AiDA Lab.
Artificial Intelligence & Data Analysis Laboratory

LSTM
(Long-Short Term Memory)

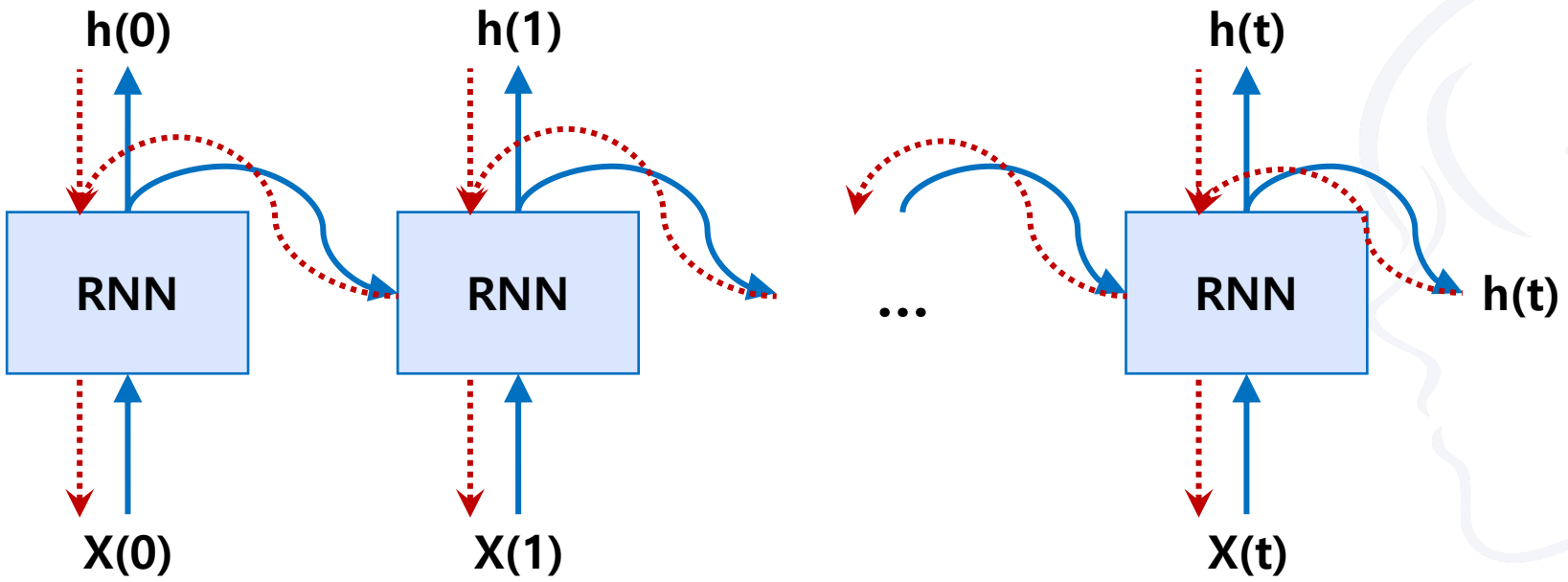
Seokhwan Yang

RNN 모델 기본 구조 및 학습 방법

- RNN 모델의 학습 방법
  - RNN 계층은 가로로 펼쳐 놓은 신경망과 동일하다고 가정할 수 있음

    →학습 방법도 동일하게 적용할 수 있음(오류 역전파 방식 등) → **BPTT 방법**

BPTT: Back Propagation Through Time



RNN 모델의 문제점

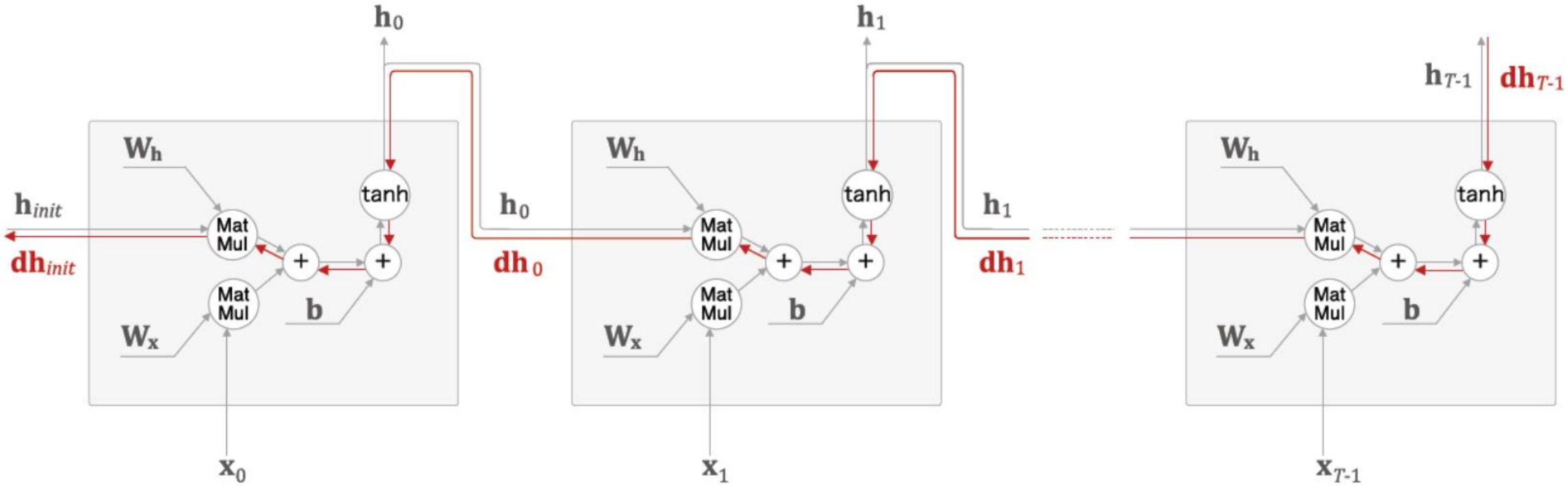
- **BPTT (Back Propagation Through Time)의 문제점**
  - **긴 시계열 데이터를 학습할 때 → 장기기억 문제**
    - 시계열 데이터의 시간 크기가 커질수록 BPTT가 **소비하는 컴퓨팅 자원도 비례하여 증가**함
    - 시간의 크기가 커질수록 역전파 시의 비율 조정을 위한 기울기가 불안정해짐
      → 기울기 폭발 또는 기울기 소실 문제 발생

BPTT를 이용하여 기울기를 구할 때, 매 시각의 RNN 계층의 중간 데이터를 메모리에 유지해 두어야 함
→ 시계열 데이터가 길어질 수록 계산량 및 메모리의 사용량이 증가함

  - **개선을 위하여 Truncated BPTT 기법 제안**

RNN 모델의 문제점

- 기울기 폭발, 소실 문제는 왜 발생하는가?

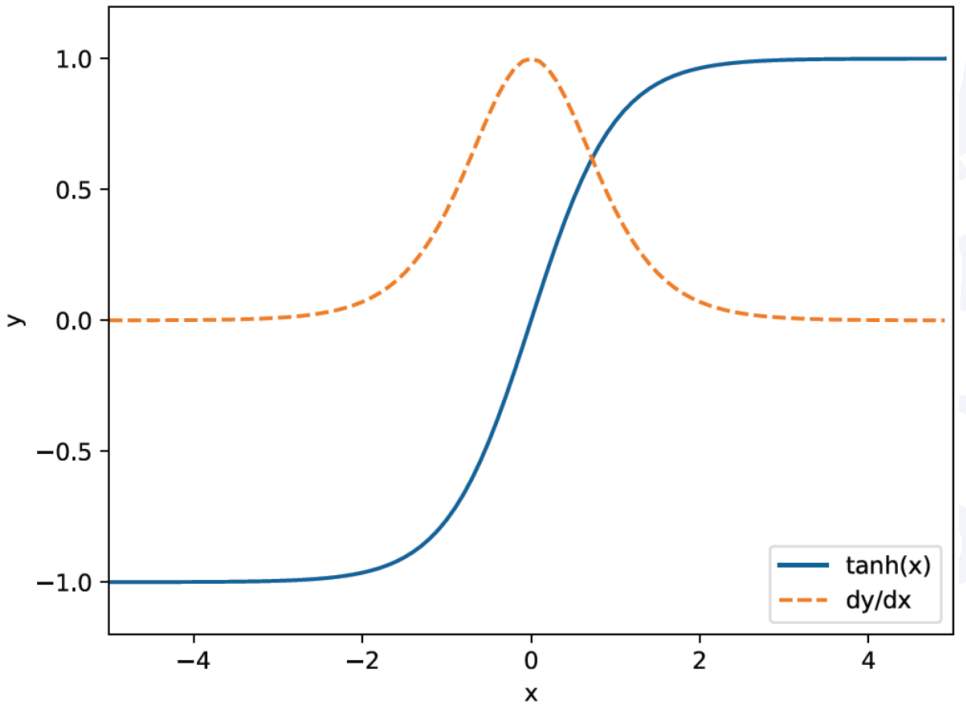


RNN 계층에서 시간 방향으로의 기울기 전파

학습을 위해 역전파 할 때, “tanh → + → MatMul”의 순서로 연산을 수행함

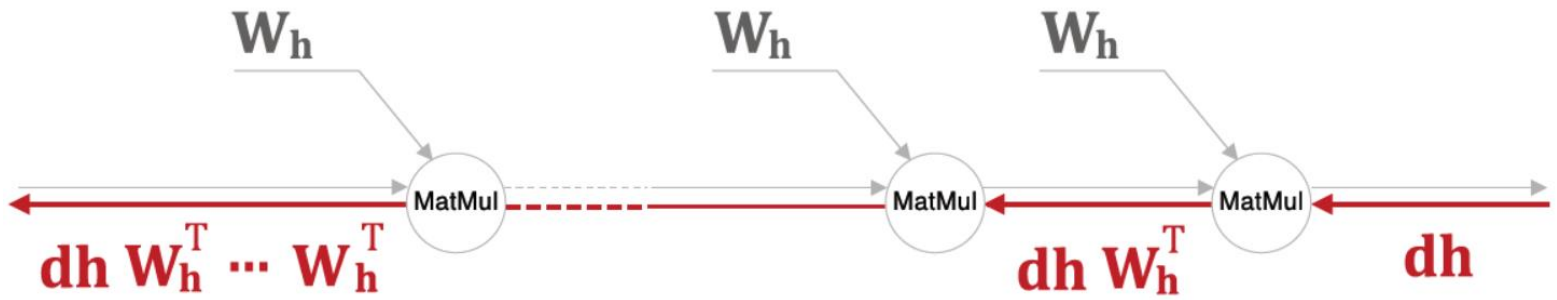
RNN 모델의 문제점

- 역전파 할 때, “tanh → + → MatMul”의 순서로 연산을 수행함
  - “+” : 그냥 기울기의 정보를 전달할 뿐 기울기의 크기가 바뀌지 않음
  - “tanh” : 역전파 할 때, 미분 연산을 수행함
    - $y = tanh(x)$일 때의 미분은 $\frac{\partial y}{\partial x} = 1 - y^2$
      → 각각 그래프를 그려보면
      → 값의 범위는 1.0 이하
      → x가 0에서 멀어질수록 작아짐
      → 역전파를 반복할수록(=$tanh$함수를 지나칠수록) 계속 작아짐

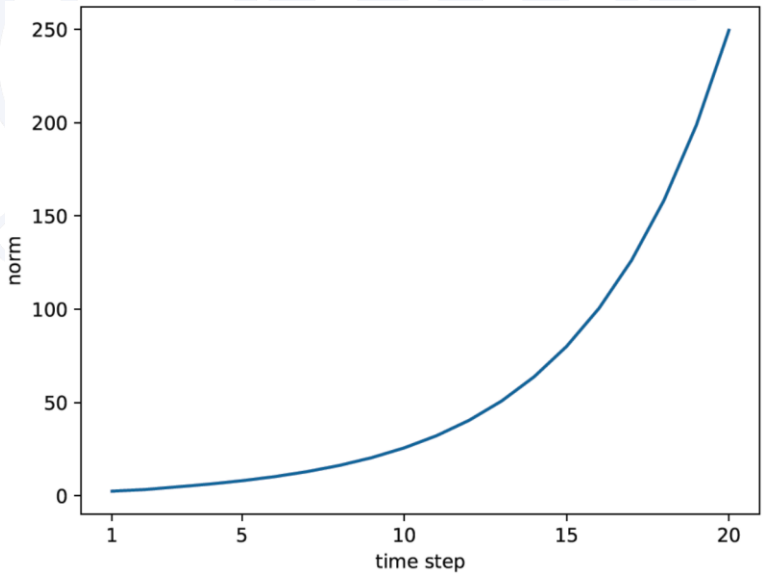


RNN 모델의 문제점

- "MatMul" : $tanh(x)$ 를 무시하고 "MatMul"만 집중해서 보면..



- 몇 번을 반복하더라도 가중치 W_h는 역전파를 지나는 도중에 변하지 않고 계속 그대로 사용됨
  → 반복적으로 곱해질 경우의 그래프를 그려보면 →

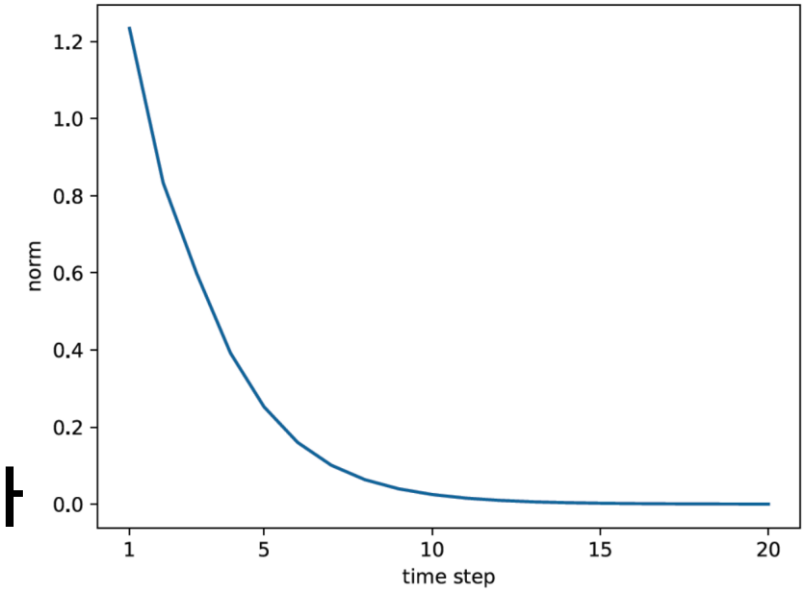


지수증가 ➔ 기울기 폭발

RNN 모델의 문제점

- W_h의 초기 값을 절반으로 줄여서 다시 반복시켜보면

  지수감소 ➔ 기울기 소실



- **W_h가 스칼라 값이면 $W_h > 1$ 이면 지수증가, $W_h < 1$이면 지수감소 하게 됨**
- **W_h가 행렬이면 "특잇값"에 따라 지수증가/감소가 결정됨**
  - 행렬의 특잇값: 데이터가 얼마나 퍼져있는지(분포)에 따라 변화

RNN 모델의 문제점

- **기울기 폭발의 대책**
  - **기울기 클리핑(Gradients Clipping)**
    - 신경망에서 사용되는 모든 매개변수에 대한 기울기를 하나로 처리한다고 가정함 ($\hat{g}$로 표시)
    - 기울기의 L2-Norm이 임계값(Threshold)을 초과하면 두 번째 줄의 수식과 같이 기울기를 수정
    - 간단한 알고리즘이지만 많은 경우에 잘 작동함

$$\text{if } \left\|\hat{\mathbf{g}}\right\| \geq threshold:$$

$$\hat{\mathbf{g}} = \frac{threshold}{\left\|\hat{\mathbf{g}}\right\|}\hat{\mathbf{g}}$$

RNN 모델의 문제점

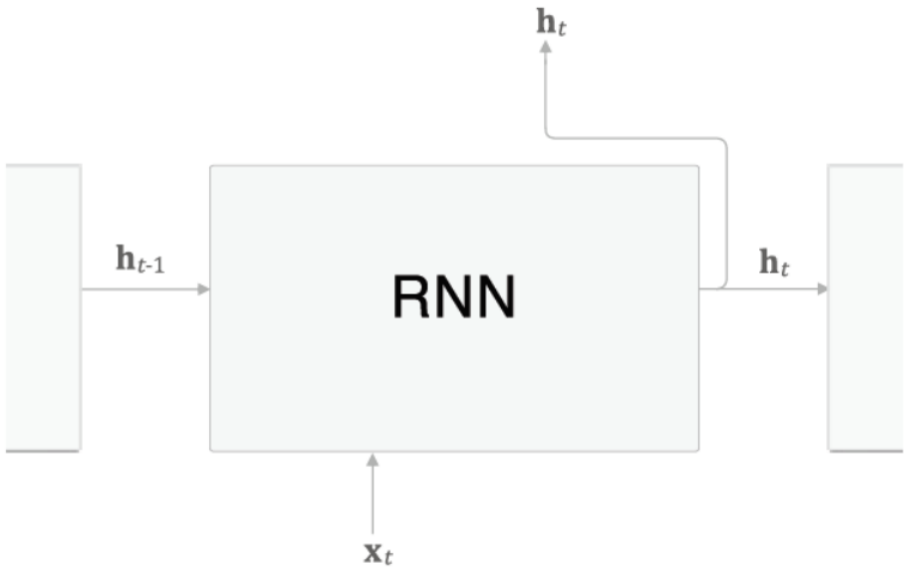
- 기울기 소실의 대책
  - 간단한 방법으로는 대책을 찾을 수 없음(RNN 모델의 근본부터 뜯어고쳐야..)
  - "기울기 소실이 일어나지 않도록 그 값을 직접 제어해 주겠다"라는 아이디어

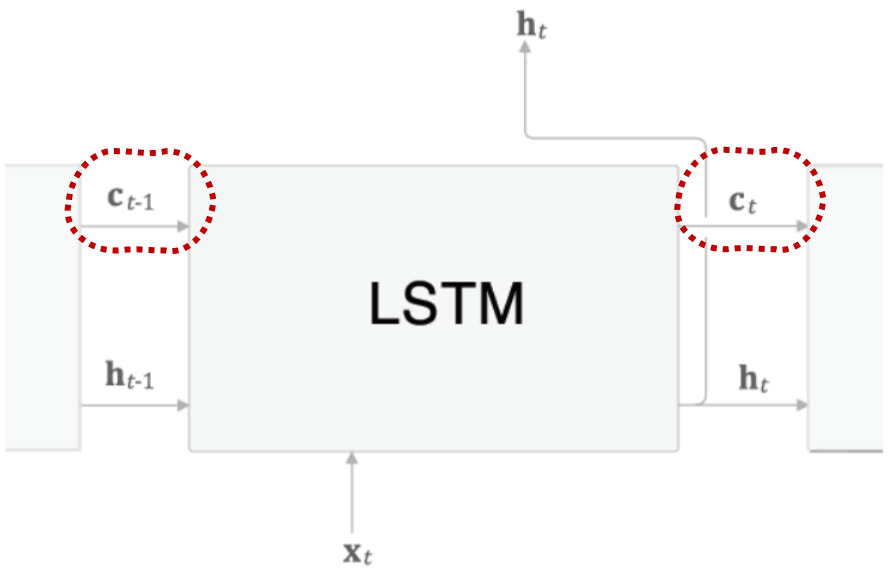
    → 제어를 위한 Gate를 추가

    → 다양한 알고리즘이 등장했으며 그 중 대표적인 알고리즘이 LSTM, GRU

LSTM 모델

- **RNN과 LSTM의 구조 비교**





- **LSTM 계층의 인터페이스에는 c 라는 경로가 있다!**
  - **c** : Cell 또는 Memory Cell

LSTM 모델

- **Memory Cell의 특징**
  - **데이터를 자기 자신으로만(LSTM 계층 내에서만) 주고 받음**

    → LSTM 계층 내에서만 완결되고, 다른 계층으로는 출력하지 않음
  - **Memory Cell c_t 에는 시각 t 에서의 LSTM의 기억을 저장함**
    - 과거로부터 시각 t 까지에 필요한 모든 정보가 저장되어 있다고 가정함
    - 또는 그렇게 저장되도록 학습 수행 → **c_t의 정보가 지속적으로 갱신되고 있음을 의미**
  - **그리고 c_t 의 정보를 바탕으로 외부 계층과 다음 시각의 LSTM 계층에 h_t 를 계산하여 출력함**

LSTM 모델

- Memory Cell은 어떤 값을 계산하는가?
  - c_t는 3개의 입력 (c_{t-1}, h_{t-1}, x)로 부터 어떤 계산을 수행함
  - 출력되는 은닉상태 $h_t = tanh(c_t)$
    → c_t의 각 요소에 $tanh$를 적용함을 의미
  - 은닉상태 h_t는 단순히 c_t에 $tanh$를 적용한 것 뿐이다
    → c_t와 h_t를 구성하는 원소의 수는 같다

그리고 h_t는 c_t의
영향을 받는다는 소리임

LSTM 모델

- Memory Cell은 무엇으로부터 제어를 받는가?
  - 3개의 Gate와 1개의 Updater의 제어를 받음
    - Output Gate
    - Forget Gate
    - Input Gate
    - Updater → New Memory Cell

Gate: 데이터의 흐름을 제어함. 열기/닫기 및 어느 정도 열지를 조절

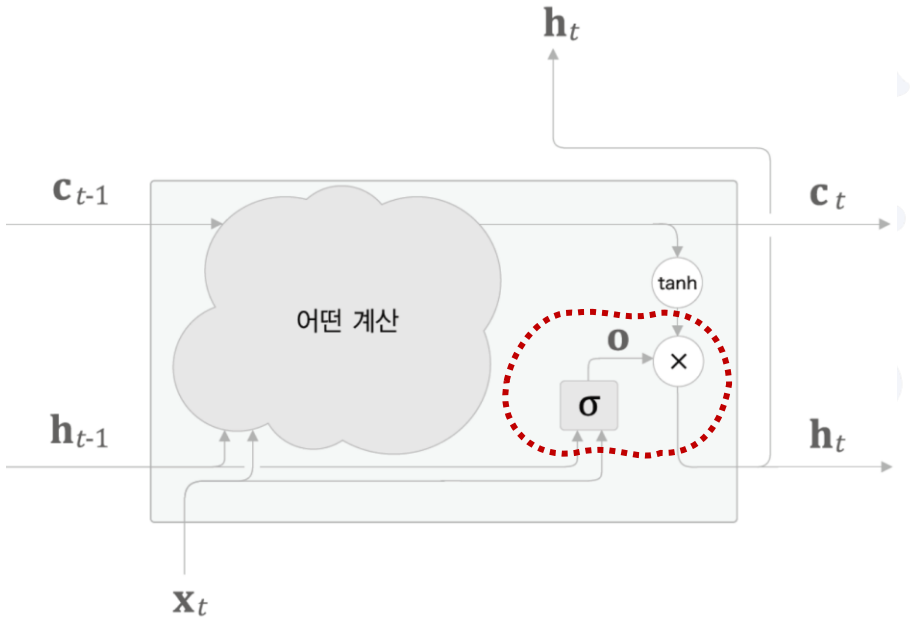
열림 상태

LSTM 모델

- **Output Gate**
  - $tanh(c_t)$의 각 원소에 대하여 "그것이 다음 시각의 은닉상태에 얼마나 중요한가?"를 조정
  - 다음 은닉상태 h_t의 출력을 담당하므로 Output Gate라고 부름
  - Output Gate의 열림 상태는 입력 x_t와 이전 상태 h_{t-1}로부터 구함

$$\mathbf{o} = \sigma(\mathbf{x}_t \mathbf{W}_{\mathbf{x}}^{(\mathbf{o})} + \mathbf{h}_{t-1} \mathbf{W}_{\mathbf{h}}^{(\mathbf{o})} + \mathbf{b}^{(\mathbf{o})})$$

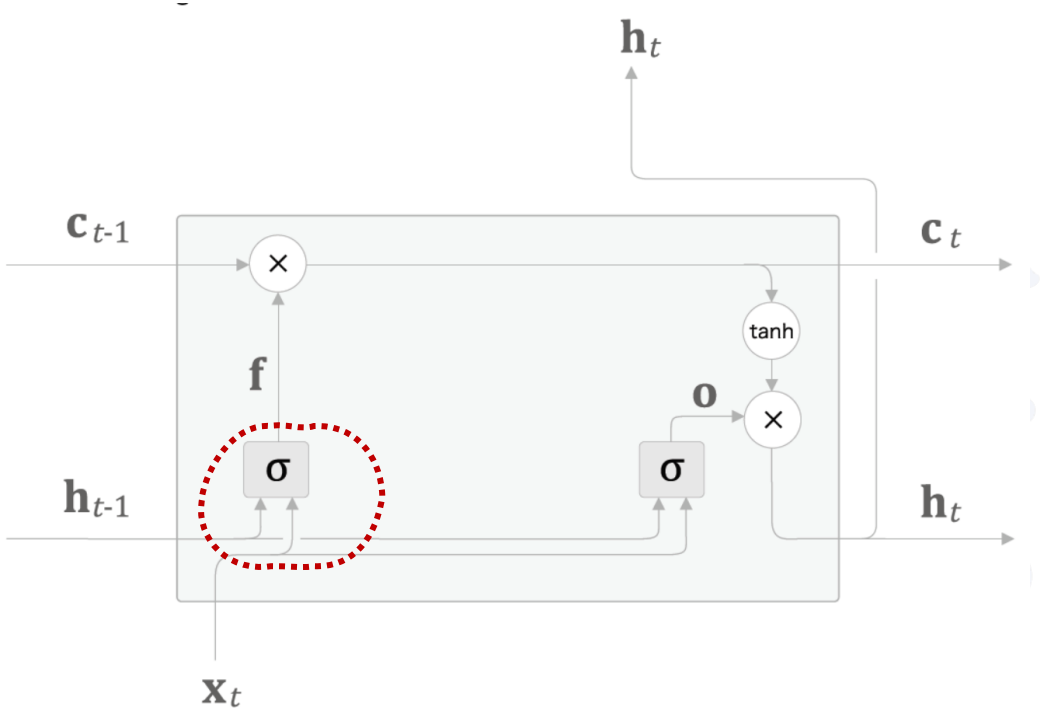
$$\mathbf{h}_t = \mathbf{o} \odot \tanh(\mathbf{c}_t)$$



LSTM 모델

- **Forget Gate**
  - c_{t-1}의 기억 중에서 불필요한 "기억의 어떤 것을 잊을까?"를 명확하게 지시하는 Gate
  - LSTM 계층에 Forget Gate를 추가하면..

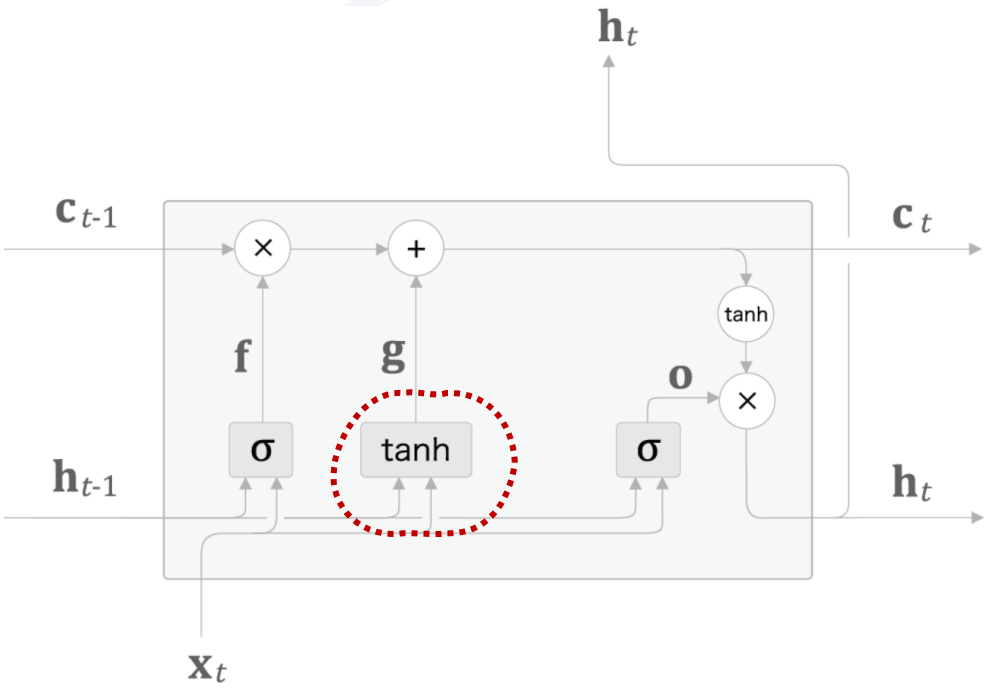
$$\mathbf{f} = \sigma(\mathbf{x}_t \mathbf{W}_x^{(\mathbf{f})} + \mathbf{h}_{t-1} \mathbf{W}_\mathbf{h}^{(\mathbf{f})} + \mathbf{b}^{(\mathbf{f})})$$



LSTM 모델

- 새로운 Memory Cell
  - 잊어야 할 기억은 삭제되었는데 새로운 기억은?
  - 새로운 기억을 Memory Cell에 추가하기 위해서 tanh 노드 추가

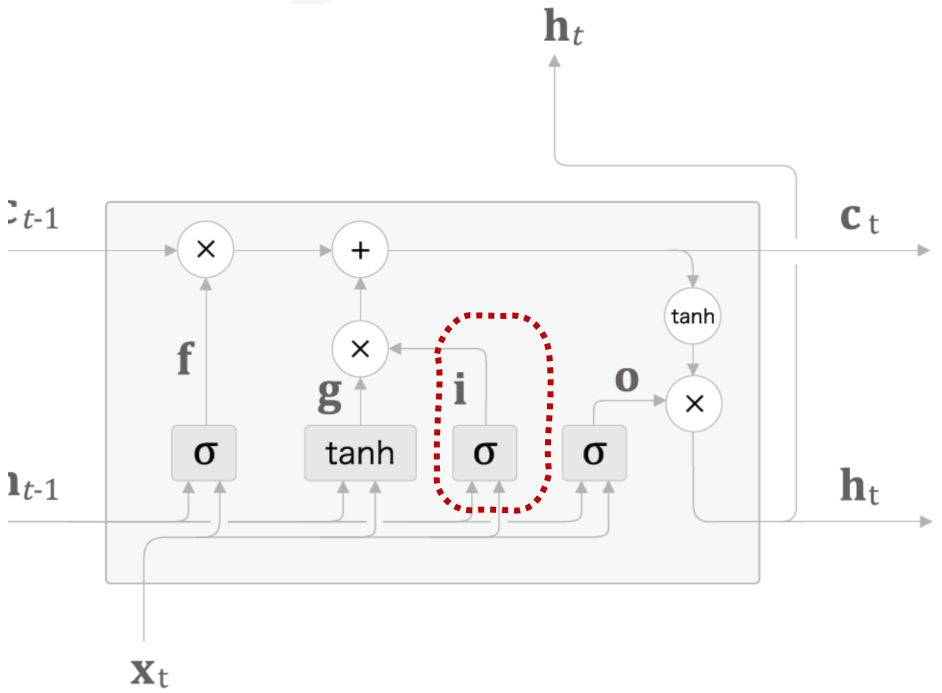
$$\mathbf{g} = \tanh(\mathbf{x}_t \mathbf{W}_x^{(\mathbf{g})} + \mathbf{h}_{t-1} \mathbf{W}_\mathbf{h}^{(\mathbf{g})} + \mathbf{b}^{(\mathbf{g})})$$



LSTM 모델

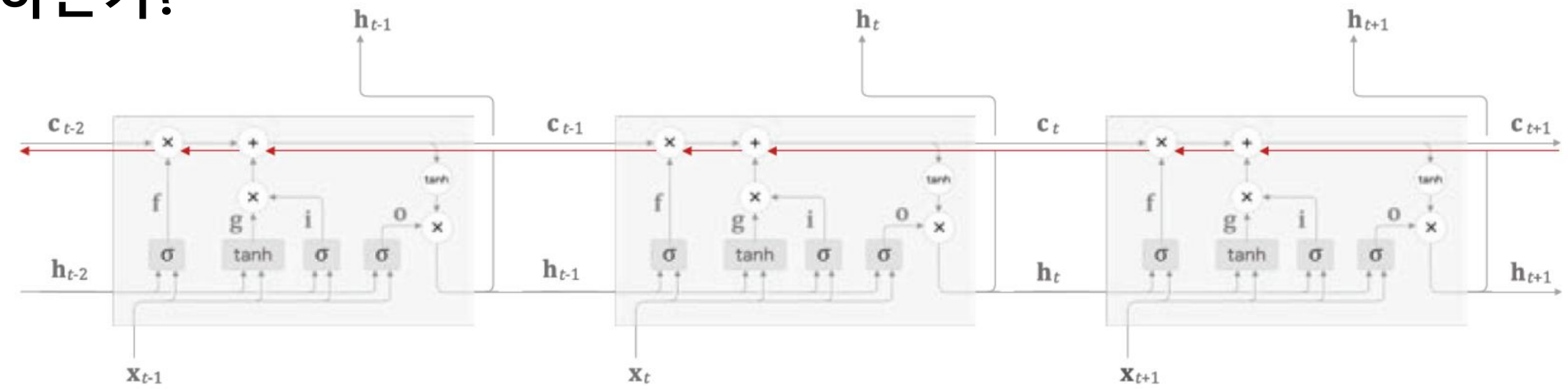
- **Input Gate**
  - g에 Gate를 하나 추가함 → 입력 게이트(input gate)
  - g의 각 원소가 새로 추가되는 정보로서의 가치가 얼마나 큰지를 판단
  - 새 정보를 무작정 받는 것이 아니라 적절히 취사선택하는 것이 Input Gate의 역할

$$\mathbf{i} = \sigma(\mathbf{x}_t \mathbf{W}_x^{(\mathbf{i})} + \mathbf{h}_{t-1} \mathbf{W}_\mathbf{h}^{(\mathbf{i})} + \mathbf{b}^{(\mathbf{i})})$$



LSTM 모델

- 어떻게 해서 Gate들과 새로운 Memory Cell이 기울기 소실을 해결하는가?



- Memory Cell “c”의 역전파에 주목해보면...
- ‘+’와 ‘x’ 노드 만을 지나게 됨

LSTM 모델

- 3개의 Gate와 1개의 업데이트 메모리셀의 4개의 수식을 모아 단 한 번의 아핀변환으로 계산

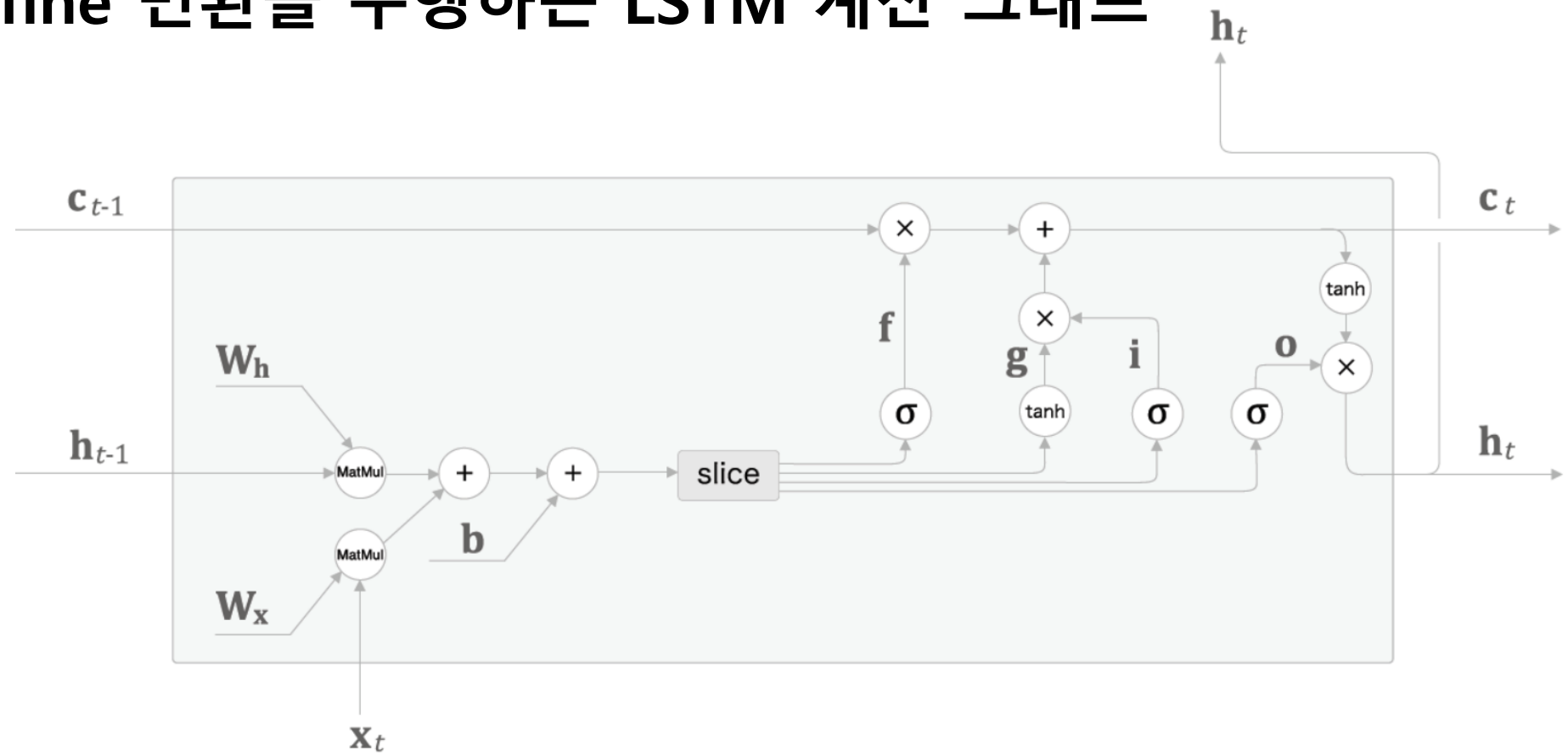
$$
\begin{aligned}
&\mathbf{x}_t\,\mathbf{W}_{\mathbf{x}}^{(\mathrm{f})} + \mathbf{h}_{t-1}\,\mathbf{W}_{\mathbf{h}}^{(\mathrm{f})} + \mathbf{b}^{(\mathrm{f})}\\
&\mathbf{x}_t\,\mathbf{W}_{\mathbf{x}}^{(\mathrm{g})} + \mathbf{h}_{t-1}\,\mathbf{W}_{\mathbf{h}}^{(\mathrm{g})} + \mathbf{b}^{(\mathrm{g})}\\
&\mathbf{x}_t\,\mathbf{W}_{\mathbf{x}}^{(\mathrm{i})} + \mathbf{h}_{t-1}\,\mathbf{W}_{\mathbf{h}}^{(\mathrm{i})} + \mathbf{b}^{(\mathrm{i})}\\
&\mathbf{x}_t\,\mathbf{W}_{\mathbf{x}}^{(\mathrm{o})} + \mathbf{h}_{t-1}\,\mathbf{W}_{\mathbf{h}}^{(\mathrm{o})} + \mathbf{b}^{(\mathrm{o})}
\end{aligned}
$$

$$
\mathbf{x}_t \left[\mathbf{W}_{\mathbf{x}}^{(\mathrm{f})}\ \mathbf{W}_{\mathbf{x}}^{(\mathrm{g})}\ \mathbf{W}_{\mathbf{x}}^{(\mathrm{i})}\ \mathbf{W}_{\mathbf{x}}^{(\mathrm{o})}\right] + \mathbf{h}_{t-1} \left[\mathbf{W}_{\mathbf{h}}^{(\mathrm{f})}\ \mathbf{W}_{\mathbf{h}}^{(\mathrm{g})}\ \mathbf{W}_{\mathbf{h}}^{(\mathrm{i})}\ \mathbf{W}_{\mathbf{h}}^{(\mathrm{o})}\right] + \left[\mathbf{b}^{(\mathrm{f})}\ \mathbf{b}^{(\mathrm{g})}\ \mathbf{b}^{(\mathrm{i})}\ \mathbf{b}^{(\mathrm{o})}\right]
$$

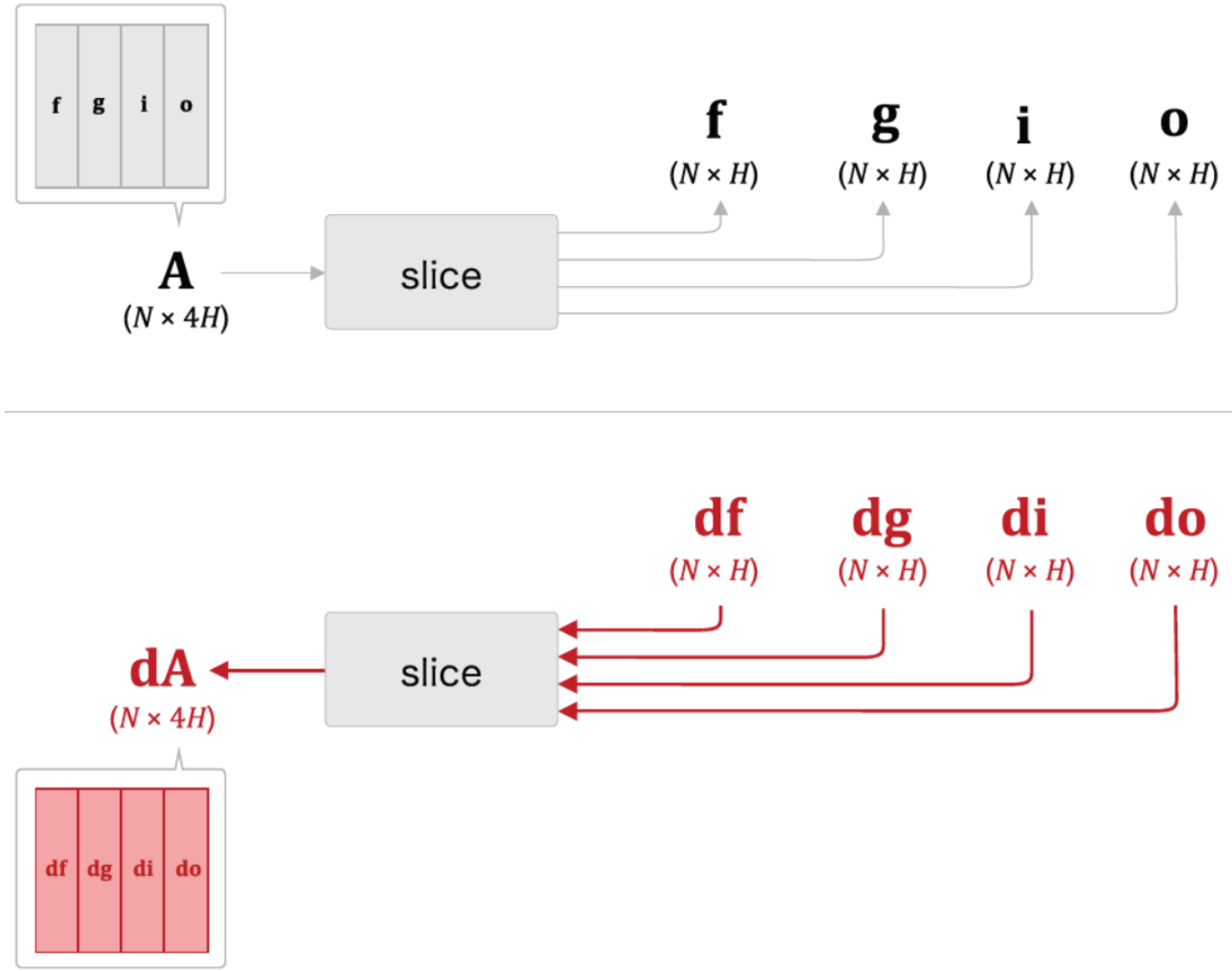
$$
\mathbf{x}_t\,\mathbf{W}_{\mathbf{x}} + \mathbf{h}_{t-1}\,\mathbf{W}_{\mathbf{h}} + \mathbf{b}
$$

LSTM 모델

- W_x, W_h, b 각각에 4개 분의 가중치(혹은 편향)가 포함되어 있다고 가정하고 Affine 변환을 수행하는 LSTM 계산 그래프



LSTM 모델


f g i o
A
(N × 4H)
slice
f
(N × H)
g
(N × H)
i
(N × H)
o
(N × H)
df
(N × H)
dg
(N × H)
di
(N × H)
do
(N × H)
slice
dA
(N × 4H)
df dg di do

LSTM 모델

- 동작 원리
  - Forget Gate를 통해 이전 특징 별로 기억 여부를 결정
  - Input Gate를 통해 현 시점의 정보가 얼마나 중요한지를 반영하여 기록
  - 이전 Cell State의 결과와 현 시점의 Forget Gate에서 잊고, Input Gate의 중요도만큼 곱한 값으로 현 시점의 Memory Cell값을 생성
  - 현 시점의 Forget Gate, Input Gate에 의해서 변경된 현 시점의 Cell State 값을 얼마만큼 다음 레이어로 전달할지 계산

GRU 모델

- LSTM에서 불필요한 부분을 제거하는 과정애서 생겨난 아키텍처
  - LSTM을 구성하는 Time-Step의 Cell을 조금 더 간소화한 버전
  - LSTM과 달리 Reset Gate(r)와 Update Gate(z)의 2개의 Gate만 가지고 있음
  - 세 모델의 비교