Trabajo 2 Aprendizaje Automático

Jacinto Carrasco Castillo

30 de marzo de 2016

A - MODELOS LINEALES

Comenzamos estableciendo la semilla y definiendo la función `pause` para interrumpir la ejecución tras cada salida por pantalla.

```
set.seed(314159)
setwd("~/Documentos/Aprendizaje Automático/AA-1516/Trabajo2")
```

```
# Realiza una pausa durante la ejecución del código
pause <- function(){
  cat("Pulse cualquier tecla")
  s <- scan()
}
```

Como en la práctica 1 y para facilitar la visualización de los resultados, se incluye un método para dibujar funciones:

```
# Función para pintar una función declarada de forma implícita en un
# cierto intervalo
# @param interval_x Extremo inicial del intervalo
# @param interval_y Extremo final del intervalo
# @param f Función declarada de forma implícita a representar
# @param levels Niveles a pintar de la función. Por defecto, f = 0.
# @param col Color en el que se pinta la función. Por defecto, negro.
# @param add  Valor lógico que determina si la gráfica se añade al plot
#             actual
draw_function <- function(interval_x, interval_y, f, levels = 0,
                          col = 1, add = FALSE){
  x <- seq(interval_x[1],interval_x[2],length=1000)
  y <- seq(interval_y[1],interval_y[2],length=1000)
  z <- outer(x,y, f) # Matriz con los resultados de hacer f(x,y)

  # Levels = 0 porque queremos pintar f(x,y)=0
  contour(x,y,z, levels=0, col = col, add = add, drawlabels = FALSE,
          ylab="", xlab="")
}

# Obtención de una función que recibe un vector como entrada
# a partir de un hiperplano y devuelve el producto escalar con los
# coeficientes del hiperplano.
# @param vec Vector de coeficientes del hiperplano
# @param change_signs Valor lógico que determina si debemos cambiar
#                     el signo de los coeficientes del vector
# @return función que realiza el producto escalar de un vector con
#         los coeficientes del hiperplano
```

```r
hypplane_to_func <- function( vec, change_signs = FALSE ){
  if(change_signs){
    vec[2:length(vec)] <- -vec[2:length(vec)]
  }
  f <- function(x){
    # @return( vec[1]*x[1]+vec[2]*x[2]+vec[3]*x[3] )
    return( x %*% vec )
  }
  return(f)
}

# Obtención de una función que recibe coordenadas 2D como entrada
# y devuelve el producto escalar con los coeficientes de una recta.
# @param vec Vector de coeficientes de la recta
# @param change_signs Valor lógico que determina si debemos cambiar
#                     el signo de los coeficientes del vector
# @return función que realiza el producto escalar de un vector con
#         los coeficientes del hiperplano
vec3D_to_func2D <- function( vec, change_signs = FALSE ){
  if(change_signs){
    vec[c(1,3)] <- -vec[c(1,3)]
  }
  f <- function(x,y){
    return( vec[1]*x+vec[2]*y+vec[3] )
  }
  return(f)
}
```

1.- Gradiente Descendente. Implementar el algoritmo de gradiente descendente.

```r
# Método del gradiente descendente.
# @param fun Función sobre la que aplicar método del gradiente descendente
# @param v_ini Vector inicial
# @param lr Tasa de aprendizaje
# @param max_iterations Número máximo de iteraciones a realizar
# @param dif  Diferencia entre dos iteraciones con la que determinamos si
#             el método ha convergido
# @param draw_iterations  Valor lógico que determina si dibujar el valor
#                         de las iteraciones
# @param print_iterations Valor lógico que determina si imprimir el valor
#                         de las iteraciones
# @return min Mínimo alcanzado
# @return iterations Número de iteraciones realizadas
gradientDescent <- function(fun, v_ini, lr, max_iterations,
                            dif = 0, draw_iterations=FALSE,
                            print_iterations=FALSE){
  # Creación del vector donde guardaremos los valores obtenidos
  values <- vector(mode = "numeric", length = max_iterations+1)

  w <- v_ini   # Solución inicial
  aux <- fun(w)
  values[1] <- aux$value
```

```
  grad <- aux$derivative_f

  # Comenzamos el bucle
  iter <- 2
  stopped <- FALSE

  while(iter <= max_iterations+1 && !stopped){
    # Actualización de w
    w <- w - lr * grad

    # Evaluamos la función
    aux <- fun(w)
    values[iter]<- aux$value
    grad <-  aux$derivative_f

    # Comprobamos si la diferencia entre dos iteraciones es menor a un umbral
    if( abs(values[iter-1] - values[iter]) < dif){
      stopped <- TRUE
    }
    # Imprimimos las iteraciones si se ha indicado así.
    if(print_iterations){
      cat("Iteration ",iter-1,"\n")
      print(w)
      print(values[iter])
    }
    iter <- iter +1
  }
  # Dibujamos las iteraciones
  if(draw_iterations){
    plot(1:iter,values[1:iter], xlab=" ", ylab=" ")
  }

  return(list('min' = w, 'iterations' = iter-2))
}
```

a) Considerar la función no lineal de error $E(u,v) = (ue^v - 2ve^{-u})^2$. Usar gradiente descendente y minimizar esta función de error, comenzando desde el punto $(u,v) = (1,1)$ y usando una tasa de aprendizaje $\nu = 0.1$.

1) Calcular analíticamente y mostrar la expresión del gradiente de la función $E(u,v)$

Debido a que es una función sencilla de derivar, lo incluimos directamente en la función en lugar de utilizar métodos numéricos de derivación:

$$w = (u,v); \quad \nabla E(w) = (\frac{\partial E}{\partial x}, \frac{\partial E}{\partial y}) = 2(ue^v - 2ve^{-u})(e^v + 2ve^{-u}, ue^v - 2e^{-u})$$

```
# Función E apartado 1a)
# @param w Vector en 2D donde evaluamos la función
# @return value Valor de la función en w
# @return derivative_f Gradiente de f en w
E_1a <- function(w){
```

```
  value <- (w[1]*exp(w[2]) - 2*w[2]*exp(-w[1]))^2
  derivative_f<-c(2*(w[1]*exp(w[2])-2*w[2]*exp(-w[1]))*
                    (exp(w[2])+ 2*w[2]*exp(-w[1])),
                  2*(w[1]*exp(w[2])-2*w[2]*exp(-w[1]))*
                    (w[1]*exp(w[2])- 2*exp(-w[1])))
  return(list('value' = value, 'derivative_f'= derivative_f))
}
```

```
results_1a <- gradientDescent(E_1a, v_ini = c(0,0.1),
                              lr = 0.1, max_iterations = 15)
print(results_1a$iterations)
```

```
## [1] 15
```

```
print(results_1a$min)
```

```
## [1] 0.04864119 0.02621090
```

```
print(E_1a(results_1a$min)$value)
```

```
## [1] 4.814825e-35
```

2) ¿Cuántas iteraciones tarda el algoritmo en obtener por primera vez un valor de $E(u,v)$ inferior a 10^{-14}?

```
print(gradientDescent(E_1a, v_ini = c(0,0.1), lr = 0.1,
                      max_iterations = 10, print_iterations = TRUE))
```

```
## Iteration  1
## [1] 0.05220684 0.02000000
## [1] 0.0002339732
## Iteration  2
## [1] 0.04896965 0.02564430
## [1] 1.971675e-06
## Iteration  3
## [1] 0.04866781 0.02616502
## [1] 1.294731e-08
## Iteration  4
## [1] 0.04864332 0.02620723
## [1] 8.293196e-11
## Iteration  5
## [1] 0.04864136 0.02621061
## [1] 5.301292e-13
## Iteration  6
## [1] 0.04864120 0.02621088
## [1] 3.388215e-15
## Iteration  7
## [1] 0.04864119 0.02621090
## [1] 2.165482e-17
## Iteration  8
```

```
## [1] 0.04864119 0.02621090
## [1] 1.384005e-19
## Iteration  9
## [1] 0.04864119 0.02621090
## [1] 8.845461e-22
## Iteration  10
## [1] 0.04864119 0.02621090
## [1] 5.653369e-24
## $min
## [1] 0.04864119 0.02621090
##
## $iterations
## [1] 10
```

Se comprueba que en la sexta iteración (séptima si contamos la evaluación del vector inicial) se obtiene un valor menor que 10^{-14}

3) ¿Qué valores de (u, v) obtuvo en el apartado anterior cuando alcanzo el error de 10^{14}

Se obtuvo $u = 0.04864120$, $v = 0.02621088$. No es el mínimo esperado, $(0, 0)$, aunque se acerca. Esto se debe a que la función es muy inestable, esto es, para pequeños valores de u y v y al hacer la exponencial de v y $-u$, se obtienen valores muy grandes según el signo de las variables.

b) Considerar ahora la función $f(x, y) = x^2 + 2y^2 + 2\sin(2\pi x)\sin(2\pi y)$

Implementamos de nuevo la función y sus derivadas:

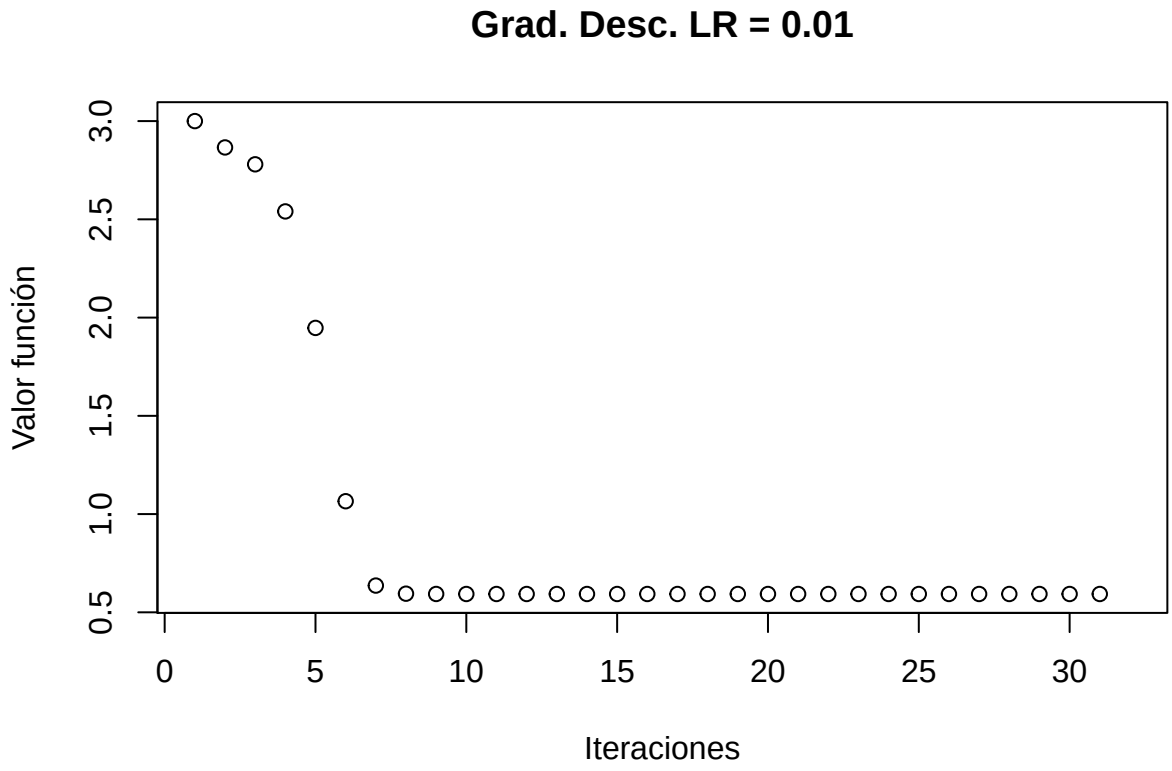
```
# Función E apartado 1b)
# @param w Vector en 2D donde evaluamos la función
# @return value Valor de la función en w
# @return derivative_f Gradiente de f en w
# @return hessian_f Matriz hessiana de f en w
E_1b <- function(w){
  value <- w[1]^2 + 2*w[2]^2 + 2*sin(2*pi*w[1])*sin(2*pi*w[2])
  derivative_f <- c(2*w[1] + 4*pi*cos(2*pi*w[1])*sin(2*pi*w[2]),
                    4*w[2] + 4*pi*sin(2*pi*w[1])*cos(2*pi*w[2]))
  hessian_f <- matrix(c(2 - 8*pi^2*cos(2*pi*w[1])*sin(2*pi*w[2]),
                        8*pi^2*cos(2*pi*w[1])*cos(2*pi*w[2]),
                        8*pi^2*cos(2*pi*w[1])*cos(2*pi*w[2]),
                        4 - 8*pi^2*sin(2*pi*w[1])*sin(2*pi*w[2]))
                      ,2,2,TRUE)
  return(list('value' = value, 'derivative_f'= derivative_f,
              'hessian_f' = hessian_f))
}
```

1)Usar gradiente descendente para minimizar esta función. Usar como valores iniciales $x_0 = 1, y_0 = 1$, la tasa de aprendizaje $\nu = 0.01$ y un máximo de 50 iteraciones. Generar un gráfico de cómo desciende el valor de la función con las iteraciones. Repetir el experimento pero usando $\nu = 0.1$, comentar las diferencias.

```
print(gradientDescent(E_1b, v_ini = c(1,1), lr = 0.01,
                      max_iterations = 30, draw_iterations = TRUE))
```

```
## $min
## [1] 1.218070 0.712812
##
## $iterations
## [1] 30
```

```
title(main="Grad. Desc. LR = 0.01",
      ylab = "Valor función", xlab = "Iteraciones")
```

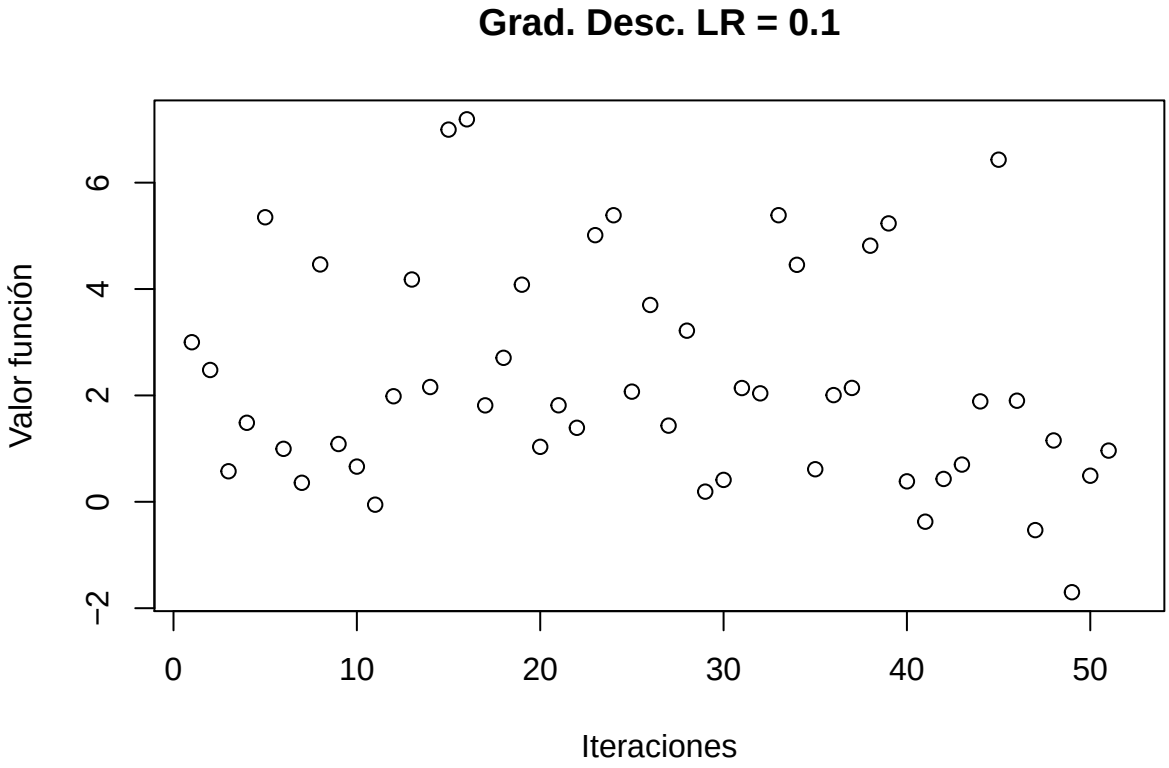


Con este valor de la tasa de aprendizaje la función converge a 0.5.

```
print(gradientDescent(E_1b, v_ini = c(1,1), lr = 0.1,
                      max_iterations = 50, draw_iterations = TRUE))
```

```
## $min
## [1] 0.1987232 0.4571101
##
## $iterations
## [1] 50
```

```
title(main="Grad. Desc. LR = 0.1",
      ylab = "Valor función", xlab = "Iteraciones")
```



Con este valor de la tasa de aprendizaje, no existe la convergencia. Esto se debe a que la función tiene varios mínimos y máximos locales y la tasa de aprendizaje hace que el punto vaya de una región a otra, en lugar de, como en el caso anterior o en la primera función, converger hacia el mínimo más cercano.

2) Obtener el valor mínimo y los valores de las variables que lo alcanzan cuando el punto de inicio se fija: (0,1, 0,1), (1, 1),(−0,5, −0,5),(−1, −1). Generar una tabla con los valores obtenidos ¿Cuál sería su conclusión sobre la verdadera dificultad de encontrar el mínimo global de una función arbitraria?

```
vectors_ini <- matrix(c(0.1,0.1,1,1,-0.5,-0.5,-1,-1),ncol=2,byrow=TRUE)
vectors_min <- t(apply(vectors_ini,1,
                       function(x) gradientDescent(E_1b, v_ini =x ,
                          lr = 0.01, max_iterations= 100)$min))
print(vectors_min)
```

```
##            [,1]       [,2]
## [1,]  0.2438050 -0.2379258
## [2,]  1.2180703  0.7128120
## [3,] -0.7313775 -0.2378554
## [4,] -1.2180703 -0.7128120
```

```
t(apply(vectors_min,1, function(x) E_1b(x)$value))
```

```
##           [,1]      [,2]      [,3]      [,4]
## [1,] -1.820079 0.5932694 -1.332481 0.5932694
```

Vemos como el mínimo es de entre los puntos es -1.8 y sin embargo un par de puntos han llegado al mismo mínimo (0.593) y el tercer punto se ha quedado en torno al -1.332. Por tanto, depende del punto inicial, además de la regularidad y concavidad de la función.

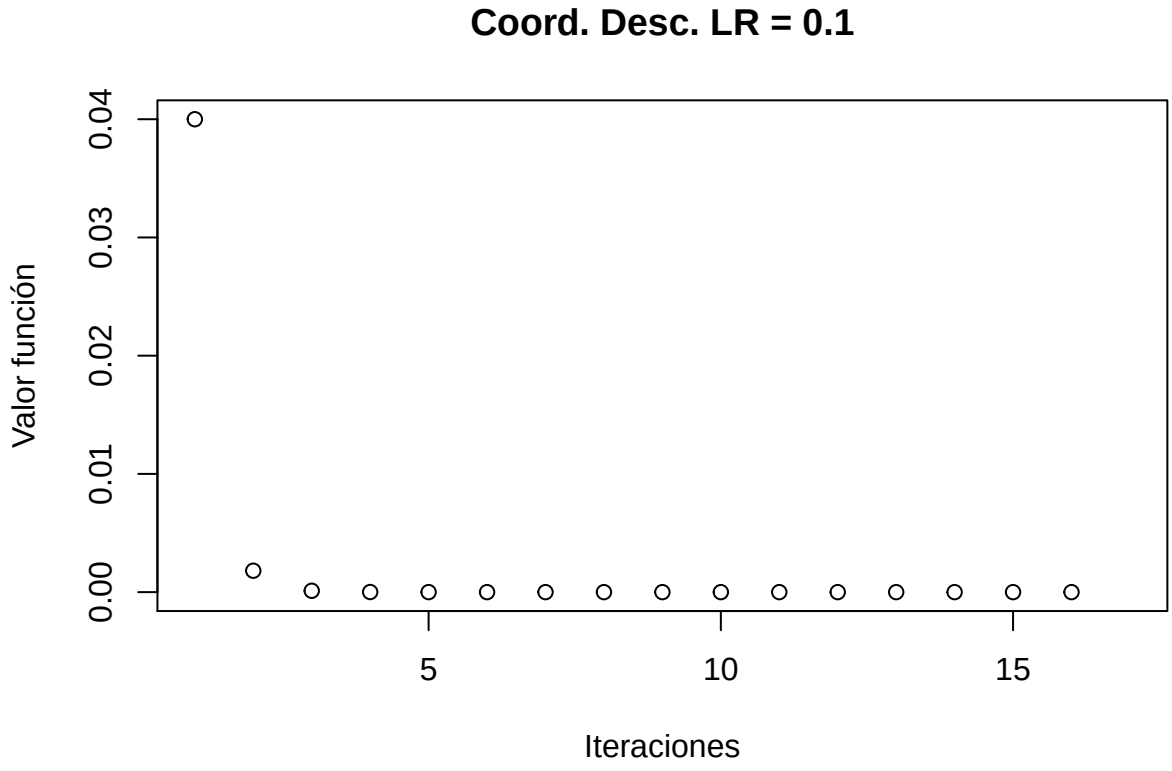
2. Coordenada descendente. En este ejercicio comparamos la eficiencia de la técnica de optimización de "coordenada descendente" usando la misma función del ejercicio 1.1a. En cada iteración, tenemos dos pasos a lo largo de dos coordenadas. En el Paso-1 nos movemos a lo largo de la coordenada u para reducir el error (suponer que se verifica una aproximación de primer orden como en gradiente descendente), y el Paso-2 es para reevaluar y movernos a lo largo de la coordenada v para reducir el error (hacer la misma hipótesis que en el paso-1). Usar una tasa de aprendizaje $\mu = 0.1$.

```
# Método de coordenada descendente.
# @param fun Función sobre la que aplicar método de la coordenada descendente
# @param v_ini Vector inicial
# @param lr Tasa de aprendizaje
# @param max_iterations Número máximo de iteraciones a realizar
# @param dif  Diferencia entre dos iteraciones con la que determinamos si
#             el método ha convergido
# @param draw_iterations  Valor lógico que determina si dibujar el valor
#                         de las iteraciones
# @param print_iterations Valor lógico que determina si imprimir el valor
#                         de las iteraciones
# @return min Mínimo alcanzado
# @return iterations Número de iteraciones realizadas
coordinateDescent <- function(fun, v_ini, lr, max_iterations,
                              dif = 0, draw_iterations=FALSE,
                              print_iterations=FALSE){

  # Creación del vector donde guardaremos los valores obtenidos
  values <- vector(mode = "numeric", length = max_iterations+1)

  w <- v_ini   # Solución inicial
  aux <- fun(w)
  values[1] <- aux$value
  grad_u <- aux$derivative_f[1]

  # Comenzamos el bucle
  iter <- 2
  stopped <- FALSE

  while(iter <= max_iterations+1 && !stopped){
    # Primer paso. Movimiento en u
    w[1] <- w[1] - lr * grad_u

    # Segundo paso. Movimiento en v
    grad_v <- fun(w)$derivative_f[2]
    w[2] <- w[2] - lr * grad_v

    # Evaluamos la función
    aux <- fun(w)
    values[iter]<- aux$value
    grad_u <-  aux$derivative_f[1]

    # Comprobamos si la diferencia entre dos iteraciones es menor
    # a un umbral
    if( abs(values[iter-1] - values[iter]) < dif){
```

```
      stopped <- TRUE
    }

    # Mostramos el punto y su valor en la función en cada iteración
    if(print_iterations){
      cat("Iteration ",iter-1,"\n")
      print(w)
      print(values[iter])
    }

    iter <- iter +1
  }

  # Dibujamos las iteraciones si se ha indicado
  if(draw_iterations){
    plot(1:iter,values[1:iter], ylab=" ", xlab=" ")
  }

  return(list('min' = w, 'iterations' = iter-2))
}
```

a) ¿Qué error E(u, v) se obtiene después de 15 iteraciones completas (i.e. 30 pasos) ?

```
min_2a <- coordinateDescent(E_1a, v_ini = c(0,0.1), lr = 0.1,
                            max_iterations = 15, draw_iterations = TRUE)$min
title(main="Coord. Desc. LR = 0.1",
      ylab = "Valor función", xlab = "Iteraciones")
```



```r
print(E_1a(min_2a)$value)
```

```
## [1] 8.990612e-20
```

b) Establezca una comparación entre esta técnica y la técnica de gradiente descendente.

Obtenemos un error de $8.990612 \cdot 10^{-20}$. Vemos como también se acerca al mínimo. Sin embargo, lo hace más lento que el método del gradiente descendente, que en las mismas 15 iteraciones llegaba a un valor de $4.814825 \cdot 10^{-35}$. Esto se debe a que con la técnica del gradiente descendente estamos bajando en ambas coordenadas por la mayor pendiente para cada punto, en lugar de bajar primero por la mayor pendiente para una dimensión, volver a evaluar, y bajar por la mayor pendiente para la otra dimensión.

3.- Método de Newton: Implementar el algoritmo de minimización de Newton y aplicarlo a la función $f(x, y)$ dada en el ejercicio 1b. Desarrolle los mismos experimentos usando los mismos puntos de inicio.

```r
# Método de Newton.
# @param fun Función sobre la que aplicar método de Newton
# @param v_ini Vector inicial
# @param lr Tasa de aprendizaje
# @param max_iterations Número máximo de iteraciones a realizar
# @param dif  Diferencia entre dos iteraciones con la que determinamos si
#             el método ha convergido
# @param draw_iterations  Valor lógico que determina si dibujar el valor
#                         de las iteraciones
# @param print_iterations Valor lógico que determina si imprimir el valor
#                         de las iteraciones
# @return min Mínimo alcanzado
# @return iterations Número de iteraciones realizadas
newtonMethod <- function(fun, v_ini, lr, max_iterations, dif = 0,
                         draw_iterations=FALSE,
                         print_iterations=FALSE){
  # Creación del vector donde guardaremos los valores obtenidos
  values <- vector(mode = "numeric", length = max_iterations+1)

  w <- v_ini   # Solución inicial
  aux <- fun(w)
  values[1] <- aux$value
  increment <- solve(aux$hessian)%*%aux$derivative_f

  # Comenzamos el bucle
  iter <- 2
  stopped <- FALSE

  while(iter <= max_iterations+1 && !stopped){
    # Actualización de w
    w <- w - lr * increment

    # Evaluamos la función
    aux <- fun(w)
    values[iter]<- aux$value
```

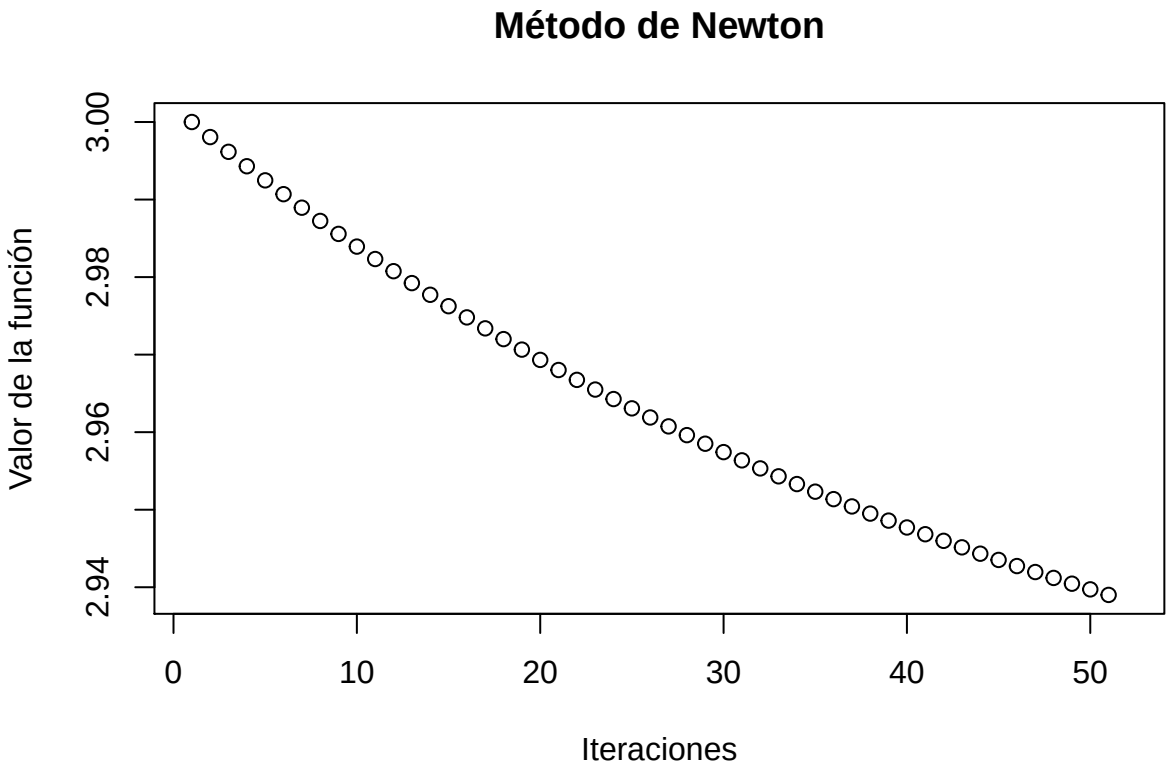
```
    increment <- solve(aux$hessian)%*%aux$derivative_f

    # Comprobamos si la diferencia entre dos iteraciones es menor
    # a un umbral
    if( abs(values[iter-1] - values[iter]) < dif){
      stopped <- TRUE
    }
    # Mostramos el punto y su valor en la función en cada iteración
    if(print_iterations){
      cat("Iteration ",iter-1,"\n")
      print(w)
      print(values[iter])
    }
    iter <- iter +1
  }

  # Dibujamos las iteraciones si se ha indicado
  if(draw_iterations){
    plot(1:iter,values[1:iter], ylab=" ", xlab=" ")
  }

  return(list('min' = w, 'iterations' = iter-2))
}
```

a) Generar un gráfico de cómo desciende el valor de la función con las iteraciones.

```
print(newtonMethod(E_1b, v_ini = c(1,1), lr = 0.01,
                   max_iterations =50, draw_iterations = TRUE))
```

```
## $min
##           [,1]
## [1,] 0.9803694
## [2,] 0.9909248
##
## $iterations
## [1] 50
```

```
title(main = "Método de Newton", ylab = "Valor de la función",
      xlab = "Iteraciones")
```

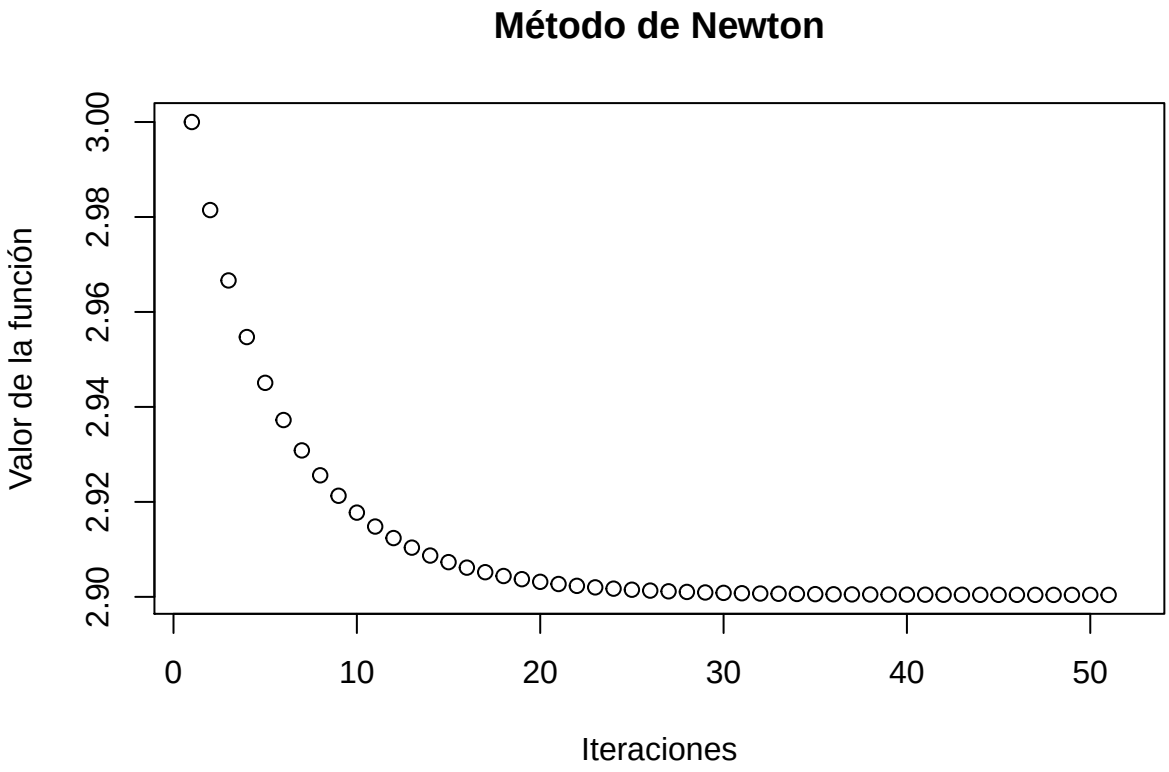


Con este valor de la tasa de aprendizaje la función converge a 2.94.

```
print(newtonMethod(E_1b, v_ini = c(1,1), lr = 0.1,
                   max_iterations = 50, draw_iterations = TRUE))
```

```
## $min
##           [,1]
## [1,] 0.9494082
## [2,] 0.9749582
##
## $iterations
## [1] 50
```

```
title(main = "Método de Newton", ylab = "Valor de la función",
      xlab = "Iteraciones")
```



Con esta tasa de aprendizaje hay convergencia a 2.90. Se comprueba que con este método es más difícil no quedarse en mínimos locales.

```
vectors_ini <- matrix(c(0.1,0.1,1,1,-0.5,-0.5,-1,-1),ncol=2,byrow=TRUE)
vectors_min <- t(apply(vectors_ini,1, function(x) newtonMethod(E_1b,
                        v_ini =x , lr = 0.01, max_iterations= 100)$min))
print(vectors_min)
```

```
##             [,1]        [,2]
## [1,]  0.02869492  0.02194543
## [2,]  0.96827827  0.98555464
## [3,] -0.48429794 -0.49208508
## [4,] -0.96834596 -0.98346603
```

```
t(apply(vectors_min,1, function(x) E_1b(x)$value))
```

```
##            [,1]     [,2]      [,3]     [,4]
## [1,] 0.05108201 2.916091 0.7286328 2.913082
```

b) Extraer conclusiones sobre las conductas de los algoritmos comparando la curva de decrecimiento de la función calculada en el apartado anterior y la correspondiente obtenida con gradiente descendente.

La conclusión que se puede obtener es que este método garantiza también para una mayor tasa de aprendizaje la convergencia a un mínimo. Sin embargo, el hecho de que tenga en cuenta la matriz hessiana hace que el punto se mueva según la forma de la función, no sólo con respecto a la máxima pendiente, con lo que se garantiza la convergencia a un mínimo local. En este caso en todos los puntos se ha convergido al mínimo local más cercano, siendo valores mayores que los puntos a los que convergía en el apartado previo.

4. Regresión Logística: En este ejercicio crearemos nuestra propia función objetivo f (probabilidad en este caso) y nuestro conjunto de datos $\mathcal{D}$ para ver cómo funciona la regresión logística. Supondremos por simplicidad que f es una probabilidad con valores $\{0, 1\}$ y por tanto que y es una función determinista de x.

- Consideremos $d = 2$ para que los datos sean visualizables, y sea $\mathcal{X} = [-1, 1] \times [-1, 1]$ con probabilidad uniforme de elegir cada $x \in \mathcal{X}$. Elegir una línea en el plano como la frontera entre $f(x) = 1$ (donde y toma valores $+1$) y $f(x) = 0$ (donde y toma valores -1), para ello seleccionar dos puntos aleatorios del plano y calcular la línea que pasa por ambos. Seleccionar $N = 100$ puntos aleatorios $\{x_n\}$ de $\mathcal{X}$ y evaluar las respuestas de todos ellos $\{y_n\}$ respecto de la frontera elegida.*

Para este apartado usaré las funciones de la práctica 1 `simula_unif` y `simula_recta`:

```
# Obtención de una muestra de datos de una distribución uniforme de
# varias dimensiones
# @param N  Número de datos de la muestra
# @param dim  Dimensión de la muestra
# @param rango  Rango de las dimensiones donde tomar la muestra
# @return muestra Muestra generada
simula_unif <- function(N, dim, rango){
  # Tomamos N*dim muestras de una uniforme de rango dado
  muestra <- matrix(runif(N*dim, min =  rango[1], max = rango[2]), N, dim)
  return(muestra)
}

# Obtención de una recta aleatoria (función lineal en 2D)
# @param  intervalo Intervalo donde se generan dos puntos con los que se
#         calculan los parámetros de la recta
# @return f Recta
simula_recta <- function(intervalo){
  puntos <- simula_unif(2,2,intervalo)
  a <- (puntos[2,2]-puntos[1,2])/(puntos[2,1]-puntos[1,1])
  b <- puntos[1,2] - a * puntos[1,1]

  f <- vec3D_to_func2D(c(a,1,b))
  return(f)
}
```

Se genera una recta, una muestra uniforme de 100 puntos y se etiquetan según el signo que le corresponda con respecto a la recta:

```
N <- 100
recta_4a <- simula_recta(c(-1,1))
muestra_4a <- simula_unif(N, 2, c(-1, 1))
etiquetas_4a <- apply(muestra_4a, 1,
                      function(X) sign(recta_4a(X[1],X[2])))
```

a) Implementar Regresión Logística (RL) con Gradiente Descendente Estocástico (SGD) bajo las siguientes condiciones:

- Inicializar el vector de pesos con valores 0.
- Parar el algoritmo cuando $\|w(t-1) - w(t)\| < 0.01$, donde $w(t)$ denota el vector de pesos al final de la época t. Una época es un pase completo a través de los N datos.

- Aplicar una permutación aleatoria de $1, 2, \ldots, N$ a los datos antes de usarlos en cada época del algoritmo.
- Usar una tasa de aprendizaje de $\nu = 0.01$

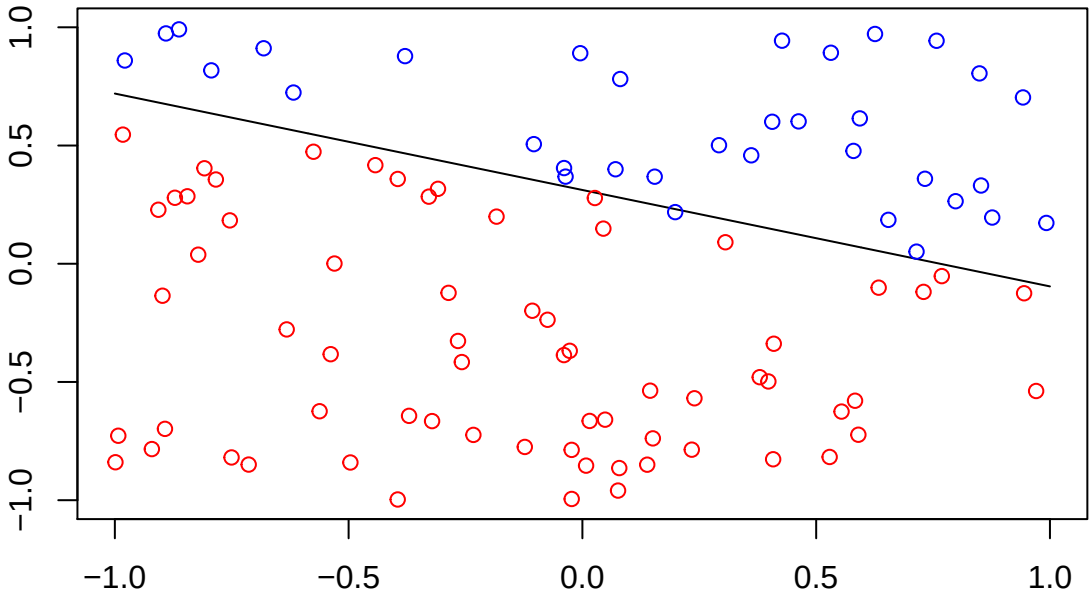
Implementación del descenso del gradiente estocástico:

```
# Norma euclídea
# @param x Vector
# @return Norma euclídea del vector.
norm_v <- function(x) sqrt(sum(x^2))

# Método de gradiente descendiente estocástico
# @param datos Datos clasificados de una población
# @param valores  Etiquetas de los datos
# @param max_iter Número máximo de iteraciones
# @param vini Vector inicial
# @param lr Tasa de aprendizaje
# @param draw_iterations Valor lógico que determina si se dibuja cada
#         iteración
# @return hiperplane Hiperplano obtenido
# @return iterations Iteraciones realizadas del método
SGD <- function(datos, valores, max_iter, vini= c(0,0,0),
                lr = 0.01, draw_iterations = FALSE){
  sol <- vini
  iter <- 0
  stopped <- FALSE

  while ( iter < max_iter && !stopped){
    permutation = sample(nrow(datos))
    prev_sol <- sol

    for( inner_iter in permutation ){
      # Añadimos coeficiente independiente
      x <- c(datos[inner_iter,],1)
      y <- valores[inner_iter]

      gr <- lr*y*x/(1+exp(y*(sol%*%x)))
      sol <- sol + gr
    }

    if(norm_v(sol - prev_sol) < 0.01)
      stopped = TRUE
    if(draw_iterations){
      draw_function(c(-1,1), c(-1,1), vec3D_to_func2D(sol),
                    col = 4)
      title(main=paste("Iteración ", iter,sep=" "), ylab ="Eje Y",
            xlab = "Eje X")
      points(datos[,1], datos[,2], col = (valores+2))
      Sys.sleep(0.5)
    }

    iter <- iter+1
  }
```

```
  # Normalizamos la solución.
  sol <- sol/sol[length(sol)-1]

  # Devolvemos el hiperplano obtenido y el número
  # de iteraciones realizadas
  return( list( hyperplane = sol, iterations = iter))
}
```

Cálculo de la función g mediante la regresión logística:

```
sol_4a <- SGD(muestra_4a, etiquetas_4a, 1000)
g_4a <- vec3D_to_func2D(sol_4a$hyperplane)
draw_function(c(-1,1),c(-1,1), g_4a)
points(muestra_4a[,1],muestra_4a[,2],col=etiquetas_4a+3)
```




```
print(sol_4a$iterations)
```

```
## [1] 366
```

Se observa que el método ha tardado 366 iteraciones en converger, pero con un buen resultado. Observando la ejecución del algoritmo se comprueba que las últimas iteraciones apenas tienen variaciones y también son buenas soluciones, con lo que podríamos pensar si reducir la diferencia entre iteraciones para considerar que se ha convergido.

b) Usar la muestra de datos etiquetada para encontrar g y estimar E_{out} usando para ello un número suficientemente grande de nuevas muestras.

Generamos una muestra aleatoria, la etiquetamos según la función aleatoria y según la función obtenida de la regresión logística:

```
muestra_4a_out <- simula_unif(N, 2, c(-1, 1))
etiquetas_4a_out <- apply(muestra_4a_out, 1,
                          function(X) sign(recta_4a(X[1],X[2])))

# Etiquetado según la regresión
rl_etiqueta_4a_out <- apply(muestra_4a_out, 1,
                            function(X) sign(g_4a(X[1],X[2])))

# Cálculo del error fuera de la muestra usada para la regresión
E_out <- sum(etiquetas_4a_out != rl_etiqueta_4a_out)/N*100
```

c) Repetir el experimento 100 veces con diferentes funciones frontera y calcule el promedio.

```
# Vector con los errores en cada iteración
E_out_4c <- vector(mode="numeric", length = 100)

for( i in 1:100){
  # Generación de los datos para cada iteración
  recta_4c <- simula_recta(c(-1,1))
  muestra_4c <- simula_unif(N, 2, c(-1, 1))
  etiquetas_4c <- apply(muestra_4c, 1,
                        function(X) sign(recta_4c(X[1],X[2])))

  # Estimación de la función
  sol_4c <- SGD(muestra_4c, etiquetas_4c, 1000)$hyperplane
  g_4c <- vec3D_to_func2D(sol_4c)

  # Etiquetado según el signo de la recta
  muestra_4c_out <- simula_unif(N, 2, c(-1,1))
  etiquetas_4c_out <- apply(muestra_4c_out, 1,
                            function(X) sign(recta_4c(X[1],X[2])))

  # Etiquetado según la regresión
  rl_etiquetas_4c_out <- apply(muestra_4c_out, 1,
                               function(X) sign(g_4c(X[1],X[2])))

  # Cálculo del error fuera de la muestra usada para la regresión
  E_out_4c[i] <- sum(etiquetas_4c_out != rl_etiquetas_4c_out)/N*100
}

cat("Media E_out: ", mean(E_out_4c))
```

```
## Media E_out:  1.82
```

5. Clasificación de Dígitos. Considerar el conjunto de datos de los dígitos manuscritos y seleccionar las muestras de los dígitos 1 y 5. Usar los ficheros de entrenamiento (training) y test que se proporcionan. Extraer las características de intensidad promedio y simetría en la manera que se indicó en el ejercicio 3 del trabajo 1.

Lectura de datos y dotación de forma para datos de entrenamiento

```
datos_train <- scan("datos/zip.train",sep=" ")
datos_train <- matrix(datos_train, ncol=257, byrow=T)
datos_train <- datos_train[datos_train[,1] == 1 | datos_train[,1]==5,]

number_train <- datos_train[,1]
pixels_train <- array(t(datos_train[,2:257]), dim=c(16,16,nrow(datos_train)))
```

Lectura de datos y dotación de forma para datos de test

```
datos_test <- scan("datos/zip.test",sep=" ")
datos_test <- matrix(datos_test,ncol=257,byrow=T)
datos_test <- datos_test[datos_test[,1] == 1 | datos_test[,1]==5,]

number_test <- datos_test[,1]
pixels_test <- array(t(datos_test[,2:257]), dim=c(16,16,nrow(datos_test)))
```

Cálculo de la simetría vertical y la media de la intensidad.

```
# Cálculo de la simetría vertical dada una matriz
# @param M matriz
# @return Simetría vertical
simetria_vertical <- function(M){
  -sum(apply(M, 1, function(x) sum(abs(x-x[length(x):1]))))
}

# Cálculo de las medias para cada imagen de test y train
means_train <- apply(pixels_train, 3, mean)
means_test <- apply(pixels_test, 3, mean)

# Cálculo de la simetría vertical para cada imagen de test y train
sim_vertical_train <- apply(pixels_train,3,simetria_vertical)
sim_vertical_test <- apply(pixels_test,3,simetria_vertical)
```

Plantear un problema de clasificación binaria que considere el conjunto de entrenamiento como datos de entrada para aprender la función g. Usando el modelo de Regresión Lineal para clasificación seguido por PLA-Pocket como mejora. Responder a las siguientes cuestiones.

Este problema consiste en, a partir de los datos de *train*, obtener una función mediante regresión lineal y PLA que nos separe los datos, y ver su tasa de acierto en el conjunto de test. Incluimos las funciones de la primera práctica para hacer regresión lineal y el algoritmo PLA modificado:sapply(x, function(y) crossprod(coefs_g10, yˆ(0:20)))

```
# Conteo de errores según el etiquetado de una función y las etiquetas reales
# @param f Función que realizará el etiquetado
# @param data Datos a etiquetar
# @param label Etiquetas originales
# @return Número de datos erróneamente etiquetados por f
count_errors <- function(f, data, label){
  #Conteo de errores
  signs <- apply(data, 1, function(x) return(sign(f(c(x,1)))))
  return( sum(signs != label) )
}
```

```r
# Método PLA Pocket
# @param data Datos sobre los que se realiza el método PLA
# @param label Etiqueta de estos datos
# @param max_iter Número máximo de iteraciones
# @param vini Vector inicial
# @param draw_iterations Valor lógico que determina si se van dibujando
#         las iteraciones
# @return hyperplane Hiperplano solución obtenido
# @return iterations Número de iteraciones
ajusta_PLA_MOD <- function(data, label, max_iter, vini,
                           draw_iterations = FALSE){
  sol <- vini
  iter <- 0
  changed <- TRUE
  current_sol <- sol

  while ( iter < max_iter && changed){
    # Comprobaremos en cada vuelta si hemos hecho algún cambio
    current_errors <- count_errors(hypplane_to_func(sol), data, label )
    changed <- FALSE

    for( inner_iter in 1:nrow(data) ){
      # Añadimos coeficiente independiente
      x <- c(data[inner_iter,],1)

      if( sign(crossprod(x,current_sol)) != label[inner_iter]){
        current_sol <- current_sol + label[inner_iter] * x
        changed <- TRUE
      }
    }

    # Dibujo de la solución actual y la mejor encontrada.
    if(draw_iterations){
      draw_function(c(-50,50), c(-50,50),vec3D_to_func2D(sol), col = 4)
      draw_function(c(-50,50), c(-50,50),vec3D_to_func2D(current_sol),
                    col = 5, add=TRUE)
      points(lista_unif[,1], lista_unif[,2], col = (label+3))
      title(main=paste("Iteración ", iter,sep=" "))
      Sys.sleep(0.5)
    }

    # Actualización de la mejor solución encontrada.
    if( current_errors >= count_errors(hypplane_to_func(current_sol),
                                       data, label )){
      sol <- current_sol
    }

    iter <- iter+1
  }
  sol <- sol/sol[length(sol)-1]

  return( list( hyperplane = sol, iterations = iter))
}
```

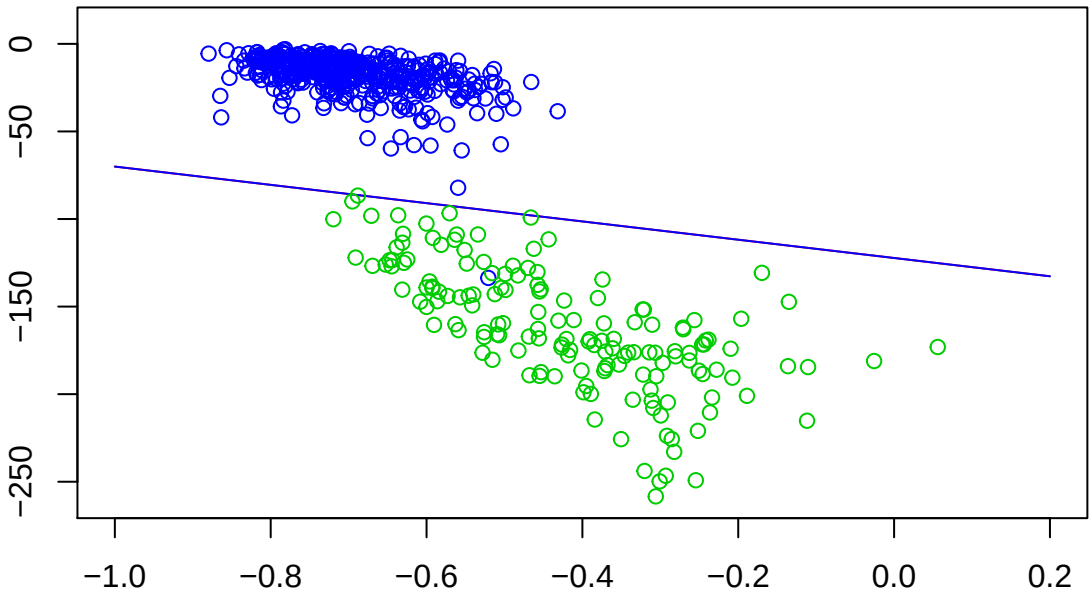
```r
# Pseudoinversa de una matriz
# @param X  Matriz de la que queremos calcular la pseudoinversa
# @return matriz pseudoinversa de X
pseudoinv <- function(X){
  desc <- svd(X)
  d <- round(desc$d, digits=5)
  d[abs(d)>0] <- 1/d[abs(d)>0]^2
  pseudo_inv <- desc$v %*% diag(d) %*% t(desc$v)
  return(pseudo_inv)
}

# Regresión lineal para ajustar unos datos a unos valores
# @param datos Datos sobre los que se realiza la regresión lineal.
# @param label Valores a los que ajustar la regresión.
# @return Coeficientes obtenidos por la regresión lineal.
regress_lin <- function(datos, label){
  pseudo_inv <- pseudoinv(datos)
  return(pseudo_inv%*%t(datos)%*%label)
}
```

Se asignan las etiquetas y se calculan los coeficientes en primer lugar por regresión, y en segundo lugar pasando por el PLA Pocket, que acaba rápidamente debido a que ya el vector obtenido por regresión es prácticamente la solución.

```r
label_5 <- numeric(length(number_train))
label_5[number_train==1] <- 1
label_5[number_train==5] <- -1

coefs_rl_5 <- regress_lin(cbind(means_train,sim_vertical_train,
                                rep(1,length(means_train))),
                          label_5)
coefs_5 <- ajusta_PLA_MOD(cbind(means_train,sim_vertical_train),
                          label_5, 100, coefs_rl_5)$hyperplane
```

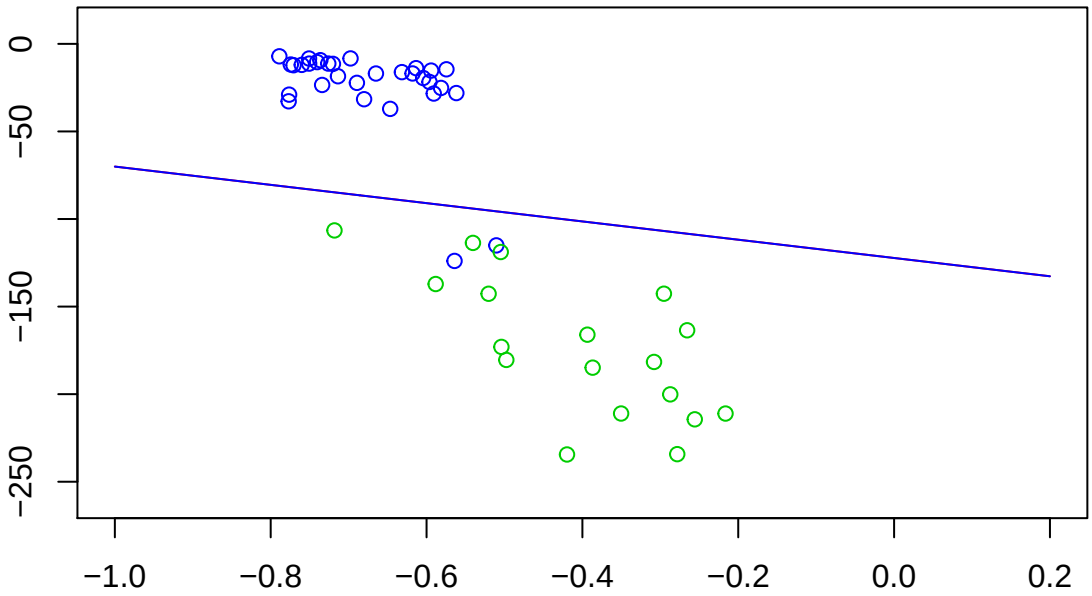
a) Generar gráficos separados (en color) de los datos de entrenamiento y test junto con la función estimada.

```r
n_train_colors <- numeric(length(number_train))
n_train_colors[number_train==1] <- 4
n_train_colors[number_train==5] <- 3
data_list_train <- list('number'=number_train, 'pixels'=pixels_train,
                        'mean'=means_train, 'v_symmetry'= sim_vertical_train,
                        'colors'=n_train_colors )

draw_function(c(-1,0.2),c(-260,10),vec3D_to_func2D(coefs_rl_5), col = 2)
draw_function(c(-1,0.2),c(-260,10),vec3D_to_func2D(coefs_5), col=4, add=TRUE)
points(data_list_train$mean, data_list_train$v_symmetry,
       col = data_list_train$colors )
title(main="Datos Train")
```



Observamos que la solución obtenida por regresión es la misma que devuelve el PLA Pocket (las líneas están superpuestas). La solución obtenida es la esperable observando los datos y no se puede obtener una solución mejor debido a que los datos no son separables linealmente.

```
n_test_colors <- numeric(length(number_test))
n_test_colors[which(number_test==1)] <- 4
n_test_colors[which(number_test==5)] <- 3
data_list_test <- list('number'=number_test, 'pixels'=pixels_test,
                       'mean'=means_test,'v_symmetry'=sim_vertical_test,
                       'colors'=n_test_colors )
draw_function(c(-1,0.2),c(-260,10),vec3D_to_func2D(coefs_rl_5), col = 2)
draw_function(c(-1,0.2),c(-260,10),vec3D_to_func2D(coefs_5), col=4, add=TRUE)
points(data_list_test$mean, data_list_test$v_symmetry,
       col = data_list_test$colors )
title(main="Datos Test")
```



Observando los datos de test, vemos que los datos de entrenamiento hacen obtener una buena solución, pues estos datos tampoco son separables linealmente y sí clasifica bien.

b) Calcular E_{in} y E_{test} (error sobre los datos de test).

```
E_in_5b = count_errors(hypplane_to_func(coefs_5),
                       cbind(means_train, sim_vertical_train),
                       label_5)/length(number_train)

label_test_5 <- numeric(length(number_test))
label_test_5[number_test==1] <- 1
label_test_5[number_test==5] <- -1

E_test_5b = count_errors(hypplane_to_func(coefs_5),
                         cbind(means_test, sim_vertical_test),
                         label_test_5)/length(number_test)

cat("Ein: \t",E_in_5b,
    "\nEtest: \t", E_test_5b)
```

```
## Ein:      0.001669449
## Etest:    0.04081633
```

Se observa que el error obtenido en los datos de entrenamiento es del orden de 0.1% y que el error en los datos de test es de 4%. Esto se debe a que sólo hubo un dato en train que no se pudiera clasificar, en cambio hay menos datos de train y dos valores no clasificables.

c) Obtener cotas sobre el verdadero valor de E_{out}. Pueden calcularse dos cotas una basada en E_{in} y otra basada en E_{test}. Usar una tolerancia $\delta = 0.05$. ¿Qué cota es mejor?

Para obtener la cota basada en E_{in} usamos la desigualdad de Vapnik-Chervonenkis generalizada:

$$E_{out}(g) \leq E_{in}(g) + \sqrt{\frac{8}{N}\log\frac{4m_{\mathcal{H}}(2N)}{\delta}}$$

Podemos, por mayor simplicidad, acotar $m_{\mathcal{H}}(2N)$ por $(2N)^{d_{VC}}$. Como en este caso d_{VC} es 3,

$$E_{out}(g) \leq E_{in}(g) + \sqrt{\frac{8}{N}\log\frac{4(2N)^3}{\delta}}$$

$N = 599$, luego

$$E_{out}(g) \leq E_{in}(g) + \sqrt{\frac{8}{599}\log\frac{4(2\cdot 599)^3}{0.05}}$$

$$E_{out}(g) \leq 0.00169449 + 0.5852643 = 0.5869337$$

Para obtener la cota basada en E_{test} usamos la desigualdad de Hoeffding con una hipótesis, que será la producida por los datos de entrenamiento:

$$\mathbb{P}(|E_{in}(g)E_{out}(g)| \geq \varepsilon) \leq 2e^{-2\varepsilon^2 N}$$

Queremos hallar el ε tal que la probabilidad de que estén a una distancia mayor que ε sea menor que 0.05, luego despejamos:

$$\mathbb{P}(|E_{test}(g)E_{out}(g)| \geq \varepsilon) \leq 2e^{-2\varepsilon^2 N} = 0.05$$

Despejando llegamos a $\varepsilon = 0.194$. Por tanto, con probabilidad 0.95, $|E_{test}(g)E_{out}(g)| \leq 0.194$. Esto significa que $E_{out}(g) \leq E_{test}(g) + 0.194 = 0.2348163$.

Llegamos por tanto a una mejor cota de E_{out}

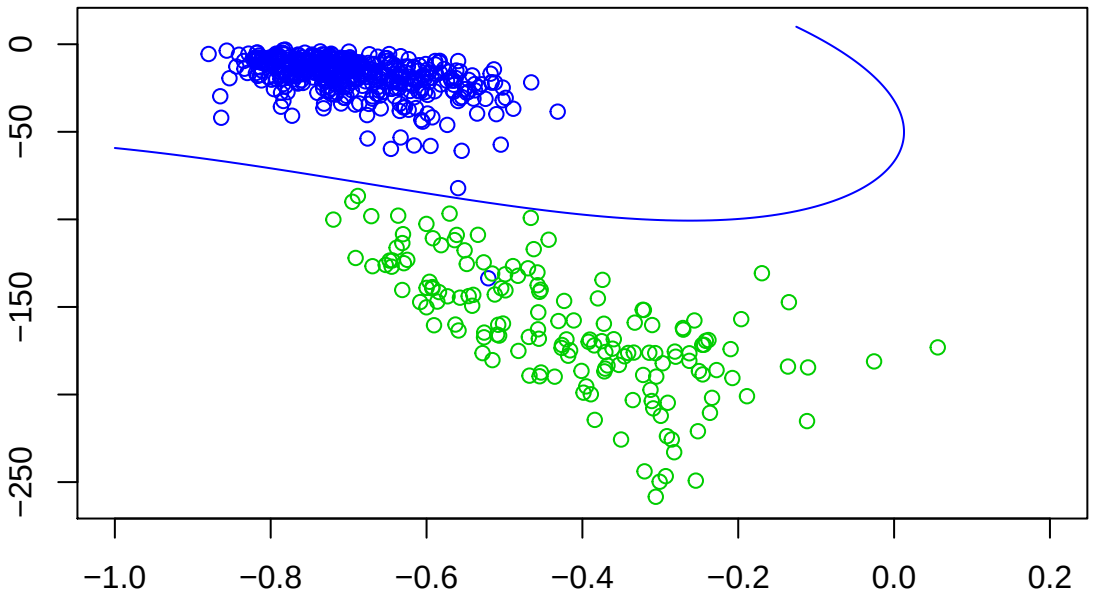
d) Repetir los puntos anteriores pero usando una transformación polinómica de tercer orden ($\Phi_3(x)$ en las transparencias de teoría).

Denotamos por $\Phi_3(x)$ a la transformación $\Phi_3(x) = 1, x_1, x_2, x_1^2, x_2^2, x_1x_2, x_1^3, x_2^3, x_1^2x_2, x_1x_2^2)$. Tenemos por tanto que realizar la regresión lineal para este modelo y ver el error dentro y fuera de la muestra:

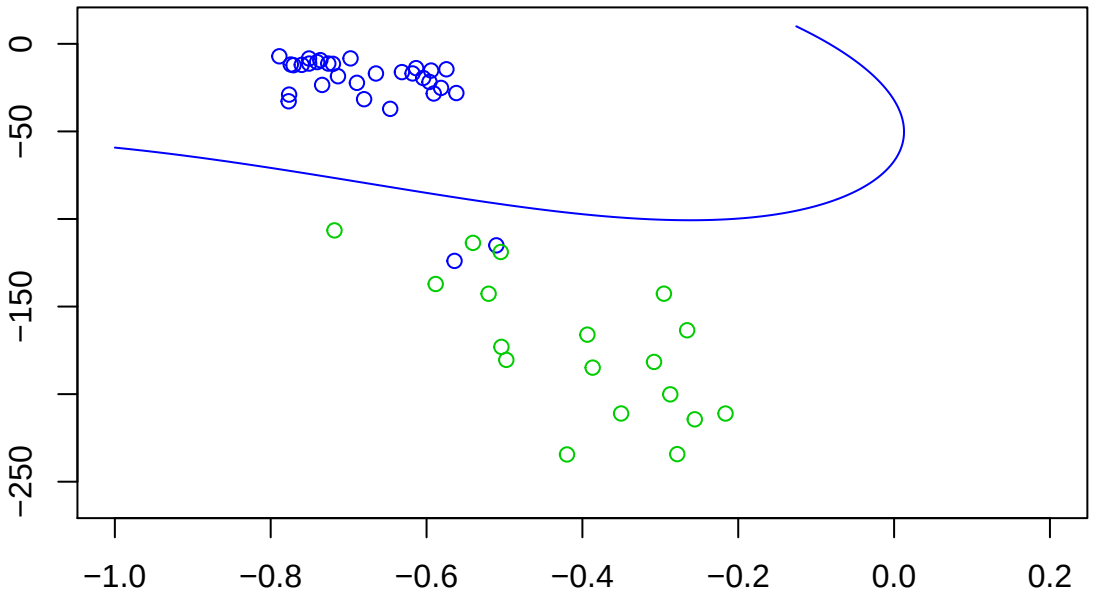
```
data_transf_5d <- cbind(means_train,sim_vertical_train,
                        means_train^2,sim_vertical_train^2,
                        means_train*sim_vertical_train,
                        means_train^3,sim_vertical_train^3,
                        means_train^2*sim_vertical_train,
                        means_train*sim_vertical_train^2)

coefs_rl_5d <- regress_lin(cbind(data_transf_5d,
                                 rep(1,length(number_train))), label_5)

estimated_f_5d <- function(x,y){
  coefs_rl_5d[1]*x + coefs_rl_5d[2]*y + coefs_rl_5d[3]*x^2 +
    coefs_rl_5d[4]*y^2 + coefs_rl_5d[5]*x*y +
    coefs_rl_5d[6]*x^3 + coefs_rl_5d[7]*y^3 +
    coefs_rl_5d[8]* x^2*y + coefs_rl_5d[9]*x*y^2 + coefs_rl_5d[10]
}
```

Mostramos la gráfica obtenida con la regresión lineal para los datos de entrenamiento y los datos de test:

```
draw_function(c(-1,0.2),c(-260,10),estimated_f_5d, col=4)
points(data_list_train$mean, data_list_train$v_symmetry,
       col = data_list_train$colors)
```




```
draw_function(c(-1,0.2),c(-260,10),estimated_f_5d, col=4)
points(data_list_test$mean, data_list_test$v_symmetry,
       col = data_list_test$colors)
```



Contamos los errores en los datos de entrenamiento y en los datos de test:

```
E_in_5d = count_errors(hypplane_to_func(coefs_rl_5d),
                       data_transf_5d,
                       label_5)/length(number_train)
```

```
data_transf_test_5d <- cbind(means_test, sim_vertical_test,
                         means_test^2,sim_vertical_test^2,
                         means_test*sim_vertical_test,
                         means_test^3,sim_vertical_test^3,
                         means_test^2*sim_vertical_test,
                         means_test*sim_vertical_test^2)

E_test_5d = count_errors(hypplane_to_func(coefs_rl_5d),
                          data_transf_test_5d,
                          label_test_5)/length(number_test)

cat("Ein: \t",E_in_5d,
    "\nEtest: \t", E_test_5d)
```

```
## Ein:      0.001669449
## Etest:    0.04081633
```

Ahora calculamos las cotas para E_{out} de la misma manera que antes:

La dimensión es $\frac{Q(Q+3)}{2}+1$, para nuestro caso, $d_{VC}=10$ y entonces, acotando $m_{\mathcal{H}}(2N)$ por $(2N)^{d_{VC}}$:

$$E_{out}(g) \leq E_{in}(g) + \sqrt{\frac{8}{N}\log\frac{4((2N)^{10}+1)}{\delta}}$$

$N=599$, luego

$$E_{out}(g) \leq E_{in}(g) + \sqrt{\frac{8}{599}\log\frac{4((2\cdot 599)^{10}+1)}{0.05}}$$

$$E_{out}(g) \leq 0.001669449 + 1.002608 = 1.004277$$

Pero esta cota sobrepasa 1, con lo que no nos aporta información. Miraremos ahora con la cota obtenida con E_{test}. Volvemos a usar la desigualdad de Hoeffding:

$$\mathbb{P}(|E_{in}(g)E_{out}(g)| \geq \varepsilon) \leq 2e^{-2\varepsilon^2 N}$$

Despejamos de nuevo ε y llegamos a $\varepsilon = 0.194$. Por tanto, con probabilidad 0.95, $|E_{test}(g)E_{out}(g)| \leq 0.194$. Esto significa que $E_{out}(g) \leq E_{test}(g) + 0.194 = 0.2348163$.

e) Si tuviera que usar los resultados para dárselos a un potencial cliente, ¿usaría la transformación polinómica? Explicar la decisión.

No usaría la transformación polinómica, pues añade demasiada complejidad a un modelo que, a la vista de los resultados, se puede resolver con el modelo lineal. Como vemos, la cota usando la dimensión de Vapnik-Chervonenkis es menor para el modelo lineal, y con la transformación cúbica no se reduce el error en el test, luego la cota es la misma. Por tanto, no hay ningún dato que sea clasificado por el modelo cúbico y no por el lineal, así que no hay razón para preferir uno más complejo.

B - SOBREAJUSTE

1.-Sobreajuste.

Vamos a construir un entorno que nos permita experimentar con los problemas de sobreajuste. Consideremos el espacio de entrada $\mathcal{X} = [-1, 1]$ con una densidad de probabilidad uniforme,

$f_U(x) = \frac{1}{2}$. **Consideramos dos modelos $\mathcal{H}_2$ y $\mathcal{H}_{10}$ representando el conjunto de todos los polinomios de grado 2 y grado 10 respectivamente. La función objetivo es un polinomio de grado Q_f que escribimos como $f(x) = \sum_{q=0}^{Q_f} a_q L_q(x)$, donde $L_q(x)$ son los polinomios de Legendre (ver la relación de ejercicios 2). El conjunto de datos es $\mathcal{D} = \{(x_1, y_1), \ldots, (x_N, y_N)\}$ donde $y_n = f(x_n) + \sigma_{\varepsilon_n}$ y las ε_n son variables aleatorias i.i.d. $\mathcal{N}(0,1)$ y σ^2 la varianza del ruido.**

Comenzamos realizando un experimento donde suponemos que los valores de Q_f, N, σ, están especificados, para ello:

* Generamos los coeficientes a_q a partir de muestras de una distribución $\mathcal{N}(0,1)$ y escalamos dichos coeficientes de manera que $\mathbb{E}_{a,x}[f^2] = 1$. (Ayuda: Dividir los coeficientes por $\sqrt{\sum_{q=0}^{Q_f} \frac{1}{2q+1}}$)

* Generamos un conjunto de datos $x_1, \ldots, x_N$ muestreando de forma independiente $\mathbb{P}(x)$ y los valores $y_n = f(x_n) + \sigma\varepsilon_n$.

Sean g_2 y g_{10} los mejores ajustes a los datos usando $\mathcal{H}_2$ y $\mathcal{H}_{10}$ respectivamente y sean $E_{out}(g_2)$ y $E_{out}(g_{10})$ sus respectivos errores fuera de la muestra.

a. Calcular g_2 y g_{10}.

Comenzamos definiendo una función para obtener los multiplicadores de Lagrange:

```
# Evaluación de los polinomios de Lagrange en un punto.
# @param x Punto en el que evaluar los polinomios.
# @param k Grado máximo del polinomio de Lagrange a evaluar.
# @return Vector de longitud k+1 con las evaluaciones de los polinomios.
lagrange_poly <- function(x,k){
  if (k ==0){
    return( 1 )
  }
  else if (k ==1){
    return( c(1,x) )
  }

  # Creación del vector
  l_poly <- vector(mode="numeric", length = k+1)
  l_poly[1] <- 1
  l_poly[2] <- x

  # Recurrencia.
  for( i in 2:k){
    l_poly[i+1] <- (2*i-1)/i*x*l_poly[i] -
      (i-1)/i*l_poly[i-1]
  }

  return( l_poly )
}
```

Definimos los valores usados para el experimento.

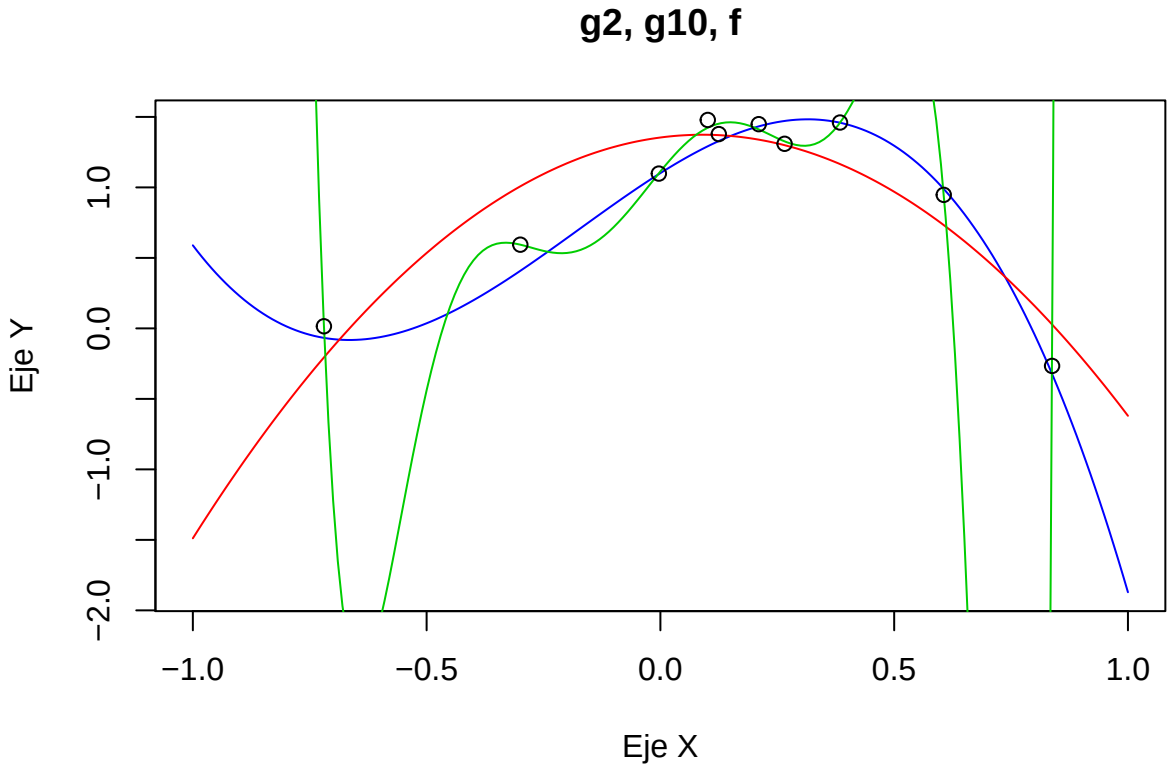
```
Q_f <- 3
N <- 10
sigma <- 0.2
```

Generamos los coeficientes a_q:

```
a_Q <- rnorm(Q_f+1)/sqrt(sum(1/(2*(0:Q_f)+1)))

# Función objetivo
# @param x Punto (o vector de puntos) en el que evaluar la sumatoria
#           de polinomios de Legendre
# @return Vector con la evaluación de la sumatoria de polinomios en x.
f_obj <- function(x){  sapply(x, function(y) crossprod(a_Q,
                                        lagrange_poly(y,Q_f))) }

x <- runif(N, min=-1, max=1)
y <- f_obj(x) + sigma*rnorm(N)
```

Para calcular g_2 y g_{10}, hacemos regresión lineal sobre los datos.

```
coefs_g2 <- regress_lin(t(sapply(x,function(i) i^(0:2))), y)
coefs_g10 <- regress_lin(t(sapply(x,function(i) i^(0:20))), y)

g2 <- function(x){
  sapply(x, function(y) crossprod(coefs_g2, y^(0:2)))
}

g10 <- function(x){
  sapply(x, function(y) crossprod(coefs_g10, y^(0:20)))
}

plot(seq(-1,1,by=0.01), sapply(seq(-1,1,by=0.01), f_obj), type ="l", col=4,
     main = "g2, g10, f", xlab = "Eje X", ylab = "Eje Y")
points(seq(-1,1,by=0.01), sapply(seq(-1,1,by=0.01), g2), type ="l", col=2)
points(seq(-1,1,by=0.01), sapply(seq(-1,1,by=0.01), g10), type ="l", col=3)
points(x,y)
```



Se aprecia el gran sobreajuste que hay en la función g_{10} (en verde) y cómo los datos no están sobre la función f, sino que hay un cierto ruido. La función g_2 se ve cómo ajusta mejor los datos pese a no poder recoger la suficiente complejidad y acercarse a f.

b. ¿Por qué normalizamos f? (Ayuda: interpretar el significado de σ)

σ representa el peso del error introducido en los datos. La normalización de los datos de f se realiza para reducir la variabilidad de los datos (especialmente en los extremos, donde se ve más la influencia de las mayores potencias.

c. ¿Cómo podemos obtener E_out analíticamente para una g_{10} dada?

La forma de obtener E_out será, dada g_{10}, calcular $\mathbb{E}_x[(g_{10}(x) - f(x))^2]$. Esto es, calcular el error fuera de la muestra, con varianza igual a 0, ya que g_{10} es fijo. Vemos el error para la g_{10} obtenida:

```
cat( "Error g10:\t",
     integrate(function(x) (g10(x)-f_obj(x))^2,-1,1,
               subdivisions = 10000L)$value)
```

```
## Error g10:    25826.12
```

```
cat( "Error g2:\t",
     integrate(function(x) (g2(x)-f_obj(x))^2,-1,1,
               subdivisions = 10000L)$value)
```

```
## Error g2:     0.6601282
```

Se aprecia un mayor valor de error en g_{10} que en $g2$ debido a que se ajusta perfectamente a los datos, que tienen error, con lo que no se está ajustando a la función real.

2. Siguiendo con el punto anterior,usando la combinación de parámetros $Q_f = 20, N = 50, \sigma = 1$ ejecutar un número de experimentos (> 100) calculando en cada caso $E_out(g_2)$ y $E_out(g_{10})$. Promediar todos los valores de error obtenidos para cada conjunto de hipótesis, es decir

$$E_{out}(\mathcal{H}_{\in}) = promedio\ sobre\ experimentos(E_{out}(g_2))$$
$$E_{out}(\mathcal{H}_{\infty\prime}) = promedio\ sobre\ experimentos(E_{out}(g_{10}))$$

Establecemos los parámetros dados:

```
Q_f <- 20
N <- 50
sigma <- 1
```

Realizamos 150 experimentos y obtenemos los datos referentes a los errores obtenidos con g_2 y g_{10}:

```
error_g2 = vector(mode = "numeric", length = 150)
error_g10 =vector(mode = "numeric", length = 150)

for(i in 1:150){
  a_Q <- rnorm(Q_f+1)/sqrt(sum(1/(2*(0:Q_f)+1)))
  f_obj <- function(x){  sapply(x, function(y) crossprod(a_Q,
                                        lagrange_poly(y,Q_f))) }
  x <- runif(N, min=-1, max=1)
  y <- f_obj(x) + sigma*rnorm(N)
  coefs_g2 <- regress_lin(t(sapply(x,function(i) i^(0:2))), y)
  coefs_g10 <- regress_lin(t(sapply(x,function(i) i^(0:10))), y)

  g2 <- function(x){
    sapply(x, function(y) crossprod(coefs_g2, y^(0:2)))
  }

  g10 <- function(x){
    sapply(x, function(y) crossprod(coefs_g10, y^(0:10)))
  }

  error_g10[i] <- integrate(function(x) (g10(x)-f_obj(x))^2,
                            -1,1,subdivisions = 100L)$value
  error_g2[i]  <- integrate(function(x)  (g2(x)-f_obj(x))^2,
                           -1,1,subdivisions = 100L)$value
}
```

```
cat("Error medio en g10=\t", mean(error_g10))
```

```
## Error medio en g10=   87.06287
```

```
cat("Error medio en g2=\t", mean(error_g2))
```

```
## Error medio en g2=    0.9681862
```

Vemos como lo obtenido en el ejemplo anterior se obtiene también aquí aún habiendo aumentado los datos, el error y el grado de la función objetivo.

Definimos una medida de sobreajuste como $E_{out}(g_{10}) - E_{out}(g_2)$

a. Argumentar por qué la medida dada puede medir el sobreajuste.

Esta medida puede medir el sobreajuste debido a que se trata de la diferencia entre $E_{out}(\mathcal{H}_{10})$ y $E_{out}(\mathcal{H}_2)$, es decir, cuánto más hay de error al suponer la función objetivo está en $\mathcal{H}_{10}$ que suponer sólo que está en $\mathcal{H}_2$. Necesariamente el error dentro de la muestra será mejor o al menos igual de bueno para las funciones en $\mathcal{H}_{10}$ que en $\mathcal{H}_2$. Si hemos seleccionado el modelo $\mathcal{H}_{10}$ y la función pertenece a un espacio más pequeño, existirá ruido determinista.

b. ¿Bajo qué condiciones esta medida es significativamente positiva (i.e. sobreajuste alto) y lo opuesto, significativamente negativa? Usar los valores $Q_f \in \{1, 2, \ldots, 100\}$, $N \in \{20, 25, \ldots, 100\}$, $\sigma \in \{0, 0.05, 0.1, \ldots, 2\}$. Explicar lo que se observa.

Tomaremos menos datos para que dé tiempo a ejecutarse:

```
Q_f = seq(1,100,by=9)
N = seq(20,100,by=10)
sigma = seq(0, 2, by=0.5)
```

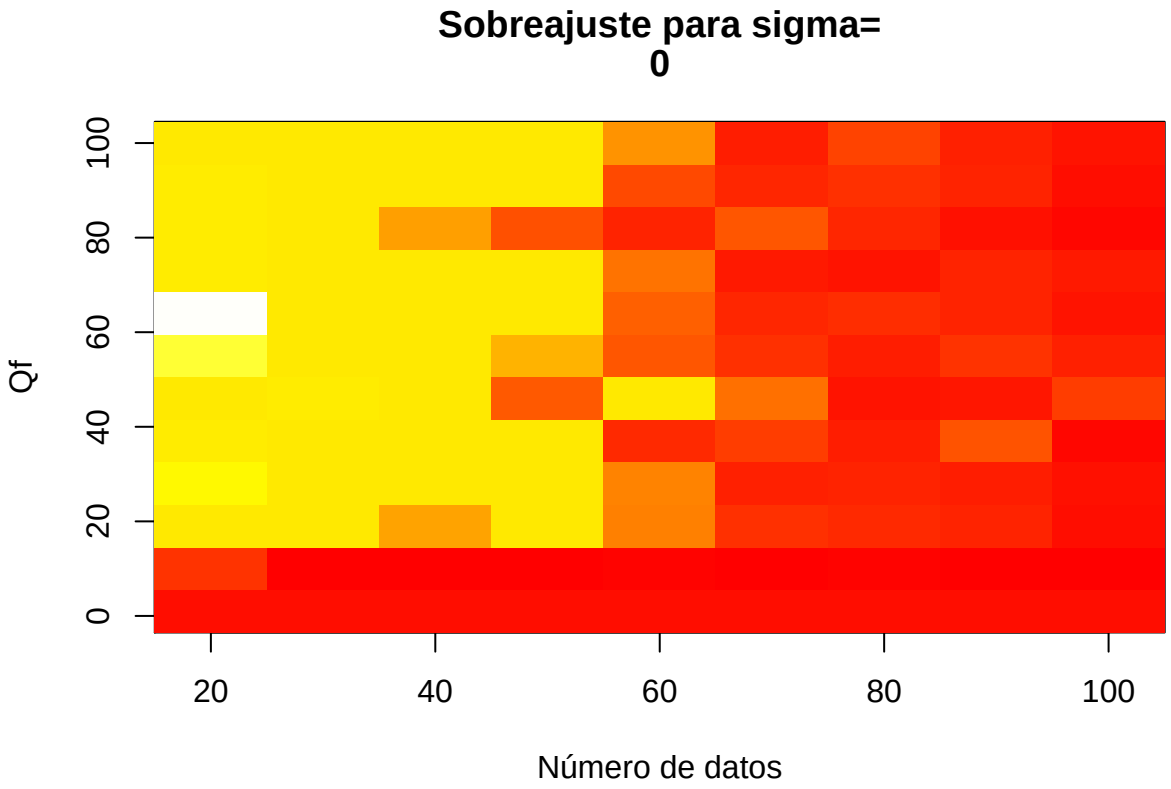
Otra forma de tomar el error es ver la diferencia entre la función objetivo y la función estimada en ciertos puntos y sumarlo. Definimos una función para obtener la suma de la diferencia entre las funciones en varios puntos.

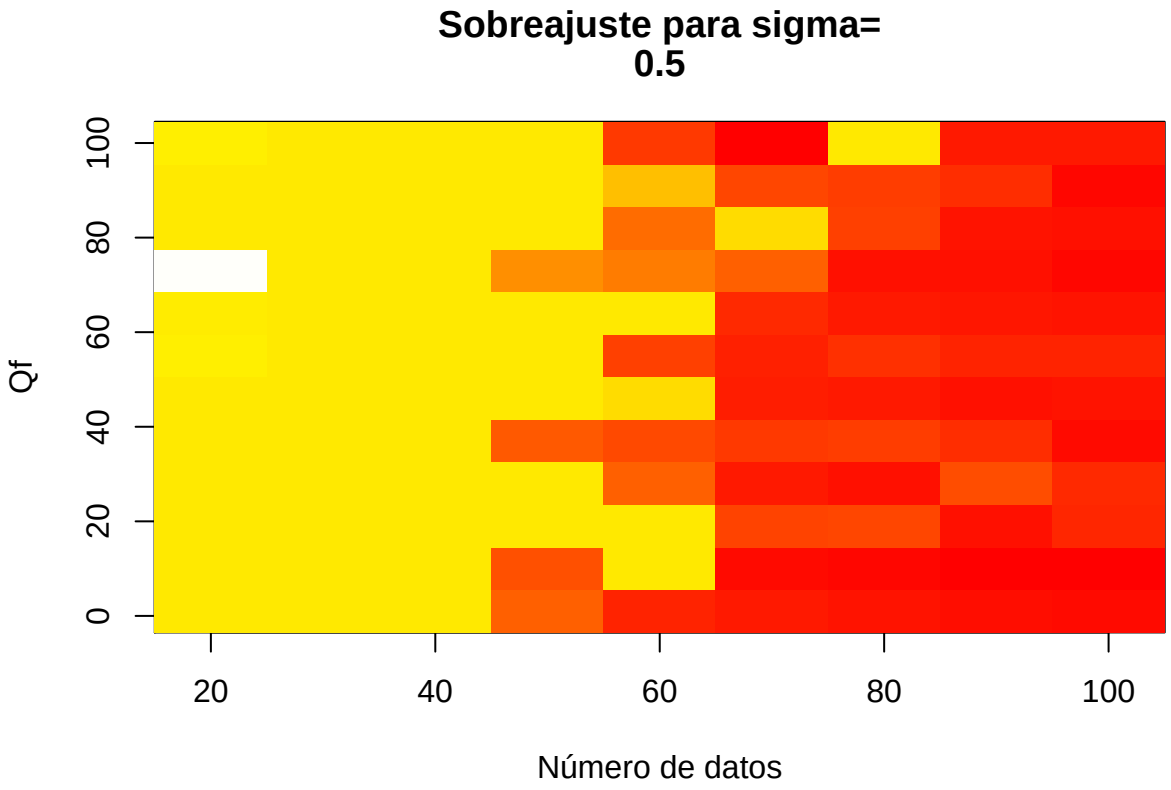
```
# Obtención del error fuera de los datos de entrenamiento dadas dos funciones
# @param f_obj Función objetivo
# @param f Función estimada.
# @param range Intervalo en el que obtener el error.
# @return Error fuera de los datos de entrenamiento
getEout <- function(f_obj, f, range = c(-1,1)){
  E_out = 0
  pob = seq(range[1],range[2],by=0.2)
  for( i in 1:10){
    E_out <- E_out + (f_obj(pob[i])-f(pob[i]))^2
  }

  return( E_out/10 )
}

# Obtención de un polinomio por regresión lineal ajustado a una función
# @param x Puntos en los que se ha evaluado una función
# @param y Evaluación de la función
# @param grade Grado máximo del polinomio que aproxime la función
# @return Función que mejor aproxima a los datos.
getAproxPolynom <- function(x,y,grade){

  coefs <- regress_lin(t(sapply(x,function(i) i^(0:grade))), y)

  polynom <- function(x){
    sapply(x, function(y) crossprod(coefs, y^(0:grade)))
  }

  return(polynom)
}
```

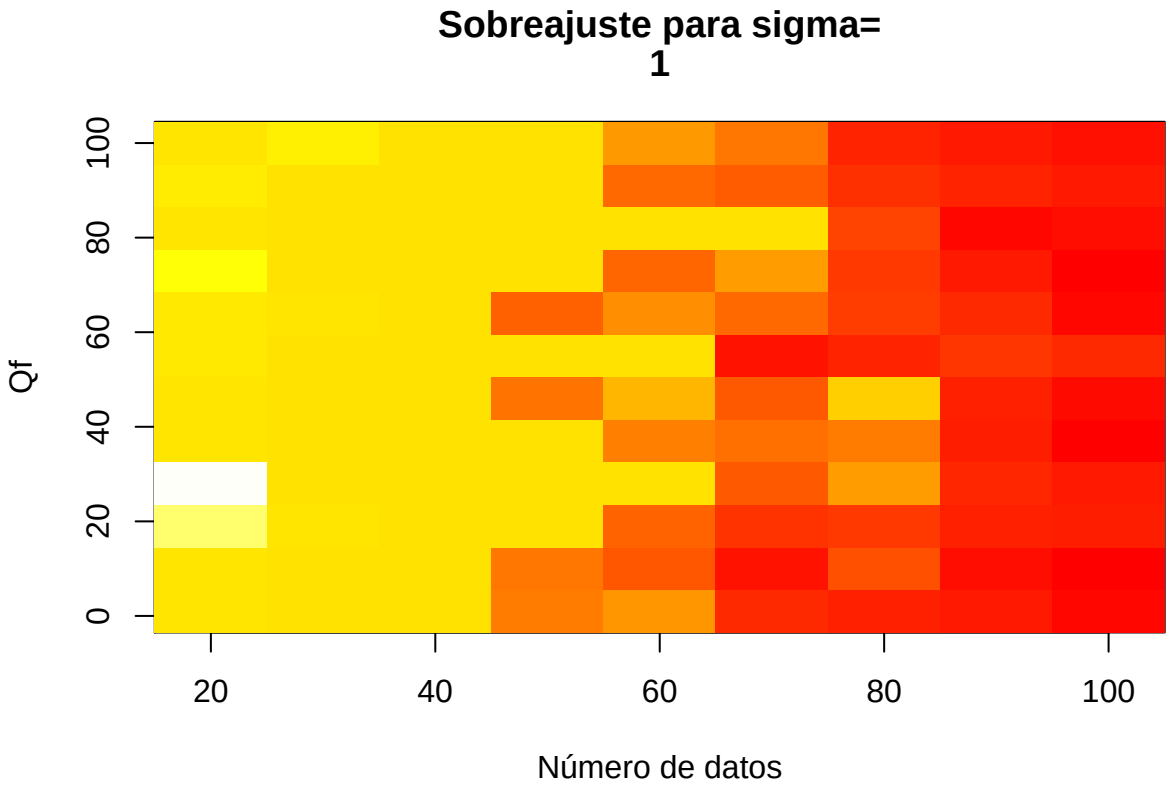
```
# Obtención del sobreajuste para este caso
# @param param Parámetros sobre los datos
# @param iterations Número de iteraciones
# @return Media del sobreajuste en las iteraciones
# @return
overfitting <- function(param, iterations){
  Q_f <- param[1]
  N <- param[2]
  sigma <- param[3]

  diff_E_outs = vector(mode = "numeric", length = iterations)

  for( i in 1:iterations){
    a_Q <- rnorm(Q_f+1)/sqrt(sum(1/(2*(0:Q_f)+1)))
    f_obj <- function(x){ sapply(x, function(y) crossprod(a_Q,
                                        lagrange_poly(y,Q_f))) }
    x <- runif(N, min=-1, max=1)
    y <- f_obj(x) + sigma*rnorm(N)

    g2 <- getAproxPolynom(x,y,2)
    g10 <- getAproxPolynom(x,y,10)

    E_out_g10 <- getEout(f_obj, g10)
    E_out_g2 <- getEout(f_obj, g2)

    diff_E_outs[i] <- E_out_g10 - E_out_g2
  }

  return(list('mean'=mean(diff_E_outs), 'aQ'=a_Q))
}
```

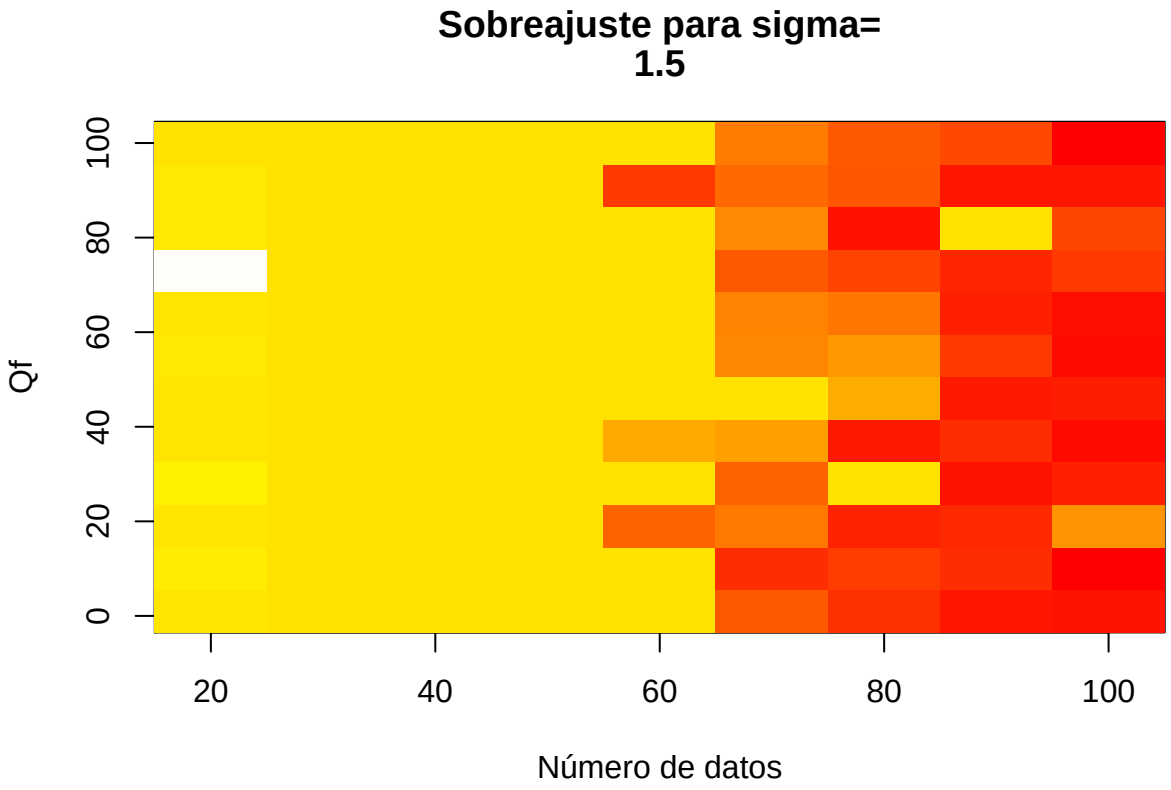
```
d <- expand.grid(x = Q_f, y = N, z = sigma)
sobreajuste_2b <- apply(d, 1, function(x){
  print(x)
  overfitting(x,100)
  })
write(sapply(sobreajuste_2b, function(x) x$mean),'sobreajuste.data',1)
```

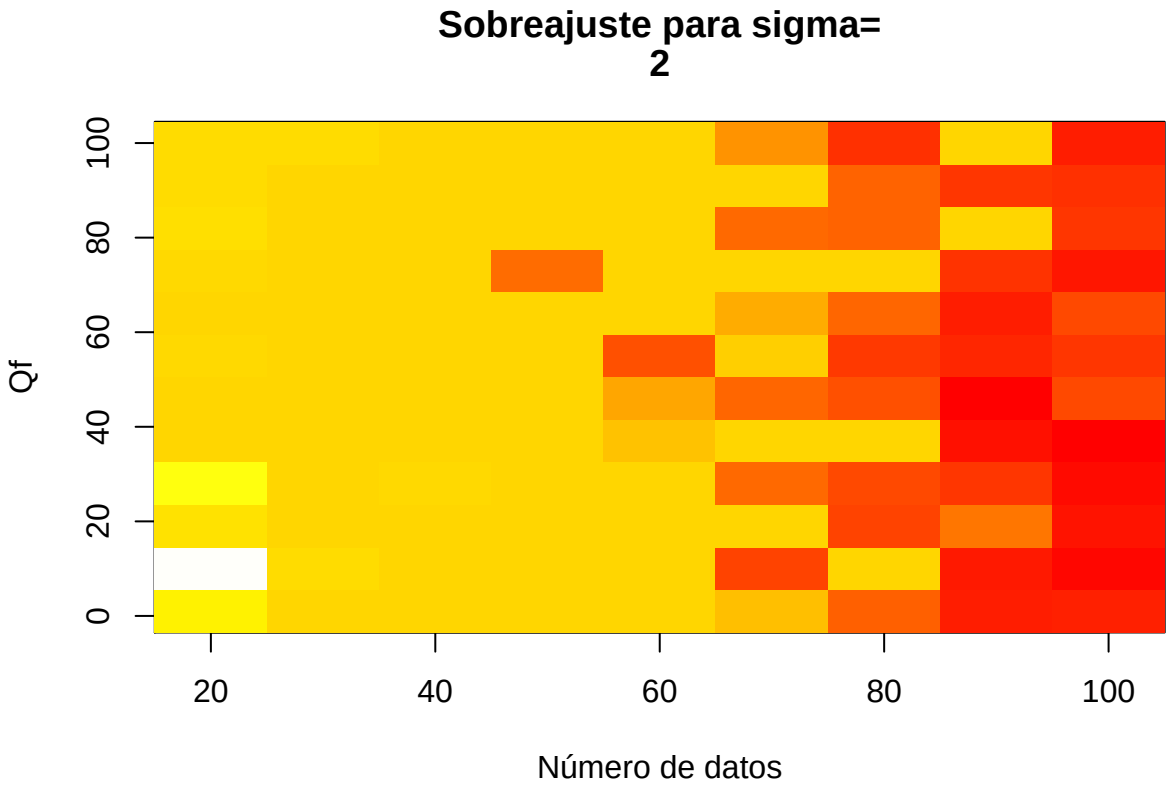
Guardo los valores en el fichero `sobreajuste.data` para recuperarlo al generar el `.pdf`


Sobreajuste para sigma=
0
Qf
0
20
40
60
80
100
20
40
60
80
100
Número de datos


Sobreajuste para sigma=
0.5
Qf
0
20
40
60
80
100
20
40
60
80
100
Número de datos


Sobreajuste para sigma=
1
Qf
0
20
40
60
80
100
20
40
60
80
100
Número de datos


Sobreajuste para sigma=
1.5
Qf
0
20
40
60
80
100
20
40
60
80
100
Número de datos



He hecho el experimento con menos datos de los que se dicen en la práctica, pero lo tenía ya programado antes de la modificación en el enunciado de la práctica. De todas formas los resultados no es que sean muy relevantes. He tenido que realizar una transformación a los datos dado que el sobreajuste es demasiado grande para ciertas combinaciones de parámetros no se aprecian diferencias en los demás datos pasando cierto umbral. De todas formas, sí se aprecia menor sobreajuste a mayor número de datos, como se comprueba con datos más fiables en las gráficas del libro. A $\sigma = 0$ también se observa que para $Q_f < 20$ el sobreajuste es mucho menor.

Si nos fijamos en las gráficas del libro, podremos pensar mejor en cómo se comporta el sobreajuste con respecto al número de datos, el grado de complejidad de la función y el ruido introducido en los datos de entrenamiento. Se comprueba cómo (al igual que muestra la imagen para $\sigma = 0$) el sobreajuste es menor, bien cuando el número de datos crece, o cuando el grado de complejidad de la función es menor o igual a 10. Esto se debe a que al ajustar una función de grado menor o igual a 10 mediante g_{10}, la función deducida será más simple de lo que es capaz de expresar y ajustarse a los datos no la penaliza con respecto al E_{out}. En cambio, cuando la función objetivo comienza a crecer en grado y complejidad, g_{10} se ajusta a los datos quedándose lejos de la función original, al contrario que g_2, que no se puede ajustar a los datos tan bien como g_{10}, pero que consigue recoger el comportamiento general de la función f. Para una σ^2 creciente, el sobreajuste también es mayor (se ve también en las imágenes obtenidas que a mayor σ la región roja disminuye) debido a que g_{10} recoge el ruido creciente de los datos y g_2, aunque también lo recoge, no puede hacer más que ajustar la función de manera general.

3.- Repetir el experimento descrito en los puntos anteriores pero para el caso de clasificación donde la función objetivo es un perceptron ruidoso $f(x) = sign(\sum_{q=1}^{Q_f} a_q L_1(x) + \varepsilon)$. Notemos que $a_0 = 0$ y que las a_q deben ser normalizadas para que $\mathbb{E}_{a,x}\left[(\sum q = 1^{Q_f} a_q L_q(x))^2\right] = 1$. En este caso los modelos $\mathcal{H}_2$ y $\mathcal{H}_{10}$ contienen el signo de los polinomios de segundo y décimo orden respectivamente. (Atención: los datos no serán separables) (Ayuda: para la normalización adaptar la regla dada en el punto anterior)

Establecemos los parámetros dados:

```
Q_f <- 20
N <- 50
sigma <- 1
```

Realizamos 150 experimentos y obtenemos los datos referentes a los errores obtenidos con g_2 y g_{10} para esta nueva f:

```
error_g2 = vector(mode = "numeric", length = 150)
error_g10 =vector(mode = "numeric", length = 150)

for(i in 1:150){
  a_Q <- rnorm(Q_f+1)/sqrt(sum(1/(2*(0:Q_f)+1)))
  f_obj <- function(x){
    sapply(x, function(y){
      sign(crossprod(a_Q[2:Q_f], lagrange_poly(y,Q_f)[2:Q_f]) +
           rnorm(1,sd=sigma))})
  }
  x <- runif(N, min=-1, max=1)
  y <- f_obj(x) + sigma*rnorm(N)
  coefs_g2 <- regress_lin(t(sapply(x,function(i) i^(0:2))), y)
  coefs_g10 <- regress_lin(t(sapply(x,function(i) i^(0:10))), y)

  g2 <- function(x){
    sapply(x, function(y) crossprod(coefs_g2, y^(0:2)))
  }

  g10 <- function(x){
    sapply(x, function(y) crossprod(coefs_g10, y^(0:10)))
  }

  error_g10[i] <- getEout(g10,f_obj)
  error_g2[i]  <- getEout(g2,f_obj)
}
```

```
cat("Error medio en g10=\t", mean(error_g10))
```

```
## Error medio en g10=   108.716
```

```
cat("Error medio en g2=\t", mean(error_g2))
```

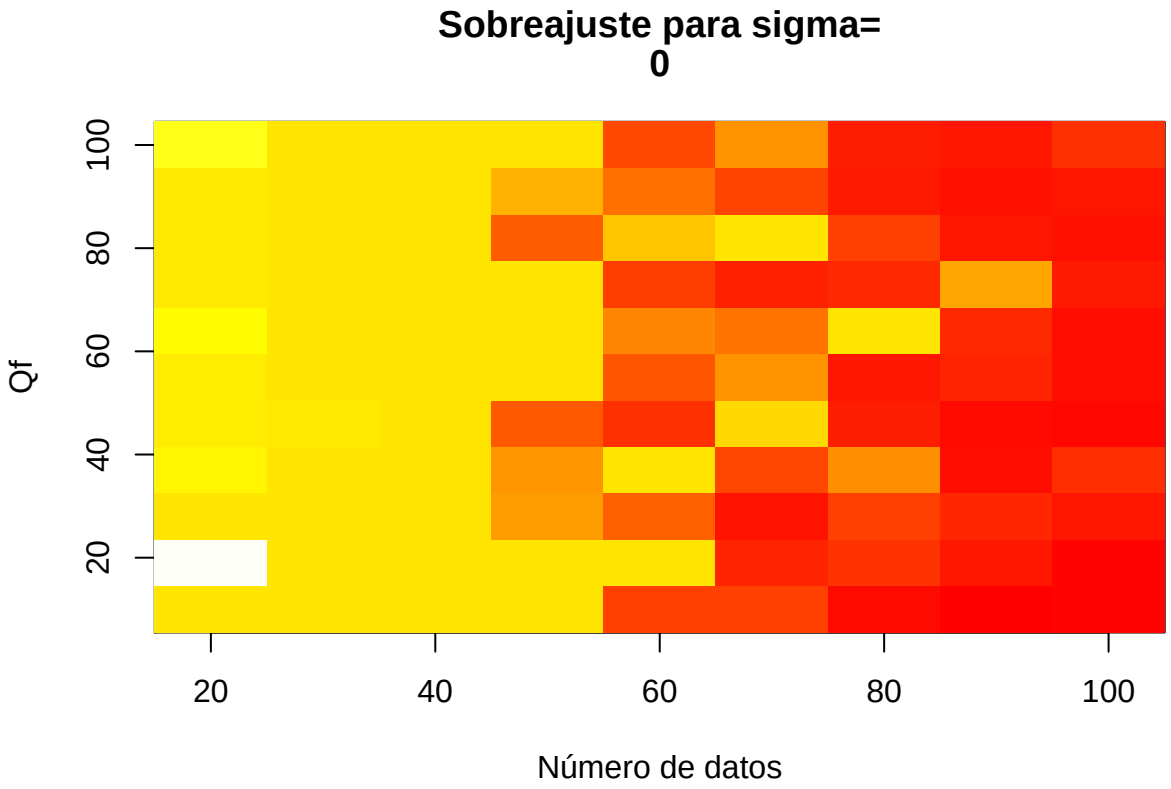
```
## Error medio en g2=    1.103832
```

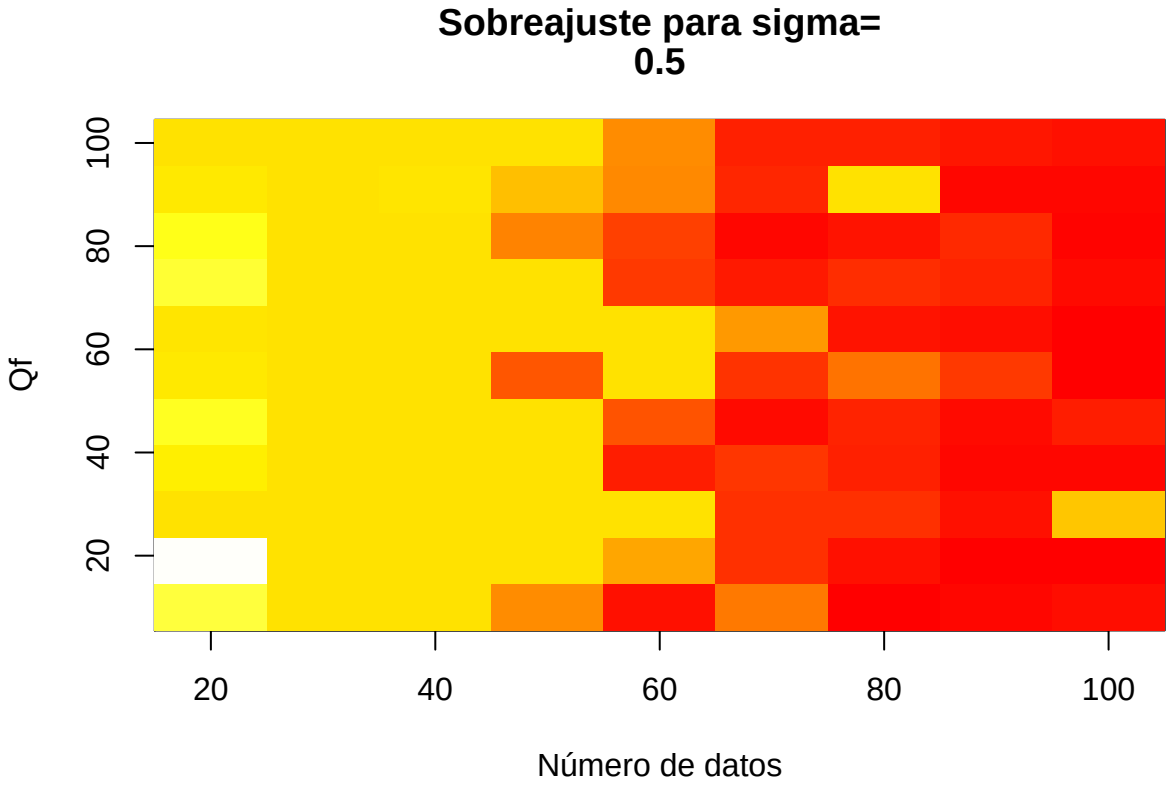
Repetimos también el experimento para un menor número de parámetros, obteniendo resultados similares a los del caso anterior.

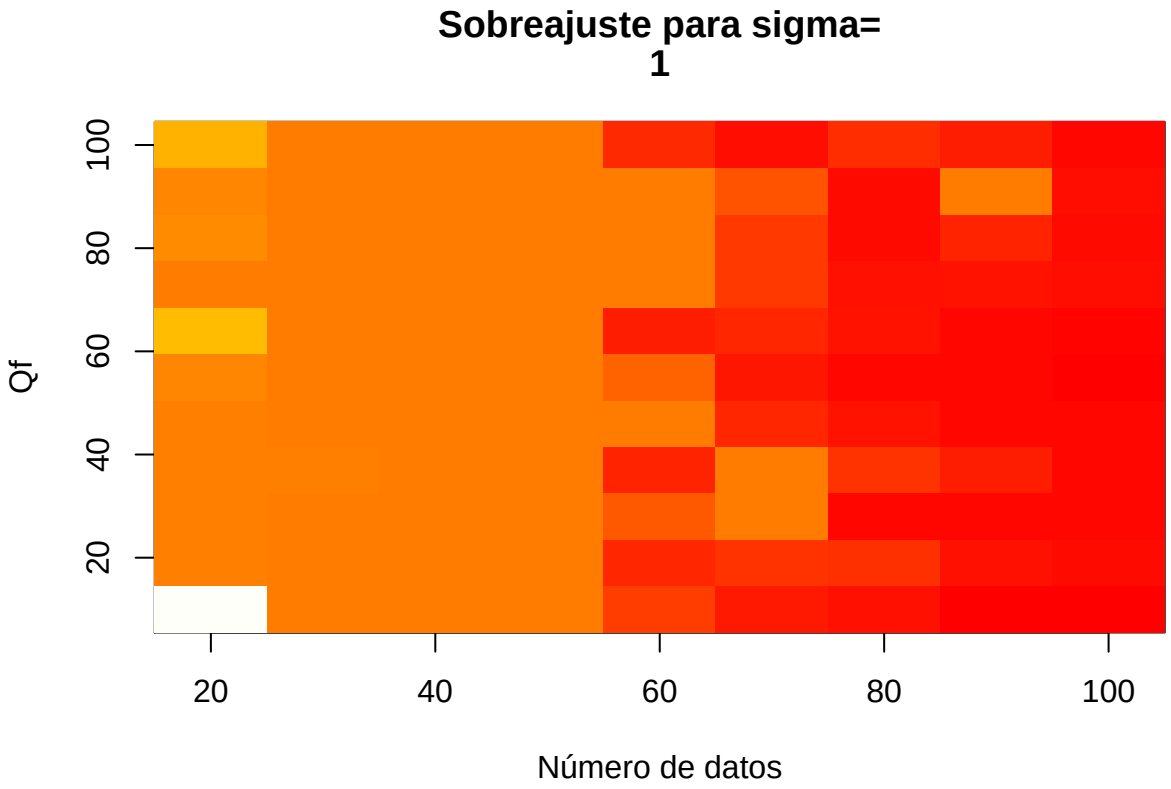
```
Q_f = seq(1,100,by=9)
N = seq(20,100,by=10)
sigma = seq(0, 2, by=0.5)
d <- expand.grid(x = Q_f, y = N, z = sigma)
```

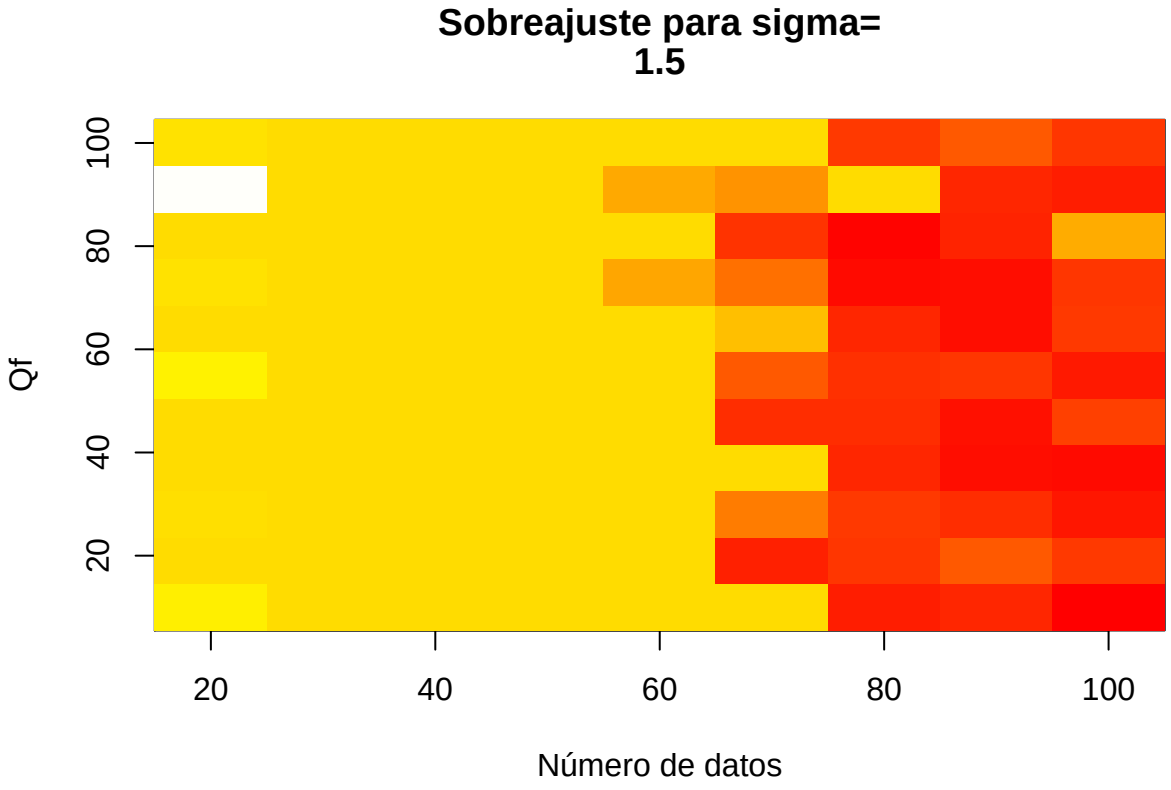
```
# Obtención del sobreajuste para el ejercicio 3
# @param param Parámetros sobre los datos
# @param iterations Número de iteraciones
# @return Media del sobreajuste en las iteraciones
# @return
overfitting_3 <- function(param, iterations){
  Q_f <- param[1]
  N <- param[2]
  sigma <- param[3]

  diff_E_outs = vector(mode = "numeric", length = iterations)

  for( i in 1:iterations){
    a_Q <- rnorm(Q_f)/sqrt(sum(1/(2*(1:Q_f)+1)))
    f_obj <- function(x){
      sapply(x, function(y){
        sign(crossprod(a_Q[2:Q_f], lagrange_poly(y,Q_f)[2:Q_f]) +
             rnorm(1,sd=sigma))})
    }
    x <- runif(N, min=-1, max=1)
    y <- f_obj(x) + sigma*rnorm(N)


    g2 <- getAproxPolynom(x,y,2)
    g10 <- getAproxPolynom(x,y,10)

    E_out_g10 <- getEout(f_obj, g10)
    E_out_g2 <- getEout(f_obj, g2)

    diff_E_outs[i] <- E_out_g10 - E_out_g2
  }

  return(list('mean'=mean(diff_E_outs), 'aQ'=a_Q))
}
```

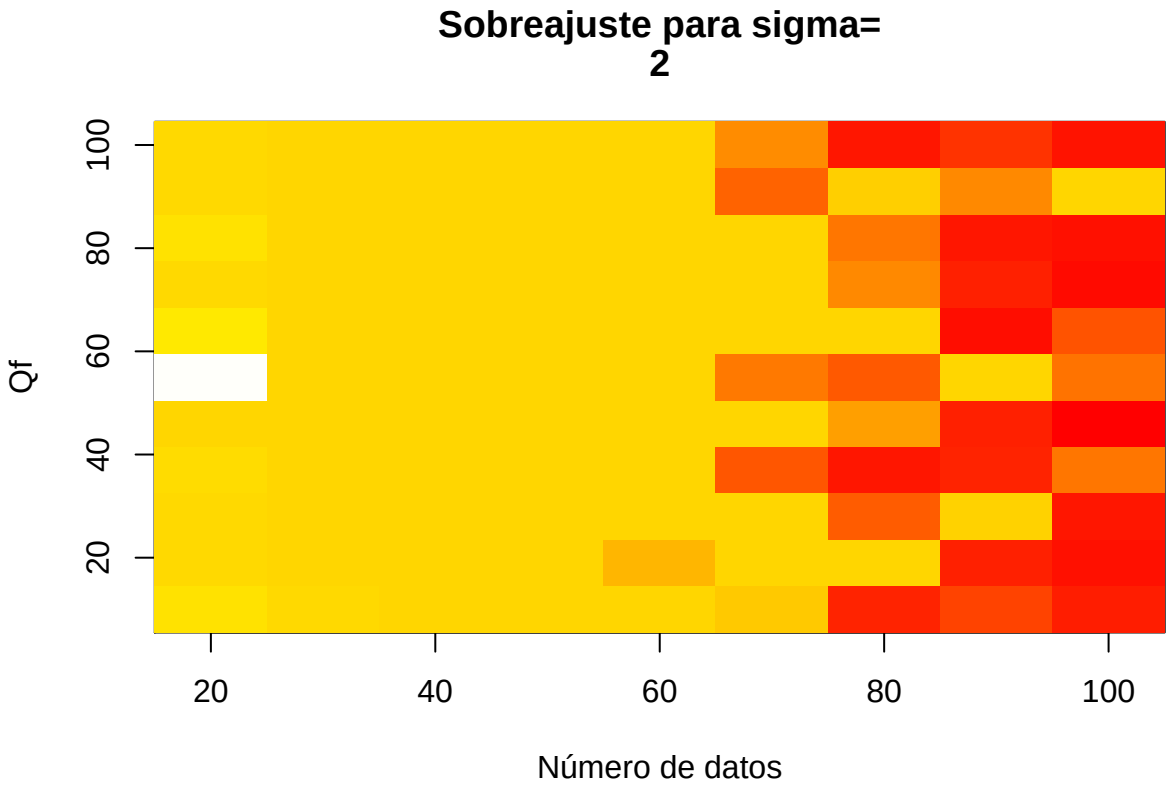
```
sobreajuste_3 <- apply(d, 1, function(x){
  print(x)
  overfitting_3(x,100)} )
write(sapply(sobreajuste_3, function(x) x$mean),'sobreajuste3.data',1)
```


Sobreajuste para sigma=
0
Qf
20
40
60
80
100
20
40
60
80
100
Número de datos


Sobreajuste para sigma=
0.5
Qf
20
40
60
80
100
20
40
60
80
100
Número de datos


Sobreajuste para sigma= 1
Qf
100
80
60
40
20
20
40
60
80
100
Número de datos


Sobreajuste para sigma= 1.5
Qf
100
80
60
40
20
20
40
60
80
100
Número de datos



C - REGULARIZACIÓN Y SELECCIÓN DE MODELOS

1.- Para $d = 3$ (dimensión) generar un conjunto de N datos aleatorios $\{x_n, y_n\}$de la siguiente forma. Para cada punto x_n generamos sus coordenadas muestreando de forma independiente una $N(0, 1)$. De forma similar generamos un vector de pesos de $d + 1$ dimensiones $\mathbf{w}_f$, y el conjunto de valores $y_n = \mathbf{w}_f^T \mathbf{x}_n + \sigma\varepsilon_n$, donde ε_n es un ruido que sigue también una $N(0, 1)$ y σ^2 es la varianza del ruido; fijar $\sigma = 0.5$.

Usar regresión lineal con regularización $*weight decay* para estimar $\mathbf{w}_f$ con $\mathbf{w}_{reg}$. Fijar el parámetro de regularización a $0.05/N$

```
# Muestra de una distribución normal de varias dimensiones.
# @param N Tamaño de la muestra
# @param dim Número de dimensiones
# @return sigma Vector de las desviaciones típicas.
# @return Muestra obtenida.
simula_gauss <- function(N, dim, sigma){
  # Tomamos N*dim elementos de una normal,
  # tomando la desviación estándar del vector sigma
  lista <- matrix(rnorm(N*dim, sd = sigma), N, dim, byrow=TRUE)
  return(lista)
}

N <- 100
sigma <- 0.5
d <- 3
x <- simula_gauss(N, d, 1)
```

```
w <- simula_gauss(1, d+1, 1)
y <- apply(x, 1, function(x_i)crossprod(t(w),c(x_i,1))+rnorm(1,sd=sigma))
wd_lamda <- 0.05/N
```

```
# Regresión lineal con decaimiento
# @param data Datos sobre los que ajustar la regresión.
# @param label Valores a los que ajustar la regresión.
# @param weight_decay Factor de decaimiento
# @return Coeficientes de la regresión lineal con decaimiento.
regress_wd <- function(data, label, weigth_decay = 0){
  inv <- solve(t(data)%*%data +
                             weigth_decay*diag(ncol(data)))
  return(inv%*%t(data)%*%label)
}
```

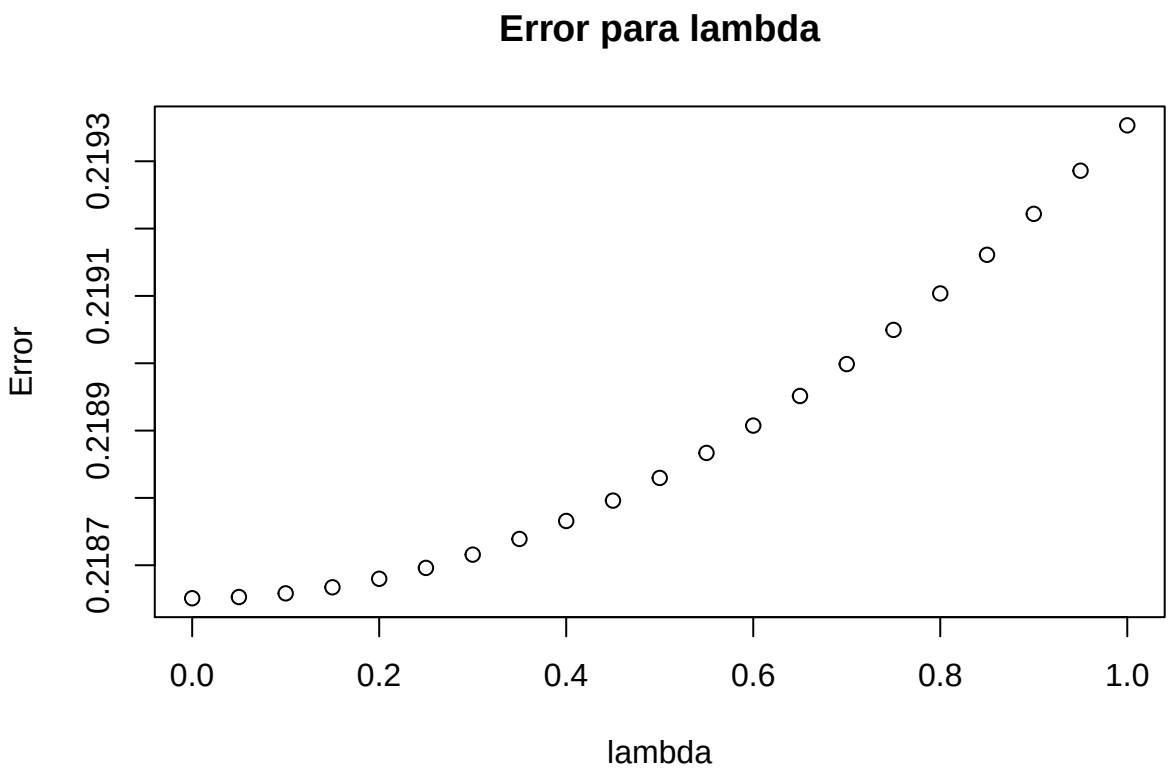
Calculamos la regresión con el λ dado y mostramos el E_{cv}. Para ello realizamos N iteraciones, dejando fuera un dato cada vez.

```
coefs_rl_1 <- regress_wd(cbind(x,1), y, wd_lamda)
e <- vector(mode = "numeric", length = N)
for( n in 1:N ){
  e[n]= (y[n]-crossprod(coefs_rl_1,c(x[n,],1)))^2
}
cat("Media de error: ",mean(e),"\n")
```

```
## Media de error:  0.218651
```

Mostramos ahora el error para lambda entre 0 y 1, y comprobamos que si el parámetro de regularización es muy grande el error también crece:

```
errores_lambda = vector(mode = "numeric", length = 21)

for(lambda in seq(0,1,by=0.05)){
  coefs_rl_1 <- regress_wd(cbind(x,1), y, lambda)
  e <- vector(mode = "numeric", length = N)
  for( n in 1:N ){
    e[n]= (y[n]-crossprod(coefs_rl_1,c(x[n,],1)))^2
  }
  errores_lambda[20*lambda+1] = mean(e)
}

plot(seq(0,1,by=0.05),errores_lambda, main = "Error para lambda",
     ylab = "Error", xlab = "lambda")
```



Se observa que el error aumenta (aunque sea un poco) conforme crece lambda. Esto puede que se deba debido al modelo y no puede hacernos pensar que es una opción a descartar.

a. Para $N \in \{d+15, d+25, \ldots, d+115\}$ calcular los errores $e_1, \ldots, e_N$ de validación cruzada y E_{cv}.

```
N_values = seq(d+15, d+115, by=10)

for( N in N_values){
  x <- simula_gauss(N, d, 1)
  w <- simula_gauss(1, d+1, 1)
  y <- apply(x, 1, function(x_i)
    crossprod(t(w),c(x_i,1))+sigma*rnorm(1))
  wd_lamda <- 0.05/N

  e <- vector(mode = "numeric", length = N)
  for( n in 1:N ){
    Dn = list('data'=cbind(x[1:N != n,],1),
              'value'=y[1:N != n])
    coefs <- regress_wd(Dn$data, Dn$value, wd_lamda)
    e[n]= (y[n]-crossprod(coefs,c(x[n,],1)))^2
  }
  cat("For N=",N,"\t Ecv=",mean(e),"\n")
}
```

```
## For N= 18     Ecv= 0.3538246
## For N= 28     Ecv= 0.5394928
## For N= 38     Ecv= 0.275638
## For N= 48     Ecv= 0.2083227
## For N= 58     Ecv= 0.2426654
```

```
## For N= 68     Ecv= 0.3936684
## For N= 78     Ecv= 0.2527698
## For N= 88     Ecv= 0.3458766
## For N= 98     Ecv= 0.2520977
## For N= 108    Ecv= 0.2110013
## For N= 118    Ecv= 0.2145937
```

Vemos cómo el error y el número de datos no guardan realmente una relación directa. Sin embargo N sí tiene influencia, como vemos más adelante.

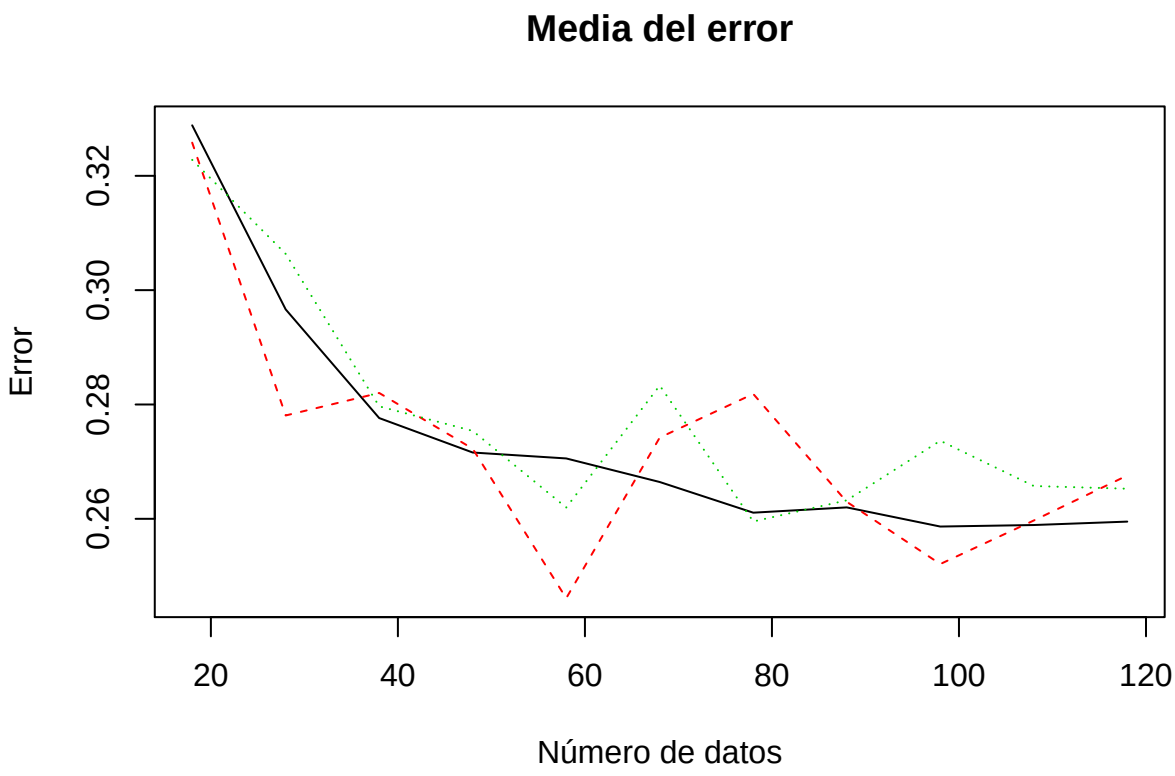
b. Repetir el experimento 10^3 veces, anotando el promedio y la varianza de e_1 , e_2 y E_{cv} en todos los experimentos.

```
repetitions = 10**3
e_1_means = vector(mode = "numeric", length = 11)
e_2_means = vector(mode = "numeric", length = 11)
E_N_means = vector(mode = "numeric", length = 11)
e_1_vars = vector(mode = "numeric", length = 11)
e_2_vars = vector(mode = "numeric", length = 11)
E_N_vars = vector(mode = "numeric", length = 11)

for( N in N_values ){
  wd_lamda <- 0.05/N
  e_1_vector = vector("numeric",length = repetitions)
  e_2_vector = vector("numeric",length = repetitions)
  E_N_vector = vector("numeric",length = repetitions)
  for ( iter in 1:repetitions ){
    x <- simula_gauss(N, d, 1)
    w <- t(simula_gauss(1, d+1, 1))
    y <- apply(x, 1, function(x_i)
      crossprod(w,c(x_i,1))+sigma*rnorm(1))

    e <- vector(mode = "numeric", length = N)
    for( n in 1:N ){
      Dn = list('data'=cbind(x[1:N != n,],1),
                'value'=y[1:N != n])
      coefs <- regress_wd(Dn$data, Dn$value, wd_lamda)
      e[n]= (y[n]-crossprod(coefs,c(x[n,],1)))^2
    }

    e_1_vector[iter] = e[1]
    e_2_vector[iter] = e[2]
    E_N_vector[iter] = mean(e)
  }
  e_1_means[(N-18)/10+1] = mean(e_1_vector)
  e_2_means[(N-18)/10+1] = mean(e_2_vector)
  E_N_means[(N-18)/10+1] = mean(E_N_vector)
  e_1_vars[(N-18)/10+1] = var(e_1_vector)
  e_2_vars[(N-18)/10+1] = var(e_2_vector)
  E_N_vars[(N-18)/10+1] = var(E_N_vector)
  cat("For N =",N,
      "\n\t e1: mean = ",mean(e_1_vector),"\t\t var = ",var(e_1_vector),
      "\n\t e2: mean = ",mean(e_2_vector),"\t\t var = ",var(e_2_vector),
```

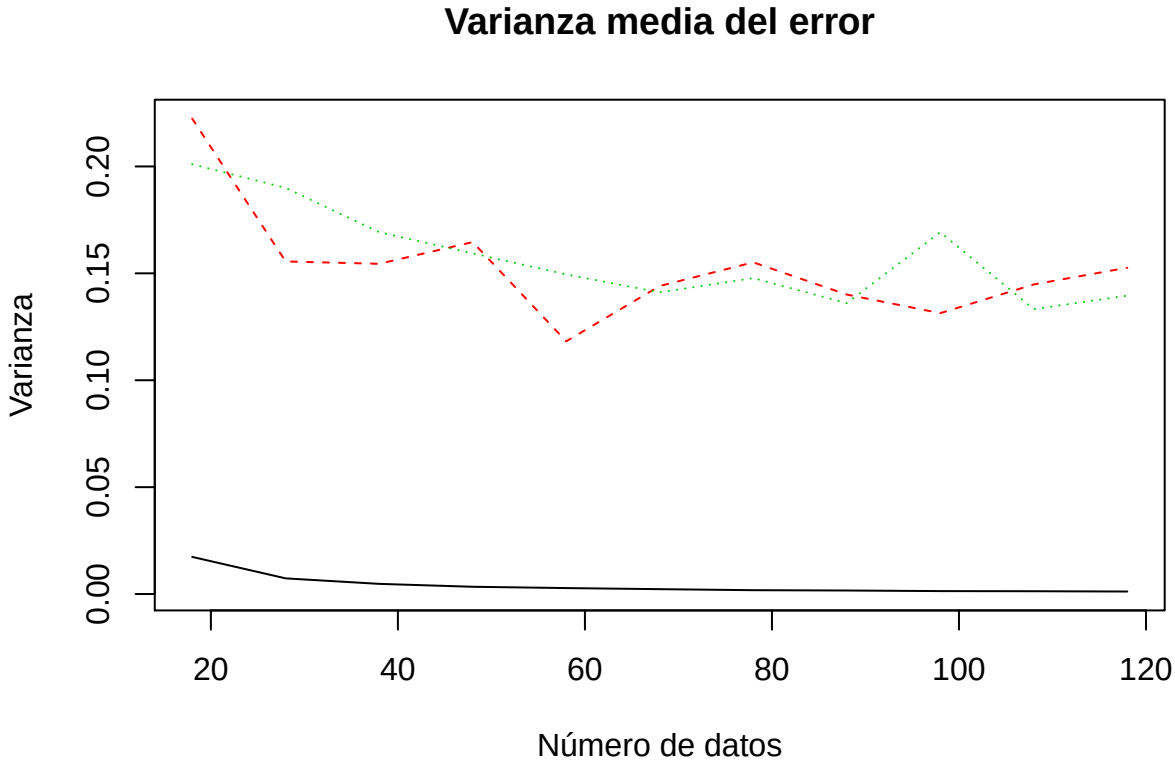
```
      "\n\t Ecv: mean = ",mean(E_N_vector),"\t var = ",
                          var(E_N_vector),"\n")
}
```

```
## For N = 18
##   e1: mean =  0.3257988       var =  0.2223703
##   e2: mean =  0.3227928       var =  0.2010226
##   Ecv: mean =  0.3288312      var =  0.01736372
## For N = 28
##   e1: mean =  0.2780776       var =  0.1555652
##   e2: mean =  0.306344        var =  0.1899461
##   Ecv: mean =  0.2966314      var =  0.007329783
## For N = 38
##   e1: mean =  0.2820121       var =  0.1544597
##   e2: mean =  0.2796752       var =  0.1692488
##   Ecv: mean =  0.2776229      var =  0.004756118
## For N = 48
##   e1: mean =  0.2722567       var =  0.1646073
##   e2: mean =  0.2753804       var =  0.1593499
##   Ecv: mean =  0.2715954      var =  0.003401494
## For N = 58
##   e1: mean =  0.2461101       var =  0.1182099
##   e2: mean =  0.2619743       var =  0.1495023
##   Ecv: mean =  0.2705623      var =  0.002784841
## For N = 68
##   e1: mean =  0.2742091       var =  0.1440807
##   e2: mean =  0.2833139       var =  0.1411107
##   Ecv: mean =  0.266437   var =  0.002270056
## For N = 78
##   e1: mean =  0.281844        var =  0.1551431
##   e2: mean =  0.259527        var =  0.147771
##   Ecv: mean =  0.2610719      var =  0.001796976
## For N = 88
##   e1: mean =  0.2629762       var =  0.1400801
##   e2: mean =  0.2632323       var =  0.1360562
##   Ecv: mean =  0.2619958      var =  0.001647882
## For N = 98
##   e1: mean =  0.2520899       var =  0.1313659
##   e2: mean =  0.2736586       var =  0.1692214
##   Ecv: mean =  0.2586486      var =  0.001374814
## For N = 108
##   e1: mean =  0.2597051       var =  0.1448219
##   e2: mean =  0.2657363       var =  0.1332685
##   Ecv: mean =  0.2589137      var =  0.001318212
## For N = 118
##   e1: mean =  0.2675734       var =  0.1526293
##   e2: mean =  0.2652601       var =  0.1395482
##   Ecv: mean =  0.2595125      var =  0.001180844
```

```
means_1 <- cbind(E_N_means,e_1_means,e_2_means)
matplot(seq(d+15, d+115, by=10), means_1, type="l", main = "Media del error",
        xlab = "Número de datos", ylab = "Error")
```




```
vars_1 <- cbind(E_N_vars,e_1_vars,e_2_vars)
matplot(N_values, vars_1, type="l", main = "Varianza media del error",
        xlab = "Número de datos", ylab = "Varianza")
```

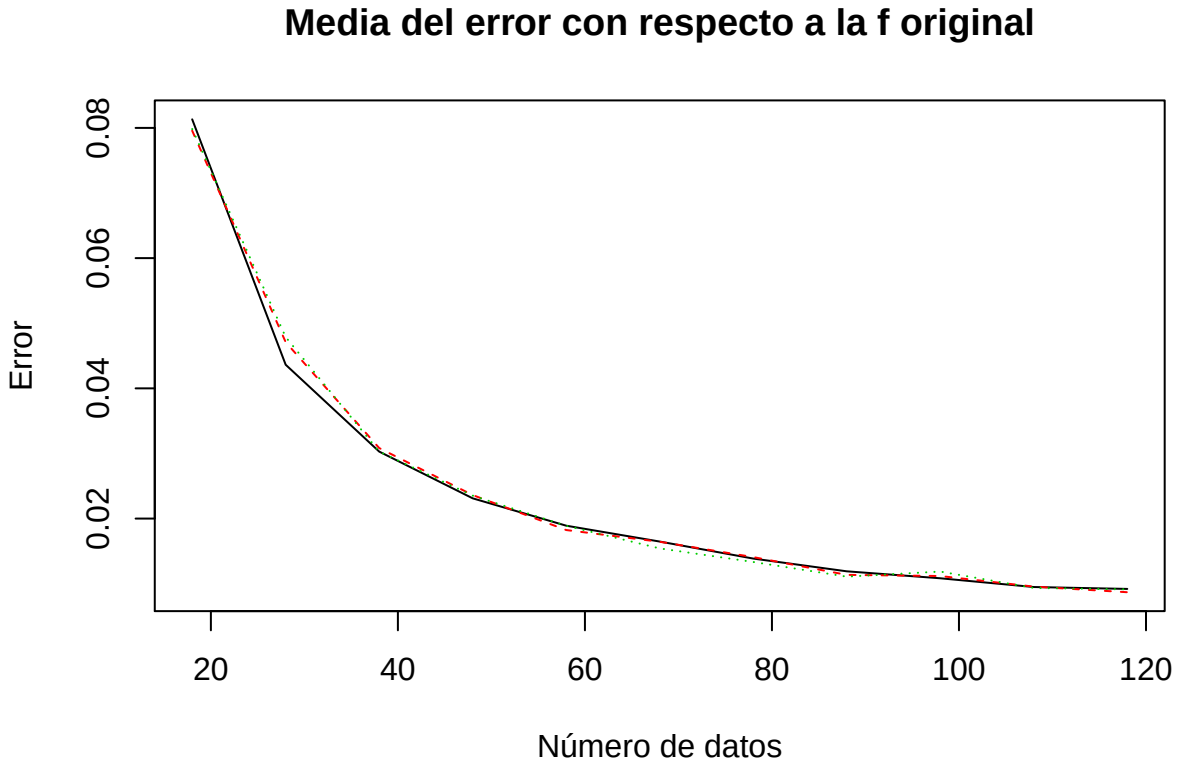


Si comprobamos el error con respecto a la función real en lugar de con respecto a las etiquetas (con ruido)

se comprueba que el error es cada vez menor debido a que el ruido tiene media 0 y cada vez son menos influyentes en la determinación del error:

```
repetitions = 10**3
e_1_means_freal = vector(mode = "numeric", length = 11)
e_2_means_freal = vector(mode = "numeric", length = 11)
E_N_means_freal = vector(mode = "numeric", length = 11)

for( N in N_values ){
  wd_lamda <- 0.05/N
  e_1_vector_freal = vector("numeric",length = repetitions)
  e_2_vector_freal = vector("numeric",length = repetitions)
  E_N_vector_freal = vector("numeric",length = repetitions)
  for ( iter in 1:repetitions ){
    x <- simula_gauss(N, d, 1)
    w <- t(simula_gauss(1, d+1, 1))
    y <- apply(x, 1, function(x_i)
      crossprod(w,c(x_i,1))+sigma*rnorm(1))

    e_freal <- vector(mode = "numeric", length = N)
    for( n in 1:N ){
      Dn = list('data'=cbind(x[1:N != n,],1),
                'value'=y[1:N != n])
      coefs <- regress_wd(Dn$data, Dn$value, wd_lamda)
      e_freal[n]= (crossprod(w,c(x[n,],1))-
                     crossprod(coefs,c(x[n,],1)))^2
    }

    e_1_vector_freal[iter] = e_freal[1]
    e_2_vector_freal[iter] = e_freal[2]
    E_N_vector_freal[iter] = mean(e_freal)
  }
  e_1_means_freal[(N-18)/10+1] = mean(e_1_vector_freal)
  e_2_means_freal[(N-18)/10+1] = mean(e_2_vector_freal)
  E_N_means_freal[(N-18)/10+1] = mean(E_N_vector_freal)
}
```

```
means_1_freal <- cbind(E_N_means_freal,e_1_means_freal,e_2_means_freal)
matplot(seq(d+15, d+115, by=10), means_1_freal, type="l",
        main = "Media del error con respecto a la f original",
        xlab = "Número de datos", ylab = "Error")
```



c. ¿Cuál debería de ser la relación entre el promedio de los valores de e_1 y el de los valores de E_{cv}? ¿y el de los valores de e_2? Argumentar la respuesta en base a los resultados de los experimentos.

Los valores de los promedios de e_1, e_2 y E_{cv} son similares, pues en cada iteración el valor de e_i contribuye al valor de E_{cv}, por eso cabe pensar, y así se observa en los datos obtenidos, que el promedio del error al quitar un dato concreto (el cual no tiene ninguna característica que lo haga especial con respecto a los otros datos) se parezca a la media de entre los datos al ir quitando uno por uno, como así sucede. También hay que mencionar que al aumentar el número de puntos el error, y por tanto también su media al repetir el experimento, irá disminuyendo como se ha dicho antes.

d. ¿Qué es lo que contribuye a la varianza de los valores de e_1?

Sin embargo, para la varianza sí que influye observar únicamente el error de una variable y la media con respecto a todos los datos. La varianza para cada dato será lógicamente mayor, pues es posible que unas veces esté cerca del valor real, y otras más lejos, que es lo que influye en la varianza. Como se observa en la gráfica, los valores de $var(e_1)$ y $var(e_2)$ son similares. En cambio $var(E_{cv})$ es menor que $var(e_1)$. Tiene sentido que pase esto, pues el error medio para los datos variará menos que el error para cada punto: en una ejecución el primer dato puede tener un valor muy cercano al real y en cambio en la siguiente ejecución ser muy alto; por contra la media de los errores será más estable.

e. Si los errores de validación cruzada fueran verdaderamente independientes, ¿cual sería la relación entre la varianza de los valores de e_1 y la varianza de los de E_{cv} ?

   Para esto usamos las siguientes propiedades de la varianza:

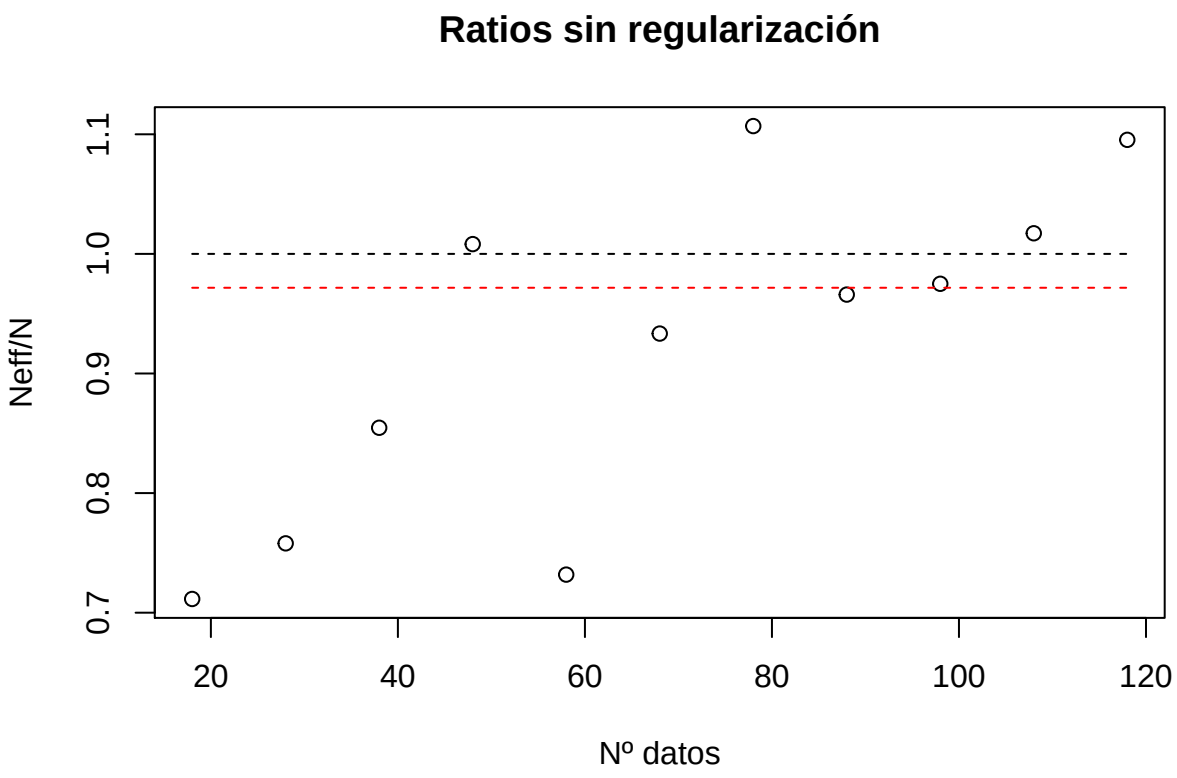
$$var(aX) = a^2 var(X)$$
$$var(X + Y) = var(X) + var(Y)$$

$$var(E_{cv}) = var\left(\frac{\sum_{i=0}^{N} e_i}{N}\right) = \frac{\sum_{i=0}^{N} var(e_i)}{N^2}$$

Con lo que corroboramos matemáticamente la idea intuitiva del apartado anterior de que la varianza en E_{cv} debe ser menor, en concreto, es la media de las varianzas partido por N.

f. Una medida del número efectivo de muestras nuevas usadas en el cálculo de E_{cv} es el cociente entre la varianza de e_1 y la varianza de E_{cv}. Explicar por qué, y dibujar, respecto de N, el número efectivo de nuevos ejemplos(N_{eff}) como un porcentaje de N. NOTA: Debería de encontrarse que N_{eff} está cercano a N.

```
ratios = e_1_vars/(E_N_vars*N_values)
plot(N_values, ratios, main = "Ratios sin regularización", xlab = "Nº datos",
     ylab = "Neff/N")
points(N_values,rep(1,length(N_values)),type="l",lty=2)
points(N_values,rep(sum(ratios*N_values)/sum(N_values),length(N_values)),
       type="l",lty=2, col=2)
```



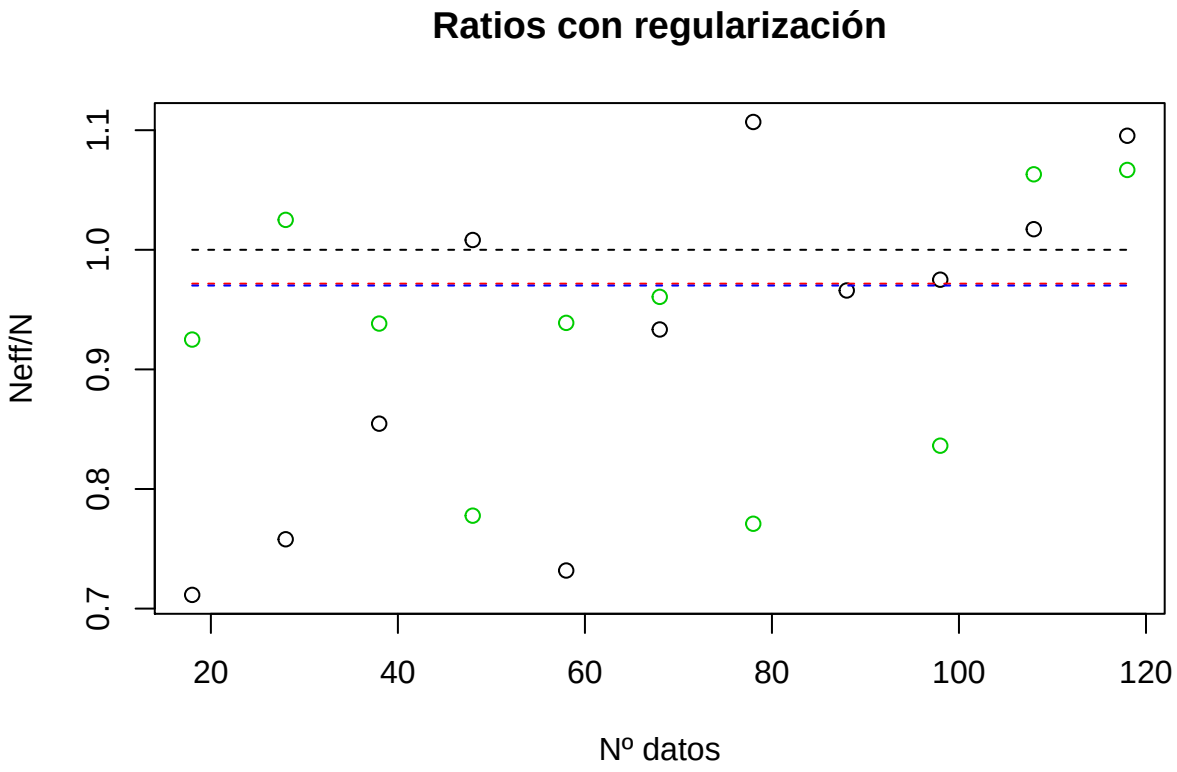
Se comprueba que el ratio efectivamente está en torno a 1 aunque la media sea un poco inferior. Si hacemos la media ponderada por el número de datos en cada caso, también la media de ratios es un poco menor que 1.
Este valor tendría que ser más ilustrativo si lo hiciéramos con la media de las varianzas. Aparte de que los e_i no son realmente independientes.
g. Si se incrementa la cantidad de regularización, ¿debería N_{eff} subir o bajar?. Argumentar la respuesta. Ejecutar el mismo experimento con $\lambda = 2.5/N$ y comparar los resultados del punto anterior para verificar la conjetura.

```
repetitions = 10**3
e_1_means_g = vector(mode = "numeric", length = 11)
e_2_means_g = vector(mode = "numeric", length = 11)
E_N_means_g = vector(mode = "numeric", length = 11)
e_1_vars_g = vector(mode = "numeric", length = 11)
e_2_vars_g = vector(mode = "numeric", length = 11)
E_N_vars_g = vector(mode = "numeric", length = 11)

for( N in N_values ){
  wd_lamda <- 2.5/N
  e_1_vector_g = vector("numeric",length = repetitions)
  e_2_vector_g = vector("numeric",length = repetitions)
  E_N_vector_g = vector("numeric",length = repetitions)
  for ( iter in 1:repetitions ){
    x <- simula_gauss(N, d, 1)
    w <- simula_gauss(1, d+1, 1)
    y <- apply(x, 1, function(x_i)
      crossprod(t(w),c(x_i,1))+sigma*rnorm(1))

    e_g <- vector(mode = "numeric", length = N)
    for( n in 1:N ){
      Dn = list('data'=cbind(x[1:N != n,],1),
                'value'=y[1:N != n])
      coefs <- regress_wd(Dn$data, Dn$value, wd_lamda)
      e_g[n]= (y[n]-crossprod(coefs,c(x[n,],1)))^2
    }

    e_1_vector_g[iter] = e_g[1]
    e_2_vector_g[iter] = e_g[2]
    E_N_vector_g[iter] = mean(e_g)
  }
  e_1_means_g[(N-18)/10+1] = mean(e_1_vector_g)
  e_2_means_g[(N-18)/10+1] = mean(e_2_vector_g)
  E_N_means_g[(N-18)/10+1] = mean(E_N_vector_g)
  e_1_vars_g[(N-18)/10+1] = var(e_1_vector_g)
  e_2_vars_g[(N-18)/10+1] = var(e_2_vector_g)
  E_N_vars_g[(N-18)/10+1] = var(E_N_vector_g)
  cat("For N =",N,
      "\n\t e1: mean = ",mean(e_1_vector_g),
      "\t\t var = ",var(e_1_vector_g),
      "\n\t e2: mean = ",mean(e_2_vector_g),
      "\t\t var = ",var(e_2_vector_g),
      "\n\t Ecv: mean = ",mean(E_N_vector_g),"\t var = ",
                          var(E_N_vector_g),"\n")
}
```

```
## For N = 18
##   e1: mean =  0.3505903       var =  0.2702629
##   e2: mean =  0.3274332       var =  0.2250881
##   Ecv: mean =  0.323982   var =  0.01623272
## For N = 28
##   e1: mean =  0.3258925       var =  0.2194255
##   e2: mean =  0.2804889       var =  0.1455762
```

```
##   Ecv: mean =  0.2961477      var =  0.007645323
## For N = 38
##   e1: mean =  0.2957752       var =  0.1681723
##   e2: mean =  0.2843127       var =  0.1647449
##   Ecv: mean =  0.2819834      var =  0.004716397
## For N = 48
##   e1: mean =  0.2640234       var =  0.1297649
##   e2: mean =  0.2798088       var =  0.1670685
##   Ecv: mean =  0.2746066      var =  0.003476109
## For N = 58
##   e1: mean =  0.2739675       var =  0.1480568
##   e2: mean =  0.2699272       var =  0.1567129
##   Ecv: mean =  0.2664624      var =  0.002718776
## For N = 68
##   e1: mean =  0.2756532       var =  0.152146
##   e2: mean =  0.3085255       var =  0.1945886
##   Ecv: mean =  0.2670107      var =  0.002329082
## For N = 78
##   e1: mean =  0.2516287       var =  0.1138718
##   e2: mean =  0.2528885       var =  0.14051
##   Ecv: mean =  0.2624827      var =  0.00189364
## For N = 88
##   e1: mean =  0.2879219       var =  0.1869303
##   e2: mean =  0.2656848       var =  0.1491374
##   Ecv: mean =  0.2634598      var =  0.001784735
## For N = 98
##   e1: mean =  0.2469084       var =  0.1156655
##   e2: mean =  0.25717         var =  0.1224774
##   Ecv: mean =  0.2599269      var =  0.001411415
## For N = 108
##   e1: mean =  0.2759751       var =  0.1500149
##   e2: mean =  0.2535071       var =  0.1322786
##   Ecv: mean =  0.2598052      var =  0.001306549
## For N = 118
##   e1: mean =  0.2477431       var =  0.1294391
##   e2: mean =  0.2716493       var =  0.1438928
##   Ecv: mean =  0.2609559      var =  0.001028285
```

```
plot(N_values, ratios, main = "Ratios con regularización",
     xlab = "Nº datos", ylab = "Neff/N")
points(N_values,rep(1,length(N_values)),type="l",lty=2)
points(N_values,rep(sum(ratios*N_values)/sum(N_values),length(N_values)),
       type="l",lty=2, col=2)
ratios_g = e_1_vars_g/(E_N_vars_g*N_values)
points(N_values, ratios_g, col=3)
points(N_values,rep(sum((ratios_g*N_values))/sum(N_values),
                    length(N_values)),
       type="l",lty=2, col=4)
```



Se observa que con mayor regularización el ratio disminuye. Esto se puede deber a, como hemos visto antes, que los errores fuesen mayores con mayor regularización y por tanto la varianza también aumente, habiendo más diferencia entre $Nvar(e_1)$ y $var(E_{cv})$

```
cat("var(ratios) =", var(ratios))
```

```
## var(ratios) = 0.01974973
```

```
cat("var(ratios_g) =", var(ratios_g))
```

```
## var(ratios_g) = 0.01652788
```

En cambio, vemos una menor varianza de los ratios con regularización, lo que nos indica que hay una menor variación de los N_{eff} con regularización, aunque estos sean sistemáticamente menores (que será debido a que los errores no son realmente independientes).

2.- La técnica de validación cruzada da una estimación precisa de $\hat{E}_{out}(N-1)$, pero puede ser demasiado inestable en problemas de selección de modelos. Una heurística común para regularizar validación cruzada en selección de modelos es usar una medida de su error $\sigma_{cv}(\mathcal{H})$.

a. Una elección para $\sigma_{cv}(\mathcal{H})$ es el uso de la desviación estandar de los errores por LOO ("leave-one-out") dividida por $\sqrt{N}$, $\sigma_{cv}(\mathcal{H}) \approx \frac{1}{\sqrt{N}}\sqrt{var(e_1,\ldots,e_n)}$. ¿Por qué se divide por $\sqrt{N}$?

b. Analizamos dos aproximaciones para la estimación:

   i. Dado el mejor modelo $\mathcal{H}^\star$, la aproximación conservadora de $1-\sigma$ selecciona el modelo más simple a una distancia $\sigma_{cv}(\mathcal{H}^\star)$ del mejor.

ii. La aproximación que minimiza una cota selecciona el modelo que minimiza $E_{out}(\mathcal{H}) + \sigma_{cv}(\mathcal{H})$.

Usar el diseño experimental del ejercicio sección 2.1 (sobreajuste) para comparar estas aproximaciones con la estimación "no regularizada" de validación cruzada. Para ello hacer lo siguiente:
I. Fijar $Q_f = 15,\ N = 20,\ \sigma = 1$.
II. Aplicar cada una de las dos aproximaciones propuestas así como el estimador estándar de validación cruzada para seleccionar el valor óptimo del parámetro de regularización λ en el conjunto $\{0.05, 0.1, 0.15, \ldots, 5\}$ usando regularización por "weight decay", $\Sigma(w) = \frac{\lambda}{N} w^T w$.
III. Dibujar el error fuera de la muestra para cada una de las técnicas, usando cada una de ellas como una función de N, con $N \in \{2 \times Q, 3 \times Q, \ldots, 10 \times Q, \}$. ¿Cuáles son sus conclusiones?.