深度学习-Transformer

本章目录

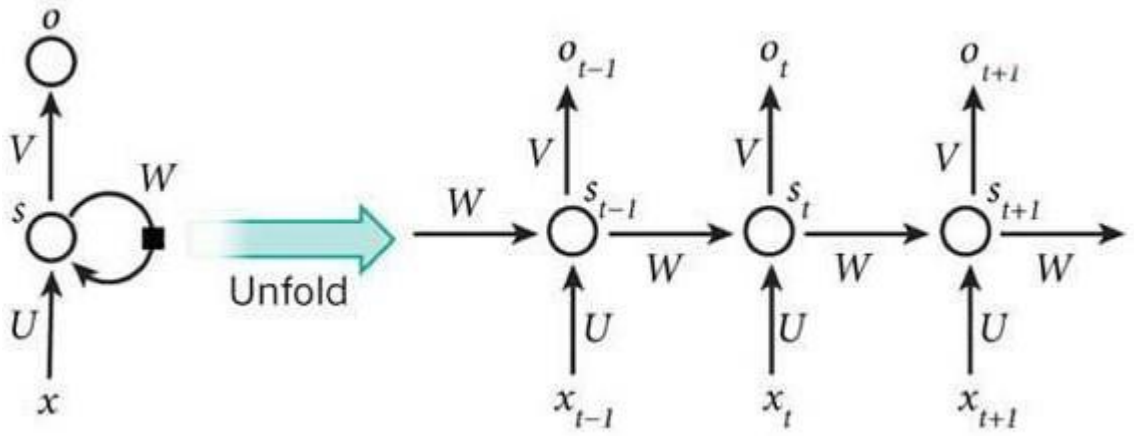
1.Transformer介绍

1. Transformer介绍
2. Transformer的工作流程
3. Transformer的训练

1.Transformer介绍

为什么需要用transformer

在没有transformer的时候，我们都是用什么来完成这系列的任务的呢?

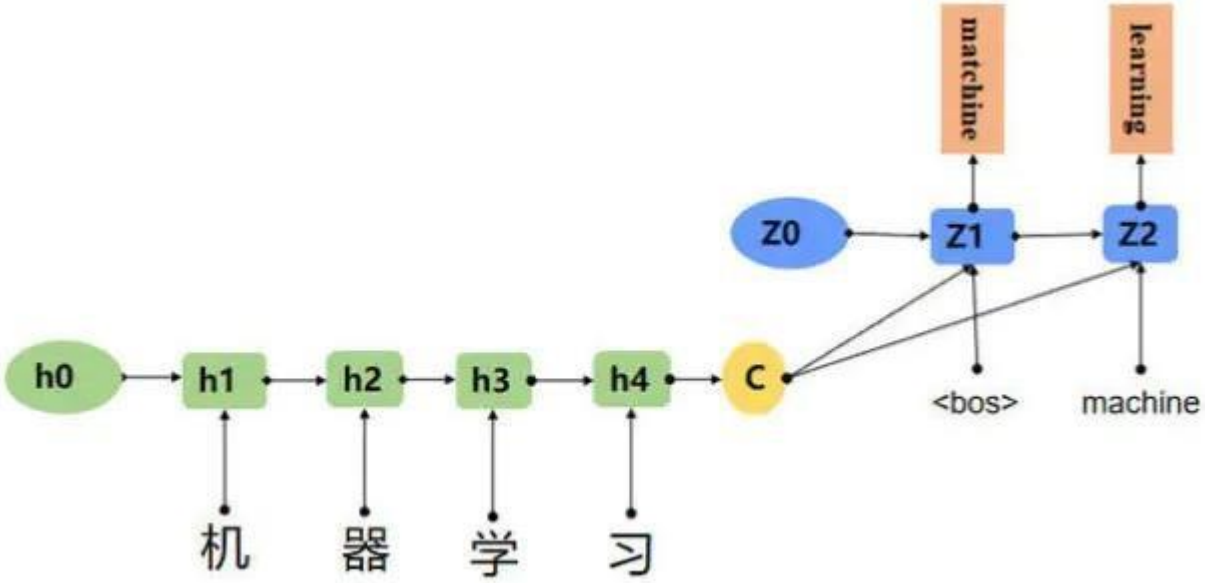


其实在之前我们使用的是RNN（或者是其的单向或者双向变种LSTM/GRU等） 来作为编解码器。RNN模块每次只能够吃进一个输入token和前一次的隐藏状态，然后得到输出。它的时序结构使得这个模型能够得到长距离的依赖关系，但是这也使得它**不能够并行计算**，模型效率十分低。

1.Transformer介绍

Seq2Seq任务

Seq2Seq 任务指的是输入和输出都是序列的任务，输出的长度不确定时采用的模型，这种情况一般是在机器翻译的任务中出现，将一句中文翻译成英文，那么这句英文的长度有可能会比中文短，也有可能会比中文长，所以输出的长度就不确定了。

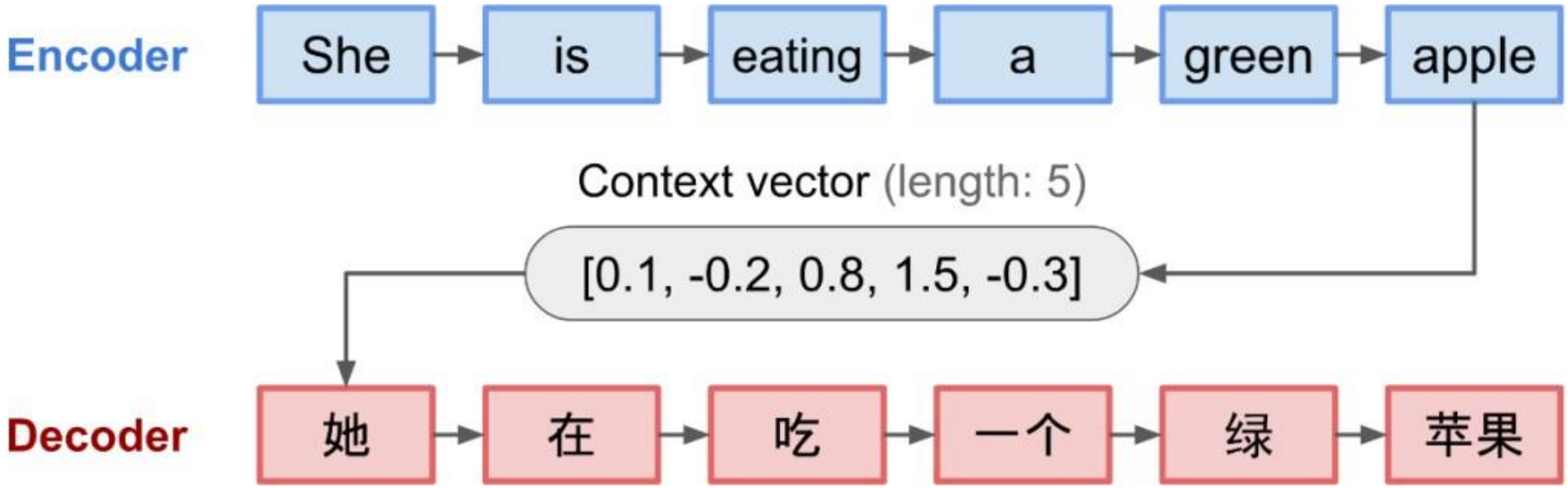


上图，输入的中文长度为4，输出的英文长度为2

1.Transformer介绍

Encoder-Decoder模型

通常来说，Seq2Seq任务最常见的是使用Encoder+Decoder的模式，先将一个序列编码成一个上下文矩阵，在使用Decoder来解码。当然，我们仅仅把context vector作为编码器到解码器的输入。



1.Transformer介绍

Attention注意力机制

在介绍什么是注意力机制之前，先让大家看一张图片。当大家看到下面图片，会首先看到什么内容？当过载信息映入眼帘时，我们的大脑会把注意力放在主要的信息上，这就是大脑的注意力机制。

1.Transformer介绍

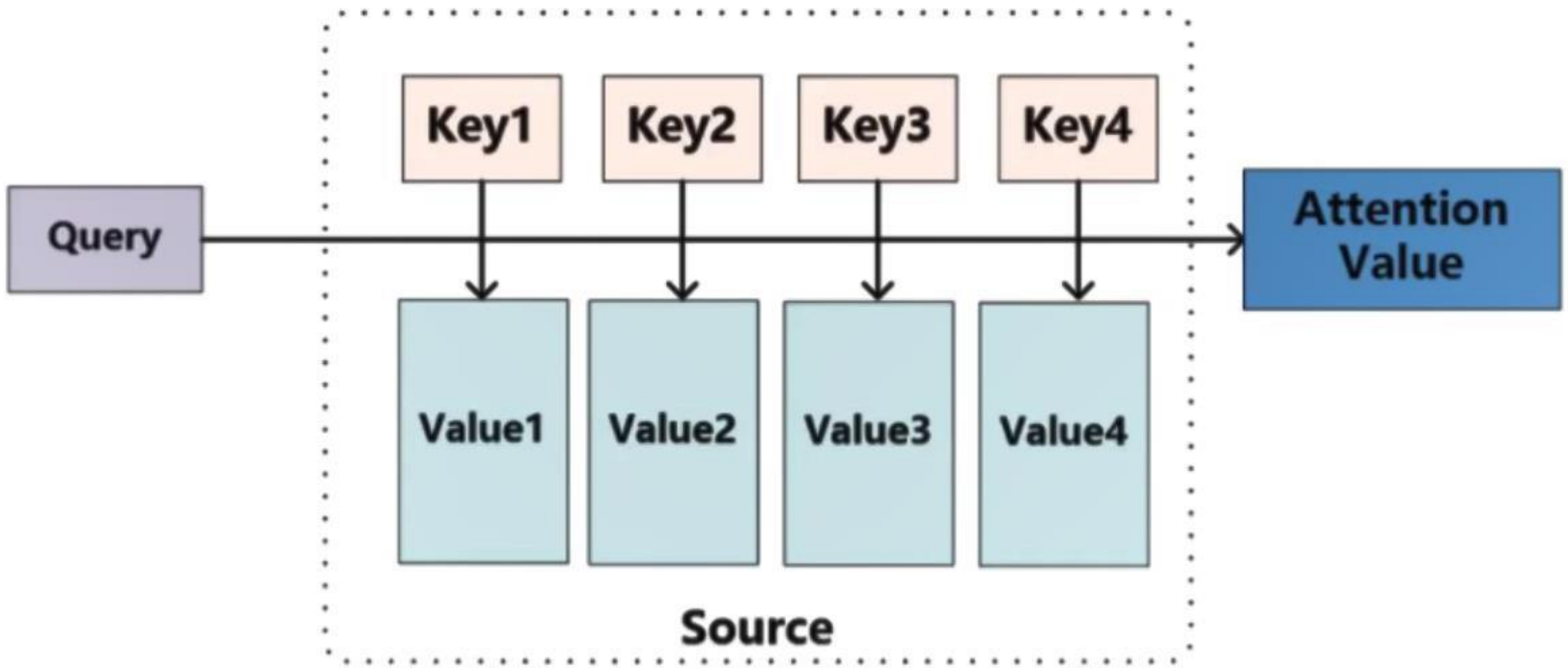
每个词的Attention计算

每个词的Q会跟整个序列中每一个K计算得分，然后基于得分再分配特征

Q: query，要去查询的

K: key，等着被查的

V: value，实际的特征信息



1.Transformer介绍

Attention的优点

1.参数少：相比于CNN、RNN，其复杂度更小，参数也更少。所以对算力的要求也就更小。

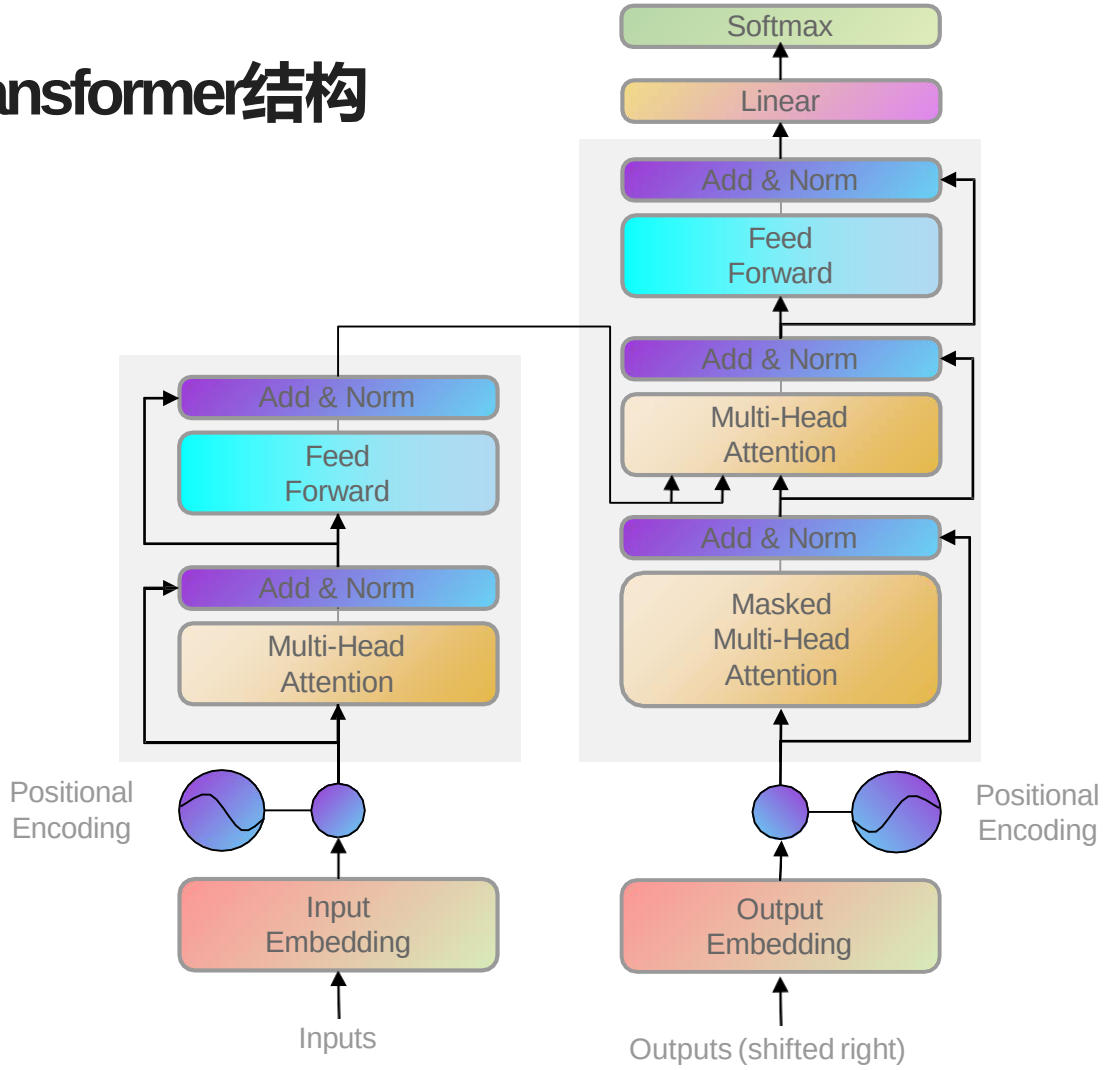
2.速度快：Attention 解决了RNN及其变体模型不能并行计算的问题。Attention机制每一步计算不依赖于上一步的计算结果，因此可以和CNN一样并行处理。

3.效果好：在Attention 机制引入之前，有一个问题大家一直很苦恼：长距离的信息会被弱化，就好像记忆能力弱的人，记不住过去的事情是一样的。

1.Transformer介绍

2017年google的机器翻译团队在NIPS上发表了**Attention is all you need**的文章，开创性地提出了在序列转录领域，完全抛弃CNN和RNN，只依赖Attention-注意力结构的简单的网络架构，名为Transformer；论文实现的任务是机器翻译。

Transformer结构



2.Transformer的工作流程

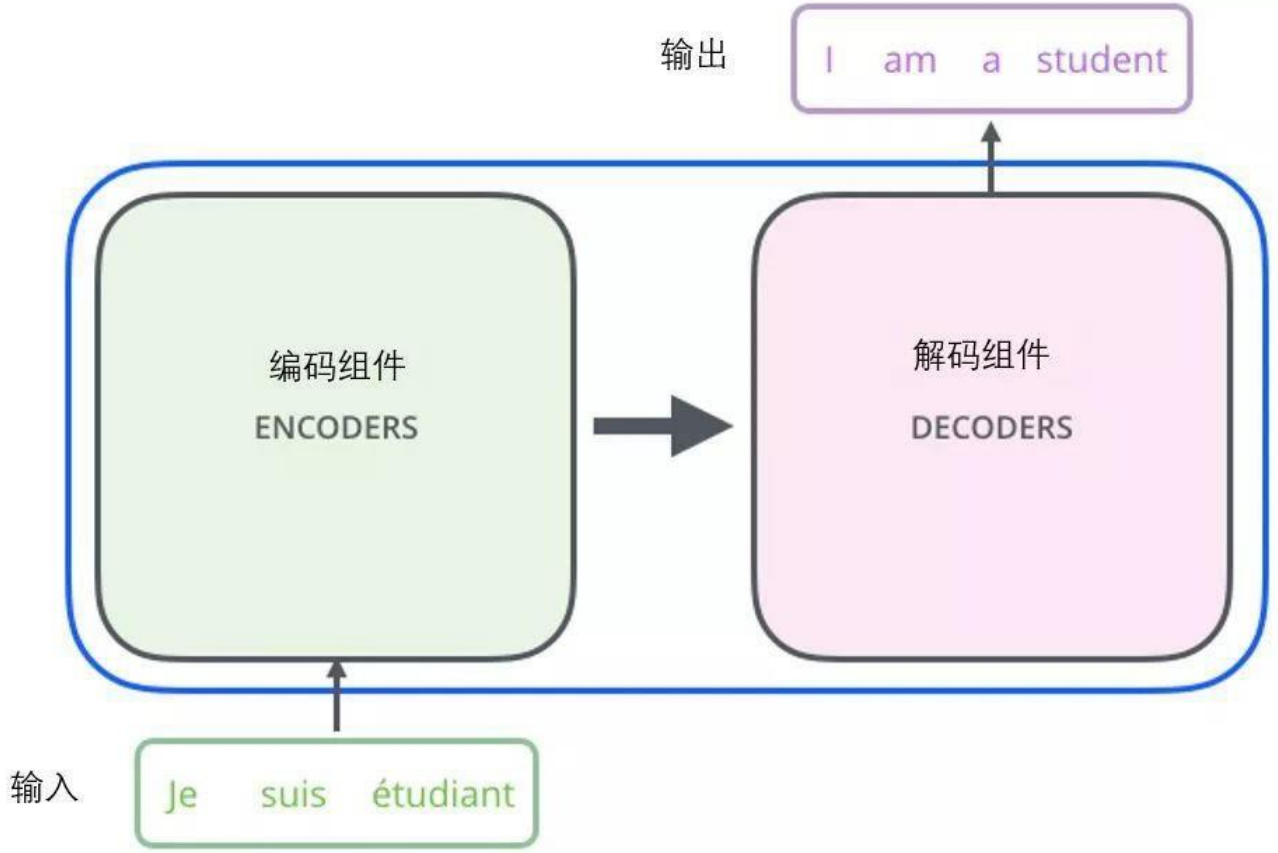
1. Transformer介绍
2. Transformer的工作流程
3. Transformer的训练

2.Transformer的工作流程

从宏观的视角开始 首先将这个模型看成是一个黑箱操作。在机器翻译中，就是输入一种语言，输出另一种语言。

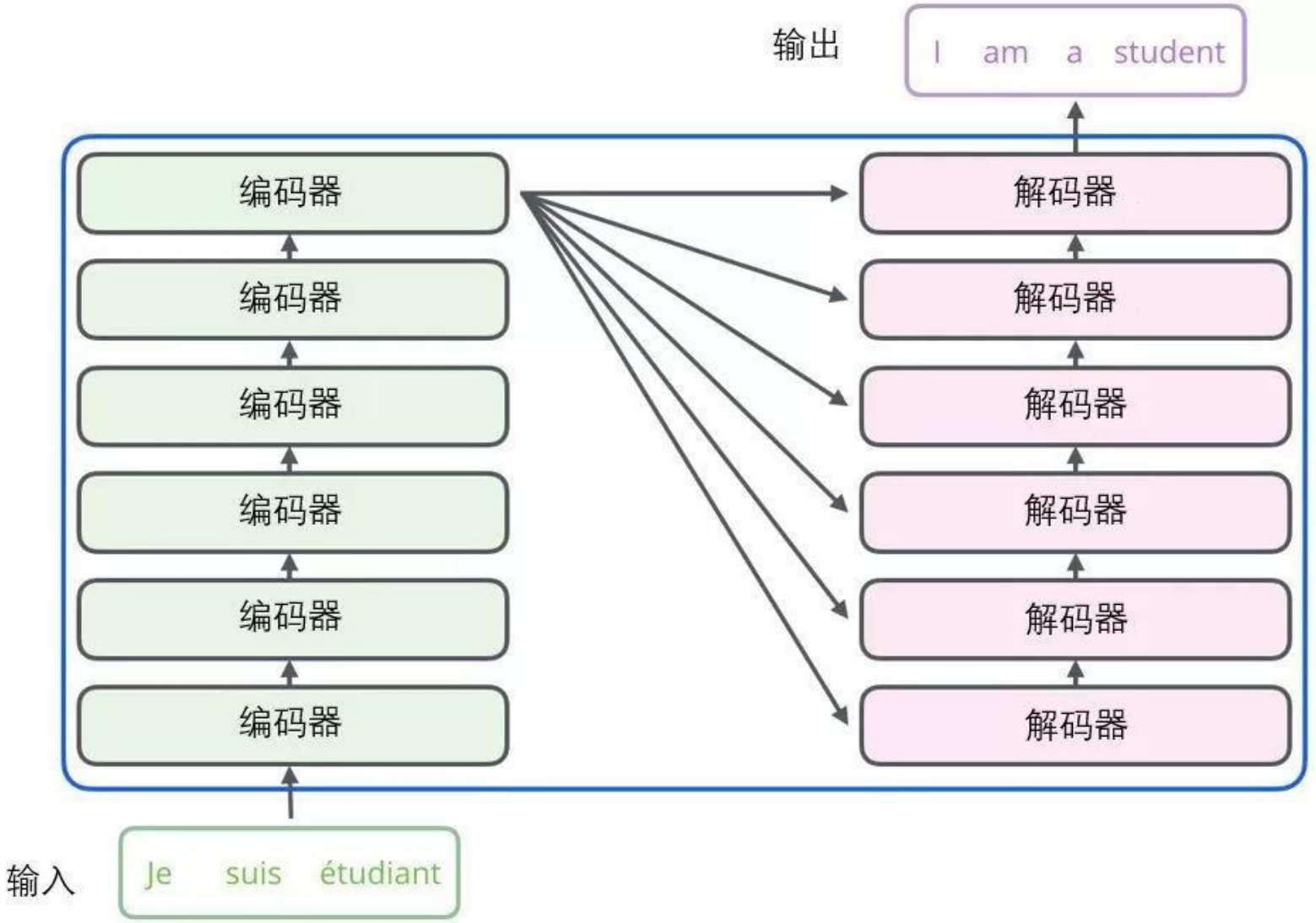
2.Transformer的工作流程

那么拆开这个黑箱，我们可以看到它是由编码组件、解码组件和它们之间的连接组成。



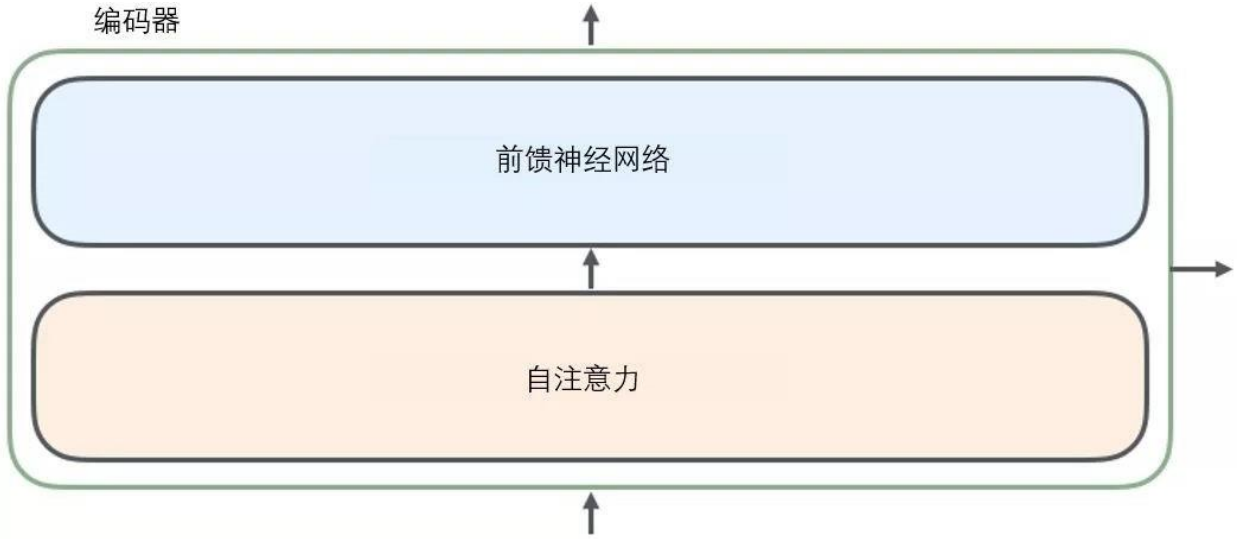
2.Transformer的工作流程

编码组件部分由一堆编码器（encoder）构成（论文中是将6个编码器叠在一起）。解码组件部分也是由相同数量（与编码器对应）的解码器（decoder）组成的。



2.Transformer的工作流程

所有的编码器在结构上都是相同的，但它们没有共享参数。每个解码器都可以分解成两个子层。

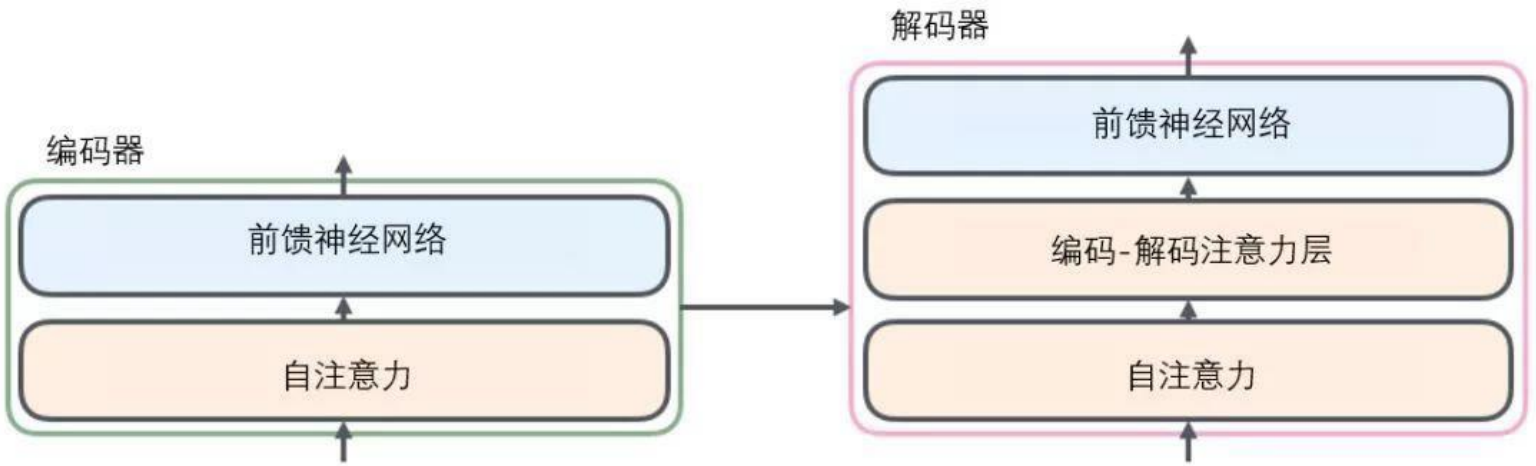


2.Transformer的工作流程

从编码器输入的句子首先会经过一个自注意力（self-attention）层，这层帮助编码器在对每个单词编码时关注输入句子的其他单词。

自注意力层的输出会传递到前馈（feed-forward）神经网络中。每个位置的单词对应的前馈神经网络都完全一样（译注：另一种解读就是一层窗口为一个单词的一维卷积神经网络）。

解码器中也有编码器的自注意力（self-attention）层和前馈（feed-forward）层。除此之外，这两个层之间还有一个注意力层，用来关注输入句子的相关部分（和seq2seq模型的注意力作用相似）。



2.Transformer的工作流程

各种向量或张量是怎样在模型的不同部分中，将输入转化为输出的。

像大部分NLP应用一样，我们首先将每个输入单词通过词嵌入算法转换为词向量。

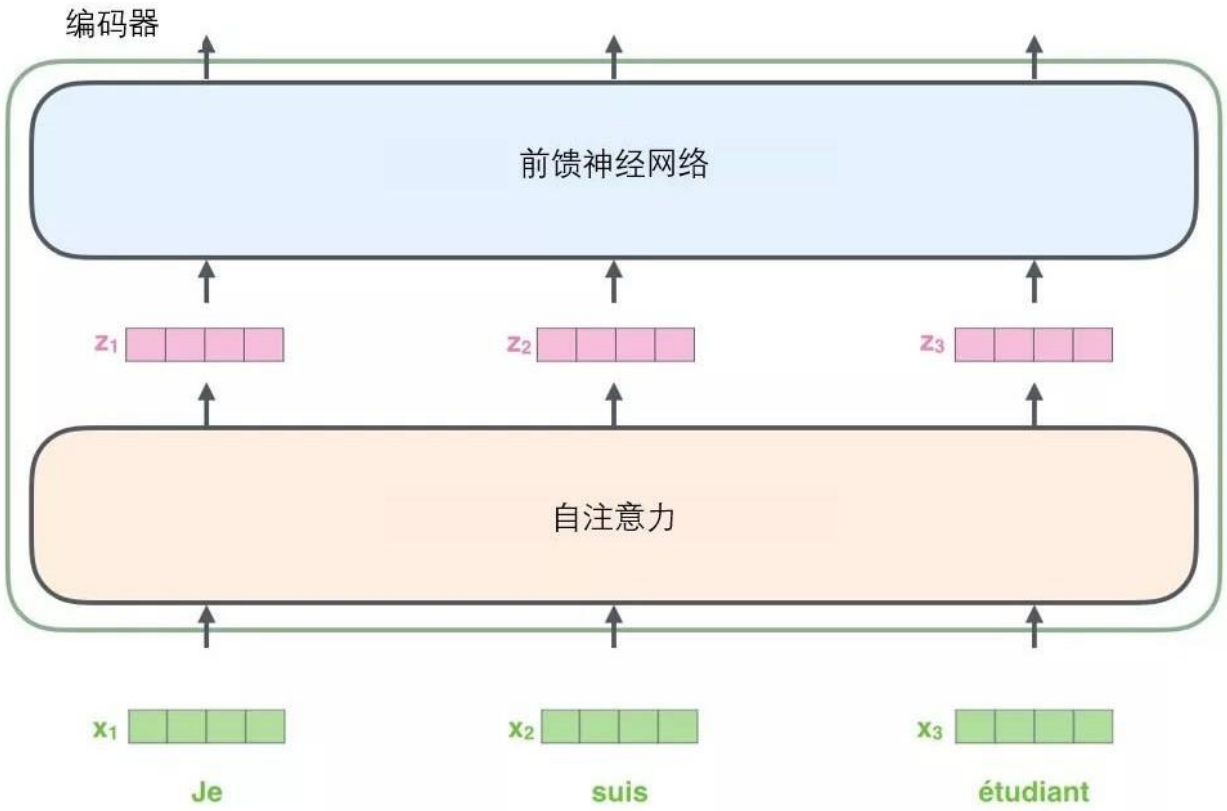
每个单词都被嵌入为512维的向量，词嵌入过程只发生在最底层的编码器中。所有的编码器都有一个相同的特点，即它们接收一个向量列表，列表中的每个向量大小为512维。在底层（最开始）编码器中它就是词向量，但是在其他编码器中，它就是下一层编码器的输出（也是一个向量列表）。

向量列表大小是我们可以设置的超参数:一般是我们训练集中最长句子的长度。

2.Transformer的工作流程

将输入序列进行词嵌入之后，每个单词都会流经编码器中的两个子层。

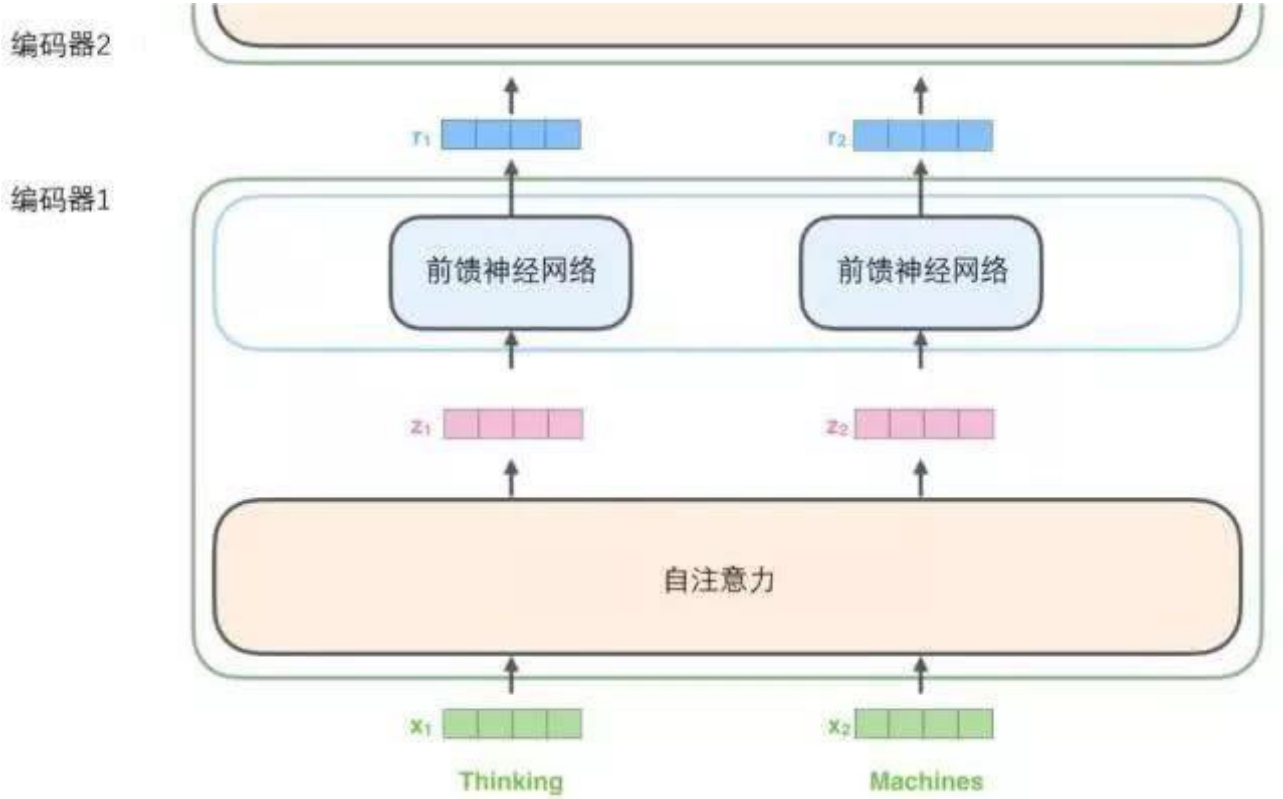
Transformer的一个核心特性，在这里输入序列中每个位置的单词都有自己独特的路径流入编码器。在自注意力层中，这些路径之间存在依赖关系。而前馈(feed-forward)层没有这些依赖关系。因此在前馈(feed-forward)层时可以并行执行各种路径。



2.Transformer的工作流程

编码过程

一个编码器接收向量列表作为输入，接着将向量列表中的向量传递到自注意力层进行处理，然后传递到前馈神经网络层中，将输出结果传递到下一个编码器中。



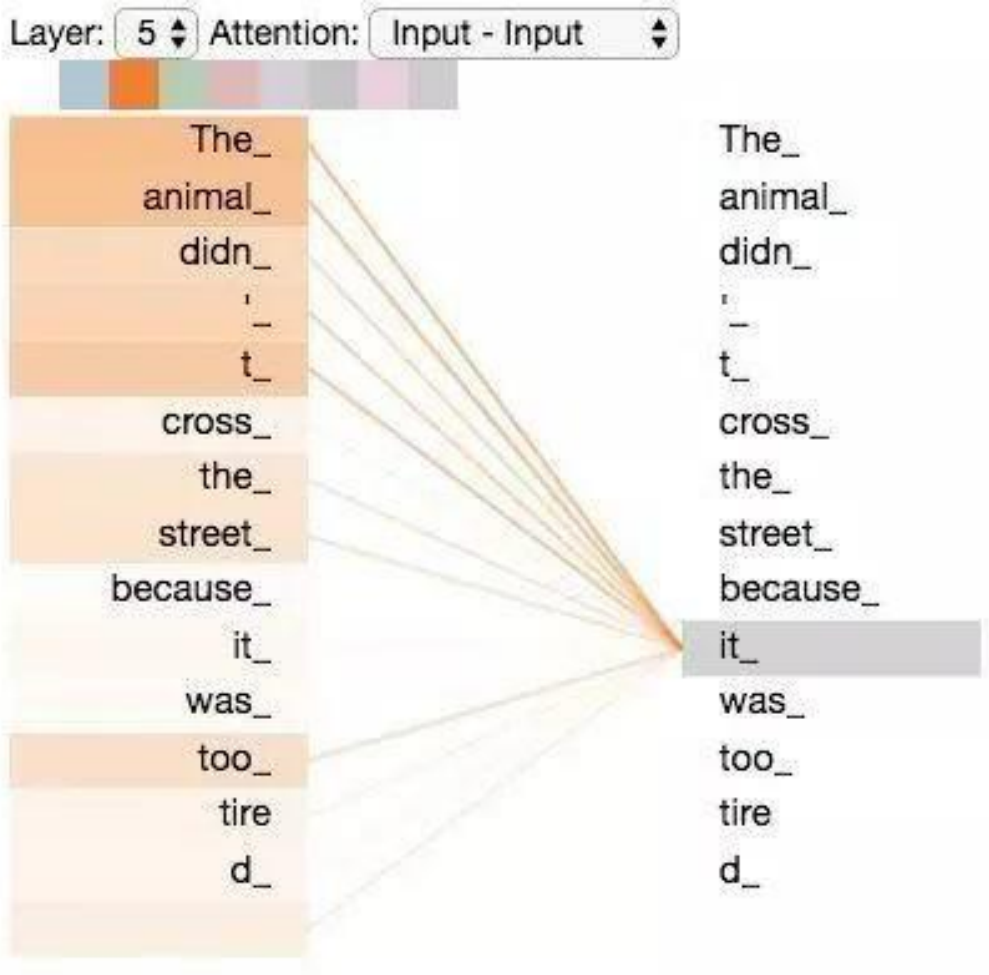
输入序列的每个单词都经过自编码过程。然后，它们各自通过前向传播神经网络：完全相同的网络，而每个向量都分别通过它。

2.Transformer的工作流程

从宏观视角看自注意力机制

随着模型处理输入序列的每个单词，自注意力会关注整个输入序列的所有单词，帮助模型对本单词更好地进行编码。

RNN会将它已经处理过的前面的所有单词/向量的表示与它正在处理的当前单词/向量结合起来。而自注意力机制会将所有相关单词的理解融入到我们正在处理的单词中。

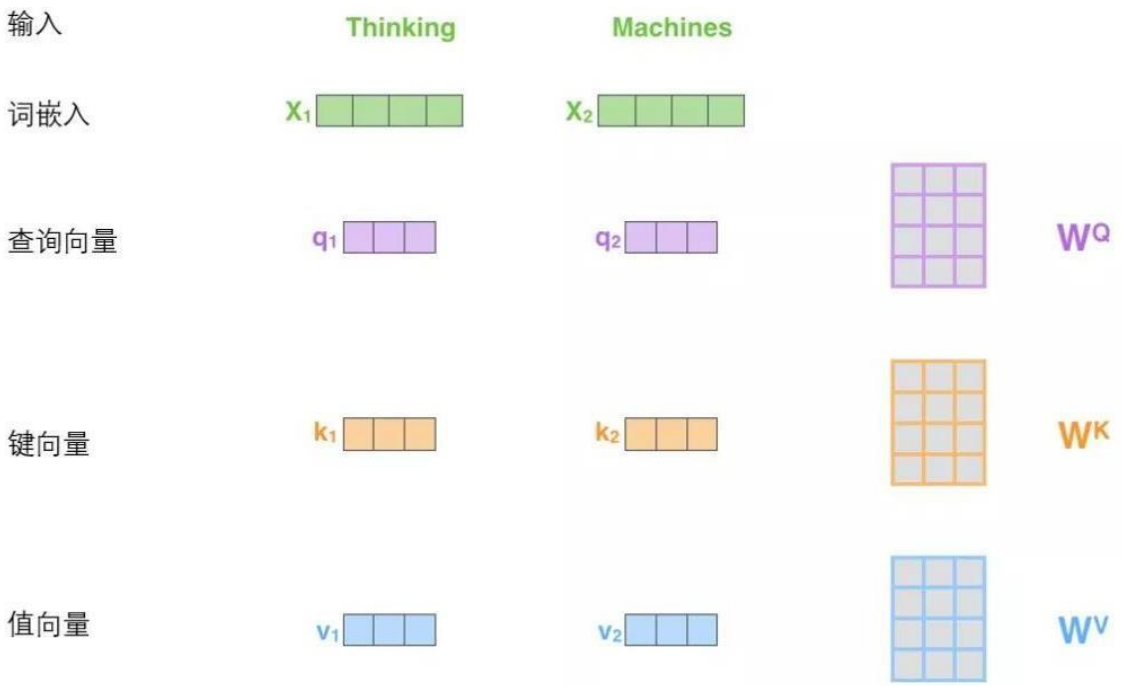


当我们在编码器#5（栈中最上层编码器）中编码“it”这个单词的时，注意力机制的部分会去关注“The Animal”，将它的表示的一部分编入“it”的编码中。

2.Transformer的工作流程

从微观视角看自注意力机制

计算自注意力的第一步就是从每个编码器的输入向量（每个单词的词向量）中生成三个向量。也就是说对于每个单词，我们创造一个查询向量(Q)、一个键向量(K)和一个值向量(V)。这三个向量是通过词嵌入与三个权重矩阵后相乘创建的，它们的维度是64，而词嵌入和编码器的输入/输出向量的维度是512. 但实际上不强求维度更小，这只是一种基于架构上的选择，它可以使多头注意力（multiheaded attention）的大部分计算保持不变。



X_1与W_Q权重矩阵相乘得到q_1, 就是与这个单词相关的查询向量。最终使得输入序列的每个单词的创建一个查询向量Q、一个键向量K和一个值向量V。

2.Transformer的工作流程

什么是查询向量Q、键向量K和值向量V?

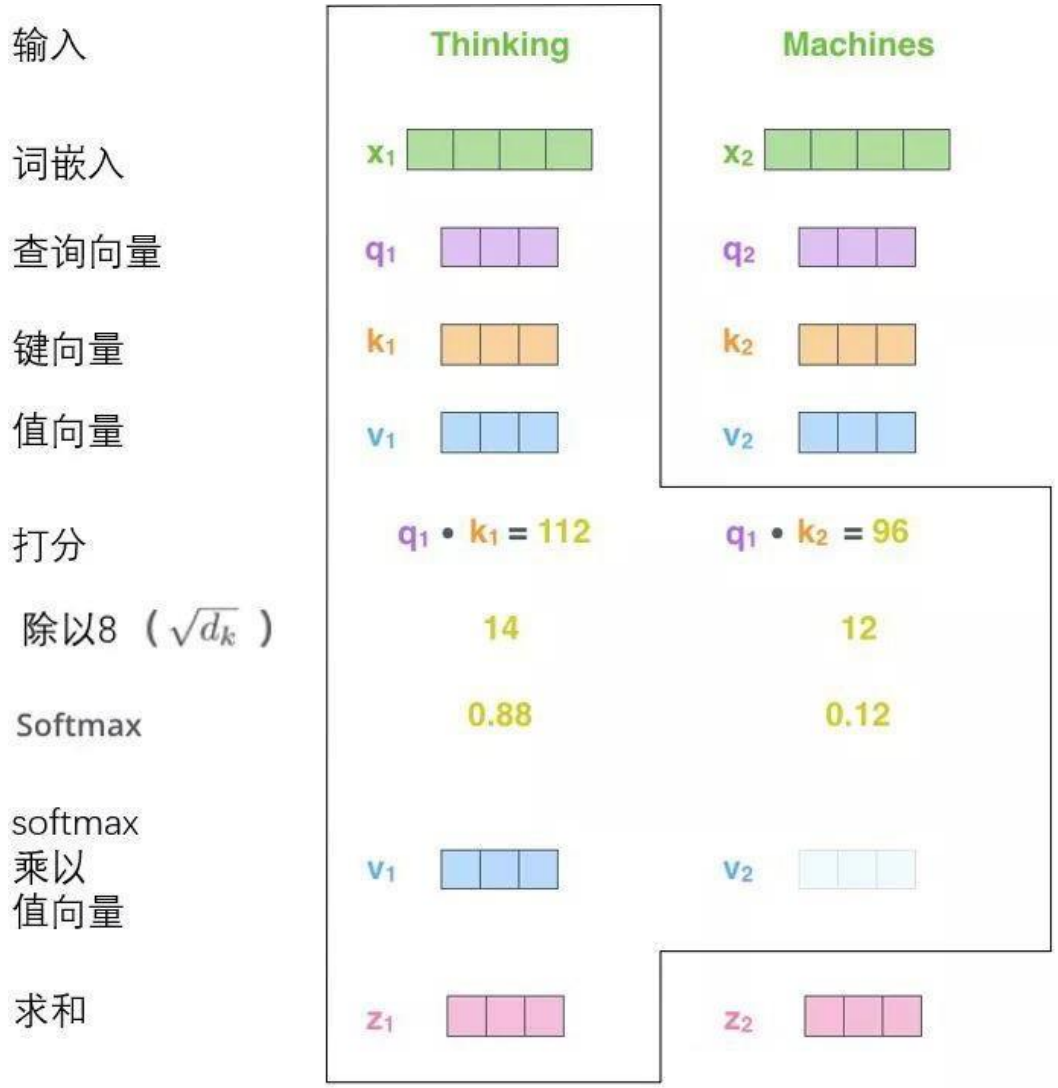
$$\text{Attention}(Q, K, V) = \text{softmax}\left(\frac{QK^T}{\sqrt{d_k}}\right)V$$

计算得分

分数除以8，然后通过softmax传递结果。

将每个值向量乘以softmax分数(这是为了准备之后将它们求和)。

对加权值向量求和，然后即得到自注意力层在该位置的输入。



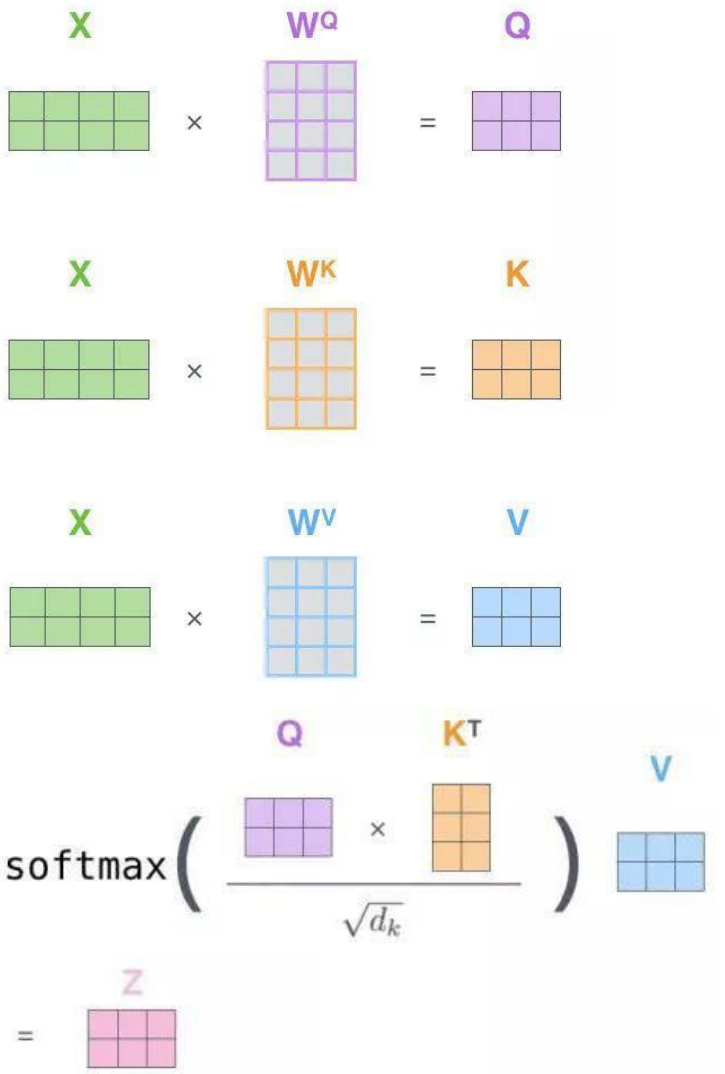
2.Transformer的工作流程

通过矩阵运算实现自注意力机制

第一步是计算查询矩阵、键矩阵和值矩阵。为此，我们将将输入句子的词嵌入装进矩阵X中，将其乘以我们训练的权重矩阵(WQ，WK，WV)。

x矩阵中的每一行对应于输入句子中的一个单词。我们再次看到词嵌入向量 (512，或图中的4个格子)和q/k/v向量(64，或图中的3个格子)的大小差异。

最后，由于我们处理的是矩阵，我们可以用一个公式来计算自注意力层的输出。



2.Transformer的工作流程

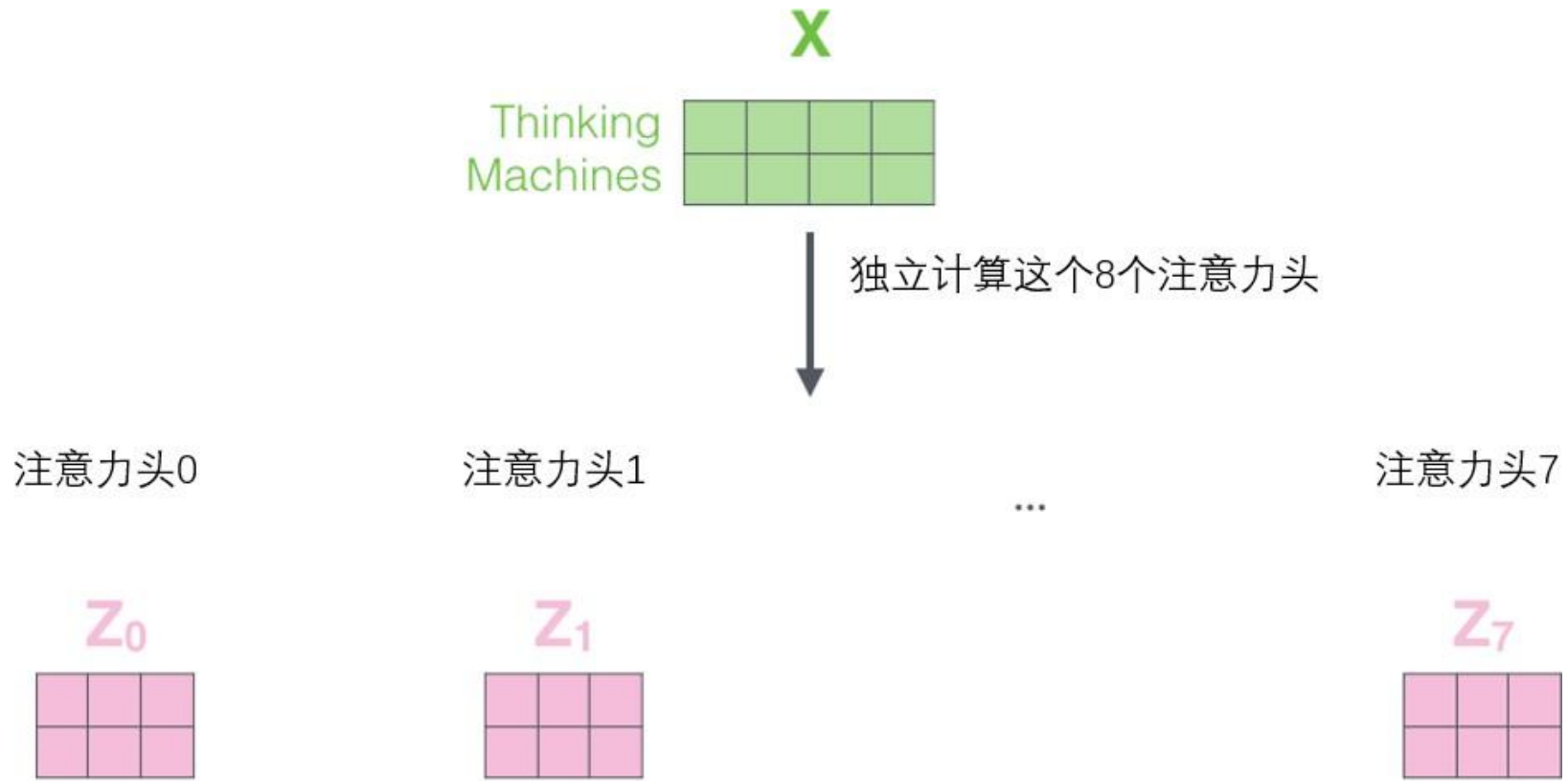
“多头”注意力（“multi-headed” attention）的机制

一组Q,K,V得到了一组当前词的特征表达

类似卷积神经网络中的filter提取多种特征?

2.Transformer的工作流程

“多头”注意力（“multi-headed” attention）的机制

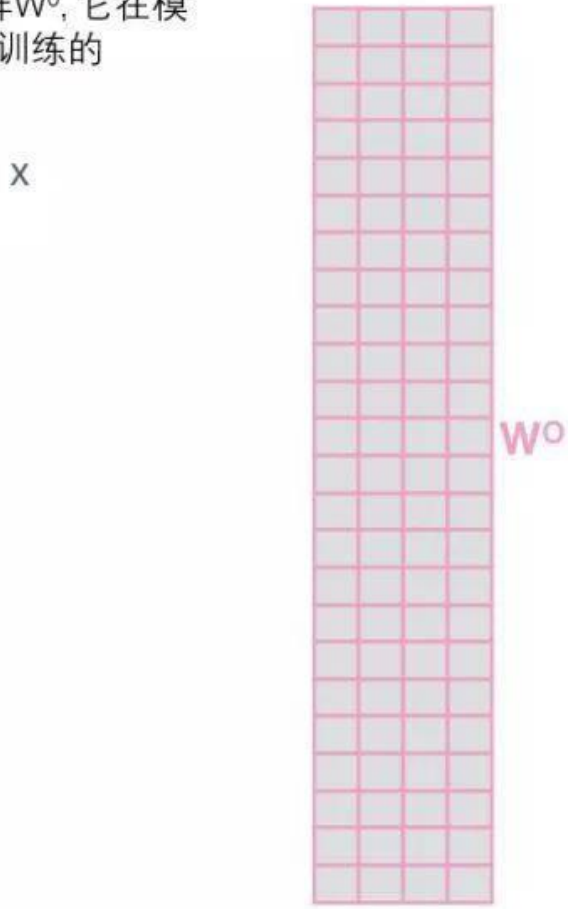


2.Transformer的工作流程

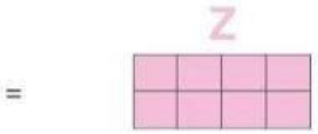
“多头”注意力（“multi-headed” attention）的机制

1）将所有注意力头拼接起来

2）乘以矩阵W^0，它在模型中是联合训练的



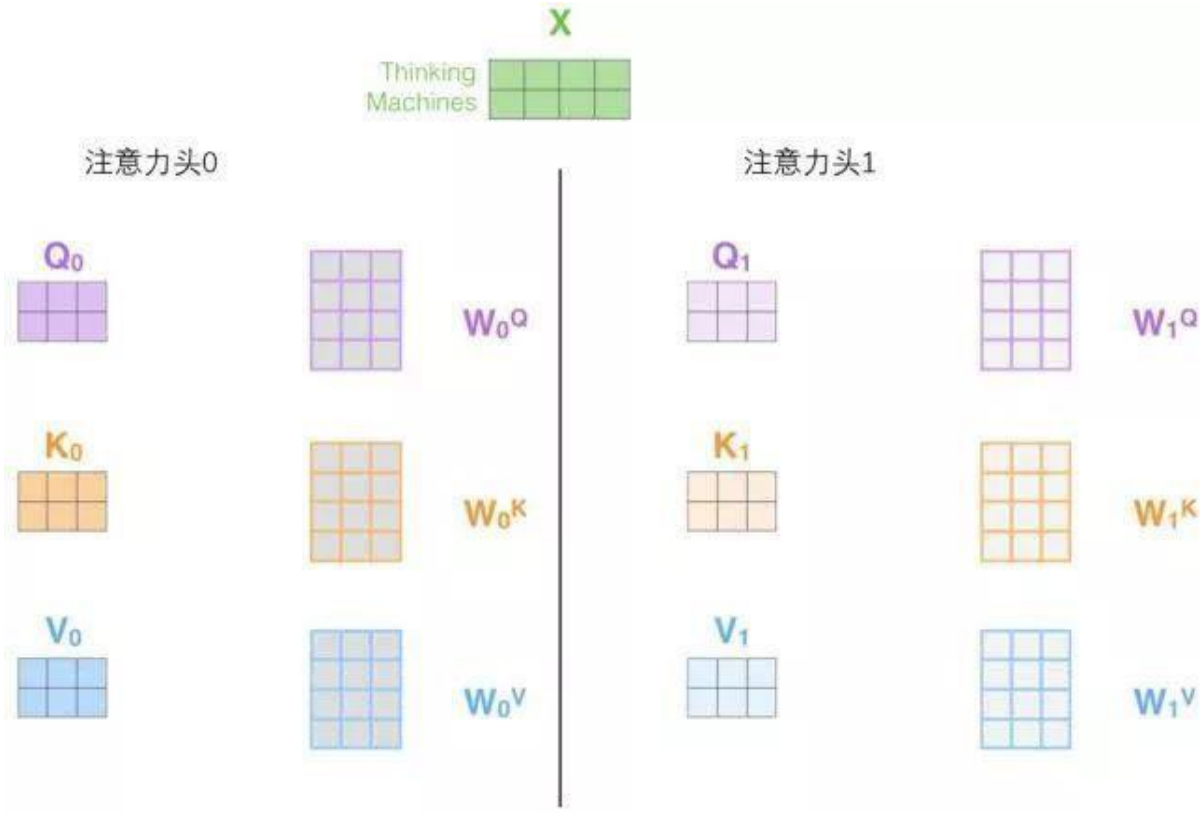
3）结果是一个融合所有注意力头信息的矩阵Z，我们可以将其送到前馈神经网络

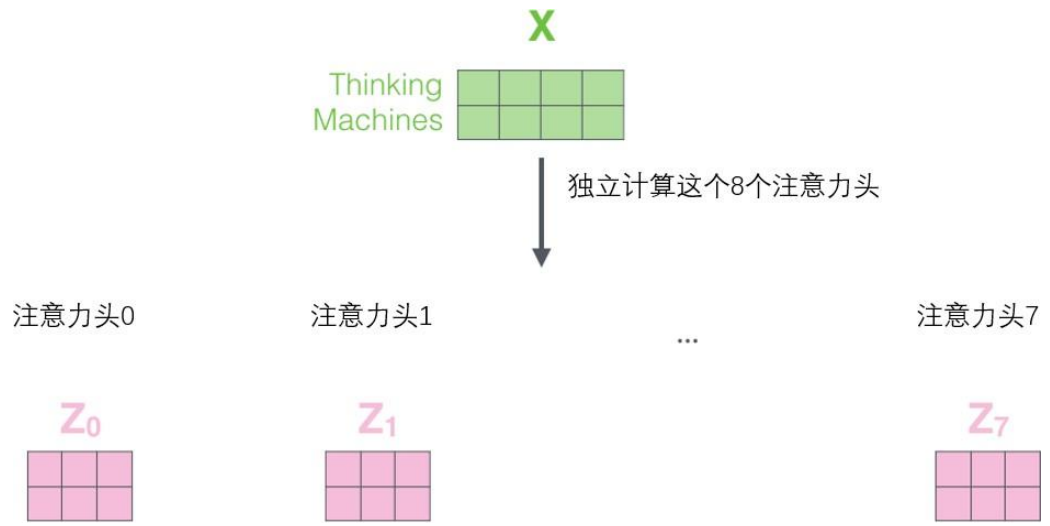


可以看到Multi-Head Attention 输出的矩阵**Z**与其输入的矩阵**X**的维度是一样的。

2.Transformer的工作流程

“多头”注意力（“multi-headed” attention）的机制





2.Transformer的工作流程

1）这是我们的输入句子*

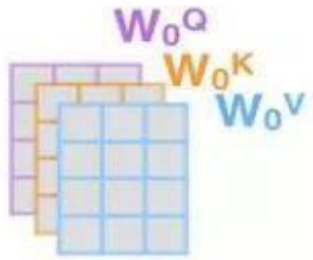
2）编码每一个单词

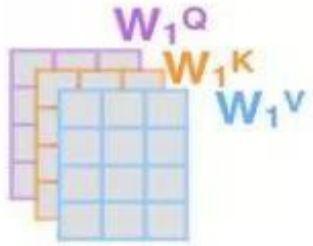
3）将其分为8个头，将矩阵X或R乘以各个权重矩阵

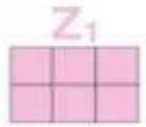
4）通过输出的查询/键/值（Q/K/V）矩阵计算注意力

5）将所有注意力头拼接起来，乘以权重矩阵W^0

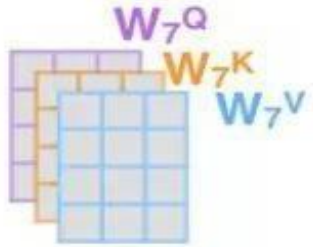
Thinking Machines

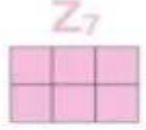


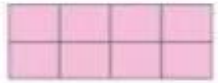




*注：除了第0个编码器，其他编码器都不需要进行词嵌入。它可以直接讲前面一层编码器的输出作为输入（矩阵R）。



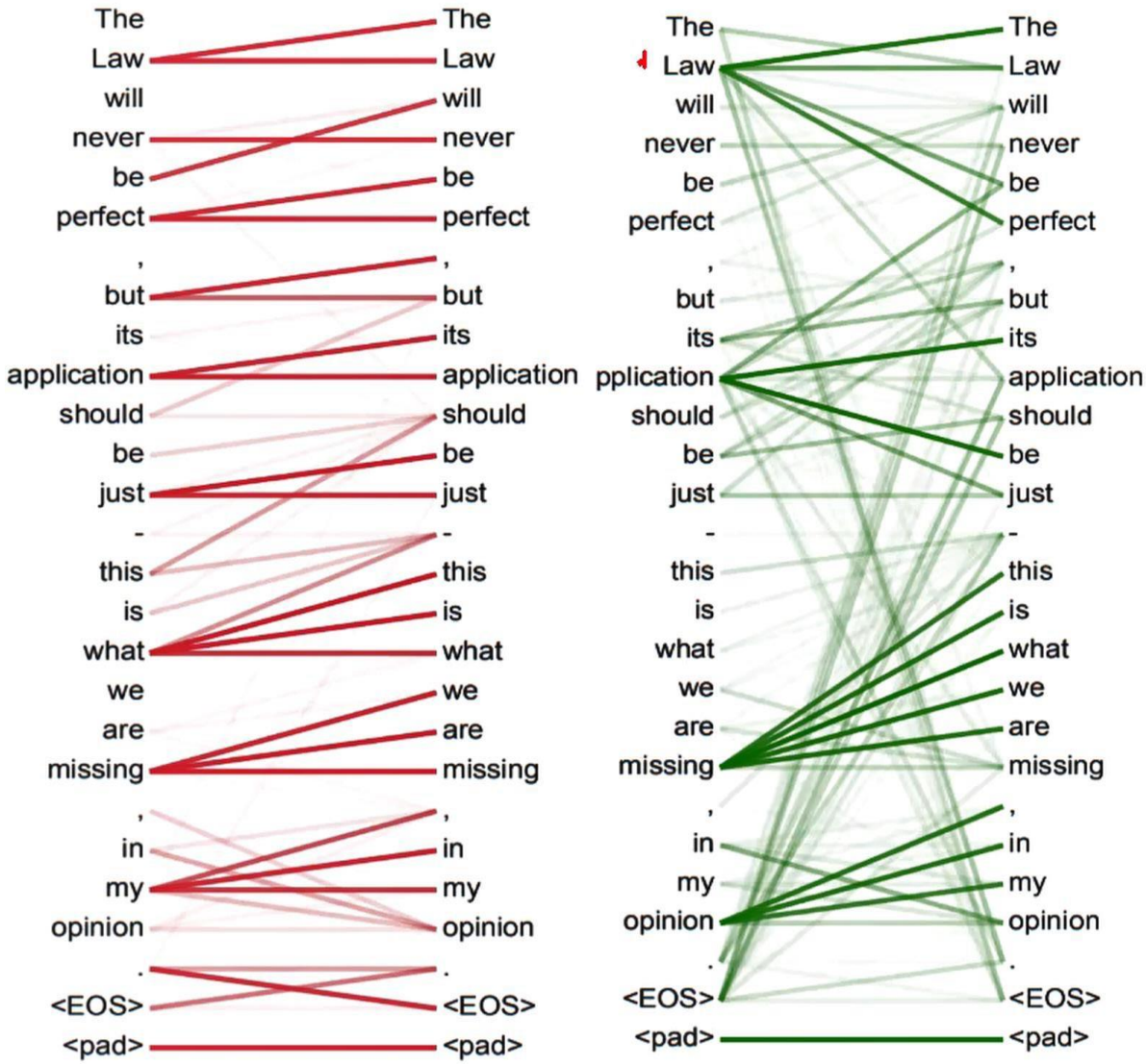




2.Transformer的工作流程

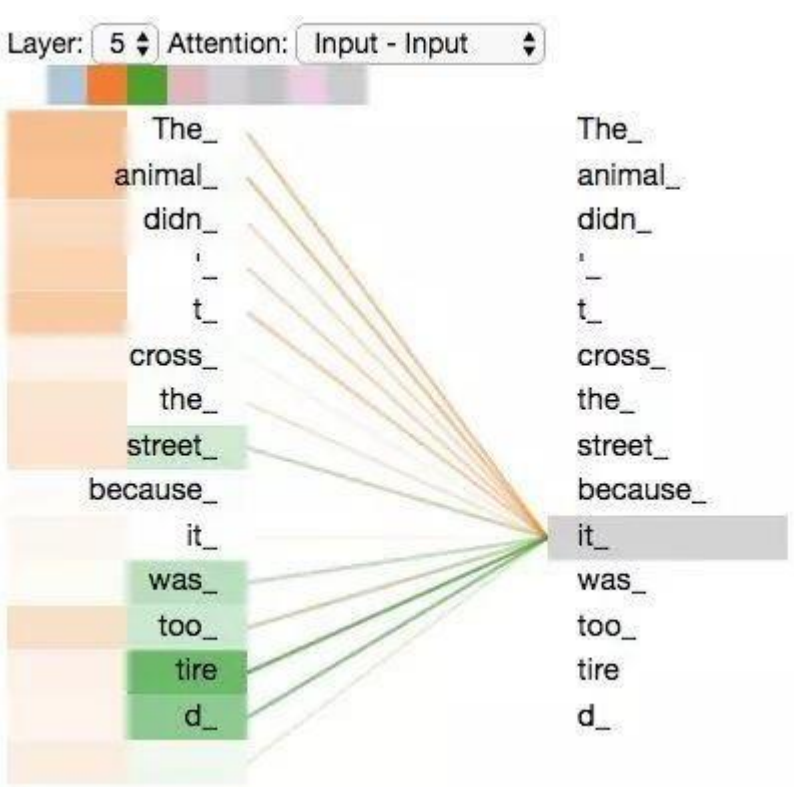
multi-headed结果

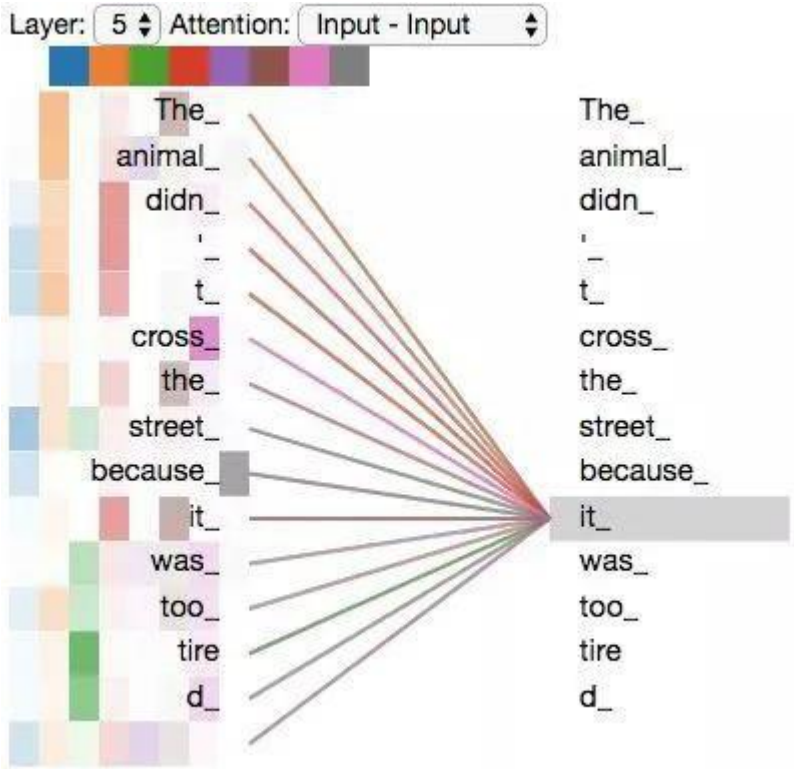
- 不同的注意力结果
- 得到的特征向量表达也不相同



2.Transformer的工作流程

当我们编码“it”一词时，一个注意力头集中在“animal”上，而另一个则集中在“tired”上，从某种意义上说，模型对“it”一词的表达在某种程度上是“animal”和“tired”的代表。
然而，如果我们把所有的attention都加到图示里，事情就更难解释了：



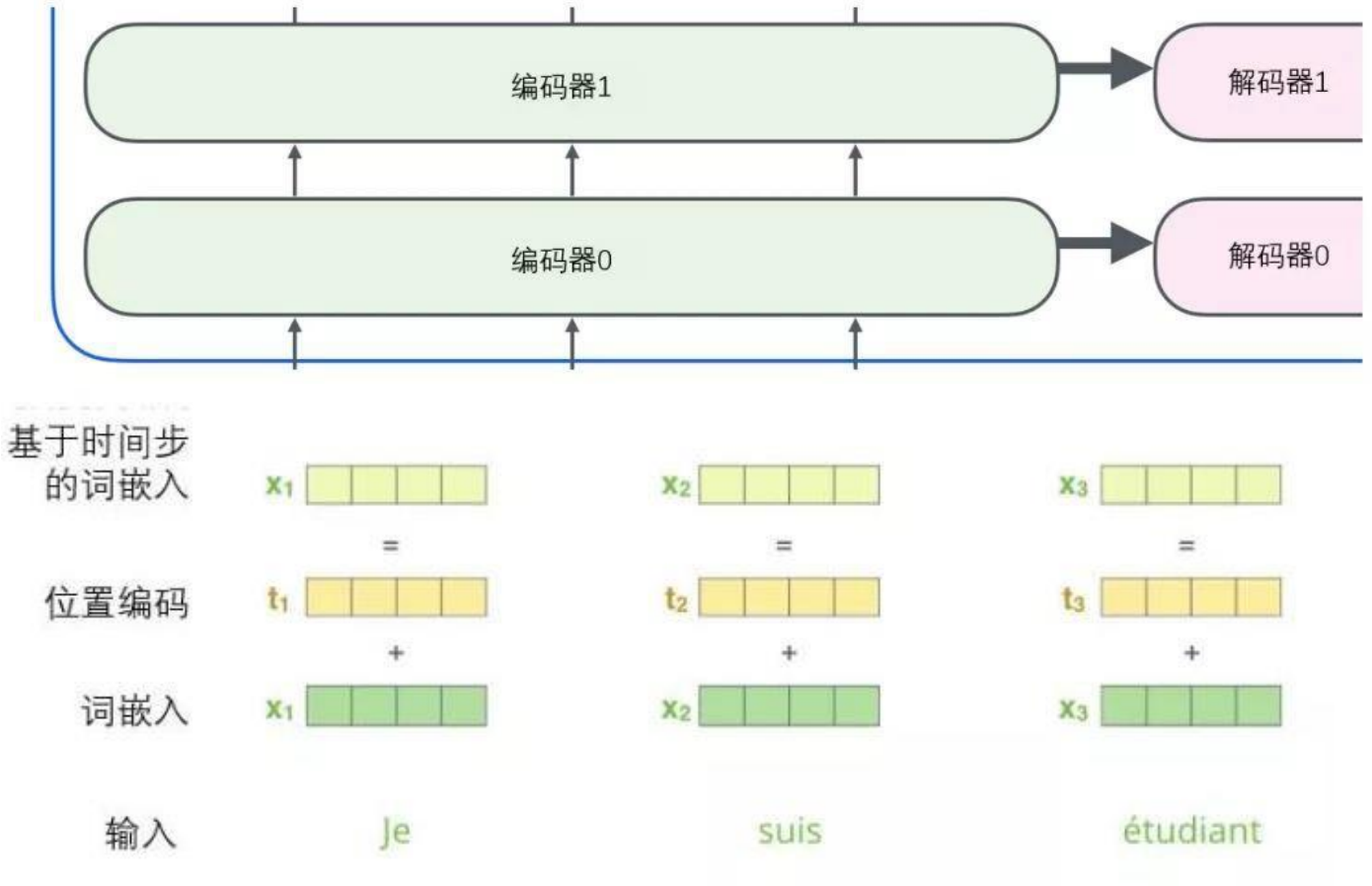


2.Transformer的工作流程

使用位置编码表示序列的顺序

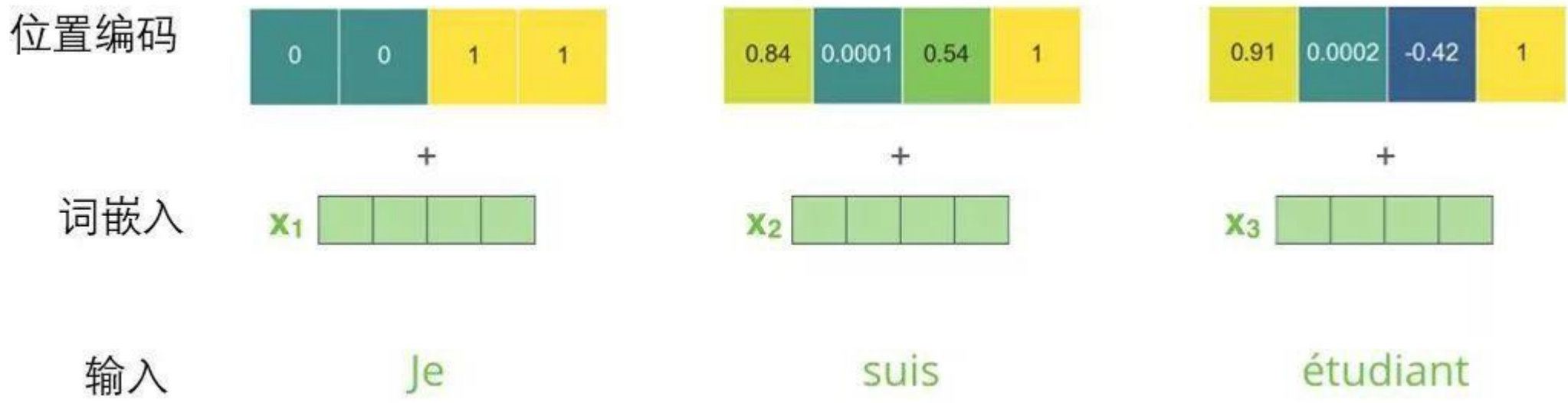
到目前为止，我们对模型的描述缺少了一种理解输入单词顺序的方法。

为了解决这个问题，Transformer为每个输入的词嵌入添加了一个向量。这些向量遵循模型学习到的特定模式，这有助于确定每个单词的位置，或序列中不同单词之间的距离。这里的直觉是，将位置向量添加到词嵌入中使得它们在接下来的运算中，能够更好地表达的词与词之间的距离。



2.Transformer的工作流程

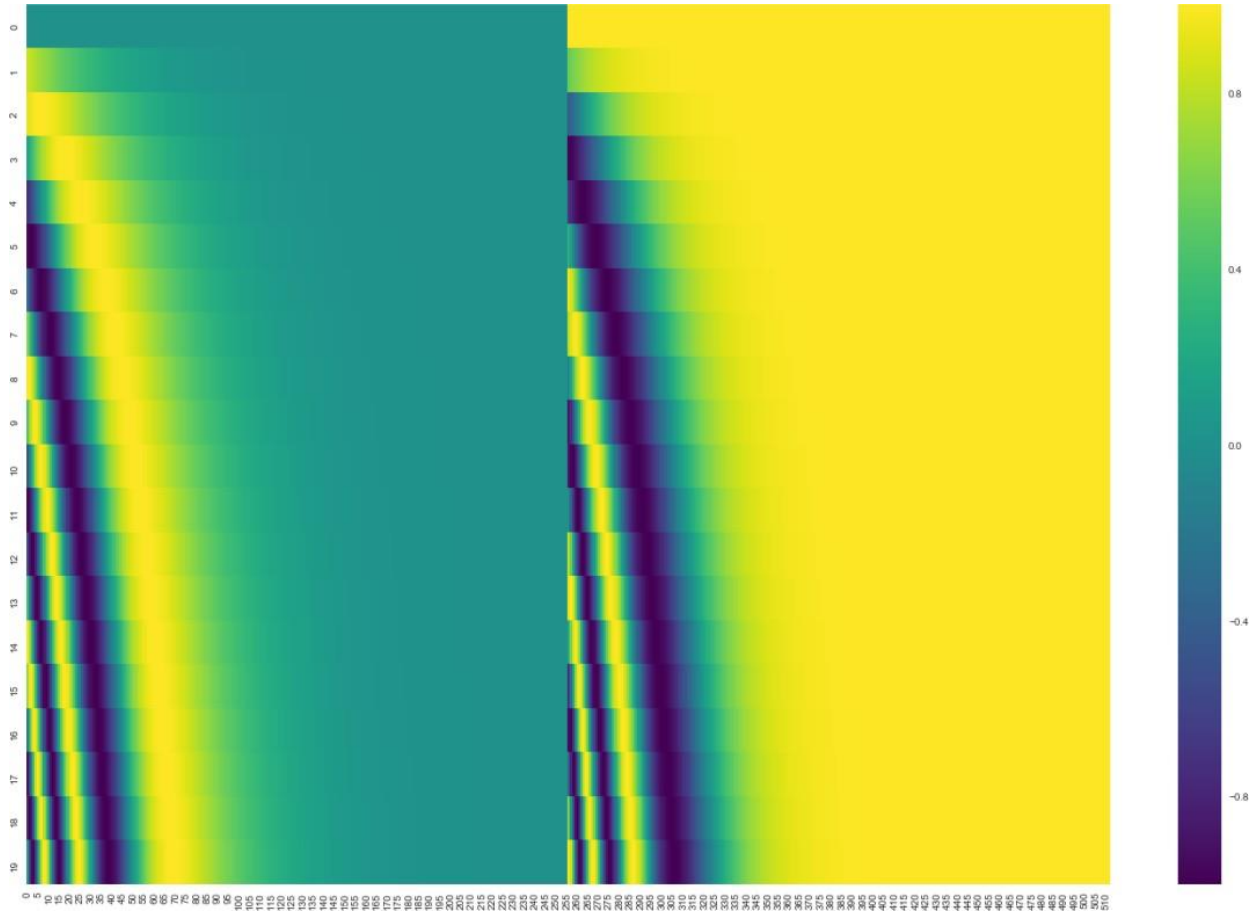
为了让模型理解单词的顺序，我们添加了位置编码向量，这些向量的值遵循特定的模式。
如果我们假设词嵌入的维数为4，则实际的位置编码如下：



2.Transformer的工作流程

20字(行)的位置编码实例，词嵌入大小为512(列)。你可以看到它从中间分裂成两半。这是因为左半部分的值由一个函数(使用正弦)生成，而右半部分由另一个函数(使用余弦)生成。然后将它们拼在一起而得到每一个位置编码向量。

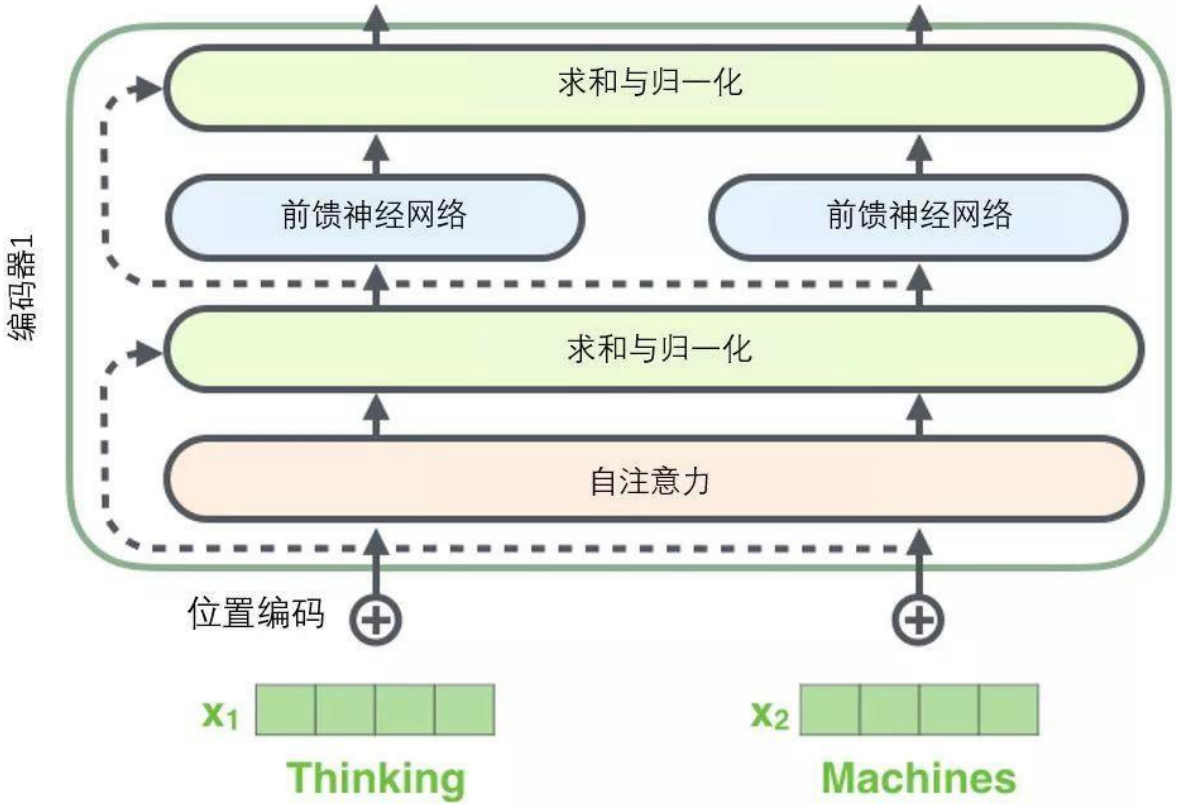
这个编码函数的可视化结果：



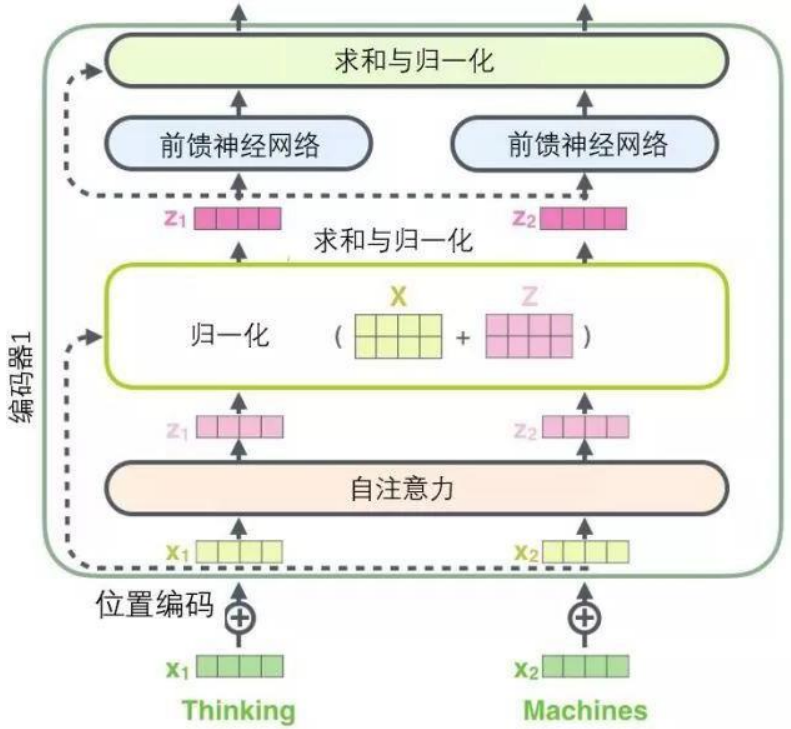
图中，每一行对应一个词向量的位置编码，所以第一行对应着输入序列的第一个词。每行包含512个值，每个值介于1和-1之间。我们已经对它们进行了颜色编码，所以图案是可见的。

2.Transformer的工作流程

在每个编码器中的每个子层（自注意力、前馈网络）的周围都有一个残差连接，并且都跟随着一个“层-归一化”步骤。

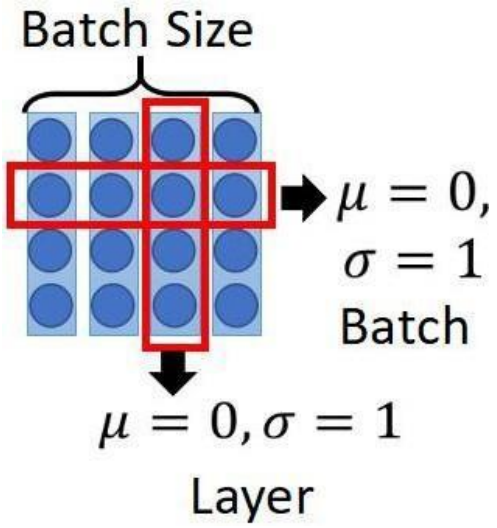


如果我们去可视化这些向量以及这个和自注意力相关联的层-归一化操作，那么看起来就像下面这张图描述一样：

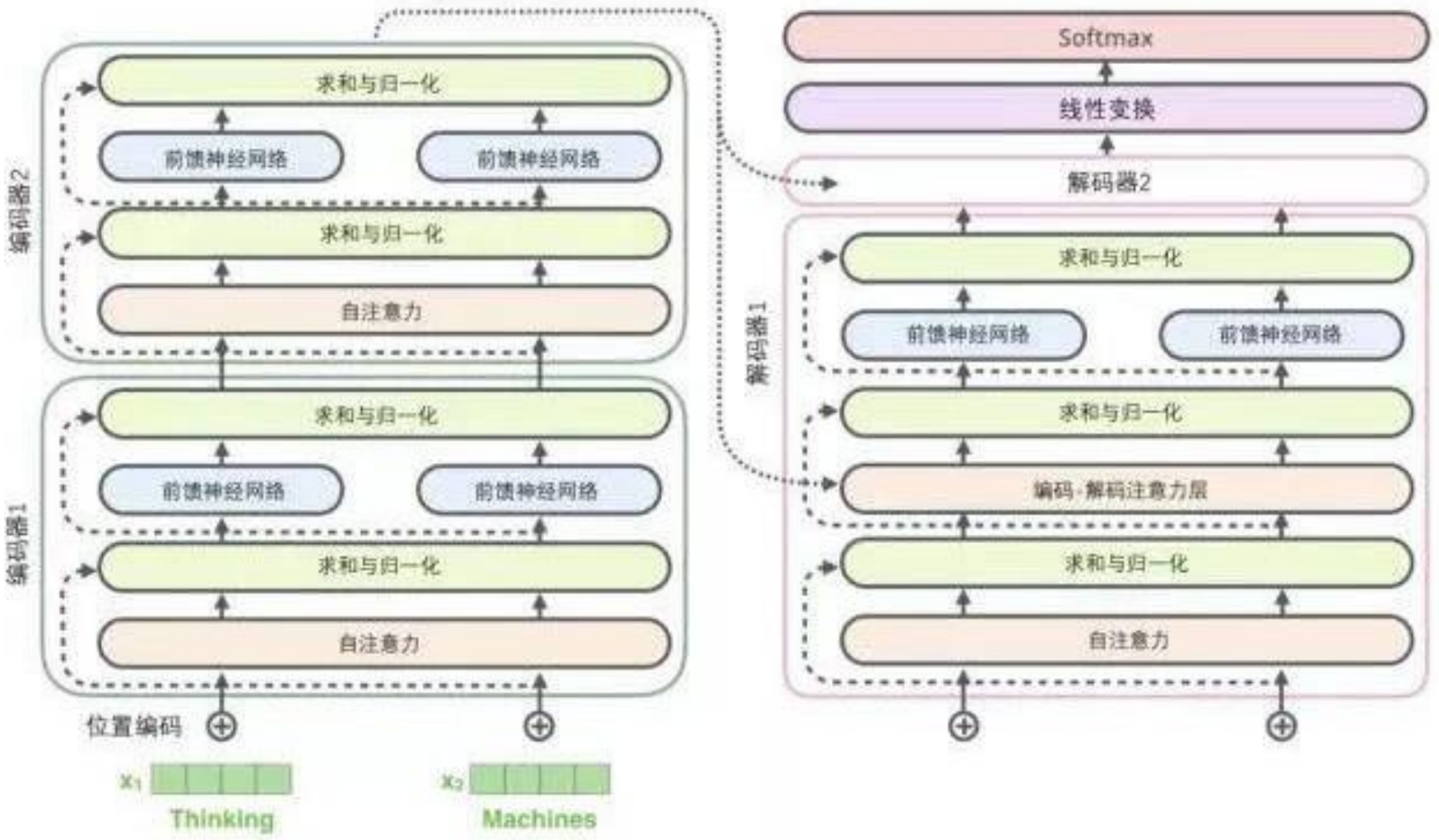


2.Transformer的工作流程

归一化：

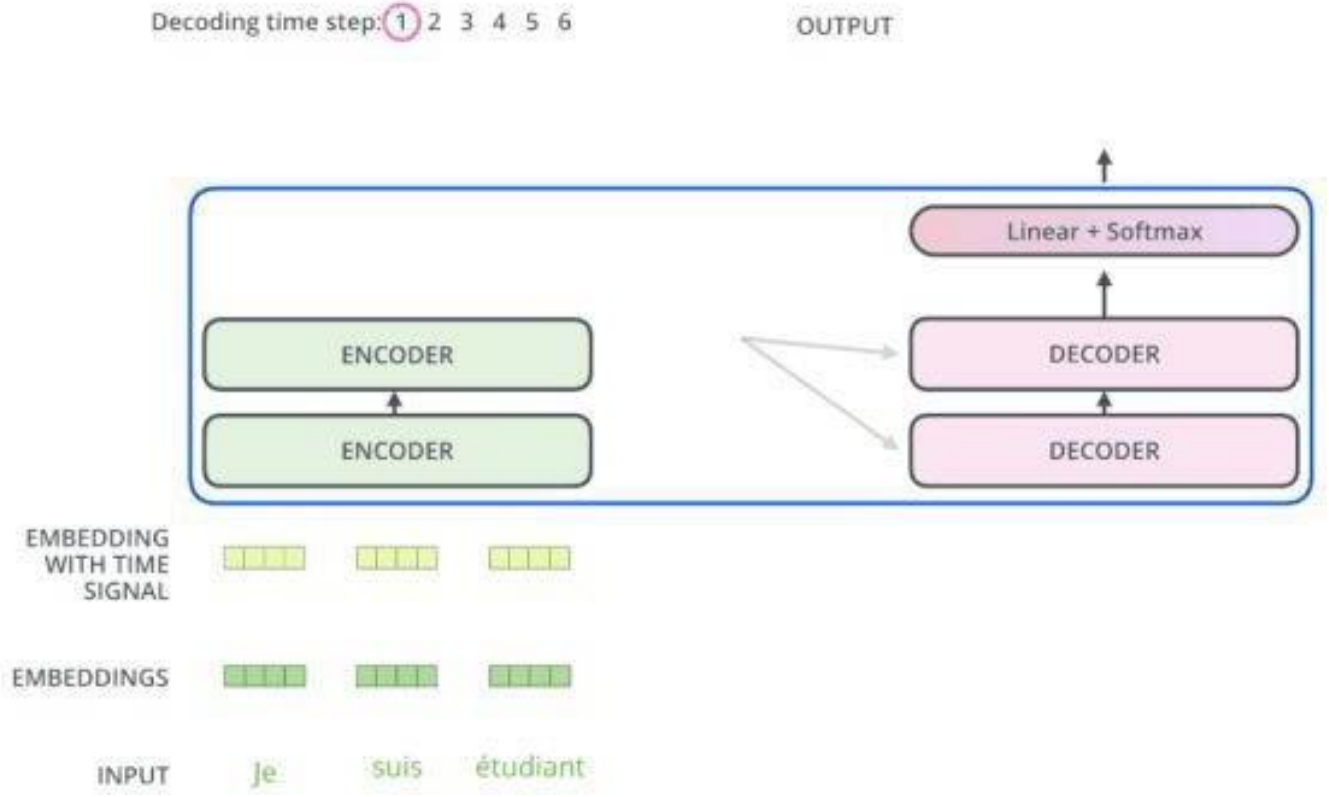


连接：基本的残差连接方式



2.Transformer的工作流程

编码器通过处理输入序列开启工作。顶端编码器的输出之后会变转化为一个包含向量K（键向量）和V（值向量）的注意力向量集 。这些向量将被每个解码器用于自身的“编码-解码注意力层”，而这些层可以帮助解码器关注输入序列哪些位置合适：



在完成编码阶段后，则开始解码阶段。解码阶段的每个步骤都会输出一个输出序列（在这个例子里，是英语翻译的句子）的元素

2.Transformer的工作流程

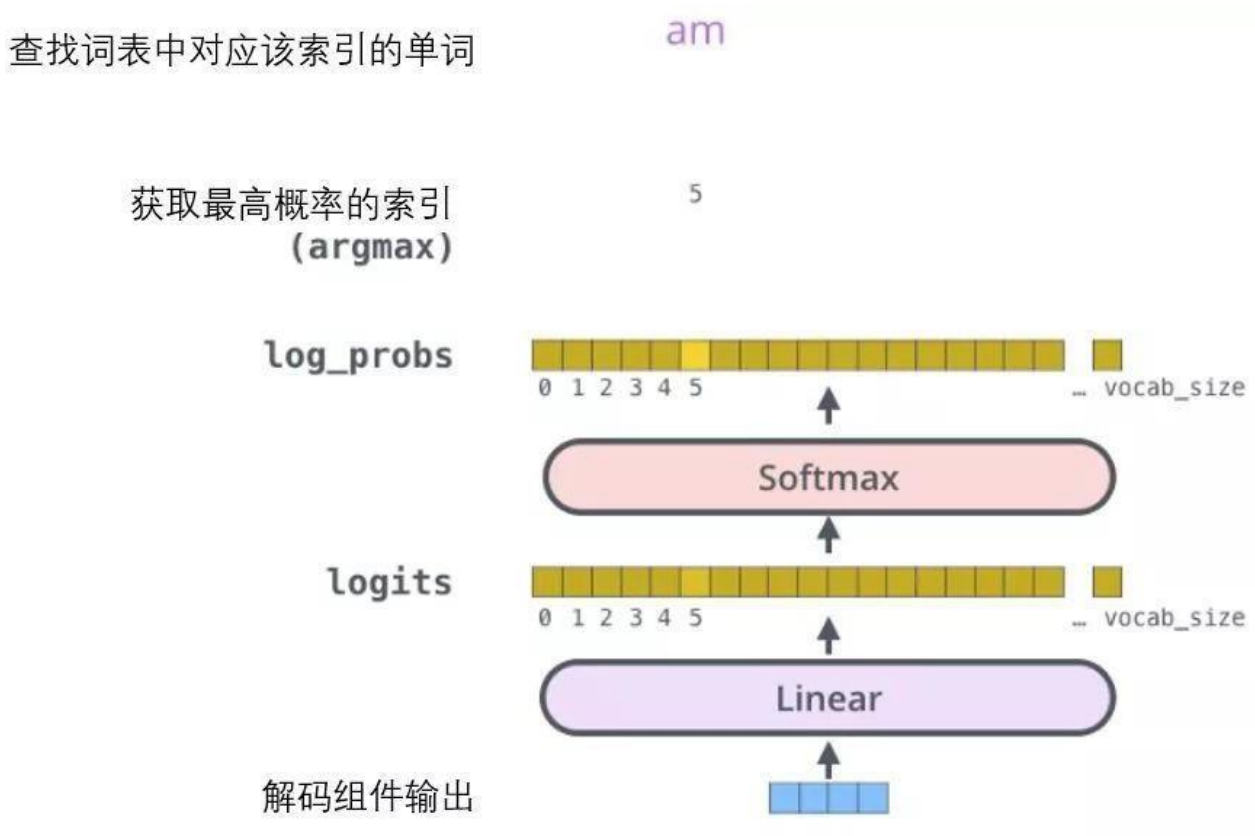
最终的线性变换和Softmax层

解码组件最后会输出一个实数向量。我们如何把浮点数变成一个单词？这便是线性变换层要做的工作，它之后就是Softmax层。

线性变换层是一个简单的全连接神经网络，它可以把解码组件产生的向量投射到一个比它大得多的、被称作对数几率（logits）的向量里。

不妨假设我们的模型从训练集中学习一万个不同的英语单词（我们模型的“输出词表”）。因此对数几率向量为一万个单元格长度的向量——每个单元格对应某一个单词的分数。

接下来的Softmax 层便会把那些分数变成概率（都为正数、上限1.0）。概率最高的单元格被选中，并且它对应的单词被作为这个时间步的输出。



这张图片从底部以解码器组件产生的输出向量开始。之后它会转化出一个输出单词。

3.Transformer的训练

1. Transformer介绍
2. Transformer的工作流程
3. Transformer的训练

3.Transformer的训练

输出词汇

eos：end of sentence的缩写形式

WORD	a	am	I	thanks	student	<eos>
INDEX	0	1	2	3	4	5

我们模型的输出词表在我们训练之前的预处理流程中就被设定好。

3.Transformer的训练

一旦我们定义了我们的输出词表，我们可以使用一个相同宽度的向量来表示我们词汇表中的每一个单词。这也被认为是一个one-hot 编码。所以，我们可以用下面这个向量来表示单词“am”：

输出词表

WORD	a	am	I	thanks	student	<eos>
INDEX	0	1	2	3	4	5

单词“am”的one-hot编码

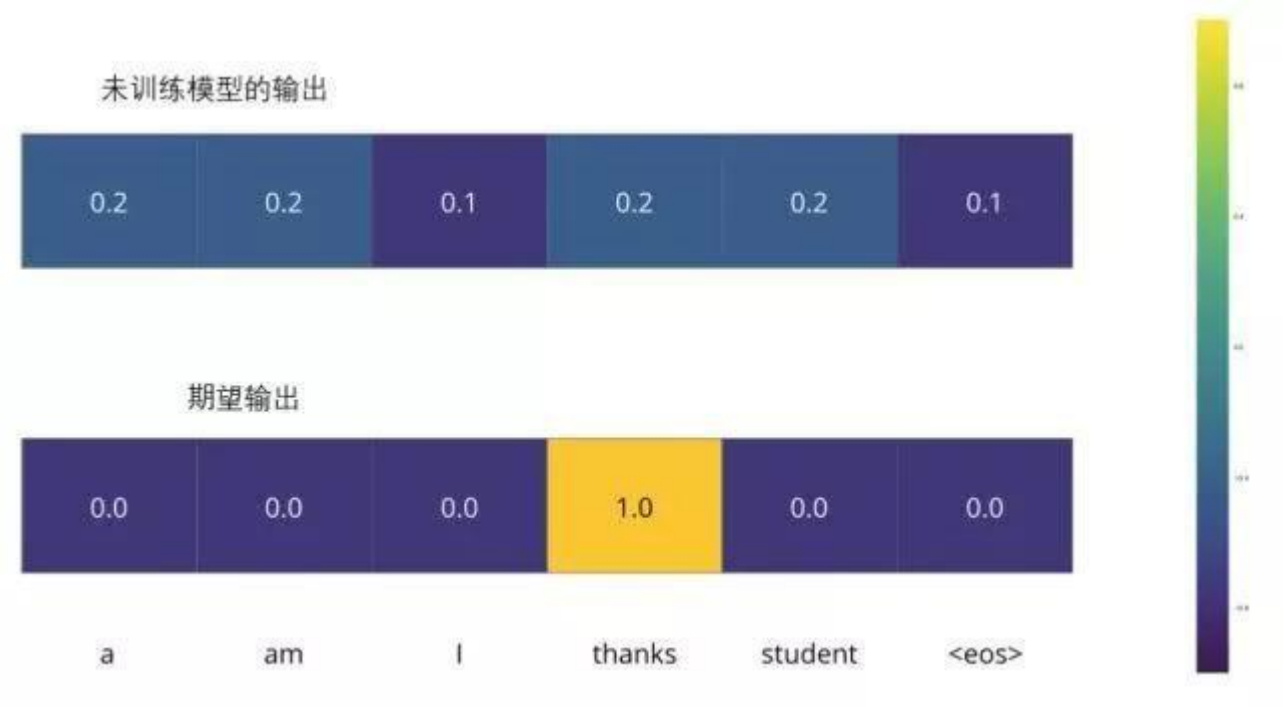
0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0

3.Transformer的训练

损失函数

比如说我们正在训练模型，现在是第一步，一个简单的例子—— 把“merci”翻译为“thanks”。

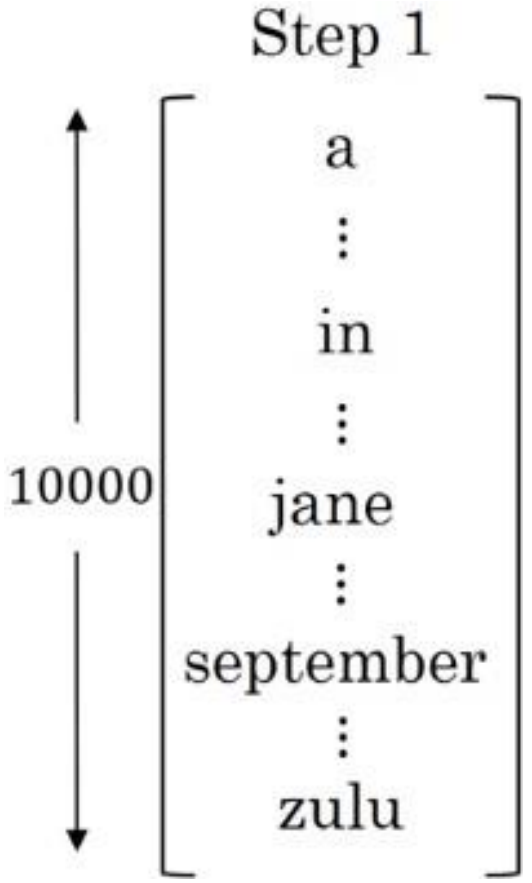
这意味着我们想要一个表示单词“thanks”概率分布的输出。但是因为这个模型还没被训练好，所以不太可能现在就出现这个结果。



3.Transformer的训练

集束搜索(Bean Search)

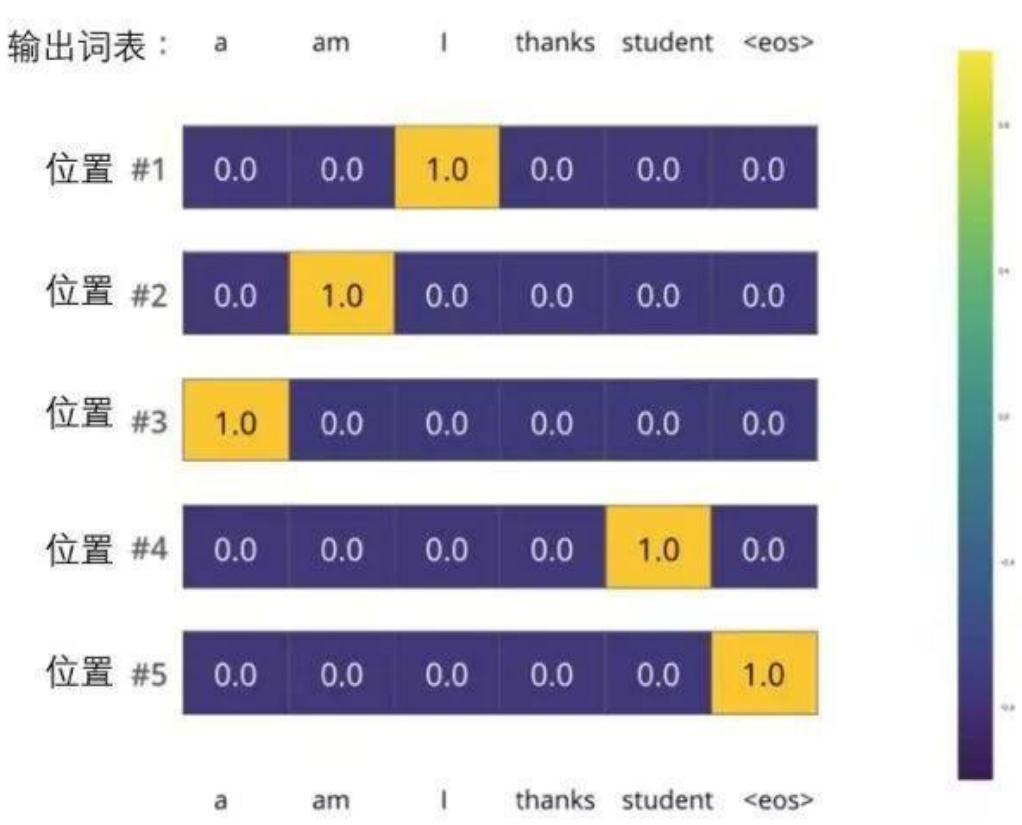
贪婪算法只会挑出最可能的那一个单词，然后继续。而集束搜索则会考虑多个选择，集束搜索算法会有一个参数B，叫做集束宽（beam width）。在这个例子中B=3，这样就意味着集束搜索不会只考虑一个可能结果，而是一次会考虑3个，比如对第一个单词有不同选择的可能性，最后找到in、jane、september，是英语输出的第一个单词的最可能的三个选项，然后集束搜索算法会把结果存到计算机内存里以便后面尝试用这三个词。



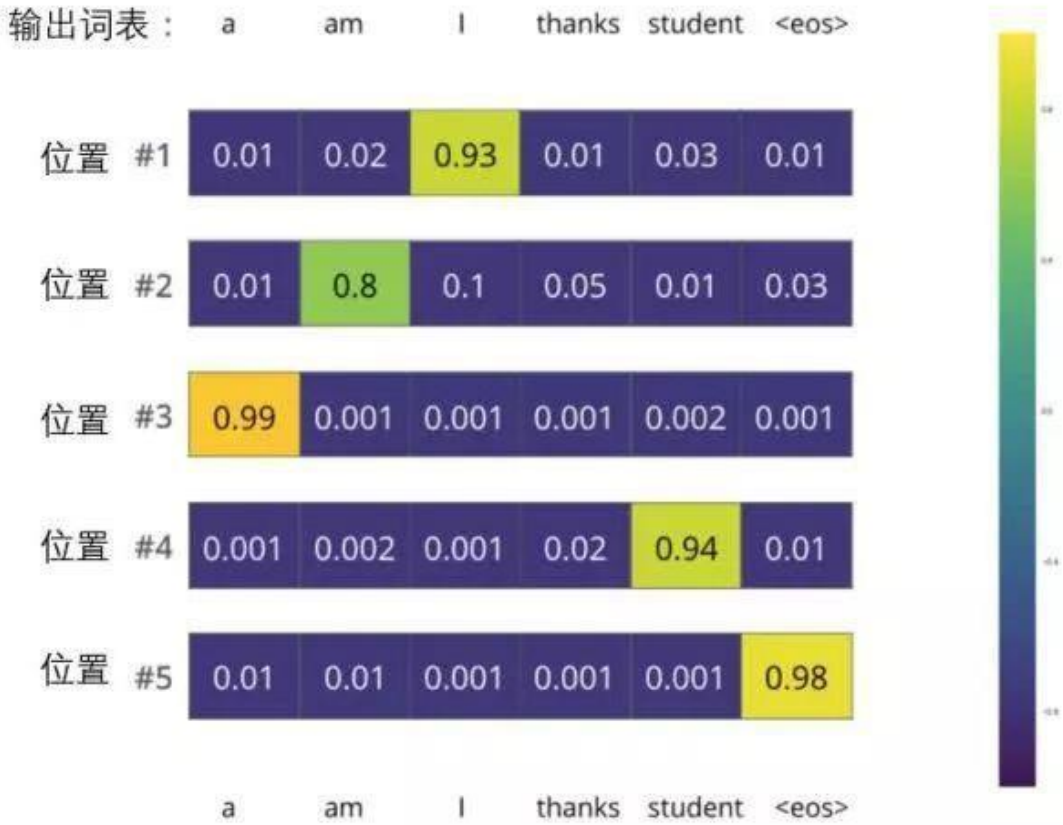
“**Jane visite l'Afrique en Septembre.**”（法语句子），我们希望翻译成英语，"**Jane is visiting Africa in September**".（英语句子）

3.Transformer的训练

模型的目标输出



模型训练后的输出



依据例子训练模型得到的目标概率分布

3.Transformer的训练

Transformer 总结

- Transformer 与 RNN 不同，可以比较好地并行训练。
- Transformer 本身是不能利用单词的顺序信息的，因此需要在输入中添加位置 Embedding，否则 Transformer 就是一个词袋模型了。
- Transformer 的重点是Self-Attention 结构，其中用到的 **Q, K, V**矩阵通过输出进行线性变换得到。
- Transformer 中 Multi-Head Attention 中有多个Self-Attention，可以捕获单词之间多种维度上的相关系数attention 分数。

参考文献

1. https://jalammar.github.io/illustrated-transformer
2. Andrew Ng，http://www.deeplearning.ai
3. https://blog.csdn.net/longxinchen_ml/article/details/86533005
4. 唐宇迪，https://www.bilibili.com/
5. 高永伟，https://www.bilibili.com/