

UNIwersytet Zielonogórski

Wydział Informatyki, Elektrotechniki i Automatyki

Praca dyplomowa

Kierunek: Informatyka

ANALIZA PORÓWNAWCZA BIBLIOTEK
UCZENIA MASZYNOWEGO JĘZYKA C++ NA
POTRZEBY ZASTOSOWAŃ W BIOSTATYSTYCE

inż. Kacper Wojciechowski

Promotor:

Prof. dr hab. inż. Dariusz Uciński

Pracę akceptuję:

.....

(data i podpis promotora)

Zielona Góra, czerwiec 2023

Streszczenie

Niniejsza praca ma na celu analizę i porównanie dostępnych w języku C++ bibliotek uczenia maszynowego, pod kątem ich zastosowania w pracy na danych biostatystycznych. W kolejnych rozdziałach czytelnik zapoznawany jest z:

- Ogólną postać problemów napotykaną w procesie implementacji rozwiązań uczenia maszynowego;
- Charakterystyką wybranego zestawu danych biostatystycznych wykorzystanych do testów omawianych bibliotek;
- Typami oraz uzyskiwanymi wynikami wybranych pod kątem danych eksperymentalnych metod uczenia maszynowego w środowisku prototypowym;
- Bibliotekami Shogun, Shark-ML i Dlib wraz z metodami implementacji poszczególnych metod wzorcowych;
- Zbiorczym podsumowaniem funkcjonalności oferowanych przez wyżej wymienione biblioteki.

Słowa kluczowe: uczenie maszynowe, C++, biblioteka, sieci neuronowe, głębokie uczenie maszynowe, płytkie uczenie maszynowe.

Spis treści

1. Wstęp	1
1.1. Wprowadzenie	1
1.2. Cel i zakres pracy	2
1.3. Struktura pracy	2
2. Uczenie maszynowe w ujęciu praktycznym	3
2.1. Problemy współczesnego uczenia maszynowego	3
2.2. Język C++ jako narzędzie do rozwiązania problemów uczenia maszy- nowego	5
2.3. Cel powstania bibliotek	6
3. Inżynieria danych eksperymentalnych i testowe szablony modeli	7
3.1. Omówienie danych eksperymentalnych	7
3.2. Charakterystyka i przetwarzanie danych	8
3.2.1. Analiza rozkładu danych	8
3.2.2. Czyszczenie i normalizacja rozkładu danych	9
3.3. Szablony docelowych modeli dla zadanych danych eksperymentalnych	12
3.3.1. Regresja logistyczna	12
3.3.2. Głęboka sieć neuronowa	14
3.3.3. Maszyna wektorów nośnych	16
4. Biblioteka Shogun	17
4.1. Wprowadzenie	17
4.2. Formaty źródeł danych	17
4.3. Metody przetwarzania i eksploracji danych	18
4.3.1. Normalizacja	18
4.3.2. Redukcja wymiarowości	19
4.3.3. Regularyzacja L1 i L2	20
4.4. Modele uczenia maszynowego	20
4.4.1. Regresja liniowa	20
4.4.2. Regresja logistyczna	21
4.4.3. Maszyna wektorów nośnych	22
4.4.4. Algorytm K najbliższych sąsiadów	24
4.4.5. Algorytm zbiorowy	24
4.4.6. Sieć neuronowa	24
4.4.7. Brzegowa regresja jądra ?	24
4.5. Metody analizy modeli	24
4.5.1. Błąd średniokwadratowy	24
4.5.2. Średni błąd absolutny	25

4.5.3.	Logarytmiczna funkcja straty	25
4.5.4.	Metryka R^2	25
4.5.5.	Metryka adjusted R^2	25
4.5.6.	Dokładność	25
4.5.7.	Precyzja i pamięć (recall)	25
4.5.8.	Metryka F-score	25
4.5.9.	Metryki AUC i ROC	25
4.5.10.	Sprawdzian krzyżowy K-krotny	25
4.6.	Dostępność dokumentacji i źródeł wiedzy	25
4.7.	Przykłady testowe	25
4.7.1.	Regresja logistyczna	25
4.7.2.	Maszyna wektorów nośnych	25
4.7.3.	Sieć neuronowa	25
5.	Biblioteka Shark-ML	26
5.1.	Wprowadzenie	26
5.2.	Formaty źródeł danych	26
5.3.	Metody przetwarzania i eksploracji danych	28
5.3.1.	Normalizacja	28
5.3.2.	Redukcja wymiarowości	28
5.3.2.1.	PCA	28
5.3.2.2.	Liniowa analiza dyskryminacyjna	29
5.3.3.	Regularyzacja L1	31
5.3.4.	Regularyzacja L2	31
5.4.	Modele uczenia maszynowego	31
5.4.1.	Regresja liniowa	31
5.4.2.	Regresja logistyczna	33
5.4.3.	Maszyna wektorów nośnych	34
5.4.4.	Algorytm K najbliższych sąsiadów	37
5.4.5.	Algorytm zbiorowy	38
5.4.6.	Sieć neuronowa	39
5.5.	Metody analizy modeli	41
5.5.1.	Funkcje straty	41
5.5.2.	Metryka R^2 i adjusted R^2	42
5.5.3.	Metryka AUC-ROC	42
5.5.4.	Sprawdzian krzyżowy K-krotny	42
5.6.	Dostępność dokumentacji i źródeł wiedzy	44
5.7.	Przykłady testowe	44
5.7.1.	Regresja logistyczna	46
5.7.2.	Maszyna wektorów nośnych	46
5.7.3.	Sieć neuronowa	46
6.	Biblioteka Dlib	47
6.1.	Wprowadzenie	47
6.2.	Formaty źródeł danych	47
6.3.	Metody przetwarzania i eksploracji danych	48
6.3.1.	Normalizacja	48
6.3.2.	Redukcja wymiarowości	48
6.3.2.1.	PCA	48

6.3.2.2.	Liniowa analiza dyskryminacyjna	48
6.3.2.3.	Mapowanie Sammona	48
6.4.	Modele uczenia maszynowego	48
6.4.1.	Regresja liniowa	48
6.4.2.	Maszyna wektorów nośnych	48
6.4.3.	Sieci neuronowe	48
6.4.4.	Brzegowa regresja jądra	48
6.5.	Metody analizy modeli	48
6.5.1.	Sprawdzian krzyżowy K-krotny	48
6.6.	Dostępność dokumentacji i źródeł wiedzy	48
6.7.	Przykłady testowe	49
6.7.1.	Maszyna wektorów nośnych	49
6.7.2.	Sieć neuronowa	49
7.	Zestawienie zbiorcze i podsumowanie	50
7.1.	Oferowane funkcjonalności	50
7.2.	Wymagany nakład pracy	50
7.3.	Jakość i ilość dostępnych źródeł referencyjnych	50

Spis rysunków

2.1. Schemat perceptronu - Simplelearn	4
2.2. Multithreading in modern C++ - Modernes C++	5
3.1. Histogram rozkładu zmiennej odpowiedzi	8
3.2. Przykłady histogramów zmiennych decyzyjnych	9
3.3. Przykład analizy obserwacji odstających dla poszczególnych klas zmiennej odpowiedzi	9
3.4. Porównanie rozkładu danych przed i po transformacji logarytmicznej.	10
3.5. Porównanie rozkładów danych przed i po zastosowaniu transformacji pierwiastkiem sześciennym.	11
3.6. Porównanie uzyskanych rozkładów danych przed i po odwrotnej transformacji Arrheniusa.	12
3.7. Wykres p-wartości dla całego zestawu zmiennych decyzyjnych.	13
3.8. Wykres i p-wartości istotnych zmiennych decyzyjnych	14
3.9. Krzywa charakterystyczna odbiornika (ROC) dla modelu regresji logistycznej	14
3.10. Schemat struktury sieci	15
3.11. Krzywa charakterystyczna odbiornika dla zestawu testowego	15
3.12. Krzywa charakterystyczna odbiornika dla danych walidacyjnych	15
3.13. Krzywa charakterystyczna odbiornika dla danych uczących modelu SVM	16
3.14. Krzywa charakterystyczna odbiornika dla danych walidacyjnych modelu SVM	16

Spis tabel

3.1. Lista istotnych regresorów	13
3.2. Struktura modelu sieci neuronowej	15
3.3. Wartości składowych X modelu dla poszczególnych zmiennych decy- zyjnych	16

Rozdział 1

Wstęp

1.1. Wprowadzenie

We współczesnym stanie techniki coraz częściej można spotkać się z urządzeniami i programami o inteligentnych funkcjach, takich jak predykcja zjawisk na podstawie zestawu danych, rozpoznawanie obrazu, analiza mowy, czy przetwarzanie języka naturalnego. Znajdują one zastosowanie w różnych dziedzinach codziennego życia, m.in. w medycynie. W zależności od potrzeb, techniki uczenia maszynowego można wykorzystać do zastosowań medycznych, jak np. rozpoznawanie komórek rakowych na skanach rezonansem magnetycznym, podejmowanie decyzji na podstawie zbioru objawów obecnych u pacjenta, lub przewidywanie norm związków naturalnie występujących w organizmie ludzkim w zależności od okoliczności i wyników pomiarów.

Jedną z istotnych dziedzin medycyny jest biostatystyka, polegająca na wykorzystaniu analizy statystycznej do wnioskowania na podstawie zbiorów danych, takich jak rezultaty przeprowadzonych badań (np. morfologicznych, poziomu poszczególnych hormonów we krwi, itp.), informacji o nawykach żywieniowych oraz stylu życia pacjenta. Szczególnie istotną formą systemów operujących w tej dziedzinie są systemy eksperckie, wykorzystujące techniki płytkiego i głębokiego uczenia maszynowego w celu wspierania diagnozy stawianej przez wykwalifikowanych lekarzy.

U podstaw wyżej wymienionych zagadnień leży implementacja rozwiązań opartych o teorię uczenia maszynowego, oraz wszelkie związane z tym problemy. W związku z tym na przestrzeni lat powstało wiele gotowych narzędzi, takich jak biblioteki i *frameworki*, mające na celu wsparcie programistów w szybkim i prawidłowym wprowadzaniu rozwiązań sztucznej inteligencji na różne platformy docelowe oraz w różnych językach, poczynając od języka C++, przez Python, po środowiska takie jak Matlab.

Istotnym krokiem w przygotowywaniu oprogramowania wykorzystującego sztuczną inteligencję jest prawidłowy wybór wspomnianych wcześniej narzędzi dokonywany na etapie projektowania, tak, aby oferowały one możliwości adekwatne do wymagań funkcjonalnych. Niniejsza praca dokonuje analizy porównawczej bibliotek uczenia maszynowego dla języka C++ w kontekście zastosowań w dziedzinie biostatystyki, celem umożliwienia czytelnikowi trafnego wyboru odpowiedniego narzędzia do realizacji projektu badawczego. Warto zaznaczyć, że niniejsza praca przedstawia jedynie wybrany zakres głównych funkcjonalności omawianych bibliotek ze względu na zastosowania w biostatystyce, w związku z czym mogą one posiadać większą ilość

bardziej szczegółowych funkcjonalności, lub nowe metody dodane po utworzeniu niniejszej pracy.

1.2. Cel i zakres pracy

Celem pracy jest przeprowadzenie analizy i przygotowanie zestawienia bibliotek do uczenia maszynowego dla języka C++, obrazując przykłady bazujące na zestawie danych biostatystycznych.

Zakres pracy obejmował:

- Przegląd dostępnych bibliotek języka C++;
- Inżynierię i kształtowanie danych;
- Płytkie i głębokie uczenie nadzorowane;
- Kwestie wydajnościowe w dopasowywaniu i wdrażaniu modeli;
- Badania praktyczne w oparciu o zestaw danych medycznych i biologicznych.

1.3. Struktura pracy

Pierwszy rozdział przedstawia ogólnym zagadnieniem dotykany przez pracę, poruszając od dziedziny problemu i jej zastosowań, do istoty tematu pracy. Dodatkowo omawiany jest cel i zakres realizacji pracy, oraz jej strukturę.

Kolejny rozdział wprowadza czytelnika do tematu uczenia maszynowego, oraz napotykanym w nim problemów dotyczących złożoności obliczeniowej oraz zużycia zasobów. Stanowią one podstawę do zaproponowania języka C++ jako technologii wspierającej ich rozwiązanie przy pomocy bibliotek.

Tematem rozdziału trzeciego jest przygotowanie elementów testowych do wykorzystania w późniejszej analizie porównawczej. Składa się na nie wybranie i przygotowanie do zestawu danych biostatystycznych do procesu uczenia oraz wybrane wzorcowych rozwiązań. Czytelnik przeprowadzony jest przez normalizację danych i selekcję najlepiej dopasowanych regresorów, oraz zostaje zapoznany z przykładowymi wynikami rozwiązań wzorcowych.

Kolejne rozdziały skupiają się na analizie głównych funkcjonalności wybranych bibliotek pod kątem zastosowań w biostatystyce. Czwarty rozdział przedstawia bibliotekę Shogun, piąty zapoznaje użytkownika z biblioteką Shark-ML, natomiast szósty omawia bibliotekę Dlib. Wprowadzają one czytelnika kolejno w poszczególne aspekty pracy z wybranym produktem, od akceptowanych formatów danych, przez manipulację obserwacjami, po dostępne modele i metody ich analizy. Każdy z rozdziałów podsumowany jest testami na danych biostatystycznych omówionych w rozdziale 3, wraz z analizą skuteczności modelu za pomocą dostępnych dla danej biblioteki metod.

Rozdział siódmy zestawia podobieństwa i różnice między bibliotekami w obiektywnej formie tabelarycznej, i subiektywnej opinii słownej autora na podstawie jego doświadczeń z implementacją rozwiązań i pracą ze źródłami wiedzy.

Rozdział 2

Uczenie maszynowe w ujęciu praktycznym

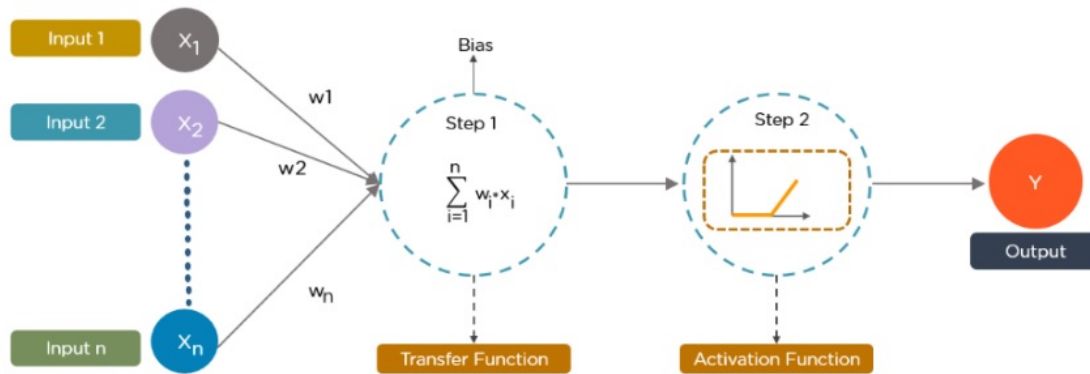
2.1. Problemy współczesnego uczenia maszynowego

Na uczenie maszynowe składają się zaawansowane techniki algorytmiczne i złożone struktury danych przeprowadzające obliczenia na zadanym przez użytkownika zestawie danych uczących, testujących, i danych otrzymywanych w trakcie użytkowania wytworzonego modelu.

Do podstawowych form modeli należą modele produkowane w wyniku technik takich jak regresja liniowa i nieliniowa, regresja logistyczna czy liniowa analiza dyskryminacyjna. W ich wyniku tworzone są modele w postaci wielomianów, które później wymagają stosunkowo bardzo małych nakładów mocy obliczeniowej w celu ewaluacji wyników na podstawie zadanego zestawu danych.

Bardziej zaawansowanymi metodami uczenia maszynowego są drzewa decyzyjne, stanowiące strukturę opartą o logikę drzewa. Każdy z poziomów drzewa odpowiada najlepszemu na danym etapie predyktorowi z dostępnych regresorów, powodując rozgałęzienie na poszczególne wartości lub zakresy. Proces obliczania wartości zmiennej wyjściowej odbywa się poprzez przejście przez drzewo od korzenia do jednego z końcowych liści.

Do najbardziej zaawansowanych, aczkolwiek także najbardziej wymagających obliczeniowo i pamięciowo technik uczenia maszynowego należą techniki uczenia głębokiego wykorzystujące sieci neuronowe, jak np. głębokie sieci neuronowe (ang. *Deep Neural Network*, *DNN*) i konwolucyjne sieci neuronowe (ang. *Convolutional Neural Network*, *CNN*). U podstaw tych metod leży struktura sieci neuronowej, składająca się z warstwy wejściowej, jednej lub więcej warstw ukrytych posiadających perceptrony, oraz jednej warstwy wyjściowej. Każdy węzeł z poprzedniej warstwy połączony jest z każdym węzłem w następnej warstwie, lecz perceptrony znajdujące się w tej samej warstwie są wzajemnie niezależne. Każde połączenie posiada przypisaną wagę użytą do przeliczenia wartości wchodzącej do danego perceptronu z danego sąsiada z poprzedniej warstwy. Wewnątrz perceptronu obliczana jest suma iloczynów wyjść z poprzednich perceptronów i wag odpowiadających połączeniom, a następnie dla uzyskanej sumy obliczana jest wartość funkcji aktywacyjnej, która stanowi wartość wyjściową perceptronu. Przykładowa sieć wykorzystująca pojedynczy perceptron w pojedynczej warstwie ukrytej przedstawiona została na rys. 2.1.



Rysunek 2.1. Schemat perceptronu - Simplelearn

Bardziej rozbudowane metody wykorzystujące sieci neuronowe, jak np. CNN, wymagają dodatkowych kroków obliczeniowych związanych z wstępnym przetworzeniem danych wejściowych, aby były one przyswajalne dla wykorzystywanej sieci.

Analizując struktury danych wymagane przez poszczególne omówione powyżej rodzaje modeli, wyróżnić można następujące problemy napotykane podczas implementacji metod uczenia maszynowego:

- Wymagania wydajnościowe – są one ściśle powiązane ze złożonością obliczeniową wykorzystanych metod, wydajnością zastosowanego języka i wydajnością zastosowanej platformy sprzętowej. Docelowym efektem jest minimalizacja czasu wymaganego na uczenie modelu (choć tutaj tolerowane są także długie czasy, szczególnie w przypadku dużych zestawów danych uczących) i czasu propagacji modelu (w przypadku czego minimalizacja czasu propagacji stanowi priorytet).
- Wymagania pamięciowe – wynikają one z wykorzystywanych platform sprzętowych i ich ograniczeń pamięciowych. Przykładem powyższego dylematu jest zastosowanie modeli uczenia maszynowego na platformach mobilnych i platformach systemów wbudowanych, gdzie obecne rozmiary pamięci RAM i pamięci masowej (szczególnie w przypadku platform wbudowanych) potrafią być wyraźnie ograniczone w stosunku do systemów komputerowych.

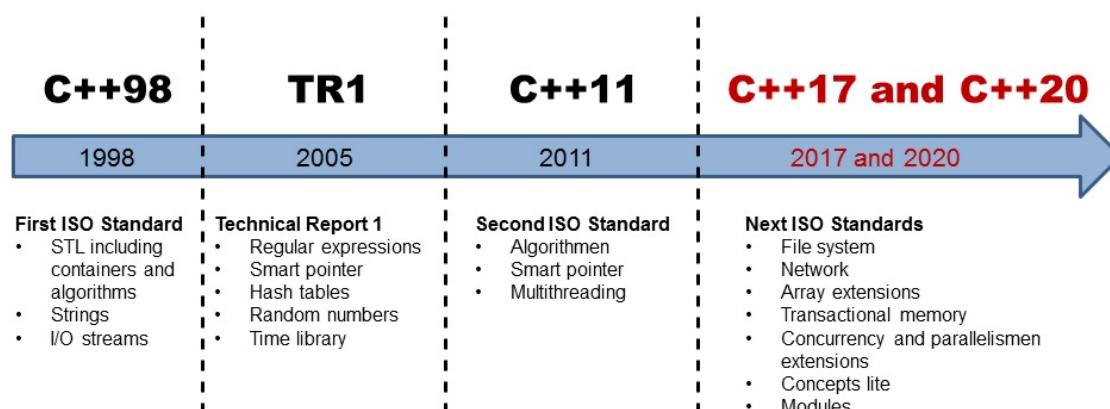
W trakcie rozwoju technologii uczenia maszynowego, postawiono stanowcze kroki w kierunku rozwiązywania powyższych problemów, aby sprostać narastającym wymaganiom związanym z coraz to nowymi i bardziej skomplikowanymi zastosowaniami sztucznej inteligencji. Dokonywano tego poprzez między innymi optymalizację algorytmów, dobór platform sprzętowych o wysokim taktowaniu, możliwym zrównolegleniu operacji, oraz wykorzystaniu wysoko wydajnych języków programowania, w szczególności języków mających możliwość wykorzystania wsparcia ze strony niskopoziomowych operacji.

2.2. Język C++ jako narzędzie do rozwiązywania problemów uczenia maszynowego

Dostępne są różne języki i środowiska wspierające uczenie maszynowe, począwszy od języków takich jak Python, C++, Java czy Matlab. Jednak spośród wymienionych kandydatów szczególnie istotnym wyborem jest język C++.

C++ to język imperatywny charakteryzujący się silnym typowaniem, łączący programowanie niskopoziomowe dla konkretnych architektur z wysokopoziomym programowaniem, w związku z czym oferuje programistom dużą kontrolę nad wykorzystaniem pamięci i możliwość optymalizacji w postaci m.in. dostosowywania wykorzystanych typów danych do wymagań funkcjonalnych tworzonej sieci, kontroli lokalizacji zmiennych (programista decyduje czy zmienna lub struktura znajdzie się na stosie czy stercie) oraz optymalizację czasów wywołań funkcji poprzez sugerowanie kompilatorowi utworzenia funkcji inline. W przeciwieństwie do języków skryptowych których kod jest interpretowany w trakcie wykonywania, takich jak Python i język środowiska Matlab, C++ jest językiem kompilowanym. Oznacza to, że program napisany w C++ przetwarzany jest z postaci tekstu do wykonawczego kodu binarnego dostosowanego do wybranej architektury procesora. Usuwa to całkowicie nadmiar złożoności obliczeniowej wykonywanego programu związanej z interpretacją poleceń i tłumaczeniem ich na język procesora danej platformy w trakcie wykonywania programu, gdyż jest to wykonywane tylko raz, na etapie kompilacji, dodatkowo pozwalając na zastosowanie przez kompilator mechanizmów optymalizacji dostępnych dla wybranej platformy.

Część mechanizmów z języka C++, wywodzących się jeszcze z języka C, pozwala na wykorzystanie wstawek kodu źródłowego w języku Assembler dla wybranego procesora, co zwiększa wydajność programu kosztem przenośności kodu. Dodatkowo niektóre platformy oferują API modułów akceleracji sprzętowej (jak np. system Android udostępniający *Neural Networks API*, *NNA* dla sieci neuronowych), co oferuje dodatkowe przyspieszenie czasu działania programu.



Rysunek 2.2. Multithreading in modern C++ - Modernes C++

Jedną z popularnych technik mających na celu znaczne zwiększenie wydajności modeli sztucznej inteligencji jest zrównoleglenie przetwarzania. Dostępność mechanizmów wielowątkowych dla procesorów (wprowadzonych w standardzie C++11 i

dalej rozwijanych, jak przedstawiono na rys. 2.2), oraz kompatybilność języka C++ z językiem CUDA pozwala wykonywać wiele obliczeń równolegle poprzez wykorzystanie wielu rdzeni lub oddelegowaniu części przetwarzania do karty (lub wielu kart) graficznej (gdzie ilość procesorów GPU znacząco przewyższa ilość rdzeni CPU). Dodatkowym atutem wykorzystania języka C++ przy tworzeniu modelu sztucznej inteligencji jest łatwa integracja z programami dedykowanymi do wysokiej wydajności, napisanymi w tym języku.

Wymienione wyżej mechanizmy i cechy charakterystyczne języka umożliwiają programistom znaczną optymalizację przygotowywanych rozwiązań sztucznej inteligencji, co przekłada się na bardziej efektywne zużycie pamięci, zabezpieczenie przed przeładowaniem stosu procesora, oraz krótsze czasy propagacji utworzonych modeli.

2.3. Cel powstania bibliotek

Implementacja mechanizmów pozwalających na tworzenie rozwiązań sztucznej inteligencji, z racji na swoją złożoność, wymagania dotyczące kompetencji twórców oraz konieczność optymalizacji jest czasochłonna i kosztowna. Tu z pomocą przychodzą biblioteki utworzone przez korporacje oraz społeczność programistów *open source*. Stanowią one gotowe zbiory mechanizmów (najczęściej pisane w sposób obiektowy, a więc ubrane w klasy posiadające określone zestawy metod), które są na bieżąco optymalizowane przez grupy programistów wykorzystujące je w prywatnych projektach lub pracy zawodowej. Oferują one możliwość wykorzystania gotowych modeli utworzonych w innych technologiach, a czasem także bezpośrednie przygotowanie modelu na podstawie odpowiednio sformatowanego i odpowiednio przystosowanego zestawu danych.

Użycie gotowych bibliotek nie tylko oszczędza kosztu i przyspiesza tworzenie pożądanego rozwiązania sztucznej inteligencji, lecz także zapewnia większą niezawodność, gdyż elementy zawarte w bibliotece są implementowane, dokładnie testowane i poprawiane przez programistów o wysokich kompetencjach, jak m.in. w przypadku biblioteki TensorFlow posiadającej wsparcie od pracowników Google.

Więszkość bibliotek przeznaczonych do uczenia maszynowego, nawet wykorzystywanych w językach takich jak Python, napisana jest w języku C++, oferując API dostępne dla określonych języków docelowych. Niestety nie wszystkie biblioteki napisane w ten sposób oferują dostęp do całego API w języku C++ dla wykorzystujących je programów zewnętrznych, lub bywa on utrudniony i skomplikowany, co sprawia że w powszechnej praktyce część bibliotek dedykowanych dla języka C++ operuje na modelach przygotowanych w ramach innej, lub czasem nawet tej samej biblioteki, napisanych w innym języku. Częstym przypadkiem jest tutaj wykorzystanie właśnie języka Python do utworzenia grafu modelu lub modelu w formacie ONNX (ang. *Open Neural Network Exchange*).

W ramach analizy porównawczej w niniejszej pracy, porównywane będą biblioteki oferujące zarówno tworzenie modeli w ramach języka C++, jak i wymagające wykorzystania modeli z innego źródła.

Rozdział 3

Inżynieria danych eksperymentalnych i testowe szablony modeli

3.1. Omówienie danych eksperymentalnych

W celu zestawienia funkcjonalnego bibliotek uczenia maszynowego w języku C++ i przedstawienia przykładów konieczne było wybranie danych eksperymentalnych możliwych do wykorzystania jako porównawczy punkt odniesienia. Jako w/w dane wybrano bazę dotyczącą diagnostyki raka piersi „*Wisconsin Diagnostic Breast Cancer*” z listopada 1995 roku, w której zamieszczono wyniki obrazowania określone w sposób liczbowy. Autorami zestawu są Dr. Wiliam H. Wolberg, W. Nick Street oraz Olvi L. Mangasarian z Uniwersytetu Wisconsin [1]. Baza ta jest dostępna do pobrania z repozytorium Uniwersytetu Californii [2]. Dane mają następującą strukturę:

- 1) ID - numer identyfikacyjny pacjentki;
- 2) Diagnosis [*Malignant* - *M* / *Benign* - *B*] - charakter nowotworu, **zmienna odpowiedzi**;
- 3) Dane klasyfikujące:
 - a) *Radius* - średnica guza;
 - b) *Texture* - tekstura guza;
 - c) *Perimeter* - obwód guza;
 - d) *Area* - pole guza;
 - e) *Smoothness* - gładkość, miara lokalnych różnic w promieniu guza;
 - f) *Compactness* - zwartość, wykorzystywana do oceny stadium guza;
 - g) *Concavity* - stopień wklęsłości miejsc guza;
 - h) *Concave points* - punkty wklęsłości guza;
 - i) *Symmetry* - symetria guza, pomagająca w ocenie charakteru przyrostu guza.

- j) *Fractal dimention* („*coastline approximation*” - 1) - wymiar fraktalny pozwalający na ilościowy opis złożoności komórek nerwowych, umożliwiającą stwierdzenie nowotworzenia się zbioru komórek.

Dla każdej ze zmiennych odpowiedzi została zebrana średnia wartość, odchylenie standardowe oraz średnia trzech największych pomiarów, gdzie każdy zestaw ustawiony jest sekwencyjnie (np. kolumna 3 - średni promień, kolumna 12 - odchylenie standardowe promienia, kolumna 22 - średnia trzech największych pomiarów promienia). Każda ze zmiennych ma charakter ciągły. Zredukowany zestaw danych, zawierający jedynie zmienne decyzyjne informujące o średnich wartościach znaleźć można jako dodatek do książki „*Biostatistics Using JMP: A Practical Guide*” autorstwa Trevora Bihla [3].

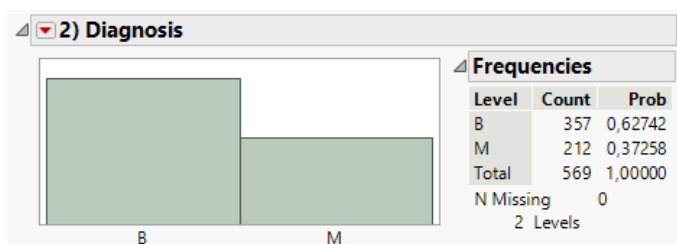
3.2. Charakterystyka i przetwarzanie danych

W celu przeprowadzenia procesu uczenia maszynowego, jednym z najistotniejszych kroków jakie należy podjąć jest wstępne zaznajomienie się z zestawem danych i jego analiza pod kątem rozkładu poszczególnych zmiennych oraz prawdopodobieństw. W tym celu wykorzystane zostało oprogramowanie JMP.

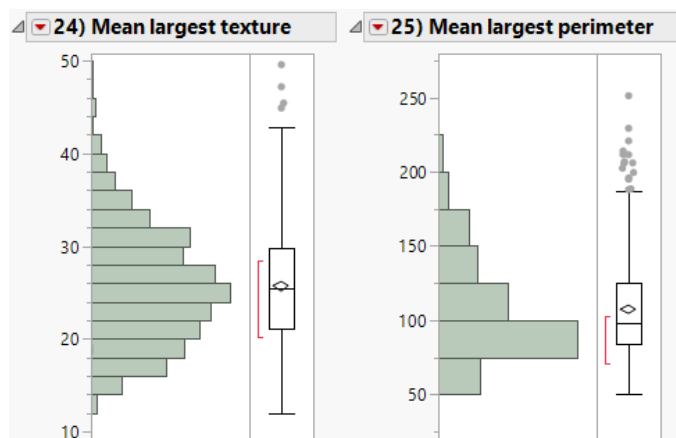
3.2.1. Analiza rozkładu danych

Proces analizy rozkładu rozpoczęty został od przyjrzenia się zmiennej odpowiedzi (*Diagnosis*). Rysunek 3.1 przedstawia uzyskany histogram, wraz z tabelą określającą ilość obserwacji danej klasy i współczynnik prawdopodobieństwa przynależności odpowiedzi do danej klasy. Zauważyć można, że dla użytego zestawu danych ilość zarejestrowano 357 obserwacji łagodnego raka piersi, a jego prawdopodobieństwo przynależności do klasy *Benign* wynosi $\approx 62,7\%$, natomiast do klasy *Malignant* przynależało 212 obserwacji z prawdopodobieństwem $\approx 37,3\%$.

Podczas analizy histogramów zmiennych decyzyjnych, stwierdzono że znaczna ilość ma charakter prawostronnie skośny oraz występują dla nich obserwacje odstające, o czym informuje znajdujący się po prawej stronie histogramu wykres okienkowy (ang. *box graph*), co przedstawiono na rysunku 3.2. Wyjątkiem okazała się zmienna *Mean Largest Concave Points*, która mimo lekkiej skośności, okazała się nie posiadać obserwacji odstających. Na podstawie tych informacji stwierdzono, że aby przygotować dane w odpowiedni sposób do procesu uczenia należy przeprowadzić ich czyszczenie oraz normalizację rozkładu.



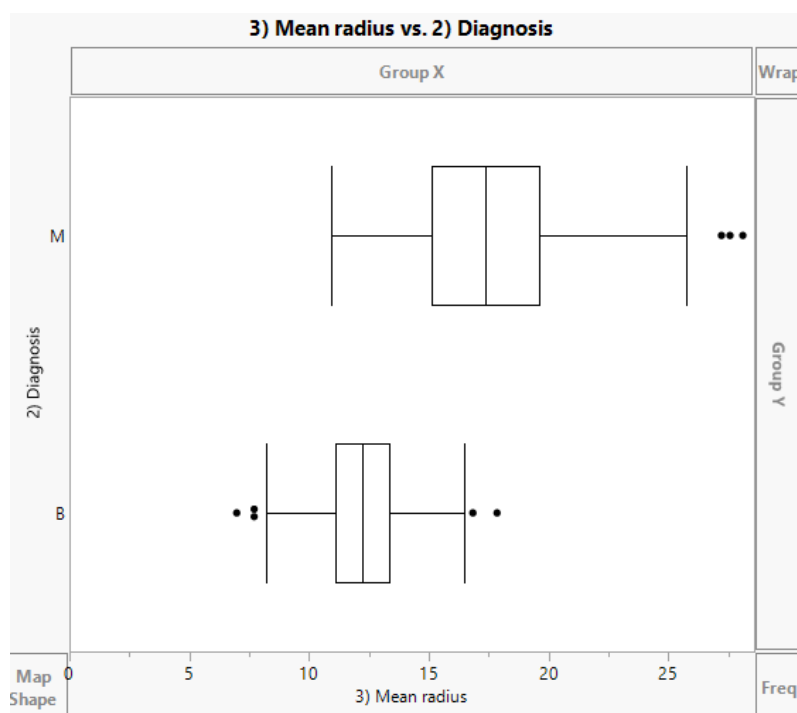
Rysunek 3.1. Histogram rozkładu zmiennej odpowiedzi



Rysunek 3.2. Przykłady histogramów zmiennych decyzyjnych

3.2.2. Czyszczenie i normalizacja rozkładu danych

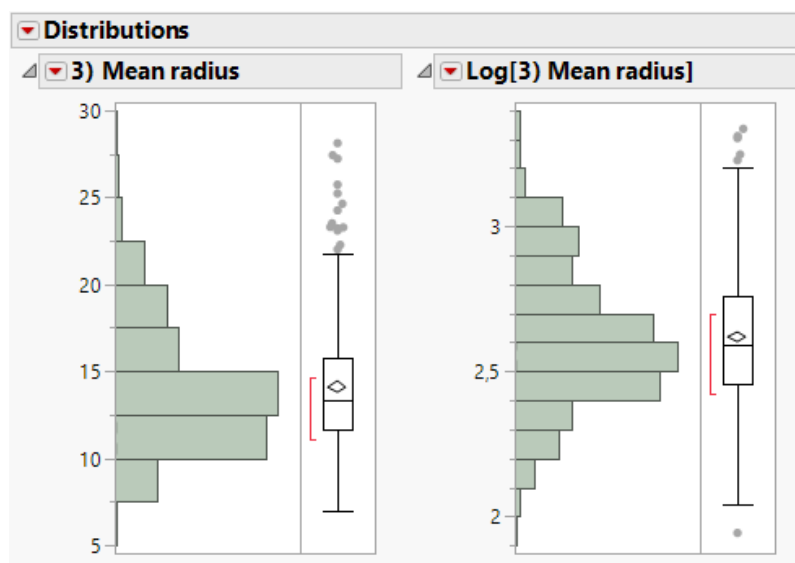
Na pełny zestaw danych składa się 569 obserwacji. Podczas wstępnej analizy stwierdzono istnienie 13 brakujących wartości dla regresora *Std err concave points*, dla których przyjęto wartość średnią z całej kolumny. Głównym problemem okazały się obserwacje odstające oraz skośności rozkładu. Do analizy obserwacji odstających wykorzystano wykresy okienkowe, gdzie oś Y reprezentowała zmienną odpowiedzi, natomiast oś X czyszczoną zmienną decyzyjną. Przykładowy wykres został przedstawiony na rysunku 3.3. Ze względu na bardzo małą ilość obserwacji zdecydowano się rozpocząć proces przystosowywania danych do uczenia poprzez normalizację ich rozkładu, aby zminimalizować lub wyeliminować konieczność usunięcia danych odstających.



Rysunek 3.3. Przykład analizy obserwacji odstających dla poszczególnych klas zmiennej odpowiedzi

W pierwszym podejściu zdecydowano się na zastosowanie transformacji logarytmicznej dla wszystkich zmiennych decyzyjnych i porównanie charakterystyk uzyskanych rozkładów z oryginalnymi. Zmienna *Mean largest concave points* okazała się posiadać rozkład bardzo zbliżony do standardowego, w związku z czym wyłączono ją z dalszej analizy normalizacji. Przykładowe wyniki przedstawiono na rysunku 3.4. Transformacja ta okazała się skutecznym rozwiązaniem jedynie dla następujących zmiennych:

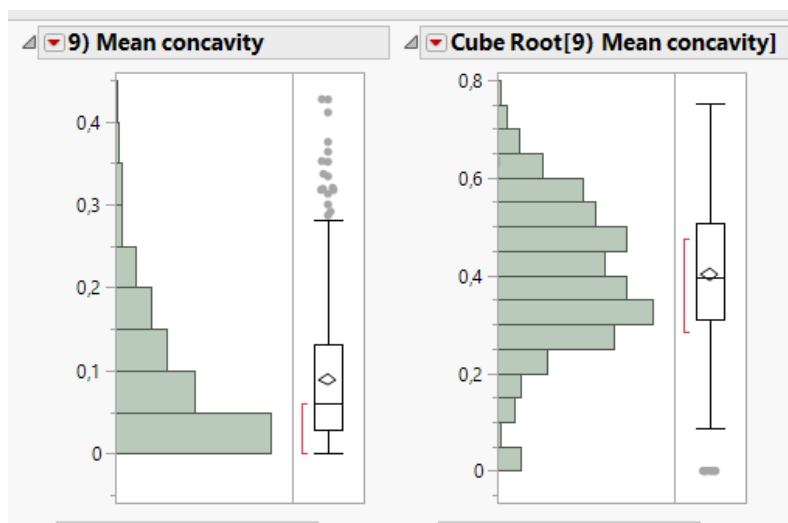
1. *Mean radius*;
2. *Mean texture*;
3. *Mean perimeter*,
4. *Mean area*;
5. *Mean smoothness*;
6. *Mean symmetry*;
7. *Std err texture*;
8. *Std err smoothness*;
9. *Std err compactness*;
10. *Std err concave points*;
11. *Mean largest texture*;
12. *Mean largest smoothness*;
13. *Mean largest compactness*.



Rysunek 3.4. Porównanie rozkładu danych przed i po transformacji logarytmicznej.

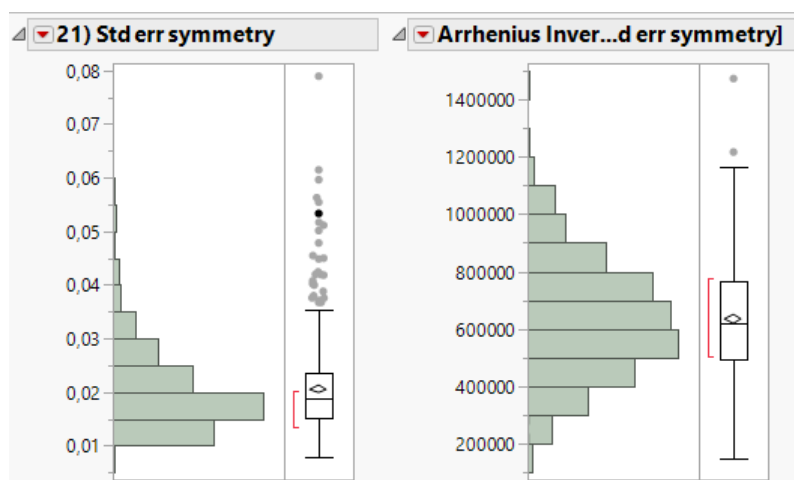
W drugim kroku podjęto próbę wykorzystania transformacji pierwiastkiem sześciennym dla pozostałych zmiennych decyzyjnych, ze względu na jej skuteczność dla danych o rozkładzie prawoskośnym. Rysunek 3.5. przedstawia porównanie rozkładu zmiennej *Mean concavity* przed i po transformacji pierwiastkiem sześciennym. Pomyślnie znormalizowano rozkład następujących zmiennych:

1. *Mean compactness*;
2. *Mean concavity*;
3. *Mean concave points*;
4. *Std err concavity*;
5. *Mean largest radius*;
6. *Mean largest perimeter*;
7. *Mean largest concavity*;
8. *Mean largest symmetry*.



Rysunek 3.5. Porównanie rozkładów danych przed i po zastosowaniu transformacji pierwiastkiem sześciennym.

Ostatecznym krokiem okazało się zastosowanie odwrotnej transformacji Arrheniusa. Niestety część z uzyskanych zmodyfikowanych zmiennych decyzyjnych zachowała częściowy skośny rozkład, jednak inne przetestowane transformacje, jak m.in. pierwiastek kwadratowy, potęga kwadratowa, logarytm $x+1$, logarytm dziesiętny, funkcja potęgowa, funkcja wykładnicza, przyniosły rezultaty porównywalne lub gorsze od uzyskanego w wyniku w/w odwrotnej transformacji Arrheniusa. Rysunek 3.6 przedstawia porównanie uzyskanych rozkładów.



Rysunek 3.6. Porównanie uzyskanych rozkładów danych przed i po odwrotnej transformacji Arrheniusa.

Ze względu na bardzo małą ilość obserwacji, zdecydowano się na zachowanie wszystkich obserwacji odstających, aby zapobiec utracie informacji i zmianie uzyskanych w procesie normalizacji rozkładów.

3.3. Szablony docelowych modeli dla zadanych danych eksperymentalnych

Ze względu na dychotomiczny charakter zmiennej odpowiedzi, wybrany został przedstawiony poniżej zestaw metod dla których wykonano i przedstawiono testy praktyczne. Szablony struktury rozwiązań, takie jak np. wybór zmiennych uczestniczących w procesie uczenia, lub struktura sieci neuronowej zostały ustalone w sposób empiryczny z wykorzystaniem programu do uczenia maszynowego JMP.

3.3.1. Regresja logistyczna

Badanie zależności w modelu regresji logistycznej odbyło się z wykorzystaniem wykresu wpływu zmiennej decyzyjnej na zmienną odpowiedzi opartego o p-wartość. Jako próg pozwalający na odrzucenie hipotezy zerowej (hipotezy o braku wpływu zmiennej na odpowiedź) przyjęto 0.05 jednostek. Rysunek 3.7 przedstawia w/w wykres wraz z p-wartościami dla poszczególnych zmiennych. Zauważyć można, że dla części zmiennych nie została wyznaczona p-wartość – oznacza to, że część zmiennych jest ze sobą skorelowanych.

Pierwszym krokiem w wybraniu istotnych zmiennych było usunięcie zmiennych skorelowanych, drugim natomiast stopniowe usuwanie zmiennych o p-wartości powyżej określonego progu. Rysunek 3.8 przedstawia listę wraz z wykresem kolumnowym istotnych regresorów. Ich lista, wraz z odpowiadającymi im p-wartościami została umieszczona w tabeli 3.1.

Nazwa zmiennej	p-wartość
<i>Log mean largest texture</i>	0,00000
<i>Log mean largest compactness</i>	0,00000
<i>Cube root mean largest symmetry</i>	0,00001
<i>Arrhenius inverse std err symmetry</i>	0,00005
<i>Arrhenius inverse std err radius</i>	0,00018
<i>Cube root mean concave points</i>	0,00056
<i>Cube root mean largest concavity</i>	0,00069
<i>Log std err texture</i>	0,00252
<i>Cube root mean largest perimeter</i>	0,00526
<i>Log mean smoothness</i>	0,04867
<i>Log mean radius</i>	0,04884

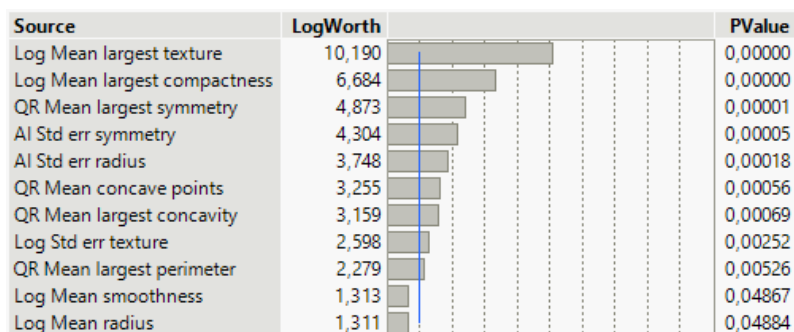
Tabela 3.1. Lista istotnych regresorów

Source	LogWorth		PValue
AI Mean largest area	951,928		0,00000
QR Mean concavity	610,420		0,00000
AI Std err area	476,593		0,00000
Log Std err smoothness	358,978		0,00000
AI Mean fractal dimation	218,578		0,00000
AI Mean largest fractal dimation	.		0,00000
QR Mean largest symmetry	.		.
Mean largest concave points	.		.
QR Mean largest concavity	.		.
Log Mean largest compactness	.		.
Log Mean largest smoothness	.		.
QR Mean largest perimeter	.		.
Log Mean largest texture	.		.
QR Mean largest radius	.		.
AI Std err fractal dimation	.		0,00000
AI Std err symmetry	.		0,00000
Log Std err concave points	.		0,00000
QR Std err concavity	.		.
Log Std err compactness	.		0,00000
AI Std Err perimeter	.		0,00000
Log Std err texture	.		0,00000
AI Std err radius	.		0,00000
Log Mean symmetry	.		0,00000
QR Mean concave points	.		.
QR Mean compactness	.		.
Log Mean smoothness	.		.
Log Mean area	.		.
Log Mean perimeter	.		.
Log Mean texture	.		0,00000
Log Mean radius	.		0,00000

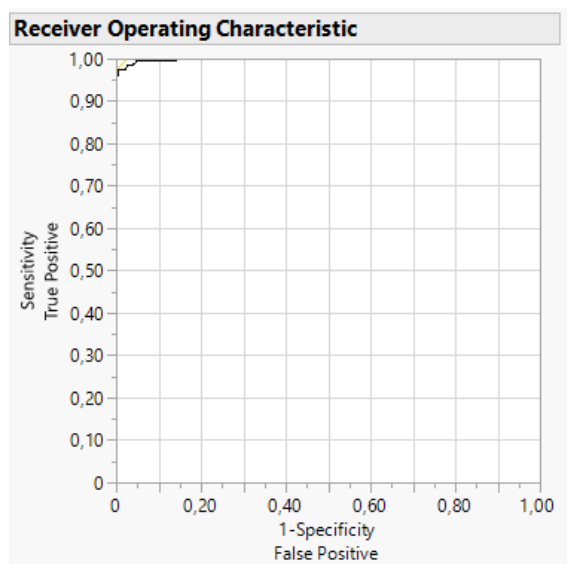
Rysunek 3.7. Wykres p-wartości dla całego zestawu zmiennych decyzyjnych.

Dla wybranego zestawu zmiennych model osiągnął dokładność na poziomie $R^2 = 0.9401$. Zgodnie z macierzą pomyłek, 207 obserwacji typu *Malignant* oraz 335 obserwacji *Benign* zostało zaklasyfikowanych poprawnie. Oznacza to, że model uży-

skalał tylko 2 wyniki typu *false-positive* (prawdopodobieństwo 0,6%) i 5 wyników typu *false-negative* (prawdopodobieństwo 2,4%) dla danych treningowych. Ze względu na mały zestaw obserwacji, ryzyko przeuczenia jest znikome, w związku z czym nie wytypowano zestawu danych walidacyjnych. Rysunek 3.9 przedstawia krzywą charakterystyczną odbiornika dla modelu.



Rysunek 3.8. Wykres i p-wartości istotnych zmiennych decyzyjnych



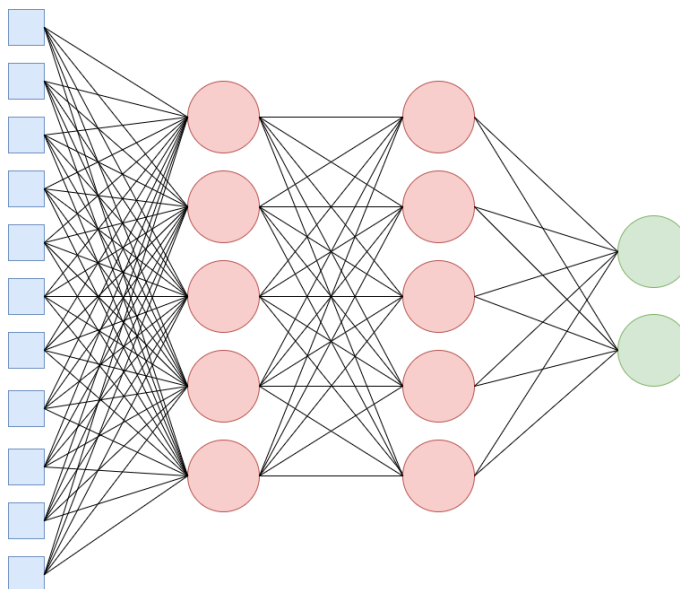
Rysunek 3.9. Krzywa charakterystyczna odbiornika (ROC) dla modelu regresji logistycznej

3.3.2. Głęboka sieć neuronowa

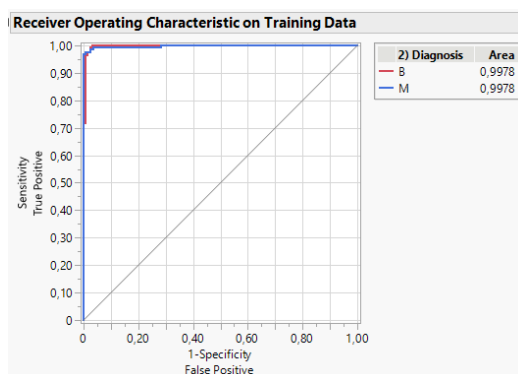
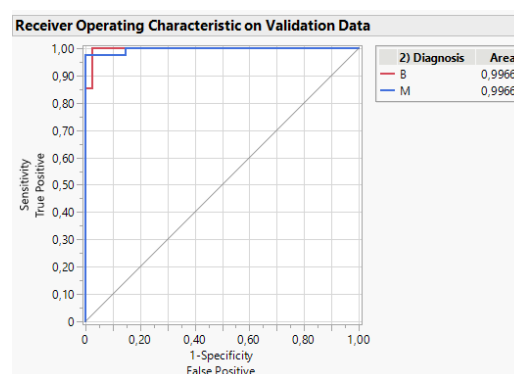
Do przygotowania sieci neuronowej wykorzystano zestaw zmiennych zawartych w tabeli 3.1. Dane zostały losowo podzielone na dane uczące i walidacyjne w proporcji 80% do 20%. W wyniku prób i błędów, optymalny model uzyskano przy strukturze przedstawionej w tabeli 3.2. Graficzny schemat struktury został także przedstawiony na rysunku 3.10.

Środowisko JMP nie udostępnia informacji o funkcji aktywacji warstwy wyjściowej, w związku z czym w tabeli 3.2 została ona pominięta. Dla ziarna o wartości 1234 uzyskano model którego statystyka R^2 dla danych treningowych wyniosła 0.966268, natomiast dla danych testowych 0.9924547. Trafność dla losowo wybranego zestawu

Typ warstwy	ilość neuronów	aktywacja
ukryta	5	tangens hiperboliczny
ukryta	5	tangens hiperboliczny
wyjściowa	2	—

Tabela 3.2. Struktura modelu sieci neuronowej**Rysunek 3.10.** Schemat struktury sieci

testowego wyniosła 100%, natomiast dla danych uczących napotkano 5 przypadków *false-negative* (prawdopodobieństwo 3%) oraz 1 przypadek *false-positive* (prawdopodobieństwo 0,4%). Rysunki 3.11 oraz 3.12 przedstawiają krzywe charakterystyczne odbiornika dla zestawu testowego i walidacyjnego.

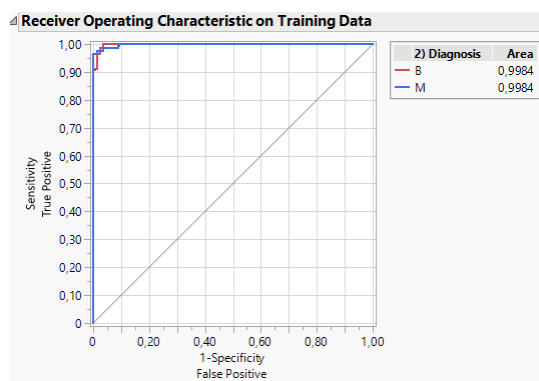
**Rysunek 3.11.** Krzywa charakterystyczna odbiornika dla zestawu testowego**Rysunek 3.12.** Krzywa charakterystyczna odbiornika dla danych walidacyjnych

3.3.3. Maszyna wektorów nośnych

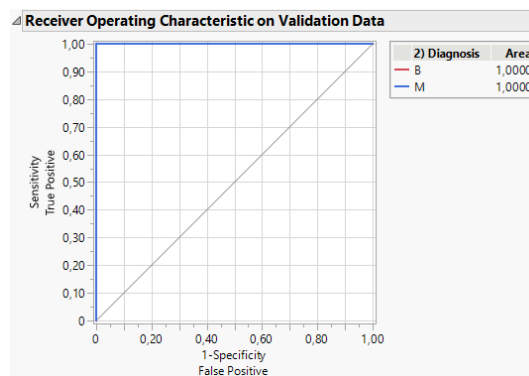
Do predykcji diagnozy wykorzystano ten sam zestaw regresorów, zawartych w tabeli 3.1. Ponownie w celu walidacji użyto metody wybrania losowego zestawu walidacyjnego spośród dostarczonych danych, w proporcji 80% obserwacji uczących i 20% testowych, z użyciem wartości 1234 dla ziarna generatora liczb pseudolosowych. Jako funkcję jądra maszyny wektorów nośnych (ang. Support Vector Machine, SVM) wybrano *Radial Basis Function*, która jest domyślnym wyborem dla SVM w środowisku JMP.

Zmienna decyzyjna	wartość X
<i>Log mean largest texture</i>	3,217
<i>Log mean largest compactness</i>	-1,5504
<i>Cube root mean largest symmetry</i>	0,65891
<i>Arrhenius inverse std err symmetry</i>	635100
<i>Arrhenius inverse std err radius</i>	38170
<i>Cube root mean concave points</i>	0,33665
<i>Cube root mean largest concavity</i>	0,5951
<i>Log std err texture</i>	0,1049
<i>Cube root mean largest perimeter</i>	4,7045
<i>Log mean smoothness</i>	-2,3502
<i>Log mean radius</i>	2,6191

Tabela 3.3. Wartości składowych X modelu dla poszczególnych zmiennych decyzyjnych



Rysunek 3.13. Krzywa charakterystyczna odbiornika dla danych uczących modelu SVM



Rysunek 3.14. Krzywa charakterystyczna odbiornika dla danych walidacyjnych modelu SVM

Utworzony w ten sposób model posiada generalizowaną statystykę R^2 na poziomie 0.97161 dla zestawu walidacyjnego, i uzyskał wskaźnik błędnej klasyfikacji wynoszący 0% dla danych testowych, oraz 1,3% dla danych uczących. Tabela 3.3 przedstawia wartości X dla poszczególnych regresorów. Rysunki 3.13 oraz 3.14 przedstawiają krzywe charakterystyczne odbiornika dla uzyskanego modelu.

Rozdział 4

Biblioteka Shogun

4.1. Wprowadzenie

Shogun to darmowa biblioteka do uczenia maszynowego o otwartym źródle, napisana w C++ i udostępniana według licencji *BSD 3-clause* [4]. Posiada ona interfejsy dla różnych języków, w tym Python, Ruby czy C#, jednak pozwala ona na jej użycie także w jej natywnym języku. Skupia się ona na problemach klasyfikacji oraz regresji.

4.2. Formaty źródeł danych

Podstawową klasą pozwalającą na załadowanie danych do biblioteki Shogun jest klasa *std::vector* z standardowej biblioteki szablonowej (ang. *Standard Template Library*, *STL*) języka C++. W związku z tym, do pobrania danych dla programu realizującego nauczanie i pracę z modelem możliwe jest wykorzystanie dowolnego mechanizmu (np. odczytu z pliku, pobranie danych z sieci czy innego urządzenia) które finalnie przetworzy je do postaci wektora, lecz należy ten mechanizm dostarczyć we własnym zakresie. Popularnym wyborem do przechowywania informacji uczących jest plik o ustrukturyzowanym formacie CSV, dla którego biblioteka Shogun posiada dedykowane wsparcie [5]. Obwarowane jest ono jednak pewnymi wymaganiami:

- **Plik musi zawierać jedynie dane numeryczne** - w przypadku występowania wartości tekstowych, należy wykonać przetwarzanie wstępne mające na celu ich zamianę na wartości liczbowe (np. w przypadku klas decyzyjnych zmiennej odpowiedzi sugerowane jest zastosowanie kodowania *one-hot*). Nietety ten wymóg nie pozwala na przechowywanie etykiet wraz z danymi.
- **Jako separator należy użyć przecinka** - mimo iż sam format, jak i wiele programów komercyjnych do pracy z danymi, jak np. Microsoft Excel, JMP, itp., pozwalają na zastosowanie innych separatorów, takich jak średnik, dla biblioteki Shogun należy zastosować w formie separatora przecinek;
- **Liczby rzeczywiste powinny być zapisywane z użyciem kropki jako separatora dziesiętnego** - wynika to ze specyfiki języka C++ (jak i wielu

innych języków), że domyślne mechanizmy wymuszają użycie kropki jako separatora dziesiętnego, i oczekują jej w przypadku parsowania liczby rzeczywistej z postaci ciągu znakowego odczytanego z pliku, do postaci wartości liczbowej.

Do odczytu i parsowania danych z pliku CSV wykorzystywana jest klasa *shogun::CCSVFile*, której wynik następnie ładowany jest do klasy *shogun::SGMatrix*. Ze względu na zapis odczytanych danych w kolejności według kolumn, do wykorzystania ich w procesie uczenia konieczna jest transpozycja, a następnie rozdzielanie macierzy na dwie części, z których jedna zawiera regresory, a druga wartości zmiennej odpowiedzi. Przykładowy fragment kodu realizujący to zadanie zamieszczony został na listingu 4.1.

Listing 4.1. Przykładowy program do odczytu i przygotowania danych z pliku CSV dla biblioteki Shogun [5]

```

1  #include <shogun/base/init.h>
2  #include <shogun/base/some.h>
3  #include <shogun/io/File.h>
4
5  using namespace shogun;
6  using Matrix = shogun::SGMatrix<float64_t>
7
8  // [...]
9  // odczyt danych z pliku .csv
10 auto csv_file = shogun::some<shogun::CCSVFile>("sample_file.csv");
11 Matrix data;
12 data.load(csv_file);
13
14 // transpozycja i rozdzielanie danych
15 Matrix::transpose_matrix(data.matrix, data.num_rows, data.num_cols);
16 Matrix inputs = data.submatrix(0, data.num_cols - 1); // utworzenie widoku
17 inputs = inputs.clone(); // przekopiowanie danych
18
19 // utworzenie widoku
20 Matrix outputs = data.submatrix(data.num_cols - 1, data.num_cols);
21 outputs = outputs.clone(); // przekopiowanie danych
22
23 // powrotna transpozycja macierzy danych treningowych dla algorytmów
24 // biblioteki
25 Matrix::transpose_matrix(inputs.matrix, inputs.num_rows, inputs.num_cols);
26
27 // przygotowanie klas wrapujących do wykorzystania przy uczeniu
28 auto features = shogun::some<shogun::CDenseFeatures<float64_t>>(inputs);
29 auto labels =
30     shogun::wrap(new shogun::CMulticlassLabels(outputs.get_column(0)));

```

4.3. Metody przetwarzania i eksploracji danych

4.3.1. Normalizacja

Biblioteka dostarcza możliwość normalizacji typu min-max, zapewniając że dane mieścić się będą w przedziale jednostkowym, za pomocą klasy *shogun::CRescaleFeatures*. W przypadku niektórych algorytmów oferowanych przez Shogun, normalizacja

jest jednym z pierwszych wykonywanych kroków, w związku z czym nie zawsze jest potrzebna wykonania jej we wstępnym przetwarzaniu. Informacja o takim przypadku powinna być zawarta w dokumentacji danej metody. Klasa pozwala na ponowne wykorzystanie dla danych o tych samych nauczonych zmiennych statystycznych. Klasa *shogun::CRescaleFeatures* posiada dwie główne metody:

- *fit()* - pozwalającą na nauczanie normalizatora statystyk danych;
- *transform()* - pozwalającą na normalizację obserwacji.

Listing 4.2 pokazuje jak wykorzystać wyżej wspomnianą klasę do zrealizowania normalizacji.

Listing 4.2. Przykład wykonania normalizacji [5]

```
1 #include <shogun/preprocessor/RescaleFeatures.h>
2
3 // [...]
4 // utwórz obiekt danych uczących
5 auto features = shogun::some<shogun::CDenseFeatures<DataType>>(inputs);
6 // [...]
7 // utwórz obiekt normalizera
8 auto scaler = shogun::wrap(new shogun::CRescaleFeatures());
9 // naucz normalizer minimalnych i maksymalnych wartości danych
10 scaler->fit(features);
11 // przetwórz dane uczące według funkcji min-max
12 scaler->transform(features);
13
14 // wyświetl wynik normalizacji
15 auto features_matrix = features->get_feature_matrix();
16 for (int i = 0; i < n; ++i)
17 {
18     std::cout << "Sample_idx_" << i << "_";
19     features_matrix.get_column(i).display_vector();
20 }
```

4.3.2. Redukcja wymiarowości

Shark udostępnia użytkownikowi kilka rodzajów algorytmów redukcji wymiarowości, realizowane przez następujące klasy [5]:

- **PCA** - klasa *CPCA*;
- **Kernel PCA** - klasa *CKernelPCA*;
- **MDS** - klasa *MultidimensionalScaling*;
- **IsoMap** - klasa *CIsoMap*;
- **ICA** - klasa *CFastICA*;
- **Factor analysis** - klasa *CFactorAnalysis*;
- **t-SNE** - klasa *CTDistributedStochasticNeighborEmbedding*.

Każda z powyższych klas operuje poprzez poprzednie nauczenie się parametrów danych uczących metodą *fit()* oraz ustawienie docelowej ilości wymiarów (z wyjątkiem kernel PCA i ISA). Nauczony obiekt reduktora można wykorzystać do redukcji wymiarowości danych poprzez metodę *transform()*, której wynik należy zrzutować na wskaźnik na *CDenseFeatures*. Listing 4.3 przedstawia sposób wykonania redukcji na przykładzie klasy *CKernelPCA*.

Listing 4.3. Przykład redukcji wymiarowości z wykorzystaniem metody Kernel PCA [5]

```

1  using namespace shogun;
2  // [...]
3  void KernelPCAReduction(Some<CDenseFeatures<DataType>> features,
4                          const int target_dim)
5  {
6      // utworzenie jądra dla metody kernel PCA
7      auto gauss_kernel = some<CGaussianKernel>(features, features, 0.5);
8      // utworzenie reduktora
9      auto pca = some<CKernelPCA>();
10     // konfiguracja reduktora
11     pca->set_kernel(gauss_kernel.get());
12     pca->set_target_dim(target_dim);
13     // nauczenie reduktora
14     pca->fit(features);
15
16     // przetworzenie danych
17     auto feature_matrix = features->get_feature_matrix();
18     for (index_t i = 0; i < features->get_num_vectors(); ++i)
19     {
20         // utworzenie przetworzonego wektora
21         auto vector = feature_matrix.get_colimn(i);
22         auto new_vector = pca->apply_to_feature_vector(vector);
23     }
24 }
```

4.3.3. Regularyzacja L1 i L2

W przypadku biblioteki Shogun, regularyzacja stanowi integralną część modelu, co oznacza że występuje ona zawsze podczas wykorzystania danego typu modelu uczenia maszynowego, oraz nie ma możliwości zmiany typu regularyzacji używanej przez docelowy model.

4.4. Modele uczenia maszynowego

4.4.1. Regresja liniowa

Jednym z podstawowych algorytmów uczenia maszynowego udostępnianych przez bibliotekę Shogun jest regresja liniowa, realizowana za pomocą klasy *CLinearRidgeRegression*. Polega ona na dekompozycji macierzy Choleskiego [5], wykorzystując podejście nie-iteracyjne. Jak wskazuje nazwa, metoda ta posiada wbudowaną regularyzację L2 (Ridge), której konfiguracja odbywa się podczas tworzenia obiektu

modelu. Listing 4.4 przedstawia sposób wykonania regresji liniowej z pomocą Shogun.

Listing 4.4. Przykład regresji liniowej w Shogun [5]

```
1 using namespace shogun;
2 // [...]
3 // utworzenie zestawu danych
4 auto x = some<CDenseFeatures<float64_t>>(x_values);
5 auto y = some<CRegressionLabels>(y_values);
6 // utworzenie modelu
7 float64_t tau_regularization = 0.0001;
8 auto lr = some<CLinearRidgeRegression>(tau_regularization, nullptr, nullptr);
9 // konfiguracja i trening modelu
10 lr->set_labels(y);
11 lr->train(x);
12 // wykonanie predykcji dla nowych danych
13 auto new_x = some<CDenseFeatures<float64_t>>(new_x_values);
14 auto y_predict = lr->apply_regression(new_x);
15 // odczytanie wag
16 auto weights = lr->get_w();
17 // wyliczenie wartości funkcji straty
18 y_predict = lr->apply_regression(x);
19 auto eval = some<CMeanSquaredError>();
20 auto mse = eval->evaluate(y_predict, y);
```

4.4.2. Regresja logistyczna

Biblioteka Shogun zawiera implementację wieloklasowej regresji logistycznej w postaci gotowego obiektu klasy *CMulticlassLogisticRegression*. Posiada ona wbudowaną konfigurowalną regularyzację. Listing 4.5 przedstawia sposób użycia wspomnianej klasy opisany w książce „Hands On Machine Learning” [5], wykorzystując dodatkowo mechanizm sprawdzianu krzyżowego do wyboru hiperparametrów, który opisany jest w dalszej części pracy.

Listing 4.5. Przykład regresji logistycznej z użyciem sprawdzianu krzyżowego [5]

```
1 using namespace shogun;
2 // [...]
3 // dane uczące i walidacyjne
4 Some<CDenseFeatures<DataType>> features;
5 Some<CMulticlassLabels> labels;
6 Some<CDenseFeatures<DataType>> test_features;
7 Some<CMulticlassLabels> test_labels;
8
9 // utworzenie drzewa parametrów
10 auto root = some<CModelSelectionParameters>();
11 // współczynnik regularyzacji
12 CModelSelectionParameters* z = new CModelSelectionParameters("m_z");
13 root->append_child(z);
14 z->build_values(0.2, 1.0, R_LINEAR, 0.1);
15
16 // utworzenie strategii podziału dla drzewa decyzyjnego
17 index_t k = 3;
18 CStatifiedCrossValidationSplitting* splitting =
```

```

19     new CStatifiedCrossValidationSplitting(labels, k);
20
21     // utworzenie kryterium ewaluacji dla drzewa decyzyjnego parametrów
22     auto eval_criterium = some<CMulticlassAccuracy>();
23     // utworzenie modelu regresji logistycznej
24     auto log_reg = some<CMulticlassLogisticRegression>();
25     // utworzenie obiektu sprawdzianu krzyżowego
26     auto cross = some<CCrossValidation>(log_reg, features, labels,
27                                         splitting, eval_criterium);
28     cross->set_num_runs(1);
29
30     auto model_selection = some<CGridSearchModelSelection>(cross, root);
31     // wybranie parametrów dla modelu
32     CParameterCombination* best_params =
33         wrap(model_selection->select_model(false));
34     // zaaplikowanie parametrów dla modelu
35     best_params->apply_to_machine(log_reg);
36     // wyświetlenie drzewa decyzyjnego
37     best_params->print_tree();
38
39     // trenowanie
40     log_reg->set_labels(labels);
41     log_reg->train(features);
42
43     // ewaluacja modelu dla danych testowych
44     auto new_labels = wrap(log_reg->apply_multiclass(test_features));
45
46     // ocena dokładności
47     auto accuracy = eval_criterium->evaluate(new_labels, test_labels);
48
49     // przetworzenie wyników
50     auto feature_matrix = test_features->get_feature_matrix();
51     for (index_t i = 0; i < new_labels->get_num_labels(); ++i)
52     {
53         auto label_idx_pred = new_labels->get_label(i);
54         auto vector = feature_matrix.get_column(i);
55         // [...]
56     }

```

4.4.3. Maszyna wektorów nośnych

Podobnie jak w przypadku regresji logistycznej, w bibliotece shogun dostępna jest implementacja wieloklasowej klasyfikacji z wykorzystaniem maszyny wektorów nośnych, w postaci klasy *CMulticlassLibSVM*. Posiada ona szereg dostępnych do konfiguracji parametrów, i umożliwia wybór zastosowanego jądra użytkownikowi. Listing 4.6 prezentuje jak wykorzystać wymienioną klasę wraz z doбором parametrów [5].

Listing 4.6. Przykład użycia maszyny wektorów nośnych [5]

```

1 using namespace shogun;
2 // [...]
3 // dane uczące i walidacyjne
4 Some<CDenseFeatures<DataType>> features;
5 Some<CMulticlassLabels> labels;
6 Some<CDenseFeatures<DataType>> test_features;
7 Some<CMulticlassLabels> test_labels;

```

```
8
9 // utworzenie jądra
10 auto kernel = some<CGaussianKernel>(features, features, 5);
11 // utworzenie wieloklasowej maszyny wektorów nośnych opartej
12 // o klasyfikację one-versus-one
13 auto svm = some<CMulticlassLibSVM>();
14 svm->set_kernel(kernel);
15
16 // utworzenie drzewa decyzyjnego dla parametrów
17 auto root = some<CModelSelectionParameters>();
18 // parametr określający stopień unikania missklasyfikacji
19 CModelSelectionParameters* c = new CModelSelectionParameters("C");
20 root->append_child(c);
21 c->build_values(1.0, 1000.0, R_LINEAR, 100.);
22 // dodanie jądra wyboru parametrów
23 auto params_kernel = some<CModelSelectionParameters>("kernel", kernel);
24 root->append_child(params_kernel);
25 // konfiuracja jądra
26 auto params_kernel_width =
27     some<CModelSelectionParameters>("combined_kernel_weight");
28 params_kernel_width->build_values(0.1, 10.0, R_LINEAR, 0.5);
29 params_kernel->append_child(params_kernel_width);
30
31 // przygotowanie strategii podziału dla drzewa decyzyjnego
32 index_t k = 3;
33 CStatifiedCrossValidationSplitting* splitting =
34     new CStatifiedCrossValidationSplitting(labels, k);
35
36 // przygotowanie kryterium ewaluacji modelu
37 auto eval_criterium = some<CMulticlassAccuracy>();
38
39 // przygotowanie obiektu sprawdzianu krzyżowego
40 auto cross =
41     some<CCrossValidation>(svm, features, labels, splitting, eval_criterium);
42 cross->set_num_runs(1);
43
44 // wybór i zaaplikowanie parametrów dla modelu
45 auto model_selection = some<CGridSearchModelSelection>(cross, root);
46 CParameterCombination* best_params =
47     wrap(model_selection->select_model(false));
48 best_params->apply_to_machine(svm);
49 best_params->print_tree();
50
51 // trenowanie
52 svm->set_labels(labels);
53 svm->train(features);
54
55 // ewaluacja modelu
56 auto new_labels = wrap(svm->apply_multiclass(test_features));
57 // obliczenie dokładności
58 auto accuracy = eval_criterium->evaluate(new_labels, test_labels);
59 std::cout << "svm_" << name << "_accuracy_" << accuracy << std::endl;
60
61 // przetworzenie wyników
62 auto feature_matrix = test_features->get_feature_matrix();
63 for (index_t i = 0; i < new_labels->get_num_labels(); ++i)
64 {
65     auto label_idx_pred = new_labels->get_label(i);
```

```
66     auto vector = feature_matrix.get_column(i);  
67     // [...]  
68 }
```

4.4.4. Algorytm K najbliższych sąsiadów

4.4.5. Algorytm zbiorowy

4.4.6. Sieć neuronowa

4.4.7. Brzegowa regresja jądra ?

4.5. Metody analizy modeli

4.5.1. Błąd średniokwadratowy

Obliczenie błędu średniokwadratowego w bibliotece Shogun sprowadza się do utworzenia obiektu wykorzystującego typ *CMeanSquaredError* jako argument szablonu funkcji *some<>()*. Jest on zwracany pod postacią wskaźnika. W celu otrzymania wartości błędu dla posiadanych danych, należy wywołać z jego pomocą funkcję *evaluate*, do której przekazany zostaje zestaw predykcji oraz oczekiwanych wartości. Listing 4.7 ukazuje sposób użycia wspomnianego mechanizmu.

Listing 4.7. Przykład obliczenia wartości błędu średniokwadratowego [5]

```
1 using namespace shogun;  
2  
3 // [...]  
4  
5 auto mse_error = some<CMeanSquaredError>();  
6 auto mse = mse_error->evaluate(predictions, train_labels);
```

4.5.2. Średni błąd absolutny

4.5.3. Logarytmiczna funkcja straty

4.5.4. Metryka R^2

4.5.5. Metryka adjusted R^2

4.5.6. Dokładność

4.5.7. Precyzja i pamięć (recall)

4.5.8. Metryka F-score

4.5.9. Metryki AUC i ROC

4.5.10. Sprawdzian krzyżowy K-krotny

4.6. Dostępność dokumentacji i źródeł wiedzy

Internetowe źródła informacji w postaci forów społecznościowych skupiają się na wykorzystaniu biblioteki Shark w innych językach, jak np. Python, lecz wraz z jej kodem źródłowym na platformie GitHub [4] możliwe jest znalezienie wielu przykładów jej wykorzystania także w języku C++ w folderze examples. Przykłady te należy zbudować za pomocą odpowiedniego skryptu Pythona zawartego w repozytorium, powodując wygenerowanie listingów kodów w docelowym języku w plikach JSON. Ponadto, Shogun jest jedną z bibliotek opisaną w książce „*Hands On Machine Learning with C++*” autorstwa Kirilla Kolodiazhnyi [5], wprowadzającej czytelnika zarówno do podstawowych funkcjonalności Shogun, jak i podsumowującej podstawy teorii uczenia maszynowego w kontekście ich zastosowania. Większość z przykładów realizacji poszczególnych typów modeli w tej książce posiada przedstawione główne fragmenty listingów dla biblioteki Shogun.

4.7. Przykłady testowe

OPISAĆ PREPROCESSING CSV !!!!

4.7.1. Regresja logistyczna

4.7.2. Maszyna wektorów nośnych

4.7.3. Sieć neuronowa

Rozdział 5

Biblioteka Shark-ML

5.1. Wprowadzenie

Shark-ML to biblioteka uczenia maszynowego dedykowana dla języka C++. Posiada ono otwarte źródło, i udostępniana jest na podstawie licencji *GNU Lesser General Public License*. Głównymi aspektami na których skupia się ta biblioteka są problemy liniowej i nieliniowej optymalizacji (w związku z czym posiada ona część funkcjonalności biblioteki do algebry liniowej), maszyny jądra (np. maszyna wektorów nośnych) i sieci neuronowe. [6] Podmiotami udostępniającymi bibliotekę jest Uniwersytet Kopenhagi w Danii, oraz Instytut Neuroinformatyki z Ruhr-Universität Bochum w Niemczech.

5.2. Formaty źródeł danych

Biblioteka operuje na własnych reprezentacjach macierzy i wektorów, które tworzone są poprzez opakowywanie surowych tablic za pomocą specjalnych adapterów, jak np. `remora::dense_matrix_adaptor<>()` lub za pomocą kontenerów biblioteki standardowej C++ i funkcji `createDataFromRange()`. Mechanizm ten jest identyczny jak w przypadku pozostałych z omawianych bibliotek, co daje użytkownikowi dużą dowolność co do sposobu przechowywania danych i mechanizmu ich odczytywania. Posiada ona także dedykowany parser dla plików w formacie CSV, lecz zakłada on obecność w pliku jedynie danych numerycznych. Do jego użycia należy użyć klasy kontenera `ClassificationDataset` oraz metody `importCSV` która zapisuje odczytane dane do wcześniej wspomnianego obiektu poprzez mechanizm zwracania przez parametr. Jeden z argumentów funkcji określa która z kolumn zawiera zmienną decyzyjną, dzięki czemu biblioteka jest w stanie od razu oddzielić dane wejściowe od kolumny oczekiwanych wartości. Artykuł „Classification with Shark-ML machine learning library” [7] dostępny na platformie GitHub pokazuje także, jak pobrać dane w postaci formatu CSV z internetu z pomocą API biblioteki `curl`, i przetworzyć je do formy akceptowanej przez Shark-ML, co zostało przedstawione na listingu 5.1. W aktualnej wersji biblioteki znalazły się także wbudowane funkcje pobierania danych współpracujące z protokołem HTTP.

Listing 5.1. Pobranie danych do uczenia z serwera HTTP [7]

```

1 // [...]
2
3 static const std::train_data_url =
4 "https://raw.githubusercontent.com/pandas-dev/pandas/master/pandas/
5 tests/data/iris.csv";
6 const std::string data_path{"iris.csv"};
7
8 // sprawdź istnienie pliku za pomocą std::filesystem
9 if (!fs::exists(data_path))
10 {
11     if (!utils::DownloadFile(train_data_url, data_path))
12     {
13         std::cerr << "Unable to download the file" <<
14             train_data_url << std::endl;
15         return 1;
16     }
17 }
18
19 // odczytaj dane z pliku do ciągu znakowego
20 std::ifstream data_file(data_path);
21 std::string train_data_str(std::istreambuf_iterator<char>(data_file),
22                             std::istreambuf_iterator<char>());
23
24 // usuń wiersz zawierający etykiety
25 train_data_str.erase(0, train_data_str.find_first_of("\n") + 1);
26
27 // zamień nazwy klas na identyfikatory
28 train_data_str =
29     std::regex_replace(train_data_str, std::regex("Iris-setosa"), "0");
30 train_data_str =
31     std::regex_replace(train_data_str, std::regex("Iris-versicolor"), "1");
32 train_data_str =
33     std::regex_replace(train_data_str, std::regex("Iris-virginica"), "2");
34
35 // odczytanie i parsowanie danych
36 shark::ClassificationDataset train_data;
37 shark::csvStringToData(train_data, train_data_str, shark::LAST_COLUMN);

```

W celu opakowania danych zawartych w kontenerach biblioteki standardowej języka C++ do obiektów akceptowanych przez bibliotekę Shark-ML, konieczne jest wykorzystanie specjalnych funkcji adaptorowych, do których przekazywany jest wskaźnik na dane w postaci surowej tablicy, wraz z oczekiwanymi wymiarami wynikowej macierzy / wektora. Sposób opakowania danych pokazano na listingu 5.2

Listing 5.2. Sposób opakowywania danych do przetwarzania przez Shark-ML [5]

```

1 // przykładowe dane zawarte w kontenerze std::vector biblioteki
2 // standardowej C++
3 std::vector<float> data{1, 2, 3, 4};
4
5 // opakowanie danych do postaci macierzy 2 x 2
6 auto m = remora::dense_matrix_adaptor<float>(data.data(), 2, 2);
7
8 // opakowanie danych do postaci wektora 1 x 4
9 auto v = remora::dense_vector_adaptor<float>(data.data(), 4);

```

5.3. Metody przetwarzania i eksploracji danych

5.3.1. Normalizacja

Biblioteka Shark-ML implementuje normalizację jako klasy treningowe dla modelu *Normalizer*, udostępniając użytkownikowi trzy możliwe do wykorzystania klasy:

- *NormalizeComponentsUnitInterval* - przetwarza dane tak aby mieściły się w przedziale jednostkowym;
- *NormalizeComponentsUnitVariance* - przelicza dane aby uzyskać jednostkową wariancję, i niekiedy także średnią wynoszącą 0.
- *NormalizeComponentsWhitening* - dane przetwarzane są w sposób zapewniający średnią wartość wynoszącą zero oraz określoną przez użytkownika wariancję (domyślnie wariancja jednostkowa).

Opierają się one o użycie metody *train()* na obiekcie normalizera, aby odpowiednio go skonfigurować do przetwarzania zarówno danych testowych, jak i wszystkich innych danych które użytkownik ma zamiar wprowadzić do modelu. Dodatkowymi funkcjami jest możliwość przemieszania danych, i wydzielenia fragmentu jako dane testowe za pomocą metody *shuffle()* klasy *ClassificationDataset* oraz funkcji *splitAtElement()*. Listing 5.1 pokazuje przykład wstępnego przetwarzania danych z wykorzystaniem normalizacji.

Listing 5.3. Wstępne przetwarzanie danych do uczenia [7]

```

1 // [...]
2
3 // przemieszanie danych i wyznaczenie danych testowych
4 train_data.shuffle();
5 auto test_data = shark::splitAtElement(train_data, 120);
6
7 // utworzenie normalizera
8 using Trainer = shark::NormalizeComponentsUnitVariance<shark::RealVector>;
9 bool remove_mean = true;
10 shark::Normalizer<shark::RealVector> normalizer;
11 Trainer normalizing_trainer(remove_mean);
12
13 // nauczanie normalizera średniej i wariancji danych treningowych
14 normalizing_trainer.train(normalizer, train_data.inputs());
15
16 // transformacja danych uczących
17 train_data = shark::transformInputs(train_data, normalizer);

```

5.3.2. Redukcja wymiarowości

5.3.2.1. PCA

Algorytm redukcji wymiarowości PCA implementowany jest w bibliotece Shark za pośrednictwem klasy *PCA*. Wykorzystuje ona obiekt modelu liniowego w formie enkodera oraz przyjmuje oprócz niego w metodzie *encoder* docelowy wymiar zestawu

danych. Wynikiem działania wymienionej metody jest konfiguracja modelu liniowego do tworzenia zestawu danych o zredukowanym wymiarze. Listing 5.4 przedstawia sposób wykorzystania klasy PCA.

Listing 5.4. Redukcja wymiarowości danych z wykorzystaniem klasy PCA i enkodera

```

1 // [...]
2
3 // utworzenie trenera PCA
4 shark::PCA pca(data);
5 shark::LinearModel<> enc;
6
7 // konfiguracja enkodera do redukcji wymiarów
8 constexpr int nbOfDim = 2;
9 pca.encoder(enc, nbOfDim);
10 auto encoded_data = enc(data);

```

5.3.2.2. Liniowa analiza dyskryminacyjna

Liniowa analiza dyskryminacyjnej (ang. *Linear Discriminant Analysis, LDA*) w przypadku biblioteki Shark-ML opiera się o rozwiązanie analityczne, poprzez konfigurację klasy modelu *LinearClassifier* przez klasę treningową *LDA*, wykorzystując funkcję *train()*. Możliwe jest także wykorzystanie LDA do zadania klasyfikacji, uzyskując predykcje dla zestawu danych za pomocą wywołania obiektu liniowego klasyfikatora jak funkcji (użycie operatora `()`) przekazując mu dane uzyskane z *ClassificationDataset* za pomocą metody *inputs()*. Szczegóły implementacyjne dla redukcji wymiarowości danych zamieszczone zostały na listingu 5.5, natomiast listing 5.6 przedstawia sposób użycia LDA do zadania klasyfikacji.

Listing 5.5. Przykład redukcji zestawu danych z wykorzystaniem modelu LDA [5]

```

1 using namespace shark;
2
3 // [...]
4
5 void LDAReduction(const UnlabeledData<RealVector>& data,
6                  const UnlabeledData<RealVector>& labels,
7                  std::size_t target_dim)
8 {
9     // utworzenie obiektów LDA
10    LinearClassifier<> encoder;
11    LDA lda;
12
13    // utworzenie zestawu danych
14    LabeledData<RealVector, unsigned int> dataset(
15        labels.numberOfElements(), InputLabelPair<RealVector, unsigned int>(
16            RealVector(data.element(0).size()), 0));
17
18    // wypełnienie zbioru danymi
19    for (std::size_t i = 0; i < labels.numberOfElements(); ++i)
20    {
21        // zmiana indeksów klas aby zaczynały się od 0
22        dataset.element(i).label =
23            static_cast<unsigned int>(labels.element(i)[0]) - 1;
24        dataset.element[i].input = data.element(i)

```

```

25     }
26
27     // trening enkodera
28     lda.train(encoder, dataset);
29
30     // utworzenie zredukowanego zestawu danych
31     auto new_labels = encoder(data);
32     auto new_data = encoder.decisionFunction()(data);
33 }

```

Listing 5.6. Przykład klasyfikacji z wykorzystaniem modelu LDA [8]

```

1  #include <shark/Algorithms/Trainers/LDA.h>
2  // [...]
3
4  using namespace shark;
5
6  int main(int argc, char **argv)
7  {
8      // import danych
9      ClassificationDataset data;
10     try
11     {
12         importCSV(data, argv[1], LAST_COLUMN, '_');
13     }
14     catch(...)
15     {
16         std::cerr << "Unable to read data from file" << argv[1] << std::endl;
17         exit(EXIT_FAILURE);
18     }
19
20     // wyświetlenie informacji o danych
21     std::cout << "overall number of data points:" << data.numberOfElements()
22               << "number of classes:" << numberOfClasses(data)
23               << "input dimension:" << inputDimension(data) << std::endl;
24
25     // wyodrębnienie danych testowych
26     auto test = splitAtElement(data, .5 * data.numberOfElements());
27     // utworzenie i wytrenowanie modelu
28     LDA ldaTrainer;
29     LinearClassifier<> lda;
30     ldaTrainer.train(lda, data);
31
32     // analiza predykcji i dokładności modelu
33     Data<unsigned int> prediction;
34     ZeroOneLoss<unsigned int> loss;
35     prediction = lda(data.inputs());
36     std::cout << "LDA on training set accuracy:"
37               << 1. - loss(data.labels(), prediction) << std::endl;
38     prediction = lda(test.inputs());
39     std::cout << "LDA on test set accuracy:"
40               << 1. - loss(test.labels(), prediction) << std::endl;
41
42     return 0;
43 }

```

5.3.3. Regularyzacja L1

Biblioteka Shark, w przeciwieństwie do Shogun nie posiada ściśle określonych mechanizmów regularyzacji dla danych metod uczenia maszynowego. Zamiast tego, istnieje możliwość umieszczenia obiektu wykonującego regularyzację w obiekcie klasy trenera, za pomocą metody *setRegularization()*. W celu zastosowania metody Lasso, należy umieścić w wybranym trenerze obiekt klasy *shark::OneNormRegularizer*, a następnie przeprowadzić proces uczenia.

5.3.4. Regularyzacja L2

Podobnie jak w przypadku metody Lasso, wykorzystanie regularyzacji L2 w trenowanym modelu opiera się na wstrzyknięciu obiektu regularyzatora do obiektu klasy trenera. Dla metody L2 jest to obiekt klasy *shark::TwoNormRegularizer*.

5.4. Modele uczenia maszynowego

5.4.1. Regresja liniowa

Jednym z podstawowych modeli oferowanych przez niniejszą bibliotekę jest regresja liniowa. Do celów jej reprezentacji dostępna jest klasa *LinearModel*, oferująca rozwiązanie problemu w sposób analityczny za pomocą klasy trenera *LinearRegression*, lub podejście iteracyjne implementowane przez klasę trenera *LinearSAGTrainer*, wykorzystujące iteracyjną metodę gradientu średniej statystycznej (ang. *Statistic Averagte Gradient*, *SAG*). W przypadku bardziej skomplikowanych regresji, gdzie może nie istnieć rozwiązanie analityczne, istnieje możliwość zastosowania podejścia iteracyjnego z użyciem optymalizatora wybranego przez użytkownika. Metoda ta sprowadza się to uczenia optymalizatora z wykorzystaniem funkcji straty, a następnie załadowanie uzyskanych wag do modelu regresji. Parametry modelu możliwe są do odczytania z wykorzystaniem metod *offset()* i *matrix()* lub metody *parameterVector()*. Na listingu 5.7 ukazane zostało wykorzystanie podejścia iteracyjnego, natomiast listing 5.8 przedstawia metodę analityczną.

Listing 5.7. Przykład regresji liniowej z wykorzystaniem optymalizatora spadku gradientowego [9]

```
1 #include <shark/Data/Csv.h>
2 #include <shark/Algorithms/GradientDescent/CG.h>
3 #include <shark/ObjectiveFunctions/ErrorFunction.h>
4 #include <shark/ObjectiveFunctions/Loss/SquaredLoss.h>
5 #include <shark/Models/LinearModel.h>
6
7 using namespace shark;
8
9 RegressionDataset loadData(const std::string& dataFile,
10                           const std::string& labelsFile)
11 {
12     Data<RealVector> inputs;
13     Data<RealVector> labels;
14
15     try
```

```

16     {
17         importCSV(inputs, regressorsFile, '_');
18         importCSV(labels, targetFile, '_');
19     }
20     catch(const std::exception& e)
21     {
22         std::cerr << e.what() << '\n';
23         exit(EXIT_FAILURE);
24     }
25     RegressionDataset data(inputs, labels);
26     return data;
27 }
28 // [...]
29
30 // odczytanie danych z plików oraz podział na dane uczące i testowe
31 RegressionDataset data = loadData("data/regressionInputs.csv",
32                                   "data/regressionLabels.csv");
33 RegressionDataset test = splitAtElement(data, static_cast<std::size_t>(
34                                         0.8*data.numberOfElements()));
35 // przygotowanie modelu
36 LinearModel<> model(inputDimension(data), labelDimension(data));
37 SquaredLoss<> loss;
38 ErrorFunction errorFunction(data, &model, &loss);
39
40 // przygotowanie i wyszkolenie optyimizatora
41 CG optimizer;
42 errorFunction.init();
43 optimizer.init(errorFunction);
44 for (int i = 0; i < 100; ++i)
45 {
46     optimizer.step(errorFunction);
47 }
48
49 // przeliczenie predykcji modelu dla danych testowych
50 model.setParameterVector(optimizer.solution().point);
51 Data<RealVector> predictions = model(test.inputs());
52 double testError = loss.eval(test.labels(), predictions);

```

Listing 5.8. Przykład regresji liniowej z wykorzystaniem trenera analitycznego [5]

```

1 // [...]
2
3 using namespace shark;
4
5 // [...]
6
7 LinearRegression trainer;
8 LinearModel<> model;
9 trainer.train(model, data);
10
11 std::cout << "intercept:_" << model.offset() << std::endl;
12 std::cout << "matrix:_" << model.matrix() << std::endl;
13
14 auto prediction = model(test);
15 SquaredLoss<> loss;
16 auto se = loss(test.labels(), prediction);

```

5.4.2. Regresja logistyczna

Mechanizm regresji logistycznej dostępny w bibliotece Shark-ML z natury rozwiązuje problem regresji binarnej. Istnieje jednak możliwość przygotowania wielu klasyfikatorów, w ilości wyrażonej wzorem:

$$\frac{N(N-1)}{2} \quad (5.1)$$

gdzie N oznacza ilość klas występujących w problemie. Utworzone klasyfikatory następnie są złączane w jeden za pomocą odpowiedniej konfiguracji obiektu *OneVersusOneClassifier*, rozwiązując problem klasyfikacji wieloklasowej. W tym celu zestaw danych należy iteracyjnie podzielić na podproblemy o charakterystyce binarnej za pomocą wbudowanej funkcji *binarySubProblem()* przyjmującej zestaw danych i klasy. Nauczanie poszczególnych modeli realizowane jest poprzez klasę trenera *LogisticRegression*. Po zakończeniu trenowania określonej partii pomniejszych modeli, są one ładowane do głównego modelu. Wykorzystanie gotowego klasyfikatora wieloklasowego nie różni się od sposobu użycia modelu uzyskanego np. w klasyfikacji liniowej. Listing 5.9 prezentuje funkcję budującą model logistycznej regresji wieloklasowej, natomiast listing 5.10 prezentuje sposób utworzenia prostego modelu dla problemu binarnego.

Listing 5.9. Przykład funkcji tworzącej model wieloklasowej regresji logistycznej [5]

```

1  using namespace shark;
2
3  // [...]
4
5  void LRClassification(const ClassificationDataset& train,
6                      const ClassificationDataset& test,
7                      unsigned int num_classes)
8  {
9      // utworzenie obiektu docelowego klasyfikatora oraz tablicy
10     // klasyfikatorów składowych
11     OneVersusOneClassifier<RealVector> ovo;
12     auto pairs = num_classes * (num_classes - 1) / 2;
13     std::vector<LinearClassifier<RealVector>> lr(pairs);
14
15     // iteracyjne konfigurowanie klasyfikatorów składowych
16     for (std::size_t n = 0, cls1=1; cls1 < num_classes; ++cls1)
17     {
18         using BinaryClassifierType =
19             OneVersusOneClassifier<RealVector>::binary_classifier_type;
20         std::vector<BinaryClassifierType*> ovo_classifiers;
21         for (std::size_t cls2 = 0; cls2 < cls1; ++cls2, ++n)
22         {
23             // pobranie binarnego podproblemu
24             ClassificationDataset binary_cls_data =
25                 binarySubProblem(train, cls2, cls1);
26
27             // trening modelu składowego
28             LogisticRegression<RealVector> trainer;
29             trainer.train(lr[n], binary_cls_data);
30
31             // załadowanie modelu składowego do serii

```

```

32         ovo_classifiers.push_back(&lr[n]);
33     }
34     // połączenie serii do głównego klasyfikatora
35     ovo.addClass(ovo_classifiers);
36 }
37
38 // użycie modelu
39 auto predictions = ovo(test.inputs());
40 // [...]
41 }

```

Listing 5.10. Przykład prostej binarnej regresji logistycznej

```

1  using namespace shark;
2
3  // [...]
4  void SimpleLR(const ClassificationDataset& train,
5               const ClassificationDataset& test)
6  {
7      // utworzenie modelu oraz trenera
8      LinearClassifier<RealVector> model;
9      LogisticRegression<RealVector> trainer;
10
11     // trenowanie modelu
12     trainer.train(model, train);
13
14     // wykorzystanie modelu
15     auto predictions = model(test.inputs());
16     // [...]
17 }

```

5.4.3. Maszyna wektorów nośnych

Jednym z bardzo istotnych z perspektywy zastosowania biblioteki Shark-ML oferowanych przez nią metod uczenia maszynowego jest maszyna wektorów nośnych stanowiąca rodzaj tzw. modeli jądra (ang. *kernel model*). Opiera się ona na wykonaniu regresji liniowej w przestrzeni cech określonych przez wykorzystany kernel. Podobnie jak w przypadku regresji logistycznej, API biblioteki umożliwia wykonanie klasyfikacji dla przypadku binarnego, natomiast rozwiązanie przy jej użyciu problemu wieloklasowego wymaga kombinacji instancji maszyn wektorów nośnych w model złożony, czego można dokonać przy pomocy klasy *OneVersusOneClassifier* oraz ilości klas wyrażonej wzorem 5.1. Zgodnie z charakterystyczną cechą tej biblioteki, użycie metody podzielone jest na utworzenie instancji modelu oraz obiektu klasy trenera, która go konfiguruje w procesie uczenia. W tym celu dostępne są dla użytkownika klasy:

- *GaussianRbfKernel* - odpowiada za obliczenie podobieństwa między zadanymi cechami wykorzystując funkcję bazową ang. *Radial Basis Function*, *RBF*;
- *KernelClassifier* - funkcja realizująca regresję liniową wewnątrz przestrzeni określonej przez jądro;

- *CSvmTrainer* - klasa trenera realizująca uczenie w oparciu o skonfigurowane parametry;

Do parametrów pozwalających na konfigurację modelu należą m.in.:

- przepustowość modelu - podawana w konstruktorze *GaussianRbfKernel* jako liczba z przedziału $\langle 0; 1 \rangle$;
- regularyzacja - podawana jako liczba rzeczywista w konstruktorze *CSvmTrainer*, domyślnie maszyna wektorów nośnych używa kary typu *1-norm penalty* za przekroczenie docelowej granicy;
- bias - flaga binarna (bool) określająca czy model ma używać biasu, podawana w konstruktorze *CSvmTrainer*;
- *sparsify* - parametr określający czy model ma zachować wektory które nie są nośne, dostępny przez metodę *sparsify()* trenera;
- minimalna dokładność zakończenia nauczania - pozwala wyspecyfikować precyzję modelu, jest dostępna jako pole struktury zwracane przez metodę *stoppingCondition()* klasy trenera;
- wielkość cache - ustawiana za pomocą funkcji *setCacheSize()* trenera;

Sposób użycia modelu jest identyczny jak w przypadku pozostałych modeli, poprzez operator wywołania funkcji - (). Listing 5.11 ukazuje przykład utworzenia i skonfigurowania modelu na podstawie wpisów dostępnych w dokumentacji biblioteki, natomiast listing 5.11 przedstawia sposób utworzenia maszyny wektorów nośnych dla problemów wieloklasowych wewnątrz funkcji przyjmującej zestaw danych uczących i testowych.

Listing 5.11. Przykład maszyny wektorów nośnych dla problemu binarnego [10]

```

1 #include <shark/Algorithms/Trainers/CSvmTrainer.h>
2 #include <shark/Models/Kernels/GaussianRbfKernel.h>
3
4 // umożliwia wygenerowanie przykładowego zestawu danych
5 #include <shark/Data/DataDistribution.h>
6
7 using namespace shark;
8
9 // ...
10
11 // wygenerowanie przykładowego zestawu danych
12 unsigned int trainingDataPoints = 500;
13 unsigned int testDataPoints = 10000;
14 Chessboard problem;
15 ClassificationDataset training = problem.generateDataset(trainingDataPoints);
16 ClassificationDataset test = problem.generateDataset(testDataPoints);
17
18 // przygotowanie kernelu
19 double gamma = 0.5; // przepustowość kernelu
20 GaussianRbfKernel<> kernel(gamma);
21 KernelClassifier<RealVector> kc; // liniowa funkcja dla przestrzeni kernelu

```

```

22
23 // przygotowanie klasy trenera
24 double regularization = 1000.0;
25 bool bias = true;
26 // drugi parametr szablonu określa wykorzystanie typu double dla pamięci
27 // cache modelu zamiast float
28 CSvmTrainer<RealVector, double> trainer(&kernel, regularization, bias);
29
30 // konfiguracja modelu
31 trainer.sparsify() = false; // zachowanie wektorów nie-nośnych
32 trainer.stopCondition().minAccuracy = 1e-6;
33 trainer.setCacheSize(0x1000000);
34
35
36 // trenowanie modelu
37 trainer.train(kc, training);
38
39 // wyświetlenie informacji diagnostycznych o uczeniu
40 std::cout << "Needed_" << trainer.solutionProperties().seconds
41           << "_seconds_to_reach_a_dual_of_"
42           << trainer.solutionProperties().value << std::endl;
43
44 // użycie modelu
45 auto predictions = kc(test.inputs());

```

Listing 5.12. Przykład maszyny wektorów nośnych dla problemu wieloklasowego [5]

```

1 using namespace shark;
2
3 // ...
4
5 void SVMClassification(const ClassificationDataset& train,
6                       const ClassificationDataset& test,
7                       unsigned int num_classes)
8 {
9     double gamma = 0.5;
10    GaussianRbfKernel<> kernel(gamma);
11
12    // utworzenie obiektu modelu docelowego
13    OneVersusOneClassifier<RealVector> ovo;
14
15    // utworzenie kontenera na poszczególne podproblemy
16    unsigned int pairs = num_classes * (num_classes - 1) / 2;
17    std::vector<KernelClassifier<RealVector>> svm(pairs);
18
19    for (std::size_t n = 0, cls1 = 1; cls1 < num_classes; cls1++)
20    {
21        // utworzenie zestawu klasyfikatorów podproblemów dla danej klasy
22        using BinaryClassifierType =
23            OneVersusOneClassifier<RealVector>::binary_classifier_type;
24        std::vector<BinaryClassifierType*> ovo_classifiers;
25
26        for (std::size_t cls2 = 0; cls2 < cls1; cls2++, n++)
27        {
28            // utworzenie podproblemu binarnego
29            ClassificationDataset binary_cls_data =
30                binarySubProblem(train, cls2, cls1);
31

```

```

32         // trenowanie modelu składowego
33         double c = 10.0;
34         CSvmTrainer<RealVector> trainer(&kernel, c, false);
35         trainer.train(svm[n], binary_cls_data);
36         ovo_classifiers.push_back(&svm[n]);
37     }
38     // dołożenie zestawu klasyfikatorów do głównego modelu
39     ovo.addClass(ovo_classifiers);
40 }
41
42 // użycie modelu
43 auto predictions = ovo(test.inputs());
44 }
```

5.4.4. Algorytm K najbliższych sąsiadów

Jedną z metod klasyfikacji oferowanych przez bibliotekę Shark-ML jest model najbliższych sąsiadów, który można wyposażyć w różne algorytmy, w tym w algorytm kNN (ang. *K Nearest Neighbours*). Do reprezentacji modelu stworzona została klasa *NearestNeighborModel*. Biblioteka umożliwia wykorzystanie rozwiązania naiwnego (ang. *brute-force*) lub bazującego na podejściu drzew dzielnych (ang. *space partitioning tree*) poprzez użycie klas *KDTree* i *TreeNearestNeighbors*. W przeciwieństwie do poprzednio wskazanych metod, wykonanie klasyfikacji wieloklasowej w tym przypadku nie wymaga tworzenia złożonych modeli lub podawania modelowi ilości klas. Jest on automatycznie konfigurowany na podstawie danych uczących. Listing 5.13 przedstawia sposób przygotowania klasyfikatora kNN.

Listing 5.13. Przykład utworzenia klasyfikatora kNN [11]

```

1  #include <shark/Data/Csv.h>
2  #include <shark/Models/NearestNeighborModel.h>
3  #include <shark/Algorithms/NearestNeighbors/TreeNearestNeighbors.h>
4  #include <shark/Models/Trees/KDTree.h>
5
6  using namespace shark;
7
8  int main()
9  {
10     std::string filename = "sample_data_file.csv"
11
12     // odczytanie danych z pliku
13     ClassificationDataset data;
14     try
15     {
16         importCSV(data, filename, LAST_COLUMN, '_');
17     }
18     catch (...)
19     {
20         std::cerr << "unable to read data from file" << filename
21                 << std::endl;
22         exit(EXIT_FAILURE);
23     }
24
25     // wyświetlenie informacji o danych
26     std::cout << "number of data points:" << data.numberOfElements()
```

```

27         << "number_of_classes:" << numberOfClasses(data)
28         << "input_dimension:" << inputDimension(data)
29         << std::endl;
30
31     // wydzielenie zestawu danych testowych
32     ClassificationDataset dataTest = splitAtElement(
33         data,
34         static_cast<std::size_t>(
35             .5 * data.numberOfElements())
36     );
37     // wyświetlenie informacji
38     std::cout << "training_data_points:" << data.numberOfElements()
39         << std::endl;
40     std::cout << "test_data_points:" << dataTest.numberOfElements()
41         << std::endl;
42
43     // utworzenie i konfiguracja drzewa oraz algorytmu
44     KDTree<RealVector> tree(data.inputs());
45     TreeNearestNeighbors<RealVector, unsigned int> algorithm(data, &tree);
46
47     // konfiguracja modelu
48     const unsigned int K = 1; // ilość sąsiadów dla algorytmu kNN
49     NearestNeighborModel<RealVector, unsigned int> KNN(&algorithm, K);
50
51     // przykład użycia modelu
52     ZeroOneLoss<unsigned int> loss;
53     auto prediction = KNN(data.inputs());
54     std::cout << K << "-KNN_on_training_set_accuracy:"
55         << 1. - loss.eval(data.labels(), prediction) << std::endl;
56     prediction = KNN(dataTest.inputs());
57     std::cout << K << "-KNN_on_test_set_accuracy:"
58         << 1. - loss.eval(dataTest.labels(), prediction)
59         << std::endl;
60
61     return 0;
62 }

```

5.4.5. Algorytm zbiorowy

Biblioteka Shogun-ML oprócz powszechnie znanych algorytmów udostępnia także bardziej złożone struktury, jak np. model algorytmów złożonych (ang. *ensemble*), bazujący na wykorzystaniu wielu składowych algorytmów bazujących na fragmentach przestrzeni cech, aby później połączyć uzyskane wyniki, osiągając w ten sposób zwiększenie precyzji predykcji. Niestety jedynym występującym w tej bibliotece mechanizmem wykorzystującym tą technikę jest losowy las (ang. *Random Forest*) złożony z drzew decyzyjnych, umożliwiający jedynie zadanie klasyfikacji (nie jest dostępna możliwość przeprowadzenia z jego użyciem regresji). Klasycznie dla omawianej biblioteki, implementacja odbywa się poprzez utworzenie obiektu klasy trenera, w tym przypadku *RFTrainer*, umożliwiającego konfigurację parametrów, a następnie nauczanie modelu, reprezentowanego przez klasę *RFClassifier*. Oprócz algorytmu Random Forest, istnieje możliwość wykorzystania biblioteki do utworzenia modelu w technice składania (ang. *stacking*), jednak z racji nie występowania tej opcji domyślnie, leży ona poza zakresem niniejszej pracy. Listing 5.14 przedstawia

sposób utworzenia i użycia modelu losowego lasu.

Listing 5.14. Utworzenie modelu algorytmu złożonego losowego lasu [5]

```
1 using namespace std;
2
3 // [...]
4
5 void RFClassification(const ClassificationDataset& train,
6                      const ClassificationDataset& test)
7 {
8     RFTrainer<unsigned int> trainer;
9     trainer.setNTrees(100);
10    trainer.setMinSplit(10);
11    trainer.setMaxDepth(10);
12
13
14    // DOKOŃCZYĆ !!!!
15 }
```

5.4.6. Sieć neuronowa

Skonstruowanie sieci neuronowej w bibliotece Shark-ML wykorzystuje pewne mechanizmy oferowane przez klasę *LinearModel<>*. Pozwala ona na określenie typu i ilości wejść, wyjść, oraz zastosowania biasu. Każda warstwa składa się z pojedynczego obiektu modelu liniowego, gdzie ilość wyjść określa liczbę neuronów zawartych w warstwie. Konfiguracja funkcji aktywacji neuronu odbywa się na etapie przekazania typów do szablonu modelu. Pełną listę dostępnych funkcji aktywacji znaleźć można w dokumentacji biblioteki [12]. Kolejnym krokiem jest przygotowanie obiektu klasy *ErrorFunction<>* w oparciu o jedną z dostępnych funkcji strat, która zostanie skonfigurowana do wykorzystania przez optymalizator przeprowadzający uczenie. Po przygotowaniu funkcji straty, należy zainicjować sieć losowymi wagami i utworzyć oraz skonfigurować wybrany obiekt klasy optymalizatora. Na tym etapie, sieć jest gotowa do przeprowadzenia procesu uczenia. Polega ono na iteracyjnym wykonywaniu kroków za pomocą funkcji *step()* obiektu optymalizatora. W międzyczasie możliwe jest także pobranie wartości funkcji straty na każdej epoce uczenia. Z racji konieczności użycia zwykłej pętli zdefiniowanej przez użytkownika, istnieje możliwość określenia własnych warunków stopu ewaluowanych po każdej epoce, jak np. liczba epok lub przekroczenie określonego progu przez uzyskaną wartość funkcji straty. Wewnątrz pętli iterującej po epokach należy umieścić kolejną pętlę, której zadaniem będzie przejście przez wszystkie batche, wykonując na nich krok optymalizatora. Po zakończeniu uczenia, należy skonfigurować obiekt modelu przekazując mu wagi ustalone przez optymalizer, uzyskując w ten sposób gotową instancję wyszkolonej sieci neuronowej. Listing 5.15 przedstawia kod realizujący cały proces, stanowiący przykład z książki „Hands On Machine Learning with C++”.

Listing 5.15. Przykład trójwarstwowej sieci neuronowej [5]

```
1 using namespace shark;
2
3 // [...]
4
```

```
5 // utworzenie zestawu danych
6 size_t n = 10000;
7 std::vector<RealVector> x_data[n];
8 std::vector<RealVector> y_data[n];
9 Data<RealVector> x = createDataFromRange(x_data);
10 Data<RealVector> y = createDataFromRange(y_data);
11 RegressionDataset train_data(x, y);
12
13 // zdefiniowanie warstw sieci
14 using DenseLayer = LinearModel<RealVector, TanhNeuron>;
15 DenseLayer layer1(1, 32, true);
16 DenseLayer layer2(32, 16, true);
17 DenseLayer layer3(16, 8, true);
18 LinearModel<RealVector> output(8, 1, true);
19 // połączenie warstw
20 auto network = layer1 >> layer2 >> layer3 >> output;
21
22 // utworzenie i konfiguracja funkcji straty
23 SquaredLoss<> loss;
24 ErrorFunction<> error(train_data, &network, &loss, true);
25 TwoNormRegularizer<> regularizer(error.numberVariables());
26 double weight_decay = 0.0001;
27 error.setRegularizer(weight_decay, &regularizer);
28 error.init();
29
30 // inicjalizacja wag sieci
31 initRandomNormal(network, 0.001);
32
33 // utworzenie i konfiguracja optymalizatora
34 SteepestDescent<> optimizer;
35 optimizer.setMomentum(0.5);
36 optimizer.setLearningRate(0.01);
37 optimizer.init(error);
38
39 // przeprowadzenie procesu uczenia
40 std::size_t epochs = 1000;
41 std::size_t iterations = train_data.numberBatches();
42 // pętla przechodząca przez kolejne epoki
43 for (std::size_t epoch = 0; epoch != epochs; ++epoch)
44 {
45     double avg_loss = 0.0;
46     // pętla operująca na pojedynczych batch'ach
47     for (std::size_t i = 0; i != iterations; ++i)
48     {
49         // wykonanie kroku optymalizatora
50         optimizer.step(error);
51         // zapisanie częściowej wartości średniej funkcji straty
52         if (i % 100 == 0)
53         {
54             avg_loss += optimizer.solution().value;
55         }
56     }
57     // obliczenie średniej wartości funkcji straty
58     avg_loss /= iterations;
59     std::cout << "Epoch" << epoch << " | Avg. Loss" << avg_loss << std::endl;
60 }
61 // konfiguracja modelu do docelowego użycia
62 network.setParameterVector(optimizer.solution().point);
```

5.5. Metody analizy modeli

5.5.1. Funkcje straty

Biblioteka Shark-ML oferuje szereg funkcji straty pozwalających na wymierną weryfikację dokładności modelu. Należą do nich [13]:

- **średni błąd absolutny** - realizowany za pomocą klasy *AbsoluteLoss*;
- **błąd średniokwadratowy** - realizowany za pomocą klasy *SquaredLoss*;
- **błąd typu zero-one** - realizowany za pomocą klasy *ZeroOneLoss*;
- **błąd dyskretny** - realizowany za pomocą klasy *DiscreteLoss*;
- **entropia krzyżowa** - realizowana za pomocą klasy *CrossEntropy*;
- **błąd typu hinge** - realizowany za pomocą klasy *HingeLoss*;
- **średniokwadratowy błąd typu hinge** - realizowany za pomocą klasy *SquaredHingeLoss*;
- **błąd typu hinge epsilon** - realizowany za pomocą klasy *EpsilonHingeLoss*;
- **średniokwadratowy błąd typu hinge epsilon** - realizowany za pomocą klasy *SquaredEpsilonHingeLoss*;
- **funkcja straty Hubera** - realizowana za pomocą klasy *HuberLoss*;
- **funkcja straty Tukeya** - realizowana za pomocą klasy *TukeyBiweightLoss*.

Każda z powyższych klas używana jest w schematyczny sposób, poprzez wcześniejsze utworzenie obiektu klasy wybranej funkcji straty, a następnie wywołanie jej jako funkcji przekazując wartości oczekiwane oraz otrzymane predykcje modelu. Listing 5.16 przedstawia omówiony sposób użycia na przykładzie błędu średniokwadratowego.

Listing 5.16. Użycie funkcji straty na przykładzie błędu średniokwadratowego

```
1 using namespace shark;  
2  
3 // [...]  
4  
5 SquaredLoss<> mse_loss;  
6 auto mse = mse_loss(train_data.labels(), predictions);  
7 auto rmse = std::sqrt(mse);
```

5.5.2. Metryka R^2 i adjusted R^2

Biblioteka Shark-ML nie oferuje bezpośredniej klasy reprezentującej metrykę R^2 jak w przypadku funkcji strat, jednak udostępnia użytkownikowi funkcję obliczania wariancji danych, co umożliwia bardzo łatwą samodzielną implementację obu metryk. Listing 5.17 przedstawia sposób ich wyliczenia, posiadając wartość błędu średniokwadratowego.

Listing 5.17. Implementacja metryk R^2 oraz adjusted R^2

```

1  using namespace shark;
2
3  // [...]
4
5  // błąd średniokwadratowy
6  SquaredLoss<> mse_loss;
7  auto mse = mse_loss(train_data.labels(), predictions);
8
9  // metryka  $R^2$ 
10 auto var = variance(train_data.labels());
11 auto r_squared = 1 - mse / var(0);
12
13 // metryka adjusted  $R^2$ 
14 auto adj_r_squared = 1 - (1 - r_squared)((num_regressors - 1)/
15                                     (num_regressors - data_size - 1));

```

5.5.3. Metryka AUC-ROC

AUC-ROC stanowi jedną z często wykorzystywanych metryk poprawności predykcji modelu, w związku z czym nie mogło jej zabraknąć w bibliotece Shark-ML. Jest ona dostępna za pośrednictwem klasy *NegativeAUC*, wykorzystywanej w taki sam sposób jak pozostałe omówione wcześniej funkcje straty. W przeciwieństwie do standardowego podejścia, wspomniana klasa oblicza odwróconą wartość pola pod wykresem funkcji ROC, aby umożliwić wykorzystanie jej jako minimalizowanego celu w procesie uczenia. Listing 5.18 przedstawia sposób obliczenia wartości wymienionej metryki.

Listing 5.18. Przykład użycia klasy *NegativeAUC* do obliczenia pola pod funkcją ROC

```

1  using namespace std;
2
3  // [...]
4
5  constexpr bool invertToPositiveROC = true;
6  NegativeAUC<> roc(invertToPositiveROC);
7  auto auc_roc = roc(train_data.labels(), predictions);

```

5.5.4. Sprawdzenie krzyżowy K-krotny

Proces poszukiwania najlepszych wartości hiperparametrów w Shark-ML uwzględnia przeprowadzenie wewnętrznie uczenia danego modelu, lecz skupia się na porównaniu uzyskiwanych wyników, w związku z czym jego opis zamieszczony został

w tej sekcji. Użycie implementacji metody sprawdzianu krzyżowego K-fold w wymaga wykorzystania trzech klas. Pierwszą z nich stanowi *CVFolds*, której zadaniem jest przechowanie zestawu danych podzielonego na odpowiednią ilość fragmentów. Drugą jest klasa *CrossValidationError* stanowiąca szablon przyjmujący typ modelu, dla którego określany będzie błąd walidacji, oraz obiekt klasy błędu, który ma zostać wyliczony. Ostatnią klasą jest *GridSearch*, którego zadaniem jest iteracyjny wybór fragmentów do uczenia i wyliczenie wartości hiperparametrów dla modelu. Wynikiem procesu jest uzyskanie najlepszego zestawu hiperparametrów do procedury szkolenia - użytkownik musi zawołać metodę *step()* klasy *GridSearch* tylko jeden raz. Listing 5.19 przedstawia przykład zawarty w książce „Hands On Machine Learning with C++” [5], w którym autor przedstawia proces wykorzystania powyższych klas na własnoręcznie zaimplementowanym modelu regresji wielomianowej.

Listing 5.19. Przykład realizacji sprawdzianu krzyżowego K-fold w Shark-ML

```

1  using namespace shark;
2
3  // [...]
4
5  // przetworzenie danych uczących
6  const unsigned int num_folds = 5;
7  CVFolds<RegressionDataset> folds =
8      createCVSameSize<RealVector, RealVector>(train_data, num_folds);
9
10 // przygotowanie parametrów dla docelowego modelu
11 double regularization_factor = 0.0;
12 double polynomial_degree = 8;
13 int num_epochs = 300;
14
15 // konfiguracja docelowego modelu
16 PolynomialModel<> model;
17 PolynomialRegression trainer(regularization_factor, polynomial_degree,
18                             num_epochs);
19
20 // utworzenie obiektu błędu oraz sprawdzianu krzyżowego
21 AbsoluteLoss<> loss;
22 CrossValidationError<PolynomialModel<>, RealVector> cv_error(
23     folds, &trainer, &model, &trainer, &loss);
24
25 // utworzenie siatki
26 GridSearch grid;
27 std::vector<double> min(2);
28 std::vector<double> max(2);
29 std::vector<std::size_t> sections(2);
30
31 // regularyzacja
32 min[0] = 0.0;
33 max[0] = 0.00001;
34 sections[0] = 6;
35
36 // stopień wielomianu
37 min[1] = 4;
38 max[1] = 10.0;
39 sections[1] = 6;
40 grid.configure(min, max, sections);
41

```

```

42 // proces uczenia i konfiguracja modelu
43 grid.step(cv_error);
44
45 trainer.setParameterVector(grid.solution().point);
46 trainer.train(model, train_data);

```

5.6. Dostępność dokumentacji i źródeł wiedzy

Biblioteka Shark-ML posiada skróconą dokumentację dostępną na głównej stronie internetowej projektu, wraz z przykładowymi plikami źródłowymi dołączonymi do repozytorium. Jest ona także wspomniana w książce „Hands-On Machine Learning with C++”, przedstawiającej sposoby użycia wybranych funkcjonalności. Kwestią wyróżniającą ją natomiast na tle pozostałych bibliotek omówionych w ramach niniejszej pracy jest fakt, że jest ona dedykowana dla języka C++, w związku z czym dużo łatwiej dostępne są wątki społecznościowe i artykuły omawiające realizację różnorodnych typów modeli z jej użyciem, oraz oferując przykładowy kod źródłowy.

5.7. Przykłady testowe

Niniejszy rozdział przedstawia sposób praktycznego wykorzystania omówionych wcześniej metod wraz z porównaniem uzyskiwanych przez nie wyników na przykładzie problemu omówionego w rozdziale 3. Odczyt danych realizowany jest z pliku .csv za pomocą funkcji dostępnej w bibliotece Shark-ML, natomiast sam plik uległ takiemu samemu przetwarzaniu wstępnemu jak opisano w niniejszej sekcji w rozdziale 4. Podobnie jak poprzednio każdy z modeli zawarty został w osobnej funkcji, pozwalając na wywołanie wszystkich poniższych przykładów z poziomu pojedynczego programu o funkcji *main()* przedstawionej na listingu ??.

PONIŻSZY KOD PRZETESTOWAĆ I SKOMPILOWAĆ

Listing 5.20. Napisany dotychczasowo kod

```

1  #include <fstream>
2  #include <filesystem>
3  #include <regex>
4  #include <string>
5  #include <string_view>
6
7  #include <shark/Algorithms/Trainers/CSvmTrainer.h>
8  #include <shark/Models/LinearModel.h>
9  #include <shark/Models/Kernels/GaussianRbfKernel.h>
10
11 void printSharkModelEvaluation(const auto& labels, const auto& predictions)
12 {
13     SquaredLoss<> loss;
14     auto mse = loss(labels, predictions);
15     std::cout << "MSE:␣" << mse << std::endl;
16
17     auto var = shark::variance(labels);
18     auto r_squared = 1 - mse / var(0);
19     std::cout << "R^2:␣" << r_squared << std::endl;

```

```
20
21     constexpr bool invertToPositiveROC = true;
22     NegativeAUC roc(invertToPositiveROC);
23     auto auc_roc = roc(labels, predictions);
24     std::cout << "AUC_ROC: " << auc_roc << std::endl << std::endl;
25 }
26
27 void sharkLogisticRegression(const shark::ClassificationDataset& trainData,
28                             const shark::ClassificationDataset& testData)
29 {
30     shark::LinearClassifier<RealVector> logisticModel;
31     shark::LogisticRegression<RealVector> trainer;
32
33     trainer.train(logisticModel, trainData);
34
35     auto trainPredictions = logisticModel(trainData.inputs());
36     auto testPredictions = logisticModel(testData.inputs());
37
38     std::cout << "-----SharkLogisticRegression-----" << std::endl;
39     std::cout << "Train_data_model_evaluation:" << std::endl;
40     printSharkModelEvaluation(trainData.labels(), trainPredictions);
41
42     std::cout << "Test_data_model_evaluation:" << std::endl;
43     printSharkModelEvaluation(testData.labels(), testPredictions);
44 }
45
46 void sharkSVM(const shark::ClassificationDataset& trainData,
47              const shark::ClassificationDataset& testData)
48 {
49     double gamma = 0.5;
50     shark::GaussianRbfKernel<> kernel(gamma);
51     KernelClassifier<RealVector> svm;
52     double regularization = 1000.0;
53     bool bias = true;
54
55     CSvmTrainer<RealVector, double> trainer(&kernel, regularization, bias);
56     trainer.sparsify() = false;
57     trainer.stopCondition().minAccuracy=1e-6;
58     trainer.setCacheSize(0x1000000);
59
60     trainer.train(svm, trainData);
61
62     auto trainPredictions = svm(trainData.inputs());
63     auto testPredictions = svm(testData.inputs());
64
65     std::cout << "-----SharkSVM-----" << std::endl;
66     std::cout << "Train_data_model_evaluation:" << std::endl;
67     printSharkModelEvaluation(trainData.labels(), trainPredictions);
68
69     std::cout << "Test_data_model_evaluation:" << std::endl;
70     printSharkModelEvaluation(testData.labels(), testPredictions);
71 }
72
73 auto preprocessAndReadCsvData(std::string filePath)
74 {
75     // odczytaj zawartość pliku
76     std::ifstream file(filePath);
77     std::string trainDataString(std::istreambuf_iterator<char>(file),
```

```
78         std::istreambuf_iterator<char>());
79
80     trainDataString.erase(0, trainDataString.find_first_of("\n") + 1);
81
82     trainDataString =
83         std::regex_replace(trainDataString, std::regex("B"), "0");
84     trainDataString =
85         std::regex_replace(trainDataString, std::regex("M"), "1");
86
87     shark::ClassificationDataset trainData;
88     shark::csvStringToData(trainData, trainDataString, shark::FIRST_COLUMN);
89
90     return trainData;
91 }
92
93 int main()
94 {
95     constexpr std::string_view dataFilePath = "wdbc_data_with_labels.csv";
96     auto trainData = preprocessAndReadCsvData(dataFilePath.data());
97
98     auto testData = shark::splitAtElement(
99         trainData, static_cast<std::size_t>(
100             0.8 * trainData.numberOfElements()));
101
102     sharkLogisticRegression(trainData, testData);
103     sharkSVM(trainData, testData);
104
105 }
```

5.7.1. Regresja logistyczna

KOD DO PRZETESTOWANIA

5.7.2. Maszyna wektorów nośnych

KOD DO PRZETESTOWANIA

5.7.3. Sieć neuronowa

KOD DO PRZETESTOWANIA

Rozdział 6

Biblioteka Dlib

6.1. Wprowadzenie

Jest to biblioteka do uczenia maszynowego napisana w nowoczesnym C++, o zastosowaniu przemysłowym oraz naukowym [14]. Podobnie jak poprzednio omawiane biblioteki, posiada ona otwarte źródło na licencji Boost Software Licence [15]. Do dziedzin wykorzystujących wyżej wspomnianą bibliotekę należą robotyka, systemy wbudowane, telefony komórkowe oraz śrowodiska o dużej wydajności obliczeniowej. Kod źródłowy biblioteki opatrzony jest testami jednostkowymi, co pozwala na łatwiejsze utrzymanie jakości dostarczanego rozwiązania. Ciekawym aspektem jest fakt, że Dlib stanowi nie tylko bibliotekę, lecz zestaw narzędzi, oferujący funkcjonalności wykraczające także poza dziedzinę uczenia maszynowego.

6.2. Formaty źródeł danych

Do reprezentacji wektora w bibliotece Dlib wykorzystywane są kontenery z biblioteki szablonów STL języka C++. Dodatkowo, istnieje możliwość ich inicjalizacji za pomocą operatora przecinka, oraz opakowania surowej tablicy (ang. *raw array*). Oznacza to, że podobnie jak w przypadku biblioteki Shogun, dane mogą być przekazywane do programu wykorzystującego Dlib w dowolny sposób zapewniający umieszczenie ich np. w surowej tablicy do późniejszego przetworzenia na obiekty akceptowane przez bibliotekę. Metoda ta działa także z kontenerami biblioteki STL, które pozwalają na dostęp do surowych danych przy użyciu metody *data()*. Tak samo jak poprzednio, występuje tu wsparcie dla formatu CSV obwarowanego tymi samymi ograniczeniami co dla Shogun. Za wspomniane wsparcie odpowiada przeładowany operator strumienia współpracujący z klasą *std::ifstream* biblioteki standardowej C++. Przykładowy kod wykorzystujący opisany mechanizm zamieszczony został na listingu 6.1.

Listing 6.1. Fragment kodu ilustrujący sposób odczytu z pliku w formacie CSV [5]

```
1 #include <Dlib/matrix.h>
2 #include <fstream>
3 #include <iostream>
4
5 using namespace Dlib;
```

```
6
7 // [...]
8
9 matrix<double> data;
10 std::ifstream file("data_file.csv");
11 file >> data;
12 std::cout << data << std::endl;
```

6.3. Metody przetwarzania i eksploracji danych

6.3.1. Normalizacja

Biblioteka udostępnia normalizację danych poprzez standaryzację, realizowaną przez klasę *Dlib::vector_normalizer*. Głównym warunkiem ograniczającym zastosowanie jej jest fakt, że nie można w niej umieścić całego zestawu danych treningowych na raz, co wymusza podział obserwacji na osobne wektory, a następnie umieszczenie ich w kontenerze *std::vector* do dalszego przetwarzania.

6.3.2. Redukcja wymiarowości

6.3.2.1. PCA

6.3.2.2. Liniowa analiza dyskryminacyjna

6.3.2.3. Mapowanie Sammona

6.4. Modele uczenia maszynowego

6.4.1. Regresja liniowa

6.4.2. Maszyna wektorów nośnych

6.4.3. Sieci neuronowe

6.4.4. Brzegowa regresja jądra

6.5. Metody analizy modeli

6.5.1. Sprawdzian krzyżowy K-krotny

6.6. Dostępność dokumentacji i źródeł wiedzy

Dlib posiada zbiór przykładów w postaci listingów kodów źródłowych realizujących poszczególne mechanizmy, dostępnych na stronie głównej projektu [[dlib:home](#)]. Jest ona także jedną z głównych bibliotek omawianych w ramach wspomnianej wcześniej książki „Hands-On Machine Learning with C++”. Niestety większość forów społecznościowych skupia się na pracy z Dlib z poziomu interfejsu języka Python, co może

utrudnić szukanie rozwiązań dla specyficznych przypadków. Warto wspomnieć, że oprócz funkcjonalności uczenia maszynowego, Dlib realizuje także inne zadania, jak np. networking, co sprawia, że przykłady kodów źródłowych dla programów machine learningu zgrupowane są razem z innymi mechanizmami.

6.7. Przykłady testowe

6.7.1. Maszyna wektorów nośnych

6.7.2. Sieć neuronowa

Rozdział 7

Zestawienie zbiorcze i podsumowanie

7.1. Oferowane funkcjonalności

7.2. Wymagany nakład pracy

7.3. Jakość i ilość dostępnych źródeł referencyj-
nych

Bibliografia

- [1] Olvi L. Mangasarian Dr William H. Wolberg W. Nick Street. *Wisconsin Diagnostic Breast Cancer (WDBC)*. 1995. URL: [https://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/breast+cancer+wisconsin+\(diagnostic\)](https://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/breast+cancer+wisconsin+(diagnostic)).
- [2] Dheeru Dua i Casey Graff. *UCI Machine Learning Repository*. 2017. URL: <http://archive.ics.uci.edu/ml>.
- [3] Trevor Bihl. *Biostatistics Using JMP: A Practical Guide*. Cary, NC: SAS Institute Inc., 2017.
- [4] shogun toolbox. *Shogun*. 2020. URL: <https://github.com/shogun-toolbox/shogun>.
- [5] Kirill Kolodiaznyi. *Hands-On Machine Learning with C++*. Packt Publishing, Maj 2020.
- [6] Christian Igel, Verena Heidrich-Meisner i Tobias Glasmachers. “Shark”. W: *Journal of Machine Learning Research* 9 (2008), s. 993–996.
- [7] mlcpp. *Classification with Shark-ML machine learning library*. 2018. URL: https://github.com/Kolkir/mlcpp/tree/master/classification_shark.
- [8] The Shark developer team. *Linear Discriminant Analysis*. 2018. URL: http://image.diku.dk/shark/sphinx_pages/build/html/rest_sources/tutorials/algorithms/lda.html.
- [9] The Shark developer team. *General Optimization Tasks*. 2018. URL: http://image.diku.dk/shark/sphinx_pages/build/html/rest_sources/tutorials/first_steps/general_optimization_tasks.html.
- [10] The Shark developer team. *Support Vector Machines: First Steps*. 2018. URL: http://image.diku.dk/shark/sphinx_pages/build/html/rest_sources/tutorials/algorithms/svm.html.
- [11] The Shark developer team. *Nearest Neighbor Classification*. 2018. URL: http://image.diku.dk/shark/sphinx_pages/build/html/rest_sources/tutorials/algorithms/nearestNeighbor.html.
- [12] The Shark developer team. *Neuron activation functions*. 2018. URL: https://www.shark-ml.org/doxygen_pages/html/group__activations.html.
- [13] The Shark developer team. *Loss and Cost Functions*. 2018. URL: http://image.diku.dk/shark/sphinx_pages/build/html/rest_sources/tutorials/concepts/library_design/losses.html.
- [14] Davis E. King. “Dlib-ml: A Machine Learning Toolkit”. W: *Journal of Machine Learning Research* 10 (2009), s. 1755–1758.

- [15] Dlib team. *Dlib License*. 2003. URL: <http://dlib.net/license.html>.