Aprendizagem

Instituto Superior Técnico

outubro de 2023

Homework 3 - Report

Joana Pimenta (103730), Rodrigo Laia (102674)

Pen and Paper

1. a) Uma função radial basis permite mapear observações para um novo espaço baseando-se na distância entre as observações e os centróides.

$$\phi_j(x) = \exp\left(-\frac{\|\vec{x} - c_j\|^2}{2}\right) \tag{1}$$

O cálculos dos vetores tranformados foi feita através da seguinte fórmula:

$$\vec{\phi_i} = \left(\exp\left(-\frac{\|\vec{x}_i - c_1\|^2}{2}\right), \exp\left(-\frac{\|\vec{x}_i - c_2\|^2}{2}\right), \exp\left(-\frac{\|\vec{x}_i - c_3\|^2}{2}\right)\right) \tag{2}$$

Assim os vetores transformados obtidos foram:

$$\phi_1 = (0.74826, 0.74826, 0.10127)$$

$$\phi_2 = (0.81465, 0.27117, 0.33121)$$

$$\phi_3 = (0.71177, 0.09633, 0.71177)$$

Para fazer regressão de Ridge é necessário minimizar a função de erro:

$$E(\vec{w}) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}(z_i - \vec{w}^T \cdot x_i)^2 + \frac{\lambda}{2}||\vec{w}||^2 \tag{3}$$

Sendo que isso é equivalente a calcular $\vec{w}$ através da seguinte fórmula:

$$\vec{w} = (X^T \cdot X + \lambda \cdot I)^{-1} \cdot X^T \cdot \vec{z} \tag{4}$$

Uma vez que estamos a trabalhar com uma transformação de espaços, é necessário calcular a matriz transformada Φ colocando para cada linha um 1 na primeira

coluna e depois o vetor transformado de cada observação. Utilizamos então as fórmulas acima com Φ no lugar de X, assumindo que após a transformação a relação entre as variáveis e o target é linear.

Cálculos intermédios:

$$\Phi = \begin{bmatrix} 1 & 0.74826 & 0.74826 & 0.10127 \\ 1 & 0.81465 & 0.27117 & 0.33121 \\ 1 & 0.71177 & 0.09633 & 0.71177 \\ 1 & 0.88250 & 0.16122 & 0.65377 \end{bmatrix}$$

$$\Phi^T = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0.74826 & 0.81465 & 0.71177 & 0.88250 \\ 0.74826 & 0.27117 & 0.09633 & 0.16122 \\ 0.10127 & 0.33121 & 0.71177 & 0.65377 \end{bmatrix}$$

$$(\Phi^T \cdot \Phi + \lambda \cdot I)^{-1} \cdot \Phi^T = \begin{bmatrix} 0.14105 & 0.35022 & 0.35575 & -0.30185 \\ -0.09064 & 0.43823 & -0.50361 & 0.53370 \\ 0.99394 & -0.50615 & -0.13690 & -0.16477 \\ -0.31222 & -0.65246 & 0.72647 & 0.42436 \end{bmatrix}$$

$$\vec{w} = \begin{bmatrix} 0.33914 \\ 0.19945 \\ 0.40096 \\ -0.29600 \end{bmatrix}$$

Assim, a regressão de Ridge obtida foi:

$$\hat{z} = 0.33914 + 0.19945 \cdot \phi_1 + 0.40096 \cdot \phi_2 - 0.29600 \cdot \phi_3$$

b) Para calcular o RMSE (root mean square error) foi utilizada a seguinte fórmula:

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(z_i - \hat{z}_i)^2} \tag{5}$$

em que,

$$\hat{z}_i = \vec{w}^T \cdot \vec{\phi_i} \tag{6}$$

Targets estimados:

$$\hat{z}_1 = 0.75843$$

$$\hat{z}_2 = 0.51231$$

$$\hat{z}_3 = 0.30905$$

$$\hat{z}_4 = 0.38629$$

Assim, o RMSE obtido foi:

$$RMSE = 0.06508$$

2. É importante referir que para este exercício se utilizou a seguinte notação: $L^{\text{label}}_{observation}$
   As fórmulas utilizadas foram:

$$\vec{x}^{[p]} = \phi(\vec{W}^{[p]} \cdot \vec{x}^{[p-1]} + \vec{b}^{[p]}) \tag{7}$$

$$\vec{\delta}^{[p]} = \frac{\partial E}{\partial \vec{x}^{[p]}} \circ \frac{\partial \vec{x}^{[p]}}{\partial \vec{z}^{[p]}} = (\vec{x}^{[p]} - \vec{t}) \circ \phi'(\vec{z}^{[p]}), \text{ para a última layer} \tag{8}$$

$$\vec{\delta}^{[p]} = (\frac{\partial \vec{z}^{[p+1]}}{\partial \vec{x}^{[p]}})^T \cdot \vec{\delta}^{[p+1]} \circ \frac{\partial \vec{x}^{[p]}}{\partial \vec{z}^{[p]}} = (\vec{W}^{[p+1]})^T \cdot \vec{\delta}^{[p+1]} \circ \phi'(\vec{z}^{[p]}), \text{ para as outras layers} \tag{9}$$

$$\vec{W}^{[p]} = \vec{W}^{[p]} - \eta \cdot \frac{\partial E}{\partial \vec{W}^{[p]}} = \vec{W}^{[p]} - \eta \cdot \vec{\delta}^{[p]} \cdot (\vec{x}^{[p-1]})^T \tag{10}$$

$$\vec{b}^{[p]} = \vec{b}^{[p]} - \eta \cdot \frac{\partial E}{\partial \vec{b}^{[p]}} = \vec{b}^{[p]} - \eta \cdot \vec{\delta}^{[p]} \tag{11}$$

   Estas expressões são válidas para squared error loss function.
   Dados necessários para começar o algoritmo:

$$\vec{x}_1^{[0]} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, t_1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \vec{x}_2^{[0]} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix}, t_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

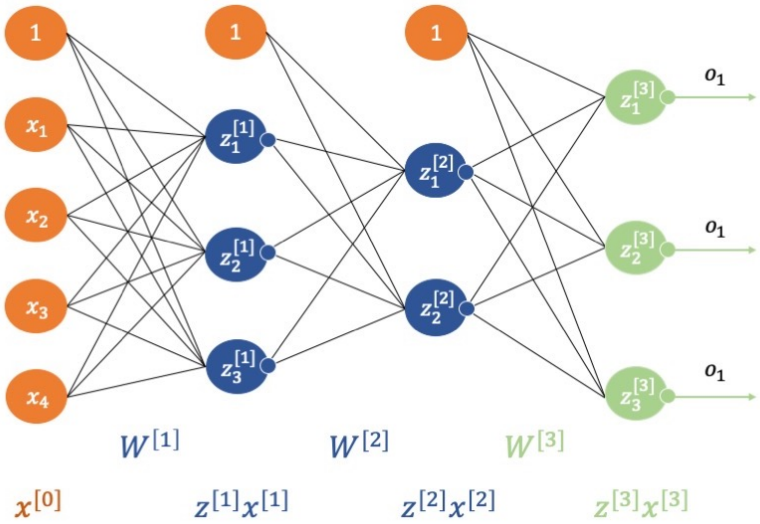
$$W^{[1]} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}, b^{[1]} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix},$$

$$W^{[2]} = \begin{bmatrix} 1 & 4 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}, b^{[2]} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix},$$

$$W^{[3]} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 3 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, b^{[3]} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\phi = tanh(0.5x - 2),\ \phi' = 0.5 * (1 - tanh^2(0.5x - 2))$$

Guia de rede considerado:



$$\hat{Z} = X^{[3]} = \Phi^{[3]}(Z^{[3]}) = \Phi^{[3]}(W^{[3]} \cdot X^{[2]} + b^{[3]})$$

$$X^{[2]} = \Phi^{[2]}(Z^{[2]}) = \Phi^{[2]}(W^{[2]} \cdot X^{[1]} + b^{[2]})$$

$$X^{[1]} = \Phi^{[1]}(Z^{[1]}) = \Phi^{[2]}(W^{[1]} \cdot X^{[0]} + b^{[1]})$$

Primeiro é necessário realizar (forward) propagation para obter os valores das observações:

- Para a primeira observação:

$$z_1^{[1]} = W^{[1]} \cdot x_1^{[0]} + b^{[1]} = \begin{bmatrix} 5 \\ 6 \\ 5 \end{bmatrix} \implies x_1^{[1]} = \phi(z_1^{[1]}) = \begin{bmatrix} 0.46212 \\ 0.76159 \\ 0.46212 \end{bmatrix}$$

$$z_1^{[2]} = W^{[2]} \cdot x_1^{[1]} + b^{[2]} = \begin{bmatrix} 4.97061 \\ 2.68583 \end{bmatrix} \implies x_1^{[2]} = \phi(z_1^{[2]}) = \begin{bmatrix} 0.45048 \\ -0.57642 \end{bmatrix}$$

$$z_1^{[3]} = W^{[3]} \cdot x_1^{[2]} + b^{[3]} = \begin{bmatrix} 0.87406 \\ 1.77503 \\ 0.87406 \end{bmatrix} \implies x_1^{[3]} = \phi(z_1^{[3]}) = \begin{bmatrix} -0.91590 \\ -0.80494 \\ -0.91590 \end{bmatrix}$$

- Para a segunda observação:

$$z_2^{[1]} = W^{[1]} \cdot x_2^{[0]} + b^{[1]} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \implies x_2^{[1]} = \phi(z_2^{[1]}) = \begin{bmatrix} -0.90515 \\ -0.90515 \\ -0.90515 \end{bmatrix}$$

$$z_2^{[2]} = W^{[2]} \cdot x_2^{[1]} + b^{[2]} = \begin{bmatrix} -4.43089 \\ -1.71545 \end{bmatrix} \implies x_2^{[2]} = \phi(z_2^{[2]}) = \begin{bmatrix} -0.99956 \\ -0.99343 \end{bmatrix}$$

$$z_2^{[3]} = W^{[3]} \cdot x_2^{[2]} + b^{[3]} = \begin{bmatrix} -0.99300 \\ -2.99212 \\ -0.99300 \end{bmatrix} \implies x_2^{[3]} = \phi(z_2^{[3]}) = \begin{bmatrix} -0.98652 \\ -0.99816 \\ -0.98652 \end{bmatrix}$$

Depois é necessário realizar (backward) propagation dos erros da última camada para a primeira:

- Para a primeira observação:

$$\delta_1^{[3]} = (x_1^{[3]} - t_1) \circ \phi'(z_1^{[3]}) = \begin{bmatrix} -0.07379 \\ -0.31773 \\ -0.07379 \end{bmatrix}$$

$$\delta_1^{[2]} = (W^{[3]})^T \cdot \delta_1^{[3]} \circ \phi'(z_1^{[2]}) = \begin{bmatrix} -0.43870 \\ -0.15535 \end{bmatrix}$$

$$\delta_1^{[1]} = (W^{[2]})^T \cdot \delta_1^{[2]} \circ \phi'(z_1^{[1]}) = \begin{bmatrix} -0.23359 \\ -0.40110 \\ -0.23359 \end{bmatrix}$$

- Para a segunda observação:

$$\delta_2^{[3]} = (x_2^{[3]} - t_2) \circ \phi'(z_2^{[3]}) = \begin{bmatrix} -0.02660 \\ -0.00183 \\ -0.01321 \end{bmatrix}$$

$$\delta_2^{[2]} = (W^{[3]})^T \cdot \delta_2^{[3]} \circ \phi'(z_2^{[2]}) = \begin{bmatrix} -1.97439 \cdot 10^{-5} \\ -2.72552 \cdot 10^{-4} \end{bmatrix}$$

$$\delta_2^{[1]} = (W^{[2]})^T \cdot \delta_2^{[2]} \circ \phi'(z_2^{[1]}) = \begin{bmatrix} -2.64099 \cdot 10^{-5} \\ -3.17617 \cdot 10^{-5} \\ -2.64099 \cdot 10^{-5} \end{bmatrix}$$

Por fim é necessário atualizar os pesos e os bias. Como estamos a realizar um batch gradient descent update (com learning rate igual a 0.1), a expressão para os pesos atualizados é:

$$W^{[p]} = W^{[p]} - \eta \cdot (\delta_1^{[p]} \cdot (x_1^{[p-1]})^T + \delta_2^{[p]} \cdot (x_2^{[p-1]})^T) \tag{12}$$

Assim, os pesos e os bias atualizados foram:

$$W^{[1]} = W^{[1]} - 0.1 \cdot (\delta_1^{[1]} \cdot (x_1^{[0]})^T + \delta_2^{[1]} \cdot (x_2^{[0]})^T) = \begin{bmatrix} 1.02336 & 1.02336 & 1.02336 & 1.02336 \\ 1.04011 & 1.04011 & 2.04011 & 1.04011 \\ 1.02336 & 1.02336 & 1.02336 & 1.02336 \end{bmatrix}$$

$$b^{[1]} = b^{[1]} - 0.1 \cdot (\delta_1^{[1]} + \delta_2^{[1]}) = \begin{bmatrix} 1.02336 \\ 1.04011 \\ 1.02336 \end{bmatrix}$$

$$W^{[2]} = W^{[2]} - 0.1 \cdot (\delta_1^{[2]} \cdot (x_1^{[1]})^T + \delta_2^{[2]} \cdot (x_2^{[1]})^T) = \begin{bmatrix} 1.02027 & 4.03341 & 1.02027 \\ 1.00715 & 1.01181 & 1.00715 \end{bmatrix}$$

$$b^{[2]} = b^{[2]} - 0.1 \cdot (\delta_1^{[2]} + \delta_2^{[2]}) = \begin{bmatrix} 1.04387 \\ 1.01556 \end{bmatrix}$$

$$W^{[3]} = W^{[3]} - 0.1 \cdot (\delta_1^{[3]} \cdot (x_1^{[2]})^T + \delta_2^{[3]} \cdot (x_2^{[2]})^T) = \begin{bmatrix} 1.00067 & 0.99310 \\ 3.01413 & 0.98150 \\ 1.00200 & 0.99443 \end{bmatrix}$$

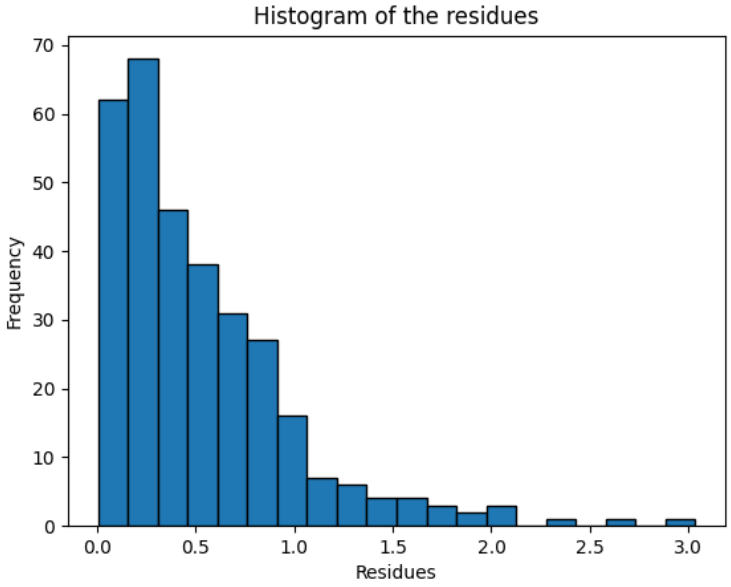
$$b^{[3]} = b^{[3]} - 0.1 \cdot (\delta_1^{[3]} + \delta_2^{[3]}) = \begin{bmatrix} 1.01004 \\ 1.03196 \\ 1.00870 \end{bmatrix}$$

Programming - Código Python e Resultados Obtidos

1. Utilizamos um training-test split de 80-20, ou seja 80% dos dados foram utilizados para treinar o modelo e 20% para testá-lo.
   De modo a minimizar o erro devido à aleatoriedade do algoritmo, o output final considerado foi a média de 10 outputs de 10 regressores MLP estocásticos com sementes de 1 a 10. Os resíduos foram calculados através da seguinte fórmula:

$$\text{residual} = |z - \hat{z}| \tag{13}$$

   O histograma dos resíduos encontra-se representado na seguinte figura:



   Observando o histograma, conclui-se que a frequência diminui significativamente com o crescimento do valor absoluto dos resíduos. Isto significa que a maior parte da diferença entre o valor real e o valor previsto pelo MLP é pequena.

   Códio Utilizado:

```
import pandas as pd, numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.neural_network import MLPRegressor

# Reading the csv file
df = pd.read_csv('Homework3/winequality-red.csv')
# Separating the variables from the target
variables = df.drop("quality", axis= 1)
target = df['quality']

# Training Test Split
variables_train, variables_test, target_train, target_test=
    train_test_split(variables, target,
```

```
            train_size=0.8, stratify=target, random_state=0)

y_pred = np.zeros(len(target_test))

# Average the mlp regressor
for i in range(1, 11):
    # Learn the MLP regressor
    mlp = MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(10,10), activation='relu
    ', early_stopping=True, validation_fraction=0.2, random_state=i)
    #Predict output
    y_pred += mlp.fit(variables_train,target_train).predict(
    variables_test)

y_pred = y_pred/10
first_rmse = np.sqrt(np.mean((target_test - y_pred)**2))

######### Exercise 1 ##########

# Calculate the residues
residues = abs(target_test - y_pred)
# Plot the residues

plt.hist(residues, edgecolor='darkblue', bins=20)
plt.title('Histogram of the residues')
plt.xlabel('Residues')
plt.ylabel('Frequency')
plt.savefig('ex1_histogram.png')
plt.show()
```

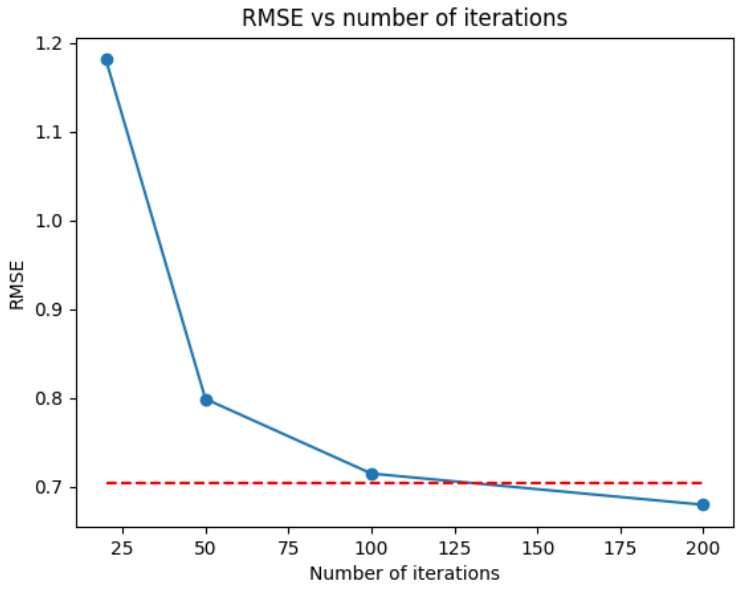
2. Uma vez que sabemos que a qualidade do vinho tem de ser um inteiro entre 1 e 10 podemos arredondar os valores previstos pelo MLP para o inteiro mais próximo e transformar os valores menores que 1 em 1 e os maiores que 10 em 10.
   Comparando os valores do erro médio absoluto (MAE) antes e depois deste processo conclui-se que o MAE antes (0.51167) é maior do que o novo (0.45625). Assim, podemos dizer que este processo melhora o desempenho do MLP.

   Código Utilizado:

```

########## Exercise 2 ##########

# Round and bound the predictions
rounded_predictions = np.round(y_pred)
min_value = 1
max_value = 10
rounded_and_bounded_predictions = np.clip(rounded_predictions,
    min_value, max_value)

# Calculate previous MAE
mae = np.mean(abs(target_test - y_pred))
#Calculate new MAE
mae_new = np.mean(abs(target_test - rounded_and_bounded_predictions
    ))

print('The previous MAE is: ', mae)
print('The new MAE is: ', mae_new)
```

```
17
18 if mae_new < mae:
19     print('The new MAE is lower than the previous one')
20 elif mae_new > mae:
21     print('The new MAE is higher than the previous one')
22 else:
23     print('The new MAE is equal to the previous one')
```

3. Até agora foram considerados MLP's com early stopping. Neste exercício vamos ver qual é o efeito do número máximo de iterações no desempenho do MLP, avaliado através do RMSE. Assim foram considerados 4 MLP's com números máximos de iterações iguais a 20, 50, 100 e 200. Da mesma maneira que antes, o modelo final considerado foi a média de 10 modelos com sementes de 1 a 10. No gráfico seguinte encontra-se representado o RMSE em função do número máximo de iterações.



Observando o gráfico, conclui-se que o RMSE diminui significativamente com o aumento do número máximo de iterações. No entanto, essa diminuição abranda à medida que se aumenta o número máximo de iterações.

Código utilizado:

```
1 # Calculate the RMSE for each number of iterations
2 rmse_final = []
3 iter_array = [20,50,100,200]
4 for iter in iter_array:
5     y_pred = np.zeros(len(target_test))
6     for i in range(1, 11):
7         # Learn the MLP regressor
8         mlp = MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(10,10), activation='
    relu', solver='adam', max_iter = iter, random_state=i)
9         #Predict output
```

```
        y_pred += mlp.fit(variables_train,target_train).predict(
    variables_test)
     y_pred = y_pred/10
     rmse_final.append(np.sqrt(np.mean((y_pred-target_test)**2)))

def const(x):
    return first_rmse

# Plot the RMSE
plt.plot(iter_array, rmse_final, '-o', label='RMSE')
plt.hlines(first_rmse, xmin=min(iter_array), xmax=max(iter_array),
    colors='r', linestyles='dashed')
plt.xlabel('Number of iterations')
plt.ylabel('RMSE')
plt.title('RMSE vs number of iterations')
plt.savefig('ex3_rmse.png')
plt.show()
```

4. Early stopping é uma técnica utilizada para combater o overfitting. O gráfico acima assemelha-se aos gráficos de overfitting mas não chega a subir ???????????'