Kapitola 3 - Křížová validace

Demonstrace použití křížové validace při klasifikování dat.

Načtení knihovny NeuralNetworks

Nejdříve načteme knihovnu neuronových sítí.

In[38]:=
```
<< NeuralNetworks`
```

Pokud pracujete v Mathematice 8.0, vypněte ještě zobrazování chybové hlášky Remove::rmnsm. Tuto hlášku vyhazují funkce knihovny NeuralNetworks. Na funkci knihovny toto nemá žádný vliv.

In[39]:=
```
Off[Remove::rmnsm]
```

Import dat

- **Načtení dat ze souboru**

Nastavíme si pracovní adresář na ten, kde máme uložen aktuální notebook.

In[40]:=
```
SetDirectory[NotebookDirectory[]]
```

Out[40]=
```
D:\Dokumenty\BP
```

A načteme data.

In[41]:=
```
data = Import["iris.data"];
```

- **Načtení dat z internetu**

Jiná možnost je importovat data přímo z internetu - příklad pro UCI databázi (stejná data jako při načítání ze souboru, jen načtena přímo z internetu.

In[42]:=
```
data =
  Import["http://ftp.ics.uci.edu/pub/machine-learning-databases/iris/iris.data"];
```

Příprava trénovacích dat

Provedeme předzpracování dat stejným postupem, jaký je popsán v kapitole 5 Dopředná síť a Iris data.

In[43]:=
```
data2 = Drop[data, -1];
inData = data2[[All, 1 ;; 4]];
outDataTmp = data2[[All, 5]];
outVal = Tally[outDataTmp][[All, 1]];
encode = MapIndexed[#1 -> Normal[SparseArray[#2 → 1, {Length[outVal]}]] &, outVal];
outData = Flatten[outDataTmp] /. encode;
```

Data odsahují 4 vstupní parametry, podle kterých budeme data klasifikovat do třech tříd.

Křížová validace (Cross validation)

Nejprve si vytvoříme neuronovou síť, kterou budeme pomocí křížové validace vyhodnocovat.

In[49]:=
```
net = InitializeFeedForwardNet[inData, outData, {3, 2}, Neuron → Sigmoid]
```

Out[49]=
```
FeedForwardNet[{{w1, w2, w3}}, {Neuron → Sigmoid, FixedParameters → None,
  AccumulatedIterations → 0, CreationDate → {2011, 5, 23, 0, 0, 55.8577533},
  OutputNonlinearity → None, NumberOfInputs → 4}]
```

Můžeme si zobrazit informace o síti.

In[50]:=
```
NetInformation[net]
```

Out[50]=
```
FeedForward network created 2011-5-23 at 0:00. The network has 4 inputs and 3
  outputs. It consists of 2 hidden layers with number of neurons per layer
  given by {3, 2}. The neuron activation function is of Sigmoid type.
```

Rozhodneme se kolikastupňovou křížovou validaci provedeme (na kolik částí (foldů) rozdělíme trénovací data).

In[51]:=
```
folds = 15;
```

Zjistíme kolik máme trénovacích dat, podle toho určíme jaké množství dat bude obsahovat jeden fold.

In[52]:=
```
vectors = Take[Dimensions[inData], 1];
vectorsInFold = IntegerPart[vectors / folds];
```

Spojíme trénovací a testovací data do jedné množiny a na této množině provedeme permutaci (zamícháme pořadí). Za první fold prohlásíme data s indexy 1 až “velikost fodu”, za druhý fold data s indexy “velikost foldu + 1” až “2 * velikost foldu”... Díky permutaci jsou data v těchto foldech náhodná.

In[54]:=
```
completeData = Join[inData, outData, 2];
completeData = RandomSample[completeData];
```

Nyní přistoupíme k samotné křížové validaci. V prvním běhu použijeme první fold jako validační množinu a ostatní data jako trénovací, v druhém běhu použijeme druhý fold jako validační množinu a ostatní data jako trénovací. Tatko budeme pokračovat dokud nevyčerpáme všechny foldy. V průběhu křížové validace si budeme udržovat informace o nejlepším, nejhorším a průměrném výsledku sítě.

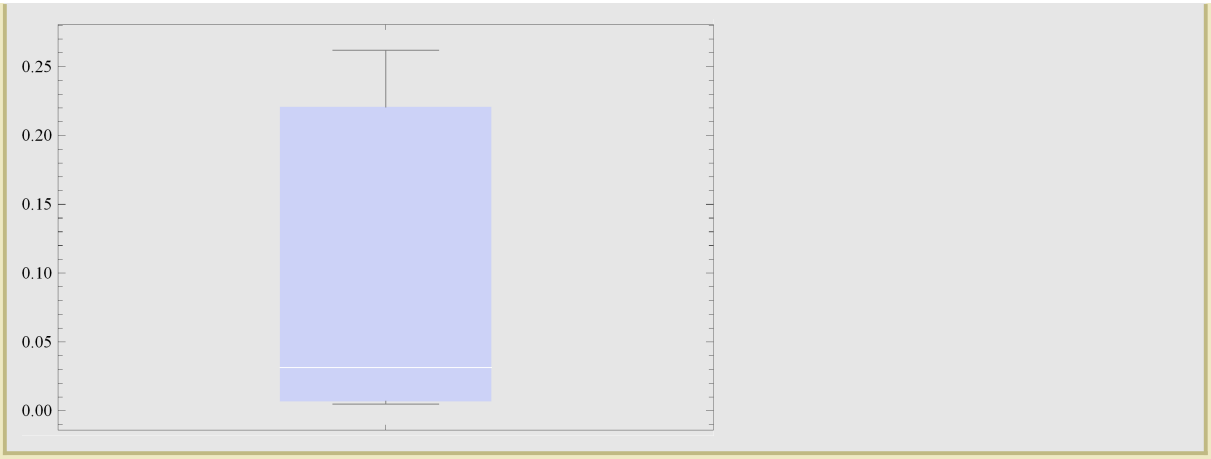
Učení neuronové sítě s validační množinou probíhá, dokud se výsledky sítě na validační množině zlepšují. Pokud by se začaly zhoršovat, je učení přerušeno a zobrazena hláška NeuralFit::StoppedSearch. Pokud nehccete tuto hášku zobrazovat, můžete její zobrazení vypnout.

In[56]:=
```
Off[NeuralFit::StoppedSearch];
```

In[57]:=
```
best = 1;
worst = 0;
sum = 0;
results = {};
For[i = 1, i <= folds, i++, (*kod jednoho kola krossvalidace*)
 validationData =
  completeData[[1 + (i - 1) * vectorsInFold[[1]] ;; i * vectorsInFold[[1]]]];
 learnData = Drop[completeData,
   {1 + (i - 1) * vectorsInFold[[1]], i * vectorsInFold[[1]]}];
 validationDataIn = validationData[[All, 1 ;; 4]];
 validationDataOut = validationData[[All, 5 ;; 7]];
 learnDataIn = learnData[[All, 1 ;; 4]];
 learnDataOut = learnData[[All, 5 ;; 7]];
 net = InitializeFeedForwardNet[inData, outData, {3, 2}, Neuron → Sigmoid];
 {net2, record} = NeuralFit[net, learnDataIn, learnDataOut, validationDataIn,
   validationDataOut, CriterionLog -> False, CriterionPlot -> False];
 current = Take[CriterionValidationValues /. record[[2]], -1];
 If[current[[1]] < best, best = current[[1]], best = best];
 If[current[[1]] > worst, worst = current[[1]], worst = worst];
sum = sum + current;
 AppendTo[results, current[[1]]];
 Print[i ". fold = ", current[[1]]];
 ]
BoxWhiskerChart[results]
```

```
. fold = 0.24505
2 . fold = 0.261811
3 . fold = 0.0313772
4 . fold = 0.0220542
5 . fold = 0.0469112
6 . fold = 0.259714
7 . fold = 0.00489297
8 . fold = 0.2207
9 . fold = 0.00480916
10 . fold = 0.108407
11 . fold = 0.00651053
12 . fold = 0.023902
13 . fold = 0.00682964
14 . fold = 0.0653303
15 . fold = 0.0080243
```

Out[62]=



Vypsaly se výsledky sítě pro každý fold. Všimněte si, že jednotlivé výsledky sítě se značně liší a jsou závislé na konkrétním rozdělení dat a také na inicializaci sítě. Dále se zobrazil graf shrnující výsledky neuronové sítě, po najetí myší na graf se zobrazí podrobnosti.

Zobrazit výsledky křížové validace je možné také takto.

In[63]:=
```
" = průměrný výsledek" sum[[1]] / folds
" = nejlepší výsledek" best
" = nejhorší výsledek" worst
```

Out[63]=
```
0.0877548 = průměrný výsledek
```

Out[64]=
```
0.00480916 = nejlepší výsledek
```

Out[65]=
```
0.261811 = nejhorší výsledek
```

Pokud bychom nepoužili křížovou validaci a místo ní použili jak jedno konkrétní rozdělení dat, byly by naše informace o úspěšnosti neuronové sítě značně nepřesné.

Křížová validace vlastní sítě

Zde si můžete nechat provést křížovou validaci vlastní sítě s vlastními daty.

In[66]:=
```
yourNet = InitializeFeedForwardNet[inData, outData, {3, 2}, Neuron → Sigmoid];
(*Vaše dopředná nebo RBF síť*)
yourInData = inData;(*Vaše předzpracovaná vstupní data*)
yourOutData = outData;(*Vaše předzpracovaná výstupní data*)
yourFolds = folds;(*Váš počet foldů*)
```

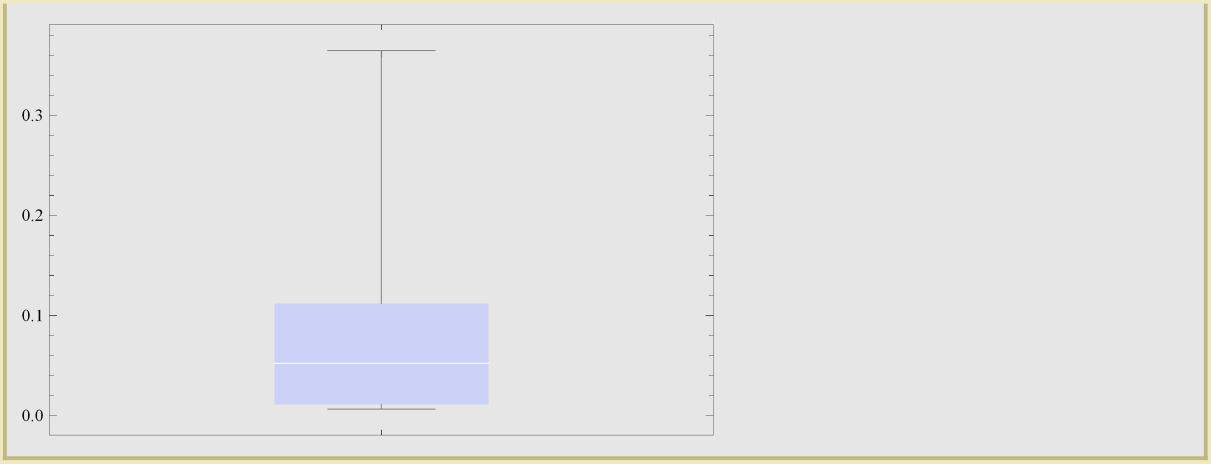
Následující blok spusťte pro vyhodnocení vlastní sítě.

In[70]:=

```
Off[NeuralFit::StoppedSearch];
yourVectors = Take[Dimensions[yourInData], 1];
inDataDimensions = Take[Dimensions[yourInData], -1];
outDataDimensions = Take[Dimensions[yourOutData], -1];
yourVectorsInFold = IntegerPart[yourVectors / yourFolds];
yourCompleteData = Join[yourInData, yourOutData, 2];
yourCompleteData = RandomSample[yourCompleteData];
yourBest = 1;
yourWorst = 0;
yourSum = 0;
yourResults = {};
For[i = 1, i <= yourFolds, i++, (*kod jednoho kola krossvalidace*)
 yourValidationData = yourCompleteData[[
    1 + (i - 1) * yourVectorsInFold[[1]] ;; i * yourVectorsInFold[[1]]]];
 yourLearnData = Drop[yourCompleteData,
    {1 + (i - 1) * yourVectorsInFold[[1]], i * yourVectorsInFold[[1]]}];
 yourValidationDataIn = yourValidationData[[All, 1 ;; inDataDimensions[[1]]]];
  yourValidationDataOut = yourValidationData[[All,
    inDataDimensions[[1]] + 1 ;; inDataDimensions[[1]] + outDataDimensions[[1]]]];
 yourLearnDataIn = yourLearnData[[All, 1 ;; inDataDimensions[[1]]]];
 yourLearnDataOut = yourLearnData[[All,
    inDataDimensions[[1]] + 1 ;; inDataDimensions[[1]] + outDataDimensions[[1]]]];
 {net2, record} = NeuralFit[yourNet, yourLearnDataIn,
    yourLearnDataOut, yourValidationDataIn, yourValidationDataOut,
    CriterionLog -> False, CriterionPlot -> False];
 current = Take[CriterionValidationValues /. record[[2]], -1];
 If[current[[1]] < yourBest, yourBest = current[[1]], yourBest = yourBest];
 If[current[[1]] > yourWorst, yourWorst = current[[1]], yourWorst = yourWorst];
 yourSum = yourSum + current;
  AppendTo[yourResults, current[[1]]];
 Print[i ". fold = ", current[[1]]];
 ]
BoxWhiskerChart[yourResults]
```

```
. fold = 0.112147
2 . fold = 0.102576
3 . fold = 0.0976581
4 . fold = 0.0067351
5 . fold = 0.166686
6 . fold = 0.0624422
7 . fold = 0.0525318
8 . fold = 0.364738
9 . fold = 0.263742
10 . fold = 0.0363415
11 . fold = 0.00699454
12 . fold = 0.0111653
13 . fold = 0.0409122
14 . fold = 0.0140085
15 . fold = 0.00908114
```

Out[82]=



Alternativní zobrazení výsledků:

In[83]:=

```
" = průměrný výsledek" (yourSum / yourFolds)[[1]]
" = nejlepší výsledek" yourBest
" = nejhorší výsledek" yourWorst
```

Out[83]=

```
0.0898506 = průměrný výsledek
```

Out[84]=

```
0.0067351 = nejlepší výsledek
```

Out[85]=

```
0.364738 = nejhorší výsledek
```

Prohlášení

Tento text je vypracován jako součást bakalářské práce Adama Činčury “Demonstrační aplikace pro podporu kurzu neuronových sítí” na FEL ČVUT 2011.