# 现代编程思想

## 案例：基于梯度下降的神经网络

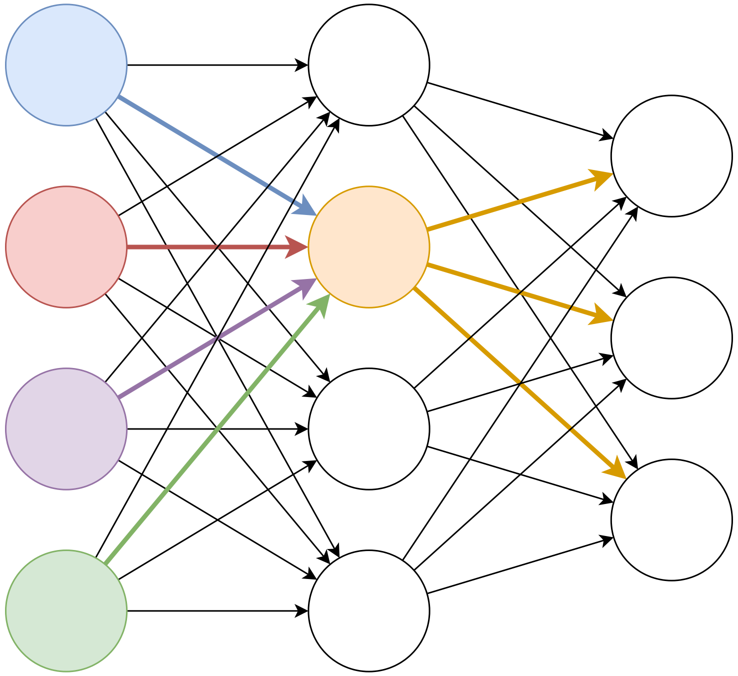
Hongbo Zhang

# 案例：鸢尾花

- 鸢尾花数据集是机器学习中的"Hello World"
  - 1936年发布
  - 包含对3种鸢尾花的测量，各有50个样本
  - 每个样本包含4项特征：花萼与花瓣的长度和宽度
- 目标
  - 通过特征，判断属于哪一类鸢尾花
  - 构建并训练神经网络，正确率95%以上

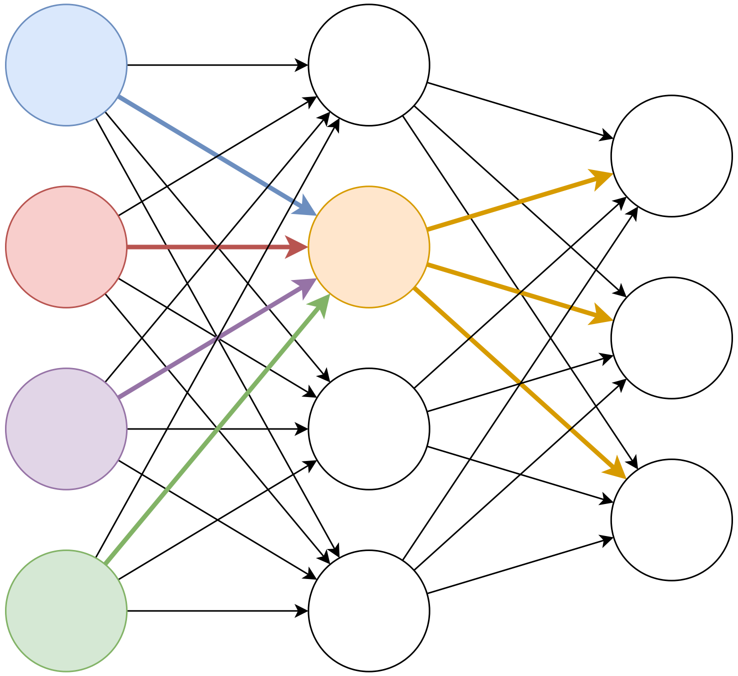
# 神经网络

- 神经网络是机器学习的一种
  - 模拟人的大脑神经结构
  - 单个神经元通常有
    - 多个输入
    - 一个输出
  - 神经元在达到一定阈值后激活
  - 通常分为多层结构



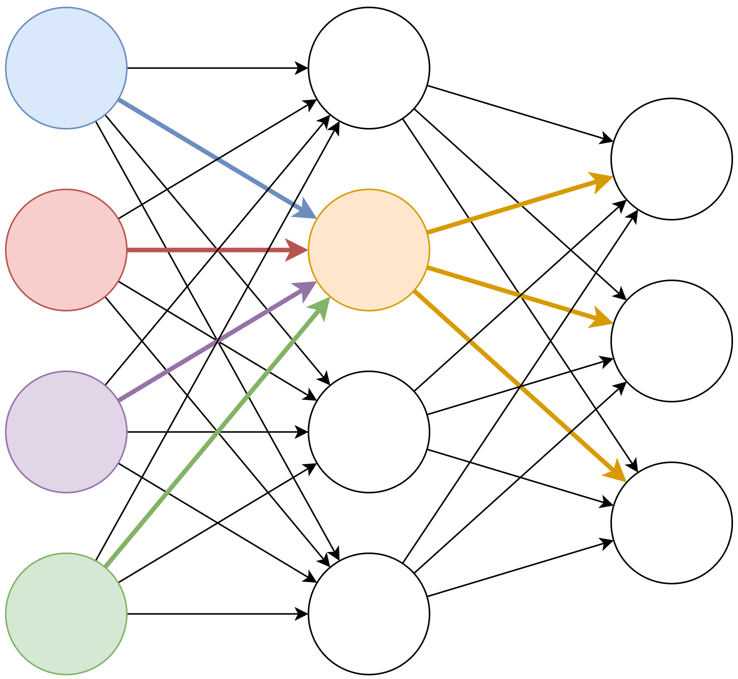
# 神经网络

- 一个典型的神经网络通常包含
  - 输入层：接受输入的参数
  - 输出层：输出计算结果
  - 隐含层：输入层与输出层之间的层级
- 神经网络的架构
  - 隐含层的层数、节点数、连接方式
  - 神经元的激活函数等



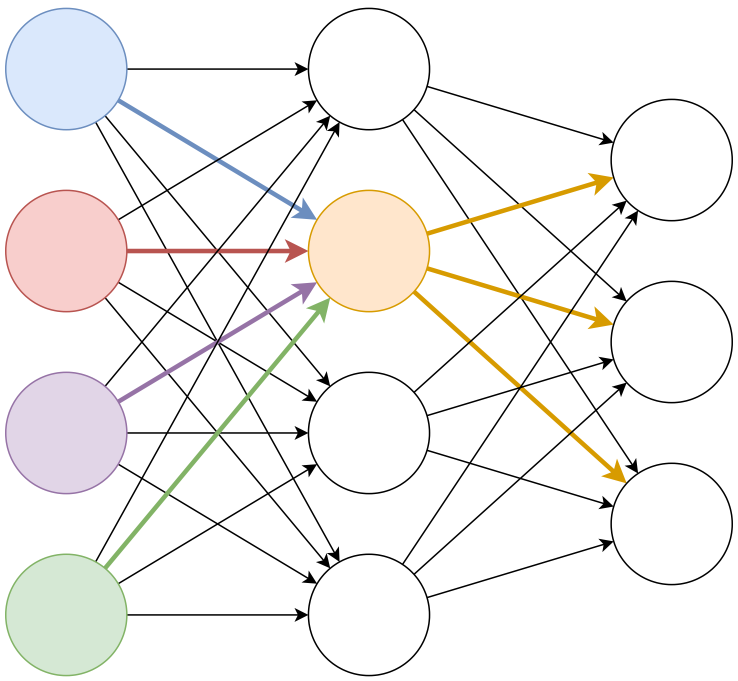
# 神经网络架构

- 输入：每个样本包含4个特征，四个输入
- 输出：属于每一种类的可能性，三个输出
- 样本数：150（总共）
- 网络架构：前馈神经网络
    - 输入层：四个节点
    - 输出层：三个节点
    - 隐含层：一层四个节点
    - 全连接：每一个神经元与前一层所有神经元相连



# 神经元

- $f = w_0x_0 + w_1x_1 + \cdots + w_nx_n + c$
  - $w_i, c$：参数
  - $x_i$：输入
- 激活函数
  - 隐含层：线性整流函数 ReLU
    - 当计算值小于零，不激活神经元
    - $f(x) = \begin{cases} x & \text{x} >= 0 \\ 0 & \text{x} < 0 \end{cases}$
  - 输出层：Softmax
    - 将输出整理为总和为1的概率分布
    - $f(x_m) = \frac{e^{x_m}}{\sum\limits_{i=1}^{N} e^{x_i}}$



# 神经网络实现

- 运算的定义

```
trait Base : Add + Neg + Mul + Div {
  constant(Double) -> Self
  value(Self) -> Double
  exp(Self) -> Self // 用于计算softmax
}
```

# 神经网络实现

- 激活函数

```
fn reLU[T : Base](t : T) -> T {
  if t.value() < 0.0 { T::constant(0.0) } else { t }
}

fn softmax[T : Base](inputs : Array[T]) -> Array[T] {
  let n = inputs.length()
  let sum = inputs.fold(init=T::constant(0.0), (acc, input) => acc + input.exp())
  Array::makei(n, i => inputs[i].exp() / sum)
}
```

# 神经网络实现

- 输入->隐含层

```
fn input2hidden[T : Base](inputs: Array[Double], param: Array[Array[T]]) -> Array[T] {
  let outputs : Array[T] = Array::makei(param.length(), o => reLU(
  inputs.foldi(init=T::constant(0.0),
    (index, acc, input) => acc + T::constant(input) * param[o][index]) +
  param[o][inputs.length()],
))
outputs
}
```

# 神经网络实现

- 隐含层->输出

```
fn hidden2output[T : Base](inputs: Array[T], param: Array[Array[T]]) -> Array[T] {
  let outputs : Array[T] = Array::makei(param.length(), o =>
  inputs.foldi(init=T::constant(0.0),
    (index, acc, input) => acc + input * param[o][index],
  ) +
  param[o][inputs.length()])
  outputs |> softmax
}
```

# 神经网络训练

- 损失函数
  - 评估当前结果与预期结果之间的“差距”
  - 我们选择交叉熵
- 梯度下降
  - 梯度决定参数的调整方向
- 学习率
  - 学习率决定参数的调整幅度
  - 我们选择指数下降，逐渐逼近

# 神经网络训练

- 多分类问题交叉熵：$I(x_j) = -\ln(p(x_j))$
  - $x_j$：事件；$p(x_j)$：$x_j$发生的概率
- 损失函数：基于抽象的定义

```
trait Log {
  log(Self) -> Self // 用于计算交叉熵
}
fn cross_entropy[T : Base + Log](inputs: Array[T], expected: Int) -> Double {
  -inputs[expected].log().value()
}
```

# 神经网络训练

MoonBit 月兔编程

- 后向微分：计算梯度
  - 从现有参数构建，积累微分

```
fn Backward::param(param: Array[Array[Double]], diff: Array[Array[Double]]) -> Array[Array[Backward]] {
  Array::makei(param.length(), i => Array::makei(param[i].length(), j => {
  value: param[i][j],
  propagate: fn() {  },
  backward: d => diff[i][j] += d,
}))
}
```

  - 计算并根据损失函数求微分

```
fn diff(inputs: Array[Double], expected: Int,
    param_hidden: Array[Array[Backward]], param_output: Array[Array[Backward]]) {
  let result = inputs
    |> input2hidden(param_hidden)
    |> hidden2output(param_output)
    |> cross_entropy(expected)
  result.backward()
}
```

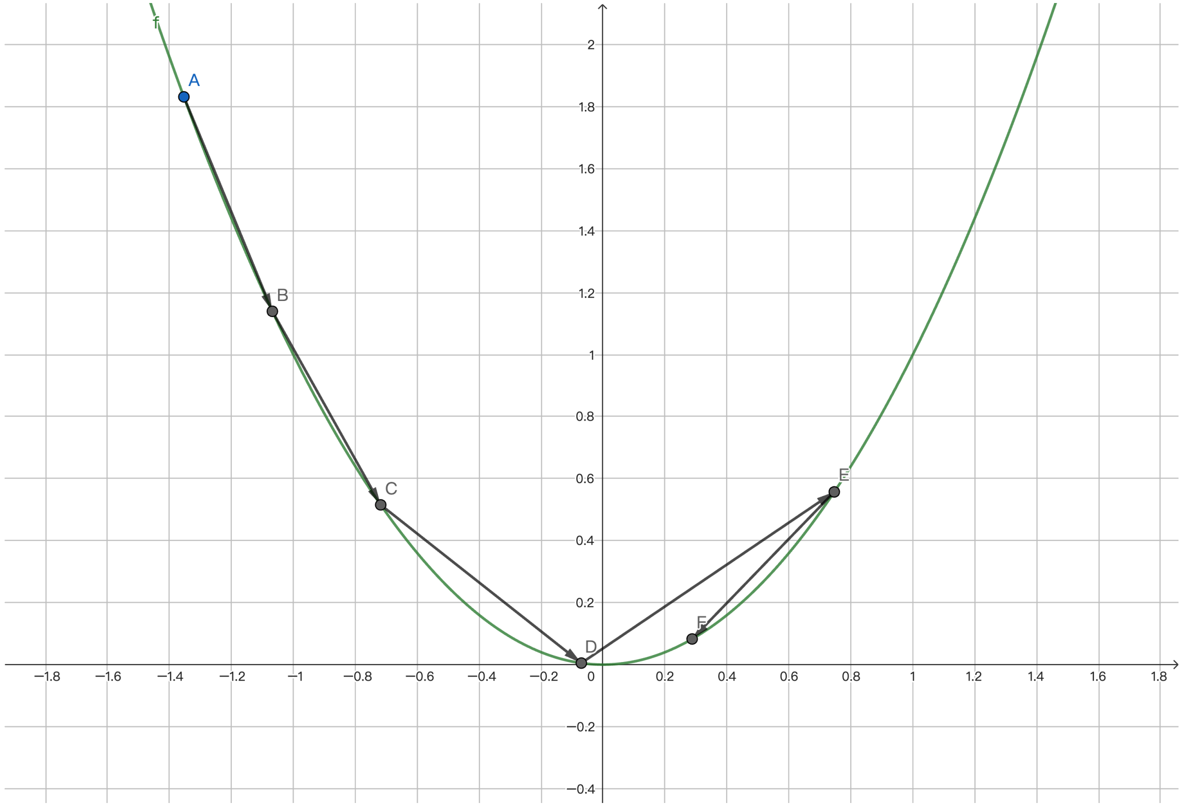
# 神经网络训练

- 根据梯度更新参数

```
fn update(params: Array[Array[Double]], diff: Array[Array[Double]], step: Double) {
  for i = 0; i < params.length(); i = i + 1 {
    for j = 0; j < params[i].length(); j = j + 1 {
      params[i][j] -= step * diff[i][j]
    }
  }
}
```

# 神经网络训练

- 学习率
  - 不合适的学习率可能导致学习成果下降，乃至无法收敛获得最佳结果




  - 指数衰减学习率：$f(x) = ae^{-bx}$，其中a、b为常数，x为训练次数

# 神经网络训练

- 将数据随机分成两个部分
  - 训练集：每一轮根据训练集的数据进行计算并求微分
  - 验证集：在训练结束后验证成果，避免过拟合
- 数据量较少，可以直接进行完整训练
  - 每一轮训练都使用训练集中的全部数据
  - 如果数据较多，则需要考虑分批训练

# 总结

- 本章节介绍了神经网络的基础知识
  - 神经网络的结构
  - 神经网络的训练
- 参考资料
  - What is a neural network