

UNIwersytet Zielonogórski

Wydział Informatyki, Elektrotechniki i Automatyki

Praca magisterska

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 bibliotek uczenia maszynowego dostępnych w języku C++ pod kątem ich zastosowania w pracy na danych biostatystycznych. W kolejnych rozdziałach omawia się:

- ogólną postać problemów napotykaną w procesie implementacji rozwiązań uczenia maszynowego;
- charakterystykę wybranego zestawu danych biostatystycznych wykorzystanych do testów omawianych bibliotek;
- typ oraz uzyskane wyniki wybranych metod uczenia maszynowego pod kątem danych eksperymentalnych w środowisku prototypowym;
- biblioteki Shogun, Shark-ML i Dlib wraz z metodami implementacji poszczególnych metod wzorcowych;
- zbiorcze podsumowanie 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	4
2.1. Problemy współczesnego uczenia maszynowego	4
2.2. Język C++ jako narzędzie do rozwiązania problemów uczenia maszy- nowego	6
2.3. Cel powstania bibliotek	7
3. Wykorzystane zestawy danych	8
3.1. Omówienie danych eksperymentalnych	8
3.1.1. Dane klasyfikacyjne	8
3.1.2. Dane regresyjne	9
3.2. Specyfika danych	9
3.2.1. Dane klasyfikacyjne	10
3.2.1.1. Analiza rozkładów predyktorów i odpowiedzi	10
3.2.1.2. Czyszczenie i normalizacja rozkładu danych	10
3.2.2. Dane regresyjne	14
3.2.2.1. Analiza rozkładu danych	14
3.2.2.2. Czyszczenie i normalizacja rozkładu danych	15
3.3. Modele zbudowane w programie JMP	17
3.3.1. Maszyna wektorów nośnych	17
3.3.2. Regresja liniowa	19
4. Biblioteka Shogun	21
4.1. Wprowadzenie	21
4.2. Formaty źródeł danych	21
4.3. Metody przetwarzania i eksploracji danych	25
4.3.1. Normalizacja	25
4.3.2. Redukcja wymiarowości	25
4.3.3. Regularyzacja L1 i L2	27
4.4. Modele uczenia maszynowego	27
4.4.1. Regresja liniowa	27
4.4.2. Regresja logistyczna	28
4.4.3. Maszyna wektorów nośnych	28
4.4.4. Algorytm K najbliższych sąsiadów	30
4.4.5. Algorytm zbiorowy	31

4.4.5.1.	Wzmacnianie gradientu	31
4.4.5.2.	Las losowy	32
4.4.6.	Sieć neuronowa	34
4.5.	Metody analizy modeli	35
4.5.1.	Błąd średniokwadratowy	35
4.5.2.	Średni błąd bezwzględny	36
4.5.3.	Logarytmiczna funkcja straty	36
4.5.4.	Metryka R^2	36
4.5.5.	Dokładność	38
4.5.6.	Precyzja i pełność (recall), oraz metryka F1	38
4.5.7.	Pole pod wykresem krzywej operacyjnej	38
4.5.8.	K-krotny sprawdzian krzyżowy	38
4.6.	Dostępność dokumentacji i źródeł wiedzy	40
5.	Biblioteka Shark-ML	41
5.1.	Wprowadzenie	41
5.2.	Formaty źródeł danych	41
5.3.	Metody przetwarzania i eksploracji danych	42
5.3.1.	Normalizacja	42
5.3.2.	Redukcja wymiarowości	43
5.3.2.1.	Analiza składowych głównych	43
5.3.2.2.	Liniowa analiza dyskryminacyjna	44
5.3.3.	Regularyzacja L1	44
5.3.4.	Regularyzacja L2	45
5.4.	Modele uczenia maszynowego	45
5.4.1.	Regresja liniowa	45
5.4.2.	Regresja logistyczna	46
5.4.3.	Maszyna wektorów nośnych	48
5.4.4.	Algorytm K najbliższych sąsiadów	51
5.4.5.	Algorytm zbiorowy	52
5.4.6.	Sieć neuronowa	52
5.5.	Metody analizy modeli	55
5.5.1.	Funkcje straty	55
5.5.2.	Metryka R^2 i skorygowane R^2	56
5.5.3.	Pole pod wykresem krzywej charakterystycznej odbiornika	56
5.5.4.	K-krotny sprawdzian krzyżowy	57
5.6.	Dostępność dokumentacji i źródeł wiedzy	58
6.	Biblioteka Dlib	59
6.1.	Wprowadzenie	59
6.2.	Formaty źródeł danych	59
6.3.	Metody przetwarzania i eksploracji danych	60
6.3.1.	Normalizacja	60
6.3.2.	Redukcja wymiarowości	60
6.3.2.1.	Analiza składowych głównych	60
6.3.2.2.	Liniowa analiza dyskryminacyjna	61
6.3.2.3.	Mapowanie Sammona	62
6.3.3.	Regularyzacja L2	62
6.4.	Modele uczenia maszynowego	63

6.4.1.	Regresja liniowa	63
6.4.2.	Maszyna wektorów nośnych	64
6.4.3.	Sieci neuronowe	65
6.4.4.	Brzegowa regresja jądrowa	66
6.5.	Metody analizy modeli	67
6.5.1.	Pole pod wykresem krzywej charakterystycznej odbiornika . .	67
6.5.2.	K-krotny sprawdzian krzyżowy	68
6.6.	Dostępność dokumentacji i źródeł wiedzy	70
7.	Zestawienie zbiorcze i podsumowanie	71
7.1.	Oferowane funkcjonalności	71
7.2.	Porównanie wyników dla zadanych przykładów	73
7.3.	Wymagany nakład pracy i jakość źródeł	74

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, takich 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 [1].

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, począwszy od języka C++, przez Python, po środowiska takie jak Matlab [2].

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 liczbę bardziej szczegółowych funkcjonalności, lub nowe metody dodane po utworzeniu niniejszej pracy. W trakcie realizacji pracy implementację bazowano na przykładach zawartych w podręczniku [3], lecz przedstawione w niej kody źródłowe stanowią wytwór autora przystosowany do wybranych modeli i zestawów danych, oraz opatrzony metodami ewaluacji poprawności modeli.

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 obejmuje:

- 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 ogólne zagadnienie poruszone w pracy, poczynając od dziedziny problemu i jej zastosowań, do istoty tematu pracy. Dodatkowo omawiany jest cel i zakres realizacji pracy, oraz jej struktura.

Kolejny rozdział wprowadza czytelnika do tematu uczenia maszynowego, oraz napotykanym w nim problemom dotyczącym 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 zestawu danych biostatystycznych do procesu uczenia oraz wybrane wzorcowe rozwiązania. Czytelnik przeprowadzony jest przez normalizację danych i selekcję najlepiej dopasowanych regresorów, oraz zostaje zapoznany z przykładowymi wynikami rozwiązań wzorcowych.

Kolejne trzy 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.

Rozdział siódmy zestawia podobieństwa i różnice między bibliotekami na podstawie wyników przeprowadzonych procesów uczenia, zestawiając wyniki uzyskanych modeli oraz dostępne funkcjonalności w formie tabel. Dodatkowo, zawarta tu została także subiektywna opinia autora w postaci opisów słownych na podstawie jego doświadczeń z implementacją rozwiązań i pracą ze źródłami wiedzy.

Rozdział 2

Uczenie maszynowe w ujęciu praktycznym

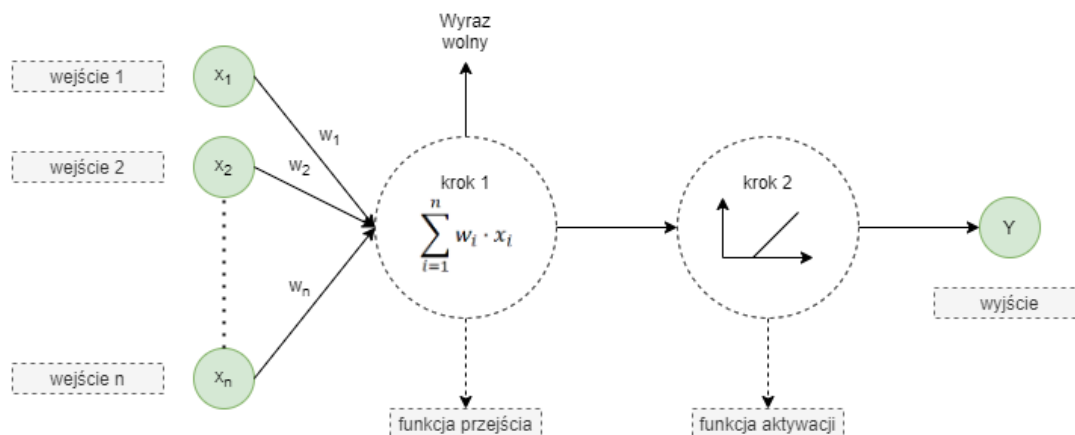
2.1. Problemy współczesnego uczenia maszynowego

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 uczenia płytkiego, które później wymagają stosunkowo bardzo małych nakładów mocy obliczeniowej w celu ewaluacji wyników na podstawie zadanego zestawu danych [4].

Bardziej zaawansowanymi metodami uczenia maszynowego są drzewa decyzyjne, stanowiące strukturę opartą o logikę drzewa [5]. 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 splotowe 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 neurony, oraz jednej warstwy wyjściowej. Każdy węzeł z poprzedniej warstwy połączony jest z każdym węzłem w następnej warstwie, lecz neurony znajdujące się w tej samej warstwie są wzajemnie niezależne. Każde połączenie posiada przypisaną wagę użytą do przeliczenia wartości wchodzącej do danego neuronu z danego sąsiada z poprzedniej warstwy. Wewnątrz peceptronu obliczana jest suma iloczynów wyjść z poprzednich neuronów i wag odpowiadających połączeniom, a następnie dla uzyskanej sumy obliczana jest wartość funkcji aktywacyjnej, która stanowi wartość wyjściową neuronu [6]. Przykładowa sieć wykorzystująca pojedynczy neuron w pojedynczej warstwie ukrytej przedstawiona została na rys. 2.1.



Rysunek 2.1. Schemat neuronu - 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 [7]:

- 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.

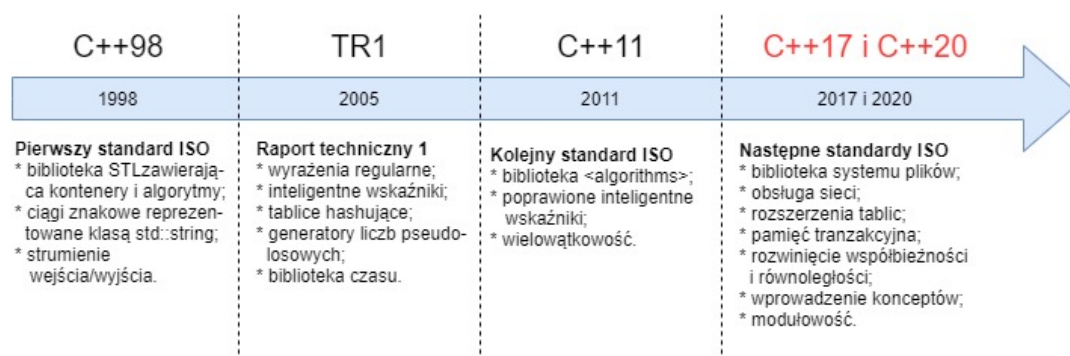
W trakcie rozwoju technologii uczenia maszynowego, postawiono stanowcze kroki w kierunku rozwiązywania powyższych problemów, aby sprostać narastającym wymaganiom związanym z coraz to nowymi i bardziej skomplikowanymi zastosowaniami sztucznej inteligencji. Dokonywano tego poprzez m.in. optymalizację algorytmów,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

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 wysokopoziomowym 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 [8].

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 [9].



Rysunek 2.2. Rozwój wielowątkowości w nowoczesnym 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 [10] pozwala wykonywać wiele obliczeń równolegle poprzez wykorzystanie wielu rdzeni lub oddelegowaniu części przetwarzania do karty (lub wielu kart) graficznej (gdzie liczba procesorów GPU znacząco przewyższa liczbę 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 redukuje koszty 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.

Większość 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 językowi 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*) [11].

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

Wykorzystane zestawy danych

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. W tym celu, dla pełnego przetestowania wybranych funkcjonalności przygotowano zestaw danych do problemu klasyfikacji binarnej oraz zadania regresji.

3.1.1. Dane klasyfikacyjne

Jako dane klasyfikacyjne 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 [12]. Baza ta jest dostępna do pobrania z repozytorium Uniwersytetu Kalifornii [13]. Dane mają następującą strukturę:

- 1) ID - numer identyfikacyjny pacjentki;
- 2) Diagnosis [*Malignant* - *M* / *Benign* - *B*] - charakter nowotworu (złośliwy / łagodny), **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 dimension („coastline approximation” - 1)* - wymiar fraktalny pozwalający na ilościowy opis złożoności komórek nerwowych, umożliwiającą stwierdzenie nowotworzenia się zbioru komórek.

Dla każdej ze zmiennych odpowiedzi określono wartość średnią, odchylenie standardowe oraz średnią 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 podręcznika [14].

3.1.2. Dane regresyjne

Do demonstracji problemu regresji wykorzystano zestaw danych „IronGlutathione” dołączony do podręcznika [14], dotyczące badań nad związkiem między zawartością żelaza, a enzymem transferazy glutationowej w organizmie człowieka. Obserwacje pochodzą z badań z 2012 roku. Zestaw obejmuje 90 obserwacji i dotyczy 10 zmiennych:

1. *Age* - wiek badanej osoby;
2. *Gender* - płeć osoby;
3. *Alpha GST (ng/L)* - zawartość transferazy glutationinowej typu α ;
4. *pi GST (mg/L)* - zawartość transferazy glutationinowej typu π ;
5. *transferrin (mg/mL)* - zawartość transferyny;
6. *sTfR (mg/mL)* - zawartość rozpuszczalnego receptora transferyny;
7. *Iron (mg/dL)* - zawartość żelaza;
8. *TIBC (mg/dL)* - całkowita zdolność wiązania żelaza;
9. *%ISAF (Iron / TIBC)* - współczynnik nasycenia transferyny;
10. *Ferritin (ng/dL)* - zawartość ferrytyny;

Z racji na większą swobodę w wyborze zmiennej odpowiedzi w przypadku danych regresyjnych, zdecydowano się na wybór ostatniej zmiennej (*Ferritin (ng/dL)*) jako odpowiedzi.

3.2. Specyfika danych

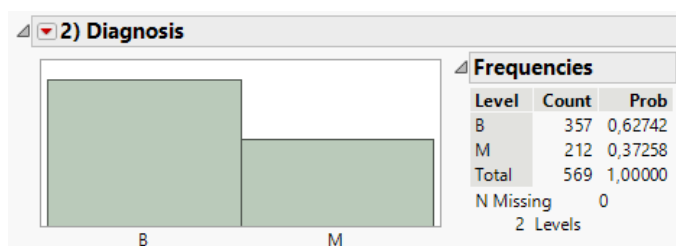
Podczas przeprowadzenia procesu uczenia maszynowego, jednym z najistotniejszych kroków jakie należy podjąć jest wstępne zaznajomienie się z zestawem danych i jego analiza pod kątem rozkładu poszczególnych zmiennych. W tym celu wykorzystane zostało oprogramowanie JMP Pro [15].

3.2.1. Dane klasyfikacyjne

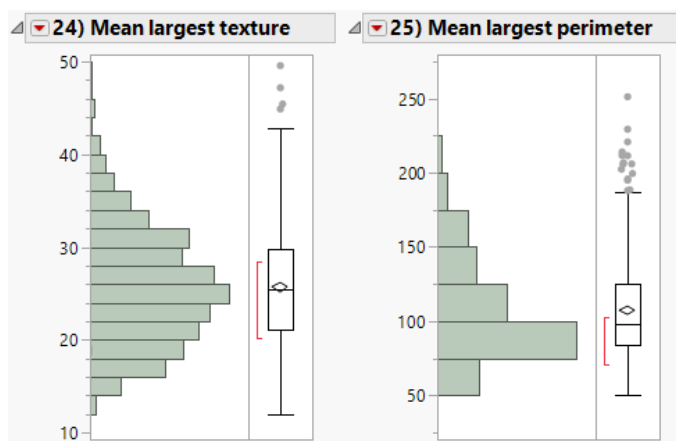
3.2.1.1. Analiza rozkładów predyktorów i odpowiedzi

Proces analizy rozkładu rozpoczęto od scharakteryzowania zmiennej odpowiedzi (*Diagnosis*). Rysunek 3.1 przedstawia uzyskany histogram, wraz z tabelą określającą liczby obserwacji danej klasy i prawdopodobieństwo przynależności odpowiedzi do danej klasy. Zauważyć można, że dla użytego zestawu danych zarejestrowano 357 obserwacji łagodnego raka piersi, a jego prawdopodobieństwo wynosi $\approx 62,7\%$, natomiast do klasy *Malignant* należało 212 obserwacji, co odpowiada prawdopodobieństwu $\approx 37,3\%$.

Podczas analizy histogramów predyktorów stwierdzono, że znaczna liczba ma charakter prawostronnie skośny oraz występują dla nich obserwacje odstające, o czym informuje znajdujący się po prawej stronie histogramu wykres pudełkowy, co przedstawiono na rys. 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.

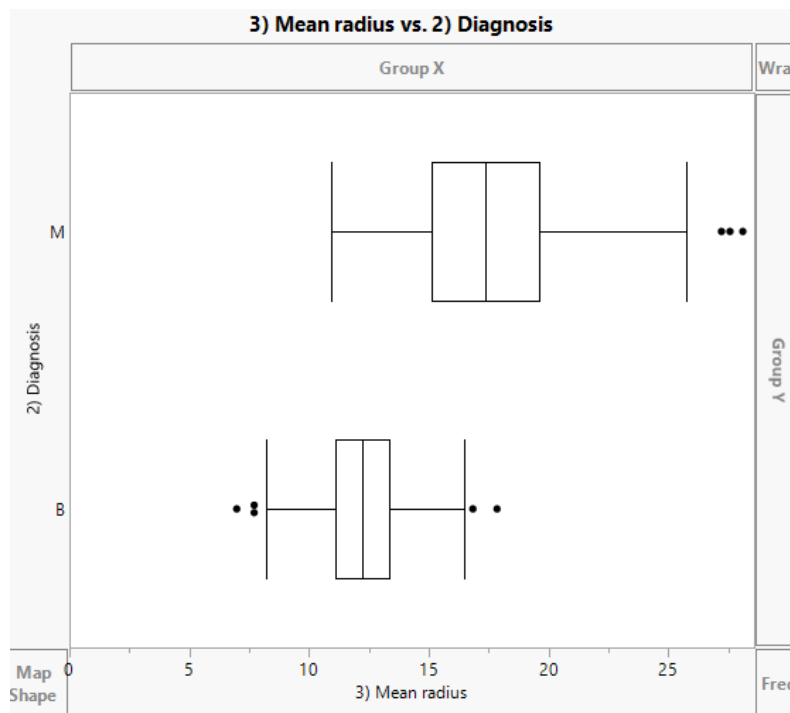


Rysunek 3.2. Przykłady histogramów zmiennych decyzyjnych.

3.2.1.2. Czyszczenie i normalizacja rozkładu danych

Na pełny zestaw danych składa się 569 obserwacji. Podczas wstępnej analizy stwierdzono istnienie 13 brakujących wartości dla predyktora *Std err concave points*, które

uzupełniono wartością średnią z całej kolumny. Głównym problemem okazały się obserwacje odstające oraz skośności rozkładu. Do analizy obserwacji odstających wykorzystano wykresy pudełkowe, 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 liczbę obserwacji zdecydowano się rozpocząć proces przystosowywania danych do uczenia od normalizacji ich rozkładu, aby zminimalizować lub wyeliminować konieczność usunięcia danych odstających.

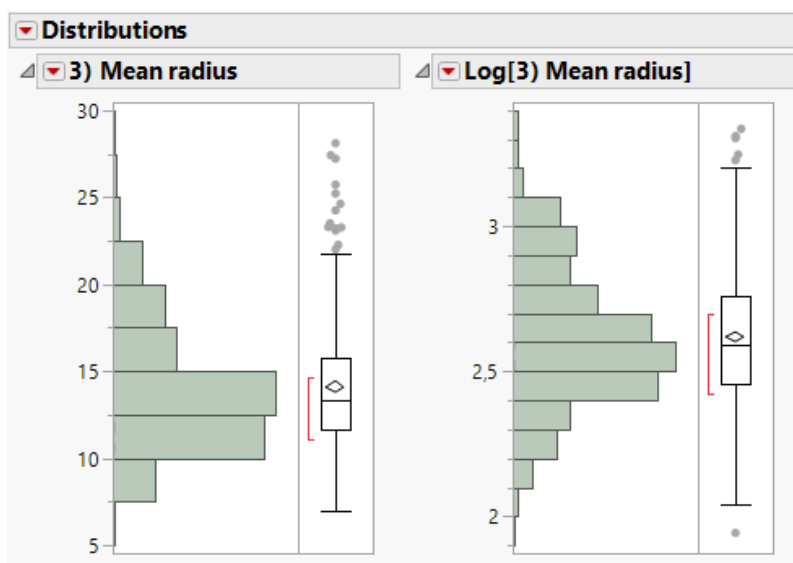


Rysunek 3.3. Przykład analizy obserwacji odstających dla poszczególnych klas zmiennej odpowiedzi.

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 rozkładu normalnego, 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*;

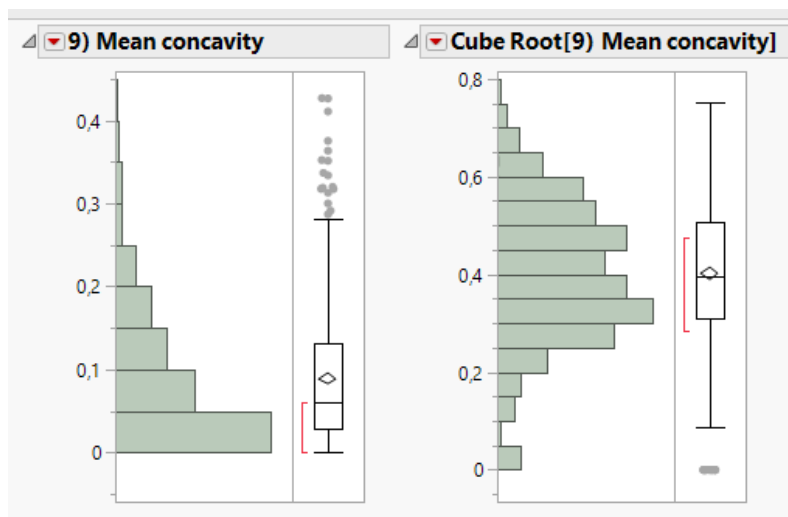
8. *Std err smoothness*;
9. *Std err compactness*;
10. *Std err concave points*;
11. *Mean largest texture*;
12. *Mean largest smoothness*;
13. *Mean largest compactness*.



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 rozkłady 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, wywodzącej się od wzoru Arrheniusa opisującego energię aktywacji reakcji chemicznej, wyrażonego wzorem 3.1 [16]:

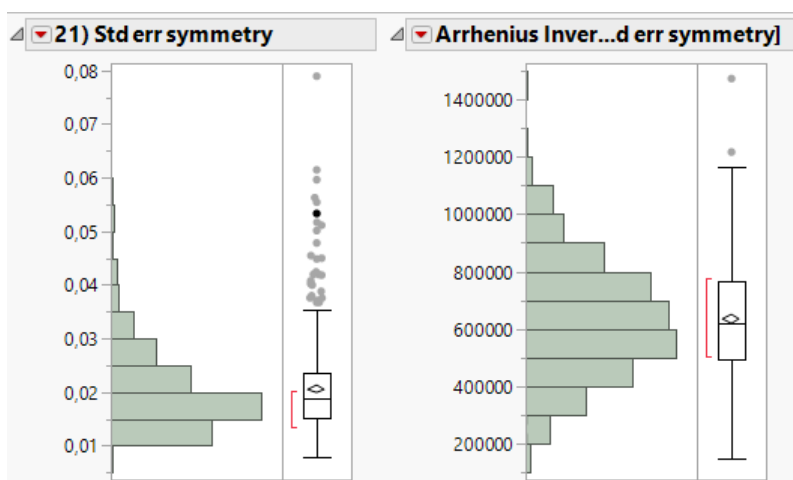
$$\ln k = \ln A - \frac{E_a}{RT} \quad (3.1)$$

gdzie:

- k - stała współczynnika reaktywności chemicznej;
- A - współczynnik częstotliwości;
- E_a - energia aktywacji reakcji;
- R - stała gazu idealnego;
- T - temperatura reakcji w Kelvinach;

Niestety, część z uzyskanych zmodyfikowanych zmiennych decyzyjnych zachowała częściowy skośny rozkład, jednak inne przetestowane transformacje, jak m.in. pierwiastek kwadratowy, potęga kwadratowa, $\log(x + 1)$, 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.

Ze względu na bardzo małą liczbę obserwacji, zdecydowano się na zachowanie wszystkich obserwacji odstających, aby zapobiec utracie informacji i zmianie uzyskanych w procesie normalizacji rozkładów. W celu zachowania kompatybilności z bibliotekami omawianymi w niniejszej pracy, przekodowano zmienną odpowiedzi na binarne wartości liczbowe, gdzie wartość 1 oznaczała złośliwy, natomiast wartość 0 łagodny charakter wykrytego nowotworu.

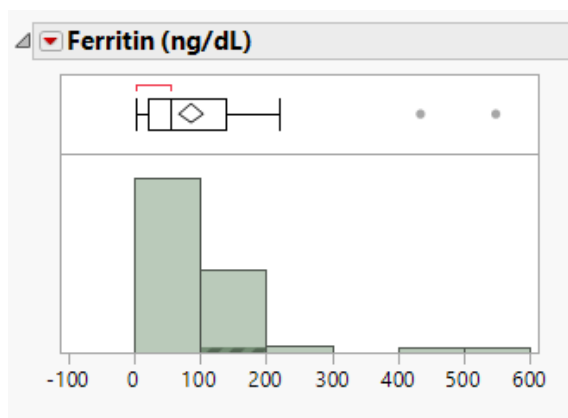


Rysunek 3.6. Porównanie uzyskanych rozkładów danych przed i po odwrotnej transformacji Arrheniusa.

3.2.2. Dane regresyjne

3.2.2.1. Analiza rozkładu danych

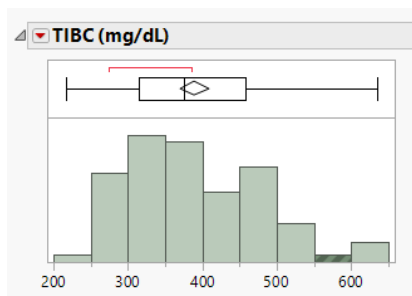
Podobnie jak w przypadku danych klasyfikacyjnych, analizę rozpoczęto od zapoznania się z rozkładem wybranej zmiennej odpowiedzi. Zauważono że posiada ona rozkład skrajnie prawostronny, co przedstawiono na rysunku 3.7.



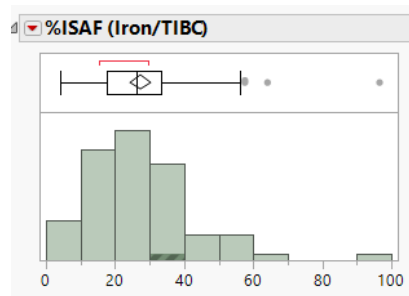
Rysunek 3.7. Wykres rozkładu zmiennej odpowiedzi dla zestawu regresyjnego.

Na wykresie pudełkowym zawartym nad histogramem rozkładu można zauważyć wystąpienie dwóch obserwacji odstających. Podczas dalszej analizy, spostrzeżono podobny problem w przypadku zmiennych *%ISAF*, *Iron*, *sTfR*, *Transferrin* oraz szczególnie *Alpha GST*. Pozostałe zmienne charakteryzują się rozkładem zbliżonym do krzywej Gaussa, nie przejawiając obserwacji zaklasyfikowanych jako odstające. Rysunek 3.8 przedstawia dwa przykładowe histogramy rozkładów zmiennych decyzyjnych.

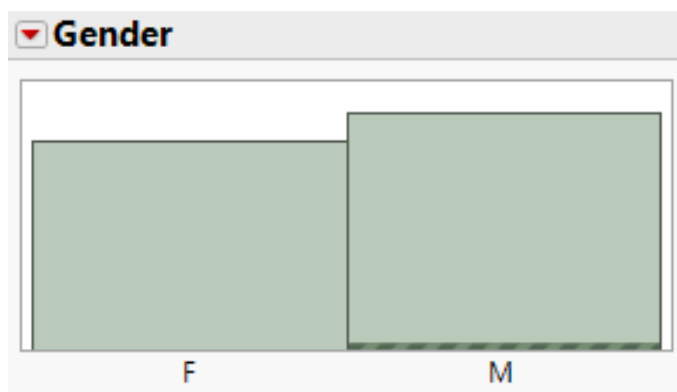
Pojedyncza zmienna - *Gender* - posiada dychotomiczny charakter, aczkolwiek okazuje się relatywnie bardzo zrównoważona, posiadając rozkład na poziomie przynależności w 46,7% do klasy F reprezentującej kobiety oraz 53,3% do klasy M odpowiadającej mężczyznom. Rozkład tej zmiennej przedstawiono na rys. 3.10.



Rysunek 3.8. Przykładowy rozkład zmiennej decyzyjnej (TIBC).



Rysunek 3.9. Przykładowy rozkład zmiennej decyzyjnej (ISAF).



Rysunek 3.10. Rozkład zmiennej *Gender*.

3.2.2.2. Czyszczenie i normalizacja rozkładu danych

W trakcie przeglądu obserwacji, zauważono pojedynczą obserwację z brakującą wartością w przypadku zmiennej *Ferritin*. Ze względu na wystąpienie tylko jednego takiego wpisu na 85 obserwacji, zdecydowano się na jej usunięcie. Pozostałymi kwestiami wymagającymi zaadresowania okazały się normalizacja rozkładu części zmiennych i decyzja o działaniu względem wartości odstających.

W celu zmniejszenia liczby obserwacji odstających, postanowiono rozpocząć następny etap od problemu normalizacji rozkładu. Następujące zmienne, ze względu na ich obecną charakterystykę, nie zostały poddane żadnym przekształceniom:

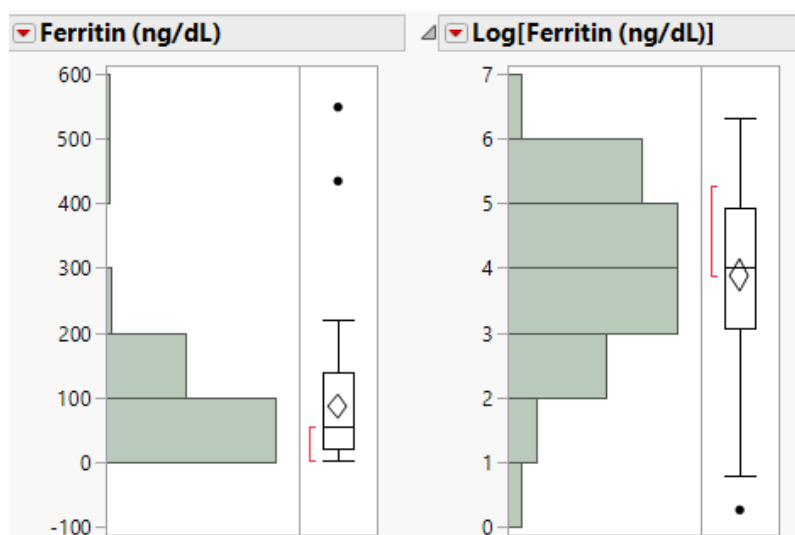
1. *Age*;
2. *Gender*;
3. *TIBC*.

Dla pozostałych zmiennych decyzyjnych zastosowano trzy rodzaje transformacji opisanych w rozdz. 3.2.1.1. Pierwszą z nich była obliczenie logarytmu z wartości zmiennej, które przyniosło zadowalający efekt dla zmiennych:

1. *alpha GST*;
2. *pi GST*;

3. $sTfR$;
4. *Ferritin* (zmienna odpowiedzi).

Rysunek 3.11 przedstawia przykład uzyskanej zmiany rozkładu dla zmiennej odpowiedzi.

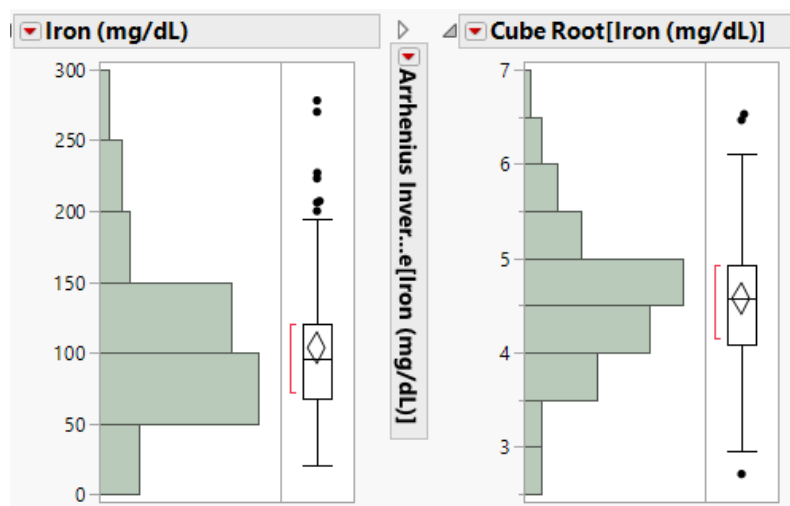


Rysunek 3.11. Wpływ transformacji logarytmicznej na rozkład zmiennej odpowiedzi.

Drugą transformacją o zadowalających wynikach okazało się zastosowanie pierwiastka kwadratowego, co pokazano na rys. 3.12. Wykorzystano ją do normalizacji rozkładu następujących zmiennych:

1. *Transferrin*;
2. *Iron*;
3. *%ISAF*.

Transformacja odwrotnym wzorem Arrheniusa okazała się nieskuteczna na wszystkich zmiennych, uzyskując gorsze efekty niż pozostałe przedstawione wyżej metody. Z racji na niewielką liczbę obserwacji, oraz stosunkowo małą liczbę wartości odstających, zdecydowano się na pozostawienie ich w procesie uczenia. W celu kompatybilności z omawianymi bibliotekami, przekodowano zmienną dychotomiczną na binarne wartości liczbowe, gdzie wartość 1 odpowiadała płci żeńskiej, natomiast 0 płci męskiej.



Rysunek 3.12. Normalizacja rozkładu za pomocą transformacji pierwiastkiem kwadratowym.

3.3. Modele zbudowane w programie JMP

W trakcie analizy zestawów danych wybrany został przedstawiony poniżej zestaw metod dla których wykonano i podsumowano 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. Maszyna wektorów nośnych

Badanie zależności w modelu maszyny wektorów nośnych odbyło się z wykorzystaniem wykresu wpływu zmiennej decyzyjnej na zmienną odpowiedzi opartego o p-wartość. Jako poziom istotności testu o braku wpływu zmiennej na odpowiedź przyjęto 0,05. Rysunek 3.13 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 progu 0,05. Rysunek 3.14 przedstawia listę wraz z wykresem kolumnowym istotnych predyktorów. Ich lista, wraz z odpowiadającymi im p-wartościami została umieszczona w tabeli 3.1.

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 jądro radialne (ang. *Radial Basis Function*), która jest domyślnym wyborem dla SVM w środowisku JMP.

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 predyktorów

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

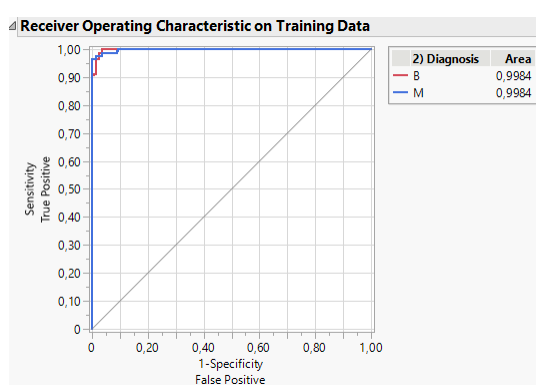
Rysunek 3.13. Zestawienie p-wartości dla zmiennych decyzyjnych.

Source	LogWorth	PValue
Log Mean largest texture	10,190	0,00000
Log Mean largest compactness	6,684	0,00000
QR Mean largest symmetry	4,873	0,00001
AI Std err symmetry	4,304	0,00005
AI Std err radius	3,748	0,00018
QR Mean concave points	3,255	0,00056
QR Mean largest concavity	3,159	0,00069
Log Std err texture	2,598	0,00252
QR Mean largest perimeter	2,279	0,00526
Log Mean smoothness	1,313	0,04867
Log Mean radius	1,311	0,04884

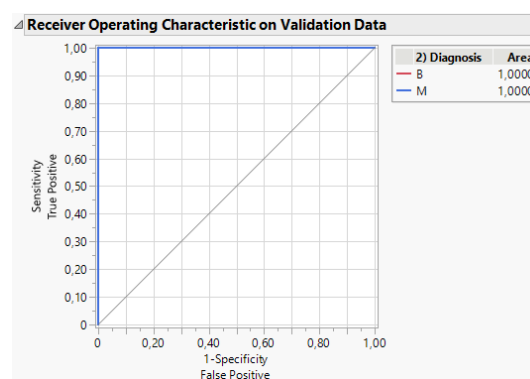
Rysunek 3.14. Wykres p-wartości istotnych zmiennych decyzyjnych.

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 3.2. Wartości składowych X modelu dla poszczególnych zmiennych decyzyjnych.



Rysunek 3.15. Krzywa charakterystyczna odbiornika dla danych uczących modelu SVM.



Rysunek 3.16. Krzywa charakterystyczna odbiornika dla danych walidacyjnych modelu SVM.

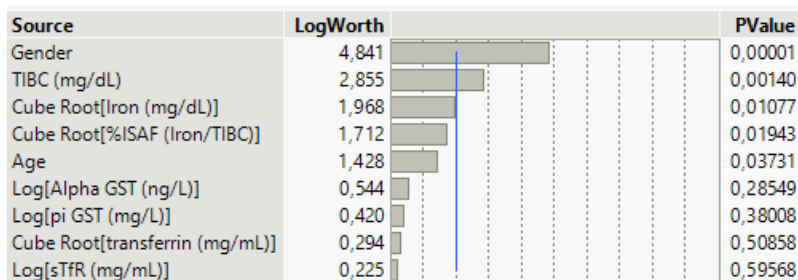
DO POPRAWIENIA ————— !!!!!!!!!

Utworzony w ten sposób model posiada generalizowaną statystykę R^2 na poziomie 0.97161 dla zestawu walidacyjnego, i uzyskał współczynnik błędnej klasyfikacji wynoszący 0% dla danych testowych, oraz 1,3% dla danych uczących. Tabela 3.2 przedstawia współczynniki wyliczone w procesie uczenia dla poszczególnych regresorów. Rysunki 3.15 oraz 3.16 przedstawiają krzywe charakterystyczne odbiornika dla uzyskanego modelu, pola pod którymi uzyskały wartość odpowiednio 0,9984 dla danych uczących i 1 dla danych testowych.

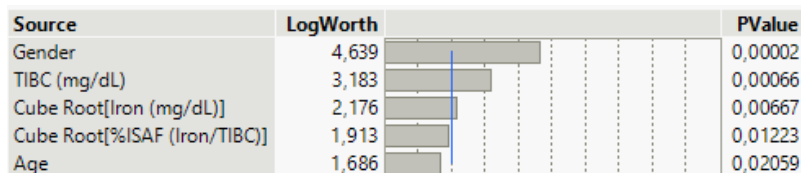
DO POPRAWIENIA ————— !!!!!!!!!

3.3.2. Regresja liniowa

Podobnie jak w przypadku regresji logistycznej, do ustalenia które z regresorów mają największy wpływ na zmienną odpowiedzi, zastosowano wykres wpływu poszczególnych zmiennych oparty o p-wartość. Jako próg zaakceptowania parametru do procesu uczenia zdecydowano się na wybranie p-wartości wynoszących poniżej 0,05



Rysunek 3.17. Wykres p-wartości dla wszystkich zmiennych.



Rysunek 3.18. Wykres p-wartości dla zmiennych wybranych do procesu uczenia.

jednostek. Rysunek 3.17 przedstawia wykres dla wszystkich zmiennych, natomiast rys. 3.18 ukazuje wykres zawierający jedynie wybrane zmienne.

W procesie eliminacji regresorów o p-wartości przekraczającej wybrany próg akceptacji, do procesu uczenia wybrano zmienne z tabeli 3.3:

Nazwa zmiennej	p-wartość
<i>Gender</i>	0.00002
<i>TIBC</i>	0.00066
<i>Cube Root Iron</i>	0.00667
<i>Cube Root %ISAF</i>	0.01223
<i>Age</i>	0.02059

Tabela 3.3. Wybrane zmienne decyzyjne i ich p-wartości.

Nazwa zmiennej	waga
<i>Intercept</i>	8,498959
<i>Age</i>	0.0201022
<i>Gender[F - M]</i>	-0.959795
<i>Cube Root Iron</i>	2,9461861
<i>TIBC</i>	-0.014182
<i>Cube Root %ISAF</i>	-4,356345

Tabela 3.4. Wartości wag zmiennych decyzyjnych.

W wyniku uczenia uzyskano model dla którego wartość współczynnika determinacji liniowej R^2 wyniosła 0.4654525, co sugeruje że dane są umiarkowanie dobrze aproksymowalne liniowo. Tabela 3.4 przedstawia nauczane wagi poszczególnych regresorów.

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* [17]. 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 uczenie 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 [3]. 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*). Niestety, 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 rozdzielenie macierzy na dwie części, z których jedna zawiera predyktory, a druga wartości zmiennej odpowiedzi. Przykładowy fragment kodu realizujący to zadanie zamieszczony został na listingu 4.1. Po prawidłowym rozgraniczeniu fragmentów danych, należy przeprowadzić ponowną transpozycję do postaci akceptowalnej przez algorytmy uczenia, oraz obudować dane klasami na których operują docelowe metody uczenia, takimi jak *CDenseFeatures*, *CMulticlassLabels* czy *CRegressionLabels*, co zostało ukazane na listingu 4.2.

Listing 4.1. Przykładowa funkcja do odczytu i przygotowania danych z pliku CSV dla biblioteki Shogun.

```

1  #pragma once
2
3  #include <shogun/base/init.h>
4  #include <shogun/base/some.h>
5  #include <shogun/io/File.h>
6  #include <shogun/io/CSVFile.h>
7  #include <shogun/labels/MulticlassLabels.h>
8  #include <shogun/lib/SGMatrix.h>
9  #include <shogun/lib/SGStringList.h>
10 #include <shogun/lib/SGVector.h>
11 #include <shogun/preprocessor/RescaleFeatures.h>
12 #include <iostream>
13
14 // pomocnicze pośrednie opakowanie na zestaw danych
15 struct Dataset
16 {
17     shogun::SGMatrix<float64_t> trainInputs;
18     shogun::SGMatrix<float64_t> testInputs;
19     shogun::SGMatrix<float64_t> trainOutputs;
20     shogun::SGMatrix<float64_t> testOutputs;
21 };
22
23 // pomocnicza struktura określająca pozycję zmiennej odpowiedzi
24 enum class LabelPos
25 {
26     FIRST,
27     LAST
28 };
29
30 inline Dataset readShogunCsvData(
31     std::string filename, LabelPos labelPos)
32 {
33     using namespace shogun;
34     using Matrix = SGMatrix<float64_t>;
35
36     Dataset ret;
37
38     // odczytanie surowej zawartości pliku csv i sparsowanie
39     // jej do macierzy
40     auto csvFile = some<CCSVFile>(filename.c_str());
41     Matrix data;
```

```

42     data.load(csvFile);
43     // transpozycja do postaci docelowej dla człowieka
44     // (działanie na kolumnach)
45     Matrix::transpose_matrix(data.matrix, data.num_rows,
46                             data.num_cols);
47     // podział macierzy na część regresorów i zmiennej odpowiedzi
48     switch(labelPos)
49     {
50         case LabelPos::FIRST:
51             ret.trainInputs = data.submatrix(1, data.num_cols)
52                             .clone();
53             ret.trainOutputs = data.submatrix(0, 1).clone();
54             break;
55         case LabelPos::LAST:
56             ret.trainInputs = data.submatrix(0, data.num_cols - 1)
57                             .clone();
58             ret.trainOutputs =
59                 data.submatrix(data.num_cols - 1, data.num_cols)
60                             .clone();
61             break;
62     };
63     // ponowna transpozycja do postaci docelowej dla algorytmów
64     // uczących (operowanie na wierszach)
65     Matrix::transpose_matrix(ret.trainInputs.matrix,
66                             ret.trainInputs.num_rows,
67                             ret.trainInputs.num_cols);
68     Matrix::transpose_matrix(ret.trainOutputs.matrix,
69                             ret.trainOutputs.num_rows,
70                             ret.trainOutputs.num_cols);
71     // podział danych na część treningową i testową
72     auto temp = ret.testInputs = ret.trainInputs.submatrix(
73         static_cast<long>(0.8 * ret.trainInputs.num_cols),
74         ret.trainInputs.num_cols).clone();
75     ret.testInputs = std::move(temp);
76     auto temp2 = ret.trainInputs.submatrix(
77         0, static_cast<long>(0.8 * ret.trainInputs.num_cols))
78         .clone();
79     ret.trainInputs = std::move(temp2);
80     auto temp3 = ret.trainOutputs.submatrix(
81         static_cast<long>(0.8 * ret.trainOutputs.num_cols),
82         ret.trainOutputs.num_cols).clone();
83     ret.testOutputs = std::move(temp3);
84     auto temp4 = ret.trainOutputs.submatrix(
85         0, static_cast<long>(0.8 * ret.trainOutputs.num_cols))
86         .clone();
87     ret.trainOutputs = std::move(temp4);
88     return ret;
89 }

```

Listing 4.2. Funkcja przepakowująca dane do kontenerów docelowych.

```

1  #pragma once
2
3  #include <inc/shogun/csv.hpp>
4  #include <inc/shogun/linear.hpp>
5  #include <inc/shogun/logistic.hpp>
6  #include <inc/shogun/svm.hpp>
7  #include <inc/shogun/neural.hpp>

```

```
8
9  #include <shogun/base/init.h>
10
11 inline void shogunModels()
12 {
13     using namespace shogun;
14
15     init_shogun_with_defaults();
16
17     // odczytanie danych we własnym pośrednim typie danych
18     auto classificationDatasetTemp =
19         readShogunCsvData("wdbc_data_with_labels.csv", LabelPos::LAST);
20     auto regressionDatasetTemp =
21         readShogunCsvData("IronGlutathione.csv", LabelPos::LAST);
22     // rozdzielanie danych na regresory i zmienne odpowiedzi
23     auto classificationTrainFeatures =
24         some<CDenseFeatures<float64_t>>(
25             classificationDatasetTemp.trainInputs);
26     auto classificationTestFeatures =
27         some<CDenseFeatures<float64_t>>(
28             classificationDatasetTemp.testInputs);
29     auto classificationTrainLabels =
30         some<CMulticlassLabels>(
31             classificationDatasetTemp.trainOutputs);
32     auto classificationTestLabels =
33         some<CMulticlassLabels>(
34             classificationDatasetTemp.testOutputs);
35     auto regressionTrainFeatures =
36         some<CDenseFeatures<float64_t>>(
37             regressionDatasetTemp.trainInputs);
38     auto regressionTestFeatures =
39         some<CDenseFeatures<float64_t>>(
40             regressionDatasetTemp.testInputs);
41     auto regressionTrainLabels =
42         some<CRegressionLabels>(
43             regressionDatasetTemp.trainOutputs);
44     auto regressionTestLabels =
45         some<CRegressionLabels>(
46             regressionDatasetTemp.testOutputs);
47
48     // wywołanie modeli
49     shogunLinear(
50         regressionTrainFeatures,
51         regressionTestFeatures,
52         regressionTrainLabels,
53         regressionTestLabels);
54     shogunLogistic(
55         classificationTrainFeatures,
56         classificationTestFeatures,
57         classificationTrainLabels,
58         classificationTestLabels);
59     shogunSVM(
60         classificationTrainFeatures,
61         classificationTestFeatures,
62         classificationTrainLabels,
63         classificationTestLabels);
64     sharkNeural(
65         classificationTrainFeatures,
```

```
66         classificationTestFeatures,  
67         classificationTrainLabels,  
68         classificationTestLabels);  
69  
70     exit_shogun();  
71 }
```

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*. Klasa pozwala na ponowne wykorzystanie dla danych o tych samych nauczonych zmiennych. Posiada ona dwie główne metody:

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

W przypadku niektórych algorytmów oferowanych przez Shogun, normalizacja jest jednym z pierwszych wykonywanych kroków, w związku z czym nie zawsze zachodzi potrzeba wykonania jej we wstępnym przetwarzaniu. Informacja o takim przypadku powinna być zawarta w dokumentacji danej metody. Listing 4.3 pokazuje jak wykorzystać wyżej wspomnianą klasę do zrealizowania normalizacji. Zarówno przedstawiona klasa jak i funkcja zawarta na listingu realizują normalizację w miejscu zapisu macierzy regresorów, w związku z czym nie ma potrzeby nadpisywania elementu ją przechowującego.

Listing 4.3. Przykład funkcji wykonującej normalizację.

```
1  #pragma once  
2  
3  #include <shogun/preprocessor/RescaleFeatures.h>  
4  
5  inline void normalize(auto& inputs)  
6  {  
7      using namespace shogun;  
8  
9      // utworzenie normalizera  
10     auto scaler = wrap(new CRescaleFeatures);  
11     // nauka normalizera oraz przeprowadzenie normalizacji  
12     scaler->fit(inputs);  
13     scaler->transform(inputs);  
14 }
```

4.3.2. Redukcja wymiarowości

Shogun udostępnia użytkownikowi kilka rodzajów algorytmów redukcji wymiarowości, realizowane przez następujące klasy [3]:

- analiza składowych głównych - klasa *CPCA*;
- jądrowa analiza składowych głównych - klasa *CKernelPCA*;
- skalowanie wielowymiarowe - klasa *MultidimensionalScaling*;
- IsoMap - klasa *CIsoMap*;
- ICA - klasa *CFastICA*;
- analiza czynnikowa - klasa *CFactorAnalysis*;
- t-SNE - klasa *CTDistributedStochasticNeighborEmbedding*.

Każda z powyższych klas operuje poprzez uprzednie nauczenie się parametrów danych uczących metodą *fit()* oraz ustawienie docelowej liczby wymiarów (z wyjątkiem ICA). Nauczony obiekt reduktora można wykorzystać do redukcji wymiarowości danych poprzez metodę *apply_to_feature_vector()* zwracającą przetworzony wektor, lub w przypadku ICA, Analizy Składowych oraz t-SNE metodą *transform()*, której wynik należy zrzutować na wskaźnik na *CDenseFeatures*. Niestety, wykorzystanie któregośkolwiek z reduktorów wiąże się z koniecznością utworzenia nowej kopii obiektu w procesie transformacji, zamiast wykonania przekształceń w miejscu. Listing 4.4 przedstawia sposób wykonania redukcji na przykładzie klasy *CKernelPCA*.

Listing 4.4. Przykład redukcji wymiarowości z wykorzystaniem metody Kernel PCA [3].

```

1  #pragma once
2
3  inline void KernelPCA(
4      shogun::Some<shogun::CDenseFeatures<float64_t>> inputs,
5      const int target_dim)
6  {
7      using namespace shogun;
8
9      // utworzenie jądra
10     auto gaussKernel = some<CGaussianKernel>(inputs, inputs, 0.5);
11     // utworzenie obiektu reduktora wymiarowości
12     auto pca = some<CKernelPCA>();
13     // konfiguracja reduktora
14     pca->set_kernel(gaussKernel.get());
15     pca->set_target_dim(target_dim);
16     // nauczenie reduktora
17     pca->fit(inputs);
18     // zastosowanie redukcji
19     auto featureMatrix = inputs->get_feature_matrix();
20     for (index_t i = 0; i < inputs->get_num_vectors(); ++i)
21     {
22         auto vector = featureMatrix.get_column(i);
23         auto newVector = pca->apply_to_feature_vector(vector);
24     }
25 }
```


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*. Jak wskazuje nazwa, metoda ta posiada wbudowaną regresję grzbietową, której konfiguracja odbywa się podczas tworzenia obiektu modelu. Listing 4.5 przedstawia sposób dopasowania modelu regresji liniowej z pomocą biblioteki Shogun.

Listing 4.5. Przykład regresji liniowej w Shogun.

```

1  #pragma once
2
3  #include <iostream>
4  #include <numeric>
5  #include <inc/shogun/verify.hpp>
6  #include <shogun/base/some.h>
7  #include <shogun/features/DenseFeatures.h>
8  #include <shogun/labels/RegressionLabels.h>
9  #include <shogun/regression/LinearRidgeRegression.h>
10 #include <vector>
11
12 inline void shogunLinear(
13     shogun::Some<shogun::CDenseFeatures<float64_t>>& trainInputs,
14     shogun::Some<shogun::CDenseFeatures<float64_t>>& testInputs,
15     shogun::Some<shogun::CRegressionLabels>& trainOutputs,
16     shogun::Some<shogun::CRegressionLabels>& testOutputs)
17 {
18     using namespace shogun;
19
20     // utworzenie modelu
21     float64_t tauRegularization = 0.0001;
22     auto linear =
23         some<CLinearRidgeRegression>(tauRegularization, nullptr, nullptr);
24     // nauczanie
25     linear->set_labels(trainOutputs);
26     linear->train(trainInputs);
27     // weryfikacja modelu
28     std::cout << "-----ShogunLinear-----" << std::endl;
29     std::cout << "Train data:" << std::endl;
30     auto predictions = wrap(linear->apply_regression(trainInputs));
31     shogunVerifyModel(predictions, trainOutputs);
32
33     std::cout << "Test data:" << std::endl;
34     auto predictions2 = wrap(linear->apply_regression(testInputs));
35     shogunVerifyModel(predictions2, testOutputs);

```

36 }

4.4.2. Regresja logistyczna

Biblioteka Shogun zawiera implementację wieloklasowej regresji logistycznej w postaci gotowego obiektu klasy *CMulticlassLogisticRegression*. Posiada ona wbudowaną konfigurowalną regularyzację. Listing 4.6 przedstawia sposób użycia wspomnianej klasy.

Listing 4.6. Przykład regresji logistycznej.

```

1  #pragma once
2
3  #include <inc/shogun/verify.hpp>
4
5  #include <iostream>
6  #include <shogun/base/some.h>
7  #include <shogun/features/DenseFeatures.h>
8  #include <shogun/labels/MulticlassLabels.h>
9  #include <shogun/multiclass/MulticlassLogisticRegression.h>
10
11
12 inline void shogunLogistic(
13     shogun::Some<shogun::CDenseFeatures<float64_t>>& trainInputs,
14     shogun::Some<shogun::CDenseFeatures<float64_t>>& testInputs,
15     shogun::Some<shogun::CMulticlassLabels>& trainOutputs,
16     shogun::Some<shogun::CMulticlassLabels>& testOutputs)
17 {
18     using namespace shogun;
19
20     // utworzenie modelu
21     auto logReg = some<CMulticlassLogisticRegression>();
22
23     // nauka modelu
24     logReg->set_labels(trainOutputs);
25     logReg->train(trainInputs);
26
27     // ewaluacja modelu
28     std::cout << "----_Shogun_Logistic_----" << std::endl;
29     std::cout << "Train:" << std::endl;
30     auto prediction = wrap(logReg->apply_multiclass(trainInputs));
31     shogunVerifyModel(prediction, trainOutputs);
32
33     std::cout << "Test:" << std::endl;
34     auto prediction2 = wrap(logReg->apply_multiclass(testInputs));
35     shogunVerifyModel(prediction2, testOutputs);
36 }
```

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 konfi-

guracji parametrów, i umożliwia wybór zastosowanego jądra użytkownikowi. Listing 4.7 prezentuje jak wykorzystać wymienioną klasę.

Listing 4.7. Przykład użycia maszyny wektorów nośnych.

```

1  #pragma once
2
3  #include <inc/shogun/verify.hpp>
4
5  #include <iostream>
6  #include <shogun/base/some.h>
7  #include <shogun/features/DenseFeatures.h>
8  #include <shogun/evaluation/CrossValidation.h>
9  #include <shogun/labels/MulticlassLabels.h>
10 #include <shogun/kernel/GaussianKernel.h>
11 #include <shogun/multiclass/MulticlassLibSVM.h>
12 #include <shogun/evaluation/MulticlassAccuracy.h>
13 #include <shogun/evaluation/StratifiedCrossValidationSplitting.h>
14 #include <shogun/modelselection/ModelSelection.h>
15 #include <shogun/modelselection/ModelSelectionParameters.h>
16 #include <shogun/modelselection/GridSearchModelSelection.h>
17 #include <shogun/modelselection/ParameterCombination.h>
18
19 inline void shogunSVM(
20     shogun::Some<shogun::CDenseFeatures<float64_t>>& trainInputs,
21     shogun::Some<shogun::CDenseFeatures<float64_t>>& testInputs,
22     shogun::Some<shogun::CMulticlassLabels>& trainOutputs,
23     shogun::Some<shogun::CMulticlassLabels>& testOutputs)
24 {
25     using namespace shogun;
26
27     // utworzenie jądra
28     auto kernel = some<CGaussianKernel>();
29     kernel->init(trainInputs, trainInputs);
30     // utworzenie i konfiguracja modelu
31     auto svm = some<CMulticlassLibSVM>(LIBSVM_C_SVC);
32     svm->set_kernel(kernel);
33
34     // poszukiwanie hiperparametrów
35     auto root = some<CModelSelectionParameters>();
36     // stopień unikania miszklasyfikacji
37     CModelSelectionParameters* c = new CModelSelectionParameters("C");
38     root->append_child(c);
39     c->build_values(1.0, 1000.0, R_LINEAR, 100.);
40     // utworzenie wskaźnika na jądro
41     auto paramsKernel = some<CModelSelectionParameters>("kernel", kernel);
42     root->append_child(paramsKernel);
43     // utworzenie wskaźnika na wagi
44     auto paramsKernelWidth =
45         some<CModelSelectionParameters>("combined_kernel_weight");
46     paramsKernelWidth->build_values(0.1, 10.0, R_LINEAR, 0.5);
47     paramsKernel->append_child(paramsKernelWidth);
48     // utworzenie podziału do sprawdzianu krzyżowego
49     index_t k = 3;
50     CStratifiedCrossValidationSplitting* splitting =
51         new CStratifiedCrossValidationSplitting(trainOutputs, k);
52     // utworzenie kryterium trafności
53     auto evalCriterion = some<CMulticlassAccuracy>();

```

```

54 // utworzenie obiektu sprawdzianu krzyżowego
55 auto cross =
56     some<CCrossValidation>(
57         svm, trainInputs, trainOutputs, splitting, evalCriterion);
58 cross->set_num_runs(1);
59 // utworzenie obiektu selekcji modelu
60 auto modelSelection = some<CGridSearchModelSelection>(cross, root);
61 // wybór i zaaplikowanie parametrów
62 CParameterCombination* bestParams =
63     wrap(modelSelection->select_model(false));
64 bestParams->apply_to_machine(svm);
65 bestParams->print_tree();
66
67
68 // trening
69 svm->set_labels(trainOutputs);
70 std::cout << "t" << std::endl;
71 svm->train(trainInputs);
72 std::cout << "u" << std::endl;
73
74 // ewaluacja modelu
75 std::cout << "-----Shogun_SVM-----" << std::endl;
76 std::cout << "Train:" << std::endl;
77 auto prediction = wrap(svm->apply_multiclass(trainInputs));
78 shogunVerifyModel(prediction, trainOutputs);
79
80 std::cout << "Test:" << std::endl;
81 auto prediction2 = wrap(svm->apply_multiclass(testInputs));
82 shogunVerifyModel(prediction2, testOutputs);
83 }

```

4.4.4. Algorytm K najbliższych sąsiadów

Algorytm K najbliższych sąsiadów dostępny jest pod postacią klasy *CKNN*. Umożliwia on wybranie sposobu obliczania odległości poprzez przekazanie obiektu odpowiedniej klasy, oraz liczby najbliższych sąsiadów. Głównymi z dostępnych typów dystansów są odległość Euklidesa, Hamminga, Manhattanu oraz podobieństwo kosinusowe. W porównaniu do poprzednich metod, nie wymaga on ustawiania hiperparametrów, dzięki czemu można z niego bezproblemowo korzystać bez sprawdzianu krzyżowego. Listing 4.8 pokazuje przykład konfiguracji i użycia algorytmu kNN z użyciem odległości euklidesowej.

Listing 4.8. Przykład algorytmu kNN w Shogun.

```

1 #pragma once
2
3 #include <inc/shogun/verify.hpp>
4
5 #include <iostream>
6 #include <shogun/base/some.h>
7 #include <shogun/features/DenseFeatures.h>
8 #include <shogun/labels/MulticlassLabels.h>
9 #include <shogun/multiclass/KNN.h>
10 #include <shogun/distance/EuclideanDistance.h>
11

```

```

12 inline void shogunKNN(
13     shogun::Some<shogun::CDenseFeatures>& trainInputs,
14     shogun::Some<shogun::CDenseFeatures>& testInputs,
15     shogun::Some<shogun::CMulticlassLabels>& trainOutputs,
16     shogun::Some<shogun::CMulticlassLabels>& testOutputs)
17 {
18     using namespace shogun;
19
20     // przygotowanie dystansu
21     auto distance = some<CEuclideanDistance>(trainInputs, trainInputs);
22     // przygotowanie modelu
23     std::int32_t k = 3;
24     auto knn = some<CKNN>(k, distance, trainOutputs);
25     // ewaluacja modelu
26     std::cout << "-----Shogun_KNN-----" << std::endl;
27     std::cout << "Train:" << std::endl;
28     auto prediction = wrap(knn->apply_multiclass(trainInputs));
29     shogunVerifyModel(prediction, trainOutputs);
30
31     std::cout << "Test:" << std::endl;
32     auto prediction2 = wrap(knn->apply_multiclass(testInputs));
33     shogunVerifyModel(prediction2, testOutputs);
34 }

```

4.4.5. Algorytm zbiorowy

4.4.5.1. Wzmacnianie gradientu

Implementacja algorytmu zbiorowego z wykorzystaniem metody wzmacniania gradientu przystosowana jest do działania jedynie z modelami wykonującymi zadanie regresji. Klasa odpowiedzialna za jego realizację to *CStochasticGBMachine*. Pozwala ona na konfigurację szeregu parametrów, do których należą:

- bazowy algorytm;
- funkcja straty;
- liczba iteracji;
- współczynnik uczenia;
- ułamek wektorów do losowego wybrania w każdej iteracji.

Listing 4.9 przedstawia sposób implementacji powyższej metody z wykorzystaniem binarnego drzewa decyzyjnego regresji i klasyfikacji (implementowanego przez klasę *CCARTree*) jako algorytmu bazowego.

Listing 4.9. Przykład użycia metody wzmacniania gradientu.

```

1 #pragma once
2
3 #include <inc/shogun/verify.hpp>
4
5 #include <iostream>

```

```

6  #include <shogun/base/some.h>
7  #include <shogun/features/DenseFeatures.h>
8  #include <shogun/labels/MulticlassLabels.h>
9  #include <shogun/loss/SquaredLoss.h>
10 #include <shogun/lib/SGMatrix.h>
11 #include <shogun/lib/SGVector.h>
12 #include <shogun/machine/StochasticGBMachine.h>
13 #include <shogun/multiclass/tree/CARTree.h>
14
15 inline void shogunGradientBoost(
16     shogun::Some<shogun::CDenseFeatures>& trainInputs,
17     shogun::Some<shogun::CDenseFeatures>& testInputs,
18     shogun::Some<shogun::CMulticlassLabels>& trainOutputs,
19     shogun::Some<shogun::CMulticlassLabels>& testOutputs)
20 {
21     using namespace shogun;
22
23     // oznaczenie regresorów jako ciągłe
24     SGVector<bool> featureType(1);
25     featureType.set_const(false);
26     // utworzenie binarnego drzewa decyzyjnego
27     auto tree = some<CCARTree>(featureType, PT_REGRESSION);
28     tree->set_max_depth(3);
29     // utworzenie funkcji straty
30     auto loss = some<CSquaredLoss>();
31     // utworzenie i konfiguracja modelu
32     constexpr int iterations = 100;
33     constexpr int learningRate = 0.1;
34     constexpr int subsetFraction = 1.0;
35     auto model = some<CStochasticGBMachine>(tree,
36                                             loss,
37                                             iterations,
38                                             learningRate,
39                                             subsetFraction);
40     // trenowanie
41     model->set_labels(trainOutputs);
42     model->train(trainInputs);
43     // ewaluacja modelu
44     std::cout << "-----Shogun_Gradient_Boost-----" << std::endl;
45     std::cout << "Train:" << std::endl;
46     auto prediction = wrap(model->apply_multiclass(trainInputs));
47     shogunVerifyModel(prediction, trainOutputs);
48
49     std::cout << "Test:" << std::endl;
50     auto prediction2 = wrap(model->apply_multiclass(testInputs));
51     shogunVerifyModel(prediction2, testOutputs);
52 }

```

4.4.5.2. Las losowy

Metoda lasu losowego jest dostępna w bibliotece Shogun poprzez użycie klasy *CRandomForest*. W przeciwieństwie do wzmacniania gradientu, implementacja tej metody pozwala także na dokonywanie klasyfikacji. Do głównych konfigurowalnych parametrów należą:

- liczba drzew;

- liczba zbiorów na które powinny zostać podzielone dane;
- algorytm wybrania końcowego wyniku;
- typ rozwiązywanego problemu;
- ciągłość wartości regresorów.

Listing 4.10 pokazuje jak utworzyć i skonfigurować model losowego lasu do wykonania zadania aproksymacji funkcji kosinus.

Listing 4.10. Przykład użycia metody losowego lasu

```

1  #pragma once
2
3  #include "inc/shogun/verify.hpp"
4
5  #include <shogun/base/some.h>
6  #include <shogun/ensemble/MajorityVote.h>
7  #include <shogun/labels/RegressionLabels.h>
8  #include <shogun/lib/SGMatrix.h>
9  #include <shogun/lib/SGVector.h>
10 #include <shogun/machine/RandomForest.h>
11
12 inline void shogunRandomForest(
13     shogun::Some<shogun::CDenseFeatures<DataType>> trainInputs,
14     shogun::Some<shogun::CDenseFeatures<DataType>> testInputs,
15     shogun::Some<shogun::CRegressionLabels> trainOutputs,
16     shogun::Some<shogun::CRegressionLabels> testOutputs)
17 {
18     using namespace shogun;
19
20     // utworzenie i konfiguracja modelu
21     constexpr std::int32_t numRandFeats = 1;
22     constexpr std::int32_t numBags = 10;
23     auto randForest =
24         some<CRandomForest>(numRandFeats, numBags);
25     auto vote = some<CMajorityVote>();
26     randForest->set_combination_rule(vote);
27     // oznaczenie danych jako ciągłe
28     SGVector<bool> featureType(1);
29     featureType.set_const(false);
30     randForest->set_feature_type(featureType);
31     // trening
32     randForest->set_labels(trainOutputs);
33     randForest->set_machine_problem_type(PT_REGRESSION);
34     randForest->train(trainInputs);
35     // ewaluacja modelu
36     std::cout << "-----ShogunRandomForest-----" << std::endl;
37     std::cout << "Train data:" << std::endl;
38     auto predictions = wrap(randForest->apply_regression(trainInputs));
39     shogunVerifyModel(predictions, trainOutputs);
40
41     std::cout << "Test data:" << std::endl;
42     auto predictions2 = wrap(randForest->apply_regression(testInputs));
43     shogunVerifyModel(predictions2, testOutputs);
44 }

```

4.4.6. Sieć neuronowa

Pierwszym krokiem tworzenia sieci neuronowej dla niniejszej biblioteki jest skonfigurowanie architektury sieci za pomocą obiektu klasy *CNeuralLayers*. Posiada ona szereg metod, które tworzą odpowiednio skonfigurowane warstwy z wybraną funkcją aktywacji:

- *input()* - warstwa wejściowa z określoną ilością wymiarów;
- *logistic()* - warstwa w pełni połączona z sigmoidalną funkcją aktywacji;
- *linear()* - warstwa w pełni połączona z liniową funkcją aktywacji;
- *rectified_linear()* - warstwa w pełni połączona z funkcją aktywacji ReLU;
- *leaky_rectified_linear* - warstwa w pełni połączona z funkcją aktywacji Leaky ReLU;
- *softmax* - warstwa w pełni połączona z funkcją aktywacji softmax.

Kolejność wywoływania powyższych metod jest istotna, ponieważ decyduje ona o kolejności warstw w modelu. Po zakończeniu konfiguracji, możliwe jest utworzenie obiektu zatwierdzonej architektury za pomocą funkcji *done()*, a następnie wykorzystanie go do inicjalizacji klasy *CNeuralNetwork*. W celu połączenia warstw, należy wywołać na obiekcie sieci neuronowej funkcję *quick_connect* oraz zainicjalizować wagi metodą *initialize_neural_network*. Może ona przyjąć parametr określający rozkład Gaussa używany do inicjalizacji parametrów.

Następnym krokiem jest skonfigurowanie optymalizatora za pomocą metody *set_optimization*. Klasa *CNeuralNetwork* wspiera optymalizację z wykorzystaniem metody najszybszego spadku oraz Broydena-Fletcher-Goldfarba-Shannona. Sieć neuronowa posiada wbudowaną regularyzację L2, którą można skonfigurować, podobnie jak pozostałe parametry takie jak współczynnik uczenia, liczba epok, kryterium zbieżności dla funkcji straty, czy wielkość zestawów wsadowych. Niestety, niemożliwy jest wybór funkcji straty, gdyż jest on dokonywany automatycznie na podstawie typu zmiennej odpowiedzi. Listing 4.11 przedstawia pełny proces budowania, konfiguracji oraz uczenia sieci. Niestety ze względu na brak implementacji warstwy neuronu o aktywacji w postaci tangensa hiperbolicznego, na potrzeby prezentacji zastosowania zdecydowano się na wykorzystanie funkcji reLU, co ma wpływ na uzyskane wyniki.

Listing 4.11. Przykład użycia sieci neuronowej.

```

1  #pragma once
2
3  #include "inc/shogun/verify.hpp"
4
5  #include <shogun/features/DenseFeatures.h>
6  #include <shogun/labels/MulticlassLabels.h>
7  #include <shogun/neuralnets/NeuralLayers.h>
8  #include <shogun/neuralnets/NeuralNetwork.h>
9  #include <shogun/base/some.h>
10
11 inline void sharkNeural(
12     shogun::Some<shogun::CDenseFeatures<float64_t>> trainInputs,
```



```

13     shogun::Some<shogun::CDenseFeatures<float64_t>> testInputs,
14     shogun::Some<shogun::CMulticlassLabels> trainOutputs,
15     shogun::Some<shogun::CMulticlassLabels> testOutputs)
16 {
17     using namespace shogun;
18
19     // konstrukcja architektury sieci
20     auto dimensions = trainInputs->get_num_features();
21     auto layers = some<CNeuralLayers>();
22     layers = wrap(layers->input(dimensions));
23     layers = wrap(layers->rectified_linear(5));
24     layers = wrap(layers->rectified_linear(5));
25     layers = wrap(layers->logistic(1));
26     auto allLayers = layers->done();
27     // utworzenie sieci
28     auto network = some<CNeuralNetwork>(allLayers);
29     network->quick_connect();
30     network->initialize_neural_network();
31     // konfiguracja sieci
32     network->set_optimization_method(NNOM_GRADIENT_DESCENT);
33     network->set_gd_mini_batch_size(64);
34     network->set_l2_coefficient(0.0001);
35     network->set_max_num_epochs(500);
36     network->set_epsilon(0.0);
37     network->set_gd_learning_rate(0.01);
38     network->set_gd_momentum(0.5);
39     // trenowanie
40     network->set_labels(trainOutputs);
41     network->train(trainInputs);
42     // walidacja
43     std::cout << "-----ShogunNeuralNetwork-----" << std::endl;
44     std::cout << "Train data:" << std::endl;
45     auto predictions = wrap(network->apply_multiclass(trainInputs));
46     shogunVerifyModel(predictions, trainOutputs);
47
48     std::cout << "Test data:" << std::endl;
49     auto predictions2 = wrap(network->apply_multiclass(testInputs));
50     shogunVerifyModel(predictions2, testOutputs);
51 }

```

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 modelu oraz zaobserwowanych wartości odpowiedzi. Listing 4.12 ukazuje sposób użycia wspomnianego mechanizmu.

Listing 4.12. Przykład obliczenia wartości błędu średniokwadratowego [3]

```

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 bezwzględny

Realizacja obliczania średniego błędu bezwzględnego dla biblioteki Shogun dokonywana jest za pomocą klasy *CMeanAbsoluteError* pełniącej rolę ewaluatora. Tworzona jest ona poprzez wykorzystanie szablonu *some<>* a następnie wykorzystywana do obliczeń wołając jej metodę *evaluate* przekazując uzyskane oraz oczekiwane wyniki regresji lub klasyfikacji. Listing 4.13 przedstawia sposób użycia wyżej wymienionej klasy.

Listing 4.13. Przykład obliczenia wartości średniego błędu bezwzględnego [3].

```

1 using namespace shogun;
2 // [...]
3 auto mae_error = some<CMeanAbsoluteError>();
4 auto mae = mae_error->evaluate(predictions, train_labels);

```

4.5.3. Logarytmiczna funkcja straty

Logarytmiczna funkcja straty jest możliwa do obliczenia z wykorzystaniem biblioteki Shogun przy użyciu klasy *CLogLoss*, jednak udostępniane przez nią metody wskazują że powinna być wykorzystywana przez model, a nie bezpośrednio przez użytkownika. Udostępnia ona metodę *get_square_grad()* pozwalającą na obliczenie kwadratu gradientu między zadaną predykcją a docelowym wynikiem. Sposób użycia tej metody zaprezentowano na listingu 4.14

Listing 4.14. Przykład użycia klasy *CLogLoss*.

```

1 using namespace shogun;
2 // [...]
3 auto logLoss = some<CLogLoss>();
4 auto squareGradient = logLoss->get_square_grad(prediction, label);

```

4.5.4. Metryka R^2

Biblioteka Shogun nie posiada bezpośredniej implementacji dla metryki R^2 w związku z czym, pomimo możliwości wykorzystania wbudowanej metody obliczania błędu średniokwadratowego, wariancja odpowiedzi potrzebna dla uzyskania wyniku musi zostać uzyskana przez własny mechanizm użytkownika. Listing 4.15 przedstawia funkcję weryfikującą poprawność modeli opisanych w poprzednich punktach, obliczającą wartość metryki R^2 .

Listing 4.15. Przykład obliczenia metryki R^2 .

```

1  #pragma once
2
3  #include <iostream>
4  #include <cmath>
5  #include <shogun/evaluation/MeanSquaredError.h>
6  #include <shogun/evaluation/MeanAbsoluteError.h>
7  #include <shogun/evaluation/ROCEvaluation.h>
8  #include <shogun/labels/RegressionLabels.h>
9  #include <shogun/labels/MulticlassLabels.h>
10
11 inline void shogunVerifyModel(
12     const shogun::Some<shogun::CRegressionLabels>& predictions,
13     const shogun::Some<shogun::CRegressionLabels>& targets)
14 {
15     using namespace shogun;
16
17     // błąd średniokwadratowy
18     auto mseError = some<CMeanSquaredError>();
19     auto mse = mseError->evaluate(predictions, targets);
20     std::cout << "MSE_=" << mse << std::endl;
21     // metryka  $R^2$ 
22     float64_t avg = 0.0;
23     float64_t sum = 0.0;
24     float64_t sumFromErr = 0.0;
25     float64_t sumFromAvg = 0.0;
26     // obliczenie średniej
27     for (index_t i = 0; i < targets->get_num_labels(); i++)
28     {
29         avg += targets->get_label(i);
30     }
31     avg /= targets->get_num_labels();
32     // obliczenie wariancji
33     for (index_t i = 0; i < targets->get_num_labels(); i++)
34     {
35         sum += std::pow(targets->get_label(i), 2);
36     }
37     float64_t variance = (sum / targets->get_num_labels()) - std::pow(avg, 2);
38     // obliczenie metryki  $R^2$ 
39     auto r_square = 1 - (mse / variance);
40     std::cout << "R^2_=" << r_square << std::endl << std::endl;
41 }
42
43 inline void shogunVerifyModel(
44     const shogun::Some<shogun::CMulticlassLabels>& predictions,
45     const shogun::Some<shogun::CMulticlassLabels>& targets)
46 {
47     using namespace shogun;
48
49     // obliczenie pola pod wykresem ROC
50     auto roc = some<CROCEvaluation>();
51     roc->evaluate(predictions->get_binary_for_class(1),
52                 targets->get_binary_for_class(1));
53     std::cout << "AUC_ROC_=" << roc->get_aucROC() << std::endl;
54 }

```

4.5.5. Dokładność

Do obliczenia dokładności w przypadku zadań regresji, biblioteka udostępnia klasę *CMulticlassAccuracy*. Pozwala ona nie tylko na samą klasyfikację, lecz także oferuje metodę pobrania macierzy błędnych klasyfikacji. Nie znaleziono natomiast klasy *CAccuracyMeasure* wspomnianej w pracy [3], co sugerowałoby jej usunięcie z biblioteki. Listing 4.16 pokazuje w jaki sposób należy użyć klasy *CMulticlassAccuracy*.

Listing 4.16. Przykład obliczenia dokładności modelu.

```

1 using namespace shogun;
2 // [...]
3 auto acc_measure = some<CMulticlassAccuracy>();
4 auto acc = acc_measure->evaluate(predictions, train_labels);
5 auto confusionMatrix = acc_measure->get_confusion_matrix(
6     predictions, train_labels);

```

4.5.6. Precyzja i pełność (recall), oraz metryka F1

W podręczniku [3] wspomniane zostały klasy *CRecallMeasure* oraz *CF1Measure* mające pozwolić obliczyć odpowiednio pamięć modelu oraz metrykę F1, jednak w trakcie pracy z biblioteką nie znaleziono definicji tych klas, lub jakichkolwiek innych pełniących te funkcje, w związku z czym założono brak implementacji tych metod dla biblioteki Shogun. Zdecydowano się na wspomnienie o tym fakcie, w celu podkreślenia możliwości wystąpienia rozbieżności między źródłami wiedzy, a aktualnym stanem biblioteki.

4.5.7. Pole pod wykresem krzywej operacyjnej

Biblioteka Shogun posiada implementację obliczania pola pod wykresem krzywej charakterystycznej odbiornika, w postaci klasy *CROCEvaluation*. Listing 4.17 przedstawia sposób jej użycia.

Listing 4.17. Przykład obliczenia pola pod wykresem funkcji ROC dla Shogun.

```

1 using namespace shogun;
2 // [...]
3 auto roc = some<CROCEvaluation>();
4 roc->evaluate(predictions, targets);
5 std::cout << "AUC_ROC=" << roc->get_aucROC() << std::endl;

```

4.5.8. K-krotny sprawdzian krzyżowy

Sprawdzian krzyżowy stanowi w bibliotece Shogun złożony mechanizm, do którego wykorzystania należy przygotować drzewo decyzyjne parametrów, reprezentowane przez klasę *CModelSelectionParameters*. Użytkownik może wybrać model oraz kryterium ewaluacji modelu poprzez utworzenie odpowiednich klas, a następnie przekazanie ich w konstruktorze obiektu sprawdzianu krzyżowego, będącego instancją

klasy *CCrossValidation*. Kolejnym krokiem jest utworzenie instancji klasy *CGridSearchModelSelection* która dokona wyboru parametrów. Ostatnim etapem jest konfiguracja docelowego modelu i przeprowadzenie procesu uczenia. Dokładny wygląd całego mechanizmu został przedstawiony na listingu 4.18.

Listing 4.18. Przygotowanie modelu wieloklasowej regresji liniowej z wykorzystaniem sprawdzianu krzyżowego.

```

1  #pragma once
2
3  inline void shogunCrossValidLogistic(
4      shogun::Some<shogun::CDenseFeatures<float64_t>>& trainInputs,
5      shogun::Some<shogun::CDenseFeatures<float64_t>>& testInputs
6      shogun::Some<shogun::CMulticlassLabels> trainOutputs,
7      shogun::Some<shogun::CMulticlassLabels> testOutputs)
8  {
9      using namespace shogun;
10
11     // utworzenie drzewa parametrów
12     auto root = some<CModelSelectionParameters>();
13     // współczynnik regularyzacji
14     CModelSelectionParameters* z = new CModelSelectionParameters("m_z");
15     root->append_child(z);
16     z->build_values(0.2, 1.0, R_LINEAR, 0.1);
17     // utworzenie strategii podziału drzewa decyzyjnego
18     index_t k = 3;
19     CStatifiedCrossValidationSplitting* splitting =
20         new CStatifiedCrossValidationSplitting(labels, k);
21     // utworzenie kryterium ewaluacji dla drzewa decyzyjnego
22     auto evalCriterium = some<CMulticlassAccuracy>();
23     // utworzenie modelu regresji logistycznej
24     auto logReg = some<CMulticlassLogisticRegression>();
25     // utworzenie obiektu sprawdzianu krzyżowego
26     auto cross = some<CCrossValidation>(logReg, trainInputs, trainOutputs,
27                                         splitting, evalCriterium);
28     cross->set_num_runs(1);
29     auto modelSelection = some<CGridSearchModelSelection>(cross, root);
30     // wybranie parametrów dla modelu
31     CParameterCombination* bestParams =
32         wrap(modelSelection->select_model(false));
33     // zaaplikowanie parametrów dla modelu
34     bestParams->apply_to_machine(logReg);
35     // wyświetlenie drzewa decyzyjnego
36     bestParams->print_tree();
37     // trenowanie docelowego modelu
38     logReg->set_labels(trainOutputs);
39     logReg->train(trainInputs);
40
41     // ewaluacja modelu
42     std::cout << "-----Shogun_CV_Logistic-----" << std::endl;
43     std::cout << "Train:" << std::endl;
44     auto prediction = wrap(logReg->apply_multiclass(trainInputs));
45     shogunVerifyModel(prediction, trainOutputs);
46
47     std::cout << "Test:" << std::endl;
48     auto prediction2 = wrap(logReg->apply_multiclass(testInputs));
49     shogunVerifyModel(prediction2, testOutputs);
50

```

```
51     delete splitting;  
52 }
```

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 [17] możliwe jest wygenerowanie 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. Niestety, okazują się one obrazować użycie biblioteki w nienaturalny, proceduralnie generowany sposób, sprawiając, że przy faktycznej próbie skorzystania z API projektu, stają się one bezużyteczne. Dodatkowo, jedyna forma dokumentacji projektu ogranicza się do komentarzy w kodzie, zmuszając użytkownika do błędzenia po repozytorium w poszukiwaniu potrzebnych informacji.

Shogun jest jedną z bibliotek opisaną w podręczniku [3], wprowadzającym 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. Warto jednak zaznaczyć, że różnią się one od przykładów generowanych przez skrypt budujący, obrazując wykorzystanie faktycznie udostępnianego API biblioteki. W toku pracy nad niniejszym rozdziałem, książka ta okazała się jedynym wartościowym źródłem wiedzy na jego temat.

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 optymalizacji liniowej i nieliniowej (w związku z czym posiada ona część funkcjonalności biblioteki do algebry liniowej), maszyny jądrowe (np. maszyna wektorów nośnych) i sieci neuronowe. [18] Podmiotami udostępniającymi bibliotekę jest Uniwersytet w Kopenhadze w Danii, oraz Instytut Neuroinformatyki z Ruhr-Universitat 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* lub *RegressionDataset* 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 [19] 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. W aktualnej wersji biblioteki znalazły się także wbudowane funkcje pobierania danych współpracujące z protokołem HTTP. Listing 5.1 ukazuje jak odczytać dane z pliku .csv znajdującego się na dysku użytkownika.

Listing 5.1. Odczytanie danych z pliku CSV.

```

1 #pragma once
2
3 #include <inc/shark/printEvaluation.hpp>
4 #include <shark/Data/Dataset.h>
5 #include <shark/Data/DataDistribution.h>
6 #include <shark/Data/Csv.h>
7 #include <shark/Data/SparseData.h>
8
9 template<typename DatasetType>
10 inline DatasetType sharkReadCsvData(std::string filePath)
11 {
12     using namespace shark;
13
14     DatasetType trainData;
15     importCSV(trainData, filePath.c_str(), LAST_COLUMN);
16     return trainData;
17 }

```

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 [3].

```

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 normalizacje 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 normalizatora, 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 5.3 pokazuje przykład wstępnego przetwarzania danych z wykorzystaniem normalizacji.

Listing 5.3. Wstępne przetwarzanie danych do uczenia [19].

```
1 #pragma once
2
3 inline auto sharkPreprocess(auto& trainData)
4 {
5     using namespace shark;
6
7     // przemieszanie danych
8     trainData.shuffle();
9     // utworzenie normalizera
10    using Trainer = NormalizeComponentsUnitVariance<RealVector>;
11    bool removeMean = true;
12    Normalizer<RealVector> normalizer;
13    Trainer normalizingTrainer(removeMean);
14    // nauczanie normalizera średniej i wariancji danych treningowych
15    normalizingTrainer.train(normalizer, trainData.inputs());
16    // transformacja danych uczących
17    return transformInputs(trainData, normalizer);
18 }
```

5.3.2. Redukcja wymiarowości

5.3.2.1. Analiza składowych głównych

Algorytm redukcji wymiarowości przez analizę składowych głównych 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 dyskryminacyjna (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.

Listing 5.5. Przykład redukcji zestawu danych z wykorzystaniem modelu LDA [3].

```

1  using namespace shark;
2
3  void LDAReduction(const UnlabeledData<RealVector>& data,
4                   const UnlabeledData<RealVector>& labels,
5                   std::size_t target_dim)
6  {
7      // utworzenie obiektów LDA
8      LinearClassifier<> encoder;
9      LDA lda;
10     // utworzenie zestawu danych
11     LabeledData<RealVector, unsigned int> dataset(
12         labels.numberOfElements(), InputLabelPair<RealVector, unsigned int>(
13             RealVector(data.element(0).size()), 0));
14     // wypełnienie zbioru danymi
15     for (std::size_t i = 0; i < labels.numberOfElements(); ++i)
16     {
17         // zmiana indeksów klas aby zaczynały się od 0
18         dataset.element(i).label =
19             static_cast<unsigned int>(labels.element(i)[0]) - 1;
20         dataset.element[i].input = data.element(i)
21     }
22     // trening enkodera
23     lda.train(encoder, dataset);
24     // utworzenie zredukowanego zestawu danych
25     auto new_labels = encoder(data);
26     auto new_data = encoder.decisionFunction()(data);
27 }

```

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 wprowadzeniu 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 średniej statystycznej gradientu (ang. *Statistic Averagte Gradient*, *SAG*). W przypadku bardziej skompilowanych modeli 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 załadowania uzyskanych wag do modelu regresji. Parametry modelu możliwe są do odczytania z wykorzystaniem metod *offset()* i *matrix()* lub metody *parameterVector()*. Na listingu 5.6 ukazane zostało wykorzystanie podejścia iteracyjnego, natomiast listing 5.7 przedstawia metodę analityczną.

Listing 5.6. Przykład regresji liniowej z wykorzystaniem optymalizatora spadku gradientowego.

```

1  #pragma once
2
3  #include <iostream>
4  #include <inc/shark/printEvaluation.hpp>
5  #include <shark/Algorithms/Trainers/LinearRegression.h>
6  #include <shark/Models/LinearModel.h>
7  #include <shark/ObjectiveFunctions/Loss/SquaredLoss.h>
8
9  inline void sharkLinear(const shark::RegressionDataset& trainData,
10                        const shark::RegressionDataset& testData)
11  {
12      using namespace shark;
13
14      // przygotowanie modelu i trenera
15      LinearModel<> model;
16      LinearRegression trainer;
17      //trenowanie
18      trainer.train(model, trainData);
19      // ewaluacja
20      std::cout << "-----Shark_Linear-----" << std::endl;
21      std::cout << "Train_data:" << std::endl;
22      auto predictions = model(trainData.inputs());
23      printSharkModelEvaluation(
24          trainData.labels(), predictions);
25
26      std::cout << "Test_data:" << std::endl;

```

```

27     predictions = model(testData.inputs());
28     printSharkModelEvaluation(
29         testData.labels(), predictions);
30 }

```

Listing 5.7. Przykład regresji liniowej z wykorzystaniem trenera analitycznego [3].

```

1  #pragma once
2
3  inline void sharkLinear(const shark::RegressionDataset& trainData,
4                          const shark::RegressionDataset& testData)
5  {
6      using namespace shark;
7
8      // utworzenie modelu
9      LinearRegression trainer;
10     LinearModel<> model;
11     // trening modelu
12     trainer.train(model, trainData);
13     // odczytanie parametrów modelu
14     std::cout << "intercept:_" << model.offset() << std::endl;
15     std::cout << "matrix:_" << model.matrix() << std::endl;
16     // ewaluacja
17     std::cout << "-----Shark_Linear-----" << std::endl;
18     std::cout << "Train_data:" << std::endl;
19     auto predictions = model(trainData.inputs());
20     printSharkModelEvaluation(
21         trainData.outputs(), predictions, Task::REGRESSION);
22
23     std::cout << "Test_data:" << std::endl;
24     predictions = model(testData.inputs());
25     printSharkModelEvaluation(
26         trainData.outputs(), predictions, Task::REGRESSION);
27 }

```

5.4.2. Regresja logistyczna

Mechanizm regresji logistycznej dostępny w bibliotece Shark-ML z natury rozwiązuje problem klasyfikacji dla dwóch klas. Istnieje jednak możliwość przygotowania wielu klasyfikatorów, w liczbie wyrażonej wzorem:

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

gdzie N oznacza liczbę klas występujących w problemie. Utworzone klasyfikatory następnie są złączane w jeden za pomocą odpowiedniej konfiguracji obiektu *One-VersusOneClassifier*, 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 5.8 prezentuje funkcję budującą model logistycznej regresji wieloklasowej, natomiast listing 5.9 pokazuje sposób utworzenia prostego modelu dla problemu binarnego.

Listing 5.8. Przykład funkcji tworzącej model wieloklasowej regresji logistycznej [3].

```

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        // podłączenie serii do głównego klasyfikatora
35        ovo.addClass(ovo_classifiers);
36    }
37
38    // użycie modelu
39    auto predictions = ovo(test.inputs());
40    // [...]
41 }

```

Listing 5.9. Przykład prostej binarnej regresji logistycznej.

```

1 #pragma once
2
3 #include <iostream>
4
5 #define SHARK_CV_VERBOSE 1
6 #include <inc/shark/printEvaluation.hpp>
7 #include <shark/Algorithms/Trainers/LogisticRegression.h>

```

```

8  #include <shark/Data/Dataset.h>
9  #include <shark/Models/Classifier.h>
10 #include <iostream>
11
12 inline void sharkLogistic(const shark::ClassificationDataset& trainData,
13                           const shark::ClassificationDataset& testData)
14 {
15     using namespace shark;
16
17     // utworzenie modelu
18     std::cout << "Start_logistic\n";
19     LinearClassifier<RealVector> logisticModel;
20     LogisticRegression<RealVector> trainer;
21     // trenowanie
22     std::cout << "Training\n";
23     trainer.train(logisticModel, trainData);
24     // ewaluacja
25     std::cout << "-----Shark_Logistic_Regression-----" << std::endl;
26     std::cout << "Train_data_model_evaluation:" << std::endl;
27     auto predictions = logisticModel(trainData.inputs());
28     printSharkModelEvaluation(
29         trainData.labels(), predictions);
30
31     std::cout << "Test_data_model_evaluation:" << std::endl;
32     predictions = logisticModel(testData.inputs());
33     printSharkModelEvaluation(
34         testData.labels(), predictions);
35 }

```

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 jeden z typów modeli jądrowych (ang. *kernel model*). Opiera się ona na wykonaniu regresji liniowej w przestrzeni cech określonych przez wykorzystane jądro. Podobnie jak w przypadku regresji logistycznej, API biblioteki umożliwia wykonanie klasyfikacji dla przypadku binarnego, natomiast rozwiązanie przy jej użyciu problemu wieloklasowego wymaga kombinacji instancji dychotomicznych maszyn wektorów nośnych w model złożony, czego można dokonać przy pomocy klasy *OneVersusOneClassifier* oraz liczbie 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 $[0; 1]$;
- regularyzacja - podawana jako liczba rzeczywista w konstruktorze *CSvmTrainer*, domyślnie maszyna wektorów nośnych używa kary w postaci normy L1 za przekroczenie docelowej granicy;
- bias - flaga binarna (bool) określająca czy model ma używać wyrazu wolnego (ang. *bias*), 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 5.10 ukazuje przykład utworzenia i skonfigurowania modelu na podstawie wpisów dostępnych w dokumentacji biblioteki, natomiast listing 5.10 przedstawia sposób utworzenia maszyny wektorów nośnych dla problemów wieloklasowych wewnątrz funkcji przyjmującej zestawu danych uczących i testowych.

Listing 5.10. Przykład maszyny wektorów nośnych dla problemu binarnego.

```

1 #pragma once
2
3 #define SHARK_CV_VERBOSE 1
4 #include <inc/shark/printEvaluation.hpp>
5 #include <shark/Algorithms/KMeans.h>
6 #include <shark/Algorithms/Trainers/CSvmTrainer.h>
7 #include <shark/Data/Dataset.h>
8 #include <shark/Models/Classifier.h>
9 #include <shark/Models/Kernels/GaussianRbfKernel.h>
10
11 inline void sharkSVM(const shark::ClassificationDataset& trainData,
12                     const shark::ClassificationDataset& testData)
13 {
14     using namespace shark;
15
16     // utworzenie jądra
17     double gamma = 0.5;
18     GaussianRbfKernel<> kernel(gamma);
19     KernelClassifier<RealVector> svm;
20     double regularization = 1000.0;
21     bool bias = true;
22     // utworzenie i konfiguracja modelu
23     CSvmTrainer<RealVector, double> trainer(
24         &kernel, regularization, bias);
25     trainer.sparsify() = false;

```

```

26     trainer.stoppingCondition().minAccuracy=1e-6;
27     trainer.setCacheSize(0x1000000);
28     // trening
29     trainer.train(svm, trainData);
30     // ewaluacja
31     std::cout << "-----Shark_SVM-----" << std::endl;
32     std::cout << "Train_data:" << std::endl;
33     auto predictions = svm(trainData.inputs());
34     printSharkModelEvaluation(
35         trainData.labels(), predictions);
36
37     std::cout << "Test_data:" << std::endl;
38     predictions = svm(testData.inputs());
39     printSharkModelEvaluation(
40         testData.labels(), predictions);
41 }

```

Listing 5.11. Przykład maszyny wektorów nośnych dla problemu wieloklasowego [3].

```

1  using namespace shark;
2
3  void SVMClassification(const ClassificationDataset& train,
4                        const ClassificationDataset& test,
5                        unsigned int num_classes)
6  {
7      double gamma = 0.5;
8      GaussianRbfKernel<> kernel(gamma);
9      // utworzenie obiektu modelu docelowego
10     OneVersusOneClassifier<RealVector> ovo;
11     // utworzenie kontenera na poszczególne podproblemy
12     unsigned int pairs = num_classes * (num_classes - 1) / 2;
13     std::vector<KernelClassifier<RealVector>> svm(pairs);
14     for (std::size_t n = 0, cls1 = 1; cls1 < num_classes; cls1++)
15     {
16         // utworzenie zestawu klasyfikatorów podproblemów dla danej klasy
17         using BinaryClassifierType =
18             OneVersusOneClassifier<RealVector>::binary_classifier_type;
19         std::vector<BinaryClassifierType> ovo_classifiers;
20         for (std::size_t cls2 = 0; cls2 < cls1; cls2++, n++)
21         {
22             // utworzenie podproblemu binarnego
23             ClassificationDataset binary_cls_data =
24                 binarySubProblem(train, cls2, cls1);
25             // trenowanie modelu składowego
26             double c = 10.0;
27             CSvmTrainer<RealVector> trainer(&kernel, c, false);
28             trainer.train(svm[n], binary_cls_data);
29             ovo_classifiers.push_back(&svm[n]);
30         }
31         // dołożenie zestawu klasyfikatorów do głównego modelu
32         ovo.addClass(ovo_classifiers);
33     }
34     // użycie modelu
35     auto predictions = ovo(test.inputs());
36 }

```

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 liczby klas. Jest on automatycznie konfigurowany na podstawie danych uczących. Listing 5.12 przedstawia sposób przygotowania klasyfikatora kNN.

Listing 5.12. Przykład utworzenia klasyfikatora kNN.

```

1  #pragma once
2
3  #define SHARK_CV_VERBOSE 1
4  #include <inc/shark/printEvaluation.hpp>
5  #include <shark/Algorithms/KMeans.h>
6  #include <shark/Algorithms/NearestNeighbors/TreeNearestNeighbors.h>
7  #include <shark/Data/Dataset.h>
8  #include <shark/Models/Classifier.h>
9  #include <shark/Models/NearestNeighborModel.h>
10 #include <shark/Models/Trees/KDTree.h>
11 #include <iostream>
12
13 inline void sharkKNN(const shark::ClassificationDataset& trainData,
14                     const shark::ClassificationDataset& testData)
15 {
16     using namespace shark;
17
18     // utworzenie i konfiguracja drzewa oraz algorytmu
19     KDTree<RealVector> tree(trainData.inputs());
20     TreeNearestNeighbors<RealVector, unsigned int> algorithm(
21         trainData, &tree);
22
23     // konfiguracja modelu
24     const unsigned int K = 2; // ilość sąsiadów dla algorytmu kNN
25     NearestNeighborModel<RealVector, unsigned int> KNN(&algorithm, K);
26
27     // ewaluacja modelu
28     std::cout << "-----Shark_KNN-----" << std::endl;
29     std::cout << "Train_data:" << std::endl;
30     auto predictions = KNN(trainData.inputs());
31     printSharkModelEvaluation(
32         trainData.labels(), predictions);
33
34     std::cout << "Test_data:" << std::endl;
35     predictions = KNN(testData.inputs());
36     printSharkModelEvaluation(
37         testData.labels(), predictions);
38 }

```

5.4.5. Algorytm zbiorowy

Oprócz powszechnie znanych algorytmów, biblioteka Shogun-ML 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 tę technikę jest las losowy 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 nauczenie 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 5.13 przedstawia sposób utworzenia i użycia modelu lasu losowego.

Listing 5.13. Utworzenie modelu algorytmu złożonego losowego lasu [3].

```

1  using namespace std;
2
3  void RFClassification(const shark::ClassificationDataset& train,
4                      const shark::ClassificationDataset& test)
5  {
6      using namespace shark;
7
8      // utworzenie i konfiguracja trenera
9      RFTrainer<unsigned int> trainer;
10     trainer.setNTrees(100);
11     trainer.setMinSplit(10);
12     trainer.setMaxDepth(10);
13     trainer.setNodeSize(5);
14     trainer.minImpurity(1.e-10);
15     // utworzenie klasyfikatora
16     RFClassifier<unsigned int> rf;
17     trainer.train(rf, train);
18     // ewaluacja
19     ZeroOneLoss<unsigned int> loss;
20     auto predictions = rf(test.inputs());
21     double accuracy = 1. - loss.eval(test.labels(), predictions);
22     std::cout << "Random_Forest_accuracy=" << accuracy << std::endl;
23 }
```

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 liczby wejść, wyjść, oraz zastosowania wyrazu wolnego. Każda warstwa składa się z pojedynczego obiektu modelu liniowego, gdzie liczba 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 [20]. 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 wagami losowymi 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 wsadowe porcje danych, wykonując na nich krok optymalizatora. Po zakończeniu uczenia, należy skonfigurować obiekt modelu przekazując mu wagi ustalone przez optymalizator, uzyskując w ten sposób gotową instancję nauczonej sieci neuronowej. Listing 5.14 przedstawia kod realizujący cały proces, stanowiący przykład z podręcznika [3].

Listing 5.14. Przykład sieci neuronowej o dwóch warstwach ukrytych do zadania klasyfikacji [3].

```

1  #pragma once
2
3  #include <iostream>
4  #include <inc/shark/printEvaluation.hpp>
5  #include <shark/Algorithms/GradientDescent/SteepestDescent.h>
6  #include <shark/Models/ConcatenatedModel.h>
7  #include <shark/Models/LinearModel.h>
8  #include <shark/Data/Dataset.h>
9  #include <shark/ObjectiveFunctions/ErrorFunction.h>
10 #include <shark/ObjectiveFunctions/Regularizer.h>
11 #include <shark/ObjectiveFunctions/Loss/CrossEntropy.h>
12
13 inline void sharkNN(const shark::ClassificationDataset& trainData,
14                    const shark::ClassificationDataset& testData)
15 {
16     using namespace shark;
17
18     // zdefiniowanie warstw sieci
19     using DenseTanhLayer = LinearModel<RealVector, TanhNeuron>;
20     using DenseLogisticLayer = LinearModel<RealVector, LogisticNeuron>;
21     DenseTanhLayer layer1(inputDimension(trainData), 5, true);
22     DenseTanhLayer layer2(5, 5, true);
23     DenseLogisticLayer output(5, numberOfClasses(trainData), true);
24     // połączenie warstw
25     auto network = layer1 >> layer2 >> output;
26     // utworzenie i konfiguracja funkcji straty
27     CrossEntropy<unsigned int, RealVector> loss;
28     ErrorFunction<> error(trainData, &network, &loss, true);
29     //TwoNormRegularizer<> regularizer(error.numberVariables());
30     double weightDecay = 0.01;
31     //error.setRegularizer(weightDecay, &regularizer);
32     error.init();
33     // inicjalizacja wag sieci
34     initRandomNormal(network, 0.001);

```

```

35 // utworzenie i konfiguracja optymalizatora
36 SteepestDescent<> optimizer;
37 optimizer.setMomentum(0.5);
38 optimizer.setLearningRate(0.1);
39 optimizer.init(error);
40 // przeprowadzenie procesu uczenia
41 std::size_t epochs = 1000;
42 std::size_t iterations = trainData.numberOfBatches();
43 // pętla przechodząca poszczególne epoki
44 for (std::size_t epoch = 0; epoch != epochs; ++epoch)
45 {
46     double avgLoss = 0.0;
47     // pętla operująca na pojedynczych batch'ach
48     for (std::size_t i = 0; i != iterations; ++i)
49     {
50         // wykonanie kroku optymalizatora
51         optimizer.step(error);
52         // zapisanie częściowej wartości funkcji straty
53         //if (i % 100 == 0)
54         //{
55             avgLoss += optimizer.solution().value;
56         //}
57     }
58     // wyliczenie średniej wartości funkcji straty
59     avgLoss /= iterations;
60     std::cout << "Epoch_" << epoch << "_|_Avg._loss_" << avgLoss
61         << std::endl;
62 }
63 // konfiguracja modelu docelowego
64 network.setParameterVector(optimizer.solution().point);
65 std::cout << "In_Shape=" << network.inputShape() << std::endl;
66 std::cout << "Out_Shape=" << network.outputShape() << std::endl;
67 //Classifier<ConcatenatedModel<RealVector>> model(network);
68
69 // walidacja
70 std::cout << "-----Shark_Neural-----" << std::endl;
71 std::cout << "Train_data:" << std::endl;
72 std::cout << "trainData.numberOfBatches()_=" <<
73     trainData.numberOfBatches() << std::endl;
74 auto predictions = network(trainData.inputs());
75 std::cout << "predictions.numberOfBatches()_=" <<
76     predictions.numberOfBatches();
77 printSharkModelEvaluation(
78     trainData.labels(), predictions);
79
80 std::cout << "Test_data:" << std::endl;
81 predictions = network(testData.inputs());
82 printSharkModelEvaluation(
83     testData.labels(), predictions);
84 }

```

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 [21]:

- **średni błąd bezwzględny** - realizowany za pomocą klasy *AbsoluteLoss*;
- **błąd średniokwadratowy** - realizowany za pomocą klasy *SquaredLoss*;
- **błąd typu zero-jeden** - realizowany za pomocą klasy *ZeroOneLoss*;
- **błąd dyskretny** - realizowany za pomocą klasy *DiscreteLoss*;
- **entropia krzyżowa** - realizowana za pomocą klasy *CrossEntropy*;
- **kawałkami liniowa funkcja straty** - realizowany za pomocą klasy *HingeLoss*;
- **średniokwadratowy błąd kawałkami liniowej funkcji straty** - realizowany za pomocą klasy *SquaredHingeLoss*;
- **kawałkami liniowa funkcja straty typu epsilon** - realizowany za pomocą klasy *EpsilonHingeLoss*;
- **średniokwadratowy błąd kawałkami liniowej funkcji straty typu 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 5.15 przedstawia omówiony sposób użycia na przykładzie błędu średniokwadratowego.

Listing 5.15. 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 skorygowane 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 umożliwi bardzo łatwą samodzielną implementację obu metryk. Listing 5.16 przedstawia sposób ich wyliczenia, posiadając wartość błędu średniokwadratowego.

Listing 5.16. Implementacja metryk R^2 oraz skorygowanego 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. Pole pod wykresem krzywej charakterystycznej odbiornika

Pole pod wykresem krzywej charakterystycznej odbiornika 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 dopełnienie pola pod wykresem funkcji ROC, aby umożliwić wykorzystanie jej jako minimalizowanego celu w procesie uczenia. Listing 5.17 przedstawia sposób obliczenia wartości wymienionej metryki.

Listing 5.17. Przykład obliczenia pola pod wykresem funkcji ROC dla Shark-ML.

```

1  #include <vector>
2  #include <algorithm>
3  #include <iterator>
4  #include <shark/LinAlg/Base.h>
5
6  std::vector<shark::RealVector> repackToRealVectorRange(
7      const auto& dataContainer)
8  {
9      using namespace shark;
10
11     // przepakowanie danych z typu unsigned int na typ RealVector
12     std::vector<RealVector> v;
13     std::for_each(dataContainer.elements().begin(),
14                   dataContainer.elements().end(),

```

```

15         [&](const auto e){
16             RealVector rv(1);
17             rv(0) = static_cast<double>(e);
18             v.emplace_back(rv); });
19     return v;
20 }
21
22 inline void printSharkModelEvaluation(
23     const shark::Data<unsigned int>& labels,
24     const auto& predictions)
25 {
26     using namespace shark;
27
28     // przygotowanie solvera pola pod wykresem ROC
29     constexpr bool invert = false;
30     NegativeAUC<unsigned int, RealVector> auc(invert);
31
32     // przepakowanie danych
33     auto predVec = repackToRealVectorRange(predictions);
34     auto predData = createDataFromRange(predVec);
35     // obliczenie AUC ROC
36     auto roc = auc(labels, predData);
37     std::cout << "ROC:␣" << (-1 * roc) << std::endl << std::endl;
38 }

```

5.5.4. K-krotny sprawdzian krzyżowy

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 K-krotnego sprawdzianu krzyżowego w wymaga wykorzystania trzech klas. Pierwszą z nich stanowi *CVFolds*, której zadaniem jest przechowanie zestawu danych podzielonego na odpowiednią liczbę 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 wyznaczenie wartości hiperparametrów dla modelu. Wynikiem procesu jest uzyskanie najlepszego zestawu hiperparametrów do procedury uczenia - użytkownik musi zawołać metodę *step()* klasy *GridSearch* tylko jeden raz. Listing 5.18 przedstawia przykład zawarty w podręczniku [3], w którym autor przedstawia proces wykorzystania powyższych klas na własnoręcznie zaimplementowanym modelu regresji wielomianowej.

Listing 5.18. Przykład realizacji sprawdzianu krzyżowego K-fold w Shark-ML [3].

```

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 językowi 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. Strona główna projektu [22] posiada rozbudowaną, przejrzystą i opatrzoną przykładami dokumentację, znacznie ułatwiając korzystanie z dostępnego API.

Rozdział 6

Biblioteka Dlib

6.1. Wprowadzenie

Jest to biblioteka do uczenia maszynowego napisana w nowoczesnym C++, o zastosowaniu przemysłowym oraz naukowym [23]. Podobnie jak poprzednio omawiane biblioteki, posiada ona otwarte źródło na licencji Boost Software Licence [24]. Do dziedzin wykorzystujących wyżej wspomnianą bibliotekę należą robotyka, systemy wbudowane, telefonia komórkowa oraz oprogramowanie 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 [3].

```
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. Przykład funkcji normalizującej przedstawiono na listingu 6.2.

Listing 6.2. Funkcja normalizująca.

```

1 #pragma once
2
3 #include <vector>
4 #include <dlib/matrix.h>
5
6 inline std::vector<dlib::matrix<double>> dlibNormalize(
7     const std::vector<dlib::matrix<double>& data)
8 {
9     using namespace dlib;
10    // utworzenie i trening normalizera
11    vector_normalizer<matrix<double>> normalizer;
12    normalizer.train(data);
13    // przetwarzanie danych
14    std::vector<matrix<double>> processedData(data.size());
15    for (auto dataMatrix : data)
16        processedData.emplace_back(normalizer(data));
17    return processedData;
18 }

```

6.3.2. Redukcja wymiarowości

6.3.2.1. Analiza składowych głównych

Implementacja metody PCA w bibliotece Dlib oferowana jest za pośrednictwem klasy *dlib::vector_normalizer_pca*, która oprócz samej redukcji wymiarowości wykonuje także wcześniej automatycznie proces normalizacji danych. Bywa to przydatne, gwarantując że redukcja będzie przeprowadzana zawsze na odpowiednio przygotowanych wartościach obserwacji. Listing 6.3 przedstawia funkcję używającą wyżej wymienioną metodę.

Listing 6.3. Przykład redukcji wymiarowości z użyciem metody PCA.

```

1  #pragma once
2
3  #include <dlib/matrix.h>
4  #include <dlib/matrix/matrix_utilities.h>
5  #include <dlib/statistics.h>
6  #include <vector>
7
8  inline std::vector<dlib::matrix<double>> dlibPCA(
9      const std::vector<dlib::matrix<double>>& data,
10     std::size_t desiredDimensions)
11  {
12     using namespace dlib;
13     // utworzenie i trening reduktora
14     vector_normalizer_pca<matrix<double>> pca;
15     pca.train(data, desiredDimensions/data[0].nr());
16     // przygotowanie kontenera na przetworzone dane
17     std::vector<matrix<double>> processedData;
18     processedData.reserve(data.size());
19     // przetwarzanie danych
20     for(auto& sample : data)
21     {
22         processedData.emplace_back(pca(sample));
23     }
24     return processedData;
25 }

```

6.3.2.2. Liniowa analiza dyskryminacyjna

Drugim z oferowanych algorytmów redukcji wymiarowości zawartych w Dlib jest algorytm liniowej analizy dyskryminacyjnej. Jest on dostępny pod postacią funkcji `dlib::compute_lda_transform`, która przekształca macierz zawierającą dane wejściowe do macierzy transformacji danych. Ze względu na nadzorowany charakter algorytmu, konieczne jest także przekazanie wartości zmiennych odpowiedzi, natomiast same dane, w przeciwieństwie do metody PCA, mogą być zawarte w pojedynczym obiekcie macierzy. Redukcja odbywa się poprzez wymnożenie otrzymanej macierzy przez transponowany wiersz zawierający próbkę. Szczegółowe zastosowanie algorytmu przedstawiono na listingu 6.4

Listing 6.4. Przykład redukcji wymiarowości z użyciem algorytmu LDA.

```

1  #pragma once
2
3  #include <dlib/matrix.h>
4  #include <dlib/matrix/matrix_utilities.h>
5  #include <dlib/statistics.h>
6  #include <vector>
7
8  inline std::vector<dlib::matrix<double>> dlibLDA(
9      const dlib::matrix<double>& data,
10     const std::vector<unsigned long>& labels,
11     std::size_t desiredDimensions)
12  {
13     using namespace dlib;
14     // utworzenie obiektów potrzebnych do redukcji

```

```

15     matrix<double, 0, 1> mean;
16     auto transform = data;
17     // przekształcenie danych w macierz redukcyjną
18     compute_lda_transform(transform, mean, labels, desiredDimensions);
19     // przygotowanie kontenera na przetworzone dane
20     std::vector<matrix<double>> transformedData;
21     transformedData.reserve(data.nr());
22     // redukcja wymiarowości
23     for (long i = 0; i < data.nr(); ++i)
24     {
25         transformedData.emplace_back(transform * trans(rowm(data, i)) - mean);
26     }
27     // zwrócenie wektora przetworzonych wierszy
28     return transformedData;
29 }

```

6.3.2.3. Mapowanie Sammona

Jednym z algorytmów wyróżniających bibliotekę DLib na tle pozostałych, jest implementacja metody redukcji wymiarowości poprzez skalowanie wielowymiarowe z użyciem nieliniowego algorytmu tzw. mapowania Sammona [25]. Całość wspomnianego algorytmu implementowana jest za pomocą klasy `dlib::sammon_projection`, i ogranicza się do utworzenia jej instancji. Wykorzystując metodę należy przekazać do utworzonego obiektu za pomocą operatora wywołania funkcji wektor danych, oraz oczekiwaną liczbę wymiarów, otrzymując przekształcone dane. W związku z powyższym, funkcja realizująca redukcję z użyciem wyżej wymienionej metody sprowadza się do wykorzystania dwóch linii. Dokładny sposób jej użycia pokazano na listingu 6.5

Listing 6.5. Przykład redukcji wymiarowości z użyciem mapowania Sammona

```

1  #pragma once
2
3  #include <dlib/matrix.h>
4  #include <dlib/matrix/matrix_utilities.h>
5  #include <dlib/statistics.h>
6  #include <vector>
7
8  inline std::vector<matrix<double>> dlibSammon(
9      const std::vector<matrix<double>>& data,
10     long desiredDimensions)
11  {
12     using namespace dlib;
13     // utworzenie obiektu mapowania
14     dlib::sammon_projection sammon;
15     // redukcja wymiarowości
16     return sammon(data, desiredDimensions);
17 }

```

6.3.3. Regularyzacja L2

Biblioteka Dlib posiada funkcję trenera pozwalającą na użycie brzegowej regresji, realizującą regularyzację L2, o nazwie `rr_trainer` dla regresji liniowej oraz `krr_trainer`

dla regresji nieliniowej. Przykłady zastosowania poszczególnych wersji tego algorytmu zostały przedstawione w sekcji omawiającej model regresji liniowej, oraz grzbietowej regresji jądrowej.

6.4. Modele uczenia maszynowego

6.4.1. Regresja liniowa

Biblioteka Dlib posiada pośrednią realizację modelu regresji liniowej. Wykorzystuje ona technikę grzbietowej regresji jądrowej, przekazując jądro liniowe. Następnie przeprowadzane jest uczenie, zapisując docelowy model w postaci funkcji decyzyjnej. Listing 6.6 przedstawia szczegóły powyższego mechanizmu.

Listing 6.6. Przykład regresji liniowej w Dlib.

```
1  #pragma once
2
3  #include <dlib/matrix.h>
4  #include <dlib/svm.h>
5
6  #include <inc/dlib/eval.hpp>
7
8  inline void dlibLinear(
9      std::vector<dlib::matrix<double, 5, 1>> trainData,
10     std::vector<dlib::matrix<double, 5, 1>> testData,
11     std::vector<double> trainLabels,
12     std::vector<double> testLabels)
13 {
14     using namespace dlib;
15     // utworzenie oraz konfiguracja trenera i jądra
16     using linearKernel = linear_kernel<matrix<double, 5, 1>>;
17     krr_trainer<linearKernel> trainer;
18     trainer.set_kernel(linearKernel());
19     // trening
20     decision_function<linearKernel> model = trainer.train(
21         trainData, trainLabels);
22     // ewaluacja
23     std::cout << "-----Dlib_Linear-----" << std::endl;
24     std::cout << "Train_data:" << std::endl;
25     auto predictions = std::vector<double>(trainData.size());
26     for (auto& sample : trainData)
27     {
28         predictions.emplace_back(model(sample));
29     }
30     dlibEval(predictions, trainLabels, Task::REGRESSION);
31     predictions.clear();
32     std::cout << "Test_data:" << std::endl;
33     for (auto& sample : testData)
34     {
35         predictions.emplace_back(model(sample));
36     }
37     dlibEval(predictions, testLabels, Task::REGRESSION);
38 }
```

6.4.2. Maszyna wektorów nośnych

W celu realizacji wieloklasowej klasyfikacji z użyciem maszyny wektorów nośnych, biblioteka Dlib oferuje klasę funkcji decyzyjnej `dlib::one_vs_one_decision_function`. Przechowuje ona wynikowy model uczenia algorytmem maszyny wektorów nośnych, zawarty w klasie `one_versus_one`, do której przesłany zostaje trener SVM. Dokładny sposób użycia został przedstawiony na listingu 6.7.

Listing 6.7. Przykład użycia maszyny wektorów nośnych w Dlib.

```

1  #pragma once
2
3  #include <dlib/matrix.h>
4  #include <dlib/svm_threaded.h>
5  #include <inc/dlib/eval.hpp>
6  #include <vector>
7
8  inline void dlibSVM(
9      std::vector<dlib::matrix<double, 11, 1>> trainData,
10     std::vector<dlib::matrix<double, 11, 1>> testData,
11     std::vector<double> trainLabels,
12     std::vector<double> testLabels)
13 {
14     using namespace dlib;
15     using OVOTrainer = one_vs_one_trainer<any_trainer<matrix<double, 11, 1>>>;
16     using Kernel = radial_basis_kernel<matrix<double, 11, 1>>;
17     // utworzenie trenera maszyny wektorów nośnych
18     svm_nu_trainer<Kernel> svmTrainer;
19     svmTrainer.set_kernel(Kernel(0.1));
20     // utworzenie trenera klasyfikatora wieloklasowego
21     OVOTrainer trainer;
22     trainer.set_trainer(svmTrainer);
23     // utworzenie modelu
24     one_vs_one_decision_function<OVOTrainer> model =
25         trainer.train(trainData, trainLabels);
26     // ewaluacja
27     std::cout << "-----Dlib_SVM-----" << std::endl;
28     std::cout << "Train_data:" << std::endl;
29     auto predictions = std::vector<double>(trainData.size());
30     for (auto& sample : trainData)
31     {
32         predictions.emplace_back(model(sample));
33     }
34     dlibEval(predictions, trainLabels, Task::CLASSIFICATION);
35     predictions.clear();
36     std::cout << "Test_data:" << std::endl;
37     for (auto& sample : testData)
38     {
39         predictions.emplace_back(model(sample));
40     }
41     dlibEval(predictions, testLabels, Task::CLASSIFICATION);
42 }

```

6.4.3. Sieci neuronowe

Konstrukcja sieci neuronowej w przypadku biblioteki Dlib rozpoczyna się od zdefiniowania architektury sieci, za pomocą odpowiedniego łańcucha szablonów. Parametry tworzą sieć w kolejności od najbardziej zagnieżdżonego do najbardziej zewnętrznego. Dlib zapewnia użytkownikowi rozdzielność typu warstwy od jej funkcji aktywacji, w związku z czym użytkownik może dokładnie dostosować działanie sieci. Niestety, sama składnia tworzonej architektury jest przez to zaciemniona, co utrudnia jej analizę. Po utworzeniu architektury, należy przygotować i skonfigurować solver. Najpopularniejszym z oferowanych przez bibliotekę jest algorytm stochastycznego spadku gradientowego, zaimplementowanego w postaci klasy `dlib::sgd`. Trzeci krok stanowi konfiguracja trenera głębokich sieci neuronowych, oferowanego przez klasę `dlib::dnn_trainer`, poprzez ustawienie parametrów takich jak:

- współczynnik uczenia;
- współczynnik zmiany szybkości uczenia;
- rozmiar porcji wsadowych;
- maksymalna liczba epok.

Obiekt trenera w trakcie jego tworzenia przyjmuje referencję do architektury sieci oraz do obiektu solvera. Proces nauki odbywa się poprzez wywołanie funkcji `train()`, natomiast wynikowy model zapisany zostaje w obiekcie architektury sieci. Listing 6.8 przedstawia przykład budowy sieci neuronowej z wykorzystaniem niniejszej biblioteki.

Listing 6.8. Przykład sieci neuronowej w Dlib.

```
1 #pragma once
2
3 #include <dlib/dnn.h>
4 #include <dlib/matrix.h>
5
6 #include <inc/dlib/eval.hpp>
7
8 #include <vector>
9
10 inline void dlibNeural(
11     std::vector<dlib::matrix<double>> trainData,
12     std::vector<dlib::matrix<double>> testData,
13     std::vector<double> trainLabels,
14     std::vector<double> testLabels)
15 {
16     using namespace dlib;
17     // zdefiniowanie architektury sieci
18     using Architecture = loss_mean_squared<fc <1,
19         htan<fc<5,
20         htan<fc<5,
21         input<matrix<double>>>>>>>>;
22     // utworzenie sieci
23     Architecture model;
24     // utworzenie i konfiguracja algorytmu optymalizacji
```

```

25     float weightDecay = 0.0001f;
26     float momentum = 0.5f;
27     sgd solver(weightDecay, momentum);
28     // utworzenie i konfiguracja trenera
29     dnn_trainer<Architecture> trainer(model, solver);
30     trainer.set_learning_rate(0.1);
31     trainer.set_learning_rate_shrink_factor(1);
32     trainer.set_mini_batch_size(64);
33     trainer.set_max_num_epochs(100);
34     trainer.be_verbose();
35     // trenowanie
36     trainer.train(trainData, trainLabels);
37     model.clean();
38     // ewaluacja
39     std::cout << "-----Dlib Neural-----" << std::endl;
40     std::cout << "Train data:" << std::endl;
41     auto predictions = model(trainData);
42     dlibEval(predictions, trainLabels, Task::CLASSIFICATION);
43
44     std::cout << "Test data:" << std::endl;
45     predictions = model(testData);
46     dlibEval(predictions, testLabels, Task::CLASSIFICATION);
47 }

```

6.4.4. Brzegowa regresja jądrowa

Przygotowanie wieloklasowego modelu grzbietowej regresji jądrowej (ang. *Kernel Ridge Regression*) w przypadku biblioteki Dlib wygląda prawie identycznie do sposobu realizacji wieloklasowej maszyny wektorów nośnych. Główną różnicą jest wykorzystany trener podstawowy, w tym wypadku stanowiący obiekt klasy `dlib::krr_trainer`. Możliwe jest także wykorzystanie tego samego typu jądra, co w przypadku maszyny wektorów nośnych. Listing 6.9 obrazuje szczegółowy sposób przygotowania modelu.

Listing 6.9. Przykład użycia brzegowej regresji jądra w Dlib.

```

1  #pragma once
2
3  #include <dlib/matrix.h>
4  #include <dlib/svm_threaded.h>
5
6  #include <inc/dlib/eval.hpp>
7
8  #include <vector>
9
10 inline void dlibKRR(
11     std::vector<dlib::matrix<double>> trainData,
12     std::vector<dlib::matrix<double>> testData,
13     std::vector<double> trainLabels,
14     std::vector<double> testLabels)
15 {
16     using namespace dlib;
17
18     using OVOTrainer = one_vs_one_trainer<any_trainer<double>>;
19     using Kernel = radial_basis_kernel<double>;
20     // utworzenie trenera maszyny wektorów nośnych

```



```

21     krr_trainer<Kernel> krrTrainer;
22     krrTrainer.set_kernel(Kernel(0.1));
23     // utworzenie trenera klasyfikatora wieloklasowego
24     OVOTrainer trainer;
25     trainer.set_trainer(krrTrainer);
26     // utworzenie modelu
27     one_vs_one_decision_function<OVOTrainer> model =
28         trainer.train(trainData, trainLabels);
29     // ewaluacja
30     std::cout << "-----Dlib_KRR-----" << std::endl;
31     std::cout << "Train_data:" << std::endl;
32     auto predictions = std::vector<double>(trainData.size());
33     for (auto& sample : trainData)
34     {
35         predictions.emplace_back(model(sample));
36     }
37     dlibEval(predictions, trainLabels, Task::CLASSIFICATION);
38     predictions.clear();
39     std::cout << "Test_data:" << std::endl;
40     for (auto& sample : testData)
41     {
42         predictions.emplace_back(model(sample));
43     }
44     dlibEval(predictions, testLabels, Task::CLASSIFICATION);
45 }

```

6.5. Metody analizy modeli

6.5.1. Pole pod wykresem krzywej charakterystycznej odbiornika

Biblioteka Dlib posiada implementację funkcji wyznaczającej krzywą ROC, jednak wymaga ona pewnego przetwarzania danych przed i po jej użyciu. W celu jej zastosowania należy podzielić dane sklasyfikowane prawidłowo i nieprawidłowo. Wynikiem funkcji jest wektor zawierający współrzędne poszczególnych punktów krzywej charakterystycznej odbiornika, które pozwalają na narysowanie wykresu na płaszczyźnie. Obliczenie wartości pola pod wykresem należy dokonać ręcznie, wykorzystując np. jedną z metod całkowania numerycznego. Listing 6.10 przedstawia funkcję wyznaczającą wartości predykcji modelu, w tym obliczenie wartości pola pod wykresem krzywej charakterystycznej odbiornika dla zadania klasyfikacji, wykonując całkowanie numeryczne z użyciem metody trapezów.

Listing 6.10. Obliczenie pola pod wykresem funkcji ROC dla Dlib.

```

1  #pragma once
2
3  #include <cmath>
4  #include <dlib/statistics.h>
5
6  enum class Task
7  {
8      CLASSIFICATION,
9      REGRESSION

```

```

10 };
11
12 inline void dlibEval(std::vector<double> predictions,
13                     std::vector<double> labels,
14                     Task task)
15 {
16     using namespace dlib;
17
18     if (task == Task::CLASSIFICATION)
19     {
20         // przygotowanie kontenerów na podzielone dane
21         std::vector<double> correct;
22         std::vector<double> incorrect;
23         // przygotowanie wartości detektora
24         constexpr double positiveDetectionScore = 0.75;
25         constexpr double negativeDetectionScore = 0.25;
26         // podział danych
27         for (int i = 0; i < predictions.size() && i < labels.size(); ++i)
28         {
29             if (predictions[i] == labels[i])
30                 correct.emplace_back(positiveDetectionScore);
31             else
32                 incorrect.emplace_back(negativeDetectionScore);
33         }
34         // obliczenie krzywej roc
35         auto roc = compute_roc_curve(correct, incorrect);
36         // obliczenie pola pod wykresem roc
37         double aucRoc = 0.0;
38         for (int i = 0; i < roc.size() - 1; i++)
39         {
40             if (roc[i+1].false_positive_rate != 0.0)
41             {
42                 aucRoc += (roc[i].true_positive_rate + roc[i+1].true_positive_rate)
43                     * (roc[i+1].false_positive_rate - roc[i].false_positive_rate) / 2;
44             }
45         }
46         std::cout << "AUC_ROC: " << aucRoc << std::endl;
47     }
48     else
49     {
50         // obliczenie sumy kwadratów różnic
51         auto sum = 0.0;
52         for (int i = 0; i < predictions.size() && i < labels.size(); ++i)
53         {
54             sum += pow(labels[i] - predictions[i], 2);
55         }
56         // obliczenie błędu średniokwadratowego
57         auto mse = sqrt(sum / predictions.size());
58         std::cout << "MSE: " << mse << std::endl;
59     }
60 }

```

6.5.2. K-krotny sprawdzian krzyżowy

Przeprowadzenie sprawdzianu krzyżowego z wykorzystaniem biblioteki Dlib stanowi złożony proces. Jest on realizowany wielofazowo, rozpoczynając od zdefinio-

wania własnej funkcji obliczającej interesujący użytkownika wynik metryki sprawdzianu, w oparciu o funkcję `dlib::cross_validate_regression_trainer()`. Zewnętrzna część ustalania docelowych wartości hiperparametrów dokonywana jest przez funkcję `dlib::find_min_global()` przyjmującą adres stworzonej funkcji optymalizacyjnej, kontenery przechowujące informacje o minimalnych i maksymalnych dopuszczalnych wartościach poszczególnych hiperparametrów, oraz liczbę dozwolonych wywołań funkcji optymalizacyjnej. Aby odczytać wynikowe wartości, należy sięgnąć do kolejnych pól składowej x zwróconej przez funkcję `find_min_global()` struktury. Szczegóły zostały zaprezentowane w oparciu o przykład z podręcznika [3] na listingu 6.11.

Listing 6.11. Przykład realizacji sprawdzianu krzyżowego.

```

1  #pragma once
2  #include <dlib/global_optimization.h>
3  #include <dlib/matrix.h>
4  #include <dlib/svm.h>
5  #include <cmath>
6
7  inline void dlibCrossValidate(std::vector<dlib::matrix<double>> data,
8                               std::vector<double> labels)
9  {
10     using namespace dlib;
11     // podział danych
12     auto dataSplit = data.begin() + data.size() * 0.8;
13     auto trainData = std::vector<matrix<double>>(
14         data.begin(), dataSplit);
15     auto testData = std::vector<matrix<double>>(
16         dataSplit, data.end());
17     auto labelSplit = labels.begin() + labels.size() * 0.8;
18     auto trainLabels = std::vector<matrix<double>>(
19         labels.begin(), labelSplit);
20     auto testLabels = std::vector<matrix<double>>(
21         labelSplit, labels.end());
22     // utworzenie funkcji sprawdzianu krzyżowego
23     auto crossValidationScore = [&](const double gamma, const double c,
24                                     const double degreeIn)
25     {
26         using namespace dlib;
27
28         auto degree = std::floor(degreeIn);
29         // zdefiniowanie jądra
30         using Kernel = polynomial_kernel<double>;
31         // przygotowanie i konfiguracja trenera
32         svr_trainer<Kernel> trainer;
33         trainer.set_kernel(Kernel(gamma, c, degree));
34         // obliczenie metryk sprawdzianu krzyżowego
35         matrix<double> result = cross_validate_regression_trainer(
36             trainer, trainData, trainLabels, 10);
37         // zwrócenie metryki błędu średniokwadratowego
38         return result(0, 0);
39     }
40     // przeprowadzenie sprawdzianu
41     auto result = find_min_global(
42         crossValidationScore,
43         {0.01, 1e-8, 5}, // wartości minimalne

```

```
44         {0.1, 1, 15},    // wartości maksymalne
45         max_function_calls(50));
46 // odczytanie ustalonych wartości hiperparametrów
47 auto gamma = result.x(0);
48 auto c = result.x(1);
49 auto degree = result.x(2);
50 // utworzenie modelu w oparciu o ustalone hiperparametry
51 using Kernel = polynomial_kernel<double>;
52 svr_trainer<Kernel> trainer;
53 trainer.set_kernel(Kernel(gamma, c, degree));
54 auto model = trainer.train(trainData, trainLabels);
55 // ewaluacja
56 std::cout << "-----Dlib_CrossValidated_SVM-----" << std::endl;
57 std::cout << "Train_data:" << std::endl;
58 auto predictions = std::vector<double>(trainData.size());
59 for (auto& sample : trainData)
60 {
61     predictions.emplace_back(model(sample));
62 }
63 dlibEval(predictions, trainLabels, Task::REGRESSION);
64 predictions.clear();
65 std::cout << "Test_data:" << std::endl;
66 for (auto& sample : testData)
67 {
68     predictions.emplace_back(model(sample));
69 }
70 dlibEval(predictions, testLabels, Task::REGRESSION);
71 }
```

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 pracy [3]. 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 nawigacja po stronie projektu jest lekko utrudniona przez obecność potencjalnie nieinteresujących użytkownika elementów.

Rozdział 7

Zestawienie zbiorcze i podsumowanie

7.1. Oferowane funkcjonalności

Omówione w ramach niniejszej pracy biblioteki różnią się typem i liczbą oferowanych funkcjonalności. Tabela 7.1 zbiorczo podsumowuje poszczególne omówione w poprzednich rozdziałach aspekty.

Funkcjonalność	Biblioteka		
	Shogun	Shark-ML	Dlib
Odczyt danych	std::vector, wsparcie dla formatu CSV	surowe tablice, wsparcie dla formatu CSV, wsparcie dla HTTP	std::vector, wsparcie dla formatu CSV
Normalizacja	min-max	przedział jednostkowy, jednostkowa wariancja, zerowa średnia i wybrana wariancja	standaryzacja
Redukcja wymiarowości	PCA, Kernel PCA, MDS, IsoMap, ICA, Factor analysis, t-SNE	PCA, Liniowa analiza dyskryminacyjna	PCA, Liniowa analiza dyskryminacyjna, Mapowanie Sammona
Regularyzacja	L1 i L2 automatyczna	L1 i L2	L2
Regresja liniowa	Tak	Tak	Tak

Regresja logistyczna	Tak	Tak	Nie
Maszyna wektorów nośnych	Tak	Tak	Tak
Algorytm K-najbliższych sąsiadów	Tak	Tak	Nie
Algorytm zbiorowy	Wzmacnianie gradientu, losowy las	Losowy las	Nie
Sieć neuronowa	Tak	Tak	Tak
Jądrowa regresja grzbietowa	Nie	Nie	Tak
Błąd średniokwadratowy	Tak	Tak	Nie
Średni błąd bezwzględny	Tak	Tak	Nie
Błąd typu zero-jeden	Nie	Tak	Nie
Błąd dyskretny	Nie	Tak	Nie
Entropia krzyżowa	Nie	Tak	Nie
Kawałkami liniowa funkcja straty	Nie	Tak	Nie
Średnio-kwadratowy błąd typu kawałkami liniowej funkcji straty	Nie	Tak	Nie
Kawałkami liniowa funkcja straty typu epsilon	Nie	Tak	Nie
Średnio-kwadratowy błąd kawałkami liniowej funkcji straty typu epsilon	Nie	Tak	Nie

Funkcja straty Hubera	Nie	Tak	Nie
Funkcja straty Tukeya	Nie	Tak	Nie
Logarytmiczna funkcja straty	Tak	Nie	Nie
Metryka R^2	Tak	Tak	Nie
Dokładność	Tak	Nie	Tak
Pole pod wykresem ROC	Tak	Tak	Tak*
Sprawdzian krzyżowy k-krotny	Tak	Tak	Tak

Tabela 7.1. Zbiorcze porównanie funkcjonalności bibliotek

* - konieczność przeliczenia pola na podstawie uzyskanych punktów pomiarowych wykresu funkcji.

Analizując dane zebrane w tabeli 7.1 można zauważyć, że biblioteki Shogun oraz Shark-ML są bardzo zbliżone do siebie typem i liczbą dostępnych metod uczenia maszynowego, jednak Shark-ML posiada więcej rodzajów błędów możliwych do wykorzystania jako funkcje strat, pozwalając na większą swobodę względem dostosowywania procesu uczenia. Najmniejszą liczbą funkcjonalności charakteryzuje się biblioteka Dlib, posiadająca jedynie podzbiór algorytmów dostępnych w innych projektach. Ponadto, posiada ona bardzo ubogie możliwości analizy sprawności modeli, wymagając od użytkownika napisania własnych procedur przetwarzania uzyskanych danych, jak np. procedura obliczania pola pod wykresem krzywej charakterystycznej odbiornika.

7.2. Porównanie wyników dla zadanych przykładów

W celu przetestowania sprawności poszczególnych bibliotek, użyto ich do stworzenia i ewaluacji modeli regresji liniowej oraz maszyny wektorów nośnych dla zestawów danych opisanych w rozdziale 3. Dla każdego modelu użyto 80% zestawu danych w celu treningu, oraz pozostałe 20% jako dane testowe. Tabela 7.2 przedstawia zbiorcze zestawienie uzyskanych wyników ewaluacji. Wyjście programów zostało zaprezentowane na rysunkach 7.1, 7.2 oraz ??.

Biblioteka	Metoda uczenia maszynowego	
	Regresja liniowa	Maszyna wektorów nośnych

Shogun	Dane treningowe: $MSE = 0,903031$; $R^2 = 0,407058$ Dane testowe: $MSE = 1,26897$; $R^2 = -0.127851$	Dane treningowe: AUC ROC: 1 Dane testowe: AUC ROC: 0,5
Shark	Dane treningowe: $MSE = 0,38728$; $R^2 = 0,745707$ Dane testowe: $MSE = 0,449118$; $R^2 = 0,60082$	Dane treningowe: AUC ROC: 1 Dane testowe: AUC ROC: 0,5
Dlib		

```

----- Shogun Linear -----
Train data:
MSE = 0.903031
R^2 = 0.407058

Test data:
MSE = 1.26897
R^2 = -0.127851

----- Shogun SVM -----
Train:
AUC ROC = 1
Test:
AUC ROC = 0.5

```

Rysunek 7.1. Wynik działania programu dla biblioteki Shogun

```

----- Shark Linear -----
Train data:
MSE: 0.38728
R^2: 0.745707
Test data:
MSE: 0.449118
R^2: 0.600826
Test1
-----Shark SVM-----
Train data:
OpenBLAS Warning : Detect
.
OpenBLAS Warning : Detect
.
OpenBLAS Warning : Detect
.
OpenBLAS Warning : Detect
.
ROC: 1
Test data:
ROC: 0.5

```

Rysunek 7.2. Wynik działania programu dla biblioteki Shark

DOPISAC DALEJ !!!!!

7.3. Wymagany nakład pracy i jakość źródeł

W procesie pracy z poszczególnymi bibliotekami zauważono, że najmniejszą ilością potrzebnego wkładu pracy charakteryzowała się biblioteka Shark-ML. Wynika to z bardzo przyjaznej dla użytkownika składni, oraz dokładnej dokumentacji dostępnej na stronie internetowej projektu, wraz z przykładami wykorzystania poszczególnych metod. Biblioteka także bez jakichkolwiek problemów została zbudowana i zainstalowana na systemie operacyjnym Ubuntu 22.04 w środowisku WSL, pozwalając bardzo szybko przejść do docelowej pracy.

Drugą biblioteką pod względem koniecznego wkładu czasu okazał się zestaw narzędziowy Dlib. Posiada on stronę projektu z wylistowanymi klasami oraz funkcjami dostępnymi w bibliotece, jednak opis działania poszczególnych metod jest bardzo pobieżny, oraz brakuje dostępnych przykładów. Składnia biblioteki może stanowić

wyzwanie dla użytkownika, gdyż nie zawsze jest oczywista, i momentami utrudnia analizę realizowanych przez program operacji.

Jako najbardziej wymagającą bibliotekę uznano Shogun. W chwili pisania niniejszej pracy, zarówno oficjalne repozytorium projektu jak i repozytorium dystrybucji dla systemu operacyjnego Ubuntu okazało się być niekompletne. Uniemożliwiło to zainstalowanie biblioteki za pomocą wbudowanego menedżera pakietów oraz zbudowanie jej ze względu na nienaprawione zależności do przeniesionych repozytoriów stron trzecich. Mimo przyjaźniejszej składni niż w przypadku Dlib, wspomniany wcześniej mankament sprawia, że w celu pobrania biblioteki konieczne okazało się zainstalowanie specjalnego menedżera pakietów *nix* posiadającego starszą wersję projektu Shogun dostępną na swoim repozytorium. Z racji braku dostępnej online dokumentacji projektu Shogun oraz faktu, że generowane przykłady nie odnoszą się do API biblioteki lecz używają jej w kompletnie odrębny, nienaturalny dla projektu sposób, ustalenie funkcjonalności oraz sposobu realizacji poszczególnych zadań uczenia maszynowego musiało zostać oparte praktycznie wyłącznie o materiały dostępne w formie książkowej. Znacznie utrudnia i wydłuża to proces zastosowania biblioteki do jakiegokolwiek projektu.

Bibliografia

- [1] Owczarek M. “Charakterystyka systemów ekspertowych i ich zastosowanie w medycynie”. W: *Mikroelektronika i informatyka - prace naukowe* 5 (2005), s. 197 –202. URL: <http://yadda.icm.edu.pl/yadda/element/bwmeta1.element.baztech-article-L0D4-0002-0067>.
- [2] Google. *TensorFlow - API Documentation*. 2013. URL: https://www.tensorflow.org/api_docs.
- [3] Kirill Kolodiaznyi. *Hands-On Machine Learning with C++*. Packt Publishing, Maj 2020.
- [4] Ayman Mahmoud. *Introduction to Shallow Machine Learning*. 2019. URL: <https://www.linkedin.com/pulse/introduction-shallow-machine-learning-ayman-mahmoud/>.
- [5] Prashant Gupta. *Decision Trees in Machine Learning*. 2017. URL: <https://towardsdatascience.com/decision-trees-in-machine-learning-641b9c4e8052>.
- [6] Larry Hardesty. *Explained: Neural Networks - Ballyhooed artificial-intelligence technique known as „deep learning” revives 70-years-old idea*. 2017. URL: <https://news.mit.edu/2017/explained-neural-networks-deep-learning-0414>.
- [7] Raghuram Madabushi. *Neural Network / Machine Learning in resource constrained environments*. 2018. URL: <https://medium.com/@raghu.madabushi/neural-network-machine-learning-in-resource-constrained-environments-c934ff1f522>.
- [8] Data Flair. *Features of C++ / How Programmers use C++ in 10 Unbelievable ways*. 2023. URL: <https://data-flair.training/blogs/features-of-c-plus-plus/>.
- [9] Edytorzy dokumentacji systemu Android. *Neural Networks API*. 2023. URL: <https://developer.android.com/ndk/guides/neuralnetworks>.
- [10] nVidia. *CUDA C++ Programming Guide*. 2023. URL: <https://docs.nvidia.com/cuda/cuda-c-programming-guide/index.html>.
- [11] ONNX Runtime Team. *Get started with ORT for C++*. 2023. URL: <https://onnxruntime.ai/docs/get-started/with-c.html>.
- [12] 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)).

- [13] Dheeru Dua i Casey Graff. *UCI Machine Learning Repository*. 2017. URL: <http://archive.ics.uci.edu/ml>.
- [14] Trevor Bihl. *Biostatistics Using JMP: A Practical Guide*. Cary, NC: SAS Institute Inc., 2017.
- [15] JMP Statistical Discovery. *JMP Pro - Predictive analytics software for scientists and engineers*. 2023. URL: https://www.jmp.com/en_nl/software/predictive-analytics-software.html.
- [16] Stephen Lower. *Arrhenius Equation*. 2023. URL: [https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Supplemental_Modules_\(Physical_and_Theoretical_Chemistry\)/Kinetics/06%3A_Modeling_Reaction_Kinetics/6.02%3A_Temperature_Dependence_of_Reaction_Rates/6.2.03%3A_The_Arrhenius_Law/6.2.3.01%3A_Arrhenius_Equation](https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Supplemental_Modules_(Physical_and_Theoretical_Chemistry)/Kinetics/06%3A_Modeling_Reaction_Kinetics/6.02%3A_Temperature_Dependence_of_Reaction_Rates/6.2.03%3A_The_Arrhenius_Law/6.2.3.01%3A_Arrhenius_Equation).
- [17] shogun toolbox. *Shogun*. 2020. URL: <https://github.com/shogun-toolbox/shogun>.
- [18] Christian Igel, Verena Heidrich-Meisner i Tobias Glasmachers. “Shark”. W: *Journal of Machine Learning Research* 9 (2008), s. 993–996.
- [19] mlcpp. *Classification with Shark-ML machine learning library*. 2018. URL: https://github.com/Kolkir/mlcpp/tree/master/classification_shark.
- [20] The Shark developer team. *Neuron activation functions*. 2018. URL: https://www.shark-ml.org/doxygen_pages/html/group__activations.html.
- [21] 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.
- [22] The Shark developer team. *Shark - Machine Learning*. 2018. URL: <https://www.shark-ml.org/>.
- [23] Davis E. King. “Dlib-ml: A Machine Learning Toolkit”. W: *Journal of Machine Learning Research* 10 (2009), s. 1755–1758.
- [24] Dlib team. *Dlib License*. 2003. URL: <http://dlib.net/license.html>.
- [25] Data Farmers. *Sammon Mapping - A non-linear mapping for data visualisation*. 2019. URL: <https://data-farmers.github.io/2019-06-10-sammon-mapping/>.