Homework 3: Recurrent Neural Networks

Student Name:

Student ID:

Exercise 1 : Backpropagation through Time

(a)

我们假设输入向量 x 的维度是 d， 输出向量 y 的维度是 n，则矩阵 W 的维度是 $n \times d$， 下面是展开成矩阵的样子，看起来更直观一些：

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ . \\ . \\ y_n \end{bmatrix} = \sigma(\begin{bmatrix} w_{11} w_{12} \ldots w_{1d} \\ w_{21} w_{22} \ldots w_{2d} \\ . \\ . \\ w_{n1} w_{n2} \ldots w_{nd} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ . \\ . \\ x_d \end{bmatrix})$$

令 t = Wx， 则

$$\begin{bmatrix} t_1 \\ t_2 \\ . \\ . \\ t_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w_{11} x_1 + w_{12} x_2 + \ldots w_{1d} x_d \\ w_{21} x_1 + w_{22} x_2 + \ldots w_{2d} x_d \\ . \\ . \\ w_{n1} x_1 + w_{n2} x_2 + \ldots w_{nd} x_d \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ . \\ . \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma(t_1) \\ \sigma(t_2) \\ . \\ . \\ \sigma(t_n) \end{bmatrix}$$

根据链式法则，得到下式：

$$\frac{\partial y}{\partial x} = \frac{\partial y}{\partial t} \frac{\partial t}{\partial x}$$

等式右边第一项是向量函数对向量求导，其结果为 Jacobian 矩阵：

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial y}{\partial t} &= \begin{bmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial t_1} & \frac{\partial y_1}{\partial t_2} & \dots & \frac{\partial y_1}{\partial t_n} \\ \frac{\partial y_2}{\partial t_1} & \frac{\partial y_2}{\partial t_2} & \dots & \frac{\partial y_2}{\partial t_n} \\ & . & & \\ & . & & \\ \frac{\partial y_n}{\partial t_1} & \frac{\partial y_n}{\partial t_2} & \dots & \frac{\partial y_n}{\partial t_n} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \sigma'(t_1) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sigma'(t_2) & \dots & 0 \\ & . & & \\ & . & & \\ 0 & 0 & \dots & \sigma'(t_n) \end{bmatrix} \\
&= diag[\sigma'(t)]
\end{aligned}
$$

其中，diag[a] 表示根据向量 a 创建一个对角矩阵，即：

$$
diag(\mathrm{a}) = \begin{bmatrix} a_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_2 & \dots & 0 \\ & . & & \\ & . & & \\ 0 & 0 & \dots & a_n \end{bmatrix}
$$

同理，上式第二项也是一个 Jacobian 矩阵：

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial t}{\partial x} &= \begin{bmatrix} \frac{\partial t_1}{\partial x_1} & \frac{\partial t_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial t_1}{\partial x_d} \\ \frac{\partial t_2}{\partial x_1} & \frac{\partial t_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial t_2}{\partial x_d} \\ & . & & \\ & . & & \\ \frac{\partial t_n}{\partial x_1} & \frac{\partial t_n}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial t_n}{\partial x_d} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} w_{11} & w_{12} & \dots & w_{1d} \\ w_{21} & w_{22} & \dots & w_{2d} \\ & . & & \\ & . & & \\ w_{n1} & w_{n2} & \dots & w_{nd} \end{bmatrix} \\
&= W
\end{aligned}
$$

最后，将两项合在一起，可得：

$$
\frac{\partial y}{\partial x} = diag(\sigma')W
$$

(b)

此步是 BPTT 算法的最后一步：计算共享权重的梯度。

根据（a）中结果，可以得到**循环层任意时刻 t 的输出** h_t 对**循环层初始时刻的输入** h_0 的偏导为：

$$\begin{aligned}\frac{\partial h_t}{\partial h_0} &= \frac{\partial h_t}{\partial h_{t-1}}\frac{\partial h_{t-1}}{\partial h_{t-2}}\cdots\frac{\partial h_1}{\partial h_0}\\ &= \prod_{i=1}^{t}\frac{\partial h_i}{\partial h_{i-1}}\\ &= \prod_{i=1}^{t} diag[\sigma'(\mathrm{Wh_{i-1}}+\mathrm{Ux_i})]W\end{aligned}$$

因为 L_t 是在时刻 t 的标量损失值，和循环层输出 h_t 有关，假设时间序列为三段， t1，t2 和 t3，因为 h_t 随着时间序列向前传播，而 h_t 又是 W 的函数，所以对 W 求偏导为：

$$\begin{aligned}\frac{\partial L_3}{\partial W} &= \frac{\partial L_3}{\partial h_3}\frac{\partial h_3}{\partial W} + \frac{\partial L_3}{\partial h_3}\frac{\partial h_3}{\partial h_2}\frac{\partial h_2}{\partial W} + \frac{\partial L_3}{\partial h_3}\frac{\partial h_3}{\partial h_2}\frac{\partial h_2}{\partial h_1}\frac{\partial h_1}{\partial W} + \frac{\partial L_3}{\partial h_3}\frac{\partial h_3}{\partial h_2}\frac{\partial h_2}{\partial h_1}\frac{\partial h_1}{\partial h_0}\frac{\partial h_0}{\partial W}\\ &= \sum_{k=0}^{3}\frac{\partial L_3}{\partial h_3}\frac{\partial h_3}{\partial h_k}\frac{\partial h_k}{\partial W}\end{aligned}$$

所以对于任意时刻 t：

$$\frac{\partial L_t}{\partial W} = \sum_{k=0}^{t}\frac{\partial L_t}{\partial h_t}\frac{\partial h_t}{\partial h_k}\frac{\partial h_k}{\partial W}$$

因为 $L=\sum_{t=0}^{T} L_t$ ，所以：

$$\frac{\partial L}{\partial W} = \sum_{t=0}^{T}\sum_{k=0}^{t}\frac{\partial L_t}{\partial h_t}\frac{\partial h_t}{\partial h_k}\frac{\partial h_k}{\partial W}$$

下面表示成矩阵形式：

令 $s_t = Wh_{t-1}+Ux_t$ ，展开成矩阵形式为：

$$
\begin{aligned}
\begin{bmatrix} s_1^t \\ s_2^t \\ . \\ . \\ s_n^t \end{bmatrix} &= U\mathrm{x}_t + \begin{bmatrix} w_{11} & w_{12} & \dots & w_{1n} \\ w_{21} & w_{22} & \dots & w_{2n} \\ . & & & \\ . & & & \\ w_{n1} & w_{n2} & \dots & w_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h_1^{t-1} \\ h_2^{t-1} \\ . \\ . \\ h_n^{t-1} \end{bmatrix} \\
&= U\mathrm{x}_t + \begin{bmatrix} w_{11} h_1^{t-1} + w_{12} h_2^{t-1} \dots + w_{1n} h_n^{t-1} \\ w_{21} h_1^{t-1} + w_{22} h_2^{t-1} \dots + w_{2n} h_n^{t-1} \\ . \\ . \\ w_{n1} h_1^{t-1} + w_{n2} h_2^{t-1} \dots + w_{nn} h_n^{t-1} \end{bmatrix}
\end{aligned}
$$

其中下标表示它是这个向量的第几个元素，它的上标表示第几个**时刻**。例如，s_j^t 表示向量 s 的第 j 个元素在 t 时刻的值。w_{ji} 表示**循环层**第 t-1 时刻的第 i 个神经元到**循环层**第 t 个时刻的第 j 个神经元的权重。

因为对 W 求导与 $U\mathrm{x}_t$ 无关，我们不再考虑。现在，根据链式法则，我们考虑在 t 时刻的损失 L_t 对权重项 w_{ji} 求导：

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial L_t}{\partial w_{ji}} &= \frac{\partial L_t}{\partial h_j^t} \frac{\partial h_j^t}{\partial s_j^t} \frac{\partial s_j^t}{\partial w_{ji}} \\
&= \frac{\partial L_t}{\partial h_j^t} \sigma'(s_j^t) h_i^{t-1}
\end{aligned}
$$

上述中我们将 h_i^{t-1} 视为前向传播计算的上一循环层的输出值，而不是一个函数，令：

$$
\delta_j^t = \frac{\partial L_t}{\partial h_j^t}
$$

则按照上面的规律生成时刻为 t 时的梯度方阵为：

$$
\frac{\partial L_t}{\partial W} = \begin{bmatrix} \delta_1^t \sigma'(s_1^t) h_1^{t-1} & \delta_1^t \sigma'(s_1^t) h_2^{t-1} & \dots & \delta_1^t \sigma'(s_1^t) h_n^{t-1} \\ \delta_2^t \sigma'(s_2^t) h_1^{t-1} & \delta_2^t \sigma'(s_2^t) h_2^{t-1} & \dots & \delta_2^t \sigma'(s_2^t) h_n^{t-1} \\ . & & & \\ . & & & \\ \delta_n^t \sigma'(s_n^t) h_1^{t-1} & \delta_n^t \sigma'(s_n^t) h_2^{t-1} & \dots & \delta_n^t \sigma'(s_n^t) h_n^{t-1} \end{bmatrix}
$$

最终的梯度是各个时刻的梯度**之和**：

$$
\frac{\partial L}{\partial W} = \sum_{t=1}^{T} \begin{bmatrix} \delta_1^t \sigma'(s_1^t) h_1^{t-1} & \delta_1^t \sigma'(s_1^t) h_2^{t-1} & \dots & \delta_1^t \sigma'(s_1^t) h_n^{t-1} \\ \delta_2^t \sigma'(s_2^t) h_1^{t-1} & \delta_2^t \sigma'(s_2^t) h_2^{t-1} & \dots & \delta_2^t \sigma'(s_2^t) h_n^{t-1} \\ . & & & \\ . & & & \\ \delta_n^t \sigma'(s_n^t) h_1^{t-1} & \delta_n^t \sigma'(s_n^t) h_2^{t-1} & \dots & \delta_n^t \sigma'(s_n^t) h_n^{t-1} \end{bmatrix}
$$

Exercise 2: Vanishing/Exploding Gradients in RNNs

(a)

当 T = 3 时：

$$\frac{\partial L_1}{\partial W}=\frac{\partial L_1}{\partial h_1}\frac{\partial h_1}{\partial W}+\frac{\partial L_1}{\partial h_1}\frac{\partial h_1}{\partial h_0}\frac{\partial h_0}{\partial W}$$

$$\frac{\partial L_2}{\partial W}=\frac{\partial L_2}{\partial h_2}\frac{\partial h_2}{\partial W}+\frac{\partial L_2}{\partial h_2}\frac{\partial h_2}{\partial h_1}\frac{\partial h_1}{\partial W}+\frac{\partial L_2}{\partial h_2}\frac{\partial h_2}{\partial h_1}\frac{\partial h_1}{\partial h_0}\frac{\partial h_0}{\partial W}$$

$$\frac{\partial L_3}{\partial W}=\frac{\partial L_3}{\partial h_3}\frac{\partial h_3}{\partial W}+\frac{\partial L_3}{\partial h_3}\frac{\partial h_3}{\partial h_2}\frac{\partial h_2}{\partial W}+\frac{\partial L_3}{\partial h_3}\frac{\partial h_3}{\partial h_2}\frac{\partial h_2}{\partial h_1}\frac{\partial h_1}{\partial W}+\frac{\partial L_3}{\partial h_3}\frac{\partial h_3}{\partial h_2}\frac{\partial h_2}{\partial h_1}\frac{\partial h_1}{\partial h_0}\frac{\partial h_0}{\partial W}$$

又因为：（**见 Ex1(b)**）

$$\begin{aligned}\frac{\partial h_t}{\partial h_0}&=\frac{\partial h_t}{\partial h_{t-1}}\frac{\partial h_{t-1}}{\partial h_{t-2}}\cdots\frac{\partial h_1}{\partial h_0}\\&=\prod_{i=1}^{t}\frac{\partial h_i}{\partial h_{i-1}}\\&=\prod_{i=1}^{t}diag[\sigma'(\mathrm{Wh_{i-1}}+\mathrm{Ux_i})]W\end{aligned}$$

所以：

$$\begin{aligned}\frac{\partial L}{\partial W}&=\frac{\partial L_0}{\partial W}+\frac{\partial L_1}{\partial W}+\frac{\partial L_2}{\partial W}+\frac{\partial L_3}{\partial W}\\&=\frac{\partial L_1}{\partial W}+\frac{\partial L_2}{\partial W}+\frac{\partial L_3}{\partial W}\end{aligned}$$

当 T = 3 时，在计算 L_3 对 W 的偏导时，需要将误差项沿着循环层反向传递三层直到初始时刻，相应的，上述展开的第三项包括了对 $diag(\sigma')W$ 的三次幂运算。

(b)

使用数学归纳法证明如下

当 n = 1时，根据定义

$$M=Q\Lambda Q^{-1}$$

当 n = k 时，假设

$$M^k = Q\Lambda^k Q^{-1}$$

当 n = k+1 时，因为 $Q^{-1}Q = I$，且 Λ 是对角矩阵，所以

$$M^{k+1} = M^k M = (Q\Lambda^k Q^{-1})(Q\Lambda Q^{-1}) = (Q\Lambda^k Q^{-1} Q\Lambda Q^{-1}) = Q\Lambda^{k+1} Q^{-1}$$

$M^n = Q\Lambda^n Q^{-1}$ 得证。

(c)

根据 Ex2 (b)：

$$\begin{aligned} W^{30} = Q\Lambda^{30}Q{-1} &= \begin{bmatrix} -0.6 & -0.8 \\ -0.8 & 0.6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.9 & 0 \\ 0 & 0.4 \end{bmatrix}^{30} \begin{bmatrix} -0.6 & -0.8 \\ -0.8 & 0.6 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} -0.6 & -0.8 \\ -0.8 & 0.6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.0424 & 0 \\ 0 & 1.153e-12 \end{bmatrix}^{30} \begin{bmatrix} -0.6 & -0.8 \\ -0.8 & 0.6 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0.0153 & 0.0203 \\ 0.0203 & 0.0271 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

发现权重矩阵中各个元素逐渐趋近于零，说明当矩阵 W 的**所有特征值的绝对值小于 1 时**，即对角矩阵 Λ 的对角元素的绝对值全部小于 1 时，矩阵的幂趋向于 0，并以指数速度减少；当 W 的**任意一个特征值的绝对值大于 1 时**，矩阵的幂趋向于无穷，并以指数速度增加；当 W 的所有特征值等于 1 时，矩阵的幂和原矩阵相同。此结果和过程可以通过 Matlab 计算矩阵二范数关于指数阶次的函数图像发现。

至此我们可以解释传统 rnn 中梯度消失和梯度爆炸的原因：

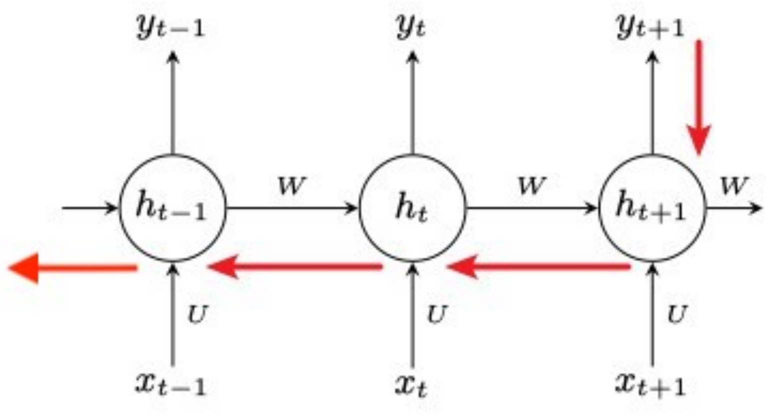


Figure 1: A recurrent neural network.

当完成前向计算并得到误差项后，BPTT 会将其沿着时间线传递到初始时刻，从而计算每个循环层的共享权重的梯度，根据 Ex2 (a) 中的公式。当时间线较长时，离当前时刻较远的梯度中 $diag(\sigma')W$ 会进行高阶的幂运算，如果可对角化方阵 $diag(\sigma')W$ 的所有特征值的绝对值是一个大于 0 小于 1 的值，则当 t 很大时， $diag(\sigma')W$ 的幂会趋向于0，导致此项梯度消失；如果 $diag(\sigma')W$ 的其中一个特征值的绝对值一个大于 1，$diag(\sigma')W$ 的幂会趋向于无穷，导致此项梯度爆炸，这点和以 $diag(\sigma')W$ 的特征值

为底的指数函数性质相同。因为 σ' 的值域为 (0,1/4)，所以每乘以一次 sigmoid 的导数值都会让后向传播的梯度衰减一次，需要靠矩阵 W 拉回来，但是如果拉得过头了又会导致梯度爆炸。

但 **RNN 中总的梯度是不会消失的**。只是训练时梯度不能在较长序列中一直传递下去，**梯度被近距离梯度主导，导致模型难以学到远距离的依赖关系吗，从而使 RNN 无法捕捉到长距离的影响。**

Exercise 3: LSTMs

(a)

原始 RNN 的隐藏层只有一个状态，即 h，它对于短期的输入非常敏感。LSTM 增加一个状态，即 c，称为**单元状态(cell state)**，让它来保存长期的状态。

在 t 时刻，LSTM 的输入有三个：

- 当前时刻网络的输入值 $\mathbf{x}_t$
- 上一时刻 LSTM 的输出值 $\mathbf{h}_{t-1}$
- 上一时刻的单元状态 $\mathbf{c}_{t-1}$

LSTM 的输出有两个：

- 当前时刻 LSTM 输出值 $\mathbf{h}_t$
- 和当前时刻的单元状态 $\mathbf{c}_t$

LSTM 的关键，就是怎样控制长期状态 c。在这里，LSTM 的思路是使用三个门（gate），**门实际上就是一层全连接层，它的输入是一个向量，输出是一个0到1之间的实数向量。**一般使用 σ （也就是 sigmoid 函数），因为它的值域是(0,1)。三个门的输入分别有六个不同的权重矩阵 W，每个门各两个 W，分别将维度是 d_h 的隐层向量 h_{t-1} 和维度是 d_x 的输入向量 x_t 映射到维度是 d_c 的单元状态向量 c_t。

其中的 f_t 就是**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 $\mathbf{c}_t$

i_t 是**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 $\mathbf{c}_t$

o_t 是**输出门（output gate）**，用来控制单元状态 $\mathbf{c}_t$ 有多少输出到 LSTM 的当前输出值 $\mathbf{h}_t$。

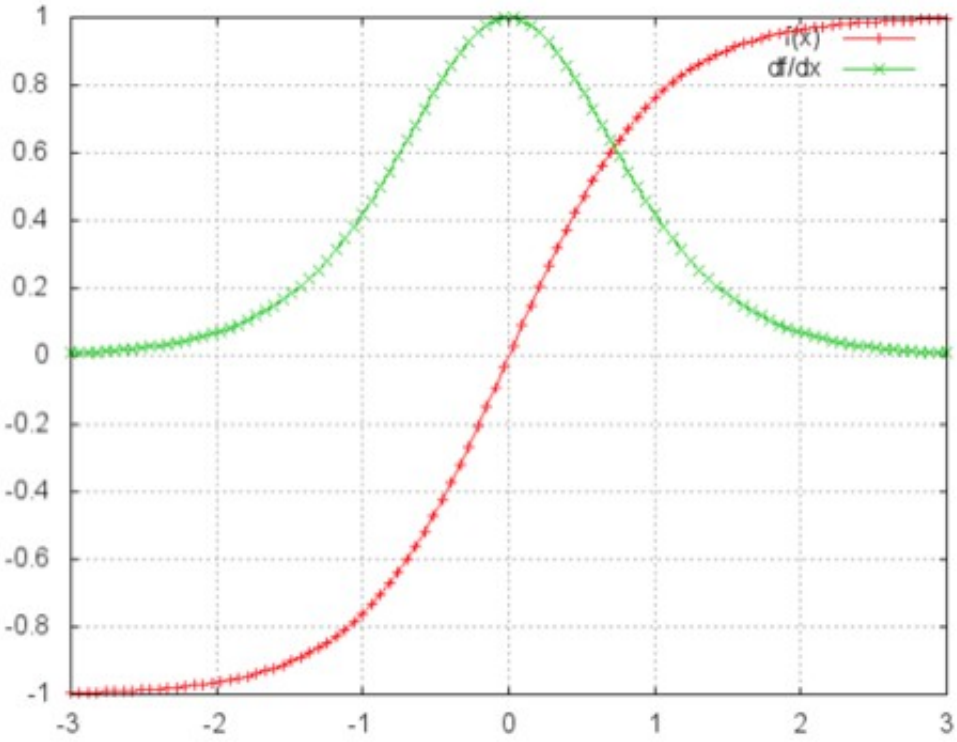
最后，用门的输出向量点乘需要控制的那个向量，即可得到 LSTM 的输出。

$$
\begin{aligned}
\mathbf{C}_t &= f_t \odot \mathbf{C}_{t-1} + i_t \odot \tilde{\mathbf{C}}_t \\
\mathbf{h}_t &= o_t \odot \mathbf{tanh}(\mathbf{C_t})
\end{aligned}
$$

(b)

三个门输出的向量总为正，因为激活函数 sigmoid 的值域为 (0,1)。

下图为 tanh 的函数图像和其导数图像，其值域分别为 (-1,1) 和 (0,1)。且对于原函数，输入和输出同号。



所以在正向传播时，$\tilde{\mathbf{C}}_t$ 的输出可能为负，导致 $\mathbf{C}_t$ 也可能为负，最终的 $\mathbf{h}_t$ 也和 $\mathbf{C}_t$ 同号。

(c)

因为：

$$\frac{\partial C_t}{\partial C_k} = \prod_{i=k+1}^{t} \frac{\partial C_i}{\partial C_{i-1}}.$$

且对于所有 t：

$$C_t = C_{t-1}$$

所以：

$$\frac{\partial C_t}{\partial C_k} = 1$$

> **LSTM 中梯度的传播有很多条路径**， $c_{t-1} \rightarrow c_t = f_t \odot c_{t-1} + i_t \odot \hat{c}_t$ 这条路径上只有逐元素相乘和相加的操作，梯度流最稳定；但是其他路径（例如 $c_{t-1} \rightarrow h_{t-1} \rightarrow i_t \rightarrow c_t$ ）上梯度流与普通 RNN 类似，照样会发生相同的权重矩阵反复连乘。 **LSTM 刚提出时没有遗忘门**，或者说相当于 $f_t = 1$ ，这时候在 $c_{t-1} \rightarrow c_t$ 直接相连的短路路径上， dl/dc_t 可以无损地传递给 dl/dc_{t-1} ，从而**这条路径**上的梯度畅通无阻，不会消失。类似于 ResNet 中的残差连接。 其一

> 是遗忘门接近 1（例如模型初始化时会把 forget bias 设置成较大的正数，让遗忘门饱和），这时候远距离梯度不消失；其二是**遗忘门接近 0，但这时模型是故意阻断梯度流的，这不是 bug 而是 feature**（例如情感分析任务中有一条样本 “A，但是 B”，模型读到“但是”后选择把遗忘门设置成 0，遗忘掉内容 A，这是合理的）。当然，常常也存在 f 介于 [0, 1] 之间的情况，在这种情况下只能说 LSTM 改善（而非解决）了梯度消失的状况。
>
> From: https://www.zhihu.com/question/34878706/answer/665429718