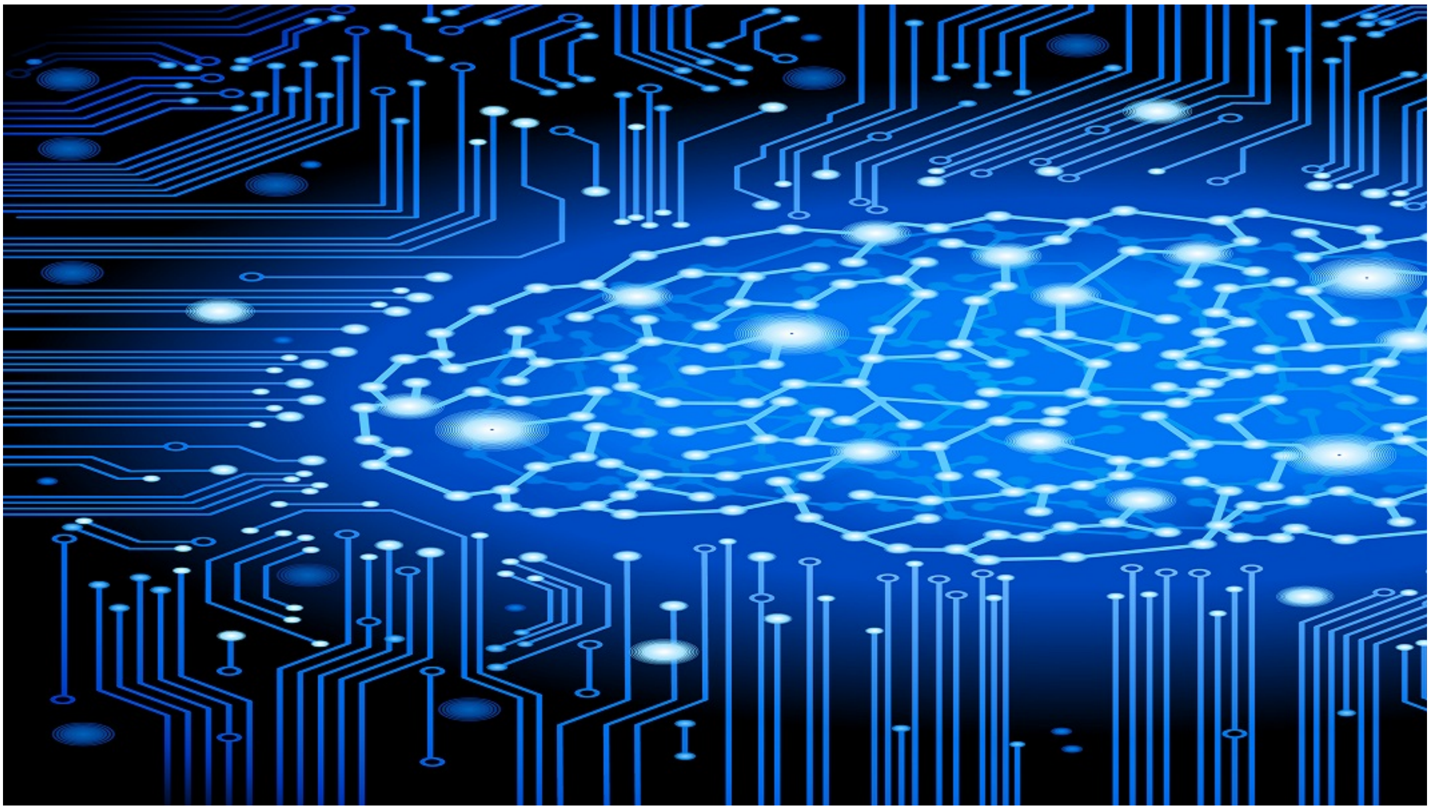
[关闭]

@hanbingtao 2017-03-01 01:08 字数 27318 阅读 20252

零基础入门深度学习(6) - 长短时记忆网络(LSTM)

机器学习 深度学习入门



无论即将到来的是大数据时代还是人工智能时代，亦或是传统行业使用人工智能在云上处理大数据的时代，作为一个有理想有追求的程序员，不懂深度学习（Deep Learning）这个超热的技术，会不会感觉马上就out了？现在救命稻草来了，《零基础入门深度学习》系列文章旨在讲帮助爱编程的你从零基础达到入门级水平。零基础意味着你不需要太多的数学知识，只要会写程序就行了，没错，这是专门为程序员写的文章。虽然文中会有很多公式你也许看不懂，但同时也会有更多的代码，程序员的你一定能看懂的（我周围是一群狂热的Clean Code程序员，所以我写的代码也不会很差）。

文章列表

往期回顾

在上一篇文章中，我们介绍了**循环神经网络**以及它的训练算法。我们也介绍了**循环神经网络**很难训练的原因，这导致了它在实际应用中，很难处理长距离的依赖。在本文中，我们将介绍一种改进之后的循环神经网络：**长短时记忆网络(Long Short Term Memory Network, LSTM)**，它成功的解决了原始循环神经网络的缺陷，成为当前最流行的RNN，在语音识别、图片描述、自然语言处理等许多领域中成功应用。但不幸的一面是，**LSTM**的结构很复杂，因此，我们需要花上一些力气，才能把LSTM以及它的训练算法弄明白。在搞清楚**LSTM**之后，我们再介绍一种**LSTM**的变体：**GRU (Gated Recurrent Unit)**。 它的结构比**LSTM**简单，而效果却和**LSTM**一样好，因此，它正在逐渐流行起来。最后，我们仍然会动手实现一个**LSTM**。

长短时记忆网络是啥

我们首先了解一下长短时记忆网络产生的背景。回顾一下零基础入门深度学习(5) - 循环神经网络中推导的，误差项沿时间反向传播的公式：

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

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

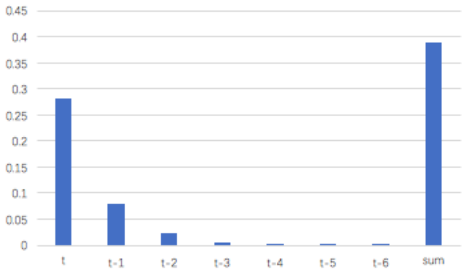
$$\|\delta_k^T\| \leqslant \|\delta_t^T\| \prod_{i=k}^{t-1} \|diag[f'(\mathbf{net}_i)]\| \|W\| \qquad (2)$$
$$\leqslant \|\delta_t^T\| (\beta_f \beta_W)^{t-k} \qquad (3)$$

我们可以看到，误差项δ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。$\beta_f\beta_w$分别是对角矩阵$diag[f'(\mathbf{net}_i)]$和矩阵W模的上界。显然，除非$\beta_f\beta_w$乘积的值位于1附近，否则，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），前者就是**梯度消失**，后者就是**梯度爆炸**。虽然科学家们搞出了很多技巧（比如怎样初始化权重），让$\beta_f\beta_w$的值尽可能贴近于1，终究还是难以抵挡指数函数的威力。

梯度消失到底意味着什么？在零基础入门深度学习(5) - 循环神经网络中我们已证明，权重数组W最终的梯度是各个时刻的梯度之和，即：

$$\nabla_W E = \sum_{k=1}^{t} \nabla_{Wk} E \qquad (4)$$
$$= \nabla_{Wt} E + \nabla_{Wt-1} E + \nabla_{Wt-2} E + \ldots + \nabla_{W1} E \qquad (5)$$

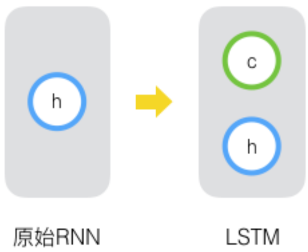
假设某轮训练中，各时刻的梯度以及最终的梯度之和如下图：



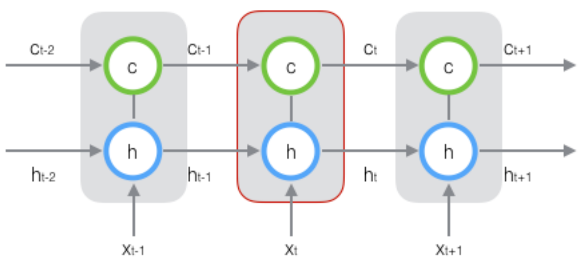
我们就可以看到，从上图的t-3时刻开始，梯度已经几乎减少到0了。那么，从这个时刻开始再往之前走，得到的梯度（几乎为零）就不会对最终的梯度值有任何贡献，这就相当于无论t-3时刻之前的网络状态h是什么，在训练中都不会对权重数组W的更新产生影响，也就是网络事实上已经忽略了t-3时刻之前的状态。这就是原始RNN无法处理长距离依赖的原因。

既然找到了问题的原因，那么我们就能解决它。从问题的定位到解决，科学家们大概花了7、8年时间。终于有一天，Hochreiter和Schmidhuber两位科学家发明出**长短时记忆网络**，一举解决这个问题。

其实，**长短时记忆网络**的思路比较简单。原始RNN的隐藏层只有一个状态，即h，它对于短期的输入非常敏感。那么，假如我们再增加一个状态，即c，让它来保存长期的状态，那么问题不就解决了么？如下图所示：



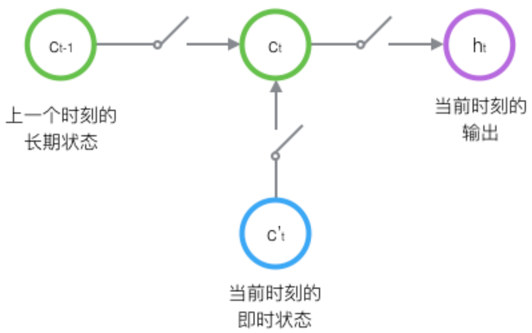
新增加的状态c，称为**单元状态(cell state)**。我们把上图按照时间维度展开：



上图仅仅是一个示意图，我们可以看出，在t时刻，LSTM的输入有三个：当前时刻网络的输入值$\mathbf{x}_t$、上一时刻LSTM的输出值$\mathbf{h}_{t-1}$、以及上一时刻的单元状态$\mathbf{c}_{t-1}$；LSTM的输出有两个：当前时刻LSTM输出值$\mathbf{h}_t$、和当前时刻的单元状态$\mathbf{c}_t$。注意$\mathbf{x}$、$\mathbf{h}$、$\mathbf{c}$都是**向量**。

LSTM的关键，就是怎样控制长期状态c。在这里，LSTM的思路是使用三个控制开关。第一个开关，负责控制继续保存长期状态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。三个开关的作用如下图所示：

长期状态**c**的控制



接下来，我们要描述一下，输出h和单元状态c的具体计算方法。

长短时记忆网络的前向计算

前面描述的开关是怎样在算法中实现的呢？这就用到了**门（gate）**的概念。门实际上就是一层**全连接层**，它的输入是一个向量，输出是一个0到1之间的实数向量。假设W是门的权重向量，$\mathbf{b}$是偏置项，那么门可以表示为：

$$g(\mathbf{x})=\sigma(W\mathbf{x}+\mathbf{b})$$

门的使用，就是用门的输出向量按元素乘以我们需要控制的那个向量。因为门的输出是0到1之间的实数向量，那么，当门输出为0时，任何向量与之相乘都会得到0向量，这就相当于啥都不能通过；输出为1时，任何向量与之相乘都不会有任何改变，这就相当于啥都可以通过。因为σ（也就是sigmoid函数）的值域是(0,1)，所以门的状态都是半开半闭的。

LSTM用两个门来控制单元状态c的内容，一个是**遗忘门（forget gate）**，它决定了上一时刻的单元状态$\mathbf{c}_{t-1}$有多少保留到当前时刻$\mathbf{c}_t$；另一个是**输入门（input gate）**，它决定了当前时刻网络的输入$\mathbf{x}_t$有多少保存到单元状态$\mathbf{c}_t$。LSTM用**输出门（output gate）**来控制单元状态$\mathbf{c}_t$有多少输出到LSTM的当前输出值$\mathbf{h}_t$。

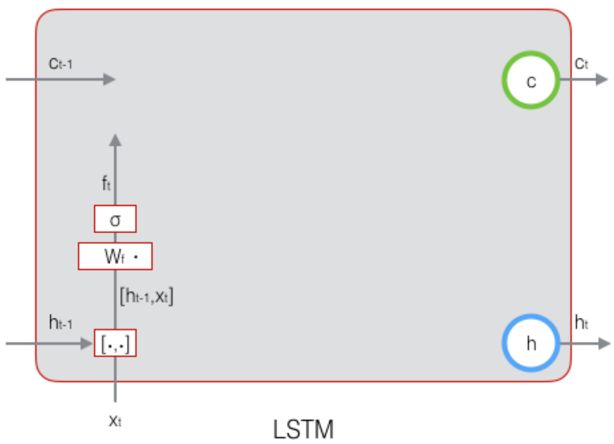
我们先来看一下遗忘门：

$$\mathbf{f}_t=\sigma(W_f\cdot[\mathbf{h}_{t-1},\mathbf{x}_t]+\mathbf{b}_f)\qquad(\text{式}1)$$

上式中，W_f是遗忘门的权重矩阵，$[\mathbf{h}_{t-1},\mathbf{x}_t]$表示把两个向量连接成一个更长的向量，$\mathbf{b}_f$是遗忘门的偏置项，$\sigma$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$d_c$（通常$d_c=d_h$），则遗忘门的权重矩阵$W_f$维度是$d_c\times(d_h+d_x)$。事实上，权重矩阵$W_f$都是两个矩阵拼接而成的：一个是$W_{fh}$，它对应着输入项$\mathbf{h}_{t-1}$，其维度为$d_c\times d_h$；一个是$W_{fx}$，它对应着输入项$\mathbf{x}_t$，其维度为$d_c\times d_x$。$W_f$可以写为：

$$\begin{aligned}\begin{bmatrix}W_f\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbf{h}_{t-1}\\\mathbf{x}_t\end{bmatrix}&=\begin{bmatrix}W_{fh}&W_{fx}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbf{h}_{t-1}\\\mathbf{x}_t\end{bmatrix}&(6)\\&=W_{fh}\mathbf{h}_{t-1}+W_{fx}\mathbf{x}_t&(7)\end{aligned}$$

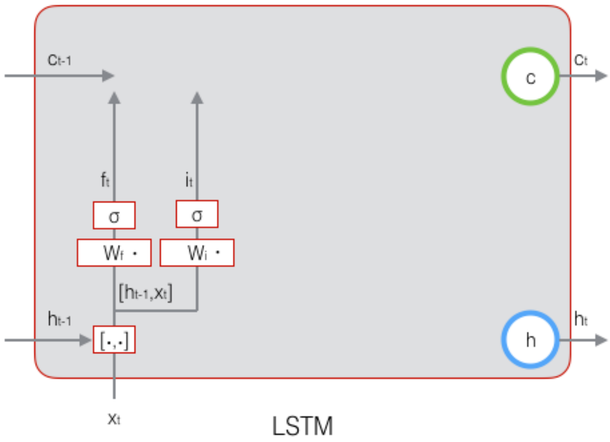
下图显示了遗忘门的计算：



接下来看看输入门：

$$\mathbf{i}_t=\sigma(W_i\cdot[\mathbf{h}_{t-1},\mathbf{x}_t]+\mathbf{b}_i)\qquad(\text{式}2)$$

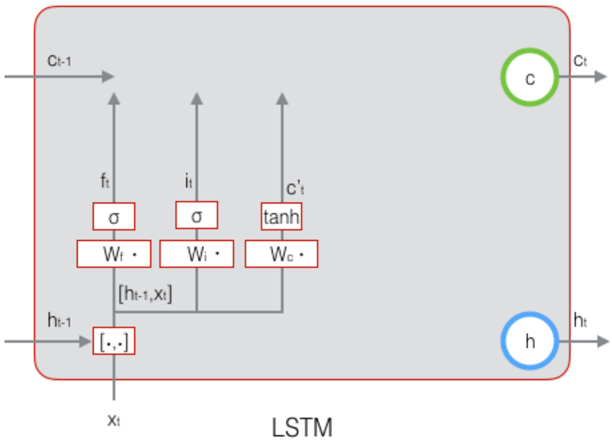
上式中，W_i是输入门的权重矩阵，$\mathbf{b}_i$是输入门的偏置项。下图表示了输入门的计算：



接下来，我们计算用于描述当前输入的单元状态$\tilde{\mathbf{c}}_t$，它是根据上一次的输出和本次输入来计算的：

$$\tilde{\mathbf{c}}_t = \tanh(W_c \cdot [\mathbf{h}_{t-1}, \mathbf{x}_t] + \mathbf{b}_c) \qquad (式3)$$

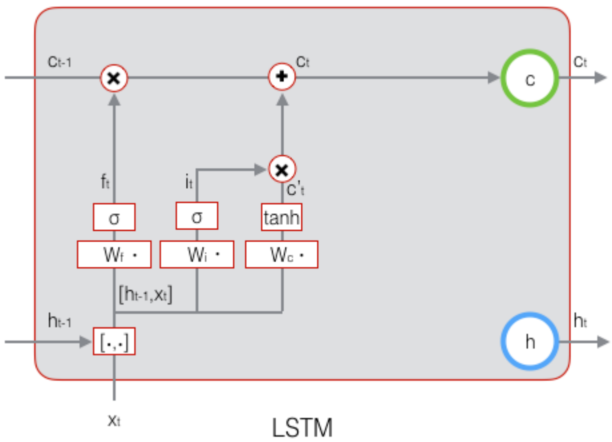
下图是$\tilde{\mathbf{c}}_t$的计算：



现在，我们计算当前时刻的单元状态$\mathbf{c}_t$。它是由上一次的单元状态$\mathbf{c}_{t-1}$按元素乘以遗忘门f_t，再用当前输入的单元状态$\tilde{\mathbf{c}}_t$按元素乘以输入门i_t，再将两个积加和产生的：

$$\mathbf{c}_t = f_t \circ \mathbf{c}_{t-1} + i_t \circ \tilde{\mathbf{c}}_t \qquad (式4)$$

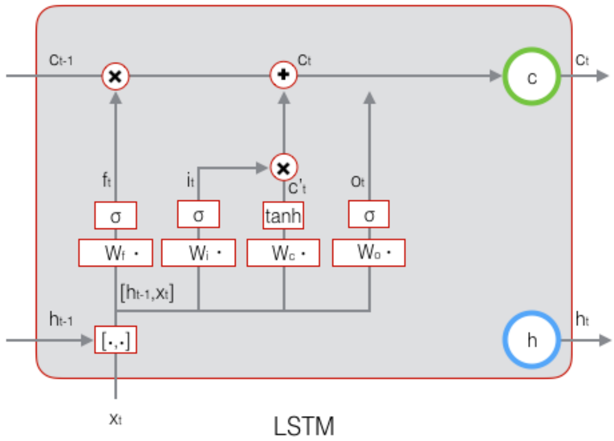
符号○表示**按元素乘**。下图是$\mathbf{c}_t$的计算：



这样，我们就把LSTM关于当前的记忆$\tilde{\mathbf{c}}_t$和长期的记忆$\mathbf{c}_{t-1}$组合在一起，形成了新的单元状态$\mathbf{c}_t$。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。下面，我们要看看输出门，它控制了长期记忆对当前输出的影响：

$$\mathbf{o}_t = \sigma(W_o \cdot [\mathbf{h}_{t-1}, \mathbf{x}_t] + \mathbf{b}_o) \qquad (式5)$$

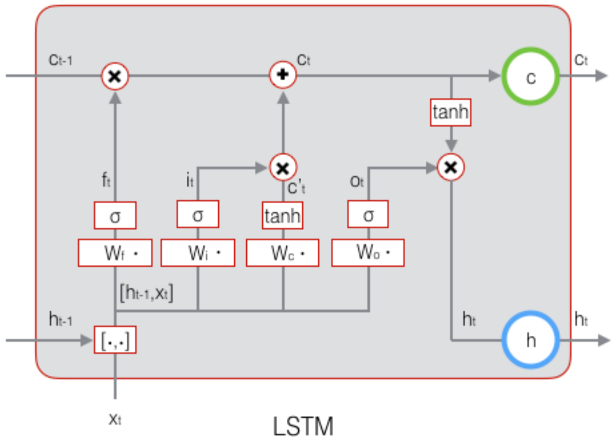
下图表示输出门的计算：



LSTM最终的输出，是由输出门和单元状态共同确定的：

$$\mathbf{h}_t = \mathbf{o}_t \circ \tanh(\mathbf{c}_t) \qquad (式6)$$

下图表示LSTM最终输出的计算：



式1到**式6**就是LSTM前向计算的全部公式。至此，我们就把LSTM前向计算讲完了。

长短时记忆网络的训练

熟悉我们这个系列文章的同学都清楚，训练部分往往比前向计算部分复杂多了。LSTM的前向计算都这么复杂，那么，可想而知，它的训练算法一定是非常非常复杂的。现在只有做几次深呼吸，再一头扎进公式海洋吧。

LSTM训练算法框架

LSTM的训练算法仍然是反向传播算法，对于这个算法，我们已经非常熟悉了。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**δ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。

关于公式和符号的说明

首先，我们对推导中用到的一些公式、符号做一下必要的说明。

接下来的推导中，我们设定gate的激活函数为sigmoid函数，输出的激活函数为tanh函数。他们的导数分别为：

$$\begin{aligned} \sigma(z) &= y = \frac{1}{1+e^{-z}} && (8) \\ \sigma'(z) &= y(1-y) && (9) \\ \tanh(z) &= y = \frac{e^z - e^{-z}}{e^z + e^{-z}} && (10) \\ \tanh'(z) &= 1 - y^2 && (11) \end{aligned}$$

从上面可以看出，sigmoid和tanh函数的导数都是原函数的函数。这样，我们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$\mathbf{b}_f$、输入门的权重矩阵W_i和偏置项$\mathbf{b}_i$、输出门的权重矩阵W_o和偏置项$\mathbf{b}_o$，以及计算单元状态的权重矩阵W_c和偏置项$\mathbf{b}_c$。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_c、W_o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}。

我们解释一下按元素乘$\circ$符号。当$\circ$作用于两个**向量**时，运算如下：

$$\mathbf{a}\circ\mathbf{b}=\begin{bmatrix}a_1\\a_2\\a_3\\\dots\\a_n\end{bmatrix}\circ\begin{bmatrix}b_1\\b_2\\b_3\\\dots\\b_n\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}a_1b_1\\a_2b_2\\a_3b_3\\\dots\\a_nb_n\end{bmatrix}$$

当$\circ$作用于一个**向量**和一个**矩阵**时，运算如下：

$$\begin{align}\mathbf{a}\circ X&=\begin{bmatrix}a_1\\a_2\\a_3\\\dots\\a_n\end{bmatrix}\circ\begin{bmatrix}x_{11} & x_{12} & x_{13} & \dots & x_{1n}\\x_{21} & x_{22} & x_{23} & \dots & x_{2n}\\x_{31} & x_{32} & x_{33} & \dots & x_{3n}\\ & & \dots & & \\x_{n1} & x_{n2} & x_{n3} & \dots & x_{nn}\end{bmatrix}\tag{12}\\&=\begin{bmatrix}a_1x_{11} & a_1x_{12} & a_1x_{13} & \dots & a_1x_{1n}\\a_2x_{21} & a_2x_{22} & a_2x_{23} & \dots & a_2x_{2n}\\a_3x_{31} & a_3x_{32} & a_3x_{33} & \dots & a_3x_{3n}\\ & & \dots & & \\a_nx_{n1} & a_nx_{n2} & a_nx_{n3} & \dots & a_nx_{nn}\end{bmatrix}\tag{13}\end{align}$$

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：

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

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：

$$\mathbf{a}^Tdiag[\mathbf{b}]=\mathbf{a}\circ\mathbf{b}$$

上面这两点，在我们后续推导中会多次用到。

在t时刻，LSTM的输出值为$\mathbf{h}_t$。我们定义t时刻的误差项δ_t为：

$$\delta_t\overset{def}{=}\frac{\partial{E}}{\partial{\mathbf{h}_t}}$$

注意，和前面几篇文章不同，我们这里假设误差项是损失函数对输出值的导数，而不是对加权输入net_t^l的导数。因为LSTM有四个加权输入，分别对应$\mathbf{f}_t$、$\mathbf{i}_t$、$\mathbf{c}_t$、$\mathbf{o}_t$，我们希望往上一层传递一个误差项而不是四个。但我们仍然需要定义出这四个加权输入，以及他们对应的误差项。

$$\begin{align}\mathbf{net}_{f,t}&=W_f[\mathbf{h}_{t-1},\mathbf{x}_t]+\mathbf{b}_f\tag{14}\\&=W_{fh}\mathbf{h}_{t-1}+W_{fx}\mathbf{x}_t+\mathbf{b}_f\tag{15}\\\mathbf{net}_{i,t}&=W_i[\mathbf{h}_{t-1},\mathbf{x}_t]+\mathbf{b}_i\tag{16}\\&=W_{ih}\mathbf{h}_{t-1}+W_{ix}\mathbf{x}_t+\mathbf{b}_i\tag{17}\\\mathbf{net}_{\tilde{c},t}&=W_c[\mathbf{h}_{t-1},\mathbf{x}_t]+\mathbf{b}_c\tag{18}\\&=W_{ch}\mathbf{h}_{t-1}+W_{cx}\mathbf{x}_t+\mathbf{b}_c\tag{19}\\\mathbf{net}_{o,t}&=W_o[\mathbf{h}_{t-1},\mathbf{x}_t]+\mathbf{b}_o\tag{20}\\&=W_{oh}\mathbf{h}_{t-1}+W_{ox}\mathbf{x}_t+\mathbf{b}_o\tag{21}\\\delta_{f,t}&\overset{def}{=}\frac{\partial{E}}{\partial{\mathbf{net}_{f,t}}}\tag{22}\\\delta_{i,t}&\overset{def}{=}\frac{\partial{E}}{\partial{\mathbf{net}_{i,t}}}\tag{23}\\\delta_{\tilde{c},t}&\overset{def}{=}\frac{\partial{E}}{\partial{\mathbf{net}_{\tilde{c},t}}}\tag{24}\\\delta_{o,t}&\overset{def}{=}\frac{\partial{E}}{\partial{\mathbf{net}_{o,t}}}\tag{25}\end{align}$$

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}。

$$\begin{align}\delta_{t-1}^T&=\frac{\partial{E}}{\partial{\mathbf{h_{t-1}}}}\tag{26}\\&=\frac{\partial{E}}{\partial{\mathbf{h_t}}}\frac{\partial{\mathbf{h_t}}}{\partial{\mathbf{h_{t-1}}}}\tag{27}\\&=\delta_{t}^T\frac{\partial{\mathbf{h_t}}}{\partial{\mathbf{h_{t-1}}}}\tag{28}\end{align}$$

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**：

$$
\begin{aligned}
\mathbf{h}_t&=\mathbf{o}_t\circ\tanh(\mathbf{c}_t) &(29)\\
\mathbf{c}_t&=\mathbf{f}_t\circ\mathbf{c}_{t-1}+\mathbf{i}_t\circ\mathbf{\tilde{c}}_t &(30)
\end{aligned}
$$

显然，$\mathbf{o}_t$、$\mathbf{f}_t$、$\mathbf{i}_t$、$\mathbf{\tilde{c}}_t$都是$\mathbf{h}_{t-1}$的函数，那么，利用全导数公式可得：

$$
\begin{aligned}
\delta_t^T\frac{\partial\mathbf{h_t}}{\partial\mathbf{h_{t-1}}}&=\delta_t^T\frac{\partial\mathbf{h_t}}{\partial\mathbf{o}_t}\frac{\partial\mathbf{o}_t}{\partial\mathbf{net}_{o,t}}\frac{\partial\mathbf{net}_{o,t}}{\partial\mathbf{h_{t-1}}}+\delta_t^T\frac{\partial\mathbf{h_t}}{\partial\mathbf{c}_t}\frac{\partial\mathbf{c}_t}{\partial\mathbf{f_t}}\frac{\partial\mathbf{f}_t}{\partial\mathbf{net}_{f,t}}\frac{\partial\mathbf{net}_{f,t}}{\partial\mathbf{h_{t-1}}}+\delta_t^T\frac{\partial\mathbf{h_t}}{\partial\mathbf{c}_t}\frac{\partial\mathbf{c}_t}{\partial\mathbf{i_t}}\frac{\partial\mathbf{i}_t}{\partial\mathbf{net}_{i,t}}\frac{\partial\mathbf{net}_{i,t}}{\partial\mathbf{h_{t-1}}}+\delta_t^T\frac{\partial\mathbf{h_t}}{\partial\mathbf{c}_t}\frac{\partial\mathbf{c}_t}{\partial\mathbf{\tilde{c}}_t}\frac{\partial\mathbf{\tilde{c}}_t}{\partial\mathbf{net}_{\tilde{c},t}}\\
&=\delta_{o,t}^T\frac{\partial\mathbf{net}_{o,t}}{\partial\mathbf{h_{t-1}}}+\delta_{f,t}^T\frac{\partial\mathbf{net}_{f,t}}{\partial\mathbf{h_{t-1}}}+\delta_{i,t}^T\frac{\partial\mathbf{net}_{i,t}}{\partial\mathbf{h_{t-1}}}+\delta_{\tilde{c},t}^T\frac{\partial\mathbf{net}_{\tilde{c},t}}{\partial\mathbf{h_{t-1}}} \qquad (\text{式}7)
\end{aligned}
$$

下面，我们要把**式7**中的每个偏导数都求出来。根据**式6**，我们可以求出：

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial\mathbf{h_t}}{\partial\mathbf{o}_t}&=diag[\tanh(\mathbf{c}_t)] &(33)\\
\frac{\partial\mathbf{h_t}}{\partial\mathbf{c}_t}&=diag[\mathbf{o}_t\circ(1-\tanh(\mathbf{c}_t)^2)] &(34)
\end{aligned}
$$

根据**式4**，我们可以求出：

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial\mathbf{c}_t}{\partial\mathbf{f_t}}&=diag[\mathbf{c}_{t-1}] &(35)\\
\frac{\partial\mathbf{c}_t}{\partial\mathbf{i_t}}&=diag[\mathbf{\tilde{c}}_t] &(36)\\
\frac{\partial\mathbf{c}_t}{\partial\mathbf{\tilde{c}_t}}&=diag[\mathbf{i}_t] &(37)
\end{aligned}
$$

因为：

$$
\begin{aligned}
\mathbf{o}_t&=\sigma(\mathbf{net}_{o,t}) &(38)\\
\mathbf{net}_{o,t}&=W_{oh}\mathbf{h}_{t-1}+W_{ox}\mathbf{x}_t+\mathbf{b}_o &(39)\\
& &(40)\\
\mathbf{f}_t&=\sigma(\mathbf{net}_{f,t}) &(41)\\
\mathbf{net}_{f,t}&=W_{fh}\mathbf{h}_{t-1}+W_{fx}\mathbf{x}_t+\mathbf{b}_f &(42)\\
& &(43)\\
\mathbf{i}_t&=\sigma(\mathbf{net}_{i,t}) &(44)\\
\mathbf{net}_{i,t}&=W_{ih}\mathbf{h}_{t-1}+W_{ix}\mathbf{x}_t+\mathbf{b}_i &(45)\\
& &(46)\\
\mathbf{\tilde{c}}_t&=\tanh(\mathbf{net}_{\tilde{c},t}) &(47)\\
\mathbf{net}_{\tilde{c},t}&=W_{ch}\mathbf{h}_{t-1}+W_{cx}\mathbf{x}_t+\mathbf{b}_c &(48)
\end{aligned}
$$

我们很容易得出：

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial\mathbf{o}_t}{\partial\mathbf{net}_{o,t}}&=diag[\mathbf{o}_t\circ(1-\mathbf{o}_t)] &(49)\\
\frac{\partial\mathbf{net}_{o,t}}{\partial\mathbf{h_{t-1}}}&=W_{oh} &(50)\\
\frac{\partial\mathbf{f}_t}{\partial\mathbf{net}_{f,t}}&=diag[\mathbf{f}_t\circ(1-\mathbf{f}_t)] &(51)\\
\frac{\partial\mathbf{net}_{f,t}}{\partial\mathbf{h}_{t-1}}&=W_{fh} &(52)\\
\frac{\partial\mathbf{i}_t}{\partial\mathbf{net}_{i,t}}&=diag[\mathbf{i}_t\circ(1-\mathbf{i}_t)] &(53)\\
\frac{\partial\mathbf{net}_{i,t}}{\partial\mathbf{h}_{t-1}}&=W_{ih} &(54)\\
\frac{\partial\mathbf{\tilde{c}}_t}{\partial\mathbf{net}_{\tilde{c},t}}&=diag[1-\mathbf{\tilde{c}}_t^2] &(55)\\
\frac{\partial\mathbf{net}_{\tilde{c},t}}{\partial\mathbf{h}_{t-1}}&=W_{ch} &(56)
\end{aligned}
$$

将上述偏导数带入到**式7**，我们得到：

$$\delta_{t-1} = \delta_{o,t}^T \frac{\partial \mathbf{net}_{o,t}}{\partial \mathbf{h_{t-1}}} + \delta_{f,t}^T \frac{\partial \mathbf{net}_{f,t}}{\partial \mathbf{h_{t-1}}} + \delta_{i,t}^T \frac{\partial \mathbf{net}_{i,t}}{\partial \mathbf{h_{t-1}}} + \delta_{\tilde{c},t}^T \frac{\partial \mathbf{net}_{\tilde{c},t}}{\partial \mathbf{h_{t-1}}} \tag{57}$$
$$= \delta_{o,t}^T W_{oh} + \delta_{f,t}^T W_{fh} + \delta_{i,t}^T W_{ih} + \delta_{\tilde{c},t}^T W_{ch} \qquad (式8) \tag{58}$$

根据$\delta_{o,t}$、$\delta_{f,t}$、$\delta_{i,t}$、$\delta_{\tilde{c},t}$的定义，可知：

$$\delta_{o,t}^T = \delta_t^T \circ \tanh(\mathbf{c}_t) \circ \mathbf{o}_t \circ (1-\mathbf{o}_t) \qquad (式9) \tag{59}$$
$$\delta_{f,t}^T = \delta_t^T \circ \mathbf{o}_t \circ (1-\tanh(\mathbf{c}_t)^2) \circ \mathbf{c}_{t-1} \circ \mathbf{f}_t \circ (1-\mathbf{f}_t) \qquad (式10) \tag{60}$$
$$\delta_{i,t}^T = \delta_t^T \circ \mathbf{o}_t \circ (1-\tanh(\mathbf{c}_t)^2) \circ \tilde{\mathbf{c}}_t \circ \mathbf{i}_t \circ (1-\mathbf{i}_t) \qquad (式11) \tag{61}$$
$$\delta_{\tilde{c},t}^T = \delta_t^T \circ \mathbf{o}_t \circ (1-\tanh(\mathbf{c}_t)^2) \circ \mathbf{i}_t \circ (1-\tilde{\mathbf{c}}^2) \qquad (式12) \tag{62}$$

式8到**式12**就是将误差沿时间反向传播一个时刻的公式。有了它，我们可以写出将误差项向前传递到任意k时刻的公式：

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

将误差项传递到上一层

我们假设当前为第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：

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

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

$$\frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_t^{l-1}} = \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net_{f,t}^l}} \frac{\partial \mathbf{net_{f,t}^l}}{\partial \mathbf{x}_t^l} \frac{\partial \mathbf{x}_t^l}{\partial \mathbf{net}_t^{l-1}} + \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net_{i,t}^l}} \frac{\partial \mathbf{net_{i,t}^l}}{\partial \mathbf{x}_t^l} \frac{\partial \mathbf{x}_t^l}{\partial \mathbf{net}_t^{l-1}} + \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net_{\tilde{c},t}^l}} \frac{\partial \mathbf{net_{\tilde{c},t}^l}}{\partial \mathbf{x}_t^l} \frac{\partial \mathbf{x}_t^l}{\partial \mathbf{net}_t^{l-1}} + \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net_{o,t}^l}} \frac{\partial \mathbf{net_{o,t}^l}}{\partial \mathbf{x}_t^l} \frac{\partial \mathbf{x}_t^l}{\partial \mathbf{net_t^{l-1}}} \tag{63}$$
$$= \delta_{f,t}^T W_{fx} \circ f'(\mathbf{net}_t^{l-1}) + \delta_{i,t}^T W_{ix} \circ f'(\mathbf{net}_t^{l-1}) + \delta_{\tilde{c},t}^T W_{cx} \circ f'(\mathbf{net}_t^{l-1}) + \delta_{o,t}^T W_{ox} \circ f'(\mathbf{net}_t^{l-1}) \tag{64}$$
$$= (\delta_{f,t}^T W_{fx} + \delta_{i,t}^T W_{ix} + \delta_{\tilde{c},t}^T W_{cx} + \delta_{o,t}^T W_{ox}) \circ f'(\mathbf{net}_t^{l-1}) \qquad (式14) \tag{65}$$

式14就是将误差传递到上一层的公式。

权重梯度的计算

对于W_{fh}、W_{ih}、W_{ch}、W_{oh}的权重梯度，我们知道它的梯度是各个时刻梯度之和（证明过程请参考文章[零基础入门深度学习(5) - 循环神经网络]），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。

我们已经求得了误差项$\delta_{o,t}$、$\delta_{f,t}$、$\delta_{i,t}$、$\delta_{\tilde{c},t}$，很容易求出t时刻的W_{oh}、的W_{ih}、的W_{fh}、的W_{ch}：

$$\frac{\partial E}{\partial W_{oh,t}} = \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{o,t}} \frac{\partial \mathbf{net}_{o,t}}{\partial W_{oh,t}} \tag{66}$$
$$= \delta_{o,t} \mathbf{h}_{t-1}^T \tag{67}$$
$$\tag{68}$$
$$\frac{\partial E}{\partial W_{fh,t}} = \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{f,t}} \frac{\partial \mathbf{net}_{f,t}}{\partial W_{fh,t}} \tag{69}$$
$$= \delta_{f,t} \mathbf{h}_{t-1}^T \tag{70}$$
$$\tag{71}$$
$$\frac{\partial E}{\partial W_{ih,t}} = \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{i,t}} \frac{\partial \mathbf{net}_{i,t}}{\partial W_{ih,t}} \tag{72}$$
$$= \delta_{i,t} \mathbf{h}_{t-1}^T \tag{73}$$
$$\tag{74}$$
$$\frac{\partial E}{\partial W_{ch,t}} = \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{\tilde{c},t}} \frac{\partial \mathbf{net}_{\tilde{c},t}}{\partial W_{ch,t}} \tag{75}$$
$$= \delta_{\tilde{c},t} \mathbf{h}_{t-1}^T \tag{76}$$

将各个时刻的梯度加在一起，就能得到最终的梯度：

$$\frac{\partial E}{\partial W_{oh}}=\sum_{j=1}^{t}\delta_{o,j}\mathbf{h}_{j-1}^{T} \tag{77}$$

$$\frac{\partial E}{\partial W_{fh}}=\sum_{j=1}^{t}\delta_{f,j}\mathbf{h}_{j-1}^{T} \tag{78}$$

$$\frac{\partial E}{\partial W_{ih}}=\sum_{j=1}^{t}\delta_{i,j}\mathbf{h}_{j-1}^{T} \tag{79}$$

$$\frac{\partial E}{\partial W_{ch}}=\sum_{j=1}^{t}\delta_{\tilde{c},j}\mathbf{h}_{j-1}^{T} \tag{80}$$

对于偏置项$\mathbf{b}_f$、$\mathbf{b}_i$、$\mathbf{b}_c$、$\mathbf{b}_o$的梯度，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：

$$\begin{aligned}
\frac{\partial E}{\partial \mathbf{b}_{o,t}}&=\frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{o,t}}\frac{\partial \mathbf{net}_{o,t}}{\partial \mathbf{b}_{o,t}} && (81)\\
&=\delta_{o,t} && (82)\\
& && (83)\\
\frac{\partial E}{\partial \mathbf{b}_{f,t}}&=\frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{f,t}}\frac{\partial \mathbf{net}_{f,t}}{\partial \mathbf{b}_{f,t}} && (84)\\
&=\delta_{f,t} && (85)\\
& && (86)\\
\frac{\partial E}{\partial \mathbf{b}_{i,t}}&=\frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{i,t}}\frac{\partial \mathbf{net}_{i,t}}{\partial \mathbf{b}_{i,t}} && (87)\\
&=\delta_{i,t} && (88)\\
& && (89)\\
\frac{\partial E}{\partial \mathbf{b}_{c,t}}&=\frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{\tilde{c},t}}\frac{\partial \mathbf{net}_{\tilde{c},t}}{\partial \mathbf{b}_{c,t}} && (90)\\
&=\delta_{\tilde{c},t} && (91)
\end{aligned}$$

下面是最终的偏置项梯度，即将各个时刻的偏置项梯度加在一起：

$$\frac{\partial E}{\partial \mathbf{b}_o}=\sum_{j=1}^{t}\delta_{o,j} \tag{92}$$

$$\frac{\partial E}{\partial \mathbf{b}_i}=\sum_{j=1}^{t}\delta_{i,j} \tag{93}$$

$$\frac{\partial E}{\partial \mathbf{b}_f}=\sum_{j=1}^{t}\delta_{f,j} \tag{94}$$

$$\frac{\partial E}{\partial \mathbf{b}_c}=\sum_{j=1}^{t}\delta_{\tilde{c},j} \tag{95}$$

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

$$\begin{aligned}
\frac{\partial E}{\partial W_{ox}}&=\frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{o,t}}\frac{\partial \mathbf{net}_{o,t}}{\partial W_{ox}} && (96)\\
&=\delta_{o,t}\mathbf{x}_t^T && (97)\\
& && (98)\\
\frac{\partial E}{\partial W_{fx}}&=\frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{f,t}}\frac{\partial \mathbf{net}_{f,t}}{\partial W_{fx}} && (99)\\
&=\delta_{f,t}\mathbf{x}_t^T && (100)\\
& && (101)\\
\frac{\partial E}{\partial W_{ix}}&=\frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{i,t}}\frac{\partial \mathbf{net}_{i,t}}{\partial W_{ix}} && (102)\\
&=\delta_{i,t}\mathbf{x}_t^T && (103)\\
& && (104)\\
\frac{\partial E}{\partial W_{cx}}&=\frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{\tilde{c},t}}\frac{\partial \mathbf{net}_{\tilde{c},t}}{\partial W_{cx}} && (105)\\
&=\delta_{\tilde{c},t}\mathbf{x}_t^T && (106)
\end{aligned}$$

以上就是LSTM的训练算法的全部公式。因为这里面存在很多重复的模式，仔细看看，会发觉并不是太复杂。

当然，LSTM存在着相当多的变体，读者可以在互联网上找到很多资料。因为大家已经熟悉了基本LSTM的算法，因此理解这些变体比较容易，因此本文就不再赘述了。

长短时记忆网络的实现

在下面的实现中，LSTMLayer的参数包括输入维度、输出维度、隐藏层维度，单元状态维度等于隐藏层维度。gate的激活函数为sigmoid函数，输出的激活函数为tanh。

激活函数的实现

我们先实现两个激活函数：sigmoid和tanh。

```
class SigmoidActivator(object):
    def forward(self, weighted_input):
        return 1.0 / (1.0 + np.exp(-weighted_input))

    def backward(self, output):
        return output * (1 - output)


class TanhActivator(object):
    def forward(self, weighted_input):
        return 2.0 / (1.0 + np.exp(-2 * weighted_input)) - 1.0

    def backward(self, output):
        return 1 - output * output
```

LSTM初始化

和前两篇文章代码架构一样，我们把LSTM的实现放在LstmLayer类中。

根据LSTM前向计算和方向传播算法，我们需要初始化一系列矩阵和向量。这些矩阵和向量有两类用途，一类是用于保存模型参数，例如W_f、W_i、W_o、W_c、$\mathbf{b}_f$、$\mathbf{b}_i$、$\mathbf{b}_o$、$\mathbf{b}_c$；另一类是保存各种中间计算结果，以便于反向传播算法使用，它们包括$\mathbf{h}_t$、$\mathbf{f}_t$、$\mathbf{i}_t$、$\mathbf{o}_t$、$\mathbf{c}_t$、$\tilde{\mathbf{c}}_t$、δ_t、$\delta_{f,t}$、$\delta_{i,t}$、$\delta_{o,t}$、$\delta_{\tilde{c},t}$，以及各个权重对应的梯度。

在构造函数的初始化中，只初始化了与forward计算相关的变量，与backward相关的变量没有初始化。这是因为构造LSTM对象的时候，我们还不知道它未来是用于训练（既有forward又有backward）还是推理（只有forward）。

```
class LstmLayer(object):
    def __init__(self, input_width, state_width,
                 learning_rate):
        self.input_width = input_width
        self.state_width = state_width
        self.learning_rate = learning_rate
        # 门的激活函数
        self.gate_activator = SigmoidActivator()
        # 输出的激活函数
        self.output_activator = TanhActivator()
        # 当前时刻初始化为t0
        self.times = 0
        # 各个时刻的单元状态向量c
        self.c_list = self.init_state_vec()
        # 各个时刻的输出向量h
        self.h_list = self.init_state_vec()
        # 各个时刻的遗忘门f
        self.f_list = self.init_state_vec()
        # 各个时刻的输入门i
        self.i_list = self.init_state_vec()
        # 各个时刻的输出门o
        self.o_list = self.init_state_vec()
        # 各个时刻的即时状态c~
        self.ct_list = self.init_state_vec()
        # 遗忘门权重矩阵Wfh, Wfx, 偏置项bf
        self.Wfh, self.Wfx, self.bf = (
            self.init_weight_mat())
        # 输入门权重矩阵Wfh, Wfx, 偏置项bf
        self.Wih, self.Wix, self.bi = (
            self.init_weight_mat())
        # 输出门权重矩阵Wfh, Wfx, 偏置项bf
        self.Woh, self.Wox, self.bo = (
            self.init_weight_mat())
        # 单元状态权重矩阵Wfh, Wfx, 偏置项bf
        self.Wch, self.Wcx, self.bc = (
            self.init_weight_mat())

    def init_state_vec(self):
        '''
        初始化保存状态的向量
        '''
        state_vec_list = []
        state_vec_list.append(np.zeros(
            (self.state_width, 1)))
        return state_vec_list

    def init_weight_mat(self):
        '''
        初始化权重矩阵
        '''
        Wh = np.random.uniform(-1e-4, 1e-4,
            (self.state_width, self.state_width))
        Wx = np.random.uniform(-1e-4, 1e-4,
            (self.state_width, self.input_width))
        b = np.zeros((self.state_width, 1))
```

```
        return Wh, Wx, b
```

前向计算的实现

forward方法实现了LSTM的前向计算：

```
    def forward(self, x):
        '''
        根据式1-式6进行前向计算
        '''
        self.times += 1
        # 遗忘门
        fg = self.calc_gate(x, self.Wfx, self.Wfh,
            self.bf, self.gate_activator)
        self.f_list.append(fg)
        # 输入门
        ig = self.calc_gate(x, self.Wix, self.Wih,
            self.bi, self.gate_activator)
        self.i_list.append(ig)
        # 输出门
        og = self.calc_gate(x, self.Wox, self.Woh,
            self.bo, self.gate_activator)
        self.o_list.append(og)
        # 即时状态
        ct = self.calc_gate(x, self.Wcx, self.Wch,
            self.bc, self.output_activator)
        self.ct_list.append(ct)
        # 单元状态
        c = fg * self.c_list[self.times - 1] + ig * ct
        self.c_list.append(c)
        # 输出
        h = og * self.output_activator.forward(c)
        self.h_list.append(h)

    def calc_gate(self, x, Wx, Wh, b, activator):
        '''
        计算门
        '''
        h = self.h_list[self.times - 1] # 上次的LSTM输出
        net = np.dot(Wh, h) + np.dot(Wx, x) + b
        gate = activator.forward(net)
        return gate
```

从上面的代码我们可以看到，门的计算都是相同的算法，而门和$\tilde{c}_t$的计算仅仅是激活函数不同。因此我们提出了calc_gate方法，这样减少了很多重复代码。

反向传播算法的实现

backward方法实现了LSTM的反向传播算法。需要注意的是，与backword相关的内部状态变量是在调用backward方法之后才初始化的。这种延迟初始化的一个好处是，如果LSTM只是用来推理，那么就不需要初始化这些变量，节省了很多内存。

```
    def backward(self, x, delta_h, activator):
        '''
        实现LSTM训练算法
        '''
        self.calc_delta(delta_h, activator)
        self.calc_gradient(x)
```

算法主要分成两个部分，一部分使计算误差项：

```
    def calc_delta(self, delta_h, activator):
        # 初始化各个时刻的误差项
        self.delta_h_list = self.init_delta()  # 输出误差项
        self.delta_o_list = self.init_delta()  # 输出门误差项
        self.delta_i_list = self.init_delta()  # 输入门误差项
        self.delta_f_list = self.init_delta()  # 遗忘门误差项
        self.delta_ct_list = self.init_delta() # 即时输出误差项

        # 保存从上一层传递下来的当前时刻的误差项
        self.delta_h_list[-1] = delta_h

        # 迭代计算每个时刻的误差项
        for k in range(self.times, 0, -1):
            self.calc_delta_k(k)

    def init_delta(self):
        '''
        初始化误差项
        '''
        delta_list = []
        for i in range(self.times + 1):
            delta_list.append(np.zeros(
                (self.state_width, 1)))
        return delta_list

    def calc_delta_k(self, k):
        '''
        根据k时刻的delta_h，计算k时刻的delta_f、
        delta_i、delta_o、delta_ct，以及k-1时刻的delta_h
        '''
        # 获得k时刻前向计算的值
        ig = self.i_list[k]
        og = self.o_list[k]
        fg = self.f_list[k]
        ct = self.ct_list[k]
```

```
            c = self.c_list[k]
            c_prev = self.c_list[k-1]
            tanh_c = self.output_activator.forward(c)
            delta_k = self.delta_h_list[k]

            # 根据式9计算delta_o
            delta_o = (delta_k * tanh_c *
                self.gate_activator.backward(og))
            delta_f = (delta_k * og *
                (1 - tanh_c * tanh_c) * c_prev *
                self.gate_activator.backward(fg))
            delta_i = (delta_k * og *
                (1 - tanh_c * tanh_c) * ct *
                self.gate_activator.backward(ig))
            delta_ct = (delta_k * og *
                (1 - tanh_c * tanh_c) * ig *
                self.output_activator.backward(ct))
            delta_h_prev = (
                    np.dot(delta_o.transpose(), self.Woh) +
                    np.dot(delta_i.transpose(), self.Wih) +
                    np.dot(delta_f.transpose(), self.Wfh) +
                    np.dot(delta_ct.transpose(), self.Wch)
                ).transpose()

            # 保存全部delta值
            self.delta_h_list[k-1] = delta_h_prev
            self.delta_f_list[k] = delta_f
            self.delta_i_list[k] = delta_i
            self.delta_o_list[k] = delta_o
            self.delta_ct_list[k] = delta_ct
```

另一部分是计算梯度：

```
        def calc_gradient(self, x):
            # 初始化遗忘门权重梯度矩阵和偏置项
            self.Wfh_grad, self.Wfx_grad, self.bf_grad = (
                self.init_weight_gradient_mat())
            # 初始化输入门权重梯度矩阵和偏置项
            self.Wih_grad, self.Wix_grad, self.bi_grad = (
                self.init_weight_gradient_mat())
            # 初始化输出门权重梯度矩阵和偏置项
            self.Woh_grad, self.Wox_grad, self.bo_grad = (
                self.init_weight_gradient_mat())
            # 初始化单元状态权重梯度矩阵和偏置项
            self.Wch_grad, self.Wcx_grad, self.bc_grad = (
                self.init_weight_gradient_mat())

           # 计算对上一次输出h的权重梯度
            for t in range(self.times, 0, -1):
                # 计算各个时刻的梯度
                (Wfh_grad, bf_grad,
                Wih_grad, bi_grad,
                Woh_grad, bo_grad,
                Wch_grad, bc_grad) = (
                    self.calc_gradient_t(t))
                # 实际梯度是各时刻梯度之和
                self.Wfh_grad += Wfh_grad
                self.bf_grad += bf_grad
                self.Wih_grad += Wih_grad
                self.bi_grad += bi_grad
                self.Woh_grad += Woh_grad
                self.bo_grad += bo_grad
                self.Wch_grad += Wch_grad
                self.bc_grad += bc_grad
                print '-----%d-----' % t
                print Wfh_grad
                print self.Wfh_grad

            # 计算对本次输入x的权重梯度
            xt = x.transpose()
            self.Wfx_grad = np.dot(self.delta_f_list[-1], xt)
            self.Wix_grad = np.dot(self.delta_i_list[-1], xt)
            self.Wox_grad = np.dot(self.delta_o_list[-1], xt)
            self.Wcx_grad = np.dot(self.delta_ct_list[-1], xt)

        def init_weight_gradient_mat(self):
            '''
            初始化权重矩阵
            '''
            Wh_grad = np.zeros((self.state_width,
                self.state_width))
            Wx_grad = np.zeros((self.state_width,
                self.input_width))
            b_grad = np.zeros((self.state_width, 1))
            return Wh_grad, Wx_grad, b_grad

        def calc_gradient_t(self, t):
            '''
            计算每个时刻t权重的梯度
            '''
            h_prev = self.h_list[t-1].transpose()
            Wfh_grad = np.dot(self.delta_f_list[t], h_prev)
            bf_grad = self.delta_f_list[t]
            Wih_grad = np.dot(self.delta_i_list[t], h_prev)
            bi_grad = self.delta_f_list[t]
            Woh_grad = np.dot(self.delta_o_list[t], h_prev)
            bo_grad = self.delta_f_list[t]
            Wch_grad = np.dot(self.delta_ct_list[t], h_prev)
            bc_grad = self.delta_ct_list[t]
            return Wfh_grad, bf_grad, Wih_grad, bi_grad, \
                   Woh_grad, bo_grad, Wch_grad, bc_grad
```

梯度下降算法的实现

下面是用梯度下降算法来更新权重：

```
    def update(self):
        '''
        按照梯度下降，更新权重
        '''
        self.Wfh -= self.learning_rate * self.Whf_grad
        self.Wfx -= self.learning_rate * self.Whx_grad
        self.bf -= self.learning_rate * self.bf_grad
        self.Wih -= self.learning_rate * self.Whi_grad
        self.Wix -= self.learning_rate * self.Whi_grad
        self.bi -= self.learning_rate * self.bi_grad
        self.Woh -= self.learning_rate * self.Wof_grad
        self.Wox -= self.learning_rate * self.Wox_grad
        self.bo -= self.learning_rate * self.bo_grad
        self.Wch -= self.learning_rate * self.Wcf_grad
        self.Wcx -= self.learning_rate * self.Wcx_grad
        self.bc -= self.learning_rate * self.bc_grad
```

梯度检查的实现

和RecurrentLayer一样，为了支持梯度检查，我们需要支持重置内部状态：

```
    def reset_state(self):
        # 当前时刻初始化为t0
        self.times = 0
        # 各个时刻的单元状态向量c
        self.c_list = self.init_state_vec()
        # 各个时刻的输出向量h
        self.h_list = self.init_state_vec()
        # 各个时刻的遗忘门f
        self.f_list = self.init_state_vec()
        # 各个时刻的输入门i
        self.i_list = self.init_state_vec()
        # 各个时刻的输出门o
        self.o_list = self.init_state_vec()
        # 各个时刻的即时状态c~
        self.ct_list = self.init_state_vec()
```

最后，是梯度检查的代码：

```
def data_set():
    x = [np.array([[1], [2], [3]]),
         np.array([[2], [3], [4]])]
    d = np.array([[1], [2]])
    return x, d

def gradient_check():
    '''
    梯度检查
    '''
    # 设计一个误差函数，取所有节点输出项之和
    error_function = lambda o: o.sum()

    lstm = LstmLayer(3, 2, 1e-3)

    # 计算forward值
    x, d = data_set()
    lstm.forward(x[0])
    lstm.forward(x[1])

    # 求取sensitivity map
    sensitivity_array = np.ones(lstm.h_list[-1].shape,
                                dtype=np.float64)
    # 计算梯度
    lstm.backward(x[1], sensitivity_array, IdentityActivator())

    # 检查梯度
    epsilon = 10e-4
    for i in range(lstm.Wfh.shape[0]):
        for j in range(lstm.Wfh.shape[1]):
            lstm.Wfh[i,j] += epsilon
            lstm.reset_state()
            lstm.forward(x[0])
            lstm.forward(x[1])
            err1 = error_function(lstm.h_list[-1])
            lstm.Wfh[i,j] -= 2*epsilon
            lstm.reset_state()
            lstm.forward(x[0])
            lstm.forward(x[1])
            err2 = error_function(lstm.h_list[-1])
            expect_grad = (err1 - err2) / (2 * epsilon)
            lstm.Wfh[i,j] += epsilon
            print 'weights(%d,%d): expected - actural %.4e - %.4e' % (
                i, j, expect_grad, lstm.Wfh_grad[i,j])
    return lstm
```

我们只对W_{fh}做了检查，读者可以自行增加对其他梯度的检查。下面是某次梯度检查的结果：

```
weights(0,0): expected - actural 1.3908e-09 - 1.3909e-09
weights(0,1): expected - actural 1.4017e-09 - 1.4017e-09
weights(1,0): expected - actural 1.4017e-09 - 1.4017e-09
weights(1,1): expected - actural 1.4126e-09 - 1.4126e-09
```

GRU

前面我们讲了一种普通的LSTM，事实上LSTM存在很多**变体**，许多论文中的LSTM都或多或少的不太一样。在众多的LSTM变体中，**GRU (Gated Recurrent Unit)**也许是最成功的一种。它对LSTM做了很多简化，同时却保持着和LSTM相同的效果。因此，GRU最近变得越来越流行。

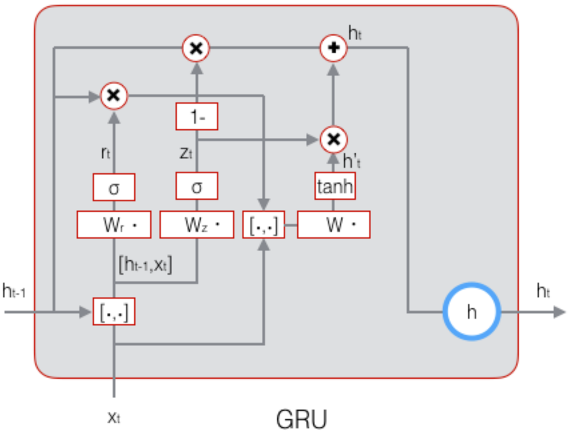
GRU对LSTM做了两个大改动：

1. 将输入门、遗忘门、输出门变为两个门：更新门（Update Gate）$\mathbf{z}_t$和重置门（Reset Gate）$\mathbf{r}_t$。
2. 将单元状态与输出合并为一个状态：$\mathbf{h}$。

GRU的前向计算公式为：

$$\mathbf{z}_t = \sigma(W_z \cdot [\mathbf{h}_{t-1}, \mathbf{x}_t]) \qquad (107)$$
$$\mathbf{r}_t = \sigma(W_r \cdot [\mathbf{h}_{t-1}, \mathbf{x}_t]) \qquad (108)$$
$$\tilde{\mathbf{h}}_t = \tanh(W \cdot [\mathbf{r}_t \circ \mathbf{h}_{t-1}, \mathbf{x}_t]) \qquad (109)$$
$$\mathbf{h} = (1 - \mathbf{z}_t) \circ \mathbf{h}_{t-1} + \mathbf{z}_t \circ \tilde{\mathbf{h}}_t \qquad (110)$$

下图是GRU的示意图：



GRU的训练算法比LSTM简单一些，留给读者自行推导，本文就不再赘述了。

小结

至此，LSTM——也许是结构最复杂的一类神经网络——就讲完了，相信拿下前几篇文章的读者们搞定这篇文章也不在话下吧！现在我们已经了解**循环神经网络**和它最流行的变体——**LSTM**，它们都可以用来处理序列。但是，有时候仅仅拥有处理序列的能力还不够，还需要处理比序列更为复杂的结构（比如树结构），这时候就需要用到另外一类网络：**递归神经网络(Recursive Neural Network)**，巧合的是，它的缩写也是**RNN**。在下一篇文章中，我们将介绍**递归神经网络**和它的训练算法。现在，漫长的烧脑暂告一段落，休息一下吧:)

参考资料

1. CS224d: Deep Learning for Natural Language Processing
2. Understanding LSTM Networks
3. LSTM Forward and Backward Pass

- **内容目录**

- 删除

查看更早的 5 条回复

回复批注

×

通知

取消 确认

-
-