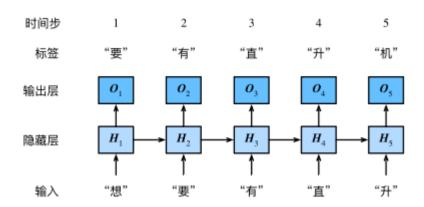
循环神经网络

本节介绍循环神经网络,下图展示了如何基于循环神经网络实现语言模型。我们的目的是基于当前的输入与过去的输入序列,预测序列的下一个字符。循环神经网络引入一个隐藏变量H,用 H_t 表示H在时间步t的值。 H_t 的计算基于 X_t 和 H_{t-1} ,可以认为 H_t 记录了到当前字符为止的序列信息,利用 H_t 对序列的下一个字符进行预测。



循环神经网络的构造

我们先看循环神经网络的具体构造。假设 $m{X}_t \in \mathbb{R}^{n imes d}$ 是时间步 $m{t}$ 的小批量输入, $m{H}_t \in \mathbb{R}^{n imes h}$ 是该时间步的隐藏变量,则:

$$oldsymbol{H}_t = \phi(oldsymbol{X}_toldsymbol{W}_{xh} + oldsymbol{H}_{t-1}oldsymbol{W}_{hh} + oldsymbol{b}_h).$$

其中, $W_{xh} \in \mathbb{R}^{d \times h}$, $W_{hh} \in \mathbb{R}^{h \times h}$, $b_h \in \mathbb{R}^{1 \times h}$, ϕ 函数是非线性激活函数。由于引入了 $H_{t-1}W_{hh}$, H_t 能够捕捉截至当前时间步的序列的历史信息,就像是神经网络当前时间步的状态或记忆一样。由于 H_t 的计算基于 H_{t-1} ,上式的计算是循环的,使用循环计算的网络即循环神经网络(recurrent neural network)。

在时间步t, 输出层的输出为:

$$oldsymbol{O}_t = oldsymbol{H}_t oldsymbol{W}_{hq} + oldsymbol{b}_q.$$

其中 $oldsymbol{W}_{hq} \in \mathbb{R}^{h imes q}$, $oldsymbol{b}_q \in \mathbb{R}^{1 imes q}$ 。

从零开始实现循环神经网络

我们先尝试从零开始实现一个基于字符级循环神经网络的语言模型,这里我们使用周杰伦的歌词作为语料,首先我们读入数据:

```
import torch
import torch.nn as nn
import time
import math
import sys
sys.path.append("/home/kesci/input")
import d2l_jay2900 as d2l
(corpus_indices, char_to_idx, idx_to_char, vocab_size) = d2l.load_data_jay_lyrics()
device = torch.device('cuda' if torch.cuda.is_available() else 'cpu')
```

one-hot向量

我们需要将字符表示成向量,这里采用one-hot向量。假设词典大小是N,每次字符对应一个从0到N-1的唯一的索引,则该字符的向量是一个长度为N的向量,若字符的索引是i,则该向量的第i个位置为i,其他位置为i。下面分别展示了索引为i0和2的one-hot向量,向量长度等于词典大小。

我们每次采样的小批量的形状是(批量大小,时间步数)。下面的函数将这样的小批量变换成数个形状为(批量大小,词典大小)的矩阵,矩阵个数等于时间步数。也就是说,时间步t的输入为 $X_t \in \mathbb{R}^{n \times d}$,其中n为批量大小,d为词向量大小,即one-hot向量长度(词典大小)。

```
In [4]:
    def to_onehot(X, n_class):
        return [one_hot(X[:, i], n_class) for i in range(X.shape[1])]

X = torch.arange(10).view(2, 5)
    inputs = to_onehot(X, vocab_size)
    print(len(inputs), inputs[0].shape)

5 torch.Size([2, 1027])
```

初始化模型参数

tensor([1., 1.])

```
In [5]:
 num_inputs, num_hiddens, num_outputs = vocab_size, 256, vocab_size
 # num_inputs: d
 # num_hiddens: h, 隐藏单元的个数是超参数
 # num_outputs: q
 def get_params():
     def _one(shape):
        param = torch.zeros(shape, device=device, dtype=torch.float32)
        nn.init.normal_(param, 0, 0.01)
        return torch.nn.Parameter(param)
     # 隐藏层参数
     W_xh = _one((num_inputs, num_hiddens))
     W_hh = _one((num_hiddens, num_hiddens))
     b_h = torch.nn.Parameter(torch.zeros(num_hiddens, device=device))
     # 输出层参数
     W_hq = _one((num_hiddens, num_outputs))
     b_q = torch.nn.Parameter(torch.zeros(num_outputs, device=device))
     return (W_xh, W_hh, b_h, W_hq, b_q)
定义模型
函数rnn用循环的方式依次完成循环神经网络每个时间步的计算。
In [6]:
 def rnn(inputs, state, params):
     # inputs和outputs皆为num_steps个形状为(batch_size, vocab_size)的矩阵
     W_xh, W_hq, b_q = params
    H, = state
     outputs = []
     for X in inputs:
        H = torch.tanh(torch.matmul(X, W_xh) + torch.matmul(H, W_hh) + b_h)
        Y = torch.matmul(H, W_hq) + b_q
        outputs.append(Y)
     return outputs, (H,)
函数init_rnn_state初始化隐藏变量,这里的返回值是一个元组。
In [7]:
 def init_rnn_state(batch_size, num_hiddens, device):
     return (torch.zeros((batch_size, num_hiddens), device=device), )
做个简单的测试来观察输出结果的个数(时间步数),以及第一个时间步的输出层输出的形状和隐藏状态的形状。
In [8]:
 print(X.shape)
 print(num_hiddens)
 print(vocab_size)
 state = init_rnn_state(X.shape[0], num_hiddens, device)
 inputs = to_onehot(X.to(device), vocab_size)
 params = get_params()
 outputs, state_new = rnn(inputs, state, params)
 print(len(inputs), inputs[0].shape)
 print(len(outputs), outputs[0].shape)
 print(len(state), state[0].shape)
 print(len(state_new), state_new[0].shape)
torch.Size([2, 5])
256
1027
5 torch.Size([2, 1027])
5 torch.Size([2, 1027])
1 torch.Size([2, 256])
1 torch.Size([2, 256])
```

裁剪梯度

循环神经网络中较容易出现梯度衰减或梯度爆炸,这会导致网络几乎无法训练。裁剪梯度(clip gradient)是一种应对梯度爆炸的方法。假设我们把所有模型参数的梯度拼接成一个向量 $m{g}$,并设裁剪的阈值是 $m{ heta}$ 。裁剪后的梯度

$$\min\left(rac{ heta}{\|oldsymbol{g}\|},1
ight)oldsymbol{g}$$

的 L_2 范数不超过heta。

```
In [9]:

def grad_clipping(params, theta, device):
    norm = torch.tensor([0.0], device=device)
    for param in params:
        norm += (param.grad.data ** 2).sum()
    norm = norm.sqrt().item()
    if norm > theta:
        for param in params:
            param.grad.data *= (theta / norm)
```

定义预测函数

以下函数基于前缀prefix(含有数个字符的字符串)来预测接下来的num_chars个字符。这个函数稍显复杂,其中我们将循环神经单元rnn设置成了函数参数,这样在后面小节介绍其他 循环神经网络时能重复使用这个函数。

```
In [10]:
 def predict_rnn(prefix, num_chars, rnn, params, init_rnn_state,
                num_hiddens, vocab_size, device, idx_to_char, char_to_idx):
     state = init_rnn_state(1, num_hiddens, device)
    output = [char_to_idx[prefix[0]]] # output记录prefix加上预测的num_chars个字符
    for t in range(num_chars + len(prefix) - 1):
        # 将上一时间步的输出作为当前时间步的输入
        X = to_onehot(torch.tensor([[output[-1]]], device=device), vocab_size)
        # 计算输出和更新隐藏状态
        (Y, state) = rnn(X, state, params)
        # 下一个时间步的输入是prefix里的字符或者当前的最佳预测字符
        if t < len(prefix) - 1:</pre>
            output.append(char_to_idx[prefix[t + 1]])
        else:
            output.append(Y[0].argmax(dim=1).item())
     return ''.join([idx_to_char[i] for i in output])
我们先测试一下predict_rnn函数。我们将根据前缀"分开"创作长度为10个字符(不考虑前缀长度)的一段歌词。因为模型参数为随机值,所以预测结果也是随机的。
In [11]:
 predict_rnn('分开', 10, rnn, params, init_rnn_state, num_hiddens, vocab_size,
            device, idx_to_char, char_to_idx)
Out[11]:
'分开却难蜴知化落果够辛抢'
困惑度
```

我们通常使用困惑度(perplexity)来评价语言模型的好坏。回忆一下"softmax回归"一节中交叉熵损失函数的定义。困惑度是对交叉熵损失函数做指数运算后得到的值。特别地,

- 最佳情况下,模型总是把标签类别的概率预测为1,此时困惑度为1;
- 最坏情况下,模型总是把标签类别的概率预测为0,此时困惑度为正无穷;
- 基线情况下,模型总是预测所有类别的概率都相同,此时困惑度为类别个数。

显然,任何一个有效模型的困惑度必须小于类别个数。在本例中,困惑度必须小于词典大小vocab_size。

定义模型训练函数

跟之前章节的模型训练函数相比,这里的模型训练函数有以下几点不同:

- 1. 使用困惑度评价模型。
- 2. 在迭代模型参数前裁剪梯度。
- 3. 对时序数据采用不同采样方法将导致隐藏状态初始化的不同。

```
In [12]:
```

```
def train_and_predict_rnn(rnn, get_params, init_rnn_state, num_hiddens,
                        vocab_size, device, corpus_indices, idx_to_char,
                        char_to_idx, is_random_iter, num_epochs, num_steps,
                        lr, clipping_theta, batch_size, pred_period,
                        pred_len, prefixes):
    if is_random_iter:
       data_iter_fn = d2l.data_iter_random
    else:
       data_iter_fn = d2l.data_iter_consecutive
    params = get_params()
    loss = nn.CrossEntropyLoss()
    for epoch in range(num_epochs):
       if not is_random_iter: # 如使用相邻采样,在epoch开始时初始化隐藏状态
           state = init_rnn_state(batch_size, num_hiddens, device)
       l_sum, n, start = 0.0, 0, time.time()
       data_iter = data_iter_fn(corpus_indices, batch_size, num_steps, device)
       for X, Y in data_iter:
           if is_random_iter: # 如使用随机采样,在每个小批量更新前初始化隐藏状态
               state = init_rnn_state(batch_size, num_hiddens, device)
           else: # 否则需要使用detach函数从计算图分离隐藏状态
               for s in state:
                   s.detach_()
           # inputs是num_steps个形状为(batch_size, vocab_size)的矩阵
           inputs = to_onehot(X, vocab_size)
           # outputs有num_steps个形状为(batch_size, vocab_size)的矩阵
           (outputs, state) = rnn(inputs, state, params)
           # 拼接之后形状为(num_steps * batch_size, vocab_size)
           outputs = torch.cat(outputs, dim=0)
           # Y的形状是(batch_size, num_steps),转置后再变成形状为
           # (num_steps * batch_size,)的向量,这样跟输出的行一一对应
           y = torch.flatten(Y.T)
           # 使用交叉熵损失计算平均分类误差
           l = loss(outputs, y.long())
           # 梯度清€
           if params[0].grad is not None:
               for param in params:
                   param.grad.data.zero_()
           l.backward()
           grad_clipping(params, clipping_theta, device) # 裁剪梯度
           d2l.sgd(params, lr, 1) # 因为误差已经取过均值,梯度不用再做平均
           l_sum += l.item() * y.shape[0]
           n += y.shape[0]
       if (epoch + 1) % pred_period == 0:
           print('epoch %d, perplexity %f, time %.2f sec' % (
               epoch + 1, math.exp(l_sum / n), time.time() - start))
           for prefix in prefixes:
               print(' -', predict_rnn(prefix, pred_len, rnn, params, init_rnn_state,
                   num_hiddens, vocab_size, device, idx_to_char, char_to_idx))
```

训练模型并创作歌词

现在我们可以训练模型了。首先,设置模型超参数。我们将根据前缀"分开"和"不分开"分别创作长度为50个字符(不考虑前缀长度)的一段歌词。我们每过50个迭代周期便根据当前训练的 模型创作一段歌词。

```
In [13]:
 num_epochs, num_steps, batch_size, lr, clipping_theta = 250, 35, 32, 1e2, 1e-2
 pred_period, pred_len, prefixes = 50, 50, ['分开', '不分开']
下面采用随机采样训练模型并创作歌词。
In [14]:
 train_and_predict_rnn(rnn, get_params, init_rnn_state, num_hiddens,
                   vocab_size, device, corpus_indices, idx_to_char,
                   char_to_idx, True, num_epochs, num_steps, lr,
                    clipping_theta, batch_size, pred_period, pred_len,
                   prefixes)
epoch 50, perplexity 69.143026, time 0.59 sec
 - 分开 我不要再想 我不要再想 我不要再想 我不要再想 我不要再想 我不要再想 我不要再想 我不要再想 我
 - 不分开 我有那 我想么这 我不要再 你的让我 你的让我 你的让我 你的让我 你的让我 你的让我
epoch 100, perplexity 9.620708, time 0.50 sec
 - 分开 一颗两双 在谁心空 我不定再不 没有你的我有 思不要 后情走 我想就这样牵着你的手不放开 爱可不
 - 不分开堡 我爱你这你 我不 你不 我不能再想 我不 再不 我不 我不 我不 我不 我不 我不 我不
epoch 150, perplexity 2.758654, time 0.53 sec
 - 分开 一只到 一颗两步三步四步望著天 看星星 一颗两颗三颗四颗 连成线背著背默默许下心愿 看远方的星是否
 - 不分开扫 我不能再想 我不 我不 我不要 爱情走的太快就像龙卷风 不能承受我已无处可躲 我不要再想 我不能
epoch 200, perplexity 1.563496, time 0.57 sec
 - 分开 一只到它心手的母斑鸠 在的黑猫笑走 学你去没有 静单三 教给堂 什么四对 在漠在中怎么擅有的窝
 - 不分开想 我不能再想 我不 我不 我不能 爱情走的太快就像龙卷风 不能承受我已无处可躲 我不要再想 我不要
epoch 250, perplexity 1.304408, time 0.50 sec
 - 分开 一直到 因手堂里术光 折变骷的豆都 然悔成著我 一口一口吃掉忧愁 别些了午三点阳光 瞎教太危重泪
 - 不分开吗 我叫你爸 你打我妈 这样对吗干嘛这样 何必让酒牵鼻子走 瞎 说一个痛废 就这伦现不 穿不想烦
接下来采用相邻采样训练模型并创作歌词。
In [15]:
 train_and_predict_rnn(rnn, get_params, init_rnn_state, num_hiddens,
                   vocab_size, device, corpus_indices, idx_to_char,
                   char_to_idx, False, num_epochs, num_steps, lr,
                   clipping_theta, batch_size, pred_period, pred_len,
                   prefixes)
epoch 50, perplexity 59.785954, time 0.59 sec
 - 分开 我不要的可爱女人 坏坏的让我疯狂的可爱女人 坏坏的让我疯狂的可爱女人 坏坏的让我疯狂的可爱女人 坏
 - 不分开 我不要的可爱女人 坏成的让我疯狂的可爱女人 坏坏的让我疯狂的可爱女人 坏坏的让我疯狂的可爱女人 坏
epoch 100, perplexity 6.826339, time 0.50 sec
 - 分开 我说好这你的我像 你为样口 整小村外的溪边 默默激待 一颗 有什么不 再来一碗热粥 配上几客栈人多
 - 不分开觉 我已经再你看 这生 却又再考倒吧 想通 你想很久了吧 通 却对很久 戒指在 分片怎么 快些有
epoch 150, perplexity 2.071869, time 0.50 sec
 - 分开 我说儿这你怎到你的手不放开 爱可不可以简简单单没有伤害 你 靠着我的肩膀 你 在我胸口睡著 像这样
 - 不分开觉透你不经 说 让不多口听是我 说不你 语沉默 一子四三 每头一碗的粥边 默默等待 娘子 有什么不妥
epoch 200, perplexity 1.290922, time 0.42 sec
 - 分开 我说儿有你每了 却少林童武故事 有是堂有城堡 每天忙碌地的寻找 到底什么我想要 却发现迷了路怎么
 - 不分开觉 你已经离开我 不知不觉 我跟了这节奏 后知后觉 又过了一个秋 后知后觉 我该好好生活 我该好好生
epoch 250, perplexity 1.150748, time 0.53 sec
 - 分开 我说好这你怎么 却少林跟武当 快使用双截棍 哼哼哈兮 快使用双截棍 哼哼哈兮 如果我有轻功 飞檐走
 - 不分开觉 你已经离开我 不知不觉 我跟了这节奏 后知后觉 后知了觉 迷迷蒙蒙 你给的梦 出现裂缝 隐隐作痛
循环神经网络的简介实现
定义模型
我们使用Pytorch中的nn.RNN来构造循环神经网络。在本节中,我们主要关注nn.RNN的以下几个构造函数参数:

    input_size - The number of expected features in the input x

  • hidden_size – The number of features in the hidden state h

    nonlinearity – The non-linearity to use. Can be either 'tanh' or 'relu'. Default: 'tanh'

  • batch_first - If True, then the input and output tensors are provided as (batch_size, num_steps, input_size). Default: False
这里的batch_first决定了输入的形状,我们使用默认的参数False,对应的输入形状是 (num_steps, batch_size, input_size)。
 forward函数的参数为:
  • input of shape (num_steps, batch_size, input_size): tensor containing the features of the input sequence.
  • h_0 of shape (num_layers * num_directions, batch_size, hidden_size): tensor containing the initial hidden state for each element in the batch. Defaults to zero if not provided. If
```

• h_0 of shape (num_layers * num_directions, batch_size, hidden_size): tensor containing the initial hidden state for each element in the batch. Defaults to zero if not provided. If the RNN is bidirectional, num_directions should be 2, else it should be 1.

forward函数的返回值是:

- output of shape (num_steps, batch_size, num_directions * hidden_size): tensor containing the output features (h_t) from the last layer of the RNN, for each t.
- h_n of shape (num_layers * num_directions, batch_size, hidden_size): tensor containing the hidden state for t = num_steps.

现在我们构造一个nn.RNN实例,并用一个简单的例子来看一下输出的形状。

```
In [16]:
    rnn_layer = nn.RNN(input_size=vocab_size, hidden_size=num_hiddens)
    num_steps, batch_size = 35, 2
    X = torch.rand(num_steps, batch_size, vocab_size)
    state = None
    Y, state_new = rnn_layer(X, state)
    print(Y.shape, state_new.shape)

torch.Size([35, 2, 256]) torch.Size([1, 2, 256])
```

我们定义一个完整的基于循环神经网络的语言模型。

```
class RNNModel(nn.Module):
     def __init__(self, rnn_layer, vocab_size):
         super(RNNModel, self).__init__()
         self.rnn = rnn_layer
         self.hidden_size = rnn_layer.hidden_size * (2 if rnn_layer.bidirectional else 1)
         self.vocab_size = vocab_size
         self.dense = nn.Linear(self.hidden_size, vocab_size)
     def forward(self, inputs, state):
         # inputs.shape: (batch_size, num_steps)
         X = to_onehot(inputs, vocab_size)
         X = torch.stack(X) # X.shape: (num_steps, batch_size, vocab_size)
         hiddens, state = self.rnn(X, state)
         hiddens = hiddens.view(-1, hiddens.shape[-1]) # hiddens.shape: (num_steps * batch_size, hidden_size)
         output = self.dense(hiddens)
         return output, state
类似的,我们需要实现一个预测函数,与前面的区别在于前向计算和初始化隐藏状态。
In [18]:
 def predict_rnn_pytorch(prefix, num_chars, model, vocab_size, device, idx_to_char,
                      char_to_idx):
     state = None
     output = [char_to_idx[prefix[0]]] # output记录prefix加上预测的num_chars个字符
     for t in range(num_chars + len(prefix) - 1):
         X = torch.tensor([output[-1]], device=device).view(1, 1)
         (Y, state) = model(X, state) # 前向计算不需要传入模型参数
         if t < len(prefix) - 1:</pre>
             output.append(char_to_idx[prefix[t + 1]])
         else:
             output.append(Y.argmax(dim=1).item())
     return ''.join([idx_to_char[i] for i in output])
使用权重为随机值的模型来预测一次。
In [19]:
 model = RNNModel(rnn_layer, vocab_size).to(device)
 predict_rnn_pytorch('分开', 10, model, vocab_size, device, idx_to_char, char_to_idx)
Out[19]:
'分开软火喝喝喝福喝福喝福'
接下来实现训练函数,这里只使用了相邻采样。
In [20]:
 def train_and_predict_rnn_pytorch(model, num_hiddens, vocab_size, device,
                                corpus_indices, idx_to_char, char_to_idx,
                                num_epochs, num_steps, lr, clipping_theta,
                                batch_size, pred_period, pred_len, prefixes):
     loss = nn.CrossEntropyLoss()
     optimizer = torch.optim.Adam(model.parameters(), lr=lr)
     model.to(device)
     for epoch in range(num_epochs):
         l_sum, n, start = 0.0, 0, time.time()
         data_iter = d2l.data_iter_consecutive(corpus_indices, batch_size, num_steps, device) # 相邻采样
         state = None
         for X, Y in data_iter:
            if state is not None:
                 # 使用detach函数从计算图分离隐藏状态
                 if isinstance (state, tuple): # LSTM, state:(h, c)
                    state[0].detach_()
                    state[1].detach_()
                 else:
                    state.detach_()
             (output, state) = model(X, state) # output.shape: (num_steps * batch_size, vocab_size)
            y = torch.flatten(Y.T)
            l = loss(output, y.long())
            optimizer.zero_grad()
            l.backward()
            grad_clipping(model.parameters(), clipping_theta, device)
            optimizer.step()
            l_sum += l.item() * y.shape[0]
            n += y.shape[0]
         if (epoch + 1) % pred_period == 0:
            print('epoch %d, perplexity %f, time %.2f sec' % (
                 epoch + 1, math.exp(l_sum / n), time.time() - start))
             for prefix in prefixes:
                 print(' -', predict_rnn_pytorch(
                    prefix, pred_len, model, vocab_size, device, idx_to_char,
                    char_to_idx))
```

训练模型。

In [17]:

In [21]:

epoch 50, perplexity 11.845853, time 0.41 sec

- 分开始想要 不能 你 我有了口让我感动的可爱女人 坏坏的让我疯狂的可爱女人 坏坏的让我疯狂的可爱女人 坏
- 不分开不 你不想我你 我不要再想 我不要再想 我不要再想 我不要再想 我不要再想 我不要再想 我不要再想 我不要再想 我不要再想 epoch 100, perplexity 1.272803, time 0.43 sec
- 分开不会像 风 没有伤害 你 靠着我的肩膀 你 在我胸口睡著 像这样的生活 我爱你 你爱我 我想大声宣
- 不分开不 像跟了很 泪真的牛 一跟好着 不慢的回忆 我有你看想 想要你却只剩大回忆 相爱还有别离 像无法 epoch 150, perplexity 1.065754, time 0.43 sec
- 分开不会像 也不没有 烦我不有多烦恼 没有你烦我 有多烦恼 没有你烦 我有多难熬 没有你烦我有多
- 不分开不 像跟了这样的生活 爱你 我爱你 我想大声宣妈 对你依依不舍 连隔壁邻居都猜到我现在的感受 河边 epoch 200, perplexity 1.041097, time 0.40 sec
- 分开不会开 今我的别过 不透 我想我不想 说 就怎么每天祈就我的心跳你 不能 不知太觉 你已经离开我
- 不分开不 像跟了很 心伤的快动 它爱里 想一定一步云掉变 我面红默铁等待我季来临变沼泽 灰狼啃食著水鹿的 epoch 250, perplexity 1.021259, time 0.43 sec
- 分开不会开 了口我的成透 不开 你笑得 不懂 你已经很久 说你心在个人 你怎么每在人 什么心多 的雨
- 不分开不 像跟了这样的甜蜜 我在起痛里你的老斑 印地安老斑鸠 腿短毛不多 几天都没有喝水也能活 脑袋瓜