Part 1 反向传播算法

代码基本架构

总体结构

1. 所有有关神经网络的代码都放在NeuralNetwork文件夹下。
2. 部分函数、类参考了pytorch的设计方式
3. 采用面向对象设计，具体激活函数、网络层、损失函数都由对应基类派生而来。

文件夹结构如下：

```
NeuralNetwork
    - __init__.py
    - ActFunc.py
    - DataDealing.py
    - Layer.py
    - Loss.py
```

各文件说明

ActFunc.py

包含各激活函数的实现，如ReLU, Sigmoid，Softmax等。各激活函数继承于ActivationFunc基类，覆写运算和求导的两个虚函数。

DataDealing.py

包含有关数据处理的函数：载入图片、打乱数据、绘图、保存/加载模型的函数。

Layer.py

是实现神经网络核心文件。内部包含网络层以及网络的实现。全连接层FCLayer继承于Layer虚基类，覆写了正/反向传播、参数调整等函数。网络类Network，内含一个Layer数组以及网络训练的相关参数。

Loss.py

包含各个损失函数：Mean Absolute Error，Mean Square Error，CrossEntropyError。所有损失函数继承于虚基类Loss，覆写计算误差以及误差求导两个函数。

__init__.py

用于将以上四个py文件统筹到统一的命名空间下。

使用者通过`import NerualNetwork as nn`可以导入四个所有类。具体使用方式如下

```python
import NerualNetwork as nn
nn.dl  # 数据处理
nn.ls  # 损失函数
nn.act # 激活函数
nn.*   # 网络层和网络
```

构建网络 & 训练网络工作流

以汉字识别为例。

1. 导入网络的包

```
import NeuralNetwork as nn
```

2. 利用nn.dl导入训练、测试数据。

```
X_train, y_train, X_test, y_test = nn.dl.load_data(
    "train", num_train_samples=500, num_test_samples=120)
```

3. 制定好超参

```
# 分类问题自身的参数
pic_size = 28 * 28
char_class_num = 12

# 各层神经元的输入、输出数量
num1 = 128 #
num2 = 64
num3 = 32

batch_size = 1
epochs = 80
lr = 0.01
# 参数初始化的期望与方差
mean = 0
dev = 0.2
```

4. 创建网络层与构建网络

```
# 声明四个全连接层，最后一层Softmax
l1 = nn.FCLayer(in_feature=pic_size, out_feature=num1,
                act_func=nn.act.ReLu, mean=mean, dev=dev)
l2 = nn.FCLayer(in_feature=num1, out_feature=num2,
                 act_func=nn.act.ReLu, mean=mean, dev=dev)
l3 = nn.FCLayer(in_feature=num2, out_feature=num3,
                 act_func=nn.act.ReLu, mean=mean, dev=dev)
l4 = nn.FCLayer(in_feature=num1, out_feature=char_class_num,
                act_func=nn.act.Softmax, mean=mean, dev=dev)
# 构建网络
nw = nn.Network(loss_func=nn.ls.CE, batch_size=batch_size,
                lr=lr, epochs=epochs,)
nw.add(l1)
nw.add(l2)
nw.add(l3)
nw.add(l4)
```

5. 分类问题训练网络

```python
# 训练结束会返回训练时间
total_time = nw.classify_train(X_train, y_train, X_test, y_test)
```

6. 使用nn.dl保存模型

```python
save_name = "128-64-32_network"
nn.dl.save_model(nw,save_name)
```

7. 使用nn.dl读取模型

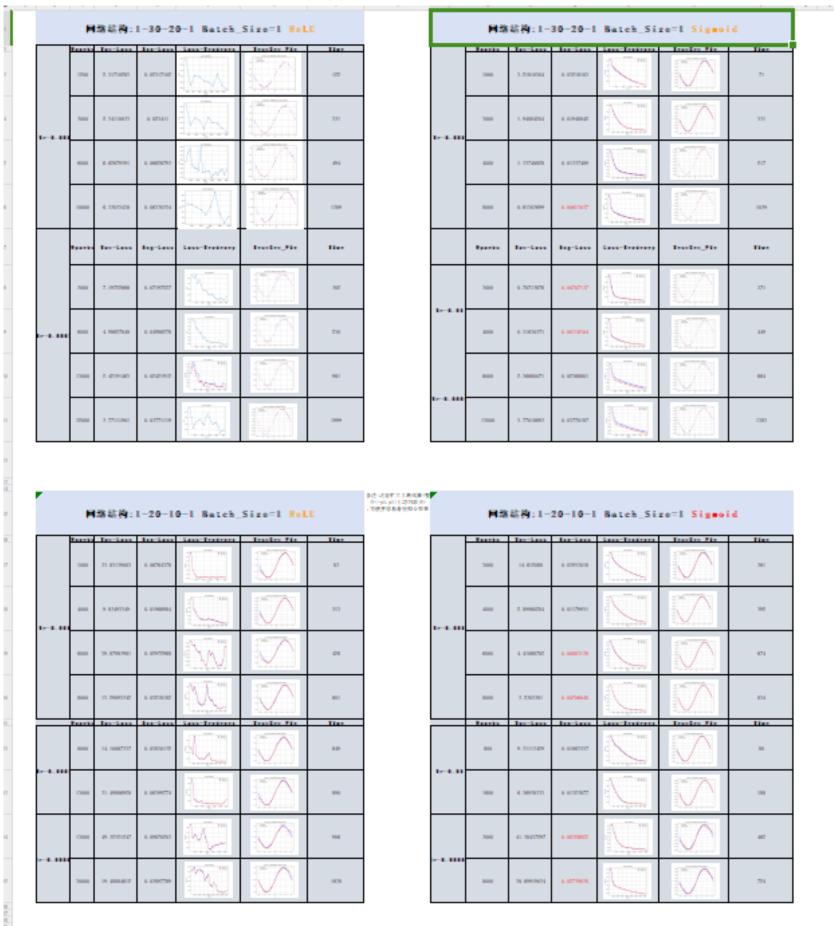
```python
nw = nn.dl.load_model(model_name)
```

不同网络结构、超参对比

Part 1：拟合Sin的结构、超参对比

对比总述

所有结果记录在了[Sin网络结构效果对比.xls]当中。



总共对比了2种网络结构，

每种网络结构下又对比了ReLU和Sigmoid两种激活函数。

不同激活函数下对比了不同学习率、不同Epochs的学习效果。

对比结论

网络结构对比

1. 两种网络结构1-30-20-1, 1-20-10-1都能出色的完成任务，使模型平均误差低至0.01一下（采用了MAE作为损失函数）。
2. 1-30-20-1 收敛速度比1-20-10-1 更慢，需要更多epochs才能使模型误差达标，但其优点在于收敛时的误差更小。这是符合直觉的，因为前者模型更复杂，需要更多训练，但也因此拟合效果更好，因而收敛时误差低。
3. 单层隐层的网络并没有写入记录表格中，但是在使用Sigmoid作为激活函数的情况下，也是可以较好拟合Sin的。

激活函数对比

1. 从拟合结果图或者平均误差上可以非常明显的看出，**Sigmoid函数在拟合Sin的任务上远远好于ReLU**，ReLU的拟合结果图甚至不是一个连续函数，而是一个分段函数。这可能是因为ReLU本身并没有Sigmoid那样光滑，因而最终拟合出的函数出现不光滑甚至不连续的情况。
2. ReLU始终无法将平均误差降至0.01以下，最好情况也是大于0.03。Sigmoid可以非常轻松达成目标。
3. ReLU的平均误差降低过程十分“陡峭”，Sigmoid函数降低过程十分平滑。
4. 同样的Epochs、结构下，ReLU训练速度比Sigmoid快大约10%~20%，虽然有ReLu比较简单的因素在，但也与我先前Sigmoid求导需先运算一遍函数结果有关（后来已经改正）。

学习率对比

1. 学习率小，Loss曲线并**不一定**能更平滑。
2. 小学习率为了达到收敛花费了更多Epochs，但小学习率不一定能得到更好的拟合结果（在使用ReLU的网络中可以看出）

训练次数对比

1. 一般来说Epochs越多误差越好，例如使用Sigmoid时的网络，但是在使用ReLU的网络中，Epochs过多时反而有可能使Loss上升。

Part 2：汉字分类的结构、超参对比

对比总述

所有结果记录在了汉字识别全连接层分类.xlsx当中。

总共比较了6种网络结构，包含单、双、三层隐层。

此外还比较了不同Batch_Size, 不同学习率，不同参数初始化的学习效果。

对比结论

网络结构对比

1. 单层隐层、双层隐层、三层隐层的测试集上最终正确率均在85%至90%之间。表现最好的是'784-392-196-98-12',达到了90.1%的正确率。表现最差的是'784-128-12’，正确率为85.97%。正确率提升了4%，但前者训练时间是后者训练时间的六倍左右。
2. Batch_Size为1的情况下，所有网络的ls和cr曲线都非常的不平滑。

Batch_Size比较

1. bs =100 相比于bs =1 ls和cr曲线光滑的多。
2. bs更大训练速度会更快，(因为不用次次BP)，但是收敛效果更差，因为采用了Batch内数据梯度的平均，并不能非常好的削减Loss。

学习率比较

1. 同拟合Sin，小学习率并不一定能带来更到的正确率，但一定会付出更多的训练时间。
2. 在大学习率训练的末尾，采用小学习率，能获得略微更好的训练结果，约2%~5%,但始终很难达到90%正确率。

参数初始化比较

本次全连接层参数都采用正态分布初始化，对比了(mean,var) = (0,0.2) / (0,0.1) /　(0,0.01）三组取值

1. 大部分网络结构var = 0.1 效果会比var = 0.2更好，但最高也只能高2%左右。

   var=0.01会比var =0.1略差1%。

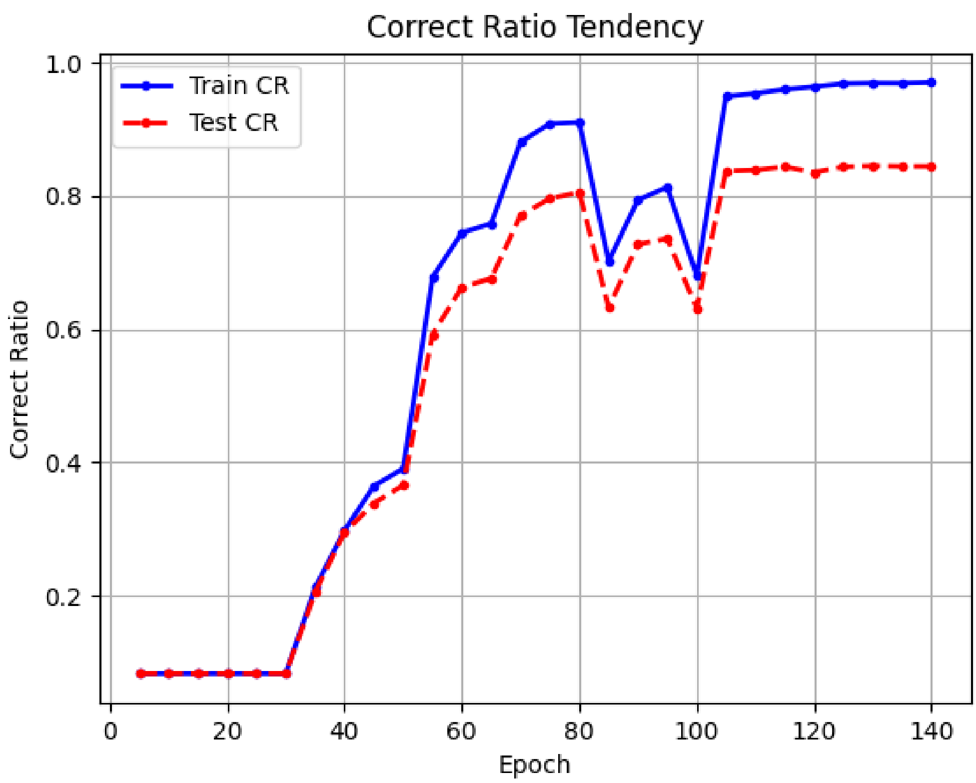
   在简单的网络里[784-128-12]下,var = 0.2更好。

2. 其他更大var也有过测试：如果var接近1会直接无法收敛，var需要低于0.6才能正常的训练。
3. 更小的初始化值，最后用更小的lr训练效果会更好。（见测试的两个两层网络），最后将lr调至非常小（0.0001）正确率都能略微提升。
4. 三者的ls，cr曲线都非常的不平滑。

激活函数

没有写在测试结果文件里，但是也有测试，比较下来也可以实现85%不到的正确率，相比于ReLU来说效果差些。并且在最初的Epochs里正确率会固定在8.3%。

此外相比于ReLU，Sigmoid更容易发生梯度消失的问题，不过好在目前测试的网络结构尚浅，问题不是很严重。对于梯度其更大影响的反而是参数初始化。

> 下面的图时Sigmoid作激活函数的cr图
>
> 
>

反向传播算法理解

反向传播本质上基于链式求导法则，但相比于单纯运用链式求导，用到了前后层之间梯度的递推，这降低了求解的复杂度。

否则一个n层的网络，在第一个隐层的梯度需要求n-1个连续的Σ，这个复杂度是难以想象的。

下面手动推导一遍反向传播算法(先不考虑BatchSize)

首先约定参数：

符号	意义
If	本层输入的数量(input feature)
Of	本层输出的数量，同时也是本层神经元数量(output feature)

符号	意义
x	本层输入矩阵，大小为[If,1]
ω,b	权重[If, of]，偏置[of,1]
O	本层输出[of,1]
f	本层激活函数
OF	本层输出经过激活函数[of,1]
E	损失函数

$$
\begin{gathered}
\text{对于每层，前向传播时，有：} \\
O=\omega^T x+b \\
Ofunc=f(O) \\
\text{对于所有层，参数更新时都有：} \\
\omega=\omega\ -lr\cdot\nabla\omega \\
b=b\ -lr\cdot\nabla b
\end{gathered}
$$

求解ω的梯度

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial E}{\partial w} &= \begin{bmatrix} \frac{\partial E}{\partial w_{11}} & \cdots & \frac{\partial E}{\partial w_{1Of}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial E}{\partial w_{If1}} & \cdots & \frac{\partial E}{\partial w_{IfOf}} \end{bmatrix} \\
&= \left[\frac{\partial E}{\partial O_j}\cdot\frac{\partial O_j}{\partial w_{ij}}\right] \\
&= \left[\frac{\partial E}{\partial O_j}\cdot x_i\right] \\
&= \boldsymbol{x}\left[\frac{\partial E}{\partial O}\right] \quad (\text{矩阵乘法})
\end{aligned}
$$

所以只要求出E关于Output的梯度即可。而

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial E}{\partial O_i} &= \frac{\partial E}{\partial OF_i}\frac{\partial OF_i}{\partial O_i} \\
\text{因此}\left[\frac{\partial E}{\partial O_i}\right] &= \left[\frac{\partial E}{\partial OF_i}\right]\cdot\left[\frac{\partial OF_i}{\partial O_i}\right] \\
&= g\_OF\cdot g\_ActFunc \\
&= g\_O
\end{aligned}
$$

g表示gradient。g_ActFunc是比较好求的，问题在于g_OF。

OF是本层的输出，同时又作为下一层的输入，对下一层所有的神经元产生影响，最终作用到E上。于是g_OF可以求了。先求对于本层第n个输出的偏导。

符号带prime的为下一层的数据。

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial E}{\partial OF_n} &= \sum_{i=1}^{Of'} \frac{\partial E}{\partial O'_i} \cdot \frac{\partial O'_i}{\partial OF_n} \\
&= \sum_{i=1}^{Of'} \frac{\partial E}{\partial O'_i} \cdot \omega'_{ni} \\
&= \left[\frac{\partial E}{\partial O'_i}\right] \cdot \boldsymbol{\omega}'_n
\end{aligned}
$$

因此 对于g_OF矩阵:

$$
\begin{aligned}
g\_OF &= \left[\frac{\partial E}{\partial OF_i}\right] \\
&= \omega' \left[\frac{\partial E}{\partial O'_i}\right] \\
&= \omega' g\_O'
\end{aligned}
$$

现在求解ω梯度所有的问题都解决了，连起来：

$$
\begin{aligned}
\nabla \omega &= \boldsymbol{x} \left[\frac{\partial E}{\partial O}\right] \quad (\text{矩阵乘法}) \\
&= \boldsymbol{x}\, g\_O \\
&= \boldsymbol{x}\, (g\_OF \cdot g\_ActFunc) \\
&= \boldsymbol{x}\, (\ (\omega' g\_O')\ \cdot g\_ActFunc)
\end{aligned}
$$

因此在写代码的时候，我们需要记录每一层的g_O, 借助下一层的g_O可以计算本层的g_O同时计算本层ω的梯度。

需要特别注意的是距离输出层的g_O，因为它没有下一层了，不过此时g_O已经可以借助损失函数E直接计算了。

特别的，在代码的实现上需要区分最后一层和其他层的反向传播。

求解b的梯度

每一层的b相当于始终连着一个输入为1的神经元。因而上面的x可以直接替换成1。

因此

$$
\begin{aligned}
\nabla b &= 1 \left[\frac{\partial E}{\partial O}\right] \\
&= g\_O
\end{aligned}
$$

所以b的梯度可以非常轻松的通过g_O得到。

总结

1. 每层记录本层关于输出的梯度的g_O，ω和b的梯度由g_O计算而来。
2. 上层g_O由下层g_O推导而来。输出层g_O需要特别求解。

实验中遇到的问题及解决

Softmax求导

由于Softmax和CrossEntropy搭配可以使得求导十分方便，最后导数直接是

$$
g\_Loss = \hat{y} - y
$$

但从代码实现的角度上来看，Softmax属于激活函数，CE属于Loss Function，两种是不同的类。导数应该分别计算。但这样的话就没法利用到上面这个优美的求导了。

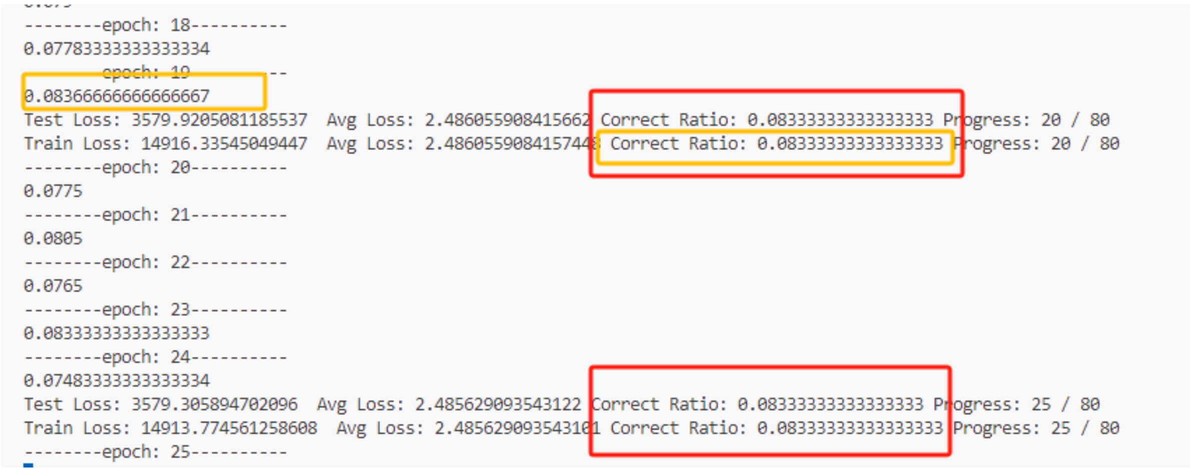
解决方法

人为规定Softmax求导恒定为1，CrossEntropy求导为上面的公式。

优点是利用了上面优美的式子，缺点是强制是的Softmax和CrossEntropy绑定，并且必须把Softmax放在最后一层。这个约束只能靠使用者自行遵守了。

汉字分类正确恒定1/12

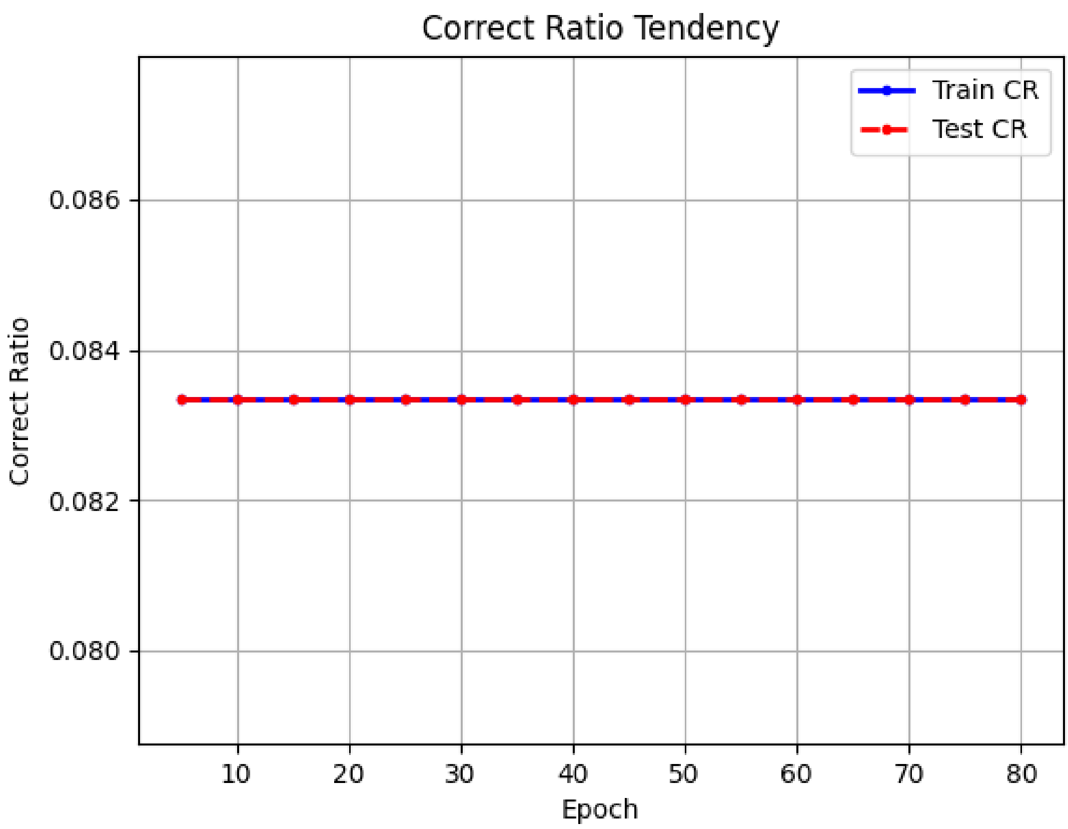
在做汉字分类时，我发现无论怎么训练，在验证集上的正确率始终为8.3%，也就是 1/12（见下图红框）。同时非常神奇的是在训练集上BP与不进行BP，计算出来的正确率是不同的（见下图黄框）。



```
--------epoch: 18----------
0.07783333333333334
--------epoch: 19----------
0.08366666666666667
Test Loss: 3579.9205081185537  Avg Loss: 2.486055908415662 Correct Ratio: 0.08333333333333333 Progress: 20 / 80
Train Loss: 14916.33545049447  Avg Loss: 2.4860559084157448 Correct Ratio: 0.08333333333333333 Progress: 20 / 80
--------epoch: 20----------
0.0775
--------epoch: 21----------
0.0805
--------epoch: 22----------
0.0765
--------epoch: 23----------
0.08333333333333333
--------epoch: 24----------
0.07483333333333334
Test Loss: 3579.305894702096  Avg Loss: 2.485629093543122 Correct Ratio: 0.08333333333333333 Progress: 25 / 80
Train Loss: 14913.774561258608  Avg Loss: 2.485629093543161 Correct Ratio: 0.08333333333333333 Progress: 25 / 80
--------epoch: 25----------
```

可以看到Loss反复的震荡，事实上无论怎么训练，loss不会低于2.4。

无论是在训练集还是在验证集上，正确零雷打不动。



原因及解决方法

我打印了训练过程中所有的梯度以及输出，发现模型自初始化后，无论遇到什么图片，输出的都是同一个分类。这解决了为什么正确率是8.3%。

至于BP与不BP正确率不同，很有可能是BP的过程中改变了模型输出的那个分类，但仍然无法做到区分图片。改变之后，模型可能会判断对新的图片，但是对于绝大部分图片来说，仍然是错误的。这造成了训练时正确率不同于8.3%。

解决办法非常简单，这实际上是由于参数初始化过大造成的。由于我使用的是ReLU，当神经元输出小于0时，激活函数的导数将会变成0，这导致该神经元不会更新。初始化参数在一个比较小的范围内使得更多的神经元在训练过程种不会'死亡'。事实上(mean,dev)= (0,1)就已经会使得训练没有任何效果了（甚至还会报错）。

连续训练-绘图连续性问题

得益于Pickle库的功能强大，能够使用Pickle库的dump函数将整个模型直接保存，也能直接读取整个模型，这省去了很多麻烦。保存模型使得模型可以复用，但也需要解决连续训练模型（紧接上一次模型训练结果接着训练）的问题。主要问题是绘制最后loss和correct_ratio的图信息不完全，此外还有当前epoch打印、训练时间打印的问题。

解决方法

将test_loss和train_loss，test_cr和train_cr都设为Network的成员变量，在验证过程当中，将相应信息append进对应数组。由于这些重要数据已经成了Network的属性，因而能一并保存与读取。最后绘图也保留之前训练的结果。

至于epoch和训练时间的打印，需要额外多存储lastEpoch，lastTime两个属性，记录之前训练了多少epochs和时间，每次训练完之后进行更新。

上述两者结合，使得读取模型后，之前的相关训练信息也能得以保留，并最终可视化的展现在用户眼前。

目前对神经网络的看法

神经网络让人们避免了思考解决复杂问题的算法，或者说神经网络本身就是一种通用的算法。

但是从我自身训练的经历来看，只是从思考解决方法转变成了玄学测试超参。这也算是一种进步吧，毕竟解决问题的“算法空间”，比神经网络的“超参空间”要来的大得多，也更难想。后者只不过是一堆数字罢了。