

Attention mechanism and **Transformers**

Clément Romac (Hugging Face & Inria)

clement.romac@inria.fr
https://clementromac.github.io/teaching/

Petit sondage 🔍

Que vous évoque le mot "Transformer"?

Contenu |

- Rappels RNNs et Seq2Seq
- Attention mechanism
- Self-Attention
 - Multi-hop
 - Multi-head
- Transformer architecture

A retenir

- Limites des RNNs
- Compréhension du principe d'attention + self-attention
- Compréhension globale de l'architecture Transformer
- Intuition des très nombreux tricks (Positional Encoding, Layer Norm, Residual connections...)

Ressources

Cours:

Waterloo university: https://www.youtube.com/watch?v=OyFJWRnt_AY

Talks:

- Arthur Szlam: https://www.youtube.com/watch?v=M-HCvbdQ8wA

<u>Lectures:</u>

- https://jalammar.github.io/illustrated-transformer/
- https://lilianweng.github.io/posts/2018-06-24-attention/
- https://lilianweng.github.io/posts/2020-04-07-the-transformer-family/
- <u>https://transformersbook.com/</u>

Rappels sur les RNNs et Seq2Seq

Comment gérer les dépendances temporelles?









Exemple 1:

J,

aime

le

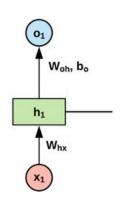
... Learning

Exemple 2:

[02, 10, 2015, 1500] [03, 10, 2015, 1205] [04, 10, 2015, 1820] ... [05, 10, 2015, 1900] Jour, mois, année, valeur

Pour un élément:

- Représentation (hidden state)
- 2) Sortie





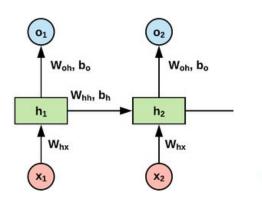


$$h_1 = \sigma_h(W_{hx}x_1)$$

$$o_1 = \sigma_o(W_{oh}h_1 + b_o)$$

Pour un élément:

- Représentation (hidden state)
- 2) Sortie





- hidden state

$$h_1 = \sigma_h(W_{hx}x_1)$$

- sortie

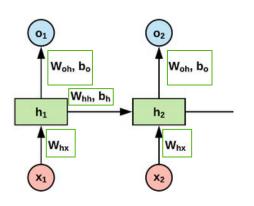
$$o_1 = \sigma_o(W_{oh}h_1 + b_o)$$

$$h_2=\sigma_h(W_{hx}x_2\!+\!W_{hh}h_1+b_h)$$

$$o_1 = \sigma_o(W_{oh}h_1 + b_o)$$

Pour un élément:

- Représentation (hidden state)
- Sortie



On réutilise le même réseau!

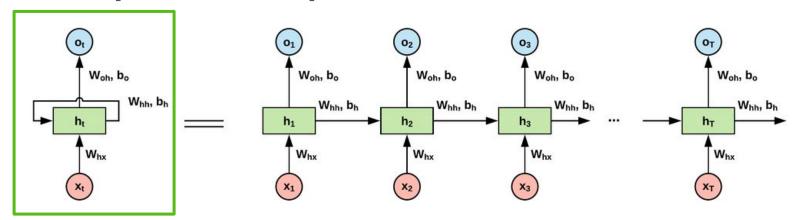


- hidden state
- sortie

$$egin{align} h_1 &= \sigma_h(W_{hx}x_1) \ o_1 &= \sigma_o(W_{oh}h_1 + b_o) \ \end{pmatrix}$$

$$h_2 = \sigma_h(\overline{W_{hx}}x_2 + \overline{W_{hh}}h_1 + \overline{b_h})$$

$$o_1 = \sigma_o(\overline{W_{oh}}h_1 + b_o)$$



hidden state

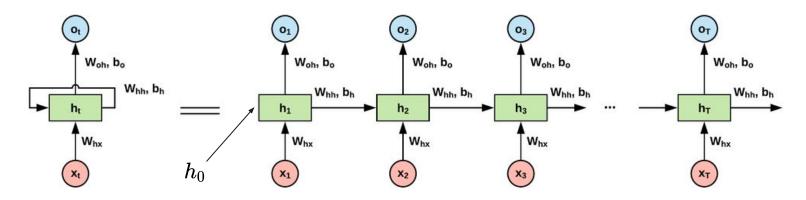
$$h_1=\sigma_h(\overline{W_{hx}}x_1)$$

sortie

 $o_1 = \sigma_o(\overline{W_{oh}}h_1 + b_o)$

$$egin{align} h_2 &= \sigma_h ig(W_{hx} x_2 + W_{hh} h_1 + b_h ig) \ o_1 &= \sigma_o ig(W_{oh} h_1 + b_o ig) \ \end{pmatrix}$$

$$o_1 = \sigma_o(W_{oh}h_1 + b_o)$$



- hidden state
- $h_1 = \sigma_h(W_{hx}x_1 {+} W_{hh}h_0 + b_h)$

- sortie

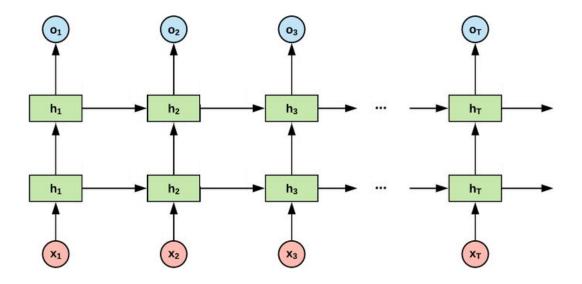
 $o_1 = \sigma_o(W_{oh}h_1 + b_o)$

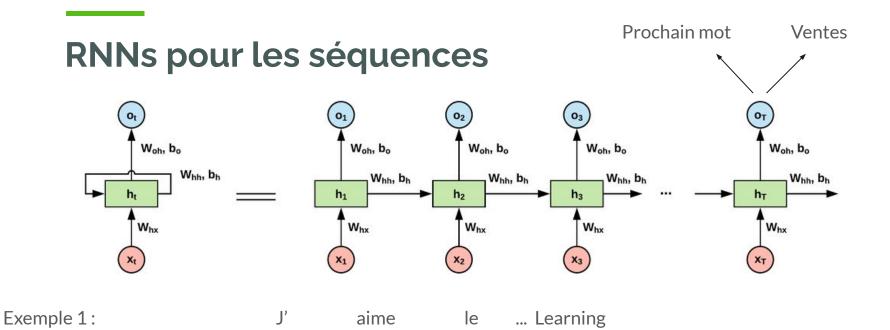
$$h_2 = \sigma_h (W_{hx} x_2 \! + \! W_{hh} h_1 + b_h)$$

$$o_1 = \sigma_o(W_{oh}h_1 + b_o)$$

On peut enchaîner les couches:

- Comme dans un
 Perceptron, on peut
 approximer des fonctions
 plus complexes
- Chaque couche a ses poids

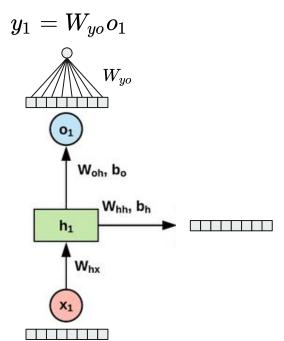




Exemple 2: [02, 10, 2015, 1500] [03, 10, 2015, 1205] [04, 10, 2015, 1820] ... [05, 10, 2015, 1900]

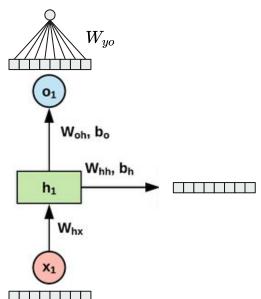
Jour, mois, année, valeur

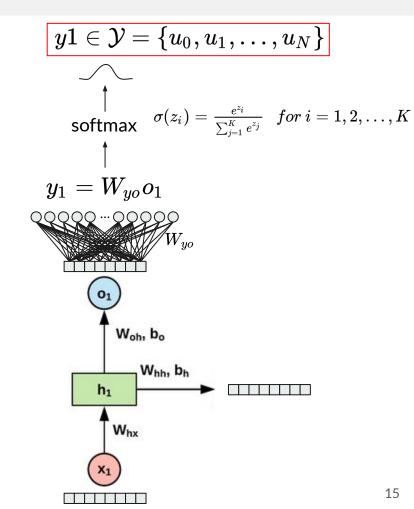
 $y1\in\mathbb{R}$



$$y1\in\mathbb{R}$$

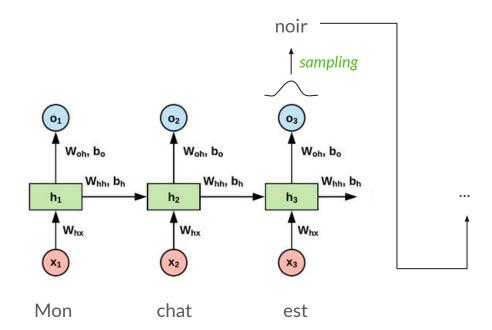
$$y_1=W_{yo}o_1$$





Utilisation à l'inférence:

- Prédiction du prochain timestep
- Réutilisation des prédictions
- Accumulation des erreurs



(Causal) Language Modeling

Given a corpus of tokens: $U = \{u1, \ldots, u_N\}$

$$\max_{ heta} L(U) = \sum_{i} log P_{ heta}(u_i|u_{i-k},\ldots,u_{i-1})$$

(Causal) Language Modeling

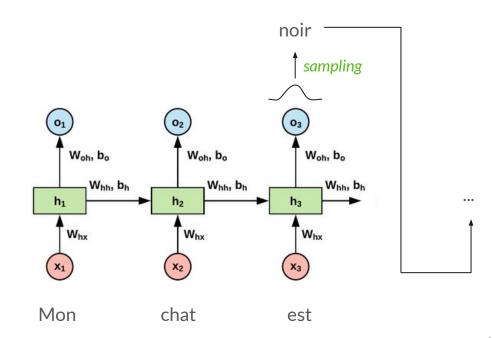
En pratique:

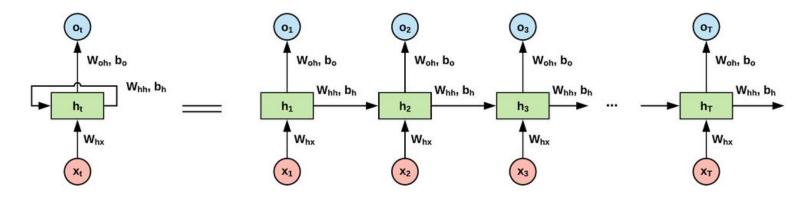
- Etant donné un corpus de texte tokenizé
- On casse le corpus en blocs de taille k
- On souhaite apprendre un modèle qui maximise la probabilité de chaque token d'apparaître dans sa séquence

Utilisation à l'inférence:

- Prédiction du prochain timestep
- Réutilisation des prédictions
- Accumulation des erreurs

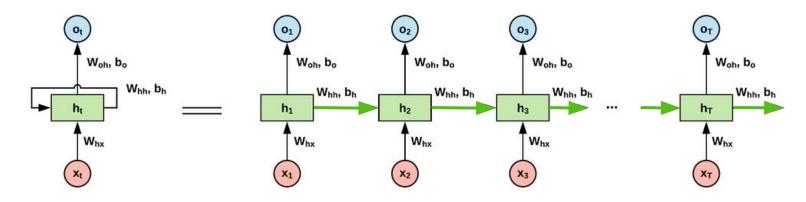
La génération de texte dans les LLMs utilise toujours cette méthode!





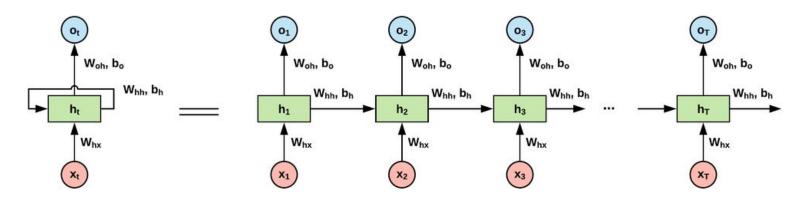
Inconvénients:

- Dépendances long terme
- Gradient vanishing
- Impossible de paralléliser



Inconvénients:

- Dépendances long terme => synthétisation de l'information dans h
- Gradient vanishing
- Impossible de paralléliser



Inconvénients:

- Dépendances long terme
- Gradient vanishing
- Impossible de paralléliser

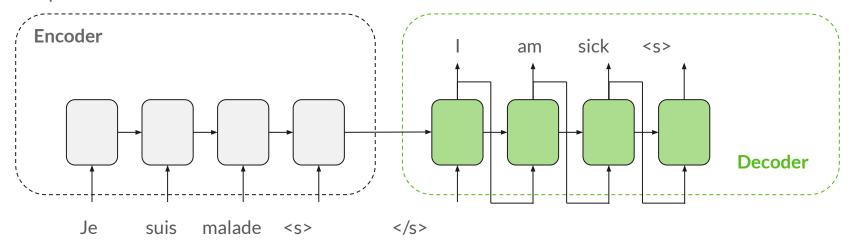
Long Short Term Memory (LSTM) (Hochreiter & Schmidhuber, 1997)

Le problème Seq2Seq

Une séquence en entrée => une séquence en sortie

On apprend à prédire seulement la séquence de sortie.

Exemple: la traduction



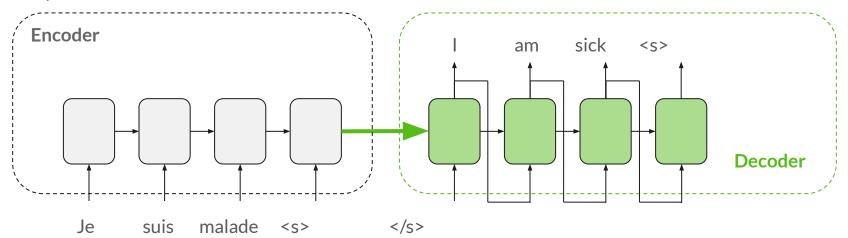
Le problème Seq2Seq

Une séquence en entrée => une séquence en sortie

On apprend à prédire seulement la séquence de sortie.

Le dernier hidden state doit représenter toute la séquence d'entrée /!\

Exemple: la traduction





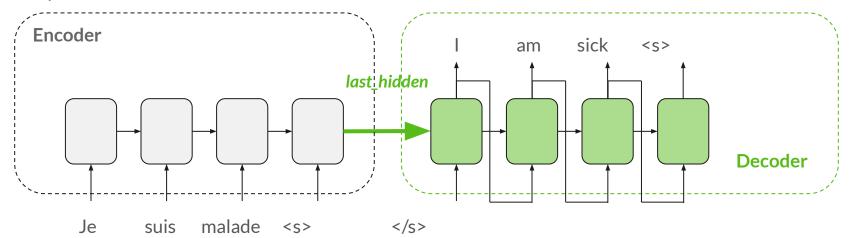
Le problème Seq2Seq

Une séquence en entrée => une séquence en sortie

On apprend à prédire seulement la séquence de sortie.

Le dernier hidden state doit représenter toute la séquence d'entrée /!\

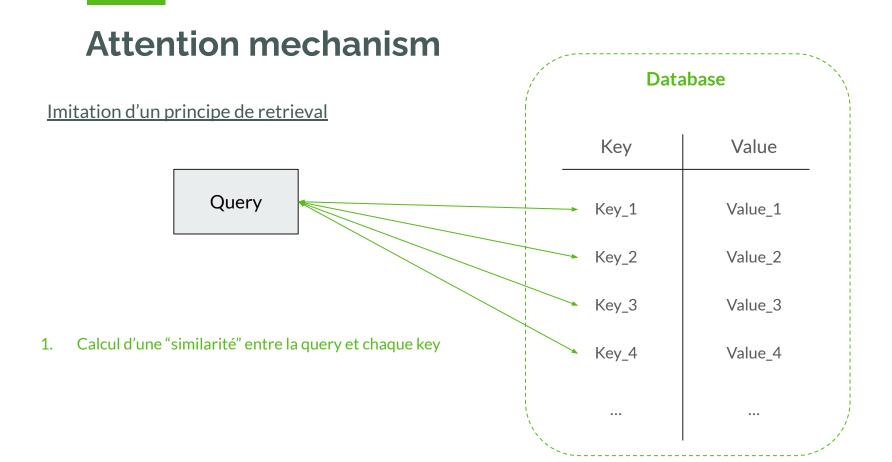
Exemple: la traduction

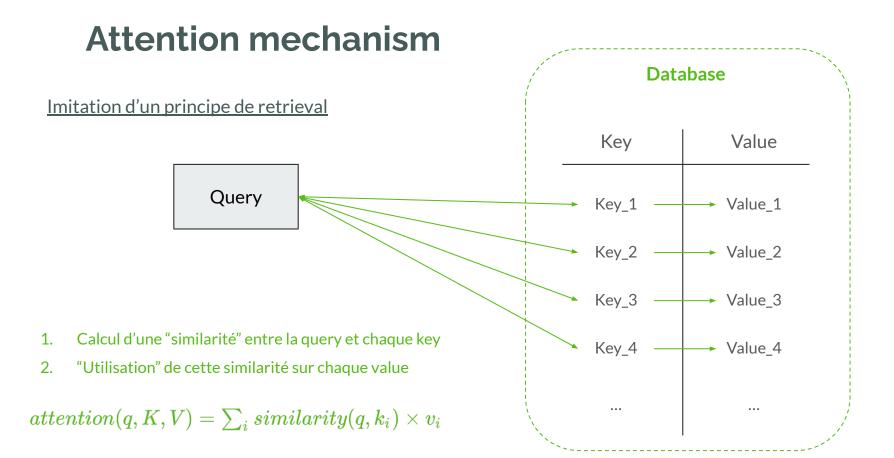


<u>Imitation d'un principe de retrieval</u>

Query

Data	abase	\ \
Кеу	Value	
Key_1	Value_1	
Key_2	Value_2	
Key_3	Value_3	
Key_4	Value_4	1 1 1 1 1 1 1 1

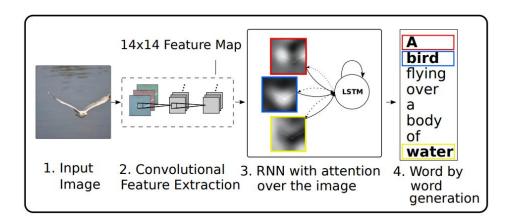




Bref historique

Vision:

- Mnih et al., 2014 => Sequence of focusing (RL)
- Xu et al., 2015 => Captioning with attention on feature maps



Bref historique

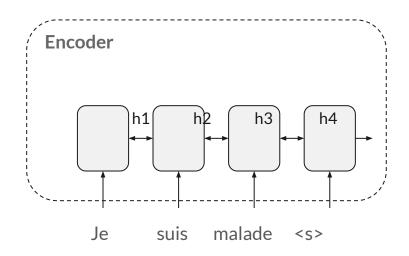
Vision:

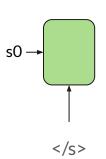
- Mnih et al., 2014 => Sequence of focusing (RL)
- Xu et al., 2015 => Captioning with attention on feature maps

NLP:

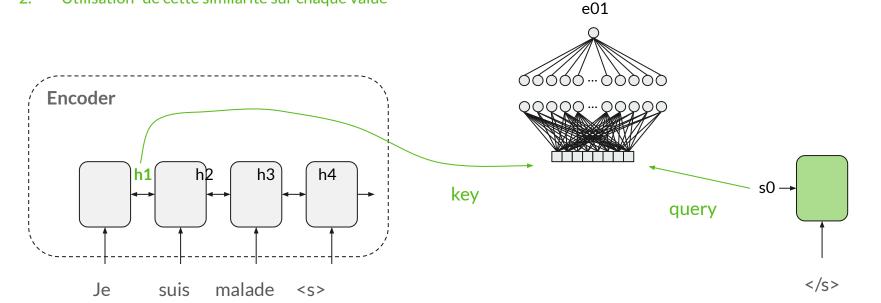
- Brown et al., 1993 => Alignment in translation (Hard attention)
- Bahdanau et al., 2015 => Attention as focusing (SOTA in NMT /!\)

- 1. Calcul d'une "similarité" entre la query et chaque key
- 2. "Utilisation" de cette similarité sur chaque value





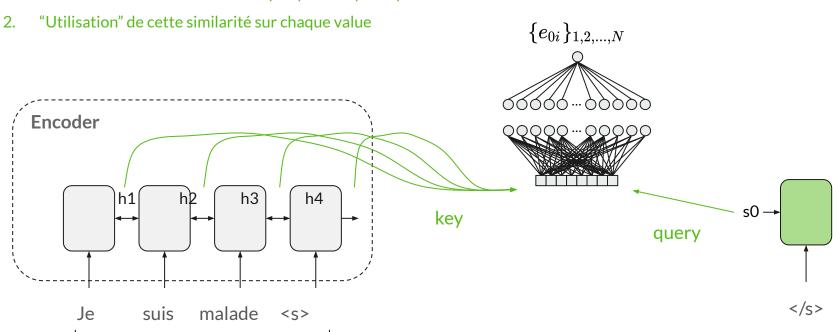
- 1. Calcul d'une "similarité" entre la query et chaque key
- 2. "Utilisation" de cette similarité sur chaque value

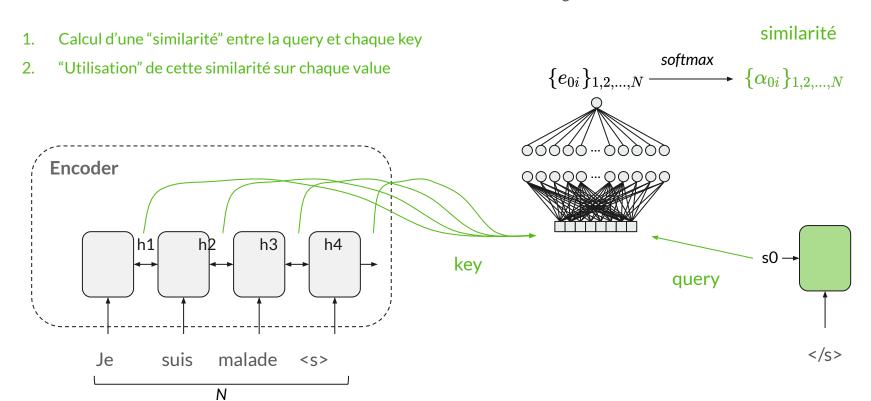


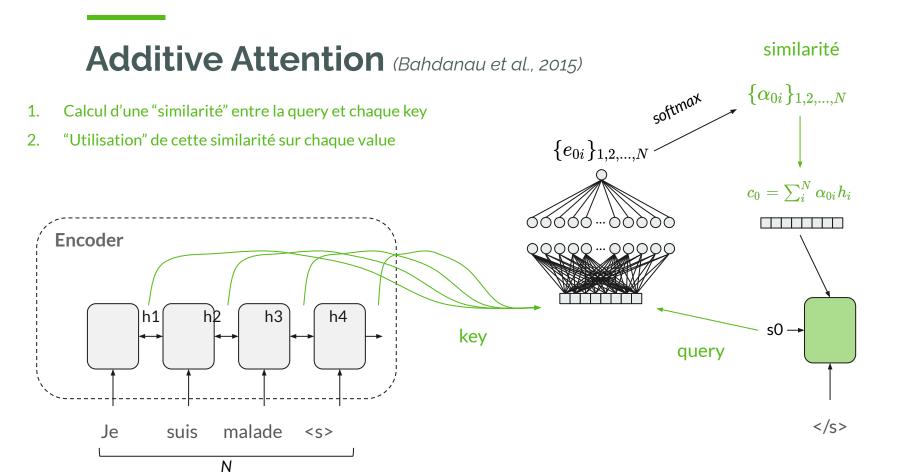
 $\operatorname{score}(\boldsymbol{s}_t, \boldsymbol{h}_i) = \mathbf{v}_a^{\top} \operatorname{tanh}(\mathbf{W}_a[\boldsymbol{s}_{t-1}; \boldsymbol{h}_i])$

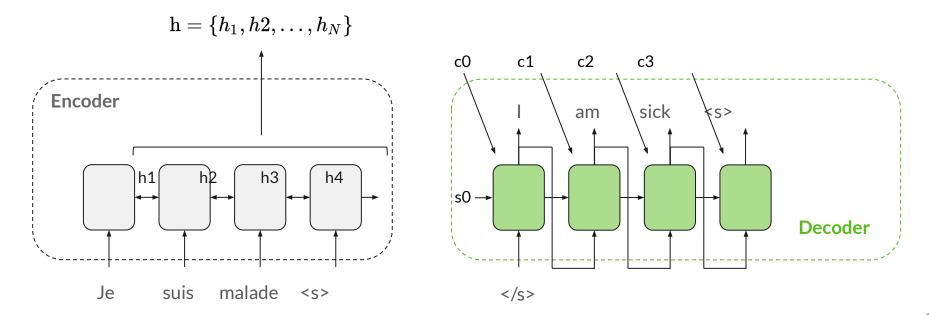
1. Calcul d'une "similarité" entre la query et chaque key

Ν

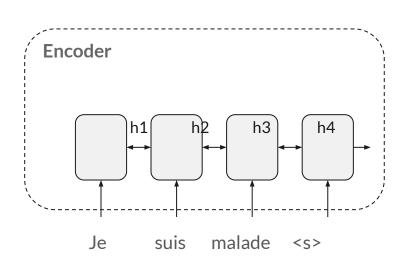


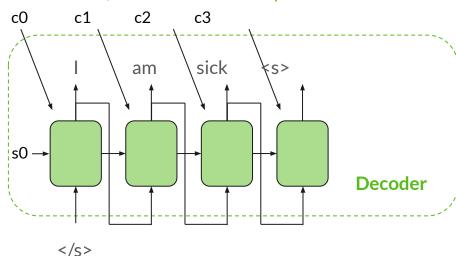


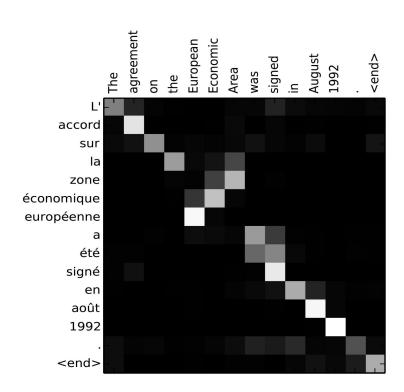




- Il y a désormais un contexte résumant la phrase d'entrée pour chaque mot du Decoder
- Chaque mot décodé a son propre contexte (query = s-1)
- Les hidden states de l'Encoder sont à la fois les clés et valeurs, ceux du Decoder les queries

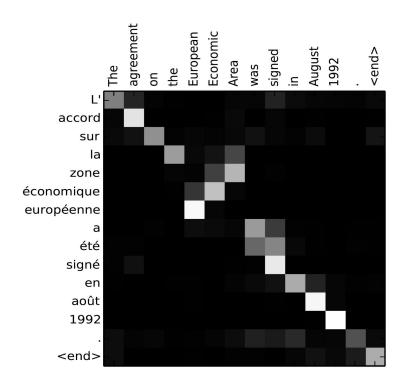






L'attention permet à chaque mot décodé de se "concentrer" sur certains mots d'entrée





L'attention permet à chaque mot décodé de se "concentrer" sur certains mots d'entrée

Attention mechanisms (https://lilianweng.github.io/posts/2018-06-24-attention/)

Name	Alignment score function	Citation
Content-base attention	$ ext{score}(oldsymbol{s}_t, oldsymbol{h}_i) = ext{cosine}[oldsymbol{s}_t, oldsymbol{h}_i]$	Graves2014
Additive(*)	$\operatorname{score}(oldsymbol{s}_t,oldsymbol{h}_i) = \mathbf{v}_a^{ op} anh(\mathbf{W}_a[oldsymbol{s}_{t-1};oldsymbol{h}_i])$	Bahdanau2015
Location-Base	$lpha_{t,i} = \mathrm{softmax}(\mathbf{W}_a \mathbf{s}_t)$ Note: This simplifies the softmax alignment to only depend on the target position.	Luong2015
General	$ ext{score}(m{s}_t, m{h}_i) = m{s}_t^ op \mathbf{W}_a m{h}_i$ where \mathbf{W}_a is a trainable weight matrix in the attention layer.	Luong2015
Dot-Product	$ ext{score}(oldsymbol{s}_t,oldsymbol{h}_i) = oldsymbol{s}_t^ op oldsymbol{h}_i$	Luong2015
Scaled Dot- Product(^)	$\mathrm{score}(m{s}_t, m{h}_i) = rac{m{s}_t^{\! op} m{h}_i}{\sqrt{n}}$ Note: very similar to the dot-product attention except for a scaling factor; where n is the dimension of the source hidden state.	Vaswani2017

^(*) Referred to as "concat" in Luong, et al., 2015 and as "additive attention" in Vaswani, et al., 2017.

^(^) It adds a scaling factor $1/\sqrt{n}$, motivated by the concern when the input is large, the softmax function may have an extremely small gradient, hard for efficient learning.

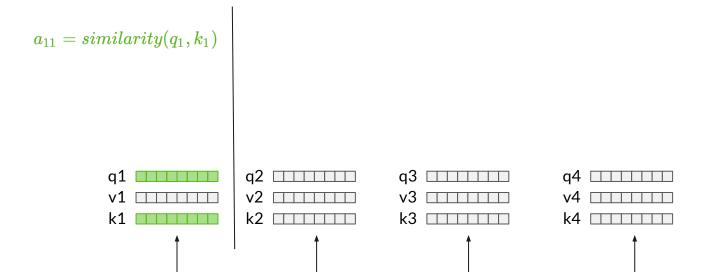
Attention mechanisms (https://lilianweng.github.io/posts/2018-06-24-attention/)

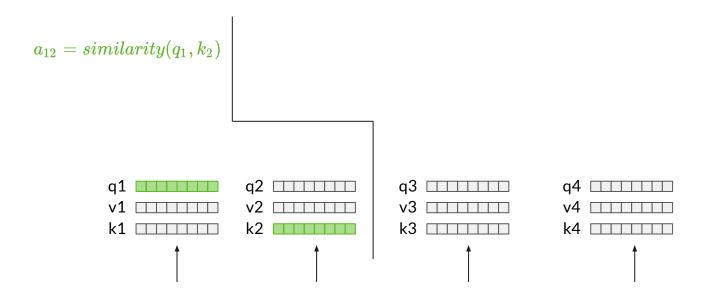
Name	Alignment score function	Citation
Content-base attention	$ ext{score}(oldsymbol{s}_t, oldsymbol{h}_i) = ext{cosine}[oldsymbol{s}_t, oldsymbol{h}_i]$	Graves2014
Additive(*)	$\operatorname{score}(oldsymbol{s}_t,oldsymbol{h}_i) = \mathbf{v}_a^ op \operatorname{tanh}(\mathbf{W}_a[oldsymbol{s}_{t-1};oldsymbol{h}_i])$	Bahdanau2015
Location-Base	$lpha_{t,i} = \mathrm{softmax}(\mathbf{W}_a \mathbf{s}_t)$ Note: This simplifies the softmax alignment to only depend on the target position.	Luong2015
General	$ ext{score}(m{s}_t, m{h}_i) = m{s}_t^ op \mathbf{W}_a m{h}_i$ where \mathbf{W}_a is a trainable weight matrix in the attention layer.	Luong2015
Dot-Product	$ ext{score}(oldsymbol{s}_t,oldsymbol{h}_i) = oldsymbol{s}_t^ op oldsymbol{h}_i$	Luong2015
Scaled Dot- Product(^)	$\mathrm{score}(s_t, h_i) = \frac{s_t^\intercal h_i}{\sqrt{n}}$ Note: very similar to the dot-product attention except for a scaling factor; where n is the dimension of the source hidden state.	Vaswani2017

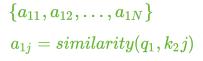
^(*) Referred to as "concat" in Luong, et al., 2015 and as "additive attention" in Vaswani, et al., 2017.

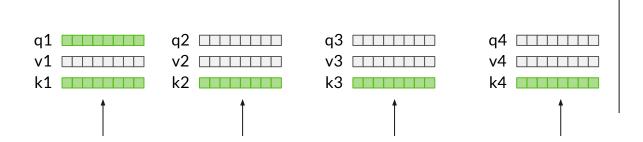
^(^) It adds a scaling factor $1/\sqrt{n}$, motivated by the concern when the input is large, the softmax function may have an extremely small gradient, hard for efficient learning.

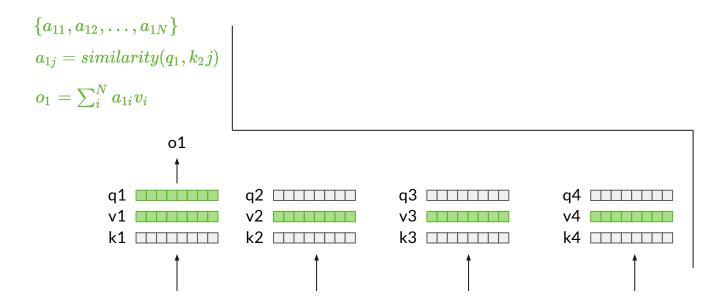
Self-Attention

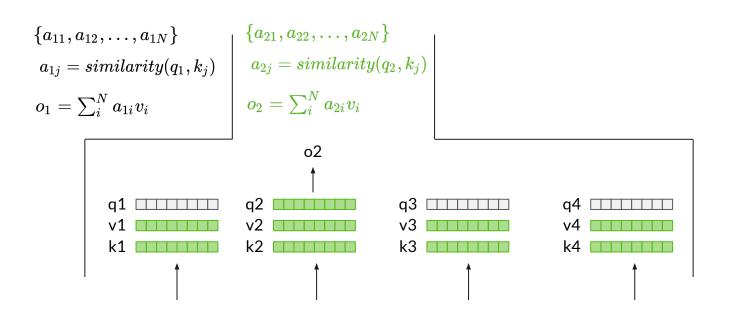


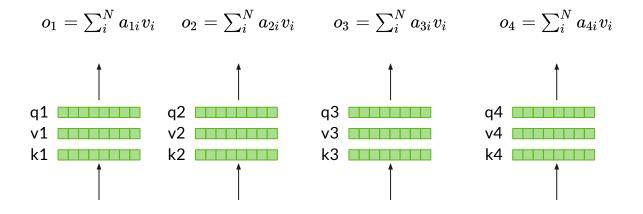








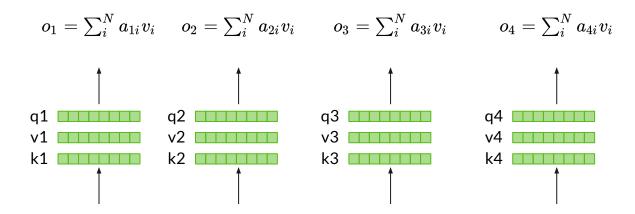




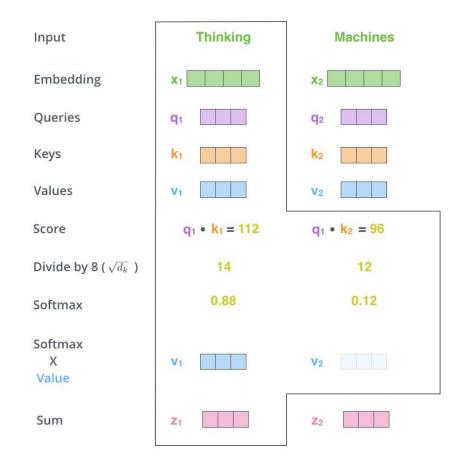
Q, K, V viennent du même ensemble

Scaled Dot-Product Attention

$$a_{ij} = \operatorname{softmax}(rac{q_i k_j^ op}{\sqrt{d_k}})$$

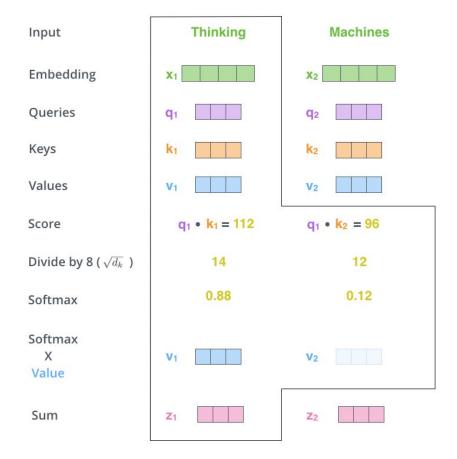


(https://jalammar.github.io/illustrated-transformer/)



(https://jalammar.github.io/illustrated-transformer/)





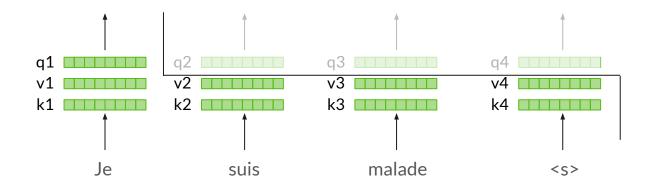
Transformer architecture

(Vaswani et al., 2019)

On enlève les RNNs!

Eléments clés:

- Self-attention (multi hidden-state propagation)

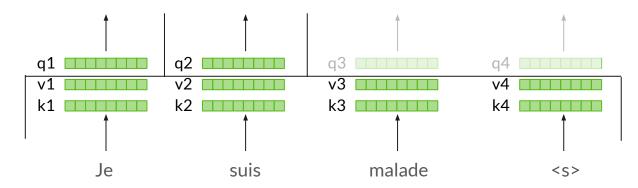


On enlève les RNNs!

Eléments clés:

- Self-attention (multi hidden-state propagation)

Tous les Oi sont produits en même temps (un peu comme dans un RNN bi-directionnel)



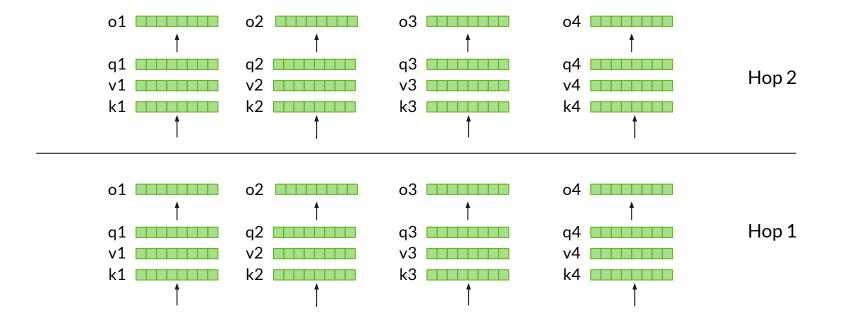
On enlève les RNNs!

Eléments clés:

- Self-attention (multi hidden-state propagation)
- Multi-hop (layers)

Multi-hop

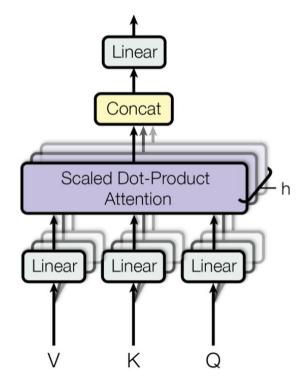
Plusieurs itérations



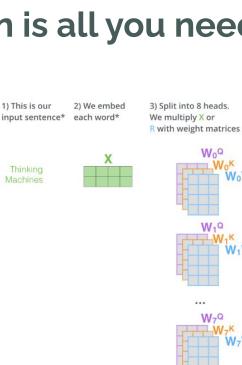
On enlève les RNNs!

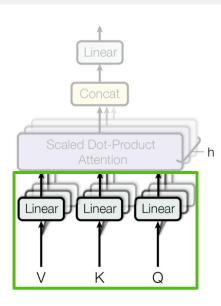
Eléments clés:

- Self-attention (multi hidden-state propagation)
- Multi-hop (layers)
- Multi-head

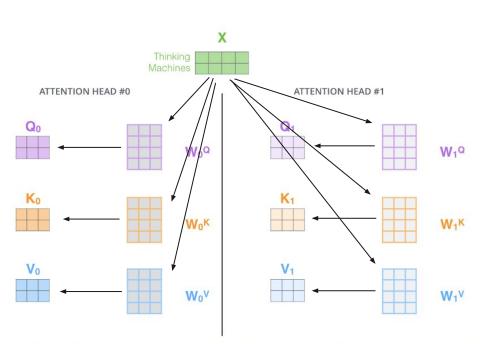


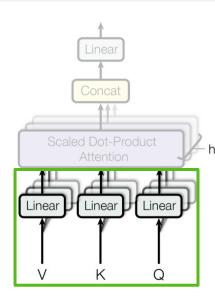
- 1 matrice de poids par tête pour Q, K, V
 - Projection avecune Thinking
- Projection avec une transformation linéaire
- Dimensions de Q, K, V définies par celle des poids
- On peut "batcher" les opérations



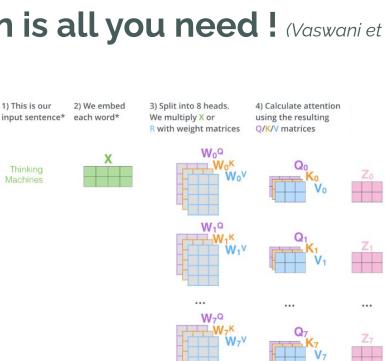


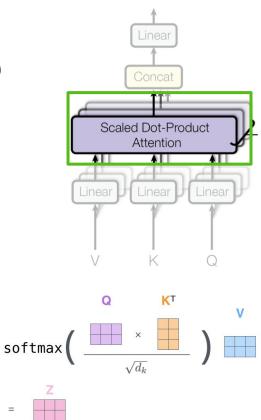
- 1 matrice de poids par tête pour Q, K, V
- Projection avec une transformation linéaire
- Dimensions de Q, K, V définies par celle des poids
- On peut "batcher" les opérations





- 1 matrice de poids par tête pour Q, K, V
- Projection avec une transformation linéaire
- Dimensions de Q, K, V définies par celle des poids
- On peut "batcher" les opérations





- On concatène les vecteurs produits par chaque tête (= un grand vecteur par entrée / mot) Thinking Machines
 - 1) This is our input sentence*

2) We embed each word*

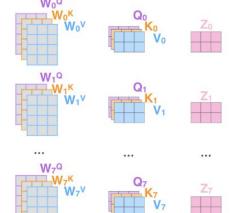
3) Split into 8 heads. We multiply X or R with weight matrices 4) Calculate attention using the resulting Q/K/V matrices

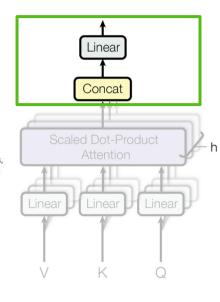
5) Concatenate the resulting Z matrices, then multiply with weight matrix Wo to produce the output of the layer

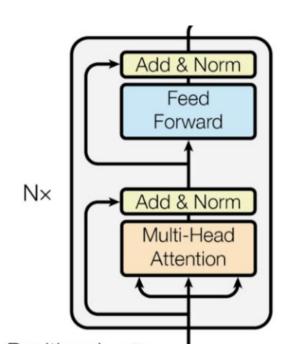




- On utilise une transformation linéaire pour revenir à la taille de l'embedding

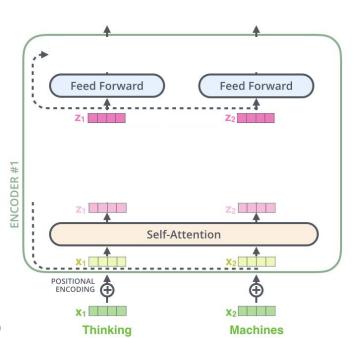


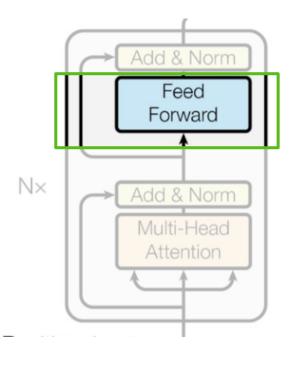




Feedforward

 Introduction de non-linéarités grâce à un feedforward



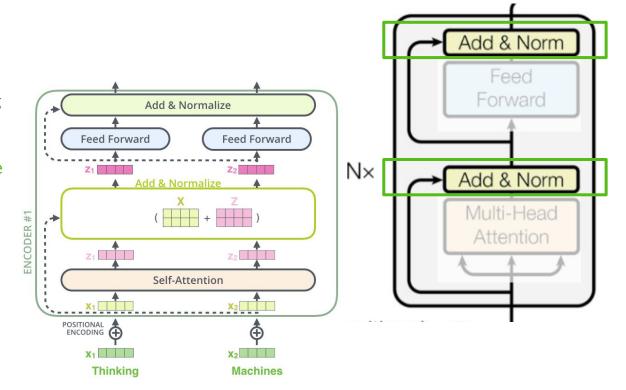


Residual connections

Intuition => garder de l'information sur l'embedding avant l'attention

En pratique: juste une somme

Note: ResNet (He et al., 2015)

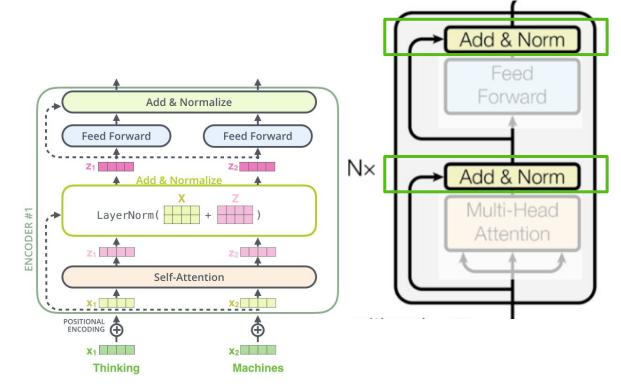


<u>Layer normalization</u>

Intuition => stabiliser l'apprentissage et éviter l'explosion de gradients

En pratique: on normalize (moyenne = 0, variance = 1) chaque vecteur de sortie

Note: fonctionne avec les petits batchs à la différence d'une BatchNorm

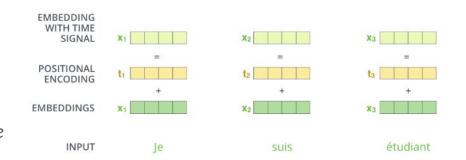


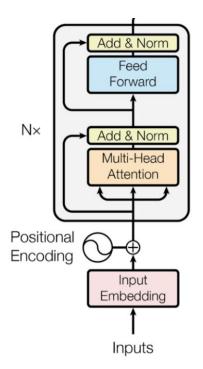
Positional Encoding

Rappel: La (Self-)Attention opère sur des ensembles != RNNs

=> L'opération n'est pas impactée par l'ordre des mots

Solution: Ajouter une information à l'embedding dépendant de la position

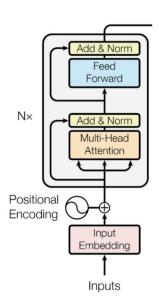




Note: Sinusoidal PE dans le papier d'origine

L'architecture complète!

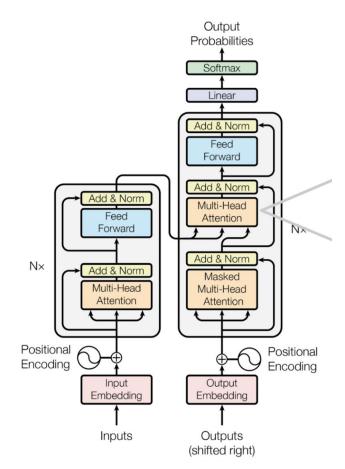
<u>Encoder:</u> Produire une représentation de l'input (un vecteur / input => concaténés dans une seule matrice de dimension N)



L'architecture complète!

<u>Encoder:</u> Produire une représentation de l'input (un vecteur / input => concaténés dans une seule matrice de dimension N)

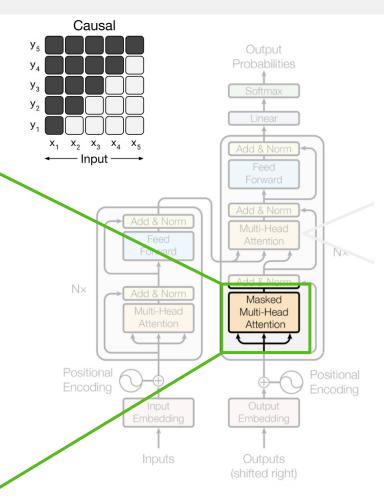
<u>Decoder:</u> Générer à partir de cette représentation



Causal Masking

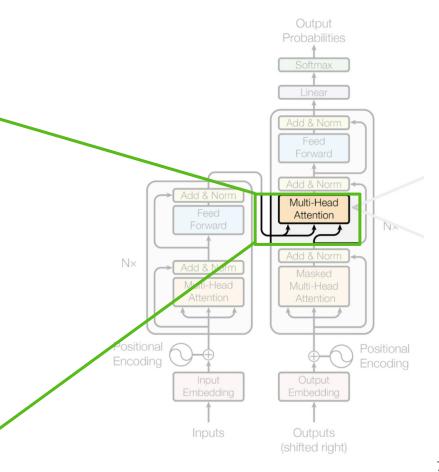
- Quand on génère du texte, on ne connaît pas le mot d'après (on y a pourtant accès à l'entraînement)
- Causal Attention: L'attention ne peut utiliser que les K, V d'avant le Q
- Solution: Appliquer un **masque** sur la sortie de l'attention avant la softmax

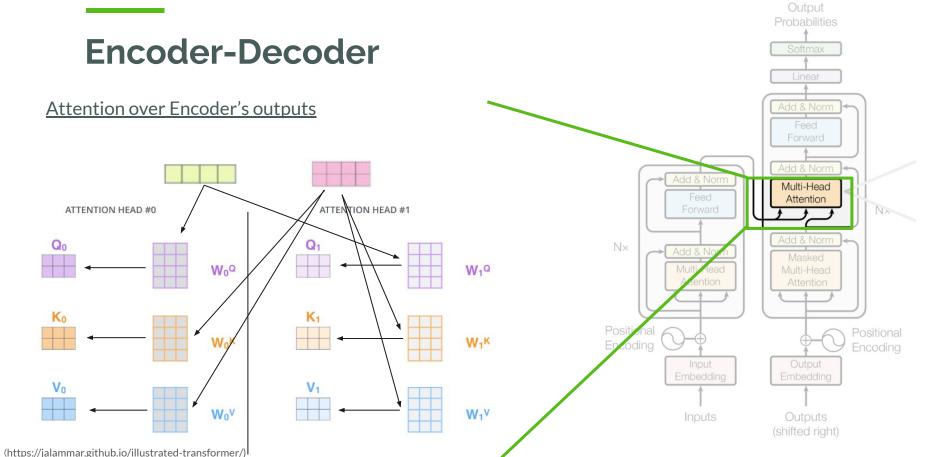
$$a_{ij} = ext{softmax}(rac{q_i k_j^ op}{\sqrt{d_k}}) \quad lacksquare \quad a_{ij} = ext{softmax}(rac{q_i k_j^ op + m_j}{\sqrt{d_k}}) \ m_j = egin{cases} 0 & ext{si } j \leq i \ - ext{inf} & ext{si } j > i \end{cases}$$



Attention over encoder's outputs

- Après un premier block de Self-Attention (+ residual & Layer Norm)
- Attention sur l'encoding: K, V viennent des vecteurs encodés par l'encoder, Q vient du Decoder
- La sortie devient une combinaison des encodings
- Le residual permet de garder aussi la représentation du Decoder

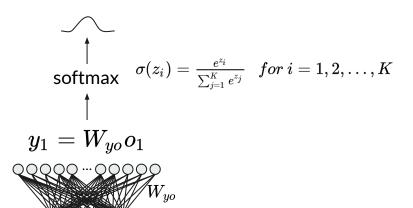


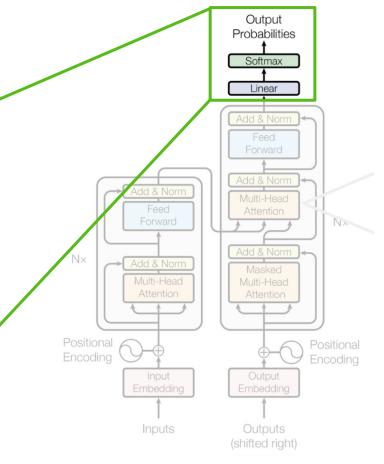


Decoding

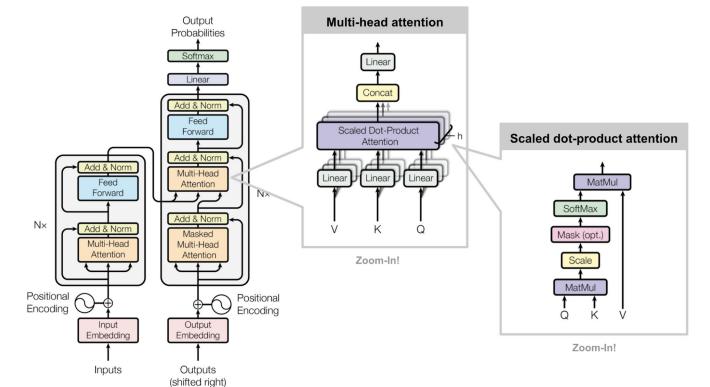
Comme avec les RNNs

=> on prend le vecteur produit par le Decoder et on le passe dans une couche linéaire + softmax

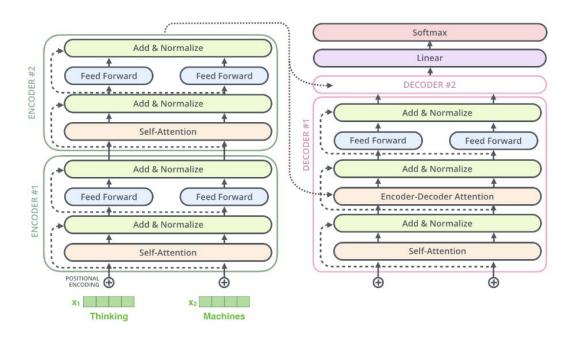




The full picture

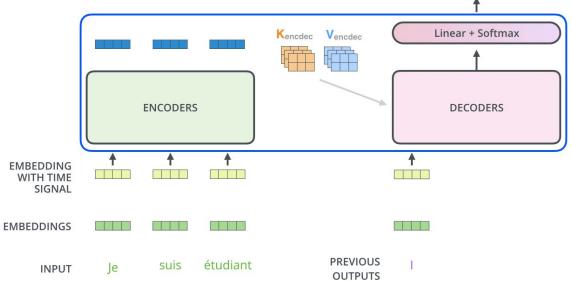


The full picture



The full picture

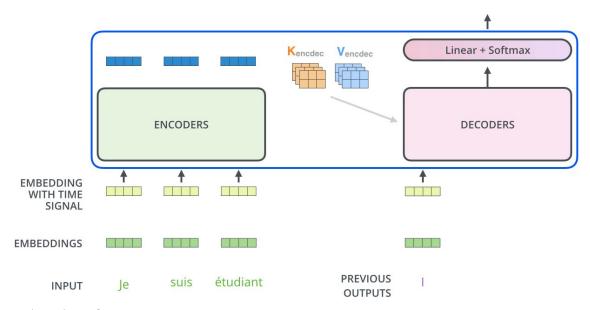
Decoding time step: 1 2 3 4 5 6 OUTPUT



TP: Partie 5

The full picture

Decoding time step: 1 2 3 4 5 6 OUTPUT



Pour aller plus loin

Vision Transformer (Dosovitskiy et al., 2020)

