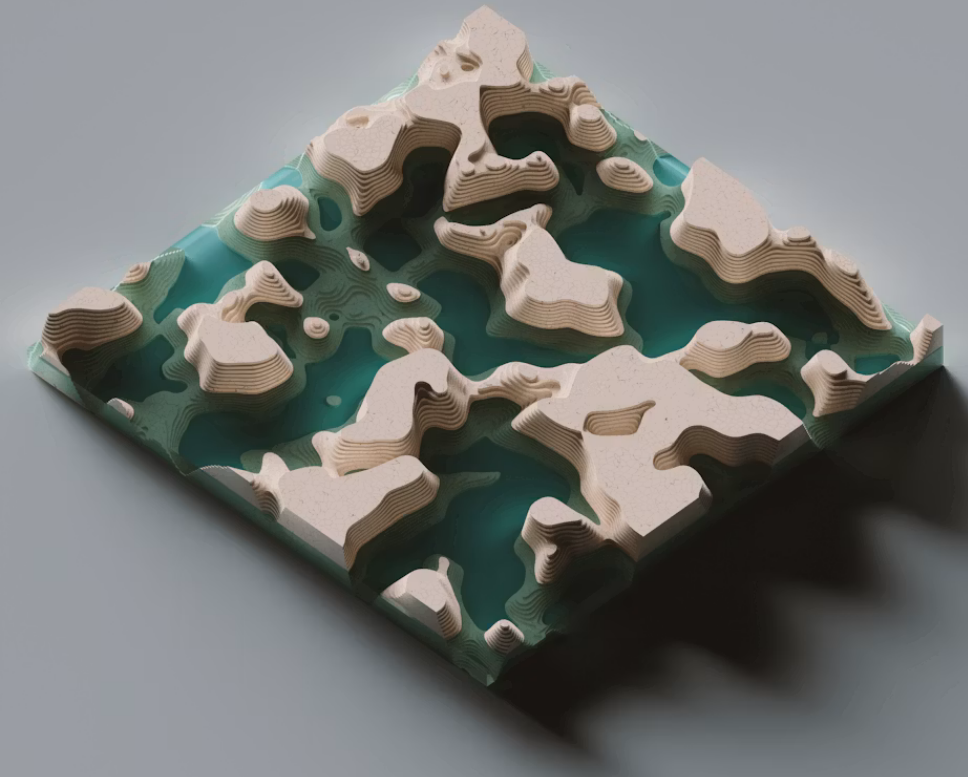


Self-Organizing Maps

Conceito e Aplicações

Prof. Dr. Denis M. L. Martins

DCM | FFCLRP | USP



Sobre mim

- Engenheiro da Computação pela Universidade de Pernambuco (UPE)
- Doutorado na Universidade de Münster (Alemanha)
- Eng. de Software na Stefanini
- Pesquisador Sênior em IA na Samsung Research Brazil
- Professor na PUC-Campinas
- **Professor no DCM-USP**

Especialidade: **Ciência de Dados e IA**



**Imagine que você tem milhares de dados: textos,
imagens, embeddings de IA...**

Como visualizar padrões escondidos em alta dimensão?

Dados multidimensionais

Dados reais raramente vivem em 2D.

Precisamos de uma técnica que ajude a **organizar o caos** e;

- dezenas de atributos;
- centenas de variáveis;
- milhares de dimensões;
- relações não lineares;
- grupos difíceis de interpretar.


Fonte da Imagem: <https://unsplash.com/@sametkurtkus> 

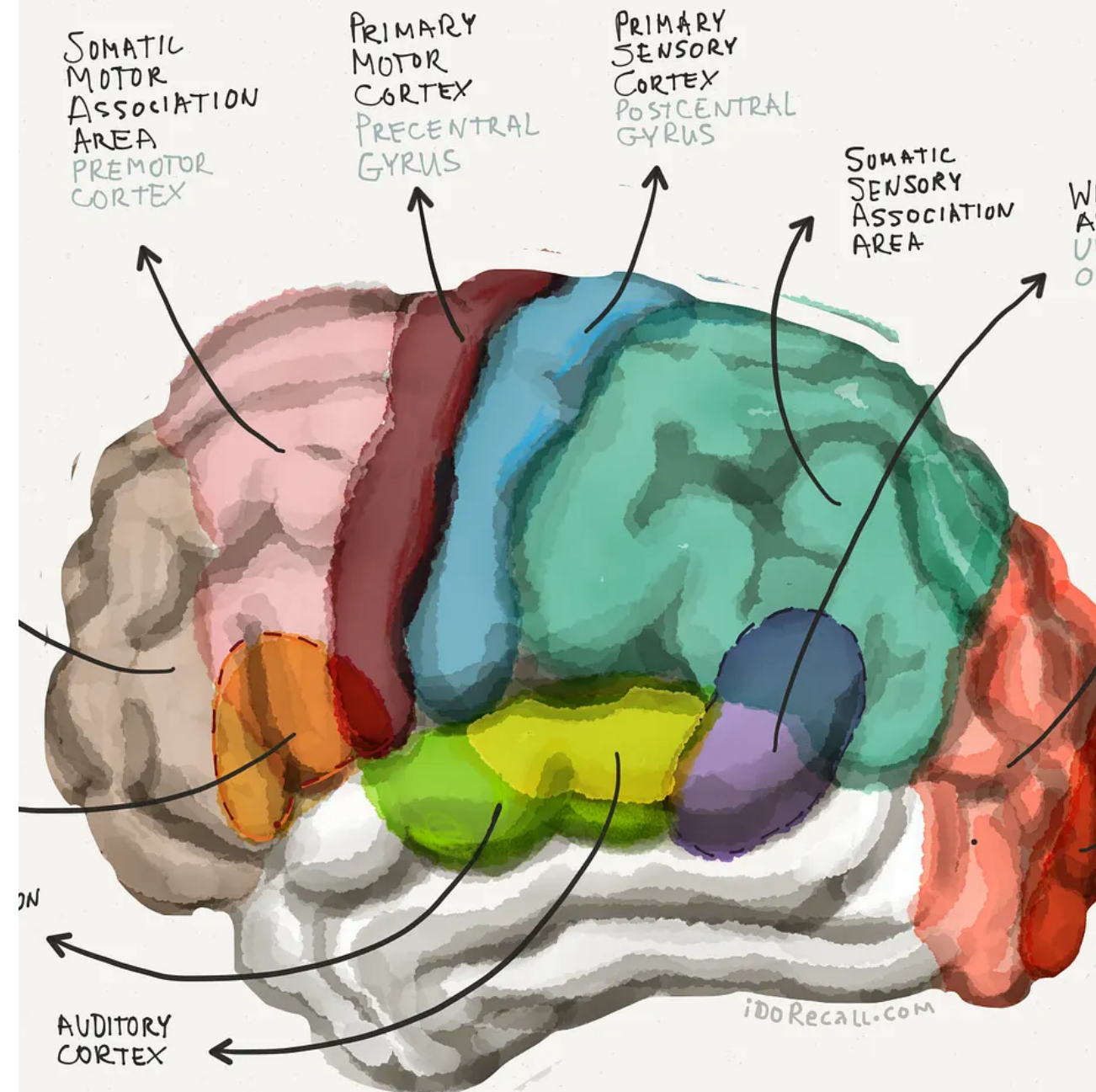


Inspiração biológica

No cérebro, estímulos semelhantes tendem a ativar regiões próximas do córtex.

- Sons com frequências parecidas ativam áreas próximas no córtex auditivo.
- Sartes vizinhas do corpo são representadas em regiões próximas no córtex somatossensorial.

Na imagem: Cerebral hemispheres (the cerebrum).
Fonte: [By David Handel, MD](#) 



Self-Organizing Map (SOM)

Um Self-Organizing Map transforma dados complexos em um **mapa bidimensional organizado**.

Ele aprende uma grade de neurônios em que:

- dados parecidos ficam próximos;
- dados diferentes ficam distantes;
- a topologia dos dados é parcialmente preservada.

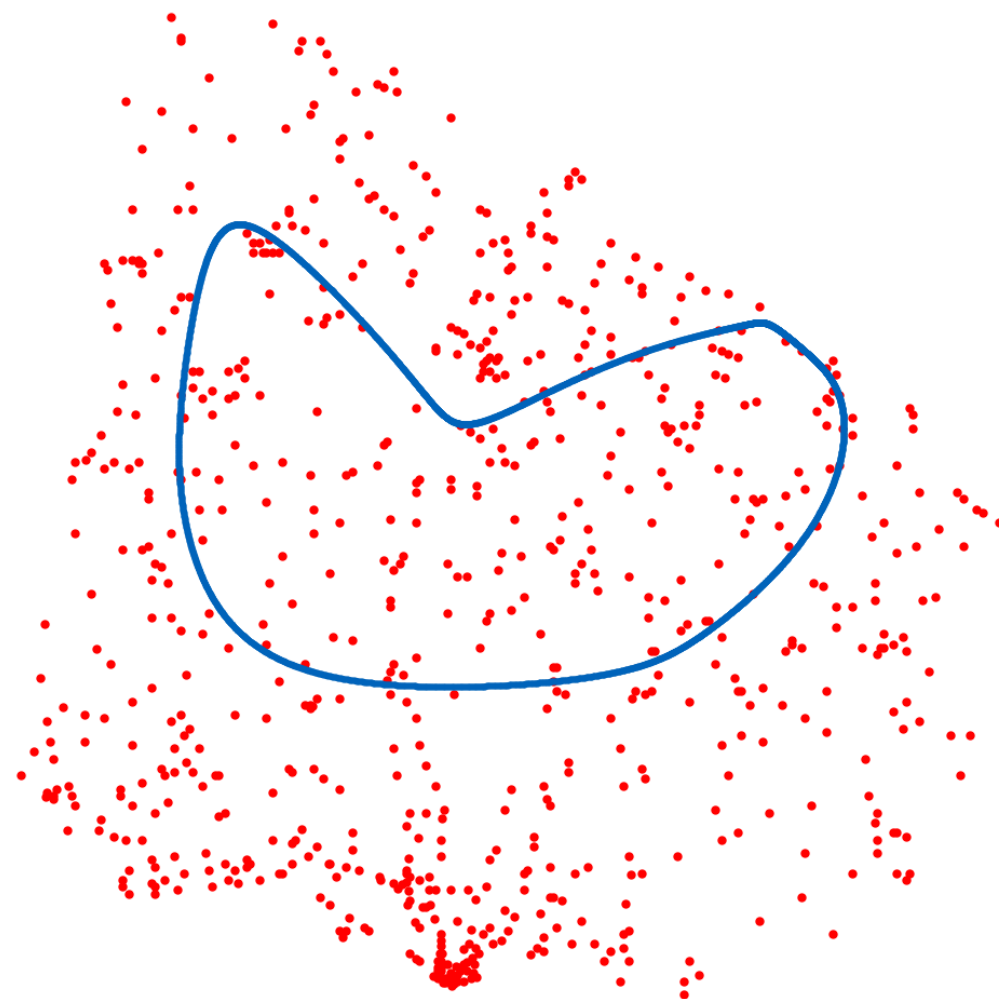
Self-Organizing Map (SOM)

Pense em um mapa geográfico.

Cidades próximas no mapa tendem a estar próximas no mundo real.

No SOM:

- cada neurônio é uma região do mapa;
- cada dado é associado ao neurônio mais parecido;
- regiões próximas representam padrões semelhantes.



Fonte da Imagem: [Diego Vicente](#) .

Self-Organizing Map (SOM): Definição

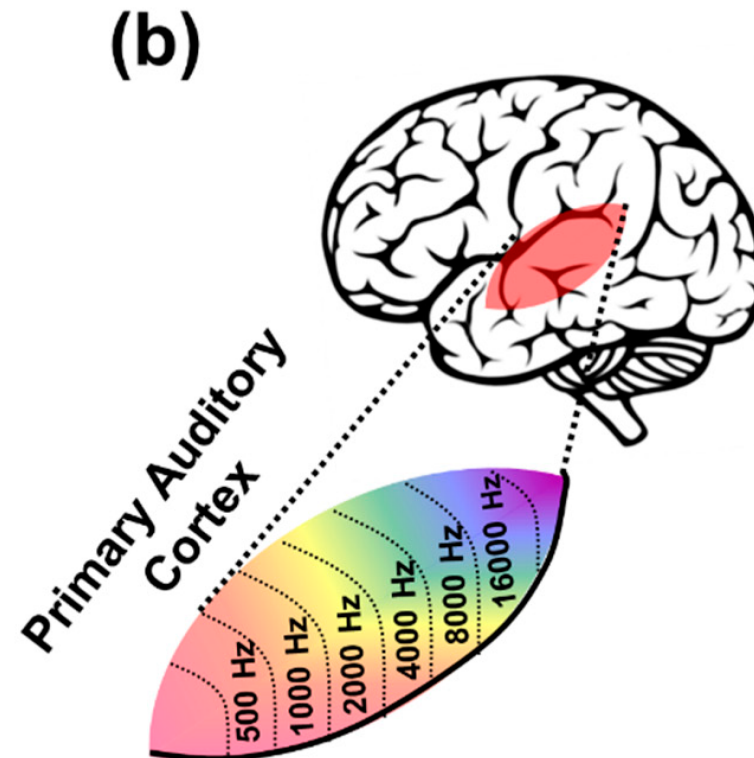
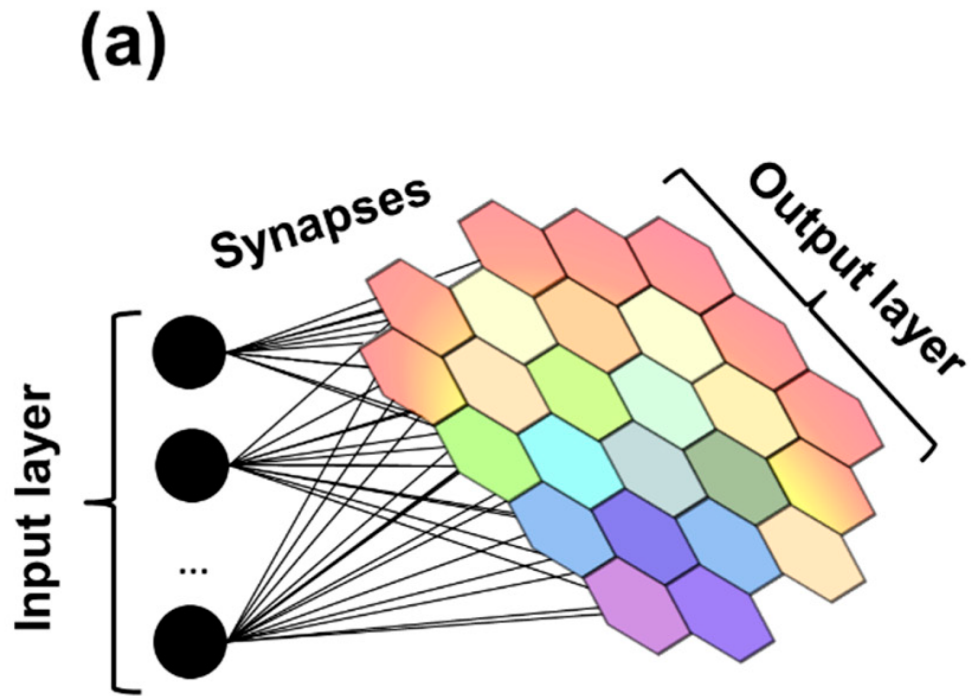
Um **Self-Organizing Map** é uma rede neural artificial **não supervisionada** proposta pelo finlandês **Teuvo Kohonen** [↗](#).

- Ela projeta dados de alta dimensão em uma grade geralmente 2D, preservando relações de vizinhança.
- Formalmente, dado um vetor de entrada: $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$
- cada neurônio possui um vetor de pesos: $\mathbf{w}_i \in \mathbb{R}^d$

Fonte da Imagem: [Wikipedia](#) [↗](#).



Self-Organizing Map (SOM)



Na imagem: (a) Exemplo de um SOM. (b) Exemplo de um mapa topológico de neurônios no cérebro humano, correspondente ao córtex auditivo. Fonte: [Marta Pedró et al.](#)

Self-Organizing Map (SOM)

SOM aprende a preservar a **topologia** dos dados.

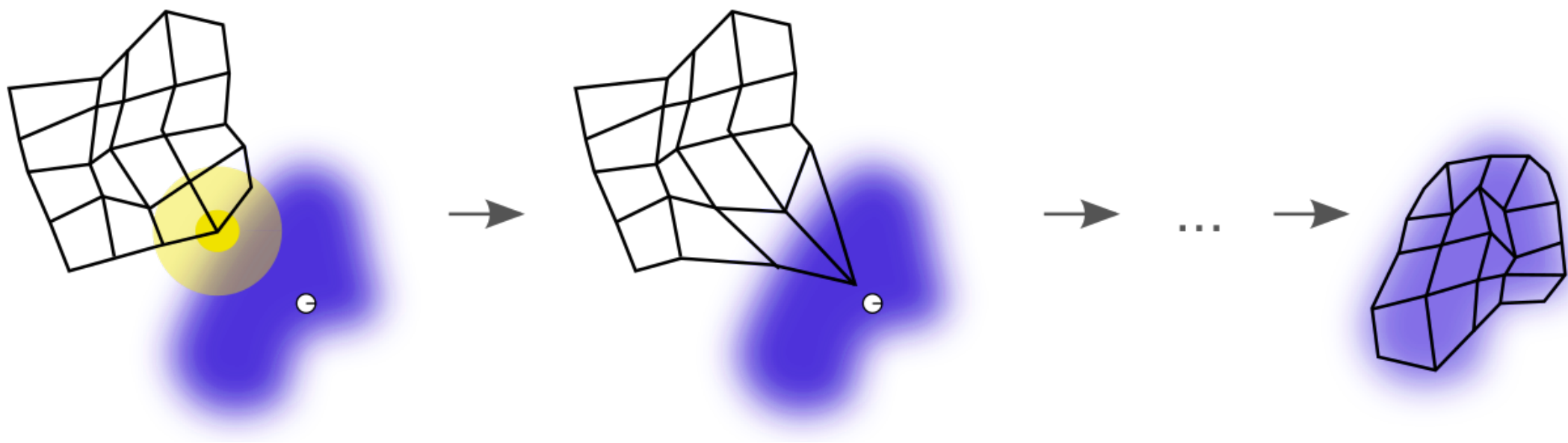
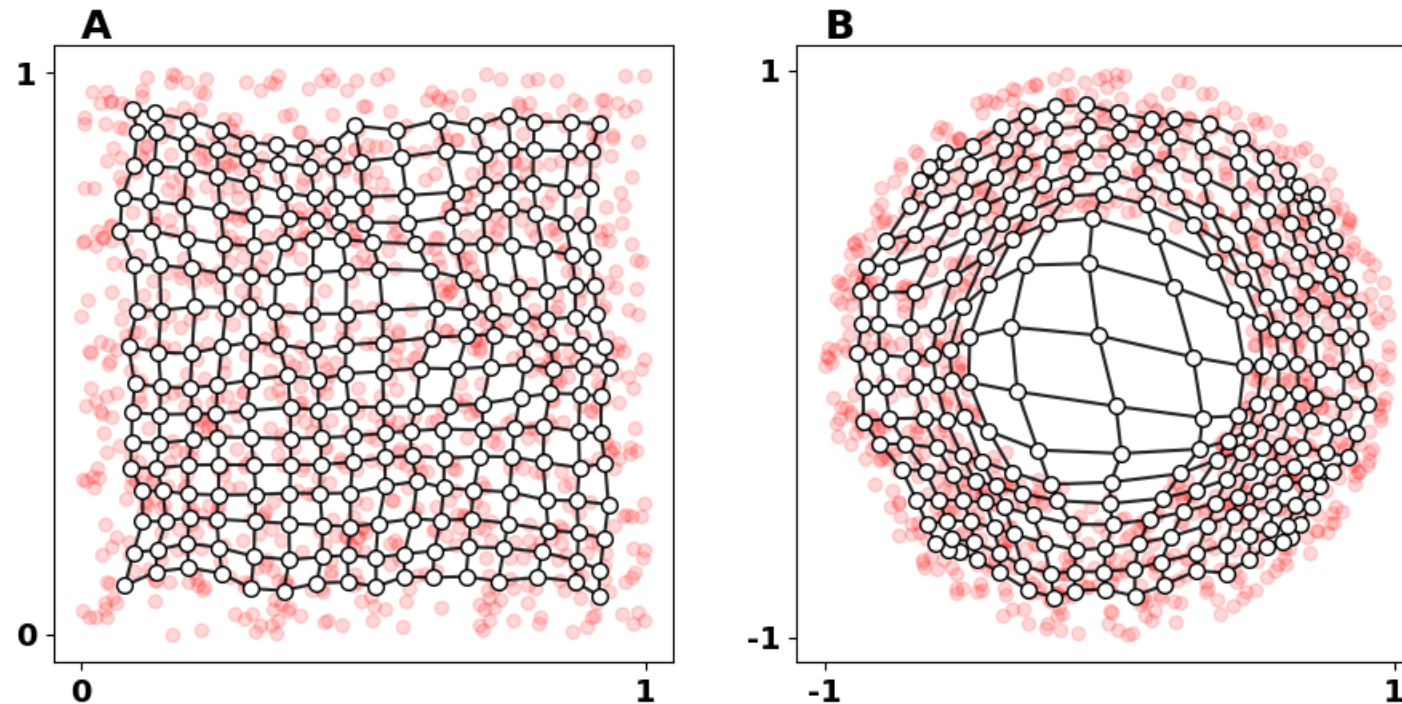



Ilustração do treinamento de SOM (grade) para se moldar à distribuição dos dados (em azul). Fonte da Imagem: [Wikipedia](#) .

Self-Organizing Map (SOM)

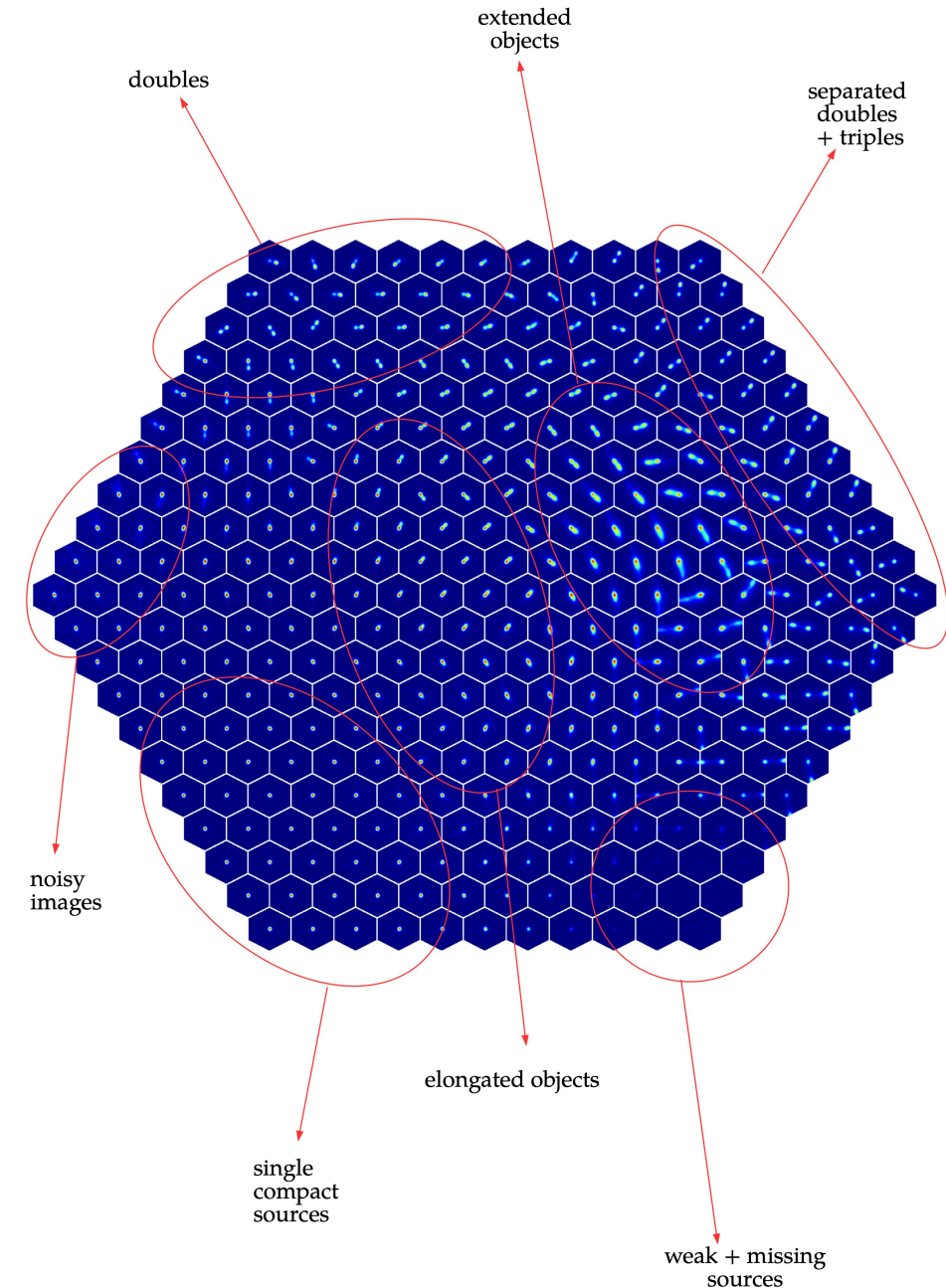
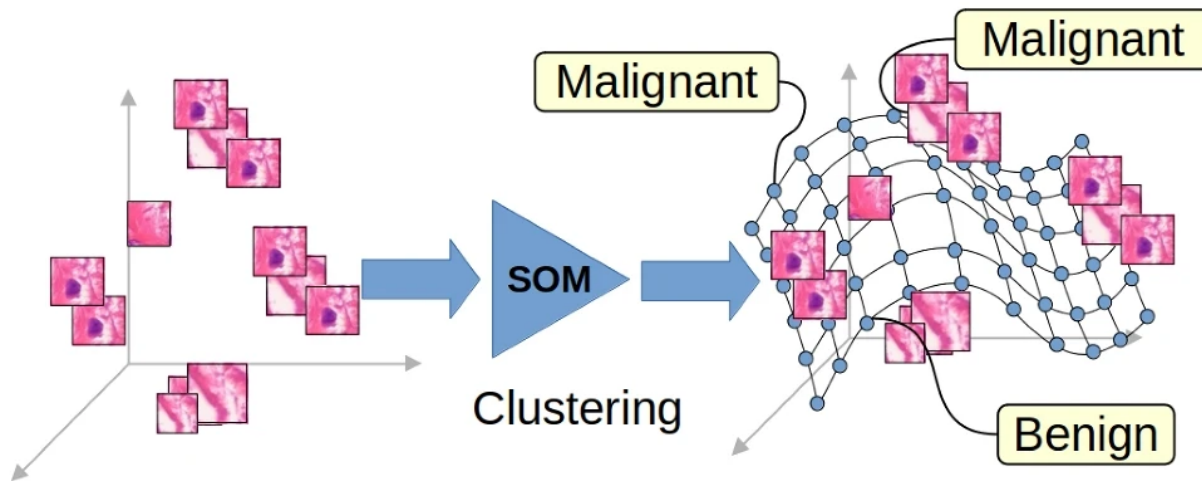
SOM aprende a preservar a **topologia** dos dados.

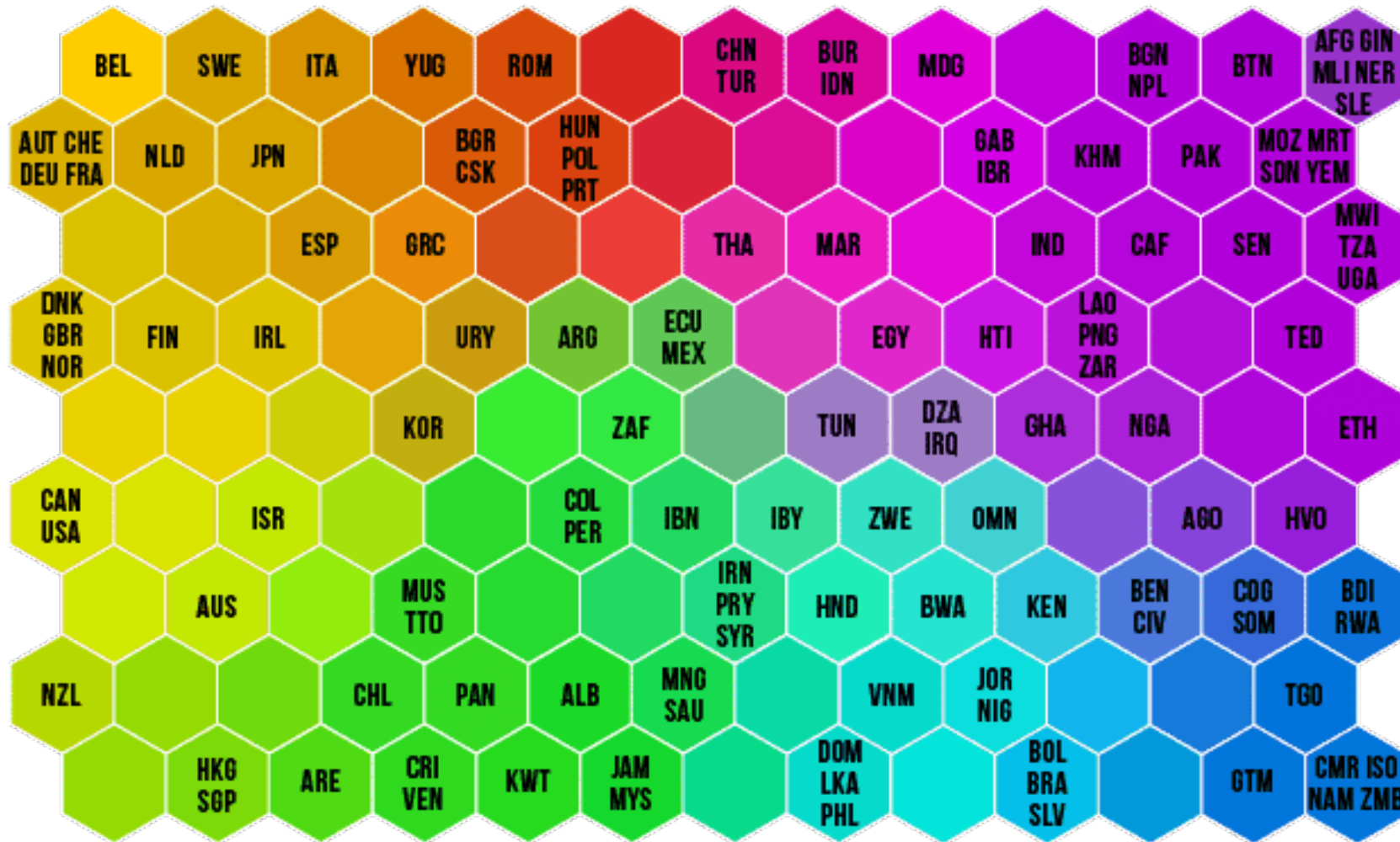


Exemplos de SOM em topologias (A) quadrada e (B) circular. Fonte da Imagem: <https://gdetor.github.io/posts/som/> .

Aplicações

- Visualização de dados de galáxias (veja ao lado: [Polsterer et al. 2015](#))
- Análise de imagens histopatológicas (veja abaixo: [Amato et al. 2024](#))

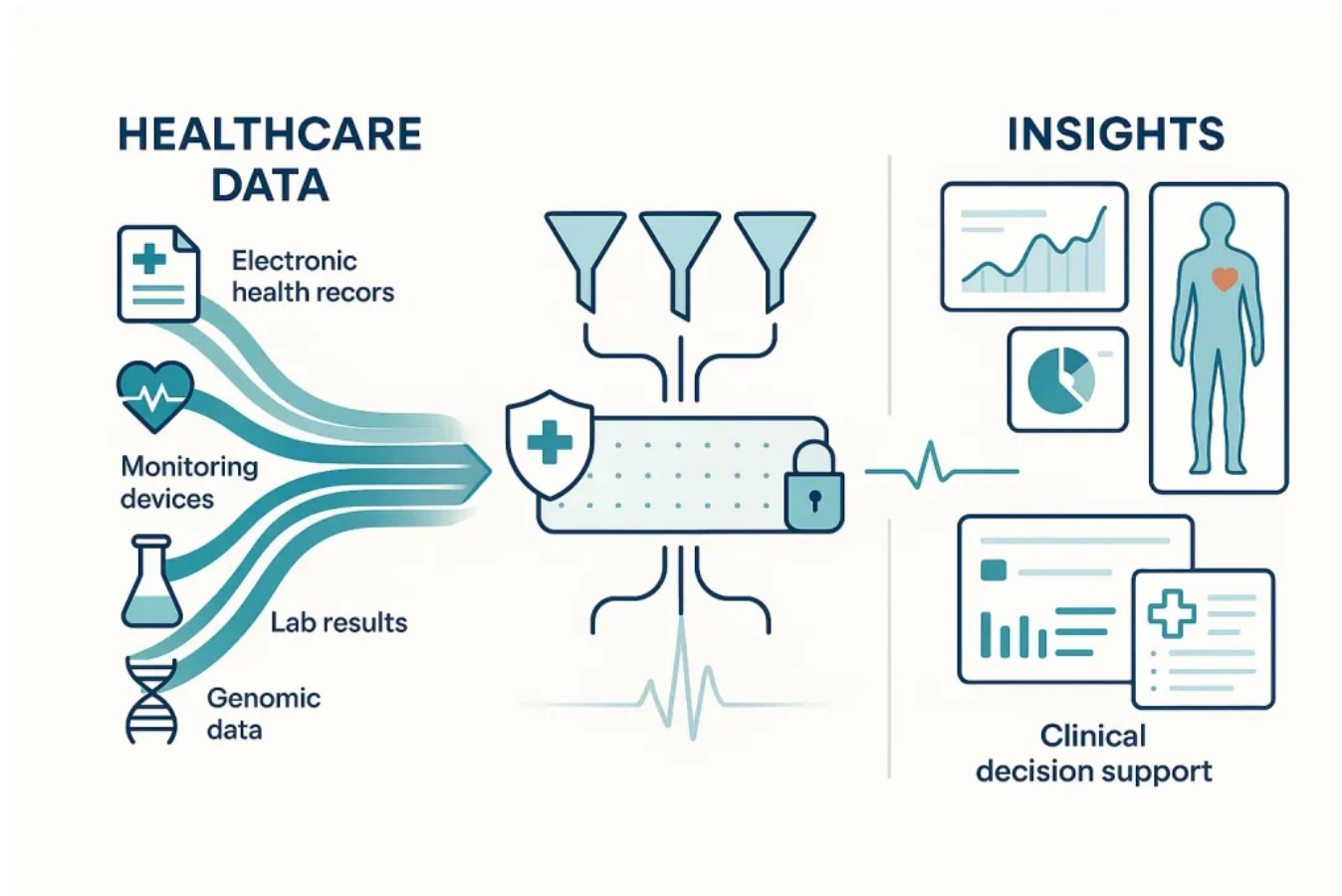




SOM treinado com dados de qualidade de vida do Banco Mundial. Fonte: [GeoInsights](#) ↗.

Qual o *maior* problema em depender *apenas* de aprendizado *supervisionado* tradicional?

Por que não-supervisionado?



Dados anotados (labeled data) na área da Saúde são caros e difíceis de obter em larga escala. Fonte da Imagem: [Macgence](#)

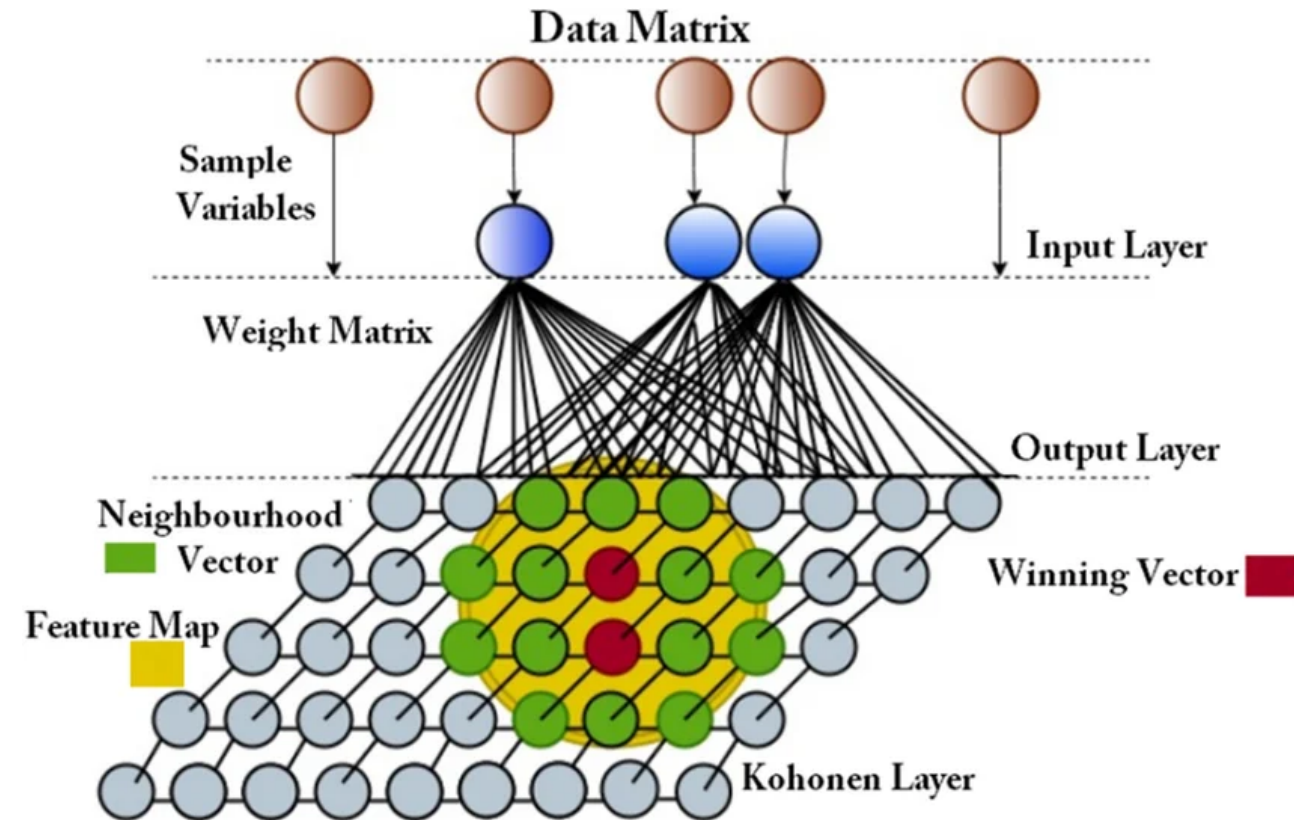
Por que não-supervisionado?

Escassez de Dados Rotulados: Obter dados rotulados (x, y) é caro e demorado.

- **Generalização Limitada:** Modelos treinados em datasets específicos podem ter dificuldades para generalizar para novos cenários.
- **Aprendizado Não-supervisionado:** Aprender a estrutura inerente aos dados através de x apenas.

SOM: Estrutura Geral

- Camada de Entrada (recebe dados de entrada x).
- Camada de Saída com neurônios conectados em vizinhança.
- Pesos de Neurônios w , com a mesma dimensionalidade de x .



Fonte da Imagem: [Naskath Jahangeer @ResearchGate](#)

SOM: Treinamento

Passo 1: encontrar o BMU:

- Para cada entrada, o SOM procura o neurônio mais parecido.
- Esse neurônio é chamado de **Best Matching Unit (BMU)**:

$$c = \arg \min_i \|\mathbf{x} - \mathbf{w}_i\|$$

Ou seja: escolhemos o neurônio cujo vetor de pesos está mais próximo do dado.

SOM: Treinamento (cont.)

Passo 2: atualizar o BMU e seus vizinhos

Depois de encontrar o BMU, atualizamos seus pesos e os pesos dos neurônios vizinhos.

$$\mathbf{w}_i(t + 1) = \mathbf{w}_i(t) + \alpha(t)h_{ci}(t)[\mathbf{x}(t) - \mathbf{w}_i(t)]$$

Onde:

- $\alpha(t)$ é a taxa de aprendizagem;
- $h_{ci}(t) = \exp\left(-\frac{\|\mathbf{r}_c - \mathbf{r}_i\|^2}{2\sigma^2(t)}\right)$ é a função de vizinhança;
- c é o BMU.

Quanto mais perto o neurônio está do BMU na grade, maior é sua atualização.

SOM: Treinamento (cont.)

O SOM usa dois esquemas de decaimento para se estabilizar:

1. Decaimento da taxa de aprendizagem:

$$\alpha(t) = \frac{\alpha_0}{1+k \cdot t} \text{ ou decaimento linear.}$$

2. Decaimento do raio de vizinhança:

$$\sigma(t) = \sigma_0 \cdot \exp(-t/\tau) \text{ ou redução linear em etapas.}$$

Se α ou σ decaem rápido demais, o mapa fica preso em um mínimo local. Se decaem lentamente demais, o mapa nunca converge.

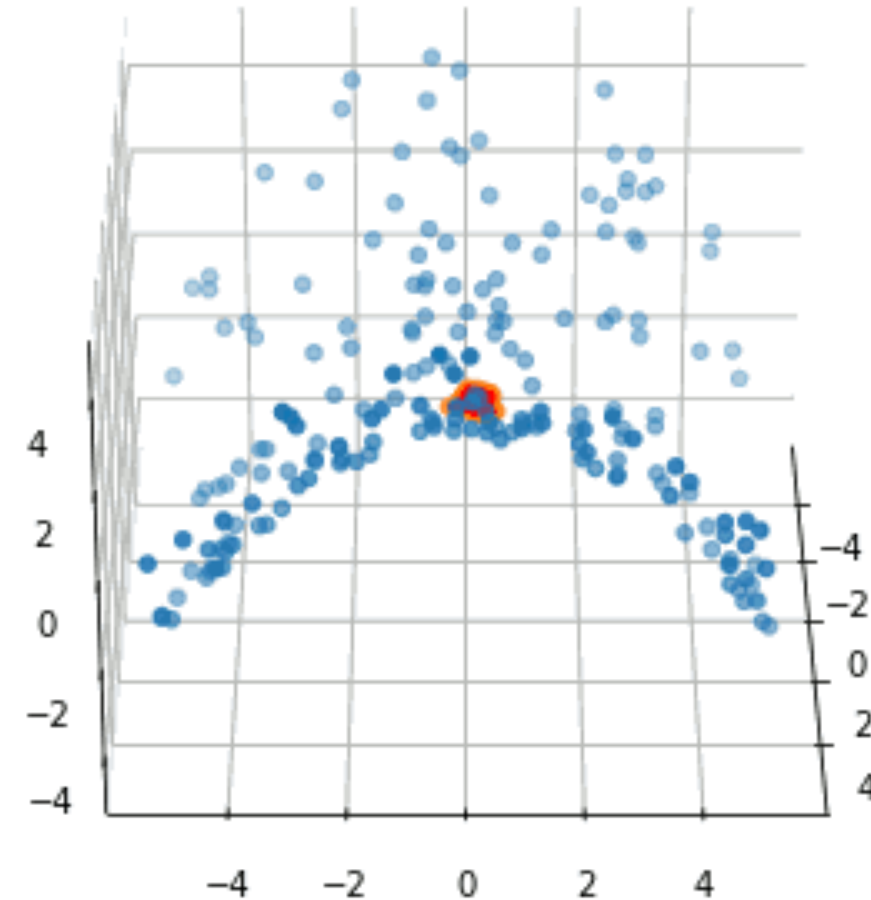
Aprendizagem ao longo do tempo

No início:

- a vizinhança é grande;
- muitos neurônios se movem juntos;
- o mapa organiza sua estrutura global.

Depois:

- a vizinhança diminui;
- ajustes ficam mais locais;
- o mapa refina detalhes.



Fonte da Imagem: <https://bsd.neuroinf.jp>

Veja também o vídeo: [Auto learning face images with Self Organizing Maps, by MITECH Corp.](#)

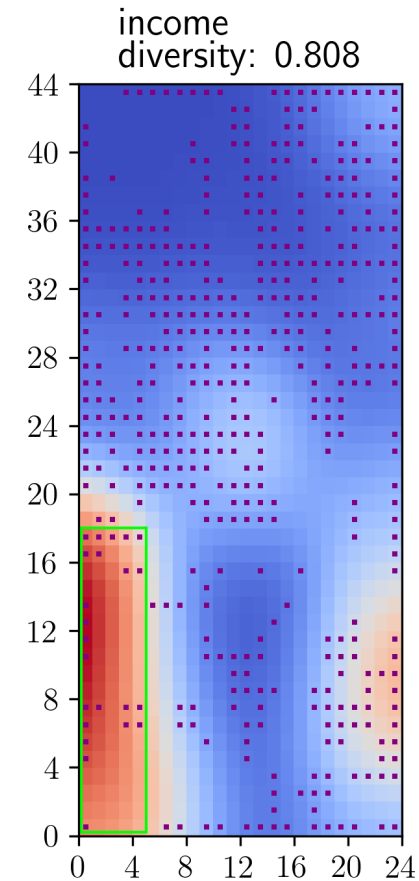
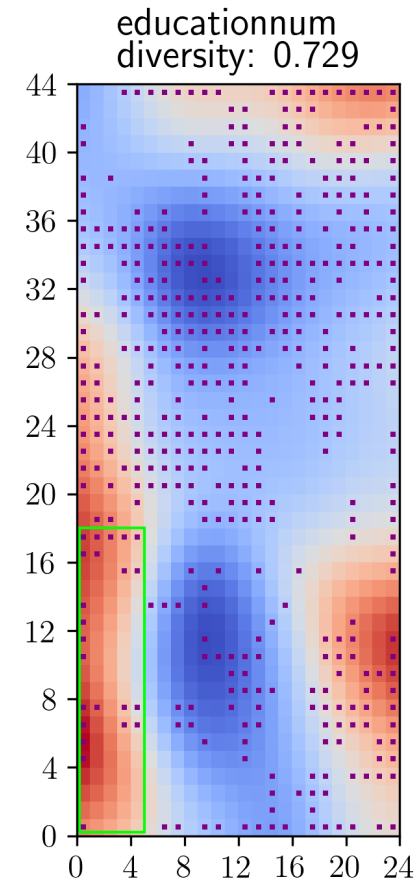
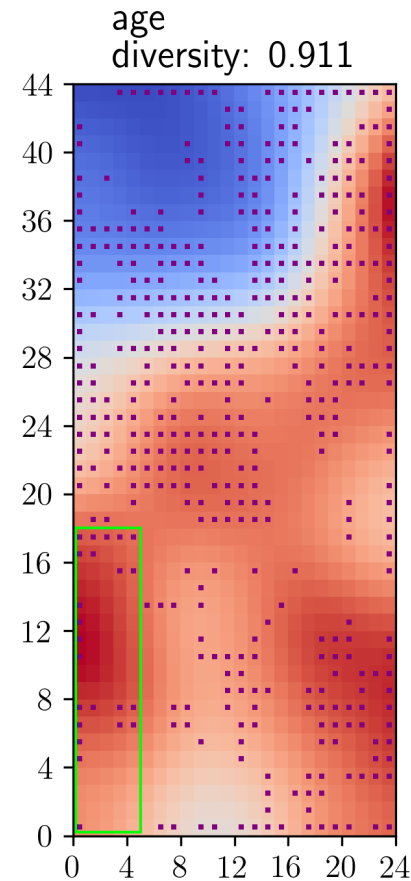
Por que SOM?

O SOM combina três ideias poderosas:

1. Redução de dimensionalidade
2. Clusterização
3. Visualização interpretável

Ele cria uma superfície organizada para explorar padrões.

Na imagem: Mapa de exploração para compra de dados. Fonte: [Martins and Vossen. "Self-organizing maps for data purchase support in data marketplaces." ICCCI 2023.](#) 



Avaliando o Mapa

Erro de quantização: mede o quanto os dados estão próximos de seus BMUs.

- Quanto menor o valor, melhor o mapa representa os dados.

$$QE = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \|\mathbf{x}_j - \mathbf{w}_{c(j)}\|$$

Erro topográfico: mede se o SOM preserva vizinhanças.

$$TE = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n u(\mathbf{x}_j)$$

Onde $u(\mathbf{x}_j) = 1$ se o primeiro e o segundo BMU não são vizinhos; caso contrário, 0.

Growing Neural Gas (GNG)

Problema com SOM: Grades fixas forçam os dados em formas retangulares.

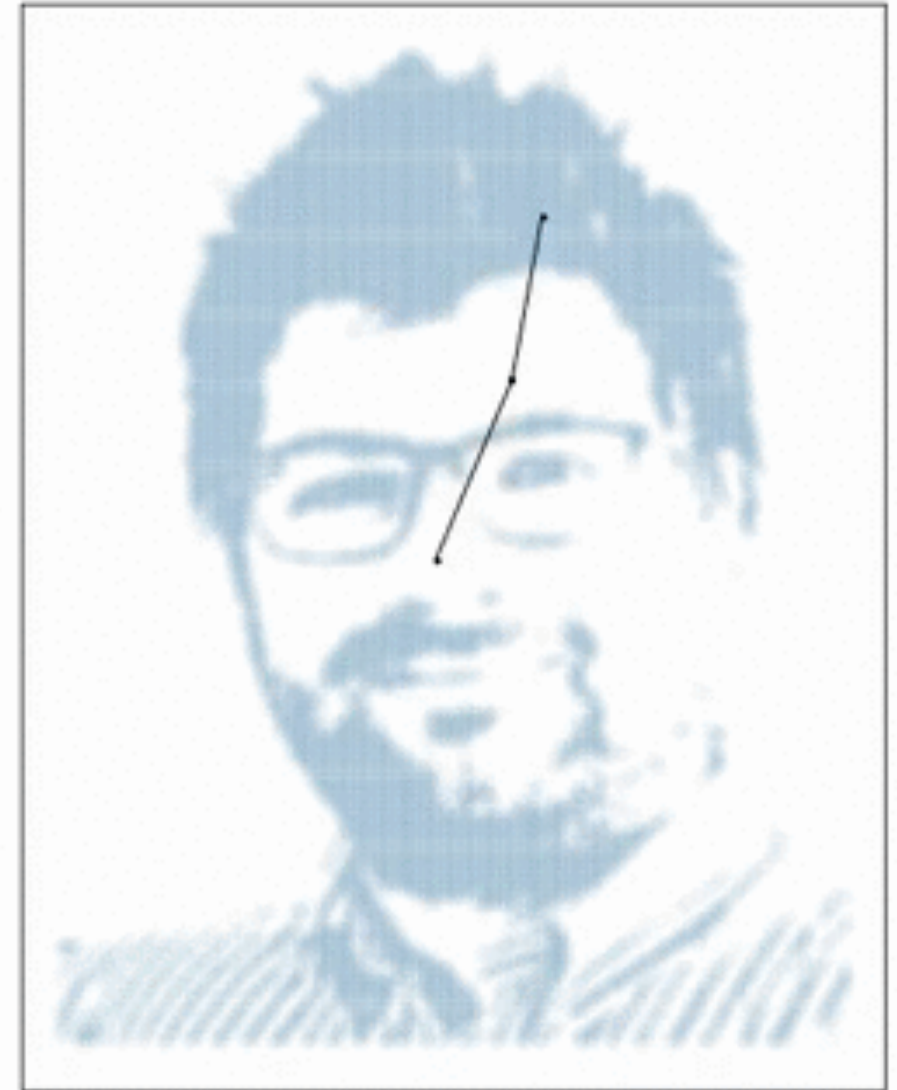
Solução: GNG usa um grafo dinâmico de nós.

Regra de Atualização:

$$w_{ij}(t + 1) = w_{ij}(t) + \alpha(t) \cdot h_{c,j}(t) \cdot (x - w_{ij}(t))$$

Com h baseado na distância ao BMU no grafo, não índices da grade.

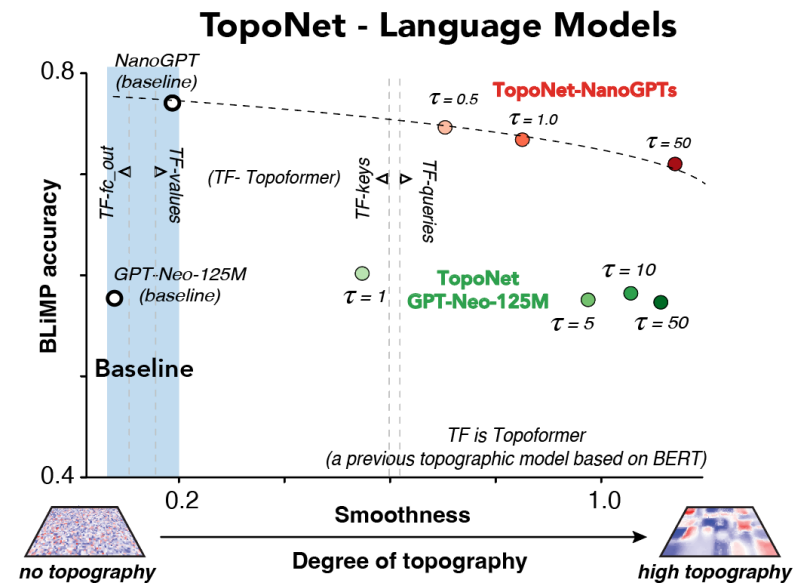
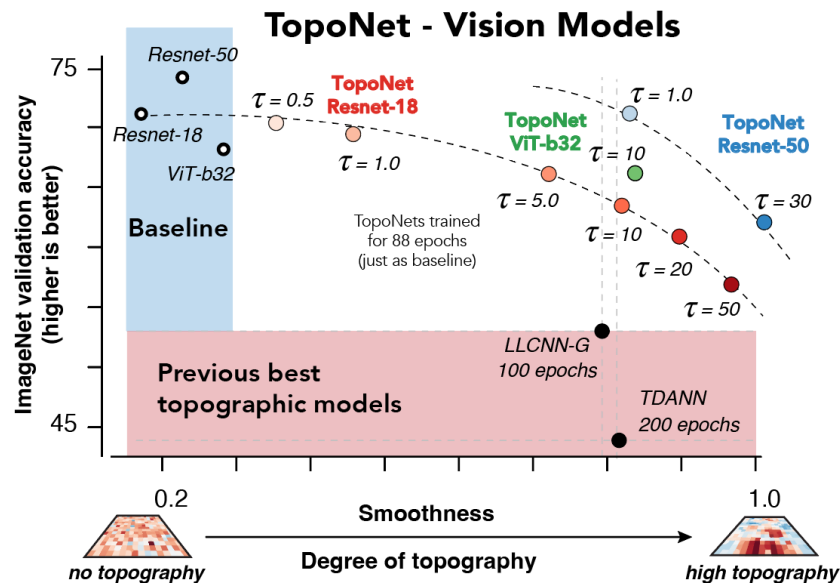
Fonte da imagem: [Chris von Csefalvay](#) .



Pesquisas Modernas: Deep SOMs

Integração com Deep Learning: gerar embeddings com uma rede profunda e treinar um SOM sobre os embeddings. Exemplo: [SOM-CPC](#).

TopoNets: Vision-Language Models que preservam topologia (veja abaixo).



Limitações e Desafios

Mesmo mapas inteligentes podem se perder quando o terreno é complexo demais.

- **Dados de alta dimensionalidade:** o desempenho se degrada em dimensões muito altas (*maldição da dimensionalidade*).
 - *Mitigação:* realizar pré-processamento com PCA ou autoencoders.
- **Sensibilidade a parâmetros:** escolher α_0 e σ_0 não é trivial.
 - *Mitigação:* usar esquemas adaptativos ou busca de hiperparâmetros.
- **Escalabilidade:** complexidade de $O(N \cdot M)$ por época, em que N representa o número de amostras e M o número de neurônios.
 - *Mitigação:* usar busca aproximada do vizinho mais próximo (*Approximate Nearest Neighbor*) para encontrar o BMU.

Ficou Interessado? Junte-se ao Nosso Time!

- **Problemas Abertos:** Precisamos de ajuda para resolver questões de escalabilidade e eficiência.
- **Pesquisa Aplicada** em Gerenciamento de Dados, Agricultura, Saúde, Direito, Pesquisa Operacional, Avaliação de Fornecedores em Cadeias de Suprimento...
- **Parcerias** nacionais e internacionais.

Se você gosta de inteligência artificial, ciência de dados e resolver problemas complexos, então nosso time é o lugar certo para você.



Muito Obrigado!

Contato: martins.denis@usp.br ↗

Site e GitHub: <https://denmartins.github.io> ↗