Prácticas de Aprendizaje Automático

Trabajo 1: Búsqueda Iterativa de Óptimos y Regresión Lineal

Pablo Mesejo y Francisco Baldán
Universidad de Granada
Departamento de Ciencias de la Computación e Inteligencia Artificial

Recordatorio normas (1). Informe.

.zip = Código (.py) + Informe (.pdf)

- Presentar un **informe escrito** con las valoraciones y **decisiones** adoptadas en cada apartado
  - No es solo hacer algo → hay que argumentar el por qué
- Incluir en el informe los **gráficos** generados.
- Incluir una **valoración/discusión de los resultados obtenidos**.

- **El informe debe presentarse en PDF**
- Si no hay informe → se considera que el trabajo no se ha presentado

Recordatorio normas (2). Código.

- **Único script Python**.
  - Los distintos ejercicios van en apartados comentados dentro del fichero

- **Todos los resultados numéricos o gráficas serán mostrados por pantalla**, parando la ejecución después de cada apartado.
  - No escribir nada en el disco

- El path que se use en la lectura de cualquier fichero auxiliar de datos debe ser siempre "**datos/nombre_fichero**".
  - Crear directorio llamado "datos“ dentro del directorio donde se desarrolla y se ejecuta la práctica

Recordatorio normas (3). Código.

- El código **debe ejecutarse de principio a fin sin errores**.

- No es válido usar opciones en las entradas.
  - **Fijar al comienzo los parámetros por defecto** que considere óptimos.

- El código debe estar obligatoriamente **comentado** explicando lo que realizan los distintos apartados
  - **Id comentando el código** que hagáis: sirve para que entendáis mejor lo que habéis hecho, y facilita mi trabajo a la hora de corregir los ejercicios.

- Entregar **solo el código fuente**, **nunca los datos**.

Recordatorio normas (y 4)

$\boxed{\text{.zip = Código (.py) + Informe (.pdf)}}$

Subir el zip a PRADO, a la actividad creada para ello.

$\boxed{\text{Fecha de entrega: 5 de Abril}}$

Template

- Podéis partir, si queréis, del template que hemos preparado y del que disponéis en PRADO

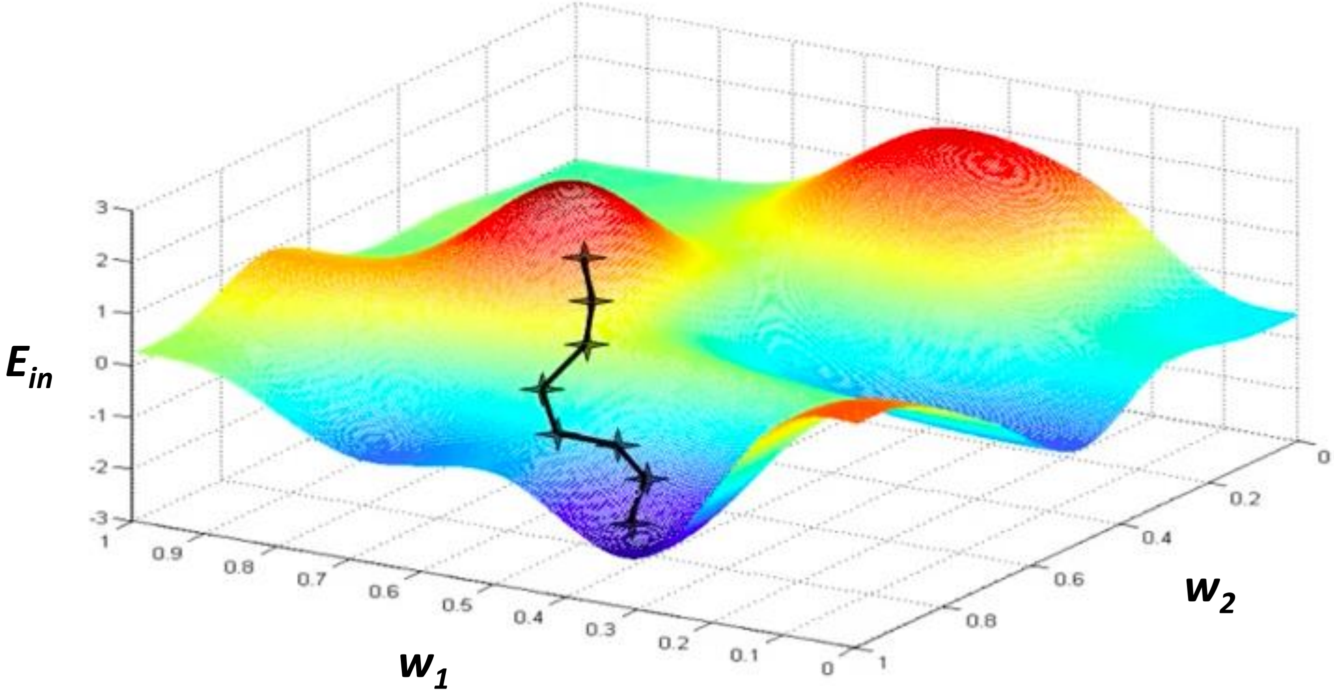
```python
# -*- coding: utf-8 -*-
"""
TRABAJO 1.
Nombre Estudiante:
"""

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

np.random.seed(1)

print('EJERCICIO SOBRE LA BUSQUEDA ITERATIVA DE OPTIMOS\n')
print('Ejercicio 1\n')

def E(u,v):
    return #function

#Derivada parcial de E con respecto a u
def dEu(u,v):
    return #Derivada parcial de E con respecto a u

#Derivada parcial de E con respecto a v
def dEv(u,v):
    return #Derivada parcial de E con respecto a v

#Gradiente de E
def gradE(u,v):
    return np.array([dEu(u,v), dEv(u,v)])

def gradient_descent(?):
    #
    # gradiente descendente
    #
    return w, iterations


eta = 0.01
maxIter = 10000000000
error2get = 1e-14
initial_point = np.array([1.0,1.0])
w, it = gradient_descent(?)


print ('Numero de iteraciones: ', it)
print ('Coordenadas obtenidas: (', w[0], ', ', w[1],')')
```

1. Búsqueda iterativa de óptimos

- Implementar el algoritmo de gradiente descendente
  - Algoritmo para minimizar funciones
  - Requiere una función derivable a minimizar
  - Es un algoritmo local: empieza en un punto y va descendiendo por la pendiente más pronunciada
    - El gradiente apunta en la dirección de mayor crecimiento de la función, y su magnitud es la pendiente en dicha dirección
    - Como estamos minimizando, se emplea el signo contrario al gradiente

$$w_j := w_j - \eta \frac{\partial E_{in}(\mathbf{w})}{\partial w_j}$$

1. Búsqueda iterativa de óptimos



Ejemplo:
Función con dos pesos/parámetros

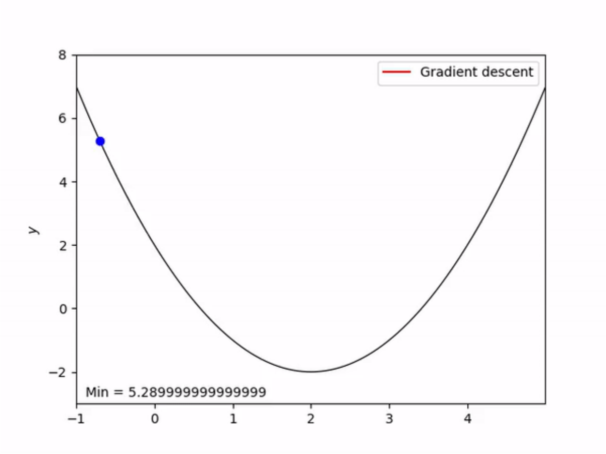
Se busca minimizar el error $\boldsymbol{E_{in}}$

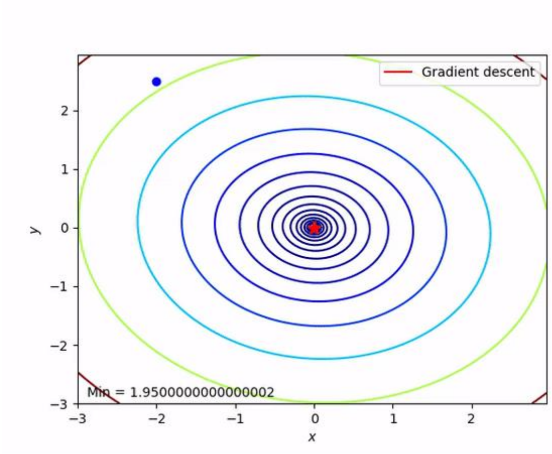
Partiendo de un punto inicial

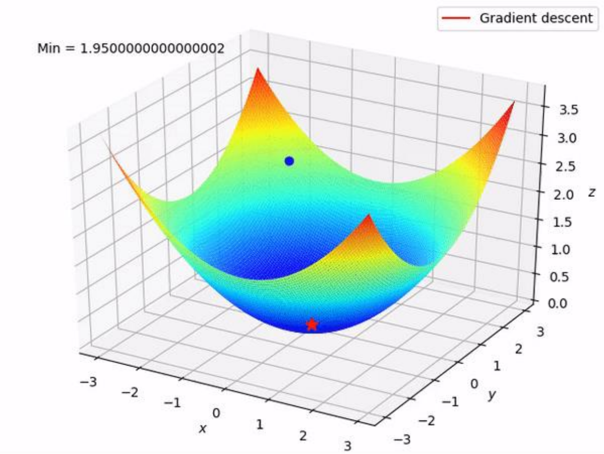
Se desciende por la dirección de mayor pendiente

Imagen extraída del curso Machine Learning de Andrew Ng

1. Búsqueda iterativa de óptimos







Animaciones extraídas de https://jed-ai.github.io/py1_gd_animation/

1. Búsqueda iterativa de óptimos

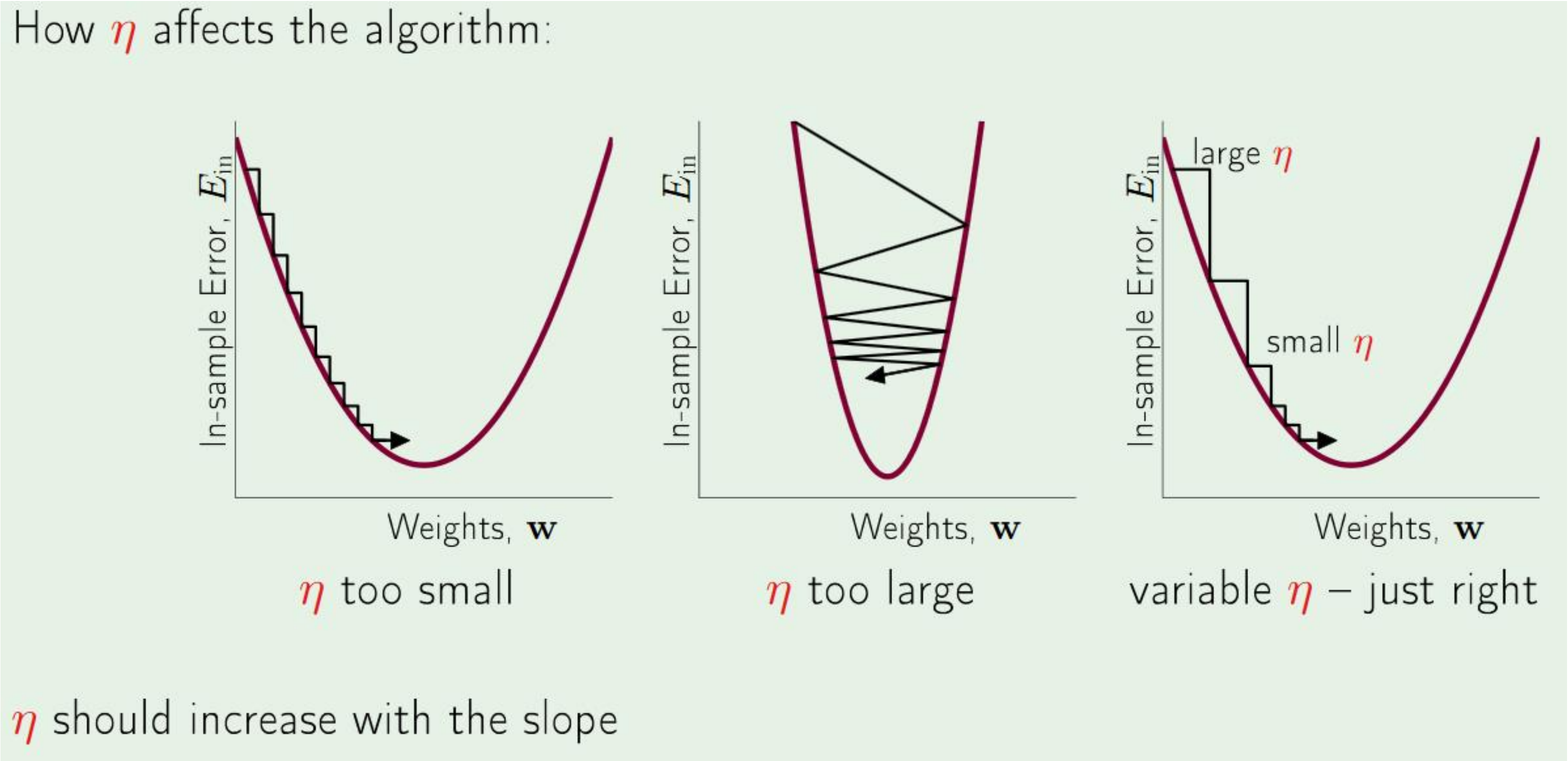
- We want to choose **w** so as to minimize $E_{in}(\mathbf{w})$
- Gradient Descent (GD):
  - Gradient descent is a general iterative optimization technique that reach a local optimum following the direction of the gradient vector on each point.

It starts on some initial value **w** and repeatedly perform the update ,

$$\boxed{w_j := w_j - \eta \frac{\partial E_{in}(\mathbf{w})}{\partial w_j}}$$ (GENERAL EQUATION)

(This update is simultaneously performed for all values of j = 0, . . . , n).Here, η is called the learning rate.

1. Búsqueda iterativa de óptimos



Slide credit: slide 21 en http://work.caltech.edu/slides/slides09.pdf

1. Búsqueda iterativa de óptimos

- Implementar el algoritmo de gradiente descendente
  1. Una función que implemente el gradiente descendente

     ```
     def gradient_descent(?):
     ```

  2. ¿Cuál es el cuerpo de la función?

     $$w_j := w_j - \eta \frac{\partial E_{in}(\mathbf{w})}{\partial w_j}$$

  3. ¿Qué argumentos se le pasan a la función?

1. Búsqueda iterativa de óptimos

- Recomendaciones
  - Imprimid el valor de la función en cada punto del descenso de gradiente → **verificad que los valores van disminuyendo**
  - Si algo no va bien, y no dais encontrado el error, **revisad las derivadas** (probablemente no estén bien calculadas)

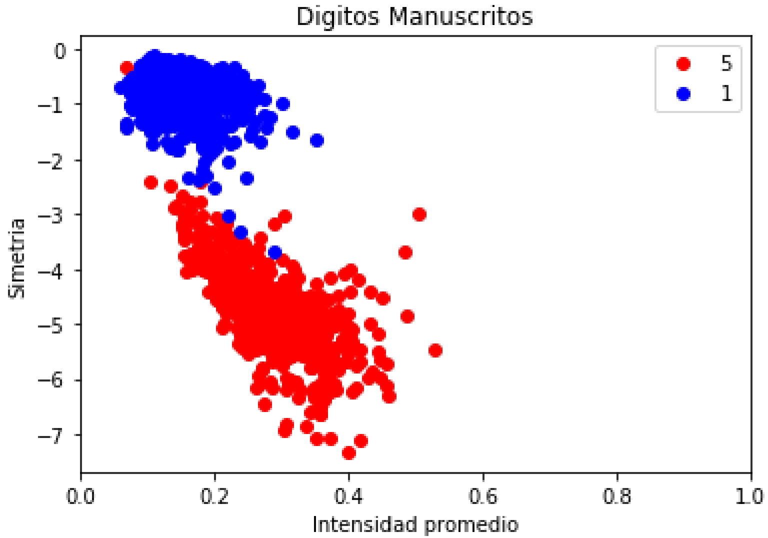
1. Búsqueda iterativa de óptimos

- Limitaciones del gradiente descendente
  - Necesidad de función derivable
  - Importancia del punto inicial (es una búsqueda local)
    - Un mínimo local de una función convexa es un mínimo global
  - Importancia del learning rate
    - Demasiado grande → podríamos no converger
    - Demasiado pequeño → llevaría demasiado tiempo

2. Ejercicio sobre Regresión Lineal

- En el template tenéis una función para leer los datos: **`def readData(file_x, file_y)`**
- La idea es usar regresión lineal para clasificación de dígitos

`y = w0 + w1x1 + w2x2`



2. Ejercicio sobre Regresión Lineal

- Al final, todo consiste en estimar los $\mathbf{w}$’s
  - Gradient Descent
  - Stochastic Gradient Descent
  - Pseudoinversa (*one-step learning*)
  - BONUS: Método de Newton

Gradient Descent vs Stochastic Gradient Descent

Gradient Descent

It starts on some initial value **w** and repeatedly perform the update ,

$$w_j := w_j - \eta \frac{\partial E_{in}(\mathbf{w})}{\partial w_j} \quad \text{(GENERAL EQUATION)}$$

(This update is simultaneously performed for all values of j = 0, . . . , n).Here, η is called the learning rate.

$$\frac{\partial E_{in}(\mathbf{w})}{\partial w_j} = \frac{\partial}{\partial w_j}\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}(\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_{\mathrm{n}} - y_n)^2 = \frac{2}{N}\sum_{n=1}^{N} x_{nj}(\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_{\mathrm{n}} - y_n) = \boxed{\frac{2}{N}\sum_{n=1}^{N}} x_{nj}(\mathbf{h}(\mathbf{x}_{\mathbf{n}}) - y_n)$$

Each point $(\mathbf{x}_n, y_n)$contributes to the update by an amount proportional to its prediction error

In this case all points are used to compute the gradient: BATCH GRADIENT DESCENT

Gradient Descent vs Stochastic Gradient Descent

Stochastic Gradient Descent

- An alternative is to use a stochastic estimation using only a part of the sample to compute the gradient, $\boxed{\text{M << N (SGD)}}$

$$\frac{\partial E_{in}(\mathbf{w})}{\partial w_j} = \boxed{\frac{2}{M}\sum_{n=1}^{M}} x_{nj}(\mathbf{h}(\mathbf{x_n}) - y_n)$$

  - Higher variability in the gradient estimation (less examples in the average)
  - Very fast of computing
  - In non-convex funtions empirical evidence of getting good local minimum

- Although an only item could be used on each iteration, a minibatch of items is the accepted rule (size: 32-128)

Gradient Descent vs Stochastic

Batch Gradient Descend

- Given the data set $(\mathbf{x}_n, y_n), n = 1,2,\cdots, N$

1. Fix **w**=0 , $\eta = \eta_0$
2. Iterate

   For j=0,..,K :

   $w_j := w_j - \eta \sum_{n=1}^{N} x_{nj}(\mathbf{h}(\mathbf{x_n}) - y_n)$ **(all sample participate)**
3. Until $E_{in}(\mathbf{w})$ < epsilon

Stochastic Gradient Descend

1. Fix **w**=0 , $\eta = \eta_0$
2. Iterate:
3. **Shuffle and Split the sample into a sequence of mini-batches**
4. Iterate on mini-batches

   For j=0,..,K :

   $w_j := w_j - \eta \sum_{n \epsilon Minibatch} x_{nj}(\mathbf{h}(\mathbf{x_n}) - y_n)$ **(only a mini-bacth participate)**
5. Until $E_{in}(\mathbf{w})$ < epsilon

Gradient Descent vs Stochastic Gradient Descent

Batch Gradient Descent **Vs** **Stochastic Gradient Descent**

all points are used to compute the gradient:

$$\frac{2}{N}\sum_{n=1}^{N} x_{nj}(\mathbf{h}(\mathbf{x_n}) - y_n)$$

M < < N (SGD)

$$\frac{\partial E_{in}(\mathbf{w})}{\partial w_j} = \frac{2}{M}\sum_{n=1}^{M} x_{nj}(\mathbf{h}(\mathbf{x_n}) - y_n)$$

2. Ejercicio sobre Regresión Lineal: Pseudoinversa

A Linear Regression Algorithm

$$E_{\text{in}}(\mathbf{w}) = \frac{1}{N}\|\mathrm{X}\mathbf{w} - \mathbf{y}\|^2$$

$$\nabla E_{\text{in}}(\mathbf{w}) = \frac{2}{N}\mathrm{X}^{\intercal}(\mathrm{X}\mathbf{w} - \mathbf{y}) = \mathbf{0}$$

$$\mathrm{X}^{\intercal}\mathrm{X}\mathbf{w} = \mathrm{X}^{\intercal}\mathbf{y}$$

$$\mathbf{w} = \mathrm{X}^{\dagger}\mathbf{y} \quad \text{where} \quad \mathrm{X}^{\dagger} = (\mathrm{X}^{\intercal}\mathrm{X})^{-1}\mathrm{X}^{\intercal}$$

$\mathrm{X}^{\dagger}$ is the '**pseudo-inverse**' of X

1: Construct the matrix X and the vector $\mathbf{y}$ from the data set $(\mathbf{x}_1, y_1), \cdots, (\mathbf{x}_N, y_N)$ as follows

$$\underbrace{\mathrm{X} = \begin{bmatrix} -\mathbf{x}_1^{\intercal}- \\ -\mathbf{x}_2^{\intercal}- \\ \vdots \\ -\mathbf{x}_N^{\intercal}- \end{bmatrix}}_{\text{input data matrix}}, \qquad \underbrace{\mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{bmatrix}}_{\text{target vector}}.$$

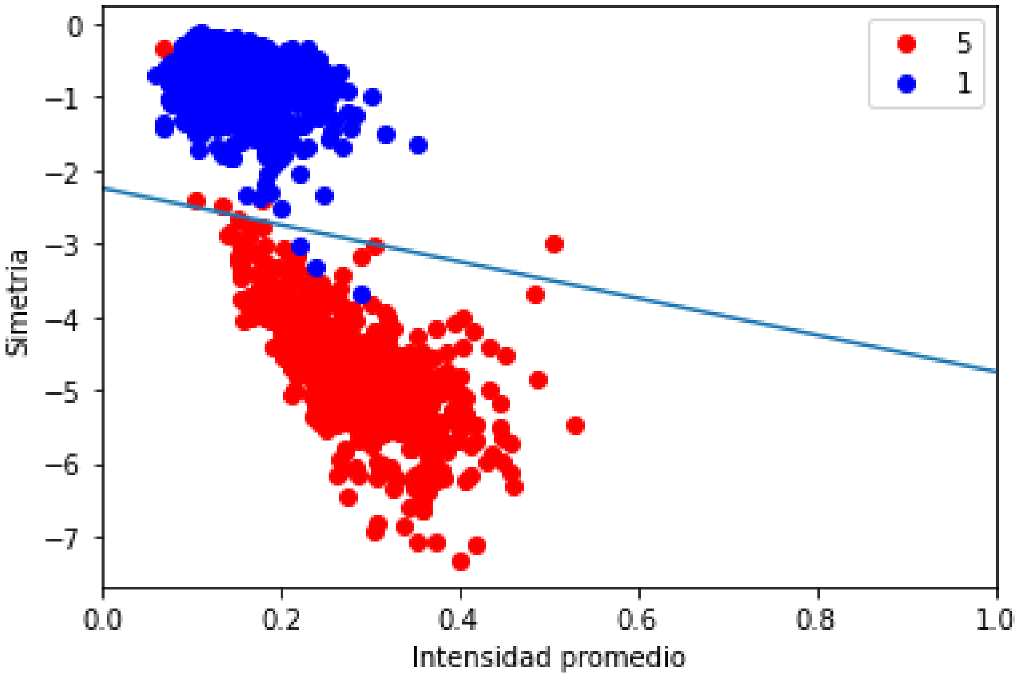
2: Compute the pseudo-inverse $\mathrm{X}^{\dagger} = (\mathrm{X}^{\intercal}\mathrm{X})^{-1}\mathrm{X}^{\intercal}$.

3: Return $\mathbf{w} = \mathrm{X}^{\dagger}\mathbf{y}$.

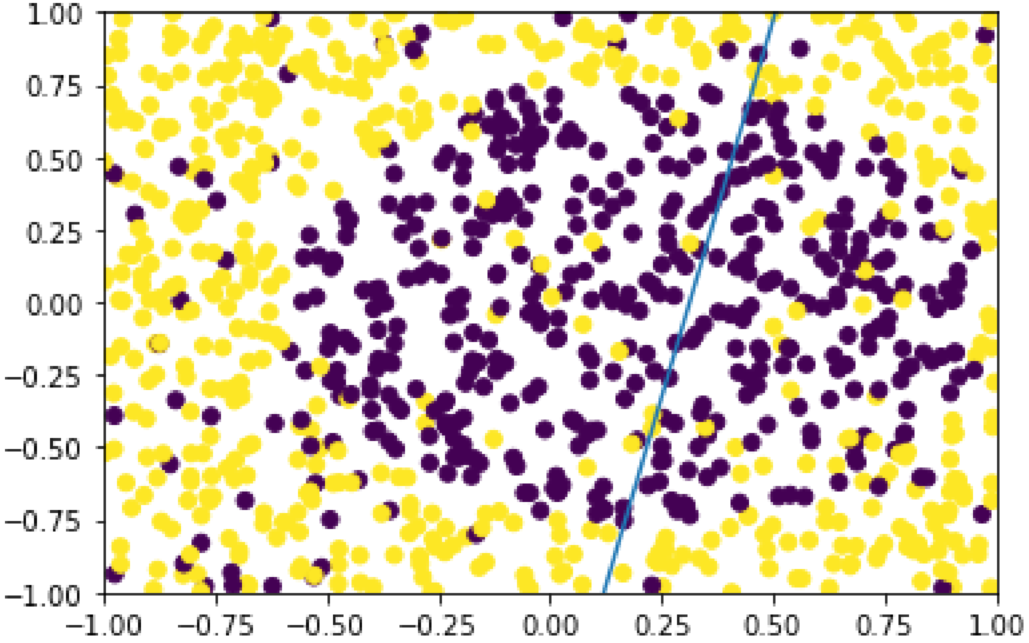
Can we always compute $(X^T X)^{-1}$?

- Let consider the Singular Value Decomposition (SVD) : $X=UDV^T$
- $X^TX = V\,DDV^T$

2. Ejercicio sobre Regresión Lineal



2. Ejercicio sobre Regresión Lineal



Referencias interesantes:
https://medium.com/@lucaspereira0612/solving-xor-with-a-single-perceptron-34539f395182
http://work.caltech.edu/slides/slides03.pdf (slides 19-23)

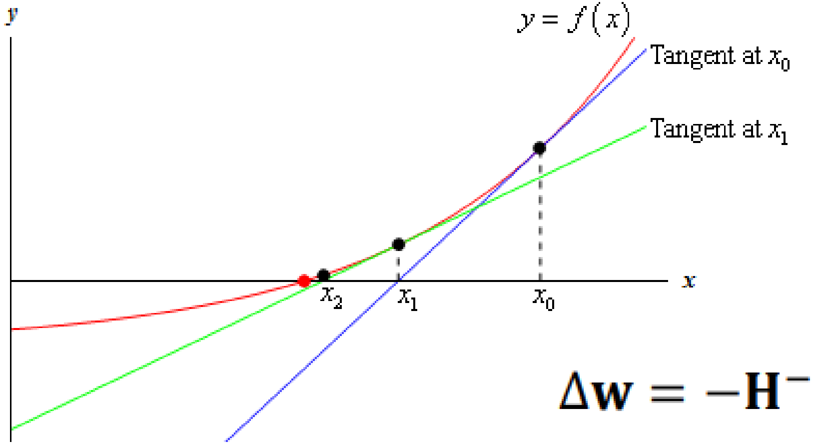
BONUS: Método de Newton

A new update rule for **w** based on the second order derivatives (Hessian)

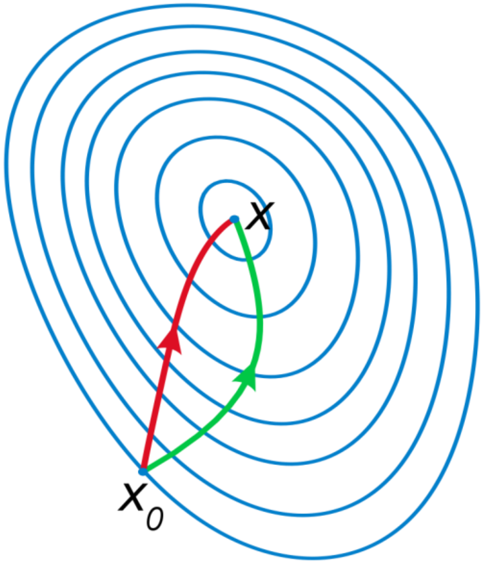
$$x_{k+1} = x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}.$$

$$f''(x) = \nabla^2 f(x) = H_f(x) \in \mathbb{R}^{d\times d}$$

$$\boxed{x_{k+1} = x_k - \gamma[f''(x_k)]^{-1} f'(x_k).}$$



$$\Delta \mathbf{w} = -\mathbf{H}^{-1} \nabla E_{\text{in}}(\mathbf{w}_0)$$



Enlaces recomendados

- Materiales de Andrew Ng sobre *linear regression* y *gradient descent* (lectures 2 and 4): https://www.youtube.com/playlist?list=PLLssT5z_DsK-h9vYZkQkYNWcItqhlRJLN

- Materiales de Yaser Abu-Mostafa (http://work.caltech.edu/lectures.html):
  - The linear model I: https://www.youtube.com/watch?v=FIbVs5GbBlQ
  - The linear model II: https://www.youtube.com/watch?v=qSTHZvN8hzs

Prácticas de Aprendizaje Automático

Trabajo 1: Búsqueda Iterativa de Óptimos y Regresión Lineal

Pablo Mesejo y Francisco Baldán
Universidad de Granada
Departamento de Ciencias de la Computación e Inteligencia Artificial