

Gabriel Lichacz

Rozpoznawanie rysunków grafów

Praca magisterska

Promotor: dr Paweł Bednarz

Spis treści

1.	Wst	Wstęp							
2.	Pod	Podstawowe definicje teorii grafów							
3.	Ucz	Uczenie maszynowe							
	3.1.	Podsta	awowe pojęcia z zakresu uczenia maszynowego	11					
	3.2.	Warst	wy w modelach sieci neuronowych	14					
	3.3.	Rodza	je uczenia maszynowego	16					
	3.4.	Proces	s uczenia maszynowego	17					
4.	Wyl	korzys	tywane technologie	18					
	4.1.	Język	R	18					
	4.2.	Język	Python	19					
	4.3.	Stanov	wisko pracy	19					
5 .	Opis modelu								
	5.1.	Genera	acja danych	20					
	5.2.	2. Dane zewnętrzne							
	5.3.	3. Opis ogólny skryptu							
		5.3.1.	Przygotowanie	23					
		5.3.2.	Model	24					
		5.3.3.	Wyniki	26					
		5.3.4.	Testy na danych zewnętrznych	26					
6.	Test	t y		27					
	6.1.	Testy	modeli	27					
		6.1.1.	Model podstawowy	27					
		6.1.2.	Model z walidacją krzyżową	30					
		6.1.3.	Model ze zmienną liczbą wierzchołków	42					
		6.1.4.	Model ze zmienną liczbą wierzchołków i walidacją krzyżową	46					
	6.2. Wnioski								
7.	Pod	sumov	vanie i wnioski końcowe	52					
$\mathbf{Z}_{\mathbf{a}}$	łącz	niki .		53					
T.i.	terat	uro		54					

Wykaz symboli

G - graf

V(G)- zbiór wierzchołków grafu G

 ${\cal E}(G)$ - 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

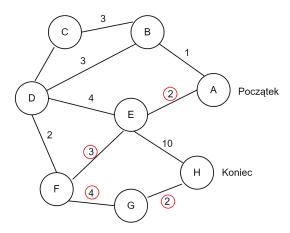
 W_n - koło n-wierzchołkowe

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 mozna 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" [14].

Teoria grafów to dziedzina matematyki zajmująca się badaniem właściwości grafów, będąca bardzo ważnym narzędziem w wielu "dziedzinach od rachunku operacyjnego, chemii, po genetykę, lingiwistykę oraz od elektroniki i geografii po socjologię i architekturę" [13]. Grafy dają możliwość zobrazowania pewnych modeli, co jest szczególnie korzystne w analizie wzorców. W kontekście grafów warto podkreślić ich zastosowanie poza teoretycznymi analizami.

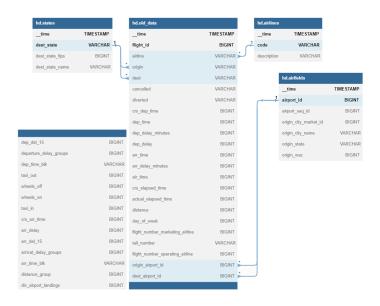
W dziedzinach informatycznych, grafy stanowią fundament wielu algorytmów, takich jak algorytmy przeszukiwania, algorytmy najkrótszej drogi, drzew rozpinających, czy modeli sieci. Przykładem może być tutaj wyszukiwanie najkrótszej trasy, chociażby w nawigacji GPS, gdzie wierzchołki odpowiadają skrzyżowaniom, 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 czeronymi 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.

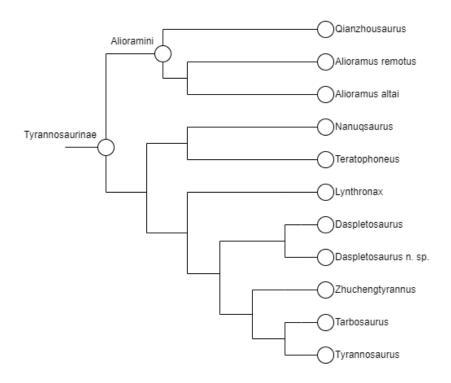


Rysunek 1.2: Przykładowy schemat relacyjnej bazy danych

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 izomeryzmu, 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 przetwarza-



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)

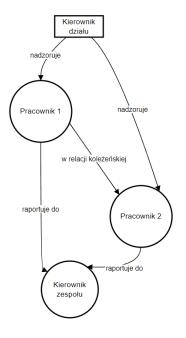
nie języka naturalnego przez komputery, co stanowi podstawę technologii takich jak tłumaczenie automatyczne czy rozpoznawanie mowy.

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 [9]. 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 [11].

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

$$H_3C$$
 N
 CH_3
 CH_3
 CH_3

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 nauczenia 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 [14], [13] oraz [15].

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: $x, y, x_i, y_i, 1, 2, ...$ 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 grafue G nazywamy skończony ciąg wierzchołków $x_1, x_2, ..., x_m, m \geqslant 2$ i krawędzi $x_i, x_{i+1}, i = 1, ..., m$.

Definicja 8. Grafem spójnym nazywamy grafG, w którym każde dwa wierzchołki są połaczone 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, żę 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 niezorientowaną.

Definicja 16. Graf skierowany - graf niezawierający krawędzi niezorientowanych.

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 biarnych - lewgo 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 umożliwiajcych 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], [10], [8] oraz [12].

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

Definicja 2. Zbiór walidacjny - 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 złożeń, 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 sceptyzm 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.

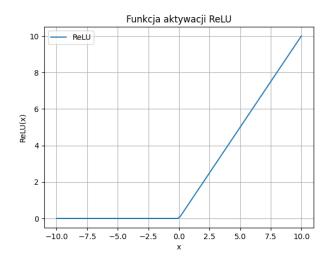
Definicja 7. Bias (błąd obciążenia) to błąd wynikający z niepoprawnych założeń w procesie uczenia maszynowego. Oznacza różnicę między przewidywaną wartością modelu a rzeczywistą wartością.

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 q to funkcja aktywacji.

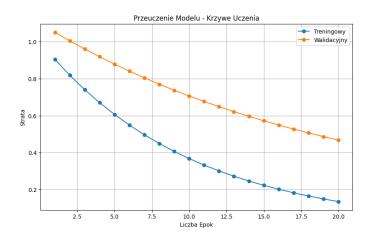
Definicja 9. Funkcja ReLU (ang. Recified Linear Unit) - funkcja aktywacji. Jest ciągła, ale nieróżniczkowalna w punkcie z=0, a jej pochodna dla z<0 wynosi 0. Spisuje się bardzo dobrze w modelowaniu złożonych funkcji, a dodatkowym aututem jest jej szybkość przetwarzania. Nie ma maksymalnej wartości wyjściowej.

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 wartstwach sieci.

Definicja 13. Epoka to pełny cykl przez cały zbiór danych treningowych, w której model przetwarza wszystie 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 porówywane 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 zeru, 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 Barnesa-Huta, co umożliwia stosowanie jej na dużych, rzeczywistych zbiorach danych.

Definicja 18. Entropia krzyżowa pomiędzy dwoma rozkładami prawdopodobieństwa p i q jest definiowana wzorem $H(p,q) = -\sum p(x) \log q(x)$ (przynajmniej wtedy, gdy obydwa rozkłady są dyskretne).

Definicja 19. Konwergencja modelu to stopniowe poprawianie się wydajności podczas trwania procesu uczenia, aż do osiągnięcia stabilnego poziomu. Według założeń, po osiągnięciu takiego poziomu, kolejne treningi nie powinny przynosić dalszych korzyści lub owe korzyści sa pomijalnie małe.

Definicja 20. Normalizacja wsadowa (ang. batch normalization) to operacja pozwalająca modelowi określić optymalną skalę i średnią danych wejściowych dla każdej warstwy. Z tego też powodu stosowana jest przed funkcją aktywacji w każdej warstwie. W jej wyniku, dane wejściowe zostają wyśrodkowane i znormalizowane,

Definicja 21. Caching danych przyspiesza naukę modelu. Proces ten umieszcza zawartość danych w pamięci podręcznej GPU. Dzięki temu każdy przykład ze zbioru danych jest odczytywany i przetwarzany tylko raz, a nie jak domyslnie - raz na epokę.

Definicja 22. Pobieranie wstępne (ang. prefetching) to metoda, w której podczas przetwarzania przez algrytm uczenia jednej grupy, zestaw danych równolegle przygotowuje kolejną grupę.

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 wekorem 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 1/(1-współczynnikDropout), aby suma wartości wejściowych pozostała niezmieniona [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:

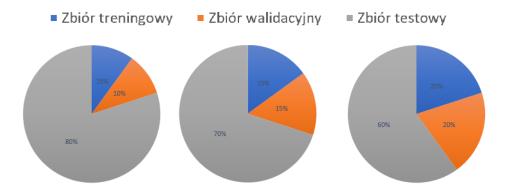
- Uczenie nadzorowane (ang. supervised learning) to podejście, w którym model jest szkolony na danych, które są już odpowiednio oznaczone (np. rekordy mają przypisane odpowiednie klasy). Celem jest odkrycie funkcji, która przekształca dane wejściowe w oczekiwane wyjścia. Znajduje zastosowanie w klasyfikacji 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 wzmacnianie (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.



Rysunek 3.8: Przykład podziału 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 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 hyperparametrów, 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, zautomatyzoawanie 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, ciągłe 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 [20]

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 wygenero-

wane 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 [19]

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 zadecydowało 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 neuronowa.

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.

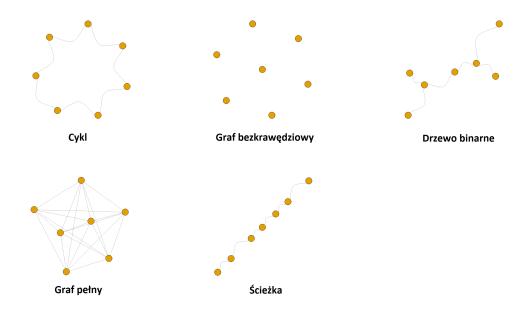
```
#' Rysuj graf
    # '
   #' @param graph Graph - Graf do narysowania
   #' @param pathName string - Sciezka
   #' Oparam fileName string - Nazwa pliku
   #' @param vertexNo int - liczba wierzcholkow
   #' @param i int - Numer iteracji
   #' @param plotCurve float
    #' @return void
9
    plotGraphHelper <- function(graph, pathName, fileName,</pre>
    vertexNo, i, plotCurve)
12
      path <- file.path(pathName, paste0(</pre>
        fileName, "-", vertexNo, "-", i, ".png"
14
      png(path, width = 800, height = 600)
      plot(graph, vertex.label = NA, edge.curved = plotCurve)
      dev.off()
18
    }
```

Listing 1: Listing skryptu rysującego grafy

```
Graf sciezka N wierzcholkow, nieskierowany
    # '
    #' Oparam N int - liczba rysunkow
    #' @param vertexNo int - liczba wierzcholkow
    #' @return void
    # ,
    plotPaths <- function(N, vertexNo)</pre>
      fileName <- 'path'
      pathName <- createDir(vertexNo, fileName)</pre>
      definition <- c()
      for (index in 1:(vertexNo-1))
        definition <- c(definition, index, index + 1)
14
      definitionMatrix <- matrix(</pre>
17
        definition, ncol = 2, byrow = TRUE
18
      for (i in 1:N)
        plotCurve <- generateGaussian(0.01, 0.99)</pre>
        graph <- graph_from_edgelist(</pre>
```

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. Testy ze stałą krzywizną wierzchołków nie zostały przedstawione w dalszej częście pracy, ze względu na ich niską wartość merytoryczną. Wyniki uzyskane z tych testów nie były zadowalające.



Rysunek 5.11: Przykładowe wygenerowane rysunki grafów z każdej klasy

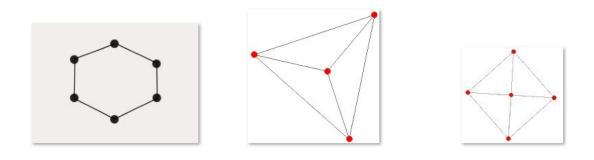
5.2. Dane zewnętrzne

Obrazy testowe, które nazwane są tutaj danymi zewnętrznymi, są rysunkami grafów pochodzącymi spoza przygotowanego testu. Dzielą 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 itreacji walidacyjnej, dane zostały podzielone inaczej. Po wczytaniu danych, zostają one przeskalowane do wielkości 180x180 pikseli i przekształcone do odcieni szarości.

```
n \text{ splits} = 5
    kfold = KFold(n_splits=n_splits, shuffle=True, random_state
     =42)
   history = []
    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']
    for train_index, val_index in kfold.split(all_images):
      train_images = [all_images[i] for i in train_index]
      validation_images = [all_images[i] for i in val_index]
      # Generowanie danych treningowych
10
      train ds = tf.keras.preprocessing.
     image_dataset_from_directory(
      train dir,
      image_size=(img_height, img_width),
13
      batch size=batch size)
14
      class names = train ds.class names
16
      train_ds = train_ds.map(lambda x, y: (rgb_to_grayscale(x), y
18
     ))
      # Generowanie danych walidacyjnych
20
      val_ds = tf.keras.preprocessing.image_dataset_from_directory
      validation_dir,
      image_size=(img_height, img_width),
      batch_size=batch_size)
25
      val_ds = val_ds.map(lambda x, y: (rgb_to_grayscale(x), y))
      # Tworzenie modelu
28
      model = tf.keras.models.Sequential([
      tf.keras.layers.Rescaling(1./255),
30
      tf.keras.layers.Conv2D(32, 3, activation='relu'),
      tf.keras.layers.MaxPooling2D(),
      tf.keras.layers.Conv2D(32, 3, activation='relu'),
      tf.keras.layers.MaxPooling2D(),
      tf.keras.layers.Conv2D(32, 3, activation='relu'),
      tf.keras.layers.MaxPooling2D(),
36
      tf.keras.layers.Flatten(),
      tf.keras.layers.Dense(128, activation='relu',
38
     kernel_regularizer=tf.keras.regularizers.12(0.01)),
```

```
tf.keras.layers.Dropout(0.2),
      tf.keras.layers.Dense(len(class_names))
40
41
      # Kompilacja modelu
      model.compile(
        optimizer='adam',
        loss=tf.losses.SparseCategoricalCrossentropy(from logits=
46
        metrics=['accuracy']
49
      # Uczenie modelu
      history.append(model.fit(
        train_ds,
        validation_data=val_ds,
        epochs = 75
54
      ))
```

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 3x3 oraz funkcję aktywacji ReLU, która wprowadza nieliniowość do modelu. MaxPooling2D redukuje rozmiar danych wejściowych, wybierając maksymalną wartość z każdego regionu (domyślnie oraz tutaj - 2x2). 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 siła 0,01. Kolejna warstwa to Droput, która losowo wyłącza 20% neuronów podczas uczenia, co również jest moetodą 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.

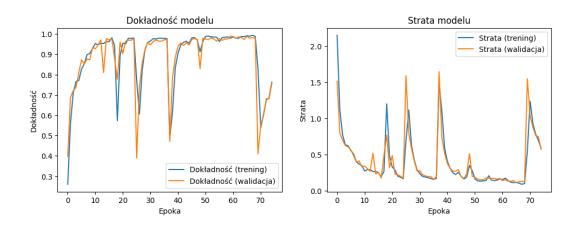
W kolejnych wariantach modeli, zmieniane były parametry poszczególnych warstw, funkcje aktywacji, czy również same warstwy, w celu znalezienia najbardziej optymalnej kombinacji.

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%.



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.

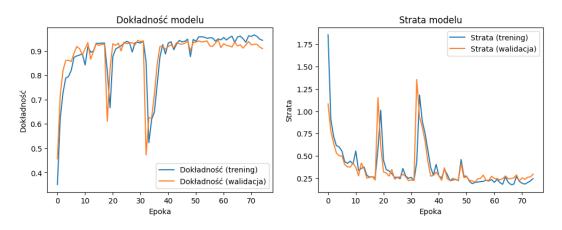
6. Testy

6.1. Testy modeli

6.1.1. Model podstawowy

Dokładność modelu podstawowego, uczonego na grafach z czterema wierzchołkami stopniowo rosnie, zaczynając od około 40% i osiągając prawie 90% pod koniec procesu uczenia. Może to sugoerować, 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 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, liczba wierzchołków = 4

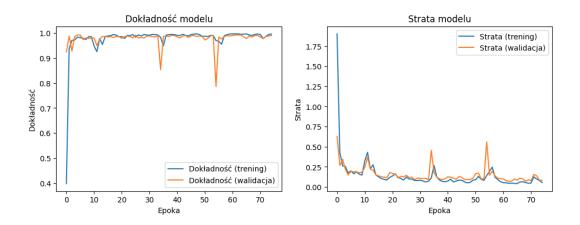
Ogólnie rzecz biorąc, model wydaje się dobrze uczyć na danych treningowych i generalizować na danych walidacyjnych, chociaż zmienność straty walidacyjnej może wskazywać na pewne problemy z przeuczeniem.

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



Rysunek 6.18: Wizualizacja klasyfikacji obrazów zewnętrznych dla modelu podstawowego, liczba wierzchołków = 4

Model przewidział poprawnie 25% grafów, co nie jest najgorszym wynikiem, zaważając że jest to najbardziej podstawowa wersja testowanego modelu.



Rysunek 6.19: Wyniki testów dla modelu podstawowego, liczba wierzchołków = 6

Rysunek 6.20: Klasyfikacja obrazów zewnętrznych dla modelu podstawowego ze stałą krzywizną wierzechołków, liczba wierzchołków = 6

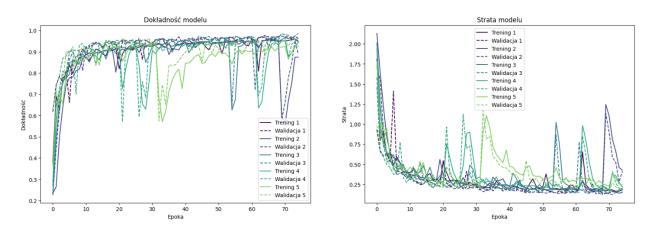


Rysunek 6.21: Wizualizacja klasyfikacji obrazów zewnętrznych dla modelu podstawowego, liczba wierzchołków = 6

6.1.2. Model z walidacją krzyżową

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 stabiliziuje się w okolicach 90%, ale mimo to widać pewne fluktuacje, zwłaszacza na danych walidacyjnych. Możliwe do zaobserowania są regularne spadki dokładności w niektórych epokach, co może wynikać z niestabilnego treningu lub problemów modelu w generalizacji dla niektórych danych walidacyjncyh.

Dla straty modelu można zaobserować 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. Nieregularne wzrosty straty, podobnie jak w przypadku dokładności, mogą wskazywać na problemy z przeuczeniem.



Rysunek 6.22: 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.

Rysunek 6.23: Klasyfikacja obrazów zewnętrznych dla modelu z walidacją krzyżowa



Rysunek 6.24: Wizualizacja klasyfikacji obrazów zewnętrznych dla modelu z walidacją krzyżową

Z powodu przeuczenia model nie radził sobie z zewnętrznymi obrazkami testowymi. Większość obrazów testowych określił jako grafy pełne, a tylko 3 jako jedna z innych klas, co oczywiście nie jest zgodne ze stanem rzeczywistym. Realna dokładność modelu wynosi więc około 24%.

Zmodyfikowany model

W celu poprawy dokładności i zapobiegnięciu przeuczenia wprowadzone zostały następujące modyfikacje do modelu z walidacją krzyżową. Każde z nich zostało przetestowane 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 normalizację wsadową 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 pobierania wstępnego danych i cachingu zbiorów danych, by przypsieszyć 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.

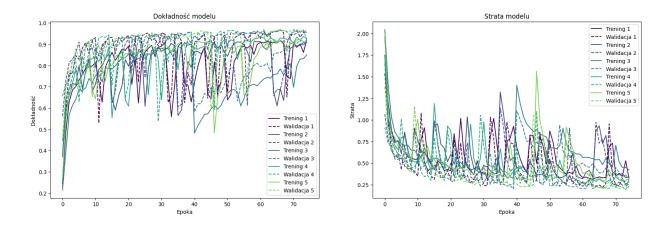
Zmodyfikowany model - Conv2D i Dropout

```
model = tf.keras.models.Sequential([
    tf.keras.layers.Rescaling(1./255),
    tf.keras.layers.Conv2D(32, 3, activation='relu'),
    tf.keras.layers.MaxPooling2D(),
    tf.keras.layers.Conv2D(64, 3, activation='relu'),
    tf.keras.layers.MaxPooling2D(),
    tf.keras.layers.Conv2D(128, 3, activation='relu'),
    tf.keras.layers.MaxPooling2D(),
    tf.keras.layers.Flatten(),
    tf.keras.layers.Flatten(),
    tf.keras.layers.Dense(128, activation='relu',
    kernel_regularizer=tf.keras.regularizers.l2(0.01)),
    tf.keras.layers.Dropout(0.5),
    tf.keras.layers.Dense(len(class_names))
]
```

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 zadoalające 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 6.25: Dokładność i walidacja dla zmodyfikowanego modelu z walidacją krzy-żową - Conv2D i Dropout

Modfyikacja 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.

Rysunek 6.26: Klasyfikacja obrazów zewnętrznych dla zmodyfikowanego modelu z walidacją krzyżową - Conv2D i Dropout



Rysunek 6.27: Wizualizacja klasyfikacji obrazów zewnętrznych dla zmodyfikowanego modelu z walidacja krzyżowa - Conv2D i Dropout

Model poprawnie sklasyfikował aż 40% rysunków grafów, co jest znacznym polepszeniem w stosunku do początkowego modelu z zastosowaną walidacją krzyżową. Wynik, o ile daleko mu do pełnej pewności, jest znacznie lepszy niż losowe przypisywanie klas grafów. Model ten więc, choć nie idealny, wykazuje pewną realną użyteczność.

Zmodyfikowany model - normalizacja wsadowa

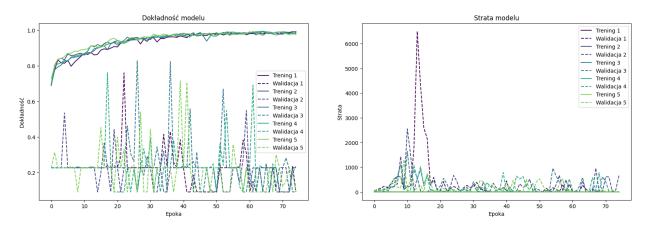
Model został zmodyfikowany poprzez zastosowanie normalizacji wsadowej pomiędzy kolejnymi warstwami Conv2D modelu. Ma to na celu poprawienie stabilności treningu oraz przyspieszenie uczenia. Użyte zostało również zwiększenie liczby filtrów w warstwach Conv2D oraz zwiększenie parametru Dropout z poprzedniej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

```
model = tf.keras.models.Sequential([
        tf.keras.layers.Rescaling(1./255),
        tf.keras.layers.Conv2D(32, 3, activation='relu'),
        tf.keras.layers.BatchNormalization(),
        tf.keras.layers.MaxPooling2D(),
        tf.keras.layers.Conv2D(64, 3, activation='relu'),
        tf.keras.layers.BatchNormalization(),
        tf.keras.layers.MaxPooling2D(),
        tf.keras.layers.Conv2D(128, 3, activation='relu'),
        tf.keras.layers.BatchNormalization(),
        tf.keras.layers.MaxPooling2D(),
        tf.keras.layers.Flatten(),
12
        tf.keras.layers.Dense(128, activation='relu',
13
    kernel_regularizer=tf.keras.regularizers.12(0.01)),
        tf.keras.layers.Dropout(0.5),
14
        tf.keras.layers.Dense(len(class names))
    ])
```

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 niestałość walidacji.

Strata treningowa, co jest spodziewane po uznaniu model za przeuczony, osiąga bardzo niskie wartości treingowe - 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 - normalizacja wsadowa

Model jest nadmiernie dopasowany do danych treningowych i nie pot

Rysunek 6.29: Klasyfikacja obrazów zewnętrznych dla zmodyfikowanego modelu z walidacją krzyżową - normalizacja wsadowa



Rysunek 6.30: Wizualizacja klasyfikacji obrazów zewnętrznych dla zmodyfikowanego modelu z walidacją krzyżową - normalizacja wsadowa

Model sklasyfikował poprawnie prawie 31% grafów zewnętrznych. Jest to o 9 punktów procentowych mniej niż poprzenia modyfikacja modelu, co prowadzi do wniosków, że zastosowanie normalizacji wsadowej nie spełniło założonej funkcji. Nie jest to udany eksperyment, lecz model wciąż prezentuje pewną użyteczność.

Zmodyfikowany model - augmentacja danych

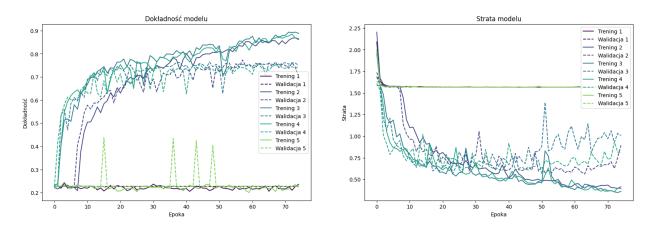
Przed rozpoczęciem nauki modelu, zastosowana została augmentacja danych treningowych. Najpierw, stworzony został sekwencyjny model, składający się z pewnych warstw. Pierwsza z nich - RandomFlip, odwraca losowe obrazy w poziomie, zwiększając tym samym różnorodność danych. Kolejna - RandomRotation, losowo obraza 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 wartości 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.

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

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

Rysunek 6.32: Klasyfikacja obrazów zewnętrznych dla zmodyfikowanego modelu z walidacja krzyżowa - augmentacja danych



Rysunek 6.33: Wizualizacja klasyfikacji obrazów zewnętrznych dla zmodyfikowanego modelu z walidacją krzyżową - augmentacja danych

Model w takiej postaci nie sklasyfikował poprawnie nawet 10% grafów testowych. Nie jest to zaskoczenie, mając na uwadze osiągniętą dokładność modelu na pewnych przejściach walidacji krzyżowej, która wynosiła około 22-23%.

Zmodyfikowany model - spowolnienie uczenia

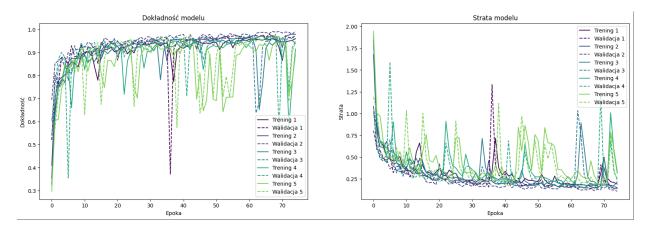
W tym modelu zostało zastosowane wywołanie zwrotne, które spowalnia proces uczenia. Współczynnik procesu uczenia decyduje o tym, jak duże kroki wykonuje algorytm optymalizacyjny podczas aktualizacji wag sieci neuronowej. Gdy owy współczynnik jest zbyt duży, model może oscylować wokół minimum funkcji 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 wsółczynnik nie zostanie już zredukowany. Zapobiega to zbyt drastycznemu zmniejszeniu learning rate, które mogłoby zahamować proces uczenia się modelu.

```
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 bezpośrdenio 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 stabiizuje 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 6.34: 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.

Rysunek 6.35: Klasyfikacja obrazów zewnętrznych dla zmodyfikowanego modelu z walidacja krzyżowa - spowolnienie uczenia



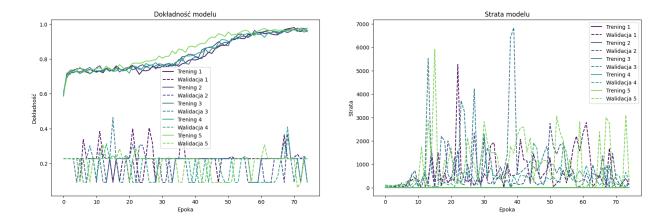
Rysunek 6.36: Wizualizacja klasyfikacji obrazów zewnętrznych dla zmodyfikowanego modelu z walidacją krzyżową - spowolnienie uczenia

Model poprawnie sklasyfikował około 31% grafów zewnętrznych. Jest to w zasadzie identyczny wynik, jak dla modelu z zastosowaniem normalizacji wsadowej. Zważając na to, że ogólną większość grafów oznaczył jako pełne, może to również być 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 wrecz 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 zaobserować wielką niestabilność - osiąga bardzo wysokie wartości, nawet rzędu kilku tysięcy, jak również bardzo niskie, bliskie zeru.



Rysunek 6.37: 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.

```
|- ../test_graphs\drawn\path-6.png - | najprawdopodobniej należy do klasy |- full - | z prawdopodobieństwem 100.00 procent.

|- ../test_graphs\drawn\path-7.png - | najprawdopodobniej należy do klasy |- full - | z prawdopodobieństwem 100.00 procent.

|- ../test_graphs\drawn\path-8.png - | najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle - | z prawdopodobieństwem 100.00 procent.

|- ../test_graphs\drawn\path-8.png - | najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle - | z prawdopodobieństwem 100.00 procent.

|- ../test_graphs\drawn\path-9.png - | najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle - | z prawdopodobieństwem 100.00 procent.

|- ../test_graphs\drawn\tree-binary-1.png - | najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle - | z prawdopodobieństwem 100.00 procent.

|- ../test_graphs\drawn\tree-binary-2.png - | najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle - | z prawdopodobieństwem 100.00 procent.

|- ../test_graphs\drawn\tree-binary-3.png - | najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle - | z prawdopodobieństwem 100.00 procent.

|- ../test_graphs\drawn\tree-binary-4.png - | najprawdopodobniej należy do klasy |- full - | z prawdopodobieństwem 100.00 procent.

|- ../test_graphs\drawn\tree-binary-5.png - | najprawdopodobniej należy do klasy |- full - | z prawdopodobieństwem 100.00 procent.

|- ../test_graphs\drawn\tree-binary-5.png - | najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle - | z prawdopodobieństwem 100.00 procent.

|- ../test_graphs\grawn\tree-binary-5.png - | najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle - | z prawdopodobieństwem 100.00 procent.

|- ../test_graphs\grawn\tree-binary-5.png - | najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle - | z prawdopodobieństwem 100.00 procent.

|- ../test_graphs\grawn\tree-binary-5.png - | najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle - | z prawdopodobieństwem 100.00 procent.

|- ../test_graphs\grawn\tree-binary-5.png - | najprawdopodobniej należy do klasy |- cycle - | z prawdopodobieństwem 100.00 procent.

|- ../test_graphs\internet\internet-full-1.jpg - | najprawdopodobniej należy do klasy |- c
```

Rysunek 6.38: Klasyfikacja obrazów zewnętrznych dla zmodyfikowanego modelu z walidacją krzyżową - modyfikacja połączone



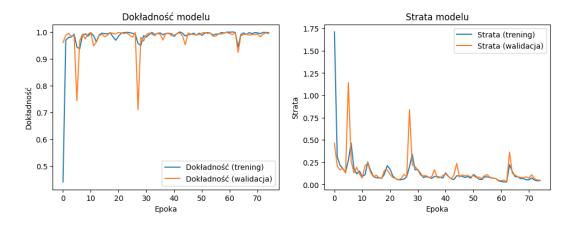
Rysunek 6.39: Wizualizacja klasyfikacji obrazów zewnętrznych dla zmodyfikowanego modelu z walidacja krzyżowa - modyfikacja połaczone

Model poprawnie wskazał klasy tylko 16% grafów testowych, co jest znacznie poniżej oczekiwanych rezultatów, zważając na liczbę zastosowanych modyfikacji modelu. Wnioskować można, że nie każda modyfikacja była odpowiednio dobrana do danego przypadku lub niektóre z nich nie łączą się zbyt dobrze.

6.1.3. Model ze zmienną liczbą 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 zaobserować pewne wzrosty, które mogą być spowodowane trudniejszymi przypadkami w zbiorze walidacyjnym.



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

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

model nie jest przeuczony.

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



Rysunek 6.42: Wizualizacja klasyfikacji obrazów zewnętrznych dla modelu ze zmienną liczbą wierzchołków

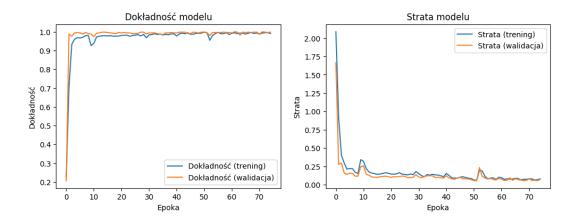
Model poprawnie sklasyfikował ponad 34% rysunków zewnętrznych. Nie jest to zły wynik, biorąc pod uwagę niską złożoność modelu.

Zmodyfikowany model - Conv2D i Droput 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, możnaby 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 6.43: Dokładność i walidacja dla zmodyfikowanego modelu ze zmienną liczbą wierzchołków - Conv2D i Droput

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

Rysunek 6.44: Klasyfikacja obrazów zewnętrznych dla zmodyfikowanego modelu ze zmienną liczbą wierzchołków - Conv2D i Droput



Rysunek 6.45: Wizualizacja klasyfikacji obrazów zewnętrznych dla zmodyfikowanego modelu ze zmienna liczba wierzchołków - Conv2D i Droput

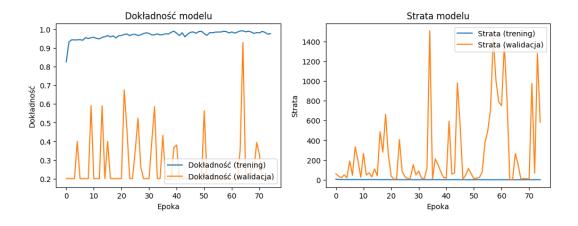
Osiągnięta stabilizacja modelu i brak znaczących różnic między wartościami dokładności, czy straty na zbiorach treningowych i wdalidacyjnych, nie przełożyła się w sposób rewolucyjny na osiągi modelu. Model jednakże nie wypadł całkowicie źle poprawnie sklasyfikował 36% zewnętrznych grafów testowych, co plasuje go w czołówce testowanych modeli pod kątem realnej dokładności.

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 niekórych epokach.



Rysunek 6.46: 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.

Rysunek 6.47: Klasyfikacja obrazów zewnętrznych dla w pelni zmodyfikowanego modelu ze zmienną liczbą wierzchołków



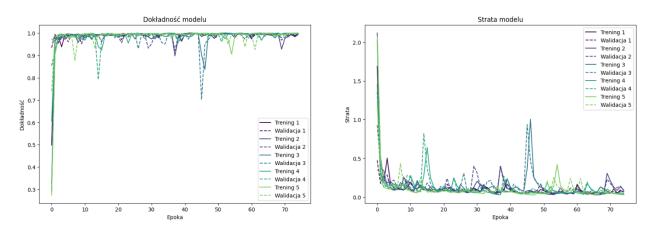
Rysunek 6.48: Wizualizacja klasyfikacji obrazów zewnętrznych dla w pelni zmodyfikowanego modelu ze zmienną liczbą wierzchołków

Model poprawnie wskazał tylko około 24% grafów, lecz analiza jego wskaźników mówi nam, że jest to dzieło raczej przypadku, aniżeli poprawnego nauczenia się ogólnych wzorców danych. Jego dokładność walidacyjna była bardzo niestabilna.

6.1.4. Model ze zmienną liczbą wierzchołków i walidacją krzyżową

Model uczony na grafach ze zmienną liczbą wierzchołków oraz zastosowaną walidacją krzyżową, bardzo szybko osiąga poziom dokładności biski 100%, bo już w kilku pierwszych epokach. Po około 10 epoce, dokonuje się stabilizacja, oscylująca między 95%, a 100%. W przypadku tego modelu, fluktuacje dokładności są znikome, co wskazuje na dobrą stabilność modelu. Pojedyncze przypadku spadu 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 6.49: 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.

Rysunek 6.50: Klasyfikacja obrazów zewnętrznych dla modelu ze zmienną liczbą wierzchołków i walidacją krzyżową



Rysunek 6.51: Wizualizacja klasyfikacji obrazów zewnętrznych dla modelu ze zmienną liczbą wierzchołków i walidacja krzyżowa

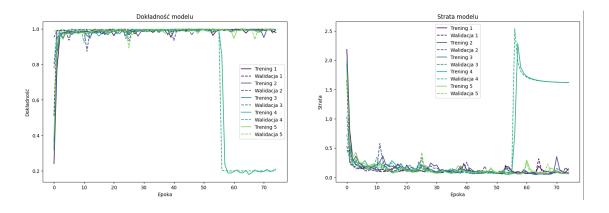
Model poprawnie sklasyfikował aż 38% testowanych danych zewnętrznych. Jest to zadowalający wynik, zważając na trudności innych modeli w poprawnym wskazywaniu klas sprawdzanych grafów. Podejrzenia dotyczące przeuczenia modelu były więc bezpodstawne. Model całkiem dobrze nauczył się żądanych wzorców.

Zmodyfikowany model - Conv2D i Droput oraz spowolnienie uczenia

Model stosuje zwiększone parametry filtrów dla warstw Conv2D, powiększony parametr Dropout z 0,2 do 0,5 oraz spowolnienie uczenia.

Dokładność osiąga poziom bliski 100% na zbiorze treningowym i walidacyjnym w bardzo szybkim tempie. Po osiągnięciu tego pułapu, utrzymuje się na nim do ostatniej epoki procesu nauczania modelu. Jedyną anomalię można zaobserować około 55 epoki dla jednego z przejść walidacji krzyżowej. Spada ona gwałtownie do poziomu 23% i pozostaje w takim stanie do końca nauki.

Strata prezentuje się podobnie jak dokładność. Wartości utrzymują się na dość niskich poziomach przez cały proces uczenia po początkowym spadku. Około 55 epoki, dla jednego przejścia walidacji krzyżowej, da się zaobserować nagły wzrost straty do około 2,5 jednostek, który stopniowo spada do około 1,8.



Rysunek 6.52: Dokładność i walidacja dla zmodyfikowanego modelu ze zmienną liczbą wierzchołków i walidacją krzyżową - Conv2D i Droput

W przypadku pojedynczej anomalii jaką da się zaobserować na krzywych do-

kładności oraz straty, można wnioskować, że dla jednego przejścia walidacji krzyżowej, a konkretnie czwartego, wystąpił pewien problem z uczeniem modelu. Mogła to być zmiana wartości współczynnika uczenia się lub inna zmiana w procesie treningu. Różnice pomiędzy wartościami dla danych treningowych oraz waldacyjnych są znikomenawet w prypadku odstającym wartościami od reszty. Ogólnie, model osiągnął bardzo dobre wyniki, co sugeruje, że proces nauczania przebiegł pomyślnie.

Rysunek 6.53: Klasyfikacja obrazów zewnętrznych dla zmodyfikowanego modelu ze zmienną liczbą wierzchołków i walidacją krzyżową - Conv2D i Droput



Rysunek 6.54: Wizualizacja klasyfikacji obrazów zewnętrznych dla zmodyfikowanego modelu ze zmienną liczbą wierzchołków i walidacją krzyżową - Conv2D i Droput

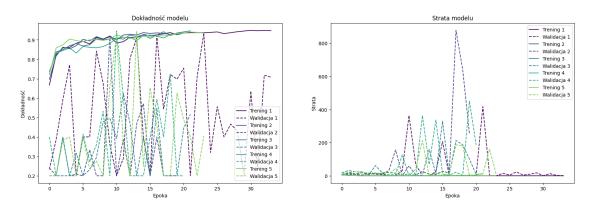
Poprawna klasyfikacja 29% grafów jest w pewnym sensie rozczarowującym wynikiem, zważajac na wysokie wartości dokładności, nawet na zbiorach walidacyjnych oraz całkiem wysoki wynik modelu bez modyfikacji. Wnioskować można, że spowolnienie uczenia i zwiększenie liczby filtrów w warstwach Conv2D oraz zwiększenie parametru dropout, nie przyniosło oczekiwanych skutków.

Zmodyfikowany model

Do modelu wprowadzone zostały wszystkie modyfikacje wymienione w rozdziale z modelem z walidacją krzyżową, czyli zwiększenie liczby filtrów w warstwach, normalizacja wsadowa, 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 zaobserować 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 6.55: 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.

Rysunek 6.56: Klasyfikacja obrazów zewnętrznych dla w pełni zmodyfikowanego modelu ze zmienna liczba wierzchołków i walidacja krzyżowa



Rysunek 6.57: Wizualizacja klasyfikacji obrazów zewnętrznych dla w pełni zmodyfikowanego modelu ze zmienną liczbą wierzchołków i walidacją krzyżową

Model ocenił poprawnie około 38% klas grafów zewnętrznych, co nie jest złym wynikiem. W przypadku modeli z walidacją krzyżową, zastosowanie wszystkich przygotowanych modyfikacji modelu, nie do końca spełniło swoje złożenia, ale również nie pogorszyło wyniku.

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 odręcznie 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 typesetting, 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, Polytefhnic 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] Goodfellow I., Bengio Y., Courville A.: Deep Learning, MIT Press 2016
- [9] Harary F., Norman R.Z.: Graph Theory as a Mathematical Model in Social Science, Research Center for Group Dynamics, University of Michigan, 1953
- [10] 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
- [11] 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
- [12] 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
- [13] Wilson R.J.: Wprowadzenie do teorii grafów. PWN, Warszawa 2012.

- [14] Włoch A., Włoch I.: Matematyka dyskretna. Podstawowe metody i algorytmy teorii grafów. Oficyna Wydawnicza Politechniki Rzeszowskiej, Rzeszów 2008.
- [15] Wojciechowski J., Pieńkosz K.: Grafy i sieci. PWN, Warszawa 2013.
- [16] https://cran.r-project.org/web/packages/igraph/index.html. Dostęp 10.03.2024.
- [17] https://developers.google.com/machine-learning. Dostep 20.07.2024.
- [18] https://www.ibm.com/topics. Dostep 20.07.2024.
- [19] https://www.python.org/. Dostęp 07.08.2024.
- [20] https://www.r-project.org/. Dostęp 07.08.2024.
- [21] http://student.krk.pl/026-Ciosek-Grybow/rodzaje.html. Dostęp 26.03.2024.
- [22] https://www.tensorflow.org/api_docs. Dostep 21.07.2024.
- [23] 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: Uczenie maszynowe, Grafy, Sieci Neuronowe

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: Machine learning, Graphs, Neural Networks