

Lab1 的 part1 拟合 $\sin x$ 部分我使用 python3.6 语言, 利用 numpy 库进行部分数学操作, 具体见如下说明:

一、函数方法说明:

A. 全局方法:

1. `rand(a,b)`: 该方法返回在区间 (a, b) 的任意随机数, 且保证每次调用的时候返回的都是与之前不同的随机数
2. `generate_w(m,n)`: 该方法返回生成的 $m \times n$ 的 weight 矩阵, 且通过在该方法中调用 `rand(a,b)` 来初始化每个 weight 的值
3. `generate_b(m)`: 该方法返回生成的 m 长度的 bias 值, 且通过在该方法中调用 `rand(a,b)` 来初始化每个 bias 的值
4. `fit_function(x,deriv=False)`: 该方法返回拟合函数, 如果该方法传入的 `deriv` 是 `True`, 则返回拟合函数的导数。我试验了两种拟合函数, 一种是 `sigmoid`。另一种是 `tanh` 函数, 在实验数据来看, `tanh` 拟合效果比较好, 而 `sigmoid` 由于只能输出 $0-1$ 的正数, 只能拟合 $0-\pi$ 的一部分, 且拟合效果不是很好

B. 定义了 BPNetwork 类, 其内部函数方法说明如下:

1. `__init__(self)`: 定义类中所需要的数据, 类中所需要维持的参数名称在此函数中事先定义。这些数据包括:

(1) `self.input_n = 0`: 表示输入层的神经元个数, 拟合 $\sin x$ 需要 `self.input_n = 2`, 一个是输入的数据, 另一个用来调节 bias

(2) `self.input_cells = []`: 表示输入层的神经元输入的数据, 有两个元素, 一个是输入的数据; 另一个用来调节 bias, 默认为 1

(3) `self.output_n = 0`: 输出层的神经元个数

(4) `self.output_cells = []`: 输出层的神经元的输出值

(5) `self.input_w = []`: 输入层到第一层隐藏层的 weight

(6) `self.output_w = []`: 最后一层隐藏层到输出层的 weight

(7) `self.hidden_ns = []`: 隐藏层的设置, 它的长度是指隐藏层个数, 它的每个元素指该层隐藏层的神经元个数

(8) `self.hidden_ws = []`: 隐藏层的 weights, 其中的每个元素为上一层隐藏层到下一层隐藏层的 weight, 一共有 $n-1$ 个 weight

(9) `self.hidden_bs = []`: 其中的每个元素 `self.hidden_bs[i]` 都是第 i 层隐藏层的 bias 设置, 其长度为隐藏层的个数

(10) `self.output_b = []`: 输出层的 bias

(11) `self.hidden_results = []`: 其中的每个元素是每一层隐藏层的输出值

(12) `self.output_deltas = []`: 指输出层的 $\partial \text{Error} / \partial (\text{output}_w)$

(13) `self.hidden_deltases = []`: 其中的每个元素 `self.hidden_deltases[i]` 指从第 i 层出

发的 $\partial \text{Error} / \partial (\text{weight})$, 该 weight 指从第 i 层到第 $i+1$ 层的 weight

2. `setup(self, input_n, output_n, hidden_set)`: 初始化类中所需参数, 输入的参数中, `input_n` 是定义输入的参数个数, 但并不等于输入层神经元个数, `self.input_n` 等于输入的参数 `input_n+1`, 原因是需要新增一个神经元用来调节 bias, 且这个神经元的输入值记为 1, 这样就可以通过用 `output_deltas` 来调节 `input_b` 了
`output_n` 是输出层个数
`hidden_set` 是一个 list, 里面的每个元素是隐藏层的神经元个数, 如 `[10,10]` 表示有两层隐藏层, 两层隐藏层都有 11 个神经元, +1 的原因同 `input_cells` 中增加一个神经元的作用是一样的, 是为了调节该隐藏层的 bias

通过这些信息就可以初始化类中所需要的数据了。即在__init__方法中的那些数据。

需要注意的是在初始化 weight 的时候使用 generate_w 方法形成一个由随机数的矩阵，初始化 bias 的时候使用 generate_b 形成一个由随机数组成的一个一维数组

3. forward_propagate(self, input): 向前传播。

(1) 将输入的 input 作为前 n-1 个输入层神经元的输入值，第 n 个输入层神经元设为 1，然后进行向前传播

(2) 传播分为三个部分，输入层到隐藏层第一层，在隐藏层之中，然后从最后一层隐藏层到输出层。传播公式为：

$$\text{Output}[h] = \text{fit_function}((\sum_{i=0}^{\text{输入层神经元个数}} \text{weight}[i][h] * \text{input}[i]) + \text{bias}[h])$$

传播的思路就是：前一层的输入的值乘以前一层到后一层的 weight，然后得到积的加和，再用这个加和加上下一层的对应的 bias，得到后一层的输出。

4. get_deltas(self, label): 该函数是得到 self.output_deltas 和 self.hidden_deltas 的函数。

$\text{self.output_deltas} = \partial \text{Error} / \partial (\text{output_w})$: 指输出层的 deltas 公式为

$$\text{output_deltas}[o] = \text{fit_function}(\text{output_cell}[o]) * (\text{label}[o] - \text{output_cells}[o])$$

$\text{self.hidden_deltas} = \partial \text{Error} / \partial (\text{weight})$ weight 是指 hidden_ws 中的元素。

$$\text{hidden_deltas}[k][o] = \text{fit_function_deriv}(\text{hidden_result}[k][o]) * (\text{deltas}[i] * \text{weight}[o][i])$$

这里的 deltas 是指的上一层神经元的 deltas

5. renew_w(self, learn): 更新 weight 的函数，仍然分成三个部分，先更新最后一层隐藏层到输出层的权重，再是隐藏层之间的权重，然后再更新第一层隐藏层到输入层的权重。更新 weight 的公式为：

$\text{Weight}[i][o] += \text{deltas}[o] * \text{input}[i] * \text{learn}$ ，其中的 o 是输出层神经元的 index，i 是输入层的神经元的 index，input 是指输入层的输入，learn 是学习率。

6. renew_b(self, learn): 更新 bias 的函数，分成两个部分，第一部分是隐藏层的 bias，第二部分是输出层的 bias。更新 bias 的公式为：

$$\text{bias}[i] += \text{deltas}[i] * \text{learn}$$

7. back_propagate(self, input, label, learn): 先进行前向传播，再进行反向传播，然后获取 deltas，更新 weight 和 bias，之后再计算此次正向传播得到的损失值，并返回。这个函数的每一行都在调用其他的函数，是一次完整的反向传播。

8. get_loss(self, label, output_cell): 用损失函数获取损失值，公式为

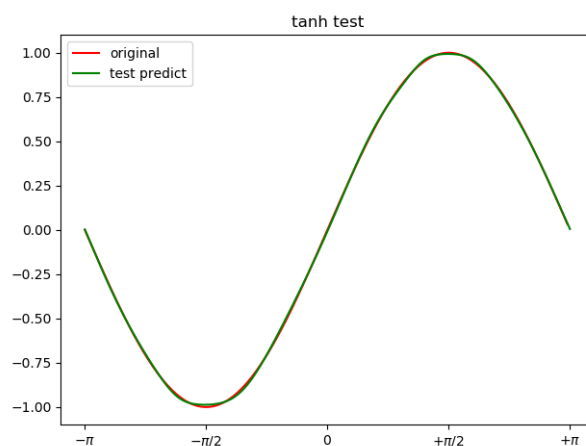
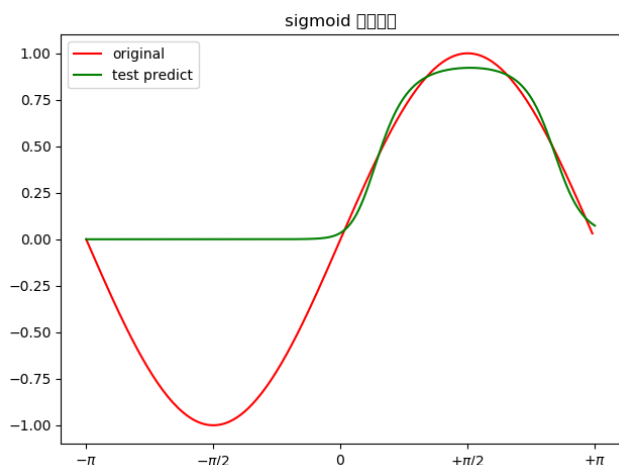
$$\sum_{o=0}^{\text{输出值的个数}} ((\text{label}[o] - \text{output_cell}[o]) ** 2) * 0.5$$

9. test(self): 设置 bp 网的结构，然后得到 20 组数据进行训练，然后再用 200 组数据进行测试。直接调用 test() 方法就可以测试。

二、遇到的困难及解决

1. 遇到的一个比较烦的问题就是 bias 的处理问题，在网上搜了一些 bp 网 bias 处理的文章，发现是通过增加一个输入层神经元，并且在每一层隐藏层上增加一个神经元来解决的。也就是说，如果输入值的个数是 1，那么就要两个输入层神经元，其中①号的神经元的值为这个输入值，②号神经元的值为 1，②号神经元与下一层的每个神经元之间的 weight 就相当于下一层每个神经元的 bias， $\text{bias} = \text{weight}_{2,i} * 1$ ，这样就可以通过 $\text{bias}[i] += \text{deltas}[i] * \text{learn}$ 来调整 bias 了，同样的，对每个隐藏层都新增一个神经元也是这样的目的。

2. 遇到的第二个困难就是 sigmoid 函数和 tanh 函数选取问题，一开始我使用 sigmoid 函数，发现拟合出来的是一条直线，通过调参，可以大致拟合出 [0, Π] 区间的形状，但效果并不是很理想。如图。后来通过使用 tanh 函数，可以很好的拟合出 $\sin x$ 的形状。



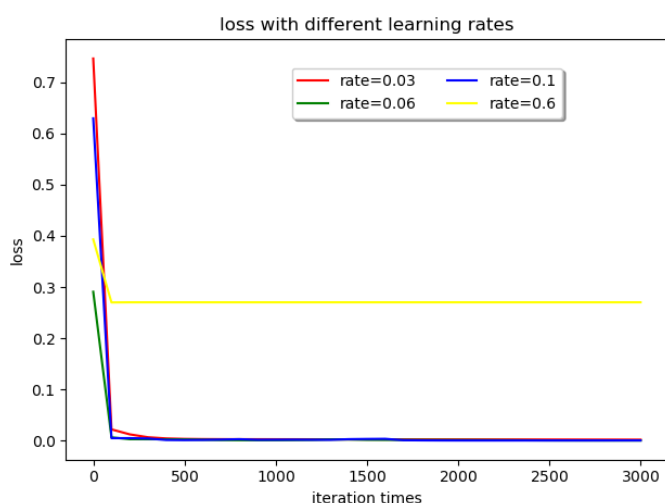
上两张图中左图是用 sigmoid 函数，右图是用 tanh 函数，参数都是 weight 取 $(-0.69, 1)$ 之间的随机数，bias 取 $(-2.409, 0.02)$ 之间的随机数，学习率为 0.05，训练样本为 $(-\pi, \pi)$ 之间的 20 个，测试样本为 $(-\pi, \pi)$ 之间 200 个，训练次数为 10000. bp 神经网络设置为 $[1, 10, 10, 1]$

可以看出来 sigmoid 拟合在为负值的部分，趋向于直线，这是因为 sigmoid 只能取 $(0, 1)$ 之间的值，所以拟合效果比较差。而 tanh 在这样的参数设置下，已经拟合的非常好了，它的平均误差只有 $1.92524882921e-05$ ，可以说非常完美了。

三、实验内容——各种因素对损失值 (loss) 的影响

一) 前提：使用 tanh 非线性函数进行拟合。Weight 初始值为 $(-0.69, 1)$ 的随机值，bias 初始值为 $(-2.409, 0.02)$ 的随机值。在相同的训练集上训练 3000 次，每 100 次选取一个点，对测试集进行测试得到 loss 的平均值作为纵坐标值。

1. 不同的学习率 (rate) 下，loss 的变化情况。前提：1 个输入值，1 个输出值，6 个中间神经元。这里使用不同的学习率。



当 learning rate = 0.01 时，平均 loss 为：0.00177692217424

当 learning rate = 0.06 时，平均 loss 为：0.000119781347307

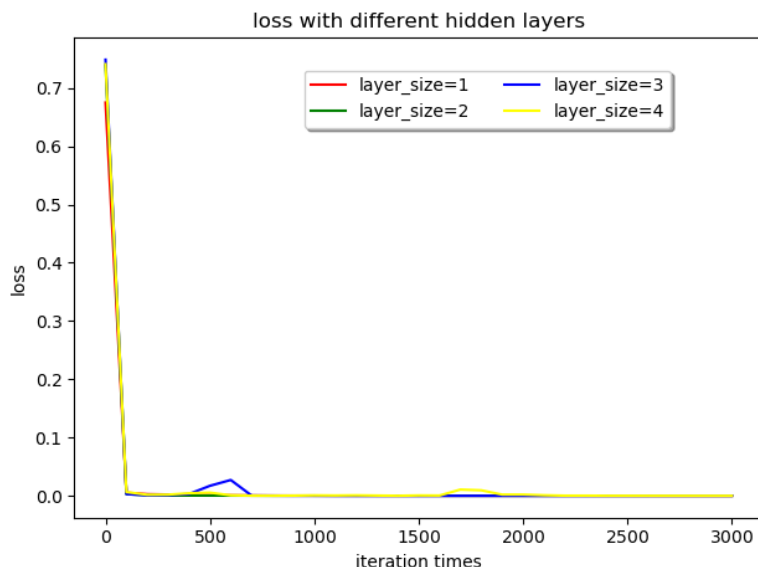
当 learning rate = 0.1 时，平均 loss 为：0.00030590788673

当 learning rate = 0.6 时，平均 loss 为：0.270187966936

，可以看出，在学习率为 0.03、0.06，0.1 的时候最后的拟合都非常好，但是一开始的 loss 的下降速率却不一样，学习率为 0.1 的时候 loss 的下降速率较小，0.06 次之，最快的下降斜率是 rate=0.03 的时候，说明在 0.03 的时候拟合的速率最快。

训练 3000 次后打印出来的平均 loss 见上图，可以看出，在学习率为 0.6 的时候平均 loss 最大，拟合效果最差，在学习率为 0.06 的时候平均 loss 最小，说明它的拟合效果最好。

2. 不同隐藏层个数下，loss 的变化。这里使用学习率为 0.05。



当隐藏层设置为： [10] 时，平均loss为： 0.000151280260482

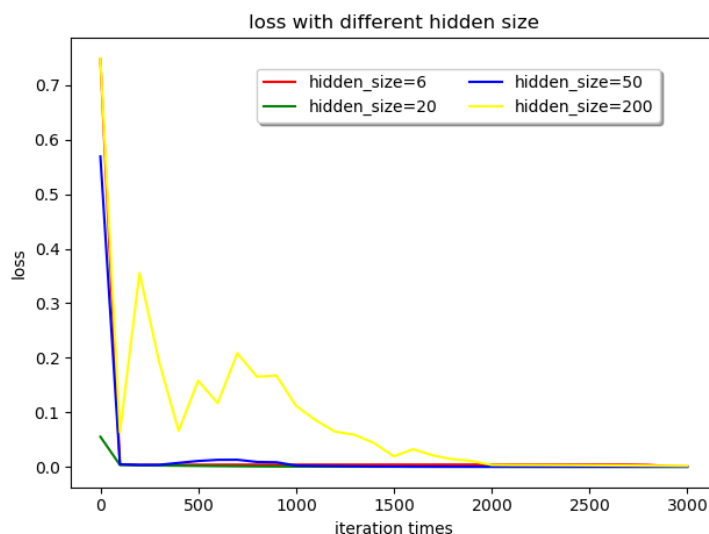
当隐藏层设置为： [10, 10] 时，平均loss为： 0.000246862602714

当隐藏层设置为： [10, 10, 10] 时，平均loss为： 7.55183091262e-05

当隐藏层设置为： [10, 10, 10, 10] 时，平均loss为： 0.000144285188015

在第一张图中可以看出，隐藏层设置 1-4 层走势差不多，只有在设置三层和第四层的时候在不同地方略有波动，可能是因为出现了局部最小值的原因，在循环次数增大后，局部最小值就被跳出来了。在训练 3000 次结束之后，输出的平均 loss 值可以看出，在隐藏层设置三层时，拟合的效果最好，其次是四层的时候。而在隐藏层设置两层时，是拟合效果最差的，原因可能是出现了局部最小值。

3. 隐藏层只有一层的时候，设置不同的神经元个数。这里使用学习率为 0.05。



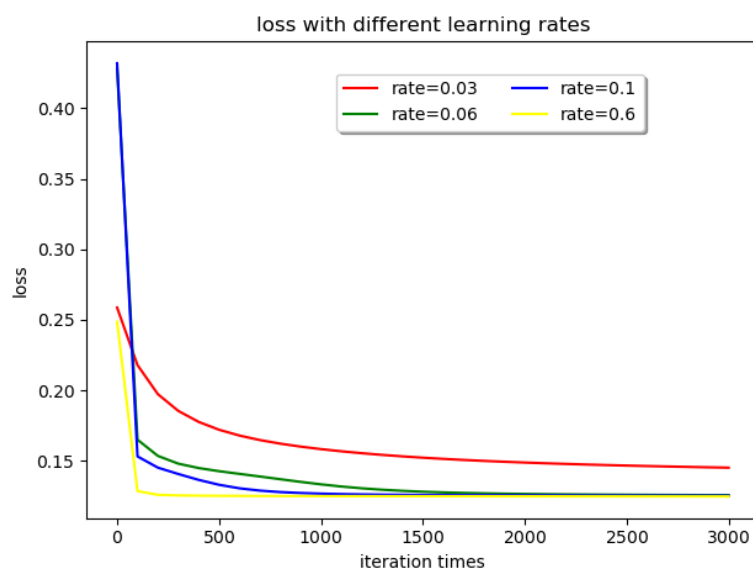
当只有一层隐藏层，该隐藏层大小为： [6] 时，平均loss为： 0.000824453103088
当只有一层隐藏层，该隐藏层大小为： [20] 时，平均loss为： 0.000224852986956
当只有一层隐藏层，该隐藏层大小为： [50] 时，平均loss为： 0.000349377716662
当只有一层隐藏层，该隐藏层大小为： [200] 时，平均loss为： 0.00183935877302

在第一张图中我们可以看到，隐藏层大小为 6, 20, 50 的时候 loss 值都下降的较稳定，而隐藏层大小为 200 的时候在 0-2000 次时波动较大，原因可能是出现过拟合和出现局部最小值的现象，而随着训练次数的增大，这种状况有所好转。

在第二张图中，我们可以看到，隐藏层为 200 的时候，拟合效果最差，可能是有些过拟合，所以结果不是很好。隐藏层大小为 6 的时候次最差，可能是失拟合，因为神经元个数过少。而隐藏层为 20 的时候效果最好。

二) 前提：使用 sigmoid 非线性函数进行拟合。Weight 初始值为(-0.69,1)的随机值，bias 初始值为(-2.409,0.02)的随机值。在相同的训练集上训练 3000 次，每 100 次选取一个点，对测试集进行测试得到 loss 的平均值作为纵坐标值。

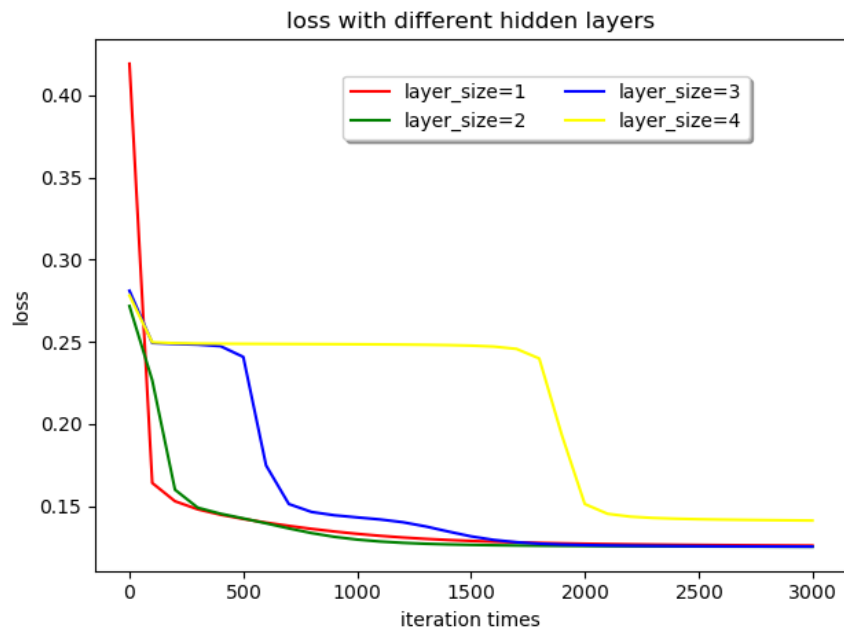
1. 不同的学习率 (rate) 下，loss 的变化情况。前提：1 个输入值，1 个输出值，6 个中间神经元。
这里使用不同的学习率。



当learning rate = 0.01 时，平均loss为： 0.145179886045
当learning rate = 0.06 时，平均loss为： 0.125691943437
当learning rate = 0.1 时，平均loss为： 0.125282922722
当learning rate = 0.6 时，平均loss为： 0.124763196227

可以看出 rate=0.1 的时候，loss 的下降速率最大，rate=0.03 时下降速率最小，且最后的 loss 值最大，拟合效果最差。而在第二张图中可以看出，在 rate=0.6 的时候，训练 3000 次之后的效果最好。0.06 和 0.1 的效果差不多。

2. 不同隐藏层个数下，loss 的变化。这里使用学习率为 0.05。



当隐藏层设置为: [10] 时, 平均loss为: 0.126079109639

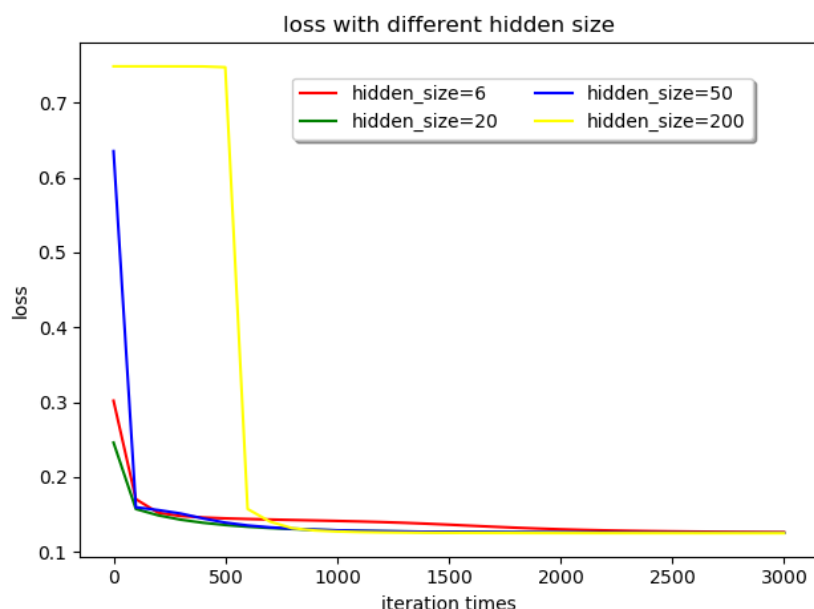
当隐藏层设置为: [10, 10] 时, 平均loss为: 0.12538880761

当隐藏层设置为: [10, 10, 10] 时, 平均loss为: 0.125472471441

当隐藏层设置为: [10, 10, 10, 10] 时, 平均loss为: 0.141319709322

可以看出在隐藏层为 3 时, 在训练次数大概为 200-700 处有一段时间的平缓, loss=0.25 左右, 这个时候拟合出来的是一条平缓的直线, 说明出现了局部最小值的情况。同样的, 在隐藏层为 4 的时候在训练次数大概为 200-1800 处出现了一样的情况, 说明也是出现了局部最小值的情况。

3. 隐藏层只有一层的时候, 设置不同的神经元个数。这里使用学习率为 0.05。



当只有一层隐藏层, 该隐藏层大小为: [6] 时, 平均loss为: 0.126358217499

当只有一层隐藏层, 该隐藏层大小为: [20] 时, 平均loss为: 0.125465216005

当只有一层隐藏层, 该隐藏层大小为: [50] 时, 平均loss为: 0.125458451668

当只有一层隐藏层, 该隐藏层大小为: [200] 时, 平均loss为: 0.125059438076

在图中可以看出在隐藏层大小为 200 时, 在训练次数为 0-500 时, 出现了局部最小值的情况, 导致 loss 值没有什么变化。600 次训练之后迅速拟合, loss 也迅速减小。隐藏层大小为 50, 6, 20 的

曲线下降速率依次降低，隐藏层大小为 50 的拟合效果最好。

四、总结

与 tanh 非线性函数拟合的效果对比可以看出 sigmoid 明显效果差，tanh 在学习率为 0.06 左右，效果比较好，隐藏层个数和层数都需要多实验几次才可以得到较好的拟合。Sigmoid 在学习率为 0.6 左右的时候效果比较好。