UNIVERSIDAD
DE GRANADA

Aprendizaje Automático
grado en ingeniería informática

PRÁCTICA 2

Programación

Autor
Vladislav Nikolov Vasilev

Rama
Computación y Sistemas Inteligentes

Escuela Técnica Superior de Ingenierías Informática y de
Telecomunicación

Curso 2018-2019

Índice

1. Ejercicio sobre la complejidad de H y el ruido

En este ejercicio debemos aprender la dificultad que introduce la aparición de ruido en las etiquetas a la hora de elegir la clase de funciones más adecuada. Haremos uso de tres funciones ya programadas:

- $simula\_unif(N, dim, rango)$, que calcula una lista de N vectores de dimensión dim. Cada vector contiene dim números aleatorios uniformes en el intervalo $rango$.
- $simula\_gaus(N, dim, sigma)$, que calcula una lista de longitud N de vectores de dimensión dim, donde cada posición del vector contiene un número aleatorio extraido de una distribucción Gaussiana de media 0 y varianza dada, para cada dimension, por la posición del vector $sigma$.
- $simula\_recta(intervalo)$, que simula de forma aleatoria los parámetros, $v = (a, b)$ de una recta, $y = ax + b$, que corta al cuadrado $[-50, 50] \times [-50, 50]$.

Apartado 1

Dibujar una gráfica con la nube de puntos de salida correspondiente.

a) Considere $N = 50, dim = 2, rango = [-50, +50]$ con $simula\_unif(N, dim, rango)$.

Como el código de la función $simula\_unif$ se ha proporcionado, no se va a mostrar su funcionamiento porque se supone que ya es conocido. Habiendo dicho esto, se procede a mostrar los datos generados:

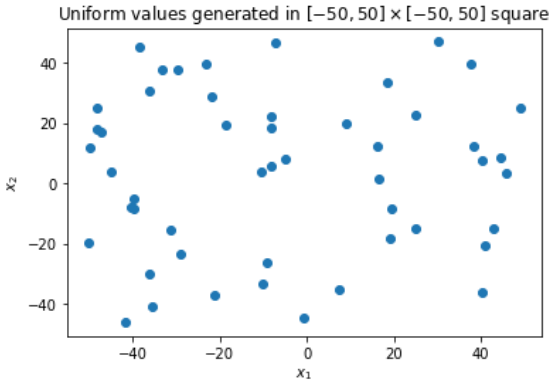


Figura 1: Datos generados por la función $simula\_unif(N, dim, rango)$ con $N = 50$, $dim = 2$, $rango = [-50, +50]$

b) Considere $N = 50$, $dim = 2$ y $sigma = [5, 7]$ con $simula\_gaus(N, dim, sigma)$.

De nuevo, como en el caso anterior, como ya se ha proporcionado la función $simula\_gaus$, no se va a mostrar su funcionamiento porque se supone que ya es conocido. Así que, con esto en mente, podemos mostrar los siguientes puntos generados:

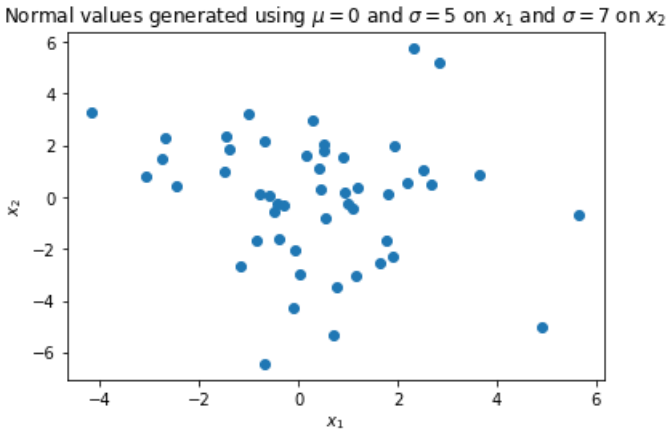


Figura 2: Datos generados por la función $simula\_gaus(N, dim, sigma)$ con $N = 50$, $dim = 2$ y $sigma = [5, 7]$

Apartado 2

Con ayuda de la función $simula\_unif()$ generar una muestra de puntos 2D a los que vamos añadir una etiqueta usando el signo de la función $f(x, y) = y - ax - b$, es decir el signo de la distancia de cada punto a la recta simulada con $simula\_recta()$.

a) Dibujar una gráfica donde los puntos muestren el resultado de su etiqueta, junto con la recta usada para ello. (Observe que todos los puntos están bien clasificados respecto de la recta).

Para realizar esto, se nos ha proporcionado la función $simula\_recta()$ desde el principio, con lo cuál no la vamos a comentar, ya que se supone conocida. Para clasificar los puntos, vamos a utilizar una función llamada $f(x, y, a, b)$, donde x es la coordenada X del punto, y la coordenada Y, a la pendiente de la recta simulada anteriormente y b el termino independiente. Esta función también se ha proporcionado, con lo cuál no se mostrará su implementación porque, de nuevo, se supone conocida.

Los puntos generados, junto con la recta, son los siguientes:

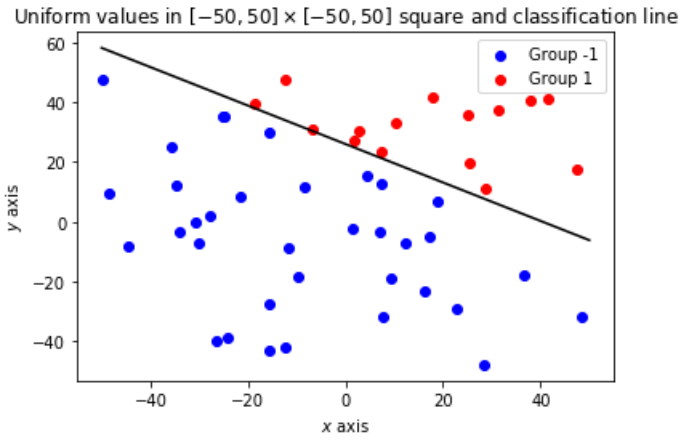


Figura 3: Gráfica de puntos generados uniformemente con la recta que separa las dos clases.

Adicionalmente, para ver que la clasificación es la correcta, se ha calculado el ratio de puntos clasificados correcta e incorrectamente mediante una función, la cuál se puede ver a continuación:

In [5]:
```python
def error_rate(x, y, a, b):
    """
    Funcion para calcular los ratios de acierto y error entre los valores
    reales de las etiquetas y los predichos.

    :param x: Array de vectores de caracteristicas
    :param y: Array de etiquetas
    :param a: Pendiente de la recta
    :param b: Valor independiente de la recta

    :return Devuelve el ratio de aciertos y el ratio de errores
    """

    # Crear lista de y predichas
    predicted_y = []

    # Predecir cada valor
    for value in x:
        predicted_y.append(f(value[0], value[1], a, b))

    # Convertir a array
    predicted_y = np.array(predicted_y)

    return np.mean(y == predicted_y), np.mean(y != predicted_y)
```

Figura 4: Función para el cálculo del ratio de aciertos y errores.

Los resultados obtenidos, como se espera en este caso ya que no hay ruido en la muestra, son los siguientes:

```
In [7]: # Obtener ratios de acierto y error
        accuracy, error = error_rate(x, y, a, b)

        print('Ratio de aciertos: {}'.format(accuracy))
        print('Ratio de error: {}'.format(error))

        Ratio de aciertos: 1.0
        Ratio de error: 0.0
```

Figura 5: Ratios de acierto y error obtenidos de la muestra sin ruido.

b) Modifique de forma aleatoria un 10 % etiquetas positivas y otro 10 % de negativas y guarde los puntos con sus nuevas etiquetas. Dibuje de nuevo la gráfica anterior. (Ahora hay puntos mal clasificados respecto de la recta)

Para insertar ruido en la muestra, de forma proporcional a la cantidad de etiquetas de las distintas clases que tenemos, nos hemos ayudado de la siguiente función:

```
In [11]: def insert_noise(y, ratio=0.1):
             """
             Función para insertar ruido en una muestra de forma proporcional en cada
             clase.

             :param y: Etiquetas sobre las que insertar ruido
             :param ratio: Ratio de elementos de cada clase que modificar
             """
             # Obtener número de elementos sobre los que aplicar ruido
             # (redondear)
             noisy_pos = round(np.where(y == 1)[0].shape[0] * ratio)
             noisy_neg = round(np.where(y == -1)[0].shape[0] * ratio)

             # Obtener las posiciones de forma aleatoria
             pos_index = np.random.choice(np.where(y == 1)[0], noisy_pos, replace=False)
             neg_index = np.random.choice(np.where(y == -1)[0], noisy_neg, replace=False)

             # Cambiar los valores
             y[pos_index] = -1
             y[neg_index] = 1
```

Figura 6: Función para insertar ruido en una muestra de datos.

Al aplicar esta función sobre nuestras etiquetas, obtenemos los siguientes datos:

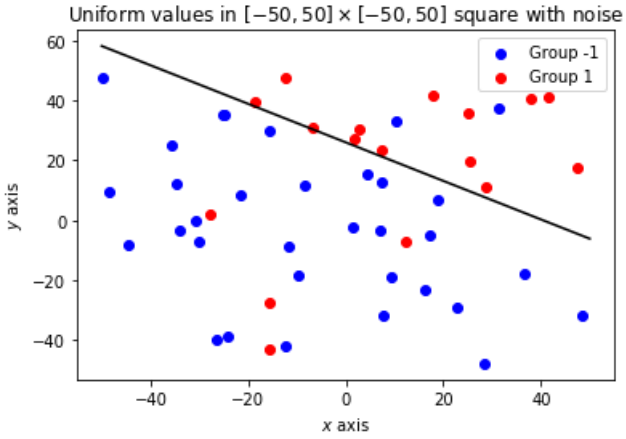


Figura 7: Gráfica de puntos generados uniformemente con ruido junto con la recta que los separa.

Como se puede ver, como había un mayor número de datos con etiqueta -1, se han modificado más elementos de esta clase, siendo este número de elementos modificados proporcional respecto al número de elementos totales de la clase.

Como era de esperarse, al haber modificado las etiquetas, los ratios de aciertos y error se han visto modificados, dejándolos de la siguiente forma:

```
Ratio de aciertos: 0.88
Ratio de error: 0.12
```

Figura 8: Ratios de acierto y error obtenidos de la muestra con ruido.

Apartado 3

Supongamos ahora que las siguientes funciones definen la frontera de clasificación de los puntos de la muestra en lugar de una recta:

1. $f(x, y) = (x - 10)^2 + (y - 20)^2 - 400$
2. $f(x, y) = 0.5(x + 10)^2 + (y - 20)^2 - 400$
3. $f(x, y) = 0.5(x - 10)^2 + (y + 20)^2 - 400$
4. $y - 20x^2 - 5x + 3$

Visualizar el etiquetado generado en $2b$ junto con cada una de las gráficas de cada una de las funciones. Comparar las formas de las regiones positivas y negativas de estas nuevas funciones con las obtenidas en el caso de la recta ¿Son estas funciones más complejas mejores clasificadores que la función lineal? ¿En qué ganan a la función lineal? Explicar el razonamiento.

Para ayudarnos con la visualización de los datos, hemos utilizado una función ya proporcionada, con lo cuál no vamos a discutir como funciona. En vez de eso, veamos cómo son las funciones anteriores una vez que se han implementado:

In [15]:
```python
# Función del primer apartado
def f1(X):
    return (X[:, 0] - 10) ** 2 + (X[:, 1] - 20) ** 2 - 400

# Función del segundo apartado
def f2(X):
    return 0.5 * (X[:, 0] + 10) ** 2 + (X[:, 1] - 20) ** 2 - 400

# Función del tercer apartado
def f3(X):
    return 0.5 * (X[:, 0] - 10) ** 2 - (X[:, 1] + 20) ** 2 - 400

# Función del cuarto apartado
def f4(X):
    return X[:, 1] - 20 * X[:, 0] ** 2  - 5 * X[:, 0]  + 3
```

Figura 9: Funciones implementadas en Python.

Estas funciones están pensadas para que se modifiquen todos los datos a la vez y se devuelva la función aplicada a éstos.

Para calcular estos ratios, nos hemos ayudado de la siguiente función, la cuál ha sido parametrizada para que pueda recibir cualquiera de las funciones anteriores, predecir las etiquetas y devolver los correspondientes ratios:

In [18]:
```python
def error_rate_func(x, y, func):
    """
    Función para calcular los ratios de acierto y error al predecir un conjunto
    de puntos x mediante una función func, con respecto de los valores reales y

    :param x: Puntos que se usarán para predecir
    :param y: Etiquetas reales de los puntos
    :param func: Función con la que se predecirán los puntos

    :return Devuelve el ratio de puntos predichos correctamente y el ratio de
            puntos predichos erróneamente
    """

    # Predecir las etiquetas
    predicted_y = func(x)

    # Hacer que los valores predichos estén en el rango (-1, 1)
    predicted_y = np.clip(predicted_y, -1, 1)

    return np.mean(predicted_y == y), np.mean(predicted_y != y)
```

Figura 10: Función para calcular las tasas de aciertos y error para las nuevas funciones.

A continuación, se presentan las gráficas de las funciones junto con los valors de los ratios de aciertos y error:

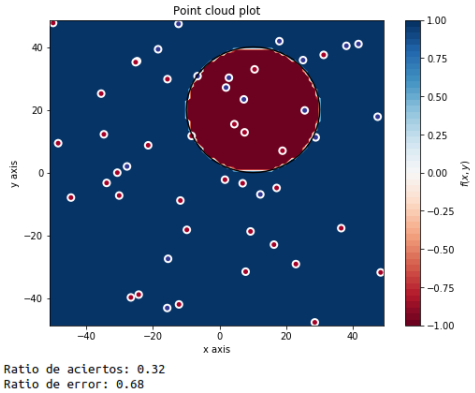


Figura 11: Gráfica y ratios de 1.

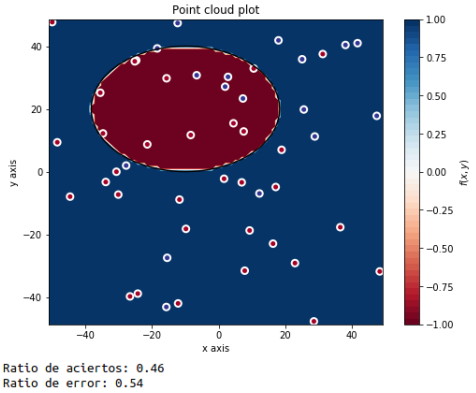


Figura 12: Gráfica y ratios de 2.

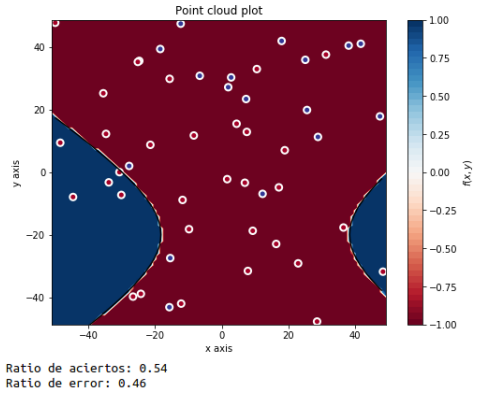


Figura 13: Gráfica y ratios de 3.

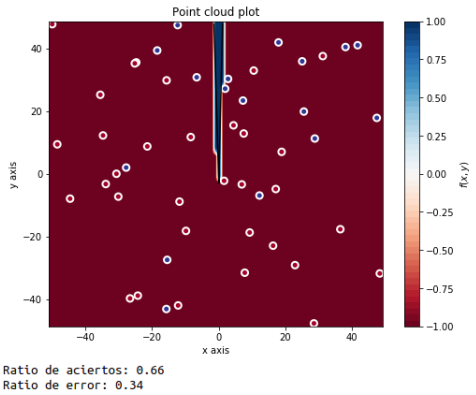


Figura 14: Gráfica y ratios de 4.

Como se puede ver, son funciones más complejas que las lineales. Algunas de ellas son figuras geométricas, como circunferencias o elipses (correspondientes a las funciones 1 y 2). Estas funciones serían capaces de explicar datos muy complejos, datos con los que las funciones lineales tendrían problemas, debido a que no son linealmente separables mediante una recta. Por ejemplo, si una clase estuviese dentro de otra, se podría usar perfectamente una función como 1 o 2.

Comparándolas con la recta, las regiones positivas y negativas cambian. En el caso de la recta, todo lo que había debajo de ella se supone que es negativo (aunque luego no sea así debido a la presencia de ruido). En estos nuevos casos, encontramos por ejemplo que las regiones negativas están dentro de las positivas (funciones 1

y 2), las regiones positivas están en los extremos laterales (función 3) o son tan pequeñas que casi no existen o parecen una parabola (caso de la función 4).

A pesar de esto, las funciones no parecen ser demasiado buenas, ya que en todos los casos los ratios de aciertos son menores que los de la función lineal (recordemos que su ratio de aciertos era 0.88). Esto se debe a que, aunque los datos presenten un cierto ruido, se pueden llegar a separar mejor utilizando una recta en vez de algo mucho más complejo como una elipse o dividiendo el espacio en regiones como en el caso de 3.

También hay que considerar que en este caso estamos cogiendo directamente funciones, sin entrenar ningún tipo de modelo para intentar ajustarlas a los datos. A lo mejor haciendo esto se podrían obtener algunos resultados un poco mejores en algunas de las funciones, pero como existe ruido en la muestra, es muy difícil dar con la función adecuada y que tenga el mínimo error. Además, en caso de encontrarla, por haber recurrido a una clase de funciones muy compleja por ejemplo, nos podríamos encontrar con el caso de *overfitting*, lo cuál es un problema gravísimo y nada deseable.

En resumen, las funciones no lineales tienen sus puntos fuertes debido a que pueden explicar ciertos tipos de muestras mejor de lo que lo haría una función lineal, pero no siempre son la solución a nuestros problemas. Pueden darse casos, como por ejemplo este, que la función lineal le gane a todas las no lineales, debido a que sea más fácil dividir los datos mediante una recta. Hay que ser muy consciente de qué tipo de función elegir en cada momento. Por ejemplo, un comportamiento no lineal en algunas carcterísticas nos podría indicar que sería mejor intentar recurrir a alguna función no lineal que a una lineal para resolver el problema. Sin embargo, antes de recurrir a los modelos no lineales, podemos asegurarnos comprobando alguna información como por ejemplo el sesgo y la varianza que nuestro modelo lineal se queda corto para explicar los datos, teniendo en cuenta siempre que no se debe hacer *overfitting* con los datos disponibles.

2. Modelos Lineales

Apartado 1

Algoritmo Perceptrón: Implementar la función $ajusta\_PLA(datos, label, max\_iter, vini)$ que calcula el hiperplano solución a un problema de clasificación binaria usando el algoritmo PLA. La entrada *datos* es una matriz donde cada item con su etiqueta está representado por una fila de la matriz, *label* el vector de etiquetas (cada etiqueta es un valor $+1$ o -1), max_iter es el número máximo de iteraciones permitidas y *vini* el valor inicial del vector. La función devuelve los coeficientes del hiperplano.

Primeramente, vamos a ver la implementación de la función:

In [14]:
```python
def adjust_PLA(data, label, max_iter, initial_values):
    """
    Implementación del PLA para ajustar una serie de pesos
    para un perceptrón

    :param data: Conjunto de datos con los que entrenar el perceptrón
    :param label: Conjunto de etiquetas, una por cada grupo de características
    :param max_iter: Número máximo de iteraciones (épocas) que hace el PLA
                     (limitar el número de iteraciones en caso de que no converja)
    :param initial_values: Valores iniciales de w

    :return Devuelve los pesos obtenidos (w) junto con el número de épocas
            que ha tardado en converger (epoch)
    """

    # Copiar valores iniciales de w
    w = np.copy(initial_values)

    # Inicializar la convergencia a falso
    convergence = False

    # Inicializar el número de épocas realizadas a 0
    epoch = 0

    # Mientras no se haya convergido, ajustar el Perceptron
    while not convergence:
        # Incrementar el número de épocas y decir que se ha convergido
        convergence = True
        epoch += 1

        # Recorrer cada elemento de los datos con su correspondiente etiqueta
        # Si se ve que el valor predicho no se corresponde con el real
        # se dice que no se ha convergido en esta época
        for x, y in zip(data, label):
            # Calculor valor predicho (función signo)
            predicted_y = signo(w.dot(x.reshape(-1, 1)))

            # Comprobar si el valor predicho es igual al real
            if predicted_y != y:
                w += y * x
                convergence = False

        # Si se ha alcanzado el máximo de épocas, terminar
        if epoch == max_iter:
            break

    return w, epoch
```

Figura 15: Implementación de la función $ajusta\_PLA()$.

a) Ejecutar el algoritmo PLA con los datos simulados en los apartados $2a$ de la sección.1. Inicializar el algoritmo con: a) el vector cero y, b) con vectores de números aleatorios en $[0, 1]$ (10 veces). Anotar el número medio de iteraciones necesarias en ambos para converger. Valorar el resultado relacionando el punto de inicio con el número de iteraciones.

Los resultados de ejecutar el algoritmo con los distintos datos son los siguientes:

```
Algoritmo PLA con w_0 = [0.0, 0.0, 0.0]

Valor w: [-360.          8.60062752   15.34534818]    Num. iteraciones: 44
```

Figura 16: Resultado del algoritmo PLA con un $w_0 = [0, 0, 0]$.

Como se puede comprobar, la haber partido de $w_0 = [0, 0, 0]$, el algoritmo PLA tarda 44 iteraciones (es decir, 44 épocas, o lo que es lo mismo, 44 vueltas completas a los datos) en converger.

```
Algoritmo PLA con w_0 aleatorio

w_0 = [0.45815087 0.88730805 0.53393433]
Valor w: [-308.54184913    7.39880231   13.09609343]    Num. iteraciones: 35

w_0 = [0.57727945 0.91749829 0.31414652]
Valor w: [-358.42272055   10.42306079   17.3459754 ]    Num. iteraciones: 46

w_0 = [0.72613844 0.80523584 0.48006293]
Valor w: [-308.27386156    7.3167301    13.04222203]    Num. iteraciones: 35

w_0 = [0.48757437 0.84141006 0.55552753]
Valor w: [-308.51242563    7.35290432   13.11768663]    Num. iteraciones: 35

w_0 = [0.26988129 0.48674271 0.27584589]
Valor w: [-326.73011871   10.7676405    16.48956701]    Num. iteraciones: 45

w_0 = [0.22539047 0.64675391 0.92113358]
Valor w: [-264.77460953    7.65188314   11.6387396 ]    Num. iteraciones: 30

w_0 = [0.20047475 0.8798531  0.4658077 ]
Valor w: [-308.79952525    7.39134736   13.0279668 ]    Num. iteraciones: 35

w_0 = [0.72498012 0.30287132 0.48900729]
Valor w: [-465.27501988   16.50949988   20.63142906]    Num. iteraciones: 65

w_0 = [0.20367433 0.08861626 0.16568964]
Valor w: [-445.79632567   15.64429041   19.04615998]    Num. iteraciones: 64

w_0 = [0.50299653 0.78758101 0.90360187]
Valor w: [-473.49700347   11.27102087   17.83989574]    Num. iteraciones: 68


Valor medio de iteraciones necesario para converger: 45.8
```

Figura 17: Resultado del algoritmo PLA con un w_0 aleatorio.

En este caso, aunque no se especificaba, también se ha mostrado individualmente cuánto tarda el algoritmo PLA en converger para cada punto aleatorio. En algunos casos tarda más que en otros, debido a que estos puntos pueden estar más cerca del correspondiente plano obtenido, pero de media se tarda 45.8 épocas en converger. Este valor medio se queda muy cerca de las 44 épocas anteriores, con lo cuál, a grandes rasgos, podemos decir que de media todos los valores aletorios se comportan casi igual que un vector de pesos inicializado a 0. Se puede ver además que, dependiendo del punto inicial, se encuentra un plano u otro que divida a los puntos, posiblemente debido a la proximidad de estos puntos a dicho plano, aunque en algunos casos los planos obtenidos son bastante parecidos (los que tienen mismo número de iteracones son casi iguales). Esto no es de extrañar, ya que existen muchísimos planos que pueden separar a los datos si estos son linealmente separables.

Con esto podemos decir que la posición inicial de w influye en el número de

épocas hasta que que el algoritmo converja, pero que si los datos son linealmente separables, como es este caso, se llega a converger siempre, aunque sea de forma un poco lenta ya que se requieren muchas iteraciones hasta poder converger.

b) Hacer lo mismo que antes usando ahora los datos del apartado 2**b** de la sección.1. ¿Observa algún comportamiento diferente? En caso afirmativo diga cual y las razones para que ello ocurra.

Vamos a ver cuáles son los resultados obtenidos en cada caso.

```
Algoritmo PLA con w_0 = [0.0, 0.0, 0.0] y datos con ruido

Valor w: [-389.          14.87257812    4.5849045 ]    Num. iteraciones: 10000
```

Figura 18: Resultado del algoritmo PLA con un $w_0 = [0, 0, 0]$ y con ruido en la muestra.

```
Algoritmo PLA con w_0 aleatorio y datos con ruido

w_0 = [0.21952409 0.73813097 0.25780289]
Valor w: [-388.78047591   15.62892281    4.39934244]    Num. iteraciones: 10000

w_0 = [0.56420874 0.13242963 0.37208768]
Valor w: [-3.91435791e+02 -2.78712499e-01  1.53508762e+01]      Num. iteraciones: 10000

w_0 = [0.08285546 0.50572622 0.69440685]
Valor w: [-399.91714454   -2.17596444   44.14282903]    Num. iteraciones: 10000

w_0 = [0.45697791 0.36127471 0.81600751]
Valor w: [-382.54302209   29.28179251   10.19639859]    Num. iteraciones: 10000

w_0 = [0.04581152 0.38782779 0.45852318]
Valor w: [-390.95418848  -15.37579277   39.84245551]    Num. iteraciones: 10000

w_0 = [0.73573212 0.90963695 0.27740547]
Valor w: [-405.26426788  -19.18979239   38.63832631]    Num. iteraciones: 10000

w_0 = [0.81776839 0.65631586 0.01128031]
Valor w: [-395.18223161    2.24818188   15.84450593]    Num. iteraciones: 10000

w_0 = [0.73535369 0.60349464 0.68001914]
Valor w: [-390.26464631   13.65392192    8.52446406]    Num. iteraciones: 10000

w_0 = [0.58395979 0.57352097 0.36101747]
Valor w: [-395.41604021    4.26188126   57.85715118]    Num. iteraciones: 10000

w_0 = [0.9586999  0.98694282 0.38713543]
Valor w: [-397.0413001     7.15980974   10.01618516]    Num. iteraciones: 10000


Valor medio de iteraciones necesario para converger: 10000.0
```

Figura 19: Resultado del algoritmo PLA con un w_0 aleatorio y con ruido en la muestra.

Como se puede comprobar a simple vista, todos los algoritmos terminan en el mismo número de iteraciones. No es casualidad, ya que al algoritmo se le ha especificado que max_iter sea 10000 iteraciones o épocas. Entonces, ¿por qué sucede esto?

La respuesta es muy simple, y es que los datos no son linealmente separables. En los datos con ruido hay puntos de una clase que están mezclados con los de la otra, y no existe ninguna forma de separar esos datos con una recta/plano (habría que intentar utilizar algo más complejo como una circunferencia o una elipse, aunque tampoco se garantiza que se consiga algo con estos, aparte de que el PLA solo trabaja con planos/rectas). Por tanto, el algoritmo PLA nunca va a poder converger en estos casos, que es precisamente lo que sucede en este ejemplo.

Apartado 2

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

Consideremos $d = 2$ para que los datos sean visualizables, y sea $\mathcal{X} = [0, 2] \times [0, 2]$ con probabilidad uniforme de elegir cada $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$. Elegir una línea en el plano que pase por $\mathcal{X}$ como la frontera entre $f(\mathbf{x}) = 1$ (donde y toma valores $+1$) y $f(\mathbf{x}) = 0$ (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 $\{\mathbf{x}_n\}$ de $\mathcal{X}$ y evaluar las respuestas $\{y_n\}$ de todos ellos respecto de la frontera elegida.

Para generar los datos, vamos a utilizar la función $simula\_unif()$ y la función $simula\_recta()$, las cuales han aparecido anteriormente. Aparte de esto, hemos cambiado la semilla aleatoria que se proporcionaba al principio, ya que los datos que se generaban inicialmente, junto con la recta, no eran muy buenos. Esta creación se puede comprobar en el siguiente código:

In [17]:
```
# Fijamos la semilla
# Se cambia la semilla porque con la primera se obtiene una recta muy mala
np.random.seed(2)

# Simular 100 puntos 2D de forma uniforme en el rango [0, 2]
x_train = simula_unif(100, 2, [0.0, 2.0])

# Simular una recta en el rango [0, 2] y calcular sus coeficientes
a, b = simula_recta([0.0, 2.0])

# Inicializar las etiquetas a una nueva lista
y_train = []

# Recorrer los valores de x_train y generar los valores de las etiquetas
# utilizando la recta de clasificación
for value in x_train:
    y_train.append(f(value[0], value[1], a, b))

# Convertir la lista de etiquetas a array
y_train = np.array(y_train)
```

Figura 20: Código para generar los datos iniciales.

Una vez generados, al representar la muestra con las etiquetas correspondientes y con la recta f que divide en dos clases, obtenemos la siguiente gráfica:

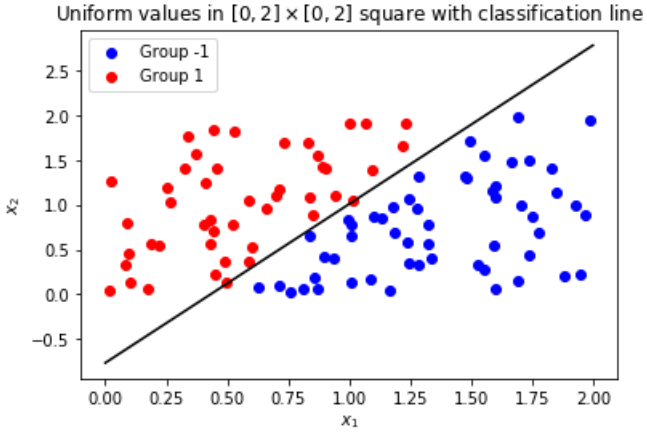


Figura 21: Gráfica de los datos generados para el problema de Regresión Lineal.

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 $||\mathbf{w}^{(t-1)} - w^{(t)}|| < 0.01$, 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, $1, 2, \ldots, N$, en el orden de los datos antes de usarlos en cada época del algoritmo.

- Usar una tasa de aprendizaje de $\eta = 0.01$.

A continuación se procede a mostrar la implementación de Regresión Lineal con Gradiente Descendente Estocástico:

In [18]:
```python
def sgdRL(data, labels, initial_w, threshold=0.01, lr=0.01):
    """
    Función que calcula unos pesos para la Regresión Logística mediante
    el Gradiente Descendente Estocástico

    :param data: Conjunto de datos
    :param labels: Conjunto de etiquetas
    :param initial_w: Valores iniciales de w
    :param threshold: Límite de las diferencias entre los w de dos épocas con
                      el que parar
    :param lr: Ratio de aprendizaje

    :return Devuelve un vector de pesos (w)
    """
    # Copiar el w inicial, los datos y las etiquetas
    w = np.copy(initial_w)
    x_data = np.copy(data)
    y_data = np.copy(labels)

    # Obtener número de elementos
    N = x_data.shape[0]

    # Establecer una diferencia inicial entre w_(t-1) y w_t
    delta = np.inf

    # Mientras la diferencia sea superior al umbral,
    # generar una nueva época e iterar sobre los datos
    while delta > threshold:
        # Crear una nueva permutación y aplicarla a los datos
        # para generar una nueva época
        indexes = np.random.permutation(N)
        x_data = x_data[indexes, :]
        y_data = y_data[indexes]

        # Guardar w_(t-1)
        prev_w = np.copy(w)

        # Actualizar w con la nueva época
        for x, y in zip(x_data, y_data):
            w = w - lr * gradient_sigmoid(x, y, w)

        # Comprobar el nuevo delta
        delta = np.linalg.norm(prev_w - w)

    return w.reshape(-1,)
```

Figura 22: Implementación de Regresión Lineal mediante SGD.

Esta implementación genera, para cada época, una nueva permutación de los datos, y actualiza w con un batch de tamaño 1, recorriendo todos los datos. Se ha llamado *delta* a la diferencia $||\mathbf{w}^{(t-1)} - w^{(t)}||$, es decir, a la distnacia Euclídea entre los dos vectores de pesos, y para calcularla se ha usado una función de *numpy* que se encarga de eso.

También se ha utlizado una función que calcula el gradiente del sigmoide, el

cuál viene dado por la siguiente expresión:

$$\nabla E_{\text{in}} = -\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\frac{y_n \mathbf{x}_n}{1 + e^{y_n \mathbf{w}^{\mathrm{T}} \mathbf{x}_n}} \tag{1}$$

Como el *batch* es de tamaño 1, la expresión anterior queda de la siguiente forma:

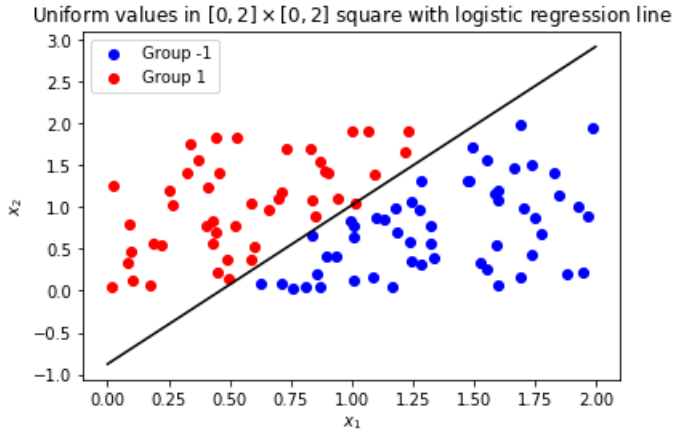
$$\nabla E_{\text{in}} = -\frac{y_n \mathbf{x}_n}{1 + e^{y_n \mathbf{w}^{\mathrm{T}} \mathbf{x}_n}} \tag{2}$$

Este resultado se puede ver en el siguiente código:

```
In [19]: def gradient_sigmoid(x, y, w):
             return -(y * x)/(1 + np.exp(y * w.dot(x.reshape(-1,))))
```

Figura 23: Implementación del gradiente de la función sigmoide.

Con los datos generados anteriormente, y pasándole un vector de pesos inicializado a 0 cada componente, se obtiene la siguiente gráfica:




```
Ein = 0.08786480050691668
```

Figura 24: Recta de Regresión Lineal ajustada mediante SGD junto con E_{in}.

Como se puede ver, se ha obtenido una recta casi idéntica a la anterior, solo que un poquito más inclinada (esto se puede notar en uno de los puntos rojos que corta, como lo deja casi por encima de la recta). Como se puede observar, el valor de E_{in}

es bastante pequeño, con lo cuál el ajuste realizado es muy bueno. Para calcular este error, se ha utilizado la siguiente fórmula, la cuál sigue el criterio ERM:

$$E_{\text{in}} = \frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N} \ln\left(1 + e^{-y_i \mathbf{w}^{\mathrm{T}} \mathbf{x}_i}\right) \tag{3}$$

El motivo por el que el E_{in} no es exactamente 0 si no un valor muy pequeño se debe al exponente. Cuando los datos son clasificados correctamente, el valor del exponente es negativo (por el signo negativo delante de y_i), con lo cuál esa exponenciación tendrá un valor pequeño, aunque no tan pequeño como para que el logaritmo neperiano de la suma sea 0, si no un poco mayor. Si los datos no son clasificados correctamente, el valor de la exponenciación es positivo, y por tanto esa suma dentro del logaritmo se hace mucho mayor, incrementando en mayor medida el error.

Una vez comentado ese aspecto, se procede a mostrar la implementación de la función para calcular el error en una muestra:

```
In [20]: def error_func(data, labels, w):
             """
             Función para calcular el error en un conjunto de datos.

             :param data: Conjunto de datos
             :param labels: Conjunto de etiquetas
             :param w: Vector de pesos

             :return Devuelve el error
             """

             # Obtener número de elementos e inicializar error inicial
             N = data.shape[0]
             error = 0.0

             # Recorrer cada elemento e ir incrementando el error con
             # la función del ERM
             for x, y in zip(data, labels):
                 error += np.log(1 + np.exp(-y * w.dot(x.reshape(-1, 1))))

             return error[0] / N
```

Figura 25: Implementación de la función de error con el criterio ERM (3).

b) Usar la muestra de datos etiquetada para encontrar nuestra solución g y estimar E_{out} usando para ello un número suficientemente grande de nuevas muestras ($>$999).

Para este experimento, se ha generado una muestra aleatoria con la función $simula\_unif()$ con $N = 2500$, la cuál se puede ver a continuación:

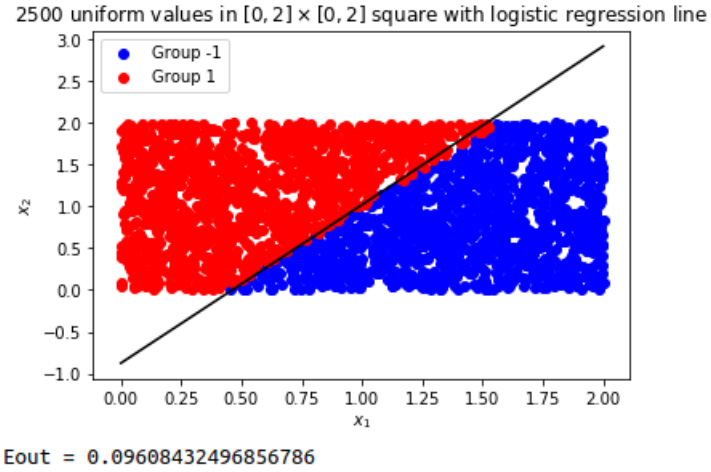


Figura 26: Muestra de 2500 elementos con la recta de Regresión Logística y el valor de E_{out}.

Como se puede ver, la recta divide casi perfectamente a la nueva muestra, a excepción de algunos puntos rojos que parece que están más pegados a los azules, quedando al otro lado de la zona de la recta que clasifica a los puntos rojos con la etiqueta +1. Sin embargo, al observar el valor de E_{out}, podemos ver que el ajuste es muy bueno, ya que este error es solo una centésima superior al valor de E_{in}, con lo cuál ambos valores están muy próximos. De aquí podemos sacar que la muestra que teníamos de entrenamiento representa muy bien a la población y tenía el tamaño suficiente como para poder entrenar correctamente a nuestro modelo.