

# **Learning PyTorch**

## **Tensor**

### ▼ 属性

• data:数值

• grad: 梯度值

• grad\_fn

requires\_grad

• is\_leaf

- 。 叶子节点的概念主要是为了节省内存,所有节点都依赖于叶子节点(初始节点),在计算图中的一轮反向传播 结束之后,非叶子节点的梯度会被释放(除非指定 retain\_grad())
- 。 PyTorch 使用动态图机制,运算和搭建同时进行,可以先计算前面节点的值,再根据这些值搭建后面的计算图
- <a href="dtype">dtype</a>: 数据类型,如 torch.FloatTensor,torch.cuda.FloatTensor
  - 。 分为 3 大类:float (16-bit, 32-bit, 64-bit)、integer (unsigned-8-bit, 8-bit, 16-bit, 32-bit, 64-bit)、Boolean。模型 参数和数据用的最多的类型是 float-32-bit。label 常用的类型是 integer-64-bit
- device

## ▼ 创建

#### ▼ 根据数值创建

- torch.tensor(data, dtype, device, requires\_grad)
  - o data: list/numpy...
- torch.from\_numpy(np.ndarray)
- torch.zeros(\*size, out=None, dtype=None, layout=torch.strided, device=None, requires\_grad=False)
  - o out: 输出的张量,如果指定了 out,那么 torch.zeros() 返回的张量和 out 指向的是同一个地址
  - 。 <u>layout</u>: 内存中布局形式,有 strided,sparse\_coo 等。当是稀疏矩阵时,设置为 sparse\_coo 可以减少内存占用
- torch.zeros\_like(input)
- torch.full(size, fill\_value):创建全为自定义数值(fill\_value)的张量
- torch.arange(start=0, end, step=1) : 创建 [start,end) 的一维张量
- torch.linspace(start, end, steps=100) : 创建 [start, end],元素个数为 steps 的均分一维张量

## ▼ 根据分布创建

- torch.logspace(start, end, steps=100, base=10) : 创建 [base^start, base^end],元素个数为 steps 的对数均分 一维张量
- torch.eye(n, m=None):创建行为 n,列为 m(默认与 n 相同)的单位对角矩阵
- torch.normal(mean, std):正态分布采样
  - 1. mean 为标量, std 为标量, 这时需要设置 size, 在同一正态分布中采样
  - 2. mean 为标量,std 为张量
  - 3. mean 为张量,std 为标量 采样的分布一个相同,另一个不同
  - 4. mean 为张量,std 为张量 从不同分布中采样
- torch.randn(\*size) torch.randn\_like(input) : 生成**标准**正态分布

- torch.rand(\*size) torch.rand\_like(input) : 生成 [0,1) 上的均匀分布
- torch.randint(low=0, high, size):生成 [low, high] 上整数均匀分布
- torch.randperm(n): 生成 0 到 n-1 的随机排列,常用于生成索引
- <u>torch.bernoulli(input)</u>:生成以 input (tensor) 为概率 (p) 的伯努利分布(0-1 离散分布)

#### ▼ 操作

#### ▼ 广播机制

- 1. 从最后一个维度开始匹配
- 2. 在前面插入若干维度(进行 unsqueeze 操作)
- 3. 将维度的 size 从 1 扩张到与某个张量相同的维度

#### 例如:

- Feature maps : [4, **32**, **14**, **14**]
- Bias:[**32, 1, 1**](Tip:后面的两个1是手动unsqueeze插入的维度)-> [1, 32, 1, 1] -> [4, 32, 14, 14]

## ▼ 拼接

- torch.cat(tensors, dim=0):将张量在 dim 维上拼接(除了 dim 维其他维度必须相同)
- torch.stack(tensors, dim=0):将张量在新创建的 dim 维上拼接(两个张量 shape 必须相同)

#### ▼ 切分

- torch.chunk(input, chunks, dim=0):将 input 向量在 dim 维上**切分为 chunks 份**(若不能整除,则最后一份张量小于其他张量)【按个数拆分】
- torch.split(tensor, split\_size\_or\_sections, dim=0): split\_size\_or\_sections 为 int 时,表示**切分的每一份长度** (若不能整除,则最后一份张量小于其他张量);为 list 时,按照 list 元素作为每一个分量的长度切分(list 中元素之和必须等于切分维度的值)【按长度拆分】

## ▼ 索引

• torch.index\_select(input, dim, index):在 dim 维度上,按照 index 索引取出 input 中的数据拼接为张量返回

• torch.mask\_select(input, mask):按照 mask 中的 True 进行索引拼接得到一维张量返回(mask 为与 input 同形的布尔类张量)

• torch.ge(input, other) le gt lt nonzero:根据比较结果返回布尔型张量, other 可以是数值或张量

#### ▼ 变换

• torch.reshape(input, shape)

注意:当张量在内存中是连续的时,返回的张量和原来的张量**共享数据内存**,改变一个变量另一个也会改变!

- torch.transpose(input, dim0, dim1):交换张量的两个维度
- torch.permute(input, dims) : 置换张量维度(内存不变)
- torch.squeeze(input, dim=None):压缩长度为 1 的维度(dim 若为 None 则移除所有长度为 1 的维度;若指定维度,则当且仅当该维度长度为 1 时可以移除)
- torch.unsqueeze(input, dim):根据 dim 扩展维度,长度为 1

## ▼ 扩张与缩减

- torch.expand()
- repeat
- narrow

## ▼ 近似与裁剪

- torch.floor torch.ceil torch.trunc torch.frac torch.round : 向下取整、向上取整、取整数部分、取小数部分、四舍五入
- torch.clamp(input, min, max):对张量中的元素,小于 min 的都设置为 min,大于 max 的都设置成 max

#### ▼ 统计属性

- torch.norm(input, p, dim=None):在 dim 维上对 input 张量**求 p 范数**
- torch.prod(input, dim=None):累积
- torch.argmax/argmin(input, dim=None) : 最大值最小值索引(若不指定 dim,默认会将Tensor打平后取最大值索引和最小值索引)
- torch.topk(input, k, dim=None, largest=True, sorted=True):返回二元组 values indices ,分别是 input 中前 k 大(largest=False 时为前 k 小)的值和索引(**不指定 dim 时默认为最后一维**,返回的两个张量与 input 相比除了 dim 维的值变成 k 外其他维不变)

```
>>> x = torch.arange(1., 6.)
>>> x
tensor([ 1., 2., 3., 4., 5.])
>>> torch.topk(x, 3)
torch.return_types.topk(values=tensor([5., 4., 3.]), indices=tensor([4, 3, 2]))
```

• torch.kthvalue(input, k, dim=None, keepdim=False) : 返回 dim 维上**第 k 小**的元素及其索引

## ▼ 其他高阶操作

- where
- gather

## ▼ 自动求导机制

- torch.autograd.backward(tensors, grad\_tensors=None, retain\_graph=False, create\_graph=None):反向求导
  - 。 tensors: 用于求导的张量,如 loss

。 grad\_tensors: 当有多个 loss 混合需要计算梯度时,设置每个 loss 的权重

○ retain\_graph:保存计算图

。 create\_graph: 创建导数计算图,用于高阶求导

```
x = torch.tensor([3.], requires_grad=True)
y = torch.pow(x, 2)  # y = x**2
# 如果需要求 2 阶号,需要设置 create_graph=True, 让一阶号数 grad_1 也拥有计算图
grad_1 = torch.autograd.grad(y, x, create_graph=True)  # grad_1 = dy/dx = 2x = 2 * 3 = 6
print(grad_1)
# 这里求 2 阶号
grad_2 = torch.autograd.grad(grad_1[0], x)  # grad_2 = d(dy/dx)/dx = d(2x)/dx = 2
print(grad_2)

'''
(tensor([6.], grad_fn=<MulBackward0>),)
(tensor([2.]),)
'''
```

• torch.aotograd.grad(outputs, inputs, grad\_outputs=None, retain\_graph=False, create\_graph=None): **outputs 对 inputs 求** 取梯度(返回一个 tuple,取出第 0 个元素为梯度计算结果)

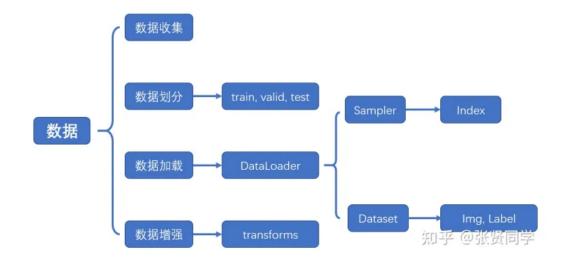
#### ▼ 注意

- 1. PyTorch 采用动态图机制,默认每次反向传播之后都会释放计算图,因此默认情况下**连续**两次调用 backward 会报错
- 2. 每次反向求导时,计算的梯度不会自动清零,若多次迭代计算而梯度没有清零,那么梯度会在前一次的基础上叠加;因此每次调用 backward 后,记得将梯度清零: a.grad.zero\_() 或 optimizer.zero\_grad()
- 3. 依赖于叶子节点的节点,requires\_grad 属性默认为 True
- 4. 叶子节点不可执行 inplace 操作

以加法来说,inplace 操作有 a += x ,  $a.add_(x)$  ,改变后的值和原来的值内存地址是 同一个。非inplace 操作有 a = a + x , a.add(x) ,改变后的值和原来的值内存地址不是 同一个。

如果在反向传播之前 inplace 改变了叶子节点的值,再执行 backward 会报错(这是因为在进行前向传播时,计算图中依赖于叶子节点的那些节点,会记录叶子节点的地址,在反向传播时就会利用叶子节点的地址所记录的值来计算梯度)

# 数据处理



## ▼ DataLoader 和 Dataset

- torch.utils.Dataset : 所有自定义数据集的基类,需要重写下列方法:
  - \_\_getitem(index)\_\_ :接收一个索引,返回索引对应的**样本**和标签
  - 。 \_\_len()\_\_:返回所有样本的数量

## 数据读取包括下列三方面:

- 读取哪些数据:每个 Iteration 读取一个 Batchsize 大小的数据,每个 Iteration 应该读取哪些数据。
- 从哪里读取数据:如何找到硬盘中的数据,应该在哪里设置文件路径参数
- 如何读取数据:不同的文件需要使用不同的读取方法和库。
- torch.utils.data.DataLoader(dataset, batch\_size=1, shuffle=False, sampler=None, batch\_sampler=None, num\_workers=0, drop\_last=False) : 数据加载器
  - 。 sampler: 自定义从数据集中采样的策略,如果制定了采样策略, shuffle 则必须为 False(所有定义了 \_\_len\_\_ 的 \_\_terable 都可以作为 sampler)
  - 。 num\_workers: 使用线程的数量,当为0时数据直接加载到主程序,默认为0
  - 。 drop\_last:布尔类型,为 True 时将会把最后不足 batch\_size 的数据丢掉,为F将会把剩余的数据作为最后一小组

Epoch: 所有训练样本都已经输入到模型中,称为一个 Epoch

Iteration: 一批样本输入到模型中,称为一个 Iteration

Batch size: 批大小,决定一个 iteration 有多少样本,也决定了一个 Epoch 有多少个 Iteration

o DataLoader 迭代器源码:

```
def __iter__(self):
    if self.num_workers == 0:
        return _SingleProcessDataLoaderIter(self)
    else:
        return _MultiProcessingDataLoaderIter(self)
```

对单进程,在 \_SingleProcessDataLoaderIter 里只有一个方法 \_next\_data(),如下:

```
def _next_data(self):
   index = self._next_index()  # may raise StopIteration
   data = self._dataset_fetcher.fetch(index)  # may raise StopIteration
   if self._pin_memory:
      data = _utils.pin_memory.pin_memory(data)
   return data
```

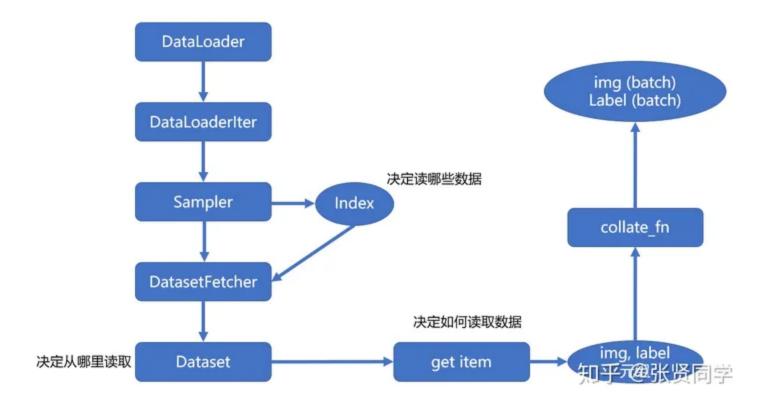
在该方法中,self.\_next\_index() 是**获取一个 batchsize 大小的 index 列表**,代码如下:

```
def _next_index(self):
    return next(self._sampler_iter) # may raise StopIteration
```

其中调用的 sampler 类的 \_\_iter\_\_() 方法返回 batch\_size 大小的随机 index 列表

在第二行中调用了 self.\_dataset\_fetcher.fetch(index) 获取数据。这里会调用 \_MapDatasetFetcher 中的 fetch() 函数:

```
def fetch(self, possibly_batched_index):
   if self.auto_collation:
    data = [self.dataset[idx] for idx in possibly_batched_index]
   else:
    data = self.dataset[possibly_batched_index]
   return self.collate_fn(data)
```



### ▼ 数据处理与数据增强

- ▼ torchvision 库简介
  - torchvision.transforms:包括常用图像预处理方法,可用在 Dataset 类初始化中,如:
    - 。 数据中心化
    - 。 数据标准化
    - 。 缩放
    - 。裁剪
    - 。旋转
    - 。 翻转
    - 。填充
    - 。噪声添加
    - 。 灰度变换
    - 。 线性变换
    - 。 仿射变换
    - 。 亮度、饱和度以及对比度变换。
  - torchvision.datasets : 包含常用数据集如 mnist、CIFAR-10、ImageNet 等
  - torchvision.models: 包含常用预训练模型,如 AlexNet、VGG、ResNet、GoogleNet 等
- ▼ transforms 中的图像处理方法
  - ▼ 裁剪与填充
    - **transforms.CenterCrop(size)**:根据给定尺寸裁剪出图像中心(若裁剪的 size 比原图大,会填充值为 0 的像素)
    - transforms.Pad(padding, fill=0, padding\_mode='constant') : 边界填充
      - 。 padding:设置填充大小
        - 当为 a 时,上下左右均填充 a 个像素
        - 当为 (a, b) 时,左右填充 a 个像素,上下填充 b 个像素
        - 当为 (a, b, c, d) 时,左上右下分别填充 a, b, c, d
      - 。 pad\_if\_need: 当图片小于设置的 size,是否填充
      - padding\_mode:
        - constant: 像素值由 fill 设定
        - edge: 像素值由图像边缘像素设定

- 。 fill: 当 padding\_mode 为 constant 时,设置填充的像素值(可以为三元 tuple,表示 RGB 三元组)
- transforms.RandomCrop(size, padding=None, pad\_if\_need=False, fill=0, padding\_mode='constant'):随机裁剪出尺寸为 size 的图片;如果 padding 不为 None,则先 padding 再裁剪
- transforms.RandomResizedCrop(size, scale=(0.08, 1.0), ratio=(0.75, 1.3333333333333333), interpolation=2)
  - 。 size: 裁剪的图片尺寸
  - 。 scale: 随机缩放面积比例,默认随机选取 (0.08, 1) 之间的一个数(放大)
  - 。 ratio: 随机长宽比,默认随机选取 (3/4, 4/3) 之间的一个数。因为超过这个比例会有明显的失真
  - 。 interpolation: 当裁剪出来的图片小于 size 时,就要使用插值方法 resize
    - PIL.Image.NEAREST
    - PIL.Image.BILINEAR
    - PIL.Image.BICUBIC

#### ▼ 翻转旋转与仿射变换

- transforms.RandomHorizontalFlip(p) / transforms.RandomVerticalFlip(p) : 根据给定概率,在水平或垂直方向翻转图片
- transforms.RandomRotation(degrees, center=None, expand=False):随机旋转
  - 。 degrees: 旋转角度
    - 当为 a 时,在 (-a, a) 之间随机选择旋转角度
    - 当为 (a, b) 时,在 (a, b) 之间随机选择旋转角度
  - 。 center: 旋转点设置,是坐标,默认中心旋转,如设置左上角为 (0,0)
  - expand:是否扩大矩形框,以保持原图信息。根据中心旋转点计算扩大后的图片。如果旋转点不是中心,即使设置 expand = True,还是会有部分信息丢失
- transforms.RandomAffine(degrees, translate=None, scale=None, shear=None, resample=False, fillcolor=0) : 随机一般仿射变换,囊括五种基本操作——翻转、旋转、平移、缩放、错切
  - 。 degree: 旋转角度设置
  - translate: 平移区间设置,如 (a, b), a 设置宽 (width), b 设置高 (height),图像在宽维度平移的区间为 image\_width \* [-a, +a],高同理
  - 。 scale: 缩放比例,以面积为单位
  - 。 fillcolor: 填充颜色设置
  - 。 shear: 错切角度设置,有水平错切和垂直错切
    - 若为 a,则仅在 x 轴错切,在 (-a, a) 之间随机选择错切角度
    - 若为 (a, b), x 轴在 (-a, a) 之间随机选择错切角度, y 轴在 (-b, b) 之间随机选择错切角度
    - 若为 (a, b, c, d), x 轴在 (a, b) 之间随机选择错切角度, y 轴在 (c, d) 之间随机选择错切角度

## ▼ 颜色调整与随机遮挡

- transforms.ColorJitter(brightness=0, contrast=0, saturation=0, hue=0) :调整亮度/对比度/饱和度/色相
  - brightness、contrast、saturation 参数
    - 当为 a 时,从 [max(0, 1-a), 1+a] 中随机选择
    - 当为 (a, b) 时,从 [a, b] 中选择
  - 。 hue:色相参数(介于0到0.5)
    - 当为 a 时,从 [-a, a] 中选择参数
    - 当为 (a, b) 时,从 [a, b] 中选择参数
- transforms.RandomGrayscale(p=0.1, num\_output\_channels=1) : 根据指定概率将图片转为灰度图
  - num\_output\_channels:输出的通道数。只能设置为1或者3(如果在后面使用了
     transforms.Normalize ,则必须设为3,因为 transforms.Normalize 只能接收3通道的输入)
- [transforms.RandomErasing(p=0.5, scale=(0.02, 0.33), ratio=(0.3, 3.3), value=0, inplace=False)]:根据给定概率 对图像随机遮挡

- 。 scale: 遮挡区域的面积。如(a, b),则会随机选择 (a, b) 中的一个遮挡比例
- 。 ratio: 遮挡区域长宽比。如(a, b),则会随机选择 (a, b) 中的一个长宽比
- 。 value: 设置遮挡区域的像素值。(R, G, B) 或者 Gray,或者任意字符串(此时会用高斯噪声遮挡)。若之前执行了 transforms.ToTensor(),像素值归一化到了 0~1 之间,因此这里设置的 (R, G, B) 要除以 255

#### ▼ 特殊操作

- transforms.Compose([list]) : 当需要多个 transforms 操作时,需要作为一个 list 包装在 transforms.Compose 中
- transforms.ToTensor(): 把图片转换为张量,**同时进行归一化操作**,把每个通道 0~255 的值**归一化为 0~1** [C, H, W]
- transforms.Normalize(mean, std, inplace=False): **逐 channel** 地对图像进行标准化 output = (input mean)/std
- transforms.Lambda([lambda function]):自定义变换

# 模型构建与模型训练



## ▼ nn.Module 类

- 必须实现 forward() 函数
- 两种 mode: model.train() / model.eval()
  - 。 注意与 requires\_grad 毫无关系,它仅仅是对在 train 和 eval 模式下表现不同的模块如 Dropout 和 BatchNorm 有用!

## ▼ 模块与参数管理

- 获取 modules (包括 children) parameters buffers 迭代器:不带 named\_ 返回 Tensor 的迭代器,带 named\_ 的返回 Tuple[str, Tensor] 的迭代器
  - modules() named\_modules(prefix=''):返回由浅入深遍历所有子模块的迭代器
  - children() named\_children(prefix=''):返回遍历所有一级子模块的迭代器
  - o parameters(recurse=True) named\_parameters(prefix='', recurse=True) :返回所有参数(默认递归迭代所有子模块)
  - o buffers(recurse=True) named\_buffers(prefix='', recurse=True) : 返回模块的 buffers(模型状态参数,不用梯度下降更新)
- 根据名字获取 submodule parameter buffer : get\_\*\*\*(target) 例如模块 A:

- 注册 module parameter buffer : register\_\*\*\*(name, [content])
- 更改参数类型/设备: model.type(dst\_type) 或 model.to(type/device) ,包括 model.half() model.cuda() 等
- 载入模型参数: model.load\_state\_dict(state\_dict)
- ▼ 模型容器(同样继承自 nn.Module)
  - nn.Sequetial :顺序性,按照顺序包装多个网络层,常用于 block 构建
  - nn.ModuleList : 迭代性,像 python 的 list 一样包装多个网络层,包含 append() extend() insert() 等方法,常用于大量重复网络构建,通过 for 循环实现重复构建
  - nn.ModuleDict :索引性,像 python 的 dict一样包装多个网络层,通过 (key, value) 的方式为每个网络层指定名称,常用于可选择的网络层

#### ▼ 模型组件

#### ▼ 卷积层

• 二维卷积: nn.Cov2d(self, in\_channels, out\_channels, kernel\_size, stride=1, padding=1, dilation=1, groups=1, bias=True, padding\_mode='zeros')

◦ in\_channels:输入通道数

。 out\_channels:输出通道数,等价于卷积核个数

。 kernel size:卷积核尺寸

。 stride:步长

。 padding:填充宽度,主要是为了调整输出的特征图大小,一般把 padding 设置合适的值后,保持输入和输出的图像尺寸不变。

。 dilation:空洞卷积大小,默认为 1,这时是标准卷积,常用于图像分割任务中,主要是为了提升感受野

。 groups:分组卷积设置,主要是为了模型的轻量化,如在 ShuffleNet、MobileNet、SqueezeNet 中用到

。 bias:偏置

完整版卷积尺寸计算考虑了空洞卷积,假设输入图片大小为  $I \times I$ ,卷积核大小为  $k \times k$ ,stride为 s,padding 的像素数为 p,dilation 为 d,图片经过卷积之后的尺寸 O 如下:。

$$O=rac{I-d imes(k-1)+2 imes p-1}{s}+1$$

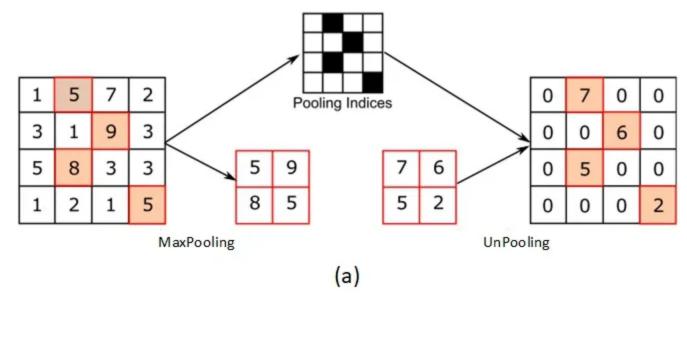
• 转置卷积:nn.ConvTranspose2d(self, in\_channels, out\_channels, kernel\_size, stride=1, padding=0, output\_padding=0, groups=1, bias=True, dilation=1, padding\_mode='zeros')

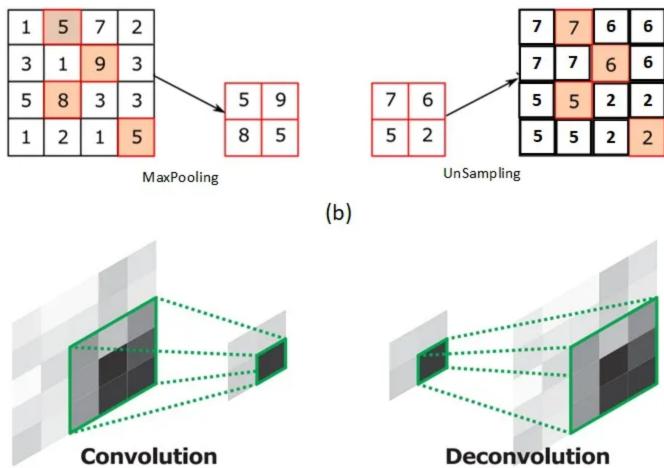
## ▼ 池化层

- 最大池化: nn.MaxPool2d(kernel\_size, stride=None, padding=0, dilation=1, return\_indices=False, ceil\_mode=False)
  - 。 kernel\_size: 池化核尺寸(无重叠,即通常 stride=kernel\_size)
  - 。 return\_indices:为 True 时,返回最大池化所使用的像素的索引,这些记录的索引通常在反最大池化时使用,把小的特征图反池化到大的特征图时,每一个像素放在哪个位置

下图 (a) 表示反池化,(b) 表示上采样,(c) 表示反卷积:

- 平均池化: nn.AvgPool2d(...)
- 最大值反池化:nn.MaxUnpool2d(kernel\_size, stride=None, padding=0)





(c) http://blog.c知于ng磷烷厚等n

## ▼ nn.init 参数初始化

• 目的:保持每一层输出的方差不能太大也不能太小

• 纯线性层:正态初始化,标准差  $\sigma(W) = \sqrt{rac{1}{n}}$ 

• 饱和激活函数(sigmoid/tanh):Xavier 初始化

Xavier 是 2010 年提出的,针对有非线性激活函数时的权值初始化方法,目标是保持数据的方差维持在 1 左右,主要针对饱和激活函数如 sigmoid 和 tanh 等。同时考虑前向传播和反向传播,需要满足两个等式:  $n_i*D(W)=1$  和  $n_{i+1}*D(W)=1$ ,可得:  $D(W)=\frac{2}{n_i+n_{i+1}}$ 。为了使 Xavier 方法初始化的权值服从均匀分布,假设 W 服从均匀分布 U[-a,a],那么方差  $D(W)=\frac{(-a-a)^2}{12}=\frac{(2a)^2}{12}=\frac{a^2}{3}$ ,令  $\frac{2}{n_i+n_{i+1}}=\frac{a^2}{3}$ ,解得:  $\mathbf{a}=\frac{\sqrt{6}}{\sqrt{n_i+n_{i+1}}}$ ,所以 W 服从分布  $U\left[-\frac{\sqrt{6}}{\sqrt{n_i+n_{i+1}}},\frac{\sqrt{6}}{\sqrt{n_i+n_{i+1}}}\right]$ 

• ReLU 激活函数:Kaiming 初始化

▼ 损失函数(同样继承 nn.Module ,因此也可视作一个网络层)

▼ 基本概念

- 损失函数(Loss Function):一个样本的模型输出与真实标签的差异
- 代价函数(Cost Function):整个样本集的模型输出与真实标签的差异,是所有样本损失函数的平均值
- 目标函数(Objective Function):代价函数加上正则项

[PyTorch 学习笔记] 4.2 损失函数 - 知乎 (zhihu.com)

## ▼ torch.optim 优化器

## ▼ 基本方法

- 初始化:给定待优化的模型参数、学习率
- optimizer.step():进行一步迭代
- optimizer.zero\_grad():将所有待优化的张量梯度置零
- optimizer.state\_dict() optimizer.load\_state\_dict(state\_dict) : 获取/填入优化器的 state\_dict

## ▼ 常用优化器

- optim.SGD(params, lr, momentum=0, dampening=0, weight\_decay=0)
  - 。 params:管理的参数组
  - 。 lr:初始学习率
  - 。 momentum:动量系数
  - 。 weight decay: L2 正则化系数
- torch.optim.Adam(params, lr=0.001, betas=(0.9, 0.999), eps=1e-08, weight\_decay=0)

## ▼ 正则化

## ▼ 模型其他操作