# Universidade Federal do Rio de Janeiro Instituto Alberto Luiz Coimbra de Pós-Graduação e Pesquisa de Engenharia



# Departamento de Engenharia Elétrica

COE782 - Introdução ao Aprendizado de Máquina Prof. Dr. Markus Vinícius Santos Lima

Lista 1 de exercícios

Luiz Henrique Souza Caldas email: lhscaldas@cos.ufrj.br

16 de maio de 2024

# Exercícios do Bishop

#### 1. Exercício 1.1

Considere a função de erro da soma dos quadrados dada por  $E(\boldsymbol{w}) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \{y(x_n, w) - t_n\}^2$ , na qual a função  $y(x, \boldsymbol{w})$  é dada pelo polinômio  $y(x, \boldsymbol{w}) = \sum_{j=0}^{M} w_j x^j$ . Mostre que os coeficientes  $\boldsymbol{w} = \{w_i\}$  que minimizam essa função de erro são dados pela solução do seguinte conjunto de equações lineares:

$$\sum_{j=0}^{M} A_{ij} w_j = T_i,$$

onde

$$A_{ij} = \sum_{n=1}^{N} (x_n)^{i+j}$$
 e  $T_i = \sum_{n=1}^{N} (x_n)^i t_n$ .

Aqui os sufixos i e j denotam os índices de um componente, onde  $(x)^i$  denota x elevado a i-ésima potência.

## Solução:

Solução: 
$$\frac{\partial E(\boldsymbol{w})}{\partial w_i} = \sum_{n=1}^N \{y(x_n, \boldsymbol{w}) - t_n\} \frac{\partial y(x_n, \boldsymbol{w})}{\partial w_i}$$
 Se  $y(x, \boldsymbol{w}) = \sum_{j=0}^M w_j x^j$ , 
$$\frac{\partial y(x_n, \boldsymbol{w})}{\partial w_i} = x_n^i$$
 
$$\frac{\partial E(\boldsymbol{w})}{\partial w_i} = \sum_{n=1}^N \{y(x_n, \boldsymbol{w}) - t_n\} x_n^i = 0$$
 
$$\sum_{n=1}^N y(x_n, \boldsymbol{w}) x_n^i = \sum_{n=1}^N t_n x_n^i$$
 
$$\sum_{n=1}^N \left(\sum_{j=0}^M w_j x_n^j\right) x_n^i = \sum_{n=1}^N \left(\sum_{j=0}^M x_n^{j+i}\right) w_j = \sum_{n=1}^N t_n x_n^i$$
 
$$\sum_{j=0}^M A_{ij} w_j = T_i$$

#### 2. Exercício 1.2

Escreva o conjunto de equações lineares acopladas, análogo a  $\sum_{j=0}^{M} A_{ij} w_i = T_i$ , satisfeitas pelos coeficientes  $w_i$  que minimizam a função de erro da soma dos quadrados regularizada dada por  $\tilde{E}(\boldsymbol{w}) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \{y(x_n, w) - t_n\}^2 - \frac{\lambda}{2} ||\boldsymbol{w}||^2$ .

$$\begin{split} &\frac{\partial \tilde{E}(\boldsymbol{w}_i)}{\partial \boldsymbol{w}} = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \left\{ \sum_{j=0}^{M} w_j x_n^j - t_n \right\} x_n^i - \lambda w_i = 0 \\ &\sum_{j=0}^{M} A_{ij} w_j + \lambda w_i = T_i \\ &\sum_{j=0}^{M} A_{ij} w_j + \sum_{j=0}^{M} \delta_{ij} \lambda w_j = T_i \quad \text{onde} \quad \delta_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{, se } i \neq j \\ 0 & \text{, se } i = j \end{cases} \end{split}$$

$$\sum_{j=0}^{M} (A_{ij} + \delta_{ij}\lambda) w_j = T_i$$

Usando a definição  $var[f(x)] = \mathbb{E}[(f(x) - \mathbb{E}[f(x)])^2]$  mostre que var[f(x)] satisfaz  $var[f(x)] = \mathbb{E}[f(x)^2] - \mathbb{E}[f(x)]^2$ .

## Solução:

$$\begin{split} \mathbb{E}[(f(x) - \mathbb{E}[f(x)])^2] &= \mathbb{E}[f(x)^2 - 2f(x)\mathbb{E}[f(x)] + \mathbb{E}[f(x)]^2] \\ \mathbb{E}[(f(x) - \mathbb{E}[f(x)])^2] &= \mathbb{E}[f(x)^2] - 2\mathbb{E}[f(x)]\mathbb{E}[f(x)] + \mathbb{E}[\mathbb{E}[f(x)]^2] \\ \mathbb{E}[(f(x) - \mathbb{E}[f(x)])^2] &= \mathbb{E}[f(x)^2] - 2\mathbb{E}[f(x)]^2 + \mathbb{E}[f(x)]^2 \\ \mathbb{E}[(f(x) - \mathbb{E}[f(x)])^2] &= \mathbb{E}[f(x)^2] - \mathbb{E}[f(x)]^2 \end{split}$$

#### 4. Exercício 1.6

Mostre que se duas variáveis x e y são independentes, então a covariância entre elas é zero.

## Solução:

$$\begin{split} &cov[x,y] = \mathbb{E}[x,y] - \mathbb{E}[x][y] \\ &\mathbb{E}[x,y] = \sum_x \sum_y p(x,y) xy \\ &\text{Se } x \in y \text{ são independentes, } p(x,y) = p(x)p(y), \text{ então temos} \\ &\mathbb{E}[x,y] = \sum_x \sum_y p(x)p(y) xy = \sum_x p(x) x \sum_y p(y) y = \mathbb{E}[x]\mathbb{E}[y] \\ &cov[x,y] = \mathbb{E}[x,y] - \mathbb{E}[x][y] = \mathbb{E}[x]\mathbb{E}[y] - \mathbb{E}[x]\mathbb{E}[y] \\ &\underbrace{cov[x,y] = 0} \end{split}$$

#### 5. Exercício 1.7

Neste exercício, provamos a condição de normalização  $\int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{N}(x|\mu,\sigma^2) dx = 1$  para a distribuição gaussiana univariável. Para fazer isso, considere a integral

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}x^2\right) dx$$

que podemos avaliar primeiro escrevendo o seu quadrado na forma

$$I^{2} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^{2}}x^{2} + -\frac{1}{2\sigma^{2}}y^{2}\right) dxdy.$$

Agora faça a transformação de coordenadas cartesianas (x, y) para coordenadas polares  $(r, \theta)$  e então substitua  $u = r^2$ . Mostre que, ao realizar as integrais em relação a  $\theta$  e u, e em seguida, tirar a raiz quadrada de ambos os lados, obtemos

$$I = \left(2\pi\sigma^2\right)^{1/2}.$$

Finalmente, use esse resultado para mostrar que a distribuição Gaussiana  $\mathcal{N}(x|\mu,\sigma^2)$  é normalizada.

## Solução:

$$I^{2} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^{2}}x^{2} + -\frac{1}{2\sigma^{2}}y^{2}\right) dxdy = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{1}{2\sigma^{2}}(x^{2} + y^{2})\right] dxdy$$

Fazendo a transformação de coordenadas cartesianas para polares temos

$$r^2 = x^2 + y^2 e dxdy = rdrd\theta$$

Substituindo

$$I^{2} = \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^{2}}r^{2}\right) r dr d\theta = 2\pi \int_{0}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^{2}}r^{2}\right) r dr d\theta$$

Fazendo  $u = r^2$ , temos du = 2rdr

$$I^2 = \pi \int_0^\infty \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}u\right) du = \pi \left[-2\sigma^2 \exp\left(-\frac{u}{2\sigma^2}\right)\right]_0^\infty = 2\pi\sigma^2$$

$$I = (2\pi\sigma^2)^{1/2}$$

Integrando a distribuição Gaussiana temos

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{N}(x|\mu,\sigma^2) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}(x-\mu)^2\right\} dx$$

Fazendo  $u = x - \mu$  e, consequentemente, du = dx temos

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{N}(x|\mu, \sigma^2) dx = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2} u^2\right\} du = \frac{I}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}} = \frac{(2\pi\sigma^2)^{1/2}}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}}$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{N}(x|\mu, \sigma^2) dx = 1 \quad |$$

#### 6. Exercício 1.8

Usando uma mudança de variáveis, verifique que a distribuição gaussiana univariável dada por  $\mathcal{N}(x|\mu,\sigma^2)=\frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}}\exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}(x-\mu)^2\right\}$  satisfaz  $\mathbb{E}[x]=\int_{-\infty}^{\infty}\mathcal{N}(x|\mu,\sigma^2)xdx=\mu$ . Em seguida, diferenciando ambos os lados da condição de normalização

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{N}(x|\mu, \sigma^2) dx = 1$$

em relação a  $\sigma^2$  verifique que a Gaussiana satisfaz  $\mathbb{E}[x^2] = \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{N}(x|\mu,\sigma^2) x^2 dx = \mu^2 + \sigma^2$ . Finalmente, mostre que  $var[x] = \mathbb{E}[x^2] - \mathbb{E}[x]^2 = \sigma^2$  é verdadeira.

$$\mathbb{E}[x] = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}(x-\mu)^2\right\}}}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}} x dx$$

$$\begin{split} &y = x - \mu \quad \to \quad x = y + \mu \quad \text{e} \quad dx = dy \\ &\mathbb{E}[x] = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}y^2\right\}}}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}} (y + \mu) dy \\ &\text{Porém} \quad y e^{-\frac{y^2}{2\sigma^2}} \text{ é impar, então a sua integral no intervalo } (-\infty, \infty) \text{ é nula} \\ &\mathbb{E}[x] = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\frac{y^2}{2\sigma^2}}}{(2\pi\sigma^2)^{\frac{1}{2}}} \cdot \mu dy = \frac{\mu}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}} \cdot I \quad \text{(do exercício anterior)} \\ &\mathbb{E}[x] = \frac{\mu}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}} \cdot (2\pi\sigma^2)^{\frac{1}{2}} \\ &\mathbb{E}[x] = \mu \quad \\ &\int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{N}(x|\mu,\sigma^2) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}(x-\mu)^2\right\} dx = 1 \\ &\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}(x-\mu)^2\right\} dx = (2\pi\sigma^2)^{1/2} \\ &\frac{d}{d\sigma^2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}(x-\mu)^2\right\} dx = \frac{d}{d\sigma^2}(2\pi\sigma^2)^{1/2} \\ &\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}(x-\mu)^2\right\} \left(\frac{-(x-\mu)^2}{2} \cdot (-1) \cdot \frac{1}{\sigma^4}\right) dx = \sqrt{2\pi} \frac{1}{2}(\sigma^2)^{-1/2} \\ &\frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}(x-\mu)^2\right\} (x-\mu)^2 dx = \sigma^2 \\ &\mathbb{E}[(x-\mu)^2] = \sigma^2 \\ &\text{Porém,} \\ &\mathbb{E}[(x-\mu)^2] = \mathbb{E}[x^2 - 2x\mu^2 + \mu^2] = \mathbb{E}[x^2] + \mathbb{E}[-2x\mu] + \mathbb{E}[\mu^2] \end{split}$$

$$\mathbb{E}[(x-\mu)^2] = \mathbb{E}[x^2 - 2x\mu^2 + \mu^2] = \mathbb{E}[x^2] + \mathbb{E}[-2x\mu] + \mathbb{E}[\mu^2]$$

$$\mathbb{E}[(x-\mu)^2] = \mathbb{E}[x^2] - 2\mu\mathbb{E}[x] + \mu^2$$

$$\mathbb{E}[(x-\mu)^2] = \mathbb{E}[x^2] - 2\mu^2 + \mu^2 = \mathbb{E}[x^2] - \mu^2$$

$$\mathbb{E}[x^2] = \mu^2 + \underbrace{\mathbb{E}[(x-\mu)^2]}_{\sigma^2}$$

$$\mathbb{E}[x^2] = \mu^2 + \sigma^2$$

$$var[x] = E[x^2] - E[x]^2 = \mu^2 + \sigma^2 - \mu^2$$
 
$$var[x] = \sigma^2$$

Mostre que a moda (ou seja, o máximo) da distribuição Gaussiana

$$\mathcal{N}(x|\mu,\sigma^2) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}(x-\mu)^2\right\}$$

é dado por  $\mu$ . Da mesma forma, mostre que o modo da distribuição gaussiana multivariada

$$\mathcal{N}(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}^2) = \frac{1}{(2\pi)^{D/2} |\boldsymbol{\Sigma}|^{1/2}} \exp\left\{-\frac{1}{2} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu})\right\}$$

é dado por  $\mu$ .

## Solução:

• Para a univariada temos:  $\frac{d}{dx}\mathcal{N}(x|\mu,\sigma^2) = \frac{d}{dx}\left(\frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}}\exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}(x-\mu)^2\right\}\right) = 0$   $\frac{d}{dx}\mathcal{N}(x|\mu,\sigma^2) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}}\left[\frac{-2(x-\mu)}{2\sigma^2}\right]\exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}(x-\mu)^2\right\} = \frac{-(x-\mu)}{\sigma^2}\mathcal{N}(x|\mu,\sigma^2) = 0$  Como  $\mathcal{N}(x|\mu,\sigma^2) = 0$  só ocorre para  $x = \pm \infty$ , o ponto de máximo estará em x tal que  $\frac{-(x-\mu)}{\sigma^2} = 0$ 

$$x = \mu$$

• De forma análoga, para a multivariada temos:

$$\begin{split} &\frac{d}{dx}\mathcal{N}(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma}^2) = \frac{d}{dx}\left(\frac{1}{(2\pi)^{D/2}|\boldsymbol{\Sigma}|^{1/2}}\exp\left\{-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})\right\}\right) = \boldsymbol{0}\\ &\frac{d}{dx}\mathcal{N}(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma}^2) = -\frac{1}{2}\mathcal{N}(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma}^2)\nabla_x\{(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})\} = \boldsymbol{0}\\ &\frac{d}{dx}\mathcal{N}(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma}^2) = -\mathcal{N}(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma}^2)\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}) = \boldsymbol{0}\\ &\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{0}\\ &\boldsymbol{x}=\boldsymbol{\mu}_-| \end{split}$$

#### 8. Exercício 1.10

Suponha que as varáveis x e z são estatisticamente independentes. Mostre que a média e a variância da soma delas satisfazem

$$\mathbb{E}[x+z] = \mathbb{E}[x] + \mathbb{E}[z]$$
$$var[x+z] = var[x] + var[z].$$

$$\mathbb{E}[x+z] = \int \int p(x,z)(x+z)dxdz$$
Se  $x$  e  $z$  são independentes,  $p(x,z) = p(x)p(z)$ 

$$\mathbb{E}[x+z] = \int \int p(x)p(z)(x+z)dxdz$$

$$\mathbb{E}[x+z] = \int \int p(x)p(z)xdxdz + \int \int p(x)p(z)zdxdz$$

$$\mathbb{E}[x+z] = \int p(z)dz \int p(x)xdx + \int p(x)dx \int p(z)zdz$$

$$\begin{split} \mathbb{E}[x+z] &= \int p(x)xdx + \int p(z)zdz \\ \underline{\mathbb{E}[x+z]} &= \mathbb{E}[x] + \mathbb{E}[z] \\ var[x+z] &= \mathbb{E}[(x+z-\mathbb{E}[x+z])^2] = \mathbb{E}[(x-\mathbb{E}[x]+z-\mathbb{E}[z])^2] \\ var[x+z] &= \underbrace{\mathbb{E}[(x-\mathbb{E}[x])^2]}_{var[x]} + \underbrace{\mathbb{E}[(z-\mathbb{E}[z])^2]}_{var[z]} + \underbrace{\mathbb{E}[2(z-\mathbb{E}[z])(x-\mathbb{E}[x])]}_{-2A} \\ A &= \int \int (x-\mathbb{E}[x])(z-\mathbb{E}[z])p(x)p(z)dxdz \\ A &= \int \int xzp(x)p(z)dxdz + \int \int \mathbb{E}[x]\mathbb{E}[z]p(x)p(z)dxdz - \int \int \mathbb{E}[x]zp(x)p(z)dxdz \\ -\int \int \mathbb{E}[z]xp(x)p(z)dxdz \\ A &= \mathbb{E}[x]\mathbb{E}[z] + \mathbb{E}[x]\mathbb{E}[z] - \mathbb{E}[x]\mathbb{E}[z] - \mathbb{E}[z]\mathbb{E}[x] = 0 \\ \underbrace{var[x+z] = var[x] + var[z]} \end{split}$$

Fazendo as derivadas da função de log-verossimilhança  $\ln p(\boldsymbol{x}|\mu,\sigma^2) = -\frac{1}{\sigma^2} \sum_{n=1}^N (x_n - \mu)^2 - \frac{N}{2} \ln \sigma^2 - \frac{N}{2} \ln(2\pi)$  em relação a  $\mu$  e  $\sigma^2$  iguais a zero, verifique os resultados  $\mu_{ML} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N x_n$  e  $\sigma_{ML}^2 = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (x_n - \mu_{ML})^2$ .

## Solução:

$$\frac{d}{d\mu} \ln p(\mathbf{x}|\mu, \sigma^2) = \frac{d}{d\mu} \left( -\frac{1}{\sigma^2} \sum_{n=1}^{N} (x_n - \mu)^2 - \frac{N}{2} \ln \sigma^2 - \frac{N}{2} \ln(2\pi) \right)$$

$$\frac{1}{2\sigma^2} (-2) \sum_{n=1}^{N} (x_n - \mu) = 0$$

$$\sum_{n=1}^{N} \mu = \sum_{n=1}^{N} x_n$$

$$N\mu = \sum_{n=1}^{N} x_n$$

$$\frac{\mu_{ML}}{d\sigma^2} \ln p(\mathbf{x}|\mu, \sigma^2) = \frac{d}{d\sigma^2} \left( -\frac{1}{\sigma^2} \sum_{n=1}^{N} (x_n - \mu)^2 - \frac{N}{2} \ln \sigma^2 - \frac{N}{2} \ln(2\pi) \right)$$

$$-\frac{1}{2} \frac{(-1)}{\sigma^4} \sum_{n=1}^{N} (x_n - \mu)^2 - \frac{N}{2} \frac{1}{\sigma^2} = 0$$

$$\frac{N}{\sigma^2} = \frac{1}{\sigma^4} \sum_{n=1}^{N} (x_n - \mu)^2$$

$$\sigma_{ML}^2 = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} (x_n - \mu_{ML})^2$$

#### 10. Exercício 1.13

Suponha que a variância de uma distribuição Gaussiana seja estimada usando o resultado  $\sigma_{ML}^2 = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} (x_n - \mu_{ML})^2$ , mas com a estimativa de máxima verossimilhança  $\mu_{ML}$  substituída pelo valor verdadeiro  $\mu$  da média. Mostre que esse estimador tem a propriedade de que sua esperança é dada pela verdadeira variância  $\sigma^2$ .

## Solução:

$$\mathbb{E}[\sigma_{ML}^{2}] = \mathbb{E}\left[\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}(x_{n} - \mu_{ML})^{2}\right] = \frac{1}{N}\mathbb{E}\left[\sum_{n=1}^{N}(x_{n}^{2} - 2x_{n}\mu_{ML} + \mu_{ML}^{2})\right]$$

$$\mathbb{E}[\sigma_{ML}^{2}] = \frac{1}{N}\left(\mathbb{E}\left[\sum_{n=1}^{N}x_{n}^{2}\right] - 2\mu\mathbb{E}\left[\sum_{n=1}^{N}x_{n}\right] + \mathbb{E}\left[\sum_{n=1}^{N}\mu^{2}\right]\right)$$

$$\mathbb{E}[\sigma_{ML}^{2}] = \frac{1}{N}\left(N(\mu^{2} + \sigma^{2}) - 2\mu N\mu + N\mu^{2}\right)$$

$$\mathbb{E}[\sigma_{ML}^{2}] = \frac{1}{N}\left(N\mu^{2} + N\sigma^{2} - 2N\mu^{2} + N\mu^{2}\right)$$

$$\mathbb{E}[\sigma_{ML}^{2}] = \sigma^{2}$$

#### 11. Exercício 1.21

Considere dois números não negativos a e b, e mostre que, se  $a \le b$ , então  $a \le (ab)^{1/2}$ . Use esse resultado para mostrar que, se as regiões de decisão de um problema de classificação de duas classes são escolhidas para minimizar a probabilidade de classificação errada, essa probabilidade satisfará

$$p(erro) \le \int \{p(x, C_1)p(x, C_2)\}^{1/2} dx.$$

## Solução:

$$a = b \to a^{2} \le ab \to \underline{a \le (ab)^{1/2}}$$

$$p(erro) = p(x \in R_{1}, C_{2}) + p(x \in R_{2}, C_{1})$$

$$p(erro) = \int_{R_{1}} p(x, C_{2}) dx + \int_{R_{2}} p(x, C_{1}) dx$$

Em  $R_1$  temos  $p(x,C_2) \leq p(x,C_1)$  e em  $R_2$  temos  $p(x,C_1) \leq p(x,C_2)$  o que resulta em

$$\begin{cases} \int_{R_1} p(x, C_2) dx \le \int_{R_1} \left\{ p(x, C_1) p(x, C_2) \right\}^{1/2} dx \\ \int_{R_2} p(x, C_1) dx \le \int_{R_2} \left\{ p(x, C_1) p(x, C_2) \right\}^{1/2} dx \end{cases}$$

Então

$$p(erro) \le \int_{R_1} \{p(x, C_1)p(x, C_2)\}^{1/2} dx + \int_{R_2} \{p(x, C_1)p(x, C_2)\}^{1/2} dx$$

Como os integrandos são iguais e as regiões são complementares, podemos unir as duas integrais para todo o domínio

$$p(erro) \le \int \{p(x, C_1)p(x, C_2)\}^{1/2} dx$$

#### 12. Exercício 1.22

Dada uma matriz de perda com elementos  $L_{kj}$ , o risco esperado é minimizado se, para cada x, escolhermos a classe que minimiza  $\sum_k L_{kj} p(C_k|x)$ . Verifique que, quando a matriz de perda é dada por  $L_{kj} = 1 - I_{kj}$ , onde  $I_{kj}$  são os elementos da matriz identidade, isso reduz ao critério

de escolher a classe que possui a maior probabilidade posterior. Qual é a interpretação dessa forma de matriz de perda?

## Solução:

$$\mathbb{E}[L] = \sum_{K} L_{kj} p(C_k | x)$$
Se  $L_{kj} = 1 - I_{kj}$ 

$$\mathbb{E}[L] = \sum_{K} (1 - I_{kj}) p(C_k | x)$$

$$\mathbb{E}[L] = \sum_{K} p(C_k | x) - \sum_{K} I_{kj} p(C_k | x)$$

$$\mathbb{E}[L] = 1 - \sum_{K} I_{kj} p(C_k | x)$$

$$\begin{cases} \text{se } k = j \to \mathbb{E}[L] = 1 - p(C_j | x) \\ \text{se } k \neq j \to \mathbb{E}[L] = 1 \end{cases}$$

Para minimizar  $\mathbb{E}[L]$  devemos escolher a classe  $C_j$  com a maior probabilidade  $p(C_j|x)$ .

A matriz de perdas da forma  $L_{kj} = 1 - I_{kj}$  atribui o mesmo peso, de valor 1, para todos os erros de classificação.

#### 13. Exercício 1.23

Derive o critério para minimizar a perda esperada quando há uma matriz de perda geral e probabilidades a priori gerais para as classes.

## Solução:

$$\mathbb{E}[L] = \sum_{K} L_{kj} p(C_k|x)$$

Pelo Teorema de Beyes,  $p(C_k|x) = \frac{p(x|C_k)p(C_k)}{p(x)}$ 

$$\mathbb{E}[L] = \sum_{K} L_{kj} \frac{p(x|C_k)p(C_k)}{p(x)}$$

$$\mathbb{E}[L] \propto \sum_{K} L_{kj} p(x|C_k) p(C_k)$$

#### 14. Exercício 1.25

Considere a generalização da função de perda quadrática  $\mathbb{E}[L] = \int \int \{y(\boldsymbol{x}) - t\}^2 p(\boldsymbol{x}, t) d\boldsymbol{x}t$  para uma única variável alvo t para o caso de múltiplas variáveis alvo descritas pelo vetor t dado por

$$\mathbb{E}[L(\boldsymbol{t},\boldsymbol{y}(\boldsymbol{x}))] = \int \int ||\boldsymbol{y}(\boldsymbol{x}) - \boldsymbol{t}||^2 p(\boldsymbol{x},\boldsymbol{t}) d\boldsymbol{x} d\boldsymbol{t}.$$

Usando o cálculo das variacional, mostre que a função  $\boldsymbol{y}(\boldsymbol{x})$  para a qual essa perda esperada é minimizada é dada por  $\boldsymbol{y}(\boldsymbol{x}) = \mathbb{E}_{\boldsymbol{t}}[\boldsymbol{t}|\boldsymbol{x}]$ . Mostre que esse resultado se reduz a  $y(\boldsymbol{x}) = \frac{\int tp(\boldsymbol{x},t)dt}{p(\boldsymbol{x})} = \int tp(t|\boldsymbol{x})dt = \mathbb{E}_{\boldsymbol{t}}[t|\boldsymbol{x}]$  para o caso de uma única variável alvo t.

Solução:

$$\frac{\delta \mathbb{E}[L(\boldsymbol{t}, \boldsymbol{y}(\boldsymbol{x}))]}{\delta \boldsymbol{y}(\boldsymbol{x})} = \frac{\delta}{\delta \boldsymbol{y}(\boldsymbol{x})} \left( \int \int ||\boldsymbol{y}(\boldsymbol{x}) - \boldsymbol{t}||^2 p(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{t}) d\boldsymbol{x} d\boldsymbol{t} \right) = 0$$

$$\frac{\delta \mathbb{E}[L(\boldsymbol{t}, \boldsymbol{y}(\boldsymbol{x}))]}{\delta \boldsymbol{y}(\boldsymbol{x})} = \int 2(\boldsymbol{y}(\boldsymbol{x}) - \boldsymbol{t}) p(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{t}) d\boldsymbol{t} = 0$$

$$\boldsymbol{y}(\boldsymbol{x}) = \frac{\int \boldsymbol{t} p(\boldsymbol{t}, \boldsymbol{x}) d\boldsymbol{t}}{\int p(\boldsymbol{t}, \boldsymbol{x}) d\boldsymbol{t}}$$

$$\boldsymbol{y}(\boldsymbol{x}) = \int \frac{\boldsymbol{t} p(\boldsymbol{t}, \boldsymbol{x}) d\boldsymbol{t}}{p(\boldsymbol{x})}$$

$$\boldsymbol{y}(\boldsymbol{x}) = \int \boldsymbol{t} p(\boldsymbol{t}|\boldsymbol{x}) d\boldsymbol{t}$$

$$\boldsymbol{y}(\boldsymbol{x}) = \mathbb{E}[\boldsymbol{t}|\boldsymbol{x}] \mid$$

Para o caso de um target escalar t, temos

$$y(x) = \int tp(t|x)dt = \mathbb{E}[t|x]$$

#### 15. Exercício 1.31

Considere duas variáveis x e y com distribuição conjunta p(x,y). Mostre que a entropia diferencial desse par de variáveis satisfaz

$$H[x,y] \le H[x] + H[y]$$

com igualdade se, e somente se, x e y forem estatisticamente independentes.

$$H[x,y] = -\int \int p(x,y) ln[p(x,y)] dxdy$$
 Se  $x$  e  $y$  são independentes, 
$$H[x,y] = -\int \int p(x) p(y) ln[p(x)p(y)] dxdy$$

$$H[x,y] = -\int \int p(x)p(y)[lnp(x) + lnp(y)]dxdy$$

$$H[x,y] = -\int \int p(x)p(y)lnp(x)dxdy - \int \int p(x)p(y)lnp(y)dxdy$$

$$H[x,y] = -\int p(x)lnp(x)dx - \int p(y)lnp(y)dy$$

$$H[x,y] = H[x] + H[y]$$

Se H[x,y] = H[y|x] + H[x], no caso de x e y forem estatisticamente independentes teremos que H[y|x] = H[y]. Calculando a informação mútua temos

$$I[x, y] = H[y] - H[y|x] = 0$$

Porém a informação mútua é dada pela divergência de Kullback-Leibler

$$I[x,y] = -\int \int p(x,y) ln \left[ \frac{p(x)p(y)}{p(x,y)} \right] dy dx$$

a qual só será nula se p(x,y) = p(x)p(y), condição que só é satisfeita se x e y forem estatisticamente independentes.

Se elas não forem independentes,  $I[x,y] \neq 0$ . Nesse caso, fazendo I[x,y] = C, sendo C uma constante positiva, temos

$$H[y|x] = H[y] - I[x, y] = H[y] - C$$
  
$$H[x, y] = H[y|x] + H[x] = H[y] + H[x] - C < H[y] + H[x]$$

Então,

 $H[x, y] \le H[x] + H[y] \mid$  como se queria demonstrar.

#### 16. Exercício 1.33

Suponha que a entropia condicional H[y|x] entre duas variáveis aleatórias discretas x e y seja zero. Mostre que, para todos os valores de x para os quais p(x) > 0, a variável y deve ser uma função de x, em outras palavras, para cada x, há apenas um valor de y tal que  $p(y|x) \neq 0$ .

## Solução:

$$H[x, y] = H[y|x] + H[x]$$
  
Se  $H[y|x] = 0$   
 $H[x, y] = H[x]$ 

Esse resultado significa que a informação necessária para descrever x e y é a mesma informação necessária para descrever apenas x, o que só pode ocorrer se y for totalmente dependente de x, ou seja, y = f(x).

## 17. Exercício 1.37

Usando a definição  $H[y|x] = -\int \int p(y,x) \ln p(y|x) dy dx$  junto com a regra do produto da probabilidade, prove o resultado H[x,y] = H[y|x] + H[x].

## Solução:

$$H[y|x] = -\int \int p(x,y) ln[p(y|x)] dy dx$$

Aplicando a regra do produto

$$H[y|x] = -\int \int p(x,y) ln \left[ \frac{p(x,y)}{p(x)} \right] dy dx$$

$$H[y|x] = -\int \int p(x,y) ln[p(x,y)] dy dx + \int \int p(x,y) ln[p(x)] dy dx$$

$$H[y|x] = H[x,y] + \int p(x) ln[p(x)] dx$$

$$H[y|x] = H[x,y] - H[x]$$

$$H[x,y] = H[y|x] - H[x]$$

Considere que duas variáveis binárias x e y tendo a distribuição conjunta dada por

$\boldsymbol{x}$	y	p(x,y)
0	0	1/3
0	1	1/3
1	0	0
1	1	1/3

Avalie as quantidades abaixo

(a)
$$H[x]$$
 (b) $H[y]$  (c) $H[y|x]$  (d) $H[x|y]$  (e) $H[x,y]$  (f) $I[x,y]$ .

Desenhe um diagrama para mostrar a relação entre essas diversas quantidades.

(a) 
$$H[x] = -(p(x=0)\log_2[p(x=0)] + p(x=1)\log_2[p(x=1)])$$
  
 $H[x] = -(\frac{2}{3}\log_2[\frac{2}{3}] + \frac{1}{3}\log_2[\frac{2}{3}])$   
 $H[x] = 0.9183$ 

(b) 
$$H[y] = -(p(y=0)\log_2[p(y=0)] + p(y=1)\log_2[p(y=1)])$$
  
 $H[x] = -\left(\frac{1}{3}\log_2[\frac{1}{3}] + \frac{2}{3}\log_2[\frac{2}{3}]\right)$   
 $H[y] = 0.9183$ 

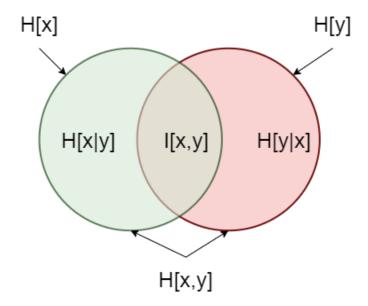
(c) 
$$H[y|x] = -p(y=0, x=0) \log_2[p(y=0|x=0)] - p(y=1, x=0) \log_2[p(y=1|x=0)] - p(y=0, x=1) \log_2[p(y=0|x=1)] - p(y=1, x=1) \log_2[p(y=1|x=1)] H[y|x] = -\left(\frac{1}{3}\log_2[\frac{1}{3}\frac{3}{2}] + \frac{1}{3}\log_2[\frac{1}{3}\frac{3}{2}] + 0\log_2[0\frac{3}{1}] + \frac{1}{3}\log_2[\frac{1}{3}\frac{3}{1}]\right) H[y|x] = 0.6667$$

(d) 
$$H[x|y] = -p(x = 0, y = 0) \log_2[p(x = 0|y = 0)] - p(x = 1, y = 0) \log_2[p(x = 1|y = 0)] - p(x = 0, y = 1) \log_2[p(x = 0|y = 1)] - p(x = 1, y = 1) \log_2[p(x = 1|y = 1)]$$
  
 $H[x|y] = -\left(\frac{1}{3}\log_2[\frac{1}{3}\frac{3}{1}] + 0\log_2[0\frac{3}{1}] + \frac{1}{3}\log_2[\frac{1}{3}\frac{3}{2}] + \frac{1}{3}\log_2[\frac{1}{3}\frac{3}{2}]\right)$   
 $H[x|y] = 0.6667$ 

(e) 
$$H[x, y] = H[y|x] + H[x] = H[x|y] + H[y]$$
  
 $H[x, y] = 1.5850$ 

(f) 
$$I[x, y] = H[x] - H[x|y] = H[y] - H[y|x]$$
  
 $I[x, y] = 0.2516 \mid$ 

Figura 1: Diagrama para mostrar a relação entre essas diversas quantidades



Usando as regras da soma e do produto de probabilidade, mostre que a informação mútua I(x,y) satisfaz a relação I[x,y] = H[x] - H[x|y] = H[y] - H[y|x].

$$I[x,y] = -\int \int p(x,y) ln \left[ \frac{p(x)p(y)}{p(x,y)} \right] dy dx$$

$$I[x,y] = -\int \int p(x,y) ln \left[ \frac{p(x)p(y)}{p(x|y)p(y)} \right] dy dx$$

$$I[x,y] = -\int \int p(x,y) ln \left[ \frac{p(x)}{p(x|y)} \right] dy dx$$

$$\begin{split} I[x,y] &= -\int \int p(x,y) \left( \ln[p(x)] - \ln[p(x|y)] \right) dy dx \\ I[x,y] &= -\int \int p(x,y) \ln[p(x)] dy dx + I[x,y] + \int \int p(x,y) \ln[p(x|y)] dy dx \\ I[x,y] &= -\int p(x) \ln[p(x)] dx + I[x,y] + \int \int p(x,y) \ln[p(x|y)] dy dx \\ \underline{I[x,y]} &= H[x] - H[x|y] = H[y] - H[y|x] \end{split}$$

## 1 Exercícios extras

#### 1.1 E1

#### **Enunciado:**

Considere a função custo/objetivo dada na equação  $E(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \{y(x_n, w) - t_n\}^2$  em que y está definido na equação  $y(x, \mathbf{w}) = \sum_{j=0}^{M} w_j x^j$ . Mostre que  $E(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \{y(x_n, w) - t_n\}^2$  pode ser escrito como

$$E(\boldsymbol{w}) = \frac{1}{2}||\boldsymbol{y} - \boldsymbol{t}||_2^2$$
 onde  

$$\boldsymbol{y} = [y(x_1, \boldsymbol{w})...y(x_N, \boldsymbol{w})]^T$$
  

$$\boldsymbol{t} = [t_1...t_N]^T$$
  

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{w}$$

Determine as dimensões e os elementos (também chamados de entradas) da matriz A. Mostre que o vetor de coeficientes que minimiza esta função objetivo pode ser escrito como

$$\boldsymbol{w}^* = \boldsymbol{A}^\dagger = (\boldsymbol{A}^T \boldsymbol{A})^{-1} \boldsymbol{A}^T \boldsymbol{t}.$$

Compare com o exercício 1.1 e note a vantagem de se usar Álgebra Linear para trabalhar com uma notação mais compacta.

## Solução:

Se 
$$\mathbf{y} = [y(x_1, \mathbf{w})...y(x_N, \mathbf{w})]^T$$
 e  $\mathbf{t} = [t_1...t_N]^T$ ,  $\mathbf{y}$ 

#### $1.2 ext{ E2}$

#### **Enunciado:**

Mesma ideia de E1, porém agora considerandando a função objetivo dada na equação  $\tilde{E}(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \{y(x_n, w) - t_n\}^2 - \frac{\lambda}{2} ||\mathbf{w}||^2$  do livro. Escrevê-la de forma matricial. Encontre o vetor de coeficientes ótimos (em fórmula fechada).

## Solução:

## 1.3 E3 (Exercício Computacional)

#### **Enunciado:**

Replique o experimento computacional denominado "Polynomial Curve Fitting" usado diversas vezes no livro texto (veja páginas 4 e 5 do livro, bem como Apêndice A). Faça:

- Replique os resultados da Figura 1.4 e da Figura 1.6 para validar seu código (i.e., ter certeza de que ele está funcionando adequadamente);
- Simule uma base de dados que não tenha relevância estatística, isto é, que seja uma amostra que NÃO representa bem o todo (a população). Verifique alguns resultados experimentais

para compreender a importância de ter uma amostra relevante. Explique qual a relação entre o caso simulado e casos práticos envolvendo vetores de dimensão elevada.

**Dica:** Para a simulação, ao invés de pegar dados igualmente espaçados no intervalo [0,1], você pode forçar com que seus dados sejam amostrados apenas do semiciclo positivo (ou apenas do negativo) do modelo gerador.

• Simule uma base de dados em que 1 dos dados seja outlier. O que ocorre com a curva vermelha, estimativa da curva verde (modelo gerador), neste caso?

**Dica:** Para a simulação, você pode gerar seus dados de treinamento normalmente, igual feito no item (a), e ao final do processo escolher 1 desses dados pra atribuir um novo valor de target que seja completamente "maluco" (por exemplo, target = 10).

## Solução:

Testando