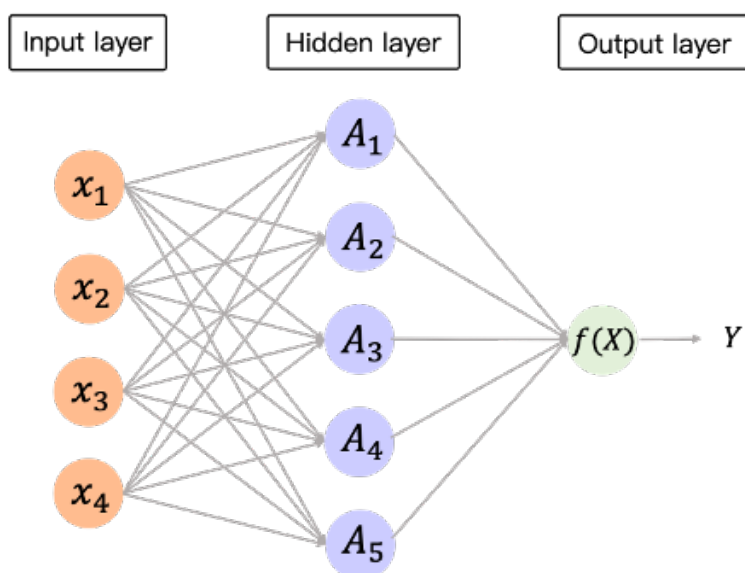


Neural Network (NN；神經網路)

神經網路即模仿人類腦部神經元發出訊號、運作、做出反應的模式來建立模型，並且可以處理迴歸與分類等問題，利用解釋變數或特徵當作輸入層（input layer），中間經過非線性方程式構成的隱藏層（hidden layer）轉換後，預測反應變數當作輸出層（output layer）（圖一）。其中，輸入與輸出層僅有一層，「層」是由多個節點組成，節點之間的連結與權重、門檻值有關，若節點高於門檻值則可以傳送至下一層（隱藏層），至於隱藏層的數量則無限制，每一個隱藏層都會分析處理前一層的資料，再傳遞下去，當層數越高，所處理的問題複雜程度也越高，也就是 Deep Neural Network（深度神經網路；又稱深度學習）。

神經網路的應用場景像是：臉部辨識（卷積神經網路 CNN）、股市預測（多層感知器 MLP）、筆跡分析（卷積神經網路 CNN）、天氣預報（組合模型：MLP+CNN etc.）。

基於模型會自主學習，最終輸出的結果就是已訓練完成的網路，中間的過程則像黑盒子一樣，層與層之間的關係無法利用方程式描述；此外，參數的設定則影響輸入層與輸出層之間的擬合，最佳的結果是不斷重複試驗參數獲得之。



圖一、神經網路示意圖 (<https://ithelp.ithome.com.tw/articles/10305927>)。

神經網路的基本訓練流程：

- (1) 定義神經網路，設置學習的參數或權重

即 初始參數設定 (hypo-parameters)、nn.Sequential() 的建立

- (2) Training data 的設定與迭代

e.g. 資料切分成 training/test data，以 training data 訓練模型

- (3) 神經網路開始處理 input layer

- (4) 計算 Loss function，也就是預測結果與正確答案的差距

*loss function 設定詳細見：損失函數—函數

- (5) 藉由 Loss function 得到新權重

新權重 = 原權重 - learning rate * 梯度

$$w := w - \alpha \frac{\partial c}{\partial \omega}$$

- (6) 更新神經網路權重

利用優化器 (Optimizer) 去更新

- (7) 重複步驟 3-6，直到找到一組權重使 loss function 最小。

Torch.nn 參數設定

1. 初始參數設定

- a. Epoch: 訓練週期
- b. Batch_size: 一群樣本數大小
- c. Batch_number: 共有幾群樣本數

e.g. 400 群資料，每一群的大小 (batch size) 有 40 筆資料，共有 10 群 (batch number)，每一輪要學 10 堆資料，也就是 10 次迭代 (iteration)，學完 10 個迭代後就是一輪 epoch 訓練的結束。

- d. Learning_rate: 學習速率，控制梯度下降的速度，太大會造成模型不穩定，太小會學習速度太慢，其值通常小於 1。

2. nn.Sequential() 的建立：快速搭建「一層連接一層」的模型結構，並一次執行 forward propagation (即輸入→模型→輸出的過程)。模型結構通常包含：學習函數、激活函數、池化層。

- a. 學習函數：根據資料來選擇之。

e.g. (1) nn.Linear: 線性變換層

(2) nn.Conv1d: 主要用於文本資料、時序資料，只對寬度做卷積。

(3) nn.Conv2d: 主要用於圖像資料，對寬度與高度做卷積。

[Convolution in 1-dimension]

一個單一震源(source pulse)經過地球內部，所看到的訊號(signal)即是震源與地球間的卷積結果。



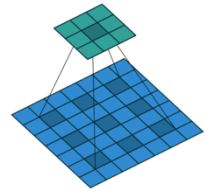
*參數設定與 Conv2d 雷同。

[Convolution in 2-dimension]

3x3 矩陣(kernel == filter)在 image 移動(stride)，計算兩個矩陣之間的乘積，得到 convolved feature。

<table border="1" style="border-collapse: collapse; text-align: center;"><tr><td>1</td><td>1</td><td>1</td><td>0</td><td>0</td></tr><tr><td>0</td><td>1</td><td>1</td><td>1</td><td>0</td></tr><tr><td>0</td><td>0</td><td>1</td><td>1</td><td>1</td></tr><tr><td>0</td><td>0</td><td>1</td><td>1</td><td>0</td></tr><tr><td>0</td><td>1</td><td>1</td><td>0</td><td>0</td></tr></table>	1	1	1	0	0	0	1	1	1	0	0	0	1	1	1	0	0	1	1	0	0	1	1	0	0	*	<table border="1" style="border-collapse: collapse; text-align: center;"><tr><td>1</td><td>0</td><td>1</td></tr><tr><td>0</td><td>1</td><td>0</td></tr><tr><td>1</td><td>0</td><td>1</td></tr></table>	1	0	1	0	1	0	1	0	1	=	<table border="1" style="border-collapse: collapse; text-align: center;"><tr><td>4</td><td>3</td><td>4</td></tr><tr><td>2</td><td>4</td><td>3</td></tr><tr><td>2</td><td>3</td><td>4</td></tr></table>	4	3	4	2	4	3	2	3	4
1	1	1	0	0																																											
0	1	1	1	0																																											
0	0	1	1	1																																											
0	0	1	1	0																																											
0	1	1	0	0																																											
1	0	1																																													
0	1	0																																													
1	0	1																																													
4	3	4																																													
2	4	3																																													
2	3	4																																													
Image		3x3矩陣		Convolved Feature																																											

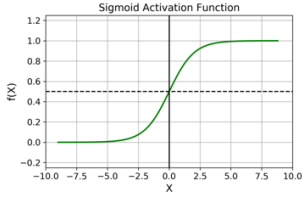
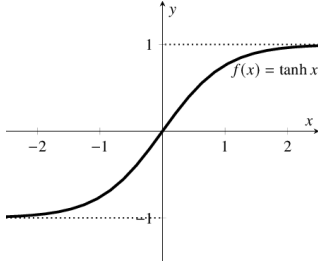
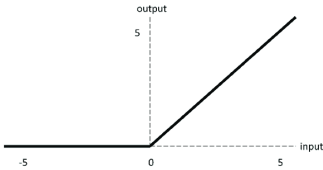
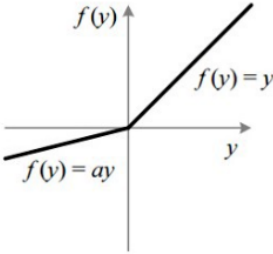
- Kernel_size: 也就是上方橘色 3*3 的矩陣，input 經過這個 filter 即會得到 3*3 的 output。
- Stride: 移動步伐，kernel 每次移動的距離。
- Padding: 在圖片外圍補 0，避免 feature 減小。
- Dilation: 在兩兩卷積點中插入一個空白，3*3 變成 5*5（如右圖，dilation=2），保留更多細節但沒有增加計算量。
- Group: 將輸入分組，再對每組進行卷積。計算數量減少到原本的 1/g。
- Bias: 可以想像成「截距」，偏移的部分可以更擬合資料。



b. 激活函數：為了讓網路學習更複雜的內容。假設沒有激活函數，output 的內只是 input 內容的線性組合，因此，激活函數通常是非線性的。

e.g. nn.ReLU()、nn.tanh()、nn.sigmoid()

Comparison:

模型 名稱	函數	優點	缺點
sigmoid	 <p>輸出範圍：0~1</p>	a. 梯度平滑 b. 明確的預測， 值，接近 0/1 c. 常用於分類為題 的輸出層	a. 趨近 0 或 1 時梯 度幾乎為 0（梯度消 失） b. 輸出恆大於 0 c. 運算慢
tanh	 <p>輸出範圍：-1~1</p>	a. 輸出以 0 為中心 b. 收斂比 sigmoid 快	a. 梯度消失 b. 不利權重更新
ReLU [最常 使用]	 <p>輸出範圍：0~x</p>	a. 計算速度快 b. 改善梯度消失問 題 c. 計算效率高	a. 輸入為負時， ReLU 完全失效 （Dead ReLU） b. 不以 0 為中心
Leaky ReLU	 <p>輸出範圍：0.1x~x</p>	a. 改善 Dead ReLU 狀況 b. 具有 ReLU 的所 有優點	

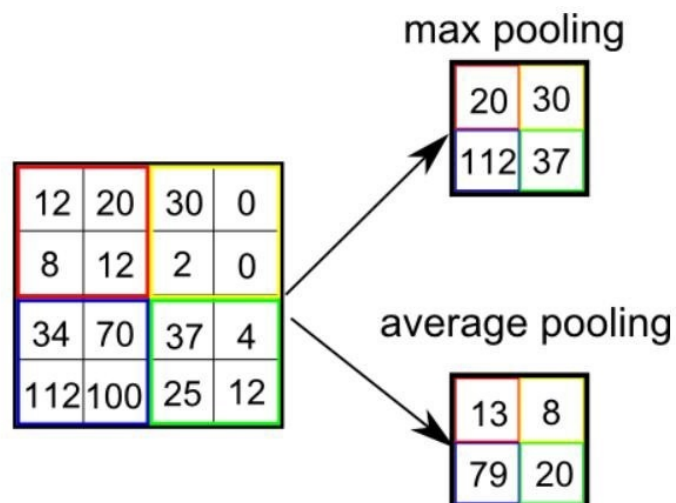
softmax	<p>Output layer</p> $\begin{bmatrix} 1.3 \\ 5.1 \\ 2.2 \\ 0.7 \\ 1.1 \end{bmatrix}$ <p>Softmax activation function</p> $\frac{e^{z_i}}{\sum_{j=1}^K e^{z_j}}$ <p>Probabilities</p> $\begin{bmatrix} 0.02 \\ 0.90 \\ 0.05 \\ 0.01 \\ 0.02 \end{bmatrix}$ <p>輸出總和為 1</p>	<p>a. 總和為 1，較小的值具有較小的機率 不會直接丟棄</p> <p>b. 模型為互相獨立的類別，且只能選擇一個類別，採用這個函數較佳。</p>	a. 在零不可微
---------	--	---	----------

* 函數使用時機：

問題種類	隱藏層	輸出層
迴歸	ReLU	Linear
二元分類		Sigmoid/Tanh
多元分類		Softmax

- c. 池化層：也就是 down-sampling，降低多餘的訊息、減少計算成本。像 convolution 一樣滑動，但每次的滑動不互相覆蓋，並以 kernel 涵蓋的最大值或平均值來篩選（如圖），而目前以 Maxpool 的效果最佳。

e.g. `nn.MaxPool1d()`、`nn.MaxPool2d()`、`nn.AvgPool1d()`、`nn.AvgPool2d()`



3. 損失函數 (Loss Function)：評估模型好壞的指標

a. 函數種類

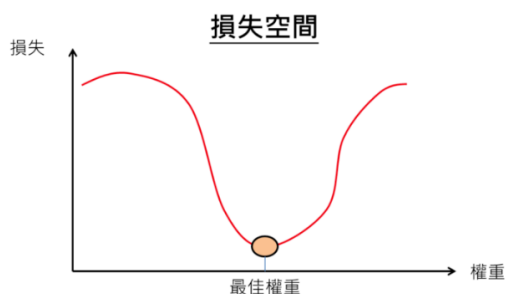
(1) CrossEntropyLoss (交叉熵損失函數)：分類問題，計算的是機率。每個類別的 entropy 越小，資料同質性越高，所有的 entropy 加總就是 cross entropy，因此希望 cross entropy 越小越好。

(2) MSELoss (均方誤差)：迴歸問題，計算的是距離。

(3) MAELoss (平均絕對值誤差)：迴歸問題，計算的是距離。

b. backward() 反向傳播

反向傳播就是要以最快的方法走到損失最小的最佳權重。對應「輸出→模型→輸入的過程」，根據 loss function 的大小來判斷權重好壞。權重改變所對應的損失，即為損失空間（如圖），找到最佳權重使模型越來越精確。



4. 優化器 (Optimizer)：根據損失函數數值去更新神經網路權重

Optimizer	解釋	特點
SGD	找出參數的梯度，往梯度的方向去更新權重 (weight)	需自行設定 learning rate 長時間才能收斂至最小值 Loss function 可能有嚴重震盪
Momentum	利用動量的概念，在同方向的維度上學習速度增加；反之	需自行設定 learning rate
AdaGrad	根據梯度調整 learning rate	適合處理稀疏資料集
Adam [最常使用]	Momentum 與 AdaGrad 的結合	適用於大數據集與高維空間 目前最常使用的

通常 Optimizer 會與以下指令使用：

```
output = cnn(bx)
    #資料放入模型，得到預測結果
loss = loss_func(output, by)
    #計算 loss function：預測結果與真實結果的差
optimization.zero_grad()
    #梯度初始化為零：每個參數的梯度值皆清零；若不清零，Pytorch 會將上次
    的計算的梯度與本次梯度累加。
loss.backward()
    #反向傳播求梯度，將 loss 反向傳遞，計算當前梯度，找到最佳權重。
optimization.step()
    #更新所有參數
```


參考網站

1. <https://ah.nccu.edu.tw/bitstream/140.119/35873/6/25700606.pdf>
2. <https://medium.com/%E9%9B%9E%E9%9B%9E%E8%88%87%E5%85%94%E5%85%94%E7%9A%84%E5%B7%A5%E7%A8%8B%E4%B8%96%E7%95%8C/%E6%A9%9F%E5%99%A8%E5%AD%B8%E7%BF%92ml-note-sgd-momentum-adagrad-adam-optimizer-f20568c968db>
3. <https://finance.sina.com.cn/tech/2021-02-24/doc-ikftssap8455930.shtml>
4. <https://ithelp.ithome.com.tw/articles/10276865>
5. <https://zhuanlan.zhihu.com/p/463234293>
6. <https://hackmd.io/@allen108108/rkn-oVGA4>
7. <https://medium.com/%E9%9B%9E%E9%9B%9E%E8%88%87%E5%85%94%E5%85%94%E7%9A%84%E5%B7%A5%E7%A8%8B%E4%B8%96%E7%95%8C/%E6%A9%9F%E5%99%A8%E5%AD%B8%E7%BF%92-ml-note-convolution-neural-network-%E5%8D%B7%E7%A9%8D%E7%A5%9E%E7%B6%93%E7%B6%B2%E8%B7%AF-bfa8566744e9>
8. <https://www.cnblogs.com/wanghui-garcia/p/10775367.html>
9. <https://medium.com/%E9%9B%9E%E9%9B%9E%E8%88%87%E5%85%94%E5%85%94%E7%9A%84%E5%B7%A5%E7%A8%8B%E4%B8%96%E7%95%8C/%E6%A9%9F%E5%99%A8%E5%AD%B8%E7%BF%92ml-note-sgd-momentum-adagrad-adam-optimizer-f20568c968db>