MLDS HW1 Report

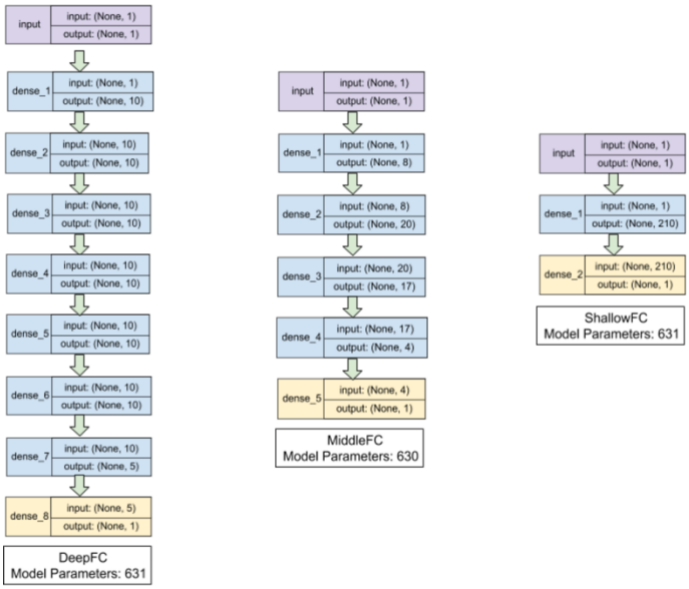
組員：b04901060 電機三 黃文璁　分工：33.33%
b04901003 電機三 許傑盛　33.33%
b04901096 電機三 蔡昕宇　33.33%

1-1 Deep vs. Shallow

1-1-1 Simulate a function

1. **Describe the models you use, including the number of parameters (at least two models) and the function you use. (0.5%)**

本次使用的模型（DeepFC、MiddleFC、ShallowFC），架構和參數量如右圖：



實驗用到的兩種函數分別為：

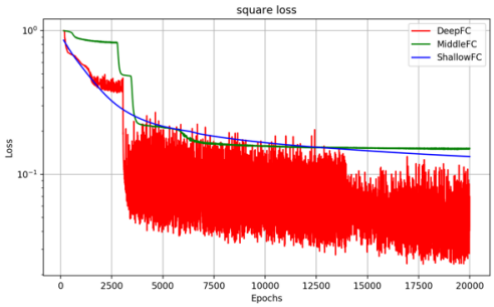
- $square(x) = sgn(\cos(8\pi x))$
- $damp(x) = 10\sqrt{x}e^{-8x}\sin\big(6\pi(x-0.25)\big)$

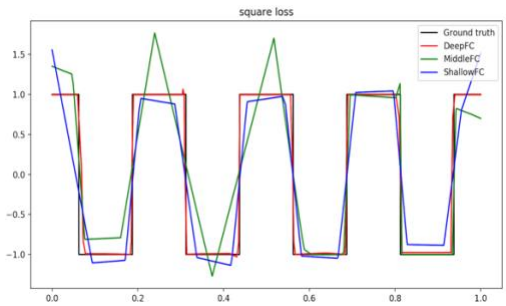
每個函數 sample 2048 個點。訓練時的 optimizer 為 Adam (lr=1e-3)，batch size 為 128。

2. **In one chart, plot the training loss of all models. (0.5%)**
3. **In one graph, plot the predicted function curve of all models and the ground-truth function curve. (0.5%)**

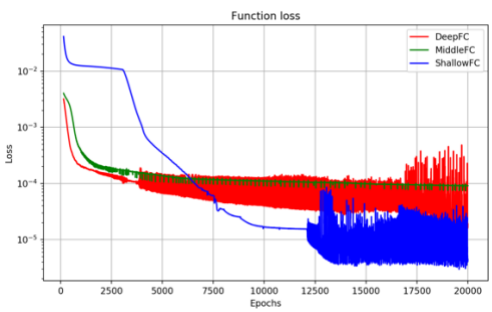
2. 3. 的實驗結果如下：

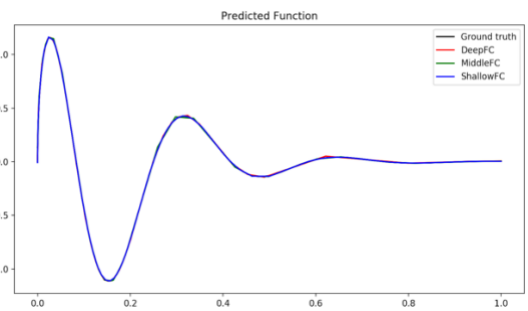
(1) $square(x)$





(2) $damp(x)$





4. **Comment on your results. (1%)**

這次實驗將三種不同深度 (hidden depth = 1, 4, 7) 的模型，應用在兩個函數上。

以 Loss function 來看，實驗 (1) 的 $square(x)$ 方波函數 loss 最低的為 DeepFC，其次為 ShallowFC，再來才是 MiddleFC。可以注意到的是最深的模型 loss 最低，但其中 shallow 卻比 middle 要好一些，故其實沒辦法斷定深度和模型 capacity 之間的關係。而可以再看到 DeepFC 在約第 3000 個 epoch 的時候遇到一個 local minimum，loss 瞬間下降，loss 在那之後震盪變得更加劇烈。

而在實驗 (2) 的 $damp(x)$ 函數可以注意到的是，一開始 MiddleFC 與 DeepFC 的 loss 下降較快，而 ShallowFC 在約 3000 多 epoch 時找到更低的 loss，曲線開始迅速下降，甚至最後比其他兩者還來的低。

但就 model 預測出來的函數值來說，實驗 (1) 的方波函數以 DeepFC fit 的最好，ShallowFC 和 MiddleFC 皆有些地方是以一直線的地放預測一個方波，相對 fit 的不是很好，符合我們對 deep model 能做出較多段的線段的假設。實驗 (2) 則相對較平滑，三個 model 在 20000 epochs 之後 fit 的狀況都相對不錯，但取中間的 model 來預測時我們發現 shallow 確實 fit 的速度較 deep 還要慢，用來 fit 的線段數較 deep 的少。

故綜合以上兩個實驗，我們可以得知 Deep 的 network 有較好的 fit 能力，而以 loss 來看可能這樣的模型稍微看不出結果，但下降的趨勢確實有符合預期。

5. **Use more than two models in all previous questions. (bonus 0.25%)**
6. **Use more than one function. (bonus 0.25%)**

我們使用了 3 種不同深度的模型，以及 2 種函數，且固定三者的參數量，符合 5. 6. 兩個 bonus 的要求。

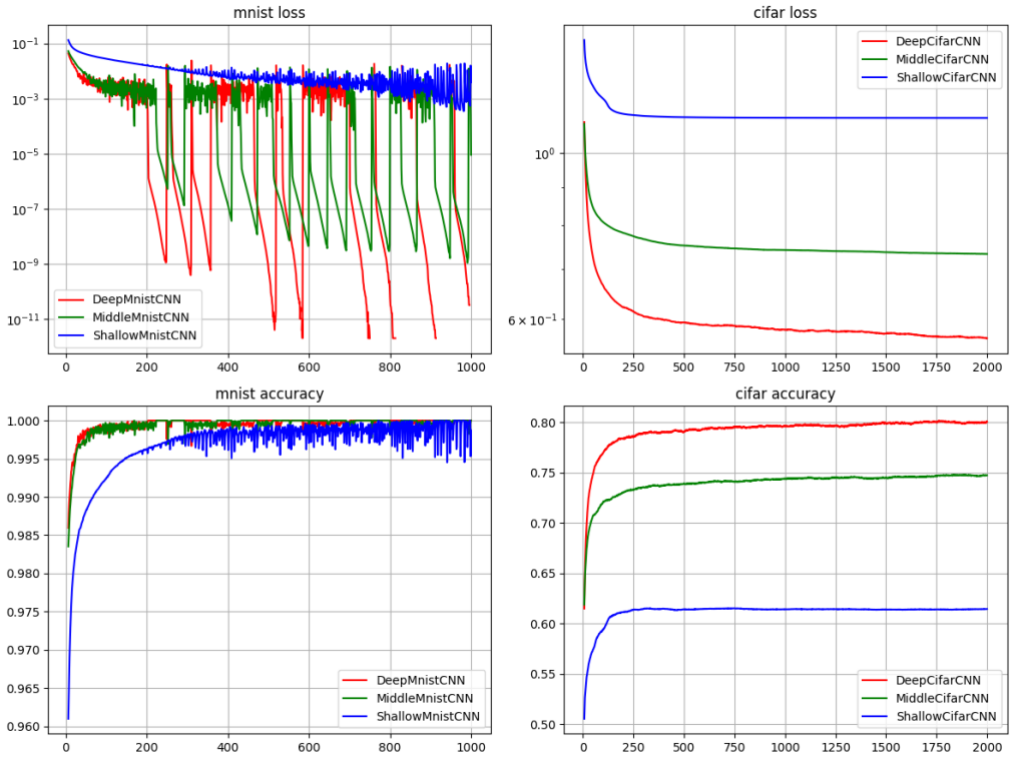
1-1-2 Train on actual tasks

1. **Describe the models you use and the task you chose. (0.5%)**

【缺】

2. **In one chart, plot the training loss of all models. (0.5%)**
3. **In one chart, plot the training accuracy. (0.5%)**

2. 3. 請參考下圖，左邊為 MNIST 的 training loss 和 accuracy，右邊則為 CIFAR-10。兩個 dataset 都分別訓練在三種不同深度且參數量相同的模型上。



4. **Comment on your results. (1%)**

上述分別在 MNIST 與 CIFAR-10 作不同深度的 model 的實驗。針對不同 model，其準確率以及 loss 對 epoch 的作圖。

從 loss 來看，可以明顯看到 ShallowCNN 的 model 在兩個 dataset 上的 training loss 下降的比其他兩者慢，下降的幅度也較小。再來就是 DeepCNN 和 MiddleCNN，在 MNIST 上的下降幅度的差異較不大，可是在 CIFAR-10 上可以看到 DeepCNN 下降的最快。這裏 loss 的結果可與前面 function 的實驗作相互比對，得到一致的發現。

而 accuracy 的部分，首先在 MNIST 上，DeepCNN 與 MiddleCNN 的準確率結果差不多，而 ShallowCNN 的結果則較低，且上升接近到 1.0 的速度較慢。在 CIFAR-10 上更是明顯，可以看到 deep 的結果比 shallow 的結果好很多。另外，亦有可能是 ShallowCNN 這次的結果剛好落在 saddle point 上，才導致 loss 較高，accuracy 特別低的結果。

5. **Use more than two models in all previous questions. (bonus 0.25%)**
6. **Train on more than one task. (bonus 0.25%)**

我們使用 3 種不同深度的模型，以及 2 種 dataset，且固定三種模型的參數量，符合 5. 6. 兩個 bonus 的要求。

1-2 Optimization

1-2-1 Visualize the optimization process

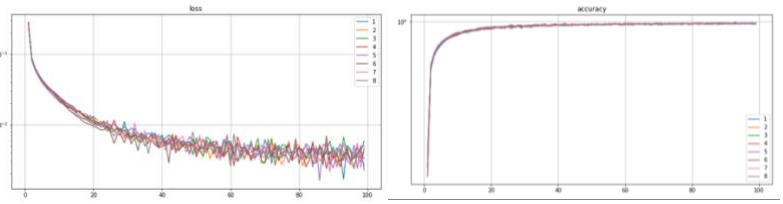
1. **Describe your experiment settings. (The cycle you record the model parameters, optimizer, dimension reduction method, etc.) (1%)**

我們所使用的模型與 1-1 中訓練在 MNIST 上所的所使用的 deep 模型一樣，其參數量為 6720。以此模型反覆訓練 8 次，每 3 個 epoch 紀錄一次模型，每次訓練 99 個 epoch，optimizer 使用 Adam (lr=1e-3)，loss 使用 cross entropy 作為目標函數。

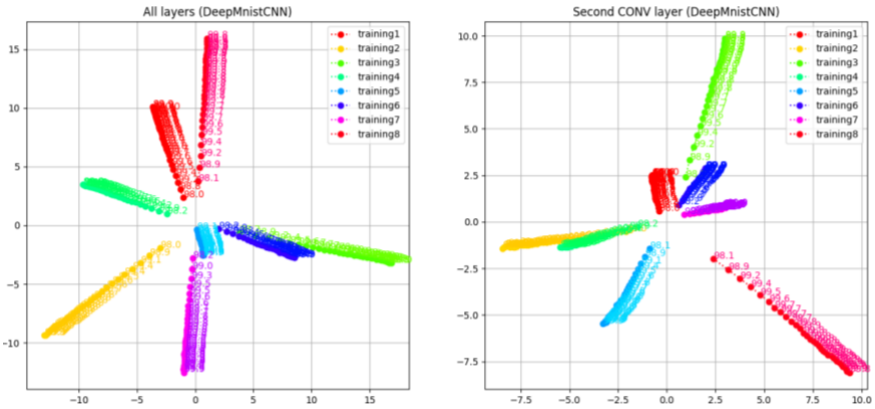
模型架構如右圖，訓練結束後我們分別對各個時間點紀錄的模型的所有 weight 以及第二層的 CONV 作為 vector 展開，並對其作 PCA 降維至 2 個維度，並標上該模型對應的 accuracy 以觀察在 training 過程中 weight 的變化模式，以及其對 accuracy 的影響。

2. **Train the model for 8 times, selecting the parameters of any one layer and whole model and plot them on the figures separately. (1%)**

下圖為 training 過程中 loss 以及 accuracy 的變化：



降維後實驗結果如下圖，左圖為對所有 weight、右圖為對第二層的 CONV 做 PCA 降維至二維，其上標注的數字為該時間點模型的 accuracy：

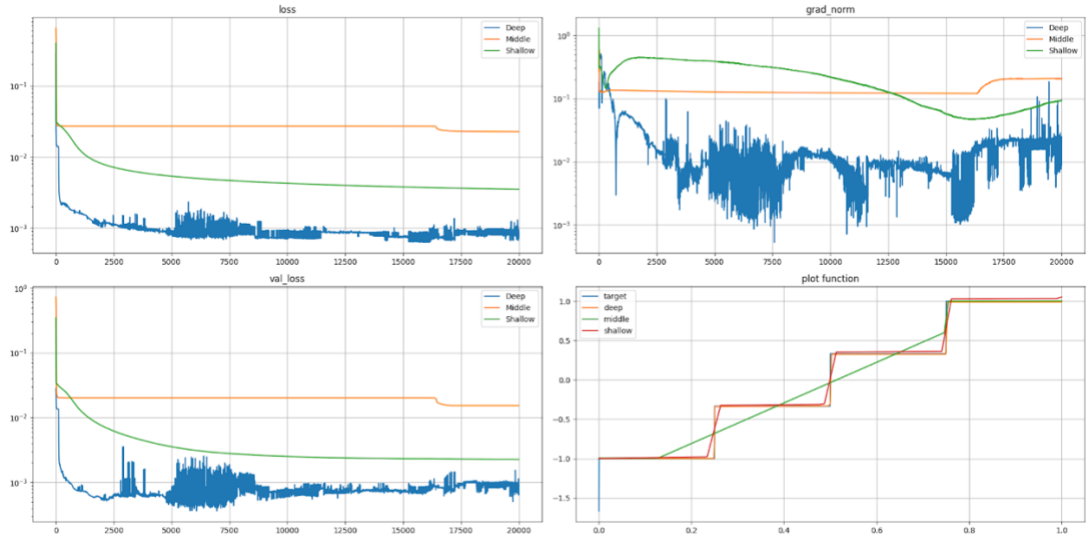


3. **Comment on your result. (1%)**

觀察上面的圖，我們可以發現當 weight 收斂到的地方雖然不一樣，但是卻有差不多的 loss，與老師上課說的不同 local minimum 具有相似的 loss 的情況不謀而合。不過 PCA 的降維方法本來就是最大化不同 vector 之間的歧異程度，這樣的實驗並不太能說明 training 過程時在高維空間中的移動情況為何。

1-2-2 Observe gradient norm during training

1. **Plot one figure which contain gradient norm to iterations and the loss to iterations. (1%)**



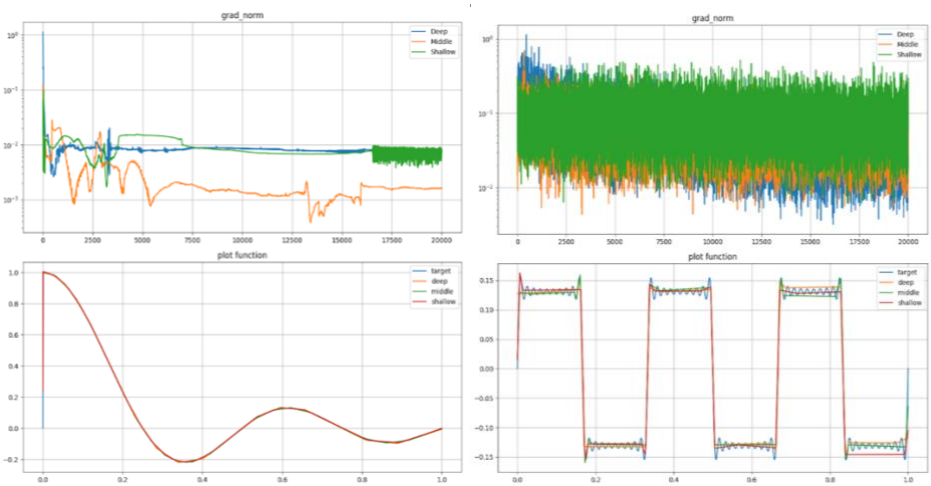
本題使用的函數為階梯函數 $stair(x) = \lceil 4x - 2.5 \rceil / 1.5$。

圖中左上為 training loss、左下為 validation loss、右上為 gradient norm、右下為 function。

2. **Comment your result. (1%)**

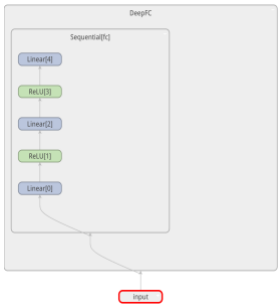
這次的實驗中，我們發現很多的模型在 training 時已經到達一個近似收斂的情況時，gradient norm 卻完全不是那一回事，僅有少數模型能夠收斂到一個比較小的值，如上圖的 stair function，但是大部分的模型卻都比較像右下圖 gibbs 的情況，gradient norm 會在一個很大的值與蠻小的值上下劇震。在 CIFAR-10 和 MNIST 都有這樣的現象，在函數的情況則會根據函數本身的特性有不同的情況。簡單區分的話，若函數越有在小區間內大規模的斜率變化，gradient norm 越會震盪，反之則叫容易收斂，如下圖：

$sinc(x)$ $gibbs(x)$



1-2-3 What happens when gradient is almost zero?

1. **State how you get the weight which gradient norm is zero and how you define the minimal ratio. (2%)**

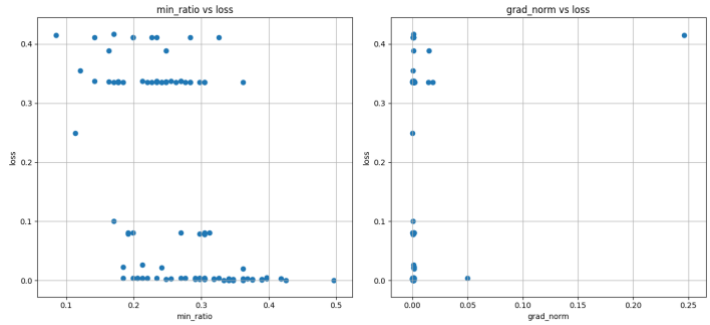


本題使用的模型參數量為 141，詳細架構如右圖，訓練在 sin 函數上，總共 128 筆資料，訓練使用的 optimizer 爲 Adam，先訓練 20000 個 epoch，再將 objective function 換爲 gradient norm，再 train 20000 次，若 gradient norm 低於設定的 threshold (1e-3) 一定次數，則視它為已收斂。

至於 minimum ratio 的計算，我們計算該模型的 hessian matrix，並取其 eigenvalue 為正值的次數除以總參數量作為 minimum ratio。

2. **Train the model for 100 times. Plot the figure of minimal ratio to the loss. (2%)**

如下圖，左圖為 loss – minimum raio，右圖為 loss – gradient norm

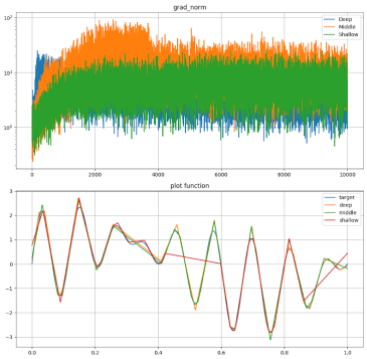


3. **Comment your result. (1%)**

從上面左圖觀察，大致上的趨勢為收斂到的 loss 越低，其 minimum ratio 則越高。雖然在同樣 loss 的情況下，minimum ratio 還是佔了很大一部份的範圍。再者由右圖可以確定，這些模型是停在一個 gradient norm 相當小的情況而這些模型收斂到的地方具有很多能收斂到同樣 loss 的地方，正好驗證了老師上課所說的模型特性，模型可能具有多個能夠收斂到相似 loss 的 local minimum。

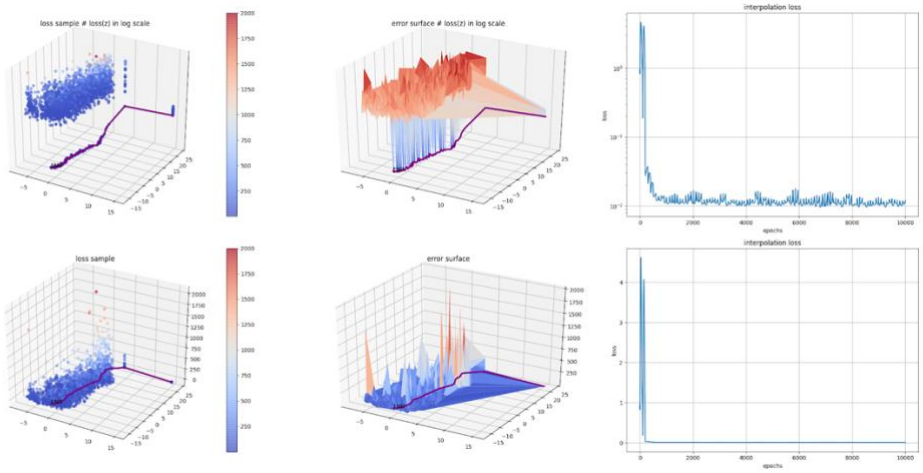
1-2-4 Bonus: Error surface

1. Use any method to visualize the error surface.

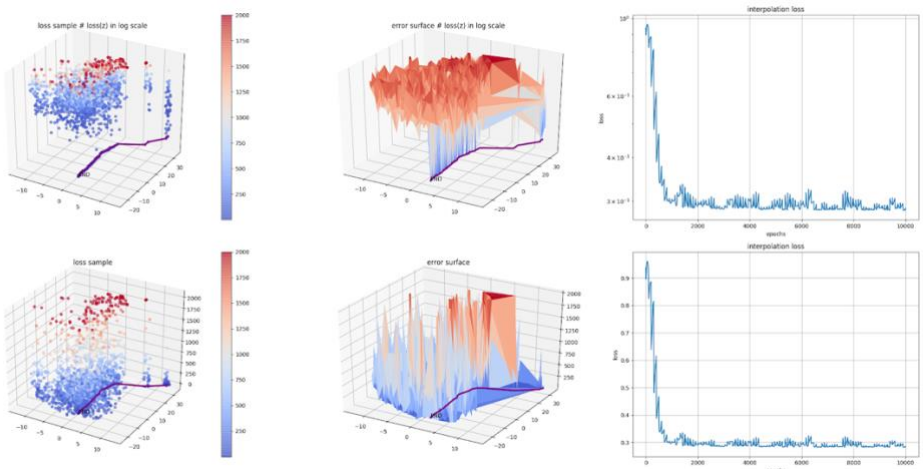


我們將實驗做在參數量較少的 fully connected model 上，總參數量 360，訓練時的 optimizer 為 Adam，batch size 64，實驗對象為右圖的多個正弦函數的加總。由圖我們可以知道此模型在訓練過程中，gradient norm 是比較處於震盪狀態的。稍微比較可以發現，middle 的模型振動幅度較大，而 deep 相對小。下圖中，上排都是取過對數後再作圖。

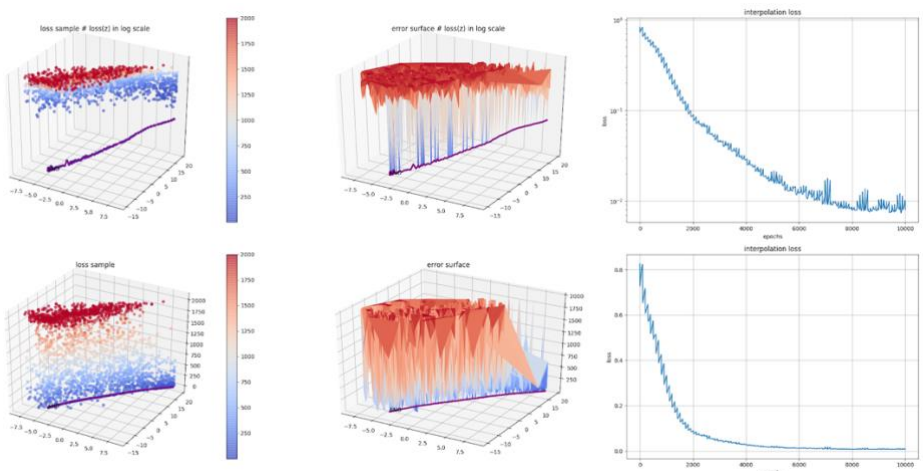
(a) DeepFC



(b) MiddleFC



(c) ShallowFC



2. Concretely describe your method and comment your result.

我們使用了兩種方法來視覺化 error surface，一種是計算每次紀錄的 model，用他的 weight 展開成向量並在其附近根據 normal distribution 隨機抽樣，並還原成模型並計算他的 loss 。第二種是在每次紀錄的模型做內插。

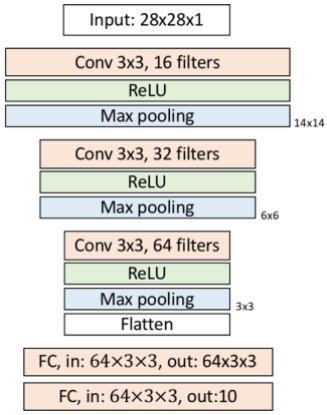
透過這兩種方法，我們可以比較直觀的比較高維空間中 training 過程的情況是如何。幾個結論如下，比較相同參數不同深度的模型，可以發現在結構較深的 error surface 會比較平坦。在先前實驗看到 gradient norm 會劇烈震盪的情況，在高維空間中能看到相當崎嶇平面，而訓練過程彷彿走在海溝中，而 gradient norm 能收斂到較小數值的情況，在高維空間中會是比較平坦的平面。

1-3 Generalization

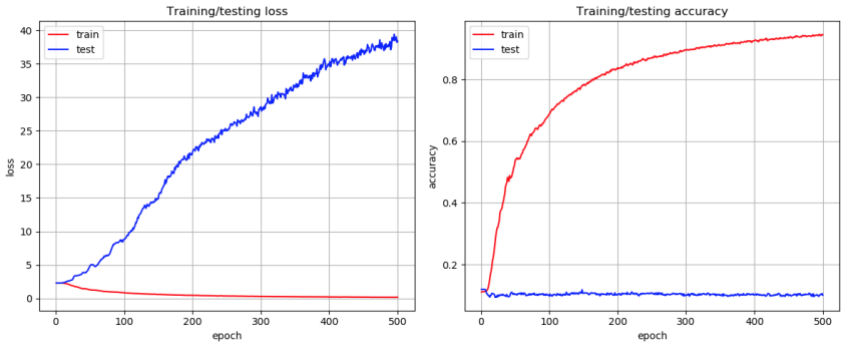
1-3-1 Can network fit random variables?

1. Describe your settings of the experiments. (e.g. which task, learning rate, optimizer) (1%)

本題使用的資料為 MNIST，模型如右圖，optimizer 為 Adam (lr=1e-3)，batch size 為 128，總共訓練 500 個 epoch，參數量為 361418，約為 MNIST 訓練資料量的 6 倍。



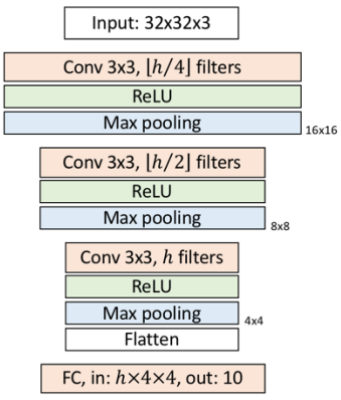
2. Plot the figure of the relationship between training and testing, loss and epochs. (1%)



由上圖可以觀察出，雖然 label 為隨機，但當參數量比資料量大得多時，就有機會讓 network 記住所有 label，也就是 network 的 capacity 夠大，注意到右圖的 training accuracy 接近 1.0 。另外由於 label 是隨機，故 testing loss 和 accuracy 顯然不會跟著 training 進步，舉例來說 testing accuracy 基本上維持在 0.1 附近，也就是和隨機猜測的結果是一樣的。

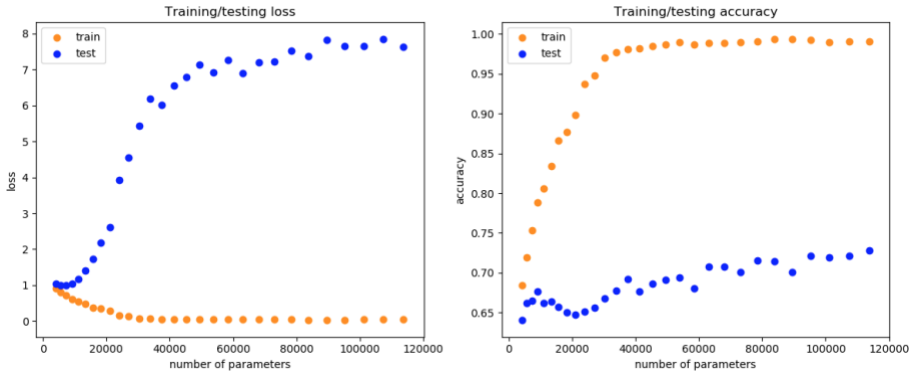
1-3-2 Number of parameters vs. Generalization

1. Describe the settings of the experiments. (e.g. task, 10 or more structures you choose) (1%)



本題使用的資料為 CIFAR-10，模型如左圖，其中 h 為變數，範圍為 16～64，batch size 為 128，使用的 optimizer 為 Adam (lr=1e-3)，每個 model 訓練 200 個 epoch，共 29 個模型。

2. **Plot the figures of training and testing, loss and accuracy to the number of parameters. (1%)**



3. **Comment your result. (1%)**

首先觀察 loss，可以注意到當參數量越多時，training loss 也就隨之變低，但值得注意的是 testing loss 反而變高，也就是參數越多時 overfitting 的情況也就越明顯。

接著觀察 accuracy，顯然當參數量增加時 training accuracy 也隨之增加，值得注意的是雖然 testing loss 不斷增加，但事實上 testing accuracy 卻也逐漸增加，這個現象在許多地方也常被討論[1,2]，簡單來說是由於 accuracy 概念上接近利用 threshold 來判斷類別，舉 binary classification 為例，機率分佈 [0.9, 0.1] 和 [0.55, 0.45] 在 loss 影響很大，在 accuracy 上則沒有影響，故從本實驗也可以得知 accuracy 較不能反映出 model overfitting 的情況。

至於單純從 training loss 和 accuracy 來觀察的話，的確可以得出參數量越多的模型，其 capacity 也就越大的結論。

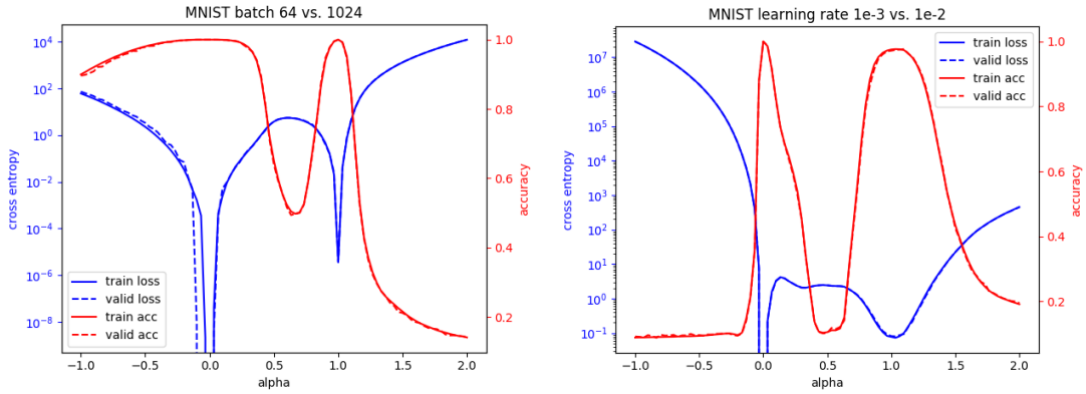
1-3-3 Flatness vs. Generalization

1-3-3-1 Visualize the lines between two training approaches

1. **Describe the settings of the experiments (e.g. which task, what training approaches) (0.5%)**

這次的實驗目標是觀察兩個已經 training 完畢的 model (不同方法)，沿著兩個 model 的方向觀察 error 的變化以及 accuracy 的變化，以探討 model 的 generalize 程度。我們的實驗模型是在 1-1 中使用在 MNIST 上的 DeepMnistCNN 模型，參數量 6720，總共對兩組變量做訓練，一組為 batch size 64 vs. 1024，另一組為 learning rate 1e-3 vs. 1e-2，optimizer 皆使用 Adam (lr=1e-3)。

2. **Plot the figures of training and testing, loss and accuracy to interpolation ratio. (1%)**



3. **Comment your result. (1%)**

實驗結果如上圖，比較 batch size 的部份，如上左圖。我們可以發現在 batch size 比較小的情況下，模型可能更 容易走到一個 loss 比較低的地方，不過在我們實驗結果中，

[1] https://github.com/keras-team/keras/issues/3755
[2] https://stats.stackexchange.com/questions/282160/how-is-it-possible-that-validation-loss-is-increasing-while-validation-accuracy

batch size 較小的模型反而走到了一個較走感覺上 generalization 較差的低點。推測原因為，可能在這方向上的特別陡峭，但其他方向上卻不然。再者由於此繪圖方法是 log scale，其實在線性的圖中這兩點看起來都相當的平坦。

接著比較 learning rate 的部份，如上右圖。我們一樣可以發現到當 learning rate 比較小時，模型一樣走到了一個 loss 更低的地方，不過在這個方向上 learinig rate 比較小的 model 反而走到了一個 sharpness 較大的地方，推測的原因跟上述的差不多。但是也可能這並不是巧合，還需要更多的實驗來佐證。

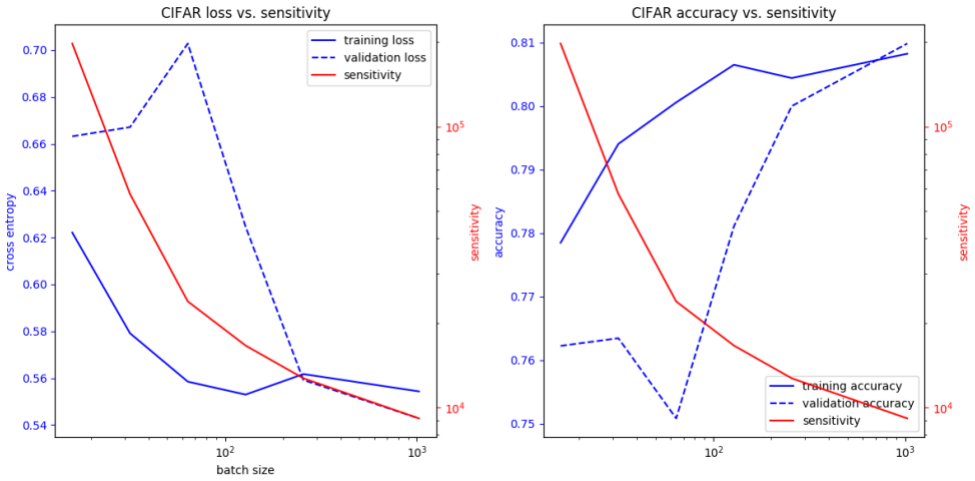
1-3-3-2 Visualize the sensitivities of different training approaches

1. **Describe the settings of the experiments (e.g. which task, what training approaches) (0.5%)**

   在本實驗中試著觀察 sensitivity 對於 generalization 的相關程度，我們將實驗做在 MNIST 和 CIFAR-10 上，不過由於 MNIST 實在太容易 train 到準確率都直接封頂，故只展示 CIFAR-10 的實驗結果。

   實驗模型皆與 1-1 中用於 CIFAR-10 的 DeepCifarCNN 架構相同，總參數量為 9027，optimizer 使用 Adam (lr=0.001)，總共對六種不同的 batch size (16, 32, 64, 128, 256, 1024) 做訓練，sensitivity 的計算就如老師上課時講的方法一樣，將所有 output 對 input 的 gradient 平方加總後開根號。

2. **Plot the figures of training and testing, loss and accuracy, sensitivity to chosen variable. (1%)**



3. **Comment your result. (1%)**

   在實驗結果中，我們可以發現這種方法定義的 sensitivity 大致上能夠反應在 validation 的表現上，不過細節的部份卻沒辦法充分反應，如上圖中我們可以發現 validation loss 在 batch size = 64 的地方有上升的現象，不過 sensitivity 並沒有辦法表現這邊的轉折趨勢。不過從斜率上觀察的話，可以發現該點的下降斜率有減緩，而且這是用 log scale 來繪圖，因此尺度應該會比圖上所示的更大。這也代表著這種定義 sensitivity 的方法能夠在一定程度上充分表達 generalization 的程度。