①

# Transformer 的逻辑解释

很多朋友问我, Transformer 是如何做逻辑推理? 在此尝试回答一下.

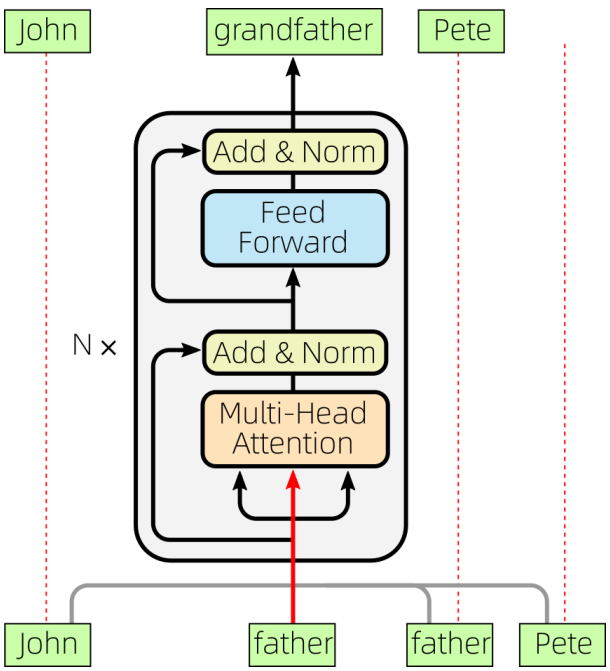
考虑这个例子:

$$\textit{John's father's father is Pete} \Rightarrow \textit{John's grandfather is Pete} \tag{1}$$

省略一些多余的 tokens, 加入变量[1]:

$$\forall X, Y.\ X\ \textit{father father}\ Y \Rightarrow X\ \textit{grandfather}\ Y \tag{2}$$

考虑这样一个简单的 $N$-层 Transformer, 它从左到右逐一处理 tokens, 红色表示 担任 Query 的 token (注意左边和右边的 tokens 都有参与 attention, 亦即 bi-directional 处理):



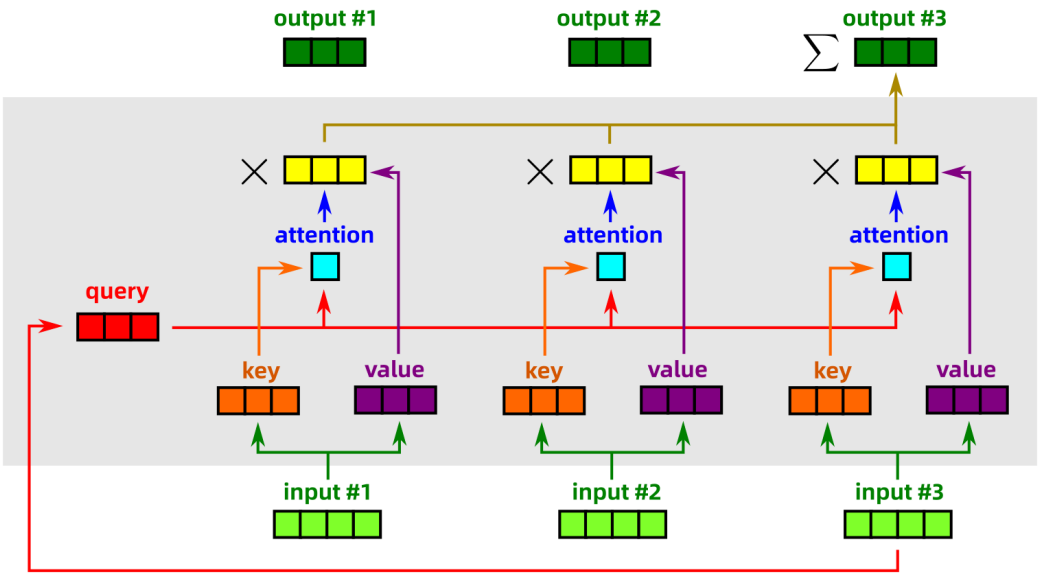

(3)

我们要回答两个问题:

- Query *father* 如何产生 *grandfather*?
- 第 4 输入位置的 *Pete* 如何出现在第 3 输出位置?

[1]这里使用了 relation algebra 的表达方式, 这种方式更接近人类语言: $aRb$ 表示 $a$ 和 $b$ 之间有关系 $R$. 关系之间可以 compose, 例如 $R \circ S$. 如果用 谓词逻辑 表达, 会比较累赘: father(X, Y) ∧ father(Y,Z) ⇒ grandfather(X,Z). 但我们不必太拘泥于逻辑形式的细节, 因为深度学习遵从「后结构主义」, 它只需要 抽取逻辑结构的某些特征, 将之变成 inductive bias 即可.

如果各位同学忘记了 self-Attention 机制是如何运作, 可以参考下图 重温一下 (图中第 3 个输入是Query):




(4)

在我们的例子 (3) 里, Query($father_1$) 配上 Key($father_2$), 所谓「配对」是指 dot product: ⟨ Query, Key ⟩.

重温一下 Attention 的公式:

$$\text{Attention}(Q, K, V) = \text{softmax}\left(\frac{\langle Q, K\rangle}{\sqrt{d_k}}\right) V \tag{5}$$

Softmax 给出的是一组概率, 也就是注意力**权重**. 例如 给予 Value($father_1$) 30% 的权重, 给 Value($father_2$) 70%.

所以输出的向量是 Value($father_1$) 和 Value($father_2$) 的**线性组合**:

$$\boxed{\text{Output}} \quad grandfather = \alpha\,\text{Value}(father_1) + \beta\,\text{Value}(father_2) \tag{6}$$

留意上式中, *grandfather* 那些是 **词向量**, 即 vector embedding.

其实 Value($father_1$) 和 Value($father_2$) 是一样的, 如果不考虑 positional embedding.

目前为止, 以上的操作是 Transformer 可以轻易做到的, so far so good ☺

## "Copy" Mechanism

第二个问题是 将 *Pete* 从第 4 位置 "copy" 到第 3 位置.

Query 是第 3 位置的 $father_2$.

用更简洁的符号表示:

$$\forall \vec{x}. \quad \vec{x} = \langle Qf_2, Kf_1 \rangle V f_1 + \langle Qf_2, Kf_2 \rangle V f_2 + \langle Qf_2, K\vec{x} \rangle V \vec{x} \tag{7}$$

代入 $\vec{x} = 0$ 可得 前两项 $= 0$, ie:

$$\forall \vec{x}. \quad \vec{x} = \langle Qf_2, K\vec{x} \rangle V \vec{x} \tag{8}$$

如果 $\vec{x}$ 可取的值 $>$ embedding dimension, 那么 $V$ 必然是 $k \cdot I$ 的形式. 那么 $\langle Qf_2, K\vec{x} \rangle = 1/k =$ constant 表示 $K$ 将 $\vec{x}$ 投射到一个超平面上. 以上对于 矩阵 $K, V$ 来说是颇强的约束, 但并非无可能. 而且, $\vec{x}$ 的取值可能只是 embedding 空间的一个子集, 因此 约束 可能更宽松.

问题是: 有了这些约束之后, 似乎这一层的 Transformer 就不能 储存 其他的逻辑 rules 了 (见下面的分析).

## Multiple Logic Rules

现在来考虑, 一层的 Transformer 能不能储存 多个逻辑 rules?

这是重要的, 因为要达到 人类 common sense 的知识, 估计需要的逻辑 rules 数量, 起码达到 百万或千万以上. BERT/GPT 给了我们一个大约的估算.

考虑 这两条不同的 rules:

- *father sister* $\Rightarrow$ *aunt*
- *church sister* $\Rightarrow$ *nun*

这等于要约束:

- *aunt* $= \gamma V$ *father* $+ \delta V$ *sister*
- *nun* $= \epsilon V$ *church* $+ \zeta V$ *sister*

于是我们看到, 不同的 逻辑前提之下, 会产生不同的 Values 的线性组合, 这表达的能力是很高的.

而且 还不要忽略 MLP 层的 非线性作用.

# Multi-Head Attention