学习链接: 视频链接: 【Transformer代码(源码Pytorch版本)从零解读(Pytorch版本)-哔哩哔哩】 https://b23.tv/3GIVDe2

时间线:

- 2024年10月16日 开始
- 2024年10月17日 要学会的内容是代码 这是讲解 方便以后回忆
- 241019 done



Transformer 代码从零解读

Transformer的三类应用:

三类应用

- 1. 机器翻译类应用-Encoder和Decoder共同使用
 - 2. 只使用Encoder端-文本分类BERT和图片分类VIT
 - 3. 只使用Decoder端-生成类模型

从图像到图像叫做 encoder+decoder

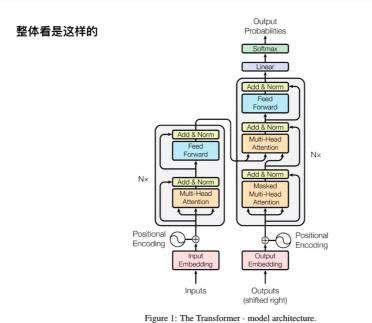
代码的原链接:

https://github.com/graykode/nlp-tutorial/blob/master/5-1.Transformer/Transformer.i pynb

```
sentences = ['ich mochte ein bier P', 'S i want a beer', 'i
want a beer E']
```

首先,从main函数开始,第一行是sentences,看到这行代码需要明白这三个句子,是一组句子,是一个样本,也就是这里的Batch size=1,这行代码有两个疑惑点需要解决① 这1、2、3三个句子分别代表的是什么?这三个句子是怎么被模型处理的?② 这三个句子的特殊符号,P、S、E分别代表的是什么

为了解决第一个疑惑点,首先串一下Transformer的架构,来看下面这张图



这是一张Transformer的架构图,看到这张图的第一眼,首先要明确,它有两个输入,首先是 编码端的输入, Inputs; 解码端的输入 Outputs

编码端的输入,经过词向量层和位置编码层,得到一个最终的输入,然后流经自注意力层, 然后流经前馈神经网络层,得到一个编码端的输出;编码端的输出先放到这里,后续和解码 端进行交互。

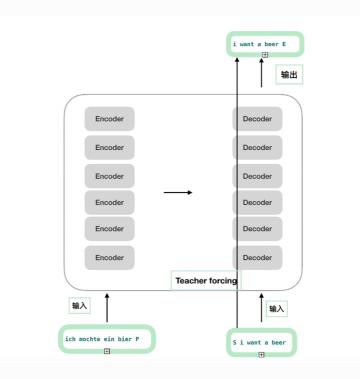
然后解码端的输入,同样经过词向量层,经过位置编码层,得到最终的输入,然后在这里经 过了掩码自注意力层,也就是把当前单词之后的,全部要mask掉,然后流经交互自注意力 层,在这个交互自注意力层,也就是把这个编码端的输出和这边解码端的信息,进行一个交 互,Q矩阵来自我本身这个解码端,KV矩阵来自于编码器的输出,流经这个交互自注意力 层、之后经过前馈神经网络层、然后最后得到一个输出。

我们把这个架构图,移植到一个机器翻译的例子,就应该是下图的样子



看到这个图,我们首先也要明白,有两个输入,就像前面Transformer的架构图,一个是编码端的输入,一个是解码端的输入,有一个输出,最后的解码端的输出。回到这个机器翻译的例子这张图,首先映入眼帘的是三个绿色的框。首先下面两个框框的句子代表的是输入,其中"我爱你"这一个句子是3个token,代表的是编码端的输入,这边这个绿色的框"SILOVE YOU"代表的是解码端的输入,S特殊字符,我们先不用去管,后续会去讲,然后上面那个绿色的框框,一定要注意,这里的绿色的框框不是解码端的输出,再重复一遍,它不是解码端的输出,那它是什么呢?它是我解码端的真实标签。我在decoder输出之后呢,会去和这个真实标签去计算损失,不知道大家有没有理解,这里就相当于如果是一个文本分类任务的话,这里是一个"SILOVE YOU",这里这个上面这个绿色的框框,这里相当于是一个0.71标志,代表的是这个句子,它是一个二分类任务,是这个句子的真实标签是什么,在这里映射过来,在这个绿色的框框这里,这并不是一个输出,输出那里才是输出,一定要区分这里这个框是真实标签,不是输出。

那么接下来,我们把这行代码的这三个句子,1,2,3拿过来,拿到这个机器翻译的例子里来, 就是这样的一个图



看这里,首先左边德语这个句子作为编码端的输入,右边英语这个句子作为解码端的输入, 上面的绿色框作为是解码端的真实标签, 然后解码端的输出和真实标签去做损失; 现在①这 个疑惑点就解决了,三个绿色的框,三个句子分别代表了什么

接下来我们解决第②这个疑惑点,②这个疑惑点就是说,这个特殊字符 sentences = ['ich mochte ein bier P', 'S i want a beer', 'i want a beer E'] P、S、E分别代表的是什么。首先这里的 S 和 E 是很容易理解的,这两个特殊字符分别是英文中 Start 和 End 的首字母。

现在,来着重解释 P 是什么意思, P 代表 Pad 字符,也就是填充字符,我们这里举得例子设置的 batch size=1,但是在我们真正训练的时候,为了加快训练速度 botch size往往不是 1,比如说,我们把 batch size 设置成 4,如果我们把botch size设置成4,这里我们的句子应该是这样的:

```
sentences = ['ich mochte ein bier P', 'S i want a beer', 'i
want a beer E']
['ich mochte ein bier P', 'S i want a beer', 'i want a beer E']
['ich mochte ein bier P', 'S i want a beer', 'i want a beer E']
['ich mochte ein bier P', 'S i want a beer', 'i want a beer E']
```

这里的batch size=4,一个batch size中,有4个样本,每个样本有3个句子,第一个句子是encoder

input, 第二个句子是decoder input, 第三个句子 ground truth

现在来看中文的例子,来看下面这张图:

									句子真实长度为
别	休	息	,	卷	起	来			7
今	天	天	气	真	不	错	啊		8
大	家	好	,	都	吃	饭	了	吗	9
真	不	错	哈						4

这里我们的batch size=4,图中给的句子是一个batch size中,4个样本,每个样本的第一个句子,也就是encoder input的部分,这里的每一个句子都是编码端的输入部分,图中把另外两个框框都省略掉了,首先,还是要明确,一个batch在被模型处理掉的时候,为了加快速度,我们往往是用矩阵化的方式去运算,但是如果一个batch中,句子的长度是不一致的,那就不能组成一个有效的矩阵,所以一个常规的操作,就是我们设置一个最大长度 max length,比如我们设置为 8,那么大于8的部分,我们就要把截掉,不要它,小于8的部分,我们使用特殊字符 pad 字符,去把它填充,于是,经过这样的处理,就变成下图:

假设max len=8 句子真实长度为 7 休 起 来 别 息 卷 P 今天 天 8 气 真 不 错|啊 大家 吗 好 吃 饭 9 都 了 真| 不 错 哈 4

大于8的部分,截掉,不要

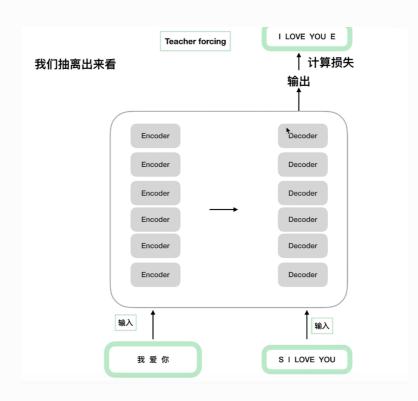
小于8的部分,Pad字符填充

如此一来,这个矩阵中的长度都是8,这样就组成了一个有效矩阵,从而可以被模型处理掉

一定要理解这个P,因为在后续的注意力层中,这个填充字符P,在后续的一个处理中,初学者很容易不明白或者产生误解,就是把 这个P置为 $-\infty$,让它不能对其他的字符产生效果,这边暂时不理解没事,后面将代码的时候,会详细讲这个问题。

在前面的讨论中,解决了两个疑惑点,第一个疑惑点,就是那3个句子,一个样本中的三个句子,分别代表的是:编码端的输入 encoder input、解码端的输入decoder input、解码端的真实标签 ground truth;第二个疑惑点是,三个特殊字符分别是什么,P代表填充字符,S代表的是 开始标志,E 代表的是一个结束标志。

接下来我们再看这个图,



【这段话主要看右边 decoder端 】想说明的一点是,解码端是不能够并行的,就是说 当我们输入为 s 的时候,输出为 I,然后我们这个 I 拿过来,作为,作为下一时刻的输入,然后经过 解码层 去输出当前的输出,不能并行的原因是因为 下一时刻的输入 I 取决于 或者说 依赖于 上一个时刻的输出,所以不能并行,但是为了加快 训练速度 和 收敛速度,我们常常有这么一种操作, 叫做 Teacher forcing

现在来解释,什么叫 teacher forcing,就是说我们把真实标签作为一种输入,真实标签作为 decoder input—起输入模型,这样处理的话,会涉及到一个问题, 比如说当前时刻我们想要输入 s ,但是我们把所有的句子同时输入,那么模型就会看到 I Love you 这个信息,所以我需要使用 mask 标志,把当前单词的后面词,全部mask住。

【up又解释了一遍】我们需要把未来的词全部mask住,不让它看到当前时刻后面的单词,因为我们在预测的时候,是在一个一个的预测的,而不会一起输入进去,所以我们是看不到后面的信息的,我们要保证训练和预测的时候,形式是一致的。

接下来, 我们来看代码 这一部分:

```
# Transformer Parameters
   # Padding Should be Zero
   ## 构建词表
   src vocab = {'P': 0, 'ich': 1, 'mochte': 2, 'ein': 3,
'bier': 4}
   src_vocab_size = len(src_vocab)
   tgt_vocab = {'P': 0, 'i': 1, 'want': 2, 'a': 3, 'beer': 4,
'S': 5, 'E': 6}
   number dict = {i: w for i, w in enumerate(tgt vocab)}
   tgt vocab size = len(tgt vocab)
   src len = 5 # length of source
   tgt len = 5 # length of target
   ## 模型参数
   d model = 512 # Embedding Size
   d ff = 2048 # FeedForward dimension
   d k = d v = 64 \# dimension of K(=Q), V
   n layers = 6 # number of Encoder of Decoder Layer
   n heads = 8 # number of heads in Multi-Head Attention
```

这些代码给出的是配置文件;

src_vocab 构建的是编码端的词表,构建词表是一个基本的操作,一个字典就是一个词表,词表是为了方便将中文字符或者说英文字符或者 其他语言的字符 对应为数字,以便被计算机更好的 识别

接着,tgt_vocab这个是解码端的词表,解码端和编码端可以共用一个词表

src_len = 5编码端的输入长度

tgt_len = 5解码端的输入长度

```
d_model = 512  # Embedding Size
d_ff = 2048  # FeedForward dimension
d_k = d_v = 64  # dimension of K(=Q), V
n_layers = 6  # number of Encoder of Decoder Layer
n_heads = 8  # number of heads in Multi-Head Attention
```

上面这几行表示模型参数

- d model设置为512、代表的是我们的每一个字符转换为Embedding的时候、它的大小
- d ff代表的是前馈神经网络中, Linear层被映射到多少维度, 这里设置的是2048
- d k、d v后面再去讲
- n_layers指的是6个encoder堆叠在一起,decoder也有一个×N,是一致的,把6个堆叠在一起
- n_heads多头注意力的时候,把头分为几个,这里是分为8个

接下来, 最关键的模型部分,

```
model = Transformer()
```

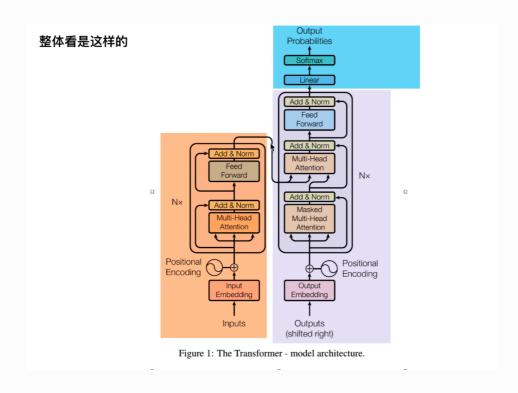
在写模型的时候,我们一定要遵循两个原则,第一个原则是从整体到局部,就是先把大的框架搭起来,然后再去完善细节部分,第二个特点就是一定要搞清楚,数据的流动形状,就是 经过这个模型的处理,输入是什么形状,输出是什么形状

接下来,我们来看Transformer的代码部分,最核心的架构代码

```
## 1. 从整体网络结构看,分为三个部分:编码层、解码层、输出层
class Transformer(nn.Module):
    def __init__(self):
        super(Transformer, self).__init__()
        self.encoder = Encoder() ## 编码层
        self.decoder = Decoder() ## 解码层
        ## 输出层d_model 是我们解码层 每个token输出的维度大小,
        ## 之后会做一个tgt_vocab_size大小的softmax
        self.projection = nn.Linear(d_model, tgt_vocab_size,
bias=False)
    def forward(self, enc_inputs, dec_inputs):
```

```
## 这里有两个数据进行输入,一个是enc inputs 形状为
[batch size, src len] src len就是max length, 主要作为编码段的输入, 一
个dec inputs, 形状为[batch size, tgt len], 主要作为解码端的输入
       ## enc inputs 作为输入, 形状为 [batch size, src len], 输出由
自己的函数内部指定,想要什么指定输出什么,可以是全部tokens的输出,可以是特
定每一层的输出; 可以是中间某些参数的输出;
       ## enc outputs就是主要的输出
       ## enc self attns 这里是没记错的是 QK转置相乘之后 softmax 之
后的矩阵值, 代表的是每个单词与其他单词的相关性
       enc outputs, enc self attns = self.encoder(enc inputs)
       ## dec outputs是decoder主要输出,用于后续的linear映射
      ## dec self attns 类比于 enc self attns 是查看每个单词对
decoder中输入的其余单词的相关性
       ## dec enc attns是decoder中每个单词对encoder中每个单词的相关
性
       dec outputs, dec self attns, dec enc attns =
self.decoder(dec inputs, enc inputs, enc outputs)
       ## dec outputs做映射到词表大小
       dec logits = self.projection(dec outputs) # dec logits
: [batch size x src vocab size x tgt vocab size]
       return dec logits.view(-1, dec logits.size(-1)),
enc self attns, dec self attns, dec enc attns
```

从架构图中,可以看出,Transformer分为三个部分,第一个编码段、第二个解码端、第三个输出端,输出部分要与真实标签做损失



所以,在Transformer类中,init部分,要把3个部分都列出来,

```
def __init__(self):
    super(Transformer, self).__init__()
    self.encoder = Encoder()
    self.decoder = Decoder()
    self.projection = nn.Linear(d_model, tgt_vocab_size,
    bias=False)
```

从上到下,分别对应编码层、解码层、输出部分,接下来,我们重点说一下,输出层 self.projection = nn.Linear(d_model, tgt_vocab_size, bias=False) decoder 的输出层,如果是d_model,也就是512个维度,我们要做的就是把这512个维度,映射到词表大小,是解码端的词表大小,然后,之后做 softmax,去看当前时刻,哪个词出现的概率最大,这是我 projection 的一个作用,然后我们去看实现函数 forward

```
def forward(self, enc_inputs, dec_inputs):
    enc_outputs, enc_self_attns = self.encoder(enc_inputs)

    dec_outputs, dec_self_attns, dec_enc_attns =
self.decoder(dec_inputs, enc_inputs, enc_outputs)

    dec_logits = self.projection(dec_outputs)
    # dec_logits : [batch_size x src_vocab_size x
tgt_vocab_size]

    return dec_logits.view(-1, dec_logits.size(-1)),
enc_self_attns, dec_self_attns, dec_enc_attns
```

```
forward(self, enc_inputs, dec_inputs)
```

对于我们整个Transformer,它是接收的两个输入,一个是编码端的输入,一个是解码端的输入,所以我们的forward 接收的是两个参数: enc_inputs, dec_inputs, 那么它们的形状是什么呢?我们已经说过了,形状非常重要,对于encoder来讲,它们的输入是batch_size×src_len,对应的是输入部分句子的长度,decoder这边是batch_size×tgt_len,解码端句子的长度(sequence_length),统一起来,就是batch_size × sequenc_length

接下来, 讲解这三行代码:

```
enc_outputs, enc_self_attns = self.encoder(enc_inputs)

dec_outputs, dec_self_attns, dec_enc_attns =
    self.decoder(dec_inputs, enc_inputs, enc_outputs)

dec_logits = self.projection(dec_outputs)
```

就是把在初始化函数中,已经放置好的编码端、解码端、以及输出层,通过数据流动串起来;

enc_outputs, enc_self_attns = self.encoder(enc_inputs)

首先是编码端的输入、流经了编码器、得到了编码端的输出

至于编码的输出这里,在我们自己最开始复现代码的时候,我们肯定是对输出什么是一头浆糊的,所以我们在写的时候,完全可以把这里置空,不用去管它,等实现完 encoder,边写边琢磨,要输出什么,或者你要输出什么,因为我们在写一个代码函数的时候,输出什么东西是由你自己函数内部制定的,你想要什么,可以指定输出什么,比如你可以指定全部tokens,也就是全部 tokens的输出,也可以指定每一层 某个token的输出,也可以是中间某些参数的输出,你都可以自己去指定;所以在最开始写的时候,如果去复现,你完全可以不用写的这么的一步到位

这里 enc_outputs 是一个主要的输出;而这里的 enc_self_attns 更像是一个 Q、K矩阵转置相乘之后,经过softmax之后那个矩阵,代表的就是我每个单词和其他单词之间的一个相关性矩阵【得分矩阵】,这是为了看一下,哪个单词和哪个单词 更相似 更有关系,可能是为了可视化

如上, 便是编码端的所有操作

dec_outputs, dec_self_attns, dec_enc_attns = self.decoder(dec_inputs,
enc_inputs, enc_outputs)

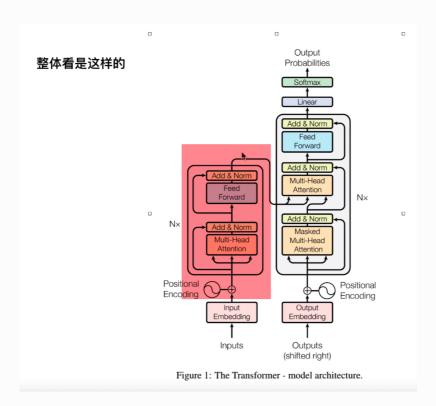
然后,我的解码端接收的输入有:解码端的输入 dec_inputs、以及编码端的输出enc_outputs作为输入,对于解码端这边,最主要的是接收这两个输入,一个是解码端的输入,一个是编码端的输出,这个是输出是为了和解码端进行交互的,所以这个编码端的输出和编码器的输入是必须要的,其中 self.decoder 还有一个输入 enc_inputs 指的是 编码端的输入,这个输入up主也记不太清了有没有用后续再看代码,得到解码器的输出 dec_outputs 以后,我们让它流经 self.projection 层,具体开始讲这句代码:

dec logits = self.projection(dec outputs)

也就是做了一个映射词表的操作,这个就是Transformer整体架构图的一个代码,然后我们再去详细的看,每一个编码层、解码层、输出层每一个的代码,是如何实现的,我们先来看encoder,也就是编码器层的代码:

```
## 2.Encoder部分包含三个部分:词向量embedding,位置编码部分,注意力层及
后续的前馈神经网络
class Encoder(nn.Module):
   def init (self):
       super(Encoder, self). init ()
       # 这个其实就是去定义生成一个矩阵,大小是 src_vocab_size *
d model
       self.src emb = nn.Embedding(src vocab size, d model)
       # 位置编码情况,这里是固定的正余弦函数,也可以使用类似词向量
nn.Embedding
       self.pos emb =
nn.Embedding.from pretrained(get sinusoid encoding table(src le
n+1, d model),freeze=True)
       self.layers = nn.ModuleList([EncoderLayer() for in
range(n layers)])
   def forward(self, enc inputs): # enc inputs : [batch size x
source len]
       enc outputs = self.src emb(enc inputs) +
self.pos emb(torch.LongTensor([[1,2,3,4,0]]))
       enc self attn mask = get attn pad mask(enc inputs,
enc inputs)
       enc self attns = []
       for layer in self.layers:
           enc outputs, enc self attn = layer(enc outputs,
enc self attn mask)
           enc self attns.append(enc self attn)
       return enc_outputs, enc self attns
```

继续看架构图encoder的部分,从整体到局部



再去细分代码,代码包含三个部分,首先是词向量层 input embedding 位置编码层 positional encoding 前馈神经网络和自注意力层,这两个构成一个 encoder layer ,因此初始化函数把这三部分先列出来,具体怎么实现,再去细分代码,init如下:

```
class Encoder(nn.Module):
    def __init__(self):
        super(Encoder, self).__init__()
        self.src_emb = nn.Embedding(src_vocab_size, d_model)
        self.pos_emb =
nn.Embedding.from_pretrained(get_sinusoid_encoding_table(src_le
n+1, d_model),freeze=True)
        self.layers = nn.ModuleList([EncoderLayer() for _ in
range(n_layers)])
```

```
## 2. Encoder 部分包含三个部分: 词向量embedding, 位置编码部分,注意力层及后续的前馈神经网络

class Encoder(nn.Module):
    def __init__(self):
        super(Encoder, self).__init__()
        self.src_emb = nn.Embedding(src_vocab_size, d_model) ## 这个其实就是去定义生成一个矩阵,大小是 src_vocab_size * d_model
        self.pos_emb = PositionalEncoding(d_model) ## 位置编码情况,这里是固定的正余绘函数,也可以使用类似词向量的nn.Embedding获得一个可以更新学习的位置编码
        self.layers = nn.ModuleList([EncoderLayer() for _ in range(n_layers)]) ## 使用ModuleList对多个encoder进行堆叠,因为后续的encoder并没有使用词向量和位置编码,所以抽离出来:
```

逐行注释:

```
self.src_emb = nn.Embedding(src_vocab_size, d_model)
```

这里其实就是定义去生成一个矩阵,大小是 src_vocab_size * d_model

这是一个词向量层,相当于定义一个词表,词表到 d model 一个矩阵

```
self.pos emb = PositonalEncoding(d model)
```

位置编码情况,这里是固定的正余弦函数,也可以使用类似词向量的 nn.Embedding 获得一个可以更新学习的位置编码

这是一个位置编码层

PositonalEncoding 位置编码的具体实现函数

```
self.layers = nn.ModuleList([EncoderLayer() for _ in range(n_layers)])
```

使用ModuleList对多个encoder进行堆叠,因为后续的encoder并没有使用词向量和位置编码,所以抽离出来

layers层是把前馈神经网络和自注意力层组合

实现encoder的堆叠

接下来看 实现函数

```
def forward (self, enc_inputs):
## 这里我们的 enc_inputs 形状是: [batch_size x source_len]

## 下面这个代码通过src_emb, 进行索引定位, enc_outputs输出形状是[batch_size, src_len, d_model]
enc_outputs = self.src_emb(enc_inputs)

## 这里就是位置编码, 把两者相加放入到了这个函数里面, 从这里可以去看一下位置编码函数的实现: 3.
enc_outputs = self.pos_emb(enc_outputs.transpose(0, 1)).transpose(0, 1)

##get_attn_pad_mask是为了得到句子中pad的位置信息, 给到模型后面, 在计算自注意力和交互注意力的时候去掉pad符号的影响, 去看一下这个函数 4.
enc_self_attn_mask = get_attn_pad_mask(enc_inputs, enc_inputs)
enc_self_attns = []
for layer in self.layers:
## 去看EncoderLayer 层函数 5.
enc_outputs, enc_self_attn = layer(enc_outputs, enc_self_attn_mask)
enc_self_attns.append(enc_self_attn)
return enc_outputs, enc_self_attns
```

实现函数一定要看输入是什么

```
def forward(self, enc_inputs): # enc_inputs : [batch_size x
source_len]
```

encoder接受一个输入,也就是 encoder inputs 形状 batch size × sourcez len

```
enc_outputs = self.src_emb(enc_inputs)
```

下面这个代码通过 src_emb 进行索引定位, enc_output 输出形状是 [batch_size,src_len,d_model]

这行代码引用的是init代码的词向量的这个代码 self.src emb

这个部分要做的就是,通过索引定位 把对应数字的词向量提取出来 最后形成一个矩阵

enc_outputs矩阵的形状是 [batch_size x source_len x d_model]

比如一个字符,比如说我这个字符对应的是 1 这个数字,那么就去 nn.Embedding 这个里面,去找 1 对应的向量,然后拿过来,这就是这行代码实现的功能

简单说,就是把字符,转化为数字,然后把数字转化为 embedding

其实 字符 转化为数字 已经做到了 这里就是把 数字 索引 转化为 embedding 转化为对应的向量

```
enc_outputs =
self.pos_emb(enc_outputs.transpose(0,1)).transpose(0,1)
```

这里是位置编码,把两者相加放入到这个函数,从这里可以看一下位置编码函数的实现: 3.

接下来看 位置编码层 主要实现 两个作用

第一个是接收 enc_outputs,即 词向量之后的输出,作为位置编码的输入,然后把位置编码 和词向量进行相加

接下来 我们看 位置编码 是怎么实现的:

```
## 3. PositionalEncoding 代码实现
class PositionalEncoding(nn.Module):
   def __init__(self, d_model, dropout=0.1, max_len=5000):
       super(PositionalEncoding, self).__init__()
       ## 位置编码的实现其实很简单,直接对照着公式去敲代码就可以,下面这个代码只是其中一种实现方式;
       ## 从理解来讲,需要注意的就是偶数和奇数在公式上有一个共同部分,我们使用 log函数把次方拿下来,方便计算;
       ##假设我的demodel是512,那么公式里的pos代表的从0, 1, 2, 3...511的每一个位置,2i那个符号中i从0取到了255,那么2i对应取值就是0, 2, 4...510
       self.dropout = nn.Dropout(p=dropout)
       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)## 这里需要注意的是pe[:, 0::2]这个用法,就是从0开始到最后面,补长为2,其实代表的就是偶数位置
       pe[:, 1::2] = torch.cos(position * div_term)##这里需要注意的是pe[:, 1::2]这个用法,就是从1开始到最后面,补长为2,其实代表的就是奇数位置
       ## 上面代码获取之后得到的pe:[max_len*d_model]
       ## 下面这个代码之后,我们得到的pe形状是: [max_len*1*d_model]
       pe = pe.unsqueeze(0).transpose(0, 1)
       self.register_buffer('pe', pe) ## 定一个缓冲区, 其实简单理解为这个参数不更新就可以
   def forward(self, x):
       x: [seq_len, batch_size, d_model]
       x = x + self.pe[:x.size(0), :]
       return self.dropout(x)
```

讲解:

之前Transformer面试的时候,都会要求,手写位置编码代码!

位置编码的实现 就是对照着公式 去敲代码 图中给出的时候 位置编码的一种实现方式 位置编码的实现公式:

位置编码公式

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

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

两个共有的部分: e^(-(2i)/dmodel*log(10000))

position就是从0到511,代表的是每个位置,2i代表的是偶数,2i+1代表的是奇数,也就是偶数和奇数分别使用不同的函数,一个使用 sin函数,一个使用 cos函数 ,摘出共有的部分,写代码

```
div_term = torch.exp(torch.arange(0,d_model,2).float()* (-
math.log(10000.0) / d_model ))
```

为什么?没看明白这,看明白了

接下来,代码 position x 共有部分

```
pe[:,0::2] = torch.sin(position * div_term)
# 这里注意pe[:,0::2]这个用法,就是从0开始到最后面,步长为2,其实就是代表的偶数位置
pe[:,1::2] = torch.cos(position * div_term)
# 这里注意pe[:,1::2]这个用法,就是从1开始到最后面,步长为2,其实就是代表的奇数位置
#上面代码 获取之后 得到的 pe的形状 就是 =[max_len * d_model]
```

这里注释讲解的很清楚了

这里我们加一个维度的变换

```
pe = pe.unsqueeze(0).transpose(0,1)
```

经过处理之后,代码形状变为 max_len × 1× d_model

```
self.register_buffer('pe',pe)
```

这行代码的作用就是定义一个缓冲区, 简单理解为参数不更新

接下来看 forward 函数, forward 函数传入的是一个词向量, 经过词向量的一个参数, 接下来和位置编码相加, 得到输出 从而得到 encoder layer的输入:

```
def forward(self,x):
    # x : [seq_len,batch_size,d_model] 为什么这的batch_size在中间
    x = x + self.pe[:x.size(0),:]
    return self.dropout(x)
```

以上是位置编码函数的实现。

```
enc_self_attn_mask = get_attn_pad_mask(enc_inputs,enc_inputs)
enc_self_attns = []
for layer in self.layers:
    # EncoderLayer层函数5.
    enc_outputs,enc_self.attn =
layer(enc_outputs,enc_self_attn_mask)
    enc_self_attns.append(enc_self_attn)

return enc_outputs,enc_self_attns
```

```
讲解 enc_self_attn_mask = get_attn_pad_mask(enc_inputs,enc_inputs)
```

get_attn_pad_mask是为了得到句子中pad的位置信息,得到模型后面,在计算自注意力和交叉注意力的时候去掉pad符号的影响

get_attn_pad_mask这个函数 非常重要,实现起来不难,但确实很好的考察Transformer细节的知识点,这个函数实现的目的,告诉后面的模型以及后面的层,在原始句子的输入中,哪些部分,是被pad符号填充的,在最开始的时候,我们说过,一个Batch不可能长度都一致,所以为了更好地组成矩阵被模型处理我们会设置一个max_length最大长度,大于最大长度的被截断丢弃,小于最大长度的作用pad填充,既然最开始的时候,用pad符号填充了,首先我们需要告诉后面的模型,那些是被pad符号填充的,那么我们怎么告诉后面的模

型是被填充了呢?要解决两个问题,首先是为什么要告诉后面的模型,其次,怎么告诉后面的模型。

现在处理第一个问题, 为什么要告诉:

为什么需要告诉后面模型哪些位置被PAD填充 起 来 PAD 5 4 20 9 softmax 5 30 起 8 12 softmax 4 8 15 14 softmax 来 PAD 9 12 14 40 softmax

首先,注意力矩阵,有这个公式:

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

这个图上的数字,是公式 softmax 里的表达 $\frac{QK^T}{\sqrt{d_k}}$

表示的是 每个单词 对 其他单词 的相似性,具体来说 卷 和 卷的相似性,卷和起 的相似性,卷和来的相似性,卷和 pad 的相似性,其实说相似性并不准确,因为还没有进行 softmax 函数,但是可以当成相似性来理解。

接下来,我们以卷 这个相似性为例,在得到这个矩阵之后,每一横行 进行 softmax ,做 softmax

是为了得到概率,知道这个四个字符卷、起、来、PAD 对于卷来说哪个更重要,比如卷最重要占0.8,起还可以占0.1,那么问题来了PAD字符是我原来句子中不存在的,是我为了组成一个有效的矩阵,填充到里面的,那么在计算相似性的时候,当然不应该把PAD这个符号计算在内,但是在QK矩阵相乘除以根号dk之后,我们发现这里确实有一个值:9,因此我们要想办法去掉它,这就引出了第二个问题,怎么告诉后面的模型这个信息呢?

我们需要用到一个符号矩阵,把PAD符号所在的位置 设置为1,不是PAD符号的 设置为 0,刚刚那个代码得到的就是一个 符号矩阵

						符号矩阵				
	卷	起	来	PAD						
卷	20	5	4	9		0	¢	0	1	
起	5	30	8	12		0	0	0	1	
来	4	8	15	14		0	0	0	1	
PAD	9	12	14	40		0	0	0	1	

enc_self_attn_mask = get_attn_pad_mask(enc_inputs,enc_inputs)

接下来, 我们来看具体的内部 get attn pad mask 是怎么实现的:

```
## 4. get_attn_pad_mask

## 比如说,我现在的句子长度是5,在后面注意力机制的部分,我们在计算出来QK转置除以根号之后,softmax之前,我们得到的形状

## len_input * len*input 代表每个单词对其余包含自己的单词的影响力

## 所以这里我需要有一个同等大小形状的矩阵,告诉我哪个位置是PAD部分,之后在计算计算softmax之前会把这里置为无穷大;

## 一定需要注意的是这里得到的矩阵形状是batch_size x len_g x len_k,我们是对k中的pad符号进行标识,并没有对k中的做标识,因为没必要

## seq_g 和 seq_k 不一定一致,在交互注意力,g来自解码端,k来自编码端,所以告诉模型编码这边pad符号信息就可以,解码端的pad信息在交互注意力层是没有用到的;

def get_attn_pad_mask(seq_g, seq_k):
    batch_size, len_g = seq_g.size()
    batch_size, len_g = seq_g.size()
    batch_size, len_k = seq_k.size()
    # eq(zero) is PAD token
    pad_attn_mask = seq_k.data.eq(0).unsqueeze(1) # batch_size x 1 x len_k, one is masking
    return pad_attn_mask.expand(batch_size, len_q, len_k) # batch_size x len_g x len_k

I
```

代码有注释, 可以帮助理解

接下来,逐行讲解

```
def get_attn_pad_mask(seq_q,seq_k):
   batch_size,len_q = seq_q.size()
   batch_size,len_k = seq_k.size()
   # eq(zero) is PAD token
   pad_attn_mask = seq_k.data.eq(0).unsqueeze(1)
   # batch_size × 1 × len_k,one is masking
   # batch_size × len_q × len_k
   return pad_attn_mask.expand(batch_size,len_q,len_k)
```

```
batch_size,len_q = seq_q.size()
batch_size,len_k = seq_k.size()
```

分别得到 batch size、输入的长度和 输出的长度

注意这里传进来的是 def get_attn_pad_mask(seq_q,seq_k) seq_q、seq_k 注意这两个输入 并不是完全一致,自注意力层的时候 是一致的,但是在交互注意力层的时候,q来自 解码层、k来自 编码端,两者是不一致的

```
pad_attn_mask = seq_k.data.eq(0).unsqueeze(1)
```

这行代码 就是去看 输入的 seq_k 里面 哪些 是 PAD 符号 然后 把这个位置 置为 true

eq(0) 也就是说 如果对应的位置是0, pad符号 对应到 数字上就是 0 我们之前说过的 如果等于0 就设置为true 就是为1 也就是经过了一个转换 把 数字为0的部分 也就是为PAD 的那个数字 对应的索引部分 转换成 true 这个符号 对应的就是 1

```
return pad_attn_mask.expand(batch_size,len_q,len_k) 然后它重复了多少次呢重复了输入为 q的 这个长度也就是 len_q,最后得到的这个形状是 batch_size × len_q × len_k
```

接下来 我们继续来看 encoder 后面的代码

```
enc_self_attns = []

for layer in self.layers:

## 去看EncoderLayer 层函数 5.

enc_outputs, enc_self_attn = layer(enc_outputs, enc_self_attn_mask)

enc_self_attns.append(enc_self_attn)
```

这部分代码 就是encoder 三个部分中的最后一个部分 就是前馈神经网络和 自注意力神经网络的一个组成部分,因为它是一个 堆叠的 所以说 这里有一个循环 把每一层的输出 作为 下一层的输入 所以我们只需要看一层代码就可以了 enc_outputs,enc_self_attn = layer(enc_outputs,enc_self_attn_mask) 首先接收的是 上一层 编码器的输出 和 传给每一层的 attn_mask,enc_self_attn_mask这个是需要传给每一层的,这个是通过

```
class Encoder(nn.Module):
   def __init__(self):
      super(Encoder, self).__init__()
      self.src_emb = nn.Embedding(src_vocab_size, d_model) ## 这个其实就是去定义生成一个矩阵, 大小是 src_vocab_size * d_model
      self.pos_emb = PositionalEncoding(d_model) ## 位置编码情况,这里是固定的正余弦函数,也可以使用类似词向量的nn.Embedding获得一个可以更新学习的位置编码
      self_layers = nn.ModuleList([EncoderLayer() for _ in range(n_layers)]) ## 使用ModuleList对多个encoder进行堆叠,因为后续的encoder并没有使用词向量和位置编码,所以抽离出来:
   def forward(self, enc_inputs):
      ## 这里我们的 enc_inputs 形状是: [batch_size x source_len]
      ## 下面这个代码通过src_emb,进行索引定位,enc_outputs输出形状是[batch_size, src_len, d_model]
      enc outputs = self.src emb(enc inputs)
      ## 这里就是位置编码,把两者相加放入到了这个函数里面,从这里可以去看一下位置编码函数的实现;3.
      enc_outputs = self.pos_emb(enc_outputs.transpose(0, 1)).transpose(0, 1)
       ##get_attn_pad_mask是为了得到句子中pad的位置信息,给到模型后面,在计算自注意力和交互注意力的时候去掉pad符号的影响,去看一下这个函数 <mark>4.</mark>
     enc_self_attn_mask = get_attn_pad_mask(enc_inputs, enc_inputs)
      enc_self_attns = []
      for layer in self.layers:
         ## 去看EncoderLayer 层函数 5.
          enc_outputs, enc_self_attn = layer(efic_outputs, enc_self_attn_mask)
        enc_self_attns.append(enc_self_attn)
      return enc_outputs, enc_self_attns
```

红框代码得到的信息

接下来 我们来看

```
enc_outputs,enc_self_attn =
layer(enc_outputs,enc_self_attn_mask)
```

layer 这个函数 是怎么实现的 ,如下:

```
## 5. EncoderLayer : 包含两个部分,多头注意力机制和前馈神经网络
class EncoderLayer(nn.Module):
    def __init__(self):
        super(EncoderLayer, self).__init__()
        self.enc_self_ittn = MultiHeadAttention()]
        self.pos_ffn = PoswiseFeedForwardNet()

def forward(self, enc_inputs, enc_self_attn_mask):
    ## 下面这个就是做自注意力层,输入是enc_inputs,形状是[batch_size x seq_len_q x d_model] 需要注意的是最初始的QKV矩阵是等同于这个输入的,去看一下enc_self_attn函数 6.
        enc_outputs, attn = self.enc_self_attn(enc_inputs, enc_inputs, enc_self_attn_mask) # enc_inputs to same Q,K,V
        enc_outputs = self.pos_ffn(enc_outputs) # enc_outputs: [batch_size x len_q x d_model]
    return enc_outputs, attn
```

首先来看 初始化函数是怎么实现的 首先来看 init函数 一个是 自注意力层 一个是 前馈神经网络层

前馈神经网络层 很简单 就是一个 linear层 self.pos_ffn = PoswiseFeedForwardNet()

但是 自注意力层 使用的是一个 多头注意力层 也是整个代码 最核心的部分

```
self.enc_self_attn = MultiHeadAttention()
```

还是继续看 forward函数,从forward函数 来看 自注意力层

首先 forward函数的自注意力层 接收了 4个输入

```
enc_outputs,attn =
self.enc_self_attn(enc_inputs,enc_inputs,enc_inputs,enc_self_at
tn_mask)
```

enc_self_attn_mask 这个输入就是将PAD的位置设置为1的符号矩阵

enc_inputs,enc_inputs,enc_inputs 这三个输入 分别代表 最原始的 qkv

然后, 我们来看 多头注意力机制是怎么实现的

```
## 6. MultiHeadAttention
class MultiHeadAttention(nn.Module):
   def __init__(self):
       super(MultiHeadAttention, self).__init__()
       ## 输入进来的QKV是相等的,我们会使用映射linear做一个映射得到参数矩阵Wq, Wk, Wv
       self.W_Q = nn.Linear(d_model, d_k * n_heads)
       self.W_K = nn.Linear(d_model, d_k * n_heads)
       self.W_V = nn.Linear(d_model, d_v * n_heads)
       self.linear = nn.Linear(n_heads * d_v, d_model)
       self.layer_norm = nn.LayerNorm(d_model)
 def forward(self, Q, K, V, attn_mask):
     ## 这个多头分为这几个步骤,首先映射分头,然后计算atten_scores,然后计算atten_value;
      ##输入进来的数据形状: Q: [batch_size x len_q x d_model], K: [batch_size x len_k x d_model], V: [batch_size x len_k x d_model]
     residual, batch_size = Q, Q.size(0)
     # (B, S, D) -proj-> (B, S, D) -split-> (B, S, H, W) -trans-> (B, H, S, W)
     ##下面这个就是先映射,后分头;一定要注意的是q和k分头之后维度是一致额,所以一看这里都是dk
      \mathbf{q_s} = \mathtt{self.W_Q(Q).view(batch\_size, -1, n\_heads, d\_k).transpose(1,2)} \quad \# \ q\_s: \ [batch\_size \times n\_heads \times len\_q \times d\_k] 
     k_s = self.W_K(K).view(batch_size, -1, n_heads, d_k).transpose(1,2) # k_s: [batch_size x n_heads x len_k x d_k]
     v_s = self.W_V(V).view(batch_size, -1, n_heads, d_v).transpose(1,2) # v_s: [batch_size \times n_heads \times len_k \times d_v]
     ## 输入进行的attn_mask形状是 batch_size x len_q x len_k, 然后经过下面这个代码得到 新的attn_mask : [batch_size x n_heads x len_q x len_k], 就是把pad信息重复了n个头上
     attn_mask = attn_mask.unsqueeze(1).repeat(1, n_heads, 1, 1)
     ##然后我们计算 ScaledDotProductAttention 这个函数,去7.看一下
     ## 得到的结果有两个: context: [batch size x
                                                 heads x \text{ len}_q \times d_v, attn: [batch_size \times n_heads \times len_q \times len_k]
     context, attn = ScaledDotProductAttention()(q_s, k_s, v_s, attn_mask)
     context = context.transpose(1, 2).contiguous().view(batch_size, -1, n_heads * d_v) # context: [batch_size x len_q x n_heads * d_v]
     output = self.linear(context)
     \textbf{return self.layer\_norm(output + residual), attn\_\# output: [batch\_size \times len\_q \times d\_model]}
```

这部分代码 一定要 搞清楚 数据流动形状

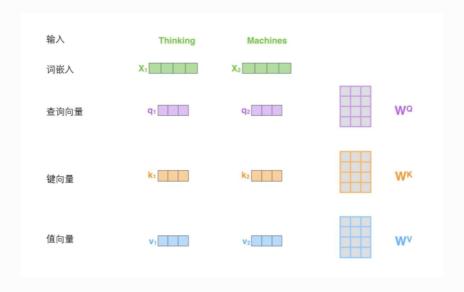
首先,在初始化函数中,前三行是得到一个 映射矩阵

```
self.W_Q = nn.Linear(d_model,d_k * n_heads)
self.W_K = nn.Linear(d_model,d_k * n_heads)
self.W_V = nn.Linear(d_model,d_v * n_heads)
```

就是把 d_model 分别映射到 d_k*n_heads 、d_k*n_heads 、d_v*n_heads

注意到 前两个 是相等的 都是 d_k * n_heads , 因为需要保证 最后得到的 Q K矩阵 维度是相同的

从图片来理解:



首先、自注意力层、输入是什么?输入是最原始的Q、K、V

而在图中,我们的输入是什么?输入的是词向量之后的一个输出,也就是词嵌入,也就是把Thinking转变成x1,Machines转变为x2,词嵌入batch=1,length=2,d_model=4,然后我们生成三个矩阵,也就是三个参数矩阵 WQ、Wk、Wv,这三个参数矩阵的作用是什么呢?它分别和这两个输入做计算,生成对应的 q、k、v ,也就是 查询向量、键向量 和 值向量,也就是我们使用词嵌入 和 三个参数矩阵 去计算 对应的 查询向量、键向量 和 值向量,在这个代码实现的时候,是把词嵌入 复制了三份,也就是Q、K、V复制了三份

```
# MultiHeadAttention
def forward(self,Q,K,V,attn_mask):
```

调用:

```
# EncoderLayer
enc_outputs,attn =
self.enc_self_attn(enc_inputs,enc_inputs,enc_inputs,enc_self_at
tn_mask)
# enc_inputs to same Q,K,V
```

在编码端做自注意力的时候,是把enc_inputs复制了三份,分别赋值为Q, K, V

分别和对应的参数矩阵做计算,现在思考为什么是复制三份而不是一份传进去,原因是因为在解码端还有交互注意力,它的Q矩阵来自于解码端,KV矩阵来自编码端,两者并不相同,所以接收三个输入,接下来看forward函数:

```
## 6. MultiHeadAttention
class MultiHeadAttention(nn.Module):
    def __init__(self):
        super(MultiHeadAttention, self).__init__()
        ## 输入进来的QKV是相等的,我们会使用映射linear做一个映射得到参数矩阵Wq, Wk, Wv
        self.W_Q = nn.Linear(d_model, d_k * n_heads)
        self.W_K = nn.Linear(d_model, d_k * n_heads)
        self.W_V = nn.Linear(d_model, d_v * n_heads)
        self.linear = nn.Linear(n_heads * d_v, d_model)
        self.layer_norm = nn.LayerNorm(d_model)
    def forward(self, Q, K, V, attn mask):
        ## 这个多头分为这几个步骤,首先映射分头,然后计算atten_scores,然后计算atten_value;
        ##输入进来的数据形状: Q: [batch_size x len_q x d_model], K: [batch_size x len_k x d_model], V: [batch_size x len_k x d_model]
        residual, batch size = Q, Q.size(0)
        # (B, S, D) -proj-> (B, S, D) -split-> (B, S, H, W) -trans-> (B, H, S, W)
        ##下面这个就是先映射,后分头;一定要注意的是a和k分头之后维度是一致额,所以一看这里都是dk
        q_s = self.W_Q(Q).view(batch_size, -1, n_heads, d_k).transpose(1,2) # <math>q_s: [batch_size \times n_heads \times len_q \times d_k]
        k_s = self.w_K(K).view(batch_size, -1, n_heads, d_k).transpose(1,2) # k_s: [batch_size x n_heads x len_k x d_k]
         \textbf{v_s} = \texttt{self.W_V(V).view(batch\_size, -1, n\_heads, d\_v).transpose(1,2)} \quad \# \ \textit{v\_s:} \ [\textit{batch\_size} \ \textit{x} \ \textit{n\_heads} \ \textit{x} \ \textit{len\_k} \ \textit{x} \ \textit{d\_v}] 
           输入进行的attn_mask形状是 batch_size x len_q x len_k, 然后经过下面这个代码得到 新的attn_mask : [batch_size x n_heads x len_q x len_k], 就是把pad信息重复了n个头上
        attn_mask = attn_mask.unsqueeze(1).repeat(1, n_heads, 1, 1)
        ##然后我们计算 ScaledDotProductAttention 这个函数,去7.看一下
        ## 得到的结果有两个: context: [batch\_size \times n\_heads \times len\_q \times d\_v], attn: [batch\_size \times n\_heads \times len\_q \times len\_k]
        context, attn = ScaledDotProductAttention()(q_s, k_s, v_s, attn_mask)
        context = context.transpose(1, 2).contiguous().view(batch_size, -1, n_heads * d_v) # context: [batch_size x len_q x n_heads * d_v]
        output = self.linear(context)
        return self.layer_norm(output + residual), attn # output: [batch_size x len_q x d_model]
```

Q最开始,我们得到的输入是什么形状呢?看注释 batch_size x len_q x d_model

K 的形状 batch_size \times len_ \mathbf{k} \times d_model、 V 的形状: batch_size \times len_ \mathbf{k} \times d_model

```
## 6. MultiHeadAttention
class MultiHeadAttention(nn.Module):
    def __init__(self):
        super(MultiHeadAttention, self).__init__()
        ## 输入进来的QKV是相等的,我们会使用映射linear做一个映射得到参
数矩阵Wq, Wk,WV
    self.W_Q = nn.Linear(d_model, d_k * n_heads)
    self.W_K = nn.Linear(d_model, d_k * n_heads)
    self.W_V = nn.Linear(d_model, d_v * n_heads)
    self.linear = nn.Linear(n_heads * d_v, d_model)
    self.layer_norm = nn.LayerNorm(d_model)

def forward(self, Q, K, V, attn_mask):

## 这个多头分为这几个步骤,首先映射分头,
```

```
## 然后计算atten scores, 然后计算atten value;
       ## 输入进来的数据形状:
       ## Q: [batch size x len q x d model],
       ## K: [batch size x len k x d model],
       ## V: [batch size x len k x d model]
       residual, batch size = Q, Q.size(0)
       # (B, S, D) -proj-> (B, S, D) -split-> (B, S, H, W) -
trans-> (B, H, S, W)
       ##下面这个就是先映射,后分头;
       # 一定要注意的是α和k分头之后维度是一致额,所以一看这里都是dk
       q s = self.W Q(Q).view(batch size, -1, n heads,
d k).transpose(1,2)
                            # q s: [batch size x n heads x
len q x d k]
       k = self.W K(K).view(batch size, -1, n heads,
d k).transpose(1,2)
                            # k s: [batch size x n heads x
len k x d_k]
       v_s = self.W_V(V).view(batch_size, -1, n_heads,
d v).transpose(1,2)
                          # v s: [batch size x n heads x
len k x d v]
       ## 输入进行的attn mask形状是 batch size x len g x len k,
       ## 然后经过下面这个代码得到 新的attn mask: [batch size x
n heads x len q x len k],就是把pad信息重复了n个头上
       attn mask = attn mask.unsqueeze(1).repeat(1, n heads,
1, 1)
       ##然后我们计算 ScaledDotProductAttention 这个函数,去7.看一
下
       ## 得到的结果有两个: context: [batch size x n heads x
len q x d v], attn: [batch size x n heads x len q x len k]
       context, attn = ScaledDotProductAttention()(q s, k s,
v s, attn mask)
       context = context.transpose(1,
2).contiguous().view(batch size, -1, n heads * d v) # context:
[batch size x len q x n heads * d v]
       output = self.linear(context)
       return self.layer norm(output + residual), attn #
output: [batch size x len q x d model]
```

首先来看 这行代码

```
q_s = self.W_Q(Q).view(batch_size, -1, n_heads,
d_k).transpose(1,2)
```

下面这个就是先映射,后分头;

首先 经过W_Q矩阵做了一个映射得到了 W_Q矩阵,然后分头,分头的时候 用view 函数,把矩阵 分成 (n_heads) 8个头,每个头是 d_k 维数

同理: 先映射 后分头

```
q_s = self.W_Q(Q).view(batch_size, -1, n_heads,
d_k).transpose(1,2)
k_s = self.W_K(K).view(batch_size, -1, n_heads,
d_k).transpose(1,2)
v_s = self.W_V(V).view(batch_size, -1, n_heads,
d_v).transpose(1,2)
```

这三行代码非常重要,以后在自己写代码,涉及到多头注意力机制的时候,基本上都是仿写或者原封不动 拿来主义,这里有一个细节点 就是在分头的时候,这里得到的 qk矩阵 维度一定会是相同的,要不然最后维度不相同 就不能相乘 这是需要记住的细节点

在得到 对应的查询向量、键向量、值向量、以后、看这行代码

```
attn_mask = attn_mask.unsqueeze(1).repeat(1, n_heads, 1, 1)
```

就是说把哪些符号是 PAD 信息,然后也分头,重复 n_heads 次数,给每个头一个信息,给每个头 一个信息

```
context, attn = ScaledDotProductAttention()(q_s, k_s, v_s,
attn_mask)
```

这行代码实现的函数

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

具体地函数实现:

```
## 7. ScaledDotProductAttention
class ScaledDotProductAttention(nn.Module):
   def init (self):
       super(ScaledDotProductAttention, self). init ()
   def forward(self, Q, K, V, attn mask):
       # 输入进来的维度分别是 [batch size x n heads x len q x
d_k]
       # K: [batch size x n heads x len k x d k]
       # V: [batch size x n heads x len k x d v]
       # 首先经过matmul函数得到的scores形状是:
       # [batch size x n heads x len q x len k]
       scores = torch.matmul(Q, K.transpose(-1, -2)) /
np.sqrt(d k)
       # 然后关键词地方来了,下面这个就是用到了我们之前重点讲的
attn mask,
       # 把被mask的地方置为无限小, softmax之后基本就是0, 对q的单词不起
作用
       scores.masked fill (attn mask, -1e9)
       # Fills elements of self tensor with value where mask
is one.
       attn = nn.Softmax(dim=-1)(scores)
       context = torch.matmul(attn, V)
       return context, attn
```

```
scores = torch.matmul(Q, K.transpose(-1, -2)) / np.sqrt(d_k)
```

Q和K转置相乘, 然后除以 根号 dk

最重要的来了,把attn_mask里面 PAD的位置 置为无穷小,使得softmax之后 为0,这样对其他单词就不会有作用

```
scores.masked_fill_(attn_mask, -1e9)
```

接着 每一横行 做softmax

```
attn = nn.Softmax(dim=-1)(scores)
```

然后 乘以对应的 > 矩阵, 然后得到输出

```
context = torch.matmul(attn, V)
```

以上代码实现了功能

```
context, attn = ScaledDotProductAttention()(q_s, k_s, v_s,
attn_mask)
```

接着、后面的代码为常规操作

以上是整个encoder部分的代码,接下来是解码端的代码,解码端的代码和编码端非常的类似

```
def forward(self, dec inputs, enc inputs, enc outputs):
       # dec inputs : [batch size x target len]
       dec outputs = self.tgt emb(dec inputs)
       # [batch size, tgt len, d model]
       dec outputs = self.pos emb(
         dec outputs.transpose(0,1)).transpose(0, 1)
       # [batch size, tgt len, d model]
       # get attn pad mask 自注意力层的时候的pad 部分
       dec_self_attn_pad_mask = get_attn_pad_mask(dec_inputs,
dec inputs)
       # get attn subsequent mask 这个做的是自注意层的mask部分
       # 就是当前单词之后看不到,使用一个上三角为1的矩阵
       dec self attn subsequent mask
=get attn subsequent mask(dec inputs)
       ## 两个矩阵相加,大于0的为1,不大于0的为0,为1的在之后就会被
fill到无限小
       dec self attn mask = torch.gt(
         (dec self attn pad mask +
dec self attn subsequent mask), 0)
       ## 这个做的是交互注意力机制中的mask矩阵,
       # enc的输入是k, 我去看这个k里面哪些是pad符号, 给到后面的模型;
       # 注意哦,我g肯定也是有pad符号,但是这里我不在意的,之前说了好多
次了哈
       dec enc attn mask = get attn pad mask(dec inputs,
enc inputs)
       dec self attns, dec enc attns = [], []
       for layer in self.layers:
           dec outputs, dec self attn, dec enc attn = layer(
             dec outputs,
             enc outputs,
             dec self attn mask,
             dec enc attn mask)
           dec self attns.append(dec self attn)
           dec enc attns.append(dec enc attn)
       return dec outputs, dec self attns, dec enc attns
```

首先 init, 也分为三个部分, 词向量、位置编码、以及后面堆叠n个解码层

接收的输入、编码端的输入、编码端的输出、以及解码端的输入

为什么需要编码端的输入?在交互的时候、告诉解码端、哪些是PAD符号

```
def forward(self, dec_inputs, enc_inputs, enc_outputs):
```

接下来, 词嵌入 & 位置编码

```
# dec_inputs : [batch_size x target_len]
dec_outputs = self.tgt_emb(dec_inputs)
# [batch_size, tgt_len, d_model]
dec_outputs =
self.pos_emb(dec_outputs.transpose(0,1)).transpose(0, 1)
# [batch_size, tgt_len, d_model]
```

整个decoder可讲的部分其实并不多,因为整体上和encoder很类似,但是有两个地方,需要强调一下,第一个就是在做自注意力层的时候,要做两个mask,一个是PAD符号,首先解码端的输入 也有PAD符号,这是第一个mask,解码端输入的mask,第二个mask,当前单词之后,看不到的mask;所以要计算这两个部分的mask,而在做交互注意力机制的时候,只需要对编码器的PAD,哪些符号是PAD的,做mask操作就可以了

一定要记住,一个是自注意力层,一个是交互注意力层

在自注意力层做两个mask,一个是对自身pad符号的mask,一个是对当前单词之后看不到的单词的mask

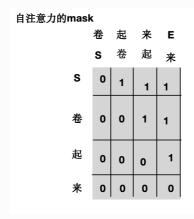
在交互注意力层这一部分,只有编码层哪些部分是PAD的,那部分单词做mask操作就可以了 具体地代码如下:

```
dec_self_attn_pad_mask = get_attn_pad_mask(dec_inputs,
dec_inputs)
```

首先这个代码,之前已经看过了,这个是生成一个符号矩阵,输入的是dec_inputs,也就是得到的是decoder inputs里面,哪些符号是PAD的,设为1,得到一个符号矩阵,和刚才讲的一样

```
dec_enc_attn_mask = get_attn_pad_mask(dec_inputs, enc_inputs)
```

这个函数很有意思,这行代码就是把当前单词之后看不到的部分,做mask,在实现的时候, 其实就是做一个上三角矩阵,上三角为1的矩阵,也就是说:



输入S在看的时候,只能看到S,看不到 卷起来;输入为 卷 的时候,只能看到 S和卷,看不到 起来;所以形成一个上三角矩阵为1的矩阵

再来看:

```
dec_self_attn_pad_mask = get_attn_pad_mask(dec_inputs,
dec_inputs)
dec_enc_attn_mask = get_attn_pad_mask(dec_inputs, enc_inputs)
```

这两行代码得到两个mask矩阵,两者相加,大于0的部分置为1,小于或者等于0的部分置为0,

也就是说经过这行代码的处理还是得到一个符号矩阵,为1的部分是被mask的部分,为0的部分,不去做操作

```
dec_enc_attn_mask = get_attn_pad_mask(dec_inputs, enc_inputs)
```

交互注意力层 只对编码器的PAD做mask操作

```
## from https://github.com/graykode/nlp-tutorial/tree/master/5-
1.Transformer
import numpy as np
import torch
import torch.nn as nn
import torch.optim as optim
import matplotlib.pyplot as plt
import math
def make batch(sentences):
    input batch = [[src vocab[n] for n in
sentences[0].split()]]
    output_batch = [[tgt_vocab[n] for n in
sentences[1].split()]]
    target_batch = [[tgt_vocab[n] for n in
sentences[2].split()]]
    return torch.LongTensor(input batch),
torch.LongTensor(output batch), torch.LongTensor(target batch)
```

```
## 10
def get attn subsequent mask(seg):
   seq: [batch size, tgt len]
   attn shape = [seq.size(0), seq.size(1), seq.size(1)]
   # attn shape: [batch size, tgt len, tgt len]
   subsequence mask = np.triu(np.ones(attn shape), k=1) # 生
成一个上三角矩阵
   subsequence mask =
torch.from numpy(subsequence mask).byte()
   return subsequence mask # [batch size, tgt len, tgt len]
## 7. ScaledDotProductAttention
class ScaledDotProductAttention(nn.Module):
   def init (self):
       super(ScaledDotProductAttention, self).__init__()
   def forward(self, Q, K, V, attn mask):
       ## 输入进来的维度分别是 [batch size x n heads x len q x
d k] K: [batch size x n heads x len k x d k] V: [batch size
x n heads x len k x d v]
       ##首先经过matmul函数得到的scores形状是: [batch size x
n heads x len q x len k]
       scores = torch.matmul(Q, K.transpose(-1, -2)) /
np.sqrt(d k)
       ## 然后关键词地方来了,下面这个就是用到了我们之前重点讲的
attn mask, 把被mask的地方置为无限小, softmax之后基本就是0, 对g的单词不
起作用
       scores.masked fill (attn mask, -1e9) # Fills elements
of self tensor with value where mask is one.
       attn = nn.Softmax(dim=-1)(scores)
       context = torch.matmul(attn, V)
       return context, attn
## 6. MultiHeadAttention
class MultiHeadAttention(nn.Module):
   def __init__(self):
       super(MultiHeadAttention, self). init ()
```

```
## 输入进来的OKV是相等的,我们会使用映射linear做一个映射得到参
数矩阵Wg, Wk, Wv
       self.W Q = nn.Linear(d model, d k * n heads)
       self.W K = nn.Linear(d_model, d_k * n_heads)
       self.W V = nn.Linear(d model, d v * n heads)
       self.linear = nn.Linear(n heads * d v, d model)
       self.layer norm = nn.LayerNorm(d model)
   def forward(self, Q, K, V, attn mask):
       ## 这个多头分为这几个步骤,首先映射分头,然后计算atten scores,
然后计算atten value;
       ##输入进来的数据形状: Q: [batch size x len q x d model],
K: [batch size x len k x d model], V: [batch size x len k x
d model]
       residual, batch size = Q, Q.size(0)
       # (B, S, D) -proj-> (B, S, D) -split-> (B, S, H, W) -
trans-> (B, H, S, W)
       ##下面这个就是先映射,后分头;一定要注意的是q和k分头之后维度是一
致额,所以一看这里都是dk
       q s = self.W Q(Q).view(batch size, -1, n heads,
d_k).transpose(1,2) # q_s: [batch_size x n_heads x len_q x
d k]
       k = self.W K(K).view(batch size, -1, n heads,
d k).transpose(1,2) # k s: [batch size x n heads x len k x
d k]
       v_s = self.W_V(V).view(batch_size, -1, n_heads,
d v).transpose(1,2) # v s: [batch size x n heads x len k x
d v]
       ## 输入进行的attn mask形状是 batch size x len g x len k,
然后经过下面这个代码得到 新的attn_mask : [batch_size x n_heads x
len q x len k], 就是把pad信息重复了n个头上
       attn mask = attn mask.unsqueeze(1).repeat(1, n heads,
1, 1)
       ##然后我们计算 ScaledDotProductAttention 这个函数,去7.看一
下
       ## 得到的结果有两个: context: [batch_size x n_heads x
len q x d v], attn: [batch size x n heads x len q x len k]
```

```
context, attn = ScaledDotProductAttention()(q s, k s,
v_s, attn_mask)
       context = context.transpose(1,
2).contiguous().view(batch size, -1, n heads * d v) # context:
[batch size x len q x n heads * d v]
       output = self.linear(context)
       return self.layer norm(output + residual), attn #
output: [batch size x len q x d model]
## 8. PoswiseFeedForwardNet
class PoswiseFeedForwardNet(nn.Module):
   def init (self):
       super(PoswiseFeedForwardNet, self). init ()
       self.conv1 = nn.Conv1d(in channels=d model,
out channels=d ff, kernel size=1)
       self.conv2 = nn.Conv1d(in channels=d ff,
out channels=d model, kernel size=1)
       self.layer norm = nn.LayerNorm(d model)
   def forward(self, inputs):
       residual = inputs # inputs : [batch size, len q,
d model]
       output = nn.ReLU()(self.conv1(inputs.transpose(1, 2)))
       output = self.conv2(output).transpose(1, 2)
       return self.layer_norm(output + residual)
## 4. get attn pad mask
## 比如说, 我现在的句子长度是5, 在后面注意力机制的部分, 我们在计算出来QK转
置除以根号之后,softmax之前,我们得到的形状
## len input * len*input 代表每个单词对其余包含自己的单词的影响力
## 所以这里我需要有一个同等大小形状的矩阵,告诉我哪个位置是PAD部分,之后在
计算计算softmax之前会把这里置为无穷大;
## 一定需要注意的是这里得到的矩阵形状是batch size x len q x len k, 我
们是对k中的pad符号进行标识,并没有对k中的做标识,因为没必要
```

```
## seq q 和 seq k 不一定一致,在交互注意力,q来自解码端,k来自编码端,所
以告诉模型编码这边pad符号信息就可以,解码端的pad信息在交互注意力层是没有用
到的;
def get attn pad mask(seq q, seq k):
   batch size, len q = seq q.size()
   batch size, len k = seq k.size()
   # eq(zero) is PAD token
   pad attn mask = seq k.data.eq(0).unsqueeze(1) # batch size
x 1 x len k, one is masking
   return pad attn mask.expand(batch size, len q, len k) #
batch size x len q x len k
## 3. PositionalEncoding 代码实现
class PositionalEncoding(nn.Module):
   def init (self, d model, dropout=0.1, max len=5000):
       super(PositionalEncoding, self).__init__()
      ## 位置编码的实现其实很简单,直接对照着公式去敲代码就可以,下面这
个代码只是其中一种实现方式;
      ## 从理解来讲,需要注意的就是偶数和奇数在公式上有一个共同部分,我
们使用log函数把次方拿下来,方便计算;
      ## pos代表的是单词在句子中的索引,这点需要注意;比如max len是
128个、那么索引就是从0、1、2、...,127
      ##假设我的demodel是512, 2i那个符号中i从0取到了255, 那么2i对应
取值就是0,2,4...510
      self.dropout = nn.Dropout(p=dropout)
      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)## 这里需要
注意的是pe[:, 0::2]这个用法, 就是从0开始到最后面, 补长为2, 其实代表的就是
偶数位置
      pe[:, 1::2] = torch.cos(position * div term)##这里需要注
意的是pe[:, 1::2]这个用法,就是从1开始到最后面,补长为2,其实代表的就是奇
```

上面代码获取之后得到的pe:[max len*d model]

数位置

```
## 下面这个代码之后,我们得到的pe形状是: [max len*1*d model]
       pe = pe.unsqueeze(0).transpose(0, 1)
       self.register_buffer('pe', pe) ## 定一个缓冲区, 其实简单理
解为这个参数不更新就可以
   def forward(self, x):
       x: [seq len, batch size, d model]
       x = x + self.pe[:x.size(0), :]
       return self.dropout(x)
## 5. EncoderLayer : 包含两个部分,多头注意力机制和前馈神经网络
class EncoderLayer(nn.Module):
   def init (self):
       super(EncoderLayer, self).__init__()
       self.enc self attn = MultiHeadAttention()
       self.pos ffn = PoswiseFeedForwardNet()
   def forward(self, enc inputs, enc self attn mask):
       ## 下面这个就是做自注意力层,输入是enc inputs,形状是
[batch size x seq len q x d model] 需要注意的是最初始的QKV矩阵是等同
于这个输入的,去看一下enc self attn函数 6.
       enc outputs, attn = self.enc self attn(enc inputs,
enc inputs, enc inputs, enc self attn mask) # enc inputs to
same Q,K,V
       enc outputs = self.pos ffn(enc outputs) # enc outputs:
[batch size x len q x d model]
       return enc outputs, attn
## 2. Encoder 部分包含三个部分: 词向量embedding, 位置编码部分, 注意力层
及后续的前馈神经网络
class Encoder(nn.Module):
   def init (self):
       super(Encoder, self).__init__()
       self.src emb = nn.Embedding(src vocab size, d model)
## 这个其实就是去定义生成一个矩阵, 大小是 src vocab size * d model
```

```
self.pos emb = PositionalEncoding(d model) ## 位置编码情
况,这里是固定的正余弦函数,也可以使用类似词向量的nn.Embedding获得一个可
以更新学习的位置编码
       self.layers = nn.ModuleList([EncoderLayer() for _ in
range(n layers)]) ## 使用ModuleList对多个encoder进行堆叠,因为后续的
encoder并没有使用词向量和位置编码, 所以抽离出来;
   def forward(self, enc inputs):
       ## 这里我们的 enc inputs 形状是: [batch size x
source len]
       ## 下面这个代码通过src emb, 进行索引定位, enc outputs输出形状
是[batch size, src len, d model]
       enc outputs = self.src emb(enc inputs)
       ## 这里就是位置编码,把两者相加放入到了这个函数里面,从这里可以去
看一下位置编码函数的实现; 3.
       enc outputs = self.pos emb(enc outputs.transpose(0,
1)).transpose(0, 1)
       ##get attn pad mask是为了得到句子中pad的位置信息,给到模型后
面,在计算自注意力和交互注意力的时候去掉pad符号的影响,去看一下这个函数 4.
       enc self attn mask = get attn pad mask(enc inputs,
enc inputs)
       enc self attns = []
       for layer in self.layers:
          ## 去看EncoderLayer 层函数 5.
          enc outputs, enc self attn = layer(enc outputs,
enc self attn mask)
           enc self attns.append(enc self attn)
       return enc outputs, enc self attns
## 10.
class DecoderLayer(nn.Module):
   def __init__(self):
       super(DecoderLayer, self). init ()
       self.dec self attn = MultiHeadAttention()
       self.dec enc attn = MultiHeadAttention()
       self.pos ffn = PoswiseFeedForwardNet()
   def forward(self, dec_inputs, enc_outputs,
dec self attn mask, dec enc attn mask):
```

```
dec outputs, dec self attn =
self.dec self attn(dec inputs, dec inputs, dec inputs,
dec self attn mask)
       dec outputs, dec enc attn =
self.dec_enc_attn(dec_outputs, enc_outputs, enc_outputs,
dec enc attn mask)
       dec outputs = self.pos ffn(dec_outputs)
       return dec outputs, dec self attn, dec enc attn
## 9. Decoder
class Decoder(nn.Module):
   def init (self):
       super(Decoder, self). init ()
       self.tgt emb = nn.Embedding(tgt vocab size, d model)
       self.pos emb = PositionalEncoding(d model)
       self.layers = nn.ModuleList([DecoderLayer() for in
range(n_layers)])
   def forward(self, dec inputs, enc inputs, enc outputs): #
dec inputs : [batch size x target len]
       dec outputs = self.tgt emb(dec inputs) # [batch size,
tgt len, d model]
       dec outputs = self.pos emb(dec outputs.transpose(0,
1)).transpose(0, 1) # [batch size, tgt len, d model]
       ## get attn pad mask 自注意力层的时候的pad 部分
       dec self_attn pad mask = get attn pad mask(dec_inputs,
dec inputs)
       ## get attn subsequent mask 这个做的是自注意层的mask部分,
就是当前单词之后看不到,使用一个上三角为1的矩阵
       dec self attn subsequent mask =
get attn subsequent mask(dec inputs)
       ## 两个矩阵相加,大于0的为1,不大于0的为0,为1的在之后就会被
fill到无限小
       dec self attn mask = torch.gt((dec self attn pad mask +
dec self attn subsequent mask), 0)
```

```
## 这个做的是交互注意力机制中的mask矩阵, enc的输入是k, 我去看这
个k里面哪些是pad符号,给到后面的模型;注意哦,我q肯定也是有pad符号,但是这
里我不在意的, 之前说了好多次了哈
      dec_enc_attn_mask = get_attn_pad mask(dec inputs,
enc inputs)
      dec self attns, dec enc attns = [], []
       for layer in self.layers:
          dec outputs, dec self attn, dec enc attn =
layer(dec outputs, enc outputs, dec self attn mask,
dec enc attn mask)
          dec self attns.append(dec self attn)
          dec enc attns.append(dec enc attn)
      return dec_outputs, dec_self_attns, dec enc attns
## 1. 从整体网路结构来看,分为三个部分:编码层,解码层,输出层
class Transformer(nn.Module):
   def init (self):
       super(Transformer, self). init ()
       self.encoder = Encoder() ## 编码层
       self.decoder = Decoder() ## 解码层
       self.projection = nn.Linear(d model, tgt vocab size,
bias=False) ## 输出层 d model 是我们解码层每个token输出的维度大小,之
后会做一个 tgt vocab size 大小的softmax
   def forward(self, enc inputs, dec inputs):
      ## 这里有两个数据进行输入,一个是enc inputs 形状为
[batch size, src len], 主要是作为编码段的输入, 一个dec inputs, 形状为
[batch size, tgt len], 主要是作为解码端的输入
      ## enc_inputs作为输入 形状为[batch_size, src_len], 输出由自
己的函数内部指定,想要什么指定输出什么,可以是全部tokens的输出,可以是特定
每一层的输出; 也可以是中间某些参数的输出;
      ## enc outputs就是主要的输出, enc self attns这里没记错的是QK
转置相乘之后softmax之后的矩阵值、代表的是每个单词和其他单词相关性;
      enc outputs, enc self attns = self.encoder(enc inputs)
      ## dec outputs 是decoder主要输出,用于后续的linear映射;
dec self attns类比于enc self attns 是查看每个单词对decoder中输入的其
余单词的相关性; dec enc attns是decoder中每个单词对encoder中每个单词的
```

相关性;

```
dec outputs, dec self attns, dec enc attns =
self.decoder(dec inputs, enc inputs, enc outputs)
       ## dec outputs做映射到词表大小
       dec_logits = self.projection(dec_outputs) # dec_logits
: [batch size x src vocab size x tgt vocab size]
       return dec logits.view(-1, dec logits.size(-1)),
enc self attns, dec self attns, dec enc attns
if name == ' main ':
   ## 句子的输入部分,
   sentences = ['ich mochte ein bier P', 'S i want a beer', 'i
want a beer E'l
   # Transformer Parameters
   # Padding Should be Zero
   ## 构建词表
   src vocab = {'P': 0, 'ich': 1, 'mochte': 2, 'ein': 3,
'bier': 4}
    src_vocab_size = len(src_vocab)
   tgt_vocab = {'P': 0, 'i': 1, 'want': 2, 'a': 3, 'beer': 4,
'S': 5, 'E': 6}
   tgt_vocab_size = len(tgt_vocab)
    src len = 5 # length of source
   tgt len = 5 # length of target
   ## 模型参数
   d model = 512 # Embedding Size
   d ff = 2048 # FeedForward dimension
   d k = d v = 64 \# dimension of K(=Q), V
   n_layers = 6 # number of Encoder of Decoder Layer
   n heads = 8 # number of heads in Multi-Head Attention
   model = Transformer()
   criterion = nn.CrossEntropyLoss()
```

```
optimizer = optim.Adam(model.parameters(), lr=0.001)

enc_inputs, dec_inputs, target_batch =
make_batch(sentences)

for epoch in range(20):
    optimizer.zero_grad()
    outputs, enc_self_attns, dec_self_attns, dec_enc_attns
= model(enc_inputs, dec_inputs)
    loss = criterion(outputs,
target_batch.contiguous().view(-1))
    print('Epoch:', '%04d' % (epoch + 1), 'cost =',
'{:.6f}'.format(loss))
    loss.backward()
    optimizer.step()
```