从零实现大语言模型

Lec3：Transformer 架构的代码实现

Penghao Kuang

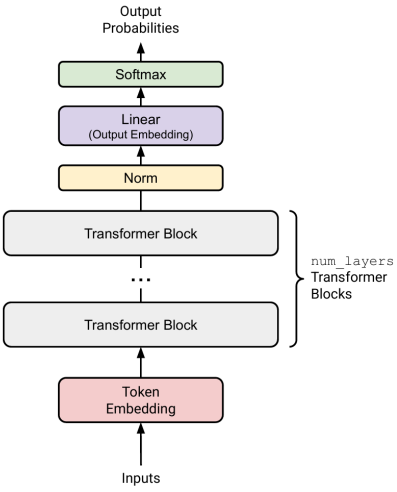
SIST, ShanghaiTech
ACM, DataTech, Geekpie

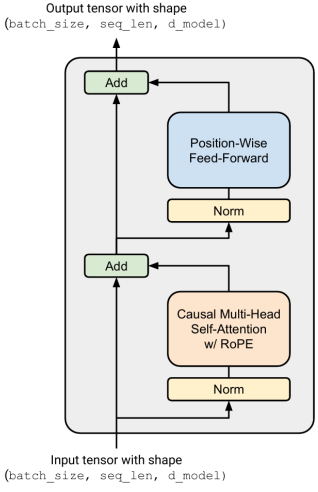
2025.11.2

Overview

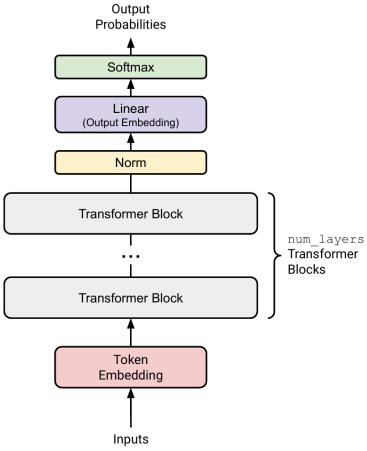
PART1:
宏观系统架构

Transformer 总体架构图示





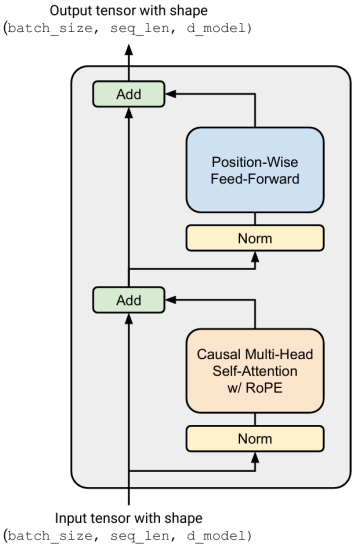
各模块结构的梳理



对于初始输入张量，要经过：

- 一个 Token Embedding 模块，转化成模型可处理的张量格式
- 若干个 Transformer Block 模块，进行多层信息吸收
- 一个 RMSNorm 模块
- 最终的线性激发模块，计算词表中各词权重得分

各模块结构的梳理

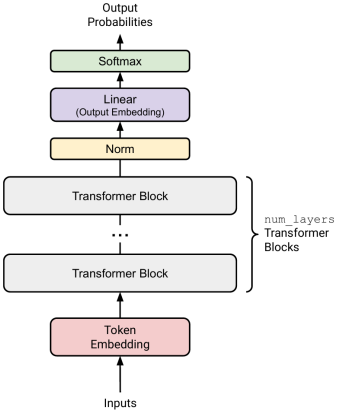


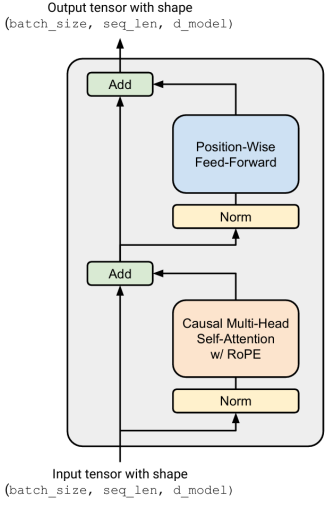
对于进入每个 Block 的张量，要经过：

- 一个 RMSNorm 模块
- 一个多头注意力模块，并进行残差连接
  - 如果选择进行位置编码，则还需要一个 RoPE 模块
  - 注意力权重计算需要 Softmax 模块
- 一个 RMSNorm 模块
- 一个 FFN 模块，并进行残差连接
  - 需要包含 SiLU 激活函数模块

除此之外，几乎所有模块都需要调用线性变换模块！

PART2:
基本运算组件的代码实现





将要实现的模块：

- `Token Embedding`
- `Linear`
- `RMSNorm`
- `SiLU`
- `Softmax`

1.class Generate_Embeddings

IDEA:

- 最原始的输入：BPE 的编码结果（如 [3,10,2,6,4]，均为 token 的词表编号）
- 张量规模：[batch_size,seq_len]
- 期望的模型输入：词表中的不同词拥有不同的编码向量，而非单纯的编号。如：
  - 1 号词拥有一个 d_model 维张量
  - 2 号词拥有另一个 d_model 维张量
  - ……
- 实现思路：生成一个 vocab_size 行、d_model 列的矩阵。每列代表该编号词的初始编码向量。该矩阵随机初始化，代表经模型处理前对任何词的意义都没有先验认知。

1.class Generate_Embeddings

传参方案：

- 初始化环节：传入 vocab_size，d_model，device（pytorch 张量储存在什么设备商）和 dtype（张量各元素的数值类型）。
- forward 环节
  - 传入 token_ids（规模 [batch_size,seq_len]）
  - 输出规模为 [batch_size,seq_len,d_model]

1.class Generate_Embeddings

代码实现：

```python
# vocab_size*embedding_dim矩阵中取样
class Generate_Embeddings(nn.Module):
    def __init__(self,number_embeddings:int,embedding_dim:int,device=None,dtype=None):
        super(Generate_Embeddings,self).__init__()
        self.embedding_matrix=torch.empty(number_embeddings,
                                          embedding_dim,
                                          device=device,
                                          dtype=torch.float32)
        nn.init.trunc_normal_(self.embedding_matrix,mean=0,std=0.02)
    def forward(self,token_ids:torch.Tensor)->torch.Tensor:
        return self.embedding_matrix[token_ids]
```

2.class Linear_Transform

IDEA:

- 假设需要将 3 维张量变成 5 维……
- 在数学上讲：令 3 维张量 x（1*3）右乘一个 3*6 矩阵 W
- xW 规模即为 1*6!

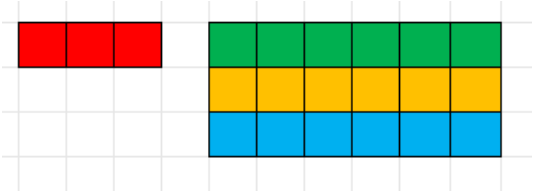
Question: 线性运算是 LLM 中最高频的运算——能否将这种运算尽可能加速？

2.class Linear_Transform

Question: 线性运算是 LLM 中最高频的运算——能否将这种运算尽可能加速？

- Pytorch 的张量遵循“最后一维元素内存地址连续”的原则
- 对于一个 3*6 张量 W，在内存空间上从前往后为：
  - 第一行 6 个元素
  - 第二行 6 个元素
  - 第三行 6 个元素
- 对于一个 4*3*6 张量（batch size，行数，列数），也是每 6 个元素内存连续
- 即：矩阵同行元素内存连续，同列不连续

2.class Linear_Transform

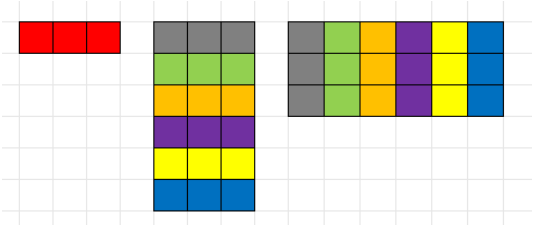


执行 6 次向量点积运算。每次运算中：

- x 整行参与，内存连续，可充分利用缓存
- W 整列参与，内存不连续，可能无法利用缓存

如何让 W 也能“整行”参与每次运算？

2.class Linear_Transform



- Pytorch 的转置操作不改变张量的内存空间……
- 新建 W：[6,3](每 3 元素内存连续)
- 转置 W 为 [3,6]：可进行矩阵乘法，且内存分布不变
- x 与 W 每次运算全部内存连续，可充分利用缓存!

2.class Linear_Transform

```python
# 重点：行主序规则
class Linear_Transform(nn.Module):
    def __init__(self,in_features:int,out_features:int,device=None,dtype=None):
        super(Linear_Transform,self).__init__()
        self.linear_matrix=torch.empty(out_features,
                                       in_features,
                                       device=device,
                                       dtype=torch.float32)
        self.linear_matrix=self.linear_matrix.transpose(-2,-1)
        nn.init.trunc_normal_(self.linear_matrix,mean=0,std=0.02)
        self.linear_matrix=nn.Parameter(self.linear_matrix)

    def forward(self,x:torch.Tensor)->torch.Tensor:
        return torch.matmul(x,self.linear_matrix)
```

3.class RMSNorm

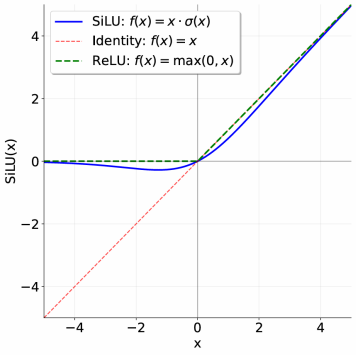
IDEA: 对输入张量 $\vec{a}$ 归一化

- $a_i = \frac{a_i}{RMS(\vec{a})} g_i$(统一除以归一化权重，并进行可学习微调)
- g_i 为可学习参数
- $RMS(\vec{a}) = \sqrt{(\frac{1}{d_{model}} \sum a_i^2) + \epsilon}$

3.class RMSNorm

```python
# 运算法则：归一化*可学习缩放倍数
class RMSNorm(nn.Module):
    def __init__(self,d_model:int,eps:float=1e-5,device=None,dtype=None):
        super(RMSNorm,self).__init__()
        self.eps=eps
        self.g=nn.Parameter(torch.ones(d_model,device=device,dtype=torch.float32))

    def _get_rms(self,x:torch.Tensor)->torch.Tensor:
        sum_square=torch.sum(x**2,dim=-1,keepdim=True)
        mean_square=sum_square/x.shape[-1]
        return torch.sqrt(mean_square+self.eps)

    def forward(self,x:torch.Tensor)->torch.Tensor:
        ori_dtype=x.dtype
        x=x.to(torch.float32) # 张量元素类型转换
        rms=self._get_rms(x)
        x_normed=x/rms
        x_normed=x_normed.to(ori_dtype)
        return x_normed*self.g
```

4.class SiLU_Activation



具体作用:

- 近似实现小于 0 的 x 值归零，大于 0 的值保持原大小不变
- 相比 ReLU 函数，在零点处光滑可导

需预先实现:

- Sigmoid 激活函数
- Sigmoid: $f(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$

4.class SiLU_Activation

```
class Sigmoid_Activation(nn.Module):
    def __init__(self):
        super(Sigmoid_Activation,self).__init__()

    def forward(self,x:torch.Tensor)->torch.Tensor:
        denominator=1+torch.exp(-x)
        return 1/denominator

class SiLU_Activation(nn.Module):
    def __init__(self):
        super(SiLU_Activation,self).__init__()
        self.sigmoid_activator=Sigmoid_Activation()

    def forward(self,x:torch.Tensor)->torch.Tensor:
        sigmoid_x=self.sigmoid_activator(x)
        return x*sigmoid_x
```

5.class Softmax_Activation

$$x_i = \frac{e^{x_i}}{\sum e^{x_i}}$$

- 每个 x_i 计算指数作为权重，再进行权重归一化
- 能够使相对较大值的优势更明显
- 即使较小的值，归一化后仍不为 0

Problem：如果存在 x_i 非常大？

- e^{1000}=NAN!

5.class Softmax_Activation

令 x_{max} 为 x_i 中的最大值：

$$Softmax(x_i) = \frac{e^{x_i}}{\sum e^{x_i}}$$

$$= \frac{e^{x_i}/e^{x_{max}}}{\sum e^{x_i}/e^{x_{max}}}$$

$$= \frac{e^{x_i - x_{max}}}{\sum e^{x_i - x_{max}}}$$

即：令所有 x_i 减去 x_{max}，即可避免过大值无法计算的问题！

5.class Softmax_Activation

```python
class Softmax_Activation(nn.Module):
    def __init__(self,dim:int=-1):
        super(Softmax_Activation,self).__init__()
        self.dim=dim

    def forward(self,x:torch.Tensor)->torch.Tensor:
        #shape of x:(bsz,seq_len,d_k)
        x_max=torch.max(x,dim=self.dim,keepdim=True).values
        x_exp=torch.exp(x-x_max)
        x_exp_sum=torch.sum(x_exp,dim=self.dim,keepdim=True)
        return x_exp/x_exp_sum
```

PART3:
RoPE 变换的代码实现

RoPE 计算法则

对于第 i 位置的 d 维词向量 $\vec{x}$，加以变换得 $R_i\vec{x}$（d 为偶数）

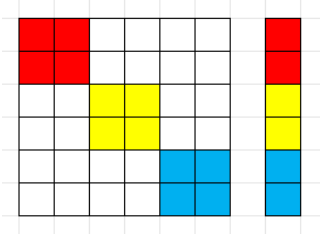
将 d 维向量分成若干个长度为 2 的子段，总共可分成 d/2 个子段。

我们需要关注的参数共有两个：词向量所在的位置 i，词向量内部的子段编号 k。

$$R^i = \begin{bmatrix} R^i_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & R^i_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & R^i_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & R^i_{d/2} \end{bmatrix}$$

$$R^i_k = \begin{bmatrix} \cos(\theta_{i,k}) & -\sin(\theta_{i,k}) \\ \sin(\theta_{i,k}) & \cos(\theta_{i,k}) \end{bmatrix}.$$

其中 $\theta_{i,k} = \frac{i}{\Theta^{2k/d}}$

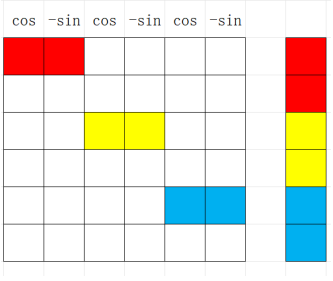


如何避免暴力计算矩阵乘法？

观察：矩阵偶数行对应同样的变化法则：[cos,-sin]，只有角度 $\theta_{i,k}$ 改变

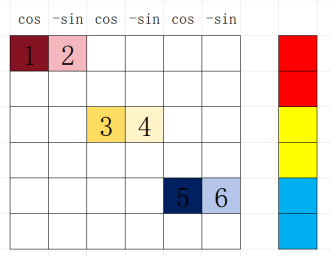
$\Rightarrow$ 如果这些共享相同法则的偶数行能被统一快捷计算，后续可以怎么处理？

- 我们期望将 R_i 的各偶数行二维块计算数值，进行逐块点乘
- 三对逐块点乘结果分别对应了变换后 x 的第 0、2、4 各元素值
- 对于奇数行同理，计算数值后进行逐块点乘，可得 1、3、5 元素值



如何计算 R_i 的值？

- 预先计算规模为 (max_seq_len，d/2) 的 $\theta_{i,k}$ 取值表
- 以此计算相同规模的 $cos(\theta_{i,k})$ 取值表、$sin(\theta_{i,k})$ 取值表
- 由 cos 取值表直接取得 1、3、5 位置的值
- 由 sin 取值表直接取得 2、4、6 位置的值
- 12、34、56 拼接成 3 块，与 x 的三块逐块点乘，得到三个偶数行的值。
- 同理得到 x 变换后所有奇数行的值，二者拼接得到完整的变换后 x 向量



RoPE 变换的代码实现

```python
class RoPE(nn.Module):
    def __init__(self,theta:float,d_k:int,max_seq_len:int,device=None):
        super(RoPE,self).__init__()
        self.theta=theta
        self.d_k=d_k
        self.max_seq_len=max_seq_len
        self.device=device

        d_half=d_k//2
        positions=torch.arange(max_seq_len, device=device).unsqueeze(1)#[max_seq_len,1]
        dims=torch.arange(d_half,device=device).unsqueeze(0)#[1,d_half]
        angles=positions/(theta**(2*dims/d_k))#[max_seq_len,d_half]

        cos_values=torch.cos(angles).unsqueeze(0)
        self.register_buffer("cos_values",cos_values)#(1,max_seq_len,d_half)
        sin_values=torch.sin(angles).unsqueeze(0)
        self.register_buffer("sin_values",sin_values)#(1,max_seq_len,d_half)
```

RoPE 变换的代码实现

```python
def forward(self,x:torch.Tensor,token_positions:torch.Tensor)->torch.Tensor:
    x_splited=x.reshape(*x.shape[:-1],self.d_k//2,2)
    cos_chunk=self.cos_values[:,token_positions,:]
    sin_chunk=self.sin_values[:,token_positions,:]

    even_transform=torch.stack([cos_chunk,-sin_chunk],dim=-1)
    odd_transform=torch.stack([sin_chunk,cos_chunk],dim=-1)

    x_rotated_odd=torch.sum(x_splited*even_transform,dim=-1)#(bsz,seq_len,d_k//2)
    x_rotated_even=torch.sum(x_splited*odd_transform,dim=-1)#(bsz,seq_len,d_k//2)
    stacked_x=torch.stack([x_rotated_odd,x_rotated_even],dim=-1)
    x_rotated=stacked_x.reshape(*stacked_x.shape[:-2],self.d_k)

    return x_rotated
```

PART4:
FFN 与 Attention 的代码实现

1.class Feed_Forward_Network

模块算法（不含残差连接）：

- 输入张量 x(d_model 维)
- 路线 1：经 W1 升维变换为 (d_ff) 维，经过 SiLU 激活函数得到新的 x
- 路线 2：经 W3 做另一个升维变换，得到 gated(d_ff 维)
- x 与 gated 逐元素相乘，得到新的 x
- 经 W2 降维回到 (d_model) 维

1.class Feed_Forward_Network

```python
class Feed_Forward_Network(nn.Module):
    def __init__(self,d_model:int,d_ff=None,device=None,dtype=None):
        super(Feed_Forward_Network,self).__init__()
        self.d_model=d_model
        if d_ff is not None:
            self.d_ff=d_ff
        else:
            self.d_ff=int(8/3*d_model)
        self.linear_w1=Linear_Transform(d_model,d_ff,device=device,dtype=dtype)
        self.linear_w3=Linear_Transform(d_model,d_ff,device=device,dtype=dtype)
        self.linear_w2=Linear_Transform(d_ff,d_model,device=device,dtype=dtype)
        self.activator=SiLU_Activation()
```

1.class Feed_Forward_Network

```python
def forward(self,x:torch.Tensor)->torch.Tensor:
    enhanced=self.linear_w1(x)
    activated=self.activator(enhanced)
    gate=self.linear_w3(x)
    gated=activated*gate
    output=self.linear_w2(gated)
    return output
```

2.class Multihead_Attention

模块算法（不含残差连接）：

- 输入张量 x[batch_size,seq_len,d_model]
- 经过三种线性变换，相当于 x 的每一个 d_model 维词向量做线性变换得：
  - Q、K 矩阵 [batch_size,seq_len,num_heads*d_k]
  - V 矩阵 [batch_size,seq_len,num_heads*d_v]
- 对 Q、K 矩阵做 RoPE 位置编码
- 生成注意力上三角掩码（防止破坏“自回归”假设）
- 利用 QKV 矩阵、注意力掩码计算注意力输出

2.class Multihead_Attention

注意力输出的计算方法：

- Q、K 矩阵相乘，计算 token 特征匹配度
- 匹配度矩阵做掩码处理
- $Softmax(\frac{QK^T}{\sqrt{d_k}})$，计算 token 之间注意力得分
- 将得分矩阵乘 V 矩阵，得到注意力输出
- 多头注意力输出合并

注意力输出的计算

```python
class Scaled_dot_Product_Attention(nn.Module):
    def __init__(self):
        super(Scaled_dot_Product_Attention,self).__init__()

    def forward(self,Q:torch.Tensor,K:torch.Tensor,V:torch.Tensor,mask:torch.Tensor=None)->torch.Tensor:
        d_k=Q.shape[-1]

        attn_score=torch.matmul(Q,K.transpose(-2,-1))/math.sqrt(d_k)#[bsz,*,Qseq_len,Kseq_len]
        if mask is not None:
            attn_score=attn_score.masked_fill(mask==0,float('-inf'))
        softmax=Softmax_Activation(dim=-1)
        attn_weight=softmax(attn_score)#[bsz,*,Qseq_len,Kseq_len]

        #V:[bsz,*,Kseq_len,d_v]
        attn_output=torch.matmul(attn_weight,V)
        return attn_output#[bsz,*,Qseq_len,d_v]
```

注意力掩码的生成

```python
class Causal_Mask:
    def __init__(self,seq_len,device=None):
        self.seq_len=seq_len
        self.device=device

    def generate(self)->torch.Tensor:
        ones=torch.ones(self.seq_len,self.seq_len,device=self.device)
        mask=torch.triu(ones,diagonal=1)
        mask=(mask==0)
        return mask
```

Multihead_Attention 所有的子模块梳理

- 注意力掩码生成模块
- 注意力输出计算模块
- RoPE 模块 ⇒ 需要额外具备 max_seq_len、theta、token_positions 等相关参数
- Q、K、V、O 四种线性变换

完整模块的组装

```python
class Multihead_Attention(nn.Module):
    def __init__(self,d_model:int,num_heads:int,max_seq_length:int=None,theta:int=None,device=None):
        super(Multihead_Attention,self).__init__()

        self.d_model=d_model
        self.num_heads=num_heads
        self.d_k=d_model//num_heads
        self.d_v=d_model//num_heads

        self.max_seq_length=max_seq_length
        self.theta=theta
        self.token_positions=None

        self.q_proj=Linear_Transform(d_model,num_heads*self.d_k,device=device)
        self.k_proj=Linear_Transform(d_model,num_heads*self.d_k,device=device)
        self.v_proj=Linear_Transform(d_model,num_heads*self.d_v,device=device)
        self.o_proj=Linear_Transform(num_heads*self.d_v,d_model,device=device)

        self.sdpa=Scaled_dot_Product_Attention()

        if max_seq_length is not None and theta is not None:
            self.rope=RoPE(theta,self.d_k,max_seq_length,device=device)
        else:
            self.rope=None
```

完整模块的组装

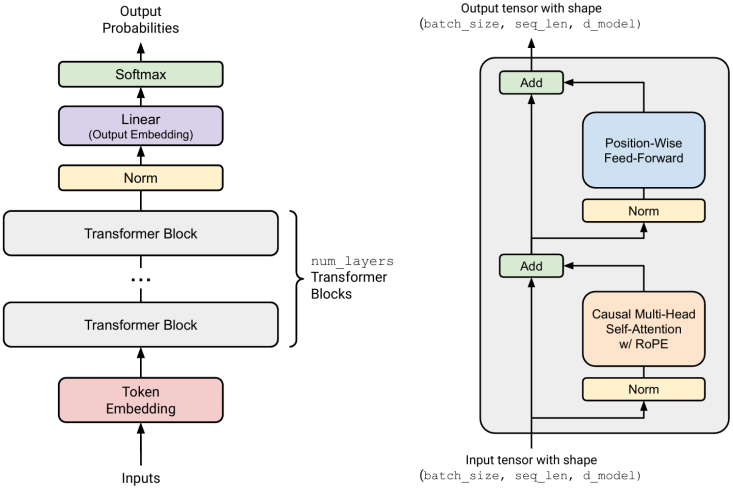
```
def forward(self,x:torch.Tensor,token_positions:torch.Tensor=None)->torch.Tensor:
    bsz=x.shape[0]
    seq_len=x.shape[1]

    #qk:[bsz,n_heads,seq_len,d_k],v:[bsz,n_heads,seq_len,d_v]
    Q=self.q_proj(x)
    Q=Q.reshape(bsz,seq_len,self.num_heads,self.d_k).transpose(1,2)
    K=self.k_proj(x)
    K=K.reshape(bsz,seq_len,self.num_heads,self.d_k).transpose(1,2)
    V=self.v_proj(x)
    V=V.reshape(bsz,seq_len,self.num_heads,self.d_v).transpose(1,2)

    #apply RoPE on QK
    if self.rope is not None:
        self.token_positions=token_positions
        Q=self.rope(Q,self.token_positions)
        K=self.rope(K,self.token_positions)
```

完整模块的组装

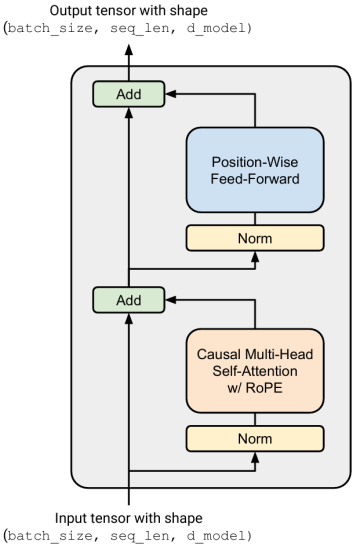
```
mask=Causal_Mask(seq_len,device=x.device).generate()
mask=mask.unsqueeze(0).unsqueeze(1)

attn_output=self.sdpa(Q,K,V,mask)
attn_output=attn_output.transpose(1,2).reshape(bsz,seq_len,self.num_heads*self.d_v)
attn_output=self.o_proj(attn_output)

return attn_output
```

PART5:
Transformer Block 与最终模型的组装

Transformer 总体架构图示



Transformer Block 结构的梳理



对于进入每个 Block 的张量，要经过：

- 一个 RMSNorm 模块
- Multihead Attention 模块
- 残差连接
- 另一个 RMSNorm 模块
- FFN 模块
- 残差连接

每个 Block 要接收的参数，就是以上所有模块需要的参数并集！

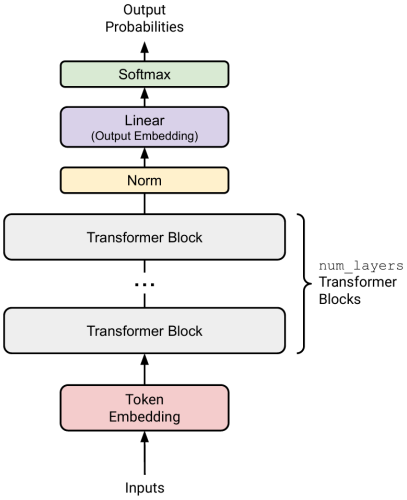
Transformer Block 的组装

```python
class Transformer_Block(nn.Module):
    def __init__(self,
                 d_model:int,
                 num_heads:int,
                 d_ff:int,
                 max_seq_length:int=None,
                 theta:int=None,
                 dtype=None,
                 device=None):
        super(Transformer_Block,self).__init__()
        self.RMSNorm_Attn=RMSNorm(d_model,dtype=dtype,device=device)
        self.RMSNorm_FF=RMSNorm(d_model,dtype=dtype,device=device)
        self.Multihead_Attn=Multihead_Attention(d_model,num_heads,max_seq_length,theta,device=device)
        self.Feed_Forward=Feed_Forward_Network(d_model,d_ff,device=device,dtype=dtype)
```

Transformer Block 的组装

```
def forward(self,x:torch.Tensor,token_positions:torch.Tensor)->torch.Tensor:
    residual_attn=x
    x_normed_attn=self.RMSNorm_Attn(x)
    attn_output=self.Multihead_Attn(x_normed_attn,token_positions)
    x=residual_attn+attn_output

    residual_ff=x
    x_normed_ff=self.RMSNorm_FF(x)
    ff_output=self.Feed_Forward(x_normed_ff)
    x=residual_ff+ff_output

    return x
```

Transformer 完整结构的梳理



对于初始输入张量，要经过：

- 一个 Token Embedding 模块，转化成模型可处理的张量格式
- 若干个 Transformer Block 模块，进行多层信息吸收
- 一个 RMSNorm 模块
- 最终的线性激发模块，计算词表中各词权重得分

完整 Transformer 的组装

```
class Transformer_LM(nn.Module):
    def __init__(self,d_model:int,num_heads:int,d_ff:int,vocab_size:int,num_layers:int,
                 max_seq_length:int=None,theta:int=None,dtype=None,device=None):
        super(Transformer_LM,self).__init__()
        self.d_model=d_model
        self.num_heads=num_heads
        self.d_ff=d_ff
        self.vocab_size=vocab_size
        self.num_layers=num_layers
        self.max_seq_length=max_seq_length
        self.theta=theta
        self.dtype=dtype
        self.device=device
        self.embeddings=Generate_Embeddings(vocab_size,d_model,device=device,dtype=dtype)
        self.transformer_blocks=nn.ModuleList([
            Transformer_Block(d_model=d_model,num_heads=num_heads,d_ff=d_ff,
                              max_seq_length=max_seq_length,theta=theta,dtype=dtype,device=device)
            for _ in range(num_layers)])
        self.final_norm=RMSNorm(d_model,device=device,dtype=dtype)
        self.final_layer=Linear_Transform(d_model,vocab_size,device=device,dtype=dtype)
```

完整 Transformer 的组装

```
def forward(self,token_ids:torch.Tensor,token_positions:torch.Tensor)->torch.Tensor:
    x=self.embeddings(token_ids)
    for block in self.transformer_blocks:
        x=block(x,token_positions)
    x=self.final_norm(x)
    linear_score=self.final_layer(x)
    return linear_score
```

谢谢！