



Exploración de celdas LSTM iterativas como método de inferencia incremental.

Leandro Palma

*En cumplimiento de los requerimientos para obtener el título de
Ingeniero en Informática*

Director: Lic. Luis Argerich

Departamento de Computación
Facultad de Ingeniería
Universidad de Buenos Aires
2017

Resumen

Las RNNs han sido ampliamente difundidas y en la actualidad se aplican sobre modelos de secuencia en diversas tareas en el campo de machine learning e inteligencia artificial. El estudio de estas redes ha sido enfocado en la explotación de su capacidad de representar procesos secuenciales para mejorar el desempeño. Sin embargo, poco se ha innovado sobre la estructura recurrente de estas redes más allá de soluciones a problemas específicos como el conocido problema del desvanecimiento y la saturación del gradiente. La presente investigación analiza las celdas LSTM desde la perspectiva del estudio de sistemas dinámicos para proponer una modificación sobre el flujo de información en la misma. Se presenta una implementación¹ de la modificación propuesta y se realizan experimentos sobre la tarea de modelado del lenguaje obteniendo un desempeño comparable con conocidos modelos mucho más complejos en términos de cantidad de parámetros.

Palabras clave: sistemas dinámicos, RNNs, celdas LSTM, modelado del lenguaje.

¹<https://github.com/PalmaLeandro/iterativeLSTM>

Abstract

RNNs have been widely diffused and today they are used over a vast number of sequence models applied to diverse tasks on the field of machine learning and artificial intelligence. The study of such networks has been focused on the exploration of its capabilities to represent sequential processes in order to improve its performance. However, there has been little innovation in respect to the recurrent structure of such networks other than solutions to specific issues, such as the gradient vanish and gradient explode problems. The present research analyses the LSTM cells from the perspective of the study of dynamic systems in order to propose a modification over the information flow in it. The implementation of such modification is presented in this work with experiments performed over the language modeling task achieving performance comparable to much more complex well-known models in terms of number of parameters.

Keywords: dynamic systems, RNNs, LSTM cells, language modeling.

Índice

1	Introducción	4
1.1	Trabajo Previo	5
1.2	Organización	6
2	RNNs	6
2.1	RNNs como sistemas dinámicos	9
2.2	Desvanecimiento y saturación del gradiente	12
3	LSTM	13
3.1	Deriva del estado	15
3.2	Conteo preciso	17
3.3	Regularización	18
3.4	Aprendizaje residual	19
4	LSTM iterativa	20
4.1	Evolución del sistema entre iteraciones	22
4.2	Desvanecimiento del gradiente	26
4.3	Formulación de LSTM iterativa	28
5	Modelado del lenguaje	31
5.1	Espacios embebidos de palabras	32
6	Experimentos	35
7	Conclusiones	38
7.1	Resumen de contribuciones	38
7.2	Trabajo futuro	39
	Appendix A Convergencia de LSTM iterativa	41
	Bibliografía	45

1 Introducción

Actualmente los modelos de secuencia, y particularmente las redes neuronales recurrentes(RNN), son ampliamente usados debido a su versatilidad para retener información sobre secuencias de datos con longitud variable, manteniendo las dependencias temporales entre los sucesivos eventos, tanto en el entrenamiento del modelo como en las predicciones realizadas por el mismo.

A pesar de los múltiples esfuerzos realizados para mejorar su desempeño[8] y de su innegable importancia en el desarrollo de modelos tanto académicos[10] como industriales[13][30][35], la estructura básica de dichos modelos solo sufrió ligeras variaciones desde la publicación de las celdas Long Short-Term Memory(LSTM), hace poco más de 20 años.

Motivados por los problemas de desvanecimiento de la señal de entrenamiento presentes en las RNN, los autores de las celdas LSTM propusieron modificaciones sobre la estructura de cada *unit* con la finalidad de retener íntegramente las dependencias temporales en los datos a partir de considerar el contexto en su evaluación y en la propagación de errores durante el entrenamiento[16].

Estos problemas son comúnmente denominados "*gradient vanish*", para el caso del desvanecimiento de la señal, y "*gradient exploding*" para el caso de la saturación de la señal. Su solución que será explorada en la sección 3 es relativamente sencilla e indudablemente eficaz.

Sin embargo, existen potenciales inconvenientes en dicha solución relacionados con el mecanismo por el cual las RNNs retienen la información registrada. Su resolución ofrece apreciables mejoras en el desempeño del modelo que serán expuestas tanto experimentalmente como en forma teórica y, según me consta, no fueron abordadas por la literatura disponible en el campo hasta el momento de realizada esta investigación.

Aprovechar todo el potencial de las RNNs requiere su estudio desde la perspectiva de sistemas dinámicos, donde se encuentran explicaciones a la capacidad de estas redes para retener información y posibilidades de optimizar sus resultados en un esquema iterativo.

Las recientes publicaciones de nuevas arquitecturas de redes neuronales [9][12] fomentan el estudio de nuevas estructuras de redes neuronales que permitan extraer información de los datos secuenciales más eficazmente, reconociendo patrones incrementalmente más complejos.

La presente investigación tiene como objetivo explorar cambios en el flujo de información a través de una capa de celdas LSTM realizando sucesivas iteraciones que evalúen la clasificación de la celda sobre los mismos datos de entrada, alterando el estado de la red.

La ejecución de las iteraciones es condicionada por una regresión logística sobre las variables internas de las celdas y el estado resultante de la misma.

Los resultados hallados sobre los experimentos realizados en tareas del campo de procesamiento del lenguaje natural(NPL) y en forma teórica sobre la teoría

de sistemas dinámicos sugieren que el esquema propuesto permite explotar el potencial de las celdas LSTM más allá de su desempeño normal.

1.1 Trabajo Previo

La modificación propuesta sobre la estructura de la celda LSTM define un sistema dinámico, el cual evoluciona el vector de estado del bloque de celdas LSTM durante sucesivas iteraciones.

En este escenario la evolución del estado individual de cada celda del bloque esta acoplada a la evolución de los estados de las otras celdas del bloque a través de la matriz que pondera las conexiones recurrentes. Esta propiedad asemeja la estructura resultante de aplicar la mejora propuesta con la variante de RNN, Echo State Network(ESN). Esta arquitectura emplea un reservorio constituido por una RNN cuyos parámetros han sido inicializados de forma aleatoria limitados a un conjunto de valores que producen dependencias relevantes entre las celdas de la red.

La arquitectura ESN es mayormente usada para predicción de series continuas de tiempo, por lo tanto, para frecuencias de muestreo sobre la secuencia de valores de entrada suficientemente altos como para considerar dichos valores constantes, se tiene un esquema similar al propuesto donde se realizan sucesivas evaluaciones de la RNN sobre los mismos valores de entrada.

Recientemente se ha publicado una investigación[18] que explora distintas estructuras de RNNs desde la perspectiva del estudio de sistemas dinámicos buscando remediar el comportamiento caótico de dicho sistema bajo condiciones particulares. El extenso análisis presentado en dicha publicación difiere del análisis presentado en las condiciones bajo las que se estudia el sistema dinámico descrito por la evolución del estado de la RNN. Adicionalmente, la motivación de dicho análisis es la de exponer el comportamiento del sistema mientras que el análisis presentado busca condiciones de la RNN para las cuales se obtiene el comportamiento convergente deseado.

La modificación propuesta se relaciona con otras estructuras iterativas[19] de RNNs que evolucionan una representación intermedia entre sucesivas iteraciones con la motivación de inferir de forma incremental el resultado esperado. Sin embargo, estas estructuras no contemplan la dinámica descrita por la RNN para producir la convergencia del vector de estado y su consiguiente robustez para representar la información registrada.

Un ejemplo de estructura iterativa de RNN es LoopyRNN[20]. Esta red recurrente realiza sucesivas iteraciones tomando como entradas el resultado previamente obtenido. Mientras este comportamiento es análogo al propuesto por la modificación sugerida, el mismo aplica el enfoque iterativo sobre el flujo que pondera los valores de las variables de entrada a la celda a diferencia de la evolución iterativa del estado de la celda propuesto. Se consideró el enfoque tomado en dicha investigación como precursor de la modificación propuesta en

la que se contempló desde la perspectiva del estudio de los sistemas dinámicos que es el estado de la celda el que debería evolucionar guiado por la influencia del presente valor de las variables de entrada.

Finalmente, el trabajo presentado contempla los efectos de la modificación propuesta sobre los conocidos problemas de entrenar RNNs para que extraigan información de secuencias de eventos de amplia longitud.

1.2 Organización

El resto del documento se organiza de la siguiente forma. En la sección 2 describe los fundamentos detrás de la estructura de una red neuronal recurrente(RNN), introduce su estudio como un sistema dinámico y expone los problemas que motivaron el desarrollo de la celda LSTM.

La sección 3 describe las mejoras obtenidas con la estructura de las celdas LSTM, explora diversas modificaciones propuestas sobre la estructura original de las celdas LSTM y las mejoras obtenidas en cada caso.

La sección 4 explica en detalle la mejora iterativa propuesta y los fundamentos detrás de su desempeño.

La sección 5 detalla la aplicación de RNNs sobre la tarea de modelado del lenguaje.

La sección 6 expone de forma comparativa los resultados obtenidos con modelos que usan celdas LSTM tradicionales y modelos que usan celdas con la mejora iterativa propuesta en su aplicación al problema de modelado del lenguaje.

Finalmente, en la sección 7 resume las contribuciones del trabajo realizado y posibles aspectos a indagar como trabajo futuro.

2 RNNs

En esta sección se describe la formulación matemática de las RNN, se mencionan ejemplos de arquitecturas que emplean RNNs como mecanismo para procesar secuencias de eventos, además de presentar un análisis de las RNNs como sistemas dinámicos y finalmente exponer los problemas inherentes a su definición que motivaron el desarrollo de las celdas LSTM.

Las RNN son modelos de secuencia que generalizan a las redes neuronales(NN) tradicionales[29]. En las RNN el conjunto de parámetros θ es compartido durante los sucesivos instantes en los que se evalúa el modelo, aplicando una operación de clasificación no lineal en cada instante t cuyo resultado varía según el valor de las variables de entrada y el estado h de la red antes de realizar la clasificación.

Formalmente, una RNN procesa una secuencia de entradas $(x(1), \dots, x(T))$, produciendo una secuencia de salidas $(y(1), \dots, y(T))$ a partir de aplicar sucesivamente y en forma ordenada las siguientes ecuaciones sobre cada instante de tiempo t

$$h(t) = g(W_{in}x(t) + W_{rec}h(t-1) + b) \quad (1)$$

$$y(t) = h(t)$$

Donde h_t es el estado de la red inmediatamente después de realizar la clasificación.

g es una función diferenciable y continua tal que $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ y es aplicada a cada coeficiente del vector de entrada, siendo normalmente seleccionada como la función tangente hiperbólica o la función sigmoidea pero pudiendo ser cualquier función diferenciable y continua que escale apropiadamente la entrada.

Generalmente se considera la dificultad en el cálculo de la derivada de estas funciones para su selección debido a que las mismas deberán ser calculadas para cada celda a ser entrenada por un del gradiente.

W_{in} , W_{rec} son matrices que ponderan las variables de entrada y el estado previo de la red, y en conjunto con el vector de sesgos b conforman el set de parámetros θ . Los mismos son inicializados con valores aleatorios según una distribución normal $\theta \sim \mathcal{N}(0, \sigma)$ donde σ es un parámetro a seleccionar por el usuario, normalmente tomado como 0.1.

En la definición dada en (1) puede notarse la realimentación del estado previo $h(t - 1)$ por el cual las RNNs mantienen información en el vector h en forma "*analógica*", es decir, en un vector de números reales. Esta propiedad es necesaria para que el modelo represente al proceso de una forma diferenciable y continua sobre el espacio de parámetros $\mathbb{R}^{|\theta|}$, siendo $|\theta|$ el número de parámetros del modelo. De esta forma el conjunto de parámetros θ puede ser optimizado usando algoritmos que usen el gradiente de una función objetivo como señal de entrenamiento.

Estos métodos se conocen como basados en el gradiente[32] e incluyen Backpropagation (BP) y su generalización sobre sucesivos instantes de tiempo, Backpropagation Through Time (BPTT) que actualmente constituye el método estándar de entrenamiento de RNNs.

En la siguiente subsección se expone como la dinámica definida en (1) le permite al modelo almacenar información en forma discreta, análogamente a como lo hace una computadora ordinaria usando bits. También se expondrá el problema inherente de las RNNs para procesar secuencias de amplia longitud siendo entrenadas por el método BPTT.

Dependiendo del proceso estocástico que se modele y que es propio de la tarea a resolver, la arquitectura de la red puede variar. Posibles cambios al modelo incluyen la agregar más *capas* en la RNN, cuya dinámica será similar a la de la RNN anteriormente definida pero tomarán como entradas las representaciones de las capas inferiores. De esta forma se generan representaciones internas de las variables de entrada[36] que sean de interés para la tarea a resolver.

En términos generales, la ventaja de disponer de un mayor número de capas radica en que es posible obtener clasificaciones más complejas sobre las variables de la secuencia de entrada.

Adicionalmente, aumentar las capas de la red implica aumentar el número de parámetros del modelo aumentando también la dificultad de evitar el problema de *overfitting*. Este problema se materializa cuando la optimización del conjunto de parámetros θ sobre el conjunto de datos de entrenamiento resulta en soluciones que tienen un muy buen desempeño sobre las secuencias de dicho conjunto pero un desempeño muy malo sobre secuencias que no estuvieran presentes en dicho conjunto.

El problema subyacente a la carencia de desempeño sobre secuencias desconocidas para el modelo es la falta de *generalización* sobre las secuencias del set de entrenamiento. En este caso el desempeño óptimo sobre el conjunto de secuencias de entrenamiento se debe a que el modelo memoriza las salidas correspondientes a cada secuencia de entrada.

El estudio de la generalización de los modelos es un tópico muy estudiado en el campo de machine learning y en este trabajo se comentan únicamente los efectos más comunes sobre arquitectura elegida. Para un completo estudio completo del problema de generalización refiero al lector a [38].

Otros aspectos a considerar son la complejidad del cálculo de la inferencia del modelo, el tiempo de procesamiento y la cantidad de memoria requerida para el cómputo a realizar.

Independientemente de la cantidad de capas usadas por el modelo, en tareas de clasificación, la secuencia final obtenida de la salida de la red es comúnmente usada para realizar una selección sobre un conjunto de clases propias de la tarea de clasificación a realizar. Un ejemplo de este patrón se presenta en tareas de procesamiento del lenguaje natural, sistemas de recomendación y en algunos esquemas de inteligencia artificial como *reinforcement learning*.

Para lograr esto se agrega una capa denominada *softmax* que pondera y normaliza la salida de la red para que obtenga una distribución de probabilidad multinomial.

Formalmente la capa softmax se define como:

$$v(t) = W_s y(t)$$

$$P(C(t) = i | x(1), \dots, x(T)) = s_i(t) = f(v_i(t)) = \frac{e^{v_i(t)}}{\sum_j e^{v_j(t)}}$$

donde y es la salida de la red, W_s es una matriz que proyecta las salidas de la red al espacio \mathbb{R}^c , siendo c el número de clases posibles. v es un vector que resume la evidencia en favor de cada clase posible en la clasificación, frecuentemente llamado *logits*. $s_i(t)$ es el resultado de aplicar la función softmax f a cada elemento de v y representa la probabilidad de que la clase i sea el elemento correspondiente al instante t de la secuencia de salida.

Un ejemplo de clasificación sobre el que se presentaran experimentos en la Sección 5 [referencia] es el procesamiento de lenguaje natural (NLP), donde

el valor de c esta dado por el tamaño del vocabulario a modelar.

Una arquitectura frecuentemente asociada con el uso de RNNs en tarea de asociación de secuencias en un dominio a otro es la disposición de redes conocida como *autoencoders*.

Esta arquitectura consiste de una RNN *encoder* que obtenga una representación intermedia de la secuencia de entrada, seguida de una RNN *decoder*, que reproduzca la representación interna sobre el espacio de secuencias de salida. Esta arquitectura corresponde con los denominados *autoencoder* y su uso fue ampliamente difundido en tareas de traducción[37] y visión computarizada[25], entre otras[10].

Otra aplicación interesante de RNNs es la implementación de modelos de atención. En estos modelos se pondera una secuencia de representaciones intermedias de las variables de entrada con la finalidad de proveer información precisa a otro modelo que tome como entradas las salidas de la RNN ponderadas por la importancia correspondiente dada por el modelo de atención. Generalmente la cantidad de secuencias a ponderar por el modelo de atención es reducido por lo que RNN simples cumplen apropiadamente esta función.

Es oportuno destacar que por ser una generalización sobre las NN, las RNN conservan las características que fomentaron el uso de las primeras. Particularmente se destaca su robustez al ruido en los valores de las variables de entrada y su capacidad de aproximar cualquier función, bajo la condición de disponer del número de neuronas adecuado.

2.1 RNNs como sistemas dinámicos

En esta sección se presenta un análisis de las RNNs modeladas como sistemas dinámicos. El estudio de las mismas desde esta perspectiva permitirá exponer los efectos de las dependencias temporales sobre secuencias de amplia longitud. Se reconocerá entonces la falencia de las RNNs entrenadas con BPTT para preservar las dependencias temporales, estableciendo la motivación para el desarrollo de las celdas LSTM.

Adicionalmente esta perspectiva permite entender el mecanismo de retención de información inherente a las RNNs y las dificultades que el mismo debe superar para cumplir su función.

Durante el desarrollo de este análisis se hará uso de la formulación equivalente de una RNN[26]

$$\begin{aligned} y(t) &= g(h(t)) \\ h(t) &= W_{rec}y(t-1) + W_{in}x(t) + b \end{aligned} \tag{2}$$

Los sistemas dinámicos son aquellos que evolucionan en el tiempo en forma dependiente de su estado actual. Los mismos se definen formalmente como[31]

$$\frac{\partial x(t)}{\partial t} = f(x_1, \dots, x_n) \quad (3)$$

donde x es un vector que representa el estado del sistema en el instante t y $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ es una función que modela el cambio de estado del sistema para cada estado actual. Adicionalmente (3) define un campo vectorial en \mathbb{R}^n , siendo n el número de parámetros del estado del sistema.

La definición dada en (3) corresponde a un sistema de ecuaciones diferenciales para cada coeficiente $x_i(t)$ del vector x . Las condiciones iniciales x_0 propias de dicho sistema de ecuaciones corresponden con el estado inicial del sistema dinámico. En las RNNs el conjunto de las condiciones iniciales esta dado por el estado inicial que es provisto por el usuario, considerado nulo, tratado como un hiperparámetro a encontrar o considerado un parámetro más del conjunto θ a optimizar[33].

Partiendo de la perspectiva de las RNNs como sistemas dinámicos podemos analizar la variación en la evolución del estado definido en (1) al variar los valores del conjunto de parámetros θ .

El modelo definido en (1) constituye un sistema dinámico al considerar su variación sobre instantes discretos de tiempo[26], esta característica del sistema dinámico es propia de un subconjunto de posibles sistemas dinámicos denominados mapas.

Su formulación es explícita esta dada por las ecuaciones

$$\begin{aligned} \frac{\partial h(t-1)}{\partial t} &= h(t) - h(t-1) = W_{rec}y(t-1) + W_{in}x(t) + b - h(t-1) \\ \frac{\partial h(t-1)}{\partial t} &= -h(t-1) + W_{rec}y(t) + W_{in}x(t) + b = f(h, x) \end{aligned} \quad (4)$$

Estudiar la evolución del estado del sistema permite entender los resultados expuestos por el mismo en forma de estado final para cada posible valor de condiciones iniciales. La definición de f dada corresponde a un sistema dinámico no autónomo debido a la variación del estado del sistema respecto del vector de variables de entrada x .

Considerando el campo vectorial f como la variación del estado instante a instante, el mismo define la existencia de *puntos fijos*, es decir puntos h^* tal que $f(h^*, x) = 0$. Sobre estos puntos la variación del estado es nula. La preservación del estado entre instantes constituye una suerte de memoria y es el mecanismo por el cual una RNN pueden retener información.

La elección de un punto fijo como condición inicial es un escenario infinitamente poco probable, por lo que es de mayor interés estudiar la evolución del sistema alrededor de un entorno de los puntos fijos.

Los estados h en un dominio cercano donde el punto fijo h^* tiene influencia

pueden ser atraídos hacia el punto fijo o expulsados dependiendo de la formulación del sistema y de los valores del conjunto de parámetros θ .

La influencia de un punto fijo en su entorno puede estudiarse a través de una linealización del sistema según establece el teorema Hartman-Grobman, siendo el punto un atractor si $Re(\lambda_i) < 0, \forall \lambda_i$, donde λ_i son los autovalores del jacobiano de la linealización de f evaluada en el punto fijo en cuestión.

Existen otros tipos de puntos fijos y particularidades del campo vectorial definido por f pero se hará énfasis en los atractores debido a su importancia en la retención de información y el resultado final del sistema.

Los atractores del espacio de estados del sistema delimitan los estados posibles que pueden resultar de la evolución del sistema para un conjunto de condiciones iniciales, reteniendo el estado dentro del dominio sobre el cual tienen influencia.

Para una condición inicial dentro de este dominio el resultado final será un estado dentro del propio dominio, por lo tanto los conjuntos de resultados posibles del sistema esta dado por los dominios de los atractores definidos por el campo vectorial f .

Sin embargo, la incorporación de nueva información puede expulsar el estado del sistema hacia el dominio de otro atractor, actualizando la información retenida en el estado de la RNN.

Esta propiedad de retener información en forma de confinamiento de estados posibles evidencia la necesidad de aprender conjuntos de parámetros θ que provean una cantidad de atractores adecuada para la cantidad de información distinta que sea oportuno retener en la tarea a desempeñar.

La inclusión de un nuevo atractor en el espacio de estados posibles del sistema implica un cambio en el conjunto de parámetros θ que en consecuencia genere un cambio en la topología del espacio en cuestión. A pesar de esto, aprovechar esta propiedad de los sistemas dinámicos puede ser difícil en la práctica debido a una serie de inconvenientes relacionados con el algoritmos de aprendizaje usado.

De particular interés son los cambios en la topología del campo vectorial, denominados bifurcaciones[31].

En los valores de los parámetros para los cuales ocurren las bifurcaciones la evolución del sistema cambia de forma abrupta, produciendo resultados muy distintos que se manifiestan con la evolución del estado del sistema a lo largo del tiempo.

Los cambios en la topología del campo vectorial incluyen la creación y destrucción de *puntos fijos*, y el cambio en la estabilidad de los mismos, es decir, su propiedad de atracción o repulsión sobre los estados h en el dominio cercano donde h^* tiene influencia.

Los cambios abruptos en la topología son un problema al momento de entrenar una RNN usando el método BPTT debido a que como se mencionó antes, el

método supone que la variación sobre la función objetivo es suave al variar el conjunto de parámetros θ y una variación de los parámetros que atravesase una bifurcación producirá una discontinuidad en la función objetivo[26][5].

Por otro lado, dependiendo del tipo de bifurcación atravesada y su ubicación, un cambio en la dinámica del sistema como lo es el esquema iterativo propuesto, puede reducir el efecto de una discontinuidad en la función objetivo en el entrenamiento. Este es el primer aspecto destacable del esquema propuesto y será explorado en detalle más adelante.

2.2 Desvanecimiento y saturación del gradiente

Adicionalmente es interesante relevar el problema de desvanecimiento o saturación de gradientes. El problema se produce cuando la señal de error respecto de la actividad de la RNN no puede ser propagada apropiadamente hacia atrás en el tiempo. Este problema fue estudiado en profundidad y múltiples soluciones han sido propuestas.

Consideraremos el efecto de un estado previo del sistema $h(k), k < t$, sobre el estado actual al usar el método BPTT. Este efecto es propagado hacia adelante en el tiempo a través de la evaluación de la RNN en sucesivos instantes, por lo tanto su efecto en hacia atrás en el tiempo es aproximable linealmente por una multiplicación de $t - k$ matrices.

Teniendo una función objetivo a optimizar \mathcal{L} que mide el desempeño de la RNN en la tarea a realizar, tal que $\mathcal{L}(y(t)) = \mathcal{E}(t)$.

Si se considera la señal de error relativa al instante de tiempo t como $\mathcal{E}(t)$ y aplicando regla de la cadena en la derivación se tiene

$$\frac{\partial \mathcal{E}(t)}{\partial \theta} = \frac{\partial \mathcal{E}(t)}{\partial h(t)} \frac{\partial h(t)}{\partial \theta} = \sum_{k=0}^t \frac{\partial \mathcal{E}(t)}{\partial h(t)} \frac{\partial h(t)}{\partial h(k)} \frac{\partial h(k)}{\partial \theta}$$

considerando que el estado en el instante t no tiene dependencias explícitas con un estado en un instante $k < t - 1$, aplicando nuevamente regla de la cadena sobre la dependencia del estado en el instante t con el instante inmediatamente anterior $t - 1$ y reemplazando $h(t)$ por su definición dada en (1) se tiene

$$\frac{\partial h(t)}{\partial h(k)} = \frac{\partial h(t)}{\partial h(t-1)} \cdots \frac{\partial h(k+1)}{\partial h(k)} = \prod_k^{t-1} \frac{\partial h(k+1)}{\partial h(k)} = \prod_k^{t-1} W_{rec} y'(k)$$

luego, acotando el producto de $t-k$ matrices idénticas y la derivada de la función no lineal y se consigue

$$\prod_k^t W_{rec} y'(k) \leq \prod_k^t \|W_{rec}\| \|y'(k)\| \leq (|\lambda|\sigma)^{(t-k)} \quad (5)$$

donde λ es el autovalor de W_{rec} con mayor módulo, σ es el mayor valor que toma la derivada de la función no lineal y el cual es igual a 1 para la función

sigmoidea o $\frac{1}{4}$ para la función tangente hiperbólica.

La condición expuesta en (5) determina la relación que deben tener los autovalores de la matriz W_{rec} con la derivada de la función no lineal y para que se produzca el problema de desvanecimiento o saturación del gradiente teniendo que ser $(\lambda\sigma) < 1$ o $(\lambda\sigma) > 1$, respectivamente al considerar una dependencia temporal prolongada, tal que $t - k \rightarrow \infty$.

Esta relación con la función no lineal y es la raíz tanto del problema de desvanecimiento del gradiente y como del problema de saturación del gradiente.

Por otro lado emplear una función no lineal para la inferencia es un requerimiento para que la una RNN sea tolerante a algún nivel de ruido en los valores de las variables de entrada[1]. Entonces el problema presentado al entrenar el modelo por el método BPTT es inherente a la formulación de las RNNs.

El desarrollo presentado sigue la deducción en Pascarnu et.al.(2012) donde se demuestra como la multiplicación de matrices se desvanece o crece exponencialmente en el espacio de estados del sistema análogamente a como lo hace una multiplicación de numerosos valores reales. Más aún, dicha publicación establece condiciones suficientes para que el problema de desvanecimiento y saturación de la señal de error se produzca.

Otros métodos para la optimización del conjunto de parámetros θ en RNNs como lo son Real-Time Recurrent Learning(RTRL) o Hessian Free(HF)[32] han tenido mayor éxito en evitar los problemas expuestos pero frecuentemente la selección de otro método de optimización requiere un balance entre la mejoría en la capacidad de entrenamiento y el tiempo de procesamiento requerido para entrenar los modelos.

3 LSTM

En esta sección se expone la formulación original de las celdas LSTM, las soluciones que provee sobre los problemas antes presentados y las modificaciones subsiguientes que buscan subsanar problemas específicos encontrados en aplicaciones prácticas.

Las celdas LSTM son un tipo de RNN donde la realimentación del estado previo fue concebida para evitar el problema de desvanecimiento o saturación del gradiente presentado anteriormente.

Su publicación se remonta a 20 años atrás pero aun son usadas en muchos los sistemas industriales[30][13] y en aplicaciones académicas[10] con algunas modificaciones motivadas por problemas específicos de su formulación que introduciremos mas adelante.

Formalmente la manipulación de la información en las celdas LSTM está definida como el procesamiento de una secuencia de entradas $(x(1), \dots, x(T))$, produciendo una secuencia de salidas $(y(1), \dots, y(T))$ resultantes de aplicar el siguiente con-

junto de ecuaciones

$$\begin{aligned}
j(t) &= f_1(W_{in,j}x(t) + W_{rec,j}h(t-1) + b_j) \\
i(t) &= f_2(W_{in,i}x(t) + W_{rec,i}h(t-1) + b_i) \\
c(t) &= c(t-1) + i(t)j(t) \\
o(t) &= f_2(W_{in,o}x(t) + W_{rec,o}h(t-1) + b_o) \\
h(t) &= o(t)f_1(c(t)) \\
y(t) &= h(t)
\end{aligned}$$

donde f_1 y f_2 son dos funciones diferenciables y continuas tal que $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, aplicadas a cada coeficiente del vector de entrada, que en la actualidad son normalmente seleccionadas como la función tangente hiperbólica y la función sigmoidea pero pueden ser cualquier función diferenciable y continua que escale apropiadamente la entrada.

Generalmente se considera la dificultad en el cálculo de la derivada de estas funciones para su selección debido a que las mismas deberán ser calculadas para cada celda a ser entrenada por un del gradiente.

Las matrices W_{in} , W_{rec} son matrices que ponderan las variables de entrada y el estado previo de la red, y junto con el vector de sesgos b constituyen el conjunto de parámetros θ a optimizar. Los mismos son inicializados con valores aleatorios según una distribución normal $\theta \sim \mathcal{N}(0, \sigma)$ donde σ es un parámetro a seleccionar por el usuario, normalmente tomado como 0.1.

Los valores iniciales $c(0)$ y $h(0)$ son tomados como 0, seleccionados por el usuario, tratados como hiperparametros a encontrar o considerados un parámetro más del conjunto θ a optimizar.

Vale la pena destacar el funcionamiento del mecanismo de realimentación de la celda. El mismo es definido adrede para que sea una copia del estado previo de la celda.

Se considera, por otro lado, que la propagación del error decae exponencialmente para las dependencias directas de las componentes i , j y o con instantes de tiempo previos debido a la sucesiva aplicación de funciones no lineales[15].

Entonces, la dependencia temporal con el estado previo es $\frac{\partial c(t+1)}{\partial c(t)} = 1$ que, como vimos anteriormente, es el único escenario donde no se produce el problema de desvanecimiento o saturación del gradiente. La solución presentada es denominada Constant Error Carrousel(CEC).

Habiendo implementado CEC, es posible obtener la señal de entrenamiento apropiada para los parámetros θ respecto a estados en instantes de tiempo muy distantes del actual según las siguientes ecuaciones

$$\frac{\partial \mathcal{E}(t)}{\partial \theta} = \frac{\partial \mathcal{E}(t)}{\partial h(t)} \frac{\partial h(t)}{\partial \theta} = \sum_{k=0}^t \frac{\partial \mathcal{E}(t)}{\partial h(t)} \frac{\partial h(t)}{\partial c(t)} \frac{\partial c(t)}{\partial c(k)} \frac{\partial c(k)}{\partial \theta} \quad (6)$$

Luego, la señal de entrenamiento es transmitida a cada instante de tiempo previo k en la sumatoria a través del vector de estado interno $c(t)$ como evidencia la

siguiente ecuación

$$\frac{\partial c(t)}{\partial c(k)} = \frac{\partial c(t)}{\partial c(t-1)} \cdots \frac{\partial c(k+1)}{\partial c(k)} = \prod_k^{t-1} \frac{\partial c(k+1)}{\partial c(k)} = 1^{t-k} = 1 \quad (7)$$

Por lo tanto, reemplazando (7) en (6) se obtiene

$$\frac{\partial \mathcal{E}(t)}{\partial \theta} = \frac{\partial \mathcal{E}(t)}{\partial h(t)} \frac{\partial h(t)}{\partial \theta} = \sum_{k=0}^t \frac{\partial \mathcal{E}(t)}{\partial h(t)} \frac{\partial h(t)}{\partial c(t)} \frac{\partial c(k)}{\partial \theta} \quad (8)$$

Es posible apreciar en (8) el que el efecto que produce el estado interno de la celda sobre el error en el instante de tiempo t es análogamente considerado para instantes previos. Esta propiedad se transfiere a la señal de entrenamiento para el conjunto de parámetros θ respecto a su aporte en instantes de tiempo previos.

Esta solución es indudablemente eficaz para retener dependencias temporales intactas incluso con secuencias de eventos extremadamente largas, del orden de 1000 períodos de tiempo.

Otro aspecto destacable de las celdas LSTM lo constituyen las compuertas de selección de entrada y salida de información, i y o respectivamente. Las mismas son la solución propuesta a un problema sutil en las RNNs.

Concretamente las compuertas mencionadas funcionan como un controlador que selecciona la información que ingresara a la celda o será expuesta como salida de la misma. Esta separación de incumbencias permite aislar la tarea de resguardar y liberar la información retenida en la celda en un componente dedicado distinto al que realiza la inferencia sobre el espacio de las variables de entrada. De esta manera la señal de error que se le atribuye a la celda es correctamente distribuida sobre los componentes dependiendo de su responsabilidad respecto del resultado expuesto.

El resultado es un entrenamiento preciso de cada componente en la tarea específica que desempeñan.

Comúnmente a estos componentes i y o se los conoce como *input gate* y *output gate* respectivamente.

3.1 Deriva del estado

A pesar de su efectividad, esta primera formulación de las celdas LSTM presenta problemas en aplicaciones prácticas debido a su incapacidad de resetear la información retenida en el estado interno $c(t)$ de la celda de forma autónoma. La celda requiere que se borre la información retenida al inicio de cada secuencia que no tenga relación con otros eventos previamente registrados por la celda, aun cuando la delimitación está claramente marcada en el espacio de valores de las variables de entrada.

Este problema fue previsto en su publicación original bajo el nombre de deriva del estado. La manifestación del problema depende de que la tarea en la que se

evalúe el modelo contenga subsecuencias sin conexión entre sí.

Particularmente en el conjunto de tareas donde fue probada la estructura original ha sido suficiente con seleccionar convenientemente el valor de los sesgos b_i de la compuerta de entrada i . Por otra parte, el estado de la celda era reseteado explícitamente al terminar cada secuencia del conjunto de tareas donde la estructura de la celda LSTM fue probada originalmente

Luego de la publicación de la estructura original de la celda LSTM se propuso una modificación que contempla específicamente el problema de deriva del estado[8]. La nueva formulación de la celda LSTM introduce una nueva compuerta f encargada de borrar la información almacenada en el estado de la celda en función de las entradas y de el estado previo de la misma.

La modificación propuesta como solución al problema de la deriva del estado afecta únicamente al cálculo del estado interno de la celda según las ecuaciones

$$f(t) = f_2(W_{in,f}x(t) + W_{rec,f}h(t-1) + b_f)$$

$$c(t) = f(t)c(t-1) + i(t)j(t)$$

donde la compuerta f constituye un modulo análogo a las compuertas i e o que actúa sobre la realimentación del estado interno previo de la celda, seleccionando bajo una condición de sus variables de entrada la proporción del estado previo que se preservara en el instante actual. Esta nueva compuerta f es denominada *forget gate*.

Es oportuno destacar el efecto que tiene esta modificación sobre el ya expuesto problema del gradiente debido a que la nueva formulación del cálculo del estado introduce la multiplicación del estado interno de la celda $c(t)$ con el valor de la compuerta $f(t)$, cuya imagen cumple $f(t) \in (0, 1)$.

Implementando la compuerta f la dependencia truncada del estado interno de la celda en el instante t con el instante de tiempo inmediatamente anterior esta dada por

$$\frac{\partial c(k+1)}{\partial c(k)} = \frac{\partial(c(k)f(k+1))}{\partial c(k)} = f(k+1) + \underbrace{\frac{\partial f(k+1)}{\partial c(k)}}_{\rightarrow 0} \quad (9)$$

Por lo tanto, reemplazando (9) en la formulación de la dependencia entre instantes de tiempo t y k , tal que $k \leq t$, se obtiene

$$\frac{\partial c(t)}{\partial c(k)} = \frac{\partial c(t)}{\partial c(t-1)} \dots \frac{\partial c(k+1)}{\partial c(k)} = \prod_k^{t-1} \frac{\partial c(k+1)}{\partial c(k)} = \prod_k^{t-1} f(k+1) \quad (10)$$

Como puede apreciarse en (10), a diferencia de la implementación original de la celda LSTM, la modificación que incluye la compuerta f introduce un factor que le permite a la celda borrar tanto el registro de la información contenida como la propagación de errores hacia instantes de tiempo previos, "olvidando"

los errores cometidos.

Otro aspecto destacable es que dado que f , cumple que $f(t) \in (0, 1)$, entonces la dependencia con un estado interno previo debería tender a desvanecerse para secuencias de eventos muy largas ya que $x^l \xrightarrow{l \rightarrow \infty} 0, \forall x \in (0, 1)$.

Comúnmente, y particularmente al inicio del entrenamiento, este problema es abordado seleccionando el sesgo b_f para que provea valores de $f(t)$ cercanos a 1. A pesar de este problema el desempeño de las celdas LSTM sobre experimentos con amplias secuencias de eventos no decae exponencialmente con el crecimiento de la longitud de la secuencia.

Esta observación indica que posiblemente la celda es capaz de compensar la pérdida de información aumentando ligeramente el estado interno c en forma constante a través de la actualización no recurrente del mismo dada por $\tilde{c}(t) = i(t)j(t)$.

3.2 Conteo preciso

Un tipo de tarea en particular presenta un desafío para las RNNs y por consiguiente a las celdas LSTM, este problema es el de el conteo preciso de tiempo. En este tipo de tareas se tiene una señal periódica que no provee mayor información que un cambio abrupto separado por intervalos de tiempo fijo. Un ejemplo de estas señales lo constituyen picos de actividad separados por intervalos de tiempo fijos e iguales.

Sobre este escenario la única información disponible para la celda LSTM es una entrada constante de tiempo durante la mayor parte del periodo y se espera que prediga con exactitud el instante en el que se producirá el cambio abrupto en forma periódica. Luego, la celda deberá valerse de su estado interno para almacenar la cantidad de tiempo transcurrido y predecir con exactitud la manifestación del pico de la señal.

La estructura de la celda LSTM incluyendo la compuerta f , definida en la sección anterior presenta problemas al momento de exponer predecir con exactitud la periodicidad de la señal debido a la secuencia de operaciones realizadas para exponer una salida.

Particularmente al presentar un valor de las variables de entrada los distintos componentes de la celda toman esa información en conjunto con el estado previo de la celda para inferir una salida, seguidamente se opera entre estas salidas parciales de cada componente para obtener el resultado expuesto.

Según el proceso descrito cada uno de los componentes desconoce el valor de los otros y más aún, desconocen el estado interno de la celda al realizar su inferencia y exponer un resultado parcial. Esto es de particular importancia en la compuerta de salida ya que la misma no tiene la información precisa del estado que está exponiendo.

Este detalle es de crucial importancia en la tarea descrita ya que un retraso de un instante de tiempo en la exposición de la salida adecuada implica un error muy grande en el resultado.

Para solucionar este problema y enriquecer a las celdas LSTM con un mecanismo que le permita realizar conteos precisos se propuso una nueva modificación en su estructura, esta vez añadiendo conexiones internas entre el estado actual de la celda y cada uno de los componentes que participan en el cálculo de la salida expuesta.

Entonces formalmente la celda LSTM con conexiones internas queda definida por las siguientes ecuaciones en el orden dado

$$\begin{aligned}
j(t) &= f_1(W_{in,j}x(t) + W_{rec,j}h(t-1) + W_{pep,j}c(t-1) + b_j) \\
i(t) &= f_2(W_{in,i}x(t) + W_{rec,i}h(t-1) + W_{pep,i}c(t-1) + b_i) \\
f(t) &= f_2(W_{in,f}x(t) + W_{rec,f}h(t-1) + W_{pep,f}c(t-1) + b_f) \\
c(t) &= f(t)c(t-1) + i(t)j(t) \\
o(t) &= f_2(W_{in,o}x(t) + W_{rec,o}h(t-1) + W_{pep,o}c(t) + b_o) \\
h(t) &= o(t)f_1(c(t)) \\
y(t) &= h(t)
\end{aligned}$$

donde las matrices W_{pep} ponderan los valores del estado interno actual al momento de realizar la inferencia en cada componente.

Nótese que en el caso de la compuerta o la ponderación se realiza con el estado interno recientemente calculado en vez que con el obtenido en el instante $t-1$ anterior.

Estas conexiones internas fueron denominadas *peephole connections*.

3.3 Regularización

Una mejora aun no explorada es la regularización de la RNN por el método Dropout. Este método es ampliamente usado en redes neuronales en general y constituye una herramienta muy valiosa en redes neuronales con una gran cantidad de parámetros.

El método de regularización Dropout busca reducir el overfitting en redes neuronales a partir de descartar las salidas de las celdas de forma aleatoria con una probabilidad p . Esta probabilidad es un parámetro a seleccionar por el usuario.

El racional detrás de este método de regularización radica en que descartando la salida de las celdas de forma aleatoria se evita que los componentes en capas superiores conectados con la salida de estas desarrollen una fuerte dependencia con los valores de los parámetros que los conectan.

Básicamente el mecanismo de regulación Dropout puede considerarse como la adición de ruido inducido sobre la red neuronal. Seguidamente se exige a la red neuronal que omita el ruido presentado, desarrollando así una representación interna que exitosamente extraiga las conexiones relevantes en la red.

En la práctica el método de regularización provee una apreciable mejora del desempeño reduciendo el error en la generalización, discutido en la sección 2.

Es oportuno mencionar que la regularización por Dropout puede aplicarse tanto sobre las salida de las celdas LSTM como a sobre las variables de entrada. Análogamente este mecanismo puede usarse en otras NNs, especialmente en otras RNNs.

Otro tipo de métodos de regularización de parámetros también pueden ser aplicados independientemente de la aplicación del método Dropout. Estos métodos forman parte del estudio del problema de generalización en NNs que, como se mencionó anteriormente, es un tema de estudio muy amplio que no será explorado en mayor detalle en la presente investigación.

3.4 Aprendizaje residual

La difusión de los modelos que apilan una amplia cantidad de capas de neuronas en una única red neuronal desbloqueó niveles de desempeño nunca antes obtenidos en el campo de machine learning. Particularmente el campo de visión computarizada fue receptor de múltiples arquitecturas novedosas que establecieron un nuevo estándar de desempeño, más allá del obtenido por los humanos[7]. No Obstante la agregación de múltiples capas de neuronas se ha convertido en un patrón frecuente en NNs en general debido a las mejoras en desempeño obtenidas por la explotación de una mayor capacidad de la red para tener representaciones internas de los datos de entrada.

Sin embargo, incorporar incrementalmente capas de redes neuronales significó la manifestación de problemas incrementalmente más complejos en el entrenamiento de la red resultante[38].

Este hecho fue explorado en profundidad concluyéndose que no se debía al ya mencionado problema de overfitting. En cambio, los experimentos realizados sobre estas redes con un amplio número de capas, del orden de 10 hasta 1000 capas, mostraron que se produce una saturación en el desempeño de la red donde no se obtienen ventajas en el desempeño por la inclusión de más capas, y luego del cual el desempeño empeora drásticamente si se siguen agregando capas.

Considerando la aún no resuelta relación entre los modelos de una reducida cantidad de capas respecto de su contraparte con una amplia cantidad de capas, se contempló el caso ya mencionado donde un modelo que se encuentra en la zona de saturación de desempeño y el caso de una versión aumentada en capas del mismo, cuyo desempeño es peor al original. Teóricamente debería ser posible para el modelo con mas capas igualar el desempeño del modelo original a partir de configurar los parámetros de las capas adicionales para que igualen la matriz identidad y de esta manera resuelvan la copia del resultado del modelo original. En la práctica se encuentra que esta configuración mencionada en la que se copia la salida resuelta por una capa inferior no es fácilmente obtenida de la optimización del conjunto de parámetros θ [14].

Se propuso entonces un esquema distinto donde se facilita esta copia de las salidas de las capas previas para resolver la perdida del desempeño observada

y de esta forma explotar la capacidad aumentada de las NNs con un mayor cantidad de capas.

Concretamente, si se considera la salida prevista por un conjunto de capas de una red como un mapeo \mathcal{H} de las entradas x , entonces se optimizan los parámetros $\theta^l, \dots, \theta^{l+n}$ de las capas $l, \dots, l+n$ de forma tal que representen el nuevo mapeo residual \mathcal{F} de las entradas x , tal que $\mathcal{F}(x) = \mathcal{H}(x) - x$. Finalmente se adiciona de forma explícita las entradas x , siendo el resultado de la evaluación de la capa igual a $\mathcal{F}(x) + x$.

Optimizar los parámetros $\theta^l, \dots, \theta^{l+n}$ de las capas $l, \dots, l+n$ para que aproximen el mapeo residual \mathcal{F} cuando $\mathcal{H} = \mathbb{I}$ es una tarea más sencilla debido a que en este caso es suficiente con configurar los parámetros para que sean igual a 0 en todos los casos y simplemente se copien las entradas x [14].

La conveniencia de este esquema radica en que se referencia la salida de las $n + l$ capas respecto de la entrada de la primera capa l , pudiendo obtenerse más fácilmente una aproximación a la función identidad que en el caso de apilar múltiples capas no lineales sin referencia a las entradas para aproximar la función identidad.

El esquema de aprendizaje residual es obtenible a partir del uso conveniente de un patrón de arquitectura de NNs denominado *shortcut connections*[28] donde se conectan en forma ponderada las salidas de capas inferiores con las capas superiores, más cercanas a la resolución de la salida de la red. En el caso del aprendizaje residual la ponderación se realiza especificando que la matriz de pesos que referencia la salida de la capa $l + n$ respecto de la salida de la capa $l - 1$ sea igual a la identidad.

En el caso de las RNNs el esquema de aprendizaje residual pueden emplearse análogamente a su aplicación en las NNs para referenciar las salidas de capas superiores, más cercanas a la salida, con la salida de capas inferiores. Particularmente será útil la aplicación de este esquema al momento de implementar la modificación sobre la estructura original de las celdas LSTM en la sección siguiente, debido a que dicha modificación aplica en forma iterativa un mapeo sobre las entradas originales luego del cual es conveniente referenciar las salidas de las celdas con las entradas de las mismas. Esta propiedad constituye un primer indicio de la relación que existe entre realizar múltiples iteraciones sobre la evaluación de una capa de celdas LSTM y la agregación de múltiples capas sin pesos compartidos.

4 LSTM iterativa

En esta sección se detalla la modificación en la estructura de las celdas LSTM propuesta como resultado del estudio de las RNNs desde la perspectiva de los sistemas dinámicos.

Según lo expuesto en la sección 2 las RNNs mencionadas describen sistemas dinámicos no homogéneos donde el estado interno de las celdas evoluciona con

cada evaluación de la misma.

Adicionalmente, dependiendo del valor del conjunto de parámetros θ , la dinámica descrita por la formulación de la RNN y el estado inicial de la red, la evolución del estado de la celda puede verse inmersa en la cuenca de un punto fijo denominado atractor. Bajo estas condiciones y mientras no se registre la presencia de nueva información relevante que lleve el estado fuera de la cuenca del atractor, la evolución del estado en sucesivas evaluaciones se mantendrá dentro dicho dominio, reteniendo de esa forma la información registrada por la celda. En este caso la representación de la información retenida es expuesta en la forma de los estados pertenecientes a la cuenca del atractor asociado a la respectiva información.

Sin embargo, representar la información retenida en forma de un dominio de estados posibles implica que en las fronteras de estos dominios pueden darse clasificaciones erróneas por los componentes que interpreten la salida de las RNNs para inferir y exponer una salida, con la intención de predecir el valor de una variable aleatoria.

Estas clasificaciones dependen de la correcta alineación de los hiperplanos correspondientes a los componentes que interpreten la salida de la RNN con las fronteras de las cuencas de los atractores. Por lo tanto, las fronteras difusas donde se mezclen los estados pertenecientes a los distintos dominios o las fronteras delimitadas por superficies irregulares aumentarán el error en la clasificación de los patrones presentes en el dominio de las variables de entrada propios de la tarea de clasificación de la red.

Explotando las propiedades de evolución de los sistemas dinámicos se propone la realización de sucesivas evaluaciones de la celda sobre los mismos valores de entrada, con la intención guiar el estado interno de la celda hacia un dominio dentro de la cuenca del atractor más reducido que el resultante de una única evaluación de la celda. Este dominio tiene una menor superficie y agrupa los estados que representan la información retenida en posiciones más próximas al atractor correspondiente.

Formalmente, se define la dinámica del estado interno de la red descrita por la celda LSTM es

$$\begin{aligned}
j(t) &= f_1(W_{in,j}x(t) + W_{rec,j}h(t-1) + b_j) \\
i(t) &= f_2(W_{in,i}x(t) + W_{rec,i}h(t-1) + b_i) \\
f(t) &= f_2(W_{in,f}x(t) + W_{rec,f}h(t-1) + b_f) \\
c(t) &= f(t)c(t-1) + i(t)j(t) \\
o(t) &= f_2(W_{in,o}x(t) + W_{rec,o}h(t-1) + b_o) \\
h(t) &= o(t)f_1(c(t))
\end{aligned}$$

$$\frac{\partial h(t-1)}{\partial t} = h(t) - h(t-1) = f(h(t-1), x(t)) \quad (11)$$

donde la formulación dada corresponde a una celda LSTM que no incorpora la mejora descrita en la sección 4 para el conteo preciso debido a que no es un requerimiento propio de las tareas a evaluar. Según (11), la formulación de la

celda LSTM empleada describe un sistema dinámico no homogéneo el cual ya se anticipó en la sección 2 que es una característica de las RNNs en general. Luego, considerando la modificación mencionada los valores de las variables de entrada $x(t)$ permanecen constantes por lo tanto la evolución del estado $h(t)$ del sistema durante sucesivas evaluaciones de la celda está completamente determinada por el valor de las condiciones iniciales $x(t)$ y $h(t-1)$. Formalizando estas condiciones y agrupando los términos constantes se obtiene la siguiente formulación del sistema dinámico durante sucesivas iteraciones

$$\begin{aligned}
j(\tau) &= f_1(W_{rec,j}h + \underbrace{W_{in,j}x(t) + b_j}_{C_j}) = f_1(W_{rec,j}h + C_j) \\
i(\tau) &= f_2(W_{rec,i}h + \underbrace{W_{in,i}x(t) + b_i}_{C_i}) = f_1(W_{rec,i}h + C_i) \\
f(\tau) &= f_2(W_{rec,f}h + \underbrace{W_{in,f}x(t) + b_f}_{C_f}) = f_1(W_{rec,f}h + C_f) \\
c(\tau) &= f(\tau) \underbrace{c(t-1)}_{c_0} + i(\tau)j(\tau) = f(\tau)c_0 + i(\tau)j(\tau) \\
o(\tau) &= f_2(W_{rec,o}h + \underbrace{W_{in,o}x(t) + b_o}_{C_o}) = f_1(W_{rec,o}h + C_o) \\
h(\tau) &= o(\tau)f_1(c(\tau)) \\
\frac{\partial h}{\partial \tau} &= h(\tau) - h = f(h(\tau)) \tag{12}
\end{aligned}$$

donde se analiza la dinámica sobre la escala de tiempo τ que distingue entre sucesivas iteraciones y que es menor que la escala de tiempo t que distingue entre sucesivos entre instantes de la secuencia de entrada. Los términos C_j, C_i, C_f, C_o son constantes en la escala de tiempo τ ya que dependen del valor de las variables de entrada $x(t)$. La constante c_0 es el valor del estado interno de la celda en el instante t , antes de comenzar a realizar sucesivas evaluaciones.

Este sistema, análogamente al descrito por las RNNs en general, es denominado un mapa.

Es oportuno destacar que la celda LSTM iterativa no modifica el estado interno de la celda hasta el momento de emitir un resultado, de esta forma las dependencias temporales pueden ser preservadas evitando el problema de desvanecimiento del gradiente como se expondrá más adelante en esta sección.

4.1 Evolución del sistema entre iteraciones

Realizando un análisis similar al expuesto en la sección 2, se estudiará la dinámica de la celda LSTM iterativa definida en (12).

Considerando la linealización del sistema obtenida por la expansión en series de

Taylor de la función f y considerando el cambio de variables $v(\tau) = (h(\tau) - h^*)$ en un entorno de un punto fijo h^* se obtiene

$$\frac{\partial h(\tau)}{\partial \tau} = f(h) = f(h^*) + \frac{\partial f(h^*)}{\partial h_1} v_1 + \dots + \frac{\partial f(h^*)}{\partial h_n} v_n + O(v_1^2, v_1 v_2, \dots, v_n^2)$$

$$\frac{\partial h(\tau)}{\partial \tau} = \frac{\partial v(\tau)}{\partial \tau} = f(h^*) + J_f(h^*)v + O(vv^T)$$

donde v_i son las coordenadas del vector $v(\tau)$ en cada iteración de la escala de tiempo τ . h^* son las coordenadas del punto fijo en el instante t , y por consiguiente en todas las iteraciones. $J_f(h^*)$ es el jacobiano de f evaluado en el punto fijo h^* .

Para simplificar notación no se explicito la dependencia del punto fijo h^* respecto de la escala de tiempo t , pero el lector debe recordar que la ubicación del punto fijo está determinada por la formulación de la dinámica de la celda y el conjunto de parámetros que forman parte de dicha formulación, en este caso son las matrices $W_{rec,j}, W_{rec,i}, W_{rec,f}, W_{rec,o}$ y los vectores C_j, C_i, C_f, C_o . Estos últimos dependen del instante de tiempo t como fue mencionado.

Luego, considerando que $f(h^*) = 0$ y teniendo en cuenta que dentro de un entorno cercano al punto fijo h^* se discrimina el efecto de los términos de mayor orden a los lineales se obtiene la aproximación

$$\begin{aligned} \frac{\partial h(\tau)}{\partial \tau} &= J_f(h^*) (h(\tau) - h^*) \\ \frac{\partial v(\tau)}{\partial \tau} &= J_f(h^*) v(\tau) \end{aligned} \tag{13}$$

Contemplando que el próximo estado del sistema esta determinado en función del estado actual y la variación instantánea del estado según la ya explorada relación

$$\begin{aligned} \frac{\partial h(\tau - 1)}{\partial \tau} &= h(\tau) - h(\tau - 1) \\ h(\tau) &= \frac{\partial h(\tau - 1)}{\partial \tau} + h(\tau - 1) \end{aligned} \tag{14}$$

análogamente puede definirse la evolución del $v(\tau)$ como

$$v(\tau) = \frac{\partial v(\tau - 1)}{\partial \tau} + v(\tau - 1) \tag{15}$$

entonces es posible obtener la secuencia de estados intermedios producto de la realización n iteraciones a partir de aplicar de forma recurrente la ecuación (15) reemplazando apropiadamente la variación instantánea descrita en (13)

$$v(\tau) = \frac{\partial v(\tau - 1)}{\partial \tau} + v(\tau - 1) = J_f(h^*) v(\tau - 1) + v(\tau - 1) = (J_f(h^*) + \mathbb{I}) v(\tau - 1) \tag{16}$$

donde \mathbb{I} es la matriz identidad. Luego, por inducción sobre (16) se obtiene la siguiente relación entre el estado al iniciar las n iteraciones y el estado final

$$v(\tau) = (J_f(h^*) + \mathbb{I})v = (J_f(h^*) + \mathbb{I})(J_f(h^*) + \mathbb{I})v(\tau - 2)$$

$$v(\tau) = (J_f(h^*) + \mathbb{I})^n v(\tau - n) = (J_f(h^*) + \mathbb{I})^n v(t - 1)$$

Entonces, es posible obtener las condiciones que debe cumplir el sistema para que iterativamente los estados dentro de la cuenca del atractor converjan al punto fijo h^* , pidiendo que $\|v(\tau)\| \xrightarrow{\tau \rightarrow \infty} 0$

$$\|v(\tau)\| \xrightarrow{\tau \rightarrow \infty} 0 \iff \|(J_f(h^*) + \mathbb{I})^\tau v(t - 1)\| \xrightarrow{\tau \rightarrow \infty} 0$$

Por otra parte, considerando la base de autovectores u_1, \dots, u_n de la matriz $J_f(h^*)$ asociados a los autovalores $\lambda_1, \dots, \lambda_n$, es posible escribir el vector v en términos dicha base como $v(t) = \sum_{i=1}^n c_i u_i$. Entonces se obtiene

$$\|v(\tau)\| = \|(J_f(h^*) + \mathbb{I})^\tau \sum_{i=1}^n c_i u_i\| = \|\sum_{i=1}^n c_i (J_f(h^*) + \mathbb{I})^\tau u_i\|$$

Aplicando el teorema que relaciona los autovalores y autovectores de una matriz A y una matriz $p(A)$, siendo $p(x)$ un polinomio de grado k , se tiene que los autovalores de $p(A)$ serán $p(\lambda_1), \dots, p(\lambda_n)$ donde $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ son los autovalores de A con su multiplicidad. Entonces, considerando primero el polinomio de grado 1, $p_1(x) = x + \mathbb{I}$, los autovalores de $p_1(J_f(h^*)) = J_f(h^*) + \mathbb{I}$ serán $\lambda_1 + 1, \dots, \lambda_n + 1$ respectivamente, siendo $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ son los autovalores de $J_f(h^*)$.

Luego considerando el polinomio de grado τ , los autovalores de $p_\tau(p_1(x)) = (J_f(h^*) + \mathbb{I})^\tau$ serán $(\lambda_1 + 1)^\tau, \dots, (\lambda_n + 1)^\tau$, nuevamente siendo $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ son los autovalores de $J_f(h^*)$.

Resumiendo el cálculo de las condiciones para la convergencia de los estados en la cuenca del atractor hacia el punto fijo h^* , según lo visto es posible obtener condiciones para los autovalores $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ de $J_f(h^*)$, relacionando los mismos con la norma del vector $v(\tau)$ y aprovechando su descomposición en la base de autovectores u_1, \dots, u_n de la matriz $J_f(h^*)$

$$\|v(\tau)\| = \|\sum_{i=1}^n c_i (J_f(h^*) + \mathbb{I})^\tau u_i\| = \|\sum_{i=1}^n c_i (\lambda_i + 1)^\tau u_i\|$$

Entonces, planteando las condiciones para la convergencia de $v(\tau)$ hacia el origen

$$\|v(\tau)\| \xrightarrow{\tau \rightarrow \infty} 0 \iff \|\sum_{i=1}^n c_i (\lambda_i + 1)^\tau u_i\| \xrightarrow{\tau \rightarrow \infty} 0$$

Sin embargo, considerando un vector $v(\tau)$ genérico se tiene que sus coordenadas c_1, \dots, c_n en la base de autovectores u_1, \dots, u_n de la matriz $J_f(h^*)$ cumplen $c_i \neq$

$0, i = 1, \dots, n$ ya que de otra forma se tendría el caso trivial $v(\tau) = 0$. Por lo tanto

$$\begin{aligned} \|h(\tau) - h^*\| = \|v(\tau)\| &\xrightarrow{\tau \rightarrow \infty} 0 \iff |(\lambda_i + 1)^\tau| \xrightarrow{\tau \rightarrow \infty} 0 \quad i = 1, \dots, n \\ &\iff |\lambda_i + 1| < 1 \quad i = 1, \dots, n \end{aligned}$$

Este resultado implica que para satisfacer la condición de convergencia hacia el punto fijo los autovalores de $J_f(h^*)$ deben pertenecer al círculo abierto de números complejos centrado en -1 .

Cumpléndose las condiciones encontradas para la convergencia resulta que

$$h(\tau) \xrightarrow{\tau \rightarrow \infty} h^* \iff |\lambda_i + 1| < 1 \quad i = 1, \dots, n$$

para un estado inicial $h(\tau = 0) = h(t - 1)$ perteneciente a un entorno del punto fijo h^* . Esta hipótesis de cercanía con el punto fijo atractor es una limitante necesaria para realizar un análisis lineal del sistema y su validez dependerá de el aporte de los términos no lineales a la variación instantánea del estado.

Recientemente, en [18] se expone el comportamiento caótico del sistema en condiciones específicas. Particularmente, dicha publicación analiza el comportamiento frente a valores nulos de las variables luego de realizar 200 iteraciones. A pesar que estas condiciones difieren ampliamente respecto de las propuestas, el carácter caótico del sistema para un gran número de iteraciones sugiere que mucha información del sistema es aportada por términos no lineales ya que estos son los únicos capaces de describir dicho comportamiento[31].

Para proveer un análisis más riguroso del sistema no lineal modelado y extraer condiciones que contemplen el aporte de los términos no lineales a la variación del estado se calcularán las condiciones necesarias para lograr la convergencia hacia el punto fijo h^* evitando el comportamiento caótico descrito. Concretamente se expondrá la sensibilidad del resultado del sistema al variar las condiciones iniciales h_0 en una cantidad δ_0 infinitesimalmente chica. Formalmente se describe la variación en el resultado final del sistema al finalizar n iteraciones como

$$\begin{aligned} |\delta_n| &= |\delta_0| e^{n\lambda} \\ \frac{|\delta_n|}{|\delta_0|} &= e^{n\lambda} \\ \lambda &= \frac{1}{n} \ln \left| \frac{\delta_n}{\delta_0} \right| \end{aligned}$$

donde λ es conocido como el exponente Liapunov y el valor que toma esta definido por el comportamiento del sistema, siendo caótico para $\lambda > 0$ y convergente para $\lambda < 0$ [31].

Tomando los cálculos del Apéndice A donde se encuentra que para un vector de estado h genérico $\left| \frac{\partial g(h)}{\partial h} \right| < 1$, es posible deducir la siguiente propiedad de los autovalores de $\frac{\partial g(h^*)}{\partial h} = J_f(h^*)$

$$|\lambda_i| < \sigma_i < 1$$

donde λ_i es el i -ésimo autovalor de $J_f(h^*)$ y $\sigma_i = \sqrt{\lambda_i}$ es su valor singular. Entonces, para que sean válidas las condiciones de convergencia del sistema en un entorno de h^* ; como se expuso en el análisis sobre la linealización del sistema en un entorno del punto fijo, y el aporte de los términos no lineales fuera de dicho entorno no resulte en un comportamiento caótico del sistema; como se expuso en el análisis sobre los exponentes de Liapunov, los autovalores λ_i deben cumplir simultáneamente las siguientes condiciones

$$\begin{aligned}
|\lambda_i + 1| &< 1 \wedge |\lambda_i| < 1 \\
|\lambda_i + 1| &= (Re(\lambda_i) + 1)^2 + Im(\lambda_i)^2 < 1 \\
\underbrace{Re(\lambda_i)^2 + Im(\lambda_i)^2}_{0 \leq |\lambda_i| < 1} + 2Re(\lambda_i) + 1 &< 1 \\
2Re(\lambda_i) + 1 &< Re(\lambda_i)^2 + Im(\lambda_i)^2 + 2Re(\lambda_i) + 1 < 1 \\
2Re(\lambda_i) &< 0 \\
Re(\lambda_i) &< 0
\end{aligned}$$

Este resultado es consistente con las condiciones planteadas para la convergencia de sistemas dinámicos hacia un punto fijo categorizado como atractor y evidencia que existen valores plausibles del conjunto de parámetros θ para las cuales el sistema tiene un comportamiento convergente en sucesivas iteraciones en las que se evalúa la celda LSTM sobre los valores de entrada y se actualiza el vector de estado h .

4.2 Desvanecimiento del gradiente

En esta subsección se expondrá el efecto de la mejora propuesta sobre el ya mencionado problema de desvanecimiento del gradiente. Nuevamente es relevante el estudio del flujo del error hacia instantes de tiempo previos debido a que la modificación introducida altera las dependencias del estado final que ahora será el resultante de un número finito de iteraciones.

Como se expuso en secciones anteriores, la dependencia del error en el instante actual respecto a los parámetros es definida como

$$\frac{\partial \mathcal{E}(t)}{\partial \theta} = \frac{\partial \mathcal{E}(t)}{\partial h(t)} \frac{\partial h(t)}{\partial \theta} = \sum_{k=0}^t \frac{\partial \mathcal{E}(t)}{\partial h(t)} \frac{\partial h(t)}{\partial c(t)} \frac{\partial c(t)}{\partial c(k)} \frac{\partial c(k)}{\partial \theta}$$

Luego, en el caso de la celda LSTM iterativa, la dependencia del estado interno de la celda en el instante t con un instante inmediatamente previo de tiempo $t - 1$ no será inicialmente truncada por lo que se tiene

$$\frac{\partial c(t)}{\partial c(t-1)} = \frac{\partial c(t)}{\partial c(t-1)} f(t) + \frac{\partial f(t)}{\partial c(t-1)} c(t-1) + \frac{\partial i(t)}{\partial c(t-1)} j(t) + i(t) \frac{\partial j(t)}{\partial c(t-1)}$$

Por otro lado es posible describir la dependencia de las compuertas i , j y f con el estado interno de la celda en el instante previo como indica la siguiente

formulación

$$\frac{\partial y^l(t)}{\partial c(t-1)} = \frac{\partial y^l(t)}{\partial h(t-1)} \frac{\partial h(t-1)}{\partial c(t-1)} = \frac{\partial y^l(t)}{\partial h(t-1)} \underbrace{o(t-1)(1 - \tanh(c(t-1)))^2}_{<1}$$

donde $y^l(t)$ es la activación de la compuerta l correspondiente. Entonces, considerando que como condición para evitar el comportamiento caótico del sistema y lograr que el estado de la celda converja hacia un punto fijo atractor se halló que $\sum_{l \in j, i, f, o} \frac{\partial y^l(t)}{\partial h(t-1)} < 1$, es posible truncar la propagación de errores y obtener

$$\frac{\partial c(t)}{\partial c(t-1)} = \frac{\partial c(t)}{\partial c(t-1)} f(t)$$

que es la misma expresión de la dependencia temporal hallada en la formulación de la celda LSTM que incorpora la compuerta f .

Esta observación provee evidencia de que están provistas las condiciones requeridas para que la celda LSTM desarrolle un comportamiento convergente hacia dominios sucesivamente más acotados a las cercanías del atractor entre iteraciones.

Un enfoque distinto, en el que se considera la evolución de los estados h de la celda en las cercanías del atractor provee información adicional sobre el estado de las dependencias temporales bajo este nuevo régimen de iteraciones. Considerando la relación (14) se plantea el cálculo recurrente del vector de estado $h(\tau)$ entre iteraciones como

$$h(\tau) = (J_f(h^*) + \mathbb{I}) h(\tau - 1)$$

Entonces diferenciando sobre $h(\tau - 1)$ se obtiene

$$\frac{\partial h(\tau)}{\partial h(\tau - 1)} = J_f(h^*) + \mathbb{I}$$

Luego extendiendo la dependencia del estado resultante luego de τ iteraciones en el instante t hacia el estado en el instante previo $t - 1$ se obtiene

$$\frac{\partial h(t)}{\partial h(t-1)} = (J_f(h^*) + \mathbb{I})^\tau h_0 = (J_f(h^*) + \mathbb{I})^\tau h(t-1)$$

Por otra parte, aplicando la inequidad triangular $-||x - y|| \leq ||x|| - ||y|| \leq ||x - y||$ a la ya explorada tendencia $|(J_f(h^*) + \mathbb{I})^\tau (h_0 - h^*)| = ||v(\tau)|| \xrightarrow{\tau \rightarrow \infty} 0$ se obtiene

$$\begin{aligned} ||v(\tau)|| &= |(J_f(h^*) + \mathbb{I})^\tau h_0 - (J_f(h^*) + \mathbb{I})^\tau h^*| \\ - \underbrace{||v(\tau)||}_{\rightarrow 0} &\leq |(J_f(h^*) + \mathbb{I})^\tau h_0| - |(J_f(h^*) + \mathbb{I})^\tau h^*| \leq \underbrace{||v(\tau)||}_{\rightarrow 0} \\ ||(J_f(h^*) + \mathbb{I})^\tau h^*|| &\leq |(J_f(h^*) + \mathbb{I})^\tau h_0| \leq |(J_f(h^*) + \mathbb{I})^\tau h^*| \end{aligned}$$

Entonces, reemplazando $\frac{\partial h(t)}{\partial h(t-1)}$ se obtiene

$$\begin{aligned} \|(\mathbf{J}_f(h^*) + \mathbb{I})^\tau(0 - h^*)\| &\leq \left\| \frac{\partial h(t)}{\partial h(t-1)} \right\| \leq \|(\mathbf{J}_f(h^*) + \mathbb{I})^\tau h^*\| \\ \|(\mathbf{J}_f(h^*) + \mathbb{I})^\tau(0 - h^*)\| &= \left\| \frac{\partial h(t)}{\partial h(t-1)} \right\| \end{aligned}$$

Esta observación indica que en un entorno cercano al atractor la dependencia del estado actual del bloque de celdas LSTM respecto del estado en un instante anterior $t - 1$ conserva la norma respecto a la evolución de un estado nulo, en el origen de coordenadas.

Otra interpretación de este resultado es que, en los casos en los que el origen de coordenadas constituye un atractor del sistema, la variación del estado final respecto al estado en un instante anterior no depende del estado previo del bloque de celdas LSTM. Esto significa que, sin importar cual sea el estado anterior, el estado luego de finalizar las iteraciones se encontrara en un dominio más cercano al origen de coordenadas.

Finalmente, considerar la celda LSTM con la modificación propuesta como un sistema dinámico aporta una propiedad a la trayectoria de estados que forman parte de la evolución del sistema. Estas trayectorias constituidas por la curva que une los sucesivos estados dentro de un mismo instante de tiempo son únicas para las condiciones iniciales, por el teorema de unicidad y existencia. Por lo tanto, para cualquier estado intermedio siempre es posible obtener los sucesivos estados que los precedieron dentro de un mismo instante de tiempo para el que se conoce la dinámica del sistema. Más aún, si se conoce la dinámica del sistema en los instantes previos es posible reconstruir completamente la trayectoria de estados que formaron parte de la evolución del estado del bloque de celdas LSTM durante toda la secuencia.

4.3 Formulación de LSTM iterativa

La modificación propuesta sobre la celda LSTM original implica modificar las ecuaciones de actualización de las variables de la celda LSTM original. La principal motivación es la de introducir el cálculo iterativo de los valores actualizados de las variables de la celda.

Formalmente, la actualización de las variables de la celda LSTM iterativa en cada iteración es calculada por el siguiente conjunto de ecuaciones

$$\begin{aligned} j(\tau) &= f_1(W_{in,j}x(t) + W_{rec,j}h(\tau - 1) + b_j) \\ i(\tau) &= f_2(W_{in,i}x(t) + W_{rec,i}h(\tau - 1) + b_i) \\ f(\tau) &= f_2(W_{in,f}x(t) + W_{rec,f}h(\tau - 1) + b_f) \\ c(\tau) &= f(\tau)c(t - 1) + i(\tau)j(\tau) \\ o(\tau) &= f_2(W_{in,o}x(t) + W_{rec,o}h(\tau - 1) + b_o) \\ h(\tau) &= o(\tau)f_1(c(\tau)) \\ y(\tau) &= h(\tau) + x(t - 1) \end{aligned} \tag{17}$$

donde las variables j, i, f, c, o, h son actualizadas por cada iteración realizada y sus valores iniciales, para $\tau = 0$, equivalen a los producidos por la celda al finalizar las τ_{t-1} iteraciones realizadas sobre los valores de entrada en el instante $t - 1$. La variable y es actualizada únicamente al momento de finalizar las τ iteraciones, cuando se expone el resultado a las capas superiores. Las funciones f_1 y f_2 son las descritas en la sección 3.

Habiendo explorado numerosas estructuras posibles para la celda LSTM iterativa se encuentra que la formulación descrita cumple con las características deseables mencionadas anteriormente en esta sección lo que es verificado en los experimentos realizados.

Finalmente, el componente que regula la ejecución de iteraciones es uno análogo a las compuertas presentes en la celda LSTM original pero con la particularidad de recibir información de las propias variables de la celda.

Se define entonces la compuerta de iteración p según la siguiente ecuación

$$p(\tau) = f_2(W_{j,p}j(\tau) + W_{i,p}i(\tau) + W_{f,p}f(\tau) + W_{h,p}h(\tau) + b_p)$$

Con la finalidad de discretizar la activación de la compuerta p se introduce un parámetro *threshold* que servirá de umbral para limitar la realización de sucesivas iteraciones. Entonces, luego de realizar la iteración τ la celda ejecutará una siguiente iteración si y solo si $p(\tau) > \text{threshold}$.

Se encuentra en los experimentos expuestos en la Sección 6 ^[referenciar] que ajustar el valor del parámetro *threshold* en cada iteración mejora el desempeño del modelo. Se conjetura entonces que seleccionar secuencias de valores más restrictivos para el parámetro *threshold* reducirá las iteraciones realizadas por la celda mientras que no inhibe la capacidad de la misma de ejecutar más iteraciones, considerando que los parámetros $W_{j,p}$, $W_{i,p}$, $W_{f,p}$, $W_{h,p}$ y b_p de la compuerta p pueden ser optimizados para contrarrestar la restrictiva variación del parámetro *threshold*.

Esta actualización sucesiva del parámetro *threshold* según una secuencia incrementalmente más restrictiva evita la necesidad de modificar la función objetivo para incluir una restricción sobre la cantidad de iteraciones a realizar. Sin embargo, se recomienda limitar de forma explícita el número de iteraciones máximo. La implementación provista incluye este límite explícito como un parámetro denominado `max_it`.

En la implementación provista de la celda LSTM iterativa el nombre del parámetro *threshold* es sustituido por el nombre `it_prob`, ya que es posible considerar el mismo como una distribución de probabilidad Bernoulli propia de la iteración τ que determina la probabilidad de realizar una iteración subsecuente.

La compuerta p sirve de controlador sobre la evolución del estado de la celda, seleccionando de forma autónoma si conservar el estado actual o modificar el mismo.

Existen otros modelos donde se usa un componente separado como controlador del comportamiento de la RNN[12] [11][34] pero en este caso la arquitectura del

controlador fue acotada a una única capa de neuronas en favor de reducir la complejidad del modelo.

Por otro lado, se considera que la extracción de la información relevante para la decisión de preservar o modificar el estado es realizada por las variables ya presentes en la celda LSTM. Recientes publicaciones que exploran la capacidad de modelos simples para proveer información relevante para la toma de decisiones motivaron esta decisión conservadora[3].

La formulación descrita en (17) permite considerar el método iterativo desde otro punto de vista relacionado con la operación de la celda sobre los valores de entrada.

Es posible apreciar en la formulación de la celda LSTM descrita en la Sección 3 que el estado previo de la celda $h(t - 1)$ actúa como un sesgo en la activación de las variables j , i , f y o , debido a que aporta un término constante respecto a la entrada de la celda $x(t)$ en el instante actual. Este término desplazará la región del dominio de los valores de las variables de entrada para los cuales se produce la activación de las variables internas de la celda.

Luego, el valor de la variable $h(\tau)$ varía en la ejecución de sucesivas iteraciones permitiendo al modelo explorar distintas regiones del dominio de las variables de entrada, evaluando la activación de las variables internas de la celda en cada uno de ellos. Esta exploración del dominio de los valores de las variables de entrada permite a la celda la clasificación de patrones más complejos.

La complejidad de los patrones presentes en el dominio de las variables de entrada dependerá de la tarea particular en la que se emplee el modelo propuesto. En la siguiente sección se exponen propiedades del espacio sobre el cual fue evaluado el modelo presentado.

Por otro lado, la capacidad de la celda LSTM iterativa para explorar distintas regiones del dominio de las variables de entrada dependerá de valores del conjunto de parámetros θ . Sin embargo, es sencillo imaginar un escenario para el cual los hiperplanos asociados a la clasificación realizada por las variables j e i tienen norma opuesta y la distancia entre los mismos, dada por $b_j - b_i$, define la región sobre la cual se produce el máximo de la activación de la nueva información $\tilde{c}(\tau)$, incorporada al estado interno de la celda en la iteración τ . Entonces, considerando valores similares para el peso del estado $h(\tau)$ en la iteración previa sobre la activación de las variables mencionadas, al variar el valor de la variable $h(\tau)$ se explorarán distintas regiones sobre la cual se produce la activación de $\tilde{c}(\tau)$. Esta exploración permitiría la clasificación de patrones no lineales como el conocido caso del problema XOR[6].

Es concebible una modificación similar a la propuesta pero que contemple iteraciones sobre una RNN de una longitud mayor a una capa. Para la presente investigación se considero más relevante exponer el efecto de la modificación propuesta que explotar la mejora de desempeño conseguible con un modelo de tal complejidad.

Vale la pena destacar que el estudio de la celda LSTM como un sistema

dinámico y la posterior propuesta de realizar sucesivas iteraciones sobre valores constantes de las variables de entradas toman como hipótesis que el modelo es capaz de optimizar el conjunto de parámetros θ para que a través de la dinámica de la celda descrita en (12) posicione los puntos fijos del sistema de forma conveniente.

Esta hipótesis permite a la celda LSTM iterativa superponer las cuencas de los atractores en distintos instantes de tiempo, asociados a la misma información. De esta forma se preserva la información entre las iteraciones realizadas en sucesivos instantes de tiempo.

5 Modelado del lenguaje

En esta sección se introduce el problema de modelado del lenguaje abordado en los experimentos y se mencionan aplicaciones destacables de RNN sobre el campo de NPL.

El campo de NPL dentro de las ciencias de la computación y la inteligencia artificial concierne a múltiples tareas estrechamente relacionadas con las formas de representación del lenguaje y el modelado de los conceptos expresados por el mismo. Algunas tareas destacables del campo son generación artificial de textos, traducción automática, reconocimiento del habla, y entendimiento del lenguaje natural.

Las aplicaciones mencionadas son comúnmente implementadas como un mapeo de una secuencia de entrada a una secuencia de salida aprovechando el orden característico del lenguaje modelado. Este procesamiento secuencial ha visto un gran avance en términos de desempeño a partir del uso de NNs y, particularmente, RNNs.

Sin embargo muchas de estas tareas se definen sobre dominios de datos de entrada constituidos por texto. El procesamiento de este dominio de entrada no está definido para las RNN, por lo que el primer problema a resolver es la transformación de los datos de entrada en puntos $x(t) \in \mathbb{R}^n$.

Existen muchos métodos distintos para obtener representaciones vectoriales de datos textuales en la siguiente sección se explora uno de los más difundidos.

Habiendo resuelto la compatibilidad de la secuencia de entrada con el procesamiento realizado por las RNN es posible usar las mismas para mapear la secuencia de entrada a la secuencia objetivo. Nuevamente, existe la problemática de definir como el resultado de la RNN usada se corresponde con la secuencia de salida.

Esto es comúnmente resuelto a partir de la concatenación de una capa de clasificación que seleccione la clase más probable de un conjunto de candidatas en base a la salida provista por la red. Usando este patrón ya estudiado en la sección 2, se definen como clases candidatas a los símbolos del vocabulario de salida, sobre el cual se selecciona el más probable como salida del modelo.

Habiendo obtenido el siguiente símbolo predicho por el modelo, se evalúa el

mismo midiendo a las propiedades de la distribución predicha por el modelo para cada símbolo de la secuencia de salida $y(t)$. La métrica usada para determinar el desempeño del modelo es la *perplejidad* por palabra. Esta métrica determina la cantidad de clases que el modelo considera igualmente viables como alternativas para el valor del siguiente símbolo $y(t)$ de la secuencia de salida. El cálculo de la perplejidad del modelo sobre el símbolo de la secuencia de salida $y(t)$ en el instante t es el siguiente

$$PPL(p) = 2^{H(p)} = 2^{-\sum_y p(y(t)) \log p(y(t))}$$

donde $H(p)$ es la entropía de la distribución modelada p . La sumatoria recorre todos los símbolos posibles de la secuencia de salida que representan símbolos del lenguaje objetivo.

En la práctica se busca que la distribución modelada coincida con la distribución de secuencias de salidas asociado al lenguaje objetivo. Teniendo en cuenta que no se conoce explícitamente la distribución p que se busca modelar (de otra forma la tarea estaría resuelta), se acota la misma[17] aplicando el teorema Shannon-McMillan-Breiman por la entropía cruzada de la distribución $y(t)$ expuesta por el modelo y la probabilidad del siguiente símbolo esperado presente en el texto objetivo para obtener una señal de error durante el entrenamiento del modelo.

5.1 Espacios embebidos de palabras

La tarea de obtener representaciones vectoriales de datos textuales es un tópico ampliamente estudiado[22] debido a su importancia para las tareas del campo NLP.

La cantidad de modelos que requieren representaciones vectoriales ha aumentado recientemente y este aumento fomenta el desarrollo de métodos que provean representaciones vectoriales más eficaces[23].

Una solución inicial al problema de tener una representación vectorial universal de los símbolos del lenguaje de entrada es la de codificar los mismos en vectores cuyas dimensiones registren la presencia de cada uno de los símbolos posibles del lenguaje.

De esta manera es posible representar un texto como una secuencia de vectores cuyas coordenadas son 0 excepto en la dimensión relacionada con el símbolo que representan donde tendrá un valor de 1.

A diferencia de la codificación dada en forma de secuencias de vectores con una única dimensión distinta de 0, otra codificación posible para el texto es un único vector donde se registren en las respectivas coordenadas los símbolos presentes en el mismo. Esta codificación es conocida como bag of words.

Las representaciones mencionadas tienen la característica de capturar la concurrencia de símbolos, que es un aspecto fundamental bajo la hipótesis de que la

co ocurrencia de símbolos relaciona el significado de los mismos. Esta hipótesis considera que la frecuencia con la que los símbolos ocurren en un mismo texto es una medida de la similitud de su significado.

Otra característica de estas representaciones es la de tener una gran dispersión ya que la mayoría de las dimensiones de los vectores involucrados tienen el mismo valor 0.

Recientemente, la generación de representaciones vectoriales tuvo un gran progreso debido a la inclusión de NNs en el cálculo de los vectores que representan cada símbolo del lenguaje de origen[2][24][27].

La difusión tardía de estos métodos es comúnmente atribuida a los requerimientos de capacidad computacional prohibitivos para los investigadores en años pasados.

El método para obtener una representación generada por modelo neuronal consiste en tomar como entrada la representación dispersa discutida anteriormente, dada por un vector cuyas dimensiones se corresponden con cada símbolo posible del lenguaje de origen y tiene valor 1 para la dimensión del símbolo a representar y 0 en otro caso, y buscar la representación tabulada del símbolo a representar en el espacio embebido.

Los parámetros del modelo son previamente optimizados tareas no supervisadas donde se incorporan NNs que reciban como entrada las representaciones embebidas para inferir la presencia de otros símbolos en un contexto cercano.

La optimización sobre tarea de inferir la presencia de símbolos requiere que la relación entre los conceptos atribuidos a los símbolos se preserve en forma geométrica sobre el espacio embebido, lo cual en consecuencia mejora el desempeño de subsecuentes modelos que usen esta representación[4].

En modelos recientes la red neuronal dispone de funciones de activación lineales por lo que la inferencia se reduce a una multiplicación matricial. Esta decisión está fundada en la reducción de la complejidad computacional requerida. Es oportuno destacar que reducir la complejidad computacional del modelo, extrayendo las operaciones no lineales, acelera el entrenamiento de los parámetros ya que es posible calcular mas veces la variación en los parámetros indicada por el gradiente de la función objetivo. Es evidente entonces que existe una negociación entre complejidad del modelo y velocidad de entrenamiento.

Profundizando el cálculo de la representación vectorial en el espacio embebido se reconoce una primera capa que multiplica la representación dispersa mencionada de los símbolos por una matriz de pesos. Esta primer capa, denominada *embedding layer*, indexa las representaciones en el espacio embebido para cada símbolo, codificadas en las filas de la matriz de pesos obteniendo únicamente la representación del símbolo cuyo valor en la representación original es 1. Las representaciones presentes en la primer capa fueron originalmente denominadas *distributed feature vectors*.

En el modelo neuronal original[2] la tarea no supervisada ejecutada para optimizar los parámetros de la primer capa consiste en obtener una representación en el espacio embebido de menor dimensión para cada uno de los símbolos en una ventana anterior al símbolo a predecir. Dichas representaciones vectoriales son usadas como valores de las variables de entrada de una red neuronal que infiere la representación del símbolo a predecir como una clasificación sobre los símbolos del lenguaje original.

La red neuronal mencionada constituye una capa superior, denominada *hidden layer*, y exige una capacidad comunicacional proporcional al tamaño del vocabulario del lenguaje de origen.

El modelo Word2Vec, recientemente publicado, elimina la necesidad de la capa superior en favor de una modelo computacionalmente más simple. Este modelo fue publicado en conjunto con dos arquitecturas diferentes para su implementación denominadas *Continuous Bag of Words*(CBOW) y *Continuous Skip-gram*(CSG).

La arquitectura CBOW, incorpora símbolos en un contexto que incluye tanto los símbolos previos al símbolo a predecir como los futuros, según el orden en el que suceden en el set de datos. Cada una de las representaciones de estos símbolos en el contexto del símbolo a predecir es promediada para producir la representación predicha.

La arquitectura CSG, considera únicamente un símbolo del set de datos para predecir los símbolos en un contexto de tamaño variable, acotado en cantidad por un parámetro límite C .

Una serie de mejoras han sido propuestas para reducir la complejidad computacional de los modelos descritos[23]. Mayormente estas mejoras buscan reducir el impacto de la capa de clasificación final constituida por la función softmax introducida en la sección 2.

Por otra parte, otros modelos basados en el uso explícito de la coocurrencia de palabras han sido recientemente propuestos[27]. Un modelo que se destaca por su desempeño es GloVe. Este modelo considera las propiedades lineales del espacio embebido para factorizar el logaritmo de la matriz de coocurrencia de símbolos en el set de entrenamiento mediante la siguiente fórmula

$$W(x_i)^T W(x_k) + b_i + b_k = \log(X_{ik})$$

donde $W(x)$ corresponde al vector que representa al símbolo x del lenguaje origen en el espacio embebido. b_i y b_k son vectores de sesgos correspondientes a los símbolos x_i y x_k respectivamente. X_{ik} es la coocurrencia de los símbolos i y k . Los símbolos x_i y x_k se corresponden con todos los pares posibles de símbolos del lenguaje de origen y la simetría de la formulación del modelo indica que la relación entre los mismos se mantiene ya que cualquiera de los dos es contexto de otro. A pesar de que el la optimización de esta formulación está en principio acotada por un factor $|V|^2$, donde $|V|$ es el tamaño del vocabulario del idioma de origen, los autores estiman una cota superior comparable con la del modelo Word2Vec y proporcional al tamaño del corpus de datos.

Como en el caso de los modelos mencionados anteriormente, las representaciones

de los símbolos están codificadas en una matriz de pesos que es indexada por la representación dispersa del símbolo en el lenguaje de origen. En todos los casos esta matriz es optimizada haciendo uso del gradiente de la función objetivo correspondiente a cada modelo.

Mientras este modelo explícitamente considera la coocurrencia de símbolos en el corpus de datos, todos los modelos contemplan la ocurrencia conjunta de los símbolos como un indicio de la relación entre el significado atribuido a los símbolos del lenguaje de origen.

Es interesante destacar que los modelos del lenguaje son entrenados sobre conjuntos de datos no categorizados manualmente. El único requerimiento de los modelos mencionados es el disponer de una colección de textos de los cuales puedan extraer de forma autónoma las relaciones entre los conceptos atribuidos a los símbolos del lenguaje de origen.

Un ejemplo donde se expone la característica de preservación del significado en forma geométrica lo constituye la siguiente operación sobre el espacio embebido

$$W(\text{'biggest'}) - W(\text{'big'}) + W(\text{'small'}) \approx W(\text{'smallest'})$$

donde $W(x)$ corresponde al vector que representa al símbolo x del lenguaje origen en el espacio embebido.

Muchos ejemplos como este pueden ser generados operando con las representaciones de los símbolos del lenguaje de origen en el espacio embebido. Una serie de servicios web proveen esta facilidad²³.

6 Experimentos

En esta sección se expondrán los resultados de los experimentos ejecutados aplicando la mejora propuesta y el efecto de variar los parámetros de la misma. La implementación de los experimentos y el modelo propuesto se basó en la implementación provista por la librería de machine learning, Tensorflow. Por otra parte, esta implementación está basada en investigaciones previas[35].

Con el objetivo de exponer la mejora en el desempeño obtenida al implementar la modificación propuesta sobre la celda LSTM se realizaron experimentos sobre la tarea de modelado del lenguaje.

Los experimentos ejecutados inicializan una arquitectura de RNN explorada en previas publicaciones[35], aplican la modificación propuesta y varían los valores de los parámetros inherentes a la modificación realizada para exponer su efecto en el desempeño.

La tarea que es ejecutada con la intención de optimizar el conjunto de parámetros θ el modelo es la ya descrita tarea de modelado del lenguaje. En la misma se

²<https://code.google.com/archive/p/word2vec/>

³<https://ronxin.github.io/wevi/>

predice el siguiente símbolo presente en una secuencia de símbolos extraída de un texto. En todos los experimentos los símbolos considerados son palabras del idioma inglés.

El corpus de datos usado para el entrenamiento del modelo es Penn Treebank[21]. El tamaño del vocabulario usado se corresponde con las 10000 palabras más frecuentes en el corpus. Los símbolos extraídos de este set de datos son representados en un espacio embebido mediante la indexación de una matriz de pesos y dicha representación es usada como valores de las variables de entrada del modelo entrenado.

La arquitectura usada para los experimentos realizados consiste en la generación de representaciones en un espacio embebido para el símbolo en el instante actual de la secuencia de entrada $x(t)$ y su uso como valores de las variables de entrada de una o más capas de un bloque de celdas LSTM iterativas, inmediatamente concatenadas a una capa regularización por el método Dropout descrito en la Sección 3. Finalmente una capa softmax realiza la clasificación sobre los posibles símbolos del vocabulario para resolver la predicción del siguiente símbolo $x(t + 1)$ de a secuencia de entrada.

La cantidad de parámetros del modelo está determinada por el tamaño del vocabulario y por la cantidad de celdas presentes en cada bloque de celdas LSTM. Se usan los mismos tamaños de bloque en todas las capas.

El régimen de entrenamiento consiste en un valor de *learning rate* α igual a 1 por las primeras 6 iteraciones, luego de las cuales el mismo es reducido por un factor de 1.2 por cada epoch. Se ejecutan en total 39 epochs de entrenamiento. Los resultados expuestos en la Tabla 6 muestran que los modelos que incorporan la modificación propuesta mejoran el desempeño respecto del modelo original, incluso en el caso de modelos considerablemente más simple en términos de cantidad de parámetros.

Los resultados tabulados corresponden a modelos optimizados como parte de la presente investigación, a excepción del modelo con mayor cantidad de parámetros para el cual se extrae la métrica de desempeño de su publicación original[35].

Tabla 1: Perplejidad por palabra en el set de datos Penn Treebank.

Modelo	Tamaño	Perplejidad Test Set
LSTM	16M	84.48
LSTM iterativa	16M	78.46
LSTM(2 capas)	20M	83.25
LSTM iterativa(2 capas)	20M	78.60
LSTM(2 capas)	50M	78.29

Para los modelos presentados no fue posible extraer métricas claras del tiempo de entrenamiento requerido, debido principalmente a que no se dispuso de recursos dedicados exclusivamente para la presente investigación. Sin embargo, es oportuno destacar que cualitativamente el tiempo requerido para

entrenar el modelo aumenta proporcionalmente al total de iteraciones producidas por los bloques de celdas LSTM iterativas en el modelo.

Con la finalidad de exponer el efecto en el desempeño sobre modelo original al variar la cantidad de iteraciones realizadas se entrenaron dos series de modelos con una arquitectura y cantidad de parámetros idéntica pero fijando las iteraciones realizadas en una cantidad incremental. La primer serie de modelos cuenta con una única capa de celdas LSTM iterativas y la segunda serie cuenta con dos capas de celdas LSTM iterativas. Los parámetros de entrenamiento se mantuvieron constantes entre estos modelos.

La configuración del experimento es la ya mencionada, a excepción que en este experimento se fuerza la cantidad de iteraciones a realizar eliminando así la necesidad del controlador que regula la ejecución de futuras iteraciones.

La figura 1 expone los resultados obtenidos para las dos series de modelos entrenados. En dicha figura puede verse como aumentar las iteraciones mejora apreciablemente el desempeño del modelo independientemente de la complejidad del mismo vinculada a la cantidad de capas de la RNN.

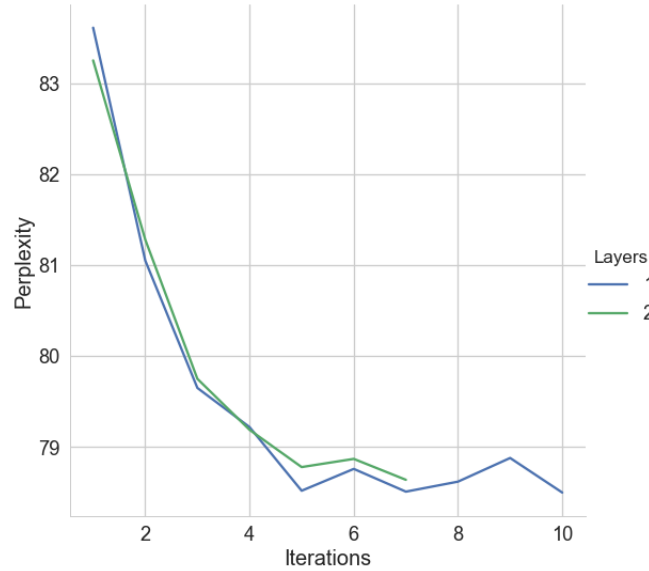


Figura 1: Perplejidad por palabra en función de las iteraciones realizadas.

Es oportuno observar que la figura 1 indica que la mejoría en el desempeño del modelo expuesta anteriormente en la comparación no se justifica con los cambios en la formulación de la estructura de la celda LSTM.

Evidentemente para explotar la mejora en el desempeño es necesario aumentar la cantidad de iteraciones por encima de una iteración como plantea la formulación de la celda LSTM sin la modificación propuesta.

7 Conclusiones

En esta sección se resume la contribución del presente trabajo, así como también futuras líneas de investigación que fundamenten las observaciones realizadas en este documento.

Los experimentos realizados exponen que los modelos que emplean la modificación propuesta mejoraron el desempeño medido por la perplejidad por palabra, respecto de su implementación original en la tarea de modelado del lenguaje. Los modelos modificados con capaces de entrenar efectivamente una compuerta lógica p que decida entre preservar el estado actual o alterarlo realizando una iteración adicional.

La mejora en el desempeño del modelo obtenida por el aumento de las iteraciones fijadas indica que realizar sucesivas iteraciones sobre los mismos valores de las variables de entrada alterando el valor del estado de la celda es una alternativa prometedora. Hasta la actualidad en mi conocimiento no hubo una investigación que desarrolle en profundidad el enfoque estudiado en este trabajo.

Los resultados de la modificación propuesta obtenidos en este trabajo, si bien son inferiores a los atribuidos a otros modelos[35] presumiblemente por modificar modelos cuyo desempeño ya fue superado, indican que es posible mejorar el desempeño de los modelos recurrentes considerándolos desde la perspectiva del estudio de los sistemas dinámicos.

7.1 Resumen de contribuciones

En el presente trabajo se introdujo el estudio de RNNs desde la perspectiva de sistemas dinámicos, argumentando la capacidad de las mismas de retener información en forma de estados pertenecientes a la cuenca del atractor asociado al estado de la información que preservan. Adicionalmente se exploran arquitecturas frecuentemente usadas en conjunto con RNNs para consolidar modelos de secuencias. Profundizar en la formulación de las RNNs permitió mostrar las condiciones del conjunto de parámetros del modelo para los cuales se manifiestan los problemas de desvanecimiento y saturación del gradiente.

Con la motivación de presentar soluciones para los problemas mencionados se introducen las celdas LSTM en conjunto con el patrón CEC para la resolución de dichos conflictos. Luego, con el objetivo de maximizar el desempeño de las celdas LSTM se introducen modificaciones comúnmente implementadas sobre su formulación original.

En base a la celda LSTM con las modificaciones descritas se introduce el estudio de las mismas como sistemas dinámicos, extendiendo el análisis ya presentado sobre las RNNs. En este contexto se propone una modificación sobre la estructura de la celda LSTM motivada en la capacidad de la misma de retener información de manera más robusta, posicionando el vector de estado de la celda LSTM más cerca del atractor de la cuenca correspondiente.

Luego, se resume la aplicación del modelo de secuencia usado a la tarea de modelado del lenguaje dentro del campo NPL.

Finalmente se exponen los resultados de los experimentos realizados sobre la tarea de modelado del lenguaje aplicando la modificación propuesta. Se destaca entonces el efecto positivo de variar los parámetros de la modificación propuesta en el desempeño final del modelo.

7.2 Trabajo futuro

A continuación se mencionan aspectos relevados parcialmente en el trabajo realizado y sobre los que es oportuno indagar.

Analizar exhaustivamente el sistema dinámico no lineal. La investigación realizada desarrolla un análisis sobre la dinámica de la celda LSTM explorando condiciones que induzcan el comportamiento deseado del sistema. Aun está pendiente un extenso desarrollo de las propiedades del sistema no lineal que contemple la dificultad de manipular un sistema con cantidad de dimensiones que comúnmente tiene una RNN.

Comparación de tiempos de entrenamiento. En los experimentos realizados se obtuvo una mejora en el desempeño en detrimento del tiempo de entrenamiento requerido. Los recursos disponibles para la presente investigación dificultaron la extracción de información relevante del aumento de la complejidad computacional al aumentar las iteraciones realizadas. Por otro lado, la negociación entre tiempo de entrenamiento y desempeño del modelo resultante es un aspecto fundamental en el campo NPL, por lo tanto un análisis detallado de este aspecto deberá ser abordado en futuros trabajos.

Aplicar la modificación en otros modelos. Los modelos explorados en este trabajo fueron aplicados únicamente a tareas de un subconjunto del campo NPL. La aplicación de la modificación propuesta sobre otras tareas de NPL y sobre todo de otros campos dentro de las ciencias de la computación y la inteligencia artificial está pendiente.

Aplicar la modificación propuesta sobre otros modelos que usen celdas LSTM debería ser sencilla, aunque más costosa que su versión original en términos de tiempo de entrenamiento como ya fue mencionado.

Particularmente prometedor se considera al estudio de modelos propios del campo *reinforcement learning* desde la perspectiva del estudio de los sistemas dinámicos por sus características inherentes para procesar datos secuenciales.

Experimentar la modificación en otras estructuras de RNNs. Centrar la investigación en las celdas LSTM significa la posibilidad de aplicar la modificación propuesta sobre un vasto número de modelos en muy distintos campos. Sin embargo se excluyen otras estructuras significativas de RNNs como Gated Recurrent Unit (GRU) y Chaos-Free Network (CFN), entre otras. Es relevante realizar experimentos que evalúen la modificación propuesta sobre otros

modelos de RNNs y comparen los resultados de los mismos.

Aumentar la complejidad de la RNN. Como fue mencionado anteriormente, el trabajo realizado se enfocó en exponer el efecto de la modificación propuesta sobre el modelo original. Este enfoque, y los recursos disponibles para la investigación realizada, implican reducir la complejidad del modelo involucrado.

Se propone entonces el estudio de modelos más extensos que incorporen la modificación propuesta y una comparación de la efectividad de la modificación propuesta al aumentar el tamaño del modelo modificado en cuestión.

Análogamente, es relevante considerar modelos más complejos para la formulación del controlador p que regula la ejecución de futuras iteraciones.

Penalizar la cantidad de iteraciones. La optimización del modelo que incorpora la mejora propuesta no cambio la función objetivo respecto del modelo original. En cambio, se introdujo la variación explícita de parámetros que regulen la cantidad de iteraciones a realizar. En la práctica esta decisión tuvo el efecto deseado, sin embargo es oportuno investigar restricciones en la función objetivo que le faciliten al modelo regular de forma autónoma la cantidad de iteraciones a realizar.

A Convergencia de LSTM iterativa

Partiendo de la definición de los exponentes de Liapunov

$$\begin{aligned}\lambda &= \frac{1}{n} \ln \left| \frac{\delta_n}{\delta_0} \right| \\ \lambda &= \frac{1}{n} \ln \left| \frac{g^n(h(t-1) + \delta_0) - g^n(h(t-1))}{\delta_0} \right| \\ \lambda &= \frac{1}{n} \ln |(g^n)'|\end{aligned}$$

siendo λ un vector cuya coordenada λ_i el exponente de Liapunov asociado a la evolución de la variación del resultado final sobre la coordenada i del vector de estado $h(t)$. $g^n(h)$ es la aplicación de la función g n veces sobre el vector de estado h . Entonces requiriendo la condición del exponente de Liapunov para la convergencia se obtiene

$$\begin{aligned}\lambda < 0 &\iff \frac{1}{n} \ln |(g^n)'| < 0 \\ &\iff |(g^n)'| < 1\end{aligned}$$

Seguidamente, es posible resolver $(g^n)'$ aplicando sucesivamente la regla de la cadena en la derivación, obteniéndose

$$\lambda = \frac{1}{n} \ln \left| \prod_{i=0}^{\tau} g'(h(i)) \right|$$

reemplazando esta identidad en el planteo de las condiciones de los exponentes de Liapunov para la convergencia de las variaciones del sistema se obtiene

$$\begin{aligned}\lambda < 0 &\iff |(g^n)'| < 1 \\ &\iff \left| \prod_{i=0}^{\tau} g'(h(i)) \right| < 1 \\ &\iff |g'(h(i))| < 1 \quad \forall i = 0, \dots, \tau\end{aligned}$$

Por otro lado, considerado la aplicación sucesiva del mapa descrito por la siguiente formulación de la iteración sobre la celda LSTM dentro de un mismo instante de tiempo t , para un vector de estado previo h genérico

$$\begin{aligned}j(h) &= \tanh(W_{rec,j} h + C_j) \\ i(h) &= \sigma(W_{rec,i} h + C_i) \\ f(h) &= \sigma(W_{rec,f} h + C_f) \\ c(h) &= f(h) c_0 + i(h) j(h) \\ o(h) &= \sigma(W_{rec,o} h + C_o) \\ h(\tau) &= g(h) = o(h) \tanh(c(h)) j(h)\end{aligned}$$

Luego, resolviendo la derivada de las funciones j, i, f, o y g respecto del vector de estado h se obtiene

$$\begin{aligned}
\frac{\partial j(h)}{\partial h} &= (1 - \tanh^2(W_{rec,j} h + C_j)) W_{rec,j} \\
\frac{\partial i(h)}{\partial h} &= \sigma(W_{rec,i} h + C_i) (1 - \sigma(W_{rec,i} h + C_i)) W_{rec,i} \\
\frac{\partial f(h)}{\partial h} &= \sigma(W_{rec,f} h + C_f) (1 - \sigma(W_{rec,f} h + C_f)) W_{rec,f} \\
\frac{\partial o(h)}{\partial h} &= \sigma(W_{rec,o} h + C_o) (1 - \sigma(W_{rec,o} h + C_o)) W_{rec,o} \\
\frac{\partial g(h)}{\partial h} &= \frac{\partial o(h)}{\partial h} \tanh(c(h)) \\
&\quad + o(h) (1 - \tanh(c(h))^2) \frac{\partial f(h)}{\partial h} c_0 \\
&\quad + o(h) (1 - \tanh(c(h))^2) \frac{\partial i(h)}{\partial h} j(h) \\
&\quad + o(h) (1 - \tanh(c(h))^2) \frac{\partial j(h)}{\partial h} i(h)
\end{aligned}$$

donde $\frac{\partial \tanh(x)}{\partial x} = 1 - \tanh(x)^2$ y $\frac{\partial \sigma(x)}{\partial x} = \sigma(x)(1 - \sigma(x))$ matrices diagonales cuyas componentes $\frac{\partial \tanh(x)}{\partial x}_{i,i}$ y $\frac{\partial \sigma(x)}{\partial x}_{i,i}$ se corresponden con la evaluación de la función $\tanh'(x_i)$ y $\sigma'(x_i)$ sobre la coordenada i del vector x , respectivamente.

Entonces, reemplazando la definición de $g'(h)$ obtenida en el planteo de las condiciones que deben cumplir los exponentes de Liapunov para asegurar la

convergencia se obtiene la siguiente desigualdad

$$\begin{aligned}
\lambda < 0 &\iff |g'(h(i))| < 1 \\
&\iff \left| \frac{\partial o(h)}{\partial h} \tanh(c(h)) \right. \\
&\quad + o(h) (1 - \tanh(c(h))^2) \frac{\partial f(h)}{\partial h} c_0 \\
&\quad + o(h) (1 - \tanh(c(h))^2) \frac{\partial i(h)}{\partial h} j(h) \\
&\quad \left. + o(h) (1 - \tanh(c(h))^2) \frac{\partial j(h)}{\partial h} i(h) \right| < 1 \\
&\iff \left| \frac{\partial o(h)}{\partial h} \tanh(c(h)) \right| \\
&\quad + \left| o(h) (1 - \tanh(c(h))^2) \frac{\partial f(h)}{\partial h} c_0 \right| \\
&\quad + \left| o(h) (1 - \tanh(c(h))^2) \frac{\partial i(h)}{\partial h} j(h) \right| \\
&\quad + \left| o(h) (1 - \tanh(c(h))^2) \frac{\partial j(h)}{\partial h} i(h) \right| < 1 \\
&\iff \left| \frac{\partial o(h)}{\partial h} \right| \underbrace{|\tanh(c(h))|}_{\leq 1} \\
&\quad + \underbrace{|o(h)|}_{<1} \underbrace{|(1 - \tanh(c(h))^2)|}_{<1} \left| \frac{\partial f(h)}{\partial h} \right| \underbrace{|c_0|}_{<1} \\
&\quad + \underbrace{|o(h)|}_{<1} \underbrace{|(1 - \tanh(c(h))^2)|}_{<1} \left| \frac{\partial i(h)}{\partial h} \right| \underbrace{|j(h)|}_{<1} \\
&\quad + \underbrace{|o(h)|}_{<1} \underbrace{|(1 - \tanh(c(h))^2)|}_{<1} \left| \frac{\partial j(h)}{\partial h} \right| \underbrace{|i(h)|}_{<1} < 1 \\
&\iff \left| \frac{\partial o(h)}{\partial h} \right| + \left| \frac{\partial f(h)}{\partial h} \right| + \left| \frac{\partial i(h)}{\partial h} \right| + \left| \frac{\partial j(h)}{\partial h} \right| < 1
\end{aligned}$$

Finalmente, reemplazando las derivadas de las funciones j, i, f, o y g respecto

del vector de estado h se obtiene

$$\begin{aligned}
\lambda < 0 &\iff \underbrace{|\sigma(W_{rec,0} h + C_i)(1 - \sigma(W_{rec,o} h + C_o))|}_{\leq \frac{1}{4}} |W_{rec,o}| \\
&\quad + \underbrace{|\sigma(W_{rec,f} h + C_i)(1 - \sigma(W_{rec,f} h + C_f))|}_{\leq \frac{1}{4}} |W_{rec,f}| \\
&\quad + \underbrace{|(1 - \tanh^2(W_{rec,j} h + C_j))|}_{\leq 1} |W_{rec,j}| \\
&\quad + \underbrace{|\sigma(W_{rec,i} h + C_i)(1 - \sigma(W_{rec,i} h + C_i))|}_{\leq \frac{1}{4}} |W_{rec,i}| < 1 \\
&\iff \leq \frac{1}{4} |W_{rec,o}| + \frac{1}{4} |W_{rec,f}| + |W_{rec,j}| + \frac{1}{4} |W_{rec,i}| < 1
\end{aligned}$$

Por lo tanto, si las matrices $W_{rec,j}, W_{rec,i}, W_{rec,f}, W_{rec,o}$ cumplen las siguientes condiciones el sistema tendrá las propiedades requeridas para la convergencia de dos estados cercanos

$$\begin{aligned}
|W_{rec,j}| + |W_{rec,i}| + |W_{rec,f}| + |W_{rec,o}| < 1 &\implies \lambda < 0 \\
\sigma_j + \frac{1}{4}\sigma_i + \frac{1}{4}\sigma_f + \frac{1}{4}\sigma_o < 1 &\implies \lambda < 0
\end{aligned}$$

siendo $\sigma_j, \sigma_i, \sigma_f, \sigma_o$ los valores singulares principales, es decir con mayor módulo, de las matrices $W_{rec,j}, W_{rec,i}, W_{rec,f}, W_{rec,o}$ respectivamente.

Particularmente se encuentra la siguiente condición como plausible

$$\sigma_j < \frac{1}{4} \wedge \sigma_i < 1 \wedge \sigma_f < 1 \wedge \sigma_o < 1$$

Bibliografía

- [1] Yoshua Bengio, Patrice Simard, and Paolo Frasconi. “Learning long-term dependencies with gradient descent is difficult”. In: *IEEE transactions on neural networks* 5.2 (1994), pp. 157–166.
- [2] Yoshua Bengio et al. “A neural probabilistic language model”. In: *Journal of machine learning research* 3.Feb (2003), pp. 1137–1155.
- [3] Heng-Tze Cheng et al. *Wide and Deep Learning for Recommender Systems*. 2016. arXiv: 1606.07792.
- [4] Ronan Collobert and Jason Weston. “A unified architecture for natural language processing: Deep neural networks with multitask learning”. In: *Proceedings of the 25th international conference on Machine learning*. ACM. 2008, pp. 160–167.
- [5] Kenji Doya. “Bifurcations in the learning of recurrent neural networks”. In: *Circuits and Systems, 1992. ISCAS’92. Proceedings., 1992 IEEE International Symposium on*. Vol. 6. IEEE. 1992, pp. 2777–2780.
- [6] Jeffrey L Elman. “Finding structure in time”. In: *Cognitive science* 14 (1990).
- [7] Robert Geirhos et al. *Comparing deep neural networks against humans: object recognition when the signal gets weaker*. 2017. arXiv: 1706.06969.
- [8] Felix Gers. “Long short-term memory in recurrent neural networks”. In: *Unpublished PhD dissertation, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, Lausanne, Switzerland* (2001).
- [9] Ian J. Goodfellow et al. *Generative Adversarial Networks*. 2014. arXiv: 1406.2661.
- [10] Alex Graves. *Sequence Transduction with Recurrent Neural Networks*. 2012. arXiv: 1211.3711.
- [11] Alex Graves, Greg Wayne, and Ivo Danihelka. *Neural Turing Machines*. 2014. arXiv: 1410.5401.
- [12] Alex Graves et al. “Hybrid computing using a neural network with dynamic external memory”. In: *Nature* 538.7626 (2016), pp. 471–476.
- [13] Awni Hannun et al. *Deep Speech: Scaling up end-to-end speech recognition*. 2014. arXiv: 1412.5567.
- [14] Kaiming He et al. *Deep Residual Learning for Image Recognition*. 2015. arXiv: 1512.03385.
- [15] Sepp Hochreiter. “Untersuchungen zu dynamischen neuronalen Netzen”. In: *Diploma, Technische Universität München* 91 (1991).
- [16] Sepp Hochreiter and Jürgen Schmidhuber. “Long short-term memory”. In: *Neural computation* 9.8 (1997), pp. 1735–1780.
- [17] Dan Jurafsky and James H Martin. *Speech and language processing*. Vol. 3. Pearson London, 2014.

- [18] Thomas Laurent and James von Brecht. *A recurrent neural network without chaos*. 2016. arXiv: 1612.06212.
- [19] Qianli Liao and Tomaso Poggio. *Bridging the Gaps Between Residual Learning, Recurrent Neural Networks and Visual Cortex*. 2016. arXiv: 1604.03640.
- [20] Donghao Luo et al. *Image Matching via Loopy RNN*. 2017. arXiv: 1706.03190.
- [21] Mitchell P Marcus, Mary Ann Marcinkiewicz, and Beatrice Santorini. “Building a large annotated corpus of English: The Penn Treebank”. In: *Computational linguistics* 19.2 (1993), pp. 313–330.
- [22] Tomas Mikolov, Wen-tau Yih, and Geoffrey Zweig. “Linguistic regularities in continuous space word representations.” In: *hlt-Naacl*. Vol. 13. 2013, pp. 746–751.
- [23] Tomas Mikolov et al. “Distributed representations of words and phrases and their compositionality”. In: *Advances in neural information processing systems*. 2013, pp. 3111–3119.
- [24] Tomas Mikolov et al. *Efficient Estimation of Word Representations in Vector Space*. 2013. arXiv: 1301.3781.
- [25] Volodymyr Mnih et al. *Recurrent Models of Visual Attention*. 2014. arXiv: 1406.6247.
- [26] Razvan Pascanu, Tomas Mikolov, and Yoshua Bengio. *On the difficulty of training Recurrent Neural Networks*. 2012. arXiv: 1211.5063.
- [27] Jeffrey Pennington, Richard Socher, and Christopher Manning. “Glove: Global vectors for word representation”. In: *Proceedings of the 2014 conference on empirical methods in natural language processing (EMNLP)*. 2014, pp. 1532–1543.
- [28] Tapani Raiko, Harri Valpola, and Yann LeCun. “Deep learning made easier by linear transformations in perceptrons”. In: *Artificial Intelligence and Statistics*. 2012, pp. 924–932.
- [29] David E Rumelhart, Geoffrey E Hinton, and Ronald J Williams. *Learning internal representations by error propagation*. Tech. rep. California Univ San Diego La Jolla Inst for Cognitive Science, 1985.
- [30] Haşim Sak, Andrew Senior, and Françoise Beaufays. *Long Short-Term Memory Based Recurrent Neural Network Architectures for Large Vocabulary Speech Recognition*. 2014. arXiv: 1402.1128.
- [31] Steven H Strogatz. *Nonlinear dynamics and chaos: with applications to physics, biology, chemistry, and engineering*. Hachette UK, 2014.
- [32] Ilya Sutskever. “Training recurrent neural networks”. In: *University of Toronto, Toronto, Ont., Canada* (2013).
- [33] DRGHR Williams and Geoffrey Hinton. “Learning representations by back-propagating errors”. In: *Nature* 323.6088 (1986), pp. 533–538.

- [34] Wojciech Zaremba and Ilya Sutskever. *Reinforcement Learning Neural Turing Machines - Revised*. 2015. arXiv: 1505.00521.
- [35] Wojciech Zaremba, Ilya Sutskever, and Oriol Vinyals. *Recurrent Neural Network Regularization*. 2014. arXiv: 1409.2329.
- [36] Matthew D Zeiler and Rob Fergus. *Visualizing and Understanding Convolutional Networks*. 2013. arXiv: 1311.2901.
- [37] Biao Zhang, Deyi Xiong, and Jinsong Su. *Recurrent Neural Machine Translation*. 2016. arXiv: 1607.08725.
- [38] Chiyuan Zhang et al. *Understanding deep learning requires rethinking generalization*. 2016. arXiv: 1611.03530.