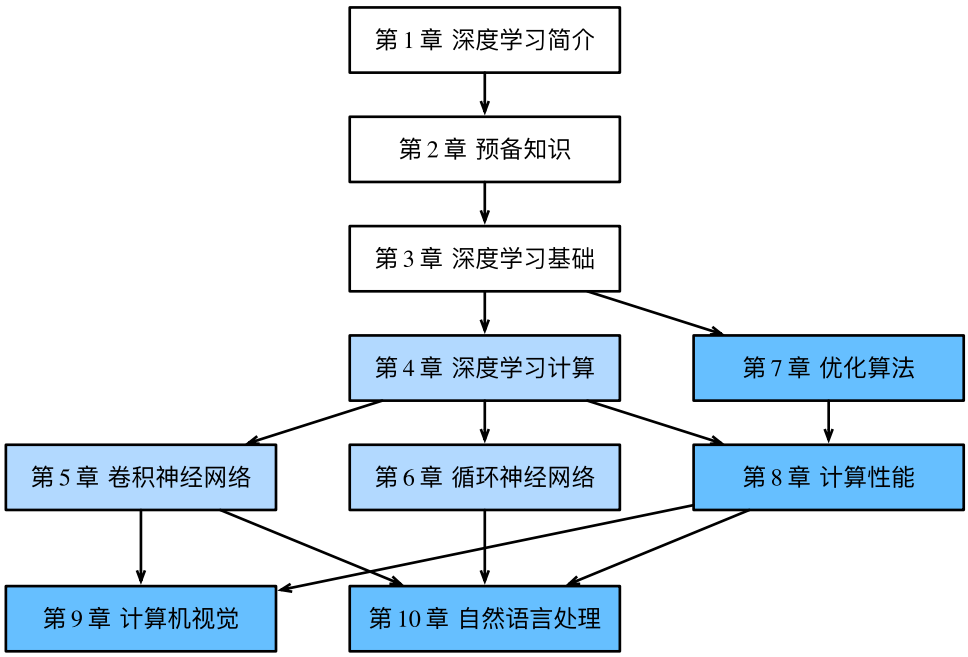
> 这是 动手学深度学习(PyTorch版)的读书笔记. 后续可能会因个人懒的原因加入更多的DL笔记啥的..

```
#  给记性不好的我的Anaconda handbook
# 查看帮助
conda -h
# 基于python3.6版本创建一个名字为python36的环境
conda create --name python36 python=3.6
# 激活此环境
activate python36
source activate python36 # linux/mac
# 再来检查python版本，显示是 3.6
python -V
# 退出当前环境
deactivate python36
# 删除该环境
conda remove -n python36 --all
# 或者
conda env remove  -n python36

# 查看所以安装的环境
conda env list
```

动手学DL(PyTorch版)



1. 简介

- "用数据编程"
  与其枯坐在房间里思考怎么设计一个识别猫的程序，不如收集一些已知包含猫与不包含猫的真实图像，然后我们的目标就转化成如何从这些图像入手得到一个可以推断出图像中是否有猫的函数。
- 算力增长 >> 存储增长
  存储容量没能跟上数据量增长的步伐。与此同时，计算力的增长又盖过了数据量的增长。这样的趋势使得统计模型可以在优化参数上投入更多的计算力，但同时需要提高存储的利用效率，例如使用非线性处理单元。
- DL特点: 端到端
  并不是将单独调试的部分拼凑起来组成一个系统，而是将整个系统组建好之后一起训练。

2. PyTorch基础操作

在PyTorch中，torch.Tensor是存储和变换数据的主要工具。Tensor近似与多维数组，具有自动求梯度与GPU计算功能.

- Tensor
  创建Tensor

```
import torch
# 创建一个5 * 3未初始化的Tensor
x = torch.empty(5, 3)

# 创建一个5 * 3 全为long 0的Tensor
x = torch.zeros(5, 3, dtype=torch.long)

# 输出形状
print(x.size())
print(x.shape)
```

  运算Tensor

```
# 加
z = x + y

torch.add(x, y, out=z)

y.add_(x) # y += x
```

索引(浅拷贝)

```
y = x[0, :]
y += 1
print(y)
print(x[0, :]) # 源tensor也被改了
```

改变形状

`y = x.view(-1, 5)`

clone(深拷贝)

`x_cp = x.clone().view(15)`

Tensor => Numpy

`np = torch.ones(5).numpy()`

Numpy => Tensor

`ts = torch.from_numpy(np.ones(5))`

Tensor with GPU

```
# Below codes CAN ONLY run with PyTorch-GPU
if torch.cuda.is_available():
  gpu = torch.device("cuda")
  y = torch.ones_like(x, device=gpu) # y is in gpu
  x = x.to(gpu)
  z = x + y
  print(z)
  print(z.to("cpu", torch.double))
```

- 梯度 (gradient)

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

  e.g.

  创建一个Tensor并设置requires_grad=True:

```
x = torch.ones(2, 2, requires_grad=True)
print(x)
print(x.grad_fn)
```

做运算操作

```
y = x + 2
print(y)
print(y.grad_fn)
```

> 注意x是直接创建的，所以它没有 `grad_fn` , 而y是通过一个加法操作创建的，所以它有一个为<AddBackward>的 `grad_fn`

像x这种直接创建的被称为叶子节点, 叶子节点的 `grad_fn` 为 `None`

```
print(x.is_leaf) # True
print(y.is_leaf) # False
```

通过 `.requires_grad_()` 来改变requires_grad属性

```
a = torch.randn(2, 2) # Default requires_grad = False
print(a.requires_grad) # False
a.requires_grad_(True)
print(a.requires_grad) # True
```

backward()自动计算梯度(grad)

```
x = torch.ones(2, 2, requires_grad=True) # x: [ [1, 1], [1, 1]]
y = x + 2  # y: [ [3, 3], [3, 3]]
z = y**2 * 3 # z: [ [27, 27], [27, 27]]
z_mean = z.mean() # z_mean: [27]
# z_mean 为一个标量, 所以无需指定求导变量
z_mean.backward() # <=> out.backward(torch.tensor(1.))
print(x.grad) # [ [4.5, 4.5], [4.5, 4.5]]
```

如果我们想要修改 `tensor` 的数值，但是又不希望被 `autograd` 记录（即不会影响反向传播），那么我么可以对 `tensor.data` 进行操作。

```
x = torch.ones(1, requires_grad=True)

print(x.data) # x.data is a tensor [1]
print(x.data.requires_grad) # False

y = x * 2
x.data *= 100 # Only changes x's value, DO NOT backward.

y.backward()
print(x) # x: [100]
print(x.grad) # 2
```

3. DL基础

线性回归 (Linear Regression)

- 线性回归的基本要素
    - 模型

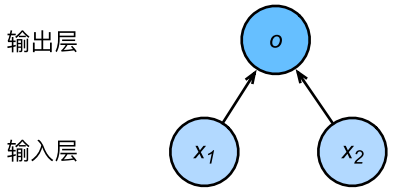
      设房屋的面积为$x1$, 房龄为$x2$, 售出面积为y, 我们需要建立y关于$x1$, $x2$的表达式, 也即是模型 (model)
    - 训练数据

      通过数据来寻找特定的模型参数值，使模型在数据上的误差尽可能小。这个过程叫作模型训练 (model training)
    - 损失函数

      在机器学习里，将衡量误差的函数称为损失函数 (loss function)
    - 优化算法

      当模型和损失函数形式较为简单时，上面的误差最小化问题的解可以直接用公式表达出来。这类解叫作解析解（analytical solution）。

      线性回归和平方误差刚好属于这个范畴。然而，大多数深度学习模型并没有解析解，只能通过优化算法有限次迭代模型参数来尽可能降低损失函数的值。这类解叫作数值解（numerical solution）。
- 线性回归的表示方法



如图, 线性回归是个单层神经网络, 在线性回归中, o的计算完全依赖于$x1$和$x2$. 所以, 这里的输出层又叫全连接层 (fully-connected layer)或稠密层 (dense layer)

- 从0开始手撸线性回归

  即只用`Tensor`和`autograd`实现线性回归的训练

  见`Source Code: LinearRegressTest.py`

- 线性回归简洁实现

  见`Source Code: LinearRegressTestSimple.py`

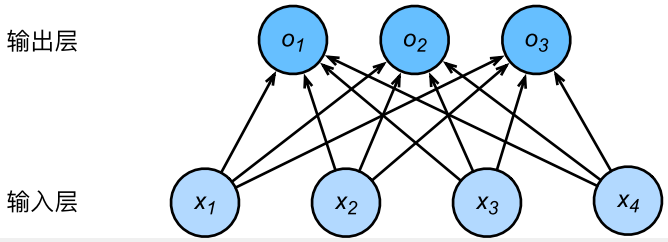
> **总结**
>
> **一般过程**:
>
> 准备数据集 -> 读入数据 -> 定义模型 -> 初始化模型参数 -> 定义损失函数 -> 定义优化算法 -> 训练
>
> **PyTorch框架对应**:
>
> `torch.utils.data`：数据处理相关
>
> `torch.nn`：神经网络的层
>
> `torch.nn.init`：模块的初始化方法
>
> `torch.optim`：优化算法

Softmax回归

- 简介

  softmax回归同线性回归一样是个单层神经网络, 由于输出o_1, o_2, o_3的计算依赖于所有输入x_1, x_2, x_3, x_4, 故softmax回归的输出层也是个全连接层.

  softmax回归也将输入特征与权重做线性叠加. 不同点在于, softmax回归的输出值个数等于标签中的类别数.



> e.g.
>
> $$o_1 = x_1 w_{11} + x_2 w_{21} + x_3 w_{31} + x_4 w_{41} + b_1,$$
> $$o_2 = x_1 w_{12} + x_2 w_{22} + x_3 w_{32} + x_4 w_{42} + b_2,$$
> $$o_3 = x_1 w_{13} + x_2 w_{23} + x_3 w_{33} + x_4 w_{43} + b_3.$$

softmax运算符 (softmax operator)将输出层的输出值变为值为正且和为1的概率分布:

$$y_1', y_2', y_3' = softmax(o_1, o_2, o_3)$$

其中

$$y_1' = \frac{exp(o_1)}{\sum_{i=1}^{3} exp(o_i)}, y_2' = \frac{exp(o_2)}{\sum_{i=1}^{3} exp(o_i)}, y_3' = \frac{exp(o_3)}{\sum_{i=1}^{3} exp(o_i)}$$

- 实现

  见`Source Code: SoftmaxTest.py`和

  见`Source Code: SoftmaxTestSimple.py`

- 交叉熵损失函数 (cross entropy loss funtion)

  衡量两个概率分布差异的方法.即不用判断概率达到某值, 而是A概率比B, C都高即可.

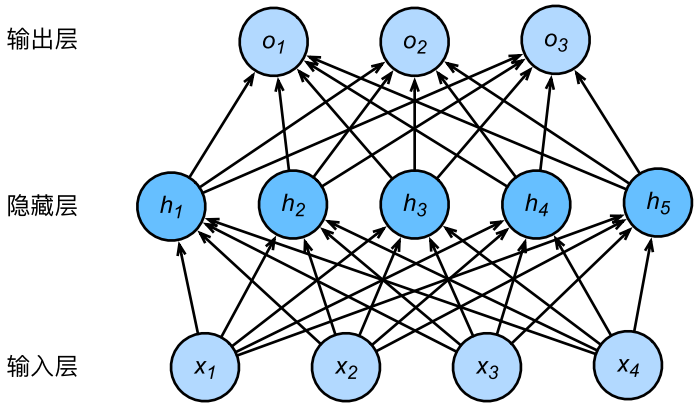
$$H(y^{(i)}, \hat{y}^{(i)}) = -\sum_{j=1}^{q} y_j^{(i)} \log \hat{y}_j^{(i)}$$

多层感知机 (MultiLayer Perceptron, MLP)

- 简介

  多层感知机即在单层神经网络的基础上引入了一个到多个隐藏层 (hidden layer)的网络结构.

  如图所示的多层感知机中包含5个隐藏单元(hidden unit), 隐藏层和输出全连接层.



- 激活函数

  多个线性函数的叠加 (多个简单隐藏层)会导致仍然为一个线性函数.为了避免这种情况, 需要对隐藏变量使用非线性函数. 被称为激活函数 (activation function).

常用的激活函数有:

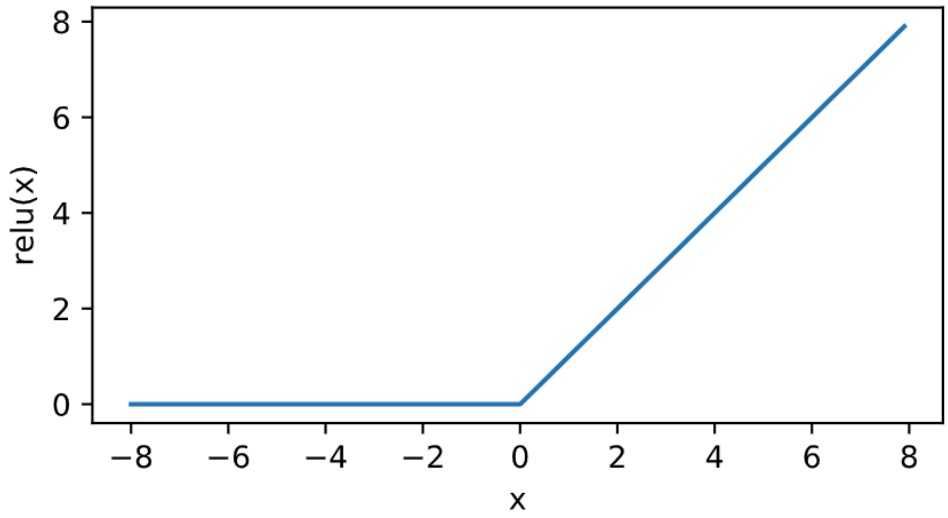
1. ReLU (Rectified Linear Unit)函数

   给定元素x, 该函数定义为

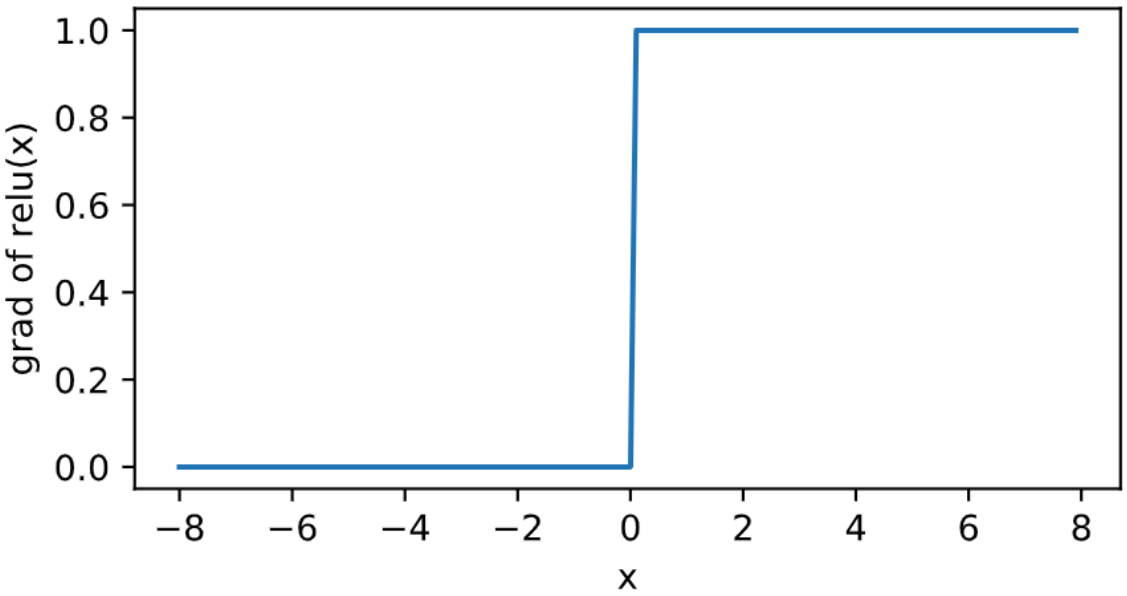
$$ReLU(x) = max(x, 0).$$

   即**保留正数**元素, 并将**负数元素清0**.

   ReLU:



ReLU gradient:

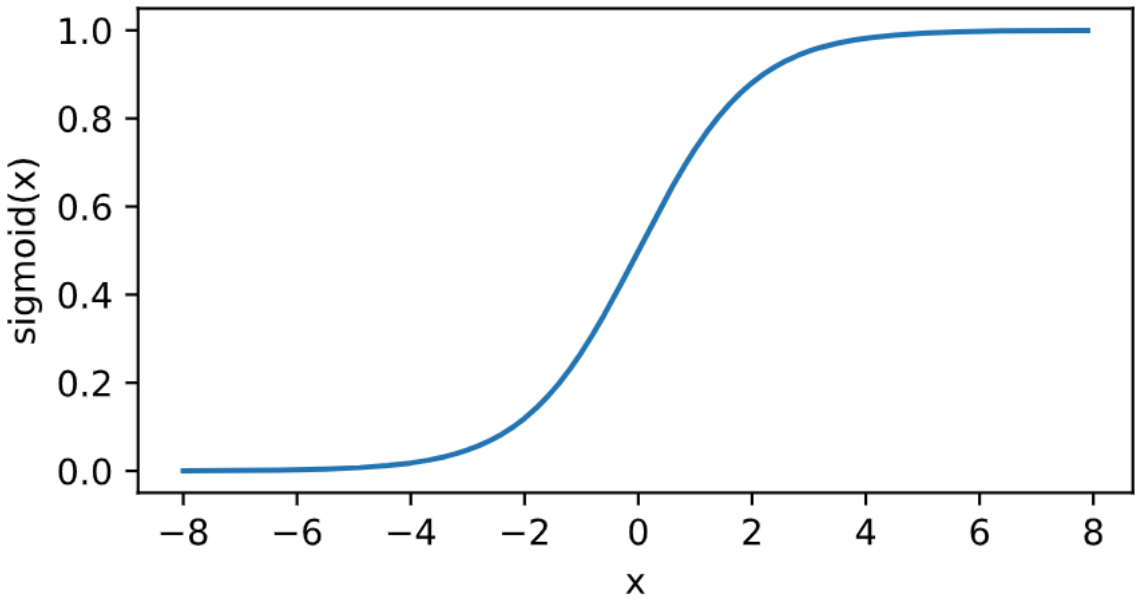


2. sigmoid函数

   sigmoid将元素x变换到 **0~1**, 定义:

$$sigmoid(x) = \frac{1}{1 + exp(-x)}$$

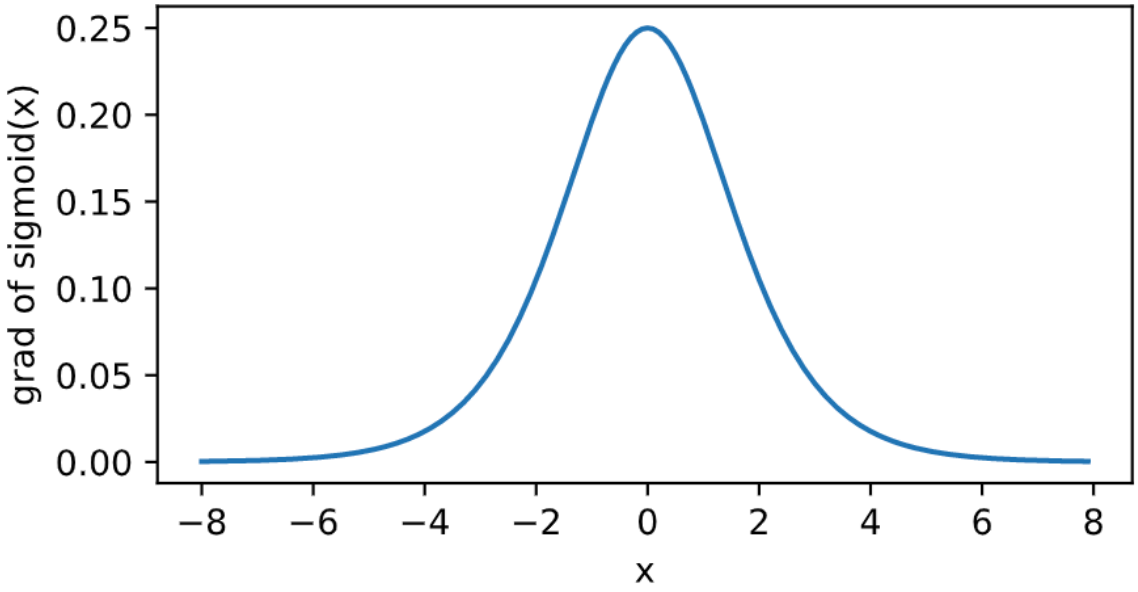
sigmoid example:



且sigmoid的导函数为:

$$sigmoid_{,}(x) = sigmoid(x)(1 - sigmoid(x)).$$

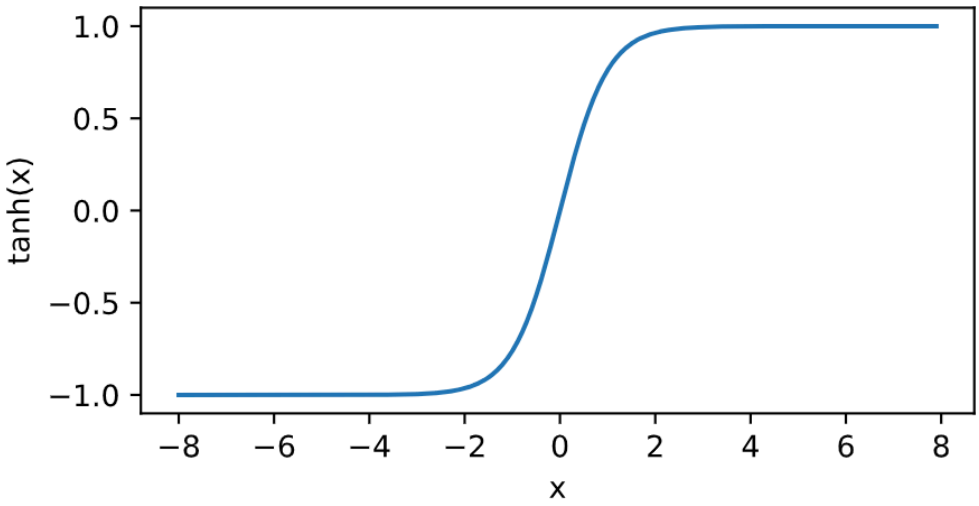
这个导函数值域为 (0, 0.25], 且越接近0越大, sigmoid'(0)=max=0.25



3. tanh函数

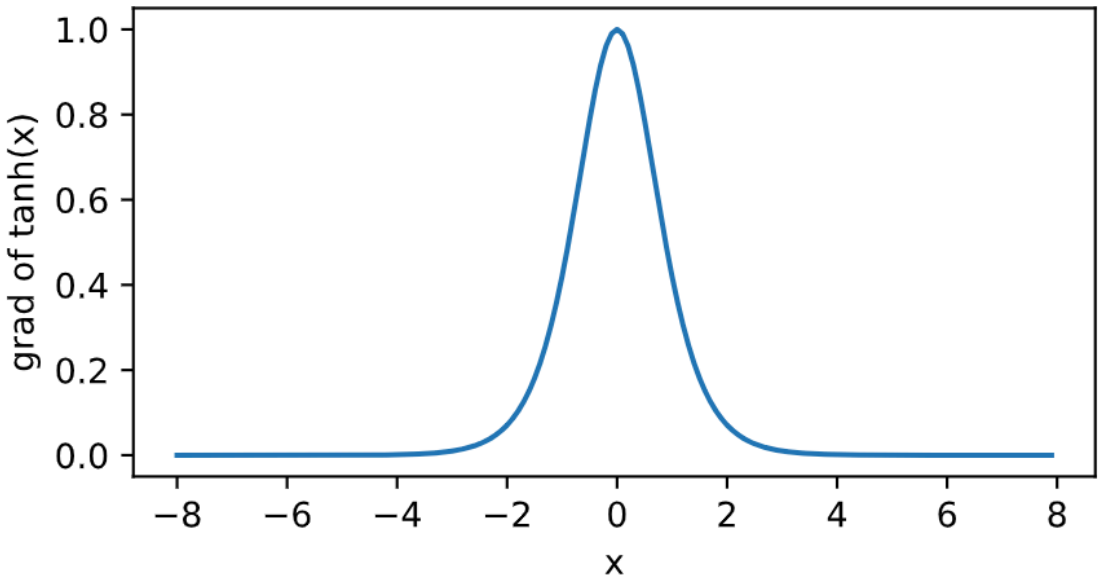
tanh (双曲正切) 将元素的值变换到 **-1~1** 之间:

$$tanh(x) = \frac{1 - exp(-2x)}{1 + exp(-2x)}.$$



tan导函数:

$$tanh_{,}(x) = 1 - tanh_{_2}(x).$$



- MLP定义
  MLP的隐藏层通过激活函数进行变换, MLP的层数和隐藏层中的隐藏单元个数为超参数.

MLP定义如下:

$$H = \phi(XW_h + b_h),$$

$$O = HW_o + b_o,$$

其中 ϕ 表示激活函数, O 为输出. 分类时可以对O做softmax预案算, 并使用softmax回归中的交叉熵损失函数.

4.深度学习计算

模型构造

- 继承`Module`类来构造
  需要重载`Module.__init__()`, `Module.forward()`
  e.g.

```
import torch
import torch.nn as nn
class MLP(nn.Module):
  def __init__(self):
    super(MLP, self).__init__()
    self.hidden = nn.Linear(784, 256)
    self.act = nn.ReLU()
    self.output = nn.Linear(256, 10)

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

## Use
X = torch.rand(2, 784)
net = MLP()
print(net)
net(X)
```

- 直接使用预构建好的类
  - Sequential

net = Sequential(
nn.Linear(784, 256),
nn.ReLU(),
nn.Linear(256, 10)
)

- ModuleList

```
## Use
net = nn.ModuleList([nn.Linear(784, 256), nn.ReLU()])
net.append(nn.Linear(256, 10))
print(net[-1])
print(net)
```

P.S

`ModuleList`仅仅是一个存储各种模块的列表, 模块之间没有联系也没有顺序, 需要自己实现`forward()`, 所以直接执行`net(X)`会报错.
而`Sequantial`内的模块要按顺序排列, `forward()`功能已经实现.

- ModuleDict

`ModuleDict`接收一个子模块的字典作为输入, 可以用key访问

```
net = nn.ModuleDict({
  'linear' : nn.Linear(784, 256),
  'act' : nn.ReLU()
})
net['output'] = nn.Linear(256, 10)
print(net['linear'])
print(net.output)
print(net)
```

- 构建灵活复杂的模型

`get_constant()`可以创建不被迭代的常参数

e.g.

```
import torch
import torch.nn as nn
class FancyMLP(nn.Module):
  def __init__(self, **kwargs):
    super(FancyMLP, self).__init__(**kwargs)

    self.rand_weight = torch.rand((20, 20), requires_grad=False)
    self.linear = nn.Linear(20, 20)

  def forward(self, x):
    x = self.linear(x)
    x = nn.functional.relu(torch.mm(x, self.rand_weight.data) + 1)

    # Reuse full connect layer.
    x = self.linear(x)
    # Get scalar to compare.
    while x.norm().item() > 1:
      x /= 2
    if x.norm().item() < 0.8:
      x *= 10
    return x.sum()

## Use
X = torch.rand(2, 20)
net = FancyMLP()
print(net)
net(X)
```

模型参数的访问,初始化

- `parameters()`, `named_parameters()`
  前者可以返回参数,后者返回参数与参数名

  ```
  for name, param in net.named_parameters():
    print(name, param.size())
  ```

- `init.normal_()`
  nn.init.normal_()可以用来初始化模型参数:

  ```
  for name, param in net.named_parameters():
    if 'weight' in name:
      init.normal_(param, mean=0, std=0.01)
  ```

  或者使用参数来初始化:

```
for name, param in net.named_parameters():
  if 'bias' in name:
    init.constant_(param, val=0)
```

自定义层

- 不含模型参数

```
class CenteredLayer(nn.Module):
  def __init__(self, **kwargs):
    super(CenteredLayer, self).__init__(**kwargs)
  def forward(self, x):
    return x - x.mean()

## Instantiate layer.
layer = CenteredLayer()
layer(torch.tensor([1, 2, 3, 4]), dtype=torch.float)

## Or be used to construct another model.
net = nn.Sequential(nn.Linear(8, 128), CenteredLayer())
```

- 含模型参数

```
class MyDense(nn.Module):
  def __init__():
    super(MyDense, self).__init__()
    self.params = nn.ParameterList([nn.Parameter(torch.randn(4, 4))
                                    for i in range(3)])
    self.params.append(nn.Parameter(torch.randn(4, 1)))

  def forward(self, x):
    for i inrange(len(self.params)):
      x = torch.mm(x, self, params[i])
    return x

net = MyDense()
print(net)
```

读取与存储

- 读写Tensor

  Write

  `torch.save(x, 'x.pt')`

Read

`x = torch.load('x.pt')`

- 读写model
    1. 读写权重`state_dict`

       Write

       `torch.save(model.state_dict(), 'dict.pt')`

       Read

       `model = MyModel()`

       `model.load_state_dict(torch.load('dict.pt'))`
    2. 读写整个模型

       Write

       `torch.save(model, 'net.pt')`

       Read

       `model = torch.load('net.pt')`

GPU相关

- GPU是否可用

  `torch.cuda.is_available()`
- 转换到GPU

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

  `x = x.cuda(0)`

  Or

  `x = torch.tensor([1, 2, 3], device=torch.device('cuda' if torch.cuda.is_availabl`

P.S.

`x.to(device)`这个方法为**Non-InReplace**方法,即赋值后才生效

6.循环神经网络

(Recurrent Neural Network, RNN)

语言模型

- 定义

$$P(w_1, w_2, ..., w_T) = \prod_{t=1}^{T} P(w_t|w_1, ..., w_{t-1}).$$

e.g. 一段含有三个字的文本序列的概率

$$P(w_1, w_2, w_3) = P(w_1)P(w_2|w_1)P(w_3|w_1, w_2).$$

- n元语法
  通过n阶马尔科夫链简化语言模型的计算, 即假设一个词的出现只与前面的n个词相关.
  e.g.
  n = 1时, 有

$$P(w_3|w_1, w_2) = P(w_3|w_2)$$

  注: n较小时, n元语法往往不准确.当n较大时, n元语法需要存储大量的词频和相邻概率.

循环神经网络

现有一个含单隐藏层的MLP, 将通过添加隐藏状态将其变为循环神经网络:

$$H = \phi(XW_{xh} + b_h)$$

隐藏层权重参数为W_{xh}, 隐藏层偏差参数为b_h
其输出层输出为:

$$O = HW_{hq} + b_q$$

若是分类问题, 可以使用softmax(O)来计算输出类别的概率分布.

考虑输入数据存在时间相关性的情况:

$$H_t = \phi(X_t W_{xh} + H_{t-1} W_{hh} + b_h)$$

保存上一时间步的隐藏变量H_{t-1}, 并引入新的权重参数W_{hh}来描述如何使用H_{t-1}

在时间步t, 输出层的输出类似:

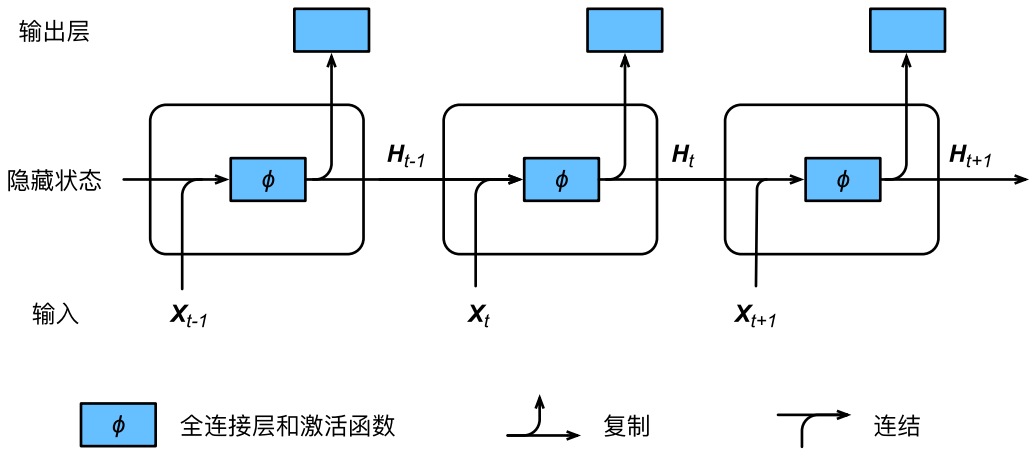
$$O_t = H_t W_{hq} + b_q$$

注:

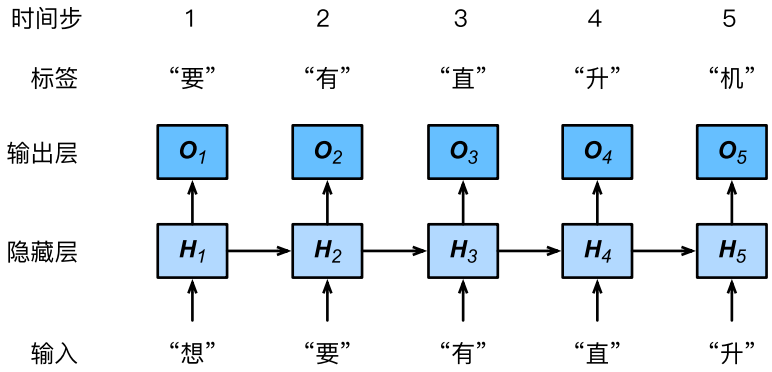
即使在不同时间步, 循环神经网络也四种使用这些模型参数. 即, RNN的模型参数不随时间步的增加而增长.

如图为RNN在3个相邻时间步的计算逻辑.

在时间t时, 相当于将输入X_t和H_{t-1}连结后输入一个激活函数为ϕ的全连接层.此全连接层的输出为H_{t+1}



- 字符级循环神经网络
  (character-level RNN)
  设样本序列为"想要有直升机". 在训练时,
  对**每个时间步**的输出层输出使用**softmax运算**, 然后使用**交叉熵损失函数**计算它与标签的误差.
  对于时间步3, 输出O_3取决于基于"想", "要", "有"生成下一个词的概率分布与该时间步的标签"直"


时间步
1
2
3
4
5
标签
“要”
“有”
“直”
“升”
“机”
输出层
O_1
O_2
O_3
O_4
O_5
隐藏层
H_1
H_2
H_3
H_4
H_5
输入
“想”
“要”
“有”
“直”
“升”