

PAVIMENTAÇÃO DE GRADE NEURAL ESFÉRICA COM PROJEÇÃO TETRAÉDRICA PARA ATENUAR CURVA DE DIMENSIONAMENTO DE GRADE NEURAL DE MAPA AUTO-ORGANIZÁVEL GEODÉSICO

Rômulo M. de Sousa, Roberto C. Limão

Universidade Federal do Pará, Instituto de Tecnologia do Pará
rmsousa@ufpa.br, limao@ufpa.br

Resumo – Este trabalho propõe a utilização do sólido platônico tetraedro para projeção geodésica na pavimentação de grade neural esférica de redes neurais artificiais (RNA) de Kohonen, ou mapas auto-organizáveis (self-organizing map – SOM). Grades neurais esféricas são utilizadas para eliminar o efeito de borda inerente às grades neurais definidas no espaço euclidiano. A projeção tetraédrica estabelece intervalos menores no crescimento de uma grade neural, diferentemente do que ocorre com a projeção do icosaedro, que é comumente utilizado por permitir uma topologia de rede da grade neural mais regular, por requerer uma menor variação no tamanho das cordas geodésicas projetadas na superfície da esfera. Contudo, o icosaedro requer um crescimento exponencial no dimensionamento das grades neurais, o que limita a processo de escolha da quantidade de neurônios que possibilite uma melhor qualidade na projeção e quantização vetorial do algoritmo SOM. Para apresentação dos resultados são utilizadas duas bases de dados, uma com pontos distribuídos de forma uniforme em um espaço euclidiano tridimensional, e outra com dados socioeconômicos de um projeto de pesquisa de ação antrópica sobre o meio ambiente.

Palavras-chave – Rede Neural de Kohonen, Mapa Auto-Organizável, Efeito de Borda, Grade Neural Esférica, Sólido Platônico

1 Introdução

A rede neural artificial (RNA) de Kohonen, ou mapa auto-organizado (*self-organizing map* (SOM)), é utilizada na análise exploratória de dados e reconhecimento de padrões através da redução de dimensionalidade, por meio do mapeamento topologicamente ordenado dos dados de entrada [1]. A redução de dimensionalidade deve-se a projeção e da quantização vetorial [1, 2], alcançando geralmente espaços bidimensionais pela facilidade da projeção do mapa de características gerado pelo algoritmo SOM. O processo de aprendizado da grade neural ocorre através das interações locais dos neurônios e os neurônios que formam sua vizinhança, até alcançar uma ordem global [3]. A estrutura em que os neurônios estão organizados em uma grade neural é definida por sua pavimentação. A pavimentação (*tessellation*) de uma superfície é a sua cobertura por figuras geométricas de forma a não ocorrer espaços vazios e sobreposições destas figuras. Grades neurais pavimentadas em um espaço euclidiano, independentemente do entrelaçamento (*lattice*) da grade ser retangular ou hexagonal, estão sujeitas ao efeito de borda, que é caracterizado com a redução no tamanho da vizinhança dos neurônios mais próximos à borda [1, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10]. Com isto, o efeito de borda causa uma desigualdade no número de interações que ocorrem com os neurônios que estão mais próximos a borda e os que estão mais ao centro, o que aumenta a distorção na quantização e projeção vetorial dos neurônios mais próximos da borda, e consequentemente um aumento da distorção total dos mapas topográficos gerados com o processo de aprendizagem do algoritmo SOM [1, 6, 7]. Uma solução empregada para eliminação do efeito de borda é a utilização de regras de pesos condicionais nos exemplos de entrada e que, dependendo na posição do neurônio vencedor e a magnitude de seus pesos sinápticos em relação aos valores do exemplo de entrada, os condicionais são modificados [1]. Outra abordagem utilizada é a eliminação das bordas através da substituição da grade neural bidimensional por grades definidas em espaços não euclidianos em que os neurônios estão organizados em uma topologia semelhante aos torus e à esfera [4].

Uma grade neural toroidal [5, 9, 11] permite uma topologia de rede regular perfeita [10], porque todos os neurônios possuem uma mesma quantidade de vizinhos, porém a estrutura anelar do torus não permite uma equidistância entre neurônios localizados na parte mais central e os neurônios posicionados mais externamente, e a visualização de um mapa toroidal não se mostra intuitiva [4, 7]. Uma grade neural esférica [4, 5, 6, 7, 8, 12, 13], por se assemelhar a mapas geográficos do globo terrestre aos quais estamos mais habituados a observar, possibilitam uma visualização mais intuitiva do que os mapas toroidais [7, 10]. Para que uma grade neural esférica alcance uma topologia de rede regular, a pavimentação da grade neural deve seguir a projeção de um sólido platônico em uma esfera. Os sólidos platônicos são poliedros convexos que possuem a mesma quantidade de faces congruentes em cada um dos vértices e possuem uma circunsfera que toca todos os seus vértices. Ao todo existem cinco sólidos platônicos: o tetraedro, o cubo, o octaedro, o icosaedro e o dodecaedro [14]. Dentre estes, a projeção do icosaedro é recomendada por Ritter [4] por requerer uma menor variação no tamanho das cordas geodésicas, que é a menor distância entre dois pontos em uma superfície [14], o que caracteriza uma maior aproximação do icosaedro à superfície de uma esfera [4, 5, 6, 7, 13]. Com a aplicação do método de pavimentação de Fuller [15], que é o embasamento do domo geodésico, podem-se aplicar diferentes frequências de triangulação nas faces do icosaedro e com redução das diferenças de tamanho das cordas geodésicas, há uma maior aproximação do formato esférico. No entanto, como cada vértice do entrelaçamento das cordas geodésicas representa um neurônio, à medida que ocorre um aumento na frequência de pavimentação a quantidade de neurônios cresce de forma exponencial com o aumento do tamanho da grade neural geodésica. Desta forma, a estrutura geométrica do icosaedro limita o controle sobre crescimento de grades neurais esféricas que o utilizam em sua projeção [10].

A definição do tamanho da rede neural determina a quantidade de neurônios que são alocados no processo de treinamento, e é um dos principais parâmetros no desenho da arquitetura de qualquer RNA. Esse parâmetro tem uma importância ainda maior para o SOM, porque os neurônios além de participarem do processo de treinamento, também são utilizados para a visualização do mapa topográfico alcançado no processo de aprendizado. Não existe uma regra geral que determine o melhor tamanho da grade neural, em consequência dos diferentes fatores que estão relacionados à definição da dimensionalidade da grade neural. A definição desse parâmetro pode estar atrelada aos próprios requisitos do problema [16], ou pode ser definido através do método da tentativa e erro [17], ou seguir uma metodologia estruturada com a utilização de métricas de medidas de qualidade que são aplicados sobre o resultado obtido em diferentes tamanhos de grade neural utilizadas no processo de treinamento [2, 18].

Este trabalho propõe uma projeção do sólido platônico tetraedro para a pavimentação da grade neural, que atenua a curva de crescimento da grade neural esférica causada pela projeção do icosaedro. Os resultados alcançados se devem à estrutura geométrica mais simples do tetraedro, que determina intervalos menores de crescimento da grade neural, e amplia o domínio na investigação dos parâmetros de dimensionamento da grade neural.

A seguir apresentamos na seção 2 uma breve revisão sobre pavimentações de grades neurais esféricas utilizadas pelo algoritmo SOM. Na seção 3 descrevemos a pavimentação de uma grade neural geodésica com a projeção do tetraedro e particularidades no algoritmo SOM para tratar a pavimentação proposta. Aspectos sobre avaliação do SOM são abordados de forma sucinta na seção 4, e na seção 5 são demonstrados os resultados alcançados com a utilização de duas bases de dados, uma com pontos distribuídos de forma uniforme e a outra com dados socioeconômicos de um projeto de pesquisa ambiental.

2 Pavimentação de grades neurais esféricas

A topologia de uma grade neural é definida pela pavimentação utilizada na organização dos neurônios que a compõem, e é considerada perfeitamente regular quando o tamanho da vizinhança de todos os neurônios possui a mesma quantidade de neurônios adjacentes. As grades neurais pavimentadas em plano euclidianos estão fadadas às topologias irregulares em decorrências dos limites impostos pela borda, e para alcançar uma regularidade topológica, o primeiro passo é eliminar as restrições impostas pelo plano euclidiano [10].

A superfície da esfera permite uma pavimentação topologicamente regular com a eliminação do efeito borda. Apesar de não ser tão perfeita quanto a regularidade topológica do torus, a curvatura uniforme positiva da superfície não euclidiana de uma esfera possibilita uma maior equidistância no entrelaçamento dos neurônios. Apenas a projeção de um sólido platônico na superfície de uma esfera pode proporcionar uma pavimentação regular [4]. Os cinco sólidos platônicos existentes, como podem ser observados na Figura 1, possuem faces regulares não-sobrepostas, planas, que são polígonos convexos, com arestas retas, e possuem igual número de faces congruentes que se unem a cada um dos vértices [14]. Estas características é que conferem aos sólidos platônicos a regularidade necessária para uma pavimentação de uma grade neural esférica com equidade tanto na distância entre os neurônios, quanto no tamanho da vizinhança de todos os neurônios. Outra peculiaridade dos sólidos platônicos é que cada um deles possuem uma circunferência que toca todos os seus vértices, uma meiasfera que toca todas as arestas, e uma insfera que toca todas as suas faces [14]. No caso da grade neural esférica, a projeção do sólido platônico se dá na circunferência, e cada vértice do sólido é o ponto de localização do neurônio.

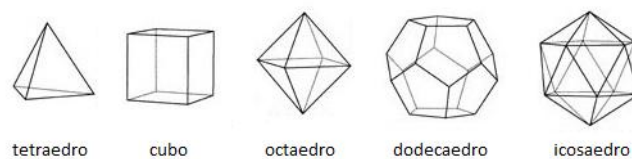


Figura 1 – Sólidos platônicos [14, 19]

Dentre os cinco sólidos platônicos, Ritter [4] recomenda a utilização do icosaedro para a pavimentação da grade neural esférica, e justifica sua utilização pela busca de uma uniformidade perfeita, através de uma subdivisão triangular das faces do icosaedro, mas deixa claro que esta triangulação alcança uma quase regularidade, pois os vértices originais do icosaedro continuarão com 5 faces triangulares e os demais com 6 faces triangulares. A projeção das arestas dos sólidos platônicos, através do método de triangulação, está baseada no método do domo geodésico [15], que tem origem na teoria de que uma esfera poderia ser subdividida em triângulos por uma rede de linhas geodésicas que se intersectam [14].

O trabalho de Boudjemaï [Boudjemaï 2003] utiliza grades neurais geodésica com a projeção do icosaedro para a pavimentação da grade, e tem como objetivo a reconstrução de superfícies através da conversão de um conjunto de pontos desorganizados em estrutura de malha coerente que representa fielmente a superfície original, de onde os pontos de exemplos foram retirados para o treinamento da grade neural. Foi utilizada uma projeção do icosaedro com uma frequência 4, que gera 320 faces, 480 arestas e 162 vértices. Como cada vértice corresponde a um neurônio esta pavimentação da grade determina 162 neurônios para o aprendizado da rede.

Na investigação de Wu [6] sobre diferentes tipos de entrelaçamento de grades neurais, umas das implementações analisadas é o algoritmo de Rakhmanov [20] que distribui 162 pontos sobre a esfera de maneira assintoticamente uniforme e

calcula a distância entre cada vértice e seus neurônios vizinhos, porém há uma variação nos valores das distâncias entre os neurônios. Outro modelo observado foi o de Oyabu [21] em que a pavimentação da esfera através de coordenadas de latitude e longitude, porém as distâncias entre os pontos localizados no equador da esfera são longas enquanto nos pólos as distâncias são comprimidas. Em decorrência da irregularidade topológica destes dois modelos, Wu optou pela utilização da projeção dos sólidos platônicos, seguindo a recomendação de Ritter [4] e, similarmente a Boudjemai [5], optou pelo icosaedro por sua maior regularidade topológica de rede, como visto anteriormente. Para apresentar os resultados alcançados, Wu [6] utilizou um icosaedro de frequência 6 que gera uma grade neural com 362 vértices neurônios. Em sua proposta para demonstrar um método de indexação de uma estrutura de dados geodésica para minimizar o tempo de processamento (GeoSOM) [7] são realizados experimentos com uma grade neural geodésica com 812 neurônios, com uma base de dados sintéticos com 500 exemplos de treinamento, e uma grade neural geodésica com 644 neurônios que foi treinada com uma base de dados de diagnóstico médico com 699 exemplos de treinamento. As grades neurais geodésicas foram pavimentadas com a projeção do icosaedro com frequência 9 e 8, respectivamente. Observamos aqui, como o crescimento da grade neural geodésica com a projeção do icosaedro se dá de forma acentuada à medida que se aumenta a frequência de triangulação do icosaedro.

Apesar da pavimentação da grade neural com a projeção do icosaedro ter a vantagem de estabelecer uma alta regularidade na topologia da rede neural, sua principal desvantagem é o limitado controle que se tem sobre o crescimento da grade neural [10]. A Figura 2 apresenta a curva de crescimento da grade neural geodésica com projeção do icosaedro. A curva demonstra a quantidade de neurônios que são produzidos à medida que aumenta a frequência de triangulação. Com uma frequência 7 são em torno de 500 neurônios, ao chegar na frequência 10 chega-se em torno de 1000, e a frequência 20 se aproxima de 4.000 neurônios. Esta curva de crescimento denota que a quantidade de neurônios gerados a cada nova frequência de triangulação dá saltos significativos entre uma frequência e outra, reduzindo as opções de escolha de uma grade neural que se mostre mais adequada a um propósito específico.

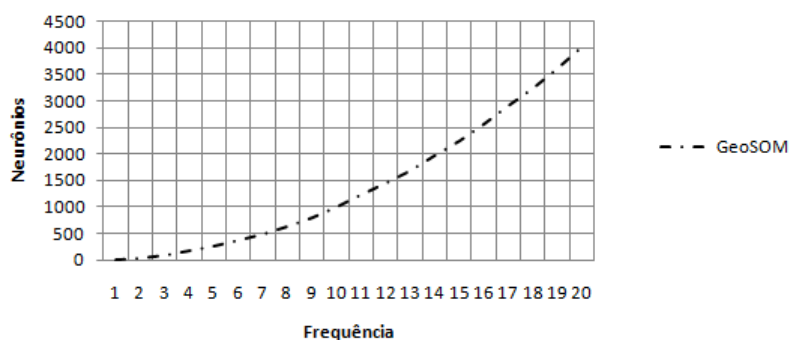


Figura 2 – Gráfico de crescimento da grade neural geodésica com projeção do icosaedro

São raros os trabalhos que necessitam de uma quantidade de neurônios como a que se apresentam para frequências de 20, mas a utilização de SOM em parametrização de superfícies [13] requer projeções do icosaedro com triangulações de frequências mais altas, usualmente são utilizadas grades neurais com menor quantidade de neurônios [9, 17, 22]. Alguma das alternativas utilizadas para minimizar a limitação no crescimento da grade neural, é a construção de uma grade neural helicoidal [8], além dos métodos observados na investigação de Wu [6], porém estas alternativas de maior controle de crescimento acabam por levar a uma irregularidade na topologia da rede [10]. Outro aspecto a considerar é a complexidade envolvida no processo de construção da grade neural helicoidal [8] e do próprio GeoSOM [7], que requerem um processo de conversão do mapa de características do SOM esférico para um plano euclidiano bidimensional para possibilitar uma visualização completa do mapa.

Desta forma, propomos neste trabalho uma alternativa de pavimentação da grade neural geodésica que se baseia na projeção de outro sólido platônico. Diferentemente da sugestão de Ritter [4] que indica a utilização do icosaedro por permitir uma alta regularidade de rede, optamos pelo tetraedro que apesar de possuir a maior variação no tamanho das arestas dentre os cinco sólidos platônicos (Figura 1), possui uma estrutura geométrica mais simples, que possui uma maior flexibilidade em sua curva de crescimento, e na apresentação do mapa topográfico. Na seção 3 apresentamos a pavimentação da grade neural geodésica com a projeção do tetraedro, a descrição das modificações no algoritmo SOM inerentes no entrelaçamento da grade neural, ao qual denominamos de SOM 4H (*tetrahedron*).

3 Grade neural geodésica tetraédrica

O tetraedro é o sólido platônico que apresenta a menor quantidade de faces, e como sua face é um triângulo, também possui uma menor quantidade de vértices e arestas, como pode ser observado na Figura 1. Estas características do tetraedro o tornam uma estrutura geométrica mais simples dentre os cinco sólidos platônicos, porém possui o maior intervalo entre a menor e a maior aresta, o que torna a sua irregularidade entre as distâncias dos seus vértices a maior dentre os sólidos platônicos, o que a

princípio contraria a recomendação de Ritter [4] que recomenda o icosaedro justamente por ser o sólido platônico de maior regularidade das distâncias dos vértices.

Como pode ser observado na Figura 1, o tetraedro possui quatro vértices e cada um deles se encontra na junção de três faces, tendo um formato de uma pirâmide. A sua pequena quantidade de faces permite criar uma rede de diagrama em um arranjo bidimensional [14] como apresentado na Figura 3.a, que forma um paralelogramo dividido por quatro triângulos equiláteros. A Figura 3.b apresenta a triangulação [14] do diagrama de rede do tetraedro. Como a posição de cada vértice é a posição de um neurônio da grade, é possível representar o entrelaçamento da grade neural de forma matricial.

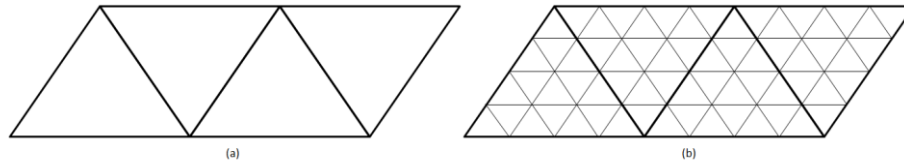


Figura 3 – Diagrama de rede do tetraedro (a) sem triangulação e (b) com triangulação de frequência 4

Para pavimentar esfericamente a grade neural com a projeção do tetraedro, os neurônios localizados nos vértices das bordas da grade devem estar associados a um neurônio espelho também localizado na borda, como mostra a Figura 4. Todos os neurônios localizados nas bordas possuem um neurônio imagem, com exceção dos neurônios A e M , que estão localizados nos vértices centrais da borda superior e da borda inferior da grade. Estes neurônios se diferenciam dos demais neurônios que representam os vértices do tetraedro, porque sua localização no diagrama de rede já é demarcada pela junção das três faces do tetraedro, no caso dos neurônios E e I , que representam os outros dois vértices, requerem neurônios imagem E' e I' , respectivamente, para compor a junção das três fases do tetraedro.

A duplicação dos demais neurônios localizados na borda conecta as seis arestas do tetraedro original, que estão localizadas externamente no diagrama de rede, como mostra a Figura 4. Desta forma, a lateral formada pelos neurônios $\{B, C, D, E\}$ se une à lateral onde estão localizados os neurônios imagem $\{B', C', D', E'\}$; a lateral $\{F, G, H\}$ com a lateral $\{F', G', H'\}$, e a lateral $\{L, K, J, I\}$ com $\{L', K', J', I'\}$, respectivamente. Unem-se assim todas as laterais, como se fosse uma dobradura de papel. Este método de duplicação, atrelado ao tamanho das dimensões da grade, permite a representação geométrica tridimensional do tetraedro. Porém, para a projeção do tetraedro na esfera é necessário que a distância entre dois neurônios seja a distância geodésica entre o vértice do tetraedro, que depende da frequência de triangulação que está sendo utilizada na pavimentação e o raio da circunferência em que é projetado o tetraedro [14].

Para a implementação da grade neural geodésica com uma pavimentação baseada no icosaedro, Boudjemaï [5] utilizou o esquema de subdivisão borboleta [23] em que um novo vértice é inserido no meio de cada aresta, criando duas novas arestas, e como considera impossível transcrever as informações de conectividade para uma tabela ou uma matriz, é utilizada uma análise de vizinhança dinâmica baseada em gráfico de adjacência entre os neurônios da grade. Para a representação da grade neural geodésica Wu [6, 7] utiliza o diagrama de rede do icosaedro e implementa os vértices que são mapeados com duas coordenadas U, V , e armazena os vértices em uma matriz bidimensional que é coberta apenas parcialmente, em decorrência da irregularidade do formato do diagrama de rede do icosaedro. Um programa é utilizado para criar uma estrutura de dados que identifica os vértices que compartilham uma mesma coordenada e cria *arrays* unidimensionais que serão utilizados para navegar pela grade neural. Para o processo de crescimento da grade neural, a triangulação é realizada através de um algoritmo de subdivisão das arestas, e as coordenadas dos novos vértices são normalizados para cobrir uma esfera unitária. A visualização do mapa topográfico gerado pelo aprendizado da grade neural é obtida com uma projeção pseudo-cilíndrica que converte a posição da superfície da esfera para um plano euclidiano.

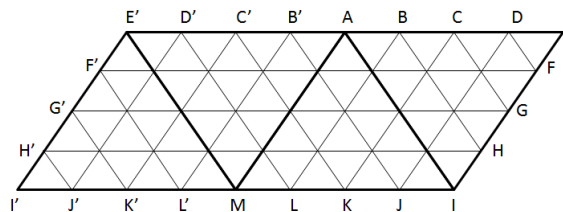


Figura 4 – Representação no plano da pavimentação da grade neural com projeção do tetraedro na circunferência

No caso do SOM 4H, todos os vértices do tetraedro cobrem toda a extensão de uma matriz bidimensional, sendo o suficiente para armazenar e identificar a posição de todos os vértices. O aumento da frequência para a triangulação do tetraedro ocorre naturalmente com o crescimento da matriz bidimensional $m \times n$, mantendo-se a relação entre as dimensões m e n de acordo com (1). O crescimento da grade neural permite que qualquer valor seja atribuído a n , e conseqüentemente m será um valor ímpar nas bordas superior e inferior.

$$n = 2m - 1 \quad (1)$$

Essa proporcionalidade entre as duas dimensões permite utilizar uma estrutura matricial para representar os vértices de uma triangulação do diagrama de rede de tetraedro em qualquer frequência. Esta flexibilidade estabelece uma curva de crescimento da grade neural de forma mais flexível do que é possível com a projeção do icosaedro, como pode ser observado na Figura 5 que apresenta as curvas de crescimento da grade neural plana bidimensional (SOM 2D), geodésica com projeção do tetraedro (SOM 4H) e geodésica com projeção do icosaedro (GeoSOM). Para a análise do SOM 2D, é utilizada grades neurais bidimensionais $m \times n$ quadráticas, ou seja, m e n possuem os mesmos valores com crescimento unitário, onde m e n variam sequencialmente no intervalo [1 20], que pode ser considerado uma forma de frequência para subdividir um plano euclidiano em quadrados. Para o SOM 4H e o Geo SOM foi realizada a triangulação do tetraedro e icosaedro, respectivamente, com um crescimento linear sequencial com frequência de 1 a 20. Totalizando ao todo 20 observações de cada tipo de grade neural. Observa-se na Figura 5 que o SOM 2D e o SOM 4H possuem uma aproximação de curva entre si, maior do que em relação ao GeoSOM que se distancia de forma abrupta conforme aumenta a frequência de triangulação, o que confere ao SOM 4H uma maior flexibilidade no crescimento da grade neural geodésica, comparativamente ao GeoSOM.

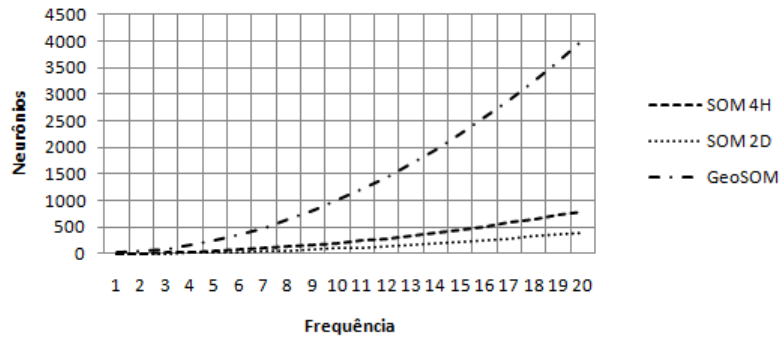


Figura 5 – Gráfico de comparação de crescimento de grades neurais geodésicas com projeção do icosaedro (GeoSOM) e projeção do tetraedro (SOM 4H), e no plano bidimensional (SOM 2D)

Por um lado, a utilização de grades neurais mais largas permite reduzir monotonicamente o erro de quantização vetorial do mapa topográfico resultante do processo de treinamento, porque os exemplos de entrada podem se distribuir de forma mais esparsa, mas por outro lado o aumento da grade neural pode levar a uma menor confiança na preservação da topologia dos dados [2]. Desta forma, uma pavimentação que possibilite uma menor granularidade no crescimento da grade neural geodésica amplia o domínio de busca na definição do tamanho da grade neural que melhor se encaixará a uma determinada aplicação, em que medidas de quantização e projeção vetorial podem ser aplicadas para auxiliar neste processo de escolha. Na seção 4 abordamos de forma breve sobre as métricas utilizadas na avaliação do SOM apresentada na seção 5, onde os resultados e o impacto que a irregularidade topológica de rede do tetraedro interfere no processo de aprendizado são analisados.

4 Métricas de Avaliação do SOM

Em decorrência da regra de atualização dos pesos sinápticos do algoritmo SOM (2) não seguir um gradiente descendente de nenhuma função de energia de forma genérica [26] que possibilite avaliar a convergência do processo de aprendizagem, a medida de distorção conforme (4) pode ser aplicada como uma função de custo do SOM, desde que o raio da vizinhança (3) seja constante e os dados sejam discretos [2,18]. Porém, essa medida de distorção é tendenciosa para grades neurais euclidianas, pois quanto menor o número de neurônios vizinhos, como é o caso dos neurônios localizados nas bordas da grade neural, menor será o erro computado. A medida de distorção proposta por Wu [6], e expressa em (5), pode ser aplicada na análise comparativa entre grades neurais de diferentes topologias.

$$m_j(t + 1) = m_j(t) + \alpha(t)h_{b_i,j}(t)[x_i(t) - m_j(t)] \quad (2)$$

onde, \mathbf{m}_j é vetor protótipo que representa os pesos sinápticos de um neurônio da grade neural, t é o ciclo de atualização dos pesos sinápticos, α é a taxa de aprendizado, b_i é o neurônio de maior similaridade com o vetor de entrada \mathbf{x}_i , e $h_{b_i,j}$ é o valor da função de vizinhança dos neurônios b_i e j da grade neural:

$$h_{b_i,j} = \exp\left(-\frac{\text{dist}(b_i,j)^2}{2r^2}\right) \quad (3)$$

onde, $\text{dist}(b_i,j)$ representa a distância na grade neural entre os neurônios b_i e j , e r o raio da vizinhança.

$$E_d = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m h_{b_i,j} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{m}_j\|^2 \quad (4)$$

onde, n é o número dos vetores de entrada, e m a quantidade de neurônios.

$$E_d = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m h_{b_{i,j}} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{m}_j\|^2 / \sum_{j=1}^m h_{b_{i,j}} \quad (5)$$

A medida de distorção identifica o erro presente nas propriedades de quantização vetorial e a projeção vetorial, ou preservação topológica, do SOM através de um único valor. A propriedade de quantização vetorial do SOM está relacionada à capacidade dos vetores de pesos sinápticos da grade neural em representar um conjunto (*cluster*) de vetores do espaço de entrada, enquanto a preservação topológica reflete a continuidade ou ordenação entre os neurônios da grade neural, que pode estar baseada apenas nos vetores de pesos sinápticos, ou em relação à preservação da topologia dos dados, isto é, as distâncias entre os vetores que formam o espaço de dados se mantêm no mapeamento da grade neural [2, 18]. A medida de distorção permite ser decomposto em mais termos para avaliar separadamente a quantização vetorial e a preservação topológica [18], porém como a preservação topográfica neste caso é baseada apenas nos pesos sinápticos, optamos por utilizar na análise dos resultados da seção 5 a medida de distorção que avalia o SOM por inteiro em sua forma modificada (5), e inserindo na análise final a utilização do erro topográfico [27] de acordo com (6), que para cada instância da base de dados, compara se existe adjacência entre o primeiro e segundo neurônios de maior similaridade com a instância apresentada a grade neural.

$$E_{et} = 1/n \sum_{i=1}^n u(x_k) \quad (6)$$

onde, n é o número dos vetores de entrada, e a função $u(x_k)$ é igual a 1 se o primeiro e segundo neurônios não são adjacentes, caso contrário é igual a 0.

5 Resultados alcançados

Em decorrência da aproximação da curva de crescimento entre o SOM 4H e o SOM 2D, como visto na seção 3, os resultados apresentados estão baseados em uma análise comparativa entre estes dois algoritmos, que utilizam respectivamente uma grade neural geodésica e uma grade neural bidimensional. Na primeira etapa da avaliação os exemplos de entrada para o treinamento são de uma base de dados de pontos com distribuição uniforme que cobrem um espaço tridimensional euclidiano em um intervalo entre [0 1], e é formado por 3 variáveis discretas e 125 instâncias. Na segunda etapa é utilizada uma base de dados de um projeto de pesquisa que analisa a ação antrópica de indivíduos sobre o meio ambiente onde está inserida a comunidade amazônica que habitam [24, 25], os exemplos de treinamento são dados socioeconômicos, e contêm 16 variáveis discretas e 1174 instâncias discretas, e está normalizada no intervalo de [0 1].

Foram realizados seis experimentos para cada algoritmo com diferentes tamanhos de grades neurais, como apresentado na Tabela 1. Cada grade neural é representada em seu tamanho matricial $m \times n$, tanto para o SOM 2D, como para o SOM 4H, é informado entre parênteses a quantidade de neurônios efetivamente alocados para o ajustes dos pesos sinápticos no processo de treinamento. Como o SOM 4H utiliza neurônios duplicados, este são subtraídos no computo do total de neurônios a serem considerados na definição do tamanho da grade neural do SOM 2D, de forma que não haja prejuízos na avaliação entre o desempenho dos dois algoritmos.

Tabela 1 – Tamanho das grades neurais para análise de desempenho

SOM	Exp. 1	Exp. 2	Exp. 3	Exp. 4	Exp. 5	Exp. 6
2D	2 x 2 (4)	3 x 3 (9)	4 x 5 (20)	5 x 7 (35)	6 x 9 (54)	7 x 11 (77)
4H	2 x 3 (4)	3 x 5 (10)	4 x 7 (20)	5 x 9 (34)	6 x 11 (52)	7 x 13 (74)

Os parâmetros de treinamento entre os dois algoritmos são os mesmos, diferindo as distâncias dos neurônios da grade neural bidimensional e a da grade geodésica, por não ser possível utilizar as mesmas medidas para os planos euclidianos e não euclidianos, respectivamente. No caso da grade neural geodésica foi utilizada uma esfera unitária na projeção do tetraedro, para definição das distâncias entre os neurônios. Os experimentos foram executados com 250 épocas, uma taxa de treinamento inicial de 0,9 que decai monotonicamente, aproximando-se zero no final do treinamento, e o raio de vizinhança varia no intervalo de 1 a 3, de acordo com a mudança do tamanho da grade neural. A avaliação dos resultados é baseada na medida de distorção (5) que é o resultado da média de três treinamentos realizados para cada experimento.

A Tabela 2 apresenta as medidas de distorções alcançadas pelos experimentos. Observa-se que há uma redução das distorções no SOM 2D e SOM 4H a medida que há o aumento do tamanho das grades neurais, e consequentemente o aumento da quantidade de neurônios que participam do processo de treinamento, que se explicam pela redução do erro de quantização vetorial que ocorre a medida que a grade neural aumenta de tamanho. Porém, analisando os percentuais de diferença das distorções entre os dois algoritmos, observa-se que ocorre uma redução da distorção com o SOM 4H nos experimentos 1, 3 e 6,

não sendo significativa este último. E apesar de não ocorrer mais o efeito de borda, há um aumento de distorção no SOM 4H nos experimentos 2, 4 e 5. Um dos possíveis motivos para este aumento da distorção no SOM 4H é a irregularidade na topologia de rede na projeção do tetraedro na esfera, que tem uma variação de tamanho de 0,66, enquanto o icosaedro é de 0,07 [14].

Tabela 2 – Resultados da distorção no treinamento do SOM 2D e SOM 4H

SOM	Exp. 1	Exp. 2	Exp. 3	Exp. 4	Exp. 5	Exp. 6
2D	0.5303	0.4014	0.2742	0.1806	0.1277	0.1065
4H	0.4739	0.4203	0.2515	0.1901	0.1421	0.1058
Dif. %	-10.64	4.70	-8.28	5.28	11.26	-0.67

Para reduzir o efeito da irregularidade da projeção do tetraedro sobre os ajustes dos pesos sinápticos, reduziu-se o raio da esfera sobre a qual a grade neural é pavimentada, de 1 para 0,5. Os resultados da grade neural geodésica com este ajuste são apresentados na Tabela 3, em comparação com resultados anteriores do SOM 2D. Observa-se que em todos os experimentos há redução de distorção no processo de aprendizado da grade neural com o SOM 4H. Percebe-se uma diferença maior nas grades dos experimentos 1, 2 e 3, que são as menores grades dos experimento. Uma grade menor demanda uma maior pressão dos exemplos de entrada na quantização vetorial com um menor número de neurônios. Especificamente na grade neural 2x2, todos os neurônios da grade estão localizados nas bordas da grade neural, e é neste experimento que a SOM 4H alcançou a maior diferença de redução entre o SOM 2D e SOM 4H, o que demonstra nitidamente a capacidade de redução de distorção do SOM 4H com a eliminação do efeito de borda. À medida que a grade neural aumenta em cada experimento, há percentualmente uma menor quantidade de neurônios na borda, e conseqüentemente há um menor efeito deste sobre a medida de distorção no cômputo geral de distorção.

Tabela 3 – Resultados da distorção no treinamento do SOM 2D e SOM 4H com alteração da projeção geodésica

SOM	Exp. 1	Exp. 2	Exp. 3	Exp. 4	Exp. 5	Exp. 6
2D	0.5303	0.4014	0.2742	0.1806	0.1277	0.1065
4H	0.4089	0.3432	0.2435	0.1730	0.1204	0.1013
Dif. %	-22.89	-14.51	-11.21	-4.21	-5.75	-4.89

A Tabela 4 apresenta os resultados de distorção com o treinamento utilizando da base de dados socioeconômicos, e com os resultados obtidos na primeira etapa dos experimentos é utilizada uma esfera de raio 0,5 para o treinamento do SOM 4H. De forma semelhante aos experimentos da primeira etapa, percebe-se uma redução da distorção tanto do SOM 2D como no SOM 4H, à medida que as grades neurais aumentam de tamanho. Porém, na análise comparativa entre os dois algoritmos, o SOM 4H apresenta uma redução de distorção mais significativa nos experimentos 2, 4, 5 e 6, em relação ao SOM 2D. Nos experimentos 1 e 3, houve um acréscimo de distorção em torno 0,5%.

Tabela 4 – Resultados da distorção com base de dados socioeconômicos

SOM	Exp. 1	Exp. 2	Exp. 3	Exp. 4	Exp. 5	Exp. 6
2D	1.9747	1.7958	1.3368	1.4933	1.2314	1.0824
4H	1.9823	1.6288	1.3444	1.1183	1.0107	0.9030
Dif. %	0.38	-9.30	0.57	-25.11	-17.93	-16.58

A redução da irregularidade do tetraedro com a diminuição do raio da esfera de pavimentação da grade neural, não foi suficiente para diminuir a distorção em todos os experimentos. Como alternativa para eliminar a irregularidade do tetraedro, foi relaxada a condição de utilização das distâncias geodésicas entre os neurônios, e atribuiu-se o valor 0,5 como distância entre os

neurônios e seus adjacentes, que é um valor próximo à média dos tamanhos das cordas geodésicas da projeção do tetraedro. Com esta modificação a grade neural deixa de ter uma pavimentação esférica, e passa a ter uma pavimentação poliédrica seguindo o formato do próprio tetraedro. A Tabela 5 apresenta os resultados encontrados com esta alteração na pavimentação da grade neural, e demonstra que houve uma redução da distorção em todos os 6 experimentos, inclusive nos experimentos 2, 4, 5 e 6, em que já havia ocorrido a redução de distorções, a redução da distorção alcançou uma diferença maior ainda em relação ao SOM 2D.

Tabela 5. Resultados da distorção com base de dados socioeconômicos com projeção poliédrica

SOM	Exp. 1	Exp. 2	Exp. 3	Exp. 4	Exp. 5	Exp. 6
2D	1.9747	1.7958	1.3368	1.4933	1.2314	1.0824
4H	1.8912	1.6295	1.3173	1.1013	1.0143	0.8731
Dif. %	-4.42	-10.21	-1.48	-35.59	-21.41	-23.97

Analisando a preservação topológica dos dados desses experimentos, através da Figura 6, nota-se que o erro topográfico aumenta conforme as duas grades neurais crescem, mas observa-se que o erro topográfico do SOM 4H possui uma tendência de crescimento menos significativa, demonstrando que o SOM 4H com a projeção poliédrica possui uma capacidade de preservação da topologia dos dados maior que o SOM 2D.

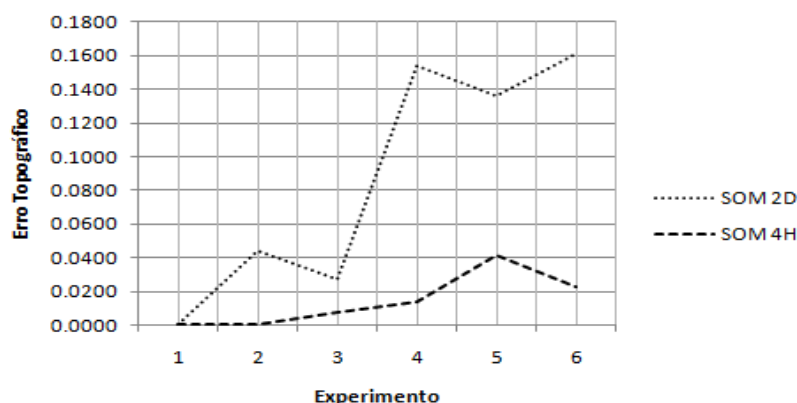


Figura 6 – Gráfico de comparação de erro topográfico entre a grade neural projeção poliédrica do tetraedro (SOM 4H) e o plano bidimensional (SOM 2D)

Os resultados da Tabela 5 demonstram a importância da regularidade na topologia da grade neural, que propicia uma equidistância entre os neurônios e seus adjacentes, e de forma ainda não identificada em outros trabalhos de conhecimento dos autores, de que a equidistância entre os pontos opostos de uma esfera não garante necessariamente uma melhor representação da topologia dos dados de um espaço de alta dimensionalidade. O formato poliédrico do tetraedro, com sua regularidade inerente aos sólidos platônicos, foi capaz de eliminar o efeito de borda com uma distorção menor do que a obtida com uma grade neural bidimensional, além de possibilitar uma maior capacidade de preservação da topologia dos dados de entrada.

5 Conclusão

A utilização do algoritmo SOM na visualização de base de dados multidimensional que utilizam grades neurais definidas no plano euclidiano está sujeita ao efeito borda, que decorre da desigualdade do tamanho da vizinha entre os neurônios localizados na borda, e os que estão mais ao centro da grade neural. Esta diferença da quantidade de neurônios adjacentes provoca uma distorção no processo de quantização e projeção vetorial da grade neural. Para eliminar o efeito borda, alguns autores propõem a utilização de uma grade neural esférica pavimentada com a projeção do icosaedro, por este sólido platônico possuir uma maior aproximação com a superfície de uma esfera, e sua triangulação permitir uma maior regularidade topológica, porém cria uma limitação no crescimento da grade neural. Para que haja um crescimento da grade neural esférica, é necessário que haja uma nova triangulação do icosaedro, o que requer uma grande quantidade de neurônios a cada aumento de frequência. Este trabalho propõe a utilização do tetraedro, outro sólido platônico, na pavimentação da grade neural esférica, que possibilita o crescimento da grade neural de forma mais gradual, o que permite um crescimento de um menor número de

neurônios no aumento da frequência de triangulação do tetraedro. Foi demonstrado através de experimentos com uma base de dados de pontos distribuídos de forma uniforme que a utilização da pavimentação da grade neural esférica com a pavimentação do sólido platônico tetraedro elimina o efeito borda, e reduz a distorção no processo de aprendizado, porém para a base de dados de um projeto de pesquisa ambiental, foi necessário relaxar a condição de distanciamento geodésico dos neurônios, transformando a grade neural esférica em uma grade neural poliédrica para alcançar um mapa topográfico com distorções menores do que as alcançadas pela grade neural bidimensional, o que demonstra que a esfera não garante necessariamente a melhor representação da topologia dos exemplos de entrada de um espaço multidimensional. Outro aspecto observado é a maior capacidade de preservação topológica da grade neural poliédrica em relação a grade neural bidimensional.

6 Referências

- [1] T. Kohonen, Self-Organizing Maps, 3ª Edition, **Springer**, (2001).
- [2] G. Pözlbauer, Survey and comparison of quality measures for self-organizing maps, **Proceeding of the Fifth Workshop on Data Analysis**, (2004) 67 – 82.
- [3] S. Haykin. Redes Neurais: Princípios e Prática. 2ª Edição, **Bookman**, (2001).
- [4] H. Ritter, Self-organizing maps on non-euclidean spaces, **Kohonen Maps**, Elsevier, (1999), 97 – 110.
- [5] F. Boudjemaï, P. B. Enberg, J. Postaire, Surface modeling by using self organizing maps of Kohonen, **System, Man and Cybernetics**, 3 (2003), 2418 – 2423.
- [6] Y. Wu, M. Takatsuka, Spherical self-organizing map using efficient indexed geodesic data structure, **Neural Networks**, 19 (2006), 900-910.
- [7] Y. Wu, M. Takatsuka, Geodesic self-organizing map, **Proceedings of SPIE**, 5669 (2005), 21 – 30.
- [8] H. Nishio, M. Altaf-UI-Amin, K. Kurokawa, S. Kanaya, Spherical SOM and arrangement of neurons helix on sphere, **IPSIJ Digital Courier**, 2 (2006), 133 – 137.
- [9] K. Gopalakrishnan, S. Khaitan, A. Manik, Enhanced clustering analysis and visualization using kohonen's self-organizing feature map networks, **International Journal of Computational Intelligence**, 4 (2008), 64 – 71.
- [10] C. R. Schmidt, S. J. Rey, A. Skupin, Effects of irregular topology in spherical self-organizing maps, **International Regional Science Review**, 34 (2011), 215 – 229.
- [11] M. Ito, T. Miyoshi, H. Masuyama, The characteristics of the torus self organizing map, **Proceedings 16th fuzzy system symposium Akita**, (2000) 373 – 374.
- [12] A. Sangole, G. K. Knopf, Visualization of randomly ordered numeric data sets using spherical self-organizing feature maps, **Computers & Graphics**, 27 (2003), 963 – 976.
- [13] C. Liou, Y. Kuo, Conformal self-organizing map for a genus-zero manifold, **The Visual Computer**, (2005) 340 – 353.
- [14] A. Pugh, Polyhedra – a Visual Approach, **University of California Press**, (1976).
- [15] R. B. Fuller, Explorations in the geometry of thinking, **Macmillan Publishing Co. Inc.**, (1975).
- [16] S. Uchida, T. Shimizu, Modification of the Kohonen algorithm for the travelling salesman problem, **Journal of the Korean Physical Society**, Vol. 40, No. 6 (2002), 1086 – 1090.
- [17] M. Yusoff, S. Abdul Rahman, S. Mutalib, A. Mohamed, Kohonen neural network performance in license plate number identification, **Proceedings of the International Conference on Electrical Engineering and Informatics**, B-20 (2007), 512 – 515.
- [18] J. Vesanto, M. Sulkava, J. Hollmén, On the decomposition of the self-organizing map distortion Measure, **Proceedings of the workshop on self-organizing maps**, (2003), 11 – 16.
- [19] Imagens tridimensionais de sólidos platônicos, <http://www.schillerinstitute.org/fid_97-01/012_cusa_moved.html>, (2011).
- [20] E. A. Rakhmonov, E. B. Saff, Y. M. Zhou, Minimal discrete energy on the sphere, **Mathematical Research Letters**, 1 (1994), 647 – 662.
- [21] Oyabu, Fukuoka, Nakatsuka, Clustering using a Self-Organizing, <<http://www2.kanazawa-it.ac.jp/oyabu/som/somint.htm>>, (2011)
- [22] M. Y. Kiang, M. Y. Hu, D. M. Fisher, An extended self-organizing map network for market segmentation – a telecommunication example, **Decision Support Systems**, 42 (2006), 36 – 37.
- [23] D. Zorin, P. Schröder, W. Sweldens, Interpolating subdivision for meshes with arbitrary topology, **Proceedings of SIGGRAPH ACM**, (1996) 189 – 192.
- [24] V. R. Ravena-Cañete, A descrição do possível: a experiência de intervenção no igarapé Mata-Fome e o levantamento de dados socioeconômicos, **Editora da Universidade da Amazônia**, (2006).
- [25] R. M. Sousa, A. M. Silveira, N. Ravena, Comunidades urbanas amazônicas: representação da dimensão humana em projetos ambientais com a utilização de redes neurais artificiais, **Movendo Idéias, Editora da Universidade da Amazônia**, (2008).
- [26] E. Erwin, K. Obermayer, K. Schulten, Self-organizing maps: ordering, convergence properties and energy functions, **Biological Cybernetics**, 67 (1992), 47 – 55.
- [27] K. Kiviluoto, Topology preservation in self-organizing maps, **Proceeding of International Conference on Neural Networks**, (1996) 294 – 299.