

## SY19 - TD/TP 3

### *Réseaux de neurones : Optimisation de l'architecture*

Automne 2013

#### Exercice I

Considérons le réseau de neurones de la Figure 1. Il possède deux entrées, un neurone caché et un neurone de sortie. Chaque neurone est supposé être un neurone de McCulloch-Pitts.

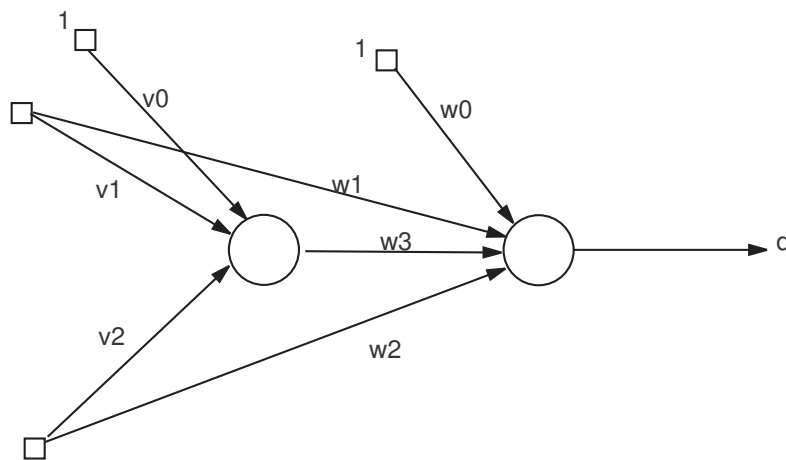


FIGURE 1 – Structure du réseau

Calculer les frontières de décision obtenues avec les poids suivants :  $v_0 = -1.5$ ,  $v_1 = 1$ ,  $v_2 = 1$ ,  $w_0 = -0.5$ ,  $w_1 = 1$ ,  $w_2 = 1$  et  $w_3 = -2$ . Représenter les régions de décision obtenues et montrer que ce réseau peut répondre au problème XOR.

#### Exercice II

##### Problématique

Le but de ce TP est la mise en œuvre d'un algorithme basé sur les réseaux de neurones pour la classification.

##### Travail Préliminaire

#####

```
p1 <- 0.25
p2 <- -0.25
p3 <- 0.25
p4 <- 0.25
```

```
n <- 200
```

```

s1 <- c(1,2)
s2 <- c(2,1)
s3 <- c(1.5,2)
s4 <- c(1,1)

s <- rbind(s1,s2,s3,s4)

m1 <- c(4,6)
m2 <- c(6,1)
m3 <- c(-4,-4)
m4 <- c(0,0)

m <- rbind(m1,m2,m3,m4)

c <- sample(c(1,2,3,4),size=n,prob=c(p1,p2,p3,p4),replace=TRUE)
x<- cbind(rnorm(n,m[c,1],s[c,1]),rnorm(n,m[c,2],s[c,2]))

couleur <- rep("red",n)

couleur[c==2]<-"blue"
couleur[c==3]<-"green"
couleur[c==4]<-"yellow"

plot(x,col=couleur)

# Frontiere de Bayes

len<-50

xp<-seq(min(x[,1]),max(x[,1]), length=len)
yp<-seq(min(x[,2]),max(x[,2]), length=len)

grille<-expand.grid(z1=xp,z2=yp)

Z<-p1*dnorm(grille[,1],m[1,1],s[1,1])*dnorm(grille[,2],m[1,2],s[1,2])
Z<-cbind(Z,p2*dnorm(grille[,1],m[2,1],s[2,1])*dnorm(grille[,2],m[2,2],s[2,2]))
Z<-cbind(Z,p3*dnorm(grille[,1],m[3,1],s[3,1])*dnorm(grille[,2],m[3,2],s[3,2]))
Z<-cbind(Z,p4*dnorm(grille[,1],m[4,1],s[4,1])*dnorm(grille[,2],m[4,2],s[4,2]))

zp<-Z[,4] - pmax(Z[,3],Z[,2], Z[,1])
contour(xp,yp,matrix(zp,len),add=TRUE,levels=0,drawlabels=FALSE)

zp<-Z[,1] - pmax(Z[,2], Z[,3],Z[,4])
contour(xp,yp,matrix(zp,len),add=TRUE,levels=0,drawlabels=FALSE)

zp <- Z[,2] - pmax(Z[,1], Z[,3],Z[,4])
contour(xp,yp,matrix(zp,len),add=TRUE,levels=0,drawlabels=FALSE)

```

```
#####
```

Question 1.

1. Quelles sont les 4 lois utilisées pour générer les observations de l'ensemble d'apprentissage

appartenant à 4 places ?

2. Donner la règle de Bayes qui permet de répondre à un problème de classification à  $c$  classes.
3. Développer la règle de Bayes pour arriver à la solution donnée dans le code ci-dessus. Vous montrez surtout comment on pourra décomposer la densité de la loi normale multidimensionnelle en un produit de deux lois monodimensionnelles.

## Réseaux de neurones sur des données simulées

Sous R, la fonction `nnet` de la librairie `nnet` permet de calculer les poids optimaux d'un perceptron à une couche cachée selon la technique de retro-propagation de l'erreur. La syntaxe simplifiée de la procédure `nnet` sous R est la suivante :

```
model <- nnet(x,T,size=3,decay=10,maxit=500,softmax=TRUE)
```

Les paramètres qui nous intéressent sont :

x	matrice $n \times p$ de variables quantitatives
T	matrice $n \times c$ contenant des 0 ou des 1 selon la classe des observations x
size	nombre de neurones de la couche cachée
decay	paramètre de régularisation
maxit=500	nombre maximal d'itérations effectuées par l'algorithme de rétro-propagation

On peut utiliser la fonction `predict` pour appliquer le réseau de neurones à de nouvelles données et obtenir les probabilités a posteriori d'appartenance aux classes. Par exemple, si grille est un ensemble de points de taille  $d \times p$  dont on veut avoir les classes :

> `predict(model,grille)` retourne une matrice de taille  $d \times c$  dont les colonnes contiennent des probabilités d'appartenance aux classes pour chaque point de grille.

Pour pouvoir appliquer un réseau de neurones sur les données décrites précédemment, on peut utiliser les commandes suivantes :

```
#####  
  
# Reseau de neurones : fonction nnet  
  
library(nnet)  
  
T<-class.ind(couleur)  
model<-nnet(x,T,size=1,decay=0,softmax=TRUE,maxit=500)  
  
# Valeur des poids  
  
model$wts  
  
# Proba. a posteriori d appartenance aux classes  
  
Z<-predict(model,grille)  
  
#####
```

Question 2. Pour `decay = 0` et `size = 5` :

1. Dessiner les frontières de décision obtenues avec un réseau de neurones sur les données générées précédemment.
2. Visualiser l'estimation des poids (à l'aide d'une figure par exemple).
3. Lancer plusieurs fois la procédure `nnet`. Obtenez-vous les mêmes résultats à chaque fois pour l'estimation des poids et des frontières de décision ?
4. Comment pouvez-vous expliquer ce phénomène ?

Dans les parties suivantes, il faut utiliser la commande `set.seed` pour initialiser le générateur aléatoire de R à la même valeur avant de lancer la procédure `nnet` :

```
#####

set.seed(1)
T <- class.ind(couleur)
model<-nnet(x,T,size=1,decay=0,softmax=TRUE,maxit=500)

#####
```

Question 3. On désire voir l'influence du nombre de neurones dans la couche cachée. Pour cela, pour `decay = 0`, faire varier `size` de 1 à 10 (nombre de neurones dans la couche cachée).

1. Commenter le nombre de "poids" à estimer en fonction de `size`, du nombre de neurones dans la couche d'entrée, et du nombre de neurones dans la couche de sortie.
2. Afficher les frontières de décision (dans le rapport vous le montrez seulement pour 4 valeurs de `size`). Dessiner la probabilité d'erreur empirique en fonction de `size`. Que constatez-vous sur la forme des frontières et sur le nombre de points mal-classés quand `size` augmente ?
3. Relancer la procédure sur un nouveau jeu de données (générer de la même manière que le précédent) en faisant varier `size` de 1 à 10. Dessiner la probabilité d'erreur en fonction de `size`.

Question 4. On désire voir l'influence du paramètre de régularisation.

1. Pour `size = 5`, comparer l'estimation des poids et des frontières pour `decay=0.001, 0.01, 0.1, 1, 10, 100` (montrer des figures et des commentaires associées).
2. Que pouvez-vous dire de la valeur des poids optimaux quand `decay` augmente ? (utiliser la fonction `boxplot` de R pour le dessin de la boîte à moustaches).
3. Comment expliquez-vous ce phénomène et comment cela se traduit-il sur la forme des frontières ?

## Classification des données de crabes

Le data.frame `crabs` de la librairie `nnet` contient des données réelles, recueillies par le biologiste Mahon (1974) à partir de mesures effectuées sur 200 crabes de la variété *Leptograpsus* et *Variegatus* sur la côte ouest de l'Australie. Les crabes sont des mâles ou des femelles qui sont bleus ou oranges. Pour chaque crabe, 5 mesures ont été effectuées :

- la longueur de la carapace (variable `CL`)
- la largeur de la carapace (variable `CW`)
- la taille du lobe frontal (variable `FL`)
- la largeur de l'arrière du crabe (variable `RW`)
- l'épaisseur du corps (variable `BD`)

On souhaite construire une règle de classification pour prédire le sexe ou bien la couleur d'un crabe à partir de deux mesures seulement : par exemple `FL` et `RW`. Vous pouvez représenter les crabes en coordonnées logarithmique selon leur sexe ou leur couleur à l'aide des commandes suivantes :

```
#####
# Separation selon le sexe
n <- 200
x <- log(cbind(crabs$FL,crabs$RW))
T<-class.ind(crabs$sex)
couleur <- rep('red',n)
couleur[crabs$sex == "M"] <- 'blue'
plot(x,col=couleur)

# Separation selon la couleur

x<- log(cbind(crabs$FL,crabs$RW))
T <- class.ind(crabs$sp)
couleur<- rep('red',n)
couleur[crabs$sp == "0"] <- 'blue'
plot(x,col=couleur)
#####
```

Question 5. Prédire le sexe des crabes à partir de FL et RW.

1. En prenant  $size = 6$  et  $decay = 0.001$ , et en utilisant la méthode de validation croisée (5 fold), donner une estimation de la probabilité d'erreur du réseau de neurones associé. Comparer avec la méthode LDA.
2. Dessiner les frontières de décision en mettant sur la figure les données d'apprentissage.

Question 6. Prédire la couleur des crabes à partir de FL et RW.

1. En prenant  $size = 5$  et  $decay = 0.001$ , et en utilisant la méthode de validation croisée (5 fold), donner une estimation de la probabilité d'erreur du réseau de neurones associé. Comparer avec la méthode LDA.
2. Dessiner les frontières de décision en mettant sur la figure les données d'apprentissage.