imhuay 【update】专题-RNN 517b3df on Sep 25 2018

1 contributor

240 lines (178 sloc) 18.3 KB

DL-专题-RNN

Index

RNN 的基本结构

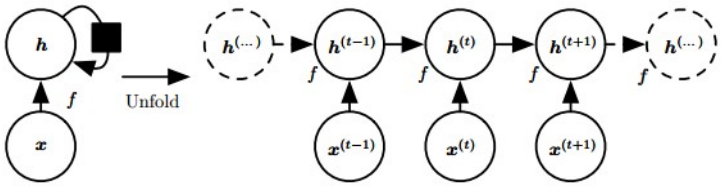
- RNN 本质上是一个**递推函数**

$$h^{(t)} = f(h^{(t-1)}; \theta)$$

- 考虑当前输入 `x(t)`

$$h^{(t)} = f(h^{(t-1)}, x^{(t)}; \theta)$$

- 以上计算公式可展开为如下**计算图**（无输出单元）



- RNN 的**前向传播**公式

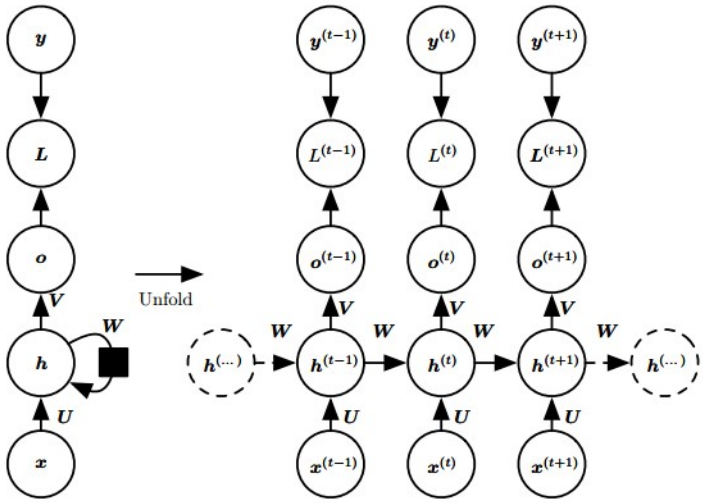
$$a^{(t)} = W \cdot [h^{(t-1)}; x^{(t)}] + b$$
$$h^{(t)} = f(a^{(t)})$$

> 一般 `h(0)` 会初始化为 0 向量；并使用 `tanh` 作为激活函数 `f`

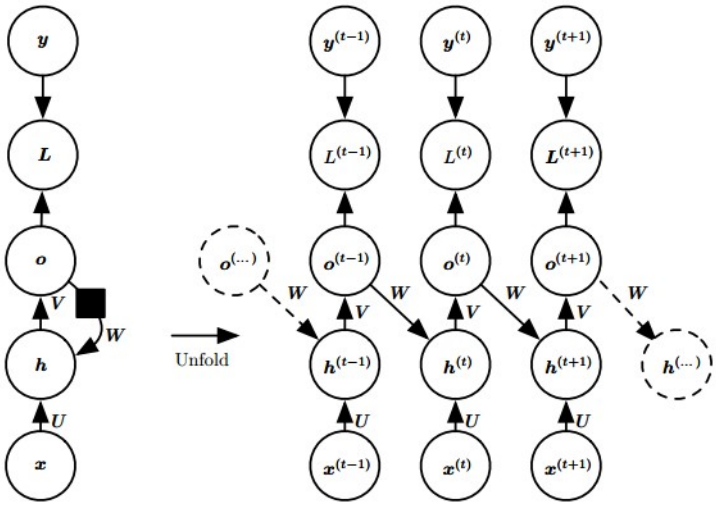
RNN 常见的几种设计模式（3）

RNN 一般包括以下几种设计模式

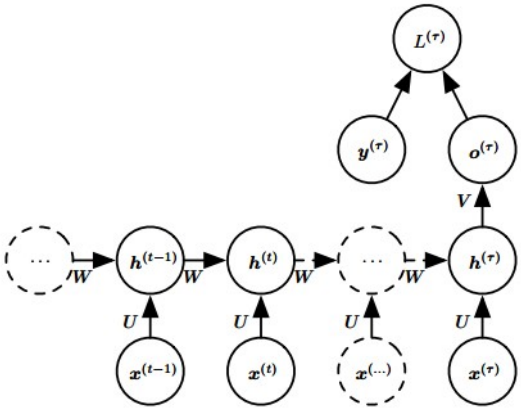
- **每个时间步都有输出，且隐藏单元之间有循环连接**
  - 即通常所说 RNN
  - 这种结构会在每个时间步产生一个输出，所以通常用于“Seq2Seq”任务中，比如序列标注、机器翻译等。这些任务通常都比较复杂。



- **每个时间步都有输出，但是隐藏单元之间没有循环连接，只有当前时刻的输出到下个时刻的隐藏单元之间有循环连接**
  - 这种模型的表示能力弱于第一种，但是它**更容易训练**
  - 因为每个时间步可以与其他时间步单独训练，从而实现**并行化**
  - 具体来说，就是使用 `y(t)` 代替 `o(t)` 输入下一个时间步。



- **隐藏单元之间有循环连接，但只有最后一个时间步有输出**
  - 忽略模式 1 中的中间输出，即可得到这种网络；
  - 这种网络一般用于**概括序列**。具体来说，就是产生**固定大小的表示**，用于下一步处理；
  - 在一些“Seq2One”中简单任务中，这种网络用的比较多；因为这些任务只需要关注序列的全局特征。



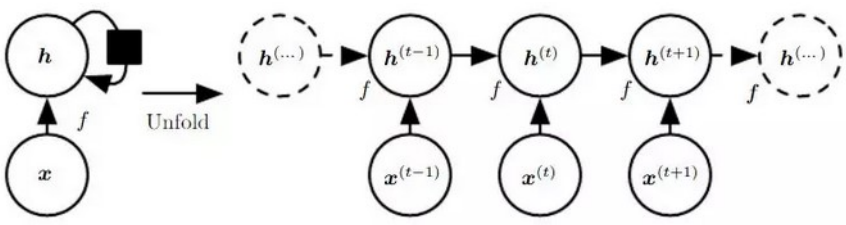
> 其中前两种 RNN 分别被称为 Elman network 和 Jordan network；通常所说的 RNN 指的是前者
>
> - Elman RNN
>
> $$h^{(t)} = \tanh\left(W_h x^{(t)} + U_h h^{(t-1)} + b_h\right)$$
> $$y^{(t)} = \mathrm{softmax}\left(W_y h^{(t)} + b_y\right)$$
>
> - Jordan RNN
>
> $$h^{(t)} = \tanh\left(W_h x^{(t)} + U_h y^{(t-1)} + b_h\right)$$
> $$y^{(t)} = \mathrm{softmax}\left(W_y h^{(t)} + b_y\right)$$
>
> Recurrent neural network - Wikipedia

RNN 的反向传播（BPTT） TODO

RNN 相关问题

RNN 相比前馈网络/CNN 有什么特点?

- **前馈网络/CNN 处理序列数据时存在的问题：**
  - 一般的**前馈网络**，通常接受一个**定长**向量作为输入，然后输出一个定长的表示；它需要一次性接收所有的输入，因而忽略了序列中的顺序信息；
  - CNN 在处理**变长序列**时，通过**滑动窗口+池化**的方式将输入转化为一个**定长的向量表示**，这样做可以捕捉到序列中的一些**局部特征**，但是很难学习到序列间的**长距离依赖**。
- RNN **处理时序数据时的优势：**
  - RNN 很适合处理序列数据，特别是带有**时序关系**的序列，比如文本数据；
  - RNN 把**每一个时间步**中的信息编码到**状态变量**中，使网络具有一定的记忆能力，从而更好的理解序列信息。
  - 由于 RNN 具有对序列中时序信息的刻画能力，因此在处理序列数据时往往能得到更准确的结果。
- **展开后的** RNN（**无输出**）



  - 一个长度为 `T` 的 RNN 展开后，可以看做是一个 **T 层的前馈网络**；同时每一层都可以有**新的输入**
  - 通过对当前输入 `x_t` 和上一层的隐状态 `h_{t-1}` 进行编码，**第 `t` 层的隐状态** `h_t` 记录了序列中前 `t` 个输入的信息。

> 普通的前馈网络就像火车的**一节车厢**，只有一个入口，一个出口；而 RNN 相当于**一列火车**，有多节车厢接收**当前时间步**的输入信息并输出**编码后的状态信息**（包括**当前的状态和之前的所有状态**）。

- **最后一层隐状态** `x_T` 编码了整个序列的信息，因此可以看作**整个序列的压缩表示。**
- 常见的文本分类任务中，将 `h_T` 通过一个 Softmax 层，即可获得作为每个类别的概率：

$$
\begin{aligned}
a_t &= Ux_t + Wh_{t-1} \\
h_t &= f(a_t) \\
y &= g(Vh_t)
\end{aligned}
$$

其中

- `U` 为输入层到隐藏层的权重矩阵
- `W` 为隐藏层从上一时刻到下一时刻的状态转移权重矩阵
- `f` 为隐藏层激活函数，通常可选 `tanh` 或 `ReLU`；
- `g` 为输出层激活函数，可以采用 `Softmax` 、 `Sigmoid` 或线性函数（回归任务）
- 通常 `h_{-1}` 初始化为 0 向量。

RNN 为什么会出现梯度消失/梯度爆炸?

- 最大步长为 `T` 的 RNN 展开后相当于一个**共享参数**的 T 层前馈网络
  - RNN 的前向传播过程

$$
\begin{aligned}
a_t &= Ux_t + Wh_{t-1} \\
h_t &= f(a_t)
\end{aligned}
$$

  - 展开前一层

$$
\begin{aligned}
a_t &= Ux_t + Wh_{t-1} \\
&= Ux_t + W \cdot f(Ux_{t-1} + Wh_{t-2})
\end{aligned}
$$

  - RNN 的梯度计算公式

$$
\frac{\partial a^{(t)}}{\partial a^{(1)}} = \frac{\partial a^{(t)}}{\partial a^{(t-1)}} \cdot \frac{\partial a^{(t-1)}}{\partial a^{(t-2)}} \cdots \frac{\partial a^{(2)}}{\partial a^{(1)}}
$$

其中

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial a^{(t)}}{\partial a^{(t-1)}} &= \frac{\partial a^{(t)}}{\partial h^{(t-1)}} \cdot \frac{\partial h^{(t-1)}}{\partial a^{(t-1)}} \\
&= W \cdot \mathrm{diag}[f'(a^{(t-1)})] \\
&= \begin{pmatrix}
w_{11} \cdot f'(a_1^{(t-1)}) & \cdots & w_{1n} \cdot f'(a_n^{(t-1)}) \\
\vdots & \ddots & \vdots \\
w_{n1} \cdot f'(a_1^{(t-1)}) & \cdots & w_{nn} \cdot f'(a_n^{(t-1)})
\end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

> 上标 `(t)` 表示时间步，下标 `n` 表示隐藏层的单元数（维度）； `diag()` 为对角矩阵

RNN 中能否使用 `ReLU` 作为激活函数?

> RNN中为什么要采用tanh而不是ReLu作为激活函数? - 知乎

- 答案是肯定的。但是会存在一些问题。
  > 其实 ReLU 最早就是为了解决 RNN 中的**梯度消失**问题而设计的。
- 假设使用 `ReLU` 并始终处于**激活状态**（ `a_{t-1} > 0` ），则 `f(x) = x` ，即

$$
\begin{aligned}
a_t &= Ux_t + W \cdot (Ux_{t-1} + Wh_{t-2}) \\
&= Ux_t + W \cdot Ux_{t-1} + W^2 h_{t-2}
\end{aligned}
$$

  - 按照以上的步骤继续展开，最终结果中将包含 `t` 个 `W` 连乘，如果 `W` 不是单位矩阵，最终结果将趋于 `0` 或无穷。
  - 因此，在 RNN 中使用 ReLU 应该注意使用**单位矩阵**来初始化权重矩阵。

> 为什么普通的前馈网络或 CNN 中不会出现这中现象?
>
> > 因为他们每一层的 `W` 不同，且在初始化时是独立同分布的，因此可以在一定程度相互抵消。即使多层之后一般也不会出现数值问题。

- **使用 `ReLU` 也不能完全避免 RNN 中的梯度消失/爆炸问题**，问题依然在于存在 `t` 个 `W` 的连乘项。
  - 注意**最后一步**，假设所有神经元都处于**激活状态**，当 `ReLU` 作为 `f` 时，有

$$\frac{\partial a^{(t)}}{\partial a^{(t-1)}} = W$$
$$\Rightarrow \quad \frac{\partial a^{(t)}}{\partial a^{(0)}} = W^t$$

  - 可见**只要 `W` 不是单位矩阵**，还是可能会出现梯度消失/爆炸。

如果使用 `ReLU` 作为 RNN 的激活函数，应该注意什么？

- 综上所述，RNN 因为每一个时间步都**共享参数**的缘故，容易出现**数值溢出问题**
- 因此，推荐的做法是将 `W` 初始化为**单位矩阵。**
- 有实践证明，使用单位矩阵初始化 `W` 并使用 `ReLU` 作为激活函数在一些应用中，与 LSTM 有相似的结果

> RNN中为什么要采用tanh而不是ReLu作为激活函数？ - chaopig 的回答 - 知乎

梯度爆炸的解决方法

- 梯度截断

梯度消失的解决方法（针对 RNN）

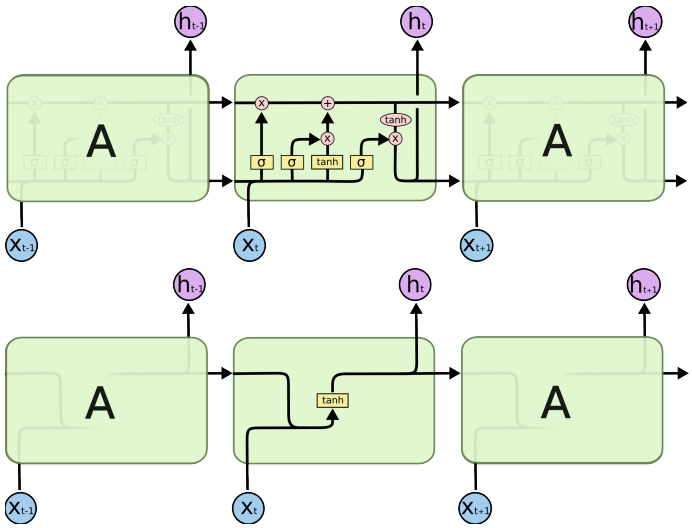
- 残差结构
- 门控机制（LSTM、GRU）

LSTM 相关问题

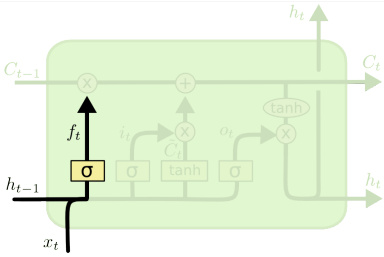
> Understanding LSTM Networks - colah's blog

LSTM 的内部结构

- LSTM 在传统 RNN 的基础上加入了**门控机制**来限制**信息的流动。**
- LSTM （上）与传统 RNN（下） 的内部结构对比

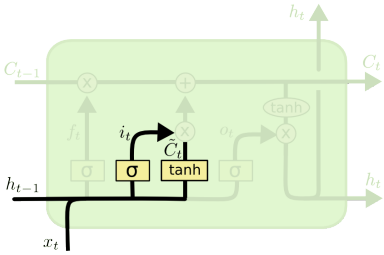


- 具体来说，LSTM 中加入了三个“门”：**遗忘门** `f` 、**输入门** `i` 、**输出门** `o` ，以及一个内部记忆状态 `c`
  - “**遗忘门** `f` ”控制前一步记忆状态中的信息有多大程度被遗忘；



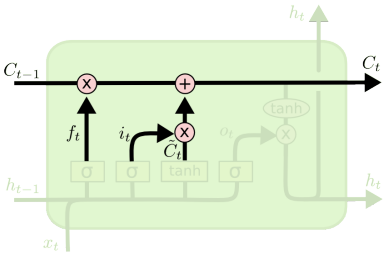
$$f_t = \sigma\left(W_f \cdot [h_{t-1}, x_t] \ + \ b_f\right)$$

- “**输入门 `i`**”控制当前计算的新状态以多大的程度更新到**记忆状态**中；



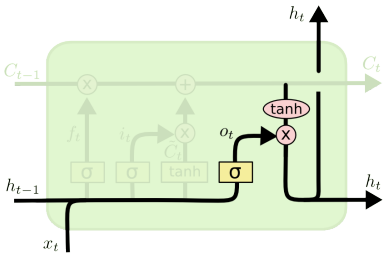
$$i_t = \sigma\left(W_i \cdot [h_{t-1}, x_t] \ + \ b_i\right)$$
$$\tilde{C}_t = \tanh(W_C \cdot [h_{t-1}, x_t] \ + \ b_C)$$

- “**记忆状态 `c`**”间的**状态转移**由输入门和遗忘门共同决定



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

- “**输出门 `o`**”控制当前的输出有多大程度取决于当前的记忆状态



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

完整的 LSTM 前向传播公式

$$f_t = \sigma(W_f \cdot [h_{t-1}; x_t] + b_f)$$
$$i_t = \sigma(W_i \cdot [h_{t-1}; x_t] + b_i)$$
$$\tilde{C}_t = \tanh(W_C \cdot [h_{t-1}; x_t] + b_C)$$
$$C_t = f_t \circ C_{t-1} + i_t \circ \tilde{C}_t$$
$$o_t = \sigma(W_o \cdot [h_{t-1}; x_t] + b_o)$$
$$h_t = o_t \circ \tanh(C_t)$$

> 其中运算符 `o` （`\circ`） 表示向量中的元素**按位相乘**；有的地方也使用符号 ⊙ （`\odot`）表示

LSTM 是如何实现长短期记忆的？（遗忘门和输入门的作用）

- LSTM 主要通过**遗忘门**和**输入门**来实现长短期记忆。
  - 如果当前时间点的状态中没有重要信息，遗忘门 `f` 中各分量的值将接近 1（`f -> 1`）；输入门 `i` 中各分量的值将接近 0（`i -> 0`）；此时过去的记忆将会被保存，从而实现**长期记忆**；
  - 如果当前时间点的状态中出现了重要信息，且之前的记忆不再重要，则 `f -> 0`， `i -> 1`；此时过去的记忆被遗忘，新的重要信息被保存，从而实现**短期记忆**；
  - 如果当前时间点的状态中出现了重要信息，但旧的记忆也很重要，则 `f -> 1`， `i -> 1`。

LSTM 里各部分使用了不同的激活函数，为什么？可以使用其他激活函数吗？

- 在 LSTM 中，所有**控制门**都使用 sigmoid 作为激活函数（遗忘门、输入门、输出门）；
- 在计算**候选记忆**或**隐藏状态**时，使用双曲正切函数 tanh 作为激活函数

sigmoid 的"饱和"性

- 所谓饱和性，即输入超过一定范围后，输出几乎不再发生明显变化了
- sigmoid 的值域为 `(0, 1)`，符合**门控**的定义：
  - 当输入较大或较小时，其输出会接近 1 或 0，从而保证门的开或关；
  - 如果使用非饱和的激活函数，将难以实现**门控/开关**的效果。
- sigmoid 是现代**门控单元**中的共同选择。

为什么使用 tanh?

- 使用 tanh 作为计算状态时的激活函数，主要是因为其**值域**为 `(-1, 1)`：
  - 一方面，这与多数场景下特征分布以 0 为中心相吻合；
  - 另一方面，可以避免在前向传播的时候发生**数值问题**（主要是上溢）
- 此外，tanh 比 sigmoid 在 0 附近有更大的梯度，通常会使模型收敛更快。

> 早期，使用 `h(x) = 2*sigmoid(x) - 1` 作为激活函数，该激活函数的值域也是 `(-1, 1)`

Hard gate

- 在一些对计算能力有限制的设备中，可能会使用 hard gate
- 因为 sigmoid 求指数时需要一定的计算量，此时会使用 0/1 门（hard gate）让门控输出 0 或 1 的离散值。

窥孔机制

> Gers F A, Schmidhuber J. Recurrent nets that time and count[C]. 2000.

- LSTM 通常使用输入 `x_t` 和上一步的隐状态 `h_{t-1}` 参与门控计算；

$$g = (W \cdot [x_t; h_{t-1}] + b)$$

- **窥孔机制**指让记忆状态也参与门控的计算中

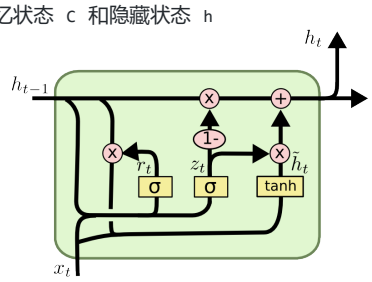
$$g = (W \cdot [x_t; h_{t-1}; c_{t-1}] + b)$$

GRU 与 LSTM 的关系

- GRU 认为 LSTM 中的**遗忘门**和**输入门**的功能有一定的重合，于是将其合并为一个**更新门。**

> 其实，早期的 LSTM 中本来就是没有**遗忘门**的 [1]，因为研究发现加入遗忘门能提升性能 [2]，从而演变为如今的 LSTM.
>
> > [1] Hochreiter S, Schmidhuber J. Long short-term memory[J]. 1997.
> > [2] Gers F A, Schmidhuber J, Cummins F. Learning to forget: Continual prediction with LSTM[J]. 1999.

- GRU 相比 LSTM 的**改动**：
  - GRU 把遗忘门和输入门合并为**更新门（update）** `z`，并使用**重置门（reset）** `r` 代替输出门；
  - **合并**了记忆状态 `c` 和隐藏状态 `h`



$$z_t = \sigma\left(W_z \cdot [h_{t-1}, x_t]\right)$$
$$r_t = \sigma\left(W_r \cdot [h_{t-1}, x_t]\right)$$
$$\tilde{h}_t = \tanh\left(W \cdot [r_t * h_{t-1}, x_t]\right)$$
$$h_t = (1 - z_t) * h_{t-1} + z_t * \tilde{h}_t$$

其中

- **更新门** `z` 用于控制前一时刻的状态信息被**融合**到当前状态中的程度
- **重置门** `r` 用于控制忽略前一时刻的状态信息的程度

完整的 GRU 前向传播公式

$$
\begin{aligned}
z_t &= \sigma(W_z \cdot [h_{t-1}; x_t]) \\
r_t &= \sigma(W_r \cdot [h_{t-1}; x_t]) \\
\tilde{h}_t &= \tanh(W_h \cdot [r_t \odot h_{t-1}; x_t]) \\
h_t &= (1 - z_t) \odot h_{t-1} + z_t \odot \tilde{h}_t
\end{aligned}
$$

> 遵从原文表示，没有加入偏置