Vítejte u třetího projektu do SUI! V tomto projektu si procvičíte trénování jednoduchých neuronových sítí. Dost jednoduchých na to, abyste pro výpočty nepotřebovali grafickou kartu. Na druhé straně, dost složitých na to, abychom Vás již netrápili implementaci v holém NumPy. Vaším nultým úkolem bude nainstalovat si PyTorch, na domovské stránce projektu si můžete nechat vygenerovat instalační příkaz pro Vaše potřeby.

Odevzdejte prosím dvojici souborů: Vyrenderované PDF a vyexportovaný Python (File -> Download as). Obojí **pojmenujte loginem vedoucího týmu**. U PDF si pohlídejte, že Vám nemizí kód za okrajem stránky.

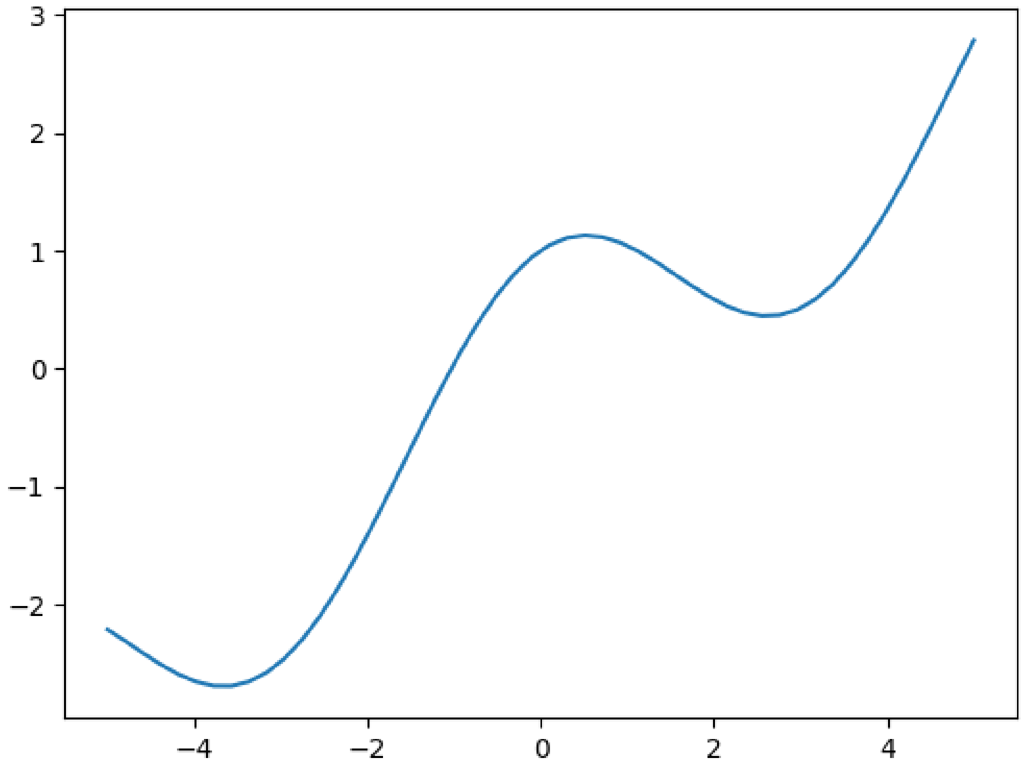
V jednotlivých buňkách s úkoly (což nejsou všechny) nahrazujte `pass` a `None` vlastním kódem.

V průběhu řešení se vždy vyvarujte cyklení po jednotlivých datech.

[1]:
```
import torch
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

from torch import Tensor  # for sake of typing
```

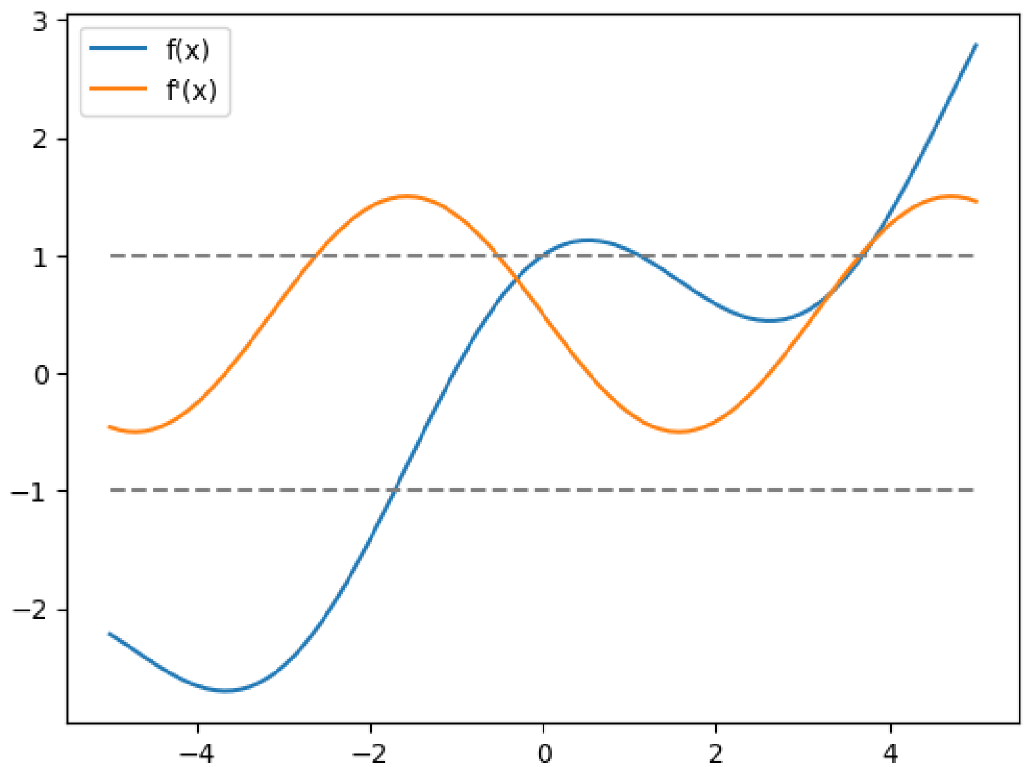
Celý tento projekt bude věnován regresi, tj. odhadu spojité výstupní veličiny. V první části projektu budete pracovat s následující funkcí:

[2]:
```
def func(x):
    return torch.cos(x) + x / 2


xs = np.linspace(-5, 5, 50)

plt.plot(xs, func(torch.tensor(xs)))
plt.show()
```



Vaším prvním úkolem bude pomocí PyTorche vypočítat hodnoty derivace této funkce na rozsahu <-5, 5>. Vytvořte si tensor `x`ů a řekněte PyTorchi, že budete vzhledem k němu chtít spočítat gradienty (defaultně se to u `Tensor`u nepředpokládá). Pomocí back-propagace je pak vypočítejte. PyTorch umí backpropagovat jenom skalár, najděte tedy způsob, jak agregovat všechny výstupy funkce tak, aby složky gradientu agregované hodnoty byly hodnotami derivace funkce `func` v jednotlivých `x`ech.

[3]:
```python
xs = torch.linspace(-5, 5, 100, requires_grad=True)
fs = func(xs)

# Create a scalar from fs by summing all the values and compute the gradient using backpropagation
fs.sum().backward()

# The gradients are stored in xs.grad
plt.plot(xs.detach(), fs.detach(), label="f(x)")
plt.plot(xs.detach(), xs.grad, label="f'(x)")
plt.plot(xs.detach(), 1 * np.ones(xs.shape[0]), color='gray', linestyle='--')
plt.plot(xs.detach(), -1 * np.ones(xs.shape[0]), color='gray', linestyle='--')
plt.legend(loc="upper left")
plt.show()
```



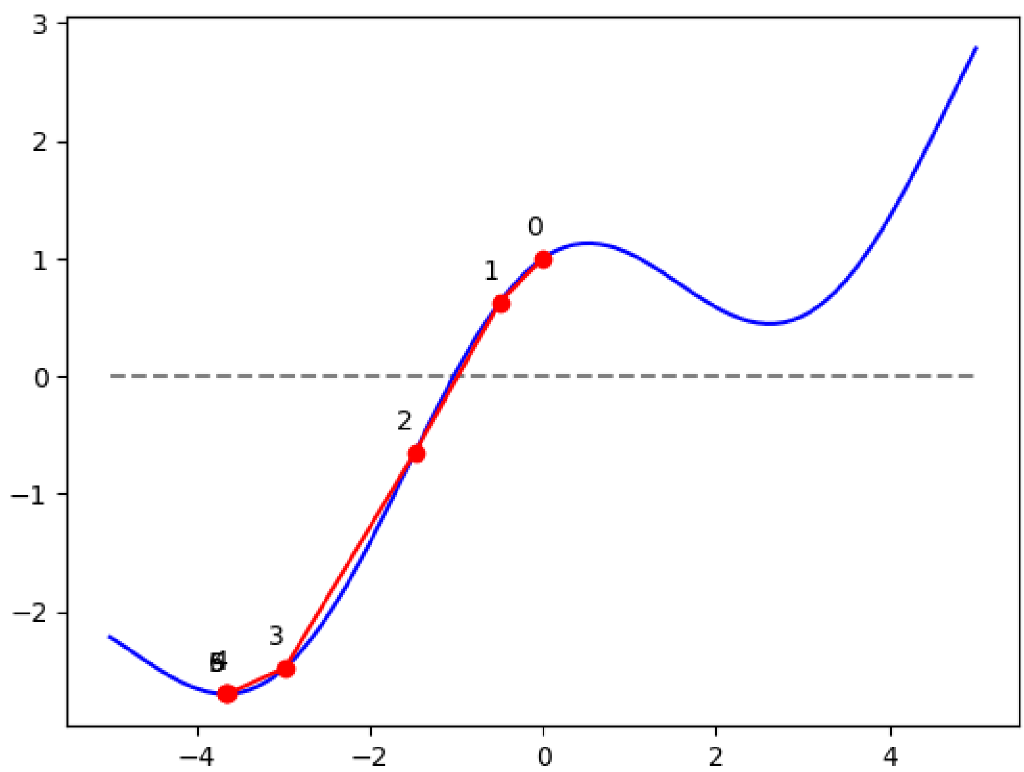
Dále budete hledat lokální minimum této funkce. Naimplementujte funkci `tangent_minimum`, která – v blízké podobnosti metodě tečen – nalezne řešení, resp. vrátí posloupnost jednotlivých bodů, jimiž při hledání minima prošla. Jejími vstupy jsou: * `function` – PyTorch-kompatibilní funkce * `x0` – počáteční bod * `nb_steps` – zadaný počet kroků, který má být proveden. Ve výstupu tedy bude `nb_steps + 1` položek (vč. `x0`)

Reálně implementujte gradient descent, tedy iterativně vypočítejte hodnotu gradientu (derivace) v aktuálním bodě řešení a odečtěte ji od onoho bodu. Neuvažujte žádnou learning rate (resp. rovnou jedné) a nepoužívejte žádné vestavěné optimalizátory z PyTorche.

Zbylý kód v buňce pak funkci zavolá a vykreslí, jak postupovala.

[4]:
```
from typing import Callable


def tangent_minimum(function: Callable[[Tensor], Tensor],
                    x0: Tensor, nb_steps: int) -> list[float]:  # I like typing
    # Suppose x0 is a tensor
    visited_values = [x0.item()]

    xi: Tensor = x0.detach().clone()
    for step in range(nb_steps):
        xi.requires_grad_()  # Enable gradient computation
```

```
        fy = function(xi)  # Compute the value
        fy.backward()  # Do backpropagation to compute the gradient
        xi.data -= xi.grad  # Update the current x by moving in the direction␣
 ↪of the gradient
        xi.grad.zero_()  # Reset the gradient to zero (so that it is not␣
 ↪accumulated)
        visited_values.append(xi.item())

    return visited_values


x0 = torch.tensor([0.0], requires_grad=True)
updates = tangent_minimum(func, x0, 6)

plt.figure()
plt.plot(xs.detach(), 0 * np.ones(xs.shape[0]), color='gray', linestyle='--')
plt.plot(xs.detach(), func(xs).detach(), 'b')
plt.plot(updates, func(torch.tensor(updates)).detach(), 'r', marker='o')

for i, (x, y) in enumerate(zip(updates, func(torch.tensor(updates)).detach())):
    plt.annotate(f'{i}', (x, y), xytext=(x - 0.2, y + 0.2))

plt.show()
```



0.1 Modelování polynomů

V následujících několika buňkách budete usilovat o modelování této křivky pomocí polynomů. Prvním krokem bude implementace třídy `LinearRegression`, která bude implementovat … lineární regresi, pomocí jediného objektu třídy… `torch.nn.Linear`! Po vytvoření objektu `torch.nn.Linear` sáhněte do jeho útrob a nastavte na nulu bias a všechny váhy kromě nulté – tu nastavte na jednu polovinu. Tím získáte model $y = \frac{x}{2}$, který pro nadcházející úlohu není úplně mimo, a nebudete se tak trápit s dramatickým dynamickým rozsahem loss.

Nechť `LinearRegression` dědí od `torch.nn.Module`, výpočet tedy specifikujte v metodě `forward()`. Při výpočtu zařiďte, aby byl výstup ve tvaru `[N]`, nikoliv `[N, 1]`; zároveň to ale nepřežeňte a pro jediný vstup vracejte stále vektor o rozměru `[1]` a ne jen skalár. Dále naimplementujte metodu `l2_norm()`, která vrací eukleidovskou velikost všech parametrů modelu dohromady, jakoby tvořily jediný vektor. Může se vám hodit `torch.nn.Module.parameters()`.

[5]:
```python
class LinearRegression(torch.nn.Module):
    def __init__(self, input_dim: int):
        super().__init__()
        self.dim = input_dim
        # in_features = input_dim, out_features = 1
        self.lin_trans = torch.nn.Linear(input_dim, 1)
        self.lin_trans.bias.data.zero_()
        self.lin_trans.weight.data.zero_()
        # the learnable weights of the module of shape (out_features,␣
 ↪in_features)
        self.lin_trans.weight.data[0, 0] = 0.5

    def forward(self, x: Tensor):
        return self.lin_trans(x).flatten()

    def l2_norm(self):
        return next(self.lin_trans.parameters()).norm(dim=1)
```

Naimplementujte funkci pro trénování modelu takového modelu. Funkce přijímá: * `model` – PyTorch-kompatibilní model * `loss_fun` – funkci, která konzumuje výstupy modelu a cílové hodnoty a model (kvůli regularizaci) * `optimizer` – PyToch-kompatibilní optimalizátor * `train_X` – trénovací data ve formátu `[N, F]` * `train_t` – cílové hodnoty ve formátu `[N]` * `nb_steps` – počet kroků, které se mají provést

Funkce potom vrací průběh trénovací MSE a průběh velikosti parametrů (předpokládejte, že `model` poskytuje `.l2_norm()`). Tedy, dodaná `loss_fun` je použita pouze pro optimalizaci, ale nikde se její hodnoty nelogují.

Dále naimplementujte třídu `MSE_with_regression`, jejíž instance budou sloužit jako mean-square-error loss, navíc rozšířená o L2 regularizaci, jejíž sílu určí uživatel při konstrukci parametrem `l2_beta`.

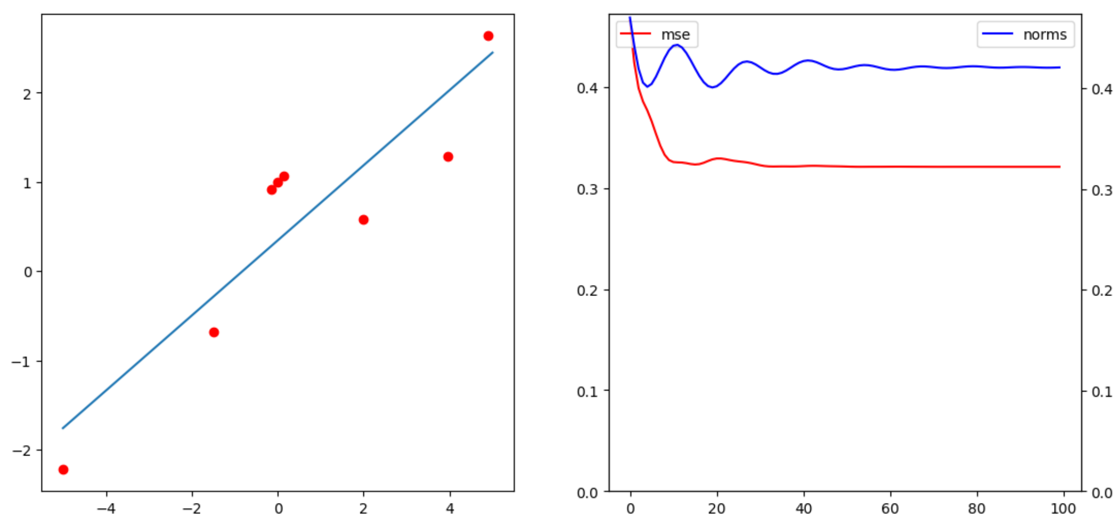
[6]:
```python
from torch.optim import Optimizer


def train_regression_model(model: LinearRegression, loss_fun: Callable[[Tensor,␣
 ↪Tensor, LinearRegression], Tensor],
                           optimizer: Optimizer, train_X: Tensor, train_t:␣
 ↪Tensor, nb_steps=100):
    mses = []
    norms = []
    for _ in range(nb_steps):
        optimizer.zero_grad()
        y = model(train_X)
        loss = loss_fun(y, train_t, model)
        loss.backward()
        optimizer.step()

        with torch.no_grad():
            # Compute the actual, non-regularized loss
            mses.append(torch.nn.functional.mse_loss(y, train_t).item())
            norms.append(model.l2_norm().item())

    return mses, norms


class MSE_with_regression:
    def __init__(self, l2_beta=0.0):
        self.loss = torch.nn.MSELoss()
        self.l2_beta = l2_beta

    def __call__(self, y: Tensor, t: Tensor, model: LinearRegression):
        mse = self.loss(y, t)
        l2 = self.l2_beta * model.l2_norm()
        return mse + l2
```

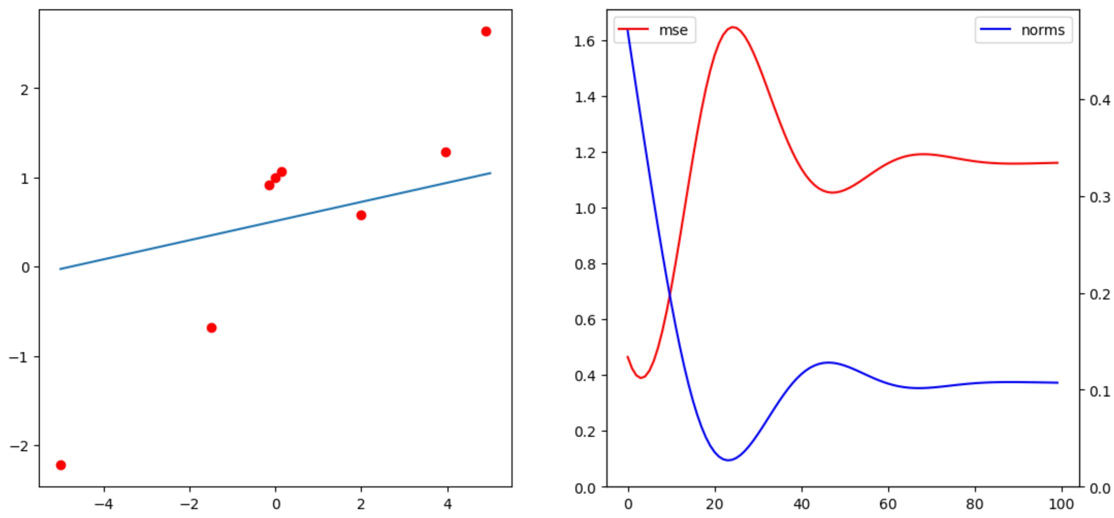
Spusťte trénování několikrát pomocí `try_beta` a najděte tři nastavení, která dají po řadě: 1. Dobrý odhad. 2. Silně potlačený odhad regrese, kde ale bude pořád dobře zřetelný trend růstu 3. Extrémně zregularizovaný model, který de facto predikuje konstantu.

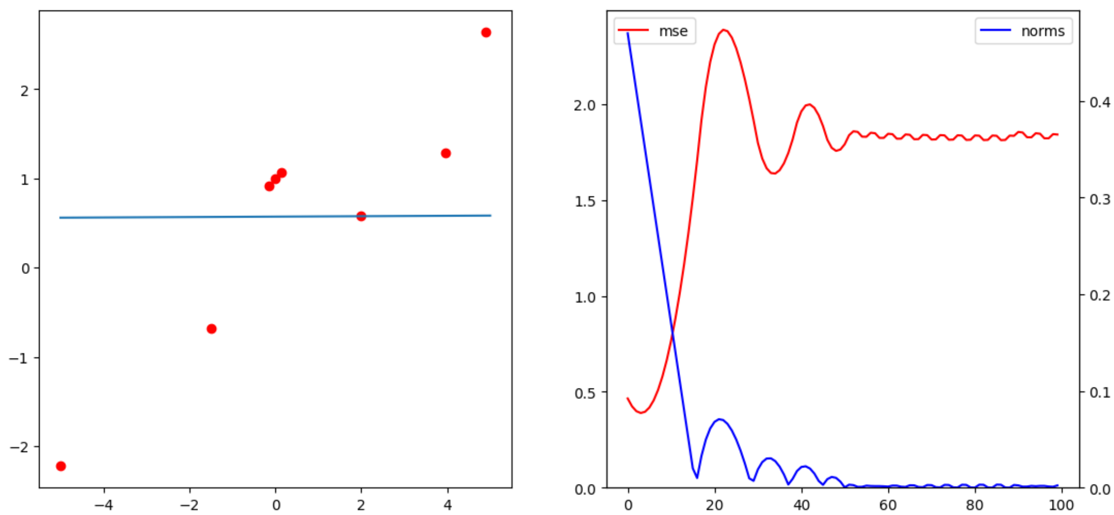
Omezte se na interval <1e-10, 1e+10>.

[7]:
```python
def plot_training_result(model, losses, norms):
    fig, axs = plt.subplots(ncols=2, figsize=(13, 6))
    axs[0].plot(xs.detach(), model(xs.float().unsqueeze(-1)).detach())
    axs[0].scatter(data, ts, c='r')

    axs[1].plot(losses, 'r-', label='mse')
    axs[1].legend(loc="upper left")
    axs[1].set_ylim(bottom=0)
```

```
    ax_2 = axs[1].twinx()
    ax_2.plot(norms, 'b-', label='norms')
    ax_2.legend(loc="upper right")
    ax_2.set_ylim(bottom=0)


xs = torch.linspace(-5, 5, steps=100)
data = torch.tensor([-4.99, 3.95, -1.5, -0.15, 0, 0.15, 2, 4.9]).unsqueeze(-1)
ts = func(data).squeeze(-1).detach()


def try_beta(l2_beta):
    regr_1 = LinearRegression(1)
    opt = torch.optim.Adam(regr_1.parameters(), 3e-2)
    losses, norms = train_regression_model(regr_1,
 ↪MSE_with_regression(l2_beta), opt, data, ts)
    plot_training_result(regr_1, losses, norms)


try_beta(1e-10)  # The lower end yielded the best MSE and high norm
try_beta(5.368)  # Values around 4 to 6 showed the required behaviour nicely
try_beta(48939.00918477489)  # Grid-search-ish-based search for the lowest norm
```





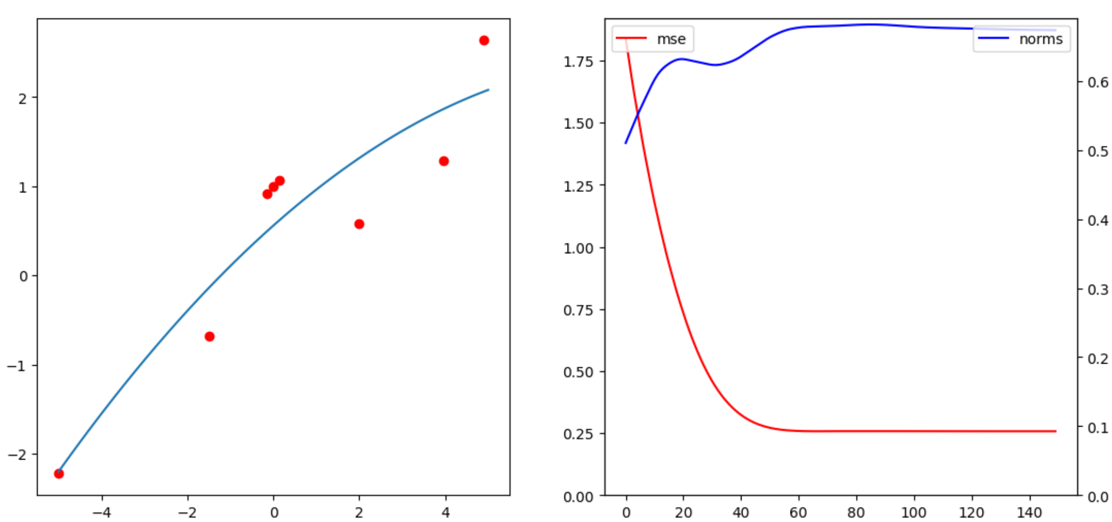


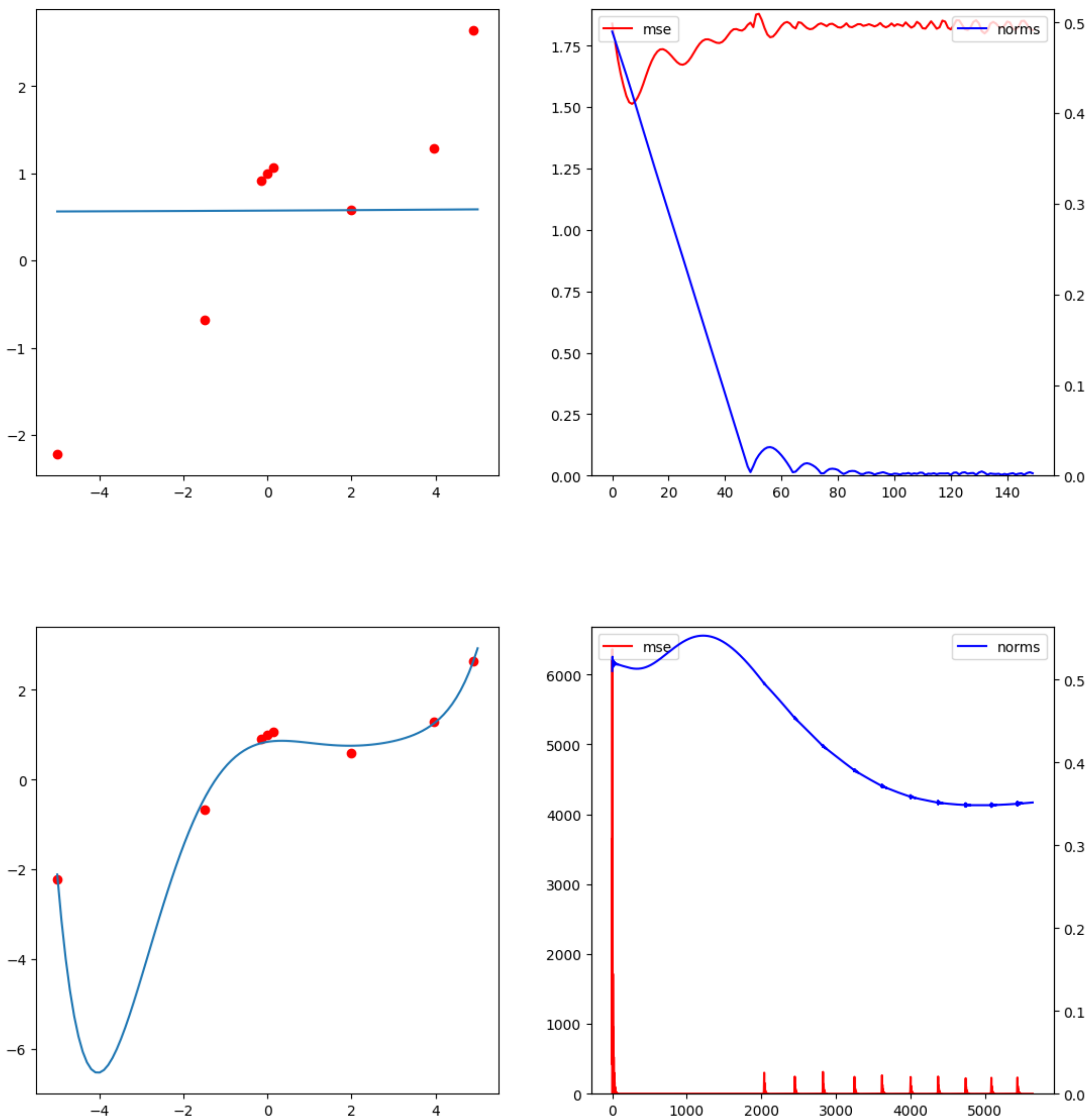
Zde doimplementujte metodu forward pro `PolynomialRegression`. Je potřeba vytvořit rozšířené příznaky a slepit je do jednoho tensoru o tvaru `[N, F]`, který předložíte `self.lin_reg`. Nezapomeňte pak výstup opět omezit na `[N]`.

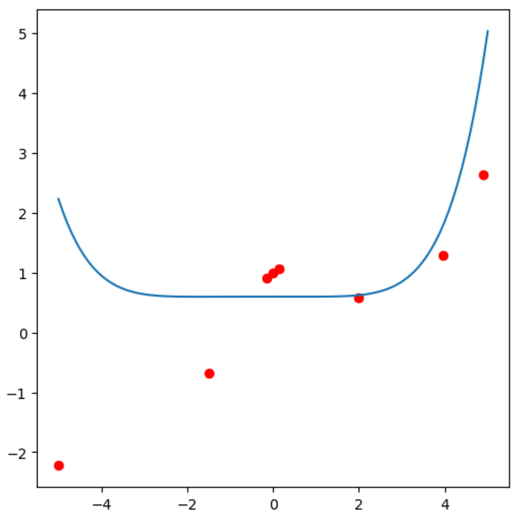
Zbytek buňky Vám model natrénuje v několika různých variantách řádu polynomu a síly regularizace.

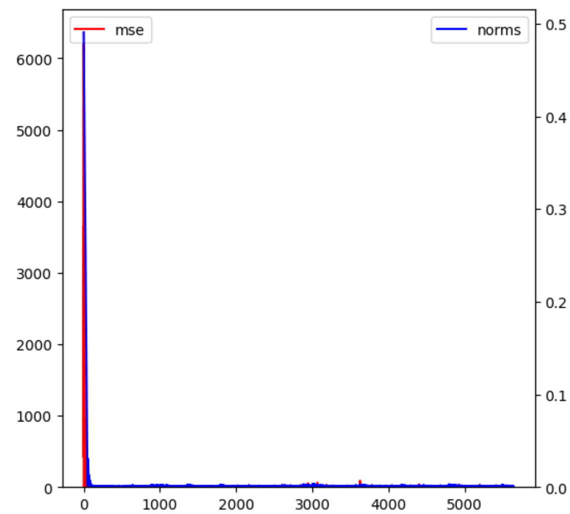
[8]:
```
class PolynomialRegression1D(torch.nn.Module):
    def __init__(self, order):
        super().__init__()
        self.order = order
        self.lin_reg = LinearRegression(order)
```

```
    def forward(self, x: Tensor):
        # This is basically the polynomial expansion from the 'simple regression' demo
        x_flat = x.flatten()
        poly_features = torch.zeros(x.shape[0], self.order, dtype=torch.float32)
        for p in range(self.order):
            poly_features[:, p] = torch.pow(x_flat, p)

        return self.lin_reg(poly_features)

    def l2_norm(self):
        return self.lin_reg.l2_norm()


def run_polynomial_regr(order, l2_beta):
    model = PolynomialRegression1D(order)

    losses, norms = train_regression_model(
        model,
        MSE_with_regression(l2_beta),
        torch.optim.Adam(model.parameters(), 1e-2),
        data,
        ts,
        nb_steps=50 + int(100 * (order - 2) ** 2.5)
    )
    plot_training_result(model, losses, norms)


run_polynomial_regr(3, 1e-3)
run_polynomial_regr(3, 1e+2)
run_polynomial_regr(7, 1e-1)
run_polynomial_regr(7, 1e+3)
```




mse
norms
mse
norms





1 Regrese meteorologických dat

V této části budete usilovat o doplnění tlaku vzduchu z dalších meteorologických měření. Nejprve pomocí lineární regrese, následně pomocí jednoduché neuronové sítě. Každopádně více pomocí vestavěných věcí z PyTorche.

[9]:
```
turany = np.loadtxt('data-chmu/turany.txt', dtype=np.float32)
mosnov = np.loadtxt('data-chmu/mosnov.txt', dtype=np.float32)
kosetice = np.loadtxt('data-chmu/kosetice.txt', dtype=np.float32)
ruzyne = np.loadtxt('data-chmu/ruzyne.txt', dtype=np.float32)
pribyslav = np.loadtxt('data-chmu/pribyslav.txt', dtype=np.float32)

features = ['teplota průměrná', 'teplota maximální', 'teplota minimální',␣
 ↪'rychlost větru ', 'tlak vzduchu',
           'vlhkost vzduchu', 'úhrn srážek', 'celková výška sněhu', 'sluneční␣
 ↪svit']
```

V prvním kroce doplňte definici MeteoDatasetu o `__getitem__()` a `__len__()`, tak jak se to očekává u objektů třídy `torch.utils.data.Dataset`. Navíc přidejte vlastnost (`@property`) `in_dim`, která říká, kolik příznaků má každé jedno dato v datasetu.

[10]:
```
class MeteoDataset(torch.utils.data.Dataset):
    def __init__(self, data, target_feature):
        self.ts = data[target_feature]
        self.xs = data[[i for i in range(data.shape[0]) if i !=␣
 ↪target_feature]].T

    def __getitem__(self, idx):
        return self.xs[idx], self.ts[idx]
```

```
    def __len__(self):
        return self.xs.shape[0]

    @property
    def in_dim(self):
        return self.xs.shape[1]


target_feature = 'tlak vzduchu'
train_dataset = MeteoDataset(np.concatenate([mosnov, kosetice, pribyslav],␣
 ↪axis=1), features.index(target_feature))
valid_dataset = MeteoDataset(ruzyne, features.index(target_feature))
test_dataset = MeteoDataset(ruzyne, features.index(target_feature))
print(valid_dataset.xs.shape, valid_dataset.ts.shape)

valid_loader = torch.utils.data.DataLoader(valid_dataset, batch_size=128,␣
 ↪shuffle=False, drop_last=False)
print(len(valid_loader))
```

```
(22280, 8) (22280,)
175
```

Zde je definována funkce pro evaluaci modelu. Budete ji používat, ale implementovat v ní nic nemusíte.

[11]:
```
def evaluate(model, data_loader):
    model.eval()
    total_squared_error = 0.0
    nb_datos = 0
    with torch.no_grad():
        for X, t in data_loader:
            y = model(X)
            total_squared_error += torch.nn.functional.mse_loss(y, t,␣
 ↪reduction='sum')
            nb_datos += len(t)

    return total_squared_error / nb_datos


evaluate(LinearRegression(train_dataset.in_dim), valid_loader)
```

[11]:
```
tensor(937555.1250)
```

Nad trénovacím dataset vytvořte `DataLoader`, který bude vytvářet minibatche o velikosti 32 příkladů. Poté z něj vytvořte nekonečný proud dat. Můžete k tomu naimplementovat vlastní cyklící iterátor nebo použít vhodnou funkci z `itertools`.

Dále naimplementujte trénovací smyčku ve funkci `train()`, která přijímá: * `model` – referenci na model, jenž má být natrénován * `train_stream` – iterátor přes trénovací batche * `optimizer` – instanci optimalizátoru, který bude využit pro trénování * `nb_updates` – počet trénovacích kroků, jež mají být provedeny * `eval_period` – po kolika krocích se má vyhodnocovat model na validačních datech * `valid_loader` – iterable s validačními daty

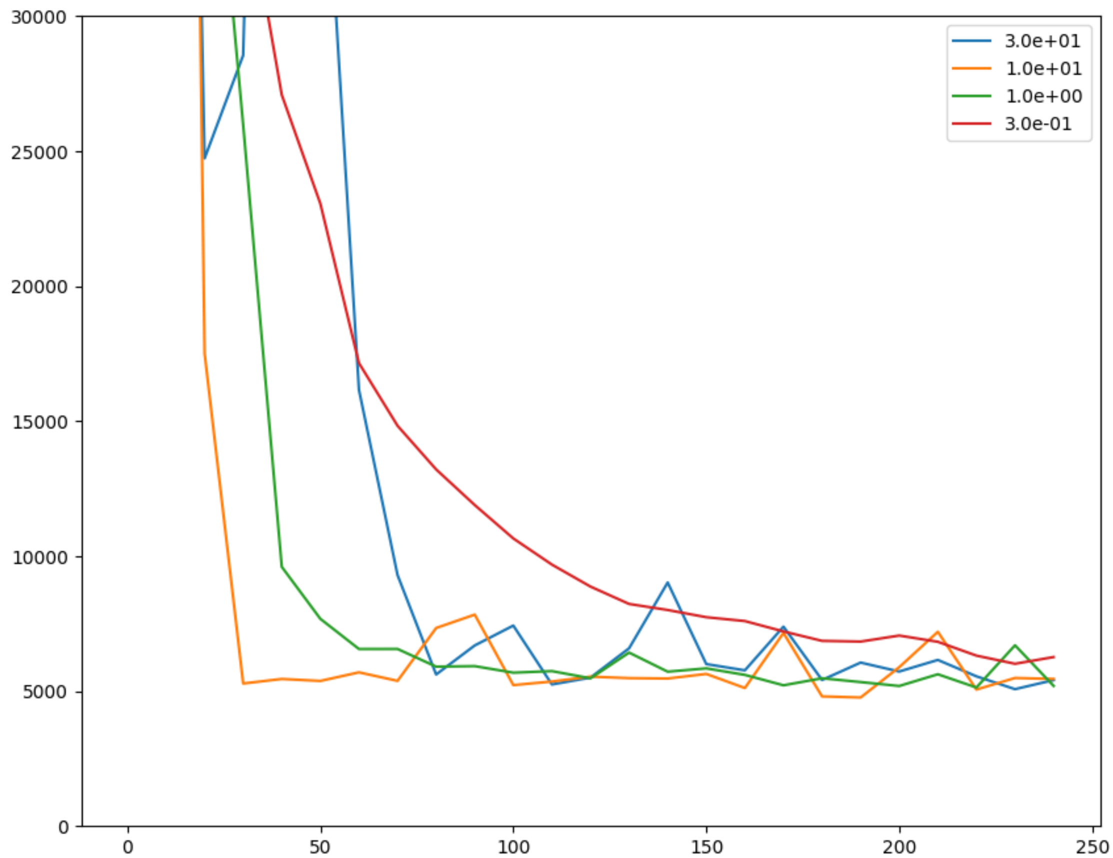
Funkce nechť používá `torch.nn.functional.mse_loss()` jako loss. Vracejte průběh validační loss spolu s pořadovými čísly kroků, kdy došlo k měření, tedy jako seznam dvojic `[(i_1, loss_1), ...]`. `model` trénujte přímo.

Zbytek buňky vyzkouší trénování pro několik různých learning rate. Vzhledem k jednoduchosti úlohy jsou to learning rate gigantické oproti prakticky používaným.

[12]:
```
import itertools as it
from torch.utils.data import DataLoader

BATCH_SIZE = 32

train_loader = DataLoader(train_dataset, BATCH_SIZE, shuffle=True)

train_stream = it.cycle(train_loader)


def train(model, train_stream, optimizer, nb_updates, eval_period,␣
 ↪valid_loader):
    valid_progress = []

    for i in range(nb_updates):
        input_data, target = next(train_stream)
        optimizer.zero_grad()
        output = model(input_data)
        loss = torch.nn.functional.mse_loss(output, target)

        loss.backward()
        optimizer.step()

        if i % eval_period == 0:
            model.eval()
            loss = evaluate(model, valid_loader)
            valid_progress.append((i, loss))
            model.train()

    return valid_progress


def lr_progress(lr):
    linear_predictor = LinearRegression(train_dataset.in_dim)
    optimizer = torch.optim.Adam(linear_predictor.parameters(), lr)
```

```
    progress = train(linear_predictor, train_stream, optimizer, 250, 10,␣
 ↪valid_loader)
    print(lr, evaluate(linear_predictor, valid_loader))
    return progress


plt.figure(figsize=(10, 8))
for lr in [3e+1, 1e+1, 1e+0, 3e-1]:
    progress = lr_progress(lr)
    plt.plot([item[0] for item in progress], [item[1] for item in progress],␣
 ↪label=f"{lr:.1e}")
plt.legend()
plt.ylim(0, 30000)
plt.show()
```

```
30.0 tensor(5657.6172)
10.0 tensor(7225.3345)
1.0 tensor(5804.1572)
0.3 tensor(6469.7441)
```



Konečně naimplementujte jednoduchou neuronovou síť, která bude schopná regrese. Při konstrukci nechť přijímá: * rozměr vstupu * počet skrytých vstev * šířku každé skryté vrstvy * instanci nelinearity, která má být aplikována v každé skryté vrstvé

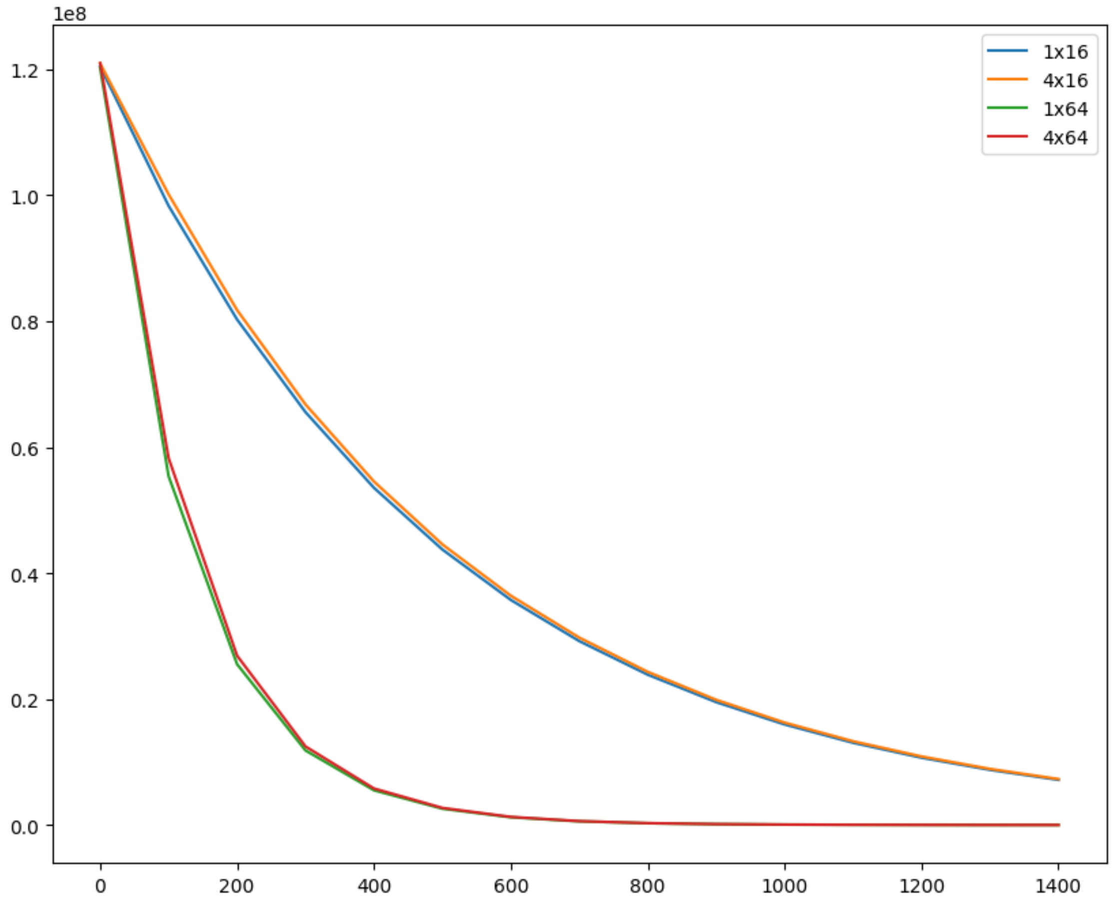
Při dopředném průchodu nechť se uplatní všechny vrstvy, nezapomeňte opět redukovat výstup na [N]. Nejspíš se Vám bude hodit `torch.nn.Sequential`.

Zbytek buňky vyzkouší několik různých konfigurací. Pravděpodobně uvidíte ilustraci faktu, že v rozporu s častou reportovací praxí není počet parametrů nutně tím nejzásadnějším číslem pro odhad síly modelu, tím může být prostě šířka.

[15]:
```
import warnings
warnings.filterwarnings('ignore')

class LocalMeteoModel(torch.nn.Module):
    def __init__(self, input_dim, nb_layers, layer_width, nonlinearity):
        super().__init__()
        self.input_dim = input_dim
        assert nb_layers >= 1

        layers = []
        layers.append(torch.nn.Linear(input_dim, layer_width))
        layers.append(nonlinearity)

        for _ in range(1, nb_layers):
            layers.append(torch.nn.Linear(layer_width, layer_width))
            layers.append(nonlinearity)

        layers.append(torch.nn.Linear(layer_width, 1))
        self.model = torch.nn.Sequential(*layers)

    def forward(self, x):
        return self.model(x)


def depth_progress(depth, width):
    nn_predictor = LocalMeteoModel(train_dataset.in_dim, depth, width, torch.nn.
 ↪Tanh())
    optimizer = torch.optim.SGD(nn_predictor.parameters(), 3e-5)
    progress = train(nn_predictor, train_stream, optimizer, 1500, 100,␣
 ↪valid_loader)
    print(f"Depth {depth}, width {width}: {evaluate(nn_predictor, valid_loader):
 ↪.2f}")
    return progress


plt.figure(figsize=(10, 8))
for depth, width in [(1, 16), (4, 16), (1, 64), (4, 64)]:
```

```
    progress = depth_progress(depth, width)
    plt.plot([item[0] for item in progress], [item[1] for item in progress],␣
 ↪label=f"{depth}x{width}")
plt.legend()
plt.show()
```

```
Depth 1, width 16: 5903682.00
Depth 4, width 16: 6013026.50
Depth 1, width 64: 18047.46
Depth 4, width 64: 17751.73
```



Gratulujeme ke zvládnutí projektu! Při odevzdání nezapomeňte soubory pojmenovat podle vedoucího týmu.