

機器學習於材料資訊的應用

Machine Learning on Material Informatics

陳南佑(NAN-YOW CHEN)

nanyow@narlabs.org.tw

楊安正(AN-CHENG YANG)

acyang@narlabs.org.tw

Use TensorBoard
to visualization



TensorBoard

Installation of tensorflow

1. `conda activate tensorflow1`
2. `conda install tensorboard==1.15.0`
(replace 1.15.0 with the actual version of tensorflow)

輸出資料至 TensorBoard

- 要在 TensorFlow 的程式中以 `tf.summary` 將要觀察的模型或資料以事件檔案 (`events files`) 的方式輸出，讓 TensorBoard 從這些事件檔案取得資料，並且繪製各種圖形。

tf.summary

- 純量值（ scalar ），我們可以利用 `tf.summary.scalar` 來輸出，例如:模型的學習率（ learning rate ）以及目標函數（ object function ）

```
tf.summary.scalar('accuracy', accuracy)
```

- 觀察整群資料的分布狀況，可以使用 `tf.summary.histogram` 畫出資料的分布圖。

```
w_hist = tf.summary.histogram('weights', weights['h1'])  
b_hist = tf.summary.histogram('biases', biases['b1'])
```

- 圖片的輸出也是常用功能，`tf.summary.image` 可以將 TensorFlow 模型內的圖片顯示在 TensorBoard 上

```
tf.summary.image('my image', my_image)
```

tf.summary.merge_all

- 在程式中可能會建立非常多的 `tf.summary`，所有的運算都要放在 `session` 的 `run` 中，該運算才會被執行，要一一管理這些 `tf.summary` 會很麻煩。
- `tf.summary.merge_all` 一次將所有的 `tf.summary` 節點匯集起來，一次放進 `session` 中執行。

```
w merged = tf.summary.merge_all()
```

tf.summary.FileWriter

- `tf.summary.merge_all` 計算的結果，以 `tf.summary.FileWriter` 寫入硬碟。
- `FileWriter` 在建立時會需要指定一個寫入資料用的目錄，另外也可以再加上一個 `graph` 的物件，讓資料呈現時可以同時顯示 `tensor shape` 的資訊，讓我們更了解整個模型內部的資料流狀況。

```
with tf.Session() as sess:
    .....
    sess.run(init)
    tb_graphs = tf.summary.FileWriter('./graphs', sess.graph)
    for step in range(1, num_steps+1):
        if step % display_step == 0 or step == 1:
            summary = sess.run(merged, feed_dict={X: batch_x, Y: batch_y})
            tb_graphs.add_summary(summary, step)
```

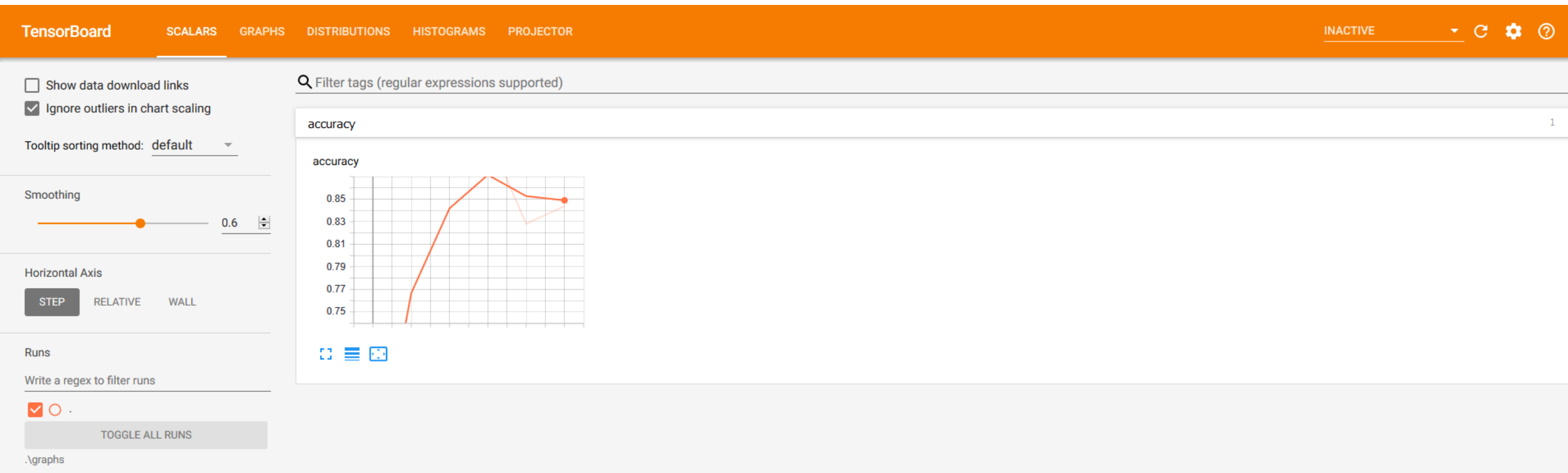
執行 TensorBoard

- * 在jupyter的terminals中執行
- `cd <workingdir>`
- `tensorboard --logdir=./graphs --host=127.0.0.1`

- * 在anaconda的terminals中執行
- `activate <env>`
- `cd <workingdir>`
- `tensorboard --logdir=./graphs --host=127.0.0.1`

開啟 <http://localhost:6006/>

TensorBoard-SCALARS



TensorBoard-GRAPH

TensorBoard

SCALARS

GRAPHS

DISTRIBUTIONS

HISTOGRAMS

PROJECTOR

INACTIVE

Search nodes. Regexes supported.

Fit to Screen

Download PNG

Run (1)

Tag (1) Default

Upload

Choose File

Graph

Conceptual Graph

Profile

Trace inputs

Show health pills

Color

Structure

Device

XLA Cluster

Compute time

Memory

TPU Compatibility

colors

same substructure

unique substructure

Close legend.

Graph

(* = expandable)

Namespace* 2

OpNode 2

Unconnected series* 2

Connected series* 2

Constant 2

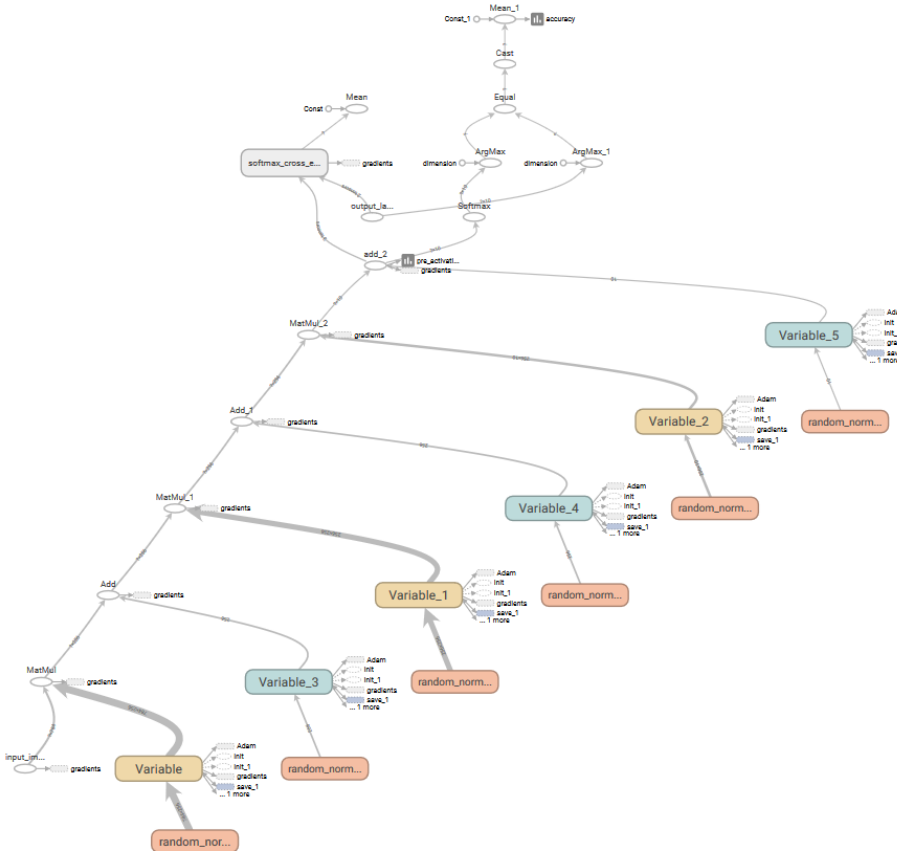
Summary 2

Dataflow edge 2

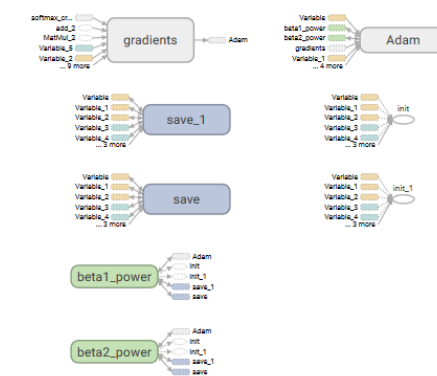
Control dependency edge 2

Reference edge 2

Main Graph



Auxiliary Nodes



TensorBoard-HISTOGRAMS

