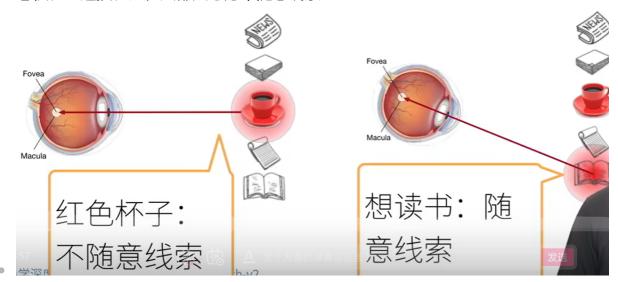
笔记: 自然语言处理

第十章 注意力机制

64 注意力机制

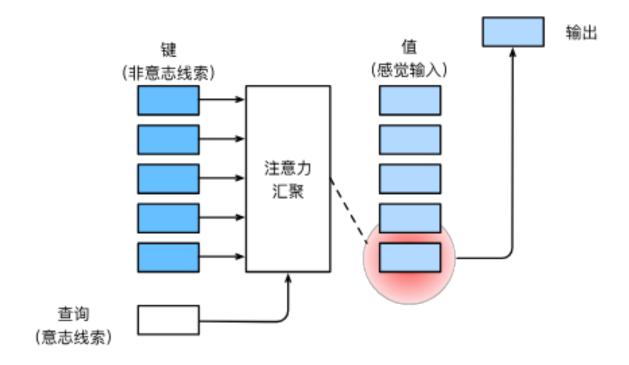
1.

• 卷积、全连接、池化层都只考虑不随意线索



- 注意力机制考虑随意线索
 - 随意线索被称之为查询query
 - 每个输入是一个 值value和不随意线索key 的对
 - 通过注意力池化层来有偏向性地选择某些输入

_



2.非参注意力池化层

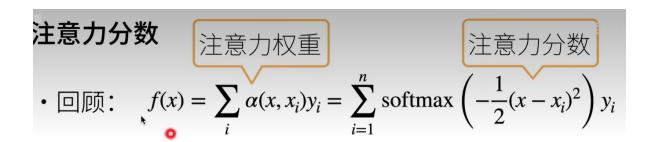
- Nadaraya-Watson核回归
- $ullet f(x) = \sum_{i=1}^n rac{K(x-x_i)}{\sum_{j=1}^n K(x-x_i)} y_i$
- 其中x是查询, (xi,yi)是键值对
- K是核函数,用来计算距离,分数表示概率,即每个的相对重要性,离x越近的值越大,也就是说对于要拟合的x,通过这个系数找到离他比较近的点,给他们的y值比较大的权重,(获得了更多的注意力)最终得到一个加权平均
- 简单来说,根据输入的位置对输出vi进行加权
- 使用高斯核 $K(u)=rac{1}{\sqrt{2\pi}}exp(-rac{u^2}{2})$

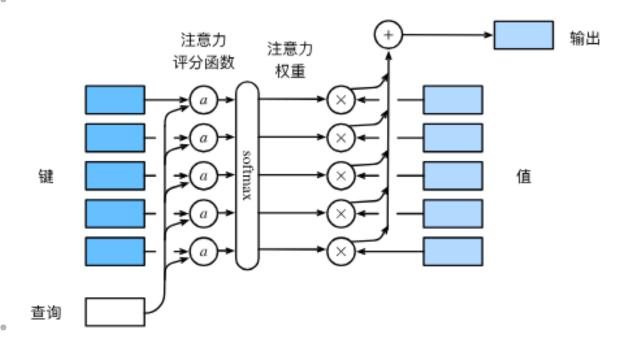
$$ullet f(x) = \sum_{i=1}^n rac{exp(-rac{(x-x_i)^2}{2})}{\sum_{j=1}^n exp(-rac{(x-x_j)^2}{2})} y_i$$

- $ullet = \sum_{i=1}^n softmax(-rac{(x-x_i)^2}{2})y_i$
 - 3.参数化的注意力机制
- 在之前的基础上引入可以学习的w
- $f(x) = \sum_{i=1}^n softmax(-rac{((x-x_i)w)^2}{2})y_i$ 4.总结
- 受试者使用非自主性和自主性提示有选择性地引导注意力。前者基于突出性,后者则 依赖于意识
- 注意力机制通过注意力汇聚使选择偏向于值(感官输入),其中包含查询(自主性提示)和键(非自主性提示)。键和值是成对的

65 注意力分数

1.注意力分数





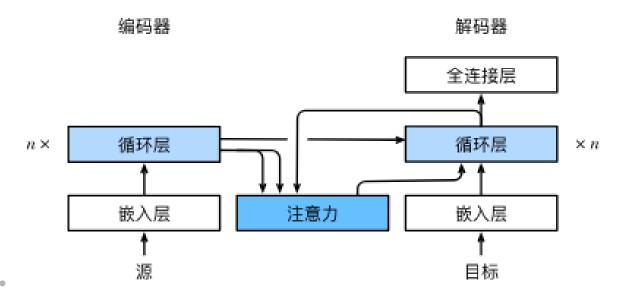
2.Additive Attention

- 可学参数: $W_k \in \mathbb{R}^{h imes k}, W_q \in \mathbb{R}^{h imes q}, v \in \mathbb{R}^h$
- $ullet \ a(k,q) = v^T tanh(W_k k + W_q q)$
- 等价于将key和query合并起来后放入到一个隐藏大小为h输出大小为1的单隐藏层 MLP
 - 3. Scaled Dot-Product Attention
- 如果query和key都是同样的长度d, $a(ki,q) = < q, ki > /\sqrt{d}$
- 分母保证对d没那么敏感4.总结
- 注意力分数是query和key的相似度,注意力权重是分数的softmax结果

66. 使用注意力机制的seq2seq

1.动机

机器翻译中,每个生成的词可能相关于源句子中不同的词,在seq2seq中源句子所有信息都被压缩在最后一个隐藏状态,引入注意力可以去关注需要的部分2.加入注意力



- 编码器对每次词的输出作为key和value
- 解码器RNN对上一个词的输出是query
- 注意力的输出和下一个词的词嵌入合并进入 3.总结
- 注意力机制可以根据解码器RNN的输出来匹配到合适的编码器的RNN的输出来更有效地传递信息
 - 4.Bahdanau注意力

带有注意力机制的解码器基本接口

```
class AttentionDecoder(d21.Decoder):
    """带有注意力机制的解码器基本接口"""
    def __init__(self, **kwargs):
        super(AttentionDecoder, self).__init__(**kwargs)

        @property
    def attention_weights(self):
        raise NotImplementedError
```

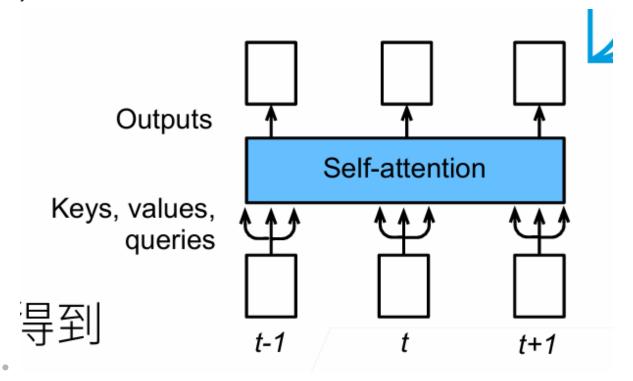
实现带有Bahdanau注意力的循环神经网络解码器

```
class Seq2SeqAttentionDecoder(AttentionDecoder):
    def __init__(self, vocab_size, embed_size, num_hiddens, num_layers,
```

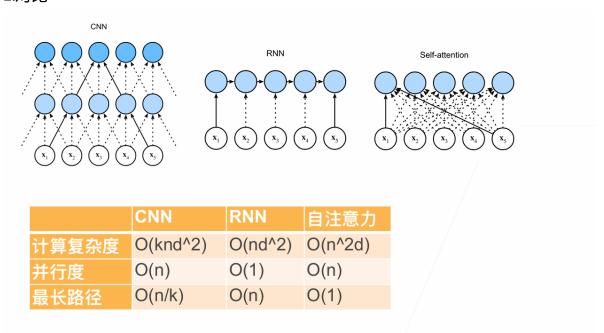
```
dropout=0, **kwargs):
    super(Seq2SeqAttentionDecoder, self). init (**kwargs)
    self.attention = d21.AdditiveAttention(
        num_hiddens, num_hiddens, num_hiddens, dropout)
    self.embedding = nn.Embedding(vocab_size, embed_size)
    self.rnn = nn.GRU(
        embed_size + num_hiddens, num_hiddens, num_layers,
        dropout=dropout)
    self.dense = nn.Linear(num hiddens, vocab size)
def init_state(self, enc_outputs, enc_valid_lens, *args):
    # outputs的形状为(batch size, num steps, num hiddens).
    # hidden_state的形状为(num_layers, batch_size, num_hiddens)
    outputs, hidden state = enc outputs
    return (outputs.permute(1, 0, 2), hidden_state, enc_valid_lens)
def forward(self, X, state):
   # enc_outputs的形状为(batch_size,num_steps,num_hiddens).
    # hidden state的形状为(num layers, batch size,
   # num hiddens)
    enc outputs, hidden state, enc valid lens = state
   # 输出X的形状为(num_steps,batch_size,embed_size)
   X = self.embedding(X).permute(1, 0, 2)
    outputs, self._attention_weights = [], []
    for x in X:
        # query的形状为(batch size,1,num hiddens)
        query = torch.unsqueeze(hidden_state[-1], dim=1)
        #解码器RNN对上一个词的输出
        # context的形状为(batch size,1,num hiddens)
        context = self.attention(
            query, enc_outputs, enc_outputs, enc_valid_lens)
       # 在特征维度上连结
        x = torch.cat((context, torch.unsqueeze(x, dim=1)), dim=-1)
        # 将x变形为(1,batch size,embed size+num hiddens)
        out, hidden_state = self.rnn(x.permute(1, 0, 2), hidden_state)
        outputs.append(out)
        self._attention_weights.append(self.attention.attention_weights)
   # 全连接层变换后, outputs的形状为
   # (num_steps,batch_size,vocab_size)
   outputs = self.dense(torch.cat(outputs, dim=∅))
    return outputs.permute(1, 0, 2), [enc_outputs, hidden_state,
                                     enc_valid_lens]
@property
def attention weights(self):
    return self._attention_weights
```

1.自注意力

- 给定序列x1,...,xn,xi作为key, value, query得到y1,...,yn
- yi=f(xi,(x1,x1),...(xn,xn))



2.对比



k是窗口的大小,n是序列长度,d是词向量特征维度,d^2是矩阵乘法。最长路径指信息传递。并行度是每个计算是否依赖其他的输出。n^2d是每次q要和n组做乘法,每个长度为d。由此可以看出,自注意力最长路径短说明他擅长看很长的序列,但反映在计算复杂度上他需要很大的计算量(n方)

3.位置编码

- 跟CNN/RNN不同,自注意力并没有记录位置信息
- 位置编码将位置信息注入到输入里
 - 假设长度为n的序列是: $X \in \mathbb{R}^{n \times d}$,那么使用位置编码矩阵 $P \in \mathbb{R}^{n \times d}$ 来输出X+P作为自编码输入
- $ullet \ p_{i,2j} = sin(rac{i}{10000^{2j/d}}), p_{i,2j+1} = cos(rac{i}{10000^{2j/d}})$

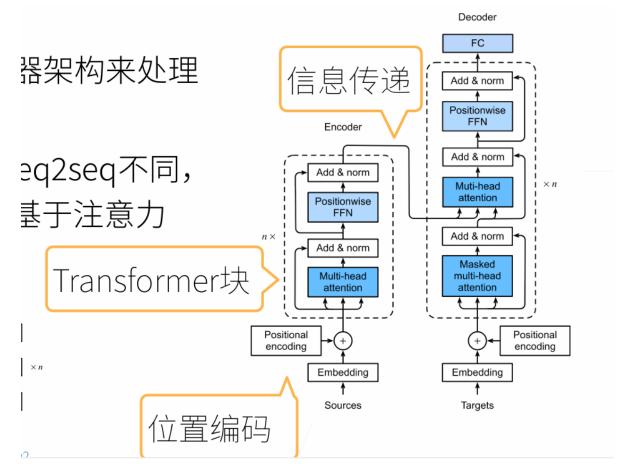
68.Transformer

1.架构

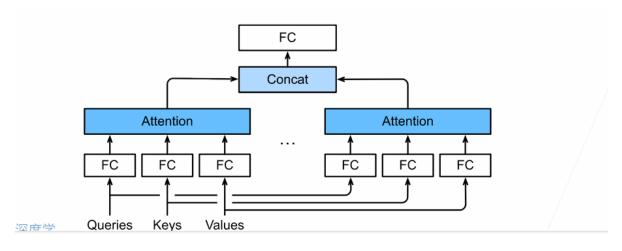
纯基于注意力

• 编码器: 多头自注意力

• 解码器: 解码器自注意力, 编码器-解码器注意力

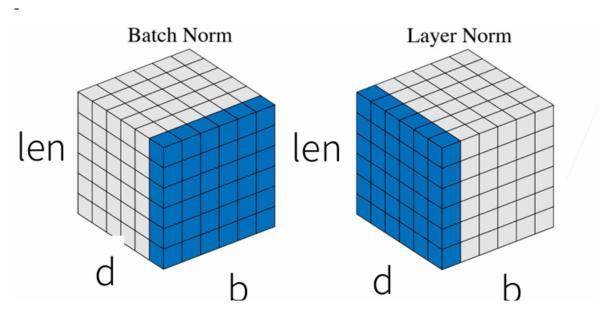


2.多头注意力



对同一key, value, query, 希望抽取不同的信息 (例如短距离关系和长距离关系)

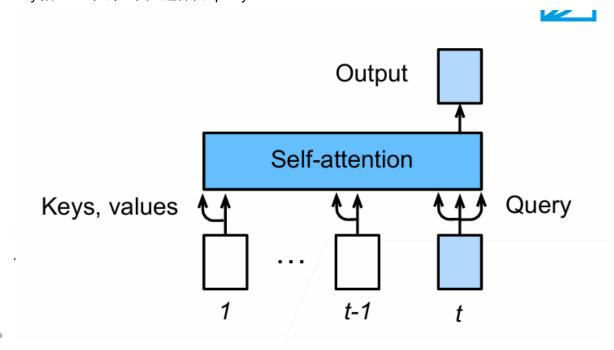
- ->多头注意力使用h个独立的注意力池化,合并各个头输出得到最终输出
- 3.基于位置的前馈网络
- 输入形状由 (b,n,d) 变换成 (bn, d)
- 作用于两个全连接层
- 输出形状由 (bn, d) 变化回 (b,n,d)
- 等价于两层核窗口为1的一维卷积层
 - 4.层归一化
- Add: ResNet
- Norm: 层归一化
 - 批量归一化对每个特征/通道里元素进行归一化,不适合序列长度会变的NLP
 - 层归一化对每个样本里的元素进行归一化



5.信息传递

编码器中的输出y1, ...yn

- 将其作为解码器中第i个Transformer块中多头注意力的key和value,它的query来自目标序列
- 意味着编码器和解码器中块的个数和输出维度都是一样的6.预测
- 预测第t+1个输出时,解码器中输入前t个预测值。在自注意力中,前t个预测值作为 key和value,第t个值还作为query



7.代码

基于位置的前馈网络

使用残差连接和层归一化

```
class AddNorm(nn.Module):
    def __init__(self, normalized_shape, dropout, **kwargs):
        super(AddNorm, self).__init__(**kwargs)
```

```
self.dropout = nn.Dropout(dropout)
self.ln = nn.LayerNorm(normalized_shape)

def forward(self, X, Y):
    return self.ln(self.dropout(Y) + X)
```

实现编码器中的一个层

```
class EncoderBlock(nn.Module):
    def __init__(self, key_size, query_size, value_size, num_hiddens,
                 norm_shape, ffn_num_input, ffn_num_hiddens, num_heads,
                 dropout, use bias=False, **kwargs):
        super(EncoderBlock, self).__init__(**kwargs)
        self.attention = d21.MultiHeadAttention(key_size, query_size,
                                                value size, num hiddens,
                                                num_heads, dropout,
use_bias)
        self.addnorm1 = AddNorm(norm_shape, dropout)
        self.ffn = PositionWiseFFN(ffn num input, ffn num hiddens,
                                   num hiddens)
        self.addnorm2 = AddNorm(norm_shape, dropout)
   def forward(self, X, valid_lens):
       Y = self.addnorm1(X, self.attention(X, X, X, valid lens))
       #这里q, k, v都是自己
        return self.addnorm2(Y, self.ffn(Y))
```

Transformer编码器

```
class TransformerEncoder(d21.Encoder):
    def __init__(self, vocab_size, key_size, query_size, value_size,
                 num_hiddens, norm_shape, ffn_num_input, ffn_num_hiddens,
                 num_heads, num_layers, dropout, use_bias=False, **kwargs):
        super(TransformerEncoder, self).__init__(**kwargs)
        self.num_hiddens = num_hiddens
        self.embedding = nn.Embedding(vocab_size, num_hiddens)
        self.pos_encoding = d2l.PositionalEncoding(num_hiddens, dropout)
        self.blks = nn.Sequential()
       for i in range(num_layers):
            self.blks.add_module(
                "block" + str(i),
                EncoderBlock(key_size, query_size, value_size, num_hiddens,
                             norm shape, ffn num input, ffn num hiddens,
                             num_heads, dropout, use_bias))
    def forward(self, X, valid_lens, *args):
```

Transformer解码器也是由多个相同的层组成

```
class DecoderBlock(nn.Module):
   """解码器中第1个块"""
   '''类比之前使用注意力机制的seq2seq,第一个attention层相当于原来的rnn层,第二
个attention层就是attention层'''
   def __init__(self, key_size, query_size, value_size, num_hiddens,
               norm_shape, ffn_num_input, ffn_num_hiddens, num_heads,
               dropout, i, **kwargs):
       super(DecoderBlock, self). init (**kwargs)
       self.i = i
       self.attention1 = d21.MultiHeadAttention(
           key size, query size, value size, num hiddens, num heads,
dropout)
       self.addnorm1 = AddNorm(norm shape, dropout)
       self.attention2 = d21.MultiHeadAttention(
           key_size, query_size, value_size, num_hiddens, num_heads,
dropout)
       self.addnorm2 = AddNorm(norm_shape, dropout)
       self.ffn = PositionWiseFFN(ffn num input, ffn num hiddens,
                                num hiddens)
       self.addnorm3 = AddNorm(norm shape, dropout)
   def forward(self, X, state):
       enc outputs, enc valid lens = state[0], state[1]
       # 训练阶段,输出序列的所有词元都在同一时间处理, q, k, v都是X
       # 因此state[2][self.i]初始化为None。
       # 预测阶段,输出序列是通过词元一个接着一个解码的,合并X和前面的输出
       # 因此state[2][self.i]包含着直到当前时间步第i个块解码的输出表示
       if state[2][self.i] is None:
           key_values = X
       else:
           key_values = torch.cat((state[2][self.i], X), axis=1)
       state[2][self.i] = key_values
       if self.training:
           batch_size, num_steps, _ = X.shape
           # dec_valid_lens的开头:(batch_size,num_steps),
           # 其中每一行是[1,2,...,num_steps]
           dec_valid_lens = torch.arange(
```

```
1, num_steps + 1, device=X.device).repeat(batch_size, 1)
else:
    dec_valid_lens = None

# 自注意力

X2 = self.attention1(X, key_values, key_values, dec_valid_lens)
Y = self.addnorm1(X, X2)
# 编码器一解码器注意力。
# enc_outputs的开头:(batch_size,num_steps,num_hiddens)
Y2 = self.attention2(Y, enc_outputs, enc_outputs, enc_valid_lens)
Z = self.addnorm2(Y, Y2)
return self.addnorm3(Z, self.ffn(Z)), state
```

Transformer解码器

```
class TransformerDecoder(d21.AttentionDecoder):
    def init (self, vocab size, key size, query size, value size,
                num_hiddens, norm_shape, ffn_num_input, ffn_num_hiddens,
                num heads, num layers, dropout, **kwargs):
       super(TransformerDecoder, self).__init__(**kwargs)
       self.num_hiddens = num_hiddens
       self.num layers = num layers
       self.embedding = nn.Embedding(vocab_size, num_hiddens)
       self.pos encoding = d21.PositionalEncoding(num hiddens, dropout)
       self.blks = nn.Sequential()
       for i in range(num layers):
           self.blks.add module("block"+str(i),
               DecoderBlock(key_size, query_size, value_size, num_hiddens,
                            norm_shape, ffn_num_input, ffn_num_hiddens,
                            num_heads, dropout, i))
       self.dense = nn.Linear(num_hiddens, vocab_size)
   def init_state(self, enc_outputs, enc_valid_lens, *args):
       return [enc_outputs, enc_valid_lens, [None] * self.num_layers]
    def forward(self, X, state):
       X = self.pos_encoding(self.embedding(X) *
math.sqrt(self.num hiddens))
       self._attention_weights = [[None] * len(self.blks) for _ in range
(2)]
       for i, blk in enumerate(self.blks):
           X, state = blk(X, state)
           # 解码器自注意力权重
           self._attention_weights[0][
               i] = blk.attention1.attention.attention weights
           # "编码器一解码器"自注意力权重
           self._attention_weights[1][
               i] = blk.attention2.attention.attention_weights
```

```
return self.dense(X), state

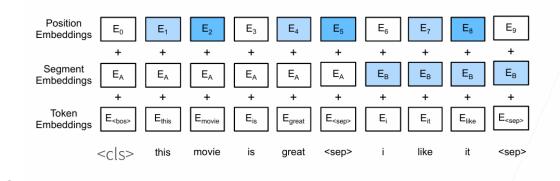
@property
def attention_weights(self):
    return self._attention_weights
```

第十四章 自然语言处理: 预训练

69 BERT预训练

1.NLP里的迁移学习

- 使用预训练好的模型来抽取词、句子的特征
 - 例如word2vec或语言模型
- 不更新预训练好的模型
- 需要构建新的网络来抓取新任务需要的信息
 - word2vec忽略了时序信息,语言模型只看了一个方向
 - 2.BERT的动机
- 基于微调的NLP模型
- 预训练的模型抽取了足够多的信息
- 新的任务只需要增加一个简单的输出层3.BERT架构
- 只有编码器的Transformer
- 两个版本:
 - Base: blocks=12, hidden size=768, heads=12, parameters=110M
 - Large: blocks=24, hidden size=1024, heads=16, parameters=340M
- 在大规模数据上训练>3B词4.对输入的修改
- 因为只有编码器,所以source和target都得给编码器
- 每个样本是一个句子对
- 加入额外的片段嵌入,用segment embedding分隔
- 位置编码可学习,每个token有一个position embedding



5.预训练任务1: 带掩码的语言模型

- Transformer的编码器是双向的,标准语言模型要求单向
- 带掩码的语言模型每次随机(15%概率)将一些词元换成mask,这样Transformer的编码器仍然可以做双向,相当于完形填空
- 因为微调任务中不会出现mask, 所以预训练中
 - 80%概率,将选中的词元变成mask
 - 10%概率,换成一个随机词元
 - 10%概率,保持原有的词元
 - 6.预训练任务2: 下一个句子预测
- 预测一个句子对中两个句子是否相邻
- 训练样本中: 50%概率选择相邻句子对, 50%概率选择随机句子对
- 将cls对应输出放到一个全连接层预测7.代码

Input Representation

```
def get_tokens_and_segments(tokens_a, tokens_b=None):
    """Get tokens of the BERT input sequence and their segment IDs."""
    tokens = ['<cls>'] + tokens_a + ['<sep>']
    segments = [0] * (len(tokens_a) + 2)
    if tokens_b is not None:
        tokens += tokens_b + ['<sep>']
        segments += [1] * (len(tokens_b) + 1)
    return tokens, segments
```

BERTEncoder class

```
class BERTEncoder(nn.Module):
    """BERT encoder."""
```

```
def init (self, vocab size, num hiddens, norm shape, ffn num input,
             ffn num hiddens, num heads, num layers, dropout,
             max_len=1000, key_size=768, query_size=768, value_size=768,
             **kwargs):
   super(BERTEncoder, self).__init__(**kwargs)
   self.token_embedding = nn.Embedding(vocab_size, num_hiddens)
   self.segment_embedding = nn.Embedding(2, num_hiddens)
   self.blks = nn.Sequential()
   for i in range(num layers):
        self.blks.add_module(f"{i}", d21.EncoderBlock(
            key_size, query_size, value_size, num_hiddens, norm_shape,
            ffn_num_input, ffn_num_hiddens, num_heads, dropout, True))
    self.pos_embedding = nn.Parameter(torch.randn(1, max_len,
                                                  num hiddens))
def forward(self, tokens, segments, valid lens):
   X = self.token_embedding(tokens) + self.segment_embedding(segments)
   X = X + self.pos_embedding.data[:, :X.shape[1], :]
   for blk in self.blks:
       X = blk(X, valid_lens)
   return X
```

Masked Language Modeling

把要预测的位置的词所对应的encoder的输出拿到这里来预测位置的值

```
class MaskLM(nn.Module):
    """The masked language model task of BERT."""
    def init (self, vocab size, num hiddens, num inputs=768, **kwargs):
        super(MaskLM, self).__init__(**kwargs)
        self.mlp = nn.Sequential(nn.Linear(num inputs, num hiddens),
                                 nn.ReLU(),
                                 nn.LayerNorm(num_hiddens),
                                 nn.Linear(num hiddens, vocab size))
    def forward(self, X, pred_positions):
        num_pred_positions = pred_positions.shape[1]
        pred_positions = pred_positions.reshape(-1)
        batch size = X.shape[0]
        batch_idx = torch.arange(0, batch_size)
        batch_idx = torch.repeat_interleave(batch_idx, num_pred_positions)
       masked_X = X[batch_idx, pred_positions]
       masked_X = masked_X.reshape((batch_size, num_pred_positions, -1))
       mlm Y hat = self.mlp(masked X)
        return mlm_Y_hat
```

```
class NextSentencePred(nn.Module):
    """The next sentence prediction task of BERT."""

def __init__(self, num_inputs, **kwargs):
    super(NextSentencePred, self).__init__(**kwargs)
    self.output = nn.Linear(num_inputs, 2)

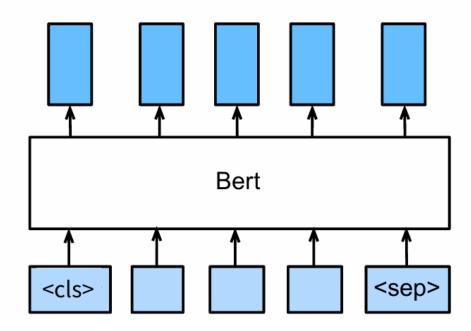
def forward(self, X):
    return self.output(X)
```

Putting All Things Together

```
class BERTModel(nn.Module):
    """The BERT model."""
   def __init__(self, vocab_size, num_hiddens, norm_shape, ffn_num_input,
                 ffn num hiddens, num heads, num layers, dropout,
                 max_len=1000, key_size=768, query_size=768, value_size=768,
                 hid in features=768, mlm in features=768,
                 nsp_in_features=768):
        super(BERTModel, self).__init__()
        self.encoder = BERTEncoder(vocab size, num hiddens, norm shape,
                    ffn_num_input, ffn_num_hiddens, num_heads, num_layers,
                    dropout, max_len=max_len, key_size=key_size,
                    query_size=query_size, value_size=value_size)
        self.hidden = nn.Sequential(nn.Linear(hid_in_features, num_hiddens),
                                    nn.Tanh())
        self.mlm = MaskLM(vocab_size, num_hiddens, mlm_in_features)
        self.nsp = NextSentencePred(nsp in features)
    def forward(self, tokens, segments, valid_lens=None,
pred_positions=None):
        encoded X = self.encoder(tokens, segments, valid lens)
        if pred positions is not None:
            mlm_Y_hat = self.mlm(encoded_X, pred_positions)
       else:
            mlm_Y_hat = None
        nsp_Y_hat = self.nsp(self.hidden(encoded_X[:, 0, :]))
        return encoded_X, mlm_Y_hat, nsp_Y_hat
```

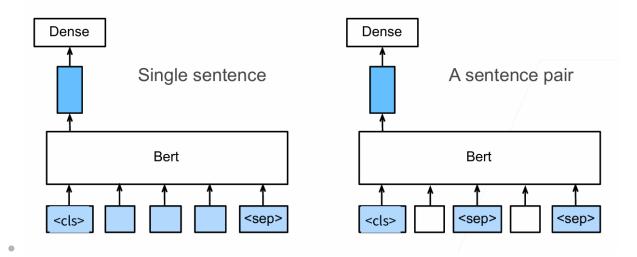
第十五章 自然语言处理: 应用

- BERT对每一个词元返回抽取了上下文信息的特征向量
- 不同的任务使用不同的特征



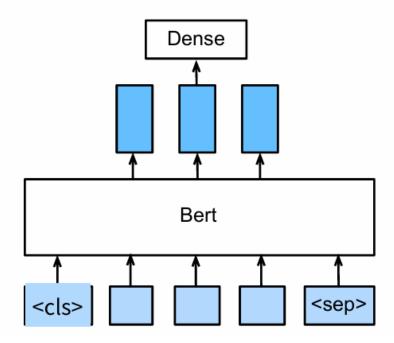
2.句子分类

将cls对应的向量输入到全连接层分类



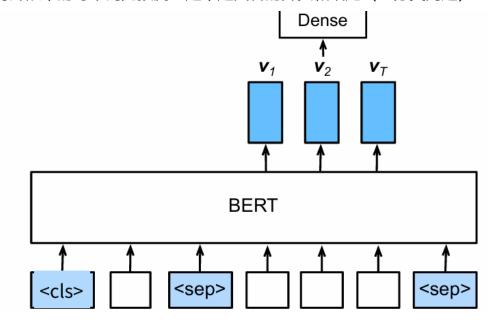
3.命名实体识别

- 识别一个词元是不是命名实体,例如人名、机构、位置
- 将非特殊词元放进全连接层分类



4.问题回答

- 给定一个问题,和描述文字,找出一个片段作为回答
- 对片段中的每个词元预测它是不是回答的开头和结尾 (三分类问题)



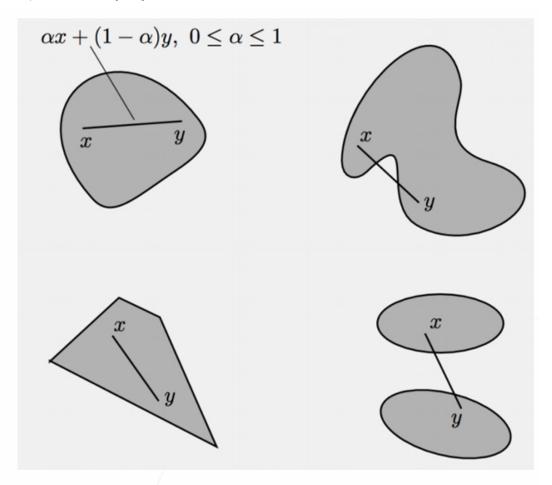
• 前面是问题,后面是描述

第十一章 优化算法

1.优化问题

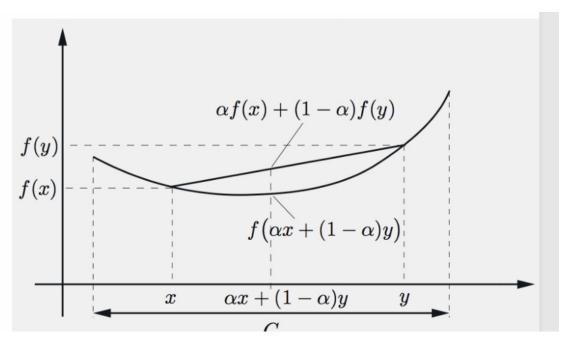
- 一般形式: minimize f (x) subject to x ∈C
 - 2.局部最小vs全局最小

- 迭代算法一般只能找到局部最小3.凸集
- $ullet \ lpha x + (1-lpha)y \in C orall lpha \in [0,1] orall x, y \in C$



4.凸函数

 $\bullet \quad f(\alpha x + (1-\alpha)y) \leqslant \alpha f(x) + (1-\alpha)f(y) \in C \forall \alpha \in [0,1] \forall x,y \in C$



5.凸函数优化

- 如果代价函数f是凸的,且限制集合c是凸的,那么就是凸优化问题,那么局部最小就 是全局最小
- 严格凸优化问题有唯一的全局最小6.例子

• 凸: 线性回归, sofmax

• 非凸: 其他: MLP,CNN,RNN,attention 7.冲量法

不会一下很猛地改变很多,因为每次改变的方向不仅取决于当前的梯度,还却决于之前的梯度

冲量法

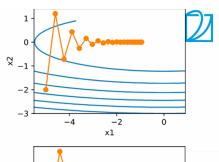
• 冲量法使用平滑过的梯度对权重更新

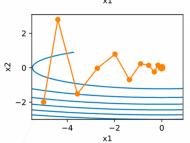
$$\mathbf{g}_t = \frac{1}{b} \sum_{i \in I_t} \nabla \mathcal{E}_i(\mathbf{x}_{t-1})$$

$$\mathbf{v}_t = \beta \mathbf{v}_{t-1} + \mathbf{g}_t \quad \mathbf{w}_t = \mathbf{w}_{t-1} - \eta \mathbf{v}_t$$

梯度平滑: $\mathbf{v}_t = \mathbf{g}_t + \beta \mathbf{g}_{t-1} + \beta^2 \mathbf{g}_{t-2} + \beta^3 \mathbf{g}_{t-3} + \dots$

β常见取值 [0.5, 0.9, 0.95, 0.99]





• 对学习率不那么敏感,非常平滑

$$v_t = eta_1 v_{t-1} + (1-eta_1) g_t, eta_1 = 0.9$$

$$ullet v_t = (1-eta_1)(g_t + eta_1 g_{t-1} + eta_1^2 g_{t-2} + eta_1^3 g_{t-3} + \dots)$$

- 无穷等比求和 (betan次方) ->权重和为 (1-beta) 1/ (1-beta) =1
- $\sum_{i=0}^t eta_1^i = rac{1-eta_1^t}{1-eta_1}$ ->在t比较小时修正 $\hat{v_t} = rac{v_t}{1-eta_1^t}$
- $ullet s_t = eta_2 s_{t-1} + (1-eta_2) g_t^2, eta_2 = 0.999$
- 在t比较小时修正 $\hat{v_t} = rac{v_t}{1-eta_2^t}$
- 计算重新调整后的梯度 $g'_t = \frac{\hat{v_t}}{\sqrt{\hat{s_t} + \epsilon}}$,分子是使得变化比较平滑,分母是和分子制衡,使得不同维度梯度变化差不多,不会让太大的影响比较小的
- 最后用这个梯度更新