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

Septiembre, 2019

Tema 3: Técnicas de optimización

Cuestiones

1 $\boxed{\text{A}}$ En la optimización directa de una función convexa q, $\boldsymbol{\nabla} q(\boldsymbol{\Theta}^{\star}) = \mathbf{0}$ es una condición *necesaria y suficiente* para que $\boldsymbol{\Theta}^{\star}$ sea solución. ¿Y si no es convexa?

A) $\boldsymbol{\nabla} q(\boldsymbol{\Theta}^{\star}) = \mathbf{0}$ es una condición necesaria
B) $\boldsymbol{\nabla} q(\boldsymbol{\Theta}^{\star}) = \mathbf{0}$ es una condición suficiente
C) $\boldsymbol{\nabla} q(\boldsymbol{\Theta}^{\star}) = \mathbf{0}$ no es condición necesaria ni suficiente.
D) $\boldsymbol{\nabla} q(\boldsymbol{\Theta}^{\star}) \neq \mathbf{0}$

2 $\boxed{\text{B}}$ 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 $\boxed{\text{B}}$ 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 $\boxed{\text{B}}$ 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 $\boldsymbol{\mu}$ de una simple gaussiana multivariada (en $\mathbb{R}^d$) a partir de un conjunto de entrenamiento $S = \{\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_N\}$ y suponiendo que Σ está fijada a una matriz unidad:

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

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:

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

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

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

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

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

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

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, $1 \leq c \leq C$, 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

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{\nabla} q_S(\boldsymbol{\theta}) &= \boldsymbol{\nabla} \sum_{\substack{(\boldsymbol{x},c)\in S \\ c\ \boldsymbol{\theta}^t \boldsymbol{x} < 0}} -c\ \boldsymbol{\theta}^t\ \boldsymbol{x} \\
&= \boldsymbol{\nabla} \sum_{\substack{(\boldsymbol{x},c)\in S \\ c\ \boldsymbol{\theta}^t \boldsymbol{x} < 0}} -c \sum_i \theta_i\ x_i \\
\frac{\partial q_S(\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_j} &= \sum_{\substack{(\boldsymbol{x},c)\in S \\ c\ \boldsymbol{\theta}^t \boldsymbol{x} < 0}} -c\ x_j \\
\boldsymbol{\nabla} q_S(\boldsymbol{\theta}) &= \sum_{\substack{(\boldsymbol{x},c)\in S \\ c\ \boldsymbol{\theta}^t \boldsymbol{x} < 0}} -c\, \boldsymbol{x}
\end{aligned}
$$

   Gradiente de la función de Widrow -Hoff

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{\nabla} q_S(\boldsymbol{\theta}) &= \boldsymbol{\nabla} \frac{1}{2} \sum_{(\boldsymbol{x},y)\in S} \left(\boldsymbol{\theta}^t \boldsymbol{x} - y\right)^2 \\
&= \boldsymbol{\nabla} \frac{1}{2} \sum_{(\boldsymbol{x},y)\in S} \left(\sum_i \theta_i x_i - y_i\right)^2 \\
\frac{\partial q_S(\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_j} &= \sum_{(\boldsymbol{x},y)\in S} \left(\sum_i \theta_i x_i - y_i\right)\ x_j \\
\boldsymbol{\nabla} q_S(\boldsymbol{\theta}) &= \sum_{(\boldsymbol{x},y)\in S} (\boldsymbol{\theta}^t \boldsymbol{x} - y)\ \boldsymbol{x}
\end{aligned}
$$

Tema 4: Máquinas de vectores soporte

Cuestiones

1 $\boxed{B}$ 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 $\boxed{C}$ En el caso de SVM con márgenes blandos, las muestras que no son vectores soporte ($n : \alpha_n^* = 0$), verifican que

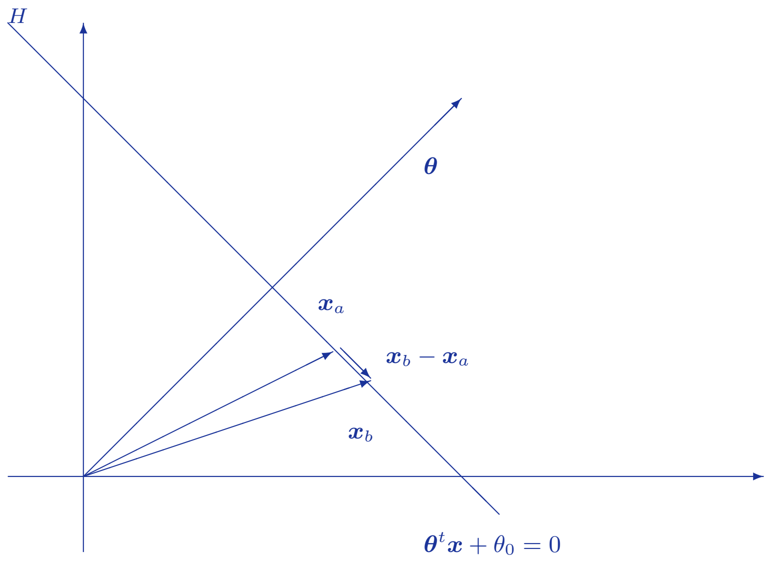
A) $\zeta_n^* > 0$
B) $\zeta_n^* < 0$
C) $\zeta_n^* = 0$
D) $\zeta_n^* \neq 0$

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.

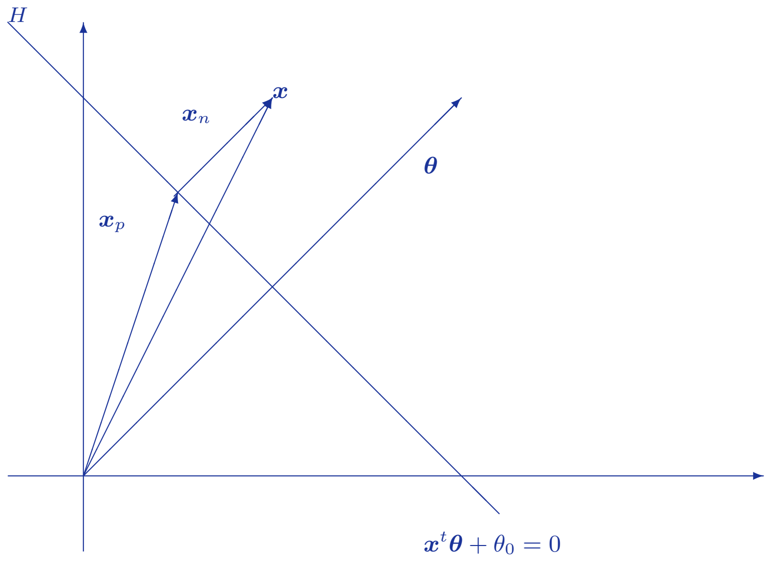
Solución:

a) El vector de pesos es perpendicular al hiperplano separador



$$\begin{aligned} \boldsymbol{x}_a, \boldsymbol{x}_b \in H \quad \Rightarrow \quad g(\boldsymbol{x}_a) = g(\boldsymbol{x}_b) &= 0 \\ \Rightarrow \quad \boldsymbol{\theta}^t(\boldsymbol{x}_b - \boldsymbol{x}_a) &= 0 \\ \Rightarrow \quad \boldsymbol{\theta} \perp H & \end{aligned}$$

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



$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_p + \boldsymbol{x}_n \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{x} &= \boldsymbol{x}_p + r\,\frac{\boldsymbol{\theta}}{||\boldsymbol{\theta}||} \\
\Rightarrow \quad g(\boldsymbol{x}) &= \theta_0 + \boldsymbol{\theta}^t\boldsymbol{x} \\
&= \theta_0 + \boldsymbol{\theta}^t\boldsymbol{x}_p + r\,\frac{\boldsymbol{\theta}^t\boldsymbol{\theta}}{||\boldsymbol{\theta}||} \\
&= r\ ||\boldsymbol{\theta}||
\end{aligned}
$$

2. Dada una función discriminante lineal $\phi(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\Theta})$, y un conjunto de puntos $S = \{(\boldsymbol{x}_1, c_1), \ldots, (\boldsymbol{x}_N, c_N)\}$, encontrar la forma canónica con respecto a S del hiperplano que define la función discriminante lineal $\phi(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\Theta})$.

   Solución:

   a) $\hat{\varphi} = \text{mín}_{1\leq n\leq N}\, c_n(\boldsymbol{\theta}^t\boldsymbol{x}_n + \theta_0)$
   b) $\theta_{ci} = \theta_i/\hat{\varphi}$ para $0 \leq i \leq d$

3. Dada una función discriminante $\phi(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\Theta})$, demostrar que si $\gamma \in \mathbb{R}^+$, entonces $\gamma\,\phi(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\Theta})$ y $\phi(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\Theta})$ 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 ecuadión 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 $\Lambda_D(\boldsymbol{\alpha})$. en el problema de la clasificacióndе margen máximo.

   Solución:

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

$$
\frac{\partial\Lambda(\boldsymbol{\theta},\theta_0,\boldsymbol{\alpha})}{\partial\theta_0} = \sum_{n=1}^{n} c_n\alpha_n = 0
$$

$$
\begin{aligned}
\Lambda_D(\boldsymbol{\alpha}) &= \Lambda(\boldsymbol{\theta}^*, \theta_0^*, \boldsymbol{\alpha}) \\
&= \frac{1}{2}\boldsymbol{\theta}^{*t}\boldsymbol{\theta}^* - \sum_{n=1}^{N}\alpha_n\left(c_n\ (\boldsymbol{\theta}^{*t}\boldsymbol{x}_n + \theta_0^*) - 1\right) \\
&= \frac{1}{2}\sum_{n,n'=1}^{N} c_n c_{n'}\alpha_n\alpha_{n'}\boldsymbol{x}_n{}^t\boldsymbol{x}_{n'} - \sum_{n=1}^{N}\alpha_n\left(c_n\ \left(\sum_{n'=1}^{N} c_{n'}\alpha_{n'}\boldsymbol{x}_{n'}{}^t\boldsymbol{x}_n + \theta_0^*\right) - 1\right) \\
&= -\frac{1}{2}\sum_{n,n'=1}^{n} c_n c_{n'}\alpha_n\alpha_{n'}\boldsymbol{x}_n{}^t\boldsymbol{x}_{n'} - \theta_0^*\sum_{n=1}^{N}\alpha_n c_n + \sum_{n=1}^{N}\alpha_n \\
&= \sum_{n=1}^{N}\alpha_n - \frac{1}{2}\sum_{n,n'=1}^{N} c_n c_{n'}\alpha_n\alpha_{n'}\boldsymbol{x}_n{}^t\boldsymbol{x}_{n'}
\end{aligned}
$$

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) $\boldsymbol{\theta}^\star$ y $\theta^\star$ que clasifiquen S con el máximo margen.

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

6. Sea $\phi(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\theta}, \theta_0)$, $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^2$, 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:

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

   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:

$$\begin{aligned}
\|\boldsymbol{\theta}^*\|^2 &= {\boldsymbol{\theta}^*}^t \boldsymbol{\theta}^* \\
&= \sum_{n \in \mathcal{V}} c_n \; \alpha_n^\star \; {\boldsymbol{\theta}^*}^t \boldsymbol{x}_n \\
&= \sum_{n \in \mathcal{V}} \; \alpha_n^\star (1 - c_n \; \theta_0^*) \\
&= \sum_{n \in \mathcal{V}} \; \alpha_n^\star - \; \theta_0^* \; \sum_{n \in \mathcal{V}} \alpha_n^* \; c_n \\
&= \sum_{n \in \mathcal{V}} \; \alpha_n^\star \\
\frac{2}{\|\boldsymbol{\theta}\|} &= \frac{2}{\sqrt{\sum_{n \in \mathcal{V}} \; \alpha_n^\star}}
\end{aligned}$$

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

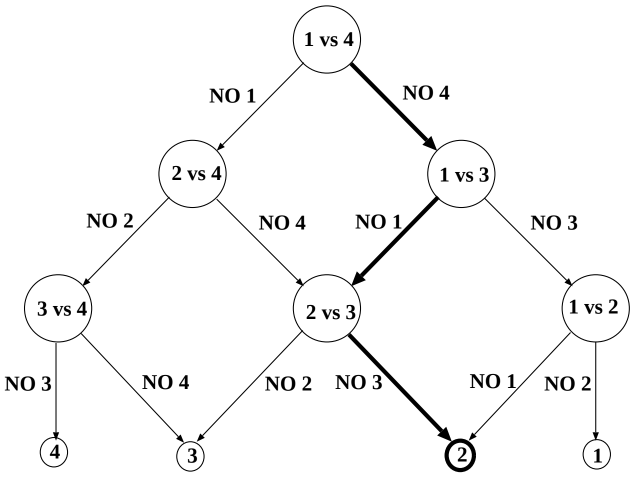
9. Linealizar una función discriminante cúbica

   Solución:

   Similar al desarrollo visto en clase con la función cuadrática.

10. Construir un DAG para un problema de clasificación en cuatro clases.

    Solución:



11. Dado una muestra de entrenamiento linealmente separable

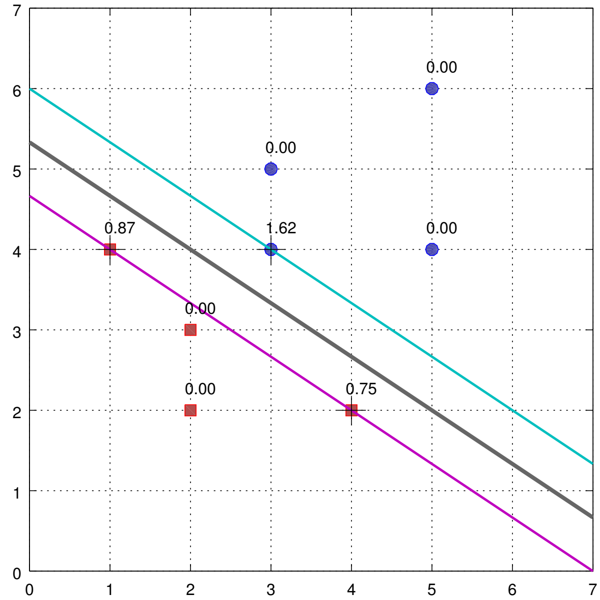
$$S = \{((1,4),+1),((2,2),+1),((2,3),+1),((4,2),+1),((3,4),-1),((3,5),-1),((5,4),-1),((5,6),-1)\},$$

al calcular los multiplicadores de Lagrange óptimos $\boldsymbol{\alpha}^*$ 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:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\theta}^* &= \sum_{n\in\mathcal{V}} c_n\ \alpha_n^\star\ \boldsymbol{x}_n = 0.87\ (1,4)^t + 0.75\ (4,2)^t - 1.62\ (3,4)^t = (-1.0,-1.5)^t\\ \boldsymbol{\theta}_0^* &= c_5 - {\boldsymbol{\theta}^*}^t \boldsymbol{x}_5 = 8.0\end{aligned}$$



- 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

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

12. Dado una muestra de entrenamiento

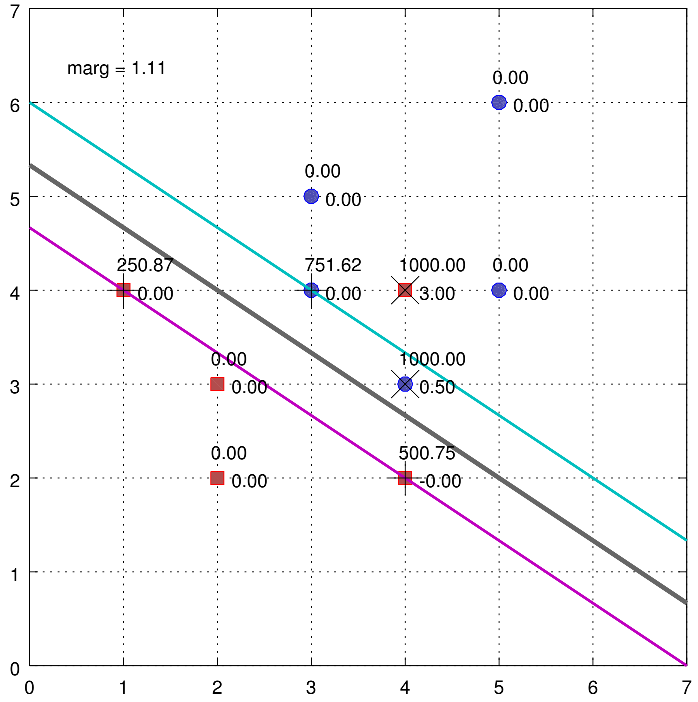
$$S = \{((1,4),+1),((2,2),+1),((2,3),+1),((4,2),+1),((3,4),-1),((3,5),-1),((5,4),-1),$$
$$((5,6),-1),((4,4),+1),((4,3),-1)\},$$

al calcular los multiplicadores de Lagrange óptimos $\boldsymbol{\alpha}^*$ 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.



marg = 1.11
0.00
0.00
0.00
0.00
250.87
0.00
751.62
0.00
1000.00
3.00
0.00
0.00
0.00
0.00
1000.00
0.50
0.00
0.00
500.75
-0.00

Tema 5: Redes neuronales multicapa

Cuestiones

1 $\boxed{\text{C}}$ La derivada de la función sigmoid $g'_S(z) = \dfrac{d\ g_S}{d\ z}$ verifica una de las siguientes propiedades

A) $g'_S(z) = g_S^2(z)$
B) $g'_S(z) = g_S(z)(1 - g_S(z))^2$
C) $g'_S(z) = g_S(z)\ (1 - g_S(z))$
D) $g'_S(z) = (1 - g_S(z))$

2 $\boxed{\text{A}}$ La derivada de la función tangente hiperbólica $g'_T(z) = \dfrac{d\ g_T}{d\ z}$ verifica una de las siguientes propiedades

A) $g'_T(z) = 1 - (g_T(z_k))^2$
B) $g'_T(z) = 1 - g_T(z_k)$
C) $g'_T(z) = (1 - g_T(z_k))\ g_T(z_k)$
D) $g'_T(z) = (g_T(z_k))^2$

3 $\boxed{\text{B}}$ 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 $z_1, \dots, z_n \in \mathbb{R}$,
$$g_M(z_i) = \frac{\exp(z_i)}{\sum_j \exp(z_j)} \Rightarrow g'_M(z_i) = \frac{d\ g_M}{d\ z} = g_M(z_i)\ (1 - g_M(z_i))$$
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 $\boldsymbol{x} = (-1, 2)$ con los siguientes vectores de pesos:
$$\theta_1^1 = [2, -2, 0] \quad \theta_2^1 = [2, -1, -1] \quad \theta_3^1 = [-2, 1, 1]$$
$$\theta_1^2 = [0, 1, 0, -1] \quad \theta_2^2 = [0, 2, -3, 0]$$
$$\theta_1^3 = [1, 1, 1] \quad \theta_2^3 = [-1, 0, 1] \quad \theta_3^3 = [1, 2, 1]$$

Solución:

- Salida de la primera capa oculta
$$\phi_1^1 = {\theta_1^1}^t \boldsymbol{x} = 2 \cdot 1 + (-2) \cdot (-1) + 0 \cdot 2 = 4 \qquad s_1^1 = g(\phi_1^1) = 1$$
$$\phi_2^1 = {\theta_2^1}^t \boldsymbol{x} = 2 \cdot 1 + (-1) \cdot (-1) + (-1) \cdot 2 = 1 \qquad s_2^1 = g(\phi_2^1) = 1$$
$$\phi_3^1 = {\theta_3^1}^t \boldsymbol{x} = (-2) \cdot 1 + 1 \cdot (-1) + 1 \cdot 2 = -1 \qquad s_3^1 = g(\phi_3^1) = 0$$
- Salida de la segunda capa oculta
$$\phi_1^2 = {\theta_1^2}^t \boldsymbol{s}_1 = 0 \cdot 1 + 1 \cdot 1 + 0 \cdot 1 + (-1) \cdot 0 = 1 \qquad s_1^2 = g(\phi_1^2) = 1$$
$$\phi_2^2 = {\theta_2^2}^t \boldsymbol{s}_1 = 0 \cdot 1 + 2 \cdot 1 + (-3) \cdot 1 + 0 \cdot 0 = -1 \qquad s_2^2 = g(\phi_2^2) = 0$$
- Salida de la capa salida
$$\phi_1^3 = {\theta_1^3}^t \boldsymbol{s}_2 = 1 \cdot 1 + 1 \cdot 1 + 1 \cdot 0 = 2 \qquad \exp(\phi_1^3) = 7.3891$$
$$\phi_2^3 = {\theta_2^3}^t \boldsymbol{s}_2 = (-1) \cdot 1 + 0 \cdot 1 + 1 \cdot 0 = -1 \qquad \exp(\phi_2^3) = 0.36788$$
$$\phi_3^3 = {\theta_3^3}^t \boldsymbol{s}_2 = 1 \cdot 1 + 2 \cdot 1 + 1 \cdot 0 = 3 \qquad \exp(\phi_3^3) = 20.086$$
$$\exp(\phi_1^3) + \exp(\phi_2^3) + \exp(\phi_3^3) = 27.843$$
$$s_1^3 = \frac{7.389}{27.843} = 0.26539 \qquad s_2^3 = \frac{0.36788}{27.843} = 0.013213 \qquad s_3^3 = \frac{20.086}{27.843} = 0.72140$$

- $\boldsymbol{x} = (-1, 2)$ 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) $\mu_1 = \dfrac{1+2+4+3+5}{5} = 3$

   $\mu_2 = \dfrac{4+3+2+5+4}{5} = 3.6$

   $\sigma_1 = \sqrt{\dfrac{(-2)^2+(-1)^2+1^2+0^2+2^2}{5-1}} = 1.5811$

   $\sigma_2 = \sqrt{\dfrac{1.6^2+(-0.6)^2+(-1.6)^2+1.4^2+0.4^2}{5-1}} = 1.3784$

   c) Conversión:

   $$\begin{array}{lcl}
   (1,4) & \Rightarrow & (\frac{1-3}{1.5811}, \frac{4-3.6}{1.3784}) = (-1.264, 0.29019) \\
   (2,3) & \Rightarrow & (\frac{2-3}{1.5811}, \frac{3-3.6}{1.3784}) = (-0.63247, -0.43529) \\
   (4,2) & \Rightarrow & (\frac{4-3}{1.5811}, \frac{2-3.6}{1.3784}) = (0.63247, -1.1608) \\
   (3,5) & \Rightarrow & (\frac{3-3}{1.5811}, \frac{5-3.6}{1.3784}) = (0.0, 1.0157) \\
   (5,4) & \Rightarrow & (\frac{5-3}{1.5811}, \frac{4-3.6}{1.3784}) = (1.2649, 0.29019)
   \end{array}$$

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:

$$\boldsymbol{\theta}_1^1 = (1,1,1)^t \quad \boldsymbol{\theta}_2^1 = (1,2,1)^t$$

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

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 $x_0 = 1.0$: $\boldsymbol{x} = (-2,1)^t \to \boldsymbol{x} = (1,-2,1)^t$

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

1) Capa oculta: $\phi_1^1(\boldsymbol{x}) = {\boldsymbol{\theta}_1^1}^t \boldsymbol{x} = \ 0; \quad s_1^1 = g(\phi_1^1(\boldsymbol{x})) = \dfrac{1}{1+\exp(0)} = 0.5$

$\phi_2^1(\boldsymbol{x}) = {\boldsymbol{\theta}_2^1}^t \boldsymbol{x} = -2; \quad s_2^1 = g(\phi_2^1(\boldsymbol{x})) = \dfrac{1}{1+\exp(2)} = 0.11920$

(Notacion extendida) $s_0^1 = 1.0$

2) Capa de salida: $\phi_1^2(\boldsymbol{s}^1) = {\boldsymbol{\theta}_1^2}^t \boldsymbol{s}^1 = \ 1.61920; \quad s_1^2 = g(\phi_1^2(\boldsymbol{s}^1)) = \dfrac{1}{1+\exp(-1.61920)} = 0.83468$

$\phi_2^2(\boldsymbol{s}^1) = {\boldsymbol{\theta}_2^2}^t \boldsymbol{s}^1 = -2.11920; \quad s_2^2 = g(\phi_2^2(\boldsymbol{s}^1)) = \dfrac{1}{1+\exp(2.11920)} = 0.10724$

$\phi_3^2(\boldsymbol{s}^1) = {\boldsymbol{\theta}_3^2}^t \boldsymbol{s}^1 = -0.11920; \quad s_3^2 = g(\phi_3^2(\boldsymbol{s}^1)) = \dfrac{1}{1+\exp(0.11920)} = 0.47024$

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:

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

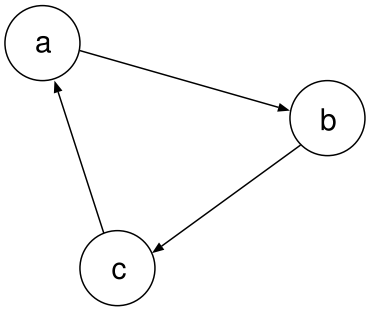
2) Actualización de pesos de la capa oculta:

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

Tema 6: Modelos gráficos

Cuestiones

1 $\boxed{\text{B}}$ El grafo de la figura

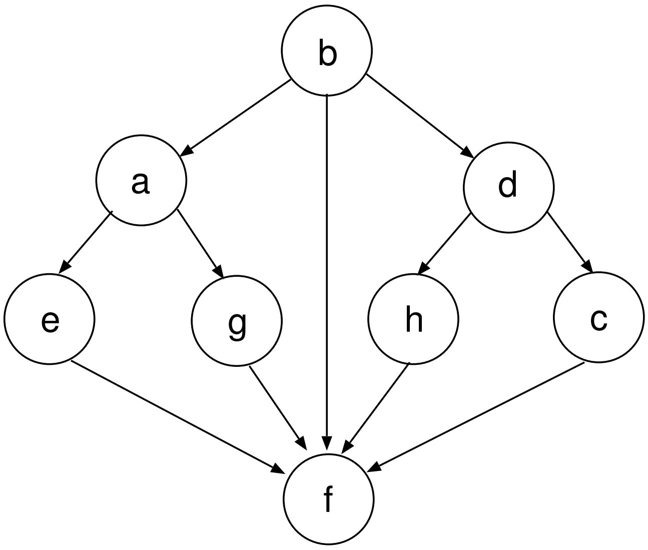


representa una de las siguientes distribuciones conjuntas:

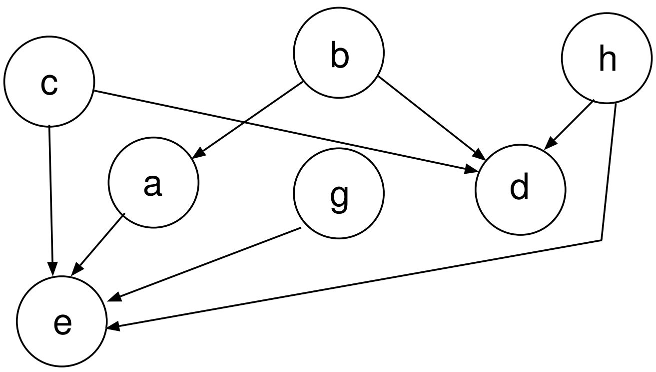
A) $P(a, b, c) = P(a)\ P(b)\ P(c)$
B) A ninguna distribución
C) $P(a, b, c) = P(a \mid c)\ P(b \mid a)\ P(c \mid b)$
D) $P(a, b, c) = P(a \mid c, b)\ P(b \mid a, c)\ P(c \mid b, a)$

Problemas

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



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:

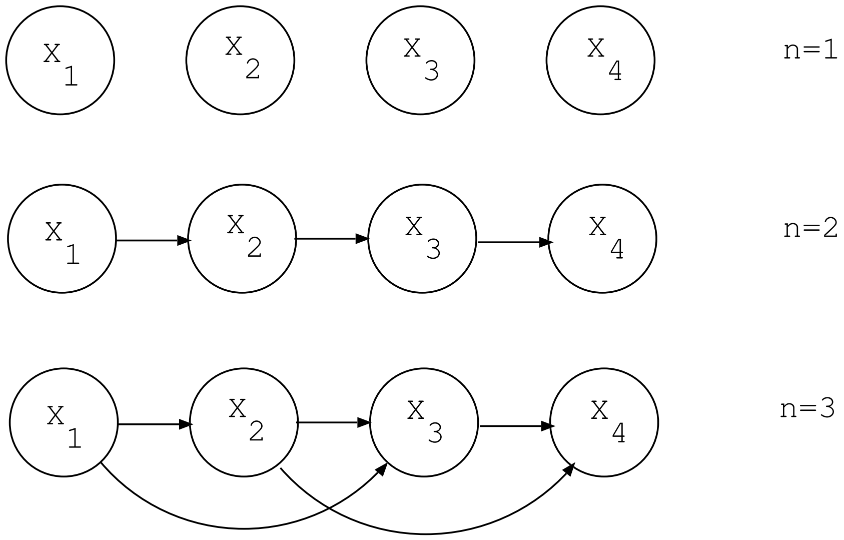


3. Las frases de un lenguaje se pueden modelar probabilísticamente mediante n-gramas, esto es la probabilidad de una palabra depende de las $n-1$ últimas palabras:

$$\begin{aligned} P(X_1, X_2, \ldots, X_N) &= P(X_1)\ P(X_2 \mid X_1)\ P(X_3 \mid X_1, X_2, X_3)\ \ldots\ P(X_N \mid X_1, X_2, \ldots, X_{N-1}) \\ &\approx P(X_1)\ P(X_2 \mid X_1)\ P(X_3 \mid X_1, X_2, X_3)\ \ldots\ P(X_i \mid X_{i-n+2}, \ldots, X_{i-1})\ \ldots \\ &\qquad P(X_N \mid X_{N-n+2}, X_2, \ldots, X_{N-1}) \end{aligned}$$

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

Solución:



4. Dado un espacio de observaciones $\mathbb{R}^d$, 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 $e' \in \mathcal{Q}$, $P_O(X = \boldsymbol{x} \mid E = e)$ es la el valor de la densidad de probablidad de emitiir $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^d$ 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 $\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_N$ con $\boldsymbol{x}_i \in \mathbb{R}^d$ para $1 \leq i \leq N$ es:

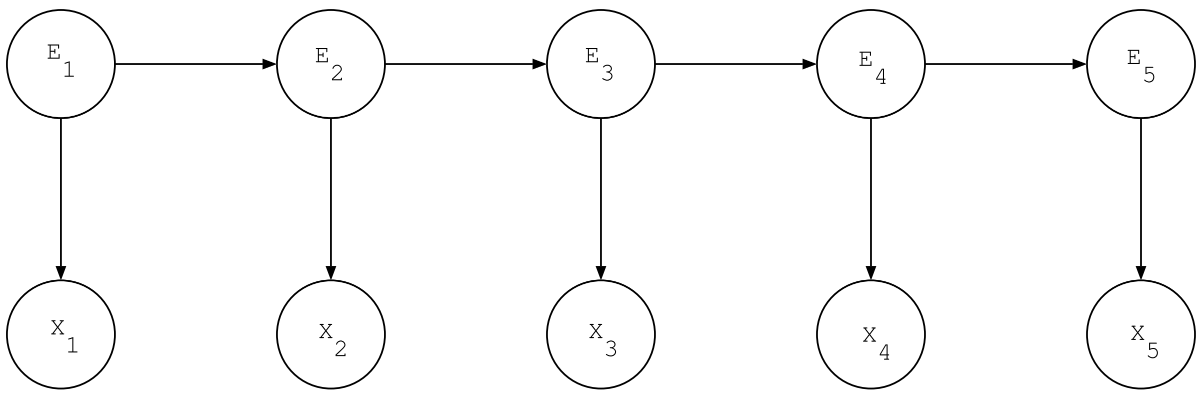
$$p_{\mathcal{H}}(X_1 = \boldsymbol{x}_1, \ldots, X_N = \boldsymbol{x}_N) =$$

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

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

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

Solución:



Esta red bayesiana permite representar la probabilidad conjunta

$$P(X_1 = \boldsymbol{x}_1, \ldots, X_5 = \boldsymbol{x}_5, E_1 = e_1, \ldots, E_5 = e_5) =$$

$$P_I(E_1 = e_1)\ P_O(X_1 = \boldsymbol{x}_1 \mid E_1 = e_1)\ P_T(E_2 = e_2 \mid E_1 = e_1)\ P_O(X_2 = \boldsymbol{x}_2 \mid E_2 = e_2)\ \ldots$$

$$P_T(X_5 = e_5 \mid E_4 = e_4)\ P_O(X_5 = \boldsymbol{x}_5 \mid E_5 = e_5)$$

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

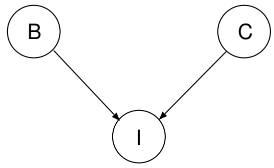
$$p_{\mathcal{H}}(X_1 = \boldsymbol{x}_1, \ldots, X_5 = \boldsymbol{x}_5) = \sum_{e_1,\ldots,e_N \in \mathcal{Q}} P(X_1 = \boldsymbol{x}_1, \ldots, X_5 = \boldsymbol{x}_5, E_1 = e_1, \ldots, E_5 = e_5)$$

5. En el ejemplo sobre el depósito de combustible, batería e indicador eléctrico, se tiene que:

- B es el estado de la batería (cargada $B = 1$ o descargada $B = 0$)
- C es el estado del depósito de combustible (lleno $C = 1$ o vacío $C = 0$)

- I es el estado del indicador eléctrico del combustible (lleno $I=1$ o vacío $I=0$)

$$
\begin{aligned}
P(B=1)=P(C=1) &= 0.9 \\
P(I=1 \mid B=1, C=1) &= 0.8 \\
P(I=1 \mid B=1, C=0) &= 0.2 \\
P(I=1 \mid B=0, C=1) &= 0.2 \\
P(I=1 \mid B=0, C=0) &= 0.1
\end{aligned}
$$



$$P(B,C,I) = P(B)\ P(C)\ P(I \mid B,C)$$

Comprobar que $P(C=0 \mid I=0, B=0) \approx 0.111$

Solución:

$$
\begin{aligned}
P(C=0 \mid I=0, B=0) &= \frac{P(C=0, I=0, B=0)}{P(I=0, B=0)} \\
&= \frac{P(C=0, I=0, B=0)}{P(C=0, I=0, B=0) + P(C=1, I=0, B=0)} \\
&= \frac{P(B=0)\ P(C=0)\ P(I=0 \mid B=0, C=0)}{P(B=0)\ P(C=0)\ P(I=0 \mid B=0, C=0) + P(B=0)\ P(C=1)\ P(I=0 \mid B=0, C=1)} \\
&= \frac{0.1 \times 0.1 \times 0.9}{0.1 \times 0.1 \times 0.9 + 0.1 \times 0.9 \times 0.8} \\
&= 0.111
\end{aligned}
$$

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:

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

7. Dada una red bayesiana con estructura de cadena,

$$P(x_1, x_2, \ldots, x_n, \ldots, x_{N-1}, x_N) = P(x_1) P(x_2 \mid x_1) \cdots P(x_n \mid x_{n-1}) \cdots P(x_N \mid x_{N-1})$$

   obtener una expresión recursiva para calcular de $P(x_n)$

   Solución:

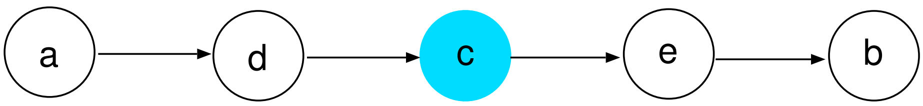
$$
\begin{aligned}
P(x_n) &= \sum_{x_{n-1}} P(x_n, x_{n-1}) \\
&= \sum_{x_{n-1}} P(x_{n-1}) P(x_n \mid x_{n-1})
\end{aligned}
$$

   Sea $\mu(x_j) \stackrel{\text{def}}{=} P(x_j)$:

$$
\begin{aligned}
\mu(x_1) &= P(x_1) \\
\mu(x_n) &= \sum_{x_{n-1}} P(x_n \mid x_{n-1})\ \mu(x_{n-1})
\end{aligned}
$$

   Por tanto: $P(x_n) \ = \ \mu(x_n)$

8. Dada la siguiente red bayesiana



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

Solución:

$$
\begin{aligned}
P(a,b \mid c) &= \frac{P(a,c,b)}{P(c)} \\
&= \frac{\sum_{d,e} P(a,d,c,e,b)}{P(c)} \\
&= \frac{\sum_{d,e} P(a)P(d \mid a)P(c \mid d)P(e \mid c)P(b \mid e)}{P(c)} \\
&= \frac{P(a)\sum_d \left(P(d \mid a)P(c \mid d)\right) \sum_e \left(P(e \mid c)P(b \mid e)\right)}{P(c)} \\
&= \frac{P(a)\sum_d P(d,c \mid a) \sum_e P(b,e \mid c)}{P(c)} \\
&= \frac{P(a)P(c \mid a)P(b \mid c)}{P(c)} \\
&= P(a \mid c)\; P(b \mid c)
\end{aligned}
$$

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 $\{\texttt{"a"},\texttt{"b"}\}$ 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
- $P(X \mid U)$ y $P(Y \mid V)$ son idénticas y vienen dadas por la tabla B

A	1	2
1	0	1
2	1	0

B	"a"	"b"
1	3/4	1/4
2	1/3	2/3

a) Representar gráficamente la red

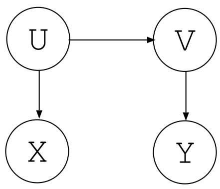
b) Obtener una expresión simplificada de $P(X,Y)$ en función de las distribuciones que definen $\mathcal{R}$ y calcular $P(X=\texttt{"a"}, Y=\texttt{"a"})$

c) ¿Cuáles son los valores de u, v para los que $P(U,V \mid X=\texttt{"a"}, Y=\texttt{"a"})$ 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 $\mathcal{R}$:

$$
\begin{aligned}
P(X,Y) &= \sum_u \sum_v P(U=u)\ P(X \mid U=u)\ P(V=v \mid U=u)\ P(Y \mid V=v) \\
&= \sum_u P(U=u)\ P(X \mid U=u)\ \sum_v P(V=v \mid U=u)\ P(Y \mid V=v) \\
&\equiv \sum_u P(u)\ P(X \mid u)\ \sum_v P(v \mid u)\ P(Y \mid v)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
P(X=\texttt{"a"}, Y=\texttt{"a"}) &= \sum_u P(u)\ P(\texttt{"a"} \mid u)\ \sum_v P(v \mid u)\ P(\texttt{"a"} \mid v) \\
&= \sum_u P(u)\ P(\texttt{"a"} \mid u)\ \Big(P(V=1 \mid u)\ P(\texttt{"a"} \mid V=1) + P(V=2 \mid u)\ P(\texttt{"a"} \mid V=2)\Big) \\
&= \sum_u\ P(u)\ P(\texttt{"a"} \mid u)\ \Big(\frac{3}{4}P(V=1 \mid u) + \frac{1}{3}P(V=2 \mid u)\Big) \\
&= \Big(\frac{2}{5}\cdot\frac{3}{4}\cdot(\frac{3}{4}\cdot 0 + \frac{1}{3}\cdot 1) + \frac{3}{5}\cdot\frac{1}{3}\cdot(\frac{3}{4}\cdot 1 + \frac{1}{3}\cdot 0)\Big) \ = \ \frac{6}{60} + \frac{9}{60} \ = \ \frac{1}{4}
\end{aligned}
$$

c) Valores de U, V para los que $P(U,V \mid X = \texttt{"a"}, Y = \texttt{"a"})$ es máxima:

$$\begin{aligned}
\hat{u}, \hat{v} &= \underset{u,v}{\arg\max}\, P(U = u, V = v \mid X = \texttt{"a"}, Y = \texttt{"a"}) \\
&= \underset{u,v}{\arg\max}\, \frac{P(U = u, V = v, X = "a", Y = "a")}{P(X = "a", Y = "a")} \;=\; \underset{u,v}{\arg\max}\, P(U = u,\ V = v,\ X = \texttt{"a"},\ Y = \texttt{"a"}) \\
&= \underset{u,v}{\arg\max}\, P(U = u) \cdot P(X = "a" \mid U = u) \cdot P(V = v \mid U = u) \cdot P(Y = "a") \mid V = v)
\end{aligned}$$

$\ldots$ Solo hay dos combinaciones no nulas: $U = 1, V = 2$ y $U = 2, V = 1$.

De estas la máxima se obtiene con: $\hat{u} = 1,\ \hat{v} = 2$

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