Assignment 2

Pattern Recognition and Machine Learning

Fudan University @ 2020 Spring

2020 年 5 月 6 日

1 问题描述

在这次作业中，需要设计一个基于 RNN 的神经网络来模拟加法器。首先，学习编写基于 Tensorflow 2.0(TF) 或 PyTorch(PT) 的源代码，完成其余的代码。然后，修改数字的长度，分析模型性能，并对模型进行改进。

2 RNN

循环神经网络（Recurrent neural network：RNN）是神经网络的一种，通过使用带自反馈的神经元，能够处理任意长度的时序数据，可以应用到很多不同类型的机器学习任务。

给定一个输入序列 $X_{1:T} = X_1, X_2, ..., X_i, ..., X_T$，循环神经网络通过下面公式更新带反馈边的隐藏层的活性值 h_t:

$$h_t = f(h_{t-1}, x_t) \tag{1}$$

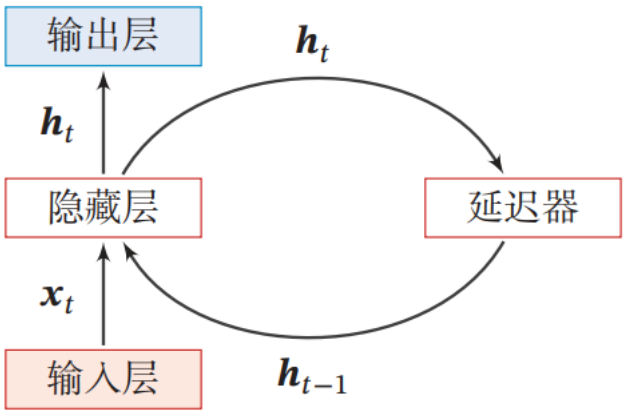


图 1: 循环神经网络

我们使用 RNN 模型实现一个简单的加法器。以二进制加法器为例，任何一个整数都可以用一个二进制串来表示，给定两个二进制串，我们希望生成表示其和的二进制串。一个二进制串可以看成一个序列，这可以用 RNN 来搭建模型。

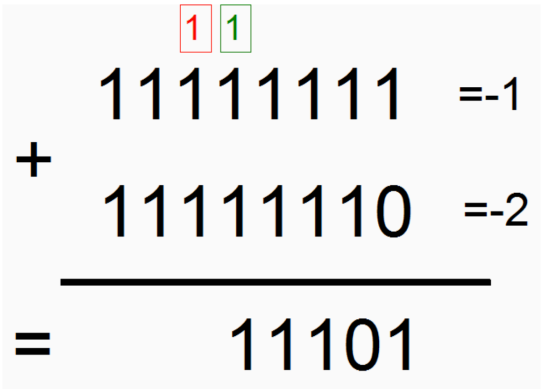


图 2: 二进制加法器

二进制器加法器从左向右开始计算，通过两个运算数对应位上二进制数来得到新的二进制数。但考虑到运算溢出的问题，图 2上彩色方框中的 1 表示的是运算溢出后的“携带位”，需要将其传递给下一位的运算。由于 RNN 具有短期记忆能力，相当于存储装置，上一个时刻的隐含特征保存这个“携带位”信息，这样当前位置的运算就可以捕获到前面运算溢出得到的“携带位”。

3 模型

该模型共有 4 层: 一个嵌入层 (embedding layer)，两个隐藏层 (hidden layer) 和一个全连接层 (fully-connected layer)。

```
class myPTRNNModel(nn.Module):
    def __init__(self):
        super().__init__()
        self.embed_layer = nn.Embedding(length, 32) #embedding layer
        self.rnn = nn.RNN(64, 64, 2, batch_first=True) #hidden layer
        self.dense = nn.Linear(64, length) #fully-connected layer

    def forward(self, num1, num2):
        num1=self.embed_layer(num1)
        num2=self.embed_layer(num2)
        input = torch.cat((num1, num2), 2)
```

```
        output,h_n=self.rnn(input)
        logits=self.dense(output)
        return logits
```

3.1 初始化

3.1.1 嵌入层

nn.Embedding(num_embeddings, embedding_dim)

- num_embeddings (int) - 嵌入字典的大小
- embedding_dim (int) - 每个嵌入向量的大小

这是一个矩阵类，里面初始化了一个随机矩阵。把进行加法运算的数看作是一个字符串序列，矩阵的长是序列的大小，宽是用来表示序列中每个元素的属性向量，向量的维度根据想要表示的元素的复杂度而定。类实例化之后可以根据序列中元素的下标来查找元素对应的向量。

3.1.2 隐藏层

nn.RNN(input_size,hidden_size,num_layers)

- input_size –输入序列的大小
- hidden_size –隐层的特征数量
- num_layers –RNN 的层数

对输入序列中每个元素，RNN 每层的计算公式为

$$h_t = tanh(w_{ih}x_t + b_{ih} + w_{hh}h_{t-1} + b_{hh}) \tag{2}$$

h_t 是时刻 t 的隐状态。x_t 是上一层时刻 t 的隐状态，或者是第一层在时刻 t 的输入。

3.1.3 全连接层

nn.Linear(in_features, out_features)

- in_features - 每个输入样本的大小
- out_features - 每个输出样本的大小

输入数据做线性变换：$y = Ax + b$

3.2 Forward

forward 定义了每次执行的计算步骤，在所有的子类中都需要重写这个函数。

1. 输入为长度为 $num\_embeddings = 10$ 的两个字符串序列 num1 和 num2，经过嵌入层的变换，输出两个大小为 $embedding\_dim = 32$ 的嵌入向量。然后对输出的两个嵌入向量进行拼接，得到大小为 $2 \times embedding\_dim = 64$ 的向量 input。

2. 将 input 作为隐藏层的输入，得到 RNN 最后一层的输出 output 和最后一个时刻隐状态 h_n。

3. 将大小为 $in\_features = 64$ 的向量 output，经过全连接层的线性变换，得到大小为 $out\_features = 10$ 的向量 logits（运算和的字符串序列）。

4 模型性能

4.1 输入序列长度

在第 3 节中定义的 RNN 模型，在加数位数分别为 10，20，50，100，训练次数为 $step = 1000$，学习率 $lr = 0.001$ 的情况下，在测试集上均能达到准确率 $acc = 1.00$。在训练集上的收敛情况如图 3所示，随着加数位数的增加，模型的收敛速度变慢。分析如下，

1. 由于各个加数的字符串序列长度不同，我们采用 padding 方法，将每个字符串序列通过补 0 扩充到一样的长度，这样会导致模型对样本的表示通过了非常多无用的字符，这样得到的信息就会有误差。

2. 当嵌入向量的大小 $embedding\_dim$ 一定时，输入序列的长度越大，通过嵌入层之后，得到的嵌入向量可能无法完全捕捉到原序列的有效信息。

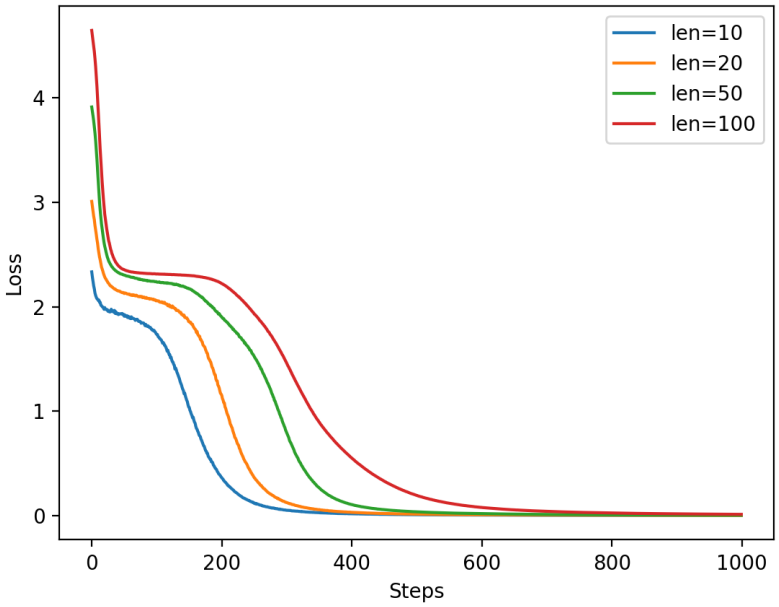
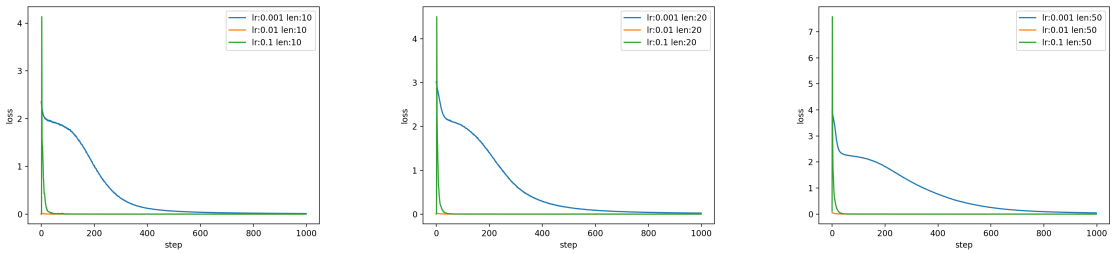


图 3: 输入序列长度不同的 RNN 模型 loss 曲线

4.2 学习率

如图 4所示，在输入序列长度分别为 10,20,50 情况下，学习率 $lr = 0.001$ 时，模型收敛速度最慢，$lr = 0.01$ 和 $lr = 0.1$ 时，模型收敛速度明显变快。

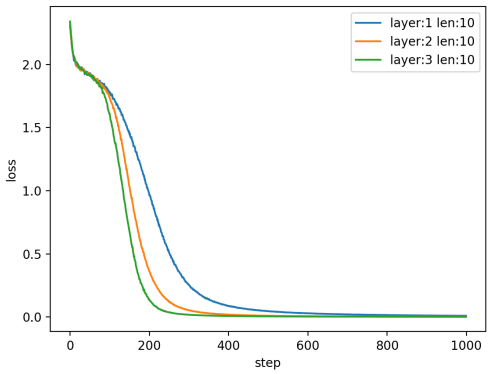


(a) $len = 10$ (b) $len = 20$ (c) $len = 50$

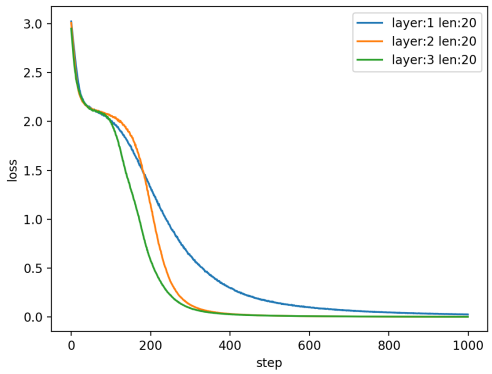
图 4: 学习率不同的 RNN 模型 loss 曲线

4.3 模型层数

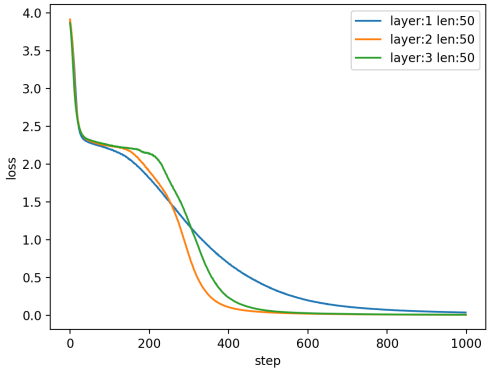
随着网络层数的加深，网络的表达能力以及抽象能力也会随着提高，但网络并非越深越好。在输入序列长度较小 $len = 10/20$ 时，模型层数越多，模型收敛速度越快；在输入



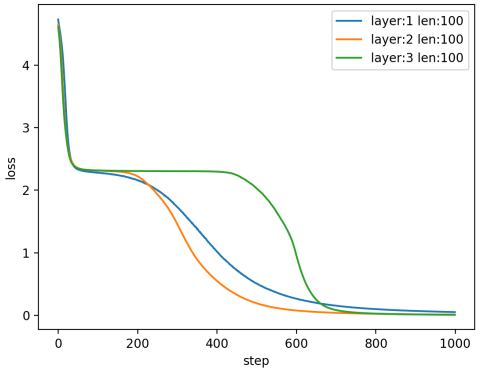
(a) $len = 10$



(b) $len = 20$



(c) $len = 50$



(d) $len = 100$

图 5: 模型层数不同的 RNN 模型 loss 曲线

序列长度较大 $len = 50/100$ 时，模型层数 $layer = 2$ 时，模型收敛速度最快（图 5）。原因可能是不断加深神经网络会带来一些负面问题，如，

1. 梯度消失，梯度爆炸问题。梯度问题产生的根本原因就是源于网络结构太深。

2. 过拟合问题。随着网络层数的加深，参数变多，神经网络的拟合能力变得很强，这也就意味着其表达出来的函数会更复杂，而如果对于简单问题如加法器，采用过于复杂的函数，容易导致过拟合。

4.4 LSTM/GRU

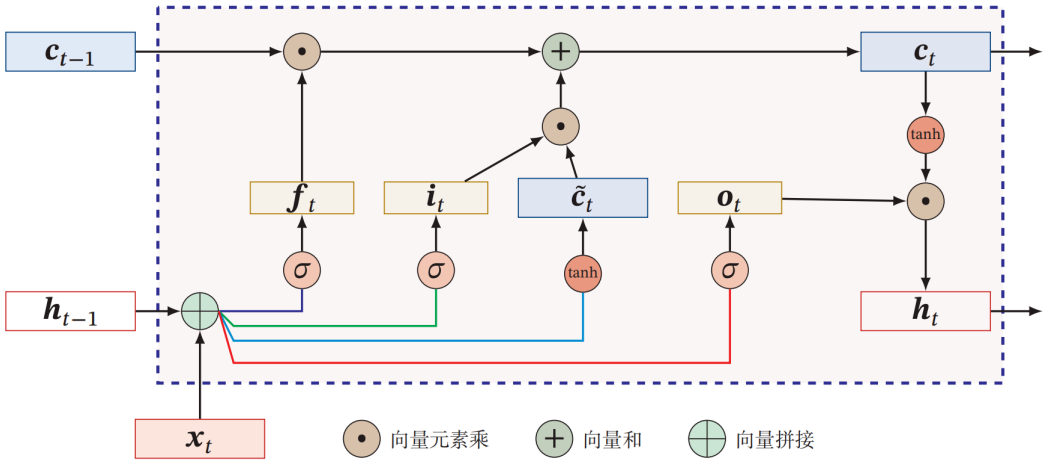


图 6: LSTM 网络的循环单元结构

长短期记忆网络（Long Short-Term Memory Network，LSTM，图 6）是循环神经网络的一个变体，可以有效地解决简单循环神经网络的梯度爆炸或消失问题。LSTM 网络主要改进在引入新的内部状态和门控机制。

门控循环单元（Gated Recurrent Unit，GRU，图 7）网络是一种比 LSTM 网络更加简单的循环神经网络。GRU 网络引入门控机制来控制信息更新的方式。和 LSTM 不同，GRU 不引入额外的记忆单元。

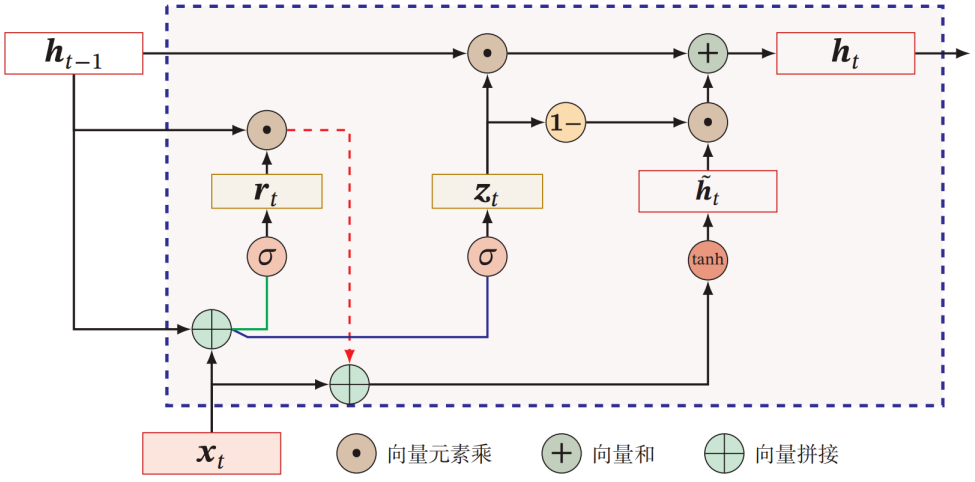


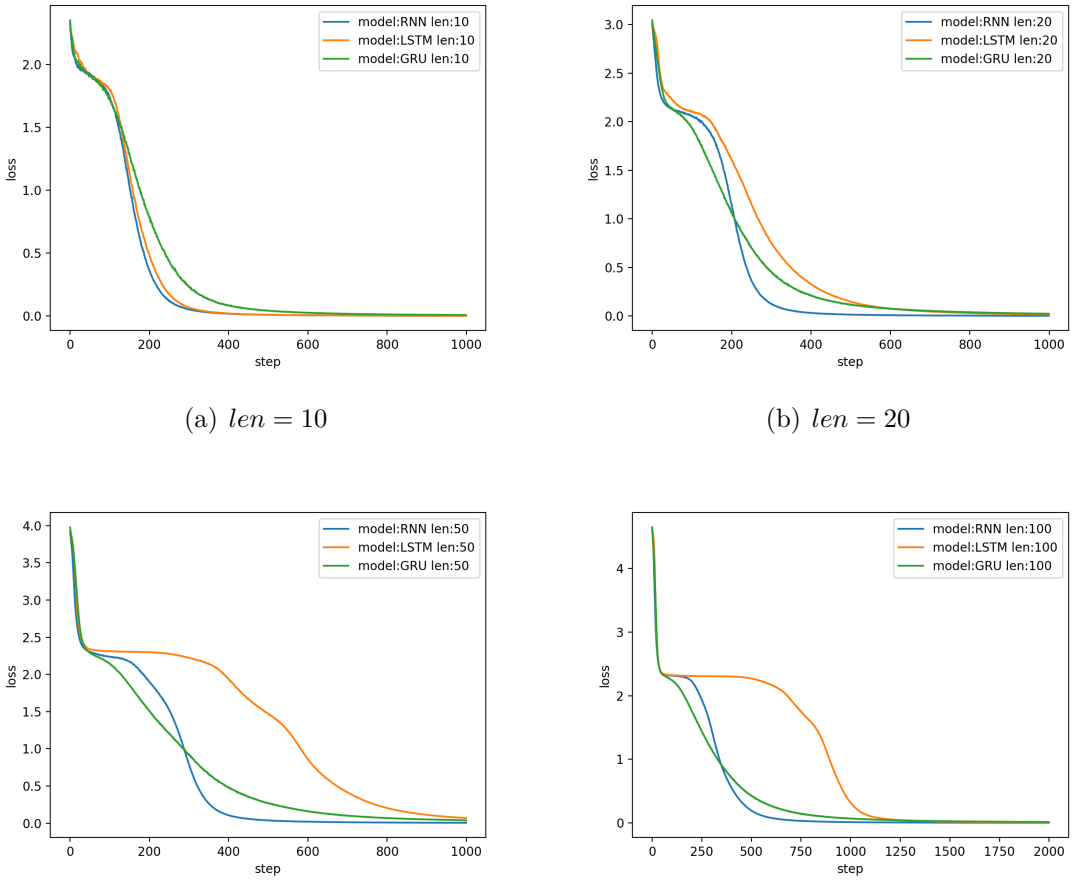
图 7: GRU 网络的循环单元结构

在输入序列长度 $len = 10$ 时，模型收敛速度：$RNN > LSTM > GRU$；在输入序列长度 $len = 20/50/100$ 时，模型收敛速度：$RNN > GRU > LSTM$。且随着输入序列长度

的增大，LSTM 和 GRU 的收敛速度差异越来越大，而 RNN 和 GRU 的收敛速度差异越来越小（图 8）。分析原因如下，

1. LSTM 及其变种 GRU 通过有选择地加入新的信息，并有选择地遗忘之前累积的信息，来改善 RNN 的长程依赖问题。但由于加法器当前位的输出，仅与两个加数当前位，以及上一时刻的进位（“携带位”）有关，与更早时刻的 “携带位” 无关，不存在长程依赖问题，所以 RNN 模型在 len 不同的情况下，始终能保持较好的性能。

2. 对于 LSTM 与 GRU 而言，由于 GRU 参数更少，收敛速度更快，因此其实际花费时间要少很多，这可以大大加速了我们的迭代过程。



(a) $len = 10$ (b) $len = 20$

(c) $len = 50$ (d) $len = 100$

图 8: RNN/LSTM/GRU 模型 loss 曲线

5 总结

通过上述实验可知，要实现一个基于 RNN 的加法器，选择 RNN 作为隐藏层，当模型层数为 2，学习率为 0.01 时候，能在不同的输入序列长度下保持较好的训练效果。