23 编码器解码器，Seq2seq模型，束搜索

概要

- 根本问题: 序列到序列的转换挑战
- 核心思想: 编码器-解码器 (Encoder-Decoder) 范式
- 具体实现: 序列到序列 (Seq2seq) 模型
- 解码策略: 从贪婪搜索到束搜索 (Beam Search)
- 质量评估: BLEU 分数

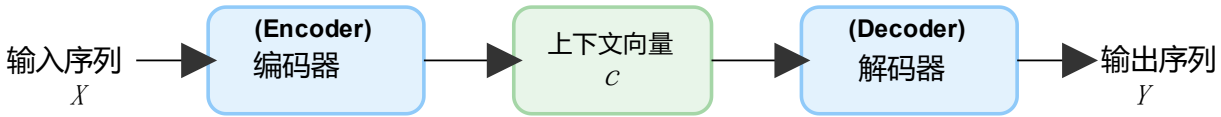
根本问题：序列到序列的转换

- 我们面临的困境是什么？

- 传统的机器学习模型（如固定大小输入的CNN、MLP）假设输入和输出的维度是固定的。但在许多关键任务中，这一假设不成立：
  - 机器翻译: “Wie geht es Ihnen?” (4个词) → “How are you doing?” (5个词)
  - 语音识别: 一段3秒的音频 → 一段10个词的文本
  - 文本摘要: 一篇1000词的文章 → 一段50词的摘要
- 这些任务的共同挑战是：如何在两个长度可变且不一定相等的序列之间，建立一个有效的映射关系？

编码器-解码器 (Encoder-Decoder) 范式

- 编码器-解码器是一种通用的模型架构。其中
  - 编码器 (Encoder)：负责“理解”。将可变长度的输入序列 $X = (x_1, x_2, \ldots, x_T)$ 映射到一个固定维度的中间表示 ——上下文向量 (Context Vector) c
  - 解码器 (Decoder)：负责“生成”。它以该上下文向量c为条件，逐个生成可变长度的目标序列 $Y = (y_1, y_2, \ldots, y_{T'})$
- 核心属性：
  - 解耦：将输入表示与输出生成分离，两个模块可以采用不同的结构
  - 信息桥梁 (Information Bridge): 上下文向量c是连接编码器和解码器的唯一信息通道。它必须封装源序列的全部必要语义。



具体实现：序列到序列 (Seq2seq) 模型

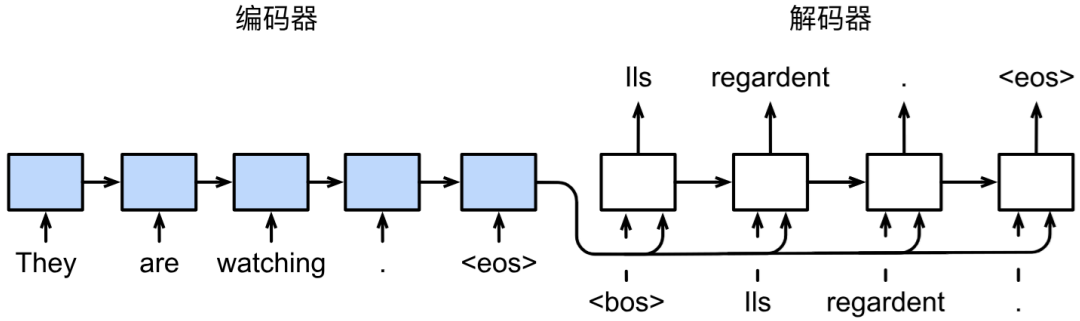
- 如何为序列数据（如文本）找到一个强大的编码器和解码器实现？
- 利用循环神经网络 (RNN) 及其变体 (LSTM, GRU) 的强大序列建模能力，来实例化Encoder-Decoder范式。
  - 编码器: 一个RNN。它按时间步逐个读取输入序列的元素，并将其信息逐步压缩进其隐状态(hidden state)
  - 解码器: 另一个RNN。它接收编码器的最终摘要信息，并逐个生成输出序列的元素
- Seq2seq模型是专门为解决序列到序列转换任务而设计的具体模型，是Encoder-Decoder范式在NLP等领域最经典的实现

核心思想与工作机制

- 编码阶段
  - 编码器RNN在每个时间步 t 读取输入词元 x_t，并更新其隐状态 $h_t = f(h_{t-1}, x_t)$
  - 处理完整个输入序列后，编码器最后一个时间步的隐状态 h_T 被视作上下文向量 c。即 $c = h_T$。被认为是整个输入序列的语义摘要
- 解码阶段
  - 解码器RNN的初始隐状态被设置为上下文向量 c
    - $s_0 = c$
  - 从特殊的起始符 <bos> (begin-of-sequence) 开始，解码器在每个时间步 t 生成一个输出 y_t
  - 其隐状态更新依赖于前一时刻的隐状态 s_{t-1} 和前一时刻的输出 y_{t-1}：
    - $s_t = g(s_{t-1}, y_{t-1})$
  - 输出 y_t 通过对 s_t 应用一个Softmax层得到
    - $P(y_t|y_{<t}, c) = \text{Softmax}(W_o s_t)$
  - 生成过程持续进行，直到输出一个特殊的结束符 <eos> (end-of-sequence)

Seq2seq 的工作机制：一个实例

- 通过一个具体的翻译任务（英语 → 法语）来可视化Seq2seq的工作流程
- 编码阶段（Encoder），读取输入序列 " They are watching. ＜eos＞ "
  - 每个词元更新RNN的内部隐状态。信息在时间步之间向右传递
  - 读到＜eos＞（序列结束符）时，编码器最终的隐状态被捕获，形成上下文向量 c
    - c是整个输入句子的浓缩表示
- 解码阶段（Decoder），直到解码器生成它自己的＜eos＞标记，表示输出序列已完成
  - 上下文向量 c 被用作解码器RNN的初始隐状态
  - 从一个特殊的起始符＜bos＞开始生成
  - 自回归：在每个时间步，上一步的输出作为下一步的输入，引导模型生成序列的下一个部分



训练与推理的根本差异

- Seq2seq模型在训练和推理（生成）时，解码器的工作方式完全不同
- 训练：Teacher Forcing (强制教学)
  - 高效地学习模型参数
  - 解码每一步，无论模型上一步预测什么，都将真实的目标词元 (ground-truth token) 作为下一步输入
  - 优点
    - 允许并行计算，训练速度快
    - 避免了误差累积（如果模型早期预测错误，不会影响后续步骤的学习）
  - 缺点
    - 模式暴露 (Exposure Bias)。造成训练与推理之间的差异，模型在训练时从未见过自己生成的错误
- 推理：Autoregressive (自回归)
  - 在解码的第 t' 步，将模型自己在第 $t'-1$ 步预测出的词元作为输入
  - 特点：
    - 生成过程是串行的，速度较慢
    - 一旦出现预测错误，这个错误可能会被带入后续的计算，导致误差累积，生成质量下降

关键假设与前提：信息瓶颈

- 一个固定大小的上下文向量 **c**能够充分地捕捉任意长度输入序列的全部语义信息
- 这个假设在什么时候会不成立？
  - 当输入序列非常长时，例如在长文档翻译或摘要任务中
- 后果
  - 信息丢失：RNN在处理长序列时，倾向于忘记早期的信息（类似“遗忘症”）。强迫所有信息挤入一个固定大小的向量 **c**会加剧这个问题，导致它成为一个信息瓶颈
  - 性能退化：模型翻译长句子的能力会显著下降
  - 这一根本性弱点，催生了后续的注意力机制 (Attention Mechanism)，后者允许解码器在生成每个词时，“回顾”并动态地关注输入序列的不同部分

解码策略与评估

解码的困境：局部最优 vs. 全局最优

- 推理时，解码器在每个时间步都会输出一个词汇表大小的概率分布 $P(y_{t'}|y_{<t'}, \mathbf{c})$。我们的目标是找到一个整体概率最大的输出序列 Y

$$P(Y|X) = \prod_{t'=1}^{T'} P\left(y_{t'}|y_1, \ldots, y_{t'-1}, \mathbf{c}\right)$$

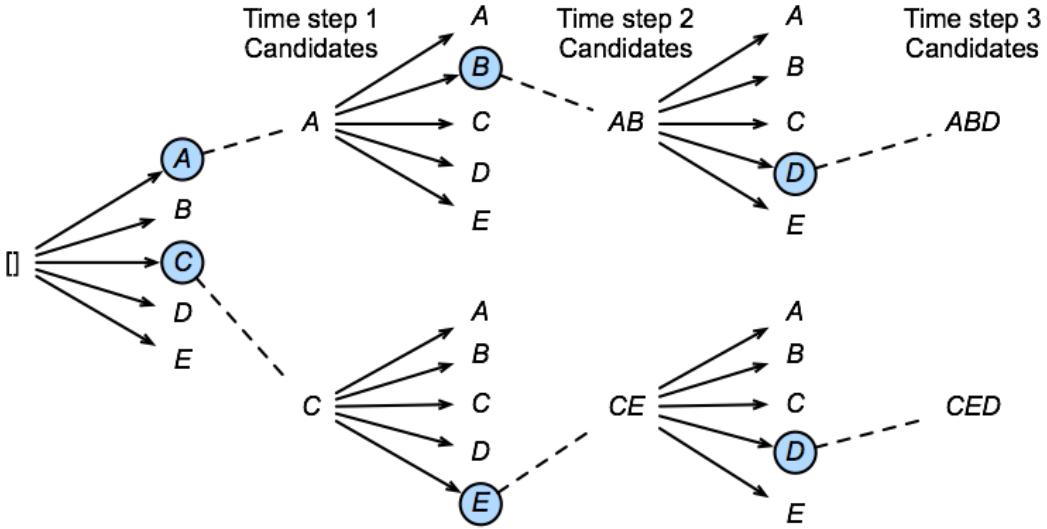
- 策略1：贪婪搜索 (Greedy Search)
  - 在每个时间步，简单地选择当前概率最高的那个词。这样非常快，实现简单
  - 但是，局部最优不等于全局最优。一个当前看起来最好的选择，可能会引入一条后续概率很低的路径
    - 路径A: $0.5 \times 0.4 \times 0.4 \times 0.6 = 0.048$
    - 路径B: $0.5 \times 0.3 \times 0.6 \times 0.6 = 0.054$ (更优)
    - 贪婪搜索会选择路径A的第一步（A: 0.4 > B: 0.3），从而错失了全局最优的路径B
- 策略2：穷举搜索 (Exhaustive Search)
  - 计算所有可能的输出序列的概率，然后选择最好的一个
  - 如果词汇表大小为 $|V|$，最大长度为 T'，计算复杂度为 $O(|V|^{T'})$，这在计算上是绝对不可行的
- 我们需要一个介于两者之间的折中方案

务实的妥协：束搜索 (Beam Search)

- 束搜索是在计算成本和生成质量之间取得平衡的解码算法
- 核心思想: 在解码的每一步，不再只保留一个最佳选择，而是保留 k 个最有可能的候选序列（这 k 个序列被称为“束”或“beam”）
  - 参数 k 称为束宽 (Beam Width)
  - 当 k=1 时，束搜索退化为贪婪搜索
  - 当 k 接近词汇表大小时，束搜索接近穷举搜索
  - k是一个超参数，需要在生成质量和计算成本之间进行权衡。常用值为 5, 10
- 束搜索通过在每一步探索有限数量的“有前途”的路径，来近似寻找全局最优的输出序列

束搜索：工作机制图示 (k=2)

- 每次都保留最好的 k个候选
- 向候选项添加一项（n种可能），在kn序列选出最好的k个



束搜索的优化：对数概率与长度惩罚

- 问题1: 数值下溢
  - 概率是多个小于1的数连乘，序列越长，总概率会越接近0，可能导致计算机浮点数下溢
  - 解决方案: 使用对数概率 (log-probability)。连乘变为求和，计算更稳定，且不改变最优解

$$\text{score}(Y) = \sum_{t=1}^{T'} \log P(y_t | y_{<t}, c)$$

- 问题2: 对短序列的偏好
  - 因为对数概率是负数，序列越长，累加的负数越多，分数越低。导致束搜索天然地偏爱更短的序列
  - 解决方案: 长度惩罚 (Length Penalty)。我们用序列长度的某个函数来对总分进行归一化，以平衡这种偏好
  - 一个常见的归一化方式是：

$$\text{Final Score} = \frac{1}{L(Y)^{\alpha}} \sum_{t=1}^{T'} \log P(y_t)$$

  - 其中 $L(Y)$ 是候选序列的长度，α 是一个超参数（通常在0.6到0.75之间），用于控制惩罚的强度。$\alpha = 0$ 表示不惩罚，$\alpha = 1$ 表示完全按长度平均

束搜索的评分与长度惩罚

- 由于概率是多个小于1的数连乘，序列越长，总得分（概率）会越低。这会导致束搜索天然地偏爱更短的序列
- 为了解决这个问题，我们通常使用对数概率 (log-probability) 并进行长度归一化
- 候选序列得分：

$$Score(y_1, \ldots, y_t) = \sum_{i=1}^{t} \log P(y_i | y_{<i}, \mathbf{c})$$

- 长度惩罚 (Length Penalty)
  - 为了平衡对短序列的偏好，用序列长度的某个函数来对总分进行归一化。常见的归一化方式

$$FinalScore = \frac{1}{L^{\alpha}} \sum_{i=1}^{L} \log P(y_i | \ldots)$$

    - 其中 L 是候选序列的长度，α 是一个超参数（通常在0.6到0.75之间），用于控制惩罚的强度。$\alpha = 0$ 表示不惩罚，$\alpha = 1$ 表示完全按长度平均
  - 这个最终得分用于在束搜索的最后，从 k 个完整候选序列中选出最优的一个

评估生成序列：BLEU 分数

- 如何客观地衡量一个机器翻译的句子“好”还是“不好”？
  - BLEU (Bilingual Evaluation Understudy) 是一种广泛使用的自动化评估指标
- 好的翻译应该与人类专业译员的翻译在词组（n-grams）上有很高的重合度，由三部分构成：
  - 改进的n-gram精度 (p_n):
    - 计算预测序列中，长度为n的词组（如unigram, bigram...）出现在任一参考翻译中的比例
    - 为什么“改进”: 使用“截断计数”。n-gram在预测中出现的次数，不能超过它在任何单个参考翻译中出现的最大次数
    - 目的: 惩罚无意义的重复。如，预测“the the the the”而参考是“the cat is on the mat”，普通精度会很高，但截断后“the”的计数只为2，精度会大幅下降
  - 短句惩罚 (Brevity Penalty, BP):
    - 如果预测序列比所有参考翻译都短，就施加一个惩罚项
    - 保证翻译的充分性。一个极短的预测可能很高的n-gram精度，但显然不是一个完整的翻译
  - 最终公式:

$$\text{BLEU} = \text{BP} \cdot \exp\left(\sum_{n=1}^{N} w_n \log p_n\right)$$

  - 通常 $N = 4$，权重 $w_n = 1/N$（即几何平均）。BLEU分数越高，表示生成序列的质量越好

总结

- Encoder-Decoder 范式: 一种强大的抽象架构，将复杂的序列转换问题解耦为“理解”（编码）和“生成”（解码）两个阶段，其核心是通过一个固定大小的上下文向量传递信息
- Seq2seq 模型: 使用RNN来具体实现Encoder-Decoder范式的经典模型。它通过将编码器最终的隐状态作为解码器的初始隐状态来工作，但也因此存在信息瓶颈问题
  - 为Attention机制的诞生埋下伏笔
- 束搜索 (Beam Search): 一种在计算成本和生成质量之间取得平衡的解码算法。它通过在每一步保留 k 个最佳候选，来近似寻找全局最优的输出序列，并通过长度惩罚来避免对短序列的偏好
- BLEU 分数: 一种衡量生成序列质量的评估指标，它通过匹配预测与参考翻译之间的n-gram并惩罚过短的句子来工作，兼顾了准确性与充分性

Thanks