UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE VALÈNCIA

Introducción a PyTorch

Alfons Juan, Jorge Civera

DSIC

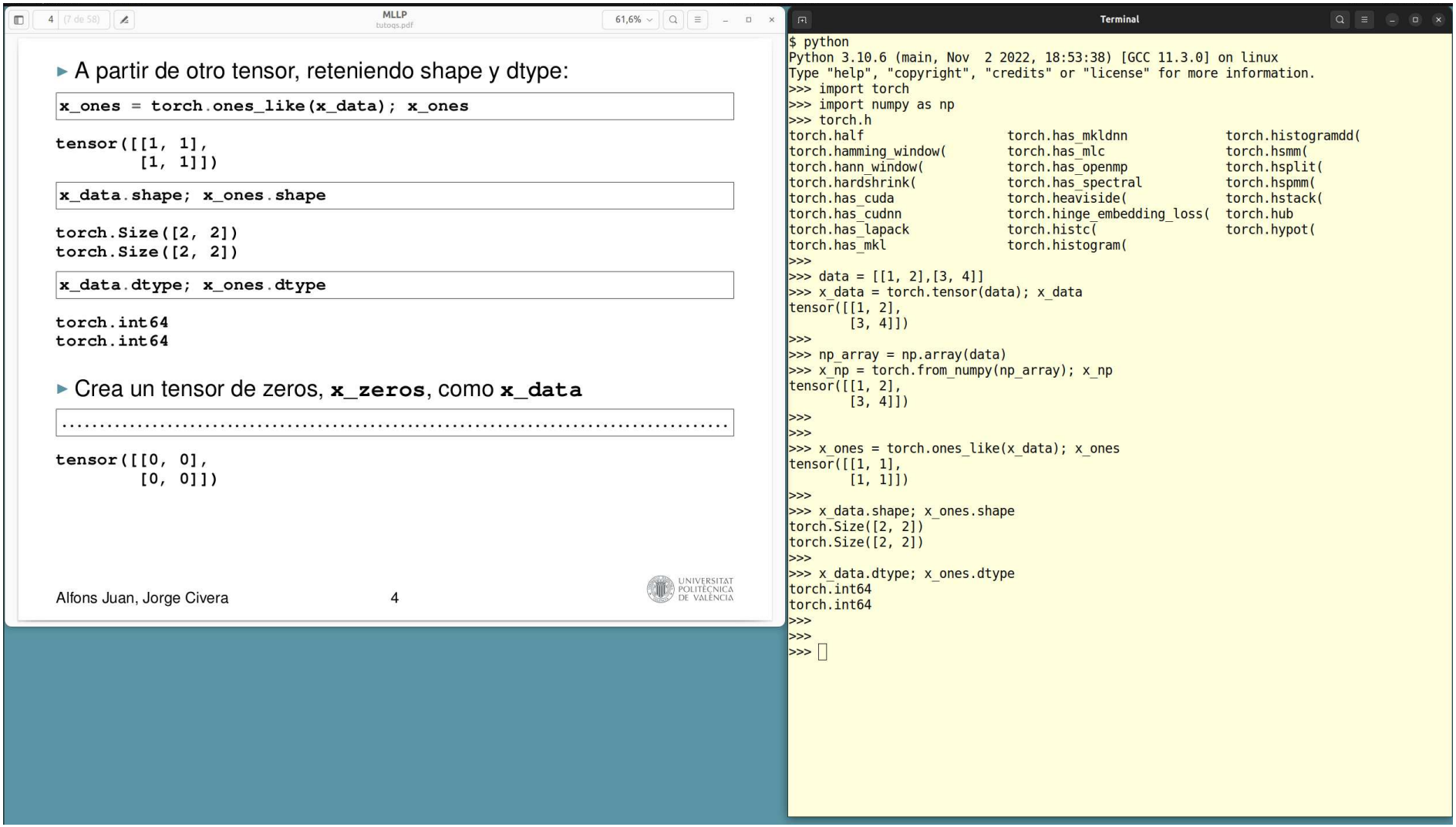
Departament de Sistemes Informàtics i Computació

Índice

1. Introducción

- ***PyTorch:*** librería de aprendizaje automático de código abierto basada en la librería ***Torch,*** usada en aplicaciones de ***visión artificial*** y ***procesamiento de lenguaje natural***
- Desarrollada por ***Facebook AI Research (FAIR)*** bajo una interfaz ***Python,*** también se ofrece a través de un ***frontend C++*** para la construcción de sistemas computacionalmente optimizados
- ***Tensores:*** ofrece la clase ***torch.Tensor*** para operar con arrays multidimensionales similares a los de ***NumPy*** en (CPU y) ***GPU***
- ***Redes neuronales profundas:*** facilita su construcción mediante módulos de ***diferenciación automática (torch.autograd)***, ***optimización (torch.optim)*** y ***construcción de redes (torch.nn).***
- Presentación basada en el ***tutorial para principiantes oficial:***
  `https://pytorch.org/tutorials/beginner/basics/intro.html`
- Polilabs: **`PYTHONPATH=$PYTHONPATH:~/asigDSIC/ETSINF/apr/mlp/pylib`**

- ***Reproducción del tutorial:*** por cada sección, se recomienda iniciar el intérprete y copiar-pegar los ejemplos enmarcados
  - El código de algunos ejemplos se proporciona en **`fichero.py`** para ejecutarse con **`exec(open("fichero.py").read())`**



2. Tensores

- ***Tutorial oficial:*** cuaderno jupyter ***tensorqs_tutorial***

https://pytorch.org/tutorials/beginner/basics/tensorqs_tutorial.html

en la consola primero hay que ejecutar python3

- Importación de las librerías torch y numpy:

```
import torch
import numpy as np
```

- Escribe **`torch.h`** seguido de tabulador:

```
torch.h # y Tab
```

```
torch.half                  torch.has_mkldnn                torch.histogramdd(
torch.hamming_window(       torch.has_mlc                   torch.hsmm(
torch.hann_window(          torch.has_openmp                torch.hsplit(
torch.hardshrink(           torch.has_spectral              torch.hspmm(
torch.has_cuda              torch.heaviside(                torch.hstack(
torch.has_cudnn             torch.hinge_embedding_loss(     torch.hub
torch.has_lapack            torch.histc(                    torch.hypot(
torch.has_mkl               torch.histogram(
```

2.1. Inicialización de un tensor

- Creación a partir de datos:

```
data = [[1, 2],[3, 4]]
x_data = torch.tensor(data); x_data
```

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

- Creación a partir de un array NumPy:

```
np_array = np.array(data)
x_np = torch.from_numpy(np_array); x_np
```

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

- A partir de otro tensor, reteniendo shape y dtype:

```
x_ones = torch.ones_like(x_data); x_ones
```

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

```
x_data.shape; x_ones.shape
```

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

```
x_data.dtype; x_ones.dtype
```

```
torch.int64
torch.int64
```

- Crea un tensor de zeros, **x_zeros**, como **x_data**

```
.....................................................................
```

```
tensor([[0, 0],
        [0, 0]])
```

x_zeros= torch.zeros_like(x_data); x_zeros

- A partir de otro tensor, cambiando el dtype:

```
torch.manual_seed(23)
x_rand = torch.rand_like(x_data, dtype=torch.float)
x_rand; x_rand.dtype
```

```
tensor([[0.4283, 0.2889],
        [0.4224, 0.3571]])
torch.float32
```

- Con valores constantes o aleatorios:

```
shape = (2,3,)
rand_tensor = torch.rand(shape)
ones_tensor = torch.ones(shape)
zeros_tensor = torch.zeros(shape)
rand_tensor; ones_tensor; zeros_tensor
```

```
tensor([[0.9577, 0.1100, 0.2933],
        [0.9205, 0.5876, 0.1299]])
tensor([[1., 1., 1.],
        [1., 1., 1.]])
tensor([[0., 0., 0.],
        [0., 0., 0.]])
```

2.2. Atributos de un tensor

- ***shape, dtype y device:***

```
tensor = torch.rand(3,4)
print(f"Shape of tensor: {tensor.shape}")
print(f"Datatype of tensor: {tensor.dtype}")
print(f"Device tensor is stored on: {tensor.device}")
```

```
Shape of tensor: torch.Size([3, 4])
Datatype of tensor: torch.float32
Device tensor is stored on: cpu
```

2.3. Operaciones sobre tensores

- Más de 100 operaciones disponibles:

  https://pytorch.org/docs/stable/torch.html

- ***Copia de un tensor (creado en CPU) a GPU:***

```
if torch.cuda.is_available():
  tensor = tensor.to('cuda')

tensor.device
```

```
device(type='cuda', index=0)
```

yo no tengo gpu :((

▸ *Indexación y troceado al estilo numpy:*

```
tensor = torch.ones(4, 4)
print('First row: ', tensor[0])
print('First column: ', tensor[:, 0])
print('Last column:', tensor[..., -1])
tensor[:,1] = 0   -> pone 0s en la 2. columna
print(tensor)
```

[fila, columna]
: means cualquier número
-1 mean la última, -2 anteúltima etc

```
First row:  tensor([1., 1., 1., 1.])
First column:  tensor([1., 1., 1., 1.])
Last column: tensor([1., 1., 1., 1.])
tensor([[1., 0., 1., 1.],
        [1., 0., 1., 1.],
        [1., 0., 1., 1.],
        [1., 0., 1., 1.]])
```

▸ Extrae la última fila de **`tensor`**:

```
.....................................................................
```

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

print('last row:', tensor[-1])

▸ *Concatenación de tensores en una dimensión dada:*

```
t1 = torch.cat([tensor, tensor, tensor], dim=1); t1
```

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

▸ Concatena **`tensor`** consigo mismo por filas (en vertical):

```
.....................................................................
```

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

dimensión 0 es por columnas,
dimensión 1 es por filas

t2 = torch.cat([tensor, tensor], dim=0); t2

- ***Producto matricial:*** y1, y2, y3 tendrán el mismo valor

```
y1 = tensor @ tensor.T
y2 = tensor.matmul(tensor.T)
y3 = torch.rand_like(tensor)
torch.matmul(tensor, tensor.T, out=y3)
```

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

no lo he entendido :(

- ***Producto elemental:*** z1, z2, z3 tendrán el mismo valor

```
z1 = tensor * tensor
z2 = tensor.mul(tensor)
z3 = torch.rand_like(tensor)
torch.mul(tensor, tensor, out=z3)
```

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

tampoco entiendo que ha pasado

- ***Tensores de un único elemento:*** conversión a número python

```
agg = tensor.sum()
print(agg, type(agg))
agg_item = agg.item()
print(agg_item, type(agg_item))
```

```
tensor(12.) <class 'torch.Tensor'>
12.0 <class 'float'>
```

- Obtén la media de **`tensor`** como número python:

```
.....................................................................
```

```
0.75
```

```
agg_mean=tensor.mean()
agg_mean_item = agg_mean.item()
print(agg_mean_item, type(agg_mean_item))
```

▸ *Operaciones en línea con el sufijo "_":*

```
tensor.add_(5)
```

```
tensor([[6., 5., 6., 6.],
        [6., 5., 6., 6.],
        [6., 5., 6., 6.],
        [6., 5., 6., 6.]])
```

▸ Réstale 5 a **`tensor`**:

```
.....................................................................................
```

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

tensor.subtract_(5)

▸ *Memoria compartida entre tensores en CPU y arrays numpy:*

```
t = torch.ones(5); n = t.numpy(); t; n
```

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

```
t.add_(1); n  # la modificación de t afecta a n
```

```
tensor([2., 2., 2., 2., 2.])
array([2., 2., 2., 2., 2.], dtype=float32)
```

```
n = np.ones(5)
t = torch.from_numpy(n)
np.add(n, 1, out=n); t # la modificación de n afecta a t
```

```
array([2., 2., 2., 2., 2.])
tensor([2., 2., 2., 2., 2.], dtype=torch.float64)
```

3. Conjuntos de datos y carga

- ***Tutorial oficial:*** cuaderno jupyter ***data_tutorial***

  `https://pytorch.org/tutorials/beginner/basics/data_tutorial.html`

- Dos clases destacadas:
  - ***torch.utils.data.Dataset:*** conjuntos de datos pre-cargados y definidos por el usuario
    - ↦ ***Imágenes:*** `https://pytorch.org/vision/stable/datasets.html`
    - ↦ ***Texto:*** `https://pytorch.org/text/stable/datasets.html`
    - ↦ ***Audio:*** `https://pytorch.org/audio/stable/datasets.html`
  - ***torch.utils.data.DataLoader:*** iterable sobre conjunto de datos

- ***API torch.utils.data:***

  `https://pytorch.org/docs/stable/data.html`

3.1. Carga de un conjunto de datos

- Librerías:

```
import torch
from torch.utils.data import Dataset
from torchvision import datasets
from torchvision.transforms import ToTensor
import matplotlib.pyplot as plt
```

- Consulta el repositorio oficial de Fashion-MNIST:
  - ¿En qué se parece a MNIST?

    .....
  - ¿Cuál es la mejor precisión con sklearn verificada?

    .....
  - ¿Cuál es la precisión humana?

    .....
  - ¿Cuál es la mejor precisión reportada?

    .....

- ***Carga de un conjunto de datos: FashionMNIST*** con
  - ***root:*** directorio donde guardar los datos de train/test
  - ***train:*** training o test
  - ***download=True:*** descarga de internet si no está en root
  - ***transform*** y ***target_transform:*** transformaciones a aplicar a las características y etiquetas

```
training_data = datasets.FashionMNIST(root="data", train=True,
  download=True, transform=ToTensor()); training_data
```

```
Dataset FashionMNIST
    Number of datapoints: 60000
    Root location: data
    Split: Train
    StandardTransform
Transform: ToTensor()
```

```
test_data = datasets.FashionMNIST(root="data", train=False,
  download=True, transform=ToTensor()); test_data
```

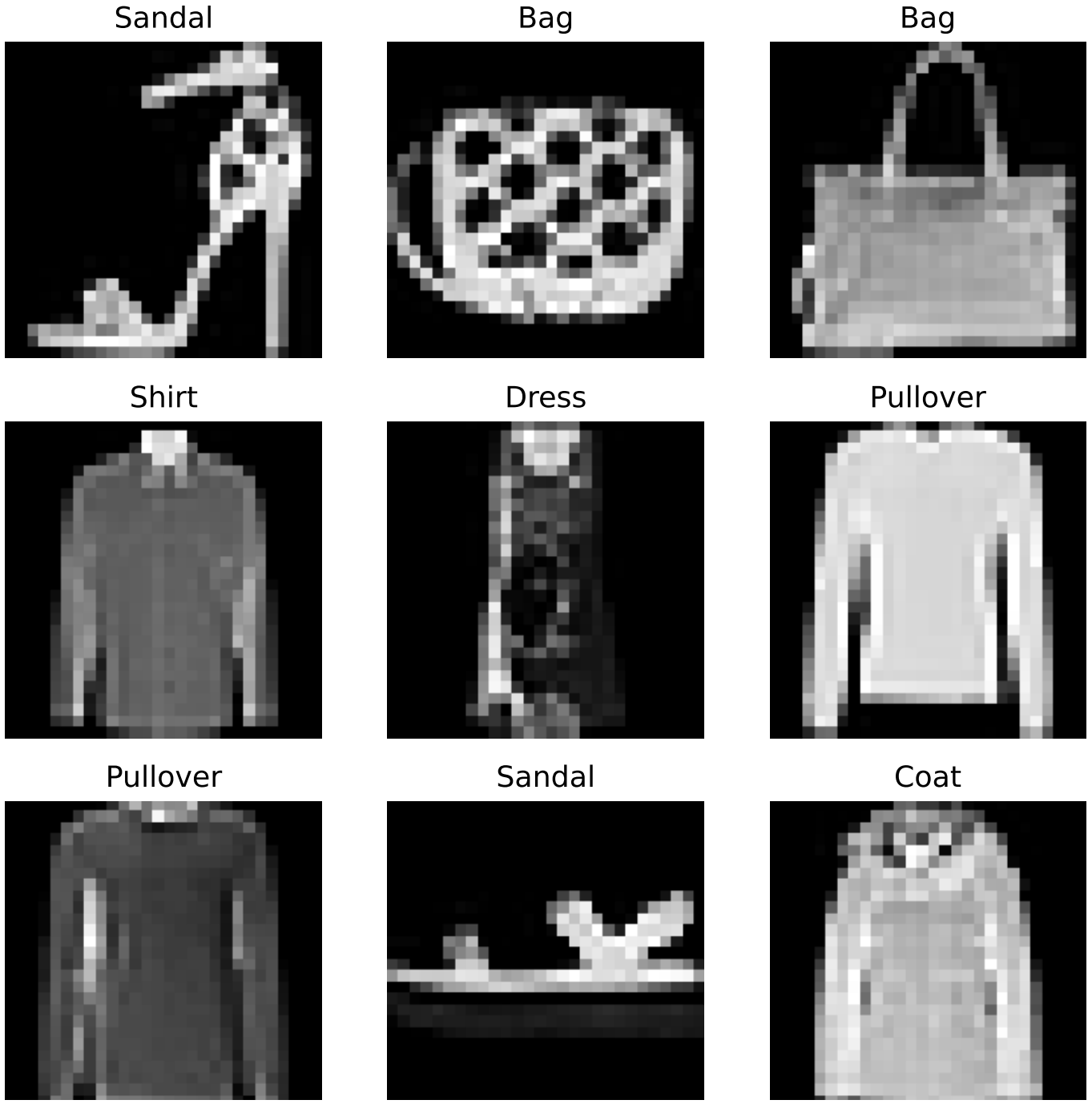
```
Dataset FashionMNIST
    Number of datapoints: 10000
    Root location: data
    Split: Test
    StandardTransform
Transform: ToTensor()
```

3.2. Iteración y visualización

exec(open("data3.2.py").read())

```
labels_map = {
  0: "T-Shirt",
  1: "Trouser",
  2: "Pullover",
  3: "Dress",
  4: "Coat",
  5: "Sandal",
  6: "Shirt",
  7: "Sneaker",
  8: "Bag",
  9: "Ankle Boot",
}
figure = plt.figure(figsize=(8, 8))
cols, rows = 3, 3
torch.manual_seed(23)
for i in range(1, cols * rows + 1):
  index = torch.randint(len(training_data), size=(1,)).item()
  img, label = training_data[index]
  figure.add_subplot(rows, cols, i)
  plt.title(labels_map[label])
  plt.axis("off")
  plt.imshow(img.squeeze(), cmap="gray")

plt.savefig('data3.2.pdf')
plt.show()
```



3.3. Conjunto de datos definido por el usuario

- ***Subclase de Dataset con tres funciones:***
  - ***__init__:*** se ejecuta una vez al instanciar un objeto Dataset
  - ***__len__:*** devuelve el número de muestras del dataset
  - ***__getitem__:*** devuelve la muestra de un índice dado
- El tutorial incluye un ejemplo genérico para imágenes

3.4. Preparación de los datos para entrenamiento

- ***DataLoader:*** en lugar de indexar los datos uno a uno, DataLoader los procesa en minibatches con posible barajado

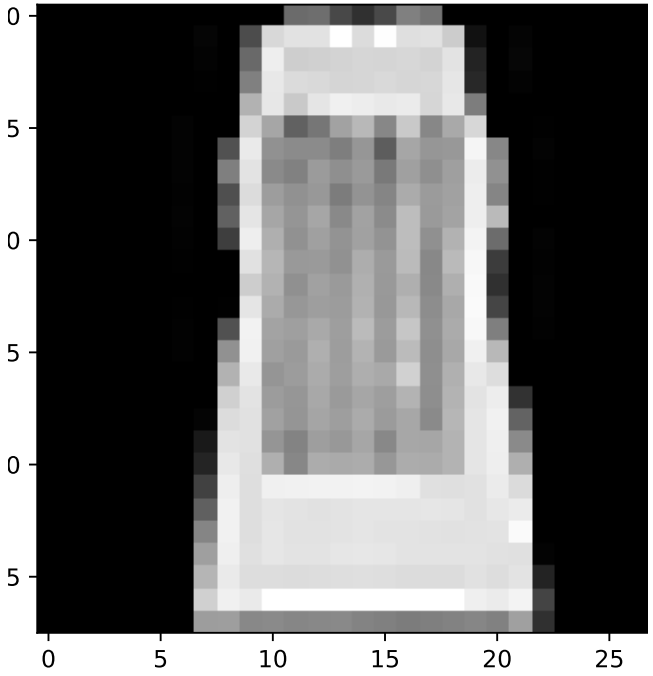
```
from torch.utils.data import DataLoader
torch.manual_seed(23)
train_dataloader = DataLoader(training_data, batch_size=64,
  shuffle=True)
test_dataloader = DataLoader(test_data, batch_size=64,
  shuffle=True)
train_dataloader.dataset; test_dataloader.dataset
```

```
Dataset FashionMNIST
    Number of datapoints: 60000
    Root location: data
    Split: Train
    StandardTransform
Transform: ToTensor()
Dataset FashionMNIST
    Number of datapoints: 10000
    Root location: data
    Split: Test
    StandardTransform
Transform: ToTensor()
```

▸ *Iteración mediante DataLoader:* un minibatch por iteración

```
train_features, train_labels = next(iter(train_dataloader))
print(f"Feature batch shape: {train_features.size()}")
print(f"Labels batch shape: {train_labels.size()}")
img = train_features[0].squeeze()
label = train_labels[0]
plt.imshow(img, cmap="gray")
plt.savefig('data3.4.pdf'); plt.show()
print(f"Label: {label}")
```

```
Feature batch shape: torch.Size([64, 1, 28, 28])
Labels batch shape: torch.Size([64])
Label: 0
```



4. Transformaciones

- ***Tutorial oficial:*** cuaderno jupyter ***transforms_tutorial***

  `https://pytorch.org/tutorials/beginner/basics/transforms_tutorial.html`

- ***Objetivo:*** procesar datos en bruto (raw) dejándolos en un formato adecuado (processed) para entrenamiento y test de modelos

- ***Conjuntos torchvision:*** dos parámetros
  - ***transform:*** transforma las características
  - ***target_transform:*** transforma las etiquetas

- ***Módulo torchvision.transforms:***
  - Operan sobre imágenes PIL, tensor o ambas
  - Encadenables mediante ***Compose***
  - La mayoría de clases transform tienen funciones equivalentes
  - Info: `https://pytorch.org/vision/stable/transforms.html`

- ***FashionMNIST:*** ***transform*** pasa de formato PIL a tensor y ***target_transform*** de entero a tensor one-hot

```
import torch
from torchvision import datasets
from torchvision.transforms import ToTensor, Lambda
ds = datasets.FashionMNIST(
  root="data", train=True, download=True,
  transform=ToTensor(),
  target_transform=Lambda(lambda y: torch.zeros(10,
    dtype=torch.float).scatter_(0, torch.tensor(y), value=1)))
```

  - ***ToTensor()*** convierte una imagen PIL en **`FloatTensor`** y normaliza intensidades en [0,1]
  - ***Lambda*** aplica una función de usuario que crea un tensor nulo de talla 10 y llama a **`scatter_`** para asignar 1 en la posición y

- Lista los atributos y métodos de **`ds`**:

```
.....................................................................
```

```
['__add__', '__class__', '__class_getitem__', '__delattr__',
↪  '__dict__', '__dir__', '__doc__', '__eq__', '__format__',
↪  '__ge__', '__getattribute__', '__getitem__', '__gt__',
↪  '__hash__', '__init__', '__init_subclass__', '__le__',
↪  '__len__', '__lt__', '__module__', '__ne__', '__new__',
↪  '__orig_bases__', '__parameters__', '__reduce__',
↪  '__reduce_ex__', '__repr__', '__setattr__', '__sizeof__',
↪  '__slots__', '__str__', '__subclasshook__', '__weakref__',
↪  '_check_exists', '_check_legacy_exist',
↪  '_format_transform_repr', '_is_protocol', '_load_data',
↪  '_load_legacy_data', '_repr_indent', 'class_to_idx',
↪  'classes', 'data', 'download', 'extra_repr', 'mirrors',
↪  'processed_folder', 'raw_folder', 'resources', 'root',
↪  'target_transform', 'targets', 'test_data', 'test_file',
↪  'test_labels', 'train', 'train_data', 'train_labels',
↪  'training_file', 'transform', 'transforms']
```

- ¿Cuál es la etiqueta de **`ds.data[0]`**?

```
.....................................................................
```

```
tensor(9)
```

5. Construcción de la red neuronal

- ***Tutorial oficial:*** cuaderno jupyter ***buildmodel_tutorial***

https://pytorch.org/tutorials/beginner/basics/buildmodel_tutorial.html

- ***torch.nn.Module:*** clase base para todos los módulos de redes

- Librerías:

```
import os
import torch
from torch import nn
from torch.utils.data import DataLoader
from torchvision import datasets, transforms
```

5.1. Obtención del dispositivo para entrenamiento

- Entrenaremos en GPU si puede ser; si no, en CPU:

```
device = 'cuda' if torch.cuda.is_available() else 'cpu'
print(f'Using {device} device')
```

```
Using cuda device
```

- Consulta brevemente, si no te suena:
  - Graphics processing unit (GPU)
  - Tensor Processing Unit (TPU)
  - Compute Unified Device Architecture (CUDA)

5.2. Definición de la clase

- ***Red:*** subclase de **`nn.Module`**
  - **`__init__`** inicializa las capas
  - **`forward`** procesa la entrada

```
exec(open("buildmodelNN.py").read())
```

```
class NeuralNetwork(nn.Module):
  def __init__(self):
    super(NeuralNetwork, self).__init__()
    self.flatten = nn.Flatten()
    self.linear_relu_stack = nn.Sequential(
      nn.Linear(28*28, 512),
      nn.ReLU(),
      nn.Linear(512, 512),
      nn.ReLU(),
      nn.Linear(512, 10),
      )
  def forward(self, x):
    x = self.flatten(x)
    logits = self.linear_relu_stack(x)
    return logits
```

▸ *Instanciación y transferencia al dispositivo:*

```
torch.manual_seed(23)
model = NeuralNetwork().to(device)
print(model)
```

```
NeuralNetwork(
  (flatten): Flatten(start_dim=1, end_dim=-1)
  (linear_relu_stack): Sequential(
    (0): Linear(in_features=784, out_features=512, bias=True)
    (1): ReLU()
    (2): Linear(in_features=512, out_features=512, bias=True)
    (3): ReLU()
    (4): Linear(in_features=512, out_features=10, bias=True)
  )
)
```

- ***Uso de la red:*** no llamamos a **`forward()`** directamente!

```
torch.manual_seed(23)
X = torch.rand(1, 28, 28, device=device)
logits = model(X)
pred_probab = nn.Softmax(dim=1)(logits)
y_pred = pred_probab.argmax(1)
print(f"Predicted class: {y_pred}")
```

```
Predicted class: tensor([8], device='cuda:0')
```

- Repite el ejemplo con un tensor de unos como **`X`**:

```
.....................................................................
nn.Softmax(dim=1)(model(X_ones)).argmax(1)
```

```
tensor([4], device='cuda:0')
```

5.3. Capas del modelo

- ***Entrada:*** minibatch de 3 imágenes 28x28

```
torch.manual_seed(23)
input_image = torch.rand(3,28,28)
print(input_image.size())
```

```
torch.Size([3, 28, 28])
```

- Escribe la primera fila de la primera imagen del minibatch:

```
.....................................................................................
```

```
tensor([0.4283, 0.2889, 0.4224, 0.3571, 0.9577, 0.1100, 0.2933, 0.9205, 0.5876,
        0.1299, 0.6729, 0.1028, 0.7876, 0.5540, 0.4653, 0.2311, 0.2214, 0.3348,
        0.4541, 0.2519, 0.6310, 0.1707, 0.3122, 0.1976, 0.5466, 0.0213, 0.9049,
        0.8444])
```

- ***nn.Flatten:*** convierte una imagen 28x28 en array 784D

```
flatten = nn.Flatten()
flat_image = flatten(input_image)
print(flat_image.size())
```

```
torch.Size([3, 784])
```

- Escribe las primeras 5 características de la primera imagen

```
.....................................................................
```

```
tensor([0.4283, 0.2889, 0.4224, 0.3571, 0.9577])
```

▸ *nn.Linear:* transformación lineal

```
torch.manual_seed(23)
layer1 = nn.Linear(in_features=28*28, out_features=20)
hidden1 = layer1(flat_image)
print(hidden1.size())
print(hidden1)
```

```
torch.Size([3, 20])
```

```
tensor([[ 4.7243, -0.3048,  0.3629, -0.3240,  0.0510, -0.3063,  0.0167,  0.2413,
         -0.1951,  0.1663,  0.1250, -0.2419, -0.1556,  0.5033,  0.1148, -0.4214,
         -0.1384, -0.2026, -0.2182,  0.2294],
        [ 0.0395,  4.5114, -0.1091, -0.1640, -0.0224, -0.1199,  0.3188, -0.2164,
         -0.0565, -0.0408,  0.0215, -0.3568, -0.0790,  0.2190,  0.2358, -0.6144,
         -0.1755, -0.2186,  0.0335,  0.2159],
        [ 0.3228, -0.4934,  4.9607, -0.4462,  0.2545, -0.2906,  0.4563,  0.0705,
         -0.3625, -0.1225,  0.0456, -0.0161,  0.0463,  0.0077,  0.3278, -0.4075,
          0.1262, -0.0512, -0.0390,  0.1706]], grad_fn=<AddmmBackward0>)
```

▸ *nn.ReLU:* activación no lineal que “apaga” negativos

```
print(f"Before ReLU:\n {hidden1}\n\n")
hidden1 = nn.ReLU()(hidden1)
print(f"After ReLU:\n {hidden1}")
```

```
Before ReLU:
 tensor([[ 4.7243, -0.3048,  0.3629, -0.3240,  0.0510, -0.3063,  0.0167,  0.2413,
          -0.1951,  0.1663,  0.1250, -0.2419, -0.1556,  0.5033,  0.1148, -0.4214,
          -0.1384, -0.2026, -0.2182,  0.2294],
         [ 0.0395,  4.5114, -0.1091, -0.1640, -0.0224, -0.1199,  0.3188, -0.2164,
          -0.0565, -0.0408,  0.0215, -0.3568, -0.0790,  0.2190,  0.2358, -0.6144,
          -0.1755, -0.2186,  0.0335,  0.2159],
         [ 0.3228, -0.4934,  4.9607, -0.4462,  0.2545, -0.2906,  0.4563,  0.0705,
          -0.3625, -0.1225,  0.0456, -0.0161,  0.0463,  0.0077,  0.3278, -0.4075,
           0.1262, -0.0512, -0.0390,  0.1706]], grad_fn=<AddmmBackward0>)
After ReLU:
 tensor([[4.7243, 0.0000, 0.3629, 0.0000, 0.0510, 0.0000, 0.0167, 0.2413, 0.0000,
          0.1663, 0.1250, 0.0000, 0.0000, 0.5033, 0.1148, 0.0000, 0.0000, 0.0000,
          0.0000, 0.2294],
         [0.0395, 4.5114, 0.0000, 0.0000, 0.0000, 0.0000, 0.3188, 0.0000, 0.0000,
          0.0000, 0.0215, 0.0000, 0.0000, 0.2190, 0.2358, 0.0000, 0.0000, 0.0000,
          0.0335, 0.2159],
         [0.3228, 0.0000, 4.9607, 0.0000, 0.2545, 0.0000, 0.4563, 0.0705, 0.0000,
          0.0000, 0.0456, 0.0000, 0.0463, 0.0077, 0.3278, 0.0000, 0.1262, 0.0000,
          0.0000, 0.1706]], grad_fn=<ReluBackward0>)
```

- ***nn.Sequential:*** contenedor de módulos ordenado

```
torch.manual_seed(23)
seq_modules = nn.Sequential(
  flatten,
  layer1,
  nn.ReLU(),
  nn.Linear(20, 10))
logits = seq_modules(input_image)
print(logits)
```

```
tensor([[-0.0418,  0.4128,  0.1166, -0.7246,  0.1914,  0.8106,  1.0597,  0.5786,
         -0.1699,  1.1271],
        [-0.3771, -0.4748, -0.8368, -0.1844,  0.5892,  0.9324,  1.0034, -0.7360,
         -0.6787, -0.5469],
        [-0.0884, -0.1937, -0.4910,  0.5475, -0.8520,  0.1503, -0.9129, -1.0010,
         -0.3887,  0.2054]], grad_fn=<AddmmBackward0>)
```

- Clasifica el minibatch **`input_image`** por máximo logit:

```
.....................................................................
```

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

- ***nn.Softmax:*** convierte logits [-infty,infty] en probabilidades [0,1]

```
softmax = nn.Softmax(dim=1)
pred_probab = softmax(logits)
print(pred_probab)
```

```
tensor([[0.0594, 0.0936, 0.0696, 0.0300, 0.0750, 0.1394, 0.1788, 0.1105, 0.0523,
         0.1913],
        [0.0612, 0.0555, 0.0386, 0.0742, 0.1608, 0.2267, 0.2433, 0.0427, 0.0453,
         0.0516],
        [0.1097, 0.0987, 0.0733, 0.2072, 0.0511, 0.1393, 0.0481, 0.0440, 0.0812,
         0.1472]], grad_fn=<SoftmaxBackward0>)
```

- Clasifica el minibatch **`input_image`** por máxima probabilidad:

```
.....................................................................................
```

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

5.4. Parámetros del modelo

- La estructura del modelo revela las capas parametrizadas:

```
print("Model structure: ", model, "\n\n")
```

```
Model structure:  NeuralNetwork(
  (flatten): Flatten(start_dim=1, end_dim=-1)
  (linear_relu_stack): Sequential(
    (0): Linear(in_features=784, out_features=512, bias=True)
    (1): ReLU()
    (2): Linear(in_features=512, out_features=512, bias=True)
    (3): ReLU()
    (4): Linear(in_features=512, out_features=10, bias=True)
  )
)
```

- ¿Dada una entrada, de qué dependerá la salida de la red?

.....

- Podemos acceder a ellos con **`parameters()`**:

```
for param in model.parameters():
  print(f"Size: {param.size()}")
```

```
Size: torch.Size([512, 784])
Size: torch.Size([512])
Size: torch.Size([512, 512])
Size: torch.Size([512])
Size: torch.Size([10, 512])
Size: torch.Size([10])
```

- También podemos usar **`named_parameters()`**:

```
for name, param in model.named_parameters():
  print(f"Layer: {name} | Size: {param.size()}")
```

```
Layer: linear_relu_stack.0.weight | Size: torch.Size([512, 784])
Layer: linear_relu_stack.0.bias | Size: torch.Size([512])
Layer: linear_relu_stack.2.weight | Size: torch.Size([512, 512])
Layer: linear_relu_stack.2.bias | Size: torch.Size([512])
Layer: linear_relu_stack.4.weight | Size: torch.Size([10, 512])
Layer: linear_relu_stack.4.bias | Size: torch.Size([10])
```

6. Diferenciación automática

- ***Tutorial oficial:*** cuaderno jupyter ***autogradqs_tutorial***

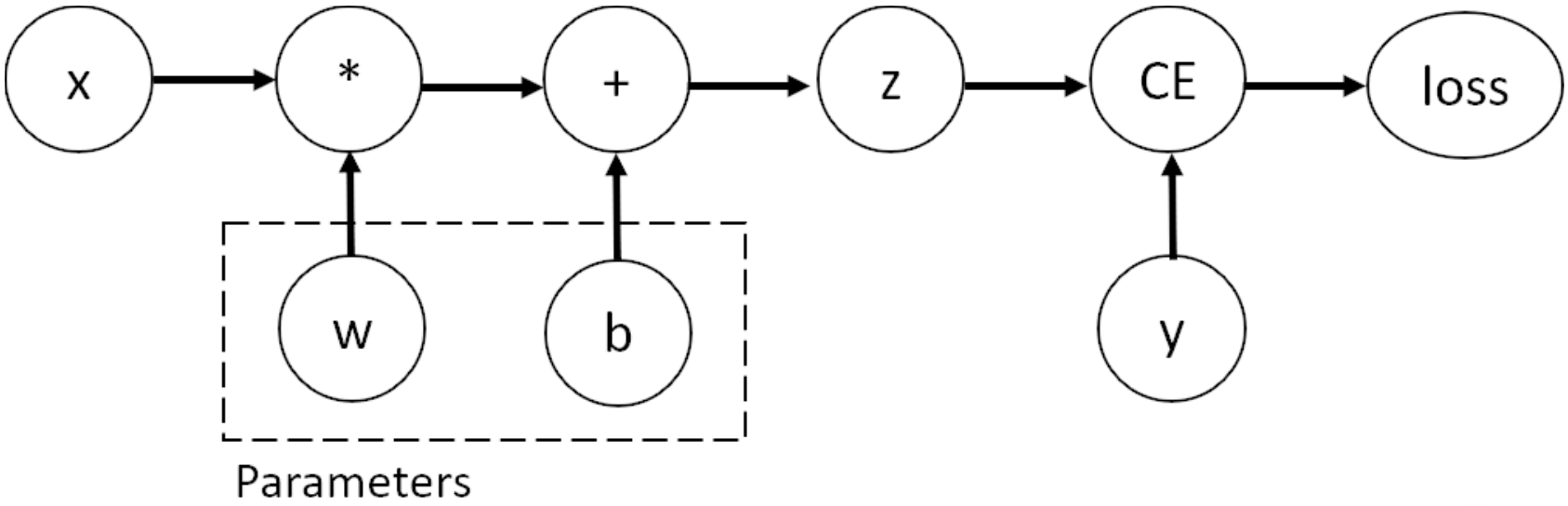
  `https://pytorch.org/tutorials/beginner/basics/autogradqs_tutorial.html`

- ***autograd:*** cálculo automático del gradiente de la función de pérdida con respecto a los parámetros del modelo
  - ***Backprop:*** usa el gradiente para entrenar la red
  - ***Grafo computacional:*** representación de la red

6.1. Tensores, funciones y grafo computacional

- *Ejemplo:* red de una capa, con entrada x, parámetros w y b, y pérdida *entropía cruzada binaria*

```
import torch
x = torch.ones(5)  # input tensor
y = torch.zeros(3)  # expected output
torch.manual_seed(23)
w = torch.randn(5, 3, requires_grad=True)
b = torch.randn(3, requires_grad=True)
z = torch.matmul(x, w)+b
loss = torch.nn.functional.binary_cross_entropy_with_logits(z, y)
```



- ***requires_grad:*** propiedad de tensores-parámetro a optimizar
- ***Función de cálculo:*** una función aplicada a tensores para construir un grafo computacional es un objeto de la clase **`Function`**
  - Permite el cálculo de la función hacia adelante (forward)
  - Permite el cálculo del gradiente de la pérdida con respecto a los parámetros
- ***grad_fn:*** propiedad de tensor con la función gradiente

```
print('Gradient function for z =', z.grad_fn)
print('Gradient function for loss =', loss.grad_fn)
```

```
Gradient function for z = <AddBackward0 object at 0x7f0ad92954b0>
Gradient function for loss =
↪  <BinaryCrossEntropyWithLogitsBackward0 object at
↪  0x7f0ad939f5b0>
```

6.2. Cálculo de gradientes

- ***Cálculo de gradientes:*** **`loss.backward()`** calcula las derivadas de la pérdida con respecto a los parámetros, $\frac{\partial loss}{\partial \boldsymbol{w}}$ y $\frac{\partial loss}{\partial \boldsymbol{b}}$, bajo ciertos valores fijos de x e y, en **`w.grad`** y **`b.grad`**

```
loss.backward()
print(w.grad)
print(b.grad)
```

```
tensor([[0.3256, 0.1307, 0.0733],
        [0.3256, 0.1307, 0.0733],
        [0.3256, 0.1307, 0.0733],
        [0.3256, 0.1307, 0.0733],
        [0.3256, 0.1307, 0.0733]])
tensor([0.3256, 0.1307, 0.0733])
```

6.3. Inhabilitación del seguimiento de gradientes

- ***Inhabilitación del seguimiento de gradientes:*** para "congelar" parámetros en fine-tuning o acelerar cálculos en inferencia, evitando que tensores con `requires_grad=True` hagan seguimiento de su historia computacional a fin de calcular gradientes

  - `torch.no_grad()`:

```
z = torch.matmul(x, w)+b
print(z.requires_grad)
with torch.no_grad():
  z = torch.matmul(x, w)+b
print(z.requires_grad)
```

```
True
False
```

  - `detach()`:

```
z = torch.matmul(x, w)+b
z_det = z.detach()
print(z_det.requires_grad)
```

```
False
```

6.4. Más sobre grafos computacionales

- ***DAG:*** autograd mantiene un registro de datos (tensores) y todas las operaciones ejecutadas (junto con los tensores resultantes) en un grafo acíclico (DAG) de objetos **`Function`**
- ***Cálculo automático de gradientes:*** recorriendo el DAG desde las raíces (tensores de salida) a las hojas (tensores de entrada)
- ***Forward:*** autograd hace dos cosas simultáneamente
  - ejecuta la operación para calcular un tensor resultante
  - mantiene la función gradiente de la operación en el DAG
- ***Backward:*** tras **`.backward()`** en la raíz del DAG, autograd
  - calcula los gradientes de cada **`.grad_fn`**
  - mantiene la función gradiente de la operación en el DAG
  - retropropaga el error a los tensores hoja (regla de la cadena)

7. Optimización de parámetros del modelo

- ***Tutorial oficial:*** cuaderno jupyter ***optimization_tutorial***

  `https://pytorch.org/tutorials/beginner/basics/optimization_tutorial.html`

- ***Entrenamiento:*** proceso iterativo tal que, en cada época:
  - el modelo predice la salida;
  - calcula el error o pérdida (*loss*) de su predicción;
  - obtiene las derivadas del error con respecto a sus parámetros;
  - y ***optimiza*** los parámetros mediante descenso por gradiente.

- ***Vídeo recomendado sobre el algoritmo Backprop:***

  `https://www.youtube.com/watch?v=tIeHLnjs5U8`

7.1. Código previo

exec(open("optim7.1.py").read())

```
import torch
from torch import nn
from torch.utils.data import DataLoader
from torchvision import datasets
from torchvision.transforms import ToTensor, Lambda

training_data = datasets.FashionMNIST(root="data", train=True,
    download=True, transform=ToTensor())
test_data = datasets.FashionMNIST(root="data", train=False,
    download=True, transform=ToTensor())

train_dataloader = DataLoader(training_data, batch_size=64)
test_dataloader = DataLoader(test_data, batch_size=64)

class NeuralNetwork(nn.Module):
  def __init__(self):
    super(NeuralNetwork, self).__init__()
    self.flatten = nn.Flatten()
    self.linear_relu_stack = nn.Sequential(
      nn.Linear(28*28, 512), nn.ReLU(),
      nn.Linear(512, 512),   nn.ReLU(),
      nn.Linear(512, 10))
  def forward(self, x):
    x = self.flatten(x)
    logits = self.linear_relu_stack(x)
    return logits

torch.manual_seed(23)
model = NeuralNetwork()
```

7.2. Hiperparámetros

- ***Número de épocas:*** número de veces a iterar sobre los datos

```
epochs = 5
```

- ***Tamaño del batch:*** número de muestras propagadas a través de la red antes de actualizar parámetros

```
batch_size = 64
```

- ***Factor de aprendizaje:*** magnitud de la actualización de parámetros en cada batch/época

```
learning_rate = 1e-3
```

  - Demasiado pequeño: aprendizaje lento
  - Demasiado grande: aprendizaje impredecible

7.3. Bucle de optimización

- ***Bucle de entrenamiento:*** itera sobre el conjunto de entrenamiento tratando de converger a parámetros óptimos

- ***Bucle de validación/test:*** itera sobre el conjunto de test para comprobar si el rendimiento del modelo está mejorando

7.4. Función de pérdida

- ***Mean Square Loss:*** `nn.MSELoss`, para regresión
- ***Negative Log Likelihood:*** `nn.NLLLoss`, para clasificación
- ***Cross Entropy:*** `nn.CrossEntropyLoss`, combina `nn.LogSoftmax` y `nn.NLLLoss`

```
loss_fn = nn.CrossEntropyLoss()
```

7.5. Optimizador

- ***optimizer:*** usamos SGD

```
optimizer = torch.optim.SGD(model.parameters(), lr=learning_rate)
```

- Tres pasos:
  - **`optimizer.zero_grad()`** reinicializa a cero los gradientes de los parámetros (y así evita sumas duplicadas)
  - **`loss.backward()`** retropropaga la pérdida de la predicción calculando sus gradientes respecto a los parámetros
  - **`optimizer.step()`** ajusta los parámetros mediante los gradientes hallados en retropropagación

7.6. Implementación completa

exec(open("optim7.6.py").read())

```
def train_loop(dataloader, model, loss_fn, optimizer):
  size = len(dataloader.dataset)
  for batch, (X, y) in enumerate(dataloader):
    pred = model(X); loss = loss_fn(pred, y)
    optimizer.zero_grad(); loss.backward(); optimizer.step() # backprop
    if batch % 100 == 0:
      loss, current = loss.item(), batch * len(X)
      print(f"trloss: {loss:>7f}  [{current:>5d}/{size:>5d}]")

def test_loop(dataloader, model, loss_fn):
  size = len(dataloader.dataset); nbatches = len(dataloader)
  teloss, correct = 0, 0
  with torch.no_grad():
    for X, y in dataloader:
      pred = model(X); teloss += loss_fn(pred, y).item()
      correct += (pred.argmax(1) == y).type(torch.float).sum().item()
  teloss /= nbatches; correct /= size
  print(f"teacc: {(100*correct):>0.1f}%, teloss: {teloss:>8f} \n")

loss_fn = nn.CrossEntropyLoss()
optimizer = torch.optim.SGD(model.parameters(), lr=learning_rate)
epochs = 10
for t in range(epochs):
  print(f"Epoch {t+1}\n-------------------------------")
  train_loop(train_dataloader, model, loss_fn, optimizer)
  test_loop(test_dataloader, model, loss_fn)
print("Done!")
```

```
Epoch 1
------------------------------
trloss: 2.311403  [    0/60000]
trloss: 2.290950  [ 6400/60000]
trloss: 2.274235  [12800/60000]
trloss: 2.260890  [19200/60000]
trloss: 2.250175  [25600/60000]
trloss: 2.219779  [32000/60000]
trloss: 2.239611  [38400/60000]
trloss: 2.202065  [44800/60000]
trloss: 2.203018  [51200/60000]
trloss: 2.171447  [57600/60000]
teacc: 29.8%, teloss: 2.160771

Epoch 2
------------------------------
trloss: 2.177448  [    0/60000]
trloss: 2.162522  [ 6400/60000]
trloss: 2.114367  [12800/60000]
trloss: 2.127496  [19200/60000]
trloss: 2.073345  [25600/60000]
trloss: 2.013937  [32000/60000]
trloss: 2.058795  [38400/60000]
trloss: 1.974498  [44800/60000]
trloss: 1.993499  [51200/60000]
trloss: 1.921251  [57600/60000]
teacc: 52.6%, teloss: 1.915133

Epoch 3
------------------------------
trloss: 1.948784  [    0/60000]
trloss: 1.915269  [ 6400/60000]
trloss: 1.819419  [12800/60000]
trloss: 1.857720  [19200/60000]
trloss: 1.733476  [25600/60000]
trloss: 1.690374  [32000/60000]
trloss: 1.727686  [38400/60000]
trloss: 1.620707  [44800/60000]
trloss: 1.655109  [51200/60000]
trloss: 1.544735  [57600/60000]
teacc: 59.6%, teloss: 1.560143

Epoch 4
------------------------------
trloss: 1.625832  [    0/60000]
trloss: 1.582964  [ 6400/60000]
trloss: 1.455607  [12800/60000]
trloss: 1.512096  [19200/60000]
trloss: 1.379335  [25600/60000]
trloss: 1.382386  [32000/60000]
trloss: 1.401563  [38400/60000]
trloss: 1.320725  [44800/60000]
trloss: 1.356428  [51200/60000]
trloss: 1.247718  [57600/60000]
teacc: 62.9%, teloss: 1.277477

Epoch 5
------------------------------
trloss: 1.354618  [    0/60000]
trloss: 1.330229  [ 6400/60000]
trloss: 1.184364  [12800/60000]
trloss: 1.269096  [19200/60000]
trloss: 1.137335  [25600/60000]
trloss: 1.170170  [32000/60000]
trloss: 1.193289  [38400/60000]
trloss: 1.127051  [44800/60000]
trloss: 1.166408  [51200/60000]
trloss: 1.072755  [57600/60000]
teacc: 64.6%, teloss: 1.099308

Epoch 6
------------------------------
trloss: 1.170938  [    0/60000]
trloss: 1.167573  [ 6400/60000]
trloss: 1.003188  [12800/60000]
trloss: 1.117761  [19200/60000]
trloss: 0.987984  [25600/60000]
trloss: 1.027530  [32000/60000]
trloss: 1.066352  [38400/60000]
trloss: 1.003134  [44800/60000]
trloss: 1.044621  [51200/60000]
trloss: 0.964757  [57600/60000]
teacc: 66.0%, teloss: 0.985917

Epoch 7
------------------------------
trloss: 1.046596  [    0/60000]
trloss: 1.063737  [ 6400/60000]
trloss: 0.880441  [12800/60000]
trloss: 1.018553  [19200/60000]
trloss: 0.895659  [25600/60000]
trloss: 0.929185  [32000/60000]
trloss: 0.984901  [38400/60000]
trloss: 0.922667  [44800/60000]
trloss: 0.961700  [51200/60000]
trloss: 0.893683  [57600/60000]
teacc: 67.3%, teloss: 0.910060

Epoch 8
------------------------------
trloss: 0.956910  [    0/60000]
trloss: 0.993390  [ 6400/60000]
trloss: 0.793749  [12800/60000]
trloss: 0.949914  [19200/60000]
trloss: 0.835471  [25600/60000]
trloss: 0.858853  [32000/60000]
trloss: 0.928901  [38400/60000]
trloss: 0.868920  [44800/60000]
trloss: 0.902640  [51200/60000]
trloss: 0.843204  [57600/60000]
teacc: 68.5%, teloss: 0.856261

Epoch 9
------------------------------
trloss: 0.888783  [    0/60000]
trloss: 0.941961  [ 6400/60000]
trloss: 0.729432  [12800/60000]
trloss: 0.900020  [19200/60000]
trloss: 0.793433  [25600/60000]
trloss: 0.806567  [32000/60000]
trloss: 0.887255  [38400/60000]
trloss: 0.831703  [44800/60000]
trloss: 0.858814  [51200/60000]
trloss: 0.804780  [57600/60000]
teacc: 69.7%, teloss: 0.815984

Epoch 10
------------------------------
trloss: 0.834625  [    0/60000]
trloss: 0.901355  [ 6400/60000]
trloss: 0.679746  [12800/60000]
trloss: 0.862242  [19200/60000]
trloss: 0.762120  [25600/60000]
trloss: 0.766526  [32000/60000]
trloss: 0.853988  [38400/60000]
trloss: 0.804405  [44800/60000]
trloss: 0.824825  [51200/60000]
trloss: 0.774202  [57600/60000]
teacc: 70.8%, teloss: 0.784274

Done!
```

8. Grabación y carga del modelo

- ***Tutorial oficial:*** cuaderno jupyter ***saveloadrun_tutorial***

  https://pytorch.org/tutorials/beginner/basics/saveloadrun_tutorial.html

- ***torchvision.models:*** subpaquete de torchvision con definiciones de modelos para diferentes tareas de visión

```
import torch
import torchvision.models as models
dir(models)
```

```
['AlexNet', 'ConvNeXt', 'DenseNet', 'EfficientNet', 'GoogLeNet', 'GoogLeNetOutputs', 'Inception3',
↪  'InceptionOutputs', 'MNASNet', 'MobileNetV2', 'MobileNetV3', 'RegNet', 'ResNet',
↪  'ShuffleNetV2', 'SqueezeNet', 'VGG', 'VisionTransformer', '_GoogLeNetOutputs',
↪  '_InceptionOutputs', '__builtins__', '__cached__', '__doc__', '__file__', '__loader__',
↪  '__name__', '__package__', '__path__', '__spec__', '_utils', 'alexnet', 'convnext',
↪  'convnext_base', 'convnext_large', 'convnext_small', 'convnext_tiny', 'densenet',
↪  'densenet121', 'densenet161', 'densenet169', 'densenet201', 'detection', 'efficientnet',
↪  'efficientnet_b0', 'efficientnet_b1', 'efficientnet_b2', 'efficientnet_b3', 'efficientnet_b4',
↪  'efficientnet_b5', 'efficientnet_b6', 'efficientnet_b7', 'feature_extraction', 'googlenet',
↪  'inception', 'inception_v3', 'mnasnet', 'mnasnet0_5', 'mnasnet0_75', 'mnasnet1_0',
↪  'mnasnet1_3', 'mobilenet', 'mobilenet_v2', 'mobilenet_v3_large', 'mobilenet_v3_small',
↪  'mobilenetv2', 'mobilenetv3', 'optical_flow', 'quantization', 'regnet', 'regnet_x_16gf',
↪  'regnet_x_1_6gf', 'regnet_x_32gf', 'regnet_x_3_2gf', 'regnet_x_400mf', 'regnet_x_800mf',
↪  'regnet_x_8gf', 'regnet_y_128gf', 'regnet_y_16gf', 'regnet_y_1_6gf', 'regnet_y_32gf',
↪  'regnet_y_3_2gf', 'regnet_y_400mf', 'regnet_y_800mf', 'regnet_y_8gf', 'resnet', 'resnet101',
↪  'resnet152', 'resnet18', 'resnet34', 'resnet50', 'resnext101_32x8d', 'resnext50_32x4d',
↪  'segmentation', 'shufflenet_v2_x0_5', 'shufflenet_v2_x1_0', 'shufflenet_v2_x1_5',
↪  'shufflenet_v2_x2_0', 'shufflenetv2', 'squeezenet', 'squeezenet1_0', 'squeezenet1_1', 'vgg',
↪  'vgg11', 'vgg11_bn', 'vgg13', 'vgg13_bn', 'vgg16', 'vgg16_bn', 'vgg19', 'vgg19_bn', 'video',
↪  'vision_transformer', 'vit_b_16', 'vit_b_32', 'vit_l_16', 'vit_l_32', 'wide_resnet101_2',
↪  'wide_resnet50_2']
```

8.1. Grabación y carga de los pesos del modelo

- ***torch.save:*** para grabar los parámetros de un modelo en su diccionario de estado **`state_dict`**

`son 528M de pesos!`

```
model = models.vgg16(pretrained=True)
torch.save(model.state_dict(), 'model_weights.pth')
```

- ***load_state_dict():*** carga los pesos de un modelo ya instanciado

```
model = models.vgg16() # we do not specify pretrained=True,
↪  i.e. do not load default weights
model.load_state_dict(torch.load('model_weights.pth'))
model.eval() # to set the dropout and batch normalization
↪  layers to evaluation mode
```

8.2. Grabación y carga del modelo completo

- ***torch.save:*** para graba el modelo completo y no solo su diccionario de estado

```
torch.save(model, 'model.pth')
```

- ***torch.load:*** para cargar el modelo completo

```
model = torch.load('model.pth')
```