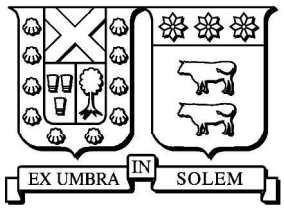


INF-395/477 Redes Neuronales Artificiales I-2018

Tarea 1 - Redes Neuronales y *Deep Learning*

Temas

- Entrenamiento de redes *Feed-Forward* vía GD y variantes (SGD, mini-*batches*), *momentum*, regularización y tasa de aprendizaje adaptiva.
- Evaluación de redes *Feed-Forward* vía validación cruzada (cross-validation).
- Rol de capas ocultas y mayor profundidad (*Deep Learning*).
- Identificar el gradiente desvaneciente.

Formalidades

- Equipos de trabajo de: 2 personas (*cada uno debe estar en condiciones de realizar una presentación y discutir sobre cada punto del trabajo realizado*)
- Se debe preparar una presentación de 20 minutos. Presentador será elegido aleatoriamente.
- Se debe preparar un (breve) Jupyter/IPython notebook que explique la actividad realizada y las conclusiones del trabajo
- Fecha de entrega y discusión: 26 de Octubre.
- Formato de entrega: envío de link Github al correo electrónico del ayudante (*margarita.bugueno.13@sansano.usm.cl (mailto:margarita.bugueno.13@sansano.usm.cl)*) , incluyendo al profesor en copia (*cvalle@inf.utfsm.cl (mailto:cvalle@inf.utfsm.cl)*). Por favor especificar el siguiente asunto: [Tarea1-INF395-II-2018]

Paquetes instalación

Para poder trabajar en el curso se necesitará instalar librerías para Python, por lo que se recomienda instalarlas a través de anaconda (para Windows y sistemas Unix) en un entorno virtual, donde podrán elegir su versión de Python. Se instalarán librerías como sklearn, una librería simple y de facil acceso para data science, keras en su versión con GPU (para cálculo acelerado a través de la tarjeta gráfica), además de que ésta utiliza como backend TensorFlow o Theano, por lo que habrá que instalar alguno de éstos, además de las librerías básicas de computer science como *numpy, matplotlib, pandas,* además de claramente *jupyter*.

- Descargar anacona
- Luego de instalar Anaconda y tenerla en el path de su computador crear un entorno virtual:

```
conda create -n redesneuronales python=version
```

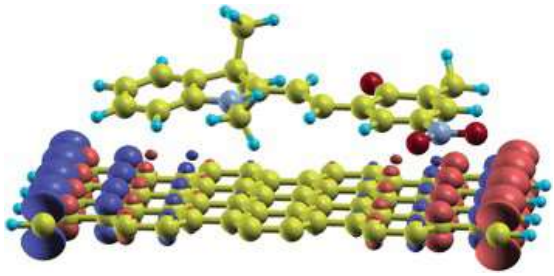
  con version, la version de Python que desea utilizar. Si está en Windows, se recomienda Python 3 debido a dependencias con una de las librerías a utilziar.
- Acceder al ambiente creado

```
source activate redesneuronales
```

- Instalar los paquetes a utilizar

1. Predicción de Entalpía de Atomización

Las simulaciones de propiedades moleculares son computacionalmente costosas y requieren de un arduo trabajo científico. El objetivo de esta sección corresponde a la utilización de métodos de aprendizaje automático supervisado (Redes Neuronales Artificiales) para predecir propiedades moleculares, en este caso la Energía de Atomización o Entalpía de Atomización, a partir de una base de datos de simulaciones obtenida mediante **Quantum Espresso (http://www.quantum-espresso.org/)**. Si esto se lograse hacer con gran precisión, se abrirían muchas posibilidades en el diseño computacional y el descubrimiento de nuevas moléculas, compuestos y fármacos.



La **entalpía de atomización** es la cantidad de variación de entalpía cuando los enlaces de un compuesto se rompen y los componentes se reducen a átomos individuales. Tal como se ha indicado, su tarea es la de predecir dicho nivel a partir de los atributos enunciados en el dataset puesto a vuestra disposición en *moodle*.

a) Construya un *dataframe* con los datos a analizar y descríbalo brevemente. Además, realice la división de éste en los conjuntos de entrenamiento, validación y testeo correspondientes. Comente por qué se deben eliminar ciertas columnas.

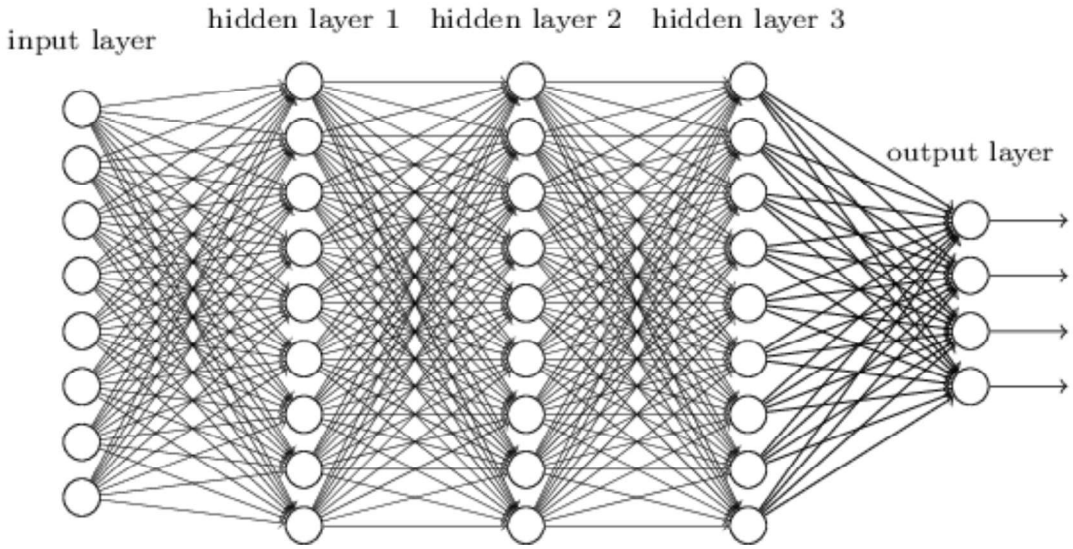
```
import pandas as pd
datos= pd.read_csv("EnergyMolecule/roboBohr.csv")
datos.shape
datos.info()
datos.describe()
...
datos.drop(columns=['Unnamed: 0','pubchem_id'],axis=1,inplace=True)
total=len(datos)
df_train=datos[:int(0.6*total)]                          #60% de los datos
df_val=datos[int(0.6*total):int(0.85*total)]             #25% de los datos
df_test=datos[int(0.85*total)::]                         #15% restante
```

a.1) Una buena práctica es la de normalizar los datos antes de trabajar con el modelo. **Explique por qué se aconseja dicho preprocesamiento**

```
from sklearn.preprocessing import StandardScaler
scaler = StandardScaler().fit(df_train)
X_train_scaled = pd.DataFrame(scaler.transform(df_train),column
s=df_train.columns)
X_val_scaled =  pd.DataFrame(scaler.transform(df_val),columns=d
f_val.columns)
X_test_scaled =  pd.DataFrame(scaler.transform(df_test),columns
=df_test.columns)
...
y_train = df_train.pop('Eat').values.reshape(-1,1)
y_val = df_val.pop('Eat').values.reshape(-1,1)
...
X_train_scaled.drop(columns=['Eat'],axis=1,inplace=True)
```

2. Deep Networks

Las *deep network*, o lo que hoy en día se conoce como *deep learning*, hace referencia a modelos de redes neuronales estructurados con muchas capas, es decir, el cómputo de la función final es la composición una gran cantidad de funciones ($f^{(n)} = f^{(n-1)} \circ f^{(n-2)} \circ \cdots \circ f^{(2)} \circ f^{(1)}$ con $n \gg 0$).
Este tipo de redes neuronales tienen una gran cantidad de parámetros, creciendo exponencialmente por capa con las redes *feed forward*, siendo bastante dificiles de entrenar comparadas con una red poco profunda, esto es debido a que requieren una gran cantidad de datos para ajustar correctamente todos esos parámetros. Pero entonces ¿Cuál es el beneficio que tienen este tipo de redes? ¿Qué ganancias trae el añadir capas a una arquitectura de una red neuronal?



En esta sección se estudiará la complejidad de entrenar redes neuronales profundas, mediante la visualización de los gradientes de los pesos en cada capa, el cómo varía mientras se hace el *backpropagation* hacia las primeras capas de la red.

a) Se trabajará con las etiquetas escaladas uniformemente, es decir, $\mu = 0$ y $\sigma = 1$, ajuste sobre el conjunto de entrenamiento y transforme éstas además de las de validación y pruebas.

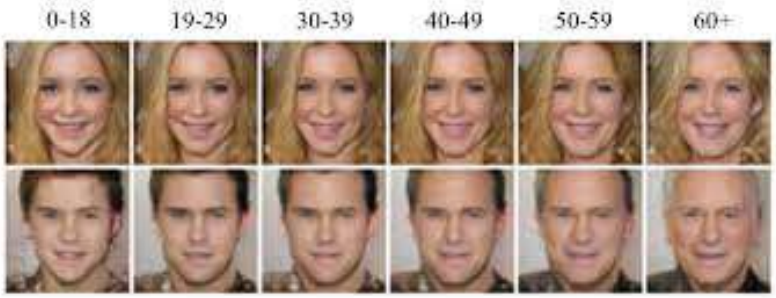
```
scaler = StandardScaler().fit(df_train)
X_train_scaled = pd.DataFrame(scaler.transform(df_train),columns=df_train.
columns)
y_train_scaled = X_train_scaled.pop('Eat').values.reshape(-1,1)
...#transform val and test
```

b) Para el mismo problema definido anteriormente (sección 1) se entrenarán diferentes redes. En esta primera instancia se trabajará con la misma red de la pregunta b), inicializada con pesos uniforme. Visualice el gradiente de la función de pérdida (*loss*) para el conjunto de entrenamiento (promedio del gradiente de cada dato) respecto a los pesos en las distintas capas, para esto se le pedirá el cálculo del gradiente para una capa mediante la función de *gradients* (**link (https://www.tensorflow.org/api_docs/python/tf/keras/backend/gradients)**) en el *backend* de Keras. Deberá generar un **histograma** para todos los pesos de cada capa antes y despues del entrenamiento con 250 *epochs*. Comente.

```
model = Sequential()
model.add(Dense(256, input_dim=X_train_scaled.shape[1], kernel_initializer
='uniform',activation='sigmoid'))
model.add(Dense(1, kernel_initializer='uniform',activation='linear'))
sgd = SGD(lr=0.01)
model.compile(optimizer=sgd,loss='mean_squared_error')
- ###calculate gradients
```

3. Entendimiento de imágenes de personas

El problema de inferir ciertas características de una persona a través de una foto de ella puede resultar bastante dificil incluso para nosotros, como por ejemplo de qué país es, la emoción que expresa, la edad que tiene, o el género. La automatización de este proceso para que máquinas logren identificar ciertas características de una persona puede ser algo crucial para el futuro desarrollo de Inteligencia Artificial.



En esta actividad trabajaremos con unos datos (imágenes) con la tarea de predecir la **edad** (*target value*) de la persona en la imagen. Los datos con corresponden a 3640 imágenes de Flickr de rostros de personas, pero, debido a que trabajamos con redes *feed forward*, se trabajará con representaciones de características extraídas. Para ésto necesitará descargar los datos del siguiente **link (http://chenlab.ece.cornell.edu/people/Andy/ImagesOfGroups.html)** en el extracto de *ageGenderClassification* o a través de la consola Unix.

```
wget http://chenlab.ece.cornell.edu/projects/ImagesOfGroups/ageGenderClassification.zip
```

Se trabajará con archivos *.mat* que pueden ser cargados de la siguiente manera:

```
import scipy.io as sio
sio.loadmat("file.mat")
```

Para descripción sobre las columnas están en el archivo readme a través del siguiente **link (http://chenlab.ece.cornell.edu/projects/ImagesOfGroups/README.txt)** o a través de la consola Unix:

```
wget http://chenlab.ece.cornell.edu/projects/ImagesOfGroups/README.txt
```

a) Cargue los datos dos dataset de entrenamiento y de pruebas ¿Cuántos datos hay en cada conjunto?

```
import scipy.io as sio
mat_train = sio.loadmat("./eventrain.mat")
mat_test = sio.loadmat("./eventest.mat")
data_train= mat_train["trcoll"][0][0]
data_test= mat_test["tecoll"][0][0]
```

b) Eliga cuál representación utilizará para trabajar los datos y entregárselos como *input* al modelo neuronal denso. Además extraiga las etiquetas del problema. Describa los datos utilziados.

```
genFeat = data[0]  #it can be used as representation: contextual features
ageClass = data[1] #target
ffcoefs = data[3]   #it can be used as representation: fisherface space
faceGist = data[4]  #it can be used as representation
```

c) Defina y entrene una modelo de red neuronal *feed forward* para la inferencia de la edad de la persona a través de la representación escogida. Intente llegar a un *mse* menor a 100 en el conjunto de pruebas. Recuerde que **NO** puede seleccionar modelos a través del conjunto de pruebas. Visualice sus resultados si estima conveniente.