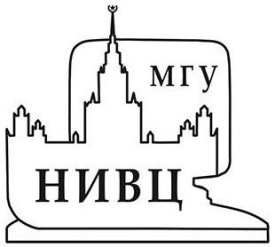


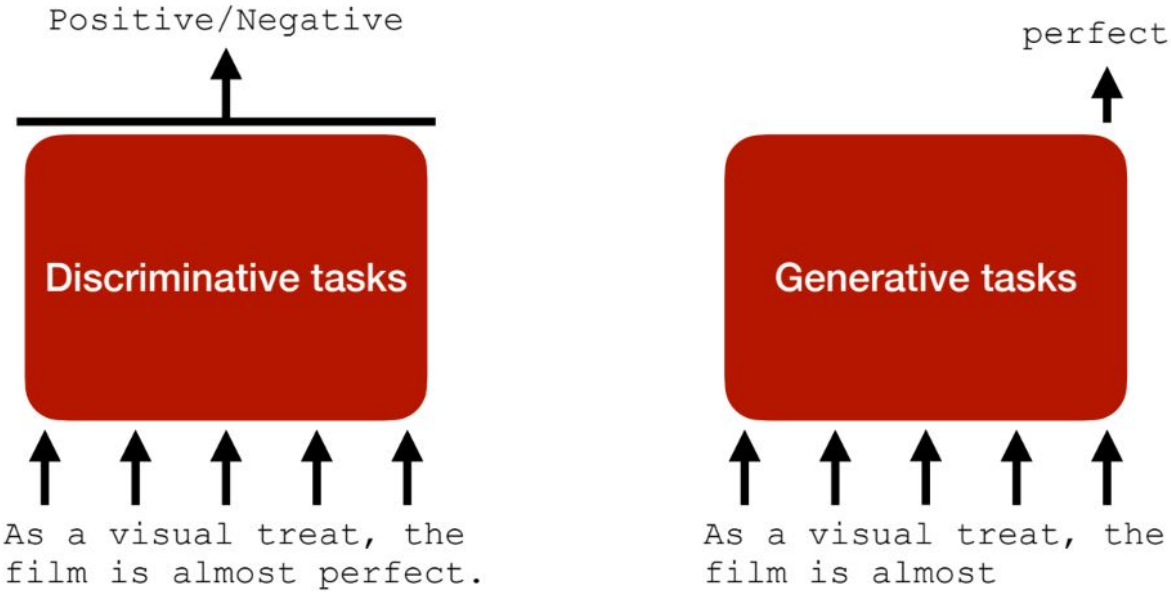
Механизм внимания, архитектура трансформер

к.ф.-м.н. Тихомиров М.М.

НИВЦ МГУ имени М. В. Ломоносова

NLP задачи

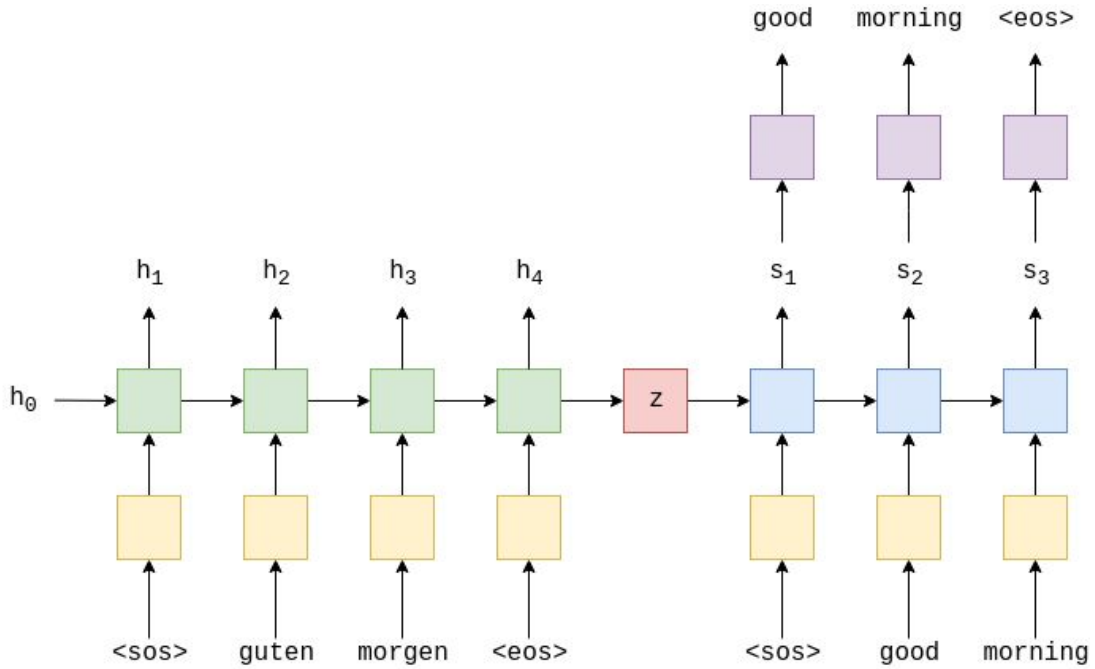
- Дискриминативные задачи: классификация, NER, и др.
- Генеративные задачи: перевод, аннотирование (summarization), языковое моделирование



https://hanlab.mit.edu/courses/2024-fall-65940

Seq2Seq до трансформеров

- Вектор финального состояния должен хранить **всю** информацию из предложения
- По сути является векторным представлением (эмбеддингом) предложения
- Теряет информацию на длинных последовательностях



Механизм внимания (2014)

Автокодирующая модель состоит из:

- **Encoder**(text) -> vector**:** переводит текст в необходимое векторное представление
- **Decoder**(vector) -> text: расшифровывает представление в ответ модели

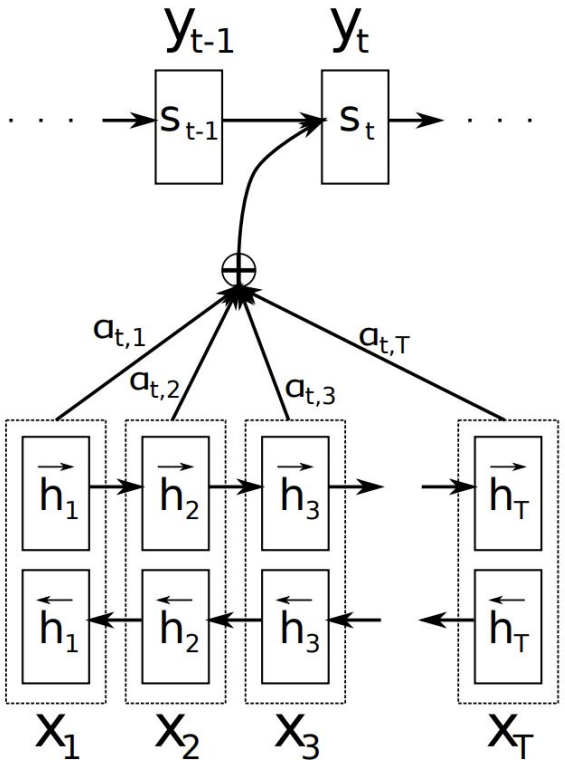
Проблема: в vector помещается только общий контекст

Решение: сохранять векторы для каждого слова и подбирать нужные под каждый шаг decoder

$$c_i = \sum_{j=1}^{T_x} \alpha_{ij} h_j.$$

$$\alpha_{ij} = \frac{\exp(e_{ij})}{\sum_{k=1}^{T_x} \exp(e_{ik})},$$

$$e_{ij} = a(s_{i-1}, h_j)$$

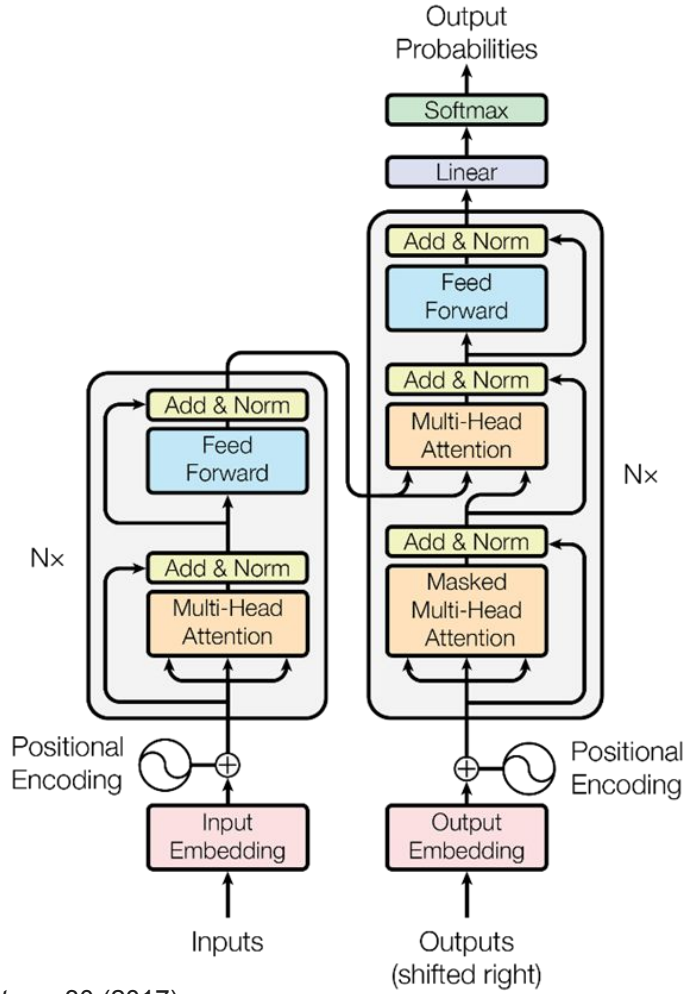


Bahdanau, Dzmitry, Kyunghyun Cho, and Yoshua Bengio. "Neural machine translation by jointly learning to align and translate." *arXiv preprint arXiv:1409.0473* (2014).

Архитектура трансформер

Transformer (2017)

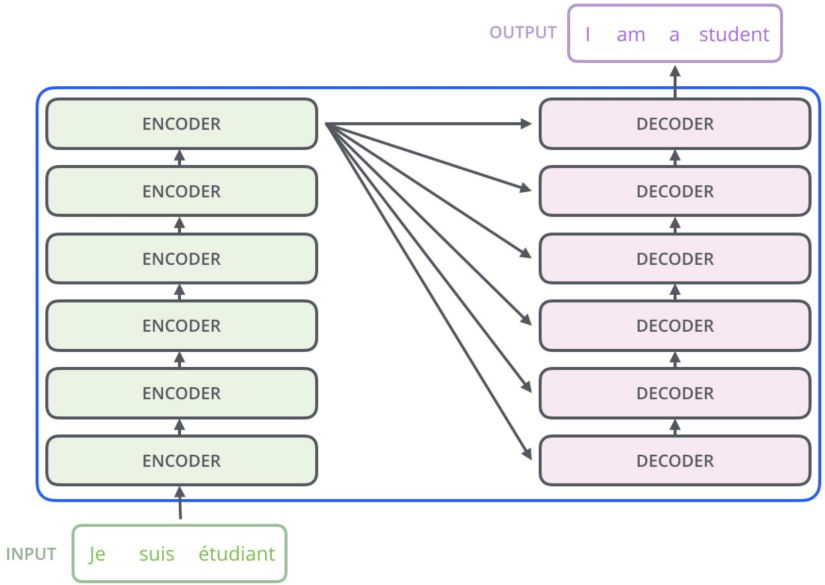
- Токенизация слов
- Позиционное кодирование
- Преобразование векторов через трансформер-блоки
  - Multi-head attention (MHA)
  - Feed-forward (FFN)
  - LayerNorm
- Итоговое предсказание слова линейным слоем (lm head)



Vaswani, Ashish, et al. "Attention is all you need." *Advances in neural information processing systems* 30 (2017).

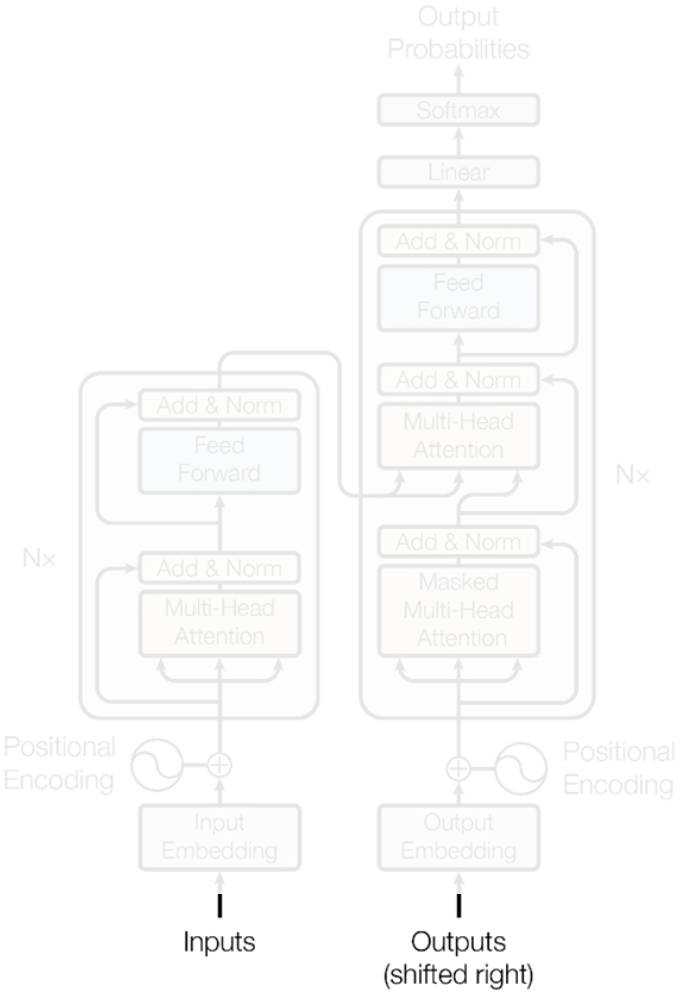
Transformer (2017)

- Исходно **encoder-decoder** архитектура
- **Блоки архитектурно эквивалентны** и последовательно **преобразует** входной вектор в выходной вектор той же размерности
- Сами веса слоев в блоках при этом отличаются



Transformer (2017)

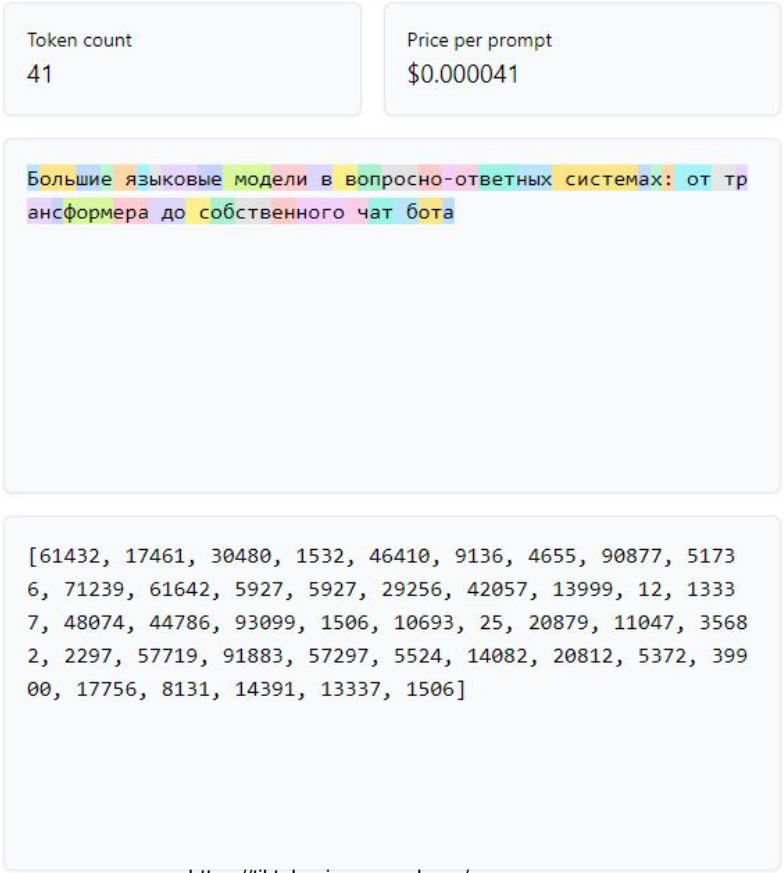
- Токенизация слов
- Позиционное кодирование
- Преобразование векторов через трансформер-блоки
  - Multi-head attention (MHA)
  - Feed-forward (FFN)
  - LayerNorm
- Итоговое предсказание слова линейным слоем (lm head)



Токенизация текста

Цель - отобразить текст в последовательность id

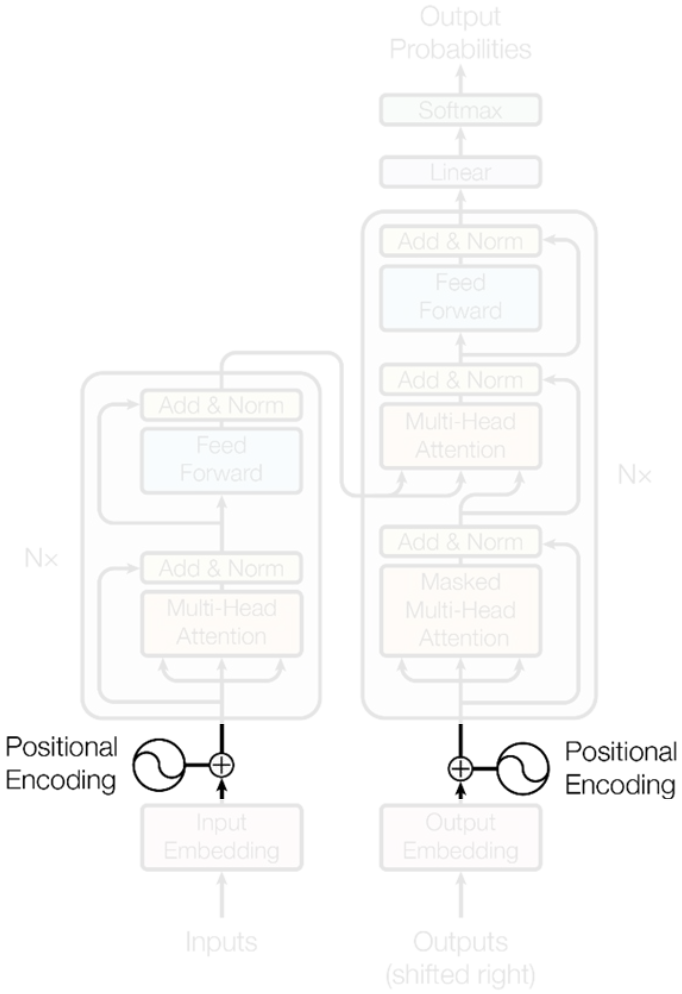
- Символы?
  - Небольшой словарь, не более 256 токенов!
  - Но длина последовательности будет огромной.
- Каждое слово - токен?
  - Количество различных слов огромное.
  - Если отсекать по частоте, будут UNK токены
- Решение: subword tokenization
  - Словарь включает в себя как символы, так и би-три-н граммы (символьные), на основе частоты в корпусе.



https://tiktokenizer.vercel.app/

Transformer (2017)

- Токенизация слов
- Позиционное кодирование
- Преобразование векторов через трансформер-блоки
  - Multi-head attention (MHA)
  - Feed-forward (FFN)
  - LayerNorm
- Итоговое предсказание слова линейным слоем (lm head)



Позиционные эмбеддинги

- В отличии от RNN трансформер смотрит на входную последовательность как на мешок слов, нет информации о позиции.
- Решение - позиционные “эмбеддинги” как добавка к эсбедингам токенов.

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

pos - позиция в последовательности, i - координата вектора.

“We also experimented with using learned positional embeddings instead, and found that the two versions produced nearly identical results”

Vaswani, Ashish, et al. "Attention is all you need." *Advances in neural information processing systems* 30 (2017).

Позиционные эмбеддинги

$$X_t + \quad \overrightarrow{p_t} = \begin{bmatrix} \sin(\omega_1 . t) \\ \cos(\omega_1 . t) \\ \\ \sin(\omega_2 . t) \\ \cos(\omega_2 . t) \\ \\ \vdots \\ \\ \sin(\omega_{d/2} . t) \\ \cos(\omega_{d/2} . t) \end{bmatrix}_{d \times 1}$$

$$\omega_k = \frac{1}{10000^{2k/d}}$$

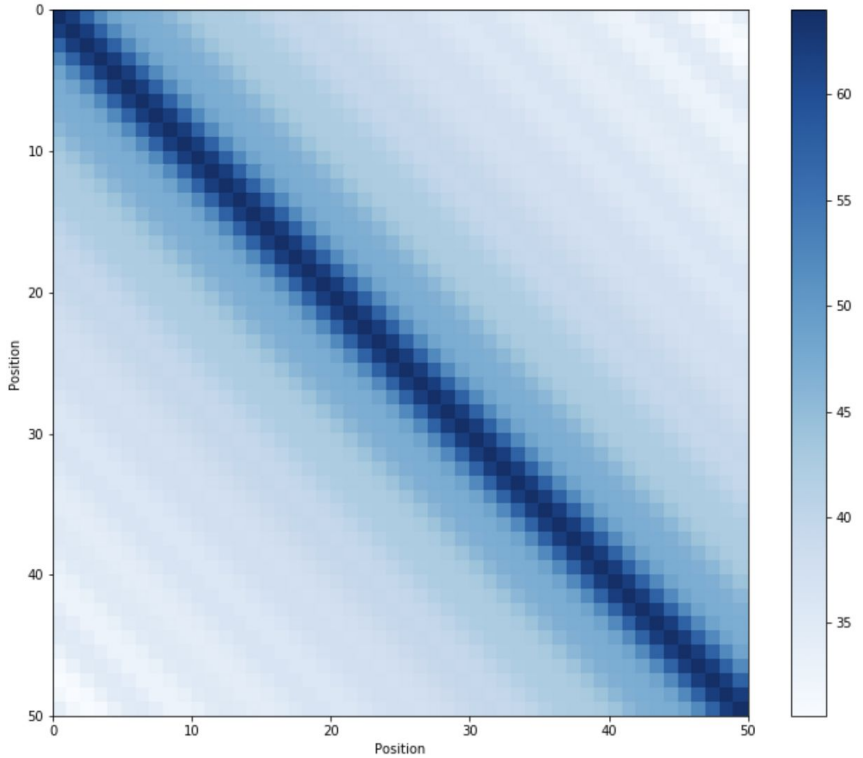
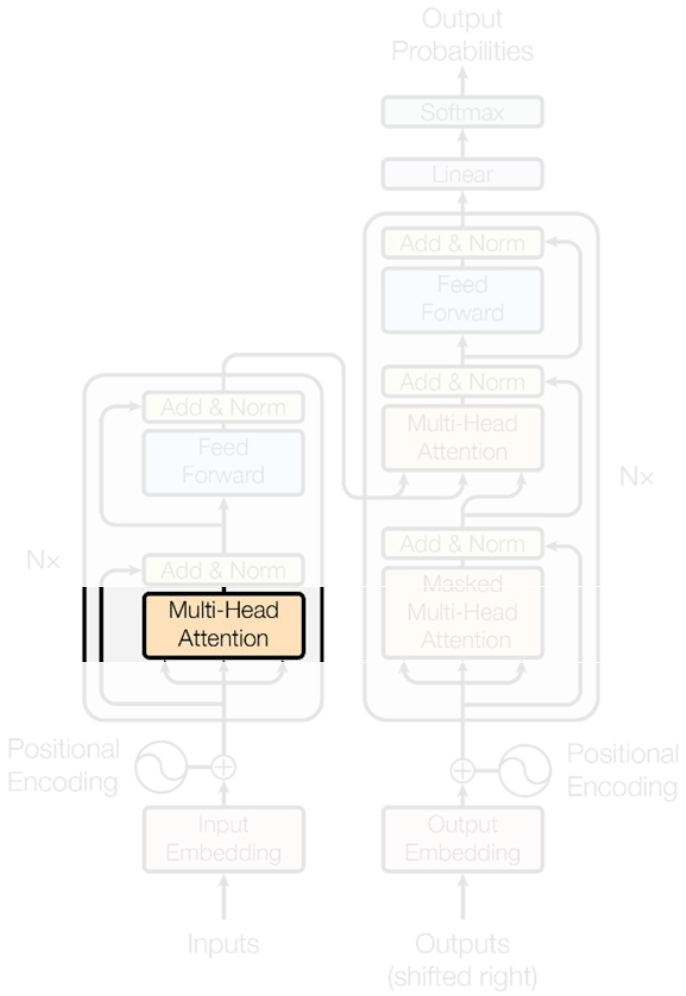


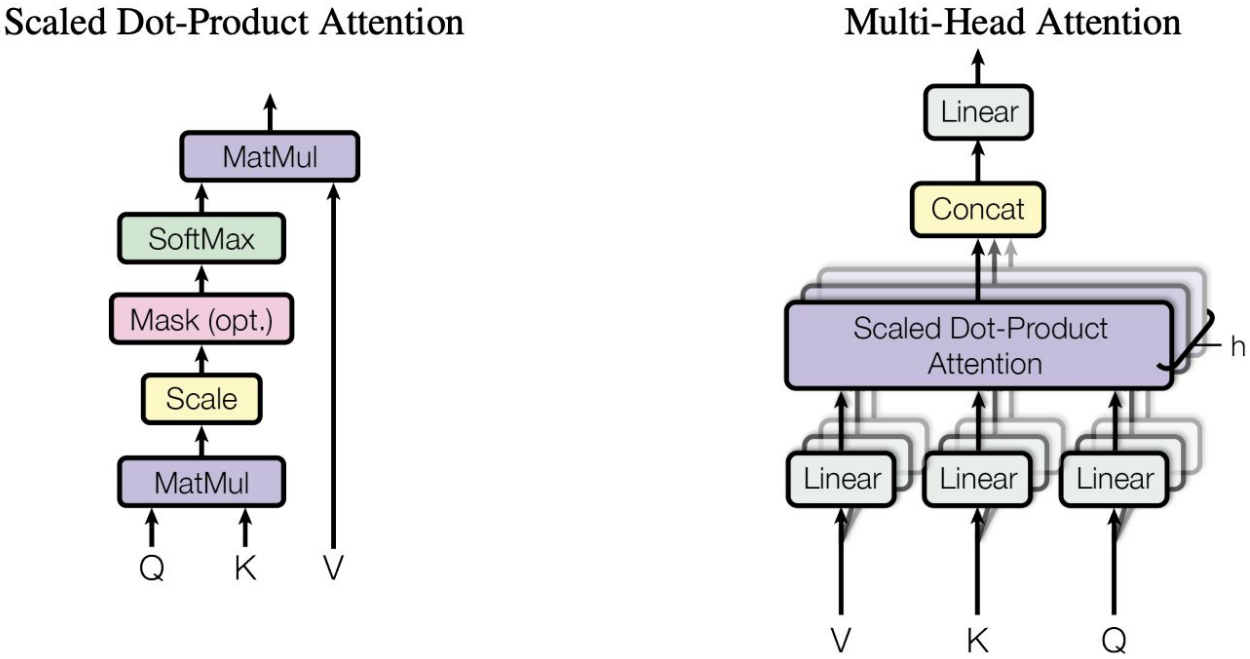
Figure 3 - Dot product of position embeddings for all time-steps

Transformer (2017)

- Токенизация слов
- Позиционное кодирование
- Преобразование векторов через трансформер-блоки
  - Multi-head attention (MHA)
  - Feed-forward (FFN)
  - LayerNorm
- Итоговое предсказание слова линейным слоем (lm head)



Multi-Head Attention



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

Multi-Head Attention: нормировка весов внимания

Зачем делить на корень из размерности?

->

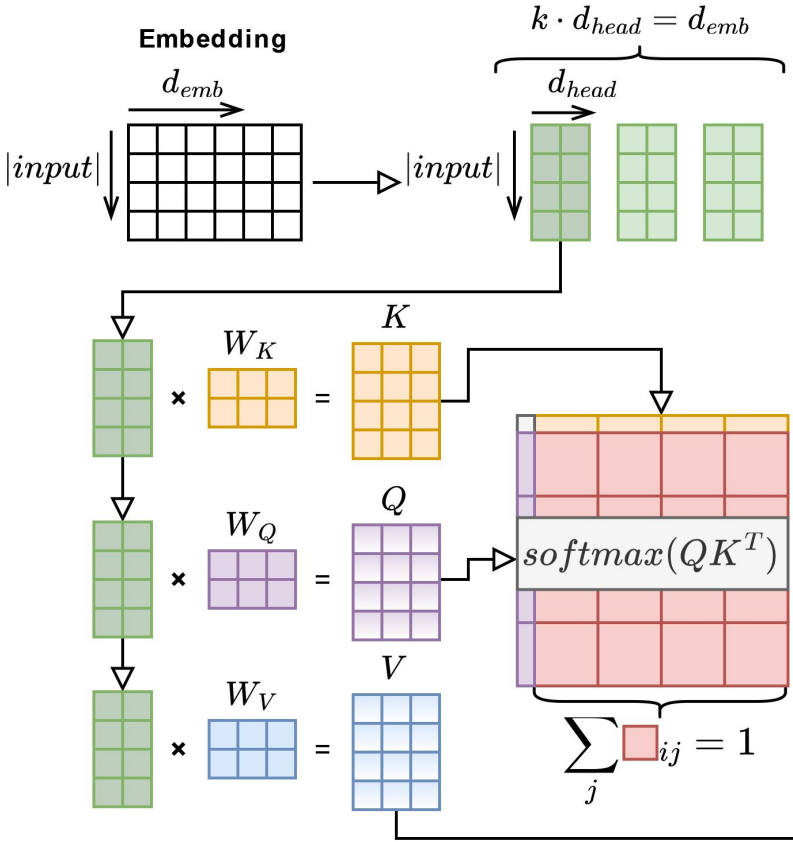
Чтобы веса внимания имели единичное стандартное отклонение.

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

$$\alpha = q_i k_j^T = \sum_{n=1}^{d_k} q_{in} k_{jn}$$

1) Предположим, что Q и K имеют 0 среднее и 1 стандартное отклонение
2) Дисперсия суммы = сумма дисперсий -> дисперсия *a* = d, а значит стандартное отклонение это корень из d.

Multi-Head Attention (tensors)



Q – запрос
K – ключи
***V* – значения (слов)**

Multi-Head Attention (Pytorch code, LLaMa) [1]

Инициализация:

```
self.q_proj = nn.Linear(self.hidden_size, self.num_heads * self.head_dim, bias=config.attention_bias)
self.k_proj = nn.Linear(self.hidden_size, self.num_key_value_heads * self.head_dim, bias=config.attention_bias)
self.v_proj = nn.Linear(self.hidden_size, self.num_key_value_heads * self.head_dim, bias=config.attention_bias)
self.o_proj = nn.Linear(self.hidden_size, self.hidden_size, bias=config.attention_bias)
```

Расчет матриц Q, K, V:

```
query_states = self.q_proj(hidden_states)
key_states = self.k_proj(hidden_states)
value_states = self.v_proj(hidden_states)
```

“Нарезка” на головы:

```
query_states = query_states.view(bsz, q_len, self.num_heads, self.head_dim).transpose(1, 2)
key_states = key_states.view(bsz, q_len, self.num_key_value_heads, self.head_dim).transpose(1, 2)
value_states = value_states.view(bsz, q_len, self.num_key_value_heads, self.head_dim).transpose(1, 2)
```

https://github.com/huggingface/transformers/blob/main/src/transformers/models/llama/modeling_llama.py

Multi-Head Attention (Pytorch code, LLaMa) [2]

Расчет весов внимания и умножение на V:

```
attn_weights = nn.functional.softmax(attn_weights, dim=-1, dtype=torch.float32).to(query_states.dtype)
attn_weights = nn.functional.dropout(attn_weights, p=self.attention_dropout, training=self.training)
attn_output = torch.matmul(attn_weights, value_states)
```

“Конкатенация” голов:

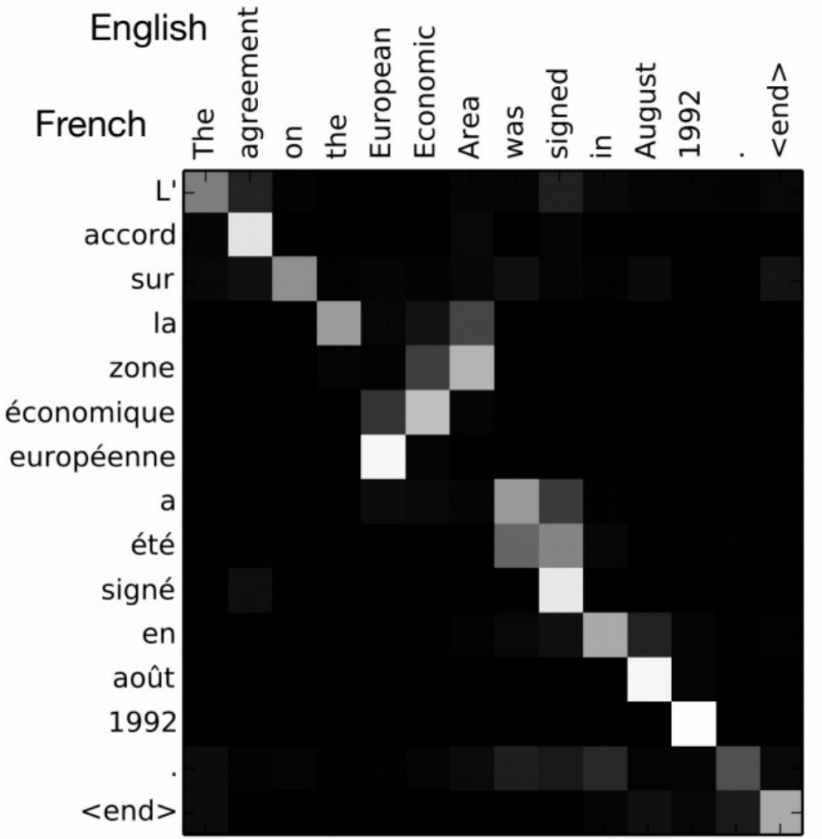
```
attn_output = attn_output.transpose(1, 2).contiguous()
attn_output = attn_output.reshape(bsz, q_len, self.hidden_size)
```

И еще один линейный слой на выходе:

```
attn_output = self.o_proj(attn_output)
```

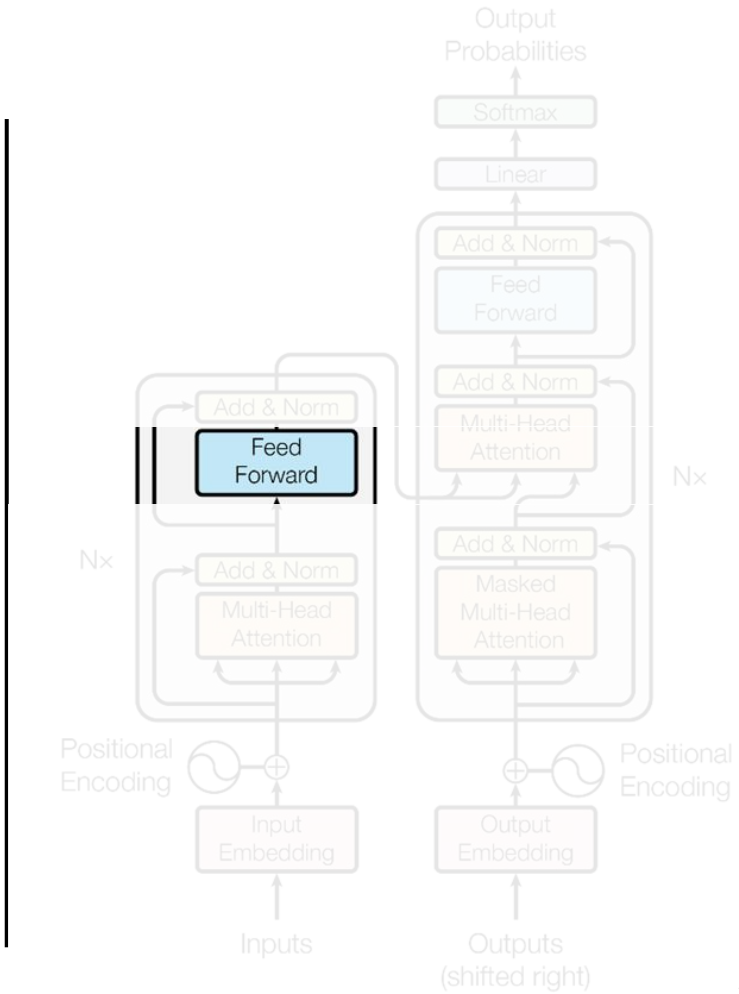
https://github.com/huggingface/transformers/blob/main/src/transformers/models/llama/modeling_llama.py

Визуализация Self Attention



Transformer (2017)

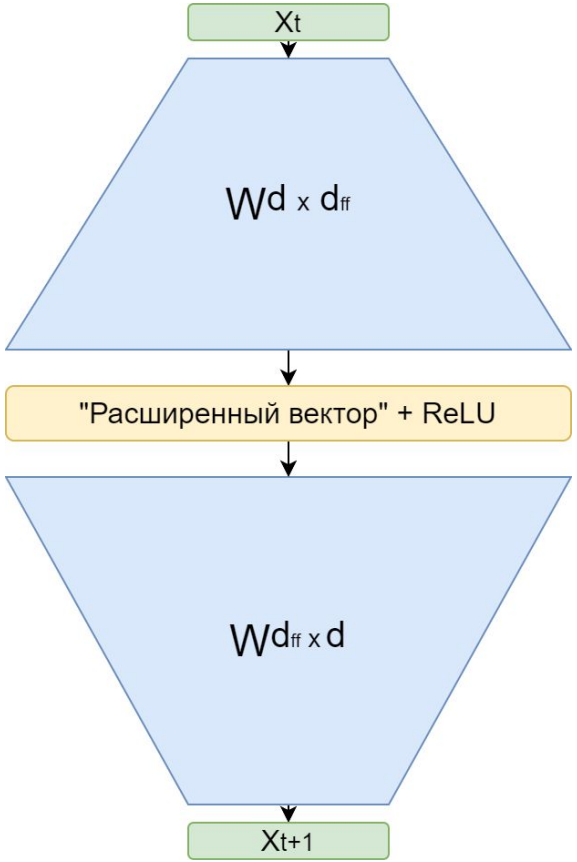
- Токенизация слов
- Позиционное кодирование
- Преобразование векторов через трансформер-блоки
  - Multi-head attention (MHA)
  - Feed-forward (FFN)
  - LayerNorm
- Итоговое предсказание слова линейным слоем (lm head)



Блок Feed Forward (MLP, FCNN)

- Внутренняя размерность обычно сильно больше hidden_size, например, x4.
- Интуиция: FF являются хранилищем “знаний” моделей (так ли это, не известно).

$$\mathrm{FFN}(x) = \max(0, xW_1 + b_1)W_2 + b_2$$



Geva M. et al. Transformer Feed-Forward Layers Are Key-Value Memories //Proceedings of the 2021 Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing. – 2021. – С. 5484-5495.

Блок Feed Forward (Pytorch code, LLaMa)

Инициализация:

```
self.gate_proj = nn.Linear(self.hidden_size, self.intermediate_size, bias=False)
self.up_proj = nn.Linear(self.hidden_size, self.intermediate_size, bias=False)
self.down_proj = nn.Linear(self.intermediate_size, self.hidden_size, bias=False)
```

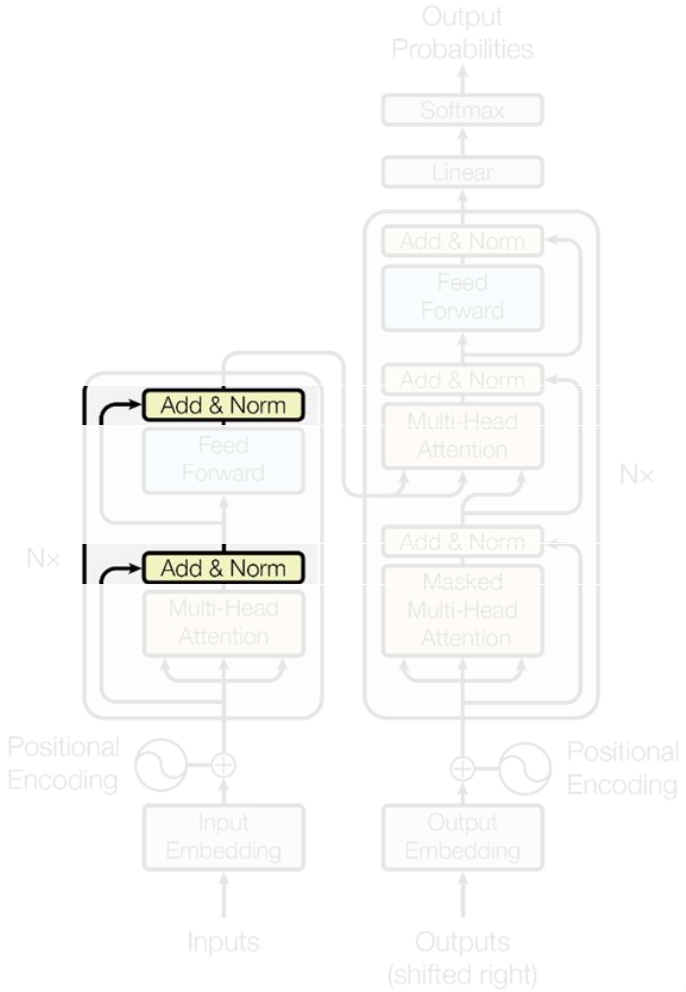
Forward:

```
down_proj = self.down_proj(self.act_fn(self.gate_proj(x)) * self.up_proj(x))
```

https://github.com/huggingface/transformers/blob/main/src/transformers/models/llama/modeling_llama.py

Transformer (2017)

- Токенизация слов
- Позиционное кодирование
- Преобразование векторов через трансформер-блоки
  - Multi-head attention (MHA)
  - Feed-forward (FFN)
  - LayerNorm
- Итоговое предсказание слова линейным слоем (lm head)



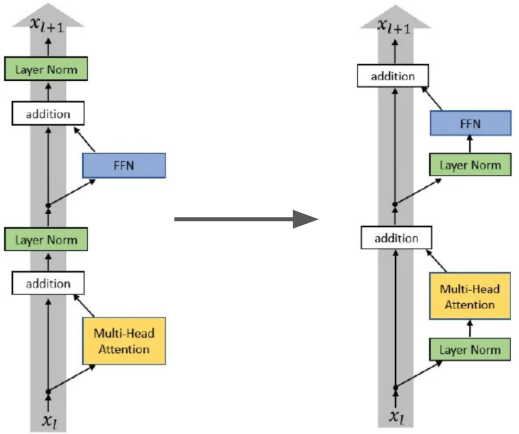
Layer Norm

- Layer Norm - это метод **нормализации** активации слоя нейронной сети.
- В оригинальной архитектуре “add and norm” шли после блока внимания и после блока FF: **Post-LN.**
- В дальнейшем слой нормализации был перенесен перед и после слоя внимания: **Pre-LN.**

$$\mathrm{LayerNorm}(v) = \gamma \frac{v-\mu}{\sigma} + \beta$$

Среднее: $$\mu = \frac{1}{d}\sum_{k=1}^{d} v_k$$

Стандартное отклонение: $$\sigma^2 = \frac{1}{d}\sum_{k=1}^{d}(v_k - \mu)^2$$



Xiong R. et al. On layer normalization in the transformer architecture //International Conference on Machine Learning. – PMLR, 2020. – С. 10524-10533.

Layer Norm (Pytorch code, LLaMa)

LN на входе блока

Блок внимания

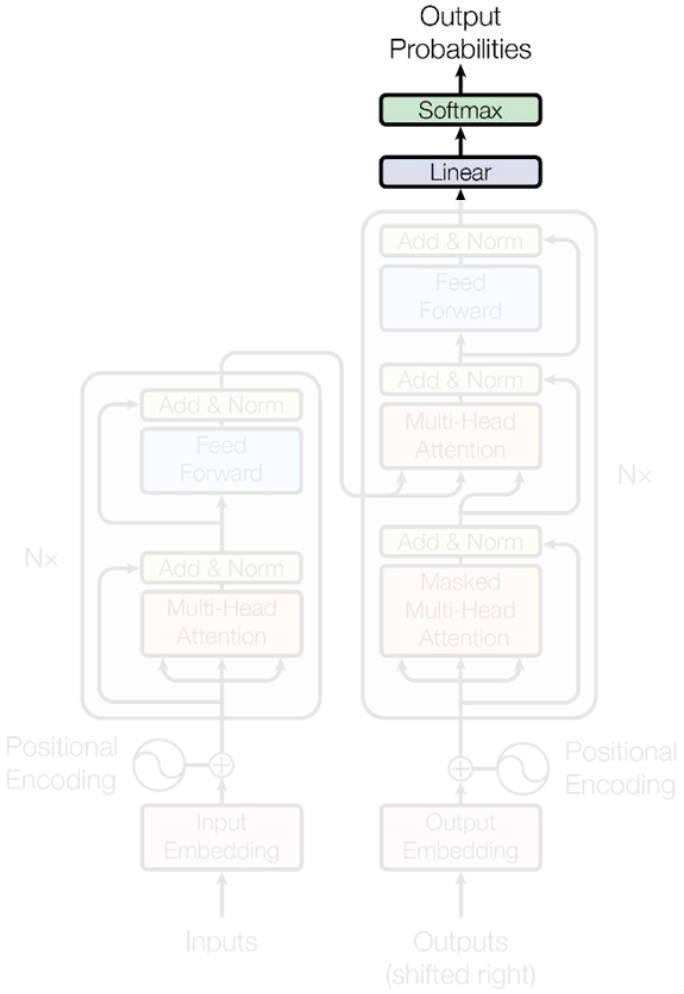
LN на выходе блока

MLP (Feed Forward)

```
residual = hidden_states

hidden_states = self.input_layernorm(hidden_states)

# Self Attention
hidden_states, self_attn_weights, present_key_value = self.self_attn(
    hidden_states=hidden_states,
    attention_mask=attention_mask,
    position_ids=position_ids,
    past_key_value=past_key_value,
    output_attentions=output_attentions,
    use_cache=use_cache,
    cache_position=cache_position,
    **kwargs,
)
hidden_states = residual + hidden_states

# Fully Connected
residual = hidden_states
hidden_states = self.post_attention_layernorm(hidden_states)
hidden_states = self.mlp(hidden_states)
hidden_states = residual + hidden_states
```

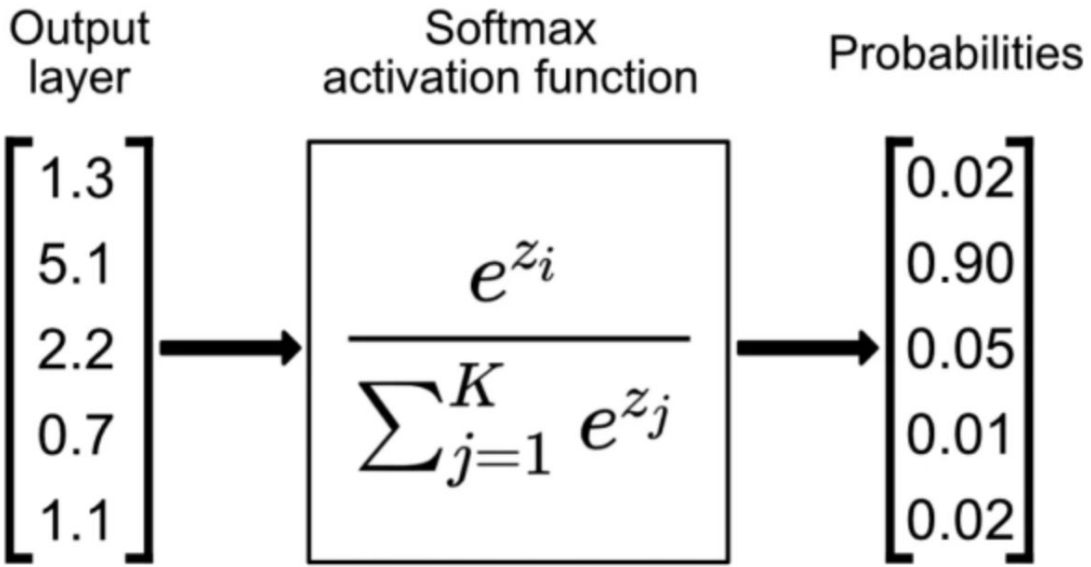
Transformer (2017)

- Токенизация слов
- Позиционное кодирование
- Преобразование векторов через трансформер-блоки
  - Multi-head attention (MHA)
  - Feed-forward (FFN)
  - LayerNorm
- Итоговое предсказание слова линейным слоем (lm head)



lm head

- Линейный слой отображающий вектор, получаемый из трансформера в вектор “логитов”, размерностью в |V|.
- Вектор логитов затем преобразуется через softmax для получения “вероятностей” токенов.



Генерация с помощью LLM

- В идеале хотелось бы уметь с помощью LLM генерировать текст, который максимизирует вероятность

$$y' = \arg\max_y p(y|x) = \arg\max_y \prod_{t=1}^{n} p(y_t|y_{<t}, x)$$

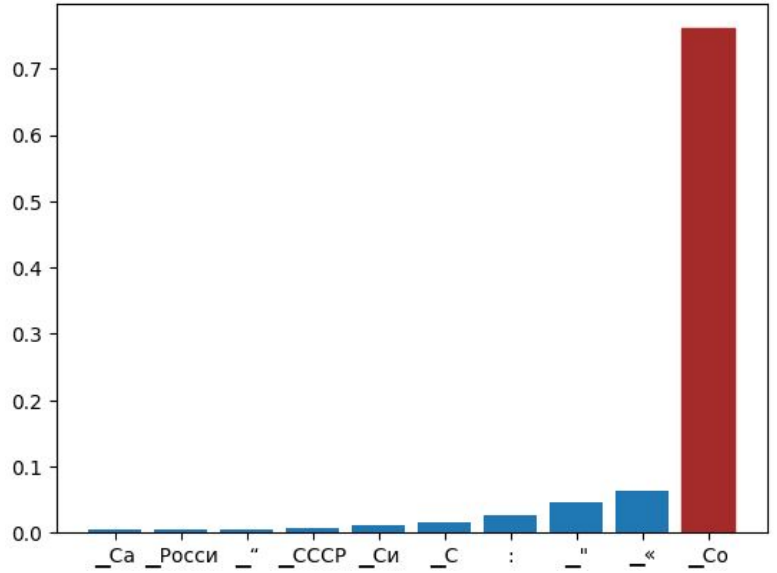
- Перебрать все существующие цепочки - невозможно.
- Выход: Генерация токен за токеном на основе текущих вероятностей - Sampling:
  - greedy ,
  - top-k,
  - top-p,
  - beam_search

https://lena-voita.github.io/nlp_course/seq2seq_and_attention.html

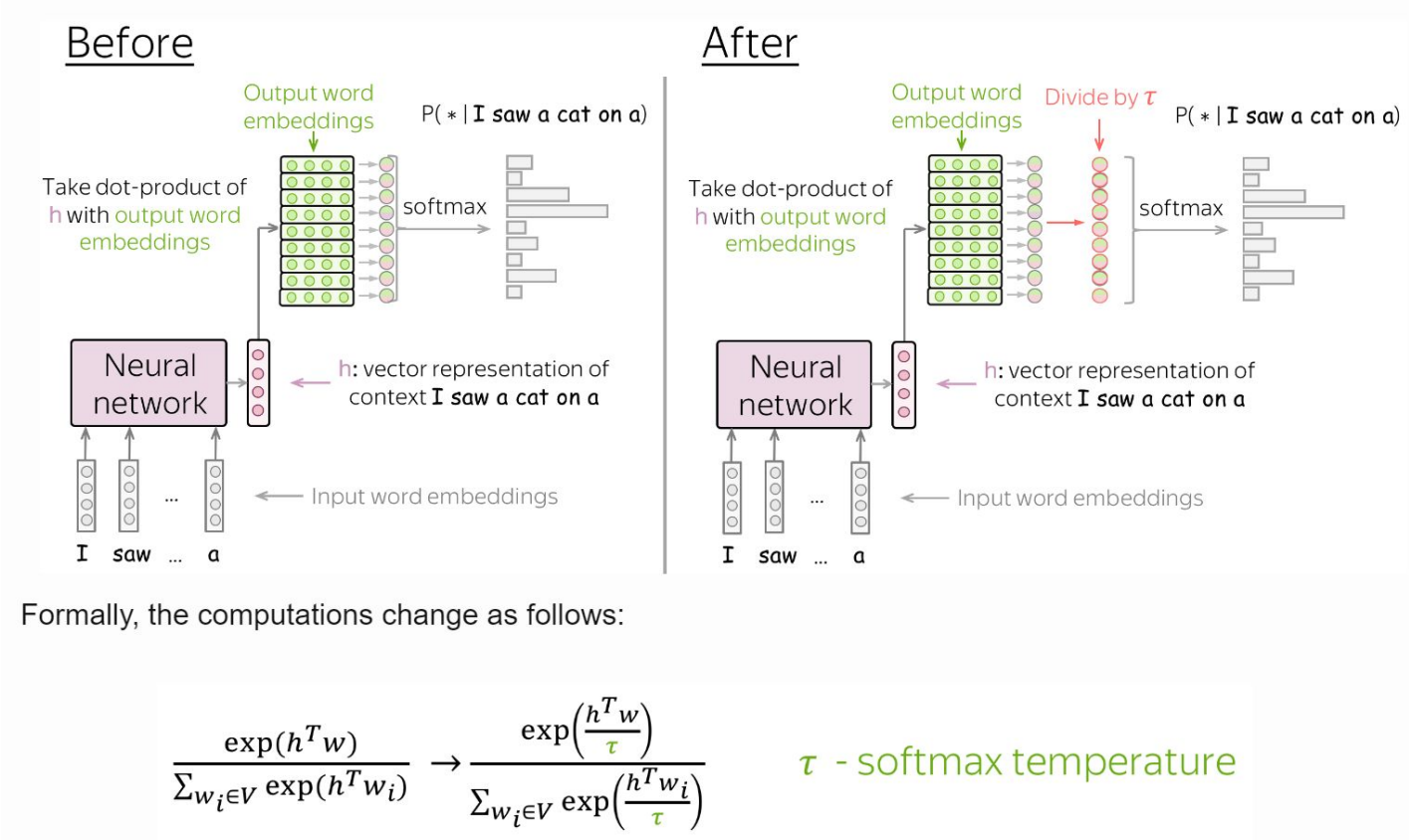
Greedy sampling

СССР расшифровывается как ?

- Каждый раз берем токен с максимальной вероятностью.
- Минусы: полное отсутствие разнообразия.
- Альтернатива: sampling в зависимости от вероятности самого токена.

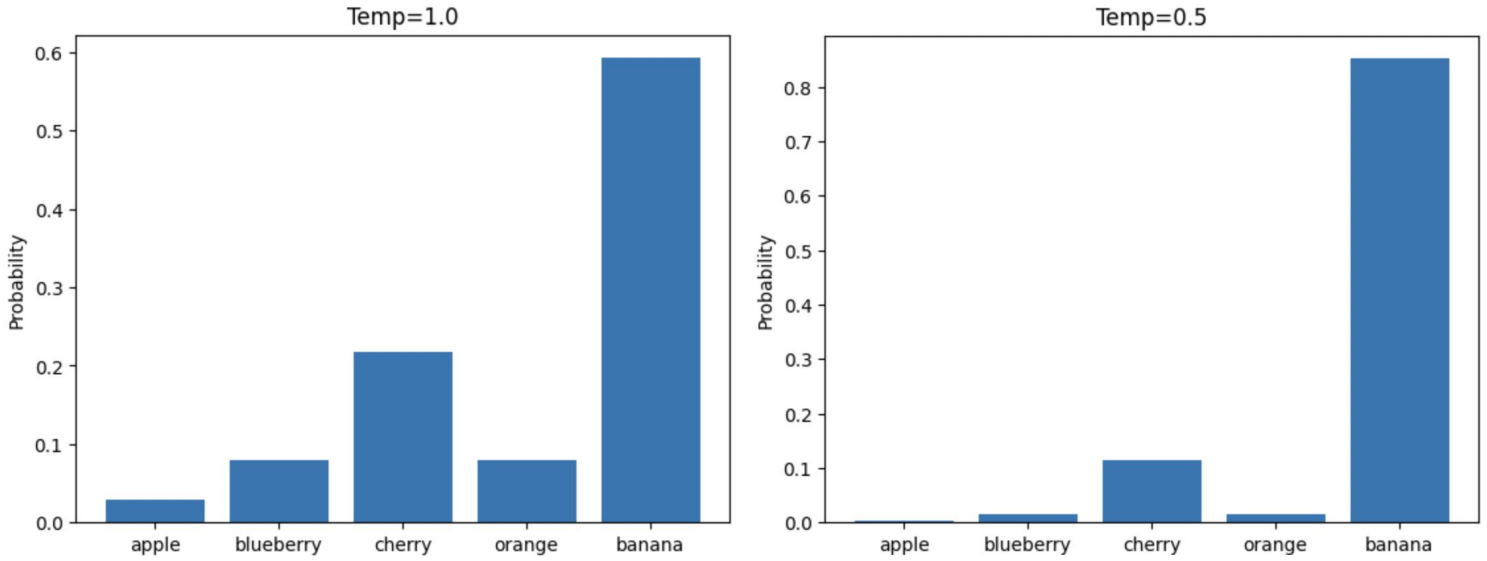


Temperature

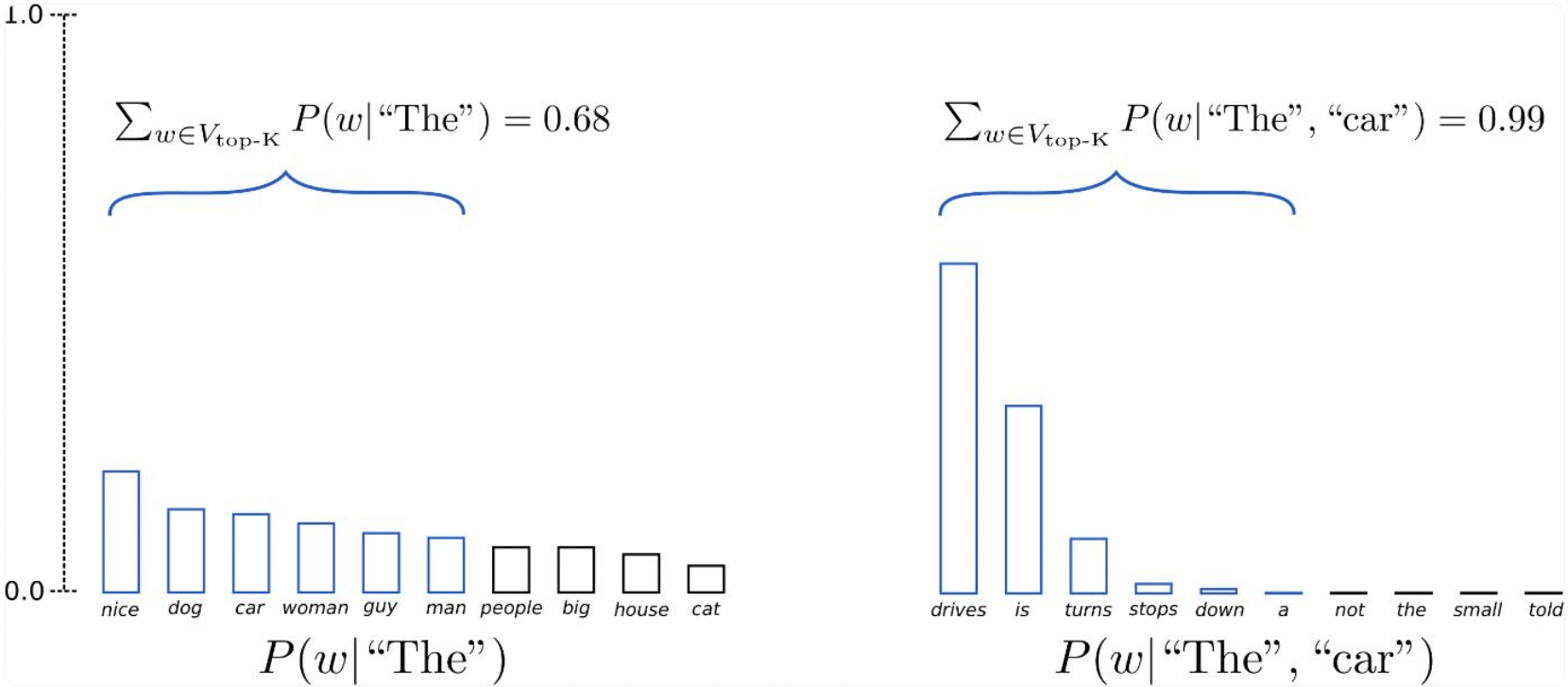


https://lena-voita.github.io/nlp_course/language_modeling.html#generation_strategies

Temperature

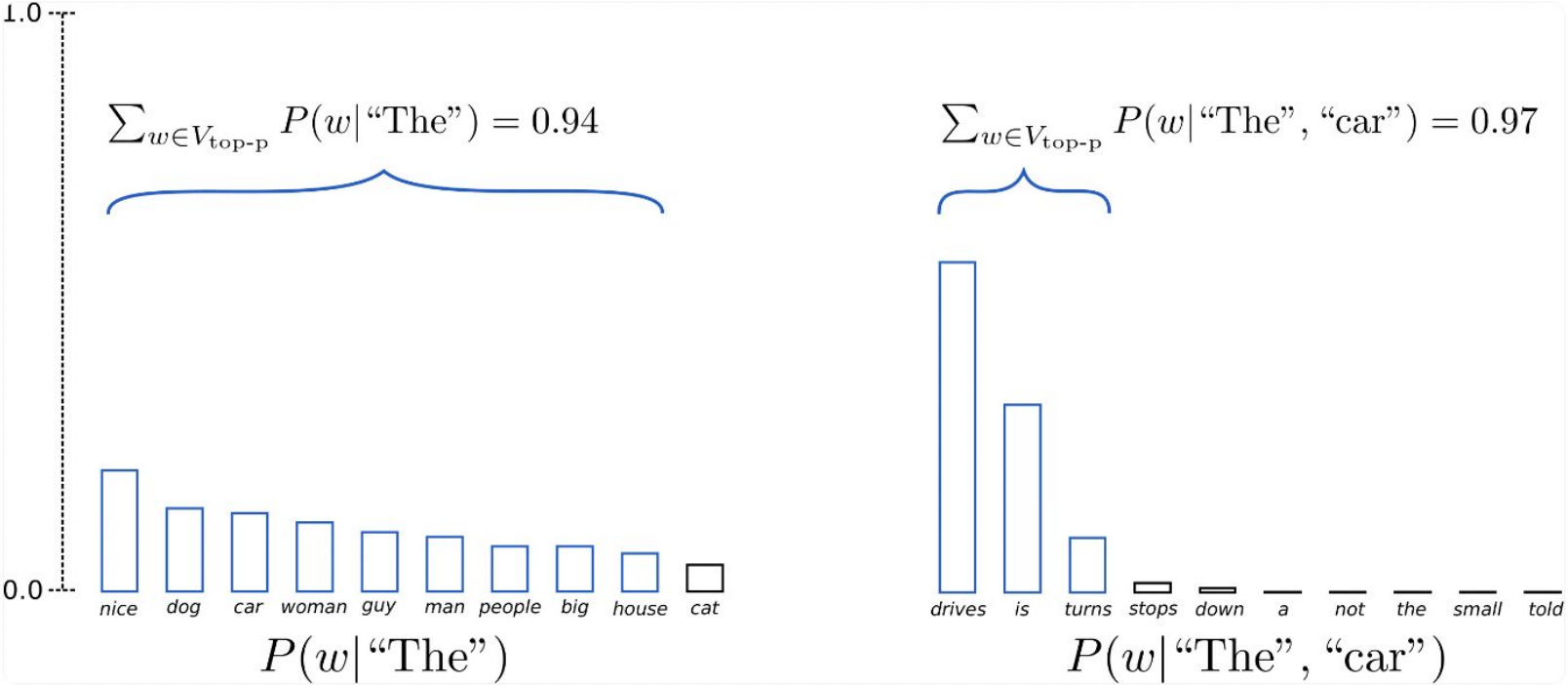


Top-K



https://huggingface.co/blog/how-to-generate

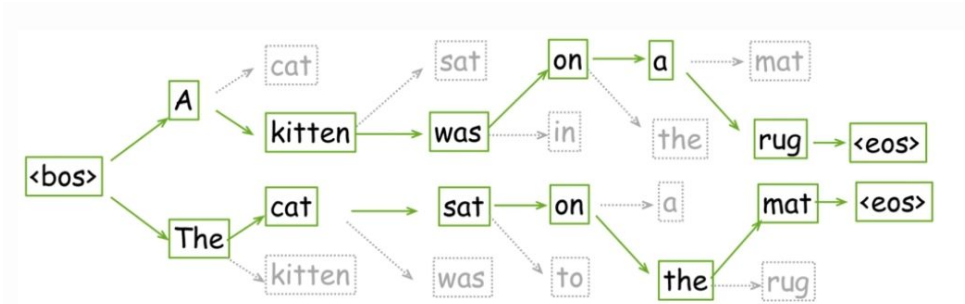
Top-P (nucleus sampling)



https://huggingface.co/blog/how-to-generate

Beam search

- Отслеживание нескольких наиболее вероятных гипотез, вместо одной.
- Вес цепочки - сумма logprobs нормированная на длину.



- Раньше активно применялся, сейчас редко из-за накладных расходов (необходимо вести beam_size генераций) и низкого разнообразия ответов.

https://lena-voita.github.io/nlp_course/seq2seq_and_attention.html

Архитектура Transformer: начало современного NLP

Transformer: первое впечатление

Model	BLEU		Training Cost (FLOPs)	
	EN-DE	EN-FR	EN-DE	EN-FR
ByteNet [18]	23.75			
Deep-Att + PosUnk [39]		39.2		$1.0 \cdot 10^{20}$
GNMT + RL [38]	24.6	39.92	$2.3 \cdot 10^{19}$	$1.4 \cdot 10^{20}$
ConvS2S [9]	25.16	40.46	$9.6 \cdot 10^{18}$	$1.5 \cdot 10^{20}$
MoE [32]	26.03	40.56	$2.0 \cdot 10^{19}$	$1.2 \cdot 10^{20}$
Deep-Att + PosUnk Ensemble [39]		40.4		$8.0 \cdot 10^{20}$
GNMT + RL Ensemble [38]	26.30	41.16	$1.8 \cdot 10^{20}$	$1.1 \cdot 10^{21}$
ConvS2S Ensemble [9]	26.36	**41.29**	$7.7 \cdot 10^{19}$	$1.2 \cdot 10^{21}$
Transformer (base model)	27.3	38.1	**$3.3 \cdot 10^{18}$**	
Transformer (big)	**28.4**	**41.8**	$2.3 \cdot 10^{19}$	

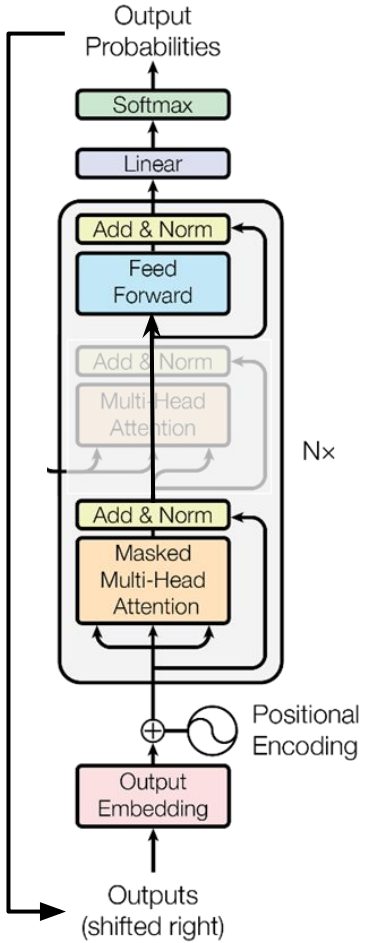
- Тестирование на задаче перевода,
- Нет существенного “скачка” в качестве.

OpenAI GPT-1 (2018)

- 12 слоев **Transformer decoder** (~117 млн.),
- Обучение в **2 этапа**:
  - Предобучение (pre-training) на задаче **моделирования языка**

$$\max_{\Theta} \sum_{0 \le i \le n} \log P(w_i | w_{i-1} \ldots w_0; \Theta)$$

    w - слова последовательности, Θ - параметры модели
  - Дообучение (fine-tuning) на целевые задачи
- Предобучался только на художественной литературе



Radford A. et al. Improving Language Understanding by Generative Pre-Training, 2018, https://openai.com/research/language-unsupervised

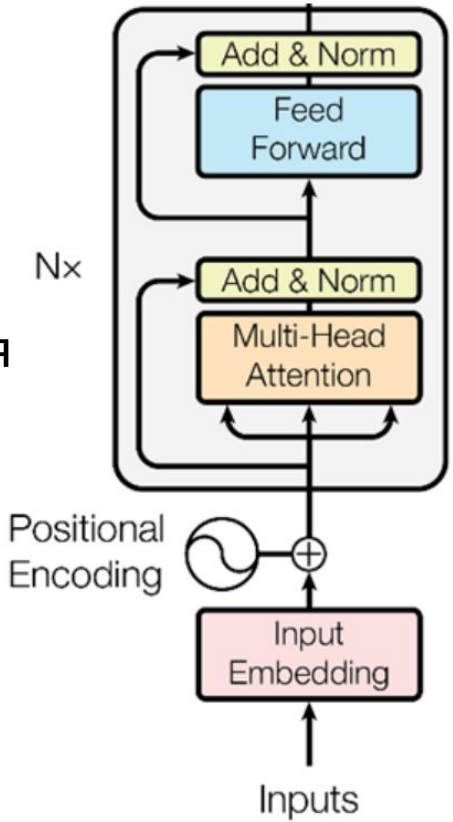
OpenAI GPT-1: оценка качества

Method	MNLI-m	MNLI-mm	SNLI	SciTail	QNLI	RTE
ESIM + ELMo [44] (5x)	-	-	89.3	-	-	-
CAFE [58] (5x)	80.2	79.0	89.3	-	-	-
Stochastic Answer Network [35] (3x)	80.6	80.1	-	-	-	-
CAFE [58]	78.7	77.9	88.5	83.3		
GenSen [64]	71.4	71.3	-	-	82.3	59.2
Multi-task BiLSTM + Attn [64]	72.2	72.1	-	-	82.1	**61.7**
Finetuned Transformer LM (ours)	**82.1**	**81.4**	**89.9**	**88.3**	**88.1**	56.0

Method	Story Cloze	RACE-m	RACE-h	RACE
val-LS-skip [55]	76.5	-	-	-
Hidden Coherence Model [7]	77.6	-	-	-
Dynamic Fusion Net [67] (9x)	-	55.6	49.4	51.2
BiAttention MRU [59] (9x)	-	60.2	50.3	53.3
Finetuned Transformer LM (ours)	**86.5**	**62.9**	**57.4**	**59.0**

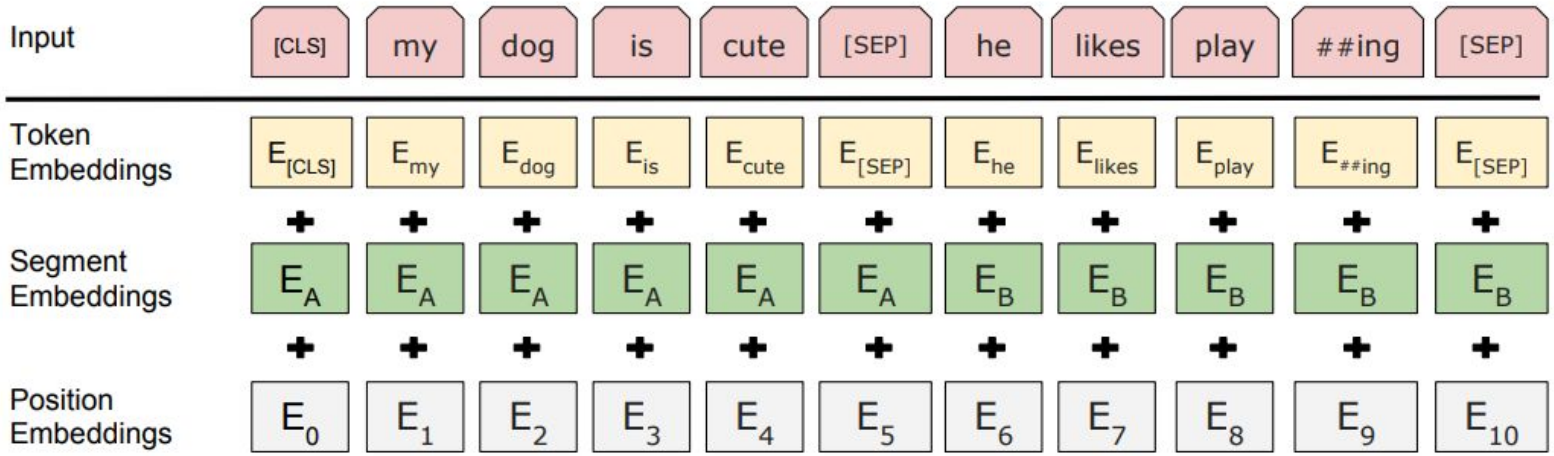
BERT (2018)

- Base: 12 слоев **Transformer encoder** (~110 млн. параметров)**,**
- Обучение в **2 этапа!**:
  - **Предобучение (pre-training**) на задачах:
    - маскированного языкового моделирования **(MLM)**
    - предсказания следующего предложения **(NSP).**
  - **Дообучение (fine-tuning)** на целевые задачи
- **3.3 миллиарда** слов English Wikipedia + BooksCorpus.

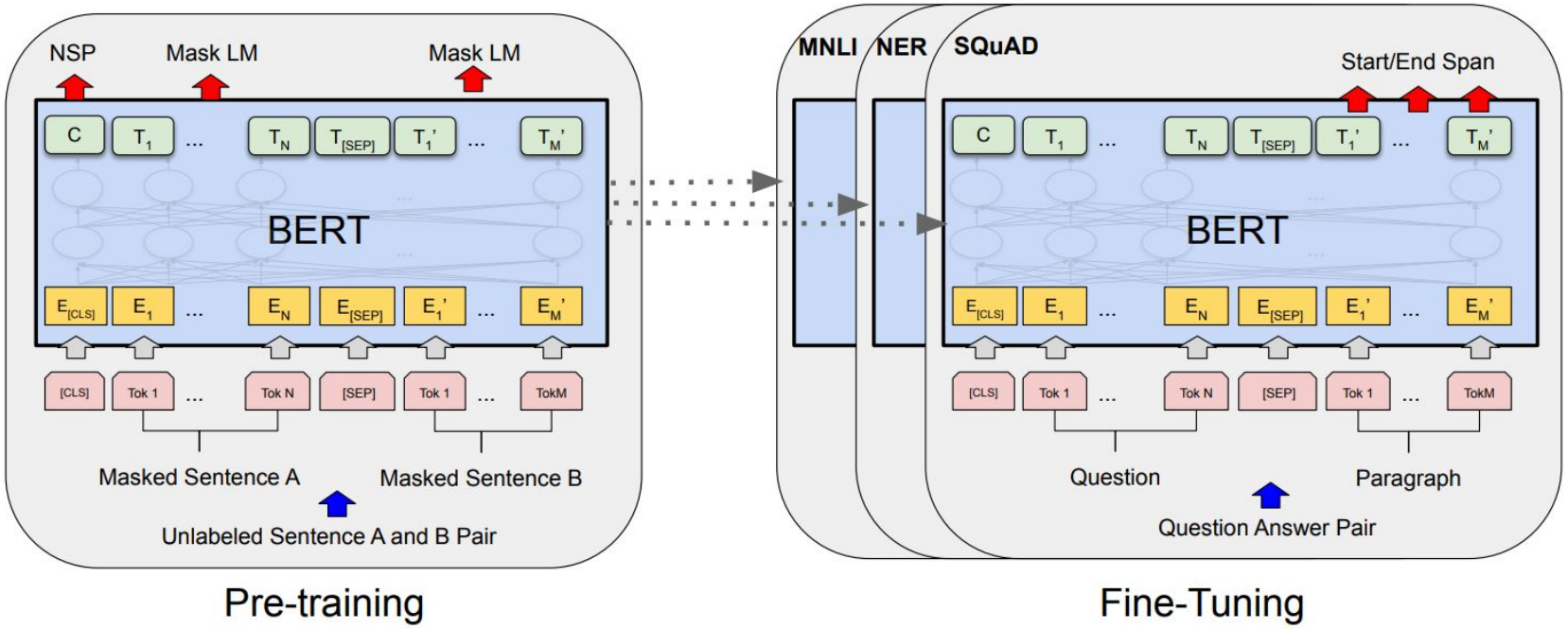


Devlin J. et al. Bert: Pre-training of deep bidirectional transformers for language understanding //arXiv preprint arXiv:1810.04805. – 2018.

BERT: формирование входа



BERT: pre-training и fine-tuning



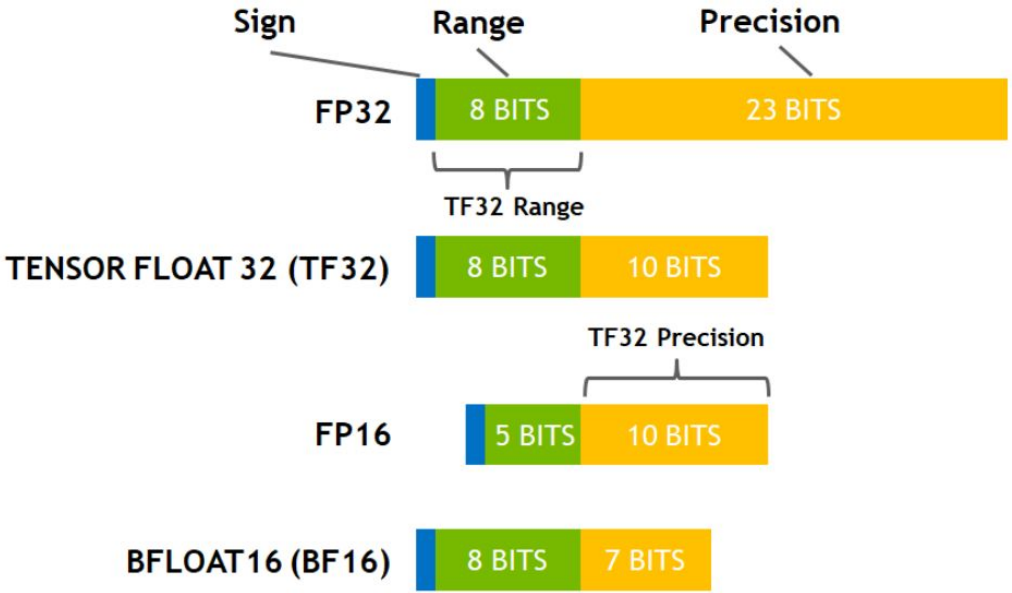
BERT: результаты

System	MNLI-(m/mm) 392k	QQP 363k	QNLI 108k	SST-2 67k	CoLA 8.5k	STS-B 5.7k	MRPC 3.5k	RTE 2.5k	**Average** -
Pre-OpenAI SOTA	80.6/80.1	66.1	82.3	93.2	35.0	81.0	86.0	61.7	74.0
BiLSTM+ELMo+Attn	76.4/76.1	64.8	79.8	90.4	36.0	73.3	84.9	56.8	71.0
OpenAI GPT	82.1/81.4	70.3	87.4	91.3	45.4	80.0	82.3	56.0	75.1
$\text{BERT}_{\text{BASE}}$	84.6/83.4	71.2	90.5	93.5	52.1	85.8	88.9	66.4	79.6
$\text{BERT}_{\text{LARGE}}$	**86.7/85.9**	**72.1**	**92.7**	**94.9**	**60.5**	**86.5**	**89.3**	**70.1**	**82.1**

Некоторые практические аспекты работы с LLM

Различные типы чисел

- В основном LLM обучают в fp16/bf16
- Некоторые операции / слои все еще могут быть в fp32 (mixed-precision)



https://developer.nvidia.com/blog/accelerating-ai-training-with-tf32-tensor-cores/

Проблемы классического attention

- Квадратичная сложность от длины последовательности как по времени, так и по памяти.
- Как результат, проблемы с длинными последовательностями.

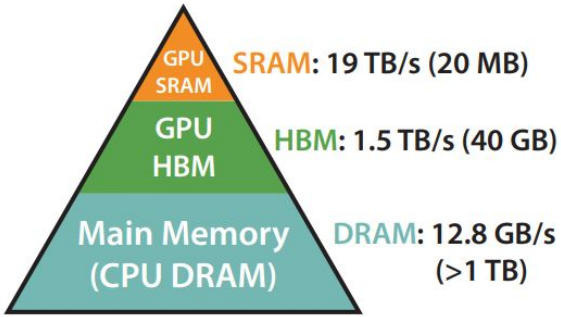
$$X \in \mathbb{R}^{n \times d}$$

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

$$SelfAttention(X) = Attention(XW_Q, XW_K, XW_V)$$

flash-attention: идея

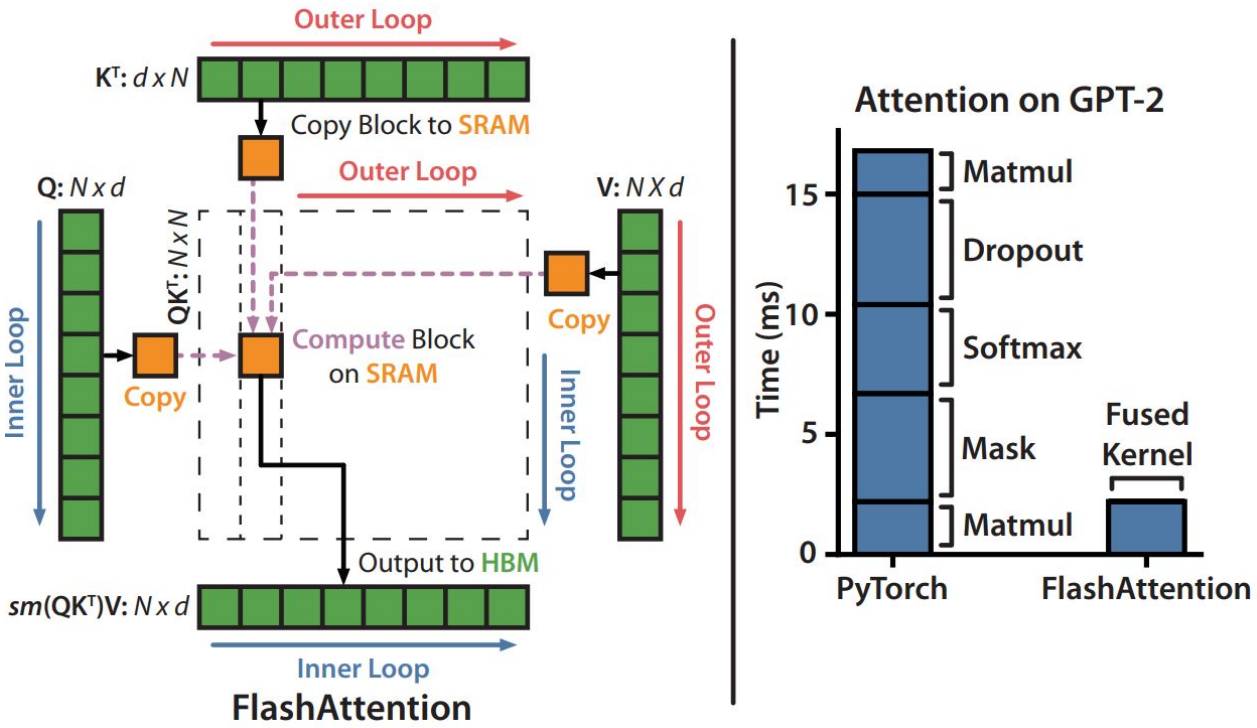
- GPU имеет разную память.
- Чтения и записи между ними, а также использование более медленной памяти снижают скорость работы вычислений.



Memory Hierarchy with Bandwidth & Memory Size

Dao T. et al. Flashattention: Fast and memory-efficient exact attention with io-awareness //Advances in Neural Information Processing Systems. – 2022. – Т. 35. – С. 16344-16359.

flash-attention: метод



"FlashAttention does not read and write the large $N \times N$ attention matrix to HBM"

flash-attention: результаты

Models	ListOps	Text	Retrieval	Image	Pathfinder	Avg	Speedup
Transformer	36.0	63.6	81.6	42.3	72.7	59.3	-
FlashAttention	37.6	63.9	81.4	43.5	72.7	59.8	2.4×
Block-sparse FlashAttention	37.0	63.0	81.3	43.6	73.3	59.6	**2.8**×
Linformer [84]	35.6	55.9	77.7	37.8	67.6	54.9	2.5×
Linear Attention [50]	38.8	63.2	80.7	42.6	72.5	59.6	2.3×
Performer [12]	36.8	63.6	82.2	42.1	69.9	58.9	1.8×
Local Attention [80]	36.1	60.2	76.7	40.6	66.6	56.0	1.7×
Reformer [51]	36.5	63.8	78.5	39.6	69.4	57.6	1.3×
Smyrf [19]	36.1	64.1	79.0	39.6	70.5	57.9	1.7×

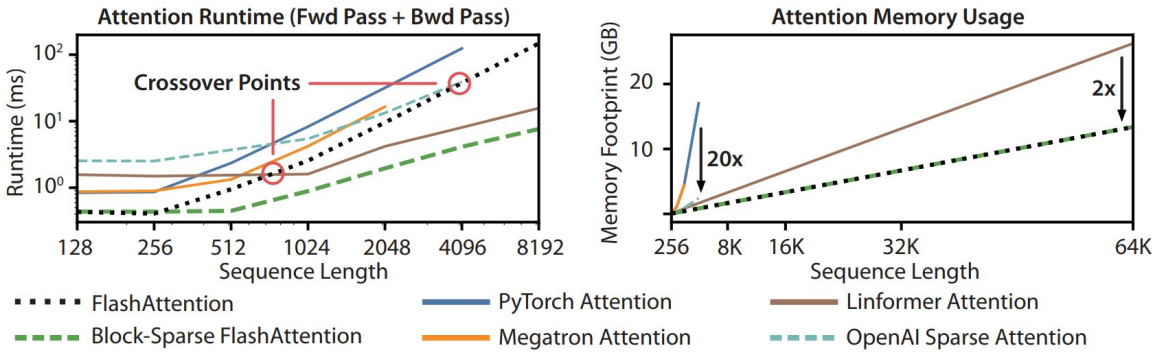


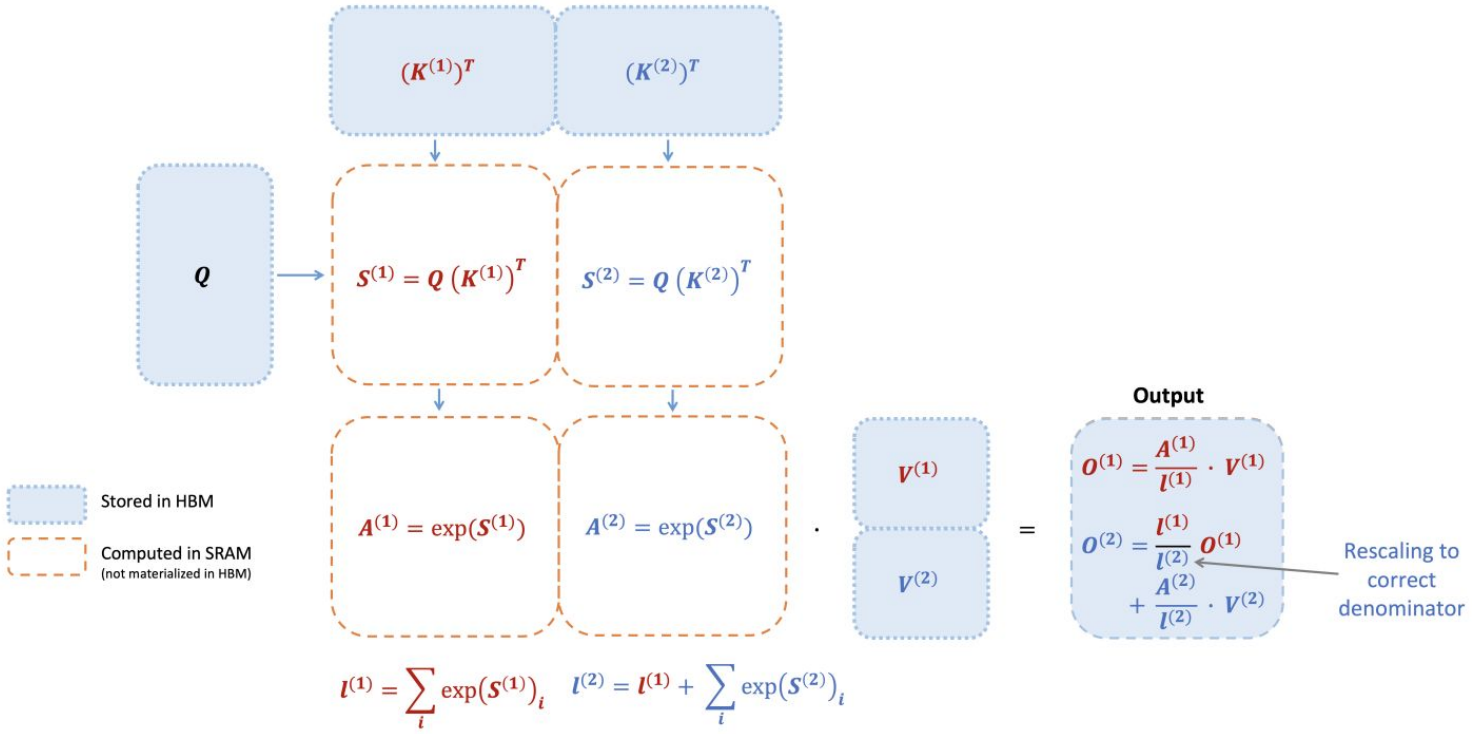
Figure 3: **Left:** runtime of forward pass + backward pass. **Right:** attention memory usage.

flash-attention-2

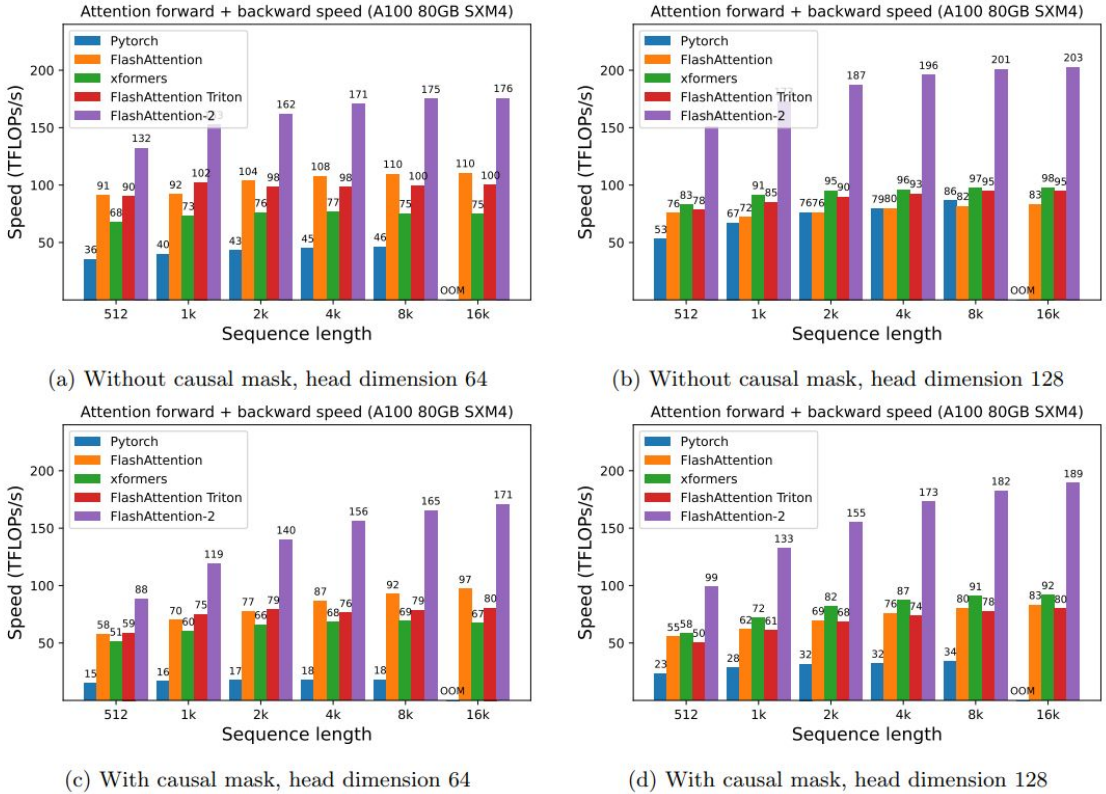
- Несмотря на то, что FlashAttention в 2-4 раза быстрее стандартной реализации, все равно forward pass достигает только 30-50% от теоретического максимума FLOPs/s на современных GPU.
  - Backward pass еще хуже, 25-35%
- Современные GPU имеют специализированные встроенные средства для перемножения матриц, благодаря которым пропускная способность matmul операции может быть в 16 раз выше, чем для non-matmul.

Dao T. FlashAttention-2: Faster Attention with Better Parallelism and Work Partitioning //The Twelfth International Conference on Learning Representations. – 2023.

flash-attention-2: метод



flash-attention-2: результаты A100



(a) Without causal mask, head dimension 64

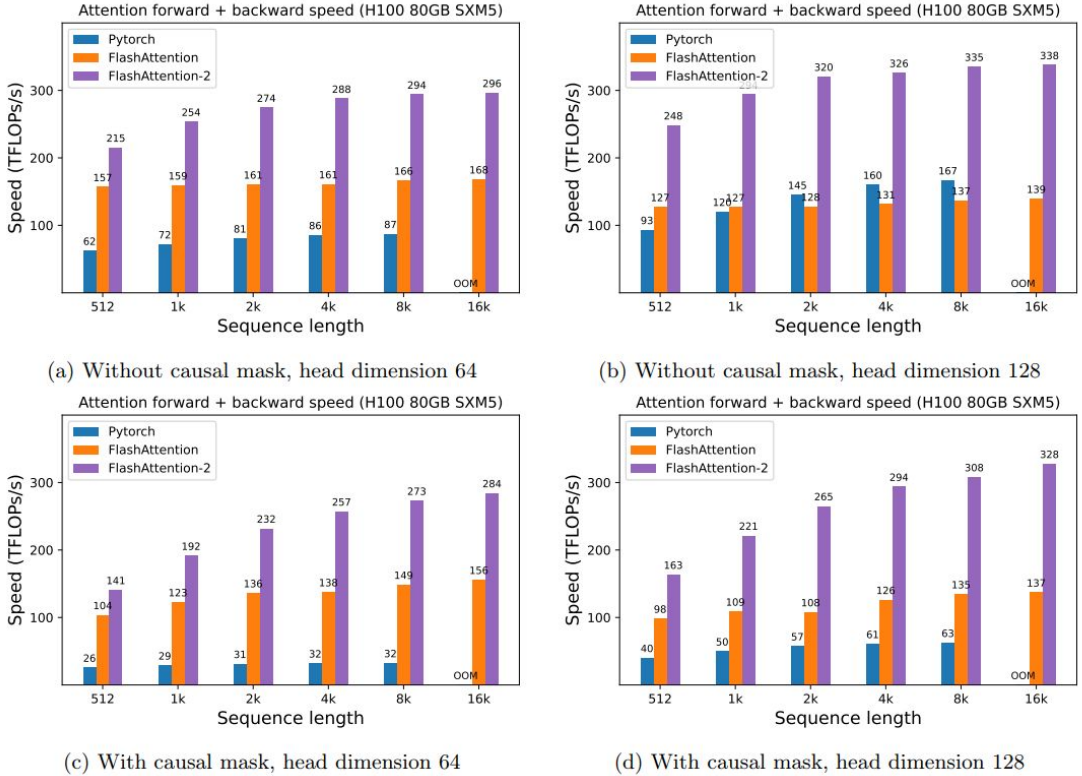
(b) Without causal mask, head dimension 128

(c) With causal mask, head dimension 64

(d) With causal mask, head dimension 128

Figure 4: Attention forward + backward speed on A100 GPU

flash-attention-2: результаты H100



(a) Without causal mask, head dimension 64

(b) Without causal mask, head dimension 128

(c) With causal mask, head dimension 64

(d) With causal mask, head dimension 128

Figure 7: Attention forward + backward speed on H100 GPU

flash-attention 1-2: выводы

- Существенное ускорение расчета attention, как во время обучения, так и во время инференса.
- Нет потери в качестве, так как по сути расчет attention не поменялся.
- Стала линейная зависимость по памяти.
- Применяется как есть на существующие уже обученные модели.
- Для FlashAttention-2 требуются современные ускорители.

FlashAttention-2 currently supports:

1. Ampere, Ada, or Hopper GPUs (e.g., A100, RTX 3090, RTX 4090, H100). Support for Turing GPUs (T4, RTX 2080) is coming soon, please use FlashAttention 1.x for Turing GPUs for now.
2. Datatype fp16 and bf16 (bf16 requires Ampere, Ada, or Hopper GPUs).
3. All head dimensions up to 256. Head dim > 192 backward requires A100/A800 or H100/H800.

Квантизация

- Квантизация – еще один способ “уменьшить” модель, в частности для “инфера”,
- Суть в **преобразовании весов модели** из типа float32, float16 в **int8**, а иногда и в **int4**,
- Преобразование делается не просто “напрямую”, а более хитрыми способами. Существуют реализации, совместимые с huggingface transformers,
  - **load_in_8bit, load_in_4bit** флаги (не лучшая квантизация),
- Закономерный результат квантизации – **падение качества**,
- Можно совмещать с обычным **LoRa**,
  - Замороженную модель в 8bit/4bit, но обучаемые веса в float16,
- **QLoRa -** более эффективный способ обучения модели с квантизацией.

Домашнее задание 1

- Зайти на google colab / kaggle (или на своем железе, если есть)
- Создать нотбук с загрузкой и работой с LLM по аналогии с показанным в лекции
- Придумать 10 не самых простых вопросов к LLM и сравнить 2 модели на выбор:
  - Например, qwen-2.5-3B instruct и qwen-2.5-7B instruct (потребует load_in_8bit)
- Сравнить вручную: лучше model1, лучше model2, одинаковы.
- Прислать нотбук + отчет (pdf)

Задание: оценивание и сроки

- Срок 1 неделя: до 16 октября 23:59.
- Присылать на tikhomirov.mm@gmail.com
  - Название письма: Practical LLM: Задание 1, запуск LLM.
  - В письме Ваше полное ФИО, группа, решение и краткий отчет по нему в PDF.
- Оценка по шкале “-/-+/+-/+/++”.
  - ++ за те решения, которые особо мне понравятся чем-либо.