HW11 Transformer

M113040105 劉東霖

Part I. Preparation

-. generate_token_dict:

主要的目的是 string 給予獨一的編號。例 如:{ 'postive':0,' BOS':1,' EOS':2,.....}。程式碼如下:

token_dict={vocab[i]:i for i in range(0,len(vocab))}

執行結果如下, vocob 對應到的編號都一樣。

=. prepocess_input_sequence:

這裡主要的目的是要把每個字符給予編號。

- 1. 首先, 先把 input str 用 split 把空白去掉
- 2. 如果元素是數字,則將數字拆分成單個字符,並將這些字符以 list 的形式加到 temp 中。例如,如果 i 是"123",則會將"1"、"2"和"3"這三個字符分別添加到 temp 中。如果元素不是數字,則直接將該元素添加到 temp 中。
- 3. 使用在 generate_token_dict 輸出的 token_dict, 將每一個字符給予相對應的編號。

程式碼如下:

```
split=input_str.split()
temp=[]
for i in split:
    if i.isnumeric():
        temp+=(list(i))
    else:
        temp.append(i)
for i in temp:
    out.append(token_dict[i])
```

執行結果如下:

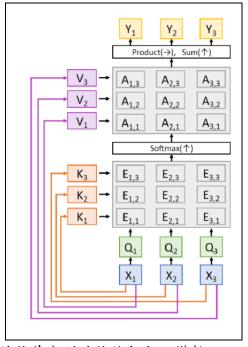
```
preprocess input token error 1: 0.0
preprocess input token error 2: 0.0
preprocess input token error 3: 0.0
preprocess input token error 4: 0.0

preprocess output token error 1: 0.0
preprocess output token error 2: 0.0
preprocess output token error 3: 0.0
preprocess output token error 4: 0.0
```

Part II. Implementing Transformer building blocks

-. scaled_dot_product_two_loop_single:

這裡主要是用雙迴圈的方式完成單一個 self attention block 計算。Self attention 的計算方式如下圖所示,Q和 K和 V都是題目給定:



1. 獲取 Q 的形狀,並將其分別賦值給 k 和 m 變數。

- 2. 創建一個形狀為(k, k)的全零 qk 張量。
- 3. 用一個雙層迴圈將 Q和 K內積,並把結果存到 qk。
- 4. 將 qk 除以 \sqrt{M} ,為了防止數值過大。
- 5. 對 qk 的每一個 column 進行 softmax 運算。
- 6. 將 qk 跟 V 矩陣相乘就是輸出結果。

程式如下:

```
k, m=query. shape
qk=torch. zeros (size=(k,k))
for i in range(k):
    for j in range(k):
        qk[i,j]=torch. inner(query[i], key[j])
qk=qk/m**0.5
qk=torch. softmax(qk, dim=1)
out=qk @ value
```

執行結果如下:

=. scaled_dot_product_two_loop_batch:

這裡是上一個的延伸,考慮到有多個輸入,流程跟上一個一樣。

- 1. 創建一個形狀為(n, k, k)的全零 qk 張量。
- 2. 創立一個雙層迴圈,利用 torch. einsum 的方式將第 i 個 query 和第 j 個 key 矩陣相乘,並將結果存到 gk。
- 3. 将 qk 除以 \sqrt{M} ,為了防止數值過大。
- 4. 對 qk 的每一個 column 進行 softmax 運算。
- 5. 將 qk 跟 V 矩陣相乘就是輸出結果。

程式如下:

```
qk=torch.zeros(size=(N,K,K))
for i in range(K):
    for j in range(K):
        qk[:, i, j] = torch.einsum('bi,bi->b', query[:, i], key[:, j])
    qk=qk/M**0.5
    qk=torch.softmax(qk,dim=-1)
    out=torch.bmm(qk,value)
```

執行結果如下:

Ξ. scaled_dot_product_no_loop_batch:

延續上一個內容,只是這裡引入 mask。Mask 用於遮罩掉未來位置的信息,以確保模型只能關注當前或過去的元素。這樣模型在生成序列的過程中只能依賴於當前或過去的信息,不會受到未來信息的影響。

- 1. 先用 self attention 的公式算出 gk。
- 2. 假如有遮罩的話,就將 qk 在 mask 為 True 的地方填滿 10⁻⁹,這樣在後面進行 指數運算時就不會參考到訊息了。
- 3. 對 gk 的每一個 column 進行 softmax 運算。
- 4. 將 qk 跟 V 矩陣相乘就是輸出結果。

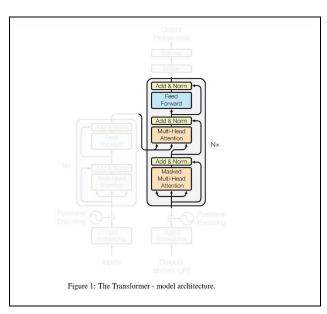
程式碼如下:

執行結果如下:

使用雙層迴圈和不使用迴圈的時間比較,發現差了4倍。

```
= emb_size = 2048
dim_q = dim_k = 2048
query = torch.linspace(-0.4, 0.6, steps=N * K * M).reshape(N, K, M) | # **to_double_cuda
key = torch.linspace(-0.8, 0.5, steps=N * K * M).reshape(N, K, M)
value = torch.linspace(-0.3, 0.8, steps=N * K * M).reshape(N, K, M)
                                                                           # *to double cuda
%timeit -n 5 -r 2 y = scaled_dot_product_no_loop_batch(query, key, value)
763 ms \pm 143 ms per loop (mean \pm std. dev. of 2 runs, 5 loops each)
K = 512
M = emb_size = 2048
dim_q = dim_k = 2048
query = torch.linspace(-0.4, 0.6, steps=N * K * M).reshape(N, K, M)
key = torch.linspace(-0.8, 0.5, steps=N * K * M).reshape(N, K, M)
value = torch.linspace(-0.3, 0.8, steps=N * K * M).reshape(N, K, M)
%timeit -n 5 -r 2 y = scaled_dot_product_no_loop_batch(query, key, value)
2.52~\mathrm{s}~\pm~41.8~\mathrm{ms} per loop (mean \pm~\mathrm{std.} dev. of 2~\mathrm{runs},~5~\mathrm{loops} each)
```

四. SelfAttention:



這裡主要是用 class 的方式完成 self attention。

__init__主要是將輸入透過 nn. linear 把 q k v 初始化,並將 q k v 的權重初始

為一個 uniform 的機率分佈,大小為[-c, c], c =
$$\sqrt{\frac{6}{Din+Dout}}$$
。

程式碼如下:

```
self. q=nn. Linear (dim_in, dim_q)
c=math. sqrt(6/(dim_in+dim_q))
torch. nn. init. uniform_(self. q. weight. data, a=-c, b=c)

self. k=nn. Linear (dim_in, dim_q)
c=math. sqrt(6/(dim_in+dim_q))
torch. nn. init. uniform_(self. k. weight. data, a=-c, b=c)

self. v=nn. Linear (dim_in, dim_v)
c=math. sqrt(6/(dim_in+dim_v))
torch. nn. init. uniform_(self. v. weight. data, a=-c, b=c)
```

Forward 主要將 q k v 進行維度轉換, 並把他帶入 scaled dot product no loop batch 裡面,得到輸出和 softmax 權重矩陣。

程式碼如下:

```
Q=self.q(query)
K=self.k(key)
V=self.v(value)
y, self.weights_softmax=scaled_dot_product_no_loop_batch(Q, K, V, mask)
```

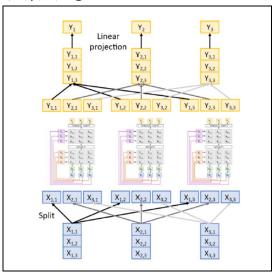
執行結果如下:

```
print("SelfAttention error: ", rel_error(y_expected, y))
print("SelfAttention error: ", rel_error(dy_expected, query_grad))

SelfAttention error: 5.282987963847609e-07
SelfAttention error: 2.474069076879365e-06
```

五. MultiHeadAttention:

MultiHeadAttention的概念如下圖所示。主要目的為,讓模型能夠並行地學習不同的關注方向和特徵表示。每個 attention 頭可以專注於序列中的不同位置、不同的語義層面或不同的注意力模式。這樣的並行計算增加了模型的表達能力,有助於捕捉更多的序列關聯性和特徵信息。:



__init__的定義如下:

1. self.num_head: attention機制裡面頭的數量。

- 2. self.attns: 根據 num_head 個數,用 nn. modulelist 把不同的頭分配到不同的 self attention 的 block 進行運算
- 3. self.linear_proj: 運算完後,用 nn.linear 把剛剛分散的頭變成原本輸入的形式。

程式碼如下:

```
self.num_heads = num_heads
self.attns = nn.ModuleList([SelfAttention(dim_in, dim_out, dim_out) for _ in range(num_heads)])
self.linear_proj = nn.Linear(num_heads * dim_out, dim_in)
```

forward 的定義如下:

- 1. 先把 q k v mask 代入 self. attns,分散到不同的 block 計算,並用一個 list 存起來。
- 2. 把算完的結果用 torch. cat 的方式串起來,變成一個 tensor。
- 3. 用 self. linear_proj 把結果變成原本輸入的形式。

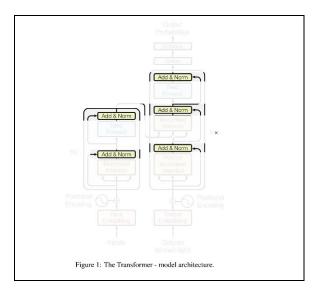
程式如下:

```
y=[h(query, key, value, mask) for h in self.attns]
y=torch.cat(y, dim=-1)
y = self.linear_proj(y)
```

執行結果如下:

MultiHeadAttention error: 5.366163452092416e-07 MultiHeadAttention error: 6.127381394302327e-07

六. LayerNormalization:



這裡的目的是將輸入的特徵在通道維度上進行歸一化,以減少不同特徵之間的相 互依賴性,從而有助於提高模型的穩定性和學習能力。

Normalization 的公式如下:

Input: Values of
$$x$$
 over a mini-batch: $\mathcal{B} = \{x_{1...m}\}$;

Parameters to be learned: γ , β

Output: $\{y_i = \mathrm{BN}_{\gamma,\beta}(x_i)\}$

$$\mu_{\mathcal{B}} \leftarrow \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m x_i \qquad // \text{ mini-batch mean}$$

$$\sigma_{\mathcal{B}}^2 \leftarrow \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (x_i - \mu_{\mathcal{B}})^2 \qquad // \text{ mini-batch variance}$$

$$\widehat{x}_i \leftarrow \frac{x_i - \mu_{\mathcal{B}}}{\sqrt{\sigma_{\mathcal{B}}^2 + \epsilon}} \qquad // \text{ normalize}$$

$$y_i \leftarrow \gamma \widehat{x}_i + \beta \equiv \mathrm{BN}_{\gamma,\beta}(x_i) \qquad // \text{ scale and shift}$$

__init__的定義如下:

- 1. self. shift: 用 nn. Parameter 定義了一個可學習的參數 shift,形狀為 (emb_dim,),初始值為全 1。scale 用於對輸入進行偏移。
- 2. self. scale:用 nn. Parameter 定義了一個可學習的參數 scale,形狀為 (emb_dim,),初始值為全 1。scale 用於對輸入進行線性縮放操作。

程式碼如下:

```
self.scale=nn.Parameter(torch.ones(emb_dim))
self.shift=nn.Parameter(torch.zeros(emb_dim))
```

Forward 主要是把 x 带入 normalization 的公式,程式碼如下:

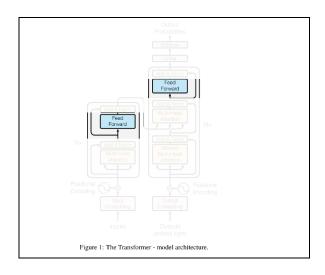
y=(self.scale*(x-x.mean(dim=-1,keepdim=True))/(x.std(dim=-1,keepdim=True,unbiased=False)+self.epsilon))+self.shift

執行結果:

```
print("LayerNormalization error: ", rel_error(y_expected, y))
print("LayerNormalization error: ", rel_error(dy_expected, inp_grad))

LayerNormalization error: 1.3772273765080196e-06
LayerNormalization error: 2.2667419499750657e-07
```

t. FeedForward:



FeedForward 輸入為 MultiAttention 的輸出,主要的成分為兩個 MLP 和兩個 ReLU。

__init__的定義如下:

- 1. self.linearl:為第一個MLP層,並將此MLP層的權重用 xavier 初始化。
- 2. self.linear2: 為第二個 MLP 層,並將此 MLP 層的權重用 xavier 初始化。
- 3. self.relu: ReLU層。

程式碼如下:

```
self.linearl=nn.Linear(inp_dim, hidden_dim_feedforward)
torch.nn.init.xavier_uniform_(self.linearl.weight.data)
self.relu=nn.ReLU()
self.linear2=nn.Linear(hidden_dim_feedforward,inp_dim)
torch.nn.init.xavier_uniform_(self.linear2.weight.data)
```

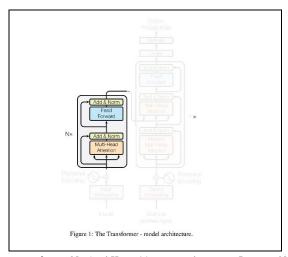
Forward 主要的順序為 x->linear1->relu->linear2,程式碼如下:

```
y=self.linear2(self.relu(self.linear1(x)))
```

程式執行結果:

```
print("FeedForwardBlock error: ", rel_error[\(\sigma_p\) expected, y\(\sigma_p\))
print("FeedForwardBlock error: ", rel_error(dy_expected, inp_grad))
FeedForwardBlock error: 2.1976864847460601e-07
FeedForwardBlock error: 2.302209886634859e-06
```

八. EncoderBlock:



這裡主要是把剛剛寫的 MultiHeadAttention 和 LayerNormalization 和 FeedForward 組合成一個 block,為 Transformer 的 encoder 部分。

__init__的定義如下:

- 1. self.mult_attn:定義了MultiHeadAttention層。
- 2. self.norml: 為 Encoder 下面的 LayerNormalization 層。
- 3. self.norm2 : 為 Encoder 上面的 LayerNormalization 層。
- 4. self.feed:定義了FeedForward層。
- 5. self.drop:定義了dropout

程式碼如下:

```
self.mult_attn=MultiHeadAttention(num_heads, emb_dim, emb_dim//num_heads)
self.norm1=LayerNormalization(emb_dim)
self.norm2=LayerNormalization(emb_dim)
self.feed=FeedForwardBlock(emb_dim, feedforward_dim)
self.dropout=nn.Dropout(dropout)
```

forward 的部分就按照 EncoderBlock 的定義代入不同的式子。比較不一樣的是,當每一次 Add_Norm 之後要加上 dropout。程式如下:

```
x=self.dropout(self.norm1(x+self.mult_attn(x, x, x)))
y=self.dropout(self.norm2(x+self.feed(x)))
```

執行結果如下:

```
encoder_out2 = enc_block(enc_seq_inp)
print("EncoderBlock error 2: ", rel_error(encoder_out2, encoder_out2_expected))

EncoderBlock error 1: 5.737253709511974e-07
EncoderBlock error 2: 5.58627368610239e-07
```

九. get subsequent mask:

為了製造 mask,所以我們要建立一個下三角矩陣,下面為 False,上面為 True。 shape 為(N, K, K), N 為 batch size, k 為 sequence length。程式如下:

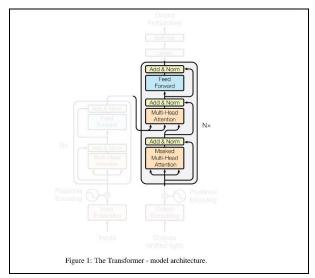
```
N, K = seq.shape
mask = (1 - torch.tril(torch.ones((N, K, K), device=seq.device))), bool()
```

執行結果如下:

看到之前寫的 scaled_dot_product_no_loop_batch,當 mask 不等於 None 時,結果是對的。

```
y_predicted, _ = scaled_dot_product_no_loop_batch(query, key, value, mask_expected)
print("scaled_dot_product_no_loop_batch error: ", rel_error(y_expected, y_predicted))
scaled_dot_product_no_loop_batch error: 2.8390648478191238e-06
```

+. DecoderBlock:



這裡主要是把剛剛寫的 MultiHeadAttention 和 LayerNormalization 和 FeedForward 和 MaskMultiHeadAttention 組合成一個 block,為 Transformer 的 encoder 部分。

__init__的定義如下:

- 1. self.attention_self: 定義了 Decoder 下面的 MultiHeadAttention 層。
- 2. self.attention_cross: 定義了 Decoder 中間的 MultiHeadAttention 層。
- 3. self.norml: 為 Decoder 下面的 LayerNormalization 層。
- 4. self.norm2: 為 Decoder 中面的 LayerNormalization 層。
- 5. self.norm3: 為 Decoder 上面的 LayerNormalization 層。
- 6. self.feed_forward: 定義了 Decoder 上面的 FeedForward 層。
- 7. self.drop:定義了dropout

程式碼如下:

```
self.attention_self = MultiHeadAttention(num_heads, emb_dim, emb_dim//num_heads)
self.attention_cross = MultiHeadAttention(num_heads, emb_dim, emb_dim//num_heads)
self.feed_forward = FeedForwardBlock(emb_dim, feedforward_dim)
self.norm1 = LayerNormalization(emb_dim)
self.norm2 = LayerNormalization(emb_dim)
self.norm3 = LayerNormalization(emb_dim)
self.dropout = nn.Dropout(dropout)
```

forward 的部分就按照 DecoderBlock 的定義代入不同的式子。程式如下:

```
#\(\tau\)

x=self. dropout(self.norm1(dec_inp+self.attention_self(dec_inp, dec_inp, dec_inp, mask)))

#\(\psi\)

x=self. dropout(self.norm2(x+self.attention_cross(x, enc_inp, enc_inp)))

#\(\psi\)
y=self. dropout(self.norm3(x+self.feed_forward(x)))
```

程式執行結果:

```
dec_out2 = dec_block(dec_inp, enc_out)
print("DecoderBlock error: ", rel_error(dec_out2, dec_out_expected))

DecoderBlock error: 0.49748849183075144
DecoderBlock error: 0.5007399975709957
```

Part III. Data loader

-. position_encoding_simple:

實現了一個簡單的位置編碼,用於生成一個序列的位置編碼表示。

- 用 torch. linspace(0, 1-1/K, steps=K)生成一個長度為 K 的 Tensor, K 為序列長度,其中每個元素的值為 n/K, n 從 0 開始遞增。這樣的數列可以表示序列中每個位置的相對位置。
- 2. 用 repeat 的方式把 shape 變成(1, M, K), M 為位置編碼的長度, 再用 permute 函式將維度重新排列為(1, K, M)。

程式碼如下:

```
y=torch.linspace(0,1-1/K, steps=K)
y=y.repeat((1, M, 1)).permute(0, 2, 1)
```

執行結果如下:

```
print("position_encoding_simple error: ", rel_error(y, y_expected))

position_encoding_simple error: 0.0
position_encoding_simple error: 0.0
```

=. Sinusoid positional encoding:

這裡實現了一個正弦型 (sinusoidal) 的位置編碼函式 position encoding sinusoid,用於生成序列的位置編碼表示。公式如下:

```
PE_{(p,2i)}=\sin\Bigl(rac{p}{10000^a}\Bigr) PE_{(p,2i+1)}=\cos\Bigl(rac{p}{10000^a}\Bigr) Where a=\left\lfloorrac{2i}{M}
ight
floor and M is the Embedding dimension of the Transformer
```

- 1. 用 pos=torch. arange(K, dtype=torch. float). reshape(1, -1, 1)生成一個形狀為(1, K, 1) 的 Tensor,其中每個元素的值為從 0 到 K-1 的連續整數,表示序列中每個位置的索引。
- 2. 用 dim=torch. arange(M, dtype=torch. float). reshape(1, 1, -1)生成一個形狀為(1, 1, M) 的 Tensor,其中每個元素的值為從 0 到 M-1 的連續整數,表示序列中位置編碼的維度。
- 3. 利用 phase=pos/(10000**(torch.div(dim, M, rounding_mode='floor'))),根據給定的公式計算位置編碼的相位值。torch.div(dim, M, rounding_mode='floor')表示將 dim 除以 M,並向下取整數。
- 4. 利用 torch. where,根據位置編碼的嵌入維度 dim 的奇偶性,選擇使用 sin或 cos 來計算位置編碼的值。如果 dim 是偶數,則使用 sin(phase);如果 dim 是奇數,則使用 cos(phase)。

程式碼如下:

```
pos=torch. arange (K, dtype=torch. float).reshape (1, -1, 1)
dim=torch. arange (M, dtype=torch. float).reshape (1, 1, -1)
phase=pos/(10000**(torch. div(dim, M, rounding_mode='floor')))
y=torch.where (dim. long()%2=0, torch. sin(phase), torch. cos(phase))
```

執行結果如下:

```
position_encoding error: 1.5795230865478516e-06
position_encoding error: 1.817941665649414e-06
```

Part IV: Using transformer on the toy dataset

-. Transformer:

__init__需要寫的部分為將輸入字串丟入 nn. Embedding 把字串變成對應的向量。 程式碼如下:

```
self.emb_layer = nn.Embedding(vocab_len, emb_dim)
```

Forward 的主要寫的部分如下:

- 1. 將輸入的問題向量 q_emb_inp 作為輸入,通過編碼器進行處理,獲得輸出 enc out。
- 2. 把 ans_b 代入 get_subsequent_mask 生成一個 mask,用於在解碼器中遮蔽未來時間的資訊。ans_b 是答案序列的 tensor, shape 為(batch_size, seq_length), ans_b[:,:-1]即去掉最後一個時間。這是因為在解碼器中,我們的目標是預測下一個時間的答案,所以不需要考慮最後一個時間的資訊。
- 3. 將輸入的答案向量 a_emb_inp、編碼器的輸出 enc_out 和 mask 作為輸入, 通過解碼器進行處理,獲得解碼器的輸出 dec out。
- 4. 將 dec_out 換為一個 2D tensor,目的是為了方便進行後續的計算和處理。程式碼如下:

```
enc_out=self.encoder(q_emb_inp)
mask=get_subsequent_mask(ans_b[:,:-1])
dec_out=self.decoder(a_emb_inp,enc_out,mask)
dec_out = dec_out.view(-1, dec_out.size(-1))
```

二. Transformer 執行結果:

1. 利用 Transformer 把少量 data train 成 overfitting,發現最後準確率為 1。

```
[epoch: 193] [loss: 0.1633] val loss: [val_loss 0.0728] [epoch: 194] [loss: 0.1835] val_loss: [val_loss 0.0743] [epoch: 195] [loss: 0.2305] val_loss: [val_loss 0.0754] [epoch: 196] [loss: 0.1156] val_loss: [val_loss 0.0768] [epoch: 197] [loss: 0.1897] val_loss: [val_loss 0.0760] [epoch: 198] [loss: 0.1532] val_loss: [val_loss 0.0742] [epoch: 199] [loss: 0.2813] val_loss: [val_loss 0.0717] [epoch: 200] [loss: 0.1864] val_loss: [val_loss 0.0706]
```

2. 利用 transformer 訓練完整 data, 花了 200 個 epoch, end_dim和 feedforward_dim都是 128,最後準確率落在 80.57%

```
[epoch: 190] [loss: 0.4883 ] val_loss: [val_loss 0.4196 ] [epoch: 191] [loss: 0.4845 ] val_loss: [val_loss 0.3990 ] [epoch: 192] [loss: 0.4899 ] val_loss: [val_loss 0.3998 ] [epoch: 193] [loss: 0.4801 ] val_loss: [val_loss 0.3894 ] [epoch: 194] [loss: 0.4726 ] val_loss: [val_loss 0.3872 ] [epoch: 195] [loss: 0.4707 ] val_loss: [val_loss 0.3872 ] [epoch: 196] [loss: 0.4712 ] val_loss: [val_loss 0.3980 ] [epoch: 197] [loss: 0.4611 ] val_loss: [val_loss 0.3729 ] [epoch: 198] [loss: 0.4714 ] val_loss: [val_loss 0.3969 ] [epoch: 199] [loss: 0.4672 ] val_loss: [val_loss 0.4079 ] [epoch: 200] [loss: 0.4836 ] val_loss: [val_loss 0.4522 ]
```