Lab1 Report

Deep Learning
Backpropagation

姓名：陳科融
學號：314551010

July 3, 2025

1 Introduction

在本次實驗中，不使用 PyTorch 函式庫，而是僅基於 `NumPy` 函式庫，從零開始建構一個完整的神經網路。這個過程涵蓋了前向傳播（Forward Propagation）與反向傳播（Backpropagation）的完整設計與實作。其中，反向傳播演算法要求手動推導模型中每一層參數的偏微分公式，並將其轉化為具體的 Python 程式碼。

本專案設計的模型能夠成功對 `linear` 與 `XOR` 這兩種二維資料集進行有效的二元分類。為了提升實驗的效率與便利性，此專案額外開發了一個基於 `tkinter` 的圖形化使用者介面（GUI）。透過此介面，研究者可以快速調整訓練參數（如學習率、網路結構等），並一鍵啟動實驗，從而方便地進行多組參數的比較與結果分析。

2 Implementation Details

2.1 Network Architecture

本次實驗的核心為一個循序式（Sequential）神經網路模型，其架構允許開發者如堆疊積木般，依序加入不同的網路層。模型的基本建構單元是 `Linear` 層（即全連接層），它負責執行 $y = Wx + b$ 的線性轉換，並與非線性的激勵函數交錯使用，賦予網路學習複雜模式的能力。

此網路設計的關鍵優勢在於其結構的靈活性。使用者可透過命令列參數 `--hidden-dims` 動態設定隱藏層的數量與各層的神經元數目。例如，輸入 `--hidden-dims 8 4` 將生成一個包含兩層隱藏層的網路，第一層有 8 個神經元，第二層則有 4 個。這種設計使得調整模型複雜度以適應不同任務需求變得相當便捷。

模型的輸入層維度固定為 2，用以處理 `linear` 與 `XOR` 資料集的二維特徵。輸出層則由單一神經元構成，並採用 `Sigmoid` 函數作為激勵，將輸出值壓縮至 (0, 1) 區間，使其能代表二元分類的機率。整個網路遵循標準的前向傳遞（Feedforward）流程，並透過反向傳播（Backpropagation）演算法進行訓練與權重更新。

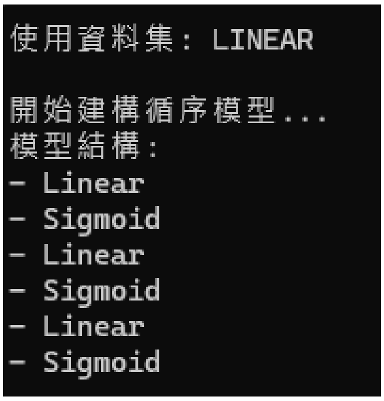


Figure 1: 模型架構圖

2.2 Activation Functions

- **Sigmoid**: 此函數將輸出壓縮至 (0, 1) 之間，適合用於二元分類問題的輸出層。其數學形式為 $\sigma(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$，導數為 $\sigma'(x) = \sigma(x)(1-\sigma(x))$。由於其輸出範圍有限，有助於穩定學習過程，但在深層網路中也可能出現梯度消失的問題。

2.3 Backpropagation

反向傳播是手動實作的，其核心邏輯如下：

1. 從損失函數開始，計算對模型最終輸出的梯度 $\partial L/\partial \hat{y}$。
2. 梯度會透過 `Sequential` 模型的 `backward` 方法，從最後一層反向傳播至第一層。
3. 每一層實作了自己的 `backward` 方法。根據鏈式法則，該方法會接收來自後一層的梯度，計算該層內部參數（如權重 W 與偏置 b）的梯度，並將計算出的梯度傳遞給前一層。
4. 例如，在 `Linear` 層中，權重與偏置的梯度分別為 $\partial L/\partial W = \mathbf{x}^T \cdot (\partial L/\partial y)$ 與 $\partial L/\partial b = \sum(\partial L/\partial y)$。

最終，優化器（Optimizer）會使用這些計算出的梯度來更新模型的全部參數。

```python
class Sigmoid(Layer):
    """
    Sigmoid 活化函數層，輸出範圍在 (0, 1) 之間。
    適用於二元分類輸出層。
    """

    def __init__(self):
        super().__init__()
        self.output = None  # 儲存前向輸出值，供 backward 使用

    def forward(self, inputs):
        """
        前向傳播：應用 sigmoid 函數。
        """
        self.output = 1 / (1 + np.exp(-inputs))
        return self.output

    def backward(self, grad):
        """
        反向傳播：
        使用 sigmoid 的導數：σ'(x) = σ(x)(1 - σ(x))
        再乘上來自下一層的梯度（鏈式法則）
        """
        return grad * (self.output * (1 - self.output))
```

Figure 2: 激勵函數

2.4 Extra Implementation

為了大幅提升模型的靈活性與實驗效率，本專案在滿足基本要求之外，進行了多項額外實作，實現了多種優化器、損失函數與一個完整的圖形化介面（GUI）。

所有可配置的選項皆整合為命令列參數，並透過 GUI 提供便捷的操作方式。下表詳細列出了所有支援的參數及其功能：

此外，如圖 3 所示的 GUI 介面，將所有參數選項視覺化，使用者無需記憶命令列指令，即可透過點選與輸入完成實驗配置，實現了一鍵啟動。

Table 1: 模型支援的命令列參數

參數	預設值	選項	說明
`--dataset`	`xor`	`linear`, `xor`	選擇要使用的資料集。
`--epochs`	`95000`	任意正整數	設定訓練的週期總數。
`--lr`	`0.1`	任意正浮點數	設定學習率。
`--hidden-dims`	`10 10`	空白分隔的正整數	設定每個隱藏層的神經元數量。
`--activation`	`sigmoid`	`sigmoid`, `relu`, `none`	選擇隱藏層的激勵函數 (Bonus)。
`--optimizer`	`sgd`	`sgd`, `gd`, `adam`, `adagrad`	選擇優化器 (Bonus)。
`--loss`	`bce`	`bce`, `mse`, `cross`	選擇損失函數。
`--momentum`	`0.0`	0.0 到 1.0	設定 SGD 優化器的動量值。
`--seed`	`1`	任意正整數	設定隨機數種子，確保實驗可重複。
`--log-interval`	`5000`	任意正整數	每隔多少週期輸出一筆訓練日誌。

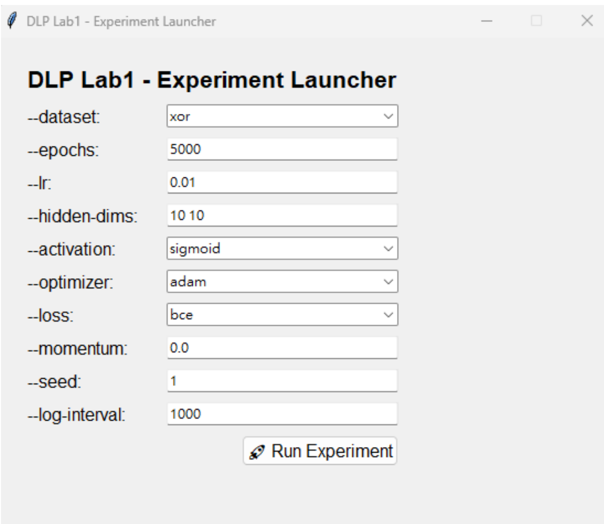


Figure 3: 基於 `tkinter` 的圖形化介面，整合了上表所有參數的設定功能。

3 Experimental Results

3.1 Screenshot and Comparison Figure

此處將原始資料的分佈與模型的預測結果進行視覺化比較。如下圖所示，左側為真實的資料標籤（Ground Truth），右側為模型經過訓練後的預測結果（Prediction）。透過比較兩者，可以清晰地觀察到模型是否成功學習到了資料的分類邊界。

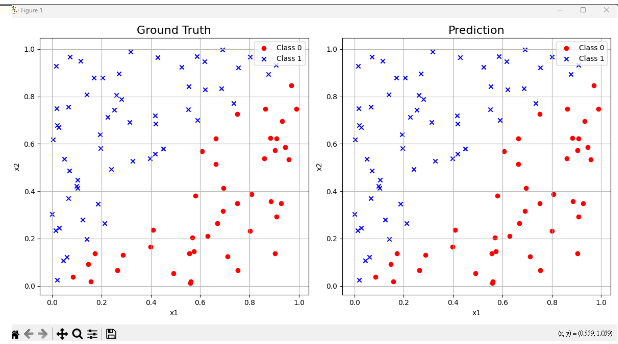
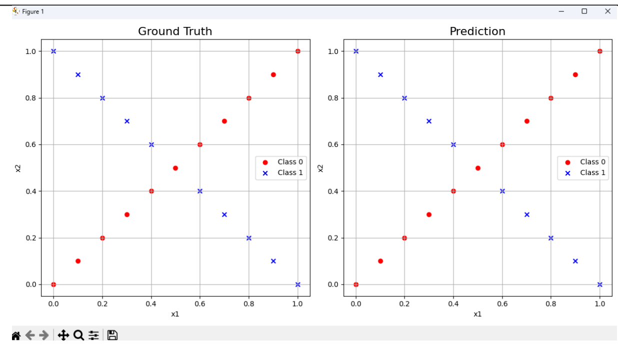
資料名稱	原始資料分佈與模型預測結果
linear	
xor	

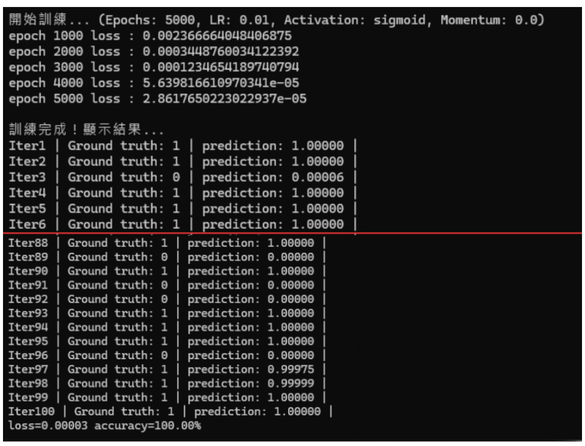
Figure 4: 原始資料分佈與模型預測結果比較圖

3.2 Prediction Accuracy

模型在 `linear` 與 `XOR` 兩個資料集上均達到了 **100%** 的預測準確率。此結果表明，網路架構與手動實作的反向傳播演算法能夠有效地學習並收斂。下表為兩個資料集的終端輸出，顯示了每一筆資料的預測詳情、最終的損失值（loss）與準確率（accuracy）。

Table 2: 模型在測試資料上的預測準確率與損失值

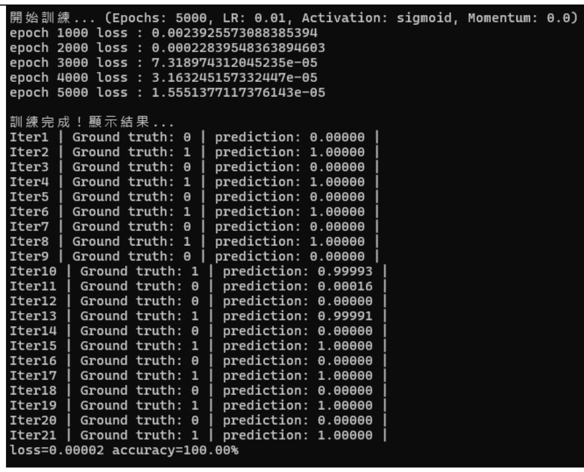
Linear



```
開始訓練... (Epochs: 5000, LR: 0.01, Activation: sigmoid, Momentum: 0.0)
epoch 1000 loss : 0.002366664048406875
epoch 2000 loss : 0.0003448760034122392
epoch 3000 loss : 0.00012346541897407794
epoch 4000 loss : 5.639816610970341e-05
epoch 5000 loss : 2.8617650223022937e-05

訓練完成！顯示結果...
Iter1 | Ground truth: 1 | prediction: 1.00000 |
Iter2 | Ground truth: 1 | prediction: 1.00000 |
Iter3 | Ground truth: 0 | prediction: 0.00006 |
Iter4 | Ground truth: 1 | prediction: 1.00000 |
Iter5 | Ground truth: 1 | prediction: 1.00000 |
Iter6 | Ground truth: 1 | prediction: 1.00000 |
Iter88 | Ground truth: 1 | prediction: 1.00000 |
Iter89 | Ground truth: 0 | prediction: 0.00000 |
Iter90 | Ground truth: 1 | prediction: 1.00000 |
Iter91 | Ground truth: 0 | prediction: 0.00000 |
Iter92 | Ground truth: 0 | prediction: 0.00000 |
Iter93 | Ground truth: 1 | prediction: 1.00000 |
Iter94 | Ground truth: 1 | prediction: 1.00000 |
Iter95 | Ground truth: 1 | prediction: 1.00000 |
Iter96 | Ground truth: 0 | prediction: 0.00000 |
Iter97 | Ground truth: 1 | prediction: 0.99975 |
Iter98 | Ground truth: 1 | prediction: 0.99999 |
Iter99 | Ground truth: 1 | prediction: 1.00000 |
Iter100 | Ground truth: 1 | prediction: 1.00000 |
loss=0.00003 accuracy=100.00%
```

XOR



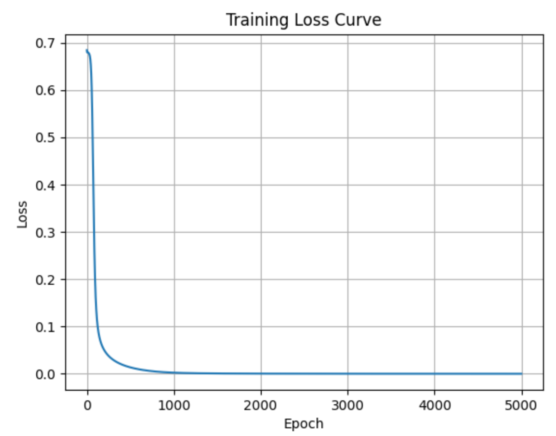
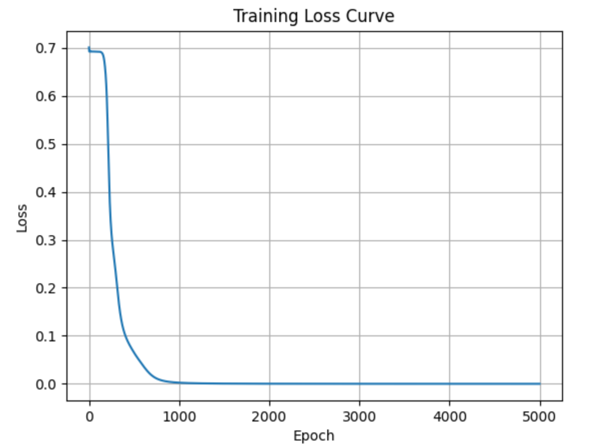
```
開始訓練... (Epochs: 5000, LR: 0.01, Activation: sigmoid, Momentum: 0.0)
epoch 1000 loss : 0.0023925573088385394
epoch 2000 loss : 0.00022839548363894603
epoch 3000 loss : 7.318974312045235e-05
epoch 4000 loss : 3.163245157332447e-05
epoch 5000 loss : 1.5551377117376143e-05

訓練完成！顯示結果...
Iter1 | Ground truth: 0 | prediction: 0.00000 |
Iter2 | Ground truth: 1 | prediction: 1.00000 |
Iter3 | Ground truth: 0 | prediction: 0.00000 |
Iter4 | Ground truth: 1 | prediction: 1.00000 |
Iter5 | Ground truth: 0 | prediction: 0.00000 |
Iter6 | Ground truth: 1 | prediction: 1.00000 |
Iter7 | Ground truth: 0 | prediction: 0.00000 |
Iter8 | Ground truth: 1 | prediction: 1.00000 |
Iter9 | Ground truth: 0 | prediction: 0.00000 |
Iter10 | Ground truth: 1 | prediction: 0.99993 |
Iter11 | Ground truth: 0 | prediction: 0.00016 |
Iter12 | Ground truth: 0 | prediction: 0.00000 |
Iter13 | Ground truth: 1 | prediction: 0.99991 |
Iter14 | Ground truth: 0 | prediction: 0.00000 |
Iter15 | Ground truth: 1 | prediction: 1.00000 |
Iter16 | Ground truth: 0 | prediction: 0.00000 |
Iter17 | Ground truth: 1 | prediction: 1.00000 |
Iter18 | Ground truth: 0 | prediction: 0.00000 |
Iter19 | Ground truth: 1 | prediction: 1.00000 |
Iter20 | Ground truth: 0 | prediction: 0.00000 |
Iter21 | Ground truth: 1 | prediction: 1.00000 |
loss=0.00002 accuracy=100.00%
```

3.3 Learning Curve

學習曲線（Learning Curve）是評估模型訓練過程的重要指標。下圖展示了模型在訓練過程中，損失值（Loss）隨著訓練週期（Epoch）變化的情況。從圖中可以看出，損失值在訓練初期迅速下降，並在後期逐漸收斂至一個較低的值，顯示模型已穩定學習。

Table 3: 訓練過程的損失函數變化圖（Loss-Epoch Curve）

Linear	**XOR**
	

3.4 Additional Results

作為補充，此處詳細列出本次實驗所實作的 SGD with Momentum 以及三種損失函數及其梯度推導過程。

3.4.1 SGD with Momentum

除了標準的 SGD，本專案還實現了帶有動量（Momentum）的 SGD。動量旨在加速 SGD 在相關方向上的收斂並抑制振盪。下圖展示了使用 Momentum (0.9) 搭配 ReLU 激勵函數的實驗結果。

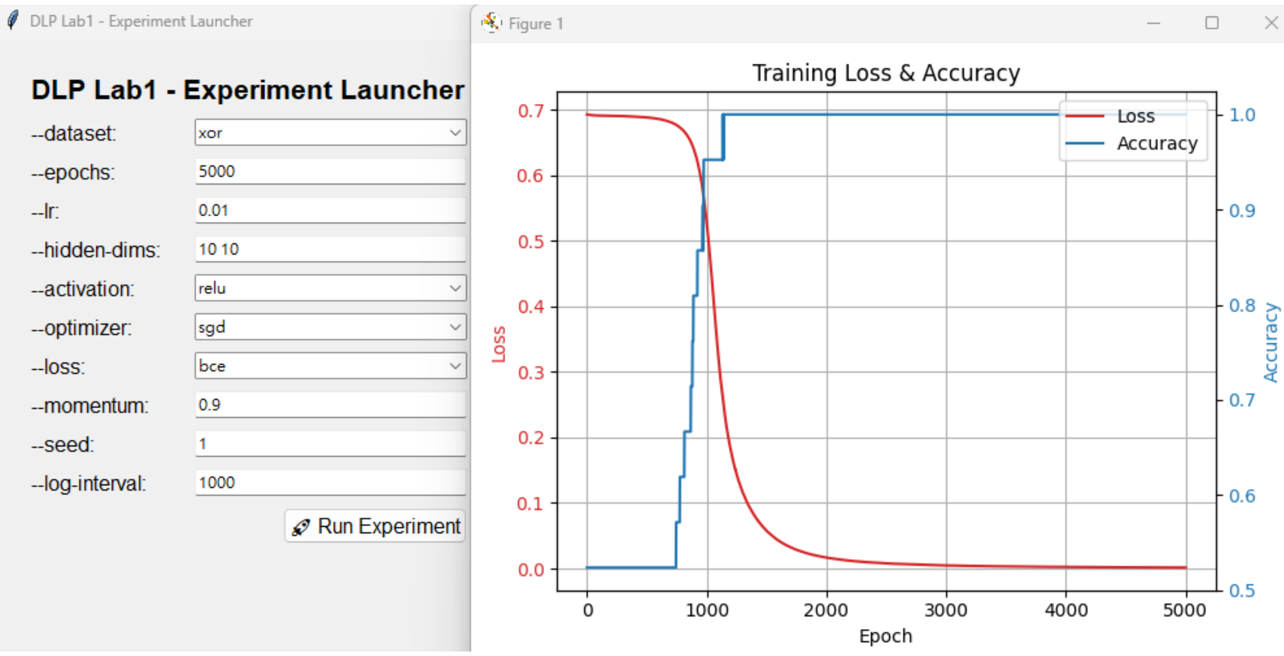


Figure 5: SGD with Momentum (0.9) and ReLU

3.4.2 Mean Squared Error (MSE)

MSE（均方誤差）是用來衡量模型預測值與真實值之間誤差的常見損失函數，常用於回歸 (連續性) 問題。其定義為：

$$\text{MSE} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\hat{y}_i - y_i)^2$$

在反向傳播（Backpropagation）中，需要對每個預測值 $\hat{y}_i$ 計算損失函數的偏微分。首先將 MSE 重寫為方便微分的形式：

$$\frac{\partial}{\partial \hat{y}_i}\left(\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}(\hat{y}_j - y_j)^2\right) = \frac{1}{n}\frac{\partial}{\partial \hat{y}_i}(\hat{y}_i - y_i)^2$$

因為只有第 i 項與 $\hat{y}_i$ 有關，其他項的偏微分為零。進一步計算：

$$\frac{\partial}{\partial \hat{y}_i}(\hat{y}_i - y_i)^2 = 2(\hat{y}_i - y_i)$$

因此，對每個預測值的梯度為：

$$\frac{\partial \text{MSE}}{\partial \hat{y}_i} = \frac{2}{n}(\hat{y}_i - y_i)$$

梯度公式：

$$\boxed{\nabla_{\hat{\mathbf{y}}}\text{MSE} = \frac{2}{n}(\hat{\mathbf{y}} - \mathbf{y})}$$

3.4.3 Cross Entropy Loss

交叉熵（Cross Entropy）常用於多類別分類問題，用以衡量模型預測的機率分布與真實標籤分布之間的差異，假設模型輸出 logits 為 $\mathbf{z} = (z_1, z_2, \ldots, z_C)$，經 softmax 轉換成預測機率：

$$\hat{y}_k = \frac{e^{z_k}}{\sum_{j=1}^{C} e^{z_j}}$$

交叉熵損失函數為：

$$L = -\sum_{c=1}^{C} y_c \log(\hat{y}_c)$$

其中 y_c 為真實標籤。
對 logits z_k 求導數，利用鏈式法則：

$$\frac{\partial L}{\partial z_k} = \sum_{j=1}^{C}\frac{\partial L}{\partial \hat{y}_j}\cdot\frac{\partial \hat{y}_j}{\partial z_k}$$

其中，

$$\frac{\partial L}{\partial \hat{y}_j} = -\frac{y_j}{\hat{y}_j}$$

且 softmax 的偏微分為：

$$\frac{\partial \hat{y}_j}{\partial z_k} = \hat{y}_j(\delta_{jk} - \hat{y}_k)$$

δ_{jk} 為克羅內克 delta，當 $j = k$ 時為 1，否則為 0。
代入整理得：

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial L}{\partial z_k} &= \sum_{j=1}^{C} \left(-\frac{y_j}{\hat{y}_j}\right) \hat{y}_j(\delta_{jk} - \hat{y}_k) \\
&= \sum_{j=1}^{C} -y_j(\delta_{jk} - \hat{y}_k) \\
&= -y_k(1 - \hat{y}_k) - \sum_{j\neq k} y_j(-\hat{y}_k) \\
&= -y_k + y_k\hat{y}_k + \hat{y}_k \sum_{j\neq k} y_j \\
&= -y_k + \hat{y}_k \sum_{j=1}^{C} y_j \\
&= -y_k + \hat{y}_k \cdot 1 \quad (\because \sum_{j=1}^{C} y_j = 1) \\
&= \hat{y}_k - y_k
\end{aligned}
$$

此推導結果是深度學習中 softmax 與交叉熵損失結合後梯度公式：

$$
\boxed{\frac{\partial L}{\partial z_k} = \hat{y}_k - y_k}
$$

3.4.4 Binary Cross Entropy Loss

Binary Cross Entropy（BCE，二元交叉熵）損失函數用於衡量二分類模型預測機率與實際標籤之間的差異，其定義如下：

$$
L = -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} [y_i \log(\hat{y}_i) + (1 - y_i) \log(1 - \hat{y}_i)]
$$

其中：

- n：樣本數
- $y_i \in \{0, 1\}$：第 i 筆樣本的真實標籤
- $\hat{y}_i \in (0, 1)$：模型對第 i 筆樣本預測為正類的機率（通常為 sigmoid 輸出）

在反向傳播時，需對每一筆預測值 $\hat{y}_i$ 計算偏微分。推導如下：

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial L}{\partial \hat{y}_i} &= -\frac{1}{n} \cdot \frac{\partial}{\partial \hat{y}_i} [y_i \log(\hat{y}_i) + (1 - y_i) \log(1 - \hat{y}_i)] \\
&= -\frac{1}{n} \left(\frac{y_i}{\hat{y}_i} - \frac{1 - y_i}{1 - \hat{y}_i}\right)
\end{aligned}
$$

因此，二元交叉熵的梯度公式為：

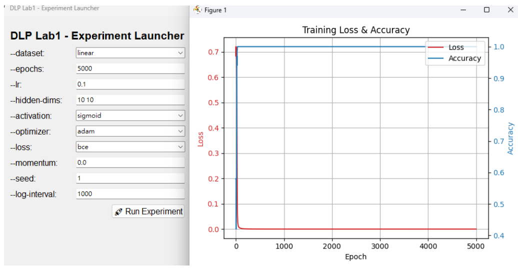
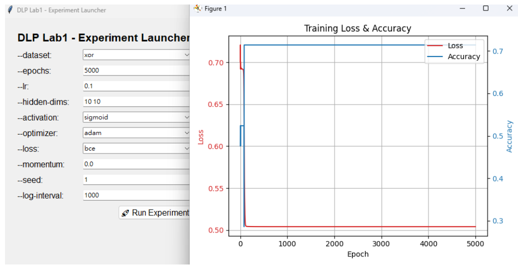
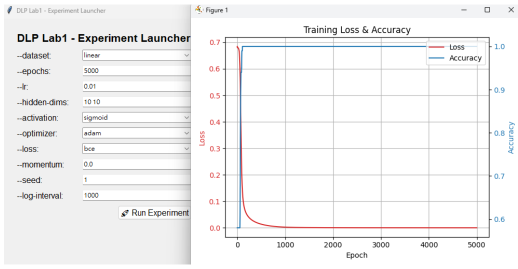
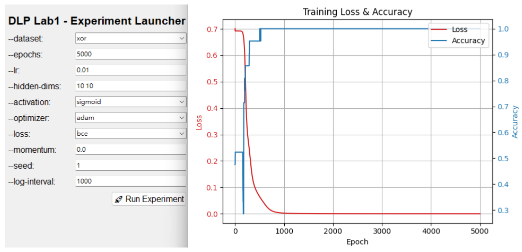
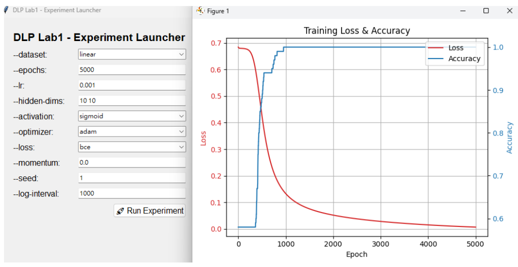
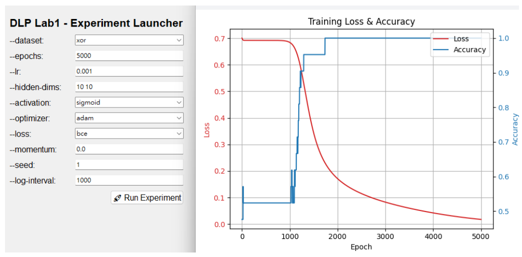
$$
\boxed{\frac{\partial L}{\partial \hat{y}_i} = -\frac{1}{n} \left(\frac{y_i}{\hat{y}_i} - \frac{1 - y_i}{1 - \hat{y}_i}\right)}
$$

4 Discussions

4.1 Learning Rates

本節比較不同學習率（Learning Rate）對模型收斂速度與最終表現的影響。當學習率過高時，模型在訓練初期損失值會劇烈震盪，甚至無法收斂；反之，當學習率過低時，雖然模型能穩定下降，但收斂速度極慢，需要耗費大量訓練時間。實驗證明，選擇一個適中的學習率至關重要，它能在保證收斂穩定性的前提下，最快地找到損失函數的最小值。下表展示了不同學習率設定下的學習曲線：

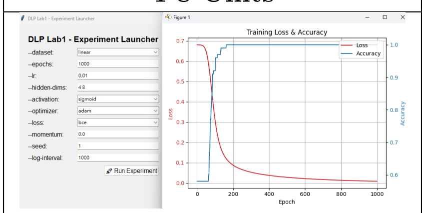
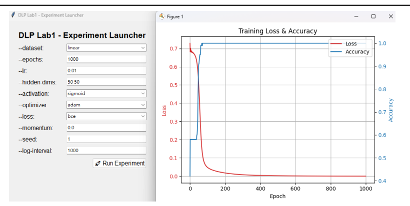
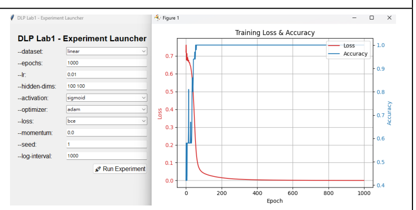
Table 4: 不同學習率下的學習曲線比較

Linear Dataset	XOR Dataset
LR = 0.1	LR = 0.1
	
LR = 0.01	LR = 0.01
	
LR = 0.001	LR = 0.001
	

4.2 Number of Hidden Units

隱藏層神經元的數量直接影響模型的表達能力。在 XOR 問題上，若神經元數量過少（例如每層僅 2 個），模型可能難以學習到非線性的決策邊界，導致準確率下降。而增加神經元數量（例如每層 10 個或更多）能賦予模型更強的擬合能力，使其輕鬆解決 XOR 問題。然而，過多的神經元也可能增加過擬合的風險與不必要的計算成本，因此需要根據問題的複雜度進行權衡。下表展示了不同隱藏層大小設定下的決策邊界：

Table 5: 不同隱藏層單元數下的決策邊界

4-8 Units	50-50 Units	100-100 Units
		

4.3 Without Activation Functions

為了驗證非線性激勵函數的必要性，此處進行了一組移除所有隱藏層激勵函數的對照實驗。在這種設定下，整個神經網路，無論有多少層，都會退化為一個單純的線性模型，因為多個線性轉換的堆疊本質上仍然是線性的。

實驗結果正如預期：

- 對於 `linear` 資料集，由於其本身就是線性可分的，模型依然能達到 100% 的準確率。
- 然而，在 `XOR` 資料集上，模型完全無法學習其非線性模式。如下圖所示，模型的準確率在 50% 左右停滯不前，損失值也無法有效下降，這與隨機猜測的結果無異。

這項實驗有力地證明了激勵函數在賦予神經網路學習複雜、非線性關係能力中的不可或缺性。沒有它，網路就無法解決像 XOR 這樣的基本非線性問題。

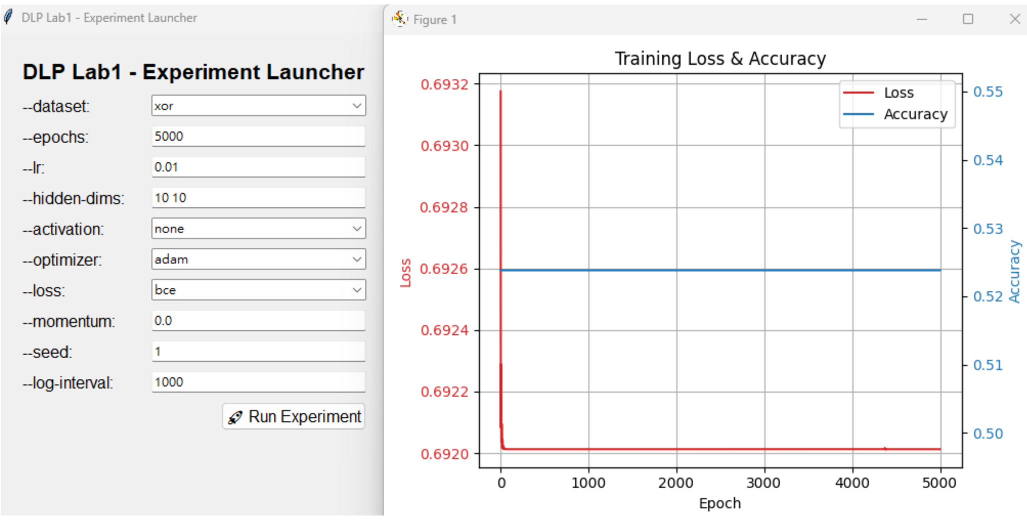


Figure 6: 在 XOR 資料集上移除激勵函數的訓練結果

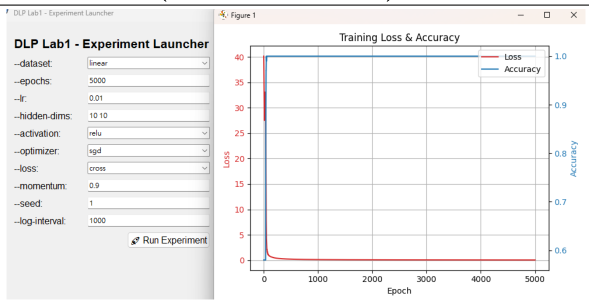
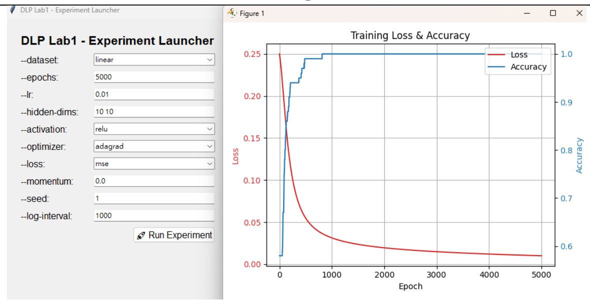
4.4 Extra Implementation Discussions

本次專案中的額外實作，極大地提升了實驗的深度與廣度。所建立的模組化框架，允許自由組合不同的激勵函數、優化器與損失函數，進行更深入的比較分析。

例如，下表展示了兩種不同的組合：

- **ReLU + SGD (Momentum=0.9) + Cross Entropy Loss**: 這個組合在訓練過程中表現出較快的收斂速度，動量的加入有助於模型跳出局部最小值。
- **ReLU + Adagrad + MSE Loss**: Adagrad 作為一種自適應學習率算法，能夠在訓練過程中自動調整學習率，使其在處理不同特徵時更具彈性。

Table 6: 不同優化器、激勵函數與損失函數組合的實驗結果

ReLU + SGD (Momentum=0.9) + Cross Entropy	ReLU + Adagrad + MSE
	

5 Questions

5.1 Purpose of Activation Functions

激勵函數（Activation Function）在神經網路中扮演著至關重要的角色，其主要目的有以下幾點：

- **引入非線性：**這是激勵函數最核心的功能。如果沒有激勵函數，多層神經網路本質上只是一個線性模型，無論網路有多深，都只能學習線性關係。例如，在本次實驗的 XOR 問題中，若移除激勵函數，模型將無法找到非線性的決策邊界。激勵函數的引入，使得網路能夠擬合複雜的非線性模式。
- **控制輸出範圍：**某些激勵函數能將神經元的輸出限制在特定範圍內。例如，Sigmoid 函數會將輸出壓縮到 (0, 1) 之間，使其能被解釋為機率，這在二元分類或機率預測任務中非常有用。

- **影響梯度傳播：**激勵函數的導數直接影響反向傳播中梯度的計算。選擇不同的激勵函數（如 ReLU）可以緩解梯度消失（Vanishing Gradients）問題，從而讓更深層的網路也能被有效訓練。

5.2 Effect of Learning Rate

學習率（Learning Rate）是控制模型權重更新幅度的超參數，其設定對訓練過程有著決定性的影響：

- **學習率過大：**如果學習率設置得太大，權重更新的步長就會過長。在梯度下降過程中，這很可能導致更新步伐「跨過」損失函數的谷底，造成損失值在最小值附近劇烈震盪，甚至可能導致損失值不減反增，模型完全無法收斂。
- **學習率過小：**如果學習率設置得太小，權重更新的步長就會非常微小。這會導致模型收斂速度極其緩慢，需要耗費大量的訓練時間與計算資源。此外，過小的學習率也可能讓模型陷入局部最小值（Local Minima）或鞍點（Saddle Point），難以找到全局最優解。

5.3 Purpose of Weights and Biases

權重（Weights）與偏置（Biases）是神經網路中的核心可學習參數，它們共同決定了模型的功能：

- **權重 (Weights):** 權重定義了神經元之間連接的強度。在一個神經元中，每個輸入特徵都對應一個權重，這個權重衡量了該特徵對於最終輸出的重要性。在訓練過程中，神經網路透過反向傳播演算法，不斷調整權重的值，其本質就是學習如何從輸入數據中提取有用的模式。可以說，權重儲存了模型從資料中學到的「知識」。
- **偏置 (Biases):** 偏置為每個神經元提供了一個可學習的常數項，它與輸入值無關。其主要作用是調整激勵函數的觸發閾值。如果沒有偏置，激勵函數的中心點將永遠固定在原點。偏置的存在，賦予了模型更大的靈活性，允許它將決策邊界向左或向右平移，從而更好地擬合數據。

總結來說，權重負責調整輸入信號的「斜率」，而偏置則負責調整「截距」，兩者共同決定了神經元的輸出。

6 Bonus

6.1 Optimizers

優化器就是不同的梯度下降方法，會根據學習率 (Learning Rate) 的大小來決定模型在訓練時的時間與速度。若 Learning Rate 太小，會花費過多時間在學習，反之，則容易造成 Overfitting。

6.1.1 Gradient Descent(GD)

梯度其實就是函數的斜率，代表函數在某點的變化率。在單變數迴歸中，權重即為斜率；而在多變數迴歸或神經網路中，則需對每個參數分別求偏微分，得到對應的梯度值。

Figure 7: GD Implementation

6.1.2 Stochastic Gradient Descent with Momentum(SGD)

隨機梯度下降（Stochastic Gradient Descent, SGD）是一種常見的優化方法，其目標是最小化損失函數 $J(\theta)$。基本的 SGD 僅依賴當前梯度來更新參數，但若加入「動量（Momentum）」機制，則能提升收斂速度並減少震盪。

動量的核心概念是：保留過去梯度的指向，透過「速度」引導參數向更穩定的方向更新。

其更新公式為：

$$
\begin{aligned}
v_t &= \mu v_{t-1} - \eta \nabla_\theta J(\theta) \\
\theta &= \theta + v_t
\end{aligned}
$$

θ 模型的參數向量。

η 學習率（learning rate）。

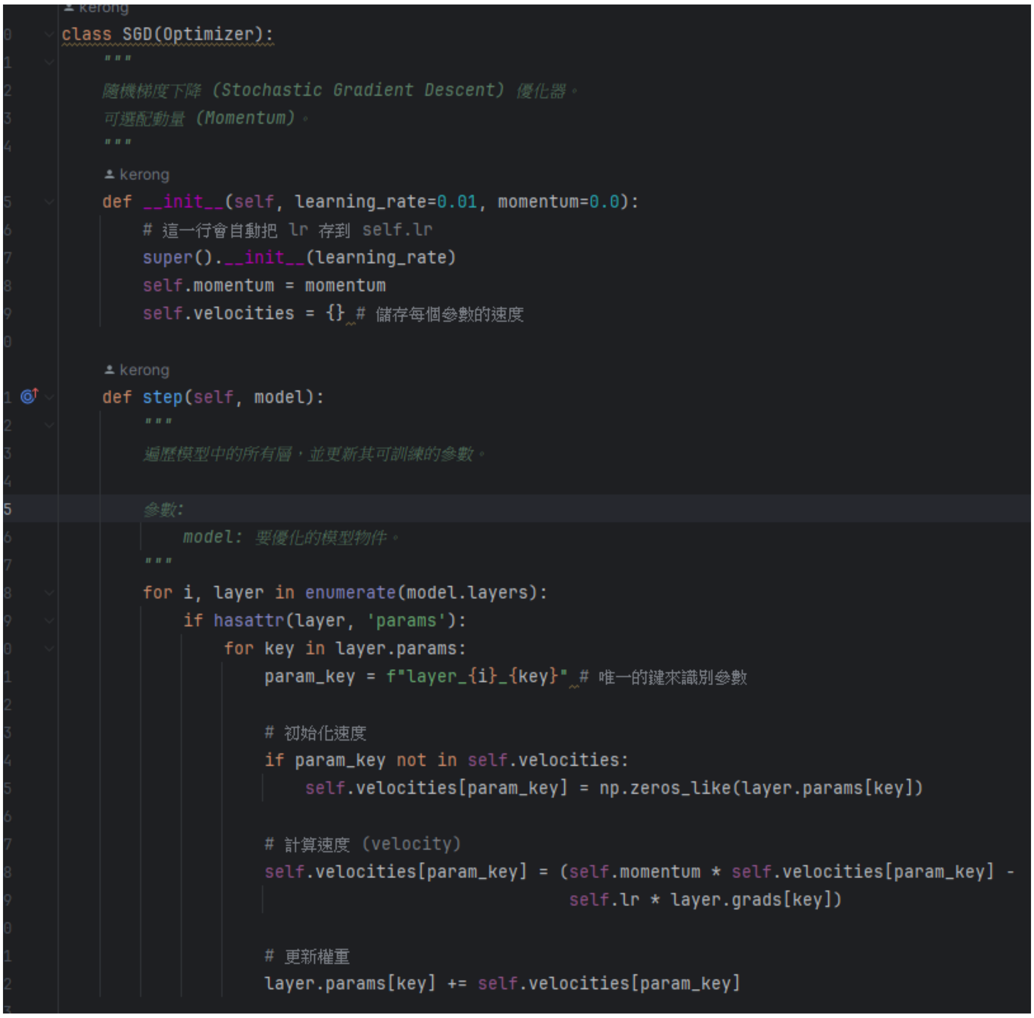
μ 動量係數（momentum coefficient）。

v_t 當前的速度（velocity）。

$\nabla_\theta J(\theta)$ 損失函數對參數的梯度。

第一式會根據當前梯度與過去速度計算新的速度，第二式則將此速度應用於參數更新。

使用動量的 SGD 方法，能有效降低梯度震盪，尤其在深度網路或不平坦的損失曲面上，能加快收斂並提升訓練穩定性。



```python
class SGD(Optimizer):
    """
    隨機梯度下降 (Stochastic Gradient Descent) 優化器。
    可選配動量 (Momentum)。
    """
    def __init__(self, learning_rate=0.01, momentum=0.0):
        # 這一行會自動把 lr 存到 self.lr
        super().__init__(learning_rate)
        self.momentum = momentum
        self.velocities = {} # 儲存每個參數的速度

    def step(self, model):
        """
        遍歷模型中的所有層，並更新其可訓練的參數。

        參數:
            model: 要優化的模型物件。
        """
        for i, layer in enumerate(model.layers):
            if hasattr(layer, 'params'):
                for key in layer.params:
                    param_key = f"layer_{i}_{key}" # 唯一的鍵來識別參數

                    # 初始化速度
                    if param_key not in self.velocities:
                        self.velocities[param_key] = np.zeros_like(layer.params[key])

                    # 計算速度 (velocity)
                    self.velocities[param_key] = (self.momentum * self.velocities[param_key] -
                                                  self.lr * layer.grads[key])

                    # 更新權重
                    layer.params[key] += self.velocities[param_key]
```

Figure 8: SGD with Momentum Implementation

6.1.3 Adaptive Moment Estimation(Adam)

Adam 是一種結合 Momentum（動量）與 RMSProp（均方根自適應學習率）的優化方法，能根據歷史梯度自動調整每個參數的學習率，並透過偏差修正讓初期估計更準確，進而提升訓練穩定性與收斂速度。

Adam 的更新步驟如下：

- 初始化：一階矩估計 $m_0 = 0$、二階矩估計 $v_0 = 0$、時間步長 $t = 0$
- 超參數設定：$\beta_1 = 0.9$、$\beta_2 = 0.999$、$\epsilon = 10^{-8}$

每一步的參數更新公式如下：

$$
\begin{aligned}
t &\leftarrow t + 1 \\
g_t &= \nabla_\theta J(\theta_t) \\
m_t &= \beta_1 \cdot m_{t-1} + (1 - \beta_1) \cdot g_t \\
v_t &= \beta_2 \cdot v_{t-1} + (1 - \beta_2) \cdot g_t^2 \\
\hat{m}_t &= \frac{m_t}{1 - \beta_1^t} \\
\hat{v}_t &= \frac{v_t}{1 - \beta_2^t} \\
\theta_{t+1} &= \theta_t - \eta \cdot \frac{\hat{m}_t}{\sqrt{\hat{v}_t} + \epsilon}
\end{aligned}
$$

```python
Adam 優化器，結合動量與 RMSProp，自動調整學習率。
"""
kerong
def __init__(self, learning_rate=0.001, beta1=0.9, beta2=0.999, epsilon=1e-8):
    # 這一行會自動把 lr 存到 self.lr
    super().__init__(learning_rate)
    self.beta1 = beta1  # 動量衰減率
    self.beta2 = beta2  # 均方衰減率
    self.epsilon = epsilon
    self.m = {}  # 一階矩估計（動量）
    self.v = {}  # 二階矩估計（均方）
    self.t = 0   # 時間步長

kerong
def step(self, model):
    self.t += 1
    for i, layer in enumerate(model.layers):
        if hasattr(layer, 'params'):
            for key in layer.params:
                param_key = f"layer_{i}_{key}"
                grad = layer.grads[key]

                # 初始化 m, v
                if param_key not in self.m:
                    self.m[param_key] = np.zeros_like(grad)
                    self.v[param_key] = np.zeros_like(grad)

                # 更新一階矩估計（動量）
                self.m[param_key] = self.beta1 * self.m[param_key] + (1 - self.beta1) * grad
                # 更新二階矩估計（均方）
                self.v[param_key] = self.beta2 * self.v[param_key] + (1 - self.beta2) * (grad ** 2)

                # 計算偏差修正
                m_hat = self.m[param_key] / (1 - self.beta1 ** self.t)
                v_hat = self.v[param_key] / (1 - self.beta2 ** self.t)

                # 參數更新
                update = self.lr * m_hat / (np.sqrt(v_hat) + self.epsilon)
                layer.params[key] -= update
```

Figure 9: Adam Implementation

6.1.4 Adaptive Gradient Algorithm(Adagrad)

Adagrad 是一種自適應學習率的優化方法。與 SGD 及 Momentum 使用固定學習率不同，Adagrad 會根據每個參數的歷史梯度，自動調整其對應的學習率。該演算法能在訓練過程中約束學習率，依據每個參數的梯度大小進行調整。

核心思想：當梯度在前期較小（例如平坦區域）時，學習率會被放大，加快訓練收斂速度；而當梯度較大（例如陡峭區域）時，學習率會被縮小，避免振盪。

其更新公式如下：

$$
\begin{aligned}
g_t &= \nabla_\theta J(\theta_t) \\
r_t &= r_{t-1} + g_t^2 \\
\theta_{t+1} &= \theta_t - \frac{\eta}{\sqrt{r_t} + \epsilon} \cdot g_t
\end{aligned}
$$

θ 表示模型參數向量。

g_t 是當前梯度 $\nabla_\theta J(\theta_t)$。

r_t 是歷史平方梯度的累積值。

η 是初始學習率（learning rate）。

ϵ 是防止除以零的小常數（通常為 10^{-8}）。

```python
class Adagrad(Optimizer):
    """
    Adaptive Gradient Algorithm
    Adagrad 優化器：自適應學習率，會根據歷史梯度調整每個參數的更新步伐。
    """
    kerong
    def __init__(self, learning_rate=0.01, epsilon=1e-8):
        # 這一行會自動把 lr 存到 self.lr
        super().__init__(learning_rate)
        self.epsilon = epsilon
        self.r = {}  # 儲存每個參數的累積平方梯度

    kerong
    def step(self, model):
        for i, layer in enumerate(model.layers):
            if hasattr(layer, 'params'):
                for key in layer.params:
                    grad = layer.grads[key]
                    param_key = f"layer_{i}_{key}"

                    # 初始化累積梯度平方
                    if param_key not in self.r:
                        self.r[param_key] = np.zeros_like(grad)

                    # 累積平方梯度
                    self.r[param_key] += grad ** 2

                    # 更新參數（學習率會因 r_t 調整）
                    adjusted_lr = self.lr / (np.sqrt(self.r[param_key]) + self.epsilon)
                    layer.params[key] -= adjusted_lr * grad
```

Figure 10: Adagrad Implementation

6.2 Activation Functions

除了 Sigmoid 之外，本專案也實作了 ReLU 作為另一種激勵函數選項。

6.2.1 Rectified Linear Unit (ReLU)

ReLU (Rectified Linear Unit) 是目前深度學習中最受歡迎的激勵函數之一，因其簡單、高效且能有效緩解梯度消失問題。

數學定義：其數學形式非常簡潔：

$$\text{ReLU}(x) = \max(0, x)$$

這意味著，當輸入 x 為正數時，輸出就是 x 本身；當輸入為負數時，輸出為 0。

梯度推導： ReLU 的導數同樣非常簡單，這使得其在反向傳播中的計算十分高效：

$$\frac{d}{dx}\text{ReLU}(x) = \begin{cases} 1 & \text{if } x > 0 \\ 0 & \text{if } x \leq 0 \end{cases}$$

在實作中，當 $x = 0$ 時的梯度可以定義為 0 或 1，通常定義為 0。這種分段線性的特性避免了 Sigmoid 函數在飽和區（輸入值過大或過小）梯度趨近於零的問題，從而讓深層網路的訓練更加穩定。

```python
class ReLU(Layer):
    """
    ReLU (Rectified Linear Unit)：
    若 x > 0 則傳遞 x，否則為 0。
    適合解決梯度消失問題。
    """

    def __init__(self):
        super().__init__()
        self.inputs = None  # 儲存輸入值以備反向使用

    def forward(self, inputs):
        """
        前向傳播：ReLU(x) = max(0, x)
        """
        self.inputs = inputs
        return np.maximum(0, inputs)

    def backward(self, grad):
        """
        反向傳播：
        ReLU 對輸入的導數為：
        - 1 if x > 0
        - 0 if x <= 0
        所以只保留對應 x > 0 的梯度
        """
        grad_copy = grad.copy()
        grad_copy[self.inputs <= 0] = 0
        return grad_copy
```

Figure 11: ReLU Implementation

7 參考資料

- https://github.com/hank891008/Deep-Learning（學習如何將 function 分層結構化）
- https://github.com/KJLdefeated/NYCU_DLP_2024（學習如何撰寫 Overleaf LaTeX 文件）
- https://github.com/shflte/nycu-dlp-2024-summer（學習程式邏輯）
- https://hackmd.io/@ivorchu/rJ3DPsgud（深度學習筆記）
- youtube 機器學習教學影片-李弘毅教授
- https://blog.csdn.net/wzk4869/article(損失函數相關參考資料)
- https://blog.csdn.net/xpy870663266/article(優化器參考資料)
- https://www.geeksforgeeks.org/machine-learning/activation-functions-neural-networks/（激勵函數相關參考資料）
- 使用 AI 工具輔助：
  - ChatGPT GPT-4o（Free Plan）
  - Google AI Gemini 2.5 Pro
  - VS Code 搭配 Copilot（GPT-4o）