

# Trabajo práctico 2: Estimación de incertidumbre

Ph. D. Saúl Calderón Ramírez  
Instituto Tecnológico de Costa Rica,  
Escuela de Ingeniería en Computación, Programa de Ciencias de Datos,  
Pattern Recognition and Machine Learning Group (PARMA-Group)

17 de abril de 2024

**Fecha de entrega:** miercoles 15 de Mayo

**Entrega:** Un archivo .zip con el código fuente LaTeX o Lyx, el pdf, y un notebook Jupyter, debidamente documentado, con una función definida por ejercicio. A través del TEC-digital.

**Modo de trabajo:** Grupos de 3 personas.

## Resumen

En el presente trabajo práctico se introduce la implementación de técnicas básicas de estimación de incertidumbre. Debe usar Pytorch al máximo posible de forma matricial.

## 1. Implementación del modelo base de clasificación y generación de datos

Para el presente trabajo práctico su equipo construirá un detector de ataques usando el conjunto de datos disponible en "*UNSW-NB15: A Comprehensive Data set for Network Intrusion Detection systems*", con el algoritmo de mínimos cuadrados.

1. **(10 puntos)** Particione los datos en 80 % datos de entrenamiento y el restante 20 % en datos de prueba. Para ese 20 % de datos de prueba, reporte la tasa de aciertos y el F1-score para la clase ataque, para 30 corridas, usando todos los atributos del dataset. Como clasificador, implemente por su cuenta el algoritmo de mínimos cuadrados. Los atributos categóricos deben ser representados usando la codificación *one-hot-vector*.
2. **(30 puntos)** Implemente la función `calculate_expected_calibration_error(X, y, uncertainties)`, el cual tome como entrada un conjunto de observaciones junto con sus etiquetas correctas (*ground truth*) y sus **cuantificaciones**

de incertidumbre, y calcule el expected calibration error (ECE) según lo explicado en el material de apoyo.

a) Diseñe y documente los resultados de al menos dos pruebas unitarias.

3. **(30 puntos)** Implemente el algoritmo de estimación de incertidumbre de ensamble detallado en el material de apoyo. Para ello, hagalo en la función *quantify\_uncertainty\_ensemble*(*x*, *model*, *N* = 10) el cual cuantifique la incertidumbre para una entrada  $\vec{x} \in \mathbb{R}^D$ , y retorne tal resultado. Hagalo usando modelos de mínimos cuadrados de clasificación. Utilice la salida del producto punto (sin pasar por la función de activación del modelo), para obtener los puntajes de los miembros del ensamble. Se recomienda dividir la implementación de esta función en la función *train\_ensemble* la cual entrene los miembros del ensamble, y *run\_ensemble\_uq* la cual tome el ensamble anteriormente construido y evalúe la varianza de las salidas. Para el entrenamiento de los regresores logísticos del ensamble, utilice 10 mil iteraciones.

a) Diseñe y documente los resultados de al menos dos pruebas unitarias.

4. **(30 puntos)** Documente las siguientes pruebas: mida el ECE y el tiempo de ejecución usando la función anterior, y un conjunto de datos de prueba correspondiente al 30 % de los datos provistos. El 70 % de los datos restantes se usarán para entrenar el o los modelos necesarios. Realice lo anterior para las siguientes configuraciones:

- a)  $N = 10$ .
- b)  $N = 100$
- c)  $N = 1000$

Realice 10 particiones de test/training para calcular el ECE promedio por cada configuración. Reporte el ECE promedio, y desviación estándar de cada configuración probada. Grafique los resultados de forma ordenada y clara, y coméntelos.