PRML assignment 3

PART 1

1. 计算LSTM单元的单步梯度

相对于常规的RNN，LSTM增加了保存较长短期记忆的单元状态——Cell State，同时使用更多的门控单元来控制信息的流动。

LSTM用两个门来控制单元状态cell的内容，一个是遗忘门$\mathbf{f_t}$（forget gate），它决定了上一时刻的单元状态有多少保留到当前时刻；另一个是输入门$\mathbf{i_t}$（input gate），它决定了当前时刻网络的输入有多少保存到单元状态。LSTM用输出门$\mathbf{o_t}$（output gate）来控制单元状态有多少输出到LSTM的当前输出值。

LSTM的前向计算过程如下：

$$\mathbf{z_t} = [\mathbf{h_{t-1}}, \mathbf{x_t}]$$

$$\mathbf{f_t} = \sigma(W_f \cdot \mathbf{z_t} + \mathbf{b_f})$$

$$\mathbf{i_t} = \sigma(W_i \cdot \mathbf{z_t} + \mathbf{b_i})$$

$$\overline{\mathbf{C}}_\mathbf{t} = \tanh(W_c \cdot \mathbf{z_t} + \mathbf{b_c})$$

$$\mathbf{C_t} = \mathbf{f_t} * \mathbf{C_{t-1}} + \mathbf{i_t} * \overline{\mathbf{C}}_\mathbf{t}$$

$$\mathbf{o_t} = \sigma(W_o \cdot \mathbf{z_t} + \mathbf{b_o})$$

$$\mathbf{h_t} = \mathbf{o_t} * \tanh(\mathbf{C_t})$$

为了更方便地推导LSTM的反向传播梯度公式，我们先计算LSTM在单步中产生的梯度公式：

$$\frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{o_t}} = diag(\tanh(\mathbf{C_t}))$$

$$\frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{C_t}} = diag(\mathbf{o_t} \odot (1 - \tanh(\mathbf{C_t})^2))$$

$$\frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{f_t}} = \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{C_t}} \frac{\partial \mathbf{C_t}}{\partial \mathbf{f_t}} = diag(\mathbf{o_t} \odot (1 - \tanh(\mathbf{C_t})^2) \odot \mathbf{C_{t-1}})$$

$$\frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{i_t}} = \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{C_t}} \frac{\partial \mathbf{C_t}}{\partial \mathbf{i_t}} = diag(\mathbf{o_t} \odot (1 - \tanh(\mathbf{C_t})^2) \odot \overline{\mathbf{C}}_\mathbf{t})$$

$$\frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \overline{\mathbf{C}}_\mathbf{t}} = \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{C_t}} \frac{\partial \mathbf{C_t}}{\partial \overline{\mathbf{C}}_\mathbf{t}} = diag(\mathbf{o_t} \odot (1 - \tanh(\mathbf{C_t})^2) \odot \mathbf{i_t})$$

$$\frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{C_{t-1}}} = \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{C_t}} \frac{\partial \mathbf{C_t}}{\partial \mathbf{C_{t-1}}} = diag(\mathbf{o_t} \odot (1 - \tanh(\mathbf{C_t})^2) \odot \mathbf{f_t})$$

$$\frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{net_{o,t}}} = diag(\tanh(\mathbf{C_t}) \odot \mathbf{o_t} \odot (1 - \mathbf{o_t}))$$

$$\frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{net_{f,t}}} = diag(\mathbf{o_t} \odot (1 - \tanh(\mathbf{C_t})^2) \odot \mathbf{C_{t-1}} \odot \mathbf{f_t} \odot (1 - \mathbf{f_t}))$$

$$\frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{net_{i,t}}} = diag(\mathbf{o_t} \odot (1 - \tanh(\mathbf{C_t})^2) \odot \overline{\mathbf{C}}_\mathbf{t} \odot \mathbf{i_t} \odot (1 - \mathbf{i_t}))$$

$$\frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{net_{\overline{C},t}}} = diag(\mathbf{o_t} \odot (1 - \tanh(\mathbf{C_t})^2) \odot \mathbf{i_t} \odot (1 - \overline{\mathbf{C}}_\mathbf{t}^{\,2}))$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{h_{t-1}}} &= \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{o_t}} \frac{\partial \mathbf{o_t}}{\partial \mathbf{h_{t-1}}} + \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{f_t}} \frac{\partial \mathbf{f_t}}{\partial \mathbf{h_{t-1}}} + \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{i_t}} \frac{\partial \mathbf{i_t}}{\partial \mathbf{h_{t-1}}} + \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \overline{\mathbf{C}}_\mathbf{t}} \frac{\partial \overline{\mathbf{C}}_\mathbf{t}}{\partial \mathbf{h_{t-1}}} \\ &= diag(\tanh(\mathbf{C_t}) \odot \mathbf{o_t} \odot (1 - \mathbf{o_t})) \cdot W_{oh} \\ &+ diag(\mathbf{o_t} \odot (1 - \tanh(\mathbf{C_t})^2) \odot \mathbf{C_{t-1}} \odot \mathbf{f_t} \odot (1 - \mathbf{f_t})) \cdot W_{fh} \\ &+ diag(\mathbf{o_t} \odot (1 - \tanh(\mathbf{C_t})^2) \odot \overline{\mathbf{C}}_\mathbf{t} \odot \mathbf{i_t} \odot (1 - \mathbf{i_t})) \cdot W_{ih} \\ &+ diag(\mathbf{o_t} \odot (1 - \tanh(\mathbf{C_t})^2) \odot \mathbf{i_t} \odot (1 - \overline{\mathbf{C}}_\mathbf{t}^{\,2})) \cdot W_{ch}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{x_t}} &= \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{o_t}} \frac{\partial \mathbf{o_t}}{\partial \mathbf{x_t}} + \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{f_t}} \frac{\partial \mathbf{f_t}}{\partial \mathbf{x_t}} + \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{i_t}} \frac{\partial \mathbf{i_t}}{\partial \mathbf{x_t}} + \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \overline{\mathbf{C}}_\mathbf{t}} \frac{\partial \overline{\mathbf{C}}_\mathbf{t}}{\partial \mathbf{x_t}} \\ &= diag(\tanh(\mathbf{C_t}) \odot \mathbf{o_t} \odot (1 - \mathbf{o_t})) \cdot W_{ox} \\ &+ diag(\mathbf{o_t} \odot (1 - \tanh(\mathbf{C_t})^2) \odot \mathbf{C_{t-1}} \odot \mathbf{f_t} \odot (1 - \mathbf{f_t})) \cdot W_{fx} \\ &+ diag(\mathbf{o_t} \odot (1 - \tanh(\mathbf{C_t})^2) \odot \overline{\mathbf{C}}_\mathbf{t} \odot \mathbf{i_t} \odot (1 - \mathbf{i_t})) \cdot W_{ix} \\ &+ diag(\mathbf{o_t} \odot (1 - \tanh(\mathbf{C_t})^2) \odot \mathbf{i_t} \odot (1 - \overline{\mathbf{C}}_\mathbf{t}^{\,2})) \cdot W_{cx}\end{aligned}$$

$$\frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{W_o}} = \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{net_{o,t}}} \frac{\partial \mathbf{net_{o,t}}}{\partial \mathbf{W_o}} = (\tanh(\mathbf{C_t}) \cdot \mathbf{o_t} \cdot (1 - \mathbf{o_t})) \cdot \mathbf{z_t^T}$$

$$\frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{W_f}} = \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{net_{f,t}}} \frac{\partial \mathbf{net_{f,t}}}{\partial \mathbf{W_f}} = (\mathbf{o_t} \cdot (1 - \tanh(\mathbf{C_t})^2) \cdot \mathbf{C_{t-1}} \cdot \mathbf{f_t} \cdot (1 - \mathbf{f_t})) \cdot \mathbf{z_t^T}$$

$$\frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{W_i}} = \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{net_{i,t}}} \frac{\partial \mathbf{net_{i,t}}}{\partial \mathbf{W_i}} = (\mathbf{o_t} \cdot (1 - \tanh(\mathbf{C_t})^2) \cdot \overline{\mathbf{C}}_\mathbf{t} \cdot \mathbf{i_t} \cdot (1 - \mathbf{i_t})) \cdot \mathbf{z_t^T}$$

$$\frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{W_c}} = \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{net_{c,t}}} \frac{\partial \mathbf{net_{c,t}}}{\partial \mathbf{W_c}} = (\mathbf{o_t} \cdot (1 - \tanh(\mathbf{C_t})^2) \cdot \mathbf{i_t} \cdot (1 - \overline{\mathbf{C}}_\mathbf{t}^{\,2})) \cdot \mathbf{z_t^T}$$

$$\frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{b_o}} = \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{net_{o,t}}} \frac{\partial \mathbf{net_{o,t}}}{\partial \mathbf{b_o}} = \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{net_{o,t}}} = diag(\tanh(\mathbf{C_t}) \odot \mathbf{o_t} \odot (1 - \mathbf{o_t}))$$

$$\frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{b_f}} = \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{net_{f,t}}} \frac{\partial \mathbf{net_{f,t}}}{\partial \mathbf{b_f}} = \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{net_{f,t}}} = diag(\mathbf{o_t} \odot (1 - \tanh(\mathbf{C_t})^2) \odot \mathbf{C_{t-1}} \odot \mathbf{f_t} \odot (1 - \mathbf{f_t}))$$

$$\frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{b_i}} = \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{net_{i,t}}} \frac{\partial \mathbf{net_{i,t}}}{\partial \mathbf{b_i}} = \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{net_{i,t}}} = diag(\mathbf{o_t} \odot (1 - \tanh(\mathbf{C_t})^2) \odot \overline{\mathbf{C}}_\mathbf{t} \odot \mathbf{i_t} \odot (1 - \mathbf{i_t}))$$

$$\frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{b_c}} = \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{net_{\overline{c},t}}} \frac{\partial \mathbf{net_{\overline{c},t}}}{\partial \mathbf{b_c}} = \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{net_{\overline{c},t}}} = diag(\mathbf{o_t} \odot (1 - \tanh(\mathbf{C_t})^2) \odot \mathbf{i_t} \odot (1 - \overline{\mathbf{C}_\mathbf{t}}^2))$$

2. 描述LSTM的反向传播

在训练过程中，我们需要计算Loss对各个参数的导数。通过BPTT算法，从loss开始，沿时间反向计算梯度（如果是多层LSTM，还要沿层反向计算）：

1. 由于我们之前已经计算过h_t对各个参数的导数，因此现在只要找出L与h_t之间的导数关系，就能通过链式求导法则求出L与各个t时刻参数的偏导数：

$$\begin{gathered} 设\mathbf{\hat{y}_t} = softmax(\mathbf{net_{y,t}}) \\ \mathbf{net_{y,t}} = V \cdot \mathbf{h_t} + \mathbf{b_q} \end{gathered}$$

$$L = -\frac{1}{T} \sum_{t=1}^{T} \sum_{i=1}^{N} y_{t,i} \log(\hat{y}_{t,i})$$

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{net_{y,t}}} = \hat{y}_t - y_t$$

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{h_t}} = (\frac{\partial \mathbf{h_{t+1}}}{\partial \mathbf{h_t}})^T \frac{\partial L}{\partial \mathbf{h_{t+1}}} + (\frac{\partial \mathbf{net_{y,t}}}{\partial \mathbf{h_t}})^T \frac{\partial L}{\partial \mathbf{net_{y,t}}}$$

在最后时刻T：

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{h_T}} = (\frac{\partial \mathbf{net_{y,T}}}{\partial \mathbf{h_T}})^T \frac{\partial L}{\partial \mathbf{net_{y,T}}}$$

观察前向计算可知，反向传播中C_t之前的节点还还有C_{t+1}，因此：

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{C_t}} = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{C_{t+1}}} \frac{\partial \mathbf{C_{t+1}}}{\partial \mathbf{C_t}} + \frac{\partial L}{\partial \mathbf{h_t}} \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{C_t}}$$

2. 对于各个W和b，我们知道它们的梯度是各个时刻梯度之和：

$$\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{W_o}} = \sum_t \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{h_t}} \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{W_o}}$$

$$\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{W_f}} = \sum_t \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{h_t}} \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{W_f}}$$

$$\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{W_i}} = \sum_t \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{h_t}} \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{W_i}}$$

$$\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{W_c}} = \sum_t \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{h_t}} \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{W_c}}$$

$$\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{b_o}} = \sum_t \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{h_t}} \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{b_o}}$$

$$\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{b_f}} = \sum_t \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{h_t}} \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{b_f}}$$

$$\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{b_i}} = \sum_t \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{h_t}} \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{b_i}}$$

$$\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{b_c}} = \sum_t \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{h_t}} \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{b_c}}$$

3. 对于embedding层的矩阵E, 其偏导数同理：

$$X = [\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ ... \ , \mathbf{x}_T]$$

$$X = E \cdot \mathbf{sentence} \quad (sentence\text{为单热点码的序列})$$

$$\mathbf{sentence} = [word1, word2, ..., word_T]$$

$$\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial E} = \sum_t \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{h_t}} \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{x_t}} \frac{\partial \mathbf{x_t}}{\partial \mathbf{E}}$$

4. 可轻松计算出全连接层参数的偏导数：

$$\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{b_q}} = \sum_t \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{net_{y,t}}}$$

$$\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial V} = \sum_t \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{net_{y,t}}} \mathbf{h_t}^T$$

PART 2

1. 处理数据集与初始化模型

本次实验使用了handout提供的唐诗小数据集，以及来自于《神经网络与深度学习》练习中的唐诗大数据集“poems.txt”（近5万首唐诗）。处理数据集的方法如下：

1. 设定输入单句的最大长度sentence_length（结尾标识符不计算在内）
2. 逐行检查原始数据集中的诗句（或检查每一首诗），若长度太小（会造成padding过多）则舍去，若长度超过设定最大长度则按最大长度截断。为筛选出的每一个诗句末尾添加结尾标识符E。
3. 使用fastNLP的DataSet和Vocabulary：将所有筛选出的诗句添加进数据集中，根据该数据集生成词表（添加unknown word标识符和padding标识符），对词表中的词作筛选（本实验选取词频>2的所有词汇，控制词表大小在6000以下）
4. 将数据集中的每个诗句的文字映射到词表中的索引，更新数据集。通过在单条数据末尾加padding的方法，将每条数据变为等长（使用fastNLP的Trainer训练时，fastNLP的Batch会帮助我们完成padding）
5. 将数据集按8:2的比例分为训练集和验证集

之后我们需要构建模型并初始化参数。本实验采用的网络结构是“embedding层--激活函数--单层LSTM”, 其中LSTM为自己编写，只使用了Pytorch的autograd模块。

在开始训练前我们要对embedding层和权重进行初始化。参数不能全部初始化为0，原因：

> 1. 初始参数需要破坏单元间的对称性。如果初始化权重为0，则对于有相同输入的单元，它们会一直以相同的梯度更新权重。迭代次数增加，各个单元的权重却基本相同，使得网络失去提取不同特征的能力。因此权重不能全部初始化为0。
> 2. embedding层的初始化与权重初始化同理。

通常初始化LSTM参数的方法有随机初始化，标准初始化和正交初始化。为避免引入超参，这里直接使用torch.nn默认的方法——随机初始化：

对于m个输入，n个输出的全连接层，权重初始化为$U(-\sqrt{\frac{1}{m}}, \sqrt{\frac{1}{m}})$，对偏置采取相同的随机初始化

对于embedding层，采用默认的高斯分布初始化：$N(0, 0.1)$

2. 用LSTM生成唐诗

2.1 利用FastNLP的Trainer模块和自建trainer函数训练

使用fastNLP的Trainer及其封装的方法，对模型进行训练。我们需要按trainer的要求来定义自己的模型，如模型forward和predict的输出必须是一个词典，且键必须与trainer中的默认设置相同或建立映射。

fastNLP提供了很好的early stop方法，帮助我们自动重新载入在给定评价方法下最好的模型。

```
trainer = Trainer(
    train_data=train_data,
    model=lstm_model,
    loss=CrossEntropyLoss(pred='pred', target='target'),
    metrics=AccuracyMetric(),
    n_epochs=50,
    batch_size=batch_size,
    print_every=10,
    validate_every=-1,
    dev_data=dev_data,
    use_cuda=True,
    optimizer=Adam(lr=learning_rate, betas=(0.5, 0.99)),
    check_code_level=2,
    metric_key='acc',
    use_tqdm=False,
)
```

目前trainer.py中封装的优化算法、准确率等接口很少。如果要使用我们所需的metrics方法——perplexity，必须自己建立一个继承fastNLP中MetricBase的类。

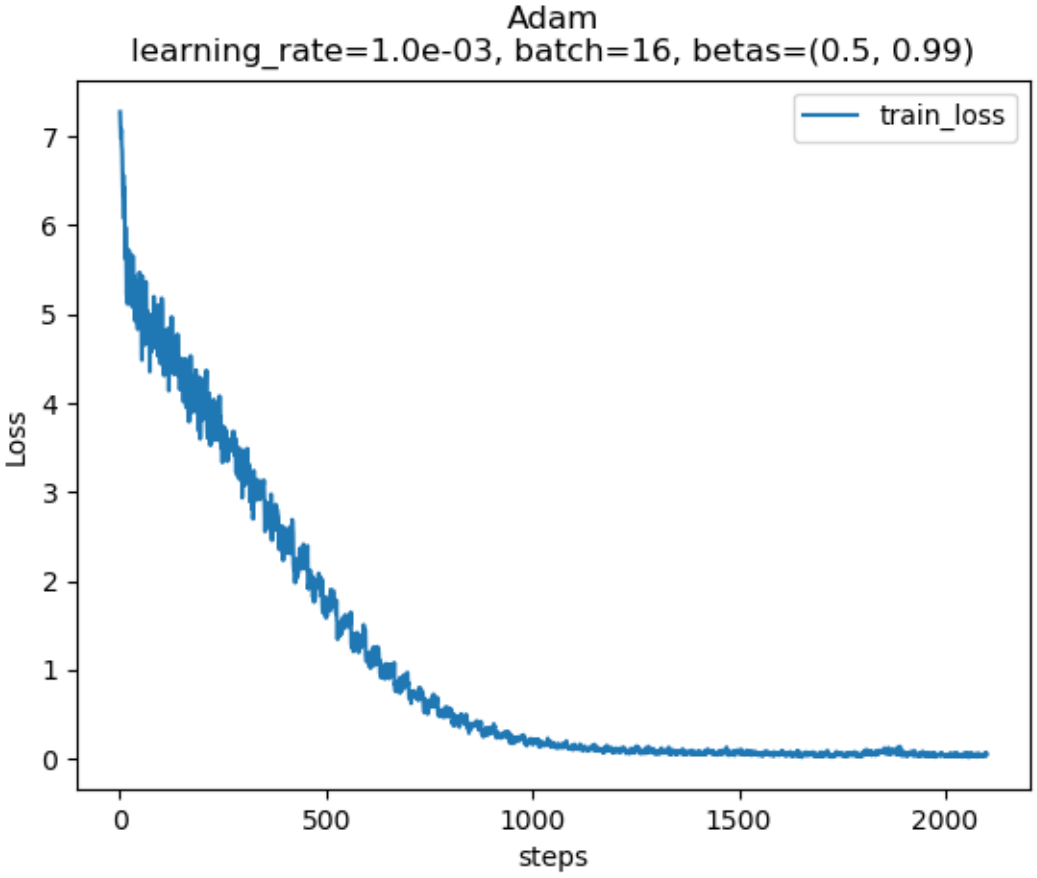
出于练习目的，我也使用了自己定义的trainer函数，结合fastNLP中的Batch模块，进行更加个性化的训练。

对于给出的小数据集，超参数设定：

> Vocabulary size = 1445
> Batch size = 16

> Sentence length = 25 (包含一个结尾标识符)
> Hidden size = 512
> Input size = 256
> Adam, learning_rate = 0.001, betas=(0.5, 0.99)

训练过程：



在给出的小数据集上尝试多次后，发现：

1. 由于数据集过小，如果在数据集中包含标点符号，则模型不能很好地学习到唐诗中标点符号的合适位置。而且生成的诗句往往达不到设定的sentence length。
2. 在小数据集上，模型十分容易过拟合，这体现为在训练过程中，经常出现：模型在训练集上的交叉熵损失下降，但在验证集上的困惑率（perplexity）单调上升。
3. 当模型刚能生成可阅读的诗句时$perplexity = 525$，$loss = 0.6$。而在$loss < 0.03$时，$perplexity > 4000$。

基本上只会生成数据集中有的诗句，如：

> 日：日夕故园意，汀洲春草生。何时一杯酒，与倚春风弄。

> 海：海亭秋日望，委曲见江山。染翰聊题壁，倾壶一解颜。

总之，该简单的模型在小数据集上的诗歌生成表现并不好,很容易过拟合,在训练的后期基本上只会生成内容相近的诗句，缺乏多样性。

2.2 更大的数据集

我使用了来自于《神经网络与深度学习》练习中的唐诗大数据集“poems.txt”，这之中大概有近50000首唐诗。处理后得到包含42110首诗的数据集。然后按1.1中的数据集处理方式拆分为训练集和验证集。

https://github.com/nndl/exercise/blob/master/for_chapter_6_RNN/poems.txt

超参数设定：

> Vocabulary size = 5416
> Batch size = 64
> Sentence length = 49 (包含一个结尾标识符)
> Hidden size = 512
> Input size = 512
> Adam, learning_rate = 0.001, betas=(0.5, 0.99)

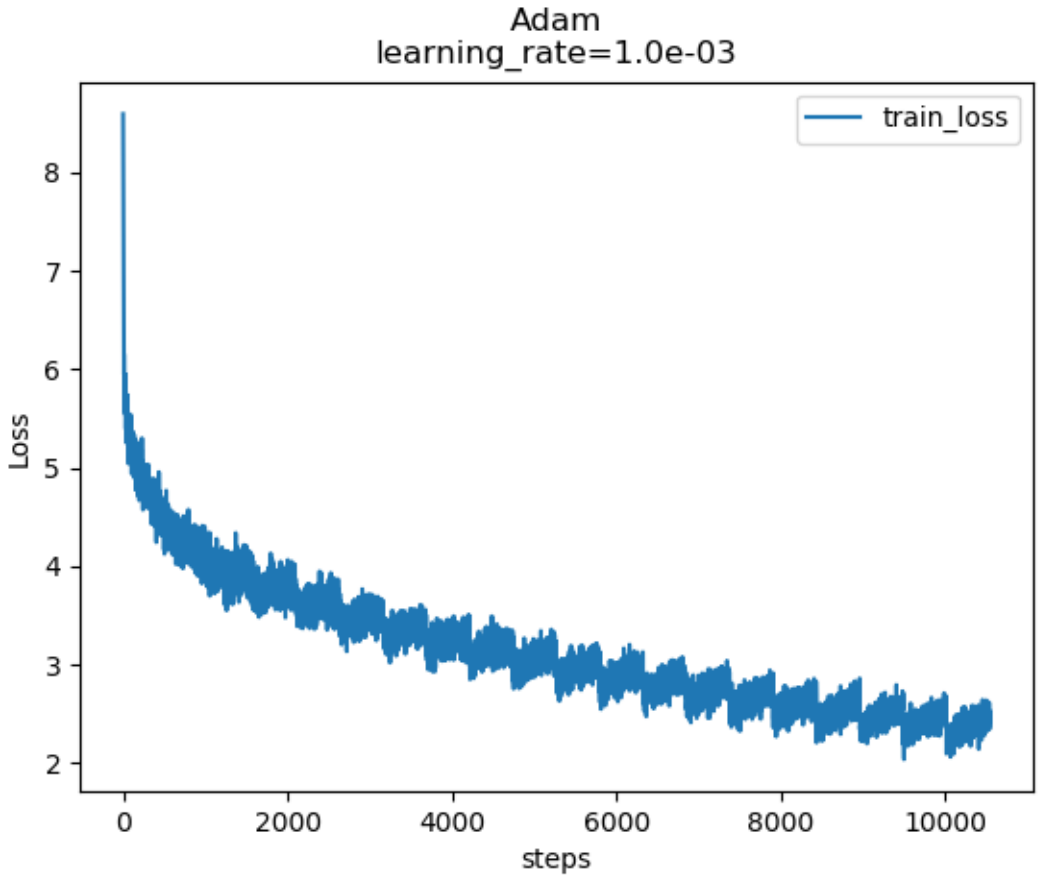
使用GPU在大数据集上训练的注意事项：

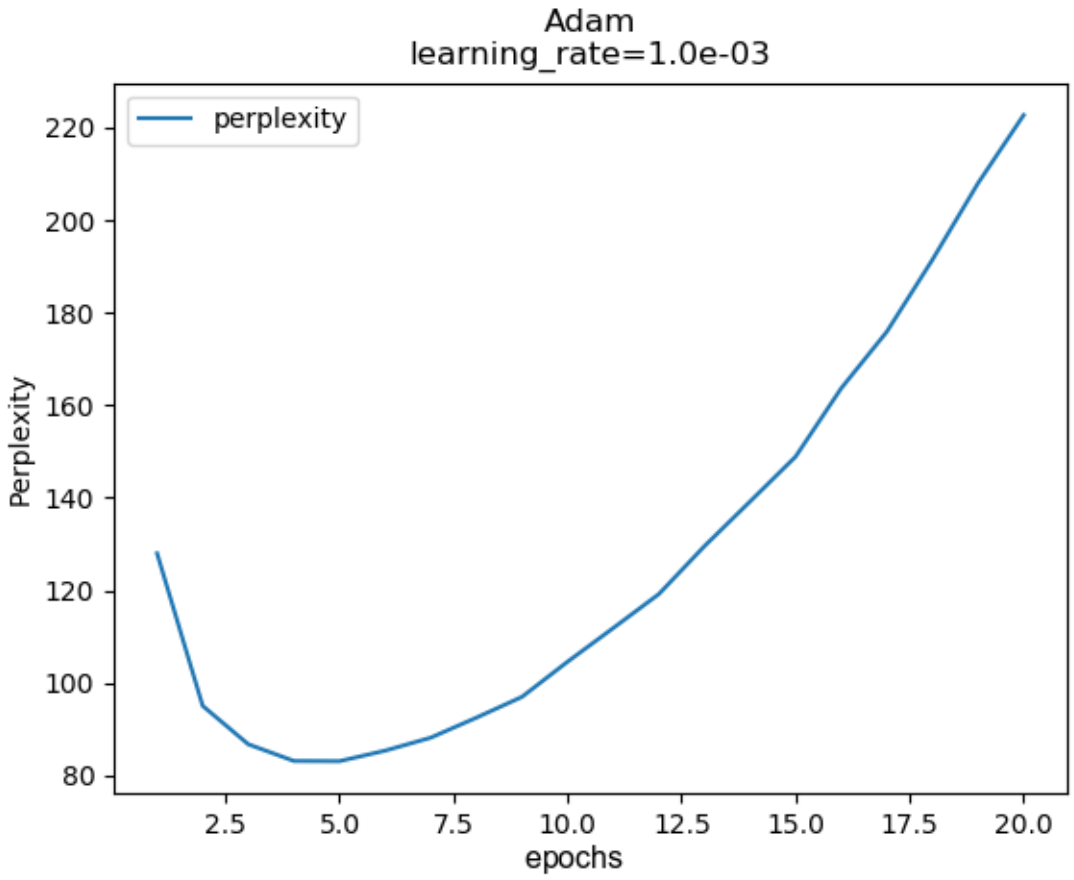
> 1. 在训练时，不涉及到反向传播的代码部分，例如验证、测试部分，请关闭autograd（比如用"with torch.no_grad():"），否则显存很容易溢出。
> 2. 在显存允许的情况下可以适当增大Batch，增加并行计算，更快地拟合模型。

在大数据集上，在跑了 2 个epoch后，模型便能较好地学到标点符号的位置，生成工整的诗句。还能学习到结尾标识符，生成长短不同的诗句。

跑了5个epoch后，模型便在验证集上达到最低的困惑率。

训练过程：





选取完成5个epoch时的模型。

在[0.6, 1.0]之间调整temperature term来使得诗句生成多样化，生成的诗句如下：

$Perplexity = 87.2$， $temperture = 0.8$

> 日：
> 日日出门时，登高望远天。云山初出岫，云雨入天山。
> 地僻人来久，山深水自闲。何当见山水，相对一相思。

> 红：
> 红烛下高楼，楼中望玉京。月明三峡晓，云里一阳台。
> 万里无人到，千家万里馀。明年江汉使，应见此时心。

> 山：
> 山中有酒熟，此去何时还。独有东山意，无人知此心。

> 夜：
> 夜来江上月明时，一夜风吹万里秋。
> 一片玉山千万里，一声风雨夜凄凉。

> 湖：
> 湖上春风满，春风日日长。绿苔生绿草，红树绿阴阴。

> 海：
> 海燕双飞去不回，一双飞去又回头。
> 人间有酒唯多病，一夜无心一夜愁。

> 月：
> 月出照南山，南山临古城。风烟入户牖，水宿鹭群鸥。
> 山色连云远，山川带夕阳。何时归故里，应见此中人。

2.3 使用numpy实现LSTM

由part1中关于前向计算和反向传播算法的推导，建立numpy实现的LSTM类。在反向传播中，用循环的方式实现公式中的“累加”，并注意在整个反向传播链上计算loss对ht和Ct的偏导数。

随机生成输入，使用数值梯度对反向传播计算出的梯度进行验证。也可以实现pytorch的LSTM方法，给2个模型以相同的初始参数，在相同的随机输入下比较2个模型计算的梯度是否相同。方法包含在lstm_numpy.py中。
（代码实现参考了 http://blog.varunajayasiri.com/numpy_lstm.html ）

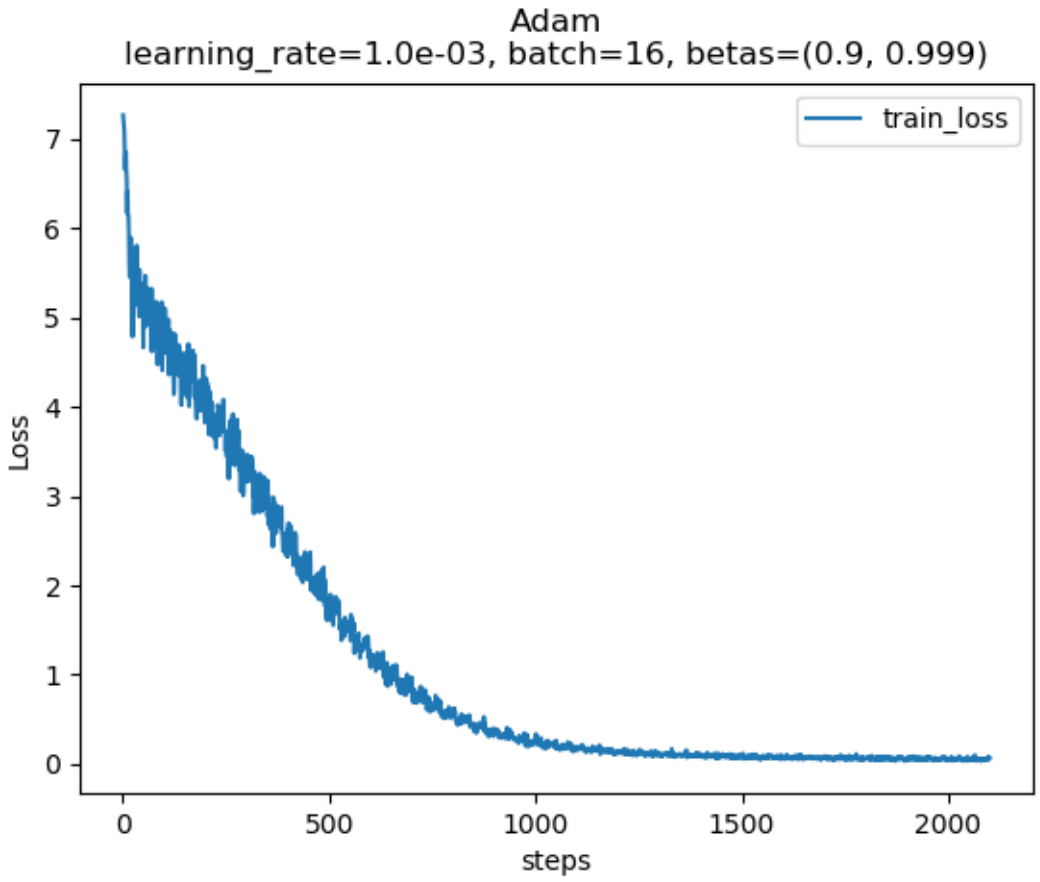
3. 梯度下降的优化算法

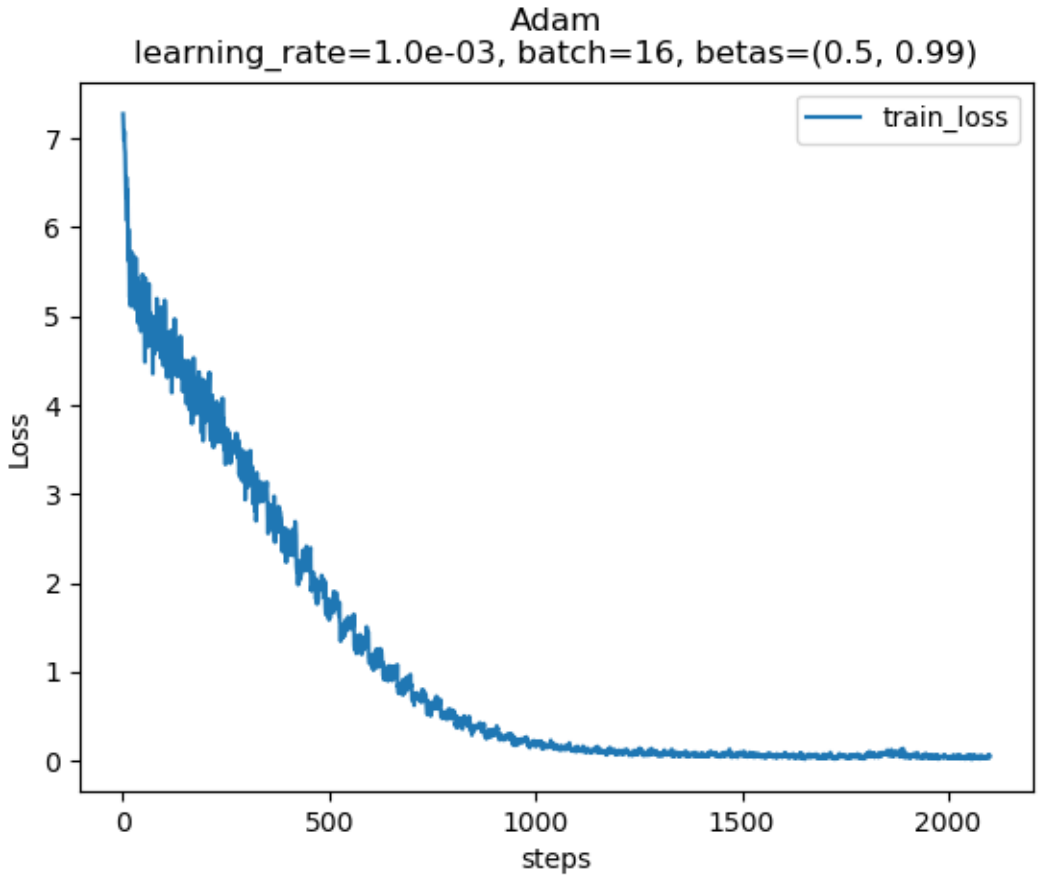
3.1 Adam

Adam算法是一种学习率自适应的优化算法，相当于结合了RMSprop和动量，利用梯度的一阶矩估计和二阶矩估计动态调整参数学习率，且包含偏置修正，使得参数变化比较平稳。Adam算法有默认的超参数设置，但它对超参数的选择鲁棒性也特别高，比如学习率取0.001和0.1， 模型参数都不会发散，只是学习率较大时参数更新路径在极小值点附近的环绕区域会更大。一般取学习率为0.001，根据实际情况大致调整就行。

对于betas的选择，默认设置为(0.99, 0.999)。但根据实验，减小第一个超参数，会缩小更新路径在极小值附近的环绕区域；而减小第二个超参数,会使更新路径变得更加曲折。因此很多文献和项目中使用betas=(0.5, 0.99)

下面给出了2种Adam超参选择方法在小数据集上的loss下降曲线，可见超参的选择对Adam算法影响不大，但观察具体数据可以发现，第二种参数选择方法收敛速度略快且最后得到的loss更小。

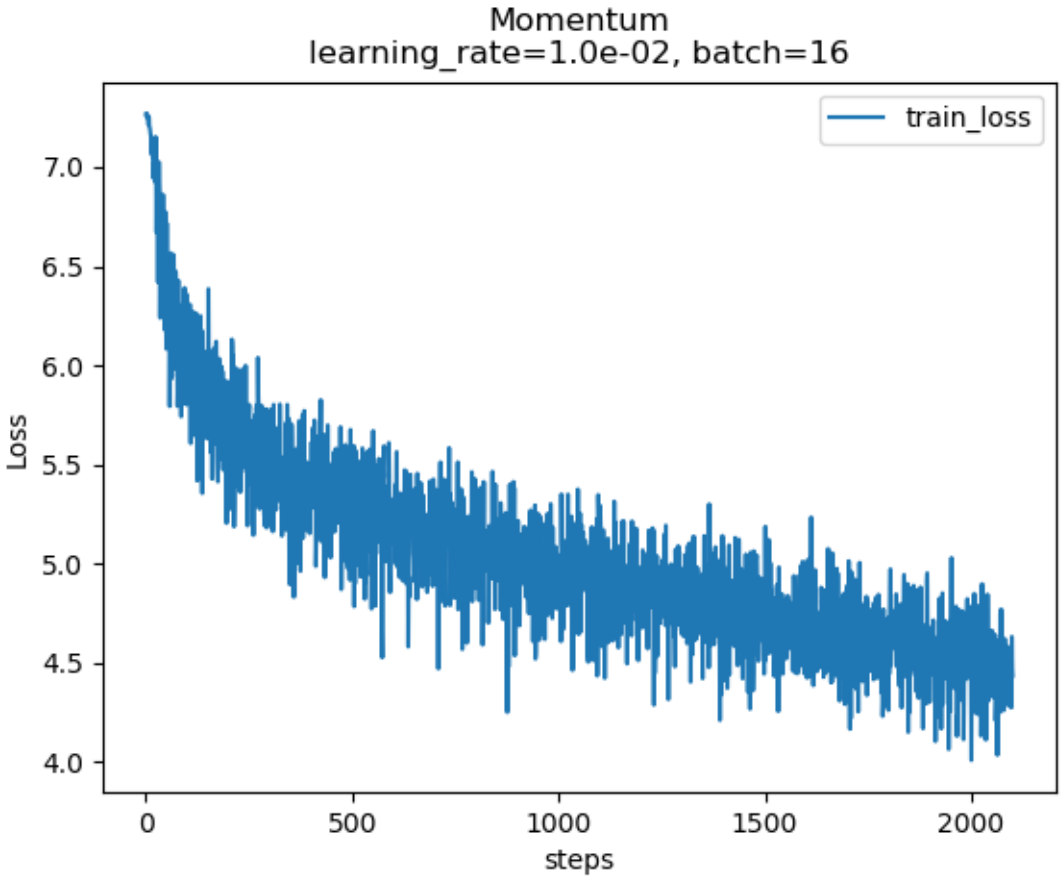

Adam
learning_rate=1.0e-03, batch=16, betas=(0.9, 0.999)
train_loss
Loss
steps
0
1
2
3
4
5
6
7
0
500
1000
1500
2000

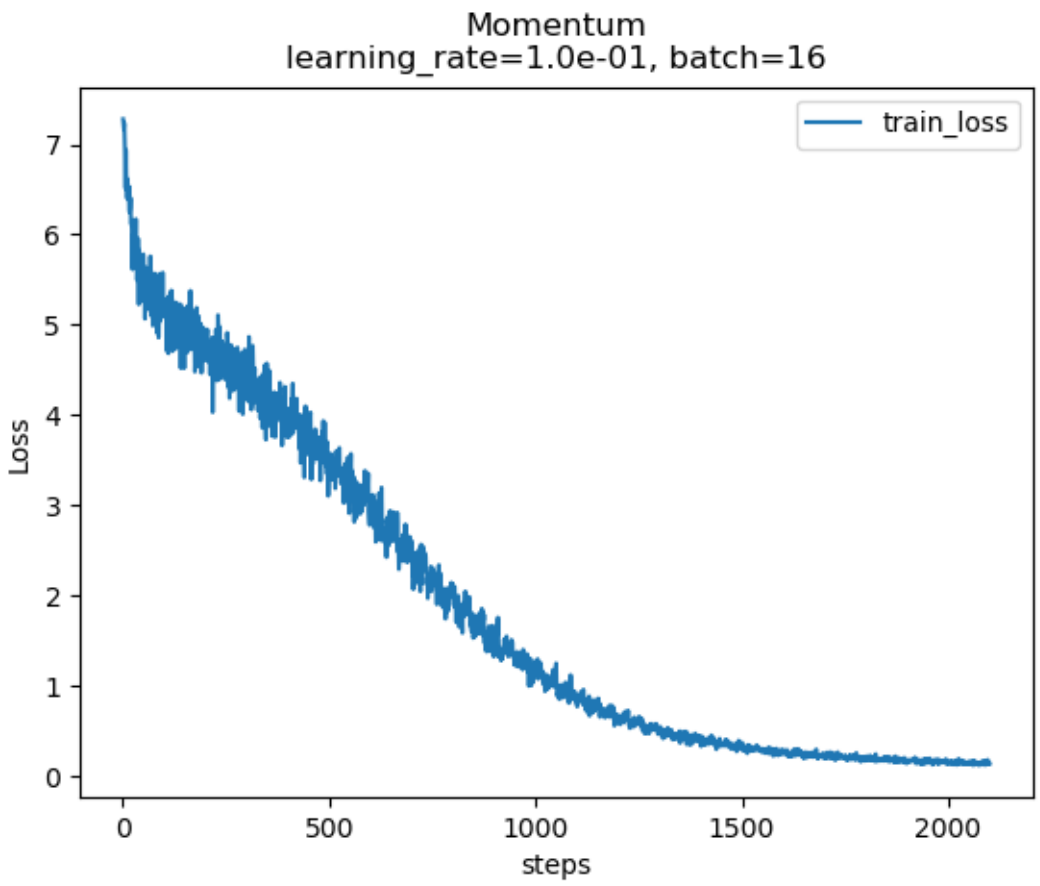

Adam
learning_rate=1.0e-03, batch=16, betas=(0.5, 0.99)
train_loss
Loss
steps
0
1
2
3
4
5
6
7
0
500
1000
1500
2000

3.2 带动量的SGD

带动量的SGD算法对学习率的选取要求比较高，相差10倍的学习率，训练效果可能十分不一样（如下2图）

一般的方法是选择较大的动量(momentum=0.9)，和"小"的学习率(learning_rate<=0.1),但这个学习率的选取还是依靠具体情况下的试验。动量也可以在训练过程中调整，往往大动量可以加速收敛。





3.3 优化方法的numpy代码实现

大部分优化算法在计算一步梯度下降时，往往需要用到之前（所有）的梯度，所以需要在每个参数上增加额外的空间，记录之前一步梯度下降的计算信息（比如Adagrad对梯度平方的累加）。

SGD，Adagrad，RMSprop，带动量的SGD方法，代码实现如下：

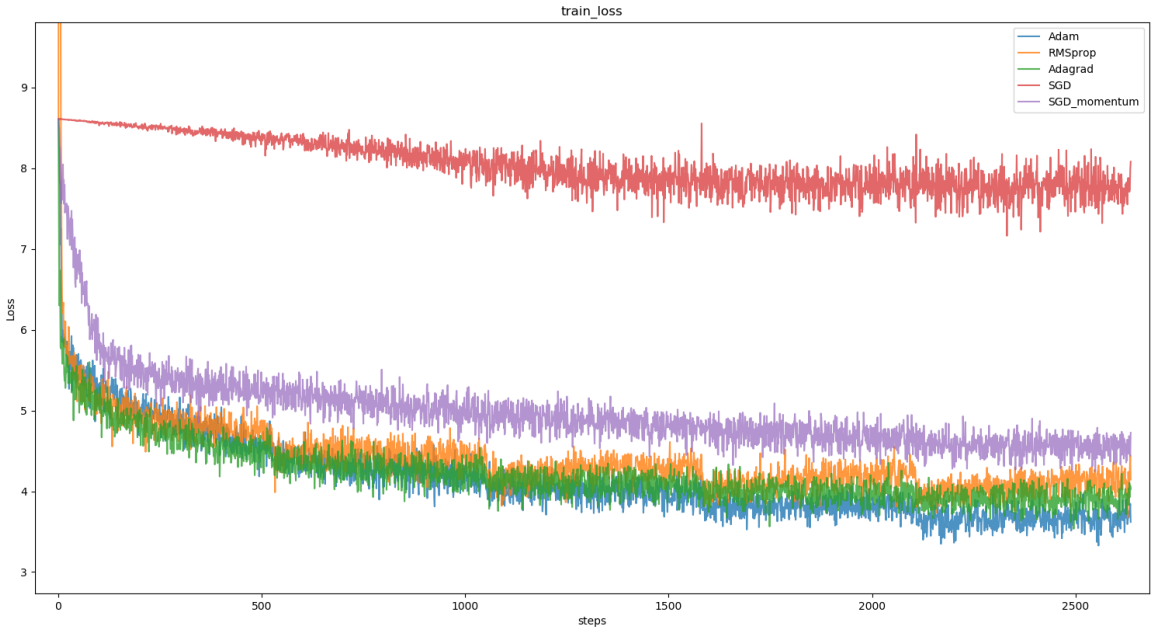
```
# p是参数, p.v是参数值, p.d是梯度, p.m是记录之前梯度下降中的额外计算信息
def update_sgd(self, learning_rate):
    for p in self.all():
        p.v -= learning_rate * p.d

def update_Adagrad(self, learning_rate, epsilon=1e-8):
    for p in self.all():
        p.m += p.d * p.d
        p.v -= learning_rate * p.d / np.sqrt(p.m + epsilon)


def update_RMSprop(self, learning_rate, beta, epsilon=1e-8):
    for p in self.all():
        p.m = beta * p.m + (1 - beta) * p.d * p.d
        p.v -= learning_rate * p.d / np.sqrt(p.m + epsilon)

def update_sgd_momentum(self, learning_rate, momentum=0.9):
    for p in self.all():
        p.m = momentum * p.m - learning_rate * p.d
        p.v += p.m
```

3.4 对5种优化方法的比较

采用以下5种优化方法，在大数据集上进行训练，观察损失下降情况：

Adam:learning rate=1e-3, betas=(0.5, 0.99)
RMSprop: learning rate = 1e-2, alpha=0.99, eps=1e-8
Adagrad: learning rate=1e-2
SGD: learning rate=1e-3
SGD(momentum=0.9): learning rate=1e-1

训练集损失下降如下图所示：



可见：

1. 若固定学习率，则SGD方法收敛速度很慢；而带动量的SGD方法则比普通的SGD方法表现好很多，但仍比不上Adam、RMSprop和Adagrad。使用动量法时，若要取得更好的效果，则需要在训练过程中动态调整学习率和动量大小。
2. 在曲线所演示的前5个epoch中，Adam、RMSprop和Adagrad表现差不多。RMSprop和Adagrad在训练初期会让损失下降得很快，但随着迭代次数增加，RMSprop和Adagrad逐渐陷入瓶颈，但Adam损失下降的持久力更强（在3个epochs后Adam得到的损失值便比其他方法都低，且仍在以比其他方法更快的速率下降）
3. 在上面的实验中，RMSprop优化算法采用的是默认配置。经过调参，在调整学习率为1e-3后，RMSprop的表现变好，其训练的最终损失值与Adam得到的最终损失值基本相同，且初期损失下降更快。
4. 我们知道，Adagrad算法的缺点是在经过一定次数的迭代依然没有找到最优点时,由于这时的学习率已经非常小,很难再继续找到最优点。这应该是Adagrad在后期乏力的原因之一。