

自然语言处理 Natural Language Processing

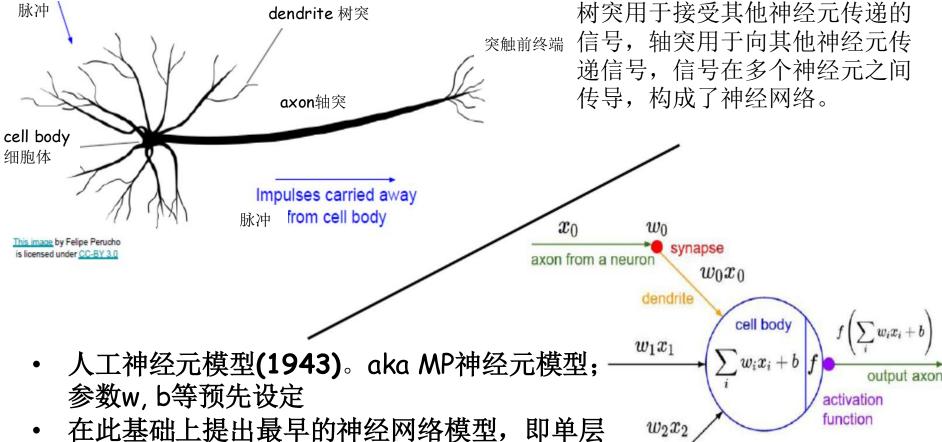
Chapter 2 NLP中的前馈神经网络

Outline

- ■前馈神经模型
- 反向传播算法
- NLP案例分析

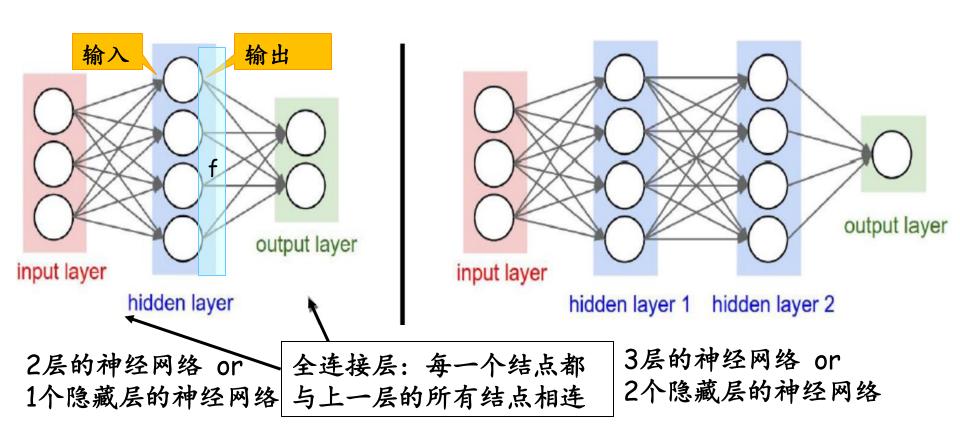
非线性神经元(Non-linear Neurons)

Impulses carried toward cell body

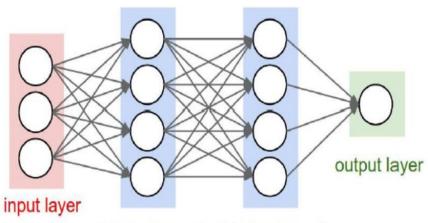


在此基础上提出最早的神经网络模型,即单层感知机(Single Layer Perceptron), 其中参数需要学习得到。只有输入层和输出层,没有隐藏层

前馈神经网络 Feedforward Neural Network, FNN



前馈神经网络



hidden layer 1 hidden layer 2

没有隐藏层: 仅能够表示线性可分函数或决策

隐藏层数=1:可以拟合任何"包含从一个有限空间到另一个有限空间的连续映射"

的函数

隐藏层数=2: 搭配适当的激活函数可以表示任意精度的任意决策边界,且可以拟合任何精度的任何平滑映射

隐藏层数>2: 多出来的隐藏层可以学习复杂的描述,类似于某种自动特征工程

通用近似定理:对于具有线性输出层和至少一个使用"挤压"性质的激活函数的隐藏层组成的前馈神经网络,只要其隐藏层神经元的数量足够,它可以以任意精度来近似任何从一个定义在实数空间中的有界闭集函数。

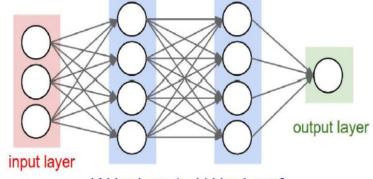
一个两层的神经网络可以模拟任何函数。

模型介绍

- 目标: 近似某个未知的理想化函数 f*:X→Y
- E.g. 分类器: $y = f^*(x)$ with x and category y
- **前馈神经网络**: 定义参数化映射 $y = f(x; \theta)$,通过经验风险最小化和正则化在训练样本上学习参数 θ 以让函数f近似于f*
- 即:函数中的信息x流动开始于输入端,流经中间每一个计算

层,最终产生输出y

- 神经元没有反馈连接 (所以叫前馈)
- 受神经科学启发(所以叫神经网)
- f可以是多个函数的组合(所以是网络)



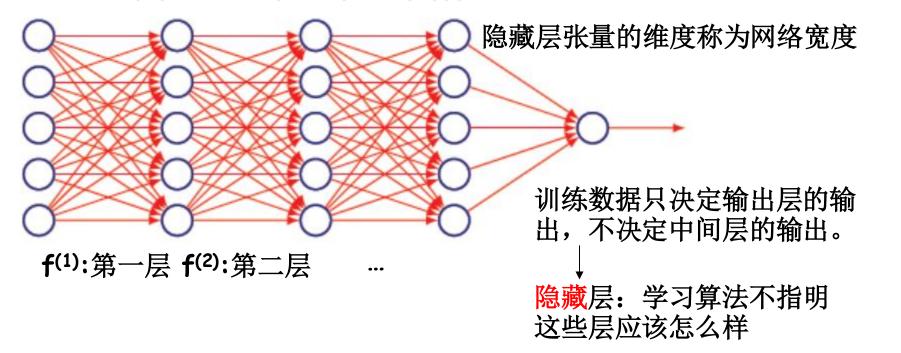
hidden layer 1 hidden layer 2

■ 又叫**多层感知机MLP**,多层的连续的非线性函数

模型介绍

• 函数 f 是多个不同函数的组合(所以是网络)

e.g. $f(x) = f^{(3)}(f^{(2)}(f^{(1)}(x)))$ 链的长度称为网络深度 \rightarrow 深度学习



函数组合可以用有向无环图来描述,体现了前馈网络的思想!

简单的前馈神经网络-前向传播

$$z_1 = f\left(w_{11}^{(1)}x_1 + w_{12}^{(1)}x_2 + w_{13}^{(1)}x_3 + b_1\right)$$

$$z_2 = f\left(w_{21}^{(1)}x_1 + w_{22}^{(1)}x_2 + w_{23}^{(1)}x_3 + b_1\right)$$
矩阵形式: $z = f(W^{(1)}x + b)$

$$x_1 = f\left(w_{21}^{(1)}x_1 + w_{22}^{(1)}x_2 + w_{23}^{(1)}x_3 + b_1\right)$$

假设 $Z^{(0)}=x$:

$$a^{(l)} = W^{(l)}z^{(l-1)} + b^{(l)}$$
 神经元的净输入/ $^{\beta$ 活性值 wx: 线性变换 $z^{(l)} = f(a^{(l)})$ 神经元的输出/活性值 wx+b: 仿射变换

• Output $\hat{y} = w_1^{(2)} z_1 + w_2^{(2)} z_2$; Loss $L = (\hat{y} - y)^2$

隐藏层:激活函数

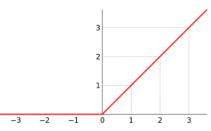
- ▶ 为什么要有激活函数:如果不使用激活函数,那么从输入层到隐藏层就是线性计算,无论叠加多少个隐藏层,都是线性的
- $z = W^T x + b \rightarrow$ 逐元素(elementwise)非线性函数f \rightarrow f(z)
- 被激活: f取值接近1
- 对于f的激活函数选择?
- 连续并可导的非线性函数,方便利用数值优化的方法来学习网络参数 函数及其导函数要尽可能的简单,有利于提高网络计算效率 导函数的值域要在一个合适的区间内,否则会影响训练的效率和稳定性

隐藏层: 激活函数

■ ReLU (Linear rectification function线性整流器)

$$f(x)=max(0, x)$$

Dying ReLU Problem

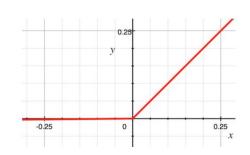


$$f'(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ 1, & x \ge 0 \end{cases}$$

死神经元:不恰当的更新后,神经元不能被激活,梯度为0

Leaky ReLU

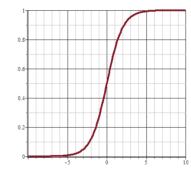
$$f(x)=max(ax, x)$$



$$f'(x) = \begin{cases} \alpha, & x < 0 \\ 1, & x \ge 0 \end{cases}$$

■ Sigmoid: 一类S型曲线

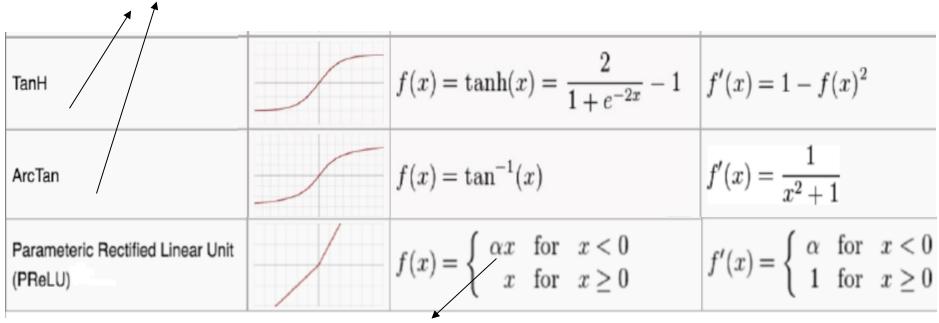
默认logistic函数: f(x)=1/(1+exp(-x))



$$f'(x) = f(x)(1 - f(x))$$

其它激活函数

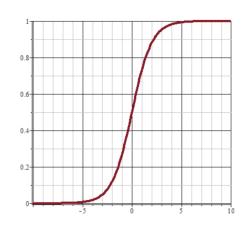
- Sigmoid: 一类S型曲线。
- 两端饱和。左饱和: **x**接近负无穷,导数接近**0**;右饱和: **x** 接近正无穷,导数接近于**0**.



可学习的参数

输出层:输出单元

- 线性单元:给出特征h,线性输出层产生输出向量: $\hat{y} = w^T h + b$
- sigmoid单元: e.g. logistic $\hat{y} = \sigma(w^T h + b)$ $\sigma(x) = 1/(1 + exp(-x))$



softmax单元:

$$\hat{y} = softmax(w^T h + b)$$

分类问题: 产生预测的类

分类问题: 产生预测的类
$$\operatorname{hom} \widehat{y}_i = p(y = i|x)$$
 $\operatorname{softmax}(x)_i = \exp(x_i) / \sum_i \exp(x_j)$

$$\log softmax(x)_i = x_i - \log \sum_{j} exp(x_j)$$

Loss Functions

■ 如何衡量模型的好坏?计算损失loss/代价cost

e.g. 分类 y = (1, 0, 0),
$$\widehat{y_A}$$
 = (0.9, 0.05, 0.05), $\widehat{y_B}$ = (0.4, 0.3, 0.3)

■ 使用负对数概率作为损失 negative log probabilities:

-log0.9=0.05, -log0.4=0.92
$$L = -log \prod \widehat{y}^{\mathrm{y}}$$

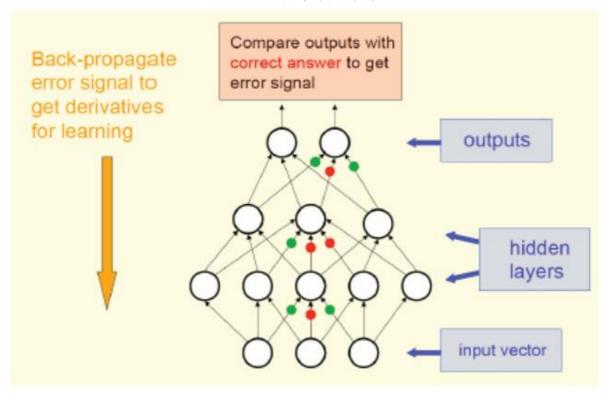
■ 等同于交叉熵损失 cross entropy, 交叉熵损失通过模型真实输出和预测输出计算得到:

$$L = -\sum y \log(\hat{y})$$

Outline

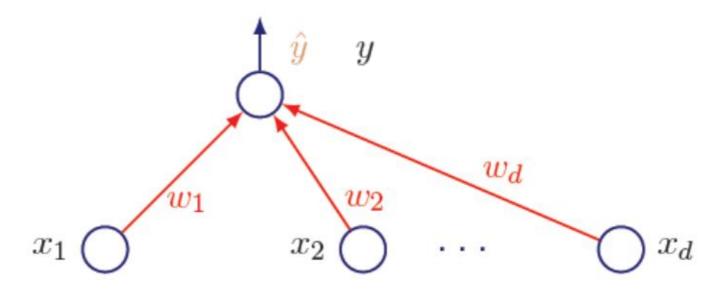
- ■前馈神经模型
- 反向传播算法
- 案例分析

反向传播算法



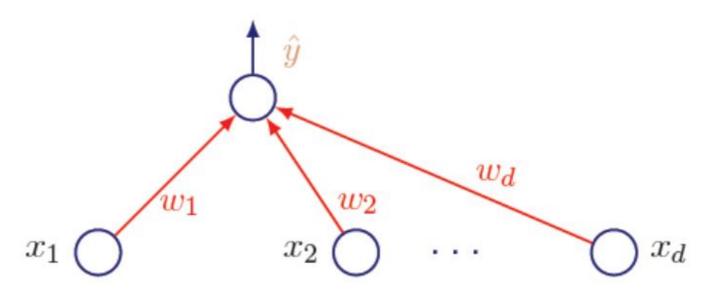
- **前向传播**:接受输入x,通过中间层传输并获得输出ŷ
- 训练过程中: 使用 ŷ和γ计算标量损失J(θ)
- **反向传播**:信息从损失开始,向输入端反向地流动,以计算 梯度

例子: 一个神经元的线性输出层



- 假设输入样本x; 输出为ŷ; x的正确结果为y
- $\hat{y} = x^T w = x_1 w_1 + x_2 w_2 + \dots + x_d w_d$
- 取平方损失 $L = (y \hat{y})^2$

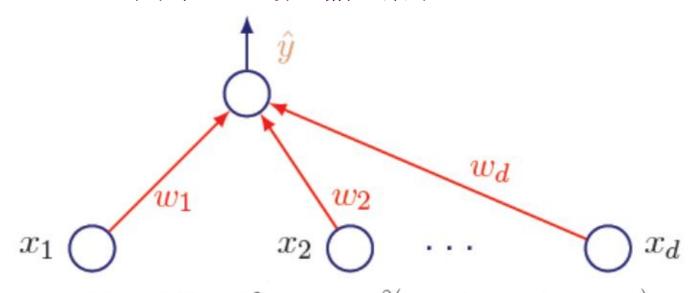
例子: 线性输出层



- . 模型优化目标: 更新 w_i
- . 更新规则: $w_i := w_i \eta \frac{\partial L}{\partial w_i}$ 重点: 求导

• 得:
$$\frac{\partial L}{\partial w_i} = \frac{\partial (\hat{y} - y)^2}{\partial w_i} = 2(\hat{y} - y) \frac{\partial (x_1 w_1 + x_2 w_2 + \dots x_d w_d)}{\partial w_i}$$
 链式法则

例子: 线性输出层



• 根据:
$$\frac{\partial L}{\partial w_i} = \frac{\partial (\hat{y} - y)^2}{\partial w_i} = 2(\hat{y} - y) \frac{\partial (x_1 w_1 + x_2 w_2 + \dots x_d w_d)}{\partial w_i}$$
$$= 2(\hat{y} - y)x_i$$

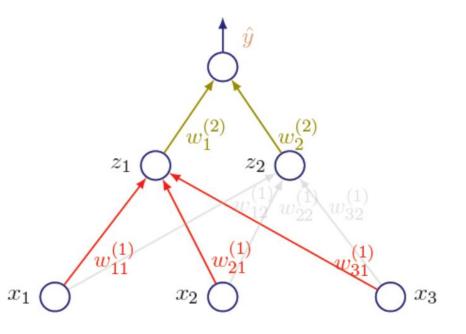
• 按照更新规则:

$$w_i := w_i - \eta(\hat{y} - y)x_i = w_i - \eta\delta x_i \text{ where } \delta = (\hat{y} - y)$$

• 向量形式: $\mathbf{w} := \mathbf{w} - \eta \delta \mathbf{x}$

例子: 单隐藏层的前馈网络

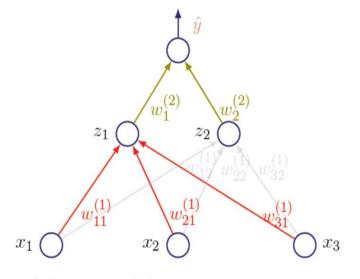
- $z_1 = \tanh(a_1)$ where $a_1 = w_{11}^{(1)}x_1 + w_{21}^{(1)}x_2 + w_{31}^{(1)}x_3$
- $z_2 = \tanh(a_2)$ where $a_2 = w_{12}^{(1)}x_1 + w_{22}^{(1)}x_2 + w_{32}^{(1)}x_3$



- Output $\hat{y} = w_1^{(2)} z_1 + w_2^{(2)} z_2$; Loss $L = (\hat{y} y)^2$
- 需要计算损失L对于每一层每一个权重参数的偏导数

顶层

- 目标: 计算 $\frac{\partial L}{\partial w_1^{(2)}}$ 以及 $\frac{\partial L}{\partial w_2^{(2)}}$
- 首先考虑w₁⁽²⁾



$$\begin{split} \frac{\partial L}{\partial w_1^{(2)}} &= \frac{\partial (\hat{y} - y)^2}{\partial w_1^{(2)}} = 2(\hat{y} - y) \frac{\partial (w_1^{(2)} z_1 + w_2^{(2)} z_2)}{\partial w_1^{(2)}} = 2(\hat{y} - y) z_1 \\ w_1^{(2)} &:= w_1^{(2)} - \eta \frac{\partial L}{\partial w_1^{(2)}} = w_1^{(2)} - \eta \delta z_1 \text{ with } \delta = (\hat{y} - y) \end{split}$$

• 同样,对于w₂⁽²⁾:

$$w_2^{(2)} := w_2^{(2)} - \eta \delta z_2$$

往下的层

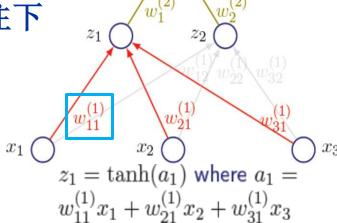
图中反向传播的第二层(对上层而言往下的一层)有6个权重参数

- 以w₁₁⁽¹⁾为例说明,其余类似
- 首先,根据上页内容计算出:

$$\frac{\partial L}{\partial w_{11}^{(1)}} = \frac{\partial (\hat{y} - y)^2}{\partial w_{11}^{(1)}} = 2(\hat{y} - y) \frac{\partial (w_1^{(2)} z_1 + w_2^{(2)} z_2)}{\partial w_{11}^{(1)}}$$

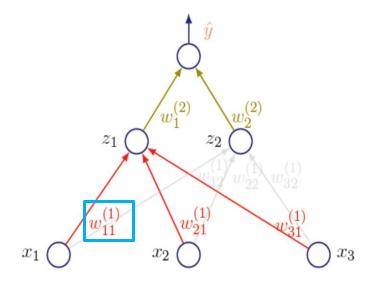
•
$$\Re \lambda \mathbf{z} : \frac{\partial (w_1^{(2)} z_1 + w_2^{(2)} z_2)}{\partial w_{11}^{(1)}} = w_1^{(2)} \frac{\partial (\tanh(w_{11}^{(1)} x_1 + w_{21}^{(1)} x_2 + w_{31}^{(1)} x_3))}{\partial w_{11}^{(1)}} + 0$$

- Ep: $w_1^{(2)}(1-\tanh^2(a_1))x_1 \tanh'(x) = 1-\tanh(x)^2$
- 因此: $\frac{\partial L}{\partial w_{11}^{(1)}} = 2(\hat{y} y)w_1^{(2)}(1 \tanh^2(a_1))x_1$



往下的层

$$\frac{\frac{\partial L}{\partial w_{11}^{(1)}}}{2(\hat{y} - y)w_1^{(2)}(1 - \tanh^2(a_1))x_1}$$

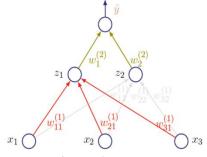


• 权重更新:

$$w_{11}^{(1)} := w_{11}^{(1)} - \eta \frac{\partial L}{\partial w_{11}^{(1)}}$$

• 同样:
$$\frac{\partial L}{\partial w_{ij}^{(1)}} = 2(\hat{y} - y)w_j^{(2)}(1 - \tanh^2(a_j))x_i$$

反向传播过程梳理



• 对于反向传播的第一层: $\frac{\partial L}{\partial w_i^{(2)}} = (\hat{y} - y)z_i = \delta z_i$ (忽略 2)

• 改写:

$$rac{\partial L}{\partial w_i^{(2)}} = igstacksymbol{\delta} igstacksymbol{z_i}$$
 local error local input 局部误差项

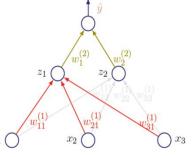
• 假设 L=g(\hat{y}), \hat{y} =f($w_i^{(2)}$)

$$\iiint \frac{\partial L}{\partial w_i^{(2)}} = \frac{\partial L}{\partial \hat{y}} \frac{\partial \hat{y}}{\partial w_i^{(2)}} , \frac{\partial L}{\partial b^{(2)}} = \frac{\partial L}{\partial \hat{y}} \frac{\partial \hat{y}}{\partial b^{(2)}}$$

 $\delta = \frac{\partial L}{\partial \hat{v}}$:从loss传来的误差信号,是loss关于本层净输入(wz+b)的偏导数。

一次计算可用于多个参数的梯度计算。反映了不同神经元对网络能力的贡献程度,解决了贡献度分配问题。

反向传播过程梳理



往下一层:

$$\frac{\partial L}{\partial w_{ij}^{(1)}} = (\hat{y} - y)w_j^{(2)}(1 - \tanh^2(a_j))x_i^{x_1(1)}$$

动态规划

$$\frac{\partial L}{\partial w_{ij}^{(1)}} = \delta_j \ x_i$$
local error
local input

本层净输入:
$$\mathbf{a} = \mathbf{w} \mathbf{x}_{\circ}$$
 $\frac{\partial L}{\partial a_{i}} = (\hat{y} - y) \frac{\partial (w_{1}^{(2)} z_{1} + w_{2}^{(2)} z_{2})}{\partial a_{i}}$

$$\frac{\partial (w_{1}^{(2)} z_{1} + w_{2}^{(2)} z_{2})}{\partial a_{i}} = \frac{\partial (w_{i}^{(2)} z_{i})}{\partial a_{i}} = w_{i}^{(2)} \frac{\partial (\tanh(a_{i}))}{\partial a_{i}}$$

$$\frac{\partial (\tanh(a_{i}))}{\partial a_{i}} = 1 - \tanh^{2}(a_{i})$$

$$\frac{\partial L}{\partial a_{i}} = (\hat{y} - y)w_{i}^{(2)} (1 - \tanh^{2}(a_{i})) = \delta_{j}$$

即 δ_i 是loss关于本层净输入的偏导数

局部误差信号δ

■ $\delta^{(l)}$: 第l层的局部误差。 $\delta^{(l)}$ 和 $\delta^{(l+1)}$ 的关系?

$$\begin{split} \delta^{(l)} &\triangleq \frac{\partial \mathcal{L}(W, \mathbf{b}; \mathbf{x}, y)}{\partial \mathbf{z}^{(l)}} & z^{l} = W^{l} a^{l-1} + b^{l} \\ &= \frac{\partial \mathbf{a}^{(l)}}{\partial \mathbf{z}^{(l)}} \cdot \frac{\partial \mathbf{z}^{(l+1)}}{\partial \mathbf{a}^{(l)}} \cdot \frac{\partial \mathcal{L}(W, \mathbf{b}; \mathbf{x}, y)}{\partial \mathbf{z}^{(l+1)}} \\ &= \mathbf{diag}(f'_{l}(\mathbf{z}^{(l)})) \cdot (W^{(l+1)})^{\top} \cdot \delta^{(l+1)} \\ &= f'_{l}(\mathbf{z}^{(l)}) \odot ((W^{(l+1)})^{\top} \delta^{(l+1)}), \end{split}$$

$$= \frac{\partial \mathbf{a}^{(l)}}{\partial z^{(l)}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_{l}(z^{(l)}_{1})}{\partial z^{(l)}_{1}} & \cdots & \frac{\partial f_{l}(z^{(l)}_{1})}{\partial z^{(l)}_{m}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_{l}(z^{(l)}_{m})}{\partial z^{(l)}_{1}} & \cdots & \frac{\partial f_{l}(z^{(l)}_{m})}{\partial z^{(l)}_{m}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_{l}(z^{(l)}_{1})}{\partial z^{(l)}_{1}} & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \frac{\partial f_{l}(z^{(l)}_{m})}{\partial z^{(l)}_{m}} \end{bmatrix} = \operatorname{diag}(f'_{l}(z^{(l)})) \end{split}$$

局部误差信号δ

■ $\delta^{(l)}$: 第l层的局部误差。 $\delta^{(l)}$ 和 $\delta^{(l+1)}$ 的关系?

$$\delta^{(l)} \triangleq \frac{\partial \mathcal{L}(W, \mathbf{b}; \mathbf{x}, y)}{\partial \mathbf{z}^{(l)}} \quad z^{l} = W^{l} a^{l-1} + b^{l} \\ = \frac{\partial \mathbf{a}^{(l)}}{\partial \mathbf{z}^{(l)}} \cdot \frac{\partial \mathbf{z}^{(l+1)}}{\partial \mathbf{a}^{(l)}} \cdot \frac{\partial \mathcal{L}(W, \mathbf{b}; \mathbf{x}, y)}{\partial \mathbf{z}^{(l+1)}} \\ = \mathbf{diag}(f'_{l}(\mathbf{z}^{(l)})) \cdot (W^{(l+1)})^{\top} \cdot \delta^{(l+1)}$$

$$= f'_l(\mathbf{z}^{(l)}) \odot ((W^{(l+1)})^{\mathsf{T}} \delta^{(l+1)}),$$
 第 l 层的误差项可以通过第 $l+1$ 层的误差项计算得到。

Hadamard product哈达玛积 矩阵对应位置相乘,形状不变

$$\frac{\partial \mathcal{L}(W, \mathbf{b}; \mathbf{x}, y)}{\partial W^{(l)}} = \delta^{(l)} (\mathbf{a}^{(l-1)})^{\mathrm{T}}$$
local error local input

反向传播算法的含义是:第 l 层的一个神经元的误差项是所有与该神经元相连的第 l+1 层的神经元的误差项的权重和。然后,再乘上该神经元激活函数的梯度

参数学习: 优化器

■ (Batch) Gradient Descent 梯度下降

$$\theta \leftarrow \theta + \epsilon \nabla_{\theta} \sum_{t} L(f(\boldsymbol{x}^{(t)}; \boldsymbol{\theta}), \boldsymbol{y}^{(t)}; \boldsymbol{\theta})$$
 每次进行参数更新需要 计算整个数据集的样本

- Stochastic Gradient Descent (SGD) 随机梯度下降
 - Online GD (取1个样本) Minibatch SGD (打乱 取m个)

Algorithm 8.1 Stochastic gradient descent (SGD) update at training iteration k

Require: Learning rate ϵ_k .

Require: Initial parameter θ

while stopping criterion not met do

Sample a minibatch of m examples from the training set $\{x^{(1)}, \dots, x^{(m)}\}$ with corresponding targets $y^{(i)}$.

Compute gradient estimate: $\hat{\boldsymbol{g}} \leftarrow +\frac{1}{m} \nabla_{\boldsymbol{\theta}} \sum_{i} L(f(\boldsymbol{x}^{(i)}; \boldsymbol{\theta}), \boldsymbol{y}^{(i)})$

Apply update: $\boldsymbol{\theta} \leftarrow \boldsymbol{\theta} - \epsilon \hat{\boldsymbol{g}}$

end while

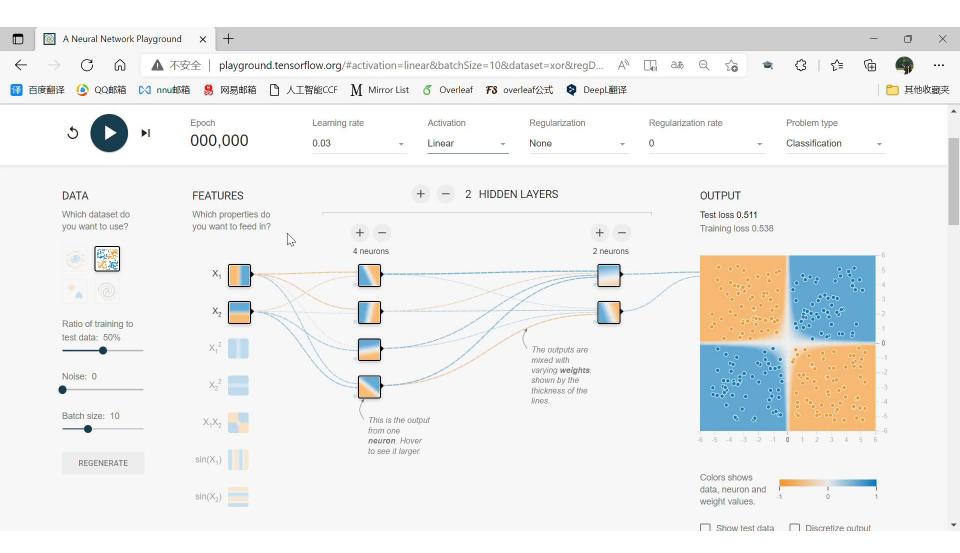
参数学习

其他优化器: RMSprop, Adam, Adadelta, Adagrad, Adamax, Nadam, Ftrl...

https://keras.io/api/optimizers/

- 网络层数
- 每层的神经元个数
- 损失函数设计(正则化项)
- 学习率

A Neural Network Playground



A Neural Network Playground

反向传播梳理

- 神经网络中的反向传播是对于权重(等参数项)的误差 的贡献度分配
 - 从前向传播的输出(output, y) 开始,往回反向计算,一直 到达待求导的参数位置
 - ,通过**链式法则**,沿用前面步骤的计算结果,即局部误差δ ,一直可以追溯到最上层的δ,体现了**动态规划**。
- 反向传播仅仅指计算梯度的方法
- 梯度计算完成后,使用另一种算法:优化器 (e.g. SGD),来使用梯度进行学习、实现对模型参数的更新

反向传播梳理

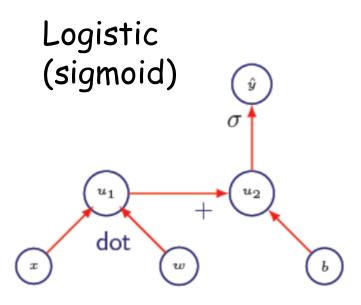
- 使用误差反向传播算法的前馈神经网络训练过程可以分为以下三步:
 - (1) 前馈计算每一层的净输入 $z^{(l)}$ 和激活值 $a^{(l)}$,直到最后一层; $z^{l} = W^{l} a^{l-1} + b^{l}$ $a^{l} = f_{l}(z^{l})$
 - (2) 反向传播计算每一层的误差项 $\delta^{(l)}$;
 - (3) 计算每一层参数的偏导数, 并更新参数

■ 反向传播算法的本质: 链式法则 + 动态规划

计算图

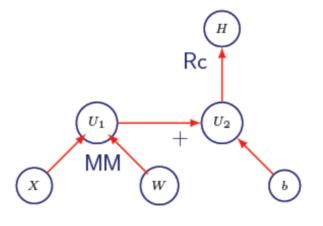
- · 将梯度计算过程通过图(graph)形式化表示,更加简洁
- 节点 表示变量或常量 (标量scalar, 向量vector, 张量tensor 等等)
- 边 表示一个或多个变量的简单函数/操作
- 计算图有一系列可能的操作, e.g. sigmoid, tanh, max...

计算图例子



$$\hat{y} = \sigma(\mathbf{x}^T \mathbf{w} + b)$$

 $H = \max\{0, XW + b\}$



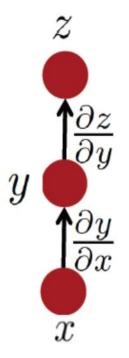
MM: 矩阵乘法

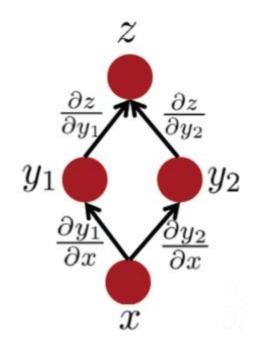
Rc: ReLU

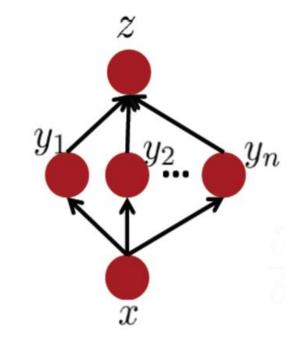
链式法则中的计算图

- 反向传播中可以使用链式法则,利用已经计算过的 梯度值,帮助简化靠近输入位置的参数的梯度计算
- Let $f, g: R \rightarrow R$
- 假设 y=g(x), z=f(y)=f(g(x))
- 根据链式法则 $\frac{dz}{dx} = \frac{dz}{dy} \frac{dy}{dx}$

链式法则







$$\frac{\partial z}{\partial x} = \frac{\partial z}{\partial y} \, \frac{\partial y}{\partial x}$$

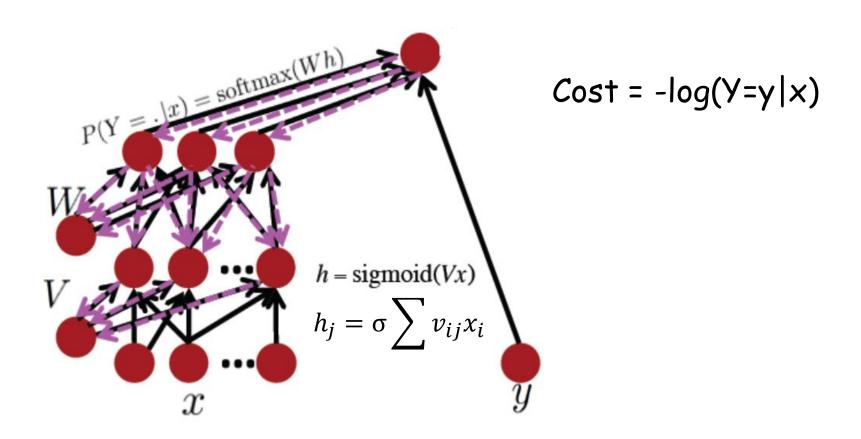
$$y_1 = f_1(x), y_2 = f_2(x)$$

$$z = g(y_1, y_2)$$

$$\frac{\partial z}{\partial x} = \frac{\partial z}{\partial y_1} \frac{\partial y_1}{\partial x} + \frac{\partial z}{\partial y_2} \frac{\partial y_2}{\partial x}$$
 多变量链式法则

$$\frac{\partial z}{\partial x} = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial z}{\partial y_i} \frac{\partial y_i}{\partial x}$$

链式法则



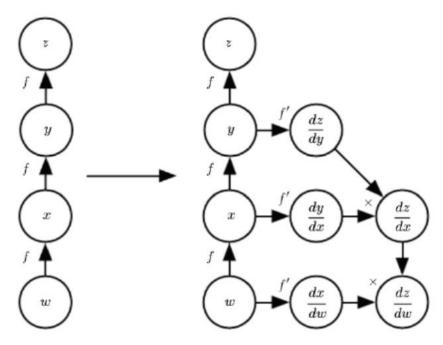
自动梯度计算

- 手动求导过程琐碎并容易出错,导致实现神经网络变得十分低效。
- 目前主流的深度学习框架都包含了自动梯度计算的功能 E.g. 在pytorch中: loss.backward()
- 更快更便捷的原型实验结果
- 自动计算梯度的方法可以分为以下三类:
 - 数值微分:使用数值方法计算 $f'(x) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x + \Delta x) f(x)}{\Delta x}$ 难以找到合适的扰动 Δx ; 计算复杂度
 - 符号微分:基于符号计算/代数计算。变量看成符号,不需要代入具体数值,处理对象是数学表达式。

自动梯度计算

- 自动微分:处理对象是一个函数或一段程序。
- 基本原理:所有的数值计算可以分解为一些基本操作(+,-,×,/和一些初等函数 exp, log, sin, cos 等), 然后利用链式法则来自动计算一个复合函数的梯度。
- 自动微分可以直接在原始程序代码进行微分,因此自动微分成为目前大多数深度学习框架的首选。
- 两种基本方式: symbol to symbol; symbol to number

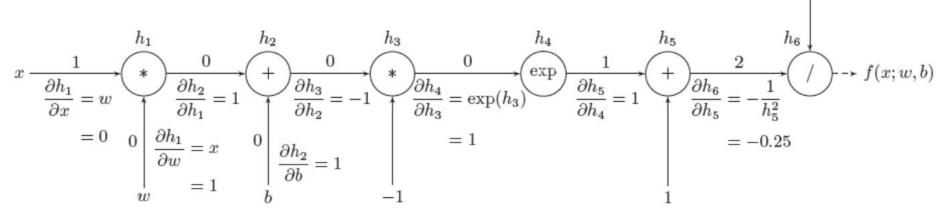
Symbol to Symbol



- 在此方式中反向传播只有符号,不会出现具体数值
- 在此方式中,把描述了导数计算的节点加入到图中
- A graph evaluation engine 进行具体的计算
- 典型应用: Theano, TensorFlow 1.0

Symbol to Number

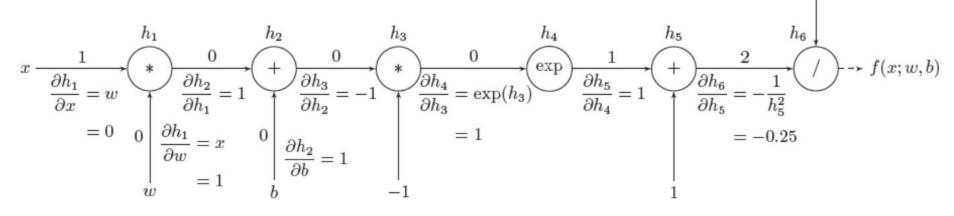
e.g. 复合函数 $f(x;w,b)=\sigma(wx+b)$ 的计算图 $\sigma(z)=1/(1+e^{-z})$



分解成6个基本函数,每个函数的导数都很简单,可以通过规则实现按照计算导数的顺序,自动微分可以分为前向和反向两种模式。

- **(1) 前向模式:**按计算图中计算方向来递归地计算梯度。需要对每个输入变量遍历。
- 计算 $\frac{\partial f}{\partial w}$ 为例,计算顺序: 先计算 $\frac{\partial h_1}{\partial w} = x = 1$,再计算 $\frac{\partial h_2}{\partial w} = \frac{\partial h_2}{\partial h_1} \frac{\partial h_1}{\partial w} = 1 * 1 = 1$, $\frac{\partial h_3}{\partial w} = \frac{\partial h_3}{\partial h_2} \frac{\partial h_2}{\partial w} = \cdots$. 直到 $\frac{\partial f}{\partial w} = \frac{\partial f}{\partial h_6} \frac{\partial h_6}{\partial w} = \cdots$

自动梯度计算



- **(2) 反向模式:**和反向传播的计算梯度的方式相同。对输出遍历。
- $\mathbb{M}\hat{F}$: $\frac{\partial f}{\partial h_6} = 1$, $\mathbb{H}\hat{F} = \frac{\partial f}{\partial h_5} = \frac{\partial f}{\partial h_6} \frac{\partial h_6}{\partial h_5} = 1 * -0.25 = -0.25 \dots$

直到 $\frac{\partial f}{\partial w} = \frac{\partial f}{\partial h_1} \frac{\partial h_1}{\partial w} = \cdots$ 一般神经网络的输出层神经元远少于输入层,

所以反向模式用得更多

$$\frac{\partial f(x; w, b)}{\partial w}|_{x=1, w=0, b=0} = \frac{\partial f(x; w, b)}{\partial h_6} \frac{\partial h_6}{\partial h_5} \frac{\partial h_5}{\partial h_4} \frac{\partial h_4}{\partial h_3} \frac{\partial h_3}{\partial h_2} \frac{\partial h_2}{\partial h_1} \frac{\partial h_1}{\partial w}$$
$$= 1 \times -0.25 \times 1 \times 1 \times -1 \times 1 \times 1$$
$$= 0.25.$$

自动梯度计算

Pytorch

```
optimizer.zero_grad()
x, y = batch
outputs = model(x)
loss = criterion(outputs, y)
loss = loss.mean()
loss.backward()
optimizer.step()
```

清空上一个batch 的参数梯度

计算损失 损失的平均 反向传播 更新参数

```
tensorflow with tf.GradientTape() as tape: # 使用with打开
               z = g(x1, x2) # 具体操作
            dz_x1 = tape.gradient(z, x1) # 求得z对x1的偏导
```

Outline

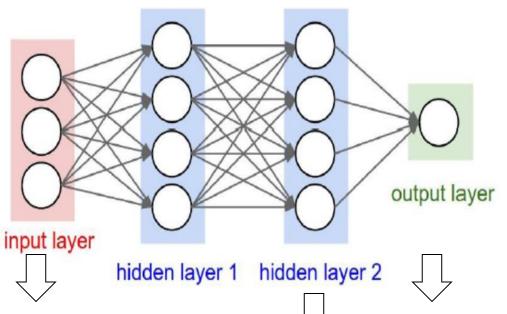
- ■前馈神经模型
- 反向传播算法
- 案例分析

通用流程

· 前馈神经网络可以作为一个编码器(encoder)

· 编码(encoding): 把输入文本序列用一个固定向量来进

行表示



文本 → 文本特征(向量)

e.g. 文本每一个词的向量 e.g. 文本长度、文本标点 等特征组成的向量

...

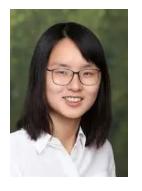
可以看成文本 最终的向量化 表示 一般是sigmoid/softmax单元 e.g. 二元分类,sigmoid<0.5代 表第一类,否则第二类; softmax=[0.6, 0.4]代表第一类

...

案例一: FNN for 依存分析

- 基于文章: A Fast and Accurate Dependency Parser using Neural Networks
- 发表于EMNLP 2014. PDF
- 第一项将神经网络用于**依存**句法分析的工作
- 传统的依存句法分析使用手工特征 ,人工总结特征难以覆盖全面,而 且特征向量非常稀疏,计算速度慢
- 用神经网络分类器做基于转移(transition-based)的贪心 (greedy)模型来缓解上述问题.

单位:斯坦福NLP组





陈丹琦 普林斯顿NLP组 创始人

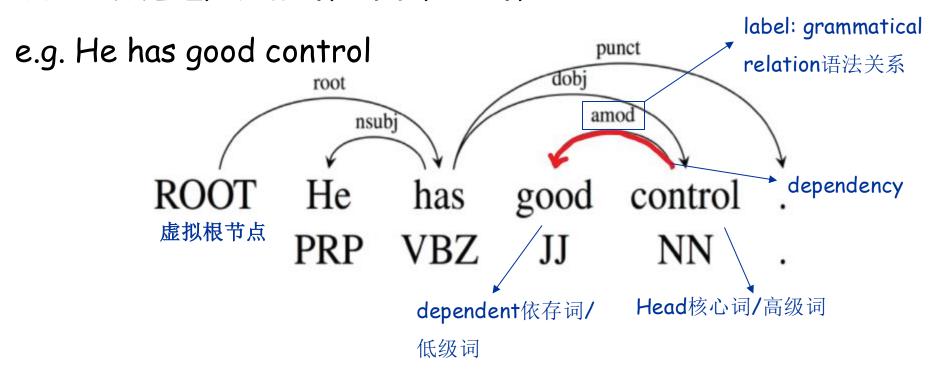
Christopher Manning

依存分析任务:回顾

Dependency Parsing

词之间的二元非对称依赖关系

形成一棵**连通,非循环,单根,无环,无交叉**的树结构



依存分析任务:回顾

Dependency Parsing

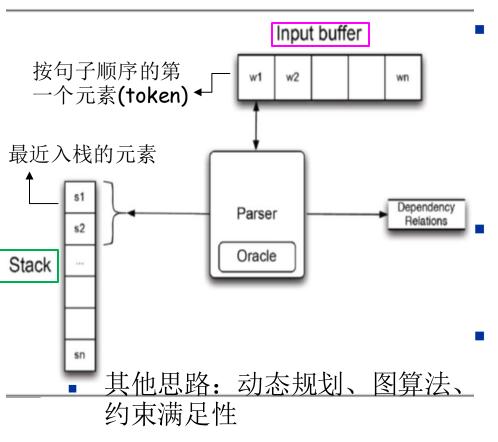
帮助减少句法歧义, 更好地理解句子语义, 服务于后续应用

e.g. I saw the man with the telescope



经典思路: Transition-based (基于转移)

■ 基于移进归约(shift-reduce):包含三个组成部分:一个上下文无关文法,一个堆栈,以及一个将要被分析的 token 列表。首先将待分析的 token 依次输入到堆栈中。栈顶两个元素去与文法规则的右值比较,如果 匹配成功,则元素被语法规则的左值替换(规约)。被用来分析程序语言



状态Configuration: 记录不完整的预测结果

- ·Stack栈(先进后出)
- · Input buffer of words缓存队列
- 依存关系集合(存放依存边)

转移Transition: 控制每一步状态的变化

依存分析目标: 找到一个最终的状态, 其中所有涉及关系的单词都会形成依存树

转移操作

- 每一步Transition做什么:根据当前状态(栈stack,缓冲区 buffer,依存关系dependency),产生一个新的状态
- 开始状态
 - Stack使用根节点root初始化
 - Buffer使用句子中的词序列初始化
 - 依存关系集合为空

- 结束状态
- · Stack有一个根节点
- · Buffer为空 此时,依存关系集合为最终的依存分 析结果
- 此时依存分析也就是:找到一个转移序列,该转移序列实现了从开始 状态到理想结束状态的过程



转移操作

- 转移操作: 改变状态中的 stack, buffer, dependency。
- arc-standard transition-based parser 包含3类动作:

(1) LEFT-ARC:

- •添加一个依存边为*s*1→*s*2,*s*1是栈顶的词(最后入栈),*s*2是第二个词(要求*s*†ack中元素个数大于等于2)
- ·将s2从stack中移除

(2) RIGHT-ARC:

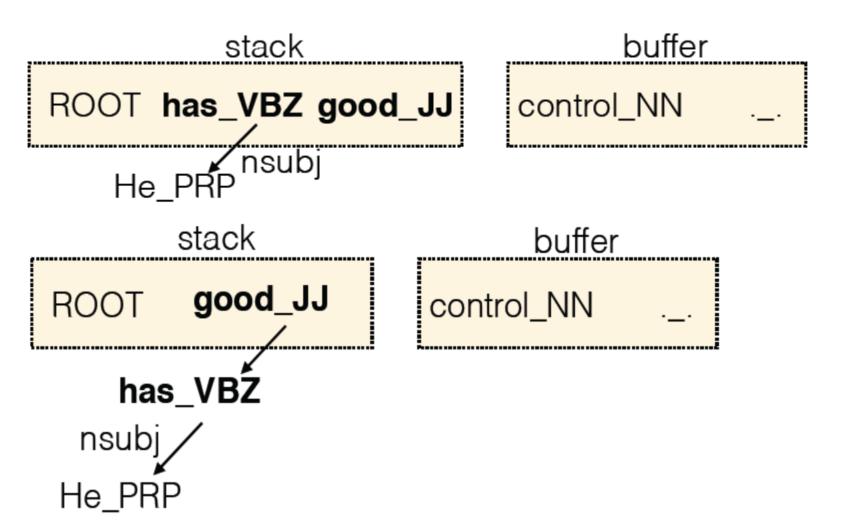
- •添加一个依存边为s2→s1 (要求stack中元素个数大于等于2)
- ·将s1从stack中移除

(3) SHIFT

- ·从buffer中移除第一个词b1(要求buffer中元素个数大于等于1)
- ·b1压入栈

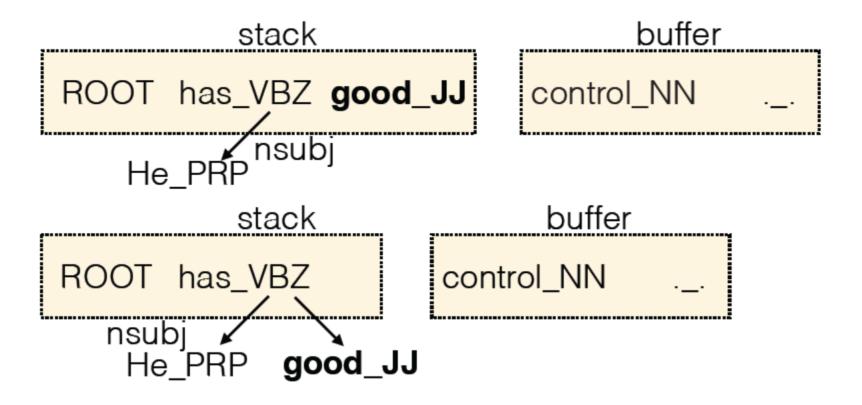
LEFT-ARC

添加依存边s1→s2,stack中移除s2



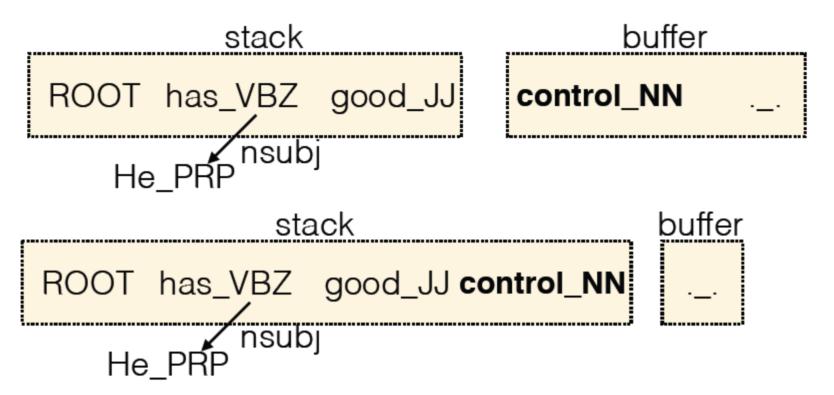
RIGHT-ARC

添加依存边 $s2\rightarrow s1$, stack中移除s1

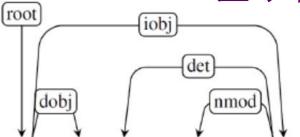


SHIFT

从buffer中移除第一个词b1,压入栈



基于转移的依存分析步骤演示



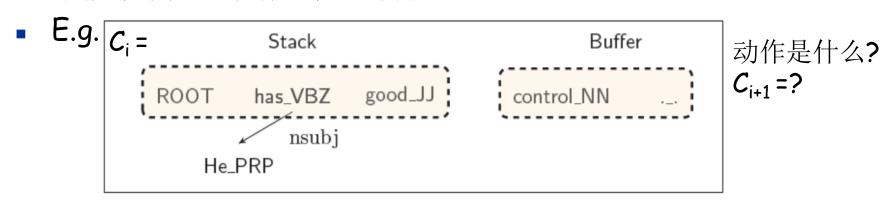
Book me the morning flight

- LEFT-ARC: 创建s1→s2; 删除s2
- RIGHT-ARC: 创建s2→s1; 删除s1
- SHIFT: 删除b1; b1入栈
- 结束状态: stack只有root, buffer为空

Step	Stack	Word List	Action	Relation Added
0	[root]	[book, me, the, morning, flight]	SHIFT	
1	[root, book]	[me, the, morning, flight]	SHIFT	
2	[root, book, me]	[the, morning, flight]	RIGHTARC	$(book \rightarrow me)$
3	[root, book]	[the, morning, flight]	SHIFT	
4	[root, book, the]	[morning, flight]	SHIFT	
5	[root, book, the, morning]	[flight]	SHIFT	
6	[root, book, the, morning, flight]		LEFTARC	$(morning \leftarrow flight)$
7	[root, book, the, flight]		LEFTARC	$(the \leftarrow flight)$
8	[root, book, flight]		RIGHTARC	$(book \rightarrow flight)$
9	[root, book]		RIGHTARC	$(root \rightarrow book)$
10	[root]		Done	

基于转移的依存分析: 贪心策略

每一个步骤贪心地预测下一个要采取的动作,只考虑当前状态下概率最大的动作,完成转移



■ 两种设置: 难点:如何分类? 预言机(oracle):提供操作符

(1) unlabeled: 只预测哪一种动作(left-arc, right-arc, shift)。

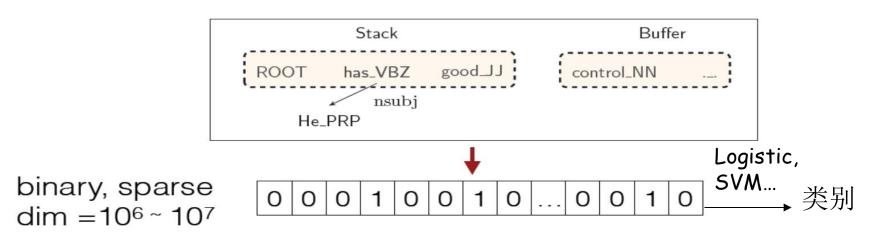
(2) labeled: 预测哪一种动作,以及left-arc或right-arc时两个词之间的依存关系。假设一共有n种依存关系,则进行(2n+1)类分类。

MaltParser(2005): 判别式分类器; s1的词和词性, b1的词和词性...

传统分类特征

word part-of-speech tag $s_2.w = \text{has} \land s_2.t = \text{VBZ}$ 查看是否满足? $s_1.w = \text{good} \land s_1.t = \text{JJ} \land b_1.w = \text{control}$ $lc(s_2).t = \text{PRP} \land s_2.t = \text{VBZ} \land s_1.t = \text{JJ}$ $lc(s_2).w = \text{He} \land lc(s_2).l = \text{nsubj} \land s_2.w = \text{has}$ dep. label

传统的分类特征由人工总结。根据状态:词汇、词性、依存关系标由这些indicator features通过拼接构成了一个很大的特征向量,该向量的值是0或1,且0占据非常大的比例,是一个稀疏向量,维度达106-107



传统分类特征

问题1:向量稀疏。在indicator特征中匹配,本身很稀疏;难以表示向量的相互作用(乘法)

问题2:特征不完整。难以总结所有特征模板

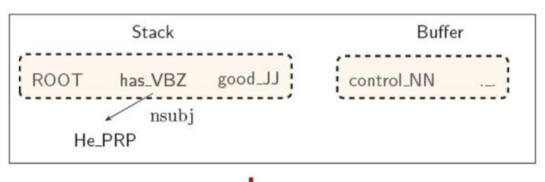
问题3: 计算代价昂贵。对词语、词性标签或语法关系标签进行拼接来生成特征字符串,并在包含数百万特征的巨大表格中进行查找。95%以上的解析时间用于特征计算。

 $s_2.w = \text{has} \land s_2.t = \text{VBZ}$ Indicator $s_1.w = \text{good} \land s_1.t = \text{JJ} \land b_1.w = \text{control}$ features $lc(s_2).t = \text{PRP} \land s_2.t = \text{VBZ} \land s_1.t = \text{JJ}$ $lc(s_2).w = \text{He} \land lc(s_2).l = \text{nsubj} \land s_2.w = \text{has}$ dep. label

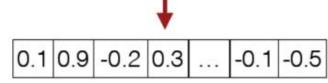
使用神经网络的分类特征

- 3大问题的解决思路:使用神经网络
- 学习**稠密**(不会出现很多**0**)、**紧凑**(维数远小)的特征表示

向量



dense dim = 200



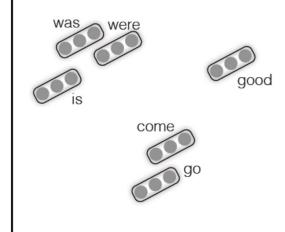
- 问题:
- ✔ 如何对所有可用信息进行编码?
- ✔ 如何对高阶特征建模?

使用神经网络的分类特征

• 首先考虑到这是一个针对文本数据的处理任务,采用词语的分布式表示: 把每一个词语表示为一个d维的稠密向量 (即词向量Word embeddings).↑

• 理想: 相似的词,则词向量也相近

. 映射到2维平面:



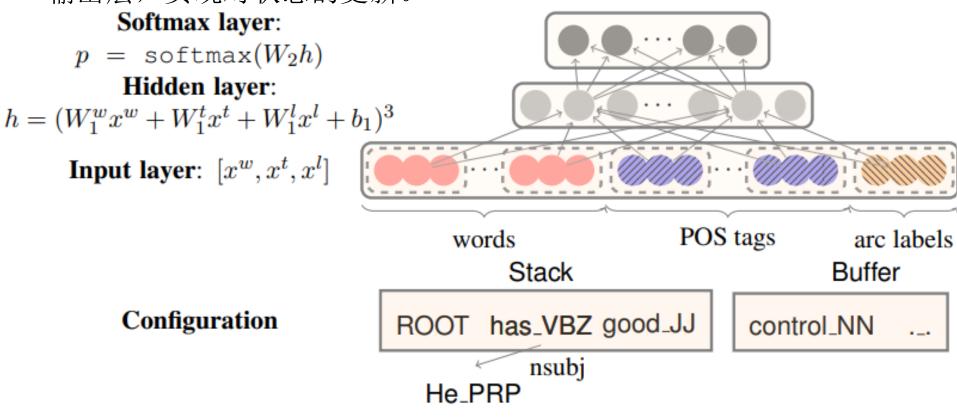
考虑到该任务是一个依存分析任务,词性和依存关系也 是紧密相关的信息:使用向量表示词性和依存关系标签.

NNS (plural noun) should be close to NN (singular noun).

num (numerical modifier) should be close to amod (adjective modifier).

神经依存分析模型结构

在转移中每一个步骤都进行一次预测,每一次预测使用这样一个单隐藏层的神经网络:输入层、隐藏层、以softmax作为输出单元的输出层,实现对状态的更新。



神经网络实际上作为一个分类器组件,完成了文本分类

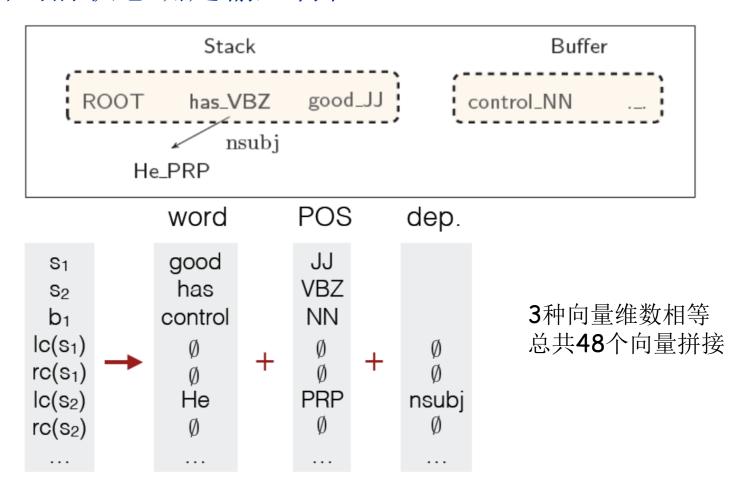
输入层特征

- 词语特征: 取以下词的词向量
- stack和buffer前3个单词: s1, s2, s3, b1, b2, b3(不够补null_token)
- stack前两个单词的左、右孩子中距离最近的两个孩子:
 lc1(s1), rc1(s1), lc2(s1), rc2(s1), lc1(s2), rc1(s2), lc2(s2), rc2(s2)
- stack前两个单词距离最近左孩子的最近左孩子,最近右孩子的最近右孩子: lc1(lc1(s1)), rc1(rc1(s1)), lc1(lc1(s2)), rc1(rc1(s2))
- 词性特征:
- 以上18个词的词性标记:Stanford POS tagger获得
- 依存边特征
- 以上 后12个词的依存边的标签
- 英文工具: CoNLL Syntactic Dependencies, Stanford Basic Dependencies; 中文工具: Penn2Malt
- 比传统的手工特征工作量小

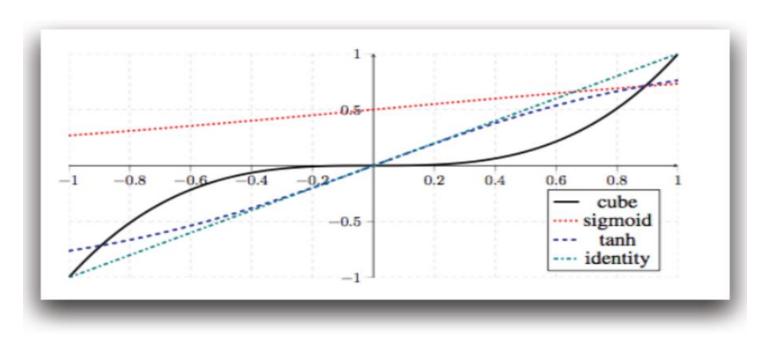
ROOT has VBZ

输入层特征

. 根据当前状态确定输入特征



隐藏层激活函数: 立方激活函数



$$g(w_1x_1+\ldots+w_mx_m+b)= \sum_{i,j,k}(w_iw_jw_k)x_ix_jx_k+\sum_{i,j}b(w_iw_j)x_ix_j\ldots$$

 x_i, x_j, x_k 可以来自三类特征中的任意一种,使用立方激活函数可以对它们进行建模,更好地捕捉不同种特征之间的相互作用

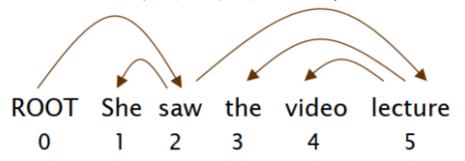
神经模型训练

- 训练样本选择:本项工作从训练文本和真实(gold)语法解析树中生成训练样本 {(c, t)},其中c是configuration,t是transition.并且遵循一种规则。要让stack尽量短.
- 训练目标/损失函数: 交叉熵Cross entropy loss
- 所有向量均使用反向传播计算梯度
- 优化器: 小批量(mini-batch)的AdaGrad
- 初始化:
 - 词语向量采用预训练的w2v向量. 50维
 - 其他向量(词性、依存关系标签) 随机初始化 (首次使用)

依存分析的评估

UAS: unlabeled 无标记依存准确率

LAS: labeled 有标记依存准确率



of deps
UAS = 4/5 = 80%
LAS = $2/5 = 40\%$

Gold				
1	2	She	nsubj	
2	0	saw	root	
3	5	the	det	
4	5	video	nn	
5	2	lecture	obj	

Parsed				
1	2	She	nsubj	
2	0	saw	root	
3	4	the	det	
4	5	video	nsubj	
5	2	lecture	ccomp	

其他:

- (1) 依存准确率:中心词预测正确的非根节点词语个数/总非根节点词数
- (2) 根准确率:正确根节点的个数/句子个数
- (3) 完全匹配率: 无标记依存结构完全正确的句子/句子总数

传统特征与稠密特征的比较

✓ 问题 #1: 向量稀疏性

indicator特征是稀疏向量,而本工作使用的是稠密的分布式向量, 能更好地表达词语的语义相似度

√ 问题 #2: 特征完整性

indicator特征是手工整理的,特征之间可能需要进行组合,而人工 枚举特征非常可能不完整。神经网络方法使用一个立方激活函数, 可以自动地对不同类别、类别内的特征进行组合。

✓ 问题 #3: 计算代价

人工整理特征费时费力,必须对词语、词性标签或语法关系标签进 行拼接来生成特征字符串,并在包含数百万特征的巨大表格中查找 它们。神经网络方法,只需要做一些矩阵操作。

实验1要求

基本要求

完成依存分析模型的构建,包括整体架构、每一层、特别是48个特征的获取

✓ 进阶要求

完成训练数据的构造、损失函数、模型训练过程、测试过程

可以参考http://fancyerii.github.io/books/nndepparser/

后续工作

- A Neural Probabilistic Structured-Prediction Model for Transition-Based Dependency Parsing
- · ACL 2015 (NLP创新的一个方式就是对已有工作的不足进行改进)
- 为什么需要改进? 贪心策略的缺点:每步选择得分最高的操作,得到一个局部最优,不能保证全局最优;无法修正,错误传递。



提出结构化的神经概率依存分析框架,最大化整个动作序列的概率



修改 解码算法 和 训练目标

还有其他优化思路吗?

解码算法

- 编码encoding: 把输入文本序列用一个固定向量来进行表 示
- 解码decoding: 把固定向量转化为输出序列。本任务中解码的目标是给定输入x, 找到全局上分数最高的动作序列
- 贪心策略修改为beam search東搜索策略,每一步骤保留k 个分数最高的预测,取得的总体分数能够更好,效果接近 于exact inference精确推断

句子级概率计算

- 避免局部最优:直接对整个动作序列的概率分布进行建模.
- · 给定一个句子x和神经网络参数,第i个动作序列y_i的概率由 softmax函数根据所有动作序列的分数给出:

序列
$$\mathbf{y}_i$$
的概率: $p(y_i \mid x, \theta) = \frac{e^{f(x, \theta)_i}}{\sum\limits_{y_j \in \text{GEN}(x)} e^{f(x, \theta)_j}}$

序列 y_i 的分数f: 包含的所有动作 a_k 的分数之和

$$f(x, \theta)_i = \sum_{a_k \in y_i} o(x, y_i, k, a_k)$$
 $\mathbf{a_k}$: 第k步的转移动作

o: 神经网络输出

模型结构和前一个工作相同

训练目标/损失

. 句子级的负对数似然损失:

$$L(\theta) = -\sum_{(x_i, y_i) \in (X, Y)} \log p(y_i \mid x_i, \theta)$$

$$= -\sum_{(x_i, y_i) \in (X, Y)} \log \frac{e^{f(x_i, \theta)_i}}{Z(x_i, \theta)}$$

$$= \sum_{(x_i, y_i) \in (X, Y)} \log Z(x_i, \theta) - f(x_i, \theta)_i$$

$$Z(x,\theta) = \sum_{\substack{y_j \in \text{GEN}(x)}} e^{f(x,\,\theta)_j}$$
 Z包含了一个样本所有可能的 预测序列 减少搜索范围: beam search

$Z(x, \theta)$ 的计算

- 对比学习: 给观测到的数据分配一个较大的概率值, 给 噪声数据分配一个较小的概率值。
- 本任务中,给gold动作序列更大的概率值,给束 (beam)中的错误序列更小的概率值。本任务中的对比 学习属于监督对比学习。
- · 这样,我们只需要对比gold动作序列和beam中的错误序列(噪声序列),而不需要对比全部的序列。beam选中的序列都是分数比较高的,所以我们希望模型可以区分正确答案,和得分高的错误答案。

新的训练目标

■ 采用了对比学习的训练目标:

$$L'(\theta) = -\sum_{(x_i, y_i) \in (X, Y)} \log p'(y_i \mid x_i, \theta)$$

$$= -\sum_{(x_i, y_i) \in (X, Y)} \log \frac{e^{f(x_i, \theta)_i}}{Z'(x_i, \theta)}$$

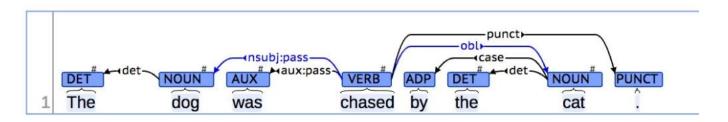
$$= \sum_{(x_i, y_i) \in (X, Y)} \log Z'(x_i, \theta) - f(x_i, \theta)_i$$

$$Z'(x,\theta) = \sum_{y_j \in \mathsf{BEAM}(x)} e^{f(x,\,\theta)_j}$$
 Z'选择的范围是BEAM 一个范围有限的束

```
Input: training examples (X, Y)
Output: \theta
                                   搜索和学习集成在一个
\theta \leftarrow pretrained embedding
                                   统一的框架中
for i \leftarrow 1 to N do
                                   随机采样一些训练集数据
   x, y = RANDOMSAMPLE(X, Y)
   \delta = 0
   foreach x_j, y_j \in \mathbf{x}, y do
      beam = \phi
      goldState = null
      terminate = false
                                   每个样本都有一个gold序列
      beamGold = true
      while beamGold and not terminate
      do
                                        循环里decode得到k个预
         beam = DECODE(beam, x_j, y_j)
                                        测序列。如果beam里的
         goldState =
                                        序列有gold,就把其他预
         GOLDMOVE(goldState, x_j, y_j)
                                        测当成负样本,内部循环
         if not ISGOLD(beam) then
                                        终止,进行参数更新;否
             beamGold = false
                                        则重新解码,直到满足内
                                        部循环的终止条件
         if ITEMSCOMPLETE(beam) then
          terminate = true;
                                        Mini-batched
      \delta = \delta + \text{UPDATE}(goldState, beam)
                                        AdaGrad
```

依存分析数据资源

- 句法分析语料库也称为句法树库,包含大规模句子以及 其对应句法树的集合。
- Universal Dependencies treebanks
- 一个在100多种不同人类语言中对语法(词性、形态特征和句法依赖性)进行一致注释的框架



依存分析数据资源

 句法分析语料库也称为句法树库,包含大规模<u>句子以及</u> 其对应<u>句法树</u>的集合。

语料库名称	单词数量	语法类型	语言
英语宾州树库 (PTB)	117万	成分语法	英文
通用依存树库(UD V2.0 CoNLL 2017)	281万	依存语法	多语言
通用依存树库(UD V2.2 CoNLL 2018)	1714万	依存语法	多语言
组合范畴语法树库(CCGBank)	116万	组合范畴语法	英文
中文宾州树库 6.0 (CTB 6.0)	78万	成分语法	中文
中文宾州树库 7.0 (CTB 7.0)	120万	成分语法	中文
中文宾州树库 8.0 (CTB 8.0)	162万	成分语法	中文
中文宾州树库 9.0 (CTB 9.0)	208万	成分语法	中文
中文语义依存树库(SDP)	52万	语义依存	中文

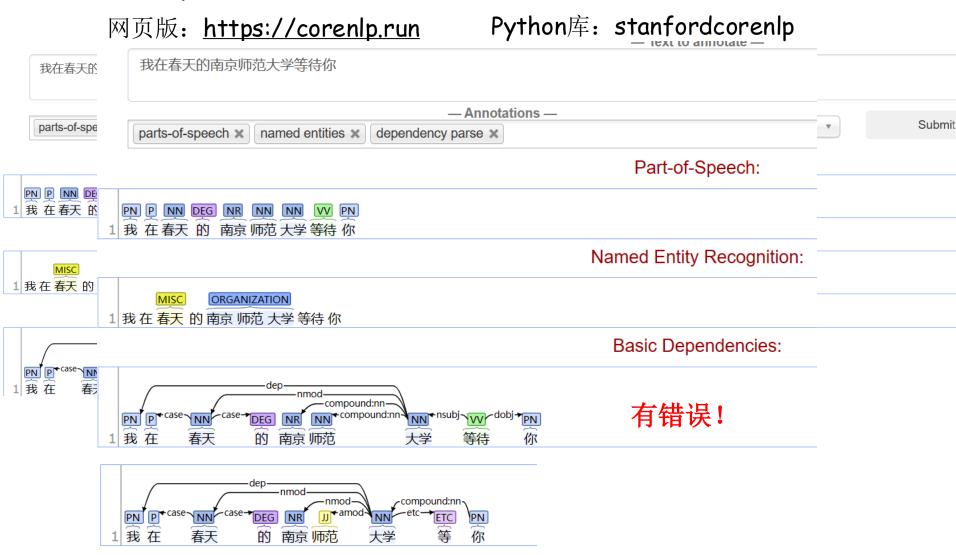
依存分析数据资源

宾州树库的数据组织结构(中英文相同)

```
((IP (NP-SBJ (DNP (NP-PN (NR 北海市))
                 (DEG 的))
             (NP (NN 崛起)))
     (PU , )
     (VP (VC 是)
         (NP-PRD (CP-APP (IP (IP-SBJ (LCP-TMP (NP (NT 近年))
                                            (LC 来))
                                   (NP-PN-SBJ (NR 广西)
                                              (NN 壮族)
                                              (NN 自治区))
                                   (VP (PP-DIR (P 对)
                                               (NP (NN 外)))
                                       (VP (VV 开放))))
                            (VP (VV 取得)
                                (NP-OBJ (ADJP (JJ 卓著))
                                       (NP (NN 成就))))
                        (DEC 的))
                 (ADJP (JJ 重要))
                 (NP (NN 标志)
                    (NN 之一))))
     (PU 。)) )
```

依存分析工具

Stanford Parser



相关测评任务

- SemEval
- 子任务-中文语义依存评测



结构:中文语义依存树库。从语义角度构建依存关系,定义了 45 个标签用来描述论元 (Argument) 之间的语义关系,19 个标签用来描述谓词 (Predicate) 之间的关系,以及 17 个标签用来提供谓词描述。

构造:两个词依存的粒度?句子粒度?

案例二: FNN for 文本分类

- Bag of Tricks for Efficient Text Classification
- 2016. PDF

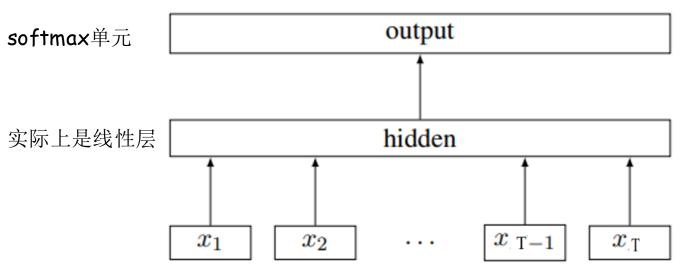
单位: Facebook, 现在的Meta





■ 命名fastText

fast: 在使用标准多核CPU的情况下10分钟内处理超过10亿个词汇



输入层: N元语法特征。

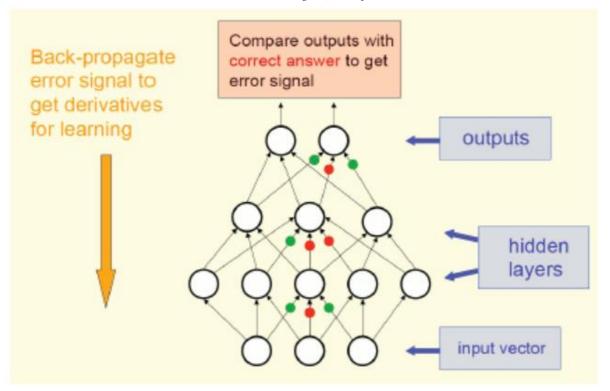
实际上是一个句子所有词的词向量累加

不考虑词序:词袋(bag of words, bow)

更好的特征? 更好的模型设计?

损失: $-\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}y_i\log(f(BAx_i))$

FNN复习



- (1) 前馈计算每一层的净输入和激活值, 直到最后一层;
- (2) 反向传播计算每一层的误差项 $\delta^{(l)}$,计算每一层参数的偏导数(链式法则+动态规划);
- (3) 根据优化器算法更新参数