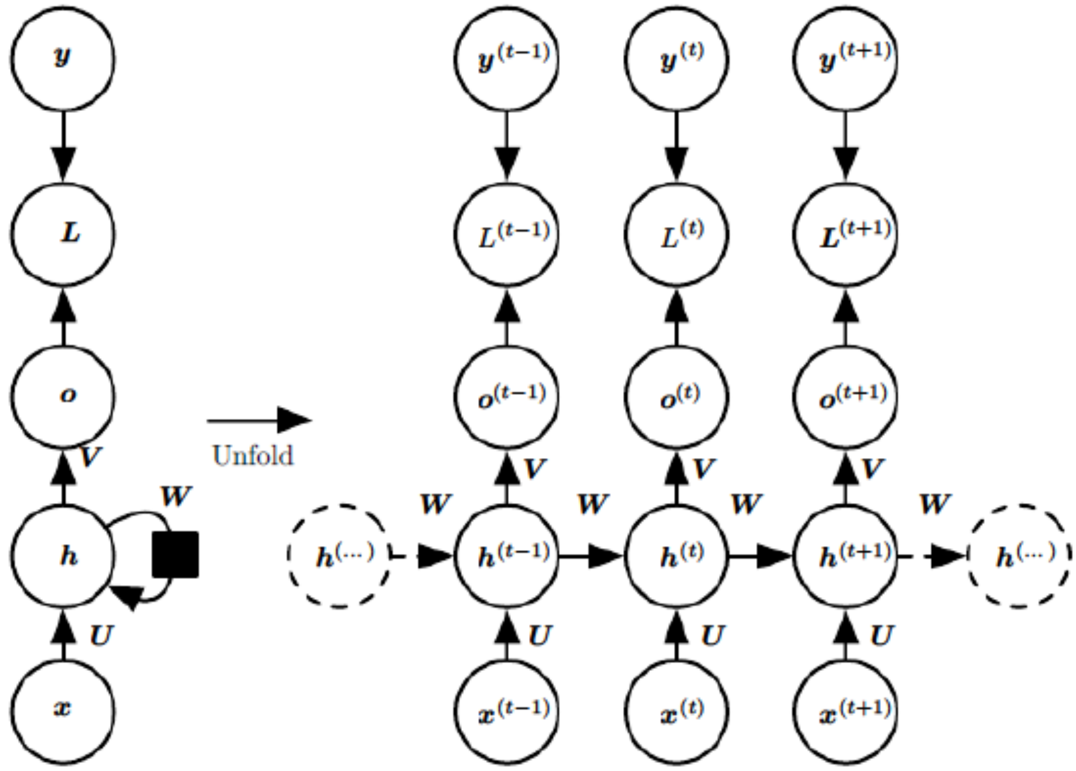
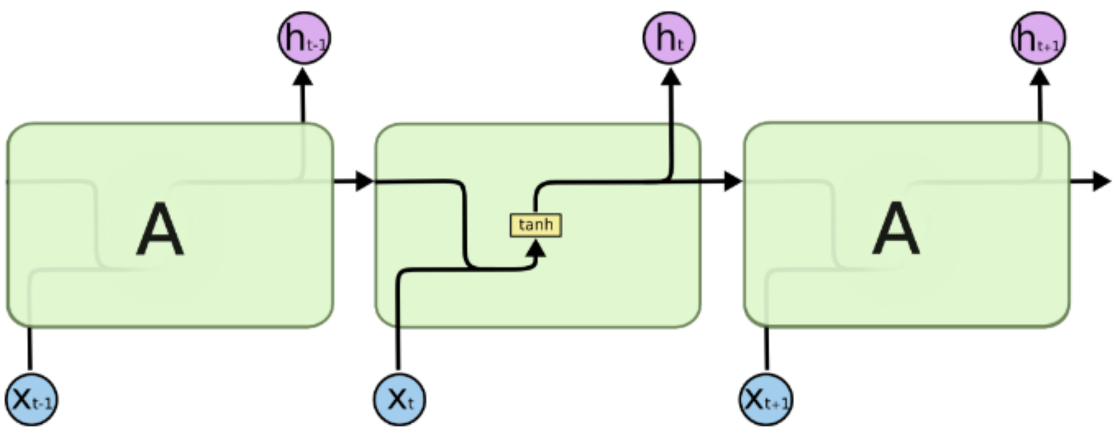
上篇文章我们已经学习了循环神经网络的原理，并指出RNN存在严重的梯度爆炸和梯度消失问题，因此很难处理长序列的数据。本篇文章，我们将学习长短期记忆网络(**LSTM,Long Short Term Memory**)，看LSTM解决RNN所带来的梯度消失和梯度爆炸问题。

1.从RNN到LSTM

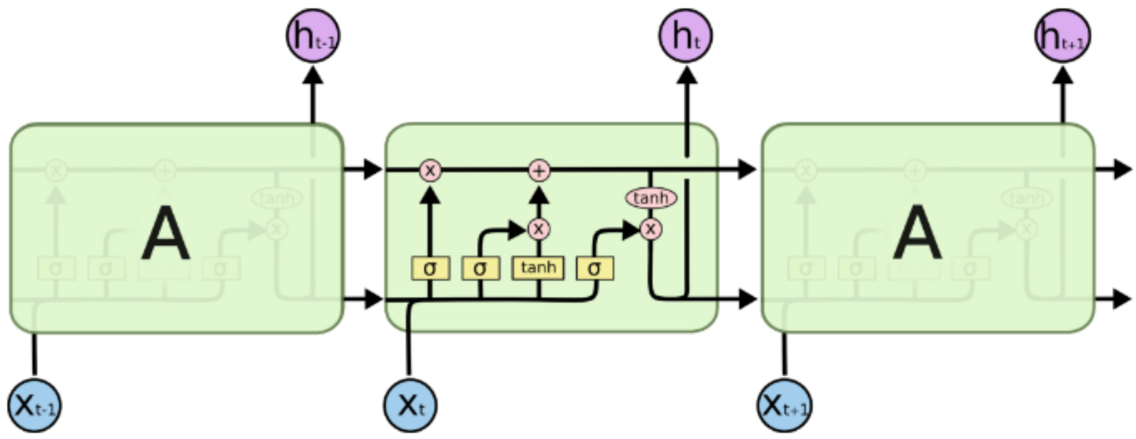
RNN模型具有如下所示的结构，其中每个索引位置t都有一个隐藏状态$h^{(t)}$。



如果省略每层的$o^{(t)}, L^{(t)}, y^{(t)}$，则RNN模型可以简化到如下所示的结构。其中隐藏状态的$h^{(t)}$由$x^{(t)}$和$h^{(t-1)}$得到，得到$h^{(t)}$后可用于计算当前层的模型损失和下一层的$h^{(t+1)}$。

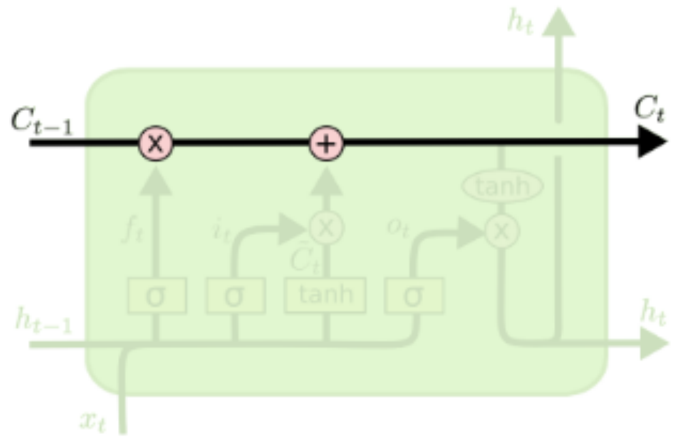


为解决梯度消失的问题，大牛们针对RNN序列索引位置**t**的隐藏结构作出相应改进，进而提出LSTM模型。其中LSTM模型有多种形式，下面我们以最常见的LSTM模型为例进行讲解。



2.LSTM模型结构

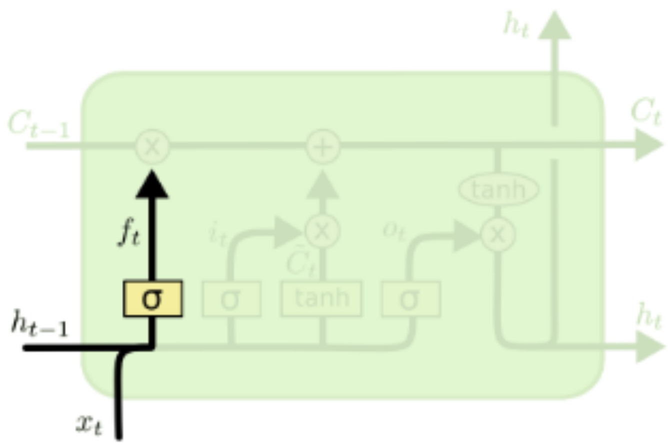
LSTM模型除了和RNN模型具有相同的隐藏状态$h^{(t)}$外，还增加了新的隐藏状态$C^{(t)}$，如下图中横线所示。新增加的隐藏状态称为**细胞状态(Cell State)**，记为$C^{(t)}$。



除了细胞状态外，LSTM中还多了很多奇怪的结构，称之为门控结构(Gate)。针对每个序列索引位置**t**，门控结构一般包含遗忘门、输入门和输出门，下面来看看门控结构和细胞状态的结构。

2.1 LSTM之遗忘门

遗忘门(forget gate)是以一定的概率控制是否遗忘上一层的隐藏细胞状态，遗忘门的结构如下所示。

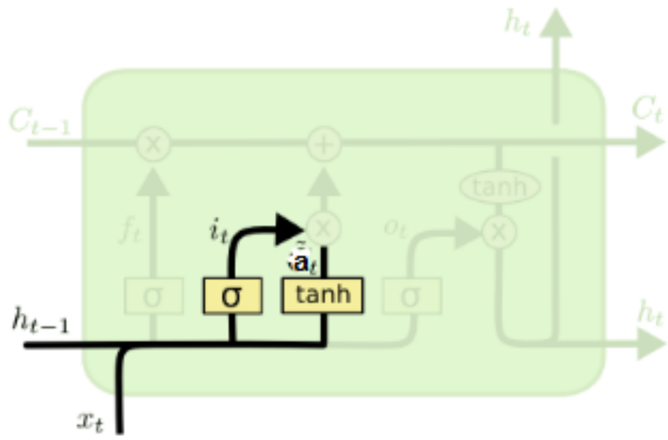


输入是上一序列的隐藏状态$h^{(t-1)}$和本序列数据$x^{(t)}$，通过一个激活函数(一般是sigmoid)，得到遗忘门的输出$f^{(t)}$。由于sigmoid的输出$f^{(t)}$在[0,1]之间，因此这里的$f^{(t)}$代表遗忘上一层隐藏细胞状态的概率，数学表达式如下所示。其中W_f, U_f, b_f为线性关系的系数和偏倚，σ为sigmoid激活函数。

$$f^{(t)} = \sigma(W_f h^{(t-1)} + U_f x^{(t)} + b_f)$$

2.2 LSTM之输入门

输入门(input gate)负责处理当前序列位置的输入，输入门的结构如下所示。



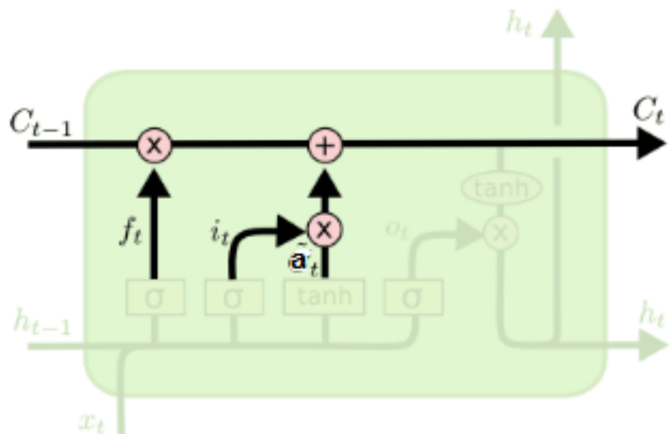
输入门由两部分组成，第一部分使用sigmoid激活函数，输出为$i^{(t)}$，第二部分使用tanh激活函数，输出为$a^{(t)}$，两者的结果后面会用于相乘后更新细胞状态。$i^{(t)}$和$a^{(t)}$数学表达式如下所示，其中$W_i, U_i, b_i, W_a, U_a, b_a$为线性关系的系数和偏倚，$\sigma$为sigmoid激活函数。

$$i^{(t)} = \sigma(W_i h^{(t-1)} + U_i x^{(t)} + b_i)$$

$$a^{(t)} = \tanh(W_a h^{(t-1)} + U_a x^{(t)} + b_a)$$

2.3 LSTM之细胞状态更新

研究LSTM输出门之前，我们先看一下LSTM细胞状态的更新，其中遗忘门和输入门的结果都作用于细胞状态$C^{(t)}$。

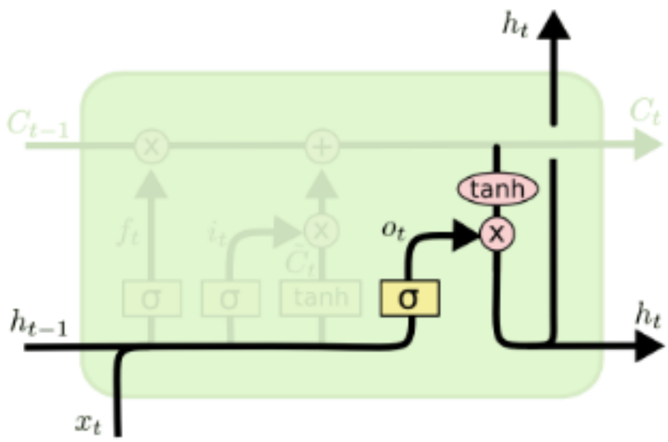


细胞状态$C^{(t)}$由两部分组成，第一部分是$C^{(t-1)}$和遗忘门输出$f^{(x)}$的乘积，第二部分是输入门的$i^{(t)}$和$a^{(t)}$的乘积，公式如下所示，其中$\odot$为Hadamard积。

$$C^{(t)} = C^{(t-1)} \odot f^{(t)} + i^{(t)} \odot a^{(t)}$$

2.4 LSTM之输出门

有了新的隐藏细胞状态$C^{(t)}$，便可以来看输出门，其结构如下所示。



隐藏状态$h^{(t)}$的细胞状态由两部分组成，第一部分$o^{(t)}$由上一序列的隐藏状态$h^{(t-1)}$和本序列数据$x^{(t)}$，以及激活函数Sigmoid组成。第二部分由隐藏状态$C^{(t)}$和tanh激活函数组成，公式如下所示

$$o^{(t)} = \sigma(W_o h^{(t-1)} + U_o x^{(t)} + b_o)$$

$$h^{(t)} = o^{(t)} \odot tanh(C^t)$$

3.LSTM之前向传播算法

通过上面的介绍，已经能够得到LSTM前向传播算法主要包括更新遗忘门输出、更新输入门、更新细胞状态、更新输出门、更新当前序列索引预测输出，各传播过程如下所示。

- 更新遗忘门输出

$$f^{(t)} = \sigma(W_f h^{(t-1)} + U_f x^{(t)} + b_f)$$

- 更新输入门两部分输出

$$i^{(t)} = \sigma(W_i h^{(t-1)} + U_i x^{(t)} + b_i)$$

$$a^{(t)} = tanh(W_a h^{(t-1)} + U_a x^{(t)} + b_a)$$

- 更新细胞状态

$$C^{(t)} = C^{(t-1)} \odot f^{(t)} + i^{(t)} \odot a^{(t)}$$

- 更新输出门输出

$$o^{(t)} = \sigma(W_o h^{(t-1)} + U_o x^{(t)} + b_o)$$

$$h^{(t)} = o^{(t)} \odot tanh(C^{(t)})$$

- 更新当前序列索引预测输出

$$\hat{y}^{(t)} = \sigma(Vh^{(t)} + c)$$

4.LSTM之反向传播算法

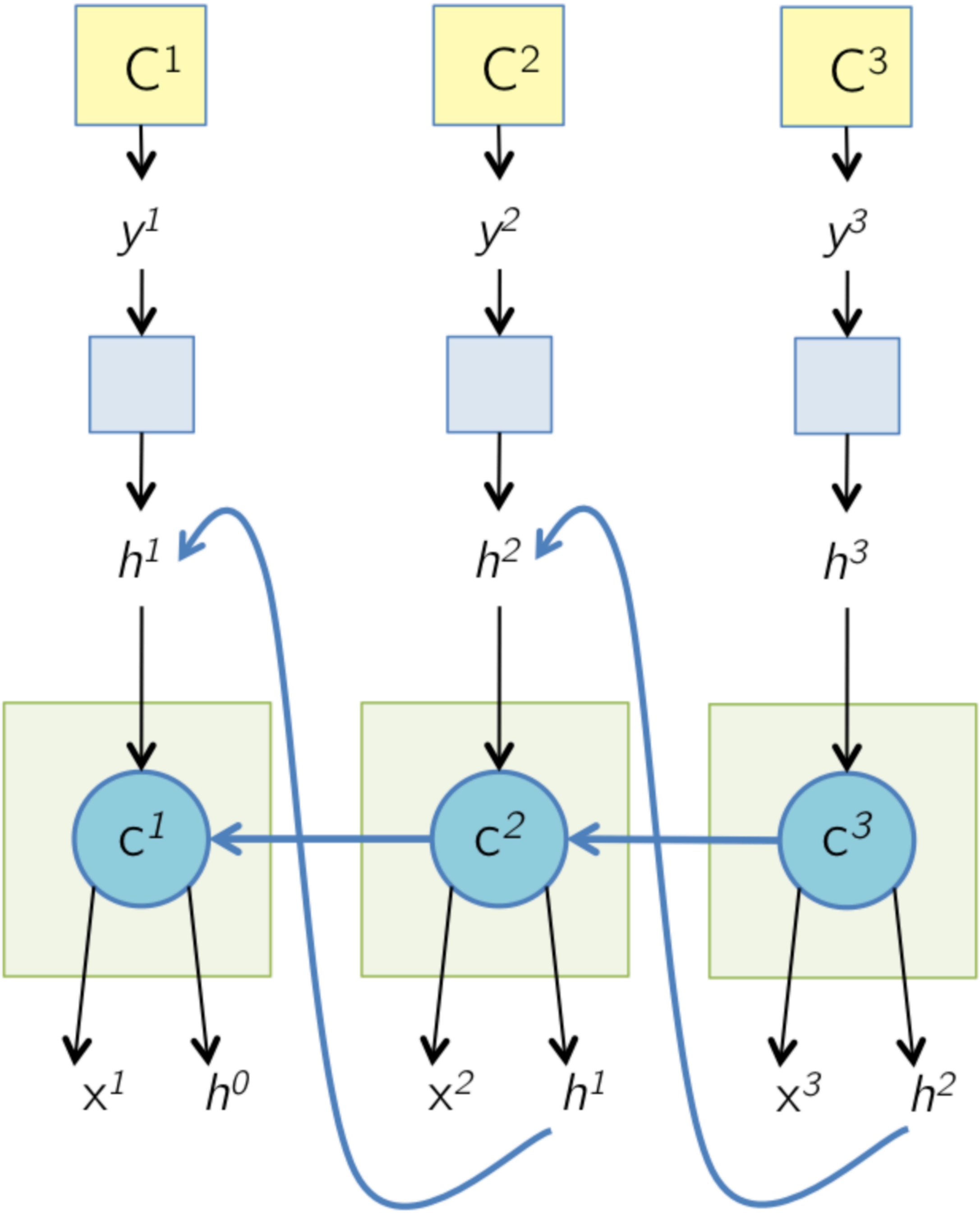
了解前向传播算法流程之后，对于反向传播算法就非常简单了。我们采用和RNN相同的反向传播算法思路，即通过梯度下降法迭代更新所有的参数。

RNN之中，我们通过隐藏状态$h^{(t)}$和梯度$\delta^{(t)}$来反向传播误差。在LSTM中，我们有两个隐藏状态，即$h^{(t)}$和$C^{(t)}$

$$\delta_h^{(t)} = \frac{\partial L}{\partial h^{(t)}}$$

$$\delta_C^{(t)} = \frac{\partial L}{\partial C^{(t)}}$$

反向传播时，只有$\delta_C^{(t)}$在反向传播，$\delta_h^{(t)}$帮助在当前层计算，如下图所示。



现在我们便来推导反向传播公式，首先是在最后索引位置τ的$\delta_h^{(\tau)}$和$\delta_C^{(\tau)}$

$$\delta_h^{(\tau)} = \frac{\partial L}{\partial O^{(\tau)}} \frac{\partial O^{(\tau)}}{\partial h^{(\tau)}} = V^T(\hat{y}^{(\tau)} - y^{(\tau)})$$

$$\delta_C^{(\tau)} = \frac{\partial L}{\partial h^{(\tau)}} \frac{\partial h^{(\tau)}}{\partial C^{(\tau)}} = \delta_h^{(\tau)} \odot o^{(\tau)} \odot (1 - tanh^2(C^{(\tau)}))$$

接着由$\delta_C^{(t+1)}$反向推导$\delta_C^{(t)}$，其中$\delta_h^{(t)}$的梯度由本层的输出梯度误差决定，即

$$\delta_h^{(t)} = \frac{\partial L}{\partial h^{(t)}} = V^T(\hat{y}^{(\tau)} - y^{(\tau)})$$

而$\delta_C^{(t)}$的反向梯度由上一层$\delta_C^{(t+1)}$的梯度误差和本层从$h^{(t)}$传回来的梯度误差两部分决定，即

$$\delta_C^{(t)} = \frac{\partial L}{\partial C^{(t+1)}} \frac{\partial C^{(t+1)}}{\partial C^{(t)}} + \frac{\partial L}{\partial h^{(t)}} \frac{\partial h^{(t)}}{\partial C^{(t)}} = \delta_C^{(t+1)} \odot f^{(t+1)} + \delta_h^{(t)} \odot o^{(t)} \odot (1 - tanh^2(C^{(t)}))$$

有了$\delta_h^{(t)}$和$\delta_C^{(t)}$之后，计算$W_f, U_f, b_f, W_a, U_a, b_a, W_i, U_i, b_i, W_o, U_o, b_o, V, c$的梯度也就相对很容易了，比如$W_f$为

$$\frac{\partial L}{\partial W_f} = \sum_{t=1}^{\tau} \frac{\partial L}{\partial C^{(t)}} \frac{\partial C^{(t)}}{\partial f^{(t)}} \frac{\partial f^{(t)}}{\partial W_f} = \sum_{t=1}^{\tau} \delta_C^{(t)} \odot C^{(t-1)} \odot f^{(t)} \odot (1 - f^{(t)})(h^{(t-1)})^T$$

5.LSTM怎么解决梯度消失和梯度爆炸

RNN反向传播过程中我们得到如下公式。因为$\tanh' \leq 1$，对于训练过程中大部分情况tanh的导数是小于1的，如果W也是大于0小于1的值，那么传播下去便会趋于0，同理当W很大时，传播下去便会趋于无穷。因此便会出现梯度消失和梯度爆炸的问题。

$$\frac{\partial h^{(t+1)}}{\partial h^{(t)}} = diag(1 - (h^{(t+1)})^2)W^T$$

LSTM能够很好的解决梯度消失和梯度爆炸问题，但怎么解决的呢。我们来看看反向传播过程中W_f的变化

$$\begin{aligned}\frac{\partial L}{\partial W_f} &= \sum_{t=1}^{\tau} \frac{\partial L}{\partial C^{(t)}} \frac{\partial C^{(t)}}{\partial f^{(t)}} \frac{\partial f^{(t)}}{\partial W_f} = \sum_{t=1}^{\tau} \frac{\partial L}{\partial C^{(t+1)}} \frac{\partial C^{(t+1)}}{\partial C^{(t)}} \frac{\partial C^{(t)}}{\partial f^{(t)}} \frac{\partial f^{(t)}}{\partial W_f} \\ &= \sum_{t=1}^{\tau} (\frac{\partial C^{(t+1)}}{\partial C^{(t)}}) \delta_C^{(t+1)} \odot C^{(t-1)} \odot f^{(t)} \odot (1 - f^{(t)})(h^{(t-1)})^T\end{aligned}$$

因为$C^{(t)} = C^{(t-1)} \odot f^{(t)} + i^{(t)} \odot a^{(t)}$，所以$\frac{\partial C^{(t+1)}}{\partial C^{(t)}}$为

$$\frac{\partial C^{(t+1)}}{\partial C^{(t)}} = (f^{(t+1)} + \dots)$$

公式里其余项不重要，这里用省略号代替。可以看出当$f^{(t+1)} = 1$时，就算其余项很小，梯度仍然可以很好地传导到上一个时刻，即使层数较深也不会发生梯度下降的问题。当$f^{(t+1)} = 0$时，上一时刻的信号不影响到当前时刻，则此项也会为0，$f^{(t)}$在这里控制着梯度传导到上一时刻的衰减程度。

5.LSTM总结

LSTM虽然复杂，但能够很好的解决梯度消失和梯度爆炸的问题，只要我们理清各部分之间的关系，进而理解前向和反向传播算法还是不难的。针对RNN和LSTM之中的梯度消失和梯度爆炸的描述，如果有相应错误，欢迎指出。

6.推广

更多内容请关注公众号**谓之小一**，若有疑问可在公众号后台提问，随时回答，欢迎关注，内容转载请注明出处。

「谓之小一」希望提供给读者别处看不到的内容，关于互联网、数据挖掘、机器学习、书籍、生活……

- 知乎：@谓之小一
- 公众号：@谓之小一
- GitHub：@weizhixiaoyi
- 技术博客：https://weizhixiaoyi.com

谓之小一

长按关注微信公众号