<< 2023-03-13 | 2023-03-15 >>

> *Don't look back. Something might be gaining on you.*
> *— Satchel Paige*

1. Introduction

1.1 课程安排

动手学深度学习课程安排

1.1.1 课程目标

00:11 课程目标

- 介绍深度学习经典和最新模型
  - LeNet, ResNet, LSTM, BERT, ...
- 机器学习基础
  - 损失函数、目标函数、过拟合、优化
- 实践
  - 使用Pytorch实现介绍的知识点
  - 在真实数据上体验算法效果

1.1.2 内容

> *深度学习基础：线性神经网络，多层感知机*
>
> *卷积神经网络：LeNet, AlexNet, VGG, Inception, ResNet*
>
> *循环神经网络：RNN，GRU，LSTM，seq2seq*

> *注意力机制：Attention， Transformer*
>
> *优化算法：SGD，Momentum，Adam*
>
> *高性能计算：并行，多GPU，分布式*
>
> *计算机视觉：目标检测，语义分割*
>
> *自然语言处理：词嵌入，BERT*

1.1.3 学到什么

04:48 可以学到什么

- What：深度学习有哪些技术，以及哪些技术可以帮你解决问题
- How：如何实现（产品 or paper）和调参（精度or速度）
- Why：背后的原因（直觉、数学）

1.1.4 基本要求

- AI相关从业人员（产品经理等）：掌握What，知道名词，能干什么
- 数据科学家、工程师：掌握What、How，手要快，能出活
- 研究员、学生：掌握What、How、Why，除了知道有什么和怎么做，还要知道为什么，思考背后的原因，做出新的突破

1.1.5 课程资源

07:33

- 课程主页：https://courses.d2l.ai/zh-v2/
- 教材：https://zh-v2.d2l.ai/
- 课程论坛讨论：https://discuss.d2l.ai/c/chinese-version/16
- Pytorch论坛：https://discuss.pytorch.org/
- b站视频合集：[https://space.bilibili.com/1567748478/channel/seriesdetail?sid=358497]

1.2 深度学习介绍

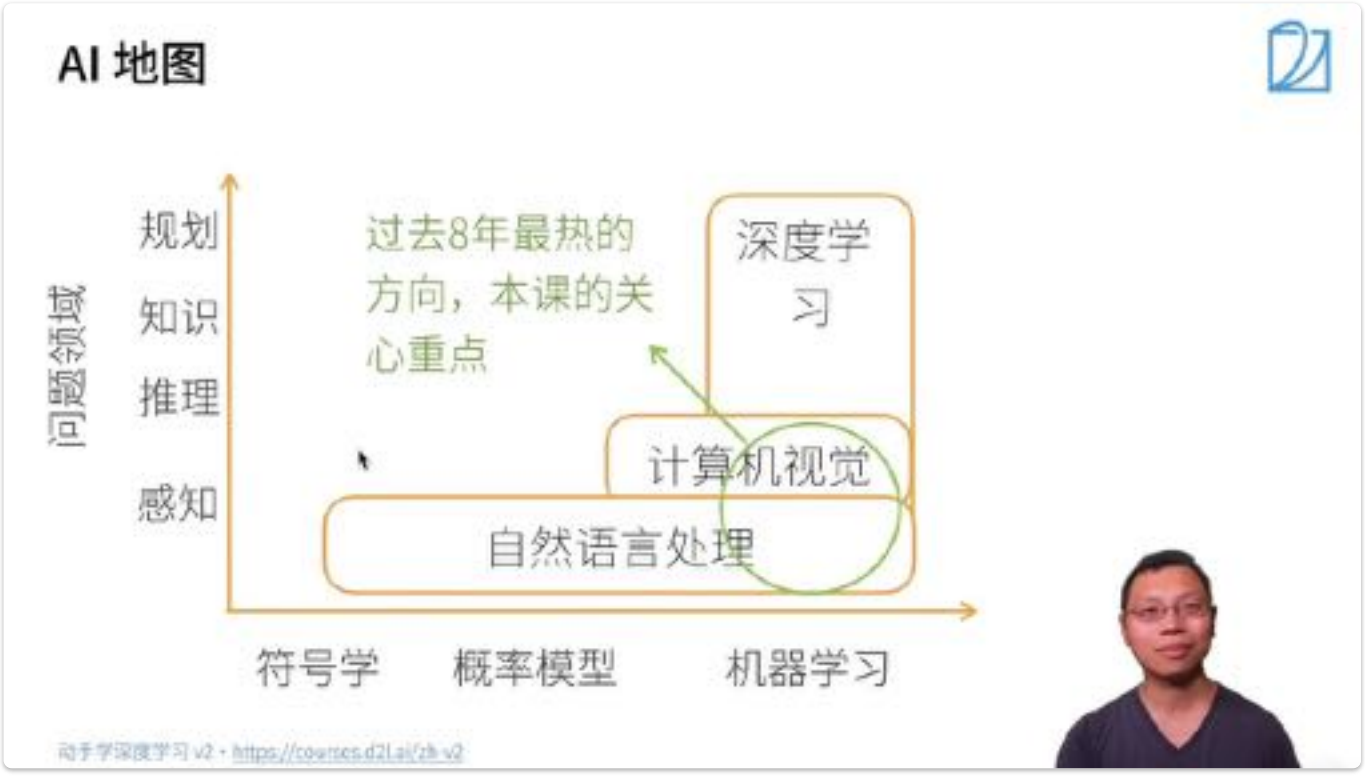
Introduction to DL Link

1.2.1 概述

0:1 什么是深度学习

0:13 AI 地图

首先画一个简单的人工智能地图：



- x轴表示不同的模式or方法：最早的是符号学，接下来是概率模型，之后是机器学习
- y轴表示可以达到的层次：由底部向上依次是

> *感知：了解是什么，比如能够可以看到物体，如面前的一块屏幕*

> *推理：基于感知到的现象，想象或推测未来会发生什么*
>
> *知识：根据看到的数据或者现象，形成自己的知识*
>
> *规划：根据学习到的知识，做出长远的规划*

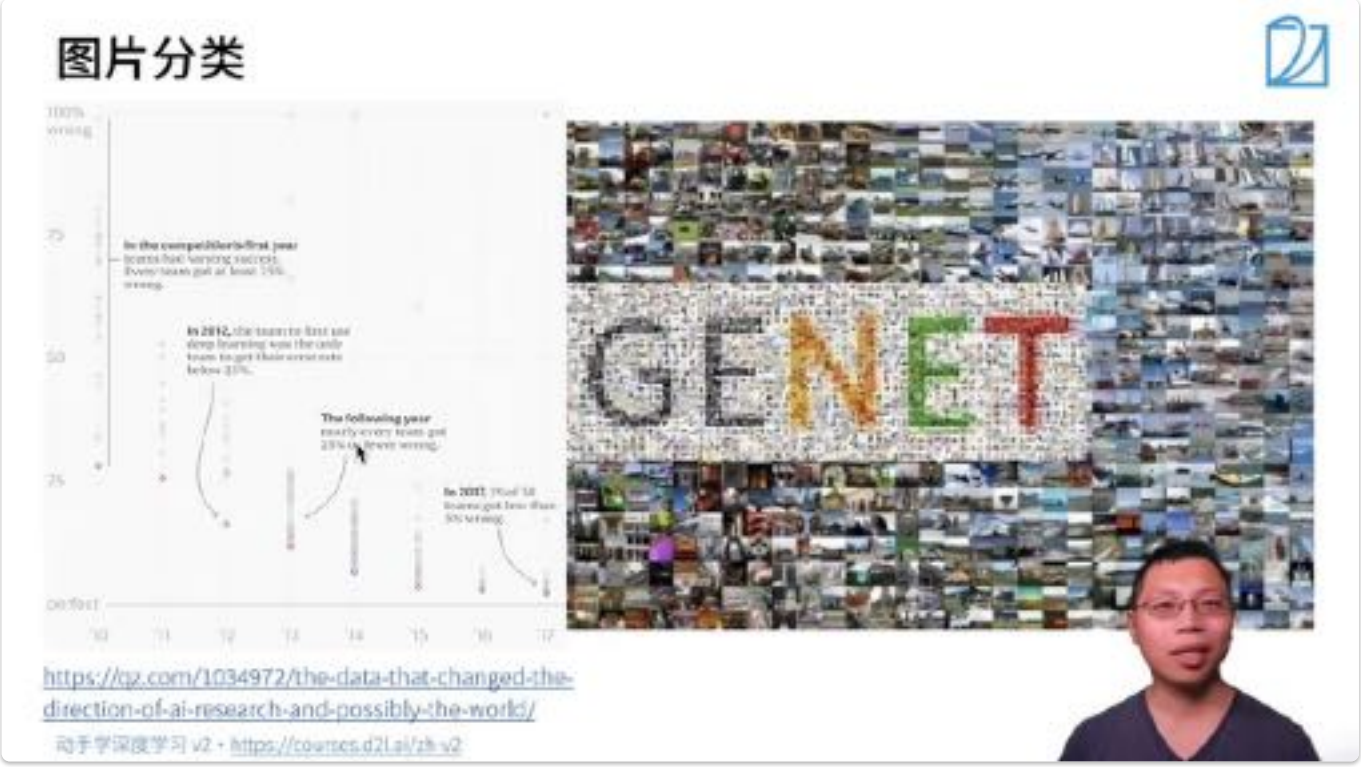
AI地图解读

- 问题领域的一个简单分类
  - **自然语言处理**：
    - 停留在比较简单的**感知**层面，比如自然语言处理用的比较多的机器翻译，给一句中文翻译成英文，很多时候是人的潜意识里面大脑感知的一个问题。一般来说，人可以几秒钟内反应过来的东西，属于感知范围。
    - 自然语言处理最早使用的方法是**符号学**，由于语言具有符号性；之后一段时间比较流行的有**概率模型**，以及现在也用的比较多的**机器学习**。
  - **计算机视觉**：
    - 在简单的感知层次之上，可以对图片做一些**推理**。
    - 图片里都是一些像素，很难用符号学解释，所以一般采用**概率模型**和**机器学习**。
  - **深度学习**
    - 机器学习的一种，更深层的神经网络。
    - 可以做计算机视觉，自然语言处理，强化学习等。
- 过去八年最热的方向，也是本课程关心的重点：
  - 深度学习+计算机视觉 / 自然语言处理

1.2.2 深度学习的应用

3:59 图片分类

深度学习最早是在图片分类上有比较大的突破，ImageNet 是一个比较大的图片分类数据集，



x轴：年份 y轴：错误率 圆点：表示某年份某研究工作/paper的错误率 IMAGENET 数据来源

> *在2010年时，错误率比较高，最好的工作错误率也在26%、27%左右；*
>
> *在2012年，有团队首次使用深度学习将错误率降到25%以下；*
>
> *在接下来几年中，使用深度学习可以将误差降到很低。*
>
> *2017年基本所有的团队可以将错误率降到5%以下，基本可以达到人类识别图片的精度。*

4:43 物体检测和分割

当你不仅仅想知道图片里有什么内容，还想知道物体是什么，在什么位置，这就是物体检测。物体分割是指每一个像素属于什么，属于飞机还是属于人(如下图)，这是图像领域更深层次的一个应用。

5:15 样式迁移

原图片+想要迁移的风格=风格迁移后的图片，加了一个可以根据输入改变图片风格的滤镜。

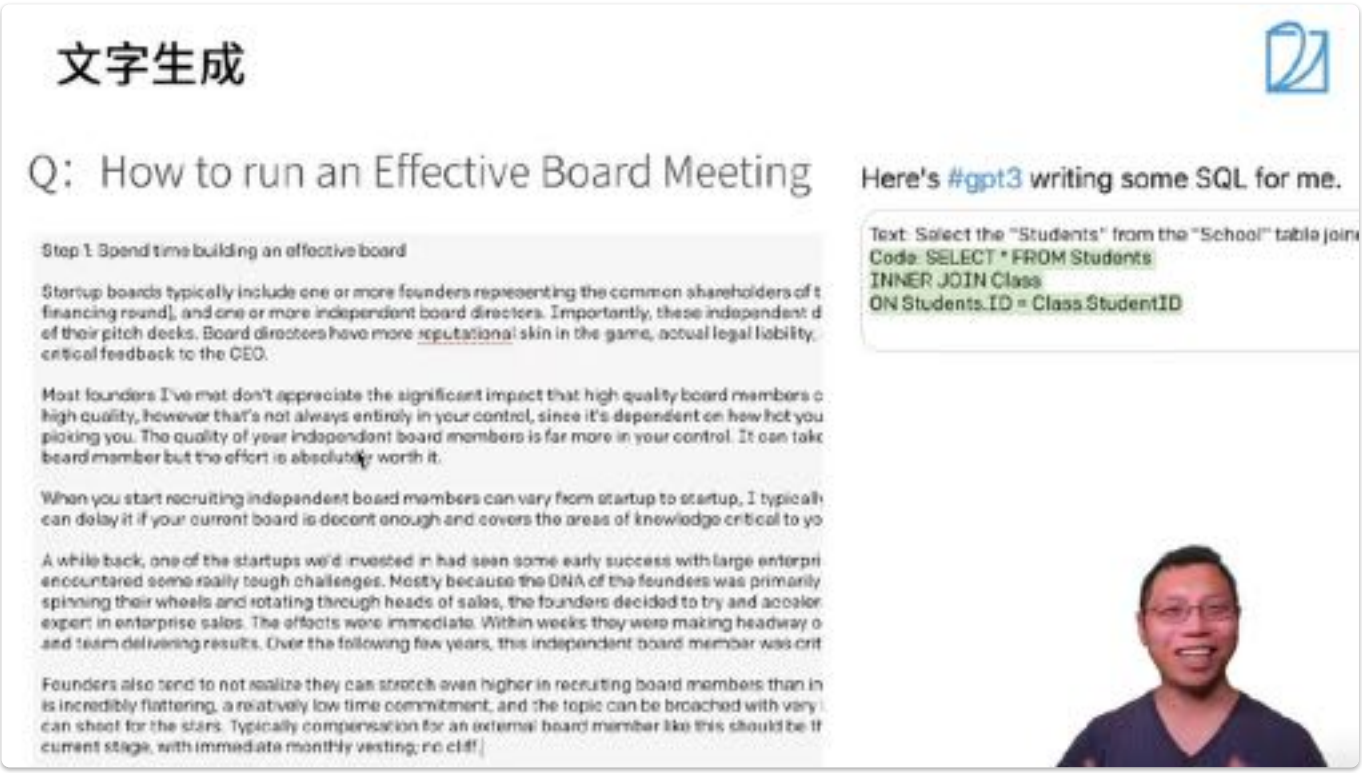
6:1 人脸合成

下图中所有的人脸都是假的，由机器合成的图片：

6:25 文生图

1. 描述：一个胡萝卜宝宝遛狗的图片。
2. 描述：一个牛油果形状的靠背椅。

7:2 文字生成



> *示例1：*
>
> *问题输入：如何举行一个有效的董事会议*

> *机器输出：生成篇章回答*

> *示例2：*
>
> *输入：将Students从School这个table中选出来*
>
> *输出：用于查询的SQL语言*

7:56 无人驾驶

识别车、道路以及各种障碍物等，并规划路线。

8:29 案例研究-广告点击

> *用户输入想要搜索的广告内容，如：baby toy*

> *网站呈现最具有效益的广告(用户更可能点击，且给网站带来更高经济效益)*

步骤：

1. 触发：用户输入关键词，机器先找到一些相关的广告
2. 点击率预估： 利用机器学习的模型预测用户对广告的点击率
3. 排序：利用点击率x竞价的结果进行排序呈现广告，排名高的在前面呈现

模型的训练与预测：

上述步骤的第二步中涉及到模型预测用户的点击率，具体过程如下：

- **模型预测**
  数据 (待预测广告) → 特征提取 → 模型 → 点击率预测

- **模型训练**
  训练数据 (过去广告展现和用户点击) → 特征(X)和用户点击(Y) → 喂给模型训练

- **领域专家**：对特定的应用有比较深的了解，根据展现情况以及用户点击分析用户的行为，期望模型对应用做一些拟合，符合真实数据和分析情况。
- **数据科学家**：利用数据训练模型，训练后模型投入使用，进行预测呈现。
- **AI专家**：应用规模扩大，用户数量增多，模型更加复杂，需要进一步提升精度和性能。

1.2.3 总结

- 通过AI地图，课程从纵向和横向两个维度解读了深度学习在重要问题领域的概况。
- 介绍了深度学习在CV和NLP方面的一些应用
- 简单分析并研究了深度学习实例——广告点击。

1.3 安装

课程链接

1.3.1 安装python

02:04 安装python

首先前提是安装python，这里推荐安装python3.8 输入命令 ***sudo apt install python3.8*** 即可

1.3.2安装Miniconda/Anaconda

- 然后第二步，安装 Miniconda（如果已经安装conda或者Miniconda，则可以跳过该步骤）。

2.1 安装Miniconda

- 安装MIniconda的好处是可以创建很多虚拟环境，并且不同环境之间互相不会有依赖关系，对日后的项目有帮助，如果只想在本地安装的话，不装Miniconda只使用pip即可，第二步可以跳过。
- 如果是Windows系统，输入命令 ***wget https://repo.anaconda.com/miniconda/Miniconda3-py38_4.10.3-Windows-x86_64.exe***
- 如果是macOS，输入命令 ***wget https://repo.anaconda.com/miniconda/Miniconda3-py38_4.10.3-MacOSX-x86_64.sh*** 之后要输入命令 ***sh Miniconda3-py38_4.10.3-MacOSX-x86_64.sh -b***
- 如果是Linux系统，输入命令 ***wget https://repo.anaconda.com/miniconda/Miniconda3-py38_4.10.3-Linux-x86_64.sh*** 之后输入命令 ***sh Miniconda3-py38_4.10.3-Linux-x86_64.sh -b***
- 以上都是基于python3.8版本，对于其他版本，可以访问 ***https://docs.conda.io/en/latest/miniconda.html*** ，下载对应版本即可。

2.2 Miniconda环境操作

- 对于第一次安装Miniconda的，要初始化终端shell，输入命令 ***~/miniconda3/bin/conda init***
- 这样我们就可以使用 ***conda create --name d2l python=3.8 -y*** 来创建一个名为xxx的环境，这里命名为d2l
- 打开xxx环境命令: ***conda activate xxx*** ； 关闭命令： ***conda deactivate xxx***。对于基础conda环境不用添加名

1.3.3 安装Pytorch, d2l, jupyter包

- 第三步，安装深度学习框架和`d2l`软件包

  在安装深度学习框架之前，请先检查你的计算机上是否有可用的GPU（为笔记本电脑上显示器提供输出的GPU不算）。 例如，你可以查看计算机是否装有NVIDIA GPU并已安装CUDA。 如果你的机器没有任何GPU，没有必要担心，因为你的CPU在前几章完全够用。 但是，如果你想流畅地学习全部章节，请提早获取GPU并且安装深度学习框架的GPU版本。

  - 你可以按如下方式安装PyTorch的CPU或GPU版本：

    ```
       pip install torch==1.8.1
    pip install torchvision==0.9.1
    ```

  - 也可以访问官网 ***https://pytorch.org/get-started/locally/*** 选择适合自己电脑pytorch版本下载!

  - 本课程的jupyter notebook代码详见 ***https://zh-v2.d2l.ai/d2l-zh.zip***

  - 下载jupyter notebook： 输入命令 ***pip install jupyter notebook*** （若pip失灵可以尝试pip3），输入密命令 ***jupyter notebook*** 即可打开。

1.3.4 总结

- 本节主要介绍安装Miniconda、CPU环境下的Pytorch和其它课程所需软件包(d2l, jupyter)。对于前面几节来说，CPU已经够用了。
  - 如果您已经安装了Miniconda/Anaconda, Pytorch框架和jupyter记事本, 您只需再安装d2l包，就可以跳过本节视频了开启深度学习之旅了; 如果希望后续章节在GPU下跑深度学习, 可以新建环境安装CUDA版本的Pytorch。
  - 如果需要在Windows下安装CUDA和Pytorch(cuda版本)，用本地GPU跑深度学习，可以参考李沐老师Windows下安装CUDA和Pytorch跑深度学习，如果网慢总失败的同学可以参考cuda11.0如何安装pytorch? - Glenn1Q84的回答 - 知乎。当然，如果不方便在本地进行配置(如无GPU, GPU显存过低等)，也可以选择Colab(需要科学上网)，或其它云服务器GPU跑深度学习。
- 如果pip安装比较慢，可以用镜像源安装：

```
pip install torch torchvision -i http://mirrors.aliyun.com/pypi/simple/  --trusted-host
mirrors.aliyun.com
```


- 如果安装时经常报错, 可以参考课程评论区部分。

1.4 数据操作与数据预处理

1.4.1 数据处理

数据处理

00:19 N维数组样例

为了能够完成各种数据操作，我们需要某种方法来存储和操作数据。通常，我们需要做两件重要的事：

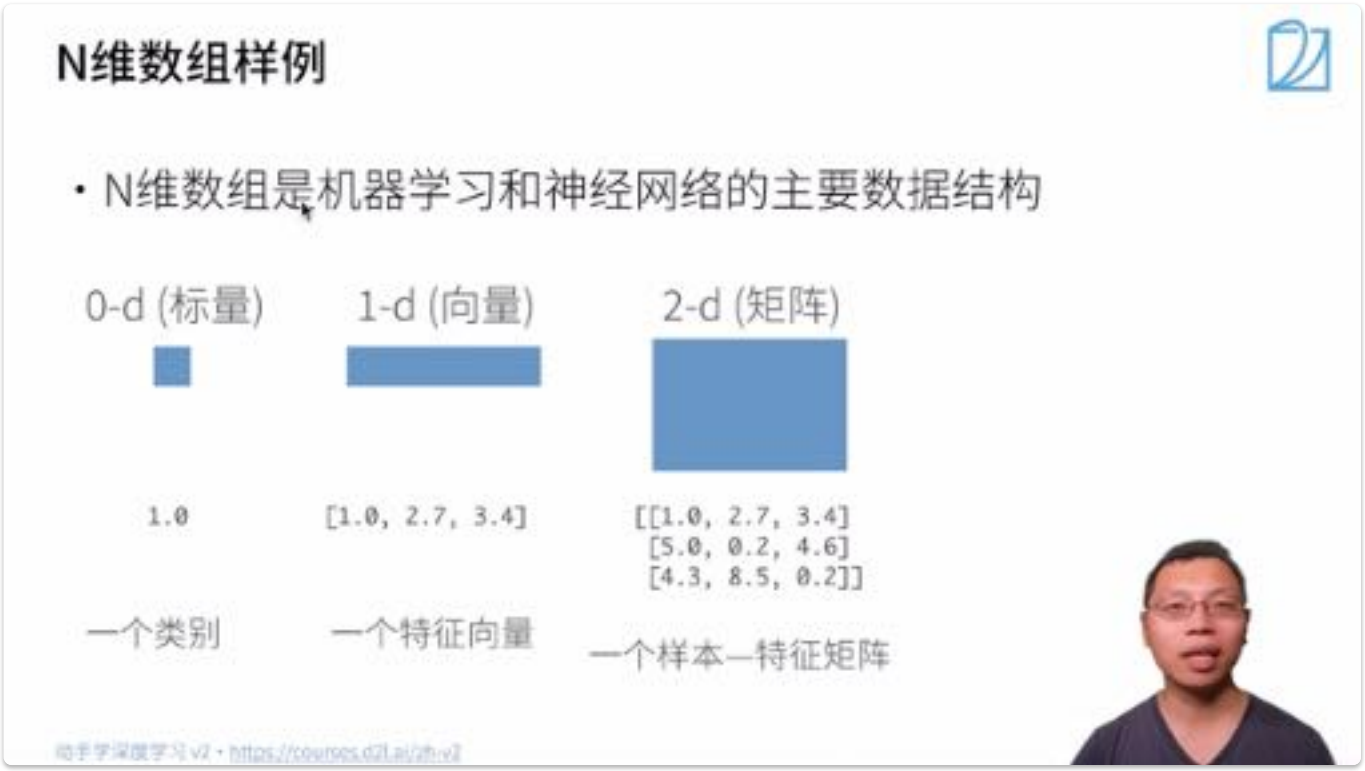
1. 获取数据；
2. 将数据读入计算机后对其进行处理。

如果没有某种方法来存储数据，那么获取数据是没有意义的。

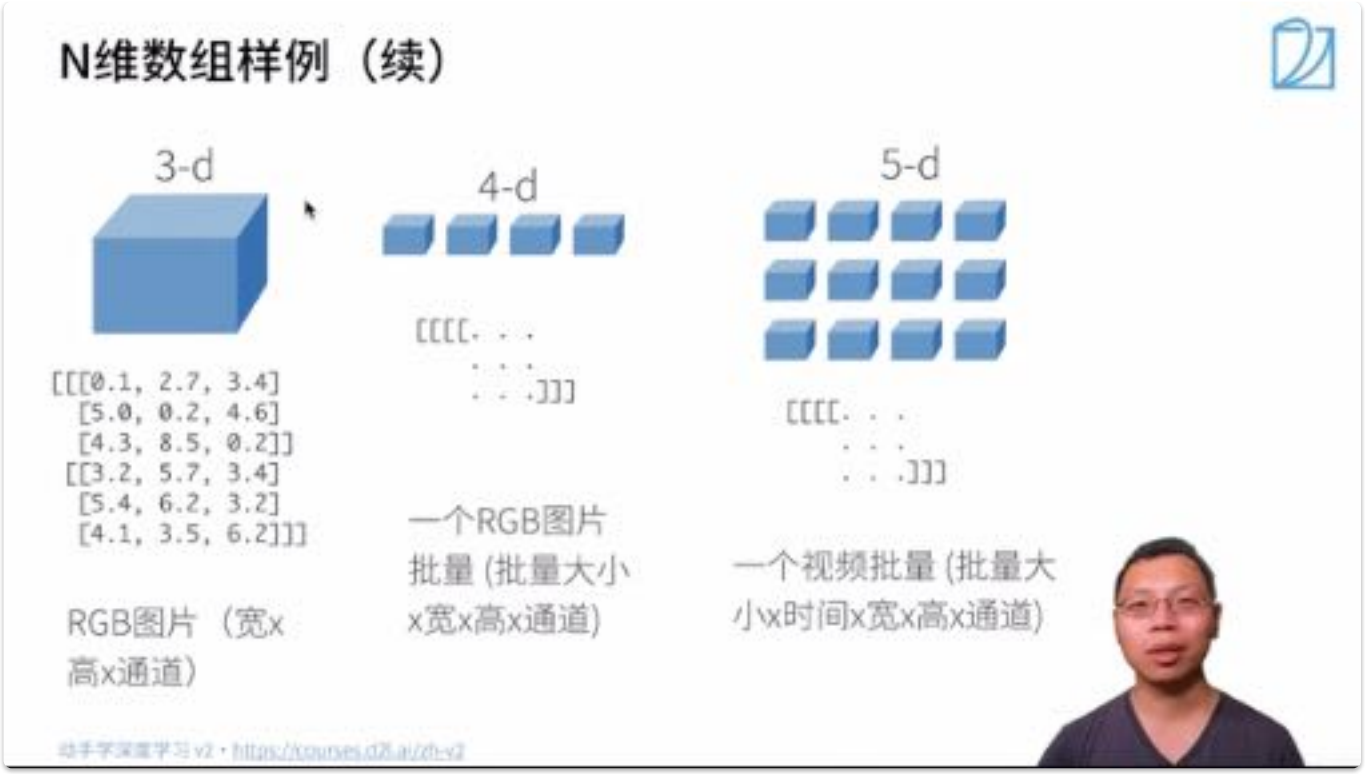
首先，我们介绍 n 维数组，也称为张量（tensor）。PyTorch的张量类与Numpy的`ndarray`类似。但在深度学习框架中应用PyTorch的张量类，又比Numpy的`ndarray`多一些重要功能：

1. tensor可以在很好地支持GPU加速计算，而NumPy仅支持CPU计算；
2. tensor支持自动微分。

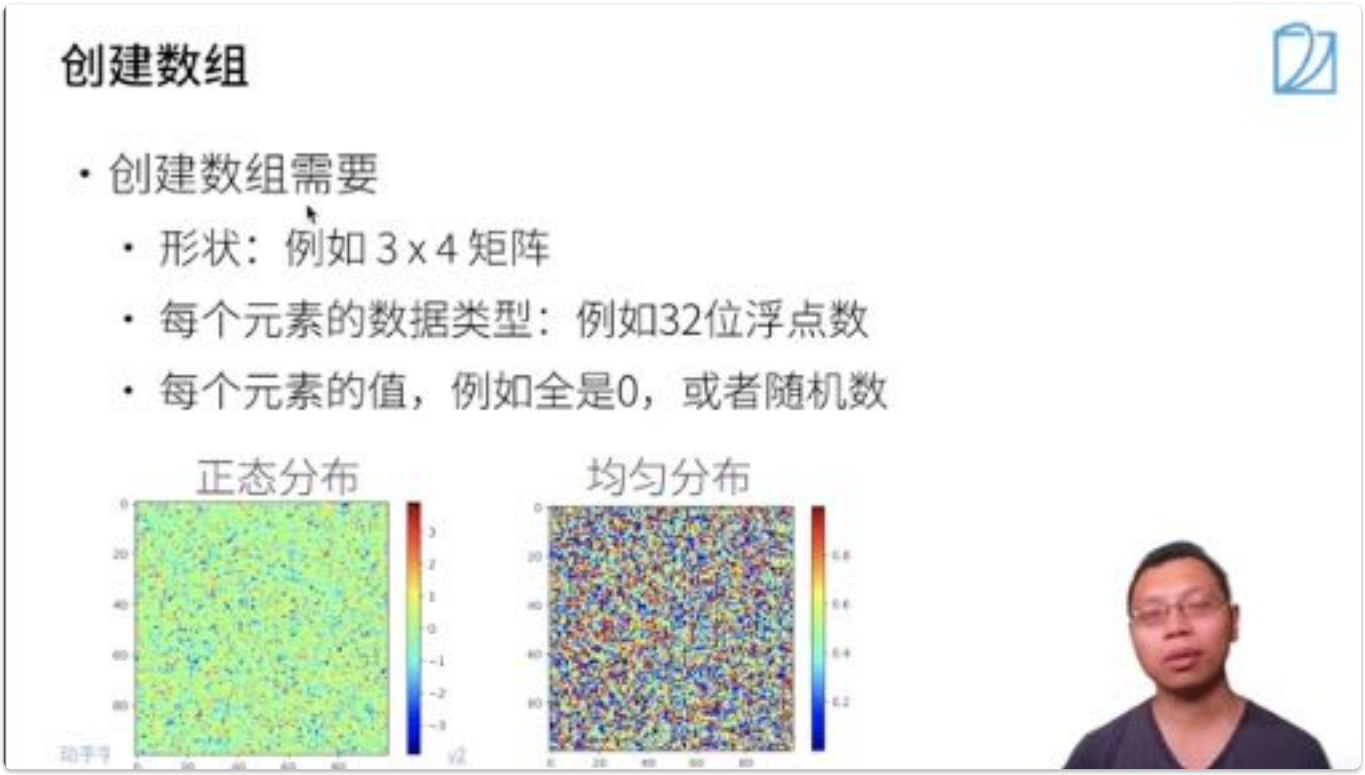
- 低维数组



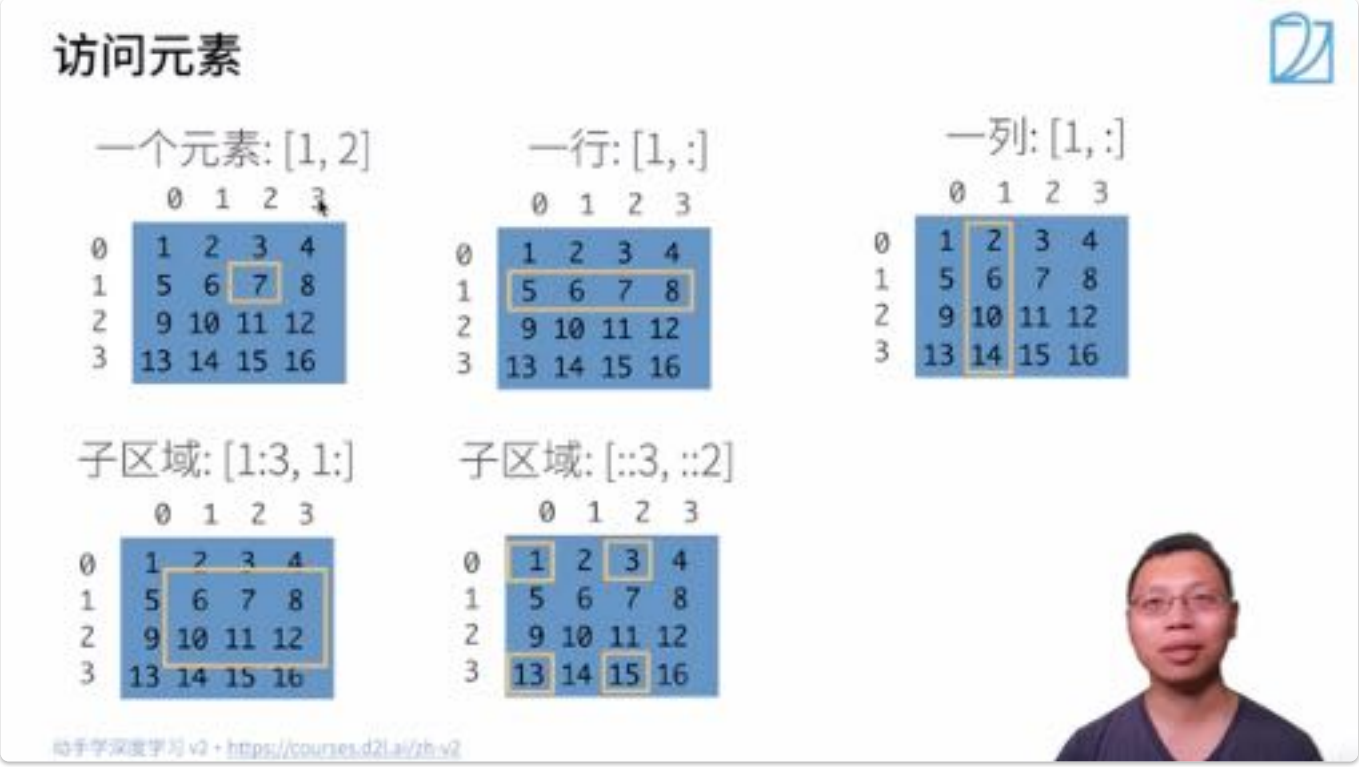
- 高维数组



02:36 创建数组



03:06 访问元素



基本操作

数据操作

张量表示由一些数值组成的数组，这个数组可能有多个维度。

- 一个轴：对应数学上的**向量**（vector）；
- 两个轴：对应数学上的**矩阵**（matrix）；
- 两个轴以上：没有特殊的数学名称。

1. 可使用`arange`创建行向量`x`，**默认创建为浮点数**，张量中的每个值都称为张量的**元素**（element）。

Note：除非额外指定，新的张量默认将存储在内存中，并采用基于CPU的计算。

```python
>>> x = torch.arange(12)
tensor([ 0.,  1.,  2.,  3.,  4.,  5.,  6.,  7.,  8.,  9., 10., 11.])
```

2. 访问张量的形状

```python
>>> x.shape # 访问张量的形状
torch.Size([12])
```

3. 张量的大小

```
>>> x.size() # 元素总数
torch.Size([12])
```

4. 元素个数。在处理更高维度的的张量时，可以用 `numel` 获取张量中元素的个数。

```python
>>> x.numel() # number of elements
12
```

5. 改变张量形状。

```python
>>> X = x.reshape(3, 4)
        tensor([[ 0,  1,  2,  3],
                [ 4,  5,  6,  7],
                [ 8,  9, 10, 11]])


>>> x.reshape(-1,4)
        tensor([[ 0,  1,  2,  3],
                [ 4,  5,  6,  7],
                [ 8,  9, 10, 11]])
```

6. 常量矩阵

```python
>>> torch.zeros((2, 3, 4))
        tensor([[[0., 0., 0., 0.],
                 [0., 0., 0., 0.],
                 [0., 0., 0., 0.]],

                [[0., 0., 0., 0.],
                 [0., 0., 0., 0.],
                 [0., 0., 0., 0.]]])

>>> torch.ones((2, 3, 4))
        tensor([[[1., 1., 1., 1.],
                 [1., 1., 1., 1.],
                 [1., 1., 1., 1.]],

                [[1., 1., 1., 1.],
                 [1., 1., 1., 1.],
                 [1., 1., 1., 1.]]])
```

7. 符合某种分布的矩阵。通过从某个特定的概率分布中随机采样来得到张量中每个元素的值。例如，当构造数组来作为神经网络中的参数时，通常会随机初始化参数的值，使得其服从均值为0、标准差为1的标准正态分布。

```python
>>> torch.randn(3, 4)
        tensor([[ 0.1364,  0.3546, -0.9091, -1.8926],
                [ 0.5786, -0.9019, -0.1305, -0.1899],
                [ 0.5696,  1.1626, -0.5987,  0.4085]])
```

8. 基于列表。

```python
>>> torch.tensor([[2, 1, 4, 3], [1, 2, 3, 4], [4, 3, 2, 1]])
        tensor([[2, 1, 4, 3],
                [1, 2, 3, 4],
                [4, 3, 2, 1]])
```

1.4.2 简单运算

我们想在这些数据上执行数学运算，其中最简单且最有用的操作是按元素（elementwise）运算。我们通过将标量函数升级为按元素向量运算来生成向量值$F:\mathbb{R}^d,\mathbb{R}^d\rightarrow\mathbb{R}^d$。

- 基本运算

```python
>>> x = torch.tensor([1.0, 2, 4, 8])
>>> y = torch.tensor([2, 2, 2, 2])
>>> x + y, x - y, x * y, x / y, x ** y
        (tensor([ 3.,  4.,  6., 10.]),
         tensor([-1.,  0.,  2.,  6.]),
         tensor([ 2.,  4.,  8., 16.]),
```

```
        tensor([0.5000, 1.0000, 2.0000, 4.0000]),
        tensor([ 1.,  4., 16., 64.]))
```

- 指数

```
>>> torch.exp(x)                                                    language-python
       tensor([2.7183e+00, 7.3891e+00, 5.4598e+01, 2.9810e+03])
```

- 连接。

```
>>> X = torch.arange(12, dtype=torch.float32).reshape((3,4))       language-python
>>> Y = torch.tensor([[2.0, 1, 4, 3], [1, 2, 3, 4], [4, 3, 2, 1]])
>>> torch.cat((X, Y), dim=0), torch.cat((X, Y), dim=1)
       (tensor([[ 0.,  1.,  2.,  3.],
                [ 4.,  5.,  6.,  7.],
                [ 8.,  9., 10., 11.],
                [ 2.,  1.,  4.,  3.],
                [ 1.,  2.,  3.,  4.],
                [ 4.,  3.,  2.,  1.]]),
        tensor([[ 0.,  1.,  2.,  3.,  2.,  1.,  4.,  3.],
                [ 4.,  5.,  6.,  7.,  1.,  2.,  3.,  4.],
                [ 8.,  9., 10., 11.,  4.,  3.,  2.,  1.]]))
```

- 三维张量连接。由上述例子可见，当需要按轴-x连结两个张量时，我们就在第x+1层括号内将两张量中的元素相组合。类似地，我们将两个三维张量相连结。

```
>>> X = torch.arange(12, dtype=torch.float32).reshape((3, 2, 2))   language-python
>>> Y = torch.tensor([[[2.0, 1], [4, 3]], [[1, 2], [3, 4]], [[4, 3], [2, 1]]])
>>> torch.cat((X, Y), dim=0), torch.cat((X, Y), dim=1), torch.cat((X, Y), dim=2)
       (tensor([[[ 0.,  1.],
                 [ 2.,  3.]],

                [[ 4.,  5.],
                 [ 6.,  7.]],

                [[ 8.,  9.],
                 [10., 11.]],

                [[ 2.,  1.],
                 [ 4.,  3.]],

                [[ 1.,  2.],
                 [ 3.,  4.]],

                [[ 4.,  3.],
                 [ 2.,  1.]]]),
        tensor([[[ 0.,  1.],
                 [ 2.,  3.],
                 [ 2.,  1.],
                 [ 4.,  3.]],

                [[ 4.,  5.],
                 [ 6.,  7.],
                 [ 1.,  2.],
                 [ 3.,  4.]],

                [[ 8.,  9.],
                 [10., 11.],
                 [ 4.,  3.],
                 [ 2.,  1.]]]),
        tensor([[[ 0.,  1.,  2.,  1.],
```

```
                [ 2.,  3.,  4.,  3.]],

               [[ 4.,  5.,  1.,  2.],
                [ 6.,  7.,  3.,  4.]],

               [[ 8.,  9.,  4.,  3.],
                [10., 11.,  2.,  1.]]])
```

- 逻辑运算。

```
>>> X == Y                                                                    language-python
        tensor([[False,  True, False,  True],
                [False, False, False, False],
                [False, False, False, False]])
```

- 求和。

```
>>> X.sum()                                                                   language-python
        tensor(66.)
```

广播机制

07:31 广播机制

在上面的部分中，我们看到了如何在相同形状的两个张量上执行按元素操作。在某些情况下，**即使形状不同，我们仍然可以通过调用*广播机制*（broadcasting mechanism）来执行按元素操作**。

这种机制的工作方式如下：首先，通过适当复制元素来扩展一个或两个数组，以便在转换之后，两个张量具有相同的形状。其次，对生成的数组执行按元素操作。在大多数情况下，我们将沿着数组中长度为1的轴进行广播，如下例子：

```
>>> a = torch.arange(3).reshape((3, 1))                                       language-python
>>> b = torch.arange(2).reshape((1, 2))
>>> a, b, a + b
        (tensor([[0],
                 [1],
                 [2]]),
         tensor([[0, 1]]))
         tensor([[0, 1],
                 [1, 2],
                 [2, 3]])
```

Note：广播机制只能扩展维度，而不能凭空增加张量的维度，例如在计算沿某个轴的均值时，若张量维度不同，则会报错：

```
>>> C = torch.arange(24, dtype=torch.float32).reshape(2, 3, 4)               language-python
>>> C / C.sum(axis=1)
        RuntimeError: The size of tensor a (3) must match the size of tensor b (2) at non-singleton
dimension 1
```

此时我们需要将`keepdims`设为True，才能正确利用广播机制扩展`C.sum(axis=1)`的维度：

```
>>> C.sum(axis = 1).shape, C.sum(axis = 1, keepdims=True).shape               language-python
        torch.Size([2, 4]), torch.Size([2, 1, 4])

>>> C / C.sum(axis=1, keepdims=True)
        tensor([[[0.0000, 0.0667, 0.1111, 0.1429],
                 [0.3333, 0.3333, 0.3333, 0.3333],
                 [0.6667, 0.6000, 0.5556, 0.5238]],

                [[0.2500, 0.2549, 0.2593, 0.2632],
```

```
                [0.3333, 0.3333, 0.3333, 0.3333],
                [0.4167, 0.4118, 0.4074, 0.4035]]])
```

索引和切片

09:34 元素访问

- 通过索引访问。

```
>>> X[-1], X[1:3]                                                    language-python
(tensor([ 8.,  9., 10., 11.]),
 tensor([[ 4.,  5.,  6.,  7.],
         [ 8.,  9., 10., 11.]]))
```

- 间隔访问。可以用`[::2]`每间隔一个元素选择一个元素，可以用`[::3]`每间隔两个元素选择一个元素：

```
>>> X[::2, ::3]                                                      language-python
tensor([[ 0.,  3.],
        [ 8., 11.]])
```

- 写入数据。除读取外，我们还可以通过指定索引来将元素写入矩阵。

```
>>> X[1, 2] = 9                                                      language-python
tensor([[ 0.,  1.,  2.,  3.],
        [ 4.,  5.,  9.,  7.],
        [ 8.,  9., 10., 11.]])
```

- 多元素赋值。

```
>>> X[0:2, :] = 12                                                   language-python
tensor([[12., 12., 12., 12.],
        [12., 12., 12., 12.],
        [ 8.,  9., 10., 11.]])
```

节约内存

10:50 内存管理

如果在后续计算中没有重复使用`X`，我们也可以使用`X[:] = X + Y`或`X += Y`来减少操作的内存开销。

```
>>> before = id(X) # 内存地址                                        language-python
>>> X += Y
>>> id(X) == before
True
```

转换为 NumPy 对象

将深度学习框架定义的张量转换为NumPy张量（`ndarray`）。torch张量和numpy数组将共享它们的底层内存，就地操作更改一个张量也会同时更改另一个张量。

```
>>> A = X.numpy()                                                    language-python
>>> B = torch.tensor(A)
>>> type(A), type(B)
(numpy.ndarray, torch.Tensor)
```

要(将大小为1的张量转换为Python标量)，我们可以调用`item`函数或Python的内置函数。

```
>>> a = torch.tensor([3.5])                                          language-python
>>> a, a.item(), float(a), int(a)
```

```
(tensor([3.5000]), 3.5, 3.5, 3)
```

1.4.2 数据预处理

00:08 数据预处理

为了能用深度学习来解决现实世界的问题，我们经常从预处理原始数据开始，而不是从那些准备好的张量格式数据开始。在Python中常用的数据分析工具中，我们通常使用`pandas`软件包。像庞大的Python生态系统中的许多其他扩展包一样，`pandas`可以与张量兼容。本节我们将简要介绍使用`pandas`预处理原始数据，并将原始数据转换为张量格式的步骤。

读取数据集

举一个例子，我们首先(创建一个人工数据集，并存储在CSV（逗号分隔值）文件)`../data/house_tiny.csv`中。以其他格式存储的数据也可以通过类似的方式进行处理。下面我们将数据集按行写入CSV文件中。

language-python
```
>>> import os
>>> os.makedirs(os.path.join('..', 'data'), exist_ok=True)
>>> data_file = os.path.join('..', 'data', 'house_tiny.csv')
>>> with open(data_file, 'w') as f:
>>>     f.write('NumRooms,Alley,Price\n')  # 列名
>>>     f.write('NA,Pave,127500\n')  # 每行表示一个数据样本
>>>     f.write('2,NA,106000\n')
>>>     f.write('4,NA,178100\n')
>>>     f.write('NA,NA,140000\n')
```

要从创建的CSV文件中加载原始数据集，我们导入`pandas`包并调用`read_csv`函数。该数据集有四行三列。其中每行描述了房间数量（“NumRooms”）、巷子类型（“Alley”）和房屋价格（“Price”）。

language-python
```
>>> import pandas as pd
>>> data = pd.read_csv(data_file)
>>> print(data)
```

	NumRooms	Alley	Price
0	NaN	Pave	127500
1	2.0	NaN	106000
2	4.0	NaN	178100
3	NaN	NaN	140000

处理缺失值

“NaN”项代表缺失值。*为了处理缺失的数据，典型的方法包括插值法和删除法*.

- 插值法：用一个替代值弥补缺失值；
- 删除法：直接忽略缺失值。

language-python
```
>>> inputs, outputs = data.iloc[:, 0:2], data.iloc[:, 2]
>>> inputs = inputs.fillna(inputs.mean())
>>> print(inputs)
```

	NumRooms	Alley
0	3.0	Pave
1	2.0	NaN
2	4.0	NaN

	NumRooms	Alley
3	3.0	NaN

利用删除法，我们删除缺失元素最多的一个样本。首先，`data.isnull()`矩阵统计每个元素是否缺失，之后在轴 `1` 的方向上（对列进行求和）将`data.isnull()`元素求和，得到每个样本缺失元素个数，取得缺失元素个数最大的样本的序号，并将其删除。

```python
>>> nan_numer = data.isnull().sum(axis=1)
>>> nan_numer
        0    1
        1    1
        2    1
        3    2
        dtype: int64

>>> nan_max_id = nan_numer.idxmax()
>>> data_delete = data.drop([nan_max_id], axis=0) # 删除第 nan_max_id 行
```

	NumRooms	Alley	Price
0	NaN	Pave	127500
1	2.0	NaN	106000
2	4.0	NaN	178100

一般情况下，可以利用`dropna`删除数据：

```python
dropna(axis=0, how='any', thresh=None, subset=None, inplace=False)
```

Note：

- `Axis`：哪个维度
- `How`：如何删除。`any` 表示有 nan 即删除，`all` 表示全为nan删除，`Thresh` 有多少个nan 删除，`Subset` 在哪些列中查找 nan
- `Inplace`：是否原地修改。

离散值处理

对于类别值或离散值，可以将“NaN”视为一个类别。

```python
>>> inputs = pd.get_dummies(inputs, dummy_na=True)
>>> print(inputs)
```

	NumRooms	Alley_Pave	Alley_nan
0	3.0	1	0
1	2.0	0	1
2	4.0	0	1
3	3.0	0	1

转换为张量格式

现在所有条目都是数值类型，可以转换为张量格式。

```language-python
>>> import torch
>>> X, y = torch.tensor(inputs.values), torch.tensor(outputs.values)
        (tensor([[3., 1., 0.],
                 [2., 0., 1.],
                 [4., 0., 1.],
                 [3., 0., 1.]], dtype=torch.float64),
         tensor([127500, 106000, 178100, 140000]))
```

1.4.3 Q&A

07:26 Q&A

Q1：reshape和view的区别?

> *View为浅拷贝，只能作用于连续型张量；Contiguous函数将张量做深拷贝并转为连续型；Reshape在张量连续时和view相同，不连续时等价于先contiguous再view。*

Q2：数组计算吃力怎么办?

> *学习numpy的知识。*

Q3：如何快速区分维度?

> *利用`a.shape`或`a.dim()`。*

Q4：Tensor和Array有什么区别?

> *Tensor是数学上定义的张量，Array是计算机概念数组，但在深度学习中有时将Tensor视为多维数组。*

Q5：新分配了y的内存，那么之前y对应的内存会自动释放吗?

> *Python会在不需要时自动释放内存。*

1.5 线性代数

线性代数

1.5.1 线性代数基础知识

这部分主要是由标量过渡到向量，再从向量拓展到矩阵操作，重点在于理解矩阵层面上的操作（都是大学线代课的内容，熟悉的可以自动忽略）

1. 标量

- 简单操作

$$c = a + b$$

$$c = a \cdot b$$

$$c = \sin a$$

- 长度

$$|a| = \begin{cases} a & \text{if} a > 0 \\ -a & \text{otherwise} \end{cases}$$

$$|a + b| \leq |a| + |b|$$

$$|a \cdot b| = |a| \cdot |b|$$

2. 向量

向量

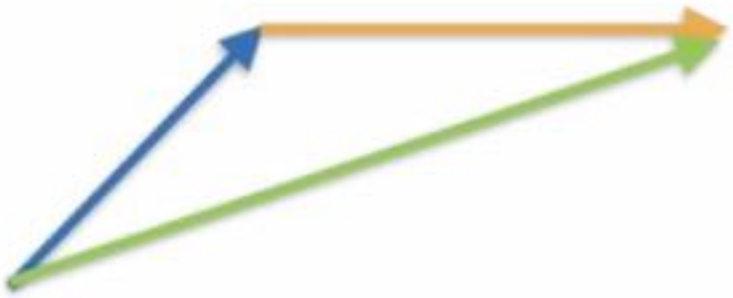
- 简单操作

$$c = a + b \quad \text{where } c_i = a_i + b_i$$
$$c = \alpha \cdot b \quad \text{where } c_i = \alpha b_i$$
$$c = \sin a \quad \text{where } c_i = \sin a_i$$

- 长度

$$\|a\|_2 = \left[\sum_{i=1}^{m} a_i^2\right]^{\frac{1}{2}}$$
$$\|a\| \geq 0 \text{ for all } a$$
$$\|a + b\| \leq \|a\| + \|b\|$$
$$\|a \cdot b\| = |a| \cdot \|b\|$$

向量



$$c = a + b$$

$$c = \alpha \cdot b$$

3. 矩阵

03:49 矩阵

矩阵的操作

矩阵

- 乘法 （矩阵乘以向量）

$$c = Ab \text{ where } c_i = \sum_j A_{ij} b_j$$

矩阵

- 范数

$$c = A \cdot b \text{ hence } \|c\| \leq \|A\| \cdot \|b\|$$

  - 取决于如何衡量 b 和 c 的长度
- 常见范数
  - 矩阵范数：最小的满足的上面公式的值
  - Frobenius 范数

$$\|A\|_{\text{Frob}} = \left[\sum_{ij} A_{ij}^2\right]^{\frac{1}{2}}$$

(矩阵范数麻烦且不常用，一般用F范数)

特殊矩阵

特殊矩阵

- 对称和反对称

$$A_{ij} = A_{ji} \text{ and } A_{ij} = -A_{ji}$$

- 正定

$$\|x\|^2 = x^\top x \geq 0 \text{ generalizes to } x^\top Ax \geq 0$$

(深度学习里基本不会涉及到正定、置换矩阵，这里明确个概念就行)

特殊矩阵

- 正交矩阵
  - 所以行都相互正交
  - 所有行都有单位长度 $U \text{ with } \sum_j U_{ij}U_{kj} = \delta_{ik}$
  - 可以写成 $UU^\top = \mathbf{1}$
- 置换矩阵

$$P \text{ where } P_{ij} = 1 \text{ if and only if } j = \pi(i)$$

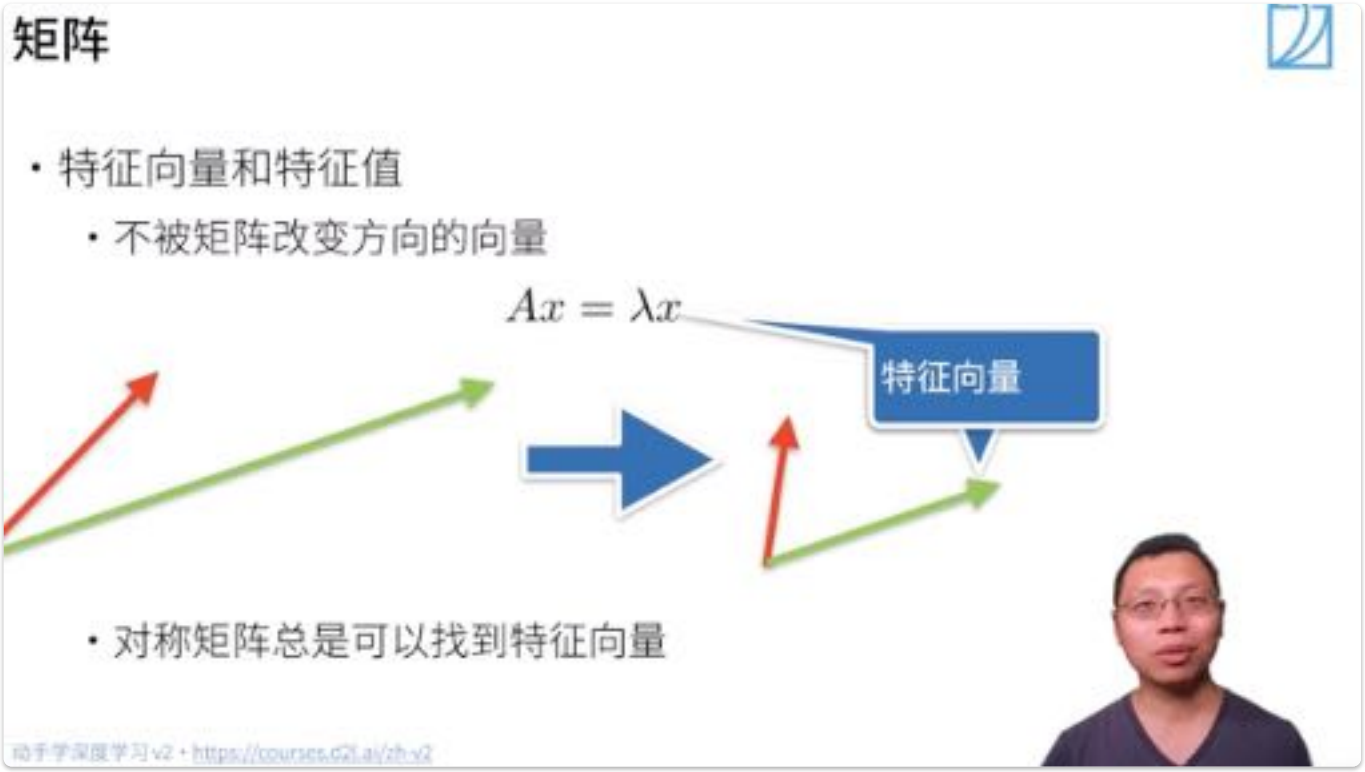
  - 置换矩阵是正交矩阵

特征向量和特征值

08:30 特征向量和特征值

- 数学定义：设 A 是 n 阶方阵，如果存在常数 λ 及非零 n 向量 x，使得 $Ax = \lambda x$，则称 λ 是矩阵 A 的特征值，x是 A 属于特征值 λ 的特征向量。

- 直观理解：不被矩阵 A 改变方向
  （大小改变没关系）的向量 x 就是A的一个特征向量



- 矩阵不一定有特征向量，但是对称矩阵总是可以找到特征向量

1.5.2 线性代数实现

00:09 线性代数实现

这部分主要是应用pytorch实现基本矩阵操作，同样由标量过渡到向量最后拓展到矩阵

1. 标量

```python
import torch    # 应用pytorch框架

# 标量由只有一个元素的张量表示
x = torch.tensor([3.0])     # 单独一个数字表示标量也可以
y = torch.tensor([2.0])     # 单独一个数字表示标量也可以
print(x + y)    # tensor([5.])
print(x * y)    # tensor([6.])
print(x / y)    # tensor([1.5000])
print(x ** y)   # tensor([9.]) 指数运算
```

2. 向量

```python
# 向量可以看作是若干标量值组成的列表
x = torch.arange(4)     # tensor([0, 1, 2, 3])
                        # 生成[0, 4)范围内所有整数构成的张量tensor
print(x[3])             # tensor(3)
                        # 和列表相似，通过张量的索引访问元素
print(len(x))           # 4
                        # 获取张量x的长度
print(x.shape)          # torch.Size([4])
```

```
                        # 获取张量形状，这里x是只有一个轴的张量因此形状只有一个元素
```

3. 矩阵

1. 创建

```python
A = torch.arange(6)      # tensor([0, 1, 2, 3, 4, 5])
B = torch.tensor([[1,2,3],[2,0,4],[3,4,5]])
C = torch.tensor([[[1,2,3],
                   [4,5,6],
                   [7,8,9]],
                  [[0,0,0],
                   [1,1,1],
                   [2,2,2]]])
D = torch.arange(20, dtype=torch.float32)
```

2. 转置

```python
A = torch.arange(6)      # tensor([0, 1, 2, 3, 4, 5])
A = A.reshape(3,2)       # tensor([[0, 1],
                         #         [2, 3],
                         #         [4, 5]])


A = A.T                  # 转置 A.T
                         # tensor([[0, 2, 4],
                         #         [1, 3, 5]])
```

3. reshape

```python
# 使用reshape方法创建一个形状为3 x 2的矩阵A
A = torch.arange(6)      # tensor([0, 1, 2, 3, 4, 5])
A = A.reshape(3,2)       # tensor([[0, 1],
                         #         [2, 3],
                         #         [4, 5]])
```

4. clone

```python
A = torch.arange(20, dtype=torch.float32)
A = A.reshape(5,4)
B = A.clone()   # 通过分配新内存，将A的一个副本分给B，该边B并不影响A的值
print(B)

'''
tensor([[ 0.,  1.,  2.,  3.],
        [ 4.,  5.,  6.,  7.],
        [ 8.,  9., 10., 11.],
        [12., 13., 14., 15.],
        [16., 17., 18., 19.]])
'''
```

5. 按元素乘

两个矩阵的按元素乘法称为 哈达玛积 (Hadamard product)，数学符号为 $\odot$。

```python
>>> A*B

tensor([[ 0.,  1.,  2.,  3.],
        [ 4.,  5.,  6.,  7.],
        [ 8.,  9., 10., 11.],
```

```
        [12., 13., 14., 15.],
        [16., 17., 18., 19.]])
```

6. sum/mean

```python
A = torch.tensor([[[1,2,3],
                   [4,5,6],
                   [7,8,9]],
                  [[0,0,0],
                   [1,1,1],
                   [2,2,2]]])
print(A.shape)
# torch.Size([2, 3, 3])

print(A.sum())
# tensor(54)

print(A.sum(axis=0))
"""
tensor([[ 1,  2,  3],
        [ 5,  6,  7],
        [ 9, 10, 11]])
"""

print(A.sum(axis=0, keepdims=True))
"""
tensor([[[ 1,  2,  3],
         [ 5,  6,  7],
         [ 9, 10, 11]]])
"""

print(A.sum(axis=1))
"""
tensor([[12, 15, 18],
        [ 3,  3,  3]])
"""

print(A.sum(axis=1, keepdims=True))
"""
tensor([[[12, 15, 18]],

        [[ 3,  3,  3]]])
"""

print(A.sum(axis=2))
"""
tensor([[ 6, 15, 24],
        [ 0,  3,  6]])
"""

print(A.sum(axis=2, keepdims=True)) # 保留维度信息
"""
tensor([[[ 6],
         [15],
         [24]],

        [[ 0],
         [ 3],
         [ 6]]])
"""
```

```
print(A.sum(axis=[0,1]))
# tensor([15, 18, 21])

print(A.sum(axis=[0,1], keepdims=True))
# tensor([[[15, 18, 21]]])
```

7. cumsum 累加

```
>>> A, A.cumsum(axis = 1)

(tensor([[ 0.,  1.,  2.,  3.],
         [ 4.,  5.,  6.,  7.],
         [ 8.,  9., 10., 11.],
         [12., 13., 14., 15.],
         [16., 17., 18., 19.]]),
 tensor([[ 0.,  1.,  3.,  6.],
         [ 4.,  9., 15., 22.],
         [ 8., 17., 27., 38.],
         [12., 25., 39., 54.],
         [16., 33., 51., 70.]]))
```

8. numel

```
A = torch.tensor([[0.,0.,0.],[1.,1.,1.]])
print(A.numel())    # 6 元素个数
```

9. 2.3.7 mean

```
A = torch.tensor([[0.,0.,0.],[1.,1.,1.]])
print(A.numel())    # 6 元素个数
print(A.sum())      # tensor(3.)
print(A.mean())     # tensor(0.5000)

# 特定轴
A = torch.tensor([[0.,0.,0.],[1.,1.,1.]])
print(A.shape[0])       # 2
print(A.sum(axis=0))    # tensor([1., 1., 1.])
print(A.mean(axis=0))   # tensor([0.5000, 0.5000, 0.5000])      平均值
```

10. dot

```
>>> x = torch.tensor([0.,1.,2.,3.])
>>> y = torch.tensor([1.,1.,1.,1.])
>>> print(torch.dot(x, y))

tensor(6.)
```

11. mm、mv

```
A = torch.tensor([[0,1,2],
                  [3,4,5]])
B = torch.tensor([[2,2],
                  [1,1],
                  [0,0]])
x = torch.tensor([3,3,3])

print(torch.mv(A, x)) # matrix-vector product 向量积
"""
tensor([ 9, 36])
"""
```

```
print(torch.mm(A, B)) # 矩阵积
"""
tensor([[ 1,  1],
        [10, 10]])
"""
```

12. L1、L2、F范数

```python
x = torch.tensor([3.0, -4.0])
print(torch.abs(x).sum())   # 向量的L1范数: tensor(7.)  x中的每个元素绝对值的和
print(torch.norm(x))        # 向量的L2范数: tensor(5.)  x中的每个元素平方的和开根号

A = torch.ones((4, 9))
print(torch.norm(A))        # 矩阵的F范数:  tensor(6.)  A中的每个元素平方的和开根号
```

13. 运算

```python
A = torch.arange(20, dtype=torch.float32)
A = A.reshape(5,4)
B = A.clone()

print(B)        # tensor([[ 0.,  1.,  2.,  3.],
                #         [ 4.,  5.,  6.,  7.],
                #         [ 8.,  9., 10., 11.],
                #         [12., 13., 14., 15.],
                #         [16., 17., 18., 19.]])


print(A == B)
"""
tensor([[True, True, True, True],
        [True, True, True, True],
        [True, True, True, True],
        [True, True, True, True],
        [True, True, True, True]])
"""

print(A + B)
"""
tensor([[ 0.,  2.,  4.,  6.],
        [ 8., 10., 12., 14.],
        [16., 18., 20., 22.],
        [24., 26., 28., 30.],
        [32., 34., 36., 38.]])
"""


print(A * B)
"""
tensor([[  0.,   1.,   4.,   9.],
        [ 16.,  25.,  36.,  49.],
        [ 64.,  81., 100., 121.],
        [144., 169., 196., 225.],
        [256., 289., 324., 361.]])
"""
```

14. 广播

```python
A = torch.tensor([[1.,2.,3.],
                  [4.,5.,6.]])
B = A.sum(axis=1, keepdims=True)
```

```
print(B)
"""
tensor([[ 6.],
        [15.]])
"""

print(A / B)
"""
tensor([[0.1667, 0.3333, 0.5000],
        [0.2667, 0.3333, 0.4000]])
"""

print(A + B)
"""
tensor([[ 7.,  8.,  9.],
        [19., 20., 21.]])
"""

print(A * B)
"""
tensor([[ 6., 12., 18.],
        [60., 75., 90.]])
"""
```

1.5.3 按特定轴求和

00:01 按特定轴求和

00:01 Q&A

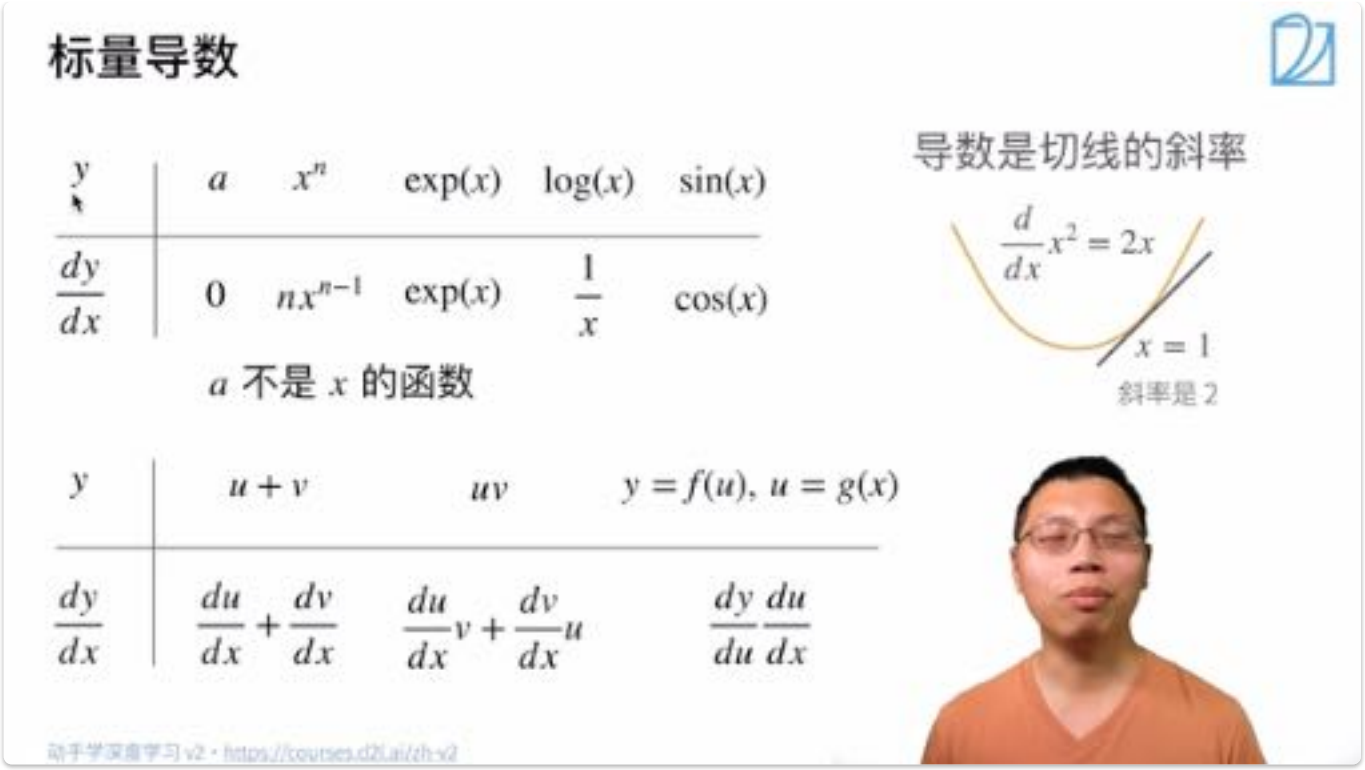
1.6 矩阵计算

00:00 矩阵计算

1.6.1 导数的概念及几何意义

标量导数

- 导数是切线的斜率

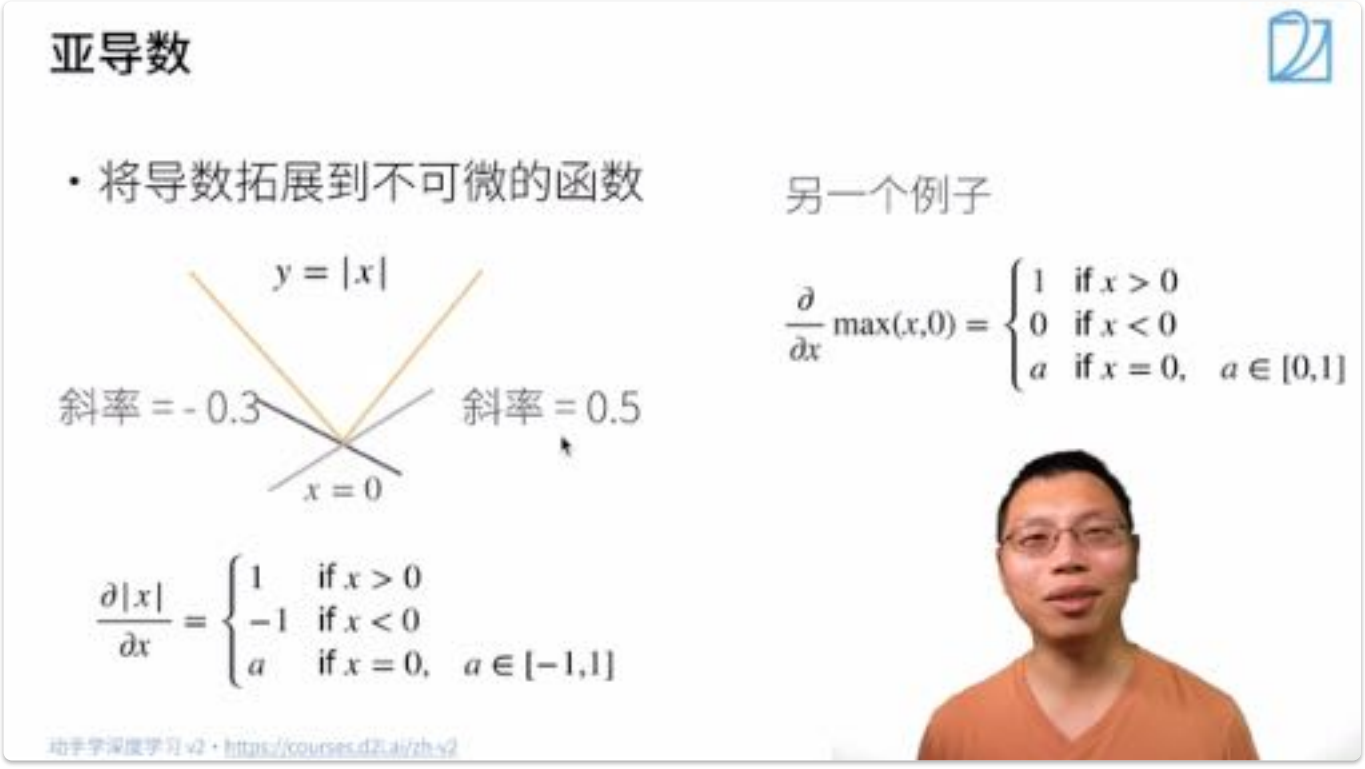


- 指向值变化最大的方向

亚导数 （偏导数）

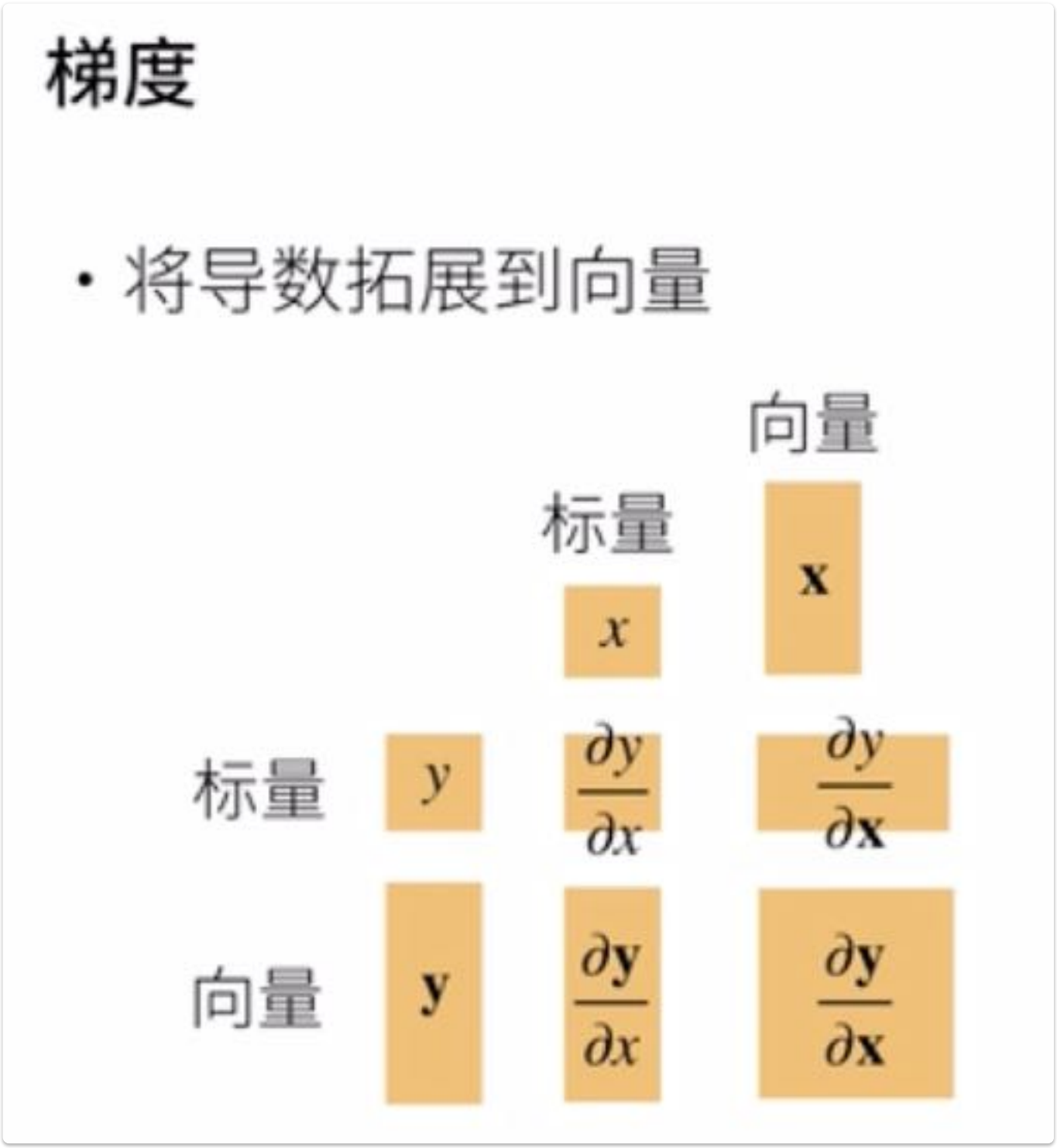
02:16 亚导数

- 将导数拓展到不可微的函数，在不可导的点的导数可以用一个范围内的数表示



梯度

03:43 梯度



1.6.2 函数与标量，向量，矩阵

该部分结合课程视频和参考文章进行总结（参考了知乎文章：矩阵求导的本质与分子布局、分母布局的本质（矩阵求导——本质篇） - 知乎 (zhihu.com)）

- 考虑一个函数 function(input)，针对 function 的类型、输入 input 的类型，可以将函数分为不同的种类：

一、function 为是一个标量

称函数 function 是一个实值标量函数。用细体小写字母 f 表示。

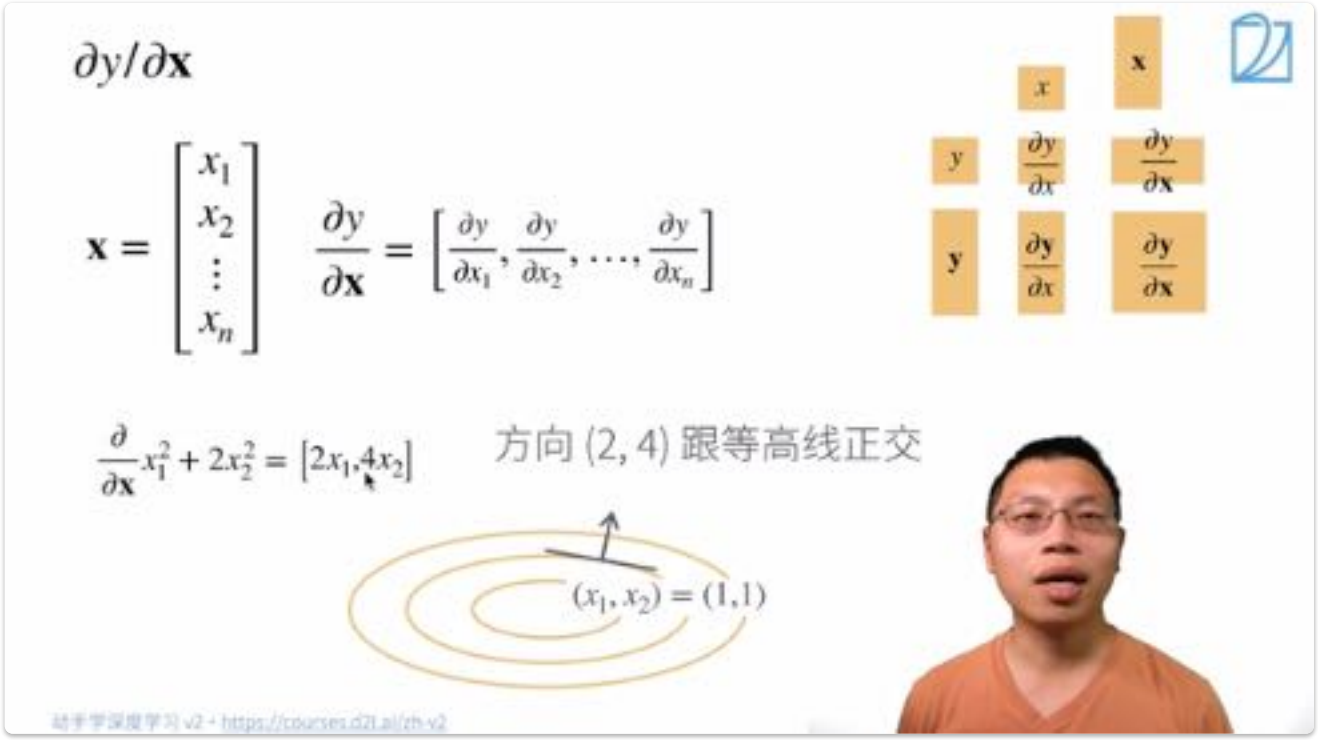
1. input 是一个标量。称函数的变元是标量。用细体小写字母 x 表示。

```
$$f(x) = x+2$$
```

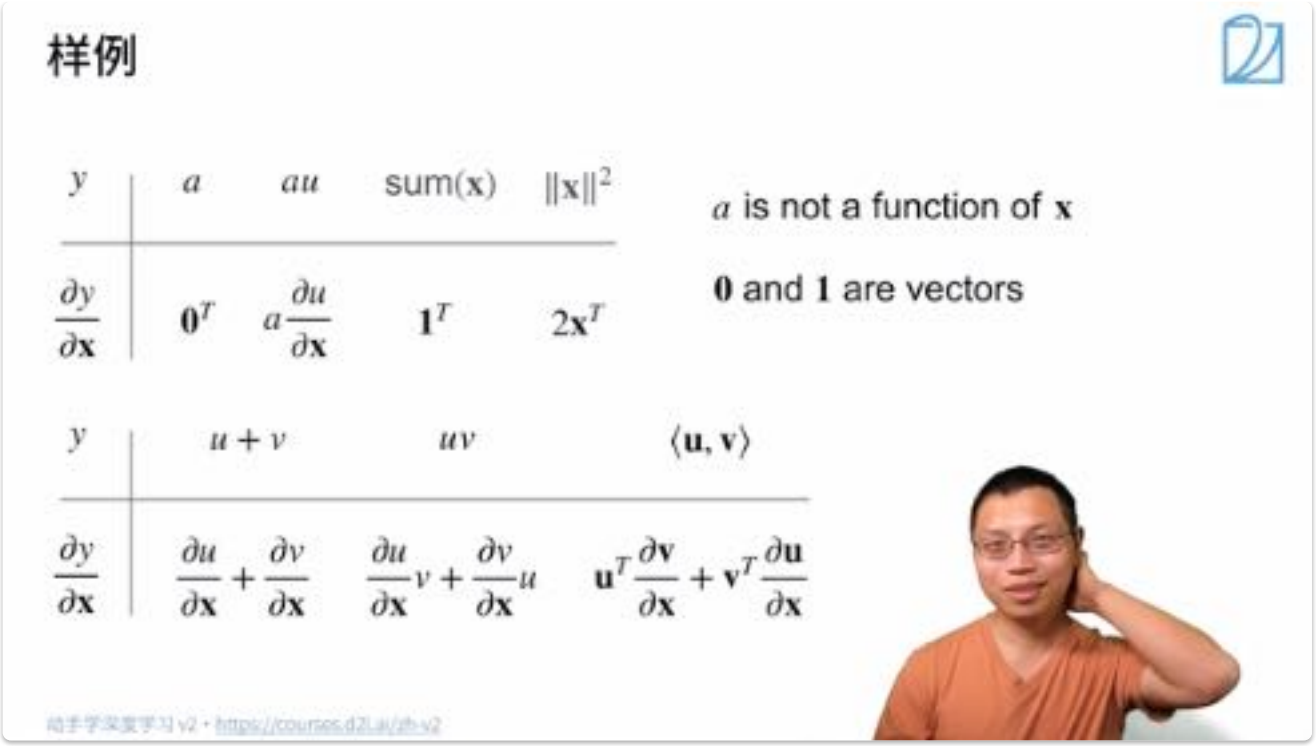
2. input 是一个向量。称 function 的变元是向量。用粗体小写字母 $\boldsymbol{x}$ 表示。

$$
\begin{aligned}
&\text{设 } \boldsymbol{x} = [x_1, x_2, x_3]^T \\
&f(\boldsymbol{x}) = a_1 x_1^2 + a_2 x_2^2 + a_3 x_3^2 + a_4 x_1 x_2
\end{aligned}
$$

求导：



样例：



3. input 是一个矩阵。称 function 的变元是矩阵。用粗体大写字母 $\boldsymbol{X}$ 表示。

$$
\begin{aligned}
&\text{设 } \boldsymbol{X}_{3\times 2}=(x_{ij})_{i=1,j=1}^{3,2}\\
&f(\boldsymbol{X})=a_1x_{11}^2+a_2x_{12}^2+a_3x_{21}^2+a_4x_{22}^2+a_5x_{31}^2+a_6x_{32}^2
\end{aligned}
$$

二、function 为是一个向量

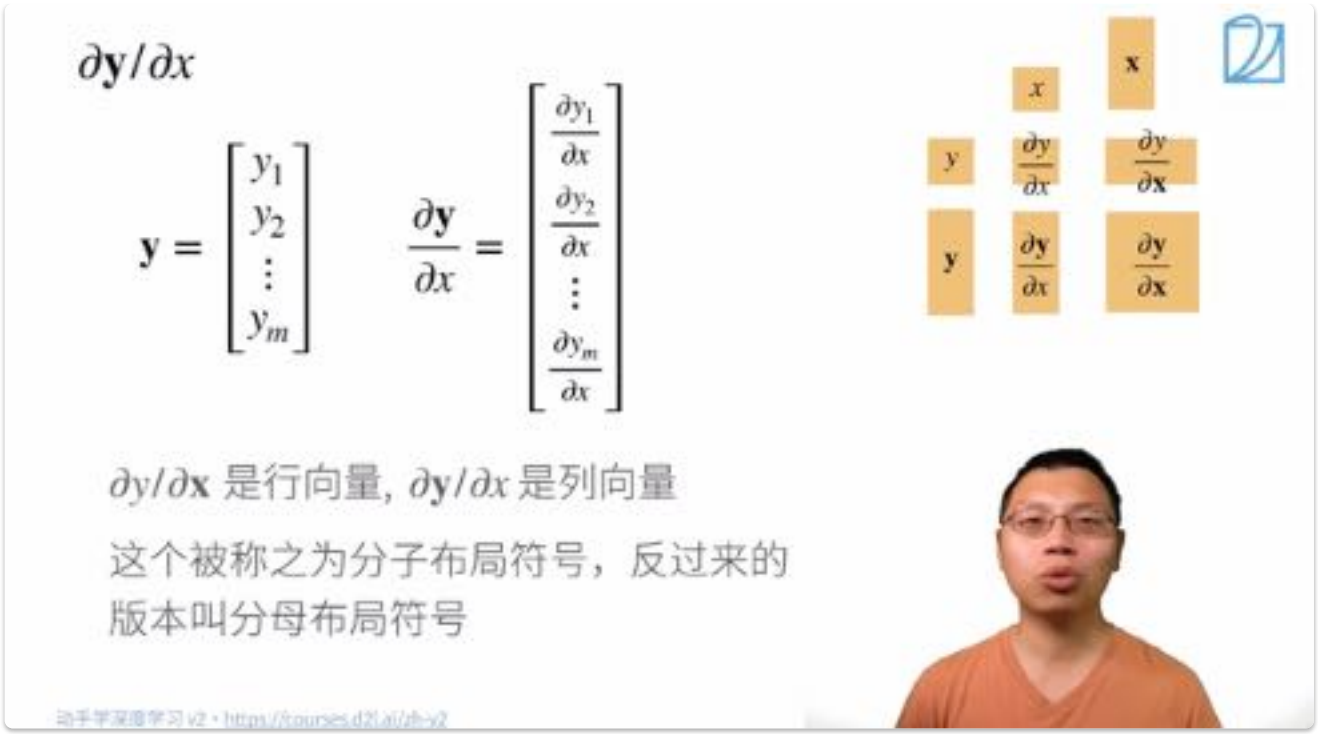
称函数 function 是一个实向量函数。用粗体小写字母 $\boldsymbol{f}$ 表示。

含义：$\boldsymbol{f}$ 是由若干个 f 组成的一个向量。

1. input 是标量。08:39

$$
f_{3\times 1}(x)=\begin{bmatrix}f_1(x)\\f_2(x)\\f_3(x)\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}x+1\\2x+1\\3x^2+1\end{bmatrix}
$$

求导：



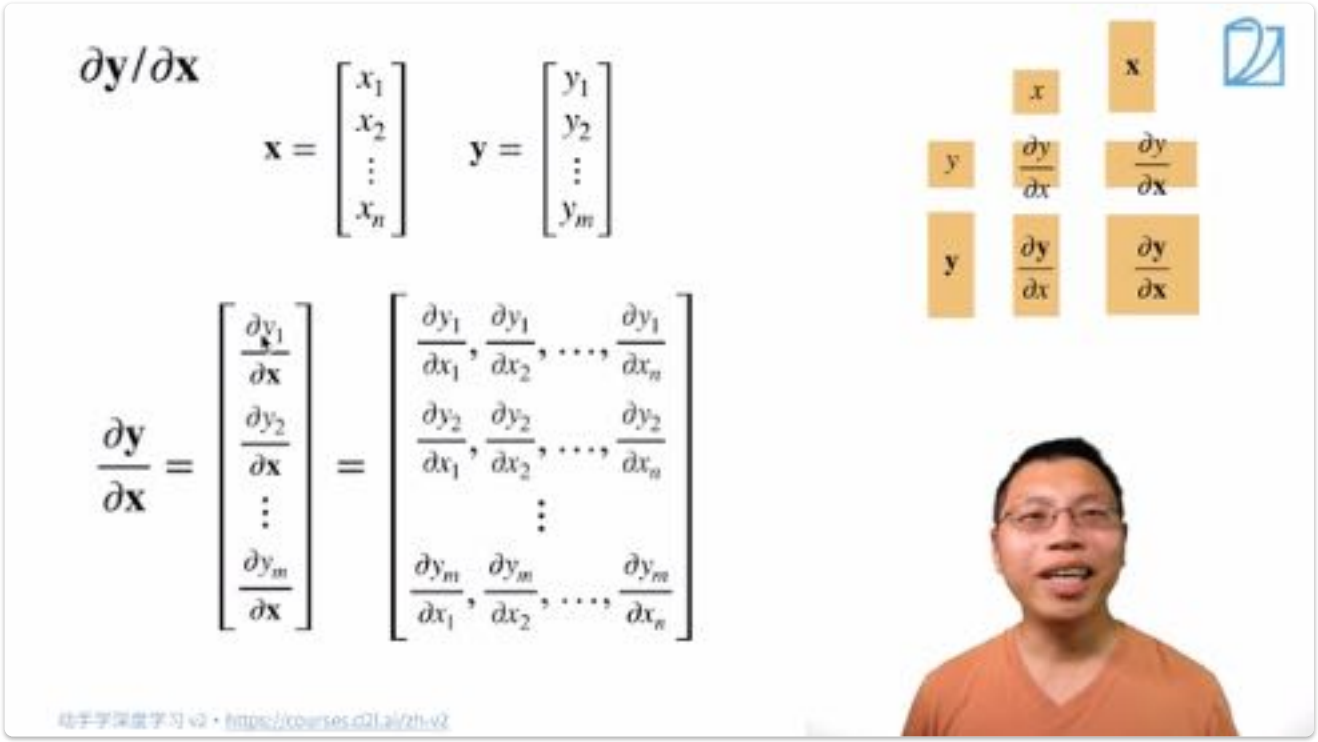
称之为分子布局符号，反过来称为坟墓布局符号。

2. input 是向量。09:15

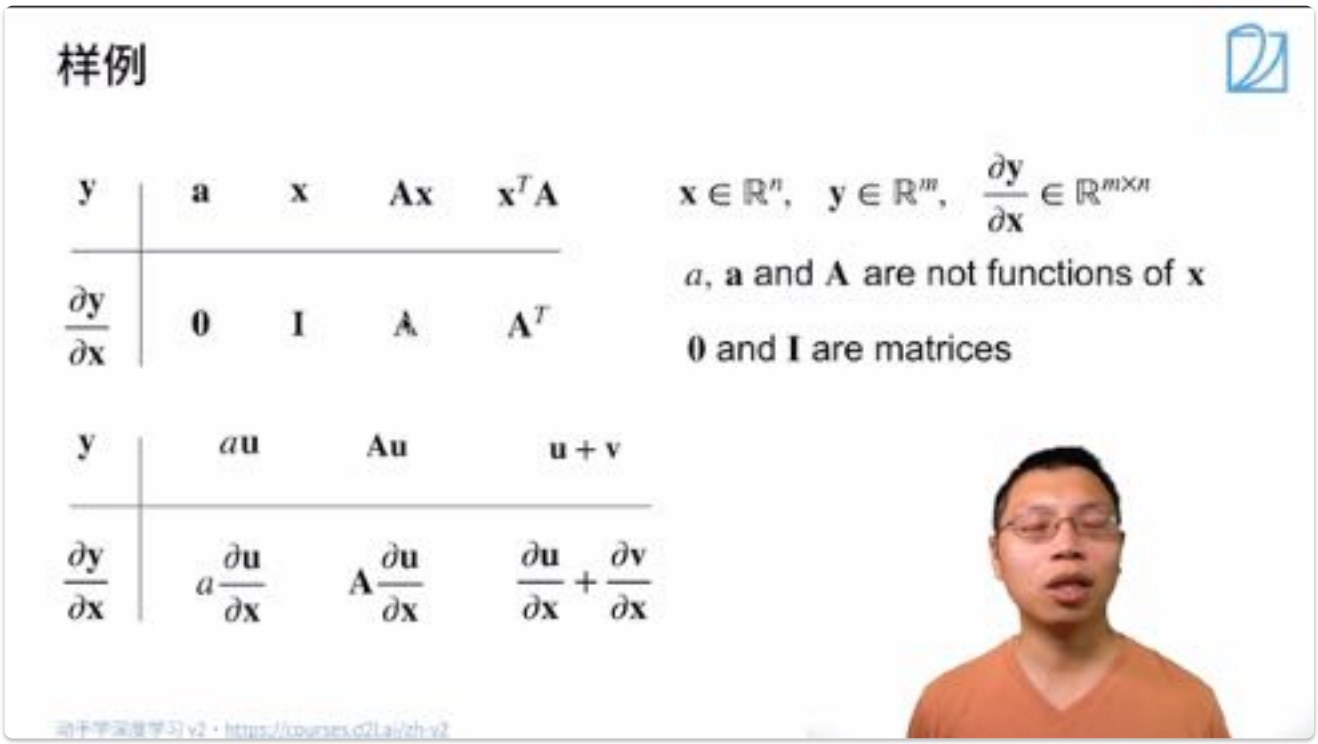
称 function 的变元是向量。用粗体小写字母 $\boldsymbol{x}$ 表示。

$$\boldsymbol{f}_{3\times 1}(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} f_1(\boldsymbol{x}) \\ f_2(\boldsymbol{x}) \\ f_3(\boldsymbol{x}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 + x_2 + x_3 \\ x_1^2 + 2x_2 + 2x_3 \\ x_1 x_2 + x_2 + x_3 \end{bmatrix}$$

求导：



样例：



3. input 是矩阵。

$$\boldsymbol{f}_{3\times 1}(\boldsymbol{X}) = \begin{bmatrix} f_1(\boldsymbol{X}) \\ f_2(\boldsymbol{X}) \\ f_3(\boldsymbol{X}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{11}+x_{12}+x_{21}+x_{22}+x_{31}+x_{32} \\ x_{11}+x_{12}+x_{21}+x_{22}+x_{31}+x_{32}+x_{11}x_{12} \\ 2x_{11}+x_{12}+x_{21}+x_{22}+x_{31}+x_{32}+x_{11}x_{12} \end{bmatrix}$$

三、function 为是一个矩阵

称函数 function 是一个实矩阵函数。用粗体大写字母 $\boldsymbol{F}$ 表示。
含义：$\boldsymbol{F}$ 是由若干个 f 组成的一个矩阵。

1. input 是标量。

$$\boldsymbol{F}_{3\times 2}(x) = \begin{bmatrix} f_{11}(x) & f_{12}(x) \\ f_{21}(x) & f_{22}(x) \\ f_{31}(x) & f_{32}(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x+1 & 2x+2 \\ x^2+1 & 2x^2+1 \\ x^3+1 & 2x^3+1 \end{bmatrix}$$

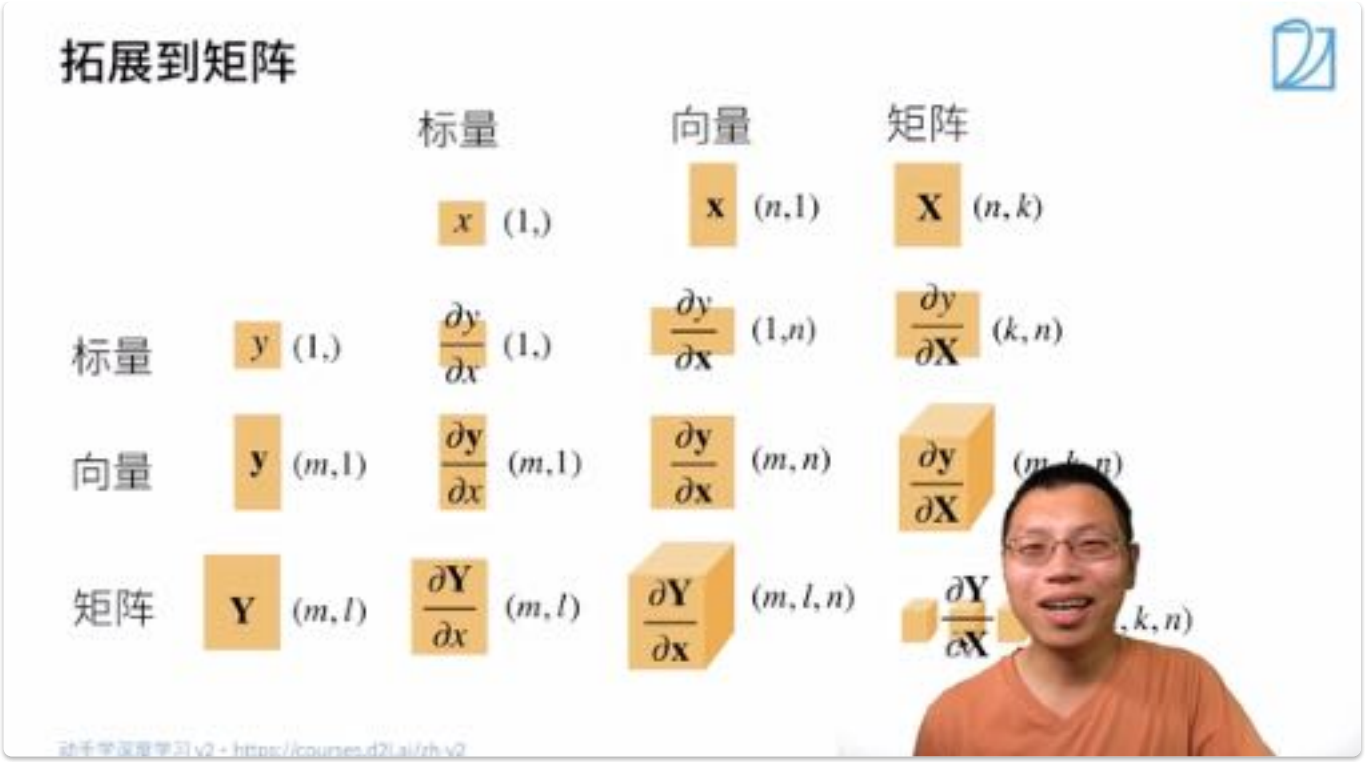
2. input 是一个向量。称 function 的变元是向量。用粗体小写字母 $\boldsymbol{x}$ 表示。

$$\boldsymbol{F}_{3\times 2}(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} f_{11}(\boldsymbol{x}) & f_{12}(\boldsymbol{x}) \\ f_{21}(\boldsymbol{x}) & f_{22}(\boldsymbol{x}) \\ f_{31}(\boldsymbol{x}) & f_{32}(\boldsymbol{x}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2x_1+x_2+x_3 & 2x_1+2x_2+x_3 \\ 2x_1+2x_2+x_3 & x_1+2x_2+x_3 \\ 2x_1+x_2+2x_3 & x_1+2x_2+2x_3 \end{bmatrix}$$

3. input 是矩阵。

$$\begin{aligned} \boldsymbol{F}_{3\times 2}(\boldsymbol{X}) &= \begin{bmatrix} f_{11}(\boldsymbol{X}) & f_{12}(\boldsymbol{X}) \\ f_{21}(\boldsymbol{X}) & f_{22}(\boldsymbol{X}) \\ f_{31}(\boldsymbol{X}) & f_{32}(\boldsymbol{X}) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} x_{11}+x_{12}+x_{21}+x_{22}+x_{31}+x_{32} & 2x_{11}+x_{12}+x_{21}+x_{22}+x_{31}+x_{32} \\ 3x_{11}+x_{12}+x_{21}+x_{22}+x_{31}+x_{32} & 4x_{11}+x_{12}+x_{21}+x_{22}+x_{31}+x_{32} \\ 5x_{11}+x_{12}+x_{21}+x_{22}+x_{31}+x_{32} & 6x_{11}+x_{12}+x_{21}+x_{22}+x_{31}+x_{32} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

求导：



求导的本质

对于一个多元函数：

$$f(x_1, x_2, x_3) = x_1^2 + x_1x_2 + x_2x_3$$

可以将 f 对 x_1，x_2，x_3 的偏导分别求出来，即

$$\begin{cases} \dfrac{\partial f}{\partial x_1} = 2x_1 + x_2 \\ \dfrac{\partial f}{\partial x_2} = x_1 + x_3 \\ \dfrac{\partial f}{\partial x_3} = x_2 \end{cases}$$

矩阵求导也是一样的，本质就是 function 中的每个 f 分别对变元中的每个元素逐个求偏导，只不过写成了向量、矩阵形式而已。

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}_{3\times 1}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f}{\partial x_2} \\ \frac{\partial f}{\partial x_3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2x_1 + x_2 \\ x_1 + x_3 \\ x_2 \end{bmatrix}$$

也可以按照 行向量形式展开：

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}^T_{3\times 1}} = \left[\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \frac{\partial f}{\partial x_3}\right] = [2x_1 + x_2, x_1 + x_3, x_2]$$

X为矩阵时，先把矩阵变元 $\boldsymbol{X}$ 进行转置，再对转置后的每个位置的元素逐个求偏导，结果布局和转置布局一样。

$$\begin{aligned} \mathrm{D}_{\boldsymbol{X}} f(\boldsymbol{X}) = & \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}^T_{m\times n}} \\ = & \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_{11}} & \frac{\partial f}{\partial x_{21}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_{11}} \\ \frac{\partial f}{\partial x_{12}} & \frac{\partial f}{\partial x_{22}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_{m2}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_{1n}} & \frac{\partial f}{\partial x_{2n}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_{mn}} \end{bmatrix}_{n\times m} \end{aligned}$$

- 所以，如果 function 中有 m 个f (标量)，变元中有 n 个元素，那么，每个 f 对变元中的每个元素逐个求偏导后，我们就会产生 $m \times n$ 个结果。

1.6.3 矩阵求导的布局

- 经过上述对求导本质的推导，关于矩阵求导的问题，实质上就是对求导结果的进一步排布问题

  对于2.2（f为向量，input也为向量）中的情况，其求导结果有两种排布方式，一种是分子布局，一种是分母布局

1. 分子布局。就是分子是列向量形式，分母是行向量形式 （课上讲的）

$$\frac{\partial \boldsymbol{f}_{2\times 1}(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}_{3\times 1}^{T}}=\begin{bmatrix}\frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \frac{\partial f_1}{\partial x_3}\\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \frac{\partial f_2}{\partial x_3}\end{bmatrix}_{2\times 3}$$

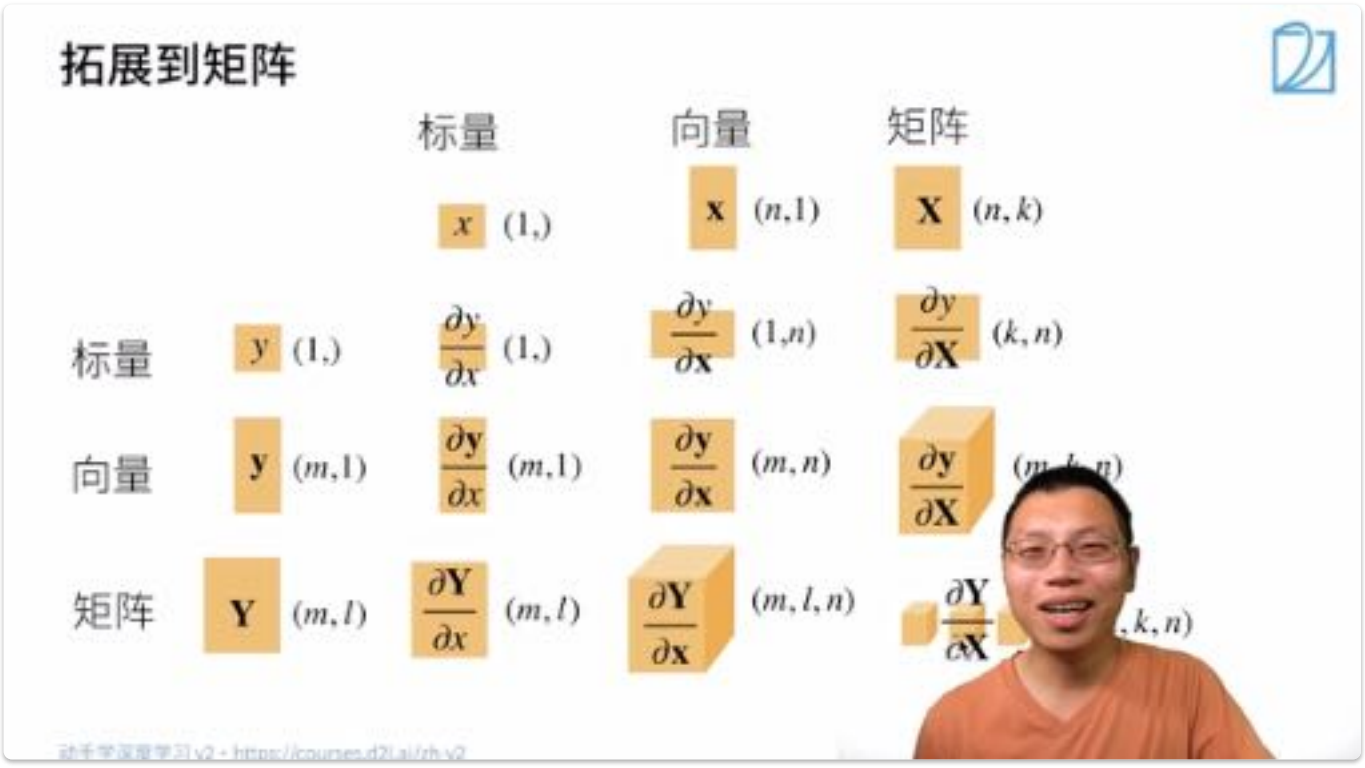
2. 分母布局，就是分母是列向量形式，分子是行向量形式

$$\frac{\partial \boldsymbol{f}_{2\times 1}^{T}(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}_{3\times 1}}=\begin{bmatrix}\frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_1}\\ \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2}\\ \frac{\partial f_1}{\partial x_3} & \frac{\partial f_2}{\partial x_3}\end{bmatrix}_{3\times 2}$$

将求导推广到矩阵，由于矩阵可以看作由多个向量所组成，因此对矩阵的求导可以看作先对每个向量进行求导，然后再增加一个维度存放求导结果。

> *例如当 F 为矩阵，input 为矩阵时，F 中的每个元素 f(标量) 求导后均为一个矩阵（按照课上的展开方式），因此每个 f（包含多个 f(标量)）求导后为存放多个矩阵的三维形状，再由于矩阵 F 由多个 f 组成，因此F求导后为存放多个 f 求导结果的四维形状。*

对于不同 f 和 input 求导后的维度情况总结如下图所示：



1.6.4 Q&A

00:00 Q&A

1.7 自动求导

1.7.1 向量链式法则

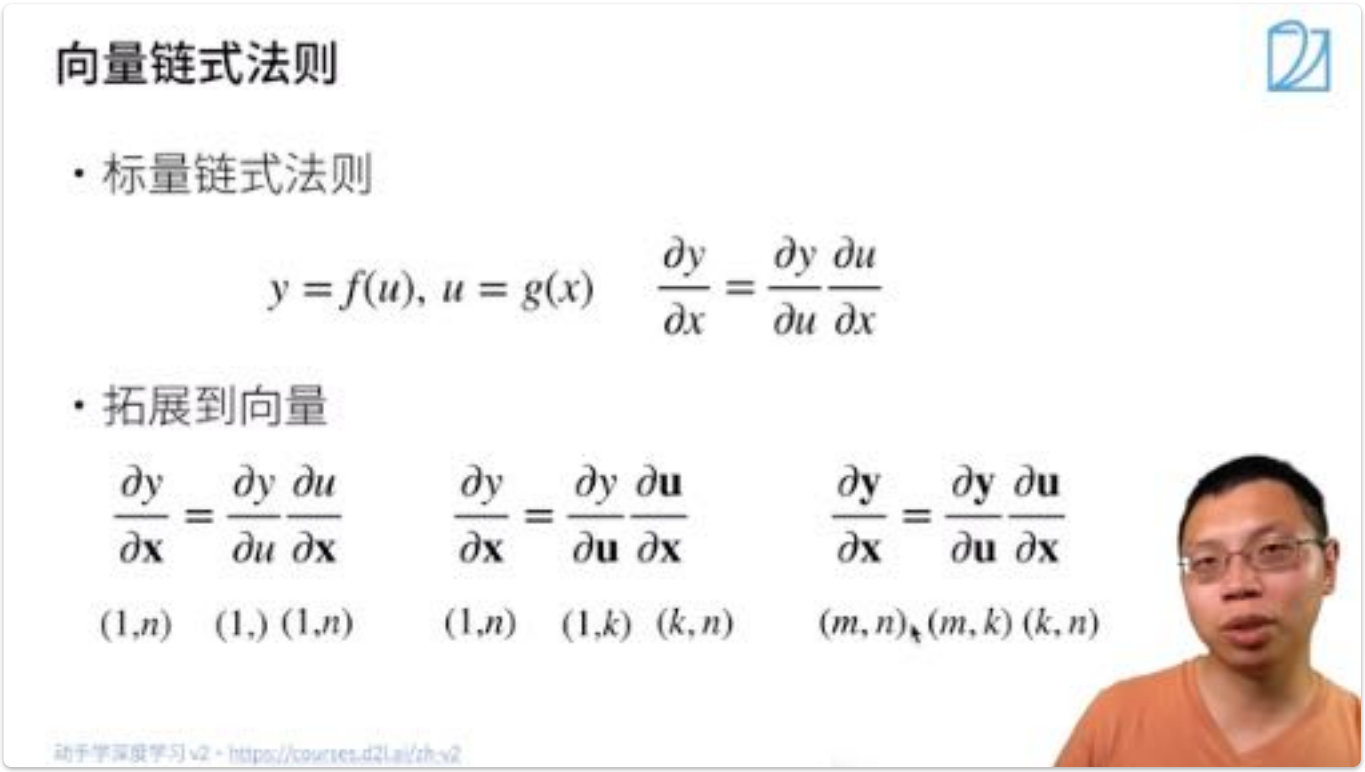
00:00 自动求导

1. 标量链式法则

$$y = f(u), u = g(x) \quad \frac{\partial y}{\partial x} = \frac{\partial y}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x}$$

2. 拓展到向量

> *需要注意维数的变化*
>
> *下图三种情况分别对应：*
>
> 1. *y为标量，x为向量*
> 2. *y为标量，x为矩阵*
> 3. *y、x为矩阵*

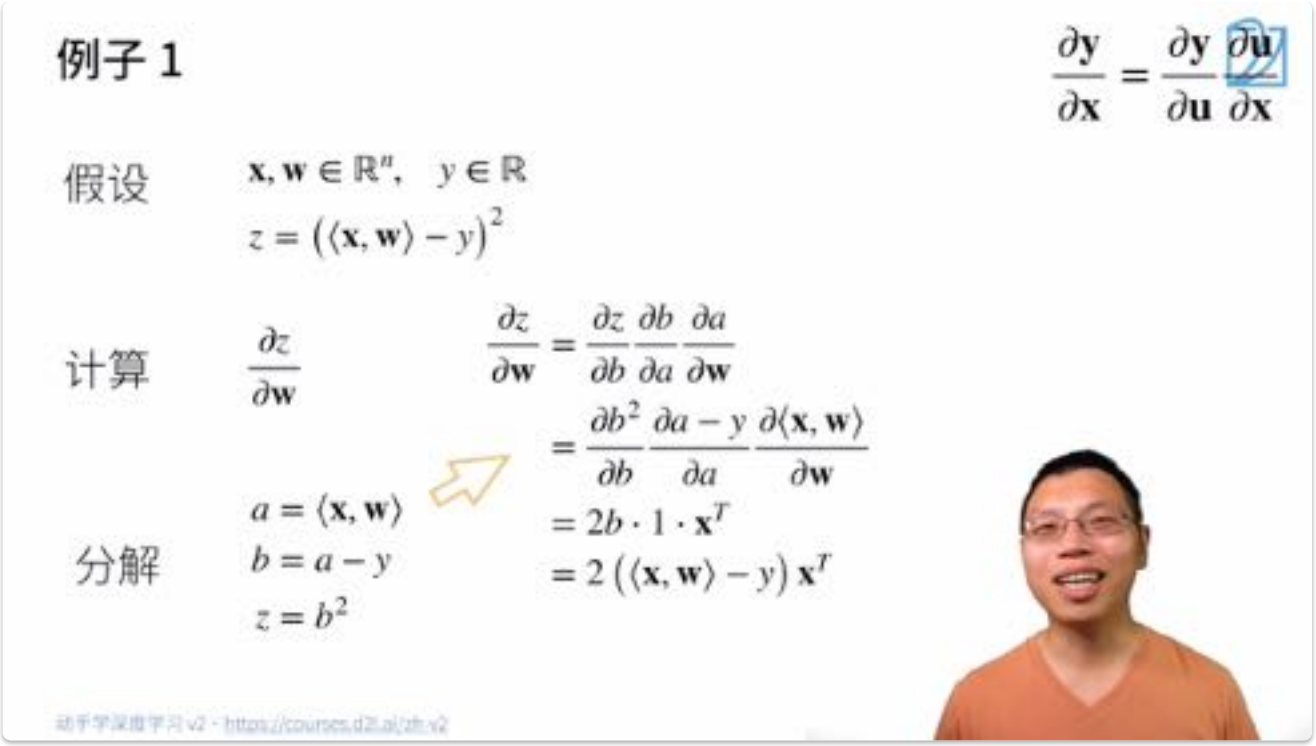


链式法则示例

01:30 链式法则示例

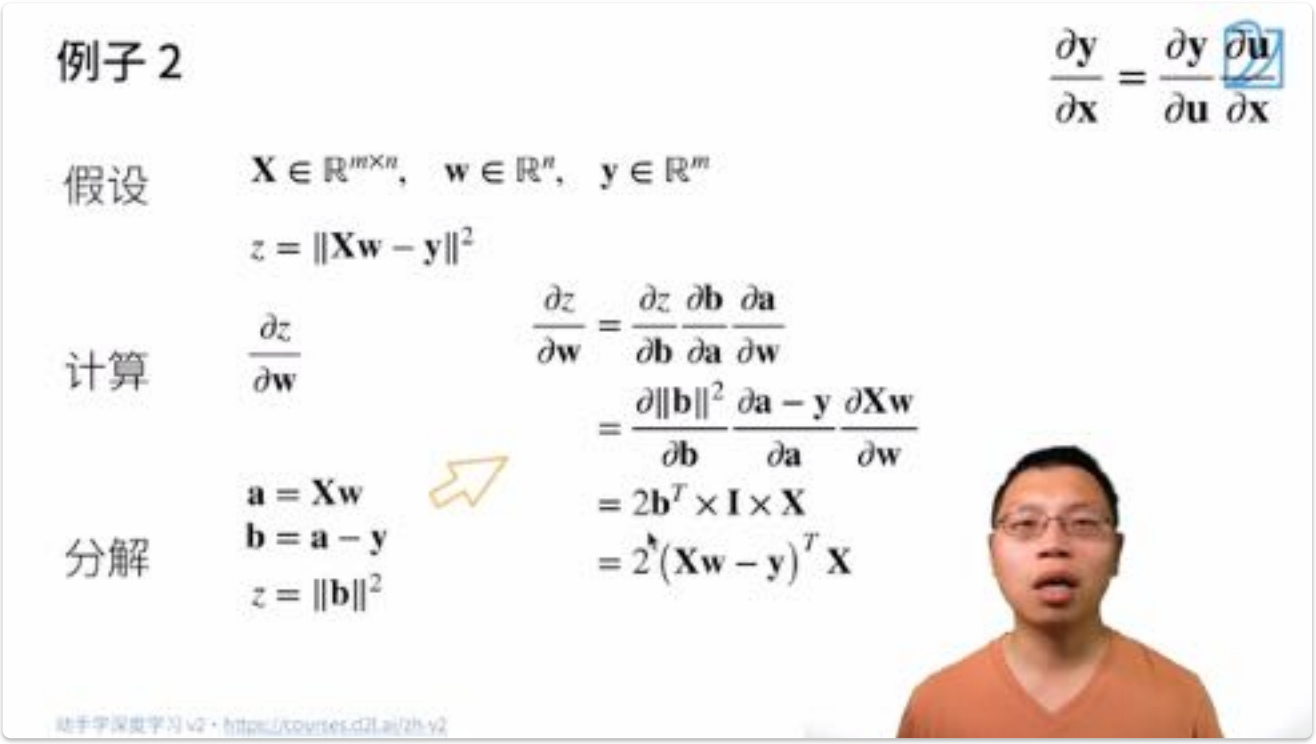
1. 标量对向量求导

> *这里应该是用分子布局，所以是X转置*



2. 涉及到矩阵的情况

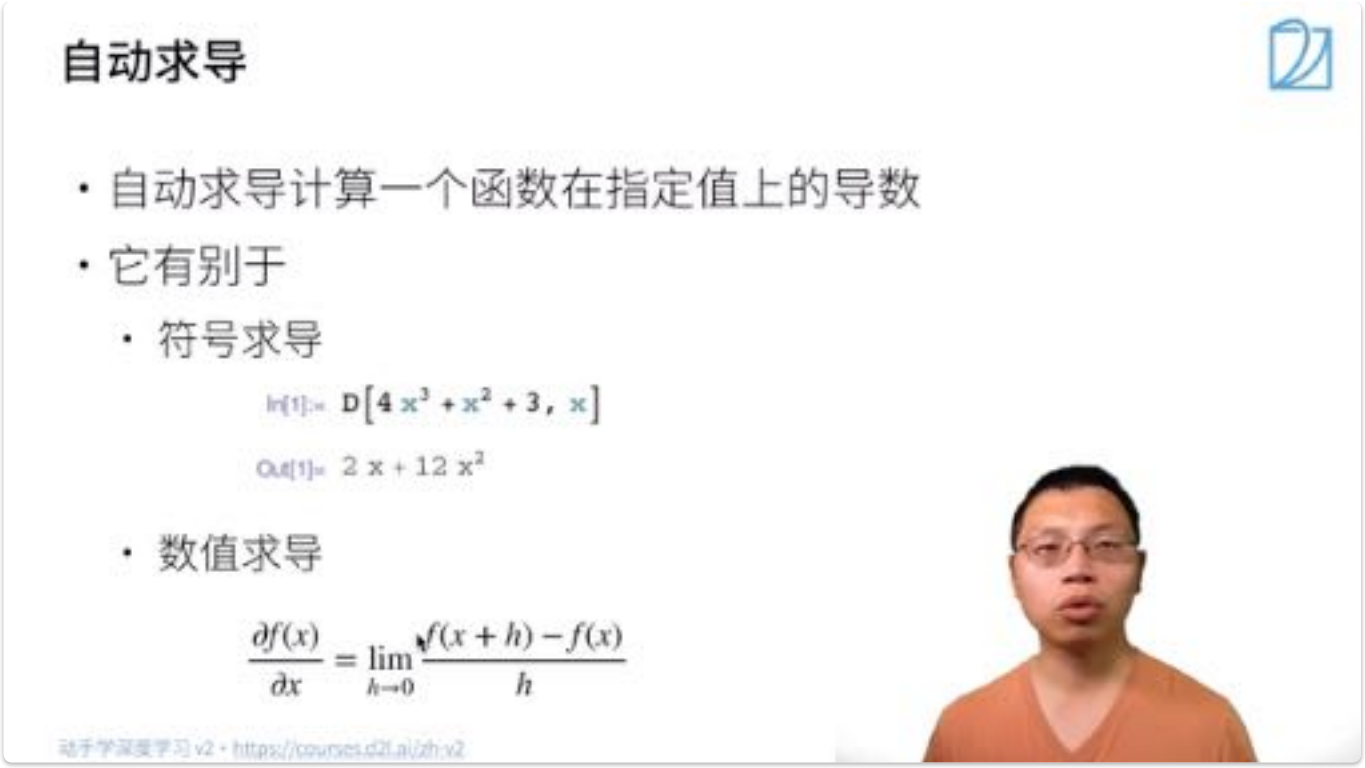
> *X是mxn的矩阵,w为n维向量，y为m维向量； z对Xw-y做L2 norm,为标量； 过程与例一大体一致；*



Note： 由于在神经网络动辄几百层，手动进行链式求导是很困难的，因此我们需要借助自动求导

1.7.2 自动求导

04:20 自动求导



含义：计算一个函数在指定值上的导数。它有别于：

- 符号求导
- 数值求导

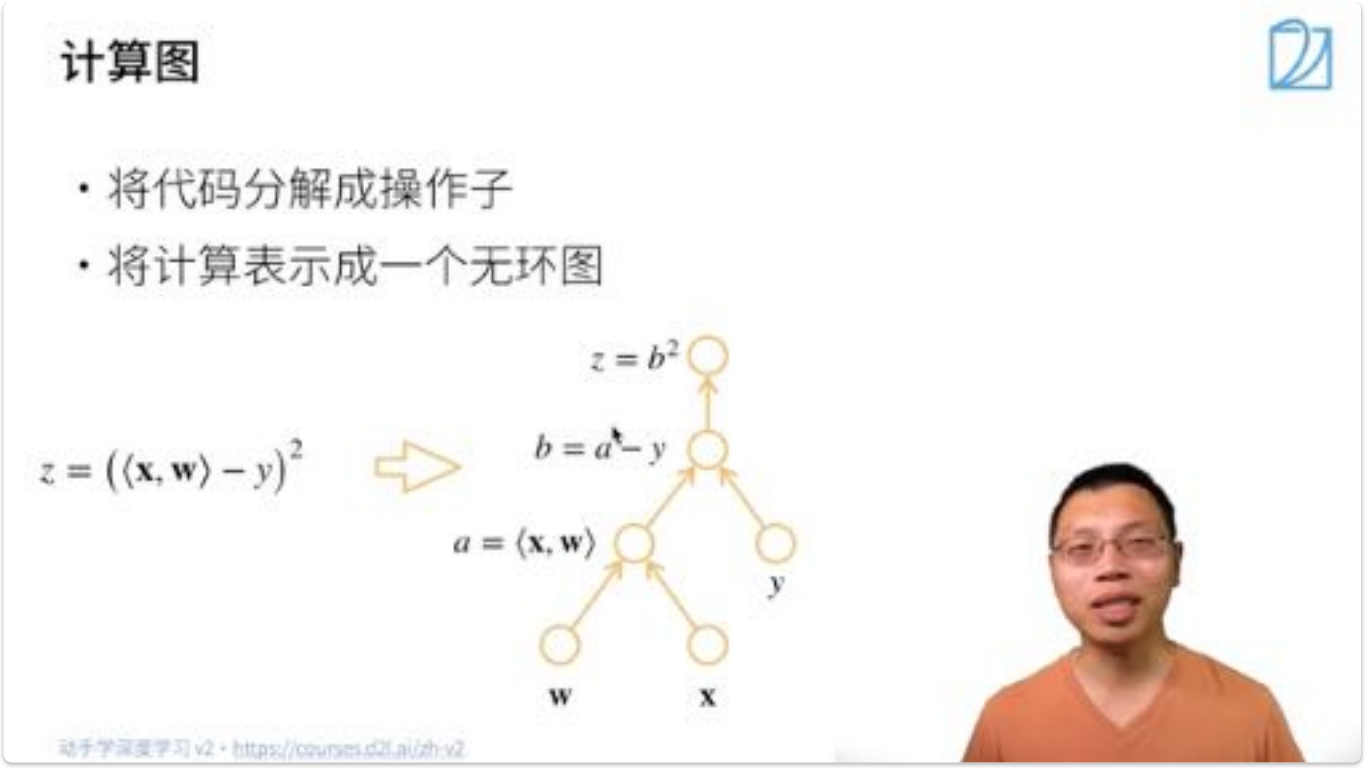
一、计算图

05:11 自动求导

一、步骤：

- 将代码分解成操作子
- 将计算表示成一个无环图

下图自底向上其实就类似于链式求导过程：



二、计算图有两种构造方式

- 显示构造

  > *可以理解为先定义公式再代值*
  >
  > *Tensorflow/Theano/MXNet*

```python
from mxnet import sym

a = sym.var()
b = sym.var()
c = 2 * a + b
# bind data into a and b later
```

- 隐式构造

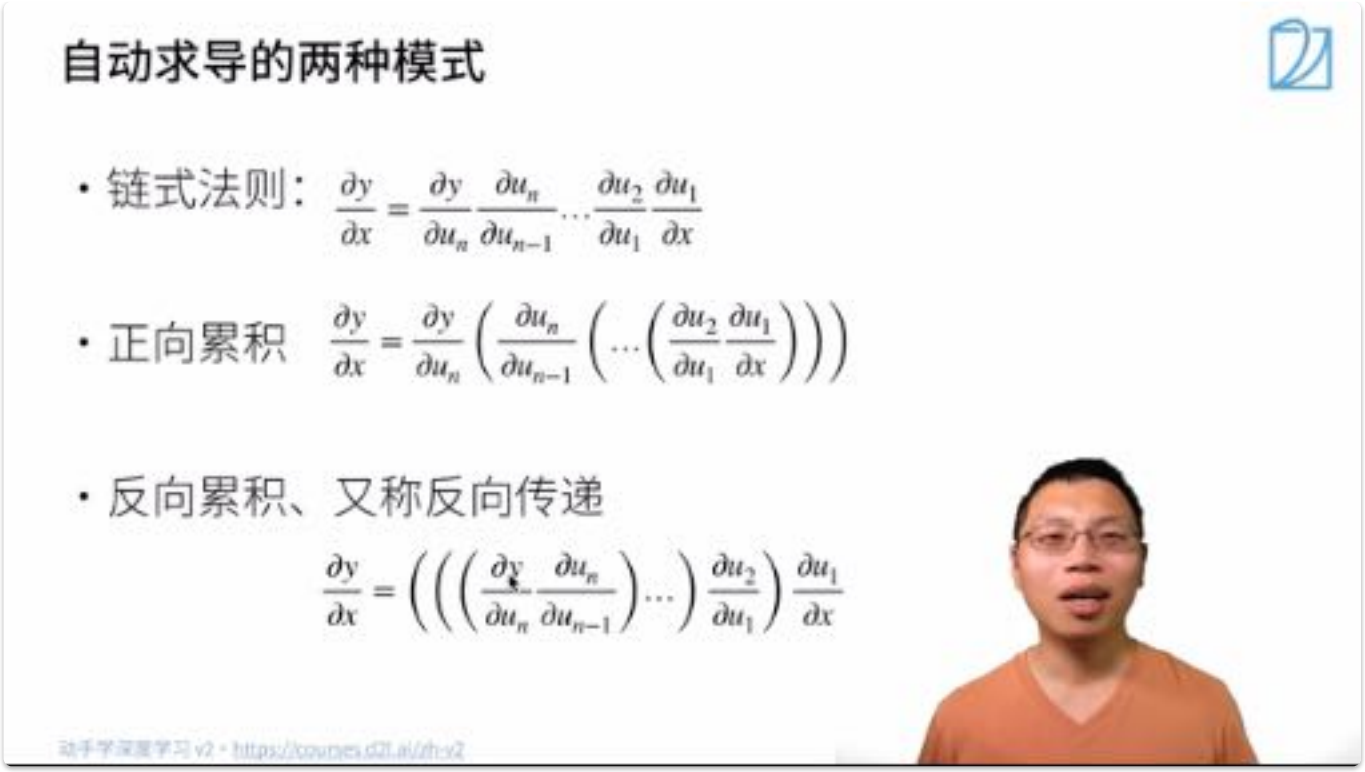
  > *系统将所有的计算记录下来*
  >
  > *Pytorch/MXNet*

```python
from mxnet import autograd, nd

with autograd.record():
        a = nd.ones((2, 1))
        b = nd.ones((2, 1))
        c = 2 * a + b
```

二、自动求导的两种模式

07:39 自动求导的两种模式



- 链式法则：

$$\frac{\partial y}{\partial x}=\frac{\partial y}{\partial u_n}\frac{\partial u_n}{\partial u_{n-1}}\cdots\frac{\partial u_2}{\partial u_1}\frac{\partial u_1}{\partial x}$$

1. 正向累积

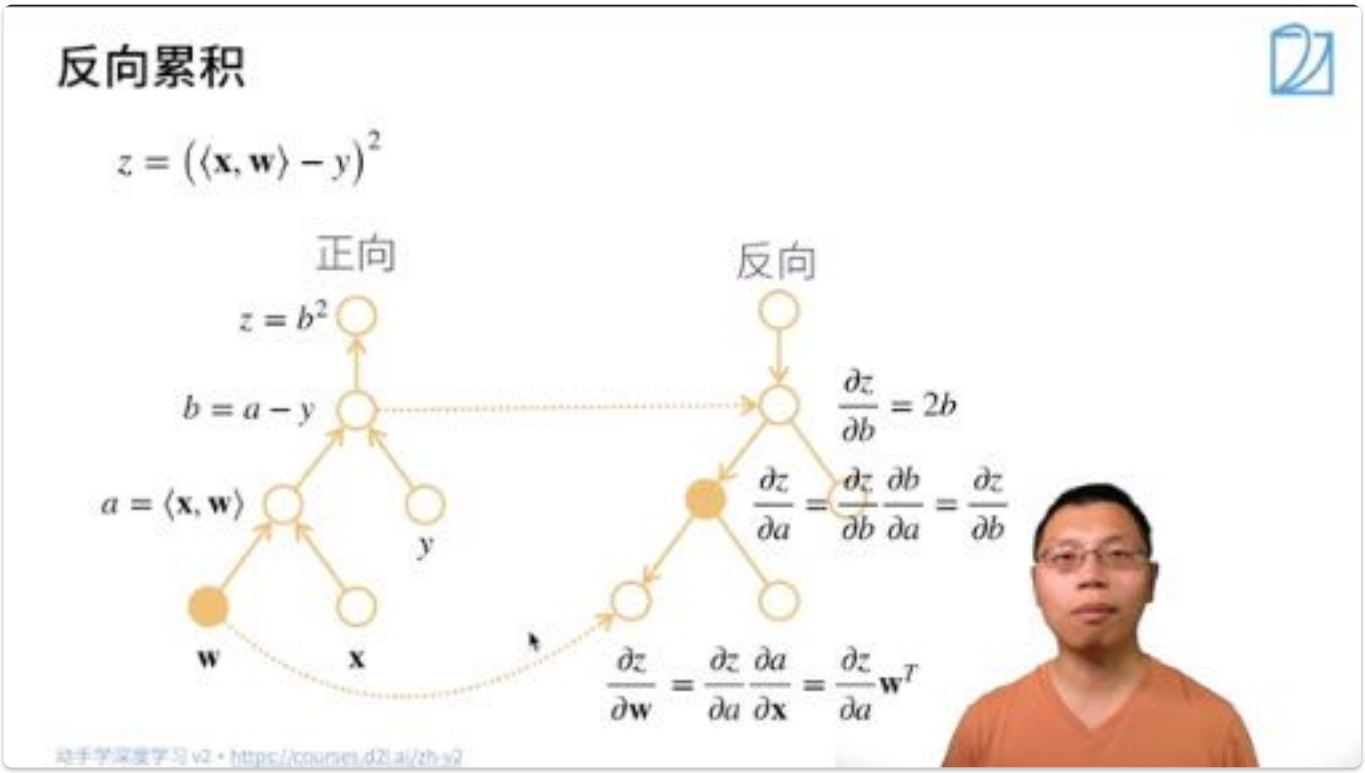
$$\frac{\partial y}{\partial x}=\frac{\partial y}{\partial u_n}\left(\frac{\partial u_n}{\partial u_{n-1}}\left(\cdots\left(\frac{\partial u_2}{\partial u_1}\frac{\partial u_1}{\partial x}\right)\right)\right)$$

2. 反向累积（反向传递back propagation）

$$\frac{\partial y}{\partial x}=\left(\left(\left(\frac{\partial y}{\partial u_n}\frac{\partial u_n}{\partial u_{n-1}}\right)\cdots\right)\frac{\partial u_2}{\partial u_1}\right)\frac{\partial u_1}{\partial x}$$

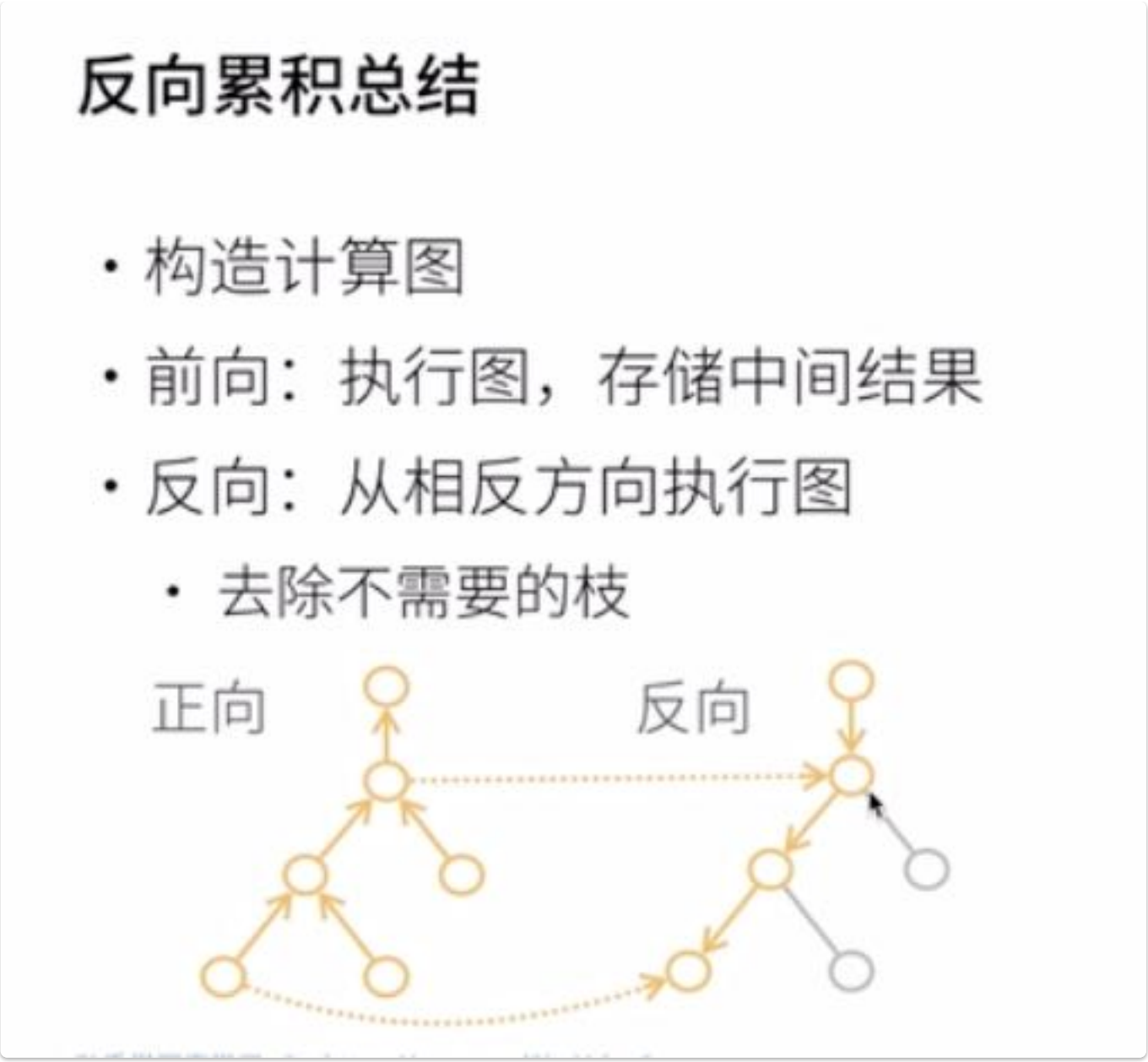
反向累积计算过程

09:01反向传递



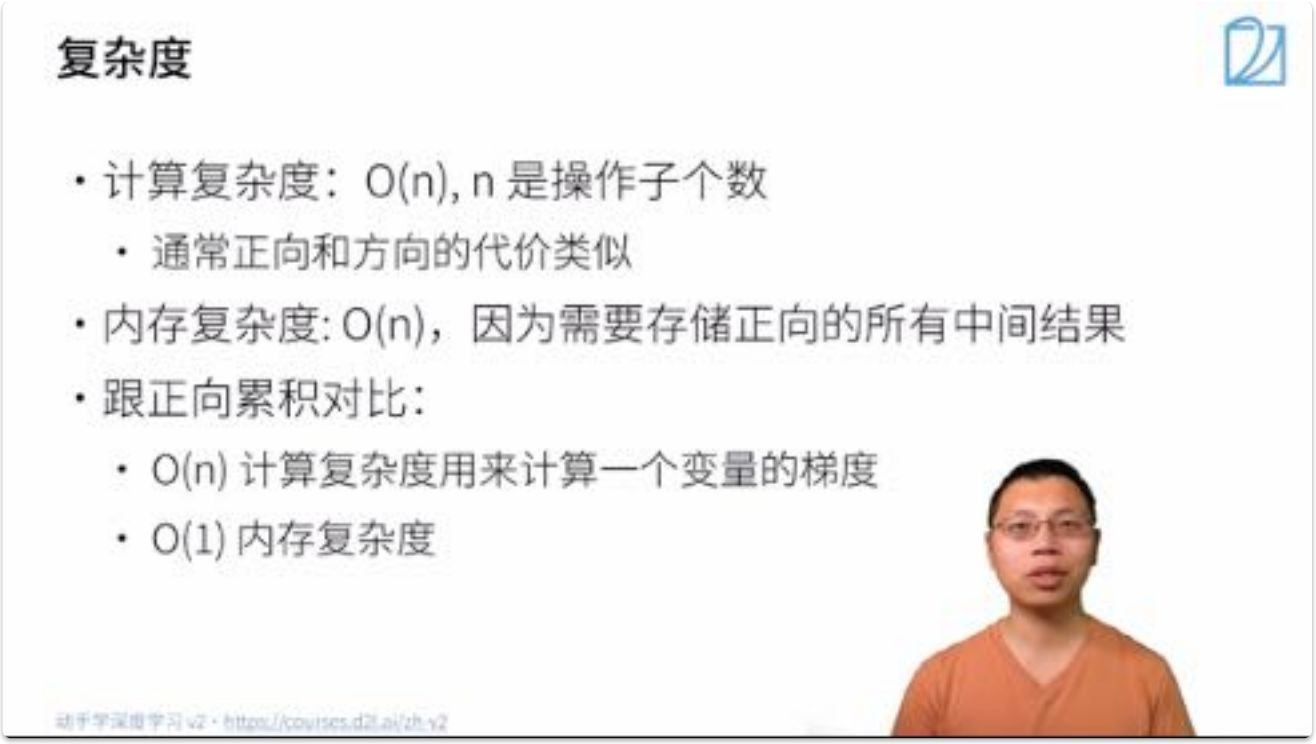
注:

> *反向累积的正向过程：自底向上，需要存储中间结果*
>
> *反向累积的反向过程：自顶向下，可以去除不需要的枝（图中的x应为w）*



三、复杂度比较

1. 反向累积
   - 时间复杂度：$O(n)$,n是操作子数
     - 通常正向和反向的代价类似
   - 内存复杂度：$O(n)$
     - 存储正向过程所有的中间结果



2. 正向累积

> *每次计算一个变量的梯度时都需要将所有节点扫一遍*

- 时间复杂度：$O(n)$
- 内存复杂度：$O(1)$

1.7.3 代码部分

00:03 自动求导代码实现

1. 对 `y = x.T x` 关于列向量x求导

```language-python
# 对y = x.Tx关于列向量x求导
>>> import torch
>>> x = torch.arange(4.0)
>>> x

tensor([0., 1., 2., 3.])
```

2. 存储梯度

```language-python
#存储梯度
>>> x.requires_grad_(True)#等价于x = torch.arange(4.0,requires_grad=True)
>>> x.grad#默认值是None


>>> y = torch.dot(x,x)
>>> y
# PyTorch隐式地构造计算图，grad_fn用于记录梯度计算

tensor(14., grad_fn=<DotBackward0>)
```

3. 通过调用反向传播函数来自动计算 y 关于 x 每个分量的梯度

```
>>> y.backward()
>>> x.grad

tensor([0., 2., 4., 6.])
```
language-python

验证：

```
>>> x.grad==2*x # 验证

tensor([True, True, True, True])
```
language-python

在默认情况下，PyTorch会累积梯度，我们需要清除之前的值：

```
x.grad.zero_()
# 如果没有上面这一步，结果就会加累上之前的梯度值，变为[1,3,5,7]
y = x.sum()
y.backward()
x.grad
```
language-python

Result：

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

4. 哈达玛积 (Hadamard product)

```
>>> x.grad.zero_()
>>> y=x*x # 哈达玛积，对应元素相乘
```
language-python

上述哈达玛积得到的 y 是一个向量，此时对 x 求导得到的是一个 矩阵。但是在深度学习中我们一般不计算微分矩阵，而是计算批量中每个样本单独计算的偏导数之和，如下：

```
>>> y.sum().backward() # 等价于y.backword(torch.ones(len(x)))
>>> x.grad

tensor([0., 2., 4., 6.])
```
language-python

5. 将某些计算移动到记录的计算图之外。03:53。

   后可用于用于将神经网络的一些参数固定住

   ```
   # 后可用于用于将神经网络的一些参数固定住
   x.grad.zero_()
   y = x*x
   u = y.detach()#把y当作常数
   z = u*x

   z.sum().backward()
   x.grad == u
   ```
   language-python

   Results:

   ```
   tensor([True, True, True, True])
   ```
   language-python

6. 控制流。05:26

即使构建函数的计算图需要用过Python控制流，仍然可以计算得到的变量的梯度。这也是隐式构造的优势，因为它会存储梯度计算的计算图，再次计算时执行反向过程就可以

```python
def f(a):
    b = a * 2
    while b.norm()<1000:
        b = b * 2
    if b.sum() > 0:
        c = b
    else:
        c = 100 * b
    return c

a = torch.randn(size=(),requires_grad=True)
d = f(a)
d.backward()

a.grad == d / a
```

Results:

```python
tensor(True)
```

1.7.3 Q&A

00:00 Q&A

Q1：ppt上隐式构造和显式构造看起来为啥差不多？

> *显式和隐式的差别其实就是数学上求梯度和python求梯度计算上的差别，不用深究*
>
> *显式构造就是我们数学上正常求导数的求法，先把所有求导的表达式选出来再代值*

Q2:需要正向和反向都算一遍吗?

> *需要正向先算一遍，自动求导时只进行反向就可以，因为正向的结果已经存储*

Q3:为什么PyTorch会默认累积梯度

> *便于计算大批量；方便进一步设计*

Q4:为什么深度学习中一般对标量求导而不是对矩阵或向量求导

> *loss一般都是标量*

Q5:为什么获取.grad前需要backward

> *相当于告诉程序需要计算梯度，因为计算梯度的代价很大，默认不计算*

Q6:pytorch或mxnet框架设计上可以实现矢量的求导吗

> *可以*