



中山大學
SUN YAT-SEN UNIVERSITY

机器学习实验报告 4

姓名：陈海弘

学号：23354049

陈海弘

2024.11.21

Contents

1	摘要	3
2	神经网络中的前向传播和后向传播	3
2.1	实验要求	3
2.2	数据读取	3
2.3	神经网络搭建	3
2.4	训练	5
2.5	训练损失测试损失展示	7
3	总结	8

1 摘要

本次实验是关于红酒品质的预测，使用的是一个关于红酒品质的数据集，总共有 1599 个样本，每个样本包含 11 个特征以及 1 个标签，每个标签的取值是连续的。本次实验已经按照 8: 2 的比例划分成了训练数据集'wine_train.csv' 以及测试数据集'wine_test.csv'，且每个数据集都已经做了归一化处理。

引用的库有 pandas、torch、matplotlib、numpy 等，其中最重要的是 torch 库，因为本次实验是关于神经网络的搭建和训练的。本次试验用的 pytorch 版本是 2.5.1。

Tensor 和 ndarray 相似，但是 Tensor 可以利用 GPU 加速。

2 神经网络中的前向传播和后向传播

2.1 实验要求

Red Wine Quality 是一个关于红酒品质的数据集，总共有 1599 个样本，每个样本包含 11 个 (都是连续的) 特征以及 1 个标签，每个标签的取值是连续的。本次实验已经按照 8: 2 的比例划分成了训练数据集'wine_train.csv' 以及测试数据集'wine_test.csv'，且每个数据集都已经做了归一化处理。

2.2 数据读取

读入训练数据集'wine_train.csv' 与测试数据集'wine_test.csv'。

```
1 train_data = pd.read_csv('wine_train.csv')
2 test_data = pd.read_csv('wine_test.csv')
```

2.3 神经网络搭建

利用线性层和激活函数搭建一个神经网络，要求输入和输出维度与数据集维度一致，而神经网络深度、隐藏层大小、激活函数种类等超参数自行调整。

输入维度为 11，输出维度为 1，所以输入层到隐藏层、隐藏层到隐藏层、隐藏层到输出层的维度分别为 11、128、32。

神经网络深度是 3 层，所以定义一个神经网络类 WineNet，继承自 nn.Module。在构造函数中定义了三个全连接层，分别是输入层到隐藏层、隐藏层到隐藏层、隐藏层到输出层。

激活函数是 ReLU 函数，即 $ReLU(x) = \max(0, x)$ 。还有其他的激活函数，例如 sigmoid 函数，即 $\text{sigmoid}(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$ ，以及 tanh 函数，即 $\text{tanh}(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}$ 。

在 forward 函数中定义了神经网络的前向传播过程，即将输入数据经过全连接层和激活函数处理后输出。

```
1 class WineNet(nn.Module):
2     def __init__(self):
3         super(WineNet, self).__init__()
4         self.fc1 = nn.Linear(11,128)
5         self.fc2 = nn.Linear(128,32)
6         self.fc3 = nn.Linear(32,1)
7     def forward(self,x):
8         x = F.relu(self.fc1(x))
9         x = F.relu(self.fc2(x))
10        x = self.fc3(x)
11        return x
12 net = WineNet()
13 print(net)
```

```
WineNet(
  (fc1): Linear(in_features=11, out_features=128, bias=True)
  (fc2): Linear(in_features=128, out_features=32, bias=True)
  (fc3): Linear(in_features=32, out_features=1, bias=True)
)
```

Figure 1: 神经网络结构

2.4 训练

用梯度下降法进行模型参数更新，记下每轮迭代中的训练损失和测试损失。

- **数据准备：**将 pandas 数据转换为 PyTorch 张量，特征数据 X 选取除最后一列外的所有列，标签数据 y 选取最后一列，并 reshape 为 $(1, -1)$ 。
- **训练阶段：**初始化神经网络模型，使用均方误差 (MSE) 作为损失函数，使用随机梯度下降 (SGD) 优化器，学习率为 0.01，迭代次数为 100 次。
- **循环过程：**
 - 将模型设置为训练模式。
 - 进行前向传播，计算训练损失。
 - 反向传播并更新模型参数。
 - 注意清空梯度，避免梯度累积导致性能下降。
- **测试阶段：**将模型设置为测试模式，进行前向传播并计算测试损失。

```
1 X_train = torch.tensor(train_data.iloc[:, :-1].values, dtype=torch.  
    float32) # 训练特征  
2 y_train = torch.tensor(train_data.iloc[:, -1].values, dtype=torch.  
    float32).view(-1, 1) # 训练标签  
3 X_test = torch.tensor(test_data.iloc[:, :-1].values, dtype=torch.  
    float32) # 测试特征  
4 y_test = torch.tensor(test_data.iloc[:, -1].values, dtype=torch.  
    float32).view(-1, 1) # 测试标签  
5  
6 net = WineNet() # 初始化模型  
7 criterion = nn.MSELoss() # 定义损失函数  
8  
9 learning_rate = 0.01
```

```
10 epochs = 100
11
12 train_losses = []
13 test_losses = []
14
15 optimizer = torch.optim.SGD(net.parameters(), lr = learning_rate)
16
17 for epoch in range(epochs):
18     net.train() # 训练阶段
19     output = net(X_train) # 前向传播
20     train_loss = criterion(output, y_train) # 计算训练损失
21
22     optimizer.zero_grad()
23     train_loss.backward()
24     optimizer.step()
25
26     net.zero_grad() # 清空梯度
27
28     # 测试阶段
29     net.eval() # 设置为评估模式
30     with torch.no_grad(): # 禁用梯度计算
31         test_output = net(X_test) # 前向传播
32         test_loss = criterion(test_output, y_test) # 计算测试损失
33
34     # 记录每轮的训练损失和测试损失
35     train_losses.append(train_loss.item())
36     test_losses.append(test_loss.item())
37
38     if epoch % 10 == 0:
39         print(f'Epoch[{epoch+1}/{epochs}], TrainLoss:{train_loss.item():.4f}, TestLoss:{test_loss.item():.4f}')
```

```
Epoch [1/100], Train Loss: 0.2175, Test Loss: 0.2044
Epoch [11/100], Train Loss: 0.1200, Test Loss: 0.1145
Epoch [21/100], Train Loss: 0.0728, Test Loss: 0.0709
Epoch [31/100], Train Loss: 0.0494, Test Loss: 0.0491
Epoch [41/100], Train Loss: 0.0374, Test Loss: 0.0379
Epoch [51/100], Train Loss: 0.0312, Test Loss: 0.0320
Epoch [61/100], Train Loss: 0.0280, Test Loss: 0.0289
Epoch [71/100], Train Loss: 0.0263, Test Loss: 0.0273
Epoch [81/100], Train Loss: 0.0254, Test Loss: 0.0265
Epoch [91/100], Train Loss: 0.0250, Test Loss: 0.0260
```

Figure 2: 训练损失和测试损失

可以看到，训练损失和测试损失都随着迭代次数的增加而减小，说明模型在逐渐收敛。

除了用 PyTorch 的优化器来更新 net 中的参数外，还可以手动更新参数，用梯度下降法手动实现。

```
1 with torch.no_grad(): # 禁用梯度计算
2     for f in net.parameters():
3         f.data.sub_(f.grad.data * learning_rate) # 手动梯度下降更新参数
```

2.5 训练损失测试损失展示

```
1 plt.plot(range(len(train_losses)), train_losses, label='Train_Loss')
2 plt.plot(range(len(test_losses)), test_losses, label='Test_Loss')
3 plt.xlabel('Epochs')
4 plt.ylabel('Loss')
5 plt.title('Training and Testing Loss')
6 plt.legend()
7 plt.grid()
8 plt.show()
```

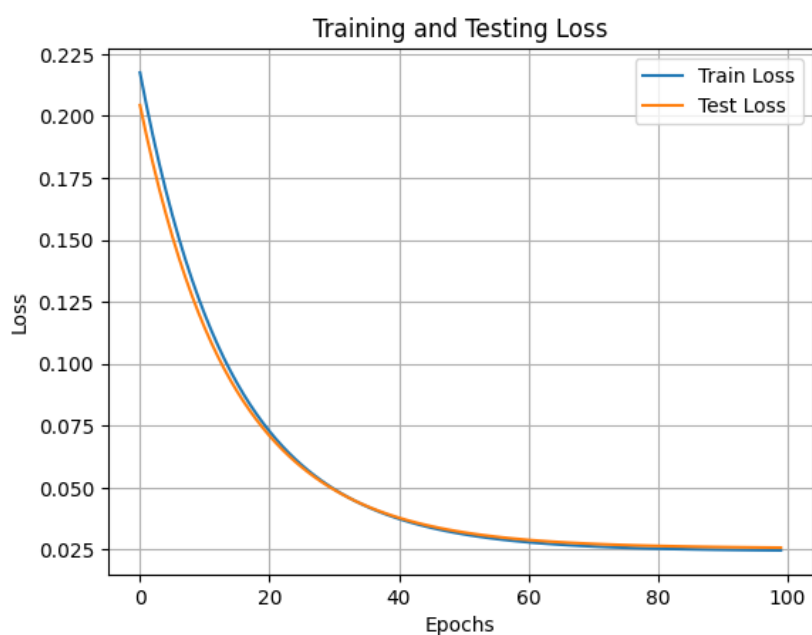


Figure 3: 训练损失和测试损失

该图显示了训练损失和测试损失随迭代次数的变化情况。可以看到，训练损失和测试损失都随着迭代次数的增加而减小，说明模型在逐渐收敛。并且训练损失和测试损失的差距在逐渐减小，说明模型在逐渐泛化。

3 总结

这次试验首先学习了 `pytorch` 库，还有 `tensor` 的创建，运算，和 `ndarray` 的转换。然后学习了神经网络的搭建，前向传播和后向传播。最后学习了如何用 `pytorch` 训练一个神经网络。

实验主要围绕对红酒品质的预测，用神经网络来预测红酒的品质。我认为我需要注意的地方有，在神经网络的搭建的时候，要注意输入和输出的维度，以及神经网络的深度和隐藏层的大小。在训练的时候，要注意梯度的清空，避免梯度累积导致性能下降。