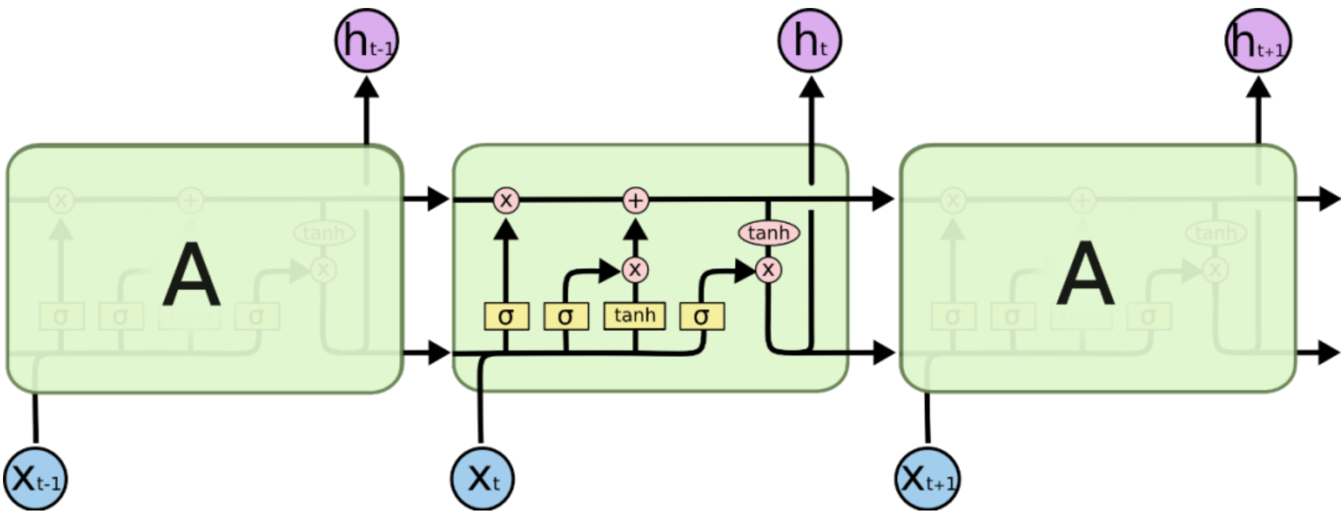
也来谈谈RNN的梯度消失/爆炸问题

原创 苏剑林 PaperWeekly 2020-11-30

©PaperWeekly 原创 · 作者 | 苏剑林
单位 | 追一科技
研究方向 | NLP、神经网络

尽管 Transformer 类的模型已经攻占了 NLP 的多数领域，但诸如 LSTM、GRU 之类的 RNN 模型依然在某些场景下有它的独特价值，所以 RNN 依然是值得我们好好学习的模型。而于 RNN 梯度的相关分析，则是一个从优化角度思考分析模型的优秀例子，值得大家仔细琢磨理解。君不见，诸如“LSTM 为什么能解决梯度消失/爆炸”等问题依然是目前流行的面试题之一。



▲经典的LSTM

关于此类问题，已有不少网友做出过回答，然而笔者查找了一些文章（包括知乎上的部分回答、专栏以及经典的英文博客），发现没有找到比较好的答案：有些推导记号本身就混乱不

堪，有些论述过程没有突出重点，整体而言感觉不够清晰自洽。为此，笔者也尝试给出自己的理解，供大家参考。

01

RNN及其梯度

RNN 的统一定义为：

$$h_t = f(x_t, h_{t-1}; \theta) \qquad (1)$$

其中 h_t 是每一步的输出，它由当前输入 x_t 和前一时刻输出 h_{t-1} 共同决定，而 θ 则是可训练参数。在做最基本的分析时，我们可以假设 h_t, x_t, θ 都是一维的，这可以让我们获得最直观的理解，并且其结果对高维情形仍有参考价值。之所以要考虑梯度，是因为我们目前主流的优化器还是梯度下降及其变种，因此要求我们定义的模型有一个比较合理的梯度。我们可以求得：

$$\frac{dh_t}{d\theta} = \frac{\partial h_t}{\partial h_{t-1}} \frac{dh_{t-1}}{d\theta} + \frac{\partial h_t}{\partial \theta} \qquad (2)$$

可以看到，其实 RNN 的梯度也是一个 RNN，当前时刻梯度 $\frac{dh_t}{d\theta}$ 是前一时刻梯度 $\frac{dh_{t-1}}{d\theta}$ 与当前运算梯度 $\frac{\partial h_t}{\partial \theta}$ 的函数。同时，从上式我们就可以看出，其实梯度消失或者梯度爆炸现象几乎是必然存在的：

当 $\left|\frac{\partial h_t}{\partial h_{t-1}}\right| < 1$ 时，意味着历史的梯度信息是衰减的，因此步数多了梯度必然消失（好比 $\lim\limits_{n\to\infty} 0.9^n \to 0$ ）；当 $\left|\frac{\partial h_t}{\partial h_{t-1}}\right| > 1$，因为这历史的梯度信息逐步增强，因此步数多了梯度必然爆炸（好比 $\lim\limits_{n\to\infty} 1.1^n \to \infty$ ）。总不可能一直 $\left|\frac{\partial h_t}{\partial h_{t-1}}\right| = 1$ 吧？当然，也有可能有些时刻大于 1，有些时刻小于 1，最终稳定在 1 附近，但这样概率很小，需要很精巧地设计模型才行。

所以步数多了，**梯度消失或爆炸几乎都是不可避免的，我们只能对于有限的步数去缓解这个问题。**

02

消失还是爆炸？

说到这里，我们还没说清楚一个问题：什么是 RNN 的梯度消失/爆炸？梯度爆炸好理解，就是梯度数值发散，甚至慢慢就 NaN 了；那梯度消失就是梯度变成零吗？并不是，我们刚刚说梯度消失是 $\left|\frac{\partial h_t}{\partial h_{t-1}}\right|$ 一直小于 1，历史梯度不断衰减，但不意味着总的梯度就为 0 了，具体来说，一直迭代下去，我们有：

$$\begin{aligned}\frac{dh_t}{d\theta} &= \frac{\partial h_t}{\partial h_{t-1}}\frac{dh_{t-1}}{d\theta} + \frac{\partial h_t}{\partial \theta} \\ &= \frac{\partial h_t}{\partial \theta} + \frac{\partial h_t}{\partial h_{t-1}}\frac{\partial h_{t-1}}{\partial \theta} + \frac{\partial h_t}{\partial h_{t-1}}\frac{\partial h_{t-1}}{\partial h_{t-2}}\frac{\partial h_{t-2}}{\partial \theta} + \dots\end{aligned} \tag{3}$$

显然，其实只要 $\frac{\partial h_t}{\partial \theta}$ 不为 0，那么总梯度为 0 的概率其实是很小的；但是一直迭代下去的话，那么 $\frac{\partial h_1}{\partial \theta}$ 这一项前面的稀疏就是 t-1 项的连乘 $\frac{\partial h_t}{\partial h_{t-1}}\frac{\partial h_{t-1}}{\partial h_{t-2}}\cdots\frac{\partial h_2}{\partial h_1}$，如果它们的绝对值都小于 1，那么结果就会趋于 0，这样一来，$\frac{dh_t}{d\theta}$ 几乎就没有包含最初的梯度 $\frac{\partial h_1}{\partial \theta}$ 的信息了。

这才是 RNN 中梯度消失的含义：**距离当前时间步越长，那么其反馈的梯度信号越不显著，最后可能完全没有起作用，这就意味着 RNN 对长距离语义的捕捉能力失效了。**

说白了，你优化过程都跟长距离的反馈没关系，怎么能保证学习出来的模型能有效捕捉长距离呢？

03

几个数学公式

上面的文字都是一般性的分析，接下来我们具体 RNN 具体分析。不过在此之前，我们需要回顾几条数学公式，后面的推导中我们将多次运用到这几条公式：

$$\begin{aligned}&\tanh x = 2\sigma(2x) - 1\\&\sigma(x) = \frac{1}{2}\left(\tanh\frac{x}{2} + 1\right)\\&(\tanh x)' = 1 - \tanh^2 x\\&\sigma'(x) = \sigma(x)(1 - \sigma(x))\end{aligned} \qquad (4)$$

其中 $\sigma(x) = 1/(1+e^{-x})$ 是 sigmoid 函数。这几条公式其实就是说了这么一件事：$\tanh x$ **和** $\sigma(x)$ **基本上是等价的，它们的导数均可以用它们自身来表示。**

04

简单RNN分析

首先登场的是比较原始的简单 RNN（有时候我们确实直接称它为 SimpleRNN），它的公式为：

$$h_t = \tanh(Wx_t + Uh_{t-1} + b) \qquad (5)$$

其中 W,U,b 是待优化参数。看到这里很自然就能提出第一个疑问：为什么激活函数用 $\tanh$ 而不是更流行的 relu？这是个好问题，我们很快就会回答它。

从上面的讨论中我们已经知道，梯度消失还是爆炸主要取决于 $\left|\frac{\partial h_t}{\partial h_{t-1}}\right|$，所以我们计算：

$$\frac{\partial h_t}{\partial h_{t-1}} = (1 - h_t^2)U \qquad (6)$$

由于我们无法确定 U 的范围，因此 $\left|\frac{\partial h_t}{\partial h_{t-1}}\right|$ 可能小于 1 也可能大于 1，梯度消失/爆炸的风险是存在的。但有意思的是，如果 |U| 很大，那么相应地 h_t 就会很接近 1 或 -1，这样 $(1-h_t^2)U$

反而会小，事实上可以严格证明：如果固定 $h_{t-1} \neq 0$，那么 $(1-h_t^2)U$ 作为 U 的函数是有界的，也就是说不管 U 等于什么，它都不超过一个固定的常数。

这样一来，我们就能回答为什么激活函数要用 $\tanh$ 了，因为激活函数用 $\tanh$ 后，对应的梯度 $\frac{\partial h_t}{\partial h_{t-1}}$ 是有界的，虽然这个界未必是 1，但一个有界的量不超过 1 的概率总高于无界的量，因此梯度爆炸的风险更低。相比之下，如果用 relu 激活的话，它在正半轴的导数恒为 1，此时 $\frac{\partial h_t}{\partial h_{t-1}} = U$ 是无界的，梯度爆炸风险更高。

所以，**RNN 用 $\tanh$ 而不是 relu 的主要目的就是缓解梯度爆炸风险**。当然，这个缓解是相对的，用了 $\tanh$ 依然有爆炸的可能性。事实上，**处理梯度爆炸的最根本方法是参数裁剪或梯度裁剪**，说白了，就是我人为地把 U 给裁剪到 [-1,1] 内，那不就可以保证梯度不爆了吗？

当然，又有读者会问，既然裁剪可以解决问题，那么是不是可以用 relu 了？确实是这样子，配合良好的初始化方法和参数/梯度裁剪方案，relu 版的 RNN 也可以训练好，但是我们还是愿意用 $\tanh$，这还是因为它对应的 $\frac{\partial h_t}{\partial h_{t-1}}$ 有界，要裁剪也不用裁剪得太厉害，模型的拟合能力可能会更好。

05

LSTM的结果

当然，裁剪的方式虽然也能 work，但终究是无奈之举，况且裁剪也只能解决梯度爆炸问题，解决不了梯度消失，如果能从模型设计上解决这个问题，那么自然是最好的。传说中的 LSTM 就是这样的一种设计，真相是否如此？我们马上来分析一下。

LSTM 的更新公式比较复杂，它是：

$$\begin{aligned} f_t &= \sigma(W_f x_t + U_f h_{t-1} + b_f) \\ i_t &= \sigma(W_i x_t + U_i h_{t-1} + b_i) \\ o_t &= \sigma(W_o x_t + U_o h_{t-1} + b_o) \\ \hat{c}_t &= \tanh(W_c x_t + U_c h_{t-1} + b_c) \\ c_t &= f_t \circ c_{t-1} + i_t \circ \hat{c}_t \\ h_t &= o_t \circ \tanh(c_t) \end{aligned} \tag{7}$$

我们可以像上面一样计算 $\frac{\partial h_t}{\partial h_{t-1}}$，但从 $h_t = o_t \circ \tanh(c_t)$ 可以看出分析 c_t 就等价于分析 h_t，而计算 $\frac{\partial c_t}{\partial c_{t-1}}$ 显得更加简单一些，因此我们往这个方向走。

同样地，我们先只关心 1 维的情形，这时候根据求导公式，我们有：

$$\frac{\partial c_t}{\partial c_{t-1}} = f_t + c_{t-1}\frac{\partial f_t}{\partial c_{t-1}} + \hat{c}_t\frac{\partial i_t}{\partial c_{t-1}} + i_t\frac{\partial \hat{c}_t}{\partial c_{t-1}} \tag{8}$$

右端第一项 f_t，也就是我们所说的“遗忘门”，从下面的论述我们可以知道一般情况下其余三项都是次要项，因此 f_t 是“主项”，由于 f_t 在 0 ~ 1 之间，因此就意味着梯度爆炸的风险将会很小，至于会不会梯度消失，取决于 f_t 是否接近于 1。

但非常碰巧的是，这里有个相当自洽的结论：**如果我们的任务比较依赖于历史信息，那么 f_t 就会接近于 1，这时候历史的梯度信息也正好不容易消失；如果 f_t 很接近于 0，那么就说明我们的任务不依赖于历史信息，这时候就算梯度消失也无妨了。**

所以，现在的关键就是看“其余三项都是次要项”这个结论能否成立。后面的三项都是“一项乘以另一项的偏导”的形式，而且求偏导的项都是 σ 或 $\tanh$ 激活，前面在回顾数学公式的时候说了 σ 和 $\tanh$ 基本上是等价的，因此后面三项是类似的，分析了其中一项就相当于分析了其余两项。以第二项为例，代入 $h_{t-1} = o_{t-1}\tanh(c_{t-1})$，可以算得：

$$c_{t-1}\frac{\partial f_t}{\partial c_{t-1}} = f_t(1-f_t)o_{t-1}\left(1-\tanh^2 c_{t-1}\right)c_{t-1}U_f \tag{9}$$

注意到 $f_t, 1-f_t, o_{t-1}$，都是在 0 ~ 1 之间，也可以证明 $\left|\left(1-\tanh^2 c_{t-1}\right)c_{t-1}\right| < 0.45$，因此它也在 - 1 ~ 1 之间。所以说白了 $c_{t-1}\frac{\partial f_t}{\partial c_{t-1}}$ 就相当于 1 个 U_f 乘上 4 个门，结果会变得更加

小，所以只要初始化不是很糟糕，那么它都会被压缩得相当小，因此占不到主导作用。

跟简单 RNN 的梯度（6）相比，它也多出了 3 个门，说直观一点那就是：1 个门我压不垮你，多来几个门还不行么？

剩下两项的结论也是类似的：

$$\begin{aligned}\hat{c}_t\frac{\partial i_t}{\partial c_{t-1}} &= i_t(1-i_t)o_{t-1}\left(1-\tanh^2 c_{t-1}\right)\hat{c}_t U_i \\ i_t\frac{\partial \hat{c}_t}{\partial c_{t-1}} &= \left(1-\hat{c}_t^2\right)o_{t-1}\left(1-\tanh^2 c_{t-1}\right)i_t U_c\end{aligned}\tag{10}$$

所以，后面三项的梯度带有更多的“门”，一般而言乘起来后会被压缩的更厉害，因此占主导的项还是 f_t，f_t 在 0 ~ 1 之间这个特性决定了它梯度爆炸的风险很小，同时 f_t 表明了模型对历史信息的依赖性，也正好是历史梯度的保留程度，两者相互自洽，所以 LSTM 也能较好地缓解梯度消失问题。

因此，LSTM 同时较好地缓解了梯度消失/爆炸问题，现在我们训练 LSTM 时，多数情况下只需要直接调用 Adam 等自适应学习率优化器，不需要人为对梯度做什么调整了。

当然，这些结果都是“概论”，你非要构造一个会梯度消失/爆炸的 LSTM 来，那也是能构造出来的。此外，就算 LSTM 能缓解这两个问题，也是在一定步数内，如果你的序列很长，比如几千上万步，那么该消失的还会消失。毕竟单靠一个向量，也缓存不了那么多信息啊 ~

06

顺便看看GRU

在文章结束之前，我们顺便对 LSTM 的强力竞争对手 GRU 也做一个分析。GRU 的运算过程为：

$$\begin{aligned}
z_t &= \sigma(W_z x_t + U_z h_{t-1} + b_z)\\
r_t &= \sigma(W_r x_t + U_r h_{t-1} + b_r)\\
\hat{h}_t &= \tanh(W_h x_t + U_h(r_t \circ h_{t-1}) + b_c)\\
h_t &= (1 - z_t)\circ h_{t-1} + z_t \circ \hat{h}_t
\end{aligned} \tag{11}$$

还有个更极端的版本是将 r_t, z_t 合成一个：

$$\begin{aligned}
r_t &= \sigma(W_r x_t + U_r h_{t-1} + b_r)\\
\hat{h}_t &= \tanh(W_h x_t + U_h(r_t \circ h_{t-1}) + b_c)\\
h_t &= (1 - r_t)\circ h_{t-1} + r_t \circ \hat{h}_t
\end{aligned} \tag{12}$$

不管是哪一个，我们发现它在算 $\hat{h}_t$ 的时候，h_{t-1} 都是先乘个 r_t 变成 $r_t \circ h_{t-1}$，不知道读者是否困惑过这一点？直接用 h_{t-1} 不是更简洁更符合直觉吗？

首先我们观察到，而 h_0 一般全零初始化，$\hat{h}_t$ 则因为 $\tanh$ 激活，因此结果必然在 -1 ~ 1 之间，所以作为 h_{t-1} 与 $\hat{h}_t$ 的加权平均的 h_t 也一直保持在 -1 ~ 1 之间，因此 h_t 本身就有类似门的作用。这跟LSTM的 c_t 不一样，理论上 c_t 是有可能发散的。了解到这一点后，我们再去求导：

$$\begin{aligned}
\frac{\partial h_t}{\partial h_{t-1}} =& 1 - z_t - z_t(1-z_t)h_{t-1}U_z + z_t(1-z_t)\hat{h}_t U_z\\
&+ \left(1 - \hat{h}_t^2\right) r_t(1 + (1-r_t)h_{t-1}U_r) z_t U_h
\end{aligned} \tag{13}$$

其实结果跟 LSTM 的类似，主导项应该是 $1 - z_t$，但剩下的项比 LSTM 对应的项少了 1 个门，因此它们的量级可能更大，相对于 LSTM 的梯度其实更不稳定，特别是 $r_t \circ h_{t-1}$ 这步操作，虽然给最后一项引入了多一个门 r_t，但也同时引入了多一项 $1 + (1-r_t)h_{t-1}U_r$，是好是歹很难说。总体相对而言，感觉 GRU 应该会更不稳定，比 LSTM 更依赖于好的初始化方式。

针对上述分析结果，个人认为如果沿用 GRU 的思想，又需要简化 LSTM 并且保持 LSTM 对梯度的友好性，更好的做法是把 $r_t \circ h_{t-1}$ 放到最后：

$$
\begin{aligned}
z_t &= \sigma(W_z x_t + U_z h_{t-1} + b_z) \\
r_t &= \sigma(W_r x_t + U_r h_{t-1} + b_r) \\
\hat{c}_t &= \tanh(W_h x_t + U_h h_{t-1} + b_c) \quad (14) \\
c_t &= (1 - z_t) \circ c_{t-1} + z_t \circ \hat{c}_t \\
h_t &= r_t \circ c_t
\end{aligned}
$$

当然，这样需要多缓存一个变量，带来额外的显存消耗了。

07

文章总结概述

本文讨论了 RNN 的梯度消失/爆炸问题，主要是从梯度函数的有界性、门控数目的多少来较为明确地讨论 RNN、LSTM、GRU 等模型的梯度流情况，以确定其中梯度消失/爆炸风险的大小。本文属于闭门造车之作，如有错漏，请读者海涵并斧正。

更多阅读