

\* Teacher: Zhou. TA: Yuan Xu

## 1st 张逸凯

Department of Computer Science and Technology

Nanjing University

@gmail.com

在我刚开始接触自然语言,句子序列的学习任务时,我渐渐认识到这是一般神经网络解决不了的问题,首先在输入输出层面,无法做到处理不同长度的句子.其次一般神经网络无法学习句子中不同位置的词带来的信息.比如我去中国与我离开中国,输出层是某个词作为目的地与出发地的概率,对于上面两句话同样是"中国"这个词的输入,一般神经网络只能输出同样的结果,但这显然第一句话中"中国"作为目的地,第二句话中作为出发地.

RNN的隐含层是有记忆的,就像我们人在阅读的时候大脑中已经有之前学习过的东西了,在学习的基础上继续学习,RNN在看见下一个词的时候,还会把之前输入的作为当前输入的一部分,共同作用.

第一层的隐含层内激活值会传到下一次输入,在每一步都会,直到最后一步.可以使用零向量来作为第一层的激活值.RNN在处理当前词时,还考虑之前它所见过的词,这就是为什么它能学习位置信息的原因.

这里隐含层的参数是共享的,接下来我将详细推导参数传递的过程,

The hidden layer parameter initialization:  $a^{(0)} = \overrightarrow{0}$ 

First propagation: 
$$a^{(1)} = g_1 \left( W_{aa} a^{(0)} + W_{ax} x^{(1)} + b_a \right)$$

First layer output: 
$$\hat{y}^{(1)} = g(W_{u_0}a^{(1)} + b_u)$$

很容易可以推广到第i层:

$$a^{(t)} = g \left( W_{aa} a^{(t-1)} + W_{ax} x^{(t)} + b_a \right)$$
$$\hat{y}^{(t)} = g \left( W_{ya} a^{(t)} + b_y \right)$$

<sup>\*</sup>谢谢老师和助教哥的耐心批改.

这里是指对第一个词的第一次forward propagation. 其中g是激活函数, 一般使用tanh.  $x^{<i>}$  是第i次输入,  $\hat{y}^{<i>}$  是第i次输出. a是隐含层参数矩阵, W 是网络的参数矩阵,  $b_y$ 是当前偏置常量.

$$a^{<0>} \longrightarrow \bigcup_{i=1}^{\tilde{y}<1>} a^{<1>} \bigcup_{i=1}^{\tilde{y}<2>} a^{<2>} \bigcup_{i=1}^{\tilde{y}<3>} \cdots a^{} \bigcup_{i=1}^{\tilde{y}} a^{<1>} \cdots a^{} \bigcup_{i=1}^{\tilde{y}$$

结合RNN的结构图我们可以更清楚的理解各参数的传导过程. 我在上面故意把W矩阵分开来写,可以更好的分层来看每一词进入网络后的传播过程. 论文里给出的一般都是通过数学处理之后合并的矩阵形式:

$$W \begin{bmatrix} a^{(t-1)} \\ x^{(t)} \end{bmatrix} = [W_{aa}W_{ax}] \begin{bmatrix} a^{(t-1)} \\ x^{(t)} \end{bmatrix} = W_{aa}a^{(t-1)} + W_{ax}x^{(t)}$$

接下来自然是backpropagation through time, 非常有趣的名字, 先来看loss function, 是交叉熵, 它代表了在某个时间步上对一个词预测的损失:

$$\mathcal{L}^{(t)}\left(\hat{y}^{(t)}, y^{(t)}\right) = -y^{(t)}\log \hat{y}^{(t)} - \left(1 - y^{(t)}\right)\log \left(1 - \hat{y}^{(t)}(t)\right)$$

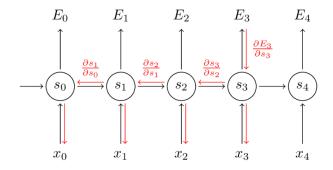
$$\mathcal{L}(\hat{y}, y) = \sum_{t=0}^{T_y} \mathcal{L}^{(t)} \left( \hat{y}^{(t)}, y^{(t)} \right)$$

在前向传播的时候计算loss function, 在其相反方向推导各个参数, 在每一个时间步的推导中, 明确我们需要计算的是相对于参数的误差梯度, 然后通过SGD或者其他计算更新参数. 注意对每一个时间步需要求和:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial W} = \sum_{t} \frac{\partial \mathcal{L}_{t}}{\partial W}$$

很自然地运用链式法则:

$$\frac{\partial \mathcal{L}_i}{\partial W} = \frac{\partial \mathcal{L}_i}{\partial \hat{y}_i} \frac{\partial \hat{y}_i}{\partial W}$$
$$= \frac{\partial \mathcal{L}_i}{\partial \hat{y}_i} \frac{\partial \hat{y}_i}{\partial a_i} \frac{\partial a_i}{\partial W}$$



这里采用PyTorch对实现部分做一个详述, 其实和传统前馈神经网络的传播方式比较, 最大的不同还是在数据流经过网络内部参数的更新方式. RNN不是一次喂进所有数据(微观上), 每一隐含层的结果都会影响下一次输入, RNN 可以被看做是同一神经网络的多次复制, 每个神经网络模块会把消息传递给下一个。需要注意的是, 上面所用的例子中RNN都是为了展示方便, 每个隐含层结点被拆成许多个, 其实它们都是一个并且不断循环不断计算.

RNN的结构是有限制的, 主要是对于长距离的记忆效果很差(序列开始的信息在后期保留很少), 而且序列开头的词汇不能被很好预测, 比如这两句话: "Teddy Roosevelt was a President.", "Teddy bears are on sale". RNN很难确定Teddy是不是一个人名. 在长期信息访问当前处理单元之前, 需要按顺序地通过所有之前的单元, 这意味着它很容易遭遇梯度消失问题. 这也为我接下来要读的论文埋下伏笔, 研究LSTM, GRU, 或者更强大的注意力机制, 层级注意力编码方式等. 下面就来说说什么是RNN的梯度消失.

如果有一句很长的话, 意味着在RNN循环较后的结点(较后的词) $\hat{y}^{< i>}$ 由于距离长, 很难受到开头词的影响, 同样在反向传播过程中, 句子后部区域的偏导数也很难影响到前面. RNN这个问题很容易可以类比到深层神经网络的梯度问题.

接下来学习的是较基础的也是比较有用的解决梯度消失的方法(其他方法有改进矩阵初始 化值或者改变激活函数): Gate Recurrent Unit, 它有一个memory cell, 不妨记为 $c^{(t)}$ , 在简单的GRU中可以认为 $c^{(t)} = a^{(t)}$ , 刚刚在RNN中提到过, 这就是隐含层: 上一次见过的词或者也可以说成short-term memory, 我们可以得到如下更新迭代过程, 其中包含memory cell和gate的 计算:

$$\hat{c}^{(t)} = \tanh \left( W_c \left[ \Gamma_{relevance} \times c^{(t-1)}, x^{(t)} \right] + b_u \right)$$

$$\Gamma_{update} = \sigma \left( W_u \left[ c^{(t-1)}, x^{(t)} \right] + b_u \right)$$

从gate的含义可以看出,就是一个filter的作用,如何体现呢:

$$c^{\langle t \rangle} = \Gamma_u \times \hat{c}^{(t)} + (1 - \Gamma_u) \times c^{\langle t-1 \rangle}$$

注意这里的gate是经过  $\sigma$  sigmoid函数处理的, 所以当我们真正需要记忆细胞, 需要保持记忆的时候, gate经过sigmoid函数之后会变得很小, 这样就保持了长期记忆的传递, 在一定程度上解决了梯度消失的问题.

接下来我学习了GRU的一个更强大, 更通用的版本: LSTM. LSTM在序列模型上有着划时代的影响. 对比RNN, 在RNN的每个神经元中, 输入经过隐含层参数(包含之前的输入信息)与激活函数获得下一层输出. 而LSTM就复杂了许多, 在每一个时间步LSTM都接受三种数据: 当前输入, "上一个"神经元的short-term memory以及long-term memory. The short-term memory is referred to as the hidden state, and the long-term memory is known as the cell state. LSTM使用gate(the Input Gate, the Forget Gate, and the Output Gate.)来控制数据到short-term memory和long-term memory, 它们可以有选择地删除无关的数据.

如图我们来慢慢看每一个gate的结构.

首先是Input Gate, 它从当前输入和short-term memory来决定了什么数据要存储在 long-term memory. 如图所示它有两层,第一层主要是筛选经过的数据,怎么做呢,将short-term memory和当前输入喂给sigmoid function. 注意这里不再有 $a^{<t>}=c^{<t>}$ ,总结一下参数与gate的更新过程:

memory cell previous value: 
$$\tilde{c}^{< t>} = \tanh \left(W_c \left[a^{< t-1>}, x^{< t>}\right] + b_c\right)$$

update gate: 
$$\Gamma_u = \sigma\left(W_u\left[a^{< t-1>}, x^{< t>}\right] + b_u\right)$$

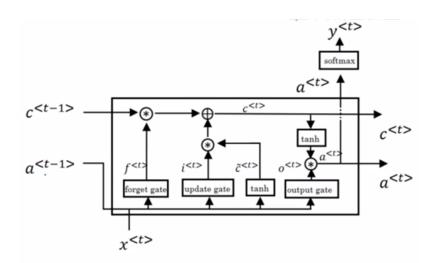
forget gate: 
$$\Gamma_f = \sigma\left(W_f\left[a^{< t-1>}, x^{< t>}\right] + b_f\right)$$

output gate: 
$$\Gamma_o = \sigma \left( W_o \left[ a^{< t-1>}, x^{< t>} \right] + \right) b_o \right)$$

memory cell update through:  $c^{< t>} = \Gamma_u * \tilde{c}^{< t>} + \Gamma_f * c^{< t-1>}$ 

最后很自然地有:

$$a^{\langle t \rangle} = \Gamma_o * \tanh c^{\langle t \rangle}$$



跟着图可以详细解释一下LSTM的过程: 首先通过forget gate,来判断什么数据是无用的不相关的,通过gate的sigmoid function抛弃,然后根据之前的数据通过 update gate,刷新一下cell state. 最后再经过output gate返回经过transform后的数据.

## word embedding部分:

one hot vector 无法捕捉词与词之间的关系,没有很好的泛化性能. 所以怎么更好地表达一个词? 很容易想到一个很简单的方法: 使用一些特征, 用这些词在这些特征上的权值来组成特征化向量, 比如与性别相关度, 与食物相关度, 与是否有生命的相关度.