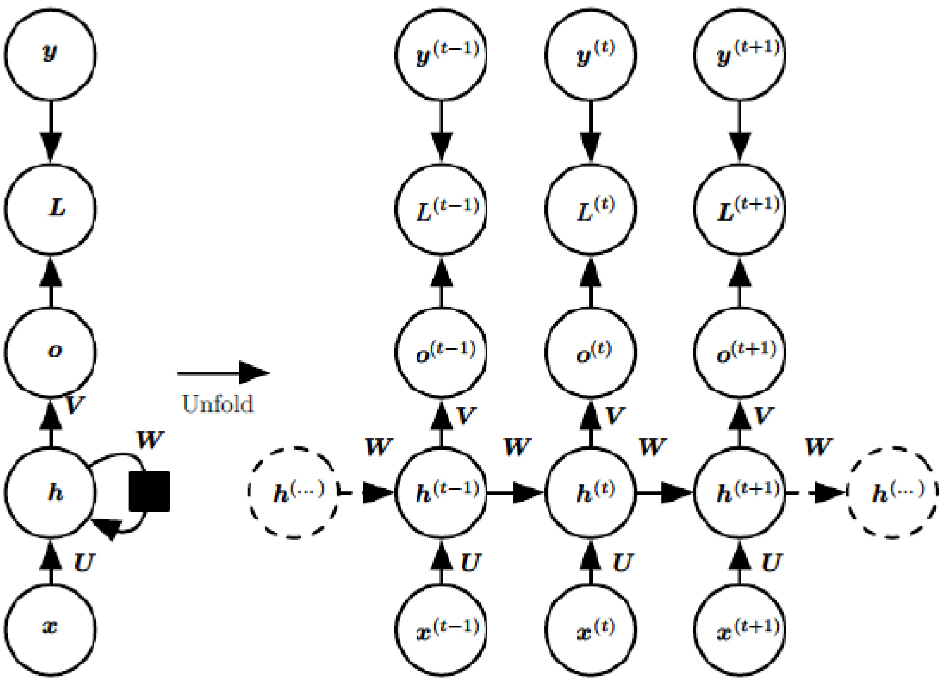
在循环神经网络(RNN)模型与前向反向传播算法中，我们总结了对RNN模型做了总结。由于RNN也有梯度消失的问题，因此很难处理长序列的数据，大牛们对RNN做了改进，得到了RNN的特例LSTM（Long Short-Term Memory），它可以避免常规RNN的梯度消失，因此在工业界得到了广泛的应用。下面我们就对LSTM模型做一个总结。

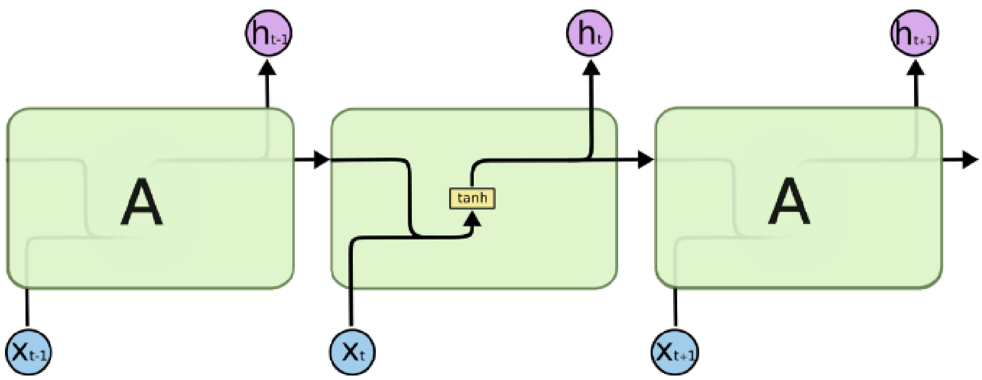
评论

1. 从RNN到LSTM

在RNN模型里，我们讲到了RNN具有如下的结构，每个序列索引位置t都有一个隐藏状态$h^{(t)}$。

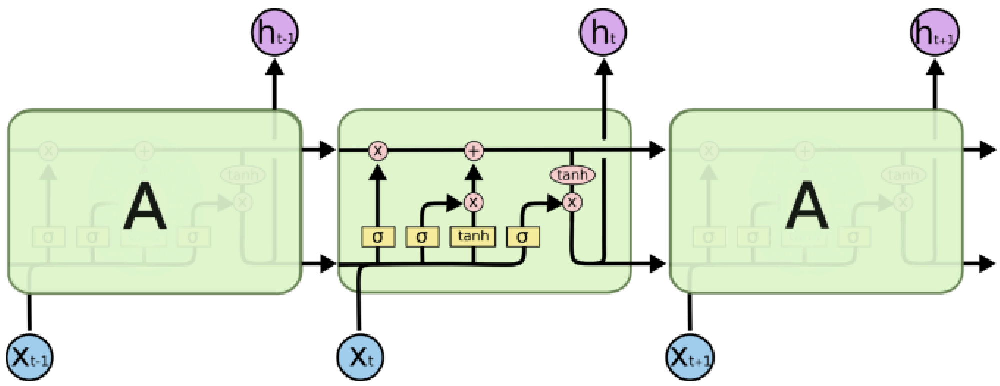


如果我们略去每层都有的$o^{(t)}, L^{(t)}, y^{(t)}$，则RNN的模型可以简化成如下图的形式：



图中可以很清晰看出在隐藏状态$h^{(t)}$由$x^{(t)}$和$h^{(t-1)}$得到。得到$h^{(t)}$后一方面用于当前层的模型损失计算，另一方面用于计算下一层的$h^{(t+1)}$。

由于RNN梯度消失的问题，大牛们对于序列索引位置t的隐藏结构做了改进，可以说通过一些技巧让隐藏结构复杂了起来，来避免梯度消失的问题，这样的特殊RNN就是我们的LSTM。由于LSTM有很多的变种，这里我们以最常见的LSTM为例讲述。LSTM的结构如下图：

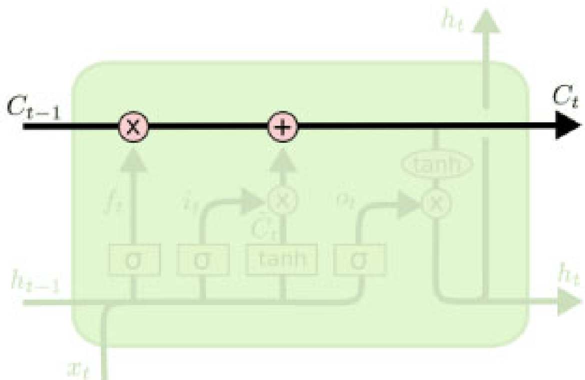


可以看到LSTM的结构要比RNN的复杂的多，真佩服牛人们怎么想出来这样的结构，然后这样居然就可以解决RNN梯度消失的问题？由于LSTM怎么可以解决梯度消失是一个比较难讲的问题，我也不是很熟悉，这里就不多说，重点回到LSTM的模型本身。

2. LSTM模型结构剖析

上面我们给出了LSTM的模型结构，下面我们就一点点的剖析LSTM模型在每个序列索引位置t时刻的内部结构。

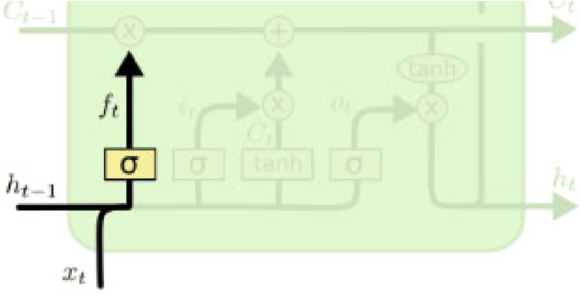
从上图中可以看出，在每个序列索引位置t时刻向前传播的除了和RNN一样的隐藏状态$h^{(t)}$，还多了另一个隐藏状态，如图中上面的长横线。这个隐藏状态我们一般称为细胞状态(Cell State)，记为$C^{(t)}$。如下图所示：



除了细胞状态，LSTM图中还有了很多奇怪的结构，这些结构一般称之为门控结构(Gate)。LSTM在在每个序列索引位置t的门一般包括遗忘门，输入门和输出门三种。下面我们就来研究上图中LSTM的遗忘门，输入门和输出门以及细胞状态。

2.1 LSTM之遗忘门

遗忘门（forget gate）顾名思义，是控制是否遗忘的，在LSTM中即以一定的概率控制是否遗忘上一层的隐藏细胞状态。遗忘门子结构如下图所示：



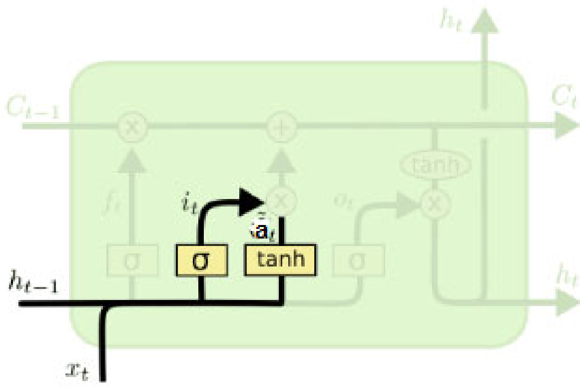
图中输入的有上一序列的隐藏状态$h^{(t-1)}$和本序列数据$x^{(t)}$，通过一个激活函数，一般是sigmoid，得到遗忘门的输出$f^{(t)}$。由于sigmoid的输出$f^{(t)}$在[0,1]之间，因此这里的输出$f^{(t)}$代表了遗忘上一层隐藏细胞状态的概率。用数学表达式即为：

$$f^{(t)} = \sigma(W_f h^{(t-1)} + U_f x^{(t)} + b_f)$$

其中W_f, U_f, b_f为线性关系的系数和偏倚，和RNN中的类似。σ为sigmoid激活函数。

2.2 LSTM之输入门

输入门（input gate）负责处理当前序列位置的输入，它的子结构如下图：



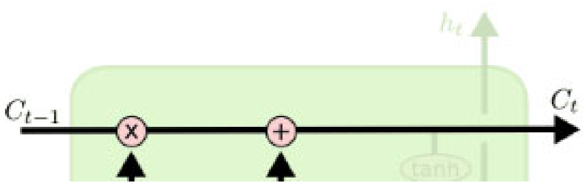
从图中可以看到输入门由两部分组成，第一部分使用了sigmoid激活函数，输出为i(t),第二部分使用了tanh激活函数，输出为a(t), 两者的结果后面会相乘再去更新细胞状态。用数学表达式即为：

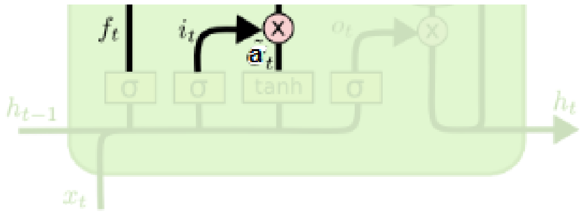
$$i^{(t)} = \sigma(W_i h^{(t-1)} + U_i x^{(t)} + b_i)$$
$$a^{(t)} = tanh(W_a h^{(t-1)} + U_a x^{(t)} + b_a)$$

其中$W_i, U_i, b_i, W_a, U_a, b_a$,,为线性关系的系数和偏倚，和RNN中的类似。σ为sigmoid激活函数。

2.3 LSTM之细胞状态更新

在研究LSTM输出门之前，我们要先看看LSTM之细胞状态。前面的遗忘门和输入门的结果都会作用于细胞状态C(t)。我们来看看从细胞状态C(t−1)如何得到C(t)。如下图所示：





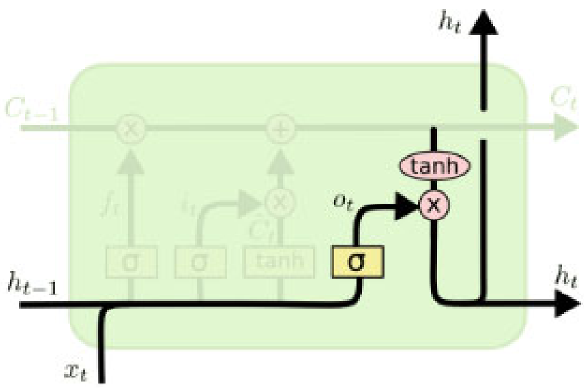
细胞状态$C^{(t)}$由两部分组成，第一部分是$C^{(t-1)}$和遗忘门输出$f^{(t)}$的乘积，第二部分是输入门的$i^{(t)}$和$a^{(t)}$的乘积，即：

$$C^{(t)} = C^{(t-1)} \odot f^{(t)} + i^{(t)} \odot a^{(t)}$$

其中，$\odot$为Hadamard积，在DNN中也用到过。

2.4 LSTM之输出门

有了新的隐藏细胞状态C(t)，我们就可以来看输出门了，子结构如下：



从图中可以看出，隐藏状态$h^{(t)}$的更新由两部分组成，第一部分是$o^{(t)}$, 它由上一序列的隐藏状态$h^{(t-1)}$和本序列数据$x^{(t)}$，以及激活函数sigmoid得到，第二部分由隐藏状态$C^{(t)}$和tanh激活函数组成, 即：

$$o^{(t)} = \sigma(W_o h^{(t-1)} + U_o x^{(t)} + b_o)$$
$$h^{(t)} = o^{(t)} \odot tanh(C^{(t)})$$

通过本节的剖析，相信大家对于LSTM的模型结构已经有了解了。当然，有些LSTM的结构和上面的LSTM图稍有不同，但是原理是完全一样的。

3. LSTM前向传播算法

现在我们来总结下LSTM前向传播算法。LSTM模型有两个隐藏状态$h^{(t)}, C^{(t)}$，模型参数几乎是RNN的4倍，因为现在多了$W_f, U_f, b_f, W_a, U_a, b_a, W_i, U_i, b_i, W_o, U_o, b_o$这些参数。

前向传播过程在每个序列索引位置的过程为：

1）更新遗忘门输出：

$$f^{(t)} = \sigma(W_f h^{(t-1)} + U_f x^{(t)} + b_f)$$

2）更新输入门两部分输出：

$$i^{(t)} = \sigma(W_i h^{(t-1)} + U_i x^{(t)} + b_i)$$
$$a^{(t)} = tanh(W_a h^{(t-1)} + U_a x^{(t)} + b_a)$$

3）更新细胞状态：

$$C^{(t)} = C^{(t-1)} \odot f^{(t)} + i^{(t)} \odot a^{(t)}$$

4）更新输出门输出：

$$o^{(t)} = \sigma(W_o h^{(t-1)} + U_o x^{(t)} + b_o)$$
$$h^{(t)} = o^{(t)} \odot tanh(C^{(t)})$$

5）更新当前序列索引预测输出：

$$\hat{y}^{(t)} = \sigma(Vh^{(t)} + c)$$

4. LSTM反向传播算法推导关键点

有了LSTM前向传播算法，推导反向传播算法就很容易了， 思路和RNN的反向传播算法思路一致，也是通过梯度下降法迭代更新我们所有的参数，关键点在于计算所有参数基于损失函数的偏导数。

在RNN中，为了反向传播误差，我们通过隐藏状态$h^{(t)}$的梯度$\delta^{(t)}$一步步向前传播。在LSTM这里也类似。只不过我们这里有两个隐藏状态$h^{(t)}$和$C^{(t)}$。这里我们定义两个δ，即：

$$\delta_h^{(t)} = \frac{\partial L}{\partial h^{(t)}}$$
$$\delta_C^{(t)} = \frac{\partial L}{\partial C^{(t)}}$$

为了便于推导，我们将损失函数L(t)分成两块，一块是时刻t位置的损失l(t)，另一块是时刻t之后损失L(t+1)，即：

$$L(t) = \begin{cases} l(t) + L(t+1) & \text{if}\, t < \tau \\ l(t) & \text{if}\, t = \tau \end{cases}$$

而在最后的序列索引位置τ的$\delta_h^{(\tau)}$和$\delta_C^{(\tau)}$为：

$$\delta_h^{(\tau)} = (\frac{\partial O^{(\tau)}}{\partial h^{(\tau)}})^T \frac{\partial L^{(\tau)}}{\partial O^{(\tau)}} = V^T(\hat{y}^{(\tau)} - y^{(\tau)})$$
$$\delta_C^{(\tau)} = (\frac{\partial h^{(\tau)}}{\partial C^{(\tau)}})^T \frac{\partial L^{(\tau)}}{\partial h^{(\tau)}} = \delta_h^{(\tau)} \odot o^{(\tau)} \odot (1 - tanh^2(C^{(\tau)}))$$

接着我们由$\delta_C^{(t+1)}, \delta_h^{(t+1)}$反向推导$\delta_h^{(t)}, \delta_C^{(t)}$.

$\delta_h^{(t)}$的梯度由本层t时刻的输出梯度误差和大于t时刻的误差两部分决定，即：

$$\delta_h^{(t)} = \frac{\partial L}{\partial h^{(t)}} = \frac{\partial l(t)}{\partial h^{(t)}} + (\frac{\partial h^{(t+1)}}{\partial h^{(t)}})^T \frac{\partial L(t+1)}{\partial h^{(t+1)}} = V^T(\hat{y}^{(t)} - y^{(t)}) + (\frac{\partial h^{(t+1)}}{\partial h^{(t)}})^T \delta_h^{(t+1)}$$

整个LSTM反向传播的难点就在于$\frac{\partial h^{(t+1)}}{\partial h^{(t)}}$这部分的计算。仔细观察，由于$\frac{\partial h^{(t+1)}}{\partial h^{(t)}}$, 在第一项$o^{(t)}$中，包含一个h的递推关系，第二项$tanh(C^{(t)})$就复杂了，tanh函数里面又可以表示成：

$$C^{(t)} = C^{(t-1)} \odot f^{(t)} + i^{(t)} \odot a^{(t)}$$

tanh函数的第一项中，$f^{(t)}$包含一个h的递推关系，在tanh函数的第二项中，$i^{(t)}$和$a^{(t)}$都包含h的递推关系，因此，最终$\frac{\partial h^{(t+1)}}{\partial h^{(t)}}$这部分的计算结果由四部分组成。即：

$$\Delta C = o^{(t+1)} \odot [1 - tanh^2(C^{(t+1)})]$$

$$\frac{\partial h^{(t+1)}}{\partial h^{(t)}} = diag[o^{(t+1)} \odot (1 - o^{(t+1)}) \odot tanh(C^{(t+1)})]W_o + diag[\Delta C \odot f^{(t+1}$$

$$+ diag[\Delta C \odot a^{(t+1)} \odot i^{(t+}$$

有了$\delta_h^{(t)}$和$\delta_C^{(t)}$， 计算这一大堆参数的梯度就很容易了，这里只给出W_f的梯度计算过程，其他的$U_f, b_f, W_a, U_a, b_a, W_i, U_i, b_i, W_o, U_o, b_o$，$V, c$的梯度大家只要照搬就可以了。

$$\frac{\partial L}{\partial W_f} = \sum_{t=1}^{\tau} [\delta_C^{(t)} \odot C^{(t-1)} \odot f^{(t)} \odot (1 - f^{(t)})](h^{(t-1)})^T$$

5. LSTM小结

LSTM虽然结构复杂，但是只要理顺了里面的各个部分和之间的关系，进而理解前向反向传播算法是不难的。当然实际应用中LSTM的难点不在前向反向传播算法，这些有算法库帮你搞定，模型结构和一大堆参数的调参才是让人头痛的问题。不过，理解LSTM模型结构仍然是高效使用的前提。