

Machine Learning for research

August 9, 2019

0.0.1 CICATA

Dr. Eric Dolores, matemático en NewSci labs.

Clase de ML para estudiantes de doctorado con nociones básicas de programación.

<https://mendozacortesgroup.github.io/MachineLearningForHumans/>

```
[1]: from IPython.display import Image
```

```
[2]: Image("img/carlos.png")
```

[2]:



```
[3]: Image("img/Carlo.jpg")
```

```
[3]:
```



Ejemplo de edición de imagen.

<https://www.nvidia.com/research/inpainting/selection>

[21]: `Image("img/gan.jpg")`

[21]:

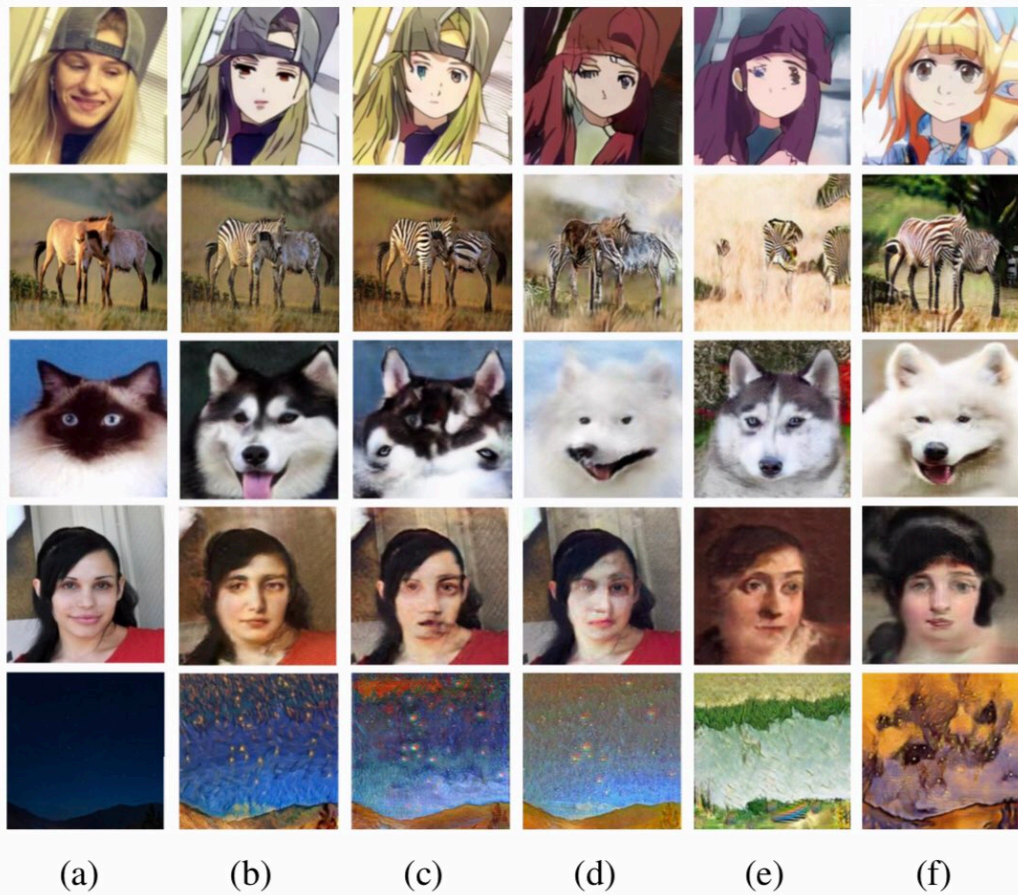


Figure 6. Visual comparisons on the five datasets. From top to bottom: selfie2anime, horse2zebra, cat2dog, photo2portrait, and photo2vangogh. (a) Source images, (b) U-GAT-IT, (c) CycleGAN, (d) UNIT, (e) MUNIT, (f) DRIT.

Traducción de imagen.

[Photo credit: @roadrunning01]

```
[1]: from IPython.display import YouTubeVideo
      YouTubeVideo('YgZEaP6Qte0?t=249')
```

```
[1]: <IPython.lib.display.YouTubeVideo at 0x27c9de90588>
```

```
[2]: YouTubeVideo('1FXJWPhDsSY?t=654')
```

```
[2]: <IPython.lib.display.YouTubeVideo at 0x27c9deb7a58>
```

Elo:

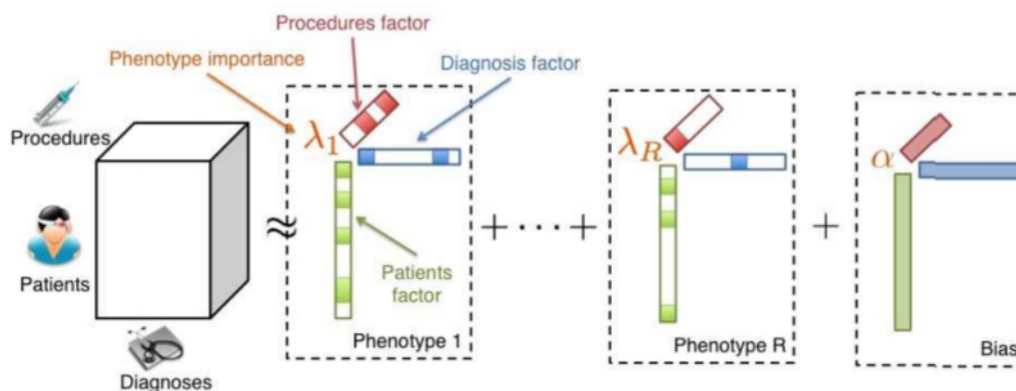
2882 Magnus Carlsen
3200 Alpha Zero

Predicción de estructura de proteínas basado en los aminoácidos/ Predicting how those chains will fold into the intricate 3D structure of a protein is what's known as the "protein folding problem".

<https://deepmind.com/blog/alphafold/>

[6]: `Image("img/tensor.png")`

[6]:



Factorización en tensores de rango uno muestra que diagnósticos concurrentes con medicación, este proceso es llamado fenotipo. El estudio de fenotipos en machine learning permitió el descubrimiento de grupos distintos de Heart Failure with preserved Ejection Fractions (HFpEF), esos grupos diferían marcadamente en características clínicas, de estructura/función...

Phenomapping for Novel Classification of Heart Failure With Preserved Ejection Fraction Sanji

[Photo credit: Marble: High-throughput Phenotyping from Electronic Health Records via Sparse Nonnegative Tensor Factorization]

Ciencia de Materiales:

<https://community.apan.org/wg/afosr/w/researchareas/22949/scientific-autonomous-reasoning-agent-sara-integrating-materials-theory-experiment-and-computation/>

Webinar: Machine Learning, AI, and Data Driven Materials Development and Design.

[3]: `YouTubeVideo('DBknkNvYlcE')`

[3]:



MRS OnDemand®
WEBINAR SERIES

Presented by:
MRS Bulletin

Machine Learning, AI, and Data-Driven Materials Development and Design

Host:
Benji Maruyama
Air Force Research Laboratory

Talks:

Machine Learning, AI, and Data-Driven Materials Development and Design
Kristofer Reyes, University at Buffalo

Artificial Intelligence (AI) for Accelerating Materials Discovery
Carla Gomes, Cornell University

Where Exactly Does One Actually Use AI in Materials Science?
Jason Hattrick-Simpers,
National Institute of Standards and Technology (NIST)

Crystal Structure Prediction via Deep Learning

<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/jacs.8b03913>

Creación de un clasificador.

<http://www.r2d3.us/una-introduccion-visual-al-machine-learning-1/>

Creación de una red neuronal.

<http://playground.tensorflow.org/>

[8]: `Image("img/fomo.jpg")`

[8]:



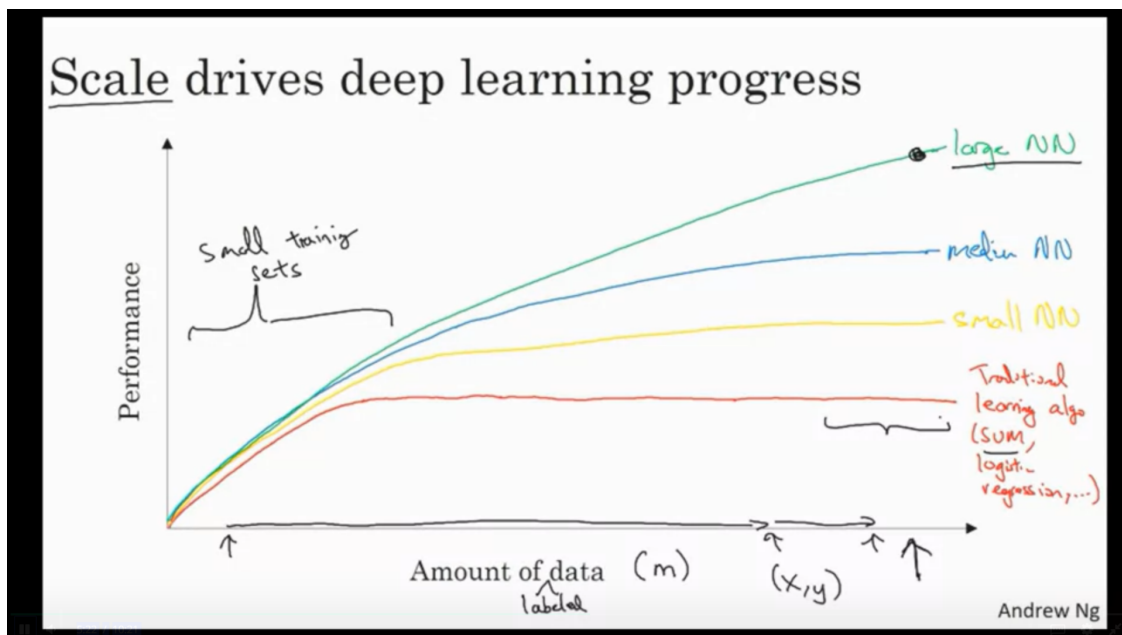
[Photo credit: PlusLexia.]

¿Le conviene a los estudiantes aprender sobre ML? si el estudiante decide no seguir por el rumbo académico, podrá trabajar como científico de datos.

¿Necesito machine learning? ¿Tienes una cantidad considerable de datos o planeas obtener miles-millones de datos?

[9]: `Image("img/nn.png")`

[9]:



[Photo credit: Andrew Ng]

¿Qué matemáticas necesito estudiar? Cálculo de varias variables, álgebra lineal, probabilidad...

<https://arxiv.org/abs/1608.08225> usando física se ha intentado explicar el funcionamiento de las redes neuronales.

¿Qué deberían saber mis estudiantes?

```
[10]: Image("img/pylogo.png")
```

[10]:



(Python)

El curso mas sencillo de Python.

<https://runestone.academy/runestone/books/published/thinkcspy/index.html>

```
[11]: Image("img/sklearn.png")
```

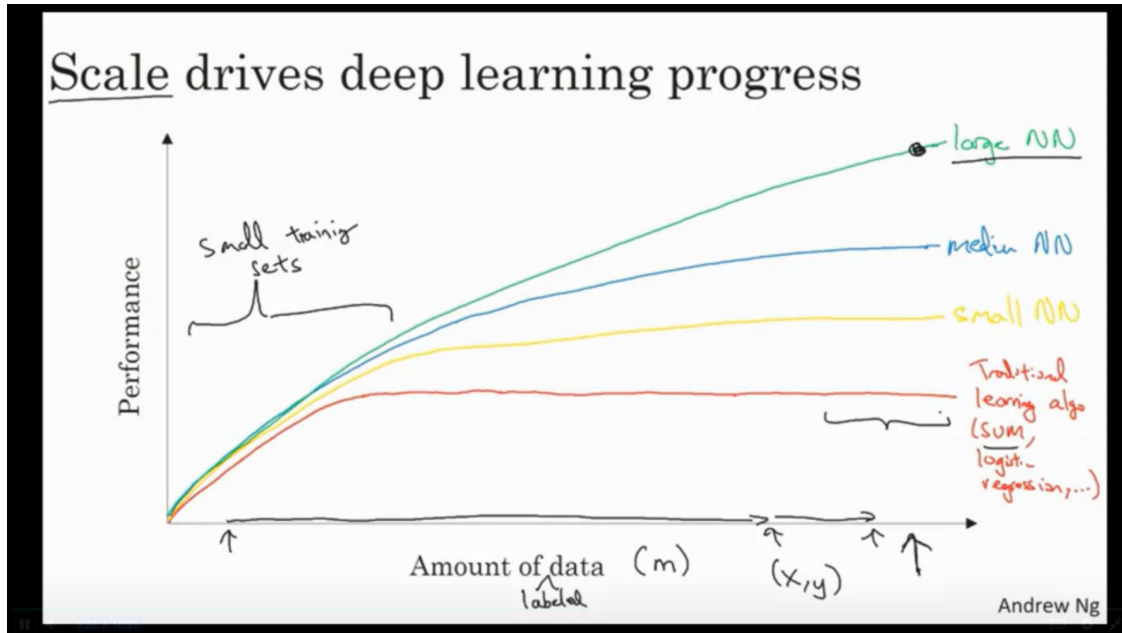
[11]:



80% de los problemas se resuelven con sklearn.

[12]: `Image("img/nn.png")`

[12]:



[Photo credit: Andrew Ng]

[13]: `Image("img/keras.png")`

[13]:



Keras.

[14]: `Image("img/pytorch.png")`

[14]:



Pytorch.

```
[15]: Image("img/altair.png")
```

[15]:



Altair. https://altair-viz.github.io/gallery/scatter_linked_brush.html

Cuentas en Twitter a seguir:

@drfeifei : Fei-Fei Li - Director of Stanford AI Lab, creator of ImageNet
@ylecun: (Yann LeCun) Leading Facebook AI/ML Research
@karpathy : Andrej Karpathy - Teaches Deep Learning at Stanford, Research Scientist at OpenAI
@AndrewYNg (Andrew Ng) : Led ML research in google, now leads AI research in Baidu
@Kdnuggets (Gregory Piatetsky) : Leading KDnuggets - tweets/retweets lots of relevant stuff.
@OpenAI
@googleresearch
@BaiduResearch

Proyectos posibles:

Calentamiento global.

<https://arxiv.org/pdf/1906.05433.pdf>

(Denuncia anónima) un Doctor del IMSS opera a pacientes para implantar prótesis de rodilla en casos innecesarios.

(Busqueda de fraude) se puede analizar si los miembros del SNI cambian sus patrones de publicación, y si lo hacen, verificar sus artículos.

De cada 20 proyectos de IA, solo tres son exitosos.

- Plausibilidad. Es posible resolver el problema con ML.
- Ya tienes los datos o necesitas a alguien que los capture.
- Analisis y preprocesamiento de datos.
- Equipo.
- Infra estructura.
- Interpretacion de resultados.

Descubrimos prejuicios en los algoritmos cuando creabamos la exhibición 'adaptation'.

<https://www.sciartmagazine.com/straight-talk-justus-harris.html>

Recomendamos tomar el curso en equidad de Google https://developers.google.com/machine-learning/crash-course/fairness/video-lecture?utm_campaign=mle-outreach&utm_medium=blog&utm_source=keyword-blog&utm_content=mlcc-fairness

[16]: `Image("img/roles.png")`

[16]:

Review: Who are the people solving these challenges?



[Photo credit: Google]

[17]: `Image("img/gcp.png")`

[17]:



Google Cloud Platform

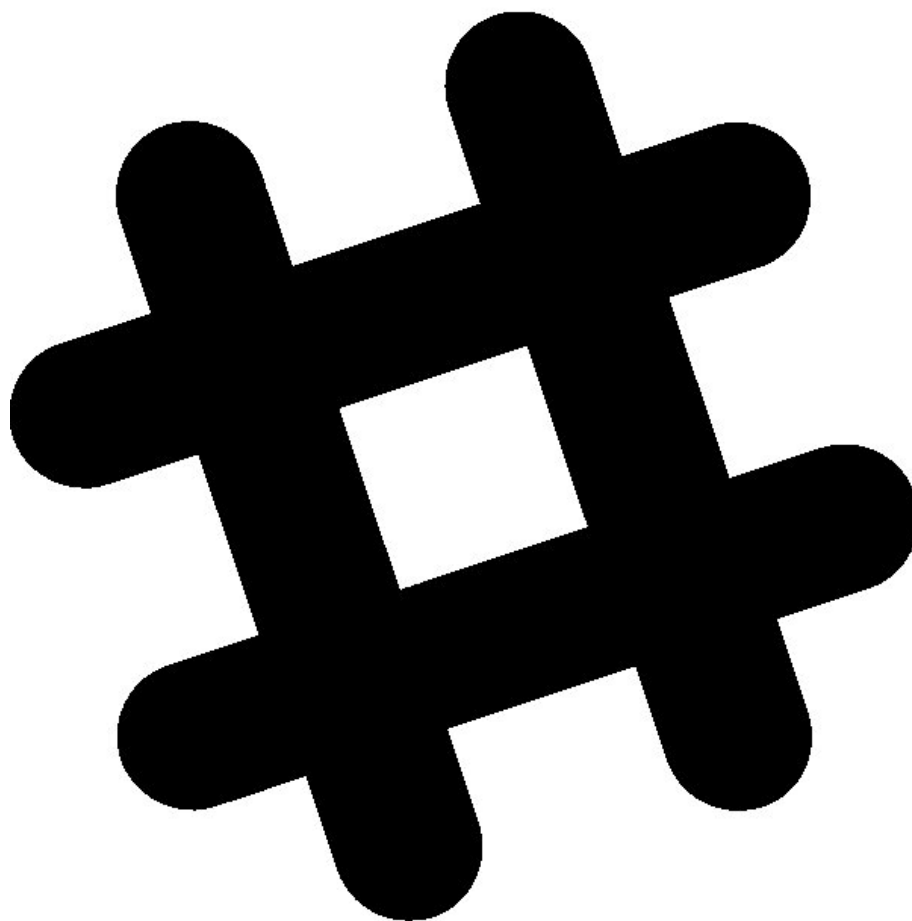
Google Cloud Platform tiene herramientas de machine learning con big data en tres niveles.

- Automatico para gente sin conocimientos de programacion.
- Sql te permite usar algoritmos predeterminados.
- TensorFlow para gente con experiencia en ML.

https://edu.google.com/intl/es-419/why-google/higher-ed-solutions/?modal_active=none


```
[18]: Image("img/slack.jpg")
```

[18]:



Tenemos un grupo en slack sobre ML en la ciencia.
<https://tinyurl.com/FSUMachineLearning>

```
[19]: Image("img/NewSci.png")
```

[19]:



¿Dudas sobre la plausibilidad de su proyecto? contactenos ericd@newsci.ai

[]:

[]:

[]:

[]:

Machine learning - A computer program is said to learn from experience E with respect to some class of tasks T and performance measure P , if its performance at tasks in T , as measured by P , improves with experience E .