人工智能之深度学习

循环神经网络RNN

主讲人: 刘老师(GerryLiu)

课程要求

- •课上课下"九字"真言
 - 认真听, 善摘录, 勤思考
 - 多温故, 乐实践, 再发散
- 四不原则
 - 不懒散惰性,不迟到早退
 - 不请假旷课,不拖延作业
- 一点注意事项
 - 违反"四不原则",不推荐就业

课程内容

- 递归神经网络(RNN)
 - 什么是递归神经网络
 - 应用场景
 - 层次结构
 - RNN描述
- LSTM
- GRU

什么是递归神经网络

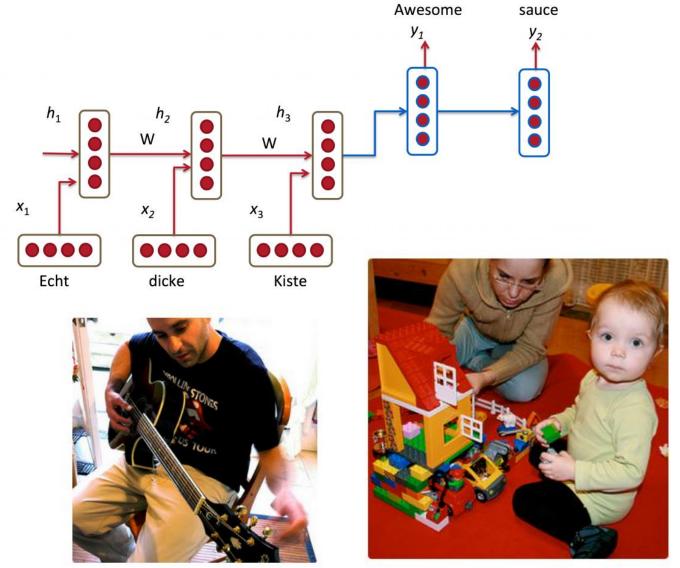
- 为什么有BP神经网络、CNN,还需要RNN?
 - BP神经网络和CNN的输入输出都是互相独立的;但是实际应用中有些场景输出内容和之前的内容是有关联的。
 - RNN引入"记忆"的概念;递归指其每一个元素都执行相同的任务,但是输出依赖于输入和"记忆"。

什么是递归神经网络

• 我们已经学习了前馈网络的两种结构——BP神经网络和卷积神 经网络, 这两种结构有一个特点, 就是假设输入是一个独立的没 有上下文联系的单位, 比如输入是一张图片, 网络识别是狗还是 猫。但是对于一些有明显的上下文特征的序列化输入,比如预测 视频中下一帧的播放内容,那么很明显这样的输出必须依赖以前 的输入,也就是说网络必须拥有一定的"记忆能力"。为了赋予 网络这样的记忆力,一种特殊结构的神经网络———递归神经网络 (Recurrent Neural Network)便应运而生了。

递归神经网络RNN-应用场景

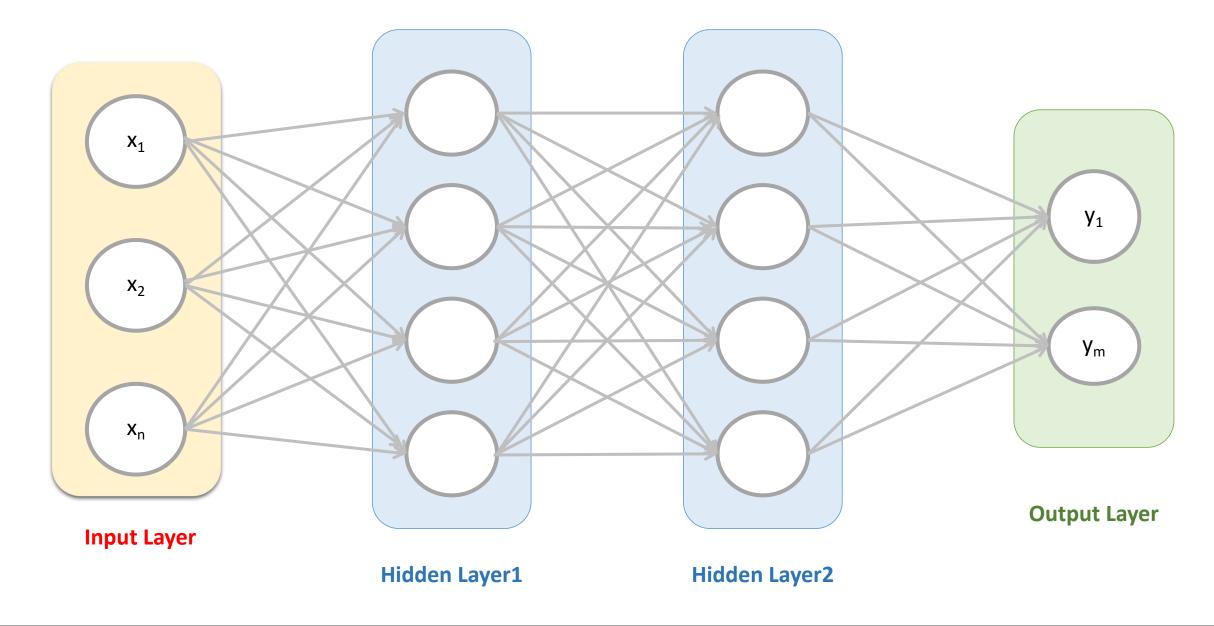
- 自然语言处理(NLP)
 - 语言模型与文本生成
- 机器翻译
- 语音识别
- 图像描述生成
- 文本相似度计算等



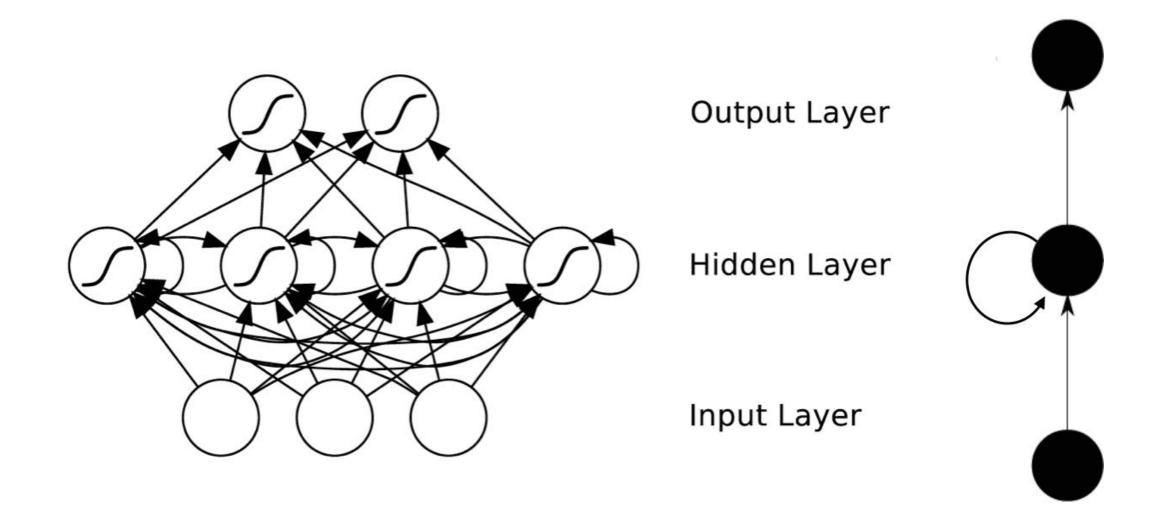
"man in black shirt is playing guitar."

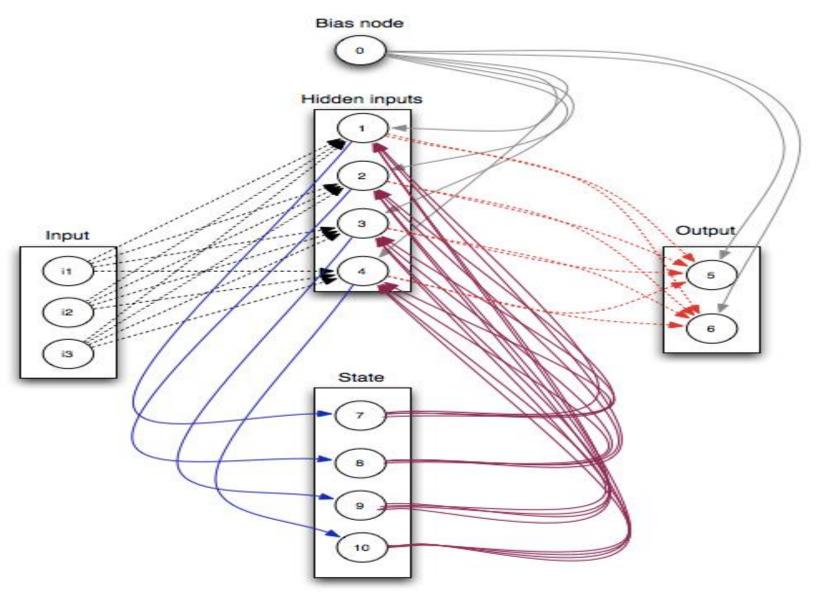
"two young girls are playing with lego toy."

神经网络之结构



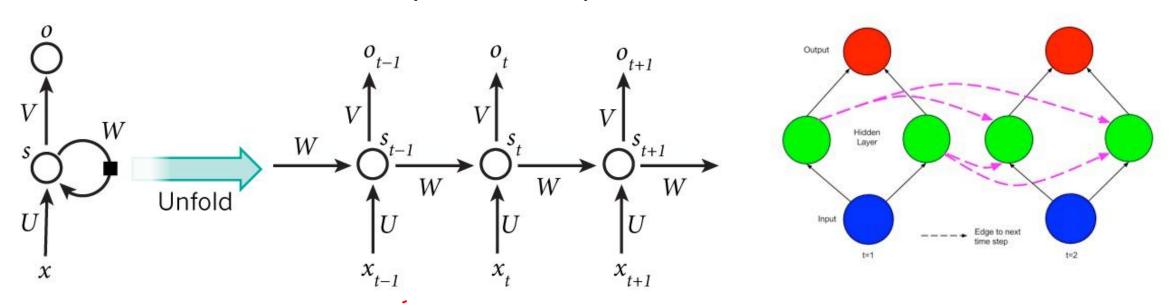
递归神经网络RNN-结构



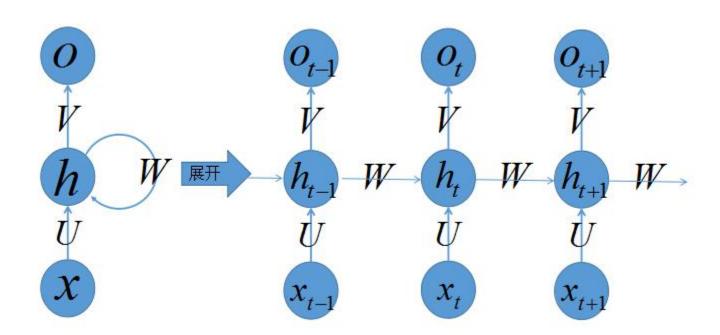


- 网络某一时刻的输入 x_t ,和之前介绍的bp神经网络的输入一样, x_t 是一个n维向量,不同的是递归网络的输入将是一整个序列,也就是 $x=[x_1,...,x_{t-1},x_t,x_{t+1},...x_T]$,对于语言模型,每一个 x_t 将代表一个词向量,一整个序列就代表一句话。
- h_t代表时刻t的隐藏状态
- o_t代表时刻t的输出
- 输入层到隐藏层之间的权重由U表示,它将我们的原始输入进行抽象作为隐藏层的输入
- 隐藏层到隐藏层的权重W,它是网络的记忆控制者,负责调度记忆。
- 隐藏层到输出层的权重V,从隐藏层学习到的表示将通过它再一次抽象,并作为最终输出。

- 将序列按时间展开就可以得到RNN的结构
 - X_t是时间t处的输入
 - S_t 是时间t处的"记忆", $S_t = f(UX_t + WS_{t-1})$,f可以是非线性转换函数,比如tanh等
 - O_t 是时间t处的输出,比如是预测下一个词的话,可能是sigmoid/softmax输出的属于 每个候选词的概率, O_t =softmax(VS_t)



按照一定的时间序列规定好计算顺序,于是实际上我们会将这样带环的结构展开成一个序列网络,也就是上图右侧被"unfold"之后的结构。



• 在t=1的时刻, U,V,W都被随机初始化好, h0通常初始化为0, 然后进行如下计算:

$$egin{aligned} s_1 &= Ux_1 + Wh_0 \ h_1 &= f(s_1) \ o_1 &= g(Vh_1) \end{aligned}$$

• 时间就向前推进,此时的状态h₁作为时刻1的记忆状态将参与下一次的预测活动,也就是:

$$s_2 = Ux_2 + Wh_1$$

 $h_2 = f(s_2)$
 $o_2 = g(Vh_2)$

• 以此类推,可得

$$s_t = Ux_t + Wh_{t-1}$$
$$h_t = f(Ux_t + Wh_{t-1})$$
$$o_t = g(Vh_t)$$

其中f可以是tanh,relu,sigmoid等激活函数,g通常是softmax也可以是其他。
 值得注意的是,我们说递归神经网络拥有记忆能力,而这种能力就是通过W将以往的输入状态进行总结,而作为下次输入的辅助。可以这样理解隐藏状态:h=f(现有的输入+过去记忆总结)

- bp神经网络用到的误差反向传播方法将输出层的误差总和,对各个权重的 梯度∇U,∇V,∇W,求偏导数,然后利用梯度下降法更新各个权重。
- 对于每一时刻t的RNN网络,网络的输出o_t都会产生一定误差e_t,误差的损失函数,可以是交叉熵也可以是平方误差等等。那么总的误差为E=∑_te_t,我们的目标就是要求取

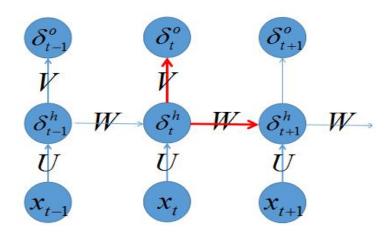
$$\nabla U = \frac{\partial E}{\partial U} = \sum_{t} \frac{\partial e_{t}}{\partial U}$$

$$\nabla V = \frac{\partial E}{\partial V} = \sum_{t} \frac{\partial e_{t}}{\partial V}$$

$$\nabla W = \frac{\partial E}{\partial W} = \sum_{t} \frac{\partial e_{t}}{\partial W}$$

对于输出o_t=g(Vs_t),对于任意损失函数,求取∇V将是简单的,我们可以直接求取每个时刻的∂e_t/∂V,由于它不存在和之前的状态依赖,可以直接求导取得,然后简单地求和即可。对于∇W,∇U的计算不能直接求导,因此需要用链式求导法则。

为了使得误差e能够对U和W求偏导数,定义一个中 δ = ∂ e/ ∂ s,首先计算出输出层的 δ ^L,再向后传播到各层 δ ^{L-1}, δ ^{L-2},....,那么如何计算 δ 呢?



• 关注当前层次发射出去的链接即可, 也就是

$$\delta_t^h = (V^T \delta_t^o + W^T \delta_{t+1}^h). *f'(s_t)$$

只要计算出所有的 $δ_t, δ_t$,就可以通过以下计算出∇W, ∇U:

• 关注当前层次发射出去的链接即可, 也就是

$$\delta_t^h = (V^T \delta_t^o + W^T \delta_{t+1}^h). *f'(s_t)$$

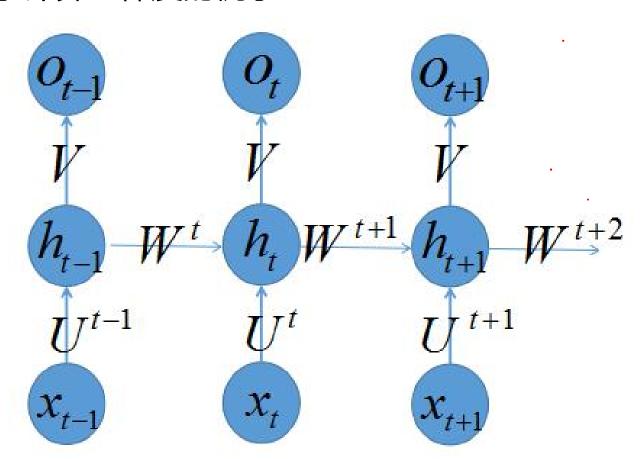
只要计算出所有的 $δ_t, δ_t$,就可以通过以下计算出∇W, ∇U:

$$\nabla W = \sum_{t} \begin{bmatrix} \delta_{0,t}^{h} h_{0,t-1} , \dots , \delta_{0,t}^{h} h_{i,t-1} , \dots , \delta_{0,t}^{h} h_{m,t-1} \\ \dots \\ \delta_{j,t}^{h} h_{0,t-1} , \dots , \delta_{j,t}^{h} h_{i,t-1} , \dots , \delta_{j,t}^{h} h_{m,t-1} \\ \dots \\ \delta_{n,t}^{h} h_{0,t-1} , \dots , \delta_{n,t}^{h} h_{i,t-1} , \dots , \delta_{n,t}^{h} h_{m,t-1} \end{bmatrix} = \sum_{t} \delta_{t}^{h} \times h_{t-1}$$

$$\nabla U = \sum_{t} \begin{bmatrix} \delta_{0,t}^{h} x_{0,t} , \dots , \delta_{0,t}^{h} x_{i,t} , \dots , \delta_{0,t}^{h} x_{m,t} \\ \dots \\ \delta_{j,t}^{h} x_{0,t} , \dots , \delta_{j,t}^{h} x_{i,t} , \dots , \delta_{j,t}^{h} x_{m,t} \\ \dots \\ \delta_{n,t}^{h} x_{0,t} , \dots , \delta_{n,t}^{h} x_{i,t} , \dots , \delta_{n,t}^{h} x_{m,t} \end{bmatrix} = \sum_{t} \delta_{t}^{h} \times x_{t}$$

$$\sum_{t} \delta_{t}^{h} \times h_{t-1}$$

• 举个详细的例子计算W梯度的例子:



• 举个对于时刻t+1产生的误差e_{t+1}, 我们想计算它对于W¹,W²,....,W^t, W^{t+1}的梯度, 可以如下计算:

$$\frac{\partial e_{t+1}}{\partial W^{t+1}} = \frac{\partial e_{t+1}}{\partial h^{t+1}} \frac{\partial h_{t+1}}{\partial W^{t+1}}$$

$$\frac{\partial e_{t+1}}{\partial W^{t}} = \frac{\partial e_{t+1}}{\partial h^{t+1}} \frac{\partial h_{t+1}}{\partial h^{t}} \frac{\partial h_{t}}{\partial W^{t}}$$

$$\frac{\partial e_{t+1}}{\partial W^{t-1}} = \frac{\partial e_{t+1}}{\partial h^{t+1}} \frac{\partial h_{t+1}}{\partial h^{t}} \frac{\partial h_{t}}{\partial h^{t}} \frac{\partial h_{t-1}}{\partial W^{t-1}}$$

反复运用链式法则,我们可以求出每一个∇W₁,∇W₂,...,∇W_t,∇W_{t+1},在不同时刻都是共享同样的参数,这样可以大大减少训练参数,和CNN的共享权重类似。对于共享参数的RNN,我们只需将上述的一系列式子抹去标签并求和,就可以得到:

推导出来的公式为:

$$\frac{\partial e_t}{\partial W} = \sum_{1 \le k \le t} \frac{\partial e_t}{\partial h^t} \prod_{k < i \le t} \frac{\partial h_i}{\partial h^{i-1}} \frac{\partial^+ h_k}{\partial W}$$

• 其中 ∂W 表示不利用链式法则直接求导,也就是假如对于函数f(h(x)),对其直接求导结果如下: $\partial f(h(x))/\partial x = f'(h(x))$,也就是求导函数可以写成x的表达式,也就是将h(x)看成常数了。

在Yoshua Bengio 论文中(http://proceedings.mlr.press/v28/pascanu13.pdf)

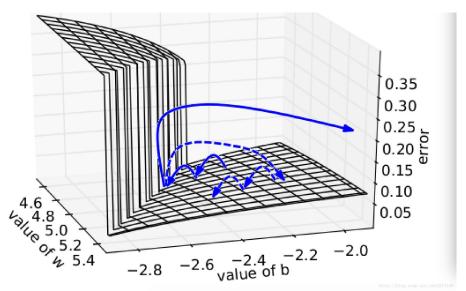
在Yoshua Bengio 论文中(http://proceedings.mir.press/v28/pascanu 13.pdi) 证明了
$$\prod_{k < i \le t} \frac{\partial h_i}{\partial h^{i-1}} \prod_{k \le t} \int_{0}^{t-k} \int_{0}^{$$

当η<1时,就会出现梯度消失问题,而当η>1时,梯度爆炸也就产生了。

为了克服梯度消失的问题,LSTM和GRU模型便后续被推出了,为什么LSTM和GRU可以克服梯度消失问题呢?由于它们都有特殊的方式存储"记忆",那么以前梯度比较大的"记忆"不会像简单的RNN一样马上被抹除,因此可以一定程度上克服梯度消失问题。(问题描述:在普通RNN中于长序列而言,很早之前时刻输入的信息,对于当前时刻是不会产生影响的。)

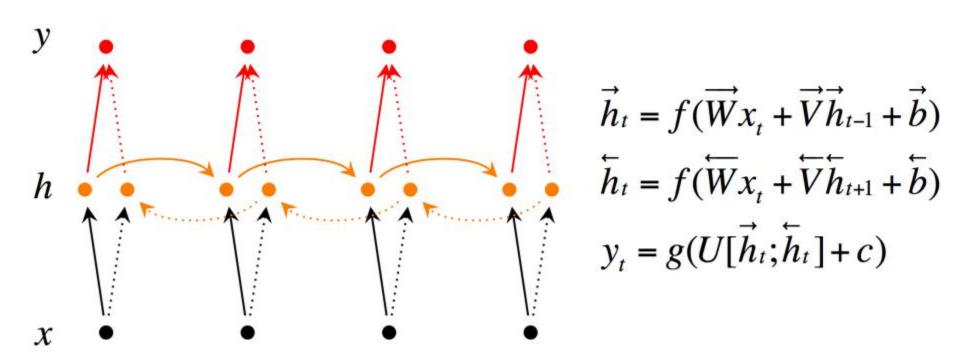
另一个简单的技巧可以用来克服梯度爆炸的问题就是gradient clipping,也就是当你计算的梯度超过阈值c的或者小于阈值-c时候,便把此时的梯度设置成c或-c。

 下图所示是RNN的误差平面,可以看到RNN的误差平面要么非常陡峭,要 么非常平坦,如果不采取任何措施,当你的参数在某一次更新之后,刚好碰 到陡峭的地方,此时梯度变得非常大,那么你的参数更新也会非常大,很容 易导致震荡问题。而如果你采取了gradient clipping这个技巧,那么即使 你不幸碰到陡峭的地方,梯度也不会爆炸,因为梯度被限制在某个阈值c。

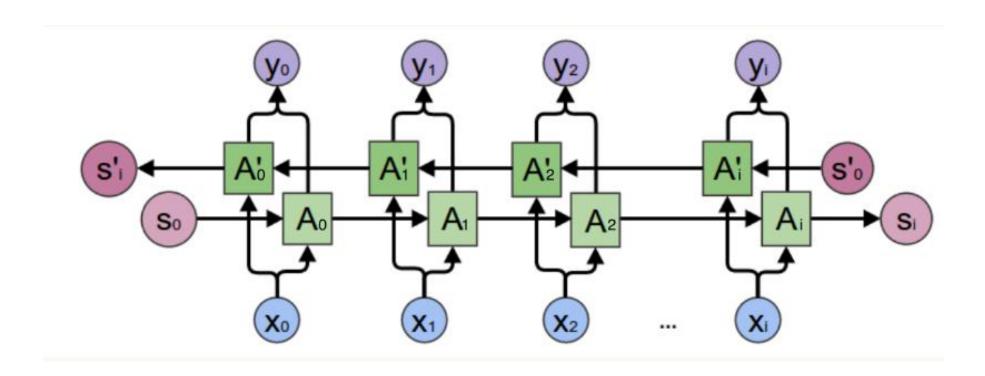


循环神经网络RNN-Bidirectional RNN

• Bidirectional RNN(双向RNN)假设当前t的输出不仅仅和之前的序列有关,并且还与之后的序列有关,例如:预测一个语句中缺失的词语那么需要根据上下文进行预测; Bidirectional RNN是一个相对简单的RNNs,由两个RNNs上下叠加在一起组成。输出由这两个RNNs的隐藏层的状态决定。

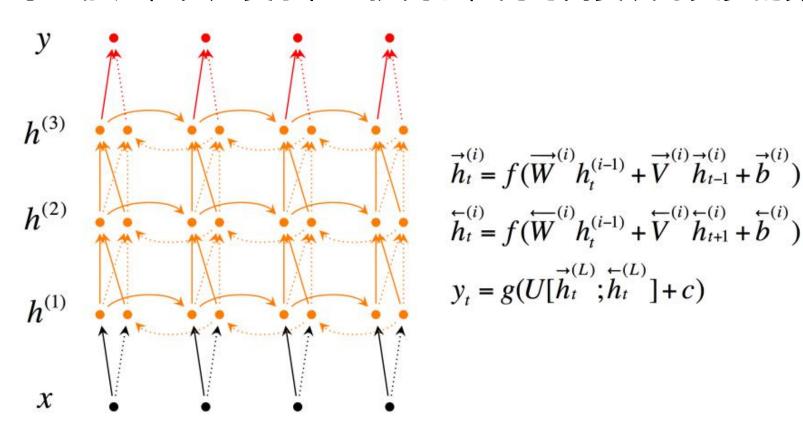


循环神经网络RNN-Bidirectional RNN



递归神经网络RNN-Deep(Bidirectional) RNN

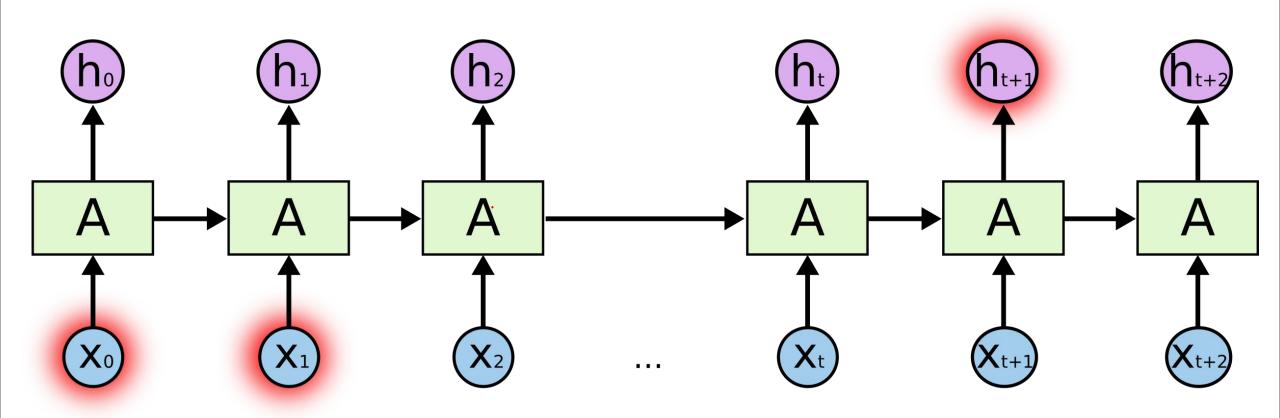
• Deep Bidirectional RNN(深度双向RNN)类似Bidirectional RNN,区别在于每个每一步的输入有多层网络,这样的话该网络便具有更加强大的表达能力和学习能力,但是复杂性也提高了,同时需要训练更多的数据。



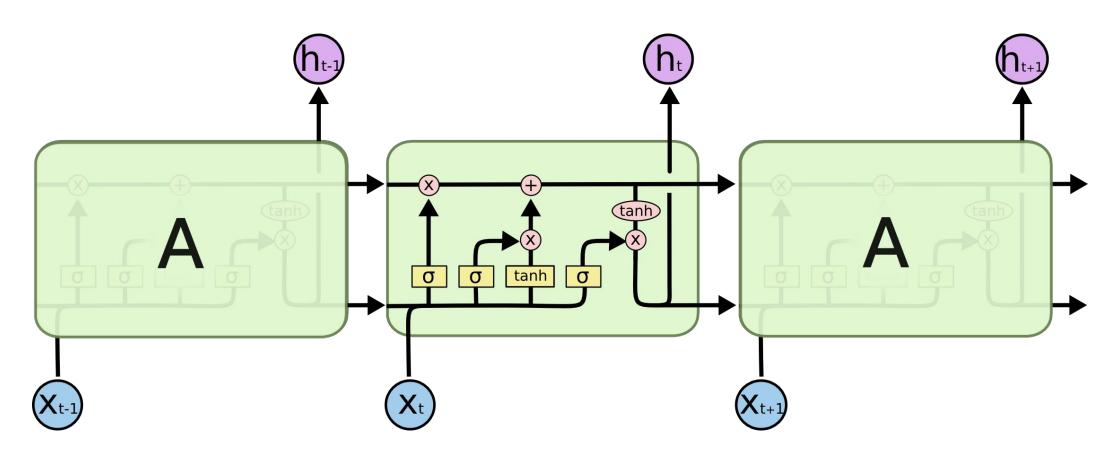
循环神经网络RNN-BPTT

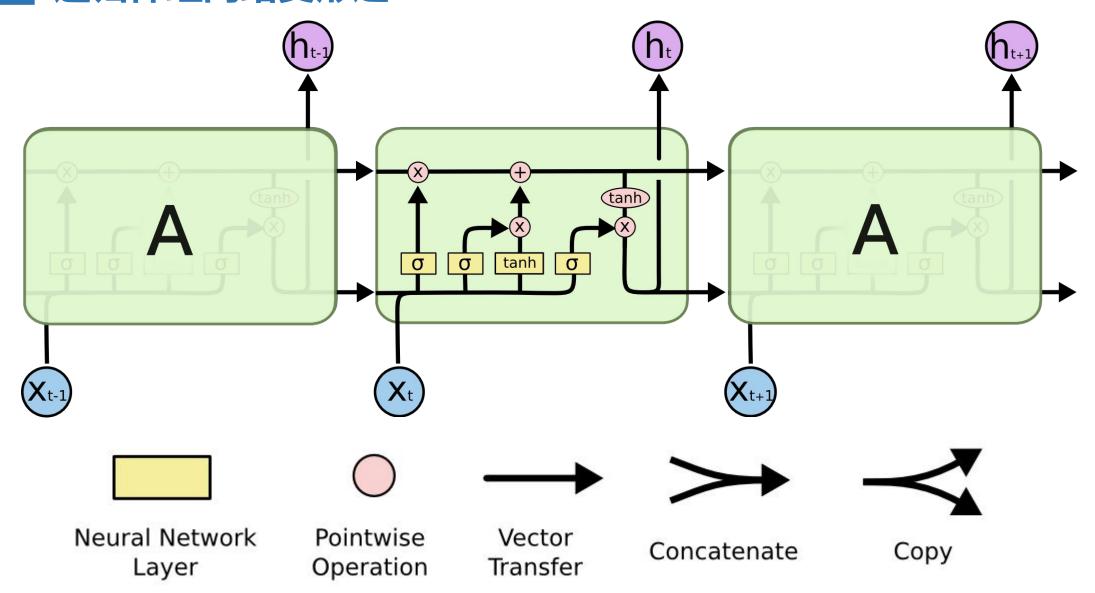
- RNN的训练和CNN/ANN训练一样,同样适用BP算法误差反向传播算法。 区别在于: RNN中的参数U\V\W是共享的,并且在随机梯度下降算法中, 每一步的输出不仅仅依赖当前步的网络,并且还需要前若干步网络的状态, 那么这种BP改版的算法叫做Backpropagation Through Time(BPTT); BPTT算法和BP算法一样,在多层(多个输入时刻)训练过程中(长时依赖<即 当前的输出和前面很长的一段序列有关,一般超过10步>),可能产生梯度 消失和梯度爆炸的问题。
- BPTT和BP算法思路一样,都是求偏导,区别在于需要考虑时间对step的影响

- 在RNN计算中,介绍到对于长期/长时依赖的问题,没法进行解决,可能产生梯度消失和梯度爆炸的问题; LSTM特别适合解决这类需要长时间依赖的问题。
- LSTM是RNN的一种变种,大体结构一致,区别在于:
 - LSTM的"记忆细胞"是改造过的
 - 该记录的信息会一直传递,不该记录的信息会被截断掉



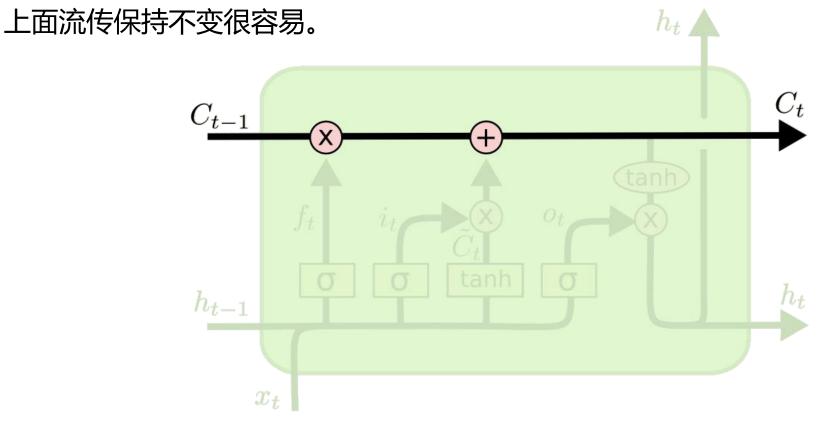
• 将"记忆细胞"变得稍微复杂一点点



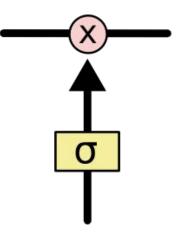


• LSTM关键: "细胞状态"

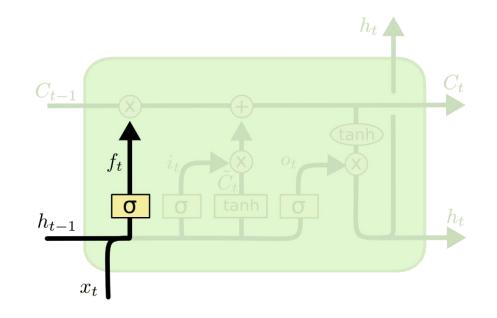
• 细胞状态类似于传送带。直接在整个链上运行,只有一些少量的线性交互。信息在



- LSTM怎么控制"细胞状态"?
 - LSTM可以通过gates("门")结构来去除或者增加"细胞状态"的信息
 - 包含一个sigmoid神经网络层次和一个pointwist乘法操作
 - Sigmoid层输出一个0到1之间的概率值,描述每个部分有多少量可以通过,0表示 "不允许任务变量通过",1表示"运行所有变量通过"
 - · LSTM中主要有三个"门"结构来控制"细胞状态"

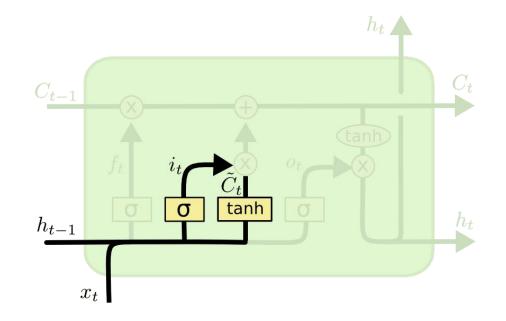


• 第一个"门"==>"忘记门"/"遗忘门": 决定从"细胞状态"中丢弃什么信息; 比如在语言模型中,细胞状态可能包含了性别信息("他"或者"她"),当我们看到新的代名词的时候,可以考虑忘记旧的数据



$$f_t = \sigma\left(W_f \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_f\right)$$

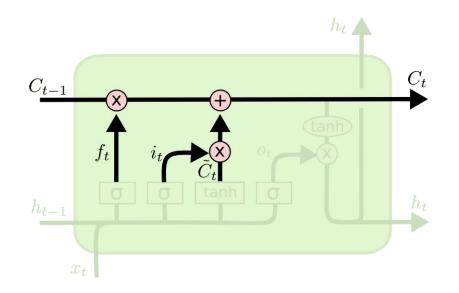
- 第二个"门"==>"信息增加门":决定放什么新信息到"细胞状态"中;
 - Sigmoid层决定什么值需要更新;
 - Tanh层创建一个新的候选向量Ct;
 - 主要是为了状态更新做准备



$$i_t = \sigma \left(W_i \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_i \right)$$

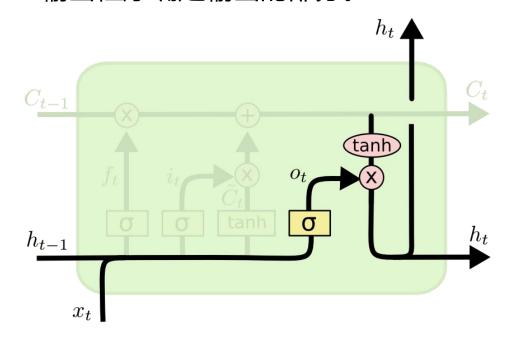
$$\tilde{C}_t = \tanh(W_C \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_C)$$

- 经过第一个和第二个"门"后,可以确定传递信息的删除和增加,即可以进行"细胞状态"的更新
 - 更新C_{t-1}为C_t;
 - 将旧状态与f_t相乘, 丢失掉确定不要的信息;
 - 加上新的候选值i_t*C_t得到最终更新后的"细胞状态"



$$C_t = f_t * C_{t-1} + i_t * \tilde{C}_t$$

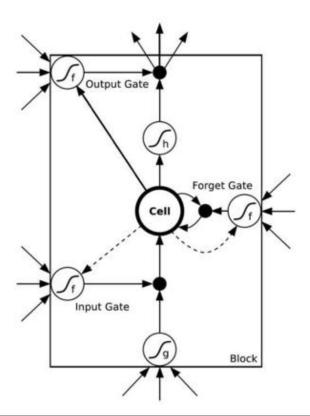
- •第三个"门"==>基于"细胞状态"得到输出,也就是"输出门";
 - 首先运行一个sigmoid层来确定细胞状态的那个部分将输出
 - 使用tanh处理细胞状态得到一个-1到1之间的值,再将它和sigmoid门的输出相乘, 输出程序确定输出的部分。



$$o_t = \sigma \left(W_o \left[h_{t-1}, x_t \right] + b_o \right)$$
$$h_t = o_t * \tanh \left(C_t \right)$$

另外一种理解方式,图中方框我们称为记忆单元,其中实线箭头代表当前时刻的信息传递,虚线箭头表示上一时刻的信息传递。从结构图中我们看出,LSTM模型共增加了三个门:**输入门、遗忘门和输出门**。进入block的箭头

代表输入,而出去的箭头代表输出。



LSTM的前向传播公式如下:

Input Gate:

$$a_{t}^{t} = \sum_{i=1}^{2} \text{Win} x_{t}^{t} + \sum_{h=1}^{H} \text{Whi} b_{h}^{t-1} + \sum_{i=1}^{C} \text{Wci} S_{c}^{t-1}$$

$$b_{t}^{t} = f(a_{t}^{t})$$
Forget Gate:
$$a_{\phi}^{t} = \sum_{i=1}^{I} \text{Wip} x_{t}^{t} + \sum_{h=1}^{H} \text{Whp} b_{h}^{t-1} + \sum_{c=1}^{C} \text{Wcp} S_{c}^{t-1}$$

$$b_{\phi}^{t} = f(a_{\phi}^{t})$$

LSTM的前向传播共公式如下:

Output Gate:

$$a_{w}^{t} = \sum_{i=1}^{I} w_{iw} \chi_{i}^{t} + \sum_{h=1}^{H} w_{hw} b_{h}^{t-1} + \sum_{c=1}^{C} w_{cw} S_{c}^{t}$$

$$b_{w}^{t} = f(a_{w}^{t})$$

$$Cell:$$

$$a_{c}^{t} = \sum_{i=1}^{I} w_{ic} \chi_{i}^{t} + \sum_{h=1}^{H} w_{hc} b_{h}^{t-1}$$

$$S_{c}^{t} = b_{\phi}^{t} S_{c}^{t-1} + b_{l}^{t} g(a_{c}^{t})$$

$$Output:$$

$$b_{c}^{t} = b_{w}^{t} h(S_{c}^{t})$$

上图有带h的权重矩阵均代表一种泛指,为LSTM的各种变种做准备,表示任 意一条从上一时刻指向当前时刻的边,本文暂不考虑。与上篇公式类似,a 代表汇集计算结果,b代表激活计算结果,Wil代表输入数据与输入门之间 的权重矩阵,Wcl代表上一时刻Cell状态与输入门之间的权重矩阵,WiΦ代 表输入数据与遗忘门之间的权重矩阵, $Wc\Phi$ 代表上一时刻Cell状态与遗忘 门之间的权重矩阵, $Wi\omega$ 代表输入数据与输出门之间的权重矩阵, $Wc\omega$ 代 表Cell状态与输出门之间的权重矩阵,Wic代表输入层原有的权重矩阵。需 要注意的是,图中Cell一栏描述的是从下方输入到中间Cell输出的整个传播 过程。

反向传播

输出门不牵扯时间维度,我们可以直接写出输出门 $Wi\omega$ 和 $Wc\omega$ 的迭代公式为:

$$\frac{\partial L}{\partial W_{iw}} = \frac{\partial L}{\partial b_c^t} \cdot \frac{\partial b_c^t}{\partial a_w^t} \cdot \frac{\partial a_w^t}{\partial W_{iw}}$$

$$= L' \cdot h(S_c^t) \cdot f'(a_w^t) \cdot \chi_i^t$$

$$W_{iw} = W_{iw} - \eta \cdot \frac{\partial L}{\partial W_{iw}}$$

$$\frac{\partial L}{\partial W_{cw}} = \frac{\partial L}{\partial b_c^t} \cdot \frac{\partial b_c^t}{\partial a_w^t} \cdot \frac{\partial a_w^t}{\partial W_{cw}}$$

$$= L' \cdot h(S_c^t) \cdot f'(a_w^t) \cdot S_c^t$$

反向传播

遗忘门的权重矩阵WiΦ也可以直接给出,如下图:

$$\frac{\partial L}{\partial W_{i\phi}} = \frac{\partial L}{\partial b_{c}^{t}} \cdot \frac{\partial b_{c}^{t}}{\partial b_{\phi}^{t}} \cdot \frac{\partial b_{\phi}^{t}}{\partial W_{i\phi}}$$

$$= L' \cdot b_{w}^{t} \cdot h'(S_{c}^{t}) \cdot S_{c}^{t-1} \cdot f'(a_{\phi}^{t}) \cdot \chi_{i}^{t}$$

$$W_{i\phi} = W_{i\phi} - \eta \cdot \frac{\partial L}{\partial W_{i\phi}}$$

反向传播

对于遗忘门的权重矩阵**WcΦ**,由于是和上一时刻Cell状态做汇集计算,残差除了来自当前Cell,还来自下一时刻的Cell,因此需要写出下一时刻Cell传播至本时刻遗忘门的时间维度前向传播公式,如下图:

$$a_{\phi}^{t+1} = \sum_{c=1}^{c} W_{c\phi} S_{c}^{t} + \sum_{i=1}^{t} W_{i\phi} X_{i}^{t+1} + \sum_{h=1}^{t} W_{h\phi} b_{h}^{t}$$

$$b_{\phi}^{t+1} = f(a_{\phi}^{t+1})$$

反向传播

有了上面的公式,我们就能完整写出WcΦ的梯度公式如下:

$$\frac{\partial L}{\partial W_{c\phi}^{c}} = \frac{\partial L}{\partial b_{c}^{t}} \cdot \frac{\partial b_{c}^{t}}{\partial b_{\phi}^{t}} \cdot \frac{\partial b_{\phi}^{t}}{\partial W_{c\phi}^{t}}$$

$$= L' \cdot b_{w}^{t} \cdot h'(S_{c}^{t}) \cdot S_{c}^{t-1} \cdot f'(a_{\phi}^{t}) \cdot S_{c}^{t-1}$$

$$= L' \cdot b_{w}^{t} \cdot h'(S_{c}^{t}) \cdot f'(a_{\phi}^{t}) \cdot S_{c}^{t-1}$$

$$\frac{\partial L}{\partial W_{c\phi}^{t}} = \frac{\partial L}{\partial b_{\phi}^{t+1}} \cdot \frac{\partial b_{\phi}^{t}}{\partial b_{\phi}^{t}} \cdot \frac{\partial b_{\phi}^{t}}{\partial W_{c\phi}^{t}}$$

$$= L'' \cdot f'(a_{\phi}^{t+1}) \cdot W_{c\phi} \cdot f'(a_{\phi}^{t}) \cdot S_{c}^{t-1}$$

$$\frac{\partial L}{\partial W_{c\phi}^{t}} = \frac{\partial L}{\partial W_{c\phi}^{t}} + \frac{\partial L}{\partial W_{c\phi}^{t}}$$

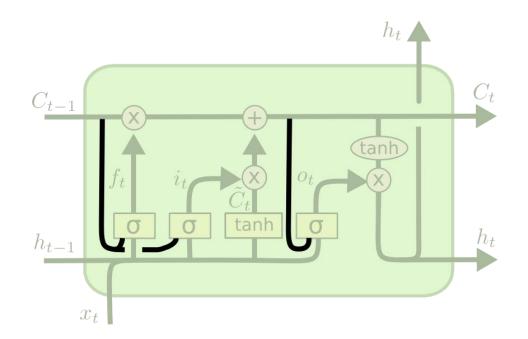
$$W_{c\phi}^{t} = W_{c\phi}^{t} - \eta \cdot \frac{\partial L}{\partial W_{c\phi}^{t}}$$

$$W_{c\phi}^{t} = W_{c\phi}^{t} - \eta \cdot \frac{\partial L}{\partial W_{c\phi}^{t}}$$

反向传播

推完遗忘门公式,就可以此类推输入门与Cell的公式。

- 变种1
 - 增加 "peephole connections" 层
 - 让门层也接受细胞状态的输入



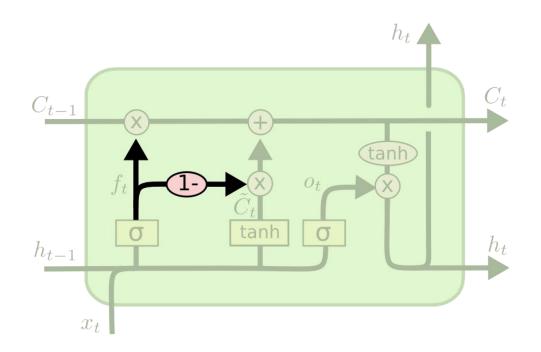
$$f_{t} = \sigma (W_{f} \cdot [C_{t-1}, h_{t-1}, x_{t}] + b_{f})$$

$$i_{t} = \sigma (W_{i} \cdot [C_{t-1}, h_{t-1}, x_{t}] + b_{i})$$

$$o_{t} = \sigma (W_{o} \cdot [C_{t}, h_{t-1}, x_{t}] + b_{o})$$

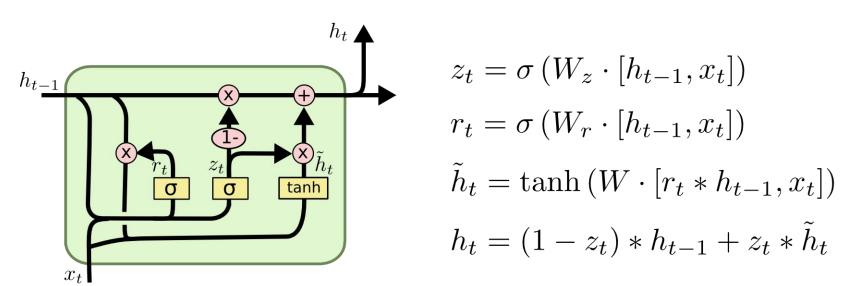
• 变种2

 通过耦合忘记门和更新输入门(第一个和第二个门);也就是不再单独的考虑忘记什么、 增加什么信息,而是一起进行考虑。

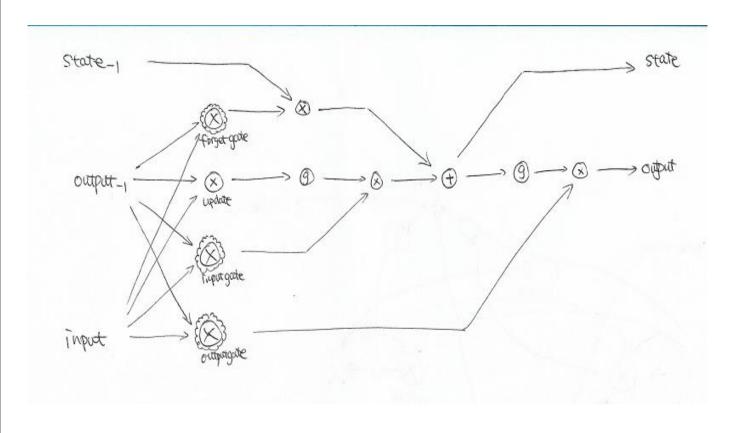


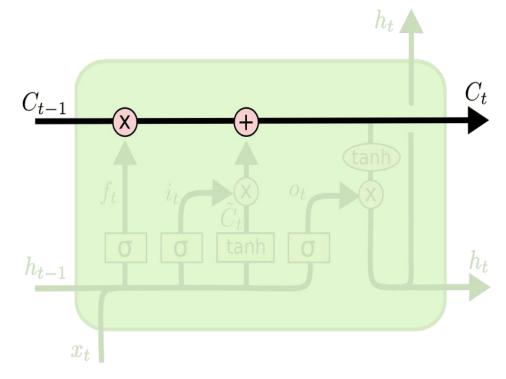
$$C_t = f_t * C_{t-1} + (1 - f_t) * \tilde{C}_t$$

- Gated Recurrent Unit(GRU), 2014年提出
 - 将忘记门和输出门合并成为一个单一的更新门
 - 同时合并了数据单元状态和隐藏状态(细胞状态和输出状态)
 - 结构比LSTM的结构更加简单



• 论文<u>http://arxiv.org/pdf/1402.1128v1.pdf</u>中定义的 LSTM Cell 似乎并不是我们平时熟悉的那种,而是如下图:





- (1) ⊗ 代表两个数据源乘上参数后相加。⊕代表两个数据源相加。
- (2) ⊗ 外面再加花边的,代表两个数据源相乘后再取 sigmoid 。
- (3) 圆圈里是 gg 的,代表取 tanh 。
- (4) State-1 下标-1代表这是上一次迭代时的结果。

