



Análisis de espectros de relajación mediante el uso de redes neuronales profundas

Autor:

Ing. Bruno Rais

Director:

Alex D. Barria C. (FIUBA)

Codirector:

John Doe (FIUBA)

*Esta planificación fue realizada en el curso de Gestión de proyectos
entre el 28 de febrero de 2023 y el 18 de abril de 2023.*

Índice

1. Descripción técnica-conceptual del proyecto a realizar	5
2. Identificación y análisis de los interesados	5
3. Propósito del proyecto	6
4. Alcance del proyecto	6
5. Supuestos del proyecto.	7
6. Requerimientos	7
7. Historias de usuarios (<i>Product backlog</i>).	7
8. Entregables principales del proyecto	8
9. Desglose del trabajo en tareas	8
10. Diagrama de Activity On Node.	9
11. Diagrama de Gantt	10
12. Presupuesto detallado del proyecto	13
13. Gestión de riesgos	13
14. Gestión de la calidad	14
15. Procesos de cierre	14

Registros de cambios

Revisión	Detalles de los cambios realizados	Fecha
0	Creación del documento	28 de febrero de 2023
1	Se completa hasta el punto 5 inclusive	14 de marzo de 2023
2	Se completa hasta el punto 9 inclusive	21 de marzo de 2023
3	Se completa hasta el punto 12 inclusive	28 de marzo de 2023

Acta de constitución del proyecto

Buenos Aires, 28 de febrero de 2023

Por medio de la presente se acuerda con el Ing. Bruno Rais que su Trabajo Final de la Carrera de Especialización en Inteligencia Artificial se titulará “Análisis de espectros de relajación mediante el uso de redes neuronales profundas”, consistirá esencialmente en implementar un método de ajuste basado en *deep learning* para obtener los parámetros necesarios para describir un material dado un determinado modelo fenomenológico, y tendrá un presupuesto preliminar estimado de 590 h de trabajo, con fecha de inicio 28 de febrero de 2023 y fecha de presentación pública el 11 de diciembre de 2023.

Se adjunta a esta acta la planificación inicial.

Dr. Ing. Ariel Lutenberg
Director posgrado FIUBA

Dr. Martín G. González
Depto. Física FIUBA

Alex D. Barria C.
Director del Trabajo Final

1. Descripción técnica-conceptual del proyecto a realizar

El análisis de espectros de relajación es esencial para el conocimiento de las propiedades eléctricas y mecánicas de materiales. Para describir los procesos de relajación se utilizan modelos fenomenológicos que permiten caracterizar la respuesta mecánica y eléctrica del material a partir de un pequeño conjunto de parámetros. Estos parámetros son relevantes para la investigación básica de materiales, como para el diseño de dispositivos y otras aplicaciones. Por lo tanto, es importante poder establecer la cantidad de procesos de relación presentes en el espectro y, dentro de los modelos fenomenológicos disponibles, definir cuál es el más adecuado a utilizar para la descripción del espectro.

Sin embargo, la obtención de algunas características en los materiales es un desafío para aplicaciones de alta temperatura y alta energía. La aparición de la temática de *deep learning* ha despertado el interés en la comunidad científica para la aplicación en múltiples campos de la ciencia y tecnología. En particular, los esquemas guiados por datos (*data-driven*), son alternativas populares y poderosas para construir modelos para la predicción de propiedades y el diseño de materiales, acelerando en gran medida el descubrimiento y la aplicación de nuevos materiales.

Bajo este contexto, el grupo de Láser, Óptica de Materiales y Aplicaciones Electromagnéticas de la Facultad de Ingeniería de la Universidad de Buenos Aires está interesado en implementar un método de ajuste basado en *deep learning* para obtener los parámetros necesarios para describir un material, dado un determinado modelo fenomenológico, comparando el rendimiento contra un método tradicional y otro bayesiano de obtención de parámetros. Por esta razón, se propuso como trabajo final para la Carrera de Especialización en Inteligencia Artificial a través del programa de vinculación con empresas.

En la figura 1 se muestra el diagrama en bloques del sistema. La entrada consistirá en modelos fenomenológicos con sus respectivas etiquetas. Luego se entrenará un algoritmo de *deep learning* y con ello se predecirán las características de los materiales para compararlas con métodos tradicionales de obtención de estas características.

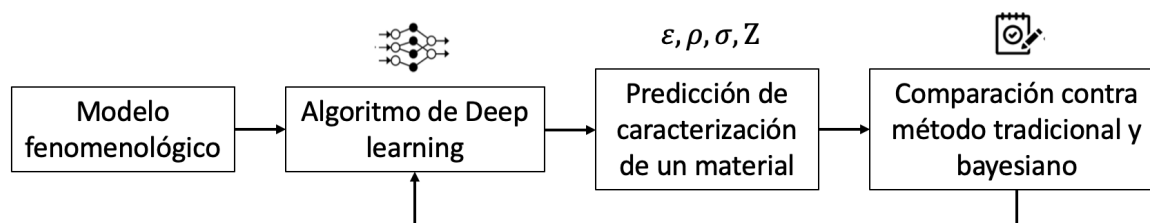


Figura 1. Diagrama en bloques del sistema.

2. Identificación y análisis de los interesados

Características de los interesados:

Rol	Nombre y Apellido	Organización	Puesto
Cliente	Dr. Martín G. González	Depto. Física FIUBA	-
Responsable	Ing. Bruno Rais	FIUBA	Alumno
Colaboradores	Dra. Ligia Ciocci Brazzano	Grupo de Láser, Óptica de Materiales y Aplicaciones Electromagnéticas de la FIUBA	-
Orientador	Alex D. Barria C.	FIUBA	Director Trabajo final
Usuario final	Comunidad científica	Grupo de Láser, Óptica de Materiales y Aplicaciones Electromagnéticas de la FIUBA	-

- Cliente: aportará conocimiento y análisis de los resultados.
- Colaborador: brindará soporte en temas relacionados con la física del proyecto y análisis de los resultados.
- Orientador: se le informará sobre los avances del proyecto. Brindará conocimiento y ayuda en el aspecto técnico de IA.

3. Propósito del proyecto

El propósito de este proyecto es colaborar con el grupo de investigación de la Facultad de Ingeniería de la Universidad de Buenos Aires especializado en Láser, Óptica de Materiales y Aplicaciones Electromagnéticas aportando una nueva alternativa de construcción de modelos para la predicción de propiedades eléctricas y mecánicas de materiales.

4. Alcance del proyecto

El presente proyecto comprende:

- Diseño de un método de *deep learning* que permita predecir las propiedades de materiales.
- Estudio del método aplicándolo a espectros simulados y medidos con ruido y relajaciones superpuestas.
- Comparación de los resultados con el método tradicional y el bayesiano.
- El usuario final tendrá acceso al código libremente.

Por otro lado no queda comprendido:

- La ejecución y el mantenimiento del software entregado luego de la finalización del trabajo.

5. Supuestos del proyecto

Para el desarrollo del presente proyecto se supone que:

- Se podrá acceder a la información y/o bases de datos.
- Las 600 h serán suficientes para cumplir con el objetivo del proyecto.
- Se aplicarán conocimientos adquiridos en la Carrera de Especialización en Inteligencia Artificial.
- Se brindará la bibliografía necesaria para entender y aplicar los fenómenos físicos alcanzables a este proyecto.
- Las complicaciones que puedan surgir no atrasarán a la entrega estipulada del proyecto.

6. Requerimientos

1. Requerimientos funcionales.

- 1.1. El modelo final propuesto debe ser capaz de predecir la características de un material definidas por el cliente.
- 1.2. El sistema debe poder soportar el volumen de datos entregados para el entrenamiento.
- 1.3. Se deben probar al menos 3 algoritmos distintos de *deep learning*.
- 1.4. El lenguaje de desarrollo debe ser en Python.

2. Requerimientos testing.

- 2.1. Los resultados serán provistos al cliente y el evaluará la eficacia de los modelos desarrollados.
- 2.2. Para el testeo se debe contar con un ambiente estable y con los *datasets* provistos por el cliente.

3. Requerimientos de documentación.

- 3.1. El código documentado y entregado debe ser claro, replicable y sustentable.
- 3.2. Un manual que contenga cómo se realiza la implementación y la configuración del código.

7. Historias de usuarios (*Product backlog*)

Para el cálculo de los *story points* correspondientes a los usuarios se tendrán en cuenta los siguientes criterios:

- Dificultad: evalúa la cantidad de trabajo a realizar.
- Complejidad: hace referencia al nivel de sofisticación del trabajo.
- Incertidumbre: se refiere al nivel de riesgo que involucra realizar la tarea.

El peso que se le asignará a cada criterio quedan detallado en la siguiente tabla.

Peso	Dificultad	Complejidad	Incertidumbre
Bajo	1	2	2
Medio	3	5	3
Alto	5	8	5

Las historias identificadas son las siguientes:

- Historia 1: como desarrollador quiero estudiar el aspecto físico de lo que se requiere en el proyecto. Dificultad: 1; complejidad: 5; incertidumbre: 3. **Story point: 13.**
- Historia 2: como desarrollador quiero aprender los modelos de *deep learning* aplicables al proyecto. Dificultad: 3; complejidad: 5; incertidumbre: 3. **Story point: 13.**
- Historia 3: como desarrollador quiero aplicar los modelos aprendidos de *deep learning* a la predicción de características de materiales. Dificultad: 3; complejidad: 8; incertidumbre: 5. **Story point: 21.**
- Historia 4: como cliente quiero evaluar la predicción de los modelos respecto a las mediciones reales. Dificultad: 1; complejidad: 2; incertidumbre: 2. **Story point: 5.**
- Historia 5: como usuario final quiero utilizar una herramienta de IA para conocer las características de materiales. Dificultad: 1; complejidad: 2; incertidumbre: 5. **Story point: 8.**

8. Entregables principales del proyecto

Los entregables del proyecto son:

1. Plan de trabajo del proyecto.
2. Informe de avance.
3. Documentación de los modelos/herramientas de inteligencia artificial utilizadas.
4. Código fuente.
5. Resultados de las pruebas llevadas a cabo y comparación con las características reales de los materiales.
6. Manual de implementación del código.
7. Memoria del Trabajo Final.

9. Desglose del trabajo en tareas

1. Capacitación general. (55 h)

- 1.1. Búsqueda y estudio de material relacionado con las características de los materiales. (15 h)
- 1.2. Búsqueda y estudio relacionado con modelos de *deep learning*. (40 hs)
2. Planificación. (55 h)
 - 2.1. Realizar el plan de proyecto. (25 h)
 - 2.2. Definir del alcance, requerimientos y tareas (15 h)
 - 2.3. Estimar tiempos, recursos humanos y presupuesto. (15 h)
3. Implementación y diseño de modelos. (215 h)
 - 3.1. Preparar el ambiente de diseño y prueba de códigos. (10 h)
 - 3.2. Obtener *dataset*. (5 h)
 - 3.3. Preparar datos para el entrenamiento. (40 h)
 - 3.4. Definir modelos a utilizar. (30 h)
 - 3.5. Entrenar modelos estudiados. (35 h)
 - 3.6. Realizar ajustes en los modelos. (15 h)
 - 3.7. Testear el código unitariamente. (30 h)
 - 3.8. Revisar código integralmente. (10 h)
 - 3.9. Optimizar código. (40 h)
4. Análisis de resultados. (100 h)
 - 4.1. Analizar resultados individuales. (30 h)
 - 4.2. Documentar resultados. (40 h)
 - 4.3. Discutir resultados con el cliente. (30 h)
5. Documentación del producto. (35 h)
 - 5.1. Subir material al repositorio de forma prolija. (5 h)
 - 5.2. Desarrollar el manual de uso y configuración del modelo. (30 h)
6. Presentación del trabajo. (130 h)
 - 6.1. Escribir el informe de avance. (30 h)
 - 6.2. Escritura de memoria. (40 h)
 - 6.3. Revisión y correcciones de la memoria. (20 h)
 - 6.4. Elaboración del video demo. (10 h)
 - 6.5. Preparar presentación publica. (20 h)
 - 6.6. Revisión y correcciones de la presentación (10 h)

Cantidad total de horas: (590 h)

10. Diagrama de Activity On Node

En la siguiente figura se muestra el diagrama *Activity On Node* del proyecto. Las flechas con mayor grosor representa el camino crítico y la duración de las tareas están representadas en horas. Por su parte, los colores representan el conjunto de tareas desglosado en la sección anterior.

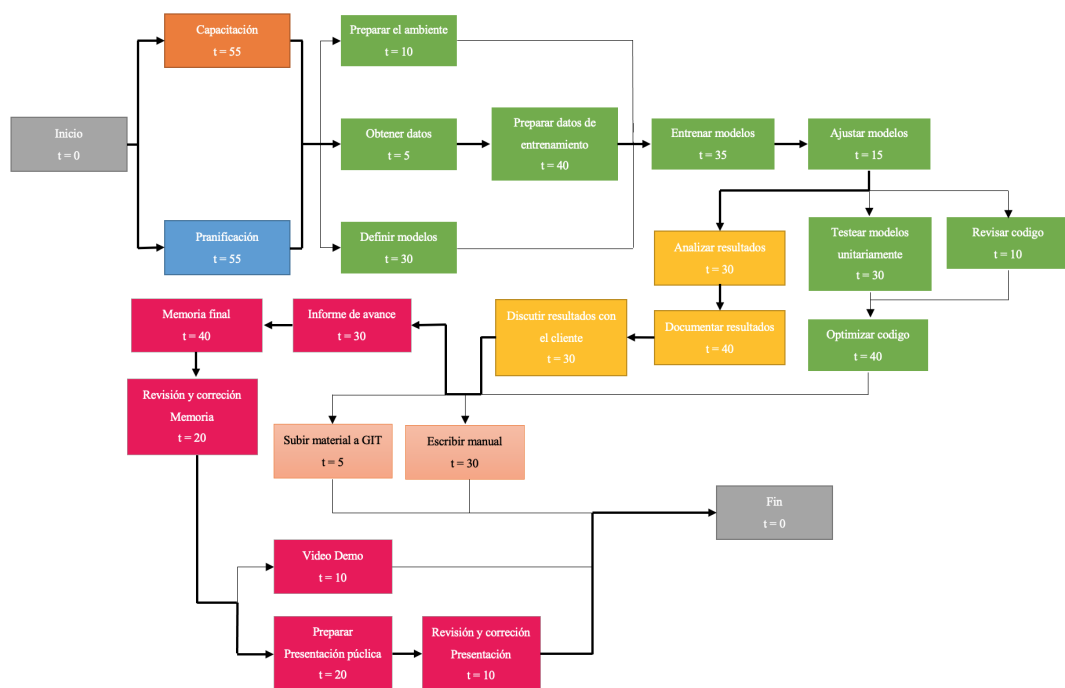


Figura 2. Diagrama de *Activity on Node*.

11. Diagrama de Gantt

Existen muchos programas y recursos *online* para hacer diagramas de Gantt, entre los cuales destacamos:

- Planner
- GanttProject
- Trello + *plugins*. En el siguiente link hay un tutorial oficial:
<https://blog.trello.com/es/diagrama-de-gantt-de-un-proyecto>
- Creately, herramienta online colaborativa.
<https://creately.com/diagram/example/ieb3p3ml/LaTeX>
- Se puede hacer en latex con el paquete *pgfgantt*
<http://ctan.dcc.uchile.cl/graphics/pgf/contrib/pgfgantt/pgfgantt.pdf>

Pegar acá una captura de pantalla del diagrama de Gantt, cuidando que la letra sea suficientemente grande como para ser legible. Si el diagrama queda demasiado ancho, se puede pegar primero la “tabla” del Gantt y luego pegar la parte del diagrama de barras del diagrama de Gantt.

Configurar el software para que en la parte de la tabla muestre los códigos del EDT (WBS).
Configurar el software para que al lado de cada barra muestre el nombre de cada tarea.
Revisar que la fecha de finalización coincida con lo indicado en el Acta Constitutiva.

En la figura 3, se muestra un ejemplo de diagrama de Gantt realizado con el paquete de *pgfgantt*. En la plantilla pueden ver el código que lo genera y usarlo de base para construir el propio.

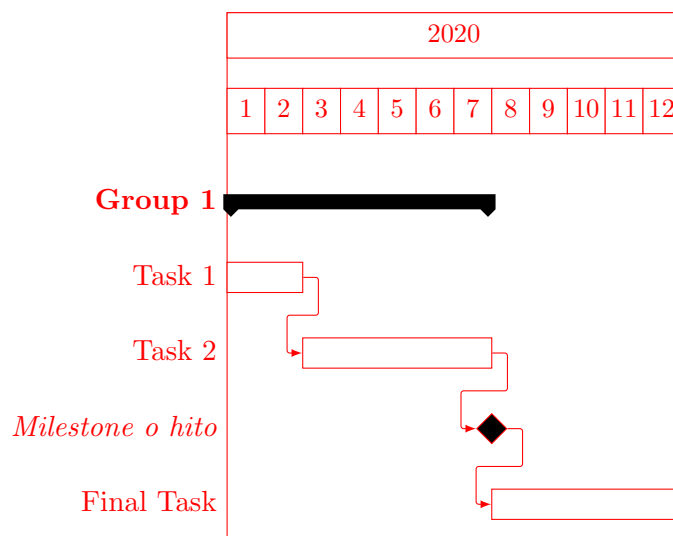


Figura 3. Diagrama de Gantt de ejemplo

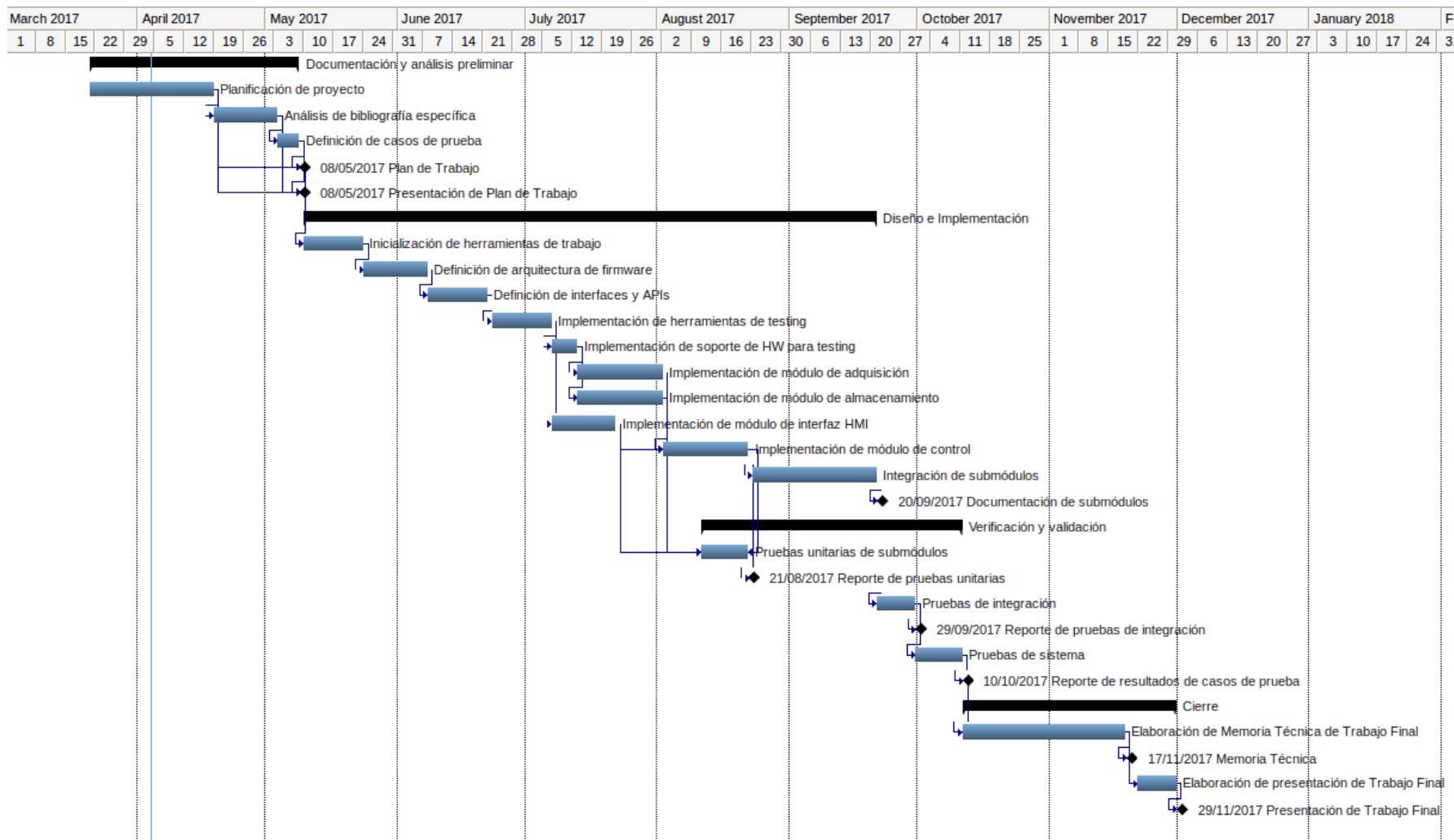


Figura 4. Ejemplo de diagrama de Gantt rotado

12. Presupuesto detallado del proyecto

COSTOS DIRECTOS			
Descripción	Cantidad	Valor unitario [ARS]	Valor total [ARS]
Horas del responsable	590	3.000	1.770.000
Horas de los colaboradores	150	3.000	450.000
SUBTOTAL			2.220.000
COSTOS INDIRECTOS			
Descripción	Cantidad	Valor unitario [ARS]	Valor total [ARS]
Capacitación del responsable	1	403.900	403.900
Equipo informático	1	200.000	200.000
Internet	10	4.500	45.000
SUBTOTAL			648.900
TOTAL			2.868.900

13. Gestión de riesgos

a) Identificación de los riesgos (al menos cinco) y estimación de sus consecuencias:

Riesgo 1: detallar el riesgo (riesgo es algo que si ocurre altera los planes previstos de forma negativa)

- Severidad (S): mientras más severo, más alto es el número (usar números del 1 al 10). Justificar el motivo por el cual se asigna determinado número de severidad (S).
- Probabilidad de ocurrencia (O): mientras más probable, más alto es el número (usar del 1 al 10). Justificar el motivo por el cual se asigna determinado número de (O).

Riesgo 2:

- Severidad (S):
- Ocurrencia (O):

Riesgo 3:

- Severidad (S):
- Ocurrencia (O):

b) Tabla de gestión de riesgos: (El RPN se calcula como $RPN=S \times O$)

Criterio adoptado: Se tomarán medidas de mitigación en los riesgos cuyos números de RPN sean mayores a...

Nota: los valores marcados con (*) en la tabla corresponden luego de haber aplicado la mitigación.

Riesgo	S	O	RPN	S*	O*	RPN*

c) Plan de mitigación de los riesgos que originalmente excedían el RPN máximo establecido:

Riesgo 1: plan de mitigación (si por el RPN fuera necesario elaborar un plan de mitigación). Nueva asignación de S y O, con su respectiva justificación: - Severidad (S): mientras más severo, más alto es el número (usar números del 1 al 10). Justificar el motivo por el cual se asigna determinado número de severidad (S). - Probabilidad de ocurrencia (O): mientras más probable, más alto es el número (usar del 1 al 10). Justificar el motivo por el cual se asigna determinado número de (O).

Riesgo 2: plan de mitigación (si por el RPN fuera necesario elaborar un plan de mitigación).

Riesgo 3: plan de mitigación (si por el RPN fuera necesario elaborar un plan de mitigación).

14. Gestión de la calidad

Para cada uno de los requerimientos del proyecto indique:

- Req #1: copiar acá el requerimiento.
 - Verificación para confirmar si se cumplió con lo requerido antes de mostrar el sistema al cliente. Detallar
 - Validación con el cliente para confirmar que está de acuerdo en que se cumplió con lo requerido. Detallar

Tener en cuenta que en este contexto se pueden mencionar simulaciones, cálculos, revisión de hojas de datos, consulta con expertos, mediciones, etc. Las acciones de verificación suelen considerar al entregable como “caja blanca”, es decir se conoce en profundidad su funcionamiento interno. En cambio, las acciones de validación suelen considerar al entregable como “caja negra”, es decir, que no se conocen los detalles de su funcionamiento interno.

15. Procesos de cierre

Establecer las pautas de trabajo para realizar una reunión final de evaluación del proyecto, tal que contemple las siguientes actividades:

- Pautas de trabajo que se seguirán para analizar si se respetó el Plan de Proyecto original:
 - Indicar quién se ocupará de hacer esto y cuál será el procedimiento a aplicar.
- Identificación de las técnicas y procedimientos útiles e inútiles que se emplearon, y los problemas que surgieron y cómo se solucionaron: - Indicar quién se ocupará de hacer esto y cuál será el procedimiento para dejar registro.

- Indicar quién organizará el acto de agradecimiento a todos los interesados, y en especial al equipo de trabajo y colaboradores: - Indicar esto y quién financiará los gastos correspondientes.