

Московский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова

Факультет Вычислительной Математики и Кибернетики

Кафедра Математических Методов Прогнозирования

Задание по практикуму на ЭВМ:  
«Работа с пакетом “nnet” в системе R»

Выполнила студентка 317 группы Любимцева Мария

2012 год

# Начало работы

---

Пакет `nnet` позволяет настраивать и использовать нейронные сети с одним скрытым слоем и `multinomial log-linear` модели.

Перед началом работы необходимо включить пакет:

*Пакеты -> Включить пакет... -> nnet*

Для демонстрации взята задача классификации пациентов на предмет наличия у них диабета: 1 - нет диабета, 2 - предиабет, 3 - диабет.

```
> #загрузка данных  
> M<-read.table("diabet_for_R.txt", header = TRUE, sep = ",")
```

## Функции пакета

---

### `class.ind(factor_class)`

---

#### Описание

На вход подается фактор, полученный из столбца, отвечающего за принадлежность объектов к классам.

На выходе получается матрица размера  $m*k$  (где  $m$  – количество объектов,  $k$  – количество классов). Ее  $ij$ -й элемент принимает значение 1, если  $i$ -ый объект принадлежит  $j$ -ому классу, и 0 в противном случае.

Если воспользоваться терминологией, введенной на АМА, то данная функция строит матрицу, состоящую из характеристических векторов классов эквивалентности.

## Примеры использования

```
> M[c(1,90,120),] #возьмем объекты из разных классов
  rel_weight glufast glutest instest sspg clinical_group
1         0.81      80     356     124    55             1
90        1.18     108     486     297   220             2
120       0.92     303    1364      42   346             3

> class.ind(factor(M[c(1,90,120),'clinical_group']))
  Chem_Diabetic Normal Overt_Diabetic
[1,]           0       1              0
[2,]           1       0              0
[3,]           0       0              1
```

---

## which.is.max(x)

---

### Описание

Возвращает индекс элемента, случайно выбранного из максимальных элементов вектора  $x$ .

## Примеры использования

```
> which.is.max(c(1, 0, 1, 1, 0, 1))
[1] 3
> which.is.max(c(1, 0, 1, 1, 0, 1))
[1] 6
> which.is.max(c(1, 0, 1, 1, 0, 1))
[1] 4
> which.is.max(c(1, 0, 1, 1, 0, 1))
[1] 1
```

---

# multinom

---

## Описание

Настройка multinomial log-linear модели, используя нейронную сеть.

## Примеры использования

```
> multinom(formula = factor(M1[,ncol(M1)])~.,
data = M1[,-ncol(M1)], subset = ind_tr)
# weights:  21 (12 variable)
initial  value 119.748739
iter   10 value 30.620889
iter   20 value 10.496096
iter   30 value  4.719632
iter   40 value  2.812935
iter   50 value  2.405701
iter   60 value  2.335009
iter   70 value  2.283478
iter   80 value  2.162779
iter   90 value  2.109086
iter  100 value  2.050354
final   value  2.050354
stopped after 100 iterations
Call:
multinom(formula = factor(M1[, ncol(M1)]) ~ ., data = M1[, -
ncol(M1)], subset = ind_tr)

Coefficients:
  (Intercept) rel_weight  glufast  glutest  instest      sspg
2   -46.31949  -1.047263 -67.55795 237.2528  2.110525  3.241692
3  -121.99472 -28.191629 180.33115 259.5070 10.029133 13.002593

Residual Deviance: 4.100708
AIC: 28.10071
```

---

# nnet

---

## Описание

Настройка нейронной сети с одним скрытым слоем. Возможно два варианта использования.

Параметры:

<b>x</b>	Матрица обучающей выборки.
<b>y</b>	Матрица ответов для обучающей выборки (должна быть преобразована с использованием <code>class.ind</code> ).
<b>weights</b>	Веса объектов, полагаются единицами в случае пропуска.
<b>size</b>	Число нейронов скрытого слоя.
<b>formula</b>	Формула вида <code>class ~ x1 + x2 + ...</code>
<b>data</b>	Data frame – выборка.
<b>subset</b>	Вектор индексов объектов, на которых следует провести обучение.
<b>na.action</b>	Параметр, определяющий, что делать с NA-значениями. По умолчанию – окончание процедуры.
<b>Wts</b>	Вектор начальных значений параметров. В случае пропуска задается случайно.
<b>mask</b>	Логический вектор, определяющий, какие из параметров необходимо оптимизировать. По умолчанию все.
<b>linout</b>	Переключатель на linear output units. По умолчанию logistic output units.
<b>entropy</b>	Переключатель для энтропии.
<b>softmax</b>	Переключатель для softmax (log-linear model) и maximum conditional likelihood fitting. <code>linout</code> , <code>entropy</code> , <code>softmax</code> и <code>censored</code> являются взаимно исключающими.
<b>censored</b>	Вариант softmax, в котором ненулевые метки означают возможность принадлежности к данному классу. Таким образом для softmax вектор $(0, 1, 1)$ означает, что объект

	принадлежит обоим классам 2 и 3, но для <code>censored</code> он значит, что объект принадлежит или классу 2, или классу 3.
<b>skip</b>	Переключение добавления связей между входом и выходом.
<b>rang</b>	Случайные начальные значения весов берутся из диапазона <code>[-rang, rang]</code> .
<b>decay</b>	Параметр для <code>weight decay</code> (сокращение весов). По умолчанию 0.
<b>maxit</b>	Число максимального количества итераций. По умолчанию 100.
<b>Hess</b>	Если значение TRUE, то гессиан меры настройки на найденном лучшем наборе возвращается через компоненту <code>Hessian</code> .
<b>trace</b>	Включает <code>tracing optimization</code> . По умолчанию TRUE.
<b>MaxNWts</b>	Максимально допустимое количество весов.
<b>abstol</b>	Остановка, если значение критерия при настройке опускается ниже <code>abstol</code> .
<b>reltol</b>	Остановка, если оптимизатор не в состоянии уменьшить критерий настройки по крайней мере на <code>1 - reltol</code> .

---

## predict

---

### Описание

Классификация объекта с помощью настроенной сети

### Примеры использования обеих функций.

```
> TestNet = function(M, num_u) {
+
+ #выборка случайным образом делится в соотношении 3:1
+ ind = sample(1:nrow(M), nrow(M), replace = F);
+
+ train = M[ind[-(1:round(0.25*nrow(M)))], -ncol(M)];
+ y_tr = M[ind[-(1:round(0.25*nrow(M)))], ncol(M)];
+ y_tr_ind = class.ind(factor(y_tr));
+
+ test = M[ind[1:round(0.25*nrow(M))], -ncol(M)];
+ y_t = M[ind[1:round(0.25*nrow(M))], ncol(M)];
+ y_t_ind = class.ind(factor(y_t));
```

```

+
+ #обучение сети на большей части
+ My_net = nnet(train, y_tr_ind, size = num_u);
+ #тестирование на меньшей
+ ans = round(predict(My_net, test));
+
+ #возвращает количество ошибок на тестовой части, размер
+ которой в данном случае - 36 объектов
+ return (Num_Er(ans, y_t_ind))
+ }

```

Применение TestNet в таком виде может давать неплохой результат

```

> TestNet(M, 50)

# weights: 453
initial value 84.127948
iter 10 value 58.377427
iter 20 value 48.408303
iter 30 value 48.087930
iter 40 value 43.206240
iter 50 value 42.713290
iter 60 value 42.506362
iter 70 value 42.469849
iter 80 value 42.445111
final value 42.445063
converged
[1] 6

```

Однако, может случиться следующая неприятность:

```

> TestNet(M, 50)
# weights: 453
initial value 190.010556
final value 109.000000
converged
[1] 36 #т.е. алгоритм ошибся на всех объектах тестовой выборки

```

В TestNet изменим параметры настройки сети:

```

> My_net = nnet(train, y_tr_ind, size = num_u, maxit = 1000,
entropy = TRUE, decay = 5e-4);

```

(По результатам экспериментов наилучшего результата удалось добиться именно при entropy = TRUE ).

Функция помощи в нахождении оптимального значения параметра size – числа нейронов в скрытом слое – при помощи метода скользящего контроля. Выдает матрицу размера  $mnum\_u * cv\_it$ , где  $ij$ -ому элементу соответствует количество ошибок на тестовой выборке при  $size = i * 10$  на  $j$ -ой итерации :

```
> NetCV = function(M) {
+
+ mnum_u = 10; #максимальное число нейронов/10
+ cv_it = 10; #число итераций для каждого значения size
+ ans = matrix(numeric(mnum_u*cv_it), nrow=mnum_u, ncol=cv_it);
+
+ for (i in 1:mnum_u) {
+ for (j in 1:cv_it) {
+ ans[i,j] = TestNet(M,i*10);
+ }
+ }
+ return(ans);
+ }
```

Результат использования и наглядная демонстрация необходимости нормировки данных:

```
> NetCV(M) #без нормировки
      [,1] [,2] [,3] [,4] [,5] [,6] [,7] [,8] [,9] [,10]
[1,]    5   36    8    2    0    7   17   21   17    3
[2,]    5    1   23   18   11    7   15    5    5   17
[3,]    7    8    5   10    6    4    5    8    9    2
[4,]    7    7    8    8    9    4    6    6    6    8
[5,]    6    3    7    4    8   10    8    5    7    7
[6,]    8    6    7    3    5    7    7    6    6    6
[7,]    6    7    6    7    7    6    6    6    8   11
[8,]    7   10    8   10    3    5    7    4    9    8
[9,]    2    4    8    4    5   10    7    7    7    4
[10,]   7    1    5   11    8    6    8    8   10    4
```

```
> #предварительно пронормируем матрицу по максимуму столбца
> max_M = numeric(6)
> max_M[6] = 1
> for (i in 1:5) max_M[i] = max(M[,i])
> h = rep(max_M,nrow(M))
> dim(h) = c(ncol(M),nrow(M))
> M1 = M / t(h)
>
> NetCV(M1)
```

	[,1]	[,2]	[,3]	[,4]	[,5]	[,6]	[,7]	[,8]	[,9]	[,10]
[1,]	1	1	5	5	4	3	1	3	6	2
[2,]	3	2	3	3	1	0	3	3	3	4
[3,]	2	3	3	3	1	2	3	4	4	0
[4,]	1	3	2	2	4	3	2	4	2	4
[5,]	1	1	2	3	4	2	4	3	3	1
[6,]	2	3	5	4	3	2	3	4	3	4
[7,]	1	3	4	3	2	2	1	3	1	4
[8,]	2	2	2	1	2	4	4	2	4	1
[9,]	2	1	2	3	4	3	3	3	1	3
[10,]	4	4	2	4	1	3	3	2	3	6

Остановимся на  $size = 80$ , так как при этом значении достигается наименьшее среднее количество ошибок по итерациям = 2.4 и наименьшая медиана = 2.0.

Продемонстрируем второй вариант использования функции `nnet`:

```
> TestNet2 = function(M) {
+
+ #разделение выборки на обучение и контроль
+ ind = sample(1:nrow(M), nrow(M), replace = F);
+ ind_tr = ind[-(1:round(0.25*nrow(M)))];
+
+ #в отличие от первого варианта, на вход подается вся выборка и
+ параметром subset указывается, какая ее часть используется при
+ обучении
+ My_net = nnet(factor(M[,"clinical_group"])~., data = M[,-
+ ncol(M)], subset = ind_tr, size = 80, maxit = 1000, entropy =
+ TRUE, decay = 5e-4);
+
+ #тестирование на контроле
+ ans = predict(My_net, M[-ind_tr,-ncol(M)], type = "class");
+
+ #возвращает количество ошибок на контроле
+ return (sum(ans != M[-ind_tr, "clinical_group"]))
+ }

> NetCV(M1)
> #10 раз прогнали TestNet2
> #результат количество ошибок на каждой итерации
      [,1] [,2] [,3] [,4] [,5] [,6] [,7] [,8] [,9] [,10]
[1,]     2     3     3     2     3     1     1     1     2     2
```

## Список литературы:

---

- 1) <http://alexanderdyakonov.narod.ru/upR.pdf>
- 2) <http://cran.gis-lab.info/web/packages/nnet/nnet.pdf>
- 3) <http://www.faqs.org/faqs/ai-faq/neural-nets/>
- 4) <http://r-analytics.blogspot.com/>