

Transformer

- 基本背景

Transformer由论文《Attention is All You Need》提出，现在是谷歌云TPU推荐的参考模型。论文相关的Tensorflow的代码可以从GitHub获取，其作为Tensor2Tensor包的一部分。哈佛的NLP团队也实现了一个基于PyTorch的版本，并注释该论文。

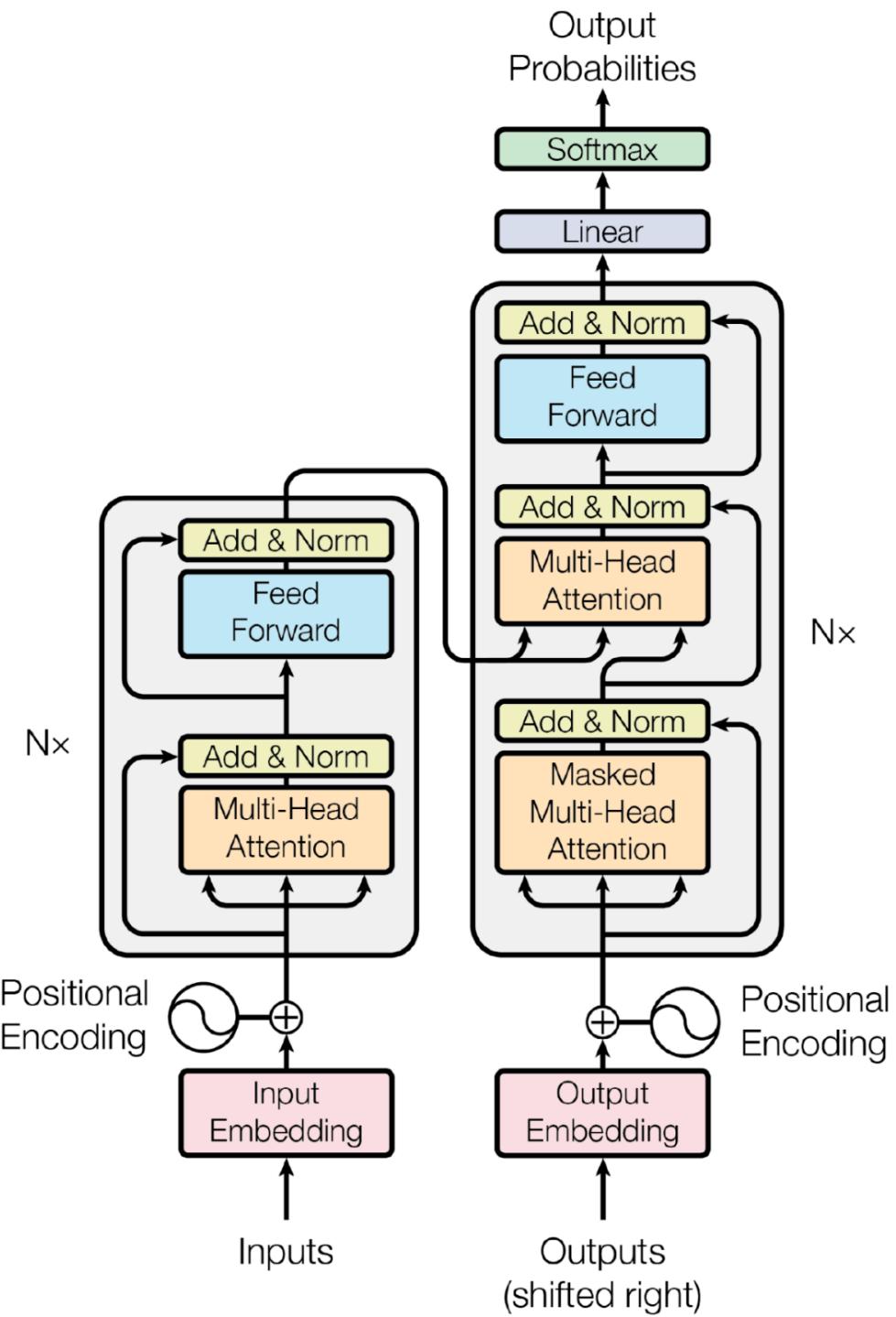
Transformer解决了RNN无法并行计算，长距离信息遗忘的问题，并且彻底摒弃RNN, CNN结构来计算，转而使用**Attention**注意力机制来解决问题。

1. Transformer 整体结构与工作流程

1.1 Transformer的整体结构

首先介绍Transformer的整体结构，传统的Transformer是 `Encoder-Decoder` 结构。

下图是Transformer的总体结构 (重要)：



可以看到 Transformer由Encoder(左)和Decoder(右)两个部分 组成。

- Encoder (编码器): 输入序列特征编码
 - 前置处理: 词嵌入 **token-embedding** 和 位置编码 **position-embedding**
 - 单层结构 (TransformerBlock) (注意: 顺序执行):
 - 多头自注意力(MultiHeadAttention) 层 (捕捉输入序列内部 token 依赖)
 - 第一次 Add & Norm (残差连接 + 层归一化, 目的: **保留原始信息, 稳定训练过程。**)
 - 前馈神经网络 (FFN): 独立非线性变换 token 向量

- 第二次 Add & Norm (残差连接 + 层归一化, 目的: 保留原始信息, 稳定训练过程。)
- **输出:** 融合了序列内部依赖关系 + 非线性变换特征、分布稳定的 token, 维度保持不变的序列。
- Decoder (解码器): 目标序列自回归生成
 - **前置处理:** 词嵌入 **token-embedding** 和 位置编码 **position-embedding**, 并加 **attention-mask**。
 - **单层结构** (TransformerBlock) (注意: 顺序执行):
 - 多头自注意力(MultiHeadAttention) 层 (捕捉输入序列内部 token 依赖)
 - 第一次 Add & Norm (残差连接 + 层归一化, 目的: 保留原始信息, 稳定训练过程。)
 - 编码器 - 解码器注意力层: Query 来自 Decoder, Key/Value 来自 Encoder, 关联输入与目标序列
 - 第二次 Add & Norm (残差连接 + 层归一化, 目的: 保留原始信息, 稳定训练过程。)
 - FeedForward层 (进一步提取和增强 token 的深层特征)
 - 第三次 Add & Norm (残差连接 + 层归一化, 目的: 保留原始信息, 稳定训练过程。)
 - **输出:** 经线性层 + **Softmax**, 输出目标 token 的概率分布, 逐 token 生成结果。

1.2 Transformer的工作流程

Transformer的工作流程如下(重要):

- 第一步 嵌入 (Embedding)

分为 **词嵌入** 和 **位置编码** 两个子步骤。

- **词嵌入**(**token-embedding**) 如何得到

单词的 **Embedding** 有很多种方式可以获取, 例如可以采用 **word2vec**、**One-hot**、**Glove** 等算法预训练得到, 也可以在 **Transformer** 中训练得到。

- **位置编码** (**position-embedding**)

$$PE_{(pos,2i)} = \sin(pos/10000^{2i/d})$$

$$PE_{(pos,2i+1)} = \cos(pos/10000^{2i/d})$$

其中, pos 表示单词在句子中的位置, d 表示 PE 的维度, $2i$ 表示偶数的维度, $2i + 1$ 表示奇数维度。

即 $2i \leq d, 2i + 1 \leq d$ 。(注意: PE 就是位置编码 **position-embedding**, 且 $d_{PE} = d_{TE}$)

使用这种公式计算 PE 有以下的好处:

1. 使位置向量能够适应比训练集里面所有句子更长的句子。

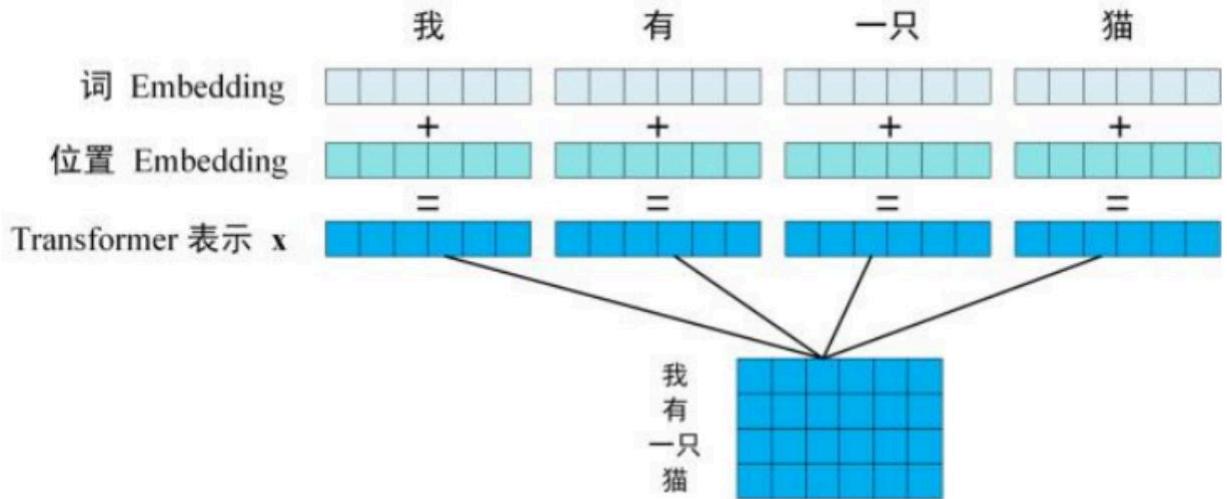
假设训练集里面最长的句子长度是20个token, 突然来了一个token长度为为21的句子, 则使用公式计算的方法可以计算出第 21 位的 Embedding。)

2. 可以让模型容易地计算出相对位置。

对于固定长度的间距 k ， $PE(pos + k)$ 可以用 $PE(pos)$ 计算得到。

因为底层逻辑可以使用 正弦余弦和差角公式。

`position-embedding` 和 `token-embedding` 相加 (二者维度一致) 之后得到 **Transformer** 表示 X 。



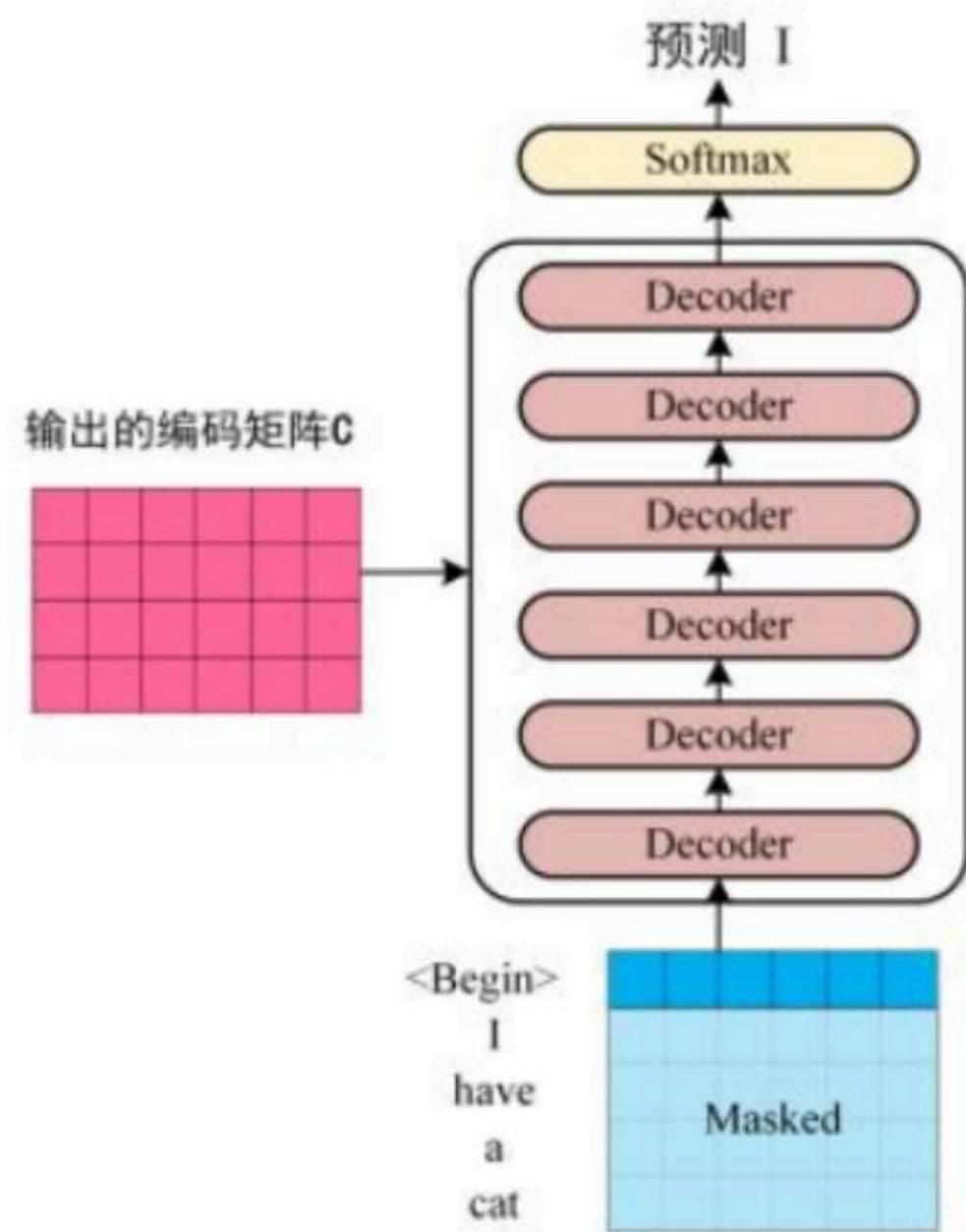
由于 X 由 **Token** 的 `Embedding` 和它 **Position** 的 `Embedding` 相加得到，因此 X 包含了每个 **Token** 在文本中的位置信息和词原本的意思。

- 第二步 编码 (Encoding)

将得到的单词表示向量矩阵 X (如上图所示) 传入 `Encoder` 中，经过6个 `Encoder` 后可以得到句子所有单词 的编码信息矩阵 C ，如下图。单词向量矩阵用 $X_n \cdot d$ 表示， n 是句子中单词个数， d 是表示向量的维度(论文中 $d = 512$)。每一个 `Encoder` 输出的矩阵维度与输入完全一致。

- 第三步 解码 (Decoding)

这一步将 `Encoder` 输出的编码信息矩阵 C 传递到 `Decoder` 中，`Decoder` 依次会根据当前预测过的单词预测下一个。



重点: 在使用的过程中，翻译到单词 i 的时候需要通过 mask (掩盖) 操作遮盖住 $i + 1$ 之后的单词。

例如上图, Decoder 接收了 Encoder 的编码矩阵 C , 然后首先输入一个翻译开始符 "", 预测第一个单词 "I" ; 然后输入翻译开始符 "" 和单词 "I" , 预测单词 "have" , 以此类推。这是 Transformer 使用时候的大致流程, 接下来是里面各个部分的细节。

Encoder 和 Decoder 的工作过程中大量涉及到 self-Attention (自注意力机制) 的概念, 接下来就要介绍。

2. Self-Attention (自注意力机制)

我们重点关注 Multi-Head Attention 以及 self-Attention (SingleHeadAttention) ;

首先详细了解一下 self-Attention 的内部逻辑。

2.1 Self-Attention 结构

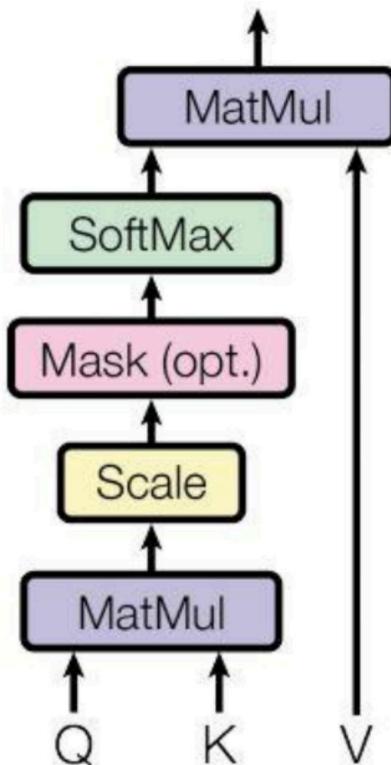
下图是 self-Attention 的结构，在计算的时候需要用到矩阵 Q (查询), K (键), V (值)。

在实际中，self-Attention 接收的是 输入。

输入的组成：

- 单词的表示向量组成的矩阵 X
- 上一个 Encoder block 的输出。

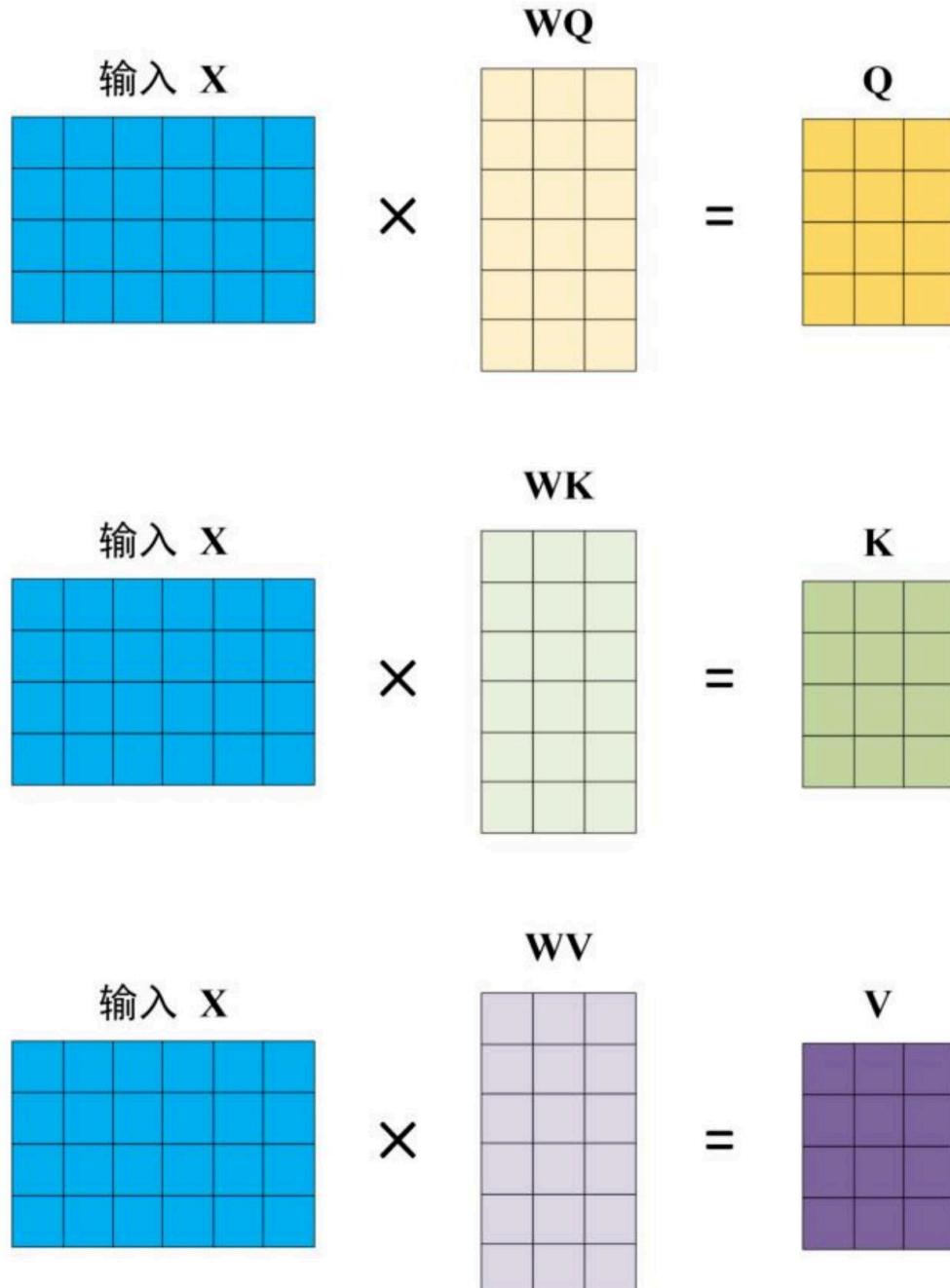
而 Q, K, V 正是通过 Self-Attention 的输入进行线性变换得到的。



2.2 Q, K, V 的计算

若 self-Attention 的输入用矩阵 X 进行表示，则：

可以用线性变阵矩阵 W_Q, W_K, W_V 计算得到 Q, K, V 。计算如下图所示：



(注意 X, Q, K, V 的每一行都表示一个 **token**。 X, Q, K, V 本身表示的是 **token** 序列。)

2.3 Self-Attention 的输出

得到矩阵 Q, K, V 之后就可以计算出 self-Attention 的输出了，计算的公式如下：

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

d_k 是 Q, K 矩阵的列数，即向量维度。

- $\sqrt{d_k}$ 是 **缩放因子**，除以它可以防止内积的结果过大，进而 **防止计算过程中出现梯度爆炸或梯度消失**。

- softmax 的作用是将注意力得分转化为合法的概率分布，以此量化不同 token 对当前 token 的重要程度。

如下图, Q 点乘 K^T 后, 得到的矩阵行列数都为 n (n 为组成文本 token 长度, 下图中 $n = 4$), 这个矩阵可以表示 token 之间的 attention 强度。下图为 Q 乘以 K^T , 1234 列表示的是句子中的 token。

$$\begin{array}{c}
 \textbf{Q} \\
 \begin{array}{l}
 1 \\
 2 \\
 3 \\
 4
 \end{array}
 \end{array}
 \times
 \begin{array}{c}
 \textbf{K}^T \\
 \begin{array}{l}
 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4
 \end{array}
 \end{array}
 =
 \begin{array}{c}
 \textbf{QK}^T \\
 \begin{array}{l}
 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4
 \end{array}
 \end{array}$$

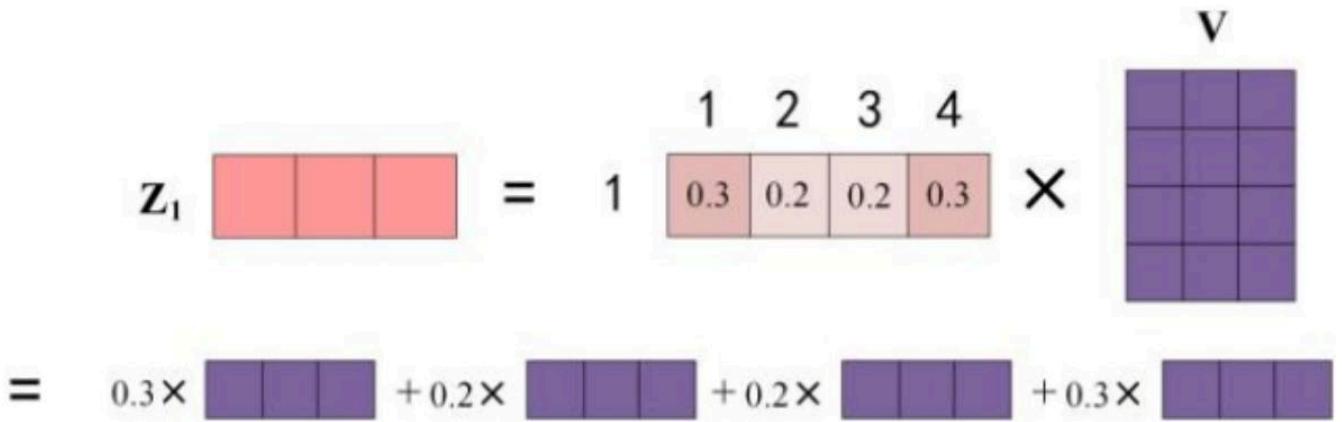
得到 QK^T 之后, 还要除以缩放因子 $\sqrt{d_k}$, 然后使用 softmax 映射, 将每一行的和都变为 1。

$$\begin{array}{c}
 \begin{array}{l}
 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4
 \end{array}
 \\ \text{Softmax} \rightarrow
 \begin{array}{c}
 \begin{array}{l}
 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4
 \end{array}
 \end{array}
 \end{array}$$

最后和 V 相乘, 得到最终的输出 Z 。

$$\begin{array}{c}
 \begin{array}{l}
 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4
 \end{array}
 \\ \times
 \begin{array}{c}
 \textbf{V} \\
 \begin{array}{l}
 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4
 \end{array}
 \end{array}
 =
 \begin{array}{c}
 \textbf{Z} \\
 \begin{array}{l}
 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4
 \end{array}
 \end{array}
 \end{array}$$

计算示例:



实现代码如下:

```

class EncodersingleHeadAttention(nn.Module):
    def __init__(self, config):
        super().__init__()
        self.head_size = config.head_size
        self.key = nn.Linear(config.n_embd, config.head_size)
        self.query = nn.Linear(config.n_embd, config.head_size)
        self.value = nn.Linear(config.n_embd, config.head_size)
        self.dropout = nn.Dropout(config.dropout)

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

        # 对输入进行线性变换得到K, Q, V矩阵
        k = self.key(x) # [batch_size, seq_len, head_size]
        q = self.query(x) # [batch_size, seq_len, head_size]
        v = self.value(x) # [batch_size, seq_len, head_size]
        batch_size, seq_len, hidden_dim = x.size()

        # 计算注意力得分（缩放点积）
        weight = q @ k.transpose(-2, -1) # [batch_size, seq_len, seq_len]
        weight = weight / math.sqrt(self.head_size) # 缩放避免梯度问题

        # Softmax归一化 + Dropout
        weight = F.softmax(weight, dim=-1) # [batch_size, seq_len, seq_len]
        weight = self.dropout(weight)

        # 输出注意力结果
        return weight @ v # [batch_size, seq_len, head_size]

class DecodersingleHeadAttention(nn.Module):
    def __init__(self, config):
        super().__init__()
        self.head_size = config.head_size
        self.key = nn.Linear(config.n_embd, config.head_size)
        self.query = nn.Linear(config.n_embd, config.head_size)
        self.value = nn.Linear(config.n_embd, config.head_size)
        self.register_buffer(
            "attention_mask",

```

```

        torch.tril(
            torch.ones(config.block_size, config.block_size)
        )
    )
    self.dropout = nn.Dropout(config.dropout)

def forward(self, x):

    # 对输入进行线性变换得到K, Q, V矩阵
    k = self.key(x) # [batch_size, seq_len, head_size]
    q = self.query(x) # [batch_size, seq_len, head_size]
    v = self.value(x) # [batch_size, seq_len, head_size]
    batch_size, seq_len, hidden_dim = x.size()

    # 计算注意力得分（缩放点积）
    weight = q @ k.transpose(-2, -1)
    weight = weight / math.sqrt(self.head_size)
    weight = weight.masked_fill(
        self.attention_mask[:seq_len, :seq_len] == 0,
        float('-inf')
    )

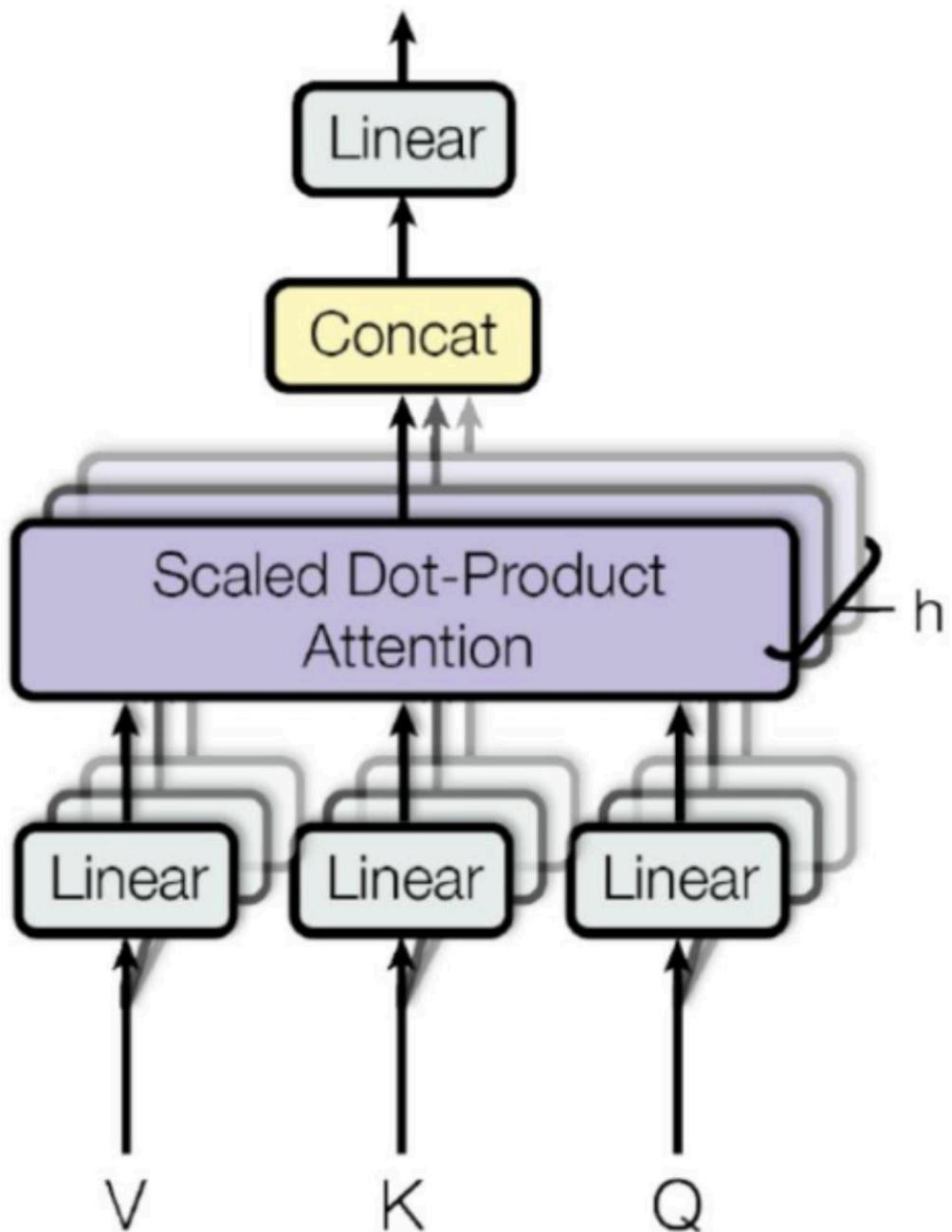
    # Softmax归一化 + Dropout
    weight = F.softmax(weight, dim=-1) # [batch_size, seq_len, seq_len]
    weight = self.dropout(weight)

    # 输出注意力结果
    return weight @ v # [batch_size, seq_len, head_size]

```

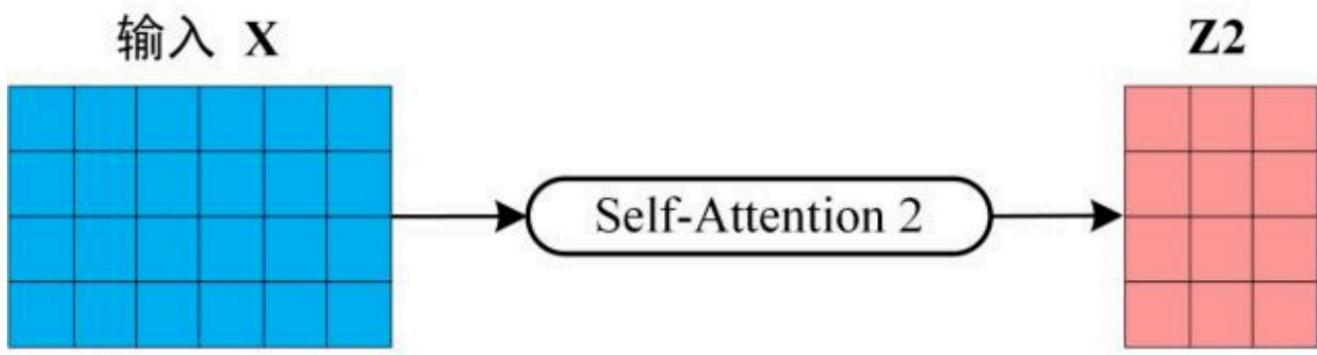
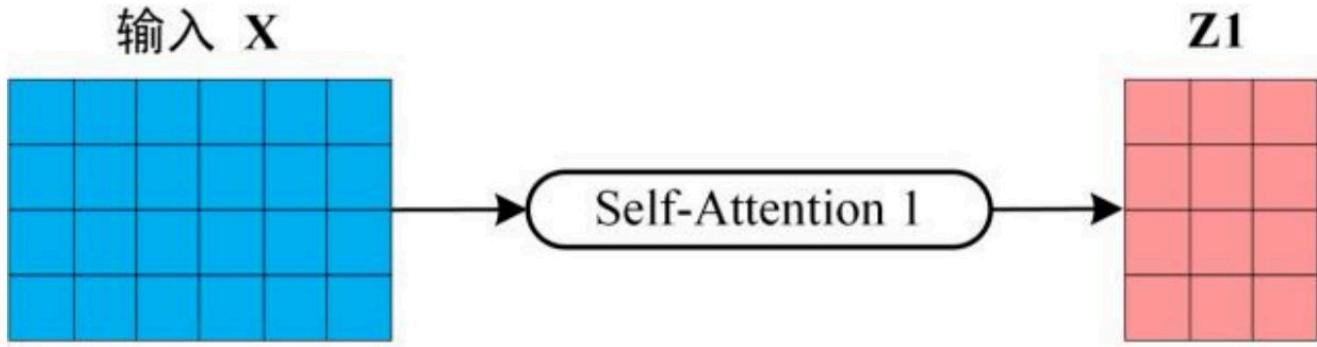
2.4 Multi-Head Attention

在上一步，我们已经知道怎么通过 `Self-Attention` 计算得到输出矩阵 Z ，而 `Multi-Head Attention` 是由多个 `Self-Attention` 组合形成的，下图是论文中 `Multi-Head Attention` 的结构图。

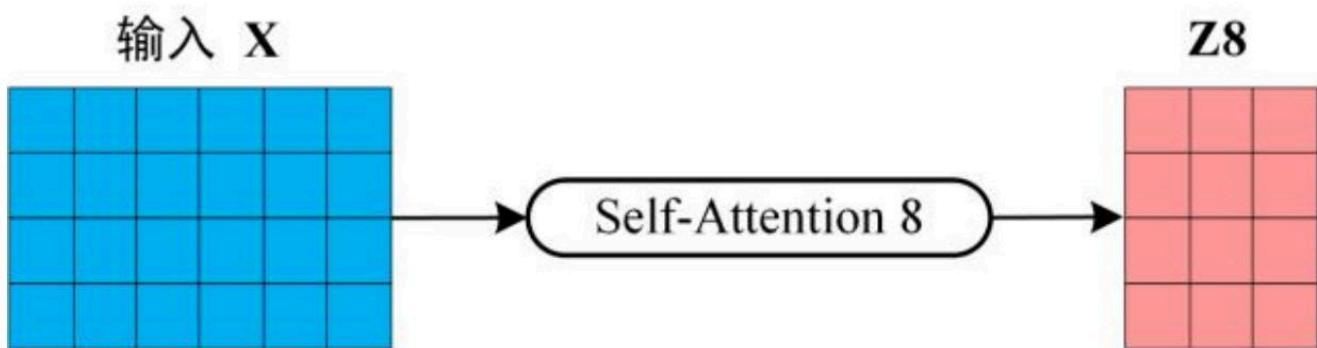


从上图可以看到 `Multi-Head Attention` 包含多个 `Self-Attention` 层，首先将输入 X 分别传递到 h 个不同的 `Self-Attention` 中，

计算得到 h 个输出矩阵 Z 。下图是 $h = 8$ 时候的情况，此时会得到 8 个输出矩阵 Z 。

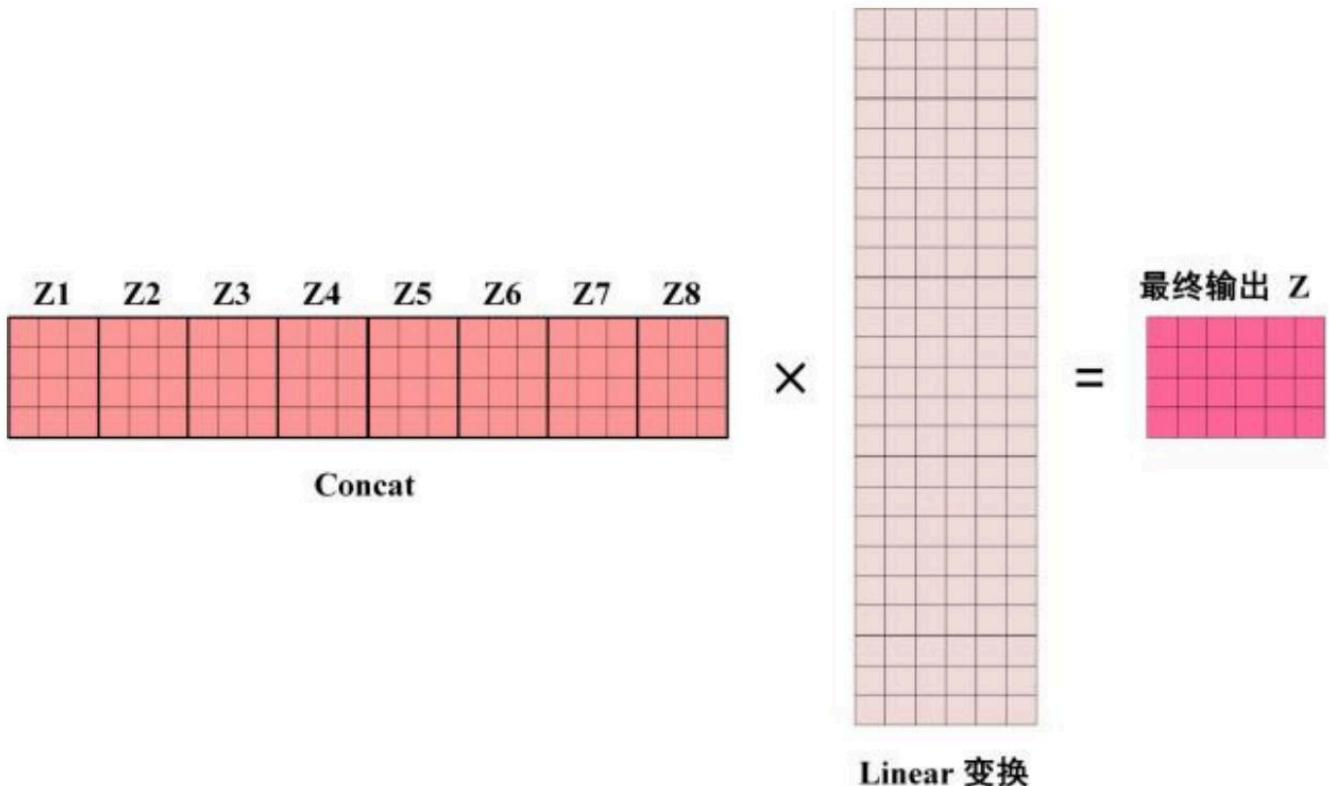


• • • • •



得到 8 个输出矩阵 Z_1 到 Z_8 之后，Multi-Head Attention 将它们拼接在一起 (concat)，然后传入一个 Linear 层，

得到 `Multi-Head Attention` 最终的输出 Z 。



可以看到 `Multi-Head Attention` 输出的矩阵 Z 与其输入的矩阵 X 的维度是一样的。

实现代码如下

```
class DecoderMultiHeadAttention(nn.Module):
    def __init__(self, config):
        super().__init__()
        self.heads = nn.ModuleList([
            DecodersingleHeadAttention(config)
            for _ in range(config.n_heads)
        ])
        self.proj = nn.Linear(config.n_embd, config.n_embd)
        self.dropout = nn.Dropout(config.dropout)

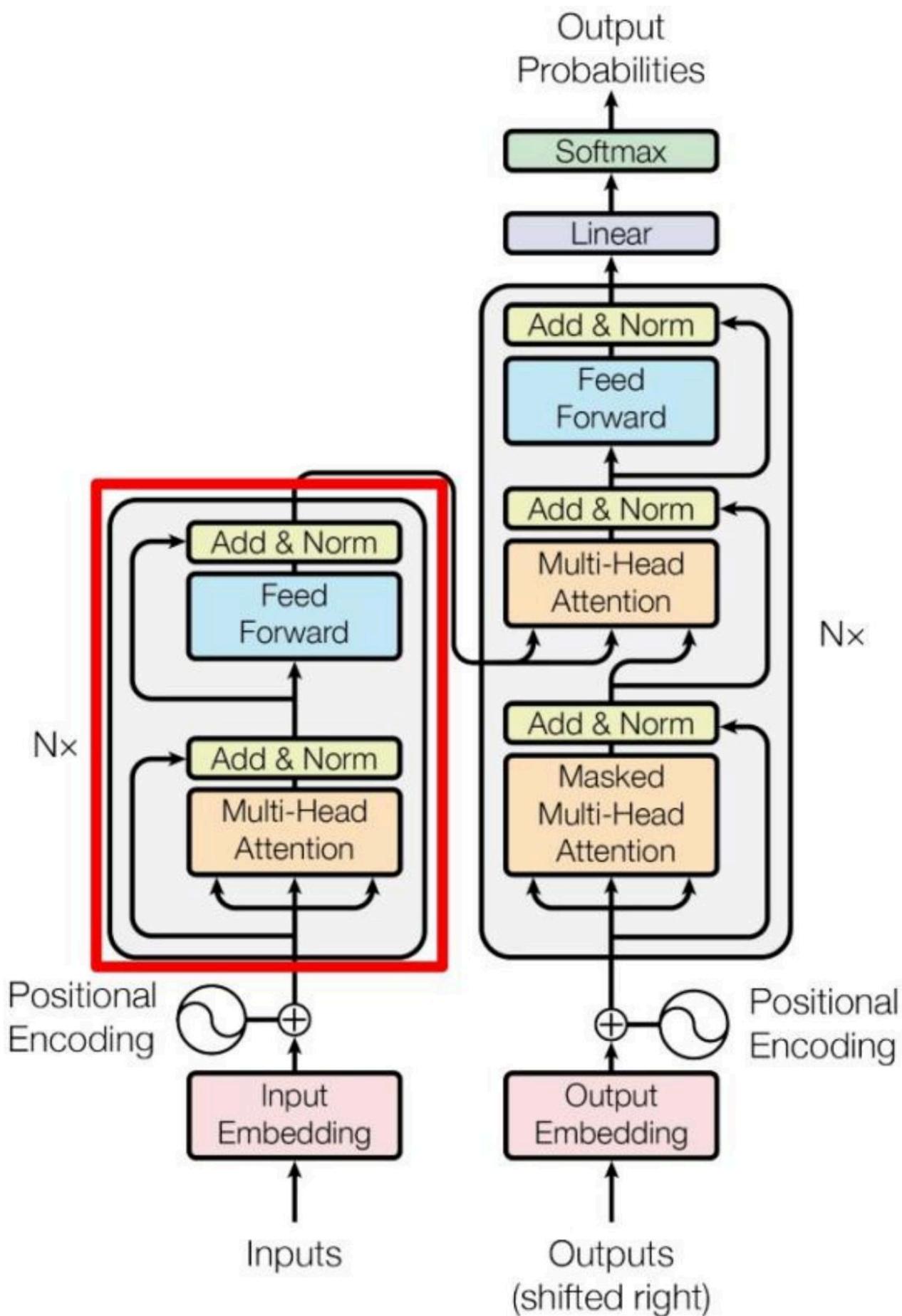
    def forward(self, x):
        output = torch.cat(
            [head(x) for head in self.heads],
            dim=-1
        )
        output = self.proj(output)
        output = self.dropout(output)
        return output

class EncoderMultiHeadAttention(nn.Module):
    def __init__(self, config):
```

```
super().__init__()
self.heads = nn.ModuleList(
    [
        EncodersingleHeadAttention(config)
        for _ in range(self.n_heads)
    ]
)
self.proj = nn.Linear(config.n_embd)
self.dropout = nn.Dropout(config.dropout)

def forward(self, x):
    output = torch.cat(
        [head(x) for head in self.heads],
        dim=-1
    )
    output = self.proj(output)
    output = self.dropout(output)
    return output
```

3. Encoder 结构



上图红色部分是 `Transformer` 的 `Encoder block` 结构，可以看到是由 `Multi-Head Attention`, `Add & Norm1`, `Feed Forward`, `Add & Norm2` 组成的。刚刚已经了解了 `Multi-Head Attention` 的计算过程，现在了解一下 `Add & Norm` 和 `Feed Forward` 部分。

3.1 Add & Norm

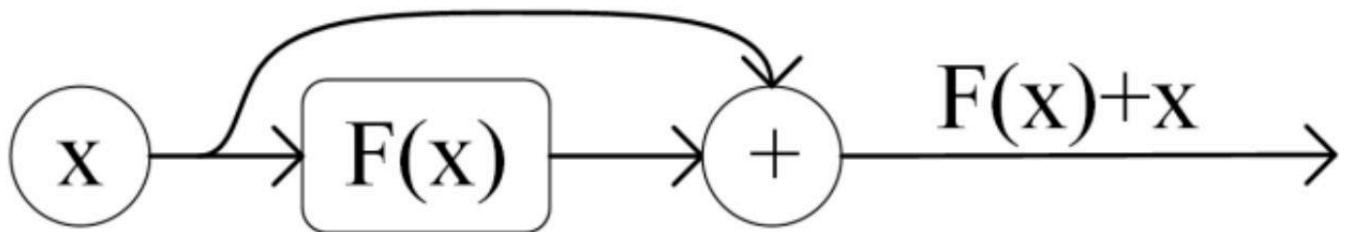
`Add & Norm` 层由 `Add` 和 `Norm` 两部分组成，其计算公式如下：

$$\begin{aligned} &\text{LayerNorm}(X + \text{MultiHeadAttention}(X)) \\ &\text{LayerNorm}(X + \text{FeedForward}(X)) \end{aligned}$$

其中 X 表示 `Multi-HeadAttention` 或者 `FeedForward` 的输入，

$\text{MultiHeadAttention}(X)$ 和 $\text{FeedForward}(X)$ 表示输出 (输出与 X 的维度是一致，所以可以相加)。

- `Add` 指残差连接，通常用于解决多层网络训练的问题，可以保留原始信息，在 `ResNet` 中经常用到。



- `Norm` 指归一化，通常用于 `RNN` 结构，会将每一层神经元的输入都转成均值方差都一样的，这样可以加快收敛。使训练更稳定。

3.2 Feed Forward

`FeedForward` 层比较简单，是一个两层的全连接层，第一层的激活函数为 `Relu`，第二层不使用激活函数，对应的公式如下。

$$\max(0, XW_1 + b_1)W_2 + b_2$$

X 是输入，`FeedForward` 最终得到的输出矩阵的维度与 X 一致。

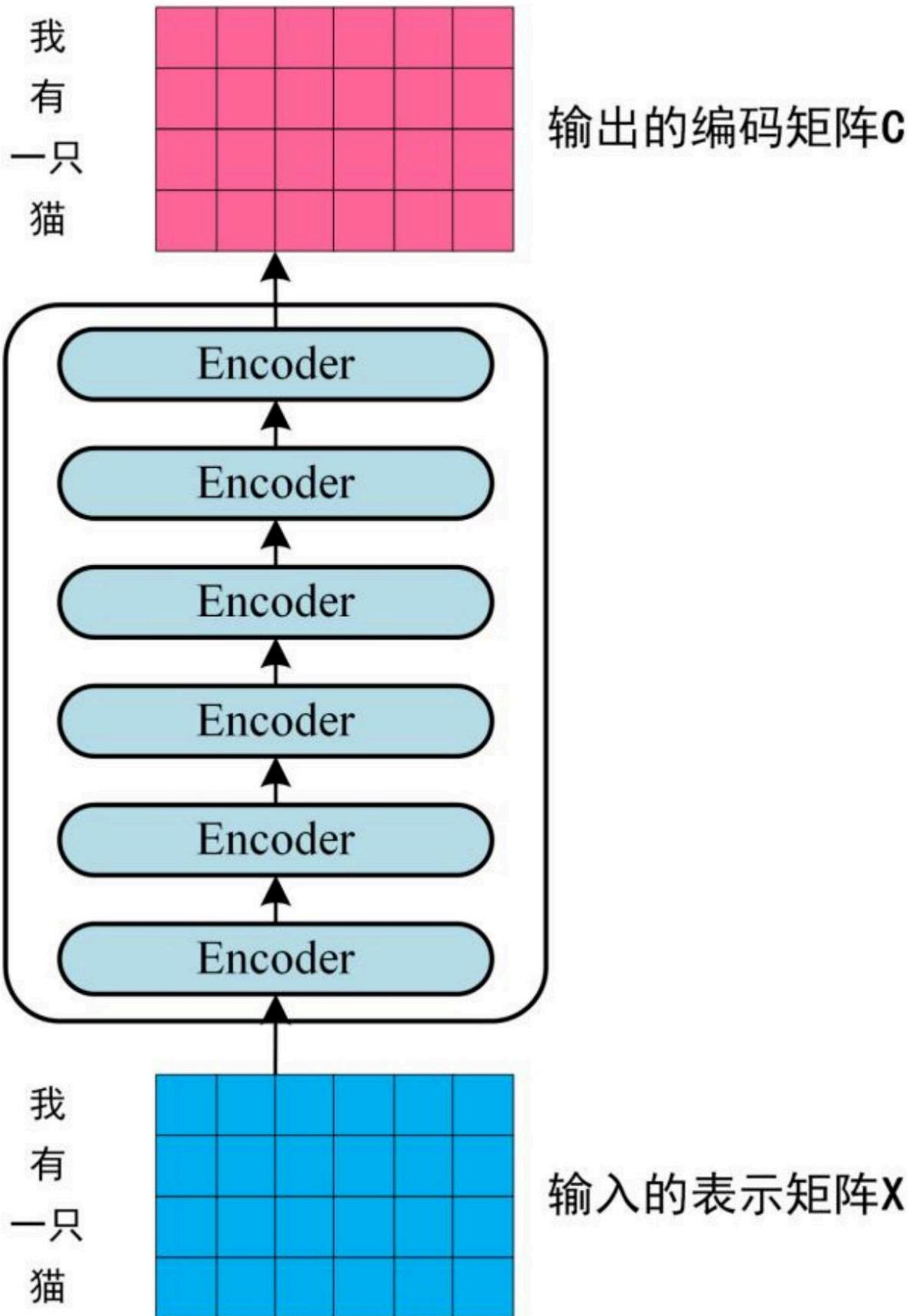
实现代码：

```
class FeedForward(nn.Module):
    def __init__(self, config):
        super().__init__()
        self.net = nn.Sequential(
            nn.Linear(config.n_embd, config.hidden_dim),
            nn.GELU(),
            nn.Linear(config.hidden_dim, config.n_embd),
            nn.Dropout(config.dropout)
        )

    def forward(self, x):
        return self.net(x)
```

3.3 组成 Encoder

通过上面描述的 `Multi-Head Attention`, `Feed Forward`, `Add & Norm` 就可以构造出一个 `Encoder block`, 第一个 `Encoder block` 的输入为句子单词的表示向量矩阵, 后续 `Encoder block` 的输入是前一个 `Encoder block` 的输出, 最后一个 `Encoder block` 输出的矩阵就是编码信息矩阵 C, 这一矩阵后续会用到 Decoder 中。



实现代码:

```
class EncoderBlock(nn.Module):
    def __init__(self, config):
```

```

super().__init__()
self.att = EncoderMultiHeadAttention(config)
self.ffn = FeedForward(config)
self.ln1 = nn.LayerNorm(config.n_embd)
self.ln2 = nn.LayerNorm(config.n_embd)

def forward(self, x, padding_mask=None):
    x = x + self.att(self.ln1(x)) # 残差连接
    x = x + self.ffn(self.ln2(x)) # 残差连接
    return x

class Encoder(nn.Module):
    def __init__(self, config):
        super().__init__()
        self.token_embedding_table = nn.Embedding(config.vocab_size, config.n_embd)
        self.position_embedding_table = nn.Embedding(config.block_size, config.n_embd)
        self.blocks = nn.Sequential(
            *[EncoderBlock(config) for _ in range(config.n_layer)])
        self.ln_final = nn.LayerNorm(config.n_embd)
        self.apply(self._init_weights)

    def _init_weights(self, module):

        if isinstance(module, nn.Linear):
            torch.nn.init.normal_(module.weight, mean=0.0, std=0.02)
            if module.bias is not None:
                torch.nn.init.zeros_(module.bias)
        elif isinstance(module, nn.Embedding):
            torch.nn.init.normal_(module.weight, mean=0.0, std=0.02)
        elif isinstance(module, nn.LayerNorm):
            torch.nn.init.zeros_(module.bias)
            torch.nn.init.ones_(module.weight)

    def forward(self, idx, targets=None):
        batch_size, seq_len = idx.size()
        token_emb = self.token_embedding_table(idx)
        pos_emb = self.position_embedding_table(
            torch.arange(seq_len, device=idx.device)
        ).unsqueeze(0)
        x = token_emb + pos_emb # [batch_size, seq_len, n_embd]
        x = self.blocks(x)
        x = self.ln_final(x)

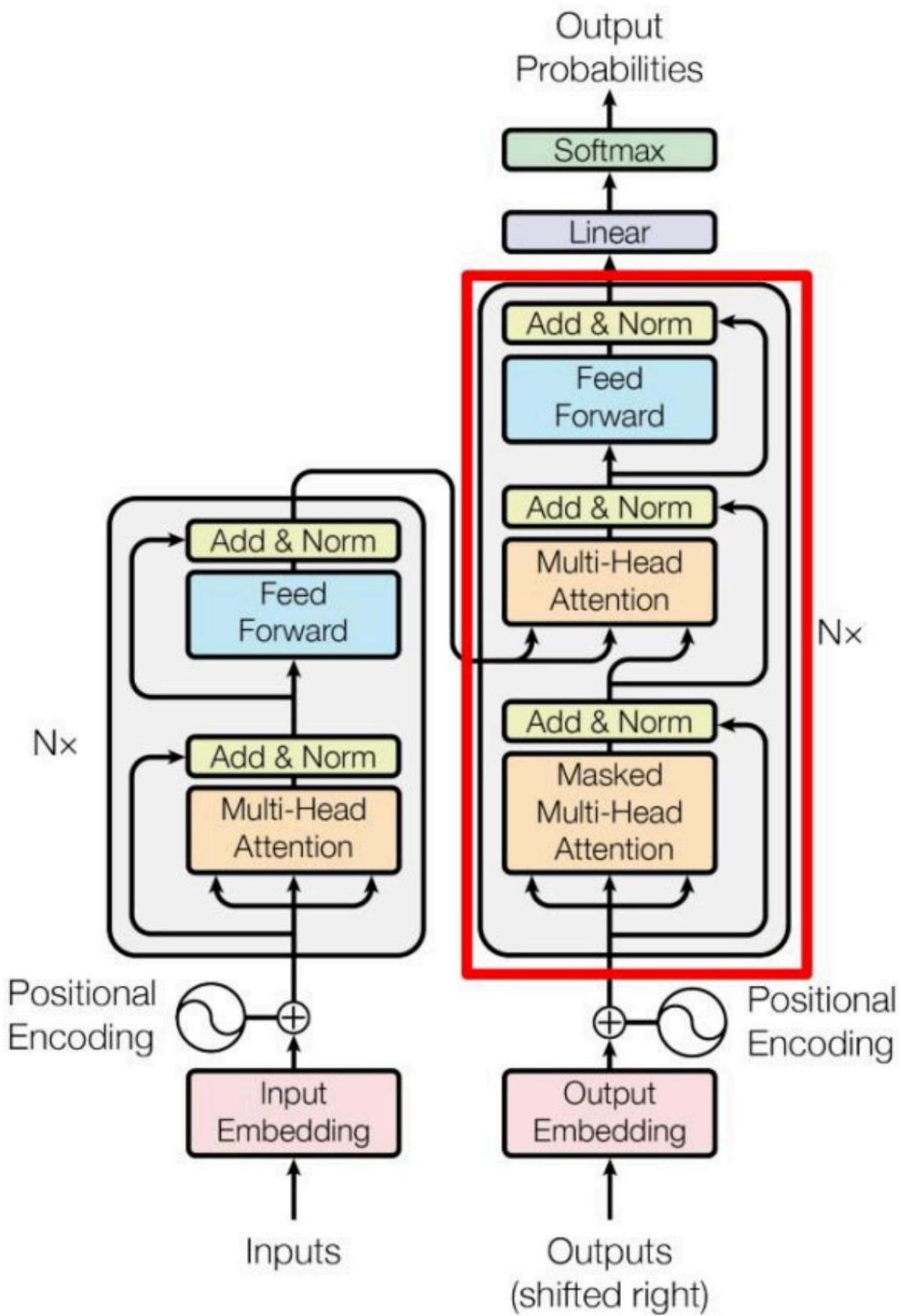
        loss = None
        if targets is not None:
            batch_size, seq_len, n_embd = x.size()
            logits = nn.Linear(n_embd, config.vocab_size, bias=False).to(x.device)(x)
            logits = logits.view(batch_size * seq_len, config.vocab_size)
            targets = targets.view(batch_size * seq_len)
            loss = F.cross_entropy(logits, targets)
        return logits, loss
    return x, loss

```

4. Decoder 结构

下图红色部分为 `Transformer` 的 `Decoder block` 结构，与 `Encoder block` 相似，但是存在一些区别：

- 包含两个 `Multi-Head Attention` 层。
- 第一个 `Multi-Head Attention` 层采用了 `Masked` 操作。
- 第二个 `Multi-Head Attention` 层的 K, V 矩阵使用 `Encoder` 的编码信息矩阵 C 进行计算，而 Q 使用上一个 `Decoder block` 的输出计算。
- 最后有一个 `softmax` 层计算下一个翻译单词的概率。



4.1 第一个 Multi-Head Attention

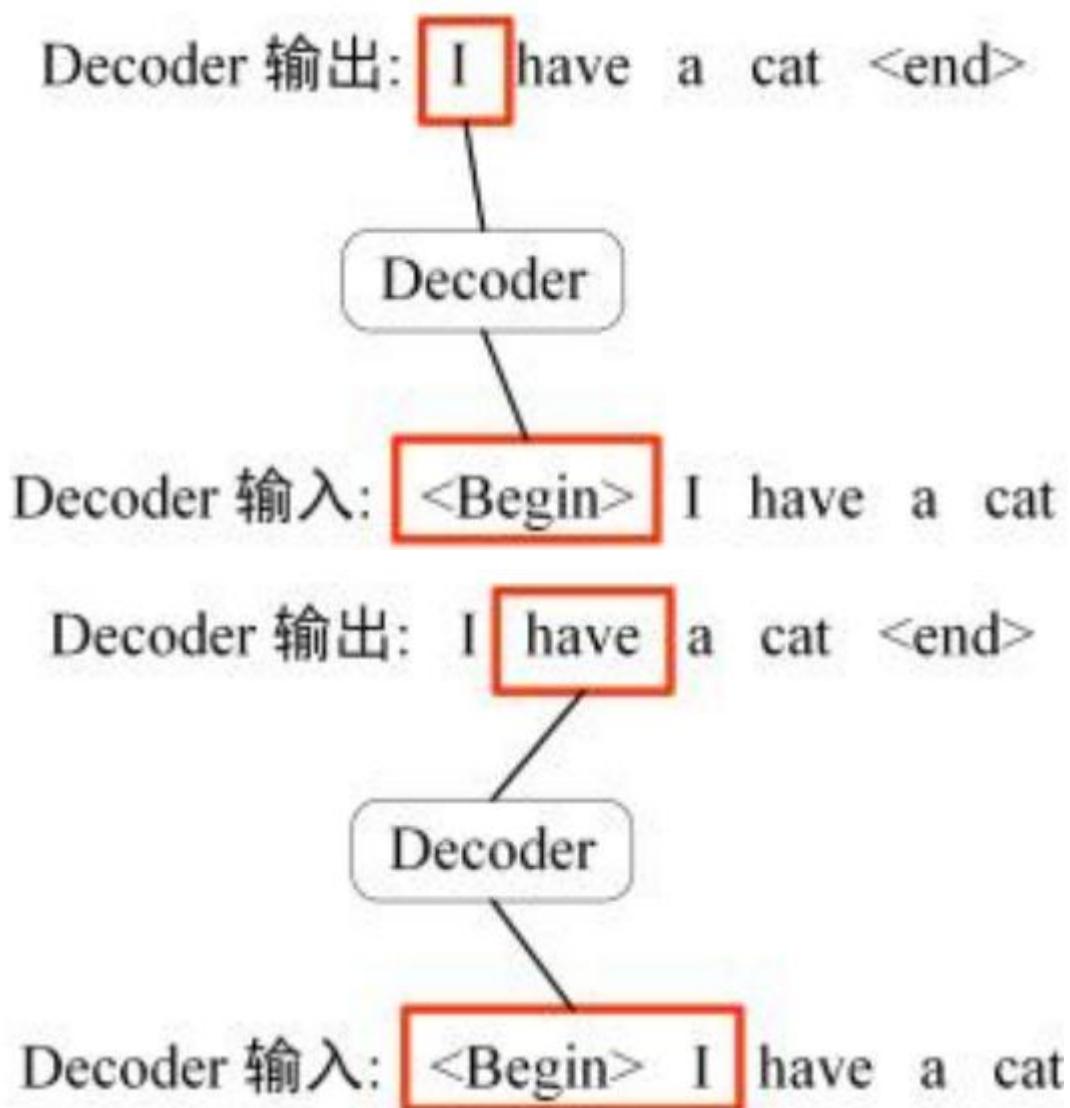
Decoder block 的第一个 Multi-Head Attention 采用了 **Masked** 操作。

在机器翻译的例子中，翻译的过程中是顺序翻译的，即翻译完第 i 个单词，才可以翻译第 $i + 1$ 个单词。

通过 **Masked** 操作可以防止第 i 个单词知道 $i + 1$ 个单词之后的信息。

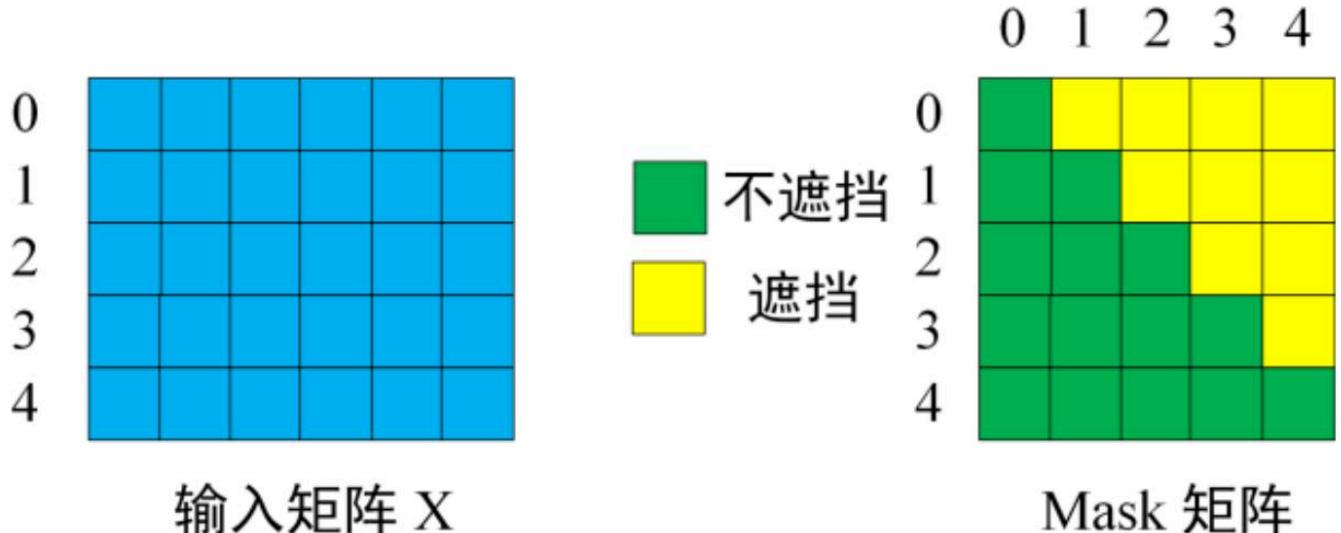
下面以 "我有一只猫" 翻译成 "I have a cat" 为例，了解一下 Masked 操作。

下面的描述中使用了类似 Teacher Forcing 的概念，在 Decoder 的时候，是需要根据之前的翻译，求解当前最有可能的翻译，如下图所示。首先根据输入 "**<Begin>**" 预测出第一个单词为 "I"，然后根据输入 "I" 预测下一个单词 "have"。



Decoder 可以在训练的过程中使用 Teacher Forcing 并且并行化训练，即将正确的单词序列 ("I have a cat") 和对应输出 ("I have a cat") 传递到 Decoder。那么在预测第 i 个输出时，就要将第 $i + 1$ 之后的单词掩盖住，注意 Mask 操作是在 Self-Attention 的 Softmax 之前使用的，下面用 012345 分别表示 "I have a cat"。

- 第一步：是Decoder的输入矩阵和Mask矩阵，输入矩阵包含"I have a cat" (0, 1, 2, 3, 4) 五个单词的表示向量，Mask是一个 5×5 的矩阵。在Mask可以发现单词0只能使用单词0的信息，而单词1可以使用单词0,1的信息，即只能使用之前的信息。



- 第二步：接下来的操作和之前的 Self-Attention 一样，通过输入矩阵 X 计算得到 Q, K, V 矩阵。然后计算 Q 和 K^T 的乘积 QK^T

The diagram illustrates the multiplication of the Q matrix and the transpose of the K matrix to produce the QK^T matrix.

Q: A 5×5 grid where every cell is yellow. The rows are labeled 0, 1, 2, 3, 4 on the left. The columns are labeled 0, 1, 2, 3, 4 at the top.

K^T : A 5×5 grid where every cell is light green. The columns are labeled 0, 1, 2, 3, 4 at the top. The rows are labeled 0, 1, 2, 3, 4 on the left.

QK^T : The result of the multiplication, shown as a 5×5 grid where every cell is pink. The rows are labeled 0, 1, 2, 3, 4 on the left. The columns are labeled 0, 1, 2, 3, 4 at the top.

Operations:

- Q (Input Matrix)
- \times (Multiplication)
- K^T (Transpose of K)
- $=$ (Result)
- QK^T (Output Matrix)

- 第三步：在得到 QK^T 之后需要进行Softmax，计算attention score，我们在Softmax之前需要使用Mask矩阵遮挡住每一个单词之后的信息，遮挡操作如下：

0 1 2 3 4

0					
1					
2					
3					
4					



按位相乘

QK^T

0 1 2 3 4

0	Green	Yellow	Yellow	Yellow	Yellow
1	Green	Yellow	Yellow	Yellow	Yellow
2	Green	Yellow	Yellow	Yellow	Yellow
3	Green	Yellow	Yellow	Yellow	Yellow
4	Green	Yellow	Yellow	Yellow	Yellow

0 1 2 3 4

=

0	Red	Black	Black	Black	Black
1	Red	Red	Black	Black	Black
2	Red	Red	Red	Black	Black
3	Red	Red	Red	Red	Black
4	Red	Red	Red	Red	Red

Mask 矩阵

Mask QK^T

得到 Mask QK^T 之后在 Mask QK^T 上进行 Softmax，每一行的和都为 1。但是单词 0 在单词 1, 2, 3, 4 上的 attention score 都为 0。

- 第四步：使用 Mask QK^T 与矩阵 V 相乘，得到输出 Z，则单词 1 的输出向量 Z1 是只包含单词 1 信息的。

$$\begin{matrix} & 0 & 1 & 2 & 3 & 4 \\ \begin{matrix} 0 \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{matrix} & \begin{matrix} \text{Mask } \mathbf{QK}^T \\ \times \\ \mathbf{V} \quad \mathbf{Z} \end{matrix} \end{matrix}$$

$$\begin{matrix} \mathbf{V} & = & \mathbf{Z} \\ \begin{matrix} \text{purple} & \text{pink} & \text{purple} \\ \text{purple} & \text{pink} & \text{purple} \\ \text{purple} & \text{pink} & \text{purple} \\ \text{purple} & \text{pink} & \text{purple} \end{matrix} & & \begin{matrix} \text{pink} & \text{pink} & \text{pink} \\ \text{pink} & \text{pink} & \text{pink} \\ \text{pink} & \text{pink} & \text{pink} \\ \text{pink} & \text{pink} & \text{pink} \end{matrix} \end{matrix}$$

- 第五步：通过上述步骤就可以得到一个Mask Self-Attention的输出矩阵 Z_i ，然后和Encoder类似，通过Multi-Head Attention拼接多个输出 Z_i 然后计算得到第一个Multi-Head Attention的输出 Z ， Z 与输入 X 维度一样。

4.2 第二个 Multi-Head Attention

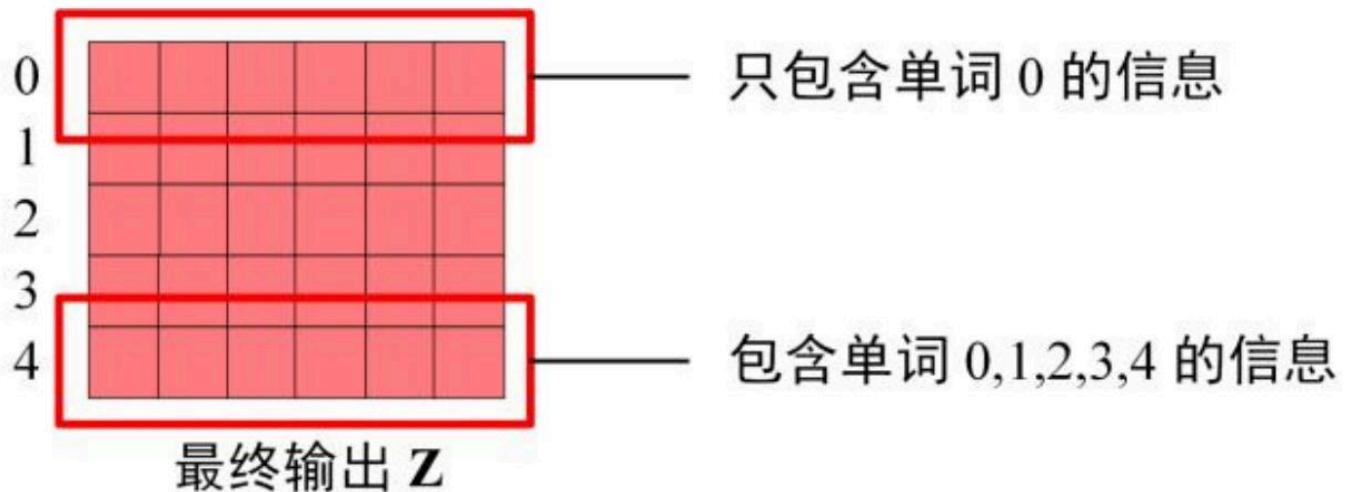
Decoder block 第二个 Multi-Head Attention 变化不大，主要的区别在于其中 Self-Attention 的 K, V 矩阵不是使用上一个 Decoder block 的输出计算的，而是使用 Encoder 的编码信息矩阵 C 计算的。

根据Encoder的输出C计算得到K,V，根据上一个Decoder block的输出Z计算Q(如果是第一个Decoder block则使用输入矩阵X进行计算)，后续的计算方法与之前描述的一致。

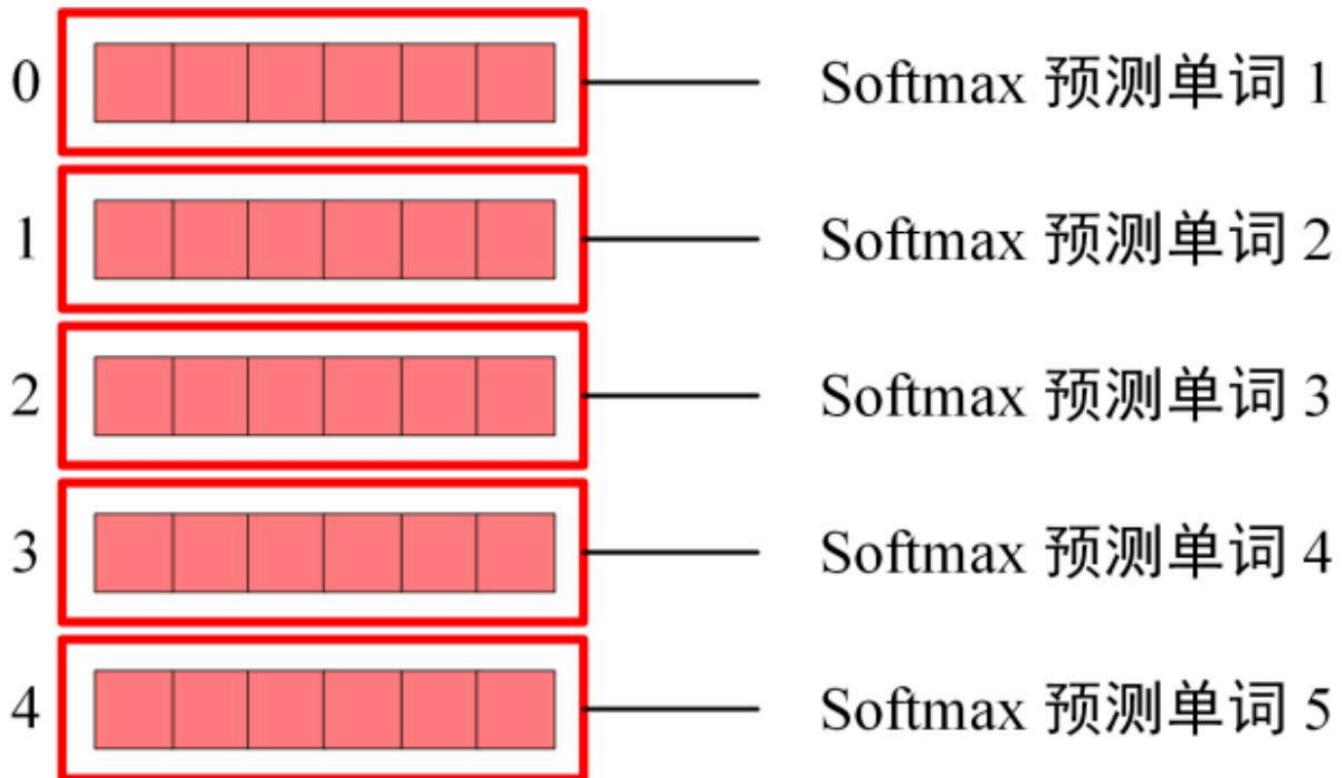
这样做好处是在 Decoder 的时候，每一位单词都可以利用到 Encoder 所有单词的信息（这些信息无需 Mask）。

4.3 Softmax 预测输出单词

Decoder block 最后的部分是利用 Softmax 预测下一个单词，在之前的网络层我们可以得到一个最终的输出 Z，因为 Mask 的存在，使得单词 0 的输出 Z_0 只包含单词 0 的信息，如下：



Softmax 根据输出矩阵的每一行预测下一个单词：



这就是 Decoder block 的定义，与 Encoder 一样，Decoder 是由多个 Decoder block 组合而成。

实现代码:

```

class DecoderBlock(nn.Module):
    def __init__(self, config):
        super().__init__()
        self.att = DecoderMultiHeadAttention(config)
        self.ffn = FeedForward(config)
        self.ln1 = nn.LayerNorm(config.n_embd)
        self.ln2 = nn.LayerNorm(config.n_embd)

    def forward(self, x):
        x = x + self.att(self.ln1(x))
        x = x + self.ffn(self.ln2(x))
        return x

class Decoder(nn.Module):
    def __init__(self, config):
        super().__init__()
        self.token_embedding_table = nn.Embedding(config.vocab_size, config.n_embd)
        self.position_embedding_table = nn.Embedding(config.block_size, config.n_embd)
        self.blocks = nn.Sequential(
            *[DecoderBlock(config) for _ in range(config.n_layer)]
        )
        self.ln_final = nn.LayerNorm(config.n_embd)
        self.lm_head = nn.Linear(config.n_embd, config.vocab_size, bias=False)
        self.token_embedding_table.weight = self.lm_head.weight
        self.apply(self._init_weights)

```

```

def _init_weights(self, module):
    if isinstance(module, nn.Linear):
        torch.nn.init.normal_(module.weight, mean=0.0, std=0.02)
        if module.bias is not None:
            torch.nn.init.zeros_(module.bias)
    elif isinstance(module, nn.Embedding):
        torch.nn.init.normal_(module.weight, mean=0.0, std=0.02)
    elif isinstance(module, nn.LayerNorm):
        torch.nn.init.zeros_(module.bias)
        torch.nn.init.ones_(module.weight)

def forward(self, idx, targets=None):
    batch_size, seq_len = idx.size()
    token_emb = self.token_embedding_table(idx)
    pos_emb = self.position_embedding_table(
        torch.arange(seq_len, device=idx.device)
    ).unsqueeze(0)
    x = token_emb + pos_emb
    x = self.blocks(x)
    x = self.ln_final(x)
    logits = self.lm_head(x)
    if targets is None:
        loss = None
    else:
        batch_size, seq_len, vocab_size = logits.size()
        logits = logits.view(batch_size * seq_len, vocab_size)
        targets = targets.view(batch_size * seq_len)
        loss = F.cross_entropy(logits, targets)
    return logits, loss

```

5. Transformer 总结

- Transformer 与 RNN 不同，可以比较好地并行训练。
- Transformer本身是不能利用单词的顺序信息的，因此需要在输入中添加位置Embedding，否则Transformer就是一个词袋模型了。
- Transformer 的重点是 Self-Attention 结构，其中用到的 Q, K, V 矩阵通过输出进行线性变换得到。
- Transformer 中 Multi-Head Attention 中有多个 Self-Attention，可以捕获单词之间多种维度上的相关系数 attention score。