分工表（0.5%）

組員	分工
B04901040 電機三 林哲賢	HW1-2 Observe gradient norm during training, What happens when gradient is almost zero HW1-3 Can the network fit random variables,
B04901117 電機三 毛弘仁	整理報告、協調分工 HW1-1 Train on Actual Tasks HW1-2 Visualize error surface HW1-3 Flatness v.s. Generalization
B04901118 電機三 王克安	HW1-1 Simulate a Function HW1-2 Visualize the optimization process HW1-3 Number of parameters v.s. Generalization

HW1-1: Deep v.s. Shallow

Simulate a Function (王)

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

這題我們使用兩個函數來做實驗：

函數一：

$$\frac{sin\pi x}{\pi x} \times \tanh x$$

函數二：

$$\frac{sin\pi x}{\pi x} \times |x| \times (11cosx - 6\cos\left(\frac{11}{6}\right)x)$$

使用的模型有以下四種fully connected的架構：

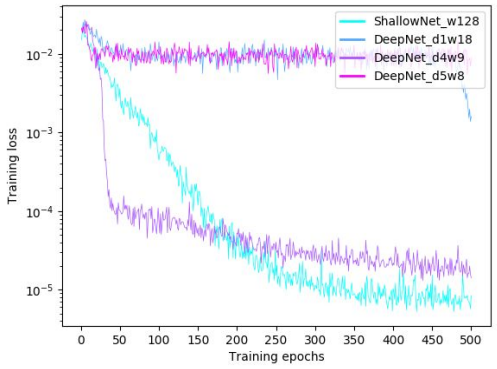
```
<bound method Module.parameters of ShallowNet(
  (input): Linear(in_features=1, out_features=128)
  (output): Linear(in_features=128, out_features=1)
)>
Trainable parameters: 385
```

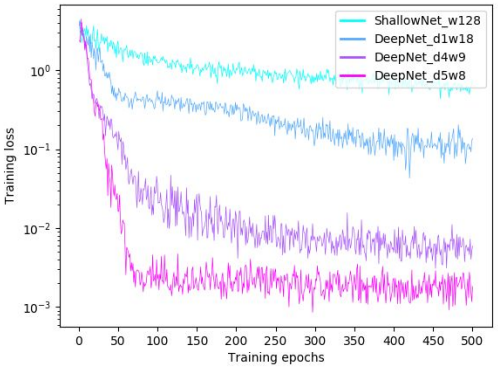
```
  (input): Linear(in_features=1, out_features=18)
  (linear): ModuleList(
    (0): Linear(in_features=18, out_features=18)
  )
  (output): Linear(in_features=18, out_features=1)
)>
Trainable parameters: 397
```

```
  (input): Linear(in_features=1, out_features=9)
  (linear): ModuleList(
    (0): Linear(in_features=9, out_features=9)
    (1): Linear(in_features=9, out_features=9)
    (2): Linear(in_features=9, out_features=9)
    (3): Linear(in_features=9, out_features=9)
  )
  (output): Linear(in_features=9, out_features=1)
)>
Trainable parameters: 388
```

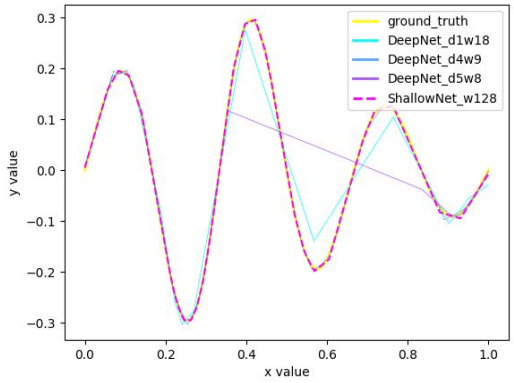
```
  (input): Linear(in_features=1, out_features=8)
  (linear): ModuleList(
    (0): Linear(in_features=8, out_features=8)
    (1): Linear(in_features=8, out_features=8)
    (2): Linear(in_features=8, out_features=8)
    (3): Linear(in_features=8, out_features=8)
    (4): Linear(in_features=8, out_features=8)
  )
  (output): Linear(in_features=8, out_features=1)
)>
Trainable parameters: 385
```

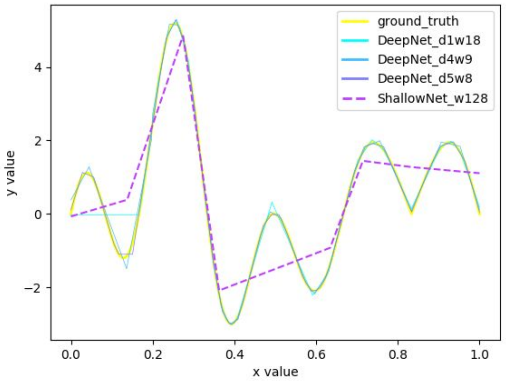
In one chart, plot the training loss of all models. (0.5%)





In one graph, plot the predicted function curve of all models and the ground-truth function curve. (0.5%)





Comment on your results. (1%)

在**第一個函數中shallownet竟然是準確率最高的一個model**，而其他model的準確率似乎不受到depth的影響，我們**推測是因為這個函數太過簡單**，如同老師上課所提到的，函數要超過一定的複雜度才看得出來deep跟shallow的差別。在第一個函數這個case當中可能是因為函數不夠複雜，所以model的準確度**受到training epochs跟random initialize的影響較大**，而跟本身架構比較沒有關係。於是我們嘗試使用第二個比較複雜的函數。

從**第二個函數**的實驗結果可以**明顯觀察到deepnet比起shallownet不論是在loss或是reconstruction上都有明顯的優勢**，而且隨著model越深其loss跟inference的結果都是隨之變好的。shallownet在這個函數上完全沒辦法預測原本的函數，而deepnet則是隨著深度增加有著更好的表現，驗證了**deepnet在一定複雜度以上的函數是會有比較好的結果**。

Use more than two models in all previous questions. (bonus 0.25%)

以上兩個function都有用4個model跑過了。

Use more than one function. (bonus 0.25%)

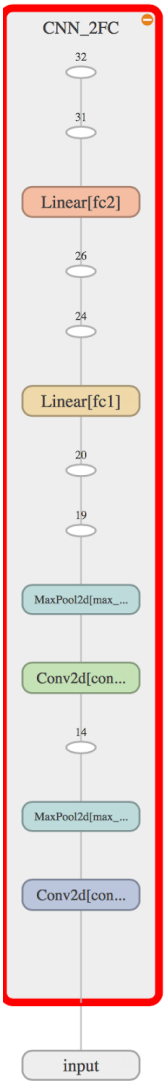
有使用兩個function做驗證。

Train on Actual Tasks(毛)

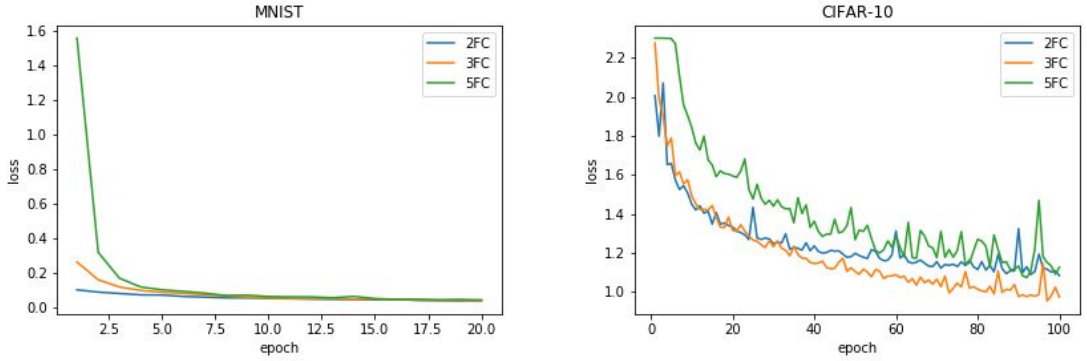
Describe the models you use and the task you chose (0.5%).

這次我們跑了兩個 task，每個 task 各有三個 model：
1. 用 CNN 跑 MNIST，三個 model 皆有大約 21,840 個 parameters
2. 用 CNN 跑 CIFAR-10，三個 model 皆有大約 31,340 個 parameters

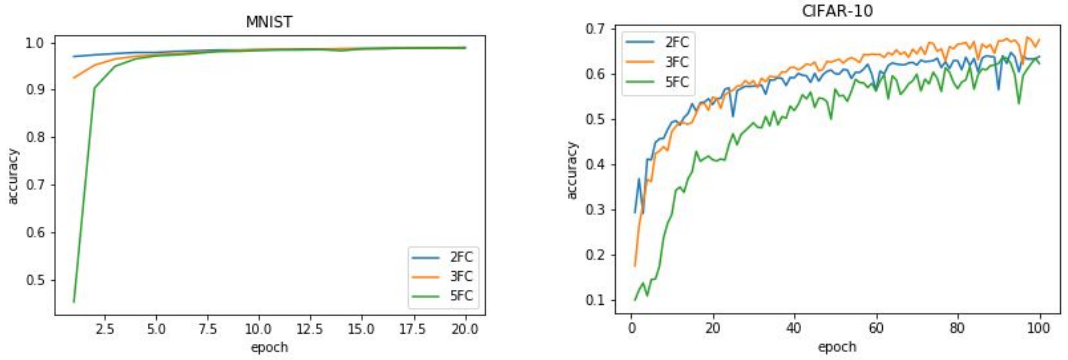
我們兩個 task 都使用右圖的 model architecture，三個 model 則分別選擇 2, 3, 5 層的 fully-connected layer。



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



In one chart, plot the training accuracy. (0.5%)



Comment on your results. (1%)

雖然題目只說要看 training loss 和 accuracy，但我們在 train 的時候其實也有看 test loss 和 accuracy，並且沒有觀察到 overfit（training loss 下降但 test loss 增加）的情形發生。

由圖表發現，**越深的神經網路，converge 所需要花的 epoch 數比較多**。這個現象又在**資料較複雜的 dataset**（相同model architecture 之下，CIFAR-10 的 loss 一直比 MNIST 高）**更加明顯**。

我們也探討**相同 parameter 數量下，更深的 feedforward network 表現是否比較好**。在 MNIST 上，deep 和 shallow 表現差不多，不過這有可能是因為 MNIST 本身比較簡單，shallow network 不需要 train 出太複雜的 function 就可以表現不錯，deep feedforward network 沒辦法「拉開差距」。在 CIFAR-10 上，3 層 fully-connected layer 比 2 層表現好，但是 5 層又比 2 層差，因此我們**不確定這個 model 的 feedforward network 是不是越 deep 越好**。老師上課曾講過，越前面的 layer 遇到 noise，越容易使 performance 降低，**或許越深的網路 vanishing gradient 問題越嚴重，使前面 layer 無法被順利 train 好**。探討各 layer 的 gradient 大小，以及嘗試使用 layer pre-training，是未來可以繼續研究的方向。另外，探討 convolution layer 的深度是否影響 performance，也是可以做的實驗。

其實越 deep 就越好，應該不是一個鐵則，不然大家只要瘋狂把 model 做深就行了。2014 年的 **NIPS，就有一篇 paper** 在 CIFAR-10 上面，用 shallow model 去學 deep model 的 output，達到差不多的 performance。期待這學期的 MLDS，可以繼續探索 neural network 的各種神秘面目！

Use more than two models in all previous questions. (bonus 0.25%)

以上兩個function都有用 3 個 model 跑過了。

Train on more than one task. (bonus 0.25%)

使用了 MNIST 及 CIFAR-10 這兩個 task。

HW1-2: Optimization

Visualize the optimization process(王)

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

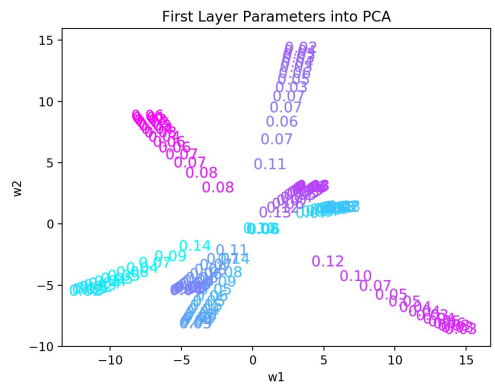
在這題中我們使用的dataset是MNIST，model架構是DNN，詳細資訊如圖所示。optimizer是adam，lr=0.0003，使用的降維方法是 PCA。

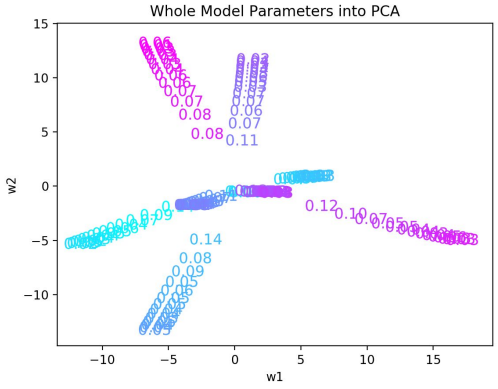
Training過程中我們總共train了8次，每次train 42個epoch，其中每三次記錄一次 model weight跟training loss。

```
(input): Linear(in_features=784, out_features=64)
(layers): ModuleList(
)
(hidden): Linear(in_features=64, out_features=16)
(output): Linear(in_features=16, out_features=10)
```

<-- model architecture

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





Comment on your result. (1%)

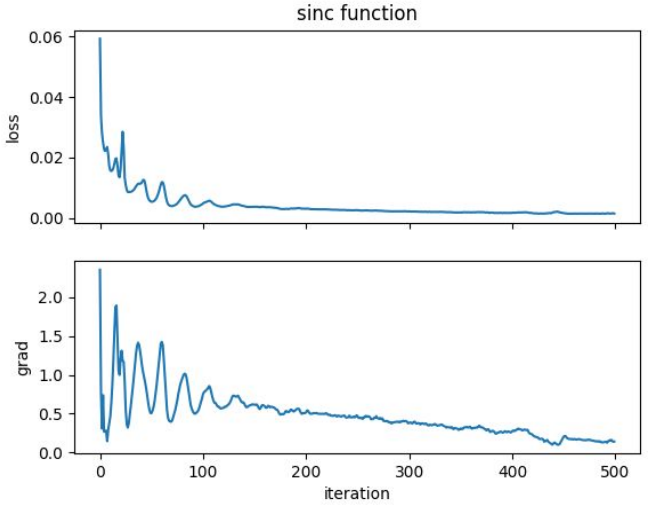
上圖中每一個顏色代表一次 training event，數字代表該 epoch 的 loss。**不同的 training event 會 random initialize 在不一樣的初始點，經過 gradient descent 之後會往不同的方向走**，所以每個 training event 的參數都不一樣，導致經過 PCA 降維之後在二維平面上的分佈會不一樣。

從圖中可以觀察到在 loss 比較大（前幾個 epoch）的時候數字跟數字之間的距離相對比較遠。這代表在 **training 初期的 gradient 是比較大的，導致 model update parameter 的速度比較快**，而到了後期training loss開始下降以後model更新參數的速度也開始下降，代表gradient開始變小，可能是 loss 開始走到 saddle point 或是 minima。

另外我們可以觀察到**兩張圖的參數分佈十分相近**，這意味著整個model中**重要的參數都集中在第一層當中**，這跟老師上課提到的現象吻合。

Observe gradient norm during training.（林）

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



Comment on your result. (1%)

我使用了3層各128個neuron來simulate sinc function(sinx/x)，可以看出來 **gradient在前期的震盪非常大**，很有可能就是老師上課所說的當gradient下降時**到了一個saddle point**，使得gradient norm到了一個低點，而當**逃出了這個saddle point後gradient norm會迅速上升**，所以會造成gradient norm一上一下的震盪，而在逐漸收斂的過程中線也是一直在做微小的震盪而非像loss一樣平緩的下降。

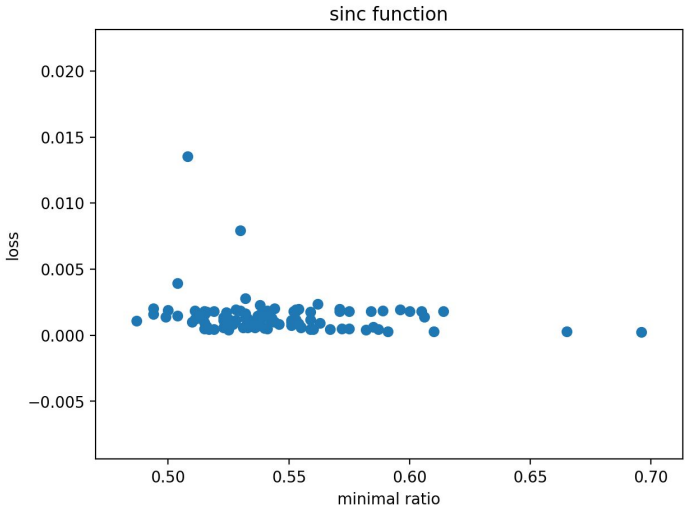
What happens when gradient is almost zero?（林）

State how you get the weight which has zero gradient norm, and how you define the minimal ratio. (2%)

1. 和1-2-2相同，我用了三層MLP來simulate sinc functon，而我使用的方法是先用MSE來算loss，然後利用這個loss來算出gradient，最後把算出來的gradient norm取代原本的loss再做backpropagation，這樣的做法讓我從minimize MSE變成minimize gradient norm，可以迅速的走到gradient norm趨近於0的點並得到model 的weight，這裡**有一個小技巧就是optimizer要選擇Adadelta會更快的收斂到gradient norm趨近0的點**。

2. 因為**pytorch計算hessien matrix會有很多的困難**，因此我是**在終點random sample 1000個點**，sample的方式是**把每一個weight加一個-0.0001~0.0001的值**，最後我把minimal ratio定成 sample出來的network去算出MSE比原本的大的比率。

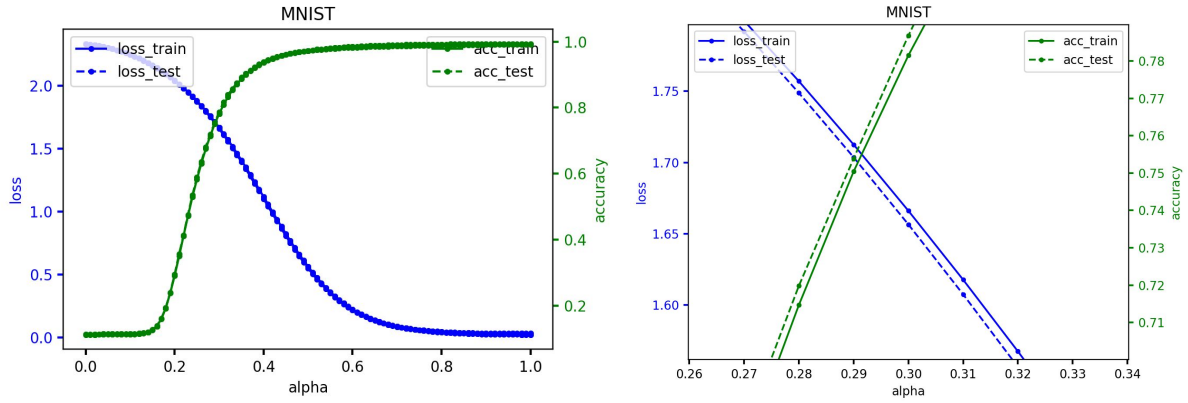
Train the model for 100 times. Plot the figure of minimal ratio to the loss. (2%)



Comment your result. (1%)

我去做了一下迴歸分析，發現**迴歸出來是一條斜率小於0的線**，雖然這是用sample而非去分析hessien matrix的eigenvalue，但還是可以**大概印證老師上課說的minimum ratio越高會越像是一個local minimum，此時 loss 也有可能會比較低**。

Bonus (1%) Use any method to visualize the error surface. Concretely describe your method and comment your result. （毛）



我們使用 **m1 * (1-alpha) + m2 * alpha 的 parameter 內插方式**來看 error surface，其中 m1 是剛 initialize 的 model（random parameters）、m2 是 train 好的 model。雖然助教的圖只有畫 **loss**，但我們決定也來看看 **accuracy。**

由圖可看出，MNIST **大概在 alpha = 0.4 的時候就有超過 0.9 的 accuracy，可見它真的是很好 train**，只要參數不要爛到太誇張，就有不錯的 performance。另外，在 alpha = 0.2~ 0.4 的區間中，accuracy 上升的速度很快，但在 alpha = 0.4~0.5 的區間，雖然 loss 的下降幅度還是差不多，但 accuracy 上升速度減緩許多，可見 **0.2~0.4 的區間，model 可能「學會」大部分的「需知」**。

因為我們 alpha 只取 200 個點（助教的圖取 10,000 個點，是我們的 50 倍），因此得出來的圖還是相當平滑，放大後（如右圖）還是看不到高低起伏。程式 evaluation 需要很多時間，期待下次可以做更精細的測量！

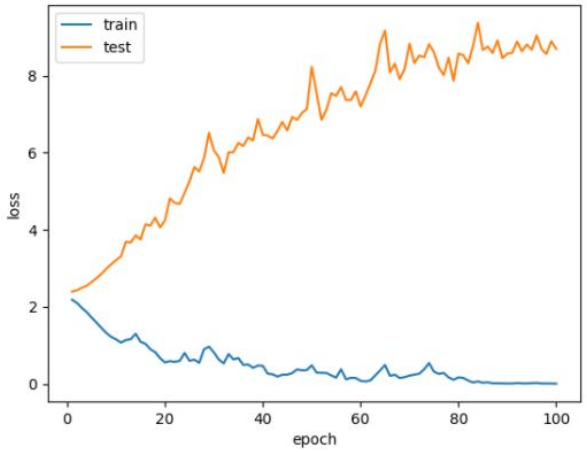
HW1-3: Generalization

Can the network fit random variables? (林)

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

我們使用 MNIST，並把training lable設成random去train(test data的label沒有動)，架構是三層的MLP，每層各256個neuron，loss function使用的是cross entropy，optimizer是adam，learning rate為0.001。

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

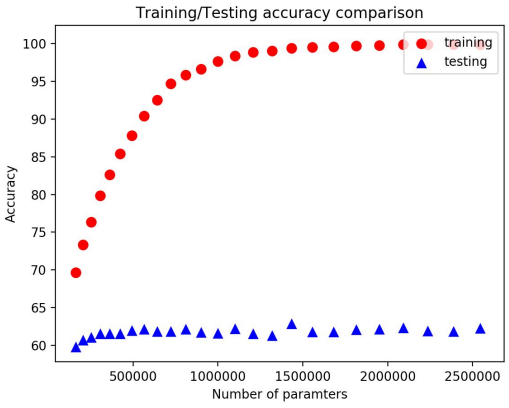


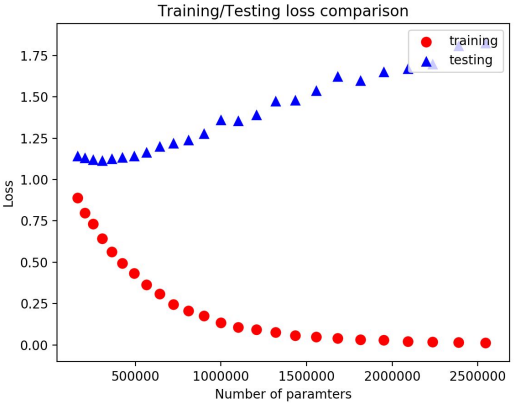
Number of parameters v.s. Generalization（王）

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

這題我們使用cifar10來做實驗，使用的model如圖所示。model的變化是藉由調整CNN的output channel來改變參數量。我們的output channel從128增加到256個，每次增加八個。

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





Comment on your result. (1%)

從實驗結果可以看到training accuracy隨著參數量增加而上升，而testing accuracy則是停在約60左右的地方。這邊可以觀察到的是**testing accuracy並不會因為參數量的增加而變低，顯示出model並沒有想像中的容易overfit**，不會因為參數量的增加而讓performance變更差。

在loss graph中有一樣的觀察結果。**training loss會因為參數量的增加而下降，而testing loss則是大約在1500000個參數的時候開始不再有大幅度的變化。**

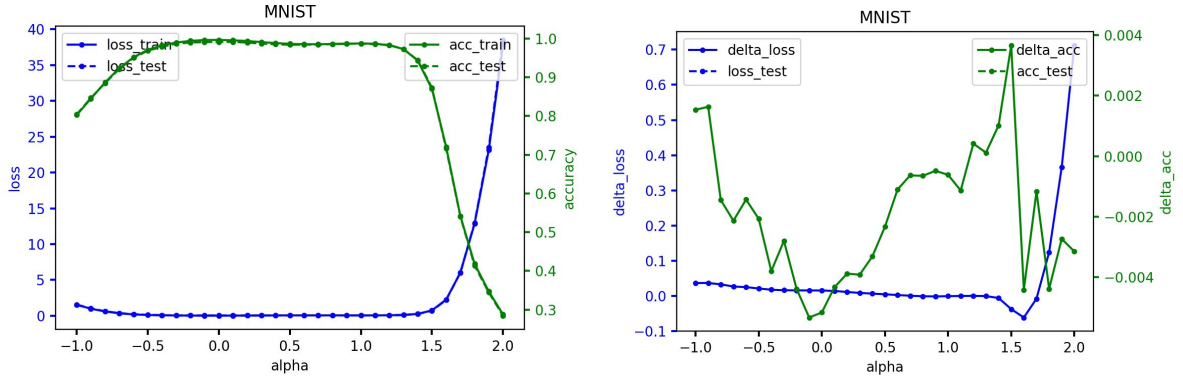
Flatness v.s. Generalization（毛）

Part 1

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

我們選擇的 task 是 MNIST，使用的 model 是第一頁畫出來的 CNN_2FC，m1 使用 batch size=64，m2 使用 batch size=1024，以這兩個 model 的 parameters 去做 interpolation，alpha 的範圍是 -1 到 2，每隔 0.1 取一點量測 loss、accuracy。兩個 model 都 train 了 200 個 epoch，以 MNIST 來講應該綽綽有餘，我們也看到 loss 和 accuracy 都 converge 了。

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



左圖的 y 軸是 loss 和 accuracy，右圖的 y 軸是 (train_loss - test_loss) 和 (train_accuracy - test_accuracy)。

Comment on your result. (1%)

一開始看到左圖，還以為是不是 code 寫錯了，因此跑了右圖，發現只是因為左圖比例尺比較大，看不出 train 和 test 的差異（其實把左圖放大，有些地方還是看得出來有差）。

由圖表可看出：

- **只要是在兩個 model 之間做內插（0 < alpha < 1），loss 仍低、accuracy 仍高，可能象徵 MNIST 是很容易 train 起來的 task，對於 hyperparameter tuning 沒有很苛刻**
- **如果變成外插，就會得到明顯比較爛的 performance**
- **Train-test mismatch 的情況，無論是用內插還是外插，似乎都不會有很大的變化，除了 alpha >= 1.8 的地方看到 delta_loss 變很大之外**

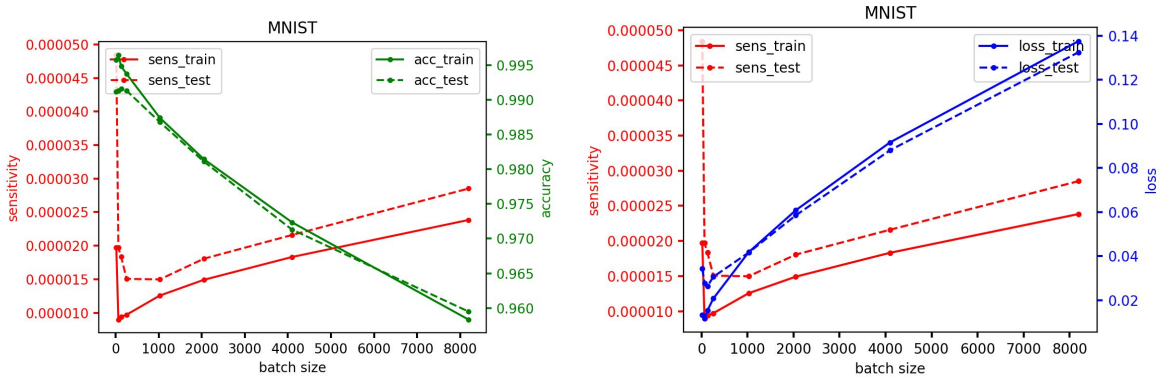
Part 2

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

我們選擇的 task 是 MNIST，使用的 model 是第一頁畫出來的 CNN_2FC，改變的 hyperparameter 是 batch size，分別使用了 16, 64, 128, 256, 1024, 2048, 4096, 8192 這八個

數字去 train。所有 model 都 train 了 200 個 epoch，確保 convergence。

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



Comment your result. (1%)

由實驗結果可發現：

- **Test set 的 sensitivity 比 train set 高**
- **Sensitivity 下降的時候，通常會 accuracy 上升、loss 下降，若 sensitivity 上升，通常結果相反。但是，最高的 sensitivity（發生在 batch size = 16）並沒有對照到最低的 accuracy、最高的 loss，我們不能說 sensitivity 下降很多，accuracy 一定上升很多（但通常至少會上升一點）。**

Bonus : Use other metrics or methods to evaluate a model's ability to generalize and concretely describe it and comment your results.