实验内容：

1.numpy实现LSTM前项传播和反向求导的过程。

2.numpy实现SGD，Momentum，Nesterov，Adagrad，Adadelta，RMSProp，Adamax，Nadam，AdaBound优化器。

part 1：

首先计算各个变量单步的梯度：

$$\frac{\partial h_t}{\partial o_t} = \tanh(c_t) * h_t$$
$$\frac{\partial h_t}{\partial c_t} = o_t * (1 - \tanh(c_t) * \tanh(c_t)) * h_t + c_t$$
$$\frac{\partial h_t}{\partial f_t} = c_{t-1} * \frac{\partial h_t}{\partial c_t}$$
$$\frac{\partial h_t}{\partial i_t} = \tilde{c_t} * \frac{\partial h_t}{\partial c_t}$$
$$\frac{\partial h_t}{\partial c_{t-1}} = f_t * \frac{\partial h_t}{\partial c_t}$$
$$\frac{\partial h_t}{\partial \tilde{c_t}} = i_t * \frac{\partial h_t}{\partial c_t}$$

$$\frac{\partial h_t}{\partial w_i} = z^T \cdot ((1 - i_t) * i_t * \frac{\partial h_t}{\partial i_t})$$
$$\frac{\partial h_t}{\partial w_f} = z^T \cdot ((1 - f_t) * f_t * \frac{\partial h_t}{\partial f_t})$$
$$\frac{\partial h_t}{\partial w_o} = z^T \cdot ((1 - o_t) * o_t * \frac{\partial h_t}{\partial o_t})$$
$$\frac{\partial h_t}{\partial w_{\tilde{c}}} = z^T \cdot ((1 - \tilde{c_t} * \tilde{c_t}) * \frac{\partial h_t}{\partial \tilde{c_t}})$$

$$\frac{\partial h_t}{\partial b_i} = \sum ((1 - i_t) * i_t * \frac{\partial h_t}{\partial i_t})$$
$$\frac{\partial h_t}{\partial b_f} = \sum ((1 - f_t) * f_t * \frac{\partial h_t}{\partial f_t})$$
$$\frac{\partial h_t}{\partial b_o} = \sum ((1 - o_t) * o_t * \frac{\partial h_t}{\partial o_t})$$
$$\frac{\partial h_t}{\partial w_{\tilde{c}}} = \sum ((1 - \tilde{c_t} * \tilde{c_t}) * \frac{\partial h_t}{\partial \tilde{c_t}})$$

$$\frac{\partial h_t}{\partial a_t} = [(1-i_t)*i_t*\frac{\partial h_t}{\partial i_t},(1-f_t)*f_t*\frac{\partial h_t}{\partial f_t},(1-o_t)*o_t*\frac{\partial h_t}{\partial o_t},(1-g_t*g_t)*\frac{\partial h_t}{\partial \tilde{c}_t}]$$

$$w_i = \begin{bmatrix} w_{i_h} \\ w_{i_x} \end{bmatrix}, w_f = \begin{bmatrix} w_{f_h} \\ w_{f_x} \end{bmatrix}, w_o = \begin{bmatrix} w_{o_h} \\ w_{o_x} \end{bmatrix}, w_g = \begin{bmatrix} w_{g_h} \\ w_{g_x} \end{bmatrix}$$

$$w_x = [w_{i_x}, w_{f_x}, w_{o_x}, w_{g_x}]$$

$$w_n = [w_{i_h}, w_{f_h}, w_{o_h}, w_{g_h}]$$

$$\frac{\partial h_t}{\partial x_t} = \frac{\partial h_t}{\partial a_t} \cdot {w_x}^T$$

$$\frac{\partial h_t}{\partial h_{t-1}} = {w_h}^T$$

实现代码如下：

```
def step_backward(self, dnext_h, dnext_c, cache):
        i_t, f_t, o_t, g_t, next_c, next_h, x, prev_h, prev_c, Wx, Wh, b = cache

        do_t = np.tanh(next_c) * dnext_h
        dc_t = o_t * (1 - np.tanh(next_c) * np.tanh(next_c)) * dnext_h + dnext_c
        df_t = prev_c * dc_t
        di_t = g_t * dc_t
        dprev_c = f_t * dc_t
        dg_t = i_t * dc_t

        dai = (1 - i_t) * i_t * di_t
        daf = (1 - f_t) * f_t * df_t
        dao = (1 - o_t) * o_t * do_t
        dag = (1 - g_t * g_t) * dg_t
        da = np.hstack((dai, daf, dao, dag))

        dWx = np.dot(x.T, da)
        dWh = np.dot(prev_h.T, da)
        db = np.sum(da, axis=0)
        dx = np.dot(da, Wx.T)
        dprev_h = np.dot(da, Wh.T)

        return dx, dprev_h, dprev_c, dWx, dWh, db
```

整个序列的反向求导过程代码如下：

```
def backward(self, dh):
        N, T, H = dh.shape
        i_t, f_t, o_t, g_t, next_c, next_h, x, prev_h, prev_c, Wx, Wh, b = self.cache[T-
1]
        D = x.shape[1]

        dprev_h = np.zeros((N, H))
        dprev_c = np.zeros((N, H))
        dx = np.zeros((N, T, D))
        dh0 = np.zeros((N, H))
```

```
        dWx = np.zeros((D, 4*H))
        dWh = np.zeros((H, 4*H))
        db = np.zeros((4*H, ))

        for i in range(T-1, -1, -1):
            step_cache = self.cache[i]
            dnext_h = dh[:, i, :] + dprev_h
            dnext_c = dprev_c
            dx[:, i, :], dprev_h, dprev_c, dWx_t, dWh_t, db_t = \
                self.step_backward(dnext_h, dnext_c, step_cache)
            dWx += dWx_t
            dWh += dWh_t
            db += db_t

        dh0 = dprev_h

        return dx, dh0, dWx, dWh, db
```

part 2:

模型的超参如下：

vocabulary size: 2508

batch size: 32

sentence length: 128

hidden size: 128

input size: 128

详见config.json文件

```json
{
  "num_epochs": 30,
  "generate": true,
  "train": true,
  "continue": false,
  "perplexity_threshold": 1,
  "tau": 1,
  "data": {
    "use_mini": true,
    "mini_data_path": "dataset/tang_mini.npz",
    "data_path": "dataset/tang_big.npz",
    "batch_size": 1
  },
  "model": {
    "wordvec_dim": 128,
    "hidden_dim": 128,
    "optimizer": "Adam",
    "optim_config": {
      "learning_rate": 1e-2,
      "beta1": 0.9,
      "beta2": 0.999
    }
  }
}
```

实验报告:

1.如果将模型参数全部初始化为零，后续运算的乘法操作将无法产生有效的梯度（始终为0），使得无法通过反向求导对模型进行优化，但是对于偏置项，可以初始化为0。embedding层如果全部初始化为0，会出现词的特征之间没有区分度，模型后续的优化无法正常实现。

一般常见的做法使用指定参数的正态来对参数进行初始化，不同类型的层所指定的正态分布参数不同，如卷积层和全连接层一般指定均值为0，方差为0.02，如果带有Batch Normalize的话指定均值为1，方差为0.02。

2.生成的唐诗如下:

```
Input a word:月
Model Loaded.
月应知君命，不偶同舟复。
来烹龙象经，行处山微张。
翼纵漠沙一，年竹前溪阴。
崖常抱雪人，累岁期再逢。
```

```
Input a word:红
Model Loaded.
红害罢骢吟，到泉罄仙舟。
君为朝落孤，英尤见皇之。
蟠未遑摇泽，深花疏旗掣。
有细腰青嶂，但愿长安本。
```

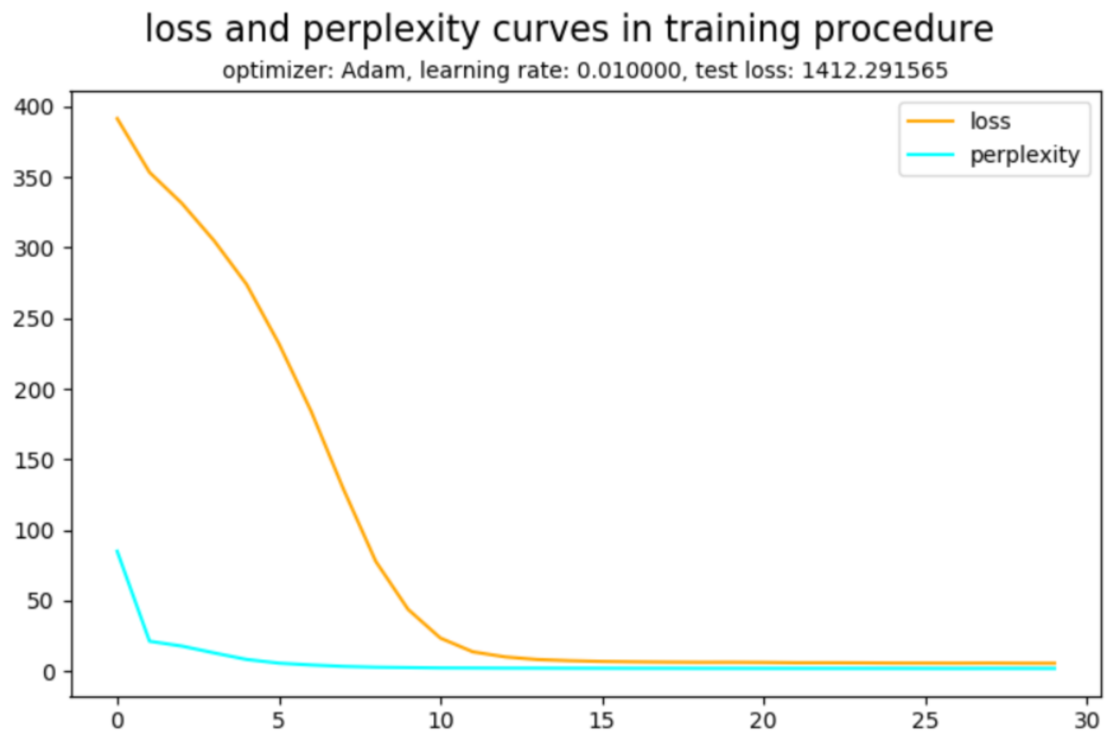
```
Input a word:山
Model Loaded.
山愚外去遥，闻牛惟我理。
花珍暖香筇，载揖龙舍近。
暮但飞萧萧，我材到泉绕。
津低离楚襄，宅人累累谷。
```

```
Input a word:夜
Model Loaded.
夜雪我未机，者田心茫负。
海亭高堂方，自天可涉抚。
头插二外丸，千岁一举竹。
昼里无隔新，幄青嶂见昨。
```

```
Input a word:湖
Model Loaded.
湖载揖海中，迷邦荆负楚。
魂千岩琴歌，林栖雨劝主。
说主缚湿望，夫雪复来圣。
罢病濡连我，观鱼传无人。
```

```
Input a word:海
Model Loaded.
海笙惟根去，承又同耕者。
敌如园荆负，鸣千刀日酩。
听白生何赩，君命之育搏。
因风龙旃翻，有细慢谷未。
```

由于用numpy实现的优化器仅仅依照优化算法的原始公式，而pytorch中的实现的优化器做了进一步的优化，如加入weight_decay这一正则项，所以梯度不会完全一致。但是，**对于提供的tangshi.txt中的数据，模型的training loss可以降低到很小的值，过拟合训练集**：




```
The epoch : 30
The epoch costs time: 57.08 s
The training loss is: 5.609158
The perplexity is: 1.931278
Model Saved.
```

3.实现了SGD，Momentum，Nesterov，Adagrad，Adadelta，RMSProp，Adamax，Nadam，AdaBound共9个优化器，详见optim.py文件。

除教材中提到的6个优化器之外，额外实现了3个：

1. Adamax是Adam的一种变体，学习率的范围更加简单。Adamax的公式如下：

$$g_t = \nabla_{\theta_{t-1}} f(\theta_{t-1})$$
$$m = \frac{\beta_1 * m + (1 - \beta_1) * g_t}{1 - \beta^t}$$
$$v = \max(\beta_2 * v, |g_t|)$$
$$\Delta\theta = -\frac{\alpha * m}{v + \epsilon}$$

2. Nadam相当于一个带有Nesterov动量项的Adam。Nadam的公式如下：

$$g_t = \nabla_{\theta_{t-1}} f(\theta_{t-1})$$
$$\hat{g}_t = \frac{g_t}{1-\prod_{i=1}^{t}\beta_{1_i}}$$
$$m_t = \beta_{1_t} * m_{t-1} + (1-\beta_{1_t}) * g_t$$
$$\hat{m}_t = \frac{m_t}{1-\prod_{i=1}^{t+1}\beta_{1_i}}$$
$$n_t = \beta_2 * n_{t-1} + (1-\beta_2) * g_t^2$$
$$\hat{n_t} = \frac{n_t}{1-\beta_2^t}$$
$$\bar{m_t} = (1-\beta_{1_t})\hat{g_t} + \beta_{1_{t+1}}\hat{m_t}$$
$$\Delta\theta_t = -\frac{\alpha\bar{m_t}}{\sqrt{\hat{n_t}}+\epsilon}$$

Nadam对学习率有了更强的约束，同时对梯度的更新也有更直接的影响，一般情况下载使用RMSProp或者Adam的地方，使用Nadam效果会更好。

3. AdaBound是今年ICLR上新提出的一个优化算法，号称有Adam的速度和SGD的性能。公式如下：

$$g_t = \nabla f_t(\theta_t)$$
$$m_t = \beta_{1_t} m_{t-1} + (1-\beta_{1_t}) g_t$$
$$v_t = \beta_2 v_{t-1} + (1-\beta_2) g_t^2$$
$$V_t = diag(v_t)$$
$$\hat{\eta_t} = Clip(\frac{\alpha}{\sqrt{V_t}}, \eta_l(t), \eta_u(t))$$
$$\eta_t = \frac{\hat{\eta_t}}{\sqrt{t}}$$
$$\Delta\theta_t = \eta_t * m_t$$
$$where\ \eta\ is\ the\ learning\ rate, and\ \eta_l/\eta_u\ is\ the\ lower/upper\ bound\ of\ learning\ rate.$$

其余详见教材。

这次实验中由于问题本身的复杂性有限，除了SGD和Momentom的优化速度明显慢于Adam类优化器之外，其余基本无明显的区别。

补充材料：

实验的文件目录如下:

ckpt
dataset
config.json
data.py
engine.py
loss.py
main.py
model.py
model_parts.py
optim.py
utility.py

1. ckpt中保存有训练好的模型，格式为.npz，使用numpy的savez_compressed函数保存，详见engine.py中的save_model函数。
2. dataset中有两个数据集，一个是tang_mini.npz，为课程github中提供的数据进行预处理后的压缩文件，另一个是tang_big.npz，来自于全唐诗，和上一个数据做了同样的处理，不同之处在于没有去掉标点符号，默认通过模型来生成标点符号，而不是手动添加，且数据规模较大。
3. config.json中用来设置和记录模型的参数。
4. data.py中为预处理文本数据和获取训练使用数据的函数。
5. engine.py中搭建了整个流程的框架，包括：

- 初始化模型和优化器
- 获取训练/验证/测试数据
- 保存模型
- 加载模型
- 训练和测试
- 计算困惑度
- 生成诗词

6. loss.py中为计算soft max (tempreture term) 的loss函数。
7. main.py为主程序，根据config.json中的参数来决定训练/继续训练模型或测试模型、生成诗句。
8. model.py中定义了用来诗词生成的模型，仿照pytorch的风格编写，考虑到遍历，一些细节与pytorch的风格略有不同。
9. model_parts.py中定义了主模型用到的小模型，包括：

- Embedding
- LSTM
- 序列全连接模型
- 全连接模型

10. optim.py中用numpy实现了用到的优化器，包括：

- SGD
- Adam
- Momentum
- Nesterov
- Adagrad

- Adadelta
- RMSProp
- Adamax
- Nadam
- AdaBound

11. utility.py中定义了用到的一些工具函数。

整个实验中没有使用pytorch，全部使用numpy完成，所以对于规模较大的数据，训练会非常慢，所以建议使用tang_mini.npz作为训练数据。

好像无法上传除了.py之外的文件，为了确保程序能正常运行，需要在文件目录下新建dataset文件夹，并将给出的数据tang.txt放在该文件夹中，同时新建config.json文件，内容如下：

```
{
  "num_epochs": 30,
  "generate": true,
  "train": true,
  "continue": false,
  "perplexity_threshold": 1,
  "tau": 1,
  "data": {
    "use_mini": true,
    "mini_data_path": "dataset/tang_mini.npz",
    "data_path": "dataset/tang_big.npz",
    "batch_size": 1
  },
  "model": {
    "wordvec_dim": 128,
    "hidden_dim": 128,
    "optimizer": "Adam",
    "optim_config": {
      "learning_rate": 1e-2,
      "beta1": 0.9,
      "beta2": 0.999
    }
  }
}
```

之后运行main.py文件。