



**WYDZIAŁ
MATEMATYKI
I FIZYKI STOSOWANEJ**
POLITECHNIKI RZESZOWSKIEJ

Gabriel Lichacz

Rozpoznawanie rysunków grafów

Praca magisterska

Promotor:
dr Paweł Bednarz

Rzeszów, 2024

Spis treści

1. Wstęp	6
2. Podstawowe definicje teorii grafów	10
3. Uczenie maszynowe	11
3.1. Podstawowe pojęcia z zakresu uczenia maszynowego	11
3.2. Warstwy w modelach sieci neuronowych	14
3.3. Rodzaje uczenia maszynowego	15
3.4. Proces uczenia maszynowego	16
4. Wykorzystywane technologie	18
4.1. Język R	18
4.2. Język Python	18
4.3. Stanowisko pracy	19
5. Opis modelu	19
5.1. Generacja danych	20
5.2. Dane zewnętrzne	22
5.3. Opis ogólny skryptu	23
5.3.1. Przygotowanie	23
5.3.2. Model	23
5.3.3. Wyniki	25
5.3.4. Testy na danych zewnętrznych	26
6. Testy	26
6.1. Testy modeli	26
6.1.1. Model podstawowy	26
6.1.2. Model z walidacją krzyżową	31
6.1.3. Model ze zmienną liczbą wierzchołków	41
6.1.4. Model ze zmienną liczbą wierzchołków i walidacją krzyżową	46
6.2. Wnioski	50
7. Podsumowanie i wnioski końcowe	50
Załączniki	52
Literatura	53

Wykaz symboli

G - graf

$V(G)$ - zbiór wierzchołków grafu G

$E(G)$ - zbiór krawędzi grafu G

C_n - cykl n -wierzchołkowy

D - digraf

$G(V_1, V_2)$ - graf dwudzielny

K_n - graf pełny

N_n - graf bezkrawędziowy

P_n - ścieżka n -wierzchołkowa

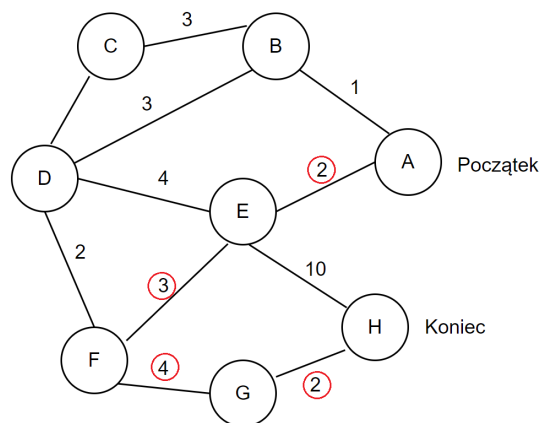
W_n - koło n -wierzchołkowe

1. Wstęp

Graf definiuje się jako pewną parę uporządkowaną $G = (V, E)$, gdzie V zbiór wierzchołków, a E to zbiór krawędzi, które łączą niektóre z tych wierzchołków. Takie obiekty można przedstawić graficznie jako reprezentację danych, w której wartości są przedstawione w pewien uporządkowany sposób, zwykle w relacji do siebie nawzajem. „Stanowią wygodny aparat do modelowania różnych obiektów, (...) i odpowiednio interpretowane - mogą zawierać pewne informacje”[13].

Teoria grafów to dziedzina matematyki zajmująca się badaniem właściwości grafów, będąca bardzo ważnym narzędziem w wielu „dziedzinach od rachunku operacyjnego, chemii, po genetykę, lingwistykę oraz od elektroniki i geografii po socjologię i architekturę”[12]. Grafy dają możliwość zobrazowania pewnych modeli, co jest szczególnie korzystne w analizie wzorców. W kontekście grafów warto podkreślić ich zastosowanie poza teoretycznymi analizami.

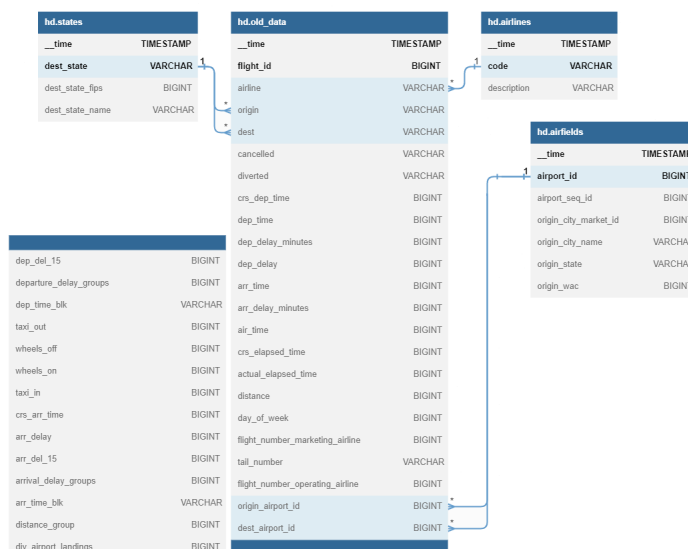
W dziedzinach informatycznych, grafy stanowią fundament wielu algorytmów, takich jak algorytmy przeszukiwania, algorytmy najkrótszej drogi, drzew rozpinających, czy modeli sieci. Przykładem może być tutaj wyszukiwanie najkrótszej trasy, chociażby w nawigacji GPS, gdzie wierzchołki odpowiadają skrzyżowaniom, a krawędzie drogom. W przypadku znajdowania najbardziej optymalnych tras, warto wymienić takie algorytmy jak A^* , Bellmana-Forda czy Dijkstry.



Rysunek 1.1: Przykład grafu z wyznaczoną najkrótszą drogą od wierzchołka A do H. Zaznaczona została czerwonymi okręgami. Liczby przy krawędziach grafu oznaczają koszt przebycia odległości między wierzchołkami łączonymi daną krawędzią.

Grafy, istotną rolę odgrywają w reprezentacji i modelowaniu struktur danych,

takich jak bazy danych. Najczęściej stosowane bazy danych, tj. relacyjne, zbudowane są w sposób, który grafy mogą doskonale zobrazować - wierzchołki odpowiadają kolumnom w tabelach a połączenia między nimi to krawędzie, reprezentujące relacje.

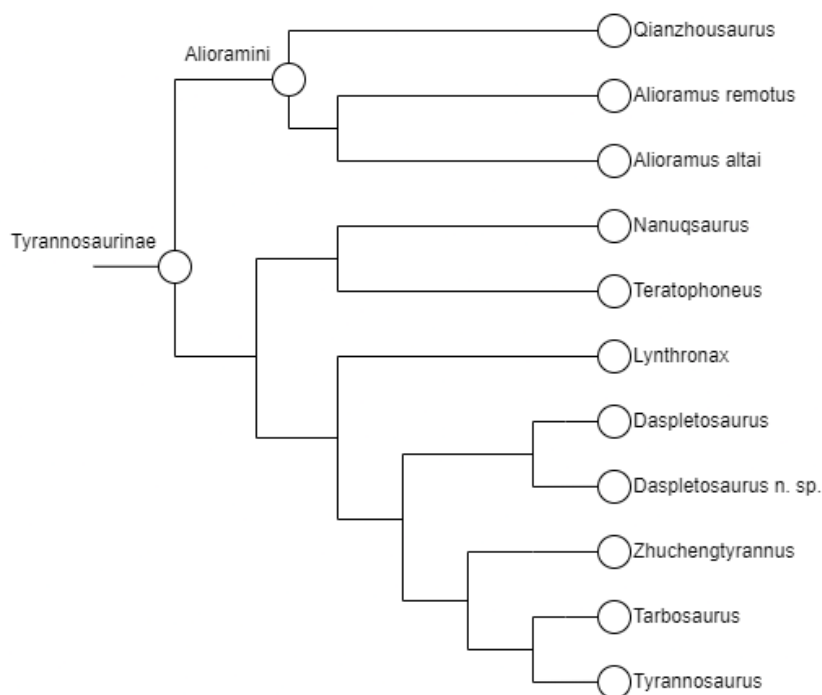


Rysunek 1.2: Przykładowy schemat relacyjnej bazy danych

W biologii, grafy pełnią ważną rolę w modelowaniu układu nerwowego, sieci białek, szlaków metabolicznych oraz interakcji między genami. W genetyce wykorzystuje się je między innymi do analizy drzew filogenetycznych, co pozwala chociażby na śledzenie relacji ewolucyjnych między organizmami, z liśćmi reprezentującymi żywe organizmy, a wierzchołkami pośrednimi jako ich wspólnymi przodkami [5].

Natomiast w chemii, grafy służą do reprezentacji struktury molekularnej związków chemicznych, umożliwiając naukowcom analizę ich właściwości i reaktywności. Znaczenie teorii grafów dla chemii wynika głównie z istnienia zjawiska izomerizmu, które jest uzasadnione przez teorię struktury chemicznej. Wszystkie wzory strukturalne związków o wiązaniach kowalencyjnych są grafami, które nazywane są grafami molekularnymi [2].

W lingwistyce, przy pomocy grafów możliwe jest modelowanie struktury języka, analiza morfologiczna czy syntaktyczna. Stosowane są również przez wiele innych dziedzin, takich jak gramatyka generatywna, będąca kandydatem na teoretyczną podstawę biolingwistyki. Przez ponad pół wieku, wykorzystywała ona notację drzewa jako pomocnicze narzędzie do wyrażania struktur językowych, lecz takie podejście zostało ostatecznie podważone przez jednego z autorytetów w dziedzinie lingwistyki - Noama Chomsky'ego [1]. Dzięki grafom, możliwe jest również lepsze zrozumienie i przetwarzanie

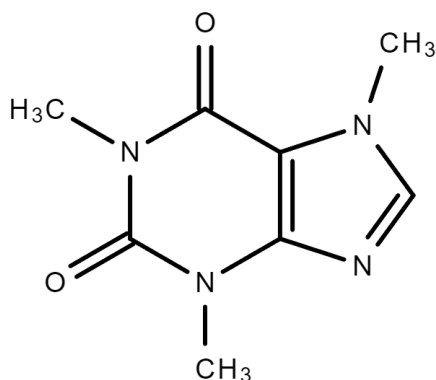


Rysunek 1.3: Filogenetyczne relacje Tyrannosaurinae. Źródło: opracowanie własne na podstawie: Brusatte, S., Carr, T. The phylogeny and evolutionary history of tyrannosauroid dinosaurs, Sci Rep 6, 20252 (2016)

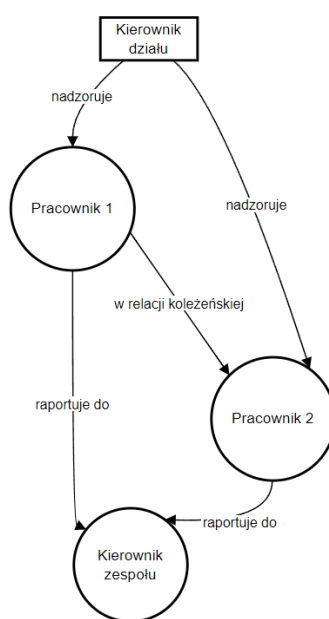
nie języka naturalnego przez komputery, co stanowi podstawę technologii takich jak tłumaczenie automatyczne czy rozpoznawanie mowy.

Teoria grafów znajduje także zastosowanie w analizie sieci społecznych, gdzie pomagają w badaniu relacji między ludźmi. Wielu psychologów i socjologów zajmuje się tematem struktur wynikających z relacji między różnymi podmiotami. Przykładami takich zależności mogą być sieci komunikacyjne między ludźmi, relacje dominacji i uległości w grupie, wpływ lub władza jednych podmiotów nad innymi, czy relacje między różnymi aspektami pola psychologicznego danej osoby lub jej osobowości [8]. Bardzo dużym polem jest również analiza mediów społecznościowych, które to wpływają coraz bardziej na przeciętnego człowieka. Poprzez gromadzenie i analizę danych dotyczących połączeń między użytkownikami, wzorców interakcji i zachowań komunikacyjnych, analiza mediów społecznościowych pozwala zauważyć pewne struktury społeczne i zidentyfikować wzorce leżące u podstaw interakcji w ich obrębie. Wszystko to możliwe jest do modelowania za pomocą struktur znanych z teorii grafów [10].

Rozpoznawanie wzorców, nam ludziom, pozwala na szybszą naukę przez rozpoznawanie czegoś, co już wcześniej widzieliśmy. W bardzo dużym uproszczeniu, al-



Rysunek 1.4: Struktura molekularna kofeiny



Rysunek 1.5: Przykład sieci relacji pomiędzy pracownikami w dziale danej firmy

gorytmy uczenia maszynowego działają w podobny sposób. Gdy model zostanie prawidłowo nauczony na pewnych danych, jest w stanie rozpoznawać podobne wzorce w innych, nigdy wcześniej nie widzianych.

Podsumowując, grafy są niezwykle wszechstronnym narzędziem, które znajduje zastosowanie w bardzo wielu dziedzinach nauki i technologii. Ich zdolność do reprezentowania skomplikowanych struktur i relacji w sposób zrozumiały, przystępny i czytelny jest nieoceniona. Dzięki nim możliwe jest również analizowanie i przetwarzanie informacji w efektywniejszy sposób, niż informacji nieustrukturyzowanych.

Celem pracy jest zobrazowanie owej zależności, na przykładzie nauczania sieci neuronowej, w taki sposób, by po wytrenowaniu na kilku typach grafów stworzonych

sztucznie, model był w stanie rozpoznać dane wzorce i je nazwać, w przestrzeni rzeczywistej.

2. Podstawowe definicje teorii grafów

Definicje zostały zaczerpnięte z literatury, z pozycji [13], [12] oraz [14].

Definicja 1. Grafem nieskierowanym, skończonym G nazywamy parę (V, E) , gdzie $V = V(G)$ jest zbiorem skończonym, niepustym, natomiast $E = E(G)$ jest rodziną mogących się powtarzać dwuelementowych podzbiorów niekoniecznie różnych elementów ze zbioru V . Zbiór $V(G)$ nazywamy zbiorem wierzchołków, a elementy tego zbioru nazywamy wierzchołkami i oznaczamy symbolami: $x, y, x_i, y_i, 1, 2, \dots$. Zbiór $E(G)$ nazywamy zbiorem krawędzi grafu G . Mówimy, że krawędź $\{v, w\}$ łączy wierzchołki v i w , i na ogół oznaczamy ją krócej symbolem vw . W wielu zagadnieniach nazwy wierzchołków są nieistotne, więc je pomijamy i mówimy wtedy, że graf jest nieoznakowany.

Definicja 2. Jeżeli w grafie G istnieją co najmniej dwie krawędzie xy , to krawędź tę nazywamy krawędzią wielokrotną.

Definicja 3. Krawędź xy w grafie G nazywamy pętlą.

Definicja 4. Graf mający krawędzie wielokrotne nazywamy multigrafem.

Definicja 5. Graf, który nie ma krawędzi wielokrotnych i pętli, nazywamy grafem prostym.

Definicja 6. Graf zawierający pętle nazywamy pseudografem.

Definicja 7. Drogę P z wierzchołka x_1 do wierzchołka x_m w grafie G nazywamy skończony ciąg wierzchołków $x_1, x_2, \dots, x_m, m \geq 2$ i krawędzi $x_i, x_{i+1}, i = 1, \dots, m$.

Definicja 8. Grafem spójnym nazywamy graf G , w którym każde dwa wierzchołki są połączone drogą dowolnej długości. Graf, który nie jest spójny, nazywamy grafem niespójnym.

Definicja 9. Dwa wierzchołki x, y w grafie G są sąsiednie, jeżeli $xy \in E(G)$. Mówimy wtedy, że wierzchołki v i w są incydentne z tą krawędzią.

Definicja 10. Stopień wierzchołka v grafu G oznaczany symbolem $\deg(v)$ jest liczbą krawędzi incydentnych z v .

Definicja 11. Wierzchołek stopnia 0 nazywamy wierzchołkiem izolowanym, a wierzchołek stopnia 1 wierzchołkiem końcowym.

Definicja 12. Graf G taki, że $E(G) = \emptyset$, nazywamy grafem bezkrawędziowym. Jeżeli $|V(G)| = n$, to graf bezkrawędziowy oznaczony symbolem N_n . Każdy wierzchołek grafu

bezkrawędziowego jest wierzchołkiem izolowanym.

Definicja 13. Graf prosty G taki, że każde dwa wierzchołki są sąsiednie, nazywamy grafem pełnym. Jeżeli $|V(G)| = n$, to graf pełny oznaczamy K_n .

Definicja 14. Drogą w grafie jest skończony ciąg naprzemiennie występujących wierzchołków i krawędzi, rozpoczynający się i kończący wierzchołkami, taki, że każde dwie kolejno po sobie następujące krawędzie mają wspólny wierzchołek.

Definicja 15. Jeżeli $xy \in E$ i $yx \in E$ to taka para jest nazywana krawędzią nieorientowaną.

Definicja 16. Graf skierowany - graf niezawierający krawędzi nieorientowanych.

Definicja 17. Drzewem nazywany spójny graf bez cykli. Korzeń w drzewie jest jedynym wierzchołkiem, który nie ma przodka, wszystkie wierzchołki sąsiednie z korzeniem są jego potomkami.

Definicja 18. Drzewem binarnym nazywamy drzewo składające się z wyróżnionego wierzchołka nazywanego korzeniem oraz dwóch poddrzew binarnych - lewego T_l oraz prawego T_p .

3. Uczenie maszynowe

Uczenie maszynowe, znane również jako machine learning, to specjalistyczna gałąź sztucznej inteligencji, która koncentruje się na konstruowaniu modeli i algorytmów umożliwiających komputerom samodzielne uczenie się z dostępnych danych. W przeciwieństwie do systemów, które są bezpośrednio programowane do wykonania określonych zadań, systemy uczenia maszynowego analizują dane, rozpoznają wzorce i podejmują decyzje oparte na zdobytej w ten sposób wiedzy.

3.1. Podstawowe pojęcia z zakresu uczenia maszynowego

Definicje zostały zaczerpnięte z literatury, z pozycji [6], [7], [9] oraz [11].

Definicja 1. Zbiór treningowy - zbiór danych, który jest używany do trenowania modelu uczenia maszynowego.

Definicja 2. Zbiór walidacyjny - zbiór danych, który jest używany do sprawdzenia wydajności modelu uczenia maszynowego.

Definicja 3. Zbiór testowy - zbiór danych używany do oceny wydajności modelu uczenia maszynowego po przeszkoleniu go na zbiorze treningowym i ocenie na zbiorze walidacyjnym.

Definicja 4. Klasyfikacja to proces polegający na przypisaniu obiektów do wcześniej zdefiniowanych klas na podstawie ich cech.

Definicja 5. Regresja liniowa - metoda, w której model liniowy przewiduje wyniki na podstawie ważonej sumy cech wejściowych oraz stałej, nazywanej punktem obciążenia lub punktem przecięcia.

Definicja 6. Walidacja krzyżowa to proces, w którym dane dzielone są na kilka części (przyjmujemy k) zwanych "złożeniami" (lub "foldami stąd nazwa k-Fold Cross-Validation). Model jest trenowany na $k - 1$ złożeniach, a testowany na pozostałym z nich. Proces ten jest powtarzany k razy, za każdym razem używając innego złożenia do testowania, a pozostałych do treningu. Jeżeli różnica w wydajności jest znacząca, uzasadniony jest sceptycyzm odnośnie pojedynczych wyników pomiaru wydajności systemu. Z drugiej strony, jeżeli wszystkie wyniki są podobne, można mieć dużą dozę pewności, że niezależnie od konkretnego podziału na dane testowe i treningowe, wydajność systemu będzie podobna. Końcowa ocena modelu jest uzyskiwana poprzez uśrednienie wyników z każdej iteracji.

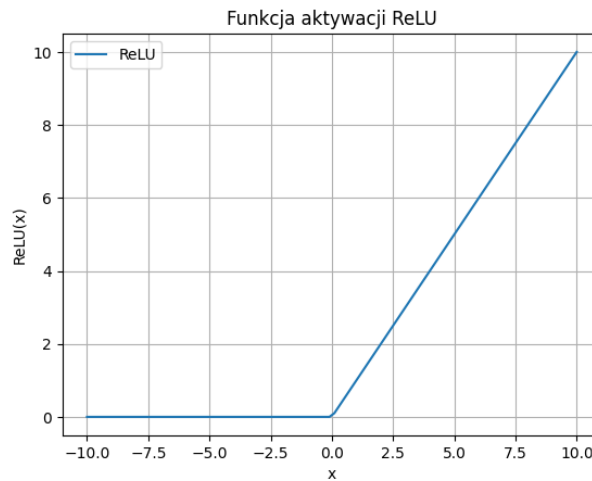
Definicja 7. Bias (błąd obciążenia) to błąd wynikający z niepoprawnych założeń w procesie uczenia maszynowego. Oznacza różnicę między przewidywaną wartością modelu a rzeczywistą wartością.

Definicja 8. Funkcje aktywacji są nieliniowe, co pozwala na modelowanie złożonych funkcji i wprowadza nieliniowość do sieci. Równanie matematyczne opisujące działanie sieci neuronowej ma postać: $Y' = g(W_o + X^T * W)$, gdzie: Y' to przewidywana wartość wyjściowa, W_o to wartość bias, X^T to transpozycja macierzy wejściowej X , W to przypisane wagi, a g to funkcja aktywacji.

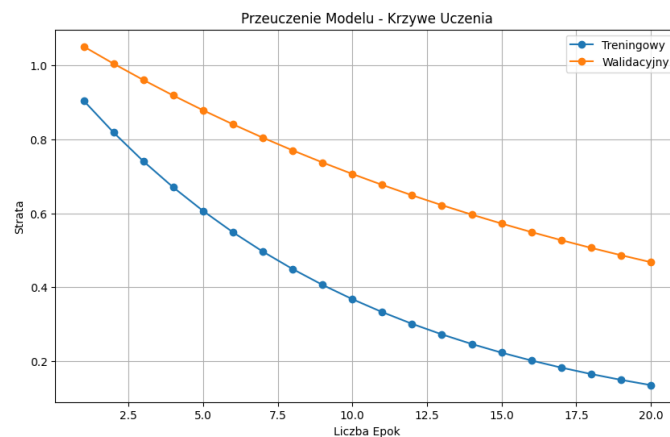
Definicja 9. Funkcja ReLU (ang. Rectified Linear Unit) - funkcja aktywacji. Jest ciągła, ale nieróżniczkowalna w punkcie $z = 0$, a jej pochodna dla $z < 0$ wynosi 0. Spisuje się bardzo dobrze w modelowaniu złożonych funkcji, a dodatkowym atutem jest jej szybkość przetwarzania. Nie ma maksymalnej wartości wyjściowej.

Definicja 10. Przeuczenie to sytuacja, w której algorytm dopasowuje się zbyt dokładnie do danych treningowych, co prowadzi do modelu, który nie potrafi dokładnie prognozować ani wnioskować na podstawie nowych danych spoza zbioru treningowego.

Definicja 11. Regularyzacja to technika stosowana w celu zapobiegania przeuczeniu modelu. Działa poprzez dodanie kary do funkcji kosztu, co penalizuje zbyt złożone modele.



Rysunek 3.6: Funkcja aktywacji ReLU. Źródło: opracowanie własne na podstawie: Géron A.: *Uczenie maszynowe z użyciem Scikit-Learn i TensorFlow*. Helion SA, Gliwice 2020.



Rysunek 3.7: Zobrazowane przeuczenie modelu

Definicja 12. Regularyzacja L2 służy do ograniczania wag sieci neuronowych, natomiast regularyzacja L1 przydaje się do tworzenia modeli rzadkich (w których wiele wag ma wartość równą 0). Zazwyczaj powinno się stosować ten sam typ regularyzatora we wszystkich warstwach sieci.

Definicja 13. Epoka to pełny cykl przez cały zbiór danych treningowych, w której model przetwarza wszystkie dostępne dane treningowe. Liczba epok określa ile razy model przejdzie przez cały zbiór danych treningowych.

Definicja 14. Dokładność modelu to stosunek oznaczonych prawidłowo wartości do przykładów sklasyfikowanych nieprawidłowo.

Definicja 15. Koncepcja macierzy pomyłek polega na zliczaniu przypadków zakla-

syfikowania próbek z klasy A jako przykładów należących do klasy B. Aby utworzyć taką macierz, należy uzyskać zbiór prognoz, które porównywane są z rzeczywistymi wartościami docelowymi.

Definicja 16. Strata modelu to wartość, która wskazuje, jak bardzo prognozy modelu różnią się od rzeczywistych wartości dla pojedynczych przykładów. Idealnie przewidziane wartości mają stratę równą zero, natomiast im większa różnica między prognozami a rzeczywistością, tym wyższa jest strata.

Definicja 17. Algorytm t-SNE (t-Distributed Stochastic Neighbor Embedding) to technika redukcji wymiarowości, która szczególnie dobrze nadaje się do wizualizacji wielowymiarowych zbiorów danych. Można ją zaimplementować przy użyciu aproksymacji Barnes-Huta, co umożliwia stosowanie jej na dużych, rzeczywistych zbiorach danych.

Definicja 18. Entropia krzyżowa

Definicja 19. Konwergencja modelu

Definicja 20. Batch Normalization

Definicja 21. Caching

Definicja 22. Prefetching

3.2. Warstwy w modelach sieci neuronowych

Głębokie sieci neuronowe, opierają się na strukturze warstw, które przekształcają i analizują dane wejściowe, aby uzyskać z nich pożądane cechy. Każda z tych warstw pełni pewną, specyficzną funkcję, począwszy od przeskalowania danych, przez konwolucje (przekształcenie macierzowe danych), aż po bardziej zaawansowane operacje, umożliwiając modelowi sprawniejsze uczenie się bardziej złożonych wzorców.

- Warstwa Flatten (spłaszczona) ma za zadanie przekształcić każdy obraz wejściowy w tablicę jednowymiarową. Nie zawiera żadnych parametrów, a jej jedynym celem jest proste, wstępne przetworzenie danych [7].
- Warstwa Dense (w pełni połączona) zarządza samodzielnie swoją macierzą wag, zawierającą wszystkie wagi połączeń między neuronami a wejściami do nich, oraz wektorem obciążeń. Zawiera najczęściej bardzo dużo parametrów, dzięki czemu model uzyskuje swobodę w dopasowaniu do danych treningowych. Jednocześnie, grozi mu również przez to ryzyko przetrenowania, zwłaszcza w przypadku korzystania z

mniejszych zestawów danych [7].

- Warstwa Rescaling mnoży każde wejście przez ustalony współczynnik skalujący. Zastosowanie tej techniki jest przydatne, gdy różne cechy danych wejściowych mają różne zakresy wartości. Poprzez jednolite skalowanie, model może efektywniej uczyć się wzorców, a proces optymalizacji staje się stabilniejszy [6].
- Warstwa Conv2D tworzy jądro splotu, które jest nakładane na dane wejściowe w jednym wymiarze przestrzennym (lub czasowym), aby wygenerować tensor danych wyjściowych. Dodatkowo, jeśli stosowana jest funkcja aktywacji, jest ona stosowana również do danych wyjściowych [7].
- Warstwa MaxPooling2D dokonuje redukcji wymiarów danych wejściowych wzdłuż ich wymiarów przestrzennych (wysokości i szerokości), wybierając maksymalną wartość z każdego okna o rozmiarze określonym przez wybrany współczynnik *pool_size*, dla każdego kanału danych wejściowych. Okno to jest przesuwane o określoną liczbę kroków wzdłuż obu wymiarów [7].
- Warstwa Dropout losowo zeruje jednostki wejściowe z prawdopodobieństwem określonym przez wybrany współczynnik dropout na każdym etapie treningu, co pomaga unikać przeuczenia modelu. Jednostki, które nie zostały wyzerowane, są skalowane w górę przez mnożenie przez $\frac{1}{1-\text{współczynnikDropout}}$, aby suma wartości wejściowych pozostała niezmienną [7].

3.3. Rodzaje uczenia maszynowego

Według [7], uczenie maszynowe można sklasyfikować na podstawie kilku kryteriów. Jest to nadzór człowieka w procesie trenowania, możliwość modelu do uczenia się w czasie rzeczywistym oraz sam sposób pracy (nauka z przykładów lub modelu). Kryteria te nie wykluczają się wzajemnie - można je dowolnie łączyć. Za przykład może posłużyć filtr antyspamowy, który ciągle się uczy, wykorzystując model sieci neuronowej i analizując wiadomości email. Taki system można określić przyrostowym, opartym na modelu i nadzorowanym.

Dodatkowe kryteria oceny rodzaju uczenia maszynowego:

- Uczenie nadzorowane (ang. supervised learning) to podejście, w którym model jest szkolony na danych, które są już odpowiednio oznaczone (np. rekordy mają przy-

pisane odpowiednie klasy). Celem jest odkrycie funkcji, która przekształca dane wejściowe w oczekiwane wyjścia. Znajduje zastosowanie w klasyfikacji i regresji. Przykład: Klasyfikacja wiadomości e-mail jako spam lub nie-spam.

- Uczenie nienadzorowane (ang. unsupervised learning) - w tym przypadku model bada nieoznaczone dane, aby odkryć pewne wzorce lub struktury. Najczęściej stosowane w klasteryzacji, czy redukcji wymiarowości. Przykłady:
 - * Klasteryzacja klientów w celu segmentacji rynku, gdzie klienci są grupowani na podstawie ich zachowań zakupowych.
 - * Redukcja wymiarowości w celu wizualizacji danych wysokowymiarowych, np. za pomocą algorytmu t-SNE.
- Uczenie przez wzmocnienie (ang. reinforcement learning) to przypadek, gdzie model uczy się poprzez interakcję ze swoim otoczeniem, podejmując decyzje, które maksymalizują pewną nagrodę. Przykłady:
 - * Algorytmy sterujące robotami, które uczą się poruszać w nieznanym terenie.
 - * Programy grające w gry, takie jak AlphaGo (chińska gra Go), które uczą się strategii gry poprzez rozgrywanie wielu partii.

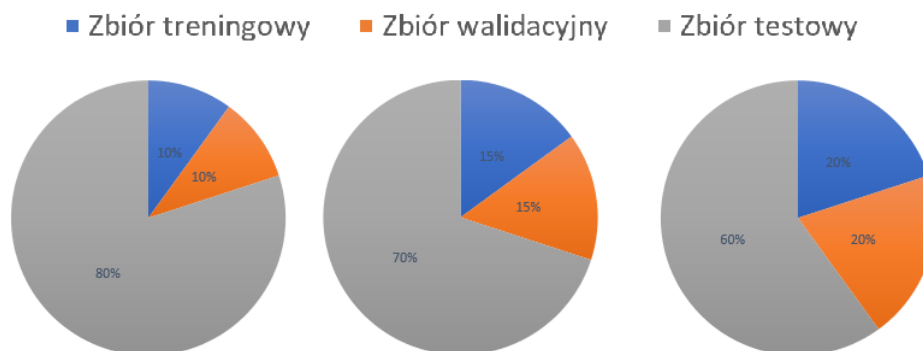
3.4. Proces uczenia maszynowego

Proces uczenia maszynowego można podzielić na kilka etapów, które są niezbędne do stworzenia skutecznego modelu zdolnego do samodzielnej nauki na podstawie zebranych danych.

Należy rozpocząć od zgromadzenia danych z odpowiednich źródeł. Mogą obejmować bazy danych, API, pliki CSV, czujniki, logi systemowe czy nawet wpisy z mediów społecznościowych. Dane mogą być ustrukturyzowane (np. tabele w bazach danych) lub nieustrukturyzowane (np. obrazy, tekst).

Dalej, konieczne jest przygotowanie danych do odpowiedniego formatu. Obejmuje to usunięcie brakujących, pustych oraz błędnych wartości, radzenie sobie z duplikatami i anomaliami, skalowanie cech, kodowanie zmiennych kategorycznych, normalizację danych oraz podzielenie danych na zbiory treningowe, walidacyjne i testowe.

Najczęściej, podział na zbiory dokonuje się w proporcjach 70-80% na trening, 10-15% na walidację i 10-15% na testy. Jest to zależne od specyfiki problemu, dlatego



Rysunek 3.8: Przykład podziału danych na zbiory treningowe, walidacyjne i testowe

konieczne jest odpowiednie przygotowanie i zbadanie danych przed podjęciem decyzji.

Wybór modelu to proces, który zależy od rodzaju problemu (np. regresja, klasyfikacja, klasteryzacja) oraz charakterystyki danych, gdzie najpopularniejsze modele to drzewa decyzyjne, lasy losowe, maszyny wektorów nośnych (SVM), sieci neuronowe, k -najbliższych sąsiadów (k -NN) i regresja liniowa/logistyczna. Trenowanie modelu to kolejny etap, który polega na dostosowaniu parametrów modelu do danych treningowych, w tym dostosowaniu hiperparametrów modelu (parametrów, które nie są uczone, np. liczba warstw w sieci neuronowej) poprzez metodę walidacji krzyżowej lub inne techniki optymalizacji.

Ewaluacja obejmuje ocenę modelu za pomocą pewnych metryk, takich jak dokładność, precyzja, recall, F1-score, błąd średniokwadratowy (MSE), błąd absolutny (MAE), a także analizy wydajności modelu w przypadku klasyfikacji binarnej. Optymalizacja modelu to kolejny etap, który obejmuje dalsze dostosowanie hiperparametrów, wybór cech, które najbardziej wpływają na wynik modelu, próby różnych architektur modelu oraz zastosowanie technik takich jak L1, L2, dropout, które zapobiegają przeuczeniu modelu.

Implementacja modelu jest procesem, w którym wdrażany jest model w środowisku produkcyjnym. Zakłada ona przeprowadzenie integracji z aplikacjami zewnętrznymi, tworzenie API serwujących dane, zautomatyzowanie decyzji, czy też śledzenie wydajności modelu w czasie rzeczywistym, aby wykryć ewentualne pogorszenie jakości (drift danych) i regularne aktualizacje modelu. Aktualizacja i utrzymanie modelu to kolejny etap, który obejmuje regularne aktualizowanie modelu na podstawie nowych danych, aby utrzymać jego dokładność i skuteczność, ciągle monitorowanie, aby

zapewnić, że model działa zgodnie z oczekiwaniami i nie występują niepożądane zachowania. Proces uczenia maszynowego jest iteracyjny i wymaga ciągłej interakcji między danymi, modelem i wynikami, aby osiągnąć optymalne rezultaty.

4. Wykorzystywane technologie

Praca opiera się na wykorzystaniu języka R oraz Python do generowania zbiorów danych, wszelkich manipulacji na nich oraz ich klasyfikacji.

4.1. Język R



Rysunek 4.9: Logo R [19]

Język R to szeroko stosowany w statystyce, analizie danych oraz naukach przyrodniczych język interpretowalny. Nie ma on skomplikowanej składni i jest przystosowany do bycia jak najbardziej przyjaznym dla nowego użytkownika. Oprócz dużych możliwości obliczeniowych, jest również świetnym narzędziem do wizualizacji danych, co spowodowało, że został wybrany do stworzenia zbioru danych. Grafy wygenerowane zostały przy pomocy biblioteki `igraph` w wersji 2.0.3. Jest to pakiet do tworzenia i analizy struktur sieci, a co za tym idzie oferuje bogaty wybór funkcji do generowania losowych i regularnych grafów oraz ich wizualizacji.

4.2. Język Python



Rysunek 4.10: Logo Python [18]

Język Python jest jednym z najpopularniejszych języków wysokopoziomowych ogólnego przeznaczenia. Zawdzięcza to swojej wszechstronności oraz prostocie składni. Znaczna liczba bibliotek pozwala na wykorzystywanie Pythona od prostych skryptów,

przez analizę danych, aż po rozbudowane aplikacje, takie jak całe systemy największych gigantów technologicznych, np. Google. Język ten jest szeroko wykorzystywany w dziedzinie Data Science do wizualizacji, analizy i przetwarzania danych oraz w uczeniu maszynowym. Ostatnie z wymienionych zastosowań zdecydowało o wyborze języka Python jako narzędzia do stworzenia modelu klasyfikacji grafów. Wykorzystana została biblioteka Keras z pakietu Tensorflow.

4.3. Stanowisko pracy

Całość pracy, tj. generacja danych, modele oraz testy, została przygotowana na komputerze osobistym o parametrach:

- CPU: i5-10400F 2.9 GHz
- RAM: 32 GB 3200 MHz
- GPU: ADM Radeon RX 5600 XT 6GB
- Dysk: 2 x 1 TB HDD, 1 TB NVMe, 120 GB SSD
- System operacyjny: Windows 10

System nie posiada karty graficznej zoptymalizowanej pod zastosowania uczenia maszynowego. Biblioteki języka Python obsługują jednak karty graficzne AMD, co umożliwia pracę.

5. Opis modelu

Model uczenia maszynowego jaki został wykorzystany w testach to sieć neuronalna.

Do testów stworzone zostało kilka modeli sieci neuronowych, wytrenowanych na rysunkach grafów stworzonych za pomocą skryptów R. Implementacja została wykonana biblioteką TensorFlow oraz Keras w języku Python. Modele są w stanie rozpoznawać rysunki grafów i przypisywać im odpowiednie klasy. Celem było również przetestowanie modeli na rzeczywistych zdjęciach, zawierających wzorce przypominające grafy, bądź rysunkach grafów narysowanych ręcznie.

Klasy, których rozpoznawania uczony był model:

- Graf bezkrawędziowy

- Graf pełny
- Drzewo binarne
- Ścieżka
- Cykl

Stworzone zostały 4 modele:

- wytrenowany na danych ze stałą liczbą wierzchołków
- wytrenowany na danych ze stałą liczbą wierzchołków oraz walidacją krzyżową
- wytrenowany na danych ze zmienną liczbą wierzchołków
- wytrenowany na danych ze zmienną liczbą wierzchołków oraz walidacją krzyżową

5.1. Generacja danych

Dane wygenerowane zostały przy pomocy skryptu stworzonego w języku R oraz biblioteki igraph. Skrypt został zaprojektowany funkcyjnie, by osiągnąć możliwie największą automatyzację testów. Rysunki grafów tworzone były o wielkości 800x600 pikseli, na białym tle, z wierzchołkami w kolorze pomarańczowym, bez jakichkolwiek oznaczeń wierzchołków oraz zapisywane w odpowiednich katalogach, odpowiadających klasie grafu. Przygotowane zostały funkcje tworzące ścieżki, cykle, grafy pełne, grafy bezkrawędziowe oraz drzewa binarne. W każdej z funkcji możliwy jest wybór liczby generowanych grafów, liczba wierzchołków grafu oraz współczynnik odpowiadający za zakrzywienie krawędzi na rysunkach.

```

1  #' Rysuj graf
2  #'
3  #' @param graph Graph - Graf do narysowania
4  #' @param pathName string - Ścieżka
5  #' @param fileName string - Nazwa pliku
6  #' @param vertexNo int - liczba wierzchołków
7  #' @param i int - Numer iteracji
8  #' @param plotCurve float
9  #' @return void
10 #'
11 plotGraphHelper <- function(graph, pathName, fileName,
12   vertexNo, i, plotCurve)
13 {
14   path <- file.path(pathName, paste0(
15     fileName, "-", vertexNo, "-", i, ".png"
  
```

```

16 png(path, width = 800, height = 600)
17 plot(graph, vertex.label = NA, edge.curved = plotCurve)
18 dev.off()
19 }

```

Listing 1: Listing skryptu rysującego grafy

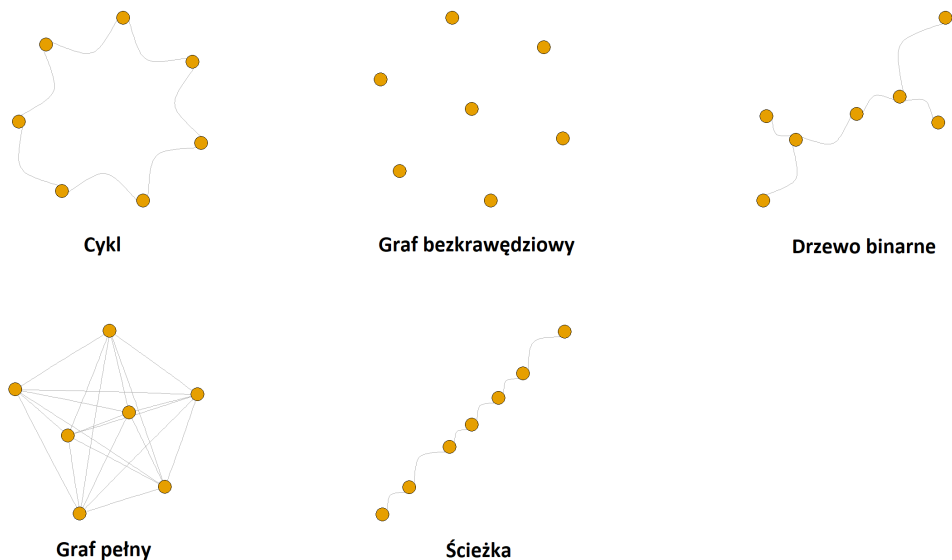
```

1  #' Graf sciezka N wierzchołkow, nieskierowany
2  #'
3  #' @param N int - liczba rysunkow
4  #' @param vertexNo int - liczba wierzchołkow
5  #' @return void
6  #'
7  plotPaths <- function(N, vertexNo)
8  {
9      fileName <- 'path'
10     pathName <- createDir(vertexNo, fileName)
11     definition <- c()
12     for (index in 1:(vertexNo-1))
13     {
14         definition <- c(definition, index, index + 1)
15     }
16     definitionMatrix <- matrix(
17         definition, ncol = 2, byrow = TRUE
18     )
19
20     for (i in 1:N)
21     {
22         plotCurve <- generateGaussian(0.01, 0.99)
23         graph <- graph_from_edgelist(
24             definitionMatrix, directed = FALSE
25         )
26         E(graph)$weight <- runif(ecount(graph))
27         plotGraphHelper(
28             graph, pathName, fileName, vertexNo, i, plotCurve
29         )
30     }
31 }

```

Listing 2: Listing funkcji tworzącej ścieżkę

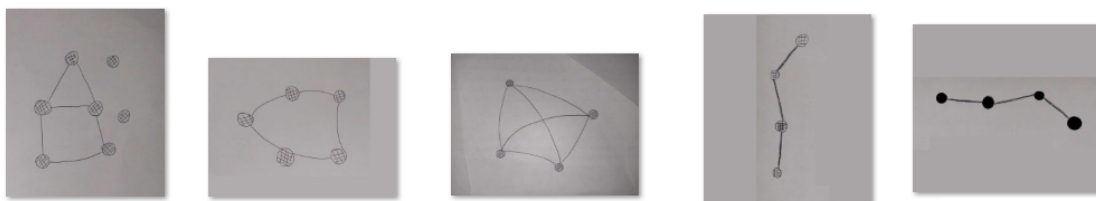
W testach wykorzystane zostały wszystkie wybrane typy grafów. Każdy z nich, czyli dana liczba wierzchołków i typ grafu, wygenerowany został w liczbie 500 sztuk. Warianty liczby wierzchołków generowanych grafów to 4, 5, 6 oraz 7 wierzchołków. Testy zostały przeprowadzone na dwa sposoby - ze stałą krzywizną krawędzi, wynoszącą 0,3, oraz z losowym parametrem krzywizny krawędzi, mieszczącym się w przedziale od 0 do 1.



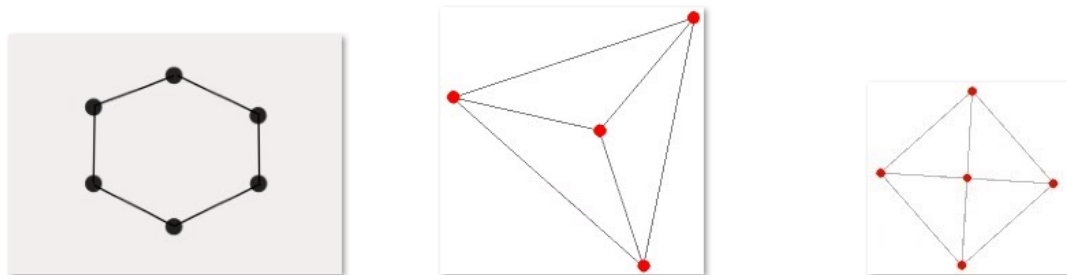
Rysunek 5.11: Przykładowe wygenerowane rysunki grafów z każdej klasy

5.2. Dane zewnętrzne

Obrazy testowe, które nazwane są tutaj danymi zewnętrznymi, są rysunkami grafów pochodzącymi spoza przygotowanego testu. Dzieli się na obrazy pobrane z internetu, obrazy wygenerowane przez skrypt w R, ale nie używane w treningu, oraz rysunki odręczne grafów. Typy danych zewnętrznych wybiegają poza klasy grafów wykorzystywanych przy uczeniu modelu.



Rysunek 5.12: Przykładowe zewnętrzne rysunki grafów narysowane odręcznie



Rysunek 5.13: Przykładowe zewnętrzne rysunki grafów pobrane z internetu

5.3. Opis ogólny skryptu

5.3.1. Przygotowanie

Wszystkie przygotowane skrypty testowe rozpoczynają się od przygotowania środowiska do trenowania modelu. Najpierw ustawiana jest ścieżka do katalogów z wygenerowanymi grafami oraz do katalogów na dane treningowe i walidacyjne. Następnie sprawdzane jest, czy te katalogi istnieją, a jeśli nie, są tworzone. Dalej, skrypty definiują parametry dotyczące wielkości obrazów oraz wielkości partii danych, które będą używane podczas treningu. Dla każdej wartości liczby wierzchołków ustawiana jest ścieżka do katalogu z wygenerowanymi grafami, pobierana lista podkatalogów oraz obrazów w każdym z nich. Następnie obrazy dzielone są na zestawy treningowe i walidacyjne w stosunku 80:20. W przypadku modeli wykorzystujących wszystkie warianty liczby wierzchołków, dane przenoszone są do jednego katalogu i od razu dzielone na zbiory treningowe i walidacyjne.

5.3.2. Model

Każdy typ modelu tworzony jest w inny sposób. Opisana zostanie tu główna zasada i ich elementy wspólne. Na początku, skrypt wczytuje obrazy przygotowane na wcześniejszym etapie do odpowiednich zmiennych - treningowe i walidacyjne. W przypadku modeli z walidacją krzyżową, dla każdej iteracji walidacyjnej, dane zostały podzielone inaczej. Po wczytaniu danych, zostają one przeskalowane do wielkości 180x180 pikseli i przekształcone do odcieni szarości.

```

1  n_splits = 5
2  kfold = KFold(n_splits=n_splits, shuffle=True, random_state
   =42)
3  history = []
4  all_images = [os.path.join(dp, f) for dp, dn, filenames in os.
   walk(data_dir_model) for f in filenames if os.path.splitext(f
   )[1] == '.png']

```

```

5
6 for train_index, val_index in kfold.split(all_images):
7     train_images = [all_images[i] for i in train_index]
8     validation_images = [all_images[i] for i in val_index]
9
10    # Generowanie danych treningowych
11    train_ds = tf.keras.preprocessing.
image_dataset_from_directory(
12        train_dir,
13        image_size=(img_height, img_width),
14        batch_size=batch_size)
15
16    class_names = train_ds.class_names
17
18    train_ds = train_ds.map(lambda x, y: (rgb_to_grayscale(x), y
19    ))
20
21    # Generowanie danych walidacyjnych
22    val_ds = tf.keras.preprocessing.image_dataset_from_directory
23    (
24        validation_dir,
25        image_size=(img_height, img_width),
26        batch_size=batch_size)
27
28    val_ds = val_ds.map(lambda x, y: (rgb_to_grayscale(x), y))
29
30    # Tworzenie modelu
31    model = tf.keras.models.Sequential([
32        tf.keras.layers.Rescaling(1./255),
33        tf.keras.layers.Conv2D(32, 3, activation='relu'),
34        tf.keras.layers.MaxPooling2D(),
35        tf.keras.layers.Conv2D(32, 3, activation='relu'),
36        tf.keras.layers.MaxPooling2D(),
37        tf.keras.layers.Conv2D(32, 3, activation='relu'),
38        tf.keras.layers.MaxPooling2D(),
39        tf.keras.layers.Flatten(),
40        tf.keras.layers.Dense(128, activation='relu',
kernel_regularizer=tf.keras.regularizers.l2(0.01)),
41        tf.keras.layers.Dropout(0.2),
42        tf.keras.layers.Dense(len(class_names))
43    ])
44
45    # Kompilacja modelu
46    model.compile(
47        optimizer='adam',
48        loss=tf.losses.SparseCategoricalCrossentropy(from_logits=
True),
49        metrics=['accuracy']
50    )
51
52    # Uczenie modelu
53    history.append(model.fit(
54        train_ds,
55        validation_data=val_ds,
56        epochs=75
57    ))

```

Listing 3: Listing skryptu tworzącego model z walidacją krzyżową oraz uczonym na wszystkich wariantach liczby wierzchołków grafów

Model sieci neuronowej został zdefiniowany jako sekwencyjny stos warstw. Dla standaryzacji danego testu, w przypadku modeli z walidacją krzyżową, ustalono K-Fold z liczbą podziałów równą 5. Pierwsza warstwa to warstwa Rescaling, która normalizuje wartości pikseli do zakresu $[0, 1]$. W przykładzie, parametr $1./255$ oznacza, że każda wartość piksela mnożona jest przez $\frac{1}{255}$. Następne trzy warstwy to Conv2D, z których każda jest następowana warstwą MaxPooling2D. W przykładzie, warstwa kolwolucyjna stosuje 32 filtry o wymiarach 3×3 oraz funkcję aktywacji ReLU, która wprowadza nieliniowość do modelu. MaxPooling2D redukuje rozmiar danych wejściowych, wybierając maksymalną wartość z każdego regionu (domyślnie oraz tutaj - 2×2). Po wyżej wymienionych warstwach, znajduje się warstwa Flatten, która przekształca mapy cech 2D w wektor 1D. Innymi słowy, przekształca wielowymiarową macierz wyjściową z poprzedniej warstwy do jednowymiarowego wektora. Następnie, dodana jest w pełni połączona (Dense) warstwa z 128 neuronami i funkcją aktywacji, podobnie jak w przypadku Conv2D, ReLU. Wprowadzona jest również regularizacja L2, która dodaje karę za duże wartości wag, by zmniejszyć ryzyko przeuczenia. Została zastosowana z siłą 0,01. Kolejna warstwa to Dropout, która losowo wyłącza 20% neuronów podczas uczenia, co również jest metodą zapobiegającą przeuczeniu. Warstwa wyjściowa zawiera tyle jednostek, ile występuje klas w danych uczących. Zależnie od danego testu, może być to różna liczba. W przypadku warstw konwolucyjnych, wybrano 32 filtry, a dla warstwy w pełni połączonej zastosowano 128 jednostek. Liczba epok w podstawowej wersji modelu wyniosła 75.

W kolejnych wariantach modeli, zmieniane były parametry poszczególnych warstw, funkcje aktywacji, czy również same warstwy, w celu znalezienia najbardziej optymalnej kombinacji.

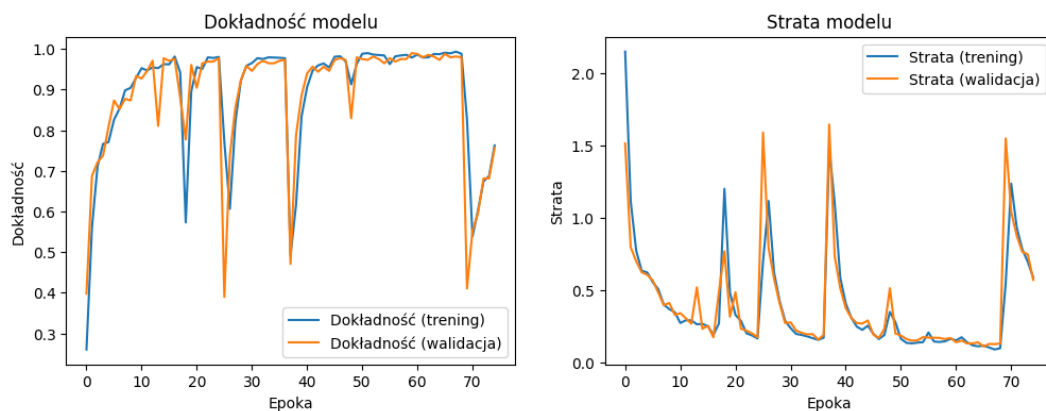
5.3.3. Wyniki

Po wytrenowaniu modelu, skrypt dokonuje wizualizacji dokładności i straty modelu. Najpierw wyświetla w konsoli wartości dokładności dla obu zbiorów z historii treningu. Dalej tworzy wykresy, gdzie na pierwszym z nich pokazuje dokładność na zbiorze treningowym i walidacyjnym, a na drugim wykresie prezentuje stratę modelu dla obu

zbiorów. Jednostką straty jest entropia krzyżowa (cross-entropy), która jest wyrażana jako liczba bezwzględna. Entropia krzyżowa mierzy różnicę między rzeczywistymi etykietami a przewidywanymi prawdopodobieństwami klas. Im mniejsza wartość entropii krzyżowej, tym lepiej model przewiduje klasy. Dokładność jest wyrażana jako wartość procentowa lub ułamek, gdzie 1 oznacza 100% dokładności. Na przykład, jeśli model przewiduje poprawnie 90 na 100 przypadków, dokładność wynosi 0.9 lub 90%.

```
Dokładność na zbiorze treningowym: [0.23868182178391883, 0.3693181872367859, 0.7579545378684998, 0.8249999888079871, 0.8682272868156433, 0.897727251
Dokładność na zbiorze walidacyjnym: [0.22727273484598236, 0.7477272748947144, 0.8659090995788574, 0.875, 0.9090909361839294, 0.9159091114997864, 0.
```

Rysunek 5.14: Przykładowe wartości dokładności dla zbioru treningowe i walidacyjnego



Rysunek 5.15: Przykładowa wizualizacja dokładności i straty wytrenowanego modelu

5.3.4. Testy na danych zewnętrznych

Po wyświetleniu dokładności modelu skrypt przeszukuje katalog z danymi i jego podkatalogi, by przygotować obrazy zewnętrzne. Następnie ustawia ścieżkę do katalogu z obrazami testowymi i pobiera ich listę. Dla każdego obrazu w tej liście wczytuje go, przeskalowuje do odpowiedniego rozmiaru i konwertuje do skali szarości. Następnie model przewiduje klasę obrazu, a wynik jest wyświetlany w konsoli.

6. Testy

6.1. Testy modeli

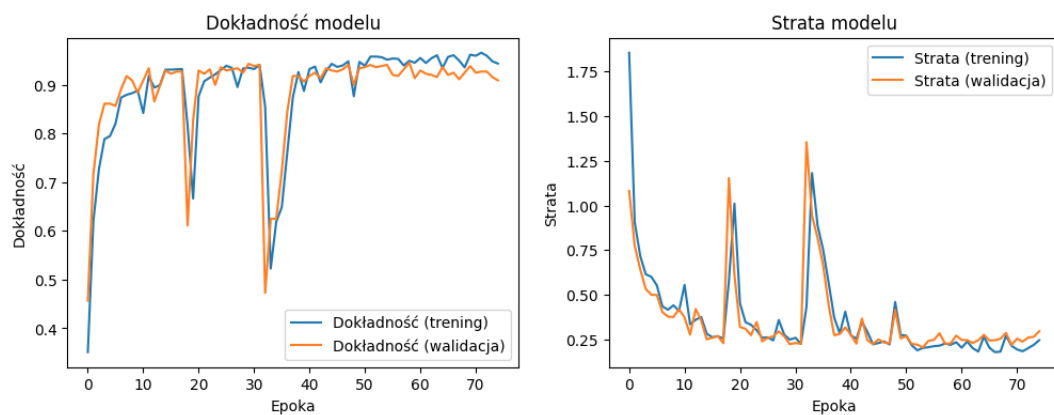
6.1.1. Model podstawowy

Model uczony na losowej krzywiźnie wierzchołków

Dokładność modelu podstawowego, uczonego na grafach z czterema wierzchołkami stopniowo rośnie, zaczynając od około 40% i osiągając prawie 90% pod koniec

procesu uczenia. Może to sugerować, że model dobrze uczy się na danych treningowych. Dokładność na danych walidacyjnych jest zbliżona do wcześniej przytoczonej. Wskazuje to, że model dobrze radzi sobie z generalizacją na nowych danych.

Strata na danych treningowych gwałtownie spada z około 1,75 do około 0,25 w ciągu pierwszych dziesięciu epok, po czym stabilizuje się. Wskazuje to na szybkie uczenie się na danych treningowych. Strata na danych walidacyjnych jest nieznacznie bardziej zmienna, z kilkoma wzrostami w późniejszych epokach. Może to sugerować trudności z generalizacją na nowych danych.



Rysunek 6.16: Wyniki testów dla modelu podstawowego z losową krzywizną wierzchołków, liczba wierzchołków = 4

Ogólnie rzecz biorąc, model wydaje się dobrze uczyć na danych treningowych i generalizować na danych walidacyjnych, chociaż zmienność straty walidacyjnej może wskazywać na pewne problemy z przeuczeniem.

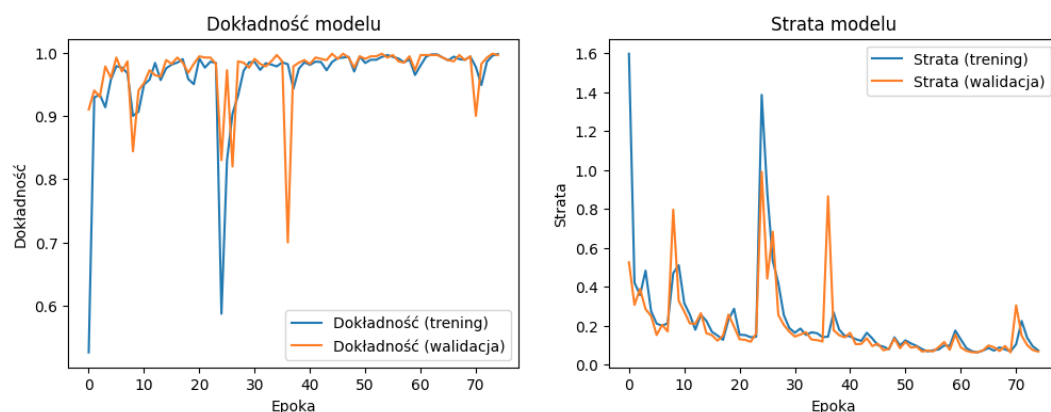
```

1/1 0s 63ms/step
|- test_graphs\drawn\connected-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 99.80 procent.
1/1 0s 19ms/step
|- test_graphs\drawn\cycle-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 99.97 procent.
1/1 0s 17ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-1.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 0s 17ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-2.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 0s 18ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-3.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 0s 18ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 99.84 procent.
1/1 0s 18ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-2.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 99.15 procent.
1/1 0s 18ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-3.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 99.99 procent.
1/1 0s 21ms/step
|- test_graphs\generated\cycle-45.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 72.96 procent.
1/1 0s 20ms/step
|- test_graphs\generated\full-113.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 0s 20ms/step
|- test_graphs\generated\path-78.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- path -| z prawdopodobieństwem 92.26 procent.
1/1 0s 19ms/step
|- test_graphs\internet\internet-cycle-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 69.63 procent.
1/1 0s 19ms/step
|- test_graphs\internet\internet-full-1.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 99.77 procent.
1/1 0s 18ms/step
|- test_graphs\internet\internet-full-2.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 99.90 procent.

```

Rysunek 6.17: Klasyfikacja obrazów zewnętrznych dla modelu podstawowego z losową krzywą wierzchołków, liczba wierzchołków = 4

Model przewidział poprawnie 50% grafów, co nie jest najgorszym wynikiem, zważając że jest to najbardziej podstawowa wersja testowanego modelu.



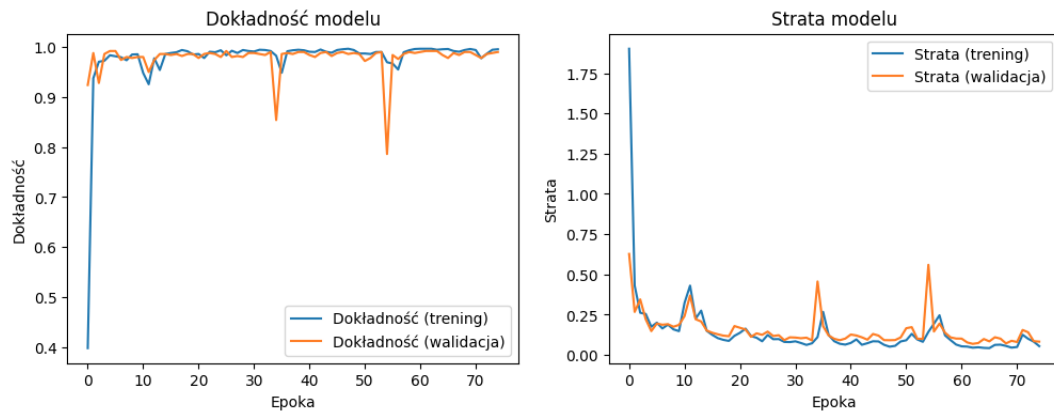
Rysunek 6.18: Wyniki testów dla modelu podstawowego z losową krzywą wierzchołków, liczba wierzchołków = 5

```

1/1 0s 67ms/step
|- test_graphs\drawn\connected-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 0s 18ms/step
|- test_graphs\drawn\cycle-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 0s 19ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-1.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 99.99 procent.
1/1 0s 18ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-2.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 0s 17ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-3.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 0s 18ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 98.76 procent.
1/1 0s 18ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-2.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- tree-binary -| z prawdopodobieństwem 63.55 procent.
1/1 0s 18ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-3.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 99.60 procent.
1/1 0s 18ms/step
|- test_graphs\generated\cycle-45.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 0s 17ms/step
|- test_graphs\generated\full-113.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 99.61 procent.
1/1 0s 18ms/step
|- test_graphs\generated\path-78.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- path -| z prawdopodobieństwem 99.88 procent.
1/1 0s 18ms/step
|- test_graphs\internet\internet-cycle-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 99.82 procent.
1/1 0s 18ms/step
|- test_graphs\internet\internet-full-1.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- tree-binary -| z prawdopodobieństwem 86.17 procent.
1/1 0s 17ms/step
|- test_graphs\internet\internet-full-2.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle -| z prawdopodobieństwem 98.09 procent.

```

Rysunek 6.19: Klasyfikacja obrazów zewnętrznych dla modelu podstawowego z losową krzywą wierzchołków, liczba wierzchołków = 5



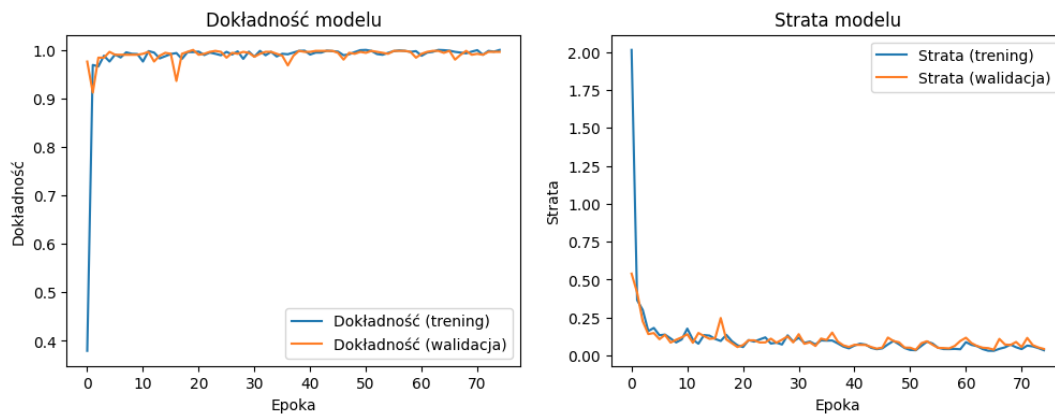
Rysunek 6.20: Wyniki testów dla modelu podstawowego z losową krzywą wierzchołków, liczba wierzchołków = 6

```

1/1 ----- 0s 67ms/step
|- test_graphs\drawn\connected-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 99.98 procent.
1/1 ----- 0s 17ms/step
|- test_graphs\drawn\cycle-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle -| z prawdopodobieństwem 80.90 procent.
1/1 ----- 0s 19ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-1.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 99.97 procent.
1/1 ----- 0s 18ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-2.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 ----- 0s 18ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-3.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 ----- 0s 17ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 93.46 procent.
1/1 ----- 0s 17ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-2.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 84.06 procent.
1/1 ----- 0s 18ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-3.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 99.95 procent.
1/1 ----- 0s 17ms/step
|- test_graphs\generated\cycle-45.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle -| z prawdopodobieństwem 97.19 procent.
1/1 ----- 0s 18ms/step
|- test_graphs\generated\full-113.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 86.45 procent.
1/1 ----- 0s 17ms/step
|- test_graphs\generated\path-78.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- path -| z prawdopodobieństwem 99.90 procent.
1/1 ----- 0s 17ms/step
|- test_graphs\internet\internet-cycle-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 ----- 0s 17ms/step
|- test_graphs\internet\internet-full-1.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 98.80 procent.
1/1 ----- 0s 17ms/step
|- test_graphs\internet\internet-full-2.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- empty -| z prawdopodobieństwem 98.36 procent.

```

Rysunek 6.21: Klasyfikacja obrazów zewnętrznych dla modelu podstawowego ze stałą krzywą wierzchołków, liczba wierzchołków = 6



Rysunek 6.22: Wyniki testów dla modelu podstawowego z losową krzywą wierzchołków, liczba wierzchołków = 7

```

1/1 ----- 0s 106ms/step
|- test_graphs\drawn\connected-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 99.92 procent.
1/1 ----- 0s 18ms/step
|- test_graphs\drawn\cycle-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 96.60 procent.
1/1 ----- 0s 17ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-1.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 99.99 procent.
1/1 ----- 0s 18ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-2.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 ----- 0s 17ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-3.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 ----- 0s 17ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 54.20 procent.
1/1 ----- 0s 19ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-2.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- tree-binary -| z prawdopodobieństwem 96.28 procent.
1/1 ----- 0s 17ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-3.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 85.59 procent.
1/1 ----- 0s 19ms/step
|- test_graphs\generated\cycle-45.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 ----- 0s 17ms/step
|- test_graphs\generated\full-113.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 98.91 procent.
1/1 ----- 0s 18ms/step
|- test_graphs\generated\path-78.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- path -| z prawdopodobieństwem 99.88 procent.
1/1 ----- 0s 17ms/step
|- test_graphs\internet\internet-cycle-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 ----- 0s 18ms/step
|- test_graphs\internet\internet-full-1.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 99.90 procent.
1/1 ----- 0s 17ms/step
|- test_graphs\internet\internet-full-2.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- empty -| z prawdopodobieństwem 98.40 procent.

```

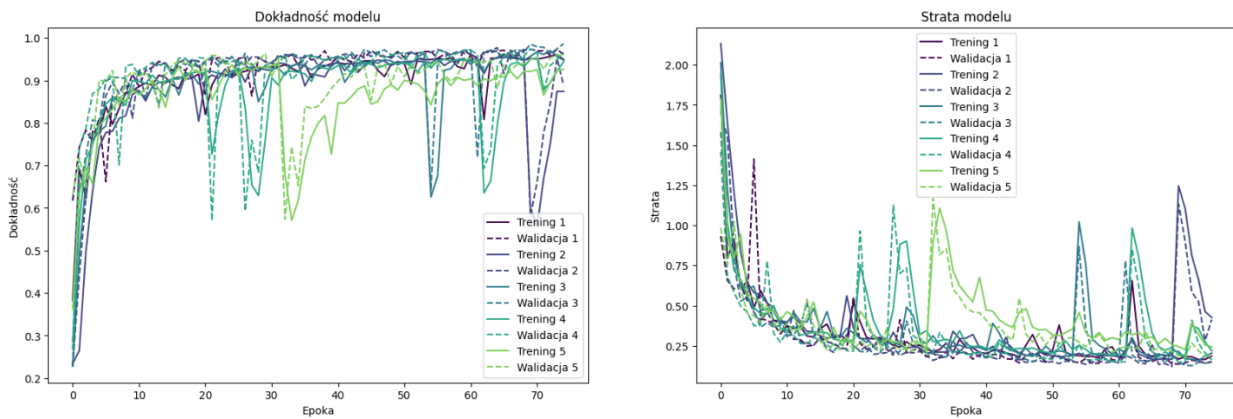
Rysunek 6.23: Klasyfikacja obrazów zewnętrznych dla modelu podstawowego z losową krzyżową wierzchołków, liczba wierzchołków = 7

6.1.2. Model z walidacją krzyżową

Model uczony na losowej krzyżówce wierzchołków

W przypadku modelu z walidacją krzyżową, uczonego na grafach z 4 wierzchołkami, dokładność wzrasta gwałtownie na początku treningu, osiągając wartości powyżej 0.8 już po około 10 epokach. Dokładność stabilizuje się w okolicach 90%, ale mimo to widać pewne fluktuacje, zwłaszcza na danych walidacyjnych. Możliwe do zaobserwowania są regularne spadki dokładności w niektórych epokach, co może wynikać z niestabilnego treningu lub problemów modelu w generalizacji dla niektórych danych walidacyjnych.

Dla straty modelu można zaobserwować spadek w pierwszych 10 epokach, co mogłoby wskazywać na szybkie uczenie się modelu. Zaraz po nim, następuje stabilizacja na niskim poziomie, z pojedynczymi skokami, głównie na zbiorze walidacyjnym. Nie-regularne wzrosty straty, podobnie jak w przypadku dokładności, mogą wskazywać na problemy z przeuczeniem.



Rysunek 6.24: Wyniki testów dla modelu z walidacją krzyżową

Podsumowując, ten wariant modelu generalnie uczy się poprawnie, dzięki czemu osiąga wysoką dokładność i niską stratę. Fluktuacje jakie występują w wynikach, szczególnie na danych walidacyjnych, sugerują jednak potencjalne problemy z generalizacją, co może być wynikiem niestabilności modelu, przeuczenia modelu, lub trudności w rozpoznawaniu bardziej złożonych przykładów w danych walidacyjnych.

W przypadku tego modelu, zwiększenie liczby epok, nie przyniosłoby zamierzonych skutków. Model zbyt szybko się przeucza, a więc większa liczba iteracji nie wpłynęłaby w żaden znaczący sposób na wynik.

```
1/1 0s 63ms/step
|- test_graphs\drawn\connected-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 99.99 procent.
1/1 0s 17ms/step
|- test_graphs\drawn\cycle-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 0s 17ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-1.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 0s 17ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-2.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 0s 19ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-3.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 0s 17ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 99.87 procent.
1/1 0s 17ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-2.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 99.91 procent.
1/1 0s 18ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-3.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 99.23 procent.
1/1 0s 19ms/step
|- test_graphs\generated\cycle-45.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 97.16 procent.
1/1 0s 18ms/step
|- test_graphs\generated\full-113.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 99.99 procent.
1/1 0s 19ms/step
|- test_graphs\generated\path-78.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- tree-binary -| z prawdopodobieństwem 51.15 procent.
1/1 0s 19ms/step
|- test_graphs\internet\internet-cycle-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 0s 19ms/step
|- test_graphs\internet\internet-full-1.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 92.25 procent.
1/1 0s 18ms/step
|- test_graphs\internet\internet-full-2.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 94.90 procent.
```

Rysunek 6.25: Klasyfikacja obrazów zewnętrznych dla modelu z walidacją krzyżową

Z powodu przeuczenia model nie radził sobie z zewnętrznymi obrazkami testowymi. Większość grafów określił jako grafy pełne, a jedną ze ścieżek jako drzewo binarne, co nie jest zgodne ze stanem rzeczywistym.

Zmodyfikowany model

W celu poprawy dokładności i zapobiegnięciu przeuczenia wprowadzone zostały następujące modyfikacje do modelu z walidacją krzyżową. Każde z nich zostało prze-testowane w osobnym modelu. Stworzony został również jeden model ze wszystkimi połączonymi modyfikacjami.

- Zmieniono liczbę filtrów w warstwach Conv2D z 32 w każdej warstwie, do kolejno 32, 64 oraz 128. Jednocześnie zwiększono parametr Dropout z 0,2 do 0,5.
- Zastosowano Batch Normalization pomiędzy warstwami modelu - konkretnie po każdej warstwie Conv2D.
- Wprowadzenie augmentacji danych przed budową modelu, która wprowadza więcej wariacji do zbioru treningowego, w celu poprawy zdolności generalizacyjnych. Wykorzystano również GPU w procesie prefetchingu i cachingu zbiorów danych, by przyspieszyć przetwarzanie danych.
- Skorzystanie z wywołania zwrotnego, które zmniejsza szybkość uczenia. W przypadku stagnacji dokładności w procesie przechodzenia przez kolejne epoki uczenia modelu może pomóc w lepszej konwergencji modelu.

Zmodyfikowany model - Conv2D i Dropout

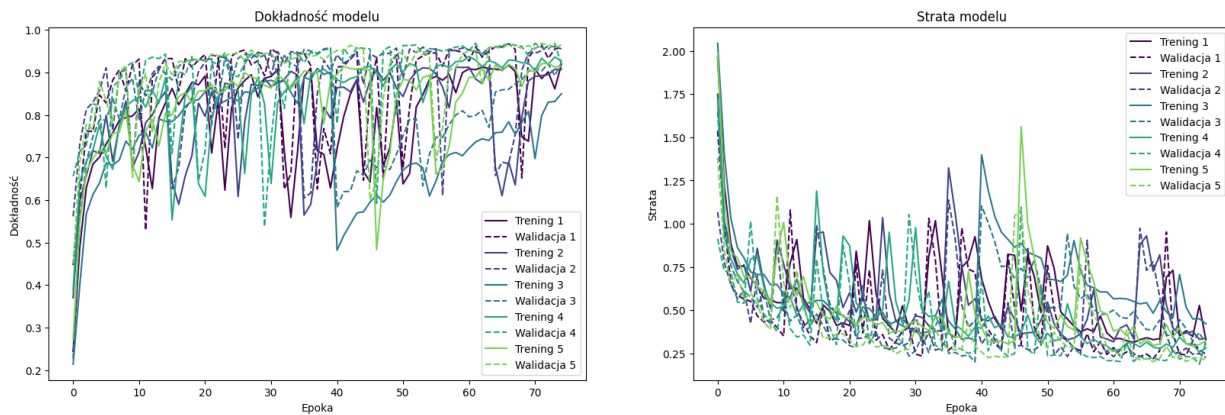
```
1 model = tf.keras.models.Sequential([
2     tf.keras.layers.Rescaling(1./255),
3     tf.keras.layers.Conv2D(32, 3, activation='relu'),
4     tf.keras.layers.MaxPooling2D(),
5     tf.keras.layers.Conv2D(64, 3, activation='relu'),
6     tf.keras.layers.MaxPooling2D(),
7     tf.keras.layers.Conv2D(128, 3, activation='relu'),
8     tf.keras.layers.MaxPooling2D(),
9     tf.keras.layers.Flatten(),
10    tf.keras.layers.Dense(128, activation='relu',
11    kernel_regularizer=tf.keras.regularizers.l2(0.01)),
12    tf.keras.layers.Dropout(0.5),
13    tf.keras.layers.Dense(len(class_names))
14    ])
```

Listing 4: Listing zmodyfikowanego skryptu tworzącego model z walidacją krzyżową - wersja 1

Wszystkie przebiegi walidacji krzyżowej osiągają wysoką dokładność po kilku pierwszych epokach. Model bardzo szybko uczy się rozpoznawać wzorce. Walidacja również osiąga zadołające wyniki, tj. około 90%. Może to wskazywać na poprawną

generalizację do nowych danych. Występuje jednak niewielka niesabilność, występująca pomiędzy epokami, co widać po gwałtownych spadkach i wzrostach dokładności walidacji.

Strata na zbiorze treningowym i walidacyjnym systematycznie maleje z kolejnymi epokami, co może wskazywać na dobre dopasowanie do danych treningowych. Zauważalnym problemem jest jednak spora fluktuacja obu wskaźników. Model może napotykać trudności z pewnymi próbkami w zbiorze danych walidacyjnych.



Rysunek 6.26: Dokładność i walidacja dla zmodyfikowanego modelu z walidacją krzyżową - Conv2D i Dropout

Modfikacja modelu wydaje się osiągać zamierzone skutki, ponieważ model wykazuje lepszą zdolność uczenia z danych treningowych oraz osiąga wysoką dokładność na danych walidacyjnych. Model może być jednak wrażliwy na trudniejsze przypadki ze zbioru danych walidacyjnych, zważając na wahania wskaźników.

```
1/1 ----- 0s 71ms/step
|- test_graphs\drawn\connected-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 89.22 procent.
1/1 ----- 0s 19ms/step
|- test_graphs\drawn\cycle-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 97.11 procent.
1/1 ----- 0s 28ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-1.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 99.94 procent.
1/1 ----- 0s 20ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-2.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 99.17 procent.
1/1 ----- 0s 28ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-3.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 96.84 procent.
1/1 ----- 0s 19ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 41.71 procent.
1/1 ----- 0s 19ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-2.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle -| z prawdopodobieństwem 52.97 procent.
1/1 ----- 0s 20ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-3.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 82.60 procent.
1/1 ----- 0s 19ms/step
|- test_graphs\generated\cycle-45.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 ----- 0s 20ms/step
|- test_graphs\generated\full-113.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 99.89 procent.
1/1 ----- 0s 19ms/step
|- test_graphs\generated\path-78.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- path -| z prawdopodobieństwem 93.79 procent.
1/1 ----- 0s 19ms/step
|- test_graphs\internet\internet-cycle-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 ----- 0s 19ms/step
|- test_graphs\internet\internet-full-1.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle -| z prawdopodobieństwem 53.22 procent.
1/1 ----- 0s 19ms/step
|- test_graphs\internet\internet-full-2.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 99.83 procent.
```

Rysunek 6.27: Klasyfikacja obrazów zewnętrznych dla zmodyfikowanego modelu z walidacją krzyżową - Conv2D i Dropout

Model poprawnie sklasyfikował 9 rysunków grafów, co jest znacznym polepszeniem w stosunku do początkowego modelu z zastosowaną walidacją krzyżową.

Zmodyfikowany model - batch normalization

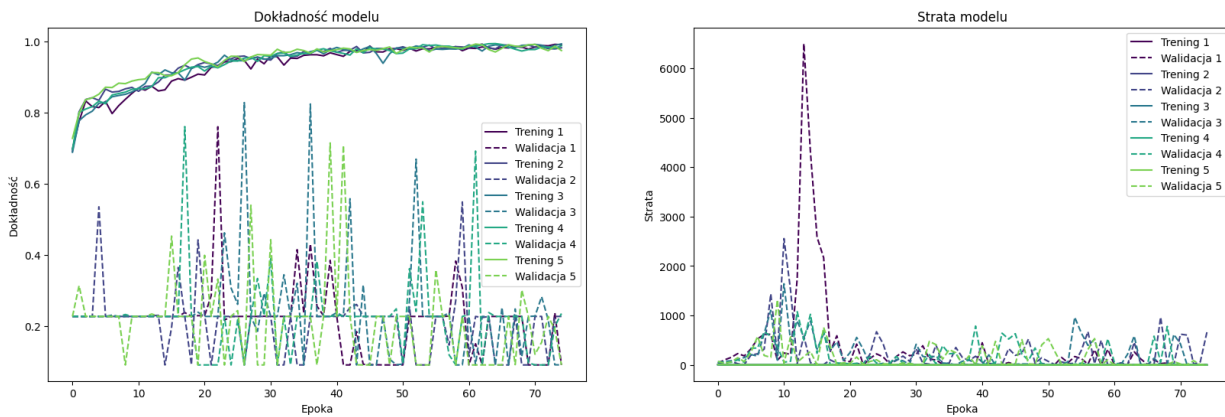
Model został zmodyfikowany poprzez zastosowanie batch normalization pomiędzy kolejnymi warstwami Conv2D modelu. Ma to na celu poprawienie stabilności treningu oraz przyspieszenie uczenia. Użyte zostało również zwiększenie liczby filtrów w warstwach Conv2D oraz zwiększenie parametru Dropout z poprzedniej modyfikacji modelu, ponieważ osiągnęła ona zamierzone cele.

```
1  model = tf.keras.models.Sequential([
2      tf.keras.layers.Rescaling(1./255),
3      tf.keras.layers.Conv2D(32, 3, activation='relu'),
4      tf.keras.layers.BatchNormalization(),
5      tf.keras.layers.MaxPooling2D(),
6      tf.keras.layers.Conv2D(64, 3, activation='relu'),
7      tf.keras.layers.BatchNormalization(),
8      tf.keras.layers.MaxPooling2D(),
9      tf.keras.layers.Conv2D(128, 3, activation='relu'),
10     tf.keras.layers.BatchNormalization(),
11     tf.keras.layers.MaxPooling2D(),
12     tf.keras.layers.Flatten(),
13     tf.keras.layers.Dense(128, activation='relu',
14         kernel_regularizer=tf.keras.regularizers.l2(0.01)),
15     tf.keras.layers.Dropout(0.5),
16     tf.keras.layers.Dense(len(class_names))
17 ])
```

Listing 5: Listing zmodyfikowanego skryptu tworzącego model z walidacją krzyżową - wersja 2

Na wykresach dokładności treningowych widać stały wzrost od około 70% do prawie 100%. Jest to oczywiście pozytywna cecha modelu, lecz po analizie krzywych dokładności walidacyjnych, należy stwierdzić, że jest to przeuczenie. Model poprawnie nauczył się danych treningowych, lecz nie zapamiętał ogólnych wzorców, zważając na wysokie wahania oraz niestaość walidacji.

Strata treningowa, co jest spodziewane po uznaniu model za przeuczony, osiąga bardzo niskie wartości treningowe - przez wszystkie epoki jest bliska 0. Strata walidacyjna zaś, mimo że pozornie wygląda na stabilną, taka nie jest - należy zwrócić uwagę na jednostki na skali. Wahania są bardzo duże oraz występuje pojedyncza wartość odstająca, która osiąga ponad 6000 jednostek.



Rysunek 6.28: Dokładność i walidacja dla zmodyfikowanego modelu z walidacją krzyżową - Batch Normalization

Model jest nadmiernie dopasowany do danych treningowych i nie pot

```
1/1 0s 102ms/step
|- test_graphs\drawn\connected-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle -| z prawdopodobieństwem 67.14 procent.
1/1 0s 21ms/step
|- test_graphs\drawn\cycle-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 0s 19ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-1.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 0s 19ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-2.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 0s 18ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-3.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 0s 19ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 99.72 procent.
1/1 0s 19ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-2.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 91.56 procent.
1/1 0s 20ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-3.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 99.83 procent.
1/1 0s 20ms/step
|- test_graphs\generated\cycle-45.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- empty -| z prawdopodobieństwem 98.65 procent.
1/1 0s 19ms/step
|- test_graphs\generated\full-113.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- empty -| z prawdopodobieństwem 81.94 procent.
1/1 0s 21ms/step
|- test_graphs\generated\path-78.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- empty -| z prawdopodobieństwem 67.32 procent.
1/1 0s 20ms/step
|- test_graphs\internet\internet-cycle-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 0s 21ms/step
|- test_graphs\internet\internet-full-1.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- empty -| z prawdopodobieństwem 80.81 procent.
1/1 0s 20ms/step
|- test_graphs\internet\internet-full-2.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- empty -| z prawdopodobieństwem 89.91 procent.
```

Rysunek 6.29: Klasyfikacja obrazów zewnętrznych dla zmodyfikowanego modelu z walidacją krzyżową - Batch Normalization

Model sklasyfikował poprawnie tylko 3 grafy zewnętrzne. Jest to zdecydowanie poniżej oczekiwań. Zastosowanie batch normalization nie spełniło założonej funkcji. Jest to nieudany eksperyment.

Zmodyfikowany model - augmentacja danych

Przed rozpoczęciem nauki modelu, zastosowana została augmentacja danych treningowych. Najpierw, stworzony został sekwencyjny model, składający się z pewnych warstw. Pierwsza z nich - RandomFlip, odwraca losowe obrazy w poziomie, zwiększając tym samym różnorodność danych. Kolejna - RandomRotation, losowo obraca obrazy o kąt w zakresie od -0.1 do 0.1 radianów, tym samym pomagając modelowi stać się odpornym na rotacje grafów. RandomZoom z kolei przybliża lub oddala obrazy o war-

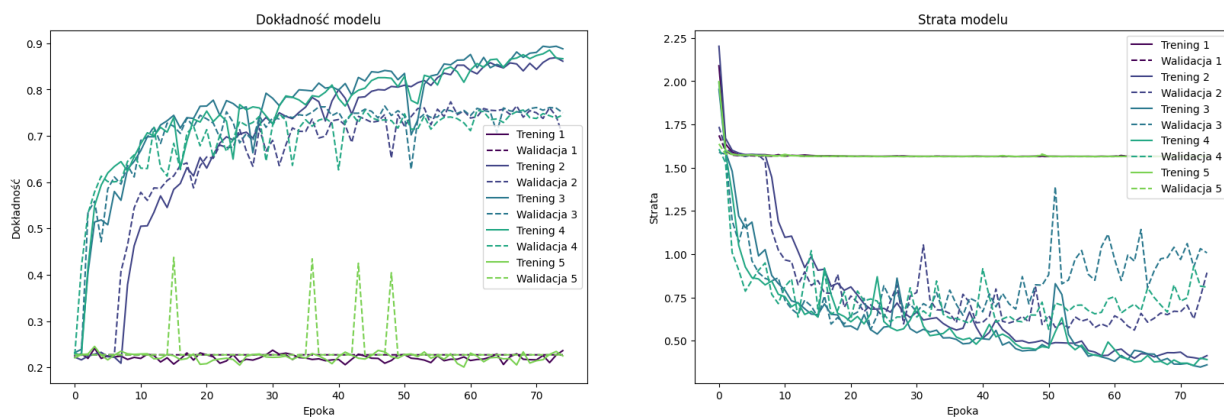
tości oscylujące w zakresie 10%. W teorii, powinno to uodpornić model na grafy różnej wielkości. W kolejnej linii skryptu, wyżej stworzony sekwencyjny model został zastosowany do zbioru danych treningowych. Dalej, na zbiorach uczących i walidacyjnych, użyte zostały funkcje cachujące dane - przyspiesza to proces uczenia.

```
1 data_augmentation = tf.keras.Sequential([
2     tf.keras.layers.RandomFlip("horizontal"),
3     tf.keras.layers.RandomRotation(0.1),
4     tf.keras.layers.RandomZoom(0.1),
5 ])
6 train_ds = train_ds.map(lambda x, y: (data_augmentation(x),
7 y))
8 train_ds = train_ds.cache().shuffle(1000).prefetch(
    buffer_size=tf.data.AUTOTUNE)
    val_ds = val_ds.cache().prefetch(buffer_size=tf.data.
    AUTOTUNE)
```

Listing 6: Listing zmodyfikowanego skryptu poprzedzającego tworzenie modelu z walidacją krzyżową - wersja 3

Dokładność treningowa i walidacyjna w ciągu kilku pierwszych epok wzrasta znacząco, od około 23% do 50%, po czym rośnie w stałym tempie do 90%. Wydają się to być dość realistyczne wartości dokładności dla nieprzeuczonego modelu. Głównym problemem w tym przypadku wydają się być niektóre przebiegi walidacji krzyżowej. W ich przypadku, dokładność na danych treningowych oraz walidacyjnych wynosi przez wszystkie epoki uczenia, około 23%. Przy każdej iteracji walidacji krzyżowej generowane są nowe zbiory walidacyjne i treningowe, co w połączeniu z augmentacją danych, może powodować, że niektóre z tych zbiorów są wyjątkowo trudne do nauki dla modelu. Możliwe jest również, że niektóre zbiory na których dokonano augmentacji, zważając na to, że jest ona losowa, są nieprzystosowane do nauki modeli uczenia maszynowego.

Strata zachowuje się podobnie jak dokładność. Dla pewnych przejść walidacji krzyżowej, osiąga ona realistyczne i spadające z biegiem epok wartości. Dla innych zaś, wartości straty są stałe przez wszystkie epoki uczenia.



Rysunek 6.30: Dokładność i walidacja dla zmodyfikowanego modelu z walidacją krzyżową - augmentacja danych

Model wydaje się radzić poprawnie z niektórymi wariantami zaaugmentowanych danych, a z innymi - całkowicie nie, co wyraża się w krzywych dokładności oraz straty modelu.

```
1/1 0s 106ms/step
|- test_graphs\drawn\connected-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- tree-binary -| z prawdopodobieństwem 22.88 procent.
1/1 0s 8ms/step
|- test_graphs\drawn\cycle-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- tree-binary -| z prawdopodobieństwem 22.88 procent.
1/1 0s 16ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-1.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- tree-binary -| z prawdopodobieństwem 22.88 procent.
1/1 0s 16ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-2.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- tree-binary -| z prawdopodobieństwem 22.88 procent.
1/1 0s 16ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-3.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- tree-binary -| z prawdopodobieństwem 22.88 procent.
1/1 0s 16ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- tree-binary -| z prawdopodobieństwem 22.88 procent.
1/1 0s 19ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-2.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- tree-binary -| z prawdopodobieństwem 22.88 procent.
1/1 0s 16ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-3.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- tree-binary -| z prawdopodobieństwem 22.88 procent.
1/1 0s 16ms/step
|- test_graphs\generated\cycle-45.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- tree-binary -| z prawdopodobieństwem 22.88 procent.
1/1 0s 21ms/step
|- test_graphs\generated\full-113.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- tree-binary -| z prawdopodobieństwem 22.88 procent.
1/1 0s 16ms/step
|- test_graphs\generated\path-78.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- tree-binary -| z prawdopodobieństwem 22.88 procent.
1/1 0s 16ms/step
|- test_graphs\internet\internet-cycle-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- tree-binary -| z prawdopodobieństwem 22.88 procent.
1/1 0s 16ms/step
|- test_graphs\internet\internet-full-1.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- tree-binary -| z prawdopodobieństwem 22.88 procent.
1/1 0s 19ms/step
|- test_graphs\internet\internet-full-2.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- tree-binary -| z prawdopodobieństwem 22.88 procent.
```

Rysunek 6.31: Klasyfikacja obrazów zewnętrznych dla zmodyfikowanego modelu z walidacją krzyżową - augmentacja danych

Model w takiej postaci nie sklasyfikował poprawnie żadnego rysunku grafu. Nie jest to zaskoczenie, mając na uwadze osiągniętą dokładność modelu na pewnych przejściach walidacji krzyżowej, która wynosiła około 22-23%.

Zmodyfikowany model - spowolnienie uczenia

W tym modelu zostało zastosowane wywołanie zwrotne, które spowalnia proces uczenia. Współczynnik procesu uczenia decyduje o tym, jak duże kroki wykonuje algorytm optymalizacyjny podczas aktualizacji wag sieci neuronowej. Gdy owy współczynnik jest zbyt duży, model może oscylować wokół minimum funkcji straty i nigdy go

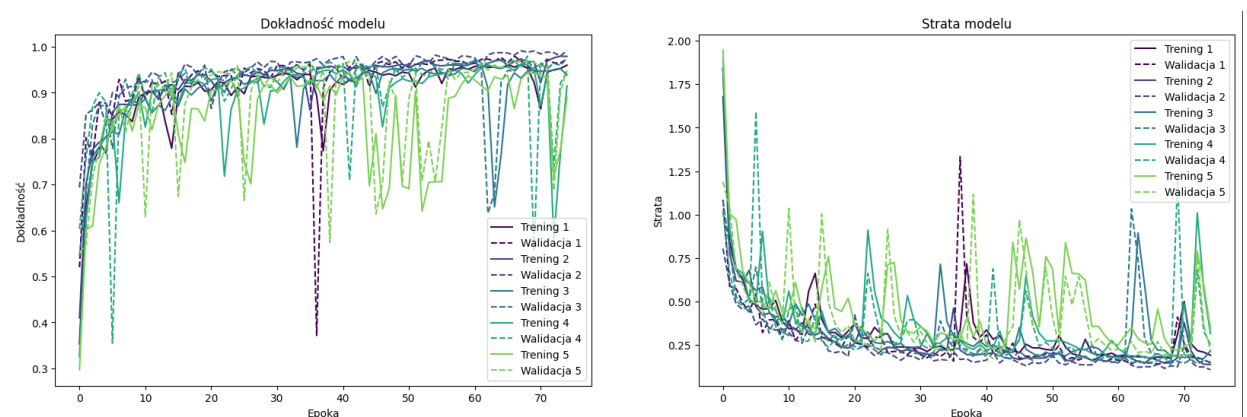
nie osiągnąć. W przypadku kiedy jest zbyt mały, może prowadzić do bardzo wolnego uczenia się, czy nawet utknięcia w lokalnym minimum. Parametr *factor* w skrypcie decyduje o tym, o jaką wartość zredukować współczynnik uczenia, jeśli nie nastąpi poprawa uczenia przez okres wyrażony parametrem *patience*. *min_lr* to minimalna wartość współczynnika uczenia, poniżej której współczynnik nie zostanie już zredukowany. Zapobiega to zbyt drastycznemu zmniejszeniu learning rate, które mogłoby zahamować proces uczenia się modelu.

```
1 reduce_lr = tf.keras.callbacks.ReduceLROnPlateau(monitor='
    val_loss', factor=0.2, patience=5, min_lr=0.001)
```

Listing 7: Listing zmodyfikowanego skryptu znajdującego się bezpośrednio po tworzeniu modelu z walidacją krzyżową - wersja 4

Krzywa dokładności treningowej oraz walidacyjnej wzrasta gwałtownie w początkowych epokach nauki. Oznacza to, że model szybko uczy się nieskomplikowanych wzorców. W kolejnej części procesu nauki, dokładność na obu zbiorach stabilizuje się między 90%, a 100%. Z powodu widocznych sporych spadków na zbiorze walidacyjnym, można założyć pewne problemy z modelem - przeuczenie.

Podobnie jak dokładność, strata gwałtownie obniża się na początku procesu uczenia. W kolejnych epokach dokonuje się pewna stabilizacja, lecz mimo tego widoczne są fluktuacje, szczególnie na zbiorze walidacyjnym. Możliwe, że model jest zbyt dopasowany do specyficznych cech danych treningowych i nie generalizuje odpowiednio na nowe dane.



Rysunek 6.32: Dokładność i walidacja dla zmodyfikowanego modelu z walidacją krzyżową - spowolnienie uczenia

Model wykazuje pewne nieporządane cechy, takie jak wahania dokładności i

straty na zbiorach walidacyjnych, co wskazuje na przeuczenie modelu.

```
1/1 0s 63ms/step
|- test_graphs\drawn\connected-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 0s 17ms/step
|- test_graphs\drawn\cycle-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 99.98 procent.
1/1 0s 19ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-1.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 0s 17ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-2.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 0s 18ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-3.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 0s 18ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 99.91 procent.
1/1 0s 17ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-2.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 96.58 procent.
1/1 0s 21ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-3.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 97.18 procent.
1/1 0s 20ms/step
|- test_graphs\generated\cycle-45.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 99.96 procent.
1/1 0s 28ms/step
|- test_graphs\generated\full-113.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 99.99 procent.
1/1 0s 19ms/step
|- test_graphs\generated\path-78.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- path -| z prawdopodobieństwem 86.63 procent.
1/1 0s 17ms/step
|- test_graphs\internet\internet-cycle-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 0s 18ms/step
|- test_graphs\internet\internet-full-1.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- path -| z prawdopodobieństwem 82.64 procent.
1/1 0s 17ms/step
|- test_graphs\internet\internet-full-2.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- path -| z prawdopodobieństwem 77.67 procent.
```

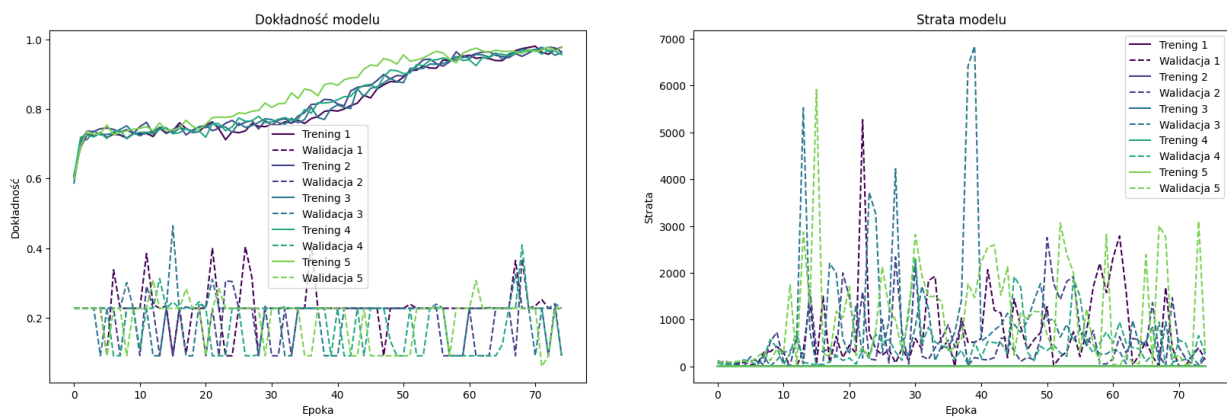
Rysunek 6.33: Klasyfikacja obrazów zewnętrznych dla zmodyfikowanego modelu z walidacją krzyżową - spowolnienie uczenia

Model poprawnie sklasyfikował 6 grafów zewnętrznych. Zważając na to, że ogólną większość grafów oznaczył jako pełne, może to również być czysty przypadek.

Zmodyfikowany model połączony

Dokładność dla wszystkich przebiegów stopniowo wzrasta wraz z liczbą epok i osiąga wysoki poziom, bo powyżej 80%, pod koniec treningu. W przypadku walidacji jednak, wyniki nie są zadowalające, a wręcz bardzo niestabilne. Przez większość przebiegów uczenia utrzymuje się na niskim poziomie, co może sugerować problemy z generalizacją danych.

Strata treningowa maleje w większości przebiegów, co jest spodziewane podczas uczenia. Widać jednak pewne fluktuacje, świadczące o problemach z konwergencją. Dla straty walidacyjnej można zaobserwować wielką niestabilność - osiąga bardzo wysokie wartości, nawet rzędu kilku tysięcy, jak również bardzo niskie, bliskie zeru.



Rysunek 6.34: Dokładność i walidacja dla zmodyfikowanego modelu z walidacją krzyżową - modyfikacja połączone

Ogólne wnioski jakie można wyciągnąć z procesu uczenia tego modelu, są takie, że model kompletnie nie radzi sobie z danymi walidacyjnymi. Model ewidentnie przeucza się na danych treningowych, podczas gdy jego wydajność na zbiorze walidacyjnym jest bardzo słaba. Zastosowanie wszystkich zaproponowanych technik na raz, nie osiągnęło zamierzonego skutku.

```
1/1 0s 146ms/step
|- test_graphs\drawn\connected-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- empty -| z prawdopodobieństwem 89.90 procent.
1/1 0s 22ms/step
|- test_graphs\drawn\cycle-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- empty -| z prawdopodobieństwem 85.24 procent.
1/1 0s 17ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-1.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- empty -| z prawdopodobieństwem 91.47 procent.
1/1 0s 18ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-2.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- empty -| z prawdopodobieństwem 93.17 procent.
1/1 0s 8ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-3.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- empty -| z prawdopodobieństwem 75.52 procent.
1/1 0s 17ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- empty -| z prawdopodobieństwem 75.46 procent.
1/1 0s 21ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-2.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- empty -| z prawdopodobieństwem 67.84 procent.
1/1 0s 17ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-3.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- empty -| z prawdopodobieństwem 70.87 procent.
1/1 0s 18ms/step
|- test_graphs\generated\cycle-45.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 0s 17ms/step
|- test_graphs\generated\full-113.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 0s 32ms/step
|- test_graphs\generated\path-78.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 0s 17ms/step
|- test_graphs\internet\internet-cycle-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 0s 34ms/step
|- test_graphs\internet\internet-full-1.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 0s 17ms/step
|- test_graphs\internet\internet-full-2.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
```

Rysunek 6.35: Klasyfikacja obrazów zewnętrznych dla zmodyfikowanego modelu z walidacją krzyżową - modyfikacja połączone

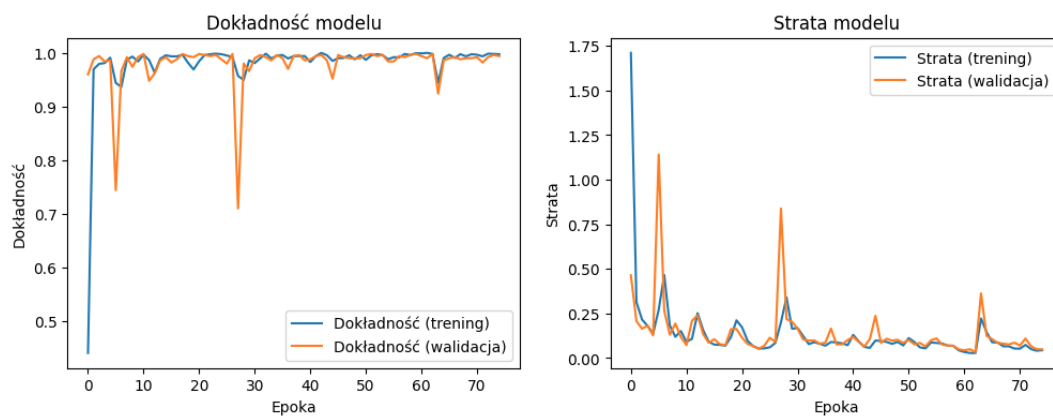
Model poprawnie wskazał klasy tylko dwóch grafów testowych, co jest znacznie poniżej oczekiwanych rezultatów.

6.1.3. Model ze zmienną liczbą wierzchołków

Model uczony na losowej krzywiźnie wierzchołków

Dokładność modelu uczonego na grafach treningowych z liczbą wierzchołków od czterech do siedmiu, prezentuje się dość stabilnie po początkowej fazie wzrostu. Występują tylko drobne fluktuacje. Po kilku początkowych epokach, dokładność oscyluje wokół 95%, dochodząc nawet do 100%. Linie walidacji i treningu są bardzo blisko siebie, co sugeruje dobrą generalizację modelu i nie wskazuje na przeuczenie.

W przypadku straty modelu, początkowy gwałtowny spadek sugeruje, że model dość szybko się uczy. Po 10 epokach następuje stabilizacja straty na niskim, bo wynoszącym około 0.1, poziomie. Podobnie jak w przypadku dokładności, strata dla zbioru walidacyjnego jest blisko straty treningowej. Można zaobserwować pewne wzrosty, które mogą być spowodowane trudniejszymi przypadkami w zbiorze walidacyjnym.



Rysunek 6.36: Dokładność i walidacja dla modelu ze zmienną liczbą wierzchołków

Model ten wydaje się być dobrze dopasowany i stabilny oraz poprawnie generalizujący. Z uwagi na bliskość wyników dla treningu i walidacji, można stwierdzić, że model nie jest przeuczony.

```

1/1 ----- 0s 61ms/step
|- test_graphs\drawn\connected-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 ----- 0s 16ms/step
|- test_graphs\drawn\cycle-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 ----- 0s 18ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-1.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 ----- 0s 19ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-2.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 ----- 0s 18ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-3.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 ----- 0s 17ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 ----- 0s 17ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-2.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 ----- 0s 16ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-3.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- tree-binary -| z prawdopodobieństwem 69.90 procent.
1/1 ----- 0s 19ms/step
|- test_graphs\generated\cycle-45.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle -| z prawdopodobieństwem 98.57 procent.
1/1 ----- 0s 18ms/step
|- test_graphs\generated\full-113.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 99.79 procent.
1/1 ----- 0s 18ms/step
|- test_graphs\generated\path-78.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- path -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 ----- 0s 17ms/step
|- test_graphs\internet\internet-cycle-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 ----- 0s 18ms/step
|- test_graphs\internet\internet-full-1.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 99.18 procent.
1/1 ----- 0s 17ms/step
|- test_graphs\internet\internet-full-2.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 95.82 procent.

```

Rysunek 6.37: Klasyfikacja obrazów zewnętrznych dla modelu ze zmienną liczbą warstw

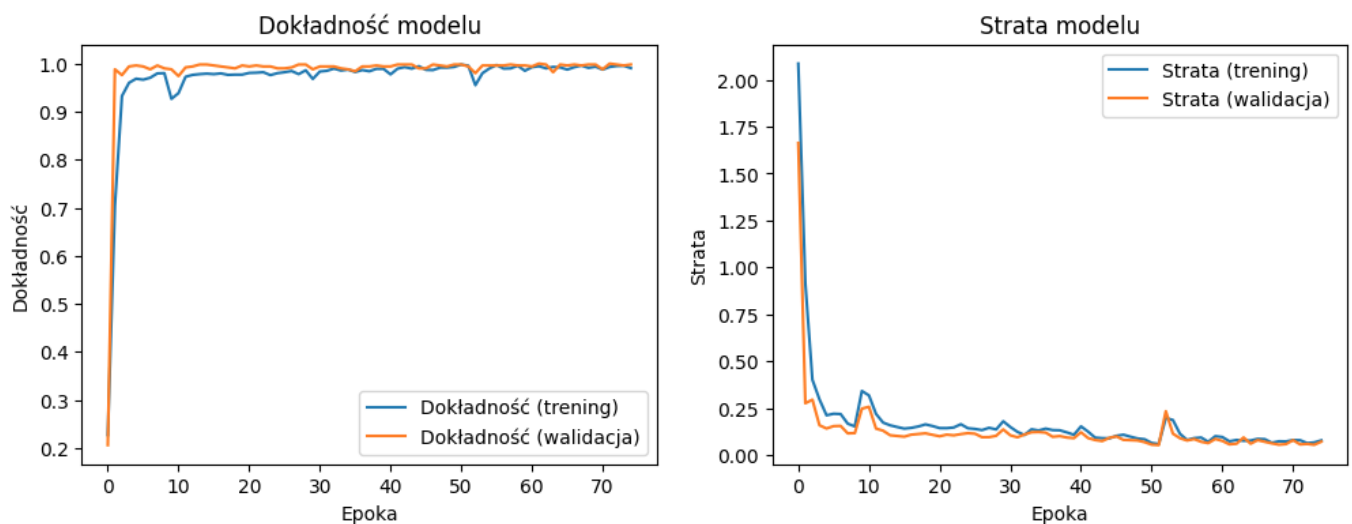
Model poprawnie sklasyfikował 10 na 14 rysunków zewnętrznych. Jest to bardzo dobry wynik - lepszy nawet od wariantu tego modelu z zastosowaną walidacją krzyżową.

Zmodyfikowany model - Conv2D i Dropout oraz spowolnienie uczenia

W modelu wprowadzone zostało zwiększenie liczby filtrów dla warstw Conv2D, zwiększenie parametru Dropout oraz zastosowano wywołanie zwrotne, które spowalnia uczenie.

Dokładność treningowa i walidacyjna modelu bardzo szybko wzrasta do wartości bliskich 100% i stabilizuje się na takim poziomie do końca procesu nauki. Gdyby tylko dokładność treningowa osiągała taki poziom, można by założyć z dużą dozą pewności, przeuczenie modelu. W tym przypadku jednak, różnice między dokładnością walidacyjną a treningową są marginalne.

Straty modelu wykazują podobne cechy do dokładności - szybki spadek wartości oraz stabilizacja na niskim poziomie.



Rysunek 6.38: Dokładność i walidacja dla zmodyfikowanego modelu ze zmienną liczbą wierzchołków - Conv2D i Dropout

Wydaje się, że model osiągnął pewną stabilność na niskim poziomie, co może pozytywnie świadczyć o jego zdolności generalizacji na nowe dane.

```
1/1 ----- 0s 99ms/step
|- test_graphs\drawn\connected-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 98.37 procent.
1/1 ----- 0s 19ms/step
|- test_graphs\drawn\cycle-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 99.92 procent.
1/1 ----- 0s 19ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-1.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 99.27 procent.
1/1 ----- 0s 20ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-2.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 99.87 procent.
1/1 ----- 0s 20ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-3.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 ----- 0s 16ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 96.19 procent.
1/1 ----- 0s 16ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-2.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- tree-binary -| z prawdopodobieństwem 84.92 procent.
1/1 ----- 0s 6ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-3.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 54.00 procent.
1/1 ----- 0s 31ms/step
|- test_graphs\generated\cycle-45.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle -| z prawdopodobieństwem 99.99 procent.
1/1 ----- 0s 16ms/step
|- test_graphs\generated\full-113.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 87.34 procent.
1/1 ----- 0s 25ms/step
|- test_graphs\generated\path-78.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- path -| z prawdopodobieństwem 99.91 procent.
1/1 ----- 0s 35ms/step
|- test_graphs\internet\internet-cycle-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 ----- 0s 16ms/step
|- test_graphs\internet\internet-full-1.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 96.23 procent.
1/1 ----- 0s 34ms/step
|- test_graphs\internet\internet-full-2.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 59.33 procent.
```

Rysunek 6.39: Klasyfikacja obrazów zewnętrznych dla zmodyfikowanego modelu ze zmienną liczbą wierzchołków - Conv2D i Dropout

Osiągnięta stabilizacja modelu i brak znaczących różnic między wartościami dokładności, czy straty na zbiorach treningowych i w walidacyjnych, nie przełożyła się w sposób rewolucyjny na osiągi modelu. Model jednakże nie wypadł całkowicie źle - poprawnie sklasyfikował aż 10 z 14 zewnętrznych grafów testowych.

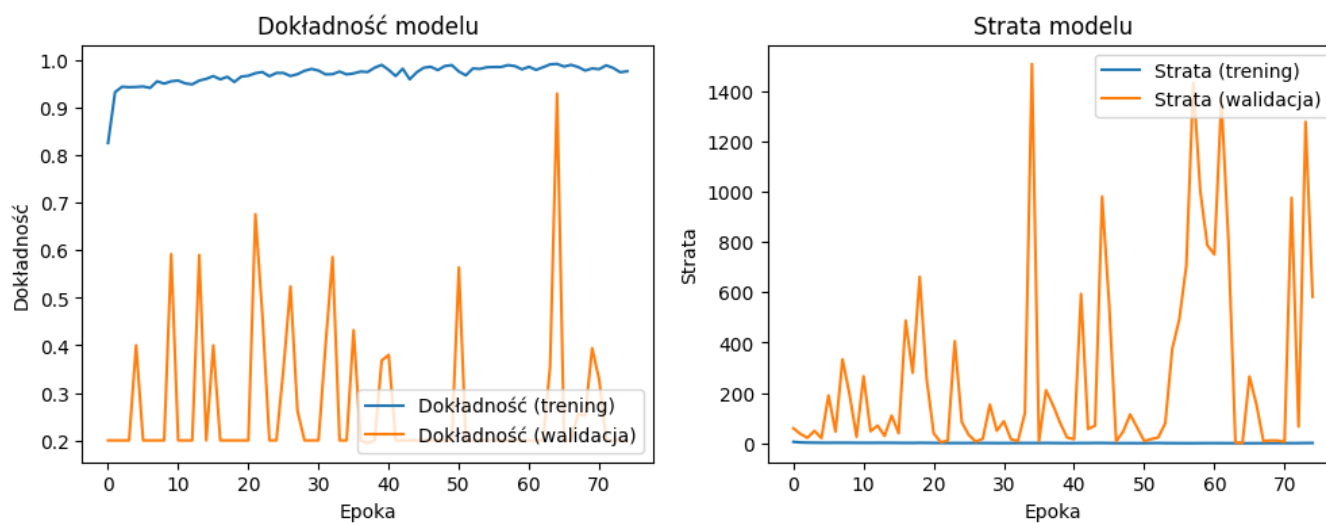
Zmodyfikowany model

Do modelu wprowadzone zostały modyfikacje na wzór tych ze zmodyfikowanego

modelu z walidacją krzyżową. Przetestowany został wariant z włączonymi wszystkimi modyfikacjami na raz.

Podobnie jak dla zmodyfikowanego modelu z walidacją krzyżową, dokładność treningowa jest bardzo wysoka (prawie 100%), ale dokładność walidacyjna nie jest ustabilizowana. Jej wartości oscylują w przedziale od 0,2, aż do 0,9. To sugeruje, że model nie generalizuje dobrze na nowych danych i może być nadmiernie dopasowany.

Wykresy straty prezentują się w podobny sposób jak i wykresy dokładności. Strata treningowa jest bliska zeru, co mówi o świetnym zapamiętywaniu danych treningowych przez model, kosztem generalizacji na nowe dane. Strata walidacji jednak jest niestabilna z bardzo wysokimi wartościami w niektórych epokach.



Rysunek 6.40: Dokładność i walidacja dla w pełni zmodyfikowanego modelu ze zmienną liczbą wierzchołków

Model wykazuje cechy modelu przeuczonego. Są to bardzo wysoka dokładność i niemal zerowa strata na zbiorze treningowym oraz bardzo niska dokładność i wysoka, ale niestabilna strata na zbiorze walidacyjnym. Wniosek jaki można wyciągnąć jest taki, że model zapamiętał dane treningowe, ale nie nauczył się żadnych wzorców.

```

1/1 ----- 0s 174ms/step
|- test_graphs\drawn\connected-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- path -| z prawdopodobieństwem 99.68 procent.
1/1 ----- 0s 31ms/step
|- test_graphs\drawn\cycle-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- path -| z prawdopodobieństwem 99.67 procent.
1/1 ----- 0s 16ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-1.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- path -| z prawdopodobieństwem 99.69 procent.
1/1 ----- 0s 16ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-2.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- path -| z prawdopodobieństwem 99.67 procent.
1/1 ----- 0s 35ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-3.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- path -| z prawdopodobieństwem 99.68 procent.
1/1 ----- 0s 31ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- path -| z prawdopodobieństwem 99.68 procent.
1/1 ----- 0s 31ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-2.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- path -| z prawdopodobieństwem 99.69 procent.
1/1 ----- 0s 31ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-3.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- path -| z prawdopodobieństwem 99.66 procent.
1/1 ----- 0s 16ms/step
|- test_graphs\generated\cycle-45.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 ----- 0s 16ms/step
|- test_graphs\generated\full-113.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 ----- 0s 16ms/step
|- test_graphs\generated\path-78.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 ----- 0s 31ms/step
|- test_graphs\internet\internet-cycle-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 ----- 0s 31ms/step
|- test_graphs\internet\internet-full-1.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 ----- 0s 16ms/step
|- test_graphs\internet\internet-full-2.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.

```

Rysunek 6.41: Klasyfikacja obrazów zewnętrznych dla w pełni zmodyfikowanego modelu ze zmienną liczbą wierzchołków

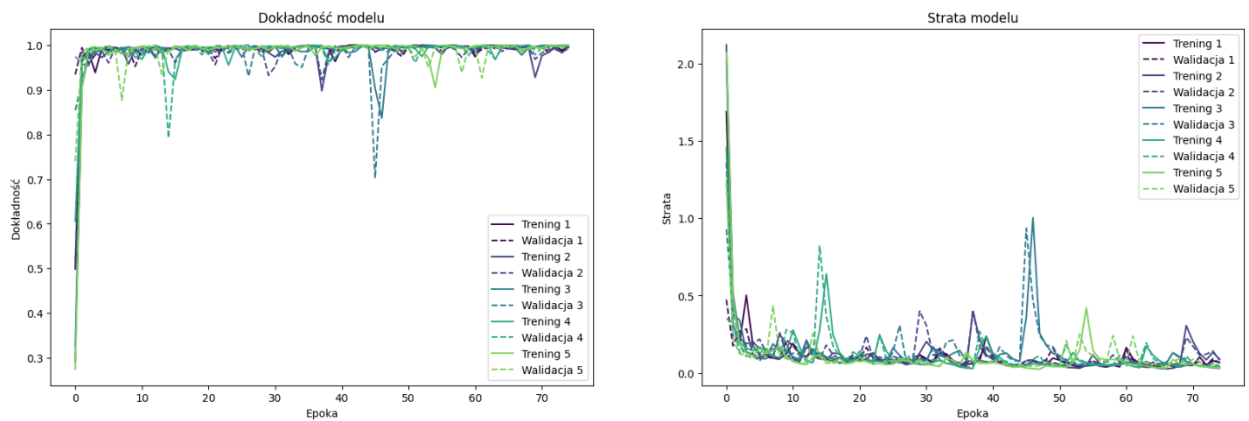
Model poprawnie wskazał aż 5 klas grafów, lecz analiza jego wskaźników mówi nam, że jest to dzieło raczej przypadku, aniżeli poprawnego nauczania się ogólnych wzorców danych.

6.1.4. Model ze zmienną liczbą wierzchołków i walidacją krzyżową

Model uczony na losowej krzyżówce wierzchołków

Model uczony na grafach ze zmienną liczbą wierzchołków oraz zastosowaną walidacją krzyżową, bardzo szybko osiąga poziom dokładności bliski 100%, bo już w kilku pierwszych epokach. Po około 10 epokach, dokonuje się stabilizacja, oscylująca między 95%, a 100%. W przypadku tego modelu, fluktuacje dokładności są znikome, co wskazuje na dobrą stabilność modelu. Pojedyncze przypadki spadów dokładności, mogą być spowodowane bardziej skomplikowanymi przypadkami w zbiorze danych walidacyjnych.

Strata tego modelu gwałtownie spada na początku procesu uczenia, po czym stabilizuje się na zadowalająco niskim poziomie - poniżej 20%. Skoki wskaźnika są bardziej zauważalne na zbiorze walidacyjnym, ale nie wydają się być regularne i nie wpływają na ogólny wynik. Mogą być wynikiem, przeuczenia na pojedynczych epokach lub naturalną zmiennością walidacyjnego zbioru danych.



Rysunek 6.42: Dokładność i walidacja dla modelu ze zmienną liczbą wierzchołków i walidacją krzyżową

Model wydaje się dokładny na zbiorze treningowym i walidacyjnym, co może skutkować polepszoną skutecznością w klasyfikacji grafów. Minimalne różnice pomiędzy dokładnością treningową a walidacyjną wskazują na dobrą zdolność generalizacji. Z otrzymanych wyników, wydawałoby się, że model nie uległ przeuczeniu, choć jest to również możliwe, zważając na bardzo wysokie wyniki dokładności.

```
1/1 0s 63ms/step
|- test_graphs\drawn\connected-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 99.98 procent.
1/1 0s 22ms/step
|- test_graphs\drawn\cycle-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle -| z prawdopodobieństwem 76.47 procent.
1/1 0s 18ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-1.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 99.32 procent.
1/1 0s 17ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-2.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 99.99 procent.
1/1 0s 16ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-3.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 0s 18ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 89.15 procent.
1/1 0s 16ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-2.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- tree-binary -| z prawdopodobieństwem 99.07 procent.
1/1 0s 18ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-3.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- tree-binary -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 0s 17ms/step
|- test_graphs\generated\cycle-45.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 0s 17ms/step
|- test_graphs\generated\full-113.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- tree-binary -| z prawdopodobieństwem 76.12 procent.
1/1 0s 20ms/step
|- test_graphs\generated\path-78.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- path -| z prawdopodobieństwem 99.99 procent.
1/1 0s 20ms/step
|- test_graphs\internet\internet-cycle-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 0s 17ms/step
|- test_graphs\internet\internet-full-1.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- tree-binary -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 0s 21ms/step
|- test_graphs\internet\internet-full-2.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- empty -| z prawdopodobieństwem 99.87 procent.
```

Rysunek 6.43: Klasyfikacja obrazów zewnętrznych dla modelu ze zmienną liczbą wierzchołków i walidacją krzyżową

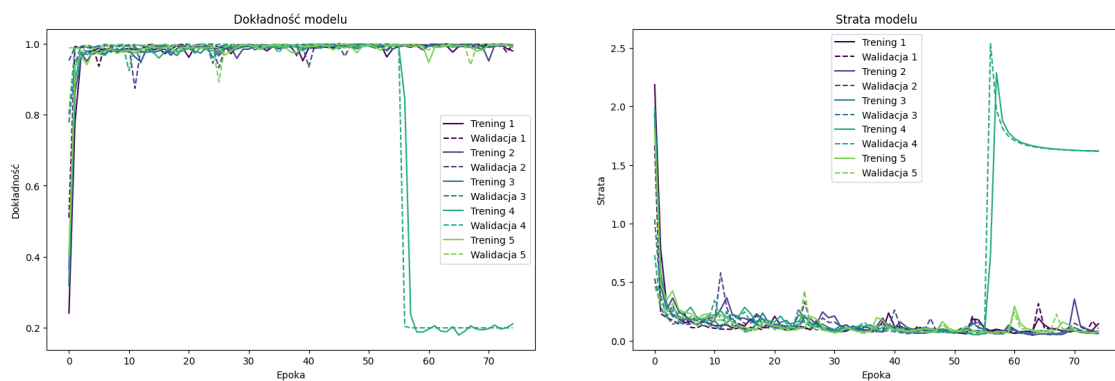
Model poprawnie sklasyfikował połowę testowanych danych zewnętrznych. Jest to zadowalający wynik, zważając na trudności innych modeli w poprawnym wskazywaniu klas sprawdzanych grafów.

Zmodyfikowany model - Conv2D i Dropout oraz spowolnienie uczenia

Opis modyfikacji

Dokładność

Strata



Rysunek 6.44: Dokładność i walidacja dla zmodyfikowanego modelu ze zmienną liczbą wierzchołków i walidacją krzyżową - Conv2D i Dropout

Ogólne

```
1/1 ----- 0s 73ms/step
|- test_graphs\drawn\connected-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 94.01 procent.
1/1 ----- 0s 29ms/step
|- test_graphs\drawn\cycle-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 99.44 procent.
1/1 ----- 0s 26ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-1.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 98.91 procent.
1/1 ----- 0s 28ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-2.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 99.97 procent.
1/1 ----- 0s 24ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-3.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 ----- 0s 24ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 85.66 procent.
1/1 ----- 0s 21ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-2.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- tree-binary -| z prawdopodobieństwem 98.87 procent.
1/1 ----- 0s 23ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-3.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- tree-binary -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 ----- 0s 21ms/step
|- test_graphs\generated\cycle-45.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle -| z prawdopodobieństwem 99.83 procent.
1/1 ----- 0s 21ms/step
|- test_graphs\generated\full-113.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- tree-binary -| z prawdopodobieństwem 92.52 procent.
1/1 ----- 0s 21ms/step
|- test_graphs\generated\path-78.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- path -| z prawdopodobieństwem 99.34 procent.
1/1 ----- 0s 22ms/step
|- test_graphs\internet\internet-cycle-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 ----- 0s 24ms/step
|- test_graphs\internet\internet-full-1.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- tree-binary -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 ----- 0s 21ms/step
|- test_graphs\internet\internet-full-2.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- tree-binary -| z prawdopodobieństwem 84.79 procent.
```

Rysunek 6.45: Klasyfikacja obrazów zewnętrznych dla zmodyfikowanego modelu ze zmienną liczbą wierzchołków i walidacją krzyżową - Conv2D i Dropout

Poprawna klasyfikacja połowy grafów jest w pewnym sensie rozczarującym wynikiem, zważając na wysokie wartości dokładności, nawet na zbiorach walidacyjnych.

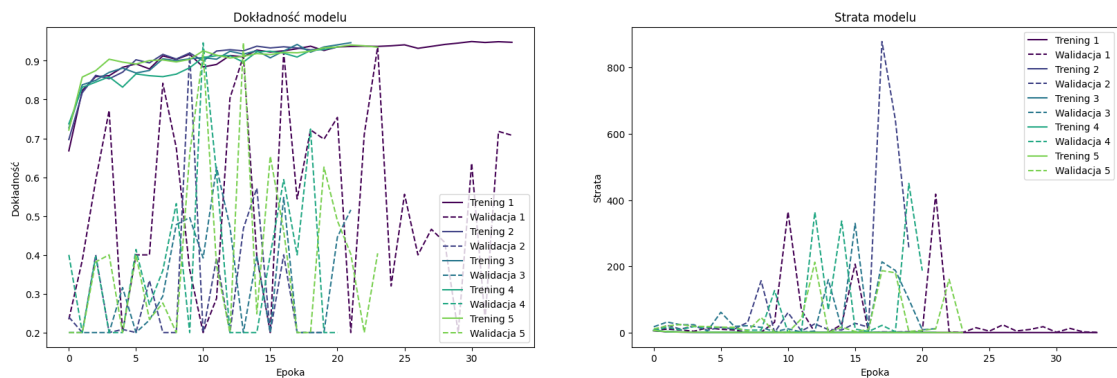
Zmodyfikowany model

Do modelu wprowadzone zostały wszystkie modyfikacje wymienione w rozdziale z modelem z walidacją krzyżową, czyli zwiększenie liczby filtrów w warstwach, batch normalization, augmentacja danych oraz zmniejszenie szybkości uczenia.

Model dość szybko osiąga wysoką dokładność na zbiorze treningowym - stabilizuje się około 90-95%. Podobnie jak i w innych modelach z zastosowanymi wszystkimi

modyfikacjami, dokładność na zbiorze walidacyjnym jest niestabilna. Można zaobserwować duże wahania pomiędzy kolejnymi epokami procesu uczenia. Sugeruje to trudności z uczeniem się wzorców.

Model szybko zmniejsza stratę treningową i pozostaje ona na bardzo niskim poziomie przez cały proces uczenia. Wskazuje to na sprawność w uczeniu się na danych treningowych. Wykresy strat przedstawiają się w nietypowej formie. Dla początkowych i końcowych epok, straty walidacji niewiele się wahają, a wręcz przeciwnie sytuacja wygląda dla epok od około dziesiątej do dwudziestej. Model ma więc trudności z radzeniem sobie z danymi, które są dla niego nowe.



Rysunek 6.46: Dokładność i walidacja dla w pełni zmodyfikowanego modelu ze zmienną liczbą wierzchołków i walidacją krzyżową

Model osiąga bardzo wysokie wyniki na zbiorze treningowym, ale ma problemy z generalizacją na zbiorze walidacyjnym. Wskazuje to na przeuczenie modelu i brak uczenia się wzorców ogólnych.

```

1/1 ----- 0s 101ms/step
|- test_graphs\drawn\connected-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- tree-binary -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 ----- 0s 19ms/step
|- test_graphs\drawn\cycle-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- tree-binary -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 ----- 0s 19ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-1.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- tree-binary -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 ----- 0s 20ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-2.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- tree-binary -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 ----- 0s 21ms/step
|- test_graphs\drawn\full-drawn-3.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- tree-binary -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 ----- 0s 20ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- tree-binary -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 ----- 0s 20ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-2.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- tree-binary -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 ----- 0s 19ms/step
|- test_graphs\drawn\path-drawn-3.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- tree-binary -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 ----- 0s 20ms/step
|- test_graphs\generated\cycle-45.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 ----- 0s 20ms/step
|- test_graphs\generated\full-113.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 ----- 0s 20ms/step
|- test_graphs\generated\path-78.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- path -| z prawdopodobieństwem 91.66 procent.
1/1 ----- 0s 19ms/step
|- test_graphs\internet\internet-cycle-1.png -| najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 ----- 0s 20ms/step
|- test_graphs\internet\internet-full-1.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- full -| z prawdopodobieństwem 100.00 procent.
1/1 ----- 0s 20ms/step
|- test_graphs\internet\internet-full-2.jpg -| najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle -| z prawdopodobieństwem 99.99 procent.

```

Rysunek 6.47: Klasyfikacja obrazów zewnętrznych dla w pełni zmodyfikowanego modelu ze zmienną liczbą wierzchołków i walidacją krzyżową

Model ocenił poprawnie 6 klas grafów zewnętrznych, z czego większość była grafami wygenerowanymi (lecz nie stosowanymi w nauce i walidacji), co pokazuje, że model rozpoznaje tylko wzorce, które są bardzo zbliżone do zbioru treningowego. Nie jest w stanie rozpoznać poprawnie ani jednego grafu narysowanego ręcznie, co jest dowodem na to, że nie radzi sobie z nowymi danymi.

6.2. Wnioski

W przypadku uczenia modeli z wykorzystaniem grafów pełnych, najczęściej dominowały one cały zbiór danych, przez co modele w kolejnych testach klasyfikowały większość testowych grafów rysowanych odrębnie jako właśnie grafy pełne.

Testy z wykorzystaniem stałej liczby wierzchołków grafów okazały się mniej owocne niż testy z rysunkami grafów o zmiennej liczbie wierzchołków.

Wystąpiła tendencja do niepoprawnego określania innych grafów, grafami dwudzielnymi, jeśli takie znajdowały się w zbiorze danych treningowych.

7. Podsumowanie i wnioski końcowe

Lorem Ipsum is simply dummy text of the printing and typesetting industry. Lorem Ipsum has been the industry's standard dummy text ever since the 1500s, when an unknown printer took a galley of type and scrambled it to make a type specimen book. It has survived not only five centuries, but also the leap into electronic typeset-

ting, remaining essentially unchanged. It was popularised in the 1960s with the release of Letraset sheets containing Lorem Ipsum passages, and more recently with desktop publishing software like Aldus PageMaker including versions of Lorem Ipsum.

Załączniki

- Skrypt generujący obrazy grafów
- Skrypt testowy z modelem podstawowym
- Skrypt testowy z modelem, z walidacją krzyżową
- Skrypt testowy z modelem dostosowanym do nauki grafów o różnej liczbie wierzchołków
- Skrypt testowy z modelem, z walidacją krzyżową, dostosowanym do nauki grafów o różnej liczbie wierzchołków

Literatura

- [1] Arikawa K.: Graph Theory Teaches Us Something About Grammaticality. The Prague Bulletin of Mathematical Linguistics No. 112, 2019, pp. 55-82
- [2] Balaban A.T.: Applications of Graph Theory in Chemistry. Department of Organic Chemistry, Polytehnice Institute. 76206 Bucharest, Roumania, 1985
- [3] Brusatte, S., Carr, T. The phylogeny and evolutionary history of tyrannosauroid dinosaurs. Sci Rep 6, 20252 (2016). <https://doi.org/10.1038/srep20252>
- [4] Chung M.K.: Graph Theory in Brain Networks, University of Wisconsin-Madison, 2021
- [5] Erciyes K.: Graph-Theoretical Analysis of Biological Networks: A Survey. Computation 2023, 11, 188, DOI: <https://doi.org/10.3390/computation11100188>
- [6] Fenner M.E.: Uczenie maszynowe w Pythonie dla każdego. Helion SA, Gliwice 2020.
- [7] Géron A.: Uczenie maszynowe z użyciem Scikit-Learn i TensorFlow. Helion SA, Gliwice 2020.
- [8] Harary F., Norman R.Z.: Graph Theory as a Mathematical Model in Social Science, Research Center for Group Dynamics, University of Michigan, 1953
- [9] Seenappa M.G.: Graph Classification using Machine Learning Algorithms. Master's Projects. 725, San Jose State University 2019, DOI: <https://doi.org/10.31979/etd.b9pm-wpng>
- [10] Umami M.H., Prihandini R.M., Agatha A.B.: Application of Graph Theory to Social Network Analysis, Department of Mathematics Educations, University of Jember, Jember, Indonesia, 2024
- [11] L.J.P. van der Maaten, Hinton G.E.: Visualizing High-Dimensional Data Using t-SNE. Journal of Machine Learning Research 9(Nov):2579-2605, 2008
- [12] Wilson R.J.: Wprowadzenie do teorii grafów. PWN, Warszawa 2012.
- [13] Włoch A., Włoch I.: Matematyka dyskretna. Podstawowe metody i algorytmy teorii grafów. Oficyna Wydawnicza Politechniki Rzeszowskiej, Rzeszów 2008.

- [14] Wojciechowski J., Pieńkosz K.: Grafy i sieci. PWN, Warszawa 2013.
- [15] <https://cran.r-project.org/web/packages/igraph/index.html>. Dostęp 10.03.2024.
- [16] <https://developers.google.com/machine-learning>. Dostęp 20.07.2024.
- [17] <https://www.ibm.com/topics>. Dostęp 20.07.2024.
- [18] <https://www.python.org/>. Dostęp 07.08.2024.
- [19] <https://www.r-project.org/>. Dostęp 07.08.2024.
- [20] <http://student.krk.pl/026-Ciosek-Grybow/rodzaje.html>. Dostęp 26.03.2024.
- [21] https://www.tensorflow.org/api_docs. Dostęp 21.07.2024.
- [22] <http://wms.mat.agh.edu.pl/~md/ang-pol.pdf>. Dostęp 29.03.2024.

POLITECHNIKA RZESZOWSKA im. I. Łukasiewicza
Wydział Matematyki i Fizyki Stosowanej

Rzeszów, 2024

STRESZCZENIE PRACY DYPLOMOWEJ MAGISTERSKIEJ
ROZPOZNAWANIE RYSUNKÓW GRAFÓW

Autor: Gabriel Lichacz, nr albumu: 164174

Opiekun: dr Paweł Bednarz

Słowa kluczowe: (max. 5 słów kluczowych w 2 wierszach, oddzielanych przecinkami)

Treść streszczenia po polsku

RZESZOW UNIVERSITY OF TECHNOLOGY
The Faculty of Mathematics and Applied Physics

Rzeszow, 2024

MSC THESIS ABSTRACT
RECOGNITION OF GRAPHS

Author: Gabriel Lichacz, nr albumu: 164174

Supervisor: Paweł Bednarz PhD

Key words: (max. 5 słów kluczowych w 2 wierszach, oddzielanych przecinkami)

Treść streszczenia po angielsku