Sebastian Raschka, Vahid Mirjalili

Python

Machine learning i deep learning

Biblioteki scikit-learn i TensorFlow 2

Tytuł oryginału: Python Machine Learning: Machine Learning and Deep Learning with Python, scikit-learn, and TensorFlow 2, 3rd Edition

Tłumaczenie: Krzysztof Sawka

ISBN: 978-83-283-7001-2

Copyright © Packt Publishing 2019. First published in the English language under the title 'Python Machine Learning - Third Edition – (9781789955750)'

Polish edition copyright © 2021 by Helion SA

All rights reserved. No part of this book may be reproduced or transmitted in any form or by any means, electronic or mechanical, including photocopying, recording or by any information storage retrieval system, without permission from the Publisher.

Wszelkie prawa zastrzeżone. Nieautoryzowane rozpowszechnianie całości lub fragmentu niniejszej publikacji w jakiejkolwiek postaci jest zabronione. Wykonywanie kopii metodą kserograficzną, fotograficzną, a także kopiowanie książki na nośniku filmowym, magnetycznym lub innym powoduje naruszenie praw autorskich niniejszej publikacji.

Wszystkie znaki występujące w tekście są zastrzeżonymi znakami firmowymi bądź towarowymi ich właścicieli.

Autor oraz Helion SA dołożyli wszelkich starań, by zawarte w tej książce informacje były kompletne i rzetelne. Nie biorą jednak żadnej odpowiedzialności ani za ich wykorzystanie, ani za związane z tym ewentualne naruszenie praw patentowych lub autorskich. Autor oraz Helion SA nie ponoszą również żadnej odpowiedzialności za ewentualne szkody wynikłe z wykorzystania informacji zawartych w książce.

Helion SA
ul. Kościuszki 1c, 44-100 Gliwice
tel. 32 231 22 19, 32 230 98 63
e-mail: *helion@helion.pl*
WWW: *http://helion.pl* (księgarnia internetowa, katalog książek)

Drogi Czytelniku!
Jeżeli chcesz ocenić tę książkę, zajrzyj pod adres
http://helion.pl/user/opinie/pythu3
Możesz tam wpisać swoje uwagi, spostrzeżenia, recenzję.

Printed in Poland.

• Kup książkę
• Poleć książkę
• Oceń książkę

• Księgarnia internetowa
• Lubię to! » Nasza społeczność

Spis treści

Informacje o autorach 13

Informacje o recenzentach 15

Wstęp 17

Rozdział 1. Umożliwianie komputerom uczenia się z danych 27

Tworzenie inteligentnych maszyn służących do przekształcania danych w wiedzę 28
Trzy różne rodzaje uczenia maszynowego 28
Przewidywanie przyszłości za pomocą uczenia nadzorowanego 29
Rozwiązywanie problemów interaktywnych za pomocą uczenia przez wzmacnianie 32
Odkrywanie ukrytych struktur za pomocą uczenia nienadzorowanego 33
Wprowadzenie do podstawowej terminologii i notacji 35
Notacja i konwencje używane w niniejszej książce 35
Terminologia uczenia maszynowego 37
Strategia tworzenia systemów uczenia maszynowego 38
Wstępne przetwarzanie — nadawanie danym formy 38
Trenowanie i dobór modelu predykcyjnego 39
Ewaluacja modeli i przewidywanie wystąpienia nieznanych danych 40
Wykorzystywanie środowiska Python do uczenia maszynowego 40
Instalacja środowiska Python i pakietów z repozytorium Python Package Index 41
Korzystanie z platformy Anaconda i menedżera pakietów 41
Pakiety przeznaczone do obliczeń naukowych, analizy danych i uczenia maszynowego 42
Podsumowanie 42

Kup ksi k Pole ksi k

Rozdział 2. Trenowanie prostych algorytmów uczenia maszynowego w celach klasyfikacji 45

Sztuczne neurony — rys historyczny początków uczenia maszynowego 46
Definicja formalna sztucznego neuronu 47
Reguła uczenia perceptronu 49
Implementacja algorytmu uczenia perceptronu w Pythonie 51
Obiektowy interfejs API perceptronu 51
Trenowanie modelu perceptronu na zestawie danych Iris 54
Adaptacyjne neurony liniowe i zbieżność uczenia 60
Minimalizacja funkcji kosztu za pomocą metody gradientu prostego 61
Implementacja algorytmu Adaline w Pythonie 63
Usprawnianie gradientu prostego poprzez skalowanie cech 67
Wielkoskalowe uczenie maszynowe i metoda stochastycznego spadku wzdłuż gradientu 69
Podsumowanie 73

Rozdział 3. Stosowanie klasyfikatorów uczenia maszynowego za pomocą biblioteki scikit-learn 75

Wybór algorytmu klasyfikującego 76
Pierwsze kroki z biblioteką scikit-learn — uczenie perceptronu 76
Modelowanie prawdopodobieństwa przynależności do klasy za pomocą regresji logistycznej 82
Regresja logistyczna i prawdopodobieństwo warunkowe 82
Wyznaczanie wag logistycznej funkcji kosztu 86
Przekształcanie implementacji Adaline do postaci algorytmu regresji logistycznej 88
Uczenie modelu regresji logistycznej za pomocą biblioteki scikit-learn 92
Zapobieganie przetrenowaniu za pomocą regularyzacji 94
Wyznaczanie maksymalnego marginesu za pomocą maszyn wektorów nośnych 97
Teoretyczne podłoże maksymalnego marginesu 98
Rozwiązywanie przypadków nieliniowo rozdzielnych za pomocą zmiennych uzupełniających 99
Alternatywne implementacje w interfejsie scikit-learn 101
Rozwiązywanie nieliniowych problemów za pomocą jądra SVM 102
Metody jądrowe dla danych nierozdzielnych liniowo 102
Stosowanie sztuczki z funkcją jądra do znajdowania przestrzeni rozdzielających w przestrzeni wielowymiarowej 104
Uczenie drzew decyzyjnych 107
Maksymalizowanie przyrostu informacji — osiąganie jak największych korzyści 108
Budowanie drzewa decyzyjnego 112
Łączenie wielu drzew decyzyjnych za pomocą modelu losowego lasu 115
Algorytm k-najbliższych sąsiadów — model leniwego uczenia 119
Podsumowanie 122

Rozdział 4. Tworzenie dobrych zestawów danych uczących — wstępne przetwarzanie danych 125

Kwestia brakujących danych 126
Wykrywanie brakujących wartości w danych tabelarycznych 126
Usuwanie przykładów uczących lub cech niezawierających wartości 127

Kup ksi k Pole ksi k

Wstawianie brakujących danych 128
Estymatory interfejsu scikit-learn 129
Przetwarzanie danych kategorialnych 130
Kodowanie danych kategorialnych za pomocą biblioteki pandas 131
Mapowanie cech porządkowych 131
Kodowanie etykiet klas 132
Kodowanie „gorącojedynkowe” cech nominalnych (z użyciem wektorów własnych) 133
Rozdzielanie zestawu danych na oddzielne podzbiory uczący i testowy 136
Skalowanie cech 138
Dobór odpowiednich cech 140
Regularyzacje L1 i L2 jako kary ograniczające złożoność modelu 141
Interpretacja geometryczna regularyzacji L2 141
Rozwiązania rzadkie za pomocą regularyzacji L1 143
Algorytmy sekwencyjnego wyboru cech 146
Ocenianie istotności cech za pomocą algorytmu losowego lasu 151
Podsumowanie 154

Rozdział 5. Kompresja danych poprzez redukcję wymiarowości 155

Nienadzorowana redukcja wymiarowości za pomocą analizy głównych składowych 156
Podstawowe etapy analizy głównych składowych 156
Wydobywanie głównych składowych krok po kroku 158
Wyjaśniona wariancja całkowita 160
Transformacja cech 161
Analiza głównych składowych w interfejsie scikit-learn 164
Nadzorowana kompresja danych za pomocą liniowej analizy dyskryminacyjnej 167
Porównanie analizy głównych składowych z liniową analizą dyskryminacyjną 167
Wewnętrzne mechanizmy działania liniowej analizy dyskryminacyjnej 169
Obliczanie macierzy rozproszenia 169
Dobór dyskryminant liniowych dla nowej podprzestrzeni cech 171
Rzutowanie przykładów na nową przestrzeń cech 173
Implementacja analizy LDA w bibliotece scikit-learn 174
Jądrowa analiza głównych składowych jako metoda odwzorowywania nierozdzielnych liniowo klas 176
Funkcje jądra oraz sztuczka z funkcją jądra 177
Implementacja jądrowej analizy głównych składowych w Pythonie 181
Rzutowanie nowych punktów danych 188
Algorytm jądrowej analizy głównych składowych w bibliotece scikit-learn 191
Podsumowanie 192

Rozdział 6. Najlepsze metody oceny modelu i strojenie parametryczne 195

Usprawnianie cyklu pracy za pomocą kolejkowania 195
Wczytanie zestawu danych Breast Cancer Wisconsin 196
Łączenie funkcji transformujących i estymatorów w kolejce czynności 197
Stosowanie k-krotnego sprawdzianu krzyżowego w ocenie skuteczności modelu 198
Metoda wydzielania 199
K-krotny sprawdzian krzyżowy 200

Kup ksi k
Pole ksi k

Sprawdzanie algorytmów za pomocą krzywych uczenia i krzywych walidacji **204**
Diagnozowanie problemów z obciążeniem i wariancją za pomocą krzywych uczenia 204
Rozwiązywanie problemów przetrenowania i niedotrenowania za pomocą krzywych walidacji 208
Dostrajanie modeli uczenia maszynowego za pomocą metody przeszukiwania siatki **209**
Strojenie hiperparametrów przy użyciu metody przeszukiwania siatki 210
Dobór algorytmu poprzez zagnieżdżony sprawdzian krzyżowy 211
Przegląd wskaźników oceny skuteczności **213**
Odczytywanie macierzy pomyłek 213
Optymalizacja precyzji i pełności modelu klasyfikującego 215
Wykres krzywej ROC 217
Wskaźniki zliczające dla klasyfikacji wieloklasowej 220
Kwestia dysproporcji klas 220
Podsumowanie **223**

Rozdział 7. Łączenie różnych modeli w celu uczenia zespołowego 225

Uczenie zespołów **225**
Łączenie klasyfikatorów za pomocą algorytmu głosowania większościowego **229**
Implementacja prostego klasyfikatora głosowania większościowego 230
Stosowanie reguły głosowania większościowego do uzyskiwania prognoz 235
Ewaluacja i strojenie klasyfikatora zespołowego 237
Agregacja — tworzenie zespołu klasyfikatorów za pomocą próbek początkowych **242**
Agregacja w pigułce 243
Stosowanie agregacji do klasyfikowania przykładów z zestawu Wine 244
Usprawnianie słabych klasyfikatorów za pomocą wzmocnienia adaptacyjnego **248**
Wzmacnianie — mechanizm działania 248
Stosowanie algorytmu AdaBoost za pomocą biblioteki scikit-learn 252
Podsumowanie **255**

Rozdział 8. Wykorzystywanie uczenia maszynowego w analizie sentymentów 257

Przygotowywanie zestawu danych IMDb movie review do przetwarzania tekstu **258**
Uzyskiwanie zestawu danych IMDb 258
Przetwarzanie wstępne zestawu danych IMDb do wygodniejszego formatu 259
Wprowadzenie do modelu worka słów **260**
Przekształcanie słów w wektory cech 261
Ocena istotności wyrazów za pomocą ważenia częstości termów — odwrotnej częstości w tekście 262
Oczyszczanie danych tekstowych 264
Przetwarzanie tekstu na znaczniki 266
Uczenie modelu regresji logistycznej w celu klasyfikowania tekstu **268**
Praca z większą ilością danych — algorytmy sieciowe i uczenie pozardzeniowe **270**
Modelowanie tematyczne za pomocą alokacji ukrytej zmiennej Dirichleta **273**
Rozkładanie dokumentów tekstowych za pomocą analizy LDA 274
Analiza LDA w bibliotece scikit-learn 274
Podsumowanie **277**

Kup ksi k Pole ksi k

Rozdział 9. Wdrażanie modelu uczenia maszynowego do aplikacji sieciowej 279

Serializacja wyuczonych estymatorów biblioteki scikit-learn 280
Konfigurowanie bazy danych SQLite 283
Tworzenie aplikacji sieciowej za pomocą środowiska Flask 285
Nasza pierwsza aplikacja sieciowa 285
Sprawdzanie i wyświetlanie formularza 287
Przekształcanie klasyfikatora recenzji w aplikację sieciową 293
Pliki i katalogi — wygląd drzewa katalogów 295
Implementacja głównej części programu w pliku app.py 296
Konfigurowanie formularza recenzji 298
Tworzenie szablonu strony wynikowej 299
Umieszczanie aplikacji sieciowej na publicznym serwerze 301
Tworzenie konta w serwisie PythonAnywhere 301
Przesyłanie aplikacji klasyfikatora filmowego 302
Aktualizowanie klasyfikatora recenzji filmowych 303
Podsumowanie 305

Rozdział 10. Przewidywanie ciągłych zmiennych docelowych za pomocą analizy regresywnej 307

Wprowadzenie do regresji liniowej 308
Prosta regresja liniowa 308
Wielowymiarowa regresja liniowa 308
Zestaw danych Housing 310
Wczytywanie zestawu danych Housing do obiektu DataFrame 310
Wizualizowanie ważnych elementów zestawu danych 312
Analiza związków za pomocą macierzy korelacji 313
Implementacja modelu regresji liniowej wykorzystującego zwykłą metodę najmniejszych kwadratów 315
Określanie parametrów regresywnych za pomocą metody gradientu prostego 316
Szacowanie współczynnika modelu regresji za pomocą biblioteki scikit-learn 319
Uczenie odpornego modelu regresywnego za pomocą algorytmu RANSAC 321
Ocenianie skuteczności modeli regresji liniowej 324
Stosowanie regularyzowanych metod regresji 327
Przekształcanie modelu regresji liniowej w krzywą — regresja wielomianowa 329
Dodawanie członów wielomianowych za pomocą biblioteki scikit-learn 329
Modelowanie nieliniowych zależności w zestawie danych Housing 331
Analiza nieliniowych relacji za pomocą algorytmu losowego lasu 334
Regresja przy użyciu drzewa decyzyjnego 334
Regresja przy użyciu losowego lasu 336
Podsumowanie 339

Rozdział 11. Praca z nieoznakowanymi danymi — analiza skupień 341

Grupowanie obiektów na podstawie podobieństwa przy użyciu algorytmu centroidów 342
Algorytm centroidów w bibliotece scikit-learn 342
Inteligentniejszy sposób dobierania pierwotnych centroidów za pomocą algorytmu k-means++ 346
Twarda i miękka analiza skupień 347

Kup ksi k Pole ksi k

Stosowanie metody łokcia do wyszukiwania optymalnej liczby skupień 349
Ujęcie ilościowe jakości analizy skupień za pomocą wykresu profilu 351
Organizowanie skupień do postaci drzewa skupień 355
Oddolne grupowanie skupień 356
Przeprowadzanie hierarchicznej analizy skupień na macierzy odległości 357
Dołączanie dendrogramów do mapy cieplnej 360
Aglomeracyjna analiza skupień w bibliotece scikit-learn 361
Wyznaczanie rejonów o dużej gęstości za pomocą algorytmu DBSCAN 363
Podsumowanie 368

Rozdział 12. Implementowanie wielowarstwowej sieci neuronowej od podstaw 369

Modelowanie złożonych funkcji przy użyciu sztucznych sieci neuronowych 370
Jednowarstwowa sieć neuronowa — powtórzenie 371
Wstęp do wielowarstwowej architektury sieci neuronowych 373
Aktywacja sieci neuronowej za pomocą propagacji w przód 376
Klasyfikowanie pisma odręcznego 379
Zestaw danych MNIST 379
Implementacja perceptronu wielowarstwowego 385
Trenowanie sztucznej sieci neuronowej 395
Obliczanie logistycznej funkcji kosztu 395
Wyjaśnienie algorytmu wstecznej propagacji 398
Uczenie sieci neuronowych za pomocą algorytmu propagacji wstecznej 399
Zbieżność w sieciach neuronowych 402
Jeszcze słowo o implementacji sieci neuronowej 404
Podsumowanie 404

Rozdział 13. Równoległe przetwarzanie sieci neuronowych za pomocą biblioteki TensorFlow 407

Biblioteka TensorFlow a skuteczność uczenia 408
Wyzwania związane z wydajnością 408
Czym jest biblioteka TensorFlow? 409
W jaki sposób będziemy poznawać bibliotekę TensorFlow? 411
Pierwsze kroki z biblioteką TensorFlow 411
Instalacja modułu TensorFlow 411
Tworzenie tensorów w TensorFlow 412
Manipulowanie typem danych i rozmiarem tensora 413
Przeprowadzanie operacji matematycznych na tensorach 414
Dzielenie, nawarstwianie i łączenie tensorów 415
Tworzenie potoków wejściowych za pomocą tf.data, czyli interfejsu danych TensorFlow 416
Tworzenie obiektów Dataset z istniejących tensorów 417
Łączenie dwóch tensorów we wspólny zestaw danych 418
Potasuj, pogrupuj, powtórz 419
Tworzenie zestawu danych z plików umieszczonych w lokalnym magazynie dyskowym 422
Pobieranie dostępnych zestawów danych z biblioteki tensorflow_datasets 425
Tworzenie modelu sieci neuronowej za pomocą modułu TensorFlow 430
Interfejs Keras (tf.keras) 430
Tworzenie modelu regresji liniowej 431

Kup ksi k Pole ksi k

Uczenie modelu za pomocą metod .compile() i .fit() 435
Tworzenie perceptronu wielowarstwowego klasyfikującego kwiaty z zestawu danych Iris 436
Ocena wytrenowanego modelu za pomocą danych testowych 439
Zapisywanie i wczytywanie wyuczonego modelu 440
Dobór funkcji aktywacji dla wielowarstwowych sieci neuronowych 440
Funkcja logistyczna — powtórzenie 441
Szacowanie prawdopodobieństw przynależności do klas w klasyfikacji wieloklasowej za pomocą funkcji softmax 443
Rozszerzanie zakresu wartości wyjściowych za pomocą funkcji tangensa hiperbolicznego 444
Aktywacja za pomocą prostowanej jednostki liniowej (ReLU) 446
Podsumowanie 448

Rozdział 14. Czas na szczegóły — mechanizm działania biblioteki TensorFlow 449

Cechy kluczowe TensorFlow 450
Grafy obliczeniowe TensorFlow: migracja do wersji TensorFlow 2 451
Grafy obliczeniowe 451
Tworzenie grafu w wersji TensorFlow 1.x 452
Migracja grafu do wersji TensorFlow 2 453
Wczytywanie danych wejściowych do modelu: TensorFlow 1.x 453
Wczytywanie danych wejściowych do modelu: TensorFlow 2 454
Poprawianie wydajności obliczeniowej za pomocą dekoratorów funkcji 455
Obiekty Variable służące do przechowywania i aktualizowania parametrów modelu 456
Obliczanie gradientów za pomocą różniczkowania automatycznego i klasy GradientTape 460
Obliczanie gradientów funkcji straty w odniesieniu do zmiennych modyfikowalnych 460
Obliczanie gradientów w odniesieniu do tensorów niemodyfikowalnych 462
Przechowywanie zasobów na obliczanie wielu gradientów 462
Upraszczanie implementacji popularnych struktur za pomocą interfejsu Keras 463
Rozwiązywanie problemu klasyfikacji XOR 466
Zwiększenie możliwości budowania modeli za pomocą interfejsu funkcyjnego Keras 471
Implementowanie modeli bazujących na klasie Model 472
Pisanie niestandardowych warstw Keras 473
Estymatory TensorFlow 476
Praca z kolumnami cech 477
Uczenie maszynowe za pomocą gotowych estymatorów 481
Stosowanie estymatorów w klasyfikacji zestawu pisma odręcznego MNIST 484
Tworzenie niestandardowego estymatora z istniejącego modelu Keras 486
Podsumowanie 488

Rozdział 15. Klasyfikowanie obrazów za pomocą głębokich splotowych sieci neuronowych 489

Podstawowe elementy splotowej sieci neuronowej 490
Splotowe sieci neuronowe i hierarchie cech 490
Splot dyskretny 492
Warstwy podpróbkowania 501

Kup ksi k
Pole ksi k

Implementowanie sieci CNN **502**
Praca z wieloma kanałami wejściowymi/barw 503
Regularyzowanie sieci neuronowej metodą porzucania 506
Funkcje straty w zadaniach klasyfikacji 509
Implementacja głębokiej sieci splotowej za pomocą biblioteki TensorFlow **511**
Architektura wielowarstwowej sieci CNN 511
Wczytywanie i wstępne przetwarzanie danych 512
Implementowanie sieci CNN za pomocą interfejsu Keras 513
Klasyfikowanie płci na podstawie zdjęć twarzy za pomocą sieci splotowej **518**
Wczytywanie zestawu danych CelebA 519
Przekształcanie obrazów i dogenerowanie danych 520
Uczenie modelu CNN jako klasyfikatora płci 525
Podsumowanie **530**

Rozdział 16. Modelowanie danych sekwencyjnych za pomocą rekurencyjnych sieci neuronowych **533**

Wprowadzenie do danych sekwencyjnych **534**
Modelowanie danych sekwencyjnych — kolejność ma znaczenie 534
Przedstawianie sekwencji 535
Różne kategorie modelowania sekwencji 536
Sieci rekurencyjne służące do modelowania sekwencji **537**
Mechanizm zapętlania w sieciach rekurencyjnych 537
Obliczanie aktywacji w sieciach rekurencyjnych 539
Rekurencja w warstwie ukrytej a rekurenacja w warstwie wyjściowej 542
Problemy z uczeniem długofalowych oddziaływań 544
Jednostki LSTM 546
Implementowanie wielowarstwowej sieci rekurencyjnej przy użyciu biblioteki TensorFlow do modelowania sekwencji **548**
Pierwszy projekt — przewidywanie sentymentów na recenzjach z zestawu danych IMDb 548
Drugi projekt — modelowanie języka na poziomie znaków w TensorFlow 561
Przetwarzanie języka za pomocą modelu transformatora **572**
Wyjaśnienie mechanizmu samouwagi 573
Wieloblokowy mechanizm uwagi i komórka transformatora 575
Podsumowanie **577**

Rozdział 17. Generatywne sieci przeciwstawne w zadaniach syntetyzowania nowych danych **579**

Wprowadzenie do generatywnych sieci przeciwstawnych **580**
Autokodery 580
Modele generatywne syntetyzujące nowe dane 582
Generowanie nowych prób za pomocą sieci GAN 584
Funkcje straty generatora i dyskryminatora w modelu GAN 585
Implementowanie sieci GAN od podstaw **587**
Uczenie modeli GAN w środowisku Google Colab 587
Implementacja sieci generatora i dyskryminatora 590
Definiowanie zestawu danych uczących 593
Uczenie modelu GAN 595

Kup ksi k Pole ksi k

Poprawianie jakości syntetyzowanych obrazów za pomocą sieci GAN: splotowej i Wassersteina **603**
Splot transponowany 603
Normalizacja wsadowa 605
Implementowanie generatora i dyskryminatora 607
Wskaźniki odmienności dwóch rozkładów 613
Praktyczne stosowanie odległości EM w sieciach GAN 616
Kara gradientowa 617
Implementacja sieci WGAN-DP służącej do uczenia modelu DCGAN 617
Załamanie modu 622
Inne zastosowania modeli GAN **623**
Podsumowanie **624**

Rozdział 18. Uczenie przez wzmacnianie jako mechanizm podejmowania decyzji w skomplikowanych środowiskach **625**

Wprowadzenie: uczenie z doświadczenia **626**
Filozofia uczenia przez wzmacnianie 626
Definicja interfejsu agent-środowisko w systemie uczenia przez wzmacnianie 628
Podstawy teoretyczne uczenia przez wzmacnianie **629**
Procesy decyzyjne Markowa 629
Wyjaśnienie matematyczne procesów decyzyjnych Markowa 630
Terminologia uczenia przez wzmacnianie: zwrot, strategia i funkcja wartości 633
Programowanie dynamiczne za pomocą równania Bellmana 636
Algorytmy uczenia przez wzmacnianie **637**
Programowanie dynamiczne 638
Uczenie przez wzmacnianie metodą Monte Carlo 641
Uczenie metodą różnic czasowych 643
Implementacja naszego pierwszego algorytmu uczenia przez wzmacnianie **646**
Wprowadzenie do pakietu OpenAI Gym 646
Rozwiązywanie problemu świata blokowego za pomocą Q-uczenia 654
Krótko o algorytmie Q-uczenia głębokiego 658
Podsumowanie rozdziału i książki **665**

Kup ksi k Pole ksi k

ROZDZIAŁ

Trenowanie prostych algorytmów uczenia maszynowego w celach klasyfikacji

W tym rozdziale wykorzystamy dwa z najwcześniejszych algorytmów klasyfikacyjnych: modele **perceptronu** oraz **adaptacyjnego neuronu liniowego**. Zaczniemy od zaimplementowania krok po kroku perceptronu w środowisku Python oraz uczenia go klasyfikacji różnych odmian kosaćca na podstawie danych z zestawu Iris. W ten sposób lepiej zrozumiemy koncepcję algorytmów klasyfikacyjnych oraz dowiemy się, jak można je skutecznie wdrożyć za pomocą Pythona.

Następnie przyjrzymy się podstawom optymalizacji przy użyciu adaptacyjnych neuronów liniowych, gdyż stanowi to wstęp do stosowania bardziej zaawansowanych klasyfikatorów przechowywanych w bibliotece scikit-learn, co zostało omówione w rozdziale 3., „Stosowanie klasyfikatorów uczenia maszynowego za pomocą biblioteki scikit-learn".

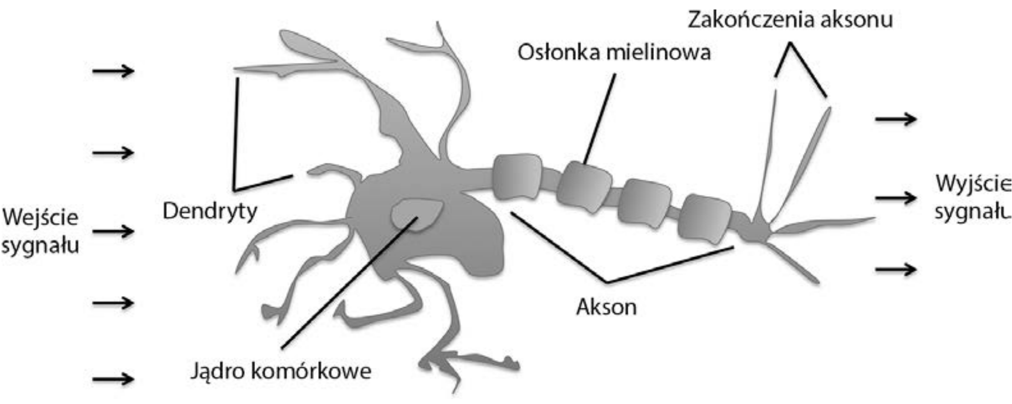
Zajmiemy się w tym rozdziale omówieniem następujących zagadnień:

- opis teoretycznych podstaw tworzenia algorytmów uczenia maszynowego,
- wykorzystanie bibliotek pandas, NumPy i Matplotlib do wczytywania, przetwarzania i wizualizowania danych,
- implementacja algorytmów liniowej klasyfikacji w środowisku Python.

Kup ksi k Pole ksi k

Sztuczne neurony — rys historyczny początków uczenia maszynowego

Zanim przejdziemy do dokładnego opisu modelu perceptronu oraz powiązanych z nim algorytmów, cofnijmy się na chwilę do początków dziedziny uczenia maszynowego. Warren McCulloch i Walter Pitts pragnęli zrozumieć mechanizm działania mózgu po to, aby zaprojektować sztuczną inteligencję, i w 1943 roku zaprezentowali pierwszą koncepcję uproszczonego modelu komórki nerwowej, tzw. **neuronu McCullocha-Pittsa** (ang. *McCulloch-Pitts neuron* — **MCP**; W.S. McCulloch i W. Pitts, *A Logical Calculus of the Ideas Immanent in Nervous Activity*, „The Bulletin of Mathematical Biophysics” 1943, nr 5 (4), s. 115 – 133). Neuronami biologicznymi nazywamy wzajemnie połączone komórki nerwowe w mózgu, które są odpowiedzialne za przetwarzanie oraz przesyłanie sygnałów chemicznych i elektrycznych, co zostało zaprezentowane na rysunku 2.1.



Rysunek 2.1. Model uproszczonego neuronu

McCulloch i Pitts opisali taką komórkę nerwową jako prostą bramkę logiczną zawierającą binarne wyjścia; do dendrytów dociera wiele sygnałów, które są integrowane w ciele komórki i, jeżeli energia impulsu przekracza określoną wartość graniczną, zostaje wygenerowany sygnał wyjściowy przepuszczany poprzez akson.

Już kilka lat później Frank Rosenblatt na podstawie modelu neuronu MCP opublikował pierwszą koncepcję reguły uczenia perceptronu (F. Rosenblatt, *The Perceptron, a Perceiving and Recognizing Automaton*, „Cornell Aeronautical Laboratory”, 1957). Korzystając z tej reguły, Rosenblatt zaproponował algorytm zdolny do automatycznego uczenia się za pomocą optymalnych współczynników wag, które są przemnażane przez wartości wejściowe, co pozwala określić, czy neuron prześle dalej sygnał. W kontekście uczenia nadzorowanego i klasyfikacji taki algorytm może być wykorzystywany do przewidywania przynależności poszczególnych punktów danych do różnych klas.

Kup ksi k Pole ksi k

Definicja formalna sztucznego neuronu

W ujęciu matematycznym możemy analizować koncepcję **sztucznych neuronów** w kontekście zadania klasyfikacji binarnej, w której dla uproszczenia odnosimy się do dwóch klas: 1 (klasy pozytywnej) oraz -1 (klasy negatywnej). Następnie definiujemy **funkcję decyzyjną** ($\phi(z)$), na którą składa się liniowa kombinacja określonych wartości wejściowych $\boldsymbol{x}$ oraz powiązanego z nimi wektora wag $\boldsymbol{w}$, gdzie z nosi nazwę całkowitego pobudzenia układu $z = w_1x_1 + w_2x_2 + \ldots + w_mx_m$:

$$\boldsymbol{w} = \begin{bmatrix} w_1 \\ \vdots \\ w_m \end{bmatrix}, \boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix}$$

Jeżeli całkowite pobudzenie z danej przykładu $\boldsymbol{x}^{(i)}$ jest wyższe od zdefiniowanej wartości progowej θ, to przewidujemy, że dany obiekt przynależy do klasy pozytywnej 1, w przeciwnym wypadku — do klasy negatywnej –1. W algorytmie perceptronu funkcja decyzyjna $\phi(\cdot)$ stanowi odmianę **funkcji skoku jednostkowego**:

$$\phi(z) = \begin{cases} 1 \text{ jeśli } z \geq \theta \\ -1 \text{ jeśli } z < \theta \end{cases}$$

Możemy dla uproszczenia przenieść wartość progową θ na lewą stronę równania i zdefiniować początkową wagę jako $w_0 = -\theta$, a $x_0 = 1$, dzięki czemu całkowite pobudzenie $\boldsymbol{z}$ przybierze prostszą postać

$$z = w_0x_0 + w_1x_1 + \ldots + w_mx_m = \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}$$

Natomiast:

$$\phi(z) = \begin{cases} 1 \text{ jeśli } z \geq 0 \\ -1 \text{ jeśli } z < 0 \end{cases}.$$

W literaturze specjalistycznej próg ujemny, czyli waga $w_0 = -\theta$, jest zazwyczaj nazywany **obciążeniem jednostkowym** (ang. *bias unit*).

> **Podstawy algebry liniowej: iloczyn skalarny i macierz transponowana**
>
> W kolejnych podrozdziałach będziemy często stosować podstawową notację z zakresu algebry liniowej, np. korzystać ze skróconego zapisu sumy iloczynów wartości $\boldsymbol{x}$ i $\boldsymbol{w}$ za pomocą **iloczynu skalarnego wektorów**, gdzie indeks górny $\boldsymbol{T}$ oznacza **transpozycję** — operację przekształcania wiersza wektora w kolumnę i odwrotnie:
>
> $$z = w_0x_0 + w_1x_1 + \cdots + w_mx_m = \sum_{j=0}^{m} x_jw_j = \mathbf{w}^T\mathbf{x}$$

Kup ksi k Pole ksi k

Na przykład: $\begin{bmatrix}1 & 2 & 3\end{bmatrix} \times \begin{bmatrix}4 \\ 5 \\ 6\end{bmatrix} = 1 \times 4 + 2 \times 5 + 3 \times 6 = 32$.

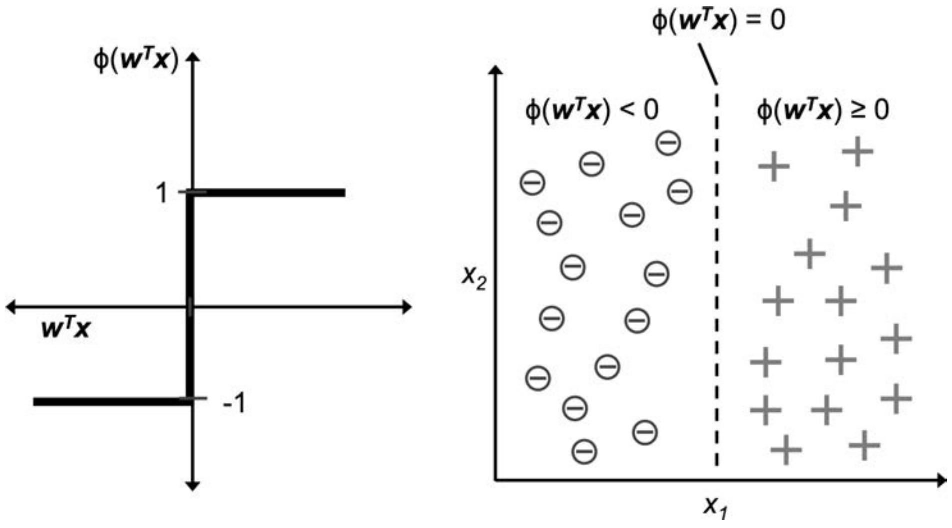
Ponadto operację transponowania można przeprowadzić również wobec macierzy, dzięki czemu następuje w niej zamiana wierszy z kolumnami:

$$\begin{bmatrix}1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6\end{bmatrix}^T = \begin{bmatrix}1 & 3 & 5 \\ 2 & 4 & 6\end{bmatrix}$$

Zwróć uwagę, że operacja transponowania jest zdefiniowana wyłącznie dla macierzy; jednak w kontekście uczenia maszynowego odnosimy się do macierzy $n \times 1$ i $1 \times m$, chociaż mówimy o „wektorze".

W tej książce będziemy wykorzystywać jedynie najprostsze pojęcia z algebry liniowej, jeżeli jednak chcesz odświeżyć sobie pamięć, polecamy znakomity skrypt *Linear Algebra Review and Reference* autorstwa Zico Koltera, który można bezpłatnie przejrzeć na stronie *http://www.cs.cmu.edu/~zkolter/course/linalg/linalg_notes.pdf*[1].

Na rysunku 2.2 widzimy, w jaki sposób całkowite pobudzenie $z = \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}$ zostaje przetworzone na wartości binarne (–1 lub 1) przez funkcję decyzyjną perceptronu (wykres po lewej), a także jak może zostać wykorzystane do rozdzielenia **dwóch odrębnych liniowo klas** (wykres po prawej).



Rysunek 2.2. Zastosowanie całkowitego pobudzenia w uczeniu maszynowym

[1] Dobrym odpowiednikiem w języku polskim jest skrypt *Matematyka dla studiów inżynierskich. Część 1. Algebra i geometria* autorstwa Stanisława Białasa, Adama Ćmiela i Andrzeja Fitzkego, dostępny pod adresem *http://winntbg.bg.agh.edu.pl/skrypty2/0077/bialas.pdf — przyp. tłum.*

Kup ksi k Pole ksi k

Reguła uczenia perceptronu

Podstawowym założeniem w neuronie MCP i modelu perceptronu **progowego** jest wprowadzenie uproszczonego mechanizmu naśladującego działanie pojedynczej komórki nerwowej: albo zostaje ona **uaktywniona**, albo nie. Z tego powodu pierwotna reguła uczenia perceptronu autorstwa Rosenblatta jest całkiem nieskomplikowana i można jej algorytm opisać następującymi etapami:

- Wprowadź wagi o wartości 0 lub niewielkich, losowych wartościach.
- Dla każdego przykładu uczącego $\mathbf{x}^{(i)}$:
  a) Oblicz wartość wyjściową $\hat{y}$.
  b) Zaktualizuj wagi.

W tym przypadku wartością wyjściową jest etykieta klasy przewidziana przez wcześniej zdefiniowaną funkcję skoku jednostkowego, a równoczesną aktualizację każdej wagi w_jw wektorze wag $\boldsymbol{w}$ można zapisać w bardziej formalny sposób:

$$w_j := w_j + \Delta w_j$$

Wartość aktualizacji wagi w_j (lub jej zmiany), którą zapisujemy jako w_j, jest wyliczana za pomocą reguły uczenia perceptronu w następujący sposób:

$$\Delta w_j = \eta(y^{(i)} - \hat{y}^{(i)})x_j^{(i)}$$

gdzie η jest **współczynnikiem uczenia** (ang. *learning rate*; zazwyczaj jest to stała przyjmująca wartości w zakresie od 0,0 do 1,0), $y^{(i)}$ stanowi **rzeczywistą etykietę klas** i-tego przykładu uczącego, natomiast $\hat{y}^{(i)}$ to **przewidywana etykieta klas**. Bardzo istotna jest informacja, że wszystkie wagi w wektorze wag są jednocześnie aktualizowane, co oznacza, że nie przeliczamy ponownie wartości $\hat{y}^{(i)}$, dopóki nie zaktualizujemy wszystkich wag o odpowiednie wartości aktualizacji, Δw_j.

Zapis aktualizacji dla dwuwymiarowego zestawu danych możemy zdefiniować następująco:

$$\Delta w_0 = \eta(y^{(i)} - wyjście^{(i)})$$
$$\Delta w_1 = \eta(y^{(i)} - wyjście^{(i)})x_1^{(i)}$$
$$\Delta w_2 = \eta(y^{(i)} - wyjście^{(i)})x_2^{(i)}$$

Zanim zaimplementujemy model perceptronu w Pythonie, przeprowadźmy mały eksperyment myślowy ukazujący piękno prostoty tej reguły uczenia. W dwóch scenariuszach, w których perceptron we właściwy sposób przewiduje etykietę klas, wagi pozostają niezmienione, gdyż wartości aktualizacji są równe 0:

$$y^{(i)} = -1, \quad \hat{y}^{(i)} = -1, \quad \Delta w_j = \eta(-1-(-1))x_j^{(i)} = 0 \tag{1}$$

$$y^{(i)} = 1, \quad \hat{y}^{(i)} = 1, \quad \Delta w_j = \eta(1-1)x_j^{(i)} = 0 \tag{2}$$

Kup ksi k

Pole ksi k

Jednak w przypadku nieprawidłowego prognozowania wagi zostają przesunięte w kierunku pozytywnej lub negatywnej klasy docelowej:

$$y^{(i)} = 1, \quad \hat{y}^{(i)} = -1, \quad \Delta w_j = \eta(1-(-1))x_j^{(i)} = \eta(2)x_j^{(i)} \tag{3}$$

$$y^{(i)} = -1, \quad \hat{y}^{(i)} = 1, \quad \Delta w_j = \eta(-1-1)x_j^{(i)} = \eta(-2)x_j^{(i)} \tag{4}$$

Aby lepiej zrozumieć koncepcję mnożnika $x_j^{(i)}$, przyjrzyjmy się kolejnemu prostemu przykładowi, w którym:

$$y^{(i)} = +1, \hat{y}^{(i)} = -1, \eta = 1$$

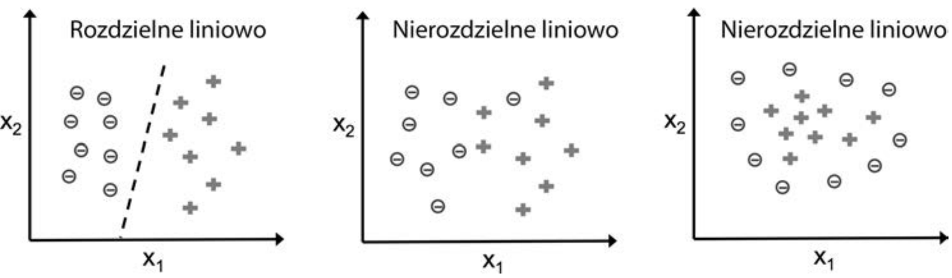
Załóżmy, że $x_j^{(i)} = 0,5$, a my ten przykład nieprawidłowo sklasyfikowaliśmy jako –1. W takim przypadku zwiększamy wagę o 1, przez co całkowite pobudzenie $x_j^{(i)} \times w_j$ będzie silniejsze w sytuacji ponownego natrafienia na ten przykład, dzięki czemu z większym prawdopodobieństwem zostanie przekroczona wartość graniczna funkcji skokowej, a badany obiekt zostanie zaklasyfikowany do klasy +1:

$$\Delta w_j = (1-(-1))0,5 = (2)0,5 = 1$$

Aktualizacja wagi jest wprost proporcjonalna do wartości $x_j^{(i)}$. Załóżmy, że mamy kolejny przykład, $x_j^{(i)} = 2$, który został nieprawidłowo zaklasyfikowany jako –1. W tej sytuacji przesuwamy granicę decyzyjną w jeszcze większym stopniu po to, aby przykład został następnym razem właściwie zaklasyfikowany:

$$\Delta w_j = (1^{(i)} - (-1)^{(i)})2^{(i)} = (2)2^{(i)} = 4$$

Zwróć uwagę, że zbieżność perceptronu zostaje zapewniona jedynie wtedy, gdy dwie klasy są liniowo rozdzielne (rysunek 2.3), a współczynnik uczenia jest wystarczająco mały (zainteresowane osoby znajdą matematyczne wyprowadzenie dowodu w moich materiałach wykładowych na stronie *https://sebastianraschka.com/pdf/lecture-notes/stat479ss19/L03_perceptron_slides.pdf*). Jeżeli nie można oddzielić dwóch klas za pomocą liniowej granicy decyzyjnej, możemy ustalić maksymalną liczbę przebiegów (**epok**) algorytmu z wykorzystaniem danych uczących i (lub) próg tolerancji nieprawidłowych klasyfikacji — w przeciwnym wypadku perceptron wiecznie aktualizowałby wagi.



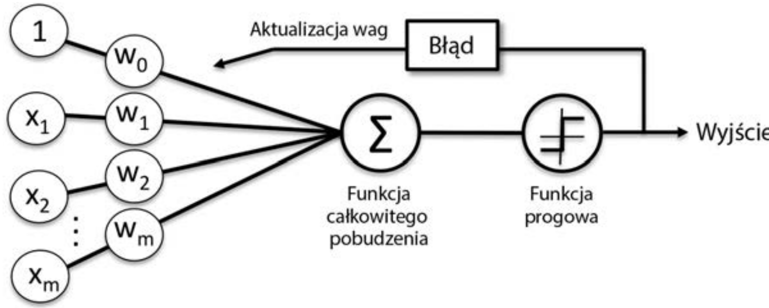
Rysunek 2.3. Rozdzielność liniowa klas

Kup ksi k
Pole ksi k

Kod źródłowy

Pliki kodu źródłowego są dostępne do pobrania pod adresem *ftp://ftp.helion.pl/przyklady/pythu3.zip* lub w oryginale pod adresem *https://github.com/rasbt/python-machine-learning-book-3rd-edition*.

Zanim przejdziemy do implementacji algorytmów w Pythonie, przyjrzyjmy się rysunkowi 2.4, który przedstawia diagram podsumowujący ogólną koncepcję, jaka kryje się za modelem perceptronu.



Rysunek 2.4. Ogólny model perceptronu

Na rysunku 2.4 widzimy schemat ukazujący sposób, w jaki perceptron otrzymuje dane wejściowe $\boldsymbol{x}$ i łączy je z wagami $\boldsymbol{w}$ w celu obliczenia funkcji całkowitego pobudzenia. Wynik jest następnie przekazywany funkcji progowej, która generuje wartość binarną –1 lub +1 — prognozowaną etykietę klas danego przykładu. W trakcie fazy uczenia dane wyjściowe są wykorzystywane do obliczenia błędu predykcji i aktualizowania wag.

Implementacja algorytmu uczenia perceptronu w Pythonie

W poprzednim podrozdziale poznaliśmy mechanizm działania perceptronu Rosenblatta; zaimplementujmy go teraz w Pythonie, a następnie przetestujmy na zestawie danych Iris, który wprowadziliśmy w rozdziale 1., „Umożliwianie komputerom uczenia się z danych”.

Obiektowy interfejs API perceptronu

Wykorzystamy strategię programowania obiektowego i zdefiniujemy interfejs perceptronu jako klasę języka Python, pozwalającą na inicjowanie nowych obiektów `Perceptron`, które będą uczyć się przy użyciu metody `fit`. Z kolei do prognozowania wykorzystamy osobną metodę — `predict`. Zgodnie z konwencją będziemy dodawać podkreślnik (_) do atrybutów, które nie są tworzone w momencie inicjalizowania obiektu, lecz w chwili wywoływania przez inne metody, np. `self.w_`.

Kup ksi k   Pole ksi k

> **Dodatkowe zasoby opisujące biblioteki naukowe Pythona**
>
> Jeżeli nie znasz jeszcze bibliotek naukowych Pythona lub musisz odświeżyć pamięć, skorzystaj z następujących zasobów (w języku angielskim):
>
> - ***NumPy***: *https://sebastianraschka.com/pdf/books/dlb/appendix_f_numpy-intro.pdf*
> - ***pandas***: *https://pandas.pydata.org/pandas-docs/stable/10min.html*
> - ***Matplotlib***: *https://matplotlib.org/tutorials/introductory/usage.html*

Poniżej prezentujemy implementację perceptronu w Pythonie:

```
import numpy as np


class Perceptron(object):
    """Klasyfikator — perceptron.

    Parametry
    ------------
    eta : zmiennoprzecinkowy
        Współczynnik uczenia (w przedziale pomiędzy 0.0 a 1.0).
    n_iter : liczba całkowita
        Liczba przebiegów po zestawach uczących.
    random_state : liczba całkowita
        Ziarno generatora liczb losowych służące do inicjowania losowych wag.

    Atrybuty
    -----------
    w_ : jednowymiarowa tablica
        Wagi po dopasowaniu.
    errors_ : lista
        Liczba nieprawidłowych klasyfikacji (aktualizacji) w każdej epoce.

    """
    def __init__(self, eta=0.01, n_iter=50, random_state=1):
        self.eta = eta
        self.n_iter = n_iter
        self.random_state = random_state

    def fit(self, X, y):
    """Dopasowanie danych uczących.

    Parametry
    ----------
    X : {tablicopodobny}, wymiary = [n_przykładów, n_cech]
        Wektory uczące, gdzie n_przykładów
        oznacza liczbę przykładów, a
        n_cech — liczbę cech.
    y : tablicopodobny, wymiary = [n_przykładów]
        Wartości docelowe.

    Zwraca
    -------
    self : obiekt
```

```
        """
        rgen = np.random.RandomState(self.random_state)
        self.w_ = rgen.normal(loc=0.0, scale=0.01,
                              size=1 + X.shape[1])
        self.errors_ = []

        for _ in range(self.n_iter):
            errors = 0
            for xi, target in zip(X, y):
                update = self.eta * (target - self.predict(xi))
                self.w_[1:] += update * xi
                self.w_[0] += update
                errors += int(update != 0.0)
            self.errors_.append(errors)
        return self

    def net_input(self, X):
        """Oblicza całkowite pobudzenie"""
        return np.dot(X, self.w_[1:]) + self.w_[0]

    def predict(self, X):
        """Zwraca etykietę klas po obliczeniu funkcji skoku jednostkowego"""
        return np.where(self.net_input(X) >= 0.0, 1, -1)
```

Dzięki powyższej implementacji perceptronu możemy teraz inicjować nowe obiekty `Perceptron` mające wyznaczone współczynnik uczenia `eta` oraz liczbę epok (przebiegów po danych uczących) — `n_iter`.

Dzięki metodzie `fit` wprowadzamy wagi w obiekcie `self.w_` do wektora $\mathbb{R}^{m+1}$, gdzie m oznacza liczbę wymiarów (cech) zestawu danych, do której dodajemy 1 dla pierwszego elementu w tym wektorze, czyli obciążenia jednostkowego. Przypominamy, że wspomniany element, `self.w_[0]`, reprezentuje omówione wcześniej tzw. obciążenie jednostkowe.

Zwróć również uwagę, że wektor ten zawiera małe losowe liczby wygenerowane za pomocą rozkładu normalnego o odchyleniu standardowym `0,01`, przy użyciu funkcji `rgen.normal(loc=0.0, scale=0.01, size=1 + X.shape[1])`, gdzie `rgen` jest generatorem liczb losowych biblioteki NumPy, dla którego wyznaczyliśmy określone ziarno, dzięki czemu w razie potrzeby możemy odtwarzać uzyskiwane wyniki.

Należy pamiętać, że nie inicjalizujemy wag z wartością zerową dlatego, że współczynnik uczenia η (eta) ma wpływ na wynik klasyfikacji jedynie wtedy, gdy początkowe wartości wag są niezerowe. Jeżeli wszystkie zainicjowane wagi mają wartość 0, zmienia się tylko skala wektora, nie jego kierunek. Jeżeli znasz się na trygonometrii, weź pod uwagę wektor $v1 = [1\ 2\ 3]$, w którym kąt pomiędzy nim a wektorem $v2 = 0{,}5 \times v1$ miałby wartość równą 0, co zostało ukazane za pomocą poniższego fragmentu kodu:

```
>>> v1 = np.array([1, 2, 3])
>>> v2 = 0.5 * v1
>>> np.arccos(v1.dot(v2) / (np.linalg.norm(v1) *
...                         np.linalg.norm(v2)))
0.0
```

W tym przypadku `np.arccos` jest arcus cosinusem, natomiast `np.linalg.norm` stanowi funkcję obliczającą długość wektora (nie ma znaczenia, czy do wygenerowania liczb losowych wykorzystasz rozkład normalny, czy równomierny albo inną wartość odchylenia standardowego; pamiętaj tylko, że zależy nam na małych wartościach, aby uniknąć omówionych wcześniej własności wektorów zerowych).

Indeksowanie tablic w NumPy

W bibliotece NumPy indeksowanie jednowymiarowych tablic działa podobnie jak w przypadku list Pythona — za pomocą notacji wykorzystującej nawiasy kwadratowe (`[]`). W czasie używania tablic dwuwymiarowych pierwszy wskaźnik odnosi się do numeru wiersza, a drugi — numeru kolumny; np. za pomocą oznaczenia `X [2, 3]` wybieramy drugi wiersz i trzecią kolumnę w dwuwymiarowej tablicy `X`.

Po zainicjalizowaniu wag metoda `fit` analizuje każdy przykład zestawu danych uczących i aktualizuje wartości wag zgodnie z omówioną wcześniej regułą uczenia perceptronu.

Etykiety klas są prognozowane poprzez metodę `predict`, która zostaje wywołana w metodzie `fit` w czasie uczenia po to, aby przewidzieć etykietę klas dla aktualizacji wag, jednak może być także wykorzystywana do predykcji etykiet klas nowych danych po wytrenowaniu modelu. Do tego w liście `self.errors_` zliczamy liczbę nieprawidłowych klasyfikacji w czasie każdej epoki, dzięki czemu możemy później przeanalizować wydajność perceptronu w procesie nauki. Wykorzystywana w metodzie `net_input` funkcja `np.dot` oblicza iloczyn skalarny wektorów $\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}$.

Zamiast stosować bibliotekę NumPy do obliczenia iloczynu skalarnego wektorów pomiędzy dwiema tablicami *a* i *b* za pomocą operacji `a.dot(b)` lub `np.dot(a, b)`, możemy tego dokonać również w „czystym” kodzie Pythona: `sum([i*j for i,j in zip(a, b)])`. Jednakże przewaga struktur pętli `for` występujących w bibliotece NumPy nad dostępnymi w klasycznym Pythonie polega na wektoryzacji operacji arytmetycznych. W procesie wektoryzacji podstawowe operacje arytmetyczne są automatycznie przeprowadzane na każdym elemencie tablicy. Wyznaczywszy operacje arytmetyczne jako sekwencję instrukcji przeprowadzanych wobec tablicy (zamiast tradycyjnego ujęcia, w którym zestaw operacji jest wykonywany oddzielnie na każdym elemencie zbioru), możemy w znacznie skuteczniejszy sposób wykorzystywać architekturę współczesnych procesorów obsługujących **architekturę SIMD** (ang. *Single Instruction, Multiple Data* — pojedyncza instrukcja, wielokrotność danych). Do tego w pakiecie NumPy stosowane są zoptymalizowane biblioteki algebry liniowej, takie jak **Basic Linear Algebra Subprograms** (**BLAS**) czy **Linear Algebra PACKage** (**LAPACK**), napisane w językach C oraz Fortran. Na koniec warto dodać, że biblioteka NumPy gwarantuje zwięźlejszy i bardziej intuicyjny zapis kodu podstaw algebry liniowej, np. iloczynu skalarnego wektorów czy macierzy.

Trenowanie modelu perceptronu na zestawie danych Iris

W celu przetestowania naszej implementacji perceptronu ograniczymy analizy i przykłady z dalszej części rozdziału do dwóch zmiennych cech (wymiarów). Reguła uczenia perceptronu nie ogranicza się wyłącznie do dwóch wymiarów, ale w celach dydaktycznych dzięki uwzględnieniu tylko dwóch cech (długości działki i długości płatka) będziemy w stanie zwizualizować rejony decyzyjne wyuczonego modelu na wykresie punktowym.

Kup ksi k	Pole ksi k

Poza tym ze względów praktycznych wybraliśmy tylko dwa gatunki kosaćca (Setosa i Versicolor) z zestawu danych Iris: pamiętaj, że perceptron jest klasyfikatorem binarnym. Można go jednak rozszerzyć do klasyfikacji wieloklasowej — np. poprzez technikę **OvA** (ang. *One versus All* — jeden przeciw wszystkim).

Metoda OvA służąca do klasyfikacji wieloklasowej

Technika **OvA**, zwana również czasami **OvR** (ang. *One versus Rest* — jeden przeciw reszcie), umożliwia rozszerzanie dowolnej klasyfikacji binarnej na problemy wieloklasowe. Za pomocą tej metody możemy uczyć jeden klasyfikator na klasę, przy czym ta klasa jest traktowana jako klasa pozytywna, a przykłady z pozostałych klas są uznawane za obiekty klasy negatywnej. Do sklasyfikowania nowych, nieoznakowanych danych uczących wykorzystalibyśmy nasze *n* klasyfikatorów, gdzie *n* oznacza liczbę etykiet klas, i przydzielilibyśmy etykietę klas o największej pewności do klasyfikowanego przykładu. W przypadku perceptronu stosowalibyśmy mechanizm OvA do doboru etykiety klas powiązanej z największą wartością bezwzględną całkowitego pobudzenia.

Najpierw wykorzystamy bibliotekę *pandas* do wczytania zbioru danych Iris z bazy **UCI Machine Learning Repository** (z ang. repozytorium uczenia maszynowego na Uniwersytecie Kalifornijskim) do obiektu `DataFrame` oraz wyświetlimy pięć ostatnich linijek za pomocą metody `tail`, aby sprawdzić, czy informacje zostały prawidłowo odczytane (rysunek 2.5):

```
>>> import os
>>> import pandas as pd
>>> s = os.path.join('https://archive.ics.uci.edu', 'ml',
...                                'machine-learning-databases',
...                                'iris','iris.data')
>>> print('Adres URL:', s)
URL: https://archive.ics.uci.edu/ml/machine-learning-databases/iris/iris.data
>>> df = pd.read_csv(s,
...                                  header=None,
...                                  encoding='utf-8')
>>> df.tail()
```

	0	1	2	3	4
145	6.7	3.0	5.2	2.3	Iris-virginica
146	6.3	2.5	5.0	1.9	Iris-virginica
147	6.5	3.0	5.2	2.0	Iris-virginica
148	6.2	3.4	5.4	2.3	Iris-virginica
149	5.9	3.0	5.1	1.8	Iris-virginica

Rysunek 2.5. Pięć ostatnich wierszy zestawu danych Iris wyświetlonych za pomocą metody tail

Kup ksi k Pole ksi k

Wczytywanie zestawu danych Iris

Kopię zestawu danych Iris (a także wszystkich pozostałych zestawów danych wykorzystywanych w tej książce) znajdziesz w przykładowym kodzie dołączonym do książki, dzięki czemu możesz z niego korzystać także, gdy będziesz odłączony od internetu lub serwer UCI (*https://archive.ics.uci.edu/ml/machine-learning-databases/iris/iris.data*) będzie w danym momencie niedostępny. Przykładowo, aby wczytać zestaw danych Iris z katalogu lokalnego, wystarczy zastąpić wiersz:

```
df = pd.read_csv('https://archive.ics.uci.edu/ml/'
        'machine-learning-databases/iris/iris.data',
         header=None, encoding='utf-8')
```

wierszem

```
df = pd.read_csv('Twoja/ścieżka/lokalna/do/pliku/iris.data',
        header=None, encoding='utf-8')
```

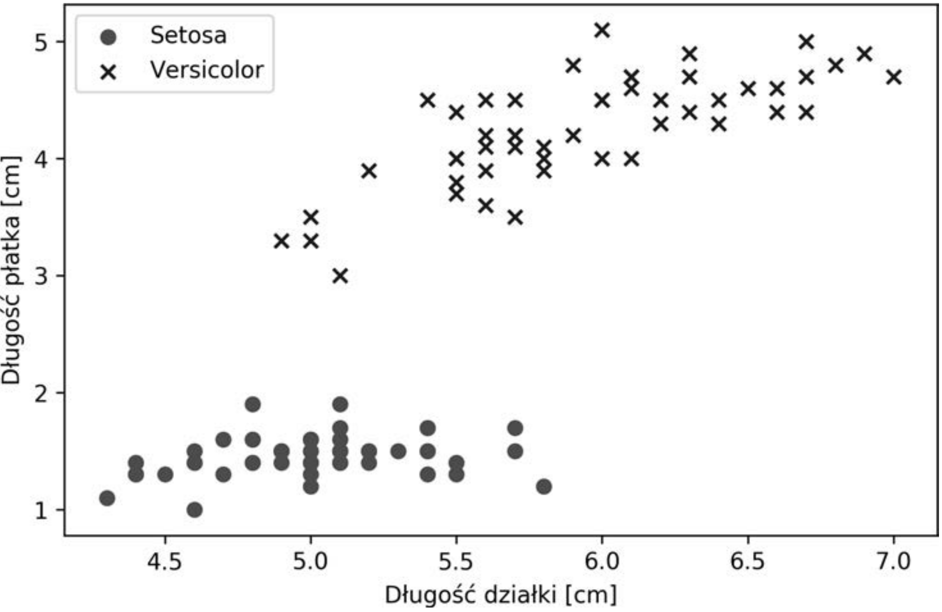
Wydzielamy następnie pierwsze 100 etykiet klas odpowiadających 50 kwiatom z gatunku *setosa* (*Iris-setosa*) oraz 50 z gatunku *versicolor* (*Iris-versicolor*) i przekształcamy je w dwie kategorie etykiet symbolizowane liczbami całkowitymi: `1` (*versicolor*) i `-1` (*setosa*), które przydzielamy do wektora `y`, w którym wartości obiektu `DataFrame` (przynależnego do biblioteki pandas) będą odpowiednikami danych otrzymywanych poprzez pakiet NumPy.

W analogiczny sposób ze zbioru 100 przykładów uczących wydzielamy pierwszą kolumnę cech (*Długość działki*) i trzecią kolumnę (*Długość płatka*) — uzyskane wartości przydzielamy do macierzy cech `X`, którą jesteśmy w stanie wyświetlić jako dwuwymiarowy wykres punktowy:

```
>>> import matplotlib.pyplot as plt
>>> import numpy as np

>>> # wybieramy odmiany setosa i versicolor
>>> y = df.iloc[0:100, 4].values
>>> y = np.where(y == 'Iris-setosa', -1, 1)

>>> # wybieramy długość działki i długość płatka
>>> X = df.iloc[0:100, [0, 2]].values

>>> # generowanie wykresu danych
>>> plt.scatter(X[:50, 0], X[:50, 1],
...             color='red', marker='o', label='Setosa')
>>> plt.scatter(X[50:100, 0], X[50:100, 1],
...             color='blue', marker='x', label='Versicolor')
>>> plt.xlabel('Długość działki [cm]')
>>> plt.ylabel('Długość płatka [cm]')
>>> plt.legend(loc='upper left')
>>> plt.show()
```

Po uruchomieniu powyższego kodu powinniśmy otrzymać wykres pokazany na rysunku 2.6.

Kup ksi k Pole ksi k



Rysunek 2.6. Graficzne przedstawienie zestawu danych uczących

Powyższy wykres pokazuje rozkład przykładów kwiatów tworzących zestaw Iris wzdłuż dwóch osi cech (mierzonych w centymetrach): długości płatka i długości działki. W tej dwuwymiarowej podprzestrzeni cech widzimy, że liniowa granica decyzyjna powinna wystarczyć do rozdzielenia odmiany *setosa* od *versicolor*.

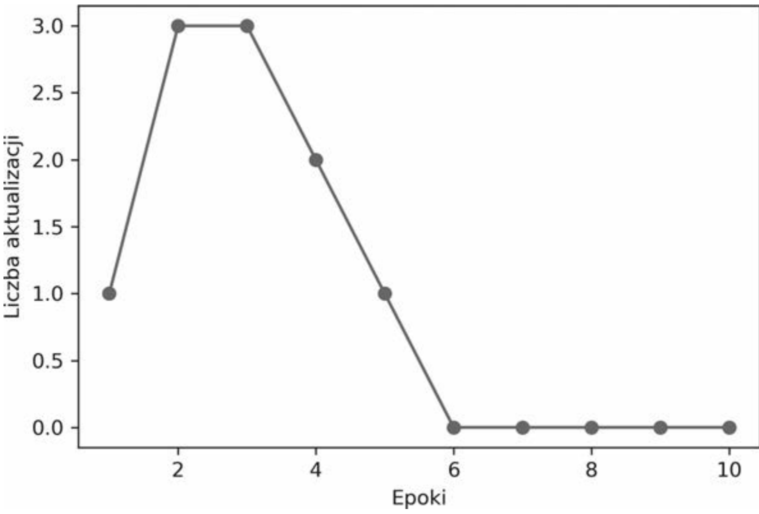
Zatem taki klasyfikator liniowy jak perceptron powinien klasyfikować bez zarzutu próbki umieszczone w zestawie danych Iris.

Przejdźmy do trenowania algorytmu perceptronu na wydobytym podzbiorze danych Iris. Wyświetlimy do tego wykres **błędów nieprawidłowej klasyfikacji** dla każdej epoki, aby sprawdzić, czy algorytm jest zbieżny i zdołał odnaleźć granicę decyzyjną rozdzielającą obydwa gatunki kwiatów kosaćca:

```
>>> ppn = Perceptron(eta=0.1, n_iter=10)
>>> ppn.fit(X, y)
>>> plt.plot(range(1, len(ppn.errors_) + 1), ppn.errors_,
...          marker='o')
>>> plt.xlabel('Epoki')
>>> plt.ylabel('Liczba aktualizacji')
>>> plt.show()
```

Po uruchomieniu powyższego kodu naszym oczom powinien ukazać się wykres błędów klasyfikacji w funkcji epok, zaprezentowany na rysunku 2.7.

Kup ksi k   Pole ksi k



Rysunek 2.7. Wykres zbieżności algorytmu

Jak widać na rysunku 2.7, nasz perceptron osiągnął zbieżność już w szóstej epoce i teraz powinien znakomicie sobie radzić z klasyfikowaniem przykładów uczących. Zaimplementujmy niewielką, wygodną funkcję służącą do wizualizowania granic decyzyjnych dla dwuwymiarowych zbiorów danych:

```
from matplotlib.colors import ListedColormap

def plot_decision_regions(X, y, classifier, resolution=0.02):

    # konfiguruje generator znaczników i mapę kolorów
    markers = ('s', 'x', 'o', '^', 'v')
    colors = ('red', 'blue', 'lightgreen', 'gray', 'cyan')
    cmap = ListedColormap(colors[:len(np.unique(y))])

    # rysuje wykres powierzchni decyzyjnej
    x1_min, x1_max = X[:, 0].min() - 1, X[:, 0].max() + 1
    x2_min, x2_max = X[:, 1].min() - 1, X[:, 1].max() + 1
    xx1, xx2 = np.meshgrid(np.arange(x1_min, x1_max, resolution),
                           np.arange(x2_min, x2_max, resolution))
    Z = classifier.predict(np.array([xx1.ravel(), xx2.ravel()]).T)
    Z = Z.reshape(xx1.shape)
    plt.contourf(xx1, xx2, Z, alpha=0.3, cmap=cmap)
    plt.xlim(xx1.min(), xx1.max())
    plt.ylim(xx2.min(), xx2.max())

    # rysuje wykres przykładów
    for idx, cl in enumerate(np.unique(y)):
        plt.scatter(x=X[y == cl, 0], y=X[y == cl, 1],
                    alpha=0.8, c=colors[idx],
                    marker=markers[idx], label=cl,
                    edgecolor='black')
```


Kup ksi k   Pole ksi k

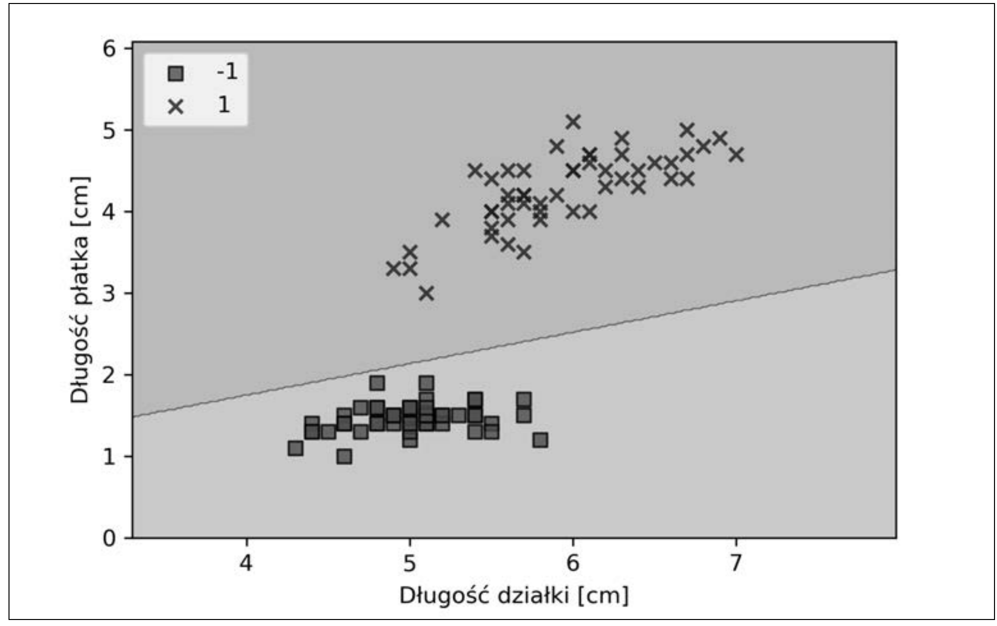
Najpierw definiujemy liczbę barw (`colors`) i znaczników (`markers`), a następnie tworzymy mapę kolorów z listy barw za pomocą klasy `ListedColormap`. Określamy teraz wartości minimalne i maksymalne dwóch cech i używamy tak uzyskanych wektorów cech do utworzenia pary tablic `xx1` oraz `xx2` za pomocą funkcji `meshgrid`. Uczyliśmy nasz klasyfikator na dwóch wymiarach cech, dlatego musimy zmodyfikować tablice `xx1` i `xx2` oraz stworzyć macierz zawierającą taką samą liczbę kolumn jak zbiór uczący, dzięki czemu będziemy w stanie zastosować metodę `predict` do przewidywania etykiet klas z odpowiednich elementów tablic.

Po przekształceniu przewidywanych etykiet klas do postaci tabelarycznej (o takich samych wymiarach jak tabele `xx1` i `xx2`) będziemy mogli narysować wykres konturowy, stosując funkcję `contourf`, która dopasowuje kolory do różnych regionów decyzyjnych dla każdej prognozowanej klasy w tablicy:

```
>>> plot_decision_regions(X, y, classifier=ppn)
>>> plt.xlabel('Długość działki [cm]')
>>> plt.ylabel('Długość płatka [cm]')
>>> plt.legend(loc='upper left')
>>> plt.show()
```

Po uruchomieniu powyższego kodu powinniśmy ujrzeć zaprezentowany na rysunku 2.8 wykres regionów decyzyjnych.

Jak widać na rysunku 2.8, perceptron wyznaczył granicę decyzyjną, dzięki której w idealny sposób sklasyfikował wszystkie przykłady z podzbioru uczącego.



Rysunek 2.8. Wykres regionów decyzyjnych

Kup ksi k Pole ksi k

Zbieżność perceptronu

Chociaż perceptron perfekcyjnie sklasyfikował dwie odmiany kosaćca, konwergencja stanowi jeden z największych problemów omawianego modelu. Rosenblatt dowiódł matematycznie, że reguła uczenia perceptronu wykazuje zbieżność, jeśli dwie klasy mogą zostać rozdzielone liniową hiperpłaszczyzną. Jeśli nie można idealnie odseparować tych klas wspomnianą granicą decyzyjną, wagi będą cały czas aktualizowane, chyba że ustalimy maksymalną liczbę epok. Osoby zainteresowane zagadnieniem znajdą podsumowanie dowodu matematycznego w moich materiałach wykładowych: *https://sebastianraschka.com/pdf/lecture-notes/stat479ss19/L03_perceptron_slides.pdf*.

Adaptacyjne neurony liniowe i zbieżność uczenia

W tym podrozdziale przyjrzymy się kolejnej odmianie jednowarstwowej sieci neuronowej: **ADAptacyjnemu LIniowemu NEuronowi** (**ADALINE**). Model Adaline został zaprezentowany zaledwie kilka lat po algorytmie perceptronu Rosenblatta przez Bernarda Widrowa i jego doktoranta Tedda Hoffa; adaptacyjny neuron liniowy można uznać za twórcze rozwinięcie koncepcji perceptronu (B. Widrow i in., *An adaptive „Adaline" neuron using chemical „memistors"*, „Number Technical Report" 1553-2, Stanford Electron. Labs, Stanford, California, October 1960).

Algorytm Adaline jest szczególnie interesujący, gdyż zaprezentowane w nim zostały kluczowe koncepcje definiowania i minimalizowania ciągłych funkcji kosztu. Stanowi to podstawę zrozumienia bardziej zaawansowanych algorytmów klasyfikujących, takich jak regresja logistyczna, maszyny wektorów nośnych, a także modeli regresji omówionych w dalszych rozdziałach.

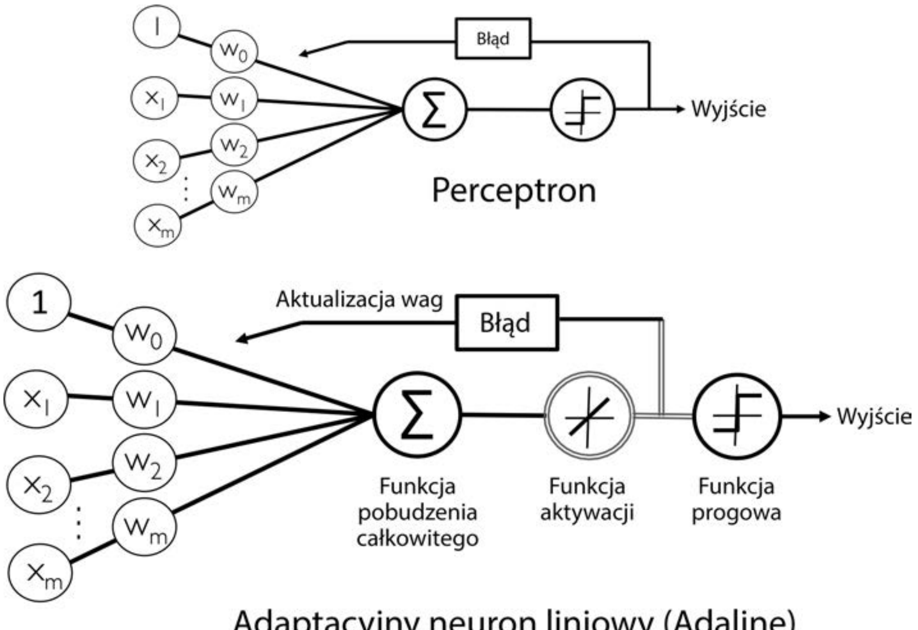
Podstawową różnicą pomiędzy regułą uczenia Adaline (zwaną również **regułą Widrowa-Hoffa**) a perceptronem Rosenblatta jest sposób traktowania wag: w przypadku adaptacyjnego neuronu liniowego wagi są aktualizowane na podstawie liniowej funkcji aktywacji, a nie funkcji skoku jednostkowego (jak to ma miejsce w perceptronie). W modelu Adaline taka liniowa funkcja aktywacji $\phi(z)$ jest po prostu funkcją tożsamościową całkowitego pobudzenia w taki sposób, że

$$\phi(\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}.$$

Liniowa funkcja aktywacji służy do obliczania wag, natomiast ciągle będziemy korzystać z funkcji progowej odpowiedzialnej za ostateczną prognozę, przypominającej omówioną wcześniej funkcję skoku jednostkowego.

Na rysunku 2.9 zostały zaprezentowane główne różnice pomiędzy perceptronem a algorytmem Adaline.

Kup ksi k Pole ksi k



Rysunek 2.9. Porównanie modelu perceptronu i Adaline

Jak widać na rysunku 2.9, algorytm Adaline porównuje rzeczywiste etykiety klas z wartościami ciągłymi funkcji liniowej aktywacji do wyliczania błędu modelu i aktualizowania wag. Z kolei perceptron porównuje rzeczywiste etykiety klas z prognozowanymi etykietami.

Minimalizacja funkcji kosztu za pomocą metody gradientu prostego

Jednym z najistotniejszych zadań w algorytmach nadzorowanego uczenia maszynowego jest zdefiniowana **funkcja celu**, która będzie optymalizowana w procesie nauki. Funkcja celu często przyjmuje postać **funkcji kosztu**, którą pragniemy zminimalizować. W przypadku modelu Adaline możemy wyznaczyć funkcję kosztu J, wyznaczającą wagi za pomocą **sumy kwadratów błędów** (ang. *sum of squared errors* — **SSE**) pomiędzy wyliczonym wynikiem a rzeczywistą etykietą klas:

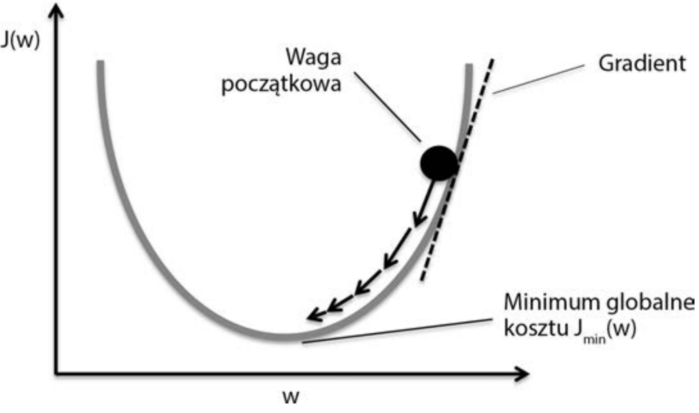
$$J(\mathbf{w}) = \frac{1}{2}\sum_i \left(y^{(i)} - \varphi(z^{(i)})\right)^2$$

Wartość $^1/_2$ została dodana jedynie dla naszej wygody, gdyż łatwiej nam będzie w ten sposób wyprowadzić gradient funkcji kosztu (straty) w odniesieniu do parametrów wag, o czym przekonamy się w dalszej części rozdziału. Główną zaletą tej liniowej funkcji aktywacji jest — w przeciwieństwie do funkcji skoku jednostkowego — umożliwienie różniczkowania funkcji kosztu. Inną przydatną własnością jest wypukłość funkcji kosztu; pozwala nam ją

Kup ksi k Pole ksi k

wykorzystywać bardzo prosty, ale potężny algorytm optymalizacyjny, zwany **gradientem prostym** (ang. *gradient descent*); umożliwia on znajdowanie wag minimalizujących funkcję kosztu klasyfikującą przykłady zawarte w zbiorze danych Iris.

Na rysunku 2.10 widzimy, że działanie algorytmu gradientu prostego możemy przyrównać do **schodzenia z górki** aż do osiągnięcia lokalnego lub globalnego minimum kosztu. W każdej iteracji kierujemy się w przeciwną stronę gradientu, a rozmiar kolejnego kroku jest określany przez wartości współczynnika uczenia, jak również przez nachylenie gradientu.



Rysunek 2.10. Schemat poglądowy działania algorytmu gradientu prostego

Za pomocą gradientu prostego możemy zaktualizować wagi poprzez wykonanie kroku w kierunku przeciwnym do gradientu $\nabla J(\boldsymbol{w})$ naszej funkcji kosztu $J(\boldsymbol{w})$:

$$\boldsymbol{w} := \boldsymbol{w} + \Delta\boldsymbol{w}$$

Zmiana wagi $\Delta\boldsymbol{w}$ jest zdefiniowana jako ujemny gradient pomnożony przez współczynnik uczenia η:

$$\Delta\boldsymbol{w} = -\eta\nabla J(w)$$

Aby wyliczyć gradient funkcji kosztu, musimy obliczyć pochodną cząstkową tej funkcji przy uwzględnieniu każdej wagi w_j:

$$\frac{\partial J}{\partial w_j} = -\sum_i \left(y^{(i)} - \phi\left(z^{(i)}\right)\right) x_j^{(i)}$$

Zatem będziemy mogli zapisać aktualizację wagi w_j jako:

$$\Delta w_j = -\eta\frac{\partial J}{\partial w_j} = \eta\sum_i \left(y^{(i)} - \phi\left(z^{(i)}\right)\right) x_j^{(i)}$$

Aktualizujemy jednocześnie wszystkie wagi, dlatego reguła uczenia Adaline przyjmuje postać

$$\boldsymbol{w} := \boldsymbol{w} + \Delta\boldsymbol{w}$$

Kup ksi k Pole ksi k

Wyprowadzenie pochodnej błędu kwadratowego

Osobom zaznajomionym z aparatem matematycznym przedstawiamy sposób wyprowadzenia pochodnej cząstkowej funkcji kosztu za pomocą sumy kwadratów błędów w odniesieniu do j-tej wagi:

$$\frac{\partial J}{\partial w_j} = \frac{\partial}{\partial w_j} \frac{1}{2} \sum_i (y^{(i)} - \phi(z^{(i)}))^2 =$$

$$= \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial w_j} \sum_i (y^{(i)} - \phi(z^{(i)}))^2 =$$

$$= \frac{1}{2} \sum_i 2\left(y^{(i)} - \phi\left(z^{(i)}\right)\right) \frac{\partial}{\partial w_j} \left(y^{(i)} - \phi\left(z^{(i)}\right)\right) =$$

$$= \sum_i \left(y^{(i)} - \phi\left(z^{(i)}\right)\right) \frac{\partial}{\partial w_j} \left(y^{(i)} - \sum_k \left(w_k^{(i)} x_k^{(i)}\right)\right) =$$

$$= \sum_i \left(y^{(i)} - \phi\left(z^{(i)}\right)\right)\left(-x_j^{(i)}\right) =$$

$$= -\sum_i \left(y^{(i)} - \phi\left(z^{(i)}\right)\right) x_j^{(i)}$$

Mimo że reguła uczenia w modelu Adaline wygląda identycznie jak w przypadku perceptronu, warto zauważyć, że wartość funkcji $\phi\left(z^{(i)}\right)$, gdzie $z^{(i)} = \boldsymbol{w}^T \boldsymbol{x}^{(i)}$, stanowi liczbę rzeczywistą, a nie liczbę całkowitą etykiety klas. Ponadto aktualizacja wag jest obliczana na podstawie wszystkich przykładów z zestawu danych uczących (czyli wagi nie są przyrostowo aktualizowane po sprawdzeniu każdego przykładu uczącego), dlatego właśnie ta technika bywa również nazywana metodą **wsadową gradientu prostego** (ang. *batch gradient descent*).

Implementacja algorytmu Adaline w Pythonie

Reguły uczenia perceptronu i adaptacyjnego neuronu liniowego są do siebie bardzo podobne, dlatego wykorzystamy utworzoną wcześniej implementację perceptronu i zmodyfikujemy metodę `fit`, przez co wagi będą aktualizowane poprzez minimalizację funkcji kosztu za pomocą techniki gradientu prostego:

```
class AdalineGD(object):
    """Klasyfikator — ADAptacyjny LIniowy NEuron.

    Parametry
    ------------
    eta : zmiennoprzecinkowy
        Współczynnik uczenia (w zakresie pomiędzy 0.0 i 1.0).
    n_iter : liczba całkowita
        Liczba przebiegów po zestawie uczącym.
    random_state : liczba całkowita
        Ziarno generatora liczb losowych służące do inicjowania
        losowych wag.
    Atrybuty
```


Kup ksi k Pole ksi k

```
-----------
w_ : jednowymiarowa tablica
    Wagi po dopasowaniu.
cost_ : lista
    Suma kwadratów błędów (wartość funkcji kosztu) w każdej epoce.

"""
def __init__(self, eta=0.01, n_iter=50, random_state=1):
    self.eta = eta
    self.n_iter = n_iter
    self.random_state=random_state

def fit(self, X, y):
    """ Trenowanie za pomocą danych uczących.

    Parametry
    ----------
    X : {tablicopodobny}, wymiary = [n_przykładów, n_cech]
        Wektory uczenia,
        gdzie n_przykładów oznacza liczbę przykładów, a
        n_cech — liczbę cech.
    y : tablicopodobny, wymiary = [n_przykładów]
        Wartości docelowe.

    Zwraca
    -------
    self : obiekt

    """
    rgen = np.random.RandomState(self.random_state)
    self.w_ = rgen.normal(loc=0.0, scale=0.01,
                          size=1 + X.shape[1])
    self.cost_ = []

    for i in range(self.n_iter):
        net_input = self.net_input(X)
        output = self.activation(net_input)
        errors = (y - output)
        self.w_[1:] += self.eta * X.T.dot(errors)
        self.w_[0] += self.eta * errors.sum()
        cost = (errors**2).sum() / 2.0
        self.cost_.append(cost)
    return self

def net_input(self, X):
    """Oblicza całkowite pobudzenie"""
    return np.dot(X, self.w_[1:]) + self.w_[0]

def activation(self, X):
    """Oblicza liniową funkcję aktywacji"""
    return X

def predict(self, X):
    """Zwraca etykietę klas po wykonaniu skoku jednostkowego"""
    return np.where(self.activation(self.net_input(X)) >= 0.0, 1, -1)
```


Kup książkę Poleć książkę

W przeciwieństwie do modelu perceptronu nie aktualizujemy tutaj wag po ocenieniu każdego przykładu uczącego, lecz obliczamy gradient na podstawie całego zestawu danych uczących poprzez operację `self.eta * errors.sum()` dla obciążenia jednostkowego (wagi zerowej) i `self.eta * X.T.dot(errors)` dla wag od *1* do *m*, gdzie `X.T.dot(errors)` jest **iloczynem macierzowo-wektorowym** macierzy cech z wektorem błędów.

Zwróć uwagę, że metoda `activation` nie ma żadnego wpływu na kod, ponieważ jest to zwykła funkcja tożsamościowa. Wprowadziliśmy tu funkcję aktywacji (obliczoną za pomocą metody `activation`) po to, aby ukazać ogólny mechanizm przepływu informacji poprzez pojedynczą warstwę sieci neuronowej: cechy z danych wejściowych, pobudzenia całkowitego, aktywacji i wyjścia.

W następnym rozdziale zajmiemy się klasyfikatorem regresji logistycznej, w którym stosowana jest nieliniowa, niezerowa funkcja aktywacji. Dowiemy się, że model regresji logistycznej jest ściśle powiązany z modelem Adaline, a jedyna różnica dotyczy jej funkcji aktywacji i kosztu.

Podobnie jak w implementacji perceptronu, gromadzimy wartości kosztu w liście `self.cost_`, aby sprawdzić zbieżność algorytmu po zakończeniu uczenia.

Iloczyn macierzowy

Iloczyn macierzowy przypomina obliczanie iloczynu skalarnego wektorów, gdyż każdy wiersz macierzy jest traktowany jak pojedynczy wektor. Dzięki takiej wektoryzacji uzyskujemy zwięźlejszą notację oraz wydajniejszy proces obliczeniowy za pomocą biblioteki NumPy; np.:

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 7 \\ 8 \\ 9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1\times7 & 2\times8 & 3\times9 \\ 4\times7 & 5\times8 & 6\times9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 50 \\ 122 \end{bmatrix}$$

Zwróć uwagę, że w powyższym równaniu mnożymy macierz przez wektor, a taka operacja nie jest zdefiniowana matematycznie. Pamiętaj jednak, że stosujemy tu konwencję, zgodnie z którą powyższy wektor jest traktowany jako macierz 3×1.

W praktyce znalezienie współczynnika uczenia η gwarantującego optymalną zbieżność wymaga odrobiny eksperymentowania. Dobierzmy więc dwie wartości współczynnika uczenia: $\eta = 0{,}1$ i $\eta = 0{,}0001$ i narysujmy wykres funkcji kosztu dla liczby epok, dzięki czemu dowiemy się, jak skutecznie algorytm Adaline uczy się z danych uczących.

Hiperparametry perceptronu

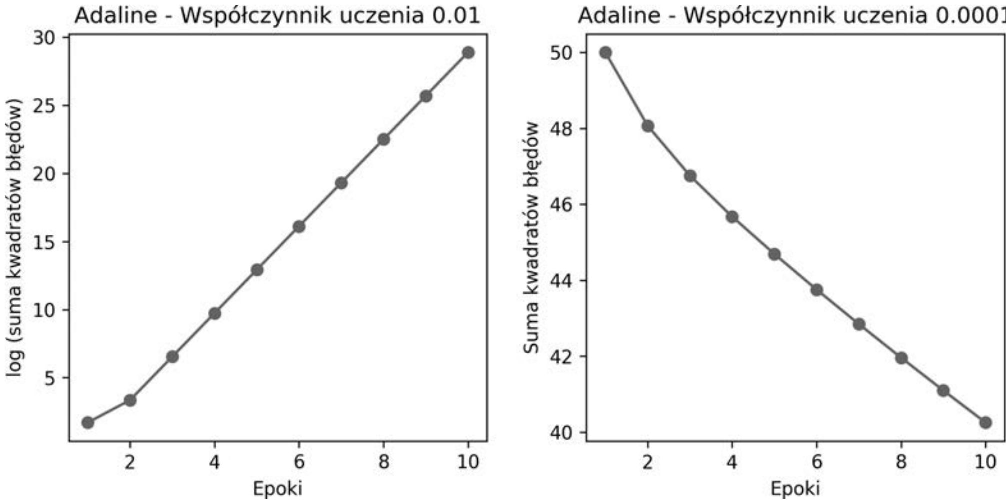
Zarówno współczynnik uczenia η (eta), jak i liczba epok (`n_iter`) to tzw. **hiperparametry** (lub parametry strojenia) implementacji perceptronu oraz adaptacyjnego neuronu liniowego. W rozdziale 6., „Najlepsze metody oceny modelu i dostrajania hiperparametrów”, poznamy inne techniki umożliwiające automatyczne wyszukiwanie wartości różnych hiperparametrów zapewniających optymalną skuteczność modelu klasyfikacji.

Stwórzmy teraz wykres kosztów dla liczby epok przy założeniu dwóch różnych wartości współczynnika uczenia:

Kup ksi k Pole ksi k

```
>>> fig, ax = plt.subplots(nrows=1, ncols=2, figsize=(10, 4))
>>> ada1 = AdalineGD(n_iter=10, eta=0.01).fit(X, y)
>>> ax[0].plot(range(1, len(ada1.cost_) + 1),
...            np.log10(ada1.cost_), marker='o')
>>> ax[0].set_xlabel('Epoki')
>>> ax[0].set_ylabel('Log (suma kwadratów błędów)')
>>> ax[0].set_title('Adaline – Współczynnik uczenia 0,01')
>>> ada2 = AdalineGD(n_iter=10, eta=0.0001).fit(X, y)
>>> ax[1].plot(range(1, len(ada2.cost_) + 1),
...            ada2.cost_, marker='o')
>>> ax[1].set_xlabel('Epoki')
>>> ax[1].set_ylabel('Suma kwadratów błędów')
>>> ax[1].set_title('Adaline – Współczynnik uczenia 0,0001')
>>> plt.show()
```

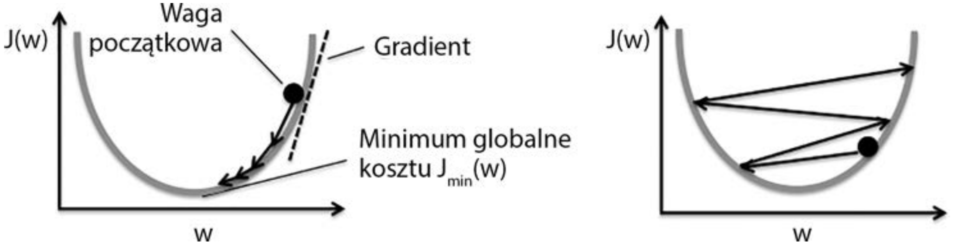
Jak widać na wykresach zaprezentowanych na rysunku 2.11, natrafiamy na dwa różne problemy. Wykres po lewej przedstawia sytuację, gdy dobieramy zbyt dużą wartość współczynnika uczenia. Zamiast minimalizacji funkcji kosztu następuje powiększanie błędu wraz z każdą epoką, ponieważ ***przeskakujemy* nad** minimum globalnym. Z drugiej strony widzimy, że na prawym wykresie koszt maleje, ale dobrana wartość η = 0,0001 jest tak mała, że algorytm musiałby wykonać mnóstwo przebiegów, żeby uzyskać zbieżność z globalnym minimum kosztu.



Rysunek 2.11. Skutek doboru niewłaściwej wartości współczynnika uczenia

Na rysunku 2.12 pokazujemy, co by się stało, gdybyśmy zmienili wartość określonego parametru wagi w celu minimalizacji funkcji kosztu J. Na lewym wykresie widoczny jest przypadek prawidłowo dobranego współczynnika uczenia — koszt maleje stopniowo, dzięki czemu dążymy do minimum globalnego. Z kolei prawy wykres pokazuje, co się dzieje, gdy dobieramy zbyt dużą wartość współczynnika uczenia i rozmijamy się z minimum globalnym.

Kup ksi k   Pole ksi k



Rysunek 2.12. Skutek doboru wartości optymalnej (wykres po lewej) i za dużej (wykres po prawej) współczynnika uczenia

Usprawnianie gradientu prostego poprzez skalowanie cech

Wiele omawianych w tej książce algorytmów uczenia maszynowego wymaga jakiejś formy skalowania cech w celu uzyskania optymalnej skuteczności, co zostanie dokładniej omówione w rozdziale 3., „Stosowanie klasyfikatorów uczenia maszynowego za pomocą biblioteki scikit-learn”, i rozdziale 4., „Tworzenie dobrych zestawów danych uczących — wstępne przetwarzanie danych”.

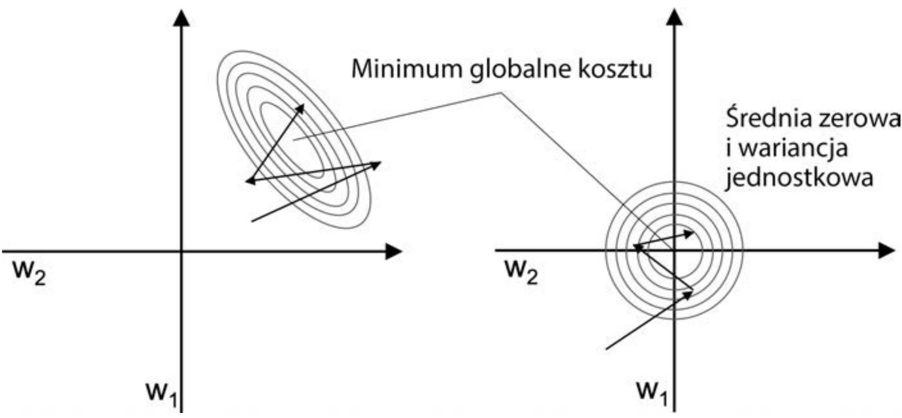
Metoda gradientu prostego stanowi jeden z wielu algorytmów, w których przydatne okazuje się skalowanie cech. W tym punkcie zastosujemy metodę skalowania zwaną **standaryzacją**, gdyż potraktowane nią dane uzyskują własności standardowego rozkładu normalnego: średnią o wartości zero i wariancję jednostkową. Taka procedura normalizacji przyśpiesza proces uzyskiwania zbieżności; nie sprawia to jednak, że pierwotny zestaw danych uzyskuje rozkład normalny. Standaryzacja przesuwa średnią każdej cechy w taki sposób, że zostaje wyśrodkowana do wartości 0, a każda cecha zawiera odchylenie standardowe równe 1 (wariancja jednostkowa). Przykładowo w celu standaryzacji j-tej cechy wystarczy odjąć średnią przykładu μ_j od każdego przykładu uczącego i podzielić ją przez jego odchylenie standardowe σ_j:

$$\boldsymbol{x}'_j = \frac{\boldsymbol{x}_j - \mu_j}{\sigma_j}$$

Tutaj $\boldsymbol{x}_j$ jest wektorem składającym się z wartości j-tej cechy wszystkich przykładów uczących n, a taka technika standaryzacji może zostać zastosowana wobec każdej cechy j w naszym zestawie danych.

Standaryzacja pomaga w nauce gradientu prostego m.in. dlatego, że funkcja optymalizująca musi wykonać mniej przebiegów w celu znalezienia optymalnego rozwiązania (globalnego minimum kosztu), co zostało zaprezentowane na rysunku 2.13; obydwa wykresy ukazują powierzchnię kosztu jako funkcję dwóch przykładowych wag w zagadnieniu klasyfikacji dwuwymiarowej.

Kup ksi k Pole ksi k



Rysunek 2.13. Porównanie modelu gradientu prostego bez standaryzacji (lewy wykres) ze standaryzacją (prawy wykres)

Możemy bardzo łatwo zaimplementować standaryzację za pomocą wbudowanych metod `mean` i `std` biblioteki NumPy:

```
>>> X_std = np.copy(X)
>>> X_std[:,0] = (X[:,0] - X[:,0].mean()) / X[:,0].std()
>>> X_std[:,1] = (X[:,1] - X[:,1].mean()) / X[:,1].std()
```

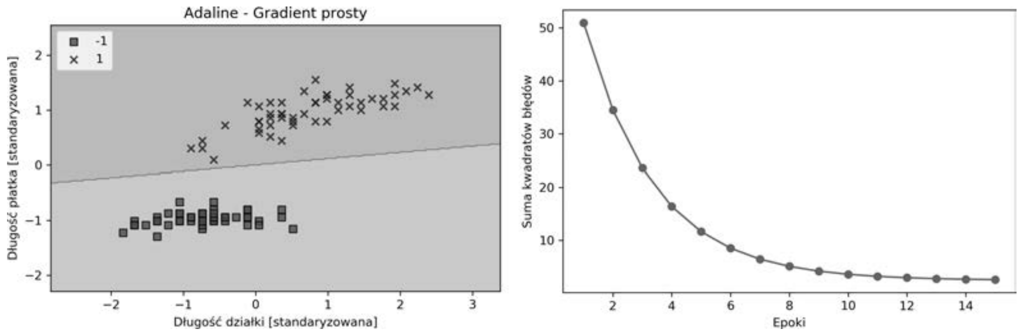
Po wprowadzeniu standaryzacji ponownie wyuczymy model Adaline i sprawdzimy, czy algorytm będzie zbieżny po wykonaniu niewielkiej liczby przebiegów przy współczynniku uczenia o wartości $\eta = 0{,}01$:

```
>>> ada_gd = AdalineGD(n_iter=15, eta=0.01)
>>> ada_gd.fit(X_std, y)

>>> plot_decision_regions(X_std, y, classifier=ada_gd)
>>> plt.title('Adaline - Gradient prosty')
>>> plt.xlabel('Długość działki [standaryzowana]')
>>> plt.ylabel('Długość płatka [standaryzowana]')
>>> plt.legend(loc='upper left')
>>> plt.tight_layout()
>>> plt.show()

>>> plt.plot(range(1, len(ada_gd.cost_) + 1), ada_gd.cost_, marker='o')
>>> plt.xlabel('Epoki')
>>> plt.ylabel('Suma kwadratów błędów')
>>> plt.tight_layout()
>>> plt.show()
```

Po uruchomieniu powyższego kodu powinniśmy ujrzeć wykresy regionów decyzyjnych oraz malejącego kosztu, pokazane na rysunku 2.14.

Jak widać, algorytm Adaline stał się zbieżny po uczeniu się na standaryzowanych cechach przy stosowaniu współczynnika uczenia $\eta = 0{,}01$. Zauważ jednak, że suma kwadratów błędów pozostaje niezerowa pomimo właściwego sklasyfikowania wszystkich przykładów kwiatów.

Kup ksi k   Pole ksi k



Rysunek 2.14. Zbieżność algorytmu Adaline po standaryzacji cech

Wielkoskalowe uczenie maszynowe i metoda stochastycznego spadku wzdłuż gradientu

W poprzednim podrozdziale nauczyliśmy się minimalizować funkcję kosztu poprzez wykonywanie kroku oddalającego od gradientu kosztu obliczonego z całego zestawu danych uczących; dlatego algorytm ten jest czasami nazywany **wsadową** metodą gradientu prostego. Wyobraź sobie teraz, że masz do dyspozycji olbrzymi zestaw danych zawierający miliony punktów danych, co jest dość często spotykaną sytuacją w technikach uczenia maszynowego. W takim przypadku stosowanie metody wsadowej gradientu bywa dość kosztowne pod względem obliczeniowym, ponieważ musimy od nowa oceniać cały zbiór danych uczących za każdym razem, gdy wykonujemy kolejny krok w kierunku globalnego minimum.

Popularnym zamiennikiem algorytmu wsadowego gradientu prostego jest metoda **stochastycznego spadku wzdłuż gradientu** (ang. *stochastic gradient descent* — **SGD**), czasami nazywana także **iteracyjnym algorytmem spadku wzdłuż gradientu**. Nie aktualizujemy w tej sytuacji wag na podstawie sumy nagromadzonych błędów spośród wszystkich przykładów uczących $\boldsymbol{x}^{(i)}$:

$$\Delta \mathbf{w} = \eta \sum_i \left(y^{(i)} - \varphi\left(z^{(i)}\right)\right) \mathbf{x}^{(i)}$$

Aktualizujemy wagi przyrostowo dla każdego przykładu uczącego:

$$\eta\left(y^{(i)} - \phi\left(z^{(i)}\right)\right)\boldsymbol{x}^{(i)}$$

Chociaż algorytm SGD można uznawać za aproksymację gradientu prostego, zazwyczaj umożliwia on znacznie szybsze uzyskanie zbieżności, gdyż wagi są częściej aktualizowane. Każdy gradient jest wyliczany na podstawie pojedynczej próbki uczącej, dlatego powierzchnia błędów generuje większe szumy niż w gradiencie prostym, co również ma znaczenie, gdyż dzięki temu algorytm SGD łatwiej może ignorować płytkie minima lokalne w przypadku, gdy pracujemy z nieliniowymi funkcjami kosztu, o czym przekonamy się w rozdziale 12., „Implementowanie wielowarstwowej, sieci neuronowej od podstaw”. Aby uzyskać satysfakcjonujące wyniki za pomocą algorytmu SGD, bardzo ważne jest zaprezentowanie algorytmowi

Kup ksi k Pole ksi k

danych uczących w przypadkowej kolejności, ponadto chcemy przed każdą epoką przetasować zestaw danych uczących, aby uniknąć cykliczności.

Korygowanie współczynnika uczenia w trakcie trenowania modelu

W implementacjach stochastycznego spadku wzdłuż gradientu niezmienny współczynnik uczenia η często jest zastępowany adaptacyjnym współczynnikiem uczenia, którego wartość maleje wraz z upływem czasu; może on przybrać np. następującą postać:

$$\frac{c_1}{[liczba\ iteracji] + c_2}$$

gdzie c_1 i c_2 są stałymi. Zwracamy uwagę, że algorytm ten nie osiąga minimum globalnego, lecz dociera do jego bardzo zbliżonych wartości. Dzięki adaptacyjnemu współczynnikowi uczenia możemy jeszcze bardziej zbliżyć się do minimum kosztu.

Kolejną zaletą metody SGD jest możliwość wykorzystania jej do **uczenia przyrostowego**. Rozwiązanie to polega na trenowaniu modelu za pomocą ciągle napływających nowych danych uczących. Jest to technika przydatna zwłaszcza w sytuacji gromadzenia dużych ilości informacji — np. danych o użytkownikach w aplikacji sieciowej. Poprzez uczenie w locie system jest w stanie natychmiastowo dostosować się do zmian, a dane uczące mogą zostać usunięte po zaktualizowaniu modelu, jeżeli pojemność dyskowa stanowi problem.

Metoda gradientu prostego z użyciem minigrup

Kompromisem pomiędzy metodą gradientu prostego a algorytmem SGD jest tzw. **uczenie za pomocą minigrup** (ang. *mini-batch learning*). Rozwiązanie to można rozpatrywać jako stosowanie metody wsadowej gradientu do mniejszych podzbiorów danych uczących — np. 32 przykładów uczących. Zaletą uczenia za pomocą minigrup jest znacznie szybsza konwergencja w porównaniu z gradientem prostym z powodu częstszych aktualizacji wag. Do tego metoda ta pozwala zastępować pętlę `for` używaną na przykładach uczących w **stochastycznym spadku wzdłuż gradientu** operacjami wektorowymi umożliwiającymi stosowanie technik algebry liniowej (np. implementację sumy ważonej za pomocą iloczynu skalarnego), co jeszcze bardziej poprawia skuteczność obliczeniową danego algorytmu uczenia.

Wcześniej zaimplementowaliśmy regułę uczenia Adaline wykorzystującą metodę gradientu prostego, dlatego wystarczy wprowadzić do niej kilka modyfikacji, żeby algorytm zaczął aktualizować wagi metodą SGD. Teraz wewnątrz metody `fit` będziemy aktualizować wagi po sprawdzeniu każdego przykładu uczącego. Następnie zaimplementujemy dodatkową metodę `partial_fit`, która nie inicjuje od nowa wag w przypadku uczenia w locie. Aby sprawdzić zbieżność algorytmu po treningu, będziemy obliczać koszt jako średni koszt przykładów uczących w każdej epoce. Ponadto dodamy możliwość tasowania (`shuffle`) danych uczących przed rozpoczęciem każdej epoki, dzięki czemu unikniemy cykliczności podczas optymalizowania funkcji kosztu; parametr `random_state` służy do generowania wartości losowej dla zachowania większej odtwarzalności:

```
from numpy.random import seed

class AdalineSGD(object):
    """Klasyfikator — ADAptacyjny LIniowy NEuron.
```


Kup ksi k   Pole ksi k

```
    Parametry
    ------------
    eta : zmiennoprzecinkowy
        Współczynnik uczenia (w zakresie pomiędzy 0.0 i 1.0).
    n_iter : liczba całkowita
        Liczba przebiegów po zestawie uczącym.
  shuffle : wartość boolowska (domyślnie: True)
        Jeżeli jest ustalona wartość True,
        tasuje dane uczące przed każdą epoką w celu zapobiegnięcia cykliczności.
    random_state : liczba całkowita
        Ziarno generatora liczb losowych służące do inicjowania
        losowych wag.

    Atrybuty
    -----------
    w_ : jednowymiarowa tablica
        Wagi po dopasowaniu.
    cost_ : lista
        Suma kwadratów błędów (wartość funkcji kosztu) ze wszystkich przykładów
  uczących w każdej epoce.

    """
    def __init__(self, eta=0.01, n_iter=10,
          shuffle=True, random_state=None):
        self.eta = eta
        self.n_iter = n_iter
        self.w_initialized = False
        self.shuffle = shuffle
        self.random_state = random_state

    def fit(self, X, y):
        """ Dopasowanie danych uczących.

        Parametry
        ----------
        X : {tablicopodobny}, wymiary = [n_przykładów, n_cech]
              Wektory uczące, gdzie n_przykładów
              oznacza liczbę przykładów, a
              n_cech określa liczbę cech.
        y : tablicopodobny, wymiary = [n_przykładów]
              Wartości docelowe.

        Zwraca
        -------
        self : obiekt

        """
        self._initialize_weights(X.shape[1])
        self.cost_ = []
        for i in range(self.n_iter):
            if self.shuffle:
                X, y = self._shuffle(X, y)
          cost = []
            for xi, target in zip(X, y):
                cost.append(self._update_weights(xi, target))
```


Kup książkę Poleć książkę

```
            avg_cost = sum(cost) / len(y)
            self.cost_.append(avg_cost)
        return self

    def partial_fit(self, X, y):
        """Dopasowuje dane uczące bez ponownej inicjacji wag"""
        if not self.w_initialized:
            self._initialize_weights(X.shape[1])
        if y.ravel().shape[0] > 1:
            for xi, target in zip(X, y):
                self._update_weights(xi, target)
        else:
            self._update_weights(X, y)
        return self

    def _shuffle(self, X, y):
        """Tasuje dane uczące"""
        r = self.rgen.permutation(len(y))
        return X[r], y[r]

    def _initialize_weights(self, m):
        """Inicjuje wagi, przydzielając im małe, losowe wartości"""
        self.rgen = np.random.RandomState(self.random_state)
        self.w_ = self.rgen.normal(loc=0.0, scale=0.01,
                                   size=1 + m)
        self.w_initialized = True

    def _update_weights(self, xi, target):
        """Wykorzystuje regułę uczenia Adaline do aktualizacji wag"""
        output = self.activation(self.net_input(xi))
        error = (target - output)
        self.w_[1:] += self.eta * xi.dot(error)
        self.w_[0] += self.eta * error
        cost = 0.5 * error**2
        return cost

    def net_input(self, X):
        """Oblicza całkowite pobudzenie"""
        return np.dot(X, self.w_[1:]) + self.w_[0]

    def activation(self, X):
        """Oblicza liniową funkcję aktywacji"""
        return X

    def predict(self, X):
        """Zwraca etykietę klas po wykonaniu skoku jednostkowego"""
        return np.where(self.activation(self.net_input(X)) >= 0.0, 1, -1)
```

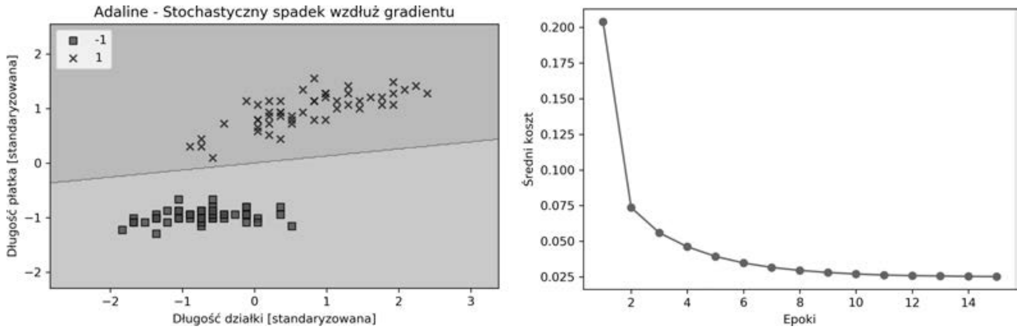
Stosowana w klasyfikatorze `AdalineSGD` metoda `_shuffle` działa w następujący sposób: dzięki funkcji `permutation` w `np.random` generujemy losową sekwencję unikatowych liczb w przedziale od 0 do 100. Liczby te są następnie wykorzystywane jako indeksy umożliwiające tasowanie macierzy cech i wektora etykiet klas.

Kup książkę Poleć książkę

Teraz możemy wykorzystać metodę `fit` do trenowania klasyfikatora `AdalineSGD` i wyświetlić wyniki nauki za pomocą funkcji `plot_decision_regions`:

```
>>> ada_sgd = AdalineSGD(n_iter=15, eta=0.01, random_state=1)
>>> ada_sgd.fit(X_std, y)

>>> plot_decision_regions(X_std, y, classifier=ada_sgd)
>>> plt.title('Adaline – Stochastyczny spadek wzdłuż gradientu')
>>> plt.xlabel('Długość działki [standaryzowana]')
>>> plt.ylabel('Długość płatka [standaryzowana]')
>>> plt.legend(loc='upper left')
>>> plt.tight_layout()
>>> plt.show()
>>> plt.plot(range(1, len(ada_sgd.cost_) + 1), ada_sgd.cost_, marker='o')
>>> plt.xlabel('Epoki')
>>> plt.ylabel('Średni koszt')
>>> plt.tight_layout()
>>> plt.show()
```

Wykresy uzyskane po uruchomieniu powyższego kodu zostały zaprezentowane na rysunku 2.15.



Rysunek 2.15. Uczenie przy zastosowaniu metody stochastycznego spadku wzdłuż gradientu

Jak widać, średni koszt maleje dość szybko, a ostateczna granica decyzyjna po 15 epokach przypomina uzyskaną za pomocą wsadowej metody gradientu prostego. Jeżeli chcemy zaktualizować nasz model, np. by zastosować go do uczenia przyrostowego za pomocą danych przesyłanych strumieniowo; wystarczy wywołać metodę `partial_fit` wobec poszczególnych przykładów uczących, na przykład w następujący sposób: `ada_sgd.partial_fit(X_std[0, :], y[0])`.

Podsumowanie

W tym rozdziale przyjrzeliśmy się uważnie podstawowym koncepcjom klasyfikatorów liniowych stosowanych w uczeniu nadzorowanym. Po zaimplementowaniu perceptronu dowiedzieliśmy się, jak można wydajnie uczyć adaptacyjne neurony liniowe poprzez wektoryzację gradientu prostego, a także jak można wykorzystać metodę SGD do uczenia w locie.

Kup ksi k Pole ksi k

Gdy już potrafimy implementować proste klasyfikatory w Pythonie, jesteśmy gotowi na następny rozdział, w którym wykorzystamy bibliotekę uczenia maszynowego scikit-learn do tworzenia bardziej zaawansowanych i potężniejszych klasyfikatorów, powszechnie używanych zarówno na uczelniach, jak i w przemyśle.

Użyta przez nas metoda obiektowa implementowania algorytmów perceptronu i Adaline pomoże w zrozumieniu interfejsu API scikit-learn; wykorzystuje on te same koncepcje, które omówiliśmy w tym rozdziale: metody `fit` i `predict`. Na ich podstawie nauczymy się wykorzystywać regresję logistyczną do modelowania prawdopodobieństwa przynależności do klas, a także używać maszyny wektorów nośnych podczas pracy z nieliniowymi granicami decyzyjnymi. Do tego zaprezentujemy odmienną klasę algorytmów uczenia nadzorowanego (algorytmy drzew), które są często łączone w potężne zespoły klasyfikatorów.

Kup ksi k Pole ksi k

PROGRAM PARTNERSKI

GRUPY HELION

1. ZAREJESTRUJ SIĘ
2. PREZENTUJ KSIĄŻKI
3. ZBIERAJ PROWIZJĘ

Zmień swoją stronę WWW w działający bankomat!

Dowiedz się więcej i dołącz już dzisiaj!

http://program-partnerski.helion.pl

Uczenie głębokie z Pythonem: zrozum i zastosuj!

Uczenie maszynowe jest jedną z najbardziej fascynujących technologii naszych czasów — rozwojem jego najróżniejszych zastosowań zajmują się tacy giganci jak Google, Facebook, Apple, Amazon czy IBM. Uczenie maszynowe otwiera zupełnie nowe możliwości i powoli staje się nieodzowne: wystarczy wymienić asystenty głosowe w smartfonach, chatboty pomagające klientom w wyborze produktu, a także sieci ułatwiające podejmowanie decyzji o inwestycjach giełdowych, filtrujące niechciane wiadomości e-mail czy wspomagające diagnostykę medyczną.

Oto obszerny przewodnik po uczeniu maszynowym i uczeniu głębokim w Pythonie. Zawiera dokładne omówienie najważniejszych technik uczenia maszynowego oraz staranne wyjaśnienie zasad rządzących tą technologią. Poszczególne zagadnienia zilustrowano mnóstwem objaśnień, wizualizacji i przykładów, co znakomicie ułatwia zrozumienie materiału i sprawne rozpoczęcie samodzielnego budowania aplikacji i modeli, takich jak te służące do klasyfikacji obrazów, odkrywania ukrytych wzorców czy wydobywania dodatkowych informacji z danych. Wydanie trzecie zostało zaktualizowane — znalazł się w nim opis biblioteki TensorFlow 2 i najnowszych dodatków do biblioteki scikit-learn. Dodano również wprowadzenie do dwóch nowatorskich technik: uczenia przez wzmacnianie i budowy generatywnych sieci przeciwstawnych (GAN).

W książce między innymi:

- platformy, modele i techniki uczenia maszynowego
- wykorzystanie biblioteki scikit-learn i TensorFlow
- sieci neuronowe, sieci GAN i inne
- przygotowywanie danych dla modeli uczenia maszynowego
- ocena i strojenie modeli
- analizy: regresyjna, skupień i sentymentów

Dr Sebastian Raschka zajmuje się rozwojem nowych technik uczenia głębokiego, pozwalających na rozwiązywanie problemów w dziedzinie biometryki. Od wielu lat programuje w Pythonie.

Dr Vahid Mirjalili specjalizuje się w wielkoskalowych symulacjach obliczeniowych struktur molekularnych oraz zastosowaniach uczenia maszynowego w rozpoznawaniu obrazów i biometryce.

ISBN 978-83-283-7001-2
9 788328 370012
Cena: 119,00 zł