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:

$$\hat{z}_1 = 0.75844$$

$$\hat{z}_2 = 0.51232$$

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

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

Assim, o RMSE obtido foi:

$$RMSE = 0.06508$$

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

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

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

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

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

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

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

$$\mathbf{x}_1^{[0]} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \mathbf{t}_1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \mathbf{x}_2^{[0]} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix}, \mathbf{t}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

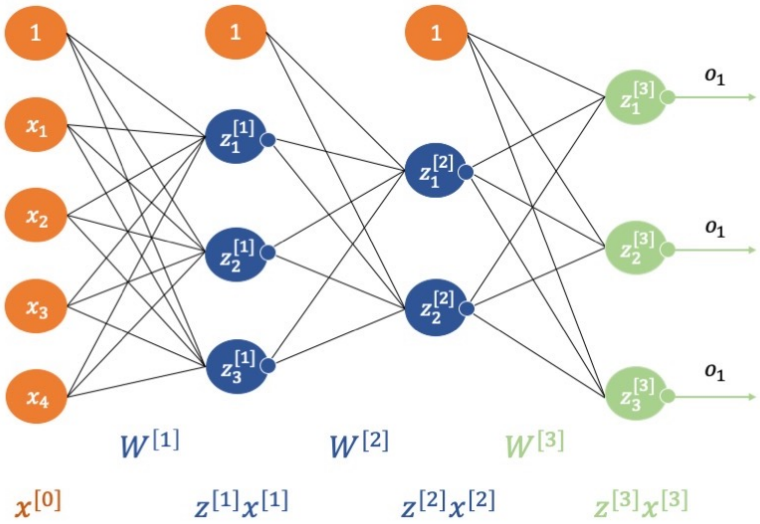
$$W^{[1]} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}, \mathbf{b}^{[1]} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

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

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

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

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:

$$\mathbf{z}_1^{[1]} = W^{[1]} \cdot \mathbf{x}_1^{[0]} + \mathbf{b}^{[1]} = \begin{bmatrix} 5 \\ 6 \\ 5 \end{bmatrix} \implies \mathbf{x}_1^{[1]} = \phi(\mathbf{z}_1^{[1]}) = \begin{bmatrix} 0.46212 \\ 0.76159 \\ 0.46212 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{z}_1^{[2]} = W^{[2]} \cdot \mathbf{x}_1^{[1]} + \mathbf{b}^{[2]} = \begin{bmatrix} 4.97061 \\ 2.68583 \end{bmatrix} \implies \mathbf{x}_1^{[2]} = \phi(\mathbf{z}_1^{[2]}) = \begin{bmatrix} 0.45048 \\ -0.57642 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{z}_1^{[3]} = W^{[3]} \cdot \mathbf{x}_1^{[2]} + \mathbf{b}^{[3]} = \begin{bmatrix} 0.87406 \\ 1.77503 \\ 0.87406 \end{bmatrix} \implies \mathbf{x}_1^{[3]} = \phi(\mathbf{z}_1^{[3]}) = \begin{bmatrix} -0.91590 \\ -0.80494 \\ -0.91590 \end{bmatrix}$$

- Para a segunda observação:

$$\mathbf{z}_2^{[1]} = W^{[1]} \cdot \mathbf{x}_2^{[0]} + \mathbf{b}^{[1]} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \implies \mathbf{x}_2^{[1]} = \phi(\mathbf{z}_2^{[1]}) = \begin{bmatrix} -0.90515 \\ -0.90515 \\ -0.90515 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{z}_2^{[2]} = W^{[2]} \cdot \mathbf{x}_2^{[1]} + \mathbf{b}^{[2]} = \begin{bmatrix} -4.43089 \\ -1.71545 \end{bmatrix} \implies \mathbf{x}_2^{[2]} = \phi(\mathbf{z}_2^{[2]}) = \begin{bmatrix} -0.99956 \\ -0.99343 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{z}_2^{[3]} = W^{[3]} \cdot \mathbf{x}_2^{[2]} + \mathbf{b}^{[3]} = \begin{bmatrix} -0.99300 \\ -2.99212 \\ -0.99300 \end{bmatrix} \implies \mathbf{x}_2^{[3]} = \phi(\mathbf{z}_2^{[3]}) = \begin{bmatrix} -0.98652 \\ -0.99816 \\ -0.98652 \end{bmatrix}$$

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

- Para a primeira observação:

$$\boldsymbol{\delta}_1^{[3]} = (\mathbf{x}_1^{[3]} - \mathbf{t}_1) \circ \phi'(\mathbf{z}_1^{[3]}) = \begin{bmatrix} -0.07379 \\ -0.31773 \\ -0.07379 \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{\delta}_1^{[2]} = (W^{[3]})^T \cdot \boldsymbol{\delta}_1^{[3]} \circ \phi'(\mathbf{z}_1^{[2]}) = \begin{bmatrix} -0.43870 \\ -0.15535 \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{\delta}_1^{[1]} = (W^{[2]})^T \cdot \boldsymbol{\delta}_1^{[2]} \circ \phi'(\mathbf{z}_1^{[1]}) = \begin{bmatrix} -0.23359 \\ -0.40110 \\ -0.23359 \end{bmatrix}$$

- Para a segunda observação:

$$\boldsymbol{\delta}_2^{[3]} = (\mathbf{x}_2^{[3]} - \mathbf{t}_2) \circ \phi'(\mathbf{z}_2^{[3]}) = \begin{bmatrix} -0.02660 \\ -0.00183 \\ -0.01321 \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{\delta}_2^{[2]} = (W^{[3]})^T \cdot \boldsymbol{\delta}_2^{[3]} \circ \phi'(\mathbf{z}_2^{[2]}) = \begin{bmatrix} -1.97439 \cdot 10^{-5} \\ -2.72552 \cdot 10^{-4} \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{\delta}_2^{[1]} = (W^{[2]})^T \cdot \boldsymbol{\delta}_2^{[2]} \circ \phi'(\mathbf{z}_2^{[1]}) = \begin{bmatrix} -2.64099 \cdot 10^{-5} \\ -3.17617 \cdot 10^{-5} \\ -2.64099 \cdot 10^{-5} \end{bmatrix}$$

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:

$$W^{[p]} = W^{[p]} - \eta \cdot (\boldsymbol{\delta}_1^{[p]} \cdot (\mathbf{x}_1^{[p-1]})^T + \boldsymbol{\delta}_2^{[p]} \cdot (\mathbf{x}_2^{[p-1]})^T) \tag{12}$$

Assim, os pesos e os bias atualizados foram:

$$W^{[1]} = W^{[1]} - 0.1 \cdot (\boldsymbol{\delta}_1^{[1]} \cdot (\mathbf{x}_1^{[0]})^T + \boldsymbol{\delta}_2^{[1]} \cdot (\mathbf{x}_2^{[0]})^T) = \begin{bmatrix} 1.02336 & 1.02336 & 1.02336 & 1.02336 \\ 1.04011 & 1.04011 & 2.04011 & 1.04011 \\ 1.02336 & 1.02336 & 1.02336 & 1.02336 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{b}^{[1]} = \mathbf{b}^{[1]} - 0.1 \cdot (\boldsymbol{\delta}_1^{[1]} + \boldsymbol{\delta}_2^{[1]}) = \begin{bmatrix} 1.02336 \\ 1.04011 \\ 1.02336 \end{bmatrix}$$

$$W^{[2]} = W^{[2]} - 0.1 \cdot (\boldsymbol{\delta}_1^{[2]} \cdot (\mathbf{x}_1^{[1]})^T + \boldsymbol{\delta}_2^{[2]} \cdot (\mathbf{x}_2^{[1]})^T) = \begin{bmatrix} 1.02027 & 4.03341 & 1.02027 \\ 1.00715 & 1.01181 & 1.00715 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{b}^{[2]} = \mathbf{b}^{[2]} - 0.1 \cdot (\boldsymbol{\delta}_1^{[2]} + \boldsymbol{\delta}_2^{[2]}) = \begin{bmatrix} 1.04387 \\ 1.01556 \end{bmatrix}$$

$$W^{[3]} = W^{[3]} - 0.1 \cdot (\boldsymbol{\delta}_1^{[3]} \cdot (\mathbf{x}_1^{[2]})^T + \boldsymbol{\delta}_2^{[3]} \cdot (\mathbf{x}_2^{[2]})^T) = \begin{bmatrix} 1.00067 & 0.99310 \\ 3.01413 & 0.98150 \\ 1.00200 & 0.99443 \end{bmatrix}$$

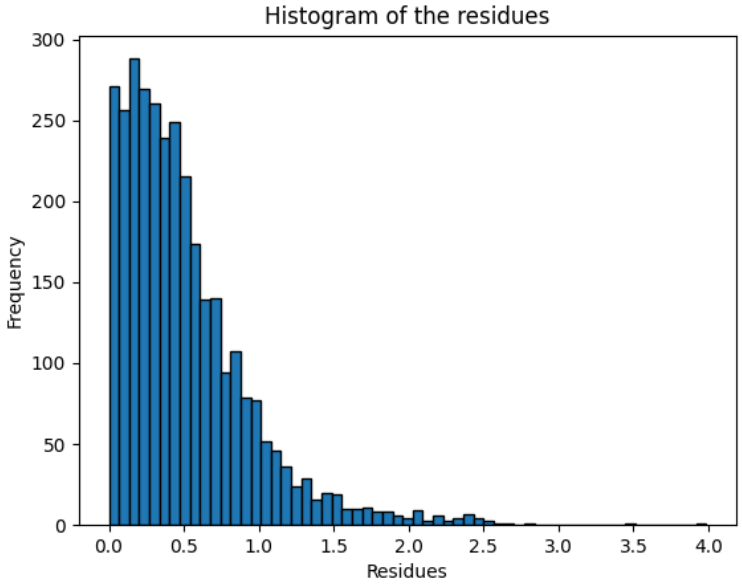
$$\mathbf{b}^{[3]} = \mathbf{b}^{[3]} - 0.1 \cdot (\boldsymbol{\delta}_1^{[3]} + \boldsymbol{\delta}_2^{[3]}) = \begin{bmatrix} 1.01004 \\ 1.03196 \\ 1.00870 \end{bmatrix}$$

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.
   A fórmula utilizada para calcular os resíduos foi:

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

   O histograma dos resíduos dos 10 MLP's (com sementes de 1 a 10) 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, logo a previsão dos MLP's em geral é boa.

   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
from sklearn.metrics import mean_absolute_error

# 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, random_state=0)

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

residues = np.array([])

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)
    #Calculate residues
    residue = abs(target_test - y_pred)
    residue = residue.to_numpy()
    residues = np.append(residues, residue)


#Plot all the residues
plt.hist(residues, edgecolor='black',bins='auto')
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 (arredondamento) e transformar os valores menores que 1 em 1 e os maiores que 10 em 10 (limitação).
   Para comparar o desempenho do MLP antes e depois destes processos, comparamos os MAE's obtidos.
   O MAE foi calculado através da seguinte fórmula:

$$MAE = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}|z_i - \hat{z}_i| \tag{14}$$

   Os valores obtidos foram os seguintes:

Processo aplicado	MAE
Nenhum	0.50972
Arredondamento	0.43875
Limitação	0.50972
Arredondamento e limitação	0.43875

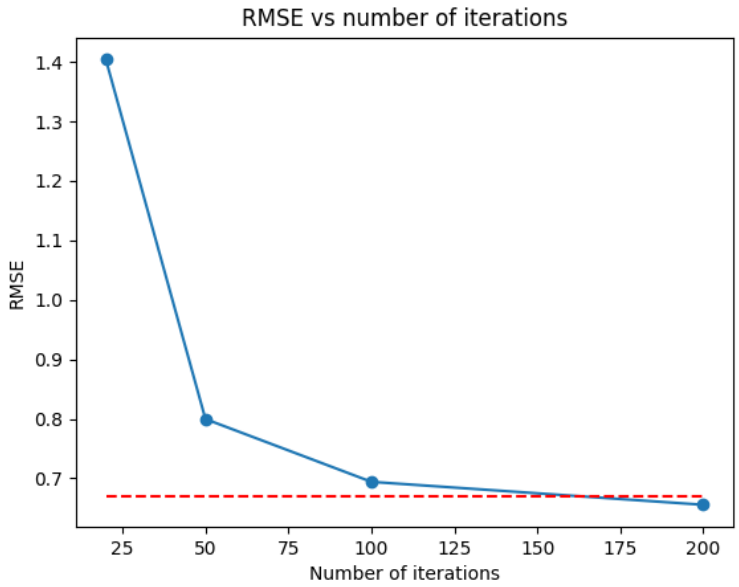
   Assim, conclui-se que para este dataset o arredondamento tem um feito positivo no desempenho do MLP, enquanto que a limitação não tem qualquer efeito.

Código Utilizado:

```
########## Exercise 2 ##########

# Round and bound the predictions
mae_array = np.array([])
mae_bounded_array = np.array([])
mae_rounded_array = np.array([])
mae_rounded_and_bounded_array = np.array([])

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)

    #Calculate MAE
    y_pred = mlp.fit(variables_train,target_train).predict(
    variables_test)
    mae = mean_absolute_error(target_test, y_pred)
    #mae = np.mean(abs(target_test - y_pred))
    mae_array = np.append(mae_array, mae)
    print(mae)
    #Calculate MAE - rounded
    y_pred_rounded = np.round(y_pred)
    mae_rounded = np.mean(abs(target_test - y_pred_rounded))
    mae_rounded_array = np.append(mae_rounded_array, mae_rounded)

    #Calculate MAE - bounded
    y_pred_bounded = np.clip(y_pred, a_min=1, a_max=10)
    mae_bounded = np.mean(abs(target_test - y_pred_bounded))
    mae_bounded_array = np.append(mae_bounded_array, mae_bounded)

    ##Calculate MAE - rounded and bounded
    y_pred_rounded_and_bounded = np.clip(y_pred_rounded, a_min=1,
    a_max=10)
    mae_rounded_and_bounded = np.mean(abs(target_test -
    y_pred_rounded_and_bounded))
    mae_rounded_and_bounded_array = np.append(
    mae_rounded_and_bounded_array, mae_rounded_and_bounded)

mean_mae = np.mean(mae_array)
mean_mae_rounded = np.mean(mae_rounded_array)
mean_mae_bounded = np.mean(mae_bounded_array)
mean_mae_rounded_and_bounded = np.mean(
    mae_rounded_and_bounded_array)

# Print the results
print('MAE (not rounded and not bounded): ', mean_mae)
print('MAE (rounded): ', mean_mae_rounded)
print('MAE (bounded): ', mean_mae_bounded)
print('MAE (rounded and bounded): ', mean_mae_rounded_and_bounded)
```

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 RMSE considerado foi a média dos 10 RMSE's de cada ums dos 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:

```
########## Exercise 3 ##########

# Calculate the RMSE for the old MLP regressor
sum_rmse_old = 0
for i in range(1, 11):
    #Learn the old MLP regressor
    mlp = MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(10,10), activation='relu', early_stopping=True, validation_fraction=0.2, random_state=i)
    #Predict old output
    y_pred_old = mlp.fit(variables_train,target_train).predict(variables_test)
    #Calculate old RMSE
    rmse = np.sqrt(np.mean((target_test - y_pred_old) ** 2))
    sum_rmse_old += rmse

average_rmse_old = np.mean(sum_rmse_old/10)

# Calculate the RMSE for each number of iterations
new_rmse_array = []
iter_array = [20,50,100,200]
for iter in iter_array:
    y_pred_new = np.zeros(len(target_test))
    sum_rmse_new = 0
    for i in range(1, 11):
```

```
23          # Learn the new MLP regressor
24          mlp = MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(10,10), activation='
    relu', max_iter = iter, random_state=i)
25          #Predict new output
26          y_pred_new = mlp.fit(variables_train,target_train).predict(
    variables_test)
27          #Calculate new RMSE
28          rmse = np.sqrt(np.mean((target_test - y_pred_new) ** 2))
29          sum_rmse_new += rmse
30      #Append new RMSE
31      new_rmse_array += [sum_rmse_new/10]
32
33  def const(x): return average_rmse_old
34
35  # Plot the RMSE
36  plt.plot(iter_array, new_rmse_array, '-o', label='Different max
    iteration MLP')
37  plt.hlines(average_rmse_old, xmin=min(iter_array), xmax=max(
    iter_array), colors='r', linestyles='dashed', label = 'Early
    stopping MLP')
38  plt.xlabel('Number of iterations')
39  plt.ylabel('RMSE')
40  plt.title('RMSE vs number of iterations')
41  plt.legend()
42  plt.savefig('ex3_rmse.png')
43  plt.show()
```

4. De um modo geral, o MLP com early stopping tem um desempenho melhor em comparação com um número fixo de iterações. Isto é, o RMSE obtido com early stopping é menor do que o RMSE obtido com um número fixo de iterações (20, 50 e 100). Para o número máximo de iterações igual a 200, o RMSE obtido com early stopping é maior do que o RMSE obtido com um número fixo de iterações. No entanto, a diferença entre os dois RMSE's é muito pequena.

   Early stopping é uma técnica utilizada para combater o overfitting. No entanto, pode impedir que o modelo alcance seu potencial total de ajuste se o critério de paragem utilizado não for o mais adequado (por ser demasiado elevado, por exemplo).

   Também é importante referir que definir um número fixo de iterações pode ser ineficiente, já que o modelo pode não precisar de tantas iterações para convergir para uma solução aceitável.

   O early stopping a 20% é um critério de paragem que fornece um certo nível de flexibilidade no treino do modelo. Ele permite que o treino continue até que o modelo comece a demonstrar um claro sinal de overfitting, mas também evita que seja encerrado prematuramente devido a flutuações no erro.