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

Programa de Engenharia de Sistemas e Computação

CPS863 - Aprendizado de Máquina

Prof. Dr. Edmundo de Souza e Silva

(PESC/COPPE/UFRJ)

Lista de Exercícios 2

Luiz Henrique Souza Caldas

email: lhscaldas@cos.ufrj.br

21 de outubro de 2024

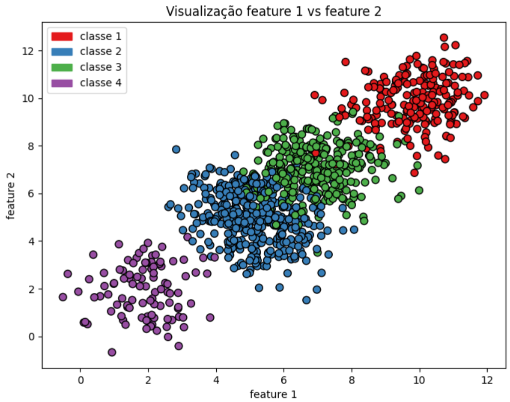
Questão 1

Responda as seguintes perguntas usando o dataset fornecido:

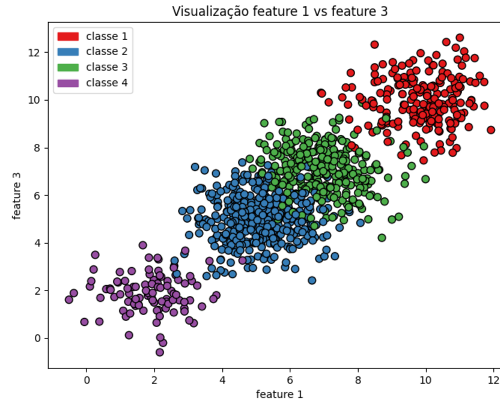
1. Visualize os dados (em 2 ou 3 dimensões) para entender a estrutura dos dados. Explique o que você fez para visualizar as figuras. Descreva sua abordagem para visualizar os dados e quais insights podem ser obtidos do gráfico, se algum.

Resposta:

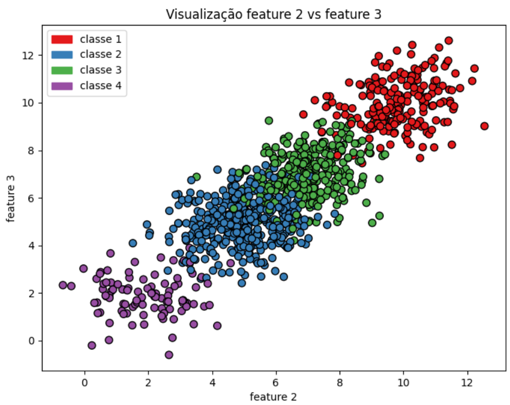
Para visualizar os dados, utilizei a função 'visualizar_dados', que gera gráficos em 2 e 3 dimensões a partir do dataset fornecido. No código, carreguei o dataset usando a biblioteca pandas e extraí as colunas 'feature 1', 'feature 2' e 'feature 3', além da coluna 'class label'.
Em seguida, criei gráficos 2D para todas as combinações de features (figuras 1a, 1b e 1c). As combinações consideradas foram 'feature 1' vs 'feature 2', 'feature 1' vs 'feature 3' e 'feature 2' vs 'feature 3'. Para cada gráfico 2D, utilizei a função 'scatter' do matplotlib, onde as cores dos pontos representam as diferentes classes. Para facilitar a identificação, adicionei uma legenda correspondente a cada classe.
Por fim, também plotei os dados em um gráfico 3D (figura 1d), representando as três features simultaneamente. Esse gráfico permite uma visualização mais abrangente da estrutura dos dados.
A análise visual revela que as classes parecem estar bem separadas, principalmente no gráfico 3D, o que sugere que um modelo de mistura de gaussianas pode ser adequado para representar os dados. As classe 1 e 4, em todas as vistas, estão bem afastadas das demais classes, enquanto as classes 2 e 3 possuem uma fronteira mais tenue entre si. Existem alguns pontos de sobreposição entre as classes, mas no geral elas estão bem separadas.



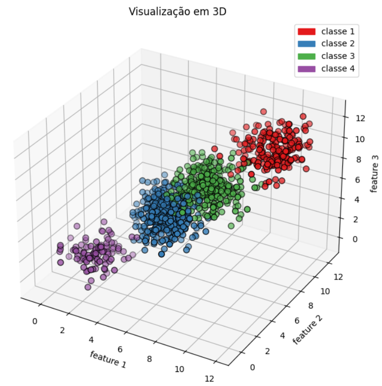
(a) Feature 1 vs Feature 2



(b) Feature 1 vs Feature 3



(c) Feature 2 vs Feature 3



(d) Gráfico 3D das features

Figura 1: Visualização dos dados em 2D e 3D

2. Ajuste uma mistura de gaussianas com 4 componentes ao conjunto de dados. Calcule TODOS os parâmetros necessários para o modelo. Explique todas as etapas. Forneça detalhes de como você determina os parâmetros de melhor ajuste para cada modelo de mistura e descreva o processo de ajuste do modelo.

Resposta:

Passos para o MLE em uma Mistura de Gaussianas com Labels Conhecidos:

(a) **Função de Verossimilhança:**
Dado que temos os rótulos y_i que indicam a qual gaussiana cada ponto x_i pertence, a função de verossimilhança é dada por:

$$L(\mu_k, \sigma_k^2, \pi_k) = \prod_{i=1}^{N} \prod_{k=1}^{K} \left[\pi_k \cdot \mathcal{N}(x_i|\mu_k, \sigma_k^2)\right]^{\mathbb{1}(y_i=k)}$$

Onde $\mathbb{1}(y_i = k)$ é a função indicadora que vale 1 quando o dado x_i pertence à classe k e $\mathcal{N}(x_i|\mu_k, \sigma_k^2)$ é a densidade da gaussiana.

(b) **Função de Log-Verossimilhança:**
Tomamos o logaritmo da função de verossimilhança para simplificar o processo de maximização:

$$\log L(\mu_k, \sigma_k^2, \pi_k) = \sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} \mathbb{1}(y_i = k) \left[\log \pi_k - \frac{1}{2}\log(2\pi\sigma_k^2) - \frac{(x_i - \mu_k)^2}{2\sigma_k^2}\right]$$

(c) **Maximização via Derivação:**

- **Derivada em relação a μ_k:**
A derivada da log-verossimilhança em relação a μ_k é:

$$\frac{\partial \log L}{\partial \mu_k} = \sum_{i=1}^{N} \mathbb{1}(y_i = k) \frac{(x_i - \mu_k)}{\sigma_k^2}$$

Igualando a zero, obtemos a estimativa para μ_k:

$$\mu_k = \frac{1}{N_k} \sum_{x_i \in X_k} x_i$$

Onde N_k é o número de amostras na classe k.

- **Derivada em relação a σ_k^2:**
A derivada da log-verossimilhança em relação a σ_k^2 é:

$$\frac{\partial \log L}{\partial \sigma_k^2} = \sum_{i=1}^{N} \mathbb{1}(y_i = k) \left(-\frac{1}{2\sigma_k^2} + \frac{(x_i - \mu_k)^2}{2\sigma_k^4}\right)$$

Igualando a zero, obtemos a estimativa para σ_k^2:

$$\sigma_k^2 = \frac{1}{N_k} \sum_{x_i \in X_k} (x_i - \mu_k)^2$$

Resposta(continuação):

(c) **Maximização via Derivação (cont.):**

- **Derivada em relação a π_k:**
  Com a restrição $\sum_{k=1}^{K} \pi_k = 1$, derivamos a log-verossimilhança em relação a π_k:

$$\frac{\partial \log L}{\partial \pi_k} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\not{\mathbb{1}}(y_i = k)}{\pi_k}$$

  Igualando a zero, obtemos a estimativa para π_k:

$$\pi_k = \frac{N_k}{N}$$

(d) **Resumo das Soluções Fechadas:**
- Médias: $\mu_k = \frac{1}{N_k} \sum_{x_i \in X_k} x_i$
- Variâncias: $\sigma_k^2 = \frac{1}{N_k} \sum_{x_i \in X_k} (x_i - \mu_k)^2$
- Pesos: $\pi_k = \frac{N_k}{N}$

Implementação: Utilizando um codigo python (presente no repositório no final deste relatório), as fórmulas finais para cada parâmetro foram implementadas e os resultados podem ser vistos nas tabelas 1, 2, 3 e 4.

Tabela 1: Médias das Gaussianas

Classe	Média 1	Média 2	Média 3
1	9.8397	9.8468	9.9668
2	5.1378	4.9909	5.0114
3	6.9380	7.0204	7.0432
4	1.9207	1.9505	1.9004

Tabela 2: Variâncias das Gaussianas

Classe	Variância 1	Variância 2	Variância 3
1	1.0293	1.0579	1.0586
2	0.9491	1.1505	0.9616
3	0.9962	0.9633	0.9925
4	0.9186	1.2481	0.6929

Tabela 3: Pesos das Gaussianas

Classe	Peso
1	0.2
2	0.4
3	0.3
4	0.1

Tabela 4: Log-Verossimilhança das Gaussianas

Classe	Log-LH 1	Log-LH 2	Log-LH 3
1	-492.2914	-486.7800	-486.6553
2	-1002.2144	-927.7639	-996.4297
3	-719.5939	-729.7360	-720.7003
4	-243.2974	-217.5307	-279.9042

3. Suponha que as classes 1 e 2 sejam uma mesma classe. Ajuste uma mistura de gaussianas com 3 componentes ao conjunto de dados.

Resposta:

Para responder a essa pergunta, fiz as seguintes alterações no código do item anterior:

- Unificação das Classes: A classe 2 foi substituída por 1 na coluna 'class label' para tratar classes 1 e 2 como uma única classe.
- Ajuste da Mistura de Gaussianas: A mistura de gaussianas foi ajustada utilizando 3 componentes, refletindo a unificação das classes.

Os resultados obtidos estão nas tabelas 5, 6, 7 e 8.

Tabela 5: Médias das Gaussianas

Classe	Média 1	Média 2	Média 3
1	6.7051	6.6095	6.6632
3	6.9380	7.0204	7.0432
4	1.9207	1.9505	1.9004

Tabela 6: Variâncias das Gaussianas

Classe	Variância 1	Variância 2	Variância 3
1	5.8888	6.3597	6.4509
3	0.9962	0.9633	0.9925
4	0.9186	1.2481	0.6929

Tabela 7: Pesos das Gaussianas

Classe	Peso
1	0.6
3	0.3
4	0.1

Tabela 8: Log-Verossimilhança das Gaussianas

Classe	Log-LH 1	Log-LH 2	Log-LH 3
1	-2035.9044	-1988.4486	-1980.2493
3	-719.5939	-729.7360	-720.7003
4	-243.2974	-217.5307	-279.9042

4. Suponha que as classes 1, 2 e 3 sejam uma mesma classe. Ajuste uma mistura de gaussianas com 2 componentes ao conjunto de dados.

Resposta:

Para responder a essa pergunta, fiz as seguintes alterações no código do item 2:

- Unificação das Classes: As classes 3 e 2 foram substituída por 1 na coluna 'class label' para tratar classes 1, 2 e 3 como uma única classe.
- Ajuste da Mistura de Gaussianas: A mistura de gaussianas foi ajustada utilizando 2 componentes, refletindo a unificação das classes.

Os resultados obtidos estão nas tabelas 9, 10, 11 e 12.

Tabela 9: Médias das Gaussianas

Classe	Média 1	Média 2	Média 3
1	6.7827	6.7465	6.7899
4	1.9207	1.9505	1.9004

Tabela 10: Variâncias das Gaussianas

Classe	Variância 1	Variância 2	Variância 3
1	4.2700	4.5984	4.6635
4	0.9186	1.2481	0.6929

Tabela 11: Pesos das Gaussianas

Classe	Peso
1	0.9
4	0.1

Tabela 12: Log-Verossimilhança das Gaussianas

Classe	Log-LH 1	Log-LH 2	Log-LH 3
1	-2906.3538	-2837.8480	-2825.6889
4	-243.2974	-217.5307	-279.9042

5. Mostre como estimar qual dos 3 modelos (2, 3 ou 4 gaussianos) melhor representa o conjunto de dados original, ignorando as classes do modelo. Justifique como chegou ao resultado, usando técnicas de avaliação de modelos como AIC, BIC ou outro critério. Estude e explique o que é AIC e BIC.

Resposta:

Definições de AIC e BIC:

- **AIC (Critério de Informação de Akaike)**: O AIC é definido pela fórmula:

$$\text{AIC} = 2k - 2\ln(L)$$

  onde k é o número de parâmetros do modelo e L é a função de verossimilhança do modelo ajustado. O AIC penaliza a complexidade do modelo, favorecendo aqueles que oferecem um bom ajuste com menos parâmetros.

- **BIC (Critério de Informação Bayesiano)**: O BIC é calculado pela fórmula:

$$\text{BIC} = \ln(n)k - 2\ln(L)$$

  onde n é o número de observações, k é o número de parâmetros do modelo, e L é novamente a função de verossimilhança. O BIC penaliza mais severamente modelos complexos, especialmente quando n é grande, o que pode levar a uma preferência por modelos mais simples.

Utilização dos Critérios:
Para determinar qual dos modelos de mistura gaussiana (2, 3 ou 4 componentes) melhor representa o conjunto de dados original, calculamos os critérios AIC e BIC para cada modelo ajustado. Os resultados estão resumidos na Tabela 13.
Analisando os valores de AIC e BIC, podemos identificar o modelo com o menor valor, que indica o melhor ajuste aos dados, levando em consideração a penalização pela complexidade do modelo. Se as diferenças nos valores de AIC e BIC forem pequenas, poderíamos preferir o modelo com menos componentes devido à sua simplicidade, o que é uma prática comum na seleção de modelos. Assim, o modelo com 4 componentes é o mais adequado para representar o conjunto de dados original.

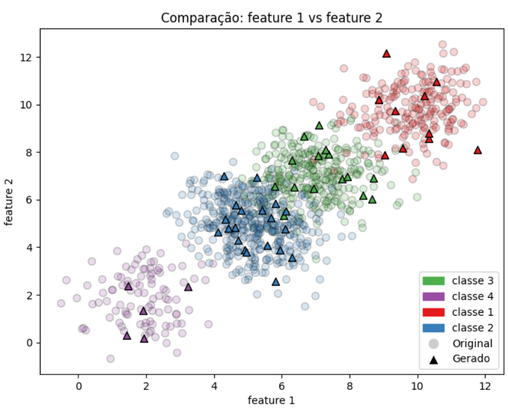
Tabela 13: AIC e BIC para Modelos de 2, 3 e 4 Componentes

Modelo	AIC	BIC
2 componentes	18635.25	18669.60
3 componentes	17852.73	17906.71
4 componentes	14635.79	14709.41

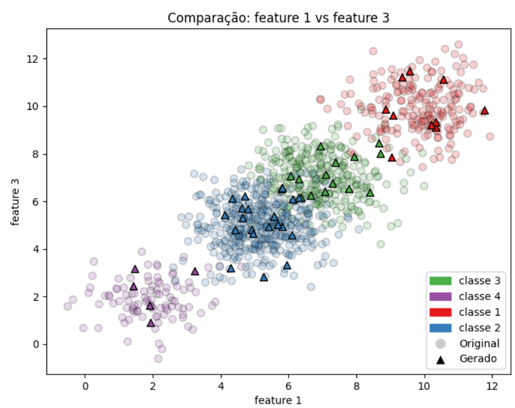
6. Gere novas amostras com base no melhor modelo pelo seu critério. Plote os resultados. Visualize as amostras geradas e compare-as com o conjunto de dados original.

Resposta:

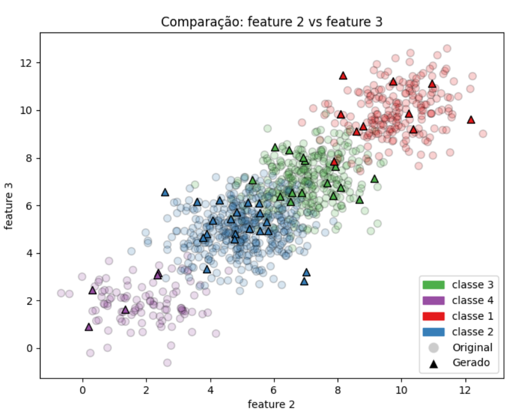
Para gerar novas amostras, utilizamos o melhor modelo de mistura de gaussianas, que identificou três classes a partir dos dados originais. As amostras geradas foram obtidas a partir dos parâmetros estimados do modelo, incluindo médias, covariâncias e pesos. Em seguida, realizamos a visualização das amostras geradas em comparação com os dados originais, utilizando diferentes marcadores para diferenciá-los: círculos para os dados originais e triângulos para as amostras geradas. A figura 2 ilustra os resultados, permitindo uma análise visual clara das diferenças e semelhanças entre os conjuntos de dados.



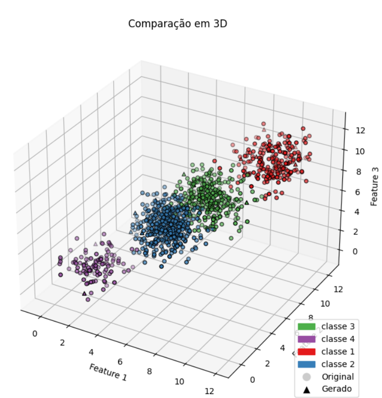
(a) Feature 1 vs Feature 2



(b) Feature 1 vs Feature 3



(c) Feature 2 vs Feature 3



(d) Gráfico 3D das features

Figura 2: Visualização dos dados em 2D e 3D

Questão 2

É dado um novo dataset com vários dados faltantes.

1. Descreva as etapas para executar a imputação de dados para as amostras incompletas. Explique sua abordagem. Descreva (mostre a matemática) que você usou para preencher os valores ausentes.

Resposta:

2. Execute os cálculos necessários para imputar os valores ausentes. Forneça os detalhes matemáticos e demonstre o processo de imputação de valores ausentes para o conjunto de dados fornecido.

Resposta: