

## B 站视频讲解

Transformer 是谷歌大脑在 2017 年底发表的论文 [attention is all you need](#) 中所提出的 seq2seq 模型。现在已经取得了大范围的应用和扩展，而 BERT 就是从 Transformer 中衍生出来的预训练语言模型

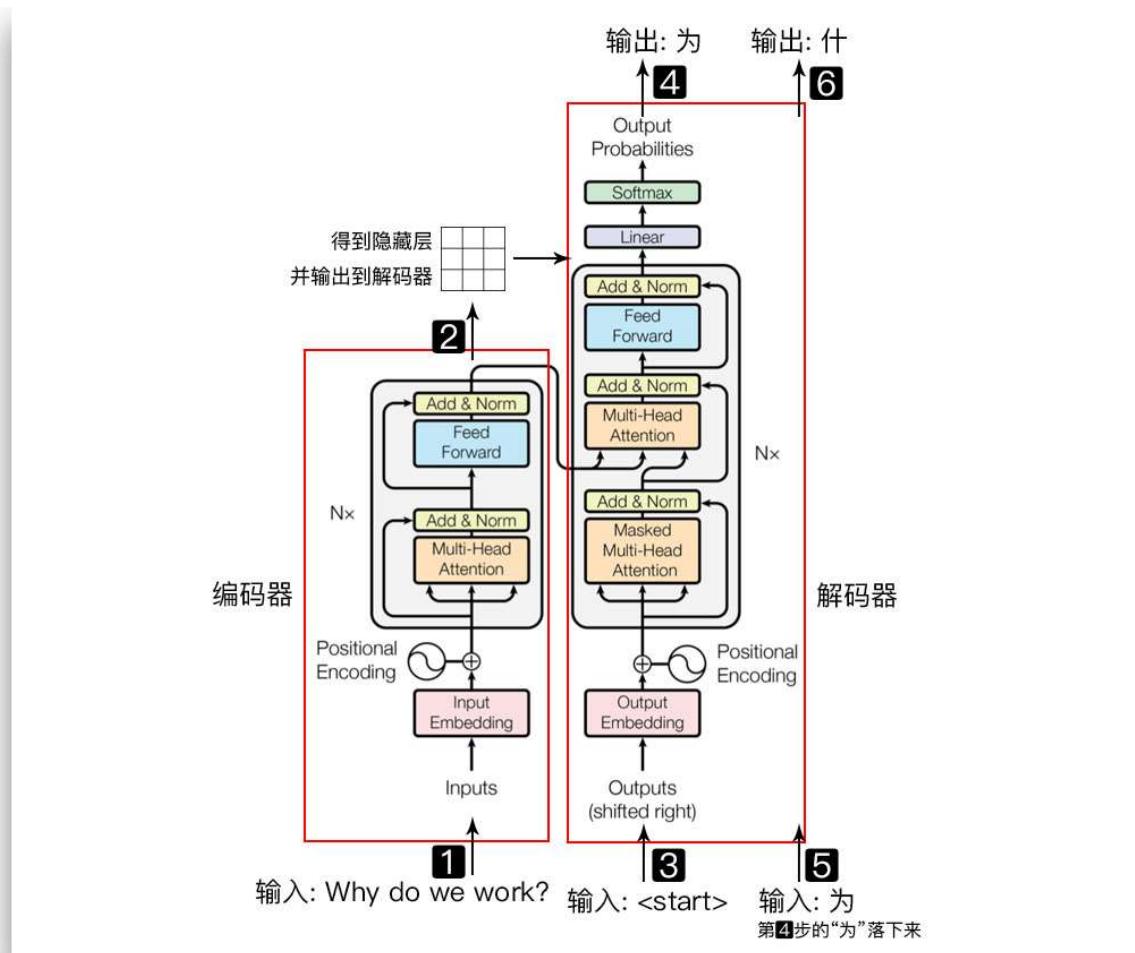
这篇文章分为以下几个部分

0. Transformer 直观认识
1. Positional Encoding
2. Self Attention Mechanism
3. 残差连接和 Layer Normalization
4. Transformer Encoder 整体结构
5. Transformer Decoder 整体结构
6. 总结
7. 参考文章

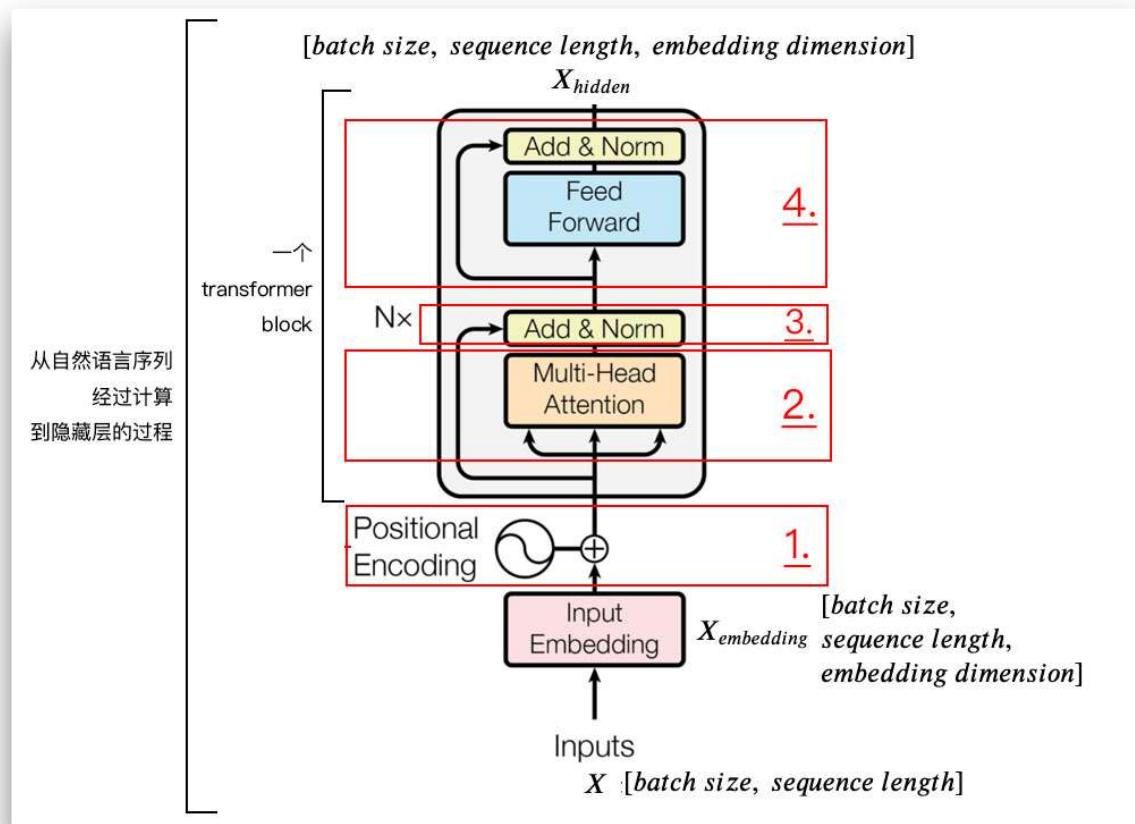
## 0. Transformer 直观认识

Transformer 和 LSTM 的最大区别，就是 LSTM 的训练是迭代的、串行的，必须要等当前字处理完，才可以处理下一个字。而 Transformer 的训练时并行的，即所有字是同时训练的，这样就大大增加了计算效率。Transformer 使用了位置嵌入 (Positional Encoding) 来理解语言的顺序，使用自注意力机制 (Self Attention Mechanism) 和全连接层进行计算，这些后面会讲到

Transformer 模型主要分为两大部分，分别是 **Encoder** 和 **Decoder**。**Encoder** 负责把输入（语言序列）映射成**隐藏层**（下图中第 2 步用九宫格代表的部分），然后解码器再把隐藏层映射为自然语言序列。例如下图机器翻译的例子（Decoder 输出的时候，是通过 N 层 Decoder Layer 才输出一个 token，并不是通过一层 Decoder Layer 就输出一个 token）



本篇文章大部分内容在于解释 **Encoder** 部分，即把自然语言序列映射为隐藏层的数学表达的过程。理解了 Encoder 的结构，再理解 Decoder 就很简单了



上图为 Transformer Encoder Block 结构图，注意：下面的内容标题编号分别对应着图中 1,2,3,4 个方框的序号

## 1. Positional Encoding

由于 Transformer 模型没有循环神经网络的迭代操作，所以我们必须提供每个字的位置信息给 Transformer，这样它才能识别出语言中的顺序关系

现在定义一个位置嵌入的概念，也就是 Positional Encoding，位置嵌入的维度为  $[\text{max\_sequence\_length}, \text{embedding\_dimension}]$ ，位置嵌入的维度与词向量的维度是相同的，都是  $\text{embedding\_dimension}$ 。 $\text{max\_sequence\_length}$  属于超参数，指的是限定每个句子最长由多少个词构成

注意，我们一般以字为单位训练 Transformer 模型。首先初始化字编码的大小为  $[\text{vocab\_size}, \text{embedding\_dimension}]$ ， $\text{vocab\_size}$  为字库中所有字的数量， $\text{embedding\_dimension}$  为字向量的维度，对应到 PyTorch 中，其实就是 `nn.Embedding(vocab_size, embedding_dimension)`

论文中使用了 `sin` 和 `cos` 函数的线性变换来提供给模型位置信息：

$$\begin{aligned} PE(pos, 2i) &= \sin(pos/10000^{2i/d_{\text{model}}}) \\ PE(pos, 2i + 1) &= \cos(pos/10000^{2i/d_{\text{model}}}) \end{aligned}$$

上式中  $pos$  指的是一句话中某个字的位置，取值范围是  $[0, \text{max\_sequence\_length}]$ ， $i$  指的是字向量的维度序号，取值范围是  $[0, \text{embedding\_dimension}/2]$ ， $d_{\text{model}}$  指的是  $\text{embedding\_dimension}$  的值

上面有 `sin` 和 `cos` 一组公式，也就是对应着  $\text{embedding\_dimension}$  维度的一组奇数和偶数的序号的维度，例如 0,1 一组，2,3 一组，分别用上面的 `sin` 和 `cos` 函数做处理，从而产生不同的周期性变化，而位置嵌入在  $\text{embedding\_dimension}$  维度上随着维度序号增大，周期变化会越来越慢，最终产生一种包含位置信息的纹理，就像论文原文中第六页讲的，位置嵌入函数的周期从  $2\pi$  到  $10000 * 2\pi$  变化，而每一个位置在  $\text{embedding\_dimension}$  维度上都会得到不同周期的 `sin` 和 `cos` 函数的取值组合，从而产生唯一的纹理位置信息，最终使得模型学到位置之间的依赖关系和自然语言的时序特性

如果不理解这里为何这么设计，可以看这篇文章 [Transformer 中的 Positional Encoding](#)

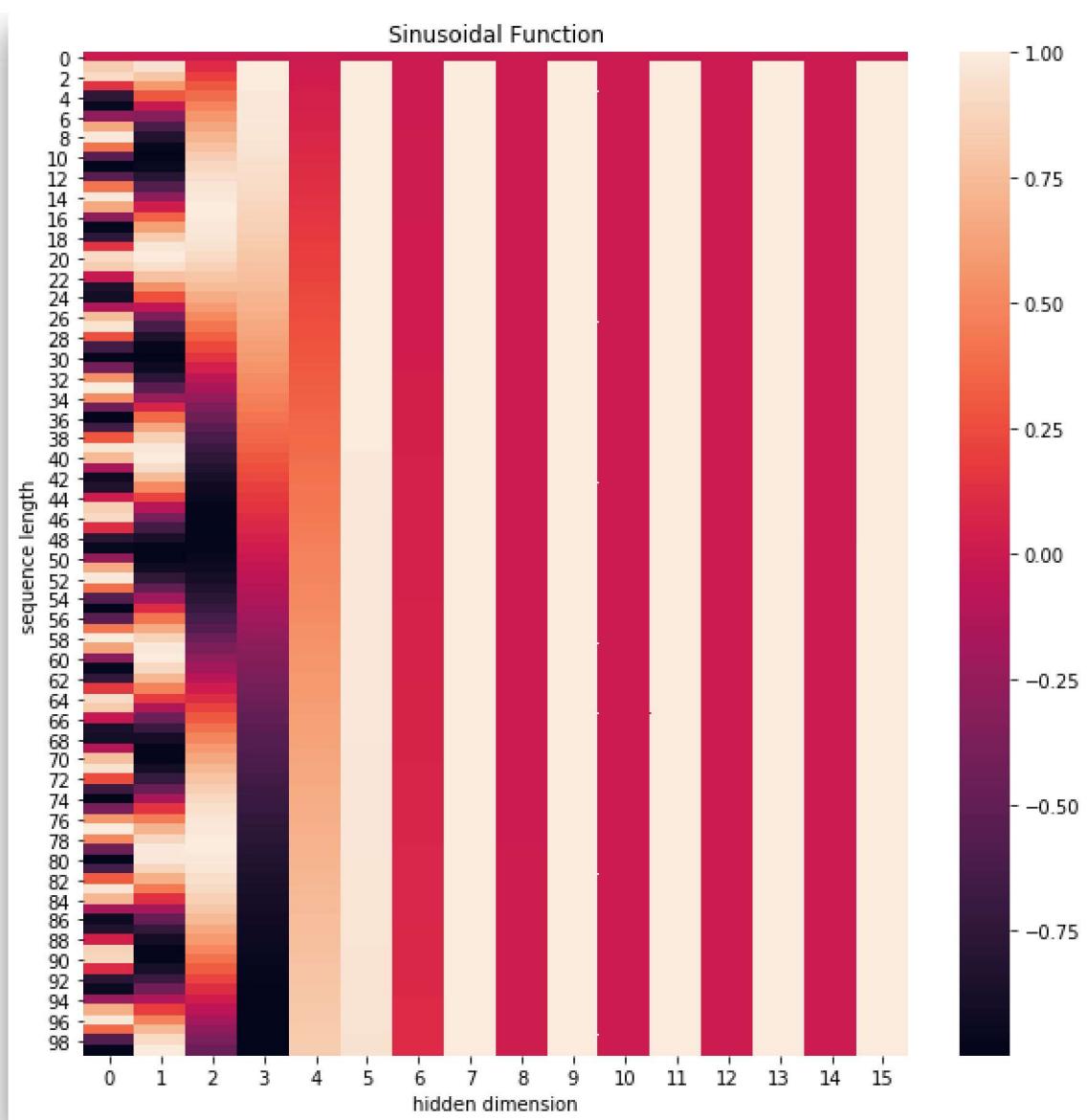
下面画一下位置嵌入，纵向观察，可见随着  $\text{embedding\_dimension}$  序号增大，位置嵌入函数的周期变化越来越平缓

```

1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3 import seaborn as sns
4 import math
5
6 def get_positional_encoding(max_seq_len, embed_dim):
7     # 初始化一个positional encoding
8     # embed_dim: 字嵌入的维度
9     # max_seq_len: 最大的序列长度

```

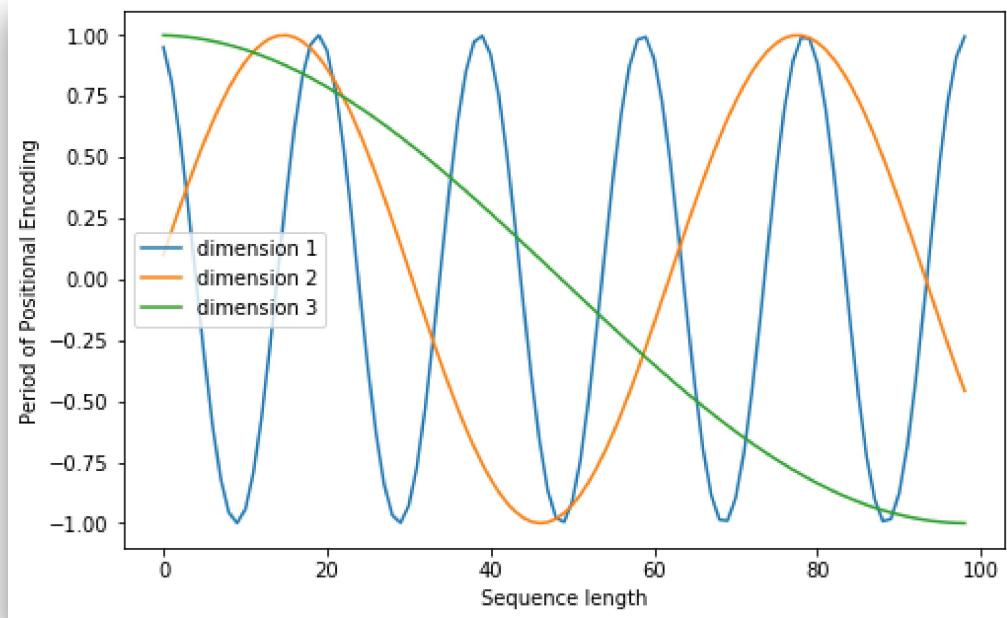
```
1     positional_encoding = np.array([
0
1         [pos / np.power(10000, 2 * i / embed_dim) for i in range(embed_
1 dim)]
1         if pos != 0 else np.zeros(embed_dim) for pos in range(max_seq_1
2 en)])
1
3
1     positional_encoding[1:, 0::2] = np.sin(positional_encoding[1:, 0::
2]) # dim 2i 偶数
1     positional_encoding[1:, 1::2] = np.cos(positional_encoding[1:, 1::
5 2]) # dim 2i+1 奇数
1     return positional_encoding
6
1
7
1     positional_encoding = get_positional_encoding(max_seq_len=100, embed_di
8 m=16)
1     plt.figure(figsize=(10,10))
9
2     sns.heatmap(positional_encoding)
0
2     plt.title("Sinusoidal Function")
1
2     plt.xlabel("hidden dimension")
2
2     plt.ylabel("sequence length")
3
```



```

1 plt.figure(figsize=(8, 5))
2 plt.plot(positional_encoding[1:, 1], label="dimension 1")
3 plt.plot(positional_encoding[1:, 2], label="dimension 2")
4 plt.plot(positional_encoding[1:, 3], label="dimension 3")
5 plt.legend()
6 plt.xlabel("Sequence length")
7 plt.ylabel("Period of Positional Encoding")

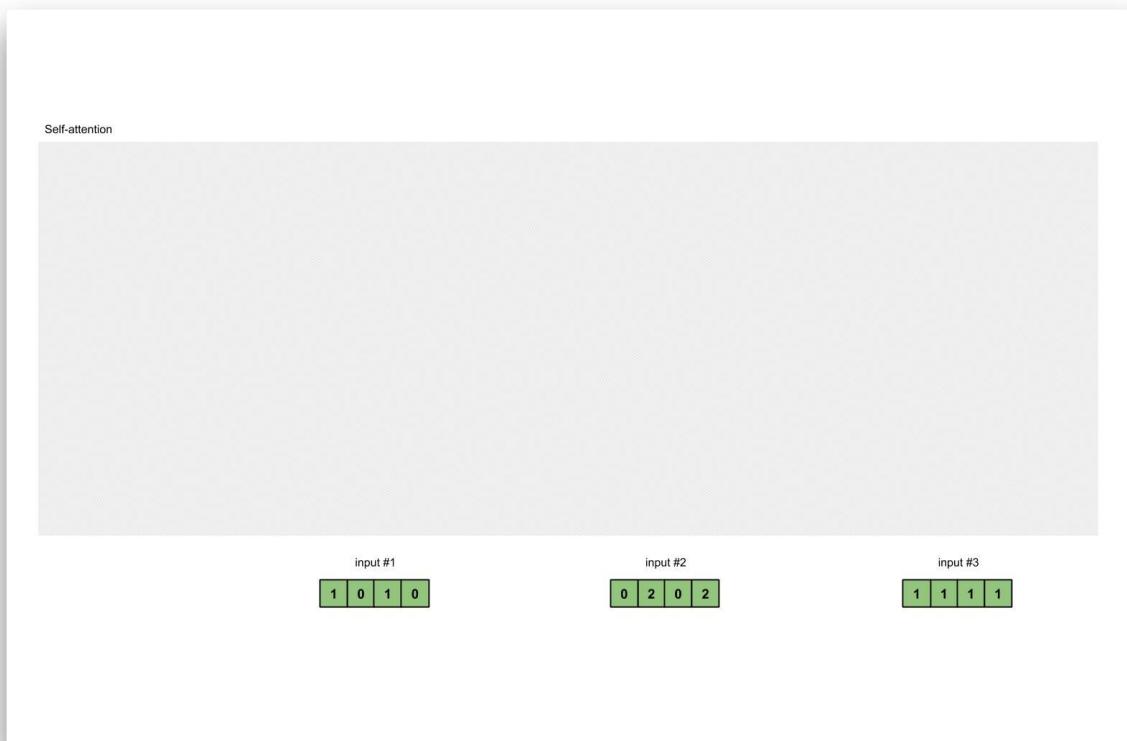
```



## 2. Self Attention Mechanism

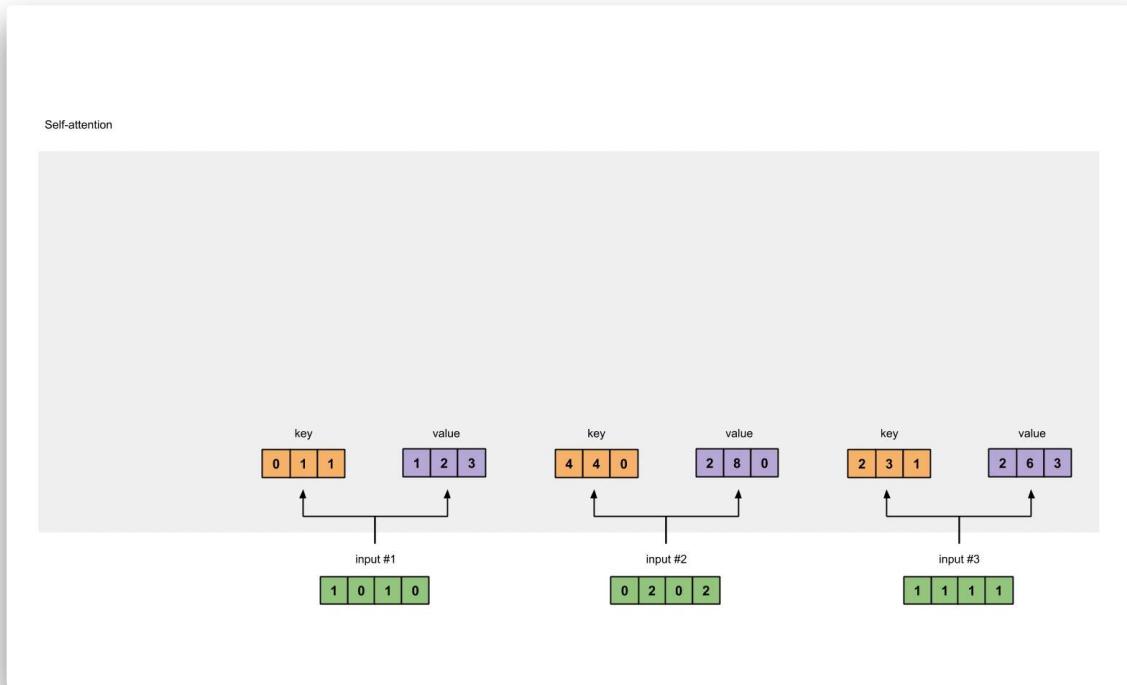
对于输入的句子  $X$ , 通过 WordEmbedding 得到该句子中每个字的字向量, 同时通过 Positional Encoding 得到所有字的位置向量, 将其相加 (维度相同, 可以直接相加), 得到该字真正的向量表示。第  $t$  个字的向量记作  $x_t$

接着我们定义三个矩阵  $W_Q, W_K, W_V$ , 使用这三个矩阵分别对所有的字向量进行三次线性变换, 于是所有的字向量又衍生出三个新的向量  $q_t, k_t, v_t$ 。我们将所有的  $q_t$  向量拼成一个大矩阵, 记作**查询矩阵**  $Q$ , 将所有的  $k_t$  向量拼成一个大矩阵, 记作**键矩阵**  $K$ , 将所有的  $v_t$  向量拼成一个大矩阵, 记作**值矩阵**  $V$  (见下图)



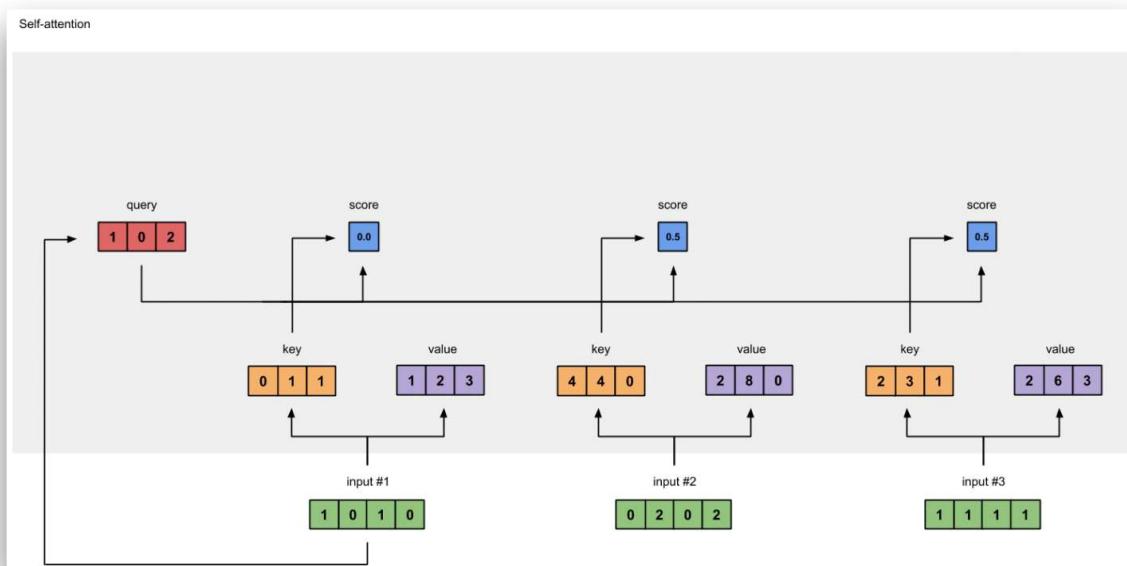
为了获得第一个字的注意力权重，我们需要用第一个字的查询向量  $q_1$  乘以键矩阵  $K$ （见下图）

$$\begin{array}{l} 1 \quad [0, 4, 2] \\ 2 \quad [1, 0, 2] \times [1, 4, 3] = [2, 4, 4] \\ 3 \quad [1, 0, 1] \end{array}$$



之后还需要将得到的值经过 softmax，使得它们的和为 1（见下图）

$$1 \quad \text{softmax}([2, 4, 4]) = [0.0, 0.5, 0.5]$$

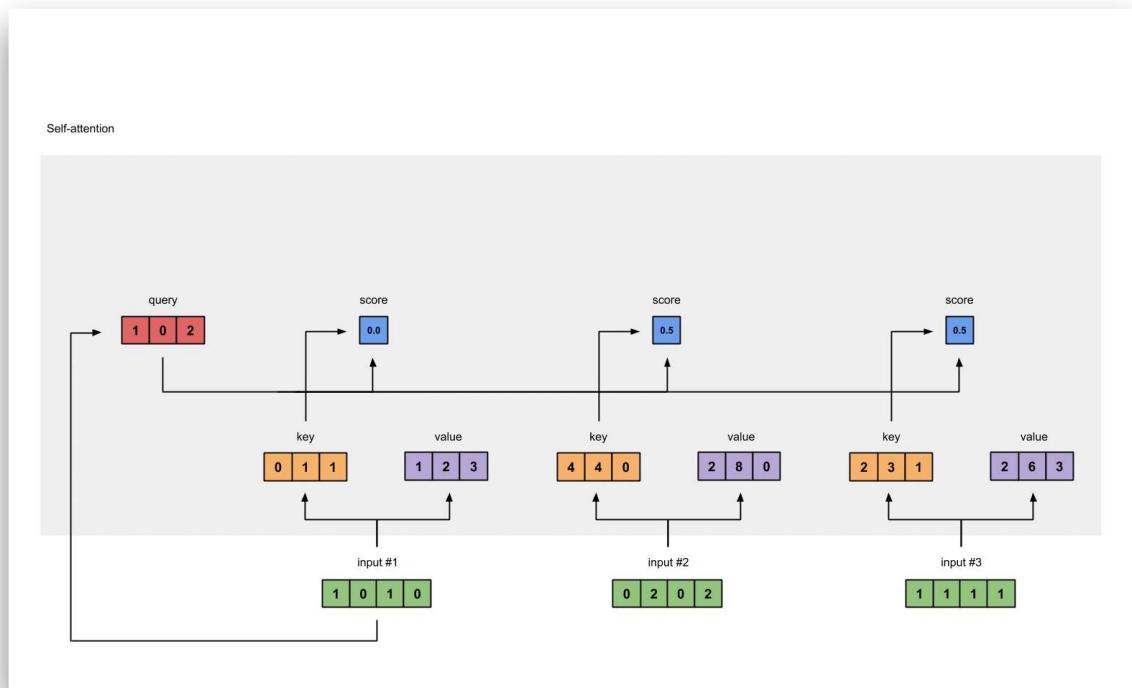


有了权重之后，将权重其分别乘以对应字的值向量  $v_t$ （见下图）

```

1  0.0 * [1, 2, 3] = [0.0, 0.0, 0.0]
2  0.5 * [2, 8, 0] = [1.0, 4.0, 0.0]
3  0.5 * [2, 6, 3] = [1.0, 3.0, 1.5]

```

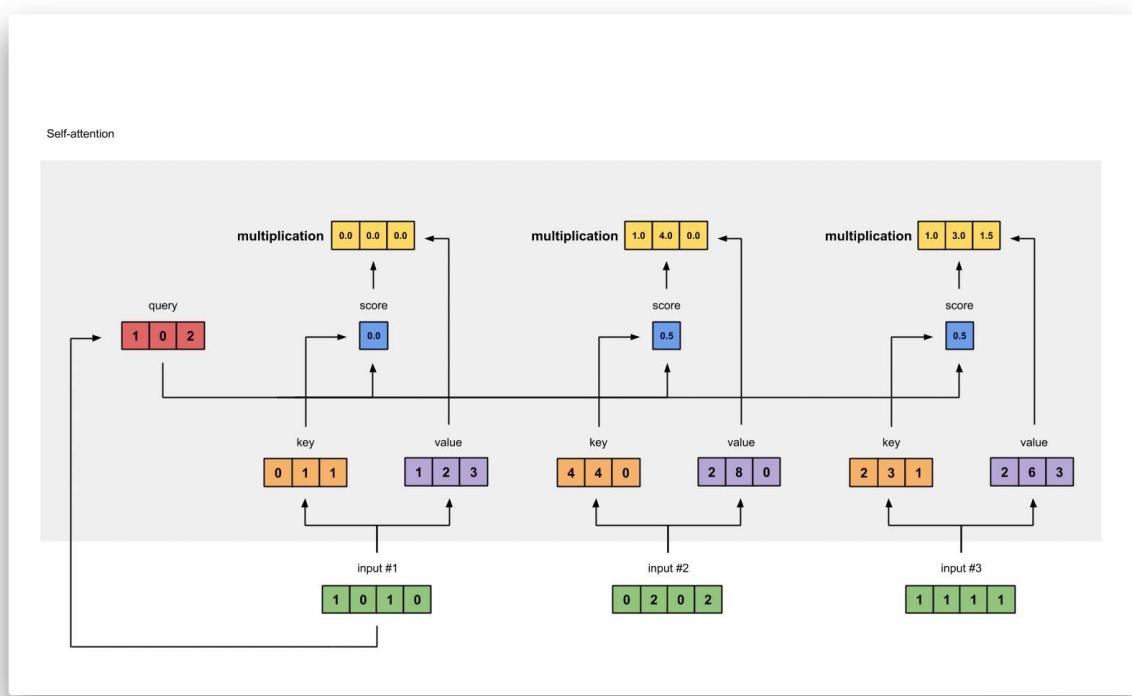


最后将这些权重化后的值向量求和，得到第一个字的输出（见下图）

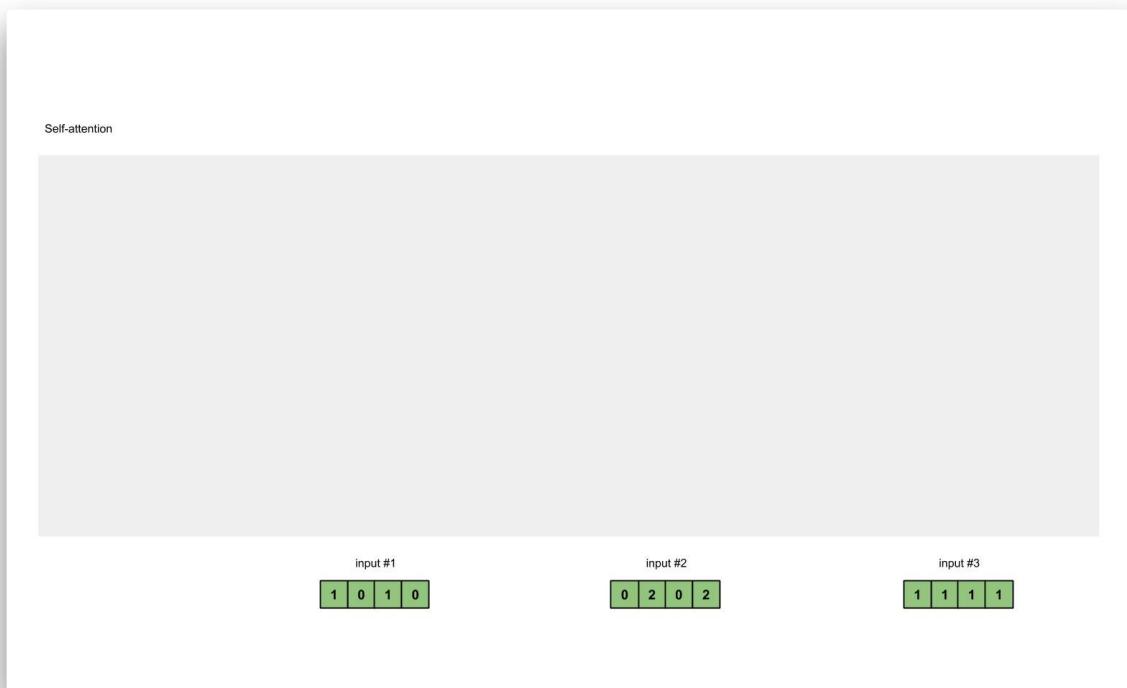
```

1      [0.0, 0.0, 0.0]
2  + [1.0, 4.0, 0.0]
3  + [1.0, 3.0, 1.5]
4  -----
5  = [2.0, 7.0, 1.5]

```



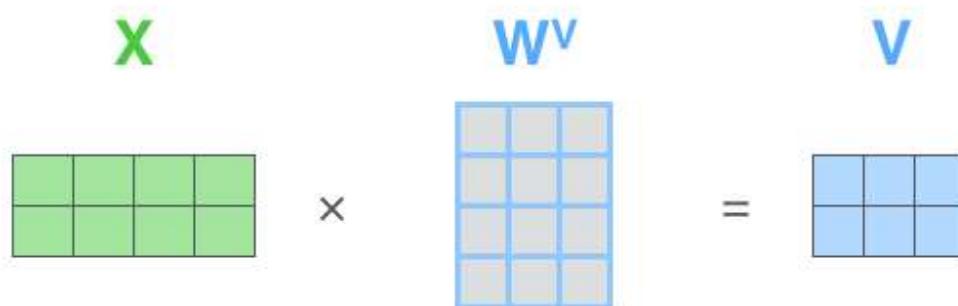
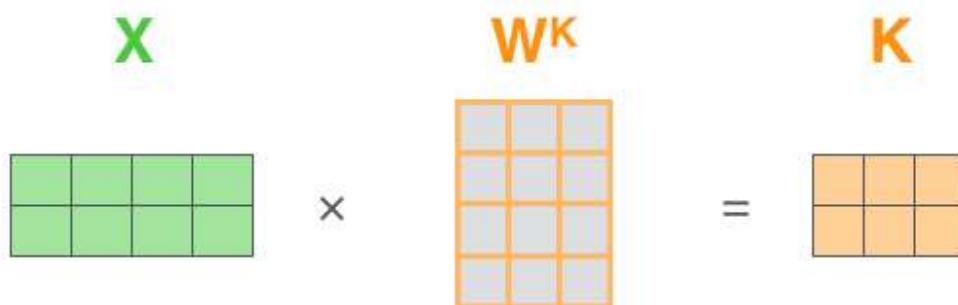
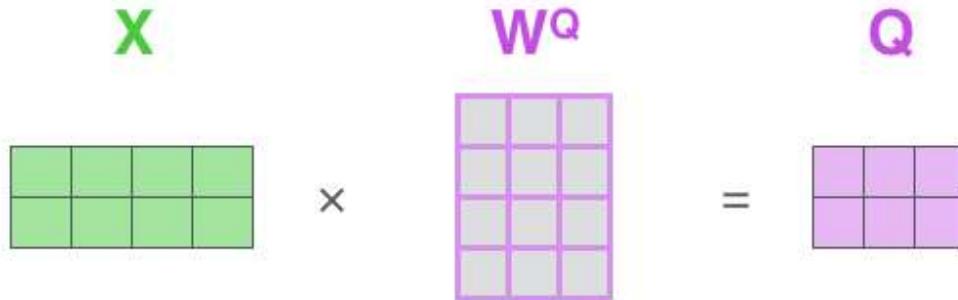
对其他的输入向量也执行相同的操作，即可得到通过 self-attention 后的所有输出



## 矩阵计算

上面介绍的方法需要一个循环遍历所有的字  $x_t$ ，我们可以把上面的向量计算变成矩阵的形式，从而一次计算出所有时刻的输出

第一步就不是计算某个时刻的  $q_t, k_t, v_t$  了，而是一次计算所有时刻的  $Q, K$  和  $V$ 。计算过程如下图所示，这里的输入是一个矩阵  $X$ ，矩阵第  $t$  行为第  $t$  个词的向量表示  $x_t$

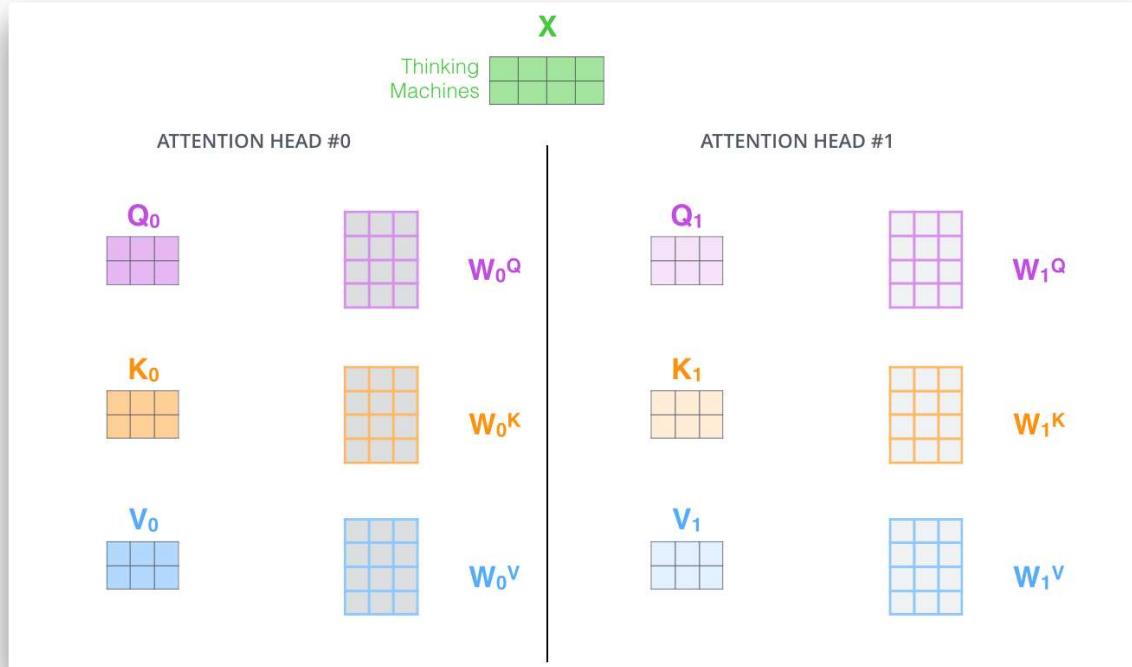


接下来将  $Q$  和  $K^T$  相乘，然后除以  $\sqrt{d_k}$ （这是论文中提到的一个 trick），经过 softmax 以后再乘以  $V$  得到输出

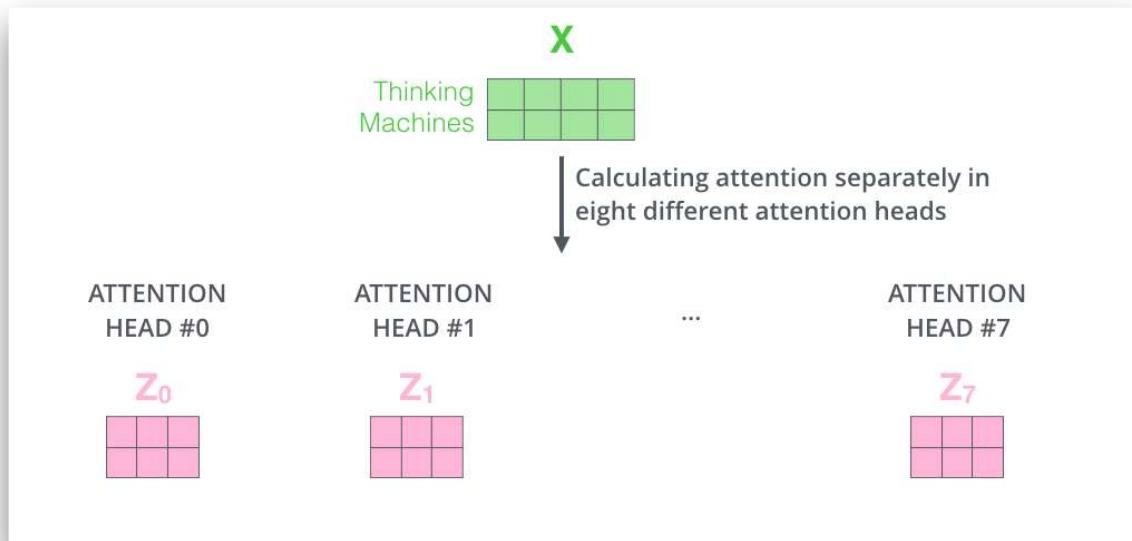
$$\text{softmax} \left( \frac{Q \times K^T}{\sqrt{d_k}} \right) V = Z$$

## Multi-Head Attention

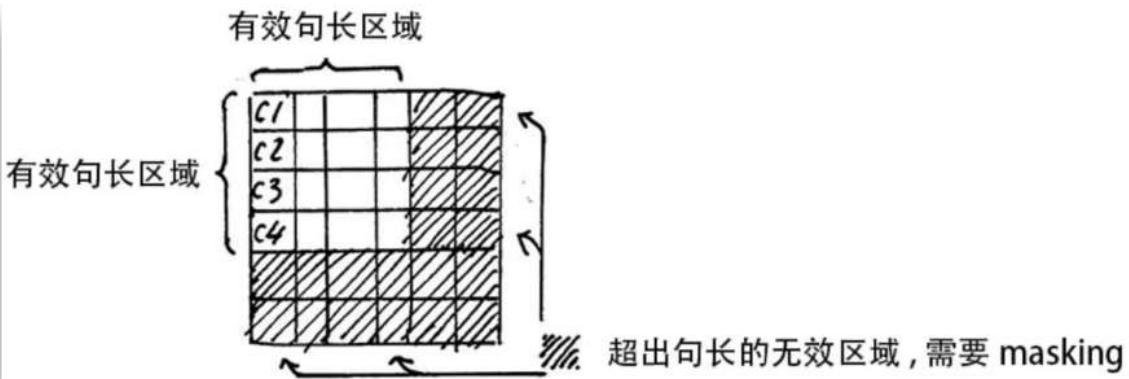
这篇论文还提出了 Multi-Head Attention 的概念。其实很简单，前面定义的一组  $Q, K, V$  可以让一个词 attend to 相关的词，我们可以定义多组  $Q, K, V$ ，让它们分别关注不同的上下文。计算  $Q, K, V$  的过程还是一样，只不过线性变换的矩阵从一组  $(W^Q, W^K, W^V)$  变成了多组  $(W_0^Q, W_0^K, W_0^V), (W_1^Q, W_1^K, W_1^V), \dots$  如下图所示



对于输入矩阵  $X$ ，每一组  $Q$ 、 $K$  和  $V$  都可以得到一个输出矩阵  $Z$ 。如下图所示



## Padding Mask



上面 Self Attention 的计算过程中，我们通常使用 mini-batch 来计算，也就是一次计算多句话，即  $X$  的维度是  $[batch\_size, sequence\_length]$ ， $sequence\_length$  是句长，而一个 mini-batch 是由多个不等长的句子组成的，我们需要按照这个 mini-batch 中最大的句长对剩余的句子进行补齐，一般用 0 进行填充，这个过程叫做 padding

但这时在进行 softmax 就会产生问题。回顾 softmax 函数  $\sigma(z_i) = \frac{e^{z_i}}{\sum_{j=1}^K e^{z_j}}$ ， $e^0$  是 1，是有值的，这样的话 softmax 中被 padding 的部分就参与了运算，相当于让无效的部分参与了运算，这可能会产生很大的隐患。因此需要做一个 mask 操作，让这些无效的区域不参与运算，一般是给无效区域加一个很大的负数偏置，即

$$Z_{illegal} = Z_{illegal} + bias_{illegal}$$

$$bias_{illegal} \rightarrow -\infty$$

### 3. 残差连接和 Layer Normalization

#### 残差连接

我们在上一步得到了经过 self-attention 加权之后输出，也就是  $\text{Self-Attention}(Q, K, V)$ ，然后把他们加起来做残差连接

$$X_{embedding} + \text{Self-Attention}(Q, K, V)$$

#### Layer Normalization

Layer Normalization 的作用是把神经网络中隐藏层归一为标准正态分布，也就是  $i.i.d$  独立同分布，以起到加快训练速度，加速收敛的作用

$$\mu_j = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m x_{ij}$$

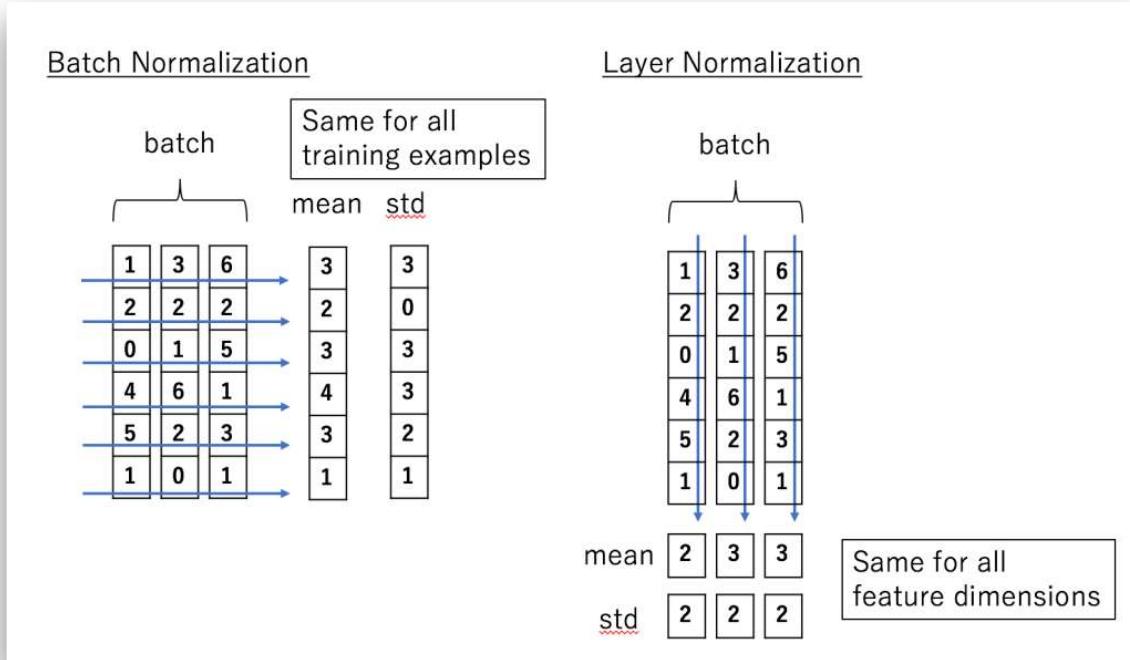
上式以矩阵的列 (column) 为单位求均值；

$$\sigma_j^2 = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (x_{ij} - \mu_j)^2$$

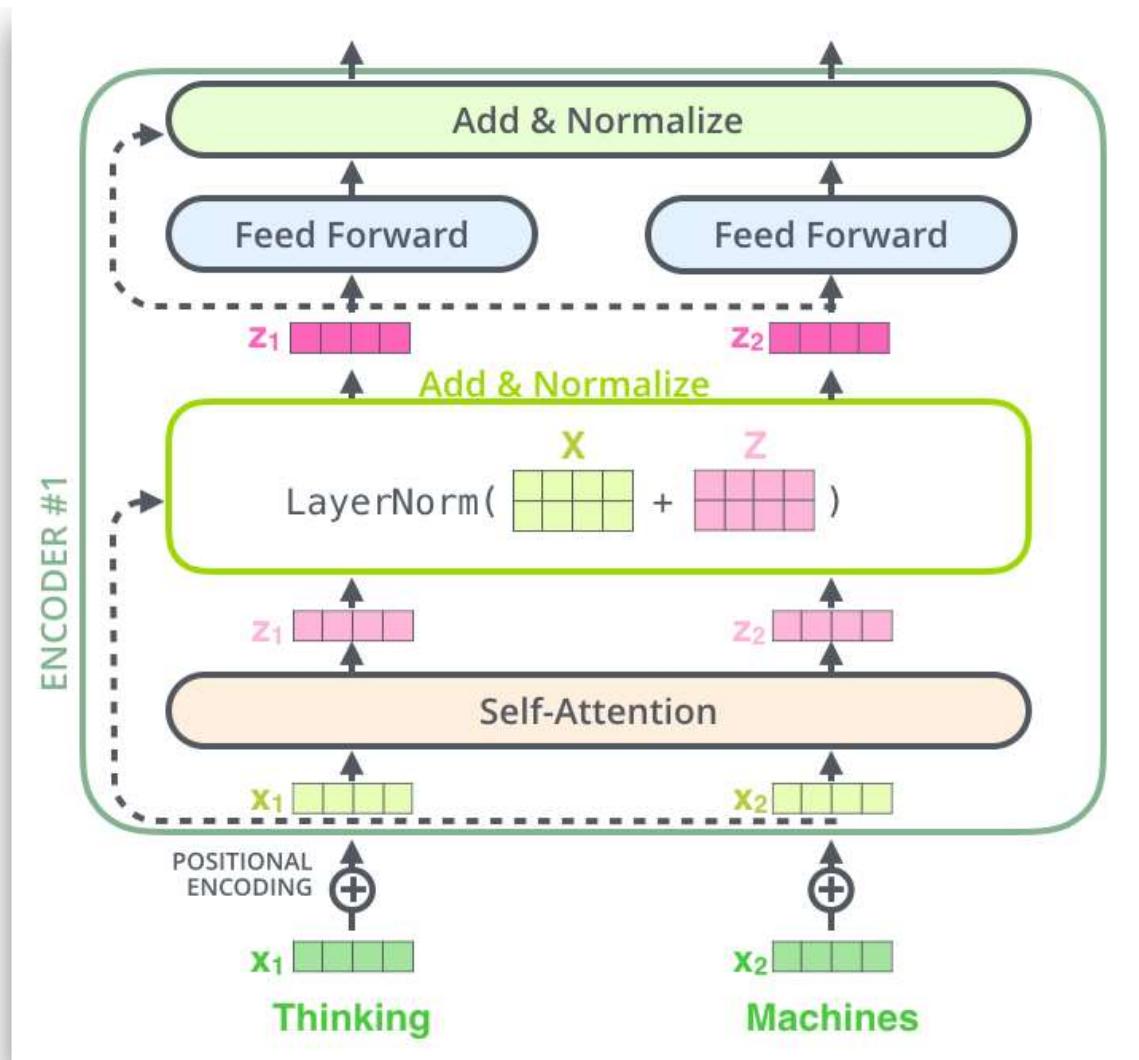
上式以矩阵的列 (column) 为单位求方差

$$\text{LayerNorm}(x) = \frac{x_{ij} - \mu_j}{\sqrt{\sigma_j^2 + \epsilon}}$$

然后用每一列的每一个元素减去这列的均值，再除以这列的标准差，从而得到归一化后的数值，加  $\epsilon$  是为了防止分母为 0



下图展示了更多细节：输入  $x_1, x_2$  经 self-attention 层之后变成  $z_1, z_2$ ，然后和输入  $x_1, x_2$  进行残差连接，经过 LayerNorm 后输出给全连接层。全连接层也有一个残差连接和一个 LayerNorm，最后再输出给下一个 Encoder (每个 Encoder Block 中的 FeedForward 层权重都是共享的)



## 4. Transformer Encoder 整体结构

经过上面 3 个步骤，我们已经基本了解了 **Encoder** 的主要构成部分，下面我们用公式把一个 Encoder block 的计算过程整理一下：

1). 字向量与位置编码

$$X = \text{Embedding-Lookup}(X) + \text{Positional-Encoding}$$

2). 自注意力机制

$$\begin{aligned} Q &= \text{Linear}_q(X) = XW_Q \\ K &= \text{Linear}_k(X) = XW_K \\ V &= \text{Linear}_v(X) = XW_V \\ X_{\text{attention}} &= \text{Self-Attention}(Q, K, V) \end{aligned}$$

3). self-attention 残差连接与 Layer Normalization

$$\begin{aligned} X_{\text{attention}} &= X + X_{\text{attention}} \\ X_{\text{attention}} &= \text{LayerNorm}(X_{\text{attention}}) \end{aligned}$$

4). 下面进行 Encoder block 结构图中的第 4 部分，也就是 FeedForward，其实就是两层线性映射并用激活函数激活，比如说 *ReLU*

$$X_{hidden} = \text{Linear}(\text{ReLU}(\text{Linear}(X_{attention})))$$

5). FeedForward 残差连接与 Layer Normalization

$$\begin{aligned} X_{hidden} &= X_{attention} + X_{hidden} \\ X_{hidden} &= \text{LayerNorm}(X_{hidden}) \end{aligned}$$

其中

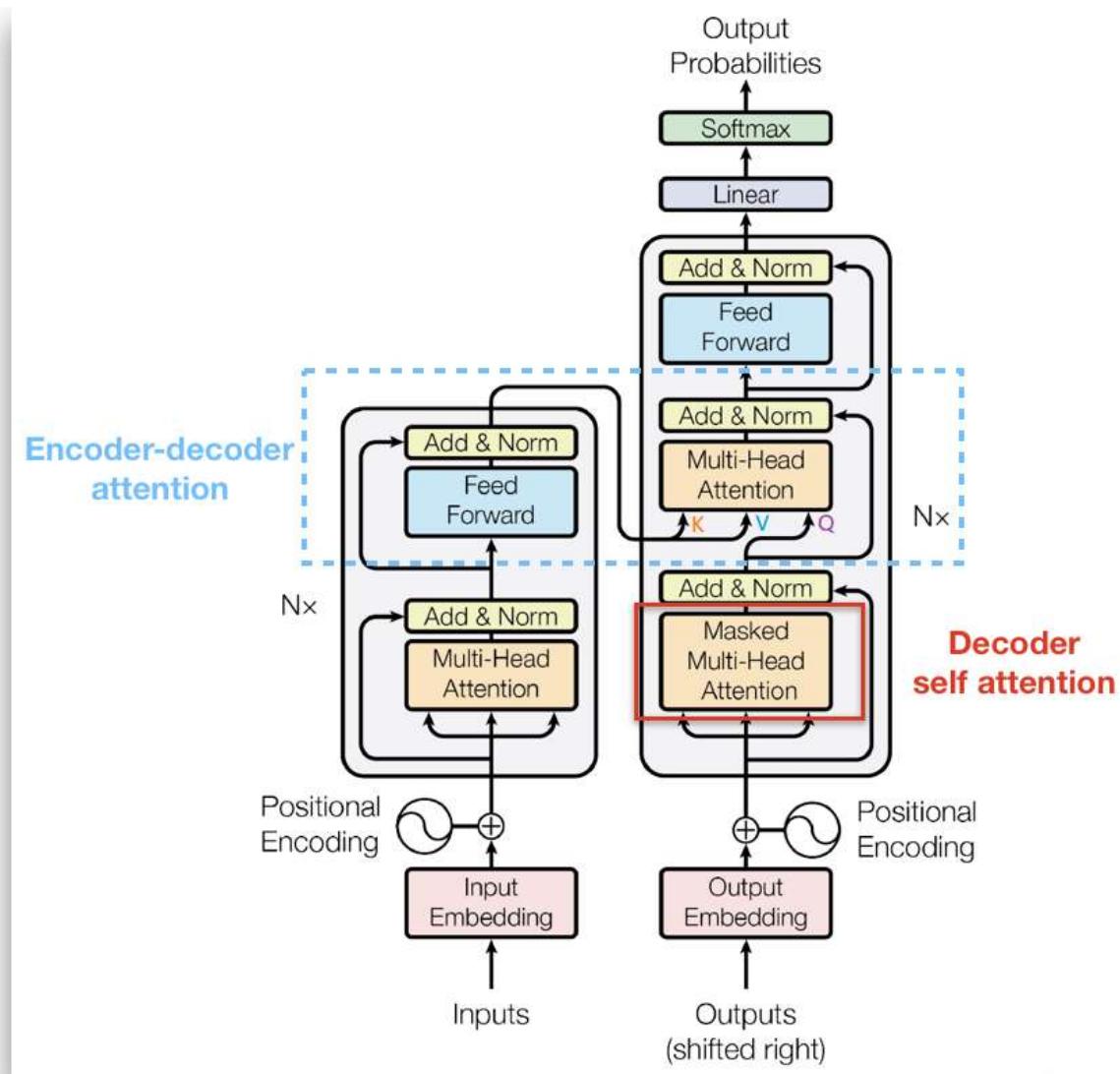
$$X_{hidden} \in \mathbb{R}^{batch\_size * seq\_len. * embed\_dim}$$

## 5. Transformer Decoder 整体结构

我们先从 HighLevel 的角度观察一下 Decoder 结构，从下到上依次是：

- Masked Multi-Head Self-Attention
- Multi-Head Encoder-Decoder Attention
- FeedForward Network

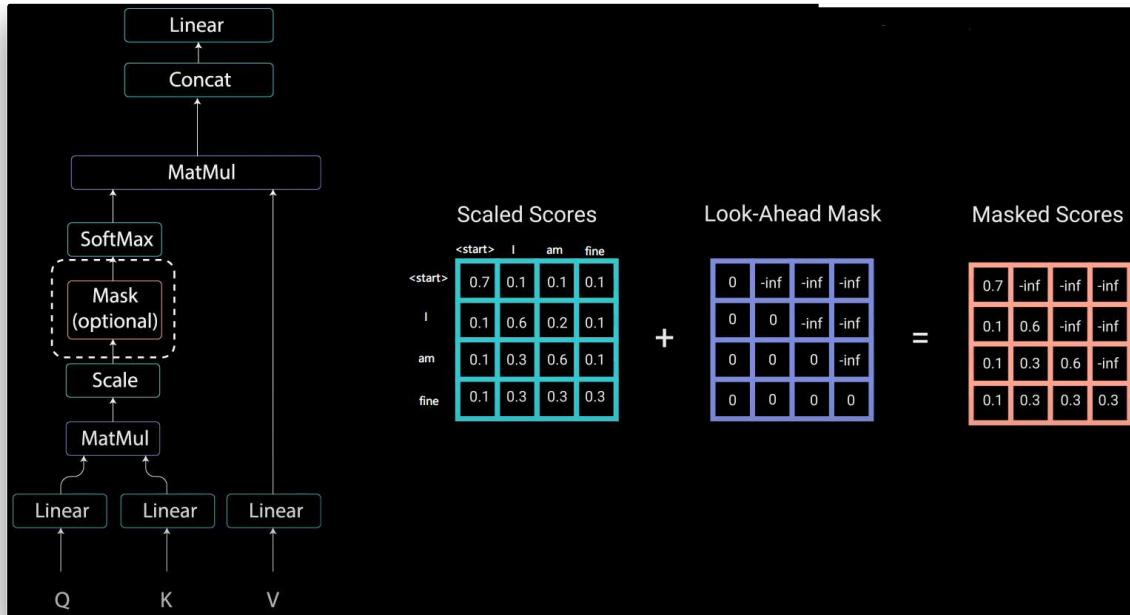
和 Encoder 一样，上面三个部分的每一个部分，都有一个残差连接，后接一个 **Layer Normalization**。Decoder 的中间部件并不复杂，大部分在前面 Encoder 里我们已经介绍过了，但是 Decoder 由于其特殊的功能，因此在训练时会涉及到一些细节



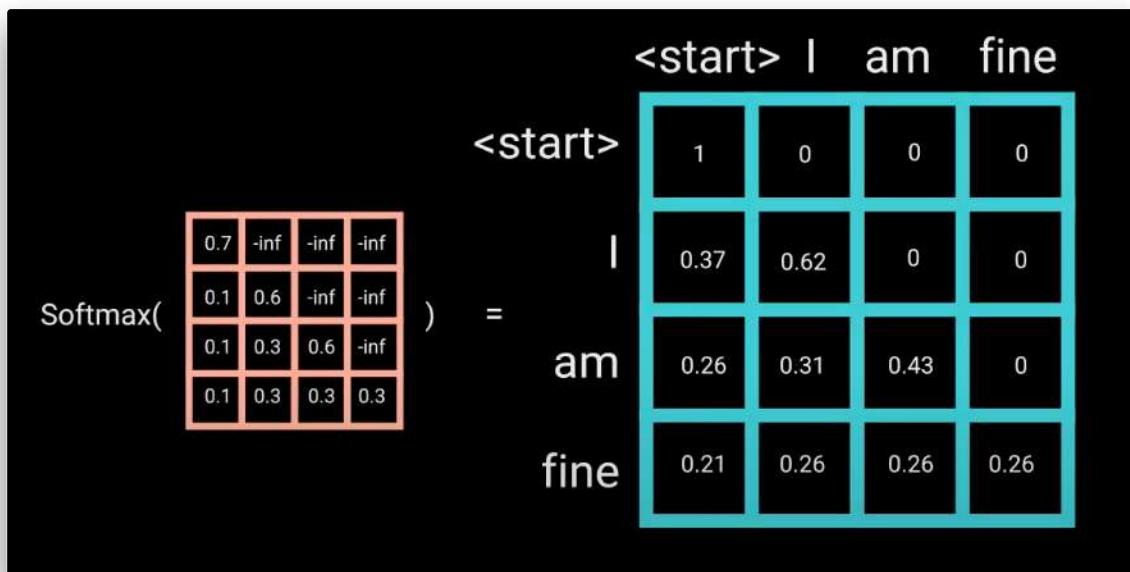
## Masked Self-Attention

具体来说，传统 Seq2Seq 中 Decoder 使用的是 RNN 模型，因此在训练过程中输入  $t$  时刻的词，模型无论如何也看不到未来时刻的词，因为循环神经网络是时间驱动的，只有当  $t$  时刻运算结束了，才能看到  $t + 1$  时刻的词。而 Transformer Decoder 抛弃了 RNN，改为 Self-Attention，由此就产生了一个问题，在训练过程中，整个 ground truth 都暴露在 Decoder 中，这显然是不对的，我们需要对 Decoder 的输入进行一些处理，该处理被称为 Mask

举个例子，Decoder 的 ground truth 为 "<start> I am fine"，我们将这个句子输入到 Decoder 中，经过 WordEmbedding 和 Positional Encoding 之后，将得到的矩阵做三次线性变换 ( $W_Q, W_K, W_V$ )。然后进行 self-attention 操作，首先通过  $\frac{Q \times K^T}{\sqrt{d_k}}$  得到 Scaled Scores，接下来非常关键，我们要对 Scaled Scores 进行 Mask，举个例子，当我们输入 "I" 时，模型目前仅知道包括 "I" 在内之前所有字的信息，即 "<start>" 和 "I" 的信息，不应该让其知道 "I" 之后词的信息。道理很简单，我们做预测的时候是按照顺序一个字一个字的预测，怎么能这个字都没预测完，就已经知道后面字的信息了呢？Mask 非常简单，首先生成一个下三角全 0，上三角全为负无穷的矩阵，然后将其与 Scaled Scores 相加即可



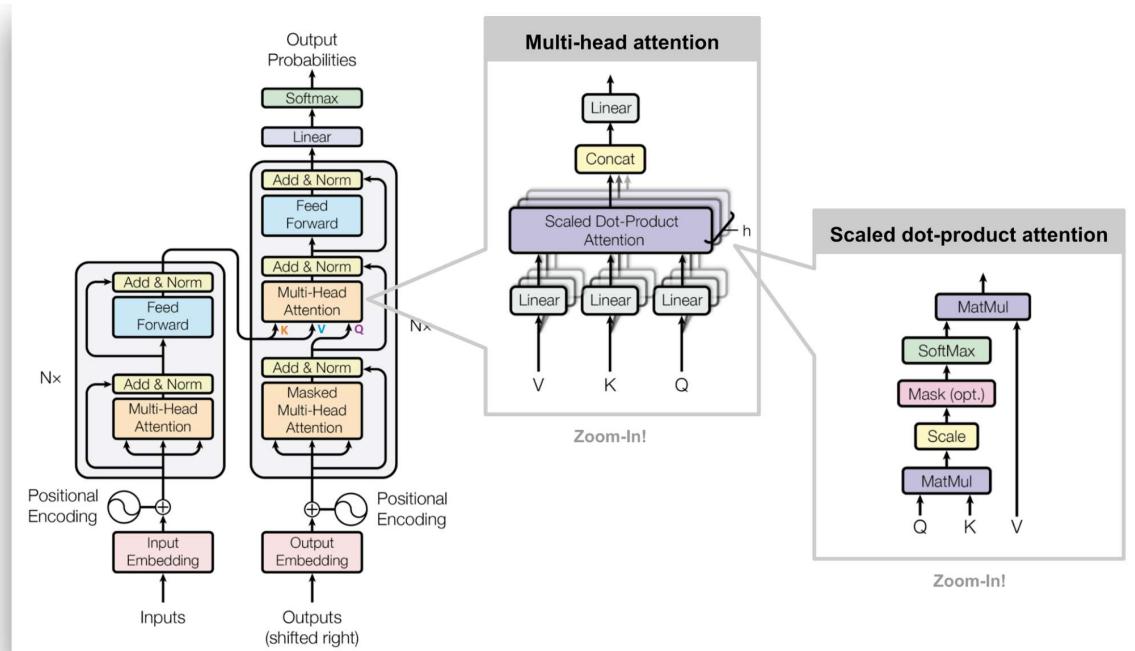
之后再做 softmax，就能将 - inf 变为 0，得到的这个矩阵即为每个字之间的权重



Multi-Head Self-Attention 无非就是并行的对上述步骤多做几次，前面 Encoder 也介绍了，这里就不多赘述了

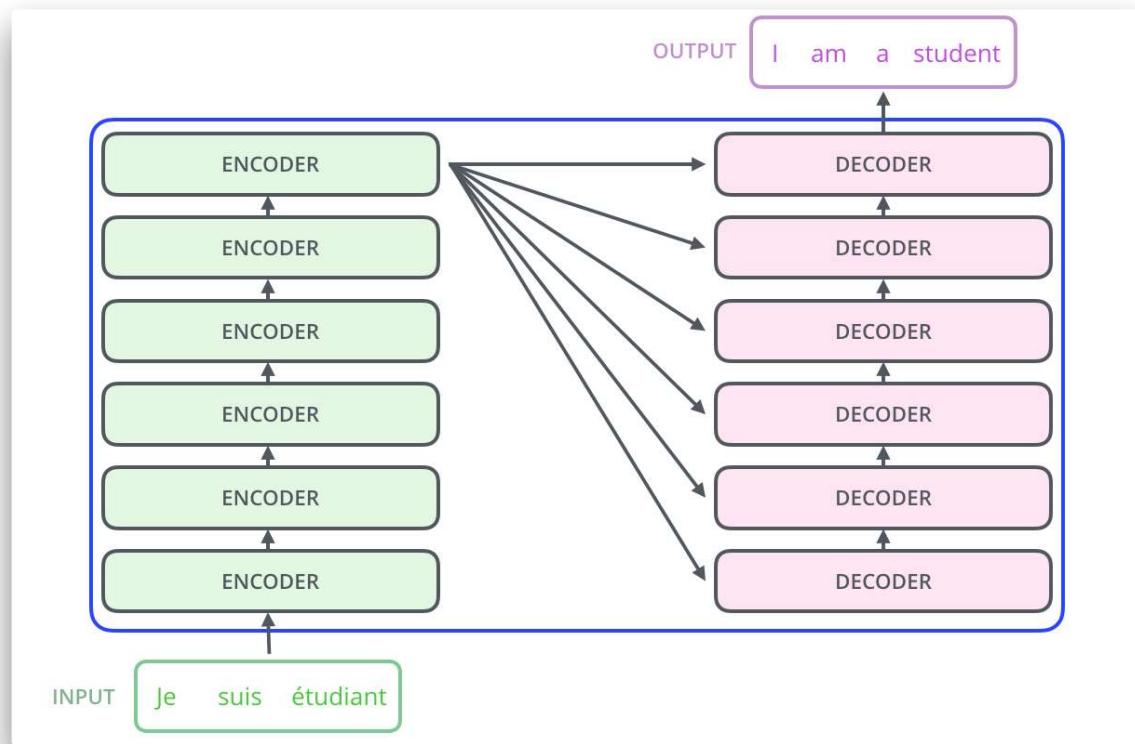
## Masked Encoder-Decoder Attention

其实这一部分的计算流程和前面 Masked Self-Attention 很相似，结构也一摸一样，唯一不同的是这里的  $K, V$  为 Encoder 的输出， $Q$  为 Decoder 中 Masked Self-Attention 的输出



## 6. 总结

到此为止，Transformer 中 95% 的内容已经介绍完了，我们用一张图展示其完整结构。不得不说，Transformer 设计的十分巧夺天工



下面有几个问题，是我从网上找的，感觉看完之后能对 Transformer 有一个更深的理解

### Transformer 为什么需要进行 Multi-head Attention?

原论文中说到进行 Multi-head Attention 的原因是将模型分为多个头，形成多个子空间，可以让模型去关注不同方面的信息，最后再将各个方面信息综合起来。其实直观上也可以想到，如果自己设计这样的

一个模型，必然也不会只做一次 attention，多次 attention 综合的结果至少能够起到增强模型的作用，也可以类比 CNN 中同时使用**多个卷积核**的作用，直观上讲，多头的注意力**有助于网络捕捉到更丰富的特征 / 信息**

## Transformer 相比于 RNN/LSTM，有什么优势？为什么？

1. RNN 系列的模型，无法并行计算，因为 T 时刻的计算依赖 T-1 时刻的隐层计算结果，而 T-1 时刻的计算依赖 T-2 时刻的隐层计算结果
2. Transformer 的特征抽取能力比 RNN 系列的模型要好

## 为什么说 Transformer 可以代替 seq2seq？

这里用代替这个词略显不妥当，seq2seq 虽已老，但始终还是有其用武之地，seq2seq 最大的问题在于**将 Encoder 端的所有信息压缩到一个固定长度的向量中，并将其作为 Decoder 端首个隐藏状态的输入，来预测 Decoder 端第一个单词 (token) 的隐藏状态。**在输入序列比较长的时候，这样做显然会损失 Encoder 端的很多信息，而且这样一股脑的把该固定向量送入 Decoder 端，**Decoder 端不能够关注到其想要关注的信息。**Transformer 不但对 seq2seq 模型这两点缺点有了实质性的改进（多头交互式 attention 模块），而且还引入了 self-attention 模块，让源序列和目标序列首先“自关联”起来，这样的话，源序列和目标序列自身的 embedding 表示所蕴含的信息更加丰富，而且后续的 FFN 层也增强了模型的表达能力，并且 Transformer 并行计算的能力远远超过了 seq2seq 系列模型

## 7. 参考文章

- [Transformer](#)
- [The Illustrated Transformer](#)
- [TRANSFORMERS FROM SCRATCH](#)
- [Seq2seq pay Attention to Self Attention: Part 2](#)

最后编辑于: 2021 年 06 月 06 日

[返回文章列表](#)

[打赏](#)