

Ficha de Unidade Curricular – (Versão A3ES 2018-2023)

1. Caracterização da Unidade Curricular.

1.1. Designação da unidade curricular (1.000 carateres).

Modelação Avançada e Simulação /
Advanced Modelling and Simulation

1.2. Sigla da área científica em que se insere (100 carateres).

MAT

1.3. Duração¹ (100 carateres).

Semestral

1.4. Horas de trabalho² (100 carateres).

162

1.5. Horas de contacto³ (100 carateres).

67.5

1.6. ECTS (100 carateres).

6

1.7. Observações⁴ (1.000 carateres).

1.7. Remarks (1.000 carateres).

2. Docente responsável e respetiva carga letiva na Unidade Curricular (preencher o nome completo) (1.000 carateres).

Gonçalo Nuno Rosado Morais - 33.75

3. Outros docentes e respetivas cargas letivas na unidade curricular (1.000 carateres).

Ricardo Mariano Roque Capela Enguiça - 33.75

4. Objetivos de aprendizagem (conhecimentos, aptidões e competências a desenvolver pelos estudantes). (1.000 carateres).

1. Construir modelos aplicados à resolução de problemas concretos;
2. Ser capaz de a partir de um modelo matemático, construir uma implementação computacional numa linguagem apropriada e a partir desta efectuar simulações eficientes;
3. Ser capaz de concluir as vulnerabilidades do modelo e corrigir as respectivas insuficiências, de criticar as soluções encontradas e perceber de que forma estas podem ser melhoradas;
4. Compreender a distinção entre inferência Bayesiana e inferência clássica e aplicar a primeira a problemas de previsão e classificação;
5. Ser capaz de construir modelos gráficos de forma a caracterizar a estrutura de dependências de um problema e, a partir destes, produzir simulações;
6. Ser capaz de compreender o funcionamento de uma rede neuronal e dos respectivos algoritmos de aprendizagem;
7. Distinguir os vários tipos de redes neuronais e os respectivos traços característicos;
8. Ser capaz de acompanhar genericamente os avanços tecnológicos na nesta área e perceber os novos desafios colocados.

4. Intended learning outcomes (knowledge, skills and competences to be developed by the students). (1.000 characters).

1. Be able to construct models applied to solving concrete problems;
2. From a mathematical model, to be able to build a computational implementation in an appropriate language and from this to carry out efficient simulations;
3. Be able to understand the vulnerabilities of the model and correct their inadequacies, to criticize the solutions found and realize how they can be improved;
4. Understand the distinction between Bayesian inference and classical inference and apply the first to prediction and classification problems;
5. To be able to construct graphical models in order to characterize the structure of dependencies of a problem and, from these, to produce simulations;
6. Be able to understand the functioning of a neural network and its learning algorithms;
7. Distinguish the various types of neural networks and their characteristic features;
8. Be able to follow generically the technological advances in this area and realize the new challenges posed.

5. Conteúdos programáticos (1.000 carateres).

1. Conceitos fundamentais de Estatística Bayesiana;
2. Modelos de Markov;
3. Campos de Markov e simulação estocástica;
4. Modelos generativos e Máquinas de Boltzmann restritas;
5. Algoritmos de aprendizagem em redes neuronais;
6. Redes de convolução;
7. Redes recorrentes.

5. Syllabus (1.000 characters).

1. Fundamental aspects of Bayesian statistics;
2. Markov Models;
3. Markov Random Fields and Stochastic Simulation;
4. Generative models and Restricted Boltzmann machines;
5. Learning algorithms in artificial neural networks;
6. Convolutional Neural Networks;
7. Recurrent Neural Networks.

6. Demonstração da coerência dos conteúdos programáticos com os objetivos de aprendizagem da unidade curricular (1.000 carateres).

Os três primeiros objectivos são os aspectos fundamentais de uma disciplina de modelação. Para atingir estes objectivos, os pontos 1 e 2 dos conteúdos programáticos serão a base fundamental para sedimentar esta realimentação biunívoca entre o modelo e a realidade. Nesse mesmo sentido, o ponto 4 dos objectivos volta a estar ligado aos mesmos conteúdos programáticos, pois a natureza dos algoritmos que permitem efectuar a simulação de modelos de Markov são naturalmente bayesianos. O ponto 5 dos objectivos é atingido através da codificação do problema através de um grafo não orientado. Como culminar deste processo, chegamos aos chamados Campos de Markov (ponto 3 dos conteúdos). A partir daqui estamos em condições de proceder a simulações estocásticas com toda a generalidade possível.

Os pontos 6, 7 e 8 dos objectivos são ligados aos pontos 4-7 dos conteúdos. Com os modelos generativos e máquinas de Boltzmann (restritas), temos um primeiro encontro com algoritmos em que a optimização é efectuada através da minimização da energia do sistema. Com esta abordagem torna-se possível a generalização de outros algoritmos (PCA, ICA, etc) para problemas fora do âmbito da formulação original. Os dois últimos pontos dos conteúdos, permitirão que os alunos tenham contacto com dois modelos de redes neuronais que estão na vanguarda do conhecimento actual, permitindo deste modo atingir os dois últimos pontos dos objectivos.

6. Evidence of the syllabus coherence with the curricular unit's intended learning outcomes (1.000 characters).

The first three objectives are the fundamental aspects of a modeling course. In order to achieve these objectives, points 1 and 2 of the programmatic contents will be the fundamental basis to sediment this one-to-one feedback between the model and reality. In the same sense, point 4 of the objectives is again related to the same programmatic content, since the nature of the algorithms that allow the simulation of Markov models have a Bayesian nature.

Point 5 of the objectives is reached by coding the problem through an undirected graph. As a culmination of this process, we come to the so-called Markov Random Fields (point 3 of the contents). From here we are in a position to carry out stochastic simulations with as much generality as possible.

Points 6, 7 and 8 of the objectives are linked to points 4-7 of the contents. With the generative models and Boltzmann machines (restricted), we have a first encounter with algorithms in which the optimization is carried out by minimizing the energy of the system. With this approach it becomes possible to generalize other algorithms (PCA, ICA, etc.) to problems outside the scope of the original formulation. The last two points of the contents will allow the students to have contact with two artificial neural network models that are at the forefront of current knowledge, thus allowing to reach the last two points of the objectives.

7. Metodologias de ensino (avaliação incluída) (1.000 carateres).

Metodologias de Ensino:

Ensino teórico prático, estando previstas cerca de 67.5 horas de contacto. O tempo total de trabalho do estudante é de 162 horas.

Nas aulas teórico-práticas é apresentada e fundamentada a teoria, a par de exemplos de aplicação, e são resolvidos exercícios. Algumas aulas são dedicadas à resolução de exercícios de aplicação direta e à resolução de problemas, individualmente ou em grupo, nos quais é dado especial ênfase a problemas aplicados.

O estudo individual deve ser complementado com a bibliografia indicada além da resolução de exercícios/problemas disponibilizados.

A avaliação de conhecimentos compreende dois elementos: a média das classificações obtidas em trabalhos a realizar periodicamente (NP) e um projecto final (NT), o qual pode ser realizada tanto em período de aulas como em período de exame.

A nota final do aluno, NF, será obtida através da fórmula

$$NF=0.5NT+0.5NP .$$

Para obter aprovação na unidade curricular o aluno deve obter uma nota mínima de 8 valores em NT e em NP e de 9.5 valores em NF.

7. Teaching methodologies (including assessment) (1.000 characters).

Practical theoretical instruction, with about 67.5 hours of contact being planned. The total work time of the student is 162 hours. In theoretical-practical classes the theory is presented and supported, along with examples of application, and exercises are solved. Some classes are dedicated to the solving of exercises of direct application and to the resolution of problems, individually or in group, in which emphasis is given to the computational implementation.

Following common practice in this area, preference will be given to implementations in Python, not neglecting the need to produce code in lower-level languages such as C/C ++.

The individual study should be complemented with the indicated bibliography besides the resolution of exercises/problems made available. The evaluation of knowledge comprises two elements: the average of the classifications obtained in works to be carried out periodically (NP) and a final project (NT), which can be carried out both in the class period and during the exam period. The final grade of the student, NF, will be obtained through the formula

$$NF = 0.5NT + 0.5NP.$$

To obtain approval in the course unit the student must obtain a minimum grade of 8 values in both NT and NP and of 9.5 values in NF.

8. Demonstração da coerência das metodologias de ensino com os objetivos de aprendizagem da unidade curricular (3.000 carateres).

As aulas teórico-práticas são essenciais a uma rigorosa e completa cobertura dos tópicos do programa, os quais surgem como resposta a situações e problemas práticos.

A análise de problemas, a respectiva modelação e simulação em contexto de aula permite ilustrar a aplicação prática dos conceitos e ferramentas estudadas, ao mesmo tempo que se aprofundam os conhecimentos teóricos.

Naturalmente, o conjunto de exemplos apresentados, pela sua organização, conteúdo e diversidade do grau de dificuldade, permitem ao aluno acompanhar todos os tópicos da matéria e são, a par de uma recolha bibliográfica mais extensa, os principais instrumentos do estudo individual.

Tendo em conta que o sucesso à matemática não é compatível com um estudo pontual exclusivamente pré-avaliação, torna-se recomendável a implementação de processos que contrariem esta tendência. Neste sentido, semanalmente serão apresentados um conjunto de exercícios teóricos/computacionais, para serem resolvidos individualmente ou em grupo, de maneira a que os alunos acompanhem a matéria leccionada.

Para muitos dos problemas apresentados nesta disciplina não foi até hoje encontrada uma solução ótima. Neste sentido, uma atitude crítica e comparativa por parte dos alunos face às soluções encontradas, terá de ser reforçada, contribuindo positivamente para a independência desejada nesta fase da graduação.

8. Evidence of the teaching methodologies coherence with the curricular unit's intended learning outcomes (3.000 characters).

Theoretical-practical classes are essential to a rigorous and complete coverage of the program topics, which arise in response to practical situations and problems. The analysis of problems, the respective modeling and simulation in class context allows to illustrate the practical application of the concepts and tools studied, while at the same time deepening the theoretical knowledge.

Naturally, the set of examples presented, by their organization, content and diversity of degree of difficulty, allows the student to follow all the topics of the subject and are, along with a more extensive bibliographical collection, the main instruments of the individual study.

Taking into account that success in mathematics is not compatible with an exclusively pre-evaluation punctual study, it is advisable to implement processes that contradict this tendency. In this sense, weekly will be presented a set of theoretical / computational exercises, to be solved individually or in a group, so that students follow the lesson.

For many of the problems presented in this course, an optimal solution has not yet been found. In this sense, a critical and comparative attitude on the part of the students regarding the solutions found, will have to be reinforced, contributing positively to the desired independence in a discipline at this stage of the course.

9. Bibliografia de consulta/existência obrigatória (1.000 carateres).

1. Gonçalo Morais, "Modelação Avançada e Simulação", (Reference book), *in progress*;
2. Kevin P. Murphy, "Machine Learning: A probabilistic Perspective", MIT Press, 2012.
2. Pierre Brémaud, "Discrete Probability Models and Methods", Springer, 2017.
3. Højsgaard, S., et al., "Graphical Models with R", Springer, 2012.
4. MacKay, D., Information Theory, Inference and Learning Algorithms, Cambridge University Press, 2003.
5. Bengio, Y., et. Al, "Deep Learning", MIT Press, 2016

¹ Anual, semestral, trimestral, ...

² Número total de horas de trabalho.

³ Discriminadas por tipo de metodologia adotado (T - Ensino teórico; TP - Ensino teórico-prático; PL - Ensino prático e laboratorial; TC - Trabalho de campo; S - Seminário; E - Estágio; OT - Orientação tutorial; O - Outro).

⁴ Assinalar sempre que a unidade curricular seja optativa.