

Rédigé par : Astrid Jourdan

A l'intention de : Elèves ING2-MI

Durée : 5h00

Credit Scoring

Dans une banque, un service s'occupe d'accorder (ou pas) des prêts à des particuliers. Pour tous les prêts déjà accordés, elle dispose des informations suivantes : salaire, métier (fonction et secteur d'activité), nombre d'enfants, situation matrimoniale, Elle désire mettre en place un outil afin de prévoir à l'avance si un futur emprunteur posera ou pas des problèmes si on lui accorde un prêt.

- Identifier la tâche de Data Mining permettant de résoudre le problème.
Corrigé : Le banquier a réparti ses clients dans des classes qui traduisent la qualité du client en termes de remboursement. C'est le banquier qui définit ces classes a priori. Par ailleurs, on connaît pour chaque client les informations suivantes : salaire, métier (fonction et secteur d'activité), nombre d'enfants, situation matrimoniale, Il désire construire un modèle qui permet sur les crédits déjà accordés d'avoir une règle de décision pour affecter un potentiel client dans une des classes en connaissant les informations citées ci-dessus. Il s'agit donc d'une tâche de classification.
- Quelles sont les informations nécessaires pour alimenter l'outil ?
Corrigé : Il faut disposer de la liste des crédits déjà accordés. Pour chaque crédit, on doit connaître l'ensemble des informations données par le client (attributs non cibles) et la classe dans laquelle le banquier l'a affectée en fonction de la qualité de ces remboursements.

Exercice 1 : OR vs XOR

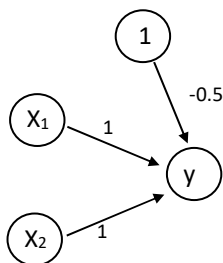
1) Considérons le problème du « OR » : les points (1,0), (1,1), (0,1) sont positifs et le point (0,0) est négatif. Soit le réseau,

$$\hat{y} = f(x_1 + x_2 - 0.5)$$

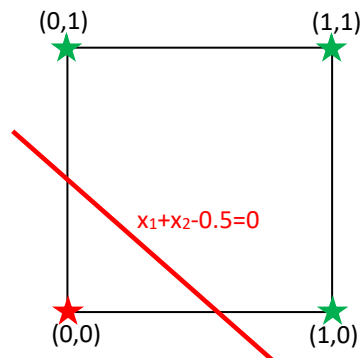
avec comme activation la fonction de Heaviside, $f(x) = 1$ si $x \geq 0$ et 0 sinon.

- Dessiner le réseau de neurones.
- Vérifier qu'il correspond bien au OR
- Faire une représentation graphique des points de la base d'apprentissage et de la frontière obtenue.
- La solution est-elle unique ? Peut-on utiliser une autre fonction d'activation ?

Correction



On a $\hat{y} = f(x_1 + x_2 - 0.5)$, d'où



| X_1 | X_2 | \hat{y} |
|-------|-------|----------------------------------|
| 0 | 0 | $0+0-0.5=-0.5 < 0 \Rightarrow 0$ |
| 0 | 1 | $0+1-0.5=0.5 > 0 \Rightarrow 1$ |
| 1 | 0 | $0+1-0.5=0.5 > 0 \Rightarrow 1$ |
| 1 | 1 | $1+1-0.5=1.5 > 0 \Rightarrow 1$ |

La solution n'est pas unique car plusieurs droites sont possibles pour séparer les positifs des négatifs. On peut utiliser une autre fonction d'activation car la sortie de réseau de neurones ne représente pas la classe mais la probabilité d'appartenir à la classe sachant x . Par exemple avec la fonction logit⁻¹, on a

$$\hat{y} = f(0,0) = f(-0,5) = \frac{1}{1 + e^{-(-0.5)}} = 0.38 = P(Y = 1 | (x_1 = 0, x_2 = 0)) < 0.5 \Rightarrow \hat{y} = 0$$

$$\hat{y} = f(1,0) = f(0,5) = \frac{1}{1 + e^{(-0.5)}} = 0.62 = P(Y = 1 | (x_1 = 0, x_2 = 0)) > 0.5 \Rightarrow \hat{y} = 1$$

2) Considérons le problème du « XOR » (ou exclusif) : les points (1,0) et (0,1) sont positifs et les points (0,0) et (1,1) sont négatifs.

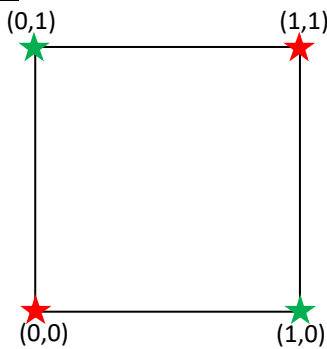
(a) Faire une représentation graphique des points de la base d'apprentissage. Pensez-vous qu'un réseau sans couche cachée soit suffisant ici ?

Considérons maintenant un réseau avec 2 neurones cachés. Notons (x_1, x_2) la couche d'entrée (x_3, x_4) la couche cachée et $\hat{y} = x_5$ la couche de sortie. On choisit les poids suivants : $w_{13}=1, w_{14}=-1, w_{23}=-1, w_{24}=1, w'_{35}=-1, w'_{45}=-1$, un biais de poids 1 entre la couche cachée et la couche de sortie, et toujours la fonction de Heaviside.

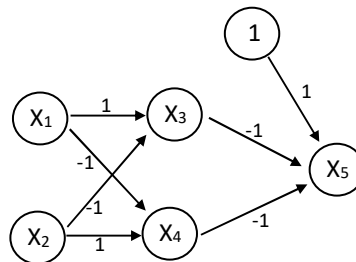
(b) Dessiner le réseau de neurone.

(c) Vérifier qu'il correspond bien au XOR.

Correction



Avec un seul neurone, on obtient une séparation linéaire (ou sigmoïde) or on constate qu'une simple frontière linéaire ne peut pas séparer les points.



On a $x_3=f(x_1-x_2), x_4=f(-x_1+x_2)$ et $x_5=f(-x_3-x_4+1)$, d'où

| X_1 | X_2 | X_3 | X_4 | X_5 |
|-------|-------|--|---|---|
| 0 | 0 | $1 \times 0 - 1 \times 0 = 0 \Rightarrow 1$ | $-1 \times 0 + 1 \times 0 = 0 \Rightarrow 1$ | $-1 \times 1 - 1 \times 1 + 1 = -1 \Rightarrow 0$ |
| 0 | 1 | $1 \times 0 - 1 \times 1 = -1 \Rightarrow 0$ | $-1 \times 0 + 1 \times 1 = 1 \Rightarrow 1$ | $-1 \times 0 - 1 \times 1 + 1 = 0 \Rightarrow 1$ |
| 1 | 0 | $1 \times 1 - 1 \times 0 = 1 \Rightarrow 1$ | $-1 \times 1 + 1 \times 0 = -1 \Rightarrow 0$ | $-1 \times 1 - 1 \times 0 + 1 = 0 \Rightarrow 1$ |
| 1 | 1 | $1 \times 1 - 1 \times 1 = 0 \Rightarrow 1$ | $-1 \times 1 + 1 \times 1 = 0 \Rightarrow 1$ | $-1 \times 1 - 1 \times 1 + 1 = -1 \Rightarrow 0$ |

Exercice 2

L'objectif est de comprendre l'algorithme de rétro-propagation du gradient sur un exemple simple en dimension 2. Il s'agit d'ajuster un réseau à un seul neurone,

$$\hat{y} = f(w_1 x_1 + w_2 x_2 + w_0)$$

avec comme activation la fonction de Heaviside, $f(x) = 1$ si $x \geq 0$ et 0 sinon.

La base d'apprentissage est réduite aux deux points,

| | x_1 | x_2 | y |
|-----|-------|-------|-----|
| a | 1 | 2 | 1 |
| b | 2 | 1 | 0 |

- 1) Expliquez que le séparateur est une droite. Supposons que le biais est nul. Qu'est-ce que cela signifie ? Que va optimiser l'algorithme ?

Correction

On remarque que

$$\hat{y}=1 \Leftrightarrow w_1x_1 + w_2x_2 + w_0 \geq 0$$

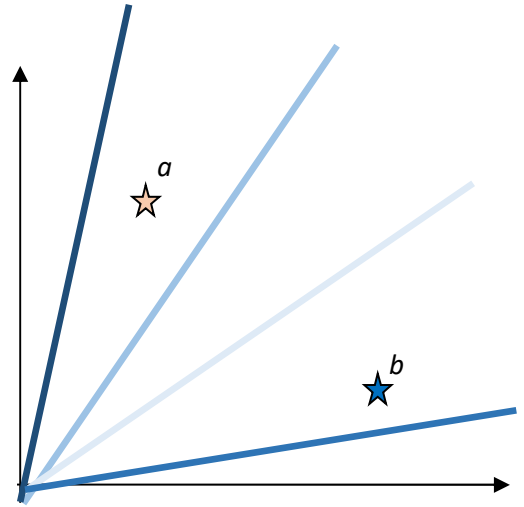
$$\hat{y}=0 \Leftrightarrow w_1x_1 + w_2x_2 + w_0 < 0$$

Donc la droite d'équation $w_1x_1 + w_2x_2 + w_0 = 0$ sépare le plan en deux. Pour plus de simplicité, supposons que la constante w_0 (biais) est nulle, c'est-à-dire que la droite passe par l'origine.

Le coefficient directeur de la droite est donné par le rapport des poids,

$$w_1x_1 + w_2x_2 = 0 \Leftrightarrow x_2 = -\frac{w_1}{w_2}x_1$$

L'ajustement de la pente de la droite se fait de façon itérative grâce à l'algorithme de rétro-propagation.



- 2) Ecrire la fonction de mise à jour des poids pour un taux d'apprentissage α .

Correction

$$\Delta w_i = \alpha(y - \hat{y})x_i \quad i=1,2$$

- 3) On initialise les poids $w_1=w_2=1$. Quelle est l'initialisation de la pente de la droite ?

Correction

$$\delta = -\frac{w_1}{w_2} = -1$$

- 4) Exprimez la pente de la droite en fonction de α à l'issue de la 1^{ère} itération. Quelle valeur de α faudrait-il poser pour que l'algorithme s'arrête à la première itération ?

Correction

- Pour le point a : $w_1x_1 + w_2x_2 = x_1 + x_2 = 3 \geq 0 \Rightarrow \hat{y} = 1$

$$\Rightarrow \Delta w_1 = \alpha(1-1)x_1 = 0$$

$$\Rightarrow \Delta w_2 = \alpha(1-1)x_2 = 0$$

Donc pas de changement de poids.

- Pour le point b : $w_1x_1 + w_2x_2 = x_1 + x_2 = 3 \geq 0 \Rightarrow \hat{y} = 1$

$$\Rightarrow \Delta w_1 = \alpha(0-1)x_1 = -2\alpha \quad \Rightarrow w_1 = 1-2\alpha$$

$$\Rightarrow \Delta w_2 = \alpha(0-1)x_2 = -\alpha \quad \Rightarrow w_2 = 1-\alpha$$

$$\Rightarrow \delta = -\frac{w_1}{w_2} = -\frac{1-2\alpha}{1-\alpha}$$

Si on veut que l'algorithme classe bien les deux exemples dès la 1^{ère} itération, il faut que la droite passe entre a et b , par exemple la 1^{ère} bissectrice, i.e. $\delta=1$.

$$\delta = 1 = -\frac{1-2\alpha}{1-\alpha} \Rightarrow \alpha = \frac{2}{3}$$

- 5) On pose $\alpha=0,2$. Déroulez l'algorithme jusqu'à la quatrième itération. Tracez les droites séparatrices au fur et à mesure de l'algorithme. Que se passe-t-il à la quatrième itération ?

Correction

1^{ère} itération : $w_1 = 1 - 2\alpha = 1 - 2 * 0,2 = 0,6$ et $w_2 = 1 - \alpha = 1 - 0,2 = 0,8$ et $\delta = -\frac{0,6}{0,8} = -0,75$

2^{ème} itération :

- Pour le point a : $w_1x_1 + w_2x_2 = 0,6x_1 + 0,8x_2 = 2,2 \geq 0 \Rightarrow \hat{y} = 1$
 $\Rightarrow \Delta w_1 = \alpha(1-1)x_1 = 0$
 $\Rightarrow \Delta w_2 = \alpha(1-1)x_2 = 0$

Donc pas de changement de poids.

- Pour le point b : $w_1x_1 + w_2x_2 = 0,6x_1 + 0,8x_2 = 2 \geq 0 \Rightarrow \hat{y} = 1$
 $\Rightarrow \Delta w_1 = \alpha(0-1)x_1 = -2\alpha \Rightarrow w_1 = 0,6 - 2\alpha = 0,2$
 $\Rightarrow \Delta w_2 = \alpha(0-1)x_2 = -\alpha \Rightarrow w_2 = 0,8 - \alpha = 0,6$

$\Rightarrow \delta = -\frac{w_1}{w_2} = -0,33$

a et b sont toujours du même côté de la droite

3^{ème} itération :

- Pour le point a : $w_1x_1 + w_2x_2 = 0,2x_1 + 0,6x_2 = 1,4 \geq 0 \Rightarrow \hat{y} = 1$
 $\Rightarrow \Delta w_1 = \alpha(1-1)x_1 = 0$
 $\Rightarrow \Delta w_2 = \alpha(1-1)x_2 = 0$

Donc pas de changement de poids.

- Pour le point b : $w_1x_1 + w_2x_2 = 0,2x_1 + 0,6x_2 = 1 \geq 0 \Rightarrow \hat{y} = 1$
 $\Rightarrow \Delta w_1 = \alpha(0-1)x_1 = -2\alpha \Rightarrow w_1 = 0,2 - 2\alpha = -0,2$
 $\Rightarrow \Delta w_2 = \alpha(0-1)x_2 = -\alpha \Rightarrow w_2 = 0,6 - \alpha = 0,4$

$\Rightarrow \delta = -\frac{w_1}{w_2} = 0,5$

a et b sont toujours du même côté de la droite

4^{ème} itération :

- Pour le point a : $w_1x_1 + w_2x_2 = -0,2x_1 + 0,4x_2 = 0,2 \geq 0 \Rightarrow \hat{y} = 1$
 $\Rightarrow \Delta w_1 = \alpha(1-1)x_1 = 0$
 $\Rightarrow \Delta w_2 = \alpha(1-1)x_2 = 0$

Donc pas de changement de poids.

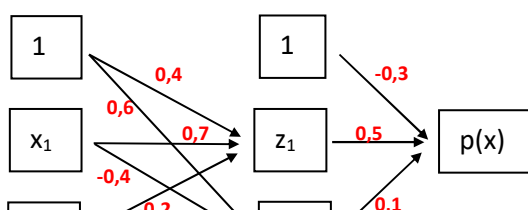
- Pour le point b : $w_1x_1 + w_2x_2 = -0,2x_1 + 0,4x_2 = 0 \geq 0 \Rightarrow \hat{y} = 1$
 $\Rightarrow \Delta w_1 = \alpha(0-1)x_1 = -2\alpha \Rightarrow w_1 = -0,2 - 2\alpha = -0,6$
 $\Rightarrow \Delta w_2 = \alpha(0-1)x_2 = -\alpha \Rightarrow w_2 = 0,4 - \alpha = 0,2$

$\Rightarrow \delta = -\frac{w_1}{w_2} = 3$

La droite a basculé de l'autre côté des points. Maintenant b est bien classé et a est mal classé. Le taux d'apprentissage est trop grand et engendre un phénomène d'oscillation.

Exercice 3

Soit le réseau de neurones suivant pour modéliser une sortie binaire, $p(x) = P(Y=1 | x)$, où $x = (x_1, x_2)$



On suppose une fonction d'activation logistique pour la couche cachée et en sortie.

1) Explicitez les deux neurones de la couche cachée

Correction

$$\Sigma_1 = 0,4 + 0,6x_1 - 0,2x_2 \Rightarrow Z_1 = f(\Sigma_1) = \frac{1}{1 + e^{-\Sigma_1}}$$

$$\Sigma_2 = 0,6 - 0,4x_1 + 0,3x_2 \Rightarrow Z_2 = f(\Sigma_2) = \frac{1}{1 + e^{-\Sigma_2}}$$

2) Explicitez $p(x)$ en fonction des deux neurones

Correction

$$T = -0,3 + 0,5Z_1 + 0,1Z_2 \Rightarrow p(x) = g(T) = \frac{1}{1 + e^{-T}}$$

3) On considère l'exemple $x=(0,1)$. Calculez la sortie du réseau.

Correction

$$\Sigma_1 = 0,2 \Rightarrow Z_1 = \frac{1}{1 + e^{-0,2}} = 0,55$$

$$\Sigma_2 = 0,9 \Rightarrow Z_2 = \frac{1}{1 + e^{-0,9}} = 0,71$$

$$T = -0,3 + 0,5 \times 0,55 + 0,1 \times 0,71 = 0,046 \Rightarrow p(x) = g(T) = \frac{1}{1 + e^{-0,046}} = 0,511$$

Questions supplémentaires

4) On suppose que la variable cible de cet exemple est $y=1$. Calculez le delta de la couche de sortie

Correction

$$\delta_k = -(y - g(T))g'(T) \quad (\text{ici } k \text{ ne sert à rien})$$

Or pour la fonction logistique, $g'(x)=g(x)(1-g(x))$. Donc

$$\delta_k = -(y - g(T))g'(T)(1 - g(T)) = -(1 - 0,511) * 0,511 * (1 - 0,511) = -0,122$$

5) Calculez les delta de la couche cachée

Correction

$$\begin{cases} \delta_1 = \delta_k w'_{1k} f'(\Sigma_1) \\ \delta_2 = \delta_k w'_{2k} f'(\Sigma_2) \end{cases}$$

Or pour la fonction logistique, $f'(x)=f(x)(1-f(x))$. Donc

$$\begin{cases} \delta_1 = \delta_k w'_{1k} f(\Sigma_1)(1 - f(\Sigma_1)) = \delta_k w'_{1k} Z_1(1 - Z_1) = 0,015 \\ \delta_2 = \delta_k w'_{2k} f(\Sigma_2)(1 - f(\Sigma_2)) = \delta_k w'_{2k} Z_2(1 - Z_2) = 0,0025 \end{cases}$$

6) Ajustez les poids en prenant un taux d'apprentissage $\alpha=0,25$

Correction

Couche de sortie

$$\begin{cases} w'_{0k} = -0,3 \\ w'_{1k} = 0,5 \\ w'_{2k} = 0,1 \end{cases} \quad \text{or} \quad \begin{cases} \Delta w'_{0k} = -\alpha \delta_k = 0,0305 \\ \Delta w'_{1k} = -\alpha \delta_k z_1 = 0,0168 \\ \Delta w'_{2k} = -\alpha \delta_k z_2 = 0,0127 \end{cases} \quad \text{donc} \quad \begin{cases} w'_{0k} = -0,2695 \\ w'_{1k} = 0,5168 \\ w'_{2k} = 0,1127 \end{cases}$$

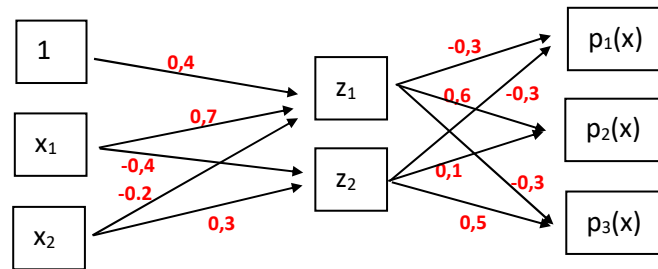
Couche cachée

$$\text{Neurone 1 : } \begin{cases} \Delta w_{01} = -\alpha \delta_1 = -0,038 \\ \Delta w_{11} = -\alpha \delta_1 x_1 = 0 \\ \Delta w_{21} = -\alpha \delta_1 x_2 = -0,038 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} w_{01} = w_{01} + \Delta w_{01} = 0,4 - 0,038 = 0,362 \\ w_{11} = w_{11} + \Delta w_{11} = 0,7 \\ w_{21} = w_{21} + \Delta w_{21} = -0,2 - 0,038 = -0,238 \end{cases}$$

$$\text{Neurone 2 : } \begin{cases} \Delta w_{02} = -\alpha \delta_2 = -0,0006 \\ \Delta w_{12} = -\alpha \delta_2 x_1 = 0 \\ \Delta w_{22} = -\alpha \delta_2 x_2 = -0,0006 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} w_{02} = w_{02} + \Delta w_{02} = 0,6 - 0,0006 = 0,594 \\ w_{12} = w_{12} + \Delta w_{12} = -0,4 \\ w_{22} = w_{22} + \Delta w_{22} = 0,3 - 0,0006 = 0,294 \end{cases}$$

Exercice 4

Soit le réseau de neurones suivant pour modéliser une sortie ayant trois classes, $Y \in \{1,2,3\}$. On note, $p_k(x) = P(Y=k|x)$, où $x = (x_1, x_2)$ et $k=1,2,3$.



On suppose une fonction d'activation tangente hyperbolique entre les couches d'entrée et cachée.

1) Explicitez les deux neurones de la couche cachée en fonction de x_1, x_2 et le biais.

Correction

$$\Sigma_1 = 0,4 + 0,7x_1 - 0,2x_2 \Rightarrow Z_1 = f(\Sigma_1) = \tanh(\Sigma_1)$$

$$\Sigma_2 = -0,4x_1 + 0,3x_2 \Rightarrow Z_2 = f(\Sigma_2) = \tanh(\Sigma_2)$$

2) Quelle est la fonction d'activation entre la couche cachée et la couche de sortie ? Explicitez $p_k(x)$ en fonction des deux neurones de la couche cachée.

Correction

Etant donné qu'il y a plus de deux classes en sortie, il faut utiliser la fonction softmax pour s'assurer que la somme des probabilités en sortie fasse 1.

$$T_1 = -0,3Z_1 - 0,3Z_2 \Rightarrow p_1(x) = g(T_1) = \frac{e^{T_1}}{e^{T_1} + e^{T_2} + e^{T_3}}$$

$$T_2 = 0,6Z_1 + 0,1Z_2 \Rightarrow p_2(x) = g(T_2) = \frac{e^{T_2}}{e^{T_1} + e^{T_2} + e^{T_3}}$$

$$T_3 = -0,3Z_1 + 0,5Z_2 \Rightarrow p_3(x) = g(T_3) = \frac{e^{T_3}}{e^{T_1} + e^{T_2} + e^{T_3}}$$

3) On considère l'exemple $x=(0,1)$. Calculez la sortie du réseau.

Correction

$$\Sigma_1 = 0,4 + 0,7 \times 0 - 0,2 \times 1 = 0,2 \Rightarrow Z_1 = \tanh(0,2) = 0,197$$

$$\Sigma_2 = -0,4 \times 0 + 0,3 \times 1 = 0,3 \Rightarrow Z_2 = \tanh(0,3) = 0,291$$

$$T_1 = -0,3 \times 0,197 - 0,3 \times 0,291 = -0,147 \Rightarrow p_1(x) = \frac{e^{-0,147}}{e^{-0,147} + e^{0,218} + e^{0,086}} = 0,27$$

$$T_2 = 0,6 \times 0,197 + 0,1 \times 0,291 = 0,218 \Rightarrow p_2(x) = \frac{e^{0,218}}{e^{-0,147} + e^{0,218} + e^{0,086}} = 0,39$$

$$T_3 = -0,3 \times 0,197 + 0,5 \times 0,291 \Rightarrow p_3(x) = \frac{e^{0,086}}{e^{-0,147} + e^{0,218} + e^{0,086}} = 0,34$$

La classe la plus probable est donc la 2.

NB. On note que la somme des probabilités = 1

Exercice 5

Dans cet exercice il s'agit de mettre en œuvre un réseau de neurones avec la fonction

`NN=nnet(Y~X1+X2+..., data=datatrain,...)`

du package `nnet` de R. L'affichage du réseau de neurones se fait à l'aide de la fonction

`plotnet(NN)`

du package `NeuralNetTools`.

L'optimisation des hyperparamètres du réseau se fait avec la fonction

`tune.nnet(Y~X1+X2+..., data=datatrain, size=2:10, decay=c(0, 0.1, 1, 2, 3), maxit=100...)`

du package `e1071`

1) A partir de l'aide de la fonction `nnet`, répondez aux questions suivantes.

- a) Comment sont initialisés les poids par défaut. Qu'est-ce que cela implique pour les variables d'entrée ?
Préparez le jeu de données « iris » en conséquence.

`wts` initial parameter vector. If missing chosen at random.
`rang` Initial random weights on `[-rang, rang]`. Value about 0.5 unless the inputs are large, in which case it should be chosen so that `rang * max(|x|)` is about 1.

L'initialisation des poids se fait de façon aléatoire par défaut quelles que soient les valeurs prises par la variable `x`. Afin d'éviter que des variables d'entrée prenant de grandes valeurs aient un rôle trop prédominant dans la combinaison linéaire de la couche cachée, soit on centre et on réduit les variables (avec la fonction `scale`), soit on normalise les variables de façon à ramener leur plage de variation entre `[0,1]` :

$$\frac{x_i - \min}{\max - \min}$$

```
data(iris)
Mydata=iris
```

```
# scale each column (except the target)
help(apply)
data.scaled = apply(Mydata[,1:4] , 2 , scale)
```

```
# Add the target
Mydata[,1:4]=data.scaled
```

- b) Construisez un réseau avec une couche cachée et 5 neurones pour les données « iris » (on utilisera toute la base pour apprendre le réseau). Combien y-a-t-il de poids à ajuster dans ce réseau (combien sur la première couche et combien sur la deuxième couche)? A quoi correspondent les informations affichées ? Est-ce que l'algorithme de rétro-propagation a convergé ? Quel autre indicateur peut-on récupérer pour savoir si l'algorithme a convergé ?

```
NN=nnet(Species~.,data=data.scaled,size=5)
```

```
# weights: 43
initial value 180.530689
iter 10 value 65.807375
iter 20 value 6.517717
iter 30 value 5.646148
iter 40 value 5.128868
iter 50 value 3.417229
iter 60 value 2.782739
iter 70 value 2.707157
iter 80 value 2.684976
iter 90 value 2.259868
iter 100 value 2.251662
final value 2.251662
stopped after 100 iterations
```

weights: 43 : Il y a 43 poids à ajuster (4 variables + constante)* (5 neurones)=25 entre la couche d'entrée et la couche cachée et (5 neurones + constante)*(3 classes)=18 entre la couche cachée et la couche de sortie.

Ensuite il y a l'évolution de la fonction de coût au cours des itérations (ici de 180.53 à 2.25)

L'algorithme n'a pas convergé car il stoppe après 100 itérations.

On peut aussi utiliser l'attribut convergence :

```
convergence 1 if the maximum number of iterations was reached, otherwise 0.
```

```
NN$convergence
```

```
[1] 1
```

- c) Quels sont les critères d'arrêt possibles pour stopper l'algorithme de rétro-propagation ? Faites varier ces critères de façon à ce que l'algorithme converge.

L'algorithme s'arrête après 100 itérations. C'est la valeur fixée par défaut. Si on la fixe à 500 par exemple, l'algorithme converge. En répétant plusieurs fois l'algorithme, on note que certaines fois, il converge vers un optimum local car l'erreur finale reste assez grande.

```
NN=nnet(Species~.,data=data.scaled,size=5,maxit=500)
```

```
# weights: 43
initial value 163.954829
iter 10 value 7.014039
iter 20 value 5.999940
iter 30 value 5.843863
iter 40 value 5.139650
iter 50 value 4.596485
iter 60 value 4.314287
iter 70 value 3.538995
iter 80 value 0.477191
iter 90 value 0.008344
iter 100 value 0.001919
iter 110 value 0.000432
iter 120 value 0.000396
iter 130 value 0.000378
iter 140 value 0.000198
iter 150 value 0.000190
iter 160 value 0.000146
iter 170 value 0.000142
final value 0.000091
converged
```

```
# weights: 43
initial value 192.607179
iter 10 value 16.069879
iter 20 value 6.019744
iter 30 value 5.928174
iter 40 value 5.749375
iter 50 value 5.466930
iter 60 value 5.071446
iter 70 value 5.022896
iter 80 value 5.012093
iter 90 value 5.011265
iter 100 value 5.007869
iter 110 value 4.999005
iter 120 value 4.989568
iter 130 value 4.978394
iter 140 value 4.975419
iter 150 value 4.975361
iter 160 value 4.971277
iter 170 value 4.968670
iter 180 value 4.967285
iter 190 value 4.966859
iter 200 value 4.966761
final value 4.966611 minimum local
converged
```

L'algorithme considère qu'il y a convergence quand l'erreur descend en dessous d'un certain seuil. On peut augmenter ce seuil, par exemple le fixer à 10.

```
NN=nnet(Species~.,data=data.scaled,size=5,maxit=100,abstol=10)
```

```
# weights: 43
initial value 211.150076
iter 10 value 14.039224
iter 10 value 9.241374
iter 10 value 9.241374
final value 9.241374
converged
```

ING2-MI : GENIE MATHEMATIQUE : DATA MINING : RESEAUX DE NEURONES

d) Quelle est la fonction d'activation de la couche de sortie ? de la couche cachée ? Quelle est la fonction de coût ?

```
linout    switch for linear output units. Default logistic output units.
entropy  switch for entropy (= maximum conditional likelihood) fitting. Default by least-squares.
softmax  switch for softmax (log-linear model) and maximum conditional likelihood
         fitting. linout, entropy, softmax and censored are mutually exclusive.
```

S'il y a une seule sortie (régression ou classification binaire) alors la fonction d'activation de la couche de sortie est par défaut la fonction logistique.

S'il y a plusieurs sorties (classification à $k > 2$ classes) alors il bascule tout seul sur la fonction softmax. Pas besoin de la passer en argument.

```
NN$softmax
[1] TRUE
```

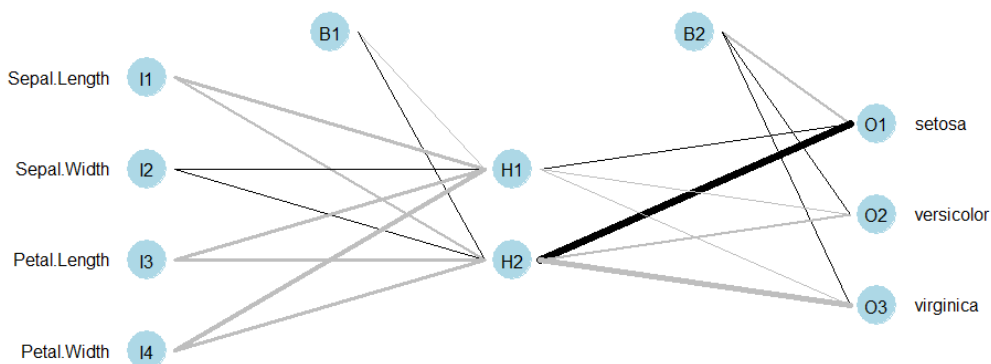
La fonction de coût est par défaut l'erreur quadratique moyenne.

```
NN$entropy
[1] FALSE
```

2) Construisez un réseau avec deux neurones et utilisez la fonction `plotnet` pour afficher le réseau de neurones. Déterminez le poids de chaque branche.

```
summary(NN)
```

```
a 4-2-3 network with 19 weights
options were - softmax modelling
b->h1  i1->h1  i2->h1  i3->h1  i4->h1
-317.26  1.42 -186.25  55.72  72.57
b->h2  i1->h2  i2->h2  i3->h2  i4->h2
 5.43 -0.90  2.83 -4.80 -6.62
b->o1  h1->o1  h2->o1
-113.23 -138.84 266.68
b->o2  h1->o2  h2->o2
 29.89  35.39  95.74
b->o3  h1->o3  h2->o3
 81.78 102.93 -363.15
```



3) Etudiez les valeurs de la fonction coût en fonction des valeurs du paramètre de régularisation $decay \in [0, 0.1, 0.2, 0.5]$.

| decay=0 | decay=0.1 | decay=0.2 | decay=0.5 |
|--|---|---|--|
| # weights: 43 initial value 186.142254 iter 10 value 10.375282 iter 20 value 5.921430 | # weights: 43 initial value 170.577866 iter 10 value 67.482703 iter 20 value 41.974713 | # weights: 43 initial value 173.557554 iter 10 value 82.556971 iter 20 value 61.476215 | # weights: 43 initial value 181.270182 iter 10 value 100.869840 iter 20 value 88.646150 |

ING2-MI : GENIE MATHEMATIQUE : DATA MINING : RESEAUX DE NEURONES

| | | | |
|---|--|--|---|
| <pre>iter 30 value 5.598421 iter 40 value 5.284298 iter 50 value 5.160997 iter 60 value 4.521340 iter 70 value 1.318902 iter 80 value 0.008205 iter 90 value 0.000385 final value 0.000058 converged</pre> | <pre>iter 30 value 39.364782 iter 40 value 39.219056 iter 50 value 39.210198 iter 60 value 39.198179 iter 70 value 39.139230 iter 80 value 39.025984 iter 90 value 38.968117 iter 100 value 38.963380 final value 38.963105 converged</pre> | <pre>iter 30 value 58.516273 iter 40 value 57.607798 iter 50 value 57.469438 iter 60 value 57.402326 iter 70 value 57.359406 iter 80 value 57.326686 iter 90 value 57.297556 iter 100 value 57.293756 final value 57.293664 converged</pre> | <pre>iter 30 value 88.387765 iter 40 value 88.386828 final value 88.386825 converged</pre> |
|---|--|--|---|

4) Utiliser la fonction `tune.nnet` pour trouver les hyperparametres optimaux.

```
opt=tune.nnet(Species~.,data=data.scaled,size=1:5,decay=c(0.01,0.05,0.1,0.2,0.3),maxit=100)
attributes(opt)
```

```
$names
[1] "best.parameters" "best.performance" "method"
[4] "nparcomb"        "train.ind"         "sampling"
[7] "performances"   "best.model"
```

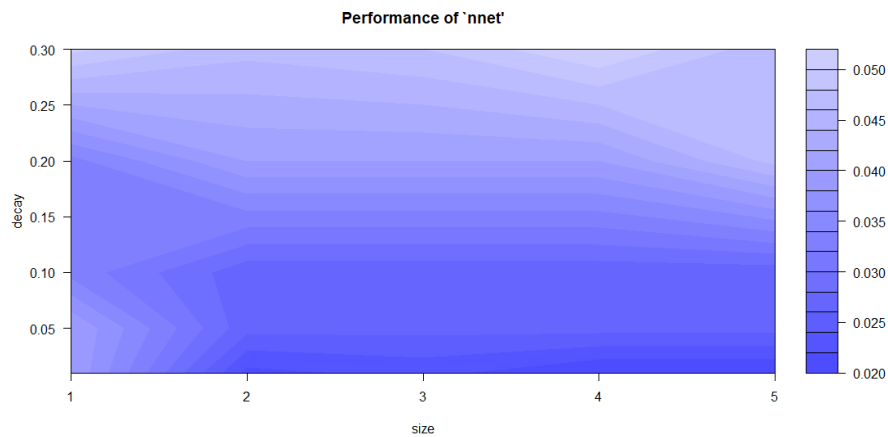
```
$class
[1] "tune"
```

On peut récupérer les paramètres optimaux, le meilleur score, la méthode de validation croisée,...

```
opt$best.parameters
```

```
size decay
4      4 0.01
```

```
plot(opt)
```



```
opt$sampling
```

```
[1] "10-fold cross validation"
```

On peut modifier la méthode de cross-validation avec la fonction `tune.control`

5) Utilisez la fonction `predict` pour prédire la probabilité des chacune des classes des exemples de la base d'apprentissage. Calculez la matrice de confusion.

```
predict(NN,data.scaled[,1:4],type="raw")
```

```
      setosa versicolor virginica
1  1.000000e+00 1.441660e-21 2.500664e-56
2  1.000000e+00 3.536638e-20 8.766913e-54
3  1.000000e+00 7.478261e-21 5.095763e-55
4  1.000000e+00 9.808499e-20 5.676299e-53
```

```
prev=predict(NN,data.scaled[,1:4],type="class")
```

```
table(data.scaled$Species,prev)
      prev
      setosa versicolor virginica
setosa      50         0         0
versicolor  0         49         1
virginica   0         1         49
```

Exercice 6

L'objectif de cet exercice est d'illustrer les frontières de séparation créées par le réseau de neurones.

1) Simulez un jeu de données de 2000 exemples tel que

ING2-MI : GENIE MATHEMATIQUE : DATA MINING : RESEAUX DE NEURONES

$$X_1 \sim U[-0.5, 0.5]$$

$$X_2 \sim U[0, 1]$$

$$Y = 1 \text{ si } 0.1X_2 > X_1^2 \text{ et } Y = 0 \text{ sinon}$$

Faites une représentation graphique du nuage de points avec les classes. Est-ce qu'il est linéairement séparable ?

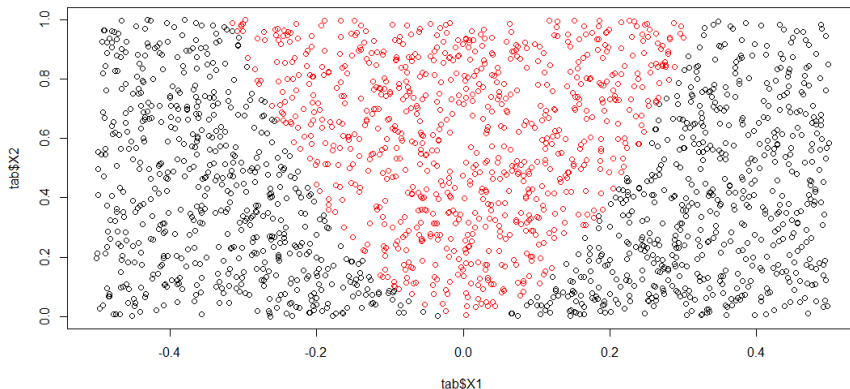
- Ajustez un réseau avec deux neurones et avec 1000 itérations maxi.
- La frontière séparatrice pour un neurone Σ est la droite d'équation : $w_0 + w_1x_1 + w_2x_2 = 0$. Sur le nuage de points, ajoutez les droites engendrées par les deux neurones.
- On considère le nouveau repère défini par les deux neurones

$$Z_1 = \frac{1}{1 + e^{-\Sigma_1}} \quad \text{et} \quad Z_2 = \frac{1}{1 + e^{-\Sigma_2}}$$

Tracez le nuage de points dans ce nouveau repère. Est-il linéairement séparable ?

- Dans ce nouveau repère, la frontière est définie par la droite d'équation : $w'_0 + w'_1z_1 + w'_2z_2 = 0$. Ajoutez cette droite sur le nouveau nuage de points.

```
tab=matrix(0,2000,3)
tab[,1]=runif(2000,min=-0.5,max=0.5) # x1=random entre [-0.5,0.5]
tab[,2]=runif(2000,min=0,max=1) # x2=random entre [0,1]
tab[,3]=(0.1*tab[,2]>(tab[,1]^2)) # Y=1 si 0.1*x2>x1^2
tab=as.data.frame(tab)
names(tab)=c("X1", "X2", "Y")
plot(tab$X1, tab$X2, col=tab$Y+1)
```



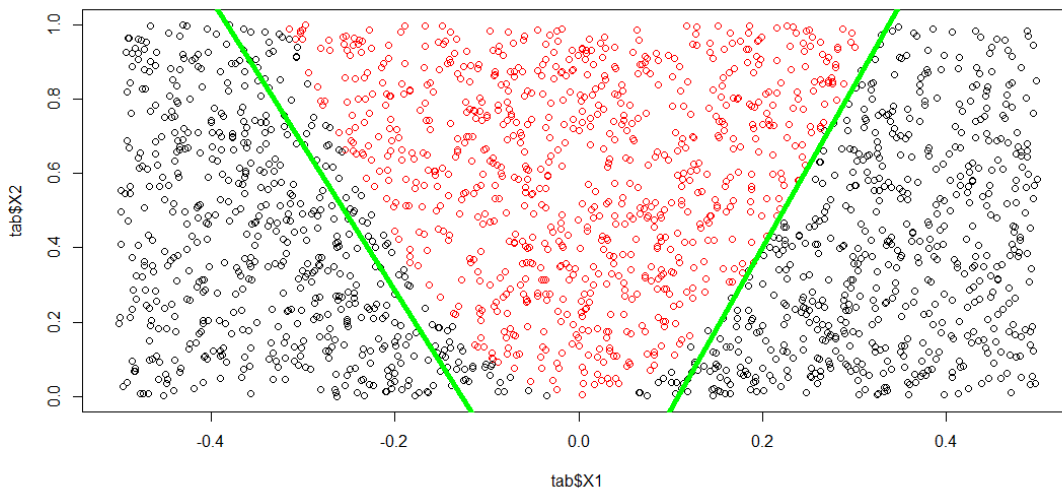
Une droite ne suffira pas à séparer les deux classes

ING2-MI : GENIE MATHEMATIQUE : DATA MINING : RESEAUX DE NEURONES

```
NN=nnet(Y~.,data=tab,size=2,maxit=1000)
summary(NN)
```

```
poids.H1=NN$wts[1:3]
poids.H2=NN$wts[4:6]
```

```
abline(-poids.H1[1]/poids.H1[3],-poids.H1[2]/poids.H1[3],lwd=5,col="green")
abline(-poids.H2[1]/poids.H2[3],-poids.H2[2]/poids.H2[3],lwd=5,col="green")
```

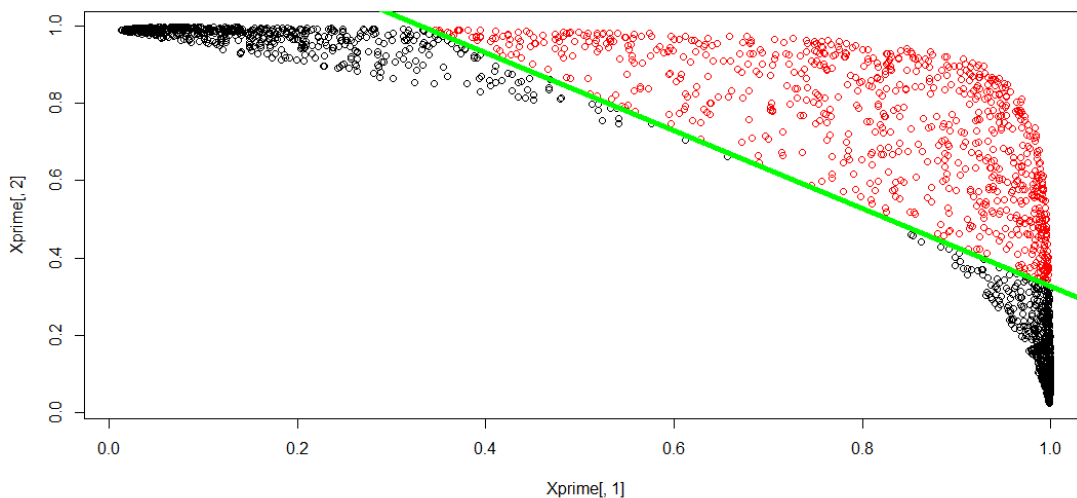


Les frontières étant légèrement quadratiques, les droites ne séparent pas parfaitement les classes mais elles se rapprochent des frontières.

```
z1=1/(1+exp(-poids.H1[1]+poids.H1[2]*x1+poids.H1[3]*x2))
z2=1/(1+exp(-poids.H2[1]+poids.H2[2]*x1+poids.H2[3]*x2))
```

```
plot(z1,z2,col=tab$Y+1)
```

```
poids.sortie=NN$wts[7:9]
abline(-poids.sortie[1]/poids.sortie[3],-poids.sortie[2]/poids.sortie[3],lwd=5,col="green")
```



La couche cachée « transforme » le problème initial en un problème plus facilement séparable.

Exercice 7

Correction en cours de rédaction

```
data(iris)
iris$setosa <- iris$Species=="setosa"
iris$virginica <- iris$Species == "virginica"
iris$versicolor <- iris$Species == "versicolor"
iris.train.idx <- sample(x = nrow(iris), size = nrow(iris)*0.5)
iris.train <- iris[iris.train.idx,]
iris.valid <- iris[-iris.train.idx,]

library(neuralnet)
iris.net <- neuralnet(setosa+versicolor+virginica ~
  Sepal.Length + Sepal.Width + Petal.Length + Petal.Width,
  data=iris.train, hidden=c(10,10), rep = 5, err.fct = "sse",
  linear.output = F, lifesign = "minimal", stepmax = 1000000,
  threshold = 0.001)

plot(iris.net, rep="best")

iris.prediction <- compute(iris.net, iris.valid[-5:-8])
idx <- apply(iris.prediction$net.result, 1, which.max)
predicted <- c('setosa', 'versicolor', 'virginica')[idx]
table(predicted, iris.valid$Species)
```

Exercice supplémentaire

Dans l'algorithme de rétro-propagation, déterminez les δ_k et δ_j lorsque la fonction coût est l'entropie croisée.

Correction

Pour un exemple (x,y) , la fonction coût est de la forme

$$E(\mathbf{w}) = \sum_{k=1}^K y_k \ln(p_k(x)) = \sum_{k=1}^K y_k \ln(g(T_k)) = \sum_{k=1}^K E_k(\mathbf{w})$$

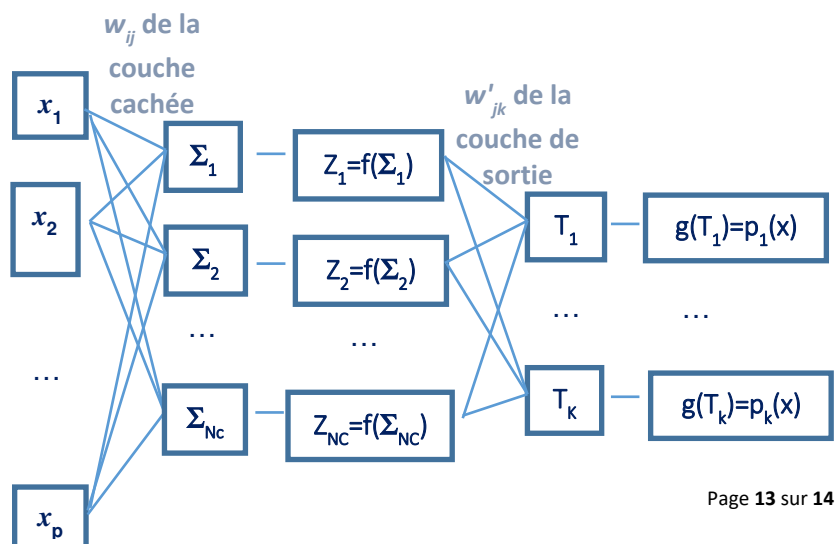
avec $E_k(\mathbf{w}) = y_k \ln(g(T_k))$, où $T_k = \sum_{j=1}^{N_c} w'_{jk} Z_j$ et $Z_j = f(\Sigma_j)$ et $\Sigma_j = \sum_{i=1}^p w_{ij} x_i$.

- Poids de la deuxième couche :

w'_{jk} entre le neurone j et la sortie de la classe k

- Poids de la première couche :

w_{ij} entre la variable i et le neurone j



Dérivée par rapport aux poids de la deuxième couche

$$\frac{\partial E(\mathbf{w})}{\partial w'_{jk}} = \frac{\partial E(\mathbf{w})}{\partial T_k} \times \frac{\partial T_k}{\partial w'_{jk}} = \frac{\partial E(\mathbf{w})}{\partial T_k} Z_j$$

car nous avons montré en cours que $\frac{\partial T_k}{\partial w'_{jk}} = Z_j$. Donc

$$\delta_k = \frac{\partial E(\mathbf{w})}{\partial T_k} = \frac{\partial}{\partial T_k} \sum_{k=1}^K E_k(\mathbf{w}) = \frac{\partial}{\partial T_k} E_k(\mathbf{w}) = \frac{\partial}{\partial T_k} y_k \ln(g(T_k)) = y_k \frac{g'(T_k)}{g(T_k)}$$

Si g est la fonction logit⁻¹ alors g'(x)=g(x)(1-g(x)), d'où

$$\delta_k = \frac{\partial E(\mathbf{w})}{\partial T_k} = y_k \frac{g(T_k)(1-g(T_k))}{g(T_k)} = y_k(1-g(T_k)).$$

Dérivée par rapport aux poids de la première couche

$$\frac{\partial E(\mathbf{w})}{\partial w_{ij}} = \sum_{k=1}^K \frac{\partial E_k(\mathbf{w})}{\partial w_{ij}}$$

On décompose

$$\frac{\partial E_k(\mathbf{w})}{\partial w_{ij}} = \frac{\partial E_k(\mathbf{w})}{\partial T_k} \times \frac{\partial T_k}{\partial Z_j} \times \frac{\partial Z_j}{\partial \Sigma_j} \times \frac{\partial \Sigma_j}{\partial w_{ij}}$$

On a vu en cours que : $\frac{\partial E_k(\mathbf{w})}{\partial T_k} = \delta_k$, $\frac{\partial T_k}{\partial Z_j} = w'_{jk}$, $\frac{\partial \Sigma_j}{\partial w_{ij}} = x_i$ et $\frac{\partial Z_j}{\partial \Sigma_j} = f'(\Sigma_j)$, donc

$$\frac{\partial E(\mathbf{w})}{\partial w_{ij}} = \delta_j x_i \quad \text{où} \quad \delta_j = \left(\sum_{k=1}^K \delta_k w'_{jk} \right) f'(\Sigma_j)$$

En fait, la démonstration pour la première couche est indépendante de la fonction coût.