

实验1 PyTorch基本操作实验

北京交通大学《深度学习》课程组





1. PyTorch安装与环境配置

- Anoconda安装
- Pytorch安装
- Jupyter Notebook

2. 基本数据处理与计算操作

- 创建Tensor
- Tensor的相关操作
- 广播机制
- Tensor和NumPy相互转换
- Tensor on GPU
- 自动求梯度

3. 线性回归实现

- 手动实现线性回归
- 利用torch.nn实现线性回归
- 常用损失函数
- 模型预测及评价(分类问题)

4. 实验要求

- 数据集介绍
- 实验内容



1.1 Anoconda安装

Anaconda是一个用于科学计算的Python发行版,支持Linux、Mac和Window系统,提供了包管理与环境管理的功能,可以很方便地解决Python并存、切换,以及各种第三方包安装的问题。

可以直接从 Anaconda官网^[1]下载,但因为Anaconda的服务器在国外,所以下载速度会很慢,这里推荐使用清华的镜像^[2]来下载。选择合适你的版本下载,这里选择Anaconda2020.02-Windowsx86_64.exe版本.

Anaconda3-2020.02-MacOSX-x86_64.pkg	442.2 MiB	2020-03-12 00:04
Anaconda3-2020.02-MacOSX-x86_64.sh	430.1 MiB	2020-03-12 00:04
Anaconda3-2020.02-Windows-x86.exe	423.2 MiB	2020-03-12 00:04
Anaconda3-2020.02-Windows-x86_64.exe	466.3 MiB	2020-03-12 00:06
Anaconda3-4.0.0-Linux-x86.sh	336.9 MiB	2017-01-31 01:34
Anaconda3-4.0.0-Linux-x86_64.sh	398.4 MiB	2017-01-31 01:35

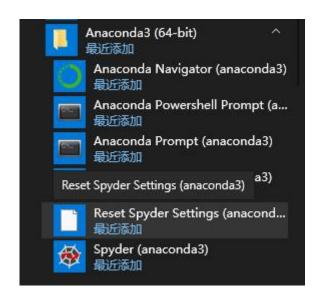
^[1] https://www.anaconda.com/

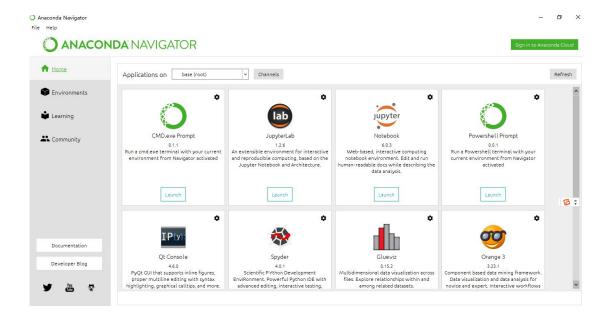
^{[2] &}lt;a href="https://mirrors.tuna.tsinghua.edu.cn/anaconda/archive/">https://mirrors.tuna.tsinghua.edu.cn/anaconda/archive/



1.1 Anoconda安装

下载之后,点击安装,按照提示依次点击下一步,直到安装结束。安装完成后,在开始菜单会出现安装后的软件,如左图所示。打开程序Anaconda Navigator,启动后可以看到Anaconda的环境界面,如右图所示。

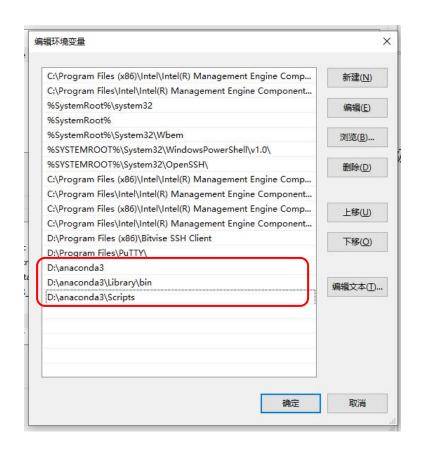






1.1 Anoconda安装

安装完成后,进行Anaconda的环境变量配置,电脑->属性->高级系统设置->环境变量->系统变量 找到Path,点击编辑,加入三个文件夹的存储路径,如左图所示,然后选择确定。点击 Win+R 打开,输入cmd,打开命令行,输入conda info,显示如右图,说明环境变量配置成功。



```
C:\WINDOWS\system32\cmd.exe
Microsoft Windows [版本 10.0.18362.900]
(c) 2019 Microsoft Corporation。保留所有权利。
:\Users\xiaowei>conda info
    active environment : None
      user config file : C:\Users\xiaowei\.condarc
populated config files : C:\Users\xiaowei\.condarc
         conda version: 4.8.2
   conda-build version: 3.18.11
       python version: 3.7.6. final.0
      virtual packages :
      base environment : D:\anaconda3 (writable)
          channel URLs: https://mirrors.tuna.tsinghua.edu.cn/anaconda/pkgs/main/win-64
                         https://mirrors.tuna.tsinghua.edu.cn/anaconda/pkgs/main/noarch
                         https://mirrors.tuna.tsinghua.edu.cn/anaconda/pkgs/free/win-64
                         https://mirrors.tuna.tsinghua.edu.cn/anaconda/pkgs/free/noarch
                         https://repo.anaconda.com/pkgs/main/win-64
                         https://repo.anaconda.com/pkgs/main/noarch
                         https://repo.anaconda.com/pkgs/r/win-64
                         https://repo.anaconda.com/pkgs/r/noarch
                         https://repo.anaconda.com/pkgs/msys2/win-64
                         https://repo.anaconda.com/pkgs/msys2/noarch
         package cache : D:\anaconda3\pkgs
                         C:\Users\xiaowei\.conda\pkgs
                         C:\Users\xiaowei\AppData\Local\conda\conda\pkgs
      envs directories : D:\anaconda3\envs
                         C:\Users\xiaowei\.conda\envs
                         C:\Users\xiaowei\AppData\Loca1\conda\conda\envs
```



进入Pytorch官网,官网提供pip和conda两种安装方式。根据电脑配置进行选择 (Anaconda2020 默认安装3.7),会生成相应的安装命令。





1.2 Pytorch安装

pip命令安装: windows+pip+python3.7+None

复制命令:

pip install torch==1.5.0+cpu torchvision==0.6.0+cpu -f https://download.pytorch.org/whl/torch_stable.html, 然后在cmd命令框中运行。



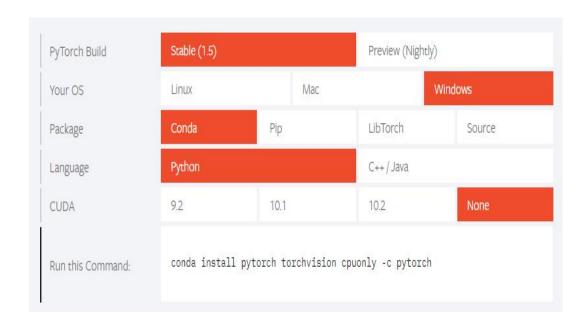


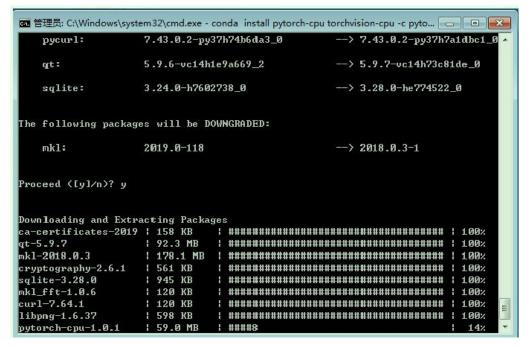


Conda命令安装: windows+Conda+python3.7+None

复制命令:

conda install pytorch torchvision cpuonly -c pytorch, 然后在cmd命令框中运行。







1.2 Pytorch安装

Pytorch安装验证

安装完pytorch后,输入一下命令进行验证是否正确安装。 首先,输入python,进入python命令行,然后再输入:

import torch Import torchvision x =torch,.rand(2,3) print(x)

如果能运行成功,证明安装成功。

```
C:\Users\xiaowei>python
Python 3.7.6 (default, Jan 8 2020, 20:23:39) [MSC v. 1916 64 bit (AMD64)] :: Anaconda, I nc. on win32

Warning:
This Python interpreter is in a conda environment, but the environment has not been activated. Libraries may fail to load. To activate this environment please see https://conda.io/activation

Type "help". "copyright". "credits" or "license" for more information.

>>> import torch
>>> import torchvision
>>> x = torch.rand(2, 3)
>>> print(x)
tensor([[0.9554, 0.8600, 0.0258], [0.6394, 0.5769, 0.1221]])
>>>
```



1.3 Jupyter Notebook

Anoconda 提供了一个交互式笔记本Jupyter Notebook ,可以支持运行40多种编程语言。本课程的后续代码在Jupyter Notebook平台上运行以及讲解。

在cmd命令框中运行: **jupyter notebook**, 这时在浏览器打开 http://localhost:8888 (通常会自动打开)

打开Jupyter Notebook后,新建python文件: new->python3



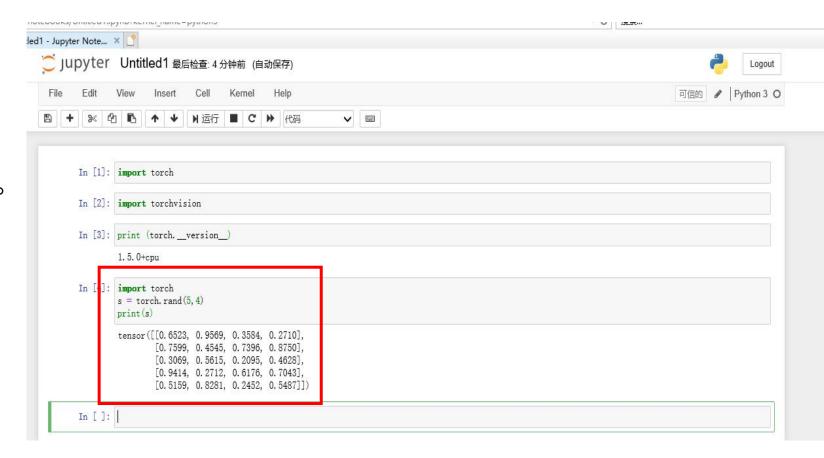


1.3 Jupyter Notebook

新建完文件后,在空的命令框中编写代码。输入一下命令:

import torch
Import torchvision
x =torch,.rand(2,3)
print(x)

验证pytorch可以在jupyter上运行。



目录

1. PyTorch安装与环境配置

- Anoconda安装
- Pytorch安装
- Jupyter Notebook

2. 基本数据处理与计算操作

- 创建Tensor
- Tensor的相关操作
- 广播机制
- Tensor和NumPy相互转换
- Tensor on GPU
- 自动求梯度

3. 线性回归实现

- 手动实现线性回归
- 利用torch.nn实现线性回归
- 常用损失函数
- 模型预测及评价(分类问题)

4. 实验要求

- 数据集介绍
- 实验内容



2 基本数据处理与计算操作

在深度学习中,我们通常会频繁地对数据进行操作。而在PyTorch中,torch.Tensor是存储和变换数据的主要工具。Tensor和NumPy的多维数组非常类似。

然而,Tensor提供了GPU计算和自动求梯度等更多功能,这些使Tensor更加适合深度学习。

"tensor"这个单词一般可译作"张量",张量可以看作是一个多维数组。<mark>标量</mark>可以看作是 0维张量,**向量**可以看作1维张量,**矩阵**可以看作是2维张量。

创建Tensor

■ 导入PyTorch

In [1]: import torch

■ 创建一个2x3的未初始化的Tensor

In [2]: x = torch.empty(2, 3) print(x) Out [2]: tensor([[1.1710e+32, 4.5782e-41, 1.1710e+32], [4.5782e-41, 2.1459e+20, 9.2489e-04]])



2.1 创建Tensor

■ 创建一个2x3的随机初始化的Tensor

```
In [3]: x = torch.rand(2, 3)
print(x)
Out [3]: tensor([[0.8891, 0.7304, 0.1292],
[0.8943, 0.6942, 0.1651]])
```

■ 创建一个2x3的long型全0的Tensor

■ 直接根据数据创建



2.1 创建Tensor

■ 我们还可以通过现有的Tensor来创建 此类方法会默认重用输入Tensor的一些属性,例如数据类型,除非自定义数据类型 。

■ 通过shape或者size()来获取Tensor的形状

```
In [6]: #返回的torch.Size其实就是一个tuple, 支持所有tuple的操作。
print(x.size())
print(x.shape)

Out [6]: torch.Size([2, 3])
torch.Size([2, 3])
```



■ 其他创建Tensor的函数(可查阅官方API[1])

函数	功能
Tensor(*sizes)	基础构造函数
tensor(data,)	类似np.array的构造函数
ones(*sizes)	全1Tensor
zeros(*sizes)	全0Tensor
eye(*sizes)	对角线为1,其他为0
arange(s , e , step)	从s到e,步长为step
linspace(s,e,steps)	从s到e,均匀切分成steps份
rand/randn(*sizes)	均匀/标准分布
normal(mean, std)/uniform(from, to)	正态分布/均匀分布
randperm(m)	随机排列



■ 算术操作

在PyTorch中,同一种操作可能有很多种形式,下面用加法作为例子

```
#加法形式一
In [1]:
           x = torch.rand(2, 3)
           y = torch.rand(2, 3)
           print(x + y)
           #加法形式二
           print(torch.add(x, y))
           #加法形式三, inplace (原地操作)
           y.add (x)
           print(y)
           # PyTorch操作的inplace版本都有后缀"_", 例如x.copy_(y), x.t_()
Out [1]:
           tensor([[0.6693, 0.6933, 0.6357],
                 [1.2661, 1.2059, 1.4899]])
```



■ 索引

我们还可以使用类似NumPy的索引操作来访问Tensor的一部分需要注意的是:索引出来的结果与原数据共享内存,也即修改一个,另一个会跟着修改。

其他更高级的选择函数(可查阅官方API)

函数	功能
index_select(input, dim, index)	在指定维度dim上选取,比如选取某些行、某些列
masked_select(input, mask)	例子如上,a[a>0],使用ByteTensor进行选取
nonzero(input)	非0元素的下标
gather(input, dim, index)	根据index,在dim维度上选取数据,输出的size与index一样



■ 改变形状

用view()来改变Tensor的形状

```
In [3]: y = x.view(6)
z = x.view(-1, 2) # -1所指的维度可以根据其他维度的值推出来
print(x.size(), y.size(), z.size())
Out [3]: torch.Size([2, 3]) torch.Size([6]) torch.Size([3, 2])
```

注意view()返回的新Tensor与源Tensor虽然可能有不同的size,但是是共享data的,也即更改其中的一个,另外一个也会跟着改变。(顾名思义,view仅仅是改变了对这个张量的观察角度,内部数据并未改变)



如果我们想返回一个真正新的副本(即不共享data内存)该怎么办呢? Pytorch还提供了一个reshape()方法可以改变形状,但是此函数并不能保证返回的是其拷贝,所以不推荐使用。我们推荐先用clone()创造一个副本然后再使用view()。



另外,PyTorch还支持一些线性函数,具体用法可参考官方文档。

函数	功能
trace	对角线元素之和(矩阵的迹)
diag	对角线元素
triu/tril	矩阵的上三角/下三角,可指 定偏移量
mm/bmm	矩阵乘法,batch的矩阵乘法
addmm/addbmm/addmv/addr/baddbmm	矩阵运算
t	转置
dot/cross	内积/外积
inverse	求逆矩阵
svd	奇异值分解



2.3 广播机制

当我们对两个形状不同的Tensor按元素运算时,可能会触发广播(broadcasting)机制: 先适当复制元素使这两个Tensor形状相同后再按元素运算。例如

由于 x 和 y 分别是1行2列和3行1列的矩阵,如果要计算 x + y,那么 x 中第一行的2个元素被广播(复制)到了第二行和第三行,而 y 中第一列的3个元素被广播(复制)到了第二列。如此,就可以对2个3行2列的矩阵按元素相加。



2.4 Tensor和NumPy相互转换

我们可以使用numpy()和from_numpy()将Tensor和NumPy中的数组相互转换。但是需要注意的一点是: 这两个函数所产生的Tensor和NumPy中的数组共享相同的内存(所以他们之间的转换很快),改变其中一个时另一个也会改变!

还有一个常用的将NumPy中的array转换成Tensor的方法就是torch.tensor(),需要注意的是,此方法总是会进行数据拷贝(就会消耗更多的时间和空间),所以返回的Tensor和原来的数据不再共享内存。

Tensor转NumPy数组

```
In [1]: 

a = torch.ones(3)

b = a.numpy()

print(a, b)

a += 1

print(a, b)

b += 1

print(a, b)

Out [1]: tensor([1., 1., 1.]) [1. 1. 1.]

tensor([2., 2., 2.]) [2. 2. 2.]

tensor([3., 3., 3.]) [3. 3. 3.]
```



2.4 Tensor和NumPy相互转换

NumPy数组转Tensor

使用torch.tensor()将NumPy数组转换成Tensor(不再共享内存)

```
In [2]: c = torch.tensor(a)
a += 1
print(a, c)

Out [2]: [4. 4. 4.] tensor([3., 3., 3.], dtype=torch.float64)
```



2.5 Tensor on GPU

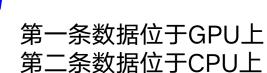
用方法to()可以将Tensor在CPU和GPU(需要硬件支持)之间相互移动。

```
In [3]:

#以下代码只有在PyTorch GPU版本上才会执行
if torch.cuda.is_available():
    device = torch.device("cuda") # GPU
    y = torch.ones_like(x, device=device) # 直接创建一个在GPU上的Tensor
    x = x.to(device) # 等价于.to("cuda")
    z = x + y
    print(z)
    print(z.to("cpu", torch.double)) # to()还可以同时更改数据类型

Out [3]:

tensor([[2, 3]], device='cuda:0')
    tensor([[2, 3.]], dtype=torch.float64)
```





在深度学习中,我们经常需要对函数求梯度(gradient)。PyTorch提供的autograd包能够根据输入和前向传播过程自动构建计算图,并执行反向传播。

Tensor是autograd包的核心类,如果将其属性.requires_grad设置为True,它将开始追踪(track)在其上的所有操作(这样就可以利用链式法则进行梯度传播了)。完成计算后,可以调用.backward()来完成所有梯度计算。此Tensor的梯度将累积到.grad属性中。

如果不想要被继续追踪,可以调用.detach()将其从追踪记录中分离出来,这样就可以防止将来的计算被追踪,这样梯度就传不过去了。此外,还可以用with torch.no_grad()将不想被追踪的操作代码块包裹起来,这种方法在评估模型的时候很常用,因为在评估模型时,我们并不需要计算可训练参数(requires_grad=True)的梯度。

Function是另外一个很重要的类。Tensor和Function互相结合就可以构建一个记录有整个计算过程的有向无环图(DAG)。每个Tensor都有一个.grad_fn属性,该属性即创建该Tensor的Function,就是说该Tensor是不是通过某些运算得到的,若是,则grad_fn返回一个与这些运算相关的对象,否则是None。



Tensor

创建一个Tensor并设置requires_grad=True:

x是直接创建的,所以它没有grad_fn

做运算操作:

y是通过一个加法操作创建的,所以它有一个为<AddBackward>的grad_fn



更复杂的运算操作:

通过.requires_grad_()来用in-place的方式改变requires_grad属性:

```
In [4]:

a = torch.randn(2, 2) # 缺失情况下默认 requires_grad = False
a = ((a * 3) / (a - 1))
print(a.requires_grad) # False
a.requires_grad_(True)
print(a.requires_grad) # True
b = (a * a).sum()
print(b.grad_fn)

Out [4]: False
True
<SumBackward0 object at 0x7fab977a33c8>
```



梯度

```
In [1]: x = \text{torch.ones}(2, 2, \text{requires\_grad=True})

y = x + 2

z = y * y * 3

out = z.mean()

out.backward() # 等价于 out.backward(torch.tensor(1.))

Print(x.grad)

Out [1]: tensor([[4.5000, 4.5000], [4.5000, 4.5000]])
```

令out为o, 因为

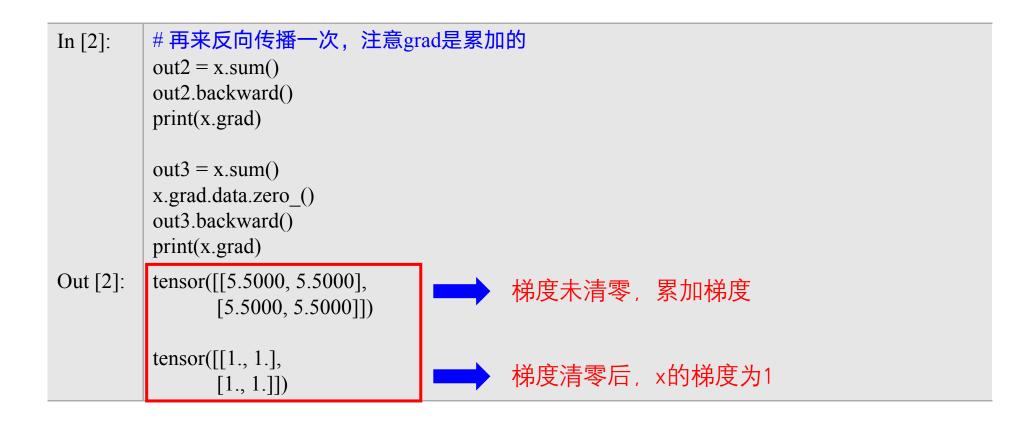
$$o = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^{4} z_i = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^{4} 3(x_i + 2)^2$$

所以

$$\frac{\partial o}{\partial x_i}|_{x_i=1}=\frac{9}{2}=4.5$$



注意: grad在反向传播过程中是<mark>累加</mark>的(accumulated),这意味着每一次运行反向传播,梯度都会累加之前的梯度,所以一般在反向传播之前都需要把梯度清零。





注意在y.backward()时,如果y是标量,则不需要为backward()传入任何参数;否则,需要传入一个与y同形的Tensor。这样的原因简单来说就是为了避免向量(甚至更高维张量)对张量求导,因此转换成标量对张量进行求导。

■ 举例

假设形状为 $m \times n$ 的矩阵 X 经过运算得到了 $p \times q$ 的矩阵 Y, Y 又经过运算得到了 $s \times t$ 的矩阵 Z。那么按照梯度计算的规则, $\frac{dZ}{dY}$ 应该是一个 $s \times t \times p \times q$ 四维张量, $\frac{dY}{dX}$ 是一个 $p \times q \times m \times n$ 的四维张量,而如何对4维张量进行计算是一个比较复杂的问题。

为了避免这个问题,我们**不允许张量对张量求导,只允许标量对张量求导,求导结果是和自变量同形的张量**。所以必要时我们要把张量通过将所有张量的元素加权求和的方式转换为标量,举个例子,假设 y 由自变量 x 计算而来,w是和 y 同形的张量,则 y. bakad (w) 的含义是:先计算 I = t ob l. sm (y * w),因此 I 是一个标量,然后我们再求 I 对自变量 x 的导数。



■ y.backward()的具体例子

■ 此时 z 不是一个标量,所以在调用backward()时需要传入一个和 z 同形的权重向量 进行加权求和来得到一个标量。

```
In [2]: v = torch.tensor([[1.0, 0.1], [0.01, 0.001]], dtype=torch.float)
z.backward(v)
print(x.grad)
Out [2]: tensor([2.0000, 0.2000, 0.0200, 0.0020])
```



1. PyTorch安装与环境配置

- Anoconda安装
- Pytorch安装
- Jupyter Notebook

2. 基本数据处理与计算操作

- 创建Tensor
- Tensor的相关操作
- 广播机制
- Tensor和NumPy相互转换
- Tensor on GPU
- 自动求梯度

3. 线性回归实现

- 手动实现线性回归
- 利用torch.nn实现线性回归
- 常用损失函数
- 模型预测及评价(分类问题)

4. 实验要求

- 数据集介绍
- 实验内容

基本概念

- 线性回归(Linear Regression)是机器学习和统计学中最基础和广泛应用的模型,是一种对自变量和因变量之间关系进行建模的回归分析。
- 从机器学习的角度来看,自变量就是样本的特征向量 $x \in R^d$ (每一维对应一个自变量),因变量是标签 y,这里 $y \in R$ 是连续值。假设空间是一组参数化的线性函数

$$f(x; w, b) = xw^{T} + b,$$

■ 其中,权重向量 \mathbf{w} 和偏置 \mathbf{b} 是线性回归需要学习的参数, 函数 $f(\mathbf{x}; \mathbf{w}, \mathbf{b}) \in R$ 称为**线性模型**。

3 线性回归

实现线性回归

- 使用Tensor 和 autograd来实现一个线性回归,具体的步骤有:
- 生成和读取数据集
- 构建模型
- 初始化模型参数
- 定义损失函数和优化算法
- 训练模型
- 导入本次实验所需的包或模块,其中matplotlib包可用于作图,用来显示生成的数据的二维图。
- import torch
 from IPython import display
 from matplotlib import pyplot as plt
 import numpy as np
 import random



3.1 手动实现线性回归

生成数据

■ 本实验先构造一个简单训练数据集,通过这个数据集可以直观的比较模型训练出来的参数和真实的模型参数的区别。设训练数据集样本数为1000,输入个数(特征数)为2,给定随机生成的批量样本特征 $X \in \mathbb{R}^{1000 \times 2}$ 。这里使用线性回归模型的**真实权重** w = [2, -3.4] 和**偏差** b = 4.2,以及一个随机噪声项 ε 来生成标签。

$$y = xw^T + b + \varepsilon$$

■ 其中,噪声项ε服从均值0、标准差为0.01的正态分布。噪声代表了数据中无意义的干扰。

```
num_inputs = 2
num_examples = 1000
true_w = [2, -3.4]
true_b = 4.2
features = torch.tensor(np.random.normal(0, 1, (num_examples, num_inputs)), dtype=torch.float)
labels = true_w[0] * features[:, 0] + true_w[1] * features[:, 1] + true_b
labels += torch.tensor(np.random.normal(0, 0.01, size=labels.size()), dtype=torch.float)
```



使用 ue _sg _pay () 和 se _f ġse () 两个函数来可视化所生成的数据。

```
def use_svg_display():

#用矢量图显示

display.set_matplotlib_formats('svg')

def set_figsize(figsize=(3.5, 2.5)):

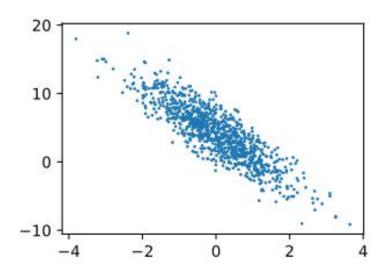
use_svg_display()

#设置图的尺寸

plt.rcParams['figure.figsize'] = figsize

set_figsize()

plt.scatter(features[:, 1].numpy(), labels.numpy(), 1);
```





读取数据

■ 在模型训练的时候,需要遍历数据集并不断读取小批量的数据样本。这里本实验定义一个函数daa_i er () 它每次返回bab_size (批量大小) 个随机样本的特征和标签。

```
def data_iter(batch_size, features, labels):
num_examples = len(features)
indices = list(range(num_examples))
random.shuffle(indices) # 样本的读取顺序是随机的
for i in range(0, num_examples, batch_size):
    j = torch.LongTensor(indices[i: min(i + batch_size, num_examples)]) # 最后一次可能不足一个batch
yield features.index_select(0, j), labels.index_select(0, j)
```



构建模型

■ 在构建模型之前,需要将权重和偏置初始化。本实验将权重初始化成**均值**为0、**标准差**为 0.01的正态随机数,偏置初始化为0。

```
    w = torch.tensor(np.random.normal(0, 0.01, (num_inputs, 1)), dtype=torch.float32)
    b = torch.zeros(1, dtype=torch.float32)
```

■ 在后面的模型训练中,需要对这些参数求梯度来迭代参数的值,因此要设置requires_grad = True

```
    w.requires_grad_(requires_grad=True)
    b.requires_grad_(requires_grad=True)
```

■ 下面使用 mm() 函数做矩阵乘法,来实现线性回归的模型。

```
def linreg(X, w, b):
return torch.mm(X, w) + b
```



损失函数和优化算法

本实验使用平方损失来定义线性回归的损失函数。在实现中,我们需要把**真实值** y 变形成**预测值** y_hat 形状。以下的函数返回的结果和 y_hat 的形状相同。

```
def squared_loss(y_hat, y):
return (y_hat - y.view(y_hat.size())) ** 2 / 2
```

■ 以下的 sgd 函数实现了小批量随机梯度下降算法。它通过不断迭代模型参数来优化损失函数。这里自动求梯度模块计算得到的梯度是一个批量样本的梯度和。我们将它除以批量大小来得到平均值。

```
def sgd(params, lr, batch_size):
for param in params:
param.data -= lr * param.grad / batch_size # 注意这里更改param时用的param.data
```



模型训练

■ 在训练过程中,模型将会多次迭代更新参数。在每次迭代中,根据当前读取的小批量数据样本(特征 x 和标签 y),通过调用反向函数backward计算小批量随机梯度,并调用优化算法sg 迭代模型参数。

```
1r = 0.03
    num epochs = 3
    batch size = 10
    net = linreg
5
    loss = squared loss
6
    for epoch in range(num epochs): # 训练模型一共需要num_epochs个迭代周期
8
      # 在每一个迭代周期中, 会使用训练数据集中所有样本一次
      for X, y in data iter(batch size, features, labels): #x和y分别是小批量样本的特征和标签
9
        1 = loss(net(X, w, b), y).sum() # I是有关小批量X和y的损失
10
        l.backward() # 小批量的损失对模型参数求梯度
11
12
        sgd([w, b], lr, batch size) # 使用小批量随机梯度下降迭代模型参数
        w.grad.data.zero () # 梯度清零
13
        b.grad.data.zero ()
14
15
      train 1 = loss(net(features, w, b), labels)
16
      print('epoch %d, loss %f' % (epoch + 1, train 1.mean().item()))
```



■ 训练完成后,打印出学到的参数和用来生成训练集的真实参数,通过比较发现它们之间非常接近。

■ 输出的结果:

```
1 [2, -3.4]
2 tensor([[ 2.0000], [-3.3996]], requires_grad=True)
3 4.2
5 tensor([4.1995], requires_grad=True)
```



Torch.nn 模块简介

- tob nn 模块是Pytorch为神经网络设计的模块化接口, 该模块定义了大量的神经网络层。nn 利用 atigad 来定义模型,其核心数据结构是 Mille 。
- 下表给出了部分 nn 中所包含模块(其它模块可查阅官方API):

模块	作用
torch.nn.Module()	Module是所有神经网络模块的基类
torch.nn.Linear()	Liner用于对输入数据进行线性变换
torch.nn.Sequential()	Sequential是一个顺序容器,其中模块的添加顺序与在构造函数中传递模块时的顺序相同
torch.nn.MSELoss	MSELoss用于衡量输入x和目标y中每个元素之间的均方误差的标准。



读取数据

■ PyTorch提供了 daa 库来读取数据。由于data常用作变量名,这里将导入的 daa 模块用 Daa 代替。对前面的读取数据部分可以使用 daa 库来处理。在每一次迭代中,使用 Daa 随机读取包含10个数据样本的小批量。

```
1r = 0.03
   import torch.utils.data as Data
   batch size = 10
   # 将训练数据的特征和标签组合
   dataset = Data.TensorDataset(features, labels)
6
   #把 dataset 放入 DataLoader
    data iter = Data.DataLoader(
     dataset=dataset, # torch TensorDataset format
9
     batch_size=batch_size, # mini batch size
10
     shuffle=True, # 是否打乱数据 (训练集一般需要进行打乱)
     num workers=2, # 多线程来读数据,注意在Windows下需要设置为0
12
13
```



构建模型

■ 构建模型的过程中,最常见的方法就是继承 nn. Mdlue ,然后构建自己的网络。一个 nn. Mdlue 实例需要包含一些层以及返回输出的前向传播方法。下面利用 nn. Mdlue 构建一个线性回归模型。

```
class LinearNet(nn.Module):
def __init__(self, n_feature):
super(LinearNet, self).__init__()
self.linear = nn.Linear(n_feature, 1)

# forward 定义前向传播
def forward(self, x):
y = self.linear(x)
return y

net =LinearNet(num_inputs)
```



■ 除了继承 nn. Mobble 来构建线性回归模型,还可以利用 nn. Squtial 结合 nn. Liner 来 搭建模型

```
#写法一
      net = nn.Sequential(
         nn.Linear(num inputs, 1)
        # 此处可以添加其它层
5
6
      #写法二
      \# net = nn.Sequential()
8
      # net.add module('linear', nn.Linear(num inputs, 1))
      # net.add module.....
10
11
      #写法三
12
      # from collections import OrderedDict
13
      # net = nn.Sequential(OrderedDict([
14
                 ('linear', nn.Linear(num_inputs, 1))
15
                # .....]))
16
```



模型参数初始化

■ 在使用定义的模型net之前,需要对模型中的一些参数进行初始化。Pytorch在init模块中提供了许多初始化参数的方法。我们可以调用i int . noan 模块通过正态分布对线性回归中的权重和偏差进行初始化

```
from torch.nn import init

init.normal_(net[0].weight, mean=0, std=0.01)

init.constant_(net[0].bias, val=0) #也可以直接修改bias的data: net[0].bias.data.fill_(0)
```

上述代码,将参数中的每个元素随机初始化为了均值为0,标准差为0.01的正态分布,同时将偏差初始化为零



损失函数和优化

■ Pytorch在 toc h.nn 中提供了各种损失函数,这些损失函数实现为 nn. Mdle 的子类,可以将这些损失函数作为一种特殊的层。

```
1 loss = nn.MSELoss()
```

■ Pytorch在 tob opim 模块中提供了诸如 SD , Adm 和 RSPop 等优化算法。本例将使用小批量随机梯度下降算法进行优化。

```
import torch.optim as optim
optimizer = optim.SGD(net.parameters(), lr=0.03) #梯度下降的学习率指定为0.03

#可以为不同的子网络设置不同学习率

# optimizer = optim.SGD([
# #如果不指定学习率,则用默认的最外层学习率

# {'params': net.subnet1.parameters()}, # lr=0.03

# {'params': net.subnet2.parameters(), 'lr': 0.01}

# ], lr=0.03)
```



模型训练

■ 训练模型时,可以调用 opim 中的 sep () 函数来迭代模型参数。

```
1  num_epochs = 3
2  for epoch in range(1, num_epochs + 1):
3   for X, y in data_iter:
4   output = net(X)
5   l = loss(output, y.view(-1, 1))
6   optimizer.zero_grad() # 梯度清零,等价于net.zero_grad()
7   l.backward()
8   optimizer.step()
9  print('epoch %d, loss: %f' % (epoch, l.item()))
```

■ 部分输出如下所示

```
epoch 1, loss: 0.000457
epoch 2, loss: 0.000081
epoch 3, loss: 0.000198
```



平均绝对误差 (MAE)

$$\ell(\theta) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} H(y^{(i)}, y^{(i)}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} |y^{(i)} - y^{(i)}|$$

■ torch.nn中的实现

 $1 \quad loss = nn.L1Loss()$

均方误差 (MSE)

$$\ell(\theta) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} H(y^{(i)}, y^{(i)}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (y^{(i)} - y^{(i)})^{2}$$

■ torch.nn中的实现

 $1 \quad loss = nn.MSELoss()$

二元交叉熵损失函数

■ 假设训练数据集的样本数为n, 根据二元交叉熵损失函数的定义

$$\ell(\theta) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} H(y^{(i)}, y^{(i)}) = -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} y^{(i)} \log y^{(i)} + (1 - y^{(i)}) \log (1 - y^{(i)})$$

■ torch.nn中的实现

1
$$loss = nn.BCELoss()$$

包含sigmoid层的二元交叉熵损失函数

$$\ell(\theta) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} H(y^{(i)}, y^{(i)}) = -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} y^{(i)} \log \sigma(y^{(i)}) + (1 - y^{(i)}) \log(1 - \sigma(y^{(i)}))$$

■ torch.nn中的实现

1 loss = nn.BCEWithLogitsLoss() # 包含了sigmoid运算



交叉熵损失函数

■ 假设训练数据集的样本数为n,根据交叉熵损失函数的定义:

$$\ell(\theta) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} H(y^{(i)}, y^{(i)}) = -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \log y_{y^{(i)}}^{(i)}$$

■ 我们给出交叉熵损失函数的实现:

```
1  #交叉熵损失函数
2  def cross_entropy(y_hat, y):
3    """
4   Parameters
-------
5   y_hat: 预测值, shape is (batch_size, class_num)
y: 真值, shape is (batch_size,)

8   Returns
------
10   """
11  return - torch.log(y_hat.gather(1, y.view(-1, 1)))
12
```



交叉熵损失函数

■ 假设训练数据集的样本数为n,根据交叉熵损失函数的定义

$$\ell(\theta) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} H(y^{(i)}, y^{(i)}) = -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \log y_{y^{(i)}}^{(i)}$$

■ torch.nn中的实现

1 loss = nn.CrossEntropyLoss()

■ 值得注意的是,分开定义 sftm 运算和交叉熵损失函数可能会造成数值不稳定。因此,PyTorch提供了一个包括 sftm 运算和交叉熵损失计算的函数。它的数值稳定性更好。所以在输出层,我们不需要再进行 sftm 操作:

def net(X):

return softmax(torch.mm(X.view((-1, num_inputs)), W) + b)



1 $\operatorname{def} \operatorname{net}(X)$:

return torch.mm(X.view((-1, num_inputs)), W) + b



3.4 模型预测及评价(分类问题)

模型预测及评价(分类问题)

- 对于分类问题,给定任一样本特征,模型可以预测每个输出类别的概率。通常,我们把预测概率最大的类别作为输出类别。如果它与真实类别(标签)一致,说明这次预测是正确的。我们使用准确率(accuracy)来评价模型的表现。它等于正确预测数量与总预测数量之比。
- 下面我们给出准确率计算函数的实现

```
def accuracy(y_hat, y):
return (y_hat.argmax(dim=1) == y).float().mean().item()
```

■ 评价模型 ne 在数据集 daa _i er 上的准确率

```
def evaluate_accuracy(data_iter, net):
    acc_sum, n = 0.0, 0
    for X, y in data_iter:
    acc_sum += (net(X).argmax(dim=1) == y).float().sum().item()
    n += y.shape[0]
    return acc_sum / n
```



1. PyTorch安装与环境配置

- Anoconda安装
- Pytorch安装
- Jupyter Notebook

2. 基本数据处理与计算操作

- 创建Tensor
- Tensor的相关操作
- 广播机制
- Tensor和NumPy相互转换
- Tensor on GPU
- 自动求梯度

3. 线性回归实现

- 手动实现线性回归
- 利用torch.nn实现线性回归
- 常用损失函数
- 模型预测及评价(分类问题)

4. 实验要求

- 数据集介绍
- 实验内容



人工构造的数据集

■ 导入所需要的报或模块

```
import torch
import matplotlib.pyplot as plt
```

■ 随机生成实验所需要的二分类数据集 x1 和 x2 ,分别对应的标签 y1 和 y2 .

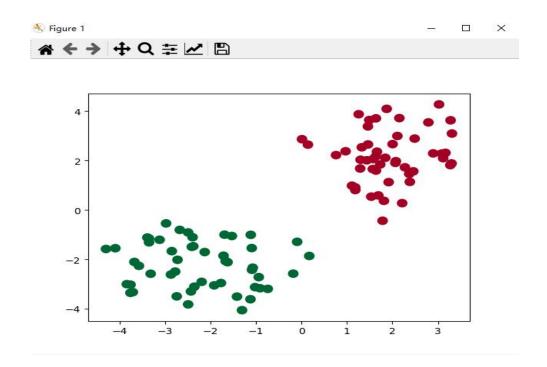


人工构造的数据集

■ 使用matplotlib将所构造的数据可视化

```
plt.scatter(x.data.numpy()[:, 0], x.data.numpy()[:, 1], c=y.data.numpy(), s=100, lw=0, cmap='RdYlGn')
plt.show()
```

■ 打印结果





Fashion-MNIST数据集(一个多类图像分类数据集)

ankle boot t-shirt t-shirt dress t-shirt pullover sneaker pullover sandal sandal

■ 训练集: 60,000

■ 测试集: 10,000

■ 每个样本的数据格式为: 28*28*1(高*宽*通道)

■ 类别(10类): dress(连衣裙)、coat(外套)、sandal(凉鞋)、shirt(衬衫)、sneaker(运动鞋)、bag(包)和ankle boot(短靴)

■ 导入需要的包或模块

1 import torch

2 import torchvision

3 import torchvision.transforms as transforms



加载Fashion-MNIST数据集(采用已经划分好的训练集和测试集)

■ 指定参数 transform = transforms. ToTensor(),将所有数据转换为 Tesr , transforms. ToTensor()可以将尺寸为 (*H* × *W* × *C*) 且数据位于[0,255]的PIL图片或者数据类型为 np. uint8 的NumPy数组转换为尺寸为(*C* × *H* × *W*),数据类型为 tob .f ba2 且数据位于[0.0,1.0]的 Tesr 。

```
mnist_train = torchvision.datasets.FashionMNIST(root='~/Datasets/FashionMNIST', train=True,
download=True, transform=transforms.ToTensor())
mnist_test = torchvision.datasets.FashionMNIST(root='~/Datasets/FashionMNIST', train=False,
download=True, transform=transforms.ToTensor())
```

■ 通过 Dahodr 读取小批量数据样本

```
batch_size = 256
train_iter = torch.utils.data.DataLoader(mnist_train, batch_size=batch_size, shuffle=True,
num_workers=num_workers)
test_iter = torch.utils.data.DataLoader(mnist_test, batch_size=batch_size, shuffle=False,
num_workers=num_workers)
```



4.2 实验内容

一、Pytorch基本操作考察(平台课+专业课)

- 1. 使用 Tesr 初始化一个 1×3 的矩阵 M和一个 2×1 的矩阵 N, 对两矩阵进行减法操作(要求实现 三种不同的形式),给出结果并分析三种方式的不同(如果出现报错,分析报错的原因),同时 需要指出在计算过程中发生了什么
- 2. ① 利用 Tesr 创建两个大小分别 3×2 和 4×2 的随机数矩阵 P 和 Q,要求服从均值为0,标准 差0.01为的正态分布;② 对第二步得到的矩阵 Q 进行形状变换得到 Q 的转置 Q ;③ 对上述得到的矩阵 P和矩阵 Q 做矩阵乘法
- 3. 给定公式 $y_3 = y_1 + y_2 = x^2 + x^3$,且 x = 1。利用学习所得到的Tensor的相关知识,求 y_3 对x的梯度,即 $\frac{dy_3}{dx}$ 。

要求在计算过程中,在计算 x^3 时中断梯度的追踪,观察结果并进行原因分析提示,可使用 with torch.no_grad(),举例:

with torch.no_grad():



二、动手实现 logistic 回归(平台课+专业课)

- 1. 要求动手从0实现 logistic 回归(只借助Tensor和Numpy相关的库)在人工构造的数据集上进行训练和测试,并从loss以及训练集上的准确率等多个角度对结果进行分析(可借助nn.BCELoss或nn.BCEWithLogitsLoss作为损失函数,从零实现二元交叉熵为选作)
- 2. 利用 torch.nn 实现 logistic 回归在人工构造的数据集上进行训练和测试,并对结果进行分析, 并从loss以及训练集上的准确率等多个角度对结果进行分析

三、动手实现 softmax 回归(平台课+专业课)

- 1. 要求动手从0实现 softmax 回归(只借助Tensor和Numpy相关的库)在Fashion-MNIST数据集上进行训练和测试,并从loss、训练集以及测试集上的准确率等多个角度对结果进行分析(要求从零实现交叉熵损失函数)
- 2. 利用torch.nn实现 softmax 回归在Fashion-MNIST数据集上进行训练和测试,并从loss,训练集以及测试集上的准确率等多个角度对结果进行分析



桑基韬:

北京交通大学《深度学习》课程组成员

景丽萍: http://faculty.bjtu.edu.cn/8249/

http://faculty.bjtu.edu.cn/9129/

张淳杰: http://faculty.bjtu.edu.cn/9371/

万怀字: http://faculty.bjtu.edu.cn/8793/

滕 代: http://faculty.bjtu.edu.cn/8902/

原继东: http://faculty.bjtu.edu.cn/9076/

丛润民: http://faculty.bjtu.edu.cn/9374/

夏佳楠: http://faculty.bjtu.edu.cn/9430/

杨扩

许万茹

