

Redes Neurais Artificiais

Estruturas Recorrentes, Redes de Hopfield e Aprendizado Não-Supervisionado

1.	Redes neurais recorrentes	3
1.1	Rede neural de Hopfield	4
1.2	Modelagem de sistemas dinâmicos lineares	13
1.3	Modelagem de sistemas dinâmicos não-lineares	14
1.4	Excursão ilustrativa por algumas arquiteturas recorrentes	15
1.5	Predição de séries temporais: um ou múltiplos passos à frente	19
2.	Organização e ordem	20
3.	Exemplos de auto-organização na natureza	21
4.	Auto-Organização	26
5.	Motivação para treinamento não-supervisionado: clusterização	30
5.1	Modelo simples de classificação para dados rotulados	31
5.2	Modelo composto de classificação para dados rotulados	32
5.3	Modelo composto de classificação para dados não-rotulados	33
5.4	Comparação com o k -means	35
6.	Treinamento não-supervisionado	36
7.	Mapas Auto-Organizáveis de Kohonen	38
7.1	Arranjo unidimensional	39
7.2	Arranjo bidimensional	43

7.3	Fase de competição.....	48
7.4	Fase de aprendizado não-supervisionado	49
7.5	Algoritmo de ajuste dos pesos	51
7.6	Um passo de ajuste num arranjo unidimensional (revisão).....	52
7.7	Ajuste de pesos com restrição de vizinhança	53
7.8	Discriminação dos agrupamentos	56
7.9	Aplicação	57
7.10	Mapa conceitual.....	60
7.11	Ferramentas de visualização e discriminação.....	63
7.12	Ordenamento de pontos em espaços multidimensionais	70
7.13	Roteamento de veículos (múltiplos mapas auto-organizáveis)	72
7.14	Mapas auto-organizáveis construtivos	73
7.15	Exemplo	74
8.	O caso Phineas Gage.....	75
9.	Monitorando a atividade cerebral	76
10.	Referências.....	77

1. Redes neurais recorrentes

- Redes neurais recorrentes são estruturas de processamento capazes de representar uma grande variedade de comportamentos dinâmicos.
- A presença de realimentação de informação possibilita a formação de representações internas e de dispositivos de memória capazes de processar e armazenar informações temporais e sinais sequenciais.
- A presença de conexões recorrentes ou realimentação de informação pode conduzir a comportamentos complexos, mesmo com um número reduzido de parâmetros.
- Como estruturas de processamento de sinais, redes neurais recorrentes se assemelham a filtros não-lineares com resposta ao impulso infinita (NERRAND *et al.*, 1993).

1.1 Rede neural de Hopfield

- Inspirada em conceitos de física estatística e dinâmica não-linear;
- Principais características: unidades computacionais não-lineares;
simetria nas conexões sinápticas;
totalmente realimentada (exceto auto-realimentação).

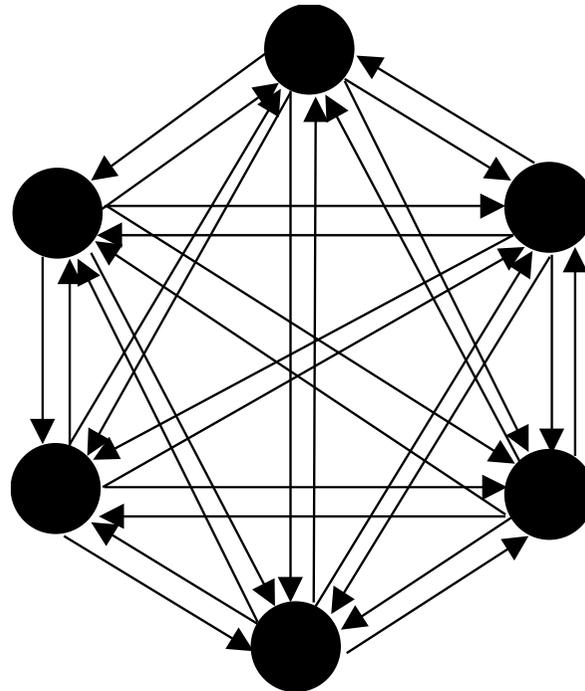


Figura 1 – Rede Neural de Hopfield: ênfase nas conexões.

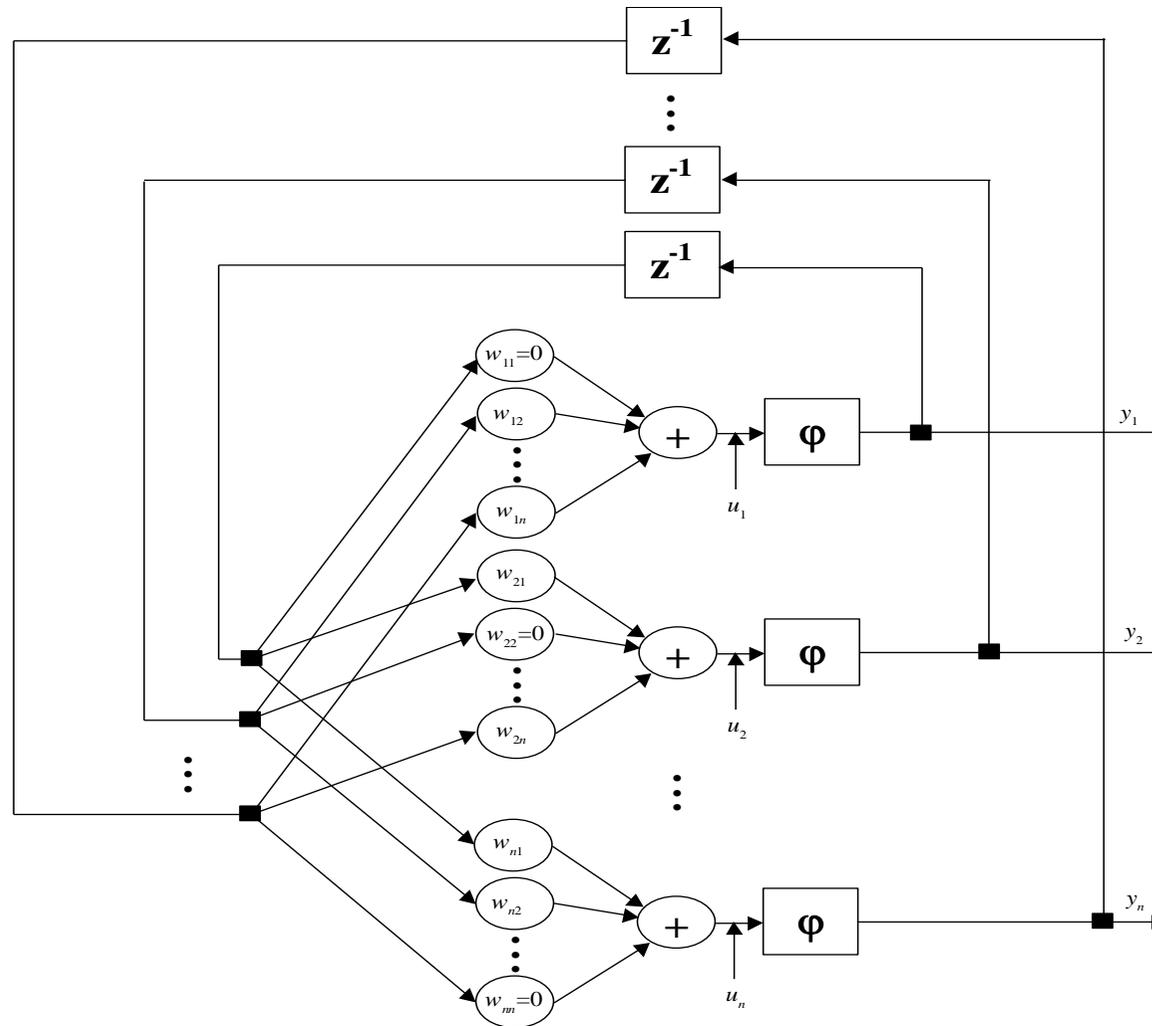


Figura 2 – Rede Neural de Hopfield: ênfase no processamento dinâmico (caso discreto).

- Percebe-se que a rede neural de Hopfield corresponde a um sistema dinâmico não-linear autônomo, pois não tem entrada externa.
- Em regime permanente (depois de vencido o transitório), sistemas dinâmicos não-lineares autônomos, sejam de tempo discreto ou contínuo, podem apresentar **quatro** comportamentos possíveis: pontos de equilíbrio, ciclos limites (soluções periódicas), soluções quase-periódicas e caos. Um mesmo sistema dinâmico pode apresentar múltiplos casos desses quatro comportamentos, dependendo da condição inicial (estado inicial do sistema dinâmico).
- Os pesos da rede neural de Hopfield não são definidos via algoritmos iterativos de treinamento, e sim via técnicas de síntese de dinâmicas não-lineares.
- Dentre todas as possibilidades de dinâmicas, buscam-se dinâmicas que expressem múltiplos pontos de equilíbrio em pontos específicos do espaço de estados.

- Cada padrão a ser armazenado fica localizado em um vale da superfície de energia. Como a dinâmica não-linear da rede é estabelecida de modo a minimizar a energia, os vales representam pontos de equilíbrio estável (cada qual com a sua base de atração).
- Incorporação de um princípio físico fundamental: armazenagem de informação em uma configuração dinamicamente estável (requer um tempo para se acomodar em uma condição de equilíbrio → dinâmica de relaxação → comportamento de estado estacionário).
- Memória ↔ Ponto de equilíbrio estável: embora outros pesquisadores já viessem buscando a implementação de tal conceito, HOPFIELD (1982) foi o primeiro a formulá-lo em termos precisos.

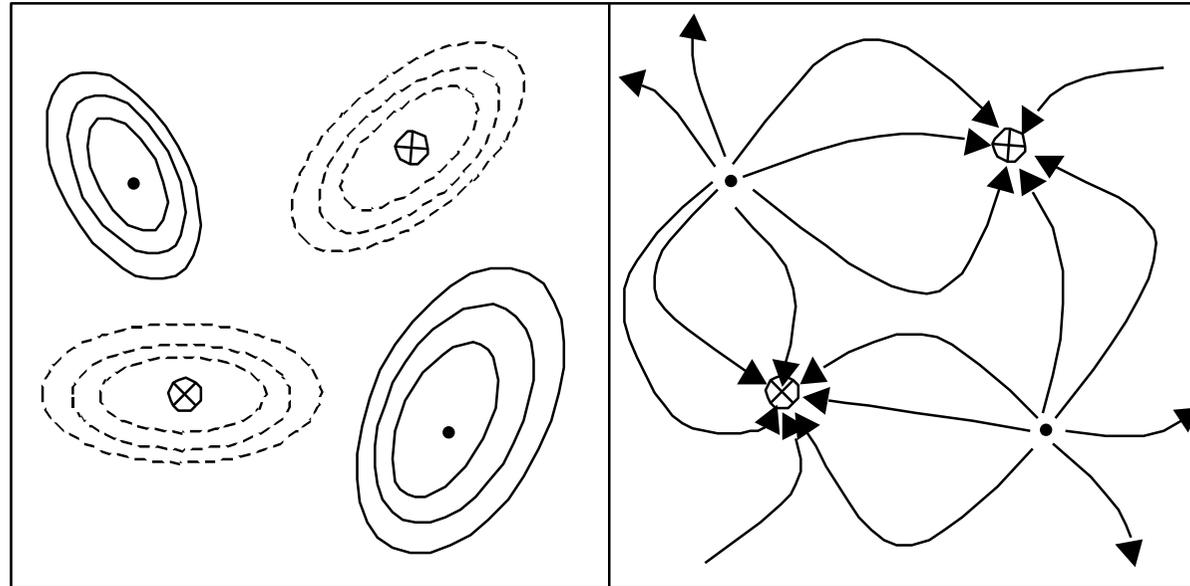


Figura 3 – Superfície de energia: pontos de equilíbrio e bases de atração.

- Este tipo de sistema dinâmico pode operar como:
 - 1) Memória associativa (endereçável por conteúdo);
 - 2) Dispositivo computacional para resolver problemas de otimização de natureza combinatória;

3) Dispositivo computacional para resolver problemas de programação não-linear.

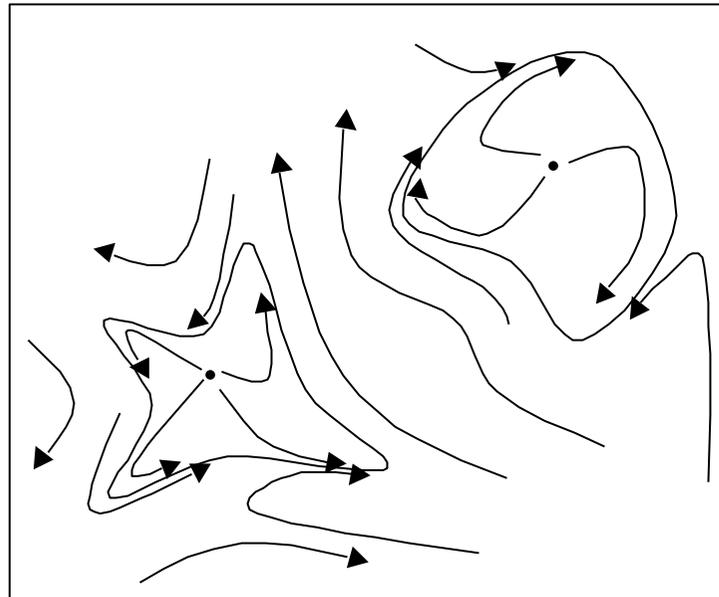


Figura 4 – Dinâmica de uma rede recorrente generalizada: presença de ciclos limites (não desejados no caso da rede de Hopfield).

Memória associativa:

- Não-linearidade é condição necessária para produzir múltiplos atratores no espaço de estados de sistemas dinâmicos.
- Hopfield resolveu (parcialmente) o seguinte problema: *Dado um conjunto de estados específicos que devem estar associados a memórias fundamentais, como gerar um sistema dinâmico não-linear que apresente pontos de equilíbrio estável justamente nestes estados específicos?*
- Caso este sistema dinâmico não-linear possa ser sintetizado, então vai existir uma superfície de energia com mínimos locais nos referidos estados específicos, sendo que a dinâmica do sistema vai atuar no sentido de conduzir o estado inicial a um dos mínimos locais da superfície de energia (particularmente àquele em cuja bacia de atração se encontra a condição inicial).
- Em uma dinâmica de relaxação, não é possível transitar entre bacias de atração, pois a energia nunca pode aumentar no decorrer do tempo.

- Logo, para uma rede de Hopfield operar como memória associativa, deve-se obter um sistema dinâmico com um ponto de equilíbrio para cada memória fundamental a ser armazenada, e cuja localização no espaço de estados deve estar diretamente associada a essas memórias.



memórias

entradas

padrões restaurados

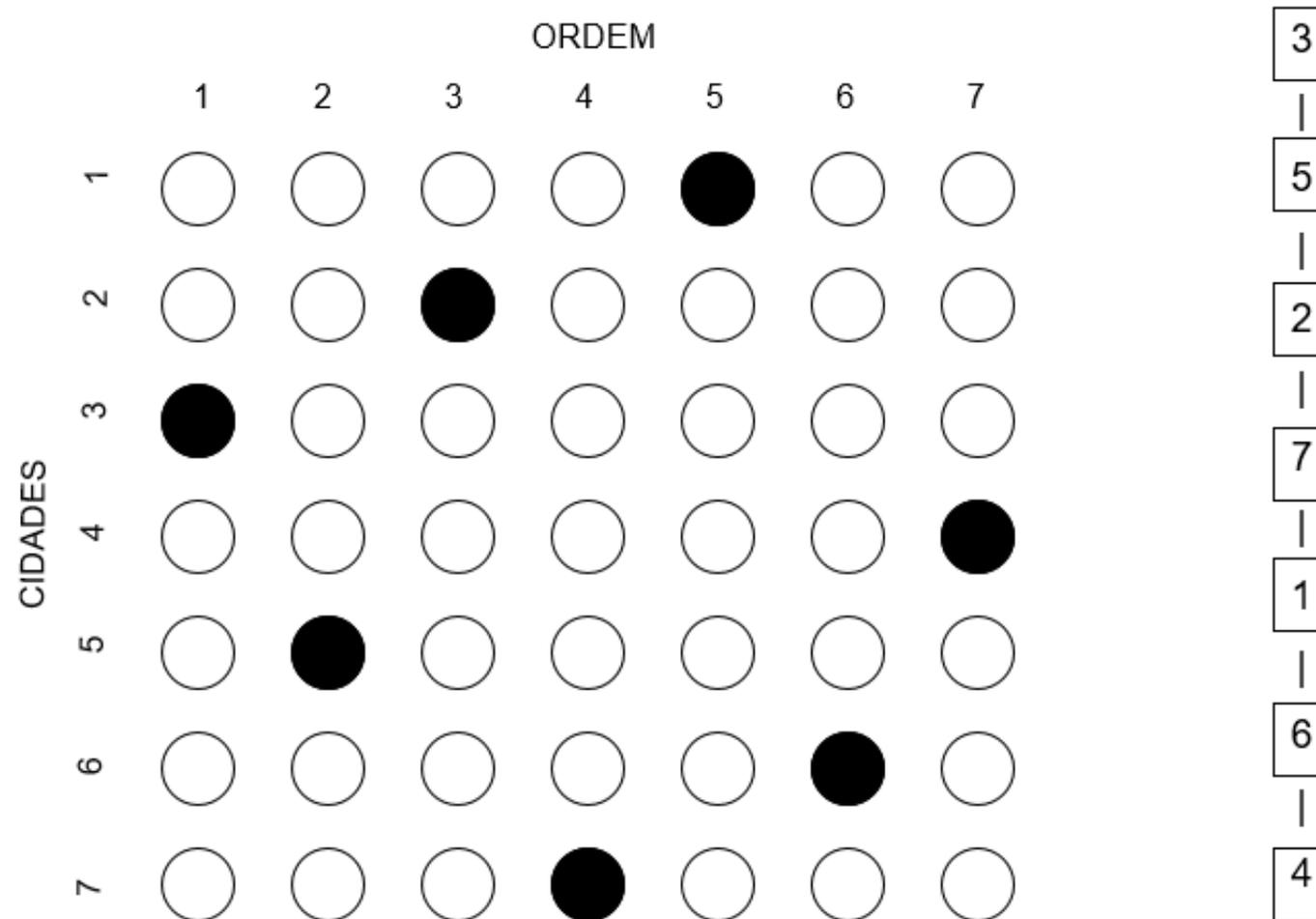


Figura 1 – Interpretação do ponto de equilíbrio como uma solução do problema do caixeiro viajante (há um e somente um neurônio ativo por linha e por coluna).

1.2 Modelagem de sistemas dinâmicos lineares

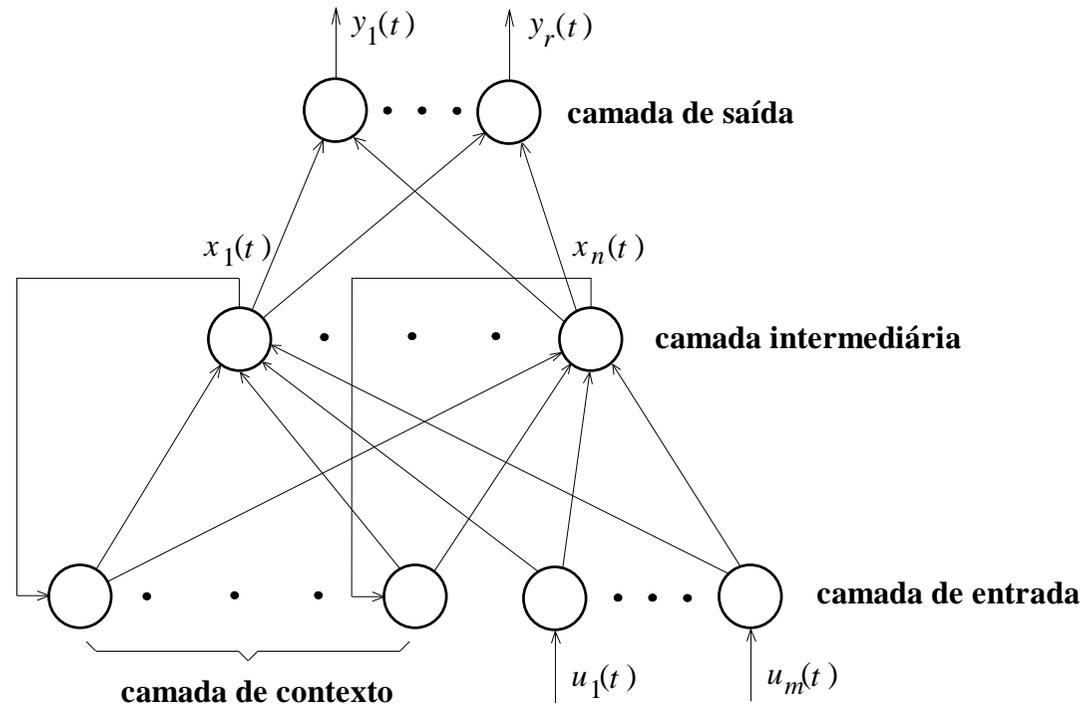


Figura 6 – Estrutura detalhada da Rede de Elman (ELMAN, 1990).

- $$\begin{cases} \mathbf{x}(t) = \mathbf{W}_{xx}\mathbf{x}(t-1) + \mathbf{W}_{xu}\mathbf{u}(t-1) \\ \mathbf{y}(t) = \mathbf{W}_{yx}\mathbf{x}(t) \end{cases} \quad (\text{aproxima qualquer dinâmica linear nesta representação})$$

1.3 Modelagem de sistemas dinâmicos não-lineares

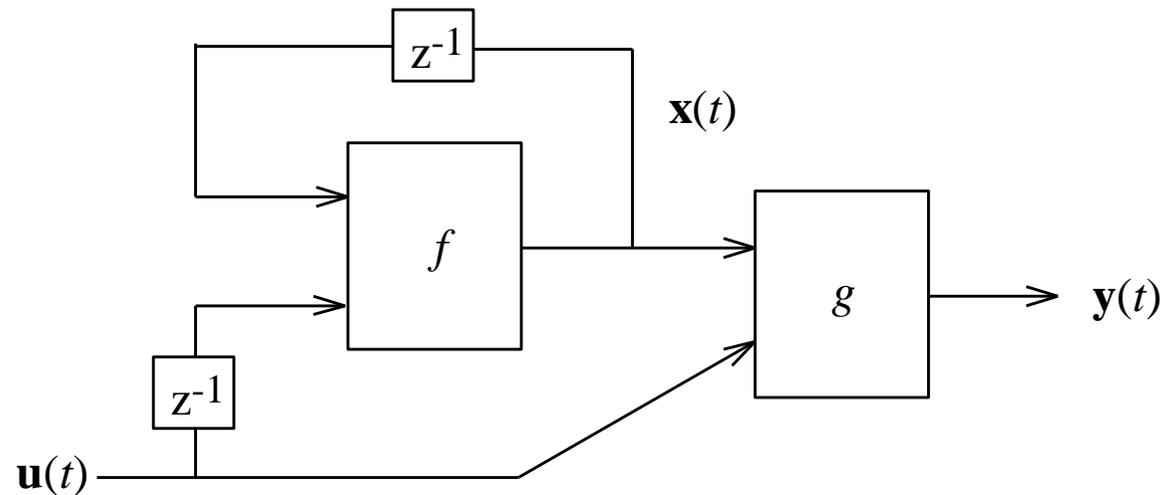


Figura 7 – Representação por espaço de estados de um sistema dinâmico não-linear.

$$\begin{cases} \mathbf{x}(t+1) = f(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) \\ \mathbf{y}(t) = g(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)) \end{cases}$$

onde $\mathbf{u}(t) \in \mathcal{R}^m$, $\mathbf{x}(t) \in \mathcal{R}^n$, $\mathbf{y}(t) \in \mathcal{R}^r$, $f: \mathcal{R}^{n \times m} \rightarrow \mathcal{R}^n$ e $g: \mathcal{R}^{n \times m} \rightarrow \mathcal{R}^r$.

1.4 Excursão ilustrativa por algumas arquiteturas recorrentes

- Repare que o processo de treinamento vai envolver duas dinâmicas acopladas: a dinâmica da rede neural e a dinâmica do ajuste de pesos.

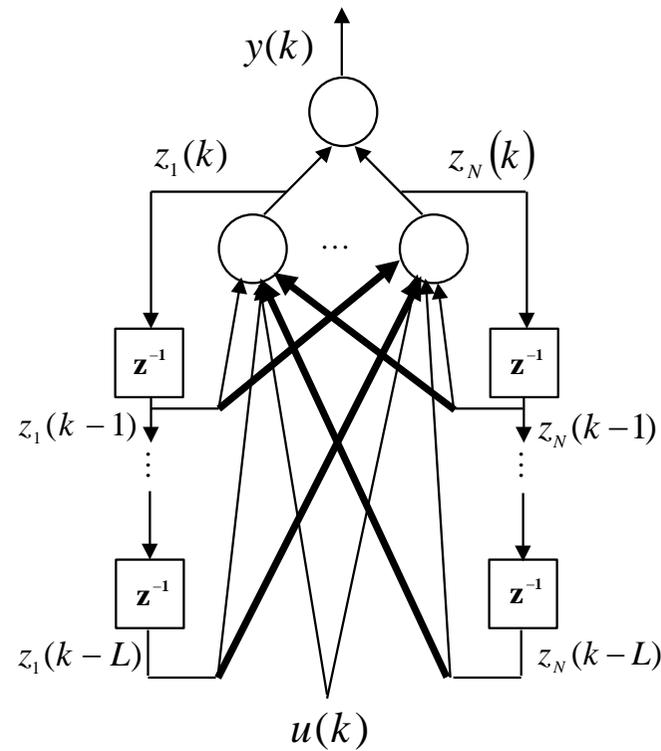


Figura 8 – *Globally recurrent neural network (GRNN)*.

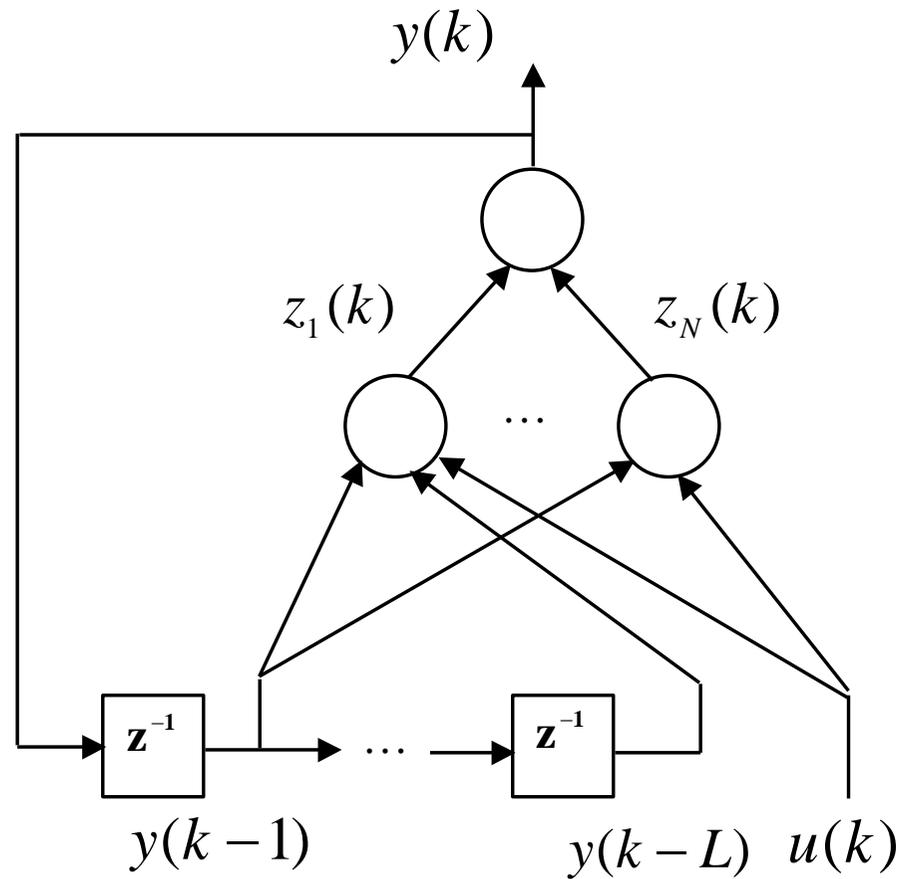


Figura 9 – Output-feedback recurrent neural network (OFRNN).

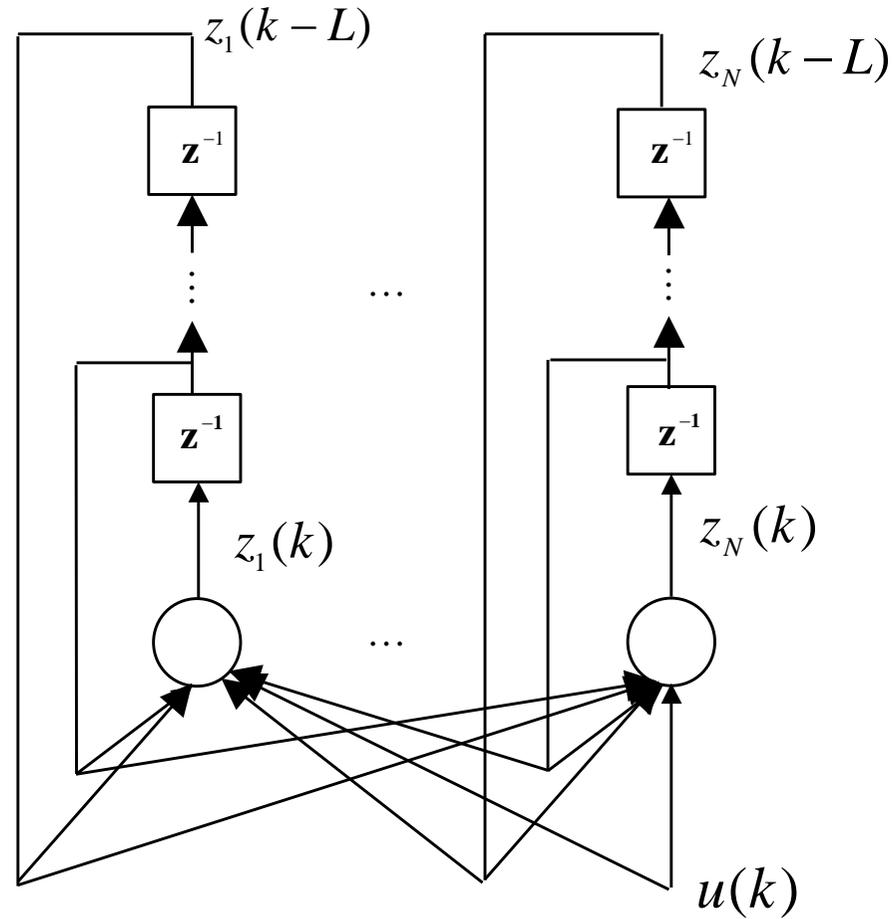


Figura 10 – Fully recurrent neural network (FRNN).

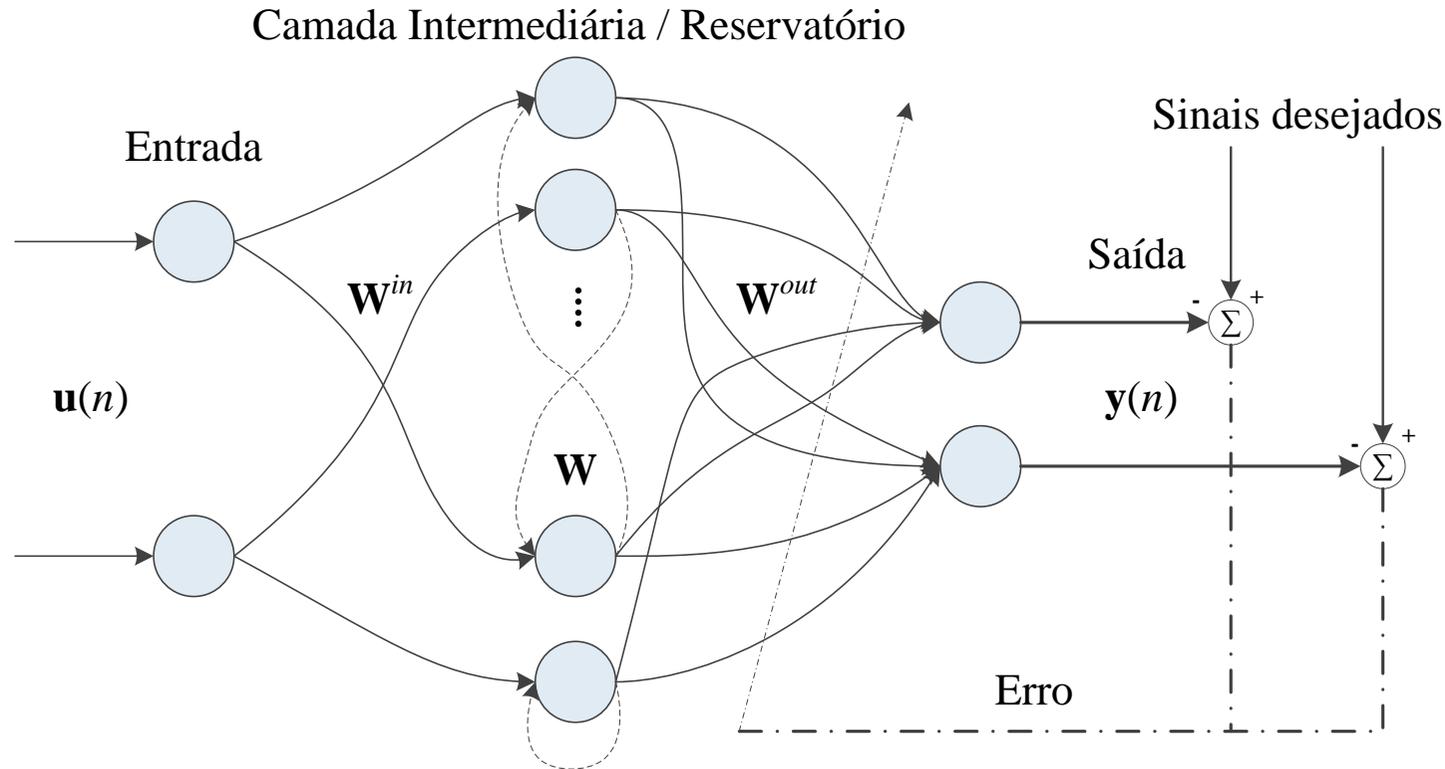


Figura 11 – *Echo state neural network* (ESN).

- Os pesos da camada intermediária são pré-ajustados (até mesmo de forma aleatória), de modo que o treinamento se reduz a um problema de regressão linear (JAEGGER, 2001; LUKOSEVICIUS & JAEGGER, 2009; BOCCATO, 2013)

1.5 Predição de séries temporais: um ou múltiplos passos à frente

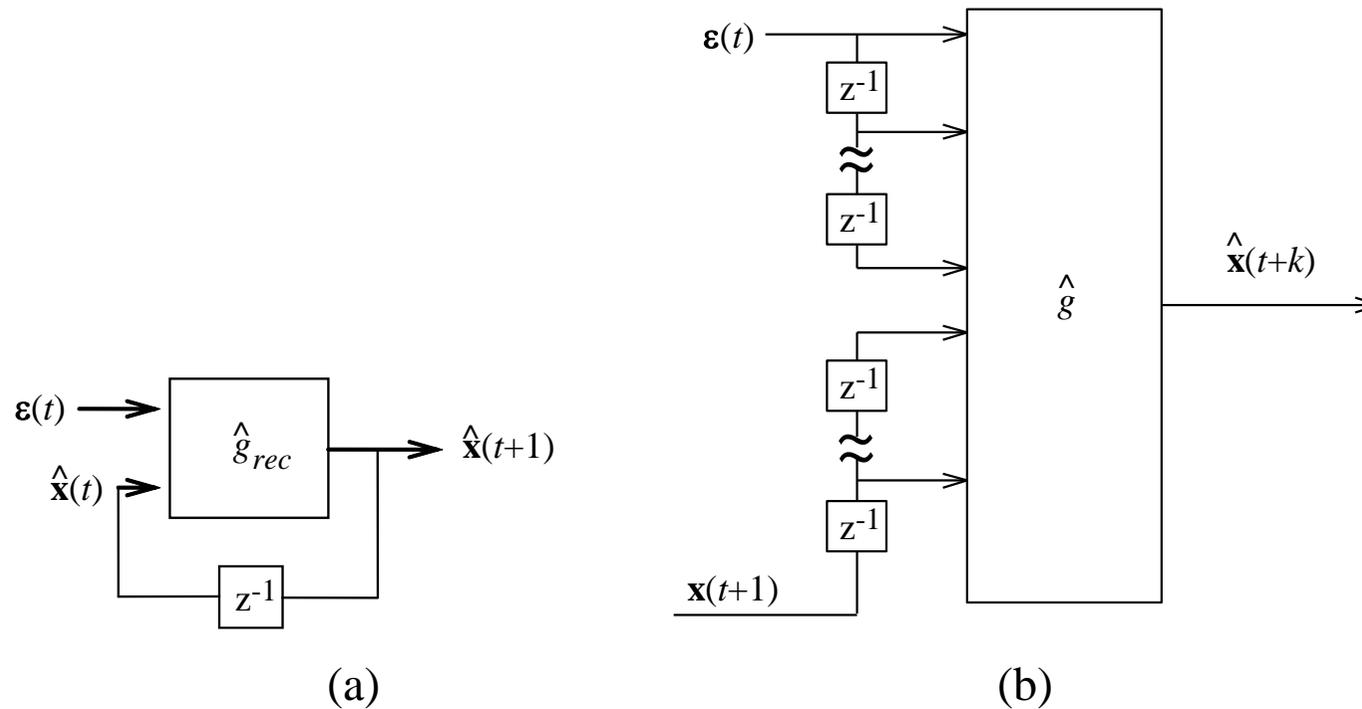


Figura 12 – Modelos para predição de séries temporais.

(a) Predição de múltiplos passos à frente.

(b) Predição de k passos à frente (k fixo, mas arbitrário)

Uso de linha de derivação de atraso (*tapped-delay line*).

2. Organização e ordem

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

3. Exemplos de auto-organização na natureza

Conchas



Processos físicos

- Dunas
- Reagentes químicos
- Rachaduras na lama
- Células de convecção de Bénard
- Rachaduras em tinta
- Rugas em verniz



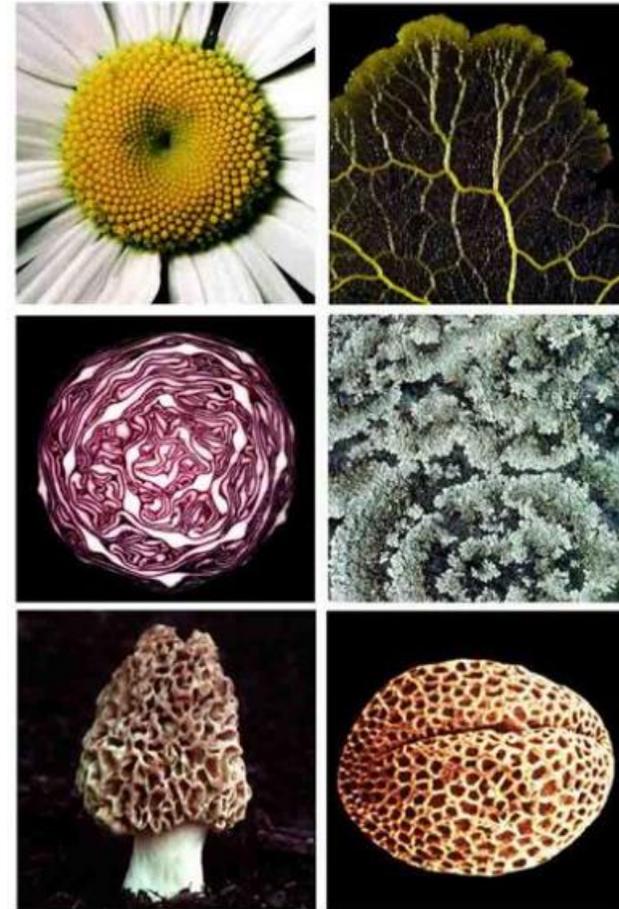
Em animais

- Listras de uma zebra
- Manchas da girafa
- Listras do tigre
- Anfíbios
- Lagartos



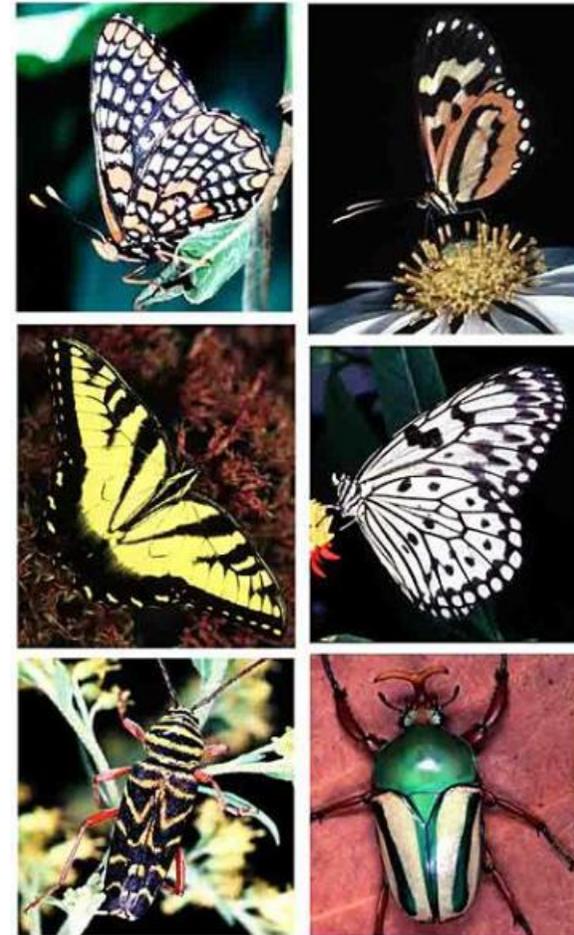
Em plantas

- Margaridas
- *Slime mold*
- Repolho vermelho
- Líquen
- Cogumelo
- Grão de pólen



Em insetos

- Asas de borboletas
- Exoesqueletos de besouros



4. Auto-Organização

- O estudo de sistemas auto-organizados é recente, embora a humanidade tenha sempre se ocupado com questões vinculadas à origem de sistemas organizados.
- As formas que podem ser observadas no mundo à nossa volta representam apenas uma pequena parcela de todas as formas possíveis. Logo, por que não existe mais variedade?
- Para procurar respostas a questões como esta é que se estudam sistemas auto-organizados e teoria da complexidade (ADAMI, 2002).
- Exemplos de sistemas naturais que apresentam organização: galáxias, planetas, componentes químicos, células, organismos, sociedades.
- Existem campos de atuação científica que procuram explicar a auto-organização recorrendo a propriedades e leis aplicáveis às partes constituintes (componentes) de um sistema organizado específico.

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

- Um sistema complexo pode ser caracterizado como o resultado da auto-organização de componentes sob forte interação, produzindo estruturas sistêmicas cujas propriedades geralmente não estão presentes em nenhum de seus componentes, já que estas dependem de níveis mais elevados de organização.
- Um sistema, por sua vez, pode ser definido como um agrupamento coerente de componentes que operam como um todo e que apresentam uma individualidade, ou seja, se distinguem de outras entidades por fronteiras reconhecíveis. Há muitas variedades de sistemas, as quais podem ser classificadas em três grandes grupos:
 1. Quando as interações de seus componentes são fixas. Ex: máquina.
 2. Quando as interações de seus componentes são irrestritas. Ex: gás.
 3. Quando existem interações fixas e variáveis de seus componentes. Ex: célula.
- Os sistemas de maior interesse aqui são aqueles pertencentes à classe 3, já que dependem da natureza e forma das interações de seus componentes ao longo de sua existência (MCSHEA, 2000). Assim, o sistema vai apresentar um novo comportamento

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

- A essência da **auto-organização** está no surgimento de estrutura (formas restritas) e organização sem que estas sejam impostas de fora do sistema. Isto implica que este fenômeno é interno ao sistema, ou seja, resulta da interação de seus componentes e, em essência, não depende da natureza física destes componentes.
- A organização pode se dar no espaço, no tempo, ou em ambos.
- O que se busca são regras gerais para o crescimento e evolução de estruturas sistêmicas. Com isso, espera-se poder prever a organização futura que irá resultar de alterações promovidas junto aos componentes de um dado sistema, além de poder estender estes resultados a outros sistemas semelhantes.
- Em geral, os mecanismos estabelecidos pelos componentes de um dado sistema capaz de expressar auto-organização são: **realimentação positiva, realimentação negativa e interação local** (MITLETON-KELLY, 2003).

- Esses mecanismos devem ocorrer simultaneamente no espaço-tempo.
- São distintos, portanto, de mecanismos de regulação de pressão arterial ou regulação de temperatura corpórea, que envolvem apenas realimentação negativa, e do mecanismo de contração no parto, que envolve apenas realimentação positiva.

5. Motivação para treinamento não-supervisionado: clusterização

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

conhecido a priori ou não. A variância e o número de dados de cada classe podem diferir ou não.

5.1 Modelo simples de classificação para dados rotulados

- Hipótese: as classes apresentam propriedades distintas (seus elementos pertencem a regiões distintas do espaço vetorial multidimensional);
 - Modelagem: um representante para cada classe;
 - Objetivo: minimizar o somatório das distâncias entre os dados e o respectivo representante da classe a que pertencem;
 - Aplicação: após finalizar o posicionamento de todos os representantes, definir o rótulo de cada novo dado não-rotulado como aquele associado ao representante que possuir a menor distância ao dado.
- Trata-se, portanto, de um problema de otimização, que pode ser resolvido por intermédio de técnicas de treinamento supervisionado.

- No caso, basta dividir o presente problema em C problemas distintos, sendo C o número de classes.
- Exemplos gráficos e análise topológica.
- Limitações.

5.2 Modelo composto de classificação para dados rotulados

- Hipótese: as classes apresentam propriedades distintas (seus elementos pertencem a regiões distintas do espaço vetorial multidimensional);
- Modelagem: múltiplos representantes para cada classe;
- Objetivo: minimizar o somatório da distância entre cada dado e o representante mais próximo da classe a que pertence;
- Aplicação: após finalizar o posicionamento de todos os representantes, definir o rótulo de cada novo dado não-rotulado como aquele associado ao representante que possuir a menor distância ao dado.

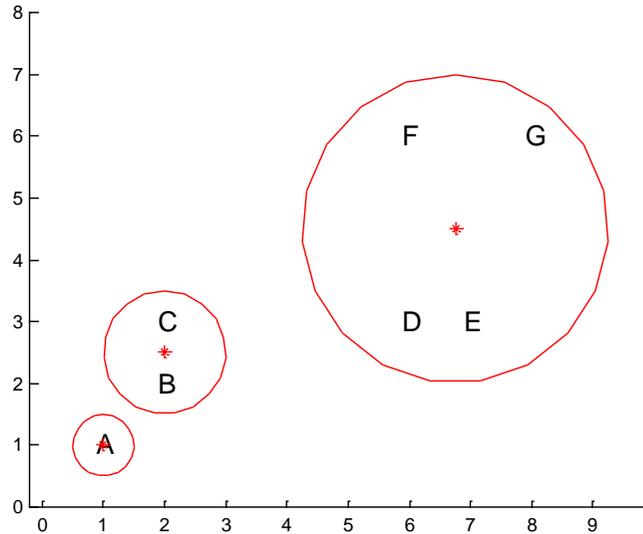
- Trata-se também de um problema de otimização, mas neste caso técnicas de treinamento não-supervisionado devem ser empregadas, pois os representantes de cada classe devem se auto-organizar no espaço de acordo com a distribuição apresentada pelos dados da respectiva classe.
- Como no caso anterior, pode-se dividir o presente problema em C problemas distintos.
- Exemplos gráficos e análise topológica.

5.3 Modelo composto de classificação para dados não-rotulados

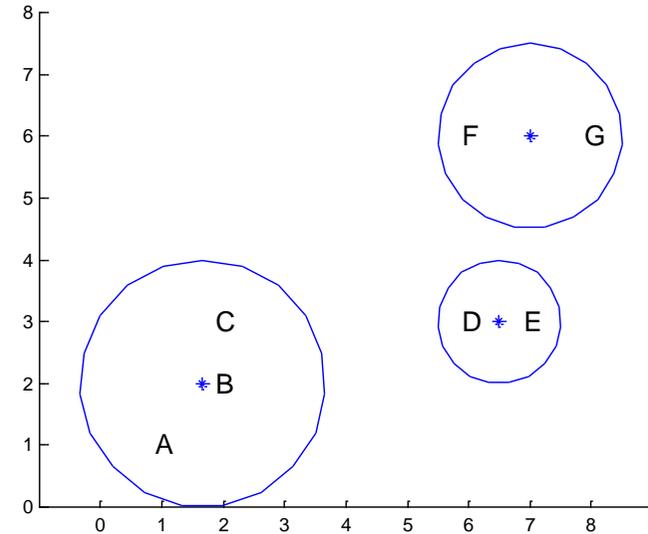
- Hipótese: não se conhece o número de classes, mas sabe-se que elas apresentam propriedades distintas (seus elementos pertencem a regiões distintas do espaço vetorial multidimensional);
- Modelagem: múltiplos representantes não-rotulados;
- Objetivo: minimizar o somatório da distância entre cada dado e o representante não-rotulado mais próximo.

- Rotulagem: após finalizar o posicionamento de todos os representantes (também por auto-organização), aplicar alguma técnica de discriminação que agrupe representantes de acordo com as posições relativas entre eles. A seguir, atribuir um rótulo diferente a cada grupo de representantes.
- Aplicação: definir o rótulo de cada novo dado não-rotulado como aquele associado ao representante que possui a menor distância ao dado.
- Exemplos gráficos e análise topológica.

5.4 Comparação com o *k*-means



Erro total = 12,250



Erro total = 5,167

- Figuras extraídas de ZUCHINI (2003) e baseadas em JAIN *et al.* (1999)
- Sensibilidade à condição inicial
- Ausência de vizinhança topológica

6. Treinamento não-supervisionado

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

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

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

Para mais detalhes, consultar DUDA *et al.* (2001) e HINTON & SEJNOWSKI (1999).

7. Mapas Auto-Organizáveis de Kohonen

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

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

7.1 Arranjo unidimensional

- Um mapa de Kohonen unidimensional é dado por uma sequência ordenada de neurônios lineares, sendo que o número de pesos de cada neurônio é igual ao número de entradas.
- Há uma relação de vizinhança entre os neurônios (no espaço unidimensional vinculado ao arranjo), mas há também uma relação entre os pesos dos neurônios no

espaço de dimensão igual ao número de entradas. Para entender a funcionalidade dos mapas de Kohonen, é necessário considerar ambas as relações.

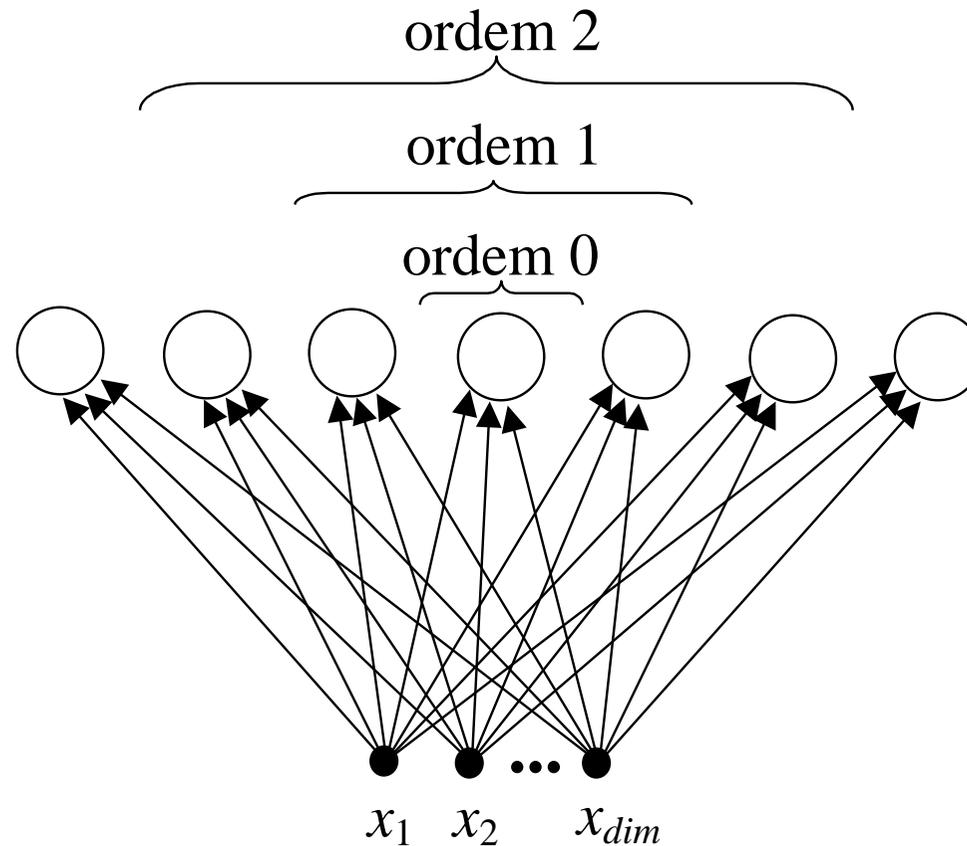


Figura 23 – Rede de Kohonen em arranjo unidimensional: ênfase na vizinhança.

- $t_{il} = \begin{cases} +1 & \text{se } i = l \\ -\varepsilon & \text{se } i \neq l, \quad \varepsilon < \frac{1}{n} \end{cases}$
- $\bar{y}(0) = \mathbf{W}\bar{x}$
- $y_i(k+1) = \max \left\{ 0, \sum_{l=1}^n t_{il} y_l(k) \right\}$

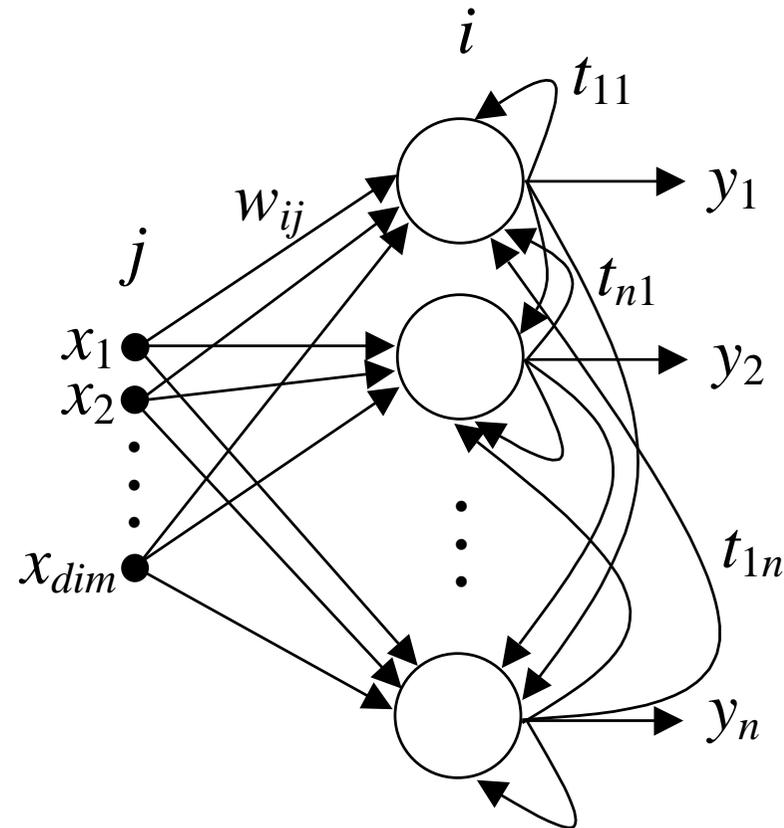


Figura 14 – Rede de Kohonen em arranjo unidimensional: ênfase nas conexões.

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

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

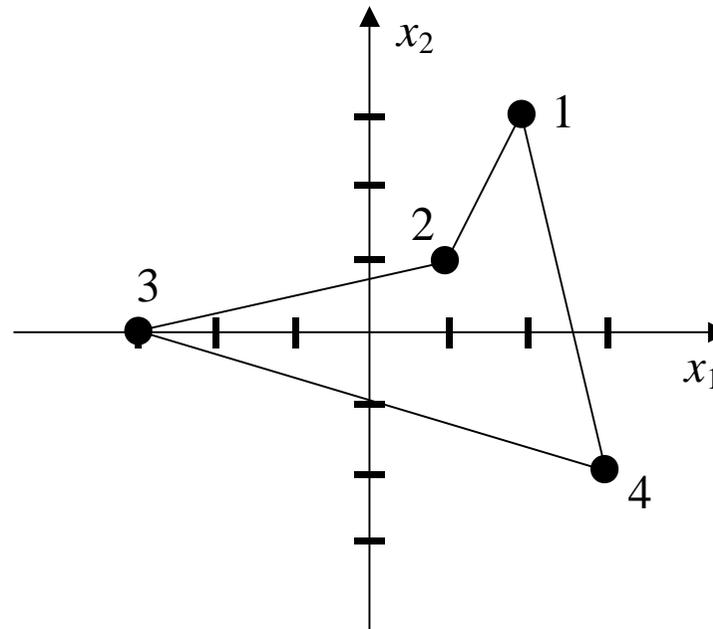


Figura 15 – Mapa de Kohonen em arranjo unidimensional (nesta caso, existe vizinhança entre primeiro e último neurônios).

7.2 Arranjo bidimensional

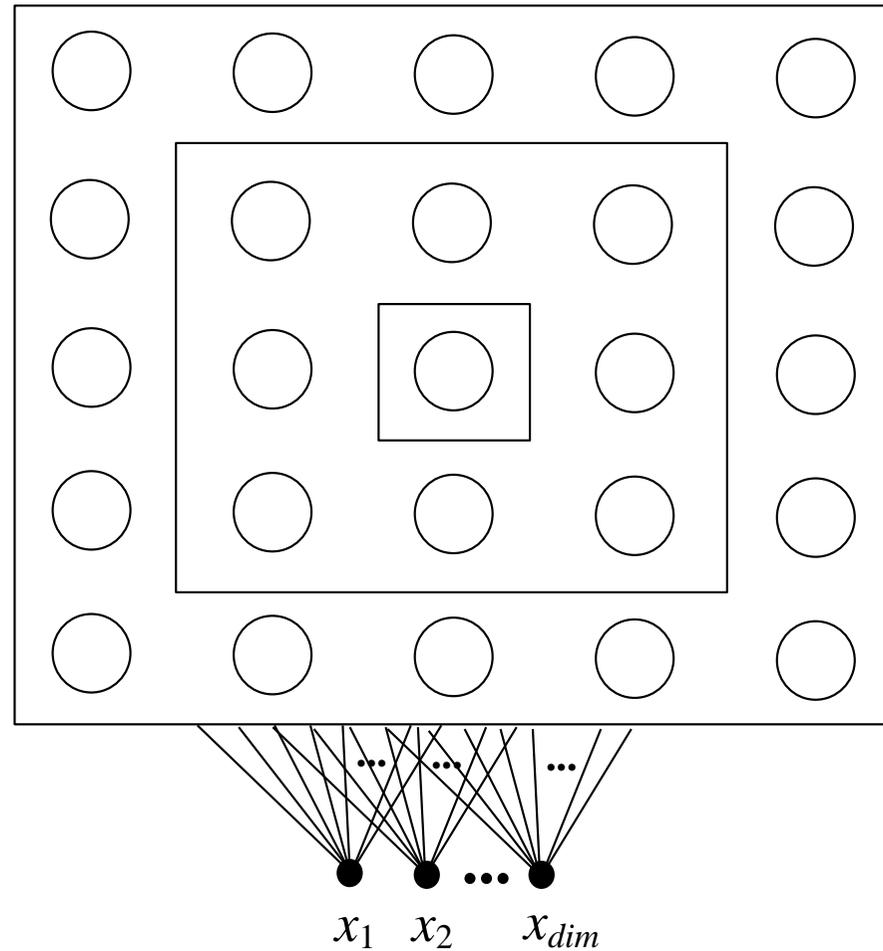


Figura 16 – Rede de Kohonen em arranjo bidimensional: ênfase na vizinhança.

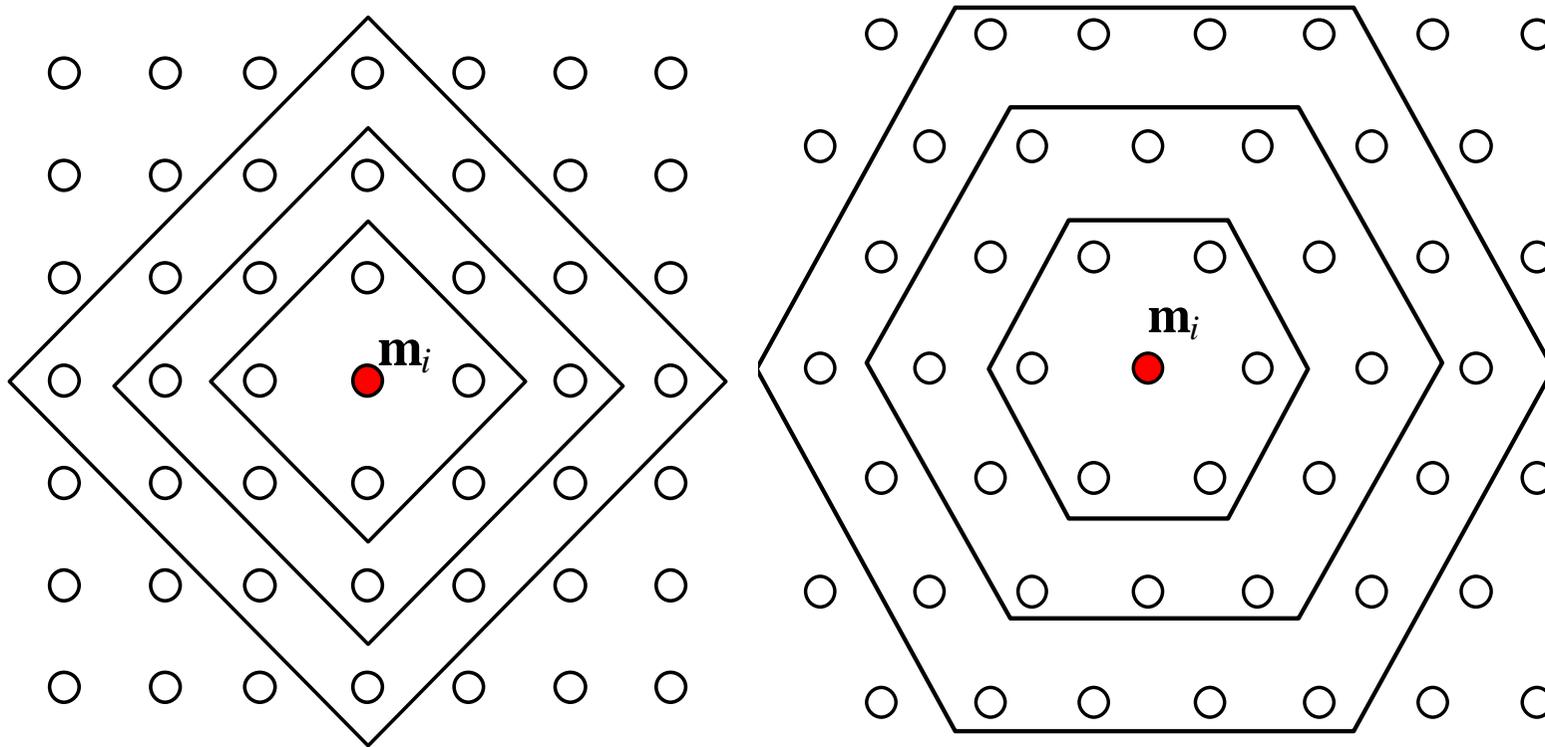


Figura 17 – Outras configurações de mapas e de vizinhança (figuras extraídas de ZUCHINI, 2003).

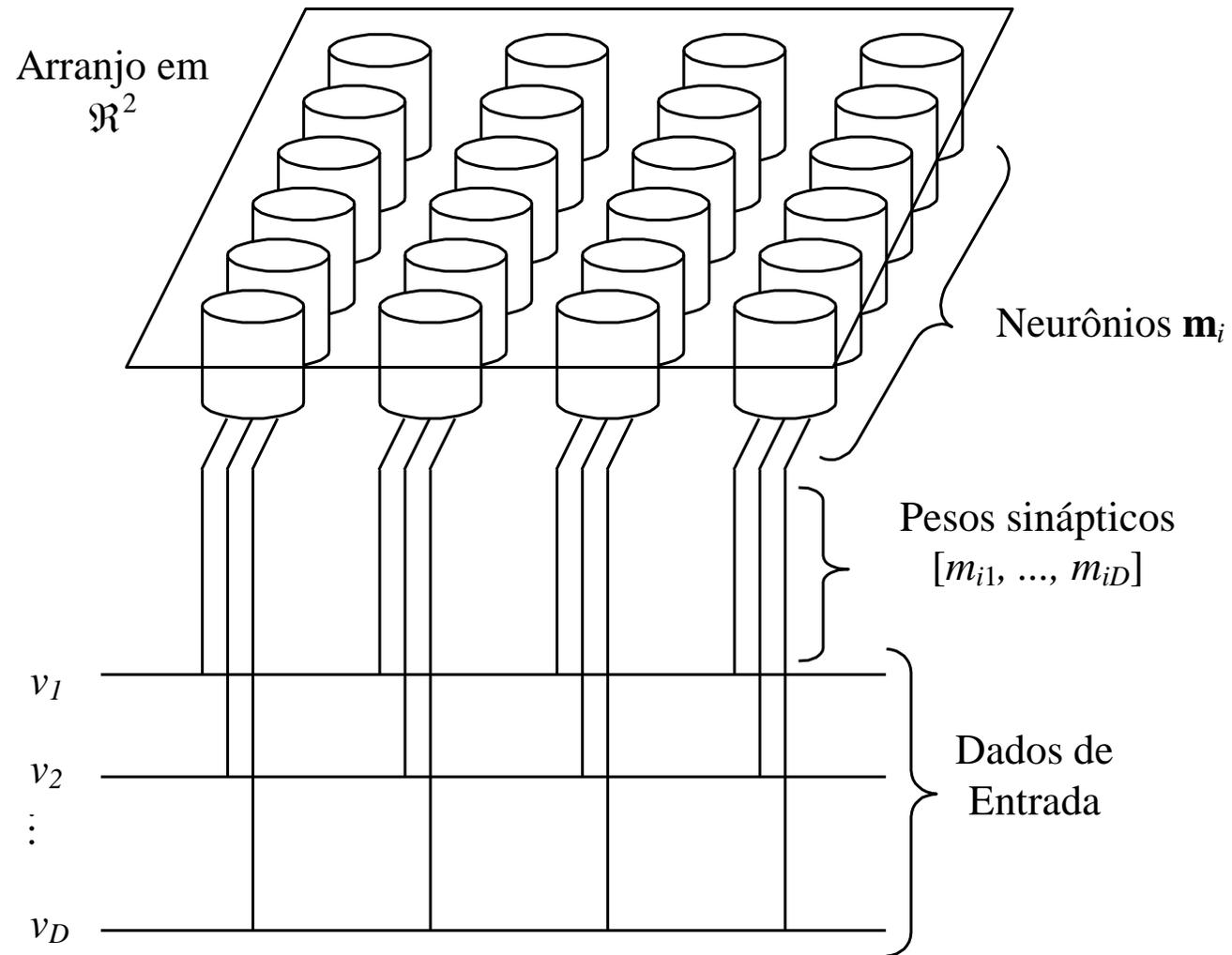


Figura 18 – Outra perspectiva para arranjo 2D (figura extraída de ZUCHINI, 2003).

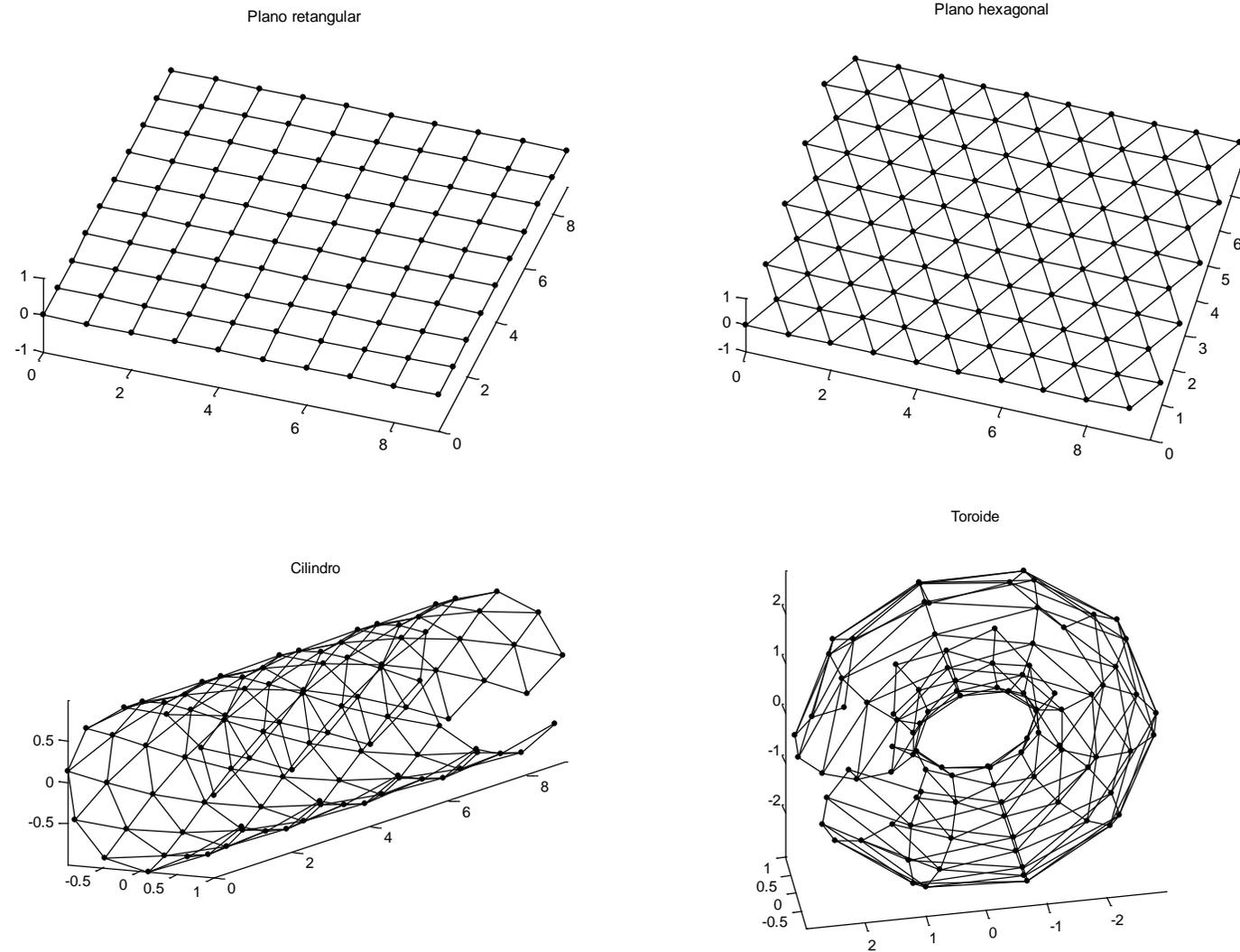


Figura 19 – Arranjos com e sem vizinhança nos extremos (figuras extraídas de ZUCHINI, 2003).

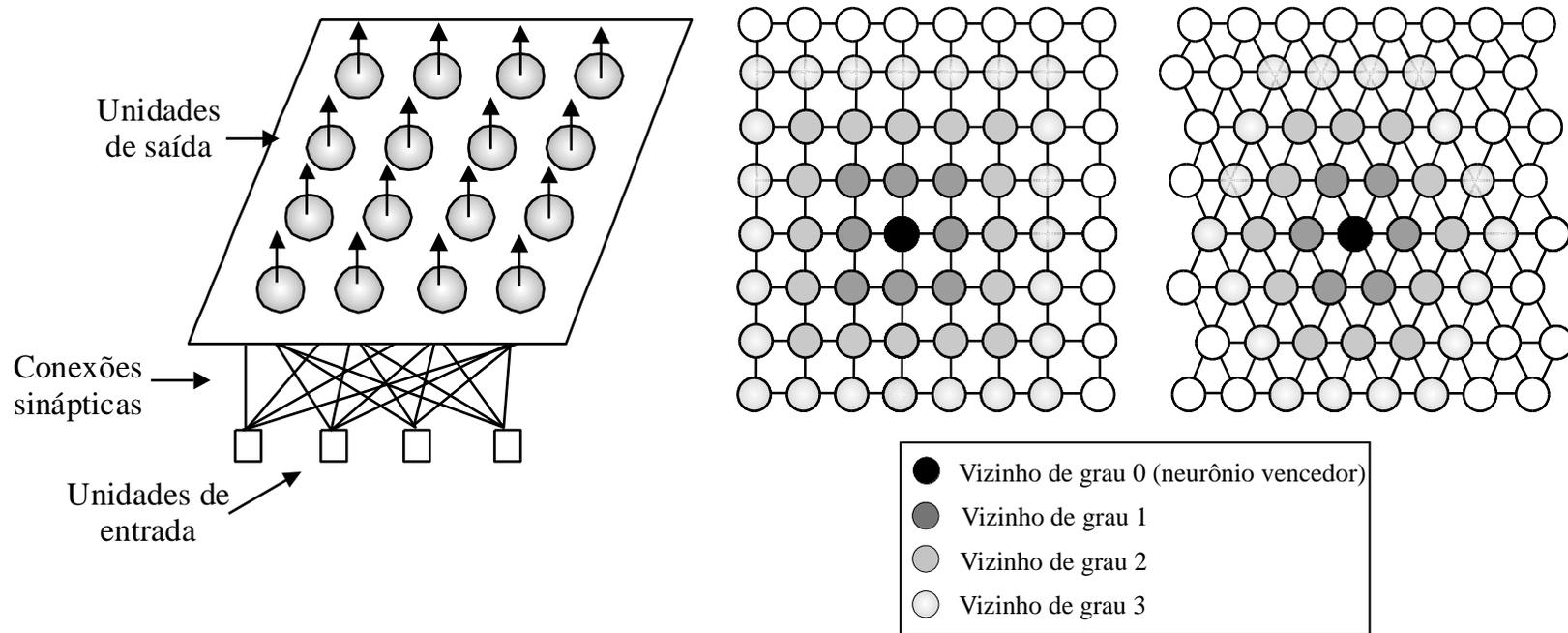
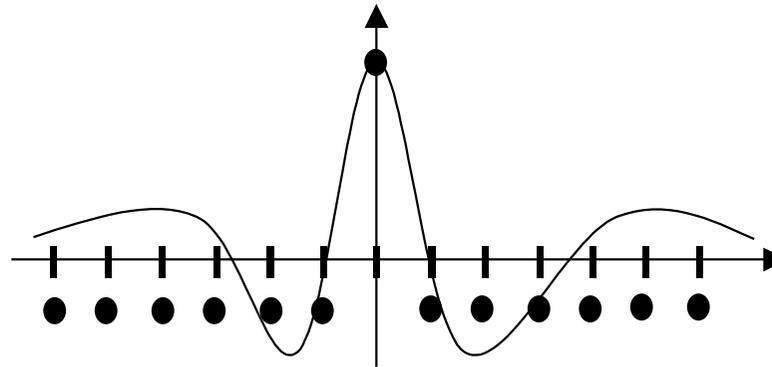


Figura 20 – Rede de Kohonen em arranjo bidimensional.

7.3 Fase de competição

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



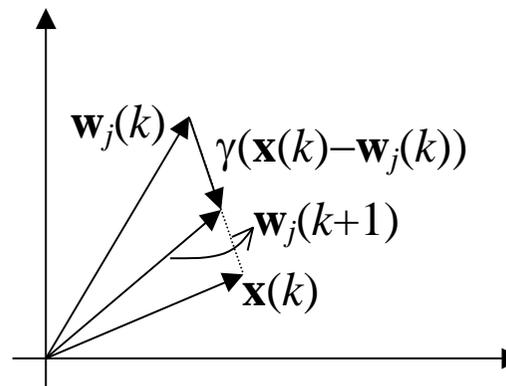
7.4 Fase de aprendizado não-supervisionado

- Se os pesos se mantiverem com norma unitária, então a definição do neurônio vencedor pode se dar de duas formas:
 1. Produto escalar;
 2. Norma euclidiana (é a forma adotada também no caso de pesos não-normalizados).
- Seja j o neurônio vencedor:

Alternativa 1

- Somente o neurônio j é ajustado na forma:

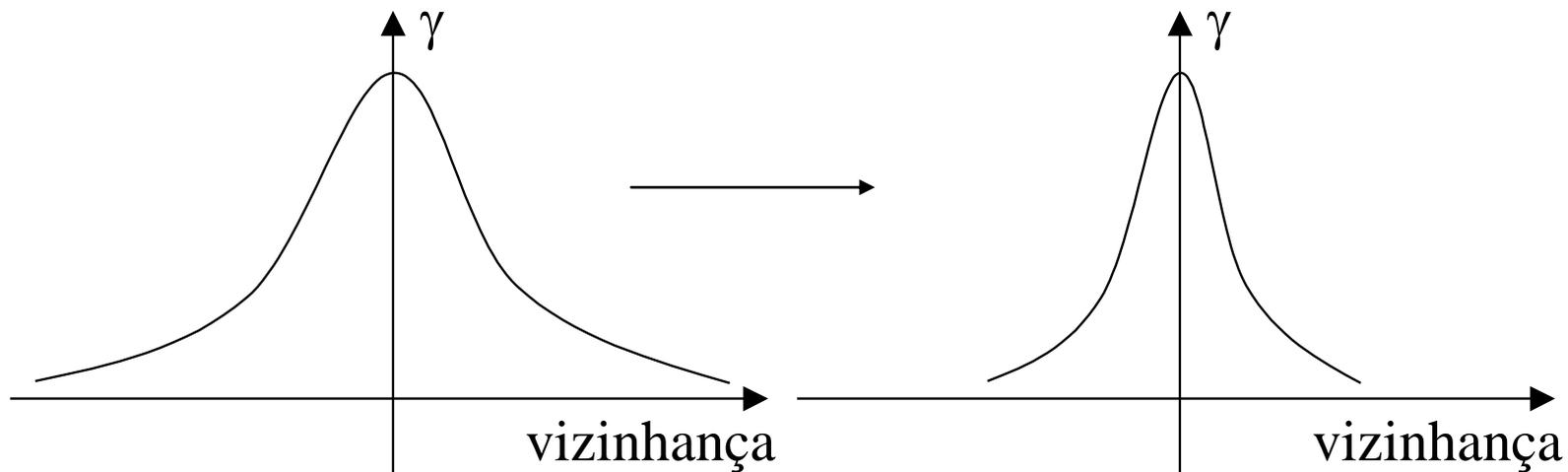
$$\mathbf{w}_j(k+1) = \mathbf{w}_j(k) + \gamma(\mathbf{x}(k) - \mathbf{w}_j(k))$$



Alternativa 2

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

Implementação



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

7.5 Algoritmo de ajuste dos pesos

while <condição de parada> não é atingida,

Ordene aleatoriamente os N padrões de entrada;

for $i=1$ até N ,

$$j = \arg \min_j \|\mathbf{x}_i - \mathbf{w}_j\|$$

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

$$\mathbf{w}_J = \mathbf{w}_J + \gamma(\text{dist}(j, J))(\mathbf{x}_i - \mathbf{w}_J);$$

end do

end for

Atualize a taxa de aprendizado γ ;

Atualize a vizinhança;

Avalie a condição de parada;

end while

7.6 Um passo de ajuste num arranjo unidimensional (revisão)

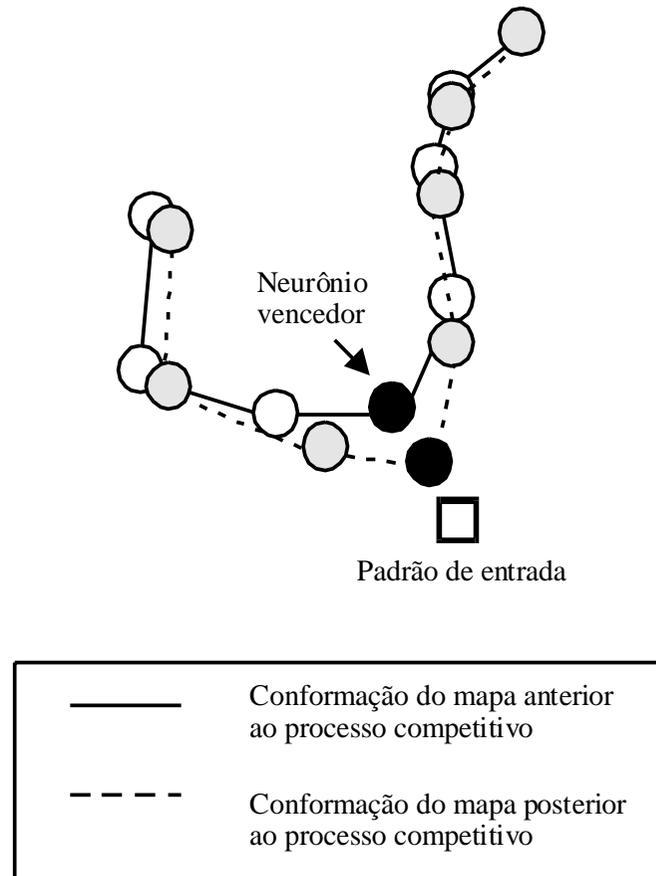


Figura 21 – Ajuste do neurônio vencedor e de seus vizinhos mais próximos.

7.7 Ajuste de pesos com restrição de vizinhança

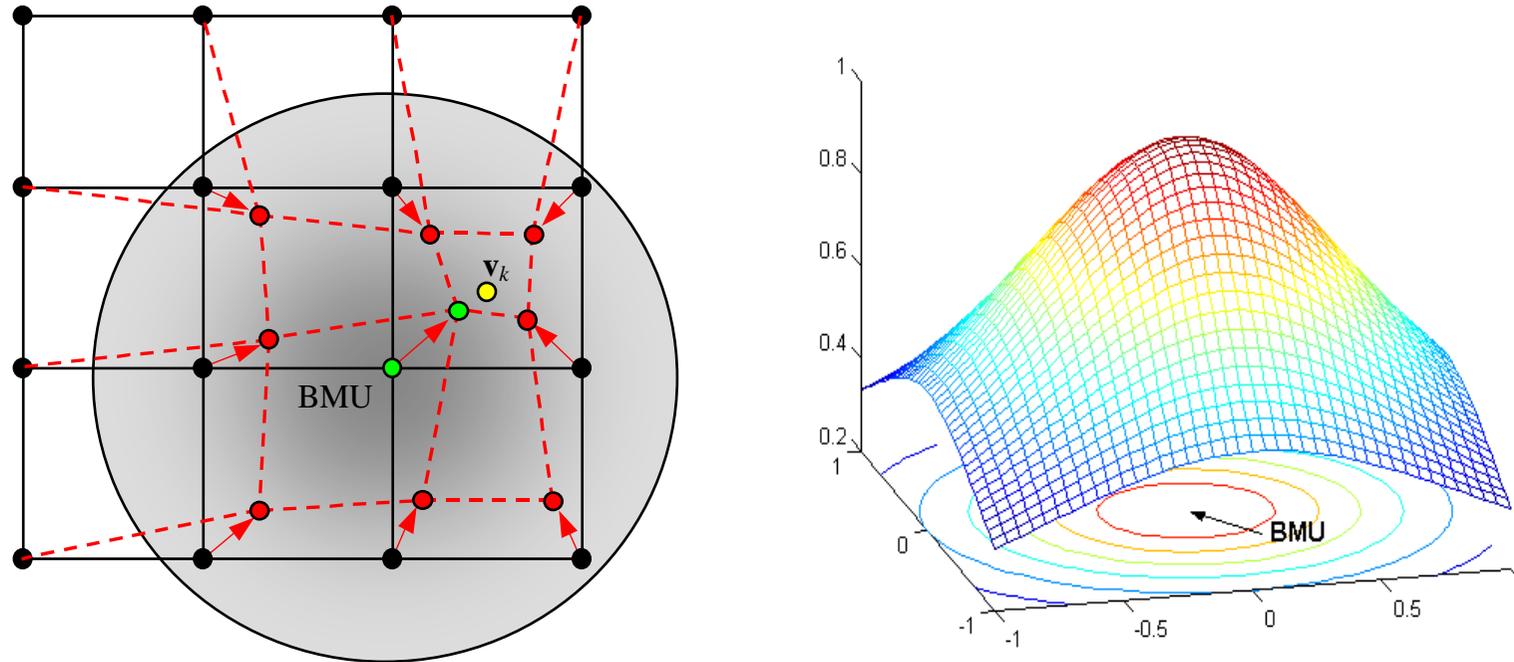
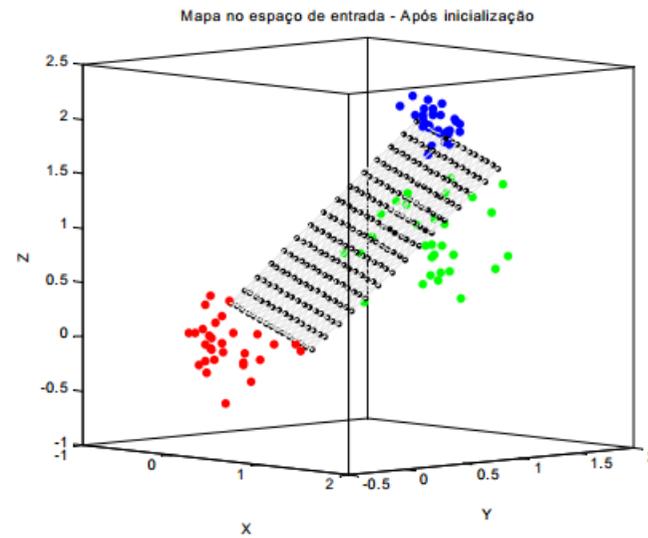
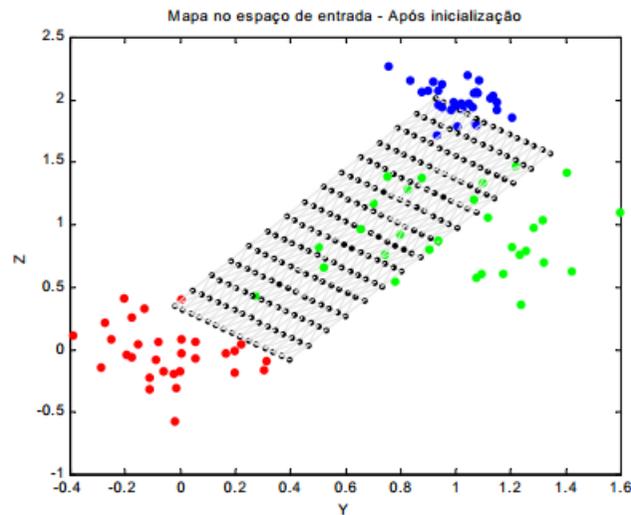
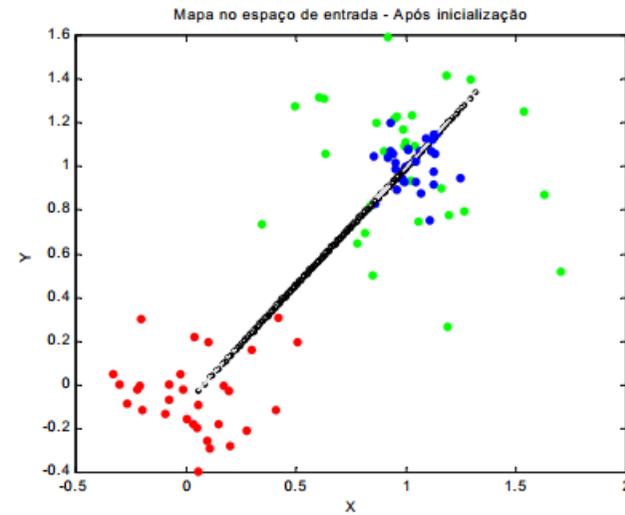
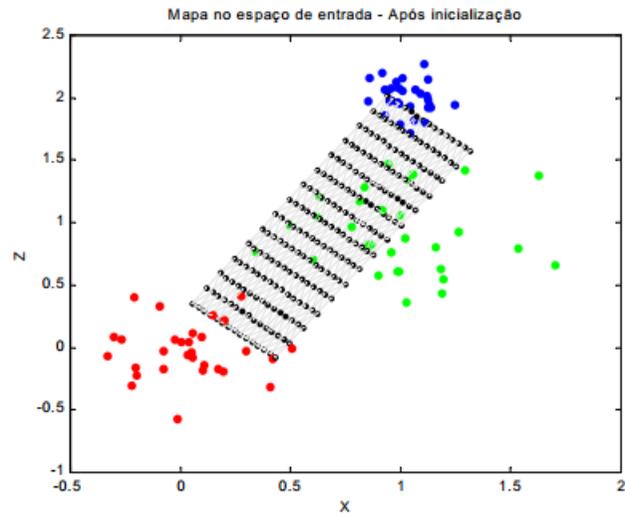
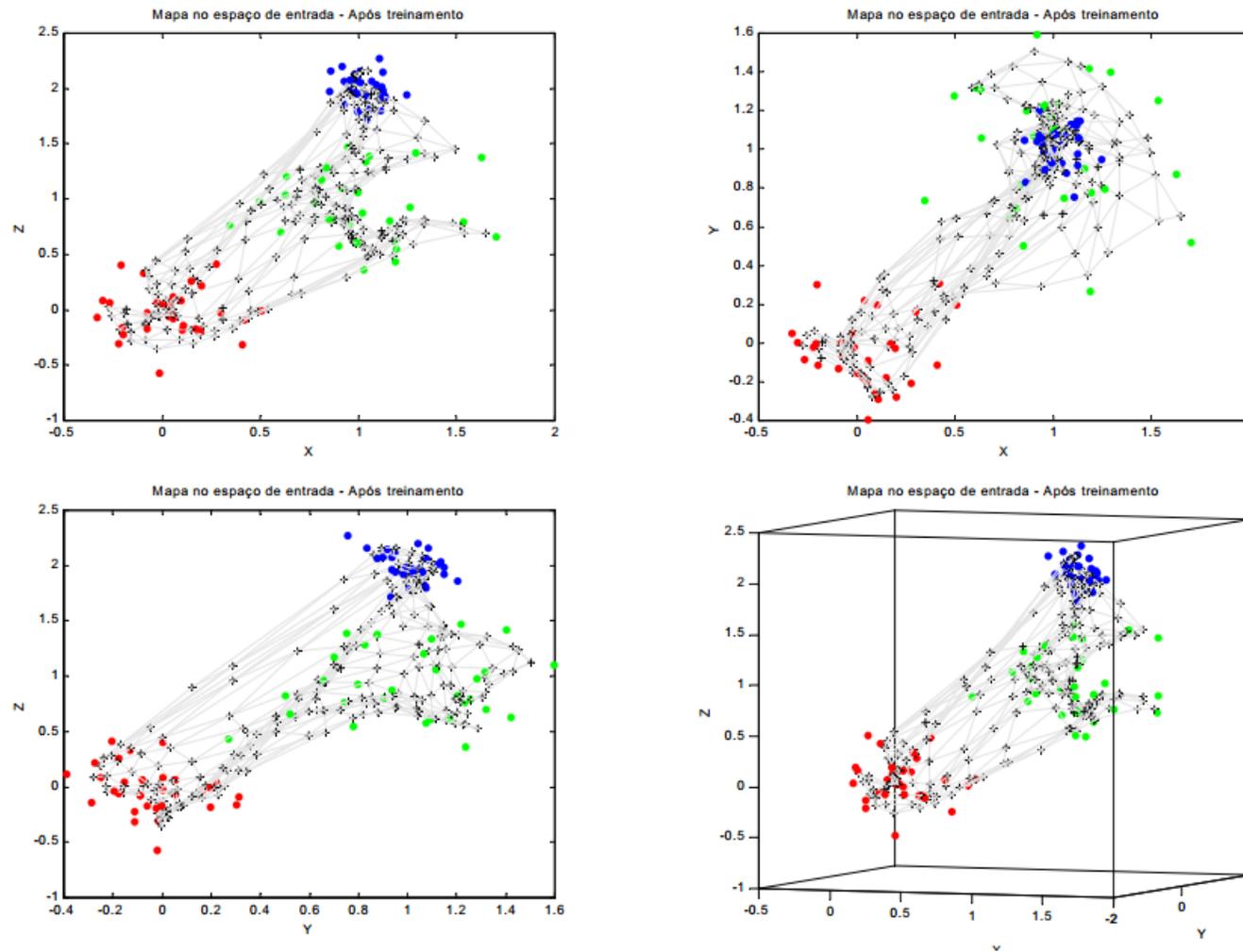


Figura 22 – BMU (*Best Matching Unit*) e seus vizinhos (figuras extraídas de ZUCHINI, 2003).

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



Inicialização linear dos vetores de pesos sobre um conjunto de dados artificiais.



Conformação do mapa após o processo de auto-organização.

7.8 Discriminação dos agrupamentos

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

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

7.9 Aplicação

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

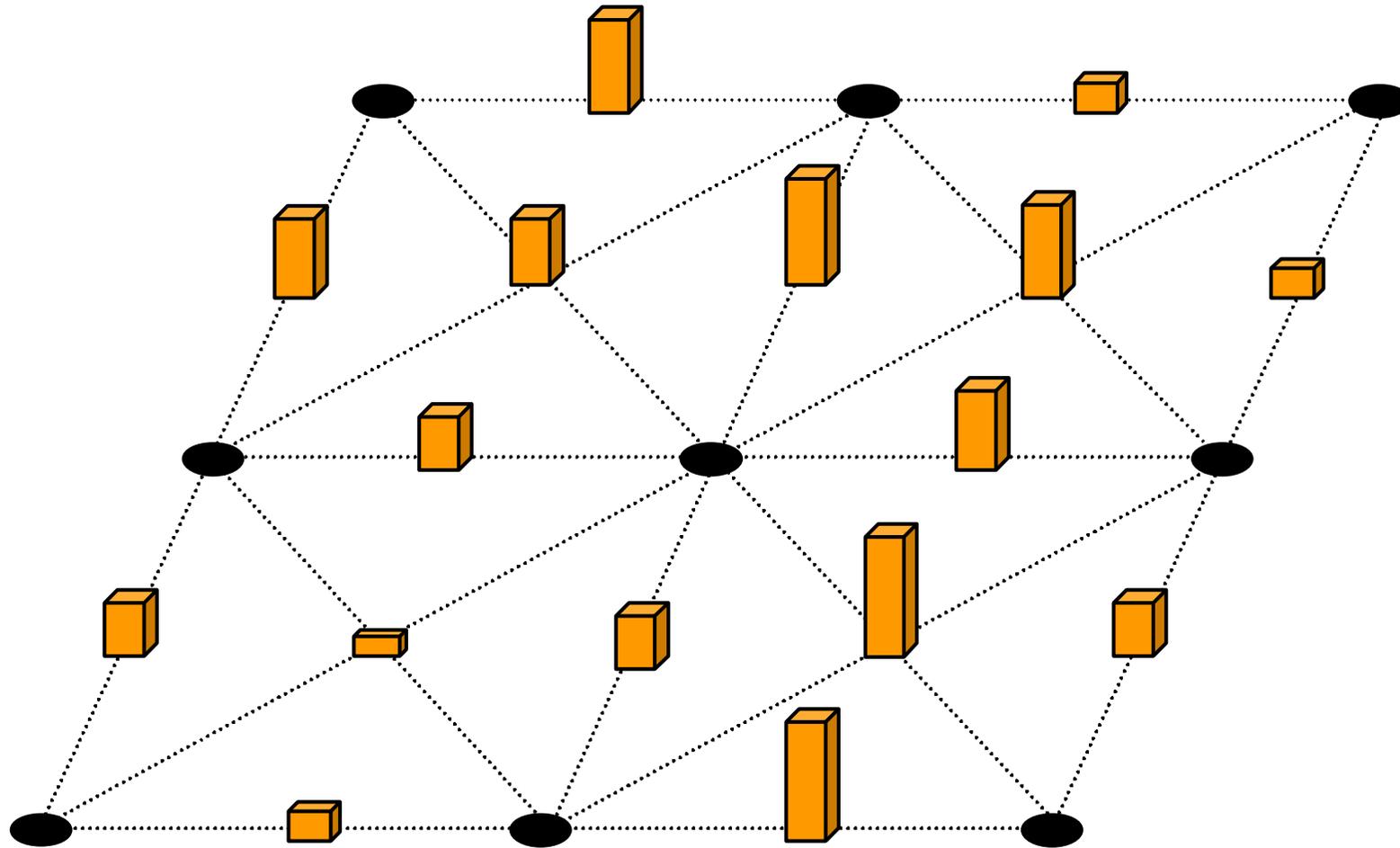


Figura 23 – Exemplo de matriz-U para arranjo retangular (figura extraída de ZUCHINI, 2003).

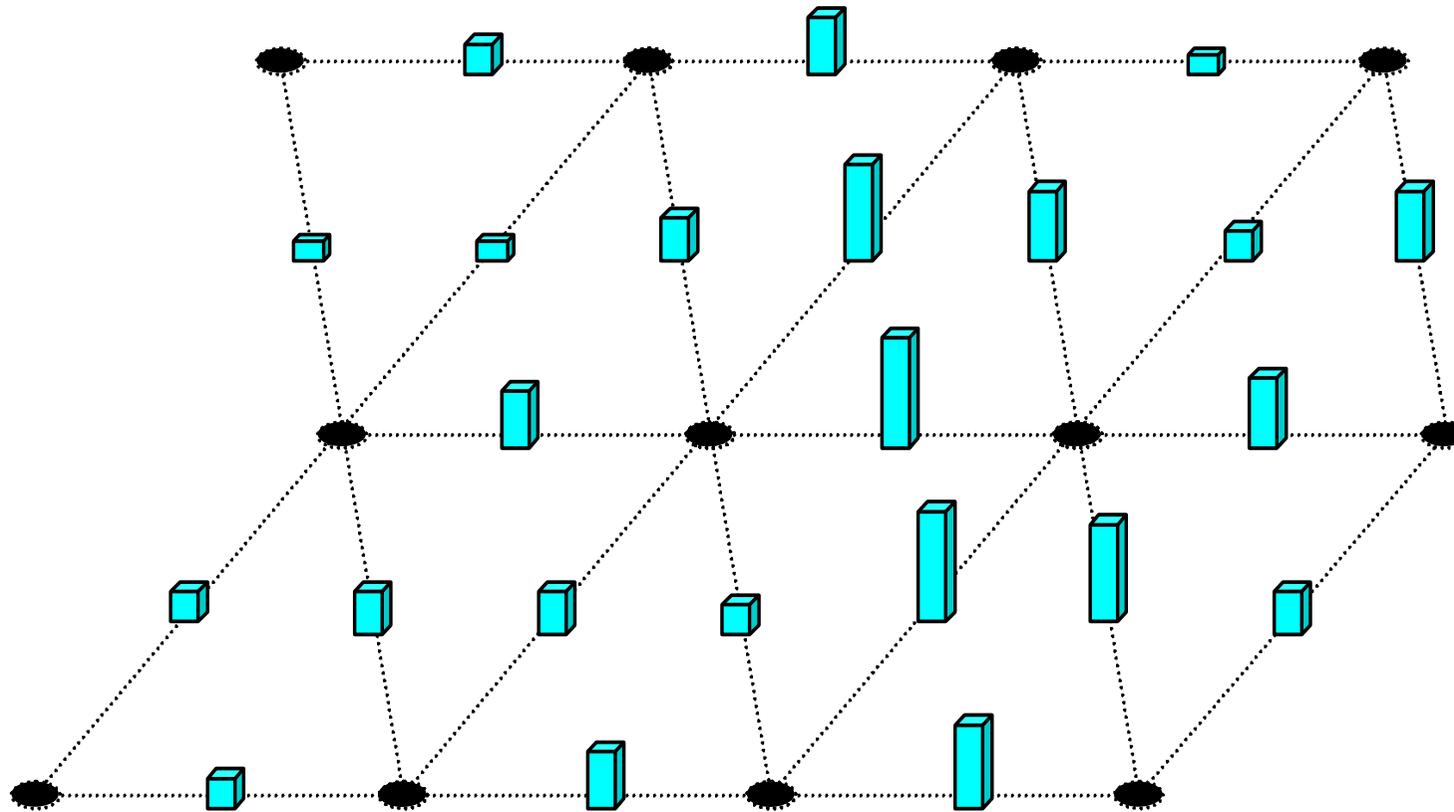
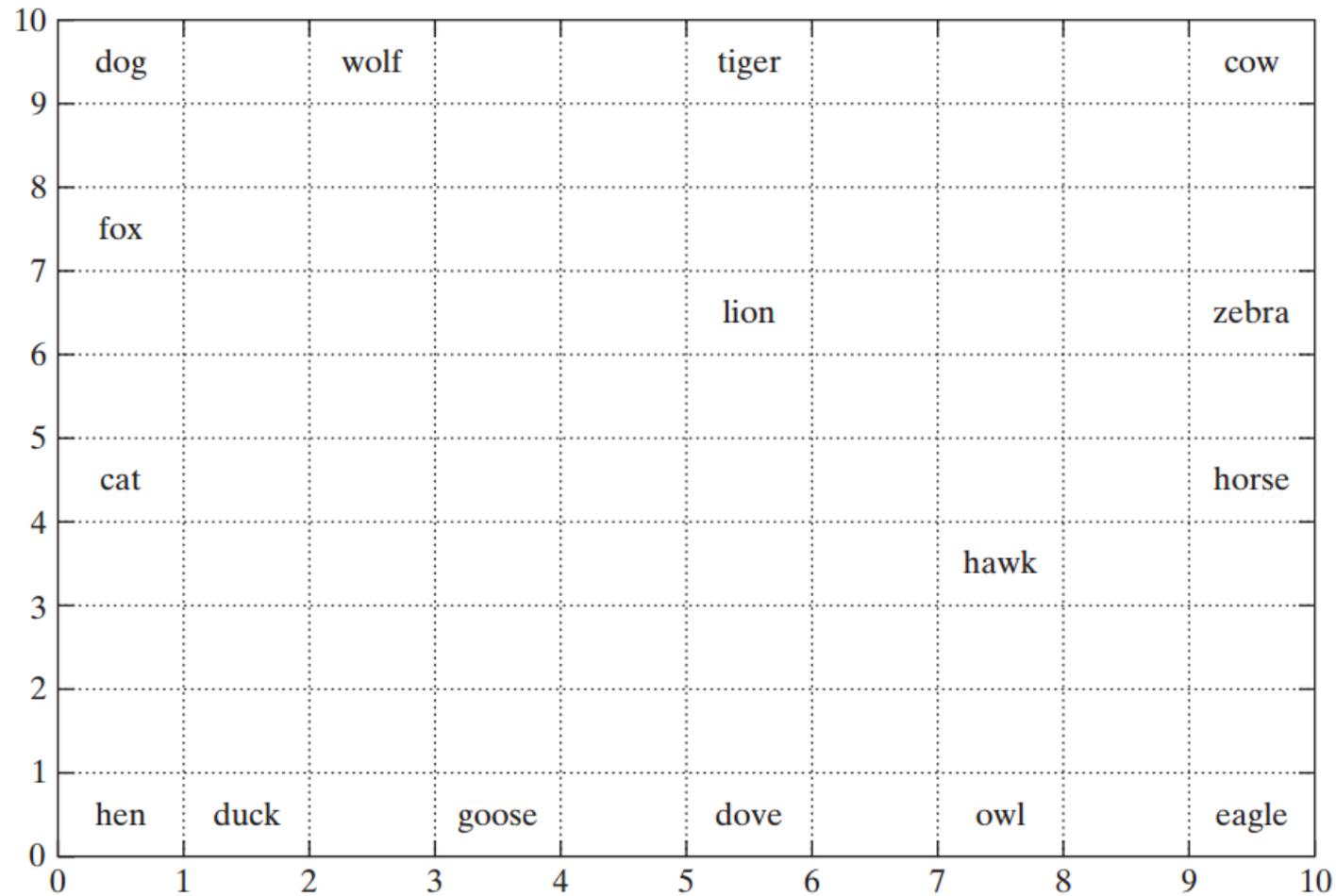


Figura 24 – Exemplo de matriz-U para arranjo hexagonal (figura extraída de ZUCHINI, 2003).

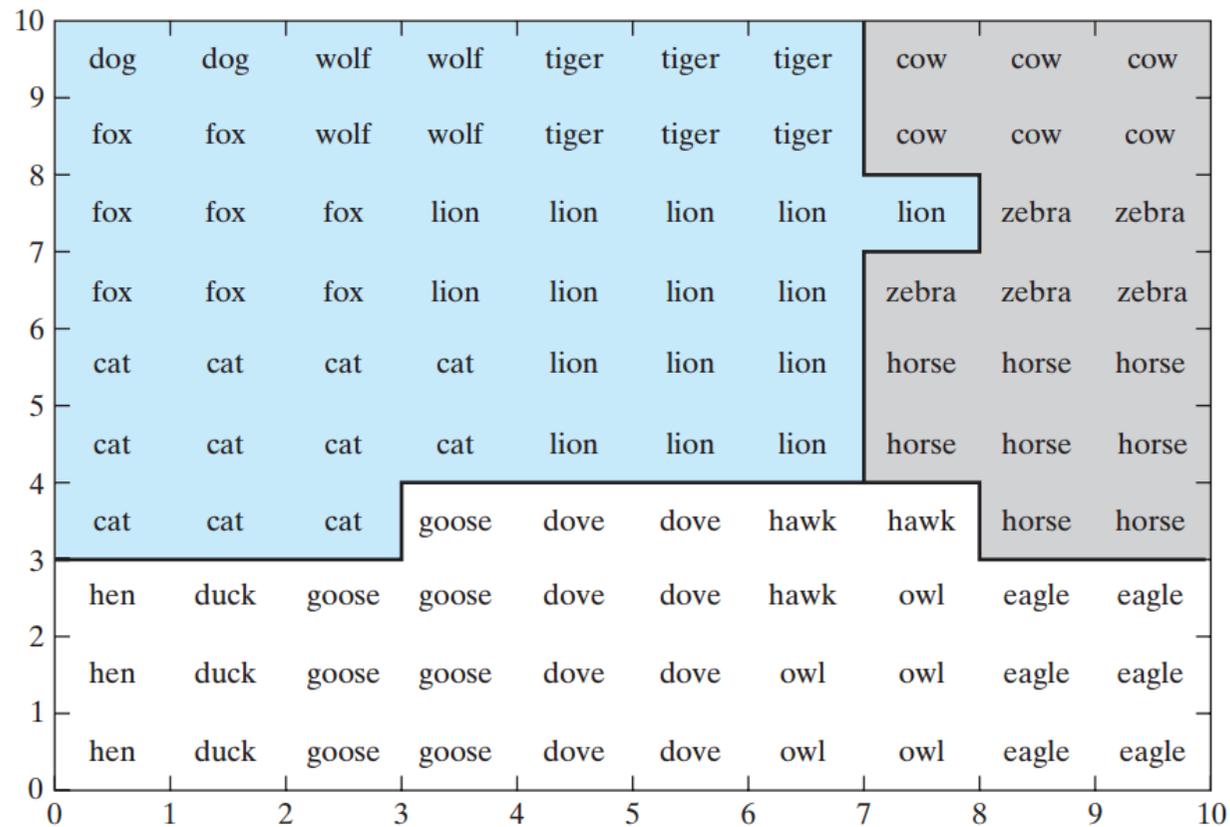
7.10 Mapa conceitual

Animal		Dove	Hen	Duck	Goose	Owl	Hawk	Eagle	Fox	Dog	Wolf	Cat	Tiger	Lion	Horse	Zebra	Cow
is	small	1	1	1	1	1	1	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0
	medium	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0
	big	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1
has	2 legs	1	1	1	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	4 legs	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1
	hair	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1
	hooves	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1
	mane	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	1	1	1	0
	feathers	1	1	1	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
likes to	hunt	0	0	0	0	1	1	1	1	0	1	1	1	1	0	0	0
	run	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0	1	1	1	1	0
	fly	1	0	0	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	swim	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Figura extraída de HAYKIN (2008), mostrando um conjunto de *features* associadas a cada espécie de animal presente no conjunto de dados.



Mapa auto-organizável 10 x 10: os neurônios que responderam mais ativamente aos padrões de entrada (*features*) receberam o respectivo rótulo. Figura extraída de HAYKIN (2008).



Cada neurônio foi marcado com o rótulo associado ao padrão de entrada (consequentemente, ao animal) para o qual ele é mais fortemente ativado. Percebe-se claramente que o mapa conseguiu capturar relações intrínsecas às próprias espécies – 3 clusters: em branco, temos os pássaros; em cinza, as espécies “pacíficas”; em azul, os predadores. Figura extraída de HAYKIN (2008).

7.11 Ferramentas de visualização e discriminação



Figura 253 – Interpretação do mapa após auto-organização (figura extraída de ZUCHINI, 2003).

- No mapa da Figura 25, cada neurônio é representante (neurônio com maior ativação) de um subconjunto dos dados de treinamento e recebe o rótulo da amostra mais próxima.
- Algumas informações podem ser extraídas do mapa mostrado na Figura 25, mesmo sem saber qual é a natureza dos dados de treinamento que levaram a este resultado:
 - Por requerer muitos neurônios para representá-la, quando comparada, por exemplo, à Classe 6, pode-se afirmar que a Classe 1 é bastante diversa em termos de perfil característico, embora haja uma continuidade de perfis (o subconjunto de neurônios que a representa é conexo).
 - Níveis elevados de diversidade também são verificados junto ao perfil da Classe 2, mas esta não exhibe uma continuidade de perfis característicos (é representada

por subconjuntos desconexos de neurônios), o que indica que a Classe 2 poderia ser dividida em subclasses mais coerentes internamente.

- As Classes 3 e 5 também poderiam ser divididas em subclasses (5 subclasses para a Classe 3 e 2 subclasses para a Classe 5) com maior coerência interna.
- Há exemplares da Classe 2 parecidos com o perfil característico de qualquer uma das outras classes existentes, pois neurônios alocados como representantes da Classe 2 são vizinhos de neurônios alocados como representantes de todas as demais classes. Já neurônios da Classe 5 são vizinhos apenas de neurônios das Classes 2, 6 e 7. Neurônios da Classe 1, por sua vez, são vizinhos apenas de neurônios das Classes 2 e 3 (tirando os possíveis *outliers* da Classe 7).

- O perfil característico da Classe 6 é mais similar ao da Classe 7 do que o perfil característico da Classe 1 o é para a mesma Classe 7 (os neurônios representantes das Classes 1 e 7 estão mais distantes no mapa do que os representantes das Classes 6 e 7).
- A Classe 7 possivelmente tem alguns *outliers*, representados por um neurônio isolado dos demais da mesma classe.

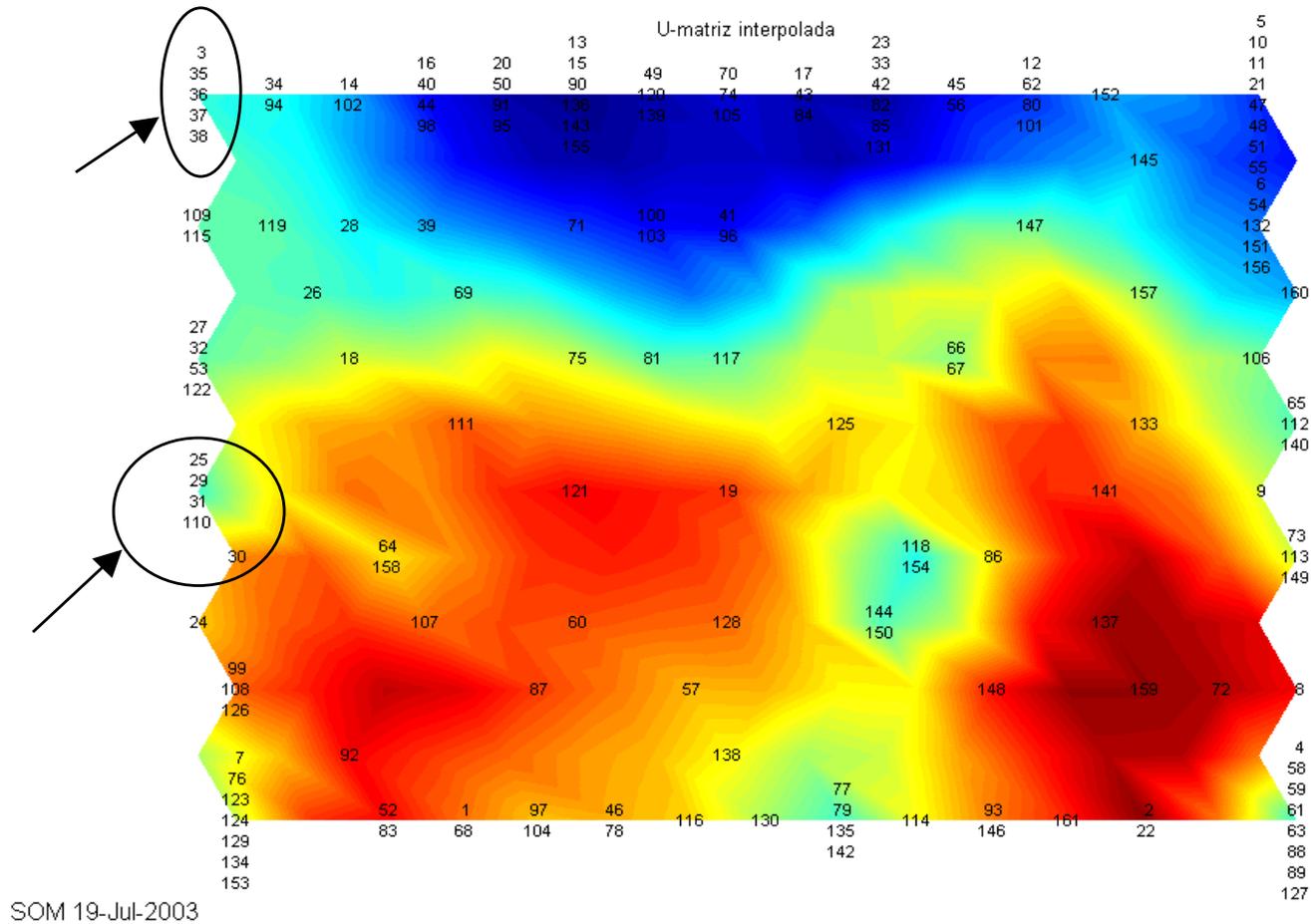


Figura 26 – Interpretação do mapa após auto-organização (figura extraída de ZUCHINI, 2003).

- Este mapa 2D foi treinado com textos referentes a centenas de resumos de um congresso interno de uma faculdade brasileira, que envolvia as áreas de (1) Exatas e Tecnologia (55 textos), (2) Humanas e Sociais (69 textos), e (3) Biológicas e Saúde (37 textos). A matriz-U da Figura 26 não possui 3 grupos característicos, mas muitos resumos sabidamente correlacionados em seu conteúdo foram mapeados num mesmo neurônio (ou em neurônios vizinhos), conforme indicado pelas setas e círculos.

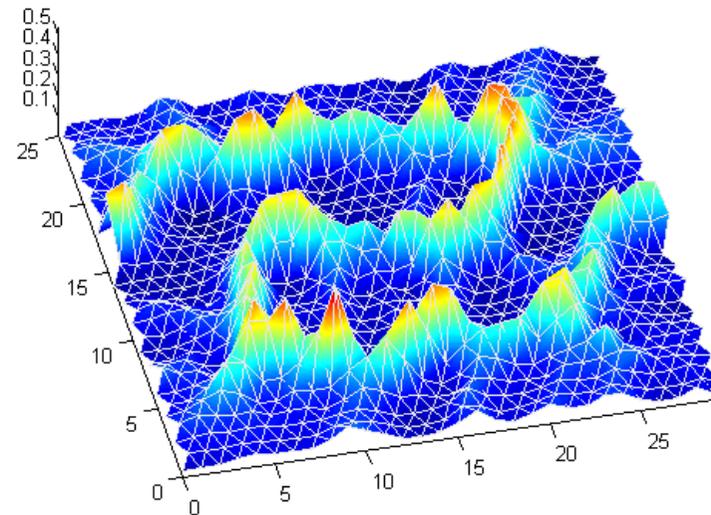
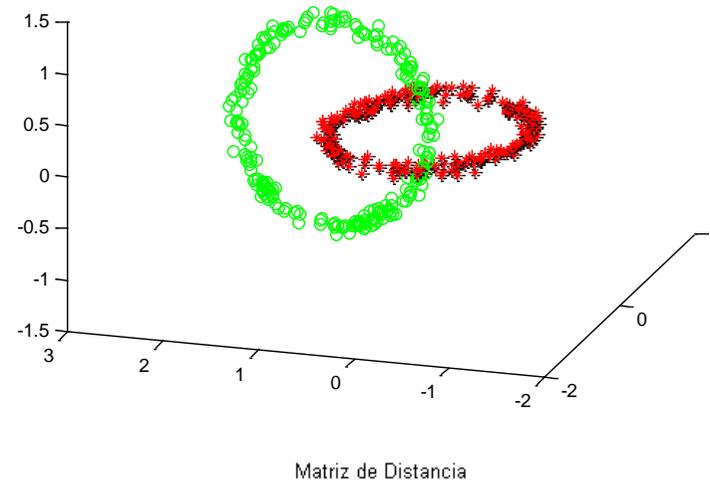


Figura 27 – Matriz-U para grid hexagonal (figuras extraídas de ZUCHINI, 2003).

7.12 Ordenamento de pontos em espaços multidimensionais

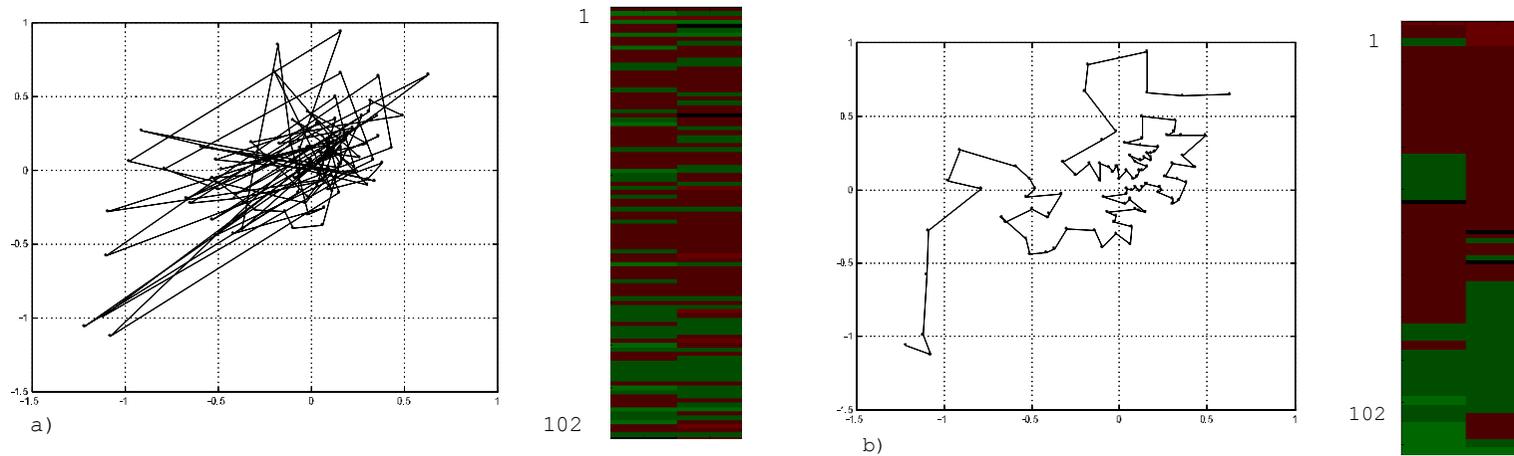
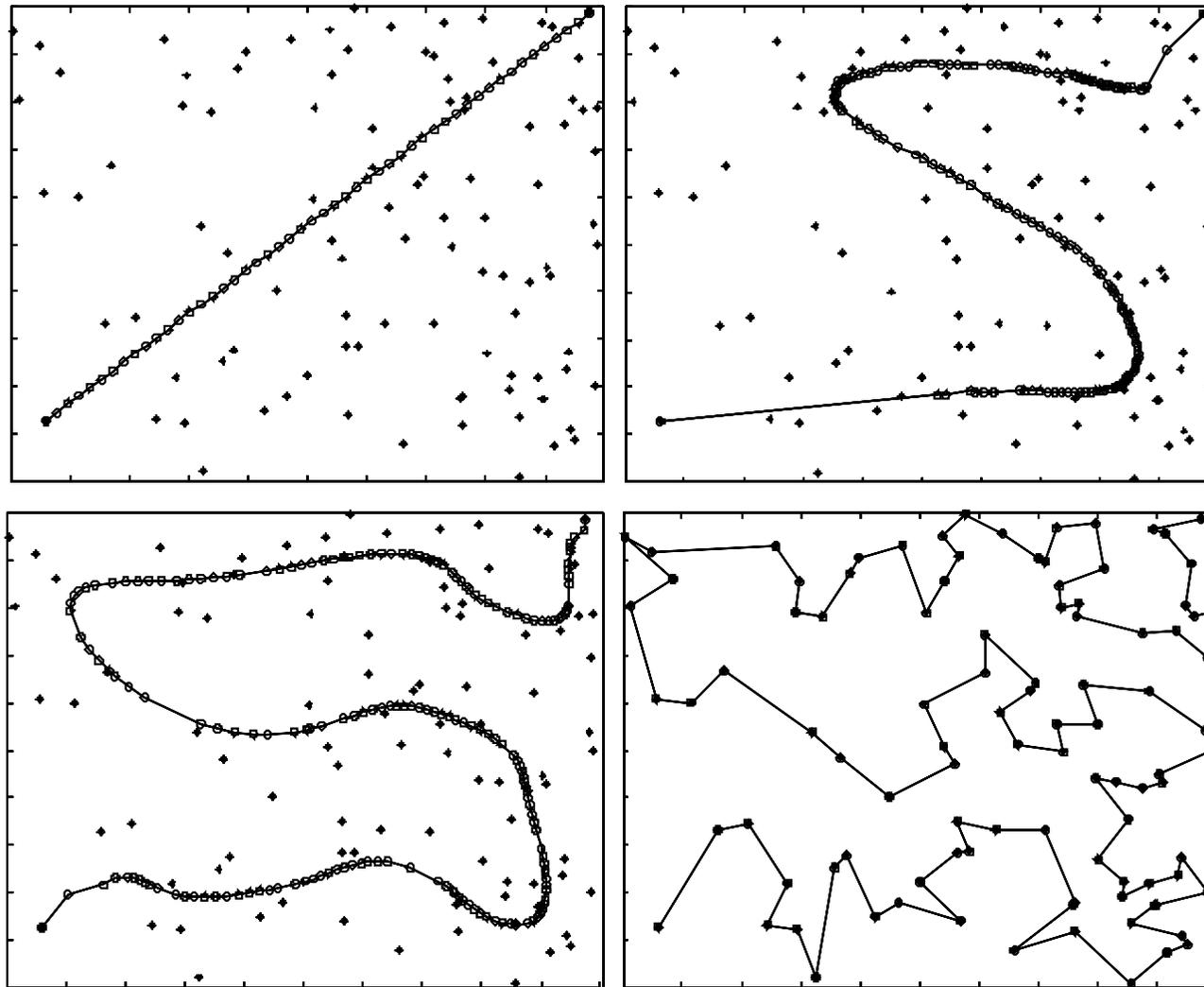


Figura 28 – Situação anterior (esquerda) e situação posterior (direita) ao ordenamento de pontos no \mathcal{R}^2 (GOMES *et al.*, 2004).

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



Modo de operação (GOMES *et al.*, 2004)

7.13 Roteamento de veículos (múltiplos mapas auto-organizáveis)

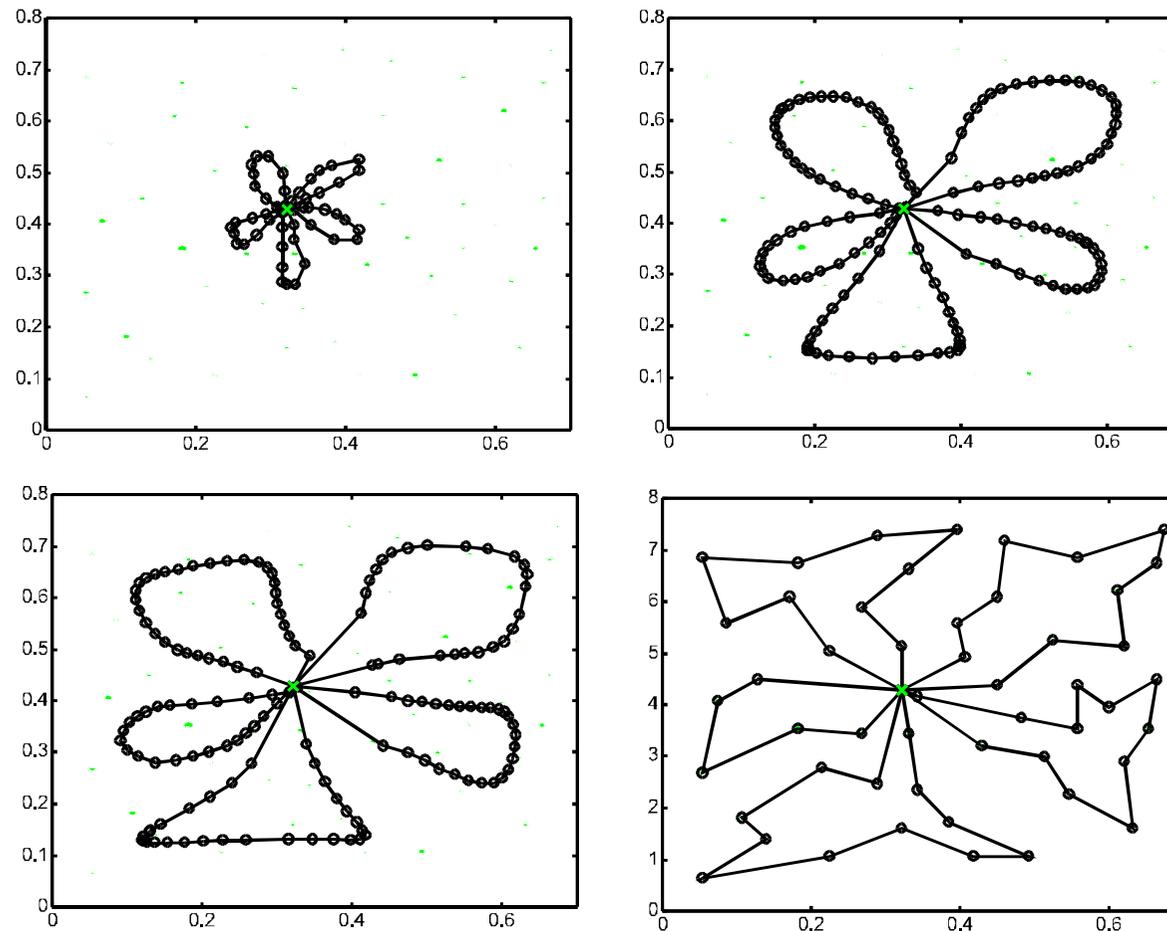
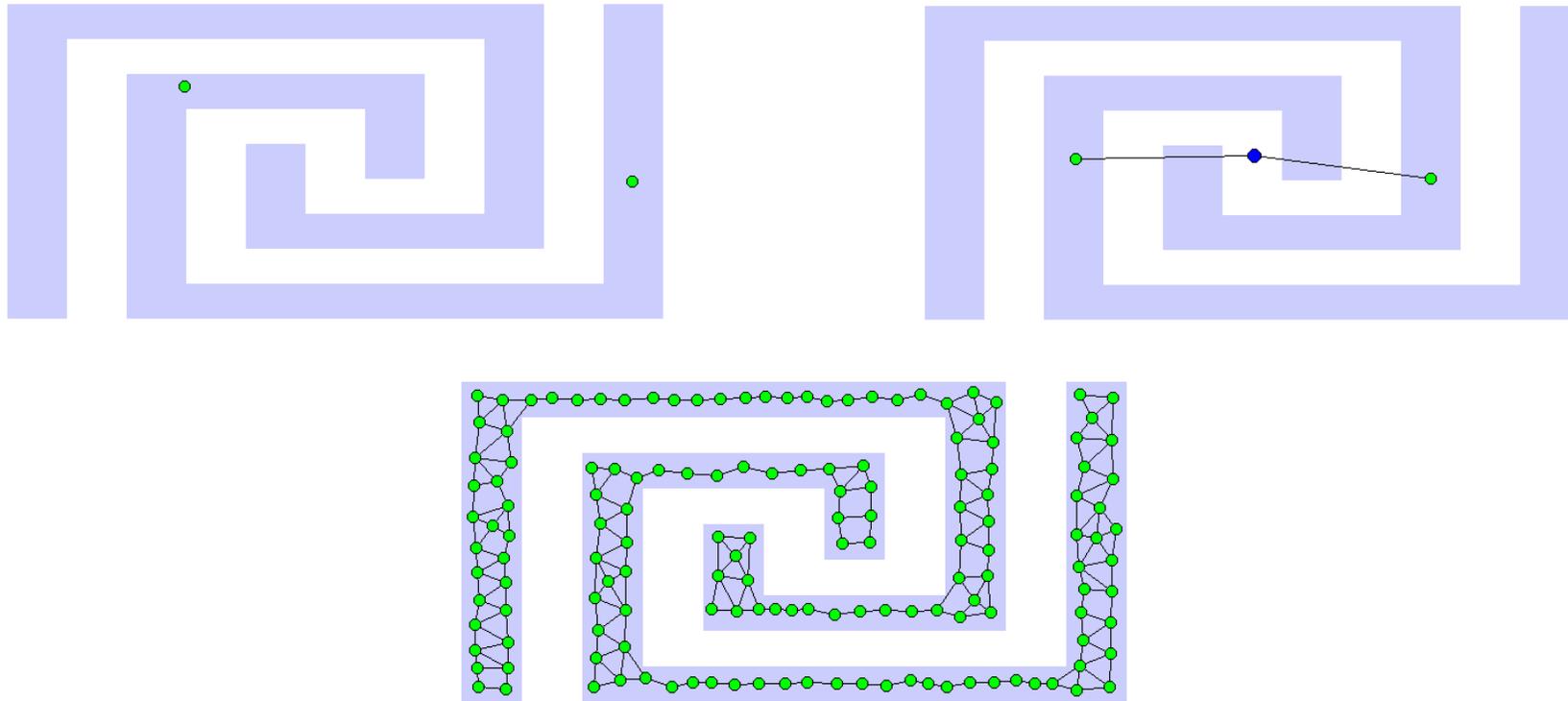


Figura 29 – Várias etapas do processo de auto-organização (GOMES & VON ZUBEN, 2002).

7.14 Mapas auto-organizáveis construtivos



Growing Neural Gas (FRITZKE, 1995).

7.15 Exemplo

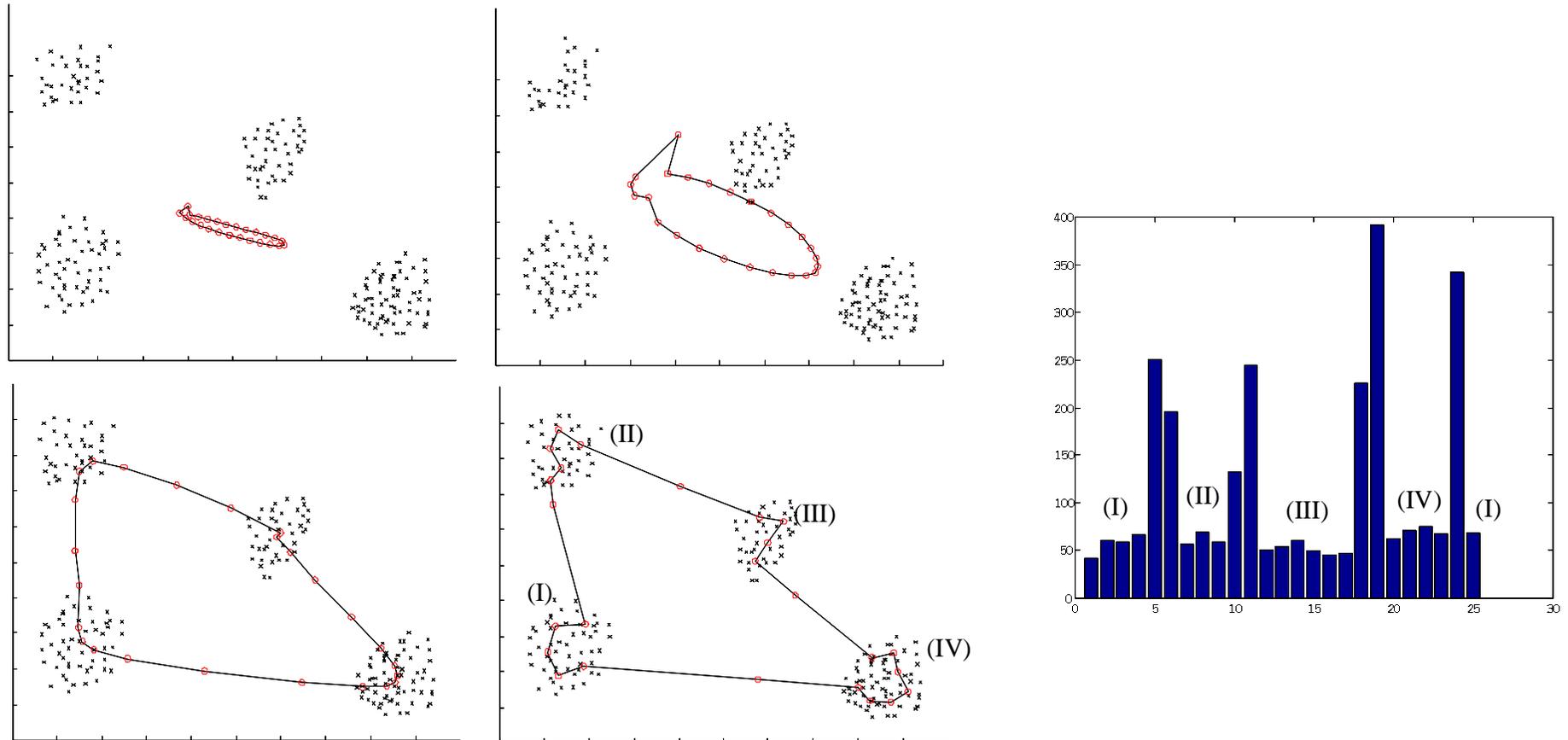


Figura 30 – Determinação automática do número de agrupamentos com base no vetor-U para arranjo unidimensional (Exemplo didático em 2 dimensões).

8. O caso Phineas Gage

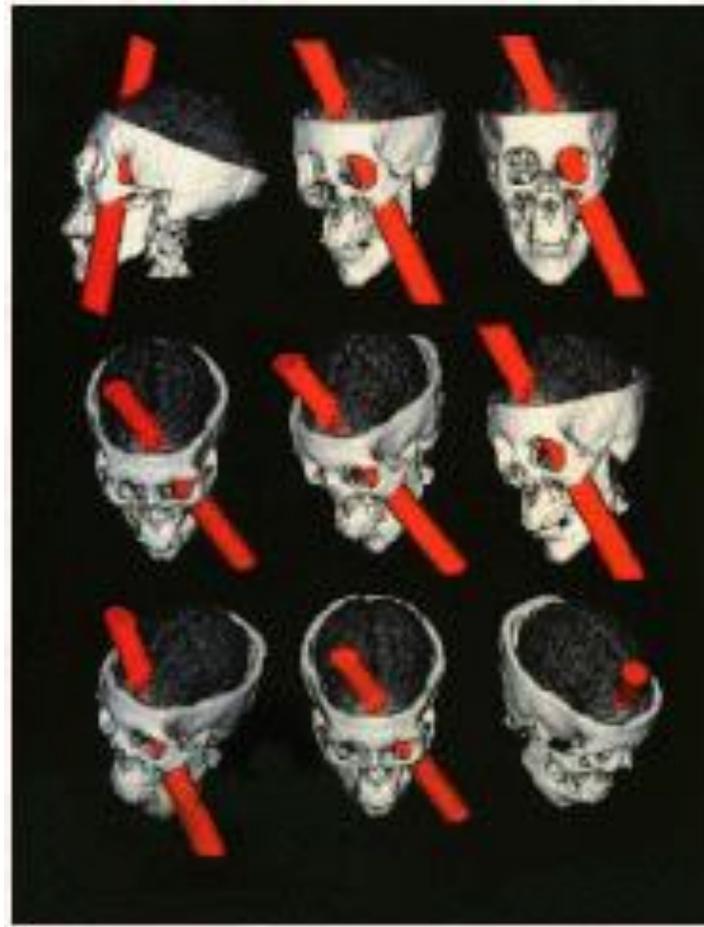
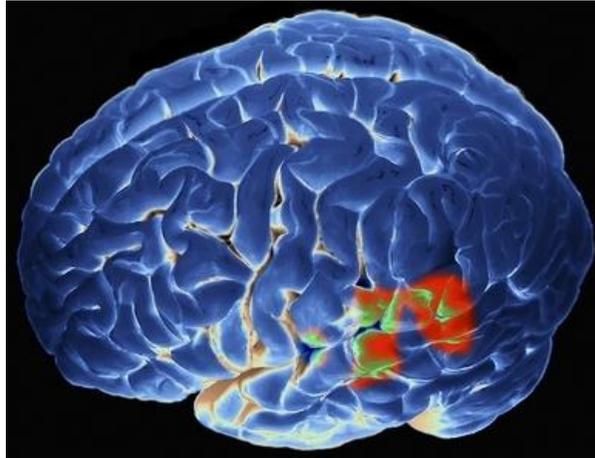


Figura 31 – Reconstrução computadorizada da destruição do cérebro de Phineas Gage por uma barra de ferro no ano de 1848.

9. Monitorando a atividade cerebral



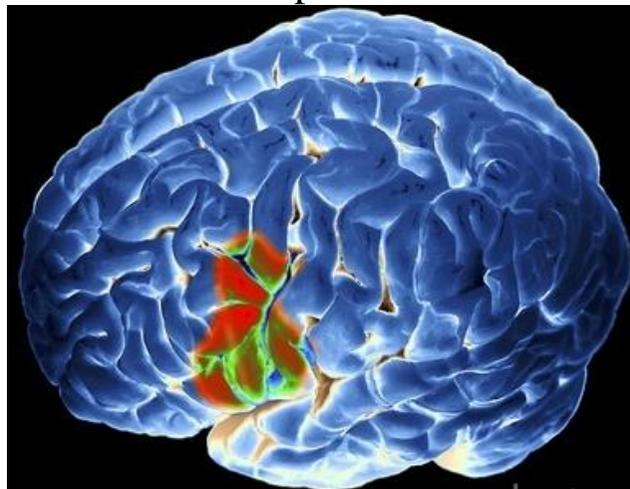
Ouvindo palavras



Lendo palavras



Falando palavras



Pensando em palavras

*Functional magnetic
resonance imaging or
functional MRI (fMRI)*

10. Referências

- BARLOW, H. B. “Unsupervised learning”, *Neural Computation*, 1: 295-311, 1989.
- BECKER, S. & PLUMBLEY, M. “Unsupervised neural network learning procedures for feature extraction and classification”, *International Journal of Applied Intelligence*, 6: 185-203, 1996.
- BOCCATO, L. “Novas Propostas e Aplicações de Redes Neurais com Estados de Eco”, Tese de Doutorado, Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação (FEEC/Unicamp), 2013.
- COSTA, J.A.F. “Classificação Automática e Análise de Dados por Redes Neurais Auto-Organizáveis”, Tese de Doutorado, Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação (FEEC/Unicamp), Dezembro 1999.
- ELMAN, J. L. Finding structure in time. *Cognitive Science*, vol. 14, p. 179-211, 1990.
- EVERITT, B. “Cluster Analysis”, 3rd. edition, John Wiley, 1993.
- FAQ: The self-organized systems (<http://www.calresco.org/sos/sosfaq.htm>)
- FAVATA, F. & WALKER, R. “A Study of the Application of Kohonen-Type Neural Networks to the Traveling Salesman Problem”, *Biological Cybernetics* 64, 463-468, 1991.
- FORT, J.C. “Solving a Combinatorial Problem via Self-Organizing Maps”, *Biological Cybernetics*, 59, 33-40, 1988.
- FRITZKE, B. “A Growing Neural Gas Network Learns Topologies”, in Tesauro, G., Touretzky, D.S., and Leen, T.K. (eds.). *Advances in Neural Information Processing Systems 7*, The MIT Press, pp. 625-632, 1995.
- GOMES, L.C.T., VON ZUBEN, F.J. & MOSCATO, P.A. “A Proposal for Direct-Ordering Gene Expression Data by Self-Organising Maps”, *International Journal of Applied Soft Computing*, vol. 5, pp. 11-21, 2004.
- HEBB, D. O. “The Organization of Behavior”, Wiley, 1949.
- JAEGER, H. “The Echo State Approach to Analyzing and Training Recurrent Neural Networks”, Technical Report GMD 148, Bremen, German National Research Center for Information Technology, 2001.

- KASKI, S. “Data Exploration Using Self-Organizing Maps”, Ph.D. Thesis, Helsinki University of Technology, Neural Networks Research Centre, 1997.
- KOHONEN, T. “Self-organized formation of topologically correct feature maps”, *Biological Cybernetics*, 43:59-69, 1982.
- KOHONEN, T. “Self-Organization and Associative Memory”, 3rd. edition, Springer, 1989 (1st. edition, 1984).
- KOHONEN, T. “The Self-Organizing Map”, *Proceedings of the IEEE*, 78:1464-1480, 1990.
- KOHONEN, T., OJA, E., SIMULA, O., VISA, A. & KANGAS, J. “Engineering applications of the self-organizing map”, *Proceedings of the IEEE*, 84:1358-1384, 1996.
- KOHONEN, T. “Self-Organizing Maps”, 2nd. edition, Springer, 1997.
- LINSKER, R. “Self-organization in a perceptual network”, *Computer*, 21: 105-128, 1988.
- LUKOSEVICIUS, M. & JAEGER, H. “Reservoir Computing Approaches to Recurrent Neural Network Training”, *Computer Science Review*, 3: 127-149, 2009.
- MACKAY, D. M. “The epistemological problem for automata”, in C. E. Shannon & J. McCarthy (eds.) *Automata Studies*, Princeton University Press, pp. 235-251, 1956.
- MATSUYAMA, Y. “Self-Organization via Competition, Cooperation and Categorization Applied to Extended Vehicle Routing Problems”, *Proc. International Joint Conference on Neural Networks*, 1, 385-390, 1991.
- MODARES, A., SOMHOM, S. & ENKAWA, T. “A Self-Organizing Neural Network Approach for Multiple Traveling Salesman and Vehicle Routing Problems”, *Int. Transactions in Operational Research*, 6, 591-606, 1999.
- NERRAND, O., ROUSSEL-RAGOT, P., PERSONNAZ, L., DREYFUS, G. Neural Networks and Nonlinear Adaptive Filtering: Unifying Concepts and New Algorithms. *Neural Computation*, vol. 5, no. 2, pp. 165-199, 1993.
- POTVIN, J.-I. & ROBILLARD, C. “Clustering for Vehicle Routing with a Competitive Neural Network”, *Neurocomputing*, 8, 125-139, 1995.

TOOLBOX: <http://www.cis.hut.fi/projects/somtoolbox/>

ULTSCH, A. “Knowledge Extraction from Self-Organizing Neural Networks”, in O. Opitz *et al.* (eds.) *Information and Classification*, Springer, pp. 301-306, 1993.

ZUCHINI, M.H. “Aplicações de Mapas Auto-Organizáveis em Mineração de Dados e Recuperação de Informação”, Tese de Mestrado, Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação (FEEC/Unicamp), Setembro 2003.