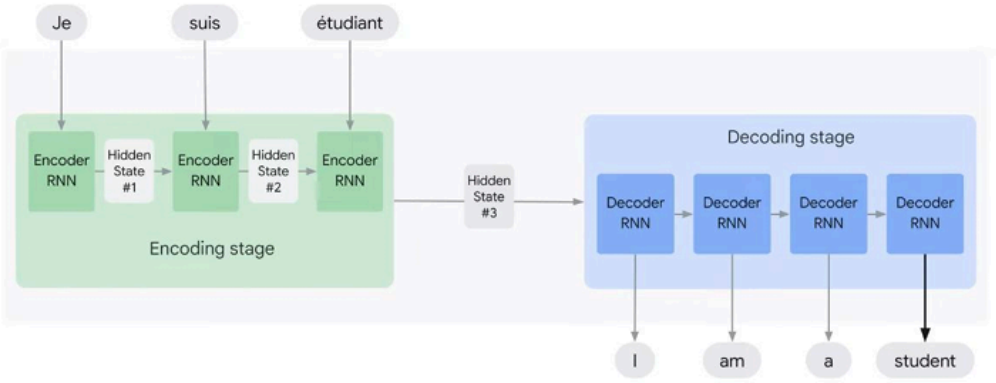
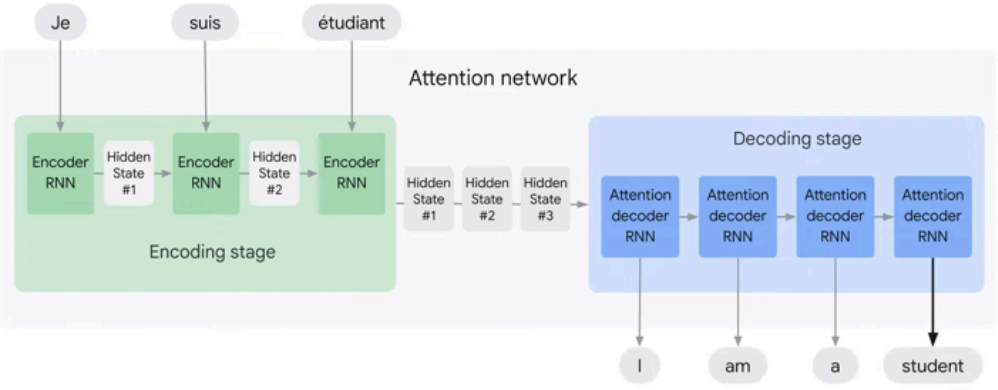
注意力机制：

Transformer最主要的是注意力机制(attention):

- **传统 Encoder-Decoder 模型**：信息传递是线性的，Decoder 只能间接利用 Encoder 的最后一个隐藏状态。
- **Transformer**：通过注意力机制，Decoder 可以直接关注 Encoder 的所有隐藏状态，从而充分利用输入序列的全局信息。





Transformer：

Transformer和传统的Encoder-Decoder的区别：

1.在Encoder的阶段都是逐词处理输入序列并生成隐藏状态。

2.在Context的阶段：传统的Encoder-Decoder模型是直接使用Encoder最后一个隐藏状态作为上下文的内容，Transformer是通过自注意力的机制，计算每个目标词的上下文向量：

(1)**Encoder** 提供所有源词的隐藏状态（已融合上下文信息）。

(2)Decoder 在生成每个目标词时：

- 使用前一时刻的隐藏状态 s_{j-1}作为 Query。
- 与 Encoder 的所有 Key（隐藏状态）计算相似度。
- 根据相似度分配权重，加权求和得到上下文向量 c_j。
- 结合 c_j 和自身状态生成下一个词的概率分布。

$$
\begin{aligned}
c_j &= \sum_{i=1}^{T} \alpha_{ij} h_i \\
\alpha_{ij} &= p(e_{ij}) \\
e_{ij} &= a(s_{j-1}, h_i)
\end{aligned}
$$

首先使用a这个对齐函数比较 Decoder 中第$j-1$个词的隐藏状态（作为 Query）与 Encoder 中第i个词的隐藏状态（作为 Key），然后再使用p 这个分布函数进行归一化，一般是softmax，最后，利用上述步骤中计算得出的注意力权重 α^{ij}，对 Encoder 的所有隐藏状态（可以视作 Value）进行加权求和，生成针对 Decoder 第 j词的上下文向量 c^j。这一步有效地使得模型能够聚焦于输入序列中最相关的部分，从而更准确地生成目标序列中的下一个词。

根据图形和伪代码，注意力机制的核心公式可以总结为：

$$A(q, K, V) = \sum_i p(a(k_i, q)) * v_i$$

- q：Query 向量（Decoder 的隐藏状态）。
- K：Key 向量（Encoder 的隐藏状态）。
- V：Value 向量（Encoder 的隐藏状态或独立的值向量）。
- a：对齐函数，计算 Query 和 Key 的相似度。

- p：分布函数，通常为 softmax，将对齐分数转换为注意力权重。

举例：翻译句子

我们以翻译英文句子 **"The cat sat on the mat"** → 法语 **"Le chat était assis sur la natte"** 为例，重点分析 **Decoder 如何通过注意力机制关注 Encoder 的输出。**

Transformer 使用 **Scaled Dot-Product Attention**，其核心公式如下：

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

其中：

- $Q \in \mathbb{R}^{m \times d_k}$：Query 矩阵（来自 Decoder）
- $K \in \mathbb{R}^{n \times d_k}$：Key 矩阵（来自 Encoder）
- $V \in \mathbb{R}^{n \times d_v}$：Value 矩阵（来自 Encoder）
- d_k：Key/Query 的维度（通常为 64 或 512）
- m：目标序列长度（法语句子长度）
- n：源序列长度（英文句子长度）

1. Encoder 输出（Key 和 Value）

假设英文句子 `"The cat sat on the mat"` 被编码为 6 个隐藏状态（每个维度为 $d_k = 3$）：

$$K = V = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{6 \times 3}$$

每一行代表一个词的 Key/Value 向量。

2. Decoder 输入（Query）

假设 Decoder 正在生成第 4 个目标词 **"assis"**（对应英文 "sat"），其 Query 向量为：

$$Q = [0, 0, 1] \in \mathbb{R}^{1 \times 3}$$

3. 计算点积（Query × Key）

计算 Query 和所有 Key 的点积：

$$QK^T = [0, 0, 1] \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}^T = [0, 0, 1] \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

逐列计算点积：

- 第1列：$0 \times 1 + 0 \times 0 + 1 \times 0 = 0$
- 第2列：$0 \times 0 + 0 \times 1 + 1 \times 0 = 0$
- 第3列：$0 \times 0 + 0 \times 0 + 1 \times 1 = 1$
- 第4列：$0 \times 1 + 0 \times 1 + 1 \times 0 = 0$
- 第5列：$0 \times 0 + 0 \times 1 + 1 \times 1 = 1$
- 第6列：$0 \times 1 + 0 \times 0 + 1 \times 1 = 1$

所以：

$$QK^T = [0, 0, 1, 0, 1, 1]$$

4. 缩放（Scale）

除以 $\sqrt{d_k} = \sqrt{3} \approx 1.732$：

$$\frac{QK^T}{\sqrt{d_k}} = [0, 0, 0.577, 0, 0.577, 0.577]$$

5. Softmax 归一化

对缩放后的点积应用 Softmax：

$$\alpha = \text{Softmax}([0, 0, 0.577, 0, 0.577, 0.577])$$

计算每个元素的指数：

- $e^0 = 1$

- $e^{0.577} \approx 1.781$

所以：

$$\alpha = \frac{[1, 1, 1.781, 1, 1.781, 1.781]}{1 + 1 + 1.781 + 1 + 1.781 + 1.781} = \frac{[1, 1, 1.781, 1, 1.781, 1.781]}{8.343} \approx [0.120, 0.120, 0.213, 0.120, 0.213, 0.213]$$

6. 加权求和（得到上下文向量）

使用注意力权重 α 对 Value 矩阵 V 进行加权求和：

$$c_j = \sum_{i=1}^{6} \alpha_i v_i = 0.120 \cdot v_1 + 0.120 \cdot v_2 + 0.213 \cdot v_3 + 0.120 \cdot v_4 + 0.213 \cdot v_5 + 0.213 \cdot v_6$$

代入 Value 向量：

$$c_j = 0.120 \cdot [1, 0, 0] + 0.120 \cdot [0, 1, 0] + 0.213 \cdot [0, 0, 1] + 0.120 \cdot [1, 1, 0] + 0.213 \cdot [0, 1, 1] + 0.213 \cdot [1, 0, 1]$$

逐项计算：

- $0.120 \cdot [1, 0, 0] = [0.120, 0, 0]$
- $0.120 \cdot [0, 1, 0] = [0, 0.120, 0]$
- $0.213 \cdot [0, 0, 1] = [0, 0, 0.213]$
- $0.120 \cdot [1, 1, 0] = [0.120, 0.120, 0]$
- $0.213 \cdot [0, 1, 1] = [0, 0.213, 0.213]$
- $0.213 \cdot [1, 0, 1] = [0.213, 0, 0.213]$

加总后：

$$c_j = [0.120 + 0 + 0 + 0.120 + 0 + 0.213, \quad 0 + 0.120 + 0 + 0.120 + 0.213 + 0, \quad 0 + 0 + 0.213 + 0 + 0.213 + 0.213] = [0.453, 0.453,$$

7. 最终输出

将上下文向量 $c_j = [0.453, 0.453, 0.639]$ 输入前馈网络，最终生成目标词 **"assis"** 的概率分布。

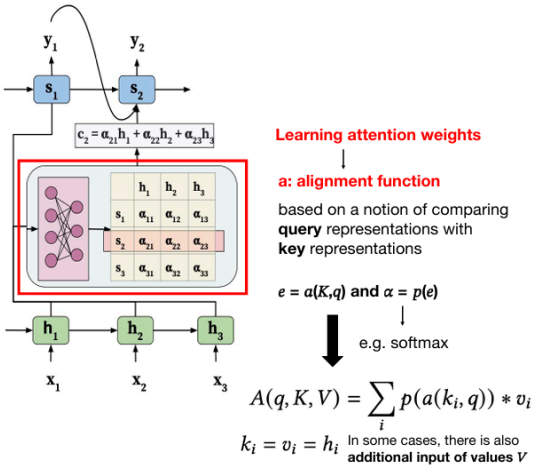
三、总结：注意力机制的关键步骤

步骤	数学操作	目的
1. Query × Key	点积计算相似度	衡量目标词与源词的相关性
2. 缩放（Scale）	除以 $\sqrt{d_k}$	防止点积过大导致梯度消失
3. Softmax	归一化为概率分布	分配注意力权重
4. 加权求和	$c_j = \sum \alpha_i v_i$	得到上下文向量

Function	Traditional Encoder-Decoder	Encoder-Decoder with Attention
Encode	$h_i = f(x_i, h_{i-1})$	$h_i = f(x_i, h_{i-1})$
Context	$c = h_T$	$c_j = \sum_{i=1}^{T} \alpha_{ij} h_i$
		$\alpha_{ij} = p(e_{ij})$
		$e_{ij} = a(s_{j-1}, h_i)$
Decode	$s_j = f(s_{j-1}, y_{j-1}, c)$	$s_j = f(s_{j-1}, y_{j-1}, c_j)$
Generate	$y_j = g(y_{j-1}, s_j, c)$	$y_j = g(y_{j-1}, s_j, c_j)$

$x = (x_1, ..., x_T)$: input sequence, T: length of input sequence, h_i: hidden states of encoder, c: context vector, α_{ij}: attention weights over input, s_j: decoder hidden state, y_j: output token, f, g: non-linear functions, a: alignment function, p: distribution function

Table 1. Encoder-decoder architecture: traditional and with attention model



Encoder 与 Decoder 的结构差异

模块	Encoder	Decoder
输入类型	源序列（如英文）	目标序列（如法语）
输入处理	词向量 + 位置编码	词向量 + 位置编码
核心机制	自注意力 + 前馈网络	自注意力 + 编码器-解码器注意力 + 前馈网络
注意力机制	仅自注意力（Self-Attention）	三层注意力：Masked 自注意力、Encoder-Decoder 注意力、前馈网络
输出目标	提取上下文特征	生成目标序列

其对齐函数有很多 如下：

$$A(q, K, V) = \sum_i p(a(k_i, q)) * v_i$$

Function	Equation	References
similarity	$a(k_i, q) = sim(k_i, q)$	[Graves et al. 2014a]
dot product	$a(k_i, q) = q^T k_i$	[Luong et al. 2015a]
scaled dot product	$a(k_i, q) = \frac{q^T k_i}{\sqrt{d_k}}$	[Vaswani et al. 2017]
general	$a(k_i, q) = q^T W k_i$	[Luong et al. 2015a]
biased general	$a(k_i, q) = k_i(Wq + b)$	[Sordoni et al. 2016]
activated general	$a(k_i, q) = act(q^T W k_i + b)$	[Ma et al. 2017b]
generalized kernel	$a(k_i, q) = \phi(q)^T \phi(k_i)$	[Choromanski et al. 2021]
concat	$a(k_i, q) = w_{imp}^T act(W[q; k_i] + b)$	[Luong et al. 2015a]
additive	$a(k_i, q) = w_{imp}^T act(W_1 q + W_2 k_i + b)$	[Bahdanau et al. 2015]
deep	$a(k_i, q) = w_{imp}^T E^{(L-1)} + b^L$ $E^{(l)} = act(W_l E^{(l-1)} + b^l$ $E^{(1)} = act(W_1 k_i + W_0 q) + b^l$	[Pavlopoulos et al. 2017]
location-based	$a(k_i, q) = a(q)$	[Luong et al. 2015a]
feature-based	$a(k_i, q) = w_{imp}^T act(W_1 \phi_1(K) + W_2 \phi_2(K) + b)$	[Li et al. 2019a]

$a(k_i, q)$: alignment function for query q and key k_i, sim : similarity functions such as cosine, d_k: length of input, $(W, w_{imp}, W_0, W_1, W_2)$: trainable parameters, b: trainable bias term, act: activation function.

Table 2. Summary of Alignment Functions

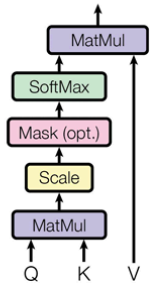
自注意力机制：

Scaled Dot-Product Attention就是一个对齐函数，多头注意力机制是使用h个不同或者相同的对齐函数去更好的理解语义。再加入一个全连接层和线性层就是Multi-Head Attention.

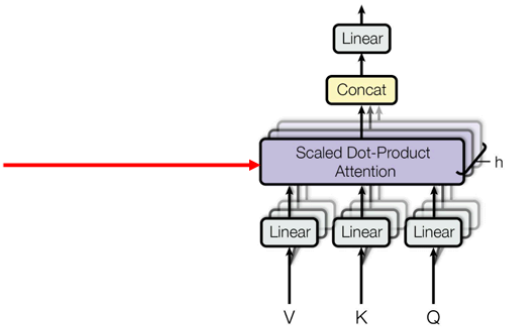
$$\text{Attention}(Q, K, V) = \text{softmax}(\frac{QK^T}{\sqrt{d_k}})V$$

$$\text{MultiHead}(Q, K, V) = \text{Concat}(\text{head}_1, ..., \text{head}_\text{h})W^O$$
$$\text{where head}_\text{i} = \text{Attention}(QW_i^Q, KW_i^K, VW_i^V)$$

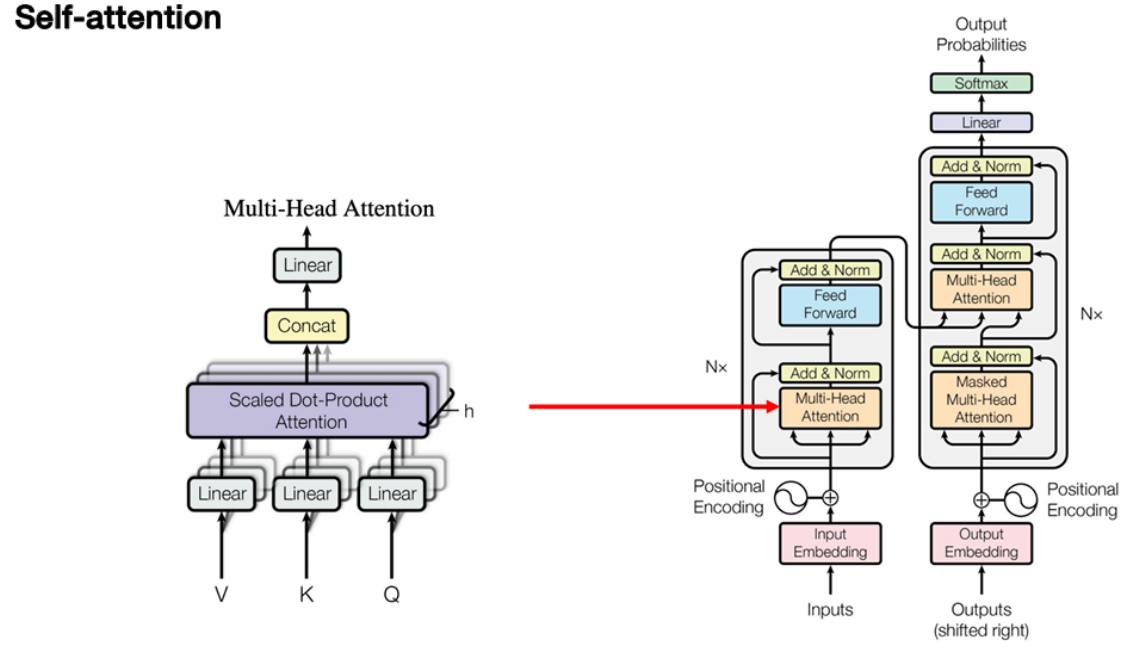
Scaled Dot-Product Attention



Multi-Head Attention

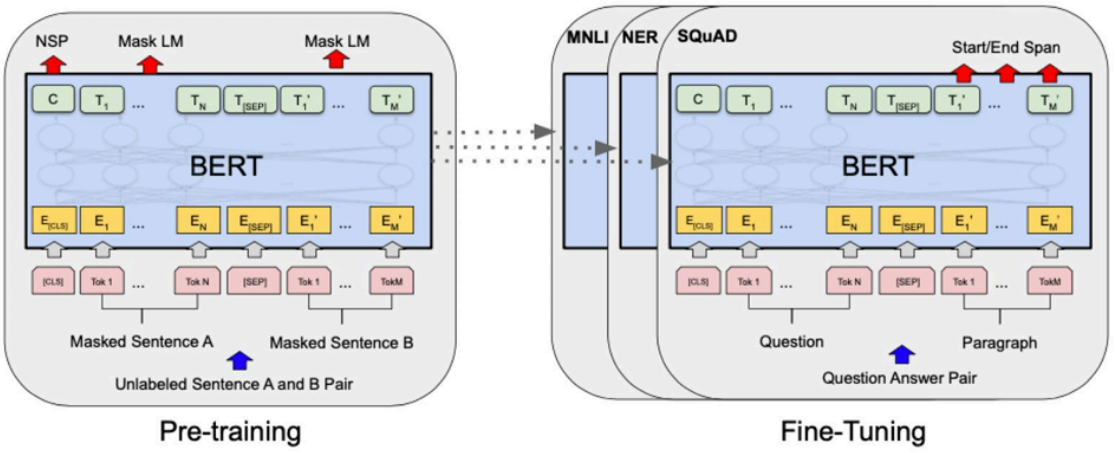


Self-attention



Bert

Bert提出了一个预训练+微调的范式：



1.全方位上下文理解：与以前的模型（例如GPT）相比，**BERT能够双向理解上下文，即同时考虑一个词 的左边和右边的上下文。**这种全方位的上下文理解使得BERT能够更好地理解语言，特别是在理解词义、 消歧等复杂任务上有明显优势。

2.**预训练+微调（Pre-training + Fine-tuning）的策略：BERT模型先在大规模无标签文本数据上进行预训练，学习语言的一般性模式，然后在具体任务的标签数据上进行微调。这种策略让BERT能够在少量标签 数据上取得很好的效果，大大提高了在各种NLP任务上的表现。**

3.跨任务泛化能力：BERT通过微调可以应用到多种NLP任务中，包括但不限于文本分类、命名实体识别、 问答系统、情感分析等。它的出现极大地简化了复杂的NLP任务，使得只需一种模型就能处理多种任务。

4.多语言支持：BERT提供了多语言版本（Multilingual BERT），可以支持多种语言，包括但不限于英语、 中文、德语、法语等，使得NLP任务能够覆盖更广的语言和区域

在 BERT 的预训练阶段，BERT 通过预测被掩盖的词（masked tokens）来学习双向上下文表示。然而，在微调（fine-tuning）阶段，输入数据通常是完整的句子，不会出现 `[MASK]` 标记。这会导致一个潜在的问题：

问题： 模型在预训练阶段经常看到 `[MASK]` 标记，但在微调阶段从未见过 `[MASK]` 标记，这可能会导致预训练和微调之间的不一致性。

为了解决这个问题，BERT 引入了一种更灵活的掩码策略，避免模型过度依赖 `[MASK]` 标记。

在 BERT 的预训练过程中，掩码策略的具体实现如下：

1. **选择 15% 的词作为目标词**：
   - 首先从输入序列中随机选择 15% 的词作为需要预测的目标词。
2. **对目标词进行处理**：
   - 对于选中的目标词，按照以下比例进行处理：
     - **80% 的时间**：用 `[MASK]` 替换目标词。
     - **10% 的时间**：用随机词替换目标词。

- **10% 的时间**：保持目标词不变。

3. **训练目标**：
   - 模型的任务是根据上下文预测这些目标词的真实值，无论它们是否被替换为 `[MASK]` 或随机词。

特性	BERT	GPT
训练方式	自编码（Autoencoding）	自回归（Autoregressive）
预测目标	给定上下文，预测其中的一个或多个缺失单词	在给定前面的单词时，预测下一个单词
输入处理	双向，可以同时考虑一个词的左右上下文	单向（从左到右或者从右到左）
适用场景	适合理解上下文，有助于信息提取、问答系统、情感分析等	适合生成式任务，如文章生成、诗歌创作等
架构	基于Transformer的编码器	基于Transformer的解码器
语言模型	判别式（Discriminative）	生成式（Generative）
优点	对上下文理解能力较强	预测的连贯性较强
缺点	生成的文本连贯性较弱	对上下文理解能力相对较弱