курс «Глубокое обучение»

PyTorch

Александр Дьяконов

05 сентября 2022 года

План

Часть 1 – тензоры

Часть 2 – предобработка данных, нейросети

Pytorch

открытый фреймворк для построения и использования динамических графов вычислений и глубокого обучения

Есть альтернативы: TensorFlow, JAX, Caffe

Изначально разрабатывался Fecebook’s AI Research Lab (FAIR).
Вместе с функционалом Python удобен для экспериментов и разработки (минимум кода при максимуме возможностей)

Наиболее важные для DL возможности

автоматическое дифференцирование,
вычисления на базе многомерных матриц (тензоров) - очень похож на numpy,
поддержка динамических вычислительных графов (создаются при работе),
поддержка вычислений на GPU,
есть полезные модули (например, torchvision).

Про установку см. на официальном сайте https://pytorch.org/get-started/locally/

Проверка версии питона, пайторча и доступности видеокарты

```
import torch # заметьте, что не import pytorch
from platform import python_version
print(python_version()) # 3.8.8
print(torch.__version__) # 1.9.0
print (torch.cuda.is_available()) # True
```

```
3.8.8
1.9.0
True
```

COLAB - прикручиваем свой гуглдиск

```
from google.colab import drive

drive.mount("/content/gdrive", force_remount=True)

data_path = "/content/gdrive/My Drive/Colab Notebooks/name/"
train_ann_path = data_path + 'train.csv'

train_df = pd.read_csv(train_ann_path)
print(train_df.head())

# команды для bash пишутся с !
!ls /content/gdrive/My\ Drive/Colab\ Notebooks/name/
```

Часть 1 – Тензоры (torch.Tensor)

– аналоги многомерных массивов пакета numpy, только могут располагаться на GPU (или поддерживать вычисления на нескольких CPU), могут быть элементами вычислительного графа и поддерживать автоматическое дифференцирование (об этом позже).

Это фундаментальная структура данных в Pytorch (с помощью неё будут храниться и обрабатываться объекты: тексты, сигналы изображения и батчи - наборы объектов).

Могут в многомерном матричном виде хранить данные определённого типа.

Тензоры: создание (из списка)

```
x = torch.tensor([[1, 2, 3], [4, 5, 6]])

print(x, '\n',
      x.shape, '\n', # размер тензора
      x.dtype, '\n', # тип
      x.device, '\n', # где лежит
      x.type(), '\n', # тип
      x.dim(), '\n', # размерность
      x.size(), '\n', # размер;.shape и .size() одно и то же
      x.numel()) # тип тензора
```

```
tensor([[1, 2, 3],
        [4, 5, 6]])
 torch.Size([2, 3])
 torch.int64
 cpu
 torch.LongTensor
 2
 torch.Size([2, 3])
 6
```

Тензоры: создание

```
x = torch.cuda.FloatTensor(2, 3) # те тензоры были на CPU
print (x)
```

Тензоры: приведение типов

```
# приведение типов

x = torch.IntTensor([1, 2]).float()
print (x)

x = torch.IntTensor([1, 2]).to(torch.float64)
print (x)

x = torch.IntTensor([1, 2]) + 0.0 #
print (x)
```

Тензоры: создание

Во всех функциях создания тензоров (ниже) есть параметры dtype - тип элементов тензора и device - где размещать тензор.

```
x = torch.empty(3, 5) # пустая матрица (тензор)
tensor([[8.9082e-39, 5.9694e-39, 8.9082e-39, 1.0194e-38, 9.1837e-39],
        [4.6837e-39, 9.9184e-39, 9.0000e-39, 1.0561e-38, 1.0653e-38],
        [4.1327e-39, 8.9082e-39, 9.8265e-39, 9.4592e-39, 1.0561e-38]])

x = torch.ones(3, 5) # матрица из 1
tensor([[1., 1., 1., 1., 1.],
        [1., 1., 1., 1., 1.],
        [1., 1., 1., 1., 1.]])

x = torch.full((3, 5), 3.14, dtype=torch.float) # матрица из 3.14
```

Тензоры: создание

```
# единичная матрица (с единицами на главной диагонали)
x = torch.eye(3, 5)

# случайная матрица с элементами равномерно распределёнными на [0, 1]
torch.manual_seed(123)
x = torch.rand(3, 5)

# случайная матрица с нормально распределёнными элементами
torch.manual_seed(123)
x = torch.randn(3, 5)

# случайная матрица с числами от 2 до 4 (не включая)
torch.manual_seed(123)
x = torch.randint(2, 4, (3, 5))
```

Тензоры: создание

«равномерные» массивы

```
x = torch.arange(0, 10, 2) # аналог np.arange
```
```
tensor([0, 2, 4, 6, 8])
```

```
x = torch.linspace(0, 10, 3) # аналог np.linspace
```
```
tensor([ 0.,  5., 10.])
```

```
x = torch.logspace(0, 1, 3) # аналог np.logspace
```
```
tensor([ 1.0000,  3.1623, 10.0000])
```

сделать тензоры «по образцу» (использовать такой же тип и размеры)

```
torch.empty_like(x), torch.zeros_like(x), torch.ones_like(x)
```
```
(tensor([ 0.,  5., 10.]), tensor([0., 0., 0.]), tensor([1., 1., 1.]))
```

Тензоры: индексация

Индексация аналогичная принятой в питоне, в частрости в numpy: [start:end:step]

```
x = torch.randint(0, 10, (2, 5))

x[0], x[0, :], x[[0], :], x[:1, :]
```

```
(tensor([6, 5, 3, 9, 4]),
 tensor([6, 5, 3, 9, 4]),
 tensor([[6, 5, 3, 9, 4]]),
 tensor([[6, 5, 3, 9, 4]]))
```

```
x[:,[1]], x[:, 1], x[:, -4]
```

```
(tensor([[5],
         [1]]),
 tensor([5, 1]),
 tensor([5, 1]))
```

Тензоры: индексация

```
print (x[0, 0]) # это тензор 1x1
print (x[0, 0].item()) # а это уже отдельный элемент
```

```
tensor(6)
6
```

При сравнении возникают «логические тензоры»

Тензоры: как скопировать тензор

```
x = torch.tensor([[1, 2], [3, 4]])
# формально можно, например так
x2 = torch.empty_like(x).copy_(x)
x2
```

```
tensor([[1, 2],
        [3, 4]])
```

```
# но лучше так:
x2 = x.detach().clone()
x[0, 1] = 10
x, x2
```

```
(tensor([[ 1, 10],
         [ 3,  4]]),
 tensor([[1, 2],
         [3, 4]]))
```

В отличие от copy_() при использовании clone() через оригинал проносят градиенты, т.к. копия остаётся в графе вычислений

Тензоры: операции

транспонируем – не происходит копирования, используется та же память

```
xt = x.t()
x[0, 0] = 30
print ('t()\n', x, '\n', xt)
```

```
t()
 tensor([[30,  2],
         [ 3,  4]])
 tensor([[30,  3],
         [ 2,  4]])
```

Тензоры: операции

```
x = torch.tensor([[1, 2], [3, 4]])
y = torch.tensor([[2, 2], [2, 2]])

z = torch.stack((x, y)) # состыковка тензоров (по умолчанию dim=0)
print (z, '\n', z.shape)
```

```
tensor([[[1, 2],
         [3, 4]],

        [[2, 2],
         [2, 2]]])
 torch.Size([2, 2, 2])
```

```
x, y = z.unbind(dim=0) # разстыковка тензоров
print (x, '\n', y)
```

```
tensor([[1, 2],
        [3, 4]])
 tensor([[2, 2],
        [2, 2]])
```

Тензоры: конкатенация

```
# конкатенация по 0 и 1 размерностям
x = torch.tensor([[1, 2], [3, 4]])
y = torch.tensor([[2, 2], [2, 2]])
torch.cat([x, y], axis=1), torch.cat([x, y], axis=0)
```

```
(tensor([[1, 2, 2, 2],
         [3, 4, 2, 2]]),
 tensor([[1, 2],
         [3, 4],
         [2, 2],
         [2, 2]]))
```

Тензоры: дополнительные размерности

```
# создание фиктивной размерности - в какую позицию вставлять фиктивную
x.unsqueeze(dim=0).shape, x.unsqueeze(dim=1).shape, x.unsqueeze(dim=2).
shape
```

```
(torch.Size([1, 2, 2]), torch.Size([2, 1, 2]), torch.Size([2, 2, 1]))
```

```
# удаляем единичные размеры
torch.empty(3, 1, 2, 1).squeeze().shape
```

```
torch.Size([3, 2])
```

Тензоры: размеры

Можно менять «представление» тензора с помощью view, фактически это изменение размеров, но реально данные не перемещаются, pytorch просто запоминает, что тензор, заданный элементами, лежащими в определённой области памяти, имеет другрой размер.

View работает только на contiguous tensors

(которые «правильно» последовательно лежат в памяти)

При использовании view может выдаваться сообщение об ошибке – если нельзя использовать эту область памяти (можно тогда сделать предварительно .contiguous())

Reshape работает всегда

(старается выдать view, если не получается делает копию данных)

При reshape() тензор может копироваться!

Тензоры: view & reshape

```
x = torch.arange(4*10*2).view(4, 10, 2)
y = x.permute(2, 0, 1)

# View
print('смежность', x.is_contiguous())
print('вытягиваем', x.view(-1))
```

```
смежность True
вытягиваем tensor([ 0,  1,  ...
```

```
# Reshape
print('смежность', y.is_contiguous())
print('вытягиваем', y.view(-1))
```

```
ошибка view size is not compatible with input tensor's size and stride
```

```
print('решейпим', y.reshape(-1))
print('делаем смежным и решейпим', y.contiguous().view(-1))
```

```
решейпим tensor([ 0,  2,  4,  ...
делаем смежным и решейпим tensor([ 0,  2,  4,  ...
```

Тензоры: размеры

```
x = torch.arange(8)
x.view(4, 2), x.view(2, -1)
```

```
(tensor([[0, 1],
         [2, 3],
         [4, 5],
         [6, 7]]),
 tensor([[0, 1, 2, 3],
         [4, 5, 6, 7]]))
```

Здесь сам тензор не поменялся, т.к. не было присваивания x = x.view()

В Pytorch-е тензоры хранятся в формате [channel, height, width],
в других системах чаще [height, width, channel].

Тензоры: размеры

```
# как хранятся данные, где следующий элемент по каждой из разметностей
print (x, x.storage(), x.stride(), x.t().stride())
```

```
tensor([[0, 1],
        [2, 3],
        [4, 5],
        [6, 7]])  0
 1
 2
 3
 4
 5
 6
 7
[torch.LongStorage of size 8] (2, 1) (1, 2)
```

Тензоры: транспонирование

```
z = torch.rand(1, 2, 3, 4)
z = z.permute(0, 3, 1, 2) # NxHxWxC -> NxCxHxW
z.shape
```

```
torch.Size([1, 4, 2, 3])
```

```
# другие способы транспонирования:
x.transpose(0, 1), x.t(), x.t_()
```

```
(tensor([[0, 2, 4, 6],
         [1, 3, 5, 7]]),
 tensor([[0, 2, 4, 6],
         [1, 3, 5, 7]]),
 tensor([[0, 2, 4, 6],
         [1, 3, 5, 7]]))
```

```
# векторизация
x.flatten() # ещё вариант .view(-1)
```

```
tensor([0, 2, 4, 6, 1, 3, 5, 7])
```

Тензоры: операции

аналогичны операциям в numpy, большинство операций выполняются поэлементно.

Поддерживаются операции линейной алгебры, многие из которых взяты из библиотек Basic Linear Algebra Subprograms (BLAS) и Linear Algebra Package (LAPACK).

Полный список операций линейной алгебры:
https://pytorch.org/docs/stable/torch.html#blas-and-lapack-operations

Тензоры: inplace-операции

В inplace-операциях используется черта,
в этом случае операция выполняется на данном тензоре:

```
x = torch.tensor([[1, 2], [3, 4]])

# заполнение
x.fill_(3) # черта - признак выполнения на данном тензоре
# обнуление
x.zero_()
```

inplace-операции специально «запрятаны»,
так как при их использовании могут быть проблемы при распространении градиента

Тензоры: операции

```
x = torch.tensor([[1, 2], [3, 4]])
y = torch.tensor([[2, 2], [2, 2]])
v = torch.tensor([1, 2])
```

```
# сложение
print (x + y,
       x.add(y))

# черта означает inplace-операцию - меняется первый тензор:
x.add_(y)
```

```
# поэлементное умножение
x * y, x.mul(y), torch.mul(x, y)
```

Тензоры: операции

Матричное умножение можно сделать по-разному:

torch.matmul – операция определена над тензорами,

можно указывать размерность для умножения (см)

torch.mm – обычное матричное умножение, но без приведения размеров (broadcasting)

torch.bmm – матричное умножение с поддержкой батчей: (b×n×m)•(b×m×p)=b×n×p

```
# матричное умножение
x @ y, x.mm(y), x.matmul(y), torch.matmul(x, y)
```

```
(tensor([[ 6,  6],
         [14, 14]]),
 tensor([[ 6,  6],
         [14, 14]]),
 tensor([[ 6,  6],
         [14, 14]]),
 tensor([[ 6,  6],
         [14, 14]]))
```

Тензоры: операции

```
x = torch.tensor([[1, 2], [3, 4]])
y = torch.tensor([[2, 2], [2, 2]])
v = torch.tensor([1, 2])

print (torch.dot(v, v), v.dot(v)) # скалярное умножение
torch.dot(x.view(-1), y.view(-1))
```

```
tensor(5) tensor(5)
tensor(20)
```

```
torch.mv(x, v), x.mv(v)  # умножение на вектор
```

```
(tensor([ 5, 11]), tensor([ 5, 11]))
```

Тензоры: операции

Всё не будем описывать

Есть специальные операции типа y + x*x …

Определитель, с.з., …

Решение уравнений, SVD, …

```
x.type(torch.DoubleTensor).log()
# приводим тип - иначе не сработает log
```

```
x.pow(2), x**2
```

```
(tensor([[ 1.,  4.],
         [ 9., 16.]]),
 tensor([[ 1.,  4.],
         [ 9., 16.]]))
```

Тензоры: статистики

Не забывать, item «выцепляет» элемент

```
x = torch.tensor([[1, 2], [3, 4]])
y = torch.tensor([[2, 2], [2, 2]])
```

```
# sum
torch.sum(x), x.sum(), x.sum().item(), x.sum(axis=0), x.sum(axis=1)
```

```
(tensor(10), tensor(10), 10, tensor([4, 6]), tensor([3, 7]))
```

```
x.sum(axis=1, keepdim=True) # keepdim - тензор остаётся двумерным
```

```
tensor([[3],
        [7]])
```

Тензоры: статистики

max возвращает и индексы

но есть также argmax

```
torch.max(x), x.max(), x.max().item(), x.max(axis=0), x.max(axis=1)
```

```
(tensor(4),
 tensor(4),
 4,
 torch.return_types.max(
 values=tensor([3, 4]),
 indices=tensor([1, 1])),
 torch.return_types.max(
 values=tensor([2, 4]),
 indices=tensor([1, 1])))
```

Тензоры: статистики

Есть стандарные: среднее, медиана, мода, std

```
x = torch.tensor([2,1,2,3,0,4,3])
x.topk(k=2), x.kthvalue(k=2)
```

```
(torch.return_types.topk(
 values=tensor([4, 3]),
 indices=tensor([5, 3])),
 torch.return_types.kthvalue(
 values=tensor(1),
 indices=tensor(1)))
```

```
x = torch.tensor([1., 2., 3.])
# сразу вычислить СКО / дисперсию и среденее
torch.std_mean(x), torch.var_mean(x)
```

```
 ((tensor(1.), tensor(2.)), (tensor(1.), tensor(2.)))
```

Тензоры: приведение размеров

- когда 2 размерности совпадают
- когда одна размерность равна 1

не надо вручную приводить размеры «размножая тензор»

```
x = torch.tensor([[1, 2], [3, 4]])
y = torch.tensor([10, 20])

x + y
```

```
tensor([[11, 22],
        [13, 24]])
```

Тензоры: приведение размеров

```
x = torch.tensor([[1, 2]])
y = torch.tensor([[0], [3]])
print (x, x.shape)
print (y, y.shape)
z = x + y
print (z, z.shape)
```

```
tensor([[1, 2]]) torch.Size([1, 2])
tensor([[0],
        [3]]) torch.Size([2, 1])
tensor([[1, 2],
        [4, 5]]) torch.Size([2, 2])
```

Тензоры: связь с Numpy

При переводе в numpy необходимо, чтобы тензор находился в CPU, а не на GPU.

```
x = torch.tensor([[1, 2], [3, 4]])
x.numpy()
```

```
array([[1, 2],
       [3, 4]], dtype=int64)
```

```
# из numpy.array в pytorch-тензор
torch.from_numpy(np.ones((2, 2)))
```

```
tensor([[1., 1.],
        [1., 1.]], dtype=torch.float64)
```

Тензоры: сохранение и загрузка

```
# сохранение и загрузка тензоров
torch.save(x, 'x-file')
x2 = torch.load("x-file")
x2
```

```
mydict = {'x': x, 'y': y}
torch.save(mydict, 'mydict')
mydict2 = torch.load('mydict')
mydict2
```

```
{'x': tensor([1., 2., 3.]),
 'y': tensor([[ 3.,  0.],
              [ 3., 12.]], requires_grad=True)}
```

GPU

Тензоры и вычислительные графы (нейросети) могут находиться как на CPU, так и на GPU (ещё на TPU).

Переменные и модели на разных устройствах не видят друг друга!

Поэтому их надо перенести на один вычислитель.

На GPU вычисления производятся существенно быстрее из-за параллелизма.

Такие записи эквивалентны:

```
device="cuda"
device=torch.device("cuda")
device="cuda:0"
device=torch.device("cuda:0")
```

```
x.cuda()
x.cpu()
x.is_cuda
z.to("cpu", torch.double)
```

GPU

```
# самая популярная конструкция, определяющая
device = torch.device("cuda:0" if torch.cuda.is_available() else "cpu")
m.to(device) # перенос на доступное устройство
```

```
x = torch.randn(5000, 5000)

# CPU
_ = torch.matmul(x, x)
```

```
CPU time: 0.77800s
```

```
# 2GPU
x = x.to("cuda:0")
```

```
CPU2GPU time: 0.09263s
```

```
# GPU
x = x + 0.0 # просто первая операция
_ = torch.matmul(x, x)
```

```
GPU time: 0.00803s
```

Инициализация генератора псевдослучайных чисел

```
def set_seed(seed):
    np.random.seed(seed)
    torch.manual_seed(seed)
    if torch.cuda.is_available(): # для GPU отдельный seed
        torch.cuda.manual_seed(seed)
        torch.cuda.manual_seed_all(seed)

set_seed(42)

# есть стохастические операции на GPU
# сделаем их детерминированными для воспроизводимости
torch.backends.cudnn.determinstic = True
torch.backends.cudnn.benchmark = False
```

Авто дифференцирование (AutoGrad)

Сначала приведём пример автоматического дифференцирования,
мы зададим функцию $y=\sin(x)\cdot(\sin^2(x)+\cos^2(x)$,
а Pytorch автоматически вычислит её производную

backward – функция «обратного прохода»,
именно при её вызове автоматически считаются производные по всем переменным,
у которых requires_grad=True

inpace-операции не работают в графе

Авто дифференцирование (AutoGrad)

```
from torch.autograd import Variable

x = torch.linspace(-2, 2, 101, dtype=torch.float32, requires_grad=True)
# x = Variable(x, requires_grad=True) # можно ли проще? - да!
y = torch.sin(x) * (torch.sin(x) ** 2 + torch.cos(x) **2)
# здесь это прямой проход
# дальще часто будем определять класс с методом y.forward()
y.sum().backward() # превращаем в число
                   # (только от таких фукнций берётся градиент)
g = x.grad # взятие производных в каждой точке
```

```
x = torch.linspace(-2, 2, 3, dtype=torch.float32)
# над целочисленными тензорами нельзя взять производную
x.requires_grad_() # как указать, что хотим вычислять производную
x
```

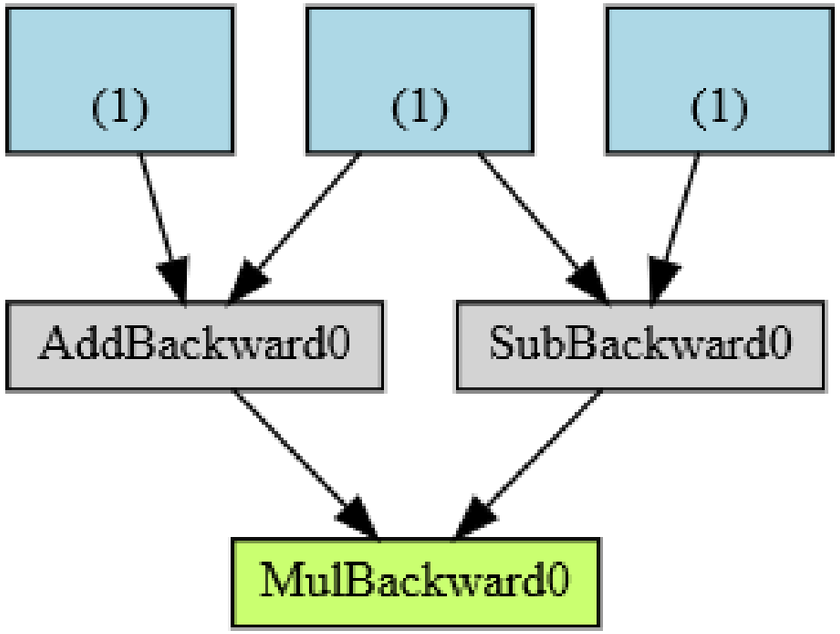
```
tensor([-2.,  0.,  2.], requires_grad=True)
```

```
import torch
from torch.autograd import Variable

#x = Variable(torch.Tensor([1]), requires_grad=True)
#y = Variable(torch.Tensor([2]), requires_grad=True)
#z = Variable(torch.Tensor([3]), requires_grad=True)

x = torch.tensor([1.], requires_grad=True)
y = torch.tensor([2.], requires_grad=True)
z = torch.tensor([3.], requires_grad=True)

f = (x + y) * (y - z)

f.backward()
x.grad, y.grad, z.grad
```

```
from torchviz import make_dot
make_dot(f)
```

Авто дифференцирование (AutoGrad)

Граф вычислений



Авто дифференцирование (AutoGrad)

Если устраняем вычисления градиентов - считается быстрее

```
f = (x + y) * (y - z)
z = f.detach()
print (f.requires_grad, z.requires_grad)

with torch.no_grad(): # когда просто нужен прямой проход -
                      # и не надо считать градиенты
    f = (x + y) * (y - z)
print (f.requires_grad)
```

```
True False
False
```

Авто дифференцирование (AutoGrad)

```
x = torch.Tensor([1, 2, 3])
w = torch.tensor([1., 1, 1], requires_grad=True)
z = w @ x
z.backward()
print(x.grad, # по этому не указывали возможность взятия градиента
      w.grad, #  должен выводиться x
      sep='\n')
```

```
None
tensor([1., 2., 3.])
```

```
z = w @ x
z.backward()
print(x.grad,
      w.grad, # идёт накопление!!!
      sep='\n')
```

```
None
tensor([2., 4., 6.])
```

Авто дифференцирование (AutoGrad)

```
with torch.no_grad(): # нет накопления
    z = w @ x
    # z.backward()
print(x.grad, w.grad, sep='\n')

w.grad.data.zero_() # а так - совсем обнулить
z = w @ x
z.backward()
print(x.grad, w.grad, sep='\n')
```

```
None
tensor([2., 4., 6.])
None
tensor([1., 2., 3.])
```

```
# w.numpy() - будет ошибка
w.detach().numpy() # создаётся копия, которую можно в np -
 у неё requires_grad=False
```

```
array([1., 1., 1.], dtype=float32)
```

Авто дифференцирование (AutoGrad)

```
# Иллюстрация взятия градиента -  с detach

x = torch.tensor([2.], requires_grad=True)

y = x * x
y.detach_() # добавили
z = x * y
# а тут не сработает
z.backward()

print(x.grad) # (2*2*x)' = 4
```

```
tensor([4.])
```

```
# динамический граф вычислений в цикле
x = torch.tensor([[1, 2], [3, 4]], requires_grad=True, dtype=torch.float32)
x0 = x
for _ in range(2):
    x = x * x

z = x.mean() # здесь будет 1/4 !!!
z.backward()
print(x, '\n', x.grad)
print(x0, '\n', x0.grad) # градиент лежит здесь!!!
# поскольку x превратился во внутреннюю вершину графа вычислений
```

```
tensor([[  1.,  16.],
        [ 81., 256.]], grad_fn=<MulBackward0>)
 None
tensor([[1., 2.],
        [3., 4.]], requires_grad=True)
 tensor([[ 1.,  8.],
        [27., 64.]])
<ipython-input-123-7397ba33abd6>:11: UserWarning: The .grad attribute of a Tensor that
is not a leaf Tensor is being accessed. ...
```

Часть 2 – предобработка данных, нейросети

TensorDataset / DataLoader – организация подачи данных в модель

TensorDataset – для представления датасета.
Часто приходится определять свой датасет, наследуя этот класс.

DataLoader – подаёт батчами данные, позволяется итерироваться по датасету, автоматически формируя батчи (и делая некоторые сопутствующие действия).

В DataLoder может передаваться сэмплер.

```
from torch.utils.data import TensorDataset
import numpy as np
from torch.utils.data import DataLoader
```

```
x = torch.from_numpy(np.vstack([np.arange(10, dtype='float32'),
                                np.ones(10, dtype='float32')]).T)
y = torch.from_numpy(np.arange(10,dtype='float32')[:, np.newaxis] ** 2)

train_ds = TensorDataset(x, y)
train_dl = DataLoader(train_ds, batch_size=4, shuffle=True)

for xb, yb in train_dl:
    print(xb)
    print(yb)
```

```
tensor([[3., 1.],
        [9., 1.],
        [7., 1.],
        [5., 1.]])
tensor([[ 9.],
        [81.],
        [49.],
        [25.]])
tensor([[1., 1.],
        [8., 1.],
        [6., 1.],
        [4., 1.]])
tensor([[ 1.],
        [64.],
        [36.],
        [16.]])
tensor([[2., 1.],
        [0., 1.]])
tensor([[4.],
        [0.]])
```

Загрузка с трансформациями

```
from torchvision import datasets

train_loader = torch.utils.data.DataLoader(
    datasets.MNIST('../data', train=True, download=True,
                   transform=transforms.Compose([
                       transforms.ColorJitter(brightness=(0.6, 1),
                                              contrast=(0.8, 1)),
                       transforms.RandomRotation((-15, 15)),
                       # перевод в тензор + нормировка на отрезок
                       transforms.ToTensor(),
                       transforms.Normalize((0.1307,), (0.3081,))
                   ])),
    batch_size=64, shuffle=True, num_workers=8, pin_memory=True)
```

с num_workers лучше поэкспериментировать!

Это число подпроцессов для загрузки данных.

Чаще pin_memory=True если используем GPU. Предварительно копирует данные на GPU.

Загрузка с трансформациями

Трансформации можно и нужно делать разные для обучения и теста

И тест не перемешиваем

```
trainset = torchvision.datasets.CIFAR10(root='./data', train=True,
                                        download=True, transform=transform)
testset = torchvision.datasets.CIFAR10(root='./data', train=False,
                                       download=True, transform=transform)
```

Своя трансформация

```
class Noise():
    """Adds gaussian noise to a tensor.
    """
    def __init__(self, mean, stddev):
        self.mean = mean
        self.stddev = stddev

    def __call__(self, tensor):
        noise = torch.zeros_like(tensor).normal_(self.mean, self.stddev)
        return tensor.add_(noise)

    def __repr__(self):
        repr = f"{self.__class__.__name__   }(mean={self.mean},
                                               sttdev={self.stddev})"
        return repr
```

Создание своего датасета

```
class CustomTextDataset(Dataset):
    '''
    Simple Dataset initializes with X and y vectors
    '''
    def __init__(self,X,y=None):
        self.data = list(zip(X,y))
        # Sort by length of first element in tuple
        self.data = sorted(self.data, key=lambda x: len(x[0]))

    def __len__(self):
        # raise NotImplementedError
        return len(self.data)

    def __getitem__(self, idx):
        # raise NotImplementedError
        return self.data[idx]
```

Модуль nn

Простейший линейный слой

```
from torch import nn
model = nn.Linear(in_features=2,
                  out_features=1,
                  bias=True)
print(model.weight)
print(model.bias)
list(model.parameters())
```

```
Parameter containing:
tensor([[-0.0243, -0.1254]], requires_grad=True)
Parameter containing:
tensor([-0.4057], requires_grad=True)
[Parameter containing:
 tensor([[-0.0243, -0.1254]], requires_grad=True),
 Parameter containing:
tensor([-0.4057], requires_grad=True)]
```

Модуль nn: простейшее задание нейронной сети

```
# через nn.Sequential
net = nn.Sequential(nn.Linear(10, 5),
                    nn.ReLU(),
                    nn.Linear(5, 2))
```

```
# через nn.Sequential, но с удобными именами
from collections import OrderedDict
net1 = nn.Sequential(OrderedDict([('hidden_linear', nn.Linear(10, 5)),
                                  ('hidden_activation', nn.ReLU()),
                                  ('output', nn.Linear(5, 2))]))

X = torch.rand(3, 10)
net(X)
```

```
tensor([[-0.2359,  0.1572],
        [-0.0946,  0.0312],
        [-0.2290,  0.0459]], grad_fn=<AddmmBackward>)
```

Модуль nn: простейшее задание нейронной сети

```
import torch.nn.functional as F

class MLP(nn.Module):
    def __init__(self):
        # инициализация параметров
        # обращение к инициализации родителя
        super().__init__() # super(MLP, self).__init__()
        self.hidden = nn.Linear(10, 5)  # Hidden layer
        self.out = nn.Linear(5, 2)  # Output layer

    def forward(self, X):
        # как обрабатываются данные и получается ответ
        return self.out(F.relu(self.hidden(X)))
```

наследуя от nn.Module и прописывая __init__ и forward

Модуль nn: простейшее задание нейронной сети

```
class NNN(torch.nn.Module):
    def __init__(self):
        super(NNN, self).__init__()

        self.layers = torch.nn.Sequential()
        self.layers.add_module('lin1', torch.nn.Linear(10, 5))
        self.layers.add_module('relu1', torch.nn.ReLU())
        self.layers.add_module('lin2', torch.nn.Linear(5, 2))

    def forward(self, input):
        return self.layers(input)
```

присоединение модулей с помощью .add_module

Модуль nn: простейшее задание нейронной сети

forward – главная ф-ия определяет прямой проход и, собственно, функционирование сети

(обратный проход не прописывается отдельным методом)

Там может быть что угодно

- **и на низком уровне**
- **и композиция других модулей**

Но когда мы делаем прямой проход, то явно не вызываем метод forward,
а используем имя НС: net(X)

(т.к. до и после вызова неявно ещё кое-что выполняется, ex: _forward_pre_hooks)

Модуль nn: простейшее задание нейронной сети

```
net
Sequential(
  (0): Linear(in_features=10, out_features=5, bias=True)
  (1): ReLU()
  (2): Linear(in_features=5, out_features=2, bias=True)
)
net2
MLP(
  (hidden): Linear(in_features=10, out_features=5, bias=True)
  (out): Linear(in_features=5, out_features=2, bias=True)
)
net3
NNN(
  (layers): Sequential(
    (lin1): Linear(in_features=10, out_features=5, bias=True)
    (relu1): ReLU()
    (lin2): Linear(in_features=5, out_features=2, bias=True)
  ) )
```

Модуль nn: доступ к параметрам НС

```
net[0], net2.hidden, net3.layers.relu1
```

```
(Linear(in_features=10, out_features=5, bias=True),
 Linear(in_features=10, out_features=5, bias=True),
 ReLU())
```

```
net.state_dict() # все параметры сети
```

```
OrderedDict([('0.weight',
              tensor([[-0.1661, -0.1646, -0.148,  0.2944,  0.079,  0.178],
                      [ 0.0149,  0.2513,  0.094, -0.3056, -0.097, -0.160],
                      [-0.1832, -0.0631,  0.015, -0.0190, -0.276, -0.036],
                      [ 0.1317, -0.0984,  0.307, -0.1473, -0.066,  0.109],
                      [ 0.1706, -0.2755,  0.303, -0.1257, -0.241, -0.314]])),
             ('0.bias', tensor([ 0.1352, -0.032,  0.1371])),
             ('2.weight',
              tensor([[ 0.0051,  0.3829, -0.1443, -0.0035, -0.2843],
                      [ 0.2041, -0.2619,  0.3165,  0.3838, -0.1594]])),
             ('2.bias', tensor([-0.2393,  0.0215]))])
```

Модуль nn: доступ к параметрам НС

```
net[0].bias.data, net2.hidden.bias.data
```

```
(tensor([-0.1051, -0.1820,  0.1631,  0.2234, -0.3068]),
 tensor([ 0.3139, -0.1659, -0.0243,  0.2580,  0.1043]))
```

```
net[0].bias.grad, net2.hidden.bias.grad
# не было обучения (ВР), поэтому None
```

```
(None, None)
```

```
# считаем число параметров
numel_list = [p.numel() for p in net.parameters() if p.requires_grad == True]
sum(numel_list), numel_list
```

```
(67, [50, 5, 10, 2])
```

Разделение параметров

```
shared = nn.Linear(8, 8)
net = nn.Sequential(nn.Linear(4, 8), nn.ReLU(),
                    shared, nn.ReLU(),
                    shared, nn.ReLU(),
                    nn.Linear(8, 1))
```

Свои модули (слои), задание модулей

```
# центрирующий слой без параметров

class CenteredLayer(nn.Module):
    def __init__(self):
        super().__init__()

    def forward(self, X):
        return X - X.mean()
```

Явное прописывание весов

```
class MyNetworkWithParams(nn.Module):
    def __init__(self,input_size, hidden_size, output_size):
        super(MyNetworkWithParams,self).__init__()
        # параметр автоматически регистрируется как параметр модуля
        self.layer1_weights = nn.Parameter(torch.randn(input_size,
                                                       hidden_size))
        self.layer1_bias = nn.Parameter(torch.randn(hidden_size))
        self.layer2_weights = nn.Parameter(torch.randn(hidden_size,
                                                       output_size))
        self.layer2_bias = nn.Parameter(torch.randn(output_size))

    def forward(self,x):
        h1 = torch.matmul(x,self.layer1_weights) + self.layer1_bias
        h1_act = torch.max(h1, torch.zeros(h1.size())) # ReLU
        output = torch.matmul(h1_act,self.layer2_weights) + self.layer2_bias
        return output

net = MyNetworkWithParams(32, 128, 10)
```

Списки слоёв

```
class MyNet(nn.Module):
    def __init__(self,n_hidden_layers):
        super(MyNet,self).__init__()
        self.n_hidden_layers = n_hidden_layers
        self.final_layer = nn.Linear(128, 10)
        self.act = nn.ReLU()
        self.hidden = []
        for i in range(n_hidden_layers):
            self.hidden.append(nn.Linear(128, 128))
        self.hidden = nn.ModuleList(self.hidden) # это важно!
    def forward(self,x):
        h = x
        for i in range(self.n_hidden_layers):
            h = self.hidden[i](h)
            h = self.act(h)
        out = self.final_layer(h)
        return out
```

Инициализация

Можно применять и по отдельным модулям

```
def init_normal(m):
    if type(m) == nn.Linear:
        nn.init.normal_(m.weight, mean=0, std=0.01)
        nn.init.zeros_(m.bias)

net.apply(init_normal)

net[0].weight.data[0], net[0].bias.data[0]
```

```
(tensor([-0.0137, -0.0014,  0.0093,  0.0124, -0.0141,  0.0154, -0.0074,
0.0009, 0.0061, -0.0013]),
 tensor(0.))
```

```
# способ, где копируются веса в нужное место
def init_custom(m):
    if type(m) == nn.Linear:
        rw = torch.randn(m.weight.data.size())
        m.weight.data.copy_(rw)
```

Модуль nn: как обучать сеть

```
def train_epoch(model, train_loader, criterion, optimizer):
    model.train()
    running_loss = 0.0
    for batch_idx, (data, target) in enumerate(train_loader):
        optimizer.zero_grad(set_to_none=True) # ~ model.zero_grad()
        # = 0 чтобы не накапливались
        data = data.to(device)
        target = target.to(device) # перенос на device

        outputs = model(data) # получили выход сетки
        loss = criterion(outputs, target) # посчитали для этого выхода лосс
        running_loss += loss.item()
        loss.backward() # вычислили градиенты loss по параметрам сети (w)
        optimizer.step() # сдалем шаг по антиградиенту - обновляем веса сети
    running_loss /= len(train_loader)

    return running_loss
```

Loss-функции

```
# [S] CrossEntropyLoss = Softmax + CrossEntropy
# тот же эффект - logSoftmax + NLLLoss
loss = nn.CrossEntropyLoss()
a = torch.tensor([[1.0, 2.0, 3.0]])
y = torch.tensor([1])

print (a, y, loss(a, y))
```

Своя Loss-функция

```
class CustomNLLLoss(nn.Module):
    def __init__(self):
        super().__init__()
    def forward(self, x, y):
        # x should be output from LogSoftmax Layer
        log_prob = -1.0 * x
        # Get log_prob based on y class_index as loss=-mean(ylogp)
        loss = log_prob.gather(1, y.unsqueeze(1))
        loss = loss.mean()
        return loss

criterion = CustomNLLLoss() # nn.NLLLoss()
CustomNLLLossClass = criterion(preds,y)
```

Темп обучения, программы изменения темпов

```
# свой темп для каждого слоя

from torch import optim

optim.SGD([
    {'params': model.features.parameters()},
    {'params': model.classifier.parameters(), 'lr': 1e-3}
    ], lr=1e-2, momentum=0.9)
```

Темп обучения, программы изменения темпов

```
from torch.optim.lr_scheduler import StepLR,
                                     ReduceLROnPlateau, CosineAnnealingLR


# сообщаем параметры оптимизатору!
optimizer = optim.SGD(net.parameters(), lr)
# сообщаем оптимизатор "шедьюлеру"
scheduler_1 = ReduceLROnPlateau(optimizer, factor=0.1,
                                patience=1, threshold=0.1)
# умножаем на gamma через каждые step_size шагов
scheduler_2 = StepLR(optimizer, step_size=1, gamma=0.1)
# ....
   # шаг на эпоху должен быть один, сделаем его после валидации
    if not is_train:
        scheduler_1.step(running_loss / (i + 1))
        scheduler_2.step()
```

Свой оптимизатор

```
class OptimizerTemplate:

    def __init__(self, params, lr):
        self.params = list(params)
        self.lr = lr

    def zero_grad(self):
        ## Set gradients of all parameters to zero
        for p in self.params:
            if p.grad is not None:
                p.grad.detach_() # For second-order optimizers important
                p.grad.zero_()
```

дальше продолжение

```
    @torch.no_grad()
    def step(self):
        ## Apply update step to all parameters
        for p in self.params:
            if p.grad is None: # We skip parameters without any gradients
                continue
            self.update_param(p)

    def update_param(self, p):
        # To be implemented in optimizer-specific classes
        raise NotImplementedError
```

```
class SGD(OptimizerTemplate):
    def __init__(self, params, lr):
        super().__init__(params, lr)
    def update_param(self, p):
        p_update = -self.lr * p.grad
        p.add_(p_update) # In-place => saves memory + doesn't create c. graph
```

Сохранение / загрузка сети

```
torch.save(model, "/tmp/model.pth")
model = torch.load("/tmp/model.pth")

torch.save(model.state_dict(), "/tmp/model.pth") # только параметры
model = MLP()
model.load_state_dict(torch.load("/tmp/model.pth")) # только параметры
model.to(device) # вот сейчас переносим
model.eval()
```

```
state = {
        'epoch': epoch + 1,
        'state_dict': net.state_dict(),
        'optimizer' : optimizer.state_dict()
        }

torch.save(state, './my_checkpoint.pth')
```

Своя функция активации

```
@torch.jit.script
def fused_gelu(x):
    return x * 0.5 * (1.0 + torch.erf(x / 1.41421))
```

```
class MySigmoid (nn.Module):

    def __init__(self):
        super().__init__()
        self.name = self.__class__.__name__
        self.config = {"name": self.name}

    def forward(self, x):
        return 1 / (1 + torch.exp(-x))
```

Будет в лекциях

свёртки

пулинг

падинг

dropout

нормализация

Transfer Learning

В torchvision.models есть готовые модели,
см. https://pytorch.org/vision/stable/models.html

```
# берём готовую модель
from torchvision import models
transfer_model = models.resnet34(pretrained=True)
transfer_model.eval() # чтобы нормально раюботали BN и DO
```

```
# заморозка слоёв
for name, param in model_cnn.named_parameters():
    if ("bn" not in name): # BN лучше не замораживать!
        param.requires_grad = False
```

Transfer Learning

```
from torchvision import models

resnet18 = models.resnet18(pretrained=True)

for parameter in resnet18.parameters(): # тут на самом деле веса,
                                        # но не как dict
    parameter.requires_grad = False

#заменяем слой
resnet18.fc = nn.Linear(512, 10)
```

не забыть трансформировать объект также,
как он был трансформирован при обучении сети

Ссылки

- https://github.com/MLWhiz/data_science_blogs/blob/master/pytorch_guide/Pytorch%20Guide.ipynb
- https://d2l.ai/
- https://atcold.github.io/pytorch-Deep-Learning/
- семинары OzonMasters
- https://habr.com/ru/post/334380/
- https://github.com/andriygav/MachineLearningSeminars/
- https://uvadlc-notebooks.readthedocs.io/en/latest/index.html
- книга Joe Papa «PyTorch Pocket Reference» 2021, https://github.com/joe-papa/pytorch-book
- https://github.com/vahidk/EffectivePyTorch