Ludwig-Maximilians-Universität München
Institut für Informatik
Dr. Volker Tresp
Franz Graf, Marisa Thoma

24.05.2011

Maschinelles Lernen und Data Mining

Sommersemester 2011

Übungsblatt 3

Besprechung des Übungsblattes am 09./10.06.2011

Aufgabe 3-1 Basisfunktionen von Neuronalen Netzen

Die Ausgabe eines neuronalen Netzes für einen Testvektor $\mathbf{x}_i$ ist definiert durch $f(\mathbf{x}_i) = \sum_{h=0}^{M_\phi - 1} w_h \phi_h(\mathbf{x}_i, \mathbf{v}_h)$.

Die Gewichte der einzelnen Neuronen können über die Backpropagation-Regel mit musterbasiertem Gradientenabstieg gelernt werden. In der Vorlesung wurden die neuronalen Netze mit sigmoiden Neuronen vorgestellt. Natürlich können auch andere Basisfunktionen verwendet werden.

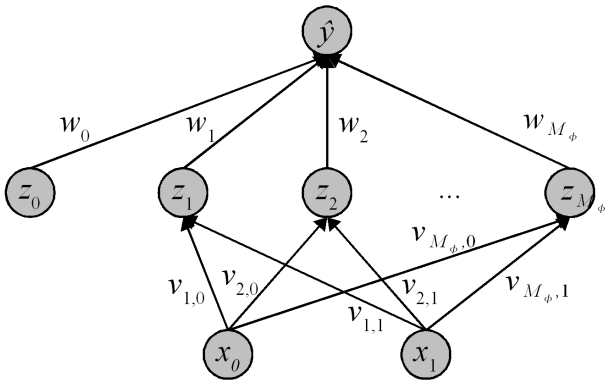
a) Welche Eigenschaften müssen diese Basisfunktionen erfüllen?

b) Ist eine Linearkombination $\phi(\mathbf{x}_i, \mathbf{v}_h) = z_h = \sum_{j=0}^{M} v_{h,j} x_{i,j}$ hierfür geeignet? Begründen Sie.

c) Ist die Anzahl der Parameter für $\phi(\mathbf{x}_i, \mathbf{v}_h)$ beschränkt? Können mehrere verschiedene Basisfunktionen für ein neuronales Netz verwendet werden?

Aufgabe 3-2 Ein einfaches neuronales Netz

Unten abgebildet sehen Sie ein zweischichtiges neuronales Netz mit einem Eingabeneuron $x \in \mathbb{R}$ und je einem Biasneuron $x_0 = z_0 = 1$ (d.h. $\mathbf{x}_i = (1, x_{i,1})^T$) in der Eingabeschicht und der versteckten Schicht.



Als Aktivierungsfunktion der versteckten Neuronen verwenden wir einen Sigmoiden, also

$$z_h = \phi(\mathbf{x}_i, \mathbf{v}_h) = \frac{1}{1 + \exp\left(-\sum_{j=0}^{M} v_{h,j} x_{i,j}\right)},$$

das Ausgangsneuron $\hat{y}$ wird wie üblich über eine Linearkombination gebildet.

b.w.

a) Zeigen Sie, dass gilt: $\frac{\partial z_h}{\partial v_{h,j}} = x_{i,j} \cdot z_h \cdot (1 - z_h)$

b) Drücken Sie den maximalen Wert von $\hat{y}$ in Abhängigkeit von $\mathbf{w}$ aus, wenn alle Ausgangsgewichte w_h ($h \in \{0, \ldots, M_\phi\}$) positiv sind. Was ist der minimale Wert?

c) Wie sieht $\hat{y}$ aus, wenn $v_{h,j} = 0$ für alle $j \in \{0, \ldots, M\}, h \in \{1, \ldots, M_\phi\}$? Welche Funktion erhalten Sie für $\hat{y}$, wenn alle $v_{h,j} = c, c \neq 0$?

Aufgabe 3-3 Kernkombinationen

Um einen selbstdefinierten Kern $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ für $\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j \in \mathbb{R}^n$ anzuwenden, muss für gewöhnlich gezeigt werden, dass es sich auch tatsächlich um einen legitimen Kern handelt. Da es recht aufwendig sein kann zu zeigen, dass für k das *Mercer Theorem* zutrifft, wird häufig explizit das Mapping der impliziten Basistransformationen angegeben: $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \phi(\mathbf{x}_i)^T \phi(\mathbf{x}_j)$.

Eine weitere beliebte Variante die Gültigkeit einer Kernfunktion zu zeigen ist die Rückführung auf eine Kombination aus Kernels, da für einige Operationen $\circ$ gilt, dass $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = k_1(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \circ k_2(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ ein legitimer Kernel ist.

Zeigen Sie dass für valide Kernelfunktionen $k_l(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j)$ mit $l \in 0, \ldots, n-1$ gilt:

a) **Skalierung**: Für $a > 0$ ist $k(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j) := a\, k_1(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j)$ ein Kernel.

b) **Summe**: $k(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j) := k_1(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j) + k_2(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j)$ ist ein Kernel.

c) **Linearkombination**: Für $w \in \mathbb{R}^n_+$ ist $k(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j) := \sum_{l=0}^{n-1} w_l\, k_l(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j)$ ein Kernel.

d) **Produkt**: $k(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j) := k_1(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j) \cdot k_2(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j)$ ist ein Kernel.

e) **Potenz**: Für ein $p \in \mathbb{N}_+ : k(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j) := k_1(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j)^p$ ist ein Kernel.

Aufgabe 3-4 Lineare Regression mit Gauss'schem Rauschen

Gegeben sei ein Datensatz D mit $d_i = (x_{i,1}, \ldots, x_{i,M}, y_i)^T$ auf N Datenpunkten mit M Variablen, dessen Zielgröße $\mathbf{y}$ linear von $\mathbf{X}$ abhängt. Aufgrund von technischen Ungenauigkeiten wurden die Eingangsvariablen von $\mathbf{X}$ jedoch nur verrauscht aufgenommen, d.h.:

$$y_i = x_i^T \mathbf{w} + \epsilon_i \,,$$

wobei ϵ_i den Rauschfehler von Datenpunkt i darstellt. Nehmen wir weiter an, dass ϵ gaussverteilt ist:

$$P(\epsilon_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{1}{2\sigma^2}\epsilon_i^2} \,.$$

Damit können wir die Verteilung von $\mathbf{y}$ in Abhängigkeit der Variablen $\mathbf{X}$ und des Modells $\mathbf{w}$ darstellen als

$$P(y_i|x_i, \mathbf{w}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(y_i - x_i^T\mathbf{w})^2} \,.$$

a) Bestimmen Sie den Parameter $\hat{\mathbf{w}}$ der die Wahrscheinlichkeiten der Trainings-Daten $P(D|\mathbf{w})$ maximiert. Verwenden Sie hierfür den *Maximum-Likelihood Schätzer*: $\hat{\mathbf{w}}^{\text{ML}} = \arg\max_{\mathbf{w}} P(D|\mathbf{w})$.

Bei der Bestimmung der Likelihoodfunktion können Sie davon ausgehen, dass $\mathbf{w}$ unabhängig von den Eingangsdaten $\mathbf{X}$ verteilt ist.

b) Eine beliebte a priori Verteilungsannahme für Zufallsvariablen in einem Bayes'schen Ansatz ist

$$P(\mathbf{w}) = \frac{1}{(2\pi\alpha^2)^{\frac{M}{2}}} e^{\left(-\frac{1}{2\alpha^2}\sum_{j=0}^{M-1} w_j^2\right)}$$

Berechnen Sie den Paramter $\hat{\mathbf{w}}$, der den Ausdruck $P(\mathbf{w})P(D|\mathbf{w})$ maximiert. Ergibt sich dadurch eine neue Interpretation des λ-Termes aus der regularisierten Kostenfunktion (*penalized least squares* (PLS))?