

教育部-华为智能基座课程

《人工智能基础与实践》

第8章：循环神经网络II

授课教师：丛润民

山东大学
控制科学与工程学院

章节目录

CONTENTS

- 01 | 长程依赖问题
- 02 | 长短期记忆网络 (LSTM)
- 03 | 门控循环神经网络 (GRU)
- 04 | 深度循环神经网络



章节目录

CONTENTS

01 | 长程依赖问题

02 | 长短期记忆网络 (LSTM)

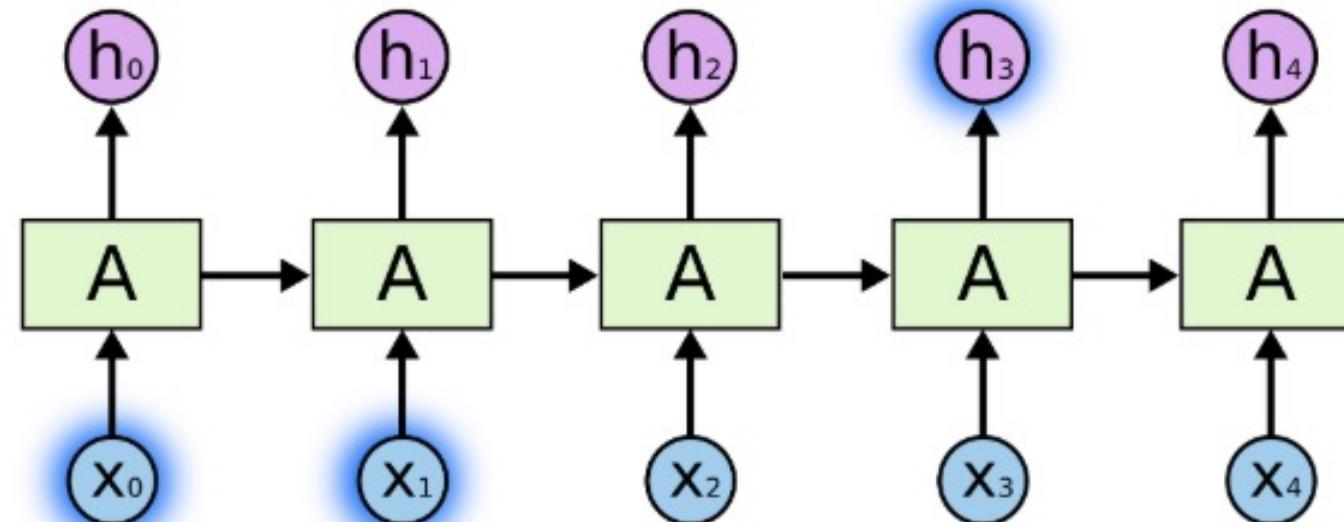
03 | 门控循环神经网络 (GRU)

04 | 深度循环神经网络



RNN的长处之一是它可以利用先前的信息到当前的任务上，**尤其当相关的信息和预测的词之间的间隔较小时效果明显。**

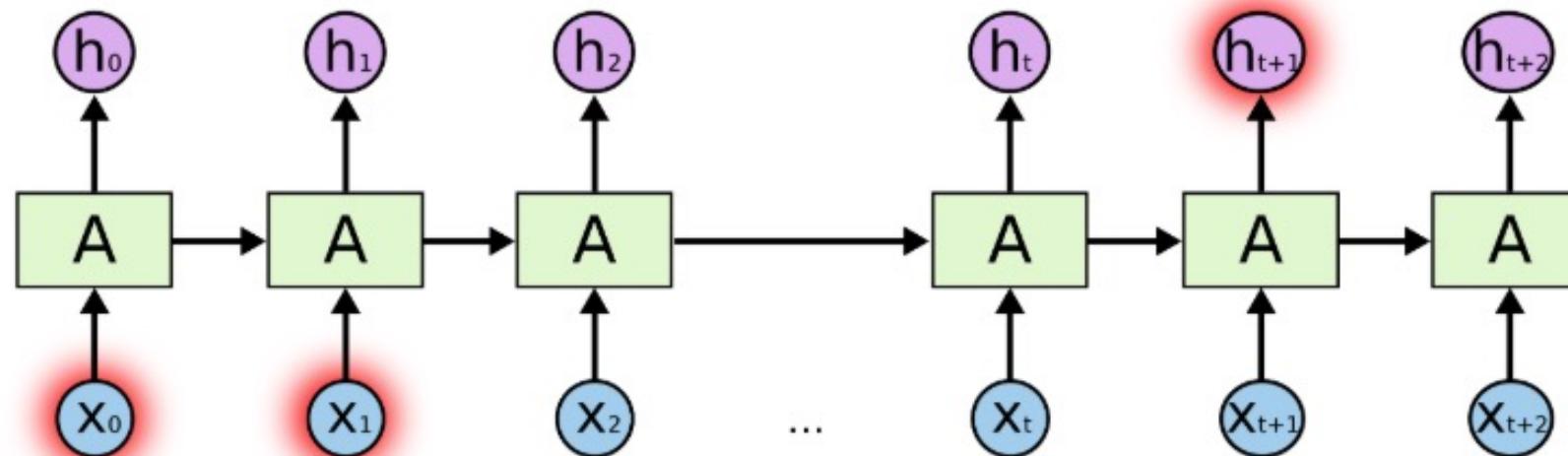
如预测句子 “the clouds are in the sky” 中的最后一个词。



较近的相关信息或位置间隔

然而在间隔不断增大时，RNN 会丧失学习到连接如此远的信息的能力。

如预测句子 “I grew up in France... I speak fluent *French*” 中最后一个词。



较长的相关信息或位置间隔

为什么在实际应用中，RNN很难处理长距离的依赖？

上一节关于RNN的推导中，误差项沿时间反向传播的公式为：

$$\delta_k^T = \delta_t^T \prod_{i=k}^{t-1} \text{diag}[f'(\mathbf{net}_i)] W$$

根据下面的不等式，来获取 δ_k^T 的模的上界（模可以看作对 δ_k^T 中每一项值的大小的度量）：

$$\begin{aligned}\|\delta_k^T\| &\leq \|\delta_t^T\| \prod_{i=k}^{t-1} \|\text{diag}[f'(\mathbf{net}_i)]\| \|W\| \\ &\leq \|\delta_t^T\| (\beta_f \beta_W)^{t-k}\end{aligned}$$

其中， β_f 、 β_W 分别是对角矩阵和矩阵W模的上界。

$$\begin{aligned}\|\delta_k^T\| &\leq \|\delta_t^T\| \prod_{i=k}^{t-1} \|\text{diag}[f'(\text{net}_i)]\| \|W\| \\ &\leq \|\delta_t^T\| (\beta_f \beta_W)^{t-k}\end{aligned}$$

可以看到，误差项从 t 时刻传递到 k 时刻，其值的上界是 $\beta_f \beta_W$ 的指数函数。

当 $t - k$ 很大时(也就是误差传递很多个时刻时)，整个式子的值就会变得极小(当

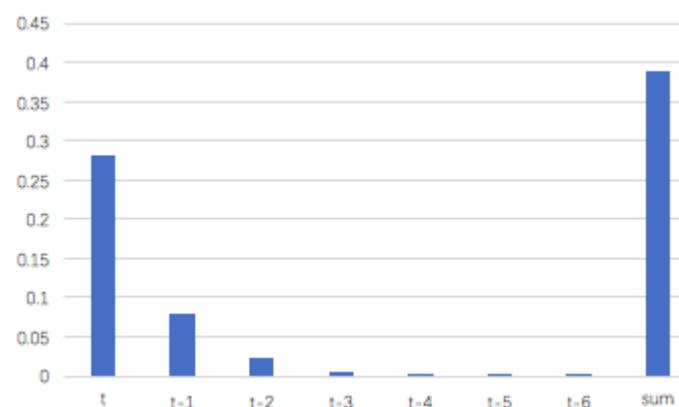
$\beta_f \beta_W$ 乘积小于1)或者极大(当 $\beta_f \beta_W$ 乘积大于1)，前者是梯度消失，后者是梯度爆炸。

梯度消失或者梯度爆炸会导致梯度为0或NaN，没法继续训练更新参数，也就是RNN的长程依赖问题。

梯度消失举例：RNN中权重矩阵W最终的梯度是各个时刻的梯度之和，即：

$$\begin{aligned}\nabla_W E &= \sum_{k=1}^t \nabla_{Wk} E \\ &= \nabla_{Wt} E + \nabla_{Wt-1} E + \nabla_{Wt-2} E + \dots + \nabla_{W1} E\end{aligned}$$

假设某轮训练中，各时刻的梯度以及最终的梯度之和如下图：



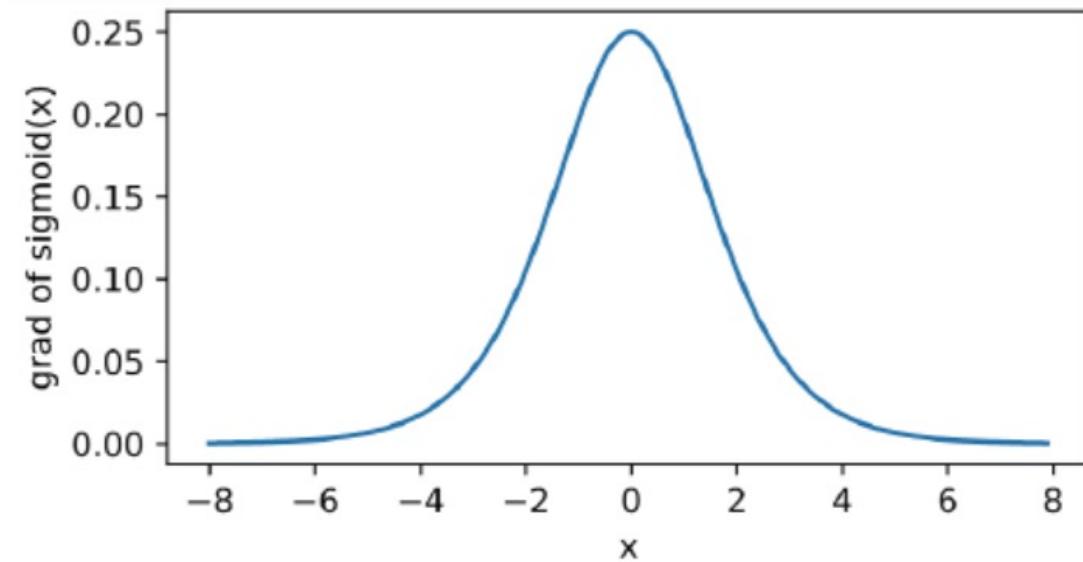
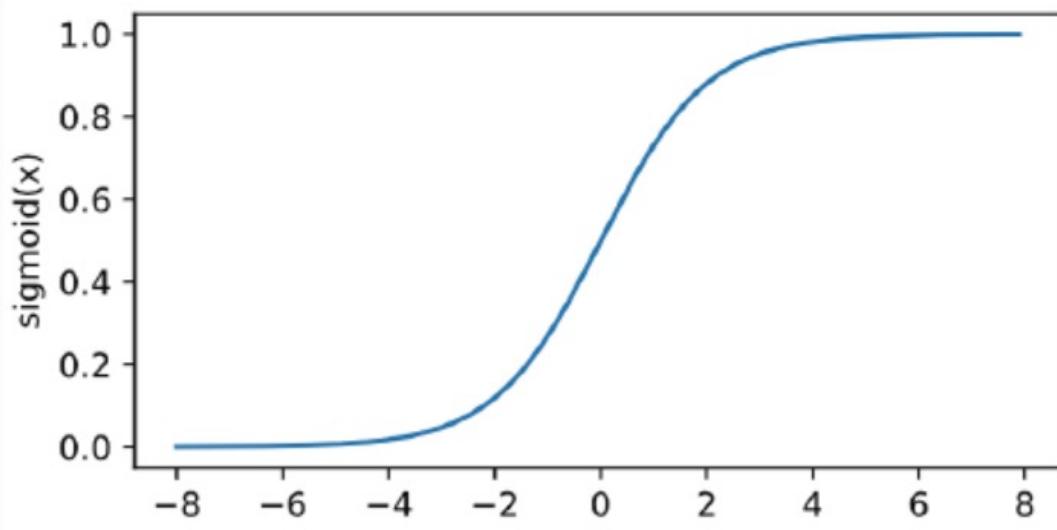
从t-3时刻开始，梯度已经几乎减少到0了。即从此时刻开始再往之前走，得到的梯度（几乎为零）就不会对最终的梯度值有任何贡献。这就是**原始RNN无法处理长距离依赖的原因**。

通常来说，**梯度爆炸**更容易处理一些。因为梯度爆炸的时候，程序会收到NaN错误。也可以设置一个梯度阈值，当梯度超过这个阈值时直接截取。

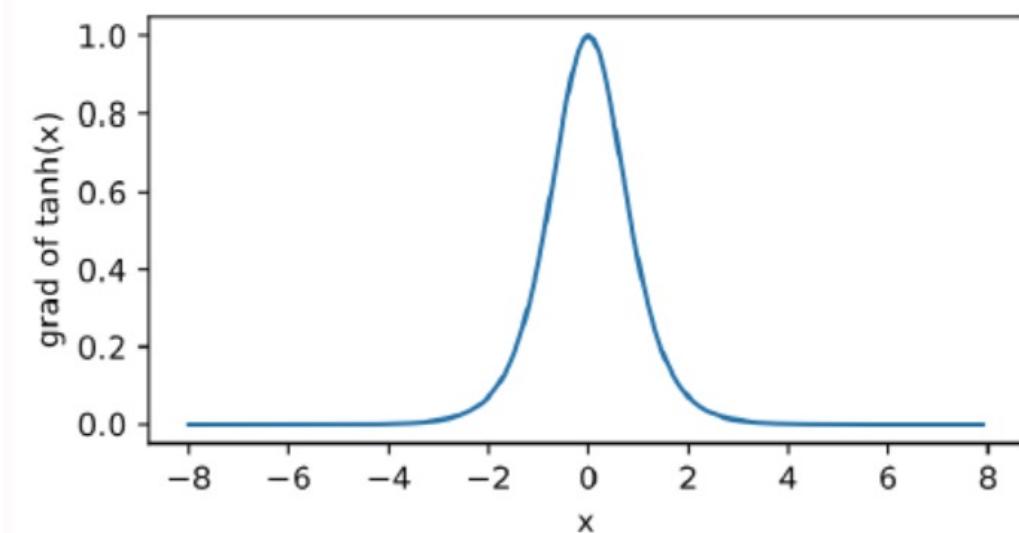
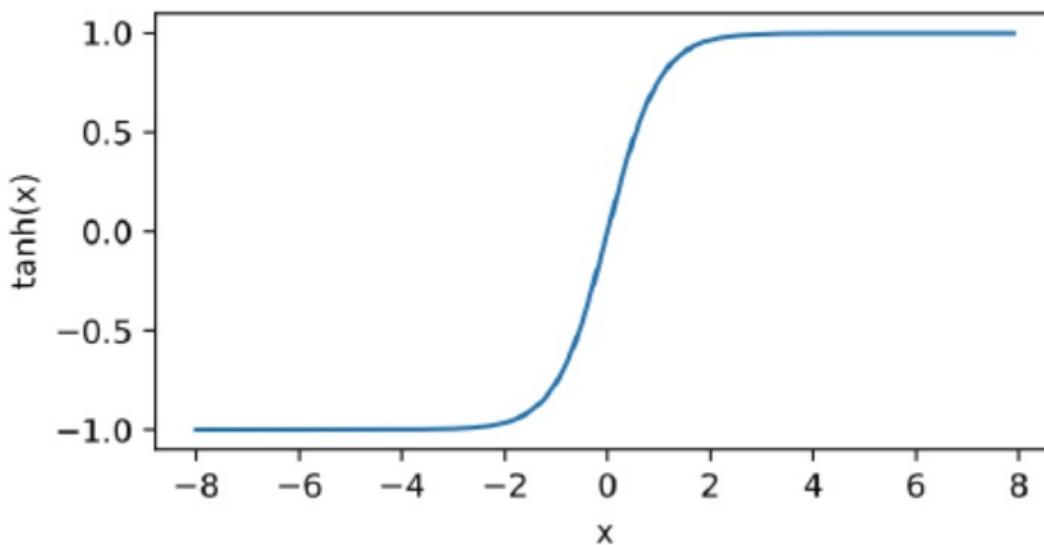
梯度消失更难检测，也更难处理一些。总的来说，有三种方法应对梯度消失问题：

1. 合理的初始化权重值。初始化权重，使每个神经元尽可能不要取极大或极小值，以躲开梯度消失的区域。
2. 使用relu代替sigmoid和tanh作为激活函数。

sigmoid函数的函数图和导数图



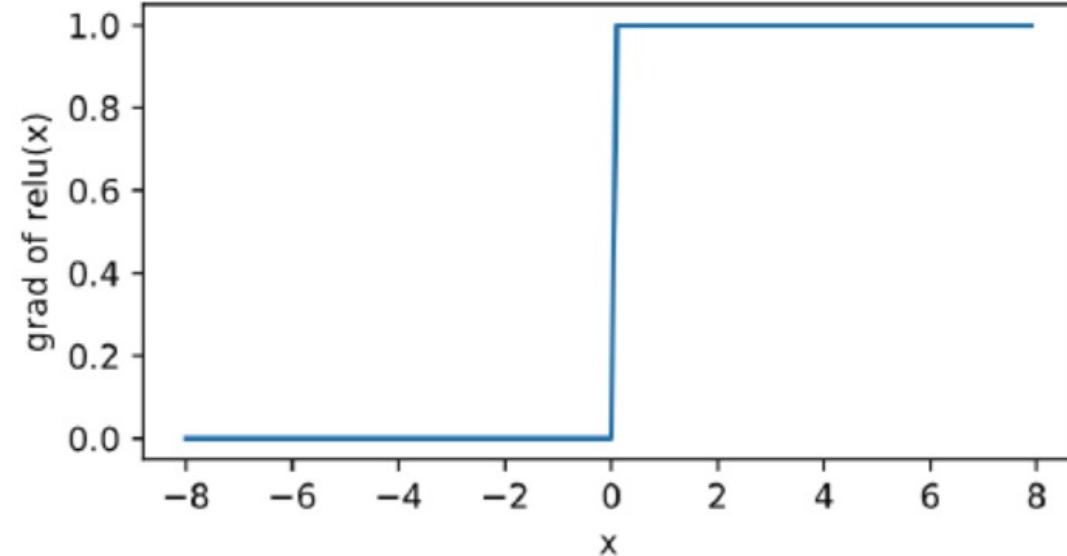
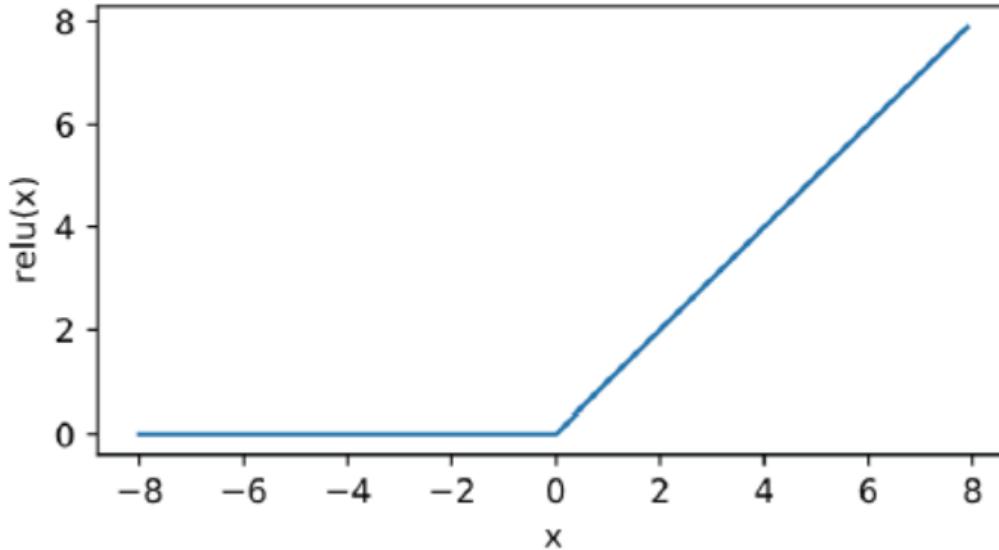
tanh函数的函数图和导数图



sigmoid函数与tanh函数比较：

- sigmoid函数的导数值范围为 $(0,0.25]$ ，反向传播时会导致梯度消失
- tanh函数的导数值范围为 $(0,1]$ ，相对范围较大，但仍会导致梯度消失
- sigmoid函数不是原点中心对称，输出均大于0
- tanh函数是原点中心对称，可以使网络收敛的更好

ReLU函数的图像和导数图为



ReLU函数的左侧导数为0，右侧导数恒为1，避免了小数的连乘，但反向传播中仍有权值的累乘。ReLU函数改善了“梯度消失”现象。

通常来说，**梯度爆炸**更容易处理一些。因为梯度爆炸的时候，程序会收到NaN错误。也可以设置一个梯度阈值，当梯度超过这个阈值时直接截取。

梯度消失更难检测，也更难处理一些。总的来说，有三种方法应对梯度消失问题：

1. 合理的初始化权重值。初始化权重，使每个神经元尽可能不要取极大或极小值，以躲开梯度消失的区域。
2. 使用relu代替sigmoid和tanh作为激活函数。
3. 使用其他结构的RNNs，比如长短期记忆网络（LSTM）和Gated Recurrent Unit（GRU）。

接下来将重点介绍**LSTM**和**GRU**两种网络。

章节目录

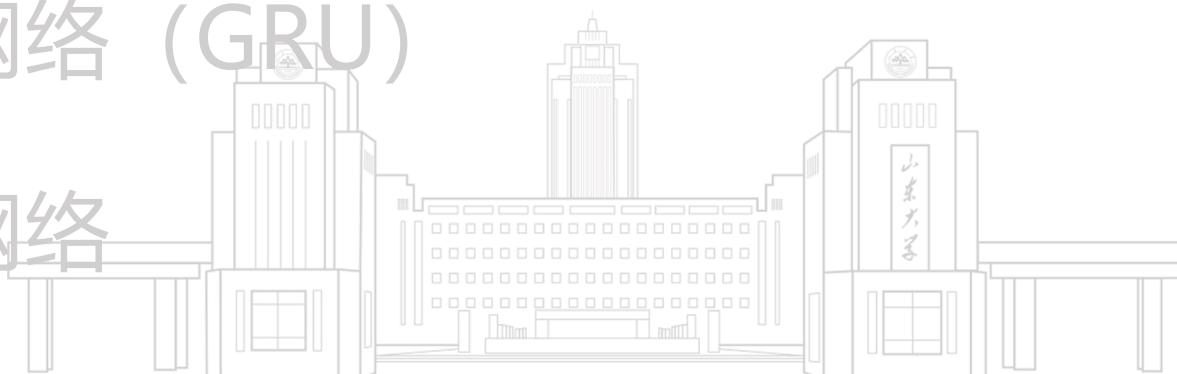
CONTENTS

01 | 长程依赖问题

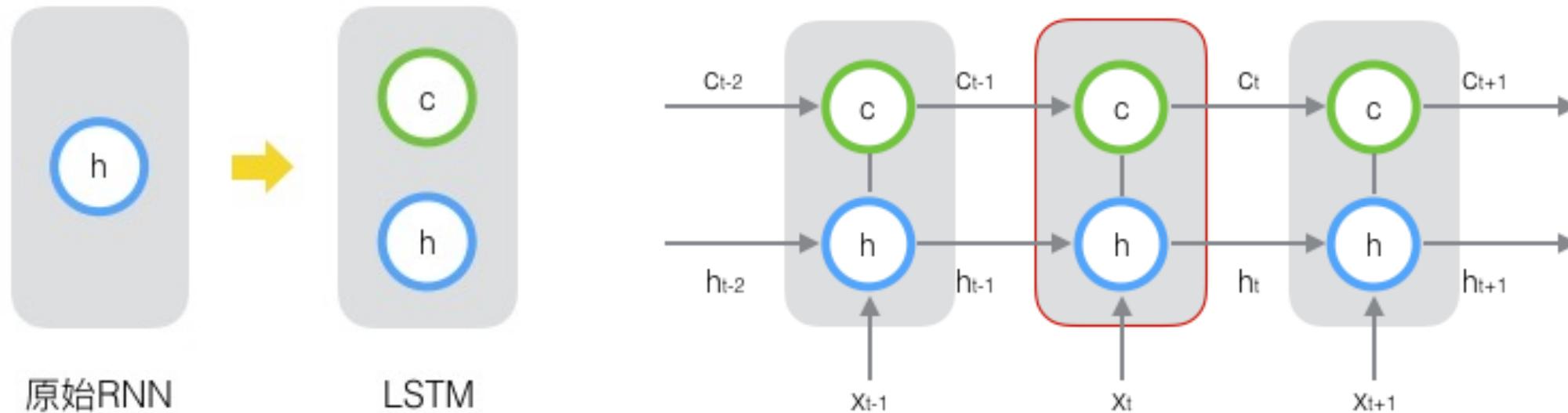
02 | 长短期记忆网络 (LSTM)

03 | 门控循环神经网络 (GRU)

04 | 深度循环神经网络



Long Short Term Memory networks (以下简称LSTMs) , 一种特殊的RNN网络，该网络设计出来是为了解决长程依赖问题。



增加状态c, 称为单元状态(cell state), 让它来保存长期的状态

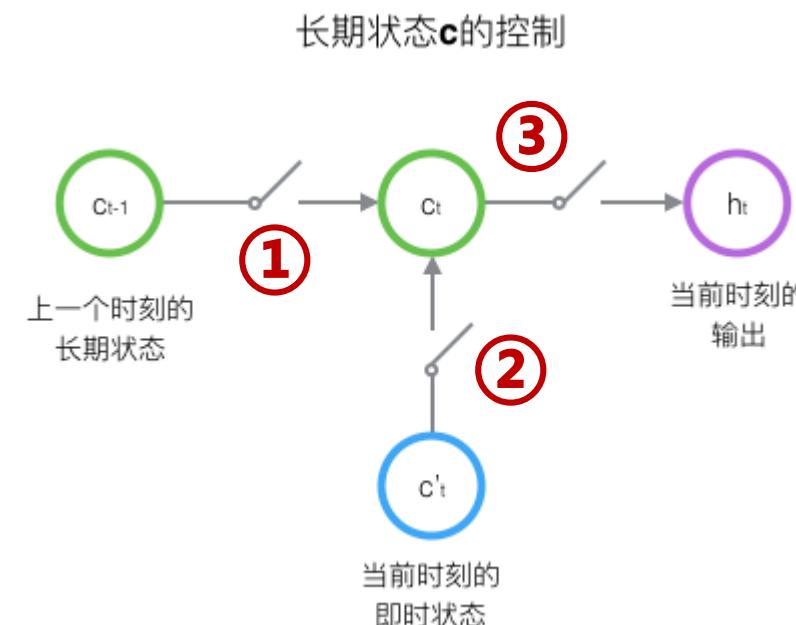
Hochreiter S, Schmidhuber J. Long short-term memory[J]. Neural computation, 1997, 9(8): 1735-1780.

LSTM的关键，就是怎样控制长期状态c。LSTM使用三个控制开关：

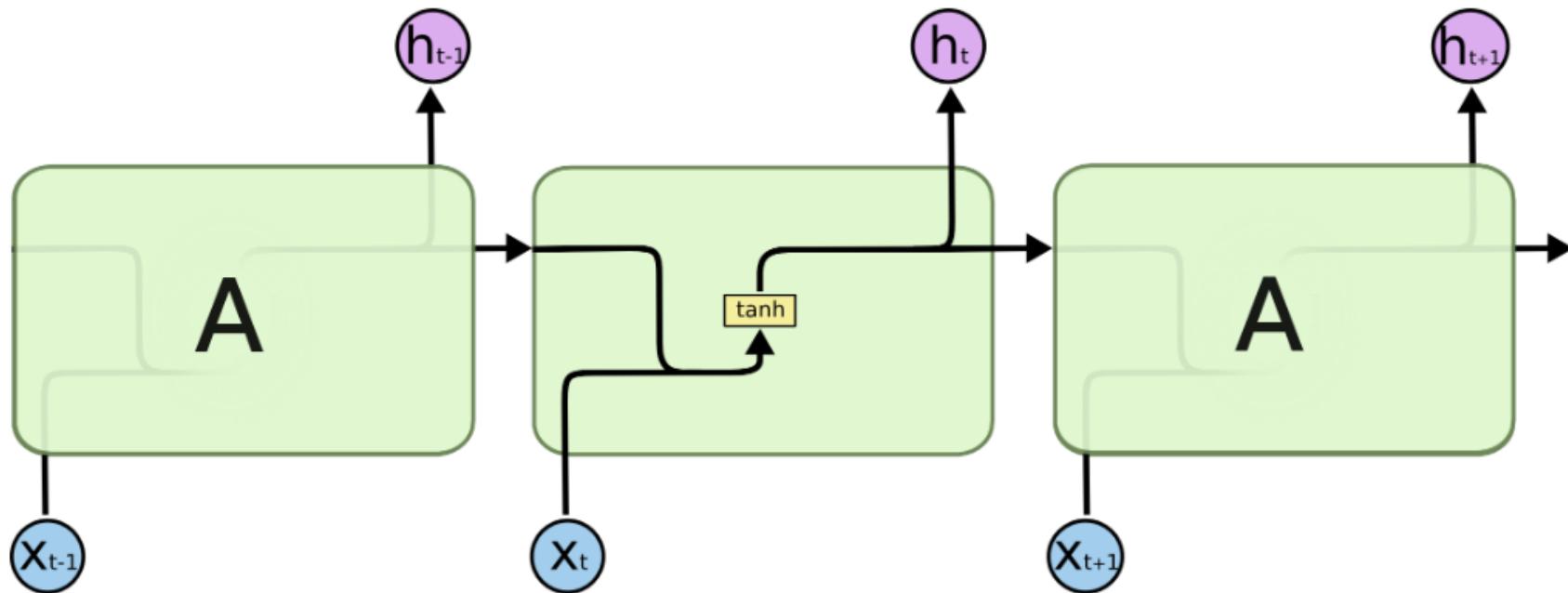
第一个开关，负责控制如何继续保存长期状态c；

第二个开关，负责控制把即时状态输入到长期状态c；

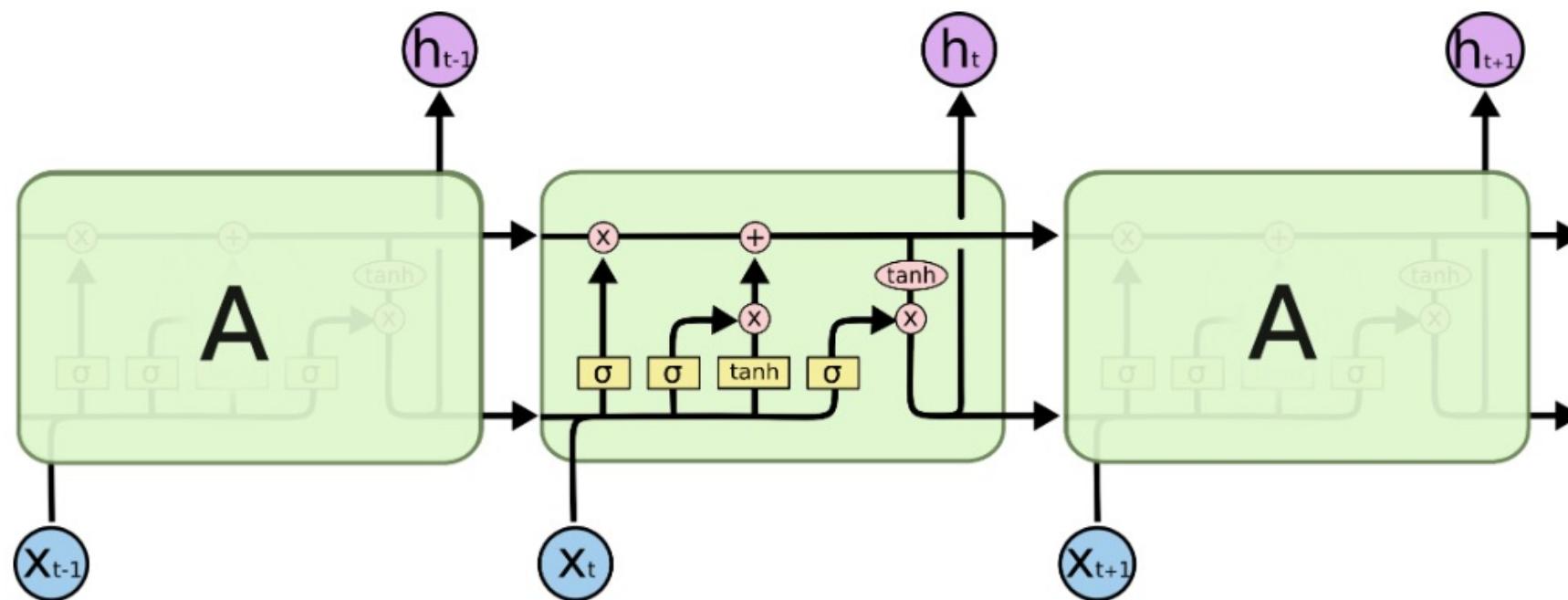
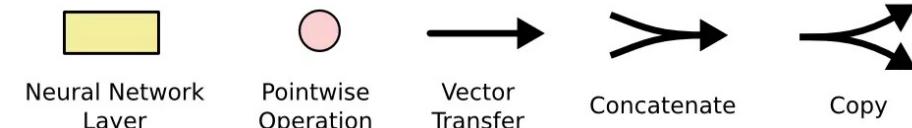
第三个开关，负责控制是否把长期状态c作为当前的LSTM的输出；



标准RNN的重复模块



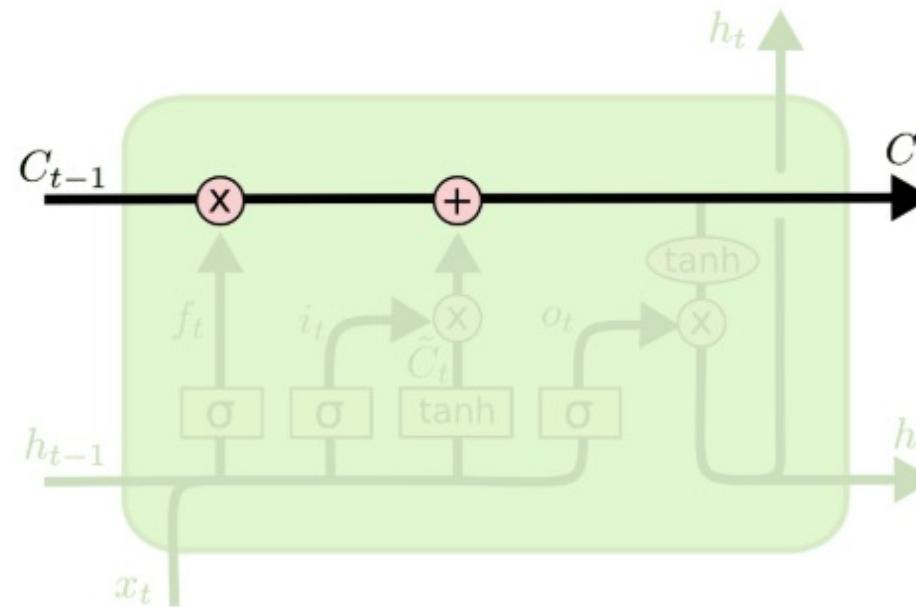
LSTM 的重复模块



除了 h 在随时间流动，单元状态 c 也在随时间流动，单元状态 c 就代表着长期记忆。

LSTM 的核心思想

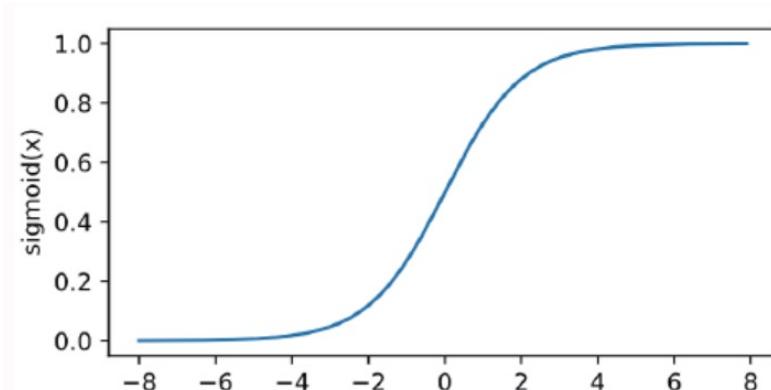
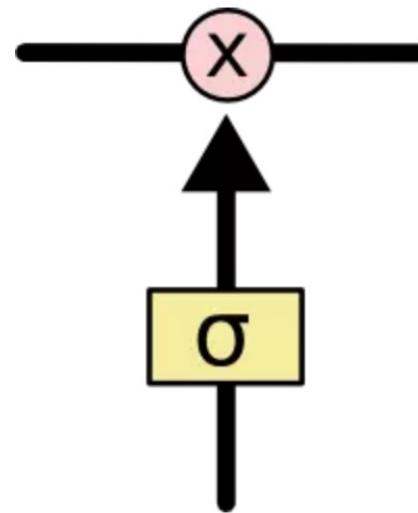
LSTM 的关键是单元状态，如水平线在图上方贯穿运行。



单元状态的传递类似于传送带，其直接在整个链上运行，中间只有一些少量的线性交互，容易保存相关信息。

前面描述的开关是怎样在算法中实现的呢？

LSTM 通过精心设计的称作为 “门” (**gate**) 的结构来去除或者增加单元状态中的信息。门是一种让信息选择式通过的方法。



此门包含一个 sigmoid 神经网络层和一个 pointwise 乘法操作

- LSTM用两个门来控制单元状态 c 的内容
 - **遗忘门 (forget gate)** , 它决定了上一时刻的单元状态 c_{t-1} 有多少保留到当前时刻 c_t ;
 - **输入门 (input gate)** , 它决定了当前时刻网络的输入 x_t 有多少保存到单元状态 c_t 。
- LSTM用**输出门 (output gate)** 来控制单元状态 c_t 有多少输出到LSTM的当前输出值 h_t

逐步理解 LSTM 之遗忘门

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

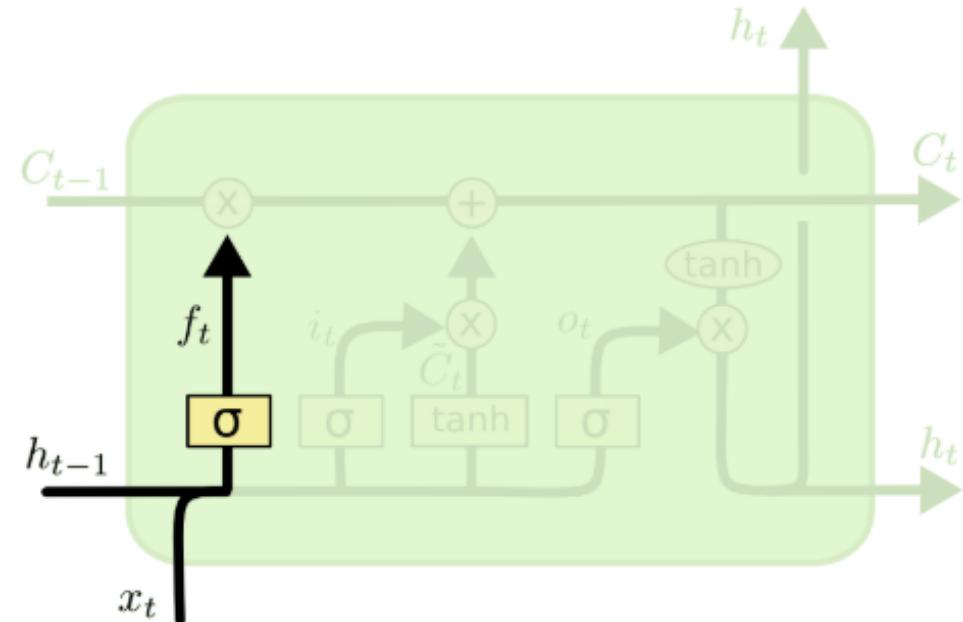
上式中, W_f 是遗忘门的权重矩阵

$[h_{t-1}, x_t]$ 表示把两个向量连接成一个更长的向量

b_f 是遗忘门的偏置项, σ 是sigmoid函数

如果输入的维度是 d_x , 隐藏层的维度是 d_h , 单元状态的维度是 d_c ,

则遗忘门的权重矩阵 W_f 的维度是 $d_c \times (d_h + d_x)$

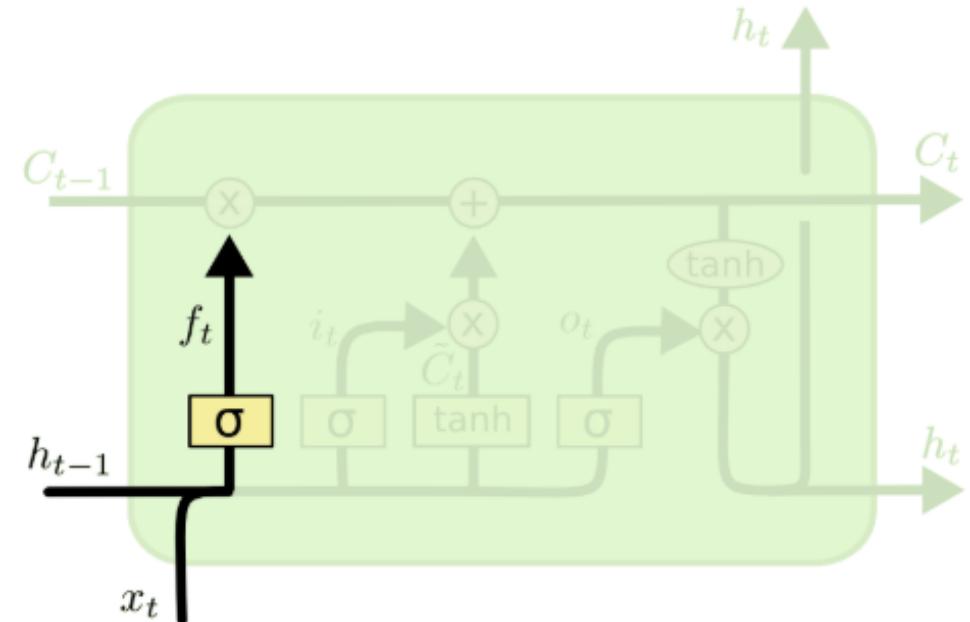


逐步理解 LSTM 之遗忘门

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

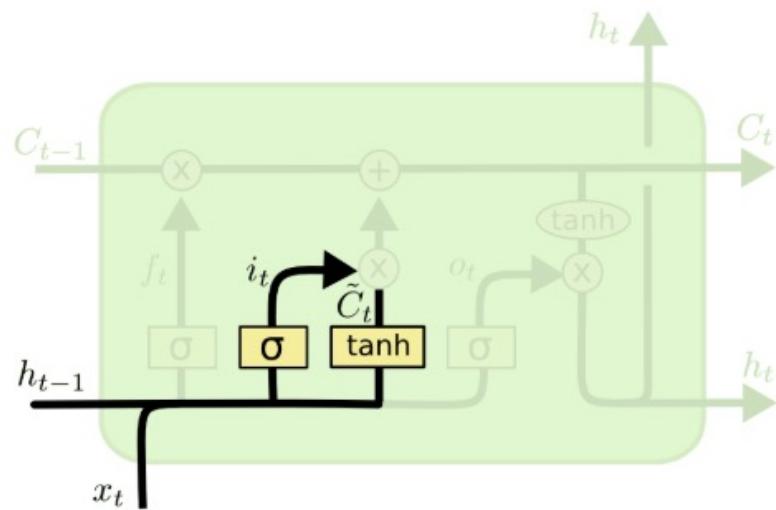
$$\begin{aligned} [W_f] \begin{bmatrix} \mathbf{h}_{t-1} \\ \mathbf{x}_t \end{bmatrix} &= [W_{fh} \quad W_{fx}] \begin{bmatrix} \mathbf{h}_{t-1} \\ \mathbf{x}_t \end{bmatrix} \\ &= W_{fh} \mathbf{h}_{t-1} + W_{fx} \mathbf{x}_t \end{aligned}$$

权重矩阵 W_f 是两个矩阵拼接而来的，
 一个是 W_{fh} ，它对应输入项 h_{t-1} ，其维度为 $d_c \times d_h$
 一个是 W_{fx} ，它对应这输入项 x_t ，其维度为 $d_c \times d_x$ 。



这个门怎么做到“遗忘”的呢？怎么理解？既然是遗忘旧的内容，为什么这个门还要接收新的 x_t ？

逐步理解 LSTM 之输入门



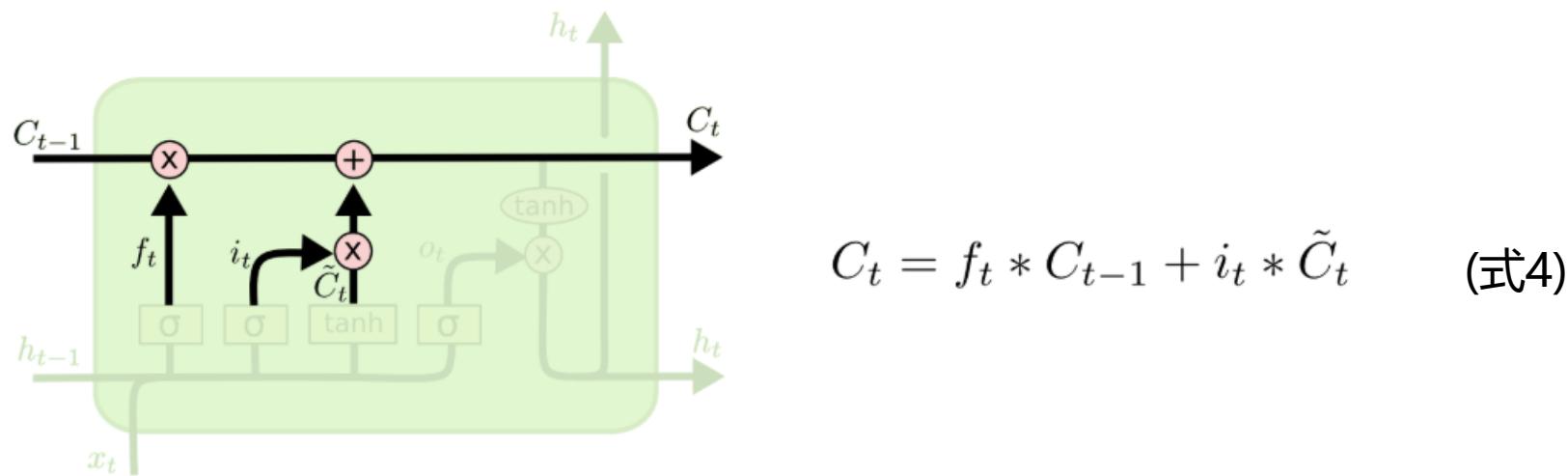
$$i_t = \sigma(W_i \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_i) \quad (\text{式2})$$

$$\tilde{C}_t = \tanh(W_C \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_C) \quad (\text{式3})$$

sigmoid 函数称为输入门，决定将要更新什么值

\tanh 层创建一个新的候选值向量， \tilde{C}_t 会被加入到状态中

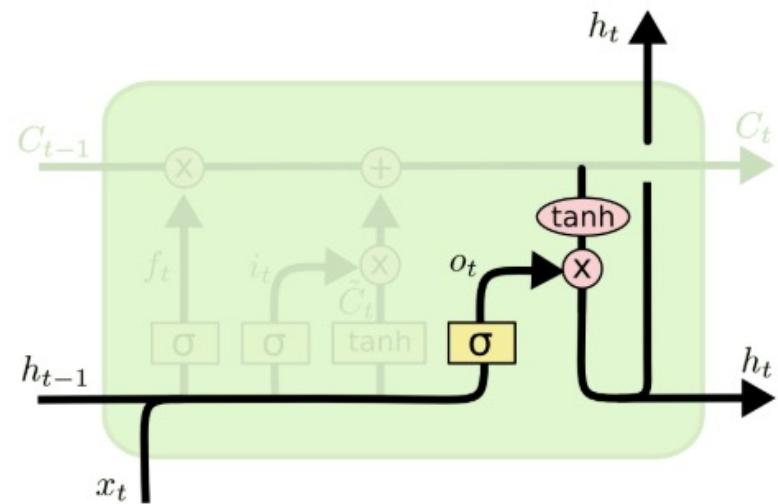
逐步理解 LSTM 之更新单元状态



现在开始计算当前时刻的单元状态 C_t 。它是由上一次的单元状态 C_{t-1} 按原元素乘以遗忘门 f_t ，再用当前输入的单元状态 \tilde{C}_t 按元素乘以输入门 i_t ，再将两个积加和产生的。

由于遗忘门的控制，它可以保存很久很久之前的信息，由于输入门的控制，它又可以避免当前无关紧要的内容进入记忆。

逐步理解 LSTM 之输出门

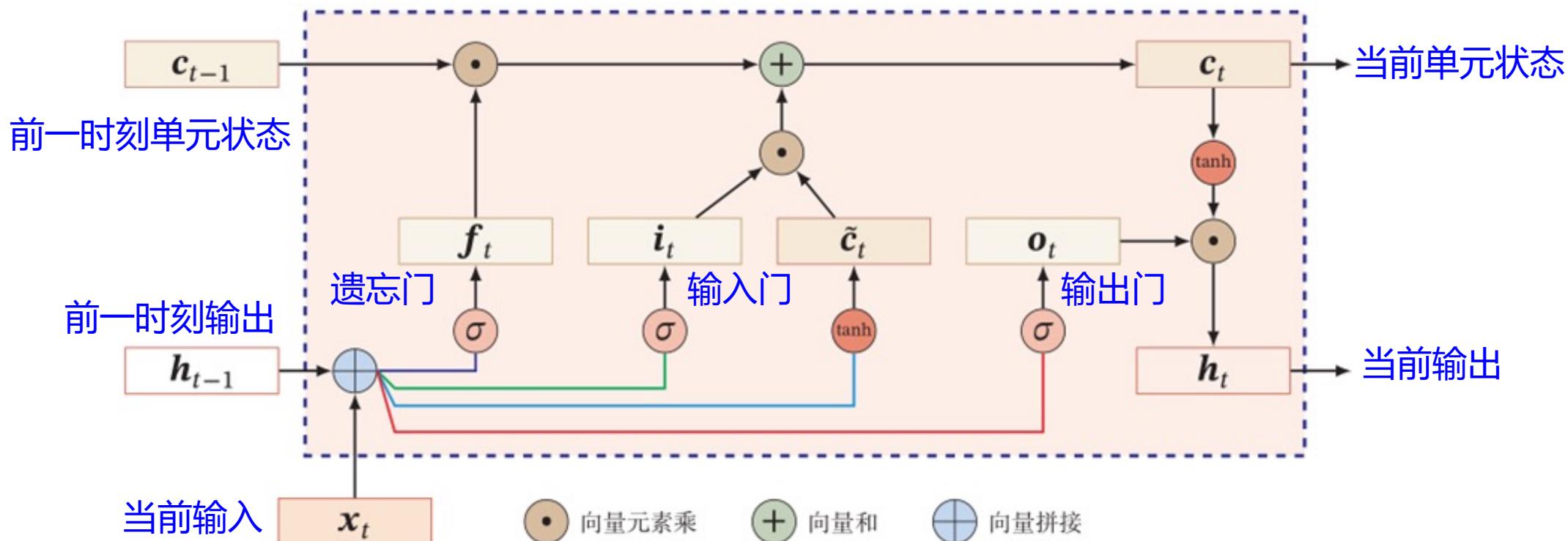


$$o_t = \sigma (W_o [h_{t-1}, x_t] + b_o) \quad (\text{式5})$$

$$h_t = o_t * \tanh (C_t) \quad (\text{式6})$$

输出门控制了长期记忆对当前输出的影响，其由输出门和单元状态共同确定。

长短期记忆网络 (LSTM)



$$i_t = \sigma(W_i \mathbf{x}_t + U_i \mathbf{h}_{t-1} + \mathbf{b}_i),$$

$$\tilde{\mathbf{c}}_t = \tanh(W_c \mathbf{x}_t + U_c \mathbf{h}_{t-1} + \mathbf{b}_c)$$

$$f_t = \sigma(W_f \mathbf{x}_t + U_f \mathbf{h}_{t-1} + \mathbf{b}_f),$$

$$\mathbf{c}_t = f_t \odot \mathbf{c}_{t-1} + i_t \odot \tilde{\mathbf{c}}_t,$$

$$\mathbf{o}_t = \sigma(W_o \mathbf{x}_t + U_o \mathbf{h}_{t-1} + \mathbf{b}_o),$$

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

1. LSTM训练算法框架

LSTM的训练算法仍然是反向传播算法。主要有下面三个步骤：

- ① 前向计算每个神经元的输出值，对于LSTM来说，即 $\mathbf{f}_t, \mathbf{i}_t, \mathbf{c}_t, \mathbf{o}_t, \mathbf{h}_t$ 五个向量的值。计算方法已经在上一节中描述过了。
- ② 反向计算每个神经元的**误差项值**。与**循环神经网络**一样，LSTM误差项的反向传播也是包括两个方向：一个是沿时间的反向传播，即从当前t时刻开始，计算每个时刻的误差项；一个是将误差项向上一层传播。
- ③ 根据相应的误差项，计算每个权重的梯度。

2. 关于公式和符号的说明

设定门gate的激活函数为sigmoid函数，输出的激活函数为tanh函数。它们的导数分别为：

$$\sigma(z) = y = \frac{1}{1 + e^{-z}}$$

$$\sigma'(z) = y(1 - y)$$

$$\tanh(z) = y = \frac{e^z - e^{-z}}{e^z + e^{-z}}$$

$$\tanh'(z) = 1 - y^2$$

sigmoid和tanh函数的导数都是原函数的函数。这样，一旦计算原函数的值，就可以用它来计算出导数的值。

LSTM需要学习的参数共有8组，分别是：
 遗忘门的权重矩阵 W_f 和偏置项 b_f 、
 输入门的权重矩阵 W_i 和偏置项 b_i 、
 输出门的权重矩阵 W_o 和偏置项 b_o 、
 计算单元状态的权重矩阵 W_c 和偏置项 b_c 。

因为权重矩阵的两部分在反向传播中使用不同的公式，因此在后续的推导中，权重矩阵 W_f W_i W_o W_c 都将被写为分开的两个矩阵

$$W_{fh} \ W_{fx} \ W_{ih} \ W_{ix} \ W_{oh} \ W_{ox} \ W_{ch} \ W_{cx}$$

按元素乘○符号。当○作用于两个**向量**时：

$$\mathbf{a} \circ \mathbf{b} = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \dots \\ a_n \end{bmatrix} \circ \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \dots \\ b_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 b_1 \\ a_2 b_2 \\ a_3 b_3 \\ \dots \\ a_n b_n \end{bmatrix}$$

当○作用于一个**向量**和一个**矩阵**时：

$$\mathbf{a} \circ X = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \dots \\ a_n \end{bmatrix} \circ \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13} & \dots & x_{1n} \\ x_{21} & x_{22} & x_{23} & \dots & x_{2n} \\ x_{31} & x_{32} & x_{33} & \dots & x_{3n} \\ \dots \\ x_{n1} & x_{n2} & x_{n3} & \dots & x_{nn} \end{bmatrix}$$

当 \circ 作用于两个矩阵时，两个矩阵对应位置的元素相乘。按元素乘可以在某些情况下简化矩阵和向量运算。例如，当一个对角矩阵右乘一个矩阵时，相当于用对角矩阵的对角线组成的向量按元素乘那个矩阵：

$$\text{diag}[\mathbf{a}]X = \mathbf{a} \circ X$$

当一个行向量右乘一个对角矩阵时，相当于这个行向量按元素乘那个矩阵对角线组成的向量：

$$\mathbf{a}^T \text{diag}[\mathbf{b}] = \mathbf{a}^T \circ \mathbf{b}$$

上面这两点，在后续推导中会多次用到。

在t时刻，LSTM的输出值为 \mathbf{h}_t 。定义t时刻的误差项 δ_t 为： $\delta_t^T \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{h}_t}$

LSTM有四个加权输入，分别对应 $\mathbf{f}_t, \mathbf{i}_t, \mathbf{c}_t, \mathbf{o}_t$ ，希望往上一层传递一个误差项而不是四个。
但仍然需要定义出这四个加权输入，以及他们对应的误差项。

$$\begin{aligned} \mathbf{net}_{f,t} &= W_f[\mathbf{h}_{t-1}, \mathbf{x}_t] + \mathbf{b}_f \\ &= W_{fh}\mathbf{h}_{t-1} + W_{fx}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_f \end{aligned} \quad \delta_{f,t}^T \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{f,t}}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{net}_{i,t} &= W_i[\mathbf{h}_{t-1}, \mathbf{x}_t] + \mathbf{b}_i \\ &= W_{ih}\mathbf{h}_{t-1} + W_{ix}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_i \end{aligned} \quad \delta_{i,t}^T \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{i,t}}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{net}_{\tilde{c},t} &= W_c[\mathbf{h}_{t-1}, \mathbf{x}_t] + \mathbf{b}_c \\ &= W_{ch}\mathbf{h}_{t-1} + W_{cx}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_c \end{aligned} \quad \delta_{\tilde{c},t}^T \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{\tilde{c},t}}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{net}_{o,t} &= W_o[\mathbf{h}_{t-1}, \mathbf{x}_t] + \mathbf{b}_o \\ &= W_{oh}\mathbf{h}_{t-1} + W_{ox}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_o \end{aligned} \quad \delta_{o,t}^T \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{o,t}}$$

3. 误差项沿时间的反向传递

沿时间反向传递误差项，就是要计算出 $t-1$ 时刻的误差项 δ_{t-1}

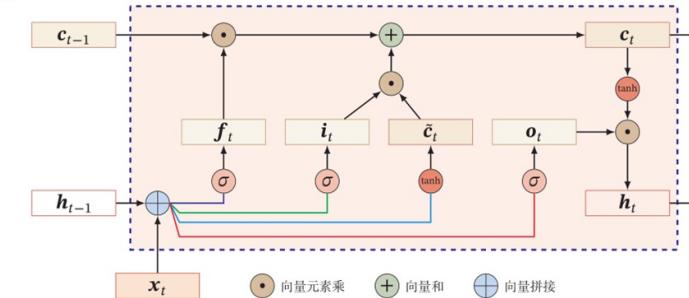
$$\delta_{t-1}^T = \frac{\partial E}{\partial \mathbf{h}_{t-1}} = \frac{\partial E}{\partial \mathbf{h}_t} \frac{\partial \mathbf{h}_t}{\partial \mathbf{h}_{t-1}} = \delta_t^T \frac{\partial \mathbf{h}_t}{\partial \mathbf{h}_{t-1}}$$

我们知道， $\frac{\partial \mathbf{h}_t}{\partial \mathbf{h}_{t-1}}$ 是一个Jacobian矩阵。如果隐藏层 h 的维度是 N 的话，那么它就是一个 $N \times N$ 矩阵。

为了求出它，我们列出 \mathbf{h}_t 的计算公式，即前面的**式6和式4**： $\mathbf{h}_t = \mathbf{o}_t \circ \tanh(\mathbf{c}_t)$
 $\mathbf{c}_t = \mathbf{f}_t \circ \mathbf{c}_{t-1} + \mathbf{i}_t \circ \tilde{\mathbf{c}}_t$

利用全导数公式可得 (式7) :

$$\delta_t^T \frac{\partial \mathbf{h}_t}{\partial \mathbf{h}_{t-1}} = \delta_t^T \frac{\partial \mathbf{h}_t}{\partial \mathbf{o}_t} \frac{\partial \mathbf{o}_t}{\partial \text{net}_{o,t}} \frac{\partial \text{net}_{o,t}}{\partial \mathbf{h}_{t-1}} + \delta_t^T \frac{\partial \mathbf{h}_t}{\partial \mathbf{c}_t} \frac{\partial \mathbf{c}_t}{\partial \mathbf{f}_t} \frac{\partial \mathbf{f}_t}{\partial \text{net}_{f,t}} \frac{\partial \text{net}_{f,t}}{\partial \mathbf{h}_{t-1}} + \delta_t^T \frac{\partial \mathbf{h}_t}{\partial \mathbf{i}_t} \frac{\partial \mathbf{i}_t}{\partial \text{net}_{i,t}} \frac{\partial \text{net}_{i,t}}{\partial \mathbf{h}_{t-1}}$$



$$\delta_t^T \frac{\partial \mathbf{h}_t}{\partial \mathbf{h}_{t-1}} = \delta_t^T \frac{\partial \mathbf{h}_t}{\partial \mathbf{o}_t} \frac{\partial \mathbf{o}_t}{\partial \text{net}_{o,t}} \frac{\partial \text{net}_{o,t}}{\partial \mathbf{h}_{t-1}} + \delta_t^T \frac{\partial \mathbf{h}_t}{\partial \mathbf{c}_t} \frac{\partial \mathbf{c}_t}{\partial \mathbf{f}_t} \frac{\partial \mathbf{f}_t}{\partial \text{net}_{f,t}} \frac{\partial \text{net}_{f,t}}{\partial \mathbf{h}_{t-1}} + \delta_t^T \frac{\partial \mathbf{h}_t}{\partial \mathbf{c}_t} \frac{\partial \mathbf{c}_t}{\partial \mathbf{i}_t} \frac{\partial \mathbf{i}_t}{\partial \text{net}_{i,t}} \frac{\partial \text{net}_{i,t}}{\partial \mathbf{h}_{t-1}}$$

下面，要把式7中的每个偏导数都求出来。

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

$$\mathbf{c}_t = \mathbf{f}_t \circ \mathbf{c}_{t-1} + \mathbf{i}_t \circ \tilde{\mathbf{c}}_t$$

根据式6，可以求出： $\frac{\partial \mathbf{h}_t}{\partial \mathbf{o}_t} = \text{diag}[\tanh(\mathbf{c}_t)]$

$$\frac{\partial \mathbf{h}_t}{\partial \mathbf{c}_t} = \text{diag}\left[\mathbf{o}_t \circ \left(1 - \tanh(\mathbf{c}_t)^2\right)\right]$$

根据式4，可以求出： $\frac{\partial \mathbf{c}_t}{\partial \mathbf{f}_t} = \text{diag}[\mathbf{c}_{t-1}]$

$$\frac{\partial \mathbf{c}_t}{\partial \mathbf{i}_t} = \text{diag}[\tilde{\mathbf{c}}_t]$$

$$\frac{\partial \mathbf{c}_t}{\partial \tilde{\mathbf{c}}_t} = \text{diag}[\mathbf{i}_t]$$

因为：

$$\mathbf{o}_t = \sigma(\mathbf{net}_{o,t})$$

$$\mathbf{net}_{o,t} = W_{oh}\mathbf{h}_{t-1} + W_{ox}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_o$$

$$\mathbf{f}_t = \sigma(\mathbf{net}_{f,t})$$

$$\mathbf{net}_{f,t} = W_{fh}\mathbf{h}_{t-1} + W_{fx}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_f$$

$$\mathbf{i}_t = \sigma(\mathbf{net}_{i,t})$$

$$\mathbf{net}_{i,t} = W_{ih}\mathbf{h}_{t-1} + W_{ix}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_i$$

$$\tilde{\mathbf{c}}_t = \tanh(\mathbf{net}_{\tilde{c},t})$$

$$\mathbf{net}_{\tilde{c},t} = W_{ch}\mathbf{h}_{t-1} + W_{cx}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_c$$

$$\sigma'(z) = y(1-y) \quad \tanh'(z) = 1 - y^2$$



$$\frac{\partial \mathbf{o}_t}{\partial \mathbf{net}_{o,t}} = \text{diag}[\mathbf{o}_t \circ (1 - \mathbf{o}_t)]$$

$$\frac{\partial \mathbf{net}_{o,t}}{\partial \mathbf{h}_{t-1}} = W_{oh}$$

$$\frac{\partial \mathbf{f}_t}{\partial \mathbf{net}_{f,t}} = \text{diag}[\mathbf{f}_t \circ (1 - \mathbf{f}_t)]$$

$$\frac{\partial \mathbf{net}_{f,t}}{\partial \mathbf{h}_{t-1}} = W_{fh}$$

$$\frac{\partial \mathbf{i}_t}{\partial \mathbf{net}_{i,t}} = \text{diag}[\mathbf{i}_t \circ (1 - \mathbf{i}_t)]$$

$$\frac{\partial \mathbf{net}_{i,t}}{\partial \mathbf{h}_{t-1}} = W_{ih}$$

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{c}}_t}{\partial \mathbf{net}_{\tilde{c},t}} = \text{diag}[1 - \tilde{\mathbf{c}}_t^2]$$

$$\frac{\partial \mathbf{net}_{\tilde{c},t}}{\partial \mathbf{h}_{t-1}} = W_{ch}$$

根据 $\delta_{o,t}$ $\delta_{f,t}$ $\delta_{i,t}$ $\delta_{\tilde{c},t}$ 的定义，可知： $\delta_{o,t}^T \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial E}{\partial \text{net}_{o,t}} = \frac{\partial E}{\partial \mathbf{h}_t} \frac{\partial \mathbf{h}_t}{\partial \mathbf{o}_t} \frac{\partial \mathbf{o}_t}{\partial \text{net}_{o,t}}$

$$\frac{\partial \mathbf{h}_t}{\partial \mathbf{o}_t} = \text{diag}[\tanh(\mathbf{c}_t)] \quad \frac{\partial \mathbf{o}_t}{\partial \text{net}_{o,t}} = \text{diag}[\mathbf{o}_t \circ (1 - \mathbf{o}_t)]$$

$$\delta_{o,t}^T = \delta_t^T \circ \tanh(\mathbf{c}_t) \circ \mathbf{o}_t \circ (1 - \mathbf{o}_t) \quad (\text{式8})$$

$$\delta_{f,t}^T = \delta_t^T \circ \mathbf{o}_t \circ \left(1 - \tanh(\mathbf{c}_t)^2\right) \circ \mathbf{c}_{t-1} \circ \mathbf{f}_t \circ (1 - \mathbf{f}_t) \quad (\text{式9})$$

$$\delta_{i,t}^T = \delta_t^T \circ \mathbf{o}_t \circ \left(1 - \tanh(\mathbf{c}_t)^2\right) \circ \tilde{\mathbf{c}}_t \circ \mathbf{i}_t \circ (1 - \mathbf{i}_t) \quad (\text{式10})$$

$$\delta_{\tilde{c},t}^T = \delta_t^T \circ \mathbf{o}_t \circ \left(1 - \tanh(\mathbf{c}_t)^2\right) \circ \mathbf{i}_t \circ (1 - \tilde{\mathbf{c}}^2) \quad (\text{式11})$$

长短期记忆网络 (LSTM)

$$\begin{aligned}\delta_{o,t}^T &= \delta_t^T \circ \tanh(\mathbf{c}_t) \circ \mathbf{o}_t \circ (1 - \mathbf{o}_t) \\ \delta_{f,t}^T &= \delta_t^T \circ \mathbf{o}_t \circ (1 - \tanh(\mathbf{c}_t)^2) \circ \mathbf{c}_{t-1} \circ \mathbf{f}_t \circ (1 - \mathbf{f}_t) \\ \delta_{i,t}^T &= \delta_t^T \circ \mathbf{o}_t \circ (1 - \tanh(\mathbf{c}_t)^2) \circ \tilde{\mathbf{c}}_t \circ \mathbf{i}_t \circ (1 - \mathbf{i}_t) \\ \delta_{\tilde{c},t}^T &= \delta_t^T \circ \mathbf{o}_t \circ (1 - \tanh(\mathbf{c}_t)^2) \circ \mathbf{i}_t \circ (1 - \tilde{\mathbf{c}}^2)\end{aligned}$$

将上述偏导数带入到式7，得到：

$$\begin{aligned}\delta_t^T \frac{\partial \mathbf{h}_t}{\partial \mathbf{h}_{t-1}} &= \delta_t^T \frac{\partial \mathbf{h}_t}{\partial \mathbf{o}_t} \frac{\partial \mathbf{o}_t}{\partial \mathbf{net}_{o,t}} \frac{\partial \mathbf{net}_{o,t}}{\partial \mathbf{h}_{t-1}} + \delta_t^T \frac{\partial \mathbf{h}_t}{\partial \mathbf{c}_t} \frac{\partial \mathbf{c}_t}{\partial \mathbf{f}_t} \frac{\partial \mathbf{f}_t}{\partial \mathbf{net}_{f,t}} \frac{\partial \mathbf{net}_{f,t}}{\partial \mathbf{h}_{t-1}} + \delta_t^T \frac{\partial \mathbf{h}_t}{\partial \mathbf{c}_t} \frac{\partial \mathbf{c}_t}{\partial \mathbf{i}_t} \frac{\partial \mathbf{i}_t}{\partial \mathbf{net}_{i,t}} \frac{\partial \mathbf{net}_{i,t}}{\partial \mathbf{h}_{t-1}} \\ &= \delta_{o,t}^T \frac{\partial \mathbf{net}_{o,t}}{\partial \mathbf{h}_{t-1}} + \delta_{f,t}^T \frac{\partial \mathbf{net}_{f,t}}{\partial \mathbf{h}_{t-1}} + \delta_{i,t}^T \frac{\partial \mathbf{net}_{i,t}}{\partial \mathbf{h}_{t-1}} + \delta_{\tilde{c},t}^T \frac{\partial \mathbf{net}_{\tilde{c},t}}{\partial \mathbf{h}_{t-1}} \\ &= \delta_{o,t}^T W_{oh} + \delta_{f,t}^T W_{fh} + \delta_{i,t}^T W_{ih} + \delta_{\tilde{c},t}^T W_{ch} = \delta_{t-1}^T\end{aligned}\quad (\text{式12})$$

式12就是将误差沿时间反向传播一个时刻的公式。有了它，可以写出将误差项向前传递到任意 k 时刻的公式：

$$\delta_k^T = \prod_{j=k}^{t-1} \delta_{o,j}^T W_{oh} + \delta_{f,j}^T W_{fh} + \delta_{i,j}^T W_{ih} + \delta_{\tilde{c},j}^T W_{ch} \quad (\text{式13})$$

4. 将误差项传递到上一层

假设当前为第 l 层，定义 $l - 1$ 层的误差项是误差函数对 $l - 1$ 层加权输入的导数，即：

$$\delta_t^{l-1} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial E}{\mathbf{net}_t^{l-1}}$$

本次LSTM的输入 x_t 由下面的公式计算：

$$\mathbf{x}_t^l = f^{l-1}(\mathbf{net}_t^{l-1})$$

上式中， f^{l-1} 表示第 $l - 1$ 层的激活函数。

因为 $\text{net}_{f,t}^l, \text{net}_{i,t}^l, \text{net}_{\tilde{c},t}^l, \text{net}_{o,t}^l$ 都是 x_t 的函数，又是 net_t^{l-1} 的函数，因此，要求出 E 对 net_t^{l-1} 的导数，就需要使用全导数公式：

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial E}{\partial \text{net}_t^{l-1}} &= \frac{\partial E}{\partial \text{net}_{f,t}^l} \frac{\partial \text{net}_{f,t}^l}{\partial \mathbf{x}_t^l} \frac{\partial \mathbf{x}_t^l}{\partial \text{net}_t^{l-1}} + \frac{\partial E}{\partial \text{net}_{i,t}^l} \frac{\partial \text{net}_{i,t}^l}{\partial \mathbf{x}_t^l} \frac{\partial \mathbf{x}_t^l}{\partial \text{net}_t^{l-1}} + \frac{\partial E}{\partial \text{net}_{\tilde{c},t}^l} \frac{\partial \text{net}_{\tilde{c},t}^l}{\partial \mathbf{x}_t^l} \frac{\partial \mathbf{x}_t^l}{\partial \text{net}_t^{l-1}} + \frac{\partial E}{\partial \text{net}_{o,t}^l} \frac{\partial \text{net}_{o,t}^l}{\partial \mathbf{x}_t^l} \frac{\partial \mathbf{x}_t^l}{\partial \text{net}_t^{l-1}} \\
 &= \delta_{f,t}^T W_{fx} \circ f'(\text{net}_t^{l-1}) + \delta_{i,t}^T W_{ix} \circ f'(\text{net}_t^{l-1}) + \delta_{\tilde{c},t}^T W_{cx} \circ f'(\text{net}_t^{l-1}) + \delta_{o,t}^T W_{ox} \circ f'(\text{net}_t^{l-1}) \\
 &= (\delta_{f,t}^T W_{fx} + \delta_{i,t}^T W_{ix} + \delta_{\tilde{c},t}^T W_{cx} + \delta_{o,t}^T W_{ox}) \circ f'(\text{net}_t^{l-1})
 \end{aligned} \tag{式 14}$$

式14就是将误差传递到上一层的公式。

$$\begin{aligned}
 \mathbf{o}_t &= \sigma(\text{net}_{o,t}) \\
 \text{net}_{o,t} &= W_{oh} \mathbf{h}_{t-1} + W_{ox} \mathbf{x}_t + \mathbf{b}_o \\
 \mathbf{f}_t &= \sigma(\text{net}_{f,t}) \\
 \text{net}_{f,t} &= W_{fh} \mathbf{h}_{t-1} + W_{fx} \mathbf{x}_t + \mathbf{b}_f \\
 \mathbf{i}_t &= \sigma(\text{net}_{i,t}) \\
 \text{net}_{i,t} &= W_{ih} \mathbf{h}_{t-1} + W_{ix} \mathbf{x}_t + \mathbf{b}_i \\
 \tilde{\mathbf{c}}_t &= \tanh(\text{net}_{\tilde{c},t}) \\
 \text{net}_{\tilde{c},t} &= W_{ch} \mathbf{h}_{t-1} + W_{cx} \mathbf{x}_t + \mathbf{b}_c
 \end{aligned}$$

5. 权重梯度的计算

对于 $W_{fh}, W_{ih}, W_{ch}, W_{oh}$ 重梯度，我们知道它的梯度是各个时刻梯度之和，我们首先求出它们在t时刻的梯度，然后再求出他们最终的梯度。

$$\mathbf{o}_t = \sigma(\mathbf{net}_{o,t})$$

$$\mathbf{net}_{o,t} = W_{oh}\mathbf{h}_{t-1} + W_{ox}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_o$$

$$\mathbf{f}_t = \sigma(\mathbf{net}_{f,t})$$

$$\mathbf{net}_{f,t} = W_{fh}\mathbf{h}_{t-1} + W_{fx}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_f$$

$$\mathbf{i}_t = \sigma(\mathbf{net}_{i,t})$$

$$\mathbf{net}_{i,t} = W_{ih}\mathbf{h}_{t-1} + W_{ix}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_i$$

$$\tilde{\mathbf{c}}_t = \tanh(\mathbf{net}_{\tilde{c},t})$$

$$\mathbf{net}_{\tilde{c},t} = W_{ch}\mathbf{h}_{t-1} + W_{cx}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_c$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial W_{oh,t}} &= \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{o,t}} \frac{\partial \mathbf{net}_{o,t}}{\partial W_{oh,t}} \\ &= \delta_{o,t} \mathbf{h}_{t-1}^T \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial W_{fh,t}} &= \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{f,t}} \frac{\partial \mathbf{net}_{f,t}}{\partial W_{fh,t}} \\ &= \delta_{f,t} \mathbf{h}_{t-1}^T \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial W_{ih,t}} &= \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{i,t}} \frac{\partial \mathbf{net}_{i,t}}{\partial W_{ih,t}} \\ &= \delta_{i,t} \mathbf{h}_{t-1}^T \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial W_{ch,t}} &= \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{\tilde{c},t}} \frac{\partial \mathbf{net}_{\tilde{c},t}}{\partial W_{ch,t}} \\ &= \delta_{\tilde{c},t} \mathbf{h}_{t-1}^T \end{aligned}$$

$$\frac{\partial E}{\partial W_{oh}} = \sum_{j=1}^t \delta_{o,j} \mathbf{h}_{j-1}^T$$

$$\frac{\partial E}{\partial W_{fh}} = \sum_{j=1}^t \delta_{f,j} \mathbf{h}_{j-1}^T$$

$$\frac{\partial E}{\partial W_{ih}} = \sum_{j=1}^t \delta_{i,j} \mathbf{h}_{j-1}^T$$

$$\frac{\partial E}{\partial W_{ch}} = \sum_{j=1}^t \delta_{\tilde{c},j} \mathbf{h}_{j-1}^T$$

对于偏置项 $\mathbf{b}_f, \mathbf{b}_i, \mathbf{b}_c, \mathbf{b}_o$ 梯度，也是将各个时刻的梯度加在一起。下面是各个时刻的偏置项梯度：

$$\begin{aligned}\frac{\partial E}{\partial \mathbf{b}_{o,t}} &= \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{o,t}} \frac{\partial \mathbf{net}_{o,t}}{\partial \mathbf{b}_{o,t}} \\ &= \delta_{o,t}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial E}{\partial \mathbf{b}_{f,t}} &= \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{f,t}} \frac{\partial \mathbf{net}_{f,t}}{\partial \mathbf{b}_{f,t}} \\ &= \delta_{f,t}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial E}{\partial \mathbf{b}_{i,t}} &= \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{i,t}} \frac{\partial \mathbf{net}_{i,t}}{\partial \mathbf{b}_{i,t}} \\ &= \delta_{i,t}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial E}{\partial \mathbf{b}_{c,t}} &= \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{\tilde{c},t}} \frac{\partial \mathbf{net}_{\tilde{c},t}}{\partial \mathbf{b}_{c,t}} \\ &= \delta_{\tilde{c},t}\end{aligned}$$

$$\mathbf{o}_t = \sigma(\mathbf{net}_{o,t})$$

$$\mathbf{net}_{o,t} = W_{oh} \mathbf{h}_{t-1} + W_{ox} \mathbf{x}_t + \mathbf{b}_o$$

$$\mathbf{f}_t = \sigma(\mathbf{net}_{f,t})$$

$$\mathbf{net}_{f,t} = W_{fh} \mathbf{h}_{t-1} + W_{fx} \mathbf{x}_t + \mathbf{b}_f$$

$$\mathbf{i}_t = \sigma(\mathbf{net}_{i,t})$$

$$\mathbf{net}_{i,t} = W_{ih} \mathbf{h}_{t-1} + W_{ix} \mathbf{x}_t + \mathbf{b}_i$$

$$\tilde{\mathbf{c}}_t = \tanh(\mathbf{net}_{\tilde{c},t})$$

$$\mathbf{net}_{\tilde{c},t} = W_{ch} \mathbf{h}_{t-1} + W_{cx} \mathbf{x}_t + \mathbf{b}_c$$

$$\frac{\partial E}{\partial \mathbf{b}_o} = \sum_{j=1}^t \delta_{o,j}$$

$$\frac{\partial E}{\partial \mathbf{b}_i} = \sum_{j=1}^t \delta_{i,j}$$

$$\frac{\partial E}{\partial \mathbf{b}_f} = \sum_{j=1}^t \delta_{f,j}$$

$$\frac{\partial E}{\partial \mathbf{b}_c} = \sum_{j=1}^t \delta_{\tilde{c},j}$$

对于 $W_{fx}, W_{ix}, W_{cx}, W_{ox}$ 的重梯度，只需要根据相应的误差项直接计算即可

$$\mathbf{o}_t = \sigma(\mathbf{net}_{o,t})$$

$$\mathbf{net}_{o,t} = W_{oh}\mathbf{h}_{t-1} + W_{ox}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_o$$

$$\mathbf{f}_t = \sigma(\mathbf{net}_{f,t})$$

$$\mathbf{net}_{f,t} = W_{fh}\mathbf{h}_{t-1} + W_{fx}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_f$$

$$\mathbf{i}_t = \sigma(\mathbf{net}_{i,t})$$

$$\mathbf{net}_{i,t} = W_{ih}\mathbf{h}_{t-1} + W_{ix}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_i$$

$$\tilde{\mathbf{c}}_t = \tanh(\mathbf{net}_{\tilde{c},t})$$

$$\mathbf{net}_{\tilde{c},t} = W_{ch}\mathbf{h}_{t-1} + W_{cx}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_c$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial E}{\partial W_{ox}} &= \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{o,t}} \frac{\partial \mathbf{net}_{o,t}}{\partial W_{ox}} \\ &= \delta_{o,t} \mathbf{x}_t^T\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial E}{\partial W_{fx}} &= \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{f,t}} \frac{\partial \mathbf{net}_{f,t}}{\partial W_{fx}} \\ &= \delta_{f,t} \mathbf{x}_t^T\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial E}{\partial W_{ix}} &= \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{i,t}} \frac{\partial \mathbf{net}_{i,t}}{\partial W_{ix}} \\ &= \delta_{i,t} \mathbf{x}_t^T\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial E}{\partial W_{cx}} &= \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{\tilde{c},t}} \frac{\partial \mathbf{net}_{\tilde{c},t}}{\partial W_{cx}} \\ &= \delta_{\tilde{c},t} \mathbf{x}_t^T\end{aligned}$$

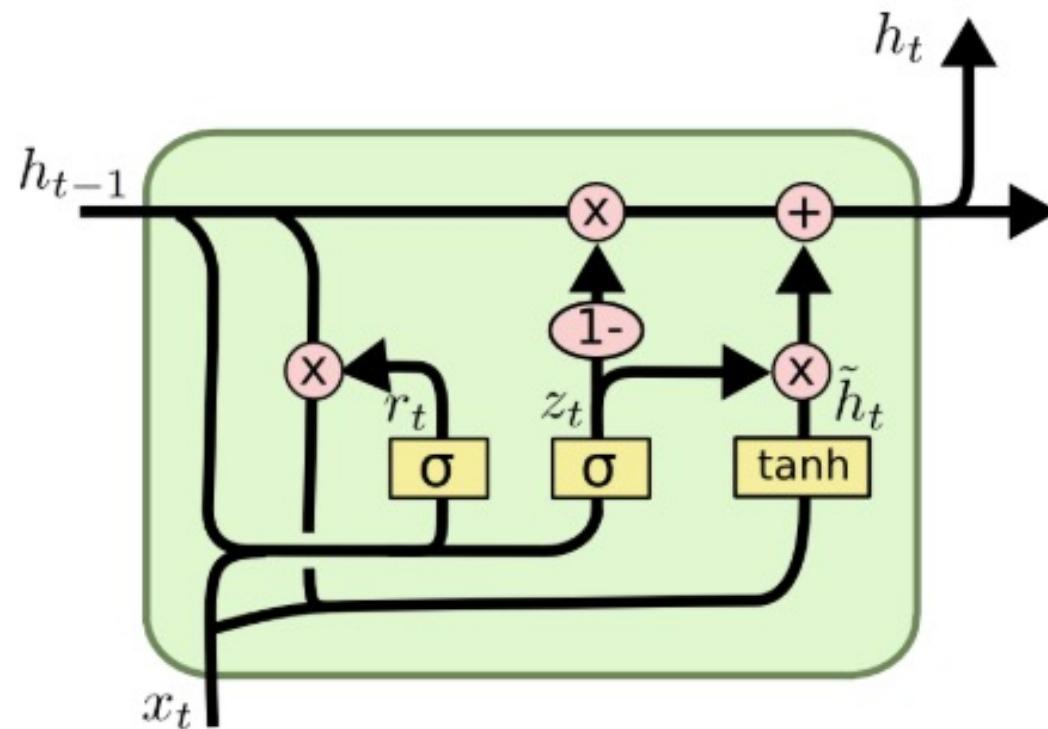
章节目录

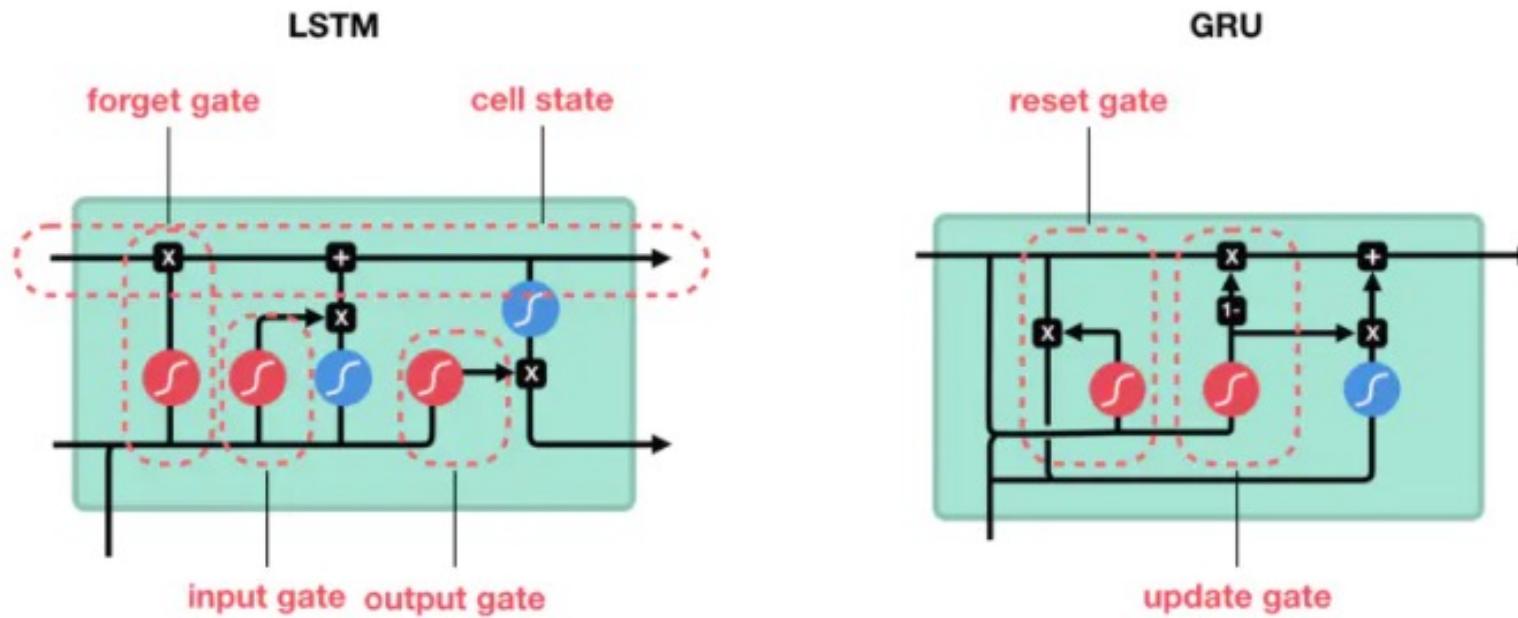
CONTENTS

- 01 | 长程依赖问题
- 02 | 长短期记忆网络 (LSTM)
- 03 | 门控循环神经网络 (GRU)
- 04 | 深度循环神经网络



GRU (Gate Recurrent Unit) 是循环神经网络RNN的一种。和LSTM一样，也是为了解决长期记忆和反向传播中的梯度等问题而提出来的。





GRU是LSTM的一种变体，它较LSTM网络的结构更加简单，而且效果也很好。

LSTM引入了三个门函数：输入门、遗忘门和输出门来控制输入值、记忆值和输出值。

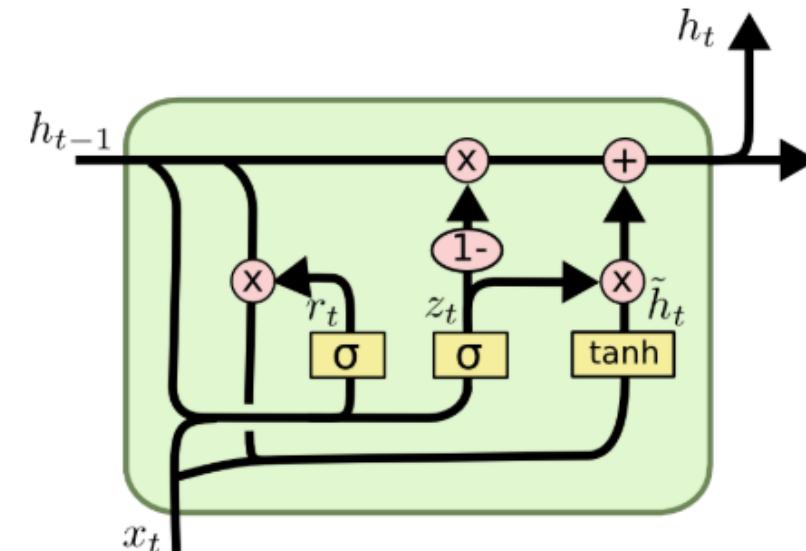
而在GRU模型中只有两个门，分别是更新门和重置门。

另外，GRU将单元状态与输出合并为一个状态 h 。

图中的 z_t 和 r_t 分别表示更新门和重置门。

更新门用于控制前一时刻的状态信息被带入到当前状态中的程度，更新门的值越大说明前一时刻的状态信息带入越多。

重置门控制前一状态有多少信息被写入到当前的候选集 \tilde{h}_t 上，重置门越小，前一状态的信息被写入的越少。



$$z_t = \sigma(W_z \cdot [h_{t-1}, x_t])$$

$$r_t = \sigma(W_r \cdot [h_{t-1}, x_t])$$

$$\tilde{h}_t = \tanh(W \cdot [r_t * h_{t-1}, x_t])$$

$$h_t = (1 - z_t) * h_{t-1} + z_t * \tilde{h}_t$$

LSTM与GRU

- GRU的参数更少，因而训练稍快或需要更少的数据来泛化。
- 如果你有足够的数据，LSTM的强大表达能力可能会产生更好的结果。

Greff, et al. (2016)对流行的LSTM变种做了对比实验，发现它们的表现几乎一致。

Jozefowicz, et al. (2015)测试了超过一万中RNN结构，发现某些任务情形下，有些变种比LSTM工作得更好。

章节目录

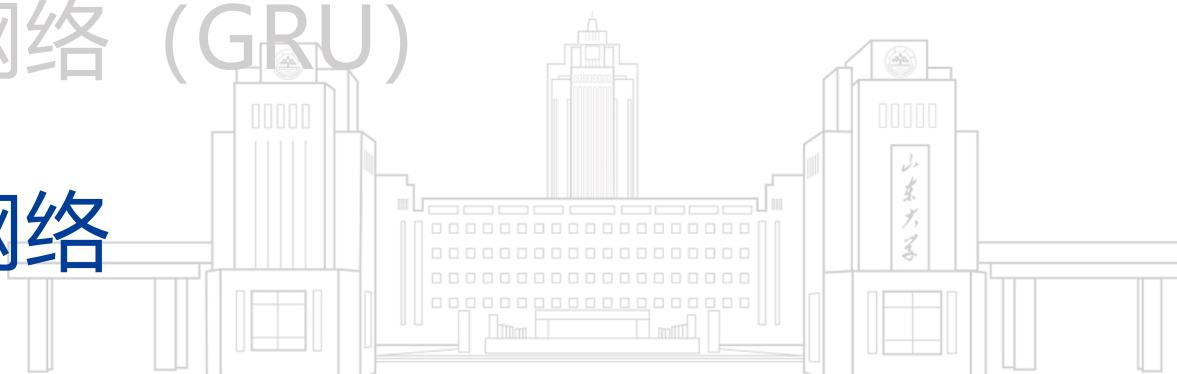
CONTENTS

01 | 长程依赖问题

02 | 长短期记忆网络 (LSTM)

03 | 门控循环神经网络 (GRU)

04 | 深度循环神经网络



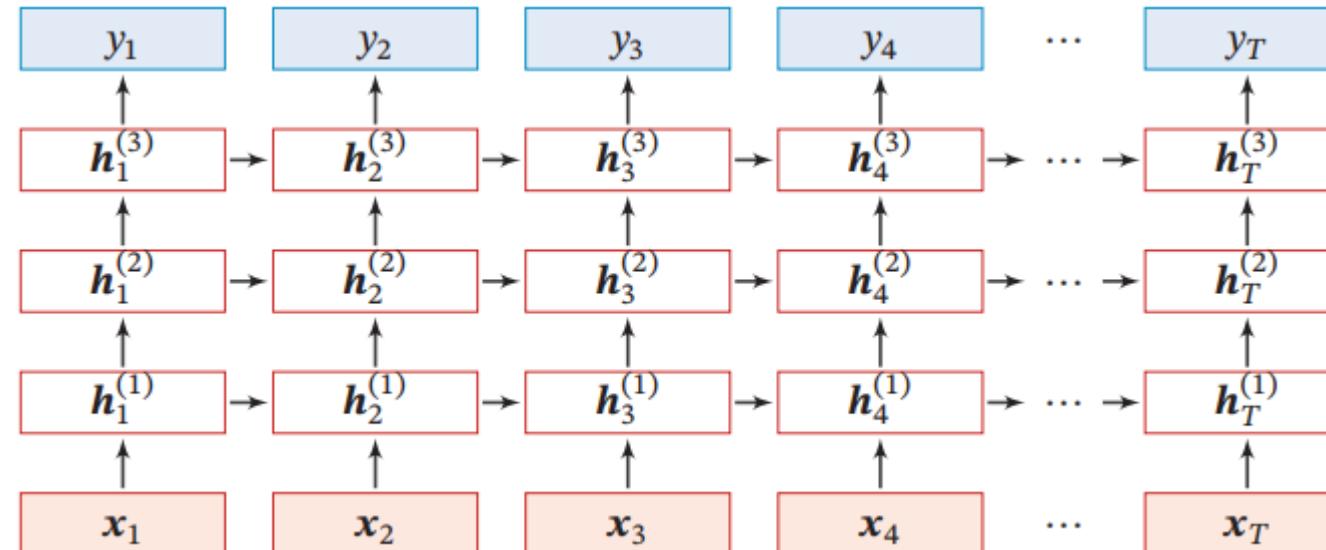
- 循环神经网络是可深可浅的网络

- 深网络：把循环网络按时间展开，长时间间隔的状态之间的路径很长
- 浅网络：同一时刻网络输入到输出之间的路径 $x_t \rightarrow y_t$ 非常浅

- 增加循环神经网络的深度

- 增强循环神经网络的能力
- 增加同一时刻网络输入到输出之间的路径 $x_t \rightarrow y_t$ ，如增加隐状态到输出 $h_t \rightarrow y_t$ ，以及输入到隐状态 $x_t \rightarrow h_t$ 之间的路径的深度

堆叠循环神经网络 (Stacked Recurrent Neural Network, SRNN)

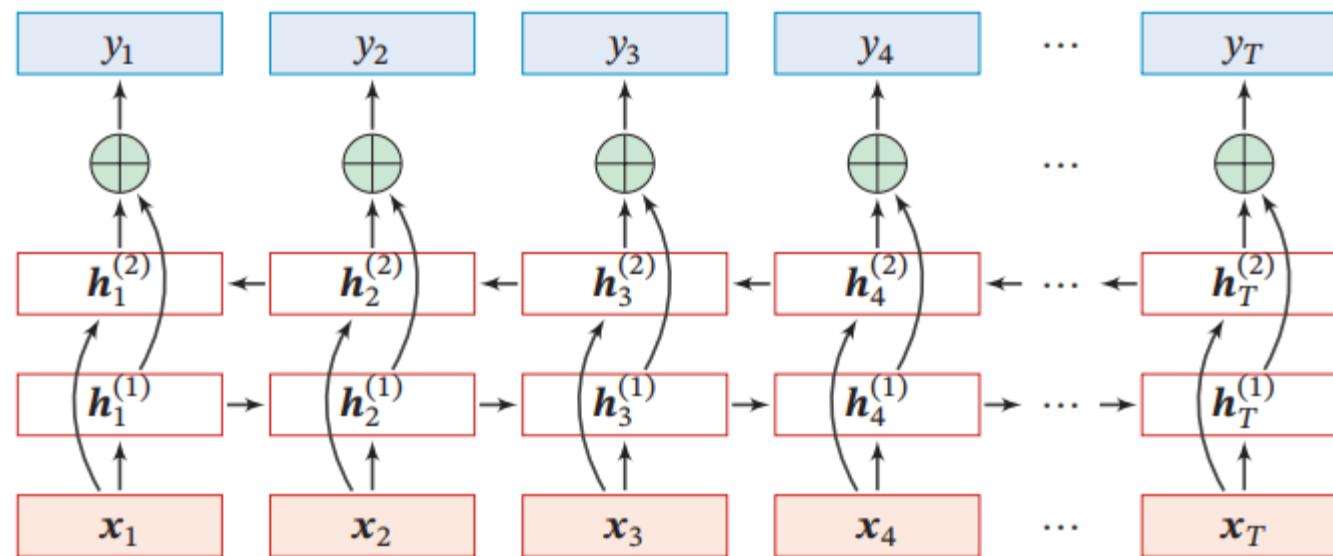


第 l 层网络的输入是第 $l - 1$ 层网络的输出. 我们定义 $\mathbf{h}_t^{(l)}$ 为在时刻 t 时第 l 层的隐状态

$$\mathbf{h}_t^{(l)} = f(\mathbf{U}^{(l)} \mathbf{h}_{t-1}^{(l)} + \mathbf{W}^{(l)} \mathbf{h}_t^{(l-1)} + \mathbf{b}^{(l)}),$$

其中 $\mathbf{U}^{(l)}$ 、 $\mathbf{W}^{(l)}$ 和 $\mathbf{b}^{(l)}$ 为权重矩阵和偏置向量, $\mathbf{h}_t^{(0)} = \mathbf{x}_t$.

双向循环神经网络(Bidirectional Recurrent Neural Network)由两层循环神经网络组成，它们的输入相同，只是信息传递的方向不同



假设第1层按时间顺序，第2层按时间逆序，在时刻 t 时的隐状态定义为 $\mathbf{h}_t^{(1)}$ 和 $\mathbf{h}_t^{(2)}$ ，则：

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

$$\mathbf{h}_t^{(2)} = f(\mathbf{U}^{(2)} \mathbf{h}_{t+1}^{(2)} + \mathbf{W}^{(2)} \mathbf{x}_t + \mathbf{b}^{(2)}),$$

$$\mathbf{h}_t = \mathbf{h}_t^{(1)} \oplus \mathbf{h}_t^{(2)},$$

1. Bengio Y, Simard P, Frasconi P. Learning long-term dependencies with gradient descent is difficult[J]. IEEE transactions on neural networks, 1994, 5(2): 157-166.
2. Understanding LSTM Networks <http://colah.github.io/posts/2015-08-Understanding-LSTMs/>
3. Hochreiter S, Schmidhuber J. Long short-term memory[J]. Neural computation, 1997, 9(8): 1735-1780.
4. Jozefowicz R, Zaremba W, Sutskever I. An empirical exploration of recurrent network architectures[C]//International conference on machine learning. 2015: 2342-2350.
5. Greff K, Srivastava R K, Koutník J, et al. LSTM: A search space odyssey[J]. IEEE transactions on neural networks and learning systems, 2016, 28(10): 2222-2232.
6. LSTM Forward and Backward Pass <http://arunmallya.github.io/writeups/nn/lstm/index.html#/>