深度学习实战教程(六)：长短时记忆网络(LSTM)

2019年1月2日 18:41:15 23 5,404 °C 编辑

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。回顾一下深度学习实战教程(五)：循环神经网络中推导的，误差项沿时间反向传播的公式：

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

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）：

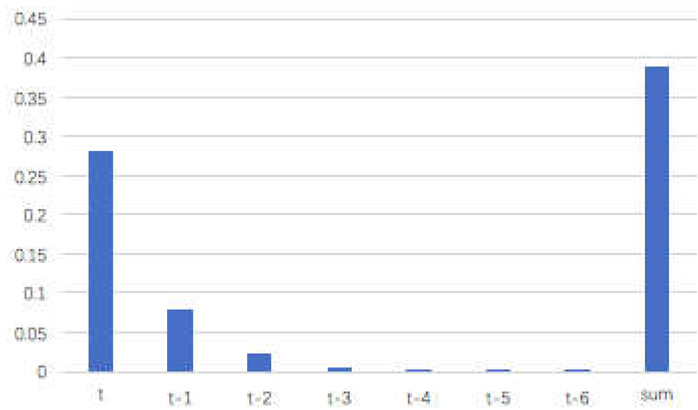
$$\begin{aligned}\|\delta_k^T\| &\leqslant \|\delta_t^T\| \prod_{i=k}^{t-1} \|diag[f'(\mathbf{net}_i)]\| \|W\| \\ &\leqslant \|\delta_t^T\| (\beta_f \beta_W)^{t-k}\end{aligned}$$

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？在深度学习实战教程(五)：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：

$$\begin{aligned}\nabla_W E &= \sum_{k=1}^{t} \nabla_{W_k} E \\ &= \nabla_{W_t} E + \nabla_{W_{t-1}} E + \nabla_{W_{t-2}} E + \ldots + \nabla_{W_1} E\end{aligned}$$

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：

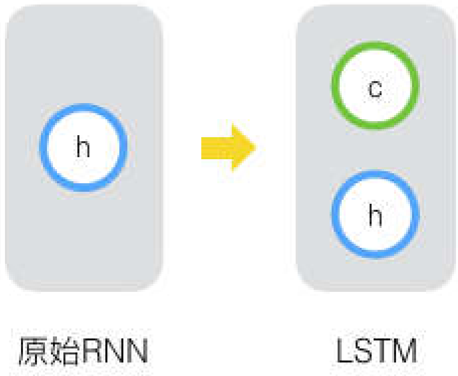


我们就可以看到，从上图的t-3时刻开始，梯度已经几乎减少到0了。那么，从这个时刻开始再往之前走，得到的梯度（几乎为零）就不会对最终的梯度值有任何贡献，这就相当于无论t-3时刻之前的网络状态h是什么，在训练中都不会对权重数组W的更新产生影响，也就是网络事实上已经忽略了t-3时刻之前的状态。这就是原始RNN无法处理长距离依赖的原因。

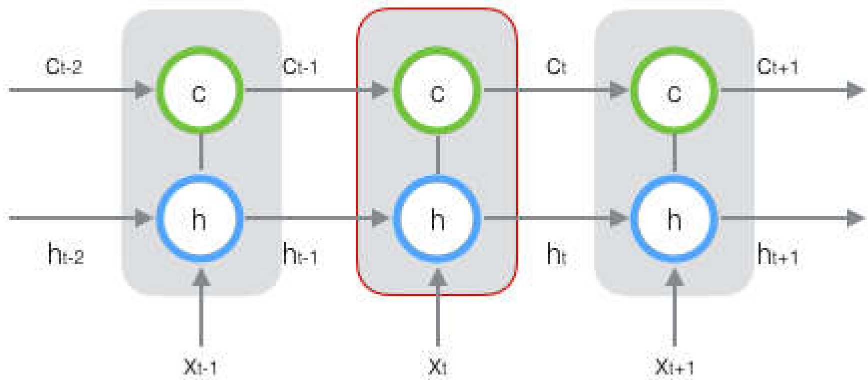
既然找到了问题的原因，那么我们就能解决它。从问题的定位到解决，科学家们大概花了7、8年时间。终于有一天，Hochreiter和Schmidhuber两位科学家发明出**长短时记忆网络**，一举解决这个问题。

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：

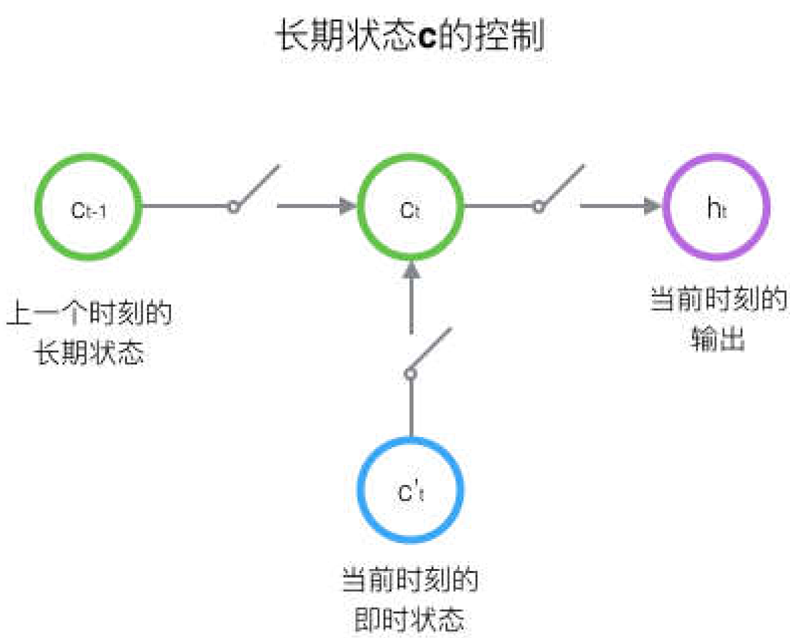


新增加的状态c，称为**单元状态(cell state)**。我们把上图按照时间维度展开：



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**x**、**h**、**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：



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，**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$\mathbf{h}_t$。

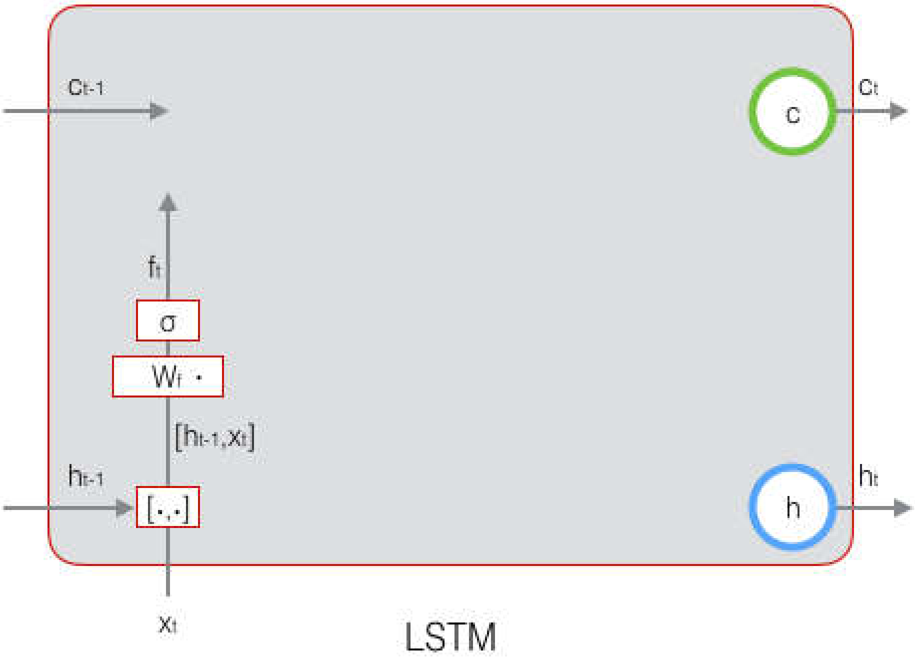
我们先来看一下遗忘门：

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

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：

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

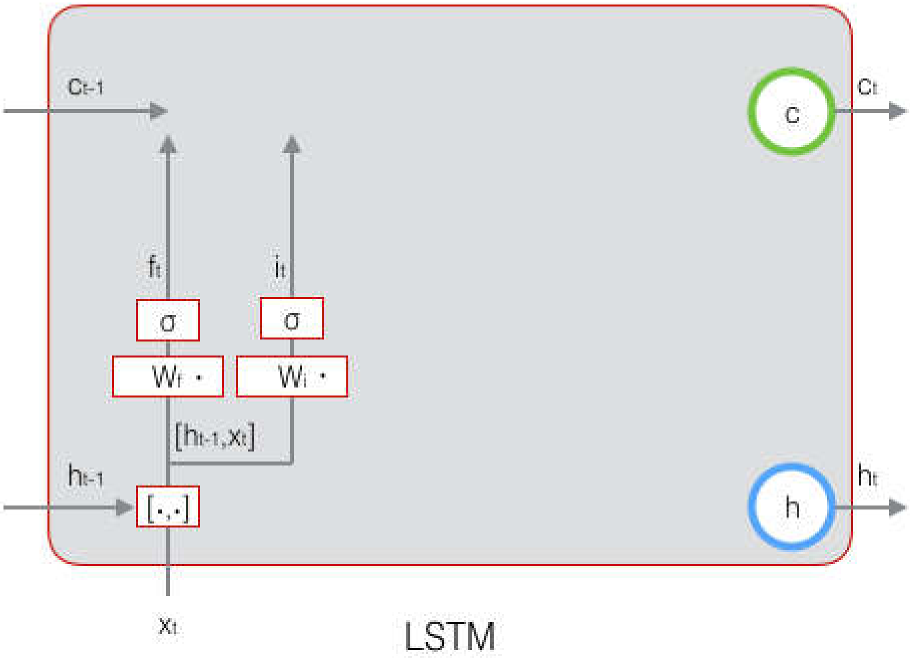
下图显示了遗忘门的计算：



接下来看看输入门：

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

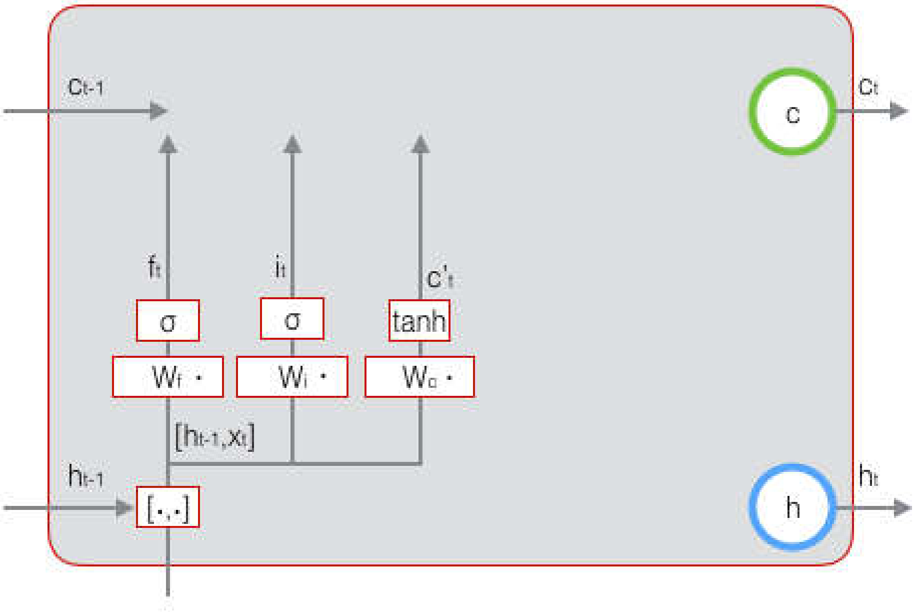
上式中，W_i是输入门的权重矩阵，$\mathbf{b}_i$是输入门的偏置项。下图表示了输入门的计算：



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：

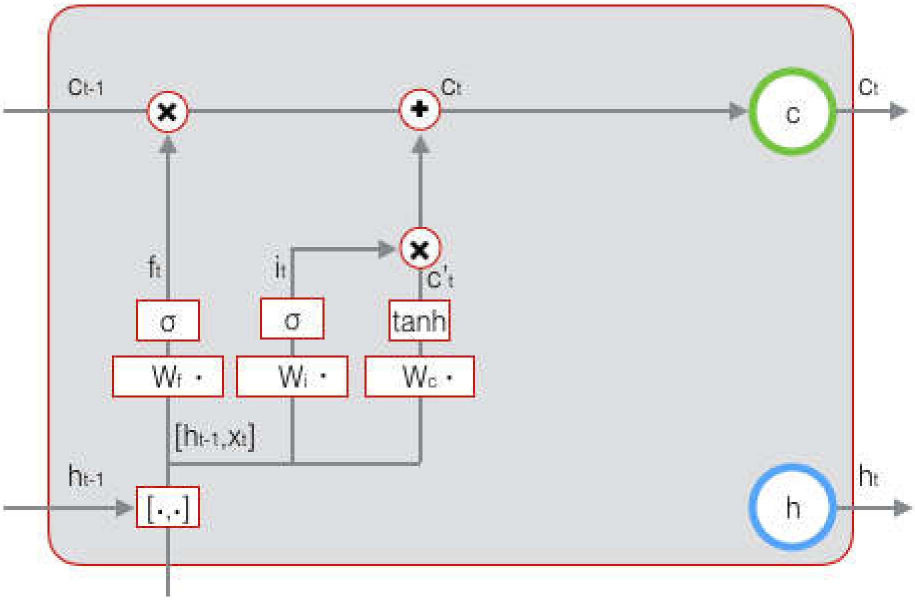


LSTM

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：

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

符号∘表示**按元素乘**。下图是$\mathbf{c}_t$的计算：

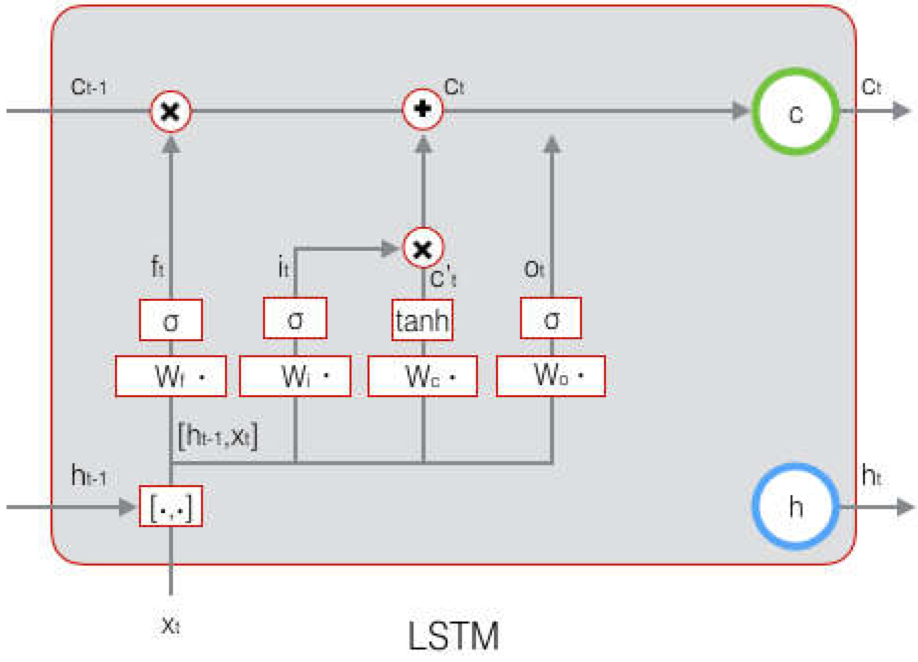


LSTM

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：

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

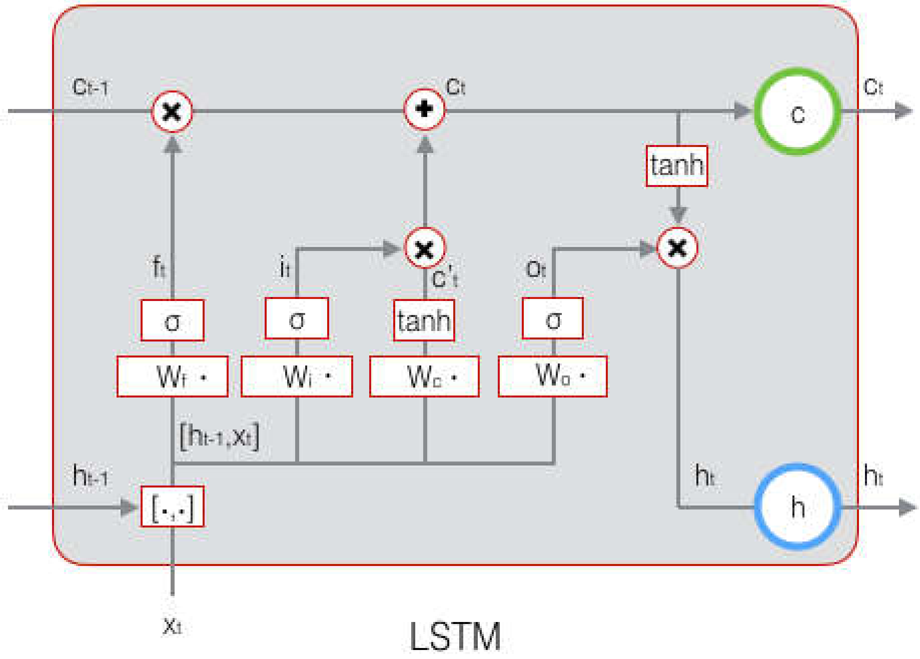
下图表示输出门的计算：



LSTM最终的输出，是由输出门和单元状态共同确定的：

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

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：

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

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，以及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_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：

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

当○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：

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

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。

$$
\begin{aligned}
\mathbf{net}_{f,t} &= W_f[\mathbf{h}_{t-1}, \mathbf{x}_t] + \mathbf{b}_f \\
&= W_{fh}\mathbf{h}_{t-1} + W_{fx}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_f \\
\mathbf{net}_{i,t} &= W_i[\mathbf{h}_{t-1}, \mathbf{x}_t] + \mathbf{b}_i \\
&= W_{ih}\mathbf{h}_{t-1} + W_{ix}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_i \\
\mathbf{net}_{\tilde{c},t} &= W_c[\mathbf{h}_{t-1}, \mathbf{x}_t] + \mathbf{b}_c \\
&= W_{ch}\mathbf{h}_{t-1} + W_{cx}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_c \\
\mathbf{net}_{o,t} &= W_o[\mathbf{h}_{t-1}, \mathbf{x}_t] + \mathbf{b}_o \\
&= W_{oh}\mathbf{h}_{t-1} + W_{ox}\mathbf{x}_t + \mathbf{b}_o \\
\delta_{f,t} &\overset{def}{=} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{f,t}} \\
\delta_{i,t} &\overset{def}{=} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{i,t}} \\
\delta_{\tilde{c},t} &\overset{def}{=} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{\tilde{c},t}} \\
\delta_{o,t} &\overset{def}{=} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{net}_{o,t}}
\end{aligned}
$$

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}。

$$
\begin{aligned}
\delta_{t-1}^T &= \frac{\partial E}{\partial \mathbf{h_{t-1}}} \\
&= \frac{\partial E}{\partial \mathbf{h_t}} \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{h_{t-1}}} \\
&= \delta_t^T \frac{\partial \mathbf{h_t}}{\partial \mathbf{h_{t-1}}}
\end{aligned}
$$

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**：

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

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

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

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：

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

根据**式4**，我们可以求出：

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

因为：

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

我们很容易得出：

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

将上述偏导数带入到**式7**，我们得到：

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

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

$$\begin{aligned}
\delta_{o,t}^T &= \delta_t^T \circ \tanh(\mathbf{c}_t) \circ \mathbf{o}_t \circ (1-\mathbf{o}_t) \qquad (\text{式}9) \\
\delta_{f,t}^T &= \delta_t^T \circ \mathbf{o}_t \circ (1-\tanh(\mathbf{c}_t)^2) \circ \mathbf{c}_{t-1} \circ \mathbf{f}_t \circ (1-\mathbf{f}_t) \qquad (\text{式}10) \\
\delta_{i,t}^T &= \delta_t^T \circ \mathbf{o}_t \circ (1-\tanh(\mathbf{c}_t)^2) \circ \tilde{\mathbf{c}}_t \circ \mathbf{i}_t \circ (1-\mathbf{i}_t) \qquad (\text{式}11) \\
\delta_{\tilde{c},t}^T &= \delta_t^T \circ \mathbf{o}_t \circ (1-\tanh(\mathbf{c}_t)^2) \circ \mathbf{i}_t \circ (1-\tilde{\mathbf{c}}^2) \qquad (\text{式}12)
\end{aligned}$$

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：

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

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：

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

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深度学习实战教程(五)：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您需要选择一个短代码$\delta_{o,t}$、$\delta_{f,t}$、$\delta_{i,t}$、$\delta_{\tilde{c},t}$，很容易求出t时刻的W_{oh}、W_{ih}、W_{fh}、W_{ch}：

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

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

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

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

将各个时刻的梯度加在一起，就能得到最终的梯度：

$$\begin{aligned}\frac{\partial E}{\partial W_{oh}}&=\sum_{j=1}^{t}\delta_{o,j}\mathbf{h}_{j-1}^T\\\frac{\partial E}{\partial W_{fh}}&=\sum_{j=1}^{t}\delta_{f,j}\mathbf{h}_{j-1}^T\\\frac{\partial E}{\partial W_{ih}}&=\sum_{j=1}^{t}\delta_{i,j}\mathbf{h}_{j-1}^T\\\frac{\partial E}{\partial W_{ch}}&=\sum_{j=1}^{t}\delta_{\tilde{c},j}\mathbf{h}_{j-1}^T\end{aligned}$$

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：

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

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

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

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

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：

$$\begin{aligned}\frac{\partial E}{\partial \mathbf{b}_o} &= \sum_{j=1}^{t} \delta_{o,j} \\ \frac{\partial E}{\partial \mathbf{b}_i} &= \sum_{j=1}^{t} \delta_{i,j} \\ \frac{\partial E}{\partial \mathbf{b}_f} &= \sum_{j=1}^{t} \delta_{f,j} \\ \frac{\partial E}{\partial \mathbf{b}_c} &= \sum_{j=1}^{t} \delta_{\tilde{c},j}\end{aligned}$$

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：

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

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

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

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

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

完整代码请参考GitHub：点击查看

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。

Python

```python
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、b_f、b_i、b_o、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）。

Python
```python
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：

```python
    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$\tilde{\mathbf{c}}_t$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。

```python
    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：

```python
    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：

```python
    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：

Python

```python
    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：

Python

```python
    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：

Python

```python
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：

```
Python 3.5.2 (v3.5.2:4def2a2901a5, Jun 25 2016, 22:18:55) [MSC v.1900 64 bit (AMD64)] on win32
Type "help", "copyright", "credits" or "license" for more information.
>>> import lstm
>>> lstm.gradient_check()
weights(0,0): expected - actural 1.5004e-09 - 1.5004e-09
weights(0,1): expected - actural 1.6163e-09 - 1.6163e-09
weights(1,0): expected - actural 1.6163e-09 - 1.6163e-09
weights(1,1): expected - actural 1.7411e-09 - 1.7410e-09
<lstm.LstmLayer object at 0x000001F46B0681D0>
```

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。

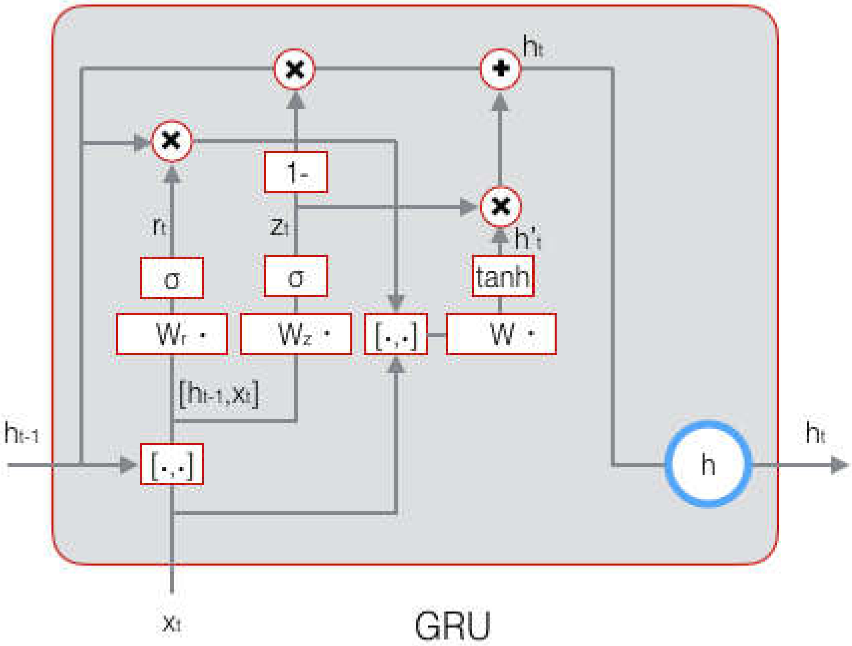
GRU对LSTM做了两个大改动：

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：**h**。

GRU的前向计算公式为：

$$
\begin{aligned}
\mathbf{z}_t &= \sigma(W_z \cdot [\mathbf{h}_{t-1}, \mathbf{x}_t]) \\
\mathbf{r}_t &= \sigma(W_r \cdot [\mathbf{h}_{t-1}, \mathbf{x}_t]) \\
\tilde{\mathbf{h}}_t &= \tanh(W \cdot [\mathbf{r}_t \circ \mathbf{h}_{t-1}, \mathbf{x}_t]) \\
\mathbf{h} &= (1 - \mathbf{z}_t) \circ \mathbf{h}_{t-1} + \mathbf{z}_t \circ \tilde{\mathbf{h}}_t
\end{aligned}
$$

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

原文链接：https://zybuluo.com/hanbingtao/note/581764

感谢原作者的付出！

不要欺骗别人，能被你骗到的都是相信你的人。--- 乔布斯