教育部产学合作协同育人项目资助
2022年北京交通大学《深度学习》课程

第九讲　循环神经网络II

主讲教师：丛润民

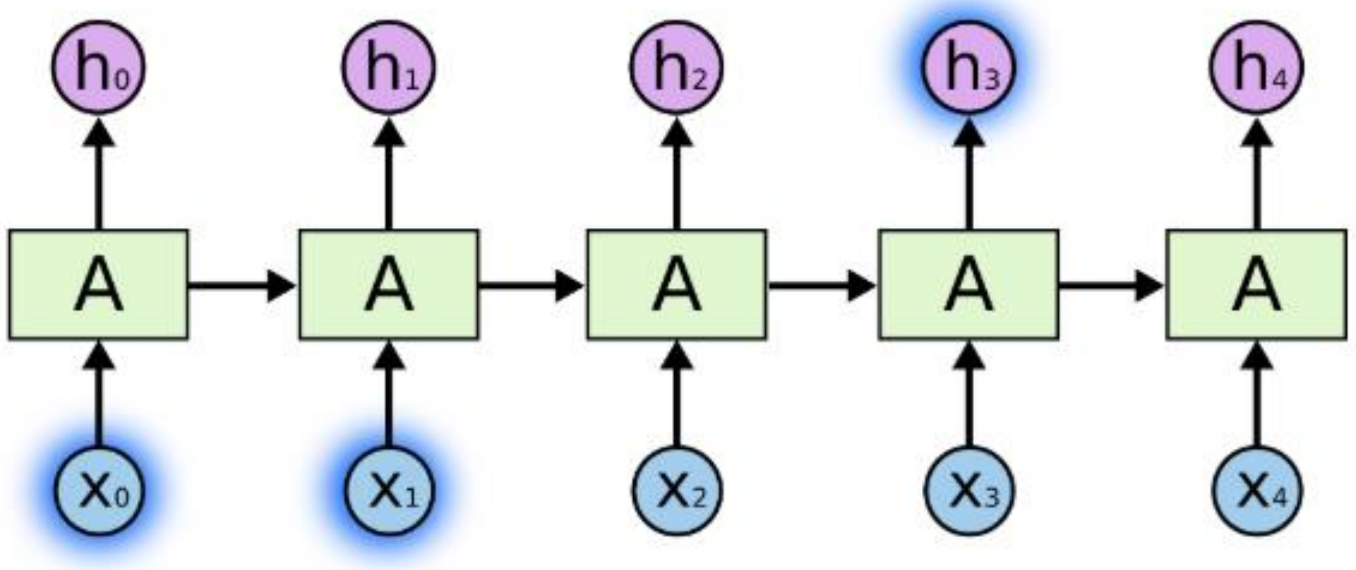
目录

目录

9.1 长程依赖问题

RNN 的长处之一是它可以利用先前的信息到当前的任务上，尤其当相关的信息和预测的词之间的间隔较小时效果明显。

如预测句子“the clouds are in the *sky*”中的最后一个词。

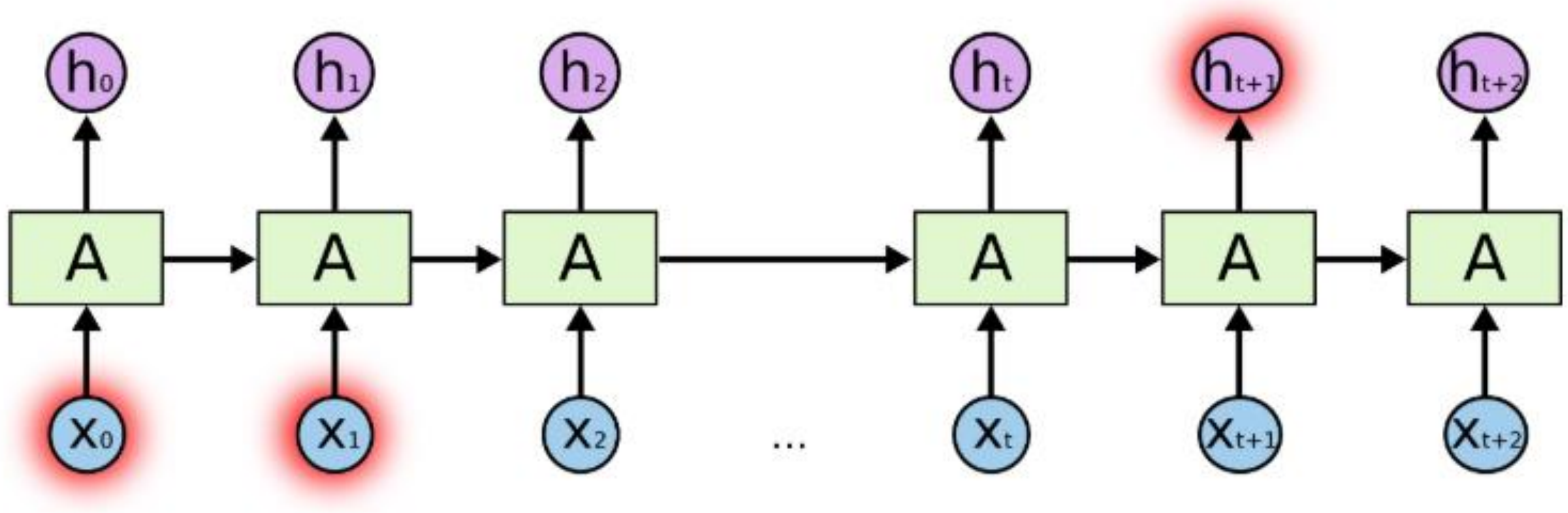


较近的相关信息或位置间隔

9.1 长程依赖问题

然而在间隔不断增大时，RNN 会丧失学习到连接如此远的信息的能力。

如预测句子“I grew up in France... I speak fluent *French*”中最后一个词。



较长的相关信息或位置间隔

9.1 长程依赖问题

为什么在实际应用中，RNN很难处理长距离的依赖?

上一节关于RNN的推导中，误差项沿时间反向传播的公式为:

$$\delta_k^T=\delta_t^T\prod_{i=k}^{t-1}\operatorname{diag}\left[f'\left(\mathbf{net}_i\right)\right]W$$

根据下面的不等式，来获取 δ_k^T 的模的上界（模可以看做对 δ_k^T 中每一项值的大小的度量）：

$$\begin{aligned}\left\|\delta_k^T\right\| &\leqslant \left\|\delta_t^T\right\|\prod_{i=k}^{t-1}\left\|\operatorname{diag}\left[f'(\mathbf{net}_i)\right]\right\|\|W\| \\ &\leqslant \left\|\delta_t^T\right\|(\beta_f\beta_W)^{t-k}\end{aligned}$$

其中，β_f、β_W分别是对角矩阵和矩阵W模的上界。

$$\left\|\delta_k^T\right\| \leqslant \left\|\delta_t^T\right\| \prod_{i=k}^{t-1} \left\|\operatorname{diag}\left[f'(\mathbf{net}_i)\right]\right\| \|W\| \leqslant \left\|\delta_t^T\right\| (\beta_f \beta_W)^{t-k}$$

可以看到，误差项从t时刻传递到k时刻，其值的上界是$\beta_f \beta_W$的指数函数。

当$t-k$很大时(也就是误差传递很多个时刻时)，整个式子的值就会变得极小(当$\beta_f \beta_W$乘积小于1)或者极大(当$\beta_f \beta_W$乘积大于1)，前者是梯度消失，后者是梯度爆炸。

梯度消失或者梯度爆炸会导致梯度为0或NaN，没法继续训练更新参数，也就是RNN的长程依赖问题。

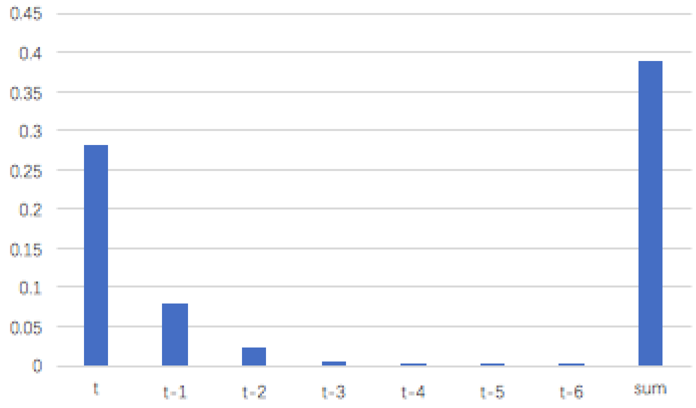
9.1 长程依赖问题

梯度消失举例：RNN中权重矩阵W最终的梯度是各个时刻的梯度之和，即：

$$\nabla_W E = \sum_{k=1}^{t} \nabla_{Wk} E$$

$$= \nabla_{Wt} E + \nabla_{Wt-1} E + \nabla_{Wt-2} E + \ldots + \nabla_{W1} E$$

假设某轮训练中，各时刻的梯度以及最终的梯度之和如下图：



从t-3时刻开始，梯度已经几乎减少到0了。即从此时刻开始再往之前走，得到的梯度（几乎为零）就不会对最终的梯度值有任何贡献。这就是**原始RNN无法处理长距离依赖的原因。**

9.1 长程依赖问题

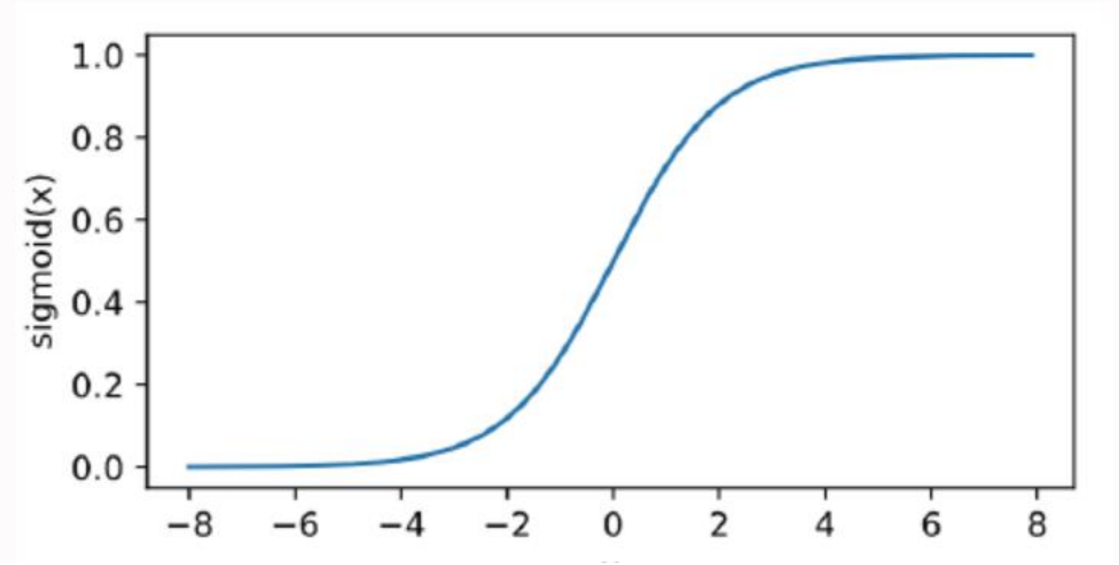
通常来说，**梯度爆炸**更容易处理一些。因为梯度爆炸的时候，程序会收到NaN错误。也可以设置一个梯度阈值，当梯度超过这个阈值时直接截取。

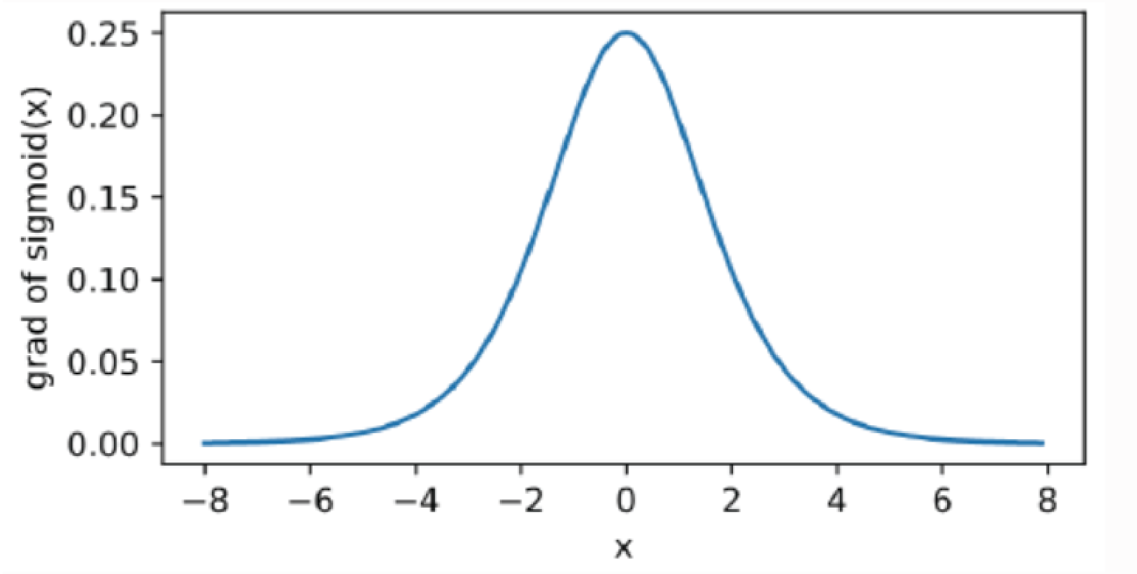
梯度消失更难检测，也更难处理一些。总的来说，有三种方法应对梯度消失问题：

1. 合理的初始化权重值。初始化权重，使每个神经元尽可能不要取极大或极小值，以躲开梯度消失的区域。

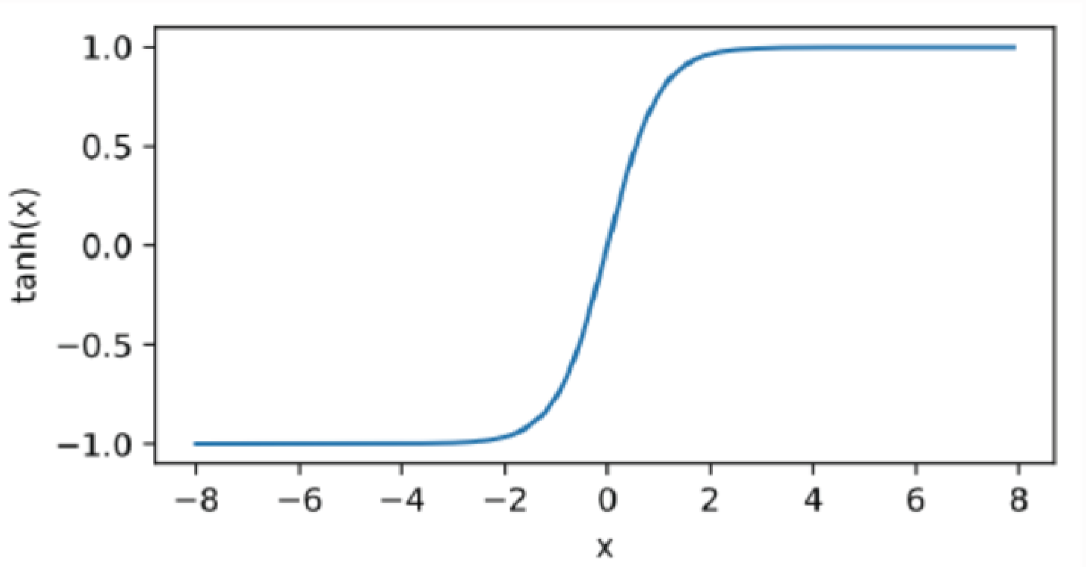
2. 使用relu代替sigmoid和tanh作为激活函数。

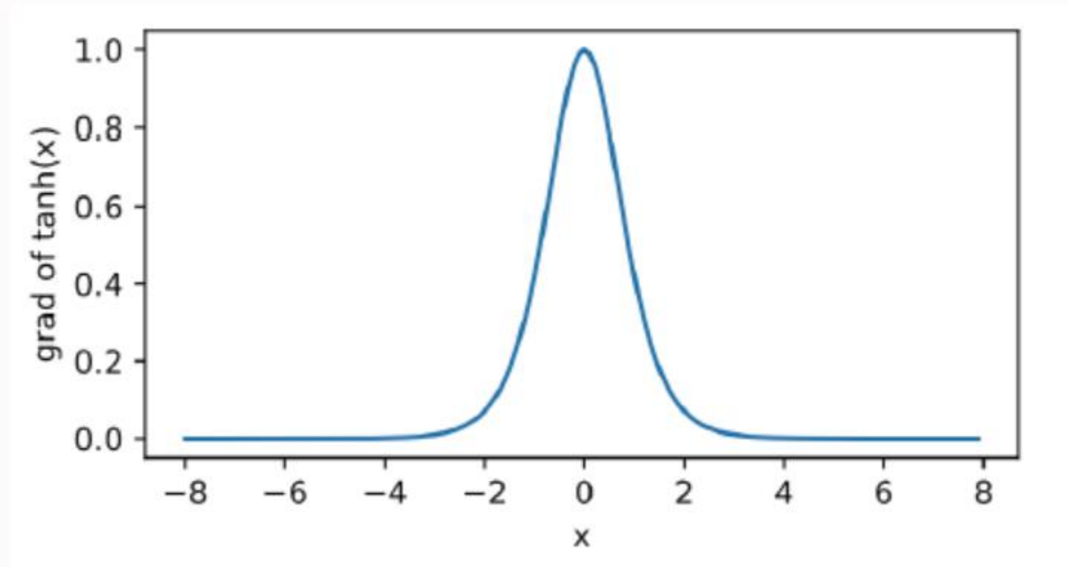
sigmoid函数的函数图和导数图





tanh函数的函数图和导数图

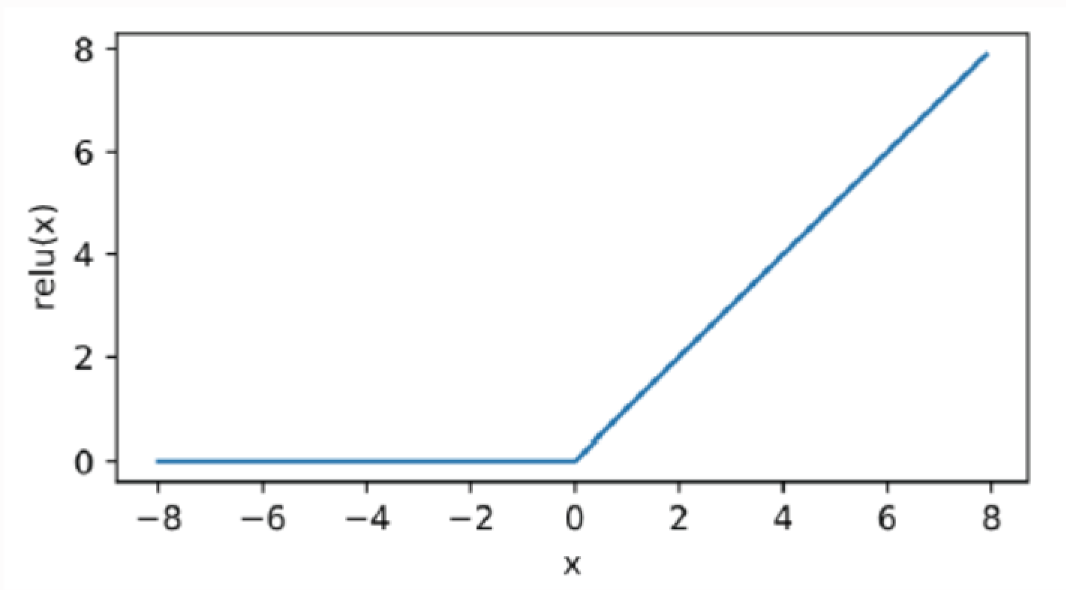


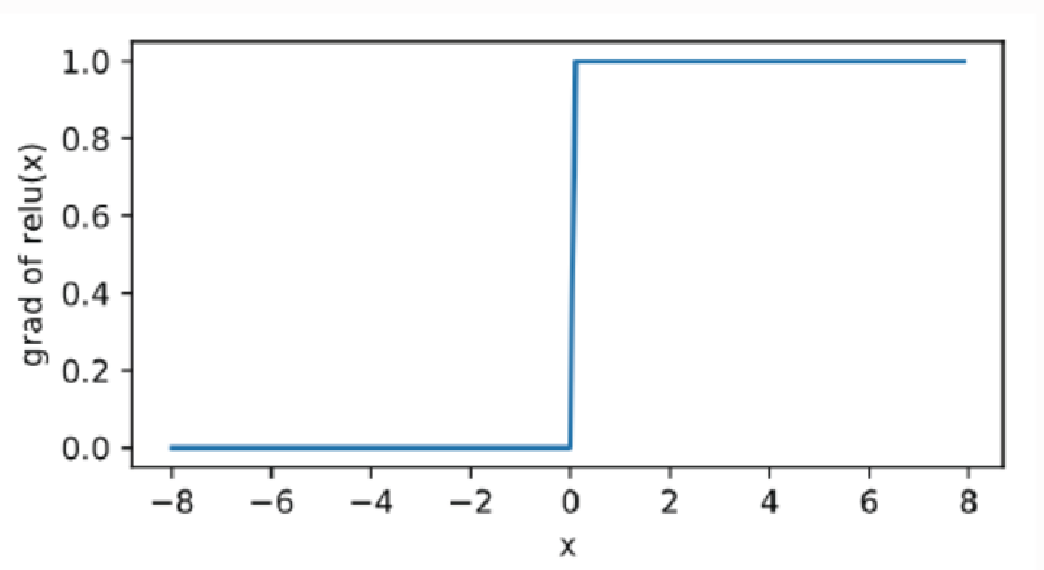


sigmoid函数与tanh函数比较：

- sigmoid函数的导数值范围为(0,0.25]，反向传播时会导致梯度消失
- tanh函数的导数值范围为 (0,1]，相对范围较大，但仍会导致梯度消失
- sigmoid函数不是原点中心对称，输出均大于0
- tanh函数是原点中心对称，可以使网络收敛的更好

ReLU函数的图像和导数图为





ReLU函数的左侧导数为0，右侧导数恒为1，避免了小数的连乘，但反向传播中仍有权值的累乘。ReLU函数改善了“梯度消失”现象。

9.1 长程依赖问题

通常来说，**梯度爆炸**更容易处理一些。因为梯度爆炸的时候，程序会收到NaN错误。也可以设置一个梯度阈值，当梯度超过这个阈值时直接截取。

梯度消失更难检测，也更难处理一些。总的来说，有三种方法应对梯度消失问题：

1. 合理的初始化权重值。初始化权重，使每个神经元尽可能不要取极大或极小值，以躲开梯度消失的区域。

2. 使用relu代替sigmoid和tanh作为激活函数。

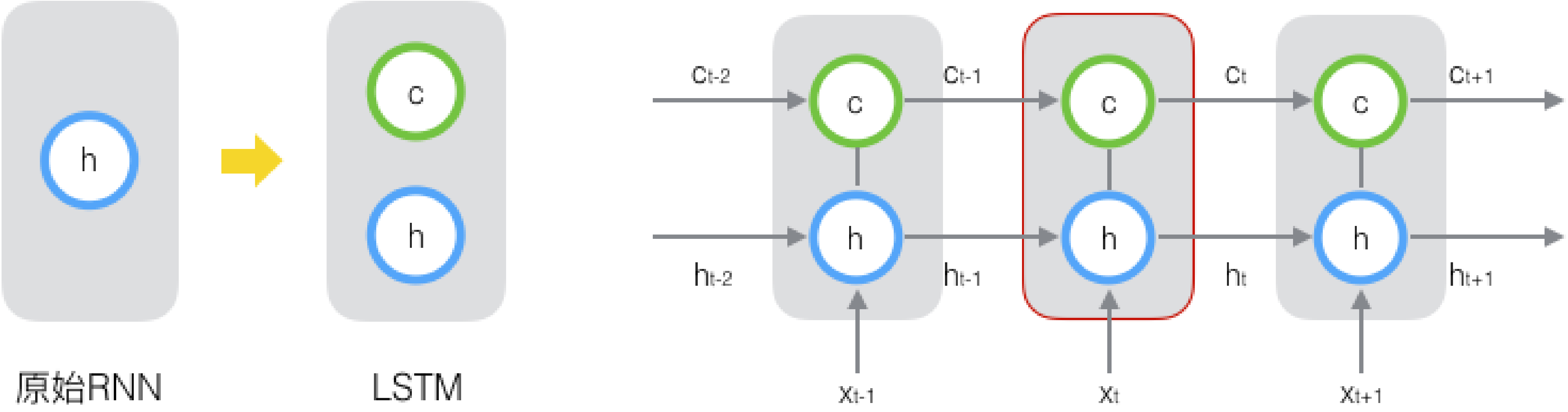
3. 使用其他结构的RNNs，比如长短时记忆网络（LTSM）和 Gated Recurrent Unit（GRU）。

接下来将重点介绍LSTM和GRU两种网络。

目录

9.2 长短期记忆网络（LSTM）

Long Short Term Memory networks（以下简称LSTMs），一种特殊的RNN网络，该网络设计出来是为了解决长程依赖问题。



增加状态c，称为单元状态(cell state)，让它来保存长期的状态

Hochreiter S, Schmidhuber J. Long short-term memory[J]. Neural computation, 1997, 9(8): 1735-1780.

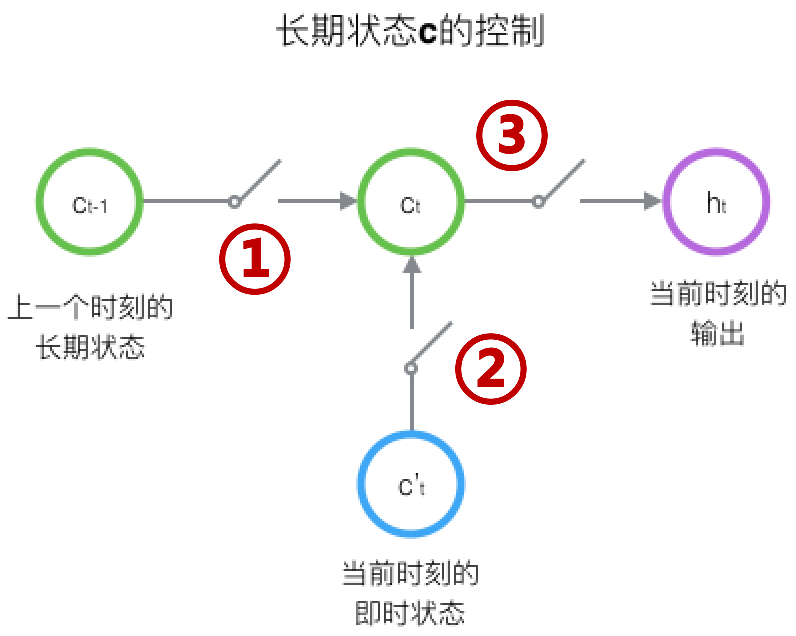
9.2 长短期记忆网络（LSTM）

LSTM的关键，就是怎样控制长期状态c。LSTM使用三个控制开关：

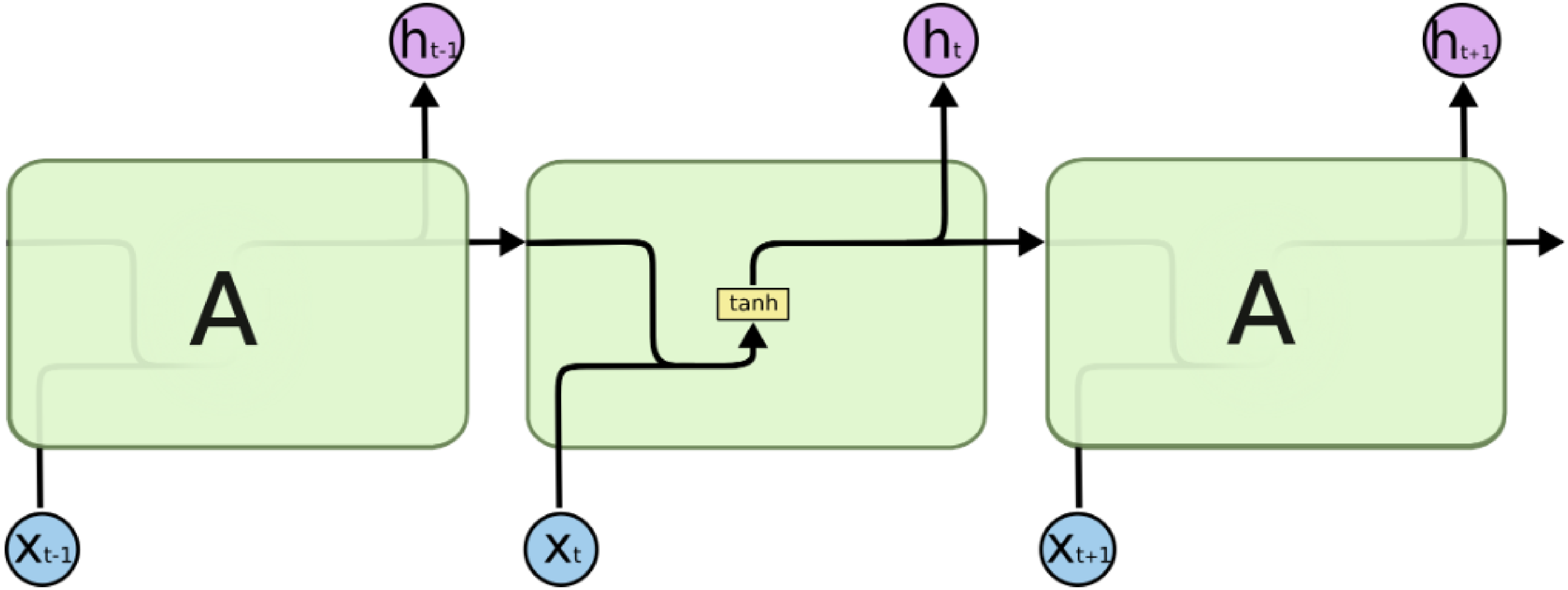
第一个开关，负责控制如何继续保存长期状态c；

第二个开关，负责控制把即时状态输入到长期状态c；

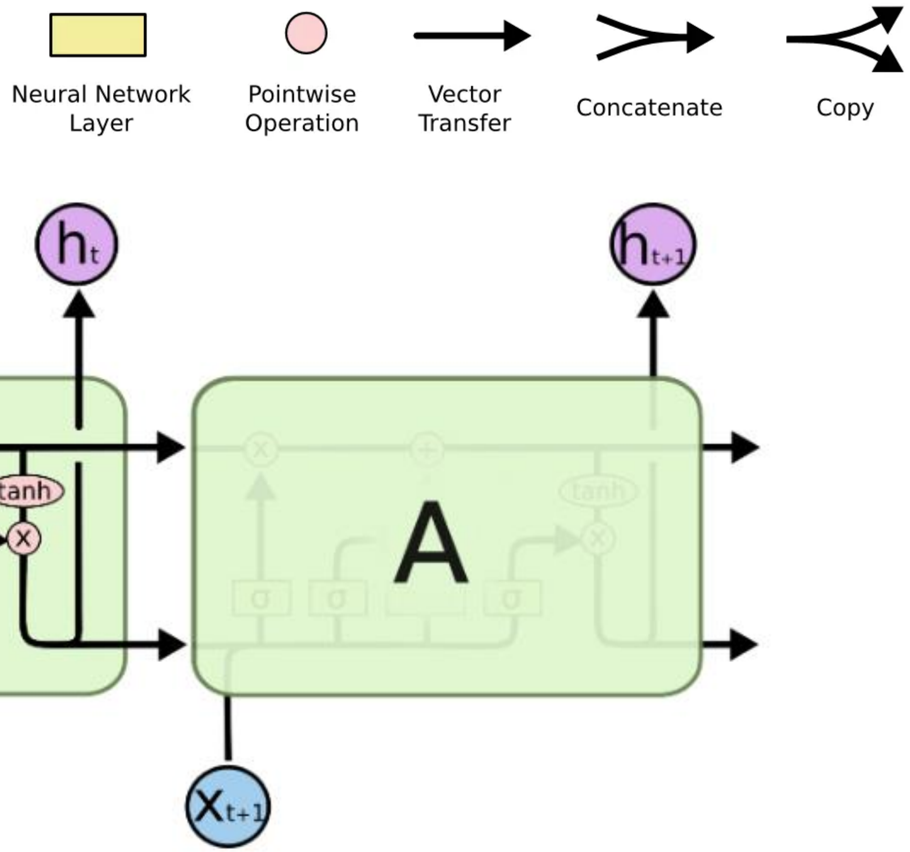
第三个开关，负责控制是否把长期状态c作为当前的LSTM的输出；



标准RNN的重复模块



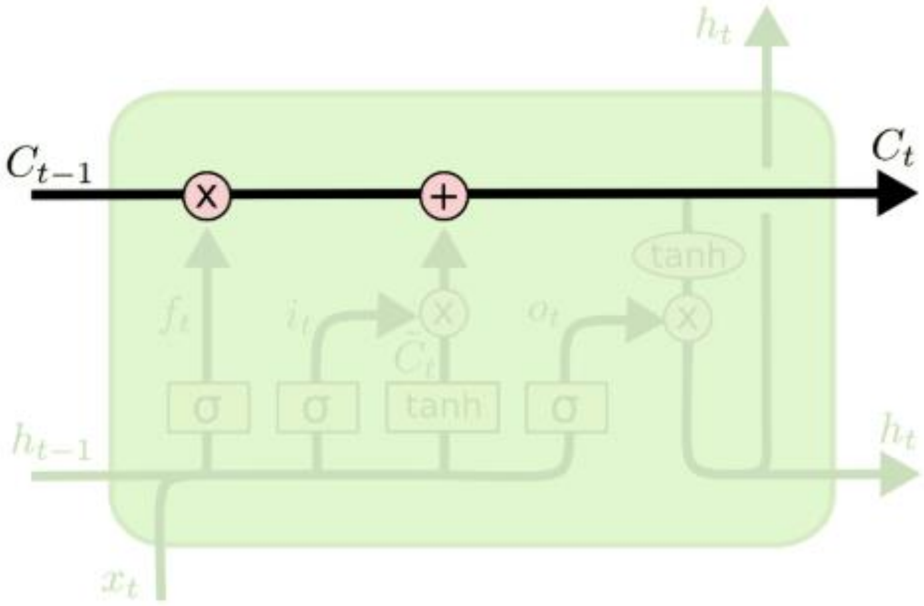
LSTM 的重复模块



除了h在随时间流动，单元状态c也在随时间流动，单元状态c就代表着长期记忆。

LSTM 的核心思想

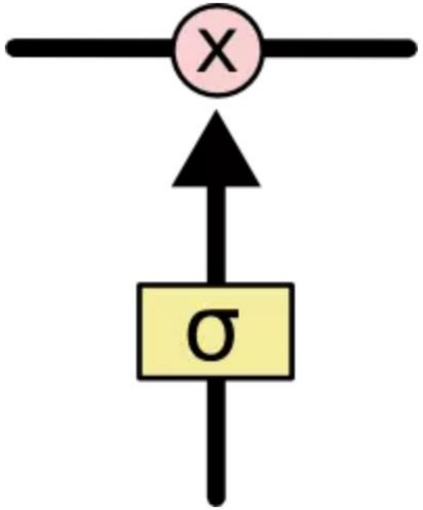
LSTM 的关键是单元状态，如水平线在图上方贯穿运行。

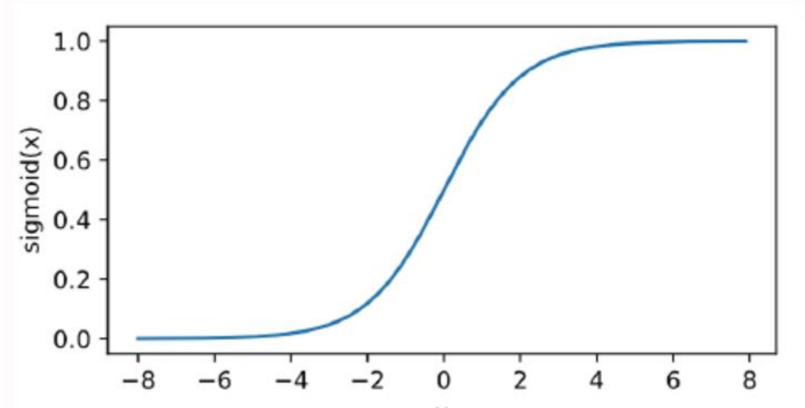


单元状态的传递类似于传送带，其直接在整个链上运行，中间只有一些少量的线性交互，容易保存相关信息。

前面描述的开关是怎样在算法中实现的呢?

LSTM 通过精心设计的称作为**“门”（gate）**的结构来去除或者增加单元状态中的信息。门是一种让信息选择式通过的方法。



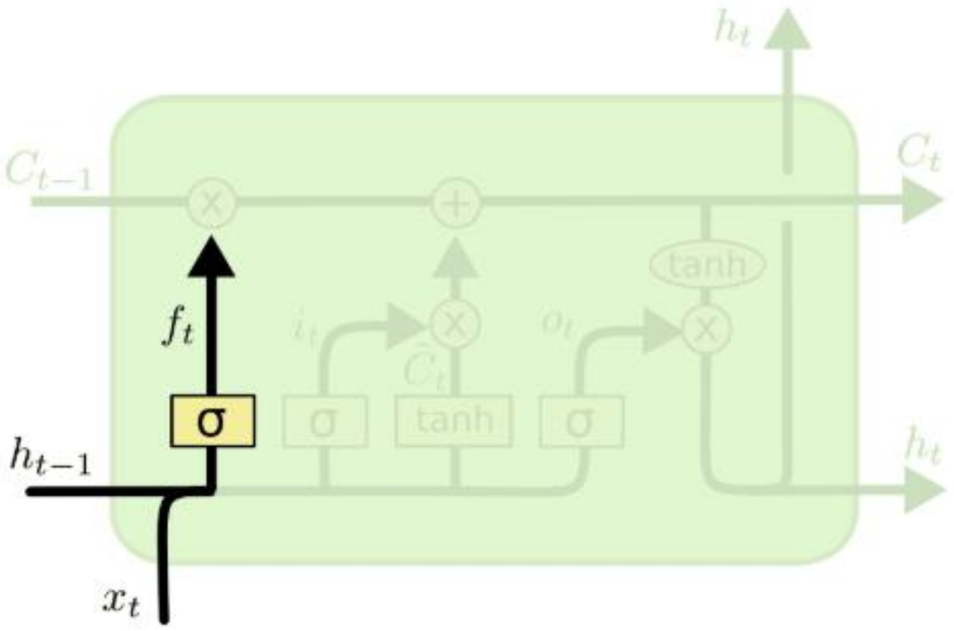


此门包含一个 sigmoid 神经网络层和一个 pointwise 乘法操作

- LSTM用两个门来控制单元状态c的内容
  - **遗忘门（forget gate）**，它决定了上一时刻的单元状态$\mathbf{c}_{t-1}$有多少保留到当前时刻$\mathbf{c}_t$;
  - **输入门（input gate）**，它决定了当前时刻网络的输入$\mathbf{x}_t$有多少保存到单元状态$\mathbf{c}_t$。
- LSTM用**输出门（output gate）**来控制单元状态$\mathbf{c}_t$有多少输出到LSTM的当前输出值$\mathbf{h}_t$

逐步理解 LSTM之**遗忘门**

$$f_t = \sigma\left(W_f \cdot [h_{t-1}, x_t] \ + \ b_f\right) \quad \text{(式1)}$$



上式中, W_f 是遗忘门的权重矩阵

$[\mathbf{h}_{t-1}, \mathbf{x}_t]$ 表示把两个向量连接成一个更长的向量

b_f是遗忘门的偏置项, σ 是sigmoid函数

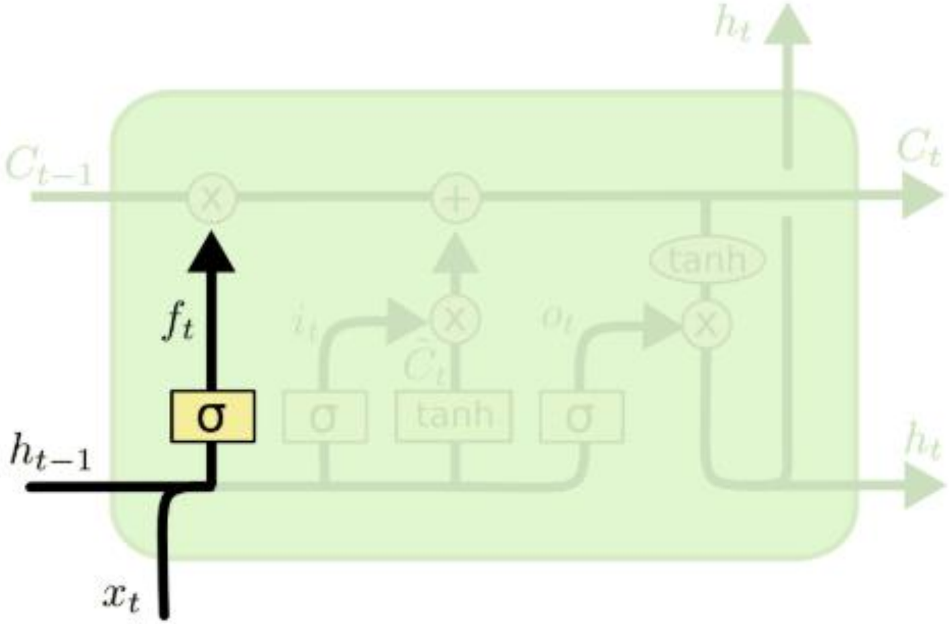
如果输入的维度是 d_x , 隐藏层的维度是 d_h， 单元状态的维度是 d_c ,

则遗忘门的权重矩阵 W_f 的维度是 $d_c \times (d_h + d_x)$

逐步理解 LSTM之**遗忘门**

$$f_t = \sigma\left(W_f \cdot [h_{t-1}, x_t] \ + \ b_f\right)$$

$$[W_f]\begin{bmatrix}\mathbf{h}_{t-1}\\ \mathbf{x}_t\end{bmatrix} = [W_{fh} \quad W_{fx}]\begin{bmatrix}\mathbf{h}_{t-1}\\ \mathbf{x}_t\end{bmatrix}$$
$$= W_{fh}\mathbf{h}_{t-1} + W_{fx}\mathbf{x}_t$$



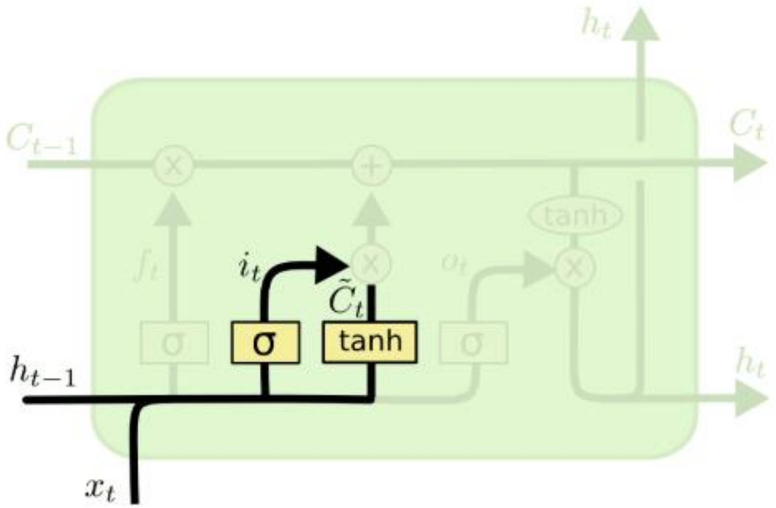
权重矩阵 W_f 是两个矩阵拼接而来的，

一个是 W_{fh} ，它对应输入项 h_{t-1} 其维度为 $d_c \times d_h$

一个是 W_{fx} ，它对应这输入项 x_t ，其维度为 $d_c \times d_x$ 。

这个门怎么做到“遗忘“的呢？怎么理解？既然是遗忘旧的内容，为什么这个门还要接收新的x_t?

逐步理解 LSTM之**输入门**



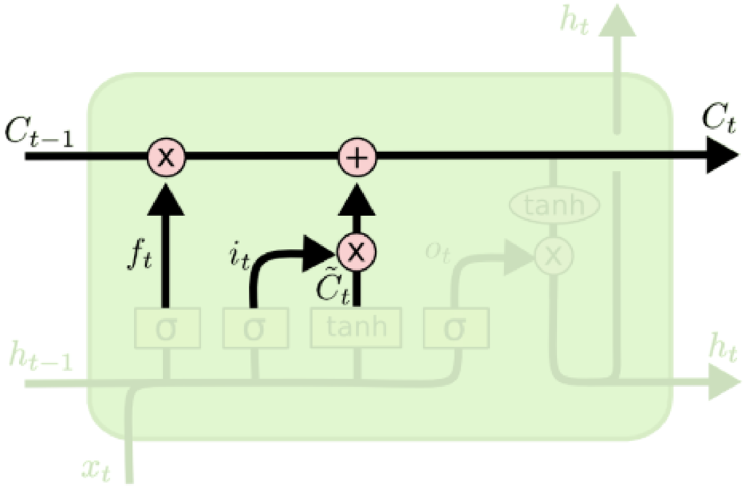
$$i_t = \sigma\left(W_i \cdot [h_{t-1}, x_t] \ + \ b_i\right) \quad \text{(式2)}$$

$$\tilde{C}_t = \tanh(W_C \cdot [h_{t-1}, x_t] \ + \ b_C) \quad \text{(式3)}$$

sigmoid 函数称为输入门，决定将要更新什么值

tanh 层创建一个新的候选值向量，$\tilde{C}_t$ 会被加入到状态中

逐步理解 LSTM之**更新单元状态**

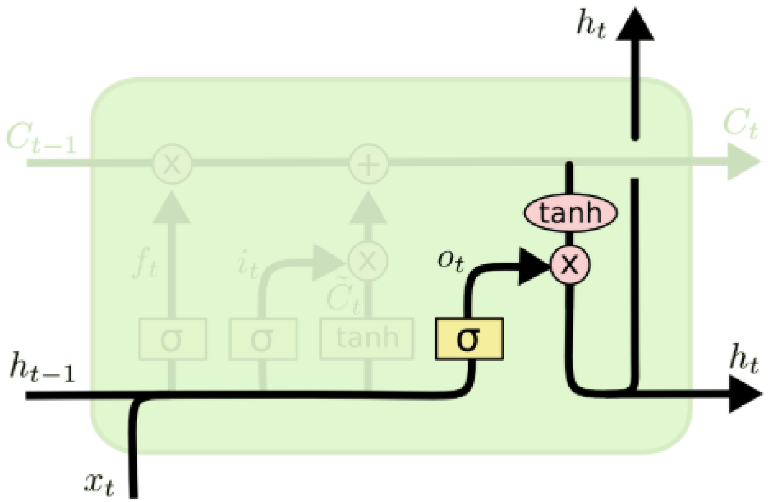


$$C_t = f_t * C_{t-1} + i_t * \tilde{C}_t \qquad \text{(式4)}$$

现在开始计算当前时刻的单元状态C_t。它是由上一次的单元状态 C_{t-1} 按原元素乘以遗忘门 f_t，再用当前输入的单元状态 $\tilde{C}_t$ 按元素乘以输入门 i_t，再将两个积加和产生的。

由于遗忘门的控制，它可以保存很久很久之前的信息，由于输入门的控制，它又可以避免当前无关紧要的内容进入记忆。

逐步理解 LSTM之**输出门**

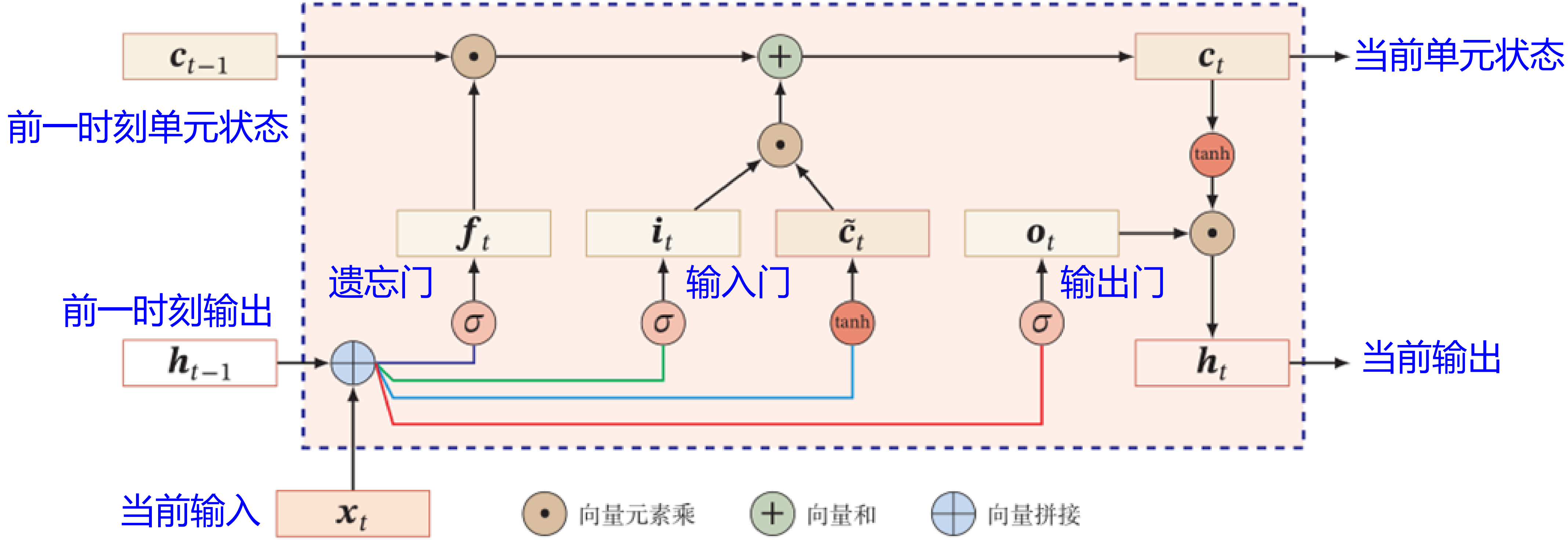


$$o_t = \sigma\left(W_o\ [h_{t-1}, x_t]\ +\ b_o\right) \qquad (式5)$$

$$h_t = o_t * \tanh\left(C_t\right) \qquad (式6)$$

输出门控制了长期记忆对当前输出的影响，其由输出门和单元状态共同确定。

9.2 长短期记忆网络（LSTM）



$$\mathbf{i}_t = \sigma(W_i\mathbf{x}_t + U_i\mathbf{h}_{t-1} + \mathbf{b}_i),$$

$$\mathbf{f}_t = \sigma(W_f\mathbf{x}_t + U_f\mathbf{h}_{t-1} + \mathbf{b}_f),$$

$$\mathbf{o}_t = \sigma(W_o\mathbf{x}_t + U_o\mathbf{h}_{t-1} + \mathbf{b}_o),$$

$$\tilde{\mathbf{c}}_t = \tanh(W_c\mathbf{x}_t + U_c\mathbf{h}_{t-1} + \mathbf{b}_c)$$

$$\mathbf{c}_t = \mathbf{f}_t \odot \mathbf{c}_{t-1} + \mathbf{i}_t \odot \tilde{\mathbf{c}}_t,$$

$$\mathbf{h}_t = \mathbf{o}_t \odot \tanh\left(\mathbf{c}_t\right),$$

1. LSTM训练算法框架

LSTM的训练算法仍然是反向传播算法。主要有下面三个步骤：

① 前向计算每个神经元的输出值，对于LSTM来说，即 $\mathbf{f}_t, \mathbf{i}_t, \mathbf{c}_t, \mathbf{o}_t, \mathbf{h}_t$ 五个向量的值。计算方法已经在上一节中描述过了。

② 反向计算每个神经元的**误差项**值。与**循环神经网络**一样，LSTM误差项的反向传播也是包括两个方向：一个是沿时间的反向传播，即从当前t时刻开始，计算每个时刻的误差项；一个是将误差项向上一层传播。

③ 根据相应的误差项，计算每个权重的梯度。

2. 关于公式和符号的说明

设定门gate的激活函数为sigmoid函数，输出的激活函数为tanh函数。它们的导数分别为：

$$\sigma(z) = y = \frac{1}{1+e^{-z}} \qquad \tanh(z) = y = \frac{e^z - e^{-z}}{e^z + e^{-z}}$$

$$\sigma'(z) = y(1-y) \qquad \tanh'(z) = 1 - y^2$$

sigmoid和tanh函数的导数都是原函数的函数。这样，一旦计算原函数的值，就可以用它来计算出导数的值。

9.2 长短期记忆网络（LSTM）

LSTM需要学习的参数共有8组，分别是：
遗忘门的权重矩阵 W_f 和偏置项 b_f 、
输入门的权重矩阵 W_i 和偏置项 b_i 、
输出门的权重矩阵 W_o 和偏置项 b_o 、
计算单元状态的权重矩阵 W_c 和偏置项 b_c 。

因为权重矩阵的两部分在反向传播中使用不同的公式，因此在后续的推导中，权重矩阵 W_f W_i W_o W_c 都将被写为分开的两个矩阵

$$W_{fh} \quad W_{fx} \quad W_{ih} \quad W_{ix} \quad W_{oh} \quad W_{ox} \quad W_{ch} \quad W_{cx}$$

按元素乘○符号。当 ○ 作用于两个**向量**时：

$$\mathbf{a} \circ \mathbf{b} = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \dots \\ a_n \end{bmatrix} \circ \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \dots \\ b_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1b_1 \\ a_2b_2 \\ a_3b_3 \\ \dots \\ a_nb_n \end{bmatrix}$$

当○作用于一个**向量**和一个**矩阵**时：

$$\mathbf{a} \circ X = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \dots \\ a_n \end{bmatrix} \circ \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13} & \dots & x_{1n} \\ x_{21} & x_{22} & x_{23} & \dots & x_{2n} \\ x_{31} & x_{32} & x_{33} & \dots & x_{3n} \\ & & \dots & & \\ x_{n1} & x_{n2} & x_{n3} & \dots & x_{nn} \end{bmatrix}$$

9.2 长短期记忆网络（LSTM）

当 ○ 作用于两个**矩阵**时，两个矩阵对应位置的元素相乘。按元素乘可以在某些情况下简化矩阵和向量运算。例如，当一个对角矩阵右乘一个矩阵时，相当于用对角矩阵的对角线组成的向量按元素乘那个矩阵：

$$\operatorname{diag}[\mathbf{a}]X = \mathbf{a} \circ X$$

当一个行向量右乘一个对角矩阵时，相当于这个行向量按元素乘那个矩阵对角线组成的向量：

$$\mathbf{a}^T \operatorname{diag}[\mathbf{b}] = \mathbf{a}^T \circ \mathbf{b}$$

上面这两点，在后续推导中会多次用到。

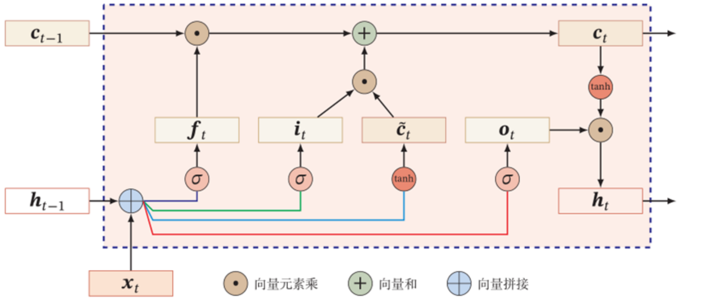
在t时刻，LSTM的输出值为 $\mathbf{h}_t$。定义t时刻的误差项 δ_t 为： $\delta_t \overset{\text{def}}{=} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{h}_t}$

LSTM有四个加权输入，分别对应 $\mathbf{f}_t, \mathbf{i}_t, \mathbf{c}_t, \mathbf{o}_t$ ，希望往上一层传递一个误差项而不是四个。但仍然需要定义出这四个加权输入，以及他们对应的误差项。

$$
\begin{aligned}
\mathbf{net}_{f,t} &= W_f[\mathbf{h}_{t-1}, \mathbf{x}_t] + \mathbf{b}_f \\
&= W_{fh}\mathbf{h}_{t-1} + W_{fx}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_f \\
\mathbf{net}_{i,t} &= W_i[\mathbf{h}_{t-1}, \mathbf{x}_t] + \mathbf{b}_i \\
&= W_{ih}\mathbf{h}_{t-1} + W_{ix}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_i \\
\mathbf{net}_{\tilde{c},t} &= W_c[\mathbf{h}_{t-1}, \mathbf{x}_t] + \mathbf{b}_c \\
&= W_{ch}\mathbf{h}_{t-1} + W_{cx}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_c \\
\mathbf{net}_{o,t} &= W_o[\mathbf{h}_{t-1}, \mathbf{x}_t] + \mathbf{b}_o \\
&= W_{oh}\mathbf{h}_{t-1} + W_{ox}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_o
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\delta_{f,t} &\overset{\text{def}}{=} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{f,t}} \\
\delta_{i,t} &\overset{\text{def}}{=} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{i,t}} \\
\delta_{\tilde{c},t} &\overset{\text{def}}{=} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{\tilde{c},t}} \\
\delta_{o,t} &\overset{\text{def}}{=} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{o,t}}
\end{aligned}
$$

3. 误差项沿时间的反向传递



沿时间反向传递误差项，就是要计算出t-1时刻的误差项 δ_{t-1}

$$\delta_{t-1}^T = \frac{\partial E}{\partial \mathbf{h_{t-1}}} = \frac{\partial E}{\partial \mathbf{h_t}} \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{h_{t-1}}} = \delta_t^T \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{h_{t-1}}}$$

我们知道，$\frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{h_{t-1}}}$ 是一个Jacobian矩阵。如果隐藏层h的维度是N的话，那么它就是一个 $N \times N$ 矩阵。

为了求出它，我们列出 $\mathbf{h}_t$ 的计算公式，即前面的**式6和式4**：

$$\mathbf{h}_t = \mathbf{o}_t \circ \tanh(\mathbf{c}_t)$$
$$\mathbf{c}_t = \mathbf{f}_t \circ \mathbf{c}_{t-1} + \mathbf{i}_t \circ \tilde{\mathbf{c}}_t$$

利用全导数公式可得（式7）：

$$\delta_t^T \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{h_{t-1}}} = \delta_t^T \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{o}_t} \frac{\partial \mathbf{o}_t}{\partial \mathbf{net}_{o,t}} \frac{\partial \mathbf{net}_{o,t}}{\partial \mathbf{h_{t-1}}} + \delta_t^T \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{c}_t} \frac{\partial \mathbf{c}_t}{\partial \mathbf{f_t}} \frac{\partial \mathbf{f_t}}{\partial \mathbf{net}_{f,t}} \frac{\partial \mathbf{net}_{f,t}}{\partial \mathbf{h_{t-1}}} + \delta_t^T \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{c}_t} \frac{\partial \mathbf{c}_t}{\partial \mathbf{i_t}} \frac{\partial \mathbf{i_t}}{\partial \mathbf{net}_{i,t}} \frac{\partial \mathbf{net}_{i,1}}{\partial \mathbf{h_{t-1}}}$$

9.2 长短期记忆网络（LSTM）

$$\delta_t^T \frac{\partial \mathbf{h}_t}{\partial \mathbf{h}_{t-1}} = \delta_t^T \frac{\partial \mathbf{h}_t}{\partial \mathbf{o}_t} \frac{\partial \mathbf{o}_t}{\partial \mathbf{net}_{o,t}} \frac{\partial \mathbf{net}_{o,t}}{\partial \mathbf{h}_{t-1}} + \delta_t^T \frac{\partial \mathbf{h}_t}{\partial \mathbf{c}_t} \frac{\partial \mathbf{c}_t}{\partial \mathbf{f}_t} \frac{\partial \mathbf{f}_t}{\partial \mathbf{net}_{f,t}} \frac{\partial \mathbf{net}_{f,t}}{\partial \mathbf{h}_{t-1}} + \delta_t^T \frac{\partial \mathbf{h}_t}{\partial \mathbf{c}_t} \frac{\partial \mathbf{c}_t}{\partial \mathbf{i}_t} \frac{\partial \mathbf{i}_t}{\partial \mathbf{net}_{i,t}} \frac{\partial \mathbf{net}_{i,1}}{\partial \mathbf{h}_{t-1}}$$

下面，要把**式7**中的每个偏导数都求出来。

$$\mathbf{h}_t = \mathbf{o}_t \circ \tanh(\mathbf{c}_t)$$
$$\mathbf{c}_t = \mathbf{f}_t \circ \mathbf{c}_{t-1} + \mathbf{i}_t \circ \tilde{\mathbf{c}}_t$$

根据**式6**，可以求出：

$$\frac{\partial \mathbf{h}_t}{\partial \mathbf{o}_t} = \mathrm{diag}[\tanh(\mathbf{c}_t)]$$

$$\frac{\partial \mathbf{h}_t}{\partial \mathbf{c}_t} = \mathrm{diag}\left[\mathbf{o}_t \circ \left(1 - \tanh(\mathbf{c}_t)^2\right)\right]$$

根据**式4**，可以求出：

$$\frac{\partial \mathbf{c}_t}{\partial \mathbf{f}_t} = \mathrm{diag}[\mathbf{c}_{t-1}]$$

$$\frac{\partial \mathbf{c}_t}{\partial \mathbf{i}_t} = \mathrm{diag}[\tilde{\mathbf{c}}_t]$$

$$\frac{\partial \mathbf{c}_t}{\partial \tilde{\mathbf{c}}_t} = \mathrm{diag}[\mathbf{i}_t]$$

因为:

$$
\begin{aligned}
\mathbf{o}_t &= \sigma(\mathbf{net}_{o,t}) \\
\mathbf{net}_{o,t} &= W_{oh}\mathbf{h}_{t-1} + W_{ox}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_o \\
\mathbf{f}_t &= \sigma(\mathbf{net}_{f,t}) \\
\mathbf{net}_{f,t} &= W_{fh}\mathbf{h}_{t-1} + W_{fx}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_f \\
\mathbf{i}_t &= \sigma(\mathbf{net}_{i,t}) \\
\mathbf{net}_{i,t} &= W_{ih}\mathbf{h}_{t-1} + W_{ix}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_i \\
\tilde{\mathbf{c}}_t &= \tanh(\mathbf{net}_{\tilde{c},t}) \\
\mathbf{net}_{\tilde{c},t} &= W_{ch}\mathbf{h}_{t-1} + W_{cx}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_c
\end{aligned}
$$

$$\sigma'(z) = y(1-y) \quad \tanh'(z) = 1 - y^2$$

$$\Rightarrow$$

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial \mathbf{o}_t}{\partial \mathbf{net}_{o,t}} &= \operatorname{diag}[\mathbf{o}_t \circ (1 - \mathbf{o}_t)] \\
\frac{\partial \mathbf{net}_{o,t}}{\partial \mathbf{h}_{t-1}} &= W_{oh} \\
\frac{\partial \mathbf{f}_t}{\partial \mathbf{net}_{f,t}} &= \operatorname{diag}[\mathbf{f}_t \circ (1 - \mathbf{f}_t)] \\
\frac{\partial \mathbf{net}_{f,t}}{\partial \mathbf{h}_{t-1}} &= W_{fh} \\
\frac{\partial \mathbf{i}_t}{\partial \mathbf{net}_{i,t}} &= \operatorname{diag}[\mathbf{i}_t \circ (1 - \mathbf{i}_t)] \\
\frac{\partial \mathbf{net}_{i,t}}{\partial \mathbf{h}_{t-1}} &= W_{ih} \\
\frac{\partial \tilde{\mathbf{c}}_t}{\partial \mathbf{net}_{\tilde{c},t}} &= \operatorname{diag}[1 - \tilde{\mathbf{c}}_t^2] \\
\frac{\partial \mathbf{net}_{\tilde{c},t}}{\partial \mathbf{h}_{t-1}} &= W_{ch}
\end{aligned}
$$

根据 $\delta_{o,t}$ $\delta_{f,t}$ $\delta_{i,t}$ $\delta_{\tilde{c},t}$ 的定义，可知: $\delta_{o,t} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{o,t}} = \frac{\partial E}{\partial \mathbf{h_t}} \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{o}_t} \frac{\partial \mathbf{o}_t}{\partial \mathbf{net}_{o,t}}$

$$\frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{o}_t} = \operatorname{diag}[\tanh(\mathbf{c}_t)] \quad \frac{\partial \mathbf{o}_t}{\partial \mathbf{net}_{o,t}} = \operatorname{diag}[\mathbf{o}_t \circ (1 - \mathbf{o}_t)]$$

$$\delta_{o,t}^T = \delta_t^T \circ \tanh(\mathbf{c}_t) \circ \mathbf{o}_t \circ (1 - \mathbf{o}_t) \qquad \text{(式8)}$$

$$\delta_{f,t}^T = \delta_t^T \circ \mathbf{o}_t \circ \left(1 - \tanh(\mathbf{c}_t)^2\right) \circ \mathbf{c}_{t-1} \circ \mathbf{f}_t \circ (1 - \mathbf{f}_t) \qquad \text{(式9)}$$

$$\delta_{i,t}^T = \delta_t^T \circ \mathbf{o}_t \circ \left(1 - \tanh(\mathbf{c}_t)^2\right) \circ \tilde{\mathbf{c}}_t \circ \mathbf{i}_t \circ (1 - \mathbf{i}_t) \qquad \text{(式10)}$$

$$\delta_{\tilde{c},t}^T = \delta_t^T \circ \mathbf{o}_t \circ \left(1 - \tanh(\mathbf{c}_t)^2\right) \circ \mathbf{i}_t \circ (1 - \tilde{\mathbf{c}}^2) \qquad \text{(式11)}$$

将上述偏导数带入到**式7**，得到：

$$\delta_t^T \frac{\partial \mathbf{h}_t}{\partial \mathbf{h}_{t-1}} = \delta_t^T \frac{\partial \mathbf{h}_t}{\partial \mathbf{o}_t} \frac{\partial \mathbf{o}_t}{\partial \mathbf{net}_{o,t}} \frac{\partial \mathbf{net}_{o,t}}{\partial \mathbf{h}_{t-1}} + \delta_t^T \frac{\partial \mathbf{h}_t}{\partial \mathbf{c}_t} \frac{\partial \mathbf{c}_t}{\partial \mathbf{f}_t} \frac{\partial \mathbf{f}_t}{\partial \mathbf{net}_{f,t}} \frac{\partial \mathbf{net}_{f,t}}{\partial \mathbf{h}_{t-1}} + \delta_t^T \frac{\partial \mathbf{h}_t}{\partial \mathbf{c}_t} \frac{\partial \mathbf{c}_t}{\partial \mathbf{i}_t} \frac{\partial \mathbf{i}_t}{\partial \mathbf{net}_{i,t}} \frac{\partial \mathbf{net}_{i,1}}{\partial \mathbf{h}_{t-1}}$$

$$= \delta_{o,t}^T \frac{\partial \mathbf{net}_{o,t}}{\partial \mathbf{h}_{t-1}} + \delta_{f,t}^T \frac{\partial \mathbf{net}_{f,t}}{\partial \mathbf{h}_{t-1}} + \delta_{i,t}^T \frac{\partial \mathbf{net}_{i,t}}{\partial \mathbf{h}_{t-1}} + \delta_{\tilde{c},t}^T \frac{\partial \mathbf{net}_{\tilde{c},t}}{\partial \mathbf{h}_{t-1}}$$

$$= \delta_{o,t}^T W_{oh} + \delta_{f,t}^T W_{fh} + \delta_{i,t}^T W_{ih} + \delta_{\tilde{c},t}^T W_{ch} = \delta_{t-1}^T \qquad \text{(式12)}$$

式12就是将误差沿时间反向传播一个时刻的公式。有了它，可以写出将误差项向前传递到任意k时刻的公式：

$$\boxed{\delta_k^T = \prod_{j=k}^{t-1} \delta_{o,j}^T W_{oh} + \delta_{f,j}^T W_{fh} + \delta_{i,j}^T W_{ih} + \delta_{\tilde{c},j}^T W_{ch}} \qquad \text{(式13)}$$

4. 将误差项传递到上一层

假设当前为第l层，定义$l-1$层的误差项是误差函数对$l-1$层**加权输入**的导数，即：

$$\delta_t^{l-1} \overset{\text{def}}{=} \frac{\partial E}{\mathbf{net}_t^{l-1}}$$

本次LSTM的输入x_t由下面的公式计算：

$$\mathbf{x}_t^l = f^{l-1}(\mathbf{net}_t^{l-1})$$

上式中，f^{l-1}表示第$l-1$层的**激活函数**。

因为 $\mathbf{net}^l_{f,t}, \mathbf{net}^l_{i,t}, \mathbf{net}^l_{\tilde{c},t}, \mathbf{net}^l_{o,t}$ 都是 x_t 的函数，又是 net^{l-1}_t 的函数，因此，要求出 E 对 net^{l-1}_t 的导数，就需要使用全导数公式：

$$\begin{aligned}
\frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}^{l-1}_t} &= \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}^{l}_{f,t}} \frac{\partial \mathbf{net}^{l}_{f,t}}{\partial \mathbf{x}^l_t} \frac{\partial \mathbf{x}^l_t}{\partial \mathbf{net}^{l-1}_t} + \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}^{l}_{i,t}} \frac{\partial \mathbf{net}^{l}_{i,t}}{\partial \mathbf{x}^l_t} \frac{\partial \mathbf{x}^l_t}{\partial \mathbf{net}^{l-1}_t} + \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}^{l}_{\tilde{c},t}} \frac{\partial \mathbf{net}^{l}_{\tilde{c},t}}{\partial \mathbf{x}^l_t} \frac{\partial \mathbf{x}^l_t}{\partial \mathbf{net}^{l-1}_t} + \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}^{l}_{o,t}} \frac{\partial \mathbf{net}^{l}_{o,t}}{\partial \mathbf{x}^l_t} \frac{\partial \mathbf{x}^l_t}{\partial \mathbf{net}^{l-1}_t} \\
&= \delta^T_{f,t} W_{fx} \circ f'(\mathbf{net}^{l-1}_t) + \delta^T_{i,t} W_{ix} \circ f'(\mathbf{net}^{l-1}_t) + \delta^T_{\tilde{c},t} W_{cx} \circ f'(\mathbf{net}^{l-1}_t) + \delta^T_{o,t} W_{ox} \circ f'(\mathbf{net}^{l-1}_t) \\
&\boxed{= (\delta^T_{f,t} W_{fx} + \delta^T_{i,t} W_{ix} + \delta^T_{\tilde{c},t} W_{cx} + \delta^T_{o,t} W_{ox}) \circ f'(\mathbf{net}^{l-1}_t)} \qquad \text{(式 14)}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{o}_t &= \sigma(\mathbf{net}_{o,t}) \\
\mathbf{net}_{o,t} &= W_{oh}\mathbf{h}_{t-1} + W_{ox}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_o \\
\mathbf{f}_t &= \sigma(\mathbf{net}_{f,t}) \\
\mathbf{net}_{f,t} &= W_{fh}\mathbf{h}_{t-1} + W_{fx}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_f \\
\mathbf{i}_t &= \sigma(\mathbf{net}_{i,t}) \\
\mathbf{net}_{i,t} &= W_{ih}\mathbf{h}_{t-1} + W_{ix}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_i \\
\tilde{\mathbf{c}}_t &= \tanh(\mathbf{net}_{\tilde{c},t}) \\
\mathbf{net}_{\tilde{c},t} &= W_{ch}\mathbf{h}_{t-1} + W_{cx}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_c
\end{aligned}$$

式14就是将误差传递到上一层的公式。

5. 权重梯度的计算

对于 $W_{fh}, W_{ih}, W_{ch}, W_{oh}$ 的梯度，我们知道它的梯度是各个时刻梯度之和，我们首先求出它们在t时刻的梯度，然后再求出他们最终的梯度。

$$
\begin{aligned}
\mathbf{o}_t &= \sigma(\mathbf{net}_{o,t}) \\
\mathbf{net}_{o,t} &= W_{oh}\mathbf{h}_{t-1} + W_{ox}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_o \\
\mathbf{f}_t &= \sigma(\mathbf{net}_{f,t}) \\
\mathbf{net}_{f,t} &= W_{fh}\mathbf{h}_{t-1} + W_{fx}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_f \\
\mathbf{i}_t &= \sigma(\mathbf{net}_{i,t}) \\
\mathbf{net}_{i,t} &= W_{ih}\mathbf{h}_{t-1} + W_{ix}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_i \\
\tilde{\mathbf{c}}_t &= \tanh(\mathbf{net}_{\tilde{c},t}) \\
\mathbf{net}_{\tilde{c},t} &= W_{ch}\mathbf{h}_{t-1} + W_{cx}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_c
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial E}{\partial W_{oh,t}} &= \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{o,t}} \frac{\partial \mathbf{net}_{o,t}}{\partial W_{oh,t}} \\
&= \delta_{o,t}\mathbf{h}_{t-1}^T \\
\frac{\partial E}{\partial W_{fh,t}} &= \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{f,t}} \frac{\partial \mathbf{net}_{f,t}}{\partial W_{fh,t}} \\
&= \delta_{f,t}\mathbf{h}_{t-1}^T \\
\frac{\partial E}{\partial W_{ih,t}} &= \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{i,t}} \frac{\partial \mathbf{net}_{i,t}}{\partial W_{ih,t}} \\
&= \delta_{i,t}\mathbf{h}_{t-1}^T \\
\frac{\partial E}{\partial W_{ch,t}} &= \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{\tilde{c},t}} \frac{\partial \mathbf{net}_{\tilde{c},t}}{\partial W_{ch,t}} \\
&= \delta_{\tilde{c},t}\mathbf{h}_{t-1}^T
\end{aligned}
$$

$$
\boxed{
\begin{aligned}
\frac{\partial E}{\partial W_{oh}} &= \sum_{j=1}^{t} \delta_{o,j}\mathbf{h}_{j-1}^T \\
\frac{\partial E}{\partial W_{fh}} &= \sum_{j=1}^{t} \delta_{f,j}\mathbf{h}_{j-1}^T \\
\frac{\partial E}{\partial W_{ih}} &= \sum_{j=1}^{t} \delta_{i,j}\mathbf{h}_{j-1}^T \\
\frac{\partial E}{\partial W_{ch}} &= \sum_{j=1}^{t} \delta_{\tilde{c},j}\mathbf{h}_{j-1}^T
\end{aligned}
}
$$

对于偏置项 $\mathbf{b}_f, \mathbf{b}_i, \mathbf{b}_c, \mathbf{b}_o$ 也是将各个时刻的梯度加在一起。下面是各个时刻的偏置项梯度：

$$
\begin{aligned}
\mathbf{o}_t &= \sigma(\mathbf{net}_{o,t}) \\
\mathbf{net}_{o,t} &= W_{oh}\mathbf{h}_{t-1} + W_{ox}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_o \\
\mathbf{f}_t &= \sigma(\mathbf{net}_{f,t}) \\
\mathbf{net}_{f,t} &= W_{fh}\mathbf{h}_{t-1} + W_{fx}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_f \\
\mathbf{i}_t &= \sigma(\mathbf{net}_{i,t}) \\
\mathbf{net}_{i,t} &= W_{ih}\mathbf{h}_{t-1} + W_{ix}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_i \\
\tilde{\mathbf{c}}_t &= \tanh(\mathbf{net}_{\tilde{c},t}) \\
\mathbf{net}_{\tilde{c},t} &= W_{ch}\mathbf{h}_{t-1} + W_{cx}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_c
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial E}{\partial \mathbf{b}_{o,t}} &= \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{o,t}} \frac{\partial \mathbf{net}_{o,t}}{\partial \mathbf{b}_{o,t}} \\
&= \delta_{o,t} \\
\frac{\partial E}{\partial \mathbf{b}_{f,t}} &= \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{f,t}} \frac{\partial \mathbf{net}_{f,t}}{\partial \mathbf{b}_{f,t}} \\
&= \delta_{f,t} \\
\frac{\partial E}{\partial \mathbf{b}_{i,t}} &= \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{i,t}} \frac{\partial \mathbf{net}_{i,t}}{\partial \mathbf{b}_{i,t}} \\
&= \delta_{i,t} \\
\frac{\partial E}{\partial \mathbf{b}_{c,t}} &= \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{\tilde{c},t}} \frac{\partial \mathbf{net}_{\tilde{c},t}}{\partial \mathbf{b}_{c,t}} \\
&= \delta_{\tilde{c},t}
\end{aligned}
$$

$$
\boxed{
\begin{aligned}
\frac{\partial E}{\partial \mathbf{b}_o} &= \sum_{j=1}^{t} \delta_{o,j} \\
\frac{\partial E}{\partial \mathbf{b}_i} &= \sum_{j=1}^{t} \delta_{i,j} \\
\frac{\partial E}{\partial \mathbf{b}_f} &= \sum_{j=1}^{t} \delta_{f,j} \\
\frac{\partial E}{\partial \mathbf{b}_c} &= \sum_{j=1}^{t} \delta_{\tilde{c},j}
\end{aligned}
}
$$

对于 $W_{fx}, W_{ix}, W_{cx}, W_{ox}$ 的权重梯度，只需要根据相应的误差项直接计算即可

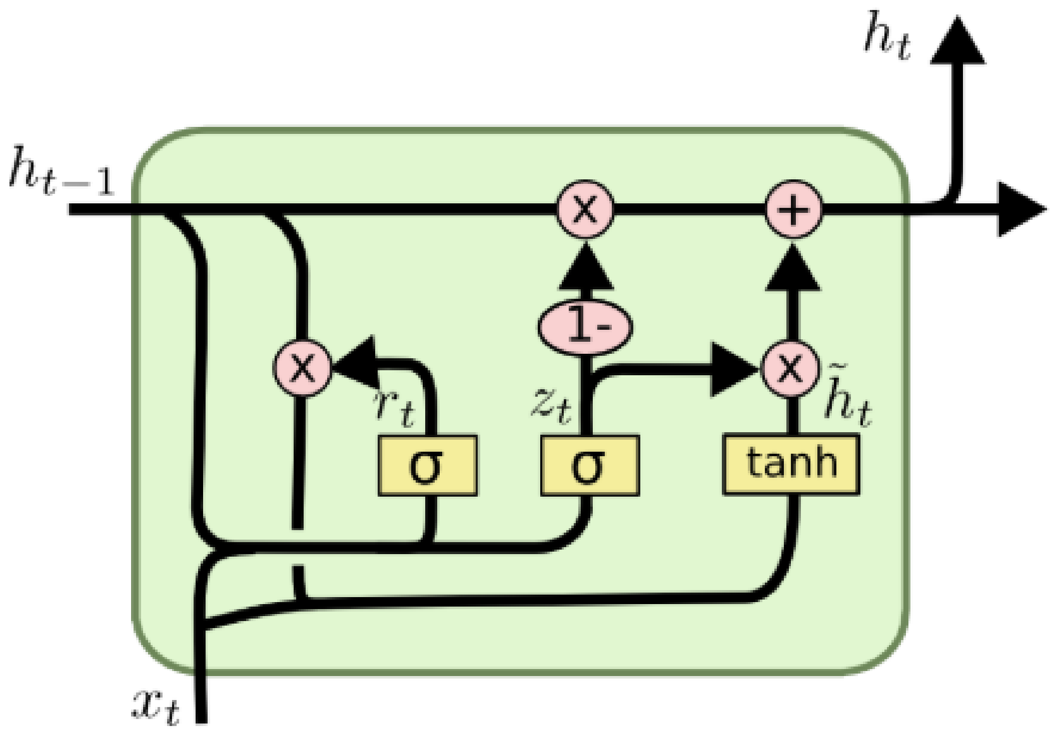
$$
\begin{aligned}
\frac{\partial E}{\partial W_{ox}} &= \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{o,t}} \frac{\partial \mathbf{net}_{o,t}}{\partial W_{ox}} \\
&= \delta_{o,t} \mathbf{x}_t^T \\
\frac{\partial E}{\partial W_{fx}} &= \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{f,t}} \frac{\partial \mathbf{net}_{f,t}}{\partial W_{fx}} \\
&= \delta_{f,t} \mathbf{x}_t^T \\
\frac{\partial E}{\partial W_{ix}} &= \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{i,t}} \frac{\partial \mathbf{net}_{i,t}}{\partial W_{ix}} \\
&= \delta_{i,t} \mathbf{x}_t^T \\
\frac{\partial E}{\partial W_{cx}} &= \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{\tilde{c},t}} \frac{\partial \mathbf{net}_{\tilde{c},t}}{\partial W_{cx}} \\
&= \delta_{\tilde{c},t} \mathbf{x}_t^T
\end{aligned}
$$

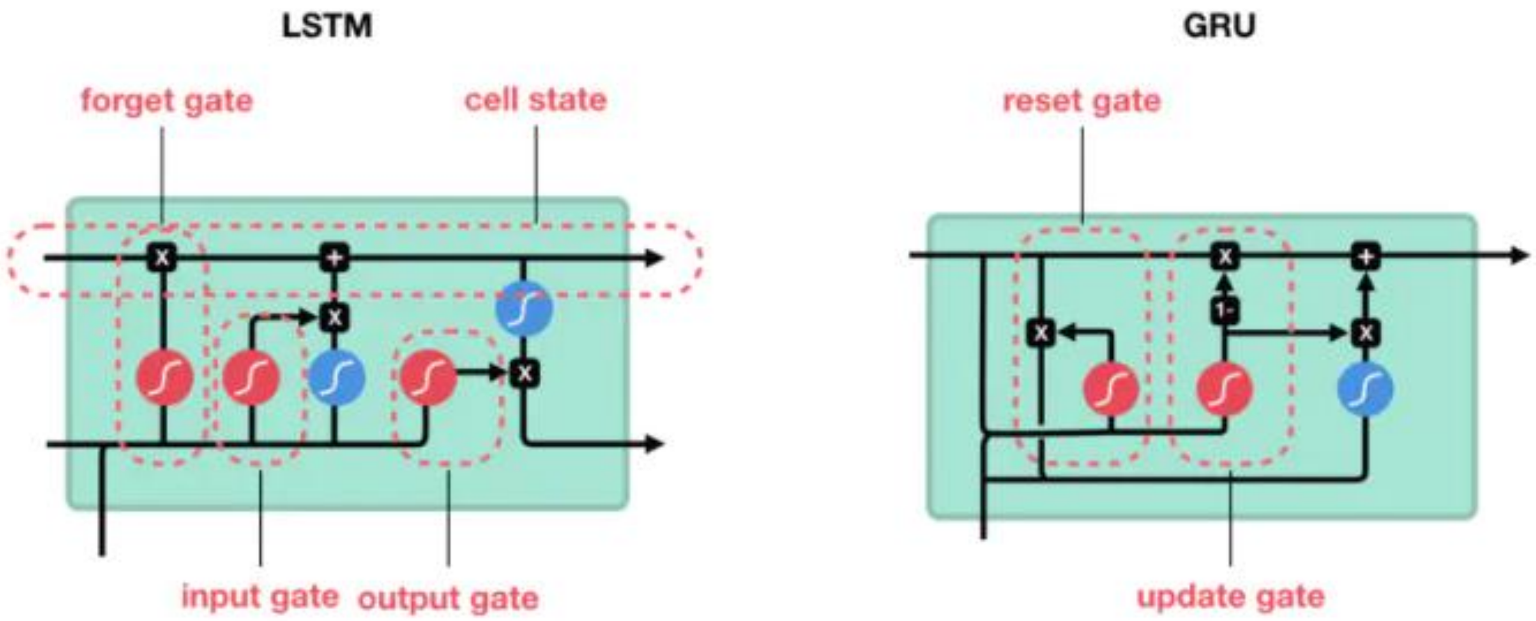
$$
\begin{aligned}
\mathbf{o}_t &= \sigma(\mathbf{net}_{o,t}) \\
\mathbf{net}_{o,t} &= W_{oh}\mathbf{h}_{t-1} + W_{ox}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_o \\
\mathbf{f}_t &= \sigma(\mathbf{net}_{f,t}) \\
\mathbf{net}_{f,t} &= W_{fh}\mathbf{h}_{t-1} + W_{fx}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_f \\
\mathbf{i}_t &= \sigma(\mathbf{net}_{i,t}) \\
\mathbf{net}_{i,t} &= W_{ih}\mathbf{h}_{t-1} + W_{ix}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_i \\
\tilde{\mathbf{c}}_t &= \tanh(\mathbf{net}_{\tilde{c},t}) \\
\mathbf{net}_{\tilde{c},t} &= W_{ch}\mathbf{h}_{t-1} + W_{cx}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_c
\end{aligned}
$$

目录

9.3 门控循环神经网络（GRU）

GRU（Gate Recurrent Unit）是循环神经网络RNN的一种。和LSTM一样，也是为了解决长期记忆和反向传播中的梯度等问题而提出来的。





GRU是LSTM的一种变体，它较LSTM网络的结构更加简单，而且效果也很好。

LSTM引入了三个门函数：输入门、遗忘门和输出门来控制输入值、记忆值和输出值。

而在GRU模型中只有两个门，分别是更新门和重置门。

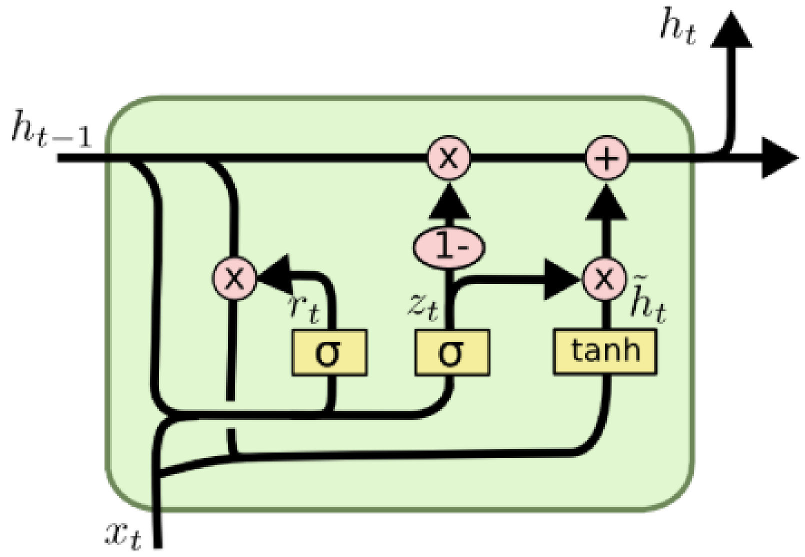
另外，GRU将单元状态与输出合并为一个状态h。

9.3 门控循环神经网络（GRU）

图中的z_t和r_t分别表示更新门和重置门。

更新门用于控制前一时刻的状态信息被带入到当前状态中的程度，更新门的值越大说明前一时刻的状态信息带入越多。

重置门控制前一状态有多少信息被写入到当前的候选集$\tilde{h}_t$上，重置门越小，前一状态的信息被写入的越少。



$$z_t = \sigma\left(W_z \cdot [h_{t-1}, x_t]\right)$$

$$r_t = \sigma\left(W_r \cdot [h_{t-1}, x_t]\right)$$

$$\tilde{h}_t = \tanh\left(W \cdot [r_t * h_{t-1}, x_t]\right)$$

$$h_t = (1 - z_t) * h_{t-1} + z_t * \tilde{h}_t$$

LSTM与GRU

- GRU的参数更少，因而训练稍快或需要更少的数据来泛化。
- 如果你有足够的数据，LSTM的强大表达能力可能会产生更好的结果。

Greff, et al. (2016)对流行的LSTM变种做了对比实验，发现它们的表现几乎一致。

Jozefowicz, et al. (2015)测试了超过一万中RNN结构，发现某些任务情形下，有些变种比LSTM工作得更好。

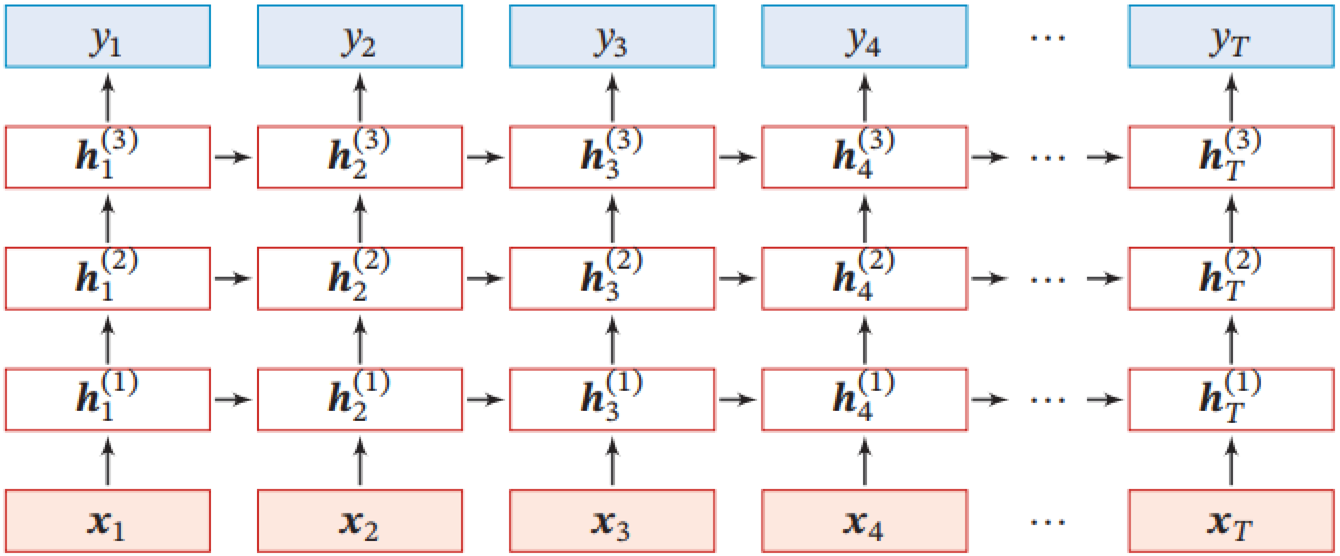
Greff K, Srivastava R K, Koutník J, et al. LSTM: A search space odyssey[J]. IEEE transactions on neural networks and learning systems, 2016, 28(10): 2222-2232.
Jozefowicz R, Zaremba W, Sutskever I. An empirical exploration of recurrent network architectures[C]//International conference on machine learning. 2015: 2342-2350.

目录

9.4 深层循环神经网络

- 循环神经网络是可深可浅的网络
  - 深网络：把循环网络按时间展开，长时间间隔的状态之间的路径很长
  - 浅网络：同一时刻网络输入到输出之间的路径 $x_t \rightarrow y_t$ 非常浅
- 增加循环神经网络的深度
  - 增强循环神经网络的能力
  - 增加同一时刻网络输入到输出之间的路径 $x_t \rightarrow y_t$，如增加隐状态到输出 $h_t \rightarrow y_t$，以及输入到隐状态 $x_t \rightarrow h_t$之间的路径的深度

堆叠循环神经网络 (Stacked Recurrent Neural Network, SRNN)

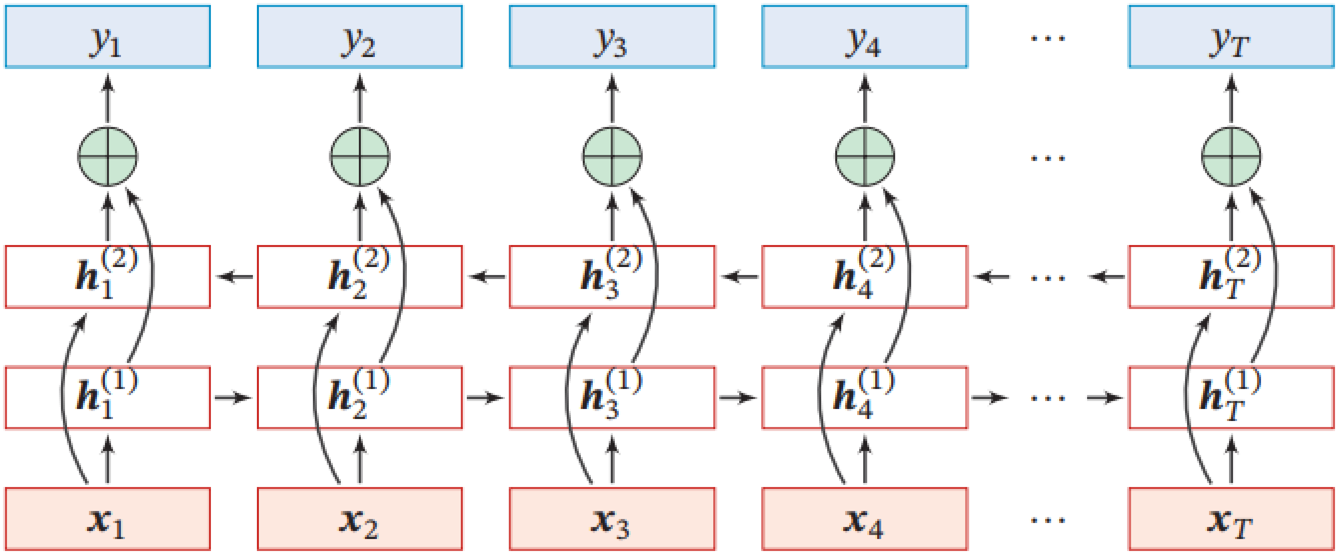


第 l 层网络的输入是第 $l-1$ 层网络的输出. 我们定义 $\boldsymbol{h}_t^{(l)}$ 为在时刻 t 时第 l 层的隐状态

$$\boldsymbol{h}_t^{(l)} = f(\boldsymbol{U}^{(l)}\boldsymbol{h}_{t-1}^{(l)} + \boldsymbol{W}^{(l)}\boldsymbol{h}_t^{(l-1)} + \boldsymbol{b}^{(l)}),$$

其中 $\boldsymbol{U}^{(l)}$、$\boldsymbol{W}^{(l)}$ 和 $\boldsymbol{b}^{(l)}$ 为权重矩阵和偏置向量, $\boldsymbol{h}_t^{(0)} = \boldsymbol{x}_t$.

双向循环神经网络(Bidirectional Recurrent Neural Network)由两层循环神经网络组成，它们的输入相同，只是信息传递的方向不同



假设第1层按时间顺序，第2层按时间逆序，在时刻t时的隐状态定义为$\boldsymbol{h}_t^{(1)}$和$\boldsymbol{h}_t^{(2)}$，则:

$$\boldsymbol{h}_t^{(1)} = f(\boldsymbol{U}^{(1)}\boldsymbol{h}_{t-1}^{(1)} + \boldsymbol{W}^{(1)}\boldsymbol{x}_t + \boldsymbol{b}^{(1)}),$$

$$\boldsymbol{h}_t^{(2)} = f(\boldsymbol{U}^{(2)}\boldsymbol{h}_{t+1}^{(2)} + \boldsymbol{W}^{(2)}\boldsymbol{x}_t + \boldsymbol{b}^{(2)}),$$

$$\boldsymbol{h}_t = \boldsymbol{h}_t^{(1)} \oplus \boldsymbol{h}_t^{(2)},$$

主要参考文献

1. Bengio Y, Simard P, Frasconi P. Learning long-term dependencies with gradient descent is difficult[J]. IEEE transactions on neural networks, 1994, 5(2): 157-166.

2. Understanding LSTM Networks http://colah.github.io/posts/2015-08-Understanding-LSTMs/

3. Hochreiter S, Schmidhuber J. Long short-term memory[J]. Neural computation, 1997, 9(8): 1735-1780.

4. Jozefowicz R, Zaremba W, Sutskever I. An empirical exploration of recurrent network architectures[C]//International conference on machine learning. 2015: 2342-2350.

5. Greff K, Srivastava R K, Koutník J, et al. LSTM: A search space odyssey[J]. IEEE transactions on neural networks and learning systems, 2016, 28(10): 2222-2232.

6. LSTM Forward and Backward Pass http://arunmallya.github.io/writeups/nn/lstm/index.html#/