深度學習

HW11

學號 : B103012002

姓名 : 林凡皓

為了保持報告完整性，本次作業報告接續上次作業報告(從十三、Attention LSTM 開始為本次作業)。

一、 Image Feature Extraction

在 Image caption model 中，首先重要的是 encoder，此 encoder 會接收一張圖片作為輸入，並生成用於解碼的特徵。

我們使用小型的 RegNetX-400MF 作為骨幹網路，以減少訓練時間。

對於 vanilla RNN 和 LSTM，我們使用 average pooled features 來解碼，而對於 attention LSTM，我們使用 learning attention weight 來聚合空間特徵。

二、 Word embedding

在深度學習系統中，我們通常使用向量來代表字母。單字中的每個字母都會與一個向量相關，這些向量將會與系統其他部分一起學習。

這邊實作 WordEmbedding 類別來將字母轉換為向量。

- 實現方法：

  初始化部分，先創建一個參數 W_embed，其 shape = (vacab_size, embed_size)。使用 torch.randn 來初始化該矩陣，並將其除以 $\sqrt{vocab\_size}$ 來進行標準化。

  接著實作 forward 方法，這個方法主要是根據輸入的字母，從 W_embed 中找到其對應的向量，可以透過 index operation 來完成。

- 執行結果：

  ```
  out error:  2.727272753724473e-09
  ```

  Error 非常低，代表說該類別功能正確。

三、 Temporal Softmax Loss

在 RNN 語言模型中，我們在每個 timestep 產生出單字中每個字母的分數。由於我們知道各個 timestep 的 ground-truth，因此我們在每個 timestep 採用 cross entropy loss。我們將 loss 進行時間上的總和，並在 minibatch 上進行平均。

但是這邊有一個問題，就是由於我們是對 minibatch 進行操作，而不同的 caption 可能會有不同的長度，因此我們在每個 caption 的尾端加上'<NULL>'以便它們都具有相同長度。我們不希望這些'<NULL>'也加入 loss 的計算，因此我們需要一個額外的參數 ignore_index 來告訴程式碼在計算 loss 時要忽略掉那些 index。

實作 temporal_softmax_loss 來完成 loss 的計算。

- 實現方法：

  透過 torch.nn.functional.cross_entropy 來實現。

  torch.nn.functional.cross_entropy 可以傳入的參數有 input、target、weight、size_average、ignore_index、reduce、reduction、label_smoothing。這邊主要為用到 input、target、ignore_index、reduction。

  Input 的部分即為 x，不過關於維度的部分，我們需要將 timestep 的維度 T 放到最後，這樣才能使用 cross entropy 計算 loss，因此可以使用 permute(0, 2, 1)將 timestep 維度與最後的維度做交換。

  Target 即為 y。

  Ignore_index 即為呼叫函數時的輸入，主要用來在計算 loss 時忽略掉一些標籤。

  Reduction 的部分要設置維'sum'，因為我們希望將計算出來的 loss 進行時間上的總合，最後再對 minibatch 取平均。

- 執行結果：

  根據不同的情況去計算 loss，結果如下

```
2.0746383666992188
20.695470809936523
2.0829384326934814
```

  這些樹直接與預期的數值接近，代表說函數功能正確。

四、 Captioning Model

我們要將所有東西封裝成一個 captioning 模組，該模組有一個通用的結構，可以根據 cell_type 參數來控制要用於 RNN、LSTM 或是 attention LSTM。目前只需要實作 cell_type = 'rnn'的部分。

- __init__：

  1. 實現方法：

     初始化部分主要是要初始化 output projection、feature projection、word_embedding 和 backbone。

     Output projection 的部分為將 RNN 的 hidden state 映射到字母機率的層，可以透過 Linear layer 來做維度的改變。

     Feature projection 的部分為從 CNN pooled feature 映射到 h0 的部分，一樣可以利用 Linear layer 來做維度的轉換。

Word_embedding 的部分即為先前定義好的 WordEmbedding 類別。

骨幹網路的部分，可以透過創建一個已經定義好的 RNN 類別來實現。

- forward :

1. 實現方法 :

實作 RNN forward path 的部分來計算 loss，backward path 會利用 autograd 來實現。

首先要將輸入的字串分割成 captions_in 和 captions_out。

captions_in 為整個字串除了最後一個字母，而 captions_out 為整個字串除了第一個字母。captions_in 即為 RNN 之 input，而 captions_out 為 RNN 預期的輸出。

接著要將輸入的字母做 embedding，此部分利用 word_embedding 實現。

關於輸入圖片，我們需要經過 Encoder 將圖片轉換為特徵，此部分透過小型 RegNet-X 400MF 來實現。

將透過 Encoder 得到的特徵 x 送進 feature projection 來映射成 h0，並透過骨幹網路(RNN)來產生 hidden state vector。

最後再透過 output projection 將 RNN 的 hidden state 映射到字母機率，並利用先前定義好的 temporal_softmax_loss 來計算 loss。

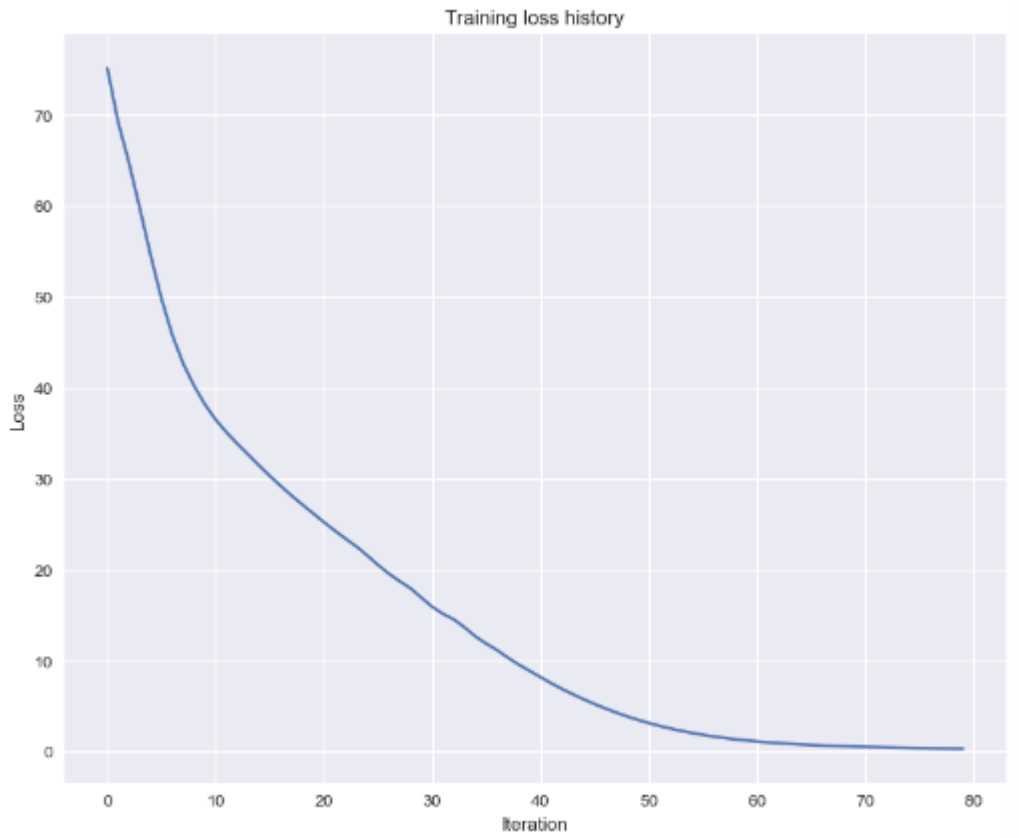
2. 執行結果 :

```
For input images in NCHW format, shape (2, 3, 224, 224)
Shape of output c5 features: torch.Size([2, 400, 7, 7])
loss:  150.60903930664062
expected loss:  150.6090393066
difference:  0.0
```

由結果可以看到，計算出來的 loss 與預期的 loss 完全相同，代表說此函數功能正確。

五、 Overfit Small Data

為了確認剛才實作的每一樣東西都可以正常運行，我們拿 50 張圖片來讓模型 overfit。訓練結果如下



可以看到經過 80 次的迭代後，loss 來到趨近於 0 的程度，即成功的 overfit 資料。

六、 Inference : Sampling Captions

Image captioning 模型在訓練與測試階段和分類器的行為模式不同。

在訓練階段，我們將 ground-truth 的 caption 在每個 timestep 餵給 RNN。

在測試階段，我們從單字的分布中採樣，並將樣本在下一個 timestep 中作為輸入餵給 RNN。

實作 CaptioningRNN.sample，並訓練模型以及對 training data 和 validation data 做採樣。

- 實現方法：

  在每個 timestep 中，我們會對當前的字母做 embedding，接著將它與先前的 hidden state 送進 RNN 已取得下一個 hidden state。利用此 hidden state 來取的每一個字母的分數，並將擁有最高分數的字母做為下一個字母。

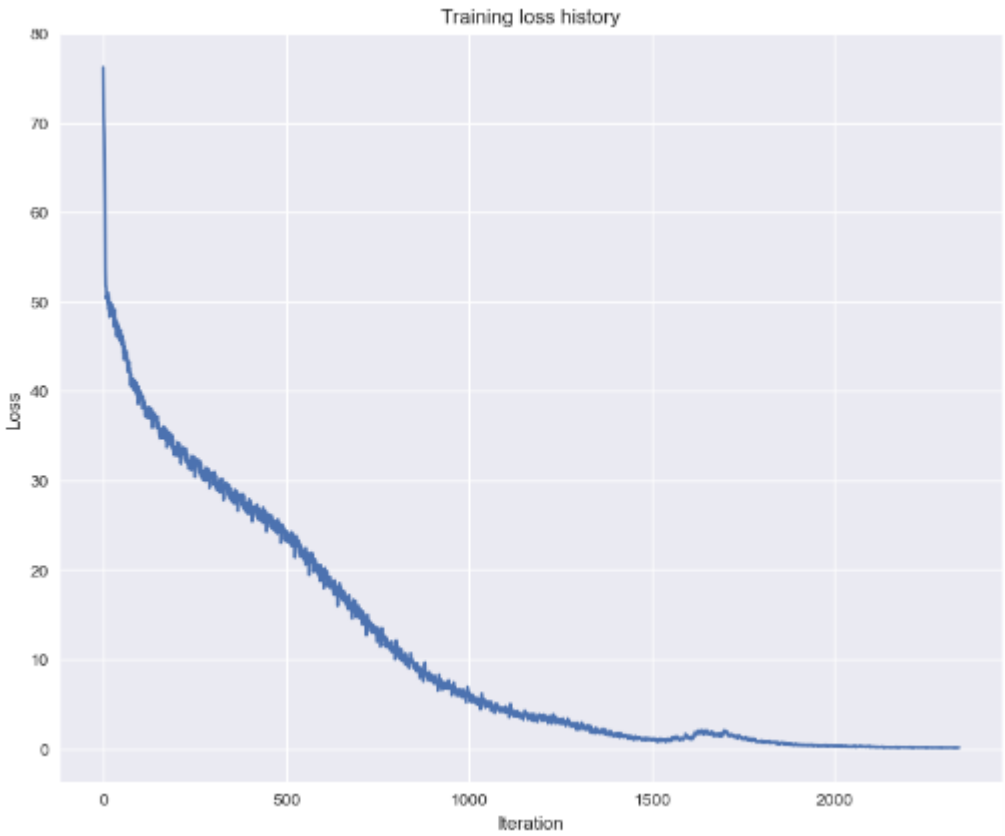
  首先將圖片經過 encoder 以取得特徵，接著利用 feature projection 將特徵映射成 hidden state。

  在每一個 timestep 中，透過先前定義好的 word_embedding 來將字母做

embedding，並將 embed 完的結果與前一個 hidden state 利用 step_forward 來產生下一個 hidden state。將 hidden state 利用 output projection 映射到分數，並從中取最高分做為下一個字母，將此字母存放到 captions 中。

為了確保每個樣本都以'<START>'作為開頭，因此要創建一個形狀為(captions.shape[0], 1)的張量，並將其與 captions 連接起來。

- 訓練過程 ：



由結果可以看出，訓練 60 個 epochs 後，loss 會降到趨近於零的程度。

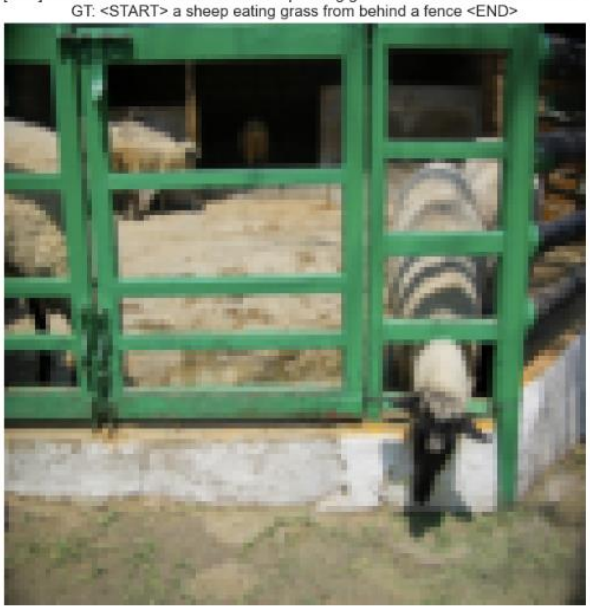
- 採樣結果 ：

接著分別查看對 training data 與 validation data 做採樣的結果。

1. Training data :

   部分結果如下

[train] RNN Generated: <START> a sheep eating grass from behind a fence <END>
GT: <START> a sheep eating grass from behind a fence <END>



[train] RNN Generated: <START> a bunch of glass <UNK> filled with yellow <UNK> and water <END>
GT: <START> a bunch of glass <UNK> filled with yellow <UNK> in water <END>

[train] RNN Generated: <START> a large group of people with some tennis <UNK> <END>
GT: <START> a large group of people with some tennis <UNK> <END>

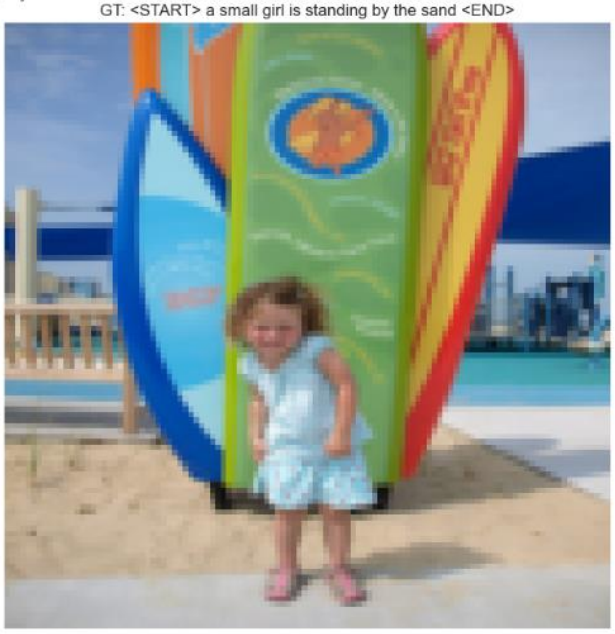
由結果可以看出，對於訓練資料來說，RNN 可以很成功的採樣出圖片的內容。

2. Validation data :

部分結果如下

[val] RNN Generated: <START> two <UNK> <UNK> on a <UNK> with a large open building <END>
GT: <START> a young boy standing next to a table near a road <END>

[val] RNN Generated: <START> a man with a <UNK> attached to a small man <END>
GT: <START> a small girl is standing by the sand <END>



由部份結果可以看到，對於 validation data 來說，RNN 基本上是無法順利採樣出圖片中的內容。

七、 LSTMs : Step Forward

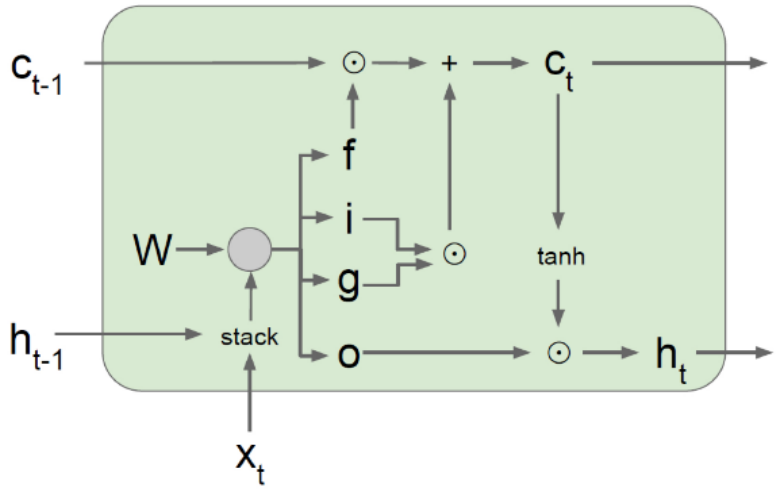
LSTM 為改良版的 RNN。一般 RNN 在處理長序列時會難以訓練，這是因為重複的矩陣乘法導致梯度消失或是梯度爆炸的問題。

LSTM 透過在 RNN 的 update rule 中引入 gate 的概念來解決這樣的問題。

與 RNN 相同，在每個 timestep 先去計算 activation vector $a = W_x x_t + W_h h_{t-1} + b$ 。接著將 a 分成四個向量a_i、a_f、a_o、$a_g \in R^H$ ，並透過 sigmoid(a_i)、sigmoid(a_f)、sigmoid(a_o)分別取得 input gate、forget gate、output gate，以及透過 tanh(a_g)取得 block gate。

最後透過$c_t = f * c_{t-1} + i * g$以及$h_t = o * \tanh(c_t)$來計算下一個 cell state 與 hidden state (*為 elementwise product)。

Computational graph 如下



接著根據以上說明完成單一 timestep 的 forward path，

LSTM.step_forward( )。執行結果如下

```
next_h error:  2.606541143878583e-09
next_c error:  1.7376745523804369e-09
```

可以看到下一個 hidden state 與 cell state 的誤差很小，代表函數功能正確。

八、 LSTM : Forward

完成 LSTM.forward( )來對整個時間序列資料執行 forward propagation。

- 實現方法 ：

  整個時間序列一共有 T 個 timestep，利用 for loop 迭代 T 次，每一次迭代都執行一次剛才定義的 LSTM.step_forward( )。將每個 timestep 所得到的 hidden state stack 在一起，得到最終 hidden state output。

- 執行結果 ：

  ```
  hn error:  2.668523515654886e-09
  ```

  Hidden state output 誤差很小，代表函數功能正確。

九、 LSTM Captioning Model

修改 CaptioningRNN 類別，將其加入 self.cell_type = 'lstm'的功能。

- 實現方法 ：

  這部分需要修改初始化與 forward 方法。

  初始化的部分，output projection、feature projection 和 encoder 接不需要修改，要修改的只有骨幹網路的部分，當 self.cell_type = 'lstm'時，骨幹網路使用 LSTM。

  Forward path 的部分，由於骨幹網路已經修改為 LSTM，因此 forward 函

數也會跟著修改成 LSTM.forward( )。

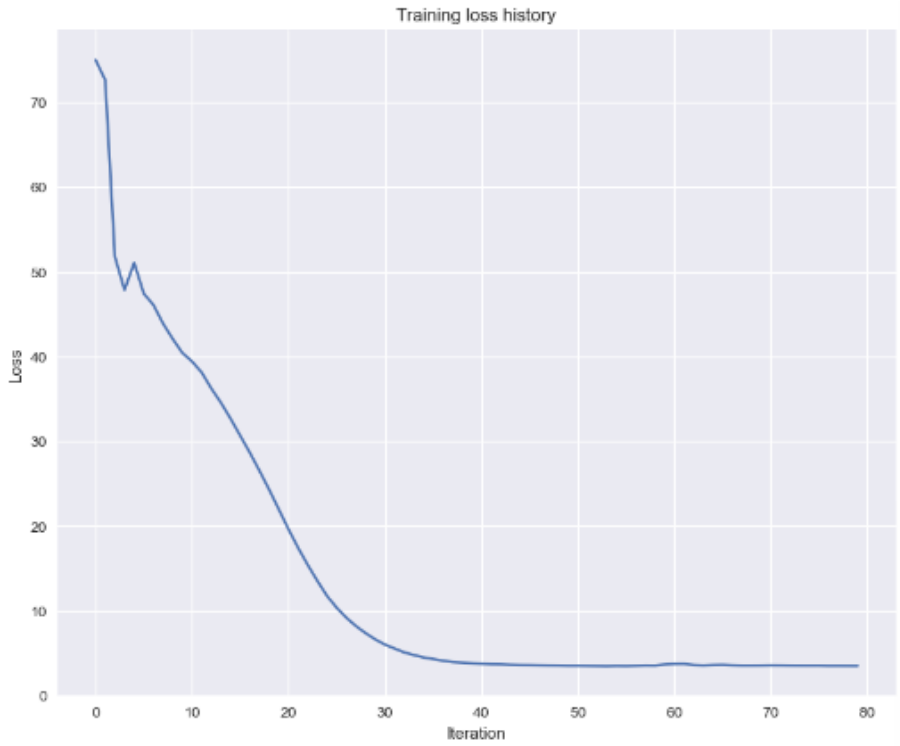
- 執行結果：

```
For input images in NCHW format, shape (2, 3, 224, 224)
Shape of output c5 features: torch.Size([2, 400, 7, 7])
loss:  146.316162109375
expected loss:  146.31614685058594
difference:  5.214321112077035e-08
```

可以看到 loss 的誤差很小，代表說此模型可以正常運作。

十、 Overfit Small Data

使用與在 RNN 時相同的資料集來讓模型 overfit，執行 80 個 epochs 後結果如下



最終的 loss 大約落在 3 左右。

十一、 Caption Sampling

修改 CaptioningRNN.sample 使得他也可以執行 LSTM。

- 實現方法：

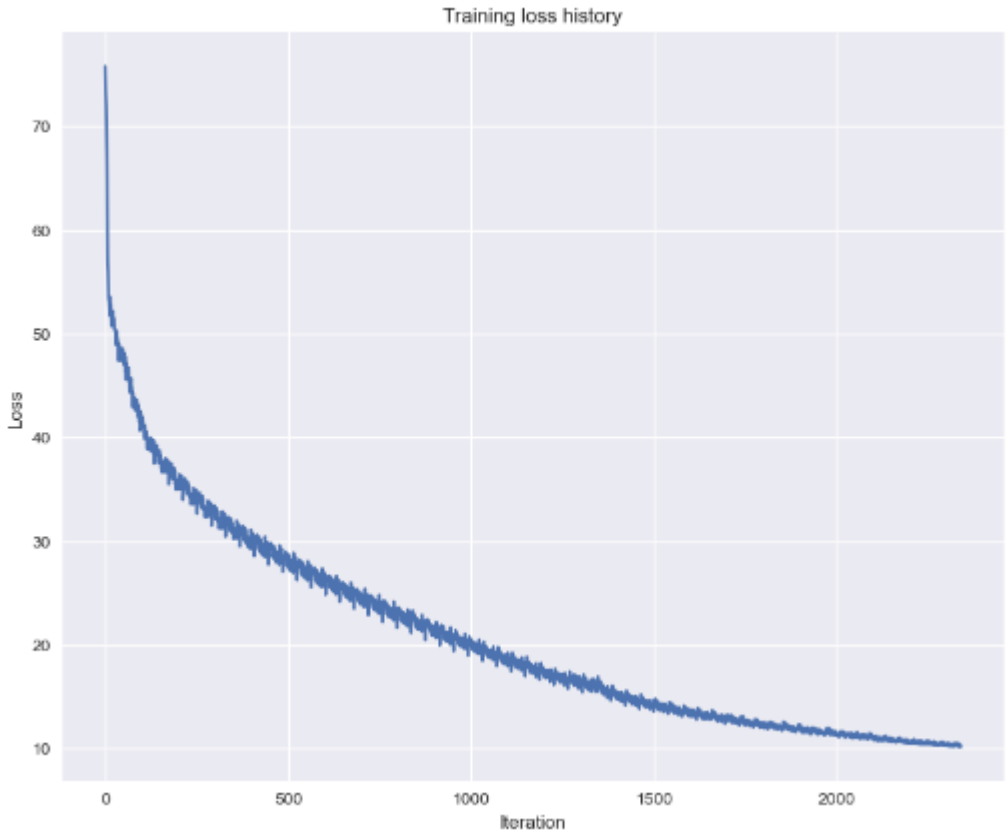
  利用 if-else 來判斷要執行 RNN 還是 LSTM。

  在 LSTM 的情況下，初始化除了要初始 hidden state 之外，還有 cell state 要做初始化。接著利用 for loop 與呼叫骨幹網路的 step_forward 來取得下一個 timestep 的 hidden state 與 cell state。

利用 output projection 來將 hidden state 映射到分數，並取分數最高的字母作為該 timestep 的最終結果。

最後再將每個 timestep 所得到的字母合併成最終結果。

- 執行結果 ：



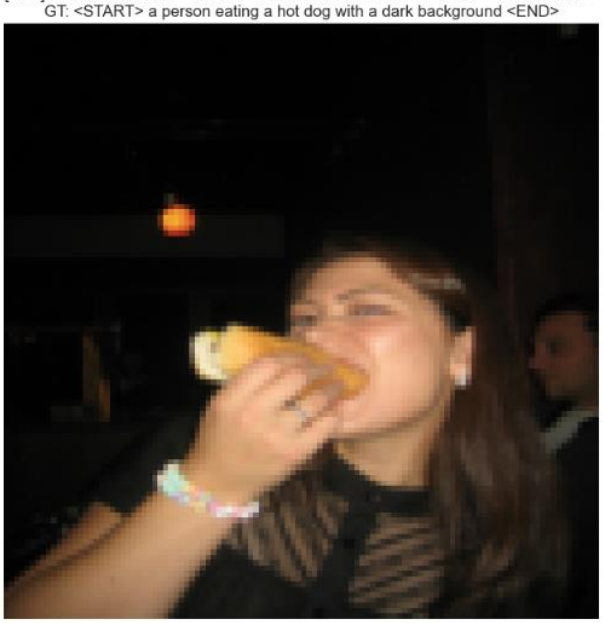
在訓練 60 個 epochs 之後，loss 降到 10 左右。

十二、 Test-time Sampling

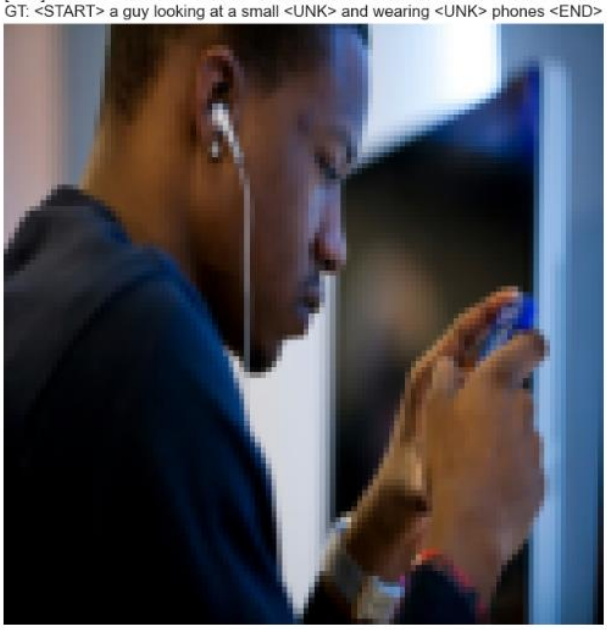
查看訓練完成的模型對 training data 與 validation data 的效果。

- Training data :

[train] LSTM Generated: <START> a man is on a <UNK> in <UNK> <UNK> <END>
GT: <START> a person eating a hot dog with a dark background <END>



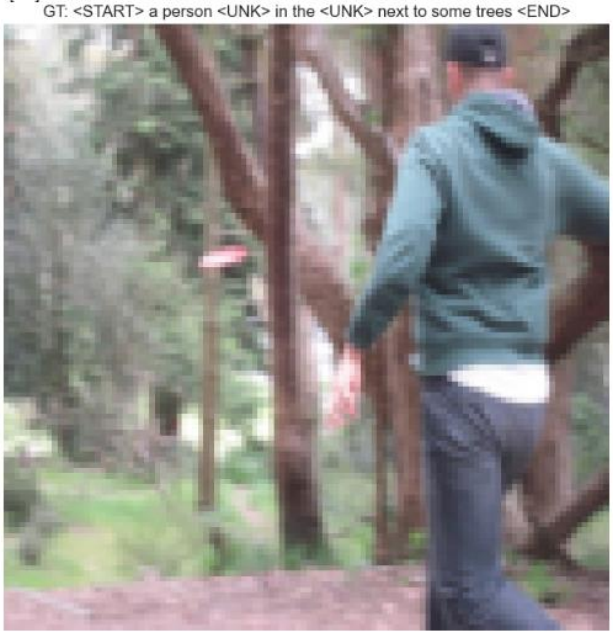
[train] LSTM Generated: <START> a man is on a <UNK> in <UNK> <UNK> <END>
GT: <START> a guy looking at a small <UNK> and wearing <UNK> phones <END>



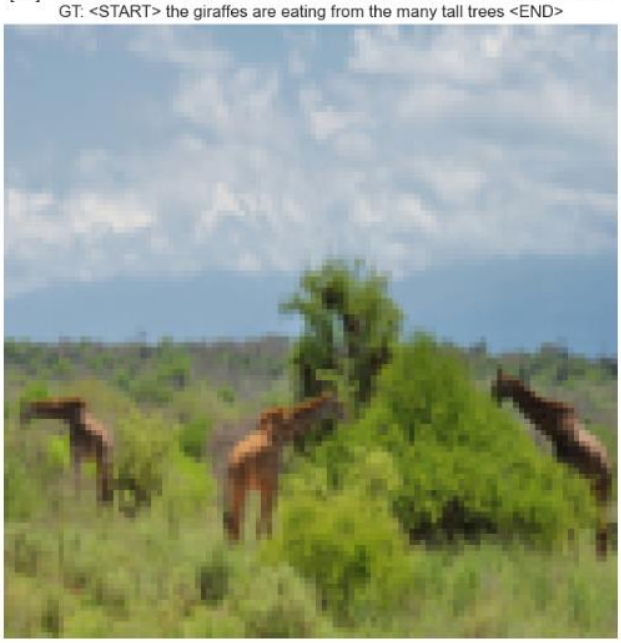
由部份結果可以看到，訓練 60 個 epochs 所得到的模型在 training data 上的採樣效果不太好。

- Validation data :

[val] LSTM Generated: <START> a man is on a <UNK> in <UNK> <UNK> <END>
GT: <START> a person <UNK> in the <UNK> next to some trees <END>



[val] LSTM Generated: <START> a man is on a <UNK> in <UNK> <UNK> <END>
GT: <START> the giraffes are eating from the many tall trees <END>



對於 validation data 也一樣，效果不太好。

十三、 Attention LSTM

在 attention LSTM 中會加入一個額外的輸入 $x_{attn}^{t} \in R^{H}$ ，與前一個 hidden state 一起輸入到 LSTM 中。

我們可以透過 scaled dot-product attention 來取得額外輸入 x_{attn}^{t}。首先，我們先將 CNN 取得的特徵從$R^{400\times4\times4}$ 映射到$R^{H\times4\times4}$ ，得到映射後的 activation A，並將 A 與前一個 time step 的 hidden state 用來產生 attention weights，公式為$M_{attn}^{t} = \frac{h_{t-1}A}{\sqrt{H}} \in R^{4\times4}$ ，M_{attn}^{t}為 A 在 time step t 之

attention weights。

為了簡化計算，我們對 A 和M_{attn}^{t}做 flatten，得到$A' \in R^{H\times 16}$以及$M_{attn}^{t'} = h_{t-1}A \in R^{16}$。接著將$M_{attn}^{t'}$送進 softmax 中，將 attention weights 作正規化。

給定 attention weights，其 attention embedding 為$x_{attn}^{t} = A'M_{attn}^{t'} \in R^{H}$。根據以上說明，完成 dot_product_attention 的實作。

- 實現方法：

  首先要將 A 做 flatten，原先 A 的 shape 為(N, H, 4, 4)可以透過 reshape 將 A flatten 為 shape (N, H, 16)。接著透過公式$M_{attn}^{t} = \frac{h_{t-1}A}{\sqrt{H}}$計算 attention weights，並將其送進 softmax 作正規化。透過 view 對M_{attn}^{t}做 flatten，並利用公式$x_{attn}^{t} = A'M_{attn}^{t'}$取得 attention embedding output。

- 執行結果：

```
attn error:  1.441032456613022e-09
attn_weights error:  3.529051724769123e-08
```

  結果 attention embedding output 與 attention weights 的誤差都很小，代表說函數功能正確。

十四、 Attention LSTM : step forward

Attention LSTM forward path 與 LSTM forward path 很相似，差別在於 attention LSTM forward path 多了 attention input 以及 embedding weight matrix 作為輸入。因此，activation vector 的公式要修正為$a = W_x x_t + W_h h_{t-1} + W_{attn}x_{attn}^{t} + b$。

- 實現方式：

  透過 activation vector 的公式取得 activation vector a，接著將 a 分成四個向量a_i、a_f、a_o、$a_g \in R^{H}$，並透過 sigmoid(a_i)、sigmoid(a_f)、sigmoid(a_o)分別取得 input gate、forget gate、output gate，以及透過 tanh(a_g)取得 block gate。最後透過$c_t = f * c_{t-1} + i * g$以及$h_t = o * \tanh(c_t)$來計算下一個 cell state 與 hidden state。

- 執行結果：

```
next_h error:  1.0313143339813063e-06
next_c error:  7.304698454209571e-07
```

  結果 next hidden state 與 next cell state 的誤差都很小，代表說函數功能正確。

十五、 Attention LSTM : forward

剛才實作一個 time step 的 forward path，現在將它延伸到整個 timeseries。

- 實現方法：

  利用 for loop 迭代 total time step T 次，每一次迭代都先透過 dot_product_attention 取得 embedding attention weights，並將此 embedding attention weights 與 attention input x、前一個 time step 的 hidden state、前一個 time step cell state 送進 activation vector 的公式中以得到 activation vector。最後將得到的 hidden state output 回傳即可。

- 額外說明：

  Hidden state output 的 shape 為(N, T, H)，其中 N 代表 batch size、T 代表 total time step、H 代表 hidden state size。在 forward 中計算的 hidden state shape 為(N, 1, H)，因為 for loop 為針對單一 time step 做計算。

- 執行結果：

```
h error:  2.487302938381543e-09
```

  結果 hidden state 的誤差都很小，代表說函數功能正確。

十六、 Attention LSTM captioning model

接著修改上一次作業中定義的 CaptioningRNN.__init__和 CaptioningRNN.forward，讓此類別可以建立並訓練 attention LSTM。

- CaptioningRNN.__init__ :

  透過 if else 判斷現在要創建'rnn'、'lstm'或是'attn'模型，這邊只針對'attn'模型部分做解釋。

  初始化部分主要是初始化 feature projection 與骨幹網路。

  Feature projection 為一個 linear layer，input channel size 與 output channel size 分別為 input dimension 與 hidden state size。

  骨幹網路為方才完成定義的 AttentionLSTM class。

- CaptioningRNN.forward :

  與 RNN 還有 LSTM 不同的地方在於，做 feature projection 時我們需要對 input 資料做 permute 以方便做 projection。原先資料 shape 為(N, H, 4, 4)，我們需要將它轉變為(N, 4, 4, H)。映射完成後，再將 shape 轉回原來的樣子。其餘部分皆與上次作業中 RNN 與 LSTM 的部分相同。

- 執行結果：

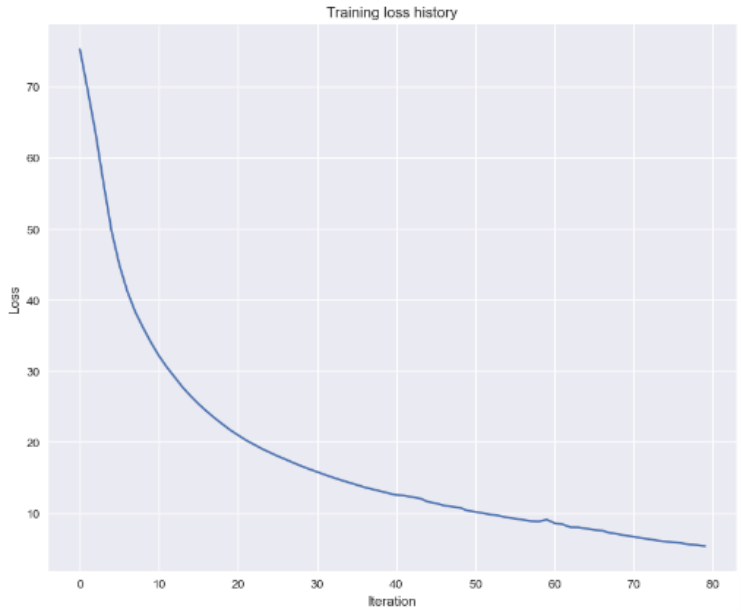
```
For input images in NCHW format, shape (2, 3, 224, 224)
Shape of output c5 features: torch.Size([2, 400, 7, 7])
loss:  8.015640258789062
expected loss:  8.015639305114746
difference:  5.9488343140184995e-08
```

Loss 之誤差很小，代表說此 forward path 可以正常運行。

十七、 Overfit small data

透過遇上次訓練 RNN 的小型資料做訓練，看模型是否能夠 overfit。

訓練過程如下




```
(Epoch 75 / 80) loss: 5.8688 time per epoch: 0.1s
(Epoch 76 / 80) loss: 5.7866 time per epoch: 0.1s
(Epoch 77 / 80) loss: 5.5601 time per epoch: 0.1s
(Epoch 78 / 80) loss: 5.4940 time per epoch: 0.1s
(Epoch 79 / 80) loss: 5.3548 time per epoch: 0.1s
```

可以看到最後幾個 epochs 訓練 loss 來到 5.5 左右，表示模型可以順利擬和小資料。

十八、 Caption sampling

修改 CaptioningRNN.smaple 的部分來訓練 attention LSTM。

- 實現方法：

  初始化部分要初始化 A、hidden state、cell state。

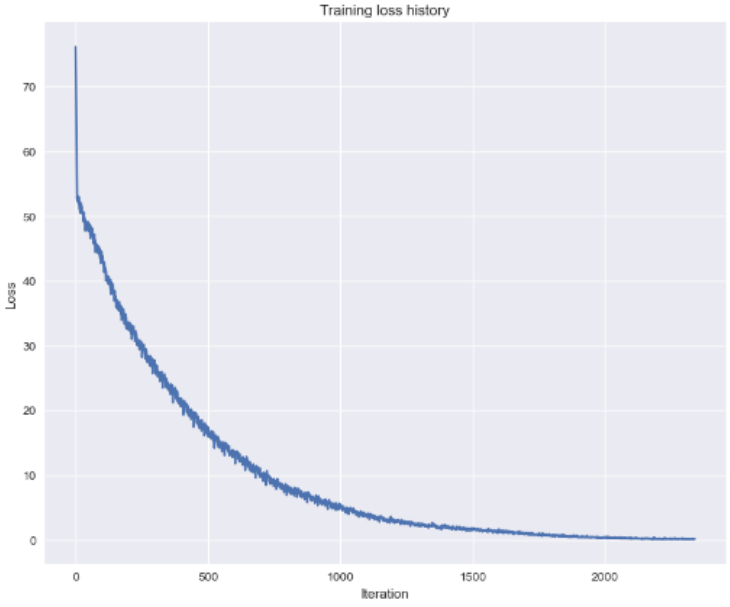
  A 為 feature projection 的結果，根據 CaptioningRNN.forward 部分說明的方式做初始化。

Hidden state 與 cell state 部分根據註解 NOTE 部分做初始化，這邊都初始化為 A.mean(dim=(2, 3))。

在 forward path 的部分，先透過 dot_product_attention 取得 attention embedding output 與 attention weights，再透過剛才定義的 step_forward 來更新 hidden state 與 cell state。最後利用 output projection 將 hidden state 轉換為分數，並取最大分數作為預測的單字。

- 執行結果 ：

對整個訓練集做訓練，訓練過程如下




```
(Epoch 55 / 60) loss: 0.1451 time per epoch: 22.4s
(Epoch 56 / 60) loss: 0.1401 time per epoch: 22.3s
(Epoch 57 / 60) loss: 0.1796 time per epoch: 22.3s
(Epoch 58 / 60) loss: 0.1887 time per epoch: 22.3s
(Epoch 59 / 60) loss: 0.1237 time per epoch: 22.3s
```

可以看到最後 loss 為 0.12，代表說模型 overfit。

接著對部分訓練資料與驗證資料察看結果

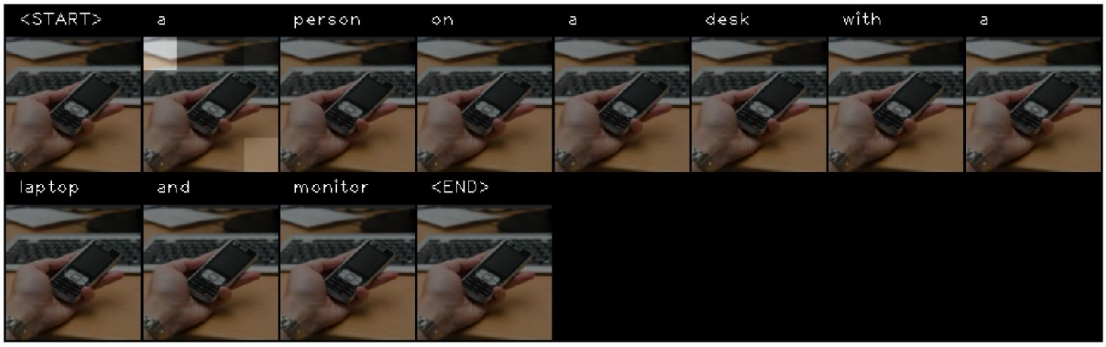
1. 訓練資料 ：

train
Attention LSTM Generated:<START> a plate of food on a table at a restaurant <END>
GT:<START> a plate of food on a table at a restaurant <END>

train
Attention LSTM Generated:<START> a red <UNK> bus parked next to a sidewalk <END>
GT:<START> a red <UNK> bus parked next to a sidewalk <END>

可以看到對於訓練資料來說，目前的模型可以有不錯的預測能力。

2. 驗證資料：



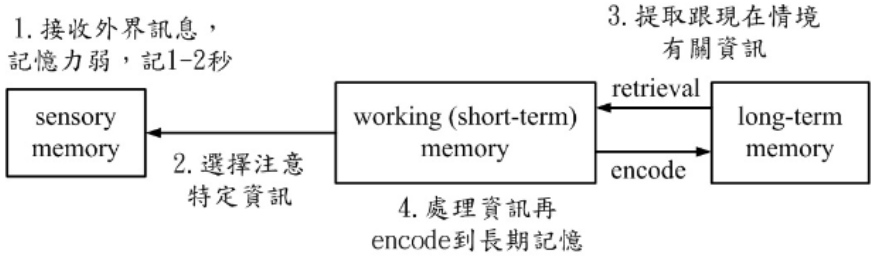
對於彥徵資料來說，雖然模型沒辦法完美地預測出結果，但是可以看到模型基本上可以對圖片做出一些合理的解釋，表現比上次作業中的 RNN 以及 LSTM 好上許多。

十九、 額外嘗試

- Attention-based Model :

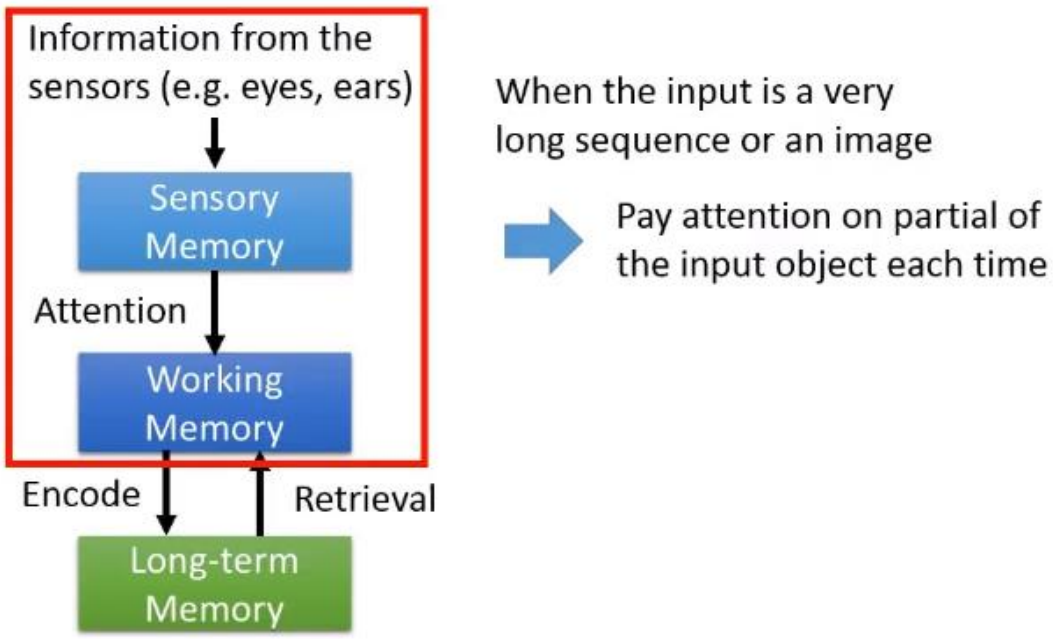
  Attention based model 是模擬人類 working memory 的功用。

  人類記憶體機制如下圖



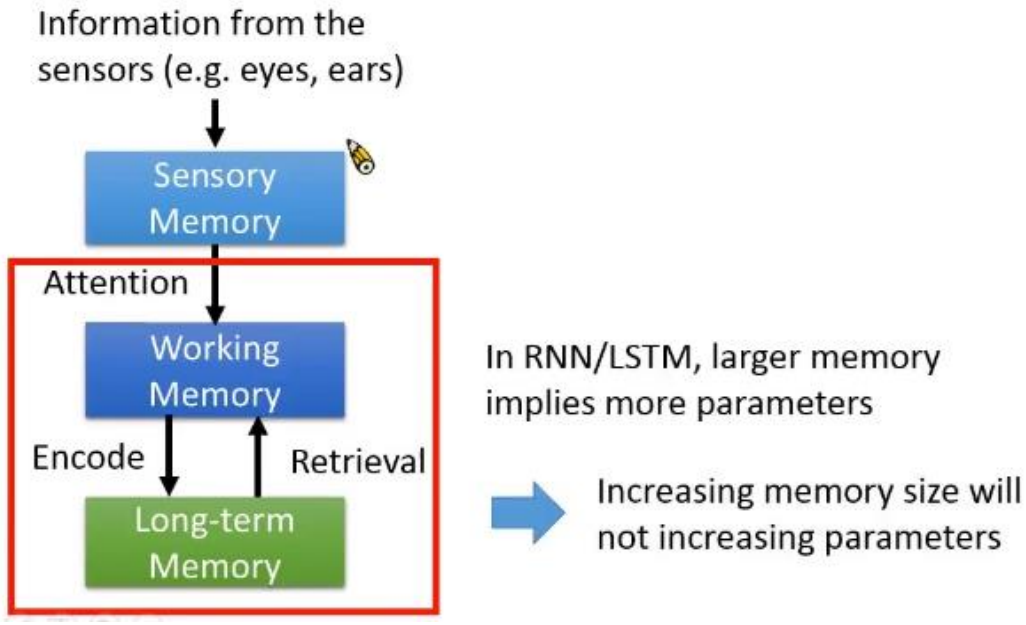
Attention based model 可以分成兩類，分別為 working memory 和 sensory memory 溝通，以及 working memory 和 long-term memory 溝通的部分。

1. 第一類 attention based model :



第一類 attention based model 的好處在於，假設輸入一個很長的序列，可能很難把所有資訊量一次處理好，attention-based model 可以一次只注意 input object 的某個部分。

2. 第二類 attention based model :



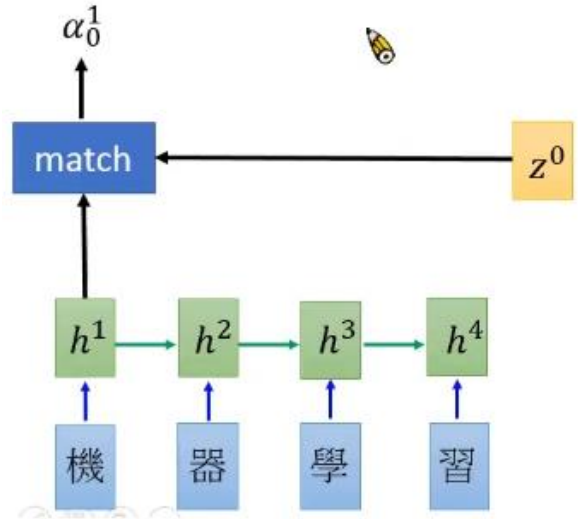
上圖為第二類 attention based model，模擬 working memory 與 long-term memory 的溝通。

RNN / LSTM 的問題在於 memory 沒辦法太大，因為 memory 越大，參數就越多。

RNN 裡面，memory 到 memory 之間有一個 transition weight。如果 memory size 是 k，那就需要 k*k 的矩陣，而參數越多越容易造成 overfitting。

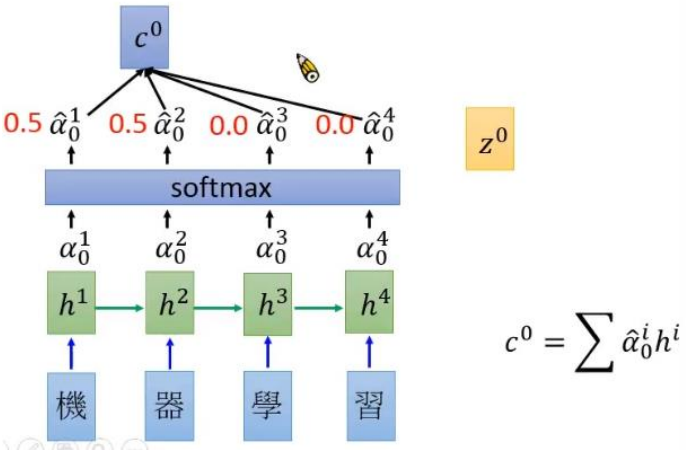
第二類 attention-based model 相較於 RRN / LSTM 的好處之一是當 memory 增加時，模型參數並不會增加。

接著以翻譯為例說明 attention-based model 的運作。

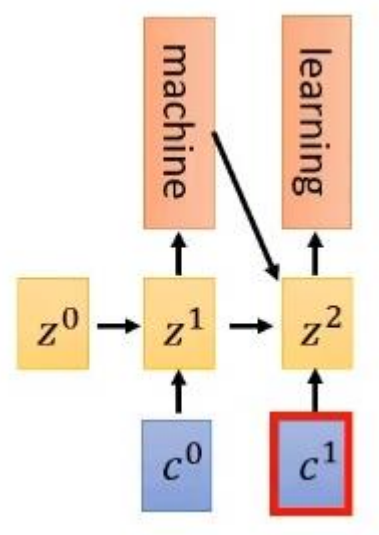


和 seq-to-seq model 相同，一開始都是一個 encode RNN，但是這邊不期待最後輸出的 hidden layer output vector 能代表整個句子的資訊。

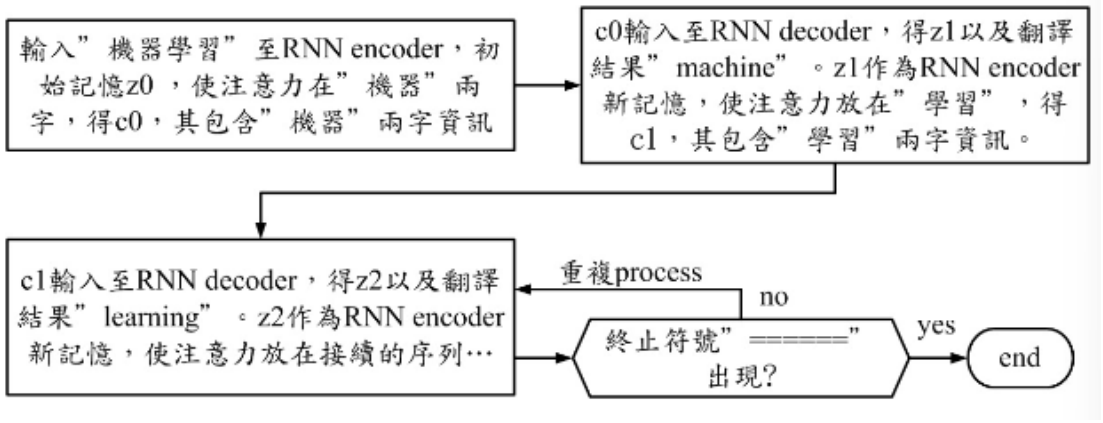
上圖中，h^1、h^2、h^3、h^4 為輸入字母的向量，接著初始化z^0，為 RNN 的初始 memory。接著會有一個 match function，此 match function 可以有不同做法，例如 cosine similarity(內積)。



上圖為 cell state 計算過程，其中$\alpha_0^1 \sim \alpha_0^4$ 為 match function 的輸出。將此輸出經過 softmax 後得到機率，並將機率當作是權重乘上 h，即$c^0 = \sum a_0^i h^i$ ，得到 cell state。接著將 cell state 送進 RNN decoder 得到z^i 即翻譯結果，如下圖所示



整體流程圖如下圖



二十、 Reference

[1] Fredrick Lee “Attention in Text： 注意力機制”
https://medium.com/@fredericklee_73485/attention-in-text-%E6%B3%A8%E6%84%8F%E5%8A%9B%E6%A9%9F%E5%88%B6-bc12e88f6c26

[2] Rice Yang “RNN, LSTM, GRU 之間的原理與差異”
https://u9534056.medium.com/rnn-lstm-gru%E4%B9%8B%E9%96%93%E7%9A%84%E5%8E%9F%E7%90%86%E8%88%87%E5%B7%AE%E7%95%B0-23eba88afa1e

[3] OpenAI. (2023). ChatGPT (Mar 14 version) [Large language model]. https://chat.openai.com/
[4] MMChiou “Attention-based Model (Prof. 李宏毅)” https://mmchiou.gitbooks.io/ai_gc_methodology_2018_v1-private/content/attention-based-model-li-hong-yi-jiao-638829/attention-based-model-prof-li-hong-6bc529.html