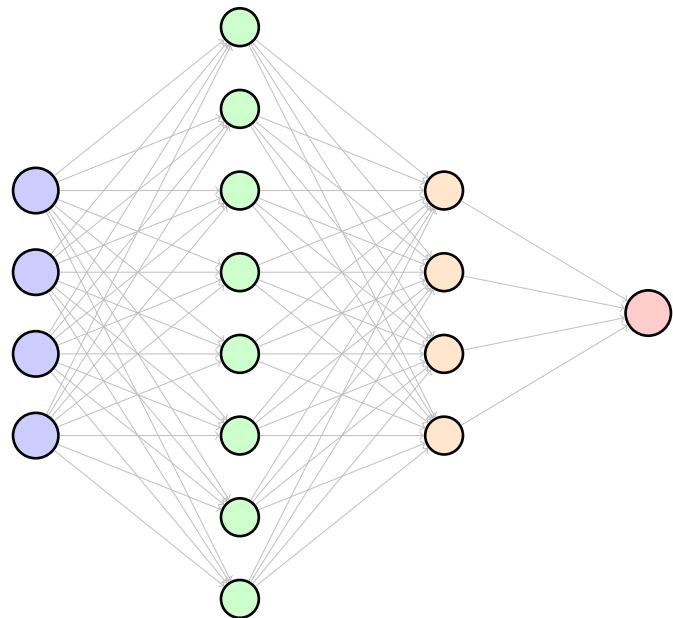


大语言模型核心理论与应用

Transformer · 注意力机制 · 预训练微调 · 提示工程 · RAG

从基础架构到高级应用，全面掌握大语言模型技术



大语言模型核心理论与应用

2026 年 1 月 6 日

目录

1	引言	3
I	第一部分：基础概念与框架	3
2	PyTorch 基础框架	4
2.1	PyTorch 核心概念	4
2.2	PyTorch 常用 API	5
3	Transformer 架构基础	6
3.1	Transformer 整体架构	6
3.2	位置编码	8
4	注意力机制详解	9
4.1	注意力机制的基本原理	9
4.1.1	为什么需要注意力机制?	9
4.1.2	注意力机制的直观理解	9
4.1.3	缩放点积注意力的数学原理	10
4.2	自注意力机制 (Self-Attention)	13
4.2.1	自注意力的定义	13
4.2.2	自注意力的计算过程	14
4.2.3	自注意力的优势	14
4.3	多头注意力机制 (Multi-Head Attention)	17

4.3.1	为什么需要多头注意力?	17
4.3.2	多头注意力的数学原理	17
4.3.3	如何实现多头注意力?	19
4.3.4	多头注意力的维度变换可视化	24
4.3.5	多头注意力的优势和应用	25
5	完整的 Transformer 实现	26
6	训练与推理基础	28
6.1	训练流程	28
6.2	推理流程	29
7	总结	30

II 第二部分：高级技术与应用 30

8	预训练与微调	30
8.1	预训练目标	30
8.2	Few-shot Learning	32
8.3	微调策略	32
9	提示工程	34
9.1	提示设计原则	34
9.2	Chain-of-Thought (CoT)	34
9.3	Few-shot Prompting	35
10	检索增强生成 (RAG)	36
10.1	RAG 架构	36
10.2	RAG 的优势	38
11	代码生成与程序理解	38
11.1	代码生成	38
11.2	程序理解	39
12	常用大模型介绍	40
12.1	GPT 系列	40

12.2 BERT 系列	40
12.3 其他重要模型	41
13 模型评估与测试	41
13.1 评估指标	41
14 训练到部署全流程	42
14.1 数据准备	42
14.2 模型训练	42
14.3 模型部署	44
15 应用场景	45
15.1 文本生成	45
15.2 知识问答	45
15.3 代码助手	45
16 未来发展方向	45
16.1 多模态交互	45
16.2 智能助手	45
16.3 Agent 应用	46
17 作业与练习	46
17.1 概念题	46
17.2 编程题	47
17.3 综合项目	47

1 引言

大语言模型（Large Language Model, LLM）是基于深度学习的自然语言处理模型，通过在大规模文本数据上预训练，学习语言的统计规律和语义表示，展现出强大的语言理解和生成能力。从 GPT 系列到 BERT，从 Transformer 架构到注意力机制，大语言模型已经成为人工智能领域最活跃的研究方向之一。

大语言模型的核心优势：

- **零样本学习能力：**无需针对特定任务进行训练，即可完成多种任务
- **通用性：**同一个模型可以应用于多种不同的 NLP 任务
- **自然语言理解：**能够理解复杂的语义关系和上下文
- **上下文学习：**通过 few-shot 或 in-context learning 快速适应新任务
- **可扩展性：**模型规模越大，性能通常越好

大语言模型面临的挑战：

- **准确性：**可能产生错误或虚假信息（幻觉问题）
- **实时性：**推理速度可能较慢，难以满足实时应用需求
- **成本：**训练和部署成本高昂，需要大量计算资源
- **数据隐私：**训练数据可能包含敏感信息
- **可解释性：**模型决策过程缺乏可解释性
- **偏见和公平性：**可能学习并放大训练数据中的偏见

本文档分为两部分：第一部分介绍与深度学习、机器学习结合较紧密的基础内容，包括 PyTorch 框架、Transformer 架构、注意力机制等；第二部分介绍较独立和先进的知识与技术，包括预训练与微调、提示工程、RAG、代码生成等。

Part I

第一部分：基础概念与框架

2 PyTorch 基础框架

PyTorch 是 Facebook 开发的深度学习框架，以其动态计算图和易用性成为大语言模型开发的首选工具。

2.1 PyTorch 核心概念

张量 (Tensor): PyTorch 的基本数据结构，类似于 NumPy 数组，但支持 GPU 加速。

```
import torch

# 创建张量
x = torch.tensor([1, 2, 3])      # 一维张量
y = torch.randn(3, 4)            # 3x4 随机张量
z = torch.zeros(2, 3)            # 2x3 零张量

# 张量运算
a = torch.tensor([[1, 2], [3, 4]])
b = torch.tensor([[5, 6], [7, 8]])
c = torch.matmul(a, b)          # 矩阵乘法
d = a + b                      # 逐元素加法

# GPU 支持
device = torch.device('cuda' if torch.cuda.is_available() else 'cpu')
x_gpu = x.to(device)
```

Listing 1: PyTorch 张量基础操作

自动微分 (Autograd): PyTorch 的自动微分系统，用于计算梯度。

```
import torch

x = torch.tensor(2.0, requires_grad=True)
y = x ** 2 + 3 * x + 1
y.backward()    # 反向传播
```

```
print(x.grad) # 输出: tensor(7.) = 2*x + 3 (在 x=2 处)
```

Listing 2: 自动微分示例

神经网络模块 (nn.Module): PyTorch 中定义神经网络的基础类。

```
import torch
import torch.nn as nn

class SimpleNet(nn.Module):
    def __init__(self, input_size, hidden_size, output_size):
        super(SimpleNet, self).__init__()
        self.fc1 = nn.Linear(input_size, hidden_size)
        self.relu = nn.ReLU()
        self.fc2 = nn.Linear(hidden_size, output_size)

    def forward(self, x):
        x = self.fc1(x)
        x = self.relu(x)
        x = self.fc2(x)
        return x

# 使用模型
model = SimpleNet(784, 128, 10)
x = torch.randn(32, 784) # 批量大小 32
output = model(x)
```

Listing 3: 简单的神经网络定义

2.2 PyTorch 常用 API

nn.Linear: 全连接层

```
linear = nn.Linear(in_features=768, out_features=3072)
# 输入: (batch_size, 768)
# 输出: (batch_size, 3072)
```

nn.Embedding: 词嵌入层

```
embedding = nn.Embedding(num_embeddings=50000, embedding_dim=768)
```

```
# 输入: (batch_size, seq_len) - 整数索引  
# 输出: (batch_size, seq_len, 768) - 嵌入向量
```

nn.LayerNorm: 层归一化

```
layer_norm = nn.LayerNorm(normalized_shape=768)  
# 输入: (batch_size, seq_len, 768)  
# 输出: (batch_size, seq_len, 768)
```

nn.Dropout: Dropout 层

```
dropout = nn.Dropout(p=0.1)  
# 训练时随机丢弃 10% 的神经元  
# 测试时所有神经元都参与计算
```

nn.MultiheadAttention: 多头注意力 (PyTorch 内置实现)

```
attention = nn.MultiheadAttention(  
    embed_dim=768,  
    num_heads=12,  
    dropout=0.1,  
    batch_first=True  
)  
# query, key, value: (batch_size, seq_len, 768)  
# output: (batch_size, seq_len, 768)  
# attn_weights: (batch_size, seq_len, seq_len)
```

3 Transformer 架构基础

Transformer 是 Vaswani 等人在 2017 年提出的完全基于注意力机制的架构，成为现代大语言模型的基础。

3.1 Transformer 整体架构

Transformer 由编码器 (Encoder) 和解码器 (Decoder) 组成：

编码器: N 个相同的层堆叠，每层包含：

- 多头自注意力子层
- 前馈神经网络子层
- 残差连接和层归一化

解码器: N 个相同的层堆叠, 每层包含:

- 掩码多头自注意力子层 (防止看到未来信息)
- 编码器-解码器注意力子层
- 前馈神经网络子层
- 残差连接和层归一化

```
import torch
import torch.nn as nn
import math

class TransformerEncoderLayer(nn.Module):
    def __init__(self, d_model, nhead, dim_feedforward, dropout=0.1):
        super().__init__()
        self.self_attn = nn.MultiheadAttention(
            d_model, nhead, dropout=dropout, batch_first=True
        )
        self.linear1 = nn.Linear(d_model, dim_feedforward)
        self.dropout = nn.Dropout(dropout)
        self.linear2 = nn.Linear(dim_feedforward, d_model)
        self.norm1 = nn.LayerNorm(d_model)
        self.norm2 = nn.LayerNorm(d_model)
        self.dropout1 = nn.Dropout(dropout)
        self.dropout2 = nn.Dropout(dropout)

    def forward(self, src, src_mask=None):
        # 自注意力
        src2 = self.self_attn(src, src, src, attn_mask=src_mask)[0]
        src = src + self.dropout1(src2)
        src = self.norm1(src)

        # 前馈网络
        src2 = self.linear2(self.dropout(torch.relu(self.linear1(src)))))


```

```

src = src + self.dropout2(src2)
src = self.norm2(src)

return src

```

Listing 4: Transformer 编码器层实现

3.2 位置编码

由于 Transformer 没有循环结构，需要显式编码位置信息。

定义 3.1 (位置编码). 对于位置 pos 和维度 i , 位置编码定义为:

$$PE_{(pos,2i)} = \sin\left(\frac{pos}{10000^{2i/d_{model}}}\right) \quad (1)$$

$$PE_{(pos,2i+1)} = \cos\left(\frac{pos}{10000^{2i/d_{model}}}\right) \quad (2)$$

其中, d_{model} 是模型维度。

```

import torch
import torch.nn as nn
import math

class PositionalEncoding(nn.Module):
    def __init__(self, d_model, max_len=5000):
        super().__init__()

        pe = torch.zeros(max_len, d_model)
        position = torch.arange(0, max_len, dtype=torch.float).unsqueeze
        (1)
        div_term = torch.exp(torch.arange(0, d_model, 2).float() *
                            (-math.log(10000.0) / d_model))
        pe[:, 0::2] = torch.sin(position * div_term)
        pe[:, 1::2] = torch.cos(position * div_term)
        pe = pe.unsqueeze(0) # (1, max_len, d_model)
        self.register_buffer('pe', pe)

    def forward(self, x):
        # x: (batch_size, seq_len, d_model)
        x = x + self.pe[:, :x.size(1), :]

```

```
    return x
```

Listing 5: 位置编码实现

4 注意力机制详解

注意力机制（Attention Mechanism）是 Transformer 的核心创新，它允许模型在处理序列时动态关注不同位置的信息，解决了传统 RNN 无法并行计算和长距离依赖建模困难的问题。

4.1 注意力机制的基本原理

4.1.1 为什么需要注意力机制？

传统序列模型的局限性：

- **RNN 的问题**: 需要顺序计算，无法并行；长距离依赖建模困难；梯度消失/爆炸
- **CNN 的问题**: 感受野有限，需要多层才能捕获长距离依赖
- **解决方案**: 注意力机制可以直接建模任意距离的依赖关系，且支持并行计算

4.1.2 注意力机制的直观理解

类比：信息检索系统

想象你在图书馆查找资料：

- **查询 (Query, Q)**: 你提出的问题或需求（“我想找什么信息”）
- **键 (Key, K)**: 每本书的索引标签（“我提供什么信息”）
- **值 (Value, V)**: 书中的实际内容（“实际的信息内容”）
- **注意力权重**: 通过比较你的问题 (Q) 和书的索引 (K)，决定哪些书最相关，然后从这些书 (V) 中提取信息

在神经网络中的应用：

- 每个位置都可以“查询”其他位置的信息
- 通过计算查询和键的相似度，得到注意力权重
- 使用注意力权重对值进行加权求和，得到该位置的输出

4.1.3 缩放点积注意力的数学原理

定义 4.1 (缩放点积注意力 (Scaled Dot-Product Attention)). 给定查询矩阵 $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{n \times d_k}$ 、键矩阵 $\mathbf{K} \in \mathbb{R}^{m \times d_k}$ 和值矩阵 $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{m \times d_v}$, 缩放点积注意力计算为:

$$\text{Attention}(\mathbf{Q}, \mathbf{K}, \mathbf{V}) = \text{softmax}\left(\frac{\mathbf{Q}\mathbf{K}^T}{\sqrt{d_k}}\right)\mathbf{V} \quad (3)$$

其中, n 是查询序列长度, m 是键值序列长度, d_k 是键的维度, $\sqrt{d_k}$ 是缩放因子。

计算步骤详解:

步骤 1: 计算注意力分数 (Attention Scores)

对于每个查询向量 \mathbf{q}_i 和键向量 \mathbf{k}_j , 计算点积:

$$s_{ij} = \mathbf{q}_i \cdot \mathbf{k}_j = \mathbf{q}_i^T \mathbf{k}_j \quad (4)$$

矩阵形式:

$$\mathbf{S} = \mathbf{Q}\mathbf{K}^T \in \mathbb{R}^{n \times m} \quad (5)$$

其中, S_{ij} 表示第 i 个查询对第 j 个键的注意力分数。

步骤 2: 缩放 (Scaling)

为了防止点积值过大导致 softmax 梯度消失, 除以 $\sqrt{d_k}$:

$$\mathbf{S}_{scaled} = \frac{\mathbf{Q}\mathbf{K}^T}{\sqrt{d_k}} \quad (6)$$

为什么需要缩放?

当 d_k 很大时, 点积的值会很大, 导致 softmax 函数进入饱和区域 (梯度接近 0)。缩放因子 $\sqrt{d_k}$ 使得点积的方差保持为 1, 假设 \mathbf{Q} 和 \mathbf{K} 的元素独立且均值为 0、方差为 1。

步骤 3: Softmax 归一化

将注意力分数转换为概率分布:

$$\alpha_{ij} = \frac{\exp(s_{ij}/\sqrt{d_k})}{\sum_{k=1}^m \exp(s_{ik}/\sqrt{d_k})} \quad (7)$$

矩阵形式:

$$\mathbf{A} = \text{softmax}\left(\frac{\mathbf{Q}\mathbf{K}^T}{\sqrt{d_k}}\right) \in \mathbb{R}^{n \times m} \quad (8)$$

其中, α_{ij} 表示第 i 个查询对第 j 个键的注意力权重, 满足 $\sum_{j=1}^m \alpha_{ij} = 1$ 。

步骤 4: 加权求和

使用注意力权重对值进行加权求和：

$$\mathbf{z}_i = \sum_{j=1}^m \alpha_{ij} \mathbf{v}_j \quad (9)$$

矩阵形式：

$$\text{Attention}(\mathbf{Q}, \mathbf{K}, \mathbf{V}) = \mathbf{AV} \in \mathbb{R}^{n \times d_v} \quad (10)$$

完整的数学表达式：

$$\text{Attention}(\mathbf{Q}, \mathbf{K}, \mathbf{V}) = \text{softmax} \left(\frac{\mathbf{Q}\mathbf{K}^T}{\sqrt{d_k}} \right) \mathbf{V} \quad (11)$$

$$= \left[\frac{\exp(\mathbf{Q}\mathbf{K}^T / \sqrt{d_k})}{\mathbf{1}_m^T \exp(\mathbf{Q}\mathbf{K}^T / \sqrt{d_k})} \right] \mathbf{V} \quad (12)$$

其中， $\mathbf{1}_m$ 是全 1 向量，分母是逐行的归一化因子。

```

import torch
import torch.nn as nn
import torch.nn.functional as F
import math

def scaled_dot_product_attention(Q, K, V, mask=None):
    """
    缩放点积注意力实现

    参数：
        Q: 查询矩阵 (batch_size, seq_len_q, d_k)
        K: 键矩阵 (batch_size, seq_len_k, d_k)
        V: 值矩阵 (batch_size, seq_len_v, d_v)
        mask: 掩码矩阵 (batch_size, seq_len_q, seq_len_k) 或 None
            - mask[i,j] = 1 表示允许注意力
            - mask[i,j] = 0 表示禁止注意力 (会被设为 -inf)

    返回：
        output: 注意力输出 (batch_size, seq_len_q, d_v)
        attn_weights: 注意力权重 (batch_size, seq_len_q, seq_len_k)
    """
    d_k = Q.size(-1) # 获取键的维度

    # 步骤1：计算注意力分数 QK^T

```

```
# Q: (batch_size, seq_len_q, d_k)
# K: (batch_size, seq_len_k, d_k)
# scores: (batch_size, seq_len_q, seq_len_k)
scores = torch.matmul(Q, K.transpose(-2, -1))

# 步骤2: 缩放, 除以 sqrt(d_k)
# 防止点积值过大, 避免 softmax 梯度消失
scores = scores / math.sqrt(d_k)

# 步骤3: 应用掩码 (如果有)
# 将掩码为0的位置设为很大的负数, softmax后接近0
if mask is not None:
    scores = scores.masked_fill(mask == 0, -1e9)

# 步骤4: Softmax 归一化, 得到注意力权重
# attn_weights[i,j] 表示第i个查询对第j个键的注意力权重
attn_weights = F.softmax(scores, dim=-1)

# 步骤5: 加权求和, 使用注意力权重对值进行加权
# attn_weights: (batch_size, seq_len_q, seq_len_k)
# V: (batch_size, seq_len_k, d_v)
# output: (batch_size, seq_len_q, d_v)
output = torch.matmul(attn_weights, V)

return output, attn_weights

# 使用示例
batch_size = 2
seq_len_q = 5 # 查询序列长度
seq_len_k = 5 # 键值序列长度
d_k = 64 # 键的维度
d_v = 64 # 值的维度

Q = torch.randn(batch_size, seq_len_q, d_k)
K = torch.randn(batch_size, seq_len_k, d_k)
V = torch.randn(batch_size, seq_len_k, d_v)

# 计算注意力
output, attn_weights = scaled_dot_product_attention(Q, K, V)
```

```

print(f"输入 Q 形状: {Q.shape}")
print(f"输入 K 形状: {K.shape}")
print(f"输入 V 形状: {V.shape}")
print(f"输出形状: {output.shape}")
print(f"注意力权重形状: {attn_weights.shape}")
print(f"注意力权重每行和: {attn_weights.sum(dim=-1)}") # 应该接近1

```

Listing 6: 缩放点积注意力详细实现（带注释）

时间复杂度分析:

对于序列长度 n 和维度 d :

- 计算 $\mathbf{Q}\mathbf{K}^T$: $O(n^2 \cdot d)$
- Softmax: $O(n^2)$
- 加权求和 \mathbf{AV} : $O(n^2 \cdot d)$
- 总复杂度: $O(n^2 \cdot d)$

注意：注意力机制的复杂度是序列长度的平方，这是 Transformer 的主要计算瓶颈。

4.2 自注意力机制 (Self-Attention)

4.2.1 自注意力的定义

自注意力 (Self-Attention) 是查询、键和值都来自同一输入序列的注意力机制。也就是说，序列中的每个位置都可以“查询”序列中所有位置（包括自己）的信息。

定义 4.2 (自注意力). 对于输入序列 $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times d}$ ，自注意力计算为：

$$\mathbf{Z} = \text{Attention}(\mathbf{XW}_Q, \mathbf{XW}_K, \mathbf{XW}_V) \quad (13)$$

其中：

- $\mathbf{W}_Q \in \mathbb{R}^{d \times d_k}$: 查询投影矩阵
- $\mathbf{W}_K \in \mathbb{R}^{d \times d_k}$: 键投影矩阵
- $\mathbf{W}_V \in \mathbb{R}^{d \times d_v}$: 值投影矩阵
- $\mathbf{Z} \in \mathbb{R}^{n \times d_v}$: 自注意力输出

4.2.2 自注意力的计算过程

步骤详解：

步骤 1：生成 Q、K、V

对于输入序列 $\mathbf{X} = [\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n]^T$ ：

$$\mathbf{Q} = \mathbf{XW}_Q = [\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_n]^T \quad (14)$$

$$\mathbf{K} = \mathbf{XW}_K = [\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \dots, \mathbf{k}_n]^T \quad (15)$$

$$\mathbf{V} = \mathbf{XW}_V = [\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n]^T \quad (16)$$

步骤 2：计算注意力权重

对于位置 i ，计算它对所有位置的注意力权重：

$$\alpha_{ij} = \frac{\exp(\mathbf{q}_i^T \mathbf{k}_j / \sqrt{d_k})}{\sum_{k=1}^n \exp(\mathbf{q}_i^T \mathbf{k}_k / \sqrt{d_k})} \quad (17)$$

步骤 3：加权求和

位置 i 的输出是所有位置的值的加权和：

$$\mathbf{z}_i = \sum_{j=1}^n \alpha_{ij} \mathbf{v}_j \quad (18)$$

矩阵形式：

$$\mathbf{Z} = \text{softmax} \left(\frac{\mathbf{XW}_Q (\mathbf{XW}_K)^T}{\sqrt{d_k}} \right) \mathbf{XW}_V \quad (19)$$

4.2.3 自注意力的优势

1. 并行计算：

- 所有位置的 Q、K、V 可以并行计算
- 所有位置的注意力输出可以并行计算
- 时间复杂度： $O(n^2 \cdot d)$ ，但可以完全并行
- 相比 RNN 的 $O(n \cdot d^2)$ 顺序计算，虽然复杂度更高，但并行度更高

2. 长距离依赖：

- 可以直接建模任意距离的依赖关系

- 不需要像 RNN 那样通过多步传播
- 不需要像 CNN 那样通过多层堆叠

3. 可解释性:

- 注意力权重 α_{ij} 可以可视化
- 可以看到模型在关注哪些位置
- 有助于理解模型的决策过程

```

import torch
import torch.nn as nn
import torch.nn.functional as F
import math

class SelfAttention(nn.Module):
    """
    自注意力模块

    参数：
        d_model: 输入和输出的维度
        d_k: 键和查询的维度（默认等于 d_model）
        d_v: 值的维度（默认等于 d_model）

    def __init__(self, d_model, d_k=None, d_v=None):
        super().__init__()
        if d_k is None:
            d_k = d_model
        if d_v is None:
            d_v = d_model

        # 定义三个线性投影层
        # 将输入 x 投影到 Q、K、V 空间
        self.W_q = nn.Linear(d_model, d_k)  # 查询投影
        self.W_k = nn.Linear(d_model, d_k)  # 键投影
        self.W_v = nn.Linear(d_model, d_v)  # 值投影
        self.d_k = d_k

    def forward(self, x, mask=None):

```

```
"""
```

前向传播

参数：

```
x: 输入序列 (batch_size, seq_len, d_model)  
mask: 掩码矩阵 (batch_size, seq_len, seq_len) 或 None
```

返回：

```
output: 自注意力输出 (batch_size, seq_len, d_v)  
attn_weights: 注意力权重 (batch_size, seq_len, seq_len)
```

```
"""
```

```
batch_size, seq_len, d_model = x.size()
```

```
# 步骤1：通过线性投影生成 Q、K、V
```

```
# 所有位置共享相同的投影矩阵
```

```
Q = self.W_q(x) # (batch_size, seq_len, d_k)
```

```
K = self.W_k(x) # (batch_size, seq_len, d_k)
```

```
V = self.W_v(x) # (batch_size, seq_len, d_v)
```

```
# 步骤2：计算缩放点积注意力
```

```
output, attn_weights = scaled_dot_product_attention(Q, K, V, mask  
)
```

```
return output, attn_weights
```

```
# 使用示例
```

```
d_model = 512
```

```
seq_len = 10
```

```
batch_size = 2
```

```
# 创建自注意力模块
```

```
self_attn = SelfAttention(d_model=d_model)
```

```
# 创建输入（随机初始化）
```

```
x = torch.randn(batch_size, seq_len, d_model)
```

```
# 前向传播
```

```
output, attn_weights = self_attn(x)
```

```
print(f"输入形状: {x.shape}")
```

```

print(f"输出形状: {output.shape}")
print(f"注意力权重形状: {attn_weights.shape}")
print(f"注意力权重示例 (第一个样本, 第一个位置) :")
print(attn_weights[0, 0, :]) # 第一个样本, 第一个位置对所有位置的注意力
print(f"注意力权重和: {attn_weights[0, 0, :].sum()}"") # 应该接近1

```

Listing 7: 自注意力详细实现 (带注释)

4.3 多头注意力机制 (Multi-Head Attention)

4.3.1 为什么需要多头注意力?

单头注意力的局限性:

- 只有一个注意力头, 只能学习一种类型的依赖关系
- 表达能力有限, 难以同时捕获多种语义关系
- 例如: 语法关系、语义关系、位置关系等

多头注意力的优势:

- **多视角学习:** 不同头可以关注不同的关系类型
- **表达能力增强:** 通过多个子空间学习, 增强模型表达能力
- **并行计算:** 多个头可以并行计算, 提高效率
- **专业化:** 不同头可以学习不同的模式 (如语法、语义、位置等)

4.3.2 多头注意力的数学原理

定义 4.3 (多头注意力). 多头注意力使用 h 个注意力头并行计算, 每个头在不同的表示子空间中学习:

$$\text{MultiHead}(\mathbf{Q}, \mathbf{K}, \mathbf{V}) = \text{Concat}(\text{head}_1, \dots, \text{head}_h) \mathbf{W}^O \quad (20)$$

$$\text{head}_i = \text{Attention}(\mathbf{Q}\mathbf{W}_i^Q, \mathbf{K}\mathbf{W}_i^K, \mathbf{V}\mathbf{W}_i^V) \quad (21)$$

其中:

- h 是注意力头的数量（通常取 8、12、16 等）
- $\mathbf{W}_i^Q \in \mathbb{R}^{d_{model} \times d_k}$: 第 i 个头的查询投影矩阵
- $\mathbf{W}_i^K \in \mathbb{R}^{d_{model} \times d_k}$: 第 i 个头的键投影矩阵
- $\mathbf{W}_i^V \in \mathbb{R}^{d_{model} \times d_v}$: 第 i 个头的值投影矩阵
- $\mathbf{W}^O \in \mathbb{R}^{h \cdot d_v \times d_{model}}$: 输出投影矩阵
- $d_k = d_v = d_{model}/h$: 每个头的维度

维度关系:

假设 $d_{model} = 512$, $h = 8$:

- 每个头的维度: $d_k = d_v = 512/8 = 64$
- 所有头拼接后: $h \cdot d_v = 8 \times 64 = 512$
- 输出投影后: 512×512 , 保持维度不变

计算过程详解:

步骤 1: 为每个头生成 \mathbf{Q} 、 \mathbf{K} 、 \mathbf{V}

对于输入 $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times d_{model}}$, 首先通过共享的线性投影:

$$\mathbf{Q} = \mathbf{X}\mathbf{W}_Q \in \mathbb{R}^{n \times d_{model}} \quad (22)$$

$$\mathbf{K} = \mathbf{X}\mathbf{W}_K \in \mathbb{R}^{n \times d_{model}} \quad (23)$$

$$\mathbf{V} = \mathbf{X}\mathbf{W}_V \in \mathbb{R}^{n \times d_{model}} \quad (24)$$

然后将 \mathbf{Q} 、 \mathbf{K} 、 \mathbf{V} 重塑并分割为 h 个头:

$$\mathbf{Q} \rightarrow [\mathbf{Q}_1, \mathbf{Q}_2, \dots, \mathbf{Q}_h], \quad \mathbf{Q}_i \in \mathbb{R}^{n \times d_k} \quad (25)$$

$$\mathbf{K} \rightarrow [\mathbf{K}_1, \mathbf{K}_2, \dots, \mathbf{K}_h], \quad \mathbf{K}_i \in \mathbb{R}^{n \times d_k} \quad (26)$$

$$\mathbf{V} \rightarrow [\mathbf{V}_1, \mathbf{V}_2, \dots, \mathbf{V}_h], \quad \mathbf{V}_i \in \mathbb{R}^{n \times d_v} \quad (27)$$

步骤 2: 每个头独立计算注意力

对于第 i 个头:

$$\text{head}_i = \text{Attention}(\mathbf{Q}_i, \mathbf{K}_i, \mathbf{V}_i) \in \mathbb{R}^{n \times d_v} \quad (28)$$

步骤 3: 拼接所有头

$$\text{Concat}(\text{head}_1, \dots, \text{head}_h) \in \mathbb{R}^{n \times (h \cdot d_v)} = \mathbb{R}^{n \times d_{model}} \quad (29)$$

步骤 4：输出投影

$$\text{MultiHead}(\mathbf{Q}, \mathbf{K}, \mathbf{V}) = \text{Concat}(\text{head}_1, \dots, \text{head}_h) \mathbf{W}^O \in \mathbb{R}^{n \times d_{model}} \quad (30)$$

4.3.3 如何实现多头注意力？

实现策略：

有两种实现多头注意力的方式：

方式 1：为每个头单独定义投影矩阵（理论方式，不常用）

- 为每个头定义独立的 \mathbf{W}_i^Q 、 \mathbf{W}_i^K 、 \mathbf{W}_i^V
- 参数量： $h \times (d_{model} \times d_k + d_{model} \times d_k + d_{model} \times d_v)$
- 优点：每个头完全独立
- 缺点：参数量大，实现复杂

方式 2：共享投影矩阵，然后分割（实际使用的方式）

- 使用共享的 \mathbf{W}_Q 、 \mathbf{W}_K 、 \mathbf{W}_V 投影到 d_{model} 维
- 然后将结果重塑并分割为 h 个头
- 参数量： $d_{model} \times d_{model} \times 3 + d_{model} \times d_{model}$ （更少）
- 优点：参数量少，实现简单，效果相同

维度变换详解：

假设 $d_{model} = 512$, $h = 8$, $d_k = d_v = 64$, 序列长度 $n = 10$:

步骤 1：共享线性投影

$$\mathbf{Q} = \mathbf{X} \mathbf{W}_Q \in \mathbb{R}^{10 \times 512} \quad (31)$$

$$\mathbf{K} = \mathbf{X} \mathbf{W}_K \in \mathbb{R}^{10 \times 512} \quad (32)$$

$$\mathbf{V} = \mathbf{X} \mathbf{W}_V \in \mathbb{R}^{10 \times 512} \quad (33)$$

步骤 2：重塑为多头形式

将 \mathbf{Q} 重塑为 (n, h, d_k) :

$$\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{10 \times 512} \rightarrow \mathbf{Q}' \in \mathbb{R}^{10 \times 8 \times 64} \quad (34)$$

然后转置为 (h, n, d_k) 以便并行计算:

$$\mathbf{Q}' \in \mathbb{R}^{10 \times 8 \times 64} \rightarrow \mathbf{Q}'' \in \mathbb{R}^{8 \times 10 \times 64} \quad (35)$$

这样, $\mathbf{Q}''[i]$ 就是第 i 个头的查询矩阵 $\mathbf{Q}_i \in \mathbb{R}^{10 \times 64}$ 。

步骤 3: 并行计算所有头的注意力

对于每个头 i :

$$\text{head}_i = \text{Attention}(\mathbf{Q}_i, \mathbf{K}_i, \mathbf{V}_i) \in \mathbb{R}^{10 \times 64} \quad (36)$$

所有头的结果: $\text{head}_1, \text{head}_2, \dots, \text{head}_8$, 每个都是 $\mathbb{R}^{10 \times 64}$ 。

步骤 4: 拼接所有头

将 h 个头的结果拼接:

$$\text{Concat}(\text{head}_1, \dots, \text{head}_8) \in \mathbb{R}^{10 \times 512} \quad (37)$$

步骤 5: 输出投影

$$\text{output} = \text{Concat}(\text{head}_1, \dots, \text{head}_8) \mathbf{W}^O \in \mathbb{R}^{10 \times 512} \quad (38)$$

```

import torch
import torch.nn as nn
import torch.nn.functional as F
import math

class MultiHeadAttention(nn.Module):
    """
    多头注意力模块

    参数:
        d_model: 模型维度（输入和输出的维度）
        num_heads: 注意力头的数量
    """

    def __init__(self, d_model, num_heads):
        super().__init__()
        # 确保 d_model 可以被 num_heads 整除

```

```

    assert d_model % num_heads == 0, "d_model 必须能被 num_heads 整除
"

self.d_model = d_model      # 模型维度, 如 512
self.num_heads = num_heads  # 注意力头数量, 如 8
self.d_k = d_model // num_heads  # 每个头的维度, 如 512 // 8 = 64

# 步骤1: 定义共享的线性投影层
# 这些投影层将输入投影到 d_model 维, 然后会被分割为多个头
self.W_q = nn.Linear(d_model, d_model)  # 查询投影
self.W_k = nn.Linear(d_model, d_model)  # 键投影
self.W_v = nn.Linear(d_model, d_model)  # 值投影

# 输出投影层, 将拼接后的多头结果投影回 d_model 维
self.W_o = nn.Linear(d_model, d_model)

def forward(self, Q, K, V, mask=None):
    """
    前向传播
    """

参数:
    Q: 查询矩阵 (batch_size, seq_len_q, d_model)
    K: 键矩阵 (batch_size, seq_len_k, d_model)
    V: 值矩阵 (batch_size, seq_len_v, d_model)
    mask: 掩码矩阵 (batch_size, seq_len_q, seq_len_k) 或 None

返回:
    output: 多头注意力输出 (batch_size, seq_len_q, d_model)
    attn_weights: 注意力权重 (batch_size, num_heads, seq_len_q,
seq_len_k)
    """

batch_size = Q.size(0)
seq_len_q = Q.size(1)
seq_len_k = K.size(1)

# ===== 步骤1: 共享线性投影 =====
# 将 Q、K、V 投影到 d_model 维
# Q_proj: (batch_size, seq_len_q, d_model)
# K_proj: (batch_size, seq_len_k, d_model)
# V_proj: (batch_size, seq_len_v, d_model)

```

```

Q_proj = self.W_q(Q)
K_proj = self.W_k(K)
V_proj = self.W_v(V)

# ===== 步骤2: 重塑为多头形式 =====
# 将 d_model 维分割为 num_heads 个头, 每个头 d_k 维
#
# 例如: d_model=512, num_heads=8, d_k=64
# Q_proj: (batch_size, seq_len_q, 512)
#   -> view: (batch_size, seq_len_q, 8, 64)
#   -> transpose(1,2): (batch_size, 8, seq_len_q, 64)
#
# 这样 Q_multi[i] 就是第 i 个头的查询矩阵
Q_multi = Q_proj.view(batch_size, seq_len_q, self.num_heads, self.d_k).transpose(1, 2)
K_multi = K_proj.view(batch_size, seq_len_k, self.num_heads, self.d_k).transpose(1, 2)
V_multi = V_proj.view(batch_size, seq_len_k, self.num_heads, self.d_k).transpose(1, 2)

# Q_multi: (batch_size, num_heads, seq_len_q, d_k)
# K_multi: (batch_size, num_heads, seq_len_k, d_k)
# V_multi: (batch_size, num_heads, seq_len_k, d_k)

# ===== 步骤3: 并行计算所有头的注意力 =====
# 使用批量矩阵乘法, 同时计算所有头的注意力
#
# 计算注意力分数: QK^T
# Q_multi: (batch_size, num_heads, seq_len_q, d_k)
# K_multi: (batch_size, num_heads, seq_len_k, d_k)
# scores: (batch_size, num_heads, seq_len_q, seq_len_k)
scores = torch.matmul(Q_multi, K_multi.transpose(-2, -1)) / math.sqrt(self.d_k)

# 应用掩码 (如果有)
if mask is not None:
    # mask: (batch_size, seq_len_q, seq_len_k)
    # 需要扩展维度以匹配 scores 的形状
    mask = mask.unsqueeze(1) # (batch_size, 1, seq_len_q,
seq_len_k)
    scores = scores.masked_fill(mask == 0, -1e9)

```

```
# Softmax 归一化，得到注意力权重
attn_weights = F.softmax(scores, dim=-1)
# attn_weights: (batch_size, num_heads, seq_len_q, seq_len_k)

# 加权求和：注意力权重 × 值
# attn_weights: (batch_size, num_heads, seq_len_q, seq_len_k)
# V_multi: (batch_size, num_heads, seq_len_k, d_k)
# attn_output: (batch_size, num_heads, seq_len_q, d_k)
attn_output = torch.matmul(attn_weights, V_multi)

# ===== 步骤4：拼接所有头 =====
# 将多个头的结果拼接在一起
#
# attn_output: (batch_size, num_heads, seq_len_q, d_k)
# -> transpose(1,2): (batch_size, seq_len_q, num_heads, d_k)
# -> contiguous().view: (batch_size, seq_len_q, num_heads * d_k
)
#     = (batch_size, seq_len_q, d_model)
attn_output = attn_output.transpose(1, 2).contiguous().view(
    batch_size, seq_len_q, self.d_model
)
# attn_output: (batch_size, seq_len_q, d_model)

# ===== 步骤5：输出投影 =====
# 将拼接后的结果投影回 d_model 维
output = self.W_o(attn_output)
# output: (batch_size, seq_len_q, d_model)

return output, attn_weights

# ===== 使用示例 =====
d_model = 512
num_heads = 8
seq_len = 10
batch_size = 2

# 创建多头注意力模块
multi_head_attn = MultiHeadAttention(d_model=d_model, num_heads=num_heads
)
```

```

# 创建输入 (Q、K、V 可以相同，也可以不同)
Q = torch.randn(batch_size, seq_len, d_model)
K = torch.randn(batch_size, seq_len, d_model)
V = torch.randn(batch_size, seq_len, d_model)

# 前向传播
output, attn_weights = multi_head_attn(Q, K, V)

print(f"输入 Q 形状: {Q.shape}")
print(f"输入 K 形状: {K.shape}")
print(f"输入 V 形状: {V.shape}")
print(f"输出形状: {output.shape}")
print(f"注意力权重形状: {attn_weights.shape} # (batch_size, num_heads,
    seq_len, seq_len)
print(f"每个头的维度 d_k: {multi_head_attn.d_k}")
print(f"注意力权重示例 (第一个样本, 第一个头, 第一个位置) :")
print(attn_weights[0, 0, 0, :]) # 第一个样本, 第一个头, 第一个位置对所有
    位置的注意力
print(f"注意力权重和: {attn_weights[0, 0, 0, :].sum()}") # 应该接近1

```

Listing 8: 多头注意力详细实现（带完整注释）

4.3.4 多头注意力的维度变换可视化

维度变换流程（以 $d_{model} = 512$, $h = 8$, $d_k = 64$ 为例）：



输出: $(batch, seq, 512)$

关键点:

- **共享投影:** 所有头共享 \mathbf{W}_Q 、 \mathbf{W}_K 、 \mathbf{W}_V ，参数量更少
- **分割策略:** 通过 reshape 和 transpose 将 d_{model} 维分割为 h 个 d_k 维的头
- **并行计算:** 所有头的注意力可以并行计算，提高效率
- **拼接和投影:** 拼接所有头的结果，然后通过 \mathbf{W}^O 投影回原始维度

4.3.5 多头注意力的优势和应用

优势:

1. 多视角学习:

- 不同头可以关注不同的关系类型
- 例如：头 1 关注语法关系，头 2 关注语义关系，头 3 关注位置关系等
- 通过可视化注意力权重可以观察到这种现象

2. 表达能力增强:

- 通过多个子空间学习，增强模型表达能力
- 相当于从多个角度理解输入序列
- 比单头注意力有更强的拟合能力

3. 并行计算:

- 多个头可以完全并行计算
- 时间复杂度: $O(n^2 \cdot d)$ (与单头相同)
- 但可以充分利用 GPU 的并行计算能力

4. 参数量优化:

- 使用共享投影矩阵，参数量为 $O(d_{model}^2)$
- 如果为每个头单独定义投影矩阵，参数量为 $O(h \cdot d_{model}^2)$

- 共享投影既减少了参数量，又保持了表达能力

实际应用中的观察：

研究表明，在训练好的 Transformer 模型中：

- 不同头确实学习到了不同的模式
- 有些头关注局部依赖（相邻位置）
- 有些头关注长距离依赖（远距离位置）
- 有些头关注特定类型的语法或语义关系

头数量的选择：

- 常见配置： $h = 8$ (BERT-base)、 $h = 12$ (BERT-large)、 $h = 16$ (GPT-3)
- 原则： d_{model} 必须能被 h 整除
- 权衡：头数越多，表达能力越强，但计算量也越大
- 经验：通常 $h = 8$ 或 $h = 16$ 效果较好

5 完整的 Transformer 实现

本节提供一个简化的 Transformer 编码器实现，展示如何将各个组件组合起来。

```
import torch
import torch.nn as nn
import math

class TransformerEncoder(nn.Module):
    def __init__(self, vocab_size, d_model=512, nhead=8,
                 num_layers=6, dim_feedforward=2048,
                 max_seq_length=5000, dropout=0.1):
        super().__init__()

        self.d_model = d_model
        self.embedding = nn.Embedding(vocab_size, d_model)
        self.pos_encoding = PositionalEncoding(d_model, max_seq_length)
```

```
encoder_layer = nn.TransformerEncoderLayer(
    d_model=d_model,
    nhead=nhead,
    dim_feedforward=dim_feedforward,
    dropout=dropout,
    batch_first=True
)
self.transformer_encoder = nn.TransformerEncoder(
    encoder_layer, num_layers=num_layers
)

self.dropout = nn.Dropout(dropout)

def forward(self, src, src_mask=None, src_key_padding_mask=None):
    # src: (batch_size, seq_len)
    # 词嵌入
    src = self.embedding(src) * math.sqrt(self.d_model)
    # 位置编码
    src = self.pos_encoding(src)
    src = self.dropout(src)

    # Transformer 编码
    output = self.transformer_encoder(
        src,
        mask=src_mask,
        src_key_padding_mask=src_key_padding_mask
    )

    return output

# 使用示例
model = TransformerEncoder(
    vocab_size=10000,
    d_model=512,
    nhead=8,
    num_layers=6
)

# 输入: (batch_size=32, seq_len=128)
input_ids = torch.randint(0, 10000, (32, 128))
```

```
output = model(input_ids)
# 输出: (32, 128, 512)
```

Listing 9: 完整的 Transformer 编码器

6 训练与推理基础

6.1 训练流程

```
import torch
import torch.nn as nn
from torch.utils.data import DataLoader

# 定义模型
model = TransformerEncoder(vocab_size=10000, d_model=512)
criterion = nn.CrossEntropyLoss()
optimizer = torch.optim.Adam(model.parameters(), lr=0.0001)

# 训练循环
def train_epoch(model, dataloader, criterion, optimizer, device):
    model.train()
    total_loss = 0

    for batch in dataloader:
        input_ids, labels = batch
        input_ids = input_ids.to(device)
        labels = labels.to(device)

        # 前向传播
        outputs = model(input_ids)

        # 计算损失 (假设是语言建模任务)
        # outputs: (batch_size, seq_len, vocab_size)
        # labels: (batch_size, seq_len)
        logits = outputs.view(-1, outputs.size(-1))
        labels_flat = labels.view(-1)
        loss = criterion(logits, labels_flat)
```

```
# 反向传播
optimizer.zero_grad()
loss.backward()
torch.nn.utils.clip_grad_norm_(model.parameters(), max_norm=1.0)
optimizer.step()

total_loss += loss.item()

return total_loss / len(dataloader)
```

Listing 10: Transformer 训练示例

6.2 推理流程

```
def generate_text(model, tokenizer, prompt, max_length=100, temperature=1.0):
    model.eval()
    tokens = tokenizer.encode(prompt)

    with torch.no_grad():
        for _ in range(max_length):
            # 准备输入
            input_ids = torch.tensor([tokens]).to(device)

            # 前向传播
            outputs = model(input_ids)

            # 获取最后一个位置的 logits
            logits = outputs[0, -1, :] / temperature

            # 采样下一个 token
            probs = F.softmax(logits, dim=-1)
            next_token = torch.multinomial(probs, num_samples=1).item()

            tokens.append(next_token)

            # 如果生成了结束符，停止
            if next_token == tokenizer.eos_token_id:
                break
```

```
return tokenizer.decode(tokens)
```

Listing 11: Transformer 推理示例

7 总结

第一部分介绍了大语言模型的基础概念和框架：

- **PyTorch 框架**: 深度学习开发的基础工具
- **Transformer 架构**: 现代 LLM 的核心架构
- **注意力机制**: 包括缩放点积注意力、自注意力和多头注意力
- **位置编码**: 为序列添加位置信息
- **训练与推理**: 基本的模型训练和文本生成流程

这些基础内容是理解和使用大语言模型的前提，与深度学习和机器学习紧密相关。在第二部分中，我们将介绍更高级的技术和应用。

Part II

第二部分：高级技术与应用

8 预训练与微调

预训练是大语言模型的核心，通过在大量无标注文本上学习语言表示，然后通过微调适应特定任务。

8.1 预训练目标

自回归语言建模 (Autoregressive Language Modeling) :

$$\mathcal{L}_{LM} = - \sum_{t=1}^T \log P(x_t | x_{<t}) \quad (39)$$

模型从左到右预测下一个词，GPT 系列使用此目标。

掩码语言建模 (Masked Language Modeling) :

$$\mathcal{L}_{MLM} = - \sum_{i \in M} \log P(x_i | \mathbf{x}_{\setminus M}) \quad (40)$$

随机掩码部分词，预测被掩码的词，BERT 使用此目标。

下一句预测 (Next Sentence Prediction) : 判断两个句子是否连续，BERT 使用此辅助任务。

```

import torch
import torch.nn as nn
import random

def create_masked_lm_predictions(tokens, tokenizer, mlm_probability=0.15):
    """
    创建掩码语言建模的标签
    """
    labels = tokens.clone()
    probability_matrix = torch.full(labels.shape, mlm_probability)

    # 不掩码特殊 token
    special_tokens_mask = torch.tensor([
        tokenizer.get_special_tokens_mask(val, already_has_special_tokens=True)
        for val in labels.tolist()
    ], dtype=torch.bool)
    probability_matrix.masked_fill_(special_tokens_mask, value=0.0)

    # 80% 的时间用 [MASK] 替换
    # 10% 的时间用随机词替换
    # 10% 的时间保持原词
    masked_indices = torch.bernoulli(probability_matrix).bool()
    labels[~masked_indices] = -100  # 只计算被掩码位置的损失

    # 80% 替换为 [MASK]
    indices_replaced = torch.bernoulli(
        torch.full(labels.shape, 0.8)
    ).bool() & masked_indices
    tokens[indices_replaced] = tokenizer.convert_tokens_to_ids('[MASK]')

    # 10% 替换为随机词

```

```
indices_random = torch.bernoulli(
    torch.full(labels.shape, 0.5)
).bool() & masked_indices & ~indices_replaced
random_words = torch.randint(len(tokenizer), labels.shape, dtype=
torch.long)
tokens[indices_random] = random_words[indices_random]

return tokens, labels
```

Listing 12: 掩码语言建模实现

8.2 Few-shot Learning

Few-shot Learning 是指模型只需少量示例就能适应新任务。

In-context Learning: 通过在提示中包含示例，让模型学习任务模式，无需更新参数。

例 8.1 (Few-shot 示例). **任务：**情感分析

提示：

评论：这部电影太棒了！

情感：正面

评论：服务很差，不推荐。

情感：负面

评论：还可以，一般般。

情感：

模型应该输出“中性”。

8.3 微调策略

全参数微调：更新所有模型参数。

参数高效微调 (Parameter-Efficient Fine-tuning)：

- **LoRA (Low-Rank Adaptation)：**只训练低秩矩阵
- **Adapter：**在 Transformer 层中插入小的适配器模块

- Prefix Tuning: 学习可训练的前缀

```
import torch
import torch.nn as nn

class LoRALayer(nn.Module):
    def __init__(self, in_features, out_features, rank=8, alpha=16):
        super().__init__()
        self.rank = rank
        self.alpha = alpha

        # LoRA 矩阵 A 和 B
        self.lora_A = nn.Parameter(torch.randn(in_features, rank))
        self.lora_B = nn.Parameter(torch.zeros(rank, out_features))

        # 原始权重 (冻结)
        self.weight = nn.Parameter(torch.randn(in_features, out_features))
        self.weight.requires_grad = False

    def forward(self, x):
        # 原始输出 + LoRA 调整
        return F.linear(x, self.weight + (self.alpha / self.rank) *
                        torch.matmul(self.lora_B, self.lora_A))

# 应用 LoRA 到线性层
class LoRALinear(nn.Module):
    def __init__(self, linear_layer, rank=8, alpha=16):
        super().__init__()
        self.original = linear_layer
        self.lora = LoRALayer(
            linear_layer.in_features,
            linear_layer.out_features,
            rank,
            alpha
        )

    def forward(self, x):
        return self.original(x) + self.lora(x)
```

Listing 13: LoRA 实现

9 提示工程

提示工程 (Prompt Engineering) 是通过设计有效的提示来引导模型生成期望的输出。

9.1 提示设计原则

1. **明确任务:** 清楚说明要完成的任务
2. **提供示例:** Few-shot 示例帮助模型理解任务
3. **指定格式:** 明确输出格式要求
4. **分解任务:** 将复杂任务分解为子任务

9.2 Chain-of-Thought (CoT)

Chain-of-Thought 通过引导模型逐步推理，提高复杂问题的解决能力。

例 9.1 (Chain-of-Thought 示例). **问题:** 一个商店有 23 个苹果。如果他们卖了 20 个，又买了 6 个，现在有多少个？

标准提示:

Q: 一个商店有 23 个苹果。如果他们卖了 20 个，又买了 6 个，现在有多少个？

A:

Chain-of-Thought 提示:

Q: 一个商店有 23 个苹果。如果他们卖了 20 个，又买了 6 个，现在有多少个？

A: 让我们一步步思考。

商店开始有 23 个苹果。

卖了 20 个后，剩下 $23 - 20 = 3$ 个。

又买了 6 个，现在有 $3 + 6 = 9$ 个。

所以答案是 9。

```

def generate_cot_prompt(question, examples=None):
    """生成 Chain-of-Thought 提示"""
    prompt = "让我们一步步思考并解决这个问题。\\n\\n"

    if examples:
        for ex_q, ex_a in examples:
            prompt += f"问题: {ex_q}\\n"
            prompt += f"解答: {ex_a}\\n\\n"

    prompt += f"问题: {question}\\n"
    prompt += "解答: "
    return prompt

# 使用示例
question = "如果一本书有 300 页，每天读 25 页，需要多少天读完？"
cot_prompt = generate_cot_prompt(question)
# 模型会生成逐步推理过程

```

Listing 14: Chain-of-Thought 实现示例

9.3 Few-shot Prompting

Few-shot Prompting 通过在提示中包含多个示例，让模型学习任务模式。

```

def create_few_shot_prompt(task_description, examples, query):
    """创建 Few-shot 提示"""
    prompt = f"{task_description}\\n\\n"

    for i, (input_ex, output_ex) in enumerate(examples, 1):
        prompt += f"示例 {i}:\\n"
        prompt += f"输入: {input_ex}\\n"
        prompt += f"输出: {output_ex}\\n\\n"

    prompt += f"输入: {query}\\n"
    prompt += "输出: "
    return prompt

# 使用示例：情感分析

```

```

task = "对以下评论进行情感分析，输出'正面'、'负面'或'中性'。"
examples = [
    ("这部电影很棒！", "正面"),
    ("服务很差。", "负面"),
    ("还可以吧。", "中性")
]
query = "这个产品一般般。"
prompt = create_few_shot_prompt(task, examples, query)

```

Listing 15: Few-shot Prompting 实现

10 检索增强生成 (RAG)

RAG (Retrieval-Augmented Generation) 通过检索外部知识库来增强生成，提高准确性和可追溯性。

10.1 RAG 架构

RAG 包含两个主要组件：

1. **检索器 (Retriever)**：从知识库中检索相关文档
2. **生成器 (Generator)**：基于检索到的文档生成答案

```

from transformers import AutoTokenizer, AutoModel
import faiss
import numpy as np

class RAGSystem:
    def __init__(self, generator_model, retriever_model, knowledge_base):
        self.generator_tokenizer = AutoTokenizer.from_pretrained(
            generator_model)
        self.generator_model = AutoModel.from_pretrained(generator_model)
        self.retriever_tokenizer = AutoTokenizer.from_pretrained(
            retriever_model)
        self.retriever_model = AutoModel.from_pretrained(retriever_model)
        self.knowledge_base = knowledge_base

```

```
# 构建向量索引
self.index = self._build_index()

def _build_index(self):
    """构建知识库的向量索引"""
    embeddings = []
    for doc in self.knowledge_base:
        inputs = self.retriever_tokenizer(
            doc, return_tensors='pt', padding=True, truncation=True
        )
        with torch.no_grad():
            embedding = self.retriever_model(**inputs).
last_hidden_state.mean(dim=1)
            embeddings.append(embedding.numpy())

    embeddings = np.vstack(embeddings)
    dimension = embeddings.shape[1]
    index = faiss.IndexFlatL2(dimension)
    index.add(embeddings.astype('float32'))
    return index

def retrieve(self, query, top_k=5):
    """检索相关文档"""
    inputs = self.retriever_tokenizer(
        query, return_tensors='pt', padding=True, truncation=True
    )
    with torch.no_grad():
        query_embedding = self.retriever_model(**inputs).
last_hidden_state.mean(dim=1)

    query_embedding = query_embedding.numpy().astype('float32')
    distances, indices = self.index.search(query_embedding, top_k)

    retrieved_docs = [self.knowledge_base[i] for i in indices[0]]
    return retrieved_docs

def generate(self, query, retrieved_docs):
    """基于检索到的文档生成答案"""
    context = "\n\n".join(retrieved_docs)
    prompt = f"基于以下上下文回答问题：\n\n{context}\n\n问题：{query}
```

```
}\n\n答案：\n\n\n    inputs = self.generator_tokenizer(\n        prompt, return_tensors='pt', padding=True, truncation=True,\n        max_length=512\n    )\n\n    with torch.no_grad():\n        outputs = self.generator_model.generate(\n            **inputs,\n            max_length=512,\n            num_beams=4,\n            early_stopping=True\n        )\n\n        answer = self.generator_tokenizer.decode(outputs[0],\n            skip_special_tokens=True)\n\n    return answer
```

Listing 16: RAG 实现示例

10.2 RAG 的优势

- **准确性**: 基于真实文档生成，减少幻觉
- **可追溯性**: 可以追溯到源文档
- **知识更新**: 通过更新知识库，无需重新训练模型
- **领域适应**: 可以针对特定领域构建知识库

11 代码生成与程序理解

大语言模型在代码生成和理解方面展现出强大能力，推动了 AI 辅助编程的发展。

11.1 代码生成

```
def generate_code(prompt, model, tokenizer, max_length=512):
```

```
"""根据自然语言描述生成代码"""
full_prompt = f"""根据以下描述生成 Python 代码：

描述: {prompt}

代码: """

inputs = tokenizer(full_prompt, return_tensors='pt')
with torch.no_grad():
    outputs = model.generate(
        **inputs,
        max_length=max_length,
        temperature=0.7,
        do_sample=True,
        pad_token_id=tokenizer.eos_token_id
    )

generated_code = tokenizer.decode(outputs[0], skip_special_tokens=True)
# 提取代码部分
code = generated_code.split("代码: ")[-1].strip()
return code

# 使用示例
description = "写一个函数计算斐波那契数列的第 n 项"
code = generate_code(description, model, tokenizer)
print(code)
```

Listing 17: 代码生成示例

11.2 程序理解

程序理解包括代码摘要、代码搜索、bug 检测等任务。

```
def summarize_code(code, model, tokenizer):
    """生成代码摘要"""
    prompt = f"""为以下代码生成简洁的摘要:

代码:
```

{code}

摘要： """

```
inputs = tokenizer(prompt, return_tensors='pt', max_length=1024,
truncation=True)
with torch.no_grad():
    outputs = model.generate(
        **inputs,
        max_length=200,
        num_beams=4,
        early_stopping=True
)

summary = tokenizer.decode(outputs[0], skip_special_tokens=True)
return summary.split("摘要：")[-1].strip()
```

Listing 18: 代码摘要生成

12 常用大模型介绍

12.1 GPT 系列

GPT-1 (2018): 1.17 亿参数，首次展示预训练 + 微调的有效性。

GPT-2 (2019): 15 亿参数，展示了大模型的语言生成能力。

GPT-3 (2020): 1750 亿参数，展示了强大的 few-shot 学习能力。

GPT-4 (2023): 多模态模型，支持图像和文本输入。

12.2 BERT 系列

BERT (2018): 双向编码器，在多个 NLP 任务上取得突破。

RoBERTa: 优化了 BERT 的训练策略。

ALBERT: 通过参数共享减少参数量。

12.3 其他重要模型

T5: 将所有 NLP 任务统一为文本到文本的生成任务。

PaLM: Google 的 Pathways 语言模型，5400 亿参数。

LLaMA: Meta 的开源大模型，参数效率高。

13 模型评估与测试

13.1 评估指标

困惑度 (Perplexity) :

$$\text{PPL} = \exp\left(-\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \log P(x_i|x_{<i})\right) \quad (41)$$

BLEU: 用于机器翻译和文本生成。

ROUGE: 用于文本摘要。

准确率: 用于分类任务。

```
def evaluate_model(model, tokenizer, test_dataset):
    """评估模型性能"""
    model.eval()
    total_loss = 0
    total_tokens = 0

    with torch.no_grad():
        for batch in test_dataset:
            input_ids, labels = batch
            outputs = model(input_ids, labels=labels)
            loss = outputs.loss
            total_loss += loss.item() * input_ids.size(0)
            total_tokens += input_ids.size(0)

    avg_loss = total_loss / total_tokens
    perplexity = torch.exp(torch.tensor(avg_loss))

    return {
        'loss': avg_loss,
```

```
'perplexity': perplexity.item()  
}
```

Listing 19: 模型评估示例

14 训练到部署全流程

14.1 数据准备

```
from datasets import load_dataset  
from transformers import AutoTokenizer  
  
def prepare_dataset(dataset_name, tokenizer_name, max_length=512):  
    """准备训练数据集"""  
    # 加载数据集  
    dataset = load_dataset(dataset_name)  
  
    # 加载分词器  
    tokenizer = AutoTokenizer.from_pretrained(tokenizer_name)  
  
    def tokenize_function(examples):  
        return tokenizer(  
            examples['text'],  
            truncation=True,  
            padding='max_length',  
            max_length=max_length  
        )  
  
    # 分词  
    tokenized_dataset = dataset.map(tokenize_function, batched=True)  
  
    return tokenized_dataset
```

Listing 20: 数据预处理

14.2 模型训练

```
from transformers import Trainer, TrainingArguments
from transformers import AutoModelForCausalLM

def train_model(model_name, dataset, output_dir):
    """训练模型"""
    # 加载模型
    model = AutoModelForCausalLM.from_pretrained(model_name)
    tokenizer = AutoTokenizer.from_pretrained(model_name)

    # 训练参数
    training_args = TrainingArguments(
        output_dir=output_dir,
        num_train_epochs=3,
        per_device_train_batch_size=4,
        gradient_accumulation_steps=4,
        warmup_steps=500,
        logging_steps=100,
        save_steps=1000,
        evaluation_strategy="steps",
        eval_steps=500,
        save_total_limit=3,
        fp16=True,  # 混合精度训练
        dataloader_pin_memory=False,
    )

    # 训练器
    trainer = Trainer(
        model=model,
        args=training_args,
        train_dataset=dataset['train'],
        eval_dataset=dataset['validation'],
    )

    # 开始训练
    trainer.train()

    # 保存模型
    trainer.save_model()
    tokenizer.save_pretrained(output_dir)
```

Listing 21: 完整训练流程

14.3 模型部署

```
from transformers import pipeline
import torch

class ModelServer:
    def __init__(self, model_path):
        self.device = 'cuda' if torch.cuda.is_available() else 'cpu'
        self.generator = pipeline(
            'text-generation',
            model=model_path,
            device=0 if self.device == 'cuda' else -1
        )

    def generate(self, prompt, max_length=100, temperature=0.7):
        """生成文本"""
        results = self.generator(
            prompt,
            max_length=max_length,
            temperature=temperature,
            num_return_sequences=1,
            do_sample=True
        )
        return results[0]['generated_text']

    def batch_generate(self, prompts, **kwargs):
        """批量生成"""
        return [self.generate(p, **kwargs) for p in prompts]

# 使用示例
server = ModelServer('path/to/model')
response = server.generate("今天天气怎么样？")
print(response)
```

Listing 22: 模型部署示例

15 应用场景

15.1 文本生成

- **内容创作**: 文章、故事、诗歌生成
- **对话系统**: 智能客服、聊天机器人
- **文本摘要**: 自动生成文档摘要

15.2 知识问答

- **开放域问答**: 回答各种知识性问题
- **阅读理解**: 基于文档回答问题
- **多轮对话**: 理解上下文进行连续对话

15.3 代码助手

- **代码生成**: 根据描述生成代码
- **代码补全**: IDE 中的智能补全
- **代码审查**: 检测代码问题和改进建议

16 未来发展方向

16.1 多模态交互

- **视觉-语言模型**: 理解图像和文本的联合表示
- **音频-语言模型**: 语音识别和生成
- **视频理解**: 视频内容理解和生成

16.2 智能助手

- **个人助理**: 日程管理、信息检索、任务执行
- **专业助手**: 医疗、法律、教育等领域的专业助手

- **创作助手**: 协助写作、设计、编程等创作任务

16.3 Agent 应用

- **自主 Agent**: 能够自主规划和执行任务的智能体
- **工具使用**: 调用外部 API 和工具完成任务
- **多 Agent 协作**: 多个 Agent 协作解决复杂问题

17 作业与练习

17.1 概念题

1. Transformer 架构:

- 解释自注意力和交叉注意力的区别。
- 为什么 Transformer 需要位置编码?
- 多头注意力的优势是什么?

2. 预训练与微调:

- 比较自回归语言建模和掩码语言建模的优缺点。
- 解释 Few-shot Learning 和 In-context Learning 的区别。
- LoRA 如何实现参数高效微调?

3. 提示工程:

- Chain-of-Thought 如何提高模型的推理能力?
- Few-shot Prompting 的工作原理是什么?
- 如何设计有效的提示?

4. RAG:

- RAG 相比直接生成有什么优势?
- 如何构建高效的检索系统?
- RAG 如何解决大模型的幻觉问题?

17.2 编程题

1. 实现 Transformer 编码器：

- 使用 PyTorch 实现完整的 Transformer 编码器
- 包含位置编码、多头注意力、前馈网络
- 在文本分类任务上测试

2. 实现注意力机制：

- 实现缩放点积注意力
- 实现多头注意力
- 可视化注意力权重

3. 实现 RAG 系统：

- 构建文档向量索引
- 实现检索功能
- 基于检索结果生成答案

4. 提示工程实践：

- 设计 Few-shot Prompting 提示
- 实现 Chain-of-Thought 提示
- 比较不同提示策略的效果

5. 模型微调：

- 使用 Hugging Face Transformers 微调预训练模型
- 实现 LoRA 微调
- 比较全参数微调和 LoRA 的效果

17.3 综合项目

项目：构建智能问答系统

- 使用预训练的大语言模型
- 实现 RAG 增强生成
- 构建知识库和检索系统

- 设计用户界面
- 评估系统性能

项目：代码生成助手

- 在代码数据集上微调模型
- 实现代码生成功能
- 添加代码补全功能
- 实现代码审查功能

通过完成以上作业和练习，读者可以深入理解大语言模型的核心技术，掌握从基础架构到高级应用的完整知识体系，为进一步的研究和应用打下坚实的基础。