



动手学深度学习

0.6

MXNet Community

2018 年 04 月 13 日

目录

1 前言	3
1.1 为什么要做这个项目	3
1.2 前言	6
1.3 主要符号一览	8
2 预备知识	11
2.1 机器学习简介	11
2.2 使用 NDArray 来处理数据	30
2.3 使用 autograd 来自动求导	35
3 深度学习模型基础	39
3.1 线性回归—从 0 开始	39
3.2 线性回归—使用 Gluon	48
3.3 多类逻辑回归—从 0 开始	51
3.4 多类逻辑回归—使用 Gluon	57
3.5 多层感知机—从 0 开始	59
3.6 多层感知机—使用 Gluon	63
3.7 欠拟合和过拟合	64
3.8 正则化—从 0 开始	74
3.9 正则化—使用 Gluon	79
3.10 丢弃法 (Dropout)—从 0 开始	82
3.11 丢弃法 (Dropout)—使用 Gluon	88
3.12 正向传播和反向传播	90
3.13 实战 Kaggle 比赛—使用 Gluon 预测房价和 K 折交叉验证	94

4 深度学习计算基础	109
4.1 模型构造	109
4.2 模型参数	115
4.3 自定义层	122
4.4 读取和存储	125
4.5 GPU 计算	128
5 卷积神经网络	135
5.1 卷积神经网络—从 0 开始	135
5.2 卷积神经网络—使用 Gluon	144
5.3 批量归一化—从 0 开始	146
5.4 批量归一化—使用 Gluon	152
5.5 深度卷积神经网络和 AlexNet	154
5.6 VGG: 使用重复元素的非常深的网络	161
5.7 网络中的网络	163
5.8 更深的卷积神经网络: GoogLeNet	166
5.9 ResNet: 深度残差网络	172
5.10 DenseNet: 稠密连接的卷积神经网络	177
6 循环神经网络	183
6.1 循环神经网络—从 0 开始	183
6.2 通过时间反向传播	203
6.3 门控循环单元 (GRU)—从 0 开始	207
6.4 长短期记忆 (LSTM)—从 0 开始	214
6.5 循环神经网络—使用 Gluon	221
7 优化算法	231
7.1 优化算法概述	231
7.2 梯度下降和随机梯度下降——从零开始	236
7.3 梯度下降和随机梯度下降——使用 Gluon	246
7.4 动量法——从零开始	250
7.5 动量法——使用 Gluon	257
7.6 Adagrad——从零开始	260
7.7 Adagrad——使用 Gluon	264
7.8 RMSProp——从零开始	266
7.9 RMSProp——使用 Gluon	271
7.10 Adadelta——从零开始	273
7.11 Adadelta——使用 Gluon	276

7.12 Adam——从零开始	278
7.13 Adam——使用 Gluon	283
8 高性能计算	287
8.1 命令式和符号式混合计算	287
8.2 惰性计算	293
8.3 自动并行	300
8.4 多 GPU 训练模型——从零开始	304
8.5 多 GPU 训练模型——使用 Gluon	311
9 计算机视觉	317
9.1 图片增广	317
9.2 Fine-tuning: 通过微调来迁移学习	329
9.3 使用卷积神经网络的物体检测	338
9.4 SSD —使用 Gluon	350
9.5 YOLO —使用 Gluon	371
9.6 语义分割: FCN	383
9.7 样式迁移	399
9.8 实战 Kaggle 比赛——使用 Gluon 对原始图像文件分类 (CIFAR-10)	411
9.9 实战 Kaggle 比赛——使用 Gluon 识别 120 种狗 (ImageNet Dogs)	422
10 自然语言处理	435
10.1 词向量—word2vec	435
10.2 词向量—GloVe 和 fastText	441
10.3 使用预训练的词向量	445
10.4 编码器—解码器 (seq2seq) 和注意力机制	451
10.5 神经机器翻译	455
11 附录	467
11.1 安装和使用	467
11.2 GPU 购买指南	475
11.3 在 AWS 上运行教程	480
11.4 数学基础	490

这是一个深度学习的教学项目。我们将使用 Apache MXNet (incubating) 的最新 gluon 接口来演示如何从 0 开始实现深度学习的各个算法。我们的将利用 Jupyter notebook 能将文档, 代码, 公式和图形统一在一起的优势, 提供一个交互式的学习体验。这个项目可以作为一本书, 上课用的材料, 现场演示的案例, 和一个可以尽情拷贝的代码库。据我们所知, 目前并没有哪个项目能既覆盖全面深度学习, 又提供交互式的可执行代码。我们将尝试弥补这个空白。

- 第一季十九课视频汇总
- 可打印的 PDF 版本[在这里](#)
- 课程源代码在[Github](#) (亲, 给个好评加颗星)
- 请使用 <http://discuss.gluon.ai/> 来进行讨论

1.1 为什么要做这个项目

两年前我们开始了 MXNet 这个项目，有一件事情一直困扰我们：每当 MXNet 发布新特性的时
候，总会收到“做啥新东西，赶紧去更新文档”的留言。我们曾一度都很费解，文档明明很多啊，比
我们以前所有做的项目都好。而且你看隔壁家轮子，都没文档，大家照样也不是用的很嗨。

后来有一天，Zack 问了这样一个问题：假设回到你刚开始学机器学习的时候，那么你需要什么样的
文档？

我是大二开始接触机器学习。那时候并没有太多很好资料，抱着晦涩的翻译版《The Elements of
Statistical Learning》读了大半年仍是懵懵懂懂。后来 08 年的时候又啃了好几个月《Pattern
Recognition And Machine Learning》，被贝叶斯那一套绕得云里雾里。10 年去港科大的时候
James 问我，你最熟悉的模型是哪个？使劲想了想，竟然答不出来。

虽然在我认识的人里，好些人能够读一篇论文或者听一个报告后就能问出很好的问题，然后就基本
弄懂了。但我在这个上笨很多。读过的论文就像喝过的水，第二天就不记得了。一定是需要静下心来，
从头到尾实现一篇，跑上几个数据，调些参数，才能心安地觉得懂了。例如在港科大的两年读了
很多论文，但现在反过来看，仍然记得可能就是那两个老老实实动手实现过写过论文的模型了。即
使后来在机器学习这个方向又走了五年，学习任何新东西仍然是要靠动手。



纸上得来终觉浅，绝知此事要躬行

几年前我开始学习深度学习，在 MXNet 这个项目里也帮助和目睹了很多小伙伴上手深度学习。我发现也有很多小伙伴跟我一样，动手去实现、去调参、去跑实验才会真正成为专家（或者合格的炼丹师）。

虽然深度学习崛起前的年代，不写代码不跑实验可以做出很好的理论工作。但在深度学习领域，动手能力才是核心竞争力。例如就算我熟知卷积的三种写法，Relu 的十个变种，理解 BatchNorm 为什么能加速收敛，对 Imagenet 历届冠军的错误率随手拈来，能滔滔不绝说上几小时神经网络几度沉浮的恩怨史。但调不出参数，一切都是枉然。发论文被问你为啥跟 state-of-the-art 差老远，做产品被喷你这精度还不如我的便宜 100 倍的线性模型。



道理我都懂，但仍调不出这个参

在过去一年我在 AWS 工作中，很大一部分是在帮助 Amazon 内部团队和云上的用户来了解深度学习，并将其应用到他们的产品中。在今年夏威夷的 CVPR 上，遇到很多老朋友，例如地平线的凯哥，今日头条的李磊，第四范式的文渊和雨强，也认识了很多新朋友，例如 Momenta 旭东和商汤俊杰。我说 MXNet 有了新 Gluon 前端，可以一次性解决产品和研究的需求。大家纷纷表示，好啊好啊，来我们这里讲讲吧。而且特别强调说，我们这里新人很多，最好能讲讲入门知识。

所以很自然的会想，我们能不能帮助更多人。于是我们想开设一些系列课程，从深度学习入门到最新最前沿的算法，从 0 开始通过交互式的代码来讲解每个算法和概念。希望通过这个让大家既能了解算法的细节，又能调得出参数。既赢得了竞赛，又做的出产品。

为此我们做了（正在做）这五件事情：

1. Eric 和 Sheng 开发了 MXNet 的新前端 Gluon，详细可以参见 Eric 的这篇介绍。这个前端带来跟 Python 更一致的便利的编程环境，不管是 debug 还是在交互上，都比 TensorFlow 之类通过计算图编程的框架更适合学习深度学习。

2. Zack, Alex, Aston 和很多小伙伴一起写了一系列的 notebook 来讲解各个模型。Zack 从一个外行（他是专业音乐人）和老师（CMU 计算机教授）的角度，从 0 开始讲解和实现各个算法。
3. 我们同时将 notebook 翻译成中文。虽然翻译进度落后了英文版，但对每个翻译了教程都做了大量的改进（之后会 merge 回英文版）
4. 建立了中文社区discuss.gluon.ai方便大家来讨论和学习。
5. 我们联合[将门](#)在斗鱼上直播一系列课程，深入讲解各个教程。

在我们准备这个的时候，Andrew Ng 也开设了深度学习课程。从课程单上看非常好，讲得特别细。而且 Andrew 讲东西一向特别清楚，所以这个课程必然是精品。但我们做的跟 Andrew 的主要有几个区别：

1. 我们不仅介绍深度学习模型，而且提供简单易懂的代码实现。我们不是通过幻灯片来讲解，而是通过解读代码，实际动手调参数和跑实验来学习。
2. 我们使用中文。不管是教材，直播，还是论坛。（虽然在美国呆了 5, 6 年了，事实上我仍然对一边听懂各式口音的英文一边理解内容很费力。）
3. Andrew 课目前免费版只能看视频，而我们不仅仅直播教学，而且提供练习题，提供大家交流的论坛，并鼓励大家在 github 上参与到课程的改进中来。希望能与大家有更近距离的交互。

从大出发点上我们跟 Andrew 一致，希望能够帮助小伙伴们快速掌握深度学习。这一次技术上的创新可能会持续辐射技术圈数年，希望小伙伴们能更快更好的参与到这一次热潮来。

@mli

1.2 前言

这个项目是我们尝试构建的一个有关深度学习的新型教育资源。我们的目标，是利用 Jupyter notebooks 的优势，将文字、图片、公式、以及（非常重要的）代码呈现在一起。如果这个尝试能够成功，其成果将会是一个极好的资源，它既是一本书、同时也是课程材料、现场教学的补充，甚至有剽窃价值的代码库（此处附上我们的“祝福”）。据我们所了解的，目前仅有很少的资源旨在教授（1）全方位有关现代机器学习的概念，或（2）一本引人入胜的教科书并搭配可运行的代码。相信这次尝试最终能够告诉我们，这种空白是否情有可原。

这些年机器学习社区和生态圈进入一个令人费解的状态。二十一世纪早期的时候虽然只有少数一些问题被攻克了，但当时我们自认为理解了这些模型运行的方式及原因（以及不少的坑）。对比现在，机器学习系统已经非常强大，但却留下一个巨大问题：为什么它们如此有效？

这个新世界提供了巨大的机会，同时也带来了浮躁的投机。现在研究预印本被标题党和肤浅的内容充斥，人工智能创业公司只需要几个演示就能获得巨大的估值，朋友圈也被不懂技术的营销人员写的小白文刷屏。这的确是个看似混乱、充斥着快钱和宽松标准的时代。

于是，我们精心打磨了这套深度学习教程项目。

1.2.1 教程的组织方式

目前我们使用下面这个方式来组织每个具体教程（除背景知识介绍教程）：

1. 引入一个（或者少数几个）新概念
2. 提供一个使用真实数据的完整样例

在这套教程中，我们会穿插介绍相应的背景知识。为了保证教程的流畅性，有些时候我们会将某个深度学习的模块视作一个黑箱。这种情况下，我们仅简要介绍该模块的基本作用，而将它的详细介绍放在稍后的篇章。举例来说，虽然深度学习需要使用某个特定的优化算法，但我们在一开始介绍某些深度学习方法时并不会对其中所使用的优化算法做具体展开，而是会在稍后的篇章里详细描述和讨论这些优化算法。这样一来，读者可以在不关心具体模块细节的情况下，用最短的时间掌握深度学习的主要框架和基本脉络。从业者也可快速了解自己需要使用的模型并简单粗暴地将教程里的代码直接应用在解决自己的实际问题中。

1.2.2 独特的学习体验

这套深度学习教程将为大家呈现以下独特的学习体验。

易用高效的 MXNet

我们将使用 `MXNet` 作为这套教程所使用的深度学习库，并重点介绍全新的高层抽象包 `gluon`。我们选用 `MXNet` 是因为它兼具易用和高效的优点。无论对研究者还是对工程师而言，无论是在科研机构还是在工业界，工具的易用与高效将从各个方面显著提升生产效率。

双轨学习法

在介绍大多数机器学习模型时，我们既会教授大家如何从零开始实现模型，也会教授大家如何使用高层抽象包 `gluon` 实现模型。从零开始实现模型有助大家深入理解深度学习底层设计。使用高层抽象包 `gluon` 将把大家从繁琐的模型模块设计与实现中解放出来。

通过动手来学习

许多教科书在介绍深度学习时，都极尽所能地呈现所有细节。例如 Chris Bishop 的经典教材，《[模式识别和机器学习](#)》，将每个课题都讲解得极为详细，以致于阅读至线性回归的一章就需要巨大的工作量。当我（Zack）首次接触机器学习时，便发现这种讲解方法并不适合作为一本入门读物。而多年后重读它时，我热爱它精确而缜密的讲解，但仍不认为这是一本初次学习时应该使用的教材。

我们坚信，学习深度学习的最好方式就是[动手实现深度学习模型](#)。

游戏之所以好玩，是因为游戏给玩家提供了及时反馈：提高属性立即就可以虐怪、打个怪立即就可以升经验值、捡个包裹立即就多了装备。学习之所以枯燥，是因为很多时候我们并没有在学习过程中获得及时反馈。

这套教程通过描述深度学习模型是如何一步步实现的，为大家提供了宝贵的动手实践的机会。因为教程里实现的代码都是可执行的，读者可以根据自己所学和思考课后问题运行或修改代码而得到及时的学习反馈。每个人可以通过及时反馈不断实现自我迭代，从而加深对深度学习的理解。

最后，英文中有句话叫做

“Get hands dirty.”

直译过来就是

“撸起袖子加油干。”

1.3 主要符号一览

以下列举了本教程中使用的主要符号。

1.3.1 数

x : 标量（整数或实数）

x : 向量

X : 矩阵

X : 张量

1.3.2 集合

\mathcal{X} : 集合

\mathbb{R} : 实数集合

\mathbb{R}^n : n 维的实数向量集合

$\mathbb{R}^{x \times y}$: $x \times y$ 维的实数矩阵集合

1.3.3 操作符

$(\cdot)^\top$: 向量或矩阵的转置

\odot : 按元素相乘

$|\mathcal{X}|$: 集合 \mathcal{X} 中元素个数

$\|\cdot\|_p$: L_p 范数

$\|\cdot\|$: L_2 范数

\sum : 连加

\prod : 连乘

1.3.4 函数

$f(\cdot)$: 函数

$\log(\cdot)$: 自然对数函数

$\exp(\cdot)$: 指数函数

1.3.5 导数和梯度

$\frac{dy}{dx}$: y 关于 x 的导数

$\frac{\partial y}{\partial x}$: y 关于 x 的偏导数

∇_y : y 关于 \cdot 的梯度

1.3.6 概率和统计

$\mathbb{P}(\cdot)$: 概率分布

$\cdot \sim \mathbb{P}$: 随机变量 \cdot 的概率分布是 \mathbb{P}

$\mathbb{P}(\cdot | \cdot)$: 条件概率分布

$\mathbb{E}(f(\cdot))$: 函数 $f(\cdot)$ 对 \cdot 的数学期望

1.3.7 复杂度

\mathcal{O} : 大 O 符号 (渐进符号)

预备知识

2.1 机器学习简介

本书作者跟广大程序员一样，在开始写作前需要来一杯咖啡。我们跳进车准备出发，Alex 掏出他的安卓喊一声“OK Google”唤醒语言助手，Mu 操着他的中式英语命令到“去蓝瓶咖啡店”。手机快速识别并显示出命令，同时判断我们需要导航，并调出地图应用，给出数条路线方案，每条方案均有预估的到达时间并自动选择最快的线路。好吧，这是一个虚构的例子，因为我们一般在办公室喝自己的手磨咖啡。但这个例子展示了在短短几秒钟里，我们跟数个机器学习模型进行了交互。

如果你从来没有使用过机器学习，你会想，“这不就是编程吗？”或者，“**机器学习（machine learning）到底是什么？**”首先，我们确实是使用编程语言来实现机器学习模型，我们跟计算机其他领域一样，使用同样的编程语言和硬件。但不是每个程序都涉及机器学习。对于第二个问题，精确定义机器学习就像定义什么是数学一样难，但我们试图在这章提供一些直观的解释。

2.1.1 一个例子

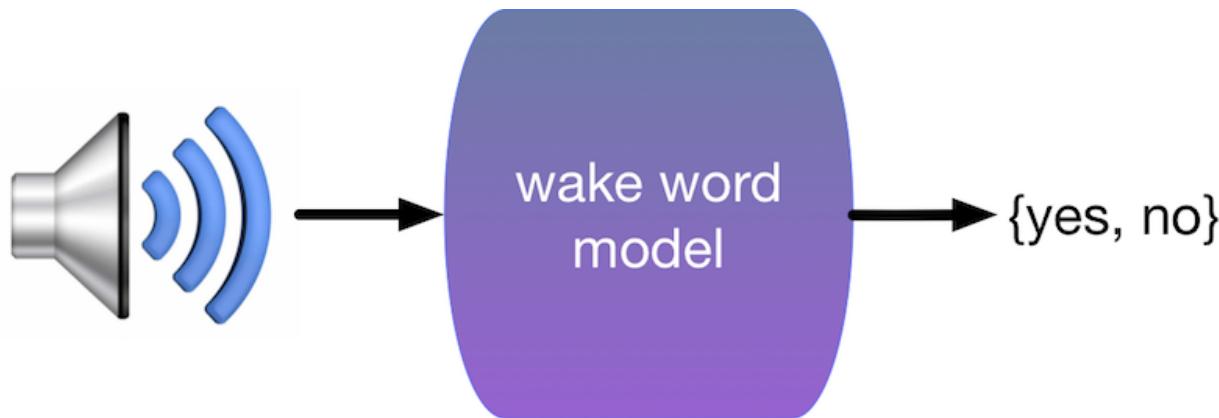
我们日常交互的大部分计算机程序，都可以使用最基本的命令来实现。当你把一个商品加进购物车时，你触发了电商的电子商务程序，把一个商品 ID 和你的用户 ID 插入一个叫做购物车的数据库表格中。你可以在没有见到任何真正客户前，用最基本的程序指令来实现这个功能。如果你发现可以这么做，那么这时就不需要使用机器学习。

对于机器学习科学家来说，幸运的是大部分应用没有那么简单。回到前面那个例子，想象下如何写

一个程序来回应唤醒词，例如“Okay, Google”，“Siri”，和“Alexa”。如果在一个只有你自己和代码编辑器的房间里，仅使用最基本的指令编写这个程序，你该怎么做？不妨思考一下……这个问题非常困难。你可能会想像下面的程序：

```
if input_command == 'Okay, Google':  
    run_voice_assistant()
```

但实际上，你能拿到的只有麦克风里采集到的原始语音信号，可能是每秒 44,000 个样本点。怎样的规则才能把这些样本点转成一个字符串呢？或者简单点，判断这些信号中是否包含唤醒词。



如果你被这个问题难住了，不用担心。这就是我们为什么需要机器学习。

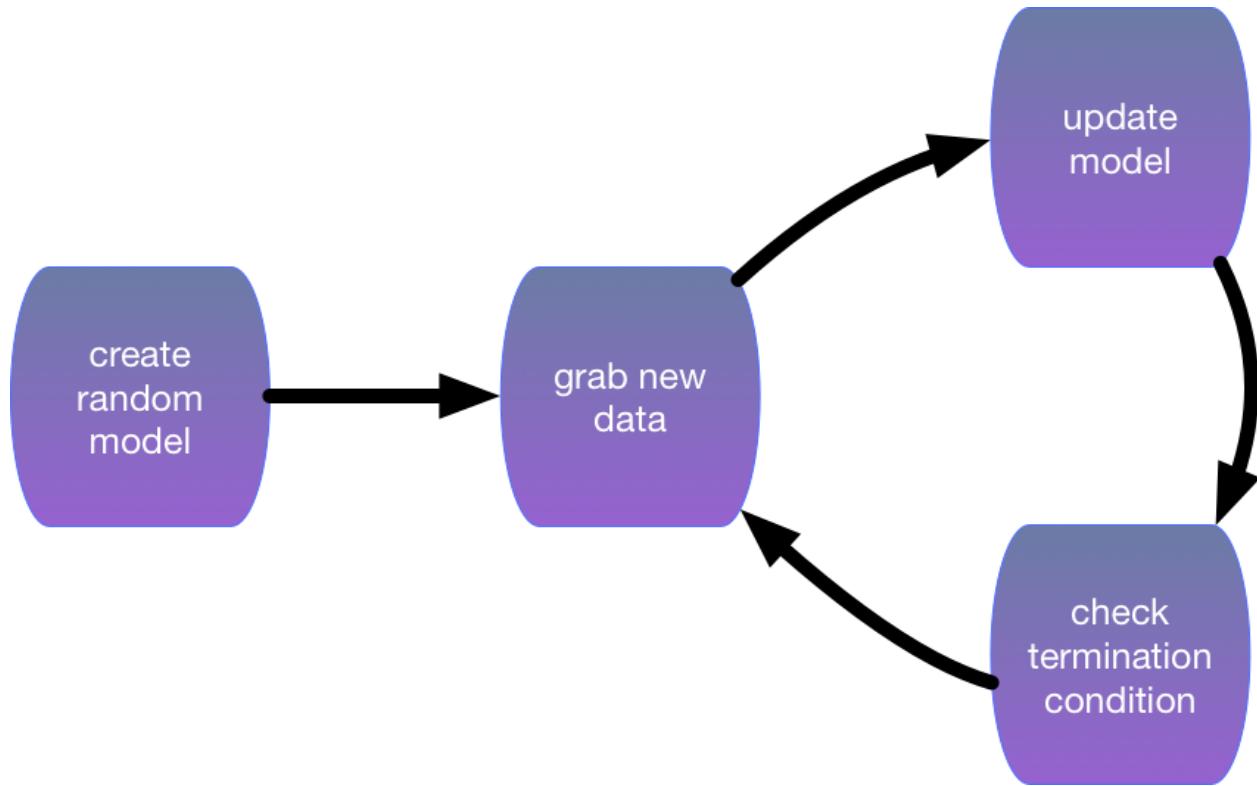
虽然我们不知道怎么告诉机器去把语音信号转成对应的字符串，但我们可以。换句话说，就算你不清楚怎么编写程序，好让机器识别出唤醒词“Alexa”，你自己完全能够识别出“Alexa”这个词。由此，我们可以收集一个巨大的**数据集（data set）**，里面包含了大量语音信号，以及每个语音型号**是否**对应我们需要的唤醒词。使用机器学习的解决方式，我们并非直接设计一个系统去**准确地**辨别唤醒词，而是写一个灵活的程序，并带有大量的**参数（parameters）**。通过调整这些参数，我们能够改变程序的行为。我们将这样的程序称为模型（models）。总体上看，我们的模型仅仅是一个机器，通过某种方式，将输入转换为输出。在上面的例子中，这个模型的**输入（input）**是一段语音信号，它的输出则是一个回答 {yes, no}，告诉我们这段语音信号是否包含了唤醒词。

如果我们选择了正确的模型，必然有一组参数设定，每当它听见“Alexa”时，都能触发 yes 的回答；也会有另一组参数，针对“Apricot”触发 yes。我们希望这个模型既可以辨别“Alexa”，也可以辨别“Apricot”，因为它们是类似的任务。不过，如果是本质上完全不同的输入和输出，比如输入图片，输出文本；或者输入英文，输出中文，这时我们则需要另一个的模型来完成这些转换。

这时候你大概能猜到了，如果我们随机地设定这些参数，模型可能无法辨别“Alexa”，“Apricot”，甚至任何英文单词。在而大多数的深度学习中，**学习（learning）** 就是指在**训练过程（training period）** 中更新模型的行为（通过调整参数）。

换言之，我们需要用数据训练机器学习模型，其过程通常如下：

1. 初始化一个几乎什么也不能做的模型;
2. 抓一些有标注的数据集（例如音频段落及其是否为唤醒词的标注）;
3. 修改模型使得它在抓取的数据集上能够更准确执行任务（例如使得它在判断这些抓取的音频段落是否为唤醒词上判断更准确）;
4. 重复以上步骤 2 和 3，直到模型看起来不错。



总而言之，我们并非直接去写一个唤醒词辨别器，而是一个程序，当提供一个巨大的有标注的数据集时，它能学习如何辨别唤醒词。你可以认为这种方式是利用数据编程。

如果给我们的机器学习系统提供足够多猫和狗的图片，我们可以“编写”一个喵星人辨别器：



如果是一只猫，辨别器会给出一个非常大的正数；如果是一只狗，会给出一个非常大的负数；如果

不能确定的话，数字则接近于零。这仅仅是一个机器学习应用的粗浅例子。

2.1.2 眼花缭乱的机器学习应用

机器学习背后的核心思想是，设计程序使得它可以在执行的时候提升它在某任务上的能力，而非直接编写程序的固定行为。机器学习包括多种问题的定义，提供很多不同的算法，能解决不同领域的各种问题。我们之前讲到的是一个讲监督学习（**supervised learning**）应用到语言识别的例子。

正因为机器学习提供多种工具，可以利用数据来解决简单规则无法或者难以解决的问题，它被广泛应用于搜索引擎、无人驾驶、机器翻译、医疗诊断、垃圾邮件过滤、玩游戏（国际象棋、围棋）、人脸识别、数据匹配、信用评级和给图片加滤镜等任务中。

虽然这些问题各式各样，但他们有着共同的模式，都可以使用机器学习模型解决。我们无法直接编程解决这些问题，但我们能够使用配合数据编程来解决。最常见的描述这些问题的方法是通过数学，但不像其他机器学习和神经网络的书那样，我们会主要关注真实数据和代码。下面我们来看点数据和代码。

2.1.3 用代码编程和用数据编程

这个例子灵感来自 Joel Grus 的一次 应聘面试。面试官让他写个程序来玩 Fizz Buzz。这是一个小孩子游戏。玩家从 1 数到 100，如果数字被 3 整除，那么喊' fizz'，如果被 5 整除就喊' buzz'，如果两个都满足就喊' fizzbuzz'，不然就直接说数字。这个游戏玩起来就像是：

1 2 fizz 4 buzz fizz 7 8 fizz buzz 11 fizz 13 14 fizzbuzz 16 …

传统的实现是这样的：

```
In [1]: res = []
for i in range(1, 101):
    if i % 15 == 0:
        res.append('fizzbuzz')
    elif i % 3 == 0:
        res.append('fizz')
    elif i % 5 == 0:
        res.append('buzz')
    else:
        res.append(str(i))
print(' '.join(res))
```

```

1 2 fizz 4 buzz fizz 7 8 fizz buzz 11 fizz 13 14 fizzbuzz 16 17 fizz 19 buzz fizz 22
→ 23 fizz buzz 26 fizz 28 29 fizzbuzz 31 32 fizz 34 buzz fizz 37 38 fizz buzz 41
→ fizz 43 44 fizzbuzz 46 47 fizz 49 buzz fizz 52 53 fizz buzz 56 fizz 58 59
→ fizzbuzz 61 62 fizz 64 buzz fizz 67 68 fizz buzz 71 fizz 73 74 fizzbuzz 76 77
→ fizz 79 buzz fizz 82 83 fizz buzz 86 fizz 88 89 fizzbuzz 91 92 fizz 94 buzz fizz
→ 97 98 fizz buzz

```

对于经验丰富的程序员来说这个太不够一颗赛艇了。所以 Joel 尝试用机器学习来实现这个。为了让程序能学，他需要准备下面这个数据集：

- 数据 X $[1, 2, 3, 4, \dots]$ 和标注 Y $['fizz', 'buzz', 'fizzbuzz', identity]$
- 训练数据，也就是系统输入输出的实例。例如 $[(2, 2), (6, fizz), (15, fizzbuzz), (23, 23), (40, buzz)]$
- 从输入数据中抽取的特征，例如 $x \rightarrow [(x \% 3), (x \% 5), (x \% 15)]$.

有了这些，Joel 利用 TensorFlow 写了一个分类器。对于不按常理出牌的 Joel，面试官一脸黑线。而且这个分类器不是总是对的。

显而易见，这么解决问题蠢爆了。为什么要用复杂和容易出错的东西替代几行 Python 呢？但是，很多情况下，这么一个简单的 Python 脚本并不存在，而一个三岁小孩就能完美地解决问题。这时候，机器学习就该上场了。

2.1.4 机器学习最简要素

针对识别唤醒语的任务，我们将语音片段和标注 (label) 放在一起组成数据集。接着我们训练一个机器学习模型，给定一段语音，预测它的标注。这种给定样例预测标注的方式，仅仅是机器学习的一种，称为**监督学习**。深度学习包含很多不同的方法，我们会在后面的章节讨论。成功的机器学习有四个要素：数据、转换数据的模型、衡量模型好坏的损失函数和一个调整模型权重来最小化损失函数的算法。

数据 (Data)

越多越好。事实上，数据是深度学习复兴的核心，因为复杂的非线性模型比其他机器学习需要更多的数据。数据的例子包括：

- **图片**：你的手机图片，里面可能包含猫、狗、恐龙、高中同学聚会或者昨天的晚饭；卫星照片；医疗图片例如超声、CT 扫描以及 MRI 等等。
- **文本**：邮件、高中作文、微博、新闻、医嘱、书籍、翻译语料库和微信聊天记录。

- **声音**: 发送给智能设备（比如 Amazon Echo, iPhone 或安卓智能机）的声控指令、有声书籍、电话记录、音乐录音，等等。
- **影像**: 电视节目和电影, Youtube 视频, 手机短视频, 家用监控, 多摄像头监控等等。
- **结构化数据**: Jupyter notebook (里面有文本, 图片和代码)、网页、电子病历、租车记录和电费账单。

模型 (Models)

通常, 我们拿到的数据和最终想要的结果相差甚远。例如, 想知道照片中的人是不是开心, 我们希望有一个模型, 能将成千上万的低级特征 (像素值), 转化为高度抽象的输出 (开心程度)。选择正确模型并不简单, 不同的模型适合不同的数据集。在这本书中, 我们会主要聚焦于深度神经网络模型。这些模型包含了自上而下联结的数据多层连续变换, 因此称之为**深度学习 (deep learning)**。在讨论深度神经网络之前, 我们也会讨论一些简单、浅显的模型。

损失函数 (Loss Functions)

我们需要对比模型的输出和真实值之间的误差。损失函数可以衡量输出结果对比真实数据的好坏。例如, 我们训练了一个基于图片预测病人心率的模型。如果模型预测某个病人的心率是 100bpm, 而实际上仅有 60bpm, 这时候, 我们就需要某个方法来提点一下这个的模型了。

类似的, 一个模型通过给电子邮件打分来预测是不是垃圾邮件, 我们同样需要某个方法判断模型的结果是否准确。典型的机器学习过程包括将损失函数最小化。通常, 模型包含很多参数。我们通过最小化损失函数来“学习”这些参数。可惜, 将损失降到最小, 并不能保证我们的模型在遇到 (未见过的) 测试数据时表现良好。由此, 我们需要跟踪两项数据:

- **训练误差 (training error)** : 这是模型在用于训练的数据集上的误差。类似于考试前我们在模拟试卷上拿到的分数。有一定的指向性, 但不一定保证真实考试分数。
- **测试误差 (test error)** : 这是模型在没见过的新数据上的误差, 可能会跟训练误差很不一样 (统计上称之为过拟合)。类似于考前模考次次拿高分, 但实际考起来却失误了。(笔者之一曾经做 GRE 真题时次次拿高分, 高兴之下背了一遍红宝书就真上阵考试了, 结果最终拿了一个刚刚够用的低分。后来意识到这是因为红宝书里包含了大量的真题。)

优化算法 (Optimization Algorithms)

最后, 我们需要算法来通盘考虑模型本身和损失函数, 对参数进行搜索, 从而逐渐最小化损失。最常见的神经网络优化使用梯度下降法作为优化算法。简单地说, 轻微地改动参数, 观察训练集的损失将如何移动。然后将参数向减小损失的方向调整。

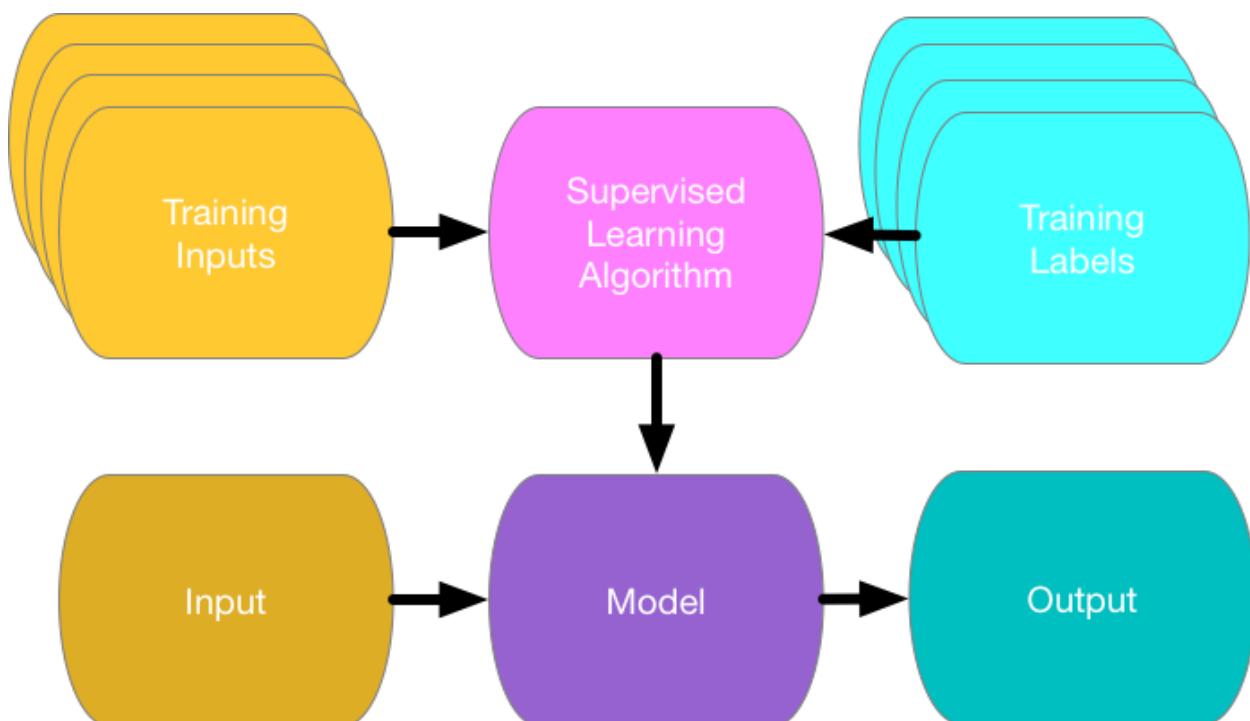
下面我们详细讨论一些不同的机器学习应用，以便理解我们具体会做什么。每个例子，我们都会介绍问题的解决方式，如训练方式、数据类型等等。这些内容仅仅是开胃小菜，并为大家提供一些共同的谈资。随着学习的推进，我们会介绍更多的类似问题。

2.1.5 监督学习 (Supervised Learning)

监督学习描述的任务是，当给定输入 x ，如何通过在有标注输入和输出的数据上训练模型而能够预测输出 y 。从统计角度来说，监督学习主要关注如何估计条件概率 $P(y|x)$ 。监督学习仅仅是机器学习的方法之一，在实际情景中却最为常用。部分原因，许多重要任务都可以描述为给定数据，预测结果。例如，给定一位患者的 CT 图像，预测该患者是否得癌症；给定英文句子，预测它的正确中文翻译；给定本月公司财报数据，预测下个月该公司股票价格。

“根据输入预测结果”，看上去简单，监督学习的形式却十分多样，其模型的选择也至关重要，数据类型、大小、输入和输出的体量都会产生影响。例如，针对序列型数据（文本字符串或时间序列数据）和固定长度的矢量表达，这两种不同的输入，会采用不同的模型。我们会在本书的前 9 章逐一介绍这些问题。

简单概括，学习过程看起来是这样的：在一大组数据中随机地选择样本输入，并获得其真实(ground-truth) 的标注 (**label**)；这些输入和标注（即期望的结果）构成了训练集 (**training set**)。我们把训练集放入一个监督学习算法 (**supervised learning algorithm**)。算法的输入是训练集，输出则是学得模型 (**learned model**)。基于这个学得模型，我们输入之前未见过的测试数据，并预测相应的标注。



回归分析 (Regression)

回归分析也许是监督学习里最简单的一类任务。在该项任务里，输入是任意离散或连续的、单一或多个的变量，而输出是连续的数值。例如我们可以把本月公司财报数据抽取出若干特征，如营收总额、支出总额以及是否有负面报道，利用回归分析预测下个月该公司股票价格。

一个更详细的例子，一个房屋的销售的数据集。构建一张表：每一行对应一幢房子；每一列对应一个属性，譬如面积、卧室数量、卫生间数量、与市中心的距离；我们将这个数据集里这样的一行，称作一个**特征向量 (feature vector)**，它所代表的对象（比如一幢房子），称作**样例 (example)**。

如果住在纽约或三藩这种大城市，你也不是某个知名科技公司 CEO，那么这个特征向量（面积、卧室数量、卫生间数量、与市中心的距离）可能是这样的 [100, 0, .5, 60]。如果住在匹兹堡，则可能是这样的 [3000, 4, 3, 10]。这些特征向量，是所有经典机器学习问题的关键。我们一般将一个特征向量标为 \mathbf{x}_i ，将所有特征向量的集合标为 X 。

一个问题是否应采用回归分析，取决于它的输出。比如你想预测一幢房子的合理的市场价格，并提供了类似的特征向量。它的目标市场价是一个**实数**。我们将单个目标（对应每一个特征向量代表的样例 \mathbf{x}_i 标为 y_i ，所有目标的集合为 y （对应所有样例的集合 X ）。当我们的目标是某个范围内的任意实数值时，这就是一个回归分析问题。模型的目标就是输出预测（在这个例子中，即价格的预测），且尽可能近似实际的目标值。我们将这些预测标为 \hat{y}_i ；如果这堆符号看起来费解，不用担心，在接下来的章节中我们会详细讲解。

许多实际问题都是充分描述的回归问题。比如预测观众给某部电影的打分；如果 2009 年时你设计出一个这样一个算法，Netflix 的**一百万大奖**就是你的了；预测病人会在医院停留的时间也是一个回归问题。一条经验就是，问题中如果包含“**多少？**”，这类问题一般是回归问题。“**这次手术需要几个小时？**”……回归分析。“**这张照片里有几只狗？**”……回归分析。不过，如果问题能够转化为“这是一个 吗？”，那这很有可能是一个分类，或者属于其余我们将会谈及的问题。

如果我们把模型预测的输出值和真实的输出值之间的差别定义为残差，常见的回归分析的损失函数包括训练数据的残差的平方和或者绝对值的和。机器学习的任务是找到一组模型参数使得损失函数最小化。我们会在之后的章节里详细介绍回归分析。

分类 (Classification)

回归分析能够很好地解答“**多少？**”的问题，但还有许多问题并不能套用这个模板。比如，银行手机 App 上的支票存入功能，用户用手机拍摄支票照片，然后，机器学习模型需要能够自动辨别照片中的文字。包括某些手写支票上龙飞凤舞的字体。这类的系统通常被称作光学字符识别 (OCR)，解决方法则是分类。较之回归分析，它的算法需要对离散集进行处理。

回归分析所关注的预测可以解答输出为**连续数值**的问题。当预测的输出是**离散的**类别时，这个监督学习任务就叫做分类。分类在我们日常生活中很常见。例如我们可以把本月公司财报数据抽取出若

干特征, 如营收总额、支出总额以及是否有负面报道, 利用分类预测下个月该公司的 CEO 是否会离职。在计算机视觉领域, 把一张图片识别成众多物品类别中的某一类, 例如猫、狗等。

在分类问题中, 我们的特征向量, 例如, 图片中的一个像素值, 然后, 预测它在一组可能值中所属的分类 (一般称作**类别 (class)**)。对于手写数字来说, 我们有数字 1~10 这 10 个类别, 最简单的分类问题莫过于二分类 (binary classification), 即仅有两个类别的分类问题。例如, 我们的数据集 X 是含有动物的图片, 标注 Y 是类别 {cat, dog}。在回归分析里, 输出是一个实数 \hat{y} 值。而在分类中, 我们构建一个**分类器 (classifier)**, 其最终的输出 \hat{y} 是预测的类别。

随着本书在技术上的逐渐深入, 我们会发现, 训练一个能够输出绝对分类的模型, 譬如“不是猫就是狗”, 是很困难的。简单一点的做法是, 我们使用概率描述它。例如, 针对一个样例 x , 模型会输出每一类标注 k 的一个概率 \hat{y}_k 。因为是概率, 其值必然为正, 且和为 1。换句话说, 总共有 K 个类别的分类问题, 我们只需要知道其中 $K - 1$ 个类别的概率, 自然就能知道剩下那个类别的概率。这个办法针对二分类问题尤其管用, 如果抛一枚不均匀的硬币有 0.6(60%) 的概率正面朝上, 那么, 反面朝上的概率就是 0.4(40%)。回到我们的喵汪分类, 一个分类器看到了一张图片, 输出图上的动物是猫的概率 $\text{Pr}(y = \text{cat} | x) = 0.9$ 。对于这个结果, 我们可以表述成, 分类器 90% 确信图片描绘了一只猫。预测所得的类别的概率大小, 仅仅是一个确信度的概念。我们会在后面的章节中进一步讨论有关确信度的问题。

多于两种可能类别的问题称为多分类。常见的例子有手写字符识别 [0, 1, 2, 3 ... 9, a, b, c, ...]。分类问题的损失函数称为**交叉熵 (cross-entropy)** 损失函数。可以在 MXNet Gluon 中[找到](#)。

请注意, 预测结果并不能左右最终的决策。比如, 你在院子里发现了这个萌萌的蘑菇:



假定我们训练了一个分类器, 输入图片, 判断图片上的蘑菇是否有毒。这个“是否有毒分类器”输出了 $\text{Pr}(y = \text{deathcap} | \text{image}) = 0.2$ 。换句话说, 这个分类器 80% 确信这个蘑菇不是入口即挂的毒鹅膏。但我们不会蠢到去吃它。这点口腹之欲不值得去冒 20% 挂掉的风险。不确定的风险远远超过了收益。数学上, 最最基本的, 我们需要算一下预期风险, 即, 把结果概率与相应的收益

(或损失) 相乘:

$$L(\text{action} \mid x) = \mathbf{E}_{y \sim p(y|x)}[\text{loss}(\text{action}, y)]$$

很走运: 正如任何真菌学家都会告诉我们的, 上图真的就是一个毒鹅膏。实际上, 分类问题可能比二分类、多分类、甚至多标签分类要复杂得多。例如, 分类问题的一个变体, **层次分类 (hierarchical classification)**。层次假设各个类别之间或多或少地存在某种关系。并非所有的错误都同等严重——错误地归入相近的类别, 比距离更远的类别要好得多。一个早期的例子来自卡尔·林奈, 他发明了沿用至今的物种分类法。

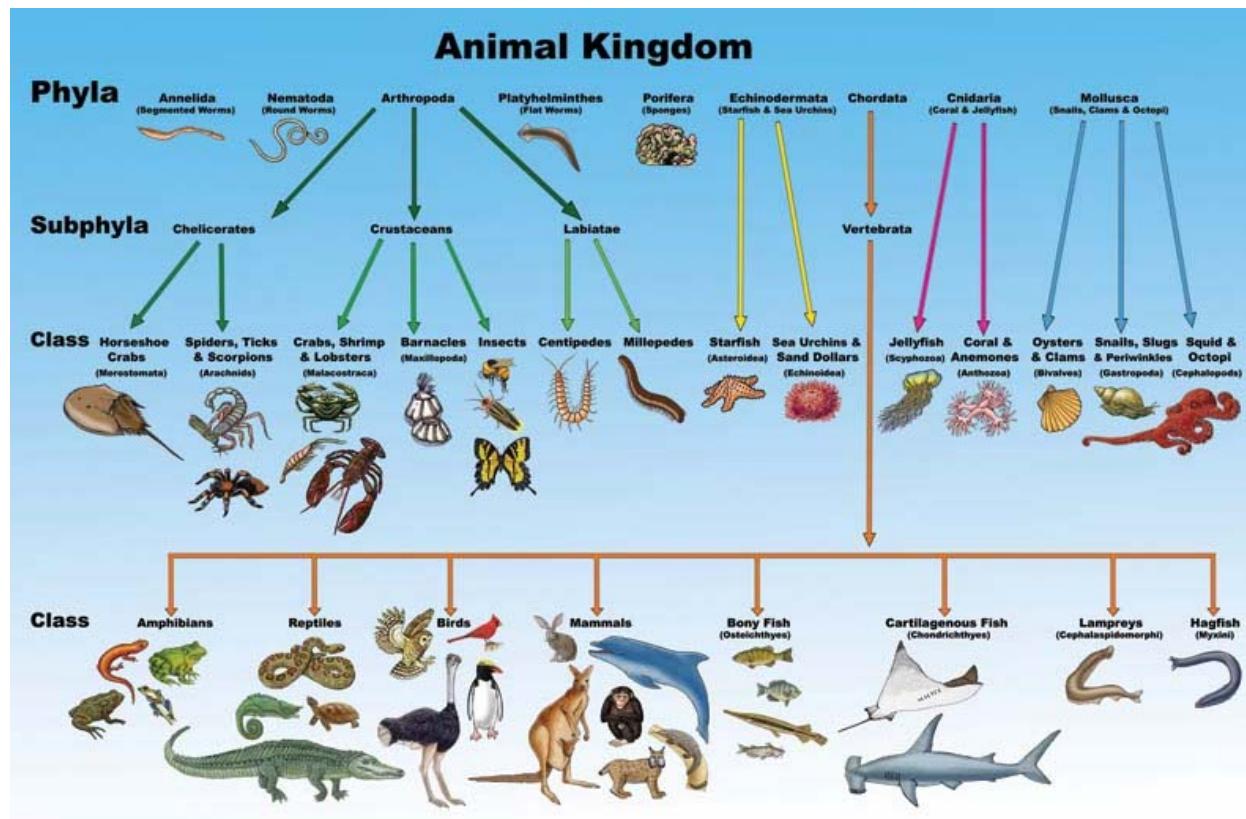


图 2.1: 动物的分类

在动物分类的中, 将贵宾犬误认为雪纳瑞并不是很严重的错误, 但把贵宾犬和恐龙混淆就是另一回事了。但是, 什么结构是合适的, 取决于模型的使用。例如, 响尾蛇和束带蛇在演化树上可能很近, 但是把一条有毒的响尾蛇认成无毒的束带蛇可是致命的。

标注 (Tagging)

事实上，有一些看似分类的问题在实际中却难以归于分类。例如，把下面这张图无论分类成猫还是狗看上去都有些问题。



正如你所见，上图里既有猫又有狗。其实还没完呢，里面还有草啊、轮胎啊、石头啊等等。与其将上图仅仅分类为其中一类，倒不如把这张图里面我们所关心的类别都标注出来。比如，给定一张图片，我们希望知道里面是否有猫、是否有狗、是否有草等。给定一个输入，输出不定量的类别，这个就叫做标注任务。

这类任务预测**非互斥分类**的任务，叫做多标签分类。想象一下，人们可能会把多个标签同时标注在自己的某篇技术类博客文章上，例如“机器学习”、“科技”、“编程语言”、“云计算”、“安全与隐私”和“AWS”。这里面的标签其实有时候相互关联，比如“云计算”和“安全与隐私”。当一篇文章可能被标注的数量很大时，人力标注就显得很吃力。这就需要使用机器学习了。

生物医学领域也有这个问题，正确地标注研究文献能让研究人员对文献进行彻底的审阅。在美国国家医学图书馆，一些专业的文章标注者会浏览 PubMed 中索引的每篇文章，并与 MeSH，一个大

约 28k 个标签的集合中的术语相关联。这是一个漫长的过程，通常在文章归档一年后才会轮到标注。在手动审阅和标注之前，机器学习可以用来提供临时标签。事实上，近几年，BioASQ 组织已经举办过相关[比赛](#)。

搜索与排序（Search and Ranking）

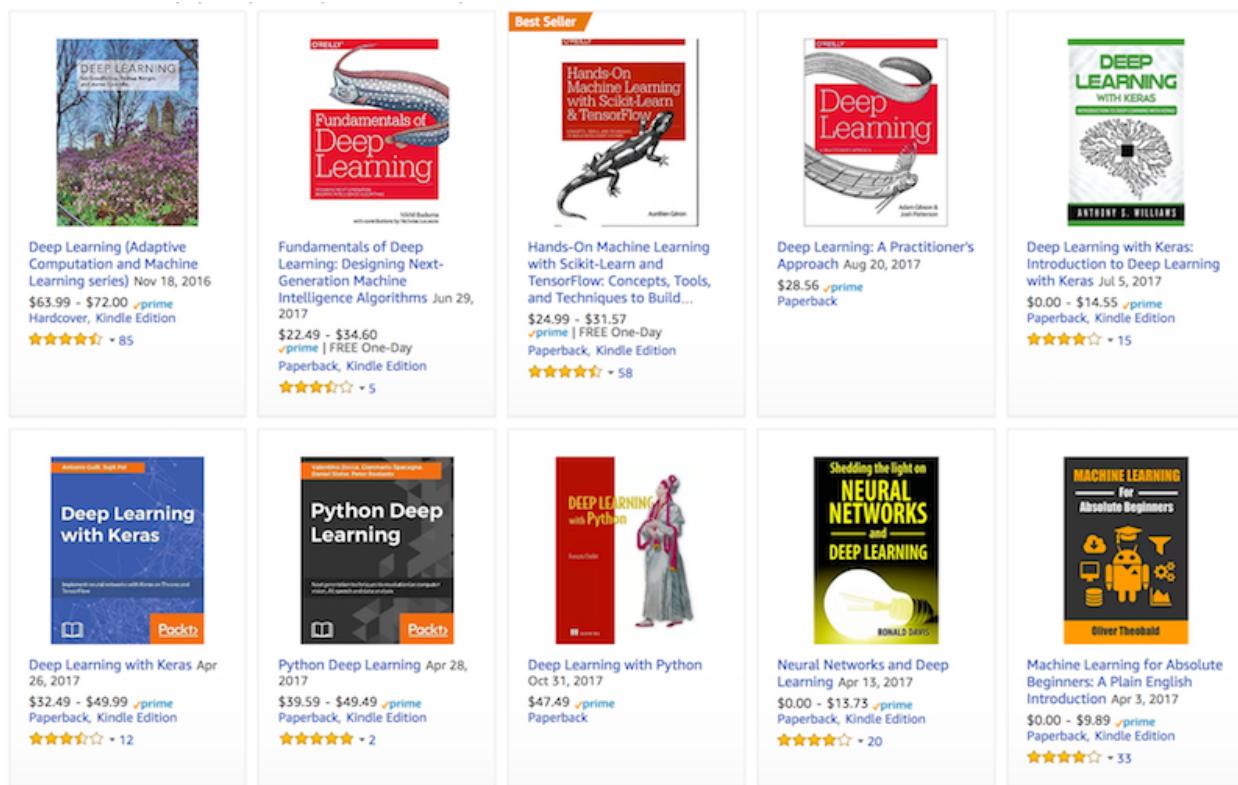
在信息检索领域，我们常常需要进行排序。以网络搜索为例，相较于判断页面是否与检索条目有关，我们更倾向于判断在浩如烟海的搜索结果中，应向用户显示哪个结果。这就要求我们的算法，能从较大的集合中生成一个有序子集。换句话说，如果要求生成字母表中的前 5 个字母，返回 A B C D E 和 C A B E D 是完全不同的。哪怕集合中的元素还是这些，但元素的顺序意义重大。

一个可行的解决方案，是用相关性分数对集合中的每个元素进行评分，并检索得分最高的元素。互联网时代早期有一个著名的网页排序算法叫做[PageRank](#)，就使用了这种方法。该算法的排序结果并不取决于用户检索条目，而是对包含检索条目的结果进行排序。现在的搜索引擎使用机器学习和行为模型来获得检索的相关性分数。有不少专门讨论这个问题的会议。

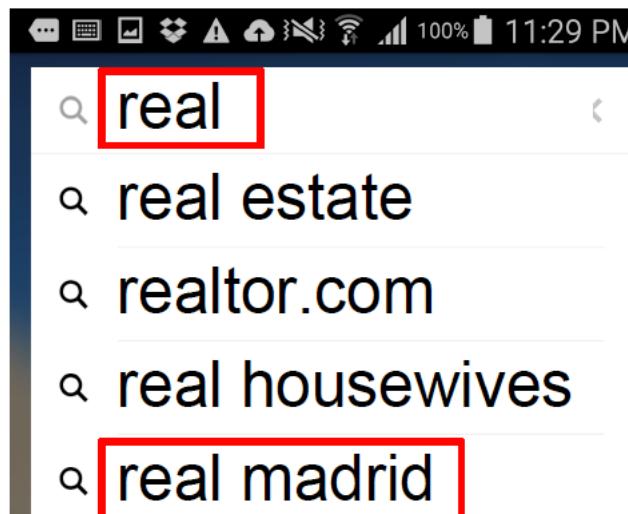
推荐系统（Recommender Systems）

推荐系统与搜索排序关系紧密，其目的都是向用户展示一组相关条目。主要区别在于，推荐系统特别强调每个用户的**个性化**需求。例如电影推荐，科幻电影粉和伍迪·艾伦喜剧爱好者的页面可能天差地别。

推荐系统被广泛应用于购物网站、搜索引擎、新闻门户网站等等。有时，客户会详细地表达对产品的喜爱（例如亚马逊的产品评论）。但有时，如果对结果不满意，客户只会提交简单的反馈（跳过播放列表中的标题）。通常，系统为用户 u_i 针对产品 o_j 构建函数，并估测出一个分数 y_{ij} 。得分 y_{ij} 最高的产品 o_j 会被推荐。实际的系统，会更加先进地把详尽的用户活动和产品特点一并考虑。以下图片是亚马逊基于个性化算法和并结合作者偏好，推荐的深度学习书籍。



搜索引擎的搜索条目自动补全系统也是个好例子。它可根据用户输入的前几个字符把用户可能搜索的条目实时推荐自动补全。在笔者之一的某项工作里，如果系统发现用户刚刚开启了体育类的手机应用，当用户在搜索框拼出“real”时，搜索条目自动补全系统会把“real madrid”（皇家马德里，足球球队）推荐在比通常更频繁被检索的“real estate”（房地产）更靠前的位置，而不是总像下图中这样。



序列学习 (Sequence Learning)

目前为止，我们提及的问题，其输入输出都有固定的长度，且连续输入之间不存在相互影响。如果我们的输入是一个视频片段呢？每个片段可能由不同数量的帧组成。且对每一帧的内容，如果我们一并考虑之前或之后的帧，猜测会更加准确。语言也是如此。热门的深度学习问题就包含机器翻译：在源语言中摄取句子，并预测另一种语言的翻译。

医疗领域也有类似的例子。我们希望构建一个模型，在密集治疗中监控患者的病情，并在未来 24 小时内的死亡风险超过某个阈值时发出警报。我们绝不希望这个模型每小时就把患者医疗记录丢弃一次，而仅根据最近的测量结果进行预测。

这些问题同样是机器学习的应用，它们是**序列学习 (sequence learning)** 的实例。这类模型通常可以处理任意长度的输入序列，或者输出任意长度的序列（或者两者兼顾！）。当输入和输出都是不定长的序列时，我们也把这类模型叫做 seq2seq，例如语言翻译模型和语音转录文本模型。以下列举了一些常见的序列学习案例。

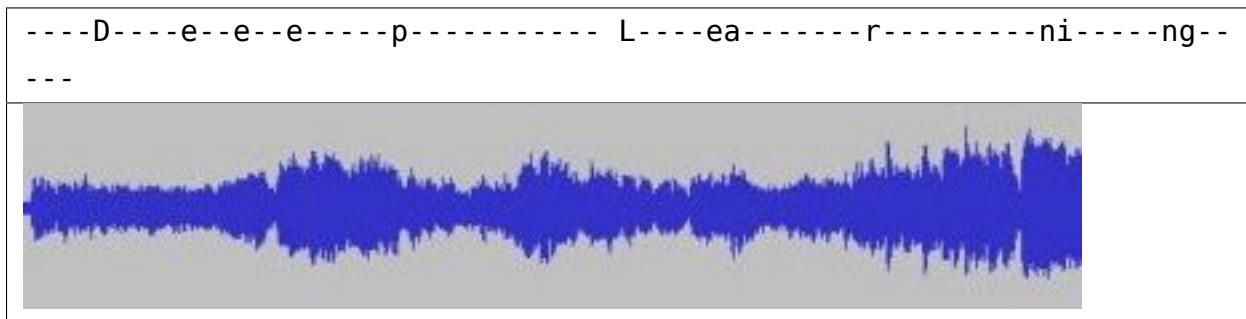
词类标注和句法分析 (Tagging and Parsing)

使用属性来注释文本序列。给定一个文本序列，动词和主语分别在哪里，哪些词是命名实体。其目的是根据结构、语法假设来分解和注释文本。实际上并没有这么复杂。以下是一个这样的例子。其中 Tom、Washington 和 Sally 都是命名实体。

Tom wants to have dinner in Washington with Sally.
E - - - - E - E

语音识别 (Automatic Speech Recognition)

在语音识别的问题里，输入序列 x 通常都是麦克风的声音，而输出 y 是对麦克风所说的话的文本转录。这类问题通常有一个难点，声音的采样率（常见的有 8kHz 或 16kHz）导致声音的帧数比文本长得，声音和文本之间不存在一一对应，成千的帧样例可能仅对应一个单词。语音识别是一类 seq2seq 问题，这里的输出往往比输入短很多。



文本转语音 (Text to Speech)

文本转语音 (TTS) 是语音识别问题的逆问题。这里的输入 x 是一个文本序列，而输出 y 是声音序列。因此，这类问题的输出比输入长。

机器翻译 (Machine Translation)

机器翻译的目标是把一段话从一种语言翻译成另一种语言。目前，机器翻译时常会翻译出令人啼笑皆非的结果。主要来说，机器翻译的复杂程度非常高。同一个词在两种不同语言下的对应有时候是多对多。另外，符合语法或者语言习惯的语序调整也令问题更加复杂。

具体展开讲，在之前的例子中，输出中的数据点的顺序与输入保持一致，而在机器翻译中，改变顺序是需要考虑的至关重要的因素。虽然我们仍是将一个序列转换为另一个序列，但是，不论是输入和输出的数量，还是对应的数据点的顺序，都可能发生变化。比如下面这个例子，这句德语（Alex 写了这段话）翻译成英文时，需要将动词的位置调整到前面。

2.1.6 无监督学习 (Unsupervised Learning)

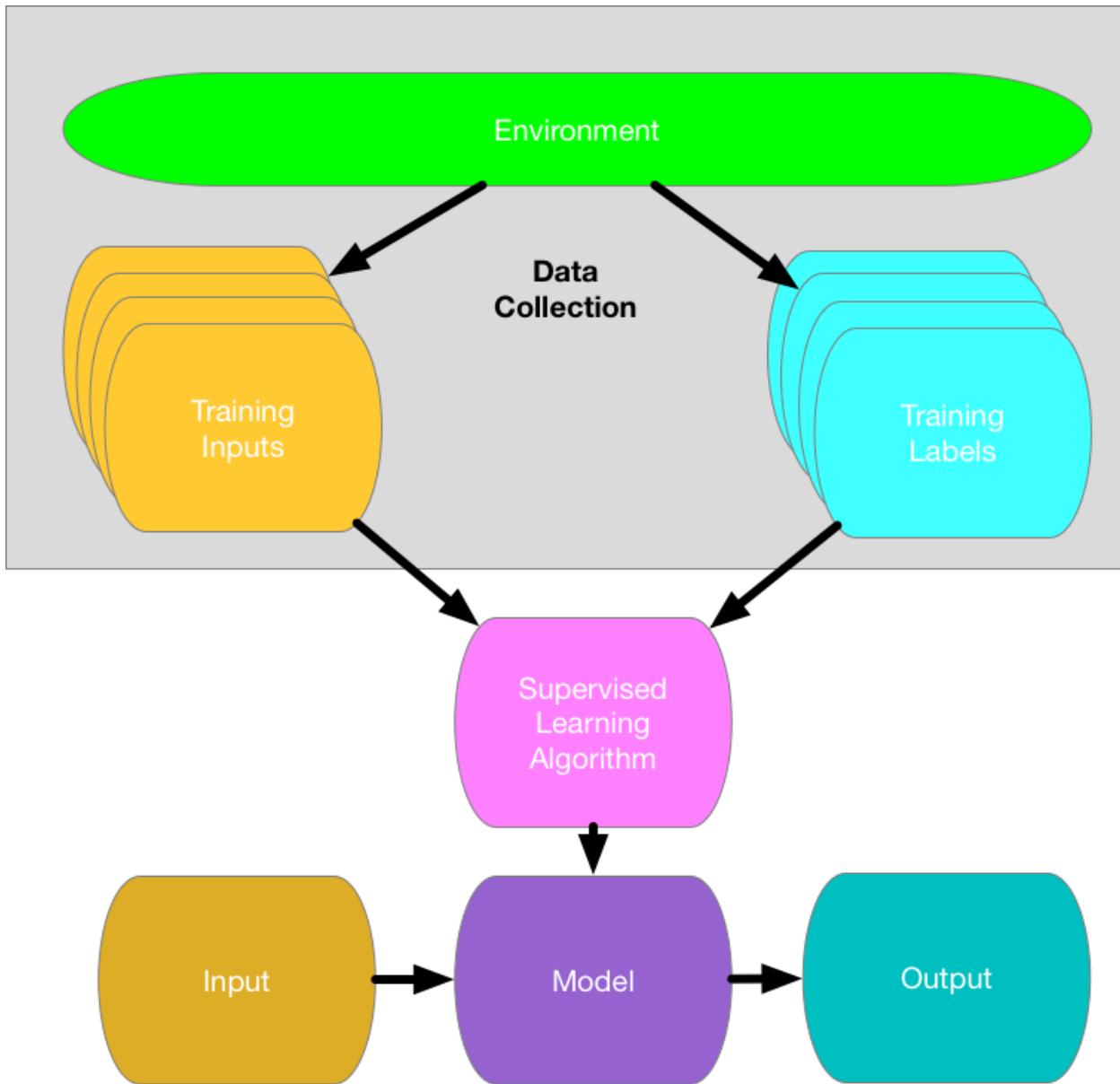
迄今为止的例子都与**监督学习**有关，即我们为模型提供了一系列样例和一系列**相应的目标值**。你可以把监督学习看成一个非常专业的工作，有一个非常龟毛的老板。老板站在你的身后，告诉你每一种情况下要做什么，直到学会所有情形下应采取的行动。为这样的老板工作听起来很无趣；另一方面，这样的老板也很容易取悦，你只要尽快识别出相应的模式并模仿其行为。

而相反的情形，给那种他们自己都不知道想让你做什么的老板打工也很糟心。不过，如果你打算成为一名数据科学家，你最好习惯这点。老板很可能就扔给你一堆数据，说，用上一点**数据科学**的方法吧。这种要求很模棱两可。我们称这类问题为**无监督学习 (unsupervised learning)**。我们能提出的问题的类型和数量仅仅受创造力的限制。我们将在后面的章节中讨论一些无监督学习的技术。现在，介绍一些常见的非监督学习任务作为开胃小菜。

- 我们能用少量的原型，精准地概括数据吗？给我们一堆照片，能把它们分成风景、狗、婴儿、猫、山峰的照片吗？类似的，给定一堆用户浏览记录，我们能把他们分成几类典型的用户吗？这类问题通常被称为**聚类 (clustering)**。
- 我们可以用少量的参数，准确地捕获数据的相关属性吗？球的轨迹可以很好地用速度，直径和质量准确描述。裁缝们也有一组参数，可以准确地描述客户的身材，以及适合的版型。这类问题被称为**子空间估计 (subspace estimation)** 问题。如果决定因素是线性关系的，则称为主成分分析 (**principal component analysis**)。
- 在欧几里德空间（例如， \mathbb{R}^n 中的向量空间）中是否存在一种符号属性，可以表示出（任意构建的）原始对象？这被称为**表征学习 (representation learning)**。例如我们希望找到城市的向量表示，从而可以进行这样的向量运算：罗马 - 意大利 + 法国 = 巴黎。
- 针对我们观察到的大量数据，是否存在一个根本性的描述？例如，如果我们有关于房价、污染、犯罪、地理位置、教育、工资等等的统计数据的，我们能否基于已有的经验数据，找出这些因素互相间的关联？贝叶斯图模型可用于类似的问题。
- 一个最近很火的领域，**生成对抗网络 (generative adversarial networks)**。简单地说，是一套生成数据的流程，并检查真实数据与生成的数据是否在统计上相似。

2.1.7 与环境因素交互

目前为止，我们还没讨论过，我们的数据实际上来自哪里，以及当机器学习模型生成结果时，究竟发生了什么。这是因为，无论是监督学习还是无监督学习，都不会着重于这点。我们在初期抓取大量数据，然后在不再与环境发生交互的情况下进行模式识别。所有的学习过程，都发生在算法和环境断开以后，这称作**离线学习 (offline learning)**。对于监督学习，其过程如下：



离线学习的简洁别有魅力。优势在于，我们仅仅需要担心模式识别本身，而不需要考虑其它因素；劣势则在于，能处理问题的形式相当有限。如果你的胃口更大，从小就阅读阿西莫夫的机器人系列，那么你大概会想象一种人工智能机器人，不仅仅可以做出预测，而会采取实际行动。我们想要的是**智能体（agent）**，而不仅仅是预测模型。意味着我们还要考虑选择恰当的**动作（action）**，而动作会影响到环境，以及今后的观察到的数据。

一旦考虑到要与周围环境交互，一系列的问题接踵而来。我们需要考虑这个环境：

- 记得我们之前的行为吗？
- 愿意帮助我们吗？比如，一个能识别用户口述内容的语音识别器。

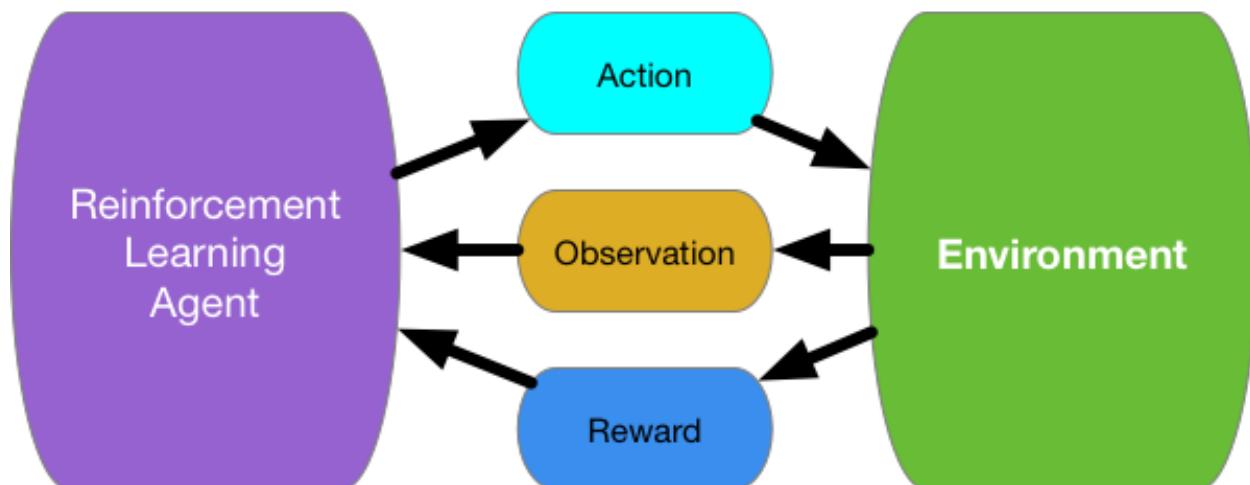
- 想要对抗我们？比如，一个对抗装置，类似垃圾邮件过滤（针对垃圾邮件发送者）或游戏玩家（针对对手）？
- 啥都不管（就像大多数情况）？
- 会动态地改变立场（随着时间表现稳定 vs 变化）？

最后的这个问题，引出了**协变量转移 (covariate shift)** 的问题（当训练和测试数据不同时）。这个坑想必不少人都经历过，平时的作业都是助教出题，而到了考试，题目却换成由课程老师编写。我们会简要介绍**强化学习 (reinforcement learning)** 和**对抗学习 (adversarial learning)**，这是两个会明确考虑与环境交互的问题。

强化学习 (Reinforcement Learning)

如果你真的有兴趣用机器学习开发一个能与周围环境交互并产生影响的智能体，你大概需要专注于**强化学习**（以下简称 RL）。包括机器人程序、对话系统、甚至是电子游戏 AI 的开发。**深度强化学习 (Deep reinforcement learning, DRL)** 将深度神经网络应用到强化学习问题上是新的风潮。这一领域两个突出的例子，一个是突破性的 Deep Q Network，仅仅使用视觉输入就在街机游戏上击败了人类；另一个是著名的 AlphaGo 击败了围棋世界冠军。

强化学习给出了一个非常笼统的问题陈述，一个智能体在一系列的**时间步长 (time steps)** 中与周围的环境交互。在每个时间步长 t ，智能体从环境中接收到一些观察数据 o_t ，并选择一个动作 a_t ，将其传回环境。最后，智能体会从环境中获得一个奖励 (reward) r_t 。由此，智能体接收一系列的观察数据，并选择一系列的后续动作，并一直持续。RL 智能体的行为受到**策略 (policy)** 约束。简而言之，所谓的**策略**，就是一组（对环境的）观察和动作的映射。强化学习的目标就是制定一个好的策略。



RL 框架的普适性并没有被夸大。例如，我们可以将任何监督学习问题转化为 RL 问题。譬如分类

问题。我们可以创建一个 RL 智能体，每个分类都有一个对应的动作；然后，创建一个可以给予奖励的环境，完全等同于原先在监督学习中使用的损失函数。

除此以外，RL 还可以解决很多监督学习无法解决的问题。例如，在监督学习中，我们总是期望训练使用的输入是与正确的标注相关联。但在 RL 中，我们并不给予每一次观察这样的期望，环境自然会告诉我们最优的动作，我们只是得到一些奖励。此外，环境甚至不会告诉我们是哪些动作导致了奖励。

举一个国际象棋的例子。唯一真正的奖励信号来自游戏结束时的胜利与否；如果赢了，分配奖励 1；输了，分配 -1；而究竟是那些动作导致了输赢却并不明确。因此，强化学习者必须处理**信用分配问题 (credit assignment problem)**。另一个例子，一个雇员某天被升职；这说明在过去一年中他选择了不少好的动作。想要继续升职，就必须知道是那些动作导致了这一升职奖励。

强化学习者可能也要处理部分可观察性 (partial observability) 的问题。即当前的观察结果可能无法反应目前的所有状态 (state)。一个扫地机器人发现自己被困在一个衣柜里，而房间中所有的衣柜都一模一样，要推测它的精确位置 (即状态)，机器人需要将进入衣柜前的观察一并放入考虑因素。

最后，在任何一个特定的时刻，强化学习者可能知道一个好的策略，但也许还有不少更优的策略，智能体从未尝试过。强化学习者必须不断决策，是否利用目前已知的最佳战略作为策略，还是去探索其它策略而放弃一些短期的奖励，以获得更多的信息。

马尔可夫决策过程，赌博机问题

一般的强化学习问题的初期设置都很笼统。动作会影响后续的观察数据。奖励只能根据所选择的动作观察到。整个环境可能只有部分被观察到。将这些复杂的因素通盘考虑，对研究人员来说要求有点高。此外，并非每一个实际问题都表现出这些复杂性。因此，研究人员研究了一些强化学习问题的特殊情况。

当环境得到充分观察时，我们将这类 RL 问题称为**马尔可夫决策过程 (Markov Decision Process, 简称 MDP)**。当状态不依赖于以前的动作时，我们称这个问题为**情境式赌博机问题 (contextual bandit problem)**。当不存在状态时，仅仅是一组可选择的动作，并在问题最初搭配未知的奖励，这是经典的**多臂赌博机问题 (multi-armed bandit problem)**。

2.1.8 小结

机器学习是一个庞大的领域。我们在此无法也无需介绍有关它的全部。有了这些背景知识铺垫，你是否对接下来的学习更有兴趣了呢？

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

2.2 使用 NDArray 来处理数据

对于机器学习来说，处理数据往往是万事之开头。它包含两个部分：(i) 数据读取，(ii) 数据已经在内存中时如何处理。本章将关注后者。

我们首先介绍 `NDArray`，这是 MXNet 储存和变换数据的主要工具。如果你之前用过 `NumPy`，你会发现 `NDArray` 和 `NumPy` 的多维数组非常类似。当然，`NDArray` 提供更多的功能，首先是 CPU 和 GPU 的异步计算，其次是自动求导。这两点使得 `NDArray` 能更好地支持机器学习。

2.2.1 让我们开始

我们先介绍最基本的功能。如果你不懂我们用到的数学操作也不用担心，例如按元素加法、正态分布；我们会在之后的章节分别从数学和代码编写的角度详细介绍。

我们首先从 `mxnet` 导入 `ndarray` 这个包

```
In [1]: from mxnet import ndarray as nd
```

然后我们创建一个 3 行和 4 列的 2D 数组（通常也叫矩阵），并且把每个元素初始化成 0

```
In [2]: nd.zeros((3, 4))
```

Out[2]:

```
[[ 0.  0.  0.  0.]
 [ 0.  0.  0.  0.]
 [ 0.  0.  0.  0.]]
<NDArray 3x4 @cpu(0)>
```

类似的，我们可以创建数组每个元素被初始化成 1。

```
In [3]: x = nd.ones((3, 4))
x
```

Out[3]:

```
[[ 1.  1.  1.  1.]
 [ 1.  1.  1.  1.]
 [ 1.  1.  1.  1.]]
<NDArray 3x4 @cpu(0)>
```

或者从 `python` 的数组直接构造

```
In [4]: nd.array([[1,2],[2,3]])
```

Out[4]:

```
[[ 1.  2.]
 [ 2.  3.]]
<NDArray 2x2 @cpu(0)>
```

我们经常需要创建随机数组，即每个元素的值都是随机采样而来，这个经常被用来初始化模型参数。以下代码创建数组，它的元素服从均值 0 标准差 1 的正态分布。

```
In [5]: y = nd.random_normal(0, 1, shape=(3, 4))
y

Out[5]:
[[ 2.21220636  0.7740038   1.04344046  1.18392551]
 [ 1.89171135 -1.23474145 -1.771029   -0.45138445]
 [ 0.57938355 -1.85608196 -1.9768796  -0.20801921]]
<NDArray 3x4 @cpu(0)>
```

跟 NumPy 一样，每个数组的形状可以通过`.shape` 来获取

```
In [6]: y.shape
```

```
Out[6]: (3, 4)
```

它的大小，就是总元素个数，是形状的累乘。

```
In [7]: y.size
```

```
Out[7]: 12
```

2.2.2 操作符

NDArray 支持大量的数学操作符，例如按元素加法：

```
In [8]: x + y
```

```
Out[8]:
```

```
[[ 3.21220636  1.77400374  2.04344034  2.18392563]
 [ 2.89171124 -0.23474145 -0.771029    0.54861557]
 [ 1.57938361 -0.85608196 -0.9768796   0.7919808 ]]
<NDArray 3x4 @cpu(0)>
```

乘法：

```
In [9]: x * y
```

```
Out[9]:
```

```
[[ 2.21220636  0.7740038   1.04344046  1.18392551]
 [ 1.89171135 -1.23474145 -1.771029   -0.45138445]
 [ 0.57938355 -1.85608196 -1.9768796  -0.20801921]]
<NDArray 3x4 @cpu(0)>
```

指数运算：

```
In [10]: nd.exp(y)
```

Out[10]:

```
[[ 9.13585091  2.16843081  2.83896756  3.26717448]
 [ 6.63070631  0.29090998  0.17015781  0.63674599]
 [ 1.78493774  0.15628375  0.13850074  0.81219143]]
<NDArray 3x4 @cpu(0)>
```

也可以转置一个矩阵然后计算矩阵乘法：

In [11]: `nd.dot(x, y.T)`

Out[11]:

```
[[ 5.21357632 -1.56544352 -3.4615972 ]
 [ 5.21357632 -1.56544352 -3.4615972 ]
 [ 5.21357632 -1.56544352 -3.4615972 ]]
<NDArray 3x3 @cpu(0)>
```

我们会在之后的线性代数一章讲解这些运算符。

2.2.3 广播（Broadcasting）

当二元操作符左右两边 ndarray 形状不一样时，系统会尝试将其复制到一个共同的形状。例如 `a` 的第 0 维是 3, `b` 的第 0 维是 1, 那么 `a+b` 时会将 `b` 沿着第 0 维复制 3 遍：

```
In [12]: a = nd.arange(3).reshape((3,1))
          b = nd.arange(2).reshape((1,2))
          print('a:', a)
          print('b:', b)
          print('a+b:', a+b)
```

```
a:
[[ 0.]
 [ 1.]
 [ 2.]]
<NDArray 3x1 @cpu(0)>
b:
[[ 0.  1.]]
<NDArray 1x2 @cpu(0)>
a+b:
[[ 0.  1.]
 [ 1.  2.]
 [ 2.  3.]]
<NDArray 3x2 @cpu(0)>
```

2.2.4 跟 NumPy 的转换

ndarray 可以很方便地同 numpy 进行转换

```
In [13]: import numpy as np
x = np.ones((2,3))
y = nd.array(x) # numpy -> mxnet
z = y.asnumpy() # mxnet -> numpy
print([z, y])

[array([[ 1.,  1.,  1.],
       [ 1.,  1.,  1.]], dtype=float32),
[[ 1.  1.  1.]
 [ 1.  1.  1.]]
<NDArray 2x3 @cpu(0)>]
```

2.2.5 替换操作

在前面的样例中，我们为每个操作新开内存来存储它的结果。例如，如果我们写 $y = x + y$, 我们会把 y 从现在指向的实例转到新建的实例上去。我们可以用 Python 的 `id()` 函数来看这个是怎么执行的：

```
In [14]: x = nd.ones((3, 4))
y = nd.ones((3, 4))

before = id(y)
y = y + x
id(y) == before

Out[14]: False
```

我们可以把结果通过 `[:]` 写到一个之前开好的数组里：

```
In [15]: z = nd.zeros_like(x)
before = id(z)
z[:] = x + y
id(z) == before

Out[15]: True
```

但是这里我们还是为 $x+y$ 创建了临时空间，然后再复制到 z 。需要避免这个开销，我们可以使用操作符的全名版本中的 `out` 参数：

```
In [16]: nd.elemwise_add(x, y, out=z)
id(z) == before

Out[16]: True
```

如果现有的数组不会复用，我们也可以用 $x[:] = x + y$ ，或者 $x += y$ 达到这个目的：

```
In [17]: before = id(x)
x += y
id(x) == before

Out[17]: True
```

2.2.6 截取 (Slicing)

MXNet NDArray 提供了各种截取方法。截取 x 的 index 为 1、2 的行：

```
In [18]: x = nd.arange(0,9).reshape((3,3))
print('x: ', x)
x[1:3]

x:
[[ 0.  1.  2.]
 [ 3.  4.  5.]
 [ 6.  7.  8.]]
<NDArray 3x3 @cpu(0)>

Out[18]:
[[ 3.  4.  5.]
 [ 6.  7.  8.]]
<NDArray 2x3 @cpu(0)>
```

以及直接写入指定位置：

```
In [19]: x[1,2] = 9.0
x

Out[19]:
[[ 0.  1.  2.]
 [ 3.  4.  9.]
 [ 6.  7.  8.]]
<NDArray 3x3 @cpu(0)>
```

多维截取：

```
In [20]: x = nd.arange(0,9).reshape((3,3))
print('x: ', x)
x[1:2,1:3]

x:
[[ 0.  1.  2.]
 [ 3.  4.  5.]
 [ 6.  7.  8.]]
<NDArray 3x3 @cpu(0)>
```

```
Out[20]:
```

```
[[ 4.  5.]]  
<NDArray 1x2 @cpu(0)>
```

多维写入:

```
In [21]: x[1:2,1:3] = 9.0  
x
```

```
Out[21]:
```

```
[[ 0.  1.  2.]  
 [ 3.  9.  9.]  
 [ 6.  7.  8.]]  
<NDArray 3x3 @cpu(0)>
```

2.2.7 总结

ndarray 模块提供一系列多维数组操作函数。所有函数列表可以参见NDArray API 文档。

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

2.3 使用 autograd 来自动求导

在机器学习中，我们通常使用**梯度下降（gradient descent）**来更新模型参数从而求解。损失函数关于模型参数的梯度指向一个可以降低损失函数值的方向，我们不断地沿着梯度的方向更新模型从而最小化损失函数。虽然梯度计算比较直观，但对于复杂的模型，例如多达数十层的神经网络，手动计算梯度非常困难。

为此 MXNet 提供 autograd 包来自动化求导过程。虽然大部分的深度学习框架要求编译计算图来自动求导，`mxnet.autograd` 可以对正常的命令式程序进行求导，它每次在后端实时创建计算图，从而可以立即得到梯度的计算方法。

下面让我们一步步介绍这个包。我们先导入 `autograd`。

```
In [1]: import mxnet.ndarray as nd  
import mxnet.autograd as ag
```

2.3.1 为变量附上梯度

假设我们想对函数 $f = 2 \times x^2$ 求关于 x 的导数。我们先创建变量 x ，并赋初值。

```
In [2]: x = nd.array([[1, 2], [3, 4]])
```

当进行求导的时候，我们需要一个地方来存 x 的导数，这个可以通过 NDArray 的方法 `attach_grad()` 来要求系统申请对应的空间。

```
In [3]: x.attach_grad()
```

下面定义 f 。默认条件下，MXNet 不会自动记录和构建用于求导的计算图，我们需要使用 autograd 里的 `record()` 函数来显式的要求 MXNet 记录我们需求导的程序。

```
In [4]: with ag.record():
```

```
    y = x * 2
    z = y * x
```

接下来我们可以通过 `z.backward()` 来进行求导。如果 z 不是一个标量，那么 `z.backward()` 等价于 `nd.sum(z).backward()`。

```
In [5]: z.backward()
```

现在我们来看求出来的导数是不是正确的。注意到 $y = x * 2$ 和 $z = x * y$ ，所以 z 等价于 $2 * x * x$ 。它的导数那么就是 $\frac{dz}{dx} = 4 \times x$ 。

```
In [6]: print('x.grad: ', x.grad)
x.grad == 4*x
```

```
x.grad:
[[ 4.  8.]
 [12. 16.]]
<NDArray 2x2 @cpu(0)>
```

```
Out[6]:
[[ 1.  1.]
 [ 1.  1.]]
<NDArray 2x2 @cpu(0)>
```

2.3.2 对控制流求导

命令式的编程的一个便利之处是几乎可以对任意的可导程序进行求导，即使里面包含了 Python 的控制流。考虑下面程序，里面包含控制流 `for` 和 `if`，但循环迭代的次数和判断语句的执行都是取决于输入的值。不同的输入会导致这个程序的执行不一样。（对于计算图框架来说，这个对应于动态图，就是图的结构会根据输入数据不同而改变）。

```
In [7]: def f(a):
    b = a * 2
    while nd.norm(b).asscalar() < 1000:
        b = b * 2
    if nd.sum(b).asscalar() > 0:
        c = b
    else:
```

```
c = 100 * b
return c
```

我们可以跟之前一样使用 record 记录和 backward 求导。

```
In [8]: a = nd.random_normal(shape=3)
a.attach_grad()
with ag.record():
    c = f(a)
c.backward()
```

注意到给定输入 a, 其输出

$f(a) = xa$, x 的值取决于输入 a。所以有 $\frac{df}{da} = x$, 我们可以很简单地评估自动求导的导数:

```
In [9]: a.grad == c/a

Out[9]:
[ 1.  1.  1.]
<NDArray 3 @cpu(0)>
```

2.3.3 头梯度和链式法则

注意: 读者可以跳过这一小节, 不会影响阅读之后的章节

当我们在一个 NDArray 上调用 backward 方法时, 例如 $y.backward()$, 此处 y 是一个关于 x 的函数, 我们将求得 y 关于 x 的导数。数学家们会把这个求导写成 $\frac{dy(x)}{dx}$ 。还有些更复杂的情况, 比如 z 是关于 y 的函数, 且 y 是关于 x 的函数, 我们想对 z 关于 x 求导, 也就是求 $\frac{d}{dx}z(y(x))$ 的结果。回想一下链式法则, 我们可以得到 $\frac{d}{dx}z(y(x)) = \frac{dz(y)}{dy} \frac{dy(x)}{dx}$ 。当 y 是一个更大的 z 函数的一部分, 并且我们希望求得 $\frac{dz}{dy}$ 保存在 $x.grad$ 中时, 我们可以传入**头梯度 (head gradient)** $\frac{dz}{dy}$ 的值作为 backward() 方法的输入参数, 系统会自动应用链式法则进行计算。这个参数的默认值是 `nd.ones_like(y)`。关于链式法则的详细解释, 请参阅[Wikipedia](#)。

```
In [10]: with ag.record():
    y = x * 2
    z = y * x

    head_gradient = nd.array([[10, 1], [.1, .01]])
    z.backward(head_gradient)
    print(x.grad)

[[ 40.          8.        ]
 [ 1.20000005  0.16      ]]
<NDArray 2x2 @cpu(0)>
```

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

深度学习模型基础

3.1 线性回归—从 0 开始

尽管强大的深度学习框架可以减少大量重复性工作，但若过于依赖它提供的便利，你就会很难深入理解深度学习是如何工作的。因此，我们的第一个教程是如何只利用 ndarray 和 autograd 来实现一个线性回归的训练。

3.1.1 线性回归

给定一个数据点集合 X 和对应的目标值 y ，线性模型的目标就是找到一条使用向量 w 和位移 b 描述的线，来尽可能地近似每个样本 $X[i]$ 和 $y[i]$ 。用数学符号来表示就是：

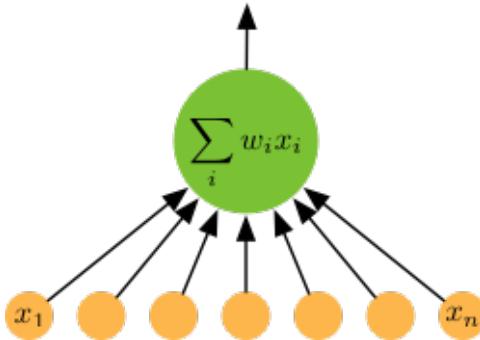
$$\hat{y} = Xw + b$$

并最小化所有数据点上的平方误差

$$\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y_i)^2.$$

你可能会对我们把古老的线性回归作为深度学习的一个样例表示奇怪。实际上线性模型是最简单、但也是最有用的神经网络。一个神经网络就是一个由节点（神经元）和有向边组成的集合。我们一般把一些节点组成层，每一层先从下面一层的节点获取输入，然后输出给上面的层使用。要计算一个节点值，我们需要将输入节点值做加权和（权数值即 w ），然后再加上一个激活函数（activation

function)。对于线性回归而言，它是一个两层神经网络，其中第一层是（下图橙色点）输入，每个节点对应输入数据点的一个维度，第二层是单输出节点（下图绿色点），它使用身份函数 ($f(x) = x$) 作为激活函数。



3.1.2 创建数据集

这里我们使用一个数据集来尽量简单地解释清楚，真实的模型是什么样的。具体来说，我们使用如下方法来生成数据；随机数值 $X[i]$ ，其相应的标注为 $y[i]$ ：

```
y[i] = 2 * X[i][0] - 3.4 * X[i][1] + 4.2 + noise
```

使用数学符号表示：

$$y = X \cdot w + b + \eta, \quad \text{for } \eta \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$$

这里噪音服从均值 0 和标准差为 0.01 的正态分布。

```
In [1]: from mxnet import ndarray as nd
        from mxnet import autograd

        num_inputs = 2
        num_examples = 1000

        true_w = [2, -3.4]
        true_b = 4.2

        X = nd.random_normal(shape=(num_examples, num_inputs))
        y = true_w[0] * X[:, 0] + true_w[1] * X[:, 1] + true_b
        y += .01 * nd.random_normal(shape=y.shape)
```

注意到 X 的每一行是一个长度为 2 的向量，而 y 的每一行是一个长度为 1 的向量（标量）。

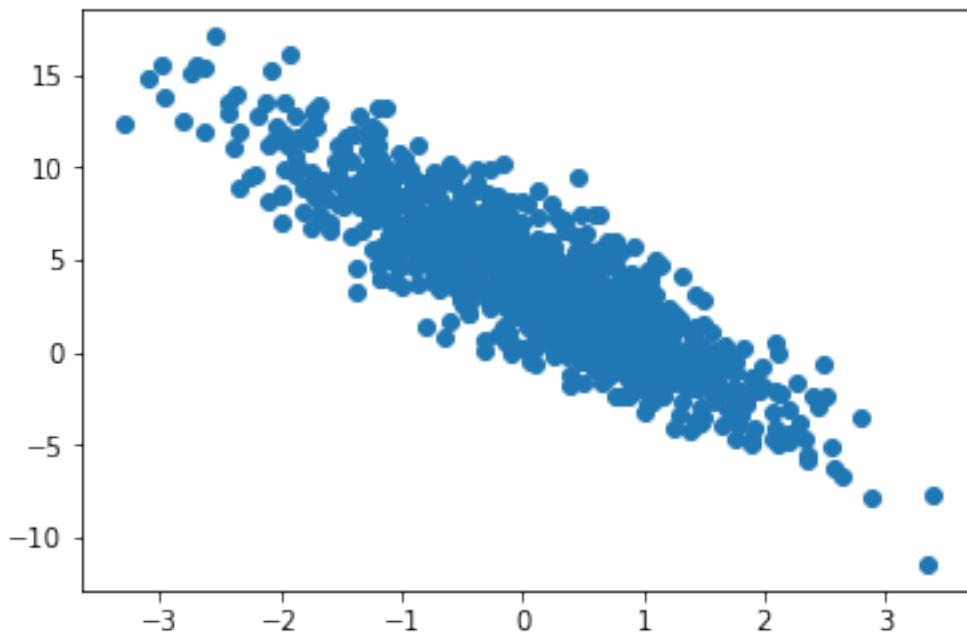
```
In [2]: print(X[0], y[0])
```

```
[ 2.21220636  0.7740038 ]
```

```
<NDArray 2 @cpu(0)>
[ 6.00058699]
<NDArray 1 @cpu(0)>
```

如果有兴趣, 可以使用安装包中已包括的 Python 绘图包 `matplotlib`, 生成第二个特征值 ($X[:, 1]$) 和目标值 Y 的散点图, 更直观地观察两者间的关系。

```
In [3]: import matplotlib.pyplot as plt
plt.scatter(X[:, 1].asnumpy(), y.asnumpy())
plt.show()
```



3.1.3 数据读取

当我们开始训练神经网络的时候, 我们需要不断读取数据块。这里我们定义一个函数它每次返回 `batch_size` 个随机的样本和对应的目标。我们通过 python 的 `yield` 来构造一个迭代器。

```
In [4]: import random
batch_size = 10
def data_iter():
    # 产生一个随机索引
    idx = list(range(num_examples))
    random.shuffle(idx)
    for i in range(0, num_examples, batch_size):
        j = nd.array(idx[i:min(i+batch_size,num_examples)])
        yield nd.take(X, j), nd.take(y, j)
```

下面代码读取第一个随机数据块

```
In [5]: for data, label in data_iter():
    print(data, label)
    break

[[ 0.20530048 -1.95319581]
 [-0.87284005  0.13884856]
 [-0.26432618  0.14649022]
 [-0.02094526  0.63740098]
 [-0.54260164  0.70735943]
 [-1.03009593  1.12043452]
 [ 0.22276424  0.28043881]
 [ 0.55835342 -0.60390592]
 [ 0.98317826  2.27419496]
 [ 2.00883245  0.2863085 ]]
<NDArray 10x2 @cpu(0)>
[ 11.26085949   1.98895013   3.16113949   1.98225629   0.71211129
 -1.67340815   3.69913387   7.37973213  -1.56150401   7.26333475]
<NDArray 10 @cpu(0)>
```

3.1.4 初始化模型参数

下面我们随机初始化模型参数

```
In [6]: w = nd.random_normal(shape=(num_inputs, 1))
        b = nd.zeros((1,))
        params = [w, b]
```

之后训练时我们需要对这些参数求导来更新它们的值，使损失尽量减小；因此我们需要创建它们的梯度。

```
In [7]: for param in params:
        param.attach_grad()
```

3.1.5 定义模型

线性模型就是将输入和模型的权重（w）相乘，再加上偏移（b）：

```
In [8]: def net(X):
        return nd.dot(X, w) + b
```

3.1.6 损失函数

我们使用常见的平方误差来衡量预测目标和真实目标之间的差距。

```
In [9]: def square_loss(yhat, y):
    # 注意这里我们把 y 变形成 yhat 的形状来避免矩阵形状的自动转换
    return (yhat - y.reshape(yhat.shape)) ** 2
```

3.1.7 优化

虽然线性回归有显式解，但绝大部分模型并没有。所以我们这里通过随机梯度下降来求解。每一步，我们将模型参数沿着梯度的反方向走特定距离，这个距离一般叫**学习率(learning rate)** lr。(我们会之后一直使用这个函数，我们将其保存在utils.py。)

```
In [10]: def SGD(params, lr):
    for param in params:
        param[:] = param - lr * param.grad
```

3.1.8 训练

现在我们可以开始训练了。训练通常需要迭代数据数次，在这里使用 epochs 表示迭代总次数；一次迭代中，我们每次随机读取固定数个数据点，计算梯度并更新模型参数。

```
In [11]: # 模型函数
def real_fn(X):
    return 2 * X[:, 0] - 3.4 * X[:, 1] + 4.2
# 绘制损失随训练次数降低的折线图，以及预测值和真实值的散点图
def plot(losses, X, sample_size=100):
    xs = list(range(len(losses)))
    f, (fg1, fg2) = plt.subplots(1, 2)
    fg1.set_title('Loss during training')
    fg1.plot(xs, losses, '-r')
    fg2.set_title('Estimated vs real function')
    fg2.plot(X[:sample_size, 1].asnumpy(),
              net(X[:sample_size, :]).asnumpy(), 'or', label='Estimated')
    fg2.plot(X[:sample_size, 1].asnumpy(),
              real_fn(X[:sample_size, :]).asnumpy(), '*g', label='Real')
    fg2.legend()
    plt.show()
```

```
In [12]: epochs = 5
learning_rate = .001
niter = 0
losses = []
moving_loss = 0
smoothing_constant = .01

# 训练
```

```
for e in range(epochs):
    total_loss = 0

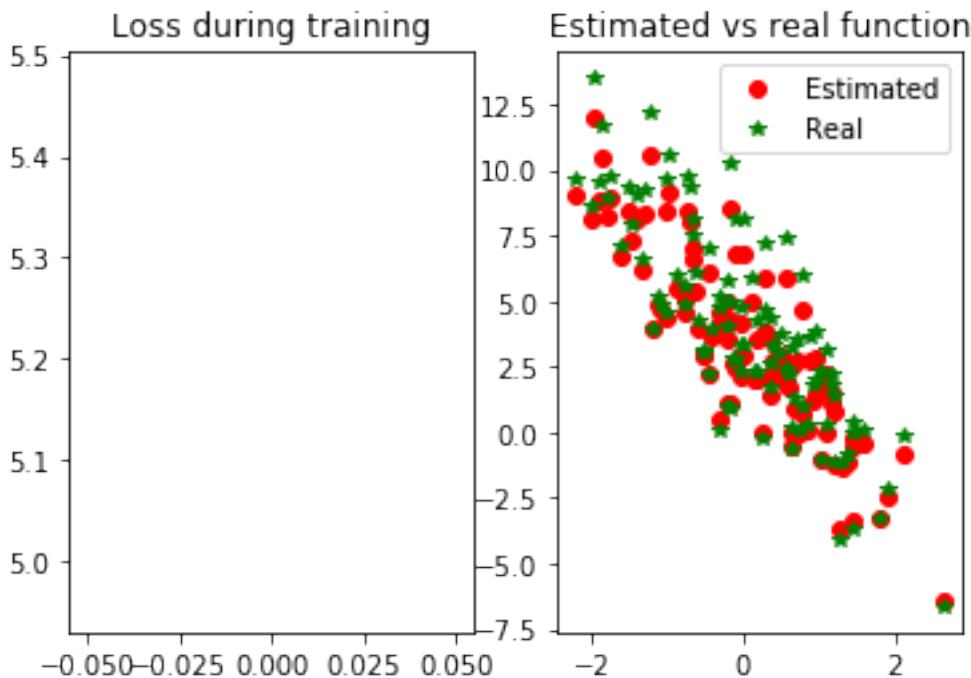
    for data, label in data_iter():
        with autograd.record():
            output = net(data)
            loss = square_loss(output, label)
        loss.backward()
        SGD(params, learning_rate)
        total_loss += nd.sum(loss).asscalar()

    # 记录每读取一个数据点后, 损失的移动平均值的变化;
    niter +=1
    curr_loss = nd.mean(loss).asscalar()
    moving_loss = (1 - smoothing_constant) * moving_loss +
    → (smoothing_constant) * curr_loss

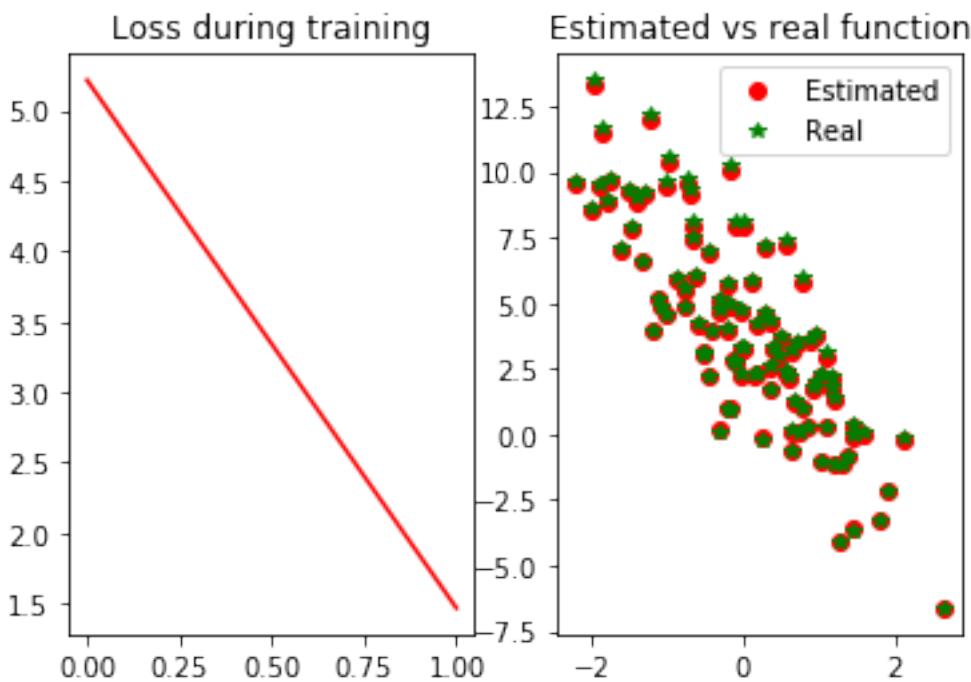
    # correct the bias from the moving averages
    est_loss = moving_loss/(1-(1-smoothing_constant)**niter)

    if (niter + 1) % 100 == 0:
        losses.append(est_loss)
        print("Epoch %s, batch %s. Moving avg of loss: %s. Average loss:
    → %f" % (e, niter, est_loss, total_loss/num_examples))
        plot(losses, X)
```

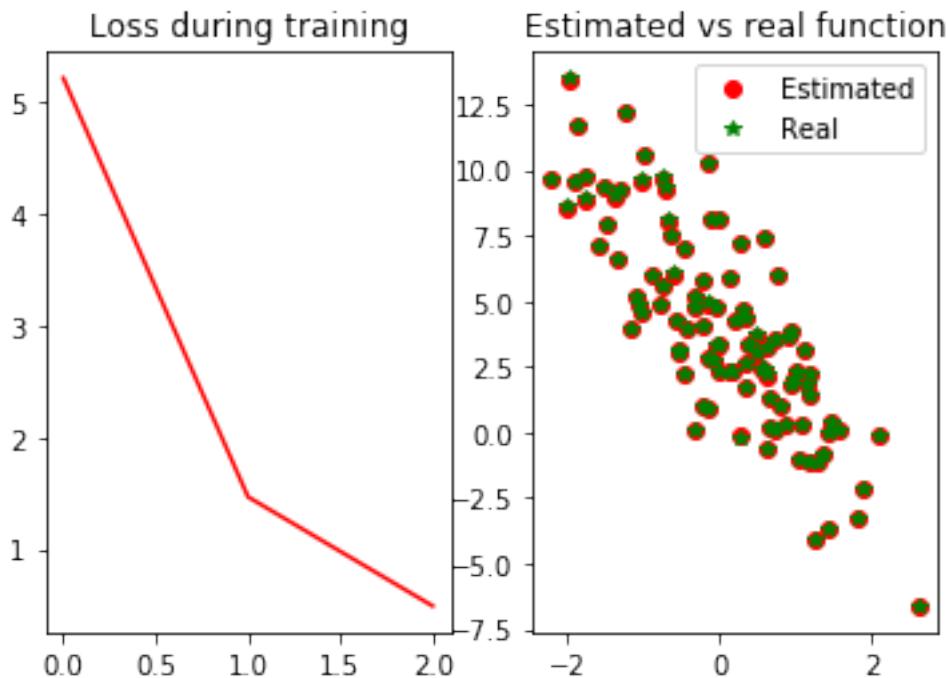
Epoch 0, batch 99. Moving avg of loss: 5.21642670173. Average loss: 6.856029



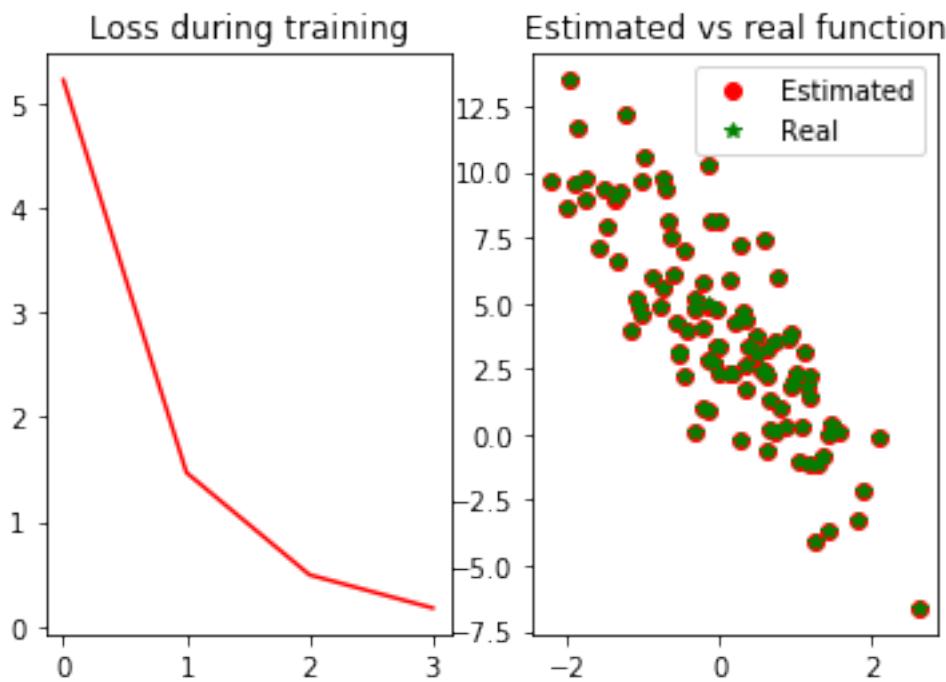
Epoch 1, batch 199. Moving avg of loss: 1.46661828786. Average loss: 0.130761



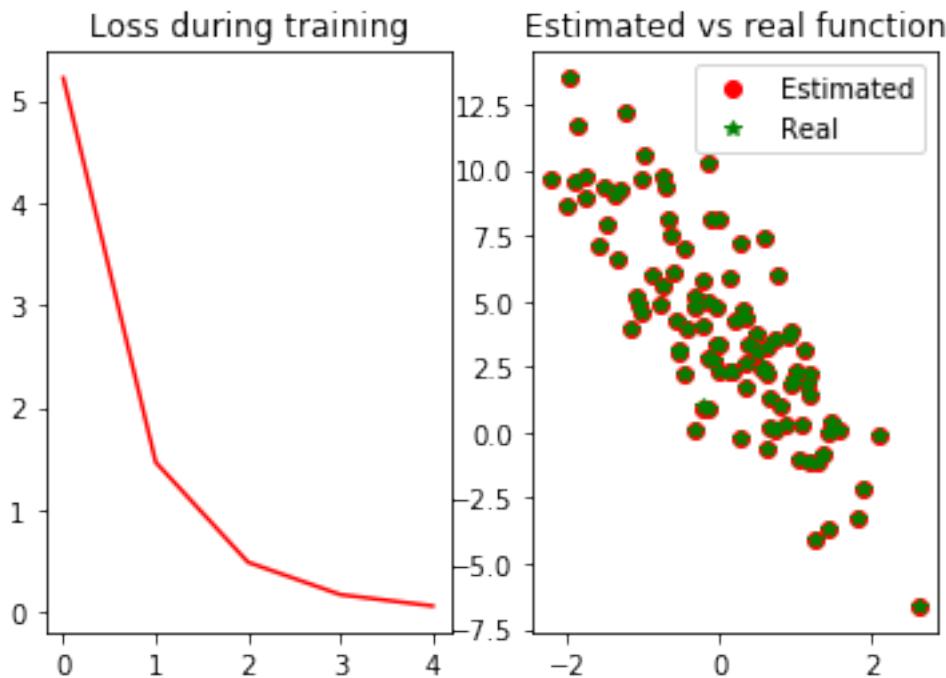
Epoch 2, batch 299. Moving avg of loss: 0.489735812016. Average loss: 0.002608



Epoch 3, batch 399. Moving avg of loss: 0.173615689191. Average loss: 0.000148



Epoch 4, batch 499. Moving avg of loss: 0.0628786453313. Average loss: 0.000101



训练完成后，我们可以比较学得的参数和真实参数

In [13]: `true_w, w`

```
Out[13]: ([2, -3.4],
           [[ 1.99986899]
            [-3.39976501]]
           <NDArray 2x1 @cpu(0)>)
```

In [14]: `true_b, b`

```
Out[14]: (4.2,
           [ 4.19958115]
           <NDArray 1 @cpu(0)>)
```

3.1.9 小结

我们现在看到，仅仅是使用 NDArray 和 autograd 就可以很容易实现的一个模型。在接下来的教程里，我们会在此基础上，介绍更多现代神经网络的知识，以及怎样使用少量的 MXNet 代码实现各种复杂的模型。

3.1.10 练习

尝试用不同的学习率查看误差下降速度（收敛率）

3.1.11 讨论

欢迎扫码直达本节内容讨论区：



3.2 线性回归—使用 Gluon

前一章我们仅仅使用了 `ndarray` 和 `autograd` 来实现线性回归，这一章我们仍然实现同样的模型，但是使用高层抽象包 `gluon`。

3.2.1 创建数据集

我们生成同样的数据集

```
In [1]: from mxnet import ndarray as nd
        from mxnet import autograd
        from mxnet import gluon

        num_inputs = 2
        num_examples = 1000

        true_w = [2, -3.4]
        true_b = 4.2

        X = nd.random_normal(shape=(num_examples, num_inputs))
        y = true_w[0] * X[:, 0] + true_w[1] * X[:, 1] + true_b
        y += .01 * nd.random_normal(shape=y.shape)
```

3.2.2 数据读取

但这里使用 `data` 模块来读取数据。

```
In [2]: batch_size = 10
        dataset = gluon.data.ArrayDataset(X, y)
        data_iter = gluon.data.DataLoader(dataset, batch_size, shuffle=True)
```

读取跟前面一致：

```
In [3]: for data, label in data_iter:
    print(data, label)
    break

[[-0.11068931 -1.35708642]
 [-0.32117304 -1.17399085]
 [-0.02094526  0.63740098]
 [-1.65758574  1.42838538]
 [-0.98526436 -0.87221128]
 [ 0.63478559  1.57956541]
 [-0.31847146  0.2945644 ]
 [-1.33603549  1.00357831]
 [ 0.42469677 -1.5595479 ]
 [-0.41308445  0.67883557]]
<NDArray 10x2 @cpu(0)>
[ 8.59291267  7.55321264   1.98225629  -3.96514177   5.21893072
 0.09139667  2.56387091  -1.8906523   10.34294891  1.04858851]
<NDArray 10 @cpu(0)>
```

3.2.3 定义模型

之前一章中，当我们从 0 开始训练模型时，需要先声明模型参数，然后再使用它们来构建模型。但 gluon 提供大量预定义的层，我们只需要关注使用哪些层来构建模型。例如线性模型就是使用对应的 `Dense` 层；之所以称为 `dense` 层，是因为输入的所有节点都与后续的节点相连。在这个例子中仅有一个输出，但在大多数后续章节中，我们会用到具有多个输出的网络。

我们之后还会介绍如何构造任意结构的神经网络，但对于初学者来说，构建模型最简单的办法是利用 `Sequential` 来所有层串起来。输入数据之后，`Sequential` 会依次执行每一层，并将前一层的输出，作为输入提供给后面的层。首先我们定义一个空的模型：

```
In [4]: net = gluon.nn.Sequential()
```

然后我们加入一个 `Dense` 层，它唯一必须定义的参数就是输出节点的个数，在线性模型里面是 1。

```
In [5]: net.add(gluon.nn.Dense(1))
```

(注意这里我们并没有定义说这个层的输入节点是多少，这个在之后真正给数据的时候系统会自动赋值。我们之后会详细介绍这个特性是如何工作的。)

3.2.4 初始化模型参数

在使用前 `net` 我们必须要初始化模型权重，这里我们使用默认随机初始化方法（之后我们会介绍更多的初始化方法）。

```
In [6]: net.initialize()
```

3.2.5 损失函数

gluon 提供了平方误差函数：

```
In [7]: square_loss = gluon.loss.L2Loss()
```

3.2.6 优化

同样我们无需手动实现随机梯度下降，我们可以创建一个 Trainer 的实例，并且将模型参数传递给它就行。

```
In [8]: trainer = gluon.Trainer(  
    net.collect_params(), 'sgd', {'learning_rate': 0.1})
```

3.2.7 训练

使用 gluon 使模型训练过程更为简洁。我们不需要挨个定义相关参数、损失函数，也不需使用随机梯度下降。gluon 的抽象和便利的优势将随着我们着手处理更多复杂模型的愈发显现。不过在完成初始设置后，训练过程本身和前面没有太多区别，唯一的不同在于我们不再是调用 SGD，而是 `trainer.step` 来更新模型（此处一并省略之前绘制损失变化的折线图和散点图的过程，有兴趣的同学可以自行尝试）。

```
In [9]: epochs = 5  
batch_size = 10  
for e in range(epochs):  
    total_loss = 0  
    for data, label in data_iter:  
        with autograd.record():  
            output = net(data)  
            loss = square_loss(output, label)  
            loss.backward()  
            trainer.step(batch_size)  
            total_loss += nd.sum(loss).asscalar()  
    print("Epoch %d, average loss: %f" % (e, total_loss/num_examples))  
  
Epoch 0, average loss: 0.933152  
Epoch 1, average loss: 0.000051  
Epoch 2, average loss: 0.000051  
Epoch 3, average loss: 0.000051  
Epoch 4, average loss: 0.000051
```

比较学到的和真实模型。我们先从 `net` 拿到需要的层，然后访问其权重和位移。

```
In [10]: dense = net[0]
         true_w, dense.weight.data()

Out[10]: ([2, -3.4],
           [[ 1.99957192 -3.40116358]]
           <NDArray 1x2 @cpu(0)>)

In [11]: true_b, dense.bias.data()

Out[11]: (4.2,
           [ 4.20007658]
           <NDArray 1 @cpu(0)>)
```

3.2.8 结论

可以看到 `gluon` 可以帮助我们更快更干净地实现模型。

3.2.9 练习

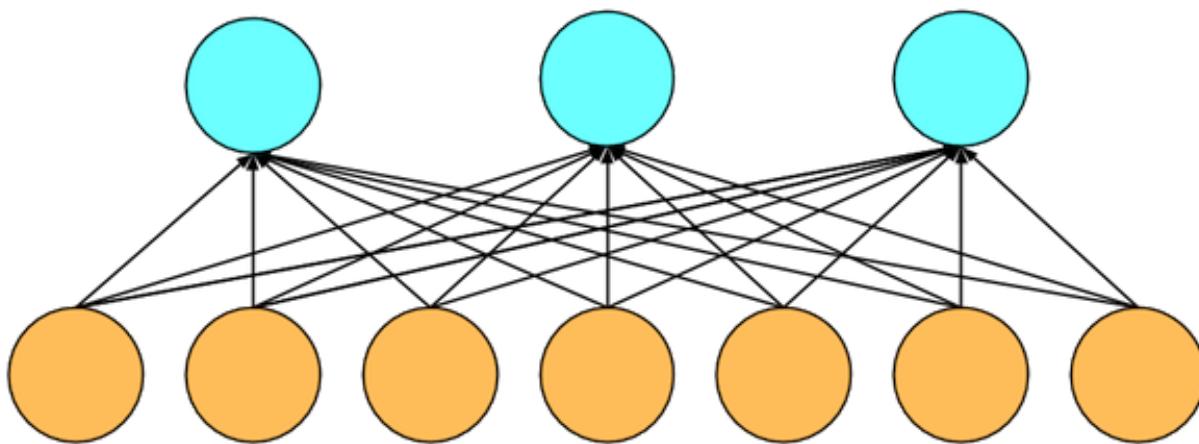
- 在训练的时候，为什么我们用了比前面要大 10 倍的学习率呢？（提示：可以尝试运行 `help(trainer.step)` 来寻找答案。）
- 如何拿到 `weight` 的梯度呢？（提示：尝试 `help(dense.weight)`）

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

3.3 多类逻辑回归—从 0 开始

如果你读过了[从 0 开始的线性回归](#)，那么最难的部分已经过去了。现在你知道如果读取和操作数据，如何构造目标函数和对它求导，如果定义损失函数，模型和求解。

下面我们来看一个稍微有意思一点的问题，如何使用多类逻辑回归进行多类分类。这个模型跟线性回归的主要区别在于输出节点从一个变成了多个。



3.3.1 获取数据

演示这个模型的常见数据集是手写数字识别 MNIST，它长这个样子。



这里我们用了一个稍微复杂点的数据集，它跟 MNIST 非常像，但是内容不再是分类数字，而是服饰。我们通过 gluon 的 data.vision 模块自动下载这个数据。

```
In [1]: from mxnet import gluon
        from mxnet import ndarray as nd

        def transform(data, label):
            return data.astype('float32')/255, label.astype('float32')
mnist_train = gluon.data.vision.FashionMNIST(train=True, transform=transform)
mnist_test = gluon.data.vision.FashionMNIST(train=False, transform=transform)
```

打印一个样本的形状和它的标号

```
In [2]: data, label = mnist_train[0]
        ('example shape: ', data.shape, 'label:', label)

Out[2]: ('example shape: ', (28, 28, 1), 'label:', 2.0)
```

我们画出前几个样本的内容，和对应的文本标号

```
In [3]: import matplotlib.pyplot as plt

        def show_images(images):
```

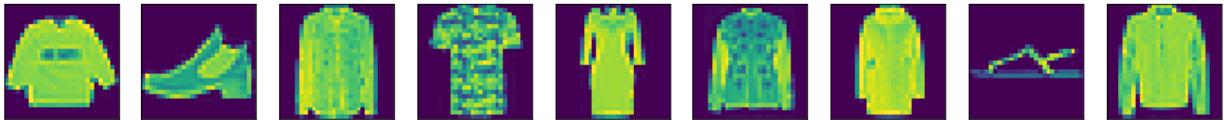
```

n = images.shape[0]
_, figs = plt.subplots(1, n, figsize=(15, 15))
for i in range(n):
    figs[i].imshow(images[i].reshape((28, 28)).asnumpy())
    figs[i].axes.get_xaxis().set_visible(False)
    figs[i].axes.get_yaxis().set_visible(False)
plt.show()

def get_text_labels(label):
    text_labels = [
        't-shirt', 'trouser', 'pullover', 'dress', 'coat',
        'sandal', 'shirt', 'sneaker', 'bag', 'ankle boot'
    ]
    return [text_labels[int(i)] for i in label]

data, label = mnist_train[0:9]
show_images(data)
print(get_text_labels(label))

```



['pullover', 'ankle boot', 'shirt', 't-shirt', 'dress', 'coat', 'coat', 'sandal',
→ 'coat']

3.3.2 数据读取

虽然我们可以像前面那样通过 `yield` 来定义获取批量数据函数，这里我们直接使用 `gluon.data` 的 `DataLoader` 函数，它每次 `yield` 一个批量。

```
In [4]: batch_size = 256
train_data = gluon.data.DataLoader(mnist_train, batch_size, shuffle=True)
test_data = gluon.data.DataLoader(mnist_test, batch_size, shuffle=False)
```

注意到这里我们要求每次从训练数据里读取一个由随机样本组成的批量，但测试数据则不需要这个要求。

3.3.3 初始化模型参数

跟线性模型一样，每个样本会表示成一个向量。我们这里数据是 $28 * 28$ 大小的图片，所以输入向量的长度是 $28 * 28 = 784$ 。因为我们要做多类分类，我们需要对每一个类预测这个样本属于此

类的概率。因为这个数据集有 10 个类型，所以输出应该是长为 10 的向量。这样，我们需要的权重将是一个 $784 * 10$ 的矩阵：

```
In [5]: num_inputs = 784
        num_outputs = 10

        W = nd.random_normal(shape=(num_inputs, num_outputs))
        b = nd.random_normal(shape=num_outputs)

        params = [W, b]
```

同之前一样，我们要对模型参数附上梯度：

```
In [6]: for param in params:
            param.attach_grad()
```

3.3.4 定义模型

在线性回归教程里，我们只需要输出一个标量 $y\hat{}$ 使得尽可能的靠近目标值。但在这里的分类里，我们需要属于每个类别的概率。这些概率需要值为正，而且加起来等于 1. 而如果简单的使用 $\hat{y} = Wx$, 我们不能保证这一点。一个通常的做法是通过 softmax 函数来将任意的输入归一化成合法的概率值。

```
In [7]: from mxnet import nd
def softmax(X):
    exp = nd.exp(X)
    # 假设 exp 是矩阵，这里对行进行求和，并要求保留 axis 1,
    # 就是返回 (nrows, 1) 形状的矩阵
    partition = exp.sum(axis=1, keepdims=True)
    return exp / partition
```

可以看到，对于随机输入，我们将每个元素变成了非负数，而且每一行加起来为 1。

```
In [8]: X = nd.random_normal(shape=(2,5))
        X_prob = softmax(X)
        print(X_prob)
        print(X_prob.sum(axis=1))

[[ 0.07024596  0.38768554  0.06740031  0.21249865  0.26216954]
 [ 0.06539094  0.1500023   0.36792335  0.02470051  0.39198291]]
<NDArray 2x5 @cpu(0)>

[ 1.  1.]
<NDArray 2 @cpu(0)>
```

现在我们可以定义模型了：

```
In [9]: def net(X):
    return softmax(nd.dot(X.reshape((-1, num_inputs)), W) + b)
```

3.3.5 交叉熵损失函数

我们需要定义一个针对预测为概率值的损失函数。其中最常见的是交叉熵损失函数，它将两个概率分布的负交叉熵作为目标值，最小化这个值等价于最大化这两个概率的相似度。

具体来说，我们先将真实标号表示成一个概率分布，例如如果 $y=1$ ，那么其对应的分布就是一个除了第二个元素为 1 其他全为 0 的长为 10 的向量，也就是 $yvec=[0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0]$ 。那么交叉熵就是 $yvec[0]*\log(yhat[0])+\dots+yvec[n]*\log(yhat[n])$ 。注意到 $yvec$ 里面只有一个 1，那么前面等价于 $\log(yhat[y])$ 。所以我们可以定义这个损失函数了

```
In [10]: def cross_entropy(yhat, y):
    return -nd.pick(nd.log(yhat), y)
```

3.3.6 计算精度

给定一个概率输出，我们将预测概率最高的那个类作为预测的类，然后通过比较真实标号我们可以计算精度：

```
In [11]: def accuracy(output, label):
    return nd.mean(output.argmax(axis=1)==label).asscalar()
```

我们可以评估一个模型在这个数据上的精度。（这两个函数我们之后也会用到，所以也都保存在.. /utils.py。）

```
In [12]: def evaluate_accuracy(data_iterator, net):
    acc = 0.
    for data, label in data_iterator:
        output = net(data)
        acc += accuracy(output, label)
    return acc / len(data_iterator)
```

因为我们随机初始化了模型，所以这个模型的精度应该大概是 $1/\text{num_outputs} = 0.1$.

```
In [13]: evaluate_accuracy(test_data, net)
```

```
Out[13]: 0.09804687500000006
```

3.3.7 训练

训练代码跟前面的线性回归非常相似：

```
In [14]: import sys
        sys.path.append('..')
        from utils import SGD
        from mxnet import autograd

        learning_rate = .1

        for epoch in range(5):
            train_loss = 0.
            train_acc = 0.
            for data, label in train_data:
                with autograd.record():
                    output = net(data)
                    loss = cross_entropy(output, label)
                loss.backward()
                # 将梯度做平均, 这样学习率会对 batch size 不那么敏感
                SGD(params, learning_rate/batch_size)

                train_loss += nd.mean(loss).asscalar()
                train_acc += accuracy(output, label)

            test_acc = evaluate_accuracy(test_data, net)
            print("Epoch %d. Loss: %f, Train acc %f, Test acc %f" %
                  epoch, train_loss/len(train_data), train_acc/len(train_data),
                  → test_acc))

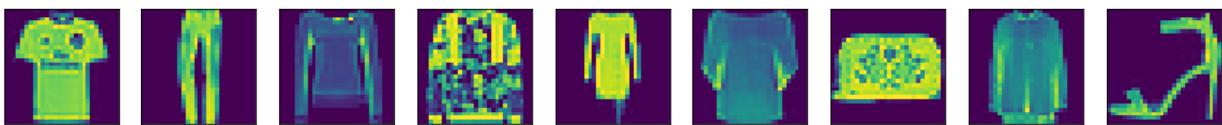
Epoch 0. Loss: 3.500751, Train acc 0.455862, Test acc 0.597070
Epoch 1. Loss: 1.844012, Train acc 0.635522, Test acc 0.670703
Epoch 2. Loss: 1.535261, Train acc 0.682746, Test acc 0.693945
Epoch 3. Loss: 1.377224, Train acc 0.707402, Test acc 0.714844
Epoch 4. Loss: 1.275698, Train acc 0.723775, Test acc 0.727051
```

3.3.8 预测

训练完成后，现在我们可以演示对输入图片的标号的预测

```
In [15]: data, label = mnist_test[0:9]
        show_images(data)
        print('true labels')
        print(get_text_labels(label))

        predicted_labels = net(data).argmax(axis=1)
        print('predicted labels')
        print(get_text_labels(predicted_labels.asnumpy()))
```



```
true labels
['t-shirt', 'trouser', 'pullover', 'pullover', 'dress', 'pullover', 'bag', 'shirt',
 → 'sandal']
predicted labels
['shirt', 'trouser', 'shirt', 't-shirt', 'trouser', 'bag', 'bag', 'shirt', 'sandal']
```

3.3.9 结论

与前面的线性回归相比，你会发现多类逻辑回归教程的结构跟其非常相似：获取数据、定义模型及优化算法和求解。事实上，几乎所有的实际神经网络应用都有着同样结构。他们的主要区别在于模型的类型和数据的规模。每一两年会有一个新的优化算法出来，但它们基本都是随机梯度下降的变种。

3.3.10 练习

尝试增大学习率，你会马上发现结果变得很糟糕，精度基本徘徊在随机的 0.1 左右。这是为什么呢？
提示：

- 打印下 output 看看是不是有什么异常
- 前面线性回归还好好的，这里我们在 net() 里加了什么呢？
- 如果给 exp 输入个很大的数会怎么样？
- 即使解决 exp 的问题，求出来的导数是不是还是不稳定？

请仔细想想再去对比下我们小伙伴之一 @pluskid 早年写的一篇 blog 解释这个问题，看看你想的是不是不一样。

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

3.4 多类逻辑回归—使用 Gluon

现在让我们使用 gluon 来更快速地实现一个多类逻辑回归。

3.4.1 获取和读取数据

我们仍然使用 FashionMNIST。我们将代码保存在..`utils.py`这样这里不用复制一遍。

```
In [1]: import sys  
        sys.path.append('..')  
        import utils  
  
        batch_size = 256  
        train_data, test_data = utils.load_data_fashion_mnist(batch_size)
```

3.4.2 定义和初始化模型

我们先使用 Flatten 层将输入数据转成 `batch_size` x ? 的矩阵，然后输入到 10 个输出节点的全连接层。照例我们不需要制定每层输入的大小，gluon 会做自动推导。

```
In [2]: from mxnet import gluon  
  
        net = gluon.nn.Sequential()  
        with net.name_scope():  
            net.add(gluon.nn.Flatten())  
            net.add(gluon.nn.Dense(10))  
        net.initialize()
```

3.4.3 Softmax 和交叉熵损失函数

如果你做了上一章的练习，那么你可能意识到了分开定义 Softmax 和交叉熵会有数值不稳定性。因此 gluon 提供一个将这两个函数合起来的数值更稳定的版本

```
In [3]: softmax_cross_entropy = gluon.loss.SoftmaxCrossEntropyLoss()
```

3.4.4 优化

```
In [4]: trainer = gluon.Trainer(net.collect_params(), 'sgd', {'learning_rate': 0.1})
```

3.4.5 训练

```
In [5]: from mxnet import ndarray as nd  
        from mxnet import autograd  
  
        for epoch in range(5):  
            train_loss = 0.
```

```

train_acc = 0.
for data, label in train_data:
    with autograd.record():
        output = net(data)
        loss = softmax_cross_entropy(output, label)
    loss.backward()
    trainer.step(batch_size)

    train_loss += nd.mean(loss).asscalar()
    train_acc += utils.accuracy(output, label)

test_acc = utils.evaluate_accuracy(test_data, net)
print("Epoch %d. Loss: %f, Train acc %f, Test acc %f" %
      epoch, train_loss/len(train_data), train_acc/len(train_data),
      test_acc))

```

Epoch 0. Loss: 0.801676, Train acc 0.739867, Test acc 0.786558
Epoch 1. Loss: 0.575579, Train acc 0.810380, Test acc 0.821514
Epoch 2. Loss: 0.531231, Train acc 0.822867, Test acc 0.822616
Epoch 3. Loss: 0.506734, Train acc 0.830061, Test acc 0.836639
Epoch 4. Loss: 0.491764, Train acc 0.833600, Test acc 0.838842

3.4.6 结论

Gluon 提供的函数有时候比手工写的数值更稳定。

3.4.7 练习

- 再尝试调大下学习率看看？
- 为什么参数都差不多，但 gluon 版本比从 0 开始的版本精度更高？

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

3.5 多层感知机—从 0 开始

前面我们介绍了包括线性回归和多类逻辑回归的数个模型，它们的一个共同点是全是只含有一个输入层，一个输出层。这一节我们将介绍多层神经网络，就是包含至少一个隐含层的网络。

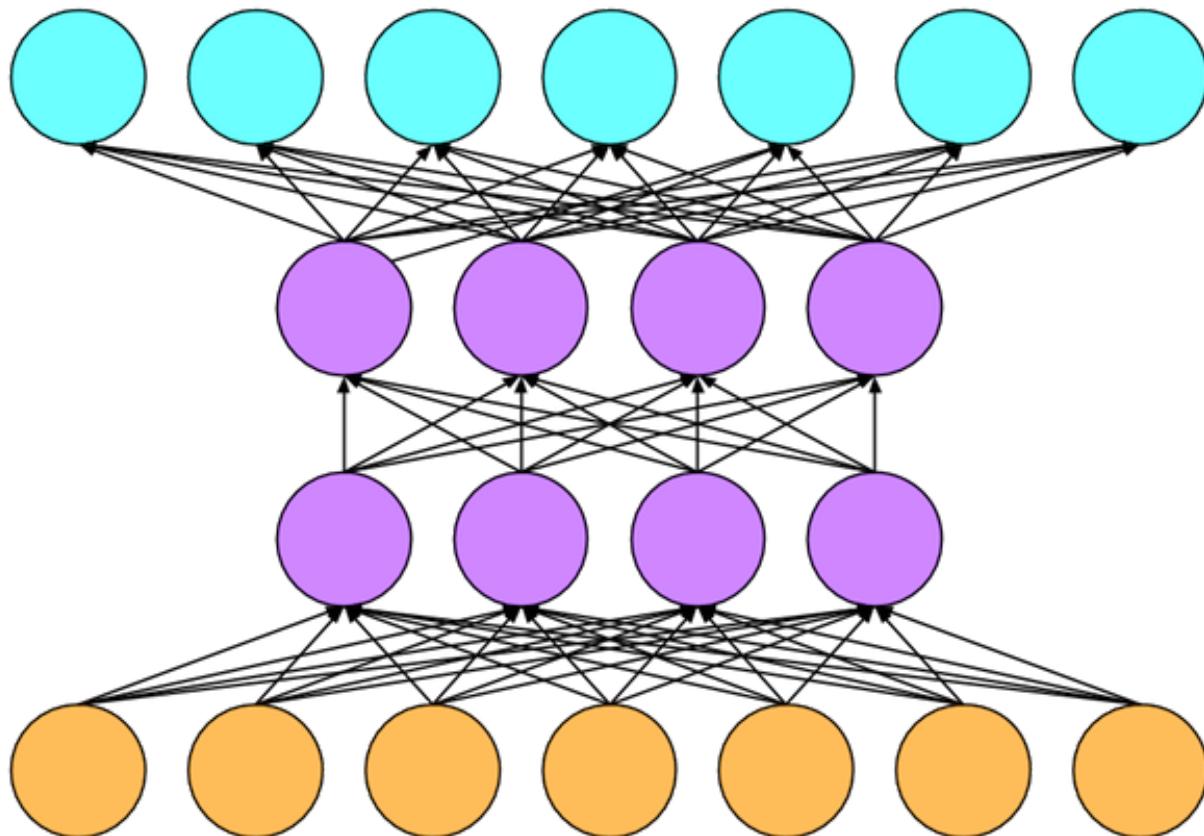
3.5.1 数据获取

我们继续使用 FashionMNIST 数据集。

```
In [1]: import sys  
        sys.path.append('..')  
        import utils  
batch_size = 256  
train_data, test_data = utils.load_data_fashion_mnist(batch_size)
```

3.5.2 多层感知机

多层感知机与前面介绍的多类逻辑回归非常类似，主要的区别是我们在输入层和输出层之间插入了一个到多个隐含层。



这里我们定义一个只有一个隐含层的模型，这个隐含层输出 256 个节点。

```
In [2]: from mxnet import ndarray as nd
```

```
num_inputs = 28*28
```

```

num_outputs = 10

num_hidden = 256
weight_scale = .01

W1 = nd.random_normal(shape=(num_inputs, num_hidden), scale=weight_scale)
b1 = nd.zeros(num_hidden)

W2 = nd.random_normal(shape=(num_hidden, num_outputs), scale=weight_scale)
b2 = nd.zeros(num_outputs)

params = [W1, b1, W2, b2]

for param in params:
    param.attach_grad()

```

3.5.3 激活函数

如果我们就用线性操作符来构造多层神经网络, 那么整个模型仍然只是一个线性函数。这是因为

$$\hat{y} = X \cdot W_1 \cdot W_2 = X \cdot W_3$$

这里 $W_3 = W_1 \cdot W_2$ 。为了让我们的模型可以拟合非线性函数, 我们需要在层之间插入非线性的激活函数。这里我们使用 ReLU

$$\text{relu}(x) = \max(x, 0)$$

```
In [3]: def relu(X):
    return nd.maximum(X, 0)
```

3.5.4 定义模型

我们的模型就是将层（全连接）和激活函数（Relu）串起来:

```
In [4]: def net(X):
    X = X.reshape((-1, num_inputs))
    h1 = relu(nd.dot(X, W1) + b1)
    output = nd.dot(h1, W2) + b2
    return output
```

3.5.5 Softmax 和交叉熵损失函数

在多类 Logistic 回归里我们提到分开实现 Softmax 和交叉熵损失函数可能导致数值不稳定。这里我们直接使用 Gluon 提供的函数

```
In [5]: from mxnet import gluon  
softmax_cross_entropy = gluon.loss.SoftmaxCrossEntropyLoss()
```

3.5.6 训练

训练跟之前一样。

```
In [6]: from mxnet import autograd as autograd  
  
learning_rate = .5  
  
for epoch in range(5):  
    train_loss = 0.  
    train_acc = 0.  
    for data, label in train_data:  
        with autograd.record():  
            output = net(data)  
            loss = softmax_cross_entropy(output, label)  
            loss.backward()  
            utils.SGD(params, learning_rate/batch_size)  
  
        train_loss += nd.mean(loss).asscalar()  
        train_acc += utils.accuracy(output, label)  
  
    test_acc = utils.evaluate_accuracy(test_data, net)  
    print("Epoch %d. Loss: %f, Train acc %f, Test acc %f" % (  
        epoch, train_loss/len(train_data),  
        train_acc/len(train_data), test_acc))  
  
Epoch 0. Loss: 0.790747, Train acc 0.705479, Test acc 0.819611  
Epoch 1. Loss: 0.489409, Train acc 0.819044, Test acc 0.832232  
Epoch 2. Loss: 0.429724, Train acc 0.841129, Test acc 0.853265  
Epoch 3. Loss: 0.395036, Train acc 0.854951, Test acc 0.860477  
Epoch 4. Loss: 0.373908, Train acc 0.862580, Test acc 0.860978
```

3.5.7 总结

可以看到，加入一个隐含层后我们将精度提升了不少。

3.5.8 练习

- 我们使用了 `weight_scale` 来控制权重的初始化值大小，增大或者变小这个值会怎么样？
- 尝试改变 `num_hiddens` 来控制模型的复杂度

- 尝试加入一个新的隐含层

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

3.6 多层感知机——使用 Gluon

我们只需要稍微改动多类 Logistic 回归来实现多层感知机。

3.6.1 定义模型

唯一的区别在这里，我们加了一行进来。

```
In [1]: from mxnet import gluon

net = gluon.nn.Sequential()
with net.name_scope():
    net.add(gluon.nn.Dense(256, activation="relu"))
    net.add(gluon.nn.Dense(10))
net.initialize()
```

3.6.2 读取数据并训练

```
In [2]: import sys
sys.path.append('..')
from mxnet import ndarray as nd
from mxnet import autograd
import utils

batch_size = 256
train_data, test_data = utils.load_data_fashion_mnist(batch_size)

softmax_cross_entropy = gluon.loss.SoftmaxCrossEntropyLoss()
trainer = gluon.Trainer(net.collect_params(), 'sgd', {'learning_rate': 0.5})

for epoch in range(5):
    train_loss = 0.
    train_acc = 0.
    for data, label in train_data:
        with autograd.record():
            output = net(data)
            loss = softmax_cross_entropy(output, label)
```

```
loss.backward()
trainer.step(batch_size)

train_loss += nd.mean(loss).asscalar()
train_acc += utils.accuracy(output, label)

test_acc = utils.evaluate_accuracy(test_data, net)
print("Epoch %d. Loss: %f, Train acc %f, Test acc %f" % (
    epoch, train_loss/len(train_data), train_acc/len(train_data),
    test_acc))

Epoch 0. Loss: 0.718534, Train acc 0.737664, Test acc 0.809195
Epoch 1. Loss: 0.472651, Train acc 0.824219, Test acc 0.783153
Epoch 2. Loss: 0.411912, Train acc 0.847756, Test acc 0.855569
Epoch 3. Loss: 0.379983, Train acc 0.858757, Test acc 0.841146
Epoch 4. Loss: 0.361155, Train acc 0.866820, Test acc 0.873397
```

3.6.3 结论

通过 Gluon 我们可以更方便地构造多层神经网络。

3.6.4 练习

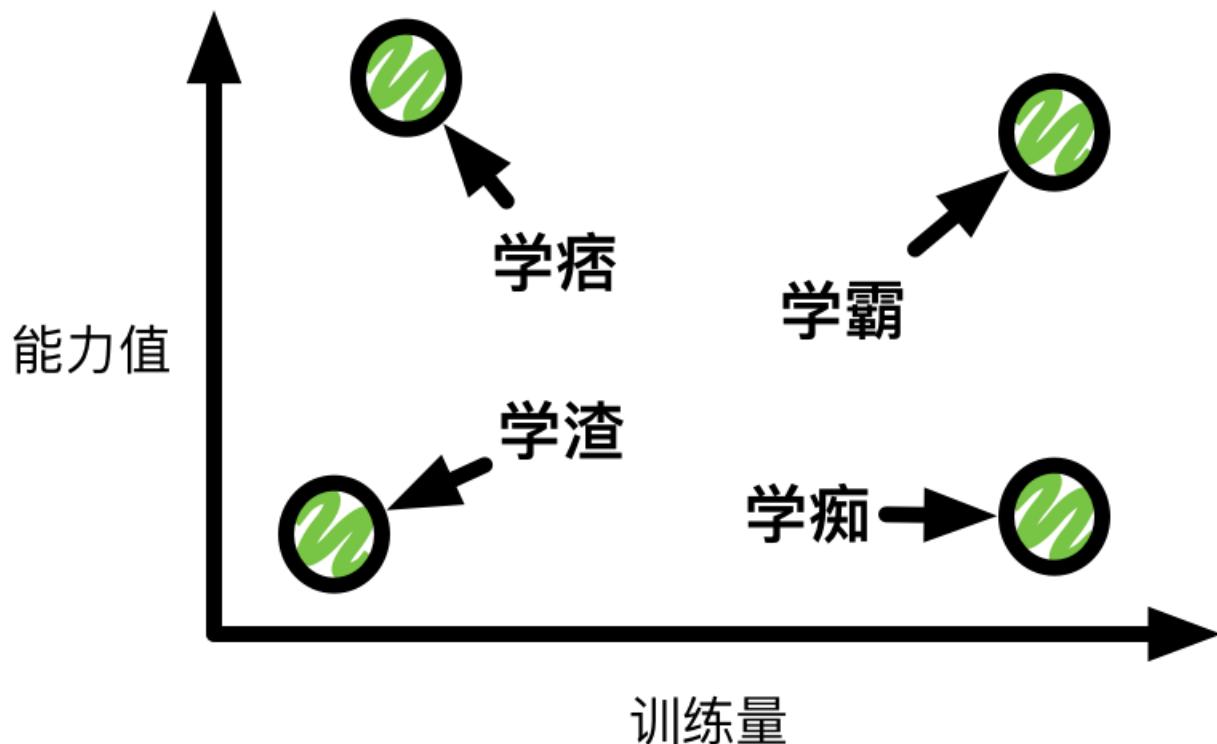
- 尝试多加入几个隐含层，对比从 0 开始的实现。
- 尝试使用一个另外的激活函数，可以使用 `help(nd.Activation)` 或者[线上文档](#)查看提供的选项。

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

3.7 欠拟合和过拟合

你有没有类似这样的体验？考试前突击背了模拟题的答案，模拟题随意秒杀。但考试时出的题即便和模拟题相关，只要不是原题依然容易考挂。换种情况来说，如果考试前通过自己的学习能力从模拟题的答案里总结出一个比较通用的解题套路，考试时碰到这些模拟题的变种更容易答对。

有人曾依据这种现象对学生群体简单粗暴地做了如下划分：



这里简要总结上图中学生的特点：

- 学渣：能力不行，也不认真做作业，容易考挂
- 学痞：能力不错，但喜欢裸奔，但还是可能考得比学渣好
- 学痴：能力不行，但贵在认真，考不赢学霸但秒掉学渣毫无压力
- 学霸：有能力，而且卖力，考完后喜大普奔

(现在问题来了，学酥应该在上图的哪里?)

学生的考试成绩和看起来与自身的训练量以及自身的学习能力有关。但即使是在科技进步的今天，我们依然没有完全知悉人类大脑学习的所有奥秘。的确，依赖数据训练的机器学习和人脑学习不一定完全相同。但有趣的是，机器学习模型也可能由于自身不同的训练量和不同的学习能力而产生不同的测试效果。为了科学地阐明这个现象，我们需要从若干机器学习的重要概念开始讲解。

3.7.1 训练误差（模考成绩）和泛化误差（考试成绩）

在实践中，机器学习模型通常在训练数据集上训练并不断调整模型里的参数。之后，我们通常把训练得到的模型在一个区别于训练数据集的测试数据集上测试，并根据测试结果评价模型的好坏。机

器学习模型在训练数据集上表现出的误差叫做**训练误差**，在任意一个测试数据样本上表现出的误差的期望值叫做**泛化误差**。

训练误差和泛化误差的计算可以利用我们之前提到的损失函数，例如[线性回归](#)里用到的平方误差和[多类逻辑回归](#)里用到的交叉熵损失函数。

之所以要了解训练误差和泛化误差，是因为统计学习理论基于这两个概念可以科学解释本节教程一开始提到的模型不同的测试效果。我们知道，理论的研究往往需要基于一些假设。而统计学习理论的一个假设是：

训练数据集和测试数据集里的每一个数据样本都是从同一个概率分布中相互独立地生成出的（独立同分布假设）。

基于以上独立同分布假设，给定任意一个机器学习模型及其参数，它的训练误差的期望值和泛化误差都是一样的。然而从之前的章节中我们了解到，在机器学习的过程中，模型的参数并不是事先给定的，而是通过训练数据学习得出的：模型的参数在训练中使训练误差不断降低。所以，如果模型参数是通过训练数据学习得出的，那么训练误差的期望值无法高于泛化误差。换句话说，通常情况下，由训练数据学到的模型参数会使模型在训练数据上的表现不差于在测试数据上的表现。

因此，一个重要结论是：

训练误差的降低不一定意味着泛化误差的降低。机器学习既需要降低训练误差，又需要降低泛化误差。

3.7.2 欠拟合和过拟合

实践中，如果测试数据集是给定的，我们通常用机器学习模型在该测试数据集的误差来反映泛化误差。基于上述重要结论，以下两种拟合问题值得注意：

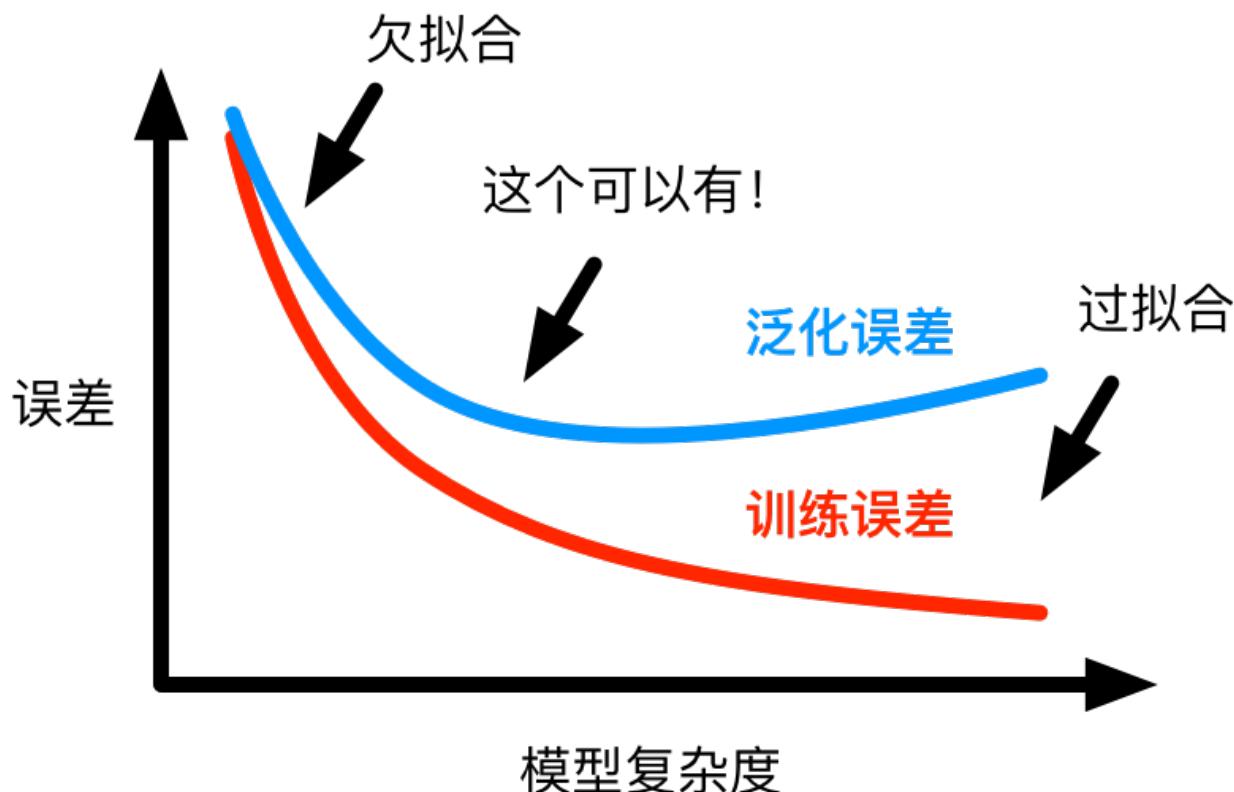
- **欠拟合**：机器学习模型无法得到较低训练误差。
- **过拟合**：机器学习模型的训练误差远小于其在测试数据集上的误差。

我们要尽可能同时避免欠拟合和过拟合的出现。虽然有很多因素可能导致这两种拟合问题，在这里我们重点讨论两个因素：模型的选择和训练数据集的大小。

模型的选择

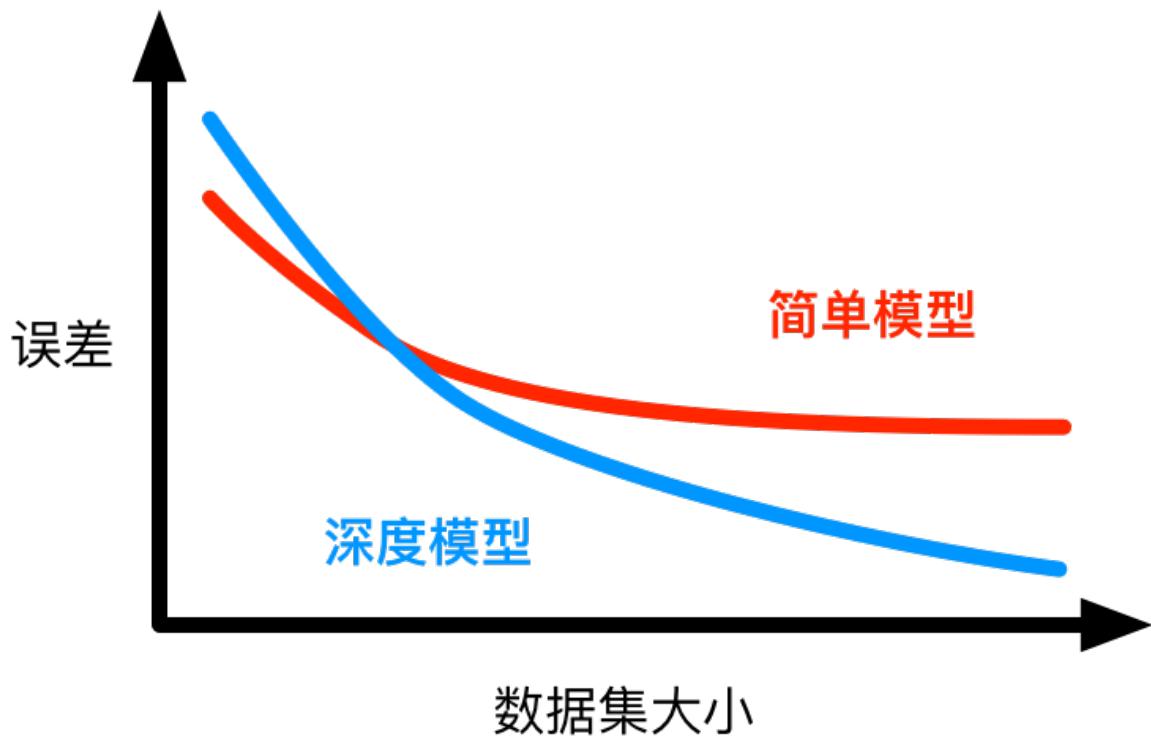
在本节的开头，我们提到一个学生可以有特定的学习能力。类似地，一个机器学习模型也有特定的拟合能力。拿多项式函数举例，一般来说，高阶多项式函数（拟合能力较强）比低阶多项式函数（拟合能力较弱）更容易在相同的训练数据集上得到较低的训练误差。需要指出的是，给定数据集，过

低拟合能力的模型更容易欠拟合，而过高拟合能力的模型更容易过拟合。模型拟合能力和误差之间的关系如下图。



训练数据集的大小

在本节的开头，我们同样提到一个学生可以有特定的训练量。类似地，一个机器学习模型的训练数据集的样本数也可大可小。一般来说，如果训练数据集过小，特别是比模型参数数量更小时，过拟合更容易发生。除此之外，泛化误差不会随训练数据集里样本数量增加而增大。



为了理解这两个因素对拟合和过拟合的影响，下面让我们来动手学习。

3.7.3 多项式拟合

我们以多项式拟合为例。给定一个标量数据点集合 x 和对应的标量目标值 y ，多项式拟合的目标是找一个 K 阶多项式，其由向量 w 和位移 b 组成，来最好地近似每个样本 x 和 y 。用数学符号来表示就是我们将学 w 和 b 来预测

$$\hat{y} = b + \sum_{k=1}^K x^k w_k$$

并以平方误差为损失函数。特别地，一阶多项式拟合又叫线性拟合。

创建数据集

这里我们使用一个人工数据集来把事情弄简单些，因为这样我们将知道真实的模型是什么样的。具体来说我们使用如下的二阶多项式来生成每一个数据样本

$$y = 1.2x - 3.4x^2 + 5.6x^3 + 5.0 + \text{noise}$$

这里噪音服从均值 0 和标准差为 0.1 的正态分布。

需要注意的是，我们用以上相同的数据生成函数来生成训练数据集和测试数据集。两个数据集的样本数都是 100。

```
In [1]: from mxnet import ndarray as nd
        from mxnet import autograd
        from mxnet import gluon

        num_train = 100
        num_test = 100
        true_w = [1.2, -3.4, 5.6]
        true_b = 5.0
```

下面生成数据集。

```
In [2]: x = nd.random.normal(shape=(num_train + num_test, 1))
        X = nd.concat(x, nd.power(x, 2), nd.power(x, 3))
        y = true_w[0] * X[:, 0] + true_w[1] * X[:, 1] + true_w[2] * X[:, 2] + true_b
        y += .1 * nd.random.normal(shape=y.shape)

        ('x:', x[:5], 'X:', X[:5], 'y:', y[:5])

Out[2]: ('x:',
 [[ 2.21220636]
 [ 0.7740038 ]
 [ 1.04344046]
 [ 1.18392551]
 [ 1.89171135]]
<NDArray 5x1 @cpu(0)>, 'X:',
 [[ 2.21220636  4.893857  10.82622147]
 [ 0.7740038   0.59908187  0.46369165]
 [ 1.04344046  1.08876801  1.13606453]
 [ 1.18392551  1.40167964  1.65948427]
 [ 1.89171135  3.5785718   6.76962519]]
<NDArray 5x3 @cpu(0)>, 'y:',
 [ 51.6748848   6.3585763   8.94907284  11.09345436  33.03696442]
<NDArray 5 @cpu(0)>)
```

定义训练和测试步骤

我们定义一个训练和测试的函数，这样在跑不同的实验时不需要重复实现相同的步骤。

以下的训练步骤在[使用 Gluon 的线性回归](#)有过详细描述。这里不再赘述。

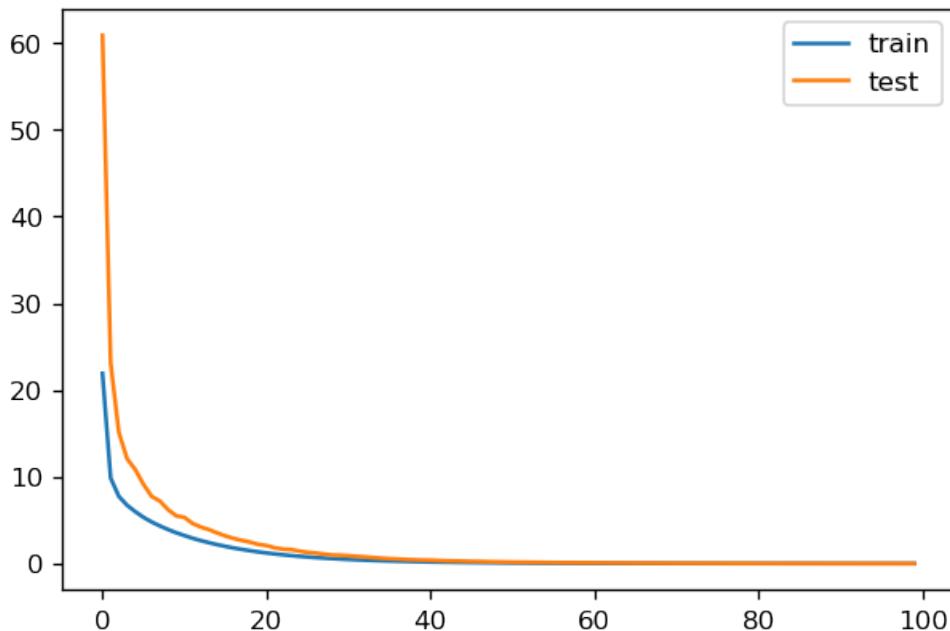
```
In [3]: %matplotlib inline
        import matplotlib as mpl
        mpl.rcParams['figure.dpi']= 120
        import matplotlib.pyplot as plt
```

```
def train(X_train, X_test, y_train, y_test):
    # 线性回归模型
    net = gluon.nn.Sequential()
    with net.name_scope():
        net.add(gluon.nn.Dense(1))
    net.initialize()
    # 设一些默认参数
    learning_rate = 0.01
    epochs = 100
    batch_size = min(10, y_train.shape[0])
    dataset_train = gluon.data.ArrayDataset(X_train, y_train)
    data_iter_train = gluon.data.DataLoader(
        dataset_train, batch_size, shuffle=True)
    # 默认 SGD 和均方误差
    trainer = gluon.Trainer(net.collect_params(), 'sgd', {
        'learning_rate': learning_rate})
    square_loss = gluon.loss.L2Loss()
    # 保存训练和测试损失
    train_loss = []
    test_loss = []
    for e in range(epochs):
        for data, label in data_iter_train:
            with autograd.record():
                output = net(data)
                loss = square_loss(output, label)
            loss.backward()
            trainer.step(batch_size)
        train_loss.append(square_loss(
            net(X_train), y_train).mean().asscalar())
        test_loss.append(square_loss(
            net(X_test), y_test).mean().asscalar())
    # 打印结果
    plt.plot(train_loss)
    plt.plot(test_loss)
    plt.legend(['train', 'test'])
    plt.show()
    return ('learned weight', net[0].weight.data(),
           'learned bias', net[0].bias.data())
```

三阶多项式拟合（正常）

我们先使用与数据生成函数同阶的三阶多项式拟合。实验表明这个模型的训练误差和在测试数据集的误差都较低。训练出的模型参数也接近真实值。

```
In [4]: train(X[:num_train, :], X[num_train:, :], y[:num_train], y[num_train:])
```

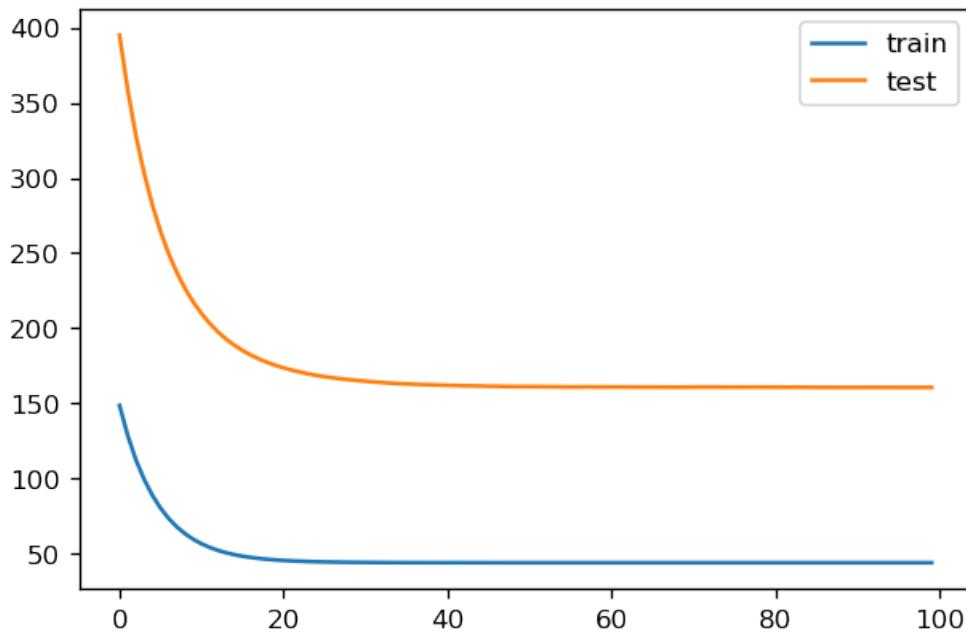


```
Out[4]: ('learned weight',
 [[ 1.32253385 -3.36304712  5.5643568 ]],
 <NDArray 1x3 @cpu(0)>, 'learned bias',
 [ 4.95249128]
 <NDArray 1 @cpu(0)>)
```

线性拟合（欠拟合）

我们再试试线性拟合。很明显，该模型的训练误差很高。线性模型在非线性模型（例如三阶多项式）生成的数据集上容易欠拟合。

```
In [5]: train(x[:num_train, :], x[num_train:, :], y[:num_train], y[num_train:])
```

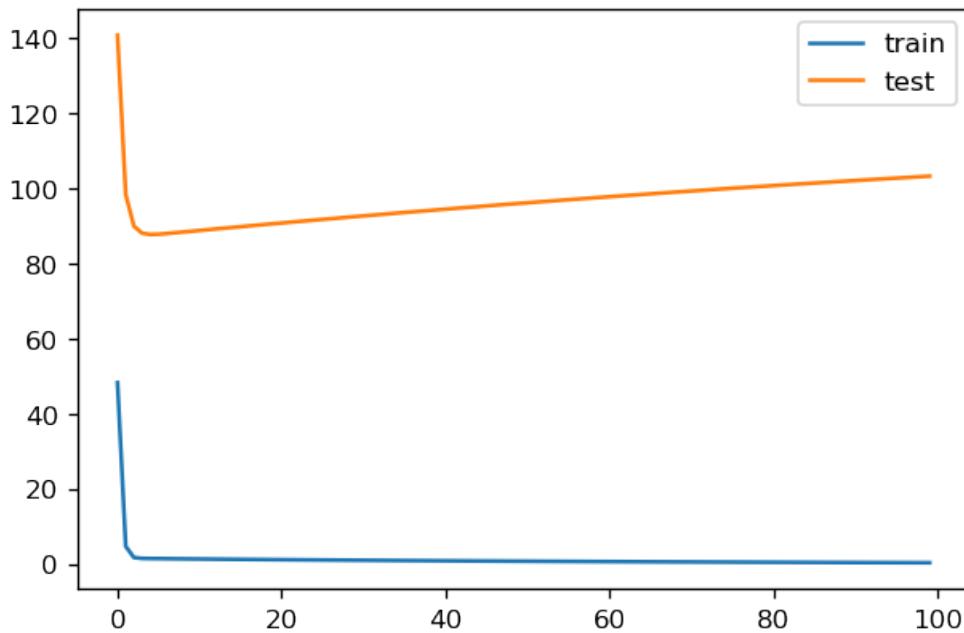


```
Out[5]: ('learned weight',
 [[ 15.57034016]],
 <NDArray 1x1 @cpu(0)>, 'learned bias',
 [ 2.28222108]
 <NDArray 1 @cpu(0)>)
```

训练量不足（过拟合）

事实上，即便是使用与数据生成模型同阶的三阶多项式模型，如果训练量不足，该模型依然容易过拟合。让我们仅仅使用两个训练样本来训练。很显然，训练样本过少了，甚至少于模型参数的数量。这使模型显得过于复杂，以至于容易被训练数据集中的噪音影响。在机器学习过程中，即便训练误差很低，但是测试数据集上的误差很高。这是典型的过拟合现象。

```
In [6]: train(X[0:2, :], X[num_train:, :], y[0:2], y[num_train:])
```



```
Out[6]: ('learned weight',
 [[ 1.38723636  1.93765891  3.50859237]]
 <NDArray 1x3 @cpu(0)>, 'learned bias',
 [ 1.23128557]
 <NDArray 1 @cpu(0)>)
```

我们还将在后面的章节继续讨论过拟合问题以及应对过拟合的方法，例如正则化。

3.7.4 结论

- 训练误差的降低并不一定意味着泛化误差的降低。
- 欠拟合和过拟合都是需要尽量避免的。我们要注意模型的选择和训练量的大小。

3.7.5 练习

- 学渣、学痞、学痴和学霸对应的模型复杂度、训练量、训练误差和泛化误差分别是怎样的？
- 如果用一个三阶多项式模型来拟合一个线性模型生成的数据，可能会有什么问题？为什么？
- 在我们本节提到的三阶多项式拟合问题里，有没有可能把 1000 个样本的训练误差的期望降到 0，为什么？

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

3.8 正则化—从 0 开始

本章从 0 开始介绍如何的正则化来应对过拟合问题。

3.8.1 高维线性回归

我们使用高维线性回归为例来引入一个过拟合问题。

具体来说我们使用如下的线性函数来生成每一个数据样本

$$y = 0.05 + \sum_{i=1}^p 0.01x_i + \text{noise}$$

这里噪音服从均值 0 和标准差为 0.01 的正态分布。

需要注意的是，我们用以上相同的数据生成函数来生成训练数据集和测试数据集。为了观察过拟合，我们特意把训练数据样本数设低，例如 $n = 20$ ，同时把维度升高，例如 $p = 200$ 。

```
In [1]: from mxnet import ndarray as nd
        from mxnet import autograd
        from mxnet import gluon
        import mxnet as mx

        num_train = 20
        num_test = 100
        num_inputs = 200
```

3.8.2 生成数据集

这里定义模型真实参数。

```
In [2]: true_w = nd.ones((num_inputs, 1)) * 0.01
        true_b = 0.05
```

我们接着生成训练和测试数据集。

```
In [3]: X = nd.random.normal(shape=(num_train + num_test, num_inputs))
        y = nd.dot(X, true_w) + true_b
        y += .01 * nd.random.normal(shape=y.shape)

        X_train, X_test = X[:num_train, :], X[num_train:, :]
        y_train, y_test = y[:num_train], y[num_train:]
```

当我们开始训练神经网络的时候，我们需要不断读取数据块。这里我们定义一个函数它每次返回 `batch_size` 个随机的样本和对应的目标。我们通过 python 的 `yield` 来构造一个迭代器。

```
In [4]: import random
batch_size = 1
def data_iter(num_examples):
    idx = list(range(num_examples))
    random.shuffle(idx)
    for i in range(0, num_examples, batch_size):
        j = nd.array(idx[i:min(i+batch_size,num_examples)])
        yield X.take(j), y.take(j)
```

3.8.3 初始化模型参数

下面我们随机初始化模型参数。之后训练时我们需要对这些参数求导来更新它们的值，所以我们需要创建它们的梯度。

```
In [5]: def init_params():
    w = nd.random_normal(scale=1, shape=(num_inputs, 1))
    b = nd.zeros(shape=(1,))
    params = [w, b]
    for param in params:
        param.attach_grad()
    return params
```

3.8.4 L_2 范数正则化

这里我们引入 L_2 范数正则化。不同于在训练时仅仅最小化损失函数 (Loss)，我们在训练时其实在最小化

$$\text{loss} + \lambda \sum_{p \in \text{params}} \|p\|_2^2$$

直观上， L_2 范数正则化试图惩罚较大绝对值的参数值。下面我们定义 L2 正则化。注意有些时候大家对偏移加罚，有时候不加罚。通常结果上两者区别不大。这里我们演示对偏移也加罚的情况：

```
In [6]: def L2_penalty(w, b):
    return ((w**2).sum() + b**2) / 2
```

3.8.5 定义训练和测试

下面我们定义剩下的所需要的函数。这个跟之前的教程大致一样，主要是区别在于计算 `loss` 的时候我们加上了 L2 正则化，以及我们将训练和测试损失都画了出来。

```
In [7]: %matplotlib inline
import matplotlib as mpl
mpl.rcParams['figure.dpi']= 120
```

```
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np

def net(X, w, b):
    return np.dot(X, w) + b

def square_loss(yhat, y):
    return (yhat - y.reshape(yhat.shape)) ** 2 / 2

def sgd(params, lr, batch_size):
    for param in params:
        param[:] = param - lr * param.grad / batch_size

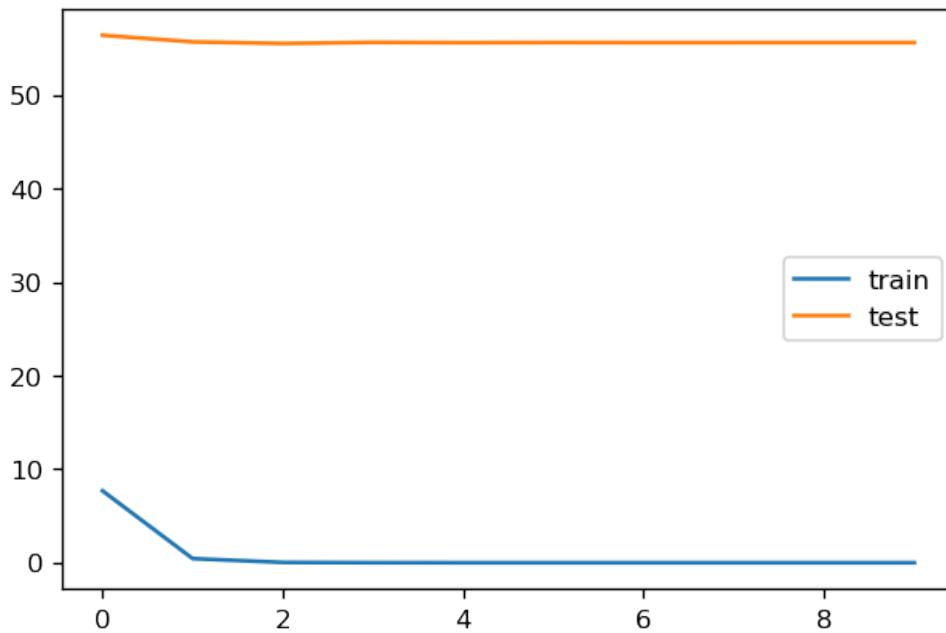
def test(net, params, X, y):
    return square_loss(net(X, *params), y).mean().asscalar()
#return np.mean(square_loss(net(X, *params), y).asnumpy())

def train(lambd):
    epochs = 10
    learning_rate = 0.005
    w, b = params = init_params()
    train_loss = []
    test_loss = []
    for e in range(epochs):
        for data, label in data_iter(num_train):
            with autograd.record():
                output = net(data, *params)
                loss = square_loss(
                    output, label) + lambd * L2_penalty(*params)
            loss.backward()
            sgd(params, learning_rate, batch_size)
        train_loss.append(test(net, params, X_train, y_train))
        test_loss.append(test(net, params, X_test, y_test))
    plt.plot(train_loss)
    plt.plot(test_loss)
    plt.legend(['train', 'test'])
    plt.show()
    return 'learned w[:10]:', w[:10].T, 'learned b:', b
```

3.8.6 观察过拟合

接下来我们训练并测试我们的高维线性回归模型。注意这时我们并未使用正则化。

In [8]: train(0)



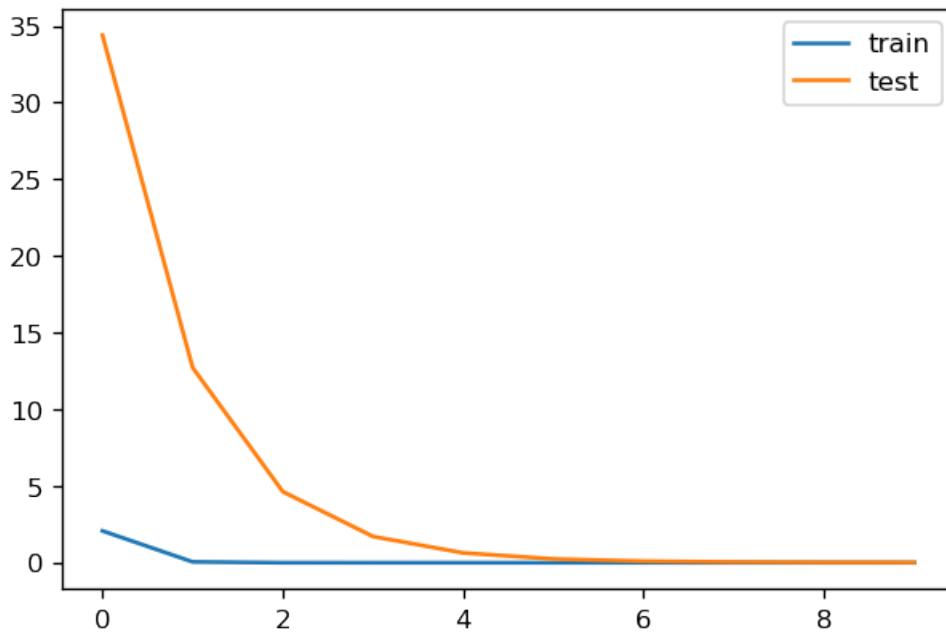
```
Out[8]: ('learned w[:10]:',
 [[-0.8182658 -0.22133528 -0.7477563 -2.26074338 -0.10052111 -0.69786942
 -0.09946157 0.61101913 -1.10575795 -1.45006227]]
 <NDArray 1x10 @cpu(0)>, 'learned b:',
 [-0.38759565]
 <NDArray 1 @cpu(0)>)
```

即便训练误差可以达到 0.000000，但是测试数据集上的误差很高。这是典型的过拟合现象。
观察学习的参数。事实上，大部分学到的参数的绝对值比真实参数的绝对值要大一些。

3.8.7 使用正则化

下面我们重新初始化模型参数并设置一个正则化参数。

```
In [9]: train(5)
```



```
Out[9]: ('learned w[:10]:',
 [[ 0.00633343  0.00422128 -0.00130939  0.0041068  -0.00109203  0.00434818
    0.0024653   0.00069299  0.00497996  0.00210173]],
 <NDArray 1x10 @cpu(0)>, 'learned b:',
 [ 0.00817512]
 <NDArray 1 @cpu(0)>)
```

我们发现训练误差虽然有所提高，但测试数据集上的误差有所下降。过拟合现象得到缓解。但打印出的学到的参数依然不是很理想，这主要是因为我们训练数据的样本相对维度来说太少。

3.8.8 结论

- 我们可以使用正则化来应对过拟合问题。

3.8.9 练习

- 除了正则化、增大训练量、以及使用合适的模型，你觉得还有哪些办法可以应对过拟合现象？
- 如果你了解贝叶斯统计，你觉得 L_2 范数正则化对应贝叶斯统计里的哪个重要概念？

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

3.9 正则化—使用 Gluon

本章介绍如何使用 Gluon 的正则化来应对过拟合问题。

3.9.1 高维线性回归数据集

我们使用与上一节相同的高维线性回归为例来引入一个过拟合问题。

```
In [1]: from mxnet import ndarray as nd
        from mxnet import autograd
        from mxnet import gluon
        import mxnet as mx

        num_train = 20
        num_test = 100
        num_inputs = 200

        true_w = nd.ones((num_inputs, 1)) * 0.01
        true_b = 0.05

        X = nd.random.normal(shape=(num_train + num_test, num_inputs))
        y = nd.dot(X, true_w) + true_b
        y += .01 * nd.random.normal(shape=y.shape)

        X_train, X_test = X[:num_train, :], X[num_train:, :]
        y_train, y_test = y[:num_train], y[num_train:]
```

3.9.2 定义训练和测试

跟前一样定义训练模块。你也许发现了主要区别, Trainer 有一个新参数 wd。我们通过优化算法的 wd 参数 (weight decay) 实现对模型的正则化。这相当于 L_2 范数正则化。

```
In [2]: %matplotlib inline
        import matplotlib as mpl
        mpl.rcParams['figure.dpi']= 120
        import matplotlib.pyplot as plt
        import numpy as np

        batch_size = 1
        dataset_train = gluon.data.ArrayDataset(X_train, y_train)
        data_iter_train = gluon.data.DataLoader(dataset_train, batch_size,
→ shuffle=True)
```

```
square_loss = gluon.loss.L2Loss()

def test(net, X, y):
    return square_loss(net(X), y).mean().asscalar()

def train(weight_decay):
    epochs = 10
    learning_rate = 0.005
    net = gluon.nn.Sequential()
    with net.name_scope():
        net.add(gluon.nn.Dense(1))
    net.collect_params().initialize(mx.init.Normal(sigma=1))

    # 注意到这里 'wd'
    trainer = gluon.Trainer(net.collect_params(), 'sgd', {
        'learning_rate': learning_rate, 'wd': weight_decay})

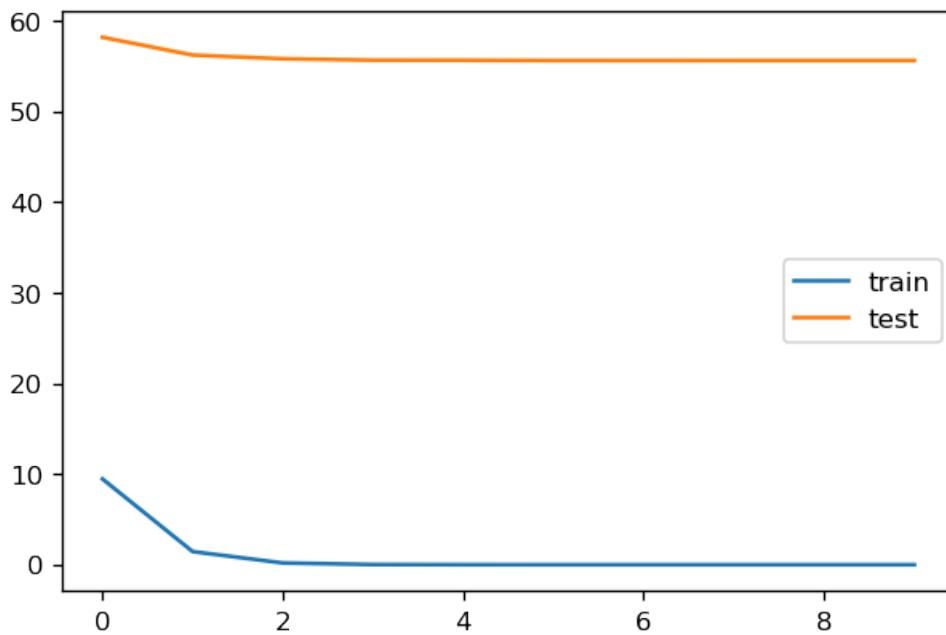
    train_loss = []
    test_loss = []
    for e in range(epochs):
        for data, label in data_iter_train:
            with autograd.record():
                output = net(data)
                loss = square_loss(output, label)
                loss.backward()
                trainer.step(batch_size)
        train_loss.append(test(net, X_train, y_train))
        test_loss.append(test(net, X_test, y_test))
    plt.plot(train_loss)
    plt.plot(test_loss)
    plt.legend(['train', 'test'])
    plt.show()

    return ('learned w[:10]:', net[0].weight.data()[:, :10],
           'learned b:', net[0].bias.data())
```

训练模型并观察拟合

接下来我们训练并测试我们的高维线性回归模型。

In [3]: `train(0)`



```
Out[3]: ('learned w[:10]:',
 [[-0.81826764 -0.22134021 -0.74775624 -2.26074052 -0.10052087 -0.69787484
 -0.09945675 0.61101449 -1.10575438 -1.45005715]]
 <NDArray 1x10 @cpu(0)>, 'learned b:',
 [-0.38759315]
 <NDArray 1 @cpu(0)>)
```

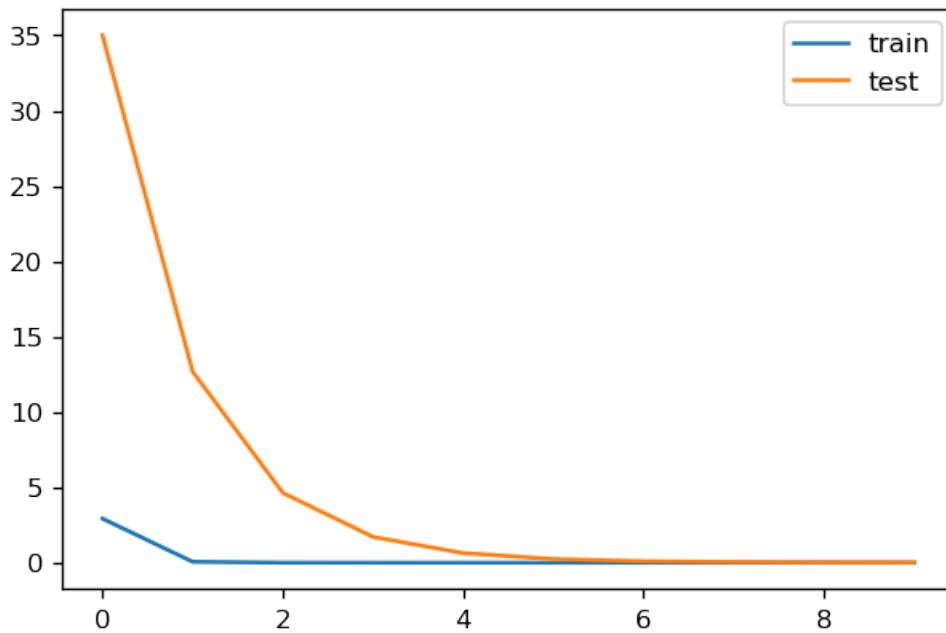
即便训练误差可以达到 0.000000，但是测试数据集上的误差很高。这是典型的过拟合现象。

观察学习的参数。事实上，大部分学到的参数的绝对值比真实参数的绝对值要大一些。

3.9.3 使用 Gluon 的正则化

下面我们重新初始化模型参数并在 Trainer 里设置一个 wd 参数。

```
In [4]: train(5)
```



```
Out[4]: ('learned w[:10]:',
 [[ 0.00595675  0.00217675 -0.00160952  0.00308067 -0.00117442  0.00386955
   0.00253454  0.00032761  0.00419771  0.00169755]],
 <NDArray 1x10 @cpu(0)>, 'learned b:',
 [ 0.00723887]
 <NDArray 1 @cpu(0)>)
```

我们发现训练误差虽然有所提高，但测试数据集上的误差有所下降。过拟合现象得到缓解。但打印出的学到的参数依然不是很理想，这主要是因为我们训练数据的样本相对维度来说太少。

3.9.4 结论

- 使用 Gluon 的 weight decay 参数可以很容易地使用正则化来应对过拟合问题。

3.9.5 练习

- 如何从字面正确理解 weight decay 的含义？它为何相当于 L_2 范式正则化？

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

3.10 丢弃法 (Dropout) — 从 0 开始

前面我们介绍了多层神经网络，就是包含至少一个隐含层的网络。我们也介绍了正则法来应对过拟合问题。在深度学习中，一个常用的应对过拟合问题的方法叫做丢弃法 (Dropout)。本节以多层

神经网络为例，从 0 开始介绍丢弃法。

由于丢弃法的概念和实现非常容易，在本节中，我们先介绍丢弃法的概念以及它在现代神经网络中是如何实现的。然后我们一起探讨丢弃法的本质。

3.10.1 丢弃法的概念

在现代神经网络中，我们所指的丢弃法，通常是对输入层或者隐含层做以下操作：

- 随机选择一部分该层的输出作为丢弃元素；
- 把丢弃元素乘以 0；
- 把非丢弃元素拉伸。

3.10.2 丢弃法的实现

丢弃法的实现很容易，例如像下面这样。这里的标量 `drop_probability` 定义了一个 `X` (`NDArray` 类) 中任何一个元素被丢弃的概率。

```
In [1]: from mxnet import nd

def dropout(X, drop_probability):
    keep_probability = 1 - drop_probability
    assert 0 <= keep_probability <= 1
    # 这种情况下把全部元素都丢弃。
    if keep_probability == 0:
        return X.zeros_like()

    # 随机选择一部分该层的输出作为丢弃元素。
    mask = nd.random.uniform(
        0, 1.0, X.shape, ctx=X.context) < keep_probability
    # 保证  $E[\text{dropout}(X)] = X$ 
    scale = 1 / keep_probability
    return mask * X * scale
```

我们运行几个实例来验证一下。

```
In [2]: A = nd.arange(20).reshape((5,4))
dropout(A, 0.0)
```

Out[2]:

```
[[ 0.   1.   2.   3.]
 [ 4.   5.   6.   7.]
 [ 8.   9.  10.  11.]
 [12.  13.  14.  15.]]
```

```
[ 16.  17.  18.  19.]
<NDArray 5x4 @cpu(0)>
```

In [3]: `dropout(A, 0.5)`

Out[3]:

```
[[ 0.  0.  0.  6.]
 [ 0.  10.  0.  0.]
 [ 16.  18.  20.  0.]
 [ 24.  26.  0.  0.]
 [ 0.  34.  0.  0.]]
<NDArray 5x4 @cpu(0)>
```

In [4]: `dropout(A, 1.0)`

Out[4]:

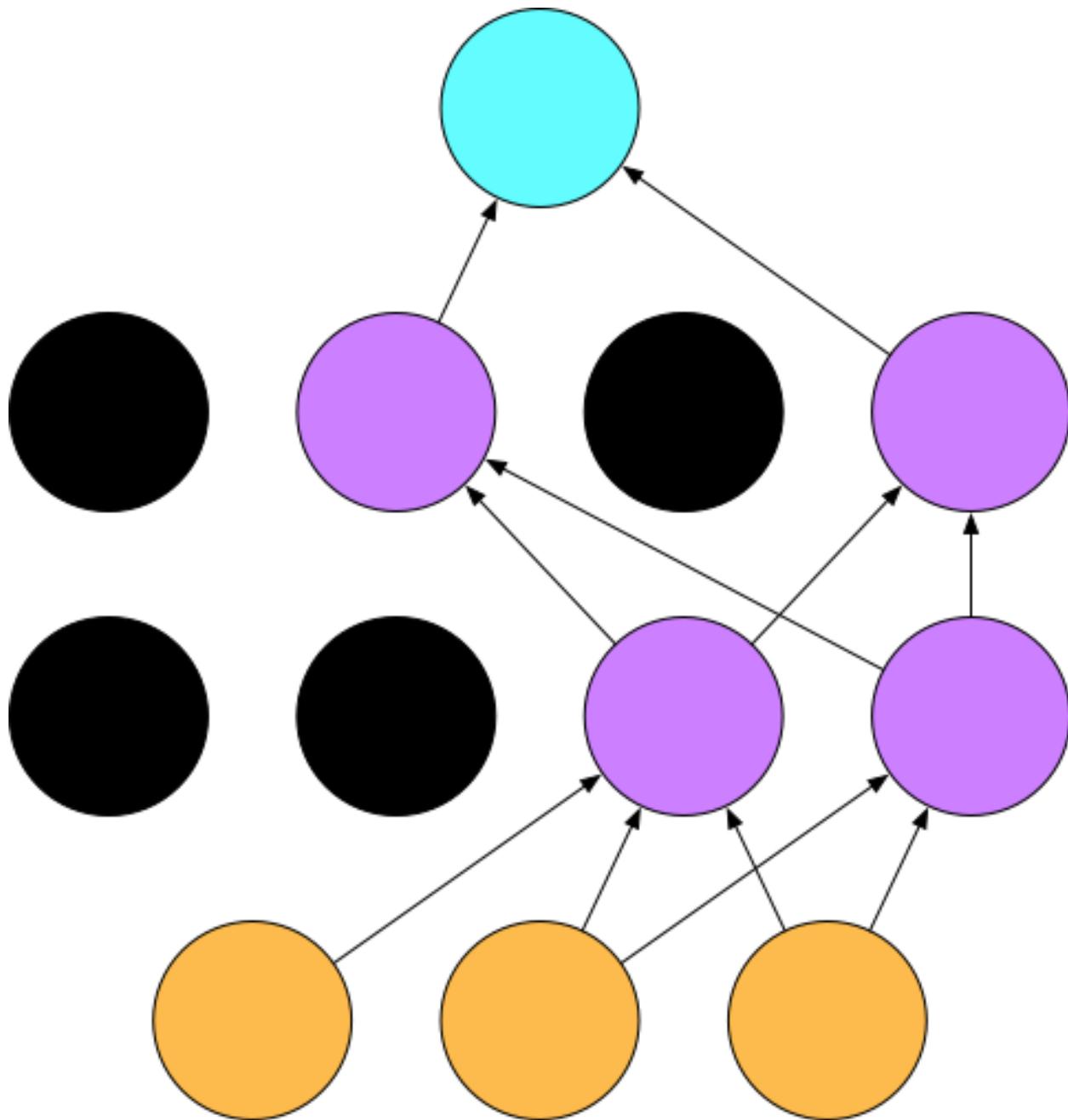
```
[[ 0.  0.  0.  0.]
 [ 0.  0.  0.  0.]
 [ 0.  0.  0.  0.]
 [ 0.  0.  0.  0.]
 [ 0.  0.  0.  0.]]
<NDArray 5x4 @cpu(0)>
```

3.10.3 丢弃法的本质

了解了丢弃法的概念与实现，那你可能对它的本质产生了好奇。

如果你了解集成学习，你可能知道它在提升弱分类器准确率上的威力。一般来说，在集成学习里，我们可以对训练数据集有放回地采样若干次并分别训练若干个不同的分类器；测试时，把这些分类器的结果集成一下作为最终分类结果。

事实上，丢弃法在模拟集成学习。试想，一个使用了丢弃法的多层神经网络本质上是原始网络的子集（节点和边）。举个例子，它可能长这个样子。



我们在之前的章节里介绍过[随机梯度下降算法](#)：我们在训练神经网络模型时一般随机采样一个批量的训练数据。丢弃法实质上是对每一个这样的数据集分别训练一个原神经网络子集的分类器。与一般的集成学习不同，这里每个原神经网络子集的分类器用的是同一套参数。因此丢弃法只是在模拟集成学习。

我们刚刚强调了，原神经网络子集的分类器在不同的训练数据批量上训练并使用同一套参数。因此，使用丢弃法的神经网络实质上是对输入层和隐含层的参数做了正则化：学到的参数使得原神经网络不同子集在训练数据上都尽可能表现良好。

下面我们动手实现一下在多层神经网络里加丢弃层。

3.10.4 数据获取

我们继续使用 FashionMNIST 数据集。

```
In [5]: import sys
        sys.path.append('..')
        import utils
        batch_size = 256
        train_data, test_data = utils.load_data_fashion_mnist(batch_size)
```

3.10.5 含两个隐藏层的多层感知机

多层感知机已经在之前章节里介绍。与之前章节不同，这里我们定义一个包含两个隐含层的模型，两个隐含层都输出 256 个节点。我们定义激活函数 Relu 并直接使用 Gluon 提供的交叉熵损失函数。

```
In [6]: num_inputs = 28*28
        num_outputs = 10

        num_hidden1 = 256
        num_hidden2 = 256
        weight_scale = .01

        W1 = nd.random_normal(shape=(num_inputs, num_hidden1), scale=weight_scale)
        b1 = nd.zeros(num_hidden1)

        W2 = nd.random_normal(shape=(num_hidden1, num_hidden2), scale=weight_scale)
        b2 = nd.zeros(num_hidden2)

        W3 = nd.random_normal(shape=(num_hidden2, num_outputs), scale=weight_scale)
        b3 = nd.zeros(num_outputs)

        params = [W1, b1, W2, b2, W3, b3]

        for param in params:
            param.attach_grad()
```

3.10.6 定义包含丢弃层的模型

我们的模型就是将层（全连接）和激活函数（Relu）串起来，并在应用激活函数后添加丢弃层。每个丢弃层的元素丢弃概率可以分别设置。一般情况下，我们推荐把更靠近输入层的元素丢弃概率设

的更小一点。这个试验中，我们把第一层全连接后的元素丢弃概率设为 0.2，把第二层全连接后的元素丢弃概率设为 0.5。

```
In [7]: drop_prob1 = 0.2
drop_prob2 = 0.5

def net(X):
    X = X.reshape((-1, num_inputs))
    # 第一层全连接。
    h1 = nd.relu(nd.dot(X, W1) + b1)
    # 在第一层全连接后添加丢弃层。
    h1 = dropout(h1, drop_prob1)
    # 第二层全连接。
    h2 = nd.relu(nd.dot(h1, W2) + b2)
    # 在第二层全连接后添加丢弃层。
    h2 = dropout(h2, drop_prob2)
    return nd.dot(h2, W3) + b3
```

3.10.7 训练

训练跟之前一样。

```
In [8]: from mxnet import autograd
from mxnet import gluon

softmax_cross_entropy = gluon.loss.SoftmaxCrossEntropyLoss()

learning_rate = .5

for epoch in range(5):
    train_loss = 0.
    train_acc = 0.
    for data, label in train_data:
        with autograd.record():
            output = net(data)
            loss = softmax_cross_entropy(output, label)
        loss.backward()
        utils.SGD(params, learning_rate/batch_size)

        train_loss += nd.mean(loss).asscalar()
        train_acc += utils.accuracy(output, label)

    test_acc = utils.evaluate_accuracy(test_data, net)
    print("Epoch %d. Loss: %f, Train acc %f, Test acc %f" % (
        epoch, train_loss/len(train_data),
```

```
train_acc/len(train_data), test_acc))  
Epoch 0. Loss: 1.174210, Train acc 0.547292, Test acc 0.765024  
Epoch 1. Loss: 0.592702, Train acc 0.778696, Test acc 0.817808  
Epoch 2. Loss: 0.493668, Train acc 0.819344, Test acc 0.835136  
Epoch 3. Loss: 0.449862, Train acc 0.834852, Test acc 0.842248  
Epoch 4. Loss: 0.426626, Train acc 0.841530, Test acc 0.854267
```

3.10.8 总结

我们可以通过使用丢弃法对神经网络正则化。

3.10.9 练习

- 尝试不使用丢弃法，看看这个包含两个隐含层的多层感知机可以得到什么结果。
- 我们推荐把更靠近输入层的元素丢弃概率设的更小一点。想想这是为什么？如果把本节教程中的两个元素丢弃参数对调会有什么结果？

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

3.11 丢弃法 (Dropout) — 使用 Gluon

本章介绍如何使用 Gluon 在训练和测试深度学习模型中使用丢弃法 (Dropout)。

3.11.1 定义模型并添加丢弃层

有了 Gluon，我们模型的定义工作变得简单了许多。我们只需要在全连接层后添加 `gluon.nn.Dropout` 层并指定元素丢弃概率。一般情况下，我们推荐把更靠近输入层的元素丢弃概率设的更小一点。这个试验中，我们把第一层全连接后的元素丢弃概率设为 0.2，把第二层全连接后的元素丢弃概率设为 0.5。

```
In [1]: from mxnet.gluon import nn
```

```
net = nn.Sequential()  
drop_prob1 = 0.2  
drop_prob2 = 0.5  
  
with net.name_scope():  
    net.add(nn.Flatten())  
    # 第一层全连接。
```

```

net.add(nn.Dense(256, activation="relu"))
# 在第一层全连接后添加丢弃层。
net.add(nn.Dropout(drop_prob1))
# 第二层全连接。
net.add(nn.Dense(256, activation="relu"))
# 在第二层全连接后添加丢弃层。
net.add(nn.Dropout(drop_prob2))
net.add(nn.Dense(10))
net.initialize()

```

3.11.2 读取数据并训练

这跟之前没什么不同。

```

In [2]: import sys
        sys.path.append('..')
        import utils
        from mxnet import nd
        from mxnet import autograd
        from mxnet import gluon

batch_size = 256
train_data, test_data = utils.load_data_fashion_mnist(batch_size)

softmax_cross_entropy = gluon.loss.SoftmaxCrossEntropyLoss()
trainer = gluon.Trainer(net.collect_params(),
                        'sgd', {'learning_rate': 0.5})

for epoch in range(5):
    train_loss = 0.
    train_acc = 0.
    for data, label in train_data:
        with autograd.record():
            output = net(data)
            loss = softmax_cross_entropy(output, label)
        loss.backward()
        trainer.step(batch_size)

        train_loss += nd.mean(loss).asscalar()
        train_acc += utils.accuracy(output, label)

    test_acc = utils.evaluate_accuracy(test_data, net)
    print("Epoch %d. Loss: %f, Train acc %f, Test acc %f" %
          (epoch, train_loss/len(train_data),
           train_acc/len(train_data), test_acc))

```

```
Epoch 0. Loss: 0.835817, Train acc 0.691790, Test acc 0.797276
Epoch 1. Loss: 0.524935, Train acc 0.808327, Test acc 0.847556
Epoch 2. Loss: 0.457502, Train acc 0.832432, Test acc 0.851763
Epoch 3. Loss: 0.419757, Train acc 0.847206, Test acc 0.864083
Epoch 4. Loss: 0.395244, Train acc 0.854784, Test acc 0.869391
```

3.11.3 结论

通过 Gluon 我们可以更方便地构造多层神经网络并使用丢弃法。

3.11.4 练习

- 尝试不同元素丢弃概率参数组合，看看结果有什么不同。

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

3.12 正向传播和反向传播

我们在线性回归—从 0 开始中使用了一个叫做随机梯度下降的优化算法来训练模型。在随机梯度下降每一次迭代中，模型参数的当前值将自减学习率与该参数梯度的乘积。注意到这里我们使用了模型参数的梯度。

和线性回归一样，通常情况下，我们需要使用优化算法来训练深度学习模型，而优化算法往往会依赖模型参数梯度的计算。因此，模型参数梯度的计算对模型的训练来说十分重要。然而，在深度学习模型中，由于网络结构的复杂性，模型参数梯度的计算通常并不直观。虽然我们可以通过 MXNet 轻松获取模型参数的梯度，但是了解模型参数梯度的计算将有助于我们进一步了解深度学习模型训练的本质。

3.12.1 概念

反向传播（back-propagation）是计算深度学习模型参数梯度的方法。总的来说，反向传播中会依据微积分中的链式法则，按照输出层、靠近输出层的隐含层、靠近输入层的隐含层和输入层的次序，依次计算并存储模型损失函数有关模型各层的中间变量和参数的梯度。

反向传播对于各层中变量和参数的梯度计算可能会依赖各层变量和参数的当前值。对深度学习模型按照输入层、靠近输入层的隐含层、靠近输出层的隐含层和输出层的次序，依次计算并存储模型的中间变量叫做正向传播（forward-propagation）。

3.12.2 案例分析——正则化的多层感知机

为了解释正向传播和反向传播, 我们以一个简单的 L_2 范数正则化的多层感知机为例。

模型定义

给定一个输入为 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^x$ (每个样本输入向量长度为 x) 和真实值为 $y \in \mathbb{R}$ 的训练数据样本, 不考虑偏差项, 我们可以得到中间变量

$$\mathbf{z} = \mathbf{W}^{(1)}\mathbf{x}$$

其中 $\mathbf{W}^{(1)} \in \mathbb{R}^{h \times x}$ 是模型参数。中间变量 $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^h$ 应用按元素操作的激活函数 ϕ 后将得到向量长度为 h 的隐含层变量

$$\mathbf{h} = \phi(\mathbf{z})$$

隐含层 $\mathbf{h} \in \mathbb{R}^h$ 也是一个中间变量。通过模型参数 $\mathbf{W}^{(2)} \in \mathbb{R}^{y \times h}$ 可以得到向量长度为 y 输出层变量

$$\mathbf{o} = \mathbf{W}^{(2)}\mathbf{h}$$

假设损失函数为 ℓ , 损失项

$$L = \ell(\mathbf{o}, y)$$

根据 L_2 范数正则化的定义, 带有提前设定的超参数 λ 的正则化项

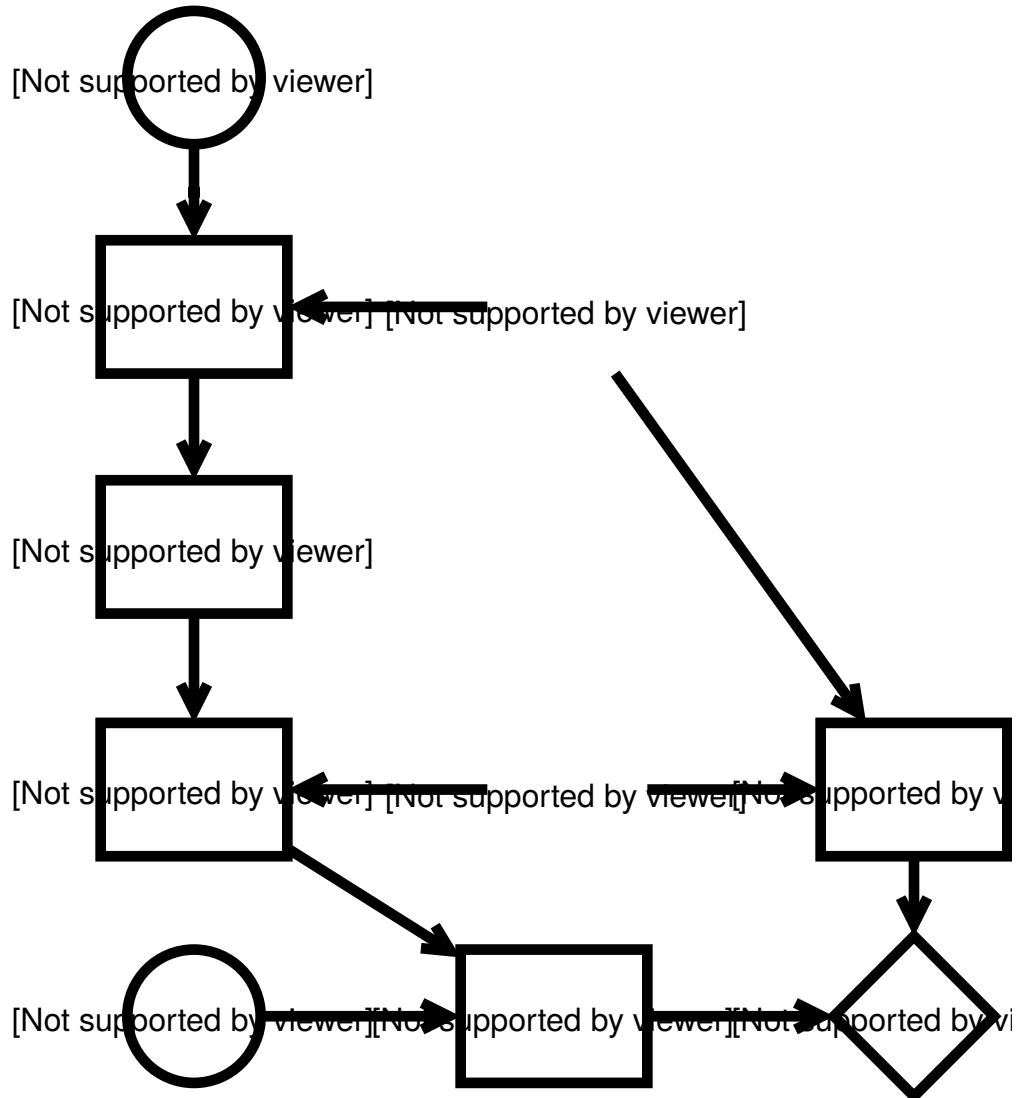
$$s = \frac{\lambda}{2}(\|\mathbf{W}^{(1)}\|_2^2 + \|\mathbf{W}^{(2)}\|_2^2)$$

模型最终需要被优化的目标函数

$$J = L + s$$

计算图

为了可视化模型变量和参数之间在计算中的依赖关系, 我们可以绘制计算图。



梯度的计算与存储

在上图中，模型的参数是 $\mathbf{W}^{(1)}$ 和 $\mathbf{W}^{(2)}$ 。为了在模型训练中学习这两个参数，以随机梯度下降为例，假设学习率为 η ，我们可以通过

$$\mathbf{W}^{(1)} = \mathbf{W}^{(1)} - \eta \frac{\partial J}{\partial \mathbf{W}^{(1)}}$$

$$\mathbf{W}^{(2)} = \mathbf{W}^{(2)} - \eta \frac{\partial J}{\partial \mathbf{W}^{(2)}}$$

来不断迭代模型参数的值。因此我们需要模型参数梯度 $\partial J / \partial \mathbf{W}^{(1)}$ 和 $\partial J / \partial \mathbf{W}^{(2)}$ 。为此，我们可以按照反向传播的次序依次计算并存储梯度。

为了表述方便，对输入输出 X, Y, Z 为任意形状张量的函数 $Y = f(X)$ 和 $Z = g(Y)$ ，我们使用

$$\frac{\partial Z}{\partial X} = \text{prod}\left(\frac{\partial Z}{\partial Y}, \frac{\partial Y}{\partial X}\right)$$

来表达链式法则。以下依次计算得到的梯度将依次被存储。

首先，我们计算目标函数有关损失项和有关正则项的梯度

$$\frac{\partial J}{\partial L} = 1$$

$$\frac{\partial J}{\partial s} = 1$$

其次，我们依据链式法则计算目标函数有关输出层变量的梯度 $\partial J / \partial \mathbf{o} \in \mathbb{R}^y$ 。

$$\frac{\partial J}{\partial \mathbf{o}} = \text{prod}\left(\frac{\partial J}{\partial L} \square \frac{\partial L}{\partial \mathbf{o}}\right) = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{o}}$$

正则项有关两个参数的梯度可以很直观地计算：

$$\frac{\partial s}{\partial \mathbf{W}^{(1)}} = \lambda \mathbf{W}^{(1)}$$

$$\frac{\partial s}{\partial \mathbf{W}^{(2)}} = \lambda \mathbf{W}^{(2)}$$

现在我们可以计算最靠近输出层的模型参数的梯度 $\partial J / \partial \mathbf{W}^{(2)} \in \mathbb{R}^{y \times h}$ 。在计算图中， $\mathbf{W}^{(2)}$ 可以经过 \mathbf{o} 和 s 通向 J ，依据链式法则，我们有

$$\frac{\partial J}{\partial \mathbf{W}^{(2)}} = \text{prod}\left(\frac{\partial J}{\partial \mathbf{o}}, \frac{\partial \mathbf{o}}{\partial \mathbf{W}^{(2)}}\right) + \text{prod}\left(\frac{\partial J}{\partial s}, \frac{\partial s}{\partial \mathbf{W}^{(2)}}\right) = \frac{\partial J}{\partial \mathbf{o}} \mathbf{h}^\top + \lambda \mathbf{W}^{(2)}$$

沿着输出层向隐含层继续反向传播，隐含层变量的梯度 $\partial J / \partial \mathbf{h} \in \mathbb{R}^h$ 可以这样计算

$$\frac{\partial J}{\partial \mathbf{h}} = \text{prod}\left(\frac{\partial J}{\partial \mathbf{o}} \square \frac{\partial \mathbf{o}}{\partial \mathbf{h}}\right) = \mathbf{W}^{(2)\top} \frac{\partial J}{\partial \mathbf{o}}$$

注意到激活函数 ϕ 是按元素操作的，中间变量 \mathbf{z} 的梯度 $\partial J / \partial \mathbf{z} \in \mathbb{R}^h$ 的计算需要使用按元素乘法符 \odot

$$\frac{\partial J}{\partial \mathbf{z}} = \text{prod}\left(\frac{\partial J}{\partial \mathbf{h}} \square \frac{\partial \mathbf{h}}{\partial \mathbf{z}}\right) = \frac{\partial J}{\partial \mathbf{h}} \odot \phi'(\mathbf{z})$$

最终，我们可以得到最靠近输入层的模型参数的梯度 $\partial J / \partial \mathbf{W}^{(1)} \in \mathbb{R}^{h \times x}$ 。在计算图中， $\mathbf{W}^{(1)}$ 可以经过 \mathbf{z} 和 s 通向 J ，依据链式法则，我们有

$$\frac{\partial J}{\partial \mathbf{W}^{(1)}} = \text{prod}\left(\frac{\partial J}{\partial \mathbf{z}}, \frac{\partial \mathbf{z}}{\partial \mathbf{W}^{(1)}}\right) + \text{prod}\left(\frac{\partial J}{\partial s}, \frac{\partial s}{\partial \mathbf{W}^{(1)}}\right) = \frac{\partial J}{\partial \mathbf{z}} \mathbf{x}^\top + \lambda \mathbf{W}^{(1)}$$

需要再次提醒的是，每次迭代中，上述各个依次计算出的梯度会被依次存储或更新。这是为了避免重复计算。例如，由于输出层变量梯度 $\partial J / \partial \mathbf{o}$ 被计算存储，反向传播稍后的参数梯度 $\partial J / \partial \mathbf{W}^{(2)}$ 和隐含层变量梯度 $\partial J / \partial \mathbf{h}$ 的计算可以直接读取输出层变量梯度的值，而无需重复计算。

还有需要注意的是，反向传播对于各层中变量和参数的梯度计算可能会依赖通过正向传播计算出的各层变量和参数的当前值。举例来说，参数梯度 $\partial J / \partial \mathbf{W}^{(2)}$ 的计算需要依赖隐含层变量的当前值 \mathbf{h} 。这个当前值是通过从输入层到输出层的正向传播计算并存储得到的。

3.12.3 总结

正向传播和反向传播是深度学习模型训练的基石（目前是）。

3.12.4 练习

- 如果模型的层数特别多，梯度的计算会有什么问题？
- 1986 年，Rumelhart, Hinton, 和 Williams 提出了反向传播。然而 2017 年 Hinton 表示他对反向传播“深刻怀疑”并发表了 Capsule 论文。你对此有何思考？

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

3.13 实战 Kaggle 比赛——使用 Gluon 预测房价和 K 折交叉验证

本章介绍如何使用 Gluon 来实战 Kaggle 比赛。我们以房价预测问题为例，为大家提供一整套实战中常常需要的工具，例如 K 折交叉验证。我们还以 pandas 为工具介绍如何对真实世界中的数据进行重要的预处理，例如：

- 处理离散数据
- 处理丢失的数据特征
- 对数据进行标准化

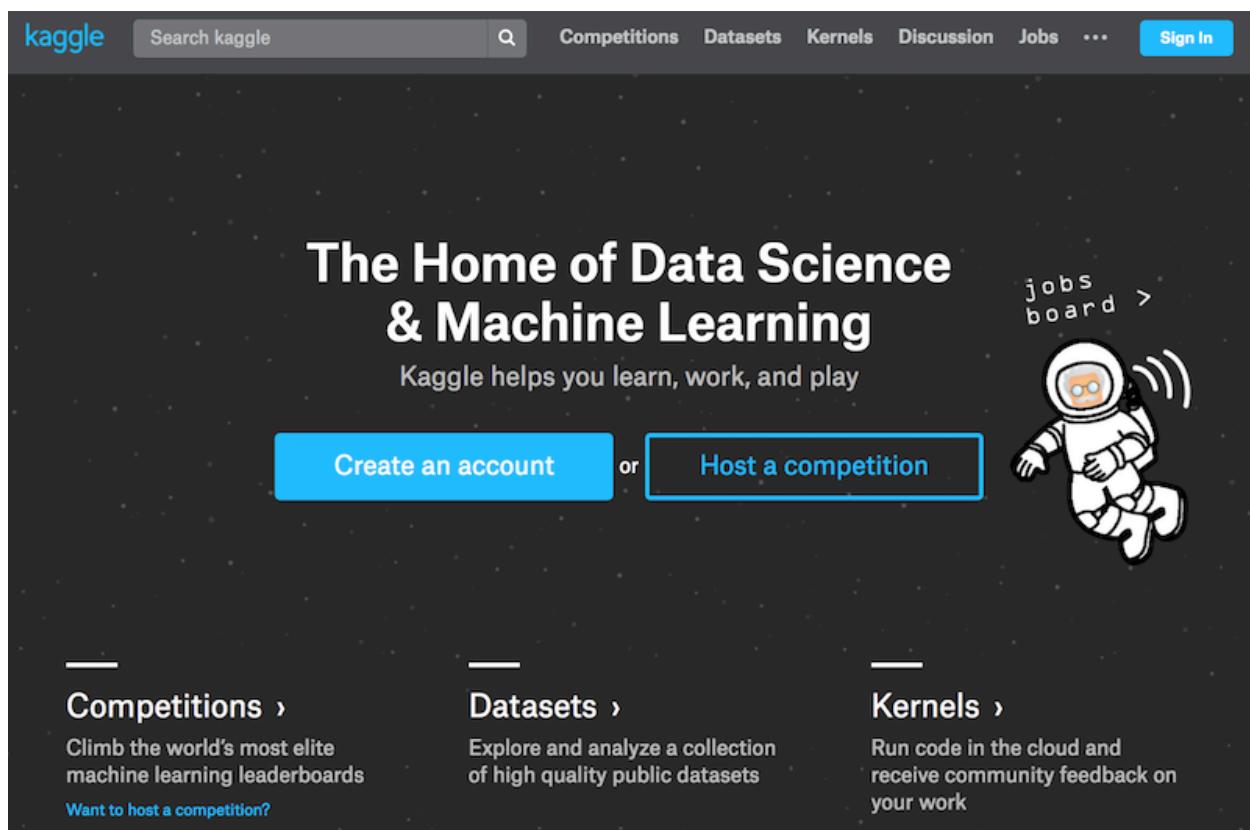
需要注意的是，本章仅提供一些基本实战流程供大家参考。对于数据的预处理、模型的设计和参数的选择等，我们特意只提供最基础的版本。希望大家一定要通过动手实战、仔细观察实验现象、认真分析实验结果并不断调整方法，从而得到令自己满意的结果。

这是一次宝贵的实战机会，我们相信你一定能从动手的过程中学到很多。

Get your hands dirty。

3.13.1 Kaggle 中的房价预测问题

Kaggle 是一个著名的供机器学习爱好者交流的平台。为了便于提交结果，请大家注册 Kaggle 账号。请注意，目前 Kaggle 仅限每个账号一天以内 10 次提交结果的机会。所以提交结果前务必三思。



我们以房价预测问题为例教大家如何实战一次 Kaggle 比赛。请大家在动手开始之前点击[房价预测问题](#)了解相关信息。



House Prices: Advanced Regression Techniques

Predict sales prices and practice feature engineering, RFs, and gradient boosting
1,698 teams · 2 years to go

[Overview](#) [Data](#) [Kernels](#) [Discussion](#) [Leaderboard](#) [Rules](#)

Overview

Description	Start here if...
Evaluation	You have some experience with R or Python and machine learning basics. This is a perfect competition for data science students who have completed an online course in machine learning and are looking to expand their skill set before trying a featured competition.
Frequently Asked Questions	
Tutorials	
	Competition Description
	
	Ask a home buyer to describe their dream house, and they probably won't begin with the height of the basement ceiling or the proximity to an east-west railroad. But this playground competition's dataset proves that much more influences price negotiations than the number of bedrooms or a white-picket fence.
	With 79 explanatory variables describing (almost) every aspect of residential homes in Ames, Iowa, this competition challenges you to predict the final price of each home.

3.13.2 读入数据

比赛数据分为训练数据集和测试数据集。两个数据集都包括每个房子的特征，例如街道类型、建造年份、房顶类型、地下室状况等特征值。这些特征值有连续的数字、离散的标签甚至是缺失值’na’。只有训练数据集包括了我们需要在测试数据集中预测的每个房子的价格。数据可以从[房价预测](#)问题中下载。

训练数据集下载地址 [测试数据集下载地址](#)

我们通过使用 `pandas` 读入数据。请确保安装了 `pandas` (`pip install pandas`)。

```
In [1]: import pandas as pd
        import numpy as np

        train = pd.read_csv("../data/kaggle_house_pred_train.csv")
        test = pd.read_csv("../data/kaggle_house_pred_test.csv")
        all_X = pd.concat((train.loc[:, 'MSSubClass':'SaleCondition'],
                           test.loc[:, 'MSSubClass':'SaleCondition']))
```

我们看看数据长什么样子。

In [2]: `train.head()`

```
Out[2]: Id MSSubClass MSZoning LotFrontage LotArea Street Alley LotShape \
0 1 60 RL 65.0 8450 Pave NaN Reg
1 2 20 RL 80.0 9600 Pave NaN Reg
2 3 60 RL 68.0 11250 Pave NaN IR1
3 4 70 RL 60.0 9550 Pave NaN IR1
4 5 60 RL 84.0 14260 Pave NaN IR1

LandContour Utilities ... PoolArea PoolQC Fence MiscFeature MiscVal
↪ \
0 Lvl AllPub ... 0 NaN NaN NaN 0
1 Lvl AllPub ... 0 NaN NaN NaN 0
2 Lvl AllPub ... 0 NaN NaN NaN 0
3 Lvl AllPub ... 0 NaN NaN NaN 0
4 Lvl AllPub ... 0 NaN NaN NaN 0

MoSold YrSold SaleType SaleCondition SalePrice
0 2 2008 WD Normal 208500
1 5 2007 WD Normal 181500
2 9 2008 WD Normal 223500
3 2 2006 WD Abnorml 140000
4 12 2008 WD Normal 250000

[5 rows x 81 columns]
```

数据大小如下。

In [3]: `train.shape`

Out[3]: (1460, 81)

In [4]: `test.shape`

Out[4]: (1459, 80)

3.13.3 预处理数据

我们使用 pandas 对数值特征做标准化处理:

$$x_i = \frac{x_i - \mathbb{E}x_i}{\text{std}(x_i)}$$

```
In [5]: numeric_feats = all_X.dtypes[all_X.dtypes != "object"].index
all_X[numeric_feats] = all_X[numeric_feats].apply(lambda x: (x - x.mean()) /
(x.std()))
```

现在把离散数据点转换成数值标签。

```
In [6]: all_X = pd.get_dummies(all_X, dummy_na=True)
```

把缺失数据用本特征的平均值估计。

```
In [7]: all_X = all_X.fillna(all_X.mean())
```

下面把数据转换一下格式。

```
In [8]: num_train = train.shape[0]
```

```
X_train = all_X[:num_train].as_matrix()
X_test = all_X[num_train: ].as_matrix()
y_train = train.SalePrice.as_matrix()
```

3.13.4 导入 NDArray 格式数据

为了便于和 Gluon 交互，我们需要导入 NDArray 格式数据。

```
In [9]: from mxnet import ndarray as nd
        from mxnet import autograd
        from mxnet import gluon

X_train = nd.array(X_train)
y_train = nd.array(y_train)
y_train.reshape((num_train, 1))

X_test = nd.array(X_test)
```

我们把损失函数定义为平方误差。

```
In [10]: square_loss = gluon.loss.L2Loss()
```

我们定义比赛中测量结果用的函数。

```
In [11]: def get_rmse_log(net, X_train, y_train):
            num_train = X_train.shape[0]
            clipped_preds = nd.clip(net(X_train), 1, float('inf'))
            return np.sqrt(2 * nd.sum(square_loss(
                nd.log(clipped_preds), nd.log(y_train))).asscalar() / num_train)
```

3.13.5 定义模型

我们将模型的定义放在一个函数里供多次调用。这是一个基本的线性回归模型。

```
In [12]: def get_net():
            net = gluon.nn.Sequential()
```

```

with net.name_scope():
    net.add(gluon.nn.Dense(1))
net.initialize()
return net

```

我们定义一个训练的函数，这样在跑不同的实验时不需要重复实现相同的步骤。

```

In [13]: %matplotlib inline
import matplotlib as mpl
mpl.rcParams['figure.dpi']= 120
import matplotlib.pyplot as plt

def train(net, X_train, y_train, X_test, y_test, epochs,
          verbose_epoch, learning_rate, weight_decay):
    train_loss = []
    if X_test is not None:
        test_loss = []
    batch_size = 100
    dataset_train = gluon.data.ArrayDataset(X_train, y_train)
    data_iter_train = gluon.data.DataLoader(
        dataset_train, batch_size, shuffle=True)
    trainer = gluon.Trainer(net.collect_params(), 'adam',
                           {'learning_rate': learning_rate,
                            'wd': weight_decay})
    net.collect_params().initialize(force_reinit=True)
    for epoch in range(epochs):
        for data, label in data_iter_train:
            with autograd.record():
                output = net(data)
                loss = square_loss(output, label)
            loss.backward()
            trainer.step(batch_size)

            cur_train_loss = get_rmse_log(net, X_train, y_train)
            if epoch > verbose_epoch:
                print("Epoch %d, train loss: %f" % (epoch, cur_train_loss))
            train_loss.append(cur_train_loss)
            if X_test is not None:
                cur_test_loss = get_rmse_log(net, X_test, y_test)
                test_loss.append(cur_test_loss)
    plt.plot(train_loss)
    plt.legend(['train'])
    if X_test is not None:
        plt.plot(test_loss)
        plt.legend(['train', 'test'])
    plt.show()

```

```

if X_test is not None:
    return cur_train_loss, cur_test_loss
else:
    return cur_train_loss

```

3.13.6 K 折交叉验证

在过拟合中我们讲过, 过度依赖训练数据集的误差来推断测试数据集的误差容易导致过拟合。事实上, 当我们调参时, 往往需要基于 K 折交叉验证。

在 K 折交叉验证中, 我们把初始采样分割成 K 个子样本, 一个单独的子样本被保留作为验证模型的数据, 其他 $K - 1$ 个样本用来训练。

我们关心 K 次验证模型的测试结果的平均值和训练误差的平均值, 因此我们定义 K 折交叉验证函数如下。

```

In [14]: def k_fold_cross_valid(k, epochs, verbose_epoch, X_train, y_train,
                           learning_rate, weight_decay):
    assert k > 1
    fold_size = X_train.shape[0] // k
    train_loss_sum = 0.0
    test_loss_sum = 0.0
    for test_i in range(k):
        X_val_test = X_train[test_i * fold_size: (test_i + 1) * fold_size, :]
        y_val_test = y_train[test_i * fold_size: (test_i + 1) * fold_size]

        val_train_defined = False
        for i in range(k):
            if i != test_i:
                X_cur_fold = X_train[i * fold_size: (i + 1) * fold_size, :]
                y_cur_fold = y_train[i * fold_size: (i + 1) * fold_size]
                if not val_train_defined:
                    X_val_train = X_cur_fold
                    y_val_train = y_cur_fold
                    val_train_defined = True
                else:
                    X_val_train = nd.concat(X_val_train, X_cur_fold, dim=0)
                    y_val_train = nd.concat(y_val_train, y_cur_fold, dim=0)
        net = get_net()
        train_loss, test_loss = train(
            net, X_val_train, y_val_train, X_val_test, y_val_test,
            epochs, verbose_epoch, learning_rate, weight_decay)
        train_loss_sum += train_loss
        print("Test loss: %f" % test_loss)

```

```

        test_loss_sum += test_loss
    return train_loss_sum / k, test_loss_sum / k

```

训练模型并交叉验证

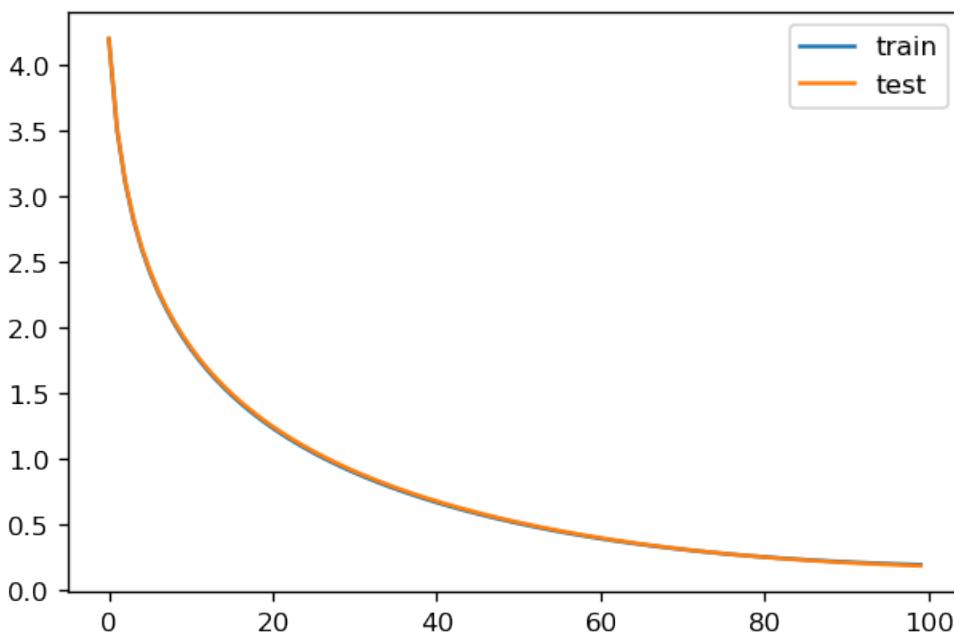
以下的模型参数都是可以调的。

```
In [15]: k = 5
      epochs = 100
      verbose_epoch = 95
      learning_rate = 5
      weight_decay = 0.0
```

给定以上调好的参数，接下来我们训练并交叉验证我们的模型。

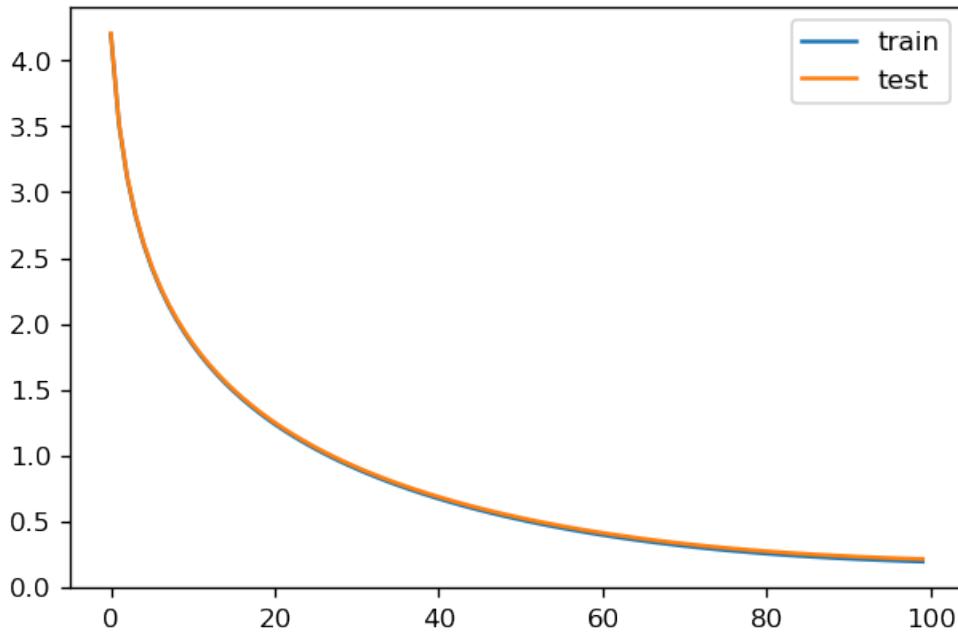
```
In [16]: train_loss, test_loss = k_fold_cross_valid(k, epochs, verbose_epoch, X_train,
                                                y_train, learning_rate,
→   weight_decay)
      print("%d-fold validation: Avg train loss: %f, Avg test loss: %f" %
            (k, train_loss, test_loss))

Epoch 96, train loss: 0.202337
Epoch 97, train loss: 0.200271
Epoch 98, train loss: 0.198269
Epoch 99, train loss: 0.196356
```

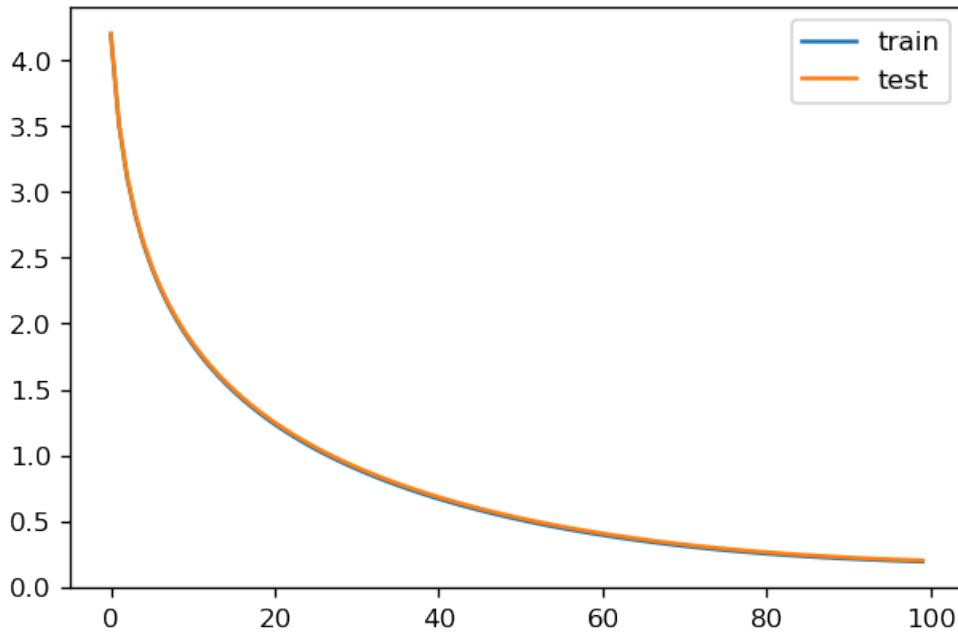


```
Test loss: 0.189179
Epoch 96, train loss: 0.197900
```

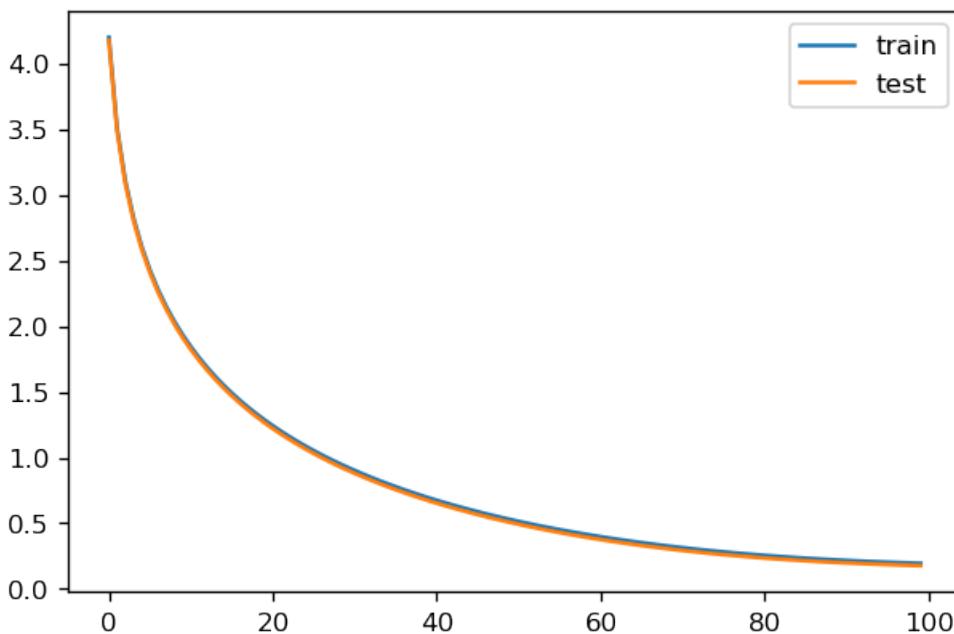
```
Epoch 97, train loss: 0.195751  
Epoch 98, train loss: 0.193691  
Epoch 99, train loss: 0.191727
```



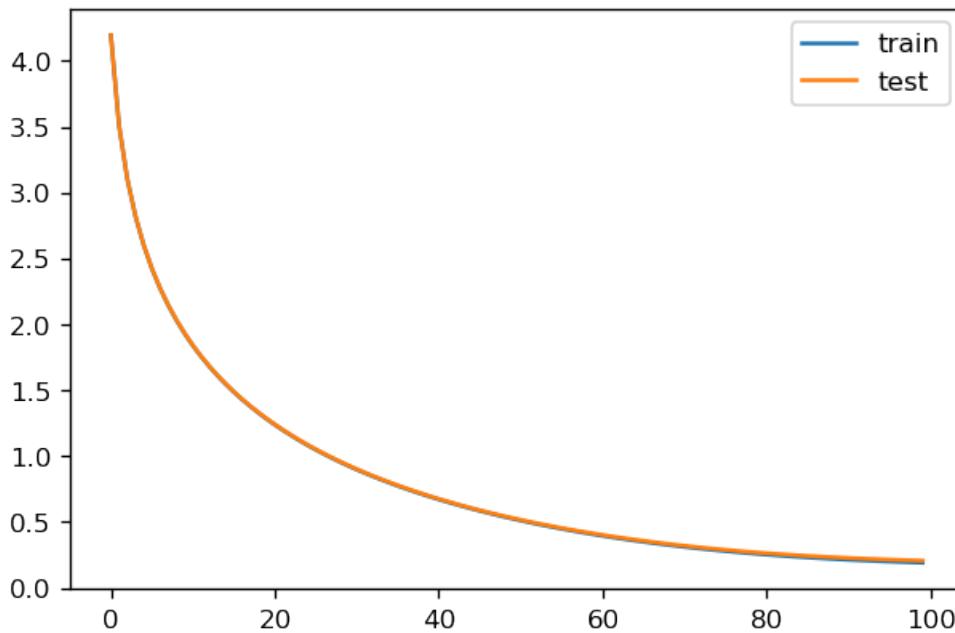
```
Test loss: 0.210915  
Epoch 96, train loss: 0.199070  
Epoch 97, train loss: 0.196924  
Epoch 98, train loss: 0.194856  
Epoch 99, train loss: 0.192937
```



```
Test loss: 0.201474
Epoch 96, train loss: 0.201440
Epoch 97, train loss: 0.199258
Epoch 98, train loss: 0.197242
Epoch 99, train loss: 0.195309
```



```
Test loss: 0.178172
Epoch 96, train loss: 0.196662
Epoch 97, train loss: 0.194436
Epoch 98, train loss: 0.192330
Epoch 99, train loss: 0.190347
```



Test loss: 0.206206

5-fold validation: Avg train loss: 0.193335, Avg test loss: 0.197189

即便训练误差可以达到很低（调好参数之后），但是 K 折交叉验证上的误差可能更高。当训练误差特别低时，要观察 K 折交叉验证上的误差是否同时降低并小心过拟合。我们通常依赖 K 折交叉验证误差结果来调节参数。

3.13.7 预测并在 Kaggle 提交预测结果（选学）

本部分为选学内容。网络不好的同学可以通过上述 K 折交叉验证的方法来评测自己训练的模型。

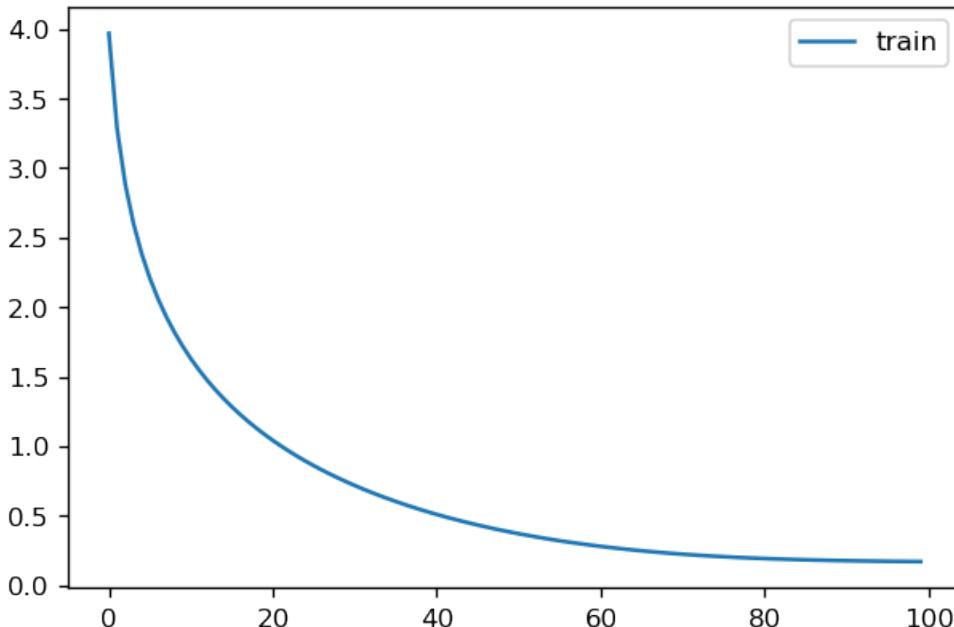
我们首先定义预测函数。

```
In [17]: def learn(epochs, verbose_epoch, X_train, y_train, test, learning_rate,
               weight_decay):
    net = get_net()
    train(net, X_train, y_train, None, None, epochs, verbose_epoch,
          learning_rate, weight_decay)
    preds = net(X_test).asnumpy()
    test['SalePrice'] = pd.Series(preds.reshape(1, -1)[0])
    submission = pd.concat([test['Id'], test['SalePrice']], axis=1)
    submission.to_csv('submission.csv', index=False)
```

调好参数以后，下面我们预测并在 Kaggle 提交预测结果。

```
In [18]: learn(epochs, verbose_epoch, X_train, y_train, test, learning_rate,
               weight_decay)
```

```
Epoch 96, train loss: 0.170963
Epoch 97, train loss: 0.170377
Epoch 98, train loss: 0.169829
Epoch 99, train loss: 0.169345
```



执行完上述代码后，会生成一个 `submission.csv` 文件。这是 Kaggle 要求的提交格式。这时我们可以在 Kaggle 上把我们预测得出的结果提交并查看与测试数据集上真实房价的误差。你需要登录 Kaggle 网站，打开[房价预测问题地址](#)，并点击下方右侧 `Submit Predictions` 按钮提交。

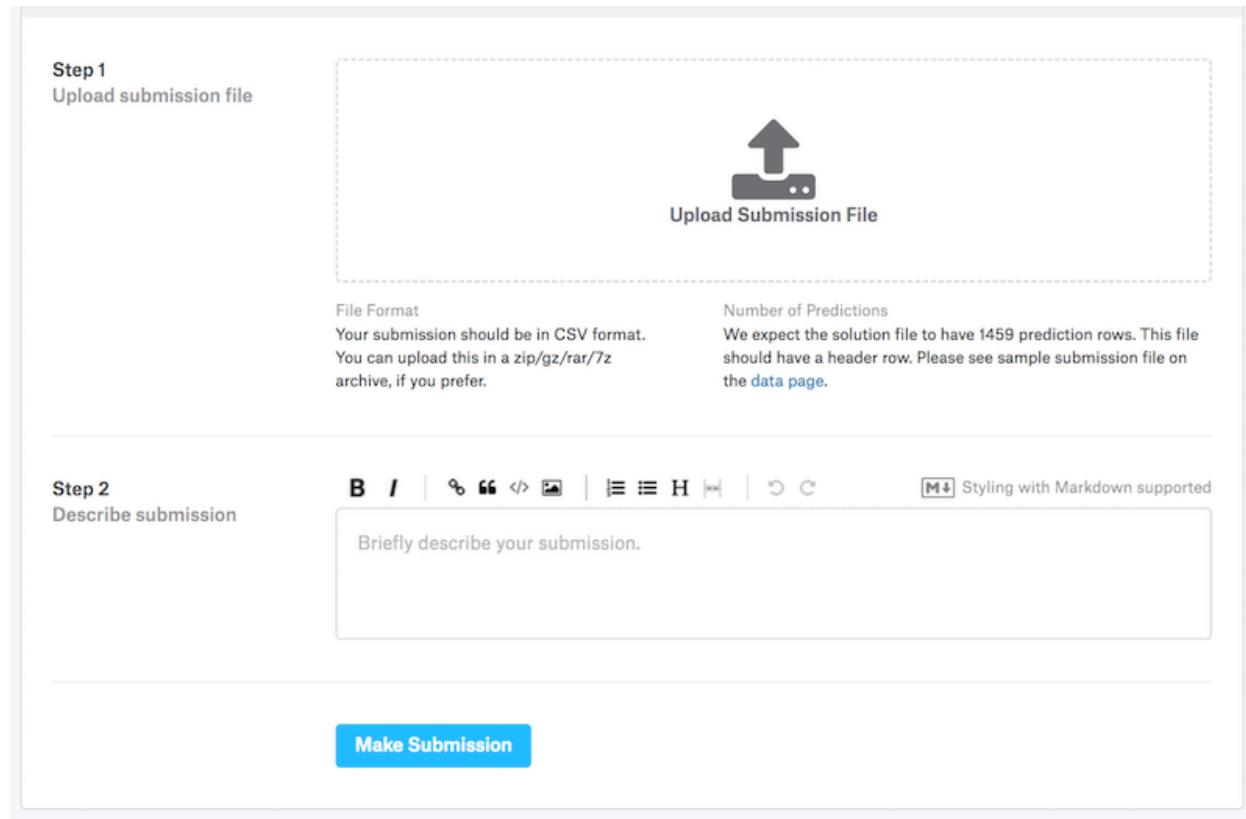
House Prices: Advanced Regression Techniques

Predict sales prices and practice feature engineering, RFs, and gradient boosting

1,698 teams · 2 years to go

Overview Data Kernels Discussion Leaderboard Rules Team My Submissions **Submit Predictions**

请点击下方 `Upload Submission File` 选择需要提交的预测结果。然后点击下方的 `Make Submission` 按钮就可以查看结果啦！



再次温馨提醒，目前 Kaggle 仅限每个账号一天以内 10 次提交结果的机会。所以提交结果前务必三思。

3.13.8 作业（汇报作业和查看其他小伙伴作业）：

- 运行本教程，目前的模型在 5 折交叉验证上可以拿到什么样的 loss？
- 如果网络条件允许，在 Kaggle 提交本教程的预测结果。观察一下，这个结果能在 Kaggle 上拿到什么样的 loss？
- 通过重新设计模型、调参并对照 K 折交叉验证结果，新模型是否比其他小伙伴的更好？除了调参，你可能发现我们之前学过的以下内容有些帮助：
 - 多层感知机—使用 *Gluon*
 - 正则化—使用 *Gluon*
- 如果不使用对数值特征做标准化处理能拿到什么样的 loss？
- 你还有什么其他办法可以继续改进模型？小伙伴们都期待学习到你独特的富有创造力的解决方案。

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

深度学习计算基础

4.1 模型构造

上一章介绍了简单的深度学习模型，例如多层感知机。为了引入深度学习计算的问题，我们以该模型为例，对输入数据做计算。

4.1.1 多层感知机的计算

在“多层感知机——使用“*Gluon*”`<..../chapter_supervised-learning/mlp-gluon.md>'__`一节中，我们通过在 `nn.Sequential` 里依次添加两个全连接层构造出多层感知机。其中第一层的输出大小为 256，即隐藏层单元个数；第二层的输出大小为 10，即输出层单元个数。

```
In [1]: from mxnet import nd
        from mxnet.gluon import nn

        net = nn.Sequential()
        with net.name_scope():
            net.add(nn.Dense(256, activation='relu'))
            net.add(nn.Dense(10))
```

接下来，让模型根据输入数据做一次计算。

```
In [2]: net.initialize()
        x = nd.random.uniform(shape=(2, 20))
```

```

print(net(x))
print('hidden layer: ', net[0])
print('output layer: ', net[1])

[[ 0.09543004  0.04614332 -0.00286654 -0.07790349 -0.05130243  0.02942037
  0.08696642 -0.0190793  -0.04122177  0.05088576]
 [ 0.0769287   0.03099705  0.00856576 -0.04467199 -0.06926839  0.09132434
  0.06786595 -0.06187842 -0.03436673  0.04234694]]
<NDArray 2x10 @cpu(0)>
hidden layer: Dense(20 -> 256, Activation(relu))
output layer: Dense(256 -> 10, linear)

```

在上面的例子中, `net` 的输入数据 `x` 包含 2 个样本, 每个样本的特征向量长度为 20 (`shape=(2, 20)`)。在按照默认方式初始化好模型参数后, `net` 计算得到一个 2×10 的矩阵作为模型的输出。其中 4 是数据样本个数, 10 是输出层单元个数。

实际上, 这个多层感知机计算的例子涉及到了深度学习计算的方方面面, 例如模型的构造、模型参数的初始化、模型的层等。在本章中, 我们将主要使用 `Gluon` 来介绍深度学习计算中的重要组成部分: 模型构造、模型参数、自定义层、读写和 GPU 计算。通过本章的学习, 读者将能够动手实现和训练更复杂的深度学习模型, 例如之后章节里的一些模型。

本节中, 我们将通过 `Gluon` 里的 `nn.Block` 来介绍如何构造深度学习模型。相信读者在学习完本节后, 也会对上一章中使用的 `nn.Sequential` 有更深刻的认识。

4.1.2 使用 `nn.Block` 构造模型

使用 `Gluon` 提供的 `nn.Block`, 我们可以很方便地构造各种模型。例如, 我们可以通过 `nn.Block` 来构造与本节开头例子中相同的多层感知机。

```

In [3]: class MLP(nn.Block):
    def __init__(self, **kwargs):
        super(MLP, self).__init__(**kwargs)
        with self.name_scope():
            self.hidden = nn.Dense(256, activation='relu')
            self.output = nn.Dense(10)

    def forward(self, x):
        return self.output(self.hidden(x))

```

这里, 我们通过创建 `nn.Block` 的子类构造模型。任意一个 `nn.Block` 的子类至少实现以下两个函数:

- `__init__`: 创建模型的参数。在上面的例子里, 模型的参数被包含在了两个 `nn.Dense` 层里。

- `forward`: 定义模型的计算。

接下来我们解释一下 `MLP` 里面用的其他命令:

- `super(MLP, self).__init__(**kwargs)`: 这句话调用 `MLP` 父类 `nn.Block` 的构造函数 `__init__`。这样，我们在调用 `MLP` 的构造函数时还可以指定函数参数 `prefix` (名字前缀) 或 `params` (模型参数，下一节会介绍)。这两个函数参数将通过 `**kwargs` 传递给 `nn.Block` 的构造函数。
- `with self.name_scope()`: 本例中的两个 `nn.Dense` 层和其中模型参数的名字前面都将带有模型名前缀。该前缀可以通过构造函数参数 `prefix` 指定。若未指定，该前缀将自动生成。我们建议，在构造模型时将每个层至少放在一个 `name_scope()` 里。

我们可以实例化 `MLP` 类得到 `net2`, 并让 `net2` 根据输入数据 `x` 做一次计算。其中, `y = net2(x)` 明确调用了 `MLP` 中的 `_call_` 函数 (从 `nn.Block` 继承得到)。在 `Gluon` 中, 这将进一步调用 `MLP` 中的 `forward` 函数从而完成一次模型计算。

```
In [4]: net = MLP()
        net.initialize()
        print(net(x))
        print('hidden layer name with default prefix:', net.hidden.name)
        print('output layer name with default prefix:', net.output.name)

[[ 0.00362228  0.00633332  0.03201144 -0.01369375  0.10336449 -0.03508018
 -0.00032164 -0.01676023  0.06978628  0.01303309]
 [ 0.03871715  0.02608213  0.03544959 -0.02521311  0.11005433 -0.0143066
 -0.03052466 -0.03852827  0.06321152  0.0038594 ]]
<NDArray 2x10 @cpu(0)>
hidden layer name with default prefix: mlp0_dense0
output layer name with default prefix: mlp0_dense1
```

在上面的例子中，隐藏层和输出层的名字前都加了默认前缀。接下来我们通过 `prefix` 指定它们的名字前缀。

```
In [5]: net = MLP(prefix='my_mlp_')
        print('hidden layer name with "my_mlp_" prefix:', net.hidden.name)
        print('output layer name with "my_mlp_" prefix:', net.output.name)

hidden layer name with "my_mlp_" prefix: my_mlp_dense0
output layer name with "my_mlp_" prefix: my_mlp_dense1
```

接下来，我们重新定义 `MLP_NO_NAMESCOPE` 类。它和 `MLP` 的区别就是不含 `with self.name_scope():`。这是，隐藏层和输出层的名字前都不再含指定的前缀 `prefix`。

```
In [6]: class MLP_NO_NAMESCOPE(nn.Block):
        def __init__(self, **kwargs):
```

```

        super(MLP_NO_NAMESCOPE, self).__init__(**kwargs)
        self.hidden = nn.Dense(256, activation='relu')
        self.output = nn.Dense(10)

    def forward(self, x):
        return self.output(self.hidden(x))

net = MLP_NO_NAMESCOPE(prefix='my_mlp_')
print('hidden layer name without prefix:', net.hidden.name)
print('output layer name without prefix:', net.output.name)

hidden layer name without prefix: dense0
output layer name without prefix: dense1

```

需要指出的是，在 gluon 里，`nn.Block` 是一个一般化的部件。整个神经网络可以是一个 `nn.Block`，单个层也是一个 `nn.Block`。我们还可以反复嵌套 `nn.Block` 来构建新的 `nn.Block`。`nn.Block` 类主要提供模型参数的存储、模型计算的定义和自动求导。读者也许已经发现了，以上 `nn.Block` 的子类中并没有定义如何求导，或者是 `backward` 函数。事实上，MXNet 会使用 `autograd` 对 `forward` 自动生成相应的 `backward` 函数。

`nn.Sequential` 是特殊的 `nn.Block`

在 Gluon 里，`nn.Sequential` 是 `nn.Block` 的子类。它也可以被看作是一个 `nn.Block` 的容器：通过 `add` 函数来添加 `nn.Block`。在 `forward` 函数里，`nn.Sequential` 把添加进来的 `nn.Block` 逐一运行。

一个简单的实现是这样的：

```

In [7]: class MySequential(nn.Block):
    def __init__(self, **kwargs):
        super(MySequential, self).__init__(**kwargs)

    def add(self, block):
        self._children.append(block)

    def forward(self, x):
        for block in self._children:
            x = block(x)
        return x

```

它的使用和 `nn.Sequential` 类似：

```

In [8]: net = MySequential()
        with net.name_scope():
            net.add(nn.Dense(256, activation='relu'))

```

```

net.add(nn.Dense(10))
net.initialize()
net(x)

Out[8]:
[[ 0.07787765  0.00216401  0.01682201  0.03059879 -0.00702019  0.01668714
  0.04822845  0.00394321 -0.09300036 -0.044943   ]
 [ 0.08891079 -0.00625484 -0.01619132  0.03807178 -0.01451489  0.02006172
  0.0303478   0.02463485 -0.07605445 -0.04389167]]
<NDArray 2x10 @cpu(0)>

```

构造更复杂的模型

与 `nn.Sequential` 相比, 使用 `nn.Block` 可以构造更复杂的模型。下面是一个例子。

```

In [9]: class FancyMLP(nn.Block):
        def __init__(self, **kwargs):
            super(FancyMLP, self).__init__(**kwargs)
            self.rand_weight = nd.random_uniform(shape=(10, 20))
            with self.name_scope():
                self.dense = nn.Dense(10, activation='relu')

        def forward(self, x):
            x = self.dense(x)
            x = nd.relu(nd.dot(x, self.rand_weight) + 1)
            x = self.dense(x)
            return x

```

在这个 `FancyMLP` 模型中, 我们使用了常数权重 `rand_weight` (注意它不是模型参数)、做了矩阵乘法操作 (`nd.dot`) 并重复使用了相同的 `nn.Dense` 层。测试一下:

```

In [10]: net = FancyMLP()
          net.initialize()
          net(x)

```

```

Out[10]:
[[ 0.          0.          0.          0.2370123   0.07323837  0.
  0.06294025  0.          0.09714817  0.          ]
 [ 0.          0.          0.          0.25646579  0.07756092  0.
  0.07705911  0.          0.1034155   0.          ]]
<NDArray 2x10 @cpu(0)>

```

由于 `nn.Sequential` 是 `nn.Block` 的子类, 它们还可以嵌套使用。下面是一个例子。

```

In [11]: class NestMLP(nn.Block):
        def __init__(self, **kwargs):
            super(NestMLP, self).__init__(**kwargs)

```

```

self.net = nn.Sequential()
with self.name_scope():
    self.net.add(nn.Dense(64, activation='relu'))
    self.net.add(nn.Dense(32, activation='relu'))
    self.dense = nn.Dense(16, activation='relu')

def forward(self, x):
    return self.dense(self.net(x))

net = nn.Sequential()
net.add(NestMLP())
net.add(nn.Dense(10))
net.initialize()
print(net(x))

[[ 6.52327653e-05  1.93947431e-04  1.24472150e-04  5.48524316e-04
  1.54831039e-04  1.61348813e-04  1.94365595e-04 -9.41830658e-05
  2.58094660e-04 -7.05455168e-05]
 [-6.40472936e-05  2.18597634e-04  1.69197563e-04  2.84988579e-04
  -6.98885633e-05  7.64168071e-05  2.81819598e-06 -1.15524264e-04
   1.05885920e-04  1.82631338e-04]]
<NDArray 2x10 @cpu(0)>

```

4.1.3 小结

- 我们可以通过 `nn.Block` 来构造复杂的模型。
- `nn.Sequential` 是特殊的 `nn.Block`。

4.1.4 练习

- 比较使用 `nn.Sequential` 和使用 `nn.Block` 构造模型的方式。如果希望访问模型中某一层（例如隐藏层）的某个属性（例如名字），这两种方式有什么不同？
- 如果把 `NestMLP` 中的 `self.net` 和 `self.dense` 改成 `self.denses = [nn.Dense(64, activation='relu'), nn.Dense(32, activation='relu'), nn.Dense(16)]`，并在 `forward` 中用 `for` 循环实现相同计算，会有什么问题吗？

4.1.5 扫码直达讨论区



4.2 模型参数

为了引出本节的话题，让我们先使用 `nn.Sequential` 定义一个多层感知机。

```
In [1]: import sys
        from mxnet import init, gluon, nd
        from mxnet.gluon import nn

        class MLP(nn.Block):
            def __init__(self, **kwargs):
                super(MLP, self).__init__(**kwargs)
                with self.name_scope():
                    self.hidden = nn.Dense(4)
                    self.output = nn.Dense(2)

            def forward(self, x):
                return self.output(nd.relu(self.hidden(x)))
```

运行下面代码，系统抱怨说模型参数没有初始化。

```
In [2]: x = nd.random.uniform(shape=(3, 5))
        try:
            net = MLP()
            net(x)
        except RuntimeError as err:
            sys.stderr.write(str(err))

Parameter 'mlp0_dense0_weight' has not been initialized. Note that you should
→ initialize parameters and create Trainer with Block.collect_params() instead of
→ Block.params because the later does not include Parameters of nested child Blocks
```

作如下修改之后，模型便计算成功。

```
In [3]: net.initialize()
        net(x)

Out[3]:
[[ 0.00212593  0.00365805]]
```

```
[ 0.00161272  0.00441845]
[ 0.00204872  0.00352518]]
<NDArray 3x2 @cpu(0)>
```

这里添加的 `net.initialize()` 对模型参数做了初始化。模型参数是深度学习计算中的重要组成部分。本节中，我们将介绍如何访问、初始化和共享模型参数。

4.2.1 访问模型参数

在 Gluon 中，模型参数的类型是 `Parameter`。下面让我们创建一个名字叫“`good_param`”、形状为 2×3 的模型参数。在默认的初始化中，模型参数中的每一个元素是一个在 $[-0.07, 0.07]$ 之间均匀分布的随机数。相应地，该模型参数还有一个形状为 2×3 的梯度，初始值为 0。

```
In [4]: my_param = gluon.Parameter("good_param", shape=(2, 3))
my_param.initialize()
print('data: ', my_param.data(), '\ngrad: ', my_param.grad(),
      '\nname: ', my_param.name)

data:
[[ 0.0421275 -0.00539289  0.00286685]
 [ 0.03927409  0.02504314 -0.05344158]]
<NDArray 2x3 @cpu(0)>
grad:
[[ 0.  0.  0.]
 [ 0.  0.  0.]]
<NDArray 2x3 @cpu(0)>
name: good_param
```

接下来，让我们访问本节开头定义的多层感知机 `net` 中隐藏层 `hidden` 的模型参数：权重 `weight` 和偏差 `bias`。它们的类型也都是 `Parameter`。我们可以看到它们的名字、形状和数据类型。

```
In [5]: w = net.hidden.weight
b = net.hidden.bias
print('hidden layer name: ', net.hidden.name, '\nweight: ', w, '\nbias: ', b)

hidden layer name: mlp0_dense0
weight: Parameter mlp0_dense0_weight (shape=(4, 5), dtype=<class 'numpy.float32'>)
bias: Parameter mlp0_dense0_bias (shape=(4,), dtype=<class 'numpy.float32'>)
```

我们同样可以访问这两个参数的值和梯度。

```
In [6]: print('weight:', w.data(), '\nweight grad:', w.grad(), '\nbias:', b.data(),
           '\nbias grad:', b.grad())

weight:
[[-0.06206018  0.06491279 -0.03182812 -0.01631819 -0.00312688]
```

```
[ 0.0408415  0.04370362  0.00404529 -0.0028032  0.00952624]
[-0.01501013  0.05958354  0.04705103 -0.06005495 -0.02276454]
[-0.0578019   0.02074406 -0.06716943 -0.01844618  0.04656678]]
<NDArray 4x5 @cpu(0)>
weight grad:
[[ 0.  0.  0.  0.  0.]
 [ 0.  0.  0.  0.  0.]
 [ 0.  0.  0.  0.  0.]
 [ 0.  0.  0.  0.  0.]]
<NDArray 4x5 @cpu(0)>
bias:
[ 0.  0.  0.  0.]
<NDArray 4 @cpu(0)>
bias grad:
[ 0.  0.  0.  0.]
<NDArray 4 @cpu(0)>
```

另外，我们也可以通过 `collect_params` 来访问 `nn.Block` 里的所有参数（包括所有的子 `nn.Block`）。它会返回一个名字到对应 `Parameter` 的字典。在这个字典中，我们既可以用 []（需要指定前缀），又可以用 `get()`（不需要指定前缀）来访问模型参数。

```
In [7]: params = net.collect_params()
print(params)
print(params['mlp0_dense0_bias'].data())
print(params.get('dense0_bias').data())

mlp0_ (
    Parameter mlp0_dense0_weight (shape=(4, 5), dtype=<class 'numpy.float32'>)
    Parameter mlp0_dense0_bias (shape=(4,), dtype=<class 'numpy.float32'>)
    Parameter mlp0_dense1_weight (shape=(2, 4), dtype=<class 'numpy.float32'>)
    Parameter mlp0_dense1_bias (shape=(2,), dtype=<class 'numpy.float32'>)
)

[ 0.  0.  0.  0.]
<NDArray 4 @cpu(0)>

[ 0.  0.  0.  0.]
<NDArray 4 @cpu(0)>
```

4.2.2 初始化模型参数

在 Gluon 中，模型的偏差参数总是默认初始化为 0。当我们对整个模型所有参数做初始化时，默认下权重参数的所有元素为 [-0.07, 0.07] 之间均匀分布的随机数。我们也可以使用其他初始化方法。以下例子使用了均值为 0，标准差为 0.02 的正态分布来随机初始化模型中所有层的权重参数。

```
In [8]: params = net.collect_params()
        params.initialize(init=init.Normal(sigma=0.02), force_reinit=True)
        print('hidden weight: ', net.hidden.weight.data(), '\nhidden bias: ',
              net.hidden.bias.data(), '\noutput weight: ', net.output.weight.data(),
              '\noutput bias: ', net.output.bias.data())

hidden weight:
[[ 0.01725933 -0.02177767  0.01344385  0.00272668 -0.00392631]
 [-0.03435376  0.01124353 -0.00622001  0.00689361  0.02062465]
 [ 0.00675439  0.01104854  0.01147354  0.00579418 -0.04144352]
 [-0.02262641  0.00582818  0.00072618  0.02628598 -0.00958349]]
<NDArray 4x5 @cpu(0)>
hidden bias:
[ 0.  0.  0.  0.]
<NDArray 4 @cpu(0)>
output weight:
[[[-0.0179193 -0.01632507 -0.03224728  0.01471114]
 [-0.00140731 -0.02293223 -0.02087744 -0.03070692]]
<NDArray 2x4 @cpu(0)>
output bias:
[ 0.  0.]
<NDArray 2 @cpu(0)>
```

我们也可以把模型中任意层任意参数初始化，例如把上面模型中隐藏层的偏差参数初始化为 1。

```
In [9]: net.hidden.bias.initialize(init=init.One(), force_reinit=True)
        print(net.hidden.bias.data())

[ 1.  1.  1.  1.]
<NDArray 4 @cpu(0)>
```

自定义初始化方法

下面我们自定义一个初始化方法。它通过重载 `_init_weight` 来实现自定义的初始化方法。

```
In [10]: class MyInit(init.Initializer):
            def __init__(self):
                super(MyInit, self).__init__()
                self._verbose = True
            def _init_weight(self, _, arr):
                # 初始化权重，使用 out=arr 后我们不需指定形状。
                nd.random.uniform(low=10, high=20, out=arr)

            net = MLP()
            net.initialize(MyInit())
```

```

net(x)
net.hidden.weight.data()

Out[10]:
[[ 14.14368629  14.66310787  14.74697495  12.44425583  16.2351017 ]
 [ 11.58969593  13.38007641  11.10375118  16.74752235  16.56329536]
 [ 13.1720171   11.38182926  17.7834549   11.96582413  19.49571037]
 [ 13.68725204  16.62526894  18.20993233  10.13571644  10.97101307]]
<NDArray 4x5 @cpu(0)>

```

我们还可以通过 `Parameter.set_data` 来直接改写模型参数。

```

In [11]: net = MLP()
        net.initialize()
        net(x)
        print('output layer default weight:', net.output.weight.data())

        w = net.output.weight
        w.set_data(nd.ones(w.shape))
        print('output layer modified weight:', net.output.weight.data())

output layer default weight:
[[ 0.05855297 -0.06101935 -0.0396449   0.0269461 ]
 [ 0.00912645  0.0093242   0.05111437 -0.03284547]]
<NDArray 2x4 @cpu(0)>
output layer modified weight:
[[ 1.  1.  1.  1.]
 [ 1.  1.  1.  1.]]
<NDArray 2x4 @cpu(0)>

```

4.2.3 延后的初始化

我们在本节开头定义的 `MLP` 模型的层 `nn.Dense(4)` 和 `nn.Dense(2)` 中无需指定它们的输入单元个数。定义 `net = MLP()` 和输入数据 `x`。我们在“[模型构造](#)”一节中介绍过，执行 `net(x)` 将调用 `net` 的 `forward` 函数计算模型输出。在这次计算中，`net` 也将从输入数据 `x` 的形状自动推断模型中每一层尚未指定的输入单元个数，得到模型中所有参数形状，并真正完成模型参数的初始化。因此，在上面两个例子中，我们总是在调用 `net(x)` 之后访问初始化的模型参数。

这种延后的初始化带来的一个便利是，我们在构造模型时无需指定每一层的输入单元个数。

下面，我们具体来看延后的初始化是怎么工作的。让我们新建一个网络并打印所有模型参数。这时，两个全连接层的权重的形状里都有 0。它们代表尚未指定的输入单元个数。

```

In [12]: net = MLP()
        net.collect_params()

```

```
Out[12]: mlp3_ (
    Parameter mlp3_dense0_weight (shape=(4, 0), dtype=<class 'numpy.float32'>)
    Parameter mlp3_dense0_bias (shape=(4,), dtype=<class 'numpy.float32'>)
    Parameter mlp3_dense1_weight (shape=(2, 0), dtype=<class 'numpy.float32'>)
    Parameter mlp3_dense1_bias (shape=(2,), dtype=<class 'numpy.float32'>)
)
```

然后，调用 `net.initialize()` 并打印所有模型参数。这时模型参数依然没有被初始化。

```
In [13]: net.initialize()
net.collect_params()
```

```
Out[13]: mlp3_ (
    Parameter mlp3_dense0_weight (shape=(4, 0), dtype=<class 'numpy.float32'>)
    Parameter mlp3_dense0_bias (shape=(4,), dtype=<class 'numpy.float32'>)
    Parameter mlp3_dense1_weight (shape=(2, 0), dtype=<class 'numpy.float32'>)
    Parameter mlp3_dense1_bias (shape=(2,), dtype=<class 'numpy.float32'>)
)
```

接下来，当模型见到输入数据 `x` 后 (`shape=(3, 5)`)，模型每一层参数的形状得以推断，参数的初始化最终完成。

```
In [14]: print(x)
net(x)
net.collect_params()
```

```
[[ 0.54881352  0.59284461  0.71518934  0.84426576  0.60276335]
 [ 0.85794562  0.54488319  0.84725171  0.42365479  0.62356371]
 [ 0.64589411  0.38438171  0.4375872   0.29753461  0.89177299]]
<NDArray 3x5 @cpu(0)>
```

```
Out[14]: mlp3_ (
    Parameter mlp3_dense0_weight (shape=(4, 5), dtype=<class 'numpy.float32'>)
    Parameter mlp3_dense0_bias (shape=(4,), dtype=<class 'numpy.float32'>)
    Parameter mlp3_dense1_weight (shape=(2, 4), dtype=<class 'numpy.float32'>)
    Parameter mlp3_dense1_bias (shape=(2,), dtype=<class 'numpy.float32'>)
)
```

4.2.4 共享模型参数

在有些情况下，我们希望模型的多个层之间共享模型参数。这时，我们可以通过 `nn.Block` 的 `params` 来指定模型参数。在下面使用 `nn.Sequential` 构造的多层感知机中，模型的第二隐藏层 (`net[1]`) 和第三隐藏层 (`net[2]`) 共享模型参数。

```
In [15]: net = nn.Sequential()
with net.name_scope():
```

```

net.add(nn.Dense(4, activation='relu'))
net.add(nn.Dense(4, activation='relu'))
# 通过 params 指定需要共享的模型参数。
net.add(nn.Dense(4, activation='relu', params=net[1].params))
net.add(nn.Dense(2))

net.initialize()
net(x)
print(net[1].weight.data())
print(net[2].weight.data())

[[ 0.02520778 -0.00740245 -0.00711232  0.04849721]
 [ 0.06699993  0.0279271  -0.05373173 -0.02835883]
 [ 0.03738332  0.0439317  -0.01234518 -0.0144892 ]
 [ 0.02456146  0.05335445 -0.03502852  0.01137821]]
<NDArray 4x4 @cpu(0)>

[[ 0.02520778 -0.00740245 -0.00711232  0.04849721]
 [ 0.06699993  0.0279271  -0.05373173 -0.02835883]
 [ 0.03738332  0.0439317  -0.01234518 -0.0144892 ]
 [ 0.02456146  0.05335445 -0.03502852  0.01137821]]
<NDArray 4x4 @cpu(0)>

```

同样，我们也可以在使用 `nn.Block` 构造的多层感知机中，让模型的第二隐藏层 (`hidden2`) 和第三隐藏层 (`hidden3`) 共享模型参数。

```

In [16]: class MLP_SHARE(nn.Block):
    def __init__(self, **kwargs):
        super(MLP_SHARE, self).__init__(**kwargs)
        with self.name_scope():
            self.hidden1 = nn.Dense(4, activation='relu')
            self.hidden2 = nn.Dense(4, activation='relu')
            # 通过 params 指定需要共享的模型参数。
            self.hidden3 = nn.Dense(4, activation='relu',
                                  params=self.hidden2.params)
            self.output = nn.Dense(2)

    def forward(self, x):
        return self.output(self.hidden3(self.hidden2(self.hidden1(x))))


net = MLP_SHARE()
net.initialize()
net(x)
print(net.hidden2.weight.data())
print(net.hidden3.weight.data())

```

```
[[ 0.05298331 -0.05103363 -0.05559913 -0.02824048]
 [-0.05706766  0.00979508 -0.02043347  0.01272219]
 [ 0.00725428  0.01040554 -0.06529249  0.02144811]
 [ 0.06565464  0.02129445 -0.02506039 -0.00960142]]
<NDArray 4x4 @cpu(0)>
```

```
[[ 0.05298331 -0.05103363 -0.05559913 -0.02824048]
 [-0.05706766  0.00979508 -0.02043347  0.01272219]
 [ 0.00725428  0.01040554 -0.06529249  0.02144811]
 [ 0.06565464  0.02129445 -0.02506039 -0.00960142]]
<NDArray 4x4 @cpu(0)>
```

4.2.5 小结

- 我们可以很方便地访问、自定义和共享模型参数。

4.2.6 练习

- 在本节任何一个例子中，`net.collect_params()` 和 `net.params` 的返回有什么不同？
- 查阅[MXNet 文档](#)，了解不同的参数初始化方式。
- 构造一个含共享参数层的多层感知机并训练。观察每一层的模型参数。
- 如果两个层共用一个参数，求梯度的时候会发生什么？

4.2.7 扫码直达讨论区



4.3 自定义层

深度学习的一个魅力之处在于神经网络中各式各样的层，例如全连接层和后面章节中将要介绍的卷积层、池化层与循环层。虽然 Gluon 提供了大量常用的层，但有时候我们依然希望自定义层。本节将介绍如何使用 `NDArray` 来自定义一个 Gluon 的层，从而以后可以被重复调用。

4.3.1 不含模型参数的自定义层

我们先介绍如何定义一个不含模型参数的自定义层。事实上，这和“[模型构造](#)”一节中介绍的使用 `nn.Block` 构造模型类似。下面通过继承 `nn.Block` 自定义了一个将输入减掉均值的层 `CenteredLayer`，并将层的计算放在 `forward` 函数里。这个层里不含模型参数。

```
In [1]: from mxnet import nd, gluon
        from mxnet.gluon import nn

        class CenteredLayer(nn.Block):
            def __init__(self, **kwargs):
                super(CenteredLayer, self).__init__(**kwargs)

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

我们可以实例化这个层用起来。

```
In [2]: layer = CenteredLayer()
        layer(nd.array([1, 2, 3, 4, 5]))

Out[2]:
[-2. -1.  0.  1.  2.]
<NDArray 5 @cpu(0)>
```

我们也可以用它来构造更复杂的模型。

```
In [3]: net = nn.Sequential()
        with net.name_scope():
            net.add(nn.Dense(128))
            net.add(nn.Dense(10))
            net.add(CenteredLayer())
```

打印自定义层输出的均值。由于均值是浮点数，它的值是个很接近 0 的数。

```
In [4]: net.initialize()
        y = net(nd.random.uniform(shape=(4, 8)))
        y.mean()

Out[4]:
[-6.63567312e-10]
<NDArray 1 @cpu(0)>
```

4.3.2 含模型参数的自定义层

我们还可以自定义含模型参数的自定义层。这样，自定义层里的模型参数就可以通过训练学出来了。我们在“[模型参数](#)”一节里介绍了 `Parameter` 类。其实，在自定义层的时候我们还可以使用 `nn.`

Block 自带的 ParameterDict 类型的成员变量 params。顾名思义，这是一个由字符串类型的参数名字映射到 Parameter 类型的模型参数的字典。我们可以通过 get 从 ParameterDict 创建 Parameter。

```
In [5]: params = gluon.ParameterDict(prefix="block1_")
    params.get("param2", shape=(2, 3))
    params

Out[5]: block1_ (
    Parameter block1_param2 (shape=(2, 3), dtype=<class 'numpy.float32'>)
)
```

现在我们看下如何实现一个含权重参数和偏差参数的全连接层。它使用 ReLU 作为激活函数。其中 in_units 和 units 分别是输入单元个数和输出单元个数。

```
In [6]: class MyDense(nn.Block):
    def __init__(self, units, in_units, **kwargs):
        super(MyDense, self).__init__(**kwargs)
        with self.name_scope():
            self.weight = self.params.get('weight', shape=(in_units, units))
            self.bias = self.params.get('bias', shape=(units,))

    def forward(self, x):
        linear = nd.dot(x, self.weight.data()) + self.bias.data()
        return nd.relu(linear)
```

下面，我们实例化 MyDense 来看下它的模型参数。这里我们特意加了名字前缀 prefix。在“模型构造”一节中介绍过，这是 nn.Block 的构造函数自带的参数。

```
In [7]: dense = MyDense(5, in_units=10, prefix='o_my_dense_')
dense.params

Out[7]: o_my_dense_ (
    Parameter o_my_dense_weight (shape=(10, 5), dtype=<class 'numpy.float32'>)
    Parameter o_my_dense_bias (shape=(5,), dtype=<class 'numpy.float32'>)
)
```

我们可以直接使用自定义层做计算。

```
In [8]: dense.initialize()
dense(nd.random.uniform(shape=(2, 10)))

Out[8]:
[[ 0.          0.09092736  0.          0.17156085  0.          ]
 [ 0.          0.06395531  0.          0.09730551  0.          ]]
<NDArray 2x5 @cpu(0)>
```

我们也可以使用自定义层构造模型。它用起来和 Gluon 的其他层很类似。

```
In [9]: net = nn.Sequential()
    with net.name_scope():
        net.add(MyDense(32, in_units=64))
        net.add(MyDense(2, in_units=32))
    net.initialize()
    net(nd.random.uniform(shape=(2, 64)))

Out[9]:
[[ 0.  0.]
 [ 0.  0.]]
<NDArray 2x2 @cpu(0)>
```

4.3.3 小结

- 使用 `nn.Block`, 我们可以方便地自定义层。

4.3.4 练习

- 如何修改自定义层里模型参数的默认初始化函数?

4.3.5 扫码直达讨论区



4.4 读取和存储

我们现在已经讲了很多，包括

- 如何处理数据
- 如何构建模型
- 如何在数据上训练模型
- 如何使用不同的损失函数来做分类和回归

但即使知道了所有这些，我们还没有完全准备好来构建一个真正的机器学习系统。这是因为我们还没有讲如何读和写模型。因为现实中，我们通常在一个地方训练好模型，然后部署到很多不同的地方。我们需要把内存中的训练好的模型存在硬盘上好下次使用。

4.4.1 读写 NDArrays

作为开始，我们先看看如何读写 NDArray。虽然我们可以使用 Python 的序列化包例如 Pickle，不过我们更倾向直接 save 和 load，通常这样更快，而且别的语言，例如 R 和 Scala 也能用到。

```
In [1]: from mxnet import nd
```

```
x = nd.ones(3)
y = nd.zeros(4)
filename = "../data/test1.params"
nd.save(filename, [x, y])
```

读回来

```
In [2]: a, b = nd.load(filename)
print(a, b)
```

```
[ 1.  1.  1.]
<NDArray 3 @cpu(0)>
[ 0.  0.  0.  0.]
<NDArray 4 @cpu(0)>
```

不仅可以读写单个 NDArray，NDArray list, dict 也是可以的：

```
In [3]: mydict = {"x": x, "y": y}
filename = "../data/test2.params"
nd.save(filename, mydict)
```

```
In [4]: c = nd.load(filename)
print(c)
```

```
'x':
[ 1.  1.  1.]
<NDArray 3 @cpu(0)>, 'y':
[ 0.  0.  0.  0.]
<NDArray 4 @cpu(0)>
```

4.4.2 读写 Gluon 模型的参数

跟 NDArray 类似，Gluon 的模型（就是 nn.Block）提供便利的 save_params 和 load_params 函数来读写数据。我们同前一样创建一个简单的多层感知机

```
In [5]: from mxnet.gluon import nn

def get_net():
    net = nn.Sequential()
    with net.name_scope():
        net.add(nn.Dense(10, activation="relu"))
        net.add(nn.Dense(2))
    return net

net = get_net()
net.initialize()
x = nd.random.uniform(shape=(2,10))
print(net(x))
```

```
[[ 0.00202203  0.00100273]
 [-0.00134863  0.00299659]]
<NDArray 2x2 @cpu(0)>
```

下面我们把模型参数存起来

```
In [6]: filename = "../data/mlp.params"
net.save_params(filename)
```

之后我们构建一个一样的多层感知机，但不像前面那样随机初始化，我们直接读取前面的模型参数。这样给定同样的输入，新的模型应该会输出同样的结果。

```
In [7]: import mxnet as mx
net2 = get_net()
net2.load_params(filename, mx.cpu()) # FIXME, gluon will support default ctx
→ later
print(net2(x))
```

```
[[ 0.00202203  0.00100273]
 [-0.00134863  0.00299659]]
<NDArray 2x2 @cpu(0)>
```

4.4.3 小结

- 通过 `load_params` 和 `save_params` 可以很方便的读写模型参数。

4.4.4 扫码直达讨论区



4.5 GPU 计算

【注意】运行本教程需要 GPU。没有 GPU 的同学可以大致理解下内容，至少是 context 这个概念，因为之后我们也会用到。但没有 GPU 不会影响运行之后的大部分教程（好吧，还是有点点，可能运行会稍微慢点）。

前面的教程里我们一直在使用 CPU 来计算，因为绝大部分的计算设备都有 CPU。但 CPU 的设计目的是处理通用的计算，例如打开浏览器和运行 Jupyter，它一般只有少数的一块区域复杂数值计算，例如 `nd.dot(A, B)`。对于复杂的神经网络和大规模的数据来说，单块 CPU 可能不够给力。

常用的解决办法是要么使用多台机器来协同计算，要么使用数值计算更加强劲的硬件，或者两者一起使用。本教程关注使用单块 Nvidia GPU 来加速计算，更多的选项例如多 GPU 和多机器计算则留到后面。

首先需要确保至少有一块 Nvidia 显卡已经安装好了，然后下载安装显卡驱动和 CUDA（推荐下载 8.0，CUDA 自带了驱动）。完成后应该可以通过 `nvidia-smi` 查看显卡信息了。（Windows 用户需要设一下 PATH: `set PATH=C:\Program Files\NVIDIA Corporation\NVSMI;%PATH%`）。

In [1]: `!nvidia-smi`

Wed Apr 11 00:06:56 2018

```
+-----+  
| NVIDIA-SMI 375.26           Driver Version: 375.26 |  
+-----+-----+-----+-----+  
| GPU  Name     Persistence-M| Bus-Id     Disp.A  | Volatile Uncorr. ECC |  
| Fan  Temp  Perf  Pwr:Usage/Cap|      Memory-Usage | GPU-Util  Compute M. |  
|=====+=====+=====+=====+=====+=====+=====+=====+  
|  0  Tesla M60        On     | 0000:00:1D.0    Off   |                  0 |  
| N/A   37C   P0    38W / 150W |    298MiB /  7612MiB |      0%     Default |  
+-----+-----+-----+-----+-----+-----+-----+  
|  1  Tesla M60        On     | 0000:00:1E.0    Off   |                  0 |  
| N/A   48C   P0    38W / 150W |    289MiB /  7612MiB |      0%     Default |  
+-----+-----+-----+-----+-----+-----+-----+
```

Processes:	GPU Memory				
GPU	PID	Type	Process name	Usage	
<hr/>					

接下来要确认正确安装了的 mxnet 的 GPU 版本。具体来说是卸载了 mxnet(pip uninstall mxnet)，然后根据 CUDA 版本安装 mxnet-cu75 或者 mxnet-cu80 (例如 pip install --pre mxnet-cu80)。

使用 pip 来确认下：

```
In [2]: import pip
for pkg in ['mxnet', 'mxnet-cu75', 'mxnet-cu80']:
    pip.main(['show', pkg])

You are using pip version 9.0.1, however version 9.0.3 is available.
You should consider upgrading via the 'pip install --upgrade pip' command.
You are using pip version 9.0.1, however version 9.0.3 is available.
You should consider upgrading via the 'pip install --upgrade pip' command.

Name: mxnet-cu80
Version: 1.2.0b20180404
Summary: MXNet is an ultra-scalable deep learning framework. This version uses
→ CUDA-8.0.
Home-page: https://github.com/apache/incubator-mxnet
Author: UNKNOWN
Author-email: UNKNOWN
License: Apache 2.0
Location: /var/lib/jenkins/miniconda3/envs/gluon_zh_docs/lib/python3.6/site-packages
Requires: graphviz, numpy, requests

You are using pip version 9.0.1, however version 9.0.3 is available.
You should consider upgrading via the 'pip install --upgrade pip' command.
```

4.5.1 Context

MXNet 使用 Context 来指定使用哪个设备来存储和计算。默认会将数据放在主内存，然后利用 CPU 来计算，这个由 `mx.cpu()` 来表示。GPU 则由 `mx.gpu()` 来表示。注意 `mx.cpu()` 表示所有的物理 CPU 和内存，意味着计算上会尽量使用多有的 CPU 核。但 `mx.gpu()` 只代表一块显卡和其对应的显卡内存。如果有多块 GPU，我们用 `mx.gpu(i)` 来表示第 i 块 GPU (i 从 0 开始)。

```
In [3]: import mxnet as mx
[mx.cpu(), mx.gpu(), mx.gpu(1)]
```

Out[3]: [cpu(0), gpu(0), gpu(1)]

4.5.2 NDArray 的 GPU 计算

每个 NDArray 都有一个 `context` 属性来表示它存在哪个设备上, 默认会是 `cpu`。这是为什么前面每次我们打印 NDArray 的时候都会看到 `@cpu(0)` 这个标识。

```
In [4]: from mxnet import nd  
x = nd.array([1,2,3])  
x.context  
  
Out[4]: cpu(0)
```

GPU 上创建内存

我们可以在创建的时候指定创建在哪个设备上 (如果 GPU 不能用或者没有装 MXNet GPU 版本, 这里会有 error):

```
In [5]: a = nd.array([1,2,3], ctx=mx.gpu())  
b = nd.zeros((3,2), ctx=mx.gpu())  
c = nd.random.uniform(shape=(2,3), ctx=mx.gpu())  
(a,b,c)  
  
Out[5]: (  
    [ 1.  2.  3.]  
    <NDArray 3 @gpu(0)>,  
    [[ 0.  0.]  
     [ 0.  0.]  
     [ 0.  0.]]  
    <NDArray 3x2 @gpu(0)>,  
    [[ 0.66865093  0.17409194  0.38500249]  
     [ 0.24678314  0.35134333  0.84042978]]  
    <NDArray 2x3 @gpu(0)>)
```

尝试将内存开到另外一块 GPU 上。如果不存在会报错。当然, 如果你有大于 10 块 GPU, 那么下面代码会顺利执行。

```
In [6]: import sys  
  
try:  
    nd.array([1,2,3], ctx=mx.gpu(10))  
except mx.MXNetError as err:  
    sys.stderr.write(str(err))  
  
[00:06:59] src/storage/storage.cc:65: Check failed: e == cudaSuccess || e ==  
→ cudaErrorCudartUnloading CUDA: invalid device ordinal  
  
Stack trace returned 10 entries:
```

```
[bt] (0) /var/lib/jenkins/miniconda3/envs/gluon_zh_docs/lib/python3.6/site-packages/m_
↪ xnet/libmxnet.so(+0x2ed342)
↪ [0x7f582fd70342]
[bt] (1) /var/lib/jenkins/miniconda3/envs/gluon_zh_docs/lib/python3.6/site-packages/m_
↪ xnet/libmxnet.so(+0x2ed918)
↪ [0x7f582fd70918]
[bt] (2) /var/lib/jenkins/miniconda3/envs/gluon_zh_docs/lib/python3.6/site-packages/m_
↪ xnet/libmxnet.so(+0x2c47a26)
↪ [0x7f58326caa26]
[bt] (3) /var/lib/jenkins/miniconda3/envs/gluon_zh_docs/lib/python3.6/site-packages/m_
↪ xnet/libmxnet.so(+0x2c4e46f)
↪ [0x7f58326d146f]
[bt] (4) /var/lib/jenkins/miniconda3/envs/gluon_zh_docs/lib/python3.6/site-packages/m_
↪ xnet/libmxnet.so(+0x26b1092)
↪ [0x7f5832134092]
[bt] (5) /var/lib/jenkins/miniconda3/envs/gluon_zh_docs/lib/python3.6/site-packages/m_
↪ xnet/libmxnet.so(MXNDArrayCreateEx+0x151)
↪ [0x7f58321348b1]
[bt] (6) /var/lib/jenkins/miniconda3/envs/gluon_zh_docs/lib/python3.6/lib-dynload/...
↪ ./libffi.so.6(ffi_call_unix64+0x4c)
↪ [0x7f587620ee6c]
[bt] (7) /var/lib/jenkins/miniconda3/envs/gluon_zh_docs/lib/python3.6/lib-dynload/...
↪ ./libffi.so.6(ffi_call+0x165)
↪ [0x7f587620dfd5]
[bt] (8) /var/lib/jenkins/miniconda3/envs/gluon_zh_docs/lib/python3.6/lib-dynload/_ct_
↪ ypes.cpython-36m-x86_64-linux-gnu.so(_ctypes_callproc+0x2ce)
↪ [0x7f5876422e2e]
[bt] (9) /var/lib/jenkins/miniconda3/envs/gluon_zh_docs/lib/python3.6/lib-dynload/_ct_
↪ ypes.cpython-36m-x86_64-linux-gnu.so(+0x12865)
↪ [0x7f5876423865]
```

我们可以通过 `copyto` 和 `as_in_context` 来在设备直接传输数据。

```
In [7]: y = x.copyto(mx.gpu())
z = x.as_in_context(mx.gpu())
(y, z)
```

```
Out[7]: (
    [ 1.  2.  3.]
    <NDArray 3 @gpu(0)>,
    [ 1.  2.  3.]
    <NDArray 3 @gpu(0)>)
```

这两个函数的主要区别是，如果源和目标的 context 一致，`as_in_context` 不复制，而 `copyto` 总是会新建内存：

```
In [8]: yy = y.as_in_context(mx.gpu())
        zz = z.copyto(mx.gpu())
(yy is y, zz is z)
```

```
Out[8]: (True, False)
```

GPU 上的计算

计算会在数据的 `context` 上执行。所以为了使用 GPU，我们只需要事先将数据放在上面就行了。结果会自动保存在对应的设备上：

```
In [9]: nd.exp(z + 2) * y
```

```
Out[9]:
```

```
[ 20.08553696 109.19629669 445.23950195]
<NDArray 3 @gpu(0)>
```

注意所有计算要求输入数据在同一个设备上。不一致的时候系统不进行自动复制。这个设计的目的是因为设备之间的数据交互通常比较昂贵，我们希望用户确切的知道数据放在哪里，而不是隐藏这个细节。下面代码尝试将 CPU 上 `x` 和 GPU 上的 `y` 做运算。

```
In [10]: try:
```

```
    x + y
```

```
except mx.MXNetError as err:
    sys.stderr.write(str(err))
```

```
[00:06:59] src/imperative./imperative_utils.h:55: Check failed:
→ inputs[i]->ctx().dev_mask() == ctx.dev_mask() (2 vs. 1) Operator broadcast_add
→ require all inputs live on the same context. But the first argument is on cpu(0)
→ while the 2-th argument is on gpu(0)
```

Stack trace returned 10 entries:

```
[bt] (0) /var/lib/jenkins/miniconda3/envs/gluon_zh_docs/lib/python3.6/site-packages/mxnet/_libmxnet.so(+0x2ed342)
→ [0x7f582fd70342]
[bt] (1) /var/lib/jenkins/miniconda3/envs/gluon_zh_docs/lib/python3.6/site-packages/mxnet/_libmxnet.so(+0x2ed918)
→ [0x7f582fd70918]
[bt] (2) /var/lib/jenkins/miniconda3/envs/gluon_zh_docs/lib/python3.6/site-packages/mxnet/_libmxnet.so(+0x27975ad)
→ [0x7f583221a5ad]
[bt] (3) /var/lib/jenkins/miniconda3/envs/gluon_zh_docs/lib/python3.6/site-packages/mxnet/_libmxnet.so(+0x27a14e1)
→ [0x7f58322244e1]
[bt] (4) /var/lib/jenkins/miniconda3/envs/gluon_zh_docs/lib/python3.6/site-packages/mxnet/_libmxnet.so(+0x26d9bcb)
→ [0x7f583215cbc]
```

```
[bt] (5) /var/lib/jenkins/miniconda3/envs/gluon_zh_docs/lib/python3.6/site-packages/m_
↳  xnet/libmxnet.so(MXImperativeInvokeEx+0x6f)
↳  [0x7f583215d18f]
[bt] (6) /var/lib/jenkins/miniconda3/envs/gluon_zh_docs/lib/python3.6/lib-dynload/...
↳  ../libffi.so.6(ffi_call_unix64+0x4c)
↳  [0x7f587620ee6c]
[bt] (7) /var/lib/jenkins/miniconda3/envs/gluon_zh_docs/lib/python3.6/lib-dynload/...
↳  ../libffi.so.6(ffi_call+0x165)
↳  [0x7f587620dfd5]
[bt] (8) /var/lib/jenkins/miniconda3/envs/gluon_zh_docs/lib/python3.6/lib-dynload/_ct_
↳  ypes.cpython-36m-x86_64-linux-gnu.so(_ctypes_callproc+0x2ce)
↳  [0x7f5876422e2e]
[bt] (9) /var/lib/jenkins/miniconda3/envs/gluon_zh_docs/lib/python3.6/lib-dynload/_ct_
↳  ypes.cpython-36m-x86_64-linux-gnu.so(+0x12865)
↳  [0x7f5876423865]
```

默认会复制回 CPU 的操作

如果某个操作需要将 NDArray 里面的内容转出来，例如打印或变成 numpy 格式，如果需要的话系统都会自动将数据 copy 到主内存。

```
In [11]: print(y)
      print(y.asnumpy())
      print(y.sum().asscalar())

[ 1.  2.  3.]
<NDArray 3 @gpu(0)>
[ 1.  2.  3.]
6.0
```

4.5.3 Gluon 的 GPU 计算

同 NDArray 类似，Gluon 的大部分函数可以通过 ctx 指定设备。下面代码将模型参数初始化在 GPU 上：

```
In [12]: from mxnet import gluon
        net = gluon.nn.Sequential()
        net.add(gluon.nn.Dense(1))

        net.initialize(ctx=mx.gpu())
```

输入 GPU 上的数据，会在 GPU 上计算结果

```
In [13]: data = nd.random.uniform(shape=[3,2], ctx=mx.gpu())
net(data)
```

```
Out[13]:
[[ 0.00271713]
 [ 0.01119637]
 [ 0.0097794 ]]
<NDArray 3x1 @gpu(0)>
```

确认下权重：

```
In [14]: net[0].weight.data()
```

```
Out[14]:
[[ 0.0068339   0.01299825]]
<NDArray 1x2 @gpu(0)>
```

4.5.4 小结

- 通过 context 我们可以很容易在不同的设备上计算。

4.5.5 练习

- 试试大一点的计算任务，例如大矩阵的乘法，看看 CPU 和 GPU 的速度区别。如果是计算量很小的任务呢？
- 试试 CPU 和 GPU 之间传递数据的速度
- GPU 上如何读写模型呢？

4.5.6 扫码直达讨论区



卷积神经网络

5.1 卷积神经网络—从 0 开始

之前的教程里，在输入神经网络前我们将输入图片直接转成了向量。这样做有两个不好的地方：

- 在图片里相近的像素在向量表示里可能很远，从而模型很难捕获他们的空间关系。
- 对于大图片输入，模型可能会很大。例如输入是 $256 \times 256 \times 3$ 的照片（仍然远比手机拍的小），输出层是 1000，那么这一层的模型大小是将近 1GB.

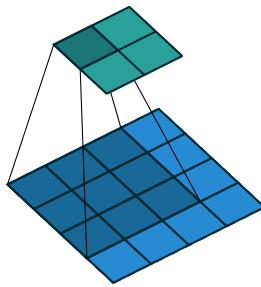
这一节我们介绍卷积神经网络，其有效解决了上述两个问题。

5.1.1 卷积神经网络

卷积神经网络是指主要由卷积层构成的神经网络。

卷积层

卷积层跟前面的全连接层类似，但输入和权重不是做简单的矩阵乘法，而是使用每次作用在一个窗口上的卷积。下图演示了输入是一个 4×4 矩阵，使用一个 3×3 的权重，计算得到 2×2 结果的过程。每次我们采样一个跟权重一样大小的窗口，让它跟权重做按元素的乘法然后相加。通常我们也是用卷积的术语把这个权重叫 kernel 或者 filter。



(图片版权属于 vdumoulin@github)

我们使用 `nd.Convolution` 来演示这个。

```
In [1]: from mxnet import nd

# 输入输出数据格式是 batch x channel x height x width, 这里 batch 和 channel 都是 1
# 权重格式是 output_channels x in_channels x height x width, 这里 input_filter 和
→ output_filter 都是 1。
w = nd.arange(4).reshape((1,1,2,2))
b = nd.array([1])
data = nd.arange(9).reshape((1,1,3,3))
out = nd.Convolution(data, w, b, kernel=w.shape[2:], num_filter=w.shape[1])

print('input:', data, '\n\nweight:', w, '\n\nbias:', b, '\n\noutput:', out)

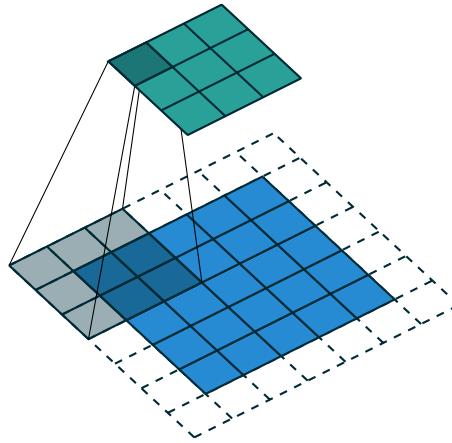
input:
[[[ 0.  1.  2.]
 [ 3.  4.  5.]
 [ 6.  7.  8.]]]
<NDArray 1x1x3x3 @cpu(0)>

weight:
[[[ 0.  1.]
 [ 2.  3.]]]
<NDArray 1x1x2x2 @cpu(0)>

bias:
[ 1.]
<NDArray 1 @cpu(0)>

output:
[[[ 20.  26.]
 [ 38.  44.]]]
<NDArray 1x1x2x2 @cpu(0)>
```

我们可以控制如何移动窗口，和在边缘的时候如何填充窗口。下图演示了 `stride=2` 和 `pad=1`。



```
In [2]: out = nd.Convolution(data, w, b, kernel=w.shape[2:], num_filter=w.shape[1],
                           stride=(2,2), pad=(1,1))

print('input:', data, '\n\nweight:', w, '\n\nbias:', b, '\n\noutput:', out)

input:
[[[[ 0.  1.  2.]
   [ 3.  4.  5.]
   [ 6.  7.  8.]]]]
<NDArray 1x1x3x3 @cpu(0)>

weight:
[[[[ 0.  1.]
   [ 2.  3.]]]]
<NDArray 1x1x2x2 @cpu(0)>

bias:
[ 1.]
<NDArray 1 @cpu(0)>

output:
[[[[ 1.  9.]
   [ 22.  44.]]]]
<NDArray 1x1x2x2 @cpu(0)>
```

当输入数据有多个通道的时候，每个通道会有对应的权重，然后会对每个通道做卷积之后在通道之间求和

$$\text{conv}(\text{data}, \text{w}, \text{b}) = \sum_i \text{conv}(\text{data}[:, i, :, :], \text{w}[:, i, :, :], \text{b})$$

```
In [3]: w = nd.arange(8).reshape((1,2,2,2))
```

```
data = nd.arange(18).reshape((1,2,3,3))

out = nd.Convolution(data, w, b, kernel=w.shape[2:], num_filter=w.shape[0])

print('input:', data, '\n\nweight:', w, '\n\nbias:', b, '\n\noutput:', out)

input:
[[[ 0.  1.  2.]
 [ 3.  4.  5.]
 [ 6.  7.  8.]]]

[[ 9. 10. 11.]
 [12. 13. 14.]
 [15. 16. 17.]]]]
<NDArray 1x2x3x3 @cpu(0)>

weight:
[[[ 0.  1.]
 [ 2.  3.]]]

[[ 4.  5.]
 [ 6.  7.]]]]
<NDArray 1x2x2x2 @cpu(0)>

bias:
[ 1.]
<NDArray 1 @cpu(0)>

output:
[[[ 269. 297.]
 [ 353. 381.]]]]
<NDArray 1x1x2x2 @cpu(0)>
```

当输出需要多通道时，每个输出通道有对应权重，然后每个通道上做卷积。

$$\text{conv}(\text{data}, \text{w}, \text{b})[:, i, :, :] = \text{conv}(\text{data}, \text{w}[i, :, :, :], \text{b}[i])$$

```
In [4]: w = nd.arange(16).reshape((2,2,2,2))
        data = nd.arange(18).reshape((1,2,3,3))
        b = nd.array([1,2])

        out = nd.Convolution(data, w, b, kernel=w.shape[2:], num_filter=w.shape[0])

        print('input:', data, '\n\nweight:', w, '\n\nbias:', b, '\n\noutput:', out)

input:
[[[ 0.  1.  2.]
 [ 3.  4.  5.]
 [ 6.  7.  8.]]]
```

```

[ 3.  4.  5.]
[ 6.  7.  8.]]]

[[ 9. 10. 11.]
 [12. 13. 14.]
 [15. 16. 17.]]]]
<NDArray 1x2x3x3 @cpu(0)>

weight:
[[[ 0.  1.]
 [ 2.  3.]]]

[[ 4.  5.]
 [ 6.  7.]]]

[[[ 8.  9.]
 [10. 11.]]]

[[12. 13.]
 [14. 15.]]]]
<NDArray 2x2x2x2 @cpu(0)>

bias:
[ 1.  2.]
<NDArray 2 @cpu(0)>

output:
[[[ 269.  297.]
 [ 353.  381.]]]

[[ 686.  778.]
 [ 962. 1054.]]]]
<NDArray 1x2x2x2 @cpu(0)>

```

池化层 (pooling)

因为卷积层每次作用在一个窗口，它对位置很敏感。池化层能够很好的缓解这个问题。它跟卷积类似每次看一个小窗口，然后选出窗口里面最大的元素，或者平均元素作为输出。

```
In [5]: data = nd.arange(18).reshape((1,2,3,3))

max_pool = nd.Pooling(data=data, pool_type="max", kernel=(2,2))
avg_pool = nd.Pooling(data=data, pool_type="avg", kernel=(2,2))
```

```
    print('data:', data, '\n\nmax pooling:', max_pool, '\n\navg pooling:',
         avg_pool)

data:
[[[ [ 0.  1.  2.]
  [ 3.  4.  5.]
  [ 6.  7.  8.]]]

 [[ 9. 10. 11.]
  [12. 13. 14.]
  [15. 16. 17.]]]]
<NDArray 1x2x3x3 @cpu(0)>

max pooling:
[[[ [ 4.  5.]
  [ 7.  8.]]]

 [[13. 14.]
  [16. 17.]]]]
<NDArray 1x2x2x2 @cpu(0)>

avg pooling:
[[[ [ 2.  3.]
  [ 5.  6.]]]

 [[11. 12.]
  [14. 15.]]]]
<NDArray 1x2x2x2 @cpu(0)>
```

下面我们可以开始使用这些层构建模型了。

5.1.2 获取数据

我们继续使用 FashionMNIST（希望你还没有彻底厌烦这个数据）

```
In [6]: import sys
        sys.path.append('..')
        from utils import load_data_fashion_mnist

        batch_size = 256
        train_data, test_data = load_data_fashion_mnist(batch_size)
```

5.1.3 定义模型

因为卷积网络计算比全连接要复杂, 这里我们默认使用 GPU 来计算。如果 GPU 不能用, 默认使用 CPU。(下面这段代码会保存在 `utils.py` 里可以下次重复使用)。

In [7]: `import mxnet as mx`

```
try:
    ctx = mx.gpu()
    _ = nd.zeros((1,), ctx=ctx)
except:
    ctx = mx.cpu()
ctx
```

Out[7]: `gpu(0)`

我们使用 MNIST 常用的 LeNet, 它有两个卷积层, 之后是两个全连接层。注意到我们将权重全部创建在 `ctx` 上:

In [8]: `weight_scale = .01`

```
# output channels = 20, kernel = (5,5)
W1 = nd.random_normal(shape=(20,1,5,5), scale=weight_scale, ctx=ctx)
b1 = nd.zeros(W1.shape[0], ctx=ctx)

# output channels = 50, kernel = (3,3)
W2 = nd.random_normal(shape=(50,20,3,3), scale=weight_scale, ctx=ctx)
b2 = nd.zeros(W2.shape[0], ctx=ctx)

# output dim = 128
W3 = nd.random_normal(shape=(1250, 128), scale=weight_scale, ctx=ctx)
b3 = nd.zeros(W3.shape[1], ctx=ctx)

# output dim = 10
W4 = nd.random_normal(shape=(W3.shape[1], 10), scale=weight_scale, ctx=ctx)
b4 = nd.zeros(W4.shape[1], ctx=ctx)

params = [W1, b1, W2, b2, W3, b3, W4, b4]
for param in params:
    param.attach_grad()
```

卷积模块通常是“卷积层-激活层-池化层”。然后转成 2D 矩阵输出给后面的全连接层。

In [9]: `def net(X, verbose=False):`
 `X = X.as_in_context(W1.context)`
 `# 第一层卷积`
 `h1_conv = nd.Convolution(`

```

    data=X, weight=W1, bias=b1, kernel=W1.shape[2:],
    ↵ num_filter=W1.shape[0])
        h1_activation = nd.relu(h1_conv)
        h1 = nd.Pooling(
            data=h1_activation, pool_type="max", kernel=(2,2), stride=(2,2))
    # 第二层卷积
    h2_conv = nd.Convolution(
        data=h1, weight=W2, bias=b2, kernel=W2.shape[2:],
    ↵ num_filter=W2.shape[0])
        h2_activation = nd.relu(h2_conv)
        h2 = nd.Pooling(data=h2_activation, pool_type="max", kernel=(2,2),
    ↵ stride=(2,2))
        h2 = nd.flatten(h2)
    # 第一层全连接
    h3_linear = nd.dot(h2, W3) + b3
    h3 = nd.relu(h3_linear)
    # 第二层全连接
    h4_linear = nd.dot(h3, W4) + b4
    if verbose:
        print('1st conv block:', h1.shape)
        print('2nd conv block:', h2.shape)
        print('1st dense:', h3.shape)
        print('2nd dense:', h4_linear.shape)
        print('output:', h4_linear)
    return h4_linear

```

测试一下，输出中间结果形状（当然可以直接打印结果）和最终结果。

```

In [10]: for data, _ in train_data:
            net(data, verbose=True)
            break

1st conv block: (256, 20, 12, 12)
2nd conv block: (256, 1250)
1st dense: (256, 128)
2nd dense: (256, 10)
output:
[[ -1.79294566e-05   5.98712104e-05   7.26883736e-05 ... ,   1.53527377e-04
  3.42280073e-05   3.73327348e-05]
 [ -4.90877501e-05   8.28537168e-07   3.53679170e-05 ... ,   7.27975494e-05
  3.57615463e-05  -1.83318298e-05]
 [ -2.17418437e-05   3.58635771e-06   3.13593810e-05 ... ,   5.70012780e-05
  -1.96763340e-05  -2.13047715e-05]
 ...
 [ -1.36901272e-05   4.75381603e-05   3.20889958e-05 ... ,   9.23057232e-05
  3.32271738e-05   1.37450543e-05]
 [ -2.12464874e-05   6.97261430e-06   1.86231791e-05 ... ,   1.33626876e-04

```

```

4.79516802e-06 3.16570004e-05]
[-2.37466484e-05 3.26117879e-05 1.06900497e-05 ... , 9.44406420e-05
2.66714069e-05 3.32137533e-05]]
<NDArray 256x10 @gpu(0)>

```

5.1.4 训练

跟前面没有什么不同的，除了这里我们使用 `as_in_context` 将 `data` 和 `label` 都放置在需要的设备上。（下面这段代码也将保存在 `utils.py` 里方便之后使用）。

```

In [11]: from mxnet import autograd as autograd
        from utils import SGD, accuracy, evaluate_accuracy
        from mxnet import gluon

softmax_cross_entropy = gluon.loss.SoftmaxCrossEntropyLoss()

learning_rate = .2

for epoch in range(5):
    train_loss = 0.
    train_acc = 0.
    for data, label in train_data:
        label = label.as_in_context(ctx)
        with autograd.record():
            output = net(data)
            loss = softmax_cross_entropy(output, label)
        loss.backward()
        SGD(params, learning_rate/batch_size)

    train_loss += nd.mean(loss).asscalar()
    train_acc += accuracy(output, label)

    test_acc = evaluate_accuracy(test_data, net, ctx)
    print("Epoch %d. Loss: %f, Train acc %f, Test acc %f" %
          (epoch, train_loss/len(train_data),
           train_acc/len(train_data), test_acc))

Epoch 0. Loss: 2.302483, Train acc 0.102047, Test acc 0.099960
Epoch 1. Loss: 1.511917, Train acc 0.439036, Test acc 0.699720
Epoch 2. Loss: 0.677461, Train acc 0.738114, Test acc 0.776042
Epoch 3. Loss: 0.543703, Train acc 0.792384, Test acc 0.789663
Epoch 4. Loss: 0.471360, Train acc 0.824586, Test acc 0.840445

```

5.1.5 结论

可以看到卷积神经网络比前面的多层感知的分类精度更好。事实上，如果你看懂了这一章，那你基本知道了计算视觉里最重要的几个想法。LeNet早在90年代就提出来了。不管你相信不相信，如果你5年前懂了这个而且开了家公司，那么你很可能现在已经把公司作价几千万卖个某大公司了。幸运的是，或者不幸的是，现在的算法已经更加高级些了，接下来我们会看到一些更加新的想法。

5.1.6 练习

- 试试改改卷积层设定，例如 filter 数量，kernel 大小
- 试试把池化层从 max 改到 avg
- 如果你有 GPU，那么尝试用 CPU 来跑一下看看
- 你可能注意到比前面的多层感知机慢了很多，那么尝试计算下这两个模型分别需要多少浮点计算。例如 $n \times m$ 和 $m \times k$ 的矩阵乘法需要浮点运算 $2nmk$ 。

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

5.2 卷积神经网络—使用 Gluon

现在我们使用 Gluon 来实现上一章的卷积神经网络。

5.2.1 定义模型

下面是 LeNet 在 Gluon 里的实现，注意到我们不再需要实现去计算每层的输入大小，尤其是接在卷积后面的那个全连接层。

```
In [1]: from mxnet.gluon import nn

net = nn.Sequential()
with net.name_scope():
    net.add(
        nn.Conv2D(channels=20, kernel_size=5, activation='relu'),
        nn.MaxPool2D(pool_size=2, strides=2),
        nn.Conv2D(channels=50, kernel_size=3, activation='relu'),
        nn.MaxPool2D(pool_size=2, strides=2),
        nn.Flatten(),
        nn.Dense(128, activation="relu"),
        nn.Dense(10)
    )
```

5.2.2 获取数据和训练

剩下的跟上一章没什么不同，我们重用 `utils.py` 里定义的函数。

```
In [2]: from mxnet import gluon
        import sys
        sys.path.append('..')
        import utils

        # 初始化
        ctx = utils.try_gpu()
        net.initialize(ctx=ctx)
        print('initialize weight on', ctx)

        # 获取数据
        batch_size = 256
        train_data, test_data = utils.load_data_fashion_mnist(batch_size)

        # 训练
        loss = gluon.loss.SoftmaxCrossEntropyLoss()
        trainer = gluon.Trainer(net.collect_params(),
                               'sgd', {'learning_rate': 0.5})
        utils.train(train_data, test_data, net, loss,
                   trainer, ctx, num_epochs=5)

initialize weight on gpu(0)
Start training on gpu(0)
Epoch 0. Loss: 0.959, Train acc 0.65, Test acc 0.78, Time 2.3 sec
Epoch 1. Loss: 0.461, Train acc 0.82, Test acc 0.86, Time 2.0 sec
Epoch 2. Loss: 0.381, Train acc 0.86, Test acc 0.87, Time 2.0 sec
Epoch 3. Loss: 0.336, Train acc 0.87, Test acc 0.86, Time 2.0 sec
Epoch 4. Loss: 0.310, Train acc 0.88, Test acc 0.89, Time 2.0 sec
```

5.2.3 结论

使用 Gluon 来实现卷积网络轻松加随意。

5.2.4 练习

再试试改改卷积层设定，是不是会比上一章容易很多？

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

5.3 批量归一化—从 0 开始

在Kaggle 实战我们输入数据做了归一化。在实际应用中，我们通常将输入数据的每个样本或者每个特征进行归一化，就是将均值变为 0 方差变为 1，来使得数值更稳定。

这个对我们在之前的课程里学过了线性回归和逻辑回归很有效。因为输入层的输入值的大小变化不剧烈，那么输入也不会。但是，对于一个可能有很多层的深度学习模型来说，情况可能会比较复杂。

举个例子，随着第一层和第二层的参数在训练时不断变化，第三层所使用的激活函数的输入值可能由于乘法效应而变得极大或极小，例如和第一层所使用的激活函数的输入值不在一个数量级上。这种在训练时可能出现的情况会造成模型训练的不稳定性。例如，给定一个学习率，某次参数迭代后，目标函数值会剧烈变化或甚至升高。数学的解释是，如果把目标函数 f 根据参数 \mathbf{w} 迭代（如 $f(\mathbf{w} - \eta \nabla f(\mathbf{w}))$ ）进行泰勒展开，有关学习率 η 的高阶项的系数可能由于数量级的原因（通常由于层数多）而不容忽略。然而常用的低阶优化算法（如梯度下降）对于不断降低目标函数的有效性通常基于一个基本假设：在以上泰勒展开中把有关学习率的高阶项通通忽略不计。

为了应对上述这种情况，Sergey Ioffe 和 Christian Szegedy 在 2015 年提出了批量归一化的方法。简而言之，在训练时给定一个批量输入，批量归一化试图对深度学习模型的某一层所使用的激活函数的输入进行归一化：使批量呈标准正态分布（均值为 0，标准差为 1）。

批量归一化通常应用于输入层或任意中间层。

5.3.1 简化的批量归一化层

给定一个批量 $B = \{x_{1,\dots,m}\}$ ，我们需要学习拉升参数 γ 和偏移参数 β 。

我们定义：

$$\begin{aligned}\mu_B &\leftarrow \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m x_i \\ \sigma_B^2 &\leftarrow \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (x_i - \mu_B)^2 \\ \hat{x}_i &\leftarrow \frac{x_i - \mu_B}{\sqrt{\sigma_B^2 + \epsilon}} \\ y_i &\leftarrow \gamma \hat{x}_i + \beta \equiv BN_{\gamma, \beta}(x_i)\end{aligned}$$

批量归一化层的输出是 $\{y_i = BN_{\gamma, \beta}(x_i)\}$ 。

我们现在来动手实现一个简化的批量归一化层。实现时对全连接层和二维卷积层两种情况做了区分。对于全连接层，很明显我们要对每个批量进行归一化。然而这里需要注意的是，对于二维卷积，我们要对每个通道进行归一化，并需要保持四维形状使得可以正确地广播。

```
In [1]: from mxnet import nd
def pure_batch_norm(X, gamma, beta, eps=1e-5):
    assert len(X.shape) in (2, 4)
    # 全连接: batch_size x feature
    if len(X.shape) == 2:
        # 每个输入维度在样本上的平均和方差
        mean = X.mean(axis=0)
        variance = ((X - mean)**2).mean(axis=0)
    # 2D 卷积: batch_size x channel x height x width
    else:
        # 对每个通道算均值和方差, 需要保持 4D 形状使得可以正确地广播
        mean = X.mean(axis=(0,2,3), keepdims=True)
        variance = ((X - mean)**2).mean(axis=(0,2,3), keepdims=True)

    # 均一化
    X_hat = (X - mean) / nd.sqrt(variance + eps)
    # 拉升和偏移
    return gamma.reshape(mean.shape) * X_hat + beta.reshape(mean.shape)
```

下面我们检查一下。我们先定义全连接层的输入是这样的。每一行是批量中的一个实例。

```
In [2]: A = nd.arange(6).reshape((3,2))
A
```

Out[2]:

```
[[ 0.  1.]
 [ 2.  3.]
 [ 4.  5.]]
<NDArray 3x2 @cpu(0)>
```

我们希望批量中的每一列都被归一化。结果符合预期。

```
In [3]: pure_batch_norm(A, gamma=nd.array([1,1]), beta=nd.array([0,0]))
```

Out[3]:

```
[[[-1.22474265 -1.22474265]
 [ 0.          0.          ]
 [ 1.22474265  1.22474265]]
<NDArray 3x2 @cpu(0)>
```

下面我们定义二维卷积网络层的输入是这样的。

```
In [4]: B = nd.arange(18).reshape((1,2,3,3))
B
```

Out[4]:

```
[[[[ 0.  1.  2.]
   [ 3.  4.  5.]
   [ 6.  7.  8.]]]
```

```
[ [ 9. 10. 11.]
  [ 12. 13. 14.]
  [ 15. 16. 17.]]]
<NDArray 1x2x3x3 @cpu(0)>
```

结果也如预期那样，我们对每个通道做了归一化。

```
In [5]: pure_batch_norm(B, gamma=nd.array([1,1]), beta=nd.array([0,0]))
```

```
Out[5]:
```

```
[[[[-1.54919219 -1.1618942 -0.7745961 ]
  [-0.38729805 0. 0.38729805]
  [ 0.7745961 1.1618942 1.54919219]]

 [[-1.54919219 -1.1618942 -0.7745961 ]
  [-0.38729805 0. 0.38729805]
  [ 0.7745961 1.1618942 1.54919219]]]
<NDArray 1x2x3x3 @cpu(0)>
```

5.3.2 批量归一化层

你可能会想，既然训练时用了批量归一化，那么测试时也该用批量归一化吗？其实这个问题乍一想不是很好回答，因为：

- 不用的话，训练出的模型参数很可能在测试时就不准确了；
- 用的话，万一测试的数据就只有一个数据实例就不好办了。

事实上，在测试时我们还是需要继续使用批量归一化的，只是需要做些改动。在测试时，我们需要把原先训练时用到的批量均值和方差替换成整个训练数据的均值和方差。但是当训练数据极大时，这个计算开销很大。因此，我们用移动平均的方法来近似计算（参见实现中的 `moving_mean` 和 `moving_variance`）。

为了方便讨论批量归一化层的实现，我们先看下面这段代码来理解 Python 变量可以如何修改。

```
In [6]: def batch_norm(X, gamma, beta, is_training, moving_mean, moving_variance,
                  eps = 1e-5, moving_momentum = 0.9):
    assert len(X.shape) in (2, 4)
    # 全连接: batch_size x feature
    if len(X.shape) == 2:
        # 每个输入维度在样本上的平均和方差
        mean = X.mean(axis=0)
        variance = ((X - mean)**2).mean(axis=0)
    # 2D 卷积: batch_size x channel x height x width
    else:
```

```

# 对每个通道算均值和方差, 需要保持 4D 形状使得可以正确的广播
mean = X.mean(axis=(0,2,3), keepdims=True)
variance = ((X - mean)**2).mean(axis=(0,2,3), keepdims=True)
# 变形使得可以正确的广播
moving_mean = moving_mean.reshape(mean.shape)
moving_variance = moving_variance.reshape(mean.shape)

# 均一化
if is_training:
    X_hat = (X - mean) / nd.sqrt(variance + eps)
    #!!! 更新全局的均值和方差
    moving_mean[:] = moving_momentum * moving_mean + (
        1.0 - moving_momentum) * mean
    moving_variance[:] = moving_momentum * moving_variance + (
        1.0 - moving_momentum) * variance
else:
    #!!! 测试阶段使用全局的均值和方差
    X_hat = (X - moving_mean) / nd.sqrt(moving_variance + eps)

# 拉升和偏移
return gamma.reshape(mean.shape) * X_hat + beta.reshape(mean.shape)

```

5.3.3 定义模型

我们尝试使用 GPU 运行本教程代码。

```
In [7]: import sys
sys.path.append('..')
import utils
ctx = utils.try_gpu()
ctx
```

```
Out[7]: gpu(0)
```

先定义参数。

```
In [8]: weight_scale = .01

# 输出通道 = 20, 卷积核 = (5,5)
c1 = 20
W1 = nd.random.normal(shape=(c1,1,5,5), scale=weight_scale, ctx=ctx)
b1 = nd.zeros(c1, ctx=ctx)

# 第 1 层批量归一化
gamma1 = nd.random.normal(shape=c1, scale=weight_scale, ctx=ctx)
beta1 = nd.random.normal(shape=c1, scale=weight_scale, ctx=ctx)
```

```

moving_mean1 = nd.zeros(c1, ctx=ctx)
moving_variance1 = nd.zeros(c1, ctx=ctx)

# 输出通道 = 50, 卷积核 = (3,3)
c2 = 50
W2 = nd.random_normal(shape=(c2,c1,3,3), scale=weight_scale, ctx=ctx)
b2 = nd.zeros(c2, ctx=ctx)

# 第 2 层批量归一化
gamma2 = nd.random_normal(shape=c2, scale=weight_scale, ctx=ctx)
beta2 = nd.random_normal(shape=c2, scale=weight_scale, ctx=ctx)
moving_mean2 = nd.zeros(c2, ctx=ctx)
moving_variance2 = nd.zeros(c2, ctx=ctx)

# 输出维度 = 128
o3 = 128
W3 = nd.random_normal(shape=(1250, o3), scale=weight_scale, ctx=ctx)
b3 = nd.zeros(o3, ctx=ctx)

# 输出维度 = 10
W4 = nd.random_normal(shape=(W3.shape[1], 10), scale=weight_scale, ctx=ctx)
b4 = nd.zeros(W4.shape[1], ctx=ctx)

# 注意这里 moving_* 是不需要更新的
params = [W1, b1, gamma1, beta1,
          W2, b2, gamma2, beta2,
          W3, b3, W4, b4]

for param in params:
    param.attach_grad()

```

下面定义模型。我们添加了批量归一化层。特别要注意我们添加的位置：在卷积层后，在激活函数前。

```

In [9]: def net(X, is_training=False, verbose=False):
    X = X.as_in_context(W1.context)
    # 第一层卷积
    h1_conv = nd.Convolution(
        data=X, weight=W1, bias=b1, kernel=W1.shape[2:], num_filter=c1)
    ### 添加了批量归一化层
    h1_bn = batch_norm(h1_conv, gamma1, beta1, is_training,
                        moving_mean1, moving_variance1)
    h1_activation = nd.relu(h1_bn)
    h1 = nd.Pooling(
        data=h1_activation, pool_type="max", kernel=(2,2), stride=(2,2))
    # 第二层卷积

```

```

h2_conv = nd.Convolution(
    data=h1, weight=W2, bias=b2, kernel=W2.shape[2:], num_filter=c2)
### 添加了批量归一化层
h2_bn = batch_norm(h2_conv, gamma2, beta2, is_training,
                    moving_mean2, moving_variance2)
h2_activation = nd.relu(h2_bn)
h2 = nd.Pooling(data=h2_activation, pool_type="max", kernel=(2,2),
→ stride=(2,2))
h2 = nd.flatten(h2)
# 第一层全连接
h3_linear = nd.dot(h2, W3) + b3
h3 = nd.relu(h3_linear)
# 第二层全连接
h4_linear = nd.dot(h3, W4) + b4
if verbose:
    print('1st conv block:', h1.shape)
    print('2nd conv block:', h2.shape)
    print('1st dense:', h3.shape)
    print('2nd dense:', h4_linear.shape)
    print('output:', h4_linear)
return h4_linear

```

下面我们训练并测试模型。

```

In [10]: from mxnet import autograd
         from mxnet import gluon

batch_size = 256
train_data, test_data = utils.load_data_fashion_mnist(batch_size)

softmax_cross_entropy = gluon.loss.SoftmaxCrossEntropyLoss()

learning_rate = 0.2

for epoch in range(5):
    train_loss = 0.
    train_acc = 0.
    for data, label in train_data:
        label = label.as_in_context(ctx)
        with autograd.record():
            output = net(data, is_training=True)
            loss = softmax_cross_entropy(output, label)
            loss.backward()
            utils.SGD(params, learning_rate/batch_size)

        train_loss += nd.mean(loss).asscalar()

```

```
train_acc += utils.accuracy(output, label)

test_acc = utils.evaluate_accuracy(test_data, net, ctx)
print("Epoch %d. Loss: %f, Train acc %f, Test acc %f" % (
    epoch, train_loss/len(train_data), train_acc/len(train_data),
    test_acc))

Epoch 0. Loss: 2.071334, Train acc 0.225010, Test acc 0.704928
Epoch 1. Loss: 0.585441, Train acc 0.771918, Test acc 0.769331
Epoch 2. Loss: 0.418015, Train acc 0.843717, Test acc 0.859575
Epoch 3. Loss: 0.358324, Train acc 0.867788, Test acc 0.878305
Epoch 4. Loss: 0.322809, Train acc 0.880308, Test acc 0.882913
```

5.3.4 总结

相比卷积神经网络—从 0 开始来说，通过加入批量归一化层，即使是同样的参数，测试精度也有明显提升，尤其是最开始几轮。

5.3.5 练习

尝试调大学习率，看看跟前面比，是不是可以使用更大的学习率。

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

5.4 批量归一化—使用 Gluon

本章介绍如何使用 Gluon 在训练和测试深度学习模型中使用批量归一化。

5.4.1 定义模型并添加批量归一化层

有了 Gluon，我们模型的定义工作变得简单了许多。我们只需要添加 `nn.BatchNorm` 层并指定对二维卷积的通道 (`axis=1`) 进行批量归一化。

```
In [1]: from mxnet.gluon import nn

net = nn.Sequential()
with net.name_scope():
    # 第一层卷积
    net.add(nn.Conv2D(channels=20, kernel_size=5))
    ### 添加了批量归一化层
    net.add(nn.BatchNorm(axis=1))
```

```

net.add(nn.Activation(activation='relu'))
net.add(nn.MaxPool2D(pool_size=2, strides=2))
# 第二层卷积
net.add(nn.Conv2D(channels=50, kernel_size=3))
### 添加了批量归一化层
net.add(nn.BatchNorm(axis=1))
net.add(nn.Activation(activation='relu'))
net.add(nn.MaxPool2D(pool_size=2, strides=2))
net.add(nn.Flatten())
# 第一层全连接
net.add(nn.Dense(128, activation="relu"))
# 第二层全连接
net.add(nn.Dense(10))

```

5.4.2 模型训练

剩下的代码跟之前没什么不一样。

```

In [2]: import sys
        sys.path.append('..')
        import utils
        from mxnet import autograd
        from mxnet import gluon
        from mxnet import nd

        ctx = utils.try_gpu()
        net.initialize(ctx=ctx)

        batch_size = 256
        train_data, test_data = utils.load_data_fashion_mnist(batch_size)

        softmax_cross_entropy = gluon.loss.SoftmaxCrossEntropyLoss()
        trainer = gluon.Trainer(net.collect_params(), 'sgd', {'learning_rate': 0.2})

        for epoch in range(5):
            train_loss = 0.
            train_acc = 0.
            for data, label in train_data:
                label = label.as_in_context(ctx)
                with autograd.record():
                    output = net(data.as_in_context(ctx))
                    loss = softmax_cross_entropy(output, label)
                    loss.backward()
                trainer.step(batch_size)

```

```
train_loss += nd.mean(loss).asscalar()
train_acc += utils.accuracy(output, label)
test_acc = utils.evaluate_accuracy(test_data, net, ctx)
print("Epoch %d. Loss: %f, Train acc %f, Test acc %f" % (
    epoch, train_loss/len(train_data),
    train_acc/len(train_data), test_acc))

Epoch 0. Loss: 0.606360, Train acc 0.774489, Test acc 0.830929
Epoch 1. Loss: 0.368709, Train acc 0.862814, Test acc 0.861178
Epoch 2. Loss: 0.310160, Train acc 0.885617, Test acc 0.894932
Epoch 3. Loss: 0.287182, Train acc 0.892561, Test acc 0.899239
Epoch 4. Loss: 0.258732, Train acc 0.902861, Test acc 0.898638
```

5.4.3 总结

使用 Gluon 我们可以很轻松地添加批量归一化层。

5.4.4 练习

如果在全连接层添加批量归一化结果会怎么样？

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

5.5 深度卷积神经网络和 AlexNet

在前面的章节中，我们学会了如何使用卷积神经网络进行图像分类。其中我们使用了两个卷积层与池化层交替，加入一个全连接隐层，和一个归一化指数 Softmax 输出层。这个结构与 LeNet，一个以卷积神经网络先驱 Yann LeCun 命名的早期神经网络很相似。LeCun 也是将卷积神经网络付诸应用的第一人，通过反向传播来进行训练，这是一个当时相当新颖的想法。当时一小批对仿生的学习模型热衷的研究者通过人工模拟神经元来作为学习模型。然而即便时至今日，依然没有多少研究者相信真正的大脑是通过梯度下降来学习的，研究社区也探索了许多其他的学习理论。LeCun 在当时展现了，在识别手写数字的任务上通过梯度下降训练卷积神经网络可以达到最先进的结果。这个奠基性的工作第一次将卷积神经网络推上舞台，为世人所知。

然而，这之后几年里，神经网络被许多其他方法超越。神经网络训练慢，并且就深度神经网络从一个随机生成的权重起点开始训练是否可行，学界没有广泛达成一致。此外，十多年前还没有黄教主的核武器 GPU 通用计算，所以训练一个多通道，多层，大量参数的在十几年前难以实现。所以虽然 LeNet 可以在 MNIST 上得到好的成绩，在更大的真实世界的数据集上，神经网络还是在这个冬天里渐渐失宠。

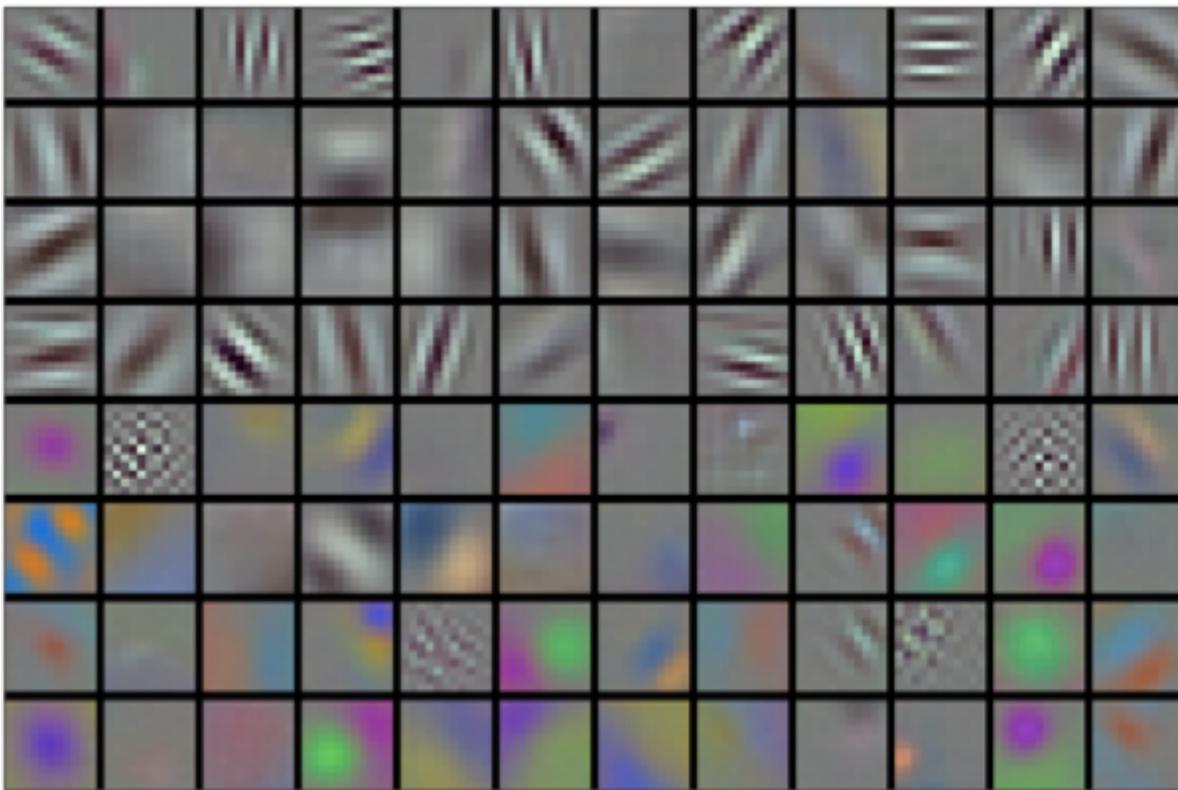
取而代之，研究者们通过勤劳，智慧和黑魔法生成了许多手工特征。通常的模式是 1. 找个数据集 2. 用一堆已有的特征提取函数生成特征 3. 把这些特征表示放进一个简单的线性模型（当时认为的机器学习部分仅限这一步）

计算机视觉领域一直维持这个状况直到 2012 年，深度学习即将颠覆应用机器学习。一个小伙伴 (Zack) 2013 年研究生入学，他的一个朋友这样总结了当时的状况：如果你跟机器学习研究者们交谈，他们会认为机器学习既重要又优美。优雅的定理证明了许多分类器的性质。机器学习领域生机勃勃，严谨，而且极其有用。然而如果你跟一个计算机视觉研究者交谈，则是另外一幅景象。这人会告诉你图像识别里“不可告人”的现实是，计算机视觉里的机器学习流水线中真正重要的是数据和特征。稍微干净点的数据集，或者略微好些的手调特征对最终准确度意味着天壤之别。反而分类器的选择对表现的区别影响不大。说到底，把特征扔进逻辑回归，支持向量机，或者其他任何分类器，表现都差不多。

5.5.1 学习特征表示

简单来说，给定一个数据集，当时流水线里最重要的是特征表示这步。并且直到 2012 年，特征表示这步都是基于硬拼出来的直觉，机械化手工地生成的。事实上，做出一组特征，改进结果，并把方法写出来是计算机视觉论文里的一个重要流派。

另一些研究者则持异议。他们认为特征本身也应该由学习得来。他们还相信，为了表征足够复杂的输入，特征本身应该阶级式地组合起来。持这一想法的研究者们，包括 Yann LeCun, Geoff Hinton, Yoshua Bengio, Andrew Ng, Shun-ichi Amari, Juergen Schmidhuber，相信通过把许多神经网络层组合起来训练，他们可能可以让网络学得阶级式的数据表征。在图片中，底层可以表示边，色彩和纹理。

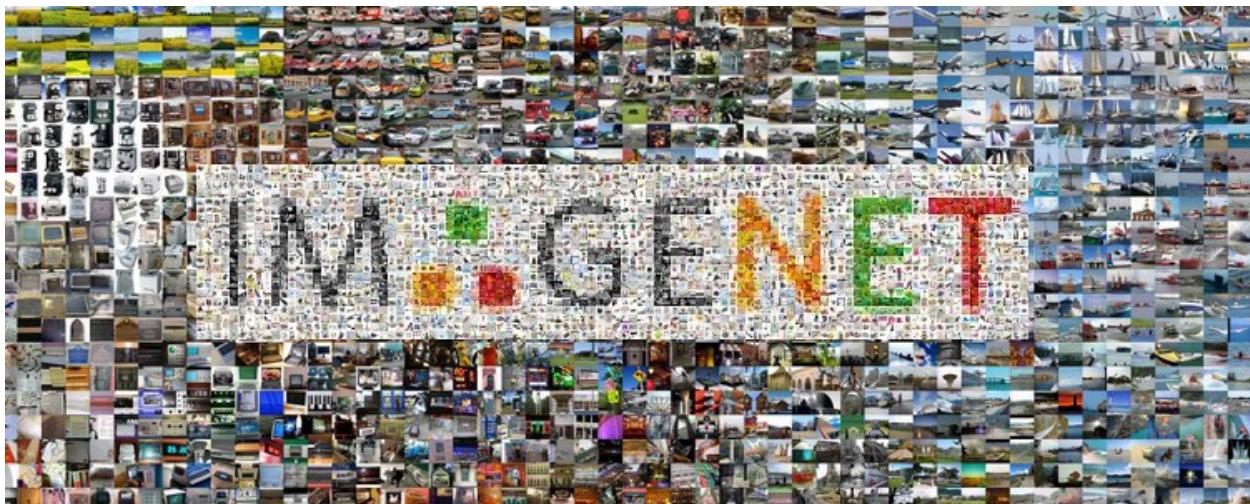


高层可能可以基于这些表示，来表征更大的结构，如眼睛，鼻子，草叶和其他特征。更高层可能可以表征整个物体，如人，飞机，狗，飞盘。最终，在分类器层前的隐含层可能会表征经过汇总的内容，其中不同的类别将会是线性可分的。然而许多年来，研究者们由于种种原因并不能实现这一愿景。

5.5.2 缺失要素 1：数据

尽管这群执着的研究者不断钻研，试图学习深度的视觉数据表征，很长的一段时间里这些野心都未能实现，这其中有着诸多因素。第一，包含许多表征的深度模型需要大量的有标注的数据才能表现得比其他经典方法更好，虽然这些当时还不为人知。限于当时计算机有限的存储和相对匮乏的 90 年代研究预算，大部分研究基于小数据集。比如，大部分可信的研究论文是基于 UCI 提供的若干个数据集，其中许多只有几百至几千张图片。

这一状况在 2009 年李飞飞贡献了 ImageNet 数据库后得以焕然一新。它包含了 1000 类，每类有 1000 张不同的图片，这一规模是当时其他数据集不可相提并论的。



(image credit: Ferhat Kurt)

这个数据集同时推动了计算机视觉和机器学习研究进入新的阶段，使得之前的最佳方法不再有优势。

5.5.3 缺失要素 2：硬件

深度学习对计算资源要求很高。这也是为什么上世纪 90 年代左右基于凸优化的算法更被青睐的原因。毕竟凸优化方法里能很快收敛，并可以找到全局最小值和高效的算法。

GPU 的到来改变了格局。很久以来，GPU 都是为了图像处理和计算机游戏而生的，尤其是为了大吞吐量的 4×4 矩阵和向量乘法，用于基本的图形转换。值得庆幸的是，这其中的数学与深度网络中的卷积层非常类似。与此同时，NVIDIA 和 ATI 开始对 GPU 为通用计算做优化，并命名为 GPGPU（即通用计算 GPU）。

为了更好的理解，我们来看看现代的 CPU。每个处理器核都十分强大，运作在高时钟频率，有先进复杂的结构和缓存。处理器可以很好地运行各种类型的代码，并由分支预测等机制使其能高效地运作在通用的常规程序上。然而，这个通用性同时也是一个弱点，因为通用的核心制造代价很高。它们会占用很多芯片面积，需要复杂的支持结构（内存接口，核间的缓存逻辑，高速互通连接等），并且跟不同任务的特制芯片相比它们在每个任务上表现并不完美。现代笔记本电脑可以有四核，而高端服务器也很少超过 64 核，就是因为这些核心并不划算。

相比较，GPU 通常有一百到一千个小处理单元组成（具体数值在 NVIDIA, ATI/AMD, ARM 和其他芯片厂商的产品间有所不同），这些单元通常被划分为稍大些的组（NVIDIA 把这称作 warps）。虽然它们每个处理单元相对较弱，运行在低于 1GHz 的时钟频率，庞大的数量使得 GPU 的运算速度比 CPU 快不止一个数量级。比如，NVIDIA 最新一代的 Volta 运算速度在特别的指令上可以达到每个芯片 120 TFlops，（更通用的指令上达到 24 TFlops），而至今 CPU 的浮点数运算速度也

未超过 1 TFlop。这其中的原因很简单：首先，能量消耗与时钟频率成二次关系，所以同样供一个运行速度是 4x 的 CPU 核心所需的能量可以用来运行 16 个 GPU 核心以其 1/4 的速度运行，并达到 $16 \times 1/4 = 4x$ 的性能。此外，GPU 核心结构简单得多（事实上有很长一段时间他们甚至都还不能运行通用的代码），这使得他们能量效率很高。最后，很多深度学习中的操作需要很高的内存带宽，而 GPU 以其十倍于很多 CPU 的内存带宽而占尽优势。

回到 2012 年，Alex Krizhevsky 和 Ilya Sutskever 实现的可以运行在 GPU 上的深度卷积网络成为重大突破。他们意识到卷积网络的运算瓶颈（卷积和矩阵乘法）其实都可以在硬件上并行。使用两个 NVIDIA GTX580 和 3GB 内存，他们实现了快速的卷积。他们足够好的代码 `cuda-convnet` 使其成为那几年里的业界标准，驱动着深度学习繁荣的头几年。



5.5.4 AlexNet

2012 年的时候，Khrizhevsky, Sutskever 和 Hinton 凭借他们的 `cuda-convnet` 实现的 8 层卷积神经网络以很大的优势赢得了 ImageNet 2012 图像识别挑战。他们在[这篇论文](#)中的模型与 1995 年的 LeNet 结构非常相似。

这个模型有一些显著的特征。第一，与相对较小的 LeNet 相比，AlexNet 包含 8 层变换，其中有五层卷积和两层全连接隐含层，以及一个输出层。

第一层中的卷积核大小是 11×11 ，接着第二层中的是 5×5 ，之后都是 3×3 。此外，第一，第二和第五个卷积层之后都跟了有重叠的大小为 3×3 ，步距为 2×2 的池化操作。

紧接着卷积层，原版的 AlexNet 有每层大小为 4096 个节点的全连接层们。这两个巨大的全连接层带来将近 1GB 的模型大小。由于早期 GPU 显存的限制，最早的 AlexNet 包括了双数据流的设计，以让网络中一半的节点能存入一个 GPU。这两个数据流，也就是说两个 GPU 只在一部分层进行通信，这样达到限制 GPU 同步时的额外开销的效果。有幸的是，GPU 在过去几年得到了长足的发展，除了一些特殊的结构外，我们也就不再需要这样的特别设计了。

下面的 Gluon 代码定义了（稍微简化过的）Alexnet：

```
In [1]: from mxnet.gluon import nn

net = nn.Sequential()
with net.name_scope():
    net.add(
        # 第一阶段
        nn.Conv2D(channels=96, kernel_size=11,
                  strides=4, activation='relu'),
        nn.MaxPool2D(pool_size=3, strides=2),
        # 第二阶段
        nn.Conv2D(channels=256, kernel_size=5,
                  padding=2, activation='relu'),
        nn.MaxPool2D(pool_size=3, strides=2),
        # 第三阶段
        nn.Conv2D(channels=384, kernel_size=3,
                  padding=1, activation='relu'),
        nn.Conv2D(channels=384, kernel_size=3,
                  padding=1, activation='relu'),
        nn.Conv2D(channels=256, kernel_size=3,
                  padding=1, activation='relu'),
        nn.MaxPool2D(pool_size=3, strides=2),
        # 第四阶段
        nn.Flatten(),
        nn.Dense(4096, activation="relu"),
        nn.Dropout(.5),
        # 第五阶段
        nn.Dense(4096, activation="relu"),
        nn.Dropout(.5),
        # 第六阶段
        nn.Dense(10)
    )
```

5.5.5 读取数据

Alexnet 使用 Imagenet 数据，其中输入图片大小一般是 224×224 。因为 Imagenet 数据训练时间过长，我们还是用前面的 FashionMNIST 来演示。读取数据的时候我们额外做了一步将数据扩大到原版 Alexnet 使用的 224×224 。

```
In [2]: import sys
        sys.path.append('..')
        import utils

        train_data, test_data = utils.load_data_fashion_mnist(
            batch_size=64, resize=224)
```

5.5.6 训练

这时候我们可以开始训练。相对于前面的 LeNet，我们做了如下三个改动：

1. 我们使用 Xavier 来初始化参数
2. 使用了更小的学习率
3. 默认只迭代一轮（这样网页编译快一点）

```
In [3]: from mxnet import init
        from mxnet import gluon

        ctx = utils.try_gpu()
        net.initialize(ctx=ctx, init=init.Xavier())

        loss = gluon.loss.SoftmaxCrossEntropyLoss()
        trainer = gluon.Trainer(net.collect_params(),
                               'sgd', {'learning_rate': 0.01})
        utils.train(train_data, test_data, net, loss,
                   trainer, ctx, num_epochs=1)

Start training on gpu(0)
Epoch 0. Loss: 1.011, Train acc 0.62, Test acc 0.79, Time 90.1 sec
```

5.5.7 结论

从 LeNet 到 Alexnet，虽然实现起来也就多了几行而已。但这个观念上的转变和真正跑出好实验结果，学术界整整花了 20 年。

5.5.8 练习

- 多迭代几轮看看？跟 LeNet 比有什么区别？为什么？（提示：看看欠拟合和过拟合的那几张图）
- 找出 Xavier 具体是怎么初始化的，跟默认的比有什么区别
- 尝试将训练的参数改回到 LeNet 看看会发生什么？想想看为什么？
- 试试从 0 开始实现看看？

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

5.6 VGG：使用重复元素的非常深的网络

我们从 Alexnet 看到网络的层数的激增。这个意味着即使是用 Gluon 手动写代码一层一层的堆每一层也很麻烦，更不用说从 0 开始了。幸运的是编程语言提供了很好的方法来解决这个问题：函数和循环。如果网络结构里面有大量重复结构，那么我们可以很紧凑来构造这些网络。第一个使用这种结构的深度网络是 VGG。

5.6.1 VGG 架构

VGG 的一个关键是使用很多有着相对小的 kernel (3×3) 的卷积层然后接上一个池化层，之后再将这个模块重复多次。下面我们先定义一个这样的块：

```
In [1]: from mxnet.gluon import nn

def vgg_block(num_convs, channels):
    out = nn.Sequential()
    for _ in range(num_convs):
        out.add(
            nn.Conv2D(channels=channels, kernel_size=3,
                      padding=1, activation='relu'))
    )
    out.add(nn.MaxPool2D(pool_size=2, strides=2))
    return out
```

我们实例化一个这样的块，里面有两个卷积层，每个卷积层输出通道是 128：

```
In [2]: from mxnet import nd
```

```
blk = vgg_block(2, 128)
blk.initialize()
```

```
x = nd.random.uniform(shape=(2,3,16,16))
y = blk(x)
y.shape
```

Out[2]: (2, 128, 8, 8)

可以看到经过一个这样的块后，长宽会减半，通道也会改变。

然后我们定义如何将这些块堆起来：

```
In [3]: def vgg_stack(architecture):
    out = nn.Sequential()
    for (num_convs, channels) in architecture:
        out.add(vgg_block(num_convs, channels))
    return out
```

这里我们定义一个最简单的一个 VGG 结构，它有 8 个卷积层，和跟 Alexnet 一样的 3 个全连接层。这个网络又称 VGG 11.

```
In [4]: num_outputs = 10
architecture = ((1,64), (1,128), (2,256), (2,512), (2,512))
net = nn.Sequential()
# add name_scope on the outermost Sequential
with net.name_scope():
    net.add(
        vgg_stack(architecture),
        nn.Flatten(),
        nn.Dense(4096, activation="relu"),
        nn.Dropout(.5),
        nn.Dense(4096, activation="relu"),
        nn.Dropout(.5),
        nn.Dense(num_outputs))
```

5.6.2 模型训练

这里跟 Alexnet 的训练代码一样除了我们只将图片扩大到 96×96 来节省些计算，和默认使用稍微大点的学习率。

```
In [5]: import sys
sys.path.append('..')
import utils
from mxnet import gluon
from mxnet import init

train_data, test_data = utils.load_data_fashion_mnist(
    batch_size=64, resize=96)
```

```

ctx = utils.try_gpu()
net.initialize(ctx=ctx, init=init.Xavier())

loss = gluon.loss.SoftmaxCrossEntropyLoss()
trainer = gluon.Trainer(net.collect_params(),
                        'sgd', {'learning_rate': 0.05})
utils.train(train_data, test_data, net, loss,
            trainer, ctx, num_epochs=1)

Start training on  gpu(0)
Epoch 0. Loss: 0.882, Train acc 0.68, Test acc 0.84, Time 141.3 sec

```

5.6.3 总结

通过使用重复的元素，我们可以通过循环和函数来定义模型。使用不同的配置 (architecture) 可以得到一系列不同的模型。

5.6.4 练习

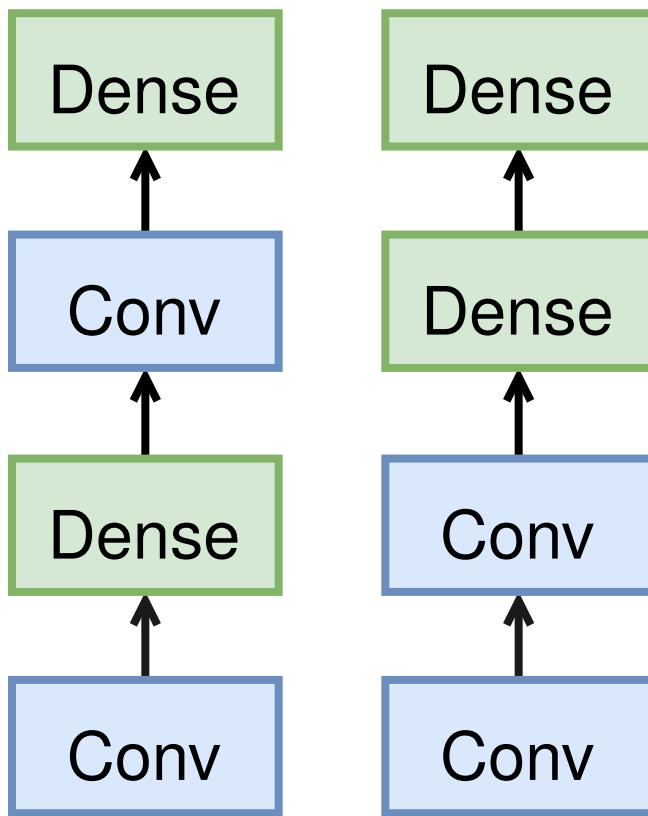
- 尝试多跑几轮，看看跟 LeNet/Alexnet 比怎么样？
- 尝试下构造 VGG 其他常用模型，例如 VGG16, VGG19. (提示：可以参考[VGG 论文](#)里的表 1。)
- 把图片从默认的 224×224 降到 96×96 有什么影响？

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

5.7 网络中的网络

Alexnet 之后一个重要的工作是[Network in Network \(NiN\)](#)，其提出的两个想法影响了后面的网络设计。

首先一点是注意到卷积神经网络一般分成两块，一块主要由卷积层构成，另一块主要是全连接层。在 Alexnet 里我们看到如何把卷积层块和全连接层分别加深加宽从而得到深度网络。另外一个自然的想法是，我们可以串联数个卷积层块和全连接层块来构建深度网络。



不过这里的一个难题是，卷积的输入输出是 4D 矩阵，然而全连接是 2D。同时在卷积神经网络里我们提到如果把 4D 矩阵转成 2D 做全连接，这个会导致全连接层有过多的参数。NiN 提出只对通道层做全连接并且像素之间共享权重来解决上述两个问题。就是说，我们使用 kernel 大小是 1×1 的卷积。

下面代码定义一个这样的块，它由一个正常的卷积层接上两个 kernel 是 1×1 的卷积层构成。后面两个充当两个全连接层的角色。

```
In [1]: from mxnet.gluon import nn

def mlpconv(channels, kernel_size, padding,
            strides=1, max_pooling=True):
    out = nn.Sequential()
    out.add(
        nn.Conv2D(channels=channels, kernel_size=kernel_size,
                  strides=strides, padding=padding,
                  activation='relu'),
        nn.Conv2D(channels=channels, kernel_size=1,
                  padding=0, strides=1, activation='relu'),
        nn.Conv2D(channels=channels, kernel_size=1,
                  padding=0, strides=1, activation='relu'))
    if max_pooling:
```

```

        out.add(nn.MaxPool2D(pool_size=3, strides=2))
    return out

```

测试一下：

In [2]: `from mxnet import nd`

```

blk = mlpconv(64, 3, 0)
blk.initialize()

x = nd.random.uniform(shape=(32, 3, 16, 16))
y = blk(x)
y.shape

```

Out[2]: (32, 64, 6, 6)

NiN 的卷积层的参数跟 Alexnet 类似，使用三组不同的设定

- kernel: 11×11 , channels: 96
- kernel: 5×5 , channels: 256
- kernel: 3×3 , channels: 384

除了使用了 1×1 卷积外，NiN 在最后不是使用全连接，而是使用通道数为输出类别个数的 mlp-conv，外接一个平均池化层来将每个通道里的数值平均成一个标量。

In [3]: `net = nn.Sequential()`
`# add name_scope on the outer most Sequential`
`with net.name_scope():`
 `net.add(
 mlpconv(96, 11, 0, strides=4),
 mlpconv(256, 5, 2),
 mlpconv(384, 3, 1),
 nn.Dropout(.5),
 # 目标类为 10 类
 mlpconv(10, 3, 1, max_pooling=False),
 # 输入为 batch_size x 10 x 5 x 5, 通过 AvgPool2D 转成
 # batch_size x 10 x 1 x 1。
 # 我们可以使用 nn.AvgPool2D(pool_size=5),
 # 但更方便是使用全局池化，可以避免估算 pool_size 大小
 nn.GlobalAvgPool2D(),
 # 转成 batch_size x 10
 nn.Flatten()
)`

5.7.1 获取数据并训练

跟 Alexnet 类似，但使用了更大的学习率。

```
In [4]: import sys
        sys.path.append('..')
        import utils
        from mxnet import gluon
        from mxnet import init

        train_data, test_data = utils.load_data_fashion_mnist(
            batch_size=64, resize=224)

        ctx = utils.try_gpu()
        net.initialize(ctx=ctx, init=init.Xavier())

        loss = gluon.loss.SoftmaxCrossEntropyLoss()
        trainer = gluon.Trainer(net.collect_params(),
                               'sgd', {'learning_rate': 0.1})
        utils.train(train_data, test_data, net, loss,
                    trainer, ctx, num_epochs=1)

Start training on gpu(0)
Epoch 0. Loss: 1.784, Train acc 0.33, Test acc 0.34, Time 131.6 sec
```

5.7.2 结论

这种“一卷卷到底”最后加一个平均池化层的做法也成为了深度卷积神经网络的常用设计。

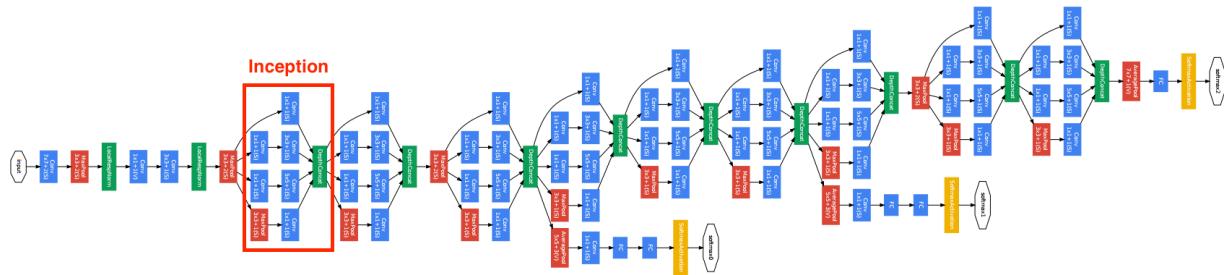
5.7.3 练习

- 为什么 mlpconv 里面要有两个 1×1 卷积？

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

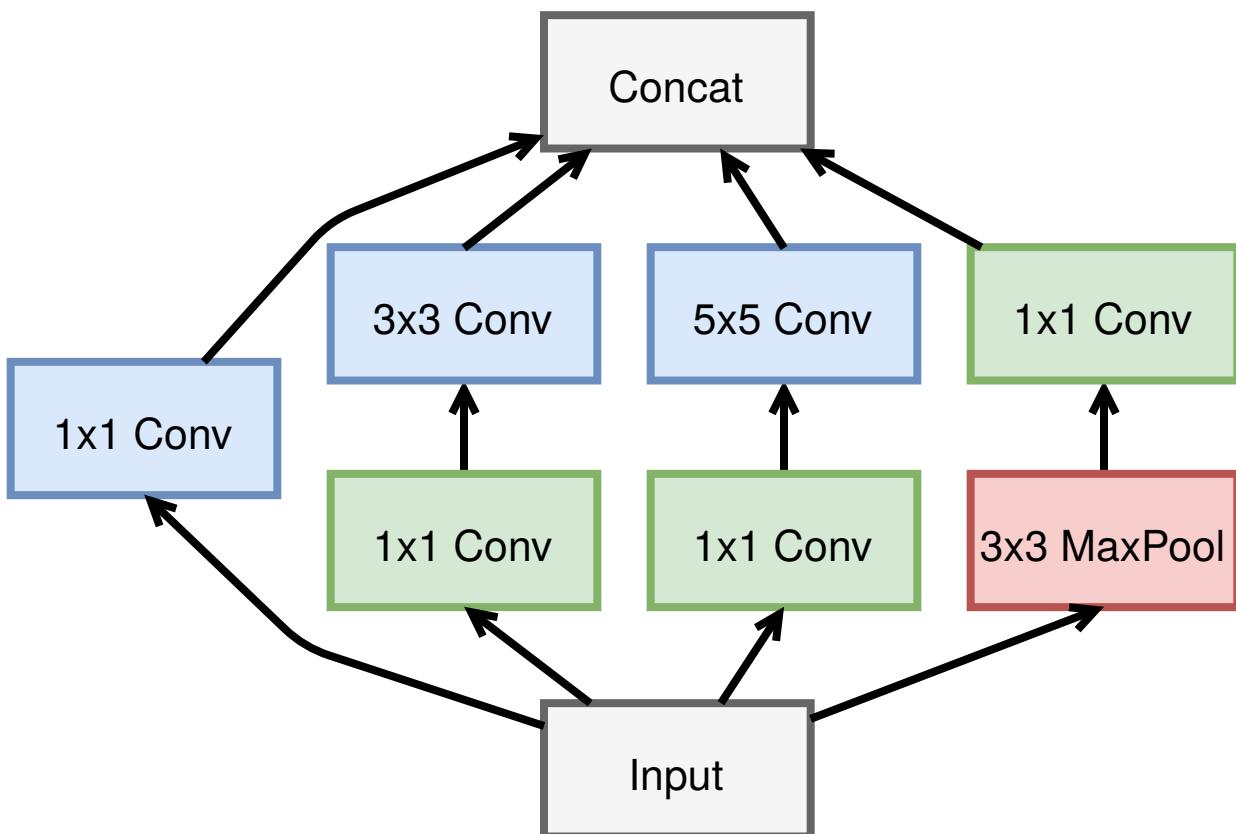
5.8 更深的卷积神经网络：GoogLeNet

在 2014 年的 Imagenet 竞赛里，Google 的研究人员利用一个新的网络结构取得很大的优先。这个叫做 GoogLeNet 的网络虽然在名字上是向 LeNet 致敬，但网络结构里很难看到 LeNet 的影子。它颠覆的大家对卷积神经网络串联一系列层的固定做法。下图是其[论文](#)对 GoogLeNet 的可视化



5.8.1 定义 Inception

可以看到其中有多个四个并行卷积层的块。这个块一般叫做 Inception，其基于*Network in network*的思想做了很大的改进。我们先看下如何定义一个下图所示的 Inception 块。



```
In [1]: from mxnet.gluon import nn
from mxnet import nd

class Inception(nn.Block):
    def __init__(self, n1_1, n2_1, n2_3, n3_1, n3_5, n4_1, **kwargs):
        super(Inception, self).__init__(**kwargs)
        # path 1
```

```

self.p1_conv_1 = nn.Conv2D(n1_1, kernel_size=1,
                        activation='relu')
# path 2
self.p2_conv_1 = nn.Conv2D(n2_1, kernel_size=1,
                        activation='relu')
self.p2_conv_3 = nn.Conv2D(n2_3, kernel_size=3, padding=1,
                        activation='relu')
# path 3
self.p3_conv_1 = nn.Conv2D(n3_1, kernel_size=1,
                        activation='relu')
self.p3_conv_5 = nn.Conv2D(n3_5, kernel_size=5, padding=2,
                        activation='relu')
# path 4
self.p4_pool_3 = nn.MaxPool2D(pool_size=3, padding=1,
                           strides=1)
self.p4_conv_1 = nn.Conv2D(n4_1, kernel_size=1,
                        activation='relu')

def forward(self, x):
    p1 = self.p1_conv_1(x)
    p2 = self.p2_conv_3(self.p2_conv_1(x))
    p3 = self.p3_conv_5(self.p3_conv_1(x))
    p4 = self.p4_conv_1(self.p4_pool_3(x))
    return nd.concat(p1, p2, p3, p4, dim=1)

```

可以看到 Inception 里有四个并行的线路。

1. 单个 1×1 卷积。
2. 1×1 卷积接上 3×3 卷积。通常前者的通道数少于输入通道，这样减少后者的计算量。后者加上了 `padding=1` 使得输出的长宽的输入一致
3. 同 2，但换成了 5×5 卷积
4. 和 1 类似，但卷积前用了最大池化层

最后将这四个并行线路的结果在通道这个维度上合并在一起。

测试一下：

```
In [2]: incp = Inception(64, 96, 128, 16, 32, 32)
incp.initialize()

x = nd.random.uniform(shape=(32,3,64,64))
incp(x).shape

Out[2]: (32, 256, 64, 64)
```

5.8.2 定义 GoogLeNet

GoogLeNet 将数个 Inception 串联在一起。注意到原论文里使用了多个输出，为了简化我们这里就使用一个输出。为了可以更方便的查看数据在内部的形状变化，我们对每个块使用一个 `nn.Sequential`，然后再把所有这些块连起来。

```
In [3]: class GoogLeNet(nn.Block):
    def __init__(self, num_classes, verbose=False, **kwargs):
        super(GoogLeNet, self).__init__(**kwargs)
        self.verbose = verbose
        # add name_scope on the outer most Sequential
        with self.name_scope():
            # block 1
            b1 = nn.Sequential()
            b1.add(
                nn.Conv2D(64, kernel_size=7, strides=2,
                         padding=3, activation='relu'),
                nn.MaxPool2D(pool_size=3, strides=2)
            )
            # block 2
            b2 = nn.Sequential()
            b2.add(
                nn.Conv2D(64, kernel_size=1),
                nn.Conv2D(192, kernel_size=3, padding=1),
                nn.MaxPool2D(pool_size=3, strides=2)
            )

            # block 3
            b3 = nn.Sequential()
            b3.add(
                Inception(64, 96, 128, 16, 32, 32),
                Inception(128, 128, 192, 32, 96, 64),
                nn.MaxPool2D(pool_size=3, strides=2)
            )

            # block 4
            b4 = nn.Sequential()
            b4.add(
                Inception(192, 96, 208, 16, 48, 64),
                Inception(160, 112, 224, 24, 64, 64),
                Inception(128, 128, 256, 24, 64, 64),
                Inception(112, 144, 288, 32, 64, 64),
                Inception(256, 160, 320, 32, 128, 128),
                nn.MaxPool2D(pool_size=3, strides=2)
            )
```

```
# block 5
b5 = nn.Sequential()
b5.add(
    Inception(256, 160, 320, 32, 128, 128),
    Inception(384, 192, 384, 48, 128, 128),
    nn.AvgPool2D(pool_size=2)
)
# block 6
b6 = nn.Sequential()
b6.add(
    nn.Flatten(),
    nn.Dense(num_classes)
)
# chain blocks together
self.net = nn.Sequential()
self.net.add(b1, b2, b3, b4, b5, b6)

def forward(self, x):
    out = x
    for i, b in enumerate(self.net):
        out = b(out)
        if self.verbose:
            print('Block %d output: %s'%(i+1, out.shape))
    return out
```

我们看一下每个块对输出的改变。

```
In [4]: net = GoogLeNet(10, verbose=True)
net.initialize()

x = nd.random.uniform(shape=(4, 3, 96, 96))
y = net(x)

Block 1 output: (4, 64, 23, 23)
Block 2 output: (4, 192, 11, 11)
Block 3 output: (4, 480, 5, 5)
Block 4 output: (4, 832, 2, 2)
Block 5 output: (4, 1024, 1, 1)
Block 6 output: (4, 10)
```

5.8.3 获取数据并训练

跟 VGG 一样我们使用了较小的输入 96×96 来加速计算。

```
In [5]: import sys
        sys.path.append('..')
        import utils
        from mxnet import gluon
        from mxnet import init

        train_data, test_data = utils.load_data_fashion_mnist(
            batch_size=64, resize=96)

        ctx = utils.try_gpu()
        net = GoogLeNet(10)
        net.initialize(ctx=ctx, init=init.Xavier())

        loss = gluon.loss.SoftmaxCrossEntropyLoss()
        trainer = gluon.Trainer(net.collect_params(),
                               'sgd', {'learning_rate': 0.01})
        utils.train(train_data, test_data, net, loss,
                    trainer, ctx, num_epochs=1)

Start training on gpu(0)
Epoch 0. Loss: 2.288, Train acc 0.25, Test acc 0.48, Time 88.2 sec
```

5.8.4 结论

GoogLeNet 加入了更加结构化的 Inception 块来使得我们可以使用更大的通道，更多的层，同时控制计算量和模型大小在合理范围内。

5.8.5 练习

GoogLeNet 有数个后续版本，尝试实现他们并运行看看有什么不一样

- v1: 本节介绍的是最早版本: [Going Deeper with Convolutions](#)
- v2: 加入和 Batch Normalization: [Accelerating Deep Network Training by Reducing Internal Covariate Shift](#)
- v3: 对 Inception 做了调整: [Rethinking the Inception Architecture for Computer Vision](#)
- v4: 基于 ResNet 加入了 Residual Connections: [Inception-ResNet and the Impact of Residual Connections on Learning](#)

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

5.9 ResNet: 深度残差网络

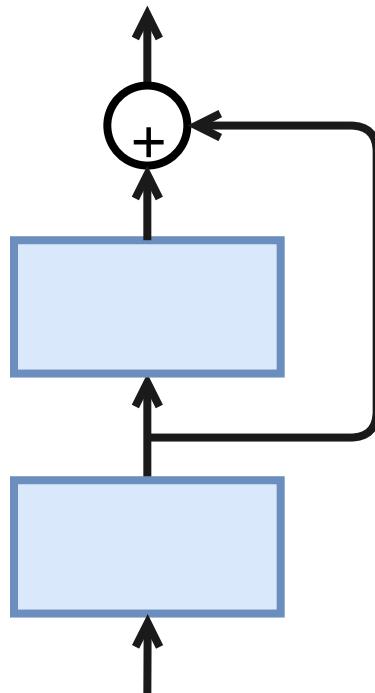
当大家还在惊叹 GoogLeNet 用结构化的连接纳入了大量卷积层的时候，微软亚洲研究院的研究员已经在设计更深但结构更简单的网络ResNet。他们凭借这个网络在 2015 年的 Imagenet 竞赛中大获全胜。

ResNet 有效的解决了深度卷积神经网络难训练的问题。这是因为在误差反传的过程中，梯度通常变得越来越小，从而权重的更新量也变小。这个导致远离损失函数的层训练缓慢，随着层数的增加这个现象更加明显。之前有两种常用方案来尝试解决这个问题：

1. 按层训练。先训练靠近数据的层，然后慢慢的增加后面的层。但效果不是特别好，而且比较麻烦。
2. 使用更宽的层（增加输出通道）而不是更深来增加模型复杂度。但更宽的模型经常不如更深的效果好。

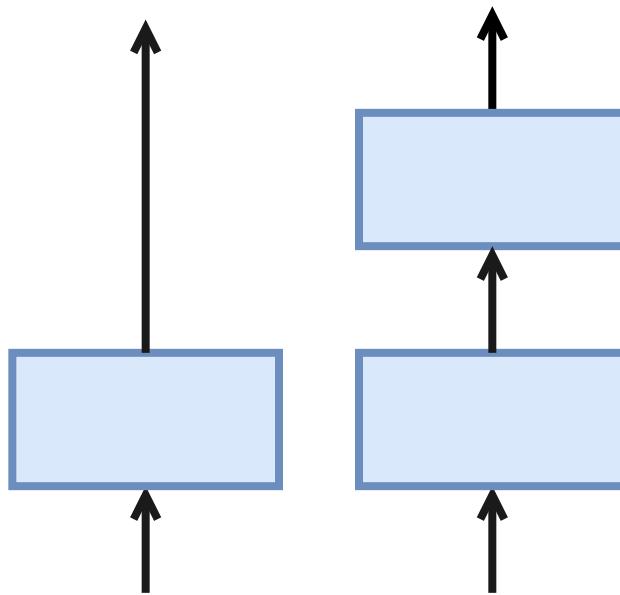
ResNet 通过增加跨层的连接来解决梯度逐层回传时变小的问题。虽然这个想法之前就提出过了，但 ResNet 真正的把效果做好了。

下图演示了一个跨层的连接。



最底下那层的输入不仅仅是输出给了中间层，而且其与中间层结果相加进入最上层。这样在梯度反传时，最上层梯度可以直接跳过中间层传到最下层，从而避免最下层梯度过小情况。

为什么叫做残差网络呢？我们可以将上面示意图里的结构拆成两个网络的和，一个一层，一个两层，最下面层是共享的。



在训练过程中，左边的网络因为更简单所以更容易训练。这个小网络没有拟合到的部分，或者说残差，则被右边的网络抓取住。所以直观上来说，即使加深网络，跨层连接仍然可以使得底层网络可以充分的训练，从而不会让训练更难。

5.9.1 Residual 块

ResNet 沿用了 VGG 的那种全用 3×3 卷积，但在卷积和池化层之间加入了批量归一化来加速训练。每次跨层连接跨过两层卷积。这里我们定义一个这样的残差块。注意到如果输入的通道数和输出不一样时 (`same_shape=False`)，我们使用一个额外的 1×1 卷积来做通道变化，同时使用 `strides=2` 来把长宽减半。

```
In [1]: from mxnet.gluon import nn
        from mxnet import nd

class Residual(nn.Block):
    def __init__(self, channels, same_shape=True, **kwargs):
        super(Residual, self).__init__(**kwargs)
        self.same_shape = same_shape
        strides = 1 if same_shape else 2
        self.conv1 = nn.Conv2D(channels, kernel_size=3, padding=1,
                            strides=strides)
        self.bn1 = nn.BatchNorm()
```

```
self.conv2 = nn.Conv2D(channels, kernel_size=3, padding=1)
self.bn2 = nn.BatchNorm()
if not same_shape:
    self.conv3 = nn.Conv2D(channels, kernel_size=1,
                          strides=strides)

def forward(self, x):
    out = nd.relu(self.bn1(self.conv1(x)))
    out = self.bn2(self.conv2(out))
    if not self.same_shape:
        x = self.conv3(x)
    return nd.relu(out + x)
```

输入输出通道相同：

```
In [2]: blk = Residual(3)
blk.initialize()

x = nd.random.uniform(shape=(4, 3, 6, 6))
blk(x).shape

Out[2]: (4, 3, 6, 6)
```

输入输出通道不同：

```
In [3]: blk2 = Residual(8, same_shape=False)
blk2.initialize()
blk2(x).shape

Out[3]: (4, 8, 3, 3)
```

5.9.2 构建 ResNet

类似 GoogLeNet 主体是由 Inception 块串联而成，ResNet 的主体部分串联多个 Residual 块。下面我们定义 18 层的 ResNet。同样为了阅读更加容易，我们这里使用了多个 `nn.Sequential`。另外注意到一点是，这里我们没用池化层来减小数据长宽，而是通过有通道变化的 Residual 块里面的使用 `strides=2` 的卷积层。

```
In [4]: class ResNet(nn.Block):
    def __init__(self, num_classes, verbose=False, **kwargs):
        super(ResNet, self).__init__(**kwargs)
        self.verbose = verbose
        # add name_scope on the outermost Sequential
        with self.name_scope():
            # block 1
            b1 = nn.Conv2D(64, kernel_size=7, strides=2)
            # block 2
```

```

b2 = nn.Sequential()
b2.add(
    nn.MaxPool2D(pool_size=3, strides=2),
    Residual(64),
    Residual(64)
)
# block 3
b3 = nn.Sequential()
b3.add(
    Residual(128, same_shape=False),
    Residual(128)
)
# block 4
b4 = nn.Sequential()
b4.add(
    Residual(256, same_shape=False),
    Residual(256)
)
# block 5
b5 = nn.Sequential()
b5.add(
    Residual(512, same_shape=False),
    Residual(512)
)
# block 6
b6 = nn.Sequential()
b6.add(
    nn.AvgPool2D(pool_size=3),
    nn.Dense(num_classes)
)
# chain all blocks together
self.net = nn.Sequential()
self.net.add(b1, b2, b3, b4, b5, b6)

def forward(self, x):
    out = x
    for i, b in enumerate(self.net):
        out = b(out)
        if self.verbose:
            print('Block %d output: %s'%(i+1, out.shape))
    return out

```

这里演示数据在块之间的形状变化:

```
In [5]: net = ResNet(10, verbose=True)
net.initialize()
```

```
x = nd.random.uniform(shape=(4, 3, 96, 96))
y = net(x)

Block 1 output: (4, 64, 45, 45)
Block 2 output: (4, 64, 22, 22)
Block 3 output: (4, 128, 11, 11)
Block 4 output: (4, 256, 6, 6)
Block 5 output: (4, 512, 3, 3)
Block 6 output: (4, 10)
```

5.9.3 获取数据并训练

跟前面类似，但因为有批量归一化，所以使用了较大的学习率。

```
In [6]: import sys
        sys.path.append('..')
        import utils
        from mxnet import gluon
        from mxnet import init

        train_data, test_data = utils.load_data_fashion_mnist(
            batch_size=64, resize=96)

        ctx = utils.try_gpu()
        net = ResNet(10)
        net.initialize(ctx=ctx, init=init.Xavier())

        loss = gluon.loss.SoftmaxCrossEntropyLoss()
        trainer = gluon.Trainer(net.collect_params(),
                               'sgd', {'learning_rate': 0.05})
        utils.train(train_data, test_data, net, loss,
                    trainer, ctx, num_epochs=1)

Start training on gpu(0)
Epoch 0. Loss: 0.430, Train acc 0.85, Test acc 0.89, Time 74.6 sec
```

5.9.4 结论

ResNet 使用跨层通道使得训练非常深的卷积神经网络成为可能。同样它使用很简单的卷积层配置，使得其拓展更加简单。

5.9.5 练习

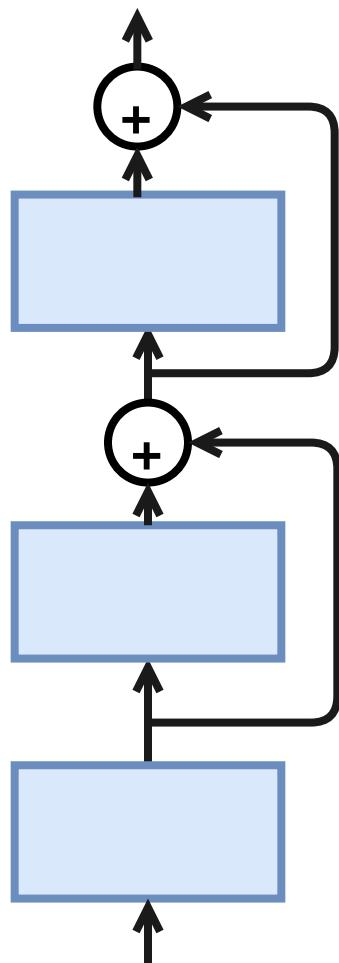
- 这里我们实现了 ResNet 18，原论文中还讨论了更深的配置。尝试实现它们。（提示：参考论文中的表 1）
- 原论文中还介绍了一个“bottleneck”架构，尝试实现它
- ResNet 作者在[接下来的一篇论文](#)讨论了将 Residual 块里面的 Conv->BN->Relu 结构改成了 BN->Relu->Conv（参考论文图 1），尝试实现它

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

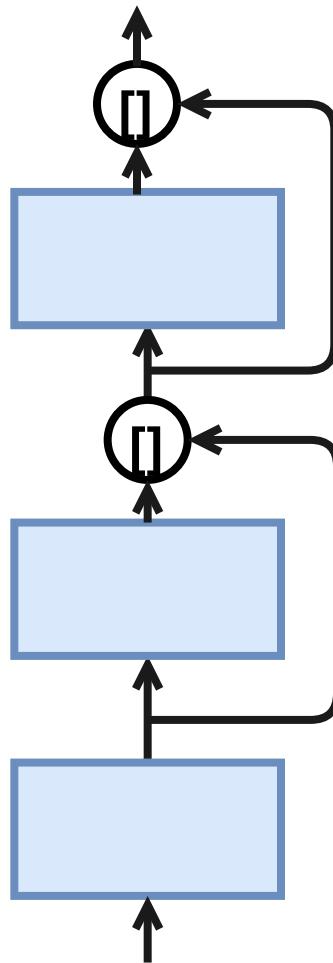
5.10 DenseNet：稠密连接的卷积神经网络

ResNet 的跨层连接思想影响了接下来的众多工作。这里我们介绍其中的一个：[DenseNet](#)。下图展示了这两个的主要区别：

ResNet



DenseNet



可以看到 DenseNet 里来自跳层的输出不是通过加法 (+) 而是拼接 (concat) 来跟目前层的输出合并。因为是拼接, 所以底层的输出会保留的进入上面所有层。这是为什么叫“稠密连接”的原因

5.10.1 稠密块 (Dense Block)

我们先来定义一个稠密连接块。DenseNet 的卷积块使用 ResNet 改进版本的 BN->Relu->Conv。每个卷积的输出通道数被称之为 `growth_rate`, 这是因为假设输出为 `in_channels`, 而且有 `layers` 层, 那么输出的通道数就是 `in_channels+growth_rate*layers`。

```
In [1]: from mxnet import nd
        from mxnet.gluon import nn
```

```

def conv_block(channels):
    out = nn.Sequential()
    out.add(
        nn.BatchNorm(),
        nn.Activation('relu'),
        nn.Conv2D(channels, kernel_size=3, padding=1)
    )
    return out

class DenseBlock(nn.Block):
    def __init__(self, layers, growth_rate, **kwargs):
        super(DenseBlock, self).__init__(**kwargs)
        self.net = nn.Sequential()
        for i in range(layers):
            self.net.add(conv_block(growth_rate))

    def forward(self, x):
        for layer in self.net:
            out = layer(x)
            x = nd.concat(x, out, dim=1)
        return x

```

我们验证下输出通道数是不是符合预期。

```

In [2]: dblk = DenseBlock(2, 10)
dblk.initialize()

x = nd.random.uniform(shape=(4,3,8,8))
dblk(x).shape

Out[2]: (4, 23, 8, 8)

```

5.10.2 过渡块 (Transition Block)

因为使用拼接的缘故，每经过一次拼接输出通道数可能会激增。为了控制模型复杂度，这里引入一个过渡块，它不仅把输入的长宽减半，同时也使用 1×1 卷积来改变通道数。

```

In [3]: def transition_block(channels):
    out = nn.Sequential()
    out.add(
        nn.BatchNorm(),
        nn.Activation('relu'),
        nn.Conv2D(channels, kernel_size=1),
        nn.AvgPool2D(pool_size=2, strides=2)
    )
    return out

```

验证一下结果：

```
In [4]: tb1k = transition_block(10)
tb1k.initialize()

tb1k(x).shape

Out[4]: (4, 10, 4, 4)
```

5.10.3 DenseNet

DenseNet 的主体就是交替串联稠密块和过渡块。它使用全局的 `growth_rate` 使得配置更加简单。过渡层每次都将通道数减半。下面定义一个 121 层的 DenseNet。

```
In [5]: init_channels = 64
growth_rate = 32
block_layers = [6, 12, 24, 16]
num_classes = 10

def dense_net():
    net = nn.Sequential()
    # add name_scope on the outermost Sequential
    with net.name_scope():
        # first block
        net.add(
            nn.Conv2D(init_channels, kernel_size=7,
                     strides=2, padding=3),
            nn.BatchNorm(),
            nn.Activation('relu'),
            nn.MaxPool2D(pool_size=3, strides=2, padding=1))
    # dense blocks
    channels = init_channels
    for i, layers in enumerate(block_layers):
        net.add(DenseBlock(layers, growth_rate))
        channels += layers * growth_rate
        if i != len(block_layers)-1:
            net.add(transition_block(channels//2))
    # last block
    net.add(
        nn.BatchNorm(),
        nn.Activation('relu'),
        nn.AvgPool2D(pool_size=1),
        nn.Flatten(),
        nn.Dense(num_classes))
)
```

```
    return net
```

5.10.4 获取数据并训练

因为这里我们使用了比较深的网络，所以我们进一步把输入减少到 32×32 来训练。

```
In [6]: import sys
        sys.path.append('..')
        import utils
        from mxnet import gluon
        from mxnet import init

        train_data, test_data = utils.load_data_fashion_mnist(
            batch_size=64, resize=32)

        ctx = utils.try_gpu()
        net = dense_net()
        net.initialize(ctx=ctx, init=init.Xavier())

        loss = gluon.loss.SoftmaxCrossEntropyLoss()
        trainer = gluon.Trainer(net.collect_params(),
                               'sgd', {'learning_rate': 0.1})
        utils.train(train_data, test_data, net, loss,
                    trainer, ctx, num_epochs=1)

Start training on gpu(0)
Epoch 0. Loss: 0.522, Train acc 0.82, Test acc 0.88, Time 86.6 sec
```

5.10.5 结论

Desnet 通过将 ResNet 里的 `+` 替换成 `concat` 从而获得更稠密的连接。

5.10.6 练习

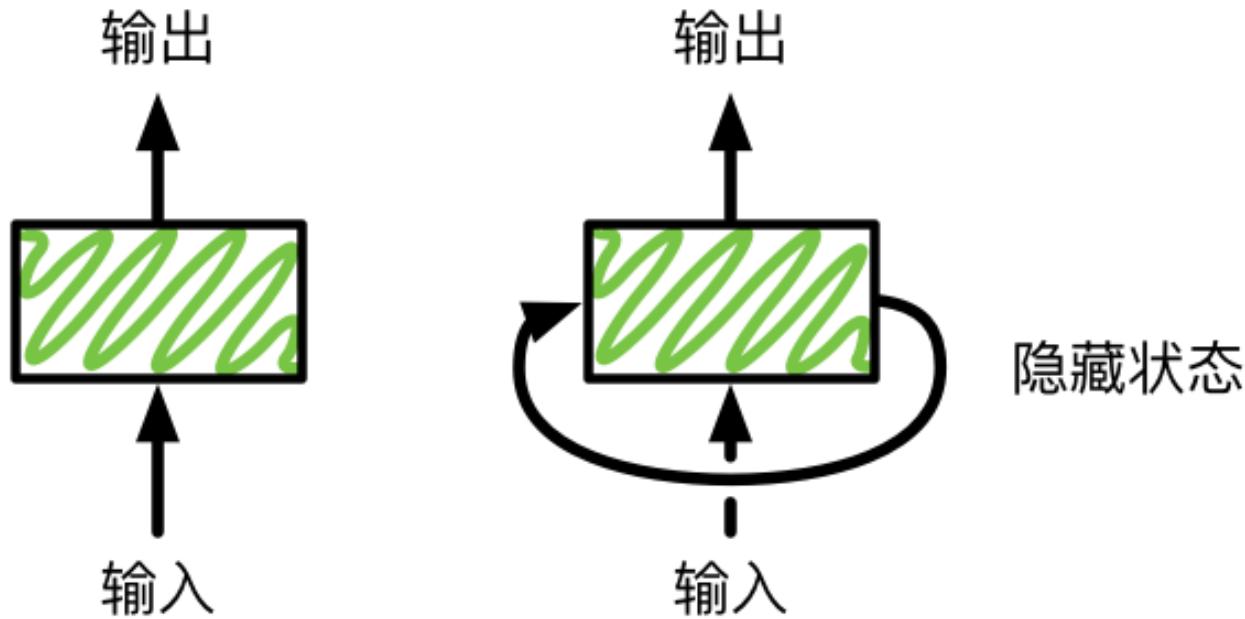
- DesNet 论文中提交的一个优点是其模型参数比 ResNet 更小，想想为什么？
- DesNet 被人诟病的一个问题是内存消耗过多。真的会这样吗？可以把输入换成 224×224 （需要改最后的 AvgPool2D 大小），来看看实际（GPU）内存消耗。
- 这里的 FashionMNIST 有必要用 100+ 层的网络吗？尝试将其改简单看看效果。

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

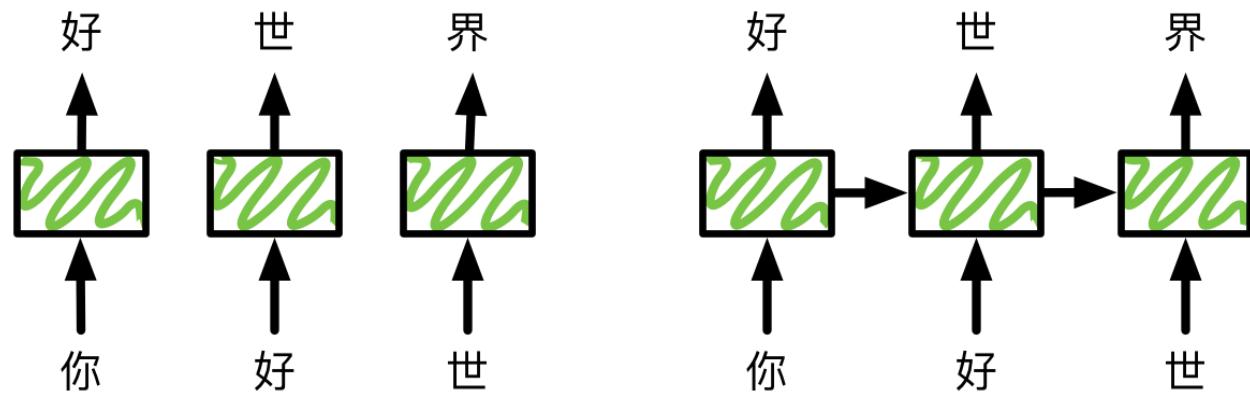
循环神经网络

6.1 循环神经网络—从 0 开始

前面的教程里我们使用的网络都属于**前馈神经网络**。之所以叫前馈，是因为整个网络是一条链（回想下 `gluon.nn.Sequential`），每一层的结果都是反馈给下一层。这一节我们介绍**循环神经网络**，这里每一层不仅输出给下一层，同时还输出一个**隐含状态**，给当前层在处理下一个样本时使用。下图展示这两种网络的区别。



循环神经网络的这种结构使得它适合处理前后有依赖关系数据样本。我们拿语言模型举个例子来解释这个是怎么工作的。语言模型的任务是给定句子的前 t 个字符，然后预测第 $t+1$ 个字符。假设我们的句子是“你好世界”，使用前馈神经网络来预测的一个做法是，在时间 1 输入“你”，预测“好”，时间 2 向同一个网络输入“好”预测“世”。下图左边展示了这个过程。



注意到一个问题是，当我们预测“世”的时候只给了“好”这个输入，而完全忽略了“你”。直觉上“你”这个词应该对这次的预测比较重要。虽然这个问题通常可以通过 **n-gram** 来缓解，就是说预测第 $t+1$ 个字符的时候，我们输入前 n 个字符。如果 $n=1$ ，那就是我们这里用的。我们可以增大 n 来使得输入含有更多信息。但我们不能任意增大 n ，因为这样通常带来模型复杂度的增加从而导致需要大量数据和计算来训练模型。

循环神经网络使用一个隐含状态来记录前面看到的数据来帮助当前预测。上图右边展示了这个过

程。在预测“好”的时候，我们输出一个隐含状态。我们用这个状态和新的输入“好”来一起预测“世”，然后同时输出一个更新过的隐含状态。我们希望前面的信息能够保存在这个隐含状态里，从而提升预测效果。

6.1.1 循环神经网络

在对输入输出数据有了解后，我们来正式介绍循环神经网络。

首先回忆一下单隐含层的前馈神经网络的定义，例如[多层感知机](#)。假设隐含层的激活函数是 ϕ ，对于一个样本数为 n 特征向量维度为 x 的批量数据 $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times x}$ (\mathbf{X} 是一个 n 行 x 列的实数矩阵) 来说，那么这个隐含层的输出就是

$$\mathbf{H} = \phi(\mathbf{X}\mathbf{W}_{xh} + \mathbf{b}_h)$$

假定隐含层长度为 h ，其中的 $\mathbf{W}_{xh} \in \mathbb{R}^{x \times h}$ 是权重参数。偏移参数 $\mathbf{b}_h \in \mathbb{R}^{1 \times h}$ 在与前一项 $\mathbf{X}\mathbf{W}_{xh} \in \mathbb{R}^{n \times h}$ 相加时使用了[广播](#)。这个隐含层的输出的尺寸为 $\mathbf{H} \in \mathbb{R}^{n \times h}$ 。

把隐含层的输出 \mathbf{H} 作为输出层的输入，最终的输出

$$\hat{\mathbf{Y}} = \text{softmax}(\mathbf{H}\mathbf{W}_{hy} + \mathbf{b}_y)$$

假定每个样本对应的输出向量维度为 y ，其中 $\hat{\mathbf{Y}} \in \mathbb{R}^{n \times y}$, $\mathbf{W}_{hy} \in \mathbb{R}^{h \times y}$, $\mathbf{b}_y \in \mathbb{R}^{1 \times y}$ 且两项相加使用了[广播](#)。

将上面网络改成循环神经网络，我们首先对输入输出加上时间戳 t 。假设 $\mathbf{X}_t \in \mathbb{R}^{n \times x}$ 是序列中的第 t 个批量输入（样本数为 n ，每个样本的特征向量维度为 x ），对应的隐含层输出是隐含状态 $\mathbf{H}_t \in \mathbb{R}^{n \times h}$ （隐含层长度为 h ），而对应的最终输出是 $\hat{\mathbf{Y}}_t \in \mathbb{R}^{n \times y}$ （每个样本对应的输出向量维度为 y ）。在计算隐含层的输出的时候，循环神经网络只需要在前馈神经网络基础上加上跟前一时间 $t - 1$ 输入隐含层 $\mathbf{H}_{t-1} \in \mathbb{R}^{n \times h}$ 的加权和。为此，我们引入一个新的可学习的权重 $\mathbf{W}_{hh} \in \mathbb{R}^{h \times h}$ ：

$$\mathbf{H}_t = \phi(\mathbf{X}_t\mathbf{W}_{xh} + \mathbf{H}_{t-1}\mathbf{W}_{hh} + \mathbf{b}_h)$$

输出的计算跟前面一致：

$$\hat{\mathbf{Y}}_t = \text{softmax}(\mathbf{H}_t\mathbf{W}_{hy} + \mathbf{b}_y)$$

一开始我们提到过，隐含状态可以认为是这个网络的记忆。该网络中，时刻 t 的隐含状态就是该时刻的隐含层变量 \mathbf{H}_t 。它存储前面时间里面的信息。我们的输出是只基于这个状态。最开始的隐含状态里的元素通常会被初始化为 0。

6.1.2 周杰伦歌词数据集

为了实现并展示循环神经网络，我们使用周杰伦歌词数据集来训练模型作词。该数据集里包含了著名创作型歌手周杰伦从第一张专辑《Jay》到第十张专辑《跨时代》所有歌曲的歌词。



下面我们读取这个数据并看看前面 49 个字符（char）是什么样的：

```
In [1]: import zipfile  
with zipfile.ZipFile('../data/jaychou_lyrics.txt.zip', 'r') as zin:  
    zin.extractall('../data/')
```

```
with open('../data/jaychou_lyrics.txt') as f:
    corpus_chars = f.read()
    print(corpus_chars[0:49])
```

想要有直升机
想要和你飞到宇宙去
想要和你融化在一起
融化在宇宙里
我每天每天每天在想想想著你

我们看一下数据集里的字符数。

In [2]: `len(corpus_chars)`

Out[2]: 64925

接着我们稍微处理下数据集。为了打印方便，我们把换行符替换成空格，然后截去后面一段使得接下来的训练会快一点。

In [3]: `corpus_chars = corpus_chars.replace('\n', ' ').replace('\r', ' ')
corpus_chars = corpus_chars[0:20000]`

6.1.3 字符的数值表示

先把数据里面所有不同的字符拿出来做成一个字典：

In [4]: `idx_to_char = list(set(corpus_chars))
char_to_idx = dict([(char, i) for i, char in enumerate(idx_to_char)])

vocab_size = len(char_to_idx)

print('vocab size:', vocab_size)`

vocab size: 1465

然后可以把每个字符转成从 0 开始的索引 (index) 来方便之后的使用。

In [5]: `corpus_indices = [char_to_idx[char] for char in corpus_chars]

sample = corpus_indices[:40]

print('chars: \n', ''.join([idx_to_char[idx] for idx in sample]))
print('\nindices: \n', sample)`

chars:
想要有直升机 想要和你飞到宇宙去 想要和你融化在一起 融化在宇宙里 我每天每天每

```
indices:
[1050, 843, 1092, 4, 955, 821, 765, 1050, 843, 543, 618, 799, 1141, 880, 751, 366,
→ 765, 1050, 843, 543, 618, 349, 640, 490, 108, 384, 765, 349, 640, 490, 880, 751,
→ 1435, 765, 147, 44, 332, 44, 332, 44]
```

6.1.4 时序数据的批量采样

同之前一样我们需要每次随机读取一些 (`batch_size` 个) 样本和其对用的标号。这里的样本跟前面有点不一样，这里一个样本通常包含一系列连续的字符（前馈神经网络里可能每个字符作为一个样本）。

如果我们把序列长度 (`num_steps`) 设成 5，那么一个可能的样本是“想要有直升”。其对应的标号仍然是长为 5 的序列，每个字符是对应的样本里字符的后面那个。例如前面样本的标号就是“要有直升机”。

随机批量采样

下面代码每次从数据里随机采样一个批量。

```
In [6]: import random
from mxnet import nd

def data_iter_random(corpus_indices, batch_size, num_steps, ctx=None):
    # 减一是因为 label 的索引是相应 data 的索引加一
    num_examples = (len(corpus_indices) - 1) // num_steps
    epoch_size = num_examples // batch_size
    # 随机化样本
    example_indices = list(range(num_examples))
    random.shuffle(example_indices)

    # 返回 num_steps 个数据
    def _data(pos):
        return corpus_indices[pos: pos + num_steps]

    for i in range(epoch_size):
        # 每次读取 batch_size 个随机样本
        i = i * batch_size
        batch_indices = example_indices[i: i + batch_size]
        data = nd.array(
            [_data(j * num_steps) for j in batch_indices], ctx=ctx)
        label = nd.array(
            [_data(j * num_steps + 1) for j in batch_indices], ctx=ctx)
        yield data, label
```

为了便于理解时序数据上的随机批量采样，让我们输入一个从 0 到 29 的人工序列，看下读出来长什么样：

```
In [7]: my_seq = list(range(30))

    for data, label in data_iter_random(my_seq, batch_size=2, num_steps=3):
        print('data: ', data, '\nlabel:', label, '\n')

data:
[[ 12.  13.  14.]
 [ 3.   4.   5.]]
<NDArray 2x3 @cpu(0)>
label:
[[ 13.  14.  15.]
 [ 4.   5.   6.]]
<NDArray 2x3 @cpu(0)>

data:
[[ 21.  22.  23.]
 [ 0.   1.   2.]]
<NDArray 2x3 @cpu(0)>
label:
[[ 22.  23.  24.]
 [ 1.   2.   3.]]
<NDArray 2x3 @cpu(0)>

data:
[[ 18.  19.  20.]
 [ 6.   7.   8.]]
<NDArray 2x3 @cpu(0)>
label:
[[ 19.  20.  21.]
 [ 7.   8.   9.]]
<NDArray 2x3 @cpu(0)>

data:
[[ 24.  25.  26.]
 [ 15.  16.  17.]]
<NDArray 2x3 @cpu(0)>
label:
[[ 25.  26.  27.]
 [ 16.  17.  18.]]
<NDArray 2x3 @cpu(0)>
```

由于各个采样在原始序列上的位置是随机的时序长度为 `num_steps` 的连续数据点，相邻的两个

随机批量在原始序列上的位置不一定相毗邻。因此，在训练模型时，读取每个随机时序批量前需要重新初始化隐含状态。

相邻批量采样

除了对原序列做随机批量采样之外，我们还可以使相邻的两个随机批量在原始序列上的位置相毗邻。

```
In [8]: def data_iter_consecutive(corpus_indices, batch_size, num_steps, ctx=None):
    corpus_indices = nd.array(corpus_indices, ctx=ctx)
    data_len = len(corpus_indices)
    batch_len = data_len // batch_size

    indices = corpus_indices[0: batch_size * batch_len].reshape((
        batch_size, batch_len))
    # 减一是因为 label 的索引是相应 data 的索引加一
    epoch_size = (batch_len - 1) // num_steps

    for i in range(epoch_size):
        i = i * num_steps
        data = indices[:, i: i + num_steps]
        label = indices[:, i + 1: i + num_steps + 1]
        yield data, label
```

相同地，为了便于理解时序数据上的相邻批量采样，让我们输入一个从 0 到 29 的人工序列，看下读出来长什么样：

```
In [9]: my_seq = list(range(30))

for data, label in data_iter_consecutive(my_seq, batch_size=2, num_steps=3):
    print('data: ', data, '\nlabel:', label, '\n')

data:
[[ 0.  1.  2.]
 [ 15. 16. 17.]]
<NDArray 2x3 @cpu(0)>
label:
[[ 1.  2.  3.]
 [ 16. 17. 18.]]
<NDArray 2x3 @cpu(0)>

data:
[[ 3.  4.  5.]
 [ 18. 19. 20.]]
<NDArray 2x3 @cpu(0)>
```

```

label:
[[ 4.  5.  6.]
 [ 19. 20. 21.]]
<NDArray 2x3 @cpu(0)>

data:
[[ 6.  7.  8.]
 [ 21. 22. 23.]]
<NDArray 2x3 @cpu(0)>
label:
[[ 7.  8.  9.]
 [ 22. 23. 24.]]
<NDArray 2x3 @cpu(0)>

data:
[[ 9. 10. 11.]
 [ 24. 25. 26.]]
<NDArray 2x3 @cpu(0)>
label:
[[ 10. 11. 12.]
 [ 25. 26. 27.]]
<NDArray 2x3 @cpu(0)>

```

由于各个采样在原始序列上的位置是毗邻的时序长度为 `num_steps` 的连续数据点，因此，使用相邻批量采样训练模型时，读取每个时序批量前，我们需要将该批量最开始的隐含状态设为上个批量最终输出的隐含状态。在同一个 epoch 中，隐含状态只需要在该 epoch 开始的时候初始化。

6.1.5 One-hot 向量

注意到每个字符现在是用一个整数来表示，而输入进网络我们需要一个定长的向量。一个常用的办法是使用 one-hot 来将其表示成向量。也就是说，如果一个字符的整数值是 i ，那么我们创建一个全 0 的长为 `vocab_size` 的向量，并将其第 i 位设成 1。该向量就是对原字符的 one-hot 向量。

In [10]: `nd.one_hot(nd.array([0, 2]), vocab_size)`

Out[10]:

```

[[ 1.  0.  0. ...,  0.  0.  0.]
 [ 0.  0.  1. ...,  0.  0.  0.]]
<NDArray 2x1465 @cpu(0)>

```

记得前面我们每次得到的数据是一个 `batch_size * num_steps` 的批量。下面这个函数将其转换成 `num_steps` 个可以输入进网络的 `batch_size * vocab_size` 的矩阵。对于一个长度为 `num_steps` 的序列，每个批量输入 $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times x}$ ，其中 $n = \text{batch_size}$ ，而 $x = \text{vocab_size}$

(onehot 编码向量维度)。

```
In [11]: def get_inputs(data):
    return [nd.one_hot(X, vocab_size) for X in data.T]

inputs = get_inputs(data)

print('input length: ', len(inputs))
print('input[0] shape: ', inputs[0].shape)

input length: 3
input[0] shape: (2, 1465)
```

6.1.6 初始化模型参数

对于序列中任意一个时间戳，一个字符的输入是维度为 `vocab_size` 的 one-hot 向量，对应输出是预测下一个时间戳为词典中任意字符的概率，因而该输出是维度为 `vocab_size` 的向量。

当序列中某一个时间戳的输入为一个样本数为 `batch_size` (对应模型定义中的 n) 的批量，每个时间戳上的输入和输出皆为尺寸 `batch_size * vocab_size` (对应模型定义中的 $n \times x$) 的矩阵。假设每个样本对应的隐含状态的长度为 `hidden_dim` (对应模型定义中隐含层长度 h)，根据矩阵乘法定义，我们可以推断出模型隐含层和输出层中各个参数的尺寸。

```
In [12]: import mxnet as mx

# 尝试使用 GPU
import sys
sys.path.append('..')
import utils
ctx = utils.try_gpu()
print('Will use', ctx)

input_dim = vocab_size
# 隐含状态长度
hidden_dim = 256
output_dim = vocab_size
std = .01

def get_params():
    # 隐含层
    W_xh = nd.random_normal(scale=std, shape=(input_dim, hidden_dim),
    ← ctx=ctx)
    W_hh = nd.random_normal(scale=std, shape=(hidden_dim, hidden_dim),
    ← ctx=ctx)
    b_h = nd.zeros(hidden_dim, ctx=ctx)
```

```
# 输出层
W_hy = nd.random_normal(scale=std, shape=(hidden_dim, output_dim),
→ ctx=ctx)
b_y = nd.zeros(output_dim, ctx=ctx)

params = [W_xh, W_hh, b_h, W_hy, b_y]
for param in params:
    param.attach_grad()
return params

Will use gpu(0)
```

6.1.7 定义模型

当序列中某一个时间截的输入为一个样本数为 `batch_size` 的批量，而整个序列长度为 `num_steps` 时，以下 `rnn` 函数的 `inputs` 和 `outputs` 皆为 `num_steps` 个尺寸为 `batch_size * vocab_size` 的矩阵，隐含变量 **H** 是一个尺寸为 `batch_size * hidden_dim` 的矩阵。该隐含变量 **H** 也是循环神经网络的隐含状态 `state`。

我们将前面的模型公式翻译成代码。这里的激活函数使用了按元素操作的双曲正切函数

$$\tanh(x) = \frac{1 - e^{-2x}}{1 + e^{-2x}}$$

需要注意的是，双曲正切函数的值域是 $[-1, 1]$ 。如果自变量均匀分布在整個实域，该激活函数输出的均值为 0。

```
In [13]: def rnn(inputs, state, *params):
    # inputs: num_steps 个尺寸为 batch_size * vocab_size 矩阵。
    # H: 尺寸为 batch_size * hidden_dim 矩阵。
    # outputs: num_steps 个尺寸为 batch_size * vocab_size 矩阵。
    H = state
    W_xh, W_hh, b_h, W_hy, b_y = params
    outputs = []
    for X in inputs:
        H = nd.tanh(nd.dot(X, W_xh) + nd.dot(H, W_hh) + b_h)
        Y = nd.dot(H, W_hy) + b_y
        outputs.append(Y)
    return (outputs, H)
```

做个简单的测试：

```
In [14]: state = nd.zeros(shape=(data.shape[0], hidden_dim), ctx=ctx)

params = get_params()
outputs, state_new = rnn(get_inputs(data.as_in_context(ctx)), state, *params)
```

```

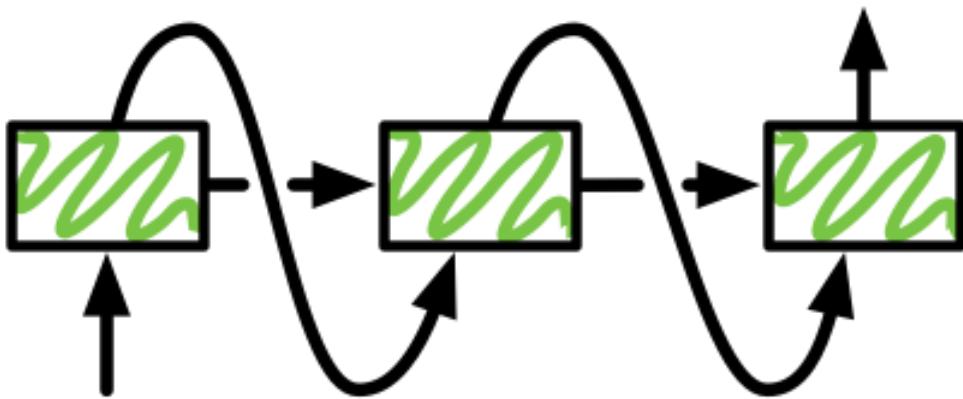
print('output length: ', len(outputs))
print('output[0] shape: ', outputs[0].shape)
print('state shape: ', state_new.shape)

output length: 3
output[0] shape: (2, 1465)
state shape: (2, 256)

```

6.1.8 预测序列

在做预测时我们只需要给定时间 0 的输入和起始隐含变量。然后我们每次将上一个时间的输出作为下一个时间的输入。



```

In [15]: def predict_rnn(rnn, prefix, num_chars, params, hidden_dim, ctx, idx_to_char,
                      char_to_idx, get_inputs, is_lstm=False):
    # 预测以 prefix 开始的接下来的 num_chars 个字符。
    prefix = prefix.lower()
    state_h = nd.zeros(shape=(1, hidden_dim), ctx=ctx)
    if is_lstm:
        # 当 RNN 使用 LSTM 时才会用到，这里可以忽略。
        state_c = nd.zeros(shape=(1, hidden_dim), ctx=ctx)
    output = [char_to_idx[prefix[0]]]
    for i in range(num_chars + len(prefix)):
        X = nd.array([output[-1]], ctx=ctx)
        # 在序列中循环迭代隐含变量。
        if is_lstm:
            # 当 RNN 使用 LSTM 时才会用到，这里可以忽略。
            Y, state_h, state_c = rnn(get_inputs(X), state_h, state_c,
                                       *params)
        else:
            Y, state_h = rnn(get_inputs(X), state_h, *params)
        if i < len(prefix) - 1:

```

```

        next_input = char_to_idx[prefix[i+1]]
    else:
        next_input = int(Y[0].argmax(axis=1).asscalar())
    output.append(next_input)
return ''.join([idx_to_char[i] for i in output])

```

6.1.9 梯度剪裁

我们在正向传播和反向传播中提到，训练神经网络往往需要依赖梯度计算的优化算法，例如我们之前介绍的随机梯度下降。而在循环神经网络的训练中，当每个时序训练数据样本的时序长度 `num_steps` 较大或者时刻 t 较小，目标函数有关 t 时刻的隐含层变量梯度较容易出现衰减（vanishing）或爆炸（explosion）。我们会在下一节详细介绍出现该现象的原因。

为了应对梯度爆炸，一个常用的做法是如果梯度特别大，那么就投影到一个比较小的尺度上。假设我们把所有梯度接成一个向量 g ，假设剪裁的阈值是 θ ，那么我们这样剪裁使得 $\|g\|$ 不会超过 θ :

$$g = \min\left(\frac{\theta}{\|g\|}, 1\right) g$$

```
In [16]: def grad_clipping(params, theta, ctx):
    if theta is not None:
        norm = nd.array([0.0], ctx)
        for p in params:
            norm += nd.sum(p.grad ** 2)
        norm = nd.sqrt(norm).asscalar()
        if norm > theta:
            for p in params:
                p.grad[:] *= theta / norm
```

6.1.10 训练模型

下面我们可以还是训练模型。跟前面前置网络的教程比，这里有以下几个不同。

1. 通常我们使用困惑度（Perplexity）这个指标。
2. 在更新前我们对梯度做剪裁。
3. 在训练模型时，对时序数据采用不同批量采样方法将导致隐含变量初始化的不同。

困惑度 (Perplexity)

回忆以下我们之前介绍的交叉熵损失函数。在语言模型中，该损失函数即被预测字符的对数似然平均值的相反数：

$$\text{loss} = -\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \log p_{\text{target}_i}$$

其中 N 是预测的字符总数， p_{target_i} 是在第 i 个预测中真实的下个字符被预测的概率。

而这里的困惑度可以简单的认为就是对交叉熵做 \exp 运算使得数值更好读。

为了解释困惑度的意义，我们先考虑一个完美结果：模型总是把真实的下个字符的概率预测为 1。也就是说，对任意的 i 来说， $p_{\text{target}_i} = 1$ 。这种完美情况下，困惑度值为 1。

我们再考虑一个基线结果：给定不重复的字符集合 W 及其字符总数 $|W|$ ，模型总是预测下个字符为集合 W 中任一字符的概率都相同。也就是说，对任意的 i 来说， $p_{\text{target}_i} = 1/|W|$ 。这种基线情况下，困惑度值为 $|W|$ 。

最后，我们可以考虑一个最坏结果：模型总是把真实的下个字符的概率预测为 0。也就是说，对任意的 i 来说， $p_{\text{target}_i} = 0$ 。这种最坏情况下，困惑度值为正无穷。

任何一个有效模型的困惑度值必须小于预测集中元素的数量。在本例中，困惑度必须小于字典中的字符数 $|W|$ 。如果一个模型可以取得较低的困惑度的值（更靠近 1），通常情况下，该模型预测更加准确。

```
In [17]: from mxnet import autograd
        from mxnet import gluon
        from math import exp

        def train_and_predict_rnn(rnn, is_random_iter, epochs, num_steps, hidden_dim,
                                learning_rate, clipping_theta, batch_size,
                                pred_period, pred_len, seqs, get_params,
                                get_inputs,
                                ctx, corpus_indices, idx_to_char, char_to_idx,
                                is_lstm=False):
            if is_random_iter:
                data_iter = data_iter_random
            else:
                data_iter = data_iter_consecutive
            params = get_params()

            softmax_cross_entropy = gluon.loss.SoftmaxCrossEntropyLoss()

            for e in range(1, epochs + 1):
```

```

# 如使用相邻批量采样, 在同一个 epoch 中, 隐含变量只需要在该 epoch 开始的时候初始化。
→   化。
if not is_random_iter:
    state_h = nd.zeros(shape=(batch_size, hidden_dim), ctx=ctx)
    if is_lstm:
        # 当 RNN 使用 LSTM 时才会用到, 这里可以忽略。
        state_c = nd.zeros(shape=(batch_size, hidden_dim), ctx=ctx)
train_loss, num_examples = 0, 0
for data, label in data_iter(corpus_indices, batch_size, num_steps,
                             ctx):
    # 如使用随机批量采样, 处理每个随机小批量前都需要初始化隐含变量。
    if is_random_iter:
        state_h = nd.zeros(shape=(batch_size, hidden_dim), ctx=ctx)
        if is_lstm:
            # 当 RNN 使用 LSTM 时才会用到, 这里可以忽略。
            state_c = nd.zeros(shape=(batch_size, hidden_dim),
                               ctx=ctx)
    with autograd.record():
        # outputs 尺寸: (batch_size, vocab_size)
        if is_lstm:
            # 当 RNN 使用 LSTM 时才会用到, 这里可以忽略。
            outputs, state_h, state_c = rnn(get_inputs(data),
                                             state_h,
                                             state_c, *params)
        else:
            outputs, state_h = rnn(get_inputs(data), state_h,
                                   *params)
        # 设 t_ib_j 为 i 时间批量中的 j 元素:
        # label 尺寸: (batch_size * num_steps)
        # label = [t_0b_0, t_0b_1, ..., t_1b_0, t_1b_1, ..., ]
        label = label.T.reshape((-1,))
        # 拼接 outputs, 尺寸: (batch_size * num_steps, vocab_size)。
        outputs = nd.concat(*outputs, dim=0)
        # 经上述操作, outputs 和 label 已对齐。
        loss = softmax_cross_entropy(outputs, label)
    loss.backward()

    grad_clipping(params, clipping_theta, ctx)
    utils.SGD(params, learning_rate)

    train_loss += nd.sum(loss).asscalar()
    num_examples += loss.size

    if e % pred_period == 0:
        print("Epoch %d. Perplexity %f" % (e,

```

```
exp(train_loss/num_examples)))  
for seq in seqs:  
    print(' - ', predict_rnn(rnn, seq, pred_len, params,  
                             hidden_dim, ctx, idx_to_char, char_to_idx, get_inputs,  
                             is_lstm))  
print()
```

以下定义模型参数和预测序列前缀。

```
In [18]: epochs = 200  
num_steps = 35  
learning_rate = 0.1  
batch_size = 32  
  
softmax_cross_entropy = gluon.loss.SoftmaxCrossEntropyLoss()  
  
seq1 = '分开'  
seq2 = '不分开'  
seq3 = '战争中部队'  
seqs = [seq1, seq2, seq3]
```

我们先采用随机批量采样实验循环神经网络谱写歌词。我们假定谱写歌词的前缀分别为“分开”、“不分开”和“战争中部队”。

```
In [19]: train_and_predict_rnn(rnn=rnn, is_random_iter=True, epochs=200, num_steps=35,  
                           hidden_dim=hidden_dim, learning_rate=0.2,  
                           clipping_theta=5, batch_size=32, pred_period=20,  
                           pred_len=100, seqs=seqs, get_params=get_params,  
                           get_inputs=get_inputs, ctx=ctx,  
                           corpus_indices=corpus_indices, idx_to_char=idx_to_char,  
                           char_to_idx=char_to_idx)
```

Epoch 20. Perplexity 224.963168

- 分开 我 不 我 你 我 你 不 在 我 你 我 我 不 在 我 你 在 我 不 我 你 不 在 我 你 我 我 不 在
- 我 你 在 我 不 我 你 不 在 我 你 我 我 不 在 我 你 在 我 不
- 不分开 我 想 我 你 我 你 不 在 我 你 我 我 不 在 我 你 在 我 不 我 你 不 在 我 你 我 我
- 不 在 我 你 在 我 不 我 你 不 在 我 你 我 我 不 在 我 你 在 我 不
- 战争中部队 我 你 在 我 不 我 你 不 在 我 你 我 我 不 在 我 你 在 我 不 我 你 不 在 我 你
- 我 我 不 在 我 你 在 我 不 我 你 不 在 我 你 我 我 不 在 我 你 在

Epoch 40. Perplexity 87.427243

- 分开 一 直 两 你 该 这 你 我 们 你 不 要 想 情 我 的 爱 你 你 我 的 世 你 你 不 是 你 的 爱 我 想 你 的 爱 写 像 我 们
- 半 兽 人 的 灵 魂 翻 滚 一 直 x Y x Y x Y x Y x Y x Y x Y x Y x Y x Y x Y x Y x
- 不 分 开 爱 我 的 半 兽 人 的 灵 魂 翻 滚 一 直 x Y x Y x Y x Y x Y x Y x Y x Y x Y x Y x Y x Y x Y x
- x Y x Y x Y x Y x Y x Y x Y x Y x Y x Y x Y x Y x Y x Y x Y x Y x

- 战争中部队 这样 我们 这不 我想 你不要我想要你 爱你的让我疯狂的可爱女人 坏坏的让我疯狂的可爱女人
→ 坏坏的让我疯狂的可爱女人 坏坏的让我疯狂的可爱女人 坏坏的让我疯狂的可爱女人
→ 坏坏的让我疯狂的可爱女人 坏坏

Epoch 60. Perplexity 30.437429

- 分开 我想要这样龙 你的手 放不到 不想 你们我 你知我 你不是 不是我 别你 有你是些 我不好再开龙
→ 我右不起 说我的可婆面 一起正 我给我的爱我 想知是 半兽我的灵魂 翻滚 停止忿 连炭 逗一直 火炭
- 不分开 我给你这样我 你知道觉 我不是这样龙 我右你打我难着你 我想你这样没 你不想 你怎我 想不
→ 你不想 你怎么 你怎么 不子 这样再 你怎么 你怎么这样我 你知道 你是我 想不 你不想 你怎么 你怎么 不
- 战争中部队 (在泡的茶 有一种味道叫做家 他往叨一张 我的世界 是你是外 车你ㄟ种 我不再这样龙
→ 我右你打我难着你 我想你这样没 你不想 你怎我 想不 你不想 你怎么 你怎么 不子 这样再 你怎么
→ 你怎么这样我

Epoch 80. Perplexity 13.345995

Epoch 100. Perplexity 7.081508

- 分开 你是我这多难要 我要是你的微笑 没人能说的人 那在刀里都不到 才我你 爱不是 陪我的 一车两 又九
- 只直好 在小跟 的灵魂 单纯 停起忿存在的神 用谦卑的身份 像砾成回忆 小天的距丽 泡在水 会不到
- 不分开 我给你这不再 你在我看多不是 我没有你想微开久 就要我很多你 一场走 车该ㄟ直的甜面 温默等待
- 娘子 一壶筐酒的炭争 等有了里之始 暗杰记 放抹怎 我想就这你离开 我才是你慢微开久 别要我不多再着
- 战争中部队家 我有轻好对牵着你 也要你笑 你不想 不要走 爱满 有直ㄟ 在小出 的灵魂 单纯
- 停起忿存在的神 用谦卑的身份 像砾成回忆 小天的距丽 泡在水 会不到 什么我 娘你怎么直来 这样躲
- 爱情你一起好 有话

Epoch 120. Perplexity 4.640309

- 分开 你要想这样牵离开 像往南方的风吻的时 从不到过懂我 也物线曾球 单思寄人运我能服难的兽
- 小轻的喊我想 在我看不到 一颗两著落 我爱就在原 没有了空落 这样 篮子 你丫 x— xi xi xi xi x
- 不分开 现在那经看不到 我有着你已狂 周你也 连着我 娘好 有你ㄟ红 让人伦 的表段调剩了一空 印到洪荒
- 去支了动操纵 我右拳打 回没有一切秋 一身正在 铁使用双截棍 哼哼哈兮 快使用双截棍 哼哼哈兮 快使
- 战争中部队落乡的回用琳点的过斑 象真莹的茶滴 闪烁是风的 这只现 一九两 三颗的公式我学不来
- (难道这不是我要的天堂景象 沉沦假象 你只会感到更加沮丧) (难道这不是我要的天堂景象 沉沦假象
- 你只会感到更加沮丧)

Epoch 140. Perplexity 3.464057

- 分开 你爱会记得龙开我 说你你妈爱球多 后晚没有坦堡 不去忙你和给你 想下为我太爱你
→ 是因为我太爱你都要我说你的爱爸 从何 风地人ㄟ了甜 龙是 笑是人ㄟ日甜 龙是 逗阵飞ㄟ日子 龙是
→ 逗阵飞ㄟ日子 龙是

- 不分开着我 这样手没离开了你 T—你很格就想 还不去 -情我 印头 一直好闷后要你在抽 我亲像
→ 用你放的太快 怎么是 剩人了一口气 不抹记 剩最后一天气 放抹记 剩最后一口气 放抹记 剩最后一口气
→ 放抹记 剩
- 战争中部队的石板 古过去 所异不能还成 我在纯 灵魂序曲了人 放抹族 爱着后一口气 放抹记 剩最后一口气
→ 放抹记 剩最后一口气 放抹记 剩最后一口气 放抹记 剩最后一口气 放抹记
→ 剩最后一口

Epoch 160. Perplexity 2.816006

- 分开开你 陪想你看手堡 让这连被安排 快攻过去 像溪边ㄟ田蝇 加字过去 像溪边ㄟ田蝇 仁字过去
→ 像溪边ㄟ田蝇 仁者哈敌 快使用双截棍 哼哼哈兮 如使用双截棍 哼哼哈兮 如使用双截棍 哼哼哈兮
→ 如使用双截棍
- 不分开着我 这样情我离我的你带经 说开我 爱场的听丽我想不太 我不再这样牵 我想不起 你已我不想多
→ 你在我会见难是 单什么(相 这样没人走 不是一直热 很遥远 说边 是否在海角对面 却一九杨柳 你在那里 在
- 战争中部队暴 淡小心世被了雕年的门窗 夕阳斜斜映在斑驳的砖墙 铺著桦木板的屋内还弥漫
→ 姥人一种热粥会一天 放不去 穿着愿望就力实 一定好没眼违色 我都要的有模有样 什么兵器最喜欢
→ 双截棍柔中带刚 想要去河南嵩山

Epoch 180. Perplexity 2.453248

- 分开着你不难着 你在你前会你是我烦会 这样的天我有坠入 看不见罪的国度 请原谅我的自负
→ 没人能说没人可说 好难承受 荣耀心中的溪边一口 默等著儿有曲寻根 面对魔界的邪吻 请空谅我的自负
→ 没人能说没人可说 好
- 不分开 我给你的爱写人西 坏坏的让我疯狂的可爱女人 透坏的让我疯狂的可爱女人
→ 透坏的让我疯狂的可爱女人 透坏的让我疯狂的可爱女人 透坏的让我疯狂的可爱女人
→ 透坏的让我疯狂的可爱女人 透坏的让我疯狂的可爱女人
- 战争中部队瓦) 我有你烦人写 放一么一张) 我的想和主义 我留拳起你看强 帮什么(客) 干什么(客)
→ 我的想会放弃 我留拳起你小强 干什么(客) 干什么(客) 我的想会放动 我留不起你怎强 可什么(客目
→ 干什么(

Epoch 200. Perplexity 2.198807

- 分开着你不会分 你比道这样乐 那不累掩睡我 选你这种队友 瞎透了我 说你说 分数怎么停默变直ㄟ 寻
→ 泡著的风有些默的那面 让我们 半兽人 的眼神 翻滚 停止古忍着永恒 只对暴力忠诚 让什么(客) 干攻抢篮我
- 不分开着 没不能还去 我的世界将被你太 太要再一天气 一种在天 回使用双截棍 哼哼哈兮 快使用双截棍
→ 哼哼哈兮 如使用双截棍 哼哼哈兮 如使用双截棍 哼哼哈兮 如使用双截棍 哼哼哈兮 如使用双截棍 哼哼哈兮
- 战争中部队暴掏 我说远 被情欣的冰快 放蹄声 让人睡不安稳 我在等 灵魂序曲我成 一家走没人在的只
→ 有小事备从袭 我怀念起国小的课桌椅 无力一只饿昏的老斑鸠 印地安老斑鸠 腿短毛不多 除非没人感
→ 不爽都想 我们是

我们再采用相邻批量采样实验循环神经网络谱写歌词。

```
In [20]: train_and_predict_rnn(rnn=rnn, is_random_iter=False, epochs=200,  
→ num_steps=35,  
→ hidden_dim=hidden_dim, learning_rate=0.2,  
→ clipping_theta=5, batch_size=32, pred_period=20,  
→ pred_len=100, seqs=seqs, get_params=get_params,  
→ get_inputs=get_inputs, ctx=ctx,
```

```
corpus_indices=corpus_indices, idx_to_char=idx_to_char,
char_to_idx=char_to_idx)
```

Epoch 20. Perplexity 215.176187

- 分开 我不的我 你的你我 你不的我 你的你我 你不的我 你的你我 你不的我 你的你我 你不的我 你的你我
- 你不的我 你的你我 你不的我 你的你我 你不的我 你的你我 你不的我 你的你我 你不的我 你的你我
- 不分开 我不的我 你的你我 你不的我 你的你我 你不的我 你的你我 你不的我 你的你我 你不的我 你的你我
- 你不的我 你的你我 你不的我 你的你我 你不的我 你的你我 你不的我 你的你我 你不的我 你的你我
- 战争中部队 我不的我 你的你我 你不的我 你的你我 你不的我 你的你我 你不的我 你的你我 你不的我
- 你的你我 你不的我 你的你我 你不的我 你的你我 你不的我 你的你我 你不的我 你的你我 你不的我
- 你的你我

Epoch 40. Perplexity 65.429415

- 分开 你不是我们 这不人 不颗 一直 xi ㄔㄚ ㄇㄚ ㄇㄧ ㄇㄚ ㄇㄧ ㄇㄚ ㄇㄧ ㄇㄚ ㄇㄧ ㄇㄚ ㄇㄧ ㄇㄚ ㄇㄧ
- ㄇㄧ ㄇㄚ ㄇㄧ
- 不分开 想要的天 我怎会这 你不是你 你不是你 我知 你想 这不 我不 我不 我不 我不 我不 我不 我不 我不
- ㄇㄧ ㄇㄧ
- 战争中部队 (不到我们 我不能再不 我不要你不 我不能你不 我不能你不 我不能你不 我不能你不 我不能你不
- ㄇㄧ ㄇㄧ
- ㄇㄧ ㄇㄧ

Epoch 60. Perplexity 21.664280

- 分开 一直人 的灵 翻在 一直 xi ㄔㄚ ㄇㄚ ㄇㄧ ㄇㄚ ㄇㄚ ㄇㄧ ㄇㄚ ㄇㄚ ㄇㄚ ㄇㄚ ㄇㄚ ㄇㄚ ㄇㄚ
- ㄇㄧ ㄇㄚ ㄇㄚ
- 不分开你走 我不着我想碎没人帮你 想不安这样是 你在我怎见你的非场 我想揍你已经很 你因的我太么
- 一直走 剩不 一直 xi ㄔㄚ ㄇㄧ ㄇㄚ ㄇㄚ
- 战争中部队 (牵泡的茶 有一种味道叫做家 他在泡白的风度 让我们 半兽人 的灵魂 单纯 对地忿存 永水
- 一起 xi ㄨㄚ ㄇㄚ ㄇㄧ ㄇㄚ ㄇㄚ

Epoch 80. Perplexity 9.625157

- 分开 说你是没有的屋 我很店来二 很两银的爱情不像顶不住那时间 为什么这样子 你看着我说你睡著
- 这不想没多你的灵空 和弦内容不么 所有回忆对你的非常 怎么内容 你来已心脏 (没有你在我有多过熬不见
- 我没有这
- 不分开你 我要有这样走着 我会会不想走开 为什么我连分开 我也学你想你很久 别是我也多不着
- 昨晚梦有你来了 我想要 放碎我 别你怎么陪要我 甩你心 快给我抬起头 有话去对医药箱我 别怪 ㄌㄚ ㄩㄡ
- ㄔㄚ ㄇㄧ
- 战争中部队家 这不去受你 我的世应 我已多 的表情 有一些风霜 老唱在 小皮堂 装属就那信片白墙我
- 泪不休 语沉默 娘子的公式我学不来 (难道这不是我要的天堂景象 沉沦假象 你只会感到更加沮丧)
- (难道这不是我要

Epoch 100. Perplexity 5.251097

- 分开 这着开的不防 一直到 让人后 不想我有别球 有话去 一直走 的灵魂 翻滚 停止忿存 永无止尽的战争
- 让我们 半兽人 的灵魂 单纯 对远忿存 永无止尽的战争 让我们 半兽人 的灵魂 单纯 对远忿存 永无
- 不分开说走 想手你说 我只感离到我 不知不觉 我跟了这节奏 后知后觉 又过了一个秋 后知后觉
- 我该好好生活 我该好好生活 后知不觉 你已经离开我 不知不觉 我跟了这节奏 后知后觉 又过了一个秋
- 后知后觉 我该

- 战争中部队的生 我给你的可写 你我要始半直开 干什么(相 这一直里道的 我什么我开你没人帮 是我们的风
- 我们过记得瘦 家色尽秋 我已了沙 我该了一种更加 我后悔的让 有一种味道叫做家 陆羽泡的茶
- 听说名和利都不

Epoch 120. Perplexity 3.628737

- 分开 这着了没的画面 让我们 半兽人 的灵魂 单纯 对远古存 永无止 的片段 有滚 一直忿忍
- 永无止尽的战争 让我们 半兽人 的灵魂 单纯 对远古存 永无止 的片段 有滚 一直忿忍 永无止尽的战争
- 让我们
- 不分开你走 爱笑你的想堡 一只 你迷到久了吧? 我不想再得你 当你开著不离要一场悲柳
- 你脸在抽搐后就想你已难 一偏间 字过出了你远间 一十个 字刻出了你现了 用偏偏文渐后出土我现你
- 不到你 一只两 一只四步
- 战争中部队的窝 它象灌木一步 所涯在老 我已一直开 我的完界想 黑不事美口里不爱 他牵着一匹瘦马
- 无人个那的画土 我会能够不好开 为什么我连爱开都迁就着你 我真的没有天份 安静的没这么快
- 我会学着放弃你 是因为我

Epoch 140. Perplexity 2.822868

- 分开 这着了没不打去 回领你的 爱你一天 木剩下功 不知己痛 没有没用 恨一场梦 不有不容 恨一种钟
- 不有不容 恨不再痛 没有不同 恨了没用 怎么没痛 恨一种梦 不有不容 恨一种钟 不有不容 恨不再痛 没有
- 不分开你走 爱笑你的想堡 想你想这样的横边 到底的风我的坚一直 我说一步一步往上爬
- 在感阳一张一张ㄟ撕 将过去一张一张ㄟ撕 这过去一张一张ㄟ撕 这过去 马撕到何时才有你ㄟ字 这日历
- 马撕到何时才有你ㄟ字 你
- 战争中部队家想的想定 这不是 所覆盖 蜕变的公式我学不来 (难道这不是我要的天堂景象 沉沦假象
- 你只会感到更加沮丧) (难道这不是我要的天堂景象 沉沦假象 你只会感到更加沮丧)
- (难道这不是我要的天堂景象 沉沦假

Epoch 160. Perplexity 2.504056

- 分开 这你了没妈的屋 我给想回忆 三两银的眼情 像什着我 全已经人防守 篮下过去 快使用双截棍 哼哼哈兮
- 快使用双截棍 哼哼哈兮 快使用双截棍 哼哼哈兮 快使用双截棍 哼哼哈兮 快使用双截棍 哼哼哈兮 快使
- 不分开整走 爱我的微子的 语是 你一半ㄟ气 说该 s样的老 干红都不到我 不知这样 我跟了这节奏
- 后知后觉 又过了一个秋 后知后觉 我该好好生活 我该好好生活 不知不觉 你已经离开我 不知 是想连咪都ㄟ
- 战争中部队的话 它在手木丛旁邂逅 一直一直一直伴奏 黑色帘幕被风吹河 阳光南言的风木树苗了默
- 爷爷泡的茶 有一种味道叫做家 他满头的茶 有一种味道叫做家 他满头的茶 有一种味道叫做家 他满头的茶
- 有一种味道叫做家

Epoch 180. Perplexity 2.192909

- 分开 这你了没样打到 哼我们了你怎我 甩开球我的腔的怒 有法渗子的风物 不被污染的转生 维持纯白的象征
- 然后还原一起一口 就能承没有点起B 像往南方燕子断翅 像往南方燕子断翅 不往搁返来巢看厉边 不曾搁返来
- 不分开就走 想手就有你离我妈的天堂景象 沉沦假象 你只会感到更加沮丧) (难道这不是我要的天堂景象
- 沉沦假象 你只会感到更加沮丧) (难道这不是我要的天堂景象 沉沦假象 你只会感到更加沮丧)
- (难道这不是我要
- 战争中部队的窝 还是你木一旁邂息 一直一天风仪 累的累间演弃 一天抢-落 干一ㄟ人落的是你 给我的快乐
- 我很想记得可是我记不得 我不到这样子 你的想美主义 后彻底不多 几天都没有喝水也能活
- 脑袋瓜有一点秀逗 猎物

Epoch 200. Perplexity 2.076224

- 分开 这你用的黑的桑 龙停么 火子变 一步四颗 回头之 的片段 有一些风霜 老唱盘 旧皮箱
 ↵ 装满了明信片的铁盒里藏著一片玫瑰花瓣 不不起 广子一枚铜币 悲在族哪里下 说亮都靠我 你拿着球不投
 ↵ 又不会掩护我
 - 不分开就走 爱我说不了那祷经 说不来没得打 让我带着你离开 这是顽固 这是逃避 没人帮着你
 ↵ 三着三的爱情有像顶不住那时间 为什么这样 我一天界想被摧人涯 你那ㄟ s梭的 娘么好的茶球 还蹄记
 ↵ 让人后一口
 - 战争中部队的街 你在的风乐 吸许开 说人走人下好 所有人 放不到 放想 你迷人ㄟ气质 过去 你想再这气质
 ↵ 龙是 你想久气质 过去 你迷人ㄟ倒质 龙是 笑想人ㄟ为止 这是 笑事人ㄟ日子 这是 笑阵酸考日子 这是

可以看到一开始学到简单的字符，然后简单的词，接着是复杂点的词，然后看上去似乎像个句子了。

6.1.11 结论

- 通过隐含状态，循环神经网络适合处理前后有依赖关系时序数据样本。
- 对前后有依赖关系时序数据样本批量采样时，我们可以使用随机批量采样和相邻批量采样。
- 循环神经网络较容易出现梯度衰减和爆炸。

6.1.12 练习

- 调整参数(例如数据集大小、序列长度、隐含状态长度和学习率)，看看对运行时间、perplexity 和预测的结果造成的影响。
- 在随机批量采样中，如果在同一个 epoch 中只把隐含变量在该 epoch 开始的时候初始化会怎么样？

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

6.2 通过时间反向传播

在上一章循环神经网络的示例代码中，如果不使用梯度裁剪，模型将无法正常训练。为了深刻理解这一现象，并激发出改进循环神经网络的灵感，本节我们将介绍循环神经网络中模型梯度的计算和存储，也即通过时间反向传播 (back-propagation through time)。

我们在正向传播和反向传播中以 L_2 范数正则化的多层感知机为例，介绍了深度学习模型梯度的计算和存储。事实上，所谓通过时间反向传播只是反向传播在循环神经网络的具体应用。我们只需将循环神经网络按时间展开，从而得到模型变量和参数之间的依赖关系，并依据链式法则应用反向传播计算梯度。

为了解释通过时间反向传播，我们以一个简单的循环神经网络为例。

6.2.1 模型定义

给定一个输入为 $\mathbf{x}_t \in \mathbb{R}^x$ (每个样本输入向量长度为 x) 和对应真实值为 $y_t \in \mathbb{R}$ 的时序数据训练样本 ($t = 1, 2, \dots, T$ 为时刻), 不考虑偏差项, 我们可以得到隐含层变量的表达式

$$\mathbf{h}_t = \phi(\mathbf{W}_{hx}\mathbf{x}_t + \mathbf{W}_{hh}\mathbf{h}_{t-1})$$

其中 $\mathbf{h}_t \in \mathbb{R}^h$ 是向量长度为 h 的隐含层变量, $\mathbf{W}_{hx} \in \mathbb{R}^{h \times x}$ 和 $\mathbf{W}_{hh} \in \mathbb{R}^{h \times h}$ 是隐含层模型参数。使用隐含层变量和输出层模型参数 $\mathbf{W}_{yh} \in \mathbb{R}^{y \times h}$, 我们可以得到相应时刻的输出层变量 $\mathbf{o}_t \in \mathbb{R}^y$ 。不考虑偏差项,

$$\mathbf{o}_t = \mathbf{W}_{yh}\mathbf{h}_t$$

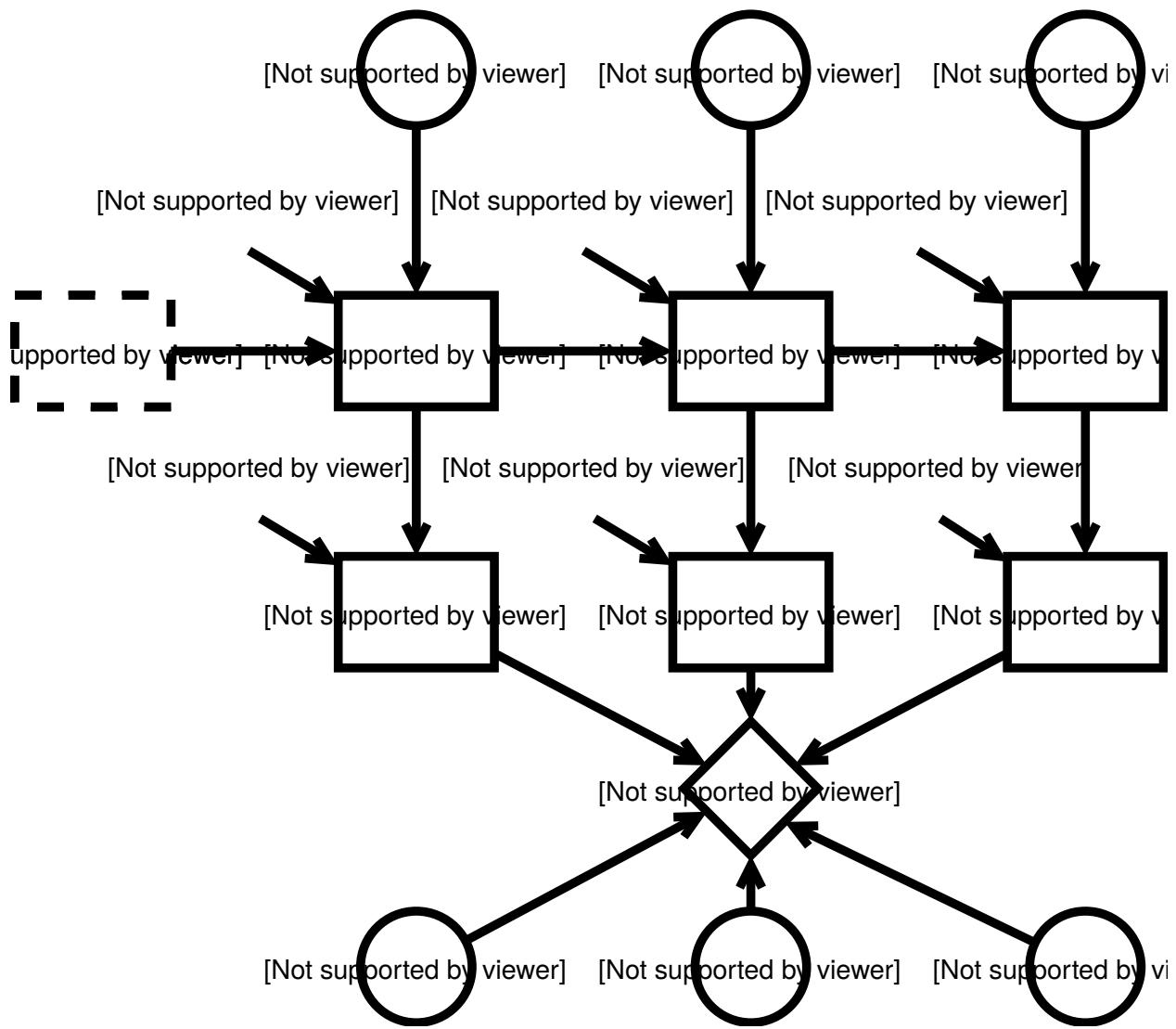
给定每个时刻损失函数计算公式 ℓ , 长度为 T 的整个时序数据的损失函数 L 定义为

$$L = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^T \ell(\mathbf{o}_t, y_t)$$

这也是模型最终需要被优化的目标函数。

计算图

为了可视化模型变量和参数之间在计算中的依赖关系, 我们可以绘制计算图。我们以时序长度 $T = 3$ 为例。



梯度的计算与存储

在上图中，模型的参数是 \mathbf{W}_{hx} 、 \mathbf{W}_{hh} 和 \mathbf{W}_{yh} 。为了在模型训练中学习这三个参数，以随机梯度下降为例，假设学习率为 η ，我们可以通过

$$\mathbf{W}_{hx} = \mathbf{W}_{hx} - \eta \frac{\partial L}{\partial \mathbf{W}_{hx}}$$

$$\mathbf{W}_{hh} = \mathbf{W}_{hh} - \eta \frac{\partial L}{\partial \mathbf{W}_{hh}}$$

$$\mathbf{W}_{yh} = \mathbf{W}_{yh} - \eta \frac{\partial L}{\partial \mathbf{W}_{yh}}$$

来不断迭代模型参数的值。因此我们需要模型参数梯度 $\partial L / \partial \mathbf{W}_{hx}$ 、 $\partial L / \partial \mathbf{W}_{hh}$ 和 $\partial L / \partial \mathbf{W}_{yh}$ 。为此，我们可以按照反向传播的次序依次计算并存储梯度。

为了表述方便，对输入输出 X, Y, Z 为任意形状张量的函数 $Y = f(X)$ 和 $Z = g(Y)$ ，我们使用

$$\frac{\partial Z}{\partial X} = \text{prod}\left(\frac{\partial Z}{\partial Y}, \frac{\partial Y}{\partial X}\right)$$

来表达链式法则。以下依次计算得到的梯度将依次被存储。

首先，目标函数有关各时刻输出层变量的梯度 $\partial L / \partial \mathbf{o}_t \in \mathbb{R}^y$ 可以很容易地计算

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{o}_t} = \frac{\partial \ell(\mathbf{o}_t, y_t)}{T \cdot \partial \mathbf{o}_t}$$

事实上，这时我们已经可以计算目标函数有关模型参数 \mathbf{W}_{yh} 的梯度 $\partial L / \partial \mathbf{W}_{yh} \in \mathbb{R}^{y \times h}$ 。需要注意的是，在计算图中， \mathbf{W}_{yh} 可以经过 $\mathbf{o}_1, \dots, \mathbf{o}_T$ 通向 L ，依据链式法则，

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{W}_{yh}} = \sum_{t=1}^T \text{prod}\left(\frac{\partial L}{\partial \mathbf{o}_t}, \frac{\partial \mathbf{o}_t}{\partial \mathbf{W}_{yh}}\right) = \sum_{t=1}^T \frac{\partial L}{\partial \mathbf{o}_t} \mathbf{h}_t^\top$$

其次，我们注意到隐含层变量之间也有依赖关系。对于最终时刻 T ，在计算图中，隐含层变量 \mathbf{h}_T 只经过 \mathbf{o}_T 通向 L 。因此我们先计算目标函数有关最终时刻隐含层变量的梯度 $\partial L / \partial \mathbf{h}_T \in \mathbb{R}^h$ 。依据链式法则，我们得到

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{h}_T} = \text{prod}\left(\frac{\partial L}{\partial \mathbf{o}_T}, \frac{\partial \mathbf{o}_T}{\partial \mathbf{h}_T}\right) = \mathbf{W}_{yh}^\top \frac{\partial L}{\partial \mathbf{o}_T}$$

为了简化计算，我们假设激活函数 $\phi(x) = x$ 。接下来，对于时刻 $t < T$ ，在计算图中，由于 \mathbf{h}_t 可以经过 \mathbf{h}_{t+1} 和 \mathbf{o}_t 通向 L ，依据链式法则，目标函数有关隐含层变量的梯度 $\partial L / \partial \mathbf{h}_t \in \mathbb{R}^h$ 需要按照时刻从晚到早依次计算：

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{h}_t} = \text{prod}\left(\frac{\partial L}{\partial \mathbf{h}_{t+1}}, \frac{\partial \mathbf{h}_{t+1}}{\partial \mathbf{h}_t}\right) + \text{prod}\left(\frac{\partial L}{\partial \mathbf{o}_t}, \frac{\partial \mathbf{o}_t}{\partial \mathbf{h}_t}\right) = \mathbf{W}_{hh}^\top \frac{\partial L}{\partial \mathbf{h}_{t+1}} + \mathbf{W}_{yh}^\top \frac{\partial L}{\partial \mathbf{o}_t}$$

将递归公式展开，对任意 $1 \leq t \leq T$ ，我们可以得到目标函数有关隐含层变量梯度的通项公式

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{h}_t} = \sum_{i=t}^T (\mathbf{W}_{hh}^\top)^{T-i} \mathbf{W}_{yh}^\top \frac{\partial L}{\partial \mathbf{o}_{T+t-i}}$$

由此可见，当每个时序训练数据样本的时序长度 T 较大或者时刻 t 较小，目标函数有关隐含层变量梯度较容易出现衰减（vanishing）和爆炸（explosion）。想象一下 2^{30} 和 0.5^{30} 会有多大。

有了各时刻隐含层变量的梯度之后，我们可以计算隐含层中模型参数的梯度 $\partial L / \partial \mathbf{W}_{hx} \in \mathbb{R}^{h \times x}$ 和 $\partial L / \partial \mathbf{W}_{hh} \in \mathbb{R}^{h \times h}$ 。在计算图中，它们都可以经过 $\mathbf{h}_1, \dots, \mathbf{h}_T$ 通向 L 。依据链式法则，我们有

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{W}_{hx}} = \sum_{t=1}^T \text{prod}\left(\frac{\partial L}{\partial \mathbf{h}_t}, \frac{\partial \mathbf{h}_t}{\partial \mathbf{W}_{hx}}\right) = \sum_{t=1}^T \frac{\partial L}{\partial \mathbf{h}_t} \mathbf{x}_t^\top$$

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{W}_{hh}} = \sum_{t=1}^T \text{prod}\left(\frac{\partial L}{\partial \mathbf{h}_t}, \frac{\partial \mathbf{h}_t}{\partial \mathbf{W}_{hh}}\right) = \sum_{t=1}^T \frac{\partial L}{\partial \mathbf{h}_t} \mathbf{h}_{t-1}^\top$$

在正向传播和反向传播中我们解释过，每次迭代中，上述各个依次计算出的梯度会被依次存储或更新。这是为了避免重复计算。例如，由于输出层变量梯度 $\partial L / \partial \mathbf{h}_t$ 被计算存储，反向传播稍后的参数梯度 $\partial L / \partial \mathbf{W}_{hx}$ 和隐含层变量梯度 $\partial L / \partial \mathbf{W}_{hh}$ 的计算可以直接读取输出层变量梯度的值，而无需重复计算。

还有需要注意的是，反向传播对于各层中变量和参数的梯度计算可能会依赖通过正向传播计算出的各层变量和参数的当前值。举例来说，参数梯度 $\partial L / \partial \mathbf{W}_{hh}$ 的计算需要依赖隐含层变量在时刻 $t = 1, \dots, T - 1$ 的当前值 \mathbf{h}_t (\mathbf{h}_0 是初始化得到的)。这个当前值是通过从输入层到输出层的正向传播计算并存储得到的。

总结

- 所谓通过时间反向传播只是反向传播在循环神经网络的具体应用。
- 当每个时序训练数据样本的时序长度 T 较大或者时刻 t 较小，目标函数有关隐含层变量梯度较容易出现衰减和爆炸。

练习

- 在循环神经网络中，梯度裁剪是否对梯度衰减和爆炸都有效？
- 你还能想到别的什么方法可以应对循环神经网络中的梯度衰减和爆炸现象？

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

6.3 门控循环单元 (GRU) — 从 0 开始

[上一节](#)中，我们介绍了循环神经网络中的梯度计算方法。我们发现，循环神经网络的隐含层变量梯度可能会出现衰减或爆炸。虽然梯度裁剪可以应对梯度爆炸，但无法解决梯度衰减的问题。因此，给定一个时间序列，例如文本序列，循环神经网络在实际中其实较难捕捉两个时刻距离较大的文本元素（字或词）之间的依赖关系。

门控循环神经网络 (gated recurrent neural networks) 的提出，是为了更好地捕捉时序数据中间隔较大的依赖关系。其中，门控循环单元 (gated recurrent unit, 简称 GRU) 是一种常用的门控循环神经网络。它由 Cho、van Merriënboer、Bahdanau 和 Bengio 在 2014 年被提出。

6.3.1 门控循环单元

我们先介绍门控循环单元的构造。它比循环神经网络中的隐含层构造稍复杂一点。

重置门和更新门

门控循环单元的隐含状态只包含隐含层变量 \mathbf{H} 。假定隐含状态长度为 h , 给定时刻 t 的一个样本数为 n 特征向量维度为 x 的批量数据 $\mathbf{X}_t \in \mathbb{R}^{n \times x}$ 和上一时刻隐含状态 $\mathbf{H}_{t-1} \in \mathbb{R}^{n \times h}$, 重置门 (reset gate) $\mathbf{R}_t \in \mathbb{R}^{n \times h}$ 和更新门 (update gate) $\mathbf{Z}_t \in \mathbb{R}^{n \times h}$ 的定义如下:

$$\mathbf{R}_t = \sigma(\mathbf{X}_t \mathbf{W}_{xr} + \mathbf{H}_{t-1} \mathbf{W}_{hr} + \mathbf{b}_r)$$

$$\mathbf{Z}_t = \sigma(\mathbf{X}_t \mathbf{W}_{xz} + \mathbf{H}_{t-1} \mathbf{W}_{hz} + \mathbf{b}_z)$$

其中的 $\mathbf{W}_{xr}, \mathbf{W}_{xz} \in \mathbb{R}^{x \times h}$ 和 $\mathbf{W}_{hr}, \mathbf{W}_{hz} \in \mathbb{R}^{h \times h}$ 是可学习的权重参数, $\mathbf{b}_r, \mathbf{b}_z \in \mathbb{R}^{1 \times h}$ 是可学习的偏移参数。函数 σ 自变量中的三项相加使用了广播。

需要注意的是, 重置门和更新门使用了值域为 $[0, 1]$ 的函数 $\sigma(x) = 1/(1 + \exp(-x))$ 。因此, 重置门 \mathbf{R}_t 和更新门 \mathbf{Z}_t 中每个元素的值域都是 $[0, 1]$ 。

候选隐含状态

我们可以通过元素值域在 $[0, 1]$ 的更新门和重置门来控制隐含状态中信息的流动: 这通常可以应用按元素乘法符 \odot 。门控循环单元中的候选隐含状态 $\tilde{\mathbf{H}}_t \in \mathbb{R}^{n \times h}$ 使用了值域在 $[-1, 1]$ 的双曲正切函数 \tanh 做激活函数:

$$\tilde{\mathbf{H}}_t = \tanh(\mathbf{X}_t \mathbf{W}_{xh} + \mathbf{R}_t \odot \mathbf{H}_{t-1} \mathbf{W}_{hh} + \mathbf{b}_h)$$

其中的 $\mathbf{W}_{xh} \in \mathbb{R}^{x \times h}$ 和 $\mathbf{W}_{hh} \in \mathbb{R}^{h \times h}$ 是可学习的权重参数, $\mathbf{b}_h \in \mathbb{R}^{1 \times h}$ 是可学习的偏移参数。

需要注意的是, 候选隐含状态使用了重置门来控制包含过去时刻信息的上一个隐含状态的流入。如果重置门近似 0, 上一个隐含状态将被丢弃。因此, 重置门提供了丢弃与未来无关的过去隐含状态的机制。

隐含状态

隐含状态 $\mathbf{H}_t \in \mathbb{R}^{n \times h}$ 的计算使用更新门 \mathbf{Z}_t 来对上一时刻的隐含状态 \mathbf{H}_{t-1} 和当前时刻的候选隐含状态 $\tilde{\mathbf{H}}_t$ 做组合, 公式如下:

$$\mathbf{H}_t = \mathbf{Z}_t \odot \mathbf{H}_{t-1} + (1 - \mathbf{Z}_t) \odot \tilde{\mathbf{H}}_t$$

需要注意的是, 更新门可以控制过去的隐含状态在当前时刻的重要性。如果更新门一直近似 1, 过去的隐含状态将一直通过时间保存并传递至当前时刻。这个设计可以应对循环神经网络中的梯度衰减问题, 并更好地捕捉时序数据中间隔较大的依赖关系。

我们对门控循环单元的设计稍作总结:

- 重置门有助于捕捉时序数据中短期的依赖关系。
- 更新门有助于捕捉时序数据中长期的依赖关系。

输出层的设计可参照循环神经网络中的描述。

6.3.2 实验

为了实现并展示门控循环单元，我们依然使用周杰伦歌词数据集来训练模型作词。这里除门控循环单元以外的实现已在循环神经网络中介绍。

数据处理

我们先读取并对数据集做简单处理。

```
In [1]: import zipfile
        with zipfile.ZipFile('../data/jaychou_lyrics.txt.zip', 'r') as zin:
            zin.extractall('../data/')

        with open('../data/jaychou_lyrics.txt') as f:
            corpus_chars = f.read()

        corpus_chars = corpus_chars.replace('\n', ' ').replace('\r', ' ')
        corpus_chars = corpus_chars[0:20000]

        idx_to_char = list(set(corpus_chars))
        char_to_idx = dict([(char, i) for i, char in enumerate(idx_to_char)])
        corpus_indices = [char_to_idx[char] for char in corpus_chars]

        vocab_size = len(char_to_idx)
        print('vocab size:', vocab_size)

vocab size: 1465
```

我们使用 onehot 来将字符索引表示成向量。

```
In [2]: def get_inputs(data):
        return [nd.one_hot(X, vocab_size) for X in data.T]
```

初始化模型参数

以下部分对模型参数进行初始化。参数 `hidden_dim` 定义了隐含状态的长度。

```
In [3]: import mxnet as mx
```

```
# 尝试使用 GPU
import sys
sys.path.append('..')
from mxnet import nd
import utils
ctx = utils.try_gpu()
print('Will use', ctx)

input_dim = vocab_size
# 隐含状态长度
hidden_dim = 256
output_dim = vocab_size
std = .01

def get_params():
    # 隐含层
    W_xz = nd.random_normal(scale=std, shape=(input_dim, hidden_dim), ctx=ctx)
    W_hz = nd.random_normal(scale=std, shape=(hidden_dim, hidden_dim),
    ← ctx=ctx)
    b_z = nd.zeros(hidden_dim, ctx=ctx)

    W_xr = nd.random_normal(scale=std, shape=(input_dim, hidden_dim), ctx=ctx)
    W_hr = nd.random_normal(scale=std, shape=(hidden_dim, hidden_dim),
    ← ctx=ctx)
    b_r = nd.zeros(hidden_dim, ctx=ctx)

    W_xh = nd.random_normal(scale=std, shape=(input_dim, hidden_dim), ctx=ctx)
    W_hh = nd.random_normal(scale=std, shape=(hidden_dim, hidden_dim),
    ← ctx=ctx)
    b_h = nd.zeros(hidden_dim, ctx=ctx)

    # 输出层
    W_hy = nd.random_normal(scale=std, shape=(hidden_dim, output_dim),
    ← ctx=ctx)
    b_y = nd.zeros(output_dim, ctx=ctx)

    params = [W_xz, W_hz, b_z, W_xr, W_hr, b_r, W_xh, W_hh, b_h, W_hy, b_y]
    for param in params:
        param.attach_grad()
    return params

Will use gpu(0)
```

6.3.3 定义模型

我们将前面的模型公式翻译成代码。

```
In [4]: def gru_rnn(inputs, H, *params):
    # inputs: num_steps 个尺寸为 batch_size * vocab_size 矩阵
    # H: 尺寸为 batch_size * hidden_dim 矩阵
    # outputs: num_steps 个尺寸为 batch_size * vocab_size 矩阵
    W_xz, W_hz, b_z, W_xr, W_hr, b_r, W_xh, W_hh, b_h, W_hy, b_y = params
    outputs = []
    for X in inputs:
        Z = nd.sigmoid(nd.dot(X, W_xz) + nd.dot(H, W_hz) + b_z)
        R = nd.sigmoid(nd.dot(X, W_xr) + nd.dot(H, W_hr) + b_r)
        H_tilda = nd.tanh(nd.dot(X, W_xh) + R * nd.dot(H, W_hh) + b_h)
        H = Z * H + (1 - Z) * H_tilda
        Y = nd.dot(H, W_hy) + b_y
        outputs.append(Y)
    return (outputs, H)
```

训练模型

下面我们开始训练模型。我们假定谱写歌词的前缀分别为“分开”、“不分开”和“战争中部队”。这里采用的是相邻批量采样实验门控循环单元谱写歌词。

```
In [5]: seq1 = '分开'
seq2 = '不分开'
seq3 = '战争中部队'
seqs = [seq1, seq2, seq3]

utils.train_and_predict_rnn(rnn=gru_rnn, is_random_iter=False, epochs=200,
                            num_steps=35, hidden_dim=hidden_dim,
                            learning_rate=0.2, clipping_norm=5,
                            batch_size=32, pred_period=20, pred_len=100,
                            seqs=seqs, get_params=get_params,
                            get_inputs=get_inputs, ctx=ctx,
                            corpus_indices=corpus_indices,
                            idx_to_char=idx_to_char, char_to_idx=char_to_idx)
```

Epoch 20. Training perplexity 273.762569

- 分开 我的我的我的我的我的我的我的我的我的我的我的我的我的我的我的我的我」
- ↳ 的我的我的我的我的我的我的我的我的我的我的我的我的我的我的我的我的我」
- ↳ 的我的我的我
- 不分开 我的我的我的我的我的我的我的我的我的我的我的我的我的我的我的我的我的我的我的我」
- ↳ 我的我的我的我的我的我的我的我的我的我的我的我的我的我的我的我的我的我的我」
- ↳ 我的我的我的我

- 战争中部队 我不的我的我的我的我的我的我的我的我的我的我的我的我的我的我的我的我的
→ 我的
→ 我的我的我的我的我

Epoch 40. Training perplexity 106.949484

- 分开 我想想这样 我不要 别兽人 的灵魂 的灵魂 的灵魂 的灵魂 的灵魂 的灵魂 的灵魂 的灵魂
→ 的灵魂
- 不分开 我想要你想你 我不要我想你 我不要我想你 我不要我想你 我不要我想你 我不要我想你
→ 我不要我想你 我不要我想你 我不要我想你 我不要我想你 我不要我想你 我不要我想你 我不要我想你
→ 我不要我想你 我不
- 战争中部队 我想要你想你 我不要我想你 我不要我想你 我不要我想你 我不要我想你 我不要我想你
→ 我不要我想你 我不要我想你 我不要我想你 我不要我想你 我不要我想你 我不要我想你 我不要我想你
→ 我不要我想你 我不

Epoch 60. Training perplexity 29.096720

- 分开 不是你的爱你在西元 我想想你的爱写在西元 坏坏的让我疯狂的可爱女人 坏坏的让我疯狂的可爱女人
→ 坏坏的让我疯狂的可爱女人 坏坏的让我疯狂的可爱女人 坏坏的让我疯狂的可爱女人
→ 坏坏的让我疯狂的可爱女人 坏
- 不分开不来 我不能再想你的天爱美 我坏的让我疯狂的可爱女人 坏坏的让我疯狂的可爱女人
→ 坏坏的让我疯狂的可爱女人 坏坏的让我疯狂的可爱女人 坏坏的让我疯狂的可爱女人
→ 坏坏的让我疯狂的可爱女人 坏坏的让我疯狂的可
- 战争中部队 当时的手 你只会感到更加沮丧) (难道这不是我要的天堂景象 沉坏的让我疯狂的可爱女人
→ 坏坏的让我疯狂的可爱女人 坏坏的让我疯狂的可爱女人 坏坏的让我疯狂的可爱女人
→ 坏坏的让我疯狂的可爱女人 坏坏的让我

Epoch 80. Training perplexity 7.918239

- 分开了没为就这样 我给你的爱写在西元前 深埋的让我疯狂的可爱女人 坏坏的让我疯狂的可爱女人
→ 坏坏的让我疯狂的可爱女人 坏坏的让我疯狂的可爱女人 坏坏的让我疯狂的可爱女人
→ 坏坏的让我疯狂的可爱女人 坏坏的让我
- 不分开了你的手 放不 过不能 一壶两三三步四步望著天 看星星 一颗两颗三颗四颗 连成线背著背默默默
→ 等著我 别怪人 的灵魂 单纯 停远忿恨 永无止尽的战争 让我们 半兽人 的灵魂 单纯 停远忿恨
→ 永无止尽的战
- 战争中部队堂痛 他不知不来 再不多逃 说你没人难过 一直在停留 不知不觉 你已经球不球 一身正气
→ 快使用双截棍 哼哼哈兮 快使用双截棍 哼哼哈兮 快使用双截棍 哼哼哈兮 快使用双截棍 哼哼哈兮
→ 快使用双截棍 哼哼

Epoch 100. Training perplexity 2.997757

- 分开了没为就这样 (过了这样天 我拉天起典 小化的钥匙孔 我会学着二 你知在抽虚 又不该掩 走过了一个秋
→ 后知不觉 你已经我妈睡到过去 我想就这样牵着你的手不放开 爱能不能够 你以着我 说你怎么面对我 甩开
- 不分开了你 趁时间来的国面 这次会抱得更紧 这样挽没有你离我 不要好好 我的手 是甘常
→ 我想了这样牵着你的手不放开 爱可不可以简简单单没有伤害 你 靠着我的肩膀 你 在我胸口睡著
→ 像这样的生活 我爱你 你爱我
- 战争中部队止) 他不知道风 试着一句热静静了望 她在床 一颗两步三步四步望著天 看星星
→ 一颗两颗三颗四颗 连成线背著背默默许下心愿 看远方的星是否听的见 手牵手 一步两步三步四步望著天
→ 看星星 一颗两颗三颗四颗

Epoch 120. Training perplexity 1.616535

- 分开了没意 这时间没有违你 而持时间的画面 不会骑扫把的胖女巫 用录丁文念咒语啦啦呜
- 她养的黑猫笑起来像像 啦啦啦呜 用水晶球替人占卜 她说下午三点阳光射进教堂的角度
- 能知道你前世是狼人还是蝙蝠 古堡 在吸
- 不分开了你 趁影慢来的将过 天空从蒙蒙的胖女巫 我有一步一步往上爬 等待阳光静静看着它的脸
- 小小的天有大大的梦想 我有手于一天 等记记 地 他一种美梦的茶色摊 寻轮千年的风沙 现在还在刮
- (千年一直晃到现在)
- 战争中部队 他真的真的想知道 那首来自东欧的民谣 和弦到底什么调 米兰的天空刚破晓 (寻马碲铁还要敲多少吉他才能买得到) 他真的真的想知道 (他不知道怎么办才好 睡不着) 他来的钥后包围了不够
- (暗了没知道 你)

Epoch 140. Training perplexity 1.206261

- 分开不好 我真的黑色每著份 也许太没有爱你的人空 想要有一种机慢上的甜萨琳法就外外 消失共 周杰伦
- siu xi xi xi la xi la xi la si xi la xi la si xi la x
- 不分开了你只会要走 杵在伊斯坦堡 却只想你和汉堡 我想要你的微笑每天都能看到
- 我知道这里很美但家乡的你更美原来我只想要你 陪我去吃汉堡 说穿了其实我的愿望就怎么小
- 就怎么每天祈祷我的心跳你知道 杵在伊
- 战争中部队操带 他不知道过 试着抱著在峰空 羞静的脸带有一点稚气 想看你看的世界 想在你梦的画面
- 只要靠在一起就能感觉甜蜜 想回到过去 试着让故事继续 至少不再让你离我而去 分散时间的注意
- 这次会抱得更紧 这样挽

Epoch 160. Training perplexity 1.091076

- 分开了注命 放时在旁险里缘B垦 为啥咪铁支路直走 火车叨位去 为啥咪铁支路直直 火车叨位去
- 为啥咪铁支路直直 火车叨位去 车过山洞变成 暗暝 车过山洞变成 暗暝 但是连咪都ㄟ 但是连咪都ㄟ
- 过去按怎你走那个
- 不分开了 把手不能解得 他在已经梦里不想 我真的话 每天了明 是你想很得泪 想知道觉担 还知不觉
- 我不好受生 我不要 想要有这样豫 怎么这样子 雨还没停你就撑伞要走 已经习惯不去阻止你
- 过好一阵子你就会回来
- 战争中部队 (街角的消防栓上的红色油漆 反射出儿时天真的嬉戏模样) 被期待 被覆盖 蜕变的公式我学不来
- (难道这不是我要的天堂景象 沉沦假象 你只会感到更加沮丧) (难道这不是我要的天堂景象 沉沦假象)
- 你只会感到

Epoch 180. Training perplexity 1.055951

- 分开不多 我不能再想 我不 我不 我不要再想你 爱情来的太快就像龙卷风 离不开暴风圈来不及逃
- 我不能再想 我不能再想 我不 我不 我不能 爱情走的太快就像龙卷风 不能承受我已无处可躲 我不要再想
- 我不要再想
- 不分开就走 把手慢慢交给我 放下心中的困惑 雨点从两旁划过 割开两种精神的我 经过老伯的家
- 篮框变得好高 爬过的那棵树 又何时变得渺小 这样也好 开始没人注意到我 等雨变强之前 我们将会分化软弱
- 趁时间没发觉
- 战争中部队操恼 他在橱老河千 腿短毛不多 几天都没有喝水也能活 脑袋瓜有一点秀逗 猎物死了它比谁都难过
- 印地安斑鸠 会学人开口 仙人掌怕羞 蜥蜴横著走 这里什么奇怪的事都有 包括像猫的狗 印地安老斑鸠
- 平常话不多

Epoch 200. Training perplexity 1.044000

- 分开不想你的身影 是雨散的欢乐有像褪生上没多可生) 我要你慢的世界的香前 深埋在美索不达米亚平原
- 用楔形文字刻下了永远 那已风化千年的誓言 一切又重演 我感到很疲倦离家乡还是很远
- 害怕再也不能回到你身边 我
- 不分开就走 把手慢慢交给我 放下心中的困惑 雨点从两旁划过 割开两种精神的我 经过老伯的家
- 篮框变得好高 爬过的那棵树 又何时变得渺小 这样也好 开始没人注意到我 等雨变强之前 我们将会分化软弱
- 趁时间没发觉
- 战争中部队操恼 他在桐老河干的民 随著情旁的旁生 这时变得得高 爬过的那棵树 又何时变得渺小 这样也好
- 开始没人注意到我 等雨变强之前 我们将会分化软弱 趁时间没发觉 让我带着你离开 没有了证明 没有了空虚
- 基于

可以看到一开始学到简单的字符，然后简单的词，接着是复杂点的词，然后看上去似乎像个句子了。

6.3.4 结论

- 门控循环单元的提出是为了更好地捕捉时序数据中间隔较大的依赖关系。
- 重置门有助于捕捉时序数据中短期的依赖关系。
- 更新门有助于捕捉时序数据中长期的依赖关系。

6.3.5 练习

- 调调参数(例如数据集大小、序列长度、隐含状态长度和学习率)，看看对运行时间、perplexity 和预测的结果造成的影响。
- 在相同条件下，比较门控循环单元和循环神经网络的运行效率。

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

6.4 长短期记忆 (LSTM) — 从 0 开始

上一节中，我们介绍了循环神经网络中的梯度计算方法。我们发现，循环神经网络的隐含层变量梯度可能会出现衰减或爆炸。虽然梯度裁剪可以应对梯度爆炸，但无法解决梯度衰减的问题。因此，给定一个时间序列，例如文本序列，循环神经网络在实际中其实较难捕捉两个时刻距离较大的文本元素（字或词）之间的依赖关系。

为了更好地捕捉时序数据中间隔较大的依赖关系，我们介绍了一种常用的门控循环神经网络，叫做门控循环单元。本节将介绍另一种常用的门控循环神经网络，长短期记忆 (long short-term memory, 简称 LSTM)。它由 Hochreiter 和 Schmidhuber 在 1997 年被提出。事实上，它比门控循环单元的结构稍微更复杂一点。

6.4.1 长短期记忆

我们先介绍长短期记忆的构造。长短期记忆的隐含状态包括隐含层变量 \mathbf{H} 和细胞 \mathbf{C} (也称记忆细胞)。它们形状相同。

输入门、遗忘门和输出门

假定隐含状态长度为 h , 给定时刻 t 的一个样本数为 n 特征向量维度为 x 的批量数据 $\mathbf{X}_t \in \mathbb{R}^{n \times x}$ 和上一时刻隐含状态 $\mathbf{H}_{t-1} \in \mathbb{R}^{n \times h}$, 输入门 (input gate) $\mathbf{I}_t \in \mathbb{R}^{n \times h}$ 、遗忘门 (forget gate) $\mathbf{F}_t \in \mathbb{R}^{n \times h}$ 和输出门 (output gate) $\mathbf{O}_t \in \mathbb{R}^{n \times h}$ 的定义如下:

$$\mathbf{I}_t = \sigma(\mathbf{X}_t \mathbf{W}_{xi} + \mathbf{H}_{t-1} \mathbf{W}_{hi} + \mathbf{b}_i)$$

$$\mathbf{F}_t = \sigma(\mathbf{X}_t \mathbf{W}_{xf} + \mathbf{H}_{t-1} \mathbf{W}_{hf} + \mathbf{b}_f)$$

$$\mathbf{O}_t = \sigma(\mathbf{X}_t \mathbf{W}_{xo} + \mathbf{H}_{t-1} \mathbf{W}_{ho} + \mathbf{b}_o)$$

其中的 $\mathbf{W}_{xi}, \mathbf{W}_{xf}, \mathbf{W}_{xo} \in \mathbb{R}^{x \times h}$ 和 $\mathbf{W}_{hi}, \mathbf{W}_{hf}, \mathbf{W}_{ho} \in \mathbb{R}^{h \times h}$ 是可学习的权重参数, $\mathbf{b}_i, \mathbf{b}_f, \mathbf{b}_o \in \mathbb{R}^{1 \times h}$ 是可学习的偏移参数。函数 σ 自变量中的三项相加使用了广播。

和门控循环单元中的重置门和更新门一样, 这里的输入门、遗忘门和输出门中每个元素的值域都是 $[0, 1]$ 。

候选细胞

和门控循环单元中的候选隐含状态一样, 长短期记忆中的候选细胞 $\tilde{\mathbf{C}}_t \in \mathbb{R}^{n \times h}$ 也使用了值域在 $[-1, 1]$ 的双曲正切函数 \tanh 做激活函数:

$$\tilde{\mathbf{C}}_t = \tanh(\mathbf{X}_t \mathbf{W}_{xc} + \mathbf{H}_{t-1} \mathbf{W}_{hc} + \mathbf{b}_c)$$

其中的 $\mathbf{W}_{xc} \in \mathbb{R}^{x \times h}$ 和 $\mathbf{W}_{hc} \in \mathbb{R}^{h \times h}$ 是可学习的权重参数, $\mathbf{b}_c \in \mathbb{R}^{1 \times h}$ 是可学习的偏移参数。

细胞

我们可以通过元素值域在 $[0, 1]$ 的输入门、遗忘门和输出门来控制隐含状态中信息的流动: 这通常可以应用按元素乘法符 \odot 。当前时刻细胞 $\mathbf{C}_t \in \mathbb{R}^{n \times h}$ 的计算组合了上一时刻细胞和当前时刻候选细胞的信息, 并通过遗忘门和输入门来控制信息的流动:

$$\mathbf{C}_t = \mathbf{F}_t \odot \mathbf{C}_{t-1} + \mathbf{I}_t \odot \tilde{\mathbf{C}}_t$$

需要注意的是, 如果遗忘门一直近似 1 且输入门一直近似 0, 过去的细胞将一直通过时间保存并传递至当前时刻。这个设计可以应对循环神经网络中的梯度衰减问题, 并更好地捕捉时序数据中间隔较大的依赖关系。

隐含状态

有了细胞以后，接下来我们还可以通过输出门来控制从细胞到隐含层变量 $\mathbf{H}_t \in \mathbb{R}^{n \times h}$ 的信息的流动：

$$\mathbf{H}_t = \mathbf{O}_t \odot \tanh(\mathbf{C}_t)$$

需要注意的是，当输出门近似 1，细胞信息将传递到隐含层变量；当输出门近似 0，细胞信息只自己保留。

输出层的设计可参照循环神经网络中的描述。

6.4.2 实验

为了实现并展示门控循环单元，我们依然使用周杰伦歌词数据集来训练模型作词。这里除长短期记忆以外的实现已在[循环神经网络](#)中介绍。

数据处理

我们先读取并对数据集做简单处理。

```
In [1]: import zipfile
        with zipfile.ZipFile('../data/jaychou_lyrics.txt.zip', 'r') as zin:
            zin.extractall('../data/')

        with open('../data/jaychou_lyrics.txt') as f:
            corpus_chars = f.read()

        corpus_chars = corpus_chars.replace('\n', ' ').replace('\r', ' ')
        corpus_chars = corpus_chars[0:20000]

        idx_to_char = list(set(corpus_chars))
        char_to_idx = dict([(char, i) for i, char in enumerate(idx_to_char)])
        corpus_indices = [char_to_idx[char] for char in corpus_chars]

        vocab_size = len(char_to_idx)
        print('vocab size:', vocab_size)

vocab size: 1465
```

我们使用 onehot 来将字符索引表示成向量。

```
In [2]: def get_inputs(data):
        return [nd.one_hot(X, vocab_size) for X in data.T]
```

初始化模型参数

以下部分对模型参数进行初始化。参数 `hidden_dim` 定义了隐含状态的长度。

In [3]: `import mxnet as mx`

```

# 尝试使用 GPU
import sys
sys.path.append('..')
from mxnet import nd
import utils
ctx = utils.try_gpu()
print('Will use', ctx)

input_dim = vocab_size
# 隐含状态长度
hidden_dim = 256
output_dim = vocab_size
std = .01

def get_params():
    # 输入门参数
    W_xi = nd.random_normal(scale=std, shape=(input_dim, hidden_dim), ctx=ctx)
    W_hi = nd.random_normal(scale=std, shape=(hidden_dim, hidden_dim),
    ↵ ctx=ctx)
    b_i = nd.zeros(hidden_dim, ctx=ctx)

    # 遗忘门参数
    W_xf = nd.random_normal(scale=std, shape=(input_dim, hidden_dim), ctx=ctx)
    W_hf = nd.random_normal(scale=std, shape=(hidden_dim, hidden_dim),
    ↵ ctx=ctx)
    b_f = nd.zeros(hidden_dim, ctx=ctx)

    # 输出门参数
    W_xo = nd.random_normal(scale=std, shape=(input_dim, hidden_dim), ctx=ctx)
    W_ho = nd.random_normal(scale=std, shape=(hidden_dim, hidden_dim),
    ↵ ctx=ctx)
    b_o = nd.zeros(hidden_dim, ctx=ctx)

    # 候选细胞参数
    W_xc = nd.random_normal(scale=std, shape=(input_dim, hidden_dim), ctx=ctx)
    W_hc = nd.random_normal(scale=std, shape=(hidden_dim, hidden_dim),
    ↵ ctx=ctx)
    b_c = nd.zeros(hidden_dim, ctx=ctx)
```

```
# 输出层
W_hy = nd.random_normal(scale=std, shape=(hidden_dim, output_dim),
→ ctx=ctx)
b_y = nd.zeros(output_dim, ctx=ctx)

params = [W_xi, W_hi, b_i, W_xf, W_hf, b_f, W_xo, W_ho, b_o, W_xc, W_hc,
          b_c, W_hy, b_y]
for param in params:
    param.attach_grad()
return params

Will use gpu(0)
```

6.4.3 定义模型

我们将前面的模型公式翻译成代码。

```
In [4]: def lstm_rnn(inputs, state_h, state_c, *params):
    # inputs: num_steps 个尺寸为 batch_size * vocab_size 矩阵
    # H: 尺寸为 batch_size * hidden_dim 矩阵
    # outputs: num_steps 个尺寸为 batch_size * vocab_size 矩阵
    [W_xi, W_hi, b_i, W_xf, W_hf, b_f, W_xo, W_ho, b_o, W_xc, W_hc, b_c,
     W_hy, b_y] = params

    H = state_h
    C = state_c
    outputs = []
    for X in inputs:
        I = nd.sigmoid(nd.dot(X, W_xi) + nd.dot(H, W_hi) + b_i)
        F = nd.sigmoid(nd.dot(X, W_xf) + nd.dot(H, W_hf) + b_f)
        O = nd.sigmoid(nd.dot(X, W_xo) + nd.dot(H, W_ho) + b_o)
        C_tilda = nd.tanh(nd.dot(X, W_xc) + nd.dot(H, W_hc) + b_c)
        C = F * C + I * C_tilda
        H = O * nd.tanh(C)
        Y = nd.dot(H, W_hy) + b_y
        outputs.append(Y)
    return (outputs, H, C)
```

训练模型

下面我们开始训练模型。我们假定谱写歌词的前缀分别为“分开”、“不分开”和“战争中部队”。这里采用的是相邻批量采样实验门控循环单元谱写歌词。

```
In [5]: seq1 = '分开'
seq2 = '不分开'
```

```

seq3 = '战争中部队'
seqs = [seq1, seq2, seq3]

utils.train_and_predict_rnn(rnn=lstm_rnn, is_random_iter=False, epochs=200,
                            num_steps=35, hidden_dim=hidden_dim,
                            learning_rate=0.2, clipping_norm=5,
                            batch_size=32, pred_period=20, pred_len=100,
                            seqs=seqs, get_params=get_params,
                            get_inputs=get_inputs, ctx=ctx,
                            corpus_indices=corpus_indices,
                            idx_to_char=idx_to_char, char_to_idx=char_to_idx,
                            is_lstm=True)

```

Epoch 20. Training perplexity 321.340498

- 分开 我我的
→ 我我的 我我的
- 不分开 我我的
→ 我我的 我我的
- 战争中部队 我我的
→ 我我的 我我的

Epoch 40. Training perplexity 179.520293

- 分开 我想的让我的可爱 我想的让我不要 我不不你 我不不 我不的我 我不的你 我不的我 我不的我
→ 我不的我
→ 我不的我
- 不分开 我想的让我不的可爱女人 我想的让我不想的可爱女人 我想的让我不想的可爱女人
→ 我想的让我不想的可爱女人 我想的让我不想的可爱女人 我想的让我不想的可爱女人
→ 我想的让我不想的可爱女人 我想的让我不想的可爱
- 战争中部队 我想的让我不的可爱女人 我想的让我不想的可爱女人 我想的让我不想的可爱女人
→ 我想的让我不想的可爱女人 我想的让我不想的可爱女人 我想的让我不想的可爱女人
→ 我想的让我不想的可爱女人 我想的让我不想的可爱

Epoch 60. Training perplexity 73.351649

- 分开 我想你的想你 我不要这你 我不要这你 我不要 你不我 我不要 我不要 我不要 我不要 我不要
→ 我不要 我
- 不分开 我不要的爱你 我不要这你 我不要这你 我不要 你不我 我不要 我不要 我不要 我不要 我不要
→ 我不要 我不要
- 战争中部队 我不着你的天 我想要你 你不我 我不要 我不要 我不要 我不要 我不要 我不要 我不要
→ 我不要 我不要

Epoch 80. Training perplexity 27.964503

- 分开 你在我的爱你 快什么(不么我 是我的我 爱你我 想不 是是的是笑的我说你 爱你不开 我不能再想想
→ 我不能爱你 爱不是我不想 我不要 我不 我不能 爱情走的太快就像像卷卷不能开 我不能可想 我不能
- 不分开过 我想要这 你已开 我不能这样着你的手爱你爱开 爱不能爱我 让我想再想 我不能再想
→ 我不能再想 我不能再爱你 我不能着你 我不能再爱你 我不不着你离开 不知不觉 我想了好节活 后知后觉
→ 我不好好生活

- 战争中部队 我想像一张蜂找 你在你那一天 我 那着我的爱人 我想能的爱爱人 我已能着你的是 我知能好开
→ 我不能再爱 我不能再爱 我不能再爱 我不能再爱 我不能再爱 我不能再爱 我不能再爱
→ 我不能再爱

Epoch 100. Training perplexity 11.102330

- 分开 你那那在太堡 干你会(又果了双截 一直哈兮 我们了你 将小的美匙 不是我动了我 因为我太爱你
→ 是什么我太爱你 是因为我 你爱我 说不怎么单留 一直在我留留 让你在 一直人 的灵魂 翻滚 停i
- 不分开过 为什么我连爱你 一直个人太堡的雨 想要着你的兽 在在在人的太 我想你看想开的天 这样
→ 我想眼你 想人有对旧 单在在美落 我们不将你 在人的美滴 又了了看着 三天的人客人 我的你 半兽人
→ 的灵魂
- 战争中部队 我右ㄟ全然龙没讯息 我亲像一只蜂找没蜜 将过去 马撕到何时才有你ㄟ字 这日历 马撕到何时
→ 有一壶很旧 回一天在落落 它在我们走 你在没人不够 又静的客栈 我们能将将 没有你太太 干你在我
→ 说你有人个

Epoch 120. Training perplexity 5.382703

- 分开 你那那 梦打我 学你心种的黑堡 我会店小二的小 没想你那我的双 什么我连分你 却因 我想人睡吧
→ 这样 你想很久了吧 放抹 你想很久 你去 你迷我很了吧? 我说不想想痛 是我们你分你 单什么我太
- 不分开过去 我想慢慢 你的手在 我想 这样再我倒我 一散球觉你太过 让我们 半兽人 的灵魂 翻滚 停起
→ 停止 停a xa xa xa xi x
- 战争中部队就看的脸画 经过的风 在吹的公头 一头头 它蟑的战隐 一种在苦旧 一人放美走 我里会 分场
→ 什么 是纯么对起对永 只想 ㄌㄚ ㄩ ㄅㄨ ㄤ ㄧ ㄭ 止写写 火车叨尽去 让我们 风景我 是思了风 唱不止

Epoch 140. Training perplexity 3.138866

- 分开 这样是没妈的背找 却吹着我想著一定味手 我要你爱爱不想 你要我梦 你对我有难球 这样的没生我
→ 快你了我说见 回场帮渐你走 开你还球球球 他的天板的太你 像谁的我有多得 我 在直人到陪你我 别散抖
- 不分开过去 我要慢慢都堡 开着你是你离到 我有 不想 你想 这么 我不要 你在我 让你不的太活 没知了
→ 让你的我活活 你说啊觉我的怒乐 我想揍你已经 让你想的不不 你嘟嘟我也爱你是一个为剧 为在我也自简无
- 战争中部队抢 我不要全开了没讯息 我亲像一只蜂找没蜜 我亲像一只蜂找没蜜 将过去一张一张ㄟ撕
→ 将过去一张一张ㄟ撕 这日历 马撕到何时才有你ㄟ字 这日历 马撕到何时才有你ㄟ字 你那全然龙没讯息
→ 你那全然龙没讯息 像

Epoch 160. Training perplexity 2.111115

- 分开 这不来 妈不打 有上不愿 你说多人得 我不能好生 我不好好生活 静静不觉 我已经离开 我不知 我
→ 我了 我想要 这样来的后知知 风不开我 不让我没多 (不啊不怎 让你了你离开 我不要觉走走 为什么
- 不分开去 我怎么慢我对著 为什么没担难就找找来着 不着你陪去 就摇不会 如水他是我比比难来熬熬
→ 我想习逼自己离开不好过你 你 靠在我的肩膀 你那太说说接 他越是心担分不到 我留 你想我陪打要你
→ 我说你 穿
- 战争中部队堂 我不要打开了天 化身为龙 那山河重新移动 填平裂缝 将东方 的日出调整了时空 回到洪荒
→ 去支配去操纵 我右拳打开了天 化身为龙 那大地心新汹涌 不安跳动 全世界 的表情只剩下一种 等待英雄
→ 我就是那

Epoch 180. Training perplexity 1.611008

- 分开 这样了 妈 妈了过写运场 它在在传默 开亮的红球 有何了种的人 有什么过去 这手的手球 又下了苦驳
→ 这不三直球 三种就斗球 三种就斗牛 三对就斗牛 三对就斗牛 三爽就斗牛 三对就斗牛 三爽就斗牛 三对

- 不分开去 就什么没连我 泪一着我会受 他望了传出 你被了球球不到 你也会有相离 我上下地一友
 ↵ 瞎什么(客 我的世脚球摧了 也许颓废也违 累不累 睡不睡 单影无人相依偎 夜越黑 梦违背 有谁肯安慰
 ↵ 我的世界
 - 战争中部队堂 你那ㄟ全然龙没讯息 你那ㄟ全然龙没讯息 我亲像一只蜂找没蜜 我亲像一只蜂找没蜜
 ↵ 将过去一张一张ㄟ撕 将过去一张一张ㄟ撕 这日历 马撕到何时才有你ㄟ字 这日历 马撕到何时才有你ㄟ字
 ↵ 你那全然龙没讯息

Epoch 200. Training perplexity 1.389141

- 分开 这样了 妈妈妈 夹上两种 听说上人变变到 我开下引了路 晒成时间古球 已经着血去 我被你将些瘦
 ↵ 世云悄悄 江脸风空霜寂寞 填落裂怨的将 篮成去 半兽常 的灵魂 翻滚 停止 恨止 xi xi xa x
 - 不分开去 为什么没我给我妈着一直... 所在我们琴的一手一演 我想我的爱爱你 你化不舍 我打我在难口
 ↵ 这样的证后你 快经了我会得得 我 我不能陪你 每这这这样打 唱经歌着一场 我该天着你走开 我想会慢慢走
 - 战争中部队抢 你那ㄟ全然 我那将不字 泪水事沉沉里快快我 在真着中的形秀 随次不得得一片 这样放留
 ↵ 像始河重注意到 我不跳好之之就知道张实 你在大到我只能甜你一边 我轻轻声去 我后能再你 我不 我不
 ↵ 我不要再想

可以看到一开始学到简单的字符，然后简单的词，接着是复杂点的词，然后看上去似乎像个句子了。

6.4.4 结论

- 长短期记忆的提出是为了更好地捕捉时序数据中间隔较大的依赖关系。
- 长短期记忆的结构比门控循环单元的结构较复杂。

6.4.5 练习

- 调调参数(例如数据集大小、序列长度、隐含状态长度和学习率)，看看对运行时间、perplexity 和预测的结果造成的影响。
- 在相同条件下，比较长短期记忆和门控循环单元以及循环神经网络的运行效率。

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

6.5 循环神经网络—使用 Gluon

本节介绍如何使用 Gluon 训练循环神经网络。

6.5.1 Penn Tree Bank (PTB) 数据集

我们以单词为基本元素来训练语言模型。Penn Tree Bank (PTB) 是一个标准的文本序列数据集。它包括训练集、验证集和测试集。

下面我们载入数据集。

```
In [1]: import math
import os
import time
import numpy as np
import mxnet as mx
from mxnet import gluon, autograd
from mxnet.gluon import nn, rnn

import zipfile
with zipfile.ZipFile('../data/ptb.zip', 'r') as zin:
    zin.extractall('../data/')
```

6.5.2 建立词语索引

下面定义了 `Dictionary` 类来映射词语和索引。

```
In [2]: class Dictionary(object):
    def __init__(self):
        self.word_to_idx = {}
        self.idx_to_word = []

    def add_word(self, word):
        if word not in self.word_to_idx:
            self.idx_to_word.append(word)
            self.word_to_idx[word] = len(self.idx_to_word) - 1
        return self.word_to_idx[word]

    def __len__(self):
        return len(self.idx_to_word)
```

以下的 `Corpus` 类按照读取的文本数据集建立映射词语和索引的词典，并将文本转换成词语索引的序列。这样，每个文本数据集就变成了 `NDArray` 格式的整数序列。

```
In [3]: class Corpus(object):
    def __init__(self, path):
        self.dictionary = Dictionary()
        self.train = self.tokenize(path + 'train.txt')
        self.valid = self.tokenize(path + 'valid.txt')
        self.test = self.tokenize(path + 'test.txt')
```

```

def tokenize(self, path):
    assert os.path.exists(path)
    # 将词语添加至词典。
    with open(path, 'r') as f:
        tokens = 0
        for line in f:
            words = line.split() + ['<eos>']
            tokens += len(words)
            for word in words:
                self.dictionary.add_word(word)
    # 将文本转换成词语索引的序列 (NDArray 格式)。
    with open(path, 'r') as f:
        indices = np.zeros((tokens,), dtype='int32')
        idx = 0
        for line in f:
            words = line.split() + ['<eos>']
            for word in words:
                indices[idx] = self.dictionary.word_to_idx[word]
                idx += 1
    return mx.nd.array(indices, dtype='int32')

```

看一下词典的大小。

```

In [4]: data = '../data/ptb/ptb.'
corpus = Corpus(data)
vocab_size = len(corpus.dictionary)
vocab_size

```

Out[4]: 10000

6.5.3 循环神经网络模型库

我们可以定义一个循环神经网络模型库。这样就可以支持各种不同的循环神经网络模型了。

```

In [5]: class RNNModel(gluon.Block):
    """ 循环神经网络模型库 """
    def __init__(self, mode, vocab_size, embed_dim, hidden_dim,
                num_layers, dropout=0.5, **kwargs):
        super(RNNModel, self). __init__(**kwargs)
        with self.name_scope():
            self.drop = nn.Dropout(dropout)
            self.encoder = nn.Embedding(vocab_size, embed_dim,

```

↳ weight_initializer=mx.init.Uniform(0.1))

if mode == 'rnn_relu':

```

        self.rnn = rnn.RNN(hidden_dim, num_layers, activation='relu',
                           dropout=dropout, input_size=embed_dim)
    elif mode == 'rnn_tanh':
        self.rnn = rnn.RNN(hidden_dim, num_layers, activation='tanh',
                           dropout=dropout, input_size=embed_dim)
    elif mode == 'lstm':
        self.rnn = rnn.LSTM(hidden_dim, num_layers, dropout=dropout,
                           input_size=embed_dim)
    elif mode == 'gru':
        self.rnn = rnn.GRU(hidden_dim, num_layers, dropout=dropout,
                           input_size=embed_dim)
    else:
        raise ValueError("Invalid mode %s. Options are rnn_relu, "
                         "rnn_tanh, lstm, and gru"%mode)

    self.decoder = nn.Dense(vocab_size, in_units=hidden_dim)
    self.hidden_dim = hidden_dim

def forward(self, inputs, state):
    emb = self.drop(self.encoder(inputs))
    output, state = self.rnn(emb, state)
    output = self.drop(output)
    decoded = self.decoder(output.reshape((-1, self.hidden_dim)))
    return decoded, state

def begin_state(self, *args, **kwargs):
    return self.rnn.begin_state(*args, **kwargs)

```

6.5.4 定义参数

我们接着定义模型参数。我们选择使用 ReLU 为激活函数的循环神经网络为例。这里我们把 epochs 设为 1 是为了演示方便。

6.5.5 多层循环神经网络

我们通过 num_layers 设置循环神经网络隐含层的层数，例如 2。

对于一个多层次循环神经网络，当前时刻隐含层的输入来自同一时刻输入层（如果有）或上一隐含层的输出。每一层的隐含状态只沿着同一层传递。

把单层循环神经网络中隐含层的每个单元当做一个函数 f ，这个函数在 t 时刻的输入是 $\mathbf{X}_t, \mathbf{H}_{t-1}$ ，

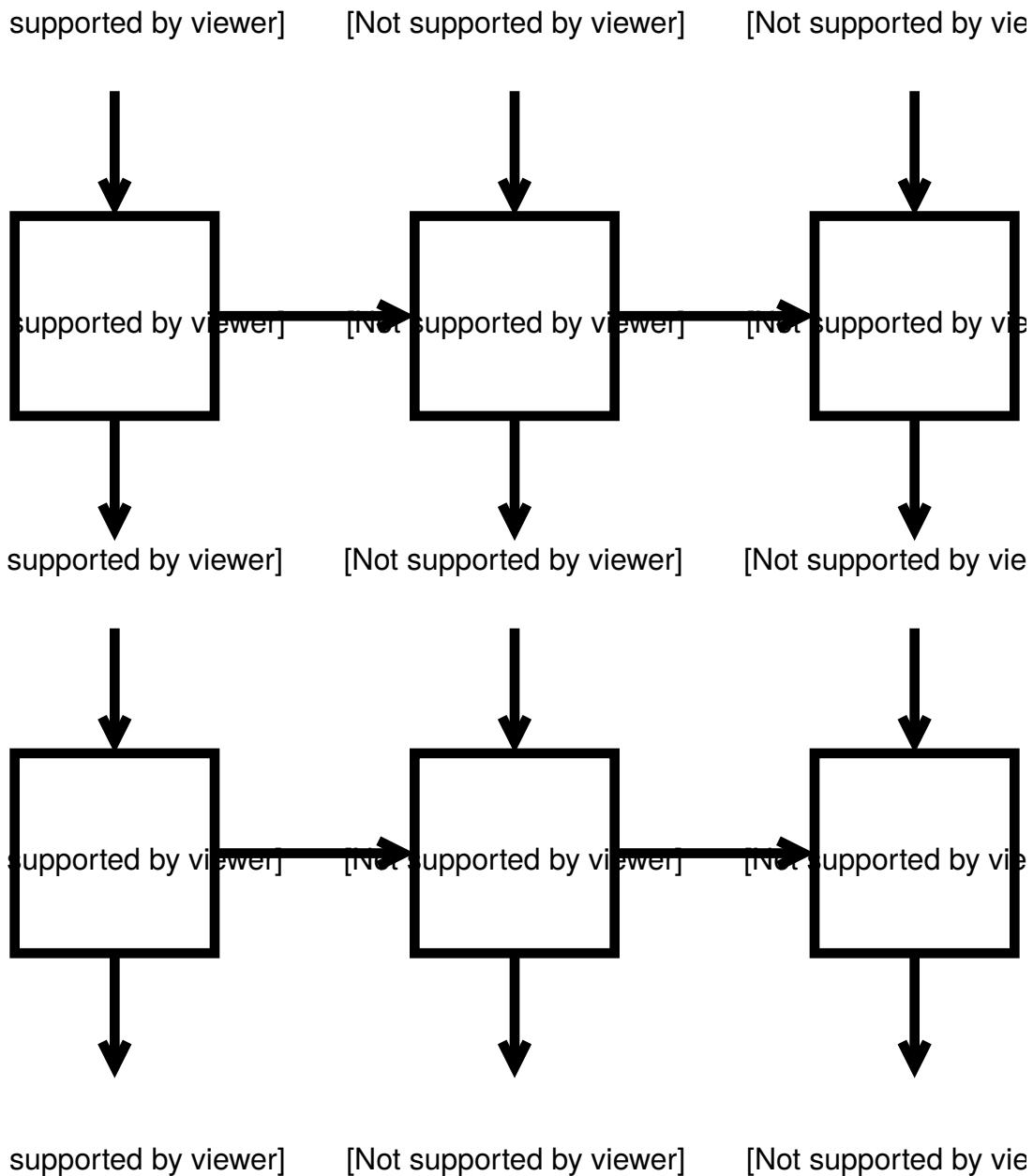
输出是 \mathbf{H}_t :

$$f(\mathbf{X}_t, \mathbf{H}_{t-1}) = \mathbf{H}_t$$

假设输入为第 0 层, 输出为第 $L + 1$ 层, 在一共 L 个隐含层的循环神经网络中, 上式中可以拓展成以下的函数:

$$f(\mathbf{H}_t^{(l-1)}, \mathbf{H}_{t-1}^{(l)}) = \mathbf{H}_t^{(l)}$$

如下图所示。



```
In [6]: model_name = 'rnn_relu'
```

```
embed_dim = 100
hidden_dim = 100
num_layers = 2
lr = 1.0
clipping_norm = 0.2
epochs = 1
batch_size = 32
num_steps = 5
dropout_rate = 0.2
eval_period = 500
```

6.5.6 批量采样

我们将数据进一步处理为便于相邻批量采样的格式。

```
In [7]: # 尝试使用 GPU
```

```
import sys
sys.path.append('..')
import utils
context = utils.try_gpu()

def batchify(data, batch_size):
    """ 数据形状 (num_batches, batch_size) """
    num_batches = data.shape[0] // batch_size
    data = data[:num_batches * batch_size]
    data = data.reshape((batch_size, num_batches)).T
    return data

train_data = batchify(corpus.train, batch_size).as_in_context(context)
val_data = batchify(corpus.valid, batch_size).as_in_context(context)
test_data = batchify(corpus.test, batch_size).as_in_context(context)

model = RNNModel(model_name, vocab_size, embed_dim, hidden_dim,
                  num_layers, dropout_rate)
model.collect_params().initialize(mx.init.Xavier(), ctx=context)
trainer = gluon.Trainer(model.collect_params(), 'sgd',
                        {'learning_rate': lr, 'momentum': 0, 'wd': 0})
loss = gluon.loss.SoftmaxCrossEntropyLoss()

def get_batch(source, i):
    seq_len = min(num_steps, source.shape[0] - 1 - i)
    data = source[i : i + seq_len]
    target = source[i + 1 : i + 1 + seq_len]
```

```
    return data, target.reshape((-1,))
```

6.5.7 从计算图分离隐含状态

在模型训练的每次迭代中，当前批量序列的初始隐含状态来自上一个相邻批量序列的输出隐含状态。为了使模型参数的梯度计算只依赖当前的批量序列，从而减小每次迭代的计算开销，我们可以使用 `detach` 函数来将隐含状态从计算图分离出来。

```
In [8]: def detach(state):
    if isinstance(state, (tuple, list)):
        state = [i.detach() for i in state]
    else:
        state = state.detach()
    return state
```

6.5.8 训练和评价模型

和之前一样，我们定义模型评价函数。

```
In [9]: def model_eval(data_source):
    total_L = 0.0
    ntotal = 0
    hidden = model.begin_state(func = mx.nd.zeros, batch_size = batch_size,
                               ctx=context)
    for i in range(0, data_source.shape[0] - 1, num_steps):
        data, target = get_batch(data_source, i)
        output, hidden = model(data, hidden)
        L = loss(output, target)
        total_L += mx.nd.sum(L).asscalar()
        ntotal += L.size
    return total_L / ntotal
```

最后，我们可以训练模型并在每个 epoch 评价模型在验证集上的结果。我们可以参考验证集上的结果调参。

```
In [10]: def train():
    for epoch in range(epochs):
        total_L = 0.0
        start_time = time.time()
        hidden = model.begin_state(func = mx.nd.zeros, batch_size =
        ↵ batch_size,
                                    ctx = context)
        for ibatch, i in enumerate(range(0, train_data.shape[0] - 1,
        ↵ num_steps)):
```

```

        data, target = get_batch(train_data, i)
        # 从计算图分离隐含状态。
        hidden = detach(hidden)
        with autograd.record():
            output, hidden = model(data, hidden)
            L = loss(output, target)
            L.backward()

        grads = [i.grad(context) for i in
→  model.collect_params().values()]
        # 梯度裁剪。需要注意的是，这里的梯度是整个批量的梯度。
        # 因此我们将 clipping_norm 乘以 num_steps 和 batch_size。
        gluon.utils.clip_global_norm(grads,
                                      clipping_norm * num_steps *
→  batch_size)

        trainer.step(batch_size)
        total_L += mx.nd.sum(L).asscalar()

    if ibatch % eval_period == 0 and ibatch > 0:
        cur_L = total_L / num_steps / batch_size / eval_period
        print('[Epoch %d Batch %d] loss %.2f, perplexity %.2f' %
              epoch + 1, ibatch, cur_L, math.exp(cur_L)))
        total_L = 0.0

    val_L = model_eval(val_data)

    print('[Epoch %d] time cost %.2fs, validation loss %.2f, validation '
          'perplexity %.2f' % (epoch + 1, time.time() - start_time,
→  val_L,
          math.exp(val_L)))

```

训练完模型以后，我们就可以在测试集上评价模型了。

```

In [11]: train()
        test_L = model_eval(test_data)
        print('Test loss %.2f, test perplexity %.2f' % (test_L, math.exp(test_L)))

[Epoch 1 Batch 500] loss 8.01, perplexity 3021.63
[Epoch 1 Batch 1000] loss 6.41, perplexity 610.50
[Epoch 1 Batch 1500] loss 6.21, perplexity 498.75
[Epoch 1 Batch 2000] loss 6.14, perplexity 462.33
[Epoch 1 Batch 2500] loss 6.03, perplexity 414.60
[Epoch 1 Batch 3000] loss 5.92, perplexity 371.34
[Epoch 1 Batch 3500] loss 5.93, perplexity 375.41
[Epoch 1 Batch 4000] loss 5.80, perplexity 331.65
[Epoch 1 Batch 4500] loss 5.79, perplexity 326.34

```

```
[Epoch 1 Batch 5000] loss 5.78, perplexity 323.76
[Epoch 1 Batch 5500] loss 5.79, perplexity 325.67
[Epoch 1] time cost 47.06s, validation loss 5.68, validation perplexity 291.98
Test loss 5.64, test perplexity 282.37
```

6.5.9 结论

- 我们可以使用 Gluon 轻松训练各种不同的循环神经网络，并设置网络参数，例如网络的层数。
- 训练迭代中需要将隐含状态从计算图中分离，使模型参数梯度计算只依赖当前的时序数据批量采样。

6.5.10 练习

- 调调参数（例如 epochs、隐含层的层数、序列长度、隐含状态长度和学习率），看看对运行时间、训练集、验证集和测试集上 perplexity 造成的影响。

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

优化算法

7.1 优化算法概述

如果读者一直按照本书的顺序读到这里，很可能已经使用了优化算法来训练深度学习模型。具体来说，在训练模型时，我们会使用优化算法不断迭代模型参数以最小化模型的损失函数。当迭代终止时，模型的训练随之终止。此时的模型参数就是模型通过训练所学习到的参数。

优化算法对于深度学习十分重要。一方面，如图 7.1 所表现的那样，训练一个复杂的深度学习模型可能需要数小时、数日、甚至数周时间。而优化算法的表现直接影响模型训练效率。另一方面，理解各种优化算法的原理以及其中各参数的意义将有助于我们更有针对性地调参，从而使深度学习模型表现地更好。

本章将详细介绍深度学习中的常用优化算法。

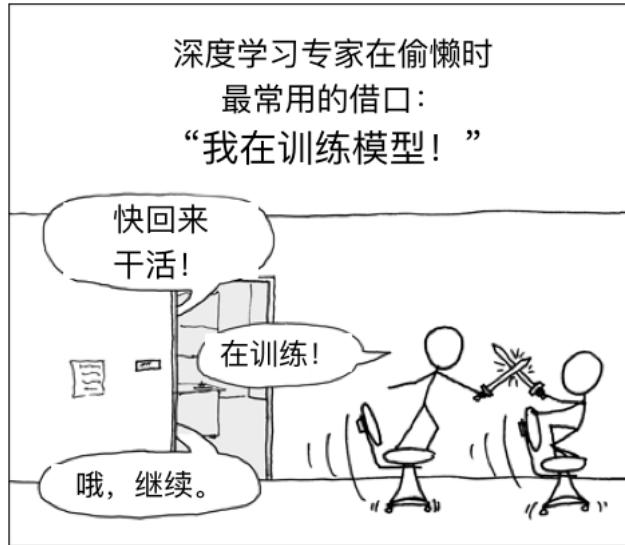


图 7.1: 漫画: 训练深度学习模型

7.1.1 优化与深度学习

在一个深度学习问题中，通常我们会预先定义一个损失函数。有了损失函数以后，我们就可以使用优化算法试图使其最小化。在优化中，这样的损失函数通常被称作优化问题的目标函数 (objective function)。依据惯例，优化算法通常只考虑最小化目标函数。其实，任何最大化问题都可以很容易地转化为最小化问题：我们只需把目标函数前面的正号或负号取相反。

虽然优化为深度学习提供了最小化损失函数的方法，但本质上，这两者之间的目标是有区别的。在欠拟合和过拟合一节中，我们区分了训练误差和泛化误差。由于优化算法的目标函数通常是一个基于训练数据集的损失函数，优化的目标在于降低训练误差。而深度学习的目标在于降低泛化误差。为了降低泛化误差，除了使用优化算法降低训练误差以外，我们还需要注意应对过拟合。

本章中，我们只关注优化算法在最小化目标函数上的表现，而不关注模型的泛化误差。

7.1.2 优化在深度学习中的挑战

绝大多数深度学习中的目标函数都很复杂。因此，很多优化问题并不存在解析解，而需要使用基于数值方法的优化算法找到近似解。这类优化算法一般通过不断迭代更新解的数值来找到近似解。我们讨论的优化算法都是这类基于数值方法的算法。

优化在深度学习中有很多挑战。以下描述了其中的两个挑战：局部最小值和鞍点。为了更好地描述问题，我们先导入需要的包。

```
In [1]: %matplotlib inline
%config InlineBackend.figure_format = 'retina'
```

```

import sys
import matplotlib as mpl
import matplotlib.pyplot as plt
from mpl_toolkits import mplot3d
import numpy as np
sys.path.append('..')
import utils

```

局部最小值

对于目标函数 $f(x)$, 如果 $f(x)$ 在 x 上的值比在 x 邻近的其他点的值更小, 那么 $f(x)$ 可能是一个局部最小值 (local minimum)。如果 $f(x)$ 在 x 上的值是目标函数在整个定义域上的最小值, 那么 $f(x)$ 是全局最小值 (global minimum)。

举个例子, 给定函数

$$f(x) = x \cdot \cos(\pi x), \quad -1.0 \leq x \leq 2.0,$$

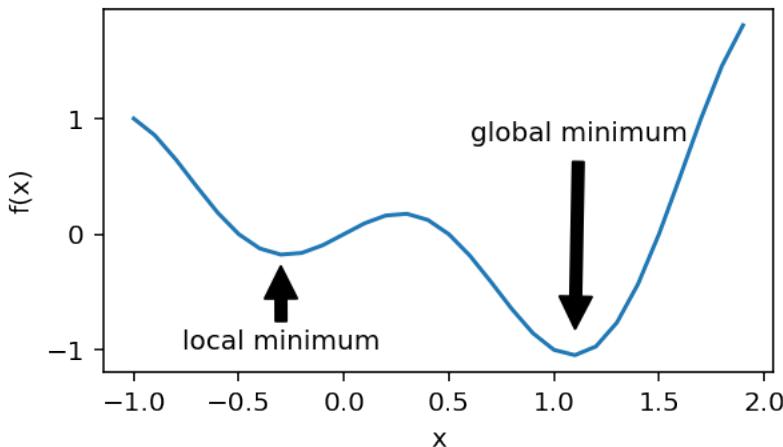
我们可以大致找出该函数的局部最小值和全局最小值的位置。需要注意的是, 图中箭头所指示的只是大致位置。

```

In [2]: def f(x):
    return x * np.cos(np.pi * x)

utils.set_fig_size(mpl, (4.5, 2.5))
x = np.arange(-1.0, 2.0, 0.1)
fig = plt.figure()
subplt = fig.add_subplot(111)
subplt.annotate('local minimum', xy=(-0.3, -0.25), xytext=(-0.77, -1.0),
                arrowprops=dict(facecolor='black', shrink=0.05))
subplt.annotate('global minimum', xy=(1.1, -0.9), xytext=(0.6, 0.8),
                arrowprops=dict(facecolor='black', shrink=0.05))
plt.plot(x, f(x))
plt.xlabel('x')
plt.ylabel('f(x)')
plt.show()

```



深度学习模型的目标函数可能有若干局部最优值。当一个优化问题的数值解在局部最优解附近时，由于目标函数有关解的梯度接近或变成零，最终迭代求得的数值解可能只令目标函数局部最小化而非全局最小化。

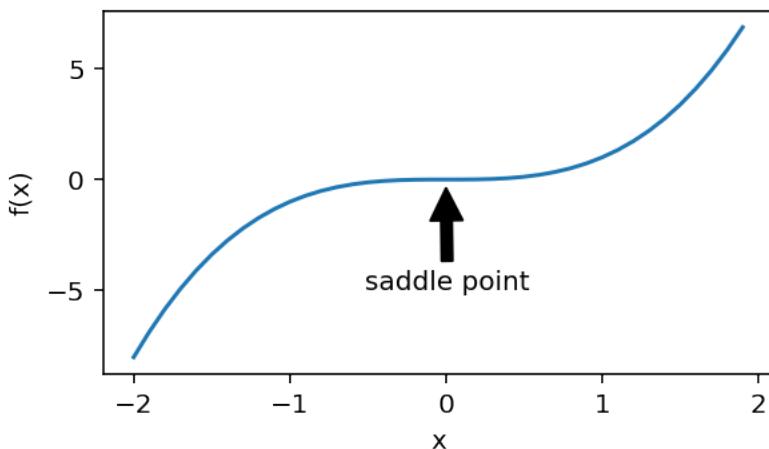
鞍点

刚刚我们提到，梯度接近或变成零可能是由于当前解在局部最优解附近所造成的。事实上，另一种可能性是当前解在鞍点（saddle point）附近。举个例子，给定函数

$$f(x) = x^3,$$

我们可以找出该函数的鞍点位置。

```
In [3]: x = np.arange(-2.0, 2.0, 0.1)
fig = plt.figure()
subplt = fig.add_subplot(111)
subplt.annotate('saddle point', xy=(0, -0.2), xytext=(-0.52, -5.0),
                arrowprops=dict(facecolor='black', shrink=0.05))
plt.plot(x, x**3)
plt.xlabel('x')
plt.ylabel('f(x)')
plt.show()
```

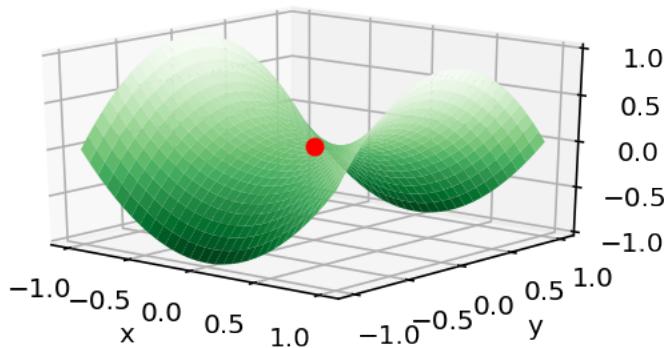


再举个定义在二维空间的函数的例子，例如

$$f(x, y) = x^2 - y^2.$$

我们可以找出该函数的鞍点位置。也许读者已经发现了，该函数看起来像一个马鞍，而鞍点恰好是马鞍上可坐区域的中心。

```
In [4]: fig = plt.figure()
ax = fig.add_subplot(111, projection='3d')
x, y = np.mgrid[-1:1:31j, -1:1:31j]
z = x**2 - y**2
ax.plot_surface(x, y, z, **{'rstride': 1, 'cstride': 1, 'cmap': "Greens_r"})
ax.plot([0], [0], [0], 'ro')
ax.view_init(azim=-50, elev=20)
plt.xticks([-1, -0.5, 0, 0.5, 1])
plt.yticks([-1, -0.5, 0, 0.5, 1])
ax.set_zticks([-1, -0.5, 0, 0.5, 1])
plt.xlabel('x')
plt.ylabel('y')
plt.show()
```



在上图的鞍点位置, 目标函数在 x 轴上是局部最小值, 而在 y 轴上是局部最大值。假设目标函数在一个维度为 k 的点上可能是局部最小值、局部最大值或者是鞍点 (梯度为零)。想象一下, 如果目标函数在该点任意维度上是局部最小值或者局部最大值的概率分别是 0.5, 该点为目标函数局部最小值的概率为 0.5^k 。事实上, 由于深度学习模型参数通常都是高维的, 目标函数的鞍点通常比局部最小值更常见。

7.1.3 小结

深度学习中, 虽然找到目标函数的全局最优解很难, 但这并非必要。我们将在接下来的章节中逐一介绍深度学习中常用的优化算法, 它们在很多实际问题中都训练出了十分有效的深度学习模型。

7.1.4 练习

- 你还能想到哪些深度学习中的优化问题的挑战?

7.1.5 扫码直达讨论区



7.2 梯度下降和随机梯度下降——从零开始

本节中, 我们将介绍梯度下降 (gradient descent) 和随机梯度下降 (stochastic gradient descent) 算法。由于梯度下降是优化算法的核心部分, 理解梯度的涵义十分重要。为了帮助读者深刻理解梯度, 我们将从数学角度阐释梯度下降的意义。

7.2.1 一维梯度下降

我们先以简单的一维梯度下降为例, 解释梯度下降算法可以降低目标函数值的原因。一维梯度是一个标量, 也称导数。

假设函数 $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ 的输入和输出都是标量。给定足够小的数 ϵ , 根据泰勒展开公式 (参见“[数学基础](#)”一节), 我们得到以下的近似

$$f(x + \epsilon) \approx f(x) + f'(x)\epsilon.$$

假设 η 是一个常数, 将 ϵ 替换为 $-\eta f'(x)$ 后, 我们有

$$f(x - \eta f'(x)) \approx f(x) - \eta f'(x)^2.$$

如果 η 是一个很小的正数, 那么

$$f(x - \eta f'(x)) \leq f(x).$$

也就是说, 如果目标函数 $f(x)$ 当前的导数 $f'(x) \neq 0$, 按照

$$x \leftarrow x - \eta f'(x).$$

迭代自变量 x 可能会降低 $f(x)$ 的值。由于导数 $f'(x)$ 是梯度 $\nabla_x f$ 在一维空间的特殊情况, 上述迭代自变量 x 的方法也即一维空间的梯度下降。一维空间的梯度下降图 7.2 (左) 所示, 自变量 x 沿着梯度方向迭代。

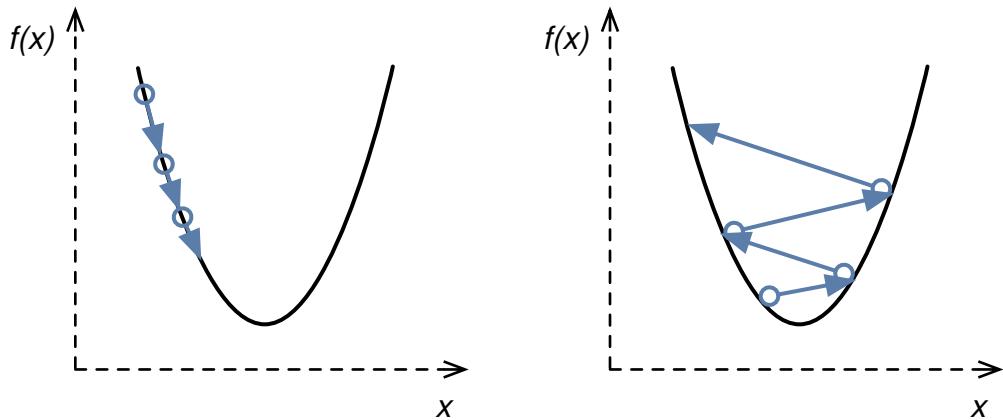


图 7.2: 梯度下降中, 目标函数 $f(x)$ 的自变量 x (圆圈的横坐标) 沿着梯度方向迭代

7.2.2 学习率

上述梯度下降算法中的 η 叫做学习率。这是一个超参数, 需要人工设定。学习率 η 要取正数。

需要注意的是, 学习率过大可能会造成自变量 x 越过 (overshoot) 目标函数 $f(x)$ 的最优解, 甚至发散。见图 7.2 (右)。

然而, 如果学习率过小, 目标函数中自变量的迭代速度会过慢。实际上, 一个合适的学习率通常需要通过多次实验找到的。

7.2.3 多维梯度下降

现在我们考虑一个更广义的情况: 目标函数的输入为向量, 输出为标量。

假设目标函数 $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ 的输入是一个 d 维向量 $\mathbf{x} = [x_1, x_2, \dots, x_d]^\top$ 。目标函数 $f(\mathbf{x})$ 有关 \mathbf{x} 的梯度是一个由 d 个偏导数组成的向量：

$$\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) = \left[\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_1}, \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_d} \right]^\top.$$

为表示简洁，我们用 $\nabla f(\mathbf{x})$ 代替 $\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x})$ 。梯度中每个偏导数元素 $\partial f(\mathbf{x})/\partial x_i$ 代表着 f 在 \mathbf{x} 有关输入 x_i 的变化率。为了测量 f 沿着单位向量 \mathbf{u} 方向上的变化率，在多元微积分中，我们定义 f 在 \mathbf{x} 上沿着 \mathbf{u} 方向的方向导数为

$$D_{\mathbf{u}} f(\mathbf{x}) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(\mathbf{x} + h\mathbf{u}) - f(\mathbf{x})}{h}.$$

依据方向导数性质 [1, 14.6 节定理三]，该方向导数可以改写为

$$D_{\mathbf{u}} f(\mathbf{x}) = \nabla f(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{u}.$$

方向导数 $D_{\mathbf{u}} f(\mathbf{x})$ 给出了 f 在 \mathbf{x} 上沿着所有可能方向的变化率。为了最小化 f ，我们希望找到 f 能被降低最快的方向。因此，我们可以通过单位向量 \mathbf{u} 来最小化方向导数 $D_{\mathbf{u}} f(\mathbf{x})$ 。

由于 $D_{\mathbf{u}} f(\mathbf{x}) = \|\nabla f(\mathbf{x})\| \cdot \|\mathbf{u}\| \cdot \cos(\theta) = \|\nabla f(\mathbf{x})\| \cdot \cos(\theta)$ ，其中 θ 为梯度 $\nabla f(\mathbf{x})$ 和单位向量 \mathbf{u} 之间的夹角，当 $\theta = \pi$ ， $\cos(\theta)$ 取得最小值-1。因此，当 \mathbf{u} 在梯度方向 $\nabla f(\mathbf{x})$ 的相反方向时，方向导数 $D_{\mathbf{u}} f(\mathbf{x})$ 被最小化。所以，我们可能通过下面的梯度下降算法来不断降低目标函数 f 的值：

$$\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{x} - \eta \nabla f(\mathbf{x}).$$

相同地，其中 η （取正数）称作学习率。

7.2.4 随机梯度下降

然而，当训练数据集很大时，梯度下降算法可能会难以使用。为了解释这个问题，考虑目标函数

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f_i(\mathbf{x}),$$

其中 $f_i(\mathbf{x})$ 是有关索引为 i 的训练数据样本的损失函数， n 是训练数据样本数。由于

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \nabla f_i(\mathbf{x}),$$

梯度下降每次迭代的计算开销随着 n 线性增长。因此，当训练数据样本数很大时，梯度下降每次迭代的计算开销很高。这时我们可以使用随机梯度下降。给定学习率 η （取正数），在每次迭代时，随机梯度下降算法随机均匀采样 i 并计算 $\nabla f_i(\mathbf{x})$ 来迭代 \mathbf{x} ：

$$\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{x} - \eta \nabla f_i(\mathbf{x}).$$

事实上，随机梯度 $\nabla f_i(\mathbf{x})$ 是对梯度 $\nabla f(\mathbf{x})$ 的无偏估计：

$$\mathbb{E}_i \nabla f_i(\mathbf{x}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \nabla f_i(\mathbf{x}) = \nabla f(\mathbf{x}).$$

7.2.5 小批量随机梯度下降

广义上，每一次迭代可以随机均匀采样一个由训练数据样本索引所组成的小批量（mini-batch） \mathcal{B} 。类似地，我们可以使用

$$\nabla f_{\mathcal{B}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{|\mathcal{B}|} \sum_{i \in \mathcal{B}} \nabla f_i(\mathbf{x})$$

来迭代 \mathbf{x} :

$$\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{x} - \eta \nabla f_{\mathcal{B}}(\mathbf{x}).$$

在上式中， $|\mathcal{B}|$ 代表样本批量大小， η （取正数）称作学习率。同样，小批量随机梯度 $\nabla f_{\mathcal{B}}(\mathbf{x})$ 也是对梯度 $\nabla f(\mathbf{x})$ 的无偏估计：

$$\mathbb{E}_{\mathcal{B}} \nabla f_{\mathcal{B}}(\mathbf{x}) = \nabla f(\mathbf{x}).$$

这个算法叫做小批量随机梯度下降。该算法每次迭代的计算开销为 $\mathcal{O}(|\mathcal{B}|)$ 。当批量大小为 1 时，该算法即随机梯度下降；当批量大小等于训练数据样本数，该算法即梯度下降。和学习率一样，批量大小也是一个超参数。当批量较小时，虽然每次迭代的计算开销较小，但计算机并行处理批量中各个样本的能力往往只得到较少利用。因此，当训练数据集的样本较少时，我们可以使用梯度下降；当样本较多时，我们可以使用小批量梯度下降并依据计算资源选择合适的批量大小。

7.2.6 小批量随机梯度下降的实现

我们只需要实现小批量随机梯度下降。当批量大小等于训练集大小时，该算法即为梯度下降；批量大小为 1 即为随机梯度下降。

```
In [1]: def sgd(params, lr, batch_size):
    for param in params:
        param[:] = param - lr * param.grad / batch_size
```

7.2.7 实验

首先，导入实验所需的包。

```
In [2]: %config InlineBackend.figure_format = 'retina'
%matplotlib inline
import random
import sys
import mxnet as mx
from mxnet import autograd, gluon, nd
import numpy as np
```

```

sys.path.append('..')
import utils

实验中，我们以之前介绍过的线性回归为例。设数据集的样本数为 1000，我们使用权重 w 为 [2, -3.4]，偏差 ‘b’ 为 4.2 的线性回归模型来生成数据集。该模型的平方损失函数即所需优化的目标函数，模型参数即目标函数自变量。

In [3]: # 生成数据集。
    num_inputs = 2
    num_examples = 1000
    true_w = [2, -3.4]
    true_b = 4.2
    X = nd.random.normal(scale=1, shape=(num_examples, num_inputs))
    y = true_w[0] * X[:, 0] + true_w[1] * X[:, 1] + true_b
    y += 0.01 * nd.random.normal(scale=1, shape=y.shape)

    # 初始化模型参数。
    def init_params():
        w = nd.random.normal(scale=1, shape=(num_inputs, 1))
        b = nd.zeros(shape=(1,))
        params = [w, b]
        for param in params:
            param.attach_grad()
        return params

    # 线性回归模型。
    def linreg(X, w, b):
        return nd.dot(X, w) + b

    # 平方损失函数。
    def squared_loss(yhat, y):
        return (yhat - y.reshape(yhat.shape)) ** 2 / 2

    # 遍历数据集。
    def data_iter(batch_size, num_examples, X, y):
        idx = list(range(num_examples))
        random.shuffle(idx)
        for i in range(0, num_examples, batch_size):
            j = nd.array(idx[i: min(i + batch_size, num_examples)])
            yield X.take(j), y.take(j)

```

下面我们描述一下优化函数 `optimize`。

由于随机梯度的方差在迭代过程中无法减小，（小批量）随机梯度下降的学习率通常会采用自我衰减的方式。如此一来，学习率和随机梯度乘积的方差会衰减。实验中，当迭代周期（epoch）大于 2 时，（小批量）随机梯度下降的学习率在每个迭代周期开始时自乘 0.1 作自我衰减。而梯度下降

在迭代过程中一直使用目标函数的真实梯度，无需自我衰减学习率。

在迭代过程中，每当 `log_interval` 个样本被采样过后，模型当前的损失函数值 (`loss`) 被记录下并用于作图。例如，当 `batch_size` 和 `log_interval` 都为 10 时，每次迭代后的损失函数值都被用来作图。

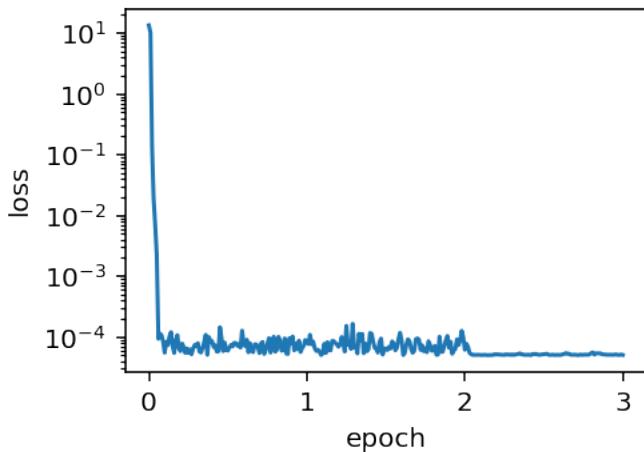
```
In [4]: net = linreg
        squared_loss = squared_loss

        def optimize(batch_size, lr, num_epochs, log_interval, decay_epoch):
            w, b = init_params()
            y_vals = [squared_loss(net(X, w, b), y).mean().asnumpy()]
            for epoch in range(1, num_epochs + 1):
                # 学习率自我衰减。
                if decay_epoch and epoch > decay_epoch:
                    lr *= 0.1
                for batch_i, (features, label) in enumerate(
                    data_iter(batch_size, num_examples, X, y)):
                    with autograd.record():
                        output = net(features, w, b)
                        loss = squared_loss(output, label)
                        loss.backward()
                        sgd([w, b], lr, batch_size)
                if batch_i * batch_size % log_interval == 0:
                    y_vals.append(squared_loss(net(X, w, b), y).mean().asnumpy())
            print('w:', w, '\nb:', b, '\n')
            x_vals = np.linspace(0, num_epochs, len(y_vals), endpoint=True)
            utils.semilogy(x_vals, y_vals, 'epoch', 'loss')
```

当批量大小为 1 时，优化使用的是随机梯度下降。在当前学习率下，损失函数值在早期快速下降后略有波动。这是由于随机梯度的方差在迭代过程中无法减小。当迭代周期大于 2，学习率自我衰减后，损失函数值下降后较平稳。最终，优化所得的模型参数值 `w` 和 `b` 与它们的真实值 [2, -3.4] 和 4.2 较接近。

```
In [5]: optimize(batch_size=1, lr=0.2, num_epochs=3, decay_epoch=2, log_interval=10)

w:
[[ 2.00095248]
 [-3.40085745]]
<NDArray 2x1 @cpu(0)>
b:
[ 4.19987965]
<NDArray 1 @cpu(0)>
```

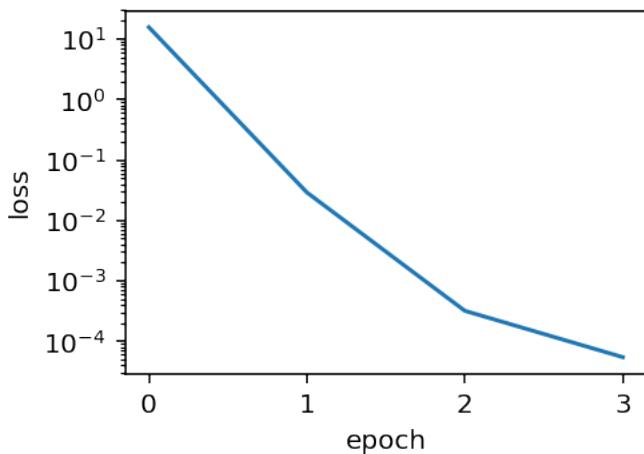


当批量大小为 1000 时, 由于数据样本总数也是 1000, 优化使用的是梯度下降。梯度下降无需自我衰减学习率 (decay_epoch=None)。最终, 优化所得的模型参数值与它们的真实值较接近。

需要注意的是, 梯度下降的 1 个迭代周期对模型参数只迭代 1 次。而随机梯度下降的批量大小为 1, 它在 1 个迭代周期对模型参数迭代了 1000 次。我们观察到, 1 个迭代周期后, 梯度下降所得的损失函数值比随机梯度下降所得的损失函数值略大。而在 3 个迭代周期后, 这两个算法所得的损失函数值很接近。

```
In [6]: optimize(batch_size=1000, lr=0.999, num_epochs=3, decay_epoch=None,
log_interval=1000)
```

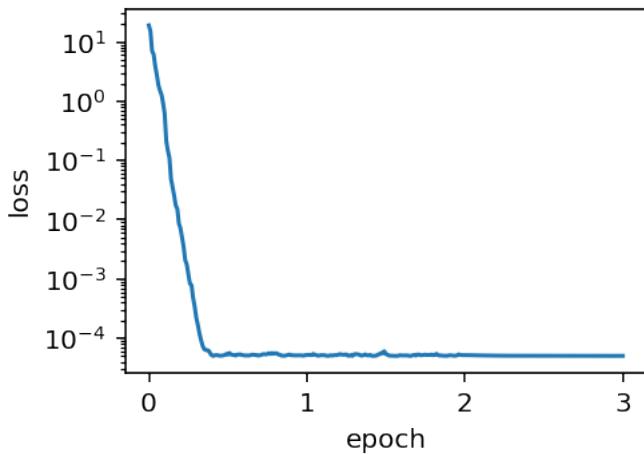
```
w:  
[[ 2.00041699]  
 [-3.40231657]]  
<NDArray 2x1 @cpu(0)>  
b:  
[ 4.19891977]  
<NDArray 1 @cpu(0)>
```



当批量大小为 10 时, 由于数据样本总数也是 1000, 优化使用的是小批量随机梯度下降。最终, 优化所得的模型参数值与它们的真实值较接近。

```
In [7]: optimize(batch_size=10, lr=0.2, num_epochs=3, decay_epoch=2, log_interval=10)

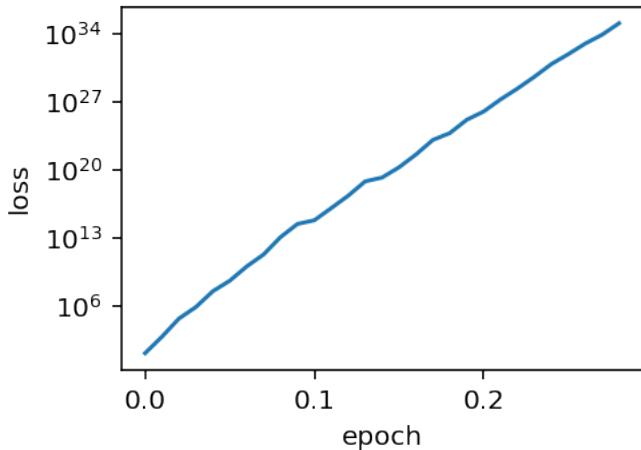
w:
[[ 1.99939156]
 [-3.40021753]]
<NDArray 2x1 @cpu(0)>
b:
[ 4.20034361]
<NDArray 1 @cpu(0)>
```



同样是批量大小为 10, 我们把学习率改大。这时损失函数值不断增大, 直到出现 “nan” (not a number, 非数)。这是因为, 过大的学习率造成了模型参数越过最优解并发散。最终学到的模型参数也是 “nan”。

```
In [8]: optimize(batch_size=10, lr=5, num_epochs=3, decay_epoch=2, log_interval=10)
```

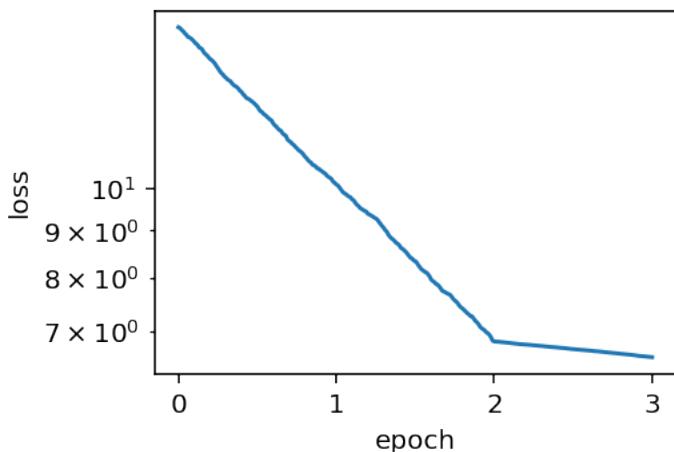
```
w:  
[[ nan]  
 [ nan]]  
<NDArray 2x1 @cpu(0)>  
b:  
[ nan]  
<NDArray 1 @cpu(0)>
```



同样是批量大小为 10，我们把学习率改小。这时我们观察到损失函数值下降较慢，直到 3 个迭代周期模型参数也没能接近它们的真实值。

```
In [9]: optimize(batch_size=10, lr=0.002, num_epochs=3, decay_epoch=2,  
log_interval=10)
```

```
w:  
[[ 0.58628148]  
 [-1.52992618]]  
<NDArray 2x1 @cpu(0)>  
b:  
[ 1.38459027]  
<NDArray 1 @cpu(0)>
```



7.2.8 小结

- 当训练数据较大，梯度下降每次迭代计算开销较大，因而（小批量）随机梯度下降更受青睐。
- 学习率过大过小都有问题。一个合适的学习率通常是需要通过多次实验找到的。

7.2.9 练习

- 运行本节中实验代码。比较一下随机梯度下降和梯度下降的运行时间。
- 梯度下降和随机梯度下降虽然看上去有效，但可能会有哪些问题？

7.2.10 扫码直达讨论区



7.2.11 参考文献

- [1] Stewart, J. (2010). Calculus: Early Transcendentals (7th Edition). Brooks Cole.

7.3 梯度下降和随机梯度下降——使用 Gluon

在 Gluon 里, 使用小批量随机梯度下降很方便, 我们无需重新实现该算法。特别地, 当批量大小等于数据集样本数时, 该算法即为梯度下降; 批量大小为 1 即为随机梯度下降。

首先, 导入实验所需的包。

```
In [1]: %config InlineBackend.figure_format = 'retina'
%matplotlib inline
import sys
import mxnet as mx
from mxnet import autograd, gluon, nd
import numpy as np
sys.path.append('..')
import utils
```

下面生成实验数据集并定义线性回归模型。

```
In [2]: # 生成数据集。
num_inputs = 2
num_examples = 1000
true_w = [2, -3.4]
true_b = 4.2
X = nd.random.normal(scale=1, shape=(num_examples, num_inputs))
y = true_w[0] * X[:, 0] + true_w[1] * X[:, 1] + true_b
y += 0.01 * nd.random.normal(scale=1, shape=y.shape)

# 线性回归模型。
net = gluon.nn.Sequential()
with net.name_scope():
    net.add(gluon.nn.Dense(1))
```

为了使学习率能够自我衰减, 我们需要访问 `gluon.Trainer` 的 `learning_rate` 属性并使用 `set_learning_rate` 函数。

```
In [3]: # 优化目标函数。
def optimize(batch_size, trainer, num_epochs, decay_epoch, log_interval, X, y,
            net):
    dataset = gluon.data.ArrayDataset(X, y)
    data_iter = gluon.data.DataLoader(dataset, batch_size, shuffle=True)
    square_loss = gluon.loss.L2Loss()
    y_vals = [square_loss(net(X), y).mean().asnumpy()]
    for epoch in range(1, num_epochs + 1):
        # 学习率自我衰减。
        if decay_epoch and epoch > decay_epoch:
            trainer.set_learning_rate(trainer.learning_rate * 0.1)
```

```

for batch_i, (features, label) in enumerate(data_iter):
    with autograd.record():
        output = net(features)
        loss = square_loss(output, label)
    loss.backward()
    trainer.step(batch_size)
    if batch_i * batch_size % log_interval == 0:
        y_vals.append(square_loss(net(X), y).mean().asnumpy())
# 为了便于打印, 改变输出形状并转化成 numpy 数组。
print('w:', net[0].weight.data(), '\nb:', net[0].bias.data(), '\n')
x_vals = np.linspace(0, num_epochs, len(y_vals), endpoint=True)
utils.semilogy(x_vals, y_vals, 'epoch', 'loss')

```

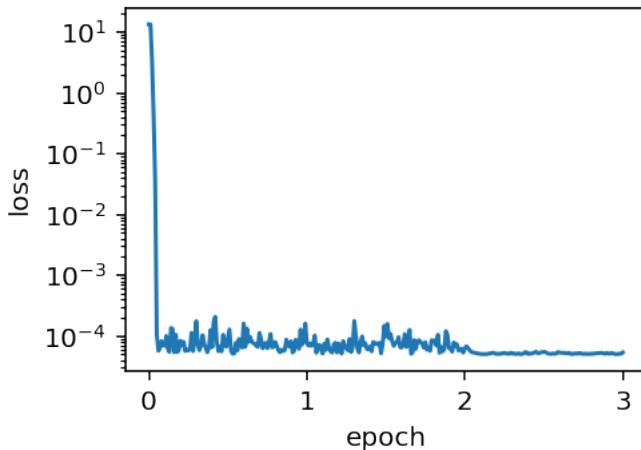
以下几组实验分别重现了”梯度下降和随机梯度下降——从零开始”一节中实验结果。

```

In [4]: net.collect_params().initialize(mx.init.Normal(sigma=1), force_reinit=True)
        trainer = gluon.Trainer(net.collect_params(), 'sgd', {'learning_rate': 0.2})
        optimize(batch_size=1, trainer=trainer, num_epochs=3, decay_epoch=2,
                 log_interval=10, X=X, y=y, net=net)

w:
[[ 1.99958956 -3.40050769]]
<NDArray 1x2 @cpu(0)>
b:
[ 4.20139122]
<NDArray 1 @cpu(0)>

```



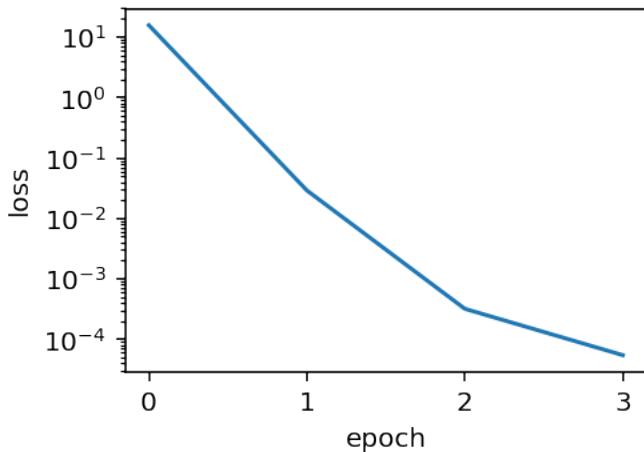
```

In [5]: net.collect_params().initialize(mx.init.Normal(sigma=1), force_reinit=True)
        trainer = gluon.Trainer(net.collect_params(), 'sgd', {'learning_rate': 0.999})
        optimize(batch_size=1000, trainer=trainer, num_epochs=3, decay_epoch=None,
                 log_interval=1000, X=X, y=y, net=net)

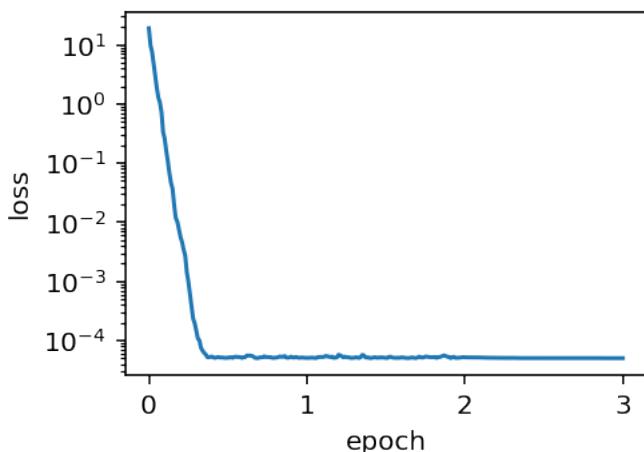
w:

```

```
[[ 2.00041699 -3.40231657]]  
<NDArray 1x2 @cpu(0)>  
b:  
[ 4.19891977]  
<NDArray 1 @cpu(0)>
```

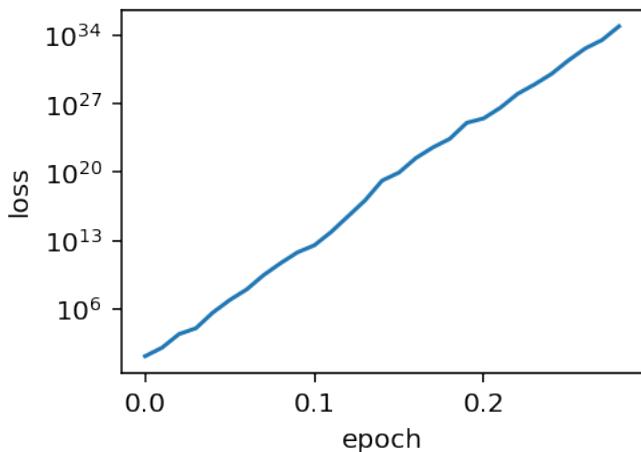


```
In [6]: net.collect_params().initialize(mx.init.Normal(sigma=1), force_reinit=True)  
trainer = gluon.Trainer(net.collect_params(), 'sgd', {'learning_rate': 0.2})  
optimize(batch_size=10, trainer=trainer, num_epochs=3, decay_epoch=2,  
log_interval=10, X=X, y=y, net=net)  
  
w:  
[[ 1.99979293 -3.4000833 ]]  
<NDArray 1x2 @cpu(0)>  
b:  
[ 4.20032835]  
<NDArray 1 @cpu(0)>
```



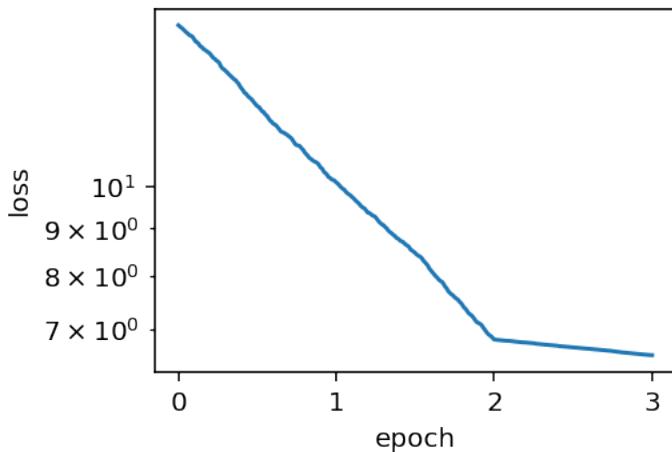
```
In [7]: net.collect_params().initialize(mx.init.Normal(sigma=1), force_reinit=True)
    trainer = gluon.Trainer(net.collect_params(), 'sgd', {'learning_rate': 5})
    optimize(batch_size=10, trainer=trainer, num_epochs=3, decay_epoch=2,
             log_interval=10, X=X, y=y, net=net)

w:
[[ nan  nan]]
<NDArray 1x2 @cpu(0)>
b:
[ nan]
<NDArray 1 @cpu(0)>
```



```
In [8]: net.collect_params().initialize(mx.init.Normal(sigma=1), force_reinit=True)
    trainer = gluon.Trainer(net.collect_params(), 'sgd', {'learning_rate': 0.002})
    optimize(batch_size=10, trainer=trainer, num_epochs=3, decay_epoch=2,
             log_interval=10, X=X, y=y, net=net)

w:
[[ 0.58611625 -1.53002906]]
<NDArray 1x2 @cpu(0)>
b:
[ 1.3845073]
<NDArray 1 @cpu(0)>
```



7.3.1 小结

- 使用 Gluon 的 Trainer 可以方便地使用小批量随机梯度下降。
- 访问 `gluon.Trainer` 的 `learning_rate` 属性并使用 `set_learning_rate` 函数可以在迭代过程中调整学习率。

7.3.2 练习

- 查阅网络或书本资料，了解学习率自我衰减的其他方法。

7.3.3 扫码直达讨论区



7.4 动量法——从零开始

我们已经介绍了梯度下降。每次迭代时，该算法根据自变量当前所在位置，沿着目标函数下降最快的方向更新自变量。因此，梯度下降有时也叫做最陡下降 (steepest descent)。目标函数有关自变量的梯度代表了目标函数下降最快的方向。

7.4.1 梯度下降的问题

给定目标函数，在梯度下降中，自变量的迭代方向仅仅取决于自变量当前位置。这可能会带来一些问题。

考虑一个输入和输出分别为二维向量 $\mathbf{x} = [x_1, x_2]^\top$ 和标量的目标函数 $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ 。图 7.3 展示了该函数的等高线示意图。

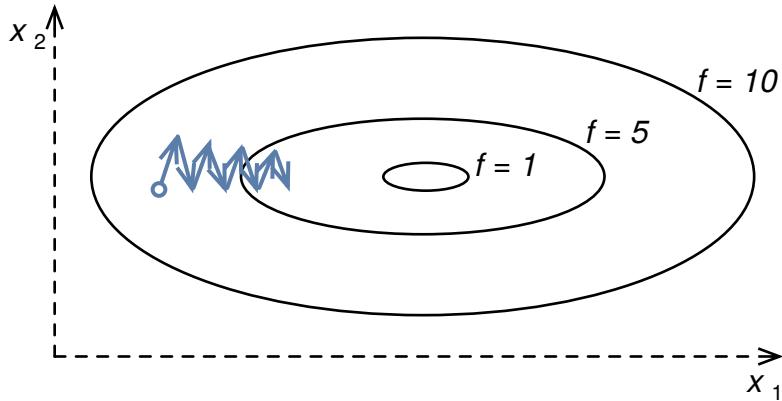


图 7.3：目标函数 f 的等高线图和自变量 $[x_1, x_2]$ 在梯度下降中的迭代。每条等高线（椭圆实线）代表所有函数值相同的自变量的坐标。实心圆代表自变量初始坐标。每个箭头头部代表自变量在每次迭代后的坐标。

由于目标函数在竖直方向 (x_2 轴方向) 比在水平方向 (x_1 轴方向) 更弯曲，给定学习率，梯度下降迭代自变量时会使自变量在竖直方向比在水平方向移动幅度更大。因此，我们需要一个较小的学习率从而避免自变量在竖直方向上越过目标函数最优解。然而，这造成了图 7.3 中自变量向最优解移动较慢。

7.4.2 动量法

动量法的提出是为了应对梯度下降的上述问题。广义上，以小批量随机梯度下降为例（当批量大小等于训练集样本数时，该算法即为梯度下降；批量大小为 1 时即为随机梯度下降），我们对小批量随机梯度算法在每次迭代的步骤做如下修改：

$$\begin{aligned} \mathbf{v} &\leftarrow \gamma \mathbf{v} + \eta \nabla f_{\mathcal{B}}(\mathbf{x}), \\ \mathbf{x} &\leftarrow \mathbf{x} - \mathbf{v}. \end{aligned}$$

其中 \mathbf{v} 是速度变量，动量超参数 γ 满足 $0 \leq \gamma \leq 1$ 。动量法中的学习率 η 和有关小批量 \mathcal{B} 的随机梯度 $\nabla f_{\mathcal{B}}(\mathbf{x})$ 已在“梯度下降和随机梯度下降”一节中描述。

指数加权移动平均

为了更清晰地理解动量法，让我们先解释指数加权移动平均（exponentially weighted moving average）。给定超参数 γ 且 $0 \leq \gamma < 1$ ，当前时刻 t 的变量 $y^{(t)}$ 是上一时刻 $t - 1$ 的变量 $y^{(t-1)}$ 和当前时刻另一变量 $x^{(t)}$ 的线性组合：

$$y^{(t)} = \gamma y^{(t-1)} + (1 - \gamma)x^{(t)}.$$

我们可以对 $y^{(t)}$ 展开：

$$\begin{aligned} y^{(t)} &= (1 - \gamma)x^{(t)} + \gamma y^{(t-1)} \\ &= (1 - \gamma)x^{(t)} + (1 - \gamma) \cdot \gamma x^{(t-1)} + \gamma^2 y^{(t-2)} \\ &= (1 - \gamma)x^{(t)} + (1 - \gamma) \cdot \gamma x^{(t-1)} + (1 - \gamma) \cdot \gamma^2 x^{(t-2)} + \gamma^3 y^{(t-3)} \\ &\dots \end{aligned}$$

由于

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{1}{n}\right)^n = \exp(-1) \approx 0.3679,$$

我们可以将 $\gamma^{1/(1-\gamma)}$ 近似为 $\exp(-1)$ 。例如 $0.95^{20} \approx \exp(-1)$ 。如果把 $\exp(-1)$ 当做一个比较小的数，我们可以在近似中忽略所有含 $\gamma^{1/(1-\gamma)}$ 和比 $\gamma^{1/(1-\gamma)}$ 更高阶的系数的项。例如，当 $\gamma = 0.95$ 时，

$$y^{(t)} \approx 0.05 \sum_{i=0}^{19} 0.95^i x^{(t-i)}.$$

因此，在实际中，我们常常将 y 看作是对最近 $1/(1-\gamma)$ 个时刻的 x 值的加权平均。例如，当 $\gamma = 0.95$ 时， y 可以被看作是对最近 20 个时刻的 x 值的加权平均；当 $\gamma = 0.9$ 时， y 可以看作是对最近 10 个时刻的 x 值的加权平均：离当前时刻越近的 x 值获得的权重越大。

由指数加权移动平均理解动量法

现在，我们对动量法的速度变量做变形：

$$\mathbf{v} \leftarrow \gamma \mathbf{v} + (1 - \gamma) \frac{\eta \nabla f_{\mathcal{B}}(\mathbf{x})}{1 - \gamma}.$$

由指数加权移动平均的形式可得，速度变量 \mathbf{v} 实际上对 $(\eta \nabla f_{\mathcal{B}}(\mathbf{x}))/((1 - \gamma))$ 做了指数加权移动平均。给定动量超参数 γ 和学习率 η ，含动量法的小批量随机梯度下降可被看作使用了特殊梯度来迭代目标函数的自变量。这个特殊梯度是最近 $1/(1 - \gamma)$ 个时刻的 $\nabla f_{\mathcal{B}}(\mathbf{x})/(1 - \gamma)$ 的加权平均。

给定目标函数，在动量法的每次迭代中，自变量在各个方向上的移动幅度不仅取决于当前梯度，还取决于过去各个梯度在各个方向上是否一致。图 7.4 展示了使用动量法的梯度下降迭代图 7.3 中目标

函数自变量的情景。我们将每个梯度代表的箭头方向在水平方向和竖直方向做分解。由于所有梯度的水平方向为正（向右）、在竖直上时正（向上）时负（向下），自变量在水平方向移动幅度逐渐增大，而在竖直方向移动幅度逐渐减小。这样，我们就可以使用较大的学习率，从而使自变量向最优解更快移动。

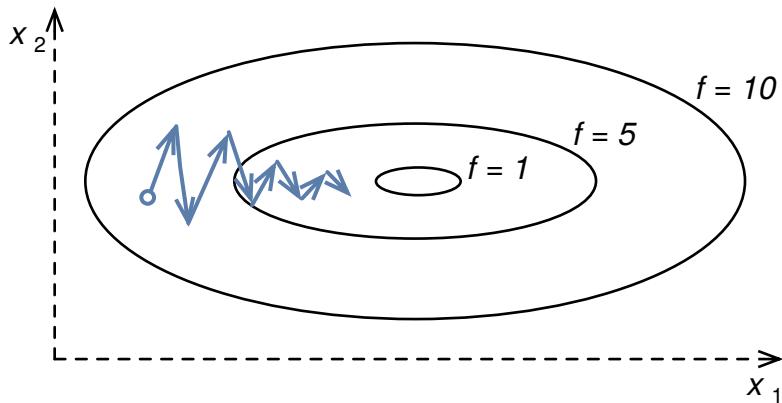


图 7.4：目标函数 f 的等高线图和自变量 $[x_1, x_2]$ 在使用动量法的梯度下降中的迭代。每条等高线（椭圆实线）代表所有函数值相同的自变量的坐标。实心圆代表自变量初始坐标。每个箭头头部代表自变量在每次迭代后的坐标。

7.4.3 动量法的实现

动量法的实现也很简单。我们在小批量随机梯度下降的基础上添加速度变量。

```
In [1]: def sgd_momentum(params, vs, lr, mom, batch_size):
    for param, v in zip(params, vs):
        v[:] = mom * v + lr * param.grad / batch_size
        param[:] -= v
```

7.4.4 实验

首先，导入实验所需的包。

```
In [2]: %config InlineBackend.figure_format = 'retina'
%matplotlib inline
import sys
import mxnet as mx
from mxnet import autograd, gluon, nd
import numpy as np
sys.path.append('..')
import utils
```

实验中，我们以之前介绍过的线性回归为例。设数据集的样本数为 1000，我们使用权重 w 为 [2, -3.4]，偏差 ‘ b ’ 为 4.2 的线性回归模型来生成数据集。该模型的平方损失函数即所需优化的目标函数，模型参数即目标函数自变量。

```
In [3]: # 生成数据集。  
num_inputs = 2  
num_examples = 1000  
true_w = [2, -3.4]  
true_b = 4.2  
X = nd.random.normal(scale=1, shape=(num_examples, num_inputs))  
y = true_w[0] * X[:, 0] + true_w[1] * X[:, 1] + true_b  
y += 0.01 * nd.random.normal(scale=1, shape=y.shape)  
  
# 初始化模型参数。  
def init_params():  
    w = nd.random.normal(scale=1, shape=(num_inputs, 1))  
    b = nd.zeros(shape=(1,))  
    params = [w, b]  
    vs = []  
    for param in params:  
        param.attach_grad()  
        # 把速度项初始化为和参数形状相同的零张量。  
        vs.append(param.zeros_like())  
    return params, vs
```

优化函数 `optimize` 与 “梯度下降和随机梯度下降——从零开始” 一节中的类似。

```
In [4]: net = utils.linreg  
squared_loss = utils.squared_loss  
  
def optimize(batch_size, lr, mom, num_epochs, log_interval):  
    [w, b], vs = init_params()  
    y_vals = [squared_loss(net(X, w, b), y).mean().asnumpy()]  
    for epoch in range(1, num_epochs + 1):  
        # 学习率自我衰减。  
        if epoch > 2:  
            lr *= 0.1  
        for batch_i, (features, label) in enumerate(  
            utils.data_iter(batch_size, num_examples, X, y)):  
            with autograd.record():  
                output = net(features, w, b)  
                loss = squared_loss(output, label)  
                loss.backward()  
                sgd_momentum([w, b], vs, lr, mom, batch_size)  
            if batch_i * batch_size % log_interval == 0:  
                y_vals.append(squared_loss(net(X, w, b), y).mean().asnumpy())
```

```

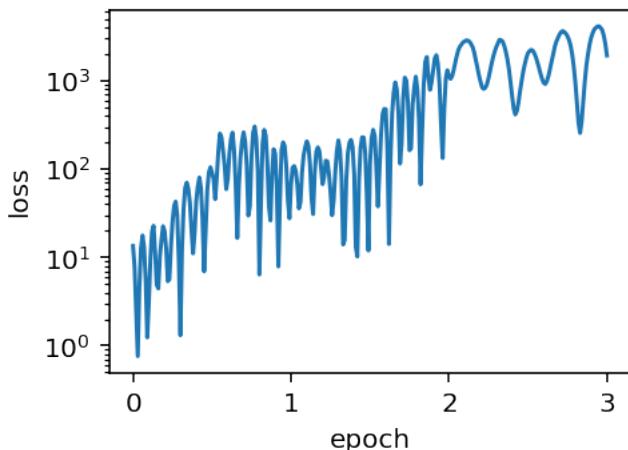
print('w:', w, '\nb:', b, '\n')
x_vals = np.linspace(0, num_epochs, len(y_vals), endpoint=True)
utils.semilogy(x_vals, y_vals, 'epoch', 'loss')

```

我们先将动量超参数 γ (mom) 设 0.99。此时，小梯度随机梯度下降可被看作使用了特殊梯度：这个特殊梯度是最近 100 个时刻的 $100\nabla f_B(x)$ 的加权平均。我们观察到，损失函数值在 3 个迭代周期后上升。这很可能是由于特殊梯度中较大的系数 100 造成的。

```
In [5]: optimize(batch_size=10, lr=0.2, mom=0.99, num_epochs=3, log_interval=10)
```

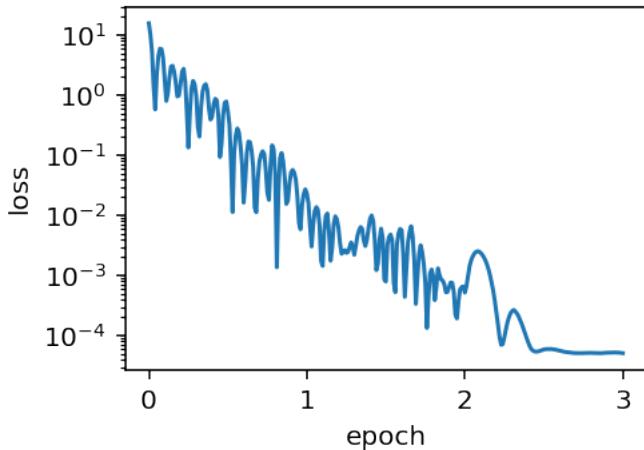
```
w:
[[ 12.59041023]
 [-55.46124268]]
<NDArray 2x1 @cpu(0)>
b:
[-20.1887989]
<NDArray 1 @cpu(0)>
```



假设学习率不变，为了降低上述特殊梯度中的系数，我们将动量超参数 γ (mom) 设 0.9。此时，上述特殊梯度变成最近 10 个时刻的 $10\nabla f_B(x)$ 的加权平均。我们观察到，损失函数值在 3 个迭代周期后下降。

```
In [6]: optimize(batch_size=10, lr=0.2, mom=0.9, num_epochs=3, log_interval=10)
```

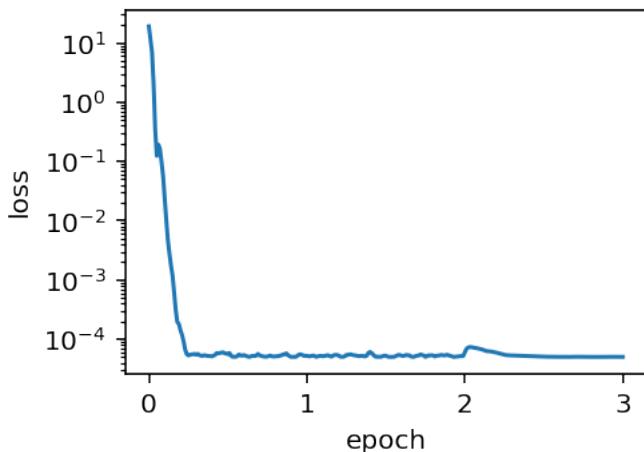
```
w:
[[ 1.99943006]
 [-3.39925933]]
<NDArray 2x1 @cpu(0)>
b:
[ 4.19961023]
<NDArray 1 @cpu(0)>
```



继续保持学习率不变，我们将动量超参数 γ (mom) 设 0.5。此时，小梯度随机梯度下降可被看作使用了新的特殊梯度：这个特殊梯度是最近 2 个时刻的 $2\nabla f_B(x)$ 的加权平均。我们观察到，损失函数值在 3 个迭代周期后下降，且下降曲线较平滑。最终，优化所得的模型参数值与它们的真实值较接近。

```
In [7]: optimize(batch_size=10, lr=0.2, mom=0.5, num_epochs=3, log_interval=10)
```

```
w:  
[[ 2.0002203 ]  
[-3.40017557]]  
<NDArray 2x1 @cpu(0)>  
b:  
[ 4.20030403]  
<NDArray 1 @cpu(0)>
```



7.4.5 小结

- 动量法使用了指数加权移动平均的思想。

7.4.6 练习

- 使用其他动量超参数和学习率的组合，观察实验结果。

7.4.7 扫码直达讨论区



7.5 动量法——使用 Gluon

在 Gluon 里，使用动量法很方便，我们无需重新实现该算法。

首先，导入实验所需的包。

```
In [1]: %config InlineBackend.figure_format = 'retina'
%matplotlib inline
import sys
import mxnet as mx
from mxnet import autograd, gluon, nd
import numpy as np
sys.path.append('..')
import utils
```

下面生成实验数据集并定义线性回归模型。

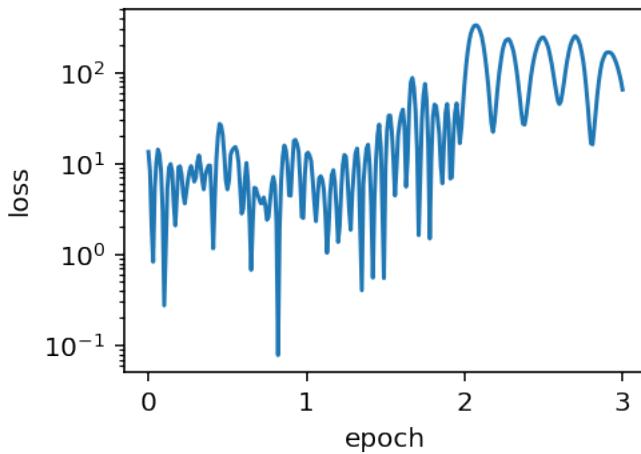
```
In [2]: # 生成数据集。
num_inputs = 2
num_examples = 1000
true_w = [2, -3.4]
true_b = 4.2
X = nd.random.normal(scale=1, shape=(num_examples, num_inputs))
y = true_w[0] * X[:, 0] + true_w[1] * X[:, 1] + true_b
y += 0.01 * nd.random.normal(scale=1, shape=y.shape)
```

```
# 线性回归模型。
net = gluon.nn.Sequential()
with net.name_scope():
    net.add(gluon.nn.Dense(1))
```

例如, 以使用动量法的小批量随机梯度下降为例, 我们可以在 `Trainer` 中定义动量超参数 `momentum`。以下几组实验分别重现了“动量法——从零开始”一节中实验结果。

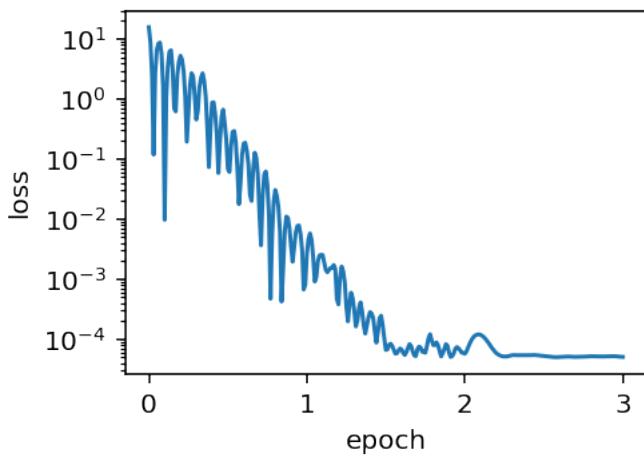
```
In [3]: net.collect_params().initialize(mx.init.Normal(sigma=1), force_reinit=True)
trainer = gluon.Trainer(net.collect_params(), 'sgd',
                        {'learning_rate': 0.2, 'momentum': 0.99})
utils.optimize(batch_size=10, trainer=trainer, num_epochs=3, decay_epoch=2,
              log_interval=10, X=X, y=y, net=net)

w:
[[ 10.90778065   3.49301887]]
<NDArray 1x2 @cpu(0)>
b:
[ 3.3389883]
<NDArray 1 @cpu(0)>
```



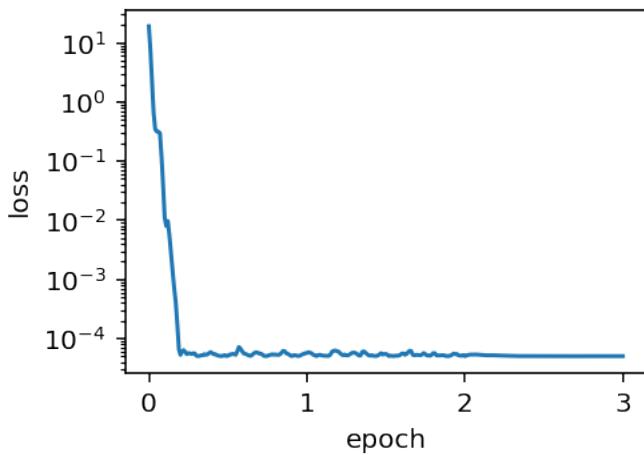
```
In [4]: net.collect_params().initialize(mx.init.Normal(sigma=1), force_reinit=True)
trainer = gluon.Trainer(net.collect_params(), 'sgd',
                        {'learning_rate': 0.2, 'momentum': 0.9})
utils.optimize(batch_size=10, trainer=trainer, num_epochs=3, decay_epoch=2,
              log_interval=10, X=X, y=y, net=net)

w:
[[ 1.99911892 -3.39912295]]
<NDArray 1x2 @cpu(0)>
b:
[ 4.20034218]
<NDArray 1 @cpu(0)>
```



```
In [5]: net.collect_params().initialize(mx.init.Normal(sigma=1), force_reinit=True)
      trainer = gluon.Trainer(net.collect_params(), 'sgd',
                           {'learning_rate': 0.2, 'momentum': 0.5})
      utils.optimize(batch_size=10, trainer=trainer, num_epochs=3, decay_epoch=2,
                    log_interval=10, X=X, y=y, net=net)

w:
[[ 1.9996357 -3.39984751]]
<NDArray 1x2 @cpu(0)>
b:
[ 4.20048285]
<NDArray 1 @cpu(0)>
```



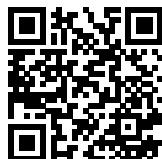
7.5.1 小结

- 使用 Gluon 的 Trainer 可以方便地使用动量法。

7.5.2 练习

- 如果想用以上代码重现小批量随机梯度下降，应该把动量参数改为多少？

7.5.3 扫码直达讨论区



7.6 Adagrad——从零开始

在我们之前介绍过的优化算法中，无论是梯度下降、随机梯度下降、小批量随机梯度下降还是使用动量法，目标函数自变量的每一个元素在相同时刻都使用同一个学习率来自我迭代。

举个例子，假设目标函数为 f ，自变量为一个多维向量 $[x_1, x_2]^\top$ ，该向量中每一个元素在更新时都使用相同的学习率。例如在学习率为 η 的梯度下降中，元素 x_1 和 x_2 都使用相同的学习率 η 来自我迭代：

$$\begin{aligned}x_1 &\leftarrow x_1 - \eta \frac{\partial f}{\partial x_1}, \\x_2 &\leftarrow x_2 - \eta \frac{\partial f}{\partial x_2}.\end{aligned}$$

如果让 x_1 和 x_2 使用不同的学习率自我迭代呢？实际上，Adagrad 就是一个在迭代过程中不断自我调整学习率，并让模型参数中每个元素都使用不同学习率的优化算法 [1]。

下面，我们将介绍 Adagrad 算法。关于本节中涉及到的按元素运算，例如标量与向量计算以及按元素相乘 \odot ，请参见“数学基础”一节。

7.6.1 Adagrad 算法

Adagrad 的算法会使用一个小批量随机梯度按元素平方的累加变量 s , 并将其中每个元素初始化为 0。在每次迭代中, 首先计算小批量随机梯度 g , 然后将该梯度按元素平方后累加到变量 s :

$$s \leftarrow s + g \odot g.$$

然后, 我们将目标函数自变量中每个元素的学习率通过按元素运算重新调整一下:

$$g' \leftarrow \frac{\eta}{\sqrt{s + \epsilon}} \odot g,$$

其中 η 是初始学习率且 $\eta > 0$, ϵ 是为了维持数值稳定性而添加的常数, 例如 10^{-7} 。我们需要注意其中按元素开方、除法和乘法的运算。这些按元素运算使得目标函数自变量中每个元素都分别拥有自己的学习率。

最后, 自变量的迭代步骤与小批量随机梯度下降类似。只是这里梯度前的学习率已经被调整过了:

$$x \leftarrow x - g'.$$

7.6.2 Adagrad 的特点

需要强调的是, 小批量随机梯度按元素平方的累加变量 s 出现在含调整后学习率的梯度 g' 的分母项。因此, 如果目标函数有关自变量中某个元素的偏导数一直都较大, 那么就让该元素的学习率下降快一点; 反之, 如果目标函数有关自变量中某个元素的偏导数一直都较小, 那么就让该元素的学习率下降慢一点。然而, 由于 s 一直在累加按元素平方的梯度, 自变量中每个元素的学习率在迭代过程中一直在降低(或不变)。所以, 当学习率在迭代早期降得较快且当前解依然不佳时, Adagrad 在迭代后期由于学习率过小, 可能较难找到一个有用的解。

7.6.3 Adagrad 的实现

Adagrad 的实现很简单。我们只需要把上面的数学公式翻译成代码。

```
In [1]: def adagrad(params, sqrs, lr, batch_size):
    eps_stable = 1e-7
    for param, sqr in zip(params, sqrs):
        g = param.grad / batch_size
        sqr[:] += g.square()
        param[:] -= lr * g / (sqr + eps_stable).sqrt()
```

7.6.4 实验

首先，导入实验所需的包。

```
In [2]: %config InlineBackend.figure_format = 'retina'
%matplotlib inline
import sys
import mxnet as mx
from mxnet import autograd, gluon, nd
import numpy as np
sys.path.append('..')
import utils
```

实验中，我们以之前介绍过的线性回归为例。设数据集的样本数为 1000，我们使用权重 w 为 [2, -3.4]，偏差 ‘ b ’ 为 4.2 的线性回归模型来生成数据集。该模型的平方损失函数即所需优化的目标函数，模型参数即目标函数自变量。

我们把梯度按元素平方的累加变量初始化为和模型参数形状相同的零张量。

```
In [3]: # 生成数据集。
num_inputs = 2
num_examples = 1000
true_w = [2, -3.4]
true_b = 4.2
X = nd.random.normal(scale=1, shape=(num_examples, num_inputs))
y = true_w[0] * X[:, 0] + true_w[1] * X[:, 1] + true_b
y += 0.01 * nd.random.normal(scale=1, shape=y.shape)

# 初始化模型参数。
def init_params():
    w = nd.random.normal(scale=1, shape=(num_inputs, 1))
    b = nd.zeros(shape=(1,))
    params = [w, b]
    sqrs = []
    for param in params:
        param.attach_grad()
        # 把梯度按元素平方的累加变量初始化为和参数形状相同的零张量。
        sqrs.append(param.zeros_like())
    return params, sqrs
```

优化函数 `optimize` 与 “梯度下降和随机梯度下降” 一节中的类似。需要指出的是，这里的初始学习率 lr 无需自我衰减。

```
In [4]: net = utils.linreg
squared_loss = utils.squared_loss

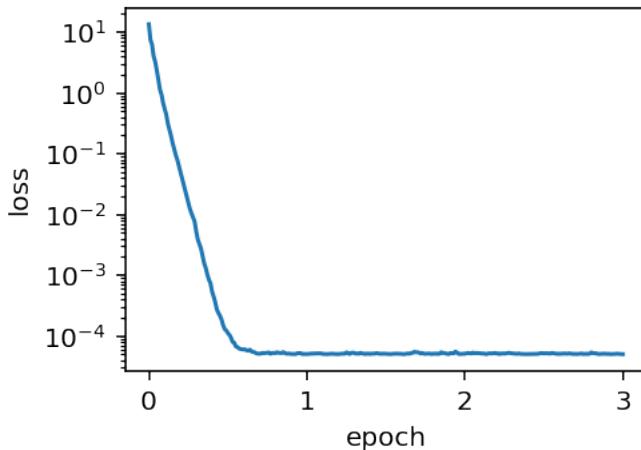
def optimize(batch_size, lr, num_epochs, log_interval):
```

```
[w, b], sqrs = init_params()
y_vals = [squared_loss(net(X, w, b), y).mean().asnumpy()]
for epoch in range(1, num_epochs + 1):
    for batch_i, (features, label) in enumerate(
        utils.data_iter(batch_size, num_examples, X, y)):
        with autograd.record():
            output = net(features, w, b)
            loss = squared_loss(output, label)
            loss.backward()
            adagrad([w, b], sqrs, lr, batch_size)
        if batch_i * batch_size % log_interval == 0:
            y_vals.append(squared_loss(net(X, w, b), y).mean().asnumpy())
print('w:', w, '\nb:', b, '\n')
x_vals = np.linspace(0, num_epochs, len(y_vals), endpoint=True)
utils.semilogy(x_vals, y_vals, 'epoch', 'loss')
```

最终，优化所得的模型参数值与它们的真实值较接近。

In [5]: optimize(batch_size=10, lr=0.9, num_epochs=3, log_interval=10)

```
w:
[[ 1.99988556]
 [-3.3998251 ]]
<NDArray 2x1 @cpu(0)>
b:
[ 4.20053148]
<NDArray 1 @cpu(0)>
```



7.6.5 小结

- Adagrad 在迭代过程中不断调整学习率，并让目标函数自变量中每个元素都分别拥有自己的学习率。
- 使用 Adagrad 时，自变量中每个元素的学习率在迭代过程中一直在降低（或不变）。

7.6.6 练习

- 在介绍 Adagrad 的特点时，我们提到了它可能存在的问题。你能想到什么办法来应对这个问题？

7.6.7 扫码直达讨论区



7.6.8 参考文献

[1] Duchi, J., Hazan, E., & Singer, Y. (2011). Adaptive Subgradient Methods for Online Learning and Stochastic Optimization. *Journal of Machine Learning Research*, 12(Jul), 2121-2159.

7.7 Adagrad——使用 Gluon

在 Gluon 里，使用 Adagrad 很方便，我们无需重新实现该算法。

首先，导入实验所需的包。

```
In [1]: %config InlineBackend.figure_format = 'retina'  
        %matplotlib inline  
        import sys  
        import mxnet as mx  
        from mxnet import autograd, gluon, nd  
        import numpy as np  
        sys.path.append('..')  
        import utils
```

下面生成实验数据集并定义线性回归模型。

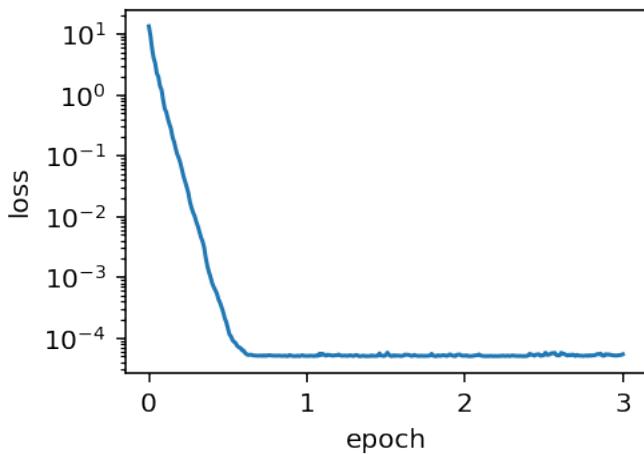
```
In [2]: # 生成数据集。
    num_inputs = 2
    num_examples = 1000
    true_w = [2, -3.4]
    true_b = 4.2
    X = nd.random.normal(scale=1, shape=(num_examples, num_inputs))
    y = true_w[0] * X[:, 0] + true_w[1] * X[:, 1] + true_b
    y += 0.01 * nd.random.normal(scale=1, shape=y.shape)

    # 线性回归模型。
    net = gluon.nn.Sequential()
    with net.name_scope():
        net.add(gluon.nn.Dense(1))
```

我们可以在 Trainer 中定义优化算法名称 `adagrad`。以下实验分别重现了“*Adagrad——从零开始*”一节中实验结果。

```
In [3]: net.collect_params().initialize(mx.init.Normal(sigma=1), force_reinit=True)
    trainer = gluon.Trainer(net.collect_params(), 'adagrad',
                           {'learning_rate': 0.9})
    utils.optimize(batch_size=10, trainer=trainer, num_epochs=3, decay_epoch=None,
                  log_interval=10, X=X, y=y, net=net)

w:
[[ 2.00026536 -3.39876842]]
<NDArray 1x2 @cpu(0)>
b:
[ 4.19775724]
<NDArray 1 @cpu(0)>
```



7.7.1 小结

- 使用 Gluon 的 Trainer 可以方便地使用 Adagrad。

7.7.2 练习

- 尝试使用其他的初始学习率, 结果有什么变化?

7.7.3 扫码直达讨论区



7.8 RMSProp——从零开始

我们在“[Adagrad——从零开始](#)”一节里提到, 由于调整学习率时分母上的变量 s 一直在累加按元素平方的小批量随机梯度, 目标函数自变量每个元素的学习率在迭代过程中一直在降低(或不变)。所以, 当学习率在迭代早期降得较快且当前解依然不佳时, Adagrad 在迭代后期由于学习率过小, 可能较难找到一个有用的解。为了应对这一问题, RMSProp 算法对 Adagrad 做了一点小小的修改 [1]。

下面, 我们来描述 RMSProp 算法。

7.8.1 RMSProp 算法

我们在“[动量法——从零开始](#)”一节里介绍过指数加权移动平均。事实上, RMSProp 算法使用了小批量随机梯度按元素平方的指数加权移动平均变量 s , 并将其中每个元素初始化为 0。给定超参数 γ 且 $0 \leq \gamma < 1$, 在每次迭代中, RMSProp 首先计算小批量随机梯度 g , 然后对该梯度按元素平方项 $g \odot g$ 做指数加权移动平均, 记为 s :

$$s \leftarrow \gamma s + (1 - \gamma)g \odot g.$$

然后, 和 Adagrad 一样, 将目标函数自变量中每个元素的学习率通过按元素运算重新调整一下:

$$g' \leftarrow \frac{\eta}{\sqrt{s + \epsilon}} \odot g,$$

其中 η 是初始学习率且 $\eta > 0$, ϵ 是为了维持数值稳定性而添加的常数, 例如 10^{-8} 。和 Adagrad 一样, 模型参数中每个元素都分别拥有自己的学习率。同样地, 最后的自变量迭代步骤与小批量随机梯度下降类似:

$$x \leftarrow x - g'.$$

需要强调的是, RMSProp 只在 Adagrad 的基础上修改了变量 s 的更新方法: 对平方项 $g \odot g$ 从累加变成了指数加权移动平均。由于变量 s 可看作是最近 $1/(1 - \gamma)$ 个时刻的平方项 $g \odot g$ 的加权平均, 自变量每个元素的学习率在迭代过程中避免了“直降不升”的问题。

7.8.2 RMSProp 的实现

RMSProp 的实现很简单。我们只需要把上面的数学公式翻译成代码。

```
In [1]: def rmsprop(params, sqrs, lr, gamma, batch_size):
    eps_stable = 1e-8
    for param, sqr in zip(params, sqrs):
        g = param.grad / batch_size
        sqr[:] = gamma * sqr + (1 - gamma) * g.square()
        param[:] -= lr * g / (sqr + eps_stable).sqrt()
```

7.8.3 实验

首先, 导入实验所需的包。

```
In [2]: %config InlineBackend.figure_format = 'retina'
%matplotlib inline
import sys
import mxnet as mx
from mxnet import autograd, gluon, nd
import numpy as np
sys.path.append('..')
import utils
```

实验中, 我们依然以线性回归为例。设数据集的样本数为 1000, 我们使用权重 w 为 $[2, -3.4]$, 偏差 “ b ” 为 4.2 的线性回归模型来生成数据集。该模型的平方损失函数即所需优化的目标函数, 模型参数即目标函数自变量。

我们把小批量随机梯度按元素平方的指数加权移动平均变量 s 初始化为和模型参数形状相同的零张量。

```
In [3]: # 生成数据集。
num_inputs = 2
num_examples = 1000
```

```

true_w = [2, -3.4]
true_b = 4.2
X = nd.random.normal(scale=1, shape=(num_examples, num_inputs))
y = true_w[0] * X[:, 0] + true_w[1] * X[:, 1] + true_b
y += 0.01 * nd.random.normal(scale=1, shape=y.shape)

# 初始化模型参数。
def init_params():
    w = nd.random.normal(scale=1, shape=(num_inputs, 1))
    b = nd.zeros(shape=(1,))
    params = [w, b]
    sqrs = []
    for param in params:
        param.attach_grad()
        # 把梯度按元素平方的指数加权移动平均变量初始化为和参数形状相同的零张量。
        sqrs.append(param.zeros_like())
    return params, sqrs

```

优化函数 `optimize` 与 “*Adagrad——从零开始*” 一节中的类似。

```

In [4]: net = utils.linreg
        squared_loss = utils.squared_loss

def optimize(batch_size, lr, gamma, num_epochs, log_interval):
    [w, b], sqrs = init_params()
    y_vals = [squared_loss(net(X, w, b), y).mean().asnumpy()]
    for epoch in range(1, num_epochs + 1):
        for batch_i, (features, label) in enumerate(
            utils.data_iter(batch_size, num_examples, X, y)):
            with autograd.record():
                output = net(features, w, b)
                loss = squared_loss(output, label)
                loss.backward()
                rmsprop([w, b], sqrs, lr, gamma, batch_size)
            if batch_i * batch_size % log_interval == 0:
                y_vals.append(squared_loss(net(X, w, b), y).mean().asnumpy())
    print('w:', w, '\nb:', b, '\n')
    x_vals = np.linspace(0, num_epochs, len(y_vals), endpoint=True)
    utils.semilogy(x_vals, y_vals, 'epoch', 'loss')

```

我们将初始学习率设为 0.03，并将 γ (`gamma`) 设为 0.9。此时，变量 s 可看作是最近 $1/(1-0.9) = 10$ 个时刻的平方项 $g \odot g$ 的加权平均。我们观察到，损失函数在迭代后期较震荡。

```
In [5]: optimize(batch_size=10, lr=0.03, gamma=0.9, num_epochs=3, log_interval=10)
```

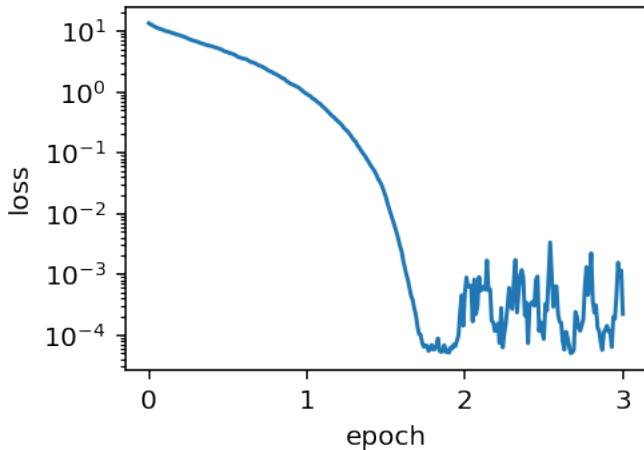
w:

```
[[ 1.98416269]
```

```

[-3.40851974]
<NDArray 2x1 @cpu(0)>
b:
[ 4.20484161]
<NDArray 1 @cpu(0)>

```



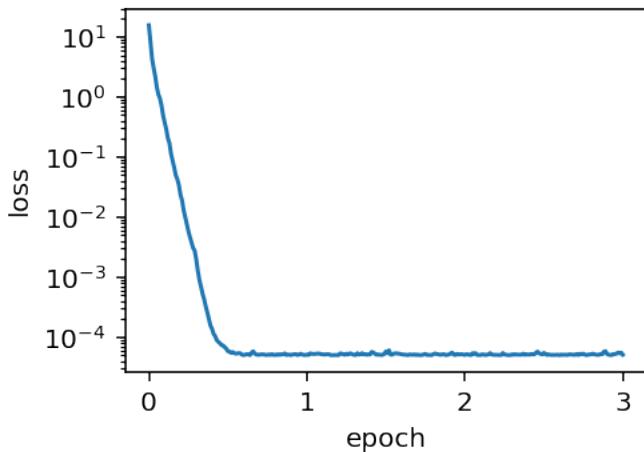
我们将 γ 调大一点，例如 0.999。此时，变量 s 可看作是最近 $1/(1 - 0.999) = 1000$ 个时刻的平方项 $\mathbf{g} \odot \mathbf{g}$ 的加权平均。这时损失函数在迭代后期较平滑。

```

In [6]: optimize(batch_size=10, lr=0.03, gamma=0.999, num_epochs=3, log_interval=10)

w:
[[ 2.00093699
  [-3.39933205]]
<NDArray 2x1 @cpu(0)>
b:
[ 4.19948959]
<NDArray 1 @cpu(0)>

```



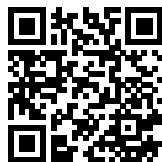
7.8.4 小结

- RMSProp 和 Adagrad 的不同在于， RMSProp 使用了小批量随机梯度按元素平方的指数加权移动平均变量来调整学习率。
- 理解指数加权移动平均有助于我们调节 RMSProp 算法中的超参数，例如 γ 。

7.8.5 练习

- 把 γ 的值设为 0 或 1，观察并分析实验结果。

7.8.6 扫码直达讨论区



7.8.7 参考文献

- [1] Hinton, G., Srivastava, N., & Swersky, K. (2012). Lecture 6a Overview of Mini-batch Gradient Descent. Coursera Lecture Slides.

7.9 RMSProp—使用 Gluon

在 Gluon 里, 使用 RMSProp 很方便, 我们无需重新实现该算法。

首先, 导入实验所需的包。

```
In [1]: %config InlineBackend.figure_format = 'retina'
%matplotlib inline
import sys
import mxnet as mx
from mxnet import autograd, gluon, nd
import numpy as np
sys.path.append('..')
import utils
```

下面生成实验数据集并定义线性回归模型。

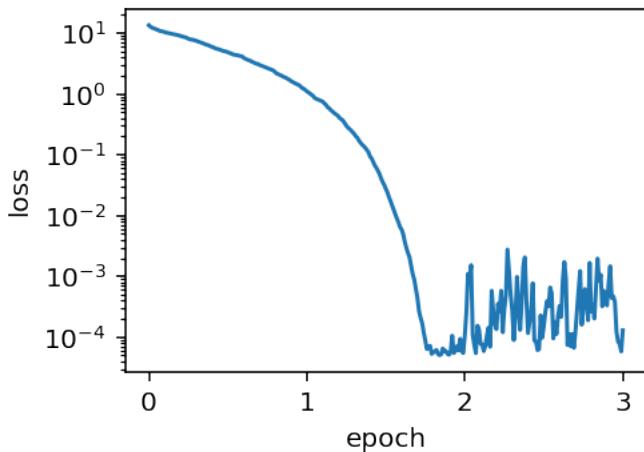
```
In [2]: # 生成数据集。
num_inputs = 2
num_examples = 1000
true_w = [2, -3.4]
true_b = 4.2
X = nd.random.normal(scale=1, shape=(num_examples, num_inputs))
y = true_w[0] * X[:, 0] + true_w[1] * X[:, 1] + true_b
y += 0.01 * nd.random.normal(scale=1, shape=y.shape)

# 线性回归模型。
net = gluon.nn.Sequential()
with net.name_scope():
    net.add(gluon.nn.Dense(1))
```

我们可以在 Trainer 中定义优化算法名称 `rmsprop` 并定义 γ 超参数 `gamma1`。以下几组实验分别重现了“*RMSProp—从零开始*”一节中实验结果。

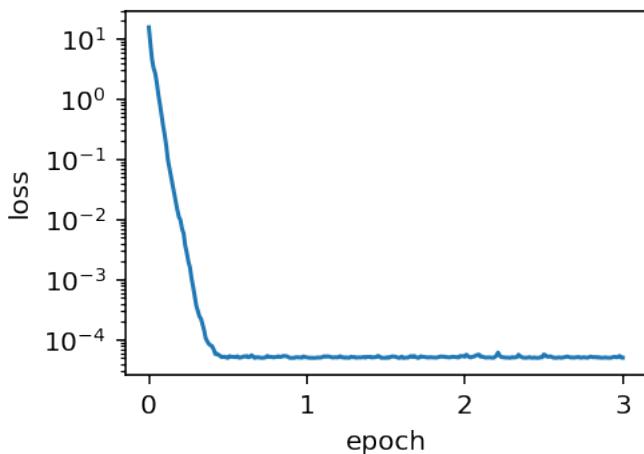
```
In [3]: net.collect_params().initialize(mx.init.Normal(sigma=1), force_reinit=True)
trainer = gluon.Trainer(net.collect_params(), 'rmsprop',
                        {'learning_rate': 0.03, 'gamma1': 0.9})
utils.optimize(batch_size=10, trainer=trainer, num_epochs=3, decay_epoch=None,
               log_interval=10, X=X, y=y, net=net)

w:
[[ 2.00205517 -3.40807843]]
<NDArray 1x2 @cpu(0)>
b:
[ 4.2098465]
<NDArray 1 @cpu(0)>
```



```
In [4]: net.collect_params().initialize(mx.init.Normal(sigma=1), force_reinit=True)
    trainer = gluon.Trainer(net.collect_params(), 'rmsprop',
                           {'learning_rate': 0.03, 'gamma1': 0.999})
    utils.optimize(batch_size=10, trainer=trainer, num_epochs=3, decay_epoch=None,
                  log_interval=10, X=X, y=y, net=net)
```

```
w:  
[[ 2.00028825 -3.40088034]]  
<NDArray 1x2 @cpu(0)>  
b:  
[ 4.20028973]  
<NDArray 1 @cpu(0)>
```



7.9.1 小结

- 使用 Gluon 的 Trainer 可以方便地使用 RMSProp。

7.9.2 练习

- 试着使用其他的初始学习率和 γ 超参数的组合，观察并分析实验结果。

7.9.3 扫码直达讨论区



7.10 Adadelta——从零开始

我们在“*RMSProp*——从零开始”一节中描述了，*RMSProp* 针对 *Adagrad* 在迭代后期可能较难找到有用解的问题，对小批量随机梯度按元素平方项做指数加权移动平均而不是累加。另一种应对该问题的优化算法叫做 *Adadelta* [1]。有意思的是，它没有学习率超参数。

7.10.1 Adadelta 算法

Adadelta 算法也像 *RMSProp* 一样，使用了小批量随机梯度按元素平方的指数加权移动平均变量 s ，并将其中每个元素初始化为 0。给定超参数 ρ 且 $0 \leq \rho < 1$ ，在每次迭代中，*RMSProp* 首先计算小批量随机梯度 g ，然后对该梯度按元素平方项 $g \odot g$ 做指数加权移动平均，记为 s ：

$$s \leftarrow \rho s + (1 - \rho)g \odot g.$$

然后，计算当前需要迭代的目标函数自变量的变化量 g' ：

$$g' \leftarrow \frac{\sqrt{\Delta x + \epsilon}}{\sqrt{s + \epsilon}} \odot g,$$

其中 ϵ 是为了维持数值稳定性而添加的常数，例如 10^{-5} 。和 *Adagrad* 与 *RMSProp* 一样，目标函数自变量中每个元素都分别拥有自己的学习率。上式中 Δx 初始化为零张量，并记录 g' 按元素平方的指数加权移动平均：

$$\Delta x \leftarrow \rho \Delta x + (1 - \rho)g' \odot g'.$$

同样地，最后的自变量迭代步骤与小批量随机梯度下降类似：

$$x \leftarrow x - g'.$$

7.10.2 Adadelta 的实现

Adadelta 的实现很简单。我们只需要把上面的数学公式翻译成代码。

```
In [1]: def adadelta(params, sqrs, deltas, rho, batch_size):
    eps_stable = 1e-5
    for param, sqr, delta in zip(params, sqrs, deltas):
        g = param.grad / batch_size
        sqr[:] = rho * sqr + (1 - rho) * g.square()
        cur_delta = ((delta + eps_stable).sqrt() /
                      (sqr + eps_stable).sqrt() * g)
        delta[:] = rho * delta + (1 - rho) * cur_delta * cur_delta
        param[:] -= cur_delta
```

7.10.3 实验

首先，导入实验所需的包。

```
In [2]: %config InlineBackend.figure_format = 'retina'
%matplotlib inline
import sys
import mxnet as mx
from mxnet import autograd, gluon, nd
import numpy as np
sys.path.append('..')
import utils
```

实验中，我们依然以线性回归为例。设数据集的样本数为 1000，我们使用权重 w 为 $[2, -3.4]$ ，偏差 ‘ b ’ 为 4.2 的线性回归模型来生成数据集。该模型的平方损失函数即所需优化的目标函数，模型参数即目标函数自变量。

我们把算法中变量 s 和 Δx 初始化为和模型参数形状相同的零张量。

```
In [3]: # 生成数据集。
num_inputs = 2
num_examples = 1000
true_w = [2, -3.4]
true_b = 4.2
X = nd.random.normal(scale=1, shape=(num_examples, num_inputs))
y = true_w[0] * X[:, 0] + true_w[1] * X[:, 1] + true_b
y += 0.01 * nd.random.normal(scale=1, shape=y.shape)

# 初始化模型参数。
def init_params():
    w = nd.random.normal(scale=1, shape=(num_inputs, 1))
    b = nd.zeros(shape=(1,))
```

```

params = [w, b]
sqrs = []
deltas = []
for param in params:
    param.attach_grad()
    # 把算法中基于指数加权移动平均的变量初始化为和参数形状相同的零张量。
    sqrs.append(param.zeros_like())
    deltas.append(param.zeros_like())
return params, sqrs, deltas

```

优化函数 `optimize` 与 “*Adagrad——从零开始*” 一节中的类似。

```

In [4]: net = utils.linreg
        squared_loss = utils.squared_loss

def optimize(batch_size, rho, num_epochs, log_interval):
    [w, b], sqrs, deltas = init_params()
    y_vals = [squared_loss(net(X, w, b), y).mean().asnumpy()]
    for epoch in range(1, num_epochs + 1):
        for batch_i, (features, label) in enumerate(
            utils.data_iter(batch_size, num_examples, X, y)):
            with autograd.record():
                output = net(features, w, b)
                loss = squared_loss(output, label)
            loss.backward()
            adadelta([w, b], sqrs, deltas, rho, batch_size)
            if batch_i * batch_size % log_interval == 0:
                y_vals.append(squared_loss(net(X, w, b), y).mean().asnumpy())
    print('w:', w, '\nb:', b, '\n')
    x_vals = np.linspace(0, num_epochs, len(y_vals), endpoint=True)
    utils.semilogy(x_vals, y_vals, 'epoch', 'loss')

```

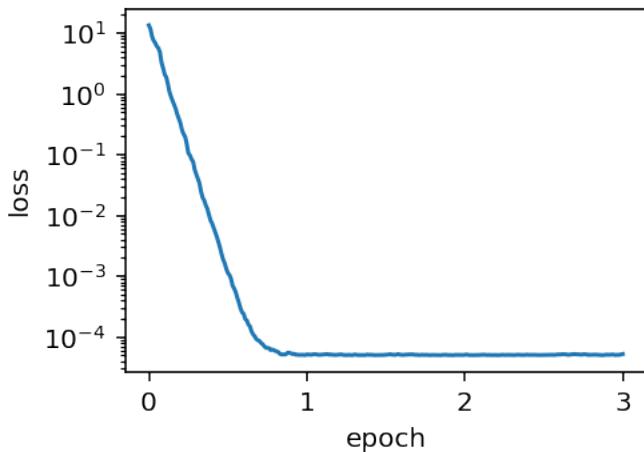
最终，优化所得的模型参数值与它们的真实值较接近。

```

In [5]: optimize(batch_size=10, rho=0.9999, num_epochs=3, log_interval=10)

w:
[[ 1.99985397
  [-3.40177464]]
<NDArray 2x1 @cpu(0)>
b:
[ 4.20134306]
<NDArray 1 @cpu(0)>

```



7.10.4 小结

- Adadelta 没有学习率参数。

7.10.5 练习

- Adadelta 为什么不需要设置学习率超参数？它被什么代替了？

7.10.6 扫码直达讨论区



7.10.7 参考文献

[1] Zeiler, M. D. (2012). ADADELTA: An Adaptive Learning Rate Method. arXiv preprint arXiv:1212.5701.

7.11 Adadelta——使用 Gluon

在 Gluon 里，使用 Adadelta 很容易，我们无需重新实现该算法。

首先，导入实验所需的包。

```
In [1]: %config InlineBackend.figure_format = 'retina'
%matplotlib inline
import sys
import mxnet as mx
from mxnet import autograd, gluon, nd
import numpy as np
sys.path.append('..')
import utils
```

下面生成实验数据集并定义线性回归模型。

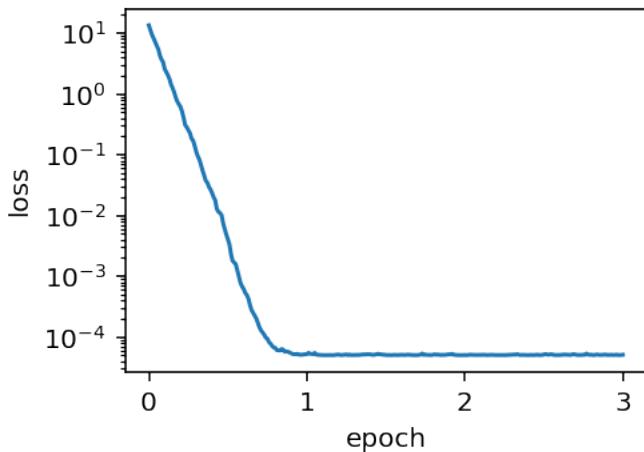
```
In [2]: # 生成数据集。
num_inputs = 2
num_examples = 1000
true_w = [2, -3.4]
true_b = 4.2
X = nd.random.normal(scale=1, shape=(num_examples, num_inputs))
y = true_w[0] * X[:, 0] + true_w[1] * X[:, 1] + true_b
y += 0.01 * nd.random.normal(scale=1, shape=y.shape)

# 线性回归模型。
net = gluon.nn.Sequential()
with net.name_scope():
    net.add(gluon.nn.Dense(1))
```

我们可以在 Trainer 中定义优化算法名称 `adadelta` 并定义 ρ 超参数 `rho`。以下实验重现了“*Adadelta——从零开始*”一节中实验结果。

```
In [3]: net.collect_params().initialize(mx.init.Normal(sigma=1), force_reinit=True)
trainer = gluon.Trainer(net.collect_params(), 'adadelta', {'rho': 0.9999})
utils.optimize(batch_size=10, trainer=trainer, num_epochs=3, decay_epoch=None,
              log_interval=10, X=X, y=y, net=net)

w:
[[ 1.99933875 -3.40097237]]
<NDArray 1x2 @cpu(0)>
b:
[ 4.19994831]
<NDArray 1 @cpu(0)>
```



7.11.1 小结

- 使用 Gluon 的 Trainer 可以方便地使用 Adadelta。

7.11.2 练习

- 如果把试验中的参数 ρ 改小会怎样？观察并分析实验结果。

7.11.3 扫码直达讨论区



7.12 Adam——从零开始

Adam 是一个组合了动量法和 RMSProp 的优化算法 [1]。下面我们来介绍 Adam 算法。

7.12.1 Adam 算法

Adam 算法使用了动量变量 v 和 RMSProp 中小批量随机梯度按元素平方的指数加权移动平均变量 s ，并将它们中每个元素初始化为 0。在每次迭代中，首先计算小批量随机梯度 g ，并递增迭代

次数

$$t \leftarrow t + 1.$$

和动量法类似，给定超参数 β_1 且满足 $0 \leq \beta_1 < 1$ （算法作者建议设为 0.9），将小批量随机梯度 \mathbf{g} 的指数加权移动平均记作动量变量 \mathbf{v} ：

$$\mathbf{v} \leftarrow \beta_1 \mathbf{v} + (1 - \beta_1) \mathbf{g}.$$

和 RMSProp 中一样，给定超参数 β_2 且满足 $0 \leq \beta_2 < 1$ （算法作者建议设为 0.999），将 \mathbf{g} 按元素平方后做指数加权移动平均得到 \mathbf{s} ：

$$\mathbf{s} \leftarrow \beta_2 \mathbf{s} + (1 - \beta_2) \mathbf{g} \odot \mathbf{g}.$$

我们在[动量法——从零开始](#)一节中解释了， \mathbf{v} 和 \mathbf{s} 可分别看作是最近 $1/(1 - \beta_1)$ 个时刻 \mathbf{g} 和最近 $1/(1 - \beta_2)$ 个时刻的 $\mathbf{g} \odot \mathbf{g}$ 的加权平均。假设 $\beta_1 = 0.9$, $\beta_2 = 0.999$ ，如果 \mathbf{v} 和 \mathbf{s} 中的元素都初始化为 0，在时刻 1 我们得到 $\mathbf{v} = 0.1\mathbf{g}$, $\mathbf{s} = 0.001\mathbf{g} \odot \mathbf{g}$ 。实际上，在迭代初期 t 较小时， \mathbf{v} 和 \mathbf{s} 可能过小而无法较准确地估计 \mathbf{g} 和 $\mathbf{g} \odot \mathbf{g}$ 。为此，Adam 算法使用了偏差修正：

$$\hat{\mathbf{v}} \leftarrow \frac{\mathbf{v}}{1 - \beta_1^t},$$

$$\hat{\mathbf{s}} \leftarrow \frac{\mathbf{s}}{1 - \beta_2^t}.$$

由于 $0 \leq \beta_1, \beta_2 < 1$ ，在迭代初期 t 较小时，上面两式的分母较接近 0，相当于放大了 \mathbf{v} 和 \mathbf{s} 的值。当迭代后期 t 较大时，上面两式的分母较接近 1，偏差修正就几乎不再有影响。

接下来，Adam 算法使用以上偏差修正后的动量变量 $\hat{\mathbf{v}}$ 和 RMSProp 中小批量随机梯度按元素平方的指数加权移动平均变量 $\hat{\mathbf{s}}$ ，将模型参数中每个元素的学习率通过按元素运算重新调整：

$$\mathbf{g}' \leftarrow \frac{\eta \hat{\mathbf{v}}}{\sqrt{\hat{\mathbf{s}}} + \epsilon},$$

其中 η 是初始学习率且 $\eta > 0$, ϵ 是为了维持数值稳定性而添加的常数，例如 10^{-8} 。和 Adagrad、RMSProp 以及 Adadelta 一样，目标函数自变量中每个元素都分别拥有自己的学习率。

最后，自变量迭代步骤与小批量随机梯度下降类似：

$$\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{x} - \mathbf{g}'.$$

7.12.2 Adam 的实现

Adam 的实现很简单。我们只需要把上面的数学公式翻译成代码。

```
In [1]: def adam(params, vs, sqrs, lr, batch_size, t):
    beta1 = 0.9
    beta2 = 0.999
    eps_stable = 1e-8
    for param, v, sqr in zip(params, vs, sqrs):
        g = param.grad / batch_size
        v[:] = beta1 * v + (1 - beta1) * g
        sqr[:] = beta2 * sqr + (1 - beta2) * g.square()
        v_bias_corr = v / (1 - beta1 ** t)
        sqr_bias_corr = sqr / (1 - beta2 ** t)
        param[:] = param - lr * v_bias_corr / (
            sqr_bias_corr.sqrt() + eps_stable)
```

7.12.3 实验

首先，导入实验所需的包。

```
In [2]: %config InlineBackend.figure_format = 'retina'
%matplotlib inline
import sys
import mxnet as mx
from mxnet import autograd, gluon, nd
import numpy as np
sys.path.append('..')
import utils
```

实验中，我们依然以线性回归为例。设数据集的样本数为 1000，我们使用权重 w 为 $[2, -3.4]$ ，偏差 “ b ” 为 4.2 的线性回归模型来生成数据集。该模型的平方损失函数即所需优化的目标函数，模型参数即目标函数自变量。

我们把算法中变量 v 和 s 初始化为和模型参数形状相同的零张量。

```
In [3]: # 生成数据集。
num_inputs = 2
num_examples = 1000
true_w = [2, -3.4]
true_b = 4.2
X = nd.random.normal(scale=1, shape=(num_examples, num_inputs))
y = true_w[0] * X[:, 0] + true_w[1] * X[:, 1] + true_b
y += 0.01 * nd.random.normal(scale=1, shape=y.shape)

# 初始化模型参数。
def init_params():
    w = nd.random.normal(scale=1, shape=(num_inputs, 1))
    b = nd.zeros(shape=(1,))
```

```

params = [w, b]
vs = []
sqrs = []
for param in params:
    param.attach_grad()
    # 把算法中基于指数加权移动平均的变量初始化为和参数形状相同的零张量。
    vs.append(param.zeros_like())
    sqrs.append(param.zeros_like())
return params, vs, sqrs

```

优化函数 `optimize` 与 “*Adagrad——从零开始*” 一节中的类似。

```

In [4]: net = utils.linreg
        squared_loss = utils.squared_loss

def optimize(batch_size, lr, num_epochs, log_interval):
    [w, b], vs, sqrs = init_params()
    y_vals = [squared_loss(net(X, w, b), y).mean().asnumpy()]
    t = 0
    for epoch in range(1, num_epochs + 1):
        for batch_i, (features, label) in enumerate(
            utils.data_iter(batch_size, num_examples, X, y)):
            with autograd.record():
                output = net(features, w, b)
                loss = squared_loss(output, label)
                loss.backward()
            # 必须在调用 Adam 前。
            t += 1
            adam([w, b], vs, sqrs, lr, batch_size, t)
            if batch_i * batch_size % log_interval == 0:
                y_vals.append(squared_loss(net(X, w, b), y).mean().asnumpy())
    print('w:', w, '\nb:', b, '\n')
    x_vals = np.linspace(0, num_epochs, len(y_vals), endpoint=True)
    utils.semilogy(x_vals, y_vals, 'epoch', 'loss')

```

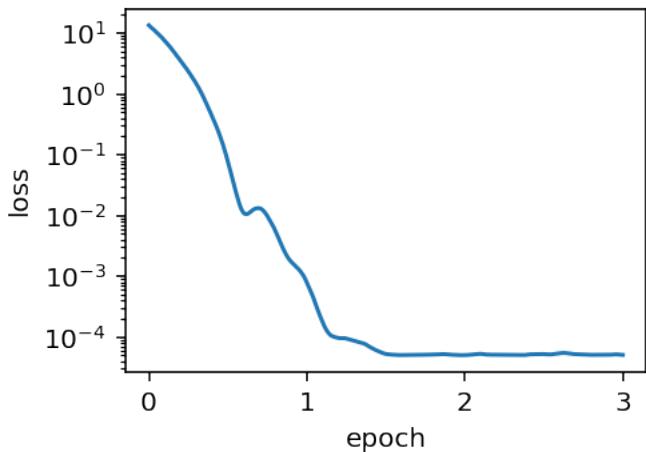
最终，优化所得的模型参数值与它们的真实值较接近。

```

In [5]: optimize(batch_size=10, lr=0.1, num_epochs=3, log_interval=10)

w:
[[ 2.00073004]
 [-3.40039587]]
<NDArray 2x1 @cpu(0)>
b:
[ 4.19991159]
<NDArray 1 @cpu(0)>

```



7.12.4 小结

- Adam 组合了动量法和 RMSProp。
- Adam 使用了偏差修正。

7.12.5 练习

- 使用其他初始学习率, 观察并分析实验结果。

7.12.6 扫码直达讨论区



7.12.7 参考文献

[1] Kingma, D. P., & Ba, J. (2014). Adam: A Method for Stochastic Optimization. arXiv preprint arXiv:1412.6980.

7.13 Adam—使用 Gluon

在 Gluon 里, 使用 Adadelta 很容易, 我们无需重新实现该算法。

首先, 导入实验所需的包。

```
In [1]: %config InlineBackend.figure_format = 'retina'
%matplotlib inline
import sys
import mxnet as mx
from mxnet import autograd, gluon, nd
import numpy as np
sys.path.append('..')
import utils
```

下面生成实验数据集并定义线性回归模型。

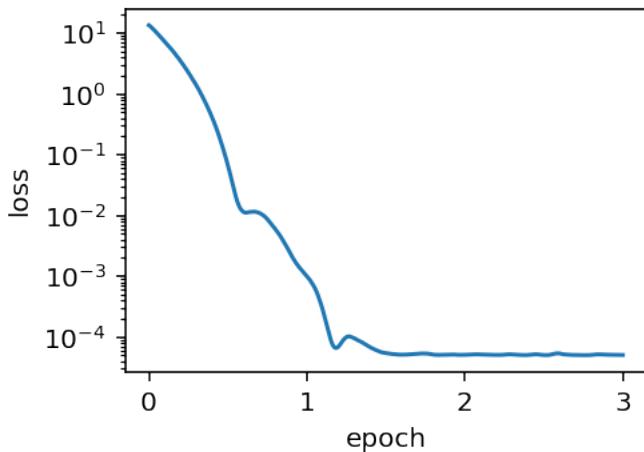
```
In [2]: # 生成数据集。
num_inputs = 2
num_examples = 1000
true_w = [2, -3.4]
true_b = 4.2
X = nd.random.normal(scale=1, shape=(num_examples, num_inputs))
y = true_w[0] * X[:, 0] + true_w[1] * X[:, 1] + true_b
y += 0.01 * nd.random.normal(scale=1, shape=y.shape)

# 线性回归模型。
net = gluon.nn.Sequential()
with net.name_scope():
    net.add(gluon.nn.Dense(1))
```

我们可以在 Trainer 中定义优化算法名称 `adam` 并定义初始学习率。以下实验重现了“*Adam—从零开始*”一节中实验结果。

```
In [3]: net.collect_params().initialize(mx.init.Normal(sigma=1), force_reinit=True)
trainer = gluon.Trainer(net.collect_params(), 'adam', {'learning_rate': 0.1})
utils.optimize(batch_size=10, trainer=trainer, num_epochs=3, decay_epoch=None,
              log_interval=10, X=X, y=y, net=net)

w:
[[ 1.99951255 -3.39966178]]
<NDArray 1x2 @cpu(0)>
b:
[ 4.20093536]
<NDArray 1 @cpu(0)>
```



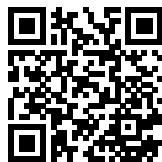
7.13.1 小结

- 使用 Gluon 的 Trainer 可以方便地使用 Adam。

7.13.2 练习

- 总结本章各个优化算法的异同。
- 回顾前面几章中你感兴趣的模型，将训练部分的优化算法替换成其他算法，观察并分析实验现象。

7.13.3 扫码直达讨论区



7.13.4 本章回顾

梯度下降可沉甸，随机降低方差难。

引入动量别弯慢，Adagrad 梯方贪。

Adadelta 学率换，RMSProp 梯方权。

Adam 动量 RMS 伴，优化还需已调参。

注释:

- 梯方: 梯度按元素平方。
- 贪: 因贪婪故而不断累加。
- 学率: 学习率。
- 换: 这个参数被替换掉。
- 权: 指数加权移动平均。

高性能计算

8.1 命令式和符号式混合计算

到目前为止我们看到的教程都使用了命令式的编程。你可能之前都从来没有听说这个词。不过，一直以来我们都是用这个方式写 Python 代码。

考虑下面这段代码：

```
In [1]: def add(A, B):
    return A + B

def fancy_func(A, B, C, D):
    E = add(A, B)
    F = add(C, D)
    G = add(E, F)
    return G

fancy_func(1,2,3,4)
```

Out[1]: 10

正如大家希望的那样，在运行 `E = add(A, B)` 的时候，我们实际上会做加法运算并返回结果。之后的指令 `F =` 和 `G =` 会跟在后面顺序执行。

这个编程方式的主要优点是很自然，大部分用户可能都不会意识还有别的其他的编程方式。但它的不足是可能会慢。这是因为我们不断跟（可能很慢的）Python 的运行环境打交道。即使我们重复

调用了 `add` 三次，我们还是会跟 Python 打三次交道。另外一点是，我们需要保存 `E` 和 `F` 的结果直到 `fancy_func` 结束。因为之前我们不知道是不是还会有谁用这些结果。

事实上这里不同的打开方式。其中一个叫**符号式编程**，大部分的深度学习框架包括 Theano 和 TensorFlow 用了这种方式。通常这个方式的程序需要下面三个步骤：

1. 定义计算流程
2. 编译成可执行的程序
3. 给定输入调用编译好的程序

我们重新实现上面的程序：

```
In [2]: def add_str():
    return ...
def add(A, B):
    return A + B
...
def fancy_func_str():
    return ...
def fancy_func(A, B, C, D):
    E = add(A, B)
    F = add(C, D)
    G = add(E, F)
    return G
...
def evoke_str():
    return add_str() + fancy_func_str() + ...
print(fancy_func(1,2,3,4))
...
prog = evoke_str()
y = compile(prog, '', 'exec')
exec(y)
```

10

可以看到我们定义的三个函数都只是返回计算流程。之后我们编译再执行。在编译的时候系统能够看到整个程序，因此有更多的优化空间。例如编译的时候可以将程序改写成 `print((1+2)+(3+4))`，甚至直接 `print(10)`。这里我们不仅减少了函数调用，同时节省了内存。

总结一下

- **命令式编程更方便。** 当我们在 Python 里用一个命令式编程库时，我们在写 Python 代码，

绝大部分代码很符合直觉。同样很容易逮 BUG, 因为我们可以拿到所有中间变量值, 我们可以简单打印它们, 或者使用 Python 的 debug 工具。

- **符号式编程更加高效而且更容易移植。** 之前我们提到在编译的时候系统可以容易的做更多的优化。另外一个好处是可以将程序变成一个与 Python 无关的格式, 从而我们可以在非 Python 环境下运行。

8.1.1 使用 `hybridize` 来拿到两者的好处

大部分的深度学习框架通常在命令式和符号式之间二选一。例如 Theano 和它启发的后来者, 例如 TensorFlow, 使用了符号式。Chainer 和它的追随者 PyTorch 使用了命令式。在设计 Gluon 的时候我们问了这个问题: 可能拿到命令式的全部好处, 但仍然享受符号式的优势吗? 从另一方面来说, 用户应该用纯命令式的方法来使用 Gluon 进行开发和调试。但当需要产品级别的性能和部署的时候, 我们可以将代码, 至少大部分, 转换成符号式来运行。

事实这一点可以做到。我们可以通过使用 `HybridBlock` 或者 `HybridSequential` 来构建神经网络。默认他们跟 `Block` 和 `Sequential` 一样使用命令式执行。当我们调用 `.hybridize()` 后, 系统会转换成符号式来执行。事实上, 所有 Gluon 里定义的层全是 `HybridBlock`, 这个意味着大部分的神经网络都可以享受符号式执行的优势。

8.1.2 `HybridSequential`

我们之前学习了如何使用 `Sequential` 来串联多个层。如果你想要它跑得飞快, 那你应该考虑替换成 `HybridSequential`。

```
In [3]: from mxnet.gluon import nn
        from mxnet import nd

        def get_net():
            net = nn.HybridSequential()
            with net.name_scope():
                net.add(
                    nn.Dense(256, activation="relu"),
                    nn.Dense(128, activation="relu"),
                    nn.Dense(2)
                )
            net.initialize()
            return net

            x = nd.random.normal(shape=(1, 512))
            net = get_net()
            net(x)
```

Out[3]:

```
[[ 0.08827581  0.00505182]]  
<NDArray 1x2 @cpu(0)>
```

我们可以通过 `hybridize` 来编译和优化 `HybridSequential`。

In [4]: `net.hybridize()`
`net(x)`

Out[4]:

```
[[ 0.08827581  0.00505182]]  
<NDArray 1x2 @cpu(0)>
```

注意到只有继承自 `HybridBlock` 的层才会被优化。`HybridSequential` 和 Gluon 提供的层都是它的子类。如果一个层只是继承自 `Block`，那么我们将跳过优化。我们会接下会讨论如何使用 `HybridBlock`。

8.1.3 性能

我们比较 `hybridize` 前和后的计算时间来展示符号式执行的性能提升。这里我们计时 1000 次 `forward`:

```
In [5]: from time import time  
  
def bench(net, x):  
    start = time()  
    for i in range(1000):  
        y = net(x)  
    # 等待所有计算完成  
    nd.waitall()  
    return time() - start  
  
net = get_net()  
print('Before hybridizing: %.4f sec'%(bench(net, x)))  
net.hybridize()  
print('After hybridizing: %.4f sec'%(bench(net, x)))  
  
Before hybridizing: 0.3247 sec  
After hybridizing: 0.1924 sec
```

可以看到 `hybridize` 提供近似两倍的加速。

8.1.4 获取符号式的程序

之前我们给 `net` 输入 `NDArray` 类型的 `x`, 然后 `net(x)` 会直接返回结果。对于调用过 `hybridize()` 后的网络, 我们可以给它输入一个 `Symbol` 类型的变量, 其会返回同样是 `Symbol` 类型的程序。

In [6]: `from mxnet import sym`

```
x = sym.var('data')
y = net(x)
y
```

Out[6]: <Symbol hybridsequential1_dense2_fwd>

我们可以通过 `export()` 来保存这个程序到硬盘。它可以之后不仅被 Python, 同时也可以其他支持的前端语言, 例如 C++, Scala, R…, 读取。

TODO(mli) export 需要 `mxnet>=0.11.1b20171015`, 样例之后放进来。

8.1.5 通过 HybridBlock 深入理解 hybridize 工作机制

前面我们展示了通过 `hybridize` 我们可以获得更好的性能和更高的移植性。现在我们来解释这个是如何影响灵活性的。记得我们提过 gluon 里面的 `Sequential` 是 `Block` 的一个便利形式, 同理, 可以 `HybridSequential` 是 `HybridBlock` 的子类。跟 `Block` 需要实现 `forward` 方法不一样, 对于 `HybridBlock` 我们需要实现 `hybrid_forward` 方法。

```
In [7]: class HybridNet(nn.HybridBlock):
    def __init__(self, **kwargs):
        super(HybridNet, self).__init__(**kwargs)
        with self.name_scope():
            self.fc1 = nn.Dense(10)
            self.fc2 = nn.Dense(2)

    def hybrid_forward(self, F, x):
        print(F)
        print(x)
        x = F.relu(self.fc1(x))
        print(x)
        return self.fc2(x)
```

`hybrid_forward` 方法加入了额外的输入 `F`, 它使用了 MXNet 的一个独特的特征。MXNet 有一个符号式的 API (`symbol`) 和命令式的 API (`ndarray`)。这两个接口里面的函数基本是一致的。系统会根据输入来决定 `F` 是使用 `symbol` 还是 `ndarray`。

我们实例化一个样例，然后可以看到默认 F 是使用 ndarray。而且我们打印出了输入和第一层 relu 的输出。

```
In [8]: net = HybridNet()
    net.initialize()
    x = nd.random.normal(shape=(1, 4))
    y = net(x)

<module 'mxnet.ndarray' from '/var/lib/jenkins/miniconda3/envs/gluon_zh_docs/lib/python3.6/site-packages/mxnet/ndarray/__init__.py'>

[[-0.12225834  0.5429998 -0.94693518  0.59643304]]
<NDArray 1x4 @cpu(0)>

[[ 0.11134676  0.04770704  0.05341475  0.          0.08091211  0.          0.
  0.04143535  0.          0.          ]]
<NDArray 1x10 @cpu(0)>
```

再运行一次会得到同样的结果。

```
In [9]: y = net(x)

<module 'mxnet.ndarray' from '/var/lib/jenkins/miniconda3/envs/gluon_zh_docs/lib/python3.6/site-packages/mxnet/ndarray/__init__.py'>

[[-0.12225834  0.5429998 -0.94693518  0.59643304]]
<NDArray 1x4 @cpu(0)>

[[ 0.11134676  0.04770704  0.05341475  0.          0.08091211  0.          0.
  0.04143535  0.          0.          ]]
<NDArray 1x10 @cpu(0)>
```

接下来看看 hybridize 后会发生什么。

```
In [10]: net.hybridize()
    y = net(x)

<module 'mxnet.symbol' from '/var/lib/jenkins/miniconda3/envs/gluon_zh_docs/lib/python3.6/site-packages/mxnet/symbol/__init__.py'>
<Symbol data>
<Symbol hybridnet0_relu0>
```

可以看到：

1. F 变成了 symbol.
2. 即使输入数据还是 NDArray 的类型，但 hybrid_forward 里不论是输入还是中间输出，全部变成了 Symbol

再运行一次看看

```
In [11]: y = net(x)
```

可以看到什么都没有输出。这是因为第一次 `net(x)` 的时候，会先将输入替换成 `Symbol` 来构建符号式的程序，之后运行的时候系统将不再访问 Python 的代码，而是直接在 C++ 后端执行这个符号式程序。这是为什么 `hybridize` 后会变快的一个原因。

但它可能的问题是我们损失写程序的灵活性。因为 Python 的代码只执行一次，而且是符号式的执行，那么使用 `print` 来调试，或者使用 `if` 和 `for` 来做复杂的控制都不可能了。

8.1.6 小结

- 通过 `HybridSequential` 和 `HybridBlock`，我们可以简单的用 `hybridize` 来将命令式的程序转成符号式程序。我们推荐大家尽可能的使用这个来获得最好的性能加速。

8.1.7 扫码直达讨论区



8.2 惰性计算

MXNet 使用惰性计算来提升系统性能。绝大部分情况下我们不用知道它的存在，因为它不会对正常使用带来影响。但理解它的工作原理有助于开发更高效的程序。

延迟执行是指命令可以等到之后它的结果真正的需要的时候再执行。我们先来看一个例子：

```
In [1]: a = 1 + 1
      # some other things
      print(a)
```

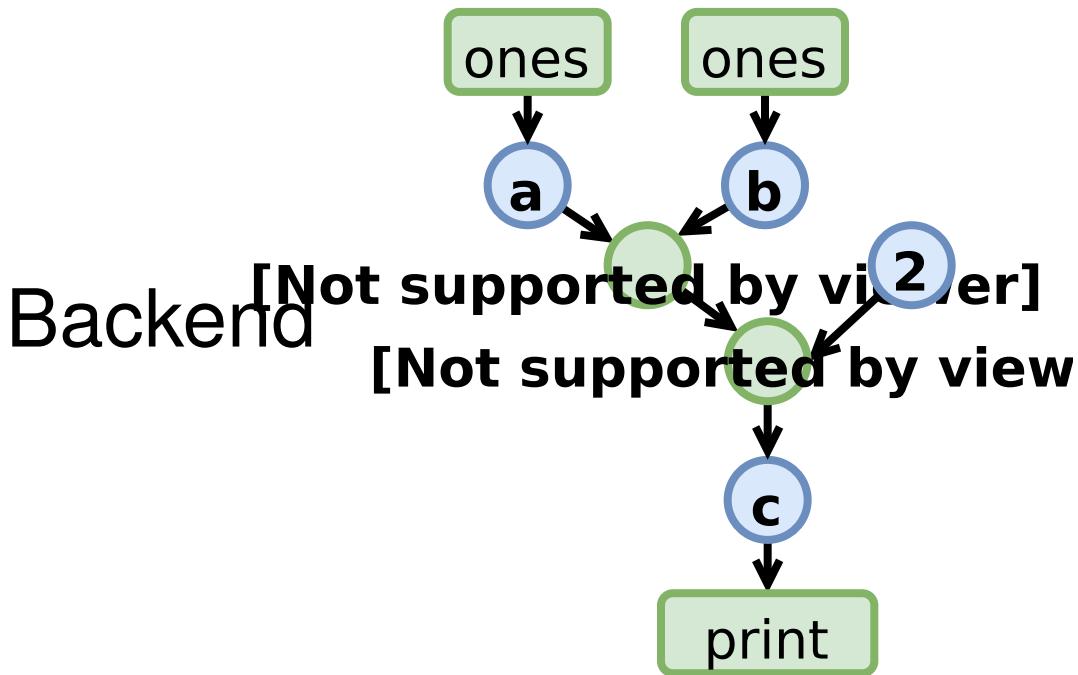
2

第一句对 `a` 赋值，再执行一些其他指令后打印 `a` 的结果。因为这里我们可能很久以后才用 `a` 的值，所以我们可以把它的执行延迟到后面。这样的主要好处是在执行之前系统可以看到后面指令，从而有更多机会来对程序进行优化。例如如果 `a` 在被使用前被重新赋值了，那么我们可以不需要真正执行第一条语句。

在 MXNet 里，我们把用户打交道的部分叫做前端。例如这个教程里我们一直在使用 Python 前端写代码。除了 Python 外，MXNet 还支持其他例如 Scala, R, C++ 的前端。不管使用什么前端，MXNet 的程序执行主要都在 C++ 后端。前端只是把程序传给后端。后端有自己的线程来不断的收集任务，构造计算图，优化，并执行。本章我们介绍后端优化之一：延迟执行。

考虑下图的样例，我们在前端调用四条语句，它们被后端的线程分析依赖并构建成计算图。

Frontend [Not supported by viewer]



在延迟执行中，前端执行前三个语句的时候，它仅仅是把任务放进后端的队列里就返回了。当在需要打印结果时，前端会等待后端线程把 c 的结果计算完。

这个设计的一个好处是前端，就是 Python 线程，不需要做实际计算工作，从而不管 Python 的性能如何，它对整个程序的影响会很小。只需要 C++ 后端足够高效，那么不管前端语言性能如何，都可以提供一致的性能。

下面的例子通过计时来展示了延后执行的效果。可以看到，当 $y=\dots$ 返回的时候并没有等待它真的被计算完。

```
In [2]: from mxnet import nd
from time import time

start = time()
x = nd.random_uniform(shape=(2000,2000))
y = nd.dot(x, x)
print('workloads are queued:\t%f sec' % (time() - start))
print(y)
print('workloads are finished:\t%f sec' % (time() - start))

workloads are queued: 0.000897 sec

[[ 501.15838623  508.29724121  495.65237427 ... ,  492.8470459  492.69091797
 490.0480957 ]
 [ 508.81057739  507.18218994  495.17428589 ... ,  503.10525513
 497.29315186  493.6791687 ]
 [ 489.565979    499.47015381  490.17721558 ... ,  490.99945068
 488.05007935  483.2883606 ]
 ...
 [ 484.00189209  495.71789551  479.92141724 ... ,  493.69952393
 478.89193726  487.20739746]
 [ 499.64932251  507.65093994  497.59381104 ... ,  493.0473938  500.74511719
 495.82711792]
 [ 516.01428223  519.17150879  506.35400391 ... ,  510.08877563  496.3560791
 495.42523193]]
<NDArray 2000x2000 @cpu(0)>
workloads are finished: 0.149934 sec
```

延迟执行大部分情况是对用户透明的。因为除非我们需要打印或者保存结果外，我们基本不需要关心目前是不是结果在内存里面已经计算好了。

事实上，只要数据是保存在 NDArray 里，而且使用 MXNet 提供的运算子，后端将默认使用延迟执行来获取最大的性能。

8.2.1 立即获取结果

除了前面介绍的 `print` 外，我们还有别的方法可以让前端线程等待直到结果完成。我们可以使用 `nd.NDArray.wait_to_read()` 等待直到特定结果完成，或者 `nd.waitall()` 等待所有前面结果完成。后者是测试性能常用方法。

```
In [3]: start = time()
y = nd.dot(x, x)
y.wait_to_read()
time() - start
```

```
Out[3]: 0.12767291069030762
```

```
In [4]: start = time()
y = nd.dot(x, x)
z = nd.dot(x, x)
nd.waitall()
time() - start
```

```
Out[4]: 0.25170183181762695
```

任何方法将内容从 NDArray 搬运到其他不支持延迟执行的数据结构里都会触发等待，例如 `asnumpy()`, `asscalar()`

```
In [5]: start = time()
y = nd.dot(x, x)
y.asnumpy()
time() - start
```

```
Out[5]: 0.13374066352844238
```

```
In [6]: start = time()
y = nd.dot(x, x)
y.norm().asscalar()
time() - start
```

```
Out[6]: 0.16390252113342285
```

8.2.2 延迟执行带来的便利

下面例子中，我们不断的对 `y` 进行赋值。如果每次我们需要等到 `y` 的值，那么我们必须要计算它。而在延迟执行里，系统有可能省略掉一些执行。

```
In [7]: start = time()

for i in range(1000):
    y = x + 1
    y.wait_to_read()

print('No lazy evaluation: %f sec' % (time()-start))

start = time()
for i in range(1000):
    y = x + 1
    nd.waitall()
print('With evaluation: %f sec' % (time()-start))
```

```
No lazy evaluation: 1.064265 sec
```

```
With evaluation: 0.737425 sec
```

8.2.3 延迟执行带来的影响

在延迟执行里, 只要最终结果是一致的, 系统可能使用跟代码不一样的顺序来执行, 例如假设我们写

```
In [8]: a = 1
        b = 2
        a + b
```

```
Out[8]: 3
```

第一句和第二句之间没有依赖, 所以把 `b=2` 提前到 `a=1` 前执行也是可以的。但这样可能会导致内存使用的变化。

下面我们列举几个在训练和预测中常见的现象。一般每个批量我们都会评测一下, 例如计算损失或者精度, 其中会用到 `asscalar` 或者 `asnumpy`。这样我们会每次仅仅将一个批量的任务放进后端系统执行。但如果我们将这些同步函数, 会导致我们将大量的批量任务同时放进系统, 从而可能导致系统占用过多资源。

为了演示这种情况, 我们定义一个数据获取函数, 它会打印什么数据是什么时候被请求的。

```
In [9]: def get_data():
    start = time()
    batch_size = 1024
    for i in range(60):
        if i % 10 == 0:
            print('batch %d, time %f sec' %(i, time()-start))
        x = nd.ones((batch_size, 1024))
        y = nd.ones((batch_size,))
        yield x, y
```

使用两层网络和 L2 损失函数作为样例

```
In [10]: from mxnet import gluon
        from mxnet.gluon import nn

        net = nn.Sequential()
        with net.name_scope():
            net.add(
                nn.Dense(1024, activation='relu'),
                nn.Dense(1024, activation='relu'),
                nn.Dense(1),
            )
        net.initialize()
        trainer = gluon.Trainer(net.collect_params(), 'sgd', {})
        loss = gluon.loss.L2Loss()
```

我们定义辅助函数来监测内存的使用（只能在 Linux 运行）

```
In [11]: import os
        import subprocess

        def get_mem():
            """get memory usage in MB"""
            res = subprocess.check_output(['ps', 'u', '-p', str(os.getpid())])
            return int(str(res).split()[15])/1e3
```

现在我们可以做测试了。我们先试运行一次让系统把 `net` 的参数初始化（回忆[延后初始化](#)）。

```
In [12]: for x, y in get_data():
            break
            loss(y, net(x)).wait_to_read()

batch 0, time 0.000002 sec
```

如果我们用 `net` 来做预测，正常情况下对每个批量的结果我们把它复制出 NDArray，例如打印或者保存在磁盘上。这里我们简单使用 `wait_to_read` 来模拟。

```
In [13]: mem = get_mem()

        for x, y in get_data():
            loss(y, net(x)).wait_to_read()
            nd.waitall()

            print('Increased memory %f MB' % (get_mem() - mem))

batch 0, time 0.000004 sec
batch 10, time 0.375623 sec
batch 20, time 0.743287 sec
batch 30, time 1.110233 sec
batch 40, time 1.476723 sec
batch 50, time 1.844460 sec
Increased memory 12.304000 MB
```

假设我们不使用 `wait_to_read()`，那么前端会将所有批量的计算一次性的添加进后端。可以看到每个批量的数据都会在很短的时间内生成，同时在接下来的数秒钟内，我们看到了内存的增长（包括了在内存中保存所有 `x` 和 `y`）。

```
In [14]: mem = get_mem()

        for x, y in get_data():
            loss(y, net(x))

            nd.waitall()
            print('Increased memory %f MB' % (get_mem() - mem))
```

```
batch 0, time 0.000003 sec
batch 10, time 0.007161 sec
batch 20, time 0.012870 sec
batch 30, time 0.019389 sec
batch 40, time 0.025143 sec
batch 50, time 0.030979 sec
Increased memory 53.436000 MB
```

同样对于训练, 如果我们每次计算损失, 那么就加入了同步

```
In [15]: from mxnet import autograd
```

```
mem = get_mem()

total_loss = 0
for x, y in get_data():
    with autograd.record():
        L = loss(y, net(x))
    total_loss += L.sum().asscalar()
    L.backward()
    trainer.step(x.shape[0])

nd.waitall()
print('Increased memory %f MB' % (get_mem() - mem))

batch 0, time 0.000003 sec
batch 10, time 0.992456 sec
batch 20, time 2.042318 sec
batch 30, time 3.091896 sec
batch 40, time 4.141078 sec
batch 50, time 5.190664 sec
Increased memory -3.272000 MB
```

但如果不去掉同步, 同样会首先把数据全部生成好, 导致占用大量内存。

```
In [16]: from mxnet import autograd
```

```
mem = get_mem()

total_loss = 0
for x, y in get_data():
    with autograd.record():
        L = loss(y, net(x))
    L.backward()
    trainer.step(x.shape[0])

nd.waitall()
```

```
print('Increased memory %f MB' % (get_mem() - mem))

batch 0, time 0.000003 sec
batch 10, time 0.016801 sec
batch 20, time 0.031158 sec
batch 30, time 0.045576 sec
batch 40, time 0.059865 sec
batch 50, time 0.074659 sec
Increased memory 221.220000 MB
```

8.2.4 小结

- 延后执行使得系统有更多空间来做性能优化。但我们推荐每个批量里至少有一个同步函数，例如对损失函数进行评估，来避免将过多任务同时丢进后端系统。

8.2.5 练习

- 为什么同步版本的训练中，我们看到了内存使用的大量下降？

8.2.6 扫码直达讨论区

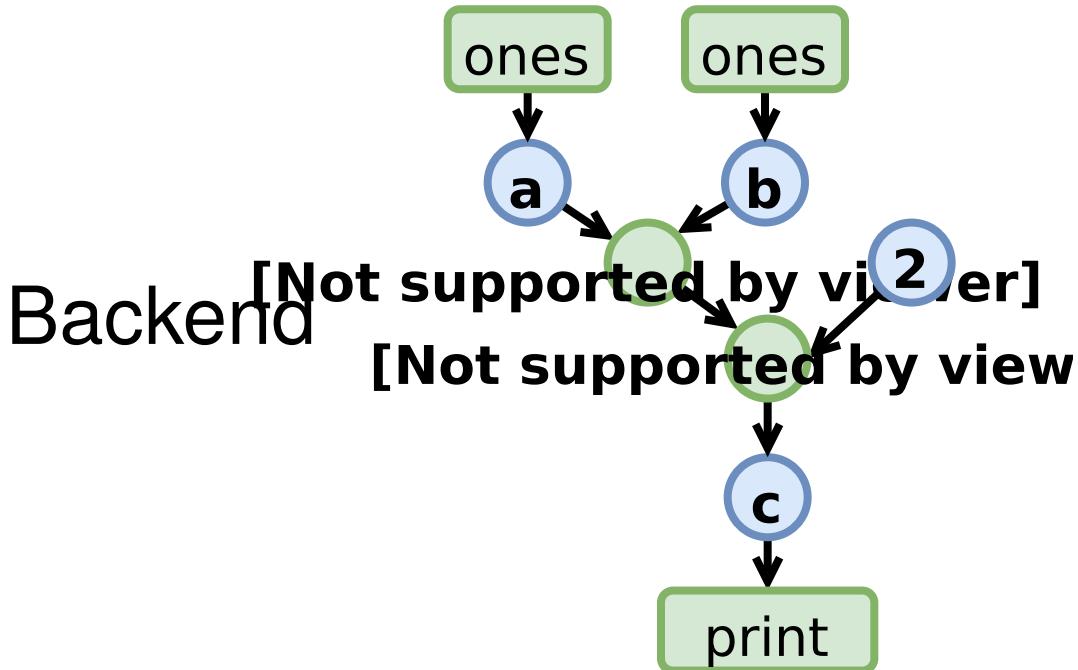


8.3 自动并行

在惰性计算里我们提到后端系统会自动构建计算图。通过计算图系统可以知道所有计算的依赖关系，有了它系统可以选择将没有依赖关系任务同时执行来获得性能的提升。

仍然考虑下面这个例子，这里 `a = ...` 和 `b = ...` 之间没有数据依赖关系，从而系统可以选择并行执行他们。

Frontend [Not supported by viewer]



通常一个运算符，例如 `+` 或者 `dot`，会用掉一个计算设备上所有计算资源。`dot` 同样用到所有 CPU 的核（即使是有多个 CPU）和单 GPU 上所有线程。因此在单设备上并行运行多个运算符可能效果并不明显。自动并行主要的用途是多设备的计算并行，和计算与通讯的并行。

【注意】本章需要至少一个 GPU 才能运行。

8.3.1 多设备的并行计算

我们首先定义一个函数，它做 10 次矩阵乘法。

```
In [1]: from mxnet import nd

def run(x):
    """push 10 matrix-matrix multiplications"""
    return [nd.dot(x,x) for i in range(10)]
```

我们分别计算在 CPU 和 GPU 上运行时间

```
In [2]: from mxnet import gpu
        from time import time

        x_cpu = nd.random.uniform(shape=(2000,2000))
        x_gpu = nd.random.uniform(shape=(6000,6000), ctx=gpu(0))
        nd.waitall()

        # warm up
        run(x_cpu)
        run(x_gpu)
        nd.waitall()

        start = time()
        run(x_cpu)
        nd.waitall()
        print('Run on CPU: %f sec'%(time()-start))

        start = time()
        run(x_gpu)
        nd.waitall()
        print('Run on GPU: %f sec'%(time()-start))
```

Run on CPU: 1.226683 sec

Run on GPU: 1.184334 sec

我们去掉两次 `run` 之间的 `waitall`, 希望系统能自动并行这两个任务:

```
In [3]: start = time()
        run(x_cpu)
        run(x_gpu)
        #nd.waitall()
        print('Run on both CPU and GPU: %f sec'%(time()-start))
```

Run on both CPU and GPU: 1.229091 sec

可以看到两个一起执行时, 总时间不是分开执行的总和。这个表示后端系统能有效并行执行它们。

8.3.2 计算和通讯的并行

在多设备计算中, 我们经常需要在设备之间复制数据。例如下面我们在 GPU 上计算, 然后将结果复制回 CPU。

```
In [4]: from mxnet import cpu
```

```

def copy_to_cpu(x):
    """copy data to a device"""
    return [y.copyto(cpu()) for y in x]

start = time()
y = run(x_gpu)
nd.waitall()
print('Run on GPU: %f sec'%(time()-start))

start = time()
copy_to_cpu(y)
nd.waitall()
print('Copy to CPU: %f sec'%(time() - start))

```

Run on GPU: 1.187553 sec
 Copy to CPU: 0.519840 sec

同样我们去掉运行和复制之间的 `waitall`:

```

In [5]: start = time()
y = run(x_gpu)
copy_to_cpu(y)
#nd.waitall()
t = time() - start
print('Run on GPU then Copy to CPU: %f sec'%(time() - start))

Run on GPU then Copy to CPU: 1.244428 sec

```

可以看到总时间小于前面两者之和。这个任务稍微不同于上面，因为运行和复制之间有依赖关系。就是 $y[i]$ 必须先计算好才能复制到 CPU。但在计算 $y[i]$ 的时候系统可以复制 $y[i-1]$ ，从而获得总运行时间的减少。

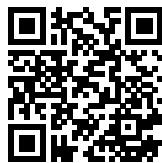
8.3.3 小结

- MXNet 能够自动并行执行没有数据依赖关系的任务从而提升系统性能。

8.3.4 练习

- `run` 里面计算了 10 次运算，他们也没有依赖关系。看看系统有没有自动并行执行他们
- 试试有更加复杂数据依赖的任务，看看系统能不能得到正确的结果，而且性能有提升吗？

8.3.5 扫码直达讨论区



8.4 多 GPU 训练模型——从零开始

本教程我们将展示如何使用多个 GPU 来加速训练。正如你期望的那样，这个教程需要至少两块 GPU 来运行。事实上，一台机器上安装多块 GPU 非常常见，因为通常主板上会有多个 PCIe 插槽。下图是一台服务器上安装了 8 块 Titan X。



如果正确安装了 NVIDIA 驱动，我们可以通过 `nvidia-smi` 来查看当前系统有多少个 GPU。

```
In [1]: !nvidia-smi
```

```
Wed Apr 11 00:07:44 2018
```

```
+-----+  
| NVIDIA-SMI 375.26 | Driver Version: 375.26 |  
+-----+-----+-----+  
| GPU Name Persistence-M| Bus-Id Disp.A | Volatile Uncorr. ECC |  
+-----+-----+-----+
```

```

| Fan Temp Perf Pwr:Usage/Cap| Memory-Usage | GPU-Util Compute M. |
|=====+=====+=====+=====+=====+=====+=====+=====|
| 0 Tesla M60      On | 0000:00:1D.0     Off |          0 |
| N/A 39C P0    38W / 150W | 298MiB / 7612MiB | 0% Default |
+-----+-----+-----+-----+
| 1 Tesla M60      On | 0000:00:1E.0     Off |          0 |
| N/A 48C P0    38W / 150W | 289MiB / 7612MiB | 0% Default |
+-----+-----+-----+-----+
+-----+-----+
| Processes:                                GPU Memory |
| GPU      PID  Type  Process name           Usage   |
|=====+=====+=====+=====+=====+=====|
+-----+

```

在自动并行里我们提到虽然大部分的运算可以要么全部使用所有的 CPU 计算资源，或者单 GPU 的资源。但对于多 GPU 的情况，我们仍然需要来实现对应的算法。这些算法中最常用的叫做数据并行。

8.4.1 数据并行

数据并行目前是深度学习里面使用最广泛的用来将任务划分到多设备的办法。它是这样工作的，假设这里有 k 个 GPU，每个 GPU 将维护一个模型参数的复制。然后每次我们将一个批量里面的样本划分成 k 块并分每个 GPU 一块。每个 GPU 使用分到的数据计算梯度。然后我们将所有 GPU 上梯度相加得到这个批量上的完整梯度。之后每个 GPU 使用这个完整梯度对自己维护的模型做更新。

8.4.2 定义模型

我们使用卷积神经网络—从 0 开始里介绍的 LeNet 来作为本章的样例任务。

```
In [2]: from mxnet import nd
        from mxnet import gluon

        # initialize parameters
        scale = .01
        W1 = nd.random.normal(shape=(20, 1, 3, 3))*scale
        b1 = nd.zeros(shape=20)
        W2 = nd.random.normal(shape=(50, 20, 5, 5))*scale
        b2 = nd.zeros(shape=50)
        W3 = nd.random.normal(shape=(800, 128))*scale
        b3 = nd.zeros(shape=128)
        W4 = nd.random.normal(shape=(128, 10))*scale
```

```
b4 = nd.zeros(shape=10)
params = [W1, b1, W2, b2, W3, b3, W4, b4]

# network and loss
def lenet(X, params):
    # first conv
    h1_conv = nd.Convolution(data=X, weight=params[0], bias=params[1],
                             kernel=(3,3), num_filter=20)
    h1_activation = nd.relu(h1_conv)
    h1 = nd.Pooling(data=h1_activation, pool_type="avg",
                     kernel=(2,2), stride=(2,2))

    # second conv
    h2_conv = nd.Convolution(data=h1, weight=params[2], bias=params[3],
                             kernel=(5,5), num_filter=50)
    h2_activation = nd.relu(h2_conv)
    h2 = nd.Pooling(data=h2_activation, pool_type="avg",
                     kernel=(2,2), stride=(2,2))
    h2 = nd.flatten(h2)

    # first dense
    h3_linear = nd.dot(h2, params[4]) + params[5]
    h3 = nd.relu(h3_linear)

    # second dense
    yhat = nd.dot(h3, params[6]) + params[7]
    return yhat

loss = gluon.loss.SoftmaxCrossEntropyLoss()
```

然后我们先实现几个在 GPU 同步数据的辅助函数。

8.4.3 在多 GPU 之间同步数据

下面函数将模型参数复制到某个特定设备并初始化梯度。

```
In [3]: from mxnet import gpu
```

```
def get_params(params, ctx):
    new_params = [p.copyto(ctx) for p in params]
    for p in new_params:
        p.attach_grad()
    return new_params

# copy param to GPU(0)
new_params = get_params(params, gpu(0))
print('b1 weight = ', new_params[1])
print('b1 grad = ', new_params[1].grad)
```

```
b1_weight =
[ 0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.
 0.  0.]
<NDArray 20 @gpu(0)>
b1_grad =
[ 0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.
 0.  0.]
<NDArray 20 @gpu(0)>
```

给定分布在多个 GPU 之间数据, 我们定义一个函数它将这些数据加起来, 然后再广播到所有 GPU 上。

```
In [4]: def allreduce(data):
    # sum on data[0].context, and then broadcast
    for i in range(1, len(data)):
        data[0][:] += data[i].copyto(data[0].context)
    for i in range(1, len(data)):
        data[0].copyto(data[i])

data = [nd.ones((1,2), ctx=gpu(i))*(i+1) for i in range(2)]
print('Before:', data)
allreduce(data)
print('After:', data)
```

```
Before: [
[[ 1.  1.]]
<NDArray 1x2 @gpu(0)>,
[[ 2.  2.]]
<NDArray 1x2 @gpu(1)>]
After: [
[[ 3.  3.]]
<NDArray 1x2 @gpu(0)>,
[[ 3.  3.]]
<NDArray 1x2 @gpu(1)>]
```

最后给定一个批量, 我们划分它并复制到各个 GPU 上。

```
In [5]: def split_and_load(data, ctx):
    n, k = data.shape[0], len(ctx)
    m = n // k
    assert m * k == n, '# examples is not divided by # devices'
    return [data[i*m:(i+1)*m].as_in_context(ctx[i]) for i in range(k)]

batch = nd.arange(16).reshape((4,4))
ctx = [gpu(0), gpu(1)]
splitted = split_and_load(batch, ctx)
```

```
print('Input: ', batch)
print('Load into', ctx)
print('Output:', splitted)

Input:
[[ 0.  1.  2.  3.]
 [ 4.  5.  6.  7.]
 [ 8.  9. 10. 11.]
 [12. 13. 14. 15.]]
<NDArray 4x4 @cpu(0)>
Load into [gpu(0), gpu(1)]
Output: [
[[ 0.  1.  2.  3.]
 [ 4.  5.  6.  7.]]
<NDArray 2x4 @gpu(0)>,
[[ 8.  9. 10. 11.]
 [12. 13. 14. 15.]]
<NDArray 2x4 @gpu(1)>]
```

8.4.4 训练一个批量

现在我们可以实现如何使用数据并行在多个 GPU 上训练一个批量了。

```
In [6]: from mxnet import autograd
import sys
sys.path.append('..')
import utils

def train_batch(data, label, params, ctx, lr):
    # split the data batch and load them on GPUs
    data_list = split_and_load(data, ctx)
    label_list = split_and_load(label, ctx)
    # run forward on each GPU
    with autograd.record():
        losses = [loss(lenet(X, W), Y)
                  for X, Y, W in zip(data_list, label_list, params)]
    # run backward on each gpu
    for l in losses:
        l.backward()
    # aggregate gradient over GPUs
    for i in range(len(params[0])):
        allreduce([params[c][i].grad for c in range(len(ctx))])
    # update parameters with SGD on each GPU
    for p in params:
        utils.SGD(p, lr/data.shape[0])
```

8.4.5 开始训练

现在我们可以定义完整的训练函数。这个跟前面教程里没有什么区别。

In [7]: `from time import time`

```
def train(num_gpus, batch_size, lr):
    train_data, test_data = utils.load_data_fashion_mnist(batch_size)

    ctx = [gpu(i) for i in range(num_gpus)]
    print('Running on', ctx)

    # copy parameters to all GPUs
    dev_params = [get_params(params, c) for c in ctx]

    for epoch in range(5):
        # train
        start = time()
        for data, label in train_data:
            train_batch(data, label, dev_params, ctx, lr)
        nd.waitall()
        print('Epoch %d, training time = %.1f sec'%
              (epoch, time()-start))

        # validating on GPU 0
        net = lambda data: lenet(data, dev_params[0])
        test_acc = utils.evaluate_accuracy(test_data, net, ctx[0])
        print('validation accuracy = %.4f'%(test_acc))
```

首先我们使用一个 GPU 来训练。

In [8]: `train(1, 256, 0.3)`

```
Running on [gpu(0)]
Epoch 0, training time = 2.1 sec
    validation accuracy = 0.1267
Epoch 1, training time = 1.7 sec
    validation accuracy = 0.7453
Epoch 2, training time = 1.7 sec
    validation accuracy = 0.7960
Epoch 3, training time = 1.7 sec
    validation accuracy = 0.8069
Epoch 4, training time = 1.7 sec
    validation accuracy = 0.8276
```

使用多个 GPU 但不改变其他参数会得到跟单 GPU 一致的结果（但数据是随机顺序，所以会有细微区别）

```
In [9]: train(2, 256, 0.3)

Running on [gpu(0), gpu(1)]
Epoch 0, training time = 1.7 sec
    validation accuracy = 0.4596
Epoch 1, training time = 1.7 sec
    validation accuracy = 0.7384
Epoch 2, training time = 1.7 sec
    validation accuracy = 0.7982
Epoch 3, training time = 1.7 sec
    validation accuracy = 0.8071
Epoch 4, training time = 1.7 sec
    validation accuracy = 0.8368
```

但在多 GPU 时, 通常我们需要增加批量大小使得每个 GPU 能得到足够多的任务来保证性能。但一个大的批量大小可能使得收敛变慢。这时候的一个常用做法是将学习率增大些。

```
In [10]: train(2, 512, 0.6)
```

```
Running on [gpu(0), gpu(1)]
Epoch 0, training time = 1.0 sec
    validation accuracy = 0.2561
Epoch 1, training time = 1.0 sec
    validation accuracy = 0.1009
Epoch 2, training time = 1.0 sec
    validation accuracy = 0.4913
Epoch 3, training time = 1.0 sec
    validation accuracy = 0.6843
Epoch 4, training time = 1.0 sec
    validation accuracy = 0.7457
```

可以看到使用两个 GPU 能有效的减少训练时间。

8.4.6 小结

- 数据并行可以有效的在多 GPU 上提升训练性能。

8.4.7 练习

- 试试不同的批量大小和学习率
- 将预测也改成多 GPU 版本
- 注意到我们使用 GPU 0 来做梯度求和, 会有带来什么问题吗?

8.4.8 扫码直达讨论区



8.5 多 GPU 训练模型——使用 Gluon

在 Gluon 里可以很容易的使用数据并行。在多 GPU 来训练—从 0 开始里我们手动实现了几个数据同步函数来使用数据并行, Gluon 里实现了同样的功能。

8.5.1 多设备上的初始化

之前我们介绍了如果使用 `initialize()` 里的 `ctx` 在 CPU 或者特定 GPU 上初始化模型。事实上, `ctx` 可以接受一系列的设备, 它会将初始好的参数复制所有的设备上。

这里我们使用之前介绍 Resnet18 来作为演示。

```
In [1]: import sys
        sys.path.append('..')
        import utils
        from mxnet import gpu
        from mxnet import cpu

        net = utils.resnet18(10)
        ctx = [gpu(0), gpu(1)]
        net.initialize(ctx=ctx)
```

记得前面提到的[延迟初始化](#), 这里参数还没有被初始化。我们需要先给定数据跑一次。

Gluon 提供了之前我们实现的 `split_and_load` 函数, 它将数据分割并返回各个设备上的复制。然后根据输入的设备, 计算也会在相应的数据上执行。

```
In [2]: from mxnet import nd
        from mxnet import gluon

        x = nd.random.uniform(shape=(4, 1, 28, 28))
        x_list = gluon.utils.split_and_load(x, ctx)
        print(net(x_list[0]))
        print(net(x_list[1]))
```

```
[[ -0.00299451 -0.114948 -0.04571831 -0.08353794 0.09219883 -0.10255374  
  0.08285993 0.08471885 -0.03377745 0.0142048 ]]  
[-0.01095816 -0.12053964 -0.05160385 -0.08963331 0.08892047 -0.10402268  
  0.07713397 0.08005997 -0.02352627 0.02912929]]  
<NDArray 2x10 @gpu(0)>
```

```
[[ -0.00705471 -0.11297002 -0.04886303 -0.08850279 0.0929175 -0.10409503  
  0.07982443 0.08671783 -0.01739573 0.02761966]  
[-0.01419117 -0.10728938 -0.0441721 -0.08339462 0.09654251 -0.09772847  
  0.08203971 0.09051772 -0.02636191 0.02598564]]  
<NDArray 2x10 @gpu(1)>
```

这时候我们可以来看初始的过程发生了什么了。记得我们可以通过 `data` 来访问参数值，它默认会返回 CPU 上值。但这里我们只在两个 GPU 上初始化了，在访问的对应设备的值的时候，我们需要指定设备。

```
In [3]: weight = net[1].params.get('weight')  
print(weight.data(ctx[0])[0])  
print(weight.data(ctx[1])[0])  
try:  
    weight.data(cpu())  
except:  
    print('Not initialized on', cpu())
```

```
[[[-0.00613896 -0.03968295 0.00958075]  
 [-0.05106945 -0.06736943 -0.02462026]  
 [ 0.01646897 -0.04904552 0.0156934 ]]]  
<NDArray 1x3x3 @gpu(0)>
```

```
[[[-0.00613896 -0.03968295 0.00958075]  
 [-0.05106945 -0.06736943 -0.02462026]  
 [ 0.01646897 -0.04904552 0.0156934 ]]]  
<NDArray 1x3x3 @gpu(1)>  
Not initialized on cpu(0)
```

上一章我们提到过如何在多 GPU 之间复制梯度求和并广播，这个在 `gluon.Trainer` 里面会被默认执行。这样我们可以实现完整的训练函数了。

8.5.2 训练

```
In [4]: from mxnet import gluon  
from mxnet import autograd  
from time import time
```

```

from mxnet import init

def train(num_gpus, batch_size, lr):
    train_data, test_data = utils.load_data_fashion_mnist(batch_size)

    ctx = [gpu(i) for i in range(num_gpus)]
    print('Running on', ctx)

    net = utils.resnet18(10)
    net.initialize(init=init.Xavier(), ctx=ctx)
    loss = gluon.loss.SoftmaxCrossEntropyLoss()
    trainer = gluon.Trainer(
        net.collect_params(), 'sgd', {'learning_rate': lr})

    for epoch in range(5):
        start = time()
        total_loss = 0
        for data, label in train_data:
            data_list = gluon.utils.split_and_load(data, ctx)
            label_list = gluon.utils.split_and_load(label, ctx)
            with autograd.record():
                losses = [loss(net(X), y) for X, y in zip(
                    data_list, label_list)]
            for l in losses:
                l.backward()
            total_loss += sum([l.sum().asscalar() for l in losses])
            trainer.step(batch_size)

        nd.waitall()
        print('Epoch %d, training time = %.1f sec' %(
            epoch, time()-start))

        test_acc = utils.evaluate_accuracy(test_data, net, ctx[0])
        print('validation accuracy = %.4f' %(test_acc))

```

尝试在单 GPU 上执行。

```

In [5]: train(1, 256, .1)

Running on [gpu(0)]
Epoch 0, training time = 14.9 sec
    validation accuracy = 0.8591
Epoch 1, training time = 14.3 sec
    validation accuracy = 0.8833
Epoch 2, training time = 14.3 sec
    validation accuracy = 0.9025
Epoch 3, training time = 14.3 sec

```

```
validation accuracy = 0.9021
Epoch 4, training time = 14.3 sec
    validation accuracy = 0.9091
```

同样的参数，但使用两个 GPU。

```
In [6]: train(2, 256, .1)

Running on [gpu(0), gpu(1)]
Epoch 0, training time = 10.8 sec
    validation accuracy = 0.8719
Epoch 1, training time = 10.1 sec
    validation accuracy = 0.9034
Epoch 2, training time = 10.2 sec
    validation accuracy = 0.8891
Epoch 3, training time = 10.3 sec
    validation accuracy = 0.8902
Epoch 4, training time = 10.3 sec
    validation accuracy = 0.9127
```

增大批量值和学习率

```
In [7]: train(2, 512, .2)

Running on [gpu(0), gpu(1)]
Epoch 0, training time = 8.4 sec
    validation accuracy = 0.8433
Epoch 1, training time = 8.3 sec
    validation accuracy = 0.8853
Epoch 2, training time = 8.2 sec
    validation accuracy = 0.8835
Epoch 3, training time = 8.2 sec
    validation accuracy = 0.9039
Epoch 4, training time = 8.2 sec
    validation accuracy = 0.8858
```

8.5.3 小结

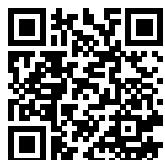
- Gluon 的参数初始化和 Trainer 都支持多设备，从单设备到多设备非常容易。

8.5.4 练习

- 跟多 GPU 来训练—从 0 开始不一样，这里我们使用了更现代些的 ResNet。看看不同的批量大小和学习率对不同 GPU 个数上的不一样。

- 有时候各个设备计算能力不一样，例如同时使用 CPU 和 GPU，或者 GPU 之间型号不一样，这时候应该怎么办？

8.5.5 扫码直达讨论区



9.1 图片增广

AlexNet 当年能取得巨大的成功，其中图片增广功不可没。图片增广通过一系列的随机变化生成大量“新”的样本，从而减低过拟合的可能。现在在深度卷积神经网络训练中，图片增广是必不可少的一部分。

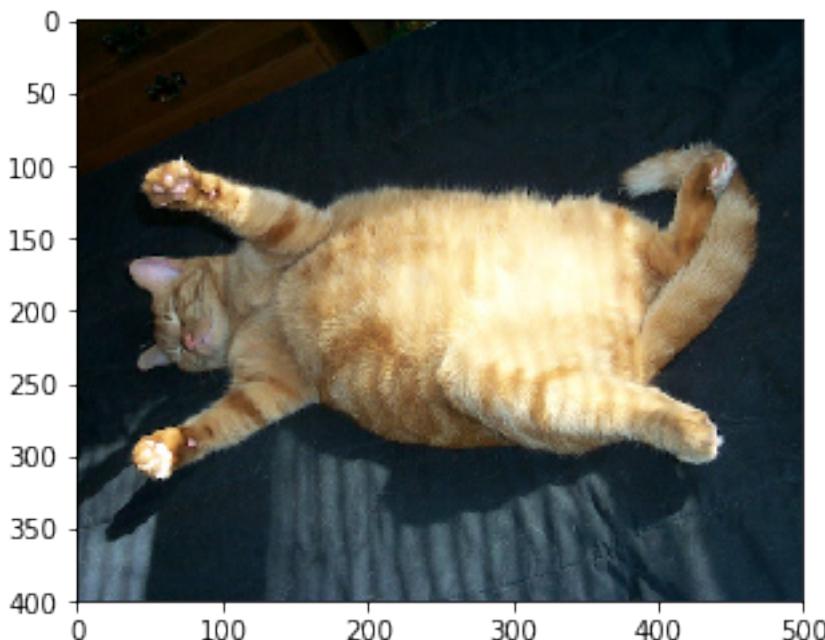
9.1.1 常用增广方法

我们首先读取一张 400×500 的图片作为样例

```
In [1]: %matplotlib inline
import matplotlib.pyplot as plt
from mxnet import image

img = image.imread(open('../img/cat1.jpg', 'rb').read())
plt.imshow(img.asnumpy())

Out[1]: <matplotlib.image.AxesImage at 0x7f31e8127240>
```



接下来我们定义一个辅助函数，给定输入图片 `img` 的增广方法 `aug`，它会运行多次并画出结果。

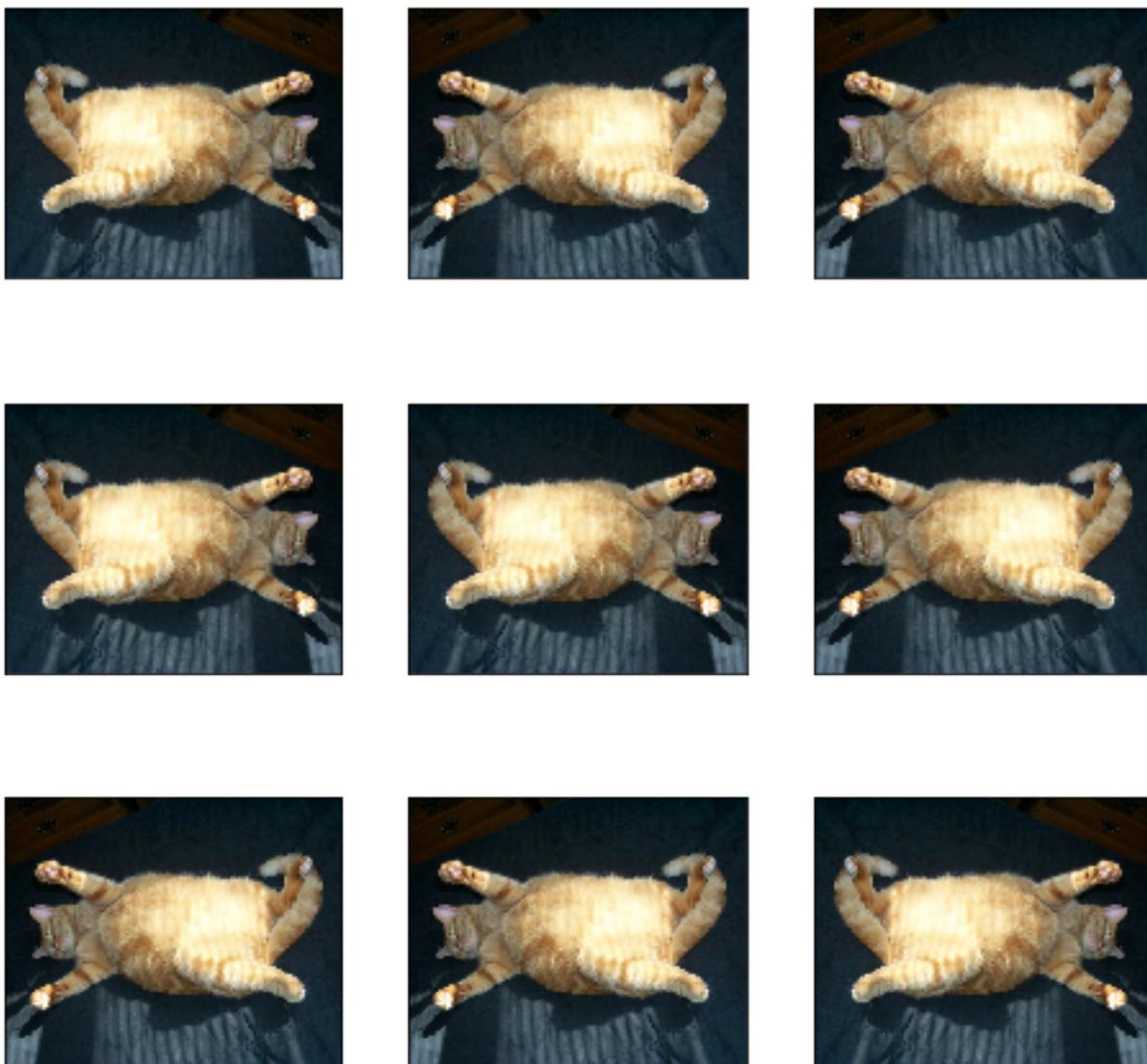
```
In [2]: from mxnet import nd
import sys
sys.path.append('..')
import utils

def apply(img, aug, n=3):
    # 转成 float, 一是因为 aug 需要 float 类型数据来方便做变化。
    # 二是这里会有一次 copy 操作, 因为有些 aug 直接通过改写输入
    # (而不是新建输出) 获取性能的提升
    X = [aug(img.astype('float32')) for _ in range(n*n)]
    # 有些 aug 不保证输入是合法值, 所以做一次 clip
    # 显示浮点图片时 imshow 要求输入在 [0,1] 之间
    Y = nd.stack(*X).clip(0,255)/255
    utils.show_images(Y, n, n, figsize=(8,8))
```

变形

水平方向翻转图片是最早也是最广泛使用的一种增广。

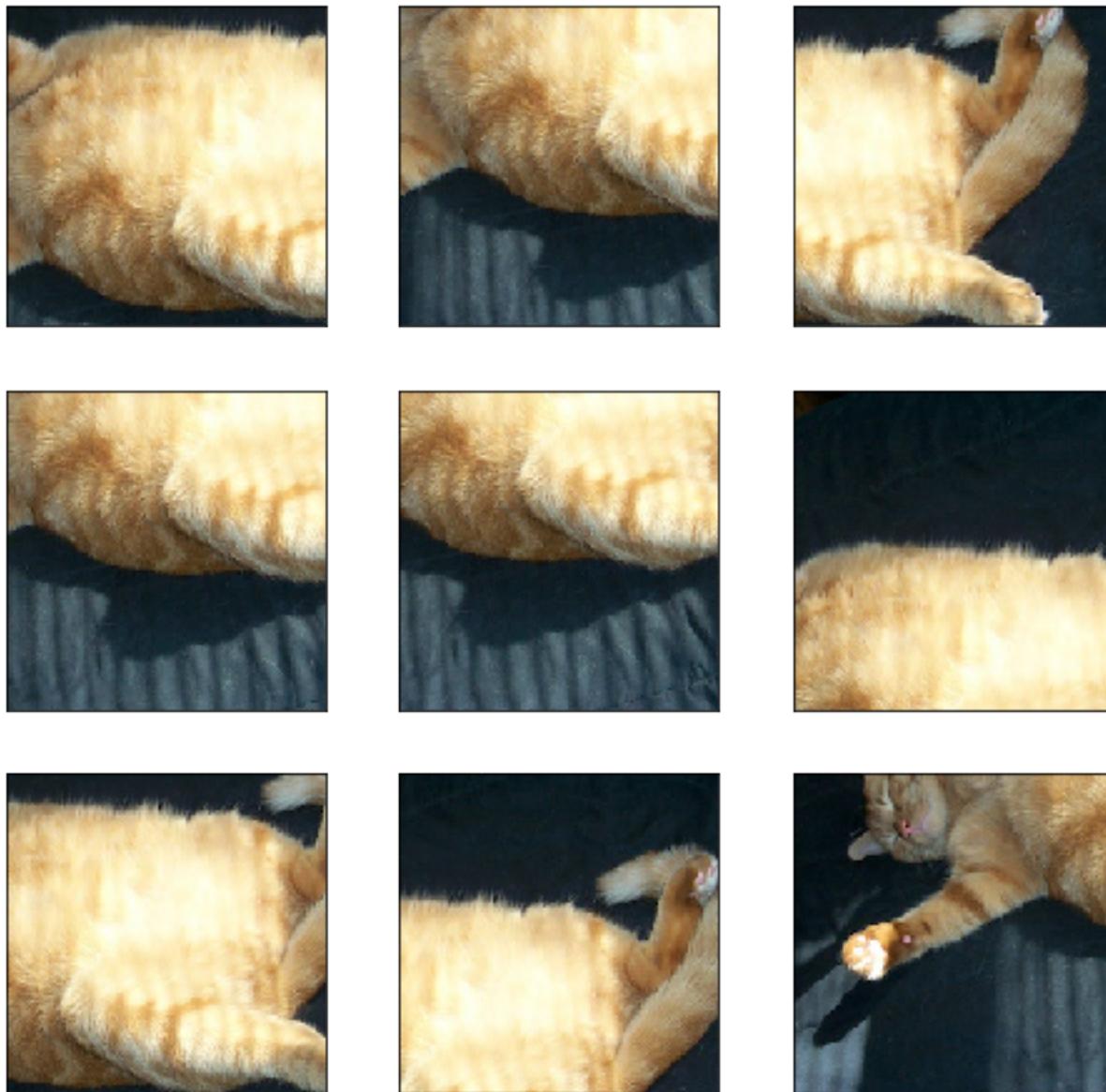
```
In [3]: # 以.5 的概率做翻转
aug = image.HorizontalFlipAug(.5)
apply(img, aug)
```



样例图片里我们关心的猫在图片正中间，但一般情况下可能不是这样。前面我们提到池化层能弱化卷积层对目标位置的敏感度，但也不能完全解决这个问题。一个常用增广方法是随机的截取其中的一块。

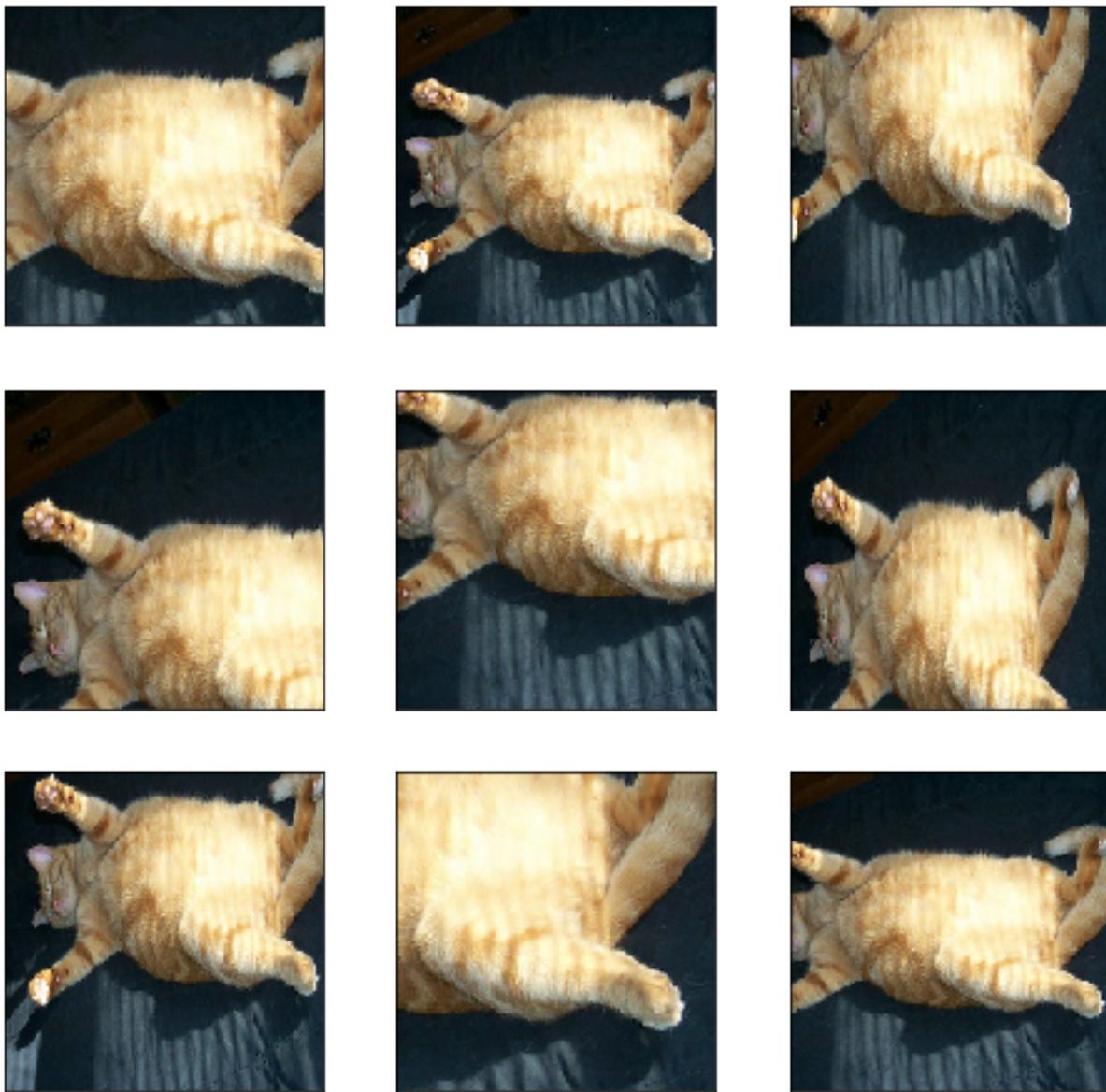
注意到随机截取一般会缩小输入的形状。如果原始输入图片过小，导致没有太多空间进行随机裁剪，通常做法是先将其放大的足够大的尺寸。所以如果你的原始图片足够大，建议不要事先将它们裁到网络需要的大小。

```
In [4]: # 随机裁剪一个块 200 x 200 的区域
aug = image.RandomCropAug([200,200])
apply(img, aug)
```



我们也可以随机裁剪一块随机大小的区域

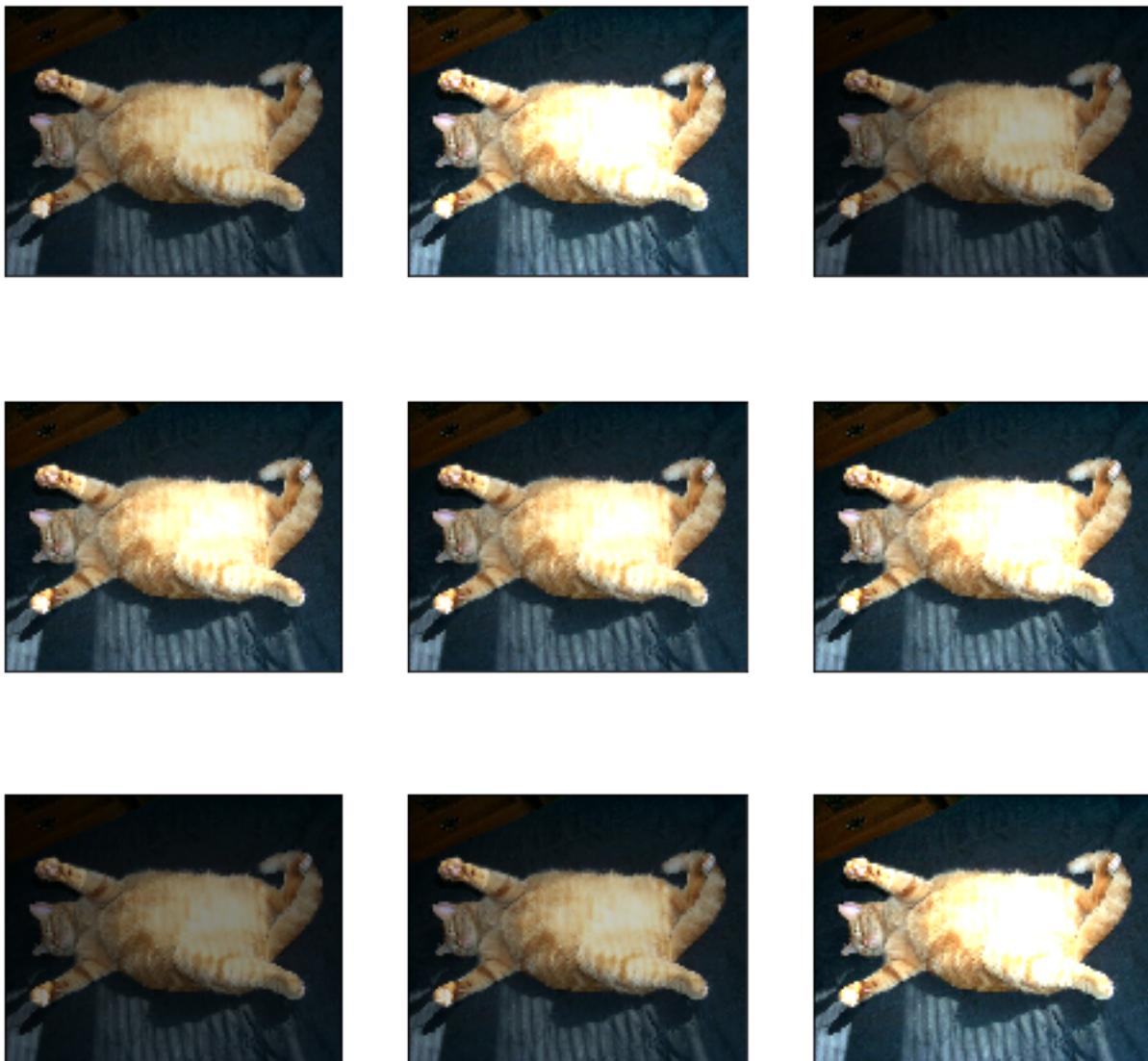
```
In [5]: # 随机裁剪, 要求保留至少 0.1 的区域, 随机长宽比在 .5 和 2 之间。  
# 最后将结果 resize 到 200x200  
aug = image.RandomSizedCropAug((200,200), .1, (.5,2))  
apply(img, aug)
```



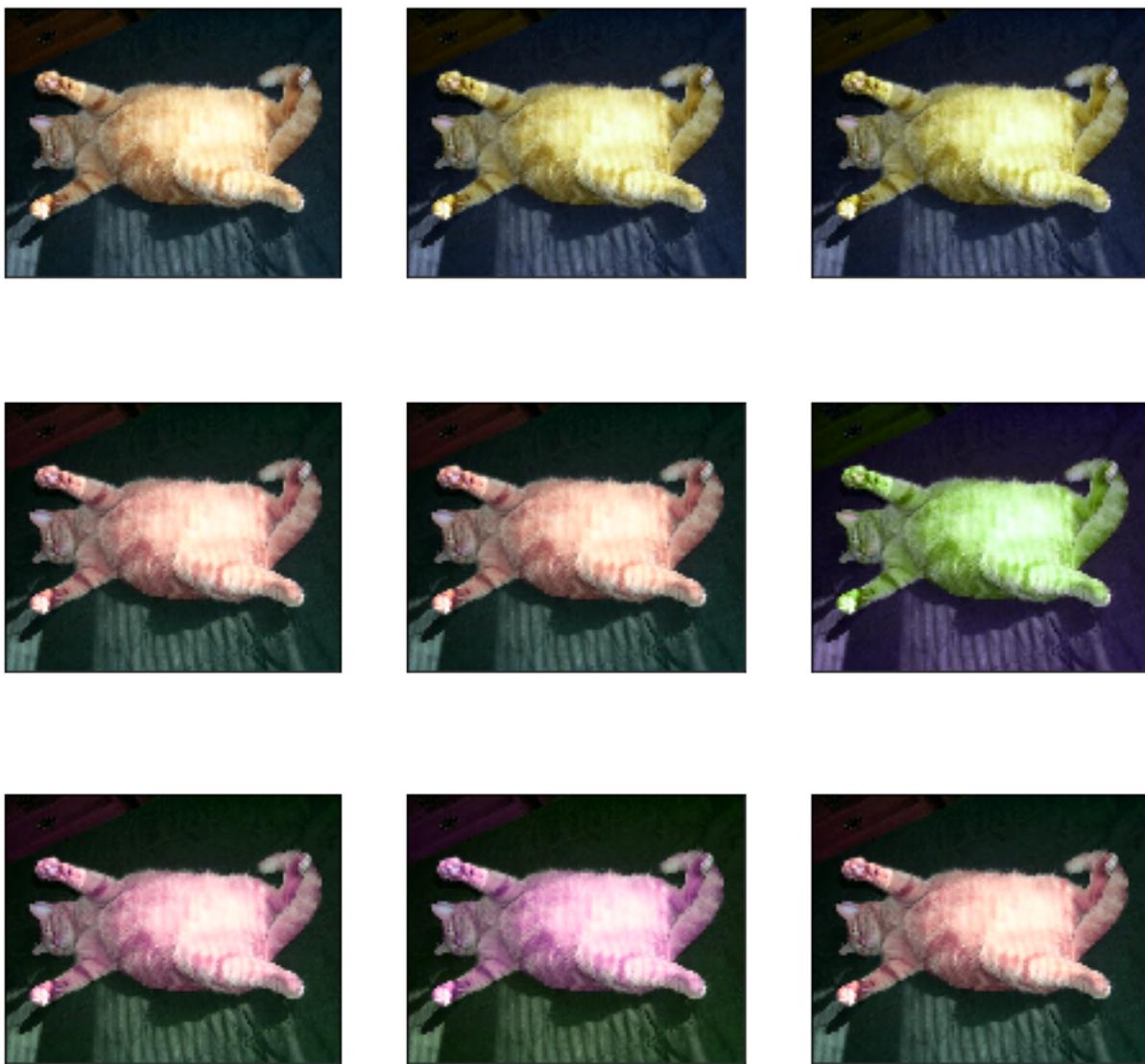
颜色变化

形状变化外的一个另一大类是变化颜色。

```
In [6]: # 随机将亮度增加或者减小在 0-50% 间的一个量  
aug = image.BrightnessJitterAug(.5)  
apply(img, aug)
```



```
In [7]: # 随机色调变化  
aug = image.HueJitterAug(.5)  
apply(img, aug)
```



9.1.2 如何使用

通常使用时我们会将数个增广方法一起使用。注意到图片增广通常只是针对训练数据，对于测试数据则用得较小。后者常用的是做 5 次随机剪裁，然后讲 5 张图片的预测结果做均值。

下面我们使用 CIFAR10 来演示图片增广对训练的影响。我们这里不使用前面一直用的 Fashion-MNIST，这是因为这个数据的图片基本已经对齐好了，而且是黑白图片，所以不管是变形还是变色增广效果都不会明显。

数据读取

我们首先定义一个辅助函数可以对图片按顺序应用数个增广：

```
In [8]: def apply_aug_list(img, augs):
    for f in augs:
        img = f(img)
    return img
```

对于训练图片我们随机水平翻转和剪裁。对于测试图片仅仅就是中心剪裁。CIFAR10 图片尺寸是 $32 \times 32 \times 3$ ，我们剪裁成 $28 \times 28 \times 3$ 。

```
In [9]: train_augs = [
    image.HorizontalFlipAug(.5),
    image.RandomCropAug((28,28))
]

test_augs = [
    image.CenterCropAug((28,28))
]
```

然后定义数据读取，这里跟前面的 FashionMNIST 类似，但在 `transform` 中加入了图片增广：

```
In [10]: from mxnet import gluon
from mxnet import nd
import sys
sys.path.append('..')
import utils

def get_transform(augs):
    def transform(data, label):
        # data: sample x height x width x channel
        # label: sample
        data = data.astype('float32')
        if augs is not None:
            # apply to each sample one-by-one and then stack
            data = nd.stack(*[
                apply_aug_list(d, augs) for d in data])
        data = nd.transpose(data, (0,3,1,2))
        return data, label.astype('float32')
    return transform

def get_data(batch_size, train_augs, test_augs=None):
    cifar10_train = gluon.data.vision.CIFAR10(
        train=True, transform=transform(train_augs))
    cifar10_test = gluon.data.vision.CIFAR10(
        train=False, transform=transform(test_augs))
```

```

train_data = utils.DataLoader(
    cifar10_train, batch_size, shuffle=True)
test_data = utils.DataLoader(
    cifar10_test, batch_size, shuffle=False)
return (train_data, test_data)

```

画出前几张看看

```

In [11]: train_data, _ = get_data(36, train_augs)
for imgs, _ in train_data:
    break
utils.show_images(imgs.transpose((0,2,3,1)), 6, 6)

Clipping input data to the valid range for imshow with RGB data ([0..1] for floats or
→ [0..255] for integers).
Clipping input data to the valid range for imshow with RGB data ([0..1] for floats or
→ [0..255] for integers).
Clipping input data to the valid range for imshow with RGB data ([0..1] for floats or
→ [0..255] for integers).
Clipping input data to the valid range for imshow with RGB data ([0..1] for floats or
→ [0..255] for integers).
Clipping input data to the valid range for imshow with RGB data ([0..1] for floats or
→ [0..255] for integers).
Clipping input data to the valid range for imshow with RGB data ([0..1] for floats or
→ [0..255] for integers).
Clipping input data to the valid range for imshow with RGB data ([0..1] for floats or
→ [0..255] for integers).
Clipping input data to the valid range for imshow with RGB data ([0..1] for floats or
→ [0..255] for integers).
Clipping input data to the valid range for imshow with RGB data ([0..1] for floats or
→ [0..255] for integers).
Clipping input data to the valid range for imshow with RGB data ([0..1] for floats or
→ [0..255] for integers).
Clipping input data to the valid range for imshow with RGB data ([0..1] for floats or
→ [0..255] for integers).
Clipping input data to the valid range for imshow with RGB data ([0..1] for floats or
→ [0..255] for integers).
Clipping input data to the valid range for imshow with RGB data ([0..1] for floats or
→ [0..255] for integers).
Clipping input data to the valid range for imshow with RGB data ([0..1] for floats or
→ [0..255] for integers).
Clipping input data to the valid range for imshow with RGB data ([0..1] for floats or
→ [0..255] for integers).
Clipping input data to the valid range for imshow with RGB data ([0..1] for floats or
→ [0..255] for integers).
Clipping input data to the valid range for imshow with RGB data ([0..1] for floats or
→ [0..255] for integers).
Clipping input data to the valid range for imshow with RGB data ([0..1] for floats or
→ [0..255] for integers).

```

Clipping input data to the valid range for imshow with RGB data ([0..1] for floats or
→ [0..255] for integers).

Clipping input data to the valid range for imshow with RGB data ([0..1] for floats or
→ [0..255] for integers).

Clipping input data to the valid range for imshow with RGB data ([0..1] for floats or
→ [0..255] for integers).

Clipping input data to the valid range for imshow with RGB data ([0..1] for floats or
→ [0..255] for integers).

Clipping input data to the valid range for imshow with RGB data ([0..1] for floats or
→ [0..255] for integers).

Clipping input data to the valid range for imshow with RGB data ([0..1] for floats or
→ [0..255] for integers).

Clipping input data to the valid range for imshow with RGB data ([0..1] for floats or
→ [0..255] for integers).

Clipping input data to the valid range for imshow with RGB data ([0..1] for floats or
→ [0..255] for integers).

Clipping input data to the valid range for imshow with RGB data ([0..1] for floats or
→ [0..255] for integers).

Clipping input data to the valid range for imshow with RGB data ([0..1] for floats or
→ [0..255] for integers).

Clipping input data to the valid range for imshow with RGB data ([0..1] for floats or
→ [0..255] for integers).

Clipping input data to the valid range for imshow with RGB data ([0..1] for floats or
→ [0..255] for integers).

Clipping input data to the valid range for imshow with RGB data ([0..1] for floats or
→ [0..255] for integers).

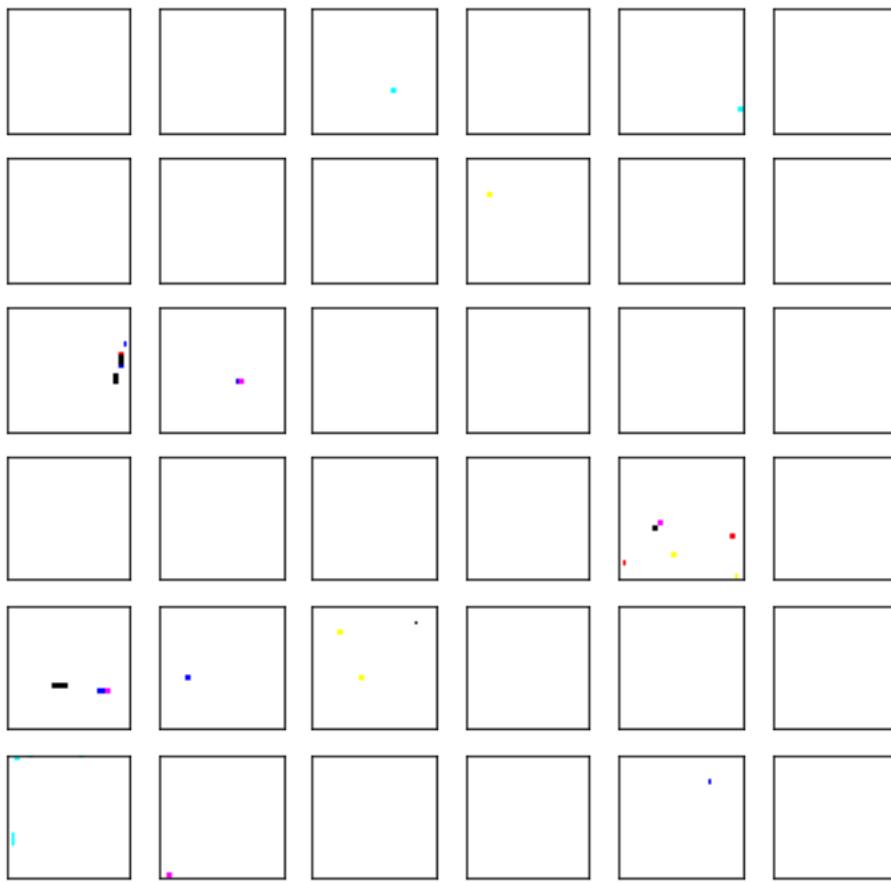
Clipping input data to the valid range for imshow with RGB data ([0..1] for floats or
→ [0..255] for integers).

Clipping input data to the valid range for imshow with RGB data ([0..1] for floats or
→ [0..255] for integers).

Clipping input data to the valid range for imshow with RGB data ([0..1] for floats or
→ [0..255] for integers).

Clipping input data to the valid range for imshow with RGB data ([0..1] for floats or
→ [0..255] for integers).

Clipping input data to the valid range for imshow with RGB data ([0..1] for floats or
→ [0..255] for integers).



In [12]: `imgs.shape`

Out[12]: `(36, 3, 28, 28)`

9.1.3 训练

我们使用*ResNet 18*训练。并且训练代码整理成一个函数使得可以重读调用：

In [13]: `from mxnet import init`

```
def train(train_augs, test_augs, learning_rate=.1):
    batch_size = 128
    num_epochs = 10
    ctx = utils.try_all_gpus()
    loss = gluon.loss.SoftmaxCrossEntropyLoss()
    train_data, test_data = get_data(
        batch_size, train_augs, test_augs)
    net = utils.resnet18(10)
    net.initialize(ctx=ctx, init=init.Xavier())
    net.hybridize()
```

```
trainer = gluon.Trainer(net.collect_params(),
                        'sgd', {'learning_rate': learning_rate})
utils.train(
    train_data, test_data, net, loss, trainer, ctx, num_epochs)
```

使用增广：

In [14]: `train(train_augs, test_augs)`

```
Start training on [gpu(0), gpu(1)]
Epoch 0. Loss: 1.492, Train acc 0.47, Test acc 0.52, Time 20.0 sec
Epoch 1. Loss: 1.071, Train acc 0.62, Test acc 0.62, Time 19.7 sec
Epoch 2. Loss: 0.873, Train acc 0.70, Test acc 0.67, Time 19.5 sec
Epoch 3. Loss: 0.768, Train acc 0.73, Test acc 0.75, Time 19.5 sec
Epoch 4. Loss: 0.692, Train acc 0.76, Test acc 0.75, Time 19.7 sec
Epoch 5. Loss: 0.636, Train acc 0.78, Test acc 0.77, Time 19.5 sec
Epoch 6. Loss: 0.585, Train acc 0.80, Test acc 0.79, Time 19.3 sec
Epoch 7. Loss: 0.551, Train acc 0.81, Test acc 0.78, Time 19.0 sec
Epoch 8. Loss: 0.514, Train acc 0.82, Test acc 0.78, Time 19.0 sec
Epoch 9. Loss: 0.485, Train acc 0.83, Test acc 0.80, Time 19.2 sec
```

不使用增广：

In [15]: `train(test_augs, test_augs)`

```
Start training on [gpu(0), gpu(1)]
Epoch 0. Loss: 1.440, Train acc 0.49, Test acc 0.56, Time 17.5 sec
Epoch 1. Loss: 0.991, Train acc 0.65, Test acc 0.67, Time 17.0 sec
Epoch 2. Loss: 0.767, Train acc 0.73, Test acc 0.67, Time 17.2 sec
Epoch 3. Loss: 0.601, Train acc 0.79, Test acc 0.72, Time 17.4 sec
Epoch 4. Loss: 0.464, Train acc 0.84, Test acc 0.74, Time 17.3 sec
Epoch 5. Loss: 0.350, Train acc 0.88, Test acc 0.70, Time 17.5 sec
Epoch 6. Loss: 0.255, Train acc 0.91, Test acc 0.73, Time 17.8 sec
Epoch 7. Loss: 0.183, Train acc 0.94, Test acc 0.71, Time 17.4 sec
Epoch 8. Loss: 0.130, Train acc 0.96, Test acc 0.74, Time 17.4 sec
Epoch 9. Loss: 0.109, Train acc 0.96, Test acc 0.74, Time 17.7 sec
```

可以看到使用增广后，训练精度提升更慢，但测试精度比不使用更好。

9.1.4 总结

图片增广可以有效避免过拟合。

9.1.5 练习

尝试换不同的增广方法试试。

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

9.2 Fine-tuning: 通过微调来迁移学习

在前面的章节里我们展示了如何训练神经网络来识别小图片里的问题。我们也介绍了 ImageNet 这个学术界默认的数据集，它有超过一百万的图片和一千类的物体。这个数据集很大的改变计算机视觉这个领域，展示了很多事情虽然在小的数据集上做不到，但在数 GB 的大数据上是可能的。事实上，我们目前还不知道有什么技术可以在类似的但小图片数据集上，例如一万张图片，训练出一个同样强大的模型。

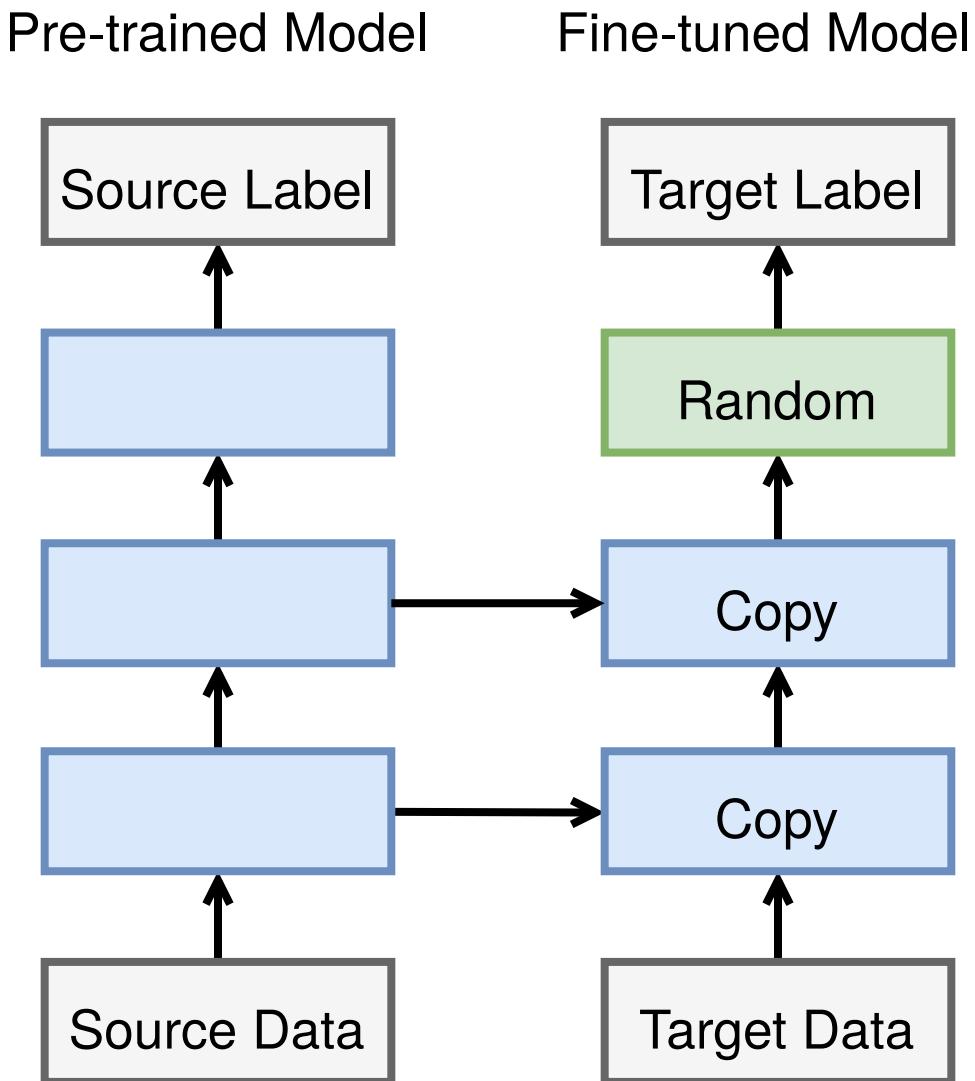
所以这是一个问题。尽管深度卷积神经网络在 ImageNet 上有了很惊讶的结果，但大部分人不关心 Imagenet 这个数据集本身。他们关心他们自己的问题。例如通过图片里面的人脸识别身份，或者识别图片里面的 10 种不同的珊瑚。通常大部分在非 BAT 类似大机构里的人在解决计算机视觉问题的时候，能获得的只是相对来说中等规模的数据。几百张图片很正常，找到几千张图片也有可能，但很难同 Imagenet 一样获得上百万张图片。

于是我们会有个很自然的问题，如何使用在百万张图片上训练出来的强大的模型来帮助提升在小数据集上的精度呢？这种在源数据上训练，然后将学到的知识应用到目标数据集上的技术通常被叫做**迁移学习**。幸运的是，我们有一些有效的技术来解决这个问题。

对于深度神经网络来说，最为流行的一个方法叫做**微调**（fine-tuning）。它的想法很简单但有效：

- 在源数据 S 上训练一个神经网络。
- 砍掉它的头，将它的输出层改成适合目标数据 S 的大小
- 将输出层的权重初始化成随机值，但其它层保持跟原先训练好的权重一致
- 然后开始在目标数据集开始训练

下图图示了这个算法：



9.2.1 热狗识别

这一章我们将通过*ResNet*来演示如何进行微调。因为通常不会每次从 0 开始在 ImageNet 上训练模型，我们直接从 Gluon 的模型园下载已经训练好的。然后将其迁移到一个我们感兴趣的问题上：识别热狗。

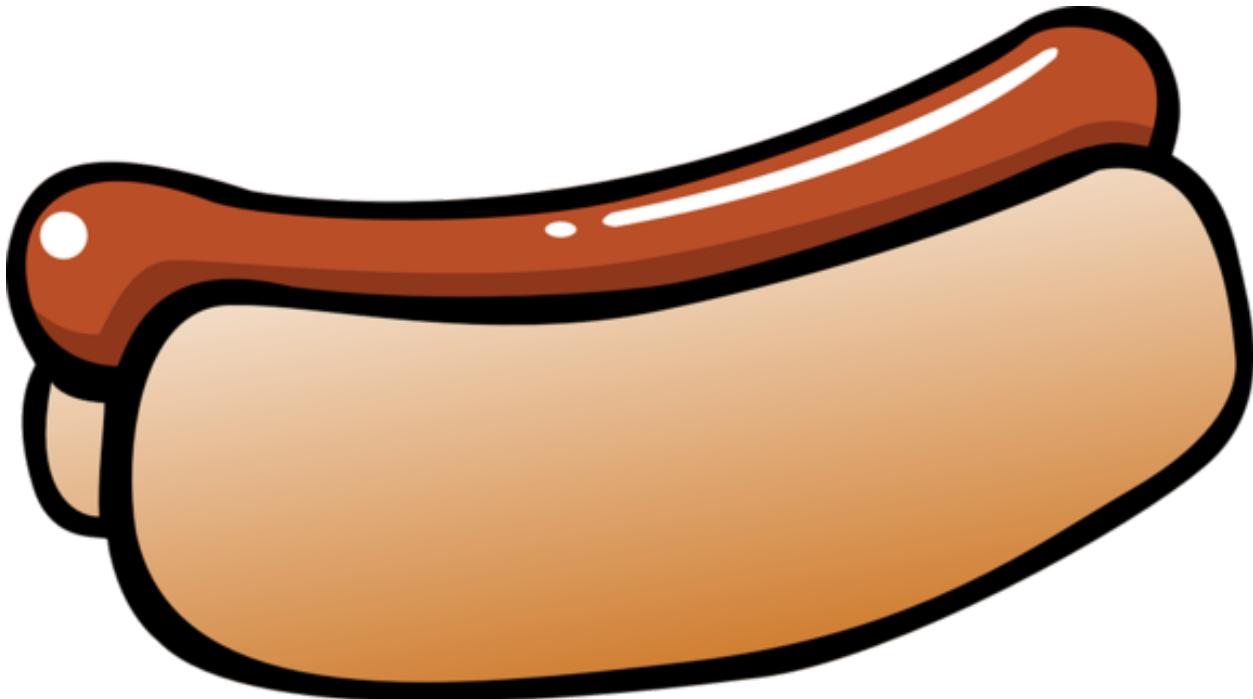


图 9.1: hot dog

热狗识别是一个二分类问题。我们这里使用的热狗数据集是从网上抓取的，它有 1400 张正类和同样多的负类，负类主要是食品相关图片。我们将各类的 1000 张作为训练集合，其余的作为测试集合。

获取数据

我们首先从网上下载数据并解压到`../data/hotdog`。每个文件夹下会有对应的`.png`文件。

```
In [1]: from mxnet import gluon
import zipfile

data_dir = '../data'
fname = gluon.utils.download(
    'https://apache-mxnet.s3-accelerate.amazonaws.com/gluon/dataset/hotdog.zip',
    path=data_dir, sha1_hash='fba480ffa8aa7e0febbb511d181409f899b9baa5')

with zipfile.ZipFile(fname, 'r') as f:
    f.extractall(data_dir)
```

我们使用图片增强里类似的方法来处理图片。

```
In [2]: from mxnet import nd
```

```
from mxnet import image
from mxnet import gluon

train_augs = [
    image.HorizontalFlipAug(.5),
    image.RandomCropAug((224,224))
]

test_augs = [
    image.CenterCropAug((224,224))
]

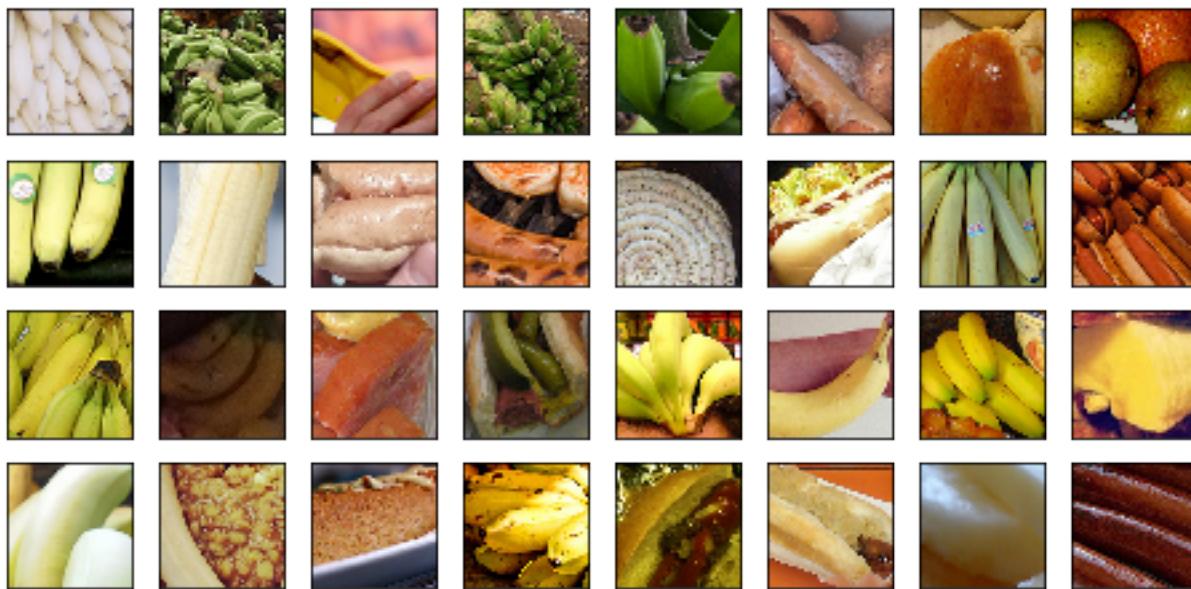
def transform(data, label, augs):
    data = data.astype('float32')
    for aug in augs:
        data = aug(data)
    data = nd.transpose(data, (2,0,1))
    return data, nd.array([label]).asscalar().astype('float32')
```

读取文件夹下的图片，并且画出一些图片

```
In [3]: %matplotlib inline
import sys
sys.path.append('..')
import utils

train_imgs = gluon.data.vision.ImageFolderDataset(
    data_dir+'/hotdog/train',
    transform=lambda X, y: transform(X, y, train_augs))
test_imgs = gluon.data.vision.ImageFolderDataset(
    data_dir+'/hotdog/test',
    transform=lambda X, y: transform(X, y, test_augs))

data = gluon.data.DataLoader(train_imgs, 32, shuffle=True)
for X, _ in data:
    X = X.transpose((0,2,3,1)).clip(0,255)/255
    utils.show_images(X, 4, 8)
    break
```



模型和训练

这里我们将使用 Gluon 提供的 ResNet18 来训练。我们先从模型园里获取改良过 ResNet。使用 `pretrained=True` 将会自动下载并加载从 ImageNet 数据集上训练而来的权重。

```
In [4]: from mxnet.gluon.model_zoo import vision as models
```

```
pretrained_net = models.resnet18_v2(pretrained=True)
```

通常预训练好的模型由两块构成，一是 `features`，二是 `output`。后者主要包括最后一层全连接层，前者包含从输入开始的大部分层。这样的划分的一个主要目的是为了更方便做微调。我们先看下 `output` 的内容：

```
In [5]: pretrained_net.output
```

```
Out[5]: Dense(512 -> 1000, linear)
```

我们可以看一下第一个卷积层的部分权重。

```
In [6]: pretrained_net.features[1].weight.data()[0][0]
```

```
Out[6]:
```

```
[[ -0.04693392  0.11487006 -0.13209556  0.16124195 -0.21484604  0.18044543
 -0.05956454]
 [-0.00242769 -0.03129578  0.01799692  0.15277492 -0.41541672  0.38176033
 -0.13370997]
 [ 0.10314132 -0.30472746  0.59482247 -0.52606624  0.0621427   0.25646785
 -0.12772678]
 [ 0.01783164 -0.21222414  0.58199424 -0.84664404  0.57027811 -0.20741715]]
```

```
0.02784866]
[ 0.01255781 -0.02931368  0.1608634 -0.33185521  0.31180814 -0.16463067
 0.05555796]
[-0.0167121   0.03173966  0.00400858 -0.02572511 -0.02412852  0.08885808
 -0.04472235]
[-0.05655501  0.08309566 -0.08147315  0.02597015 -0.03567177  0.0657132
 -0.03488606]]
<NDArray 7x7 @cpu(0)>
```

在微调里，我们一般新建一个网络，它的定义跟之前训练好的网络一样，除了最后的输出数等于当前数据的类别数。新网络的 `features` 被初始化前面训练好网络的权重，而 `output` 则是从头开始训练。

In [7]: `from mxnet import init`

```
finetune_net = models.resnet18_v2(classes=2)
finetune_net.features = pretrained_net.features
finetune_net.output.initialize(init.Xavier())
```

我们先定义一个可以重复使用的训练函数。

In [8]:

```
def train(net, ctx, batch_size=64, epochs=10, learning_rate=0.01, wd=0.001):
    train_data = gluon.data.DataLoader(train_imgs, batch_size, shuffle=True)
    test_data = gluon.data.DataLoader(test_imgs, batch_size)

    # 确保 net 的初始化在 ctx 上
    net.collect_params().reset_ctx(ctx)
    net.hybridize()
    loss = gluon.loss.SoftmaxCrossEntropyLoss()
    # 训练
    trainer = gluon.Trainer(net.collect_params(), 'sgd', {
        'learning_rate': learning_rate, 'wd': wd})
    utils.train(train_data, test_data, net, loss, trainer, ctx, epochs)
```

现在我们可以训练了。

In [9]: `ctx = utils.try_all_gpus()`
`train(finetune_net, ctx)`

```
Start training on [gpu(0), gpu(1)]
Epoch 0. Loss: 0.340, Train acc 0.85, Test acc 0.93, Time 16.5 sec
Epoch 1. Loss: 0.185, Train acc 0.92, Test acc 0.93, Time 14.5 sec
Epoch 2. Loss: 0.125, Train acc 0.95, Test acc 0.93, Time 14.3 sec
Epoch 3. Loss: 0.099, Train acc 0.97, Test acc 0.92, Time 14.3 sec
Epoch 4. Loss: 0.086, Train acc 0.97, Test acc 0.94, Time 14.4 sec
Epoch 5. Loss: 0.075, Train acc 0.98, Test acc 0.95, Time 14.3 sec
Epoch 6. Loss: 0.058, Train acc 0.98, Test acc 0.96, Time 14.4 sec
```

Epoch 7. Loss: 0.061, Train acc 0.98, Test acc 0.96, Time 14.3 sec
 Epoch 8. Loss: 0.046, Train acc 0.99, Test acc 0.96, Time 14.4 sec
 Epoch 9. Loss: 0.057, Train acc 0.98, Test acc 0.96, Time 14.4 sec

对比起见我们尝试从随机初始值开始训练一个网络。

```
In [10]: scratch_net = models.resnet18_v2(classes=2)
        scratch_net.initialize(init=init.Xavier())
        train(scratch_net, ctx)

Start training on [gpu(0), gpu(1)]
Epoch 0. Loss: 0.446, Train acc 0.79, Test acc 0.80, Time 14.5 sec
Epoch 1. Loss: 0.368, Train acc 0.84, Test acc 0.84, Time 14.4 sec
Epoch 2. Loss: 0.340, Train acc 0.85, Test acc 0.84, Time 14.5 sec
Epoch 3. Loss: 0.332, Train acc 0.85, Test acc 0.78, Time 14.4 sec
Epoch 4. Loss: 0.323, Train acc 0.86, Test acc 0.79, Time 14.3 sec
Epoch 5. Loss: 0.314, Train acc 0.86, Test acc 0.85, Time 14.4 sec
Epoch 6. Loss: 0.321, Train acc 0.86, Test acc 0.80, Time 14.4 sec
Epoch 7. Loss: 0.312, Train acc 0.87, Test acc 0.82, Time 14.4 sec
Epoch 8. Loss: 0.309, Train acc 0.87, Test acc 0.83, Time 14.5 sec
Epoch 9. Loss: 0.292, Train acc 0.87, Test acc 0.85, Time 14.5 sec
```

可以看到，微调版本收敛比从随机值开始的要快很多。

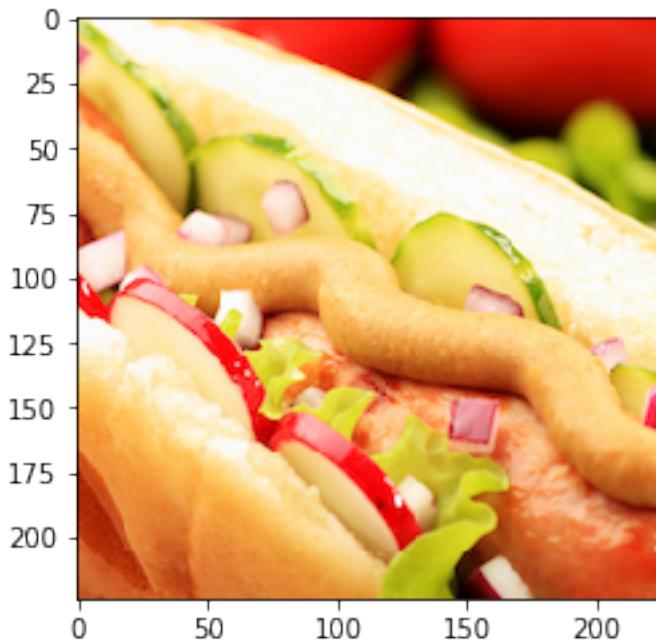
图片预测

```
In [11]: import matplotlib.pyplot as plt

def classify_hotdog(net, fname):
    with open(fname, 'rb') as f:
        img = image.imread(f.read())
    data, _ = transform(img, -1, test_augs)
    plt.imshow(data.transpose((1, 2, 0)).asnumpy() / 255)
    data = data.expand_dims(axis=0)
    out = net(data.as_in_context(ctx[0]))
    out = nd.SoftmaxActivation(out)
    pred = int(nd.argmax(out, axis=1).asscalar())
    prob = out[0][pred].asscalar()
    label = train_imgs.synsets
    return 'With prob=%f, %s' % (prob, label[pred])
```

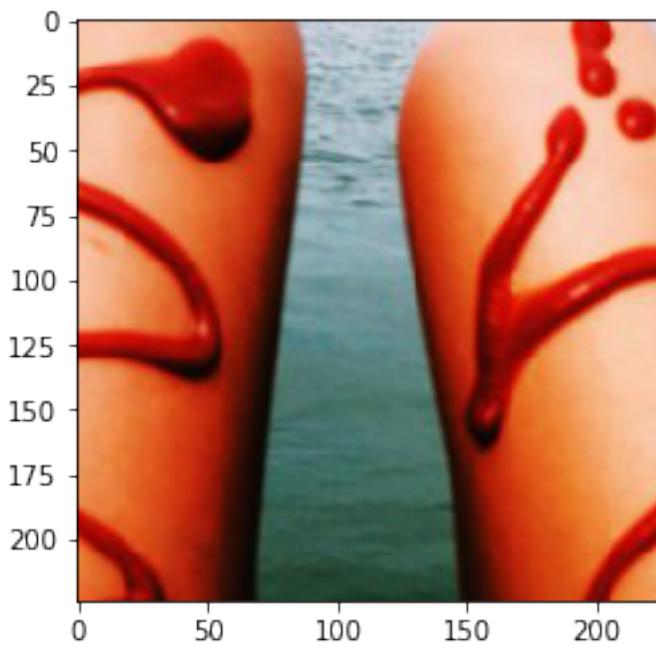
接下来我们用训练好的模型来预测几张图片：

```
In [12]: classify_hotdog(finetune_net, '../img/real_hotdog.jpg')
Out[12]: 'With prob=0.999723, hotdog'
```



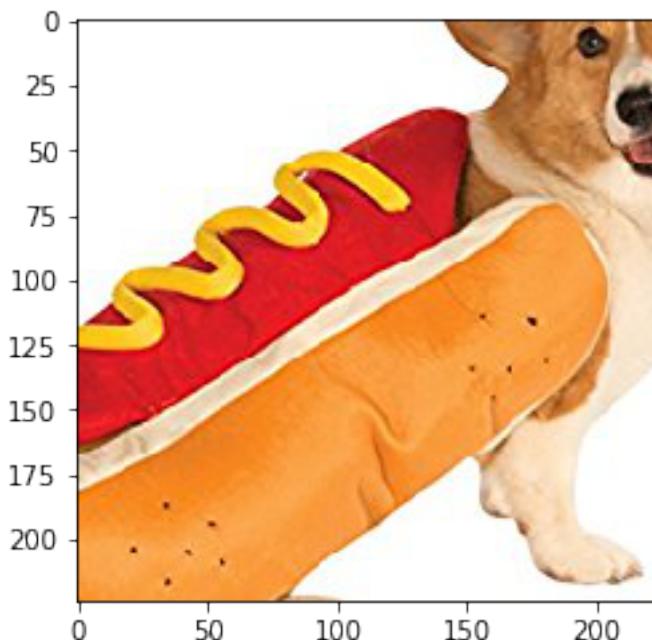
In [13]: `classify_hotdog(finetune_net, '../img/leg_hotdog.jpg')`

Out[13]: 'With prob=0.999529, hotdog'



In [14]: `classify_hotdog(finetune_net, '../img/dog_hotdog.jpg')`

Out[14]: 'With prob=0.941694, hotdog'



9.2.2 结论

我们看到，通过一个预先训练好的模型，我们可以在即使较小的数据集上训练得到很好的分类器。这是因为这两个任务里面的数据表示有很多共通性，例如都需要如何识别纹理、形状、边等等。而这些通常被在靠近数据的层有效的处理。因此，如果你有一个相对较小的数据在手，而且担心它可能不够训练出很好的模型，你可以寻找跟你数据类似的大数据集来先训练你的模型，然后再在你手上的数据集上微调。

9.2.3 练习

- 多跑几个 epochs 直到收敛（你可以也需要调调参数），看看 scratch_net 和 finetune_net 最后的精度是不是有区别
- 这里 finetune_net 重用了 pretrained_net 除最后全连接外的所有权重，试试少重用些权重，有会有什么区别
- 事实上 ImageNet 里也有 hotdog 这个类，它的 index 是 713。例如它对应的 weight 可以这样拿到。试试如何重用这个权重

```
In [15]: weight = pretrained_net.output.weight
hotdog_w = nd.split(weight.data(), 1000, axis=0)[713]
hotdog_w.shape
```

```
Out[15]: (1, 512)
```

- 试试不让 `finetune_net` 里重用的权重参与训练，就是不更新权重
- 如果图片预测这一章里我们训练的模型没有分对所有的图片，如何改进？

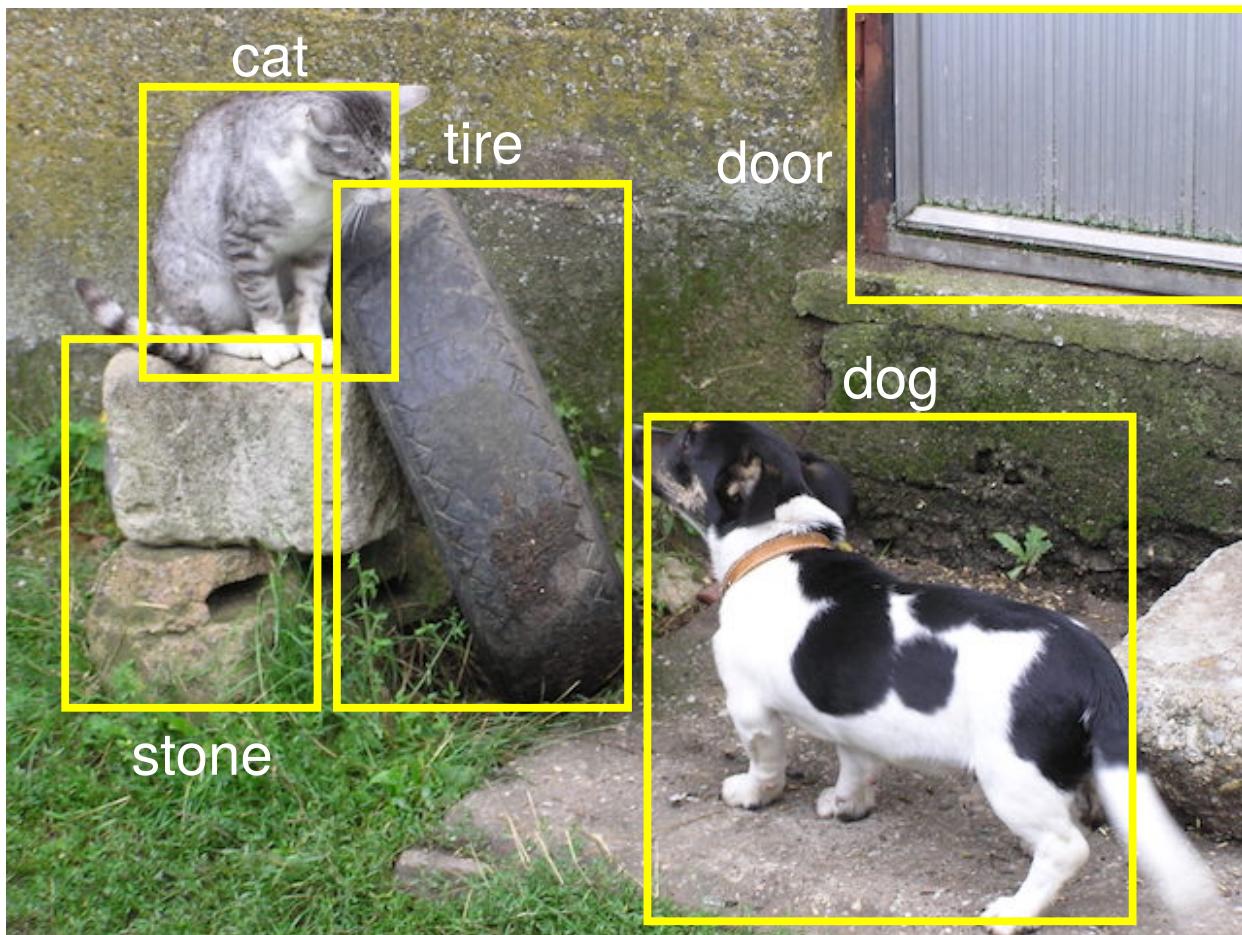
吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

9.3 使用卷积神经网络的物体检测

当我们讨论对图片进行预测时，到目前为止我们都是谈论分类。我们问过这个数字是 0 到 9 之间的哪一个，这个图片是鞋子还是衬衫，或者下面这张图片里面是猫还是狗。



但现实图片会更加复杂，它们可能不仅仅包含一个主体物体。**物体检测**就是针对这类问题提出，它不仅是要分析图片里有什么，而且需要识别它在什么位置。我们使用在**机器学习简介**那章讨论过的图片作为样例，并对它标上主要物体和位置。



可以看出物体检测跟图片分类有几个不同点：

1. 图片分类器通常只需要输出对图片中的主物体的分类。但物体检测必须能够识别多个物体，即使有些物体可能在图片中不是占主要版面。严格上来说，这个任务一般叫**多类物体检测**，但绝大部分研究都是针对多类的设置，所以我们这里为了简单去掉了“多类”。
2. 图片分类器只需要输出将图片物体识别成某类的概率，但物体检测不仅需要输出识别概率，还需要识别物体在图片中的位置。这个通常是一个括住这个物体的方框，通常也称之为**边界框**（bounding box）。

但也看到物体检测跟图片分类有类似之处，都是对一块图片区域判断其包含的主要物体。因此可以想象我们在前面介绍的基于卷积神经网络的图片分类可以被应用到这里。

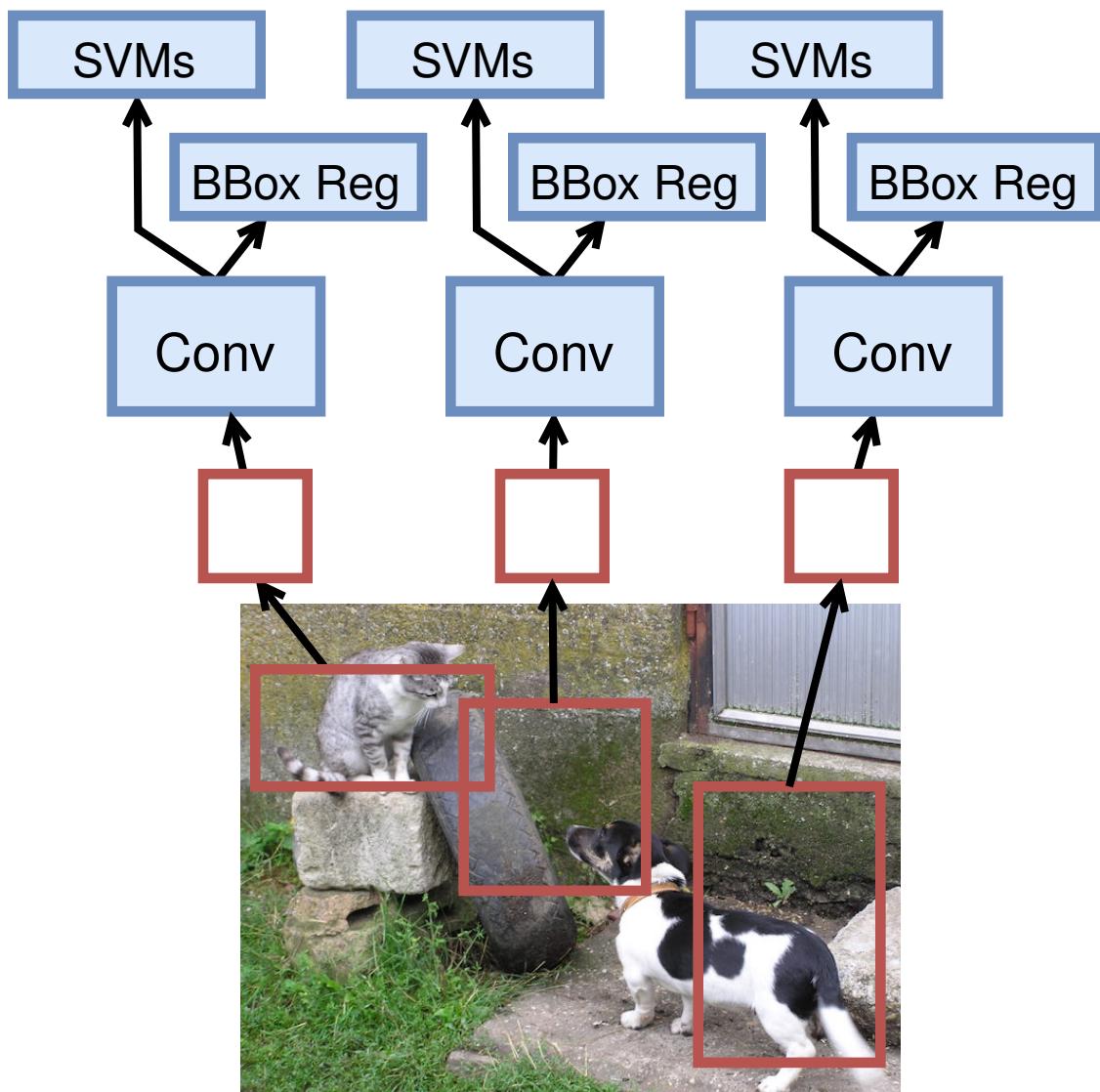
这一章我们将介绍数个基于卷积神经网络的物体检测算法的思想：

- R-CNN: <https://arxiv.org/abs/1311.2524>
- Fast R-CNN: <https://arxiv.org/abs/1504.08083>
- Faster R-CNN: <https://arxiv.org/abs/1506.01497>

- Mask R-CNN: <https://arxiv.org/abs/1703.06870>
- SSD: <https://arxiv.org/abs/1512.02325>
- YOLO: <https://arxiv.org/abs/1506.02640>
- YOLOv2: <https://arxiv.org/abs/1612.08242>

9.3.1 R-CNN：区域卷积神经网络

这是基于卷积神经网络的物体检测的奠基之作。其核心思想是在对每张图片选取多个区域，然后每个区域作为一个样本进入一个卷积神经网络来抽取特征，最后使用分类器来对齐分类，和一个回归器来得到准确的边框。



Selective Search

图 9.2: R-CNN

具体来说，这个算法有如下几个步骤：

1. 对每张输入图片使用一个基于规则的“选择性搜索”算法来选取多个提议区域
2. 跟[微调迁移学习](#)里那样，选取一个预先训练好的卷积神经网络并去掉最后一个输入层。每个区域被调整成这个网络要求的输入大小并计算输出。这个输出将作为这个区域的特征。
3. 使用这些区域特征来训练多个 SVM 来做物体识别，每个 SVM 预测一个区域是不是包含某个物体
4. 使用这些区域特征来训练线性回归器将提议区域

直观上 R-CNN 很好理解，但问题是它可能特别慢。一张图片我们可能选出上千个区域，导致一张图片需要做上千次预测。虽然跟微调不一样，这里训练可以不用更新用来抽特征的卷积神经网络，从而我们可以事先算好每个区域的特征并保存。但对于预测，我们无法避免这个。从而导致 R-CNN 很难实际中被使用。

9.3.2 Fast R-CNN：快速的区域卷积神经网络

Fast R-CNN 对 R-CNN 主要做了两点改进来提升性能。

1. 考虑到 R-CNN 里面的大量区域可能是相互覆盖，每次重新抽取特征过于浪费。因此 Fast R-CNN 先对输入图片抽取特征，然后再选取区域
2. Fast R-CNN 不再使用多个 SVM 来做分类，而是用单个多类逻辑回归，这也是前面教程里默认使用的。

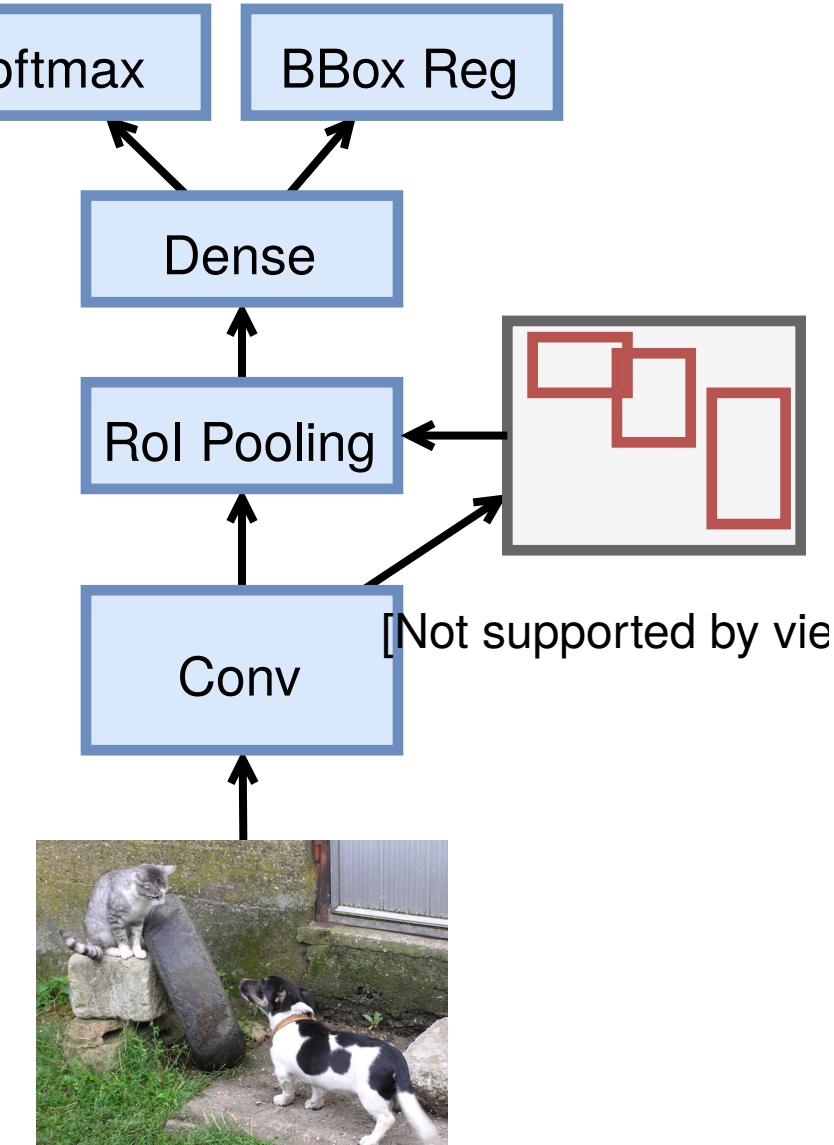


图 9.3: Fast R-CNN

从示意图可以看到，使用选择性搜索选取的区域是作用在卷积神经网络提取的特征上。这样我们只需要对原始的输入图片做一次特征提取即可，如此节省了大量重复计算。

Fast R-CNN 提出兴趣区域池化层（Region of Interest (RoI) pooling），它的输入为特征和一系列的区域，对每个区域它将其均匀划分成 $n \times m$ 的小区域，并对每个小区域做最大池化，从而得到一个 $n \times m$ 的输出。因此不管输入区域的大小，RoI 池化层都将其池化成固定大小输出。

下面我们仔细看一下 RoI 池化层是如何工作的，假设对于一张图片我们提出了一个 4×4 的特征，并且通道数为 1。

```
In [1]: from mxnet import nd
```

```
x = nd.arange(16).reshape((1,1,4,4))
x
```

Out[1]:

```
[[[[ 0.  1.  2.  3.]
   [ 4.  5.  6.  7.]
   [ 8.  9. 10. 11.]
   [12. 13. 14. 15.]]]]
<NDArray 1x1x4x4 @cpu(0)>
```

然后我们创建两个区域，每个区域由一个长为 5 的向量表示。第一个元素是其对应的物体的标号，之后分别是 x_{min} , y_{min} , x_{max} , 和 y_{max} 。这里我们生成了 3×3 和 4×3 大小的两个区域。

RoI 池化层的输出大小是 $num_regions \times num_channels \times n \times m$ 。它可以当做一个样本个数是 $num_regions$ 的普通批量进入到其他层进行训练。

```
In [2]: rois = nd.array([[0,0,0,2,2], [0,0,1,3,3]])
nd.ROIPooling(x, rois, pooled_size=(2,2), spatial_scale=1)
```

Out[2]:

```
[[[[ 5.  6.]
   [ 9. 10.]]

   [[ 9. 11.]
   [13. 15.]]]]
<NDArray 2x1x2x2 @cpu(0)>
```

9.3.3 Faster R-CNN：更快速的区域卷积神经网络

Fast R-CNN 沿用了 R-CNN 的选择性搜索方法来选择区域。这个通常很慢。Faster R-CNN 做的主要改进是提出了区域提议网络（region proposal network, RPN）来替代选择性搜索。它是这么工作的：

1. 在输入特征上放置一个 $1 \times 256 \times 3 \times 3$ 卷积。这样每个像素，连同它的周围 8 个像素，都被映射成一个长为 256 的向量。
2. 以每个像素为中心，生成 k 个大小和长宽比都预先设计好的默认边框，通常也叫锚框。
3. 对每个边框，使用其中心像素对应的 256 维向量作为特征，RPN 训练一个 2 类分类器来判断这个区域是不是含有任何感兴趣的物体还是只是背景，和一个 4 维输出的回归器来预测一个更准确的边框。
4. 对于所有的锚框，个数为 nmk 如果输入大小是 $n \times m$ ，选出被判断成还有物体的，然后前他们对应的回归器预测的边框作为输入放进接下来的 RoI 池化层

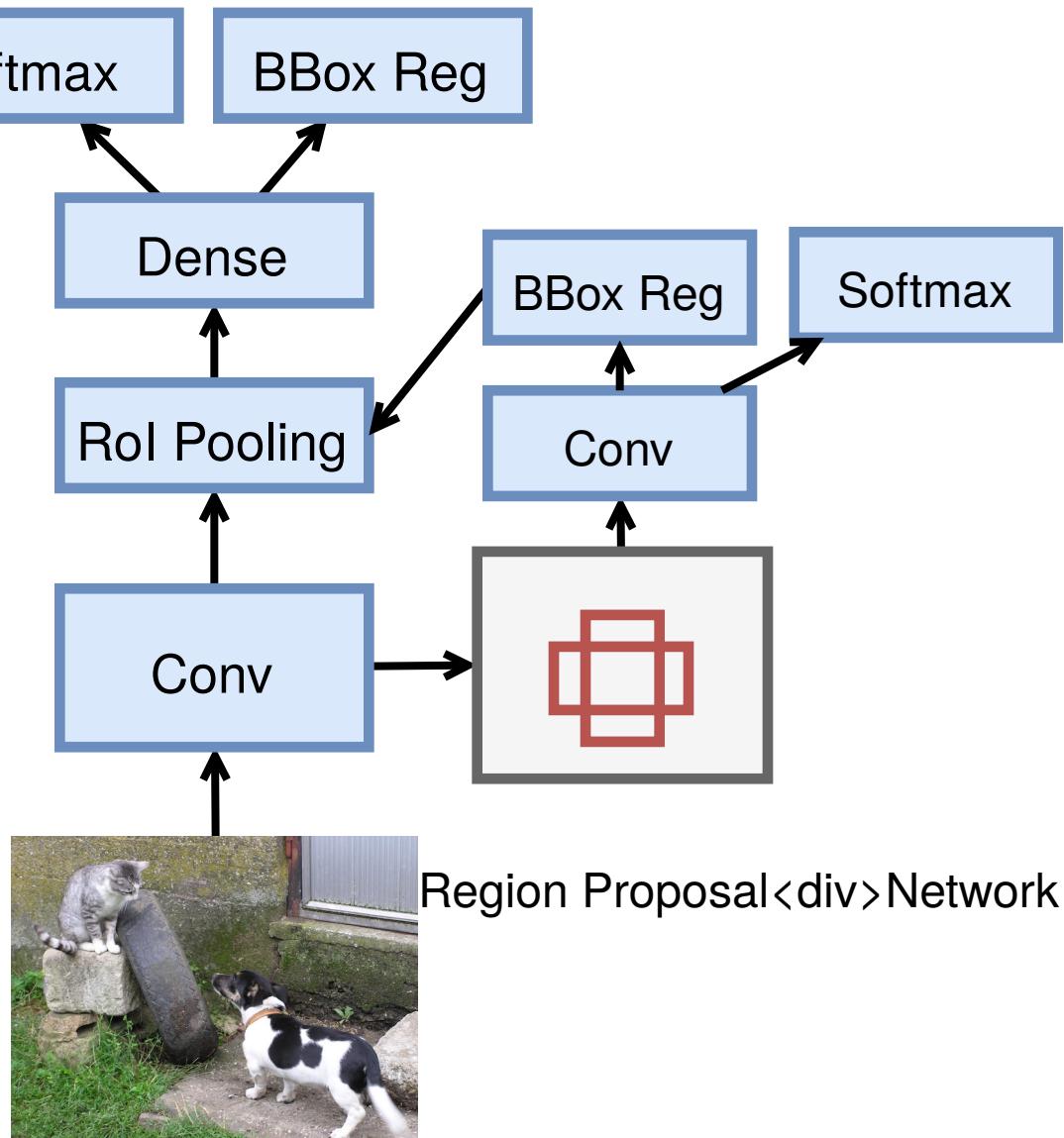


图 9.4: Faster R-CNN

虽然看上有些复杂，但 RPN 思想非常直观。首先提议预先配置好的一些区域，然后通过神经网络来判断这些区域是不是感兴趣的，如果是，那么再预测一个更加准确的边框。这样我们能有效降低搜索任何形状的边框的代价。

9.3.4 Mask R-CNN

Mask R-CNN 在 Faster R-CNN 上加入了一个新的像素级别的预测层，它不仅预测一个锚框对应的类和真实的边框，而且会判断这个锚框内每个像素对应的是物体还是只是背景。后者是语义分割要解决的问题。Mask R-CNN 使用了之后我们将介绍的全连接卷积网络 (FCN) 来完成这个预

测。当然这也意味这训练数据必须有像素级别的标注，而不是简单的边框。

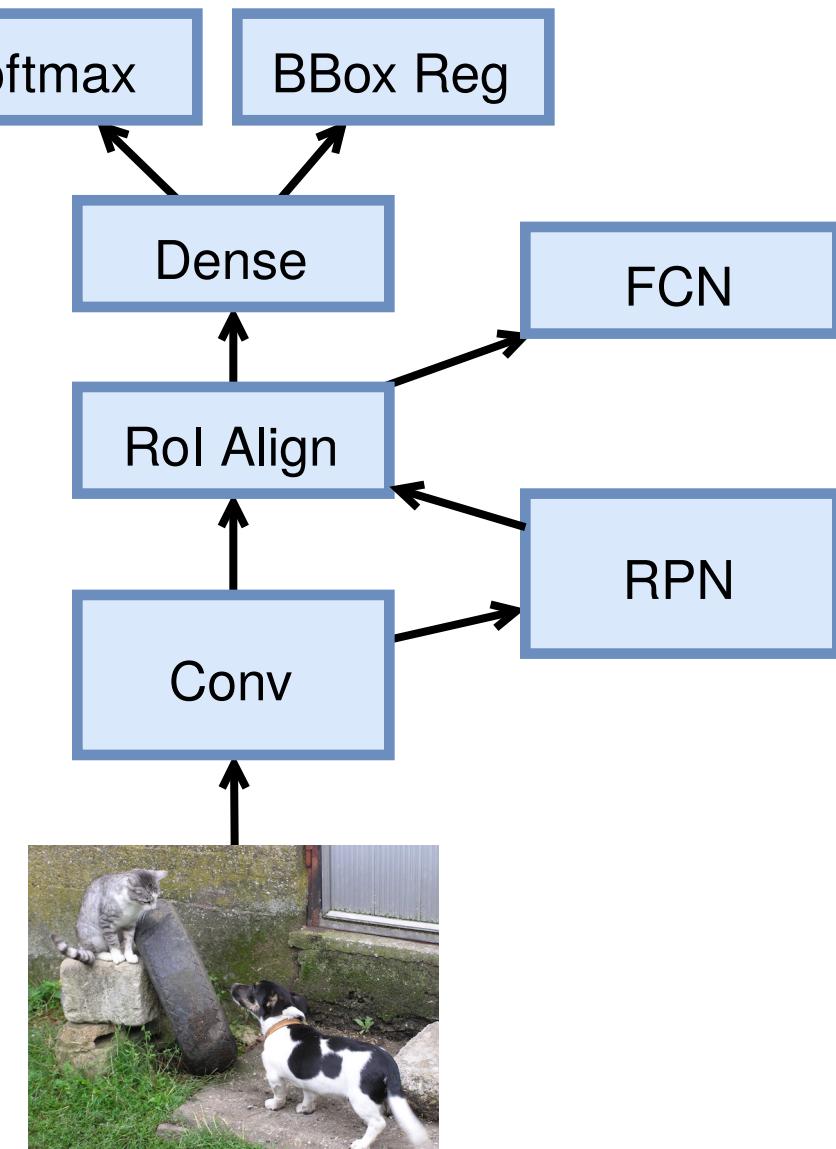


图 9.5: Mask R-CNN

因为 FCN 会精确预测每个像素的类别，就是输入图片中的每个像素都会在标注中对应一个类别。对于输入图片中的一个锚框，我们可以精确的匹配到像素标注中对应的区域。但是 ROI 池化是作用在卷积之后的特征上，其默认是将锚框做了定点化。例如假设选择的锚框是 (x, y, w, h) ，且特征抽取将图片变小了 16 倍，就是如果原始图片是 256×256 ，那么特征大小就是 16×16 。这时候在特征上对应的锚框就是变成了 $(\lfloor x/16 \rfloor, \lfloor y/16 \rfloor, \lfloor w/16 \rfloor, \lfloor h/16 \rfloor)$ 。如果 x, y, w, h 中有任何一个不被 16 整除，那么就可能发生错位。同样道理，在上面的样例中我们看到，如果锚框的长宽不被池化大小整除，那么同样会定点化，从而带来错位。

通常这样的错位只是在几个像素之间，对于分类和边框预测影响不大。但对于像素级别的预测，这样的错位可能会带来大问题。Mask R-CNN 提出一个 RoI Align 层，它类似于 RoI 池化层，但是去除了定点化步骤，就是移除了所有 $\lfloor \cdot \rfloor$ 。如果计算得到的表框不是刚好在像素之间，那么我们就用四周的像素来线性插值得到这个点上的值。

对于一维情况，假设我们要计算 x 点的值 $f(x)$ ，那么我们可以用 x 左右的整点的值来插值：

$$f(x) = (\lfloor x \rfloor + 1 - x)f(\lfloor x \rfloor) + (x - \lfloor x \rfloor)f(\lfloor x \rfloor + 1)$$

我们实际要使用的是二维差值来估计 $f(x, y)$ ，我们首先在 x 轴上差值得到 $f(x, \lfloor y \rfloor)$ 和 $f(x, \lfloor y \rfloor + 1)$ ，然后根据这两个值来差值得到 $f(x, y)$ 。

9.3.5 SSD: 单发多框检测器

在 R-CNN 系列模型里。区域提议和分类是分作两块来进行的。SSD 则将其统一成一个步骤来使得模型更加简单并且速度更快，这也是为什么它被称之为单发的原因。

它跟 Faster R-CNN 主要有两点不一样

1. 对于锚框，我们不再首先判断它是不是含有感兴趣物体，再将正类锚框放入真正物体分类。SSD 里我们直接使用一个 `num_class+1` 类分类器来判断它对应的是哪类物体，还是只是背景。我们也不再有额外的回归器对边框再进一步预测，而是直接使用单个回归器来预测真实边框。
2. SSD 不只是对卷积神经网络输出的特征做预测，它会进一步将特征通过卷积和池化层变小来做预测。这样达到多尺度预测的效果。

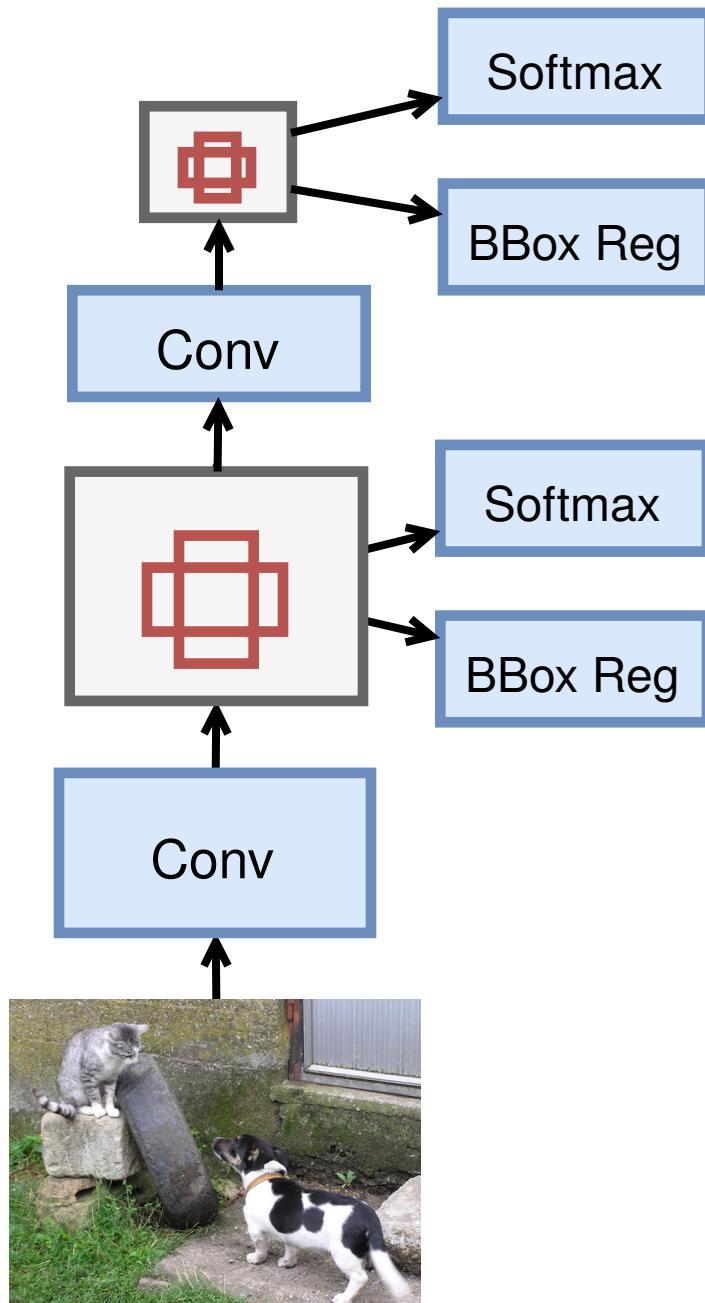


图 9.6: SSD

SSD 的具体实现将在下一章详细阐述。

9.3.6 YOLO：只需要看一遍

不管是 Faster R-CNN 还是 SSD，它们生成的锚框仍然有大量是相互重叠的，从而导致仍然有大量的区域被重复计算了。YOLO 试图来解决这个问题。它将图片特征均匀的切成 $S \times S$ 块，每一块

当做一个锚框。每个锚框预测 B 个边框，以及这个锚框主要包含哪个物体。

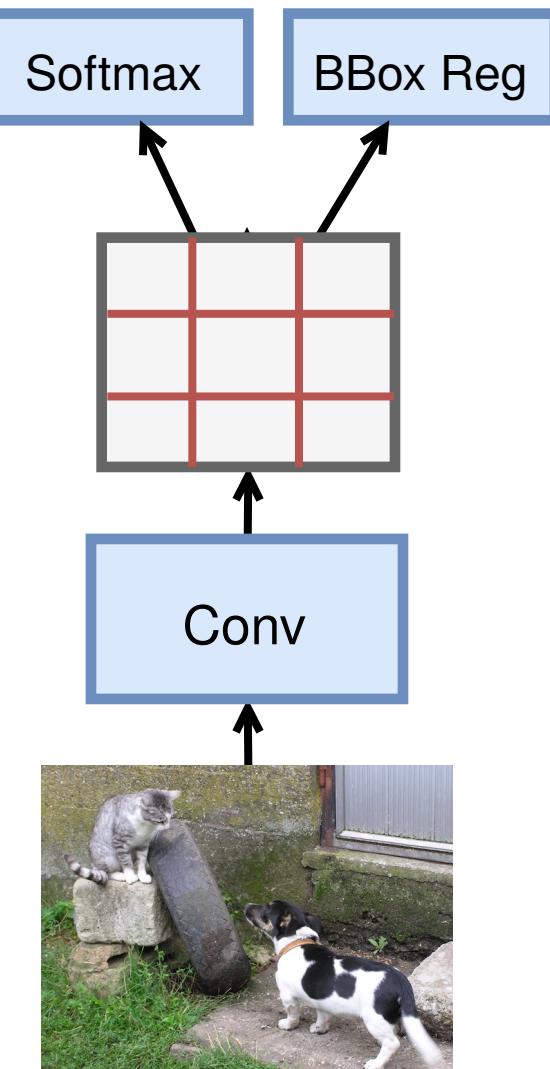


图 9.7: Yolo

9.3.7 YOLO v2: 更好，更快，更强

YOLO v2 对 YOLO 进行一些地方的改进，其主要包括：

1. 使用更好的卷积神经网络来做特征提取，使用更大输入图片 448×448 使得特征输出大小增大到 13×13
2. 不再使用均匀切来的锚框，而是对训练数据里的真实锚框做聚类，然后使用聚类中心作为锚框。相对于 SSD 和 Faster R-CNN 来说可以大幅降低锚框的个数。
3. 不再使用 YOLO 的全连接层来预测，而是同 SSD 一样使用卷积。例如假设使用 5 个锚框

(聚类为 5 类), 那么物体分类使用通道数是 $5*(1+num_classes)$ 的 1×1 卷积, 边框回归使用通道数 $4*5$.

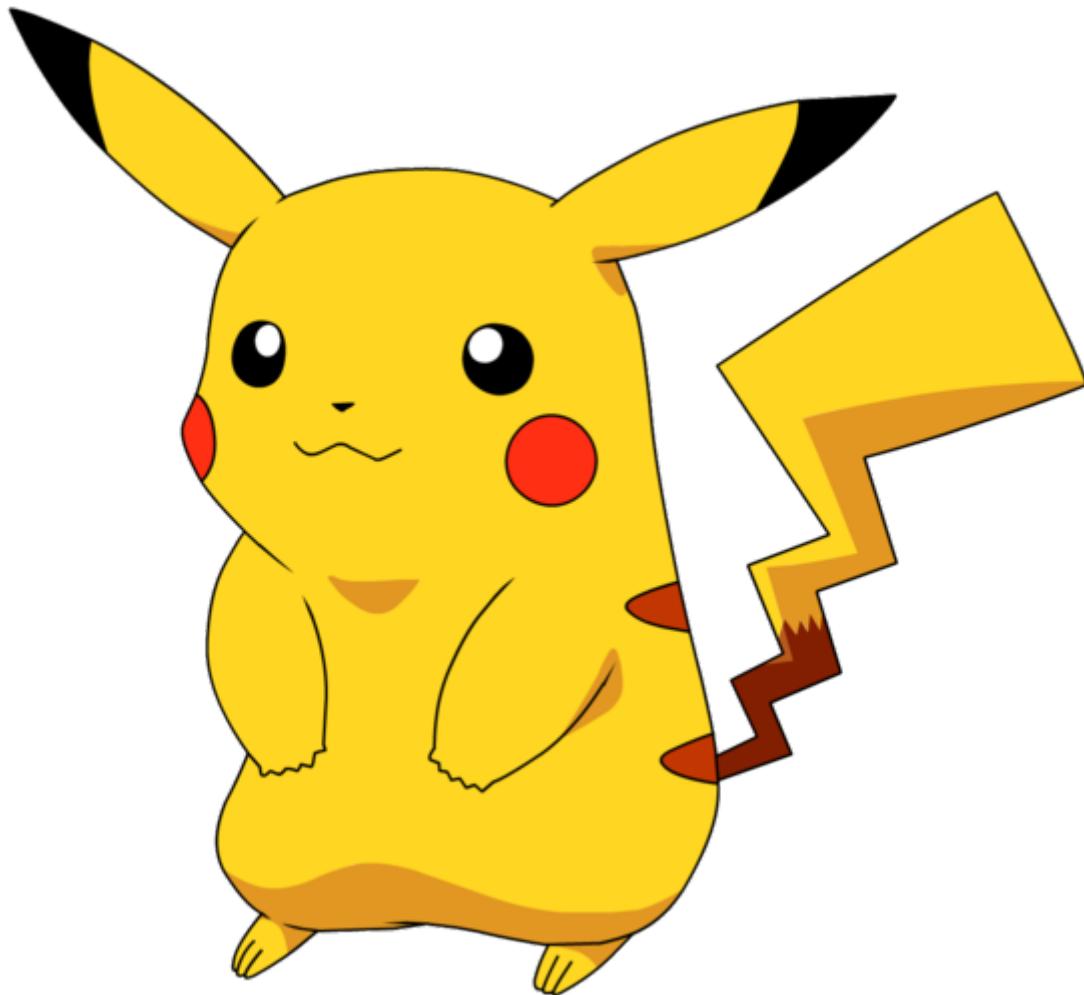
9.3.8 总结

我们描述了基于卷积神经网络的几个物体检测算法。他们之间的共同点在于首先提出锚框, 使用卷积神经网络抽取特征后来预测其包含的主要物体和更准确的边框。但他们在锚框的选择和预测上各有不同, 导致他们在计算实际和精度上也各有权衡。

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

9.4 SSD – 使用 Gluon

这一章下面我们将实现上一章介绍的 SSD 来检测野生皮卡丘。



9.4.1 数据集

为此我们合成了一个人工数据集。我们首先使用一个开源的皮卡丘 3D 模型，用其生成 1000 张不同角度和大小的照片。然后将其随机的放在背景图片里。我们将图片打包成 `rec` 文件，这是一个 MXNet 常用的二进制数据格式。我们可以使用 MXNet 下的 `tools/im2rec.py` 来将图片打包。(TODO(@mli) 加一个教程关于如何使用 `im2rec`)。

下载数据

打包好的数据可以直接在网下载：

```
In [1]: from mxnet import gluon

root_url = ('https://apache-mxnet.s3-accelerate.amazonaws.com/'
            'gluon/dataset/pikachu/')
data_dir = '../data/pikachu/'
dataset = {'train.rec': 'e6bcb6ffba1ac04ff8a9b1115e650af56ee969c8',
           'train.idx': 'dcf7318b2602c06428b9988470c731621716c393',
           'val.rec': 'd6c33f799b4d058e82f2cb5bd9a976f69d72d520'}
for k, v in dataset.items():
    gluon.utils.download(root_url+k, data_dir+k, sha1_hash=v)
```

读取数据集

我们使用 `image.ImageDetIter` 来读取数据。这是针对物体检测的迭代器，(Det 表示 Detection)。它跟 `image.ImageIter` 使用很类似。主要不同是它返回的标号不是单个图片标号，而是每个图片里所有物体的标号，以及其对用的边框。

```
In [2]: from mxnet import image
        from mxnet import nd

data_shape = 256
batch_size = 32
rgb_mean = nd.array([123, 117, 104])

def get_iterators(data_shape, batch_size):
    class_names = ['pikachu']
    num_class = len(class_names)
    train_iter = image.ImageDetIter(
        batch_size=batch_size,
        data_shape=(3, data_shape, data_shape),
        path_imgrec=data_dir+'train.rec',
        path_imgidx=data_dir+'train.idx',
        shuffle=True,
        mean=True,
        rand_crop=1,
        min_object_covered=0.95,
        max_attempts=200)
    val_iter = image.ImageDetIter(
        batch_size=batch_size,
        data_shape=(3, data_shape, data_shape),
        path_imgrec=data_dir+'val.rec',
        shuffle=False,
        mean=True)
    return train_iter, val_iter, class_names, num_class
```

```
train_data, test_data, class_names, num_class = get_iterators(
    data_shape, batch_size)
```

我们读取一个批量。可以看到标号的形状是 `batch_size x num_object_per_image x 5`。这里数据里每个图片里面只有一个标号。每个标号由长为 5 的数组表示，第一个元素是其对用物体的标号，其中 -1 表示非法物体，仅做填充使用。后面 4 个元素表示边框。

```
In [3]: batch = train_data.next()
print(batch)
```

```
DataBatch: data shapes: [(32, 3, 256, 256)] label shapes: [(32, 1, 5)]
```

图示数据

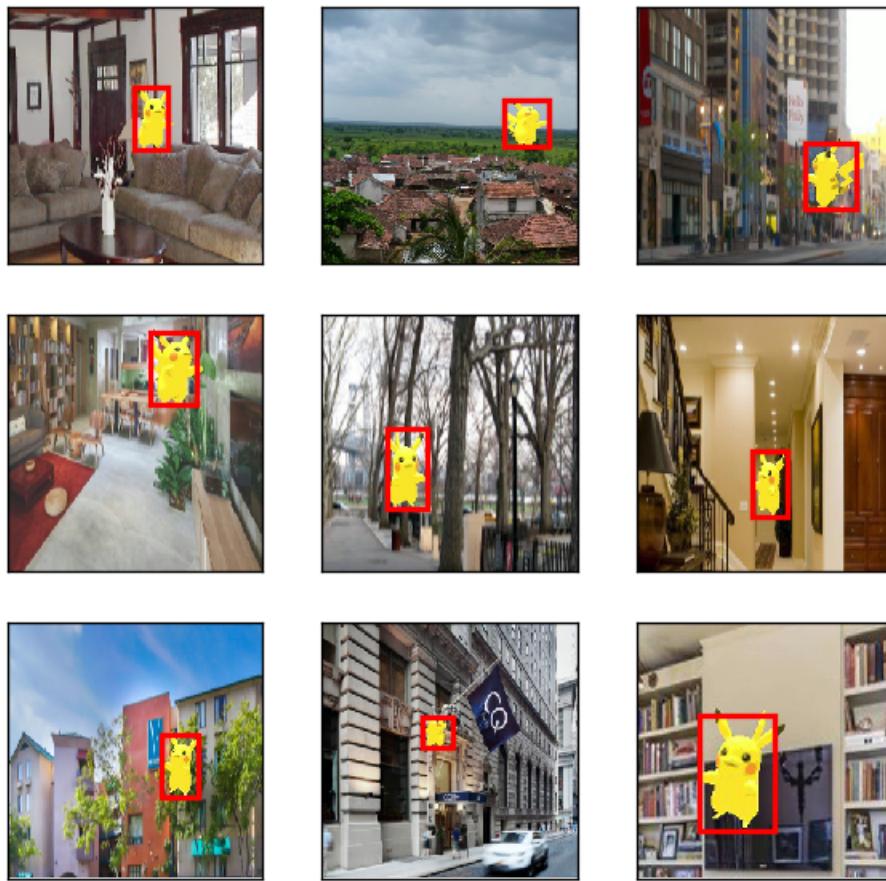
我们画出几张图片和其对应的标号。可以看到比卡丘的角度大小位置在每张图图片都不一样。不过也注意到这个数据集是直接将二次元动漫皮卡丘跟三次元背景相结合。可能通过简单判断区域的色彩直方图就可以有效的区别是不是有我们要的物体。我们用这个简单数据集来演示 SSD 是如何工作的。实际中遇到的数据集通常会复杂很多。

```
In [4]: %matplotlib inline
import matplotlib as mpl
mpl.rcParams['figure.dpi']= 120
import matplotlib.pyplot as plt

def box_to_rect(box, color, linewidth=3):
    """convert an anchor box to a matplotlib rectangle"""
    box = box.asnumpy()
    return plt.Rectangle(
        (box[0], box[1]), box[2]-box[0], box[3]-box[1],
        fill=False, edgecolor=color, linewidth=linewidth)

_, figs = plt.subplots(3, 3, figsize=(6,6))
for i in range(3):
    for j in range(3):
        img, labels = batch.data[0][3*i+j], batch.label[0][3*i+j]
        # (3L, 256L, 256L) => (256L, 256L, 3L)
        img = img.transpose((1, 2, 0)) + rgb_mean
        img = img.clip(0, 255).asnumpy()/255
        fig = figs[i][j]
        fig.imshow(img)
        for label in labels:
            rect = box_to_rect(label[1:5]*data_shape, 'red', 2)
            fig.add_patch(rect)
        fig.axes.get_xaxis().set_visible(False)
```

```
fig.axes.get_yaxis().set_visible(False)
plt.show()
```



9.4.2 SSD 模型

锚框：默认的边界框

因为边框可以出现在图片中的任何位置，并且可以有任意大小。为了简化计算，SSD 跟 Faster R-CNN 一样使用一些默认的边界框，或者称之为锚框（anchor box），做为搜索起点。具体来说，对输入的每个像素，以其为中心采样数个有不同形状和不同比例的边界框。假设输入大小是 $w \times h$ ，

- 给定大小 $s \in (0, 1]$ ，那么生成的边界框形状是 $ws \times hs$
- 给定比例 $r > 0$ ，那么生成的边界框形状是 $w\sqrt{r} \times \frac{h}{\sqrt{r}}$

在采样的时候我们提供 n 个大小（sizes）和 m 个比例（ratios）。为了计算简单这里不生成 nm 个锚框，而是 $n + m - 1$ 个。其中第 i 个锚框使用

- `sizes[i]` 和 `ratios[0]` 如果 $i \leq n$

- `sizes[0]` 和 `ratios[i-n]` 如果 $i > n$

我们可以使用 `contrib.ndarray` 里的 `MultiBoxPrior` 来采样锚框。这里锚框通过左下角和右上角两个点来确定，而且被标准化成了区间 $[0, 1]$ 的实数。

```
In [5]: from mxnet import nd
        from mxnet.contrib.ndarray import MultiBoxPrior

        # shape: batch x channel x height x weight
n = 40
x = nd.random.uniform(shape=(1, 3, n, n))

y = MultiBoxPrior(x, sizes=[.5,.25,.1], ratios=[1,2,.5])

boxes = y.reshape((n, n, -1, 4))
print(boxes.shape)
# The first anchor box centered on (20, 20)
# its format is (x_min, y_min, x_max, y_max)
boxes[20, 20, 0, :]

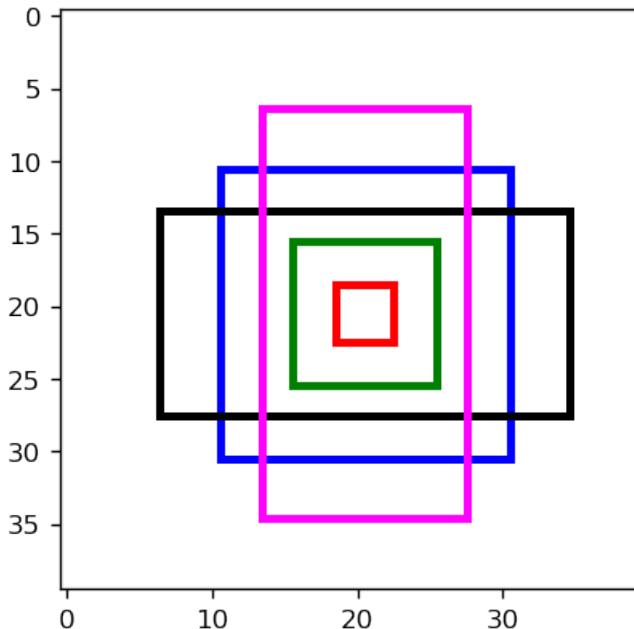
(40, 40, 5, 4)

Out[5]:
[ 0.26249999  0.26249999  0.76249999  0.76249999]
<NDArray 4 @cpu(0)>
```

我们可以画出以 $(20, 20)$ 为中心的所有锚框：

```
In [6]: colors = ['blue', 'green', 'red', 'black', 'magenta']

plt.imshow(nd.ones((n, n, 3)).asnumpy())
anchors = boxes[20, 20, :, :]
for i in range(anchors.shape[0]):
    plt.gca().add_patch(box_to_rect(anchors[i,:]*n, colors[i]))
plt.show()
```



预测物体类别

对每一个锚框我们需要预测它是不是包含了我们感兴趣的物体，还是只是背景。这里我们使用一个 3×3 的卷积层来做预测，加上 `pad=1` 使用它的输出和输入一样。同时输出的通道数是 `num_anchors*(num_classes+1)`，每个通道对应一个锚框对某个类的置信度。假设输出是 `Y`，那么对应输入中第 n 个样本的第 (i, j) 像素的置信值是在 `Y[n, :, i, j]` 里。具体来说，对于以 (i, j) 为中心的第 a 个锚框，

- 通道 $a * (\text{num_class} + 1)$ 是其只包含背景的分数
- 通道 $a * (\text{num_class} + 1) + 1 + b$ 是其包含第 b 个物体的分数

我们定义一个这样的类别分类器函数：

```
In [7]: from mxnet.gluon import nn
def class_predictor(num_anchors, num_classes):
    """return a layer to predict classes"""
    return nn.Conv2D(num_anchors * (num_classes + 1), 3, padding=1)

cls_pred = class_predictor(5, 10)
cls_pred.initialize()
x = nd.zeros((2, 3, 20, 20))
y = cls_pred(x)
y.shape

Out[7]: (2, 55, 20, 20)
```

预测边界框

因为真实的边界框可以是任意形状，我们需要预测如何从一个锚框变换为真正的边界框。这个变换可以由一个长为 4 的向量来描述。同上一样，我们用一个有 `num_anchors * 4` 通道的卷积。假设输出是 `Y`，那么对应输入中第 n 个样本的第 (i, j) 像素为中心的锚框的转换在 `Y[n, :, i, j]` 里。具体来说，对于第 a 个锚框，它的变换在 $a*4$ 到 $a*4+3$ 通道里。

```
In [8]: def box_predictor(num_anchors):
    """return a layer to predict delta locations"""
    return nn.Conv2D(num_anchors * 4, 3, padding=1)

    box_pred = box_predictor(10)
    box_pred.initialize()
    x = nd.zeros((2, 3, 20, 20))
    y = box_pred(x)
    y.shape

Out[8]: (2, 40, 20, 20)
```

减半模块

我们定义一个卷积块，它将输入特征的长宽减半，以此来获取多尺度的预测。它由两个 Conv-BatchNorm-Relu 组成，我们使用填充为 1 的 3×3 卷积使得输入和输入有同样的长宽，然后再通过跨度为 2 的最大池化层将长宽减半。

```
In [9]: def down_sample(num_filters):
    """stack two Conv-BatchNorm-Relu blocks and then a pooling layer
    to halve the feature size"""
    out = nn.HybridSequential()
    for _ in range(2):
        out.add(nn.Conv2D(num_filters, 3, strides=1, padding=1))
        out.add(nn.BatchNorm(in_channels=num_filters))
        out.add(nn.Activation('relu'))
    out.add(nn.MaxPool2D(2))
    return out

    blk = down_sample(10)
    blk.initialize()
    x = nd.zeros((2, 3, 20, 20))
    y = blk(x)
    y.shape

Out[9]: (2, 10, 10, 10)
```

合并来自不同层的预测输出

前面我们提到过 SSD 的一个重要性质是它会在多个层同时做预测。每个层由于长宽和锚框选择不一样，导致输出的数据形状会不一样。这里我们用物体类别预测作为样例，边框预测是类似的。

我们首先创建一个特定大小的输入，然后对它输出类别预测。然后对输入减半，再输出类别预测。

```
In [10]: x = nd.zeros((2, 8, 20, 20))
    print('x:', x.shape)

    cls_pred1 = class_predictor(5, 10)
    cls_pred1.initialize()
    y1 = cls_pred1(x)
    print('Class prediction 1:', y1.shape)

    ds = down_sample(16)
    ds.initialize()
    x = ds(x)
    print('x:', x.shape)

    cls_pred2 = class_predictor(3, 10)
    cls_pred2.initialize()
    y2 = cls_pred2(x)
    print('Class prediction 2:', y2.shape)

x: (2, 8, 20, 20)
Class prediction 1: (2, 55, 20, 20)
x: (2, 16, 10, 10)
Class prediction 2: (2, 33, 10, 10)
```

可以看到 y_1 和 y_2 形状不同。为了之后处理简单，我们将不同层的输入合并成一个输出。首先我们将通道移到最后的维度，然后将其展成 2D 数组。因为第一个维度是样本个数，所以不同输出之间是不变，我们可以将所有输出在第二个维度上拼接起来。

```
In [11]: def flatten_prediction(pred):
    return pred.transpose(axes=(0,2,3,1)).flatten()

def concat_predictions(preds):
    return nd.concat(*preds, dim=1)

flat_y1 = flatten_prediction(y1)
print('Flatten class prediction 1', flat_y1.shape)
flat_y2 = flatten_prediction(y2)
print('Flatten class prediction 2', flat_y2.shape)
y = concat_predictions([flat_y1, flat_y2])
print('Concat class predictions', y.shape)
```

```
Flatten class prediction 1 (2, 22000)
Flatten class prediction 2 (2, 3300)
Concat class predictions (2, 25300)
```

主体网络

主体网络用来从原始像素抽取特征。通常前面介绍的用来图片分类的卷积神经网络，例如 ResNet，都可以用来作为主体网络。这里为了示范，我们简单叠加几个减半模块作为主体网络。

```
In [12]: def body():
    out = nn.HybridSequential()
    for nfilt in [16, 32, 64]:
        out.add(down_sample(nfilt))
    return out

bnet = body()
bnet.initialize()
x = nd.random.uniform(shape=(2,3,256,256))
y = bnet(x)
y.shape

Out[12]: (2, 64, 32, 32)
```

创建一个玩具 SSD 模型

现在我们可以创建一个玩具 SSD 模型了。我们称之为玩具是因为这个网络不管是层数还是锚框个数都比较小，仅仅适合之后我们之后使用的一个小数据集。但这个模型不会影响我们介绍 SSD。

这个网络包含四块。主体网络，三个减半模块，以及五个物体类别和边框预测模块。其中预测分别应用在在主体网络输出，减半模块输出，和最后的全局池化层上。

```
In [13]: def toy_ssd_model(num_anchors, num_classes):
    downsamplers = nn.Sequential()
    for _ in range(3):
        downsamplers.add(down_sample(128))

    class_predictors = nn.Sequential()
    box_predictors = nn.Sequential()
    for _ in range(5):
        class_predictors.add(class_predictor(num_anchors, num_classes))
        box_predictors.add(box_predictor(num_anchors))

    model = nn.Sequential()
    model.add(body(), downsamplers, class_predictors, box_predictors)
    return model
```

计算预测

给定模型和每层预测输出使用的锚框大小和形状，我们可以定义前向函数。

```
In [14]: def toy_ssd_forward(x, model, sizes, ratios, verbose=False):
    body, downsamplers, class_predictors, box_predictors = model
    anchors, class_preds, box_preds = [], [], []
    # feature extraction
    x = body(x)
    for i in range(5):
        # predict
        anchors.append(MultiBoxPrior(
            x, sizes=sizes[i], ratios=ratios[i]))
        class_preds.append(
            flatten_prediction(class_predictors[i](x)))
        box_preds.append(
            flatten_prediction(box_predictors[i](x)))
    if verbose:
        print('Predict scale', i, x.shape, 'with',
              anchors[-1].shape[1], 'anchors')
    # down sample
    if i < 3:
        x = downsamplers[i](x)
    elif i == 3:
        x = nd.Pooling(
            x, global_pool=True, pool_type='max',
            kernel=(x.shape[2], x.shape[3]))
    # concat data
    return (concat_predictions(anchors),
            concat_predictions(class_preds),
            concat_predictions(box_preds))
```

完整的模型

```
In [15]: from mxnet import gluon
class ToySSD(gluon.Block):
    def __init__(self, num_classes, verbose=False, **kwargs):
        super(ToySSD, self).__init__(**kwargs)
        # anchor box sizes and ratios for 5 feature scales
        self.sizes = [[.2,.272], [.37,.447], [.54,.619],
                      [.71,.79], [.88,.961]]
        self.ratios = [[1,2,.5]]*5
        self.num_classes = num_classes
        self.verbose = verbose
```

```

num_anchors = len(self.sizes[0]) + len(self.ratios[0]) - 1
# use name_scope to guard the names
with self.name_scope():
    self.model = toy_ssd_model(num_anchors, num_classes)

def forward(self, x):
    anchors, class_preds, box_preds = toy_ssd_forward(
        x, self.model, self.sizes, self.ratios,
        verbose=self.verbose)
    # it is better to have class predictions reshaped for softmax
    → computation
    class_preds = class_preds.reshape(shape=(0, -1, self.num_classes+1))
    return anchors, class_preds, box_preds

```

我们看一下输入图片的形状是如何改变的，已经输出的形状。

```

In [16]: net = ToySSD(num_classes=2, verbose=True)
net.initialize()
x = batch.data[0][0:1]
print('Input:', x.shape)
anchors, class_preds, box_preds = net(x)
print('Output anchors:', anchors.shape)
print('Output class predictions:', class_preds.shape)
print('Output box predictions:', box_preds.shape)

Input: (1, 3, 256, 256)
Predict scale 0 (1, 64, 32, 32) with 4096 anchors
Predict scale 1 (1, 128, 16, 16) with 1024 anchors
Predict scale 2 (1, 128, 8, 8) with 256 anchors
Predict scale 3 (1, 128, 4, 4) with 64 anchors
Predict scale 4 (1, 128, 1, 1) with 4 anchors
Output anchors: (1, 5444, 4)
Output class predictions: (1, 5444, 3)
Output box predictions: (1, 21776)

```

9.4.3 训练

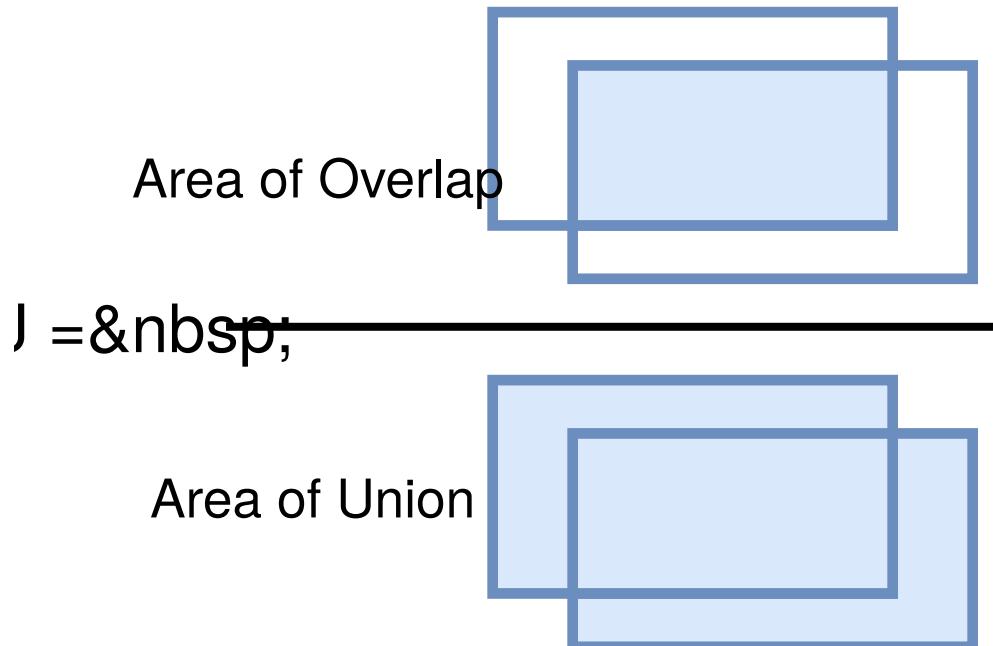
之前的教程我们主要是关注分类。对于分类的预测结果和真实的标号，我们通过交叉熵来计算他们的差异。但物体检测里我们需要预测边框。这里我们先引入一个概率来描述两个边框的距离。

IoU：交集除并集

我们知道判断两个集合的相似度最常用的衡量叫做 Jaccard 距离，给定集合 A 和 B ，它的定义是

$$J(A, B) = \frac{|A \cap B|}{|A \cup B|}$$

边框可以看成是像素的集合，我们可以类似的定义它。这个标准通常被称之为 Intersection over Union (IoU)。



大的值表示两个边框很相似，而小的值则表示不相似。

损失函数

虽然每张图片里面通常只有几个标注的边框，但 SSD 会生成大量的锚框。可以想象很多锚框都不会框住感兴趣的物体，就是说跟任何对应感兴趣物体的表框的 IoU 都小于某个阈值。这样就会产生大量的负类锚框，或者说对应标号为 0 的锚框。对于这类锚框有两点要考虑的：

1. 边框预测的损失函数不应该包括负类锚框，因为它们并没有对应的真实边框
2. 因为负类锚框数目可能远多于其他，我们可以只保留其中的一些。而且是保留那些目前预测最不确定它是负类的，就是对类 0 预测值排序，选取数值最小的哪一些困难的负类锚框。

我们可以使用 `MultiBoxTarget` 来完成上面这两个操作。

```
In [17]: from mxnet.contrib.ndarray import MultiBoxTarget
def training_targets(anchors, class_preds, labels):
```

```

    class_preds = class_preds.transpose(axes=(0,2,1))
    return MultiBoxTarget(anchors, labels, class_preds)

out = training_targets(anchors, class_preds, batch.label[0][0:1])
out

Out[17]: [
    [[ 0.  0.  0. ...,  0.  0.  0.]],
    <NDArray 1x21776 @cpu(0)>,
    [[ 0.  0.  0. ...,  0.  0.  0.]],
    <NDArray 1x21776 @cpu(0)>,
    [[ 0.  0.  0. ...,  0.  0.  0.]],
    <NDArray 1x5444 @cpu(0)>]

```

它返回三个 NDArray, 分别是

1. 预测的边框跟真实边框的偏移, 大小是 batch_size x (num_anchors*4)
2. 用来遮掩不需要的负类锚框的掩码, 大小跟上面一致
3. 锚框的真实的标号, 大小是 batch_size x num_anchors

我们可以计算这次只选中了多少个锚框进入损失函数:

```
In [18]: out[1].sum()/4
```

Out[18]:

```
[ 12.]
<NDArray 1 @cpu(0)>
```

然后我们可以定义需要的损失函数了。

对于分类问题, 最常用的损失函数是之前一直使用的交叉熵。这里我们定义一个类似于交叉熵的损失, 不同于交叉熵的定义 $\log(p_j)$, 这里 j 是真实的类别, 且 p_j 是对于的预测概率。我们使用一个被称之为关注损失的函数, 给定正的 γ 和 α , 它的定义是

$$-\alpha(1 - p_j)^\gamma \log(p_j)$$

下图我们演示不同 γ 导致的变化。可以看到, 增加 γ 可以使得对正类预测值比较大时损失变小。

```
In [19]: import numpy as np
```

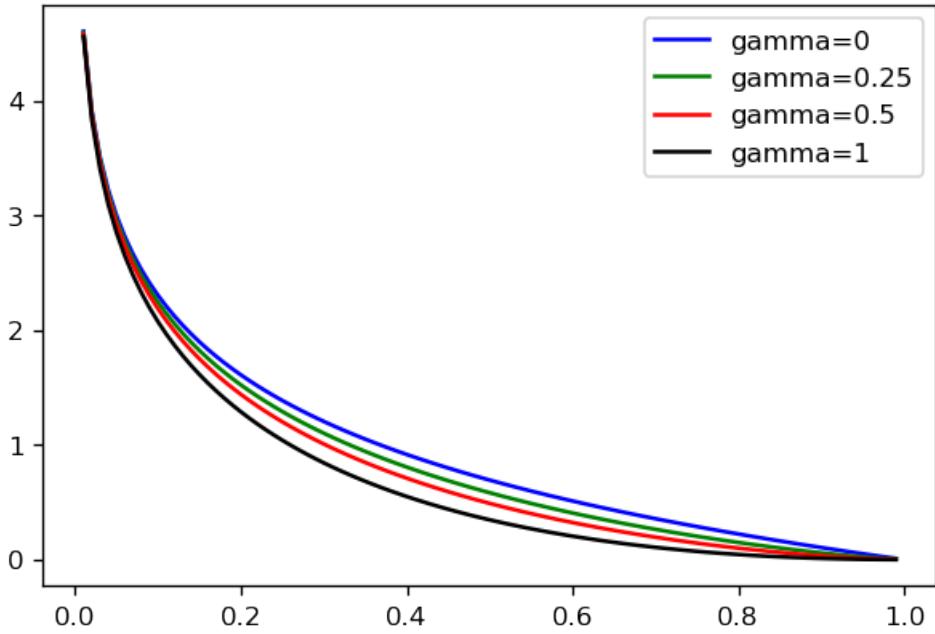
```

def focal_loss(gamma, x):
    return - (1-x)**gamma*np.log(x)

x = np.arange(0.01, 1, .01)
gammas = [.0,.25,.5,1]
for i,g in enumerate(gammas):
    plt.plot(x, focal_loss(g,x), colors[i])

```

```
plt.legend(['gamma=' + str(g) for g in gammas])
plt.show()
```



这个自定义的损失函数可以简单通过继承 `gluon.loss.Loss` 来实现。

```
In [20]: class FocalLoss(gluon.loss.Loss):
    def __init__(self, axis=-1, alpha=0.25, gamma=2, batch_axis=0, **kwargs):
        super(FocalLoss, self).__init__(None, batch_axis, **kwargs)
        self._axis = axis
        self._alpha = alpha
        self._gamma = gamma

    def hybrid_forward(self, F, output, label):
        output = F.softmax(output)
        pj = output.pick(label, axis=self._axis, keepdims=True)
        loss = - self._alpha * ((1 - pj) ** self._gamma) * pj.log()
        return loss.mean(axis=self._batch_axis, exclude=True)

cls_loss = FocalLoss()
cls_loss
```

Out[20]: `FocalLoss(batch_axis=0, w=None)`

对于边框的预测是一个回归问题。通常可以选择平方损失函数（L2 损失） $f(x) = x^2$ 。但这个损失对于比较大的误差的惩罚很高。我们可以采用稍微缓和一点绝对损失函数（L1 损失） $f(x) = |x|$ ，它是随着误差线性增长，而不是平方增长。但这个函数在 0 点处导数不唯一，因此可能会影响收敛。一个通常的解决办法是在 0 点附近使用平方函数使得它更加平滑。它被称之为平滑 L1 损失函数。

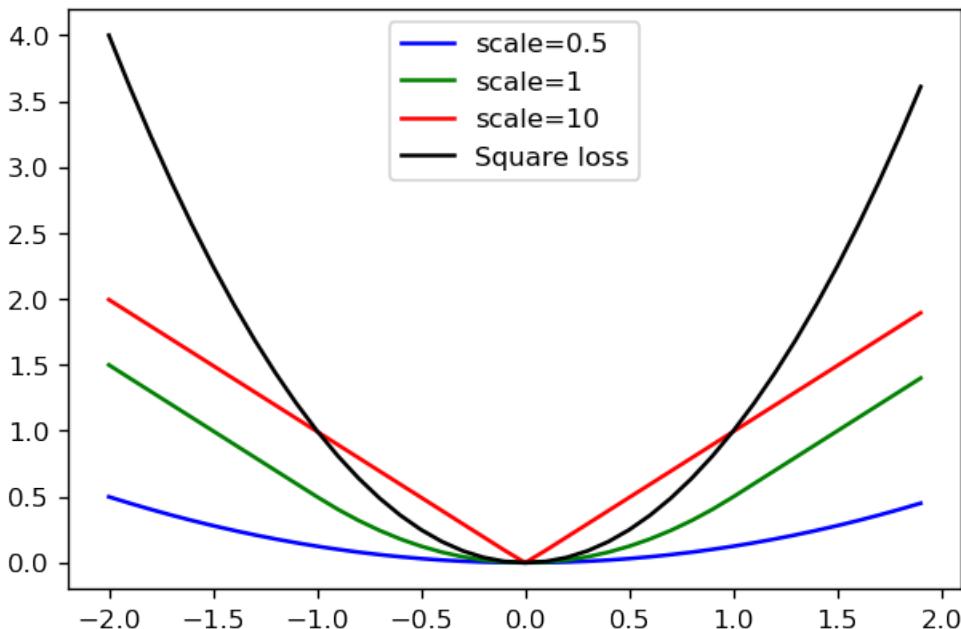
它通过一个参数 σ 来控制平滑的区域:

$$f(x) = \begin{cases} (\sigma x)^2/2, & \text{if } x < 1/\sigma^2 \\ |x| - 0.5/\sigma^2, & \text{otherwise} \end{cases}$$

我们图示不同的 σ 的平滑 L1 损失和 L2 损失的区别。

```
In [21]: scales = [.5, 1, 10]
x = nd.arange(-2, 2, 0.1)

for i,s in enumerate(scales):
    y = nd.smooth_l1(x, scalar=s)
    plt.plot(x.asnumpy(), y.asnumpy(), color=colors[i])
plt.plot(x.asnumpy(), (x**2).asnumpy(), color=colors[len(scales)])
plt.legend(['scale=' + str(s) for s in scales] + ['Square loss'])
plt.show()
```



我们同样通过继承 `Loss` 来定义这个损失。同时它接受一个额外参数 `mask`, 这是用来屏蔽掉不需要被惩罚的负例样本。

```
In [22]: class SmoothL1Loss(gluon.loss.Loss):
    def __init__(self, batch_axis=0, **kwargs):
        super(SmoothL1Loss, self).__init__(None, batch_axis, **kwargs)

    def hybrid_forward(self, F, output, label, mask):
        loss = F.smooth_l1((output - label) * mask, scalar=1.0)
        return loss.mean(self._batch_axis, exclude=True)
```

```
box_loss = SmoothL1Loss()
box_loss

Out[22]: SmoothL1Loss(batch_axis=0, w=None)
```

评估测量

对于分类好坏我们可以沿用之前的分类精度。评估边框预测的好坏的一个常用是平均绝对误差。记得[在线性回归](#)我们使用了平均平方误差。但跟上面对损失函数的讨论一样，平方误差对于大的误差给予过大的值，从而数值上过于敏感。平均绝对误差就是将二次项替换成绝对值，具体来说就是预测的边框和真实边框在 4 个维度上的差值的绝对值。

```
In [23]: from mxnet import metric

cls_metric = metric.Accuracy()
box_metric = metric.MAE()
```

初始化模型和训练器

```
In [24]: from mxnet import init
from mxnet import gpu

ctx = gpu(0)
# the CUDA implementation requires each image has at least 3 labels.
# Pad two -1 labels for each instance
train_data.reshape(label_shape=(3, 5))
train_data = test_data.sync_label_shape(train_data)

net = ToySSD(num_class)
net.initialize(init.Xavier(magnitude=2), ctx=ctx)
trainer = gluon.Trainer(net.collect_params(),
                        'sgd', {'learning_rate': 0.1, 'wd': 5e-4})
```

训练模型

训练函数跟前面的不一样在于网络会有多个输出，而且有两个损失函数。

```
In [25]: import time
from mxnet import autograd
for epoch in range(30):
    # reset data iterators and metrics
    train_data.reset()
    cls_metric.reset()
```

```

box_metric.reset()
tic = time.time()
for i, batch in enumerate(train_data):
    x = batch.data[0].as_in_context(ctx)
    y = batch.label[0].as_in_context(ctx)
    with autograd.record():
        anchors, class_preds, box_preds = net(x)
        box_target, box_mask, cls_target = training_targets(
            anchors, class_preds, y)
        # losses
        loss1 = cls_loss(class_preds, cls_target)
        loss2 = box_loss(box_preds, box_target, box_mask)
        loss = loss1 + loss2
    loss.backward()
    trainer.step(batch_size)
    # update metrics
    cls_metric.update([cls_target], [class_preds.transpose((0,2,1))])
    box_metric.update([box_target], [box_preds * box_mask])

    print('Epoch %d, train %s %.2f, %s %.5f, time %.1f sec' %
          epoch, *cls_metric.get(), *box_metric.get(), time.time()-tic
          ))

```

Epoch 0, train accuracy 0.95, mae 0.00425, time 12.8 sec
Epoch 1, train accuracy 0.99, mae 0.00372, time 10.6 sec
Epoch 2, train accuracy 0.99, mae 0.00326, time 10.7 sec
Epoch 3, train accuracy 0.99, mae 0.00329, time 10.7 sec
Epoch 4, train accuracy 0.99, mae 0.00329, time 10.6 sec
Epoch 5, train accuracy 0.99, mae 0.00321, time 10.6 sec
Epoch 6, train accuracy 1.00, mae 0.00311, time 10.7 sec
Epoch 7, train accuracy 1.00, mae 0.00317, time 10.6 sec
Epoch 8, train accuracy 1.00, mae 0.00310, time 10.6 sec
Epoch 9, train accuracy 1.00, mae 0.00306, time 10.6 sec
Epoch 10, train accuracy 1.00, mae 0.00290, time 10.7 sec
Epoch 11, train accuracy 1.00, mae 0.00288, time 10.7 sec
Epoch 12, train accuracy 1.00, mae 0.00290, time 10.7 sec
Epoch 13, train accuracy 1.00, mae 0.00299, time 10.6 sec
Epoch 14, train accuracy 1.00, mae 0.00290, time 10.7 sec
Epoch 15, train accuracy 1.00, mae 0.00278, time 10.7 sec
Epoch 16, train accuracy 1.00, mae 0.00283, time 10.7 sec
Epoch 17, train accuracy 1.00, mae 0.00281, time 10.6 sec
Epoch 18, train accuracy 1.00, mae 0.00272, time 10.7 sec
Epoch 19, train accuracy 1.00, mae 0.00280, time 10.6 sec
Epoch 20, train accuracy 1.00, mae 0.00270, time 10.7 sec
Epoch 21, train accuracy 1.00, mae 0.00270, time 10.6 sec
Epoch 22, train accuracy 1.00, mae 0.00271, time 10.7 sec

```
Epoch 23, train accuracy 1.00, mae 0.00278, time 10.6 sec
Epoch 24, train accuracy 1.00, mae 0.00252, time 10.7 sec
Epoch 25, train accuracy 1.00, mae 0.00260, time 10.7 sec
Epoch 26, train accuracy 1.00, mae 0.00268, time 10.7 sec
Epoch 27, train accuracy 1.00, mae 0.00262, time 10.7 sec
Epoch 28, train accuracy 1.00, mae 0.00253, time 10.7 sec
Epoch 29, train accuracy 1.00, mae 0.00264, time 10.6 sec
```

9.4.4 预测

在预测阶段，我们希望能把图片里面所有感兴趣的物体找出来。

我们先定一个数据读取和预处理函数。

```
In [26]: def process_image(fname):
    with open(fname, 'rb') as f:
        im = image.imread(f.read())
    # resize to data_shape
    data = image.imresize(im, data_shape, data_shape)
    # minus rgb mean
    data = data.astype('float32') - rgb_mean
    # convert to batch x channel x height x width
    return data.transpose((2,0,1)).expand_dims(axis=0), im
```

然后我们跟训练那样预测表框和其对应的物体。但注意到因为我们要对每个像素都会生成数个锚框，这样我们可能会预测出大量相似的表框，从而导致结果非常嘈杂。一个办法是对于 IoU 比较高的两个表框，我们只保留预测执行度比较高的那个。这个算法（称之为 non maximum suppression）在 MultiBoxDetection 里实现了。下面我们实现预测函数：

```
In [27]: from mxnet.contrib.ndarray import MultiBoxDetection

def predict(x):
    anchors, cls_preds, box_preds = net(x.as_in_context(ctx))
    cls_probs = nd.SoftmaxActivation(
        cls_preds.transpose((0,2,1)), mode='channel')

    return MultiBoxDetection(cls_probs, box_preds, anchors,
                           force_suppress=True, clip=False)
```

预测函数会输出所有边框，每个边框由 [class_id, confidence, xmin, ymin, xmax, ymax] 表示。其中 class_id=-1 表示要么这个边框被预测只含有背景，或者被去重掉了。

```
In [28]: x, im = process_image('../img/pikachu.jpg')
        out = predict(x)
        out.shape
```

```
Out[28]: (1, 5444, 6)
```

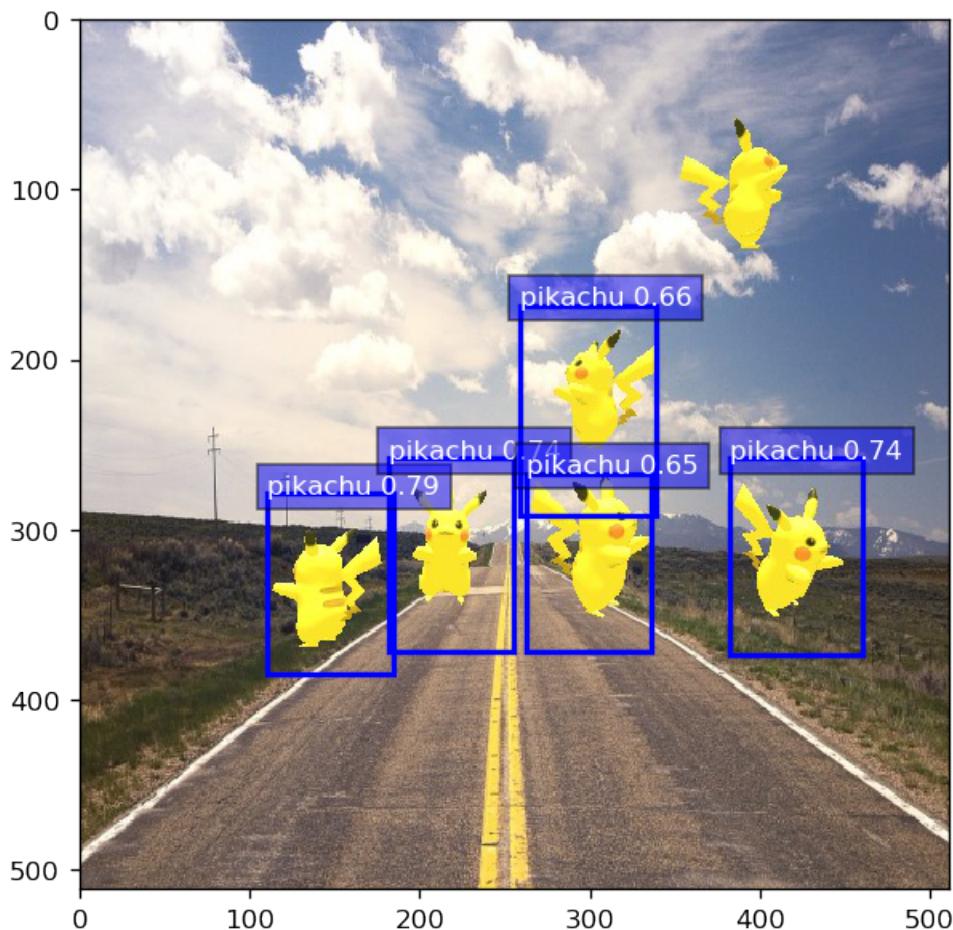
最后我们将预测出置信度超过某个阈值的边框画出来：

```
In [29]: mpl.rcParams['figure.figsize'] = (6,6)
```

```
def display(im, out, threshold=0.5):
    plt.imshow(im.asnumpy())
    for row in out:
        row = row.asnumpy()
        class_id, score = int(row[0]), row[1]
        if class_id < 0 or score < threshold:
            continue
        color = colors[class_id%len(colors)]
        box = row[2:6] * np.array([im.shape[0],im.shape[1]]*2)
        rect = box_to_rect(nd.array(box), color, 2)
        plt.gca().add_patch(rect)

        text = class_names[class_id]
        plt.gca().text(box[0], box[1],
                       '{:s} {:.2f}'.format(text, score),
                       bbox=dict(facecolor=color, alpha=0.5),
                       fontsize=10, color='white')
    plt.show()

display(im, out[0], threshold=0.5)
```



9.4.5 结论

物体检测比分类要困难很多。因为我们不仅要预测物体类别，还要找到它们的位置。这一章我们展示我们还是可以在合理篇幅里实现 SSD 算法。

9.4.6 练习

我们有很多细节并没有展开讨论。例如

1. 锚框的大小和长宽比是如何选取的
2. MultiBoxTarget 里我们没有采样负例
3. 分类和回归损失我们直接加起来了，并没有给予权重
4. 在展示的时候如何选取阈值 threshold

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

9.5 YOLO — 使用 Gluon

接着上一讲的 SSD, 我们继续来实现一个目标检测的经典算法-YOLO2。YOLO2 是继 YOLO 之后使用纯卷积网络的作品。这里不再赘述数据集之类的琐事, 直接进入算法实现的部分, 推荐不熟悉的小伙伴先用 SSD 的例子热身一下。

```
In [1]: import numpy as np
        import mxnet as mx
        from mxnet import gluon
        from mxnet import nd
        from mxnet.gluon import nn
        from mxnet.gluon import Block, HybridBlock
        from mxnet.gluon.model_zoo import vision
```

9.5.1 YOLO v2

原始卷积输出的转换

我们知道原始卷积输出的是一个 (B, N, H, W) 的矩阵, 其中 B 是 batch-size, H 和 W 是特征层的空间维度, N 是卷积的输出通道数, 相对比较复杂, 是我们关注的维度。简单地说, 我们需要对每个空间维度上的点 (x, y) 输出 $(类别数 + 1 + 4)$ 个预测值。类别数很好理解, 就是训练集里正类的数量, 4 也很好理解, 就是每个预测框的偏移量预测 (x, y, w, h)

中心点的转换

中心点是 sigmoid 函数的输出值, 本身在 0 到 1 之间, 表示的意义是每个格点内部的空间位置, 我们需要把它们转换成图片上的相对位置。通过 arange 函数生成连续递增的数列, 加上预测值, 就是每个目标中心在图片上的相对坐标。

```
In [2]: def transform_center(xy):
    """Given x, y prediction after sigmoid(), convert to relative coordinates
    in (0, 1) on image."""
    b, h, w, n, s = xy.shape
    offset_y = nd.tile(nd.arange(0, h, repeat=(w * n * 1),
    ctx=xy.context).reshape((1, h, w, n, 1)), (b, 1, 1, 1, 1))
    # print(offset_y[0].asnumpy()[:, :, 0, 0])
    offset_x = nd.tile(nd.arange(0, w, repeat=(n * 1),
    ctx=xy.context).reshape((1, 1, w, n, 1)), (b, h, 1, 1, 1))
    # print(offset_x[0].asnumpy()[:, :, 0, 0])
    x, y = xy.split(num_outputs=2, axis=-1)
    x = (x + offset_x) / w
```

```
y = (y + offset_y) / h
return x, y
```

长宽的转换

长宽是 exp 函数的输出，意义是相对于锚点长宽的比率，我们对预测值的 exp() 乘以相对锚点的长宽，除以图片格点的数量，得到的是目标长宽相对于图片的尺寸。

```
In [3]: def transform_size(wh, anchors):
    """Given w, h prediction after exp() and anchor sizes, convert to relative
    width/height (0, 1) on image"""
    b, h, w, n, s = wh.shape
    aw, ah = nd.tile(nd.array(anchors, ctx=wh.context).reshape((1, 1, 1, -1,
    ↵ 2)), (b, h, w, 1, 1)).split(num_outputs=2, axis=-1)
    w_pred, h_pred = nd.exp(wh).split(num_outputs=2, axis=-1)
    w_out = w_pred * aw / w
    h_out = h_pred * ah / h
    return w_out, h_out
```

yolo2_forward 作为一个方便使用的函数，会把卷积的通道分开，转换，最后转成我们需要的检测框

```
In [4]: def yolo2_forward(x, num_class, anchor_scales):
    """Transpose/reshape/organize convolution outputs."""
    stride = num_class + 5
    # transpose and reshape, 4th dim is the number of anchors
    x = x.transpose((0, 2, 3, 1))
    x = x.reshape((0, 0, 0, -1, stride))
    # now x is (batch, m, n, stride), stride = num_class + 1(object score) +
    ↵ 4(coordinates)
    # class probs
    cls_pred = x.slice_axis(begin=0, end=num_class, axis=-1)
    # object score
    score_pred = x.slice_axis(begin=num_class, end=num_class + 1, axis=-1)
    score = nd.sigmoid(score_pred)
    # center prediction, in range(0, 1) for each grid
    xy_pred = x.slice_axis(begin=num_class + 1, end=num_class + 3, axis=-1)
    xy = nd.sigmoid(xy_pred)
    # width/height prediction
    wh = x.slice_axis(begin=num_class + 3, end=num_class + 5, axis=-1)
    # convert x, y to positions relative to image
    x, y = transform_center(xy)
    # convert w, h to width/height relative to image
```

```
w, h = transform_size(wh, anchor_scales)
# cid is the argmax channel
cid = nd.argmax(cls_pred, axis=-1, keepdims=True)
# convert to corner format boxes
half_w = w / 2
half_h = h / 2
left = nd.clip(x - half_w, 0, 1)
top = nd.clip(y - half_h, 0, 1)
right = nd.clip(x + half_w, 0, 1)
bottom = nd.clip(y + half_h, 0, 1)
output = nd.concat(*[cid, score, left, top, right, bottom], dim=4)
return output, cls_pred, score, nd.concat(*[xy, wh], dim=4)
```

定义一个函数来生成 yolo2 训练目标

YOLO2 寻找真实目标的方法比较特殊，是在每个格点内各自比较，而不是使用全局的预设。而且我们不需要对生成的训练目标进行反向传播，为了简洁描述比较的方法，我们可以在这里转成 numpy 而且可以用 for 循环（切记转成 numpy 会破坏自动求导的记录，只有当反向传播不需要的时候才能使用这个技巧），实际使用中，如果遇到速度问题，我们可以用 mx.ndarray 矩阵的写法来加速。这里我们使用了一个技巧：sample_weight（个体权重）矩阵，用于损失函数内部权重的调整，我们也可以通过权重矩阵来控制哪些个体需要被屏蔽，这一点在目标检测中尤其重要，因为往往大多数的背景区域不需要预测检测框。

```
In [5]: def corner2center(boxes, concat=True):
    """Convert left/top/right/bottom style boxes into x/y/w/h format"""
    left, top, right, bottom = boxes.split(axis=-1, num_outputs=4)
    x = (left + right) / 2
    y = (top + bottom) / 2
    width = right - left
    height = bottom - top
    if concat:
        last_dim = len(x.shape) - 1
        return nd.concat(*[x, y, width, height], dim=last_dim)
    return x, y, width, height

def center2corner(boxes, concat=True):
    """Convert x/y/w/h style boxes into left/top/right/bottom format"""
    x, y, w, h = boxes.split(axis=-1, num_outputs=4)
    w2 = w / 2
    h2 = h / 2
    left = x - w2
    top = y - h2
    right = x + w2
```

```

bottom = y + h2
if concat:
    last_dim = len(left.shape) - 1
    return nd.concat(*[left, top, right, bottom], dim=last_dim)
return left, top, right, bottom

def yolo2_target(scores, boxes, labels, anchors, ignore_label=-1, thresh=0.5):
    """Generate training targets given predictions and labels."""
    b, h, w, n, _ = scores.shape
    anchors = np.reshape(np.array(anchors), (-1, 2))
    #scores = nd.slice_axis(outputs, begin=1, end=2, axis=-1)
    #boxes = nd.slice_axis(outputs, begin=2, end=6, axis=-1)
    gt_boxes = nd.slice_axis(labels, begin=1, end=5, axis=-1)
    target_score = nd.zeros((b, h, w, n, 1), ctx=scores.context)
    target_id = nd.ones_like(target_score, ctx=scores.context) * ignore_label
    target_box = nd.zeros((b, h, w, n, 4), ctx=scores.context)
    sample_weight = nd.zeros((b, h, w, n, 1), ctx=scores.context)
    for b in range(output.shape[0]):
        # find the best match for each ground-truth
        label = labels[b].asnumpy()
        valid_label = label[np.where(label[:, 0] > -0.5)[0], :]
        # shuffle because multi gt could possibly match to one anchor, we keep
        ← the last match randomly
        np.random.shuffle(valid_label)
        for l in valid_label:
            gx, gy, gw, gh = (l[1] + l[3]) / 2, (l[2] + l[4]) / 2, l[3] -
            ← l[1], l[4] - l[2]
            ind_x = int(gx * w)
            ind_y = int(gy * h)
            tx = gx * w - ind_x
            ty = gy * h - ind_y
            gw = gw * w
            gh = gh * h
            # find the best match using width and height only, assuming
            ← centers are identical
            intersect = np.minimum(anchors[:, 0], gw) * np.minimum(anchors[:, 1], gh)
            ovps = intersect / (gw * gh + anchors[:, 0] * anchors[:, 1] -
            ← intersect)
            best_match = int(np.argmax(ovps))
            target_id[b, ind_y, ind_x, best_match, :] = l[0]
            target_score[b, ind_y, ind_x, best_match, :] = 1.0
            tw = np.log(gw / anchors[best_match, 0])
            th = np.log(gh / anchors[best_match, 1])

```

```

        target_box[b, ind_y, ind_x, best_match, :] = mx.nd.array([tx, ty,
→   tw, th])
        sample_weight[b, ind_y, ind_x, best_match, :] = 1.0
        # print('ind_y', ind_y, 'ind_x', ind_x, 'best_match', best_match,
→   't', tx, ty, tw, th, 'ovp', ovps[best_match], 'gt', gx, gy, gw/w, gh/h, 'anchor',
→   anchors[best_match, 0], anchors[best_match, 1])
    return target_id, target_score, target_box, sample_weight

```

我们用 **YOLO2Output** 作为 **yolo2** 的输出层, 其其实质就是一个 **HybridBlock**, 内部包了一个卷积层作为最终的输出

```

In [6]: class YOLO2Output(HybridBlock):
    def __init__(self, num_class, anchor_scales, **kwargs):
        super(YOLO2Output, self).__init__(**kwargs)
        assert num_class > 0, "number of classes should > 0, given
→   {}".format(num_class)
        self._num_class = num_class
        assert isinstance(anchor_scales, (list, tuple)), "list or tuple of
→   anchor scales required"
        assert len(anchor_scales) > 0, "at least one anchor scale required"
        for anchor in anchor_scales:
            assert len(anchor) == 2, "expected each anchor scale to be (width,
→   height), provided {}".format(anchor)
            self._anchor_scales = anchor_scales
        out_channels = len(anchor_scales) * (num_class + 1 + 4)
        with self.name_scope():
            self.output = nn.Conv2D(out_channels, 1, 1)

    def hybrid_forward(self, F, x, *args):
        return self.output(x)

```

接下来是下载并加载数据集

```

In [7]: from mxnet import gluon

root_url = ('https://apache-mxnet.s3-accelerate.amazonaws.com/'
            'gluon/dataset/pikachu/')
data_dir = '../data/pikachu/'
dataset = {'train.rec': 'e6bcb6ffbalac04ff8a9b1115e650af56ee969c8',
           'train.idx': 'dcf7318b2602c06428b9988470c731621716c393',
           'val.rec': 'd6c33f799b4d058e82f2cb5bd9a976f69d72d520'}
for k, v in dataset.items():
    gluon.utils.download(root_url+k, data_dir+k, sha1_hash=v)

```

```
In [8]: from mxnet import image
        from mxnet import nd

        data_shape = 256
        batch_size = 32
        rgb_mean = nd.array([123, 117, 104])
        rgb_std = nd.array([58.395, 57.12, 57.375])

        def get_iterators(data_shape, batch_size):
            class_names = ['pikachu', 'dummy']
            num_class = len(class_names)
            train_iter = image.ImageDetIter(
                batch_size=batch_size,
                data_shape=(3, data_shape, data_shape),
                path_imgrec=data_dir+'train.rec',
                path_imgidx=data_dir+'train.idx',
                shuffle=True,
                mean=True,
                std=True,
                rand_crop=1,
                min_object_covered=0.95,
                max_attempts=200)
            val_iter = image.ImageDetIter(
                batch_size=batch_size,
                data_shape=(3, data_shape, data_shape),
                path_imgrec=data_dir+'val.rec',
                shuffle=False,
                mean=True,
                std=True)
            return train_iter, val_iter, class_names, num_class

        train_data, test_data, class_names, num_class = get_iterators(
            data_shape, batch_size)

In [9]: batch = train_data.next()
        print(batch)

DataBatch: data shapes: [(32, 3, 256, 256)] label shapes: [(32, 1, 5)]

In [10]: %matplotlib inline
        import matplotlib as mpl
        mpl.rcParams['figure.dpi']= 120
        import matplotlib.pyplot as plt

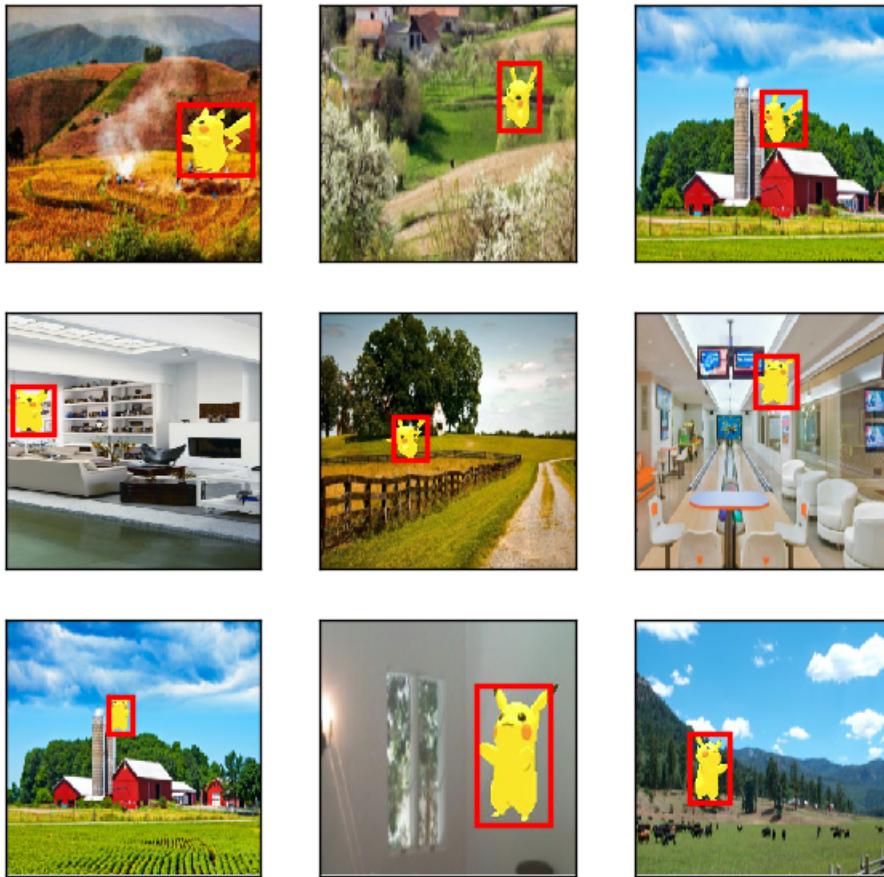
        def box_to_rect(box, color, linewidth=3):
            """convert an anchor box to a matplotlib rectangle"""
            box = box.astype(np.float32)
            rect = plt.Rectangle((box[0], box[1]), box[2]-box[0], box[3]-box[1],
                                fill=False, color=color, linewidth=linewidth)
```

```

    return plt.Rectangle(
        (box[0], box[1]), box[2]-box[0], box[3]-box[1],
        fill=False, edgecolor=color, linewidth=linewidth)

_, figs = plt.subplots(3, 3, figsize=(6,6))
for i in range(3):
    for j in range(3):
        img, labels = batch.data[0][3*i+j], batch.label[0][3*i+j]
        img = img.transpose((1, 2, 0)) * rgb_std + rgb_mean
        img = img.clip(0,255).asnumpy()/255
        fig = figs[i][j]
        fig.imshow(img)
        for label in labels:
            rect = box_to_rect(label[1:5]*data_shape, 'red', 2)
            fig.add_patch(rect)
        fig.axes.get_xaxis().set_visible(False)
        fig.axes.get_yaxis().set_visible(False)
plt.show()

```



损失函数

```
In [11]: sce_loss = gluon.loss.SoftmaxCrossEntropyLoss(from_logits=False)
        l1_loss = gluon.loss.L1Loss()
```

评估测量

这里我们取巧用一个自己定义的 metric 来记录纯损失值，有的时候当你想不出特别贴切的观测函数，不如直接看损失值有没有下降

```
In [12]: from mxnet import metric

    class LossRecorder(mx.metric.EvalMetric):
        """LossRecorder is used to record raw loss so we can observe loss
        directly
        """
        def __init__(self, name):
            super(LossRecorder, self).__init__(name)

        def update(self, labels, preds=0):
            """Update metric with pure loss
            """
            for loss in labels:
                if isinstance(loss, mx.nd.NDArray):
                    loss = loss.asnumpy()
                self.sum_metric += loss.sum()
                self.num_inst += 1

        obj_loss = LossRecorder('objectness_loss')
        cls_loss = LossRecorder('classification_loss')
        box_loss = LossRecorder('box_refine_loss')
```

粗粒度调控下每种损失相对的权重

```
In [13]: positive_weight = 5.0
        negative_weight = 0.1
        class_weight = 1.0
        box_weight = 5.0
```

网络

加载模型园里训练好的 resnet 网络，取出中间的特征提取层，用合适的锚点尺寸新建我们的 YOLO2 输出层

```
In [14]: pretrained = vision.get_model('resnet18_v1', pretrained=True).features
net = nn.HybridSequential()
for i in range(len(pretrained) - 2):
    net.add(pretrained[i])

# anchor scales, try adjust it yourself
scales = [[3.3004, 3.59034],
           [9.84923, 8.23783]]

# use 2 classes, 1 as dummy class, otherwise softmax won't work
predictor = YOLO2Output(2, scales)
predictor.initialize()
net.add(predictor)
```

这里我们还是需要 **GPU** 来加速训练

```
In [15]: from mxnet import init
from mxnet import gpu

ctx = gpu(0)
net.collect_params().reset_ctx(ctx)
trainer = gluon.Trainer(net.collect_params(),
                        'sgd', {'learning_rate': 1, 'wd': 5e-4})

In [16]: import time
from mxnet import autograd
for epoch in range(20):
    # reset data iterators and metrics
    train_data.reset()
    cls_loss.reset()
    obj_loss.reset()
    box_loss.reset()
    tic = time.time()
    for i, batch in enumerate(train_data):
        x = batch.data[0].as_in_context(ctx)
        y = batch.label[0].as_in_context(ctx)
        with autograd.record():
            x = net(x)
            output, cls_pred, score, xywh = yolo2_forward(x, 2, scales)
            with autograd.pause():
```

```

        tid, tscore, tbox, sample_weight = yolo2_target(score, xywh,
←  y, scales, thresh=0.5)
        # losses
        loss1 = sce_loss(cls_pred, tid, sample_weight * class_weight)
        score_weight = nd.where(sample_weight > 0,
                                nd.ones_like(sample_weight) *
←  positive_weight,
                                nd.ones_like(sample_weight) *
←  negative_weight)
        loss2 = l1_loss(score, tscore, score_weight)
        loss3 = l1_loss(xywh, tbox, sample_weight * box_weight)
        loss = loss1 + loss2 + loss3
        loss.backward()
        trainer.step(batch_size)
        # update metrics
        cls_loss.update(loss1)
        obj_loss.update(loss2)
        box_loss.update(loss3)

    print('Epoch %d, train %s %.5f, %s %.5f, %s %.5f time %.1f sec' %
          epoch, *cls_loss.get(), *obj_loss.get(), *box_loss.get(),
←  time.time()-tic))

Epoch 0, train classification_loss 0.00097, objectness_loss 0.03677, box_refine_loss
←  0.00243 time 9.0 sec
Epoch 1, train classification_loss 0.00035, objectness_loss 0.01589, box_refine_loss
←  0.00202 time 8.3 sec
Epoch 2, train classification_loss 0.00011, objectness_loss 0.00719, box_refine_loss
←  0.00198 time 8.3 sec
Epoch 3, train classification_loss 0.00007, objectness_loss 0.00451, box_refine_loss
←  0.00187 time 8.3 sec
Epoch 4, train classification_loss 0.00005, objectness_loss 0.00336, box_refine_loss
←  0.00202 time 8.3 sec
Epoch 5, train classification_loss 0.00006, objectness_loss 0.00290, box_refine_loss
←  0.00195 time 8.3 sec
Epoch 6, train classification_loss 0.00006, objectness_loss 0.00253, box_refine_loss
←  0.00186 time 8.3 sec
Epoch 7, train classification_loss 0.00005, objectness_loss 0.00224, box_refine_loss
←  0.00183 time 8.4 sec
Epoch 8, train classification_loss 0.00004, objectness_loss 0.00199, box_refine_loss
←  0.00176 time 8.3 sec
Epoch 9, train classification_loss 0.00005, objectness_loss 0.00199, box_refine_loss
←  0.00167 time 8.4 sec
Epoch 10, train classification_loss 0.00005, objectness_loss 0.00184, box_refine_loss
←  0.00166 time 8.3 sec

```

```

Epoch 11, train classification_loss 0.00003, objectness_loss 0.00169, box_refine_loss
    ↳ 0.00156 time 8.3 sec
Epoch 12, train classification_loss 0.00003, objectness_loss 0.00161, box_refine_loss
    ↳ 0.00155 time 8.3 sec
Epoch 13, train classification_loss 0.00003, objectness_loss 0.00147, box_refine_loss
    ↳ 0.00145 time 8.3 sec
Epoch 14, train classification_loss 0.00004, objectness_loss 0.00161, box_refine_loss
    ↳ 0.00135 time 8.2 sec
Epoch 15, train classification_loss 0.00004, objectness_loss 0.00153, box_refine_loss
    ↳ 0.00137 time 8.2 sec
Epoch 16, train classification_loss 0.00003, objectness_loss 0.00142, box_refine_loss
    ↳ 0.00140 time 8.3 sec
Epoch 17, train classification_loss 0.00003, objectness_loss 0.00143, box_refine_loss
    ↳ 0.00133 time 8.3 sec
Epoch 18, train classification_loss 0.00004, objectness_loss 0.00150, box_refine_loss
    ↳ 0.00131 time 8.3 sec
Epoch 19, train classification_loss 0.00003, objectness_loss 0.00141, box_refine_loss
    ↳ 0.00124 time 8.3 sec

```

预处理和预测函数

```

In [17]: def process_image(fname):
    with open(fname, 'rb') as f:
        im = image.imread(f.read())
    # resize to data_shape
    data = image.imresize(im, data_shape, data_shape)
    # minus rgb mean, divide std
    data = (data.astype('float32') - rgb_mean) / rgb_std
    # convert to batch x channel x height xwidth
    return data.transpose((2,0,1)).expand_dims(axis=0), im

def predict(x):
    x = net(x)
    output, cls_prob, score, xywh = yolo2_forward(x, 2, scales)
    return nd.contrib.box_nms(output.reshape((0, -1, 6)))

```

继续读取皮卡丘来做测试

```

In [18]: x, im = process_image('../img/pikachu.jpg')
out = predict(x.as_in_context(ctx))
out.shape
out

```

Out[18]:

```
[[[ 0.          0.99509615  0.51926863  0.49514884  0.67085505  0.70833272]
 [ 0.          0.98589677  0.22010335  0.58727294  0.35647455  0.73740596]
 [ 0.          0.96322763  0.75319529  0.50830024  0.90151668  0.71124977]
 ...,
 [-1.         -1.          -1.          -1.          -1.          -1.        ]
 [-1.         -1.          -1.          -1.          -1.          -1.        ]
 [-1.         -1.          -1.          -1.          -1.          -1.        ]]
<NDArray 1x512x6 @gpu(0)>
```

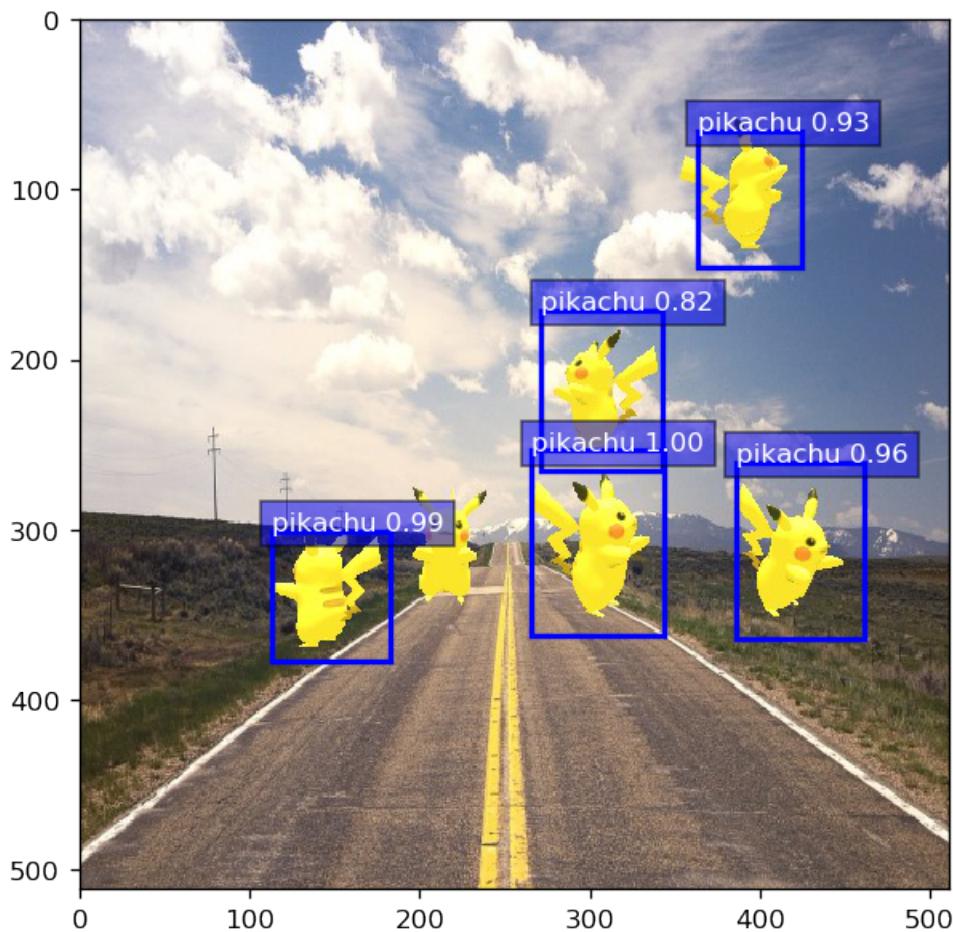
显示结果

In [19]: `mpl.rcParams['figure.figsize'] = (6,6)`

```
colors = ['blue', 'green', 'red', 'black', 'magenta']

def display(im, out, threshold=0.5):
    plt.imshow(im.asnumpy())
    for row in out:
        row = row.asnumpy()
        class_id, score = int(row[0]), row[1]
        if class_id < 0 or score < threshold:
            continue
        color = colors[class_id%len(colors)]
        box = row[2:6] * np.array([im.shape[0],im.shape[1]]*2)
        rect = box_to_rect(nd.array(box), color, 2)
        plt.gca().add_patch(rect)
        text = class_names[class_id]
        plt.gca().text(box[0], box[1],
                       '{:s} {:.2f}'.format(text, score),
                       bbox=dict(facecolor=color, alpha=0.5),
                       fontsize=10, color='white')
    plt.show()

display(im, out[0], threshold=0.5)
```



9.5.2 课后习题

1. 试试改变默认的 anchor scale, 调整尺寸, 增加或减少数量?
2. 调整不同损失函数相对的权重, 看看对于训练结果有什么影响?
3. 在目标检测这种 batch 内部有效目标占比很少的情况下, 损失函数内部取平均有什么问题, 更好的方法?

9.6 语义分割: FCN

我们已经学习了如何识别图片里面的主要物体, 和找出里面物体的边框。语义分割则在之上更进一步, 它对每个像素预测它是否只是背景, 还是属于哪个我们感兴趣的物体。



图 9.8: Semantic Segmentation

可以看到，跟物体检测相比，语义分割预测的边框更加精细。

也许大家还听到过计算机视觉里的一个常用任务：图片分割。它跟语义分割类似，将每个像素划分的某个类。但它跟语义分割不同的时候，图片分割不需要预测每个类具体对应哪个物体。因此图片分割经常只需要利用像素之间的相似度即可，而语义分割则需要详细的类别标号。这也是为什么称其为语义的原因。

本章我们将介绍利用卷积神经网络解决语义分割的一个开创性工作之一：全链接卷积网络。在此之前我们先了解用来做语义分割的数据。

9.6.1 数据集

VOC2012是一个常用的语义分割数据集。输入图片跟之前的数据集类似，但标注也是保存称相应大小的图片来方便查看。下面代码下载这个数据集并解压。注意到压缩包大小是 2GB，可以预先下好放置在 `data_root` 下。

```
In [1]: import os
```

```

import tarfile
from mxnet import gluon

data_root = '../data'
voc_root = data_root + '/VOCdevkit/VOC2012'
url = ('http://host.robots.ox.ac.uk/pascal/VOC/voc2012'
       '/VOCtrainval_11-May-2012.tar')
sha1 = '4e443f8a2eca6b1dac8a6c57641b67dd40621a49'

fname = gluon.utils.download(url, data_root, sha1_hash=sha1)

if not os.path.isfile(voc_root+'/ImageSets/Segmentation/train.txt'):
    with tarfile.open(fname, 'r') as f:
        f.extractall(data_root)

```

下面定义函数将训练图片和标注按序读进内存。

In [2]: `from mxnet import image`

```

def read_images(root=voc_root, train=True):
    txt_fname = root + '/ImageSets/Segmentation/' + (
        'train.txt' if train else 'val.txt')
    with open(txt_fname, 'r') as f:
        images = f.read().split()
    n = len(images)
    data, label = [None] * n, [None] * n
    for i, fname in enumerate(images):
        data[i] = image.imread('%s/JPEGImages/%s.jpg' % (
            root, fname))
        label[i] = image.imread('%s/SegmentationClass/%s.png' % (
            root, fname))
    return data, label

```

我们画出前面三张图片和它们对应的标号。在标号中，白色代表边框黑色代表背景，其他不同的颜色对应不同物体。

In [3]: `import sys`

```

sys.path.append('..')
import utils

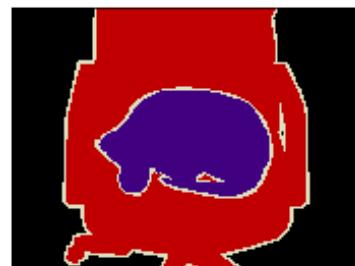
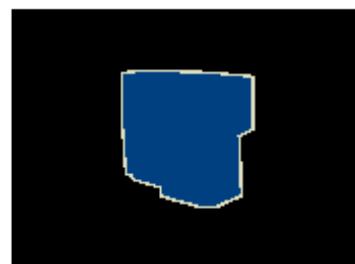
train_images, train_labels = read_images()

imgs = []
for i in range(3):
    imgs += [train_images[i], train_labels[i]]

utils.show_images(imgs, nrows=3, ncols=2, figsize=(12,8))

```

```
[im.shape for im in imgs]
```



```
Out[3]: [(281, 500, 3),  
          (281, 500, 3),  
          (375, 500, 3),  
          (375, 500, 3),  
          (375, 500, 3),  
          (375, 500, 3)]
```

同时注意到图片的宽度基本是 500，但高度各不一样。为了能将多张图片合并成一个批量来加速计算，我们需要输入图片都是同样的大小。之前我们通过 `imresize` 来将他们调整成同样的大小。但在语义分割里，我们需要对标注做同样的变化来达到像素级别的匹配。但调整大小将改变像素颜色，使得再将它们映射到物体类别变得困难。

这里我们仅仅使用剪切来解决这个问题。就是说对于输入图片，我们随机剪切出一个固定大小的区域，然后对标号图片做同样位置的剪切。

```
In [4]: def rand_crop(data, label, height, width):  
    data, rect = image.random_crop(data, (width, height))  
    label = image.fixed_crop(label, *rect)  
    return data, label
```

```







    imgs = []
    for _ in range(3):
        imgs += rand_crop(train_images[0], train_labels[0],
                          200, 300)

    utils.show_images(imgs, nrows=3, ncols=2, figsize=(12,8))

```

接下来我们列出每个物体和背景对应的 RGB 值

```

In [5]: classes = ['background', 'aeroplane', 'bicycle', 'bird', 'boat',
                 'bottle', 'bus', 'car', 'cat', 'chair', 'cow', 'diningtable',
                 'dog', 'horse', 'motorbike', 'person', 'potted plant',
                 'sheep', 'sofa', 'train', 'tv/monitor']
# RGB color for each class
colormap = [[0,0,0],[128,0,0],[0,128,0], [128,128,0], [0,0,128],
            [128,0,128],[0,128,128],[128,128,128],[64,0,0],[192,0,0],
            [64,128,0],[192,128,0],[64,0,128],[192,0,128],
            [64,128,128],[192,128,128],[0,64,0],[128,64,0],

```

```
[0, 192, 0], [128, 192, 0], [0, 64, 128]]
```

```
len(classes), len(colormap)
```

```
Out[5]: (21, 21)
```

这样给定一个标号图片，我们就可以将每个像素对应的物体标号找出来。

```
In [6]: import numpy as np
        from mxnet import nd

cm2lbl = np.zeros(256**3)
for i, cm in enumerate(colormap):
    cm2lbl[(cm[0]*256+cm[1])*256+cm[2]] = i

def image2label(im):
    data = im.astype('int32').asnumpy()
    idx = (data[:, :, 0]*256+data[:, :, 1])*256+data[:, :, 2]
    return nd.array(cm2lbl[idx])
```

可以看到第一张训练图片的标号里面属于飞机的像素被标记成了 1.

```
In [7]: y = image2label(train_labels[0])
y[105:115, 130:140]
```

```
Out[7]:
```

```
[[ 0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  1.]
 [ 0.  0.  0.  0.  0.  0.  1.  1.  1.  1.]
 [ 0.  0.  0.  0.  0.  0.  1.  1.  1.  1.]
 [ 0.  0.  0.  0.  0.  1.  1.  1.  1.  1.]
 [ 0.  0.  0.  0.  0.  1.  1.  1.  1.  1.]
 [ 0.  0.  0.  0.  0.  1.  1.  1.  1.  1.]
 [ 0.  0.  0.  0.  1.  1.  1.  1.  1.  1.]
 [ 0.  0.  0.  0.  1.  1.  1.  1.  1.  1.]
 [ 0.  0.  0.  0.  0.  1.  1.  1.  1.  1.]
 [ 0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  1.  1.  1.]
<NDArray 10x10 @cpu(0)>
```

现在我们可以定义数据读取了。每一次我们将图片和标注随机剪切到要求的形状，并将标注里每个像素转成对应的标号。简单起见我们将小于要求大小的图片全部过滤掉了。

```
In [8]: from mxnet import gluon
        from mxnet import nd
```

```
rgb_mean = nd.array([0.485, 0.456, 0.406])
rgb_std = nd.array([0.229, 0.224, 0.225])
```

```

def normalize_image(data):
    return (data.astype('float32') / 255 - rgb_mean) / rgb_std

class VOCSegDataset(gluon.data.Dataset):

    def _filter(self, images):
        return [im for im in images if (
            im.shape[0] >= self.crop_size[0] and
            im.shape[1] >= self.crop_size[1])]

    def __init__(self, train, crop_size):
        self.crop_size = crop_size
        data, label = read_images(train=train)
        data = self._filter(data)
        self.data = [normalize_image(im) for im in data]
        self.label = self._filter(label)
        print('Read '+str(len(self.data))+' examples')

    def __getitem__(self, idx):
        data, label = rand_crop(
            self.data[idx], self.label[idx],
            *self.crop_size)
        data = data.transpose((2,0,1))
        label = image2label(label)
        return data, label

    def __len__(self):
        return len(self.data)

```

我们采用 320×480 的大小用来训练，注意到这个比前面我们使用的 224×224 要大上很多。但是同样我们将长宽都定义成了 32 的整数倍。

```
In [9]: # height x width
input_shape = (320, 480)
voc_train = VOCSegDataset(True, input_shape)
voc_test = VOCSegDataset(False, input_shape)
```

Read 1114 examples

Read 1078 examples

最后定义批量读取。可以看到跟之前的不同是批量标号不再是一个向量，而是一个三维数组。

```
In [10]: batch_size = 64
train_data = gluon.data.DataLoader(
    voc_train, batch_size, shuffle=True, last_batch='discard')
test_data = gluon.data.DataLoader(
    voc_test, batch_size, last_batch='discard')
```

```

for data, label in train_data:
    print(data.shape)
    print(label.shape)
    break

(64, 3, 320, 480)
(64, 320, 480)

```

9.6.2 全连接卷积网络

在数据的处理过程我们看到语义分割跟前面介绍的应用的主要区别在于，预测的标号不再是一个或者几个数字，而是每个像素都需要有标号。在卷积神经网络里，我们通过卷积层和池化层逐渐减少数据长宽但同时增加通道数。例如 ResNet18 里，我们先将输入长宽减少 32 倍，由 $3 \times 224 \times 224$ 的图片转成 $512 \times 7 \times 7$ 的输出，应该全局池化层变成 512 长向量，然后最后通过全链接层转成一个长度为 n 的输出向量，这里 n 是类数，既 `num_classes`。但在里面，对于输出为 $3 \times 320 \times 480$ 的图片，我们需要输出是 $n \times 320 \times 480$ ，就是每个输入像素都需要预测一个长度为 n 的向量。

全连接卷积网络（FCN）的提出是基于这样一个观察。假设 f 是一个卷积层，而且 $y = f(x)$ 。那么在反传求导时， $\partial f(y)$ 会返回一个跟 x 一样形状的输出。卷积是一个对偶函数，就是 $\partial^2 f = f$ 。那么如果我们想得到跟输入一样的输入，那么定义 $g = \partial f$ ，这样 $g(f(x))$ 就能达到我们想要的。

具体来说，我们定义一个卷积转置层（transposed convolutional，也经常被错误的叫做 deconvolutions），它就是将卷积层的 `forward` 和 `backward` 函数兑换。

下面例子里我们看到使用同样的参数，除了替换输入和输出通道数外，`Conv2DTranspose` 可以将 `nn.Conv2D` 的输出还原其输入大小。

```

In [11]: from mxnet.gluon import nn

conv = nn.Conv2D(10, kernel_size=4, padding=1, strides=2)
conv_trans = nn.Conv2DTranspose(3, kernel_size=4, padding=1, strides=2)

conv.initialize()
conv_trans.initialize()

x = nd.random.uniform(shape=(1,3,64,64))
y = conv(x)
print('Input:', x.shape)
print('After conv:', y.shape)
print('After transposed conv', conv_trans(y).shape)

Input: (1, 3, 64, 64)
After conv: (1, 10, 32, 32)
After transposed conv (1, 3, 64, 64)

```

另外一点要注意的是，在最后的卷积层我们同样使用平化层（`nn.Flatten`）或者（全局）池化层来使得方便使用之后的全连接层作为输出。但是这样会损害空间信息，而这个对语义分割很重要。一个解决办法是去掉不需要的池化层，并将全连接层替换成 1×1 卷基层。

所以给定一个卷积网络，FCN 主要做下面的改动

- 替换全连接层成 1×1 卷基
- 去掉过于损失空间信息的池化层，例如全局池化
- 最后接上卷积转置层来得到需要大小的输出
- 为了训练更快，通常权重会初始化为预先训练好的权重

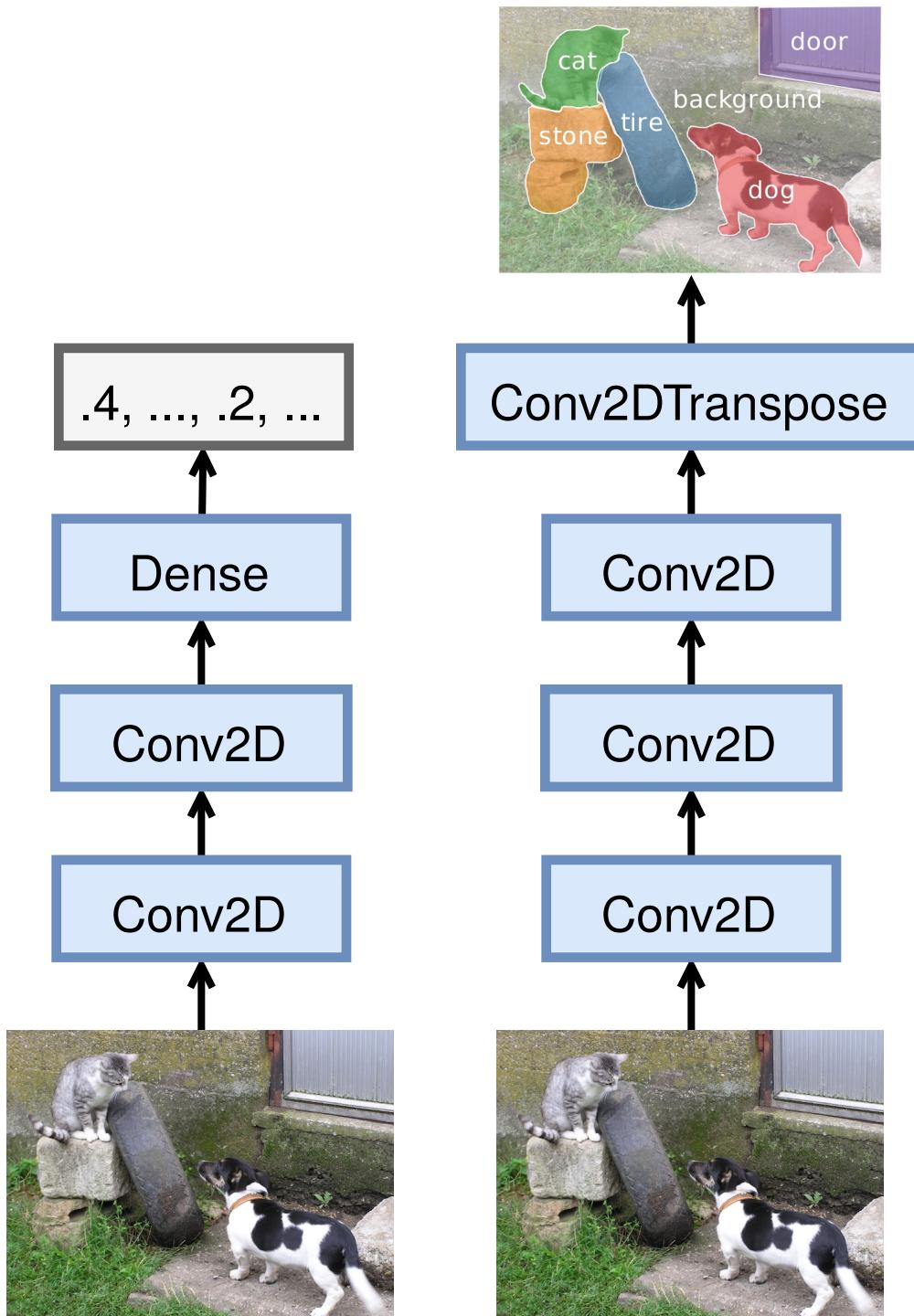


图 9.9: FCN

下面我们基于 Resnet18 来创建 FCN。首先我们下载一个预先训练好的模型。

```
In [12]: from mxnet.gluon.model_zoo import vision as models
pretrained_net = models.resnet18_v2(pretrained=True)
```

```
(pretrained_net.features[-4:], pretrained_net.output)

Out[12]: ([BatchNorm(axis=1, eps=1e-05, momentum=0.9, fix_gamma=False,
→ use_global_stats=False, in_channels=512),
Activation(relu),
GlobalAvgPool2D(size=(1, 1), stride=(1, 1), padding=(0, 0),
→ ceil_mode=True),
Flatten],
Dense(512 -> 1000, linear))
```

我们看到 `feature` 模块最后两层是 `GlobalAvgPool2D` 和 `Flatten`, 都是我们不需要的。所以我们定义一个新的网络, 它复制除了最后两层的 `features` 模块的权重。

```
In [13]: net = nn.HybridSequential()
for layer in pretrained_net.features[:-2]:
    net.add(layer)

x = nd.random.uniform(shape=(1,3,*input_shape))
print('Input:', x.shape)
print('Output:', net(x).shape)

Input: (1, 3, 320, 480)
Output: (1, 512, 10, 15)
```

然后接上一个通道数等于类数的 1×1 卷积层。注意到 `net` 已经将输入长宽减少了 32 倍。那么我们需要接入一个 `strides=32` 的卷积转置层。我们使用一个比 `stides` 大两倍的 `kernel`, 然后补上适当的填充。

```
In [14]: num_classes = len(classes)

with net.name_scope():
    net.add(
        nn.Conv2D(num_classes, kernel_size=1),
        nn.Conv2DTranspose(num_classes, kernel_size=64,
→ padding=16,strides=32)
    )
```

9.6.3 训练

训练的时候我们需要初始化新添加的两层。我们可以随机初始化, 但实际上发现将卷积转置层初始化成双线性差值函数可以使得训练更容易。

```
In [15]: def bilinear_kernel(in_channels, out_channels, kernel_size):
    factor = (kernel_size + 1) // 2
    if kernel_size % 2 == 1:
```

```
center = factor - 1
else:
    center = factor - 0.5
og = np.ogrid[:kernel_size, :kernel_size]
filt = (1 - abs(og[0] - center) / factor) * \
       (1 - abs(og[1] - center) / factor)
weight = np.zeros(
    (in_channels, out_channels, kernel_size, kernel_size),
    dtype='float32')
weight[range(in_channels), range(out_channels), :, :] = filt
return nd.array(weight)
```

下面代码演示这样的初始化等价于对图片进行双线性差值放大。

In [16]: `from matplotlib import pyplot as plt`

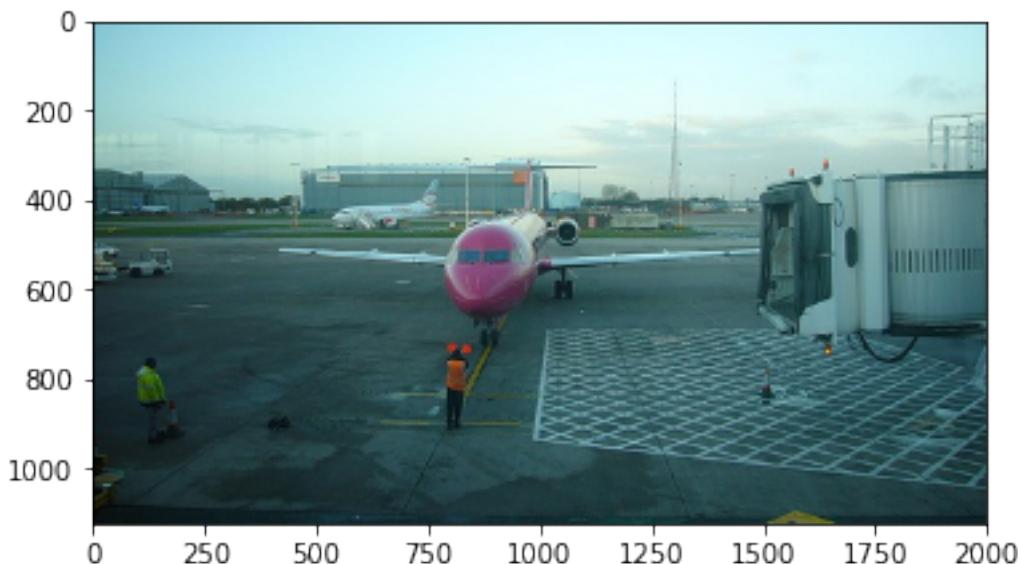
```
x = train_images[0]
print('Input', x.shape)
x = x.astype('float32').transpose((2,0,1)).expand_dims(axis=0)/255

conv_trans = nn.Conv2DTranspose(
    3, in_channels=3, kernel_size=8, padding=2, strides=4)
conv_trans.initialize()
conv_trans(x)
conv_trans.weight.set_data(bilinear_kernel(3, 3, 8))

y = conv_trans(x)
y = y[0].clip(0,1).transpose((1,2,0))
print('Output', y.shape)

plt.imshow(y.asnumpy())
plt.show()

Input (281, 500, 3)
Output (1124, 2000, 3)
```



所以网络的初始化包括了三部分。主体卷积网络从训练好的 ResNet18 复制得来, 替代 ResNet18 最后全连接的卷积层使用随机初始化。

最后的卷积转置层则使用双线性差值。对于卷积转置层, 我们可以自定义一个初始化类。简单起见, 这里我们直接通过权重的 `set_data` 函数改写权重。记得我们介绍过 Gluon 使用延后初始化来减少构造网络时需要制定输入大小。所以我们先随意初始化它, 计算一次 `forward`, 然后再改写权重。

```
In [17]: from mxnet import init

conv_trans = net[-1]
conv_trans.initialize(init=init.Zero())
net[-2].initialize(init=init.Xavier())

x = nd.zeros((batch_size, 3, *input_shape))
net(x)

shape = conv_trans.weight.data().shape
conv_trans.weight.set_data(bilinear_kernel(*shape[0:3]))
```

这时候我们可以真正开始训练了。值得一提的是我们使用卷积转置层的通道来预测像素的类别。所以在做 `softmax` 和预测的时候我们需要使用通道这个维度, 即维度 1. 所以在 `SoftmaxCrossEntropyLoss` 里加入了额外的 `axis=1` 选项。其他的部分跟之前的训练一致。

```
In [18]: import sys
sys.path.append('..')
import utils
```

```
loss = gluon.loss.SoftmaxCrossEntropyLoss(axis=1)

ctx = utils.try_all_gpus()
net.collect_params().reset_ctx(ctx)

trainer = gluon.Trainer(net.collect_params(),
                        'sgd', {'learning_rate': .1, 'wd': 1e-3})

utils.train(train_data, test_data, net, loss,
            trainer, ctx, num_epochs=10)

Start training on [gpu(0), gpu(1)]
Epoch 0. Loss: 1.587, Train acc 0.72, Test acc 0.80, Time 72.4 sec
Epoch 1. Loss: 0.581, Train acc 0.83, Test acc 0.84, Time 35.7 sec
Epoch 2. Loss: 0.485, Train acc 0.85, Test acc 0.83, Time 35.7 sec
Epoch 3. Loss: 0.420, Train acc 0.87, Test acc 0.84, Time 35.6 sec
Epoch 4. Loss: 0.357, Train acc 0.88, Test acc 0.85, Time 35.6 sec
Epoch 5. Loss: 0.323, Train acc 0.89, Test acc 0.85, Time 35.6 sec
Epoch 6. Loss: 0.286, Train acc 0.91, Test acc 0.85, Time 35.7 sec
Epoch 7. Loss: 0.285, Train acc 0.90, Test acc 0.86, Time 35.6 sec
Epoch 8. Loss: 0.255, Train acc 0.91, Test acc 0.85, Time 35.6 sec
Epoch 9. Loss: 0.245, Train acc 0.92, Test acc 0.86, Time 35.7 sec
```

9.6.4 预测

预测函数跟之前的图片分类预测类似，但跟上面一样，主要不同在于我们需要在 `axis=1` 上做 `argmax`。同时我们定义 `image2label` 的反函数，它将预测值转成图片。

```
In [19]: def predict(im):
    data = normalize_image(im)
    data = data.transpose((2, 0, 1)).expand_dims(axis=0)
    yhat = net(data.as_in_context(ctx[0]))
    pred = nd.argmax(yhat, axis=1)
    return pred.reshape((pred.shape[1], pred.shape[2]))

def label2image(pred):
    x = pred.astype('int32').asnumpy()
    cm = nd.array(colormap).astype('uint8')
    return nd.array(cm[x, :])
```

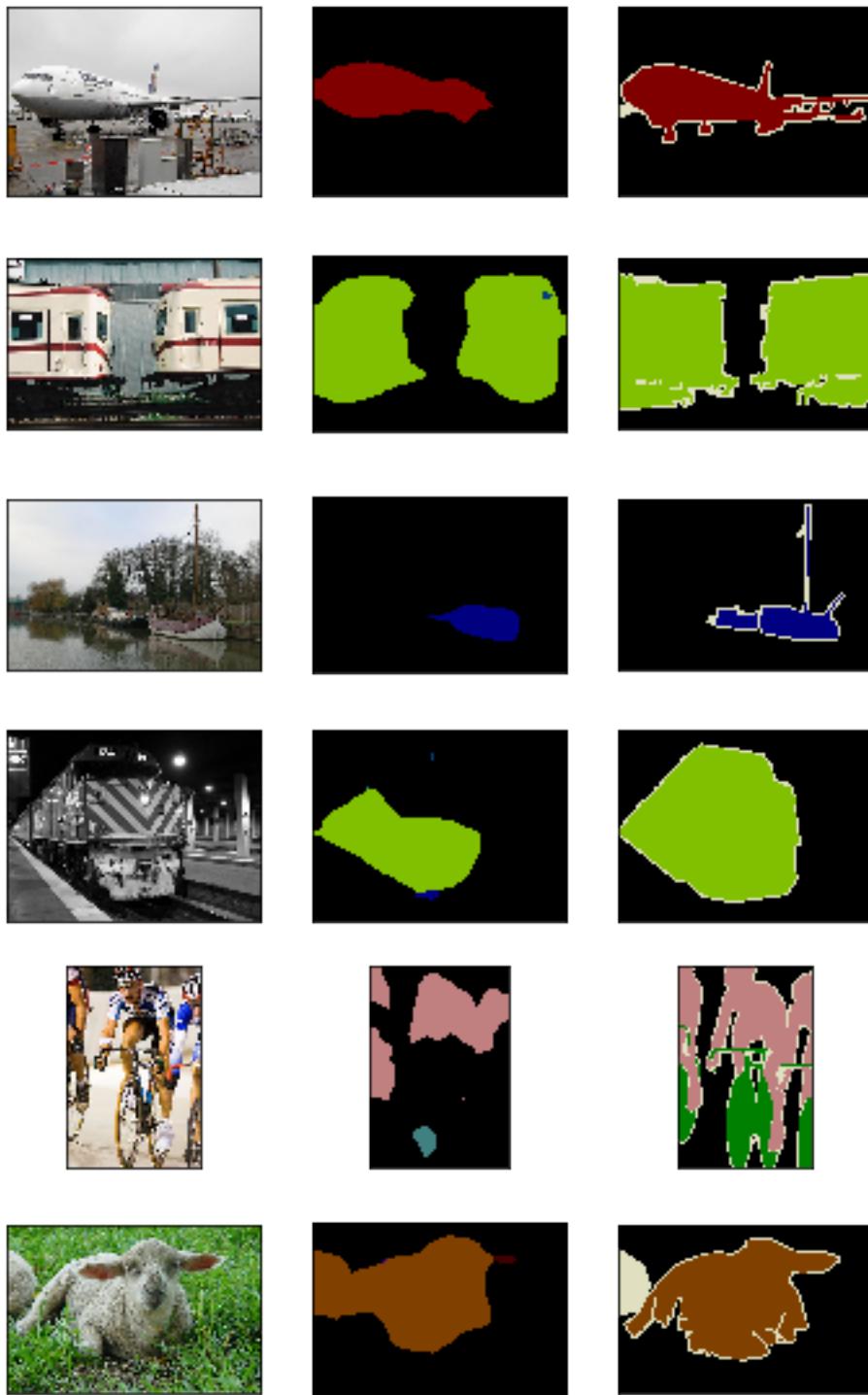
我们读取前几张测试图片并对其进行预测。

```
In [20]: test_images, test_labels = read_images(train=False)

n = 6
imgs = []
```

```
for i in range(n):
    x = test_images[i]
    pred = label2image(predict(x))
    imgs += [x, pred, test_labels[i]]

utils.show_images(imgs, nrows=n, ncols=3, figsize=(6,10))
```



9.6.5 总结

通过使用卷积转置层，我们可以得到更大分辨率的输出。

9.6.6 练习

1. 试着改改最后的卷积转置层的参数设定
2. 看看双线性差值初始化是不是必要的
3. 试着改改训练参数来使得收敛更好些
4. FCN 论文中提到了不只是使用主体卷积网络输出, 还可以将前面层的输出也加进来。试着实现。

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

9.7 样式迁移

喜欢拍照的同学可能都接触过滤镜, 它们能改变照片的颜色风格, 使得风景照更加锐利, 或者人像更加美白。但一个滤镜通常只能改变照片的某个方面, 要达到想要的风格, 经常需要我们大量组合尝试多个滤镜。这个过程被通常称之为“PS一下”。对于简单的调整, 例如拉一拉颜色曲线变成日系小清新风或者加点德味, 通常都不难做到。但对于复杂的要求, 例如将图片调成梵高风, 则需要大量的专业技巧。例如 17 年上映的《挚爱梵高》由 115 名专业画师画了 65,000 张梵高风格的油画而得。

一个自然的想法是, 我们能不能通过神经网络来自动化这个过程。具体来说, 我们希望将一张指定的图片的风格, 例如梵高的某张油画, 应用到另外一张内容图片上。

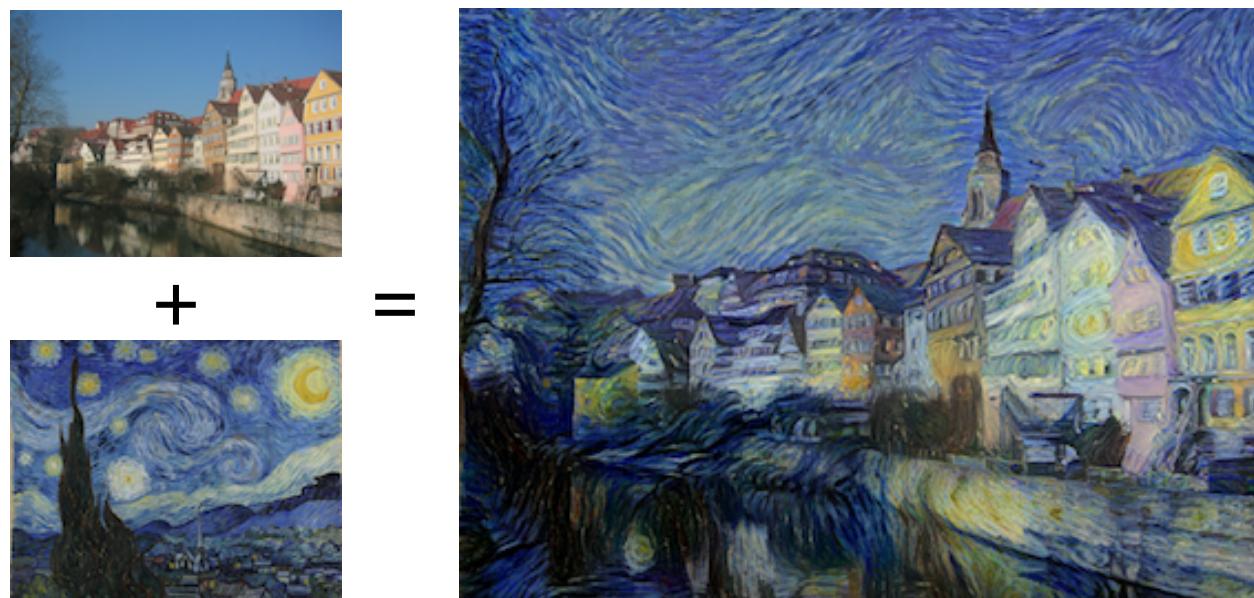


图 9.10: Neural Style

Gatys 等人开创性的通过匹配卷积神经网络的中间层输出来训练出合成图片。它的流程如下所示：

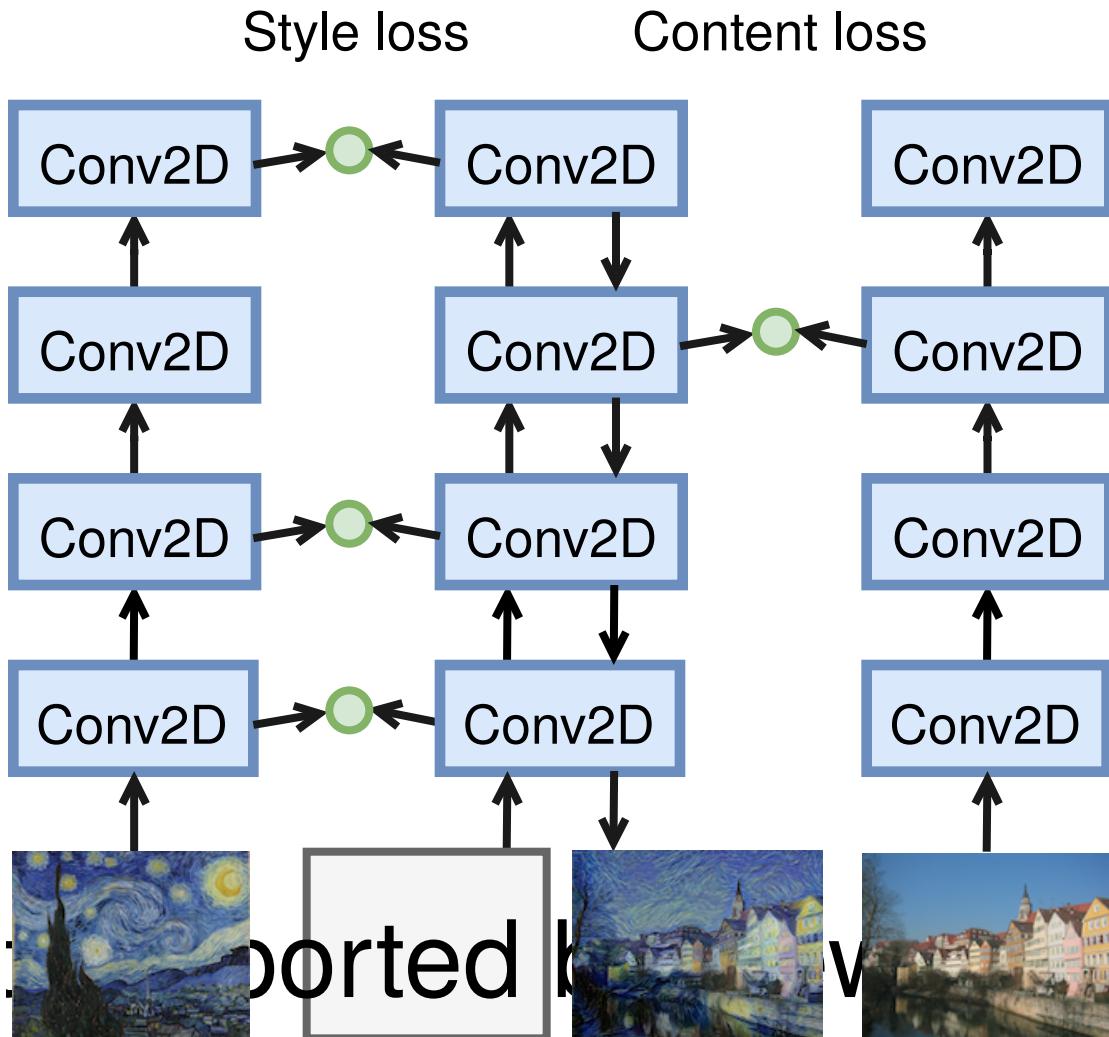


图 9.11: Neural Style Training

1. 我们首先挑选一个卷积神经网络来提取特征。我们选择它的特定层来匹配样式，特定层来匹配内容。示意图中我们选择层 1,2,4 作为样式层，层 3 作为内容层。
2. 输入样式图片并保存样式层输出，记第 i 层输出为 s_i
3. 输入内容图片并保存内容层输出，记第 i 层输出为 c_i
4. 初始化合成图片 x 为随机值或者其他更好的初始值。然后进行迭代使得用 x 抽取的特征能够匹配上 s_i 和 c_i 。具体来说，我们如下迭代直到收敛。
5. 输入 x 计算样式层和内容层输出，记第 i 层输出为 y_i
6. 使用样式损失函数来计算 y_i 和 s_i 的差异

7. 使用内容损失函数来计算 y_i 和 c_i 的差异
8. 对损失求和并对输入 x 求导, 记导数为 g
9. 更新 x , 例如 $x = x - \eta g$

内容损失函数使用通常回归用的均方误差。对于样式, 我们可以将它看成是像素点在每个通道的统计分布。例如要匹配两张图片的颜色, 我们的一个做法是匹配这两张图片在 RGB 这三个通道上的直方图。更一般的, 假设卷积层的输出格式是 $c \times h \times w$, 既 `channels x height x width`。那么我们可以把它变形为 $c \times hw$ 的 2D 数组, 并将它看成是一个维度为 c 的随机变量采样到的 hw 个点。所谓的样式匹配就是使得两个 c 维随机变量统计分布一致。

匹配统计分布常用的做法是冲量匹配, 就是说使得他们有一样的均值, 协方差, 和其他高维的冲量。为了计算简单起见, 我们这里假设卷积输出已经是均值为 0 了, 而且我们只匹配协方差。也就是说, 样式损失函数就是对 s_i 和 y_i 计算 Gram 矩阵然后应用均方误差

$$\text{styleloss}(s_i, y_i) = \frac{1}{c^2 hw} \|s_i s_i^T - y_i y_i^T\|_F$$

这里假设我们已经将 s_i 和 y_i 变形成了 $c \times hw$ 的 2D 矩阵了。

下面我们将实现这个算法来深入理解各个参数, 例如样式层和内容层的选取, 对实际结果的影响。

9.7.1 数据

我们将尝试将下面的水粉橡树的样式应用到实拍的松树上。

```
In [1]: %matplotlib inline
import matplotlib as mpl
mpl.rcParams['figure.dpi']= 150
import matplotlib.pyplot as plt

from mxnet import image

style_img = image.imread('../img/autumn_oak.jpg')
content_img = image.imread('../img/pine-tree.jpg')

plt.imshow(style_img.asnumpy())
plt.show()
plt.imshow(content_img.asnumpy())
plt.show()
```



跟前面教程一样我们定义预处理和后处理函数，它们将原始图片进行归一化并转换成卷积网络接受的输入格式，和还原成能展示的图片格式。

In [2]: `from mxnet import nd`

```
rgb_mean = nd.array([0.485, 0.456, 0.406])
rgb_std = nd.array([0.229, 0.224, 0.225])
```

```
def preprocess(img, image_shape):
```

```

    img = image.imresize(img, *image_shape)
    img = (img.astype('float32')/255 - rgb_mean) / rgb_std
    return img.transpose((2,0,1)).expand_dims(axis=0)

def postprocess(img):
    img = img[0].as_in_context(rgb_std.context)
    return (img.transpose((1,2,0))*rgb_std + rgb_mean).clip(0,1)

```

9.7.2 模型

我们使用原论文使用的 VGG 19 模型。并下载在 Imagenet 上训练好的权重。

In [3]: `from mxnet.gluon.model_zoo import vision as models`

```

pretrained_net = models.vgg19(pretrained=True)
pretrained_net

```

Out[3]: VGG(
 (features): HybridSequential(
 (0): Conv2D(3 -> 64, kernel_size=(3, 3), stride=(1, 1), padding=(1, 1))
 (1): Activation(relu)
 (2): Conv2D(64 -> 64, kernel_size=(3, 3), stride=(1, 1), padding=(1, 1))
 (3): Activation(relu)
 (4): MaxPool2D(size=(2, 2), stride=(2, 2), padding=(0, 0),
 ceil_mode=False)
 (5): Conv2D(64 -> 128, kernel_size=(3, 3), stride=(1, 1), padding=(1, 1))
 (6): Activation(relu)
 (7): Conv2D(128 -> 128, kernel_size=(3, 3), stride=(1, 1), padding=(1, 1))
 (8): Activation(relu)
 (9): MaxPool2D(size=(2, 2), stride=(2, 2), padding=(0, 0),
 ceil_mode=False)
 (10): Conv2D(128 -> 256, kernel_size=(3, 3), stride=(1, 1), padding=(1,
 1))
 (11): Activation(relu)
 (12): Conv2D(256 -> 256, kernel_size=(3, 3), stride=(1, 1), padding=(1,
 1))
 (13): Activation(relu)
 (14): Conv2D(256 -> 256, kernel_size=(3, 3), stride=(1, 1), padding=(1,
 1))
 (15): Activation(relu)
 (16): Conv2D(256 -> 256, kernel_size=(3, 3), stride=(1, 1), padding=(1,
 1))
 (17): Activation(relu)
 (18): MaxPool2D(size=(2, 2), stride=(2, 2), padding=(0, 0),
 ceil_mode=False)

```
(19): Conv2D(256 -> 512, kernel_size=(3, 3), stride=(1, 1), padding=(1,
    ↵ 1))
    (20): Activation(relu)
    (21): Conv2D(512 -> 512, kernel_size=(3, 3), stride=(1, 1), padding=(1,
    ↵ 1))
        (22): Activation(relu)
        (23): Conv2D(512 -> 512, kernel_size=(3, 3), stride=(1, 1), padding=(1,
    ↵ 1))
            (24): Activation(relu)
            (25): Conv2D(512 -> 512, kernel_size=(3, 3), stride=(1, 1), padding=(1,
    ↵ 1))
                (26): Activation(relu)
                (27): MaxPool2D(size=(2, 2), stride=(2, 2), padding=(0, 0),
    ↵ ceil_mode=False)
                    (28): Conv2D(512 -> 512, kernel_size=(3, 3), stride=(1, 1), padding=(1,
    ↵ 1))
                        (29): Activation(relu)
                        (30): Conv2D(512 -> 512, kernel_size=(3, 3), stride=(1, 1), padding=(1,
    ↵ 1))
                            (31): Activation(relu)
                            (32): Conv2D(512 -> 512, kernel_size=(3, 3), stride=(1, 1), padding=(1,
    ↵ 1))
                                (33): Activation(relu)
                                (34): Conv2D(512 -> 512, kernel_size=(3, 3), stride=(1, 1), padding=(1,
    ↵ 1))
                                    (35): Activation(relu)
                                    (36): MaxPool2D(size=(2, 2), stride=(2, 2), padding=(0, 0),
    ↵ ceil_mode=False)
                                    (37): Dense(25088 -> 4096, Activation(relu))
                                    (38): Dropout(p = 0.5, axes=())
                                    (39): Dense(4096 -> 4096, Activation(relu))
                                    (40): Dropout(p = 0.5, axes=())
    )
    (output): Dense(4096 -> 1000, linear)
)
```

回忆[VGG](#)这一章里，我们使用五个卷积块 `vgg_block` 来构建网络。快之间使用 `nn.MaxPool2D` 来做间隔。我们有很多种选择来使用某些层作为样式和内容的匹配层。通常越靠近输入层越容易匹配内容和样式的细节信息，越靠近输出则越倾向于语义的内容和全局的样式。这里我们按照原论文使用每个卷积块的第一个卷基层输出来匹配样式，和第四个块中的最后一个卷积层来匹配内容。根据 `pretrained_net` 的输出我们记录下这些层对应的位置。

```
In [4]: style_layers = [0,5,10,19,28]
                      content_layers = [25]
```

因为只需要使用中间层的输出，我们构建一个新的网络，它只保留我们需要的层。

```
In [5]: from mxnet.gluon import nn

def get_net(pretrained_net, content_layers, style_layers):
    net = nn.Sequential()
    for i in range(max(content_layers+style_layers)+1):
        net.add(pretrained_net.features[i])
    return net

net = get_net(pretrained_net, content_layers, style_layers)
```

给定输入 x ，简单使用 $net(x)$ 只能拿到最后的输出，而这里我们还需要 net 的中间层输出。因此我们逐层计算，并保留需要的输出。

```
In [6]: def extract_features(x, content_layers, style_layers):
    contents = []
    styles = []
    for i in range(len(net)):
        x = net[i](x)
        if i in style_layers:
            styles.append(x)
        if i in content_layers:
            contents.append(x)
    return contents, styles
```

9.7.3 损失函数

内容匹配是一个典型的回归问题，我们将来使用均方误差来比较内容层的输出。

```
In [7]: def content_loss(yhat, y):
    return (yhat-y).square().mean()
```

样式匹配则是通过拟合 Gram 矩阵。我们先定义它的计算：

```
In [8]: def gram(x):
    c = x.shape[1]
    n = x.size / x.shape[1]
    y = x.reshape((c, int(n)))
    return nd.dot(y, y.T) / n

gram(nd.ones((1,3,4)))
```

Out[8]:

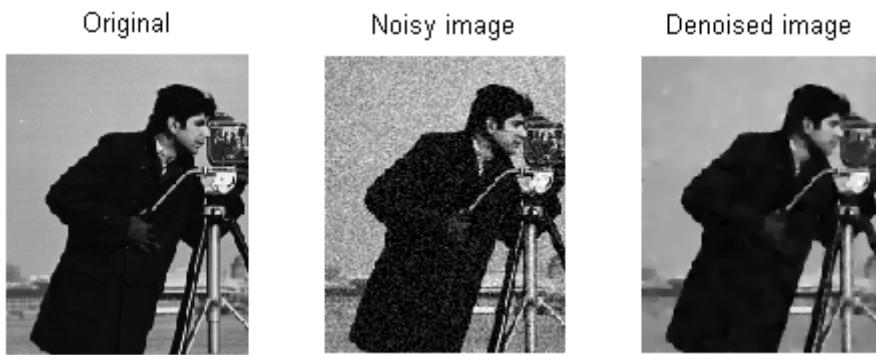
```
[[ 1.  1.  1.]
 [ 1.  1.  1.]
```

```
[ 1.  1.  1.]
<NDArray 3x3 @cpu(0)>
```

和对应的损失函数。对于要匹配的样式图片它的样式输出在训练中不会改变，我们将提前计算好它的 Gram 矩阵来作为输入使得计算加速。

```
In [9]: def style_loss(yhat, gram_y):
    return (gram(yhat) - gram_y).square().mean()
```

当使用靠近输出层的高层输出来拟合时，经常可以观察到学到的图片里面有大量高频噪音。这个有点类似老式天线电视机经常遇到的白噪音。有多种方法来降噪，例如可以加入模糊滤镜，或者使用总变差降噪（Total Variation Denoising）。



假设 $x_{i,j}$ 表示像素 (i,j) ，那么我们加入下面的损失函数，它使得邻近的像素值相似：

$$\sum_{i,j} |x_{i,j} - x_{i+1,j}| + |x_{i,j} - x_{i,j+1}|$$

```
In [10]: def tv_loss(yhat):
    return 0.5*((yhat[:, :, 1:, :] - yhat[:, :, :-1, :]).abs().mean() +
                (yhat[:, :, :, 1:] - yhat[:, :, :, :-1]).abs().mean())
```

总损失函数是上述三个损失函数的加权和。通过调整权重值我们可以控制学到的图片是否保留更多样式，更多内容，还是更加干净。注意到样式匹配中我们使用了 5 个层的输出，我们对靠近输入的层给予比较大的权重。

```
In [11]: channels = [net[l].weight.shape[0] for l in style_layers]
style_weights = [1e4/n**2 for n in channels]
content_weights = [1]
tv_weight = 10
```

我们可以使用 `nd.add_n` 来将多个损失函数的输出按权重加起来。

```
In [12]: def sum_loss(loss, preds, truths, weights):
    return nd.add_n(*[w*loss(yhat, y) for w, yhat, y in zip(
        weights, preds, truths)])
```

9.7.4 训练

首先我们定义两个函数，他们分别对源内容图片和源样式图片提取特征。

```
In [13]: def get_contents(image_shape):
    content_x = preprocess(content_img, image_shape).copyto(ctx)
    content_y, _ = extract_features(content_x, content_layers, style_layers)
    return content_x, content_y

def get_styles(image_shape):
    style_x = preprocess(style_img, image_shape).copyto(ctx)
    _, style_y = extract_features(style_x, content_layers, style_layers)
    style_y = [gram(y) for y in style_y]
    return style_x, style_y
```

训练过程跟之前的主要的主要不同在于

1. 这里我们的损失函数更加复杂。
2. 我们只对输入进行更新，这个意味着我们需要对输入 x 预先分配了梯度。
3. 我们可能会替换匹配内容和样式的层，和调整他们之间的权重，来得到不同风格的输出。这里我们对梯度做了一般化，使得不同参数下的学习率不需要太大变化。
4. 仍然使用简单的梯度下降，但每 n 次迭代我们会减小一次学习率

```
In [14]: from time import time
        from mxnet import autograd

        def train(x, max_epochs, lr, lr_decay_epoch=200):
            tic = time()
            for i in range(max_epochs):
                with autograd.record():
                    content_py, style_py = extract_features(
                        x, content_layers, style_layers)
                    content_L = sum_loss(
                        content_loss, content_py, content_y, content_weights)
                    style_L = sum_loss(
                        style_loss, style_py, style_y, style_weights)
                    tv_L = tv_weight * tv_loss(x)
                    loss = style_L + content_L + tv_L

                    loss.backward()
                    x.grad[:] /= x.grad.abs().mean() + 1e-8
                    x[:] -= lr * x.grad
                    # add sync to avoid large mem usage
                    nd.waitall()
```

```

if i and i % 20 == 0:
    print('batch %3d, content %.2f, style %.2f, '
          'TV %.2f, time %.1f sec' % (
              i, content_L.asscalar(), style_L.asscalar(),
              tv_L.asscalar(), time()-tic))
    tic = time()

if i and i % lr_decay_epoch == 0:
    lr *= 0.1
    print('change lr to ', lr)

plt.imshow(postprocess(x).asnumpy())
plt.show()
return x

```

现在所有函数都定义好了，我们可以真正开始训练了。从性能上考虑，首先我们在一个大小为 300×200 的输入大小上进行训练。因为我们不会更新源图片和模型参数，所以我们可以提前抽取好他们的特征。我们把要合成图片的初始值设成内容图片来加速收敛。

```

In [15]: import sys
        sys.path.append('..')
        import utils

        image_shape = (300,200)

        ctx = utils.try_gpu()
        net.collect_params().reset_ctx(ctx)

        content_x, content_y = get_contents(image_shape)
        style_x, style_y = get_styles(image_shape)

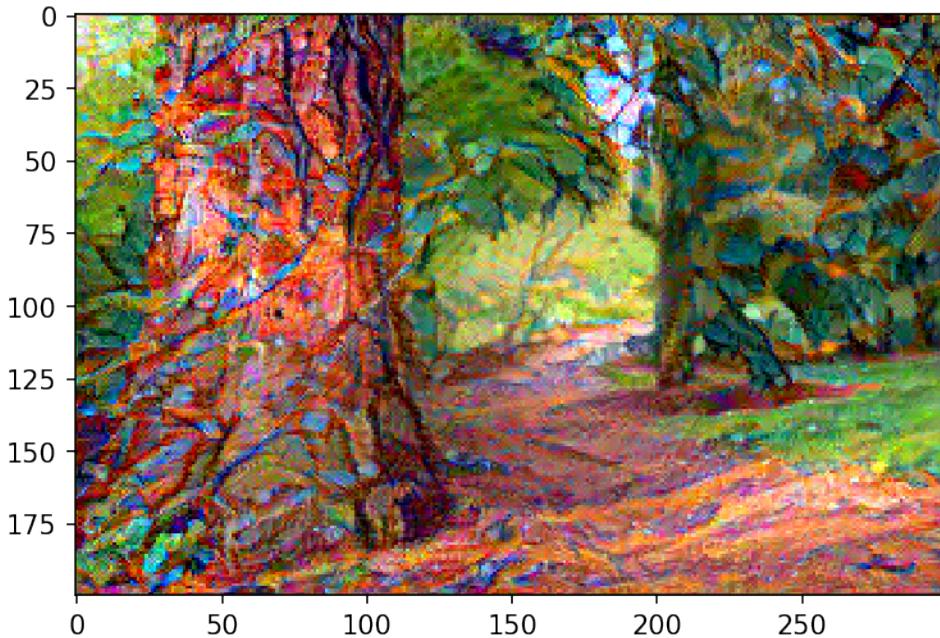
        x = content_x.copyto(ctx)
        x.attach_grad()

        y = train(x, 500, 0.1)

batch 20, content 29.58, style 609.40, TV 4.60, time 3.7 sec
batch 40, content 31.04, style 287.28, TV 4.95, time 1.3 sec
batch 60, content 28.73, style 333.63, TV 5.10, time 1.3 sec
batch 80, content 29.62, style 259.36, TV 5.37, time 1.3 sec
batch 100, content 29.53, style 190.71, TV 5.51, time 1.3 sec
batch 120, content 28.20, style 220.32, TV 5.54, time 1.3 sec
batch 140, content 29.10, style 158.32, TV 5.72, time 1.3 sec
batch 160, content 29.95, style 152.75, TV 5.83, time 1.3 sec
batch 180, content 27.55, style 183.77, TV 5.81, time 1.3 sec

```

```
batch 200, content 28.56, style 150.58, TV 5.99, time 1.3 sec
change lr to 0.01000000000000002
batch 220, content 23.99, style 33.61, TV 5.73, time 1.3 sec
batch 240, content 22.19, style 27.06, TV 5.68, time 1.3 sec
batch 260, content 20.95, style 24.88, TV 5.65, time 1.3 sec
batch 280, content 20.05, style 23.83, TV 5.62, time 1.3 sec
batch 300, content 19.42, style 22.63, TV 5.59, time 1.3 sec
batch 320, content 18.85, style 21.69, TV 5.56, time 1.3 sec
batch 340, content 18.37, style 21.08, TV 5.54, time 1.3 sec
batch 360, content 17.84, style 19.75, TV 5.51, time 1.3 sec
batch 380, content 17.59, style 18.85, TV 5.49, time 1.3 sec
batch 400, content 17.42, style 18.58, TV 5.49, time 1.3 sec
change lr to 0.00100000000000002
batch 420, content 16.84, style 12.46, TV 5.47, time 1.3 sec
batch 440, content 16.50, style 12.03, TV 5.45, time 1.3 sec
batch 460, content 16.24, style 11.71, TV 5.44, time 1.3 sec
batch 480, content 16.03, style 11.44, TV 5.42, time 1.3 sec
```



观察损失值的变化。因为我们使用了内容图片作为初始化，所以一开始看到样式损失比较大。但随着迭代的进行，它减少的非常迅速，尤其是在每次调整学习率后。噪音在训练中有略微的增加，但在后期还是控制在合理的范围。

最后的结果里可以看到明显的我们将样式图片里面的大的色块应用到了内容图片上。但是由于输入图片大小比较小，所以看到细节上比较模糊。

下面我们在更大的 1200×800 的尺寸上训练，希望能得到更加清晰的合成图片。同样为了加速收敛，我们将前面得到的合成图片放大成我们要的尺寸做为初始值。

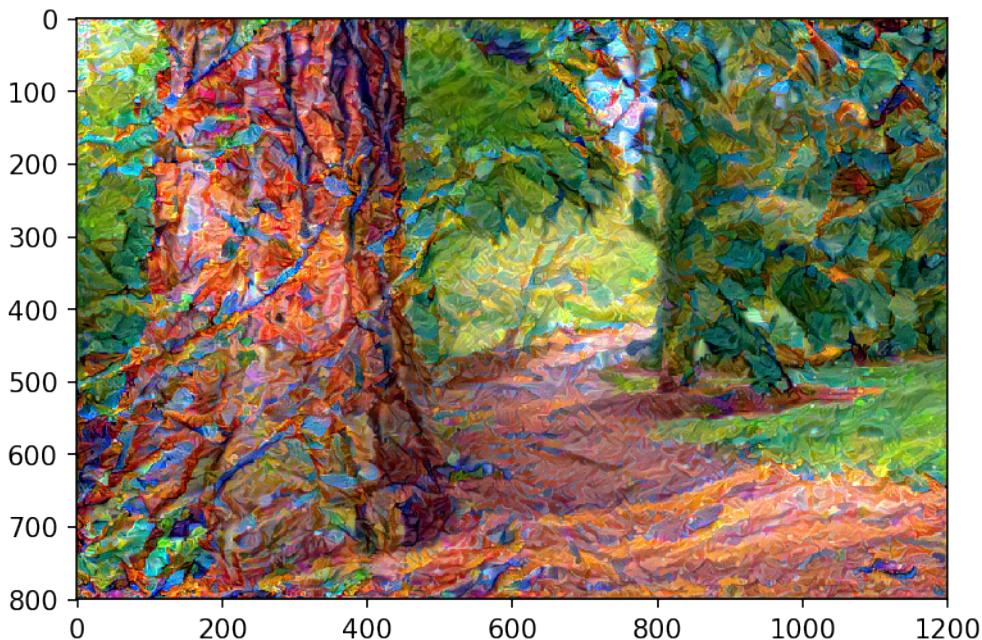
```
In [16]: image_shape = (1200,800)

content_x, content_y = get_contents(image_shape)
style_x, style_y = get_styles(image_shape)

x = preprocess(postprocess(y)*255, image_shape).copyto(ctx)
x.attach_grad()

z = train(x, 300, 0.1, 100)

batch 20, content 48.11, style 771.16, TV 3.29, time 25.7 sec
batch 40, content 46.45, style 716.86, TV 3.59, time 18.2 sec
batch 60, content 46.28, style 730.57, TV 3.82, time 18.1 sec
batch 80, content 46.35, style 761.87, TV 4.02, time 18.1 sec
batch 100, content 46.96, style 800.38, TV 4.18, time 18.2 sec
change lr to 0.010000000000000002
batch 120, content 29.42, style 62.15, TV 3.68, time 18.2 sec
batch 140, content 25.32, style 30.91, TV 3.47, time 18.2 sec
batch 160, content 23.31, style 45.07, TV 3.38, time 18.2 sec
batch 180, content 23.36, style 24.70, TV 3.33, time 18.2 sec
batch 200, content 21.88, style 17.87, TV 3.27, time 18.2 sec
change lr to 0.001000000000000002
batch 220, content 20.41, style 13.21, TV 3.23, time 18.2 sec
batch 240, content 19.56, style 12.10, TV 3.21, time 18.2 sec
batch 260, content 18.95, style 11.41, TV 3.19, time 18.2 sec
batch 280, content 18.47, style 10.89, TV 3.17, time 18.2 sec
```



可以看到由于初始值更加好，这次的收敛更加迅速，虽然每次迭代花时间更长。由于是图片更大，我们可以更清楚的看到细节。里面不仅有大块的色彩，色彩块里面也有细微的纹理。这是由于我们在匹配样式的时候使用了多层的输出。

最后我们可以把合成的图片保存下来。

```
In [17]: plt.imsave('result.png', postprocess(z).asnumpy())
```

9.7.5 总结

通过匹配神经网络的中间层输出，我们可以有效的融合不同图片的内容和样式。

9.7.6 练习

1. 改变内容和样式层
2. 使用不同的权重
3. 换几张样式和内容图片

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

9.8 实战 Kaggle 比赛——使用 Gluon 对原始图像文件分类 (CIFAR-10)

我们在监督学习中的一章里，以房价预测问题为例，介绍了如何使用 Gluon 来实战 Kaggle 比赛。

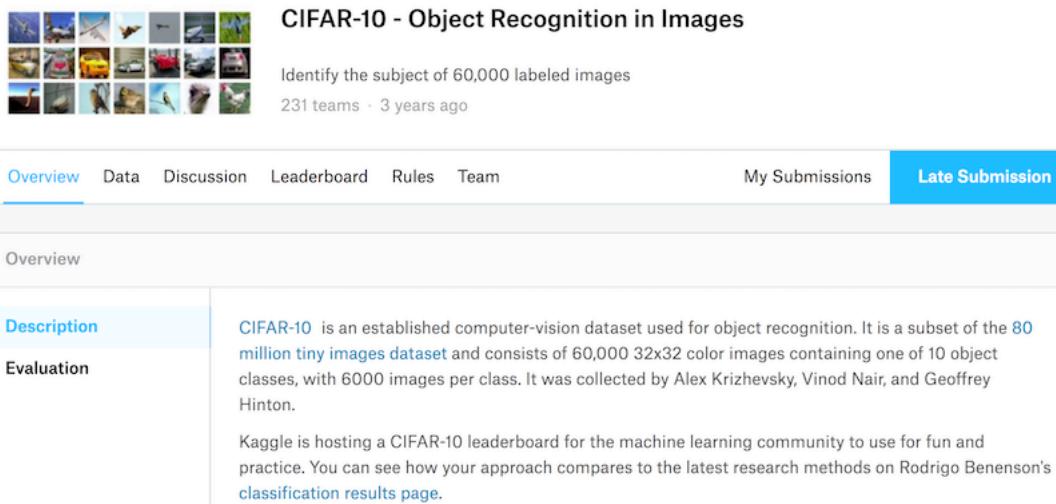
我们在本章中选择了 Kaggle 中著名的CIFAR-10 原始图像分类问题。我们以该问题为例，为大家提供使用 Gluon 对原始图像文件进行分类的示例代码。

计算机视觉一直是深度学习的主战场，请

Get your hands dirty。

9.8.1 Kaggle 中的 CIFAR-10 原始图像分类问题

Kaggle是一个著名的供机器学习爱好者交流的平台。为了便于提交结果，请大家注册Kaggle账号。然后请大家先点击CIFAR-10 原始图像分类问题了解有关本次比赛的信息。



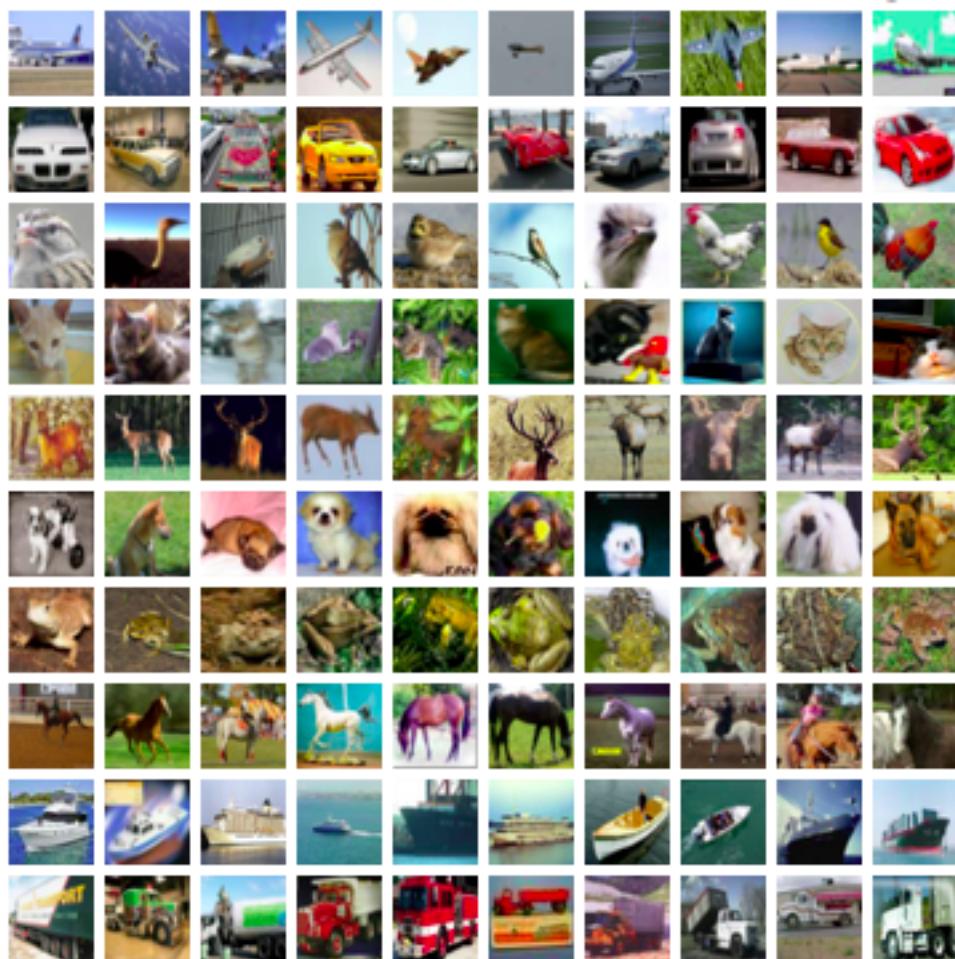
The screenshot shows the Kaggle interface for the CIFAR-10 competition. At the top, there's a grid of small sample images from the dataset. Below it, the title "CIFAR-10 - Object Recognition in Images" is displayed. A brief description follows: "Identify the subject of 60,000 labeled images" and "231 teams · 3 years ago". A navigation bar below includes links for Overview (which is underlined in blue), Data, Discussion, Leaderboard, Rules, Team, My Submissions, and Late Submission (which is highlighted with a blue background). The "Overview" section is currently active. On the left, there are two expandable sections: "Description" and "Evaluation". The "Description" section contains text about the dataset being a subset of the 80 million tiny images dataset, containing 60,000 32x32 color images of 10 objects, collected by Alex Krizhevsky, Vinod Nair, and Geoffrey Hinton. The "Evaluation" section describes the Kaggle leaderboard where users can compare their results against the latest research methods.

9.8.2 整理原始数据集

比赛数据分为训练数据集和测试数据集。训练集包含 5 万张图片。测试集包含 30 万张图片：其中有 1 万张图片用来计分，但为了防止人工标注测试集，里面另加了 29 万张不计分的图片。

两个数据集都是 png 彩色图片，大小为 $32 \times 32 \times 3$ 。训练集一共有 10 类图片，分别为飞机、汽车、鸟、猫、鹿、狗、青蛙、马、船和卡车。

(那么问题来了，你觉得你用肉眼能把下面 100 个图片正确分类吗?)



下载数据集

登录 Kaggle 后，数据可以从CIFAR-10 原始图像分类问题中下载。

- 训练数据集 train.7z 下载地址
- 测试数据集 test.7z 下载地址
- 训练数据标签 trainLabels.csv 下载地址

解压数据集

训练数据集 train.7z 和测试数据集 test.7z 都是压缩格式，下载后请解压缩。解压缩后原始数据集的路径可以如下：

- `../data/kaggle_cifar10/train/[1-50000].png`
- `../data/kaggle_cifar10/test/[1-300000].png`

-/data/kaggle_cifar10/trainLabels.csv

为了使网页编译快一点, 我们在 git repo 里仅仅存放 100 个训练样本('train_tiny.zip')和 1 个测试样本('test_tiny.zip')。执行以下代码会从 git repo 里解压生成小样本训练和测试数据, 文件夹名称分别为' train_tiny' 和' test_tiny'。训练数据标签的压缩文件将被解压成 trainLabels.csv。

```
In [1]: # 如果训练下载的 Kaggle 的完整数据集, 把下面改 False
```

```
demo = True
if demo:
    import zipfile
    for fin in ['train_tiny.zip', 'test_tiny.zip', 'trainLabels.csv.zip']:
        with zipfile.ZipFile('../data/kaggle_cifar10/' + fin, 'r') as zin:
            zin.extractall('../data/kaggle_cifar10/')
```

整理数据集

我们定义下面的 `reorg_cifar10_data` 函数来整理数据集。整理后, 同一类图片将出现在同一个文件夹下, 便于 Gluon 稍后读取。

函数中的参数如 `data_dir`、`train_dir` 和 `test_dir` 对应上述数据存放路径及训练和测试的图片集文件夹名称。参数 `label_file` 为训练数据标签的文件名称。参数 `input_dir` 是整理后数据集文件夹名称。参数 `valid_ratio` 是验证集占原始训练集的比重。以 `valid_ratio=0.1` 为例, 由于原始训练数据有 5 万张图片, 调参时将有 4 万 5 千张图片用于训练(整理后存放在 `input_dir/train`)而另外 5 千张图片为验证集(整理后存放在 `input_dir/valid`)。

```
In [2]: import os
```

```
import shutil
```

```
def reorg_cifar10_data(data_dir, label_file, train_dir, test_dir, input_dir,
→ valid_ratio):
    # 读取训练数据标签。
    with open(os.path.join(data_dir, label_file), 'r') as f:
        # 跳过文件头行(栏名称)。
        lines = f.readlines()[1:]
        tokens = [l.rstrip().split(',') for l in lines]
        idx_label = dict(((int(idx), label) for idx, label in tokens))
    labels = set(idx_label.values())

    num_train = len(os.listdir(os.path.join(data_dir, train_dir)))
    num_train_tuning = int(num_train * (1 - valid_ratio))
    assert 0 < num_train_tuning < num_train
    num_train_tuning_per_label = num_train_tuning // len(labels)
    label_count = dict()
```

```

def mkdir_if_not_exist(path):
    if not os.path.exists(os.path.join(*path)):
        os.makedirs(os.path.join(*path))

# 整理训练和验证集。
for train_file in os.listdir(os.path.join(data_dir, train_dir)):
    idx = int(train_file.split('.')[0])
    label = idx_label[idx]
    mkdir_if_not_exist([data_dir, input_dir, 'train_valid', label])
    shutil.copy(os.path.join(data_dir, train_dir, train_file),
                os.path.join(data_dir, input_dir, 'train_valid', label))
    if label not in label_count or label_count[label] <
        num_train_tuning_per_label:
        mkdir_if_not_exist([data_dir, input_dir, 'train', label])
        shutil.copy(os.path.join(data_dir, train_dir, train_file),
                    os.path.join(data_dir, input_dir, 'train', label))
        label_count[label] = label_count.get(label, 0) + 1
    else:
        mkdir_if_not_exist([data_dir, input_dir, 'valid', label])
        shutil.copy(os.path.join(data_dir, train_dir, train_file),
                    os.path.join(data_dir, input_dir, 'valid', label))

# 整理测试集。
mkdir_if_not_exist([data_dir, input_dir, 'test', 'unknown'])
for test_file in os.listdir(os.path.join(data_dir, test_dir)):
    shutil.copy(os.path.join(data_dir, test_dir, test_file),
                os.path.join(data_dir, input_dir, 'test', 'unknown'))

```

再次强调，为了使网页编译快一点，我们在这里仅仅使用 100 个训练样本和 1 个测试样本。训练和测试数据的文件夹名称分别为' train_tiny' 和' test_tiny'。相应地，我们仅将批量大小设为 1。实际训练和测试时应使用 Kaggle 的完整数据集。由于数据集较大，批量大小 batch_size 大小可设为一个较大的整数，例如 128。

我们将 10% 的训练样本作为调参时的验证集。

```
In [3]: if demo:
    # 注意：此处使用小训练集为便于网页编译。Kaggle 的完整数据集应包括 5 万训练样本。
    train_dir = 'train_tiny'
    # 注意：此处使用小测试集为便于网页编译。Kaggle 的完整数据集应包括 30 万测试样本。
    test_dir = 'test_tiny'
    # 注意：此处相应使用小批量。对 Kaggle 的完整数据集可设较大的整数，例如 128。
    batch_size = 1
else:
    train_dir = 'train'
    test_dir = 'test'
    batch_size = 128
```

```
data_dir = '../data/kaggle_cifar10'
label_file = 'trainLabels.csv'
input_dir = 'train_valid_test'
valid_ratio = 0.1
reorg_cifar10_data(data_dir, label_file, train_dir, test_dir, input_dir,
→ valid_ratio)
```

9.8.3 使用 Gluon 读取整理后的数据集

为避免过拟合，我们在这里使用 `transforms` 来增广数据集。例如我们加入 `transforms.RandomFlipLeftRight()` 即可随机对每张图片做镜面反转。我们也通过 `transforms.Normalize()` 对彩色图像 RGB 三个通道分别做标准化。以下我们列举了所有可能用到的操作，这些操作可以根据需求来决定是否调用，它们的参数也都是可调的。

```
In [4]: from mxnet import autograd
        from mxnet import gluon
        from mxnet import init
        from mxnet import nd
        from mxnet.gluon.data import vision
        from mxnet.gluon.data.vision import transforms
        import numpy as np

        transform_train = transforms.Compose([
            # transforms.CenterCrop(32)
            # transforms.RandomFlipTopBottom(),
            # transforms.RandomColorJitter(brightness=0.0, contrast=0.0,
            → saturation=0.0, hue=0.0),
            # transforms.RandomLighting(0.0),
            # transforms.Cast('float32'),
            # transforms.Resize(32),

            # 随机按照 scale 和 ratio 裁剪，并放缩为 32x32 的正方形
            transforms.RandomResizedCrop(32, scale=(0.08, 1.0), ratio=(3.0/4.0,
            → 4.0/3.0)),
            # 随机左右翻转图片
            transforms.RandomFlipLeftRight(),
            # 将图片像素值缩小到 (0,1) 内，并将数据格式从"高 * 宽 * 通道" 改为"通道 * 高 * 宽"
            transforms.ToTensor(),
            # 对图片的每个通道做标准化
            transforms.Normalize([0.4914, 0.4822, 0.4465], [0.2023, 0.1994, 0.2010])
        ])

        # 测试时，无需对图像做标准化以外的增强数据处理。
```

```
transform_test = transforms.Compose([
    transforms.ToTensor(),
    transforms.Normalize([0.4914, 0.4822, 0.4465], [0.2023, 0.1994, 0.2010])
])
```

接下来, 我们可以使用 Gluon 中的 `ImageFolderDataset` 类来读取整理后的数据集。注意, 我们要在 `loader` 中调用刚刚定义好的图片增广函数。通过 `vision.ImageFolderDataset` 读入的数据是一个 `(image, label)` 组合, `transform_first()` 的作用便是对这个组合中的第一个成员 (即读入的图像) 做图片增广操作。

```
In [5]: input_str = data_dir + '/' + input_dir + '/'

# 读取原始图像文件。flag=1 说明输入图像有三个通道（彩色）。
train_ds = vision.ImageFolderDataset(input_str + 'train', flag=1)
valid_ds = vision.ImageFolderDataset(input_str + 'valid', flag=1)
train_valid_ds = vision.ImageFolderDataset(input_str + 'train_valid', flag=1)
test_ds = vision.ImageFolderDataset(input_str + 'test', flag=1)

loader = gluon.data.DataLoader
train_data = loader(train_ds.transform_first(transform_train),
                     batch_size, shuffle=True, last_batch='keep')
valid_data = loader(valid_ds.transform_first(transform_test),
                     batch_size, shuffle=True, last_batch='keep')
train_valid_data = loader(train_valid_ds.transform_first(transform_train),
                          batch_size, shuffle=True, last_batch='keep')
test_data = loader(test_ds.transform_first(transform_test),
                   batch_size, shuffle=False, last_batch='keep')

# 交叉熵损失函数。
softmax_cross_entropy = gluon.loss.SoftmaxCrossEntropyLoss()
```

9.8.4 设计模型

我们这里使用了ResNet-18模型。我们使用`hybridizing`来提升执行效率。

请注意: 模型可以重新设计, 参数也可以重新调整。

```
In [6]: from mxnet.gluon import nn
from mxnet import nd

class Residual(nn.HybridBlock):
    def __init__(self, channels, same_shape=True, **kwargs):
        super(Residual, self).__init__(**kwargs)
        self.same_shape = same_shape
        with self.name_scope():
```

```

strides = 1 if same_shape else 2
self.conv1 = nn.Conv2D(channels, kernel_size=3, padding=1,
                     strides=strides)
self.bn1 = nn.BatchNorm()
self.conv2 = nn.Conv2D(channels, kernel_size=3, padding=1)
self.bn2 = nn.BatchNorm()
if not same_shape:
    self.conv3 = nn.Conv2D(channels, kernel_size=1,
                         strides=strides)

def hybrid_forward(self, F, x):
    out = F.relu(self.bn1(self.conv1(x)))
    out = self.bn2(self.conv2(out))
    if not self.same_shape:
        x = self.conv3(x)
    return F.relu(out + x)

class ResNet(nn.HybridBlock):
    def __init__(self, num_classes, verbose=False, **kwargs):
        super(ResNet, self).__init__(**kwargs)
        self.verbose = verbose
        with self.name_scope():
            net = self.net = nn.HybridSequential()
            # 模块 1
            net.add(nn.Conv2D(channels=32, kernel_size=3, strides=1,
                             padding=1))
            net.add(nn.BatchNorm())
            net.add(nn.Activation(activation='relu'))
            # 模块 2
            for _ in range(3):
                net.add(Residual(channels=32))
            # 模块 3
            net.add(Residual(channels=64, same_shape=False))
            for _ in range(2):
                net.add(Residual(channels=64))
            # 模块 4
            net.add(Residual(channels=128, same_shape=False))
            for _ in range(2):
                net.add(Residual(channels=128))
            # 模块 5
            net.add(nn.AvgPool2D(pool_size=8))
            net.add(nn.Flatten())
            net.add(nn.Dense(num_classes))

```

```

def hybrid_forward(self, F, x):
    out = x
    for i, b in enumerate(self.net):
        out = b(out)
        if self.verbose:
            print('Block %d output: %s'%(i+1, out.shape))
    return out

def get_net(ctx):
    num_outputs = 10
    net = ResNet(num_outputs)
    net.initialize(ctx=ctx, init=init.Xavier())
    return net

```

9.8.5 训练模型并调参

在过拟合中我们讲过，过度依赖训练数据集的误差来推断测试数据集的误差容易导致过拟合。由于图像分类训练时间可能较长，为了方便，我们这里不再使用 K 折交叉验证，而是依赖验证集的结果来调参。

我们定义模型训练函数。这里我们记录每个 epoch 的训练时间。这有助于我们比较不同模型设计的时间成本。

```

In [7]: import datetime
        import sys
        sys.path.append('..')
        import utils

        def train(net, train_data, valid_data, num_epochs, lr, wd, ctx, lr_period,
        ↵ lr_decay):
            trainer = gluon.Trainer(
                net.collect_params(), 'sgd', {'learning_rate': lr, 'momentum': 0.9,
        ↵ 'wd': wd})

            prev_time = datetime.datetime.now()
            for epoch in range(num_epochs):
                train_loss = 0.0
                train_acc = 0.0
                if epoch > 0 and epoch % lr_period == 0:
                    trainer.set_learning_rate(trainer.learning_rate * lr_decay)
                for data, label in train_data:
                    label = label.astype('float32').as_in_context(ctx)
                    with autograd.record():

```

```

        output = net(data.as_in_context(ctx))
        loss = softmax_cross_entropy(output, label)
        loss.backward()
        trainer.step(batch_size)
        train_loss += nd.mean(loss).asscalar()
        train_acc += utils.accuracy(output, label)
        cur_time = datetime.datetime.now()
        h, remainder = divmod((cur_time - prev_time).seconds, 3600)
        m, s = divmod(remainder, 60)
        time_str = "Time %02d:%02d:%02d" % (h, m, s)
        if valid_data is not None:
            valid_acc = utils.evaluate_accuracy(valid_data, net, ctx)
            epoch_str = ("Epoch %d. Loss: %f, Train acc %f, Valid acc %f, "
                         % (epoch, train_loss / len(train_data),
                            train_acc / len(train_data), valid_acc))
        else:
            epoch_str = ("Epoch %d. Loss: %f, Train acc %f, "
                         % (epoch, train_loss / len(train_data),
                            train_acc / len(train_data)))
        prev_time = cur_time
        print(epoch_str + time_str + ', lr ' + str(trainer.learning_rate))
    
```

以下定义训练参数并训练模型。这些参数均可调。为了使网页编译快一点，我们这里将 epoch 数量有意设为 1。事实上，epoch 一般可以调大些，例如 100。

我们将依据验证集的结果不断优化模型设计和调整参数。依据下面的参数设置，优化算法的学习率将在每 80 个 epoch 自乘 0.1。

```

In [8]: ctx = utils.try_gpu()
num_epochs = 1
learning_rate = 0.1
weight_decay = 5e-4
lr_period = 80
lr_decay = 0.1

net = get_net(ctx)
net.hybridize()
train(net, train_data, valid_data, num_epochs, learning_rate,
      weight_decay, ctx, lr_period, lr_decay)

Epoch 0. Loss: 4.232512, Train acc 0.100000, Valid acc 0.100000, Time 00:00:01, lr 0.1
    
```

9.8.6 对测试集分类

当得到一组满意的模型设计和参数后，我们使用全部训练数据集（含验证集）重新训练模型，并对测试集分类。

```
In [9]: import numpy as np
import pandas as pd

net = get_net(ctx)
net.hybridize()
train(net, train_valid_data, None, num_epochs, learning_rate,
      weight_decay, ctx, lr_period, lr_decay)

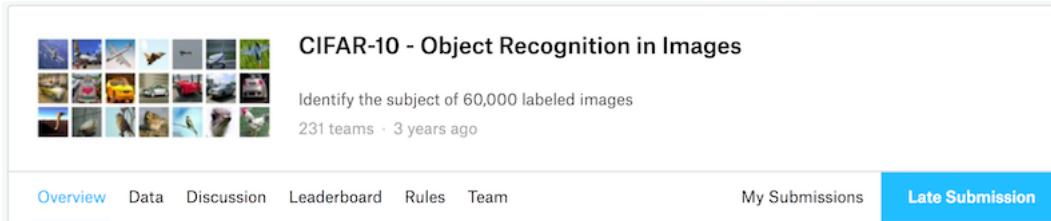
preds = []
for data, label in test_data:
    output = net(data.as_in_context(ctx))
    preds.extend(output.argmax(axis=1).astype(int).asnumpy())

sorted_ids = list(range(1, len(test_ds) + 1))
sorted_ids.sort(key = lambda x:str(x))

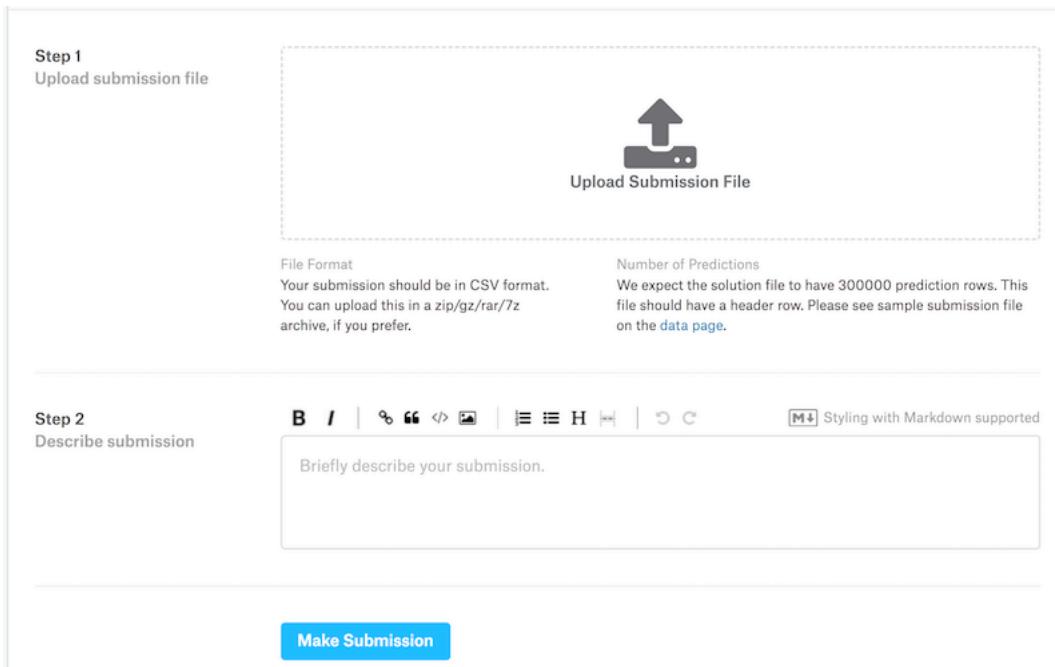
df = pd.DataFrame({'id': sorted_ids, 'label': preds})
df['label'] = df['label'].apply(lambda x: train_valid_ds.synsets[x])
df.to_csv('submission.csv', index=False)

Epoch 0. Loss: 3.509385, Train acc 0.080000, Time 00:00:01, lr 0.1
```

上述代码执行完会生成一个 `submission.csv` 的文件用于在 Kaggle 上提交。这是 Kaggle 要求的提交格式。这时我们可以在 Kaggle 上把对测试集分类的结果提交并查看分类准确率。你需要登录 Kaggle 网站，打开CIFAR-10 原始图像分类问题，并点击下方右侧 Late Submission 按钮。



请点击下方 `Upload Submission File` 选择需要提交的预测结果。然后点击下方的 `Make Submission` 按钮就可以查看结果啦！



9.8.7 作业（汇报作业和查看其他小伙伴作业）：

- 使用 Kaggle 完整 CIFAR-10 数据集，把 batch_size 和 num_epochs 分别改为 128 和 100，可以在 Kaggle 上拿到什么样的准确率和名次？
- 如果不使用增强数据的方法能拿到什么样的准确率？
- 你还有什么其他办法可以继续改进模型和参数？小伙伴们都期待你的分享。

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

9.9 实战 Kaggle 比赛——使用 Gluon 识别 120 种狗 (ImageNet Dogs)

我们在本章中选择了 Kaggle 中的 120 种狗类识别问题。这是著名的 ImageNet 的子集数据集。与之前的 [CIFAR-10 原始图像分类问题](#) 不同，本问题中的图片文件大小更接近真实照片大小，且大小不一。本问题的输出也变的更加通用：我们将输出每张图片对应 120 种狗的分别概率。

9.9.1 Kaggle 中的 CIFAR-10 原始图像分类问题

Kaggle 是一个著名的供机器学习爱好者交流的平台。为了便于提交结果，请大家注册 [Kaggle 账号](#)。然后请大家先点击 [120 种狗类识别问题](#) 了解有关本次比赛的信息。

9.9.2 整理原始数据集

比赛数据分为训练数据集和测试数据集。训练集包含 10,222 张图片。测试集包含 10,357 张图片。

两个数据集都是 jpg 彩色图片，大小接近真实照片大小，且大小不一。训练集一共有 120 类狗的图片。

下载数据集

登录 Kaggle 后，数据可以从 120 种狗类识别问题中下载。

- 训练数据集 train.zip 下载地址

- 测试数据集 test.zip 下载地址
- 训练数据标签 label.csv.zip 下载地址

解压数据集

训练数据集 train.zip 和测试数据集 test.zip 都是压缩格式，下载后它们的路径可以如下：

-/data/kaggle_dog/train.zip
-/data/kaggle_dog/test.zip
-/data/kaggle_dog/labels.csv.zip

为了使网页编译快一点，我们在 git repo 里仅仅存放小数据样本 ('train_valid_test_tiny.zip')。执行以下代码会从 git repo 里解压生成小数据样本。

```
In [1]: # 如果训练下载的 Kaggle 的完整数据集，把 demo 改为 False。
demo = True
data_dir = '../data/kaggle_dog'

if demo:
    zipfiles= ['train_valid_test_tiny.zip']
else:
    zipfiles= ['train.zip', 'test.zip', 'labels.csv.zip']

import zipfile
for fin in zipfiles:
    with zipfile.ZipFile(data_dir + '/' + fin, 'r') as zin:
        zin.extractall(data_dir)
```

整理数据集

对于 Kaggle 的完整数据集，我们需要定义下面的 reorg_dog_data 函数来整理一下。整理后，同一类狗的图片将出现在同一个文件夹下，便于 Gluon 稍后读取。

函数中的参数如 data_dir、train_dir 和 test_dir 对应上述数据存放路径及原始训练和测试的图片集文件夹名称。参数 label_file 为训练数据标签的文件名称。参数 input_dir 是整理后数据集文件夹名称。参数 valid_ratio 是验证集中每类狗的数量占原始训练集中数量最少一类的狗的数量(66) 的比重。

```
In [2]: import math
import os
import shutil
from collections import Counter
```

```

def reorg_dog_data(data_dir, label_file, train_dir, test_dir, input_dir,
                   valid_ratio):
    # 读取训练数据标签。
    with open(os.path.join(data_dir, label_file), 'r') as f:
        # 跳过文件头行（栏名称）。
        lines = f.readlines()[1:]
        tokens = [l.rstrip().split(',') for l in lines]
        idx_label = dict(((idx, label) for idx, label in tokens))
    labels = set(idx_label.values())

    num_train = len(os.listdir(os.path.join(data_dir, train_dir)))
    # 训练集中数量最少一类的狗的数量。
    min_num_train_per_label = (
        Counter(idx_label.values()).most_common()[:-2:-1][0][1])
    # 验证集中每类狗的数量。
    num_valid_per_label = math.floor(min_num_train_per_label * valid_ratio)
    label_count = dict()

    def mkdir_if_not_exist(path):
        if not os.path.exists(os.path.join(*path)):
            os.makedirs(os.path.join(*path))

    # 整理训练和验证集。
    for train_file in os.listdir(os.path.join(data_dir, train_dir)):
        idx = train_file.split('.')[0]
        label = idx_label[idx]
        mkdir_if_not_exist([data_dir, input_dir, 'train_valid', label])
        shutil.copy(os.path.join(data_dir, train_dir, train_file),
                    os.path.join(data_dir, input_dir, 'train_valid', label))
        if label not in label_count or label_count[label] <
        → num_valid_per_label:
            mkdir_if_not_exist([data_dir, input_dir, 'valid', label])
            shutil.copy(os.path.join(data_dir, train_dir, train_file),
                        os.path.join(data_dir, input_dir, 'valid', label))
            label_count[label] = label_count.get(label, 0) + 1
        else:
            mkdir_if_not_exist([data_dir, input_dir, 'train', label])
            shutil.copy(os.path.join(data_dir, train_dir, train_file),
                        os.path.join(data_dir, input_dir, 'train', label))

    # 整理测试集。
    mkdir_if_not_exist([data_dir, input_dir, 'test', 'unknown'])
    for test_file in os.listdir(os.path.join(data_dir, test_dir)):
        shutil.copy(os.path.join(data_dir, test_file), test_dir),

```

```
os.path.join(data_dir, input_dir, 'test', 'unknown'))
```

再次强调，为了使网页编译快一点，我们在这里仅仅使用小数据样本。相应地，我们仅将批量大小设为 2。实际训练和测试时应使用 Kaggle 的完整数据集并调用 `reorg_dog_data` 函数整理便于 Gluon 读取的格式。由于数据集较大，批量大小 `batch_size` 大小可设为一个较大的整数，例如 128。

```
In [3]: if demo:
    # 注意：此处使用小数据集为便于网页编译。
    input_dir = 'train_valid_test_tiny'
    # 注意：此处相应使用小批量。对 Kaggle 的完整数据集可设较大的整数，例如 128。
    batch_size = 2
else:
    label_file = 'labels.csv'
    train_dir = 'train'
    test_dir = 'test'
    input_dir = 'train_valid_test'
    batch_size = 128
    valid_ratio = 0.1
    reorg_dog_data(data_dir, label_file, train_dir, test_dir, input_dir,
                   valid_ratio)
```

9.9.3 使用 Gluon 读取整理后的数据集

为避免过拟合，我们在这里使用 `transforms` 来增广数据集。例如我们加入 `transforms.RandomFlipLeftRight()` 即可随机对每张图片做镜面反转。以下我们列举了所有可能用到的操作，这些操作可以根据需求来决定是否调用，它们的参数也都是可调的。

```
In [4]: from mxnet import autograd
from mxnet import gluon
from mxnet import init
from mxnet import nd
from mxnet.gluon.data import vision
from mxnet.gluon.data.vision import transforms
import numpy as np

transform_train = transforms.Compose([
    # transforms.CenterCrop(32)
    # transforms.RandomFlipTopBottom(),
    # transforms.RandomColorJitter(brightness=0.0, contrast=0.0,
    #                             saturation=0.0, hue=0.0),
    # transforms.RandomLighting(0.0),
    # transforms.Cast('float32'),
```

```

# 将图片按比例放缩至短边为 256 像素
transforms.Resize(256),
# 随机按照 scale 和 ratio 裁剪, 并放缩为 224x224 的正方形
transforms.RandomResizedCrop(224, scale=(0.08, 1.0), ratio=(3.0/4.0,
    4.0/3.0)),
    # 随机左右翻转图片
transforms.RandomFlipLeftRight(),
# 将图片像素值缩小到 (0,1) 内, 并将数据格式从"高 * 宽 * 通道" 改为"通道 * 高 * 宽"
transforms.ToTensor(),
# 对图片的每个通道做标准化
transforms.Normalize([0.485, 0.456, 0.406], [0.229, 0.224, 0.225])
])

# 去掉随机裁剪/翻转, 保留确定性的图像预处理结果
transform_test = transforms.Compose([
    transforms.Resize(256),
    # 将图片中央的 224x224 正方形区域裁剪出来
    transforms.CenterCrop(224),
    transforms.ToTensor(),
    transforms.Normalize([0.485, 0.456, 0.406], [0.229, 0.224, 0.225])
])

```

接下来, 我们可以使用 Gluon 中的 `ImageFolderDataset` 类来读取整理后的数据集。注意, 我们要在 `loader` 中调用刚刚定义好的图片增广函数。通过 `vision.ImageFolderDataset` 读入的数据是一个 `(image, label)` 组合, `transform_first()` 的作用便是对这个组合中的第一个成员 (即读入的图像) 做图片增广操作。

```

In [5]: input_str = data_dir + '/' + input_dir + '/'

# 读取原始图像文件。flag=1 说明输入图像有三个通道 (彩色)。
train_ds = vision.ImageFolderDataset(input_str + 'train', flag=1)
valid_ds = vision.ImageFolderDataset(input_str + 'valid', flag=1)
train_valid_ds = vision.ImageFolderDataset(input_str + 'train_valid', flag=1)
test_ds = vision.ImageFolderDataset(input_str + 'test', flag=1)

loader = gluon.data.DataLoader
train_data = loader(train_ds.transform_first(transform_train),
                    batch_size, shuffle=True, last_batch='keep')
valid_data = loader(valid_ds.transform_first(transform_test),
                    batch_size, shuffle=True, last_batch='keep')
train_valid_data = loader(train_valid_ds.transform_first(transform_train),
                        batch_size, shuffle=True, last_batch='keep')
test_data = loader(test_ds.transform_first(transform_test),
                   batch_size, shuffle=False, last_batch='keep')

```

```
# 交叉熵损失函数。  
softmax_cross_entropy = gluon.loss.SoftmaxCrossEntropyLoss()
```

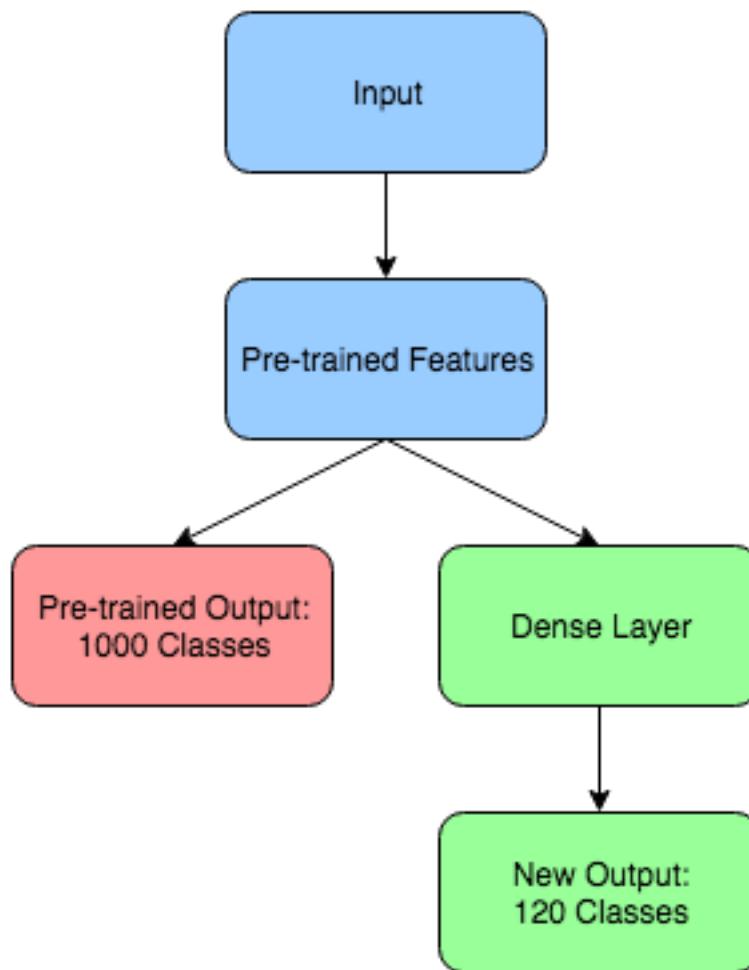
9.9.4 设计模型

这个比赛的数据属于 ImageNet 数据集的子集，因此我们可以借助迁移学习的思想，选用在 ImageNet 全集上预训练过的模型，并通过微调在新数据集上进行训练。Gluon 提供了不少预训练模型，综合考虑模型大小与准确率，我们选择使用 ResNet-34。

这里，我们使用与前述教程略微不同的迁移学习方法。在新的训练数据与预训练数据相似的情况下，我们认为原有特征是可重用的。基于这个原因，在一个预训练好的新模型上，我们可以不去改变原已训练好的权重，而是在原网络结构上新加一个小的输出网络。

在训练过程中，我们让训练图片通过正向传播经过原有特征层与新定义的全连接网络，然后只在这个小网络上通过反向传播更新权重。这样的做法既能够节省在整个模型进行后向传播的时间，也能节省在特征层上储存梯度所需要的内存空间。

注意，我们在之前定义的数据预处理函数里用了 ImageNet 数据集上的均值和标准差做标准化，这样才能保证预训练模型能够捕捉正确的数据特征。



首先我们定义一个网络，并拿到预训练好的 ResNet-34 模型权重。接下来我们新定义一个两层的全连接网络作为输出层，并初始化其权重，为接下来的训练做准备。

```

In [6]: from mxnet.gluon import nn
        from mxnet import nd
        from mxnet.gluon.model_zoo import vision as models

def get_net(ctx):
    # 设置 pretrained=True 就能拿到预训练模型的权重，第一次使用需要联网下载
    finetune_net = models.resnet34_v2(pretrained=True)

    # 定义新的输出网络
    finetune_net.output_new = nn.HybridSequential(prefix=' ')
    # 定义 256 个神经元的全连接层
    finetune_net.output_new.add(nn.Dense(256, activation='relu'))
    # 定义 120 个神经元的全连接层，输出分类预测
  
```

```
finetune_net.output_new.add(nn.Dense(120))
# 初始化这个输出网络
finetune_net.output_new.initialize(init.Xavier(), ctx=ctx)

# 把网络参数分配到即将用于计算的 CPU/GPU 上
finetune_net.collect_params().reset_ctx(ctx)
return finetune_net
```

9.9.5 训练模型并调参

在过拟合中我们讲过，过度依赖训练数据集的误差来推断测试数据集的误差容易导致过拟合。由于图像分类训练时间可能较长，为了方便，我们这里不再使用 K 折交叉验证，而是依赖验证集的结果来调参。

我们定义损失函数以便于计算验证集上的损失函数值。我们也定义了模型训练函数，其中的优化算法和参数都是可以调的。

注意，我们为了只更新新的输出层参数，做了两处修改：

1. 在 `gluon.Trainer` 里只对 `net.output_new.collect_params()` 定义了优化方法和参数。
2. 在训练时只在新输出层上记录自动求导的结果。

```
In [7]: import datetime
import sys
sys.path.append('..')
import utils

def get_loss(data, net, ctx):
    loss = 0.0
    for feas, label in data:
        label = label.as_in_context(ctx)
        # 计算特征层的结果
        output_features = net.features(feas.as_in_context(ctx))
        # 将特征层的结果作为输入，计算全连接网络的结果
        output = net.output_new(output_features)
        cross_entropy = softmax_cross_entropy(output, label)
        loss += nd.mean(cross_entropy).asscalar()
    return loss / len(data)

def train(net, train_data, valid_data, num_epochs, lr, wd, ctx, lr_period,
          lr_decay):
    # 只在新的全连接网络的参数上进行训练
    trainer = gluon.Trainer(net.output_new.collect_params(),
```

```

'sgd', {'learning_rate': lr, 'momentum': 0.9,
← 'wd': wd})
    prev_time = datetime.datetime.now()
    for epoch in range(num_epochs):
        train_loss = 0.0
        if epoch > 0 and epoch % lr_period == 0:
            trainer.set_learning_rate(trainer.learning_rate * lr_decay)
        for data, label in train_data:
            label = label.astype('float32').as_in_context(ctx)
            # 正向传播计算特征层的结果
            output_features = net.features(data.as_in_context(ctx))
            with autograd.record():
                # 将特征层的结果作为输入, 计算全连接网络的结果
                output = net.output_new(output_features)
                loss = softmax_cross_entropy(output, label)
            # 反向传播与权重更新只发生在全连接网络上
            loss.backward()
            trainer.step(batch_size)
            train_loss += nd.mean(loss).asscalar()
        cur_time = datetime.datetime.now()
        h, remainder = divmod((cur_time - prev_time).seconds, 3600)
        m, s = divmod(remainder, 60)
        time_str = "Time %02d:%02d:%02d" % (h, m, s)
        if valid_data is not None:
            valid_loss = get_loss(valid_data, net, ctx)
            epoch_str = ("Epoch %. Train loss: %f, Valid loss %f, "
                         % (epoch, train_loss / len(train_data), valid_loss))
        else:
            epoch_str = ("Epoch %. Train loss: %f, "
                         % (epoch, train_loss / len(train_data)))
        prev_time = cur_time
        print(epoch_str + time_str + ', lr ' + str(trainer.learning_rate))

```

以下定义训练参数并训练模型。这些参数均可调。为了使网页编译快一点，我们这里将 epoch 数量有意设为 1。事实上，epoch 一般可以调大些。我们将依据验证集的结果不断优化模型设计和调整参数。

另外，微调一个预训练模型往往不需要特别久的额外训练。依据下面的参数设置，优化算法的学习率设为 0.01，并将在每 10 个 epoch 自乘 0.1。

```
In [8]: ctx = utils.try_gpu()
num_epochs = 1
learning_rate = 0.01
weight_decay = 1e-4
lr_period = 10
lr_decay = 0.1
```

```
net = get_net(ctx)
net.hybridize()
train(net, train_data, valid_data, num_epochs, learning_rate,
      weight_decay, ctx, lr_period, lr_decay)

Epoch 0. Train loss: 5.491287, Valid loss 4.770427, Time 00:00:02, lr 0.01
```

9.9.6 对测试集分类

当得到一组满意的模型设计和参数后，我们使用全部训练数据集（含验证集）重新训练模型，并对测试集分类。注意，我们要用刚训练好的新输出层做预测。

In [9]: `import numpy as np`

```
net = get_net(ctx)
net.hybridize()
train(net, train_valid_data, None, num_epochs, learning_rate, weight_decay,
      ctx, lr_period, lr_decay)

outputs = []
for data, label in test_data:
    # 计算特征层的结果
    output_features = net.features(data.as_in_context(ctx))
    # 将特征层的结果作为输入，计算全连接网络的结果
    output = nd.softmax(net.output_new(output_features))
    outputs.extend(output.astype(np.float32))

ids = sorted(os.listdir(os.path.join(data_dir, input_dir, 'test/unknown')))
with open('submission.csv', 'w') as f:
    f.write('id,' + ','.join(train_valid_ds.synsets) + '\n')
    for i, output in zip(ids, outputs):
        f.write(i.split('.')[0] + ',' + ','.join(
            [str(num) for num in output]) + '\n')
```

Epoch 0. Train loss: 5.094832, Time 00:00:02, lr 0.01

上述代码执行完会生成一个 `submission.csv` 的文件用于在 Kaggle 上提交。这是 Kaggle 要求的提交格式。这时我们可以在 Kaggle 上把对测试集分类的结果提交并查看分类准确率。你需要登录 Kaggle 网站，打开120 种狗类识别问题，并点击下方右侧 `Submit Predictions` 按钮。

Playground Prediction Competition

Dog Breed Identification

Determine the breed of a dog in an image

Kaggle · 178 teams · 4 months to go

Overview Data Kernels Discussion Leaderboard Rules Team My Submissions Submit Predictions

请点击下方 Upload Submission File 选择需要提交的预测结果。然后点击下方的 Make Submission 按钮就可以查看结果啦！

Step 1
Upload submission file

File Format
Your submission should be in CSV format.
You can upload this in a zip/gz/rar/7z archive, if you prefer.

Number of Predictions
We expect the solution file to have 10357 prediction rows. This file should have a header row. Please see sample submission file on the [data page](#).

Step 2
Describe submission

B I | % <> | H H | C C | M Styling with Markdown supported

Briefly describe your submission.

Make Submission

温馨提醒，目前 Kaggle 仅限每个账号一天以内 5 次提交结果的机会。所以提交结果前务必三思。

9.9.7 作业（汇报作业和查看其他小伙伴作业）：

- 使用 Kaggle 完整数据集，把 batch_size 和 num_epochs 分别调大些，可以在 Kaggle 上拿到什么样的准确率和名次？
- 你还有什么其他办法可以继续改进模型和参数？小伙伴们都期待你的分享。

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

10.1 词向量—word2vec

自然语言是一套用来表达含义的复杂系统。在这套系统中，词是表义的基本单元。在机器学习中，如何使用向量表示词？

顾名思义，词向量是用来表示词的向量，通常也被认为是词的特征向量。近年来，词向量已逐渐成为自然语言处理的基础知识。

10.1.1 为何不采用 one-hot 向量

我们在循环神经网络中介绍过 one-hot 向量来表示词。假设词典中不同词的数量为 N ，每个词可以和从 0 到 $N - 1$ 的连续整数一一对应。假设一个词的相应整数表示为 i ，为了得到该词的 one-hot 向量表示，我们创建一个全 0 的长为 N 的向量，并将其第 i 位设成 1。

然而，使用 one-hot 词向量并不是一个好选择。一个主要的原因是，one-hot 词向量无法表达不同词之间的相似度。例如，任何一对词的 one-hot 向量的余弦相似度都为 0。

10.1.2 word2vec

2013 年，Google 团队发表了 word2vec 工具。word2vec 工具主要包含两个模型：跳字模型 (skip-gram) 和连续词袋模型 (continuous bag of words，简称 CBOW)，以及两种高效训练

的方法：负采样（negative sampling）和层序 softmax（hierarchical softmax）。值得一提的是，word2vec 词向量可以较好地表达不同词之间的相似和类比关系。

word2vec 自提出后被广泛应用在自然语言处理任务中。它的模型和训练方法也启发了很多后续的词向量模型。本节将重点介绍 word2vec 的模型和训练方法。

10.1.3 模型

跳字模型

在跳字模型中，我们用一个词来预测它在文本序列周围的词。例如，给定文本序列“the”，“man”，“hit”，“his”，和“son”，跳字模型所关心的是，给定“hit”，生成它邻近词“the”，“man”，“his”，和“son”的概率。在这个例子中，“hit”叫中心词，“the”，“man”，“his”，和“son”叫背景词。由于“hit”只生成与它距离不超过 2 的背景词，该时间窗口的大小为 2。

我们来描述一下跳字模型。

假设词典大小为 $|\mathcal{V}|$ ，我们将词典中的每个词与从 0 到 $|\mathcal{V}| - 1$ 的整数一一对应：词典索引集 $\mathcal{V} = \{0, 1, \dots, |\mathcal{V}| - 1\}$ 。一个词在该词典中所对应的整数称为词的索引。给定一个长度为 T 的文本序列中， t 时刻的词为 $w^{(t)}$ 。当时间窗口大小为 m 时，跳字模型需要最大化给定任一中心词生成背景词的概率：

$$\prod_{t=1}^T \prod_{-m \leq j \leq m, j \neq 0} \mathbb{P}(w^{(t+j)} | w^{(t)})$$

上式的最大似然估计与最小化以下损失函数等价

$$-\frac{1}{T} \sum_{t=1}^T \sum_{-m \leq j \leq m, j \neq 0} \log \mathbb{P}(w^{(t+j)} | w^{(t)})$$

我们可以用 \mathbf{v} 和 \mathbf{u} 分别代表中心词和背景词的向量。换言之，对于词典中一个索引为 i 的词，它在作为中心词和背景词时的向量表示分别是 \mathbf{v}_i 和 \mathbf{u}_i 。而词典中所有词的这两种向量正是跳字模型所要学习的模型参数。为了将模型参数植入损失函数，我们需要使用模型参数表达损失函数中的中心词生成背景词的概率。假设中心词生成各个背景词的概率是相互独立的。给定中心词 w_c 在词典中索引为 c ，背景词 w_o 在词典中索引为 o ，损失函数中的中心词生成背景词的概率可以使用 softmax 函数定义为

$$\mathbb{P}(w_o | w_c) = \frac{\exp(\mathbf{u}_o^\top \mathbf{v}_c)}{\sum_{i \in \mathcal{V}} \exp(\mathbf{u}_i^\top \mathbf{v}_c)}$$

当序列长度 T 较大时，我们通常随机采样一个较小的子序列来计算损失函数并使用随机梯度下降优化该损失函数。通过微分，我们可以计算出上式生成概率的对数关于中心词向量 \mathbf{v}_c 的梯度为：

$$\frac{\partial \log \mathbb{P}(w_o | w_c)}{\partial \mathbf{v}_c} = \mathbf{u}_o - \sum_{j \in \mathcal{V}} \frac{\exp(\mathbf{u}_j^\top \mathbf{v}_c)}{\sum_{i \in \mathcal{V}} \exp(\mathbf{u}_i^\top \mathbf{v}_c)} \mathbf{u}_j$$

而上式与下式等价：

$$\frac{\partial \log \mathbb{P}(w_o | w_c)}{\partial \mathbf{v}_c} = \mathbf{u}_o - \sum_{j \in \mathcal{V}} \mathbb{P}(w_j | w_c) \mathbf{u}_j$$

通过上面计算得到梯度后，我们可以使用随机梯度下降来不断迭代模型参数 \mathbf{v}_c 。其他模型参数 \mathbf{u}_o 的迭代方式同理可得。最终，对于词典中的任一索引为 i 的词，我们均得到该词作为中心词和背景词的两组词向量 \mathbf{v}_i 和 \mathbf{u}_i 。

连续词袋模型

连续词袋模型与跳字模型类似。与跳字模型最大的不同是，连续词袋模型中用一个中心词在文本序列周围的词来预测该中心词。例如，给定文本序列“the”，“man”，“hit”，“his”，和“son”，连续词袋模型所关心的是，邻近词“the”，“man”，“his”，和“son”一起生成中心词“hit”的概率。

假设词典大小为 $|\mathcal{V}|$ ，我们将词典中的每个词与从 0 到 $|\mathcal{V}| - 1$ 的整数一一对应：词典索引集 $\mathcal{V} = \{0, 1, \dots, |\mathcal{V}| - 1\}$ 。一个词在该词典中所对应的整数称为词的索引。给定一个长度为 T 的文本序列中， t 时刻的词为 $w^{(t)}$ 。当时间窗口大小为 m 时，连续词袋模型需要最大化由背景词生成任一中心词的概率：

$$\prod_{t=1}^T \mathbb{P}(w^{(t)} | w^{(t-m)}, \dots, w^{(t-1)}, w^{(t+1)}, \dots, w^{(t+m)})$$

上式的最大似然估计与最小化以下损失函数等价

$$-\sum_{t=1}^T \log \mathbb{P}(w^{(t)} | w^{(t-m)}, \dots, w^{(t-1)}, w^{(t+1)}, \dots, w^{(t+m)})$$

我们可以用 \mathbf{v} 和 \mathbf{u} 分别代表背景词和中心词的向量（注意符号和跳字模型中的不同）。换言之，对于词典中一个索引为 i 的词，它在作为背景词和中心词时的向量表示分别是 \mathbf{v}_i 和 \mathbf{u}_i 。而词典中所有词的这两种向量正是连续词袋模型所要学习的模型参数。为了将模型参数植入损失函数，我们需要使用模型参数表达损失函数中的中心词生成背景词的概率。给定中心词 w_c 在词典中索引为 c ，背景词 $w_{o_1}, \dots, w_{o_{2m}}$ 在词典中索引为 o_1, \dots, o_{2m} ，损失函数中的背景词生成中心词的概率可以使用 softmax 函数定义为

$$\mathbb{P}(w_c | w_{o_1}, \dots, w_{o_{2m}}) = \frac{\exp[\mathbf{u}_c^\top (\mathbf{v}_{o_1} + \dots + \mathbf{v}_{o_{2m}})/(2m)]}{\sum_{i \in \mathcal{V}} \exp[\mathbf{u}_i^\top (\mathbf{v}_{o_1} + \dots + \mathbf{v}_{o_{2m}})/(2m)]}$$

当序列长度 T 较大时，我们通常随机采样一个较小的子序列来计算损失函数并使用随机梯度下降优化该损失函数。通过微分，我们可以计算出上式生成概率的对数关于任一背景词向量 \mathbf{v}_{o_i} ($i = 1, \dots, 2m$) 的梯度为：

$$\frac{\partial \log \mathbb{P}(w_c | w_{o_1}, \dots, w_{o_{2m}})}{\partial \mathbf{v}_{o_i}} = \frac{1}{2m} (\mathbf{u}_c - \sum_{j \in \mathcal{V}} \frac{\exp(\mathbf{u}_j^\top \mathbf{v}_c)}{\sum_{i \in \mathcal{V}} \exp(\mathbf{u}_i^\top \mathbf{v}_c)} \mathbf{u}_j)$$

而上式与下式等价:

$$\frac{\partial \log \mathbb{P}(w_c | w_{o_1}, \dots, w_{o_{2m}})}{\partial \mathbf{v}_{o_i}} = \frac{1}{2m} (\mathbf{u}_c - \sum_{j \in \mathcal{V}} \mathbb{P}(w_j | w_c) \mathbf{u}_j)$$

通过上面计算得到梯度后, 我们可以使用随机梯度下降来不断迭代各个模型参数 \mathbf{v}_{o_i} ($i = 1, \dots, 2m$)。其他模型参数 \mathbf{u}_c 的迭代方式同理可得。最终, 对于词典中的任一索引为 i 的词, 我们均得到该词作为背景词和中心词的两组词向量 \mathbf{v}_i 和 \mathbf{u}_i 。

10.1.4 近似训练法

我们可以看到, 无论是跳字模型还是连续词袋模型, 每一步梯度计算的开销与词典 \mathcal{V} 的大小相关。显然, 当词典较大时, 例如几十万到上百万, 这种训练方法的计算开销会较大。所以, 使用上述训练方法在实践中是有难度的。

我们将使用近似的方法来计算这些梯度, 从而减小计算开销。常用的近似训练法包括负采样和层序 softmax。

负采样

我们以跳字模型为例讨论负采样。

词典 \mathcal{V} 大小之所以会在目标函数中出现, 是因为中心词 w_c 生成背景词 w_o 的概率 $\mathbb{P}(w_o | w_c)$ 使用了 softmax, 而 softmax 正是考虑了背景词可能是词典中的任一词, 并体现在 softmax 的分母上。

我们不妨换个角度, 假设中心词 w_c 生成背景词 w_o 由以下相互独立事件联合组成来近似

- 中心词 w_c 和背景词 w_o 同时出现在该训练数据窗口
- 中心词 w_c 和第 1 个噪声词 w_1 不同时出现在该训练数据窗口 (噪声词 w_1 按噪声词分布 $\mathbb{P}(w)$ 随机生成, 假设一定和 w_c 不同时出现在该训练数据窗口)
- ...
- 中心词 w_c 和第 K 个噪声词 w_K 不同时出现在该训练数据窗口 (噪声词 w_K 按噪声词分布 $\mathbb{P}(w)$ 随机生成, 假设一定和 w_c 不同时出现在该训练数据窗口)

我们可以使用 $\sigma(x) = 1/(1 + \exp(-x))$ 函数来表达中心词 w_c 和背景词 w_o 同时出现在该训练数据窗口的概率:

$$\mathbb{P}(D = 1 | w_o, w_c) = \sigma(\mathbf{u}_o^\top \mathbf{v}_c)$$

那么, 中心词 w_c 生成背景词 w_o 的对数概率可以近似为

$$\log \mathbb{P}(w_o | w_c) = \log [\mathbb{P}(D = 1 | w_o, w_c) \prod_{k=1, w_k \sim \mathbb{P}(w)}^K \mathbb{P}(D = 0 | w_k, w_c)]$$

假设噪声词 w_k 在词典中的索引为 i_k , 上式可改写为

$$\log \mathbb{P}(w_o | w_c) = \log \frac{1}{1 + \exp(-\mathbf{u}_o^\top \mathbf{v}_c)} + \sum_{k=1, w_k \sim \mathbb{P}(w)}^K \log [1 - \frac{1}{1 + \exp(-\mathbf{u}_{i_k}^\top \mathbf{v}_c)}]$$

因此, 有关中心词 w_c 生成背景词 w_o 的损失函数是

$$-\log \mathbb{P}(w_o | w_c) = -\log \frac{1}{1 + \exp(-\mathbf{u}_o^\top \mathbf{v}_c)} - \sum_{k=1, w_k \sim \mathbb{P}(w)}^K \log \frac{1}{1 + \exp(\mathbf{u}_{i_k}^\top \mathbf{v}_c)}$$

当我们把 K 取较小值时, 每次随机梯度下降的梯度计算开销将由 $\mathcal{O}(|\mathcal{V}|)$ 降为 $\mathcal{O}(K)$ 。

我们也可以对连续词袋模型进行负采样。有关背景词 $w^{(t-m)}, \dots, w^{(t-1)}, w^{(t+1)}, \dots, w^{(t+m)}$ 生成中心词 w_c 的损失函数

$$-\log \mathbb{P}(w^{(t)} | w^{(t-m)}, \dots, w^{(t-1)}, w^{(t+1)}, \dots, w^{(t+m)})$$

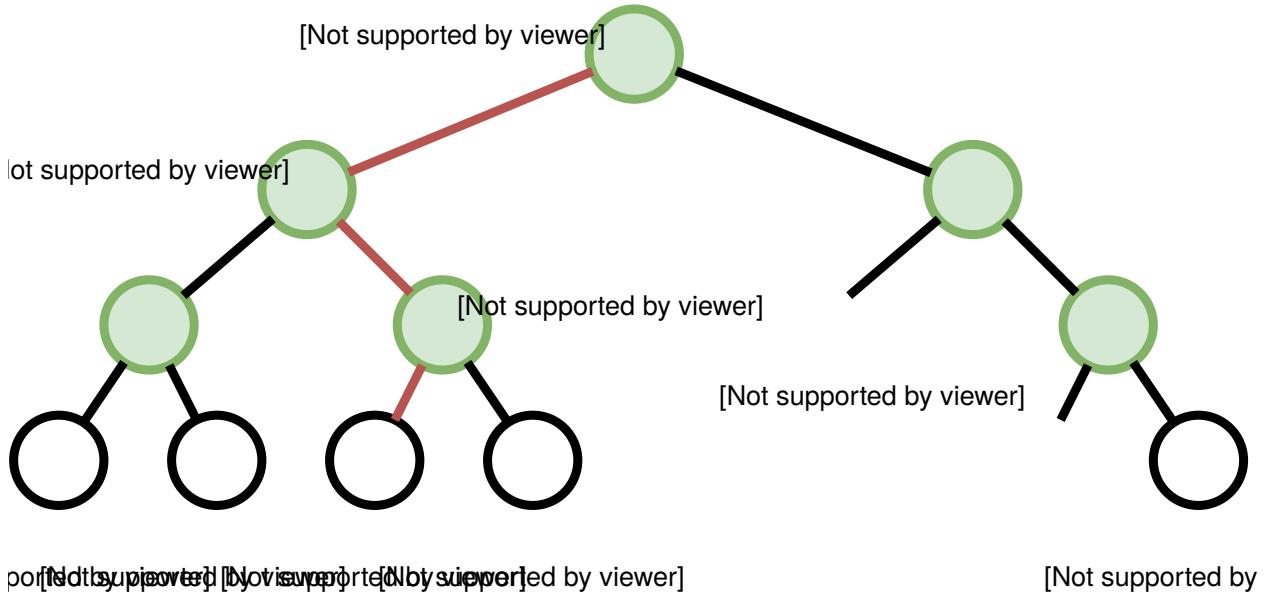
在负采样中可以近似为

$$-\log \frac{1}{1 + \exp[-\mathbf{u}_c^\top (\mathbf{v}_{o_1} + \dots + \mathbf{v}_{o_{2m}})/(2m)]} - \sum_{k=1, w_k \sim \mathbb{P}(w)}^K \log \frac{1}{1 + \exp[(\mathbf{u}_{i_k}^\top (\mathbf{v}_{o_1} + \dots + \mathbf{v}_{o_{2m}})/(2m))]}$$

同样地, 当我们把 K 取较小值时, 每次随机梯度下降的梯度计算开销将由 $\mathcal{O}(|\mathcal{V}|)$ 降为 $\mathcal{O}(K)$ 。

10.1.5 层序 softmax

层序 softmax 利用了二叉树。树的每个叶子节点代表着词典 \mathcal{V} 中的每个词。每个词 w_i 相应的词向量为 \mathbf{v}_i 。我们以下图为例, 来描述层序 softmax 的工作机制。



假设 $L(w)$ 为从二叉树的根到代表词 w 的叶子节点的路径上的节点数，并设 $n(w, i)$ 为该路径上第 i 个节点，该节点的向量为 $\mathbf{u}_{n(w,i)}$ 。以上图为例， $L(w_3) = 4$ 。那么，跳字模型和连续词袋模型所需要计算的任意词 w_i 生成词 w 的概率为：

$$\mathbb{P}(w | w_i) = \prod_{j=1}^{L(w)-1} \sigma([n(w, j+1) = \text{leftChild}(n(w, j))] \cdot \mathbf{u}_{n(w,j)}^\top \mathbf{v}_i)$$

其中 $\sigma(x) = 1/(1 + \exp(-x))$ ，如果 x 为真， $[x] = 1$ ；反之 $[x] = -1$ 。

由于 $\sigma(x) + \sigma(-x) = 1$ ， w_i 生成词典中任何词的概率之和为 1：

$$\sum_{w=1}^{\mathcal{V}} \mathbb{P}(w | w_i) = 1$$

让我们计算 w_i 生成 w_3 的概率，由于在二叉树中由根到 w_3 的路径上需要向左、向右、再向左地遍历，我们得到

$$\mathbb{P}(w_3 | w_i) = \sigma(\mathbf{u}_{n(w_3,1)}^\top \mathbf{v}_i) \cdot \sigma(-\mathbf{u}_{n(w_3,2)}^\top \mathbf{v}_i) \cdot \sigma(\mathbf{u}_{n(w_3,3)}^\top \mathbf{v}_i)$$

我们可以使用随机梯度下降在跳字模型和连续词袋模型中不断迭代计算字典中所有词向量 \mathbf{v} 和非叶子节点的向量 \mathbf{u} 。每次迭代的计算开销由 $\mathcal{O}(|\mathcal{V}|)$ 降为二叉树的高度 $\mathcal{O}(\log|\mathcal{V}|)$ 。

10.1.6 结论

word2vec 工具中的跳字模型和连续词袋模型可以使用两种负采样和层序 softmax 减小训练开销。

10.1.7 练习

- 噪声词 $\mathbb{P}(w)$ 在实际中被建议设为 w 的单字概率的 $3/4$ 次方。为什么？（想想 $0.99^{3/4}$ 和 $0.01^{3/4}$ 的大小）
- 一些“the”和“a”之类的英文高频词会对结果产生什么影响？该如何处理？（可参考word2vec 论文第 2.3 节）
- 如何训练包括例如“new york”在内的词组向量？（可参考word2vec 论文第 4 节）。

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

10.2 词向量—GloVe 和 fastText

本节介绍两种更新一点的词向量。它们分别是 2014 年由 Stanford 团队发表的GloVe和 2017 年由 Facebook 团队发表的fastText。

10.2.1 GloVe

GloVe 使用了词与词之间的共现 (co-occurrence) 信息。我们定义 \mathbf{X} 为共现词频矩阵，其中元素 x_{ij} 为词 j 出现在词 i 的环境 (context) 的次数。这里的“环境”有多种可能的定义。举个例子，在一段文本序列中，如果词 j 出现在词 i 左边或者右边不超过 10 个词的距离，我们可以认为词 j 出现在词 i 的环境一次。令 $x_i = \sum_k x_{ik}$ 为任意词出现在词 i 的环境的次数。那么，

$$P_{ij} = \mathbb{P}(j | i) = \frac{x_{ij}}{x_i}$$

为词 j 出现在词 i 的环境的概率。这一概率也称词 i 和词 j 的共现概率。

共现概率比值

GloVe 论文里展示了以下一组词对的共现概率与比值：

- $\mathbb{P}(k | \text{ice})$: 0.00019 ($k = \text{solid}$), 0.000066 ($k = \text{gas}$), 0.003 ($k = \text{water}$), 0.000017 ($k = \text{fashion}$)
- $\mathbb{P}(k | \text{steam})$: 0.000022 ($k = \text{solid}$), 0.00078 ($k = \text{gas}$), 0.0022 ($k = \text{water}$), 0.000018 ($k = \text{fashion}$)
- $\mathbb{P}(k | \text{ice})/\mathbb{P}(k | \text{steam})$: 8.9 ($k = \text{solid}$), 0.085 ($k = \text{gas}$), 1.36 ($k = \text{water}$), 0.96 ($k = \text{fashion}$)

我们通过上表可以观察到以下现象：

- 对于与 ice 相关而与 steam 不相关的词 k , 例如 $k = \text{solid}$, 我们期望共现概率比值 P_{ik}/P_{jk} 较大, 例如上面最后一栏的 8.9。
- 对于与 ice 不相关而与 steam 相关的词 k , 例如 $k = \text{gas}$, 我们期望共现概率比值 P_{ik}/P_{jk} 较小, 例如上面最后一栏的 0.085。
- 对于与 ice 和 steam 都相关的词 k , 例如 $k = \text{water}$, 我们期望共现概率比值 P_{ik}/P_{jk} 接近 1, 例如上面最后一栏的 1.36。
- 对于与 ice 和 steam 都不相关的词 k , 例如 $k = \text{fashion}$, 我们期望共现概率比值 P_{ik}/P_{jk} 接近 1, 例如上面最后一栏的 0.96。

由此可见, 共现概率比值能比较直观地表达词之间的关系。GloVe 试图用有关词向量的函数来表达共现概率比值。

用词向量表达共现概率比值

GloVe 的核心在于使用词向量表达共现概率比值。而任意一个这样的比值需要三个词 i 、 j 和 k 的词向量。对于共现概率 $P_{ij} = \mathbb{P}(j | i)$, 我们称词 i 和词 j 分别为中心词和背景词。我们使用 \mathbf{v} 和 $\tilde{\mathbf{v}}$ 分别表示中心词和背景词的词向量。

我们可以用有关词向量的函数 f 来表达共现概率比值:

$$f(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j, \tilde{\mathbf{v}}_k) = \frac{P_{ik}}{P_{jk}}$$

需要注意的是, 函数 f 可能的设计并不唯一。首先, 我们用向量之差来表达共现概率的比值, 并将上式改写成

$$f(\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j, \tilde{\mathbf{v}}_k) = \frac{P_{ik}}{P_{jk}}$$

由于共现概率比值是一个标量, 我们可以使用向量之间的内积把函数 f 的自变量进一步改写。我们可以得到

$$f((\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j)^\top \tilde{\mathbf{v}}_k) = \frac{P_{ik}}{P_{jk}}$$

由于任意一对词共现的对称性, 我们希望以下两个性质可以同时被满足:

- 任意词作为中心词和背景词的词向量应该相等: 对任意词 i , $\mathbf{v}_i = \tilde{\mathbf{v}}_i$
- 词与词之间共现次数矩阵 \mathbf{X} 应该对称: 对任意词 i 和 j , $x_{ij} = x_{ji}$

为了满足以上两个性质, 一方面, 我们令

$$f((\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j)^\top \tilde{\mathbf{v}}_k) = \frac{f(\mathbf{v}_i^\top \tilde{\mathbf{v}}_k)}{f(\mathbf{v}_j^\top \tilde{\mathbf{v}}_k)}$$

并得到 $f(x) = \exp(x)$ 。以上两式的右边联立,

$$\exp(\mathbf{v}_i^\top \tilde{\mathbf{v}}_k) = P_{ik} = \frac{x_{ik}}{x_i}$$

由上式可得

$$\mathbf{v}_i^\top \tilde{\mathbf{v}}_k = \log(x_{ik}) - \log(x_i)$$

另一方面, 我们可以把上式中 $\log(x_i)$ 替换成两个偏移项之和 $b_i + b_k$, 得到

$$\mathbf{v}_i^\top \tilde{\mathbf{v}}_k = \log(x_{ik}) - b_i - b_k$$

将索引 i 和 k 互换, 我们可验证对称性的两个性质可以同时被上式满足。

因此, 对于任意一对词 i 和 j , 用它们词向量表达共现概率比值最终可以被简化为表达它们共现词频的对数:

$$\mathbf{v}_i^\top \tilde{\mathbf{v}}_j + b_i + b_j = \log(x_{ij})$$

损失函数

上式中的共现词频是直接在训练数据上统计得到的, 为了学习词向量和相应的偏移项, 我们希望上式中的左边与右边越接近越好。给定词典大小 V 和权重函数 $f(x_{ij})$, 我们定义损失函数为

$$\sum_{i,j=1}^V f(x_{ij})(\mathbf{v}_i^\top \tilde{\mathbf{v}}_j + b_i + b_j - \log(x_{ij}))^2$$

对于权重函数 $f(x)$, 一个建议的选择是, 当 $x < c$ (例如 $c = 100$), 令 $f(x) = (x/c)^\alpha$ (例如 $\alpha = 0.75$), 反之令 $f(x) = 1$ 。需要注意的是, 损失函数的计算复杂度与共现词频矩阵 \mathbf{X} 中非零元素的数目呈线性关系。我们可以从 \mathbf{X} 中随机采样小批量非零元素, 使用[随机梯度下降](#)迭代词向量和偏移项。

需要注意的是, 对于任意一对 i, j , 损失函数中存在以下两项之和

$$f(x_{ij})(\mathbf{v}_i^\top \tilde{\mathbf{v}}_j + b_i + b_j - \log(x_{ij}))^2 + f(x_{ji})(\mathbf{v}_j^\top \tilde{\mathbf{v}}_i + b_j + b_i - \log(x_{ji}))^2$$

由于 $x_{ij} = x_{ji}$, 对调 \mathbf{v} 和 $\tilde{\mathbf{v}}$ 并不改变损失函数中这两项之和的值。也就是说, 在损失函数所有项上对调 \mathbf{v} 和 $\tilde{\mathbf{v}}$ 也不改变整个损失函数的值。因此, 任意词的中心词向量和背景词向量是等价的。只是由于初始化值的不同, 同一个词最终学习到的两组词向量可能不同。当所有词向量学习得到后, GloVe 使用一个词的中心词向量与背景词向量之和作为该词的最终词向量。

10.2.2 fastText

fastText 在使用负采样的跳字模型基础上, 将每个中心词视为子词 (subword) 的集合, 并学习子词的词向量。

以 `where` 这个词为例, 设子词为 3 个字符, 它的子词包括 “`<wh`”、“`whe`”、“`her`”、“`ere`”、“`re>`” 和特殊子词 (整词) “`<where>`”。其中的 “`<`” 和 “`>`” 是为了将作为前后缀的子词区分出来。而且, 这里的子词 “`her`” 与整词 “`<her>`” 也可被区分。给定一个词 w , 我们通常可以把字符长度在 3 到 6 之间的所有子词和特殊子词的并集 \mathcal{G}_w 取出。假设词典中任意子词 g 的子词向量为 \mathbf{z}_g , 我们可以把使用负采样的跳字模型的损失函数

$$-\log \mathbb{P}(w_o | w_c) = -\log \frac{1}{1 + \exp(-\mathbf{u}_o^\top \mathbf{v}_c)} - \sum_{k=1, w_k \sim \mathbb{P}(w)}^K \log \frac{1}{1 + \exp(\mathbf{u}_{i_k}^\top \mathbf{v}_c)}$$

直接替换成

$$-\log \mathbb{P}(w_o | w_c) = -\log \frac{1}{1 + \exp(-\mathbf{u}_o^\top \sum_{g \in \mathcal{G}_{w_c}} \mathbf{z}_g)} - \sum_{k=1, w_k \sim \mathbb{P}(w)}^K \log \frac{1}{1 + \exp(\mathbf{u}_{i_k}^\top \sum_{g \in \mathcal{G}_{w_c}} \mathbf{z}_g)}$$

我们可以看到, 原中心词向量被替换成中心词的子词向量的和。与整词学习 (word2vec 和 GloVe) 不同, 词典以外的新词的词向量可以使用 fastText 中相应的子词向量之和。

fastText 对于一些语言较重要, 例如阿拉伯语、德语和俄语。例如, 德语中有很多复合词, 例如乒乓球 (英文 `table tennis`) 在德语中叫 “`Tischtennis`”。fastText 可以通过子词表达两个词的相关性, 例如 “`Tischtennis`” 和 “`Tennis`”。

10.2.3 结论

- GloVe 用词向量表达共现词频的对数。
- fastText 用子词向量之和表达整词。

10.2.4 练习

- GloVe 中, 如果一个词出现在另一个词的环境中, 是否可以利用它们之间在文本序列的距离重新设计词频计算方式? (可参考 [Glove 论文 4.2 节](#))
- 如果丢弃 GloVe 中的偏移项, 是否也可以满足任意一对词共现的对称性?
- 在 fastText 中, 子词过多怎么办 (例如, 6 字英文组合数为 26^6)? (可参考 [fastText 论文 3.2 节](#))

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

10.3 使用预训练的词向量

本节介绍如何通过 `mxnet.contrib.text` 使用预训练的词向量。需要注意的是，`mxnet.contrib.text` 正在测试中并可能在未来有改动。如有改动，本节内容会作相应更新。

本节使用的预训练的 GloVe 和 fastText 词向量分别来自：

- GloVe 项目网站：<https://nlp.stanford.edu/projects/glove/>
- fastText 项目网站：<https://fasttext.cc/>

我们先载入需要的包。

```
In [1]: from mxnet import gluon
        from mxnet import nd
        from mxnet.contrib import text
```

10.3.1 由数据集建立词典和载入词向量——以 fastText 为例

看一下 fastText 前五个预训练的词向量。它们分别从不同语言的 Wikipedia 数据集训练得到。

```
In [2]: text.embedding.get_pretrained_file_names('fasttext')[:5]
Out[2]: ['crawl-300d-2M.vec',
          'wiki_aa.vec',
          'wiki_ab.vec',
          'wiki_ace.vec',
          'wiki_ady.vec']
```

访问词向量

为了演示方便，我们创建一个很小的文本数据集，并计算词频。

```
In [3]: text_data = " hello world \n hello nice world \n hi world \n"
        counter = text.utils.count_tokens_from_str(text_data)
```

我们先根据数据集建立词典，并为该词典中的词载入 fastText 词向量。这里使用 Simple English 的预训练词向量。

```
In [4]: my_vocab = text.vocab.Vocabulary(counter)
        my_embedding = text.embedding.create(
            'fasttext', pretrained_file_name='wiki.simple.vec', vocabulary=my_vocab)
```

```
/var/lib/jenkins/miniconda3/envs/gluon_zh_docs/lib/python3.6/site-packages/mxnet/cont_
↳   rib/text/embedding.py:278: UserWarning: At line 1 of the pre-trained text
↳   embedding file: token 111051 with 1-dimensional vector [300.0] is likely a
↳   header and is skipped.
'skipped.' % (line_num, token, elems))
```

词典除了包括数据集中四个不同的词语，还包括一个特殊的未知词符号。看一下词典大小。

```
In [5]: len(my_embedding)
```

```
Out[5]: 5
```

任意一个词典以外词的词向量默认为零向量。

```
In [6]: my_embedding.get_vecs_by_tokens('beautiful')[:10]
```

```
Out[6]:
```

```
[ 0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.]  
<NDArray 10 @cpu(0)>
```

看一下数据集中两个词“hello”和“world”词向量的形状。fastText中每个词均使用300维的词向量。

```
In [7]: my_embedding.get_vecs_by_tokens(['hello', 'world']).shape
```

```
Out[7]: (2, 300)
```

打印“hello”和“world”词向量前五个元素。

```
In [8]: my_embedding.get_vecs_by_tokens(['hello', 'world'])[:, :5]
```

```
Out[8]:
```

```
[[ 0.39567      0.21454      -0.035389     -0.24299      -0.095645  ]
 [ 0.10444     -0.10858      0.27212       0.13299     -0.33164999]]  
<NDArray 2x5 @cpu(0)>
```

看一下“hello”和“world”在词典中的索引。

```
In [9]: my_embedding.to_indices(['hello', 'world'])
```

```
Out[9]: [2, 1]
```

使用预训练词向量初始化 gluon.nn.Embedding

我们可以使用预训练的词向量初始化 `gluon.nn.Embedding`。

```
In [10]: layer = gluon.nn.Embedding(len(my_embedding), my_embedding.vec_len)
         layer.initialize()
         layer.weight.set_data(my_embedding.idx_to_vec)
```

使用词典中“hello”和“world”两个词在词典中的索引，我们可以通过 `gluon.nn.Embedding` 得到它们的词向量，并向神经网络的下一层传递。

```
In [11]: layer(nd.array([2, 1]))[:, :5]
```

Out[11]:

```
[[ 0.39567    0.21454   -0.035389   -0.24299   -0.095645   ]
 [ 0.10444   -0.10858    0.27212    0.13299   -0.33164999]]
<NDArray 2x5 @cpu(0)>
```

10.3.2 由预训练词向量建立词典——以 GloVe 为例

看一下 GloVe 前五个预训练的词向量。

```
In [12]: text.embedding.get_pretrained_file_names('glove')[:5]
```

Out[12]: ['glove.42B.300d.txt',
 'glove.6B.50d.txt',
 'glove.6B.100d.txt',
 'glove.6B.200d.txt',
 'glove.6B.300d.txt']

为了演示简便，我们使用小一点的词向量，例如 50 维。这里不再传入根据数据集建立的词典，而是直接使用预训练词向量中的词典。

```
In [13]: glove_6b50d = text.embedding.create('glove',
                                             pretrained_file_name='glove.6B.50d.txt')
```

看一下这个词典多大。注意其中包含一个特殊的未知词符号。

```
In [14]: print(len(glove_6b50d))
```

400001

我们可以访问词向量的属性。

```
In [15]: # 词到索引。
      print(glove_6b50d.token_to_idx['beautiful'])
      # 索引到词。
      print(glove_6b50d.idx_to_token[3367])
      # 词向量长度。
      print(glove_6b50d.vec_len)
```

3367

beautiful

50

10.3.3 预训练词向量的应用——以 GloVe 为例

为了应用预训练词向量, 我们需要定义余弦相似度。它可以比较两个向量之间的相似度。

```
In [16]: from mxnet import nd
def cos_sim(x, y):
    return nd.dot(x, y) / (nd.norm(x) * nd.norm(y))
```

余弦相似度的值域在-1 到 1 之间。余弦相似度值越大, 两个向量越接近。

```
In [17]: x = nd.array([1, 2])
y = nd.array([10, 20])
z = nd.array([-1, -2])

print(cos_sim(x, y))
print(cos_sim(x, z))
```

```
[ 1.]
<NDArray 1 @cpu(0)>

[-1.]
<NDArray 1 @cpu(0)>
```

求近似词

给定任意词, 我们可以从整个词典 (大小 40 万, 不含未知词符号) 中找出与它最接近的 k 个词 (k nearest neighbors)。词与词之间的相似度可以用两个词向量的余弦相似度表示。

```
In [18]: def norm_vecs_by_row(x):
    return x / nd.sqrt(nd.sum(x * x, axis=1)).reshape((-1, 1))

def get_knn(token_embedding, k, word):
    word_vec = token_embedding.get_vecs_by_tokens([word]).reshape((-1, 1))
    vocab_vecs = norm_vecs_by_row(token_embedding.idx_to_vec)
    dot_prod = nd.dot(vocab_vecs, word_vec)
    indices = nd.topk(dot_prod.reshape((len(token_embedding), )), k=k+2,
                      ret_typ='indices')
    indices = [int(i.asscalar()) for i in indices]
    # 除去未知词符号和输入词。
    return token_embedding.to_tokens(indices[2:])
```

查找词典中与 “baby” 最接近的 5 个词。

```
In [19]: get_knn(glove_6b50d, 5, 'baby')

Out[19]: ['babies', 'boy', 'girl', 'newborn', 'pregnant']
```

验证一下“baby”和“babies”两个词向量之间的余弦相似度。

```
In [20]: cos_sim(glove_6b50d.get_vecs_by_tokens('baby'),
                 glove_6b50d.get_vecs_by_tokens('babies'))
```

```
Out[20]:
[ 0.83871299]
<NDArray 1 @cpu(0)>
```

查找词典中与“computers”最接近的5个词。

```
In [21]: get_knn(glove_6b50d, 5, 'computers')
```

```
Out[21]: ['computer', 'phones', 'pcs', 'machines', 'devices']
```

查找词典中与“run”最接近的5个词。

```
In [22]: get_knn(glove_6b50d, 5, 'run')
```

```
Out[22]: ['running', 'runs', 'went', 'start', 'ran']
```

查找词典中与“beautiful”最接近的5个词。

```
In [23]: get_knn(glove_6b50d, 5, 'beautiful')
```

```
Out[23]: ['lovely', 'gorgeous', 'wonderful', 'charming', 'beauty']
```

求类比词

我们可以使用预训练词向量求词与词之间的类比关系。例如，man : woman :: son : daughter是一个类比例子：“man”之于“woman”相当于“son”之于“daughter”。求类比词问题可以定义为：对于类比关系中的四个词 a : b :: c : d，给定前三个词 a, b, c，求 d。解类比词的思路是，找到和 $c + (b - a)$ 的结果词向量最相似的词向量。

本例中，我们将从整个词典（大小40万，不含未知词符号）中找类比词。

```
In [24]: def get_top_k_by_analogy(token_embedding, k, word1, word2, word3):
    word_vecs = token_embedding.get_vecs_by_tokens([word1, word2, word3])
    word_diff = (word_vecs[1] - word_vecs[0] + word_vecs[2]).reshape((-1, 1))
    vocab_vecs = norm_vecs_by_row(token_embedding.idx_to_vec)
    dot_prod = nd.dot(vocab_vecs, word_diff)
    indices = nd.topk(dot_prod.reshape((len(token_embedding), )), k=k+1,
                      ret_typ='indices')
    indices = [int(i.asscalar()) for i in indices]

    # 不考虑未知词为可能的类比词。
    if token_embedding.to_tokens(indices[0]) ==
    ↵ token_embedding.unknown_token:
        return token_embedding.to_tokens(indices[1:])
```

```
    else:  
        return token_embedding.to_tokens(indices[:-1])
```

“男-女”类比：“man”之于“woman”相当于“son”之于什么？

```
In [25]: get_top_k_by_analogy(glove_6b50d, 1, 'man', 'woman', 'son')
```

```
Out[25]: ['daughter']
```

验证一下 $\text{vec}(\text{"son"}) + \text{vec}(\text{"woman"}) - \text{vec}(\text{"man"})$ 与 $\text{vec}(\text{"daughter"})$ 两个向量之间的余弦相似度。

```
In [26]: def cos_sim_word_analogy(token_embedding, word1, word2, word3, word4):  
    words = [word1, word2, word3, word4]  
    vecs = token_embedding.get_vecs_by_tokens(words)  
    return cos_sim(vecs[1] - vecs[0] + vecs[2], vecs[3])  
  
cos_sim_word_analogy(glove_6b50d, 'man', 'woman', 'son', 'daughter')
```

```
Out[26]:  
[ 0.96583432]  
<NDArray 1 @cpu(0)>
```

“首都-国家”类比：“beijing”之于“china”相当于“tokyo”之于什么？

```
In [27]: get_top_k_by_analogy(glove_6b50d, 1, 'beijing', 'china', 'tokyo')
```

```
Out[27]: ['japan']
```

“形容词-形容词最高级”类比：“bad”之于“worst”相当于“big”之于什么？

```
In [28]: get_top_k_by_analogy(glove_6b50d, 1, 'bad', 'worst', 'big')
```

```
Out[28]: ['biggest']
```

“动词一般时-动词过去时”类比：“do”之于“did”相当于“go”之于什么？

```
In [29]: get_top_k_by_analogy(glove_6b50d, 1, 'do', 'did', 'go')
```

```
Out[29]: ['went']
```

10.3.4 结论

- 使用 `mxnet.contrib.text` 可以轻松载入预训练的词向量。
- 我们可以应用预训练的词向量求相似词和类比词。

10.3.5 练习

- 将近似词和类比词应用中的 k 调大一些，观察结果。

- 测试一下 fastText 的中文词向量 (`pretrained_file_name='wiki.zh.vec'`)。
- 如果在使用循环神经网络的语言模型中将 Embedding 层初始化为预训练的词向量，效果如何？

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

10.4 编码器—解码器 (seq2seq) 和注意力机制

在基于词语的语言模型中，我们使用了循环神经网络。它的输入是一段不定长的序列，输出却是定长的，例如一个词语。然而，很多问题的输出也是不定长的序列。以机器翻译为例，输入可以是英语的一段话，输出可以是法语的一段话，输入和输出皆不定长，例如

英语：They are watching.

法语：Ils regardent.

当输入输出都是不定长序列时，我们可以使用编码器—解码器 (encoder-decoder) 或者 seq2seq。它们分别基于 2014 年的两个工作：

- Cho et al., [Learning Phrase Representations using RNN Encoder-Decoder for Statistical Machine Translation](#)
- Sutskever et al., [Sequence to Sequence Learning with Neural Networks](#)

以上两个工作本质上都用到了两个循环神经网络，分别叫做编码器和解码器。编码器对应输入序列，解码器对应输出序列。下面我们来介绍编码器—解码器的设计。

10.4.1 编码器—解码器

编码器和解码器是分别对应输入序列和输出序列的两个循环神经网络。我们通常会在输入序列和输出序列后面分别附上一个特殊字符 '`<eos>`' (end of sequence) 表示序列的终止。在测试模型时，一旦输出 '`<eos>`' 就终止当前的输出序列。

编码器

编码器的作用是把一个不定长的输入序列转化成一个定长的背景向量 \mathbf{c} 。该背景向量包含了输入序列的信息。常用的编码器是循环神经网络。

我们回顾一下循环神经网络知识。假设循环神经网络单元为 f ，在 t 时刻的输入为 $x_t, t = 1, \dots, T$ 。假设 \mathbf{x}_t 是单个输出 x_t 在嵌入层的结果，例如 x_t 对应的 one-hot 向量 $\mathbf{o} \in \mathbb{R}^x$ 与嵌入层参数矩阵

$\mathbf{E} \in \mathbb{R}^{x \times h}$ 的乘积 $\mathbf{o}^\top \mathbf{E}$ 。隐含层变量

$$\mathbf{h}_t = f(\mathbf{x}_t, \mathbf{h}_{t-1})$$

编码器的背景向量

$$\mathbf{c} = q(\mathbf{h}_1, \dots, \mathbf{h}_T)$$

一个简单的背景向量是该网络最终时刻的隐含层变量 \mathbf{h}_T 。我们将这里的循环神经网络叫做编码器。

双向循环神经网络

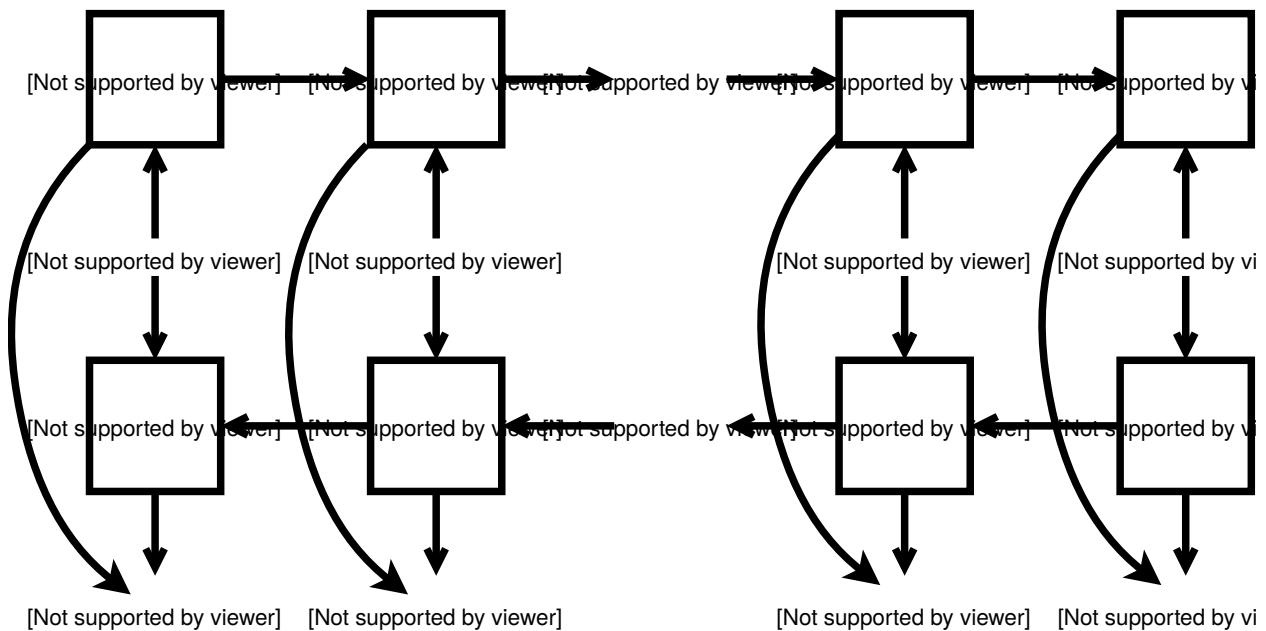
编码器的输入既可以是正向传递，也可以是反向传递。如果输入序列是 x_1, x_2, \dots, x_T ，在正向传递中，隐含层变量

$$\vec{\mathbf{h}}_t = f(\mathbf{x}_t, \vec{\mathbf{h}}_{t-1})$$

而反向传递中，隐含层变量的计算变为

$$\overleftarrow{\mathbf{h}}_t = f(\mathbf{x}_t, \overleftarrow{\mathbf{h}}_{t+1})$$

当我们希望编码器的输入既包含正向传递信息又包含反向传递信息时，我们可以使用双向循环神经网络。例如，给定输入序列 x_1, x_2, \dots, x_T ，按正向传递，它们在循环神经网络的隐含层变量分别是 $\vec{\mathbf{h}}_1, \vec{\mathbf{h}}_2, \dots, \vec{\mathbf{h}}_T$ ；按反向传递，它们在循环神经网络的隐含层变量分别是 $\overleftarrow{\mathbf{h}}_1, \overleftarrow{\mathbf{h}}_2, \dots, \overleftarrow{\mathbf{h}}_T$ 。在双向循环神经网络中，时刻 i 的隐含层变量可以把 $\vec{\mathbf{h}}_i$ 和 $\overleftarrow{\mathbf{h}}_i$ 连结起来。



```
In [1]: # 连结两个向量。
from mxnet import nd
h_forward = nd.array([1, 2])
h_backward = nd.array([3, 4])
h_bi = nd.concat(h_forward, h_backward, dim=0)
h_bi

Out[1]:
[ 1.  2.  3.  4.]
<NDArray 4 @cpu(0)>
```

解码器

编码器最终输出了一个背景向量 \mathbf{c} , 该背景向量编码了输入序列 x_1, x_2, \dots, x_T 的信息。

假设训练数据中的输出序列是 $y_1, y_2, \dots, y_{T'}$, 我们希望表示每个 t 时刻输出的既取决于之前的输出又取决于背景向量。之后, 我们就可以最大化输出序列的联合概率

$$\mathbb{P}(y_1, \dots, y_{T'}) = \prod_{t'=1}^{T'} \mathbb{P}(y_{t'} | y_1, \dots, y_{t'-1}, \mathbf{c})$$

并得到该输出序列的损失函数

$$-\log \mathbb{P}(y_1, \dots, y_{T'})$$

为此, 我们使用另一个循环神经网络作为解码器。解码器使用函数 p 来表示单个输出 $y_{t'}$ 的概率

$$\mathbb{P}(y_{t'} | y_1, \dots, y_{t'-1}, \mathbf{c}) = p(y_{t'-1}, \mathbf{s}_{t'}, \mathbf{c})$$

其中的 \mathbf{s}_t 为 t' 时刻的解码器的隐含层变量。该隐含层变量

$$\mathbf{s}_{t'} = g(y_{t'-1}, \mathbf{c}, \mathbf{s}_{t'-1})$$

其中函数 g 是循环神经网络单元。

需要注意的是, 编码器和解码器通常会使用多层循环神经网络。

10.4.2 注意力机制

在以上的解码器设计中, 各个时刻使用了相同的背景向量。如果解码器的不同时刻可以使用不同的背景向量呢?

以英语-法语翻译为例, 给定一对输入序列 “they are watching” 和输出序列 “Ils regardent”, 解码器在时刻 1 可以使用更多编码了 “they are” 信息的背景向量来生成 “Ils”, 而在时刻 2 可以使

用更多编码了“watching”信息的背景向量来生成“regardent”。这看上去就像是在解码器的每一时刻对输入序列中不同时刻分配不同的注意力。这也是注意力机制的由来。它最早由 Bahanau 等在 2015 年提出。

现在，对上面的解码器稍作修改。我们假设时刻 t' 的背景向量为 $\mathbf{c}_{t'}$ 。那么解码器在 t' 时刻的隐含层变量

$$\mathbf{s}_{t'} = g(\mathbf{y}_{t'-1}, \mathbf{c}_{t'}, \mathbf{s}_{t'-1})$$

令编码器在 t 时刻的隐含变量为 \mathbf{h}_t ，解码器在 t' 时刻的背景向量为

$$\mathbf{c}_{t'} = \sum_{t=1}^T \alpha_{t't} \mathbf{h}_t$$

也就是说，给定解码器的当前时刻 t' ，我们需要对编码器中不同时刻 t 的隐含层变量求加权平均。而权值也称注意力权重。它的计算公式是

$$\alpha_{t't} = \frac{\exp(e_{t't})}{\sum_{k=1}^T \exp(e_{t'k})}$$

而 $e_{t't} \in \mathbb{R}$ 的计算为：

$$e_{t't} = a(\mathbf{s}_{t'-1}, \mathbf{h}_t)$$

其中函数 a 有多种设计方法。在 Bahanau 的论文中，

$$e_{t't} = \mathbf{v}^\top \tanh(\mathbf{W}_s \mathbf{s}_{t'-1} + \mathbf{W}_h \mathbf{h}_t)$$

其中的 \mathbf{v} 、 \mathbf{W}_s 、 \mathbf{W}_h 和编码器与解码器两个循环神经网络中的各个权重和偏移项以及嵌入层参数等都是需要同时学习的模型参数。在 Bahanau 的论文中，编码器和解码器分别使用了门控循环单元（GRU）。

在解码器中，我们需要对 GRU 的设计稍作修改。假设 \mathbf{y}_t 是单个输出 y_t 在嵌入层的结果，例如 y_t 对应的 one-hot 向量 $\mathbf{o} \in \mathbb{R}^y$ 与嵌入层参数矩阵 $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{y \times s}$ 的乘积 $\mathbf{o}^\top \mathbf{B}$ 。假设时刻 t' 的背景向量为 $\mathbf{c}_{t'}$ 。那么解码器在 t' 时刻的单个隐含层变量

$$\mathbf{s}_{t'} = \mathbf{z}_{t'} \odot \mathbf{s}_{t'-1} + (1 - \mathbf{z}_{t'}) \odot \tilde{\mathbf{s}}_{t'}$$

其中的重置门、更新门和候选隐含状态分别为

$$\mathbf{r}_{t'} = \sigma(\mathbf{W}_{yr} \mathbf{y}_{t'-1} + \mathbf{W}_{sr} \mathbf{s}_{t'-1} + \mathbf{W}_{cr} \mathbf{c}_{t'} + \mathbf{b}_r)$$

$$\mathbf{z}_{t'} = \sigma(\mathbf{W}_{yz} \mathbf{y}_{t'-1} + \mathbf{W}_{sz} \mathbf{s}_{t'-1} + \mathbf{W}_{cz} \mathbf{c}_{t'} + \mathbf{b}_z)$$

$$\tilde{\mathbf{s}}_{t'} = \tanh(\mathbf{W}_{ys} \mathbf{y}_{t'-1} + \mathbf{W}_{ss} (\mathbf{s}_{t'-1} \odot \mathbf{r}_{t'}) + \mathbf{W}_{cs} \mathbf{c}_{t'} + \mathbf{b}_s)$$

10.4.3 结论

- 编码器-解码器 (seq2seq) 的输入和输出可以都是不定长序列。
- 在解码器上应用注意力机制可以在解码器的每个时刻使用不同的背景向量。每个背景向量相当于对输入序列的不同部分分配了不同的注意力。

10.4.4 练习

- 了解其他的注意力机制设计。例如论文Effective Approaches to Attention-based Neural Machine Translation。
- 在Bahdanau 的论文中，我们是否需要重新实现解码器上的 GRU？
- 除了机器翻译，你还能想到 seq2seq 的哪些应用？
- 除了自然语言处理，注意力机制还可以应用在哪些地方？

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

10.5 神经机器翻译

本节介绍编码器—解码器和注意力机制的应用。我们以神经机器翻译（neural machine translation）为例，介绍如何使用 Gluon 实现一个简单的编码器—解码器和注意力机制模型。

10.5.1 使用 Gluon 实现编码器—解码器和注意力机制

我们先载入需要的包。

```
In [1]: import mxnet as mx
        from mxnet import autograd, gluon, nd
        from mxnet.gluon import nn, rnn, Block
        from mxnet.contrib import text

        from io import open
        import collections
        import datetime
```

下面定义一些特殊字符。其中 PAD (padding) 符号使每个序列等长；BOS (beginning of sequence) 符号表示序列的开始；而 EOS (end of sequence) 符号表示序列的结束。

```
In [2]: PAD = '<pad>'  
BOS = '<bos>'  
EOS = '<eos>'
```

以下是一些可以调节的模型参数。我们在编码器和解码器中分别使用了一层和两层的循环神经网络。

```
In [3]: epochs = 50  
epoch_period = 10  
  
learning_rate = 0.005  
# 输入或输出序列的最大长度（含句末添加的 EOS 字符）。  
max_seq_len = 5  
  
encoder_num_layers = 1  
decoder_num_layers = 2  
  
encoder_drop_prob = 0.1  
decoder_drop_prob = 0.1  
  
encoder_hidden_dim = 256  
decoder_hidden_dim = 256  
alignment_dim = 25  
  
ctx = mx.cpu(0)
```

读取数据

我们定义函数读取训练数据集。为了减少运行时间，我们使用一个很小的法语——英语数据集。

这里使用了之前章节介绍的 `mxnet.contrib.text` 来创建法语和英语的词典。需要注意的是，我们会在句末附上 EOS 符号，并可能通过添加 PAD 符号使每个序列等长。

```
In [4]: def read_data(max_seq_len):  
    input_tokens = []  
    output_tokens = []  
    input_seqs = []  
    output_seqs = []  
  
    with open('../data/fr-en-small.txt') as f:  
        lines = f.readlines()  
        for line in lines:  
            input_seq, output_seq = line.rstrip().split('\t')  
            cur_input_tokens = input_seq.split(' ')  
            cur_output_tokens = output_seq.split(' ')
```

```

if len(cur_input_tokens) < max_seq_len and \
    len(cur_output_tokens) < max_seq_len:
    input_tokens.extend(cur_input_tokens)
    # 句末附上 EOS 符号。
    cur_input_tokens.append(EOS)
    # 添加 PAD 符号使每个序列等长 (长度为 max_seq_len)。
    while len(cur_input_tokens) < max_seq_len:
        cur_input_tokens.append(PAD)
    input_seqs.append(cur_input_tokens)
    output_tokens.extend(cur_output_tokens)
    cur_output_tokens.append(EOS)
    while len(cur_output_tokens) < max_seq_len:
        cur_output_tokens.append(PAD)
    output_seqs.append(cur_output_tokens)

fr_vocab = text.vocab.Vocabulary(collections.Counter(input_tokens),
                                 reserved_tokens=[PAD, BOS, EOS])
en_vocab = text.vocab.Vocabulary(collections.Counter(output_tokens),
                                 reserved_tokens=[PAD, BOS, EOS])
return fr_vocab, en_vocab, input_seqs, output_seqs

```

以下创建训练数据集。每一个样本包含法语的输入序列和英语的输出序列。

```

In [5]: input_vocab, output_vocab, input_seqs, output_seqs = read_data(max_seq_len)
X = nd.zeros((len(input_seqs), max_seq_len), ctx=ctx)
Y = nd.zeros((len(output_seqs), max_seq_len), ctx=ctx)
for i in range(len(input_seqs)):
    X[i] = nd.array(input_vocab.to_indices(input_seqs[i]), ctx=ctx)
    Y[i] = nd.array(output_vocab.to_indices(output_seqs[i]), ctx=ctx)

dataset = gluon.data.ArrayDataset(X, Y)

```

编码器、含注意力机制的解码器和解码器初始状态

以下定义了基于GRU的编码器。

```

In [6]: class Encoder(Block):
    """ 编码器 """
    def __init__(self, input_dim, hidden_dim, num_layers, drop_prob,
                 **kwargs):
        super(Encoder, self).__init__(**kwargs)
        with self.name_scope():
            self.embedding = nn.Embedding(input_dim, hidden_dim)
            self.dropout = nn.Dropout(drop_prob)

```

```

        self.rnn = rnn.GRU(hidden_dim, num_layers, dropout=drop_prob,
                           input_size=hidden_dim)

    def forward(self, inputs, state):
        # inputs 尺寸: (1, num_steps), emb 尺寸: (num_steps, 1, 256)
        emb = self.embedding(inputs).swapaxes(0, 1)
        emb = self.dropout(emb)
        output, state = self.rnn(emb, state)
        return output, state

    def begin_state(self, *args, **kwargs):
        return self.rnn.begin_state(*args, **kwargs)

```

以下定义了基于GRU的解码器。它包含上一节里介绍的注意力机制的实现。

```

In [7]: class Decoder(Block):
    """ 含注意力机制的解码器 """
    def __init__(self, hidden_dim, output_dim, num_layers, max_seq_len,
                 drop_prob, alignment_dim, encoder_hidden_dim, **kwargs):
        super(Decoder, self).__init__(**kwargs)
        self.max_seq_len = max_seq_len
        self.encoder_hidden_dim = encoder_hidden_dim
        self.hidden_size = hidden_dim
        self.num_layers = num_layers
        with self.name_scope():
            self.embedding = nn.Embedding(output_dim, hidden_dim)
            self.dropout = nn.Dropout(drop_prob)
            # 注意力机制。
            self.attention = nn.Sequential()
            with self.attention.name_scope():
                self.attention.add(nn.Dense(
                    alignment_dim, in_units=hidden_dim + encoder_hidden_dim,
                    activation="tanh", flatten=False))
                self.attention.add(nn.Dense(1, in_units=alignment_dim,
                                           flatten=False))

            self.rnn = rnn.GRU(hidden_dim, num_layers, dropout=drop_prob,
                               input_size=hidden_dim)
            self.out = nn.Dense(output_dim, in_units=hidden_dim)
            self.rnn_concat_input = nn.Dense(
                hidden_dim, in_units=hidden_dim + encoder_hidden_dim,
                flatten=False)

    def forward(self, cur_input, state, encoder_outputs):
        # 当 RNN 为多层时, 取最靠近输出层的单层隐含状态。
        single_layer_state = [state[0][-1].expand_dims(0)]

```

```

encoder_outputs = encoder_outputs.reshape((self.max_seq_len, 1,
                                         self.encoder_hidden_dim))
# single_layer_state 尺寸: [(1, 1, decoder_hidden_dim)]
# hidden_broadcast 尺寸: (max_seq_len, 1, decoder_hidden_dim)
hidden_broadcast = nd.broadcast_axis(single_layer_state[0], axis=0,
                                      size=self.max_seq_len)

# encoder_outputs_and_hiddens 尺寸:
# (max_seq_len, 1, encoder_hidden_dim + decoder_hidden_dim)
encoder_outputs_and_hiddens = nd.concat(encoder_outputs,
                                         hidden_broadcast, dim=2)

# energy 尺寸: (max_seq_len, 1, 1)
energy = self.attention(encoder_outputs_and_hiddens)

batch_attention = nd.softmax(energy, axis=0).reshape(
    (1, 1, self.max_seq_len))

# batch_encoder_outputs 尺寸: (1, max_seq_len, encoder_hidden_dim)
batch_encoder_outputs = encoder_outputs.swapaxes(0, 1)

# decoder_context 尺寸: (1, 1, encoder_hidden_dim)
decoder_context = nd.batch_dot(batch_attention, batch_encoder_outputs)

# input_and_context 尺寸: (1, 1, encoder_hidden_dim +
→ decoder_hidden_dim)
input_and_context = nd.concat(self.embedding(cur_input).reshape(
    (1, 1, self.hidden_size)), decoder_context, dim=2)
# concat_input 尺寸: (1, 1, decoder_hidden_dim)
concat_input = self.rnn_concat_input(input_and_context)
concat_input = self.dropout(concat_input)

# 当 RNN 为多层时, 用单层隐含状态初始化各个层的隐含状态。
state = [nd.broadcast_axis(single_layer_state[0], axis=0,
                           size=self.num_layers)]

output, state = self.rnn(concat_input, state)
output = self.dropout(output)
output = self.out(output)
# output 尺寸: (1, output_size), hidden 尺寸: [(1, 1,
→ decoder_hidden_dim)]
return output, state

def begin_state(self, *args, **kwargs):
    return self.rnn.begin_state(*args, **kwargs)

```

为了初始化解码器的隐含状态，我们通过一层全连接网络来转化编码器的输出隐含状态。

```
In [8]: class DecoderInitState(Block):
    """ 解码器隐含状态的初始化 """
    def __init__(self, encoder_hidden_dim, decoder_hidden_dim, **kwargs):
        super(DecoderInitState, self).__init__(**kwargs)
        with self.name_scope():
            self.dense = nn.Dense(decoder_hidden_dim,
                                  in_units=encoder_hidden_dim,
                                  activation="tanh", flatten=False)

    def forward(self, encoder_state):
        return [self.dense(encoder_state)]
```

训练和应用模型

我们定义 `translate` 函数来应用训练好的模型。这些模型通过该函数的前三个参数传递。解码器的最初时刻输入来自 BOS 字符。当任一时刻的输出为 EOS 字符时，输出序列即完成。

```
In [9]: def translate(encoder, decoder, decoder_init_state, fr_ens, ctx, max_seq_len):
    for fr_en in fr_ens:
        print('Input :', fr_en[0])
        input_tokens = fr_en[0].split(' ') + [EOS]
        # 添加 PAD 符号使每个序列等长（长度为 max_seq_len）。
        while len(input_tokens) < max_seq_len:
            input_tokens.append(PAD)
        inputs = nd.array(input_vocab.to_indices(input_tokens), ctx=ctx)
        encoder_state = encoder.begin_state(func=mx.nd.zeros, batch_size=1,
                                             ctx=ctx)
        encoder_outputs, encoder_state = encoder(inputs.expand_dims(0),
                                                encoder_state)
        encoder_outputs = encoder_outputs.flatten()
        # 解码器的第一个输入为 BOS 字符。
        decoder_input = nd.array([output_vocab.token_to_idx[BOS]], ctx=ctx)
        decoder_state = decoder_init_state(encoder_state[0])
        output_tokens = []

        for i in range(max_seq_len):
            decoder_output, decoder_state = decoder(
                decoder_input, decoder_state, encoder_outputs)
            pred_i = int(decoder_output.argmax(axis=1).asnumpy())
            # 当任一时刻的输出为 EOS 字符时，输出序列即完成。
            if pred_i == output_vocab.token_to_idx[EOS]:
                break
            else:
```

```

        output_tokens.append(output_vocab.idx_to_token[pred_i])
        decoder_input = nd.array([pred_i], ctx=ctx)

    print('Output:', ' '.join(output_tokens))
    print('Expect:', fr_en[1], '\n')

```

下面定义模型训练函数。为了初始化解码器的隐含状态，我们通过一层全连接网络来转化编码器最早时刻的输出隐含状态。这里的解码器使用当前时刻的预测结果作为下一时刻的输入。

```

In [10]: def train(encoder, decoder, decoder_init_state, max_seq_len, ctx,
→ eval_fr_ens):
    # 对于三个网络，分别初始化它们的模型参数并定义它们的优化器。
    encoder.collect_params().initialize(mx.init.Xavier(), ctx=ctx)
    decoder.collect_params().initialize(mx.init.Xavier(), ctx=ctx)
    decoder_init_state.collect_params().initialize(mx.init.Xavier(), ctx=ctx)
    encoder_optimizer = gluon.Trainer(encoder.collect_params(), 'adam',
                                      {'learning_rate': learning_rate})
    decoder_optimizer = gluon.Trainer(decoder.collect_params(), 'adam',
                                      {'learning_rate': learning_rate})
    decoder_init_state_optimizer = gluon.Trainer(
        decoder_init_state.collect_params(), 'adam',
        {'learning_rate': learning_rate})

    softmax_cross_entropy = gluon.loss.SoftmaxCrossEntropyLoss()

    prev_time = datetime.datetime.now()
    data_iter = gluon.data.DataLoader(dataset, 1, shuffle=True)

    total_loss = 0.0
    for epoch in range(1, epochs + 1):
        for x, y in data_iter:
            with autograd.record():
                loss = nd.array([0], ctx=ctx)
                encoder_state = encoder.begin_state(
                    func=mx.nd.zeros, batch_size=1, ctx=ctx)
                encoder_outputs, encoder_state = encoder(x, encoder_state)

                # encoder_outputs 尺寸: (max_seq_len, encoder_hidden_dim)
                encoder_outputs = encoder_outputs.flatten()
                # 解码器的第一个输入为 BOS 字符。
                decoder_input = nd.array([output_vocab.token_to_idx[BOS]],
                                       ctx=ctx)
                decoder_state = decoder_init_state(encoder_state[0])
                for i in range(max_seq_len):
                    decoder_output, decoder_state = decoder(
                        decoder_input, decoder_state, encoder_outputs)

```

```

# 解码器使用当前时刻的预测结果作为下一时刻的输入。
decoder_input = nd.array(
    [decoder_output.argmax(axis=1).asscalar()], ctx=ctx)
loss = loss + softmax_cross_entropy(decoder_output,
→  y[0][i])
    if y[0][i].asscalar() == output_vocab.token_to_idx[EOS]:
        break

loss.backward()
encoder_optimizer.step(1)
decoder_optimizer.step(1)
decoder_init_state_optimizer.step(1)
total_loss += loss.asscalar() / max_seq_len

if epoch % epoch_period == 0 or epoch == 1:
    cur_time = datetime.datetime.now()
    h, remainder = divmod((cur_time - prev_time).seconds, 3600)
    m, s = divmod(remainder, 60)
    time_str = 'Time %02d:%02d:%02d' % (h, m, s)
    if epoch == 1:
        print_loss_avg = total_loss / len(data_iter)
    else:
        print_loss_avg = total_loss / epoch_period / len(data_iter)
    loss_str = 'Epoch %d, Loss %f, ' % (epoch, print_loss_avg)
    print(loss_str + time_str)
    if epoch != 1:
        total_loss = 0.0
    prev_time = cur_time

translate(encoder, decoder, decoder_init_state, eval_fr_ens, ctx,
         max_seq_len)

```

以下分别实例化编码器、解码器和解码器初始隐含状态网络。

```
In [11]: encoder = Encoder(len(input_vocab), encoder_hidden_dim, encoder_num_layers,
                           encoder_drop_prob)
decoder = Decoder(decoder_hidden_dim, len(output_vocab),
                  decoder_num_layers, max_seq_len, decoder_drop_prob,
                  alignment_dim, encoder_hidden_dim)
decoder_init_state = DecoderInitState(encoder_hidden_dim, decoder_hidden_dim)
```

给定简单的法语和英语序列，我们可以观察模型的训练结果。打印的结果中，Input、Output 和 Expect 分别代表输入序列、输出序列和正确序列。

```
In [12]: eval_fr_ens =[['elle est japonaise .', 'she is japanese .'],
                     ['ils regardent .', 'they are watching .']]
train(encoder, decoder, decoder_init_state, max_seq_len, ctx, eval_fr_ens)
```

Epoch 1, Loss 2.878788, Time 00:00:00

Input : elle est japonaise .

Output: they are are .

Expect: she is japanese .

Input : ils regardent .

Output: they are are .

Expect: they are watching .

Epoch 10, Loss 1.177206, Time 00:00:06

Input : elle est japonaise .

Output: she is old .

Expect: she is japanese .

Input : ils regardent .

Output: she are watching .

Expect: they are watching .

Epoch 20, Loss 0.318475, Time 00:00:06

Input : elle est japonaise .

Output: she is japanese .

Expect: she is japanese .

Input : ils regardent .

Output: they are watching .

Expect: they are watching .

Epoch 30, Loss 0.331472, Time 00:00:06

Input : elle est japonaise .

Output: she is japanese .

Expect: she is japanese .

Input : ils regardent .

Output: they are watching .

Expect: they are watching .

Epoch 40, Loss 0.005420, Time 00:00:06

Input : elle est japonaise .

Output: she is japanese .

Expect: she is japanese .

Input : ils regardent .

Output: they are watching .

Expect: they are watching .

Epoch 50, Loss 0.001943, Time 00:00:06

Input : elle est japonaise .

Output: she is japanese .

Expect: she is japanese .

Input : ils regardent .

Output: they are watching .

Expect: they are watching .

10.5.2 束搜索

在上一节里, 我们提到编码器最终输出了一个背景向量 \mathbf{c} , 该背景向量编码了输入序列 x_1, x_2, \dots, x_T 的信息。假设训练数据中的输出序列是 $y_1, y_2, \dots, y_{T'}$, 输出序列的生成概率是

$$\mathbb{P}(y_1, \dots, y_{T'}) = \prod_{t'=1}^{T'} \mathbb{P}(y_{t'} \mid y_1, \dots, y_{t'-1}, \mathbf{c})$$

对于机器翻译的输出来说, 如果输出语言的词汇集合 \mathcal{Y} 的大小为 $|\mathcal{Y}|$, 输出序列的长度为 T' , 那么可能的输出序列种类是 $\mathcal{O}(|\mathcal{Y}|^{T'})$ 。为了找到生成概率最大的输出序列, 一种方法是计算所有 $\mathcal{O}(|\mathcal{Y}|^{T'})$ 种可能序列的生成概率, 并输出概率最大的序列。我们将该序列称为最优序列。但是这种方法的计算开销过高 (例如, $10000^{10} = 1 \times 10^{40}$)。

我们目前所介绍的解码器在每个时刻只输出生成概率最大的一个词汇。对于任一时刻 t' , 我们从 $|\mathcal{Y}|$ 个词中搜索出输出词

$$y_{t'} = \operatorname{argmax}_{y_{t'} \in \mathcal{Y}} \mathbb{P}(y_{t'} \mid y_1, \dots, y_{t'-1}, \mathbf{c})$$

因此, 搜索计算开销 ($\mathcal{O}(|\mathcal{Y}| \times T')$) 显著下降 (例如, $10000 \times 10 = 1 \times 10^5$), 但这并不能保证一定搜索到最优序列。

束搜索 (beam search) 介于上面二者之间。我们来看一个例子。

假设输出序列的词典中只包含五个词: $\mathcal{Y} = \{A, B, C, D, E\}$ 。束搜索的一个超参数叫做束宽 (beam width)。以束宽等于 2 为例, 假设输出序列长度为 3, 假如时刻 1 生成概率 $\mathbb{P}(y_{t'} \mid \mathbf{c})$ 最大的两个词为 A 和 C , 我们在时刻 2 对于所有的 $y_2 \in \mathcal{Y}$ 都分别计算 $\mathbb{P}(y_2 \mid A, \mathbf{c})$ 和 $\mathbb{P}(y_2 \mid C, \mathbf{c})$, 从计算出的 10 个概率中取最大的两个, 假设为 $\mathbb{P}(B \mid A, \mathbf{c})$ 和 $\mathbb{P}(E \mid C, \mathbf{c})$ 。那么, 我们在时刻 3 对于所有的 $y_3 \in \mathcal{Y}$ 都分别计算 $\mathbb{P}(y_3 \mid A, B, \mathbf{c})$ 和 $\mathbb{P}(y_3 \mid C, E, \mathbf{c})$, 从计算出的 10 个概率中取最大的两个, 假设为 $\mathbb{P}(D \mid A, B, \mathbf{c})$ 和 $\mathbb{P}(D \mid C, E, \mathbf{c})$ 。

接下来, 我们可以在输出序列: A 、 C 、 AB 、 CE 、 ABD 、 CED 中筛选出以特殊字符 EOS 结尾的

候选序列。再在候选序列中取以下分数最高的序列作为最终候选序列：

$$\frac{1}{L^\alpha} \log \mathbb{P}(y_1, \dots, y_L) = \frac{1}{L^\alpha} \sum_{t'=1}^L \log \mathbb{P}(y_{t'} \mid y_1, \dots, y_{t'-1}, \mathbf{c})$$

其中 L 为候选序列长度, α 一般可选为 0.75。分母上的 L^α 是为了惩罚较长序列的分数中的对数相加项。

10.5.3 评价翻译结果

2002 年, IBM 团队提出了一种评价翻译结果的指标, 叫做BLEU (Bilingual Evaluation Understudy)。

设 k 为我们希望评价的 n-gram 的最大长度, 例如 $k = 4$ 。n-gram 的精度 p_n 为模型输出中的 n-gram 匹配参考输出的数量与模型输出中的 n-gram 的数量的比值。例如, 参考输出 (真实值) 为 ABCDEF, 模型输出为 ABBCD。那么 $p_1 = 4/5, p_2 = 3/4, p_3 = 1/3, p_4 = 0$ 。设 len_{ref} 和 len_{MT} 分别为参考输出和模型输出的词数。那么, BLEU 的定义为

$$\exp(\min(0, 1 - \frac{len_{ref}}{len_{MT}})) \prod_{i=1}^k p_n^{1/2^n}$$

需要注意的是, 随着 n 的提高, n-gram 的精度的权值随着 $p_n^{1/2^n}$ 中的指数减小而提高。例如 $0.5^{1/2} \approx 0.7, 0.5^{1/4} \approx 0.84, 0.5^{1/8} \approx 0.92, 0.5^{1/16} \approx 0.96$ 。换句话说, 匹配 4-gram 比匹配 1-gram 应该得到更多奖励。另外, 模型输出越短往往越容易得到较高的 n-gram 的精度。因此, BLEU 公式里连乘项前面的系数为了惩罚较短的输出。例如当 $k = 2$ 时, 参考输出为 ABCDEF, 而模型输出为 AB, 此时的 $p_1 = p_2 = 1$, 而 $\exp(1 - 6/3) \approx 0.37$, 因此 BLEU=0.37。当模型输出也为 ABCDEF 时, BLEU=1。

10.5.4 结论

- 我们可以将编码器—解码器和注意力机制应用于神经机器翻译中。
- 束搜索有可能提高输出质量。
- BLEU 可以用来评价翻译结果。

10.5.5 练习

- 试着使用更大的翻译数据集来训练模型, 例如WMT和Tatoeba Project。调一调不同参数并观察实验结果。

- Teacher forcing：在模型训练中，试着让解码器使用当前时刻的正确结果（而不是预测结果）作为下一时刻的输入。结果会怎么样？

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

11.1 安装和使用

11.1.1 首次安装

每个教程是一个可以编辑和运行的 Jupyter notebook。运行这些教程需要 Python, Jupyter, 以及最新版 MXNet。

通过 Conda 安装

首先根据操作系统下载并安装Miniconda (Anaconda也可以)。接下来下载所有教程的包 (下载 tar.gz 格式或者[下载 zip 格式](#)均可)。解压后进入文件夹。

例如 Linux 或者 Mac OSX 10.11 以上可以使用如下命令

```
mkdir gluon-tutorials && cd gluon-tutorials
curl https://zh.gluon.ai/gluon_tutorials_zh.tar.gz -o tutorials.tar.gz
tar -xzvf tutorials.tar.gz && rm tutorials.tar.gz
```

Windows 用户可以用浏览器[下载zip 格式](#)并解压，在解压目录文件资源管理器的地址栏输入 cmd 进入命令行模式。

【可选项】配置下载源来使用国内镜像加速下载:

```
# 优先使用清华 conda 镜像
conda config --prepend channels https://mirrors.tuna.tsinghua.edu.cn/anaconda/pkgs/
→free/

# 也可选用科大 conda 镜像
conda config --prepend channels http://mirrors.ustc.edu.cn/anaconda/pkgs/free/
```

然后安装所需的依赖包并激活环境：

```
conda env create -f environment.yml
source activate gluon # 注意 Windows 下不需要 source
```

之后运行下面命令，然后浏览器打开<http://localhost:8888>（通常会自动打开）就可以查看和运行各个教程了。

```
jupyter notebook
```

【可选项】国内用户可使用国内 Gluon 镜像加速数据集和预训练模型的下载

- Linux/OSX 用户：

```
bash MXNET_GLUON_REPO=https://apache-mxnet.s3.cn-north-1.amazonaws.com.
cn/ jupyter notebook
```

- Windows 用户：

```
bash set MXNET_GLUON_REPO=https://apache-mxnet.s3.cn-north-1.amazonaws.
com.cn/ jupyter notebook
```

通过 docker 安装

首先你需要下载并安装docker。例如 Linux 下可以

```
wget -qO- https://get.docker.com/ | sh
sudo usermod -aG docker
# 然后 logout 一次
```

然后运行下面命令即可

```
docker run -p 8888:8888 muli/gluon-tutorials-zh
```

然后浏览器打开<http://localhost:8888>，这时通常需要填 docker 运行时产生的 token。## 更新教程

目前我们仍然一直在快速更新教程, 通常每周都会加入新的章节。同时 MXNet 的 Gluon 前端也在快速发展, 因此我们推荐大家也做及时的更新。更新包括下载最新的教程, 和更新对应的依赖 (通常是升级 MXNet)。

用 Conda 更新

先重新下载新的zip或者tar.gz教程包。解压后, 使用下面命令更新环境

```
conda env update -f environment.yml
```

用 Docker 更新

直接下载新的 docker image 就行。

```
docker pull mli/gluon-tutorials-zh
```

使用 Git

如果你熟悉 git, 那么直接 pull 并且之后 merge 冲突

```
git pull https://github.com/mli/gluon-tutorials-zh
```

如果不想 merge 冲突, 那么可以在 pull 前用 reset 还原到上一个版本 (记得保存有价值的本地修改)

```
git reset --hard
```

之后更新环境

```
conda env update -f environment.yml
```

使用了 MXNet GPU 版本

这时候 conda update 可能不会自动升级 GPU 版本, 因为默认是安装了 CPU。这时候可以运行了 source activate gluon 后手动更新 MXNet。例如如果安装了 mxnet-cu80 了, 那么

```
pip install -U --pre mxnet-cu80
```

11.1.2 高级选项

使用 GPU

默认安装的 MXNet 只支持 CPU。有一些教程需要 GPU 来运行。假设电脑有 N 卡而且 CUDA7.5 或者 8.0 已经安装了，那么先卸载 CPU 版本

```
pip uninstall mxnet
```

然后选择安装下面版本之一：

```
pip install --pre mxnet-cu75 # CUDA 7.5
pip install --pre mxnet-cu80 # CUDA 8.0
```

【可选项】国内用户可使用豆瓣 pypi 镜像加速下载：

```
pip install --pre mxnet-cu75 -i https://pypi.douban.com/simple # CUDA 7.5
pip install --pre mxnet-cu80 -i https://pypi.douban.com/simple # CUDA 8.0
```

使用 notedown 插件来读写 github 源文件

注意：这个只推荐给想上 github 提交改动的小伙伴。我们源代码是用 markdown 格式来存储，而不是 jupyter 默认的 ipynb 格式。我们可以用 notedown 插件来读写 markdown 格式。下面命令下载源代码并且安装环境：

```
git clone https://github.com/mli/gluon-tutorials-zh
cd gluon-tutorials-zh
conda env create -f environment.yml
source activate gluon # Windows 下不需要 source
```

然后安装 notedown，运行 Jupyter 并加载 notedown 插件：

```
pip install https://github.com/mli/notedown/tarball/master
jupyter notebook --NotebookApp.contents_manager_class='notedown.NotedownContentsManager'
↪'
```

【可选项】默认开启 notedown 插件

首先生成 jupyter 配置文件（如果已经生成过可以跳过）

```
jupyter notebook --generate-config
```

将下面这一行加入到生成的配置文件的末尾 (Linux/macOS 一般在 `~/.jupyter/jupyter_notebook_config.py`)

```
c.NotebookApp.contents_manager_class = 'notedown.NotedownContentsManager'
```

之后就只需要运行 `jupyter notebook` 即可。

在远端服务器上运行 Jupyter

Jupyter 的一个常用做法是在远端服务器上运行, 然后通过 `http://myserver:8888` 来访问。有时候防火墙阻挡了直接访问对应的端口, 但 ssh 是可以的。如果本地机器是 linux 或者 mac (windows 通过第三方软件例如 putty 应该也能支持), 那么可以使用端口映射

```
ssh myserver -L 8888:localhost:8888
```

然后我们可以使用<http://localhost:8888>打开远端的 Jupyter。

运行计时

我们可以通过 `ExecutionTime` 插件来对每个 cell 的运行计时。

```
pip install jupyter_contrib_nbextensions
jupyter contrib nbextension install --user
jupyter nbextension enable execute_time/ExecuteTime
```

11.1.3 老中医自检程序

用途

本教程提供了一系列自检程序供没有成功安装或者运行报错的难民进行自救, 如果全篇都没找到药方, 希望可以自己搜索问题, 欢迎前往 <https://discuss.gluon.ai> 提问并且帮他人解答。

通过 Conda 安装

确保 conda 已经安装完成, 并且可以在命令行识别到 “`conda -version`”

症状

```
-bash: conda: command not found /' conda '不是内部或外部命令，也不是可运行的程序
```

病情分析

conda 不在系统搜索目录下，无法找到 conda 可执行文件

药方

```
# linux 或者 mac 系统  
export PATH=/path/to/miniconda3/bin:$PATH  
# windows 用 set 或者 setx  
set PATH=C:\path\to\miniconda3\bin;%PATH%
```

完成后命令行测试 "conda --version"
如果显示类似于 "conda 4.3.21"，则症状痊愈

症状

```
Conda 安装正常，conda env -f environment.yml 失败
```

病情分析

如果在国内的网络环境下，最大的可能是连接太慢，用国内镜像加速不失为一良方

药方

- conda config -prepend channels <https://mirrors.tuna.tsinghua.edu.cn/anaconda/pkgs/free/>
- 如果是 miniconda 可以改用 Anaconda

病情分析

失败后重新尝试 conda env -f environment.yml 会报错 ##### 药方
conda info -e 查看失败信息, 建议删除失败的 env: conda env remove -name gluon -all
手动 pip 安装

症状: pip install mxnet 失败

病情分析

pip 本身不存在, pip -version 不能正确显示 pip 版本号和安装目录

药方

参考 <http://pip-cn.readthedocs.io/en/latest/installing.html> 安装 pip

病情分析

pip 版本太低

药方

```
pip install --upgrade pip
```

病情分析

无法找到匹配的 wheel, No matching distribution found for mxnet>=0.11.1b20170902

药方

确保系统被支持, 比如 Ubuntu 14.04/16.04, Mac10.11/10.12(10.10 即将支持), Windows 10(win7 未测试), 如果都符合, 可以试试命令

```
python -c "import pip; print(pip.pep425tags.get_supported())"
```

然后上论坛讨论：<https://discuss.gluon.ai>

症状：pip install mxnet 成功，但是 import mxnet 失败

病情分析

如果看到这样的错误

```
ImportError: No module named mxnet
```

python 无法找到 mxnet，有可能系统上有多个 python 版本，导致 pip 和 python 版本不一致

药方

找到 pip 的安装目录

```
pip --version
```

找到 python 安装目录

```
which python  
# or  
whereis python  
# or  
python -c "import os, sys; print(os.path.dirname(sys.executable))"
```

如果 pip 目录和 python 目录不一致，可以改变默认加载的 python，比如

```
python3 -c "import mxnet as mx; print(mx.__version__)"
```

或者用和 python 对应的 pip 重新安装 mxnet

```
pip3 install mxnet --pre  
pip2 install mxnet --pre
```

如果不是简单的 python2/3 的问题，推荐修复默认调用的 python。

病情分析

假设你看到这个错误：

```
ImportError: libgfortran.so.3: cannot open shared object file: No such file or
directory
```

药方

这个一般发生在 Linux 下。安装 `libgfortran` 就好，例如 Ubuntu 下可以 `sudo apt-get install libgfortran`

症状：可以 `import mxnet`，但是版本不正常 (< 0.11.1b20170908)

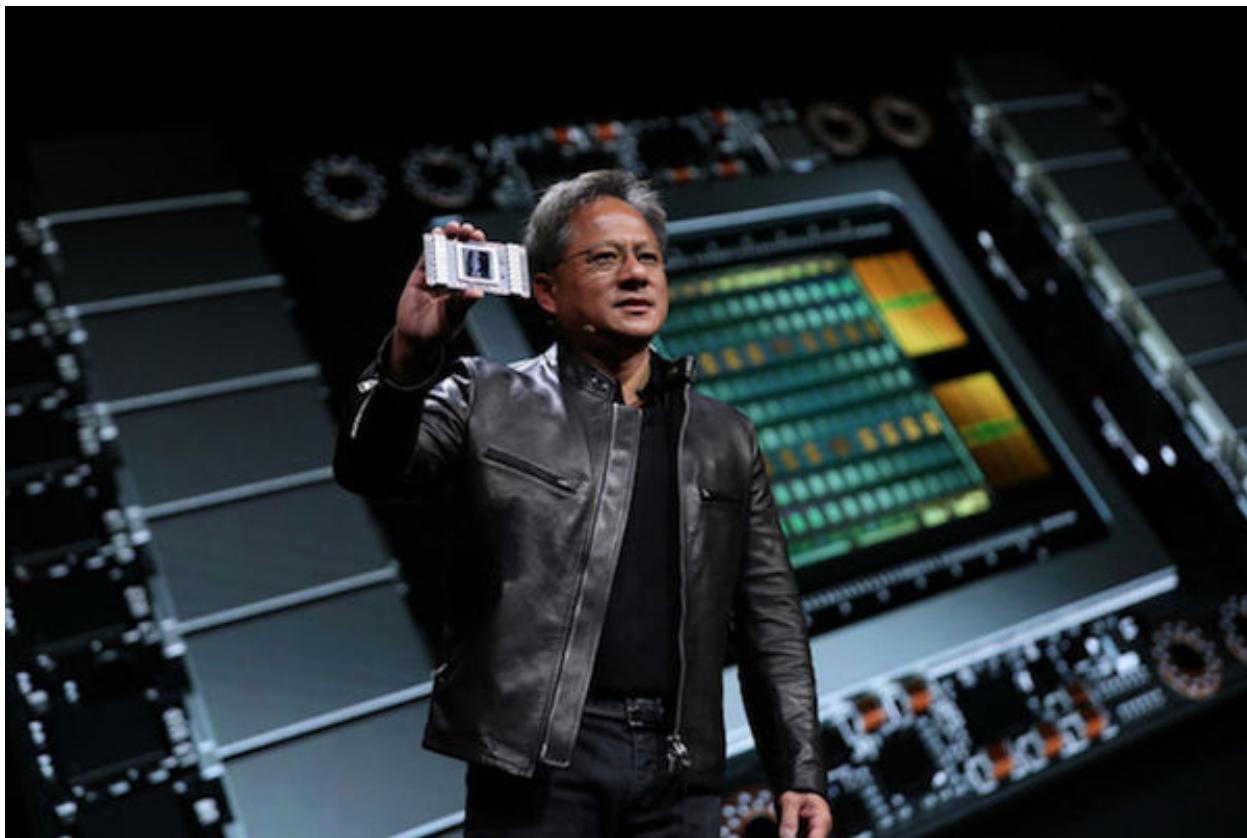
病情分析

安装时没有指定最新的版本 ##### 药方可以使用 `pip install mxnet -upgrade -pre` 安装最新的 `mxnet` ##### 病情分析由于系统的问题，无法正确安装最新版本，参考 `No matching distribution found for mxnet>=0.11.1b20170902` #### Jupyter Notebook ##### 症状：打开 notebook 乱码 ##### 病情分析 Windows 下不支持编码？ ##### 未测试药方把 `md` 文件用文本编辑器保存为 GBK 编码 ##### 其他 ##### 症状：Windows 下 `curl`, `tar` 失败 ##### 病情分析 Windows 默认不支持 `curl`, `tar` ##### 药方下载和解压推荐用浏览器和解压软件，手动拷贝 ##### 最后如果你尝试了很多依然一头雾水，可以试试 docker 安装：
<https://zh.gluon.ai/install.html#docker>

吐槽和讨论欢迎点[这里](#)

11.2 GPU 购买指南

深度学习训练通常需要大量的计算资源。GPU 目前是深度学习最常使用的计算加速硬件。相对于 CPU 来说，GPU 更便宜（达到同样的计算能力 GPU 一般便宜 10 倍），而且计算更加密集（一台服务器可以搭配 8 块或者 16 块 GPU）。因此 GPU 数量通常是衡量深度学习计算能力的一个标准，同时 Nvidia 的创始人 Jensen Huang 也被人称深度学习教父。



(Nvidia CEO 黄教主和他的战术核武器)

本章我们简要介绍 GPU 的购买须知。这里主要针对个人用户购买一两台自用的 GPU 服务器。而不是针对需要购买

- 100+ 台机器的大公司用户。请咨询专业数据中心维护人员，通常你们会考虑 Nvidia Tesla P100 或者 V100。你可以完全跳过此节。
- 10+ 台机器的实验室和中小公司用户：不缺钱可以上 Nvidia DGX-1，不然可以考虑购买如 Supermicro 之类性价比较高的服务器。此节的一些内容可以做为参考。

11.2.1 选择 GPU

目前独立 GPU 主要有 AMD 和 Nvidia 两家厂商。其中 Nvidia 由于深度学习布局较早，深度学习框架支持更好，因此目前主要会选择 Nvidia 的卡。

Nvidia 卡有面向个人用户（例如 GTX 系列）和企业用户（例如 Tesla 系列）两种。企业用户卡通常使用被动散热和增加了内存校验从而更加适合数据中心。但计算能力上两者相当。企业卡通常要贵上 10 倍，因此个人用户通常选用 GTX 系列。

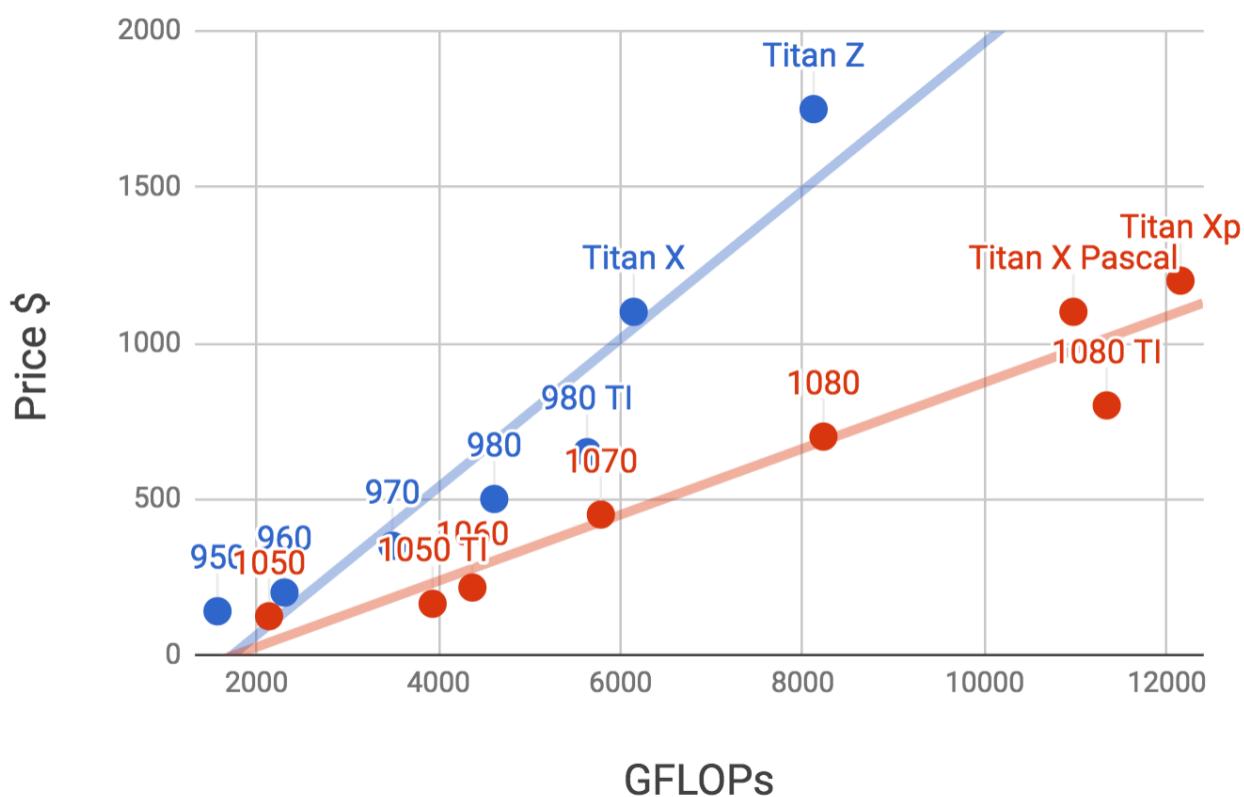
Nvidia 一般每一两年会更新一次大版本，例如目前最新的 1000 系列。每个系列里面有数个不同型号，对应不同的性能。

GPU 的性能主要由下面三个主要参数构成：

1. 计算能力。通常我们关心的是 32 位浮点计算能力。当然，对于高玩来说也可以考虑 16 位浮点用来训练，8 位整数来预测。
2. 内存大小。神经网络越深，或者训练时批量大小越大，所需要的 GPU 内存就越多。
3. 内存带宽。内存带宽要足够才能发挥出所有计算能力。

对于大部分用户来说，只要考虑计算能力就行了。内存不要太小就好，例如不要小于 4GB。如果显卡同时要用来显示图形界面，那么推荐 6G 内存。内存带宽可以让厂家来纠结。

下图画了 900 和 1000 系列里各个卡的 32 位浮点计算能力和价格的对比（价格是 wikipedia 的推荐价格，真实价格通常会有浮动）。



我们可以读出两点信息：

1. 在同一个系列里面，通常价格和性能成正比
2. 1000 系列性价比 900 高 2 倍左右。

如果大家继续比较 GTX 前面几代，也发现规律是类似的。根据这个我们推荐

1. 买新不买旧，因为目前看来 GPU 性能还是在快速迭代，贬值较快。
2. 量力购买。不缺钱直接上最好的，但入门的 1050TI 也不错。

11.2.2 整机配置

如果主要是用 GPU 来做计算，或者说主要是做深度学习训练，不需要购买高端的 CPU。可以将主要预算花费在 GPU 上。所以整机配置可以参考网上推荐的中高档就好。

不过由于 GPU 的功耗，散热和体积，需要一些额外考虑。

- 机箱体积。GPU 尺寸较大，通常不考虑太小的机箱。而且机箱自带的风扇要好。（下图里我们曾尝试在一个中等机箱里塞满 4 卡导致散热不好烧了 2 块 GPU。）



- 电源。购买 GPU 时需要查下 GPU 的功耗, 50w 到 300w 不等。因此买电源时需要功率足够的。(我们倒是一开始就考虑了这个, 但忘了不过载机房供电。下面是 5 台机器满负荷运行时烧掉了一个 30A 的电源接口。)



- 主板的 PCIe 卡槽。推荐使用 PCIe 3.0 16x 来保证足够的 GPU 到主内存带宽。如果是多卡的话，要仔细看主板说明，保证多卡一起使用时仍然是 16x 带宽。（有些主板插 4 卡时会降到 8x 甚至 4x）

对于更具体的配置可以参考我们[走过的一些弯路](#)，和来讨论区[交流大家的机器配置](#)。

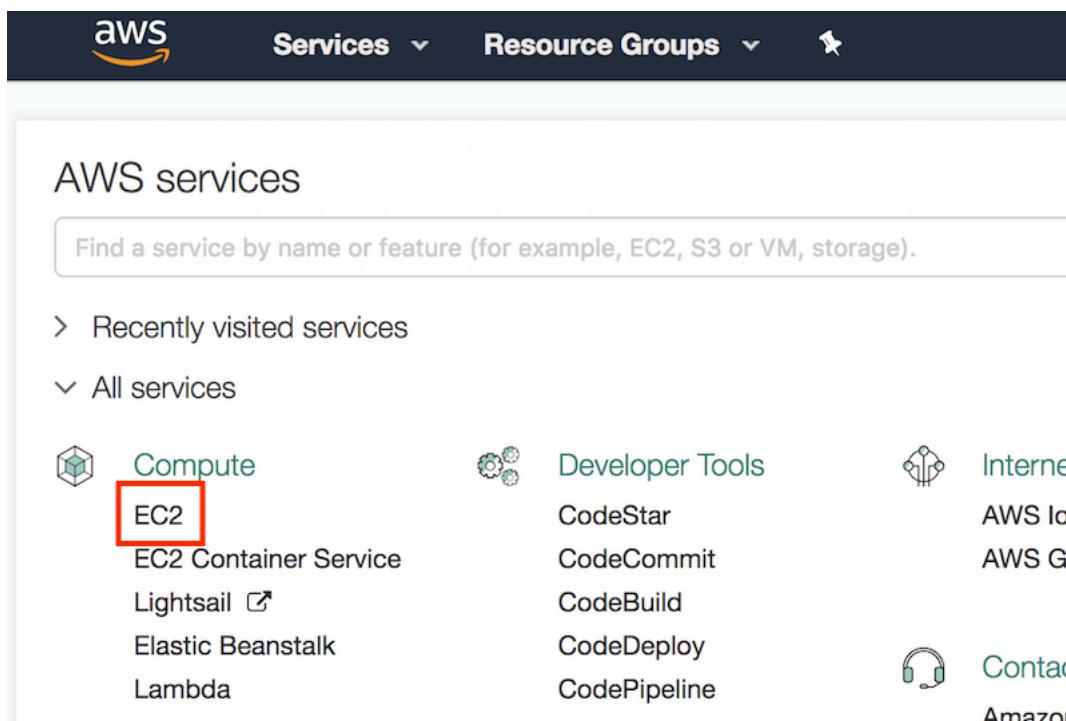
11.3 在 AWS 上运行教程

本节我们一步步讲解如何从 0 开始在 AWS 上申请 CPU 或者 GPU 机器并运行教程。

11.3.1 申请账号并登陆

首先我们需要在<https://aws.amazon.com/>上面创建账号，通常这个需要一张信用卡。不熟悉的同学可以自行搜索“如何注册 aws 账号”。【注意】AWS 中国需要公司实体才能注册，个人用户请注册 AWS 全球账号。

登陆后点击 EC2 进入 EC2 面板：



11.3.2 选择并运行 EC2 实例

【可选】进入面板后可以在右上角选择离我们较近的数据中心来减低延迟。例如国内用户可以选亚太地区数据中心。

【注意】有些数据中心可能没有 GPU 实例。

然后点击启动实例来选择操作系统和实例类型。

The screenshot shows the AWS EC2 Dashboard. The top navigation bar includes the AWS logo, 'Services' dropdown, 'Resource Groups' dropdown, a user icon, and a dropdown for the 'Oregon' region, which is highlighted with a red box. The left sidebar contains links for 'EC2 Dashboard', 'Events', 'Tags', 'Reports', 'Limits', 'INSTANCES' (with 'Instances', 'Spot Requests', 'Reserved Instances', 'Scheduled Instances', 'Dedicated Hosts'), 'IMAGES' (with 'AMIs', 'Bundle Tasks'), 'ELASTIC BLOCK STORE' (with 'Volumes', 'Snapshots'), and 'NETWORK & SECURITY' (with 'Security Groups'). The main 'Resources' section displays usage statistics: 7 Running Instances, 2 Elastic IPs, 0 Dedicated Hosts, 6 Snapshots, 9 Volumes, 0 Load Balancers, 1 Key Pairs, 39 Security Groups, and 0 Placement Groups. A callout box in the center says 'Just need a simple virtual private server? Get everything you need to jumpstart your project - compute, storage, and networking – for a low, predictable price. Try Amazon Lightsail for free.' Below it is a 'Create Instance' section with a 'Launch Instance' button, also highlighted with a red box. The right sidebar includes 'Account Attribu', 'Supported Platforms', 'VPC', 'Default VPC', 'Resource ID length m...', 'Additional Info...', 'Getting Started Guide', 'Documentation', 'All EC2 Resources', 'Forums', 'Pricing', 'Contact Us', and 'AWS Marketpla'. A note at the bottom states 'Note: Your instances will launch in the US West (Oregon) region'.

在接下来的操作系统里面选 Ubuntu 16.06:

The screenshot shows the 'Step 1: Choose an Amazon Machine Image (AMI)' page of the EC2 instance creation wizard. The top navigation bar shows steps 1 through 7. The main area is titled 'Step 1: Choose an Amazon Machine Image (AMI)'. It lists an AMI: 'Ubuntu Server 16.04 LTS (HVM), SSD Volume Type - ami-6e1a0117'. A 'Free tier eligible' badge is shown. To the right is a 'Select' button, also highlighted with a red box. The bottom of the screen shows the 'Cancel and Exit' button.

EC2 提供大量的有着不同配置的实例。这里我们选择了 p2.xlarge, 它有一个 K80 GPU。我们也可以选择有更多 GPU 的实例例如 p2.16xlarge, 或者有新一点 GPU 的 g3 系列。我们也可以选择只有 CPU 的实例, 例如 c4 系列。每个不同实例的机器配置和收费可以参考 ec2instances.info.

Step 2: Choose an Instance Type

<input type="checkbox"/>	GPU instances	g2.8xlarge	32	60 2 x 120 (SSD)
<input checked="" type="checkbox"/>	GPU compute	p2.xlarge	4	61 EBS only

【注意】选择某个类型的样例前我们需要在 `Limits` 里检查下这个是不是有数量限制。例如这个账号的 `p2.xlarge` 限制是最多一个区域开一个。如果需要更多，需要点右边来申请更多的实例容量（通常需要一个工作日来处理）。

EC2 Dashboard

- Events
- Tags
- Reports
- Limits**

INSTANCES

Running On-Demand p2.16xlarge instances	1	Request limit increase	
Running On-Demand p2.8xlarge instances	1	Request limit increase	
Running On-Demand p2.xlarge instances	1	Request limit increase	
Running On-Demand r3.2xlarge instances	20	Request limit increase	

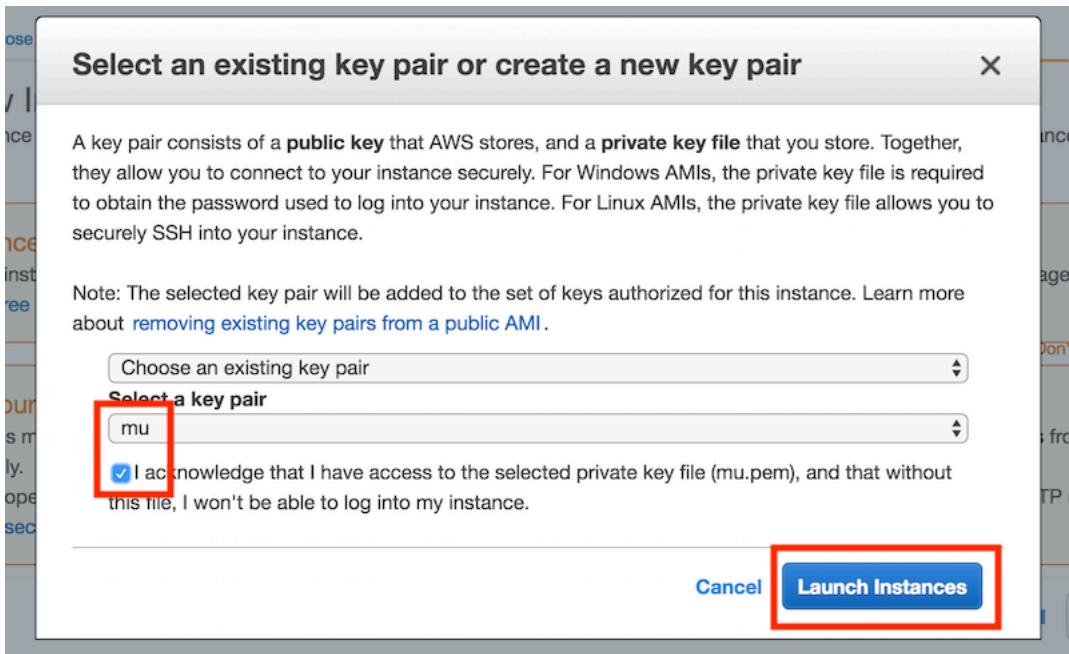
然后我们在存储那里将默认的硬盘从 8GB 增大的 40GB. 因为安装 CUDA 需要 4GB 空间，所以最小推荐 20GB (只有 CPU 的话不需要 CUDA，可以更少)。

Step 4: Add Storage

Volume Type	Device	Snapshot	Size (GiB)	Volume Type	IOPS	Th (M)
Root	/dev/sda1	snap-02cc1e40d2e121683	40	General Purpose S	100 / 3000	N/A

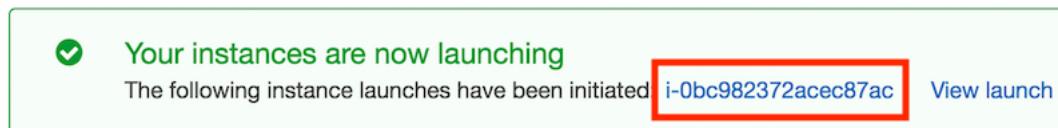
Add New Volume

其他的项我们都选默认，然后可以启动了。这时候会跳出选项选择 `key pair`，这是用来之后访问机器的秘钥（EC2 默认不支持密码访问）。如果没有的话可以选择生成一对秘钥。

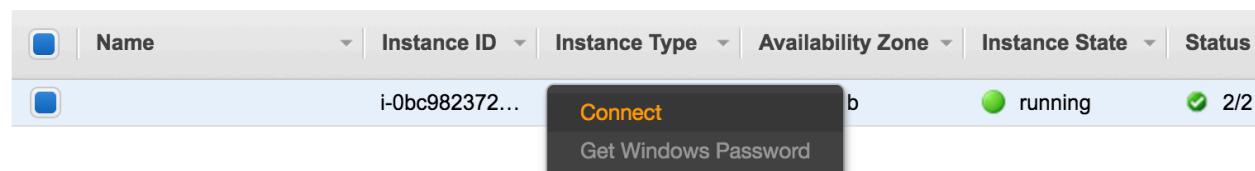


然后点击实例的 ID 可以查看当前实例的状态

Launch Status



状态变绿后右击点 Connect 就可以看到如何访问这个实例的说明了



例如我们这里

```
Mus-MacBook-Pro:~ muli$ ssh ubuntu@ec2-34-203-223-63.compute-1.amazonaws.com
The authenticity of host 'ec2-34-203-223-63.compute-1.amazonaws.com (34.203.223.63)' can't be established.
ECDSA key fingerprint is SHA256:8aPhw5p745TdmsUxnWb+MpWF+vvMKddahBKB12eYi8I.
Are you sure you want to continue connecting (yes/no)? yes
Warning: Permanently added 'ec2-34-203-223-63.compute-1.amazonaws.com,34.203.223.63' (ECDSA) to the list of known hosts.
Welcome to Ubuntu 16.04.2 LTS (GNU/Linux 4.4.0-1022-aws x86_64)

 * Documentation:  https://help.ubuntu.com
 * Management:     https://landscape.canonical.com
 * Support:        https://ubuntu.com/advantage

Get cloud support with Ubuntu Advantage Cloud Guest:
  http://www.ubuntu.com/business/services/cloud
```

11.3.3 安装依赖包

成功登陆后我们先更新并安装编译需要的包。

```
sudo apt-get update && sudo apt-get install -y build-essential git libgfortran3
```

安装 CUDA

【注意】只有 CPU 的实例可以跳过步骤。

我们去 Nvidia 官网下载 CUDA 并安装。选择正确的版本并获取下载地址。

【注意】目前 CUDA 默认下载 9.0 版，但 mxnet-cu90 的 daily build 还不完善。建议使用下面命令安装 8.0 版。

Select Target Platform

Click on the green buttons that describe your target platform. Only supported platforms will be shown.

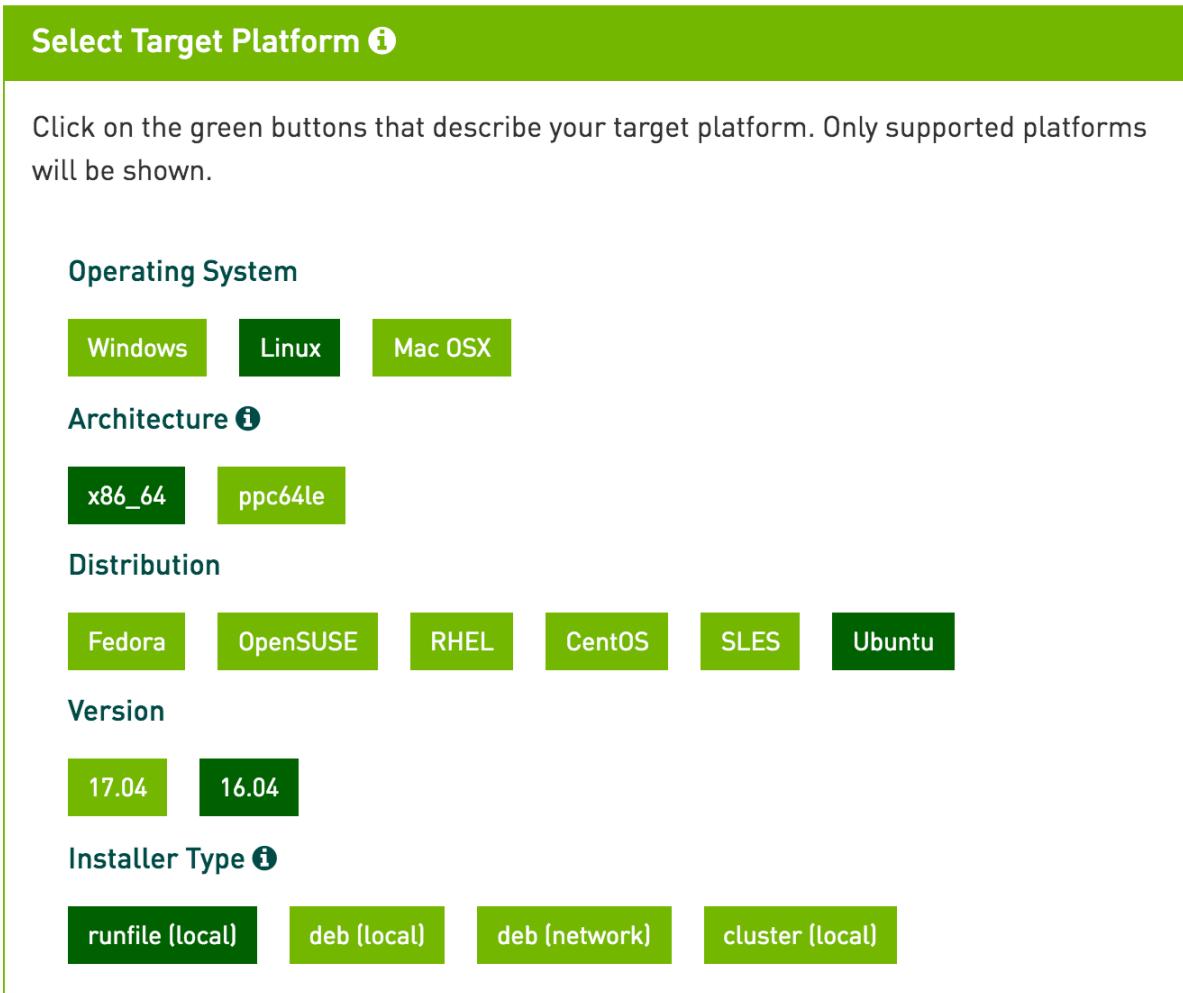
Operating System

Architecture 

Distribution

Version

Installer Type 



Download Installer for Linux Ubuntu 16.04 x86_64

The base installer is available for download below.

› Base Installer

Installation Instructions:

1. Run `sudo sh cuda_9.0.176_384.81_linux.run`
2. Follow the command-line prompts

Do

- Open Link in New Tab
- Open Link in New Window
- Open Link in Incognito Window
- Save Link As...
- Copy Link Address**

然后使用 wget 下载并且安装

```
wget https://developer.nvidia.com/compute/cuda/8.0/Prod2/local_installer/cuda_8.0.61_
→375.26_linux-run
sudo sh cuda_8.0.61_375.26_linux-run
```

这里需要回答几个问题。

```
accept/decline/quit: accept
Install NVIDIA Accelerated Graphics Driver for Linux-x86_64 375.26?
(y)es/(n)o/(q)uit: y
Do you want to install the OpenGL libraries?
(y)es/(n)o/(q)uit [ default is yes ]: y
Do you want to run nvidia-xconfig?
(y)es/(n)o/(q)uit [ default is no ]: n
Install the CUDA 8.0 Toolkit?
(y)es/(n)o/(q)uit: y
Enter Toolkit Location
[ default is /usr/local/cuda-8.0 ]:
Do you want to install a symbolic link at /usr/local/cuda?
(y)es/(n)o/(q)uit: y
Install the CUDA 8.0 Samples?
(y)es/(n)o/(q)uit: n
```

安装完成后运行

```
nvidia-smi
```

就可以看到这个实例的 GPU 了。最后将 CUDA 加入到 library path 方便之后安装的库找到它。

```
echo "export LD_LIBRARY_PATH=\${LD_LIBRARY_PATH}:/usr/local/cuda-8.0/lib64" >>.bashrc
```

安装 MXNet

先安装 Miniconda

```
wget https://repo.continuum.io/miniconda/Miniconda3-latest-Linux-x86_64.sh
bash Miniconda3-latest-Linux-x86_64.sh
```

需要回答下面几个问题

```
Do you accept the license terms? [yes|no]
[no] >>> yes
Do you wish the installer to prepend the Miniconda3 install location
```

```
to PATH in your /home/ubuntu/.bashrc ? [yes|no]
[no] >>> yes
```

运行一次 bash 让 CUDA 和 conda 生效。

下载本教程，安装并激活 conda 环境

```
git clone https://github.com/mli/gluon-tutorials-zh
cd gluon-tutorials-zh
conda env create -f environment.yml
source activate gluon
```

默认环境里安装了只有 CPU 的版本。现在我们替换成 GPU 版本。

```
pip uninstall -y mxnet
pip install --pre mxnet-cu80
```

同时安装 notedown 插件来让 jupyter 读写 markdown 文件。

```
pip install https://github.com/mli/notedown/tarball/master
jupyter notebook --generate-config
echo "c.NotebookApp.contents_manager_class = 'notedown.NotedownContentsManager'" >>~/.jupyter/jupyter_notebook_config.py
```

11.3.4 运行

并运行 Jupyter notebook。

```
jupyter notebook
```

如果成功的话会看到类似的输出

```
(gluon) ubuntu@ip-172-31-0-171:~/gluon-tutorials-zh$ jupyter notebook
[I 22:10:29.383 NotebookApp] Writing notebook server cookie secret to /run/user/1000
[I 22:10:29.404 NotebookApp] Serving notebooks from local directory: /home/ubuntu
[I 22:10:29.404 NotebookApp] 0 active kernels
[I 22:10:29.404 NotebookApp] The Jupyter Notebook is running at: http://localhost:8888
[I 22:10:29.404 NotebookApp] Use Control-C to stop this server and shut down all
[W 22:10:29.404 NotebookApp] No web browser found: could not locate runnable browser
[C 22:10:29.404 NotebookApp]
```

```
Copy/paste this URL into your browser when you connect for the first time,
to login with a token:
http://localhost:8888/?token=c9c7b7d48caedc5c039535d777450f61dff7c0ad6fc1
```

因为我们的实例没有暴露 8888 端口, 所以我们可以在本地启动 ssh 从实例映射到本地

```
ssh -i "XXX.pem" -L8888:localhost:8888 ubuntu@XXXX.XXXX.compute.amazonaws.com
```

然后把 jupyter log 里的 URL 复制到本地浏览器就行了。

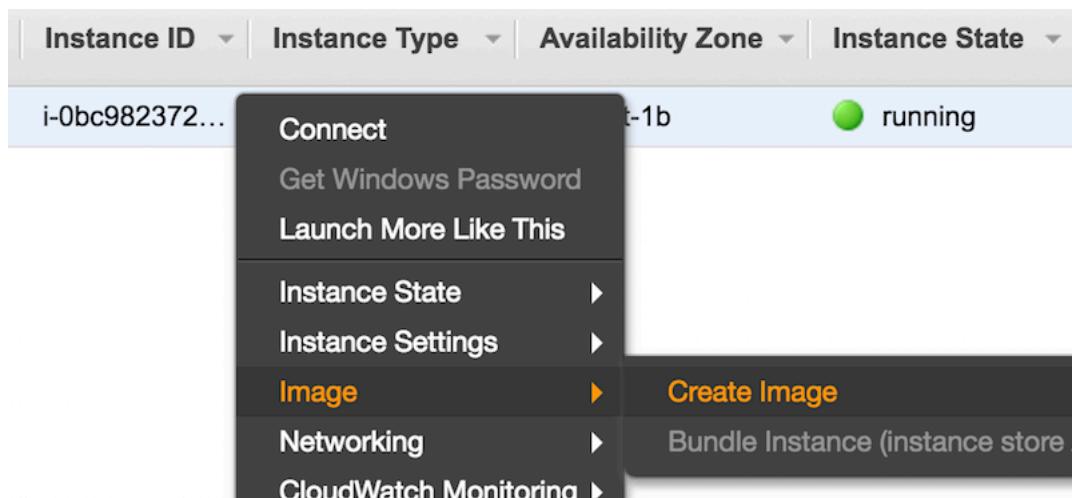
【注意】如果本地运行了 Jupyter notebook, 那么 8888 端口就可能被占用了。要么关掉本地 jupyter, 要么把端口映射改成别的。例如, 假设 aws 使用默认 8888 端口, 我们可以在本地启动 ssh 从实例映射到本地 8889 端口:

```
ssh -i "XXX.pem" -N -f -L localhost:8889:localhost:8888 ubuntu@XXXX.XXXX.compute.amazonaws.com
```

然后在本地浏览器打开 localhost:8889, 这时会提示需要 token 值。接下来, 我们将 aws 上 jupyter log 里的 token 值 (例如上图里:localhost:8888/?token=token 值) 复制粘贴即可。

11.3.5 后续

因为云服务按时间计费, 通常我们不用时需要把样例关掉, 到下次要用时再开。如果是停掉 (Stop), 下次可以直接继续用, 但硬盘空间会计费。如果是终结 (Termination), 我们一般会先把操作系统做镜像, 下次开始时直接使用镜像 (AMI) (上面的教程使用了 Ubuntu 16.06 AMI) 就行了, 不需要再把上面流程走一次。



每次重新开始后, 我们建议升级下教程 (记得保存自己的改动)

```
cd gluon-tutorials-zh  
git pull
```

和 MXNet 版本

```
source activate gluon  
pip install -U --pre mxnet-cu80
```

11.3.6 总结

云上可以很方便的获取计算资源和配置环境

11.3.7 练习

云很方便，但不便宜。研究下它的价格，和看看如何节省开销。

11.4 数学基础

TODO(@astonzhang)

11.4.1 运算

按元素运算

假设 $x = [4, 9]^\top$ ，以下是一些按元素运算的例子：

- 按元素相加： $x + 1 = [5, 10]^\top$
- 按元素相乘： $x \odot x = [16, 81]^\top$
- 按元素相除： $72/x = [18, 8]^\top$
- 按元素开方： $\sqrt{x} = [2, 3]^\top$

11.4.2 导数和梯度

假设目标函数 $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ 的输入是一个 d 维向量 $\mathbf{x} = [x_1, x_2, \dots, x_d]^\top$ 。目标函数 $f(\mathbf{x})$ 有关 \mathbf{x} 的梯度是一个由 d 个偏导数组成的向量：

$$\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) = \left[\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_1}, \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_d} \right]^\top.$$

为表示简洁，我们用 $\nabla f(\mathbf{x})$ 代替 $\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x})$ 。

泰勒展开

函数 f 的泰勒展开式是

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(a)}{n!} (x - a)^n,$$

其中 $f^{(n)}$ 为函数 f 的 n 阶导数。假设 ϵ 是一个足够小的数，如果将上式中 x 和 a 分别替换成 $x + \epsilon$ 和 x ，我们可以得到

$$f(x + \epsilon) \approx f(x) + f'(x)\epsilon + \mathcal{O}(\epsilon^2).$$

由于 ϵ 足够小，上式也可以简化成

$$f(x + \epsilon) \approx f(x) + f'(x)\epsilon.$$

本教程的[英文版本](#)（注意：中文版本根据社区的反馈做了比较大的更改，我们还在努力的将改动同步到英文版）