FAET630004: AI-Core and RISC Architecture **(Due: 06/11/20)**

Homework Assignment #3

Instructor: Chixiao Chen *Name:* Xinru Jia(贾心茹) , *FudanID:* 20212020041

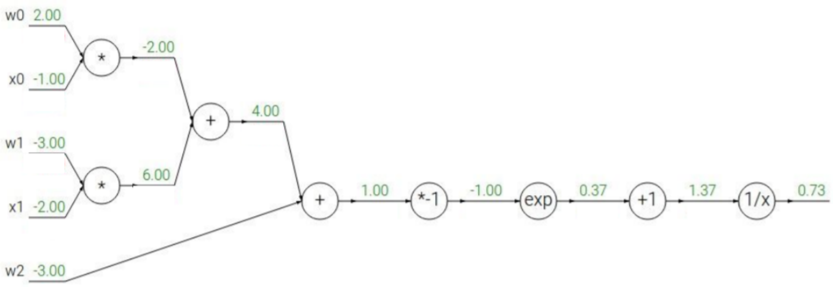
- This HW counts 15% of your final score, please treat it carefully.
- Please submit the electronic copy via mail: faet_english@126.com before 06/11/2020 11:59pm.
- It is encouraged to use LaTeX to edit it, the source code of the assignment is available via: https://www.overleaf.com/read/mrhqrdztsdzs
- You can also open it by Office Word, and save it as a .doc file for easy editing. Also, you can print it out, complete it and scan it by your cellphone.
- Problem 2 needs python and numpy. If you do not have a local python environment, please use an online version https://colab.research.google.com/.
- You can answer the assignment either in Chinese or English

Problem 1: Gradient Computing (30 points)

Assuming that one loss function in a classifier has the following output expression:

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-(w_0x_0 + w_1x_1 + w_2)}},$$

and the current state is shown below:



Please compute all the weight gradients $\frac{\partial f}{\partial w_i}, i = 0, 1, 2.$

(Solution)

函数 f(x) 由一个线性多项式和一个 Logistic 函数复合而成，我们不妨将其变成一个复合函数，分别将线性多项式和 Logistic 函数记作 g 和 s。则复合函数 f(x) 的表达式如下所示：

$$f(x) = s(g) \bullet g(x) \tag{0.1}$$

这其中子函数 s(g) 和 g(x) 的函数表达式如下所示：

$$g(x) = w_0x_0 + w_1x_1 + w_2, \tag{0.2}$$

$$s(g) = \frac{1}{1 + e^{-g}} \tag{0.3}$$

然后根据复合函数的链式求导法则，权重梯度 $\frac{\partial\ f}{\partial\ w_i}$ 可以通过如下公式求得：

$$\frac{\partial\ f}{\partial\ w_i} = \frac{\mathrm{d}\ s}{\mathrm{d}\ g} * \frac{\partial\ g}{\partial\ w_i} \tag{0.4}$$

根据上述复合函数求导公式分别计算两个乘法因子，其中第一项 $\frac{\mathrm{d}\ s}{\mathrm{d}\ g}$ 为：

$$\frac{\mathrm{d}\ s(g)}{\mathrm{d}\ g} = s(g)(1 - s(g)) \tag{0.5}$$

然后将上述计算公式带入图中当前状态下 $g = w_0x_0 + w_1x_1 + w_2 = 1.00$ 的值可以求出：

$$\frac{\mathrm{d}\ s(g)}{\mathrm{d}\ g} = s(g)(1 - s(g)) = \frac{1}{1 + e^{-1}} * (1 - \frac{1}{1 + e^{-1}}) = 0.1966 \tag{0.6}$$

下一步计算复合函数求导公式下的另一个乘法因子 $\frac{\partial\ g}{\partial\ w_i}$ 为：

$$\begin{cases} \frac{\partial\ g}{\partial\ w_0} = x0, \\ \frac{\partial\ g}{\partial\ w_1} = x1, \\ \frac{\partial\ g}{\partial\ w_2} = 1 \end{cases} \tag{0.7}$$

近一步带入当前状态下的 x0，x1 的值，分别是-1.00 和-2.00:

$$\begin{cases} \frac{\partial\ g}{\partial\ w_0} = x0 = -1.00, \\ \frac{\partial\ g}{\partial\ w_1} = x1 = -2.00, \\ \frac{\partial\ g}{\partial\ w_2} = 1 = 1.00 \end{cases} \tag{0.8}$$

那么此时我们将公式（0.6）和公式（0.8）中所示分别计算两个乘法因子的结果再次相乘，即可获得如下计算结果为最终结果：

$$\begin{cases} \frac{\partial\ f}{\partial\ w_0} = \frac{\mathrm{d}\ s}{\mathrm{d}\ g} * \frac{\partial\ g}{\partial\ w_0} = -0.1966, \\ \frac{\partial\ f}{\partial\ w_1} = \frac{\mathrm{d}\ s}{\mathrm{d}\ g} * \frac{\partial\ g}{\partial\ w_1} = -0.3932, \\ \frac{\partial\ f}{\partial\ w_2} = \frac{\mathrm{d}\ s}{\mathrm{d}\ g} * \frac{\partial\ g}{\partial\ w_2} = 0.1966 \end{cases} \tag{0.9}$$

Problem 2: Training a two-layer neural network using Numpy (70 points)

Assuming you have a tiny dataset which has 8 inputs, 4 classes and 500 samples. Please design a two-layer neural network as the classifier. Both forward (inference) and backward (training) propagation are required. The first 400 samples are for training, and the last 100 samples are for test. The dataset is available via: https://cihlab.github.io/course/dataset.txt. The activation function is ReLU in the case.

The following table is an example interpretation of the dataset file. (The first two lines of the file is illustrated.)

x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	x_8	Class Label
0.4812	0.7790	0.8904	0.7361	0.9552	0.2119	0.7992	0.2409	4
0.4472	0.5985	0.7859	0.5035	0.6912	0.4038	0.0787	0.2301	1

Please submit you code and a brief report with the loss function definition, the final accuracy results, the neuron number in the hidden layers, etc. Also include your strategy for batch size and learning rate. (Hint: It is encouraged to use python and numpy (https://www.numpy.org/). You can refer to the slides 34 in the lecture 7 notes. The problem does not encourage you to use Tensorflow/caffe/pytorch, but if you have no idea about numpy, you can also using these frameworks.)

(Solution)

代码参见附件中 main.py 文件所示，为我针对该 problem 中所提供的 dataset.txt 数据集进行训练和测试的神经网络代码。运行该代码所需的环境需要至少装有 python3.5 及以上，而且需要 numpy 和 matplotlib 库，前者用于搭建神经网络进行前向传播及反向传播的运算，后者用于绘制训练结果图片。

下文中将具体介绍整个网络结构及所涉及的超参数：

- 该网络第一层为 8 * 128 的全连接层, 激活函数按照题目要求为 ReLU。
- 该网络第一层为 128 * 4 的全连接层, 激活函数为 softmax。
- 如（0.10）所示为 softmax 函数的表达公式。Softmax 函数实际上是有限项离散概率分布的梯度对数归一化。因此，Softmax 函数在包括多项逻辑回归，多项线性判别分析，朴素贝叶斯分类器和人工神经网络等的多种基于概率的多分类问题方法中都有着广泛应用。在本题中最后 4 个神经元输出经过 softmax 函数后的最大值所对应的神经元标签即为本神经网络对该数据集输入样本的预测标签。

$$softmax(x)_i = \frac{exp(x_i)}{\sum_j exp(x_j))} \tag{0.10}$$

  本代码 main.py 中 $def\ softmax(x)$: 为进行 softmax 计算的子函数

- 鉴于在本数据集中仅有 4 个分类预测标签，使用 Cross-Entropy（交叉熵）作为损失函数。

$$L = \frac{1}{N}\sum_i L_i = \frac{1}{N}\sum_i -(y\log(p) + (1-y)\log(1-p)) \tag{0.11}$$

$$L = \frac{1}{N}\sum_i L_i = \frac{1}{N}\sum_i -\sum_{c=1}^{M} y_{i,c}\log(p_{i,c}) \tag{0.12}$$

  (0.10) 是对于二分类情况下交叉熵损失函数表达式，(0.11) 为多分类情况下交叉熵损失函数表达式即符合本题中的要求。该函数是凸函数，求导时能够得到全局最优值。

  这其中涉及的参数主要有三个：M 为分类数量，即本题中为 4；$y_{i,c}$ 指示变量（0 或 1），如果该类别和样本 i 的类别相同就是 1，否则是 0；$p_{i,c}$ 对于观测样本 i 属于类别 c 的预测概率。

  需要注意的是，我们采用 Cross Entropy 作为损失函数的原因除了可以很好的衡量模型效果，还有一个就是它与 softmax 具有较好的结合性，非常适合求导运算，这会给反向传播减轻计算负担。具体计算我们将在后文中详细展示。

- 附件 main.py 代码中 $def\ get\_dataset(file\_path)$: 为数据集预处理函数，将数据集中所包含的 500 个采样数据随机且每类均匀分成 400：100，分别对应训练集和测试集，防止出现数据集污染现象。由于数据集不够，为防止出现欠拟合并没有单独列出验证集而是取训练集中 100 个数据作为验证集。

- Batch Size 为 400，即包含了整个训练集。
- learning_rate：在附件 main.py 代码中提供了 $def\ lr\_decay(init\_lr, epoch, max\_epoch)$: 子函数来进行训练过程中的学习率调整。本子函数提供了多种选择：1: 学习率在训练过程中按照初始赋值不变；2: 学习率在训练过程中随着 epoch 增长按照一定规律下降，具体变化规律包括线性变化，指数变化，cosine 变化等具体见代码。
- 如图 1 所示，在初始赋值学习率为 0.01，隐藏层神经元数量为 128，采用 softmax 作为分类预测函数结合交叉熵损失函数的训练过程中，在 200000epochs 次数下，训练集和测试集准确率的变化趋势。附件中 main.py 文件代码中第 91 行开始为借助 matplolib 库来完成该绘图。

  最终训练集的准确率达 100%，测试集准确率为 68%，此时交叉熵损失函数 Loss 的值为 0.7991。也就是发生了一定程度的过拟合，可以通过采用 Batch Normalization 和 L1 正则化或者 dropout 进行一定程度对神经元抛弃来完成进一步训练：

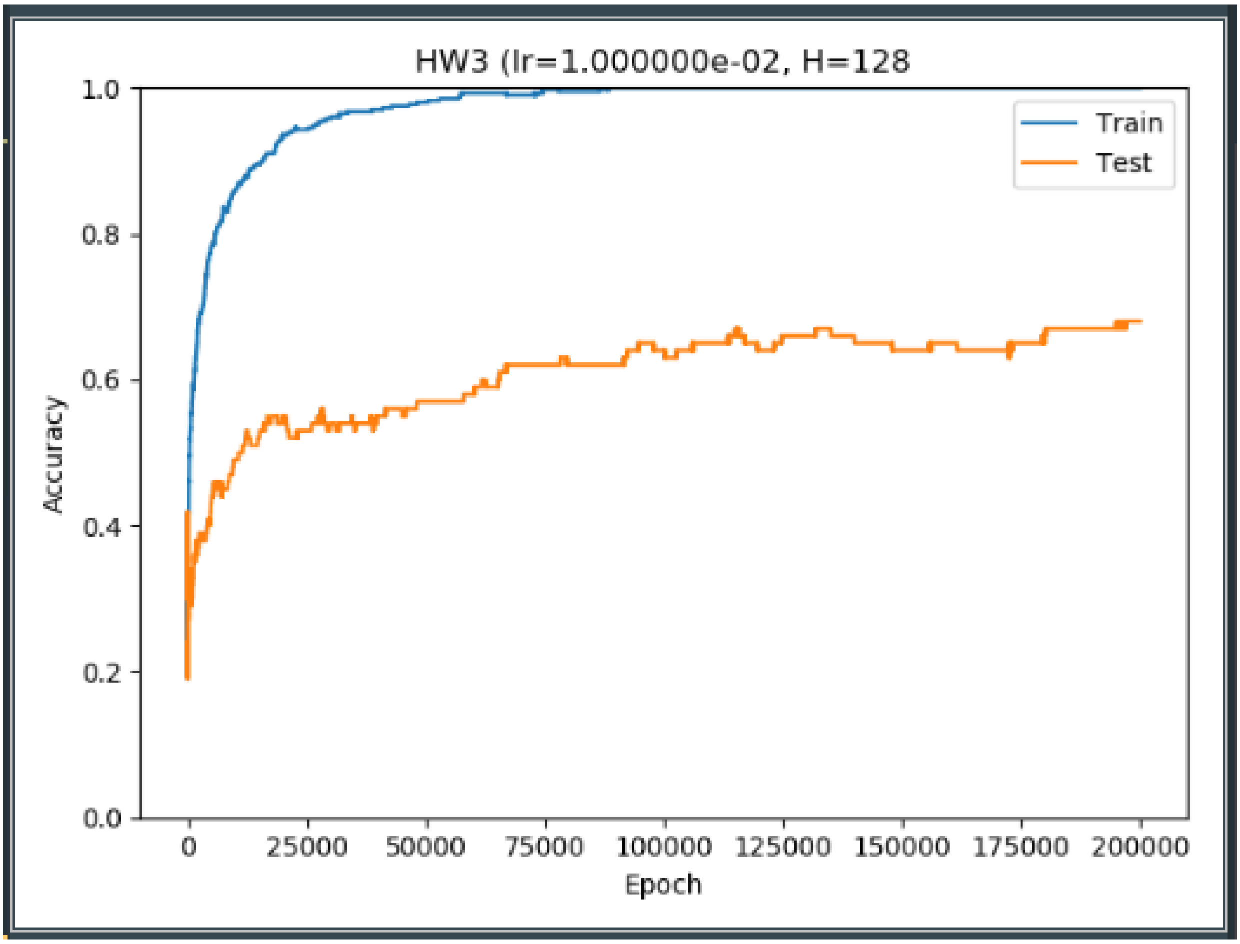


Figure 1: 训练过程中准确率变化趋势

除此之外，下文中将具体介绍代码中一些需要说明的 tricks：

1、如公式（0.10）所示，Softmax 函数中存在指数项，在代码实现环节中容易发生溢出。因此在代码 main.py 中 $def\ softmax(x)$: 子函数里，我们考虑在在所有的指数项上都除以一个适宜的常数 $C = exp(Max(x))$，在不会对运算结果产生变化的同时，避免发生溢出现象，即：

$$softmax(x)_i = \frac{exp(x_i - Max(x))}{\sum_j exp(x_j - Max(x))} \tag{0.13}$$

2、根据公式（0.10），Softmax 的导数如公式（0.14）所示：

$$\frac{\mathrm{d}\ p_i}{\mathrm{d}\ a_i} = \begin{cases} p_i * (1 - p_j), & i = j \\ -p_j * p_i, & i \neq j \end{cases} \tag{0.14}$$

而根据公式 (0.12),Cross-Entropy 的导数公式如（0.15）所示：

$$\frac{\mathrm{d}\ L}{\mathrm{d}\ c_i} = -\sum y_k \frac{1}{p_k}\ *\ \frac{\mathrm{d}\ p_k}{c_i} \tag{0.15}$$

进一步将公式（0.14）与（0.15）进行结合，可有公式（0.16）：

$$\frac{\mathrm{d}\ L}{\mathrm{d}\ c_i} = -\sum y_i(1-p_i)\ -\ \sum_{k\neq i} y_k \frac{1}{p_k}(-p_k\ *\ p_i) =\ p_i(y_i + \sum_{k\neq i} y_k) - y_i \tag{0.16}$$

由于一般 y 的标签使用独热码编码，因此可以直接 $p_i - y_i$ 作为 L 对 c_i 的导数。但在本题中，数据集的表示是 1-indexed 而非 0-indexed。因此，读入数据集后也就是附件 main.py 代码中 $def\ get\_dataset(file\_path):$ 数据集预处理函数应当先修正标签值。