Aprendizaje Automático Cuestiones y ejercicios

Francisco Casacuberta Nolla & Enrique Vidal Ruiz

Escola Tècnica Superior d'Informàtica Dep. de Sistemes Informàtics i Computació Universitat Politècnica de València

Julio, 2018

Tema 3: Técnicas de optimización

Cuestiones

- 1 A En la optimización directa de una función convexa q, $\nabla q(\Theta^*) = \mathbf{0}$ es una condición necesaria y suficiente para que Θ^* sea solución. ¿Y si no es convexa?
 - A) $\nabla q(\mathbf{\Theta}^{\star}) = \mathbf{0}$ es una condición necesaria
 - B) $\nabla q(\mathbf{\Theta}^{\star}) = \mathbf{0}$ es una condición suficiente
 - C) $\nabla q(\Theta^*) = 0$ no es condición necesaria ni suficiente.
 - D) $\nabla q(\mathbf{\Theta}^{\star}) \neq \mathbf{0}$
- 2 B La técnica de descenso por gradiente garantiza, bajo determinadas condiciones, alcanzar un mínimo local. ¿De qué depende que sea un mínimo u otro?
 - A) Del factor de aprendizaje
 - B) De la inicialización
 - C) De la forma de la funcion q a optimizar
 - D) Del número de mínimos locales.
- 3 B La técnica de descenso por gradiente garantiza, bajo determinadas condiciones, alcanzar un mínimo local. ¿En que caso ese mínimo es único?
 - A) Nunca
 - B) La función q es convexa
 - C) La función q es polinómica
 - D) Siempre
- 4 B El algoritmo perceptrón cuando se aplica a una muestra de entrenamiento que no es linealmente separable verifica:
 - A) Converge en un número de iteraciones doble al número de muestras
 - B) No converge nunca
 - C) A veces converge y a veces no
 - D) Converge en un número de iteraciones fijo

Problemas

1. Estimar los parámetros μ de una simple gaussiana multivariada (en \mathbb{R}^d) a partir de un conjunto de entrenamiento $S = \{x_1, \dots, x_N\}$ y suponiendo que Σ está fijada a una matriz unidad:

$$p(\boldsymbol{x}\mid\boldsymbol{\Theta}) = (2\pi)^{-d/2}|\boldsymbol{\Sigma}|^{-1/2}\exp\left(-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})\right)$$

Solución:

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \boldsymbol{x}_n$$

2. Minimizar $q(\boldsymbol{\theta}) = \theta_1^2 + \theta_2^2$ con $\theta_1 + \theta_2 = 1$

Solución:

$$\Lambda(\boldsymbol{\theta}, \beta) = \theta_1^2 + \theta_2^2 + \beta(1 - \theta_1 - \theta_2)$$

$$\frac{\partial \Lambda}{\partial \theta_1} = 2 \theta_1 - \beta = 0 \qquad \frac{\partial \Lambda}{\partial \theta_2} = 2 \theta_2 - \beta = 0$$

$$\theta_1^*(\beta) = \frac{\beta}{2} \qquad \theta_2^*(\beta) = \frac{\beta}{2}$$

$$\Lambda_D(\beta) = \frac{\beta^2}{2} + \beta(1 - \beta) = -\frac{\beta^2}{2} + \beta$$

$$\frac{d\Lambda_D}{d\beta} = -\beta + 1 = 0 \implies \beta^* = 1$$

$$\theta_1^*(\beta^*) = \theta_2^*(\beta^*) = \frac{1}{2}$$

3. Aplicar la técnica de los mutiplicadores de Langrange al problema de la minimización de $q(\theta)=q_0+(\theta-\theta_0)^2$ con $\theta \leq \theta_1$ en el caso de que $\theta_1>\theta_0$

Solución: Aplicar la condición KKT.

- 4. Aplicar la técnica de los mutiplicadores de Langrange al problema de la minimización de $q(\theta) = q_0 + (\theta \theta_0)^2$ con $q(\theta) + \theta = K$, donde K es una constante
- 5. Demostrar que en cualquier problema de clasificación en C clases, la estimación de máxima verosimilitud de la probabilidad a priori de cada clase c, $1 \le c \le C$, es $\hat{p}_c = n_c/N$, donde $N = \sum_c n_c$ es el número total de datos observados y n_c es el número de datos de la clase c.r

Solución: Similar al visto en clase para dos clases.

6. Calcular los gradientes de las funciones perceptrón y de Widrow-Hoff

Solución: Gradiente de la función perceptrón

$$\nabla q_{S}(\boldsymbol{\theta}) = \nabla \sum_{\substack{(\boldsymbol{x},c) \in S \\ c \ \boldsymbol{\theta}^{t} \boldsymbol{x} < 0}} -c \ \boldsymbol{\theta}^{t} \ \boldsymbol{x}$$

$$= \nabla \sum_{\substack{(\boldsymbol{x},c) \in S \\ c \ \boldsymbol{\theta}^{t} \boldsymbol{x} < 0}} -c \sum_{i} \theta_{i} \ x_{i}$$

$$\frac{\partial q_{S}(\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_{j}} = \sum_{\substack{(\boldsymbol{x},c) \in S \\ c \ \boldsymbol{\theta}^{t} \boldsymbol{x} < 0}} -c \ x_{j}$$

$$\nabla q_{S}(\boldsymbol{\theta}) = \sum_{\substack{(\boldsymbol{x},c) \in S \\ c \ \boldsymbol{\theta}^{t} \boldsymbol{x} < 0}} -c \ \boldsymbol{x}$$

$$c \ \boldsymbol{\theta}^{t} \boldsymbol{x} < 0$$

Gradiente de la función de Widrow -Hoff

$$\nabla q_S(\boldsymbol{\theta}) = \nabla \frac{1}{2} \sum_{(\boldsymbol{x}, y) \in S} (\boldsymbol{\theta}^t \boldsymbol{x} - y)^2$$

$$= \nabla \frac{1}{2} \sum_{(\boldsymbol{x}, y) \in S} \left(\sum_i \theta_i x_i - y_i \right)^2$$

$$\frac{\partial q_S(\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_j} = \sum_{(\boldsymbol{x}, y) \in S} \left(\sum_i \theta_i x_i - y_i \right) x_j$$

$$\nabla q_S(\boldsymbol{\theta}) = \sum_{(\boldsymbol{x}, y) \in S} (\boldsymbol{\theta}^t \boldsymbol{x} - y) \boldsymbol{x}$$

Tema 4: Máquinas de vectores soporte

Cuestiones

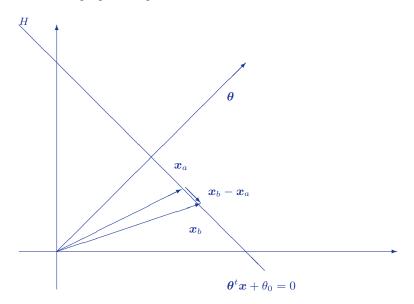
- 1 B En el caso de SVM para muestras linealmente separables, indicar qué afirmación es la incorrecta:
 - A) Los vectores soporte están formados por al menos una muestra de cada clase.
 - B) Los vectores soporte están formados por al menos dos muestra de una clase y una muestra de la otra clase..
 - C) Los vectores soporte son las únicas muestras que contribuyen en la obtención del vector de pesos
 - D) El umbral se defina a partir de un vector soporte
- 2 | C | En el caso de SVM con márgenes blandos, las muestras que no son vectores soporte $(n : \alpha_n^* = 0)$, verifican que
 - A) $\zeta_n^* > 0$
 - B) $\zeta_n^* < 0$
 - C) $\zeta_{*}^{n} = 0$
 - $\stackrel{\frown}{D} \stackrel{\frown}{\zeta_n^*} \neq 0$

Problemas

1. Desmostrar que en el caso de una función discriminante para dos clases, el valor de la función en un punto es proporcional a la distancia al hiperplano separador.

Solución:

a) El vector de pesos es perpendicular al hiperplano separador

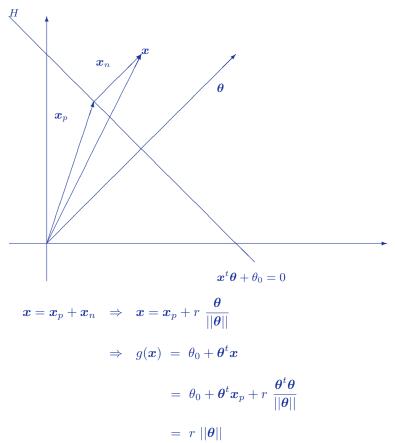


$$\mathbf{x}_a, \mathbf{x}_b \in H \quad \Rightarrow \quad g(\mathbf{x}_a) = g(\mathbf{x}_b) = 0$$

$$\Rightarrow \quad \boldsymbol{\theta}^t(\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a) = 0$$

$$\Rightarrow \quad \boldsymbol{\theta} \perp H$$

b) El vector asociado a un punto cualquier se descompone en un vector al hiperplanos separador y un vector perpendicular al hiperplano separador



- 2. Dada una función discriminante lineal $\phi(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\Theta})$, y un conjunto de puntos $S = \{(\boldsymbol{x}_1, c_1), \dots, (\boldsymbol{x}_N, c_N)\}$, encontrar la forma canónica con respecto a S del hiperplano que define la función discriminante lineal $\phi(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\Theta})$. Solución:
 - a) $\hat{\varphi} = \min_{1 \le n \le N} c_n(\boldsymbol{\theta}^t \boldsymbol{x}_n + \theta_0)$
 - b) $\theta_{ci} = \theta_i/\hat{\varphi}$ para $0 \le i \le d$
- 3. Dada una función discriminante $\phi(x; \mathbf{\Theta})$, demostrar que si $\gamma \in \mathbb{R}^+$, entonces $\gamma \phi(x; \mathbf{\Theta})$ y $\phi(x; \mathbf{\Theta})$ representan la misma frontera de decisión.

Solución: Sean H' y H las fronteras de decisión asociadas a $\phi(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\Theta})$ y a $\gamma \phi(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\Theta})$, respectivamente. H' viene dado por la ecuación: $\phi(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\Theta}) = 0$; y H por: $\gamma \phi(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\Theta}) = 0$. Como $\gamma > 0$, la ecuación de H se puede reescribir como: $\phi(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\Theta}) = 0$, que es la misma ecuación que la de H'.

4. Desarrollar completamente los pasos necesarios hasta obtener la lagrangiana dual $\Lambda_D(\alpha)$, en el problema de la clasificación de margen máximo.

Solución:

$$\frac{\partial \Lambda(\boldsymbol{\theta}, \theta_0, \boldsymbol{\alpha})}{\partial \theta_i} = \theta_i - \sum_{n=1}^N c_n \alpha_n x_{ni} = 0 \text{ para } 1 \le i \le d \Rightarrow \boldsymbol{\theta}^*(\boldsymbol{\alpha}) = \sum_{n=1}^N c_n \alpha_n \boldsymbol{x}_n$$
$$\frac{\partial \Lambda(\boldsymbol{\theta}, \theta_0, \boldsymbol{\alpha})}{\partial \theta_0} = \sum_{n=1}^n c_n \alpha_n = 0$$

$$\begin{split} & \Lambda_{D}(\boldsymbol{\alpha}) &= \Lambda(\boldsymbol{\theta}^{*}, \boldsymbol{\theta}_{0}^{*}, \boldsymbol{\alpha}) \\ &= \frac{1}{2} \boldsymbol{\theta}^{*t} \boldsymbol{\theta}^{*} - \sum_{n=1}^{N} \alpha_{n} \left(c_{n} \left(\boldsymbol{\theta}^{*t} \boldsymbol{x}_{n} + \boldsymbol{\theta}_{0}^{*} \right) - 1 \right) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{n,n'=1}^{N} c_{n} c_{n'} \alpha_{n} \alpha_{n'} \boldsymbol{x}_{n}^{t} \boldsymbol{x}_{n'} - \sum_{n=1}^{N} \alpha_{n} \left(c_{n} \left(\sum_{n'=1}^{N} c_{n'} \alpha_{n'} \boldsymbol{x}_{n'}^{t} \boldsymbol{x}_{n} + \boldsymbol{\theta}_{0}^{*} \right) - 1 \right) \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{n,n'=1}^{n} c_{n} c_{n'} \alpha_{n} \alpha_{n'} \boldsymbol{x}_{n}^{t} \boldsymbol{x}_{n'} - \boldsymbol{\theta}_{0}^{*} \sum_{n=1}^{N} \alpha_{n} c_{n} + \sum_{n=1}^{N} \alpha_{n} \\ &= \sum_{n=1}^{N} \alpha_{n} - \frac{1}{2} \sum_{n,n'=1}^{N} c_{n} c_{n'} \alpha_{n} \alpha_{n'} \boldsymbol{x}_{n}^{t} \boldsymbol{x}_{n'} \end{split}$$

5. Sea $S = \{((1,1)^t,+1),((2,2)^t,-1)\}$ una muestra de entrenamiento. Mediante el método de los multiplicadores de Lagrange, obtener (analíticamente) θ^* y θ^* que clasifiquen S con el máximo margen.

Solución: Pista: Resolver el problema primal y hacer uso de las condiciones KKT.

6. Sea $\phi(x; \theta, \theta_0)$, $x, \theta \in \mathbb{R}^2$, una FDL obtenida mediante el método SVM a partir de una muestra de entrenamiento en 2 dimensones. Obtener las ecuaciones de: a) la recta de decisión asociada a ϕ ; b) las ecuaciones de las rectas que definen las fronteras del margen.

Solución:

a) Ecuación de la recta de separación asociada a ϕ :

$$\phi(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\theta},\theta_0) = 0 \Rightarrow \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \theta_0 = 0 \Rightarrow x_2 = -\frac{\theta_1}{\theta_2} x_1 - \frac{\theta_0}{\theta_2}$$

b) Ecuaciones de las rectas que definen las fronteras del margen:

$$\phi(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\theta},\theta_0) = +1 \quad \Rightarrow \quad \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \theta_0 = +1 \quad \Rightarrow \quad x_2 = -\frac{\theta_1}{\theta_2} x_1 - \frac{\theta_0 - 1}{\theta_2}$$
$$\phi(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\theta},\theta_0) = -1 \quad \Rightarrow \quad \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \theta_0 = -1 \quad \Rightarrow \quad x_2 = -\frac{\theta_1}{\theta_2} x_1 - \frac{\theta_0 + 1}{\theta_2}$$

7. Sea S una muestra linealmente separable. Demostrar que el margen óptimo es:

$$2\left(\sum_{n\in\mathcal{V}}\alpha_n^{\star}\right)^{-1/2}$$

Solución:

$$\|\boldsymbol{\theta}^*\|^2 = \boldsymbol{\theta}^{*t} \boldsymbol{\theta}^*$$

$$= \sum_{n \in \mathcal{V}} c_n \, \alpha_n^* \, \boldsymbol{\theta}^{*t} \boldsymbol{x}_n$$

$$= \sum_{n \in \mathcal{V}} \alpha_n^* (1 - c_n \, \theta_0^*)$$

$$= \sum_{n \in \mathcal{V}} \alpha_n^* - \, \theta_0^* \, \sum_{n \in \mathcal{V}} \alpha_n^* \, c_n$$

$$= \sum_{n \in \mathcal{V}} \alpha_n^*$$

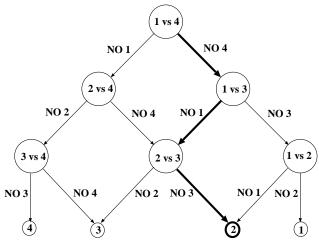
$$\frac{2}{\|\boldsymbol{\theta}\|} = \frac{2}{\sqrt{\sum_{n \in \mathcal{V}} \alpha_n^*}}$$

- 8. Desarrollar completamente los pasos necesarios para encontrar una SVM para el caso que no es linealmente separable. Solución: Los mismos pasos que en el caso linealmente separable r
- 9. Linealizar una función discriminante cúbica

Solución:

Similar al desarrollo visto en clase con la función cuadrática.

Construir un DAG para un problema de clasificación en cuatro clases.
 Solución:



11. Dado una muestra de entrenamiento linealmente separable

$$S = \{((1,4),+1),((2,2),+1),((2,3),+1),((4,2),+1),((3,4),-1),((3,5),-1),((5,4),-1),((5,6),-1)\},$$

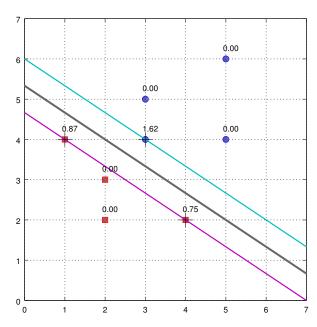
al calcular los multiplicadores de Lagrange óptimos α^* se obtiene [0.87, 0.0, 0.0, 0.75, 1.62, 0.0, 0.0, 0.0]. Obtener la correspondiente función discriminante lineal, calcular el margen óptimo y clasificar la muestra (4,5).

Solución:

• Vector de pesos y umbral:

$$\boldsymbol{\theta}^* = \sum_{n \in \mathcal{V}} c_n \ \alpha_n^* \ \boldsymbol{x}_n = 0.87 \ (1, 4)^t + 0.75 \ (4, 2)^t - 1.62 \ (3, 4)^t = (-1.0, -1.5)^t$$

$$\boldsymbol{\theta}_0^* = c_5 - \boldsymbol{\theta}^{*t} \boldsymbol{x}_5 = 8.0$$



■ El margen óptimo es

$$2\left(\sum_{n\in\mathcal{V}}\alpha_n^{\star}\right)^{-1/2} = \frac{2}{\sqrt{0.87 + 0.75 + 1.62}} = 1.11$$

• La clasificación de $\boldsymbol{x}=(4,5)$ será

$$(-1.0, -1.5)^{t}(4,5) + 8.0 = -3.5 < 0 \Rightarrow \text{clase } -1$$

12. Dado una muestra de entrenamiento

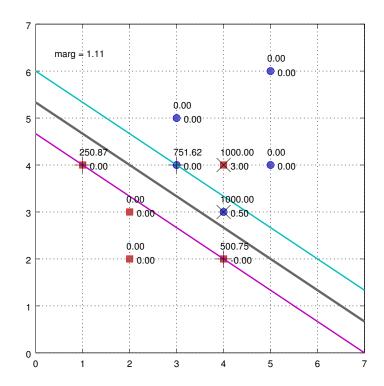
$$S = \{((1,4),+1), ((2,2),+1), ((2,3),+1), ((4,2),+1), ((3,4),-1), ((3,5),-1), ((5,4),-1), ((5,6),-1), ((4,4),+1), ((4,3),-1)\},\$$

al calcular los multiplicadores de Lagrange óptimos α^* con C=1000 se obtiene

$$[250.87, 0.0, 0.0, 500.75, 751.62, 0.0, 0.0, 0.0, 1000.0, 1000.0]$$

Obtener la correspondiente función discriminante lineal, las tolerancias óptimas ζ_n^* y clasificar la muestra (4,5).

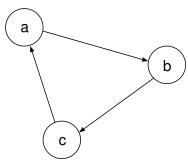
Solución: Procedimiento similar al problema anterior, Para calcular las tolerancias óptimas ζ_n^* , utilizar la condición KKT (1) de la transaparencia "SVM en el caso de no separabilidad lineal" de los apuntes de APR. Los resultados se muestran en la siguiente figura.



Tema 5: Modelos gráficos

Cuestiones

1 B El grafo de la figura

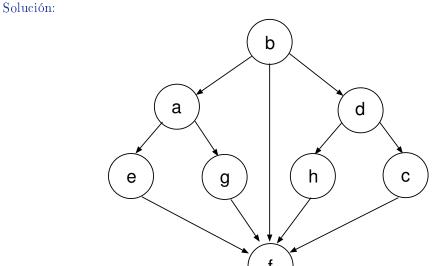


representa una de las siguientes distribuciones conjuntas:

- A) P(a,b,c) = P(a) P(b) P(c)
- B) A ninguna distribución
- C) $P(a,b,c) = P(a \mid c) P(b \mid a) P(c \mid b)$ D) $P(a,b,c) = P(a \mid c,b) P(b \mid a,c) P(c \mid b,a)$

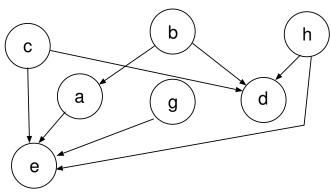
Problemas

Dibujar la red bayesiana asociada a $P(a, b, c, d, e, f, g, h) = P(b) \ P(a \mid b) \ P(d \mid b) \ P(e \mid a) \ P(g \mid a) \ P(h \mid d) \ P(c \mid d) \ P(f \mid b, e, g, h, c)$



2. Dibujar la red bayesiana asociada a

 $P(a, b, c, d, e, g, h) = P(b) P(c) P(h) P(a \mid b) P(g) P(d \mid c, b, h) P(e \mid c, a, g, h)$ Solución:



3. Las frases de un lenguaje se pueden modelar probabilísticamente mediante n-gramas, esto es la probabilidad de una palabra depende de las n-1 últimas palabras:

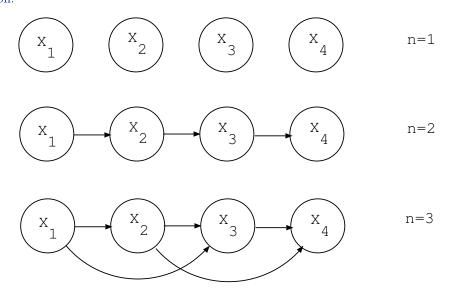
$$P(X_{1}, X_{2}, ..., X_{N}) = P(X_{1}) P(X_{2} | X_{1}) P(X_{3} | X_{1}, X_{2}, X_{3}) ... P(X_{N} | X_{1}, X_{2}, ..., X_{N-1})$$

$$\approx P(X_{1}) P(X_{2} | X_{1}) P(X_{3} | X_{1}, X_{2}, X_{3}) ... P(X_{i} | X_{i-n+2}, ..., X_{i-1}) ...$$

$$P(X_{N} | X_{N-n+2}, X_{2}, ..., X_{N-1})$$

9

Para N=4, construir las redes bayesianas en los casos en que n=1,2,3 Solución:



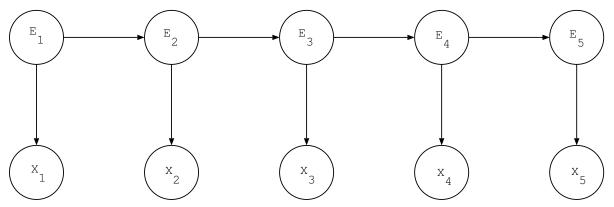
4. Dado un espacio de obervaciones \mathbb{R}^d , un modelo de Markov oculto (ver asignatura SIN) $\mathcal{H} = (\mathcal{Q}, P_T, p_O, P_I)$, donde \mathcal{Q} es un conjunto finito de estado, $P_T(E' = e' \mid E = e)$ es la probabilidad de pasar del estado $e \in \mathcal{Q}$ al estado $e' \in \mathcal{Q}$, $P_O(X = x \mid E = e)$ es la el valor de la densidad de probablidad de emitiir $x \in \mathbb{R}^d$ enl estado $e \in \mathcal{Q}$ y $P_I(E = e)$ es la probabilidad de que el estado $e \in \mathcal{Q}$ sea estado inicial. La probabilidad de que \mathcal{H} genere una cadena dada de N obervaciones x_1, \ldots, x_N con $x_i \in \mathbb{R}^d$ para $1 \leq i \leq N$ es:

$$p_{\mathcal{H}}(X_1 = \boldsymbol{x}_1, \dots, X_N = \boldsymbol{x}_N) = \sum_{e_1, \dots, e_N \in \mathcal{Q}} P_I(E_1 = e_1) \ P_O(X_1 = \boldsymbol{x}_1 \mid E_1 = e_1) \ P_T(E_2 = e_2 \mid E_1 = e_1) \ P_O(X_2 = \boldsymbol{x}_2 \mid E_2 = e_2) \ \dots$$

$$P_T(X_N = e_N \mid E_{N-1} = e_{N-1}) \ P_O(X_N = \boldsymbol{x}_N \mid E_N = e_N)$$

Se pide construir al red bayesiana que permita calcular $p_{\mathcal{H}}(X_1 = \boldsymbol{x}_1, \dots, X_5 = \boldsymbol{x}_5)$

Solución:



Esta red bayesiana permite representar la probabilidad conjunta

$$P(X_1 = \mathbf{x}_1, \dots, X_5 = \mathbf{x}_5, E_1 = e_1, \dots, E_5 = e_5) =$$
 $P_I(E_1 = e_1) \ P_O(X_1 = \mathbf{x}_1 \mid E_1 = e_1) \ P_T(E_2 = e_2 \mid E_1 = e_1) \ P_O(X_2 = \mathbf{x}_2 \mid E_2 = e_2) \ \dots$
 $P_T(X_5 = e_5 \mid E_4 = e_4) \ P_O(X_5 = \mathbf{x}_5 \mid E_5 = e_5)$

y $p_{\mathcal{H}}(X_1 = \boldsymbol{x}_1, \dots, X_5 = \boldsymbol{x}_5)$ se calcula como

$$p_{\mathcal{H}}(X_1 = \mathbf{x}_1, \dots, X_5 = \mathbf{x}_5) = \sum_{e_1, \dots, e_N \in \mathcal{Q}} P(X_1 = \mathbf{x}_1, \dots, X_5 = \mathbf{x}_5, E_1 = e_1, \dots, E_5 = e_5)$$

5. En el ejemplo sobre el depósito de compubstible, batería e indicador eléctrico, comprobar que $P(C=0 \mid I=0, B=0) \approx 0.111$

Solución: Desarrollo similar al que está en las transparencias

6. En la inferencia en cadenas, ¿Qué ocurre si también conocemos $x_{i'} \in E_{x_n}^+$ con i' < i? y ¿Qué ocurre si también conocemos $x_{f'} \in E_{x_n}^-$ con f' > f?

Solución:

$$P(x_n \mid x_{i'}, x_i, x_f) = \frac{P(x_n, x_{i'} \mid x_i, x_f)}{P(x_{i'} \mid x_i, x_f)} = \frac{P(x_n \mid x_i, x_f)P(x_{i'} \mid x_i, x_f)}{P(x_{i'} \mid x_i, x_f)} = P(x_n \mid x_i, x_f)$$

$$P(x_n \mid x_i, x_f, x_{f'}) = P(x_n \mid x_i, x_f)$$

7. En la inferencia en cadenas, calcular $P(x_n)$

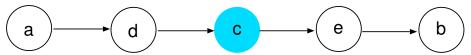
Solución: Si la cadena es de longitud N

$$\pi(x_1) = P(x_1) \qquad \lambda(x_N) = P(x_N \mid x_{N-1})$$

$$\pi(x_n) = \sum_{x_{n-1}} P(x_n \mid x_{n-1}) \ \pi(x_{n-1}) \qquad \lambda(x_n) = \sum_{x_{n+1}} P(x_{n+1} \mid x_n) \ \lambda(x_{n+1})$$

$$P(x_n) = \alpha \pi(x_n) \lambda(x_n)$$

8. Dada la siguiente red bayesiana



Demostrar que $P(a, b \mid c) = P(a \mid c) P(b \mid c)$

Solución:

$$P(a, b \mid c) = \frac{P(a, c, b)}{P(c)}$$

$$= \frac{\sum_{d,e} P(a, d, c, e, b)}{P(c)}$$

$$= \frac{\sum_{d,e} P(a)P(d \mid a)P(c \mid d)P(e \mid c)P(b \mid e)}{P(c)}$$

$$= \frac{P(a)\sum_{d} (P(d \mid a)P(c \mid d))\sum_{e} (P(e \mid c)P(b \mid e))}{P(c)}$$

$$= \frac{P(a)\sum_{d} P(d, c \mid a)\sum_{e} P(b, e \mid c)}{P(c)}$$

$$= \frac{P(a)P(c \mid a)P(b \mid c)}{P(c)}$$

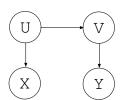
$$= P(a \mid c) P(b \mid c)$$

- 9. Considerar la red bayesiana \mathcal{R} definida como $P(U, V, X, Y) = P(U) P(X \mid U) P(V \mid U) P(Y \mid V)$, cuyas variables U, V, toman valores en el conjunto $\{1, 2\}$ y las variables X, Y en el conjunto $\{"a","b"\}$ y las distribuciones de probabilidad asociadas son como sigue:
 - P(U) viene dada por P(U=1) = 2/5, P(U=2) = 3/5
 - $P(V \mid U)$ viene dada por la tabla A
 - $\blacksquare \ P(X \mid U)$ y $P(Y \mid V)$ son idénticas y vienen dadas por la tabla B

- a) Representar gráficamente la red
- b) Obtener una expresión simplificada de P(X,Y) en función de las distribuciones que definen \mathcal{R} y calcular P(X="a",Y="a")
- c) ¿Cuáles son los valores de u, v para los que P(U, V, X = "a", Y = "a") es máxima?
- d) \mathcal{R} corresponde a un proceso de generación de una cadena de dos símbolos mediante un modelo de Markov. Representar gráficamente este modelo.

Solución:

a) Representación gráfica de la red:

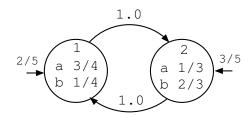


b) Obtener una expresión simplificada de P(X,Y) en función de las distribuciones que definen \mathcal{R} :

$$\begin{split} P(X,Y) &=& \sum_{u} \sum_{v} P(U=u) \; P(X \mid U=u) \; P(V=v \mid U=u) \; P(Y \mid V=v) \\ &=& \sum_{u} P(U=u) \; P(X \mid U=u) \; \sum_{v} P(V=v \mid U=u) \; P(Y \mid V=v) \\ &\equiv & \sum_{u} P(u) \; P(X \mid u) \; \sum_{v} P(v \mid u) \; P(Y \mid v) \\ P(X="\mathtt{a"},Y="\mathtt{a"}) &=& \sum_{u} P(u) \; P("\mathtt{a"} \mid u) \; \sum_{v} P(v \mid u) \; P("\mathtt{a"} \mid v) \\ &=& \sum_{u} P(u) \; P("\mathtt{a"} \mid u) \; \left(P(V=1 \mid u) \; P("\mathtt{a"} \mid V=1) + P(V=2 \mid u) \; P("\mathtt{a"} \mid V=2) \right) \\ &=& \sum_{u} P(u) \; P("\mathtt{a"} \mid u) \; \left(\frac{3}{4} P(V=1 \mid u) + \frac{1}{3} P(V=2 \mid u) \right) \\ &=& \left(\frac{3}{5} \cdot \frac{3}{4} \cdot \frac{3}{4} \cdot 0 \; + \; \frac{3}{5} \cdot \frac{3}{4} \cdot \frac{1}{3} \cdot 1 \; + \; \frac{2}{5} \cdot \frac{1}{3} \cdot \frac{3}{4} \cdot 1 \; + \; \frac{2}{5} \cdot \frac{1}{3} \cdot \frac{1}{3} \cdot 0 \right) \; = \; \frac{3}{20} \; + \; \frac{2}{20} \; = \; \frac{1}{4} \end{split}$$

c) Valores de U, V para los que P(U, V, X = "a", Y = "a") es máxima:

d) Modelo de Markov representado por \mathcal{R} :



Tema 6: Redes neuronales multicapa

Cuestiones

- 1 C La derivada de la función sigmoid $g'_S(z) = \frac{d g_S}{d z}$ verifica una de las siquientes propiedades

 - $\begin{array}{ll} \mathbf{A}) \ \ g_S'(z) = g_S^2(z) \\ \mathbf{B}) \ \ g_S'(z) = g_S(z)(1-g_S(z))^2 \\ \mathbf{C}) \ \ g_S'(z) = g_S(z) \ (1-g_S(z)) \\ \mathbf{D}) \ \ g_S'(z) = (1-g_S(z)) \end{array}$
- 2 A La derivada de la función tangente hiperbólica $g'_T(z) = \frac{d g_T}{d z}$ verifica una de las siquientes propiedades

 - $\begin{array}{ll} \text{A)} & g_T'(z) = 1 (g_T(z_k))^2 \\ \text{B)} & g_T'(z) = 1 g_T(z_k) \\ \text{C)} & g_T'(z) = (1 g_T(z_k)) \ g_T(z_k) \\ \text{D)} & g_T'(z) = (g_T(z_k)^2 \end{array}$
- 3 B La parálisis de una red multicapa se proeduce cuando:
 - A) En entrenamiento se alcanza un mínimo de la función de error.
 - B) En entrenamiento, la red no evoluciona porque la derivada de la función de activación es muy pequeña
 - C) En clasificación, la red devuelve un cero
 - D) En entrenamiento, se acaban las muestras de entrenamiento

Problemas

- 1. Demostrar que $g_T(z) = 2g_S(2z) 1 \quad \forall z \in \mathbb{R}$
- 2. Demostrar que la derivada de la función Softmax es, dados $z_1, \ldots, z_n \in \mathbb{R}$,

$$g_M(z_i) = \frac{\exp(z_i)}{\sum_i \exp(z_i)} \Rightarrow g'_M(z_i) = \frac{d g_M}{d z} = g_M(z_i) (1 - g_M(z_i))$$

3. Supongamos que queremos resolver un problema de clasificación en 3 clases con un perceptrón multicapa con dos capas ocultas $(M_3 = 3)$. Se emplean funciones de activación en escalón en las capas ocultas y softmax en la capa de salida. Las muestras se representan en un espacio de representación de dos dimensiones $(M_0 = 2)$. Calcula la salida de la red neuronal para la muestra x = (-1, 2) con los siguientes vectores de pesos:

$$\begin{split} \theta_1^1 &= [2,-2,0] \quad \theta_2^1 = [2,-1,-1] \quad \theta_3^1 = [-2,1,1] \\ \theta_1^2 &= [0,1,0,-1] \quad \theta_2^2 = [0,2,-3,0] \\ \theta_1^3 &= [1,1,1] \quad \theta_2^3 = [-1,0,1] \quad \theta_3^3 = [1,2,1] \end{split}$$

Solución:

• Salida de la primera capa oculta

$$\begin{split} \phi_1^1 &= {\theta_1^1}^t \boldsymbol{x} = 2 \cdot 1 + (-2) \cdot (-1) + 0 \cdot 2 = 4 & s_1^1 = g(\phi_1^1) = 1 \\ \phi_2^1 &= {\theta_2^1}^t \boldsymbol{x} = 2 \cdot 1 + (-1) \cdot (-1) + (-1) \cdot 2 = 1 & s_2^1 = g(\phi_2^1) = 1 \\ \phi_3^1 &= {\theta_3^1}^t \boldsymbol{x} = (-2) \cdot 1 + 1 \cdot (-1) + 1 \cdot 2 = -1 & s_3^1 = g(\phi_3^1) = 0 \end{split}$$

Salida de la segunda capa oculta

$$\phi_1^2 = \theta_1^{2t} s_1 = 0 \cdot 1 + 1 \cdot 1 + 0 \cdot 1 + (-1) \cdot 0 = 1 \qquad s_1^2 = g(\phi_1^2) = 1$$
$$\phi_2^2 = \theta_2^{2t} s_1 = 0 \cdot 1 + 2 \cdot 1 + (-3) \cdot 1 + 0 \cdot 0 = -1 \qquad s_2^2 = g(\phi_2^2) = 0$$

Salida de la capa salida

$$\phi_1^3 = \theta_1^{3t} s_2 = 1 \cdot 1 + 1 \cdot 1 + 1 \cdot 0 = 2 \qquad \exp(\phi_1^3) = 7.3891$$

$$\phi_2^3 = \theta_2^{3t} s_2 = (-1) \cdot 1 + 0 \cdot 1 + 1 \cdot 0 = -1 \qquad \exp(\phi_2^3) = 0.36788$$

$$\phi_3^3 = \theta_3^{3t} s_2 = 1 \cdot 1 + 2 \cdot 1 + 1 \cdot 0 = 3 \qquad \exp(\phi_3^3) = 20.086$$

$$\exp(\phi_1^3) + \exp(\phi_2^3) + \exp(\phi_3^3) = 27.843$$

$$s_1^3 = \frac{7.389}{27.843} = 0.26539 \qquad s_2^3 = \frac{0.36788}{27.843} = 0.013213 \qquad s_3^3 = \frac{20.086}{27.843} = 0.72140$$

- $\boldsymbol{x} = (-1, 2)$ es de la clase 3
- 4. Dado una muestra de entrenamiento $S = \{((1,4),A),((2,3),B),((4,2),B),((3,5),C),((5,4),C)\}$, generar un conjunto de entrenamiento con los rangos de entrada normalizados.

Solución:

a)
$$S' = \{(1,4), (2,3), (4,2), (3,5), (5,4)\}$$

b) $\mu_1 = \frac{1+2+4+3+5}{5} = 3$
 $\mu_2 = \frac{4+3+2+5+4}{5} = 3.6$
 $\sigma_1 = \frac{(-2)^2 + (-1)^2 + 1^2 + 0^2 + 2^2}{5-1} = 1.5811$
 $\sigma_2 = \frac{1.6^2 + (-0.6)^2 + (-1.6)^2 + 1.4^2 + 0.4^2}{5-1} = 1.3784$

c) Conversión:

Conversion.

$$(1,4) \Rightarrow \left(\frac{1-3}{1.5811}, \frac{4-3.6}{1.3784}\right) = (-1.264, 0.29019)$$

$$(2,3) \Rightarrow \left(\frac{2-3}{1.5811}, \frac{3-3.6}{1.3784}\right) = (-0.63247, -0.43529)$$

$$(4,2) \Rightarrow \left(\frac{4-3}{1.5811}, \frac{2-3.6}{1.3784}\right) = (0.63247, -1.1608)$$

$$(3,5) \Rightarrow \left(\frac{3-3}{1.5811}, \frac{5-3.6}{1.3784}\right) = (0.0, 1.0157)$$

$$(5,4) \Rightarrow \left(\frac{5-3}{1.5811}, \frac{4-3.6}{1.3784}\right) = (1.2649, 0.29019)$$

5. Considerar un perceptrón de dos capas con la siguiente topología: dos entradas, tres nodos en la capa de salida y dos en la oculta, todos los nodos con función de activación sigmoid. Sus pesos son:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\theta}_1^1 &= (1,1,1)^t \quad \boldsymbol{\theta}_2^1 = (1,2,1)^t \\ \boldsymbol{\theta}_1^2 &= (1,1,1)^t \quad \boldsymbol{\theta}_2^2 = (-1,-2,-1)^t \quad \boldsymbol{\theta}_3^2 = (-1,2,-1)^t \end{aligned}$$

Detallar la traza de una iteración del algoritmo BackProp, con factor de aprendizaje $\rho = 1.0$, para una muestra de entrenamiento $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{t}), \ \boldsymbol{x} = (-2, 1)^t, \ \boldsymbol{t} = (0, 1, 0)^t$.

Solución: Utilizaremos la notación extendida para \boldsymbol{x} con $x_0 = 1.0$: $\boldsymbol{x} = (-2, 1)^t \rightarrow \boldsymbol{x} = (1, -2, 1)^t$

a) Cálculo hacia adelante de las salidas de cada nodo:

1) Capa oculta:
$$\phi_1^1(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{\theta}_1^{1t} \boldsymbol{x} = 0;$$
 $s_1^1 = g(\phi_1^1(\boldsymbol{x})) = \frac{1}{1 + \exp(0)} = 0.5$ $\phi_2^1(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{\theta}_2^{1t} \boldsymbol{x} = -2;$ $s_2^1 = g(\phi_2^1(\boldsymbol{x})) = \frac{1}{1 + \exp(2)} = 0.11920$ (Notacion extendida) $s_0^1 = 1.0$

2) Capa de salida:
$$\phi_1^2(s^1) = \boldsymbol{\theta}_1^{2^t} s^1 = 1.61920;$$
 $s_1^2 = g(\phi_1^2(s^1)) = \frac{1}{1 + \exp(-1.61920)} = 0.83468$ $\phi_2^2(s^1) = \boldsymbol{\theta}_2^{2^t} s^1 = -2.11920;$ $s_2^2 = g(\phi_2^2(s^1)) = \frac{1}{1 + \exp(2.11920)} = 0.10724$ $\phi_3^2(s^1) = \boldsymbol{\theta}_3^{2^t} s^1 = -0.11920;$ $s_3^2 = g(\phi_3^2(s^1)) = \frac{1}{1 + \exp(0.11920)} = 0.47024$

- b) Cálculo de errores hacia atrás:
 - 1) Errores en la capa de salida:

$$\delta_1^2 = (t_1 - s_1^2) \ g'(\phi_1^2) = (t_1 - s_1^2) s_1^2 (1 - s_1^2) = -0.11518$$

$$\delta_2^2 = (t_2 - s_2^2) \ g'(\phi_2^2) = (t_2 - s_2^2) s_2^2 (1 - s_2^2) = 0.08547$$

$$\delta_3^2 = (t_3 - s_3^2) \ g'(\phi_3^2) = (t_3 - s_3^2) s_3^2 (1 - s_3^2) = -0.11714$$

2) Errores en la capa oculta:

$$\delta_{1}^{1} = (\delta_{1}^{2} \ \theta_{11}^{2} + \delta_{2}^{2} \ \theta_{21}^{2} + \delta_{3}^{2} \ \theta_{31}^{2}) \ g'(\phi_{1}^{1}) = (\delta_{1}^{2} \ \theta_{11}^{2} + \delta_{2}^{2} \ \theta_{21}^{2} + \delta_{3}^{2} \ \theta_{31}^{2}) \ s_{1}^{1}(1 - s_{1}^{1}) = -0.12582$$

$$\delta_{2}^{1} = (\delta_{1}^{2} \ \theta_{12}^{2} + \delta_{2}^{2} \ \theta_{22}^{2} + \delta_{3}^{2} \ \theta_{32}^{2}) \ g'(\phi_{2}^{1}) = (\delta_{1}^{2} \ \theta_{12}^{2} + \delta_{2}^{2} \ \theta_{22}^{2} + \delta_{3}^{2} \ \theta_{32}^{2}) \ s_{2}^{1}(1 - s_{2}^{1}) = -0.00834$$

- c) Actualización de los pesos:
 - 1) Actualización de pesos de la capa de salida:

$$\begin{array}{lll} \theta_{10}^2 = \theta_{10}^2 + \Delta \theta_{10}^2 = \theta_{10}^2 + \rho \ \delta_1^2 \ s_0^1 & = \ 0.88483 \\ \theta_{11}^2 = \theta_{11}^2 + \Delta \theta_{11}^2 = \theta_{11}^2 + \rho \ \delta_1^2 \ s_1^1 & = \ 0.94241 \\ \theta_{12}^2 = \theta_{12}^2 + \Delta \theta_{12}^2 = \theta_{12}^2 + \rho \ \delta_1^2 \ s_2^1 & = \ 0.98627 \\ \theta_{20}^2 = \theta_{20}^2 + \Delta \theta_{20}^2 = \theta_{20}^2 + \rho \ \delta_2^2 \ s_0^1 & = -0.91452 \\ \theta_{21}^2 = \theta_{21}^2 + \Delta \theta_{21}^2 = \theta_{21}^2 + \rho \ \delta_2^2 \ s_1^1 & = -1.95726 \\ \theta_{22}^2 = \theta_{22}^2 + \Delta \theta_{22}^2 = \theta_{22}^2 + \rho \ \delta_2^2 \ s_2^1 & = -0.98981 \\ \theta_{30}^2 = \theta_{30}^2 + \Delta \theta_{30}^2 = \theta_{30}^3 + \rho \ \delta_3^2 \ s_0^1 & = -1.11714 \\ \theta_{31}^2 = \theta_{31}^2 + \Delta \theta_{31}^2 = \theta_{31}^2 + \rho \ \delta_3^2 \ s_1^1 & = 1.94143 \\ \theta_{32}^2 = \theta_{32}^2 + \Delta \theta_{32}^2 = \theta_{32}^2 + \rho \ \delta_3^2 \ s_2^1 & = -1.01396 \end{array}$$

2) Actualización de pesos de la capa oculta:

$$\begin{array}{llll} \theta_{10}^1 = \theta_{10}^1 + \Delta \theta_{10}^1 = \theta_{10}^1 + \rho \ \delta_1^1 \ x_0 & = \ 0.87418 \\ \theta_{11}^1 = \theta_{11}^1 + \Delta \theta_{11}^1 = \theta_{11}^1 + \rho \ \delta_1^1 \ x_1 & = \ 1.25163 \\ \theta_{12}^1 = \theta_{12}^1 + \Delta \theta_{12}^1 = \theta_{12}^1 + \rho \ \delta_1^1 \ x_2 & = \ 0.87418 \\ \theta_{20}^1 = \theta_{20}^1 + \Delta \theta_{20}^1 = \theta_{20}^1 + \rho \ \delta_2^1 \ x_0 & = \ 0.99166 \\ \theta_{21}^1 = \theta_{21}^1 + \Delta \theta_{21}^1 = \theta_{21}^1 + \rho \ \delta_2^1 \ x_1 & = \ 2.01668 \\ \theta_{22}^1 = \theta_{22}^1 + \Delta \theta_{22}^1 = \theta_{22}^1 + \rho \ \delta_2^1 \ x_2 & = \ 0.99166 \end{array}$$

15