figura 5, enquanto que os neurônios da região do córtex secundário apresentam uma distribuição mais difusa e menos organizada tonotopicamente. Segundo Purves *et al*,

> "*Sons especialmente importantes para a comunicação intraespecífica possuem em geral uma estrutura temporal altamente ordenada, Em humanos, o melhor exemplo de tais sinais variáveis no tempo é a fala, para a qual diferentes sequências fonéticas são percebidas como sílabas e como palavras distintas*" [(PURVES, AUGUSTINE, *et al.*, 2005) página 295].

Resumindo, a organização do córtex auditivo primário é especialmente importante para funções básicas como discriminar frequências e localizar sons. Ao contrário, no córtex auditivo secundário e adjacências, a especialização está no processamento de combinações de frequências e modulações em amplitude e frequência que são temporalmente complexas tais como ocorre na fala e na música.

2.6 Considerações Finais

Este capítulo procurou destacar os principais pontos de inspiração biológica que conduzem este trabalho de pesquisa. A organização dos temas cobertos procurou apontar:

a) A relação entre memória e aprendizado;
b) Aprendizado por categorização;
c) Mapas corticais sensoriais e auditivos;
d) Possíveis reduções de dimensionalidade nas representações sensoriais.

Cada um dos itens listados são temas que, de alguma maneira, estarão relacionados com os sistemas artificiais que serão discutidos nos próximos capítulos deste trabalho. Assim, essa mínima introdução se faz necessária para ressaltar as bases biológicas que conduziram os estudos e relacioná-los com a temática principal da tese que são os Mapas Auto-Organizados.

É importante também observar que os conceitos biológicos abordados neste texto são apenas ilustrativos e inspiradores dos mecanismos e estratégias de processamento de informações discutidos nos capítulos que se seguem. Os processos biológicos são extremamente complexos e exigem não somente uma visão microscópica (molecular) do neurônio, mas também uma visão mais holística. O cérebro não deve ser visto apenas como uma máquina computacional biológica, e sim como um sistema complexo que tem interação com diferentes estruturas e órgãos que se comunicam por uma intrincada rede de neurônios, mediadores químicos e hormonais.

3. Exploração de Espaços de Dados em Alta Dimensão

"One of the most interesting aspects of the world is that it can be considered to be made by patterns. A pattern is essentially an arrangement. It is characterized by the order of the elements of which it is made rather than by intrinsic nature of these elements"

Norbert Wiener

Os avanços tecnológicos sempre trazem inúmeras facilidades para o cotidiano e como consequência abre espaço para novas pesquisas. Um exemplo típico desse fenômeno está relacionado com a enorme quantidade de informação visual no formato digital (fotos, vídeos, etc.) que é gerada diariamente. Essas imagens, que podem ser do cotidiano, industriais, médicas, científicas, geográficas, espaciais, e etc., exigem novos mecanismos de busca, reconhecimento de padrões, categorização, classificação e armazenamento (FODOR, 2002).

Usualmente, uma imagem digital pode ser representada como uma matriz $\mathbf{Z}$ de dimensão $l \times c$, na qual l representa o número de linhas e c o número de colunas da matriz. Concatenando-se as linhas (ou as colunas) da matriz $\mathbf{Z}$ obter-se-á um vetor $\mathbf{x}$ de dimensão $n = l \times c$ que representará a imagem da matriz $\mathbf{Z}$ como um ponto no espaço $\mathbb{R}^n$. Esta forma de representação vetorial é mais adequada para o processamento da informação porque com ela se pode compor uma nova matriz $\mathbf{Z}^*{}_{N \times n}$ que representa a coleção de N imagens n-dimensionais.

Contudo, a alta dimensionalidade dos dados, inerente às representações do espaço de imagens, torna qualquer processamento computacionalmente massivo, isto sem considerar a dificuldade de avaliar a função densidade de distribuição das imagens no espaço n-dimensional para permitir dividir as regiões em categorias ou classes. Técnicas de manipulação e reconhecimento de imagens que trabalham com transformações lineares podem não representar corretamente o espaço de alta dimensão, caso o espaço seja formado de curvaturas e protuberâncias na sua superfície de distribuição (ZHANG, LI e WANG, 2005). Desta forma, torna-se necessário desenvolver técnicas que promovam uma manipulação otimizada da massa de dados e que possibilitem a exploração e a visualização da distribuição dos dados no espaço de alta dimensão. A otimização seria a exploração da estrutura da massa de dados para fins de simplificação, seja ela por meio da redução do número de características da massa de dados para um espaço d-dimensional, na qual $d < n$, ou pela redução da massa de dados de N elementos para uma quantidade de q-representantes do volume N total, tal que $q < N$, e que

mantenham a representatividade compacta da massa de dados original (MINGOTI, 2007) (MEDEIROS e COSTA, 2008). A palavra estrutura será usada, no contexto desta tese, como sendo uma relação geométrica entre os subconjuntos dos vetores de dados do espaço n-dimensional e formas geométricas tais como: hiperplanos e hiperesferas (SAMMON JR., 1969). A alta dimensionalidade dos dados não está restrita somente às imagens digitais. Qualquer representação de informação cuja quantidade de variáveis ou características seja maior do que três, no contexto desta tese, será considerada como de alta dimensão, visto que a nossa capacidade de visualizar espaços vetoriais está limitada a $\mathbb{R}^3$.

3.1 Objetivos do Capítulo

As próximas seções descreverão resumidamente alguns temas e conceitos considerados no contexto desta tese tais como: mapeamento e visualização dos espaços de alta dimensão. A próxima seção inicia a discussão apresentando alguns exemplos em mineração de dados, principalmente com imagens de vídeo, apenas para contextualizar o conceito de exploração de dados. Em seguida descrevem-se as restrições impostas pelos espaços de alta dimensão dos dados e os principais métodos para visualização e exploração desses espaços.

3.2 Objetivos da Exploração de Dados em Espaços de Alta Dimensão

A função primária de qualquer técnica de exploração de dados em alta dimensão é reduzir a massa de dados, seja em dimensionalidade n, seja em quantidade de dados N. Entretanto, outros objetivos não tão explícitos são apresentados. Compreender a estrutura de distribuição dos dados permite um conhecimento *a priori* de como as amostras se espalham e se comportam no espaço multidimensional, e esse conhecimento auxilia na categorização e classificação de novas amostras. Como descrito em (LEE e VERLEYSEN, 2010) e (MARTINEZ e MARTINEZ, 2005), o conhecimento da estrutura de alta dimensão permitiria:

a) Descobrir padrões (*Pattern Discovery*);
b) Reduzir a dimensionalidade (*Dimensionality Reduction*) e extrair a dimensionalidade intrínseca do espaço de dados de entrada, ou seja, encontrar formas de representação mais compacta (*Intrinsic Dimensionality*);
c) Visualizar a forma da distribuição do espaço de entrada (*Data Visualization*).

As subseções seguintes discutirão os temas relacionados no contexto da exploração de dados em alta dimensão e que são de interesse desta tese. Apresentam-se também algumas técnicas que auxiliam na exploração de dados em espaços multidimensionais mapeando-os para um espaço de dados de menor dimensão.

3.2.1 O Processo de Descobrir Padrões

O termo "Descobrir Padrões" (*Pattern Discovery*) é muito utilizado na área de Mineração de Dados (*Data Mining*) e significa explorar uma base de dados em busca de padrões. Desenvolvem-se ferramentas computacionais cujo objetivo é descobrir um padrão a partir de uma massa bruta de dados e de maneira não supervisionada. O mercado financeiro (Bancos e Operadoras de Cartões de Crédito) e os departamentos de *Marketing* das empresas utilizam muitos recursos de mineração de dados tanto para detectar operações fraudulentas quanto para estudar o comportamento do consumidor. Um exemplo clássico é o caso de uma rede de alimentação que observou que quando um homem vai ao supermercado comprar fraldas, ele com frequência caminha um pouco mais e compra um pacote com seis latas de cervejas. De posse dessa informação é possível adequar a distribuição dos produtos dentro do supermercado, conforme o interesse do consumidor, para aumentar as vendas (SUMATHI e SIVANANDAM, 2006).

Descobrir padrões é também considerado uma fase inicial do processo ou pré-processamento do KDD (*Knowledge Discovery in Database*). Vários autores destacam que Mineração de Dados (MD) não é KDD, e sim um processo dentro do KDD, que é definido como de extração de conhecimento novo e potencialmente útil para tomada de decisões (SUMATHI e SIVANANDAM, 2006) (SASSI, 2006).

Outra área que se beneficia da descoberta de padrões de maneira não supervisionada é a Mineração de Vídeo (*Video Mining*). A Mineração de Vídeo é uma abordagem de extração semântica da informação contida nas sequências de vídeo baseada em padrões de imagens, detecção de movimento e classificação de objetos (DAI, ZHANG e LI, 2006). Em Zhu *et al* (ZHU, AREF, *et al.*, 2003), os autores complementam que o objetivo básico da mineração de vídeo é *"(...) organizar dados de vídeo para exploração ou mineração de conhecimento onde o conhecimento possa ser explicado como um padrão especial (ex. eventos, agrupamentos, classificação, etc.) o qual seria desconhecido antes do processamento."*

Com as definições discutidas anteriormente chega-se numa sobreposição de conceitos. Qual a diferença entre *Descoberta de Padrões* e *Reconhecimento de Padrões*? Semanticamente define-se descoberta como: "o ato de descobrir algo, ação ou processo de revelar o que não se sabe". E reconhecer como: "identificar, distinguir algo ou alguém com certas características" (HOUAISS, 2001). Há uma sutil diferença semântica entre os dois verbos e que também se traduz nas metodologias computacionais. Tomemos como exemplo o caso do paciente com amnésia, descrito na seção 2.3 do capítulo 2, com os experimentos de categorização e reconhecimento de padrões. De alguma maneira o paciente percebeu que havia algum padrão entre as amostras. Entretanto, ele não conseguia armazenar as características dos padrões que permitissem o reconhecimento de novas amostras. Os mecanismos de descoberta de padrões por humanos ainda não são conhecidos, mas especula-se que possa estar associado às características intrínsecas da massa de dados que se está explorando (DICARLO, ZOCCOLAN e RUST, 2012).

Descobrir e reconhecer padrões são ações complementares, assim como destacado em (JAIN, DUIN e MAO, 2000), reconhecer padrões é realizar uma classificação supervisionada ou não supervisionada. Contudo, ao reconhecer padrões não se garante que há uma ordem temporal definida. Um exemplo seria um sistema que categorizasse sequências de vídeo e agrupasse as imagens (quadros) de acordo com as similaridades, mas não como uma sequência temporal e evolutiva das cenas. E a categorização de cenas de vídeo pode se tornar mais complexa caso outros contextos estejam misturados no conjunto dos dados brutos. A Figura 6 representa duas sequências de vídeo de um diálogo entre um médico e seu paciente. O agrupamento das imagens apenas por meio das similaridades descaracterizaria todo contexto das cenas. Neste contexto, uma combinação de várias técnicas se faz necessária para tentar resolver este problema.

Figura 6 – Duas sequências de cenas de vídeo (A e B) de um diálogo entre um paciente e um médico [Extraída de (ZHU, AREF, *et al.*, 2003)].

3.2.2 Redução da Dimensionalidade e Dimensionalidade Intrínseca

Técnicas de redução de dimensionalidade são ferramentas básicas em qualquer área que trabalhe com análise de dados, aprendizado de máquinas e reconhecimento de padrões. Usualmente nessas áreas, têm-se dados multidimensionais e poucas observações ou amostras, tornando a estimação de alguns parâmetros estatísticos das amostras muito limitada (RAUDYS e JAIN, 1991). Kaski e Peltonen (KASKI e PELTONEN, 2011), (PELTONEN, 2009) e (VENNA e KASKI, 2007) consideram que numa tarefa de redução de dimensionalidade, a visualização pode ser formalizada como recuperação de informação e que as medidas de qualidade da visualização recuperada dependem de quão precisa foi a generalização da recuperação.

Em geral, as técnicas de redução de dimensionalidade objetivam diminuir significativamente a massa de dados sob o ponto de vista de quantidade ou por redução do número de características que as representa. A dimensionalidade intrínseca pode ser entendida como uma premissa de que os dados do mundo real, apesar da alta dimensionalidade, podem ser representados num espaço de menor dimensão. É importante destacar que no mundo real os espaços não são necessariamente contínuos e suaves, usualmente são espaços não convexos e com descontinuidades (MAATEN, POSTMA e HERIK, 2009).

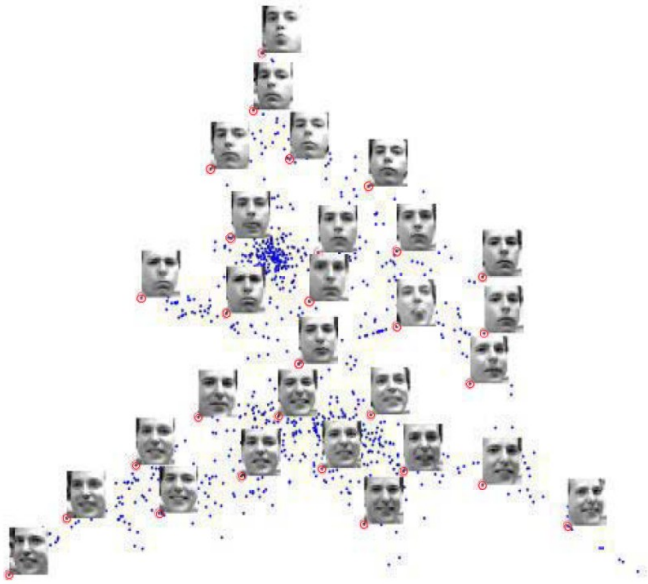


Figura 7 – Distribuição de 1000 imagens de faces no espaço bidimensional. Os pontos marcados em vermelho são os que representam as imagens de faces mostradas na figura [Extraída de (WEINBERGER e SAUL, 2004)].

As fotografias em sequência de uma pessoa sorrindo e depois triste não produzem duas pessoas diferentes. A pessoa é a mesma, apenas a expressão está se alterando. A di-

mensionalidade intrínseca da distribuição das imagens dessa pessoa poderia ser representada em duas dimensões, como ilustrada na Figura 7. Isto porque a percepção indicaria que há menos graus de liberdade do que a alta dimensionalidade das imagens propõe. Os pontos azuis na Figura 7 são marcações geradas pelo algoritmo SDE *(Semidefinite Embedding*) indicando onde as imagens estariam representadas no espaço de duas dimensões (WEINBERGER e SAUL, 2004).

As imagens de faces da Figura 7 foram anexadas manualmente pelos autores do artigo apenas para ilustrar como essa distribuição de pontos no plano 2D coincide com as expressões da pessoa. Deve-se observar também que foram mapeadas não somente as expressões, mas também a direção do perfil da face (WEINBERGER e SAUL, 2004).

Capturando uma sequência de imagens de um objeto qualquer com uma câmera, observa-se que as imagens desse objeto em várias posições não correspondem a objetos alterados, mas apenas representam os graus de liberdade da câmera que capturou as imagens. A Figura 8 apresenta 12 imagens de um total de 400 fotografias que foram capturadas de um pote de chá durante a rotação do pote (WEINBERGER e SAUL, 2004). Um sistema que analisa e extrai a dimensionalidade intrínseca dessa sequência de fotos poderia informar que as imagens caem sobre uma curva 2D contida no espaço de alta dimensão das imagens.

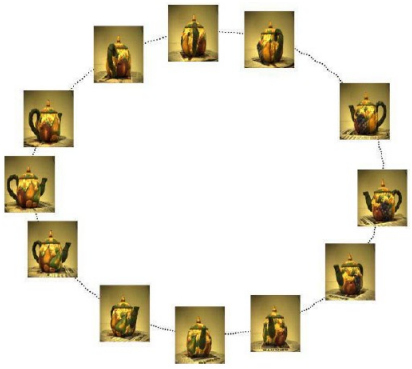


Figura 8 – Amostras de imagens de um conjunto de 400 fotos de um pote de chá sendo girado em torno de seu eixo. As diferentes posições representariam os graus de liberdade da câmera e não do objeto. As imagens foram manualmente posicionadas sobre a linha circular pelos autores do artigo apenas para ilustrar a ideia da dimensionalidade intrínseca [Extraída de (WEINBERGER e SAUL, 2004)].

Os dois exemplos citados mostram que o objetivo do algoritmo SDE foi encontrar uma dimensionalidade intrínseca no conjunto de imagens de alta dimensão. Desta maneira pode-se otimizar a memorização de informação, visto que não seria necessário armazenar todos os modos de variação de uma face (expressões). A Figura 9 ilustra simplificadamente, baseada nos dois exemplos anteriores, o espaço de imagens que contempla todos os graus de

liberdade da informação, enquanto que o subespaço M é a superfície na qual as imagens discretizadas poderiam estar presentes.

Definindo-se que o subespaço $\mathbb{R}^d \subset \mathbb{R}^n$ é tal que $d < n$, a dimensionalidade intrínseca são os pontos do espaço $\mathbb{R}^n$ que caem sobre o subespaço $\mathbb{R}^d$ e é definida como o menor número de variáveis ou dimensões que modela um conjunto de dados sem perda de informações (FUKUNAGA, 1990).

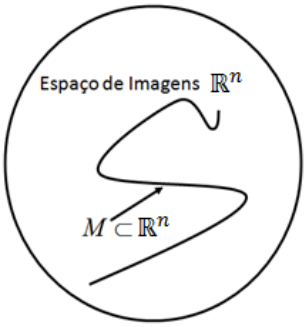


Figura 9- Representação do espaço de imagens e o subespaço e a trilha (*Manifold*) onde recaem as amostras de entrada [Extraída e adaptada de (BRANSON, 2001)].

Um termo que estará muito presente ao longo deste texto será a palavra "*manifold*", cuja tradução muito utilizada na Matemática é "Variedade". Entretanto, esta tese manterá a palavra original em inglês para definir que *manifold* é um espaço topológico $\mathcal{M}^d$, localmente Euclidiano, tal que $\mathcal{M}^d \subset \mathbb{R}^n$. Mais detalhes sobre o conceito de *manifolds* pode ser consultado no Apêndice B e também em (LEE, 2000), (LEE e VERLEYSEN, 2010) e (GIRALDI, KITANI, *et al.*, 2011).

3.3 Métodos de Exploração dos Espaços de Dados em Alta Dimensão

Como discutido na subseção 3.2, explorar o espaço de dados pode trazer informações de como esses dados se distribuem, como são formados, quais são as características de similaridades e dissimilaridades entre as amostras, bem como descobrir uma possível dimensionalidade intrínseca. Entende-se que o objetivo principal das metodologias exploratórias discutidas neste trabalho é mapear os dados de entrada contidos numa matriz $\mathbf{X}$ de dimensão n para uma matriz de saída $\mathbf{Y}$ d-dimensional menor, tal que $d < n$, mas preservando as relações geométricas e topológicas tanto quanto possível, assim como formalizado na expressão.

$$\mathbf{X} \in \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbf{Y} \in \mathbb{R}^d \,. \tag{3-1}$$

Esta subseção discutirá sucintamente os principais métodos exploratórios, estudando-se suas características e limitações. Essas metodologias são largamente reconhecidas na comunidade científica e formam o arcabouço principal de várias outras técnicas.

3.3.1 Análise de Componentes Principais

É a mais antiga, conhecida e utilizada ferramenta de exploração de espaços de dados em alta dimensão. Foi desenvolvida em 1901 por Karl Pearson para aplicações em ambientes biológicos utilizando uma abordagem geométrica. Posteriormente, em 1933, Hotelling formalizou o PCA (*Principal Components Analysis*) para operações com matrizes, sendo o primeiro autor a cunhar o termo "Componentes Principais" (JOLLIFFE, 2002). Karhunen e Loève trabalharam de forma independente para desenvolver uma generalização para o espaço contínuo. Posteriormente, passou a ser conhecida como Expansão de Séries por Karhunen-Loève (SHANMUGAN e BREIPOHL, 1988).

O PCA trabalha com a matriz de covariância das amostras procurando uma nova base ortogonal que minimize o erro de reconstrução dos dados de entrada e maximize a variância nessa nova base. Dessa forma, o PCA permite representar os dados de entrada como combinações lineares das suas projeções na nova base. Quando se tem um conjunto aleatório de amostras, a suposição mais simples que pode se fazer sobre a forma da sua estrutura de distribuição é que ela seja normalmente distribuída. No entanto, essa é uma premissa muito precária, pois os dados reais não necessariamente têm esse tipo de distribuição. Apesar de não se ter uma noção exata da forma da distribuição, é possível estimar a variância e covariância de vetores aleatórios contendo n-dimensões. Dados N vetores aleatórios $\mathbf{x}_i = (x_1, x_2, \dots, x_\mathrm{n})^\mathrm{T}$ com a estimativa da média,

$$\bar{\mathbf{x}} = \left(\frac{1}{N}\right)\sum_{i=1}^{N}(\mathbf{x}_j), \tag{3-2}$$

a estimativa da matriz de covariância $\mathbf{\Sigma}_\mathrm{x}$ será:

$$\mathbf{\Sigma}_\mathbf{x} = \left(\frac{1}{N-1}\right)\sum_{i=1}^{N}(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}})^T. \tag{3-2}$$

Deve-se lembrar que o PCA é uma transformação linear na qual se projetam as amostras do espaço de entrada n-dimensional para um novo espaço d-dimensional definido pela matriz $\mathbf{\Phi}$ de p componentes principais extraídas da matriz de covariância $\mathbf{\Sigma}_{\mathrm{X}}$ do espaço de entrada $\mathbf{X}$. A projeção é definida como uma nova matriz

$$\mathbf{Y} = \mathbf{\Phi}^{\mathbf{T}}(\mathbf{X} - \bar{\mathbf{x}}), \tag{3-3}$$

de maneira que a nova matriz $\mathbf{Y}$ represente a distribuição dos pontos da matriz de entrada $\mathbf{X}$, no espaço formado pela matriz de autovetores $\mathbf{\Phi}$ ordenados conforme os autovalores $\lambda_1 > \lambda_2 > \lambda_3 \dots \lambda_n > 0$. A matriz $\mathbf{\Phi}$ é ortogonal de dimensão $n \times n$ formada pelos autovalores da matriz de covariância $\mathbf{\Sigma}_{\mathrm{x}}$. Pode-se escrever cada vetor da matriz $\mathbf{Y}$ como uma combinação linear da sua respectiva entrada $\mathbf{x}_i$ com as componentes principais $\boldsymbol{\varphi}_i$ da matriz $\mathbf{\Phi}$, resultando em:

$$\mathbf{y}_i = \varphi_{i1}x_{i1} + \varphi_{i2}x_{i2} + \cdots \varphi_{in}x_{in} \tag{3-4}$$

onde $i = 1,2 \dots N$.

Observa-se pela equação (3-4) que a dimensionalidade no novo espaço projetado é a mesma do espaço de entrada. O que ocorre nesta situação é a rotação e a centralização da massa de dados da matriz $\mathbf{X}$ em relação ao novo eixo de coordenadas formado pelos autovetores $\mathbf{\Phi}$. Entretanto, em aplicações com imagens, nem sempre é possível trabalhar com a dimensionalidade do espaço de entrada. Isto ocorre porque a dimensionalidade da matriz $\mathbf{X}$ é muito alta ou porque o número de amostras é muito menor do que a dimensionalidade do espaço de características das amostras.

Na segunda situação ocorre o fenômeno conhecido como "*Maldição da Dimensionalidade*" cujo efeito é que o número de amostras N é menor do que a dimensionalidade n. Alguns aspectos teóricos desse efeito são discutidos no Apêndice C. O efeito direto é que a matriz de covariância $\mathbf{\Sigma}_{\mathrm{x}}$ não considerará todos os pares de características do espaço de entrada $\mathbf{X}$. Consequentemente, haverá um espaço de características nulo na matriz de covariância, e essa matriz será considerada degenerada, tendo no máximo ordem (*rank*) $N - 1$. Esse problema é conhecido também como problema de *SSS* (*Small Sample S*ize) e faz com que a base vetorial formada pelos autovetores da matriz $\mathbf{\Phi}$ fique limitada a $N - 1$ vetores linearmente independentes, limitando os graus de liberdade das projeções da amostras no novo espaço (FUKUNAGA, 1990), (KITANI, 2007).

Para esclarecer melhor o efeito de se ter uma base vetorial cujos autovalores são nulos ilustra-se na Figura 10 dois conjuntos de pontos distribuídos no espaço $\mathbb{R}^3$ definido pela base vetorial $\boldsymbol{\varphi} = (\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3)$, e que apontam as direções de maior variância em ordem decrescente de importância.

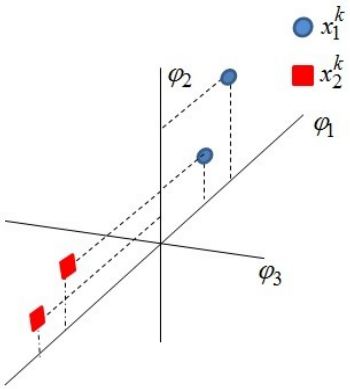


Figura 10 – Ilustração de uma base vetorial e dois pontos distribuídos nessa base. Os pontos que caem no eixo φ_3 são nulos [Adaptada e ampliada de (KITANI, 2007) página 59].

Entretanto, os pontos x_1^k e x_2^k poderiam ser representados apenas com dois eixos, visto que no terceiro eixo o autovalor é zero. Desta maneira, cada ponto poderia então ser descrito apenas como uma combinação linear de suas projeções nos dois eixos da nova base $\boldsymbol{\Phi}$. A determinação da base vetorial $\boldsymbol{\Phi}$ deve ordenar os autovetores de $\boldsymbol{\Phi}$ de maneira que as maiores variâncias definidas em $\boldsymbol{\Lambda}$, estejam em ordem decrescente satisfazendo a equação (3-5),

$$\boldsymbol{\Lambda} = \boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\Phi}, \tag{3-5}$$

onde a matriz de covariância $\boldsymbol{\Sigma}_{\mathrm{x}}$ é calculada a partir da matriz de entrada $\mathbf{X}_{N \times n}$, e dada por

$$\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{X}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}})^T, \tag{3-6}$$

e $\boldsymbol{\Lambda}$ é uma matriz diagonal composta pelos autovalores $\lambda_1 > \lambda_2 > \lambda_3 \ldots \lambda_n > 0$.

O problema é que a matriz $\boldsymbol{\Sigma}_{\mathrm{x}}$ de dimensão $N \times N$ não determina os autovetores $\boldsymbol{\Phi}$ para os autovalores $\lambda_i \in \boldsymbol{\Lambda}$ que são zero, isto porque um número de $(n - N)$ elementos é suprimido quando $(n > N)$. Isto faz com que os autovetores gerados por essa matriz de covariância sejam ortogonais entre si, mas não ortonormais, ou seja, os autovetores não são normalizados. Fukunaga (FUKUNAGA, 1990) propõe uma solução para esse problema, normalizando a matriz de autovetores conforme seu respectivo autovalor, como indicado na equação (3-7),

$$\mathbf{\Phi}_{pca} = \frac{\mathbf{X}^T \mathbf{\Phi}(\mathbf{\Lambda})^{-\frac{1}{2}}}{(\sqrt{N-1})}, \tag{3-7}$$

onde $\mathbf{\Phi}_{pca}$ será a nova matriz de autovetores.

A matriz $\mathbf{\Phi}_{pca}$ tem dimensão $p \times n$, onde p é o número de componentes principais n-dimensionais retidos cujo autovalor é não nulo. Cada vetor $\boldsymbol{\varphi}_i$ representa um vetor ortonormal da base que faz rotação do conjunto $\mathbf{X}$ para a orientação que representa a maior variância e consequentemente, a direção de uma característica ou informação. Em aplicações no domínio de imagens o número de amostras é normalmente menor que o número de características. Isto significa que cada autovetor pode representar a direção de mais de uma informação relacionada com alguma característica das imagens.

3.3.2 Multidimensional Scaling - MDS

O MDS (*Multidimensional Scaling*) é outra técnica estatística muito antiga, proposta por Young & Householder em 1938. Posteriormente, em 1952 Torgeson (TORGERSON, 1952) propôs o uso da métrica Euclidiana para determinar as dissimilaridades entre amostras do espaço de entrada. Como descrito por Lee & Verleysen (LEE e VERLEYSEN, 2010), o Escalonamento Multidimensional poderia ser considerado como um conjunto de técnicas que mapeiam e representam dados multidimensionais graficamente, num espaço de menor dimensão, respeitando a distância, similaridades e dissimilaridades entre os elementos do espaço original. Entretanto, podem-se classificar as técnicas de MDS em dois grupos:

a) Escalonamento clássico ou métrico;
b) Escalonamento não métrico ou ordinal.

Contudo, este trabalho discutirá apenas o escalonamento clássico ou métrico. O escalonamento não métrico pode ser consultado em (WEBB, 2005). O escalonamento clássico trabalha com a matriz dos pares do produto escalar de um espaço n-dimensional tal que $\mathbf{S} = \mathbf{X}^T\mathbf{X}$. $\mathbf{S}$ é uma matriz de Gram com dimensão $n \times n$ que permite a decomposição em fatores de modo que:

$$\mathbf{S} = \mathbf{\Phi}\mathbf{\Lambda}\mathbf{\Phi}^T, \tag{3-8}$$

onde $\mathbf{\Phi}$ é a matriz de autovetores de **S,** e $\mathbf{\Lambda}$ a matriz diagonal com os autovalores de **S**. Portanto, a matriz de coordenadas no espaço mapeado pode ser descrita como:

$$\mathbf{Y} = \mathbf{\Phi}\mathbf{\Lambda}^{1/2}, \tag{3-9}$$

de maneira que as novas projeções preservam as dissimilaridades do espaço original. Em outras palavras, dado um conjunto de amostras e uma matriz com as dissimilaridades δ_{ij} procura-se uma configuração de pontos num espaço de baixa dimensão tal que as distâncias d_{ij} satisfaçam $d_{ij} \approx \delta_{ij}$ (MINGOTI, 2007).

Quando a dimensionalidade da matriz **X** é muito alta pode ser mais econômico computacionalmente usar a matriz de distâncias **D** (assumindo que $\delta_{ij} \approx d_{ij}$) entre os pares de entrada, e assim obter a matriz **S** convertendo **D** a partir de:

$$\mathbf{S}_{ij} = -\frac{1}{2}\left[d_{ij}^2 - d_{i.}^2 - d_{.j}^2 + d_{..}^2\right], \tag{3-10}$$

nos quais

$$d_{i.}^2 = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} d_{ij}^2\,; \quad d_{.j}^2 = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} d_{ij}^2 \quad e\ d_{..}^2 = \frac{1}{N^2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} d_{ij}^2. \tag{3-11}$$

Assim, a matriz **S** pode ser expressa como:

$$\mathbf{S}_{N\times N} = -\frac{1}{2}\left[\mathbf{I}_{N\times N} - \frac{1}{N}\mathbf{I}_{N\times 1}\mathbf{I}_{1\times N}^T\right]\mathbf{D}_{N\times N}^2\left[\mathbf{I}_{N\times N} - \frac{1}{N}\mathbf{I}_{N\times 1}\mathbf{I}_{1\times N}^T\right], \tag{3-12}$$

onde $\mathbf{I}_{N\times 1} = [1,1,1,\ldots 1]^T$ e $\mathbf{I}_{N\times N}$ é uma matriz identidade.

Portanto, o mapeamento MDS poderia ser descrito conforme o seguinte procedimento:

1) A partir da matriz de distâncias **D**, encontre uma matriz **Q** dada por:

$$q_{ij} = -\frac{1}{2}\left(\delta_{ij}\right)^2. \tag{3-13}$$

2) Construa uma matriz **H** que leve os pontos ao centro de massa.

$$\mathbf{H} = \left[\mathbf{I}_{N\times N} - \frac{1}{N}\mathbf{I}_{N\times 1}\mathbf{I}_{1\times N}^T\right]. \tag{3-14}$$

3) Encontre a matriz **S.**

$$\mathbf{S} = \mathbf{HQH}. \tag{3-15}$$

4) Determine os autovalores e autovetores de **S.**

$$\mathbf{S} = \mathbf{\Phi\Lambda\Phi}^T. \tag{3-16}$$

5) As coordenadas no espaço de menor dimensão são mapeadas conforme

$$\mathbf{Y} = \mathbf{\Phi\Lambda}^{1/2}. \tag{3-17}$$

O leitor interessado nos detalhes e derivações das equações do MDS deve consultar (TORGERSON, 1952), (COX e COX, 2001), (WEBB, 2005), (LEE e VERLEYSEN, 2010) e (MINGOTI, 2007).

A metodologia MDS é muito semelhante ao PCA, com a diferença de que o PCA trabalha com a matriz de covariância das amostras e o MDS com a matriz dos pares do produto escalar das amostras. Entretanto, quando o número de amostras é alto e a dimensionalidade também é alta, o consumo de memória do MDS pode ser um limitador. Nesses casos pode ser mais interessante utilizar o PCA. Contudo, se a dimensionalidade é alta e o número de amostras muito pequeno, pode ser mais interessante trabalhar com MDS. Uma característica comum é que ambas as abordagens são lineares (LEE e VERLEYSEN, 2010).

3.3.3 Projeção de Sammon

A técnica de projeção de Sammon (SAMMON, 1969) foi proposta como uma alternativa não linear para realizar projeções do espaço de alta dimensão para um espaço de baixa dimensão. Conhecido também como NLM (*Nonlinear Mapping*), é um algoritmo iterativo que procura minimizar uma função de erro dada por:

$$E_{NLM} = \left(\frac{1}{\sum_{\substack{i=1\\i<j}}^{N}\left(d(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j)\right)}\right)\left(\sum_{\substack{i=1\\i<j}}^{N}\frac{\left(d(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j)-d(\mathbf{y}_i,\mathbf{y}_j)\right)^2}{d(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j)}\right), \tag{3-18}$$

onde, $d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ é a distância Euclidiana entre os pares de pontos no espaço de entrada n-dimensional para $i = 1,2, \dots N$ e $j = 1,2, \dots, N$ e $d(\mathbf{y}_i, \mathbf{y}_j) \mid \mathbf{y} \in \mathbb{Z}^d$ é a distância Euclidiana entre pares de pontos no espaço de saída d-dimensional, na qual d pode ser 2 ou 3. A função procura um conjunto de pontos no espaço de saída cuja relação de distância represente da melhor maneira a configuração dos pontos no espaço de entrada. Observa-se que a função E_{NLM} privilegia os pontos do espaço de entrada que estão mais próximos e minimiza o impacto dos pares de pontos que estão mais longe. O algoritmo pode então ser descrito como:

a) Calcule todos os pares de distância $d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ do espaço de entrada n-dimensional;
b) Inicialize aleatoriamente uma matriz de coordenadas $\mathbf{Y} \in \mathbb{Z}^d$ com N pontos no espaço de saída d-dimensional;
c) Calcule o E_{NLM} para todos os pontos da saída $\mathbf{Y}$;
d) Atualize a matriz $\mathbf{Y}$ para todos os pontos conforme: $\mathbf{y}_k^{new}(i) \leftarrow \mathbf{y}_k^{old}(i) - c\,\frac{\frac{\partial E_{NLM}}{\mathrm{y}_k(i)}}{\left|\frac{\partial^2 E_{NLM}}{\partial(\mathrm{y}_k(i))^2}\right|}$;
e) Retorne ao passo (c) até que a função de erro E_{NLM} esteja minimizada.

No passo (b) do algoritmo acima, o espalhamento dos pontos no espaço de saída pode seguir uma orientação prévia definida pelos componentes principais calculados a partir do espaço de entrada. No passo (d) calcula-se os valores de atualização da matriz de saída $\mathbf{Y}$. A primeira derivada da função E_{NLM} é determinada por:

$$\frac{\partial E_{NLM}}{\partial \mathbf{y}_k(i)} = \left[\frac{-2}{c}\right] \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N} \left(\frac{d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) - d(\mathbf{y}_i, \mathbf{y}_j)}{d(\mathbf{x}_i, x_j)\, d(\mathbf{y}_i, \mathbf{y}_j)}\right) - \mathbf{y}_k(i) - \mathbf{y}_k(j), \tag{3-19}$$

e a segunda derivada de E_{NLM}, dada por:

$$\frac{\partial^2 E_{NLM}}{\partial \mathbf{y}_k^2(i)} = \left[\frac{-2}{c}\right] \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N} \left(\frac{d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) - d(\mathbf{y}_i, \mathbf{y}_j)}{d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)\, d(\mathbf{y}_i, \mathbf{y}_j)}\right) - \left(\frac{\left(\mathbf{y}_k(i) - \mathbf{y}_k(j)\right)^2}{d(\mathbf{y}_i, \mathbf{y}_j)^3}\right), \tag{3-20}$$

onde o coeficiente c foi definido por (SAMMON JR., 1969) como um valor empírico entre 0,3 e 0,4, e $k = 1, 2, \dots, d$. O coeficiente c é derivado do procedimento de otimização pelo método de Newton-Raphsom para a versão multivariada, tendo o domínio entre $0 < c \leq 1$ (LEE e VERLEYSEN, 2010). Finalmente, no passo (e) calcula-se iterativamente a minimização da função E_{NLM}.

Assim como no caso do MDS, uma limitação da metodologia é o consumo de memória para armazenar a matriz de distância do espaço original dado por $N(N-1)/2$ elementos. A sugestão seria aplicar um algoritmo de compressão de dados como o PCA antes de mapear o espaço. Da mesma maneira que o MDS, a Projeção de Sammon não prevê uma estratégia para computar incrementalmente um novo ponto (LEE e VERLEYSEN, 2010).

3.3.4 ISOMAP – Mapeamento de Características Isométricas

O ISOMAP (*Isometric Feature Mapping*) é uma metodologia de mapeamento e redução de dimensionalidade, proposta por Tenenbaum *et al*. (TENENBAUM, SILVA e LANGFORD, 2000), que é similar ao MDS. Contudo, o ISOMAP é uma abordagem não linear e global e utiliza a distância geodésica ao invés da Euclidiana. A ideia baseia-se em usar as distâncias ao longo da hipersuperfície geodésica $\mathcal{M}$ onde os pontos de entrada se distribuem e "caminham" sobre essa hipersuperfície para encontrar as regiões de $\mathcal{M}$ onde os pontos se localizam. O ISOMAP busca mapear $f: X \rightarrow Y$ de maneira a preservar as distâncias entre as observações considerando a proximidade sobre a superfície topológica onde os pontos caem (MARTINEZ e MARTINEZ, 2005).

O ISOMAP pode ser mais bem compreendido observando-se a Figura 11. Na figura (a) encontram-se dois pontos x_1 e x_2 indicados no espaço que contém a superfície $\mathcal{M} \in \mathbb{R}^3$. A distância Euclidiana pode ser descrita como a menor distância entre eles, que neste caso está representado por uma linha reta (pontilhado em azul na figura (a)) entre os pontos x_1 e x_2. Entretanto, considerando-se que a distribuição dos pontos acompanha uma curvatura no espaço, não seria razoável considerar essa distância.

Outra possibilidade seria então seguir a curvatura da estrutura dos dados, como ilustrado pela linha azul na figura (a). Contudo, o ISOMAP utiliza os pontos da estrutura de dados para mapear um caminho entre x_1 e x_2. Mede-se a distância entre x_1 e x_2 sobre a superfície $\mathcal{M}$, "caminhando" pelos pontos da superfície, como destacado pela linha vermelha na figura (b). Mapeando-se a superfície $\mathcal{M} \in \mathbb{R}^3$ para $\mathbb{R}^2$, temos uma planificação dessa estrutura e pode-se observar um "caminho" não linear entre os pontos x_1 e x_2, como representado na figura (c).

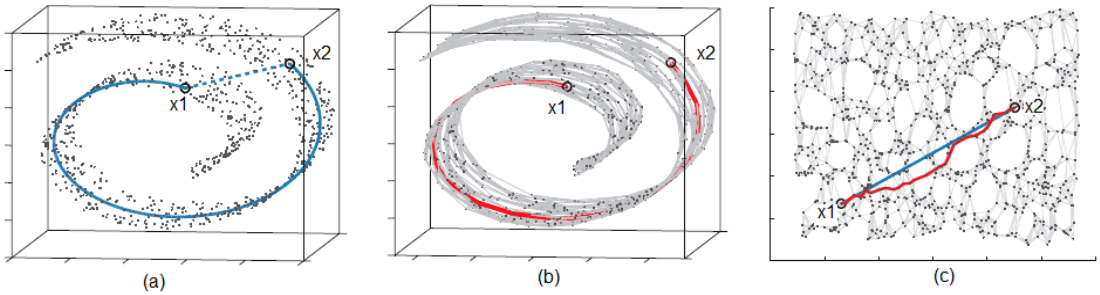


Figura 11 – Em (a) a representação de um conjunto de pontos conhecidos como Rolo Suíço (*Swiss Roll)* e em destaque os pontos x_1 e x_2 indicando um segmento de reta pontilhado como a distância Euclidiana entre eles. Em (b) a superfície 3D mapeada pelo ISOMAP e o caminho a ser seguido entre os pontos x_1 e x_2. Em (c) a estrutura do Rolo Suíço planificada em 2D para visualização do caminho mais curto sobre a superfície $\mathcal{M}$ [Extraída de (TENENBAUM, SILVA e LANGFORD, 2000)].

O ISOMAP parte do princípio de que os pontos caem sobre uma hipersuperfície geodésica e que é possível determinar as menores distâncias passando por k-pontos da hipersuperfície. Considere um semicírculo, como aquele mostrado na Figura 12 onde a linha azul representa a distância geodésica entre x_1 e x_7.

As linhas verdes na Figura 12 representam as arestas do grafo que une os pontos x_1 e x_7 e a linha vermelha representa a distância Euclidiana entre os pontos x_1 e x_7. Abordagens que trabalham diretamente no espaço original sem olhar para os desdobramentos do espaço indicarão a distância Euclidiana como uma relação de vizinhança entre os pontos x_1 e x_7. Contudo, neste caso, a relação que se estabelece entre x_1 e x_7 é construída sobre a superfície $\mathcal{M}$. Quando se faz o desdobramento dessa linha 2D para 1D, observa-se que a distância Euclidiana (linha vermelha) não reproduz a correta relação de distância dos pontos no espaço original.

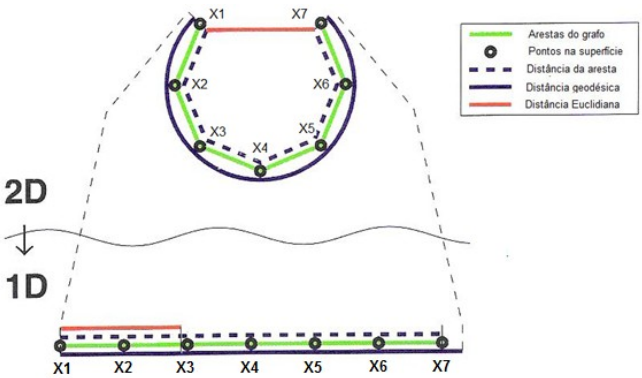


Figura 12 – Exemplo de pontos distribuídos no espaço 2D e desdobrados para o espaço unidimensional. A linha cheia em azul representa o espaço geodésico, a linha em verde indica as arestas do grafo que ligam os pontos x_i, a linha pontilhada indica o comprimento de cada aresta e a linha vermelha indica a distância Euclidiana entre os pontos x_1 e x_7 [Extraída e adaptada de (LEE e VERLEYSEN, 2010) página 103].

Assim, define-se como distância geodésica a distância na superfície entre dois pontos que caem sobre essa superfície.

O algoritmo básico do ISOMAP é computado em fases, como descrito em (TENENBAUM, SILVA e LANGFORD, 2000) e reproduzido abaixo:

a) Calcule todos os pares de distância $d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \mid i \neq j$ do espaço de entrada $\mathbf{X}$ n-dimensional;
b) Construa um grafo de conexões de $\mathbf{x}_i$ e os seus k-vizinhos mais próximos. As arestas do grafo têm o peso definido por $d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_k)$;
c) Inicialize uma matriz de distâncias $\mathbf{G}$ para armazenar os valores de: $d(G_i, G_j) = d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ se os pontos $\mathbf{x}_i$ e $\mathbf{x}_j$ estão ligados por uma aresta e $d(G_i, G_j) = \infty$, de outra forma.
d) Determine para cada $k = 1, 2, \ldots, N$ o $min\{d(G_i, G_j),\ d(G_i, G_k) + d(G_k, G_j)\}$. A matriz $\mathbf{D}_G = \{d(G_i, G_j)\}$ conterá todos os pares de pontos com o caminho mais curto.
e) Finalmente, aplica-se o algoritmo de MDS (conforme detalhado na seção 3.3.2) na matriz $\mathbf{D}_G$.

O resultado do algoritmo ISOMAP constrói um conjunto de dados no espaço de saída d-dimensional que estima a dimensionalidade intrínseca contida nos dados de entrada. As coordenadas do espaço de saída que são escolhidas devem minimizar uma função custo definida como:

$$E = \|\tau(\mathbf{D}_G) - \tau(\mathbf{D}_Y)\|, \tag{3-21}$$

onde $\mathbf{D}_Y = \{\|\mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j\|\}$ é a matriz de distâncias do espaço de saída e τ é um operador que converte as matrizes de distâncias em matrizes do produto escalar e é definido por $\tau(D) = -HSH/2$ onde S é a matriz das distâncias ao quadrado $\{S = D_{ij}^2\}$ e $H = \{H_{ij} = \delta_{ij} - 1/N\}$ é matriz que leva os N pontos ao centro de massa (TENENBAUM, 1998) (TENENBAUM, SILVA e LANGFORD, 2000).

3.3.5 Outras Abordagens de Exploração de Espaços Multidimensionais

Atualmente existem várias abordagens com o propósito de realizar a redução de dimensionalidade e visualização da estrutura dos dados. Cada abordagem traz vantagens e desvantagens e às vezes estão mais adaptadas a um tipo de aplicação. Podem ainda ser híbridas ou melhorias de algoritmos já propostos.

Vários autores já realizaram revisões e comparações das diferentes técnicas sobre o tema. Uma excelente revisão deste assunto pode ser encontrada em (CARREIRA-PERPIÑÁN, 2001), onde o autor apresenta uma visão geral do problema, como apresentado neste capítulo, e as principais técnicas disponíveis até aquela data. Em (FODOR, 2002) há uma descrição sumarizada de algumas técnicas e em (CAYTON, 2005) uma abordagem das técnicas de redução de dimensionalidade vistas como técnicas de aprendizado.

Cayton (CAYTON, 2005) também faz uma revisão dos principais algoritmos incluindo o ISOMAP (TENENBAUM, SILVA e LANGFORD, 2000) e SDE (*Semidefinite Embedding*) proposto por (WEINBERGER e SAUL, 2004). Yin (YIN, 2007) apresenta uma revisão que cobre somente as técnicas não lineares, incluindo as redes neurais. Em (MEDEIROS e COSTA, 2008) os autores apresentam um comparativo das principais técnicas utilizando-se algumas bases de dados públicas e indicam um desempenho superior da rede neural SOM (*Self-Organizing Maps*) proposto por (KOHONEN, 1982).

Maaten e Hinton (MAATEN e HINTON, 2008) apresentam um uma nova técnica denominada t-SNE (t-*Stochastic Neighbor Embedding*), que é uma variação do método SNE (*Stochastic Neighbor Embedding*) proposto por (HINTON e ROWEIS, 2002). Maaten e Hinton fazem uma comparação com outras 7 técnicas de redução de dimensionalidade entre elas: Sammon, ISOMAP e LLE. Os resultados de mapeamento e redução de dimensionalidade do t-SNE comparado aos outro 7 mostrou-se mais adequado para o conjunto de dados que foram utilizados para os testes.

Em (MAATEN, POSTMA e HERIK, 2009) os autores apresentam um extenso comparativo testando treze técnicas de redução de dimensionalidade com bases de dados sintéticos e reais. Os resultados mostraram um surpreendente desempenho do PCA para dados reais e superiores a muitas técnicas não lineares. Lee e Verleysem (LEE e VERLEYSEN, 2010) discutem várias técnicas de redução de dimensionalidade realizando comparações tanto com base

de dados sintéticos quanto com imagens de faces, além de fornecer várias fundamentações teóricas sobre o tema.

Como destacado em (HAMMER, GISBRECHT e SCHULZ, 2012), a visualização de dados em alta dimensão vem se tornando muito importante na atualidade em virtude do grande crescimento em tamanho e complexidade dos bancos de dados. Métodos de redução de dimensionalidade que apresentam dados de maneira visual são mais intuitivos e fáceis de interpretar, tanto para identificar agrupamentos quanto para visualizar *outliers*.

3.4 Considerações Finais

O objetivo deste capítulo foi realizar uma breve revisão das principais técnicas de mapeamento e redução de dimensionalidade de dados em alta dimensão e que, de alguma maneira, estarão dentro das propostas desta tese. Os destaques principais que foram contextualizados são:

a) Exploração de dados em alta dimensão;
b) Redução da dimensionalidade dos dados;
c) Dimensionalidade intrínseca contida nos dados de alta dimensão;
d) Principais técnicas e algoritmos de mapeamento e visualização de dados em alta dimensão, tais como: PCA, MDS, Sammon e ISOMAP.

Ao longo deste capítulo foram apresentados as 4 principais técnicas de redução de dimensionalidade e visualização de dados em alta dimensão (PCA, MDS, Sammon, ISOMAP), bem como a citação de trabalhos sobre comparações entre as diversas técnicas existentes e que não foram cobertas neste capítulo. Contudo, não foi avaliado se as técnicas tem inspiração biológica, visto que os seres vivos também fazem redução de dimensionalidade dos dados. A exceção talvez seria o PCA, na qual alguns autores sugerem que os seres vivos fazem uma decomposição em componentes ou fatores principais dos sinais sensoriais (ROLLS e TREVES, 1998), (ROLLS, 2007) e (ROLLS, 2008).

Em (KITANI, DEL-MORAL-HERNANDEZ, *et al.*, 2011) foram brevemente discutidos os aspectos neurológicos e psicológicos que poderiam estar representados no modelo dos Mapas Auto-Organizados de Kohonen, principalmente com o reconhecimento de padrões visuais. Essas discussões reforçaram a motivação para estudar os Mapa Auto-

Organizados e explorar aspectos que não foram cobertos pelos trabalhos anteriores sobre redução e dimensionalidade e visualização de dados em alta dimensão.

No próximo capítulo é apresentado uma breve introdução sobre os Mapas Auto-Organizáveis e como esses mapas tratam dados em alta dimensão e os possíveis problemas associados com o mapeamento de estruturas não convexas tais como o Rolo Suíço.

4. Mapas Auto-Organizáveis

"In many cases, if not all cases, I believe that the process of cognition may be thought of as pattern formation by self-organization."

Hermann Haken

Uma das características dos algoritmos não supervisionados é explorar um conjunto de dados de entrada sem nenhum conhecimento *a priori* da sua estrutura de distribuição. O algoritmo de Kohonen faz parte da classe de algoritmos que buscam mapear o espaço dos dados e gerar vetores protótipos de maneira que esses poucos elementos possam representar aproximadamente esses dados nesse espaço, preservando a topologia original e de uma forma mais econômica. Contudo, ele não é o único a realizar a tarefa de explorar e descobrir padrões significativos de maneira não supervisionada. Entende-se como Mapa Auto-Organizável o resultado do processo iterativo e não supervisionado de adaptação de uma rede que descreve ordenadamente os vetores de entrada em termos de sua estrutura de distribuição (KOHONEN, 1993).

4.1 Objetivos do Capítulo

Este capítulo descreve resumidamente alguns trabalhos relacionados com os Mapas Auto-Organizáveis sob o ponto de vista histórico, da plausibilidade biológica, do mapeamento topológico e da redução de dimensionalidade dos dados de entrada. Adicionalmente, abordam-se os conceitos de preservação topológica e métodos de avaliação da qualidade da preservação topológica. Complementarmente, uma breve descrição sobre a metodologia dos Mapas Auto-Organizáveis de Kohonen é apresentada na próxima seção. Entretanto, literaturas detalhadas sobre fundamentação teórica, arquitetura e algoritmo dos Mapas Auto-Organizáveis de Kohonen podem ser consultadas em (KOHONEN, 2001), (HAYKIN, 2001), (ZUCHINI, 2003) e (COSTA, 1999). Em (OJA e KASKI, 1999) o leitor encontrará um extenso conteúdo sobre as aplicações e variantes dos Mapas Auto Organizáveis, que a partir deste ponto, serão chamados de SOM (*Self Organizing Maps*).

4.2 Auto-Organização Baseada em Modelos Biológicos

Na década de 60 os pesquisadores Hubel e Wiesel (HUBEL e WIESEL, 1962) estudaram e registraram as atividades dos neurônios do córtex estriado de um gato anestesiado, e observaram que havia uma grande orientação seletiva de populações distintas de neurônios. As pesquisas indicaram que haviam neurônios sensíveis a determinadas orientações e comprimento das barras utilizadas como estímulo visual, demonstrando a existência de seletividade em grupos de neurônios. A seletividade se apresentava na forma excitatória ou inibitória.

Possivelmente, o trabalho mais inspirador para o desenvolvimento dos Mapas Auto-Organizáveis tenha sido o artigo de Willshaw & Von der Malsburg (WILLSHAW e VON DER MALSBURG, 1976), em que os autores investigaram as razões da formação de conexões padrões no sistema nervoso, especialmente naqueles associados ao córtex visual. Eles destacam também que, na maioria dos casos, os mapas biológicos são bidimensionais, principalmente o mapa que se forma na retina e no córtex estriado. A proposta de Willshaw & Von der Malsburg era modelar uma rede para tentar explicar o fenômeno da auto-organização no sistema ótico. O ponto de partida foi que a proximidade geométrica das células pré-sinápticas codifica alguma forma de correlação. Essa proximidade é compreendida pela célula pós-sináptica como uma relação de vizinhança e produz um reforço ou redução de conexão.

Acompanhando a Figura 13 é possível compreender a proposta. Considere que x e y são grupos de células pré-sinápticas e X e Y são grupos de células pós-sinápticas, e que a sinapse entre x e X é indicada por $x \rightarrow X$.

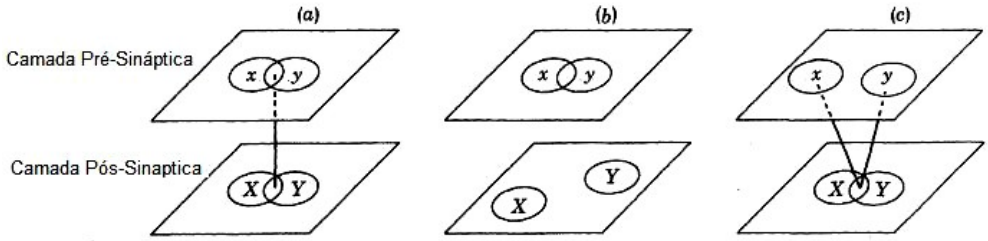


Figura 13 – Representação das possíveis ações de colaboração e competição sináptica entre grupos de neurônios. Em (a) as excitações dos neurônios x e y da camada pré-sináptica são colaborativas e reforçam as conexões colaborativas da camada pós-sináptica. Em (b), apesar da sobreposição das excitações os neurônios da camada pós-sináptica não ocupam a mesma região e não compartilham as sinapses. Finalmente, em (c) apesar das excitações não estarem próximas, o resultado da excitação ocorre no mesmo grupo da camada pós-sináptica, reforçando essa ligação [Extraída de (WILLSHAW e VON DER MALSBURG, 1976)].

Em (a), quando os dois grupos de células x e y estão se sobrepondo, obtém-se um reforço sináptico com as células pós-sinápticas X e Y, isto porque elas compartilham os axô-

nios pelo efeito associativo, que neste caso pode ser entendido como a ocorrência de x pela ocorrência de y provocando $X \cap Y$. Em (b) quando o mesmo grupo de células faz sinapses com os grupos $X\ e\ Y$ o efeito é fraco. Apesar das ocorrências de x e y serem sobrepostas o efeito pós-sináptico é reduzido pelo espaçamento entre os grupos X e Y. Finalmente em (c), as inibições laterais não permitem reforço pós-sináptico, porque as ações são competitivas de maneira que quando ocorre $x \rightarrow X \cap Y$ ocorre $y \rightarrow X \cap Y$ (WILLSHAW e VON DER MALSBURG, 1976).

Entre as características principais da proposta desenvolvida por Willshaw & Von der Malsburg destaca-se que as duas camadas, pré e pós sináptica, têm o mesmo tamanho. O processamento da camada pós-sináptica tem excitação de curto alcance e inibição de longo alcance e a regra de modificação sináptica segue a teoria de Hebb (WILLSHAW e VON DER MALSBURG, 1976).

4.2.1 Mapas Auto-Organizáveis de Kohonen

Posteriormente ao trabalho de Willshaw & Von der Malsburg, em 1982 Teuvo Kohonen propôs uma rede auto-organizada que ficou conhecida como SOM, e desde então a rede de Mapas Auto-Organizáveis tem sido uma das mais utilizadas na comunidade científica e em aplicações comerciais e industriais (HAYKIN, 2001), (KOHONEN, 2001). O SOM teve uma grande inspiração biológica baseada nos mapas corticais auditivos, assim como aqueles descritos no capítulo dois. Ele se baseia nas seguintes características: aprendizado por quantização vetorial, projeção dos dados do espaço de alta dimensão da entrada $\mathbb{R}^n$ (espaço vetorial) para espaços $\mathbb{Z}$, $\mathbb{Z}^2$, $\mathbb{Z}^3$ (espaço matricial), apesar de que espaços de saída maiores sejam possíveis. Adicionalmente, o mapa de saída do espaço $\mathbb{Z}^d$ procura preservar a topologia do espaço de entrada $\mathbb{R}^n$, a partir da preservação da relação de vizinhança entre os vetores de peso no espaço de entrada.

Como os vetores de peso dos neurônios têm a mesma dimensionalidade do espaço de entrada não há uma redução de dimensionalidade no espaço vetorial $\mathbb{R}^n$. Contudo, pode-se representar a massa dos dados de entrada com uma quantidade menor de neurônios que preserve adequadamente a estrutura de distribuição dos dados. O SOM também pode ser visto como um processo de regressão vetorial não paramétrica, sendo uma metodologia de exploração não supervisionada e que tem um algoritmo de fácil compreensão e implementação prática (KOHONEN, 2001).

Esse conjunto de características deu ao SOM uma enorme popularidade e permitiu um amplo espectro de aplicações. Atualmente, há diversas variantes do SOM cujas propostas trabalham nas lacunas deixadas pelo SOM ou em implementações híbridas com outras abordagens. A criação do SOM de Kohonen foi consequência de uma série de pesquisas com inspirações biológicas e que resultaram no desenvolvimento do método. Um dos primeiros artigos de Kohonen relacionando inspiração biológica com sistemas computacionais foi publicado em (KOHONEN, 1972), onde o autor propõe um modelo de memória associativa baseado em matriz de correlação.

Kohonen também propôs um modelo adaptativo de aprendizado supervisionado para classificação de subespaços, conhecido como LSM (*Learning Subspace Method*), que extrai adaptativamente as componentes principais de cada classe do grupo de amostras. A diferença do LSM em relação aos métodos estatísticos convencionais é que a abordagem busca um vetor de representação correspondente a cada classe a partir de um processo de aprendizado competitivo. Esse método foi o precursor do SOM (KOHONEN, 2001).

O SOM pode ser definido como uma rede neural não supervisionada que mapeia uma relação não linear entre o espaço de entrada e o espaço de saída. O aprendizado é competitivo e não existe um critério de convergência ou minimização. Basicamente, o algoritmo trabalha com um número definido de iterações durante a fase de aprendizado e adaptação dos pesos. Na rede SOM todas as entradas estão conectadas com todos os neurônios da saída, e os neurônios têm uma relação de vizinhança definida por conexões laterais com os neurônios adjacentes durante a fase de aprendizado, que diminui ao longo do treinamento. Usualmente, o mapa SOM tem uma configuração unidimensional ou bidimensional. Contudo, dimensões maiores são possíveis, mas a visualização se torna mais complicada. O SOM também é conhecido como um tipo de algoritmo de Quantização Vetorial (VQ - *Vector Quantization*) (LEE e VERLEYSEN, 2010) (KOHONEN, 2001).

O algoritmo de aprendizagem incremental ou sequencial para gerar o mapa SOM de Kohonen pode ser descrito conforme apresentado na Tabela 1. Este trabalho irá apenas utilizar o termo "neurônio" quando for referenciar uma unidade do mapa SOM e as seguintes definições serão utilizadas no algoritmo da Tabela 1 e 2 para facilitar a leitura e compreensão dos algoritmos SOM Sequencial e em Batelada (*Batch*) ou Lote:

a) Os neurônios são identificados como $m_j,\ j = 1, 2, \ldots, k$, sendo k o número de neurônios da rede;

b) O vetor de peso associado ao neurônio m_j é definido como $\mathbf{w}_j$ e possui a mesma dimensionalidade dos dados de entrada;
c) As entradas são $\mathbf{x}_i$, com $i = 1, 2, \ldots, N$, onde N é número de amostras;
d) A variável c representa o neurônio mais próximo de $\mathbf{x}_i$ e o índice c pode ainda indicar um parâmetro associado ao neurônio definido como BMU (*Best Match Unit*).

Tabela 1 – Algoritmo incremental para treinamento dos Mapas Auto-Organizáveis - SOM.

1) Prepare a rede SOM conforme a sequência a seguir:
   a) Defina o formato da grade (rede) de saída desejada, podendo ser unidimensional $(d = 1)$ ou bidimensional $(d = 2)$ (dimensões maiores são possíveis);
   b) Defina a grade de vizinhança entre os neurônios, quadrada ou hexagonal;
   c) Defina o número de k neurônios de saída tal $m_j \in \mathbb{Z}^d, j = 1, 2, \ldots k$;
   d) Inicialize aleatoriamente os pesos $\mathbf{w}_j \in \mathbb{R}^n$ tal que $1 \leq j \leq k$, sejam associados a cada neurônio de saída m_j;
   e) Defina um número de iterações T tal que $T > N$, sendo N o tamanho do conjunto de treinamento;
2) Apresente aleatoriamente um vetor de entrada $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^n$ à rede, onde o vetor $\mathbf{x}_i$ é a i-ésima entrada escolhida no tempo t;
3) Calcule a distância[1] Euclidiana $d(\mathbf{x}_i, \mathbf{w}_j)$ entre o vetor de entrada $\mathbf{x}_i$ com cada neurônio de saída m_j, de modo que se encontre:

$$c = \underbrace{argmin}_{j} \{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{w}_j(t)\|\} \; tal \; que \; 1 \leq j \leq k. \tag{4-1}$$

4) Defina o neurônio vencedor m_c, também conhecido como BMU (*Best Match Unit*), que produziu a menor $d(\mathbf{x}_i, \mathbf{w}_j)$;
5) Atualize o peso do neurônio m_c e de seus vizinhos, cujo tamanho da vizinhança é definida por $\sigma_c(t)$. Os novos pesos serão corrigidos por:

$$\mathbf{w}_j(t+1) = \mathbf{w}_j(t) + \alpha(t) h_{c_j}(t) \|\mathbf{x}_i - \mathbf{w}_j(t)\|, \tag{4-2}$$

onde o fator de aprendizado $\alpha(t)$ é decrementado monotonicamente, por exemplo como:

$$\alpha(t) = \alpha_0 \left(1 - \frac{t}{T}\right), \tag{4-3}$$

e o tamanho da influência $h_{cj}(t)$ que o neurônio m_c tem na taxa de aprendizado dos seus vizinhos pode ser definido como:

$$h_{c_j}(t) = e^{\left(-\frac{\|r_c - r_a\|^2}{2\sigma_c^2(t)}\right)}. \tag{4-4}$$

sendo $r_a \in \mathbb{Z}^d$ a posição na grade do neurônio adjacente de $r_c \in \mathbb{Z}^d$. Se $\|r_c - r_a\|$ aumenta, $h_{c_j}(t)$ diminui. Finalmente, o raio de influência $\sigma_c(t)$ do BMU decresce monotonicamente no tempo e poderia ser, por exemplo, calculado como:

[1] Kohonen apenas definiu uma medida de distância, não necessariamente Euclidiana.

$$\sigma_c(t) = \sigma_0 e^{\left(-\frac{T}{t}\right)}. \tag{4-5}$$

6) Retorne ao passo (2) até que $t = T$.

A taxa de aprendizado $\alpha(t)$ decrementa com o tempo para reduzir o aprendizado após certo número de iterações. O tamanho do raio de influência $h_{cj}(t)$ também diminui à medida que o tempo passa para que cada neurônio tenha independência na localização dos seus representados.

O processo de aprendizado incremental, também conhecido como *on-line*, pode ser divido em duas fases de operação, como foi proposto e implementado por (VESANTO, HIMBERG, *et al.*, 2000). Na primeira etapa ocorre o processo de ordenação, na qual as amostras são aleatoriamente apresentadas aos neurônios. Espera-se com esse processo particionar o espaço dos dados de entrada em k células do Diagrama de Voronoi V_j tais que:

$$V_j \supset \{\mathbf{x}_i \mid \|\mathbf{x}_i - \mathbf{w}_j\| < \|\mathbf{x}_i - \mathbf{w}_k\| \; \forall \, j \neq k\}, \tag{4-6}$$

e assim criar uma ordenação inicial. Na segunda fase ocorre o processo de refinamento, reduzindo-se a taxa de aprendizado e a relação de vizinhança, de maneira que apenas se refine o mapa e não se remova a ordem topológica já estabelecida.

Outro processo de treinamento proposto por Kohonen (KOHONEN, 2001, pág. 138) é o treinamento em batelada. Neste processo, todos os dados de entradas são apresentados aos neurônios e somente no final da apresentação os pesos dos neurônios são atualizados. Esse processo é repetido por um certo número de vezes. Entre as principais características do treinamento em batelada, como discutido em (FORT, LETREMY e COTTRELL, 2005) e (FORT, 2001), estão:

a) O treinamento é muito mais rápido no batelada do que no sequencial;
b) Não há taxa de aprendizado para ser ajustada;
c) Caso os pesos dos neurônios sejam conhecidos no início do treinamento, o processo é sempre determinístico e o resultado pode ser reproduzido;
d) Possui erro de distorção menor;
e) Tem forte dependência na inicialização dos pesos;
f) Pode gerar ordenamento final do mapa inadequado em virtude de (e).

A aparente facilidade de uso do treinamento por batelada, por não ter taxa de aprendizado para ser ajustado, aliado à convergência mais rápida pode exigir várias simulações até

que um resultado adequado seja encontrado em virtude da maior influência da inicialização dos vetores de peso. Uma possível solução seria inicializar os vetores de peso dentro dos limites do espaço de dados e orientados pelas direções principais definidas pelo algoritmo PCA aplicado previamente na massa de dados.

A Tabela 2 ilustra o algoritmo do treinamento em batelada para o mapa SOM. Fundamentalmente, o treinamento em batelada calcula a média das contribuições de todos os padrões para cada neurônio e atualiza o peso no final da iteração. Em outras palavras, durante a fase de aprendizado são apresentadas todas as amostras do conjunto de treinamento. Os valores das distâncias de cada neurônio que foi vencedor são armazenados numa lista e depois é calculada a média e somente então é atualizado o valor dos pesos de cada neurônio.

Tabela 2 – Algoritmo em batelada para treinamento dos Mapas Auto-organizáveis – SOM

1) Prepare a rede SOM conforme a sequência a seguir:
   a) Defina o formato da grade (rede) de saída desejada, podendo ser unidimensional $(d = 1)$ ou bidimensional $(d = 2)$ (dimensões maiores são possíveis);
   b) Defina a grade de vizinhança entre os neurônios, quadrada ou hexagonal;
   c) Defina o número de k neurônios de saída tal $m_j \in \mathbb{Z}^d, j = 1, 2, \ldots k$;
   d) Inicialize os pesos $\mathbf{w}_j$ tal que $1 \leq j \leq k$ sejam associados a cada neurônio de saída m_j;
   e) Defina um número de iterações T;
2) Apresente o vetor de entrada $\mathbf{x}_i \in \Re^n$ à rede, na qual o vetor $\mathbf{x}_i$ é a i-ésima entrada;
3) Calcule a distância Euclidiana $d(\mathbf{x}_i, \mathbf{w}_j)$ entre o vetor de entrada $\mathbf{x}_i$ com cada neurônio de saída m_j, de modo que se encontre:

$$c = \underbrace{argmin}_{j} \{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{w}_j\|\} \; tal \; que \; 1 \leq j \leq k \,. \qquad (4\text{-}7)$$

4) Defina o neurônio vencedor m_c, também conhecido como BMU (*Best Match Unit*), que produziu o menor $d(\mathbf{x}_i, \mathbf{w}_j)$;
5) Armazene numa lista $\mathbf{q}_j$ para cada m_j a amostra $\mathbf{x}_i \mid d(\mathbf{x}_i, \mathbf{w}_j)$ é mínima;
6) Repita o passo 2 até que todas as amostras $\mathbf{x}_i$ sejam apresentadas;
7) Calcule a média de todas as amostras $\mathbf{x}_i$ associadas a cada neurônio m_j, conforme:

$$S_j = \frac{1}{N_{V_j}} \sum_{i=1}^{N_{V_j}} \mathbf{x}_i \,, \qquad (4\text{-}8)$$

onde N_{V_j} é o número de amostras $\mathbf{x}_i$ associados ao neurônio m_i ;

8) Atualize os pesos dos neurônios m_j por:

$$\mathbf{w}_j(t+1) = \frac{\sum_{j=1}^{k} h_{c_j}(t) S_j(t)}{\sum_{j=1}^{k} h_{c_j}(t))} \,. \qquad (4\text{-}9)$$

9) Retorne ao passo (2) até que $t = T$.

Nos dois algoritmos de treinamento do SOM (Sequencial e Batelada) apresentados nas tabelas 1 e 2 mostram que a seleção do neurônio m_c vencedor é determinada por $c = \underbrace{\text{argmin}}_{j} \{\|x_i - w_j\|\}$ tal que $1 \leq j \leq k$, que representa a busca da menor distância Euclidiana. Entretanto, podem existir situações nas quais a distância Euclidiana não será a melhor métrica para determinar o neurônio vencedor. Por exemplo, quando os padrões de entrada forem definidos por valores binários (0 e 1) ou letras do alfabeto, a distância de Hamming seria uma métrica mais adequada (KOHONEN, 2001).

O algoritmo SOM busca aproximar as similaridades entre os neurônios e os dados do conjunto de treinamento através das métricas de distâncias. Da mesma maneira, similaridades e dissimilaridades entre agrupamentos também seriam naturalmente definidas por distâncias. Contudo, deve-se considerar que métricas por distâncias são sensíveis à diferença de escalas e transformações. Assim, deve-se considerar um pré-processamento dos dados antes da aplicação do SOM. Métricas como a Distância de Euclidiana, Distância de Manhattan e Distâncias Fracionárias, que são casos especiais da Distância de Minkowski, podem ainda sofrer influência da dimensionalidade dos dados (DUDA, HART e STORK, 2001). Uma breve discussão sobre os efeitos da dimensionalidade nas métricas de distâncias encontra-se no Apêndice C.

4.3 Plausibilidade Biológica dos Mapas Auto-Organizáveis

O processo auto-organizado nos sistemas biológicos é um fenômeno bem caracterizado na literatura científica. Apesar dos indivíduos de uma espécie serem diferentes entre si, eles apresentam uma similaridade macroscópica que emerge de forma autônoma a partir das instruções genéticas, interações químicas, hormonais e ambientais. A organização em subestruturas e funções é um fato bem conhecido pelos neurocientistas, no entanto, a razão pela qual o cérebro cria essa organização ainda não é muito clara (PURVES, AUGUSTINE, *et al.*, 2005).

Baseado nos princípios biológicos, Kohonen (KOHONEN, 1989) postulou que há algumas razões para essa organização. A organização no sistema nervoso permitiria:

a) Agrupar estímulos similares para minimizar ligações neurais;
b) Criar uma estrutura lógica e robusta evitando cruzamentos de ligações;
c) Favorecer a formação de padrões a partir de atributos organizados e estruturados;

d) Reduzir a massa de dados a partir da criação de representações que preservem relações de similaridades.

Os mapas corticais são um bom exemplo de Mapas Auto-Organizáveis biológicos, como descritos no Capítulo dois. Alguns pacientes que tiveram amputação de algum membro relatam a percepção de que o membro ainda existe. Esses casos são conhecidos como membros "fantasmas", resultado da existência de mapas somatotópicos que enviam ao cérebro informações sensoriais vindas desses membros. Como a lesão afeta fisicamente o membro amputado e não a área cortical, a percepção da existência física do membro ainda permanece (BEAR, CONNORS e PARADISO, 2001). Entretanto, com o tempo algumas áreas somatosensoriais que são privadas de estímulos tendem a representar estímulos das áreas vizinhas. Experimentos com macacos adultos que tiveram algum dedo removido cirurgicamente indicam uma reorganização do mapa cortical na região do dedo removido. Esse mecanismo de reorganização em mamíferos adultos indicaria certa capacidade do sistema nervoso em adquirir novas conexões em virtude da inatividade da região afetada. Essa plasticidade neural estaria associada possivelmente ao aumento da sensibilidade local do córtex em virtude da perda de conexões, ou então associado à formação de novas conexões nos axônios e / ou dendritos (KASS, MERZENICH e KILLACKEY, 1983).

Ritter e Schulten (RITTER e SCHULTEN, 1986), testaram o efeito da plasticidade neural nos mapas SOM. Treinou-se um mapa SOM de dimensão 30×30 com uma estrutura de dados bidimensionais, cuja distribuição de pontos simulava quatro dedos de uma mão. Após o treinamento do mapa SOM, observou-se que o mapa copiou a distribuição dos dados. Simulou-se então a remoção de um dedo, eliminando-se os dados da estrutura de distribuição referente ao dedo que se desejava remover. Com essa nova configuração na distribuição dos dados de entrada o mapa foi treinado novamente. Executaram-se 2000 iterações até que a nova estrutura de distribuição fosse copiada. O fenômeno da plasticidade neural no mapa SOM foi observado pelo rearranjo dos neurônios ao longo do mapa e pela ampliação do número de neurônios associados aos dados remanescentes.

Sistemas sensoriais mais complexos como visão e audição possuem mapas corticais mais intrincados. Nesses sistemas a privação não tem o efeito de ocupação de espaços, mas é seguido do aumento da eficácia de atuação dos sensores saudáveis. É notória a maior capacidade auditiva das pessoas cegas em relação às pessoas normais. Contudo, há pesquisas que indicam que a organização ocorre também de maneira multimodal, quando dois ou mais tipos

de sensores se organizam para responder mais rapidamente aos estímulos externos, como é o caso de atenção e vigília (STEIN e STANFORD, 2008) e (MERABET e PASCUAL-LEONE, 2010).

Por volta de 1973, Richard Morris desenvolveu um experimento para avaliar a capacidade de autolocalização dos ratos num ambiente sem referência (BEAR, CONNORS e PARADISO, 2001). Esse experimento ficou conhecido como Labirinto de Água do Morris (*Morris' Water Maze*). O objetivo era avaliar a influência do hipocampo na capacidade de aprendizado e memorização espacial de ratos normais e de ratos com lesão no hipocampo. O experimento era formado por um tanque com água e uma pequena plataforma submersa que não era visível da superfície, entretanto, uma vez encontrada, era um ponto seguro de apoio acima do nível d'água. O que se observou foi que os ratos saudáveis, depois que aprendiam onde a plataforma se encontrava, memorizavam sua localização.

Nas repetidas vezes em que eles eram colocados no tanque, eles encontravam a plataforma imediatamente. Quando colocaram ratos com lesão bilateral no hipocampo, eles não memorizavam onde a plataforma se encontrava e sempre nadavam por vários minutos até encontrá-la novamente (BEAR, CONNORS e PARADISO, 2001). Postulou-se que o hipocampo exerce uma função importante na localização espacial dos mamíferos.

Posteriormente, em (HAFTING, FYHN, *et al.*, 2005), os autores gravaram as atividades elétricas neurais do córtex entorrinal de ratos quando eles circulavam dentro de um ambiente controlado e com referências definidas e fixas. Quando se removiam as referências e apagava-se a luz, observou-se que os ratos não perdiam muito a noção geográfica anteriormente aprendida. A Figura 14 ilustra o resultado do experimento realizado por Hafting *et al.* (HAFTING, FYHN, *et al.*, 2005). Na coluna (a) no alto tem-se o mapa dos caminhos percorridos por um rato após ter aprendido os locais de visitação. Na coluna (a) embaixo observa-se a área do córtex entorrinal que era estimulada quando o rato caminhava pelo ambiente. Em (b) quando as luzes eram apagadas e em (c) quando eram acesas novamente.

A questão fundamental foi que as atividades do córtex entorrinal apresentavam a mesma distribuição espacial que os caminhos percorridos pelos ratos. Quando as referências foram removidas, eles tinham memorizado os locais de visitação, e quando o estímulo visual era removido, eles continuavam se orientando pelo mapa armazenado no córtex.

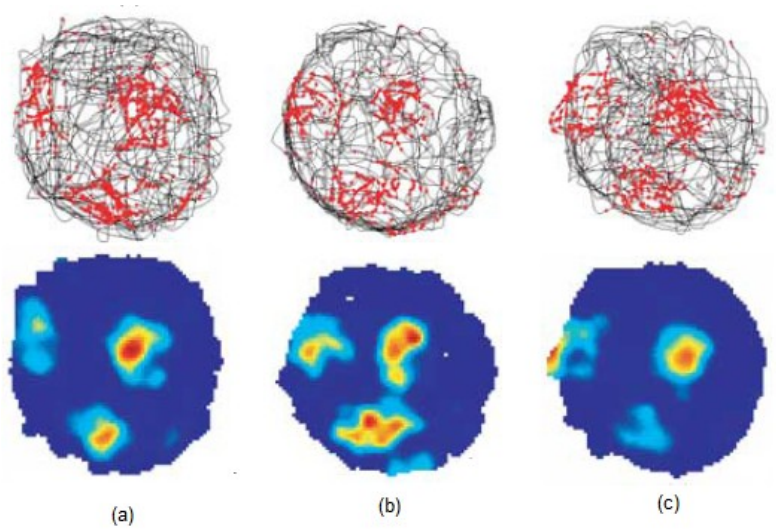


Figura 14 – Na coluna (a) no alto tem-se o mapa dos caminhos percorridos por um rato após ter aprendido os locais de visitação. Na coluna (a) embaixo a área do córtex entorrinal que era estimulada quando o rato caminhava pela ambiente. Em (b) quando as luzes eram apagadas e em (c) quando eram acesas novamente. Os pontos vermelhos nas figuras da primeira fila indicam a preferência de visitação dos locais geográficos [Extraída de (HAFTING, FYHN, *et al.*, 2005)].

Outro aspecto do SOM que sempre intrigou os pesquisadores era se os sistemas biológicos teriam o conceito do "Vencedor Leva Tudo" WTA (*Winner-Take-All*). Coultrip *et al.* (COULTRIP, GRANGER e LYNCH, 1992) formalizaram o mecanismo do WTA e forneceram uma métrica para determinar o desempenho desse mecanismo, porém, nenhum comparativo foi apresentado. Kaski e Kohonen (KASKI e KOHONEN, 1994) também oferecem uma prova matemática de que as redes competitivas biológicas trabalham no conceito de WTA. Em (JENSEN e LISMAN, 1996) os autores apresentam um estudo descrevendo o processo de aprendizado e recuperação de memória em células do hipocampo no nível celular. Eles observaram que o processo de inibição ocorre dentro do conceito de WTA.

Possivelmente, um exemplo da estratégia WTA biológica pode ser observado na percepção visual. A Figura 15 reproduz uma obra de Edgar Rubin, conhecido como Vaso de Rubin. O fenômeno que se observa ao dar atenção à figura é uma dicotomia entre o que é a imagem principal e o que é fundo. Quando a atenção é exigida para um dos dois temas da imagem, o outro é inibido. Conforme (KANDEL, SCHWARTZ e JESSELL, 2000), este é um exemplo de estratégia WTA da percepção visual humana.

Figura 15 – Reprodução da ilustração criada por Edgar Rubin conhecido como Vaso de Rubin, utilizada para demonstrar o conceito de WTA, criando uma ilusão entre a imagem do vaso em preto e duas faces de perfil no plano de fundo [Extraída de (KANDEL, SCHWARTZ e JESSELL, 2000) página 494].

Nota-se que é comum a formação de padrões em processos auto-organizados do cérebro. Inúmeros exemplos são ilustrados na literatura médica (KANDEL, SCHWARTZ e JESSELL, 2000). A razão para a formação de padrões de maneira auto-organizada pode estar relacionada com a otimização do processo de transmissão de informação através dos mecanismos genéticos do DNA (*Deoxyribonucleic Acid*). Somente considerando o número de neurônios que um cérebro possui, estimado em mais de 100 bilhões, e juntamente com as possíveis conexões que eles têm que formar ao longo da vida, chega-se ao impressionante número de 10^{15} conexões. Não seria possível carregar essa quantidade de informações dentro do código genético. Ao contrário, o DNA carrega informações de como o processo deve evoluir a partir de uma estrutura básica, e o restante das informações deve ser aprendido do ambiente (COSTA, 1999).

4.4 Processo de Redução de Dimensionalidade nos Mapas Auto-Organizáveis

A redução de dimensionalidade é um conceito inerente aos Mapas Auto-Organizáveis, principalmente quando consideramos os mapas uni e bidimensionais, que guardam o mapeamento das relações topológicas de entrada, mas num espaço de menor dimensão. Ademais, estruturas biológicas também trabalham com representações bidimensionais (KIVILUOTO, 1996). Como também descrito em (LEE e VERLEYSEN, 2010), a representação do espaço topológico pode ser considerada como um mecanismo de redução de dimensionalidade logo, o SOM também se enquadra na classe das metodologias descritas no Capítulo três.

Alguns autores como (HAYKIN, 2001) e (RITTER, 2003) consideram ainda que o SOM apresenta algumas propriedades do PCA e pode ser visto como uma generalização não linear do PCA. Kohonen (KOHONEN, 2001) e Kiviluoto (KIVILUOTO, 1996) também consideram que o SOM é uma rede com um número finito de neurônios e que representa uma "*superfície elástica*" que se ajusta à estrutura de distribuição dos dados, permi-

tindo encontrar as possíveis componentes principais não lineares. A maneira de se controlar a rigidez ou flexibilidade de um mapa SOM é reduzindo ou aumentando a largura da relação de vizinhança $h_{c_j}(t)$. Entretanto, diferentemente dos autovetores do PCA, os vetores de peso dos neurônios não criam um conjunto de vetores linearmente independentes, portanto não são ortogonais e não formam uma base vetorial.

Tenenbaum (TENENBAUM, 1998) argumenta que o SOM tenta generalizar os conceitos do PCA de maneira não linear sobre a estrutura dos dados, mas sem olhar para uma relação entre os dados e a estrutura global. A Figura 16 (b) ilustra a situação descrita acima, na qual o SOM posiciona os neurônios sem considerar a relação mais global dos dados de treinamento, gerando um mapa distorcido que não representa exatamente os dados de observações de (a). O SOM tenta inicialmente ocupar todo o volume do espaço de dados da entrada e iterativamente procura se acomodar sobre as observações (pontos). Todavia, esse ajuste ocorre mantendo-se a relação de vizinhança na grade bidimensional do mapa SOM que foi inicialmente definida e que ao longo das iterações não é perdida. Logo, ocorre o que Lee e Verleysen (LEE e VERLEYSEN, 2010) chamam de "atalhos" que os neurônios mapeiam no espaço onde não se definem dados.

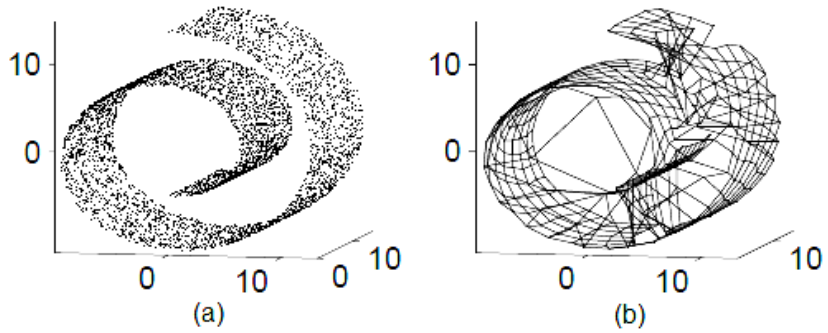


Figura 16 – Em (a) a representação de um espaço de dados distribuídos de forma não linear (Rolo Suíço) e em (b) como o SOM mapeia esse espaço, ocupando regiões que não necessariamente representam os dados da distribuição original [Extraída de (TENENBAUM, 1998)].

Esta tese também propõe uma alternativa para minimizar o problema de distorção do mapeamento da estrutura do Rolo Suíço pelo SOM e discute no capítulo 5 a extensão dessa proposta para dados em alta dimensão.

4.5 Métodos de Visualização dos Mapas Auto-Organizáveis

A discussão conduzida nesta seção torna-se relevante quando se considera que o resultado dos mapas auto-organizáveis pode ser utilizado como uma ferramenta para Análise Visual de dados. O conceito de Análise Visual é definido como a ciência que estuda métodos para facilitar o raciocínio analítico por meio de *interfaces* visuais. Segundo, Keim *et al* (KEIM, MANSMANN, *et al.*, 2006) a Análise Visual é uma área altamente multidisciplinar, pois o objetivo é extrair conhecimento a partir de dados brutos e então criar representações gráficas para auxiliar na tomada de decisão. Para atingir esse objetivo é necessário coletar dados, pré processar a informação, representar a informação e torná-la visualmente útil. Em outras palavras, representar graficamente dados ou conceitos.

Seguindo o raciocínio acima, pode-se recordar que os primeiros trabalhos apresentados por Kohonen trouxeram exemplos muito ilustrativos da capacidade do SOM em representar uma massa de dados. Visualizações de mapas 1D e 2D ocuparam diversas publicações e as três principais estão reproduzidas aqui.

A Figura 17 ilustra o estado inicial e final de três configurações de mapas. Em (a) tem-se um modelo de mapa unidimensional tentando representar o espaço de entrada bidimensional. Em (b) o estado inicial e final de um mapa 2D tentando representar um espaço de entrada bidimensional e finalmente, em (c) uma ilustração de uma mapa 2D tentando representar a distribuição tridimensional dos pontos num volume. As ilustrações fornecem uma percepção visual da capacidade de representação do SOM. Entretanto, o que ocorre quando a massa de dados possui alta dimensionalidade?

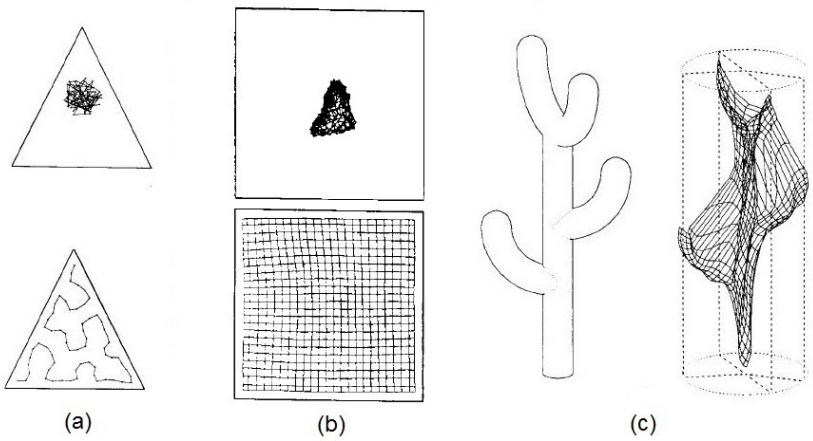


Figura 17 – Em (a) um mapa com dimensão 1D representando o espaço de entrada 2D, em (b) um mapa 2D representando um espaço 2D e em (c) um mapa 2D representando um espaço 3D [Figuras extraídas de (KOHONEN, 1990)].

Apesar da Figura 17 ilustrar adequadamente a proposta do SOM, pode-se dizer que das três figuras, apenas os mapas da figura (a) e (c) promoveram uma redução de dimensionalidade, isto porque foi mapeado um espaço de distribuição de duas e três dimensões para um mapa de uma dimensão e duas dimensões, respectivamente. No mapa da figura (b) manteve-se a mesma dimensão do espaço de entrada.

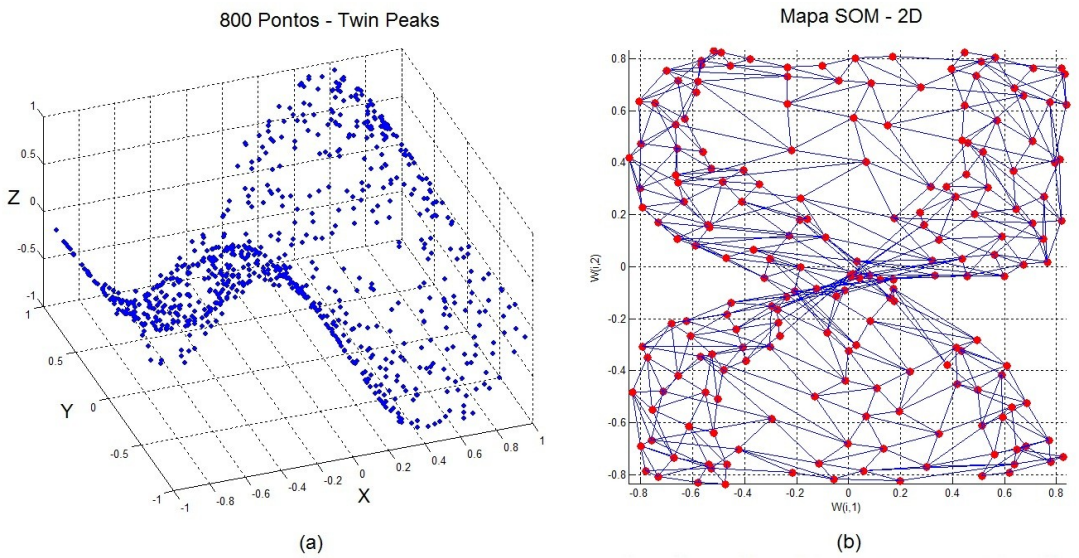


Figura 18 – Em (a) o exemplo da distribuição de pontos no formato *Twin Peaks*, em (b) os pontos vermelhos são os neurônios do mapa SOM e as linhas em azul representam as relações de vizinhança na grade bidimensional. As imagens foram obtidas com auxílio da ferramenta SOM *Toolbox* para Matlab® disponível em (http://www.cis.hut.fi/somtoolbox/download/) e acessado em 07/05/2008, juntamente com o código MANI.m disponibilizado por Todd Wittman, disponível em (http://www.math.ucla.edu/~wittman/mani/#downloads, acessado em 09/07/2011).

Para compreender melhor as possíveis dificuldades de se interpretar os mapas SOM, foi gerado um conjunto de 1000 pontos distribuídos no espaço $\mathbb{R}^3$ com formato *Twin Peaks,* como pode ser observado na Figura 18 (a). Esse conjunto de pontos foi treinado com o algoritmo SOM para que se realizasse um mapeamento para o espaço 2D. O resultado do mapeamento SOM pode ser visto na Figura 18 (b), cujos pontos vermelhos são os neurônios projetados no espaço 2D e as linhas em azul representam as conexões entre os neurônios adjacentes. Observa-se que, apesar dos neurônios apresentarem uma distribuição compatível com a base de dados, o SOM distorceu um pouco essa representação.

Estudar como os neurônios se distribuem no mapa SOM pode auxiliar na estimação da densidade de probabilidade dos dados. Para isso é necessário conhecer o histograma de vota-

ção de cada BMU (*Best Match Unit*). Como o mapa SOM não carrega a informação do histograma de votação de cada neurônio é necessário o uso de ferramentas como o SOM *Toolbox*[2] para Matlab® para obter o valor da quantidade de votações de cada neurônio. A ferramenta de *software* SOM *Toolbox* é um conjunto de funções desenvolvido para o programa Matlab® por Vesanto *et al*. (VESANTO, HIMBERG, *et al.*, 2000) e disponibilizado pela Universidade de Helsinki. O pacote é composto de funções para treinar e visualizar os mapas SOM e constitui uma das ferramentas mais conhecidas na comunidade que trabalha com o SOM.

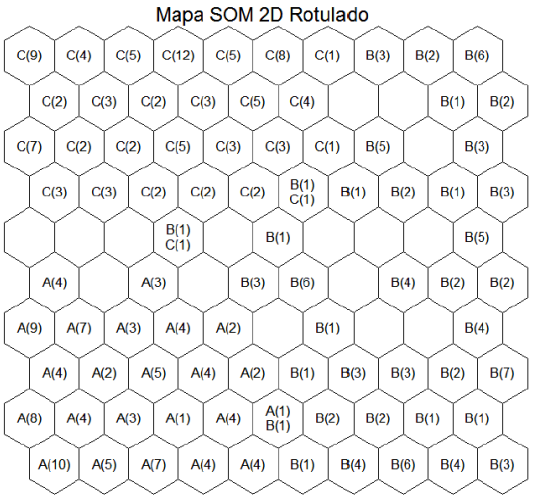


Figura 19 – Exemplo de um mapa SOM rotulado (A, B, C) treinado com dados artificiais e com os valores de votação entre parênteses de cada neurônio [Extraída de (SILVA, 2009) página 43].

A Figura 19 ilustra um mapa SOM rotulado e com os valores de votação de cada neurônio que se tornou BMU. As células em branco indicam que o neurônio correspondente nunca foi um BMU, portanto não representa nenhuma amostra do espaço de entrada. A inspeção visual da distribuição dos neurônios vencedores no mapa rotulado facilita a estimação inicial do número de possíveis agrupamentos existentes numa base de dados. Neste exemplo específico, a colocação de rótulos nas amostras favorece essa inspeção. Destaca-se que os rótulos foram baseados no conhecimento *a priori* da classe de cada amostra do conjunto de treinamento.

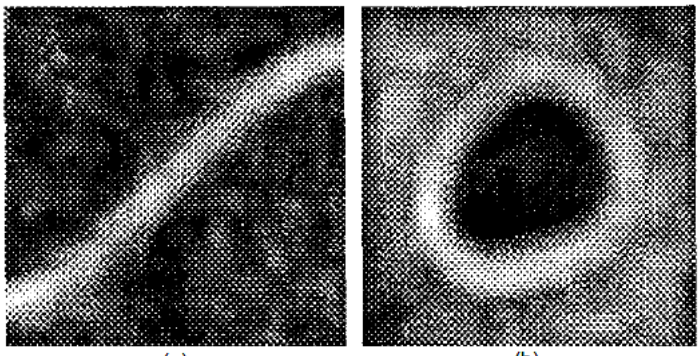
Infelizmente, nem sempre se dispõe de dados previamente rotulados. Nos casos em que o número de neurônios é muito pequeno, pode também ocorrer uma subestimativa da es-

[2] - Toolbox disponível em http://www.cis.hut.fi/somtoolbox/ e acessado em 07/05/2008.

trutura de distribuição dos dados de entrada, o que pode ocasionar distorções em virtude da baixa resolução do mapa. Espaços de dados de entrada também podem ter descontinuidades e dobras que podem não estar corretamente mapeadas. Na ocorrência de dois neurônios distintos, que não sejam vizinhos na grade do mapa, serem o primeiro e o segundo neurônios mais próximos de uma determinada amostra de entrada, pode ser um indicativo de que há uma descontinuidade no espaço de entrada ou alguma distorção do mapa SOM (KIVILUOTO, 1996) (KASKI, 1997).

Em Kraaijveld *et al*. (KRAAIJVELD, MAO e JAIN, 1992), foi apresentada uma proposta de visualização da estrutura dos dados capturada por uma grade bidimensional do SOM. A máxima distância entre cada neurônio com seus quatro vizinhos no espaço de características era calculada e convertida por uma escala de cinza e depois se montava uma matriz de imagem para representar o posicionamento dos neurônios no espaço de saída. Distâncias curtas tendiam ao preto e distâncias mais longas tendiam ao branco.

A Figura 20 reproduz duas imagens com o resultado visual de dois dos experimentos realizados em (KRAAIJVELD, MAO e JAIN, 1992) com mapas SOM. No primeiro experimento foi treinado um mapa SOM com dois conjuntos de pontos bem separados. Cada conjunto era formado por pontos de dimensionalidade 10 e normalmente distribuídos. O resultado da imagem em (a) indica que os neurônios se aglomeraram em cada lado da linha mais clara na diagonal. Essa linha branca indica a fronteira entre os dois grupos de neurônios. No outro experimento foram treinados dois conjuntos de pontos distribuídos em $\mathbb{R}^3$ e com formatos esféricos e diâmetros diferentes. A distribuição dos pontos da esfera menor estava dentro da distribuição dos pontos da esfera maior. O resultado do mapeamento dos neurônios na grade bidimensional pode ser visualizado na figura (b).



(a) (b)

Figura 20 – Em (a) reprodução da imagem em tons de cinza de um mapa SOM com 100X100 neurônios representando a distribuição de dois aglomerados bem separados. Em (b) a reprodução da imagem de um mapa SOM

com 100X100 neurônios representando a distribuição de dois conjuntos de pontos no formato esférico, sendo um menor dentro de um maior [Extraída de (KRAAIJVELD, MAO e JAIN, 1992)].

Esta subseção discutiu algumas ferramentas de visualização dos mapas SOM. Em (MOEHRMANN, BURKOVISKI, *et al.*, 2011) os autores apresentaram um estudo com análise de 11 técnicas de visualização de mapas SOM, indicando o grau de interatividade das ferramentas com o usuário final. Os autores observaram que a maioria das ferramentas de visualização está mais focada na identificação de agrupamentos. Todavia, há pouca ou nenhuma interatividade com o usuário de maneira a permitir uma extração de informação que não seja somente sobre agrupamentos. Eles consideram que a interpretação da informação contida nos agrupamentos pode trazer mais conhecimento sobre os dados do que somente a quantidade de grupos que são formados. Esta tese apresentará nos capítulos 5 e 6 novas propostas de visualização dos mapas SOM com objetivo de extrair mais informações.

4.6 Métodos de Avaliação da Preservação Topológica e Relação de Vizinhança

Como apresentado na seção 4.2.1, o SOM é também considerado um tipo de Quantizador Vetorial tal como o algoritmo conhecido como LBG (LINDE, BUZO e GRAY, 1980). Porém, a grande diferença do SOM em relação ao quantizador LBG está justamente na preservação da topologia dos dados de entrada.

Na literatura (KOHONEN, 1993) (KASKI, SINKKONEN e PELTONEN, 2001) (HAYKIN, 2001) (LEE e VERLEYSEN, 2010), o SOM é entendido como uma rede "elástica" que tenta aproximar o *manifold* dos dados de entrada, dobrando, esticando ou encolhendo a rede para que possa adequadamente representar esse espaço de entrada. As dobras podem criar descontinuidades no espaço mapeado porque o SOM privilegia as características locais das amostras. Logo, discutir a preservação topológica dos mapas SOM é avaliar se o mapa manteve as propriedades da estrutura original. Por exemplo, considere a **Erro! Fonte de eferência não encontrada.** que ilustra um mapa de 16×16 neurônios sobre uma superfície esférica.

Observa-se que a distância entre o neurônio A e B poderia ser determinada sobre a superfície como uma distância geodésica ou por meio de um grafo e não simplesmente como a menor distância Euclidiana entre A e B, assim como foi discutido na Seção 3.3.4. Se os dados de entrada estão próximos à superfície onde se encontram os neurônios, a região do segmento de reta que une os pontos A e B pode não pertencer ao conjunto dos dados de entrada.

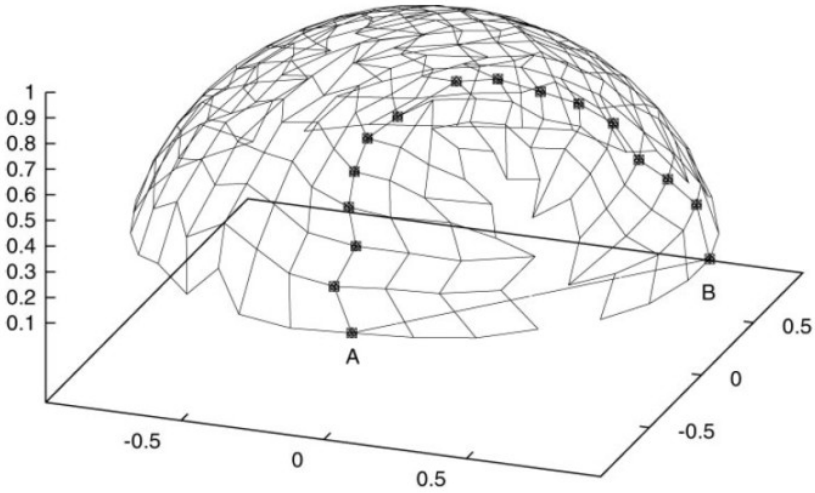


Figura 21 – Um mapa de neurônios com tamanho 16×16 sobre uma superfície esférica. [Extraída de (BAUER, HERRMANN e VILLMANN, 1999)].

Para compreender como a relação de vizinhança está relacionada com a preservação da topologia, discute-se a seguir um exemplo de mapeamento de pontos do espaço dos dados de entrada $\mathcal{A}$ para pontos no espaço de saída $\mathcal{V}$. Considere um mapeamento injetor tal que $\mathcal{A} \rightarrow \mathcal{V}$. A Figura 22 representa quatro exemplos de mapeamentos injetores do espaço de dados de entrada $\mathcal{A} = \{1, 2, 3, 4\}$ para o espaço de saída $\mathcal{V} = \{w_1, w_2, w_3, w_4\}$.

Em (a) ilustra-se um mapeamento perfeito, visto que são preservadas as relações de similaridade e de topologia. Neste trabalho, a similaridade ou dissimilaridade deve ser entendida como uma relação de distância entre pares de amostras. Portanto, para o exemplo da figura (a) temos: $d_{\mathcal{A}}(1,2) = d_{\mathcal{A}}(2,3) = d_{\mathcal{A}}(3,4)$ e mesma relação é mantida na saída $d_{\mathcal{V}}(w_1, w_2) = d_{\mathcal{V}}(w_2, w_3) = d_{\mathcal{V}}(w_3, w_4)$. Com relação à preservação topológica entende-se que o mapeamento deve preservar o ordenamento definido no espaço de entrada para o mapeamento no espaço de saída. Desta forma temos que: $1 \rightarrow w_1, 2 \rightarrow w_2, 3 \rightarrow w_3, 4 \rightarrow w_4$, indicando a perfeita preservação topológica. Seguindo o raciocínio proposto observa-se que em (b) há uma violação na preservação da relação de distância entre os pares de pontos.

Em (c) não é mantida a preservação de distância entre o par $d_{\mathcal{V}}(w_1, w_3)$ em relação ao par $d_{\mathcal{A}}(1,3)$ e inverte-se a relação de vizinhança entre os pontos w_2 e w_3 em relação à w_1, provocando uma violação de topologia e implicando na violação de similaridade por distância. Finalmente, em (d) tem-se a preservação do ordenamento, mas uma inversão na relação de

distâncias entre pares de vizinhos. Observa-se que as distâncias entre $d_{\mathcal{A}}(1,2) > d_{\mathcal{A}}(3,4)$ não é respeitada na saída, na qual $d_{\mathcal{V}}(w_1, w_2) < d_{\mathcal{V}}(w_3, w_4)$ (BAUER, HERRMANN e VILLMANN, 1999).

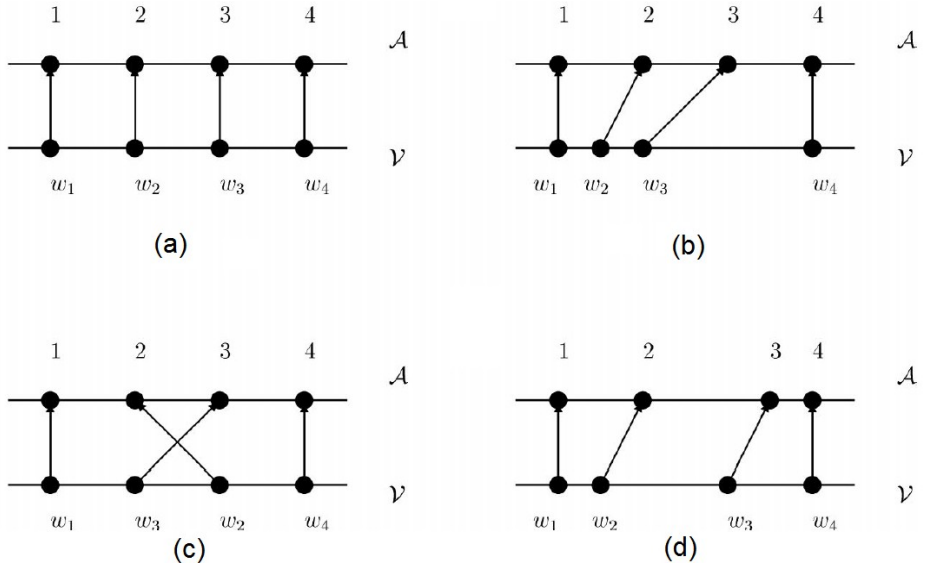


Figura 22 – Ilustração de mapeamentos ponto a ponto do espaço de entrada $\mathcal{A}$ para o espaço de saída $\mathcal{V}$. Os elementos do espaço $\mathcal{A}$ estão numerados como 1, 2, 3, 4 e os elementos ou projeções no espaço de saída como w_1, w_2, w_3 e w_4. As figuras ilustram diferentes violações topológicas por ordenamento, vizinhança ou ambas. Veja o texto para maiores detalhes. [Extraída de (BAUER, HERRMANN e VILLMANN, 1999)]

A perfeição da preservação topológica pode ser entendida como preservação das similaridades entre os pares de entrada do espaço $\mathcal{A}$ e a manutenção dessa similaridade nos pares de saída do espaço $\mathcal{V}$ (GOODHILL e SEJNOWSKI, 1992). Bauer *et al*. (BAUER, HERRMANN e VILLMANN, 1999) propuseram que qualquer métrica para medir a qualidade da preservação topológica deveria incluir os seguintes aspectos:

a) A medida deveria indicar se um mapa está preservando perfeitamente a topologia;
b) A medida deveria expressar qual, entre dois mapas, representa mais adequadamente os mesmos dados de entrada;
c) Diferentes amostras apresentadas a um mapa com os mesmos parâmetros deveriam resultar em valores similares;
d) A medida deveria apenas depender da topologia do espaço de entrada e não de qualquer escalonamento ou transformações lineares;
e) Se a topologia do mapa é aumentada monotonicamente na sua dimensionalidade, o valor da medida deveria capturar esse aumento.

As próximas subseções farão uma descrição resumida dos principais métodos de avaliação das distorções topológicas relacionados com os mapas SOM.

4.6.1 Produto Topográfico

É considerado uma das primeiras tentativas de propor um método para quantificar a continuidade ou erros de distorção do mapa de saída SOM. Foi proposto por Bauer e Pawelzik em 1992 (BAUER e PAWELZIK, 1992) e foi baseado na teoria do Produto Topográfico aplicado em atratores caóticos em sistemas dinâmicos não lineares. Nessa teoria, discute-se uma medida de preservação das relações de vizinhança entre espaços de diferentes dimensionalidades. Os autores então desenvolveram uma adaptação da teoria do Produto Topográfico para avaliar o SOM, dada a enorme similaridade entre os dois conceitos, em termos de vizinhança. A proposta conhecida como TP (*Topographic Product*) considera que a preservação do espaço topológico deve seguir o ordenamento sequencial definido em $\mathcal{A}$ e respeitado em $\mathcal{V}$.

Utilizando-se as notações descritas em Bauer e Pawelzik (BAUER e PAWELZIK, 1992) para medir as distâncias no espaço de entrada $\mathcal{A} \in \mathbb{R}^n$ (espaço vetorial) e no espaço de saída $\mathcal{V} \in \mathbb{Z}^d$ (espaço matricial), definem-se $d_{\mathcal{A}}$ e $d_{\mathcal{V}}$, respectivamente. A Figura 23 ilustra um exemplo de um espaço de entrada $\mathcal{A}$ bidimensional e a projeção dos pontos de entrada para um espaço de saída $\mathcal{V}$ unidimensional.

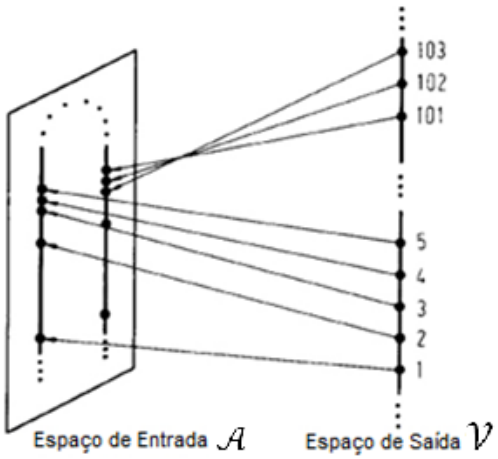


Figura 23 – Representação de uma projeção de pontos do espaço 2D para um espaço 1D na qual não está preservada a topologia [Extraída de (BAUER e PAWELZIK, 1992)].

Observa-se que para o ponto do nó 3, os vizinhos mais próximos no espaço de entrada são os nós: 4, 5, 2, 102. No espaço de saída, os vizinhos mais próximos desses nós são: 2, 4, 5 e o nó 102 foi mapeado longe do nó 3, não sendo considerado vizinho no espaço de saída. Assim, a métrica TP considera que a perfeita preservação topológica somente ocorre quando esse ordenamento relativo é preservado.

Considere que para cada elemento j do espaço $\mathcal{A}$ temos um elemento vizinho $n_i^{\mathcal{A}}(j)$ e a sua projeção no espaço $\mathcal{V}$ dado por $n_i^{\mathcal{V}}(j)$, cuja distância para o i-ésimo elemento mais próximo são dadas por $d_{\mathcal{A}}$ e $d_{\mathcal{V}}$, respectivamente. Exemplificando para o espaço de saída $\mathcal{V}$:

$$\begin{aligned} n_1^{\mathcal{V}}(j): &\quad d_V\left(j, n_1^{\mathcal{V}}\right) \\ n_2^{\mathcal{V}}(j): &\quad d_V\left(j, n_2^{\mathcal{V}}\right) \\ n_3^{\mathcal{V}}(j): &\quad d_V\left(j, n_3^{\mathcal{V}}\right) \\ &\quad . \end{aligned} \tag{4-10}$$

e para os elementos da entrada $\mathcal{A}$

$$\begin{aligned} n_1^{\mathcal{A}}(j): &\quad d_{\mathcal{A}}\left(j, n_1^{\mathcal{A}}\right) \\ n_2^{\mathcal{A}}(j): &\quad d_{\mathcal{A}}\left(j, n_2^{\mathcal{A}}\right) \\ n_3^{\mathcal{A}}(j): &\quad d_{\mathcal{A}}\left(j, n_3^{\mathcal{A}}\right) \\ &\quad . \\ &\quad . \\ &\quad . \end{aligned} \tag{4-11}$$

Pode-se definir que a razão

$$Q_{\mathcal{A}}(j,k') = \frac{d_{\mathcal{A}}\left(\mathbf{w}_j, \boldsymbol{w}_{n_{k'}^{\mathcal{V}}}(j)\right)}{d_{\mathcal{A}}\left(\mathbf{w}_j, \mathbf{w}_{n_{k'}^{\mathcal{A}}}(j)\right)} \tag{4-12}$$

e

$$Q_{\mathcal{V}}(j,k') = \frac{d_{\mathcal{V}}\left(j, n_{k'}^{\mathcal{V}}(j)\right)}{d_{\mathcal{V}}\left(j, n_{k'}^{\mathcal{A}}(j)\right)}, \tag{4-13}$$

onde $\mathbf{w}_j$ é o peso do vetor j, serão tais que $Q_{\mathcal{A}}(j,k') = Q_{\mathcal{V}}(j,k') = 1$ somente se os vizinhos mais próximos da ordem k' coincidirem no espaço de entrada $\mathcal{A}$ e também no espaço de saída $\mathcal{V}$ (BAUER e PAWELZIK, 1992). Logo, define-se a métrica P do Produto Topográfio que mede a média de todos os desvios de vizinhança entre os espaços $\mathcal{A}$ e $\mathcal{V}$, como dada na equação a seguir,

$$P = \frac{1}{N'(N'-1)} \sum_{j=1}^{N'} \sum_{k'=1}^{N'-1} \left(log\left(\prod_{l=1}^{k'} Q_{\mathcal{A}}(j,l) Q_{\mathcal{V}}(j,l) \right)^{\frac{1}{2k'}} \right), \qquad (4\text{-}14)$$

onde k' representa o número de vizinhos mais próximos de j. As notações k' e N' foram adotadas desta maneira para manter as equações próximas do artigo original e não criar divergências com as notações e símbolos adotados nesta tese.

A interpretação do valor de P também poderia auxiliar na indicação de que o tamanho do mapa SOM no espaço de saída $\mathcal{V}$ tem dimensão adequado para representar o espaço de entrada $\mathcal{A}$. Valores de P menores do que zero indicam que o mapa do espaço de saída é menor do que o espaço de entrada, e valores de P maiores do que zero indicam que o mapa do espaço de saída é maior do que a entrada. Quando o espaço de saída tem uma dimensão e formatos adequados o produto P tende a zero.

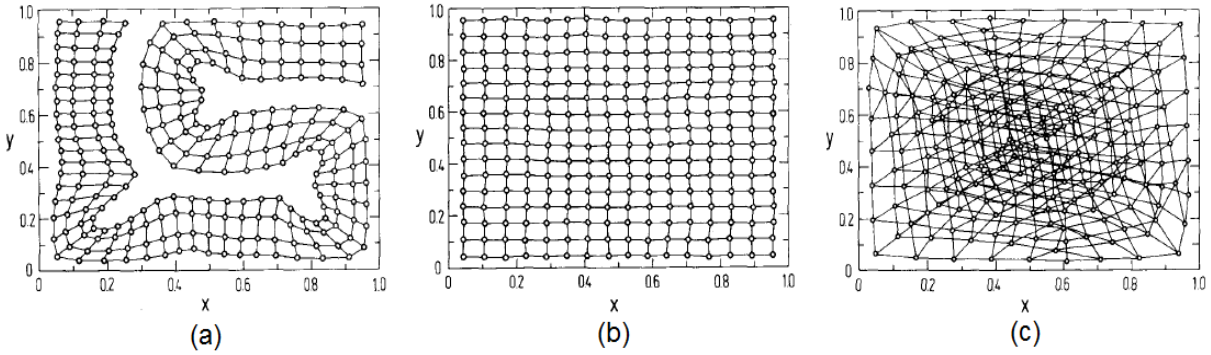


Figura 24 – Três mapas SOM treinados com um conjunto de pontos uniformemente distribuídos num espaço de entrada bidimensional. Em (a) o resultado do mapeamento do espaço de entrada com um mapa de dimensão 64×4, em (b) o resultado do mapeamento com um mapa SOM de dimensão 16×16. Finalmente em (c), um mapa SOM tridimensional com 6×6×6 neurônios. [Extraídas de (BAUER e PAWELZIK, 1992)].

A Figura 24 ilustra o resultado final de 3 mapas SOM treinados com um conjunto pontos uniformemente distribuídos num espaço bidimensional. Visualmente observa-se que o mapa SOM da figura (b) representa mais adequadamente o espaço de entrada. O produto topográfico P, de cada mapa são $P_a = -0{,}066$, $P_b = 0{,}0005$ e $P_c = 0{,}0382$, respectivamente, indicando que os valores correspondem à lógica de interpretação do Produto Topográfico proposta por (BAUER e PAWELZIK, 1992).

4.6.2 Função Topográfica

A proposta do Produto Topológico (TP) apresentada anteriormente não considera o possível *manifold* $\mathcal{M}$ que o espaço de entrada $\mathcal{A}$ pode conter. A relação de distância ponto a ponto entre os vetores do espaço de entrada (vetorial) e saída (matricial) faz com que o TP somente encontre sub-*manifolds* lineares, tal que $\mathcal{M} \subseteq \mathcal{A}$. Em outras palavras, o TP não distingue as possíveis dobras do *manifold* dos dados em relação às dobras e torções do mapa de saída. Para corrigir esse problema, Villmann, Der e Martinetz (VILLMANN, DER e MARTINETZ, 1994) propuseram trabalhar com uma Função Topográfica (TF- *Topographic Function*) para medir a preservação topológica. A ideia é definir um campo receptivo R_j para um neurônio j, tal que:

$$R_j = V_j \cap M, \tag{4-15}$$

em que V_j é a região do Diagrama de Voronoi definida pelo neurônio j sobre o possível *manifold* $\mathcal{M}$. O campo receptivo R_j seria então o espaço correspondente ao volume do Diagrama de Voronoi V_j. Desta maneira, os autores consideram que um mapa SOM perfeito tem somente os vizinhos mais próximos do neurônio $m_j \in R_j$ no espaço $\mathcal{A}$ se as projeções $m_j^V \in R_j^V$ no espaço $\mathcal{V}$ forem adjacentes.

4.6.3 Erro Topográfico

Posteriormente, Kiviluoto (KIVILUOTO, 1996), postulou que se deve buscar um balanço entre continuidade e resolução do mapa. Para definir esse *trade-off* são necessárias métricas para avaliar a influência da resolução e da continuidade. Kiviluoto propôs uma métrica denominada *Erro Topográfico (TE = Topographic Error*), que mede as adjacências do 1ª e 2ª BMUs de um vetor de entrada $\mathbf{x}_i$. Se os dois BMUs são adjacentes comparados ao vetor $\mathbf{x}_i$, significa que o mapeamento é contínuo. O TE é computado como segue,

$$TE = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} u(\mathbf{x}_k), \tag{4-16}$$

$$u(x_k) = \begin{cases} 1 \Rightarrow \text{se os BMUs } 1^a \text{ e } 2^a \text{ não forem adjacentes} \\ 0 \Rightarrow \text{para qualquer outra situação} \end{cases} \quad (4\text{-}17)$$

4.6.4 Medida de Distorção Ed

Como descrito anteriormente, uma característica que distingue o SOM em relação aos métodos de Quantização Vetorial é a influência da relação de vizinhança h_{c_j} a partir do neurônio BMU m_c sobre os neurônios vizinhos m_j, durante a fase de treinamento. Kohonen (KOHONEN, 2001) propõe que uma medida de distorção do mapa baseado no erro de quantização deveria também considerar a influência da relação de vizinhança h_{cj}, tal que:

$$e = \sum_{j \in L} \; h_{c_j} d(\mathbf{x}, \mathbf{w}_j), \quad (4\text{-}18)$$

onde L é o conjunto de índices dos neurônios do mapa. Logo, o valor médio esperado da medida do erro de distorção poderia ser escrito como:

$$E = \int e.p(\mathbf{x}).d\mathbf{x} = \int \sum_{j \in L} h_{cj} d(\mathbf{x}, \mathbf{w}_j) p(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad (4\text{-}19)$$

e então buscar valores de $\mathbf{w}_j$ que globalmente minimizem o erro médio da distorção (KOHONEN, 2001) (LUTTRELL, 1989). Pode se escrever o erro de distorção na versão discretizada e com h_{cj} fixo, como sendo:

$$E_d = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{k} h_{cj} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{w}_j\|, \quad (4\text{-}20)$$

onde, N é o número de amostras dos dados de entrada e k é o número de neurônios no mapa. A medida E_d é então uma variação do erro de quantização global, mas ponderada localmente pela relação de vizinhança h_{cj} (KASKI, 1997). Observa-se que a equação do erro de distorção é muito semelhante com a função de minimização do algoritmo K-*Means*. Entretanto, a função h_{cj} faz com que haja uma atualização, não somente do neurônio mais próximo da amostra apresentada, mas também de todos os neurônios que estão dentro do raio de influência do h_{cj}, e esse princípio rege o ordenamento topológico do SOM. Portanto, olhar a medida de distorção somente pela quantização não permitiria avaliar adequadamente a influência da vizinhança no erro global. Kaski (KASKI, 1997) propôs uma expansão discretizada da equação (4-19) em dois termos:

$$Ed = \sum_{i=1}^{N} H_{c_i} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{n}_{c_i}\| + \sum_{i=1}^{k} N_i \sum_{j=1}^{k} h_{ij} \|\mathbf{n}_i - \mathbf{w}_j\|. \quad (4\text{-}21)$$

O primeiro termo da equação 4-21 expressa a qualidade da representação do mapa SOM sobre a distribuição dos dados, sendo que $\mathbf{n}_{c_i} = \frac{1}{\#V_j} \sum_{\mathbf{x}_i \in V_j} (\mathbf{x}_i)$ é centro de massa das amostras que são representadas pelo neurônio $m_j \mid \mathbf{x}_i \in V_j$ e $H_{c_i} = \sum_j h_{c_i,j}$, onde o índice c_i representa o BMU da amostra $\mathbf{x}_i$. No segundo termo a variável $N_i = \#V_i$ representa o número de elementos de cada região de Voronoi definido pelo neurônio m_i e o seu centro de massa $\mathbf{n}_i = \sum_{\mathbf{x} \in V_i} \mathbf{x} / N_i$. Este termo indica o quão distante os neurônios estão dos centros de massa das amostras por eles representados. Posteriormente, Vesanto *et al* (VESANTO, SULKAWA e HOLLMÉN, 2003) propuseram a expansão do segundo termo da equação 4-21, de maneira que a equação do erro de distorção E_d fosse representado por três componentes, e que foi expresso como:

$$E_d = E_{qx} + E_{nb} + E_{nv}. \quad (4\text{-}22)$$

O primeiro termo E_{qx} representa o erro de quantização total, considerando a variância local de cada amostra $\mathbf{x}_i \mid m_j$ com o centro de massa $\mathbf{n}_j$ das amostras contidas na região V_j de Voronoi. Assim temos que:

$$E_{qx} = \sum_{j=1}^{k} \#V_j \, H_j \left(\sum_{\mathbf{x}_i \in V_j} \left(\frac{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{n}_j\|}{\#V_j} \right) \right), \quad (4\text{-}23)$$

$$V_j = \{\mathbf{x}_i \mid \|\mathbf{x}_i - \mathbf{w}_j\| < \|\mathbf{x}_i - \mathbf{w}_k\| \; \forall \, k \neq j\}, \quad (4\text{-}24)$$

$$H_j = \sum_{i=1}^{k} h_{c_i}(m_i, m_j), \quad (4\text{-}25)$$

onde $\#V_j$ representa o número de amostras dentro da região do Diagrama de Voronoi V_j e penaliza o custo do erro dependendo do número de elementos contidos na região. O termo H_j representa a somatória das influências dos outros neurônios do mapa sobre o neurônio m_j.

O segundo termo E_{nb} combina a qualidade da quantização com a ordenação dos neurônios no espaço de saída e a manutenção da vizinhança.

$$E_{nb} = \sum_{j=1}^{k} \#V_j H_j \|\mathbf{n}_j - \bar{\mathbf{w}}_j\|, \quad (4\text{-}26)$$

$$\overline{\mathbf{w}}_j = \frac{\sum_{i=1}^{k} h_{c_i}(m_i, m_j).\mathbf{w}_i}{H_j}. \tag{4-27}$$

O $\overline{\mathbf{w}}_j$ representa a média ponderada de todos os pesos dos neurônios que estão dentro do raio de influência h_{c_i}. Esta medida é influenciada pelas bordas e/ou torções no mapa.

O terceiro termo E_{nv} mede a compactação dos neurônios na rede baseado na variância da vizinhança e indicando a qualidade da ordenação. Define-se como:

$$E_{nv} = \sum_{j=1}^{k} \#V_j H_j \left(\sum_{g=1}^{k} \left(\frac{h_{gj} \|\mathbf{w}_g - \overline{\mathbf{w}}_j\|}{H_j} \right) \right). \tag{4-28}$$

A grande característica da medida do Erro de Distorção *Ed* é que é possível avaliar individualmente os erros de distorção E_{qx}, E_{nb} e E_{nv} por neurônios e identificar no mapa SOM quais regiões estão sendo afetadas por problemas de quantização, ordenação e falhas na topologia.

Em Goodhill *et al* (GOODHILL e SEJNOWSKI, 1992) os autores descrevem e avaliam oito métodos de medidas de preservação de vizinhança em mapas topológicos. Os estudos indicaram que até aquele momento nenhuma metodologia havia conseguido ser completa. Deve-se considerar que os experimentos conduzidos por Goodhill *et al*. foram realizados com mapeamentos bijetores entre o espaço de entrada e saída. No caso dos mapas SOM, usualmente, os mapas são menores que o espaço de entrada, assim, realizam-se mapeamentos do tipo sobrejetores. Se o objetivo da avaliação da preservação topológica for apenas medir o grau de vizinhança dos pontos, as métricas propostas no MDS (COX e COX, 2001) e Projeções de Sammon (SAMMON JR., 1969) podem ser mais adequadas. Caso se deseje um maior refinamento dos mapas com superfícies suaves objetivando a visualização do espaço, o método denominado "Princípio da Distorção Mínima" (PDM) (LUTTRELL, 1994) pode ser usado, principalmente em mapas produzidos pelo SOM. Para o caso contínuo, o PDM foi definido como:

$$PDM \equiv \int d\mathbf{x} P(\mathbf{x}) \|\mathbf{x}'(\mathbf{y}(\mathbf{x})) - \mathbf{x}\| \tag{4-29}$$

onde $\mathbf{x}$ e $\mathbf{y}$ são vetores do espaço de entrada e de saída, respectivamente. $\mathbf{y}(\mathbf{x})$ é o mapeamento na saída e $\mathbf{x}'$ é a reconstrução do vetor $\mathbf{y}(\mathbf{x})$ para o espaço original e $P(\mathbf{x})$ é a probabilidade da ocorrência de $\mathbf{x}$. Caso $P(\mathbf{x}) = 1$, o PDM se comporta como uma medida do erro

de quantização das distâncias $d(\mathbf{x}', \mathbf{x})$. O estudo de (GOODHILL e SEJNOWSKI, 1992) indica que as métricas para medir a preservação topológica são dependentes da aplicação ou do tipo da estrutura dos dados de entrada. Como a minimização do erro de quantização e a preservação topológica são forças opostas, as métricas que são sensíveis às tais forças, acabam sendo influenciadas por elas.

A seção anterior discutiu o que é preservação topológica e algumas técnicas para se medir quantitativamente essa característica. Entretanto, não há um consenso sobre a técnica mais adequada para se avaliar resultado dos mapas. Como os mapas SOM têm muitos graus de liberdade relacionados com os vários parâmetros de configuração inicial, diferentes mapas fornecerão diferentes resultados para uma mesma base de treinamento. A dificuldade em se estabelecer uma função custo para ser minimizada ou maximizada exige heurísticas para se definir valores iniciais de alguns parâmetros dos mapas. Diferentes inicializações e configurações de mapas podem ser utilizadas para se determinar o melhor mapeamento (KOHONEN, HYNNINEN, *et al.*, 1996). Dois parâmetros que afetam o resultado do mapa e não estão associados a nenhuma função de otimização são: número de neurônios e formato do mapa para os casos acima de duas dimensões.

4.7 Considerações Finais

No conjunto dos temas explorados neste capítulo objetivou-se apresentar ao leitor uma visão geral da metodologia SOM, não somente no aspecto das aplicações, mas também das abordagens que dão suporte ao SOM ou que, de alguma maneira influenciam a capacidade e o desempenho do algoritmo. Apresentaram-se os temas que darão sustentação à algumas das propostas deste trabalho. Neste capítulo discutiram-se os como os modelos biológicos inspiraram a criação SOM, bem com a plausibilidade biológica que pode ser observada em vários parâmetros ou em parte do algoritmo SOM. Discutiu-se também como o resultado do mapa SOM pode ser interpretado e como determinar a qualidade de representação do mapa, visto que o algoritmo SOM não tem uma função de erro que deva ser minimizada. Para fins de avaliação, algumas técnicas que determinam numericamente o grau de qualidade dos mapas também foram discutidas, bem como o que significa preservação topológica e de vizinhança.

Os destaques principais foram:

a) Fundamentos e algoritmos do SOM;

b) Plausibilidade biológica do SOM;
c) Visualização dos resultados dos mapas SOM;
d) Métricas de avaliação da Preservação Topológica e Erro de Distorção.

As seções que discutiram as medidas de preservação topológica e distorções do mapa SOM procuraram destacar que não há uma única métrica ideal para avaliar a qualidade do resultado do mapa SOM. Nos próximos capítulos, um dos temas a ser discutido será a proposta de novas medidas de qualidade que estarão mais relacionadas com o desenvolvimento das propostas desta tese.

5. Interpretação Visual dos Mapas SOM

"Imagine a vast sheet of paper on which straight Lines, Triangles, Squares, Pentagons, Hexagons, and other figures, instead of remaining fixed in their places, move freely about, on or in the surface, but without the power of rising above or sinking below it, very much like shadows—only hard and with luminous edges and you will then have a pretty correct notion of my country and countrymen. Alas, a few years ago, I should have said "my universe": but now my mind has been opened to higher views of things."

Flatland by Edwin A. Abbott

Neste capítulo se inicia a discussão sobre as várias propostas desenvolvidas nesta tese. Os capítulos anteriores permitiram construir um conjunto de ideias e conceitos que historicamente conectaram o SOM à Biologia. Os aspectos metodológicos tais como: algoritmos SOM, visualização dos mapas SOM e medidas de erro topológico também foram abordados. Contudo, não somente o tema SOM foi apresentado nos capítulos anteriores. Abordaram-se também assuntos como: dimensionalidade dos dados, dimensão intrínseca, *manifolds* e técnicas de redução de dimensionalidade que estão no contexto das propostas desenvolvidas nesta tese.

5.1 Objetivos do Capítulo

A próxima seção discute uma das questões fundamentais sobre os mapas SOM: a influência do tamanho e formato do mapa no resultado visual do mapeamento em relação ao erro de quantização. Para atingir esse objetivo, utilizou-se como base de experimentos uma estrutura de dados tridimensionais no formato de Rolo Suíço. Após a discussão dos problemas associados ao aprendizado do Rolo Suíço apresenta-se uma proposta para minorar esses problemas em modelos de baixa dimensão, mas que é extensível para aplicações de dados em alta dimensão.

O capítulo finaliza propondo uma nova metodologia de visualização dos dados de imagens a partir do mapa SOM. Entende-se que esta abordagem poderá ser útil para todos que trabalham com o algoritmo SOM em bases de imagens. O desenvolvimento e resultados iniciais desta proposta foram discutidos em (KITANI, DEL-MORAL-HERNANDEZ, *et al.*, 2010) (KITANI, DEL MORAL HERNANDEZ e SILVA, 2012b), e agora expandidos neste capítulo.

A maioria das aplicações que utilizam imagens com SOM não realizam o retorno das características capturadas pelos neurônios para o espaço visual. Em geral, as metodologias trabalham por medidas de similaridades baseadas em distâncias e recuperam a imagem mais próxima do banco de imagens em relação a um determinado neurônio. Dois exemplos aplicação são o PicSOM desenvolvido por Laaksonen *et al.* (LAAKSONEN, KOSKELA e OJA, 1999) para recuperação de imagens baseadas em conteúdo e outro para recuperação de imagens médicas desenvolvido por (SILVA, 2009).

Ao longo da exposição deste capítulo discute-se também a influência do tamanho e formato do mapa SOM no resultado final do treinamento comparando-se medidas de erros que quantificam essas influências. Poucos trabalhos discutiram esse tema e seus impactos no resultado do mapa SOM. Em (PERES e NETTO, 2008) os autores propuseram uma medida da dimensão topológica que seria ideal para os mapas de saída SOM, baseada na medida determinada pela metodologia DFFS (Dimensão Fractal Fuzzy Significativa). Essa medida pode auxiliar na avaliação da decisão sobre a redução no tamanho do mapa em função do conjunto de treinamento.

5.2 Análise Visual do Mapa SOM de Baixa Dimensão

O SOM é na essência uma rede neural que tem como característica o aprendizado não supervisionado e competitivo. As configurações mais comuns de arquiteturas são obtidas com neurônios dispostos de maneira unidimensional (em fila) ou bidimensional como uma grade. Com esse conjunto de características o SOM iterativamente adapta os pesos dos neurônios para tentar descrever da maneira mais adequada possível a estrutura de distribuição dos dados de entrada. No final do treinamento os neurônios mapearam a estrutura dos dados de entrada tentando manter as três relações básicas com essa estrutura: a relação de similaridade, a preservação da topologia e a mesma dimensionalidade do espaço vetorial dos dados.

O mapa SOM se estica e contrai sobre a massa de dados durante a fase de treinamento para tentar se ajustar a estrutura de distribuição dos dados, mas sem perder a relação de vizinhança entre os neurônios. A relação de vizinhança cria uma conexão sináptica com os neurônios adjacentes durante o treinamento e é a chave da manutenção topológica do mapa.

Estruturas não convexas, tais como o Rolo Suíço, são um bom exemplo de conjunto de treinamento para testar o SOM. A despeito da simplicidade visual, o Rolo Suíço oferece

alguns desafios para o algoritmo SOM. Primeiro, os pontos estão aleatoriamente dispostos numa estrutura fina, como se fosse uma folha de papel. Segundo, essa folha se enrola em torno de si mesma, criando espaços vazios entre regiões nas quais não se definem dados.

Quando um mapa SOM é treinado com dados no formato de Rolo Suíço ele cria atalhos nos espaços vazios, assim como já discutido na seção 4.4. Não se está discutindo se esses atalhos são corretos ou incorretos, visto que a proposta inicial de Kohonen era desenvolver uma rede neural não supervisionada baseada numa grade (neste caso, de duas dimensões) e que copiasse a estrutura de entrada. Essa condição permite que neurônios ocupem espaços intermediários tornando-se muitas vezes neurônios conhecidos como "neurônios de interpolação". Os neurônios nessa condição não representam dados de entrada, mas foram posicionados nos espaços vazios em virtude da relação de vizinhança h_{cj} que atualizou todos os vetores de peso ao longo do treinamento.

Em (KITANI, DEL MORAL HERNANDEZ e SILVA, 2012b) foi realizado um experimento computacional treinando um mapa SOM de tamanho 20×20 sobre uma estrutura de dados no formato de Rolo Suíço com 900 pontos distribuídos aleatoriamente e com média zero. Na Figura 25 (a) ilustra-se o conjunto de treinamento e em (b) o mapa SOM após o treinamento. Os círculos verdes representam neurônios que tiveram votação e os círculos vermelhos os neurônios que não tiveram votação durante a fase de treinamento.

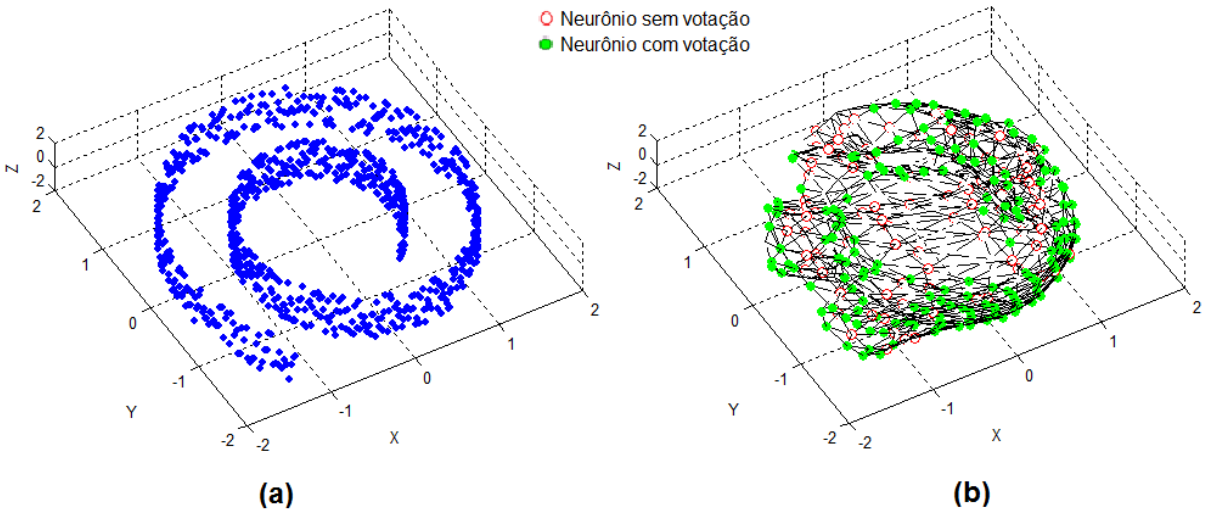


Figura 25 – Perspectiva tridimensional na qual, em (a) ilustra-se o conjunto de treinamento em formato de Rolo Suíço com 900 pontos distribuídos aleatoriamente com média zero. Em (b) o resultado do mapa SOM após 11000 iterações. Os círculos em verde representam os neurônios que tiveram votação e os círculos em vermelho os neurônios que não tiveram votação durante a fase de treinamento.

Para permitir uma compreensão adequada da questão que está sendo levantada nesta seção sobre os atalhos que o mapa SOM mapeia sobre a estrutura de dados do Rolo Suíço,

ilustra-se na Figura 26 (a) uma perspectiva 3D dos pontos que formam a distribuição dos dados de entrada e em (b) os neurônios do mapa SOM após o treinamento descrito acima.

Observa-se que existem regiões que não têm neurônios representando dados de entrada, apesar de existirem dados de entrada nessas regiões. Nota-se também neurônios ocupando espaços onde o Rolo Suíço não define dados nesse espaço. Em resumo, o Rolo Suíço não está sendo adequadamente representado pelos neurônios do mapa SOM e este não proporciona uma ideia clara de como os dados se distribuem sobre a estrutura de entrada. Se ocorrem o mapeamento de atalhos com dados de baixa dimensão ($\mathbb{R}^3$), será natural que também possa ocorrer com dados de alta dimensão ($\mathbb{R}^n$), e com um complicador adicional, não será possível realizar uma inspeção visual.

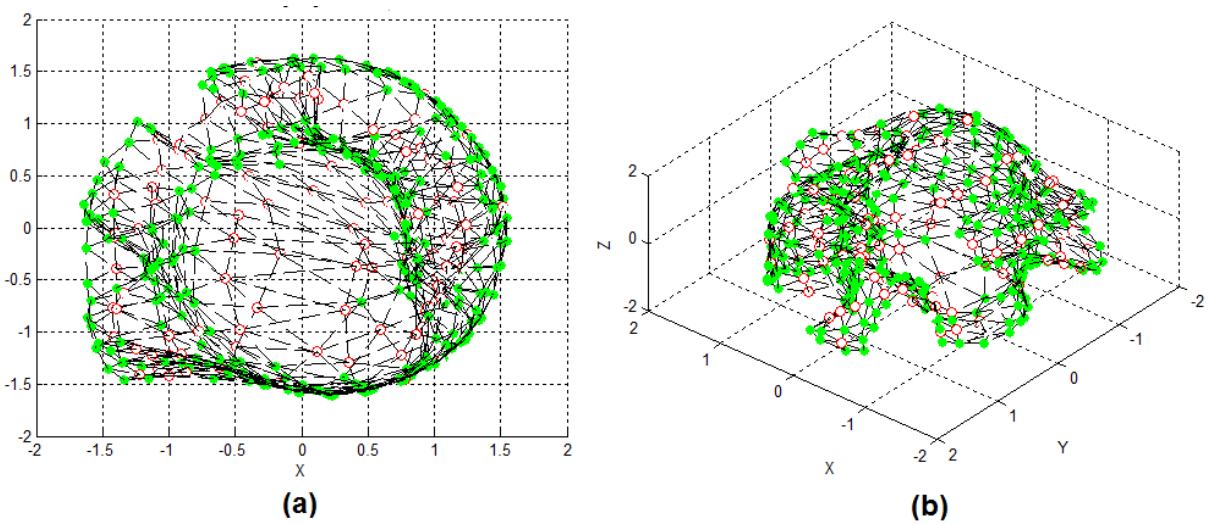


Figura 26 – Duas perspectivas dos neurônios do mapa SOM treinados com a estrutura do Rolo Suíço. Em (a) uma perspectiva de topo, na qual não se observa claramente onde começa e termina a estrutura. Em (b) o Rolo Suíço visto em 3D. Nota-se que o mapa se dobra bastante para tentar representar a estrutura de entrada.

Como foi descrito na seção 4.4, a razão pela qual o SOM cria os atalhos em espaços vazios (no exemplo do Rolo Suíço) pode estar relacionada com o fato de que o SOM é uma metodologia de aprendizado competitivo. Isto significa que o SOM não explora globalmente o espaço de características dos dados antes de iniciar o mapeamento. O processo de mapeamento ocorre localmente a partir do neurônio BMU e seus vizinhos. Em outras palavras, durante a fase de treinamento o algoritmo procura otimizar a distância entre cada amostra do espaço de entrada e os neurônios do mapa, mas não considera as possíveis distâncias sobre o *manifold* no qual os dados estão definidos. Ao contrário do SOM, o ISOMAP é considerado um algoritmo de otimização global, porque ele constroi um mapeamento a partir do cálculo prévio das distâncias geodésicas entre todos os pares de

pontos do espaço dos dados de entrada. Outra hipótese seria que a relação de vizinhança arrasta alguns neurônios para regiões vazias durante a fase de treinamento.

Campoy (2009) propôs um algoritmo denominado SOMOS (*Self-Organizing Map decision taken in Output Space*) para resolver o problema dos atalhos criado pelo SOM treinado com os dados do Rolo Suíço. Assim como no SOM, o SOMOS inicializa uma rede de neurônios com pares de variáveis $(y, \mathbf{w}_y)$, na qual $y \in \mathbb{Z}^d \mid d = 1,2,\ldots,d$ é o número do neurônio no espaço matricial e $\mathbf{w}_y \in \mathbb{R}^n$ é o peso sináptico associado ao neurônio y no espaço vetorial. Entretanto, o algoritmo apenas inicializa os pesos $\mathbf{w}_y$, mas não os associa a quaisquer variáveis y. Então não há uma relação fixa entre o número do neurônio na grade com o seu vetor de peso no espaço de características. Durante a fase de treinamento ocorre a associação entre y e $\mathbf{w}_y$ conforme a regra de atualização definida no SOMOS. A abordagem SOMOS não utiliza a relação de vizinhança fixa semelhante ao SOM, na realidade o SOMOS constrói a relação de vizinhança durante a fase de treinamento.

Similä (2005) também apresentou uma solução diferente para o mesmo problema, porém utilizou uma proposta de dois estágios. No primeiro estágio aplica-se a abordagem LLE (*Local Linear Embedding*) (ROWEIS e SAUL, 2000) para capturar a dimensionalidade intrínseca da massa de dados. Depois, sobre o mapa produzido pelo LLE, aplica-se a abordagem que o autor denominou de M-SOM (*Manifold* SOM), que é uma modificação da proposta original do SOM. Nesta abordagem os autores trabalharam um mapeamento global antes do treinamento com o SOM.

A próxima seção apresenta a proposta desta tese para minimizar os "atalhos" que o SOM original produz sobre a estrutura de dados do Rolo Suíço, mas sem realizar modificações no algoritmo original. Trabalha-se numa melhoria do mapa final reduzindo o erro de quantização e preservando as relações de vizinhança que foram definidas no inicio do treinamento original. Os experimentos com o Rolo Suíço permitem um acompanhamento visual dos resultados e facilitam a análise. Entretanto, todas as soluções propostas nesta tese são aplicáveis para base de dados de alta dimensão tais como imagens. Esta tese considera que as propostas que melhoram o resultado visual do mapa SOM com conjuntos de teste de baixa dimensão poderiam ser também úteis também em bases com dimensões $\mathbb{R}^n$.

Todos os experimentos com o SOM foram conduzidos utilizando-se um conjunto de ferramentas do SOM *Toolbox* para o *software* comercial Matlab®, conforme apresentado no

capítulo anterior. Todos os treinamentos foram executados no modo batelada (*Batch*) e vizinhança hexagonal, exceto quando houver outra indicação.

5.3 Proposta para Melhorar o Mapeamento do Mapa SOM

O treinamento do mapa SOM com a estrutura de dados do Rolo Suíço mostrou que se a ideia do mapeamento com o SOM for reproduzir adequadamente a estrutura dos dados de entrada, então a hipótese de realocar os neurônios após a fase de treinamento convencional poderia reduzir o erro de quantização global. Essa proposta foi inicialmente desenvolvida e publicada em (KITANI, DEL MORAL HERNANDEZ e SILVA, 2012b) e será expandida nesta seção.

O mapa SOM é o resultado da interação de duas forças que agem durante a fase de treinamento, a quantização vetorial e a preservação topológica. Contudo, essas forças são concorrentes e caso não existisse a preservação topológica do espaço matricial o SOM se comportaria como um algoritmo K-*Means*.

A Quantização Vetorial é um processo que busca um neurônio m_c no mapa de saída, para uma amostra de entrada $\mathbf{x}_i$, tal que: $\mathrm{c} = \underbrace{\mathrm{argmin}}_{\mathrm{j}}\{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{w}_j\|\}$, e desta forma, minimiza o erro de distorção *E* definido por:

$$E = \int \|\mathbf{x}_i - \mathbf{w}_c\|^2 p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \tag{5-1}$$

onde $p(\mathbf{x})$ é a função densidade de probabilidade de $\mathbf{x}$ (KOHONEN, 2001).

Entretanto, a relação de vizinhança h_{cj} faz com que outros neurônios, além do neurônio m_c, alterem suas posições no mapa ao longo das iterações. A Figura 27 ilustra simplificadamente o processo de atualização do peso do neurônio m_c e o peso de todos os neurônios vizinhos na grade do mapa. As linhas sólidas indicam a situação anterior ao processo de atualização dos pesos, as linhas pontilhadas indicam a relação de vizinhança e os círculos cinza indicam as novas posições dos neurônios com os pesos.

Antes, deve-se recordar que os neurônios do mapa SOM são sempre definidos por dois parâmetros. O primeiro é a posição do neurônio no espaço da grade de saída tal que $m_j \in \mathbb{Z}^d$, $j = 1, 2, \ldots, k$, e $d = 1, 2, 3, \ldots$ representa a dimensionalidade da grade ou rede no espaço matricial. O segundo parâmetro está associado ao vetor de peso $\mathbf{w}_j \in \mathbb{R}^n$ do *j*-ésimo neurônio e

que contém as informações de características do espaço de dados da entrada onde os neurônios estão posicionados. Por exemplo, nos mapas SOM de duas dimensões ocorre um mapeamento f entre dois espaços tal que $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{Z}^2$. E a relação que se mantém entre os dois espaços é a de vizinhança entre os neurônios m_j que foi estabelecida no espaço de saída $\mathbb{Z}^2$ juntamente com as relações de vizinhança vetorial dos respectivos vetores de pesos $\mathbf{w}_j$, como ilustrado na Figura 27. Os neurônios m_j que têm os vetores de pesos $\mathbf{w}_j$ próximos no espaço de características mapeiam também essa proximidade no espaço de saída.

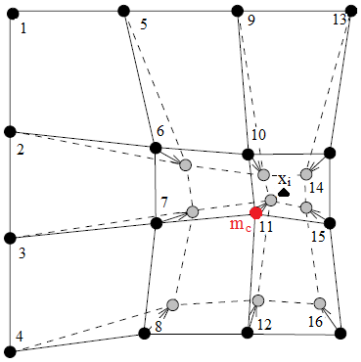


Figura 27 – Ilustração representando o processo de atualização do neurônio vencedor m_c (circulo vermelho), que está mais próximo do vetor de entrada $\mathbf{x}_i$ (triângulo preto), e também a atualização do peso dos neurônios vizinhos na grade. Neste exemplo, o mapa é formado por uma grade de 16 neurônios (círculos pretos) com topologia retangular e a relação de vizinhança é representada pelas linhas tracejadas em cinza claro [Extraída e adaptada de (VESANTO, 2002)]

A proposta para melhorar o resultado visual e reduzir a distorção do mapa SOM é modificar os vetores de peso dos neurônios após a fase de treinamento de maneira que se reduza o erro de quantização global. Essencialmente, a ideia é reposicionar apenas os neurônios vencedores cujo erro de quantização local seja maior que o erro de quantização global. Basicamente, o algoritmo de reposicionamento determina a média das características das amostras $\mathbf{x}_j \in V_j$, tal que V_j representa a região do Diagrama de Voronoi definido pelo neurônio m_j, tal que:

$$V_j \supset \{\mathbf{x}_i \mid \|\mathbf{x}_i - \mathbf{w}_j\| < \|\mathbf{x}_i - \mathbf{w}_k\| \; \forall \, j \neq k\}. \tag{5-2}$$

Desta maneira, pode-se calcular o centro de massa dos elementos de V_j como sendo:

$$\overline{\mathbf{w}}_{V_j} = \frac{1}{\#V_j} \sum_{\mathbf{x}_i \in V_j} (\mathbf{x}_i), \tag{5-3}$$

onde $\#V_j$ representa o número de elementos dentro da região de Voronoi V_j. Em seguida atualiza-se o vetor de pesos dos neurônios conforme:

$$\mathbf{w}_j = \bar{\mathbf{w}}_{V_j} \iff \#V_j \geq 2 \quad . \tag{5-4}$$

O algoritmo de reposicionamento dos neurônios está descrito na Tabela 3. Basicamente, o algoritmo de reposiciomento move o neurônio m_j para o centro de massa dos seus representados conforme o critério descrito no algoritmo e não altera a posição dos neurônios de interpolação. Por convenção deste texto, o resultado do mapeamento logo após o treinamento será denominado "Mapa SOM Original" e o mapeamento resultante da execução do algoritmo de reposicionamento, conforme descrito na seção 5.3, será denominado "Mapa SOM Reposicionado".

Tabela 3 – Algoritmo de Reposicionamento dos Neurônios

a) Calcule o mapa composto de k neurônios usando o algoritmo de Kohonen;

b) Calcule o erro de quantização global $QE = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\|\mathbf{x}_i - \mathbf{w}_c\|$ das N amostras $\mathbf{x}_i$ associadas ao neurônio vencedor $\mathbf{w}_c$ durante a fase de treinamento;

c) Calcule o limiar de corte do algoritmo $qeth = 1\%$ do erro global QE determinado em (b), faça $t = 1$ e defina o número máximo de iterações I_{lim};

d) Enquanto $(QE^t - QE^{t-1}) > qeth$ ou $t < I_{lim}$; (Ver nota 1)

d.1) Calcule para cada neurônio vencedor $j \mid \#V_j \geq 2$, $qe_j = \frac{1}{\#V_j}\sum_{\mathbf{x}_i \in V_j}\|\mathbf{x}_i - \mathbf{w}_j\|$;

d.2) Calcule $QE^t = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\|\mathbf{x}_i - \mathbf{w}_c\|$;

d.3) $t = t + 1$;

d.4) Se $qe_j > QE^{t-1}$ e $\#V_j \geq 2$ então atualize $\mathbf{w}_j = \frac{1}{\#V_j}\sum_{\mathbf{x}_i \in V_j}(\mathbf{x}_i)$;

e) Fim.

Nota 1: O índice t acumula o número de iterações; para $t = 1$ adota-se $(QE^t - QE^{t-1}) > qeth$.

Para avaliar o resultado do algoritmo de reposicionamento descrito na Tabela 3, realizou-se um conjunto de testes com a estrutura de dados do Rolo Suíço. Foram treinados diversos mapas bidimensionais com diferentes configurações de forma (largura e comprimento) e também mapas unidimensionais. A quantidade de neurônios variou de 64 a 900 com diferentes configurações de mapas, a vizinhança do mapa foi definida como sendo hexagonal, a inicialização dos mapas foi linear e o comprimento do treinamento em batelada (número de épocas) foi de 10000 para fase inicial e 1000 para fase de refinamento. Um mapa adicional com 100×30 neurônios foi treinado apenas para avaliar se o algoritmo de batelada do SOM produziria um resultado mais adequado com um número de neurônios muito maior do que de amostras. O número de neurônios fixos para

diferentes configurações de mapas promove uma restrição desse parâmetro no algoritmo do SOM e assim permite a análise dos resultados dos mapas com diferentes configurações de forma.

A Figura 28 ilustra o resultado do mapa SOM em duas situações: em (a) e (c) uma perspectiva 3D e uma perspectiva no plano xy do mapa SOM após o treinamento, em (b) e (d) as mesmas perspectivas, porém com o mapa SOM no qual os neurônios foram reposicionados conforme o algoritmo apresentado na Tabela 3.

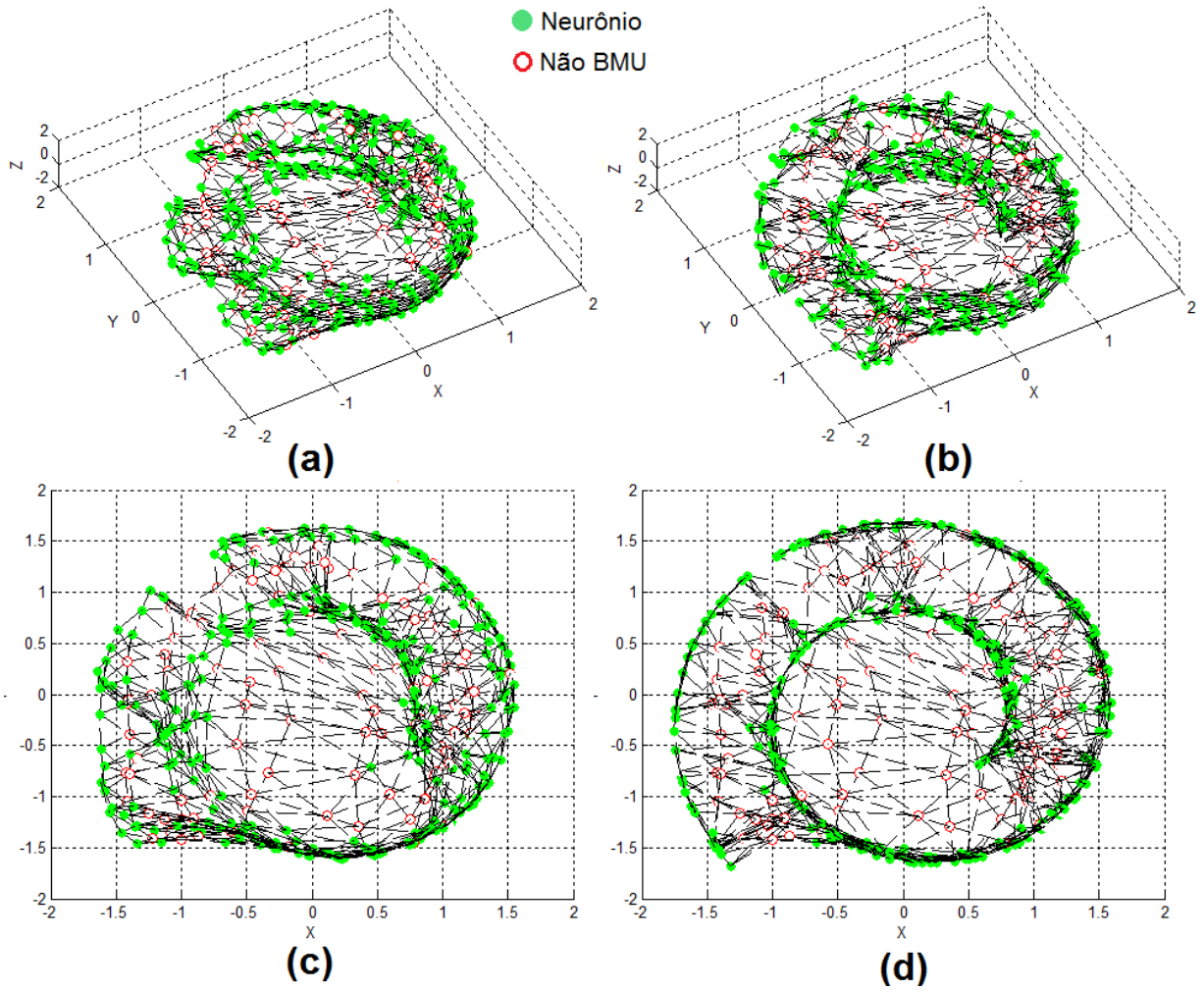


Figura 28 – Na figura (a) ilustra-se uma perspectiva em três dimensões de um mapa SOM de dimensão 20×20 treinado sobre a estrutura do Rolo Suíço. Em (c) uma perspectiva do plano xy do mapa SOM. Em (b) a perspectiva em três dimensões do mapa SOM com os neurônios reposicionados e em (d) uma perspectiva do plano xy do mapa SOM com os neurônios reposicionados. As linhas pretas dentro do rolo representam as conexões entre os neurônios na grade do mapa.

O resultado visual indica que houve uma melhora na representação da estrutura do Rolo Suíço. Enquanto no mapa sem reposicionamento (c) observam-se falhas na estrutura e regiões ocupadas nas quais não se definem dados, no mapa com os neurônios reposicionados (d) percebe-se uma maior proximidade com a estrutura dos dados de entrada. Para não se restringir apenas à análise visual utilizou-se a medida de distorção E_d, como discutido na

seção 4.6.4, para avaliar o erro de quantização e a preservação topológica. A

Figura 29 apresenta os gráficos das medidas de distorção dos componentes E_{qx}, E_{nv}, E_{nb}, como foi definido na seção 4.6.4 e cuja expressão é reproduzida aqui por conveniência.

$$E_d = E_{qx} + E_{nv} + E_{nb}. \tag{5-5}$$

Na seção 4.6.4 discutiu-se que a medida de distorção E_d é a soma de três erros que devem ser minimizados para que o mapa satisfaça os requisitos de minimização do erro de quantização global e manutenção da ordem topológica. Sabe-se também que esses dois requisitos são concorrentes entre si, portanto, deve-se procurar um equilíbrio. Como a medida de distorção é um número adimensional que deve ser minimizado, o valor absoluto não é útil para comparar diferentes tamanhos e formatos de mapas. O valor absoluto do erro E_d é válido quando se estuda o mesmo formato e tamanho de mapa, com a mesma base de dados, mas alterando-se apenas os parâmetros de treinamento. Entretanto, pode-se olhar o erro E_d em termos relativos entre os três componentes, e assim determinar qual componente está influenciando mais no erro de distorção do mapa. Portanto, os gráficos da Figura 29 foram produzidos considerando a contribuição de cada componente do erro E_d sobre o total do erro absoluto.

Observa-se que os erros relativos de quantização E_{qx} são maiores para os mapas unidimensionais e com menor número de neurônios. No caso do mapa unidimensional 1×90 o E_{qx} representa mais de 40% do total do erro. Este fenômeno é bem conhecido, quanto menor o número de neurônios maior o erro de quantização, pois poucos neurônios têm que representar muitas amostras. Nota-se também no gráfico (a) da

Figura 29 que, mantendo o número de neurônios constante, o erro de quantização é influenciado pelo formato do mapa.

A primeira conclusão sobre esses resultados é que mapas muito estreitos não conseguem ocupar todo o espaço de entrada e o mapa tem que se mover muito ao longo da estrutura, pois a relação de vizinhança limita o movimento dos neurônios. Para o caso unidimensional, a relação de vizinhança está definida entre o neurônio da frente e o de trás.

Isso faz com que o mapa tenha que se desdobrar muito mais para representar os dados. Mesmo com mapas delgados ou unidimensionais, o erro de quantização relativo tem menor

contribuição no erro global para os mapas SOM Reposicionados, como indicado pelo gráfico da Figura 29 (b).

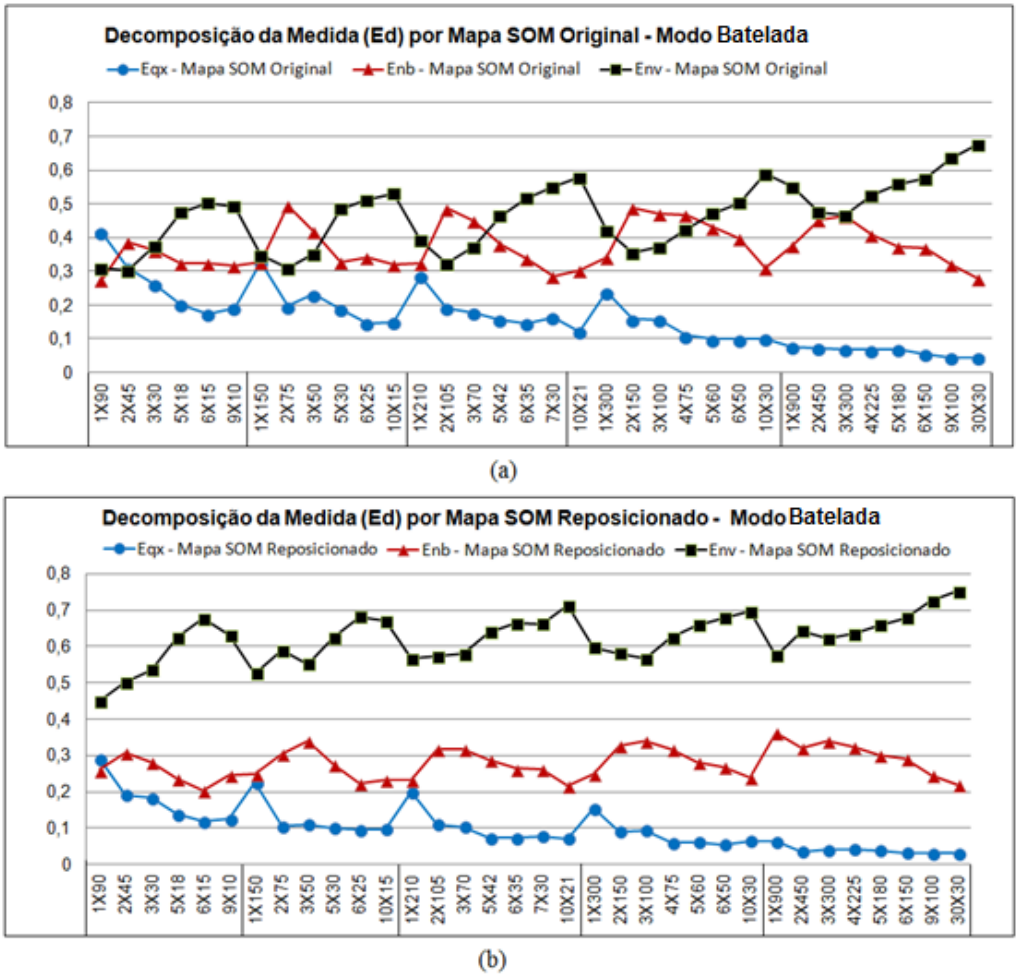
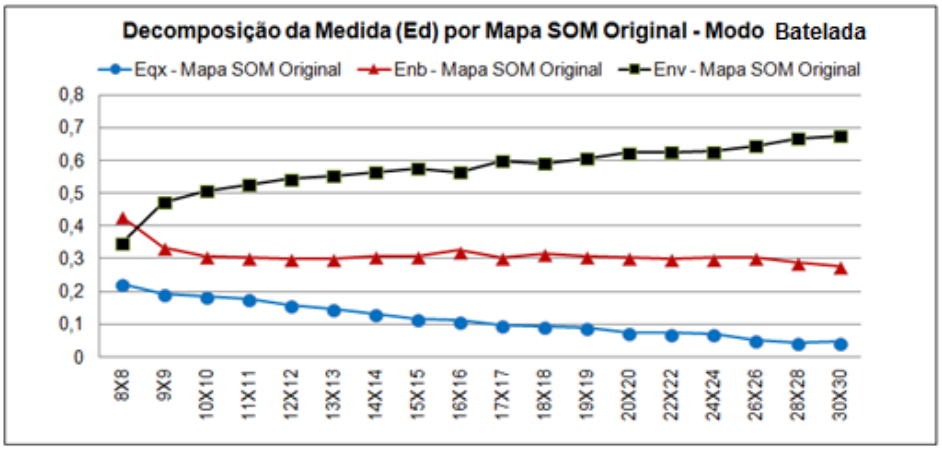


Figura 29 – Gráficos dos componentes da medida de distorção E_d dos mapas SOM treinados em modo batelada (*Batch*). Em (a) apresentam-se os resultados sobre os mapas SOM Original para cada configuração de mapa. Em (b) os resultados dos mapas SOM Reposicionado. Os agrupamentos nos eixos x dos dois gráficos indicam a mesma quantidade de neurônios para diferentes formatos de mapas.

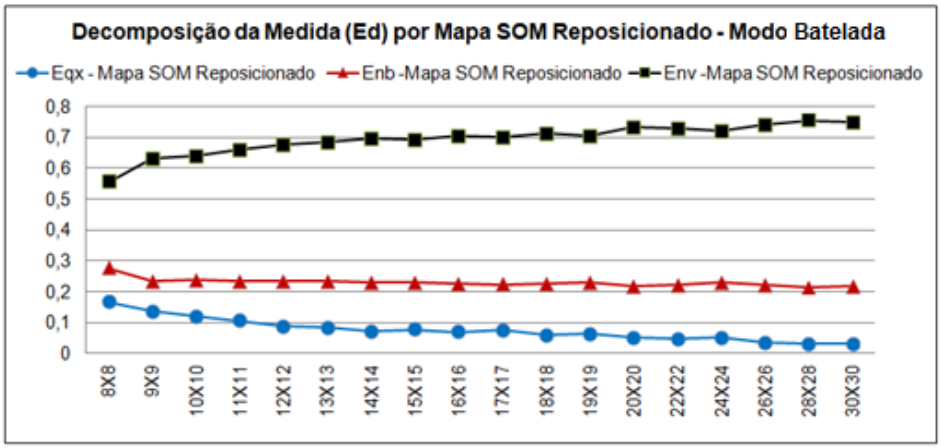
Outro indicativo da qualidade de representação do mapa está no erro E_{nb}. Como descrito na seção 4.6.4, o erro E_{nb} combina o efeito da quantização e a qualidade das projeções. Os resultados indicam que o erro E_{nb} é muito influenciado pelo formato do mapa, sendo que quanto mais quadrado, menor o erro. Possivelmente porque mapas delgados exigem mais contorções e esse índice é mais sensível às curvaturas.

Há também uma redução da influência do erro de quantização e do erro distribuição à medida que o mapa se torna mais quadrado. Para avaliar a hipótese da influência dos mapas quadrados no resultado do erro de quantização, realizou-se testes com 17 mapas com diferentes quantidades de neurônios (de 8×8 até 30×30). O resultado pode ser avaliado nos gráficos da Figura 30. As curvas indicam que o erro de quantização diminue com o aumento

do tamanho do mapa e o erro E_{nb} se mantém praticamente constante. Apenas o erro E_{nv} aumenta, indicando possivelmente que os neurônios vizinhos no espaço $\mathbb{R}^n$ não estão tão próximos no espaço $\mathbb{Z}^2$. Poderia-se entender esse índice como uma medida de confiabilidade da topologia do mapa.



(a)



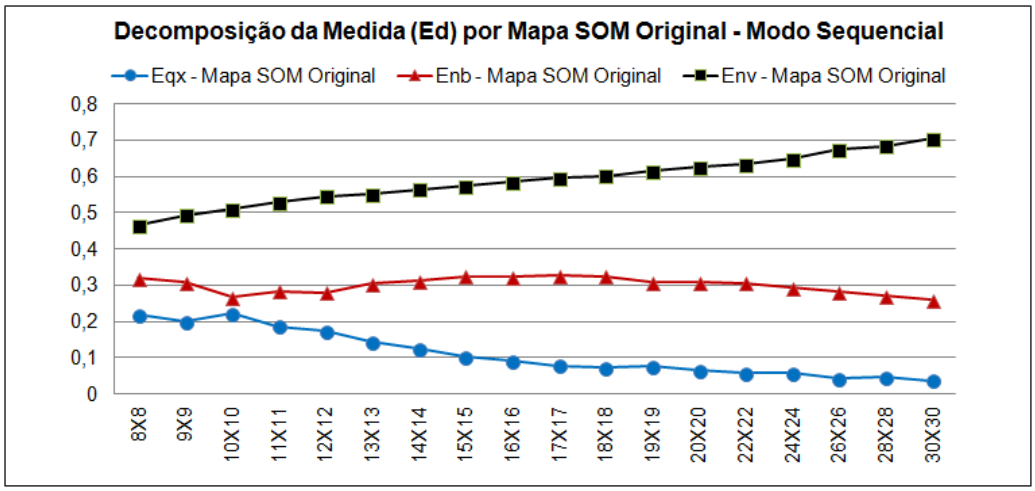
(b)

Figura 30 – Gráficos dos componentes da medida de distorção E_d com os mapas SOM treinados no modo Batch. Em (a) os resultados sobre os mapas SOM Original para cada configuração de mapa. Em (b) os resultados sobre os mapas SOM Reposicionado.

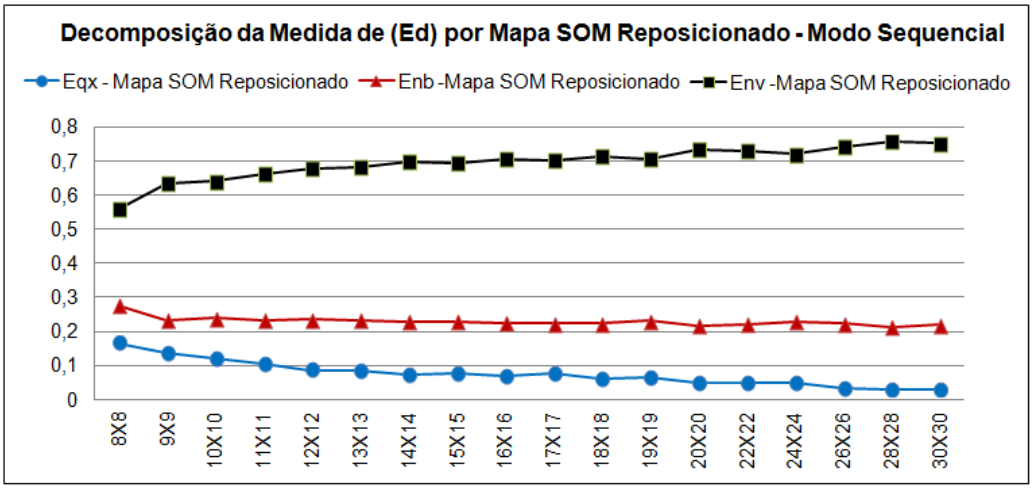
Como informado no início desta subseção, os mapas SOM foram treinados no modo *Batch*. Este modo de operação tem algumas vantagens, dentre elas destacam-se: treinamento mais rápido, maior imunidade a ruídos e menos parâmetros de configuração. Fort *et al* (2005). (FORT, LETREMY e COTTRELL, 2002) compararam e discutiram os resultados de testes realizados com mapas SOM no modo Sequencial e Batelada (*Batch*), e concluiram que o modo Batelada é muito sensível aos valores iniciais dos pesos dos neurônios. Os autores argumentam que às vezes consegue-se uma redução no erro de distorção, mas às custas de uma péssima organização topologica do mapa. Uma alternativa, que não foi testada nesta tese, seria realizar o treinamento Sequencial primeiro e depois o de Batelada. Esta alternativa

híbrida poderia resolver o problema de inicialização dos vetores de peso para o modo Batelada.

Para avaliar o efeito do treinamento com mapas SOM no modo sequencial, foram repetidos todos os testes anteriores: unidimensionais, retangulares e quadrados. Foi escolhida inicialização aleatória, relação de vizinhança hexagonal, treinamento da fase de ordenação igual a 10000 épocas e treinamento na fase de sintonia fina igual a 1000 épocas. A Figura 31 ilustra graficamente o resultado das medidas de cada componente do erro E_d em todos os testes.



(c)



(d)

Figura 31 - Gráficos dos componentes da medida de distorção E_d com mapas SOM treinados no modo Sequencial. Em (a) os resultados sobre os mapas SOM Original para cada configuração de mapa. Em (b) os resultados sobre os mapas SOM Reposicionado.

Nota-se pelos gráficos que mesmo para o treinamento no modo Sequencial o erro de quantização é menor quando o mapa se torna mais quadrado. Comparando-se os gráficos dos

mapas SOM Reposicionado nos modos Batelada e Sequencial observa-se também que há um aumento da contribuição do erro E_{nb} nos mapas treinados no modo Sequencial. Contudo, o mesmo fenôneno não se reproduz nos mapas quadrados, como pode ser visualizado nos gráficos da Figura 32.

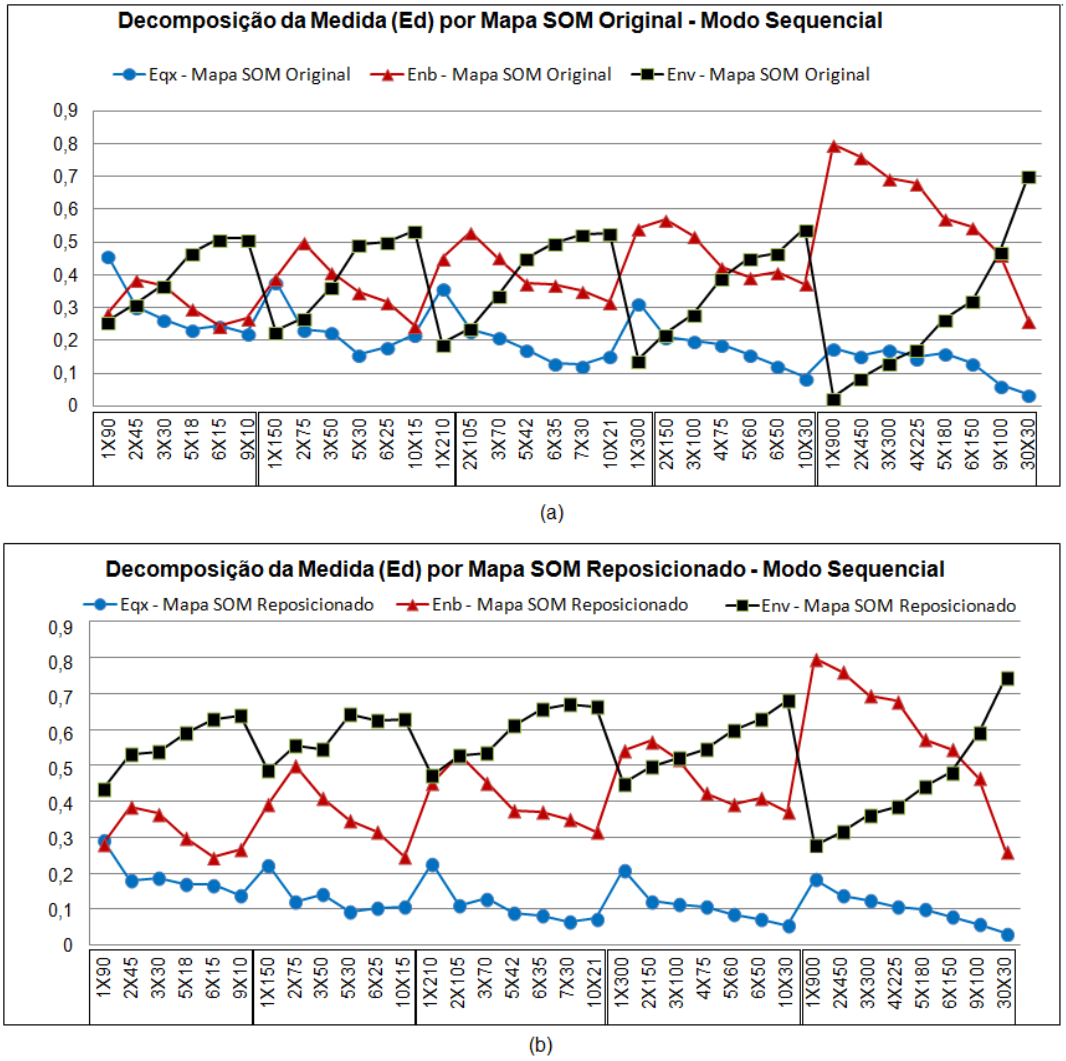


Figura 32 - Gráficos dos componentes da medida de distorção E_d com os mapas SOM treinados no modo Sequencial. Em (a) os resultados sobre os mapas SOM Original para cada configuração de mapa. Em (b) os resultados sobre os mapas SOM Reposicionado.

A Figura 33 reproduz o resultado do treinamento de um mapa unifilar de dimensão 1×900. Observa-se que a grande contorção que a rede de neurônios faz no espaço de entrada produz altos valores de erros E_{nb} e E_{nv}. Como a rede treinada é unifilar, nota-se que os neurônios fazem um "ziguezague" no espaço das amostras de entrada, não necessariamente acompanhando ordenadamente a estrutura de dados do Rolo Suíço. Contudo, observa-se que mesmo no mapa SOM Original a distribuição dos neurônios sobre a estrutura de dados do Rolo Suiço é mais organizada do que no modo Batelada (*Batch*). Aplicando-se o Algoritmo

de Reposicionamento, nota-se uma melhora na representação, conforme pode ser visto na Figura 33 (b). Este resultado reforça a conclusão de (FORT, LETREMY e COTTRELL, 2002).

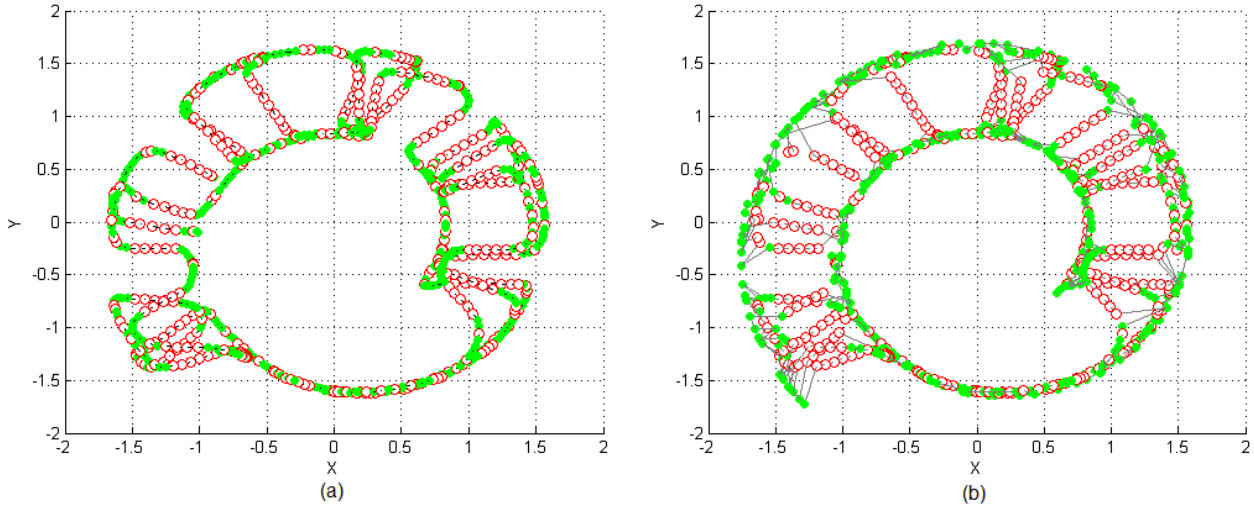


Figura 33 - Na figura (a) ilustra-se uma perspectiva do plano xy de um mapa SOM Original de dimensão 1×900 treinado sobre a estrutura do Rolo Suíço. Em (b) uma perspectiva do plano xy do mapa SOM Reposicionado.

Na Figura 34 foram sobrepostos o posicionamento final dos neurônios juntamente com os dados do Rolo Suíço. Pode-se observar as várias contorções que o mapa fez para preencher o espaço de dados.

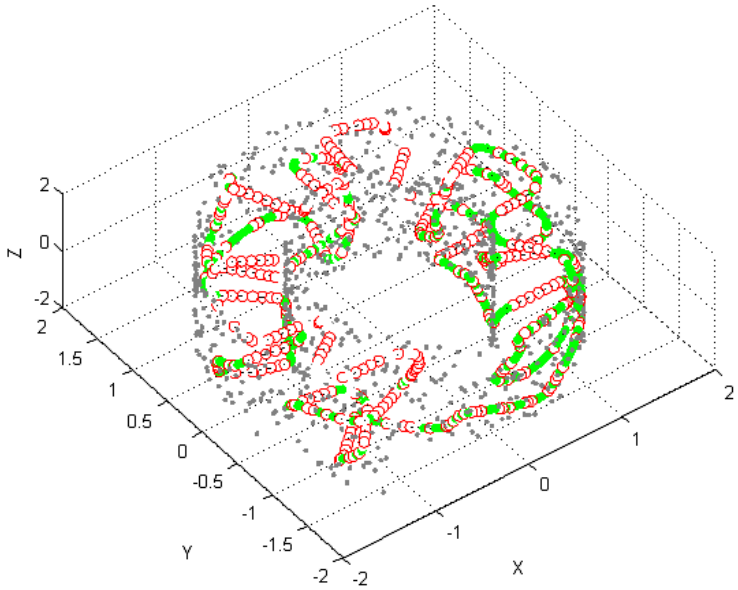


Figura 34 – Mapa SOM unifilar sobreposto na estrutura de dados do Rolo Suíço. Os pontos em cinza são os dados do Rolo Suíço, os círculos vermelhos são os neurônios sem votação e os círculos verdes são os neurônios que representam o espaço de dados da entrada.

Mapas treinados com dados que têm características definidas em espaços de três dimensões são facilmente visualizados. Entretanto, como já mencionado, para espaços de alta

dimensões serão necessários ferramentas auxiliares. Na próxima subseção discute-se resumidamente como visualizar e interpretar o resultado dos mapas SOM utilizando a ferramenta auxiliar *U-Matrix*.

5.4 Análise Visual do Mapa SOM com Dados em Alta Dimensão

Discutiu-se na seção anterior que mapas SOM treinados com dados de dimensões menores ou iguais a três podem ser visualizados diretamente no espaço de características. Naturalmente, o uso do SOM em dimensões "visíveis" aos humanos só tem sentido nas situações em que se deseja reduzir a quantidade dos dados, criando representações mais econômicas. Entretanto, quando se trabalha com espaços de alta dimensão a plotagem direta dos neurônios não é possível.

Em aplicações de análise de agrupamento, a principal proposta para mitigar esse problema foi a criação de uma matriz que armazena as distâncias calculadas no espaço de características (espaço vetorial) entre os neurônios e seus vizinhos matriciais. Essa matriz de distâncias unificadas ficou conhecida como *U-Matrix.* Também associa-se a esse nome a técnica que converte os valores de distância unificada contidas na matriz U em gradiente de cores formando uma complexa imagem monocromática ou colorida que representa as relações de distância entre os neurônios vizinhos do mapa SOM. A *U-Matrix* foi proposta por Ultsch e Siemon (ULTSCH e SIEMON, 1990) e originalmente foi definida para trabalhar em mapas SOM bidimensionais.

A matriz U é construída medindo-se a distância Euclidiana no espaço vetorial entre o neurônios adjacentes. O valor dessa distância pode ser normalizada para ser representada por cores ou em tons de cinza. Em (COSTA, 1999) o leitor encontrará uma descrição detalhada da construção da *U-Matrix*.

Basicamente, a *U-Matrix* exibe as seguintes propriedades:

a) Cores mais para o vermelho na representação *U-Matrix* indicam neurônios distantes;
b) Cores mais para o azul na representação *U-Matrix* indicam neurônios próximos;
c) Usualmente, os agrupamentos de neurônios apresentam cores em azul;
d) Regiões com cores mais para o vermelho na representação *U-Matrix* indicam regiões de fronteiras dos agrupamentos.

A Figura 35 ilustra um exemplo de uma representação *U-Matrix* na esquerda e na direita uma escala de cores indicando a magnitude da distância entre os neurônios do mapa SOM. A *U-Matrix* da Figura 35 foi gerada com o auxilio das funções contidas no SOM *Toolbox* para Matlab® e representa as distâncias entre os neurônios adjacentes no espaço vetorial de um mapa SOM 20×20 treinado com os dados do Rolo Suíço. Destaca-se que a estrutura do Rolo Suíço não possui agrupamentos, de maneira que a visualização da *U-Matrix* gerada a partir do mapa SOM treinado com aquela estrutura não fará muito sentido. A reprodução da *U-Matrix* na Figura 35 é apenas para ilustrar como seria a representação dos dados do Rolo Suíço através da matriz de distâncias unificadas.

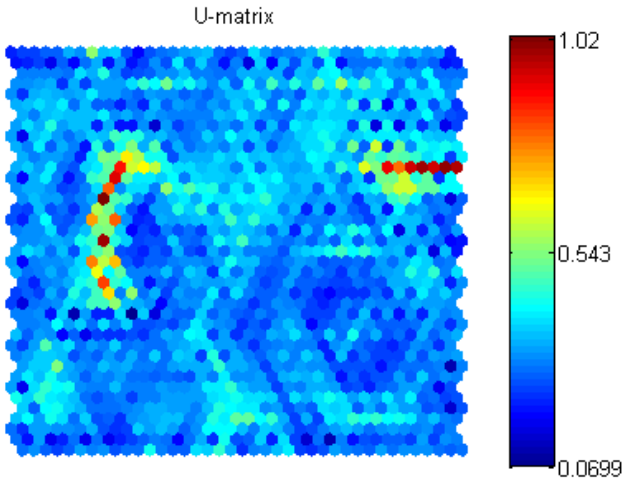


Figura 35 –Mapa *U-Matrix* resultante do treinamento de um mapa SOM 20×20 sobre o Rolo Suíço.

Apesar desse recurso visual a interpretação da *U-Matrix* pode ser confusa. Kohonen (KOHONEN, 2001) na página 166 também apresenta o resultado de uma *U-Matrix* e deixa para o leitor a interpretação daquela figura. É importante destacar que a determinação do número de agrupamentos mapeados pelo SOM, usando o recurso visual da *U-Matrix*, é dependente do usuário. Em outras palavras, a proposta da *U-Matrix* não é trazer informação sobre número ou características dos agrupamentos, mas apenas indicar qual a relação de distâncias entre os neurônios adjacentes do mapa SOM.

Todavia, quando se trabalha dados de alta dimensão não é possível visualizar as relações de vizinhança a partir dos neurônios do mapa SOM. Nessas situações a alternativa é utilizar a técnica de visualização *U-Matrix*. É intuitivamente fácil de reconhecer agrupamentos com a *U-Matrix*. Considere que os neurônios próximos têm distâncias menores e quando os agrupamentos estão longe teremos um afastamento numérico entre os neurônios de fronteira entre os grupos. Então, a partir da escala de cores entende-se que as regiões em

azul (mais baixas na escala) tendem a agrupar os neurônios similares. Se os agrupamentos estiverem muito afastados a distância entre os neurônios da fronteira desses agrupamentos será representada por cores vermelhas.

Para evitar apenas uma avaliação subjetiva e manual da *U-Matrix*, Costa (COSTA, 1999) propôs a aplicação de uma técnica de processamento de imagens para analisar a *U-Matrix* como um problema de segmentação de imagens. O algoritmo proposto por Costa (1999), denominado SL-SOM (*Self Labeled* SOM), permite localizar agrupamentos de forma autônoma. Entretanto, existem situações nas quais somente a visualização do resultado do mapeamento SOM através da *U-Matrix* pode não trazer muita informação, além dos possíveis agrupamentos. Isso pode ocorrer quando se trabalha, por exemplo, com imagens de faces de um único gênero, na qual a informação sobre os possíveis agrupamentos pode não auxiliar muito no entendimento sobre os dados que foram mapeados. A próxima seção discutirá em detalhes esse tipo de aplicação.

5.5 Proposta de Visualização dos Neurônios do Mapa SOM

A proposta desta seção é apresentar uma plataforma híbrida PCA + SOM que facilite ao usuário visualizar o resultado do mapeamento do SOM em aplicações com imagens e permitir uma avaliação diretamente no espaço de imagens ao invés de utilizar ferramentas auxiliares como a *U-Matrix*. Basicamente, projetam-se as imagens no espaço PCA para promover a redução de dimensionalidade e depois treina-se o SOM com essas projeções. Em seguida, cada vetor de peso $\mathbf{w}_j$ dos neurônios m_j é retornado para o espaço de imagens por um processo inverso para permitir que o usuário avalie visualmente o resultado do mapeamento SOM.

Os primeiros resultados desse trabalho foram apresentados em (KITANI, DEL-MORAL-HERNANDEZ, *et al.*, 2010) e ampliados nesta tese com a aplicação da técnica de reposicionamento de neurônios discutida na seção 5.3. Esse trabalho aplicou o método de reconstrução visual dos neurônios de um mapa SOM treinado com imagens de faces. Desejava-se observar quais características faciais seriam mapeadas e agrupadas conforme as similaridades e dissimilaridades.

Como já citado anteriormente, o SOM é uma metodologia não supervisionada. A extração de informação e a auto-organização podem produzir resultados diferentes daqueles realizados por humanos. Para não ficar restrito somente a ensaios computacionais com ima-

gens de faces testou-se também a capacidade do SOM em extrapolar informações de um conjunto de imagens de corte coronal de um cérebro que possui um número muito reduzido de amostras de alta dimensão. Os detalhes desse conjunto de treinamento e resultados encontram-se na seção 5.5.2.

A Figura 36 ilustra esquematicamente a plataforma PCA + SOM e o fluxo das projeções desde o espaço de imagens até o mapeamento SOM. A linha tracejada em vermelho indica o processo de retorno das características contidas nos neurônios do mapa SOM para o espaço visual.

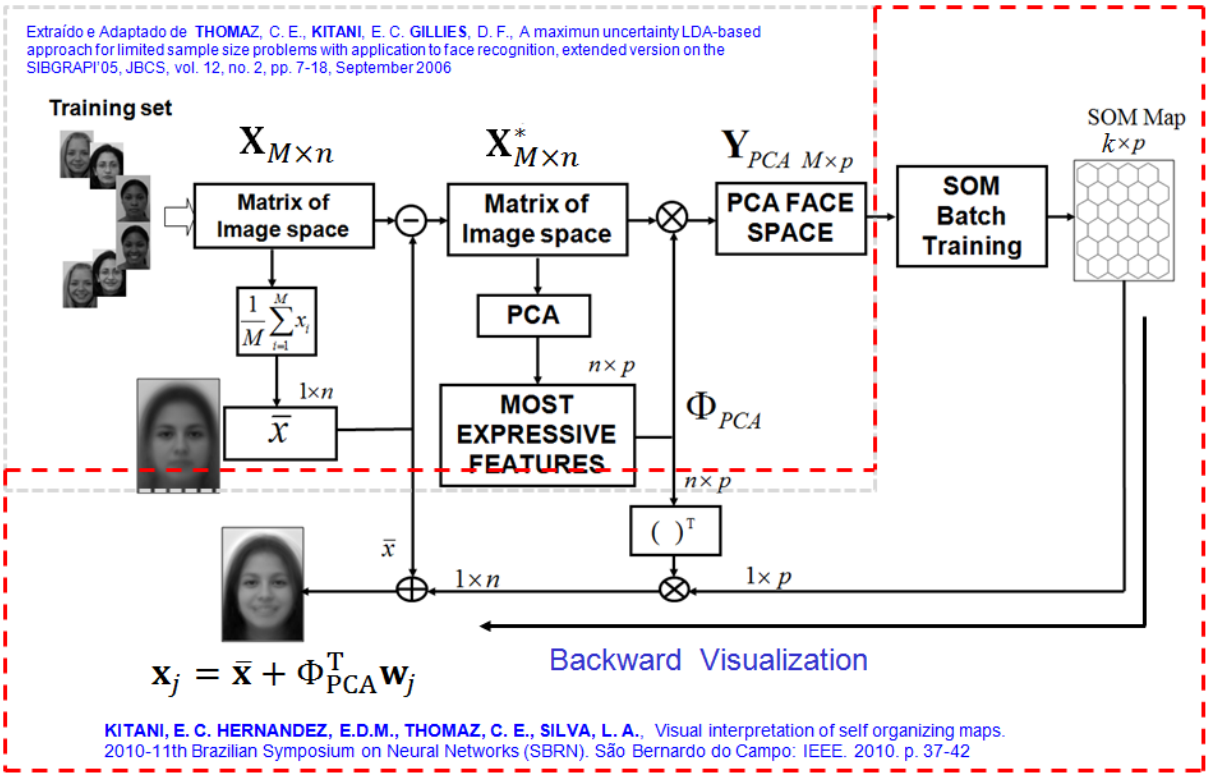


Figura 36 – Plataforma de projeção e visualização dos neurônios do SOM para espaço visual. A figura foi extraída da apresentação do artigo (KITANI, DEL-MORAL-HERNANDEZ, *et al.*, 2010).

Os blocos que estão fora da linha tracejada contém a metodologia de projeção dos dados de entrada $\mathbf{X}$ para o espaço PCA, conforme foi apresentada na metodologia de aplicação do PCA descrita na seção 3.3.1. Assim, as projeções contidas na matriz $\mathbf{Y}_{\mathrm{PCA}}$ são as N imagens do conjunto de treinamento $(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}})|i = 1,2,\ldots,N$, projetadas no espaço PCA. A matriz $\mathbf{Y}_{\mathrm{PCA}}$ contém as características mais significativas do conjunto de treinamento. As projeções das imagens de faces no espaço PCA são utilizadas para treinar SOM. Finalmente, para retornar o conteúdo de qualquer neurônio, após o mapeamento, para o espaço de imagens, basta seguir o processo inverso conforme a equação (5-6) a seguir.

$$\tilde{\mathbf{x}}_j = \bar{\mathbf{x}} + \Phi_{\mathrm{PCA}}^{\mathrm{T}} \mathbf{w}_j, \tag{5-6}$$

na qual, o vetor $\tilde{\mathbf{x}}_j$ é a representação do neurônio m_j no espaço de imagens, $\bar{\mathbf{x}}$ é a face média global, $\mathbf{w}_j$ é vetor do neurônio m_j e $\Phi_{\mathrm{PCA}}^{\mathrm{T}}$ é a matriz de autovetores do PCA. A plataforma PCA+SOM é bastante útil quando se trabalha com imagens em geral, mas pode ser também aplicado em bases que não sejam formados por imagens.

Para realizar os testes com imagens foram utilizados dois bancos de faces denominados "Banco de Faces da FEI[3]" e "Banco de Faces FERET". Os dois bancos de faces foram gentilmente disponibilizados pelos pesquisadores do Centro Universitário da FEI para realização desta tese. O primeiro banco de faces consiste de 200 faces masculinas e 200 femininas com expressões neutras e sorrindo de indivíduos com idades, etnias e características variadas, cuja descrição técnica pode ser encontrada em (OLIVEIRA JR. e THOMAZ, 2006). Do Banco de Faces da FEI, separaram-se as 100 imagens de faces femininas sorrindo e as 100 faces não sorrindo e cada imagem colorida de dimensão 260×360 *pixels* foi convertida para monocromática.

O segundo banco de faces utilizado contém um conjunto parcial de imagens do Banco de Faces FERET (PHILLIPS, MOON, *et al.*, 2000) de domínio público e muito conhecido na área de processamento e reconhecimento de faces. Esse banco é composto de imagens de faces frontais de 1199 voluntários americanos, tiradas em 15 sessões entre agosto de 1993 e julho de 1996. Há um total de 14126 imagens de diferentes grupos étnicos e idades. Do Banco de Faces FERET foram selecionados os primeiros 200 indivíduos da base. Desses 200 indivíduos 107 eram do sexo masculino e 93 do sexo feminino com diferentes etnias e idades, mas todas com a expressão facial neutra. Completou-se o banco parcial com a seleção das imagens desses mesmos 200 indivíduos com a expressão facial sorrindo. Na sequência, as imagens foram normalizadas, alinhadas e tiveram o fundo removido de maneira que somente permanecessem visíveis as características faciais de cada indivíduo. O trabalho de seleção e tratamento das imagens de faces do banco FERET foi realizado pelos membros do programa de Mestrado da FEI, cujos detalhes podem ser encontrados em(AMARAL e THOMAZ, 2008)(THOMAZ e GIRALDI, 2010). (AMARAL e THOMAZ, 2012)

5.5.1 SOM no Espaço PCA com Imagens de Face

O objetivo dos experimentos com imagens de faces é compreender como o SOM mapeia dados de alta dimensionalidade e quais características são consideradas nos agrupamentos. Isto significa que se deseja visualizar o resultado do mapeamento SOM diretamente no espaço de características. E o uso de imagens de faces humanas permite uma avaliação imediata dos resultados sem dependência do laudo de um especialista. A despeito dessa facilidade de interpretação, as imagens de faces são padrões multidimensionais, redundantes e com ruídos.

Como descrito no início da seção 5.5, o objetivo deste experimento é avaliar como o SOM distingue características faciais sutis que diferenciam gênero, etnia, expressão, etc. Como o conjunto de imagens foi formado por 200 faces femininas de 100 pessoas diferentes, decidiu-se dividir as imagens em dois grupos. O primeiro grupo como sendo MN (Mulher Normal) com expressão neutra e o segundo grupo como MS (Mulher Sorrindo). Isto não necessariamente significa que os grupos das faces femininas estejam separadas de forma tão absoluta no espaço de alta dimensão. Entretanto, rotulando-se os dados com o conhecimento a *priori* será possível analisar como o SOM faz a distribuição dos neurônios para representar as diferentes características das imagens de face. Com o resultado do mapeamento pode-se então comparar as características agrupadas pelo SOM com aquelas previamente categorizadas para o experimento (MN, MS).

O tamanho do mapa SOM seguiu a heurística definida em (VESANTO, HIMBERG, et al., 2000), dado por: Tamanho do Mapa $= 5\sqrt{\mathrm{N}} = 5\sqrt{200} \approx 70$ neurônios, o treinamento foi realizado no modo batelada com 10000 épocas na fase de organização e 1000 épocas na fase de refinamento do mapa. A Figura 37 apresenta o resultado do mapeamento da matriz de imagens de faces do espaço PCA realizada pelo SOM e a respectiva *U-Matrix*.

---

[3] Disponível em http://fei.edu.br/~cet/facedatabase.htm e acessado em 23/09/2012.

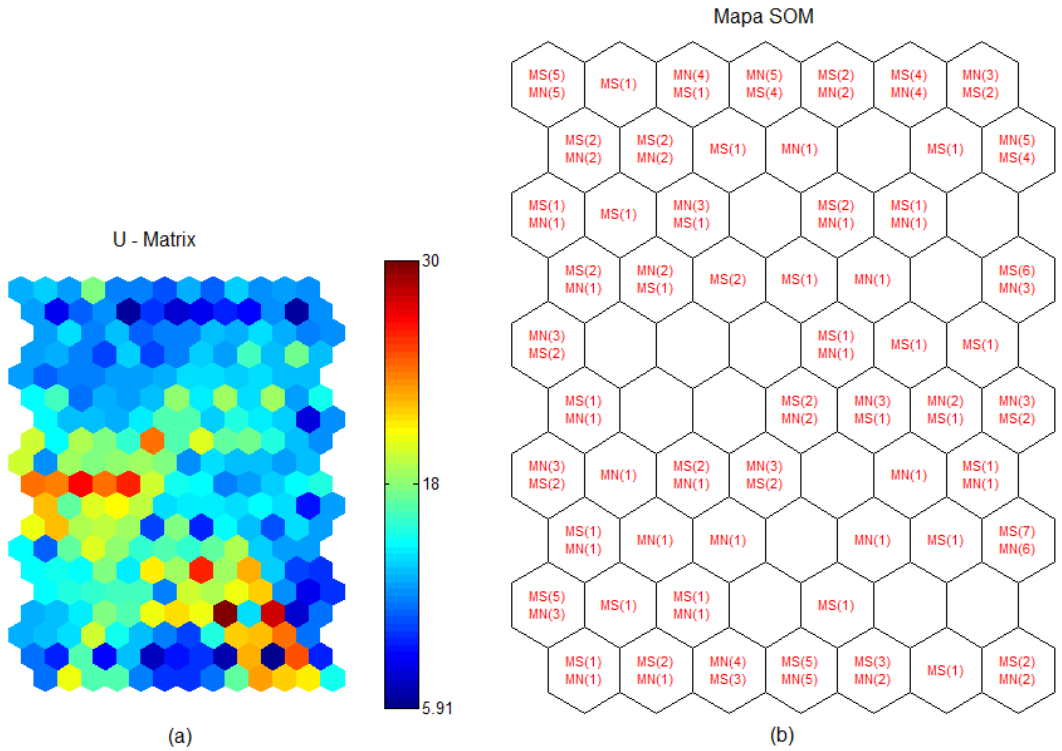


Figura 37 – Em (a) tem-se a representação da *U-Matrix* do mapa SOM da figura (b), cujos rótulos são indicações de quais classes foram mais votadas durante o treinamento. Os rótulos foram definidos no início do treinamento. O mapa é formado de 70 neurônios numa configuração de 10×7. Os números entre parênteses representam a quantidade de votações associadas a cada neurônio durante a fase de treinamento.

Nota-se pela Figura 37 (a) uma extensa área em azul no alto da *U-Matrix* indicando que há uma concentração de neurônios similares. Como descrito anteriormente, não necessariamente, a distribuição desses grupos deva ocorrer exatamente como se imagina. Se as imagens fossem rotuladas de outra maneira (ex. loiras e morenas) haveria apenas um rearranjo desses rótulos no mapa SOM. Entretanto, a *U-Matrix* manteria o mesmo resultado anterior, porque o SOM não usa o rótulo como característica durante o treinamento. Rotular cada imagem antes do treinamento é um recurso que a ferramenta SOM *Toolbox* oferece para auxiliar na interpretação dos resultados.

Os neurônios que não representam nenhum grupo de entrada estão em branco. Uma análise mais detalhada da *U-Matrix* indica a possibilidade de existirem dois grupos, sendo que um deles é maior do que o outro. Essa observação é em virtude da separação que existe entre as duas regiões em azul. Essa separação é sinalizada pelo distanciamento entre os dois grupos indicados na *U-Matrix* e caracterizada pelas cores mais para o vermelho. A maioria das BMUs representam imagens de dois grupos (MN e MS). Isto ocorre porque a característica não sorrindo MN e sorrindo MS não representa uma informação significativa que discrimine uma imagem de face da outra. Neste exemplo, existem imagens MN e MS da mesma pessoa

que foram mapeadas pelo mesmo neurônio. Contudo, como as imagens foram rotuladas antes do treinamento, esse rótulo é o que está sendo identificado no mapa.

Entretanto, persiste a dúvida sobre o mecanismo que está provocando o aglutinamento e distanciamento das imagens no espaço de entrada. Sabe-se que os agrupamentos se formam por similaridades e distanciamentos por dissimilaridades. A informação retornada pelo mapa SOM e *U-Matrix* não permite essa distinção, principalmente pelo fato do mapa ainda estar num espaço de alta dimensão. Deve-se lembrar de que a dimensionalidade do mapa SOM está relacionada com a dimensionalidade do espaço PCA, que neste caso específico é de $\Re^{199}$.

Portanto, avaliar os neurônios no espaço original das imagens de faces pode trazer uma melhor compreensão sobre como ocorre essa distribuição. O leitor deve estar atento a dois fatos: as transformações realizadas pelo PCA são lineares e os neurônios do mapa SOM têm a mesma dimensionalidade do espaço PCA. No espaço de projeções do PCA, qualquer ponto pode ser escrito como uma combinação linear dos autovetores de Φ_{pca}. Logo, qualquer ponto do espaço PCA pode ser reconstruído para o espaço original através da transformação indicada na equação (5.6).

Como cada $\mathbf{w}_j$ é uma combinação linear dos autovetores Φ_{pca}, então a imagem reconstruída $\mathbf{x}_j$ é uma generalização de um grupo de imagens de faces que são representadas pelo neurônio m_j. Nota-se pelo mapa SOM da Figura 37, que há 14 neurônios que não representam nenhuma imagem ou grupo de entrada. Em outras palavras, neurônios que não receberam votação. Entretanto, a reconstrução visual fornece uma ideia de como seriam esses neurônios e quais características eles poderiam representar. Considerando que eles estão rodeados por neurônios muito similares, em termos de características e apesar de terem perdido a competição para representar amostras de entradas, eles foram influenciados pela relação de vizinhança h_{c_j} durante a fase de treinamento.

A Figura 38 ilustra a reconstrução visual de todos os neurônios do mapa SOM treinado (a) e também da versão com neurônios reposicionados (b). É possível observar uma série de características distintas que fazem com que os neurônios se agrupem em regiões do mapa e se distanciem em outras. Na literatura, este tipo de neurônio também é conhecido como neurônio de interpolação.

(a) (b)

Figura 38 – Reconstrução visual dos neurônios do Mapa SOM da Figura 37, cujo conjunto de treinamento era formado por imagens de faces de 100 mulheres com expressão neutra e as mesmas 100 com expressão sorrindo. As imagens dentro dos retângulos em vermelho indicam os neurônios que não representam amostras do conjunto de entrada. Em (a) reconstrução visual das imagens do mapa SOM com as posições originais e em (b) a reconstrução visual das imagens do mapa SOM reposicionado (centrado).

Observando as imagens reconstruídas, nota-se que os dois grupos mais extremos na diagonal do mapa (vértice superior esquerdo e vértice inferior direito) se diferenciam pela cor da face, morena e loira, apesar de as imagens terem sido convertidas para monocromáticas. Outras categorias detectadas visualmente são as imagens que representam as mulheres de cabelo curto e longo. Pequenos agrupamentos nas regiões internas do mapa indicam que há uma predominância de representação de etnias. As imagens que estão dentro dos retângulos em vermelho indicam a reconstrução de um neurônio que não se tornou BMU. Sugere-se ao leitor observar o mapa SOM apresentado na Figura 37 e comparar os neurônios que não receberam votação com as imagens equivalentes que foram reconstruídas na Figura 38.

Observa-se na Figura 38 que as reconstruções visuais dos neurônios do mapa SOM Reposicionado apresentam algumas faces que se aproximam muito de algumas faces perten-

centes ao conjunto de treinamento (ex. 6, 10 e 20). A Figura 39 apresenta as faces do conjunto de treinamento que mais se assemelham às faces reconstruídas 6, 10 e 20 do mapa SOM Reposicionado. A identificação numérica das imagens do mapa SOM é realizada por colunas, do alto para baixo e da esquerda para direita. Assim, a primeira imagem no alto à esquerda é o (1) e depois o última dessa mesma coluna é o (10). A imagem (20) está ao lado da imagem (10).

Figura 39 – Imagens de faces do Banco de Faces FEI cuja semelhança com as imagens reconstruídas do mapa SOM Reposicionado é muito próxima.

Ao contrário, as reconstruções visuais dos neurônios do mapa SOM Original são representações suavizadas das faces representadas pelos neurônios. Apenas para tornar mais clara essa ideia, os neurônios do mapa SOM definem as regiões do Diagrama de Voronoi, mas não necessariamente estarão no centro de massa das regiões ou no centro de massa das amostras contidas nas regiões do Diagrama de Voronoi.

Como já mencionado anteriormente na seção 5.3, o resultado do mapeamento logo após o treinamento será denominado "Mapa SOM Original" e o mapeamento resultante da execução do algoritmo de reposicionamento será denominado "Mapa SOM Reposicionado".

A Tabela 4 informa as medidas de qualidade obtidas após o treinamento do mapa SOM com as imagens de faces. As medidas de erro de quantização QE e erro topológico TE são tradicionais nas aplicações que utilizam o SOM *Toolbox*. Adicionalmente, avaliou-se também os índices relativos do erro de distorção E_d, conforme apresentado e discutido na seção 4.6.4.

Tabela 4 – Resultado das medidas de qualidade do mapa treinado com imagens de faces.

Medida	Mapa SOM Original 10X7	Mapa SOM Reposicionado
QE	39,563	35,234
TE	0,000	0,002
Eqx	0,4907	0,3985
Enb	0,3699	0,3390
Env	0,1394	0,2625

Nota-se que o erro de quantização E_{qx} representa quase 40% do erro total E_d, indicando que pode haver uma deficiência no número de neurônios e que, possivelmente, os neurônios estejam muito espalhados no espaço definido pelas imagens de treinamento. Considerando-se os resultados obtidos com os testes realizados com o Rolo Suíço, observa-se que mesmo em alta dimensão o formato do mapa e o número de neurônios têm uma influência significativa no erro de quantização.

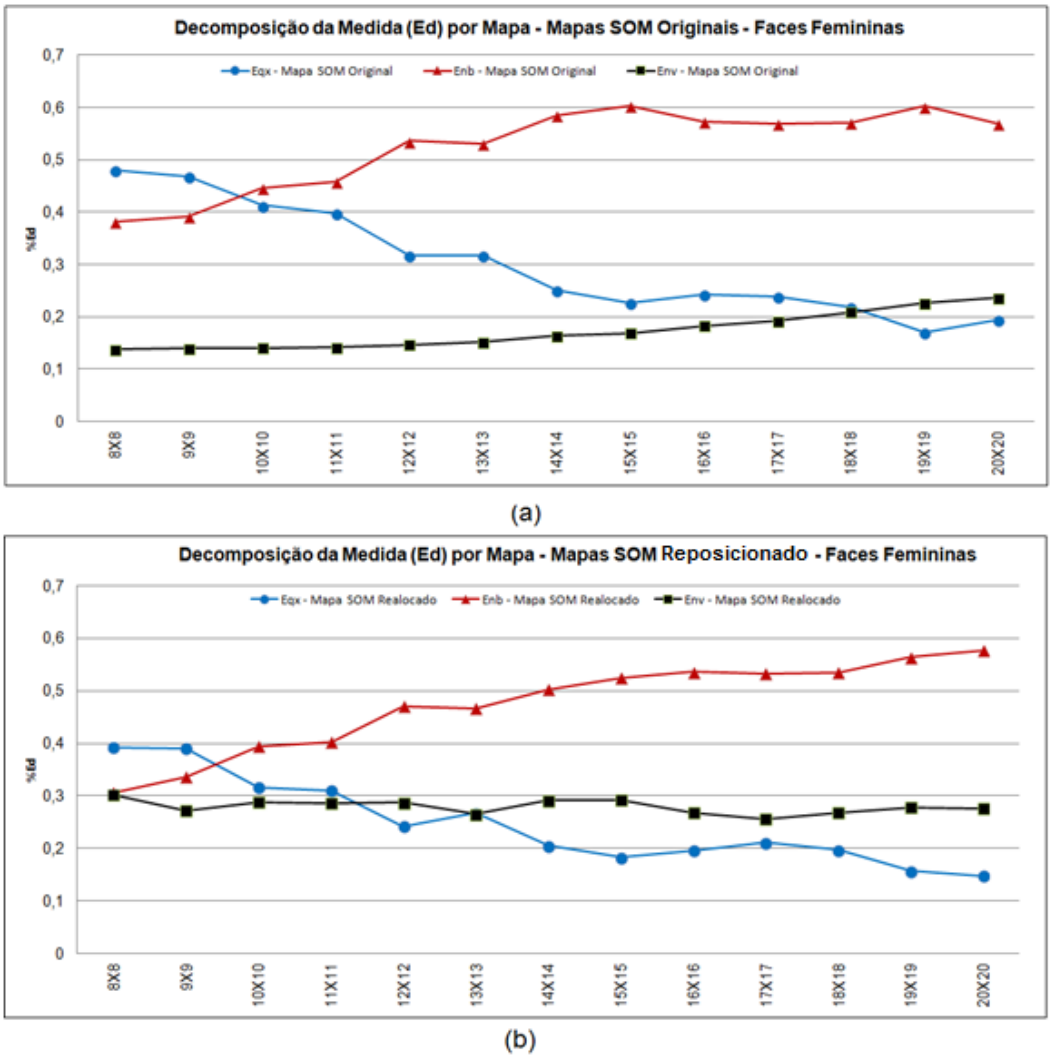


Figura 40 – Gráficos dos componentes da medida de distorção (E_{qx}, E_{nv}, E_{nb}) dos mapas SOM treinados no modo *Batch*. Em (a) apresentam-se os resultados das três medidas de distorção sobre os mapas SOM Original para cada configuração de mapa. Em (b) os resultados das medidas de distorção sobre os mapas SOM Reposicionado.

Para avaliar a questão sobre os resultados do aumento no número de neurônios e alterações no formato do mapa, geraram-se mais 13 experimentos com mapas quadrados variando de 8×8 até 20×20 e treinados com as imagens de faces femininas cujo resultado pode

ser avaliado na Figura 40. Ao contrário do treinamento com os dados do Rolo Suíço, observa-se que neste caso o erro que mais subiu foi o E_{nb}. Como discutido anteriormente, o erro E_{nb} está relacionado com as regiões com dobras no mapa, indicando que neurônios que deveriam estar mais afastados, estão mais próximos de uma determinada região do espaço de dados. O aumento do número de neurônios no mapa intensifica o efeito de dobras do mapa no espaço de dados.

Os testes realizados com as imagens de faces femininas indicaram que há vários agrupamentos formados pelo mapa SOM, mas que não são claramente visíveis pela *U-Matrix*. Um observador humano fará a categorização das imagens de acordo com um conhecimento a *prior*i e principalmente as imagens das faces femininas usadas neste experimento favorecem essa categorização.

No próximo experimento utilizou-se as imagens de faces do banco FERET conforme foi descrito na seção 5.5. Os resultados do mapeamento e da reconstrução visual do mapa SOM podem ser analisados na Figura 41. Na figura (a) encontram-se as imagens reconstruídas do mapa SOM Original e em (b) do Mapa SOM Reposicionado.

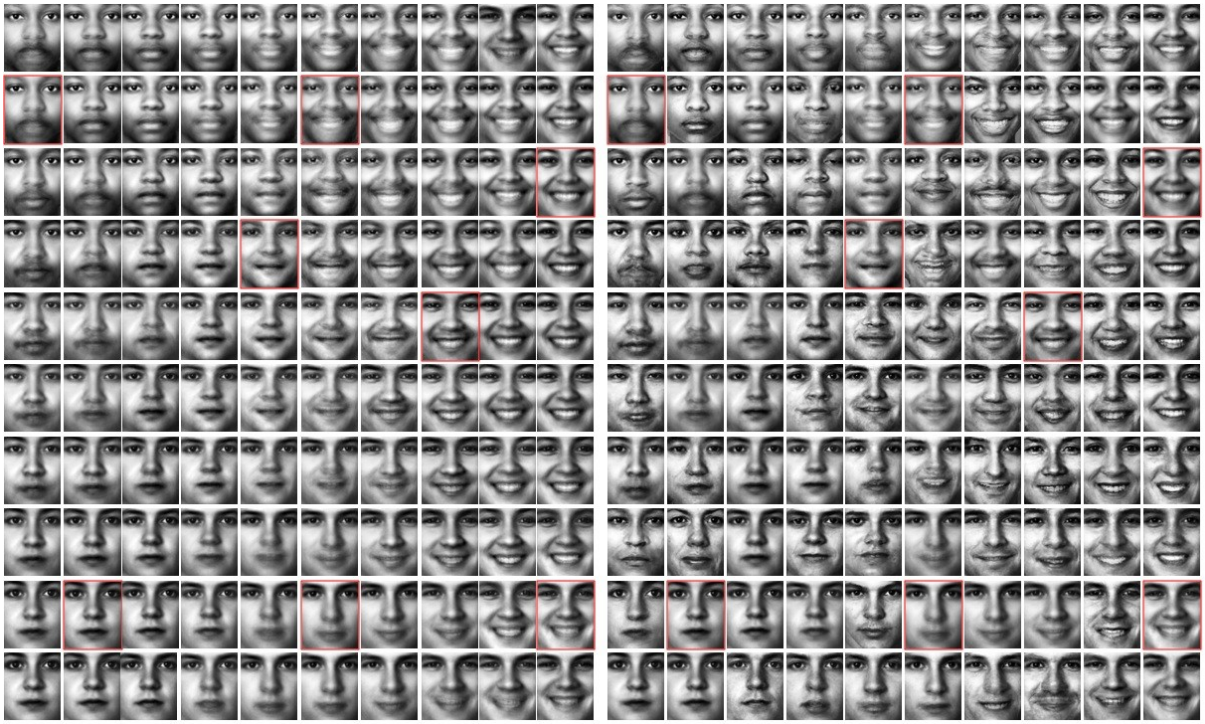


Figura 41 - Reconstrução visual dos neurônios do Mapa SOM 10×10 treinados com o banco de faces FERET parcial. As imagens dentro dos retângulos em vermelho indicam os neurônios que não representam amostras do conjunto de entrada. Em (a) reconstrução visual das imagens do mapa SOM com as posições originais e em (b) a reconstrução visual das imagens do mapa SOM Reposicionado.

Visualmente notam-se agrupamentos que indicam faces com diferentes etnias (ne-

gros, caucasianos e asiáticos), bem como faces masculinas, femininas, com expressões faciais neutras ou sorrindo. Assim como no experimento anterior, observa-se que há neurônios que representam imagens de faces muito próximas dos indivíduos pertencentes ao conjunto de treinamento.

Na Figura 42 se apresenta o resultado da *U-Matrix* do mapa SOM treinado com o banco de faces parcial FERET. Novamente, se observa falta de clareza sobre quantos agrupamentos ou categorias de imagens existem no mapa. Contudo, com as imagens reconstruídas do mapa SOM, é possível uma categorização manual e um entendimento melhor sobre como as informações estão distribuídas na massa de dados. Como informado no início deste capítulo, o recurso de visualização dos neurônios do mapa é uma ferramenta adicional, juntamente com a *U-Matrix*, para auxiliar os usuários do SOM que trabalham com base de imagens.

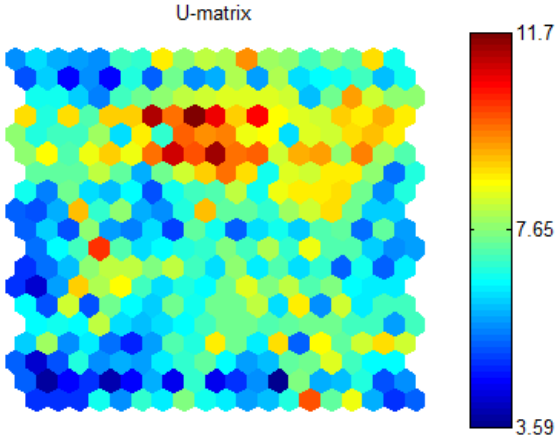
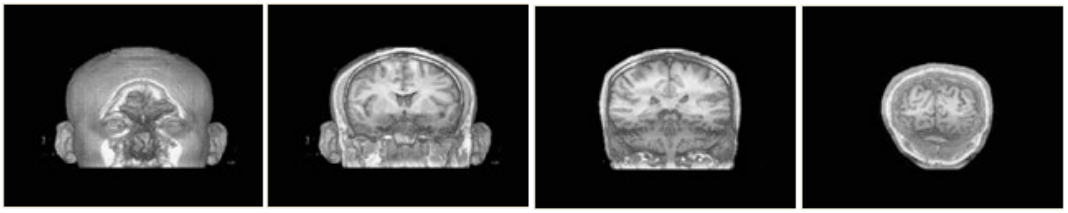


Figura 42 – Mapa *U-Matrix* do mapa SOM 10×10 treinados com o banco de faces parcial FERET.

Nos dois experimentos com imagens de faces notou-se a existência de neurônios de interpolação, neurônios que não receberam votação, mas foram influenciados pela relação de vizinhança. Kohonen (KOHONEN, 2001) afirma que o SOM também pode ser considerado como uma ferramenta de regressão não linear, isto porque as características extraídas pelo SOM estão sempre limitadas pelo espaço de características dos dados de entrada. Portanto, se o conjunto de treinamento é formado por imagens de faces é natural pensar que o SOM não modelará nenhum neurônio que não seja uma estimação das imagens de faces que ele representa. Então, o próximo experimento procura avaliar a capacidade de regressão não linear do SOM com imagens, principalmente quando dispomos de uma base de imagens muito limitada.

5.5.2 SOM no Espaço PCA com Imagens de MRI do Cérebro Humano

Neste experimento utilizou-se um banco de imagens médicas composto de 22 imagens em corte do plano coronal de um crânio humano coletadas por meio de MRI (*Magnetic Resonance Imaging*). O banco de imagens de cérebro foi criado por Sudheimer et al (SUDHEIMER, WINN, *et al.*) e encontra-se disponível num projeto denominado Atlas do Cérebro Humano mantido pela Universidade do Estado de Michigan[4] e financiado pela *National Science Foundation* dos EUA sob os números IBN 0131267, 0131826 e 0131028 (Citação feita aqui de acordo com o formato solicitado pelos autores do Atlas do Cérebro Humano). Cada imagem tem dimensão de 744×565 *pixels* e a Figura 43 ilustra uma amostra desse banco.



1.jpg 7.jpg 13.jpg 19.jpg

Figura 43 – Amostras do conjunto de imagens médicas de um crânio em cortes coronais obtidas pela técnica de MRI (*Magnetic Resonance Imaging*) (Extraída de (SUDHEIMER, WINN, *et al.*).

Foi treinado um mapa SOM de dimensão 7×3 e após o treinamento com as imagens, obteve-se o mapa ilustrado na Figura 44 (b). Os rótulos foram colocados apenas por conveniência para ilustrar quais neurônios tiveram votação durante o treinamento. Observa-se uma maior homogeneidade no topo da *U-Matrix* (na figura a) em relação a parte inferior. Todavia, há uma boa discriminação entre as amostras. Como o conjunto é formado por pouquíssimas amostras e sem grandes redundâncias nota-se a dificuldade dos neurônios em representar esse espaço.

---

[4] Disponível em https://www.msu.edu/~brains/brains/human/index.html e acessado em 16/06/2011.

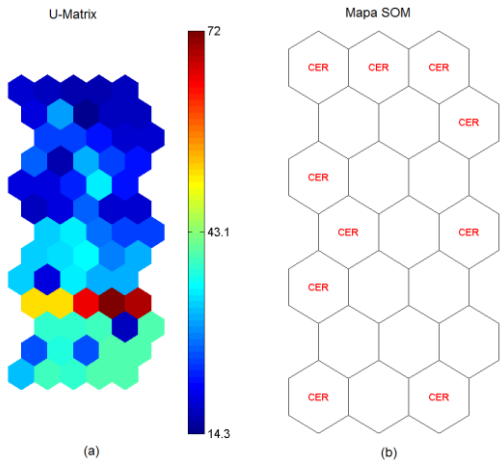


Figura 44 – Em (a) o mapa U *Matrix* e em (b) o mapa SOM do conjunto de imagens de cérebro. O grande espaço sem rótulos no mapa SOM é resultado do número reduzido de amostras no conjunto de treinamento.

A reconstrução visual dos neurônios do mapa SOM está reproduzida na Figura 45 e ilustra o aspecto visual dos neurônios do mapa SOM. Nota-se que a representação visual dos neurônios se aproxima bastante das imagens do conjunto de treinamento e mesmo os neurônios de interpolação (marcados por quadrados vermelhos) são uma aproximação razoável do conjunto de imagens de treinamento. Em certas situações as informações contidas nos neurônios de interpolação poderiam ser consideradas uma estimativa de dados em regiões esparsas. Neste caso com imagens de cérebros, dado o baixo número de amostras, poderia se considerar o uso desses neurônios de interpolação como estimações para realizar avaliações estatísticas de bases de entrada com poucas amostras.

A metodologia de reconstrução visual e reposicionamento dos neurônios desenvolvida e apresentada nesta tese junto com o método *U-Matrix* representam uma alternativa para interpretar adequadamente o mapa SOM. Em aplicações nas quais a redução drástica da resolução da imagem pode ser uma restrição, trabalhar com as metodologias PCA + SOM e Reposicionamento, e depois retornando as informações contidas nos neurônios para o espaço de imagens, pode permitir análises visuais mais precisas.

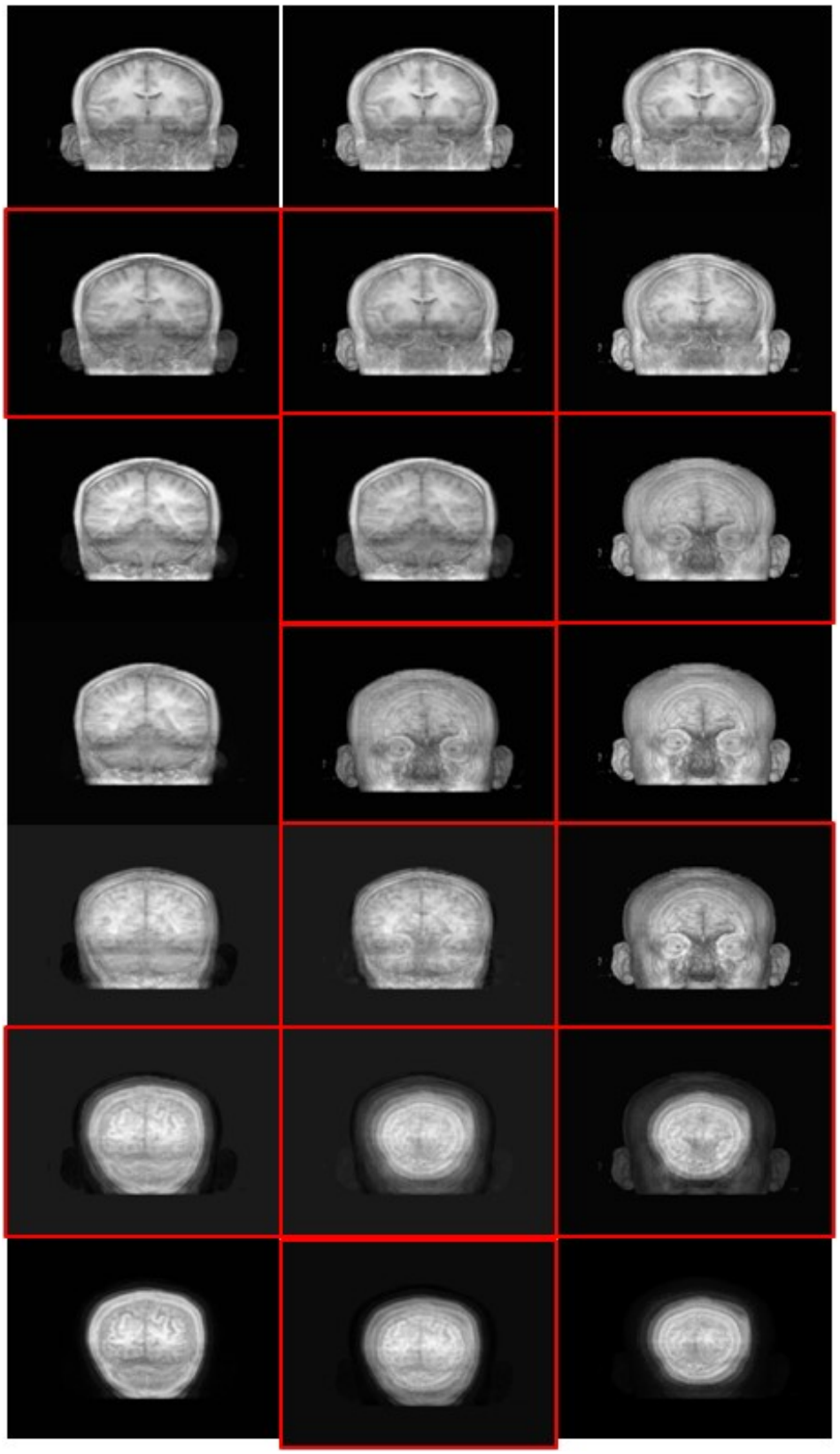


Figura 45 – Reconstrução visual dos neurônios do mapa SOM de imagens do cérebro da Figura 44. As imagens dentro dos retângulos em vermelho representam os neurônios que não receberam votação e são extrapolações criadas pelo SOM.

5.6 Considerações Finais

Apresentou-se neste capítulo o desenvolvimento das propostas desta tese relacionadas com a melhoria da representação dos mapas SOM e uma técnica para visualizar neurônios quando se trabalha no espaço PCA com imagens. A melhoria está relacionada com o reposicionamento dos neurônios de maneira a representar mais fielmente a informação contida nos mesmos. Destaca-se também que a técnica de reposicionamento pelo centro de massa dos elementos contidos nas células do Diagrama de Voronoi simula uma filtragem por um Filtro Passa Baixas.

Como discutido no Capítulo 3 seção 3.3.1, é possível trabalhar com o PCA sem que haja perda significativa de informação. O PCA pode ser considerado uma alternativa prática de redução de dimensionalidade. Observa-se que o algoritmo SOM poderia ser treinado diretamente no espaço de dados das imagens, sem a necessidade do pré-processamento, exigindo apenas uma normalização dos dados. Mas quando se trabalha com imagens, não é possível ter o compromisso de alta resolução da imagem com eficiência computacional em virtude do grande consumo de memória. Portanto, a solução combinada PCA + SOM mostra-se muito útil em várias aplicações com dados de alta dimensionalidade.

Os três experimentos conduzidos objetivaram apresentar o resultado das propostas e estabelecer a aplicação de uma metodologia para auxiliar a interpretação dos mapas SOM. Como já discutido, o mapa SOM isoladamente exige ferramentas auxiliares para trazer informações que seriam importantes para categorizar um conjunto de treinamento. Apesar da *U-Matrix* ser uma ferramenta desenvolvida para esse fim, avaliou-se que ela apresenta certa complexidade e algumas vezes uma subjetividade na análise.

O experimento adicional com as imagens de cérebro fornece uma ideia da capacidade do SOM em generalizar e extrapolar informações a partir de um conjunto de treinamento limitado, criando estimativas factíveis sobre a base de dados. Essas representações estimadas seriam úteis para completar informações faltantes numa base de dados e poderiam ser úteis em aplicações com treinamento semi-supervisionado.

O próximo capítulo apresentará a proposta de uma metodologia para "caminhar" e recortar o *manifold* de entrada de forma ordenada e assim permitir a exploração de espaços de alta dimensão e descobrir possíveis agrupamentos de forma não supervisionada, mas diretamente do mapa SOM.

6. Self-Organized Manifold Mapping – SOMM

"Look deep into nature, and then you will understand everything better."
Albert Einstein

O mapa SOM é uma ferramenta rica em informações. Pode ser utilizado para reconhecer padrões, representar agrupamentos, reduzir dimensionalidade projetando o espaço multidimensional para o espaço 2D. Além de ser uma metodologia não supervisionada, apresenta grande plausibilidade biológica. Se considerarmos a autonomia dos animais e humanos em seus ambientes, é de se imaginar que possuam "algoritmos e heurísticas" bastante eficazes. Desta maneira, buscar essa aproximação funcional seria benéfico do ponto de vista tecnológico. Como apresentado na seção 2.3, os seres humanos e os mamíferos em geral têm uma grande capacidade de categorização de padrões. Descobrir e reconhecer padrões é uma questão de sobrevivência no mundo biológico. Logo, aprender como os seres biológicos realizam essa tarefa seria muito promissor no desenvolvimento de novos algoritmos.

6.1 Objetivos do Capítulo

Para contextualizar, a próxima seção apresenta um exemplo de como pode ocorrer o fenômeno da redução de dimensionalidade e mapeamento dos dados sensoriais nas abelhas. Procura-se estabelecer uma ligação temática sobre como os sistemas auto-organizados biológicos realizam o reconhecimento de padrões e categorização de informações baseado em mapas. Seguindo esse raciocínio este capítulo propõe e desenvolve uma metodologia para extrair informações a partir dos *manifolds* dos dados de entrada e que foi denominada de *SOMM (Self Organized Manifold Mapping*). A exploração do *manifold* a partir dos dados pode fornecer indicações sobre a existência de uma dimensionalidade intrínseca embutida na massa de dados e que pode ser útil em aplicações de aprendizado, reconhecimento de objetos e estimação de pose (MURASE e NAYAR, 1995).

As próximas seções discutirão e descreverão as bases teóricas da proposta, o algoritmo SOMM, comparação temática com o algoritmo MST (*Minimu Spanning Three*) e as métricas de qualidade para avaliar os resultados do SOMM.

6.2 Componentes Principais e Categorização de Padrões na Biologia

Foi discutido que uma das características dos seres humanos é não guardar todas as informações que recebe do mundo, mas somente algumas representações que possam ser generalizadas e depois comparadas com novas amostras. A questão da generalização foi discutida no capítulo 2 como sendo, possivelmente, o uso de uma dimensionalidade intrínseca, ao invés de se trabalhar no espaço multidimensional. Pesquisas realizadas com invertebrados têm demonstrado que eles realizam redução de dimensionalidade criando representações sensoriais que estariam confinadas num espaço de menor dimensão (MASSE, TURNER e JEFFERIS, 2009) (CHITTKA e BROCKMANN, 2005).

Guerrieri *et al* (GUERRIERI, SCHUBERT, *et al.*, 2005) realizaram um experimento treinando abelhas para medir sua capacidade de discriminar odores. Foram utilizados dezesseis odores cujos grupos químicos básicos pertenciam ao Álcool, Aldeídos e Acetonas. Foram treinadas 2048 abelhas, condicionando-as com cada um dos dezesseis odores. O treinamento usou uma solução açucarada como elemento de estímulo ou recompensa. Depois, cada abelha foi testada com quatro odores que poderia ou não conter os odores treinados. Os autores desejavam entender quantos eixos linearmente independentes eram necessários para discriminar odores, visto que a quantidade de receptores olfativos das abelhas é relativamente alta, em torno de 60000 receptores ao longo das antenas, conforme ilustrado na Figura 46 (CHITTKA e BROCKMANN, 2005). Os receptores olfativos das abelhas localizam-se nas antenas e alguns deles estão representados como pontos coloridos na antena à esquerda da Figura 46.

Figura 46 – Imagem ampliada da cabeça de uma abelha e sobreposta sobre ela um mapa glomerular dos receptores da antena e sua localização no sistema nervoso. Cada cor representa um receptor olfativo sensível a um conjunto de odores [Extraída de (CHITTKA e BROCKMANN, 2005)].

A pesquisa conduzida por Guerrieri *et al.* (GUERRIERI, SCHUBERT, *et al.*, 2005) indicou que as fragrâncias mais importantes estão sobre o eixo da componente principal que define o tamanho da cadeia de carbono na sua composição, enquanto que os outros dois eixos separam os odores conforme os grupos funcionais como Álcool e Aldeídos. A Figura 47 ilustra um mapa tridimensional na qual Guerrieire *et al.* descrevem como estão decompostos por importância os odores primários que formam o sistema de percepção olfativo das abelhas. Nota-se que o grau de importância é exatamente o da maior variância das amostras de odores, o que sugere que o sistema nervoso realiza uma decomposição em componentes ou fatores principais.

Esses resultados podem indicar a possibilidade dos sistemas biológicos não tratarem dados de alta dimensão diretamente, mas decompor em conjuntos de características para realizar correlações. Portanto, deve existir um conjunto de eixos de características principais nas quais as informações são decompostas e representadas. Os eixos poderiam conter curvas principais que representam economicamente o espaço de características. Seria uma indicação de que há uma dimensão intrínseca no espaço de características de alta dimensão do sistema olfativo das abelhas.

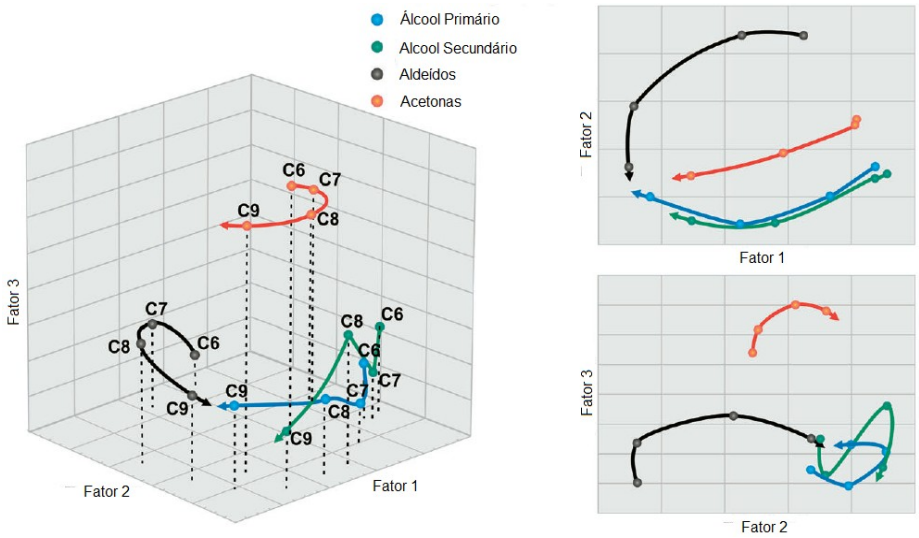


Figura 47 – Mapa tridimensional dos fatores de decomposição de odores no sistema olfativo das abelhas [Extraída de (GUERRIERI, SCHUBERT, *et al.*, 2005)].

6.3 Curvas Principais e a Relação com o SOM

Uma das grandes características descritas sobre o SOM é que ele é considerado uma generalização das Componentes Principais Não Lineares (HAYKIN, 2001). Uma maneira ilustrativa de compreender esse fenômeno pode ser vista na Figura 48. Nessa

figura há um conjunto de pontos com distribuição bidimensional e cujo formato é altamente não linear. Na mesma figura (a) foi traçada uma reta que representa a primeira componente principal determinada pelo PCA sobre o conjunto desses pontos. Essa reta representa a direção que minimiza a soma dos erros quadráticos das projeções ortogonais dos pontos à reta. Em (b) está representada uma curva principal que objetiva minimizar a soma dos erros quadráticos das projeções ortogonais dos pontos à curva, mas sujeito as restrições de suavização da curva.

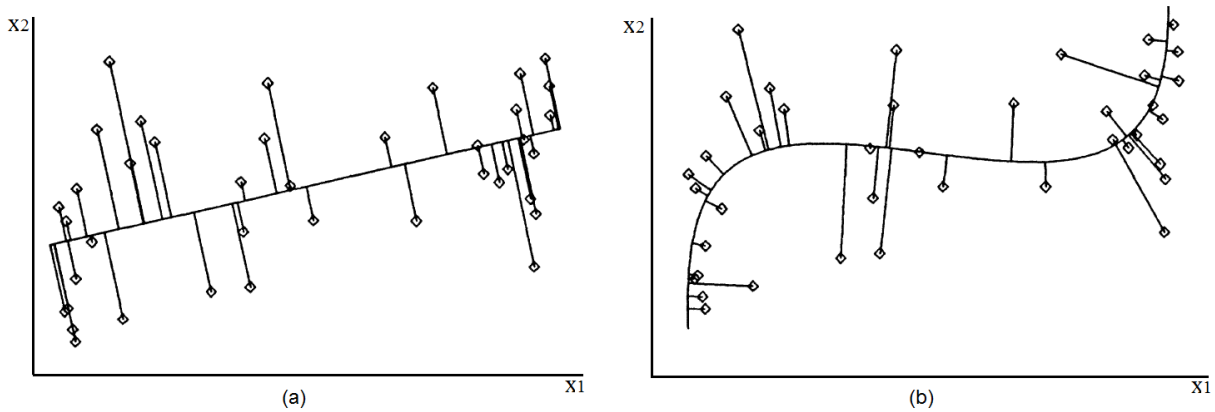


Figura 48 – Distribuição não linear de pontos no espaço bidimensional. Em (a) uma reta que coincide com a primeira componente principal extraída pelo PCA. Em (b) uma curva suave que minimiza a soma dos erros quadráticos das distâncias dos pontos à curva (Extraída e adaptada de (HASTIE, 1984)).

O conceito de Curvas e Superfícies Principais (*Principal Curves and Surfaces*) foi proposto inicialmente por Hastie (HASTIE, 1984) e publicado em (HASTIE e STUETZLE, 1989). A ideia proposta por Hastie era encontrar um conjunto de curvas que melhor descrevessem uma distribuição não linear, sujeita à restrição de que essa curva deveria ser suave e passar sobre o centro de distribuição do conjunto de dados. Mais formalmente define-se uma Curva Principal como um arco unidimensional dado por uma função $f(s)$ suave imerso no espaço com densidade de distribuição $P(V)$, com comprimento finito que não se cruza consigo mesma. A Figura 49 ilustra essa descrição.

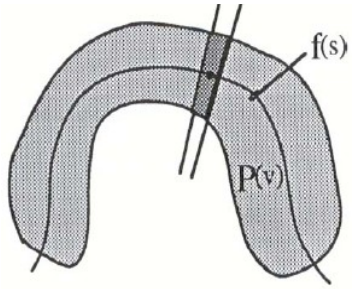


Figura 49 – Representação de uma curva $f(s)$ que passa pelo centro de gravidade da densidade de distribuição $P(V)$. O centro de gravidade da região definida entre as duas retas ortogonais infinitesimalmente separadas encontra-se no sobre a curva $f(s)$ que passa nessa região [Extraída de (RITTER, MARTINETZ e SCHULTEN, 1992) página 232].

Tomando-se como exemplo a Figura 48 (b), a generalização do SOM para simular as Curvas Principais poderia estar baseada no fato de que os neurônios serviriam como uma aproximação discretizada de uma curva suave que passa pelo centro de gravidade da densidade de distribuição dos dados.

Originariamente, o algoritmo de construção das Curvas Principais dependia de um ponto inicial. Como normalmente se desconhece o formato da distribuição dos dados, Hastie e Stuetzle (HASTIE e STUETZLE, 1989) sugeriram usar o PCA para encontrar a primeira componente principal e depois deformar essa componente até encontrar a curva principal, mas sem a garantia de haver convergência. A razão para discutir as Curvas e Superfícies Principais é que o SOM pode, no estado estável (final do treinamento), definir uma aproximação discretizada da superfície principal. Como descrito em (RITTER, MARTINETZ e SCHULTEN, 1992), uma propriedade do SOM é deformar iterativamente a rede de neurônios de maneira que o centro de gravidade da densidade de distribuição $P(V)$ contido dentro do volume V_j coincida com o vetor de peso $\mathbf{w}_j$ do neurônio m_j. A Figura 50 ilustra mais claramente essa definição.

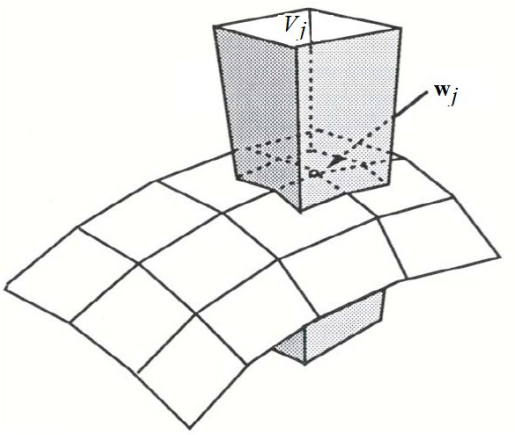


Figura 50 - A figura representa uma grade discreta bidimensional de um mapa SOM em treinamento onde o cruzamento das linhas representa a posição atual do vetor de peso $\mathbf{w}_j$. Um volume parcial da densidade de distribuição dos dados está representado na figura por V_j.A grade SOM possuirá propriedade da superfície principal se cada neurônio $\mathbf{w}_j$ for o centro de gravidade da densidade local definida pelo volume V_j [Extraída de (RITTER, MARTINETZ e SCHULTEN, 1992) pág. 234].

A partir da ideia de que as curvas principais formam um esqueleto sobre a estrutura dos dados, desenvolveu-se nesta tese a possibilidade de se usar o mapeamento final do SOM para encontrar esse esqueleto. Se existe um esqueleto ou um grafo que está embutido na estrutura de um *manifold* que represente um espaço de padrões, pode-se navegar sobre esse *manifold* usando o esqueleto formado pelos neurônios e explorar os diversos modos de

variação dos padrões de uma maneira ordenada e sistemática (WILSON, HANCOCK e LUO, 2005).

6.4 Self Organized Manifold Mapping - SOMM

Foi proposta em (KITANI, DEL-MORAL-HERNANDEZ, *et al.*, 2011) uma metodologia de exploração de agrupamentos sobre o mapa SOM treinado, baseada no "passeio" Euclidiano sobre os neurônios do mapa SOM. A motivação para essa proposta foi obtida a partir do experimento com a reconstrução visual dos neurônios das imagens de faces, conforme descrita na seção 5.5.1. Observou-se que visualmente era possível identificar alguns agrupamentos e transformações nas imagens de faces, representadas pelos neurônios vizinhos. Essa mesma percepção foi observada nos resultados com as imagens de cérebro. Assim, abre-se a questão: seria possível determinar esses agrupamentos e transformações baseado nas representações fornecidas pelos neurônios e de forma autônoma?

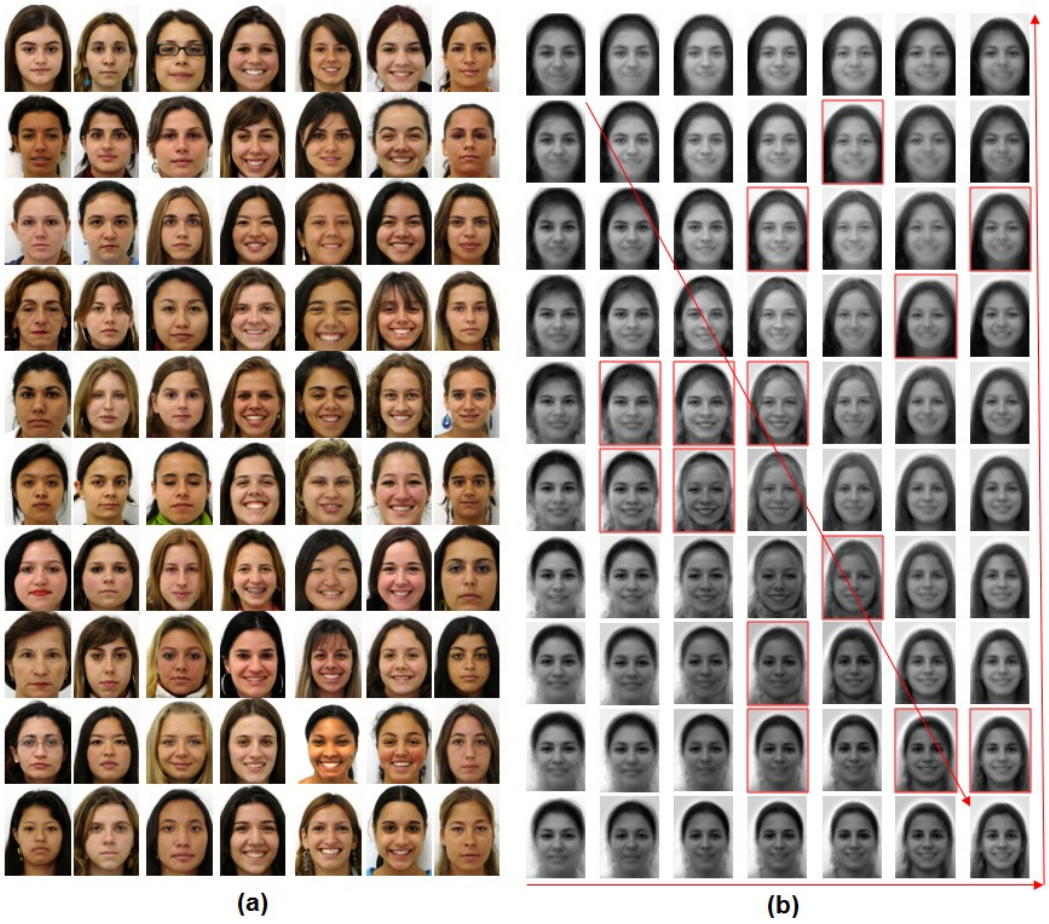


Figura 51 – Em (a) algumas imagens de faces do conjunto de treinamento, em (b) a reconstrução visual dos neurônios treinados com as imagens de faces femininas, conforme discutido na seção 5.5.1. As setas indicam algumas direções nas quais podem-se observar transições de características das imagens de face.

A Figura 51 (b) reproduz novamente as reconstruções visuais dos neurônios treinados com as imagens de faces femininas. Entretanto, foram adicionadas manualmente três setas vermelhas.

Apenas para ilustrar e contrastar, em (a) foram dispostas algumas das imagens de faces do conjunto de treinamento. Cada seta indica possíveis direções onde cada imagem representa uma mudança discreta de características faciais de maneira auto-organizada. Por exemplo, a seta que indica a direção da esquerda para a direita na

(b) mostra que as sete imagens alteram várias características faciais, mas predominantemente o formato do cabelo e o tamanho da face. É importante recordar que as reconstruções visuais dos neurônios do SOM são realizadas por uma transformação linear conforme descrito na equação (5-6).

Sabe-se que qualquer neurônio m_j contém as características aprendidas de um grupo de imagens $\mathbf{x}_i \in V_j$, onde V_j é a região do Diagrama de Voronoi definida pelo neurônio j. Contudo, a imagem $\mathbf{x}_j$ é a imagem média $\bar{\mathbf{x}}$ somada às características faciais contidas no neurônio m_j. Em outras palavras, cada imagem reconstruída dos neurônios é uma variação estatística das características capturadas das amostras e que é incorporada na imagem média. Logo, todas as imagens reconstruídas dos neurônios representam a variabilidade estatística do conjunto de dados de treinamento. A partir desse raciocínio desenvolveu-se uma metodologia que explorasse o *manifold* dos dados de entrada a partir dos neurônios do mapa SOM treinado.

Partindo da proposta de (TENENBAUM, SILVA e LANGFORD, 2000) com o ISOMAP, estudou-se a possibilidade de construir uma árvore que representasse o caminho sobre o *manifold* utilizando-se os neurônios como pontos de suporte. Visto que os neurônios são representações econômicas de grupos de vetores de entrada, a distância entre os neurônios do mapa indica a similaridade ou dissimilaridade entre os grupos e, quanto mais dissimilares, mais distantes os neurônios estarão entre si. No entanto, como foi discutido em vários trabalhos (TENENBAUM, SILVA e LANGFORD, 2000) (LEE e VERLEYSEN, 2010), (CAMPOY, 2009), a relação de vizinhança local pode não representar adequadamente a estrutura multidimensional global.

A proposta desta tese não é mapear o espaço dos neurônios para um espaço de menor dimensão, mas sim encontrar relações topológicas, no espaço vetorial $\mathbb{R}^n$ a partir dos neurônios, de maneira global. Entretanto, essa busca se faz sem a preocupação de

manter as relações de vizinhança criadas no espaço matricial $\mathbb{Z}^d$ durante o treinamento do SOM convencional. Desta forma, é como construir novas relações de vizinhança, reorganizando-os de acordo com o *manifold* de entrada que foi aprendido pelo SOM. Em resumo, o SOMM usa a auto-organização aprendida pela abordagem híbrida PCA+SOM e depois usa os vetores de peso dos neurônios para encontrar novas relações de vizinhança, mas de maneira global e sobre o *manifold* dos dados de entrada. Este capítulo desenvolve um algoritmo que recorta o mapa SOM formando agrupamentos de maneira não supervisionada a partir do mapa SOM.

Proposta semelhante de descoberta de agrupamentos foi apresentada em (PÖLZBAUER, RAUBER e DITTENBACH, 2005), na qual o método consiste em encontrar, a partir dos dados do espaço de entrada, os k-vizinhos mais próximos de uma amostra $\mathbf{x}_i$ e montando-se um conjunto $N_k(\mathbf{x}_i)$. Em seguida, encontra-se o neurônio $m_c = BMU(\mathbf{x}_i)$. Em seguida procuram-se os neurônios vizinhos mais próximos tal que $m_j \in \{BMU\big(N_k(\mathbf{x}_i)\big)\}$ e conectam-se os neurônios mais próximos, formando árvores à medida que o algoritmo varre os dados de entrada. Posteriormente, (MAYER e RAUBER, 2010) propuseram o uso da técnica de Árvore de Espalhamento Mínimo (MST – *Minimun Spanning Three*) para conectar os neurônios de maneira que possam representar os agrupamentos.

A proposta desenvolvida e apresentada em (KITANI, DEL-MORAL-HERNANDEZ, *et al.*, 2011) sugere também conectar os neurônios como se fossem árvores usando o princípio da busca progressiva do vizinho mais próximo (FUKUNAGA, 1990) na matriz dos pares de distância entre todos os neurônios do mapa SOM. Dessa maneira, no crescimento gradual da árvore, avalia-se qual neurônio está mais próximo vetorialmente, mas sem se preocupar com a relação de vizinhança inicialmente estabelecida no algoritmo do SOM clássico.

Para favorecer a compreensão do algoritmo SOMM que está descrito na Tabela 5 e evitar ambiguidades destacam-se algumas notações e símbolos adotados especificamente para este caso:

a) $A = [1, 2, \dots, k]$ é uma lista que inicialmente contém os índices dos k neurônios (m_j) do mapa SOM que ainda não foram visitados pelo algoritmo SOMM, sendo $A(i)$ o i-ésimo elemento da lista. À medida que a visitação ocorre, os índices dos neurônios visitados são zerados. Opcionalmente, os

neurônios não votados podem ser zerados no início, caso não se deseje usá-los nas visitações;

b) L_n é uma lista que será usada para compor os elementos de uma árvore, sendo que $\{L_n\} \mid n \geq 1$ representa a floresta formada incrementalmente pelo algoritmo SOMM. O n^* é um índice de apoio na identificação e inserção de novos elementos em listas já formadas;

c) $d_{ij} = \|m_i - m_j\|$ é a métrica de distância adotada no SOMM, mas outras distância são possíveis e viáveis;

d) **M** é uma matriz quadrada que contém as distâncias Euclidianas entre pares de neurônios;

e) S_n é uma lista que contém os pares ordenados que formam a árvore L_n;

f) r, s e s^*são índices que auxiliam na busca de elementos da matriz **M**;

g) O símbolo $a \coloneqq$ b indica uma atribuição do valor contido em b para a;

h) O símbolo $a = b$ indica uma relação lógica de igualdade

O algoritmo SOMM segue os passos apresentados na Tabela 5.

O SOMM constroi um grafo $G = \{V, E\}$ não orientado, na qual V é o conjunto de todos os vértices v e E o conjunto de todos os arcos ou arestas e. Considerando o arco e como uma função custo f para conectar os neurônios do mapa, que são considerados os vértices v da árvore. Um arco é considerado um caminho π_m, na qual $\pi_m = d(m_i, m_j)$ é a distância Euclidiana no espaço vetorial do neurônio m_i para o neurônio m_j. Iniciando-se de um neurônio semente m_i qualquer, busca-se a menor distância do neurônio semente a todos os neurônios $m_j = 1, 2, \ldots, k, i \neq j$, incrementalmente, de forma a criar uma árvore C_i, que representa um caminho sobre o *manifold*. Uma vez encontrado o menor caminho π_m entre o neurônio m_i e um neurônio m_j, o próximo caminho π_{m+1} inicia-se no neurônio m_j repetindo todo o processo de busca. Entretanto, o SOMM considera que o caminho π_m é sempre à frente, não permitindo que se retorne para o neurônio anterior. Essa heurística de caminhar à frente é para evitar que o menor caminho seja sempre o neurônio imediatamente anterior.

Um exemplo típico de fim de árvore está ilustrado na Figura 52. Considerando o vértice 1 como raiz, a construção da árvore segue para o vértice 2, pois é o mais próximo de 1. A partir do vértice 2 o mais próximo é o 11 e assim sucessivamente. Entretanto, o vértice 23 compartilha o vértice 11 junto com o vértice 2, considerando o

vértice 11 como o mais próximo. Entretanto, deve se considerar que $d(m_2, m_{11}) < d(m_2, m_{23})$. Logo, o SOMM faz a poda da árvore no vértice 23 porque não há nenhum outro vértice $v_m \in G$ que seja mais próximo do que o vértice 11.

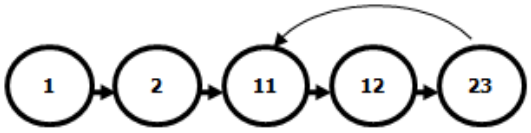


Figura 52 – Árvore formada pelo SOMM mostrando que o vértice 11 é o mais próximo dos vértices 2 e 23.

Caso qualquer caminho à frente tenha um custo maior do que qualquer custo da lista V (exceto do π_{m-1}), o processo de busca se encerra e um novo neurônio é buscado. Caso ocorram empates liga-se o vértice cujo posto (precedência na matriz de distância) seja menor. O algoritmo busca iterativamente, a partir de um vértice inicial, um vértice final, passando por uma série de vértices. Esse conjunto de vértices forma o que se chama de "caminho direto". A cada árvore C_i cria-se um recorte sobre o *manifold* formando um esqueleto sobre a estrutura dos dados. Caso esse esqueleto esteja no centro de massa das amostras forma-se uma Curva Principal.

Um aspecto relevante do algoritmo SOMM é poder utilizar os neurônios do mapa SOM que não se tornaram BMUs. Como discutido anteriormente, os não BMUs são neurônios de interpolação e podem trazer uma estimativa razoável para regiões da densidade de distribuição que não contêm dados. Entretanto, não necessariamente esse aproveitamento é obrigatório. É possível trabalhar com a metodologia SOMM criando uma heurística que não utilize os neurônios que não se tornaram BMUs. Aproveitar ou não os neurônios que não são BMUs dependerá da aplicação do usuário, visto que esses neurônios foram atualizados pela influência dos neurônios vizinhos, mas podem ocupar espaços vazios que não necessariamente representam os dados do espaço de entrada. As duas situações de validade do uso ou não dos BMUs foram apresentadas nos exemplos do Rolo Suíço e Imagens do Cérebro desenvolvidas no capítulo 5.

Entre as principais características do algoritmo SOMM estão:

a) Parte inicialmente de um grafo completamente conectado e ponderado;
b) O custo da aresta (i, j) é definido pela distância Euclidiana entre os neurônios m_i e m_j, mas pode utilizar outras distâncias;

c) É um algoritmo guloso e similar ao Dijkstra (CORMEN, LEISERSON, *et al.*, 2002), porém com múltiplos pontos iniciais;

d) Semelhante ao MST (*Minimun Spanning Three*), mas sem função de custo mínimo.

Tabela 5 – Algoritmo SOMM (Conforme notação e simbologia definidas anteriormente)

a) Compute um mapa SOM com k neurônios. Crie uma lista ordenada $A = [1, 2, \ldots, k]$ contendo os índices dos neurônios m_j;

b) Crie uma matriz $\mathbf{M}$ de dimensão $k \times k$ com todas as distâncias Euclidianas entre os k neurônios; Faça $\mathbf{M}(j,j) := \infty$ para j=1,2,...,k;

c) $r := A(i) \mid i := \underbrace{argprimeiro}_{i} (A(i) \neq 0),\ i := 1, 2, \ldots, k;\quad n = 1,$ (Ver nota 1);

d) Até que $A(i) = 0,\ i := 1, 2, \ldots, k$ (Ver nota 2)

$L_n \leftarrow r;\ A(r) := 0;$

Faça $s^* := \underbrace{argmin}_{s} \left(\mathbf{M}(s,r)\right) \mid s := 1, 2, \ldots, k$ (Ver nota 3),

$\mathbf{M}(r, s^*) := \infty,$ (Ver nota 4),

Se $s^* \notin L_n$, então $S_n \leftarrow (r, s^*);\ r := s^*;$ vá para d;

$n := n + 1;$

$r := A(i) \mid i := \underbrace{argprimeiro}_{i} (A(i) \neq 0),\quad i := 1, 2, \ldots, k;$

Faça $s^* := \underbrace{argmin}_{s} \left(\mathbf{M}(s,r)\right) \mid s := 1, 2, \ldots, k,$

$\mathbf{M}(r, s^*) := \infty;$

Enquanto $s^* \in L_j\ \forall, j = 1, 2, \ldots, n;$ (Ver nota 5)

$n^* := \underbrace{argmin}_{j} \left(s^* \in L_j\right) \mid j := 1, 2, \ldots, n \quad ; \quad L_{n^*} \leftarrow r \quad ;$

$S_{n^*} \leftarrow (r, s^*);$

$A(r) := 0;$

$r := A(i) \mid i := \underbrace{argprimeiro}_{i} (A(i) \neq 0),\ i := 1, 2, \ldots, k;$

$s^* := \underbrace{argmin}_{s} \left(\mathbf{M}(s,r)\right) \mid s := 1, 2, \ldots, k;$

e) Fim

Nota 1: $\underbrace{argprimeiro}_{i}(A(i) \neq 0),\ i := 1, 2, \ldots, k;$ é um primitivo que devolve o índice do primeiro valor diferente de zero na lista que está sendo percorrida, neste caso a lista A.

Nota 2: Este laço constrói as árvores SOMM a partir da matriz **M.**

Nota 3: Nos casos de empate, segue-se a ordem numérica da lista.

Nota 4: Na matriz **M,** a distância do neurônio antecessor recebe atribuição infinito para evitar que o algoritmo considere o neurônio imediatamente antecessor como o mais próximo.

Nota 5: Este trecho acrescenta um novo neurônio na lista de uma árvore já formada.

A principal motivação para o desenvolvimento da metodologia SOMM está relacionada com aplicações em alta dimensionalidade dos dados. Exemplos de aplicações que envolvem alta dimensão são as imagens digitais, como aquelas discutidas no capítulo 3. Também no Capítulo três foram discutidas três técnicas de redução de dimensionalidade para permitir que dados de alta dimensão pudessem ser visualizados em baixa dimensão (≤ 3). Entretanto, mesmos projetando os dados em baixa dimensão é possível que a estrutura dos dados de entrada ainda não possa ser reconhecida ou identificada.

A Figura 53 ilustra a projeção das duas primeiras componentes principais extraídas do conjunto de treinamento formado por faces femininas. As cores representam os dois grupos de imagens de faces que foram categorizadas manualmente como sendo: pontos azuis representando as faces sorrindo (MS) e os pontos verdes as faces neutras (MN). Os círculos vermelhos representam os neurônios do mapa SOM após o treinamento. Nota-se que não é, ao menos, facilmente perceptível qualquer estrutura extraída pelo SOM e nem o que representa cada ponto em termos de características. Para visualizá-las é bastante conveniente a reconstrução de qualquer ponto do espaço PCA para o espaço visual, como discutido seção 5.5.1.

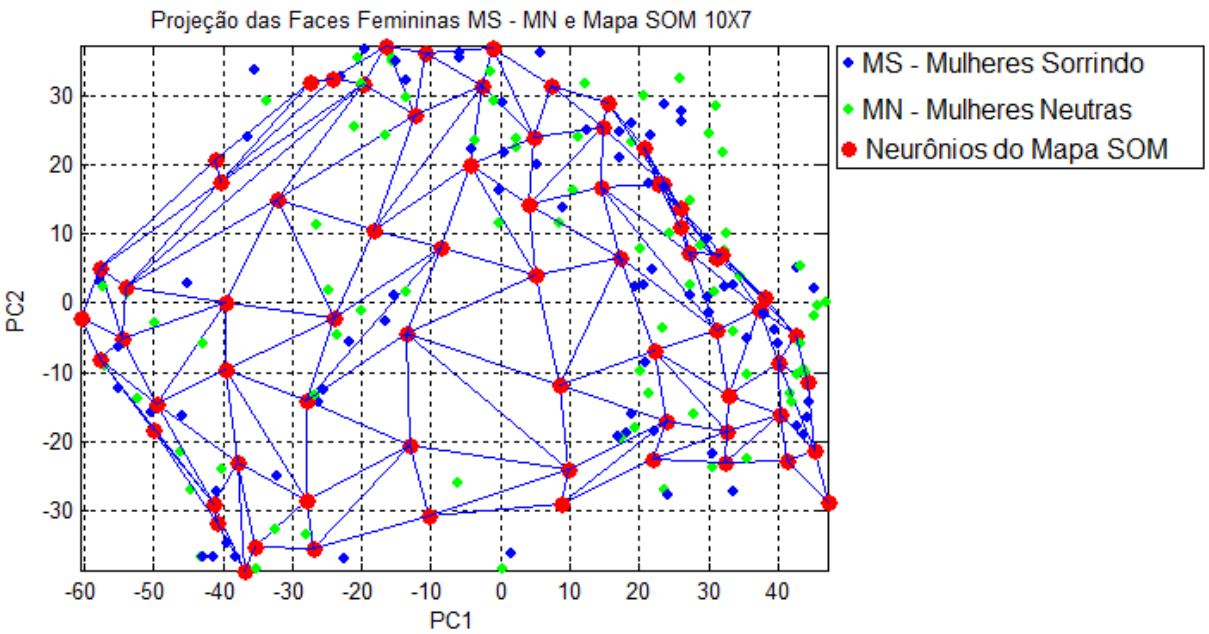


Figura 53 – Distribuição das imagens de faces femininas do Banco de Faces FEI (OLIVEIRA JR. e THOMAZ, 2006) a partir das duas primeiras componentes principais. Os círculos em vermelho representam os neurônios após o treinamento. As linhas azuis indicam a relação de vizinhança entre os neurônios.

6.5 Comparação do SOMM com MST (*Minimum Spanning Three*)

Discute-se nesta seção uma breve introdução sobre o algoritmo MST e depois uma comparação com o algoritmo desenvolvido nesta tese. O SOMM é um algoritmo que produz uma árvore como um grafo conexo e acíclico ou florestas como união disjunta de árvores.

Seja um grafo não orientado $G = (V, E)$, onde V é o conjunto de todos os vértices (u, v) do grafo e E o conjunto de todos os arcos ou arestas. Define-se para cada arco $(u, v) \in E$ um custo $w(u, v) = \|u - v\|$. O objetivo do MST é encontrar um subconjunto acíclico $T \subseteq E$ que conecte todos os vértices e cujo custo total

$$w(T) = \sum_{(u,v)\epsilon T} w(u, v), \tag{6-1}$$

seja minimizado (CORMEN, LEISERSON, *et al.*, 2002).

Contudo, o SOMM não percorre todo o grafo G para buscar a minimização do custo global da árvore, mas apenas olha para o grafo buscando um arco de menor custo local, e faz isso até que se termine a construção da k-ésima árvore $C_k \subseteq E$ ou quando termina de percorrer todo grafo G.

Para compreender o algoritmo SOMM descreve-se a seguir um conjunto de exemplos que ilustram o funcionamento do algoritmo. Suponha um grafo parcialmente conectado com arcos ponderados e pesos iguais. Ao se aplicar o algoritmo SOMM sobre esse grafo obtém-se uma árvore que conecta todos os vértices conforme pode ser visto na Figura 54 (a).

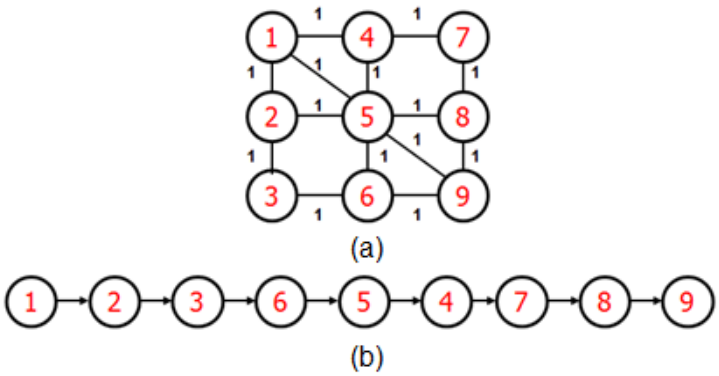


Figura 54 – Em (a) tem-se um grafo parcialmente conectado com pesos ponderados iguais e em (b) a árvore formada pelo algoritmo SOMM.

O caminho seguido pelo SOMM considera o vértice (1) como raiz e a partir dele busca o vértice mais próximo. Como há três arcos com o mesmo peso $w(1,2) = w(1,4) = w(1,5) = 1$, a escolha foi para o sequencialmente mais próximo, neste caso o vértice (2). No vértice (2) o processo de busca se repete, mas não se considera mais o vértice (1), pois a construção da árvore é acíclica. Na Figura 54 (b) pode-se avaliar o resultado final.

Outro exemplo ilustrativo que pode melhorar a compreensão sobre como o SOMM trabalha é apresentado na Figura 55, onde propõe-se a formação de árvores a partir do grafo ponderado da figura (a). A primeira solução é uma árvore genérica cuja figura (b) poderia ser uma possível solução de poda a partir do grafo da figura (a). Se aplicarmos o algoritmo SOMM sobre o grafo (a) formam-se duas árvores disjuntas como ilustrado em (c). Finalmente em (d) formou-se uma árvore MST. Nota-se que o SOMM separou os dois grupos que estavam mais aglutinados (A-B-C e D-E-F). Isto ocorreu porque o SOMM percorre sempre as menores distâncias a partir de um dado vértice, caso um vértice tenha uma distância maior do que as que já foram percorridas o SOMM faz a poda. Intuitivamente, poderia se considerar o arco (A-D) como um arco inconsistente que une dois agrupamentos distintos (ZAHN, 1971).

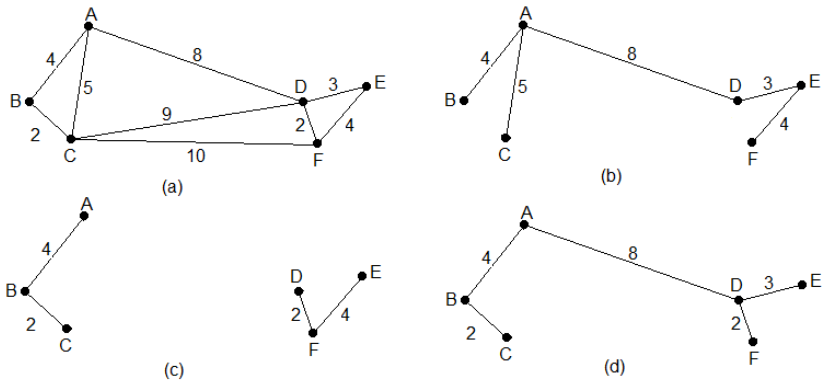


Figura 55 – Exemplos de formação de árvores a partir do grafo em (a), em (b) uma árvore genérica em (c) duas árvores formadas pelo algoritmo SOMM e em (d) uma árvore MST [As figuras (a), (b) e (d) foram extraídas e a figura (c) foi adaptada de (ZAHN, 1971)].

A metodologia SOMM pode, em algumas circunstâncias, encontrar agrupamentos caso esses agrupamentos possam ser claramente definidos pela formação das árvores. Novamente, apenas para ilustrar esse conceito, a Figura 56 apresenta em (a) dois agrupamentos (C_1 e C_2) formados pelas árvores do SOMM e em (b) uma MST que une os dois grupos. Da mesma maneira que no exemplo anterior o arco A-B é considerado intuitivamente inconsistente em virtude da nossa percepção da existência de dois agrupamentos, mas o MST não tem no seu algoritmo um mecanismo para remover esse arco.

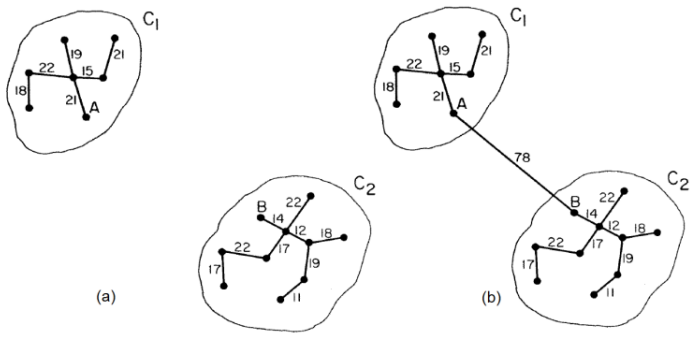


Figura 56 – Representação de dois agrupamentos formados pelo SOMM em (a) e em (b) os mesmos agrupamentos ligados por um arco "inconsistente" pelo algoritmo MST [A figura (b) foi extraída e a figura (a) foi adaptada de (ZAHN, 1971)].

Apesar do exemplo ilustrativo não deixar dúvidas sobre a capacidade de separação de agrupamentos, existem situações nas quais não será possível separar grupos que estejam muito próximos. Um contra exemplo seria quando se tem um arco cujo peso (comprimento) é menor do que qualquer outro arco pertencente ao grupo em construção. A Figura 57 ilustra essa situação, na qual o arco A-B tem um comprimento menor do que qualquer outro arco existente dentro dos dois agrupamentos (à esquerda de A e à direita de B). A percepção Gestaltiana indica que a separação deveria ocorrer entre os vértices A e B. Entretanto, neste exemplo, o SOMM considerará a existência de um

único agrupamento. Naturalmente, isto ocorrerá dependendo de onde se inicia a raiz da árvore.

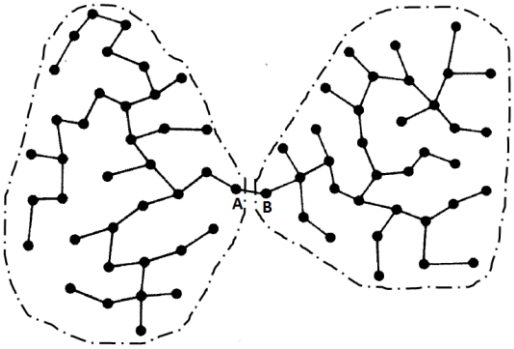


Figura 57 – Contra exemplo de um arco (A-B) Gestalticamente inconsistente conforme (ZAHN, 1971) e que pode não ser removido pelo SOMM [Extraída e adaptada de (ZAHN, 1971)].

6.6 Medidas de Qualidade do SOMM

Este capítulo apresentou uma nova técnica de exploração de espaço de baixa e alta dimensão utilizando o mapa SOM como uma cópia miniaturizada e ordenada da estrutura de entrada. O SOMM é uma metodologia que pode ser aplicada diretamente sobre a estrutura de dados de entrada. Porém, dependendo da base de dados haverá um consumo grande de memória e tempo de processamento do computador. Portanto, trabalhar com uma redução de dimensionalidade é menos custoso. Como foi discutido anteriormente, o SOMM não usa a relação de vizinhança inicial do SOM e, consequentemente, não se preocupa com a ordem dos neurônios do espaço $\mathbb{Z}^d$ que foi previamente estabelecida. Na realidade, constrói-se uma nova relação de vizinhança com o mapa treinado, e essa relação está baseada na minimização da distância entre cada neurônio.

Discutiu-se que a maioria das métricas de qualidade do SOM estão sempre relacionadas com a topologia do mapa SOM e erros de quantização. As violações de topologia se referem ao resultado do mapeamento no espaço de características em relação às posições dos neurônios no espaço de baixa dimensão. Neurônios vizinhos no espaço de característica $\mathbb{R}^n$ devem ser vizinhos no espaço de saída $\mathbb{Z}^d$ para que a topologia seja perfeita. Entretanto, são poucas as metodologias que associam falhas de topologias comparando as amostras do espaço de entrada $\mathbb{R}^n$ com o resultado do mapeamento na saída $\mathbb{Z}^d$. As que mais se aproximam desse conceito são: a medida proposta por (BEZDEK e PAL, 1995) chamada MTP (*Metric Topology Preserving*) e o erro topografico TE (*Topographic Error*) proposto por (KIVILUOTO, 1996). Na proposta do MTP

os autores usaram o coeficiente de ρ de Spearman (PRESS, TEUKOLSKY, *et al.*, 1992) para medir a preservação da ordenação topológica entre os dados do espaço de entrada comparados com a saída. O erro topográfico é mais simples e avalia para cada amostra de entrada $\mathbf{x}_i$ se o respectivo neurônio vencedor $m_c = BMU(\mathbf{x}_i)$ é adjacente ao segundo neurônio vencedor dessa mesma amostra.

Este trabalho propõe uma composição de métricas para validar os resultados do SOMM. A principal característica do SOMM é o recorte ordenado do *manifold* do espaço de dados de entrada sem o uso da vizinhança pré-estabelecida pelo SOM original. Desta forma, as métricas conhecidas para o SOM precisam ser adaptadas para serem aplicadas no SOMM.

No desenvolvimento das métricas de qualidade para os resultados do SOMM procurou-se compreender quais características seriam medidas e a primeira avaliação foi baseada no conceito de agrupamentos, visto que cada neurônio representa um conjunto de informações. Alguns autores (BOSCARIOLI, 2008), (SILVA, 2009), (COSTA, GONÇALVES e ANDRADE NETTO, 2011) trabalharam com índices que medem a coesão de um grupo relacionando-os com a distância entre os grupos. Entre os índices que já foram aplicados com o SOM estão: índice DB (Davies-Bouldin - (DAVIES e BOULDIN, 1979)), índice CDbw (*Composing Density between and within clusters* - (HALKIDI e VAZIRGIANNIS, 2002)) e índice Silhouette (ROUSSEEUW, 1987), (KAUFMAN e ROUSSEEUW, 1990). Os índices DB e Silhouette são os mais conhecidos na área de Mineração de Dados para validação de agrupamentos. Porém, o índice DB tende a considerar uma estrutura elipsoidal sobre os agrupamentos, o que muitas vezes não é o formato das partições do Diagrama de Voronoi definidas pelos neurônios do SOM.

Esta tese considerará o conjunto das quatro medidas (s, ρ, TE_SOMM e QEL) como métricas de qualidade para avaliar o resultado do SOMM e que serão discutidas em detalhes nas próximas seções.

6.6.1 Índice Silhouette

O índice DB considera os centros de massa dos agrupamentos para determinar se os grupos estão bem separados ou não. Por outro lado, o índice Silhouette determina a dissimilaridade de cada amostra com o seu próprio grupo e também se a amostra não

seria mais similar a outro grupo. O índice Silhoutte pode ser entendido como uma medida de qualidade que indica quais amostras estão bem posicionadas num agrupamento e quais não estão agrupadas adequadamente. O índice Silhouette apenas avalia a qualidade dos agrupamentos, sendo necessário rotular e categorizar previamente todos os dados do espaço de entrada por meio de qualquer algoritmo tal como o k-*means* ou SOM. Portanto, esta tese avaliará a qualidade dos agrupamentos formados pelos neurônios do mapa SOM usando o índice Silhouette. O algoritmo do Silhouette pode ser descrito como:

a) Considere a existência de dois ou mais grupos C_j tal que $C_j \neq \emptyset$, $j = 1, 2, \dots, C$;

b) Tome um elemento $x_i \in C_j$ e calcule o termo $a(x_i) = \frac{1}{\#\{C_j\}} \sum_{x_k \in C_j} (\|x_i - x_k\|) \mid i \neq k$, como sendo a média de todas as dissimilaridades de x_i em relação a todos os elementos de C_j e $\#\{C_j\}$ representa o numero de elementos do conjunto C_j;

c) Calcule $b(x_i) = min_{C \neq A}\{d(i, C_n)\} \mid d(i, C_n) = \frac{1}{\#\{C_n\}} \sum_{x_k \in C_n} (\|x_i - x_k\|) \mid i \neq k \ \wedge x_i \in C_j$, na qual $d(i, C_n)$ representa a média das dissimilaridades de x_i em relação a todos os elementos de $C_n \mid j \neq n$ e $\#\{C_n\}$ representa o numero de elementos do conjunto C_n;

d) Um agrupamento C_b conterá um elemento x_b tal que $d(x_i, x_b) = b(x_i)$, denominado agrupamento vizinho mais próximo de x_i ou a segunda melhor escolha;

e) Define-se $s(x_i) = \begin{cases} 1 - \frac{a(x_i)}{b(x_i)} & se\ a(xi) < b(x_i). \\ 0 & se\ a(xi) = b(x_i). \\ \frac{b(x_i)}{a(x_i)} - 1 & se\ a(xi) > b(x_i). \end{cases}$

f) Cada elemento x_i produzirá $-1 \leq s(x_i) \leq 1$;

Rousseeuw (ROUSSEEUW, 1987) definiu o índice $s(x_i)$ como um valor adimensional para cada elemento do conjunto de dados. Depois ele propôs representar graficamente os índices de cada grupo de maneira a permitir uma avaliação visual dos agrupamentos pelo gráfico. Nesta tese considera-se a média dos índices $s(x_i)$ de cada partição do Diagrama de Voronoi definida pelo neurônio m_j, como proposta na equação 6-3, e

avalia-se a qualidade do agrupamento definida pelo neurônio j.

$$\bar{s}(C_j) = \frac{1}{\#\{C_j\} - \#\{s(x_i) < 0\}} \sum_{s(x_i) \in C_j \wedge s(x_i) > 0} (s(x_i)), \qquad (6\text{-}2)$$

na qual, $\#\{C_j\} - \#\{s(x_i) < 0\}$ representa o número de elementos cujo o índice $s(x_i) > 0$. A razão desta escolha é que quando $s(x_i) \to 1$ não haveria dúvida de que $x_i \in C_j$.

Foi proposto também por (KAUFMAN e ROUSSEEUW, 1990) uma tabela de avaliação subjetiva baseada no resultado de uma série de experimentos. Esses autores ainda concluíram que, de uma maneira geral, é possível avaliar a qualidade dos agrupamentos baseada apenas num índice global. A tabela 6 reproduz o método de interpretação dos resultados do Silhouette conforme (KAUFMAN e ROUSSEEUW, 1990). Esta tese também considerará a avaliação local de cada agrupamento definido pelos neurônios do mapa SOM, calculando o índice médio local por neurônio.

Tabela 6 – Tabela de Avaliação Subjetiva do Índice Silhouette global.

$\bar{\mathbf{s}}(\mathbf{x_i})$	***Interpretação Proposta por*** (KAUFMAN e ROUSSEEUW, 1990)
71% - 100%	Um agrupamento consistente foi encontrado.
51% - 70%	Um agrupamento razoável foi encontrado.
26% - 50%	Um agrupamento fraco foi encontrado.
$\leq 25\%$	Nenhuma evidência de agrupamento foi encontrada.

A Figura 58 ilustra a aparência de um gráfico Silhouette representando quatro agrupamentos. O valor médio global $\bar{s}(x_i)$ foi de 26,63%. Se considerarmos a interpretação proposta na tabela 6 termos agrupamentos com consistência fraca, apesar de visualmente ser possível afirmar que há quatro grupos. Essa inconsistência está relacionada com o fato de que na proposta original do Silhouette a avaliação é realizado por agrupamento e nesta tese calculou-se a média global dos $s(x_i)$.

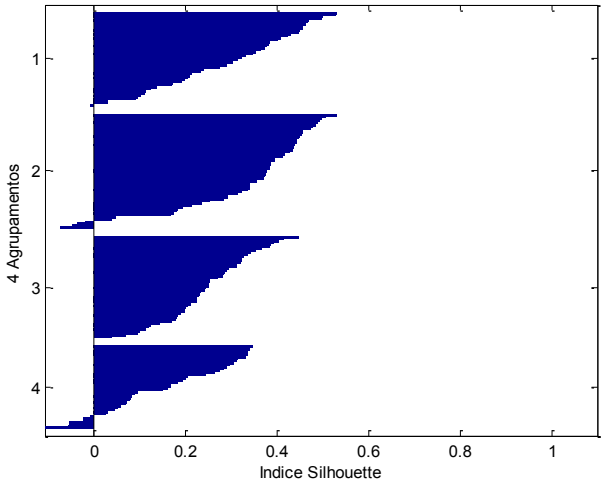


Figura 58 – Gráfico Silhoutte representando quatro agrupamentos a partir do conjunto de treinamento de Faces Femininas. O eixo x representa o valor do índice Silhouette para cada imagem de face e no eixo y a separação e ordenamento decrescente de cada imagem por grupo.

6.6.2 Coeficiente de Correlação de Spearman

Outro índice que será utilizado nos experimentos será o coeficiente ρ de Spearman (PRESS, TEUKOLSKY, *et al.*, 1992). Como vários experimentos serão conduzidos com o uso do PCA como pré-processamento, e sabe-se que os eixos ortonormais são ordenados de maneira decrescente pelos autovalores, então entende-se que há uma possível correlação monotônica entre dois vetores próximos. Em outras palavras, a ordem de importância dos autovetores na formação de um padrão pode estar correlacionada (THOMAZ e GIRALDI, 2010).

Para compreender melhor o conceito acima, retorna-se à seção 3.3.1 onde se discutem os princípios do PCA. Entende-se que quando se aplica o PCA numa base de dados de entrada, ele extrai os autovetores $\mathbf{\Phi}_{\mathrm{PCA}}$ da matriz de covariância $\mathbf{\Sigma}_{\mathbf{x}}$ da base de entrada. Portanto, pode se escrever que cada amostra projetada no espaço PCA pode ser reconstruída de volta para o espaço original com um mínimo de erro como:

$$\tilde{\mathbf{x}}_i = \bar{\mathbf{x}} + \mathbf{\Phi}_{\mathrm{PCA}}^T \mathbf{b}_i, \tag{6-3}$$

onde $\mathbf{b}_i$ é um vetor d-dimensional ($d < n$) que define os parâmetros da amostra i na base ortonormal $\mathbf{\Phi}_{\mathrm{PCA}}$. Pode-se escrever que:

$$\mathbf{b}_i = \mathbf{\Phi}_{\mathrm{PCA}}^T (\tilde{\mathbf{x}}_i - \bar{\mathbf{x}}). \tag{6-4}$$

O parâmetro $\mathbf{b}_i$ define, no caso de imagens, o peso da representatividade de cada autovetor na formação de uma determinada imagem. Logo, o que diferencia as imagens de faces umas das outras no espaço PCA são os diferentes pesos que cada imagem terá para o seu parâmetro $\mathbf{b}_i$. Desta forma, dizer que uma imagem $\mathbf{x}_i$ está próxima de $\mathbf{x}_j$ no espaço original significa que elas mantêm a mesma relação de distância no espaço PCA. Como discutido anteriormente, o PCA é uma transformação linear, então pode-se escrever que:

$$\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\| = \|\mathbf{b}_i - \mathbf{b}_j\|. \tag{6-5}$$

O que torna a imagem $\mathbf{x}_i$ diferente de $\mathbf{x}_j$ no espaço PCA é a diferença de suas projeções. À medida que a imagem $\mathbf{x}_i$ se aproxima de $\mathbf{x}_j$, seus pesos ponderadores $\mathbf{b}_i \in \mathbb{R}^d$ de cada autovetor tornam-se mais similares.

Considere a Figura 59, na qual um espaço de projeção PCA de duas dimensões é representado. Sendo o cruzamento dos eixos o centro da distribuição, a diferença entre $\mathbf{x}_i$ e $\mathbf{x}_j$ é definida apenas pela distância $\mathbf{b}_2$ que pondera a segunda componente principal.

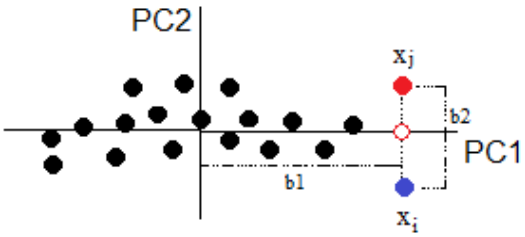


Figura 59 – Projeção em duas dimensões de uma massa de dados (círculos pretos) e duas imagens $\mathbf{x}_i$ e $\mathbf{x}_j$ próximas entre si separadas pelo hiperplano ortogonal à segunda componente principal. O círculo vermelho sobre o eixo da PC1 é apenas ilustrativo, representando a projeção ortogonal do ponto $\mathbf{x}_j$ sobre esse eixo.

Nota-se que as transformações são lineares, mas naturalmente, não se está afirmando que a modelagem de uma imagem é linear. Usando apenas relações lineares (veja o algoritmo), o SOM faz mapeamentos e interpolações não lineares do espaço de dados da entrada, e esta é uma das grandes características do SOM.

Como o SOMM navega sobre os neurônios a partir da menor distância entre eles, então o passeio entre dois neurônios poderia ser considerado como um modelo de transformação que converte o ponto $\mathbf{x}_i$ para o ponto $\mathbf{x}_j$, como descrito na equação (6-7).

$$\mathbf{x}_j = \bar{\mathbf{x}} + \mathbf{\Phi}_{\mathbf{PCA}}^{\mathbf{T}}(\mathbf{b}_i - \mathbf{b}_\mathrm{j}). \tag{6-6}$$

O uso do coeficiente de Spearman está associado à ideia de que, se dois vetores estão indo na mesma direção, seus coeficientes também são correlacionados por ordem de importância dos autovetores.

O cálculo do coeficiente de Spearman ρ para pares de neurônios é definido por:

$$\rho(\mathbf{w}_i, \mathbf{w}_j) = \frac{6\sum_{k=1}^{d}\left(\mathrm{R}\mathbf{w}_{ik} - \mathrm{R}\mathbf{w}_{jk}\right)^2}{d^3 - d}, \tag{6-7}$$

na qual d é a dimensionalidade dos neurônios $\mathbf{w}_i$ e $\mathbf{w}_j$ e $R\mathbf{w}_{ik}$ e $R\mathbf{w}_{jkj}$ são os postos dos vetores em duas séries ordenadas para $k = 1, 2, \ldots, d$ (PRESS, TEUKOLSKY, *et al.*, 1992). Originariamente, o coeficiente de Spearman foi desenvolvido para avaliar correlações monotônicas entre pares de conjuntos de amostras unidimensionais. O coeficiente de Spearman também traz o teste de hipótese para existência da correlação para H_1, e é dado por:

$$\mathrm{t}\rho = \rho(\mathbf{w}_i, \mathbf{w}_j)\sqrt{\frac{d-2}{1-(\rho(\mathbf{w}_i, \mathbf{w}_j))^2}}, \tag{6-8}$$

e que está distribuído aproximadamente como o t-*Student* com d-2 graus de liberdade. Como o cálculo é por pares, calcular-se-á o valor médio por agrupamento, conforme:

$$\bar{\rho}_i = \frac{1}{\#C_s}\sum_{m_k, m_j \in C_s} \rho(\mathbf{w}_k, \mathbf{w}_j), \tag{6-9}$$

na qual $\#C_s$ representa o número de neurônios na árvore C_s e $\rho(\mathbf{w}_k, \mathbf{w}_j)$ é o coeficiente e Spearman entre os neurônios m_k e . m_j.

6.6.3 Erro Topográfico do SOMM

Ao longo deste capítulo destacou-se que o SOMM não utiliza a relação de vizinhança previamente estabelecida. E as métricas de erro topológico do SOM clássico consideram justamente a manutenção dessa vizinhança. Para avaliar se o SOMM está violando a topologia dos dados de entrada, decidiu-se adaptar uma métrica dessa medida para o SOMM. A métrica escolhida foi o TE (*Topographic Error*) que foi apresentada na seção 4.6.3. A diferença principal no caso do SOMM é que a métrica considera a vizinhança sobre as árvores do SOMM. Então o algoritmo acompanha os neurônios da

árvore C_s para determinar se houve ou não uma violação topológica. A equação a (6-11) determina o erro topológico de cada árvore C_s.

$$te_SOMM_{c_s} = \frac{1}{\#C_s} \sum_{m_j \in C_s} \sum_{\mathbf{x}_i \in V_j} te(\mathbf{x}_i), \tag{6-10}$$

$$BMU(\mathbf{x}_i) = min\{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{w}_j\| | \|\mathbf{x}_i - \mathbf{w}_j\| < \|\mathbf{x}_i - \mathbf{w}_k\| < \|\mathbf{x}_i - \mathbf{w}_l\| \; j \neq k \neq l\} \quad 6\text{-}11)$$

$$te(x_k) = \begin{cases} 1 \Rightarrow se \;\; o \; m_j \; e \;\; m_k \; ou \; m_l \;\; não \; são \; adjacentes \; na \; árvore \\ 0 \Rightarrow para \; qualquer \; outra \; situação \end{cases} \tag{6-12}$$

Pode-se determinar o erro topológico global calculando a média dos erros de todas as árvores SOMM, como sendo:

$$TE_SOMM = \frac{1}{\#C_s} \sum_{i=1}^{NC_s} te_SOMM_i, \tag{6-13}$$

onde $\#C_s$ é o número de árvores SOMM formadas. Como TE_SOMM é um índice de erro, cujo valor ótimo é zero.

6.6.4 Erro de Quantização Local

O Erro de Quantização Local QEL é amplamente utilizado com metodologias que têm como base a Quantização Vetorial. É um índice para avaliar o grau de aproximação dos neurônios com as amostras do espaço de entrada, mas sofre uma forte influência do número de neurônios do mapa e não pode ser considerado isoladamente. O erro de quantização local QEL do neurônio m_j é definido por:

$$\mathrm{QEL}(m_j) = \frac{1}{\#V_j} \sum_{\mathbf{x}_i \in V_j} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{w}_j\|, \tag{6-14}$$

onde $\#V_j$ representa o número de elementos contidos na partição V_j do Diagrama de Voronoi definido pelo neurônio m_j , e da mesma maneira que no caso anterior com o coeficiente de Spearman, faz-se o cálculo por árvore SOMM:

$$\overline{\mathrm{QEL}}_i = \frac{1}{\#C_i} \sum_{\mathrm{QEL}_{m_j} \in C_i} \mathrm{QEL}(m_j). \tag{6-15}$$

na qual $\#C_i$ representa o número de neurônios na árvore C_i.

6.7 Considerações Finais

Neste capítulo foram discutidas e desenvolvidas as bases teóricas da proposta desta tese sobre a exploração do *manifold* dos dados de entrada usando os neurônios treinados do SOM como vértices de uma árvore. Com essas árvores será possível segmentar o *manifold* dos dados de entrada e compreender como os dados se distribuem no espaço de alta dimensão. Caso a segmentação seja adequadamente realizada será possível também encontrar agrupamentos. Também foram discutidas e desenvolvidas a adaptação de duas medidas estatísticas bem definidas na comunidade científica para se avaliar a qualidade do mapeamento SOM e a adaptação de uma medida de erro topológico para ser usado com o SOMM.

O SOMM pode ser considerado uma nova alternativa para visualização do resultado dos Mapas Auto-Organizados como o SOM ou o *Neural Gas* (MARTINETZ e SCHULTEN, 1991) ou qualquer outra metodologia de quantização vetorial. O SOMM pode ser uma alternativa de exploração do espaço de entrada a partir dos recortes do *manifold*. A proposta desenvolvida neste capítulo também pode ser útil para realizar Mineração Visual de dados, assim como proposto em (PAULOVICH, OLIVEIRA e MINGHIM, 2007). A metodologia proposta nesta tese tem a vantagem de ser não supervisionada e não exigir grandes pré-processamentos dos dados. Pode-se ainda, categorizar o SOMM como uma ferramenta estatística de *Data Tour*, na qual a visualização é guiada pelos dados. As primeiras propostas de passeio sobre estruturas de dados foram enunciadas por Asimov (ASIMOV, 1985) usando um método de navegação via projeções ortogonais entre sequências de subespaços.

No próximo capítulo serão apresentados os resultados e análises dos experimentos computacionais realizados com o SOMM utilizando-se as bases imagens de faces apresentadas até o momento e mais duas adicionais, com o objetivo de se avaliar a capacidade de exploração e extração de informações de espaços de alta dimensão pelo SOMM.

7. Ensaios Computacionais com o SOMM

"If I were again beginning my studies, I would follow the advice of Plato and start with mathematics."

Galileo Galilei

Neste capítulo todo o conjunto de fundamentações teóricas abordadas até o capítulo 6 formam a base para o entendimento dos experimentos e resultados. Ao longo dos seis capítulos anteriores os temas apresentados e discutidos formam a gênese do desenvolvimento do algoritmo SOMM. Apesar da simplicidade do método, os resultados que o SOMM produz são bastante interessantes. Para que o conjunto das propostas desenvolvidas nesta tese seja observado nos resultados dos experimentos, sumariza-se a seguir os principais tópicos que estarão presentes neste capítulo, e que por vezes pode exigir alguma revisita aos capítulos anteriores.

Entre os temas que se deseja ter conectados neste capítulo está a necessidade da redução de dimensionalidade e a criação de representações econômicas. Todas as ferramentas de redução de dimensionalidade apresentadas no Capítulo três realizam mapeamento de dados de um espaço de alta dimensão para um espaço de baixa dimensão. Contudo, somente o PCA mapeia um novo ponto sem a necessidade de retreiná-lo com todos os dados. Como o PCA é uma metodologia linear pode ainda retornar um dado projetado em baixa dimensão para o espaço original em alta dimensão.

O SOM é uma ferramenta de exploração não linear que faz o mapeamento do espaço de dados de alta dimensão para baixa dimensão representando economicamente a distribuição dos dados de entrada. Pode ainda interpolar e generalizar informações a partir do aprendizado com os dados de entrada. Como o SOM tenta copiar a estrutura de distribuição dos dados de entrada, na realidade ele mapeia o *manifold* dos dados, tendo os neurônios como amostras discretas desse espaço.

O SOMM (*Self-Organized Manifold Mapping*) é uma metodologia que usa os neurônios do mapa SOM para realizar recortes sobre o *manifold* dos dados, e assim encontrar direções das curvas das dimensões intrísecas que podem estar embutidas nos dados. Em virtude das características do SOMM, foram desenvolvidas e adaptadas novas métricas para avaliar seus resultados.

7.1 Objetivos do Capítulo

O objetivo deste capítulo é apresentar, descrever e discutir os resultados dos experimentos computacionais realizados com a metodologia SOMM desenvolvida nesta tese. Todos os experimentos foram realizados utilizando-se um computador portátil PC *i*7 com 6 GB de memória e sistema operacional Windows® 7 de 64 *bits*. Todos os treinamentos dos mapas SOM foram realizados com auxílio da ferramenta de *software* SOM *Toolbox* para o Matlab® e as rotinas do SOMM foram criadas pelo autor desta tese em linguagem Matlab® R2009a. As rotinas Silhouette e Spearman fazem parte do pacote de *Toolbox* de Estatística do Matlab® e foram adaptadas para trabalhar com as árvores do SOMM.

Serão apresentados os experimentos realizados com o Banco de Faces FEI e Banco de Faces FERET, cuja composição e detalhes foram descritos no Capítulo seis. Mais dois bancos de imagens de acesso público foram utilizados nos experimentos. O primeiro é o conjunto de imagens de faces de uma estátua, que foram desenvolvidas por Josh Tenenbaum, para o desenvolvimento do ISOMAP (TENENBAUM, 1998). Esse conjunto de imagens é muito utilizado para comparação das metodologias de redução de dimensionalidade. O Banco de Faces ISOMAP é composto de 698 imagens da face de uma estátua com variações na pose e iluminação. Cada imagem tem resolução de 64×64 *pixels* e são todas monocromáticas. O objetivo do experimento com as faces do ISOMAP é determinar a capacidade do SOMM em encontrar as direções das dimensões intrínsecas contidas nas imagens de faces.

O último experimento utiliza um conjunto de imagens de quadros de uma sequência de vídeo desenvolvida por Tim Cootes para aplicações com o método AAM (*Active Appearence Model*) (COOTES, 2001). O objetivo é mapear o espaço de dados dos quadros de vídeo e analisar o *manifold* onde estão distribuídas as informações das imagens. Pretende-se avaliar a perda de informação de contexto quando os dados têm uma ligação temporal.

Quando for necessário, cada seção de experimentos trará mais detalhes e mais informações sobre as bases de imagens utilizadas. Todos os experimentos acompanham as medidas de qualidade definidas na seção 6.6 do Capítulo 6. O índice Silhouette e Spearman são métricas de qualidade cujo valor ótimo é um (1) e a medida de erro TE-SOMM deve tender para zero (0) para indicar a manutenção da topologia pelas árvores do SOMM.

7.2 Experimentos com o SOMM e Imagens de Faces Femininas

Conforme descrito no capítulo 5, o Banco de Faces FEI é composto de 400 faces masculinas e femininas. Desse banco foram selecionadas apenas as imagens de faces femininas com expressões sorrindo e neutra num total de 200 imagens. As imagens foram concatenadas para formar uma única matriz **X** de dimensão 200×93600 (número de amostras × dimensionalidade de cada amostra) contendo todas as imagens. Aplicou-se o PCA na matriz **X** e obteve-se uma nova matriz **Y** de dimensão 200×199. A matriz **Y** foi utilizada no treinamento de um mapa SOM de dimensão 10×7, com vizinhança hexagonal e no modo batelada. Após o mapeamento do espaço de dados PCA pelo SOM, montaram-se duas matrizes com o resultado do mapeamento SOM. Uma matriz denominada $\mathbf{Z}_{SOM}$ contendo os valores originais dos vetores de peso $\mathbf{w}_j$ de cada neurônio m_j após o treinamento do mapa, e uma segunda matriz denominada $\mathbf{Z}_{SOM_qe}$ contendo os vetores de peso $\mathbf{w}_j$ atualizados pelo Algoritmo de Reposicionamento dos neurônios, conforme discutido na seção 5.3. O objetivo do reposicionamento de alguns neurônios é melhorar a representação do mapa SOM sobre a estrutura dos dados de entrada. Ao longo deste capítulo denominaremos a matriz $\mathbf{Z}_{SOM}$ como o mapa SOM Original e a matriz $\mathbf{Z}_{SOM_qe}$ como o mapa SOM Reposicionado, assim já feito em seções anteriores.

A Figura 60 e a Figura 61 ilustram as projeções das duas primeiras componentes principais de todo o conjunto de treinamento com as imagens de faces femininas. Categorizou-se *a priori* as imagens de faces como sendo: pontos azuis para as imagens de mulheres sorrindo e pontos roxos para imagens de mulheres com expressão neutra. Sobre esses mesmos gráficos foram sobrepostas as árvores geradas pelo algoritmo SOMM aplicado no mapa SOM Original e no SOM Reposicionado. Os círculos verdes representam os neurônios com votação e os círculos vermelhos os neurônios de interpolação. Os círculos verdes que estão circundados por uma circunferência preta maior representam as raízes das árvores por onde o algoritmo SOMM iniciou a construção das árvores.

O resultado indica a formação de uma floresta com sete árvores no mapa SOM Original e quatro árvores no mapa SOM Reposicionado. Cada árvore representa uma região do manifold de entrada na qual dados similares estão próximos segundo a métrica Euclidiana. A distribuição dos neurônios sobre esse manifold acompanha a distribuição das imagens. Portanto, pode-se entender os neurônios como uma representação econômica do espaço de dados que carregam características mapeadas da regiões que eles ocupam, visto que eles são

uma generalização discretizada do conjunto de dados de entrada.

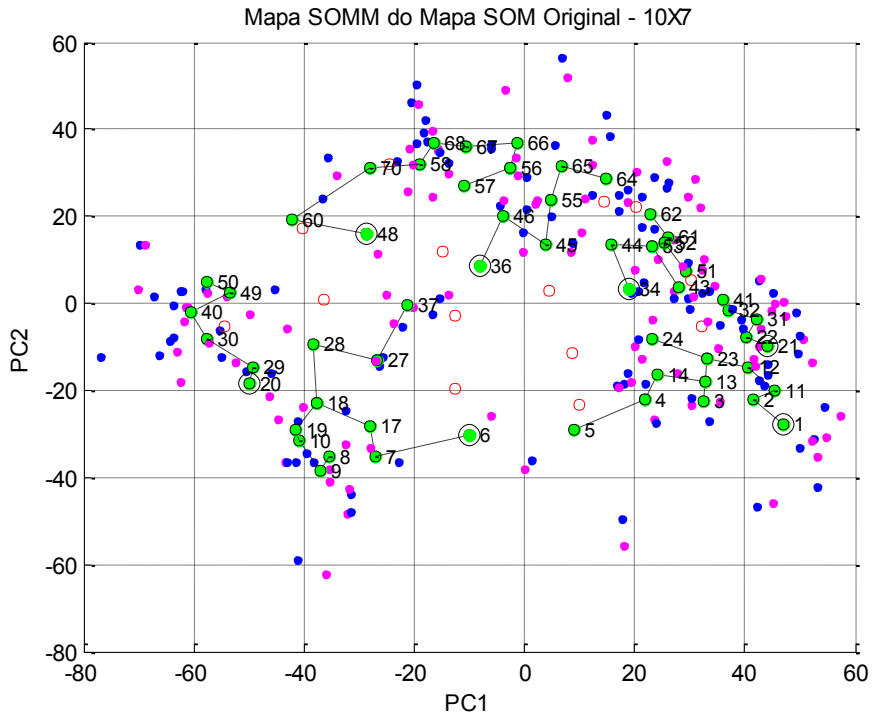


Figura 60 – Mapa SOMM com dados do mapa SOM Original 10×7 sobrepostos sobre as projeções das duas primeiras componentes principais do conjunto de treinamento com faces femininas. Os pontos azuis representam as faces femininas sorrindo, os pontos roxos representam as faces com expressão neutra, os círculos vermelhos são os neurônios de interpolação e os círculos verdes são os neurônios com votação. As raízes das árvores estão indicadas por uma circunferência preta envolvendo um círculo verde.

Foi dito anteriormente que os neurônios são generalizações do espaço de dados. Para compreender essa afirmação, assume-se que os neurônios m_j definem regiões tal que cada amostra de entrada $\mathbf{x}_i$ pertence a uma região do Diagrama de Voronoi V_j, definida como $V_j = \{\mathbf{x}_i | \, \|\mathbf{x}_i - \mathbf{w}_j\| < \|\mathbf{x}_i - \mathbf{w}_k\| \; \forall \, k \neq j\}$. Logo, entende-se que cada neurônio m_j da região V_j traduz a média do conjunto de características que Euclidianamente representam essa região. Portanto, o SOMM explora essa proximidade métrica sobre o *manifold*, desconsiderando qualquer relação de vizinhança inicialmente criada pelo algoritmo SOM, como foi discutido no capítulo 6. Como os mapas SOM têm vetores de peso $\mathbf{w}_j \in \mathbb{R}^d \mid d = 199$, o passeio sobre o *manifold*, usando os neurônios como vértices de um grafo, produzirá caminhos sobre o espaço de alta dimensão. Entretanto, somente podemos indicar por quais neurônios ocorreu esse passeio devido a impossibilidade de se visualizar o espaço $\mathbb{R}^d$. Assim, olhar o resultado do SOMM como árvores de um grafo facilita a compreensão de como ocorreu o passeio e os recortes do *manifold*.

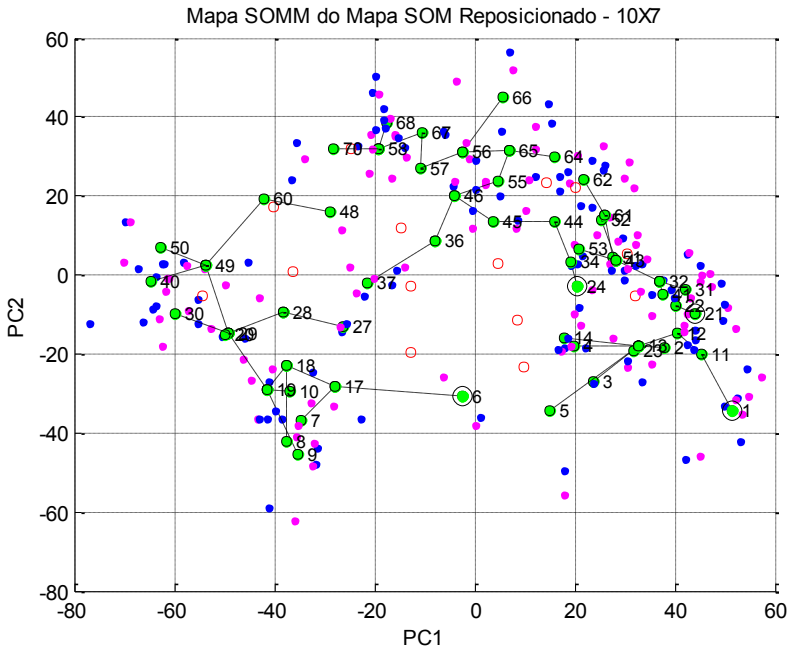


Figura 61 - Mapa SOMM com dados do mapa SOM Reposicionado 10×7 sobrepostos sobre as projeções das duas primeiras componentes principais do conjunto de treinamento com faces femininas. As convenções de cores seguem as mesmas definições da Figura 60.

Considere na Figura 62 um mapa SOMM com os rótulos indicativos dos neurônios da grade original do SOM. Cada árvore formada tem uma raiz (indicada por um círculo verde diferenciado) que pode ter uma série de ramificações. Cada neurônio tem ao menos um neurônio predecessor, menos os neurônios raízes. Navegar a partir do neurônio raiz para todos os ramos da árvore fornecerá uma indicação de quais características estão sendo agrupadas em cada região de Voronoi.

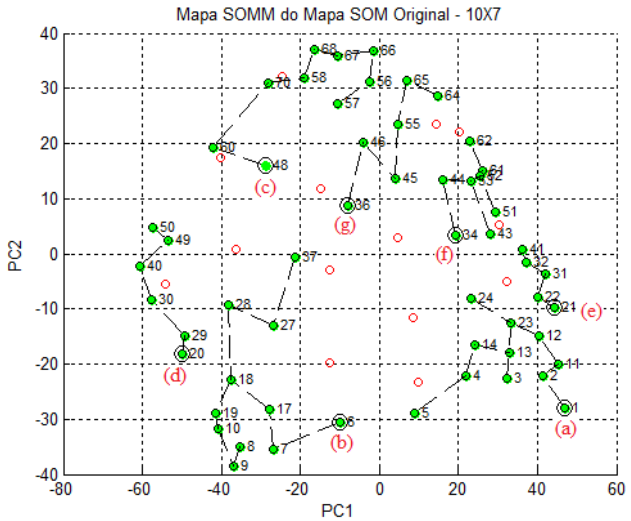


Figura 62 – Mapa SOMM com os neurônios originais. Observa-se a formação de sete árvores sobre todo espaço de entrada. Os círculos vermelhos são neurônios que não receberam votação. As letras em vermelho indicam onde se encontram as raízes das árvores. As convenções de cores seguem as mesmas definições da Figura 60.

Para compreender melhor quais características cada neurônio, e principalmente, cada árvore capturou do *manifold* de dados, reproduz-se na Figura 63 a reconstrução visual de todos os neurônios do mapa SOM usando a técnica de visualização reversa apresentada na seção 5.5 do capítulo 5. A sequência das imagens corresponde à sequência dos neurônios em cada árvore gerada pelo SOMM. Deseja-se reforçar a ideia de que essas árvores foram formadas baseadas no conceito de recortes do *manifold* na qual se encontram os neurônios. Logo, o que se observa são imagens que traduzem transições ou mudanças entre as várias regiões do *manifold*. Naturalmente, se o recorte ocorre numa região onde a densidade de dados é maior, pode ocorrer que as transições sejam mais sutís e o senso de agrupamento seja mais evidente do que de interpolação, tais como as que aparecem nas imagens do grupo (c). Podem também ocorrer ramificações a partir de um agrupamento principal, como visto nas árvores (a), (b) e (f).

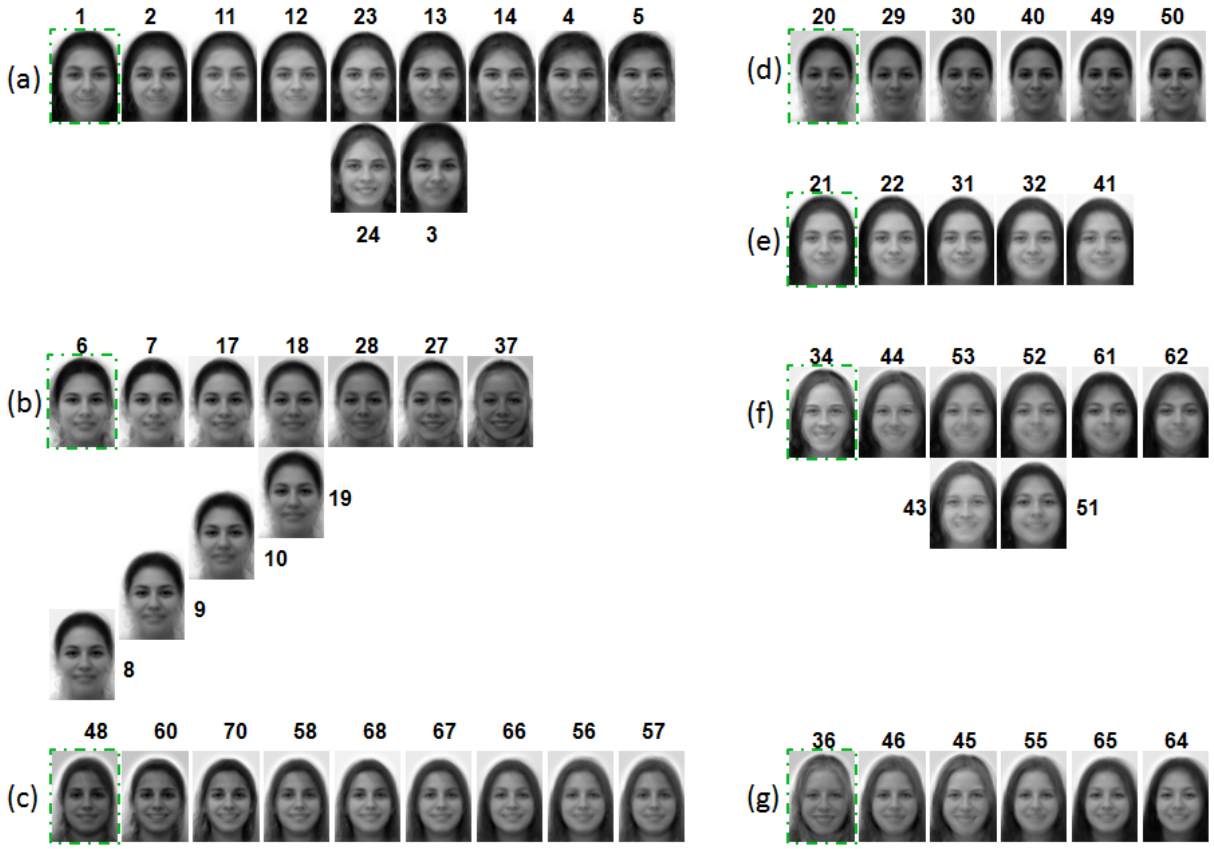


Figura 63 – Imagens reconstruídas dos neurônios que formam as árvores do SOMM. As imagens pontilhadas em verde representam as raízes das árvores e os números sobre as imagens correspondem aos neurônios das árvores do mapa SOMM.

Apesar das reconstruções visuais trazerem uma boa compreensão sobre como os dados estão se distribuindo sobre o *manifold* de entrada, é necessário avaliar se não há problemas com violações de topologia ou dados muito esparsos que possam tendenciar a análise visual.

Portanto, aplicou-se as métricas definidas no capítulo 6 para avaliar a qualidade dos mapeamentos SOMM. Avaliou-se o coeficiente $\bar{s}(x_i)$ de Silhouette para cada neurônio com votação, o coeficiente ρ de Spearman para cada par de neurônios vizinhos em cada árvore, o erro topológico TE-SOMM, já definido anteriormente, e o Erro de Quantização Local (QEL). A tabela sumariza os resultados das avaliações das sete árvores geradas pelo SOMM.

Tabela 7 – Tabela dos índices de qualidade, erro de distorção e quantização para o Mapa SOM Original..

Árvores *Cj*	**Silhouette** S(x*j*)	**Spearman ρ(Rmi,Rmj)**	**TE-SOMM**	**QEL(*j*)**
(a)	26,08%	66,18%	0,39	37,09
(b)	49,30%	65,09%	0,31	37,10
(c)	48,23%	54,45%	0,35	37,12
(d)	22,28%	63,98%	0,21	37,10
(e)	34,81%	67,34%	0,14	37,60
(f)	46,90%	67,92%	0,59	37,00
(g)	26,18%	65,90%	0,12	37,03
Média Global	36,26%	64,41	0,30	37,15

Analisando a Tabela 7 juntamente com as imagens reconstruídas da Figura 63 nota-se que as árvores que traduzem melhor o conceito de similaridade apresentam os coeficientes Silhouette maiores. Portanto, pela Tabela 7, as árvores (b), (c) e (f) são as que apresentam maiores coesões em termos de agrupamentos. A Tabela 8 apresenta os resultados das medidas de erro e qualidade para o mapa SOM Reposicionado.

Tabela 8 – Tabela dos índices de qualidade, erro de distorção e quantização para o Mapa SOM Reposicionado

Árvores Cj	**Silhouette S(xj)**	**Spearman ρ(Rmi,Rmj)**	**TE-SOMM**	**QEL(j)**
(a)	31,41%	29,43%	0,24	37,09
(b)	48,45%	32,78%	0,32	37,10
(c)	31,75%	49,14%	0,17	37,12
(d)	33,41%	53,44%	0,23	37,10
Média Global	36,26%	41,20%	0,24	37,20

As árvores geradas pelo SOMM sobre o mapa SOM Reposicionado são mais ramificadas

do que as árvores geradas a partir do mapa SOM Original, como pode ser visto na Figura 64.

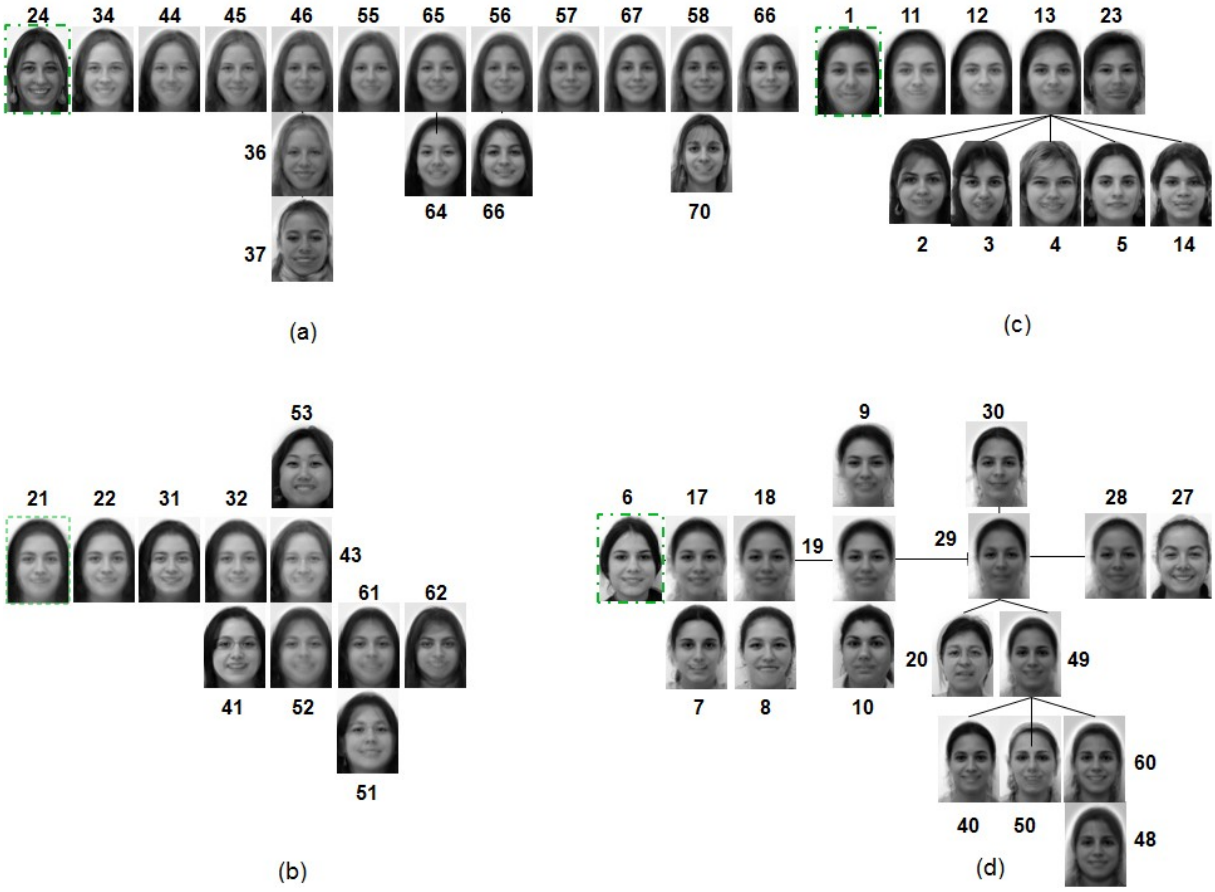
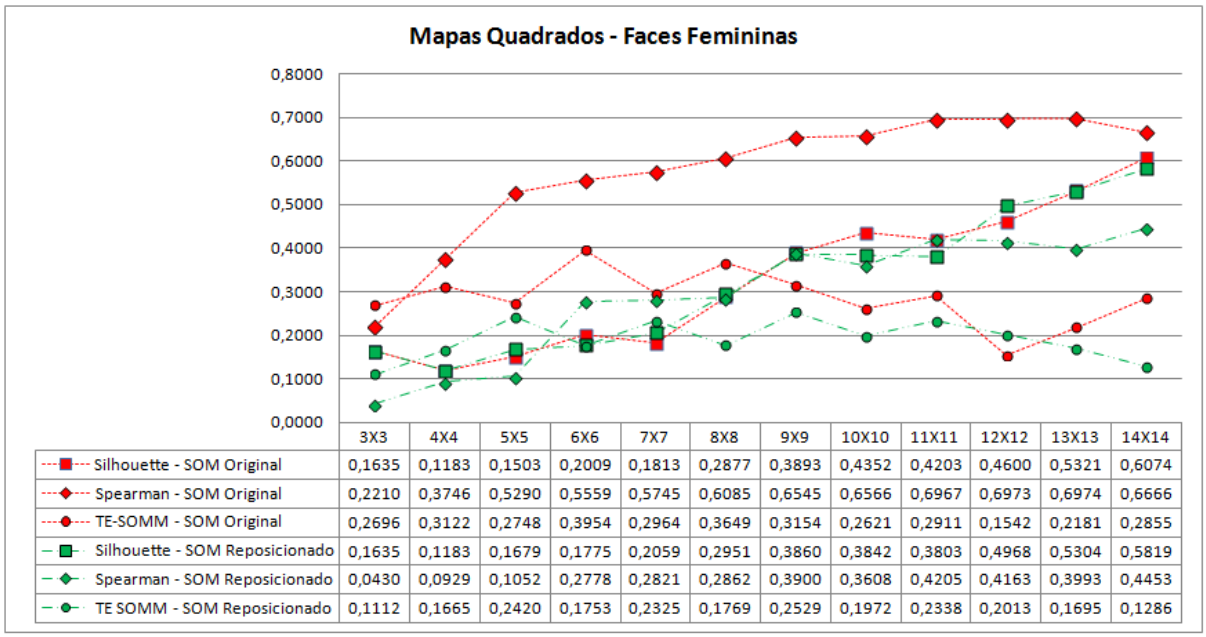


Figura 64- Imagens reconstruídas dos neurônios reposicionados que formam as árvores do SOMM. As imagens pontilhadas em verde representam as raízes das árvores e os números sobre as imagens correspondem aos neurônios das árvores do mapa SOMM.

O próximo experimento testou vários mapas SOM de formato quadrado e com número crescente de neurônios até o limite da quantidade de amostras do conjunto de treinamento (200). O objetivo é avaliar o quanto o número de neurônios no mapa SOM afeta a qualidade das árvores geradas pelo SOMM. O resultado está sumarizado nos gráficos da Figura 65.

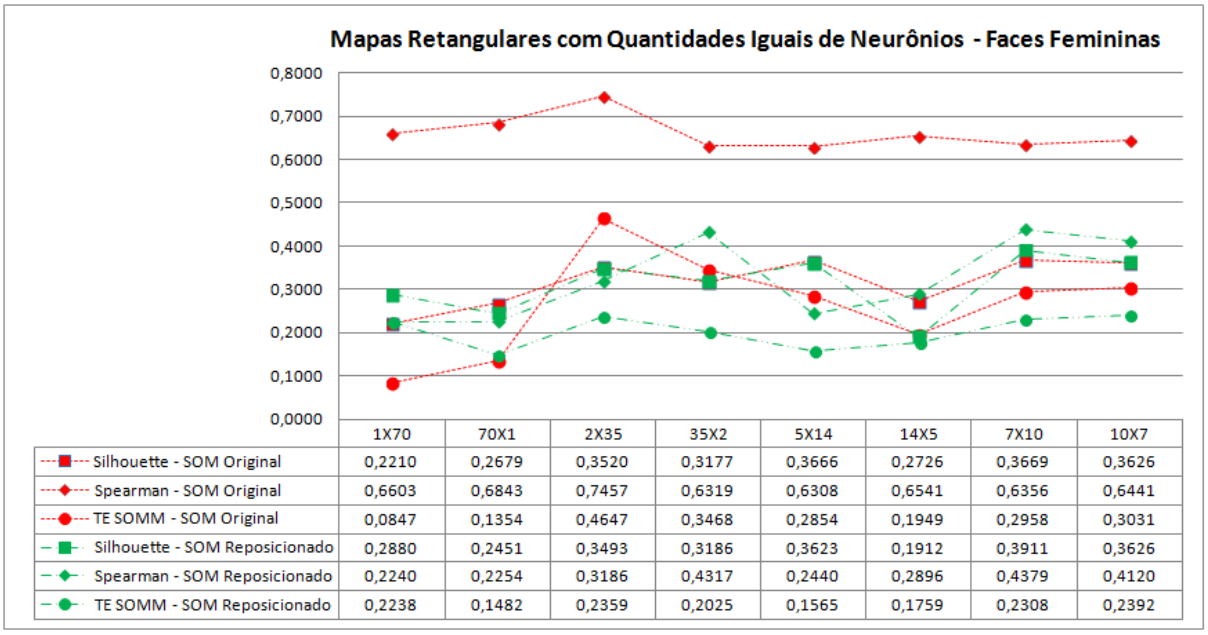
Os mapas quadrados indicam que há um crescimento em todos os índices de correlação. Entretanto, o crescimento acentuado do índice Spearman, para mapas SOM Original, somente ocorre até mapas de tamanho 10×10. Esse tamanho de mapa representa a metade da quantidade das amostras do conjunto de treinamento. Isto pode ser um indicativo de que o aumento no número de neurônios não está melhorando a resolução do mapa. O processo de aprendizado competitivo acaba gerando muitos neurônios de interpolação ou sem votação. O índice Silhoutte tem um comportamento oposto, à medida que a quantidade de neurônios aumenta, aumenta a coesão dos agrupamentos, favorendo esse índice. O erro topológico TE-SOMM

também é favorecido pelo aumento no número de neurônios. Este erro indica se o posicionamento dos neurônios sobre a estrutura dos dados está adequada em termos de preservação da topologia dos dados. Em outras palavras, se as partições V_j do Diagrama de Voronoi representadas pelos neurônios m_j são adjacentes em relação ao neurônios da árvore SOMM.



	3X3	4X4	5X5	6X6	7X7	8X8	9X9	10X10	11X11	12X12	13X13	14X14
Silhouette - SOM Original	0,1635	0,1183	0,1503	0,2009	0,1813	0,2877	0,3893	0,4352	0,4203	0,4600	0,5321	0,6074
Spearman - SOM Original	0,2210	0,3746	0,5290	0,5559	0,5745	0,6085	0,6545	0,6566	0,6967	0,6973	0,6974	0,6666
TE-SOMM - SOM Original	0,2696	0,3122	0,2748	0,3954	0,2964	0,3649	0,3154	0,2621	0,2911	0,1542	0,2181	0,2855
Silhouette - SOM Reposicionado	0,1635	0,1183	0,1679	0,1775	0,2059	0,2951	0,3860	0,3842	0,3803	0,4968	0,5304	0,5819
Spearman - SOM Reposicionado	0,0430	0,0929	0,1052	0,2778	0,2821	0,2862	0,3900	0,3608	0,4205	0,4163	0,3993	0,4453
TE SOMM - SOM Reposicionado	0,1112	0,1665	0,2420	0,1753	0,2325	0,1769	0,2529	0,1972	0,2338	0,2013	0,1695	0,1286

Figura 65 – Gráficos dos índices de correlação Silhouette, Spearman e Erro Topológico TE_SOMM para mapas quadrados. Estão diferenciados por cores os mapas SOM Original e SOM Reposicionado.



	1X70	70X1	2X35	35X2	5X14	14X5	7X10	10X7
Silhouette - SOM Original	0,2210	0,2679	0,3520	0,3177	0,3666	0,2726	0,3669	0,3626
Spearman - SOM Original	0,6603	0,6843	0,7457	0,6319	0,6308	0,6541	0,6356	0,6441
TE SOMM - SOM Original	0,0847	0,1354	0,4647	0,3468	0,2854	0,1949	0,2958	0,3031
Silhouette - SOM Reposicionado	0,2880	0,2451	0,3493	0,3186	0,3623	0,1912	0,3911	0,3626
Spearman - SOM Reposicionado	0,2240	0,2254	0,3186	0,4317	0,2440	0,2896	0,4379	0,4120
TE SOMM - SOM Reposicionado	0,2238	0,1482	0,2359	0,2025	0,1565	0,1759	0,2308	0,2392

Figura 66 - Gráficos dos índices de correlação Silhouette, Spearman e Erro Topológico TE-SOMM para mapas retangulares com 70 neurônios no total. Estão diferenciados por cores os mapas SOM Original e SOM Reposicionado.

Também foram realizados testes com mapas retangulares, mas com uma quantidade fixa de neurônios (70) variando-se apenas o formato. Assim como no caso dos mapas quadrados, deseja-se avaliar o impacto na geração das árvores SOMM conforme o formato do mapa SOM. Foram testadas todas as combinações possíveis de largura e altura do mapa SOM, mantendo-se a quantidade de 70 neurônios no total. O gráfico da Figura 66 ilustra o os resultados para os mapas SOM Original e SOM Reposicionado.

Os mapas retangulares sem alteração na quantidade de neurônios e variando-se apenas a relação largura e altura, auxiliam no entendimento da influência do formato do mapa sobre os resultados do SOMM. Analisando a Figura 66 novamente pode-se observar que o melhor índice de Spearman ocorreu com mapa no formato 2×35, enquanto que nos outros formatos não há grande variação. Nesse formato, o mapa se adequou melhor ao formato de distribuição dos dados, favorecendo uma maior proximidade entre os neurônios.

Os gráficos da Figura 67 e Figura 68 ilustram o resultado do mapeamento SOMM sobreposto sobre as projeções das duas primeiras componentes principais do conjunto de treinamento. Observa-se pela Figura 67 que os neurônios estão mais alinhados com as duas principais direções apontadas pelo PCA e também os neurônios estão mais próximos entre si.

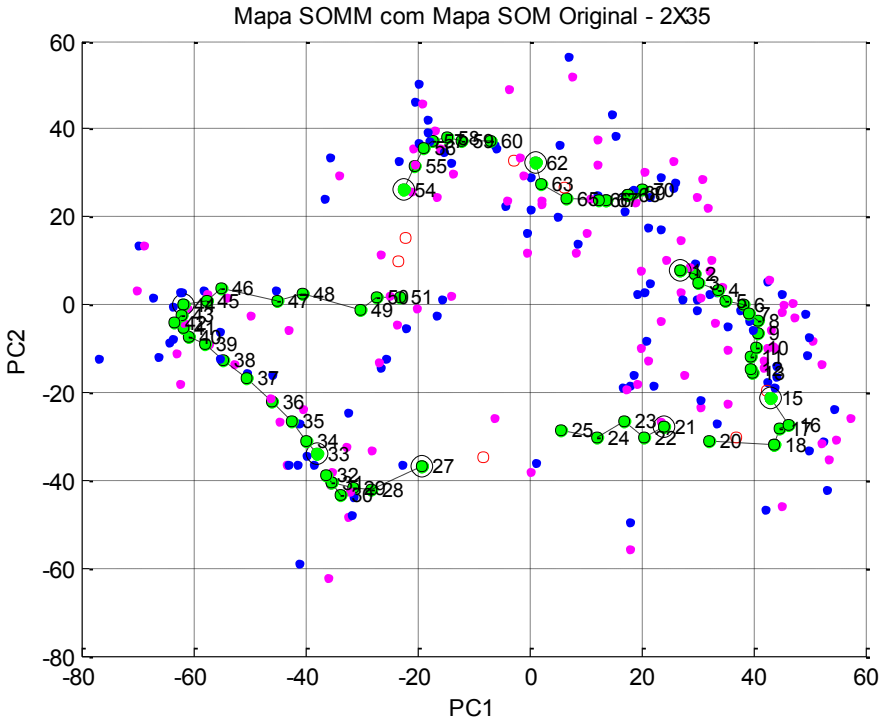


Figura 67 – Projeção das árvores SOMM sobre as duas primeiras componentes principais do conjunto de treinamento com faces femininas. Os neurônios são do mapa SOM Original. As convenções de cores seguem as mesmas definições da Figura 60.

Na Figura 68 temos o mesmo mapeamento, mas com os neurôrnios do mapa SOM Reposicionado. O algoritmo de reposicionamento faz com que os neurônios procurem ocupar mais regiões sobre a estrutura dos dados, espalhando-os para que se aproximem mais do centro de massa das amostras contidas em cada partição do Diagrama de Voronoi.

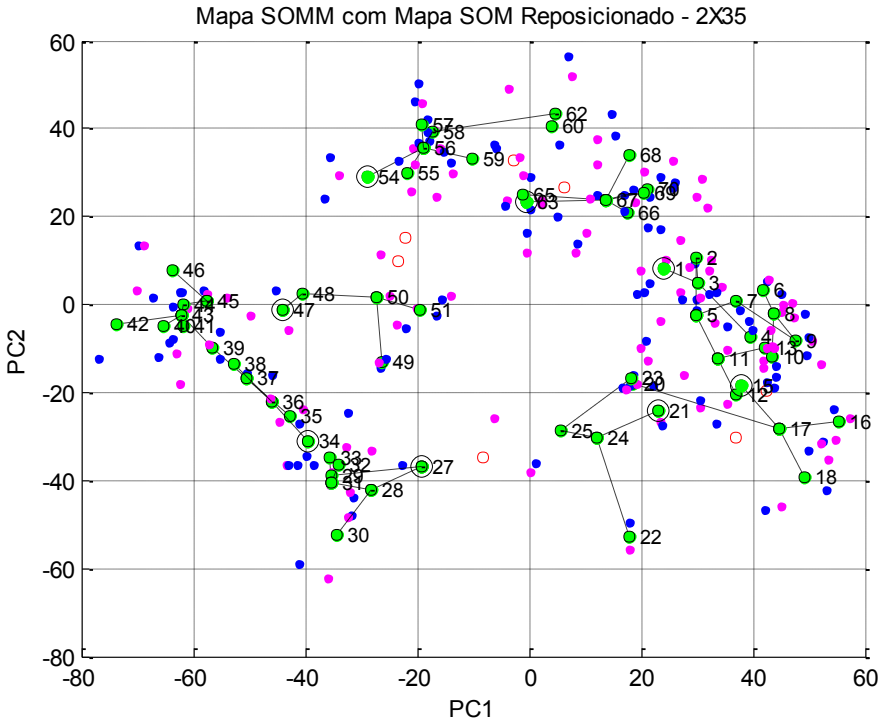


Figura 68 - Projeção das árvores SOMM das duas primeiras componentes principais do conjunto de treinamento com faces femininas. Os neurônios são do mapa SOM Reposicionado. As convenções de cores seguem as mesmas definições da Figura 60.

O que se pode concluir é que o SOMM aplicado sobre os neurônios nas posições originais segue a tendência de ser uma representação suavizada e média da distribuição dos dados de entrada, como se fosse uma Curva Principal, conforme descrito na seção 6.3. Ao contrário, o SOMM com os neurônios reposicionados tende a aproximar mais os neurônios dos agrupamentos locais. Esse reposicionamento produz uma distribuição mais difusa de neurônios do que no mapa SOM Original. Portanto, navegar sobre o SOMM usando os neurônios do mapa SOM Original pode trazer uma ideia de como são as transformações médias que as variáveis ou características relacionadas com cada neurônio sofrem ao longo desse passeio. Em outras palavras, no caso das imagens de faces femininas, quais características faciais distinguem cada região da estrutura de distribuição, por exemplo, indo de faces mais morenas para mais claras.

O experimento com as imagens de faces femininas mostrou que as imagens apresentam grande variabilidade de fundo (*background*) produzida pelas diferenças na distância focal, escala ou até mesmo pelo formato, cor e tamanho do cabelo. Quando se observa atentamente as imagens da Figura 38 da seção 5.5.1, nota-se que a organização das imagens acompanha a variação da iluminação da imagem. E essa variação coincide com algumas características que foram capturadas pelos neurônios. Ainda analisando a Figura 38 da seção 5.5.1, nota-se que as imagens de faces que se encontram na parte superior têm o fundo mais escuro e as imagens que se encontram na parte inferior têm o fundo mais claro. A Figura 69 ilustra uma amostra do banco das imagens de faces e chama-se a atenção do leitor para observar as variações nas imagens citadas acima.

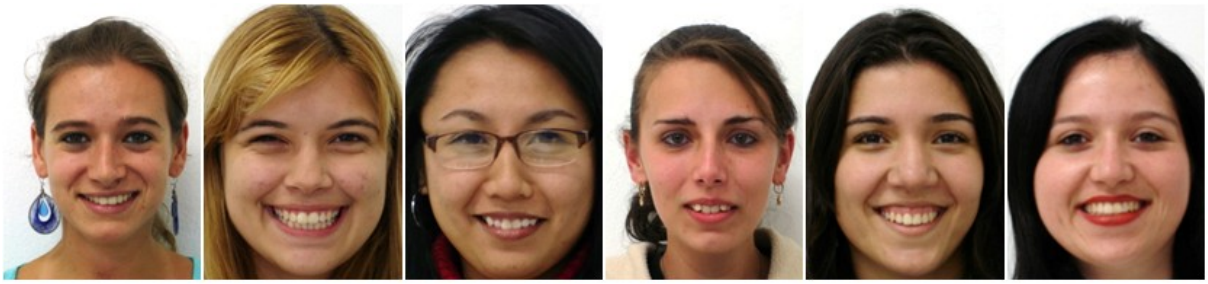


Figura 69 – Amostras do Banco de Faces FEI. Grupos de faces femininas com expressão sorrindo.

O próximo experimento apresentado foi realizado com um conjunto de imagens de faces que foi pré-processado. O conjunto de imagens utilizadas no próximo experimento foi apresentado na seção 5.5.

7.3 Experimentos com o SOMM e Banco de Faces FERET

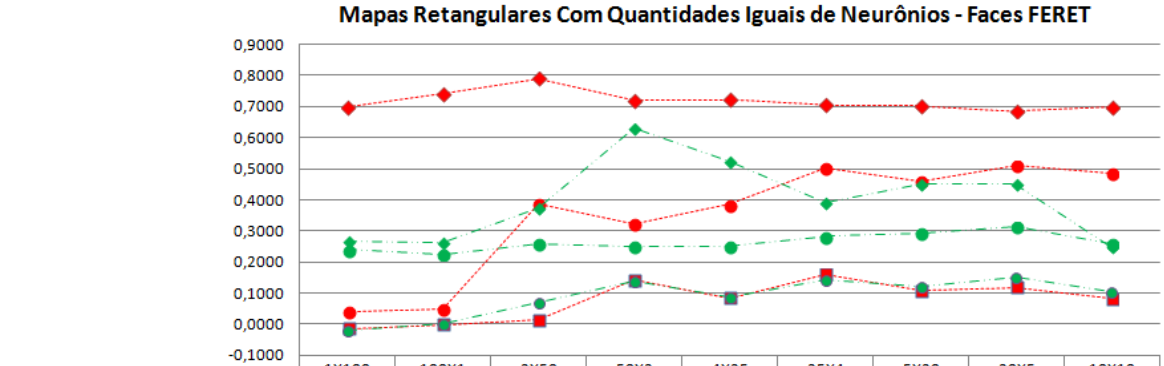
O experimento anterior foi realizado com um banco de faces cujo controle de características das imagens era limitado. O experimento desenvolvido nesta seção, utilizou o Banco de Faces FERET parcial com 400 imagens, cujos detalhes foram descritos na seção 5.5.1. As imagens de faces foram alinhadas e normalizadas, e as regiões externas às faces das pessoas removidas ao máximo. O objetivo deste experimento é semelhante ao realizado com as imagens de faces femininas, mas imagens mais controladas.

O número de neurônios é um parâmetro aberto para o qual não há uma definição clara sobre como determiná-lo em função do tamanho do conjunto de treinamento. Usualmente, é definido por heurísticas, tais como aquela proposta por Vesanto *et al*. (VESANTO, HIMBERG, *et al.*, 2000), como sendo $Tamanho\ do\ Mapa = 5\sqrt{\mathrm{N}} = 5\sqrt{400} = 100$. Entretanto, nunca

ficaram claras as bases teóricas que os levaram a propor aquela equação. Além destes pontos, Vesanto *et al.* não informam como devem ser distribuídos os neurônios no mapa, se o formato deve ser quadrado ou retangular. De qualquer forma, nossos experimentos foram conduzidos usando a heurística acima, a menos que haja indicação contrária. O experimento com o Banco de Faces FERET parcial foi conduzido mantendo-se o número de neurônios constante e alterando-se o formato do mapa.

Os resultados dos índices de correlação para o conjunto de faces FERET para os diferentes formatos de mapa SOM encontram-se na Figura 70. Nota-se que o formato do mapa não afeta muito o índice de correlação Silhouette e Speaman para os mapas com neurônios nas posições originais. Entretanto, nos mapas com neurônios reposicionados o índice de Spearman sofre mais variação com o formato do mapa. Isto é decorrência da distância que aumenta entre os neurônios nas árvores definidas pelo SOMM.

Observa-se também que mapas unifilares mantêm o erro topológico TE_SOMM baixo e o índice ρ de Spearman alto. É um indicador de que o mapa SOMM está representando adequadamente o espaço de dados, apesar do índice Silhouette ser baixo para mapas unifilares. Entretanto, mesmo para outros formatos os índices Silhouette continuam baixo indicando que a existência de agrupamentos não está bem definida.



	1X100	100X1	2X50	50X2	4X25	25X4	5X20	20X5	10X10
Silhouette - SOM Original	-0,0140	-0,0021	0,0129	0,1408	0,0845	0,1603	0,1077	0,119	0,0819
Spearman - SOM Original	0,6990	0,7399	0,7896	0,7192	0,7223	0,7044	0,702	0,6848	0,6982
TE_SOMM - SOM Original	0,0398	0,0482	0,3860	0,3219	0,3848	0,5031	0,4597	0,5096	0,4867
Silhouette - SOM Reposicionado	-0,0193	0,0025	0,0690	0,1379	0,0857	0,1414	0,1229	0,1511	0,1031
Spearman - SOM Reposicionado	0,2676	0,2607	0,3723	0,6287	0,5222	0,3929	0,4514	0,4508	0,2489
SOM_TE - SOM Reposicionado	0,2392	0,2257	0,2592	0,2495	0,2502	0,2826	0,2927	0,3131	0,2595

Figura 70 - Gráficos dos índices de correlação Silhouette, Spearman e Erro Topológico TE-SOMM para mapas retangulares com 100 neurônios no total. Estão diferenciados por cores os mapas SOM Original e SOM Reposicionado.

A Figura 72 ilustra as árvores do SOMM sobrepostas sobre as duas primeiras componentes principais do conjunto de imagens do Banco de Faces FERET parcial.

A Figura 71 ilustra as árvores do SOMM com os neurônios reposicionados. Nota-se que as árvores procuram acompanhar a densidade de dados da estrutura, formando um esqueleto de tais dados, como se fossem Curvas Principais.

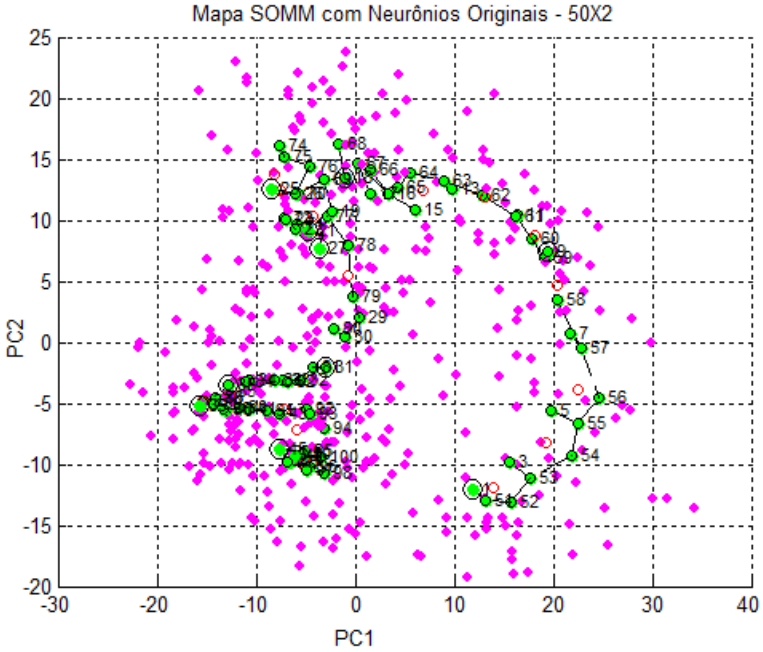


Figura 71 – Projeções, nas duas componentes principais, das árvores SOMM com neurônios nas posições originais. Os pontos roxos representam as imagens do Banco de Faces FERET parcial.

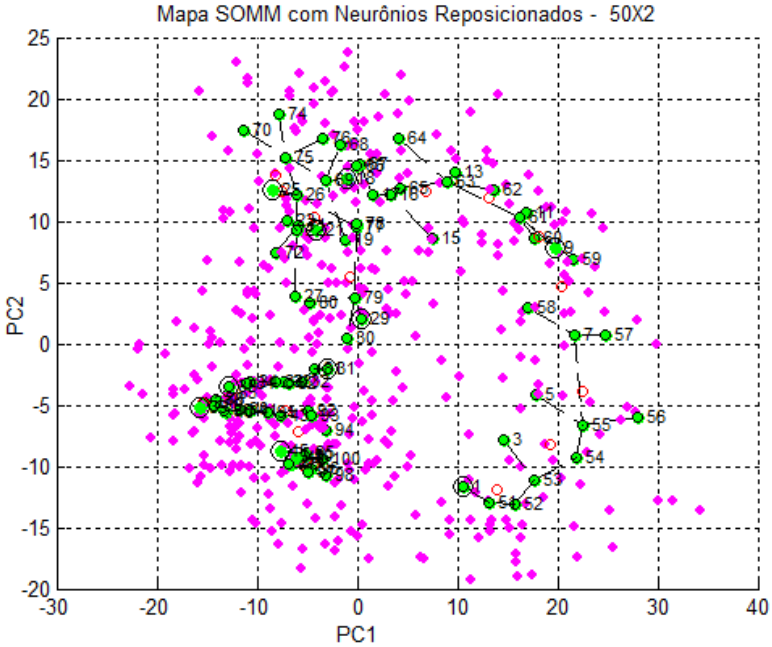


Figura 72 - Projeções, nas duas componentes principais, das árvores SOMM com neurônios reposicionados. Os pontos roxos representam as imagens do Banco de Faces FERET parcial.

Para favorecer uma melhor compreensão sobre os resultados produzidos pelas árvores do SOMM e o quê exatamente a metodologia recorta do *manifold* dos dados de entrada, reconstruiram-se para o espaço visual quatro árvores de um total de onze do SOMM treinado com as imagens de faces FERET.

A Figura 73 ilustra as quatro árvores SOMM que representam quatro regiões distintas do *manifold*. Observa-se que a árvore (a) sugere faces masculinas negras com expressão neutra (face 1) até expressão sorrindo (face 58). A árvore (b) sugere faces masculinas caucasianas e todas com expressões sorridentes. Em (c) tem-se faces sorridentes e com traços mais suaves, sugerindo serem faces femininas e finalmente em (d) tem-se as faces masculinas caucasianas com expressão neutra.

Um aspecto importante nessas imagens é que nenhuma delas representa exatamente uma pessoa. Elas são apenas representações médias obtidas a partir do conjunto de treinamento. Os números acima de cada imagem representam os respectivos neurônios do mapa SOM.

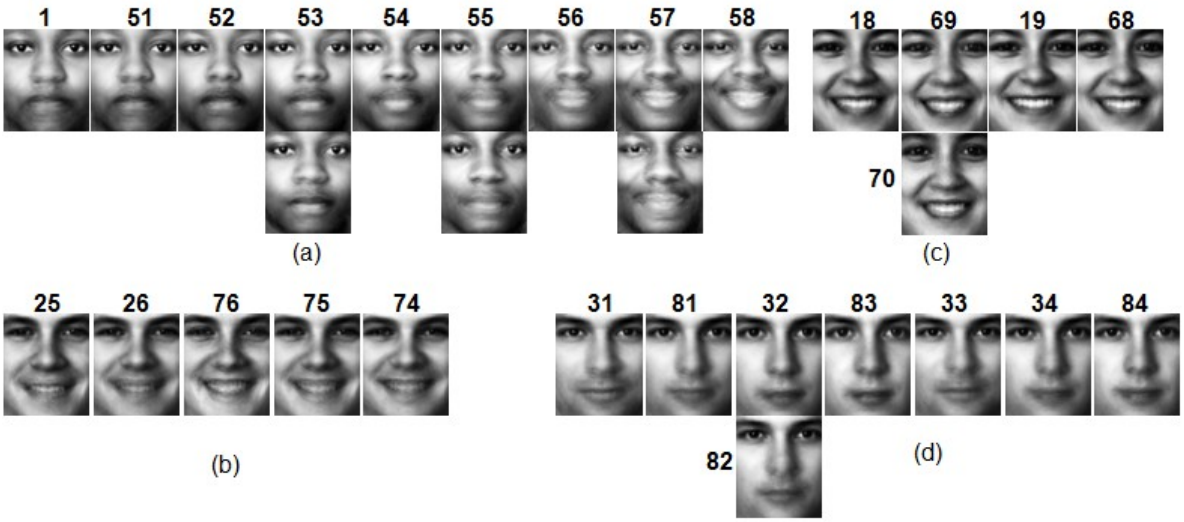


Figura 73 – Reconstrução visual de quatro árvores SOMM geradas a partir de um mapa SOM Original modelando a base de dados do Banco de Faces FERET parcial.

7.4 Experimentos com o SOMM e Banco de Faces ISOMAP

Durante o denvolvimento da pesquisa consolidada nesta tese foram realizados também experimentos com o banco de imagens de faces artificiais disponibilizados pelos autores que desenvolveram o ISOMAP (TENENBAUM, SILVA e LANGFORD, 2000). Desse experimento foi produzido um artigo e publicado no ICANN-2012 (*International Conference*

on Artificial Neural Networks) (KITANI, DEL MORAL HERNANDEZ e SILVA, 2012a) conforme listado no Apêndice A. Os resultados do referido artigo serão discutidos nesta seção.

Apesar do SOMM não estar diretamente ligado ao conceito de projeção para redução de dimensionalidade, entende-se que, como o SOMM segue a orientação da disposição dos dados e como os dados podem carregar uma dimensionalidade intrínseca, poder-se-ia dizer que as árvores do SOMM indicam as direções das dimensões intrínsecas contidas nos dados de alta dimensão. Para tornar claro esse aspecto do SOMM treinou-se um mapa SOM retangular de dimensão 13×10 com 698 imagens de faces de uma estátua com diferentes ângulos de tomada da foto e diferentes ângulos de incidência de luz. Isto produziu um rico conjunto de treinamento para avaliar metodologias de redução de dimensionalidade. Foram geradas nove árvores SOMM, cuja representação parcial de uma das árvores pode ser visualizada na Figura 74. A imagen que esta abaixo de cada círculo numerado representa a imagem mais próxima do número de neurônios indicados no círculo. Essa sequência de círculos representa um trecho da árvore SOMM gerada a partir do banco de faces ISOMAP.

Esta forma de representação pode reforçar o conceito de que é possível navegar pelo *manifold* utilizando os neurônios do SOM como suporte de um caminho ordenado. Esse caminho pode indicar como determinadas características se alteram ao longo da estrutura de distribuição dos dados. Eventuais saltos podem estar relacionados com o baixo número de neurônios comparados com o número de dados.

Figura 74 – Os círculos numerados indicam os neurônios da árvore SOMM gerada de um mapa SOM Original treinado com as imagens do Banco ISOMAP.

Os resultados das árvores SOMM geradas foram projetados nas duas primeiras componentes principais e sobre esse gráfico foram colocadas manualmente algumas imagens do espaco de entrada, mais próximos dos neurônios que formam as árvores SOMM. Pode-se observar pela Figura 75 que as árvores do SOMM estão seguindo uma orientação que extrai os modos de variação das faces conforme a variação do ângulo e a incidência da iluminação. Isto é possível porque essa orientação é intrínseca da base de dados e os neurônios aprenderam essa organização durante a fase de treinamento do mapa SOM. Portanto, caminhar sobre as árvores do SOMM é caminhar ordenadamente sobre a estrutura dos dados de entrada de maneira auto-

organizada. A Tabela 9 mostra os resultados das avaliações do índices de qualidade e distorção do SOMM.

Tabela 9 - Resultado de qualidade do mapeamento com as imagens ISOMAP.

Métrica	**Valor**
Erro de Quantização Global - QE	7,46
Erro Topológico - TE	0,02
Índice Sillhoute Global – S(x)	0,26
Índice Spearman - ρ(m)	0,59
TE-SOMM	0,47

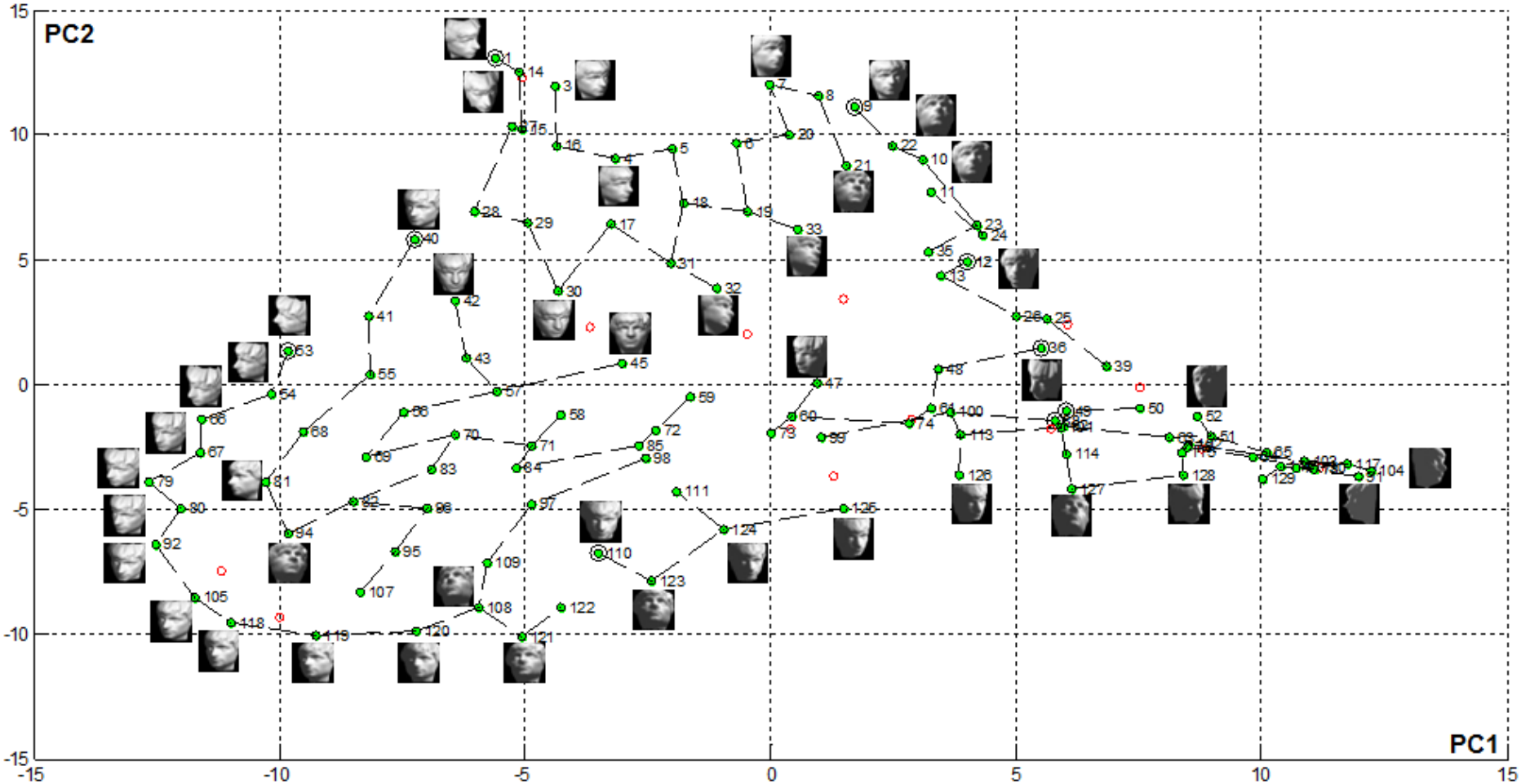


Figura 75 – Projeção das árvores SOMM nas duas primeiras componentes principais. As imagens de faces acrescentadas à figura são as mais próximas dos neurônios correspondentes e foram dispostas manualmente.

7.5 Experimento com o SOMM e Imagens de Sequências de Vídeo

Finalmente, para avaliar a capacidade do SOMM em capturar variações intrínsecas das imagens, tais como: poses e expressões diferentes; realizou-se um teste com imagens reais de uma pessoa conversando. As imagens são quadros de um vídeo de aproximadamente 200 segundos de gravação que produziram 5000 imagens com resolução de 720×576 *pixels* (COOTES, Acessado em 03/01/2013). Desse total, foram utilizadas apenas as primeiras 1000 imagens para realizar o teste. Adicionalmente, elas foram reduzidas para a resolução de 64×64 e convertidas para monocromático em tons de cinza, para diminuir o esforço computacional e o consumo de memória. A Figura 76 fornece uma pequena amostra das imagens originais.

Figura 76 – Amostras dos quadros de vídeo de uma pessoa conversando em frente a uma câmera [5] [Extraída de (COOTES, Acessado em 03/01/2013).

Foi treinado um mapa SOM de dimensão 20×20 com vizinhança hexagonal e no modo *Batch*. Após o treinamento, aplicou-se a metodologia SOMM para gerar as árvores que criam os recortes sobre o *manifold* das imagens de entrada. Em termos de medidas de qualidade, obteveram-se os seguintes valores apresentados na Tabela 10.

Tabela 10 – Resultado de qualidade do mapeamento com as imagens de quadros de vídeo.

Métrica	Valor
Erro de Quantização Global - QE	0,58
Erro Topológico - TE	0,02
Índice Sillhoute Global – S(x)	0,44
Índice Spearman - ρ(m)	0,45
TE-SOMM	0,58

[5] Disponível em http://www.isbe.man.ac.uk/~bim/data/talking_face/talking_face.html, acessada em 12/01/2013.

O mapa SOMM com as árvores e algumas imagens reconstruídas pela técnica de visualização reversa apresentada na seção 5.5 estão ilustradas na Figura 77. Observa-se que as imagens dispostas na figura mostram como os neurônios se distribuem no espaço de entrada. Como os neurônios são representações de grupos de quadros do vídeo, não carregam a temporaridade do evento gravado.

7.6 Considerações Finais

Os resultados apresentados neste capítulo indicam que o SOMM pode realizar um recorte ordenado e organizado do *manifold* de entrada permitindo-se uma compreensão de como os dados estão distribuídos no espaço de entrada. A capacidade do SOMM de encontrar agrupamentos é muito sensível ao resultado final do mapeamento SOM. Caso o posicionamento dos neurônios seja muito difuso, o SOMM poderá gerar várias árvores e pode dar ao usuário uma ideia equivocada do número correto de agrupamentos. Essa dependência está relacionada com a maneira mecânica que foi utilizada para se realizar os cortes ou podas das árvores. Podem-se realizar refinamentos analíticos adicionais para adequar o algoritmo à aplicação.

Portanto, o SOMM tem como maior característica a exploração visual dos dados em alta dimensão. Adicionalmente ao SOMM, as técnicas de Reposicionamento de Neurônios e a Visualização Reversa podem melhorar e facilitar a exploração do espaço de dados.

Neste capítulo foram discutidas as bases para o uso de uma nova metodologia para mapear dados com alta dimensionalidade a partir do resultado dos mapas SOM. Entretanto, a metodologia SOMM não está restrita apenas ao uso com mapas SOM. Na realidade, qualquer técnica auto-organizada ou mesmo a aplicação do SOMM diretamente no espaço de dados.

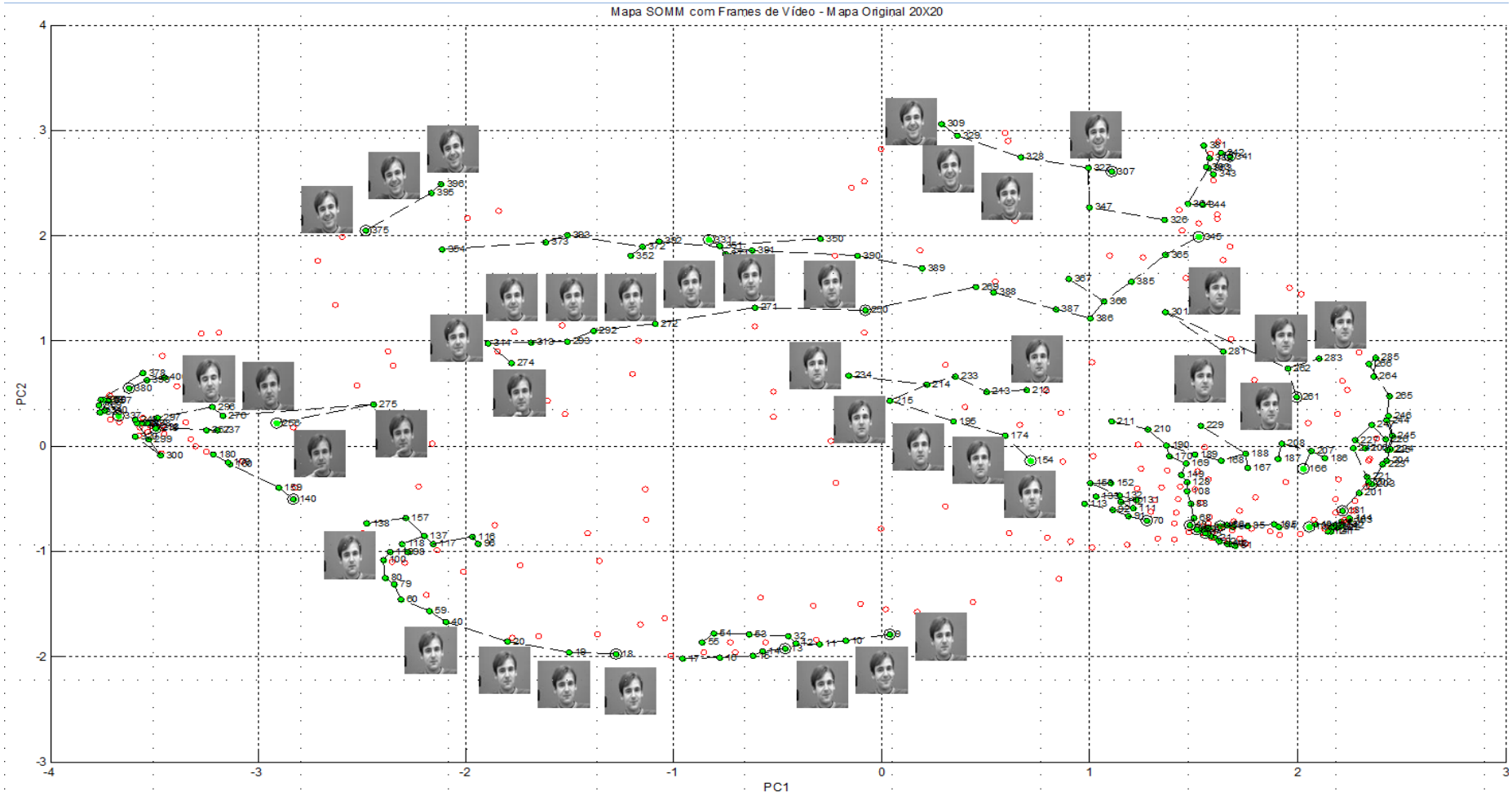


Figura 77 – Mapas SOMM e árvores geradas com o conjunto de treinamento de *frames* de vídeo. As imagens de faces reconstruídas foram colocadas manualmente próximas ao neurônio que as representam. Os quadros de vídeo foram disponibilizados por Tim Cootes em: http://personalpages.manchester.ac.uk/staff/timothy.f.cootes/tfc_software.html. Acessado em 03/01/2013.

8. Discussões Finais e Conclusão

"I predict in the not too distant future, people in academic life are going to define themselves not by one specialty area, but by two sub-specialties that belong to two rather different main specialties".

Donald E. Knuth

Este trabalho propôs e apresentou os resultados do desenvolvimento de uma nova metodologia para visualização de dados de alta dimensão usando os vetores de pesos dos neurônios dos Mapas Auto-Organizáveis de Kohonen. Discutiram-se também vários temas bastante relevantes e atuais tais como: efeitos da alta dimensionalidade dos dados de entrada, generalização de dados, método de visualização e análise dos mapas SOM e extração de informação baseada no conceito de *manifold* dos dados.

Tradicionalmente, os mapas SOM são apresentados como grades bidimensionais que se acomodam conforme a estrutura de dados que se deseja representar. Usualmente, como ilustração, as descrições do SOM apresentam o mapa se adaptando em formas tridimensionais com conjuntos de dados artificiais. Entretanto, os dados reais não são de baixa dimensão e muito menos tão bem caracterizados como os dados artificiais. Não há certeza também de que dados reais de alta dimensão tenham formatos côncavos ou convexos, como nos vários exemplos utilizados nos *benchmarks* de algoritmos. Dessa forma, este trabalho visou compreender como a alta dimensionalidade influencia o SOM, tanto na preservação quanto na representação da estrutura de distribuição dos dados de entrada usando dados reais.

Entre as contribuições desta tese pode-se destacar:

a) Revisão bibliográfica atualizada com resgate dos conceitos biológicos que inspiraram as redes neurais artificiais e especificamente o SOM e adição de novos temas baseados nas descobertas biológicas recentes. As revisões foram cobertas não somente no Capítulo dois, mas também nas seções 4.3 e 6.2;
b) Utilização do PCA para redução de dimensionalidade em aplicações relacionadas com imagens e mapas SOM. A parte teórica do PCA encontra-se na seção 3.3.1 e a descrição metodológica da visualização dos neurônios do mapa SOM quando se trabalha com imagens no espaço PCA foi coberta na seção 5.5;

c) Proposta de um novo método para reduzir o erro de quantização final dos mapas SOM foi apresentada na seção 5.3 e experimentado com dados reais, tais como imagens, e os resultados foram discutidos no capítulo 7;
d) Um novo conceito de visualização dos resultados dos mapas SOM e o desenvolvimento do algoritmo que cria um novo mapa para navegação sobre os neurônios do mapa treinado. Este novo mapa, denominado SOMM, cria novas relações de vizinhança sobre os neurônios e permite a exploração não supervisionada dos espaços de dados nos quais os neurônios estão imersos. Toda metodologia está descrita no capítulo 6 e os experimentos no capítulo 7, bem como uma discussão sobre a importância da interpretação da informação contida nos agrupamentos representados pelos neurônios;
e) Proposta de uma nova maneira de se aplicar os índices Silhouete e Spearman, de correlação estatística, para avaliação dos mapas SOMM, cuja descrição encontra-se na seção 6.6;
f) Proposta de uma nova métrica denominada TE-SOMM que foi derivada do tradicional TE para mapas SOM. Essa medida é útil para avaliar violações de topologia geradas pelas árvores SOMM. A metodologia de cálculo do TE-SOMM encontra-se na seção 6.6.

8.1 Áreas de Aplicação das Contribuições desta Tese

Entre as áreas de aplicação deste trabalho estão principalmente aquelas relacionadas com mineração visual de dados. A metodologia SOMM permite uma exploração organizada da estrutura de distribuição dos dados. O SOMM faz isto criando um tipo de "esqueleto" básico dos dados de entrada de forma auto-organizada, permitindo que o usuário possa compreender quais características são alteradas à medida que se caminha pelas árvores.

Categorização não supervisionada dos dados é a primeira área de aplicação do SOMM, dentro da mineração de dados, visto que ele aprende a partir da própria auto-organização dos dados. Desta forma, se tomarmos o exemplo do experimento com as imagens ISOMAP e os *Frames* de Vídeo, discutidos no capítulo sete, pode-se após o treinamento rotular o resultado e o sistema estará apto a realizar uma classificação, baseada nesses novos rótulos. Todavia, ressalta-se que a categorização foi realizada de maneira não supervisionada.

Uma possível aplicação das possibilidades discutidas acima seria o desenvolvimento de avatares automáticos que modelassem as próprias expressões faciais a partir de *manifolds* aprendidos previamente e a posterior extrapolação para o espaço visual. Pode-se ainda realizar a operação inversa, na qual um sistema automático capture as expressões faciais e determine

em qual região do *manifold* a imagem foi projetada. Então, poder-se-ia determinar qual categoria de expressão facial estaria sendo capturada.

8.2 Propostas Futuras de Pesquisa

Há várias propostas de ampliação do trabalho apresentado nesta tese. Pode-se destacar:

a) Modificar o algoritmo SOMM para criar um parâmetro de tolerância de poda e ligação das árvores e, assim favorecer a formação de agrupamentos. O critério atual não tem ajuste de tolerância numérica e trabalha no limite da precisão do Matlab®;
b) Testar e avaliar as árvores geradas pelo SOMM para bases de dados não visuais e de alta dimensão, tais como a base IRIS, WINE disponibilizados pela UCI[6], e que são bastante usadas para testar classificadores;
c) Estender o estudo com outras redes auto-organizadas para avaliar a influência da ausência de uma relação de vizinhança inicial fixa, como é o caso do *Neural Gas*, por exemplo;
d) No algoritmo de reposicionamento dos neurônios, testar a atualização dos neurônios, não pela média, mas pela mediana dos elementos contidos nas partições do Diagrama de Voronoi, de maneira a não ter influência de eventuais pontos que podem ser *outliers*.

[6] Disponível em Bache, K. & Lichman, M. (2013). UCI Machine Learning Repository [http://archive.ics.uci.edu/ml]. Irvine, CA: University of California, School of Information and Computer Science.

9. Referências Bibliográficas

AGGARWAL, C. C.; HINNEBURG, A.; KEIN, D. A. On the surprising behavior of distance metrics in high dimensional space. **Lecture Notes in Computer Science**, v. 1973, 2001. p. 420-434.

AMARAL, V.; THOMAZ, C. E. **Extração e comparação de características locais e globais para reconhecimento automático de imagens de faces**. Anais do VIII Workshop de Visão Computacional WVC 2012. Goiania: GO. 2012. p. 6.

AMARAL, W. D.; THOMAZ, C. E. **Normalização espacial de imagens frontais de face**. Centro Universitário da FEI - Departamento de Engenharia Elétrica. SBC, p. p. 13. 2008. (Relatório Técnico - Disponível em http://www.fei.edu.br/~cet - Acessado em 10/11/2012).

ASHBY, F. G.; WALDRON, E. M. The neuropsychological bases of category learning. **Current directions in psychological science - American Psychological Society**, v. 9, n. 1, February 2000.

ASIMOV, D. The grand tour: A tool for viewing multidimensional data. **SIAM - Journal of Scientific and Statistical Computing**, 6, January 1985. pp 128-143.

BAKKER, A. et al. Pattern separation in the human hippocampal CA3 and dentate gyrus. **Science Magazine**, New York, v. 319, n. 5870, p. 1640-1642, 2008.

BAUER, H. U.; HERRMANN, M.; VILLMANN, T. Neural maps and topographic vector quantization. **Neural Networks**, v. 12, p. 659-676, June 1999.

BAUER, H. U.; PAWELZIK, K. R. Quantifying the neighborhood preservation of Self-Organizing Feature Maps. **IEEE Transactions on Neural Networks**, v. 3, n. 4, p. 570-579, 1992.

BEAR, M. F.; CONNORS, B. W.; PARADISO, M. A. **Neuroscience:** Exploring the Brain. 3. ed. Baltimore: Lippincott Williams & Wilkins, 2001.

BEYER, K. et al. When is nearest neighbor meaninful? **Lecture Notes in Computer Science**, v. 1540, 1999. p. 217-235.

BEZDEK, J. C.; PAL, N. R. An index of topological preservation for feature extraction. **Pattern Recognition**, 1995. p. 381-391.

BOSCARIOLI, C. **Análise de agrupamentos baseada na topologia dos dados e em mapas auto-organizáveis**. Tese de Doutorado - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. São Paulo, p. 138. 2008.

BRANSON, K. Global geometric frameworks for nonlinear dimensionality reduction - Presentation 2002. **UC San Diego - Vision Computer**, 2001. Disponivel em: <http://vision.ucsd.edu/~kbranson/research/research.html>. Acesso em: 21 jul. 2011.

CAMPOY, P. **Dimensionality reduction by self organizing maps that preserve distance in output space**. Proc. International Joint Conference on Neural Networks. Atlanta: IEEE. 2009. p. 432-438.

CARREIRA-PERPIÑÁN, M. Á. **Continuous latent variable models for dimensionality reduction and sequential data reconstruction**. Ph.D. Thesis - University of Sheffield. UK, p. 333. 2001.

CAYTON, L. **Algorithms for manifold learning**. University of California. US, p. 1-17. 2005. (Technical Report - CS2008-0923).

CHITTKA, L.; BROCKMANN, A. Perception space - The final frontier. **PLOS Biology**, v. 3, n. 4, p. 564-568, April 2005.

CISI, R. R. L.; KOHN, A. F. **From neuronal ionic channels to muscle control:** A Web-based simulator and its application to teaching. The International Conference of Systems Biology and Bioengineering, WCE. London: S.I. 2008. p. 1662-1665.

COOTES, T. **Talking face video**. Disponível em http://personalpages.manchester.ac.uk/staff/timothy.f.cootes/tfc_software.html. [S.l.]. Acessado em 03/01/2013.

COOTES, T. F. Active Appearance Model. **PAMI - Pattern Analysis and Machine Intelligence**, v. 23, n. 6, 2001. 681-685.

CORMEN, T. H. et al. **Algoritmos - Teoria e Prática**. 5a. ed. Rio de Janeiro: Campus, 2002.

COSTA, J. A. F. **Classificação automática e análise de dados por redes neurais auto-organizáveis**. Tese de Doutorado - Universidade de Campinas. Campinas, p. 359. 1999.

COSTA, J. A.; GONÇALVES, M. L.; ANDRADE NETTO, M. L. Visualização e análise de agrupamentos usando redes auto organizáveis, segmentação de imagens e índice de validação. **Journal of the Brazilian Neural Network Society**, v. 9, p. 91-103, 2011.

COULTRIP, R.; GRANGER, R.; LYNCH, G. A cortical model of Winner-Take-All competition via lateral inhibition. **Neural Networks**, 5, 1992. 47-54.

COX, T.; COX, M. A. A. **Multidimensional Scaling**. 2. ed. Boca Raton: Chapman & Hall CRC, 2001.

DAI, K.; ZHANG, L.; LI, G. **Video mining:** Concepts, approaches and applications. 12th Internacional Multi-Media Modelling Conference Procedings. Beijing, China: IEEE. 2006. p. 477-480.

DAVIES, D. L.; BOULDIN, D. W. A cluster separation measure. **IEEE Transaction on Pattern Analysis and Machine Intelligence - PAMI**, v. 1, p. 224-227, 1979.

DICARLO, J.; ZOCCOLAN, D.; RUST, N. C. How does the brain solve visual object recognition. **Neuron**, 73, 9 February 2012. 415-434.

DUDA, R. O.; HART, P. E.; STORK, D. G. **Pattern Classification**. 2. ed. Danvers: John Wiley & Sons, 2001.

EBERHART, R. C.; SHI, Y. **Computational Intelligence:** Concepts to implementations. Burlington: Morgan Kaufmann, 2007.

FARAH, M. Why does the somatosensory homunculus have hands next to face and feet next to genitals? A hypothesis. **Neural Computation**, Massachusetts, v. 10, n. 15, p. 1983-1985, 1998.

FODOR, I. **A survey of dimension reduction techniques**. Center of Applied Scientific Computing. Livermore, p. 1-18. 2002. (Relatório Técnico).

FORT, J. C. **Stochastic on-line algorithm versus batch algorithm for quantization and self organizing maps**. Proceedings of the 2001 IEEE Signal Processing Society Workshop. Vandoevre-les-Nancy: IEEE. 2001. p. 43-52.

FORT, J. C.; LETREMY, P.; COTTRELL, M. **Advantages and drawbacks of the batch Kohonen algorithm**. Proceedings of ESANN 2002. Brussels: Springer. 2002. p. 223-230.

FORT, J. C.; LETREMY, P.; COTTRELL, M. **Advantages and drawbacks of the batch Kohonen algorithm**. 10th European Symp. on Artificial Neural Networks. Bruges - Belgiun: Springer. 2005. p. 223-230.

FUKUNAGA, K. **Introduction to Statistical Pattern Recognition**. 2. ed. San Diego: Academic Press, 1990.

GENESIS, 2011. Disponivel em: <http://genesis-sim.org/>. Acesso em: 15 ago. 2011.

GERSTENER, W.; KISTLER, W. **Spiking neuron models**. 3. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2002.

GIRALDI, G. A. et al. **Discriminant Component Analysis and Self-Organized Manifold Mapping for Exploring and Undertanding Image Face Spaces**. Advanced Tutorial on SIBIGRAPI-2011. Maceió: IEEE. 2011. p. 1-12.

GOODHILL, G. J.; SEJNOWSKI, T. J. **Quantifying neigbourhood preservation in topographic mappings**. Proceedings of the 3rd Joint Symposium on Neural Computation. San Diego: IEEE Transactions on Neural Networks. 1992. p. 61-82.

GUERRIERI, F. et al. Perceptual and neural olfactory similarity in honeybees. **PLOS Biology**, v. 3, n. 4, p. 1-15, April 2005.

HAFTING, T. et al. Microstructure of a spatial map in the entorhinal cortex. **Nature**, v. 436, August 2005. p. 801-806.

HALKIDI, M.; VAZIRGIANNIS, M. **Clustering validity assesment using multi representatives**. Procedings of Hellenic Conference on Artificial Intelligence SETN 02. Thessaloniki: . 2002.

HAMMER, B.; GISBRECHT, A.; SCHULZ, A. **How to visualize large data set?** Advances in Self-Organizing Maps 9th International Workshop, WSOM 2012. Santiago, Chile: Springer. 2012. p. 1-12.

HASTIE, T. **Principal curves and surfaces**. Stanford University. Stanford - California, p. 104. 1984.

HASTIE, T.; STUETZLE, J. Principal curves. **Journal of the American Statistical Association**, 86, n. 406, 1989. 502-516.

HAYKIN, S. **Redes neurais artificiais. Principios e prática**. 2. ed. Porto Alegre: Bookman, 2001.

HEBB, D. **The organization of behavior:** A neuropsychologica theory. 2002. ed. Mahwah: Taylor & Francis, 1949.

HINTON, G.; ROWEIS, S. T. Stochastic Neighbor Embedding. **Advances in Neural Information Processing Systems**, Cambridge, 15, 2002. 833-840.

HOUAISS, A. **Dicionário Houaiss da Lingua Portuguesa**. Sao Paulo: Objetiva, 2001.

HUBEL, D. H.; WIESEL, T. N. Receptive fields, binocular interaction and functional architecture in the cat's visual cortex. **Journal of Physiology**, 160, 1962. 106-154.

IJCNN. **2011 International Joint Conference on Neural Networks**, 2011. Disponivel em: <http://www.ijcnn2011.org/newannouncement.php>. Acesso em: 15 ago. 2011.

JAIN, A. K.; DUIN, R. P. W.; MAO, J. Statistical pattern recognition. **IEEE Transaction on Pattern Analysis and Machine Intelligence**, 22, January 2000. 4-37.

JENSEN, O.; LISMAN, J. E. Theta/Gamma networks with slow NMDA channel learn sequence and encode episodic memory: Role of NMDA channels in recall. **Learning & Memory**, 3, 1996. 264-278.

JOLLIFFE, I. T. **Principal components analysis**. 2nd. ed. New York: Springer, 2002.

KANDEL, E. R.; SCHWARTZ, J. H.; JESSELL, T. M. **Principles of Neural Science**. 4. ed. New York: McGraw-Hill Medical, 2000.

KASKI, S. **Data exploration using Self Organizing Maps**. Ph.D Thesis - Helsinki - University of Technology - Finland. Helsinki, p. 57. 1997.

KASKI, S.; KOHONEN, T. Winner-Take-All networks for physiological models of competitive learning. **Neural Networks**, 7, n. 6/7, 1994. p. 973-984.

KASKI, S.; PELTONEN, J. Dimensionality reduction for data visualization. **IEEE Signal Processing Magazine**, p. 100-104, March 2011.

KASKI, S.; SINKKONEN, J.; PELTONEN, J. **Data visualization and analysis with Self Organizing Maps in learning metrics**. 3rd International Conference DaWak 2001 - Data Warehousing and Knowledge Discovery. Munich: Springer. 2001. p. 162-173.

KASS, J. H.; MERZENICH, M. M.; KILLACKEY, H. P. The reorganization of somatosensory cortex following peripheral nerve damage in adult and developing mammals. **Annual Reviews of Neuroscience**, 6, 1983. p. 325-356.

KAUFMAN, L.; ROUSSEEUW, P. **Finding groups in data**. Hoboken: John Wiley & Sons, 1990.

KEIM, D. A. et al. **Challenges in visual data analysis**. Proceedings of 10th International Conference on Information Visualization. London: IEEE Computing & Processing. 2006. p. 9-16.

KITANI, E. C. **Análise de discriminantes lineares para modelagem e reconstrução de imagens de faces**. Dissertação de Mestrado - Centro Universitário da FEI. São Bernardo do Campo, p. 175. 2007.

KITANI, E. C. et al. **Visual interpretation of self organizing maps**. 2010-11th Brazilian Symposium on Neural Networks (SBRN). São Bernardo do Campo: IEEE. 2010. p. 37-42.

KITANI, E. C. et al. Exploring and understanding the high dimensional and sparse image face space: A self organized manifold mapping. In: CORCORAM, P. **New approaches to characterization and recognition of faces**. Rijeka: Intech Open Access Publisher, 2011. p. 225-238.

KITANI, E. C.; DEL MORAL HERNANDEZ, E.; SILVA, L. A. **SOMM - Self Organized Manifold Mapping**. 22nd ICANN 2012 - Internation Conference on Artificial Neural Network - Proceeding Part II. Lausanne: Springer Verlag. 2012a. p. 355-362.

KITANI, E. C.; DEL MORAL HERNANDEZ, E.; SILVA, L. A. **Learning Embedded Data Structure with Self Organizing Maps**. WSOM 2012. Santiago: Springer. 2012b. p. 225-234.

KIVILUOTO, K. **Topology preservation in self organizing maps**. Proc of International Conference on Neural Networks (ICNN). : IEEE. 1996. p. 294-299.

KOHONEN, T. Correlation matrix memory. **IEEE Transaction on Computers**, vol. 21, 353-359 April 1972.

KOHONEN, T. Self-organized formation of topologically correct feature maps. **Biological Cybernetics**, 43, 1982. 59-69.

KOHONEN, T. **Self-organization and associative memory**. New York: Springer, 1989.

KOHONEN, T. The self-organizing map. **Proceedings of the IEEE**, v. 78, n. 9, p. 1464-1480, 1990.

KOHONEN, T. **Things you haven´t heard about the Self Organizing Maps**. IEEE International Conference on Neural Networks. San Francisco - CA: IEEE. 1993. p. 1147-1156.

KOHONEN, T. **Self-Organizing maps**. 3. ed. Nova York: Springer, 2001.

KOHONEN, T. et al. **SOM_PACK: The Self-Organizing Map program package**. CIS - University of Helsinki. Helsinki, p. 27. 1996.

KRAAIJVELD, M.; MAO, J.; JAIN, A. K. **A non linear projection method based on Kohonen´s topology preserving maps**. Proceedings in Recognition Methodology and Systems 11th IAPR. [S.l.]: IEEE. May 1992. p. 548-559.

KUMAR, S. **Neural networks. A classroom approach**. 9. ed. Nova Deli: Tata McGraw Hill, 2004.

LAAKSONEN, J. T.; KOSKELA, J. M.; OJA, E. **PicSOM - A framework for content-based image database retrivel using self organizing maps**. 11th Scandinavian Conference on Image Analysis (SCIA99). Kamgerlussuaq: [s.n.]. 1999. p. 151-156.

LEE, J. A.; VERLEYSEN, M. **Nonlinear dimensionality reduction**. New York: Springer, 2010.

LEE, J. M. **Introduction to topological manifolds**. : Springer, 2000.

LINDE, Y.; BUZO, A.; GRAY, R. An algorithm for Vector Quantization design. **IEEE Transaction on Communications**, January 1980. 84-95.

LUTTRELL, S. P. **Self-organization:** a derivation of a class of training algorithms. IJCNN 89 - International Joint Conference on Neural Networks. Washington DC: IEEE. 1989. p. 18-22.

LUTTRELL, S. P. A Bayesian analysis of self-organizing maps. **Neural computation**, May 1994. 767-794.

MAATEN, L. V. D.; HINTON, G. Visualizing Data using t-SNE. **Journal of Machine Learning Research 9**, nov. 2008. 2579-2605.

MAATEN, L. V. D.; POSTMA, E.; HERIK, J. V. D. **Dimensionality reduction: A comparative review**. Tilburg University. Tilburg - Netherlands, p. 1-33. 2009.

MARTINETZ, T.; SCHULTEN, K. A Neural Gas network learns topologies. **Artificial Neural Networks**, 1991. 397-402.

MARTINEZ, W. L.; MARTINEZ, A. R. **Exploratory data analysis with Matlab**. Boca Raton: Chapman & Hall - CRC, 2005.

MASSE, N. Y.; TURNER, G. C.; JEFFERIS, G. Olfatory information processing in Drosophyla. **Current Biology**, v. 19, p. 700-713, August 2009.

MAYER, R.; RAUBER, A. **Visualising clusters in self organizing maps with minimum spanning threes**. ICANN'10 Proceedings of the 20th International Conference on Artificial Neural Networks. Berlin: Springer. 2010. p. 426-431.

MCCULLOCH, W. S.; PITTS, W. A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity. **Bulletin of Mathematical Biophysics**, US, vol. 5, 1943. p. 115-133.

MEDEIROS, C. J. F.; COSTA, J. A. Uma comparação empírica de métodos de redução de dimensionalidade aplicados a visualização de dados. **Revista Brasileira de Redes Neurais**, v. 6, n. 2, p. 81-110, 2008.

MERABET, L.; PASCUAL-LEONE, A. Neural reorganization following sensory loss: the opportunity of change. **Nature**, 11, January 2010.

MINGOTI, S. A. **Análise multivariada de dados através de métodos de estatísticas multivariada**. Belo Horizonte: UFMG, 2007.

MOEHRMANN, J. et al. **A discussion on visual interactive data exploration using Self-Organizing Maps**. In Workshop of Self Organizing Maps WSOM'11. Espoo: Springer. 2011. p. 178-187.

MURASE, H.; NAYAR, S. Visual learning and recognition of 3-D objects from appearance. **International Jornal of Computer Vision**, 14, 1995. 5-24.

OJA, E.; KASKI, S. **Kohonen Maps**. Amsterdam: Elsevier, 1999.

OLIVEIRA JR., L. L.; THOMAZ, C. E. **Captura e alinhamento de imagens: Um banco de faces brasileiro**. Centro Unversitário da FEI. São Bernardo do Campo, p. 10. 2006. (Relatório de Iniciação Científica - http://www.fei.edu/cet - Acessado em 5/12/2012).

PAULOVICH, F. V.; OLIVEIRA, M. C.; MINGHIM, R. **The projection explorer - A flexible tool for projection based multidimensional visualization**. Proceedings of SIBGRAPI 2007. Belo Horizonte: IEEE - Computer Graphics and Image Processing. 2007. p. 27-36.

PELTONEN, J. **Visualization by linear projection as information retrieval**. Advances in Self-Organizing Maps. Berlin: Springer. 2009. p. 237-245.

PERES, S. M.; NETTO, M. L. A. **The Meaningful Fractal Fuzzy Dimension Applied to the Design of Self Organizing Maps**. 2008 International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN 2008). [S.l.]: IEEE. 2008. p. 1285-1291.

PHILLIPS, P. J. et al. The FERET evaluation methodology for face recognition algorithms. **IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence - PAMI**, October 2000. p. 1090-1104.

PÖLZBAUER, G.; RAUBER, A.; DITTENBACH, M. **Graph projection techniques for self-organizing maps**. ESANN'2005 European Symposium on Artificial Neural Networks. Bruges: Springer. 2005. p. 533-538.

PRESS, W. H. et al. **Numerical Recipes in C - The art of scientific computing**. 2. ed. Cambridge: Press Syndicate of the University of Cambridge, 1992.

PURVES, D. et al. **Neurociências**. 2. ed. Porto Alegre: Artmed, 2005.

RAUDYS, S. J.; JAIN, A. K. Small sample size effects in statistical pattern recognition: Recomendation for practiioners. **IEEE Transaction on Pattern Analysis and Machine Intelligence**, 13, March 1991. p. 252-264.

RITTER, H. Self-Organizing Feature Maps. In: ARBIB, M. A. **The handbook of brain theory and neural networks**. 2. ed. Madison: MIT Press, 2003. p. 1005-1010.

RITTER, H.; MARTINETZ, T.; SCHULTEN, K. **Neural Computation and Self Organizing Maps - An Introduction**. New York: Addison Wesley, 1992.

RITTER, H.; SCHULTEN, K. On the stationary state of Kohonen's Self-Organizing Sensory Mapping. **Biological Cybernetics**, 54, 1986. 99-106.

ROLLS, E. T. An attractor network in the hippocampus: Theory and neurophysiology. **Learning & Memory**, v. vol. 14, n. 11, p. 714-731, 2007.

ROLLS, E. T. **Memory Attention, and Decision Making**. Oxford: Oxford University Press, 2008.

ROLLS, E. T.; TREVES, A. **Neural Networks and Brain Function**. 3a. ed. Oxford: Oxford University Press, 1998.

ROUSSEEUW, P. Silhouettes: a graphical aid to the interpretation and validation of cluster analysis. **Journal of Computational and Applied Mathematics**, North Holland, 1987. 53-65.

ROWEIS, S. T.; SAUL, L. K. Nonlinear dimensionality reduction by locally linear embedding. **Science Magazine**, December 2000. 2323-2326.

SAMMON JR., J. W. A nonlinear mapping for data structure analysis. **IEEE Transaction on computer**, May 1969. 401-409.

SAMMON, J. W. A nonlinear mapping for data structure analysis. **IEEE Transaction on computers**, C18, n. 5, May 1969. 401-409.

SASSI, R. J. **Uma arquitetura hibrida para descoberta de conhecimento em bases de dados: Teoria dos Rough Sets e Redes Neurais Artificiais Mapa Auto-Organizáveis**. Tese de Doutorado - Escola Politécnica, Universidade de São Paulo. São Paulo. 2006.

SERENO, A. B.; LEHKY, S. R. Population coding of visual space: comparison of spatial representations in dorsal and ventral pathways. **Frontiers in Computational Neuroscience**, v. vol. 4, p. 1-15, February 2011.

SEUNG, H. S.; LEE, D. The manifold ways of perception. **Science Magazine**, US, v. vol. 290, p. 2268-2269, December 2000.

SHANMUGAN, K. S.; BREIPOHL, A. M. **Randon signals Detection estiimation and data analysis**. : John Wiley & Sons, 1988.

SILVA, L. A. D. **Categorização de imagens médicas baseada em Transformada Wavelet e Mapas Auto-Organizáveis**. Tese de Doutorado - Universidade de São Paulo. São Paulo, p. 127. 2009.

SQUIRE, L. R.; KNOWLTON, B. Learning about categories in the absence of memory. **Proc National Academy of Science**, v. 92, p. p. 12470-12474, December 1995.

SQUIRE, L. R.; ZOLA, S. M. Structure and function of declarative and nondeclarative memory systems. **Proc. National Academy of Science**, v. 93, p. 13515-13522, November 1996.

STEIN, B. E.; STANFORD, T. R. Multisensory integration: current issue from the perspective of the single neuron. **Nature Neuroscience**, 9, April 2008.

SUDHEIMER, K. et al. The Human Brain Atlas. **Michigan State University Brain Biodiversity Bank**. Disponivel em: <www.msu.edu/~brains/brains/human/index.html>. Acesso em: 16 jul. 2011.

SUMATHI, S.; SIVANANDAM, S. N. **Introduction to data mining and its application**. Berlin: Springer, v. 29, 2006.

TENENBAUM, J. **Mapping a manifold of perceptual observation**. NIPS97 - Advances in Neural Information Processing Systems. Cambridge: MIT Press. 1998. p. 682-688.

TENENBAUM, J. B.; SILVA, V. D.; LANGFORD, J. C. A global geometric framework for nonlinear dimensionality reduction. **Science Magazine**, 290, December 2000. p. 2319-2323.

THOMAZ, C. E.; GIRALDI, G. A. A new ranking method for principal components analysis and its application to face image analysis. **Image and Vision Computing**, 28, 2010. 902-913.

TORGERSON, W. S. Multidimensional scaling. Theory and method. **Psychomerika**, v. 4, December 1952. 19.

ULTSCH, A.; SIEMON, H. P. Kohonen's Self Organizing Feature Maps for Exploratory Data Analysis. **In Proceedings of International Neural Network Conference**, 1990. p. 305-308.

VENNA, J.; KASKI, S. **Nonlinear dimensionality reduction as information retrieval**. Proceedings of International Conference on Artificial Intelligence and Statistics AISTAST 2007. San Juan: JMLR. 2007. p. p. 21-24.

VERLEYSEN, M.; FRANÇOIS, D.; WERTZ, V. **On the effects of dimensionality on data analysis with neural networks**. Proceeding of International Work-Conference on Artificial Neural and Natural Networks. Menorca: Springer. 2003. p. 105-112.

VESANTO, J. **Data exploration process based on the Self-Organizing Map**. Helsinki University of Technology. Helsinki, p. 96. 2002.

VESANTO, J. et al. **SOM Toolbox for Matlab 5**. Helsinki University of Technology. Helsinki, p. 1-60. 2000. (Report A57 - http://www.cis.hut.fi/projects/somtoolbox/ - Acessado em 07/05/2008).

VESANTO, J.; SULKAWA, M.; HOLLMÉN, J. On the decomposition of the Self-Organizing Map distortion measure. **In Proceedings of the Workshop on Self-Organizing Maps (WSOM'03)**, Hibikino, 2003. p. 11-16.

VILLMANN, T.; DER, R.; MARTINETZ, T. **A new quantitative measure of topology preservation in Kohonen´s feature maps**. IEEE Conference on World Congress on Computational Intelligence - Neural Networks. Orlando: IEEE. 1994. p. 645-648.

WEBB, A. **Statistical Pattern Recognition**. New Jersey: John Willey & Sons, 2005.

WEINBERGER, K. Q.; SAUL, L. K. **Unsupervised learning of image manifolds by semidefinite programming**. Proceedings of the 2004 IEEE CIS Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. : IEEE. 2004.

WILLSHAW, D. J.; VON DER MALSBURG, C. How patterned neural network connection can be set up by self organization. **Proc. Royal Society of London**, London GB, 1976. p. 431-445.

WILSON, R. C.; HANCOCK, E. R.; LUO, B. Pattern vectors from algebraic graph theory. **IEEE Transaction on Pattern Analysis and Machine Intelligence - PAMI**, v. 27, n. 7, July 2005. p. 1112-1124.

YIN, H. Nonlinear dimensionality reduction and data visualization: A review. **International Journal of Automation and Computing**, 4, n. 3, July 2007. p. 294-303.

ZAHN, C. Graph theoretical methods for detecting and describing Gestalt clusters. **IEEE Transaction on Computers**, January 1971. p. 68-86.

ZEITHAMOVA, D.; MADDOX, W. T. Dual-task interference in perceptual category learning. **Memory & Cognition**, v. 34, n. 2, p. 387-398, 2006.

ZHANG, J.; LI, S. Z.; WANG, J. Manifold learning and applications in recognition. **Intelligent multimedia processing with soft computing**, 168, 2005. p. 281-300.

ZHU, X. et al. Medical video mining for efficient database indexing, managment and access. **Proceedings of 19th International Conference on Data Engineering (ICDE'03)**, 2003. p. 569-580.

ZUCHINI, M. H. **Aplicações de mapas auto-organizados em mineração de dados e recuperação de informação**. Dissertação (Mestrado) Universidade de Campinas. Campinas, p. 227. 2003.

Apêndice A – Lista de Publicações Associadas

Abaixo se encontra a lista de publicações, entre artigos em congressos e um capítulo de livro, produzidas durante o doutorado e que fornecem uma ideia temática de como ocorreu a gênese e o desenvolvimento do projeto de pesquisa apresentado no corpo deste trabalho.

KITANI, E. C., DEL-MORAL-HERNANDEZ, E. SILVA, L. A., Learning Embedded Structure in Self-Organizing Maps, Proceedings of 9th Workshop of Self-Organizing Maps WSOM 2012b, Santiago, Chile.

KITANI, E. C., DEL-MORAL-HERNANDEZ, E. SILVA, L. A., Self-organizing manifold mapping. Proceedings of 22th International Conference on Artificial Neural Networks ICANN 2012, Lausanne, LNCS v. 7553, p, 355-362, 2012a.

GIRALDI, G. A., KITANI, E. C., DEL-MORAL-HERNANDEZ, E., THOMAZ, C. E., Discriminant Component Analysis and Self-Organized Manifold Mapping for Exploring and Understanding Image Face Spaces. Proceedings of the 24th SIBGRAPI (Conference on Graphics, Patterns and Images), 2011, Maceio. Tutorials of SIBGRAPI 2011.

KITANI, E. C., DEL-MORAL-HERNANDEZ, E. GIRALDI, G. A., THOMAZ, C. E., Exploring and understanding the high dimensional and sparse image face space: A self organized manifold mapping. In Peter Corcoram ed., New approaches to characterization and recognition of faces. Intech Open Access Publisher, pp. 18-33, 2011.

KITANI, E. C., DEL-MORAL HERNANDEZ, E., THOMAZ, C. E., SILVA, L. A., Visual interpretation of self organizing maps. Proceedings of 2010-11th Brazilian Symposium on Neural Networks (SBRN). São Bernardo do Campo; IEEE. 2010. pp. 37-42.

Apêndice B – Manifold Learning

Ao longo de toda tese foi utilizada muito a palavra "*manifold*" para designar o espaço onde a estrutura de dados se encontra. Discutiram-se também métodos de exploração, mapeamento e visualização de dados de alta dimensão que estariam contidos num *manifold* de dimensão menor. Para tornar essa linguagem clara e manter o correto entendimento sobre o uso da palavra *manifold* no contexto desta tese, expande-se neste apêndice o conceito de *manifolds* ou variedades geométricas em português.

Suponha a existência de uma curva suave definida por uma função $f(x)$ tal que essa função seja continuamente diferenciável. Define-se que essa curva pertence a um *manifold* de uma dimensão, porque o número de variáveis necessárias para definir qualquer ponto sobre essa curva pode ser definida pelo valor de x (LEE, 2000). A Figura 78 ilustra três exemplos de *manifolds* unidimensionais, onde a figura (a) poderia ser definida por uma função $f(x)$, a figura (b) por $\cos^2(x) + sen^2(x) = 1$ e a figura (c) por $f(t) = f(x, y, z) \mid x = \cos(t), y = sen(t)\ e\ z = t$.

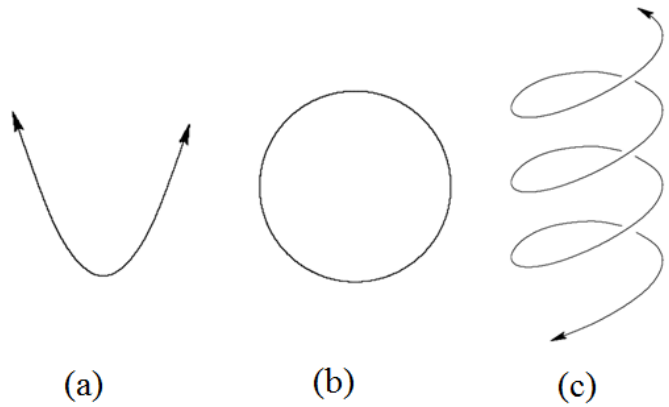


Figura 78 – Representação de três *manifolds* unidimensionais [Extraída de (LEE, 2000) página 2].

Apesar de, na Figura 78, um plano bidimensional para as formas (a) e (b) e um tridimensional para a forma (c) serem necessários para construí-las nota-se que, parametricamente basta apenas uma variável para definir qualquer ponto sobre suas curvas. Em outras palavras, o espaço de representação visual do objeto é maior do que o espaço de descrição do objeto.

Espaços de *manifolds* maiores são possíveis, por exemplo, no caso da Figura 79 observa-se um *manifold* bidimensional representado por uma figura que pode ser parametrizada

como $f(v,u) = f(x,y,z) \mid x = (R + r\cos(v))\cos(u), y = (R + r\cos(v))\text{sen}(u)\ e\ z = rsen(v)$, onde R é o raio do toróide e r é o raio do tubo. Neste caso, apesar da representação visual estar em três dimensões são necessários dois parâmetros para definir o objeto.

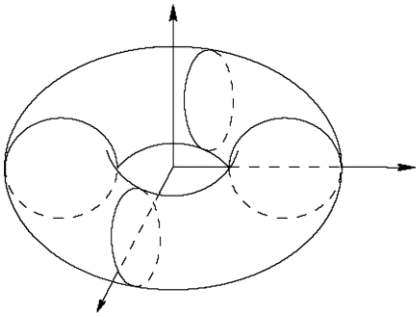


Figura 79 – Representação de um *manifold* bidimensional [Extraída de (LEE, 2000), página 3].

Entretanto, quando se trabalha com dados coletados experimentalmente, somente se dispões de suas coordenadas no espaço de dados e não a função paramétrica que define sua forma, como nos exemplos anteriores. Suponha um conjunto de três pontos p_i definidos por coordenadas nos eixos ortonormais $\mathbf{x}_1$ e $\mathbf{x}_2$, com ilustrado na Figura 80. A curva suave que passa pelos pontos $\mathrm{p}_1, \mathrm{p}_2, \mathrm{p}_3$ é apenas uma abstração sobre o possível *manifold* original onde os pontos poderiam cair. Logo, o problema se resume a como recuperar esse *manifold* original a partir das informações das amostras de dados. Portanto, as técnicas de Aprendizado por *Manifold* que foram discutidas nesta tese procuram olhar para as formas de representação mais compacta buscando o *manifold* original a partir dos dados de entrada.

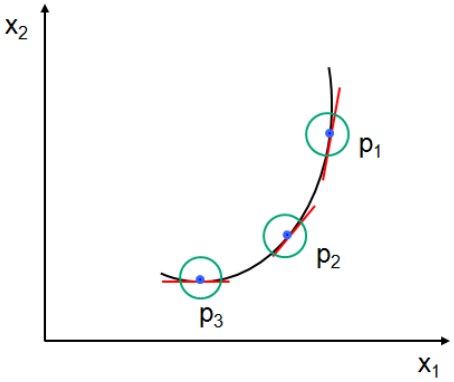


Figura 80 – Ilustração de um conjunto de pontos nos espaço de vetorial de duas dimensões e a possível curva original onde os dados poderiam estar contidos [Adaptada de (FUKUNAGA, 1990), página 281]

Apêndice C – Maldição da Dimensionalidade

A dimensionalidade do espaço de entrada é um aspecto muito relevante e que afeta todas as metodologias multivariadas. Foi discutido na seção 3.3.1 o problema conhecido como SSS (*Small Sample Size problem*) e na seção 4.4 a questão sobre redução de dimensionalidade em mapas SOM. O núcleo dos dois temas é o mesmo, como mitigar a falta de amostras que representem significativamente o espaço de entrada.

A Maldição da Dimensionalidade foi um termo cunhado por Richard Bellman durante os estudos sobre controles adaptativos (HAYKIN, 2001). Bellman postulou que dado um hipercubo de 10 dimensões no qual cada lado $L_i = 1,\ i = 1, 2, \ldots, 10$, se cada lado do cubo for dividido em espaçamentos iguais de um décimo, ter-se-á um total de pontos de 10^{10}. Caso o número de lados do hipercubo seja de 20 lados com os mesmos espaçamentos no plano Cartesiano, obtém-se 10^{20} pontos. O crescimento do número de pontos é exponencial. Para estruturas de dados regulares como o hipercubo, não seria um problema representá-lo com menos pontos, dois em cada dimensão (LEE e VERLEYSEN, 2010). Entretanto, quando se tem uma estrutura de dados multidimensional desconhecida, todos os pontos são importantes para aprender a descrevê-lo. Logo, a Maldição da Dimensionalidade encontra-se na limitação de se obter um número significativo de amostras que preencham o volume da estrutura de dados e que permita uma estimação adequada da superfície. A ausência de amostras em certas regiões fará com que os estimadores preencham os espaços de forma aleatória, degenerando a estrutura de dados original (HAYKIN, 2001).

A Maldição da Dimensionalidade é conhecida há muito tempo, principalmente na área de reconhecimento de padrões e classificadores estatísticos. Raudys e Jain (RAUDYS e JAIN, 1991) apresentaram um trabalho comparativo com vários algoritmos de classificação, informando a influência que a Maldição da Dimensionalidade causaria em cada aplicação. Adicionalmente, fizeram algumas recomendações, e uma delas refere-se ao classificador *k*-NN (*k-Neareast Neighbor*) (DUDA, HART e STORK, 2001), na qual recomendam o uso do Mahalanobis como métrica de distância. Verleysen *et al*. (VERLEYSEN, FRANÇOIS e WERTZ, 2003) destacam três fatos associados aos espaços multidimensionais, como descritos.

Um fenômeno que ocorre em espaços de alta dimensão é a degeneração das hiperesferas. Seja um espaço n-dimensional, na qual o volume da hiperesfera nesse espaço é função do raio r, então se pode definir que:

$$V_{esfera}(r) = \frac{\pi^{n/2} r^n}{\Gamma(1+n/2)}. \quad \text{(B-1)}$$

Seja um hipercubo inscrito na hiperesfera de raio r, o volume do hipercubo em função do raio r pode ser determinado por:

$$V_{cubo}(r) = (2r)^n. \quad \text{(B-2)}$$

Definindo-se a relação R_{ec} como sendo a razão entre o volume da esfera pelo volume do cubo, encontra-se o paradoxo no qual o volume da esfera diminui e a do cubo aumenta na medida em que a dimensionalidade aumenta. Logo, observa-se que:

$$R_{ec} = \lim_{n\to\infty} \frac{V_{esfera(r)}}{V_{cubo}(r)} = 0. \quad \text{(B-3)}$$

Para compreender melhor essa relação em termos práticos, considere um conjunto de pontos H, e defina um ponto $Q \in$ H. Considere $Dmin$ o raio do ponto mais próximo de Q e $Dmax$ como o ponto mais distante de Q, sendo que $D_{mim}, D_{max} \in$ H. Definindo-se um fator de ganho ε tal que qualquer ponto que caia num raio ampliado $(1+\varepsilon)D_{min}$ é considerado vizinho mais próximo do ponto Q. A Figura 81 representa graficamente a situação proposta. Se alguns pontos caírem dentro do raio definido pelo ganho ε, fica difícil definir quem será o ponto mais próximo de Q se o ganho ε for pequeno. Portanto, define-se que um ponto mais próximo de Q é considerado vizinho instável se a distância entre eles for menor que $(1+\varepsilon)Dmin$, dado que $\varepsilon > 0$. Logo, (BEYER, GOLDTEIN, *et al.*, 1999) demonstram que para qualquer $\varepsilon > 0$, quando a dimensionalidade D aumenta, a instabilidade do ponto Q tende a 1. Desta maneira, os autores discutem que as distâncias entre dois pontos num espaço de alta dimensão não tem o mesmo comportamento que em baixa dimensão.

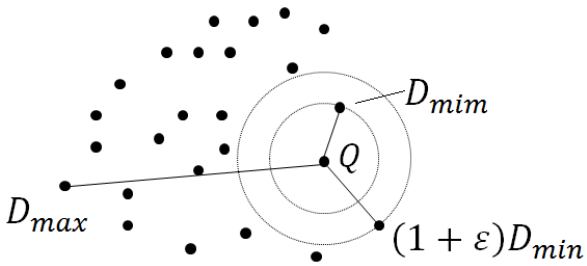


Figura 81 – Dado um ponto Q no espaço de pontos H, define-se D_{max} como a maior distância e D_{mim} como a menor distância em relação ao ponto Q. Os pontos que caem no espaço expandido por um fator de ganho ε, que define uma região de incerteza em relação ao ponto Q, podem não ser corretamente diferenciados como os vizinhos mais próximos [Extraída de (BEYER, GOLDTEIN, *et al.*, 1999)].

As simulações conduzidas pelos autores (BEYER, GOLDTEIN, *et al.*, 1999) indicaram que a diferença entre as distâncias do D_{max} e D_{min} diminuem rapidamente nas primeiras 20 dimensões.

O teorema de Beyer *et al.* postula que se

$$\lim_{n\to\infty} var\left(\frac{\|\mathbf{X}\|_k}{E\|\mathbf{X}\|_k}\right) = 0 \mid \in \mathbb{R}^n, \tag{B-4}$$

onde $\|\mathbf{X}\|_k = \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_i\|, i \neq k \; e \; i = 1, 2, \dots, N$ é a distância Euclidiana entre os vetores $\mathbf{x}_k$ e $\mathbf{x}_i$ então a razão

$$\frac{D_{max}(\mathbf{x}_k) - D_{min}(\mathbf{x}_k)}{D_{min}(\mathbf{x}_k)} \to 0, \tag{B-5}$$

tenderá a zero, sendo $D_{min}(\mathbf{x}_k) = \min\{\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_i\|, i \neq k \; e \; i = 1, 2, \dots, N\}$ e $D_{max}(\mathbf{x}_k) = \max\{\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_i\|, i \neq k \; e \; i = 1, 2, \dots, N\}$

Logo, quando a dimensionalidade do espaço de entrada aumenta, a diferença entre o vetor mais próximo e o mais distante não aumenta. Posteriormente, em (AGGARWAL, HINNEBURG e KEIN, 2001), os autores propuseram uma nova métrica para dados em espaços multidimensionais, dado que a norma L2 (Euclidiana) não considera essa degeneração da distância no espaço multidimensional. Os experimentos realizados por esses autores indicaram uma melhora significativa na taxa de reconhecimento com ensaios em vários bancos de dados públicos, obtendo 99% para o método apresentado contra 89% da métrica Euclidiana. Fundamentalmente, a proposta apresentada nesse estudo é utilizar a mesma equação de Min-

kowski (DUDA, HART e STORK, 2001), mas com coeficiente $0 < f < 1$, agora denominada de métrica fracionaria, assim como definido na equação B-6.

$$d(\mathbf{x},\mathbf{y})_{fracionáriaa} = \sum_{i=1}^{n}[(x_i - y_i)^f]^{1/f}. \tag{B-6}$$

Segundo (AGGARWAL, HINNEBURG e KEIN, 2001), a métrica L1 é mais adequada do que L2 em espaços de alta dimensão. Experimentalmente, (RAUDYS e JAIN, 1991) já indicavam que para o algoritmo *k*-NN a métrica mais adequada seria a do Mahalanobis, possivelmente porque essa métrica considera o volume V da hiperesfera de raio r, conforme a equação B-7, e não somente o espalhamento dos pontos em torno da média.

$$V = V_n r^n, \tag{B-7}$$

no qual V é o volume de uma esfera *n*-dimensional e

$$V_n = \begin{cases} \dfrac{\pi^{n/2}}{(n/2)!} & para\ n\ par \\ \dfrac{2^{(n+1)/2}\pi^{(n-1)/2}}{n!!} & para\ n\ impar \end{cases} \tag{B-8}$$

e

$$n!! = \begin{cases} 1, \text{ se } n = 0 \text{ ou } n = 1 \\ n(n-2)!! \text{ se } n \geq 2 \end{cases} . \tag{B-9}$$

Os efeitos desse problema foram discutidos teoricamente em (VERLEYSEN, FRANÇOIS e WERTZ, 2003), e os autores sugerem que todas as redes neurais que usam métricas de distância são afetadas e, portanto merecem atenção sobre o tema.