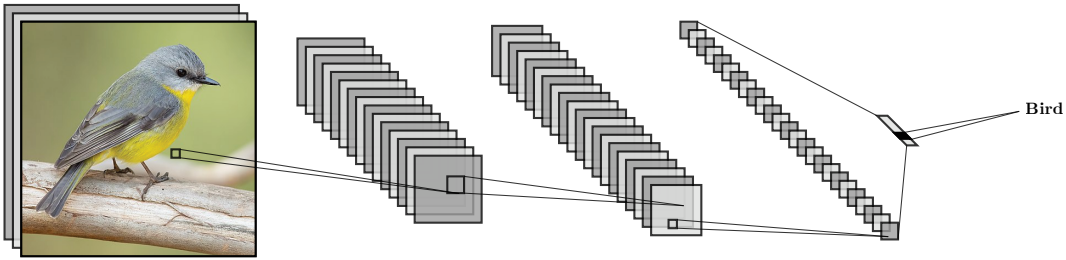
Attention mechanisms & Transformers

Motivación

Muchas tareas no necesitan de toda la entrada para predecir la salida.

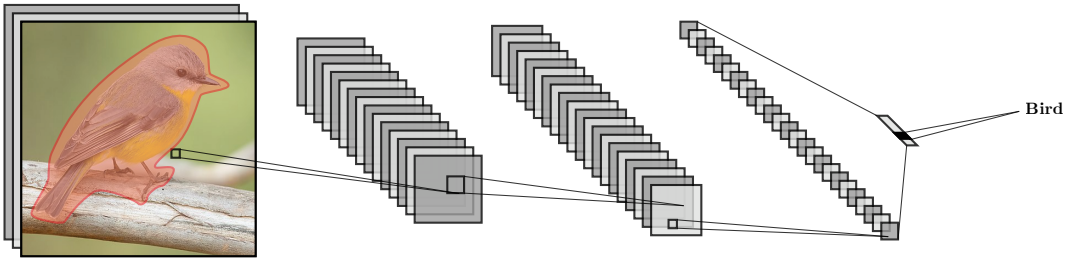
Ejemplo: Predecir la clase de una imagen.



Motivación

Muchas tareas no necesitan de toda la entrada para predecir la salida.

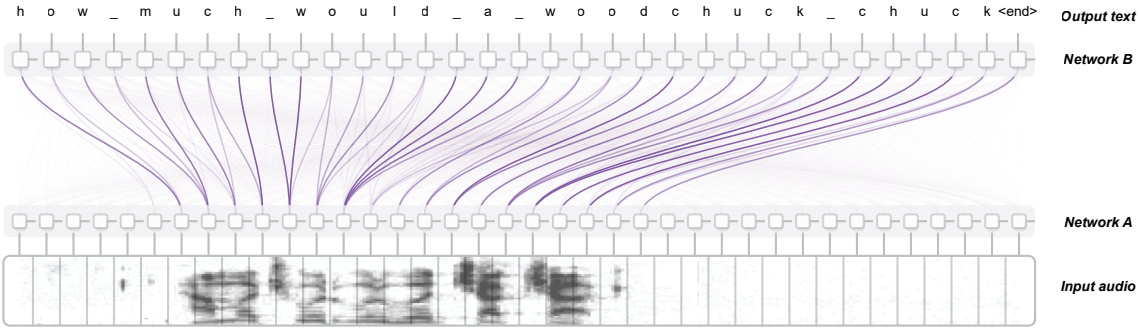
Ejemplo: Predecir la clase de una imagen.



Motivación

Muchas tareas no necesitan de toda la entrada para predecir la salida.

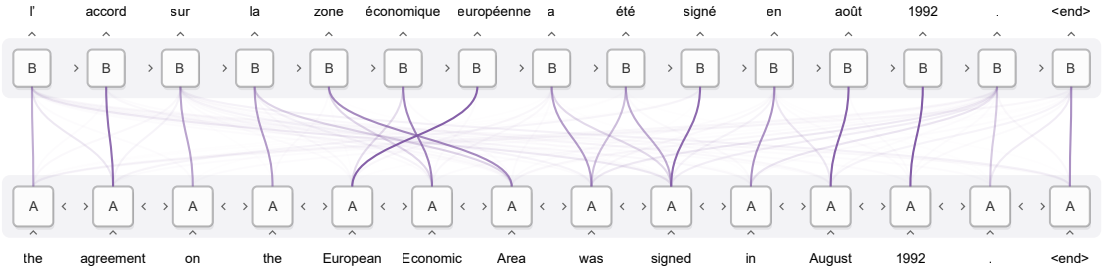
Ejemplo: Transformar audio en texto.



Motivación

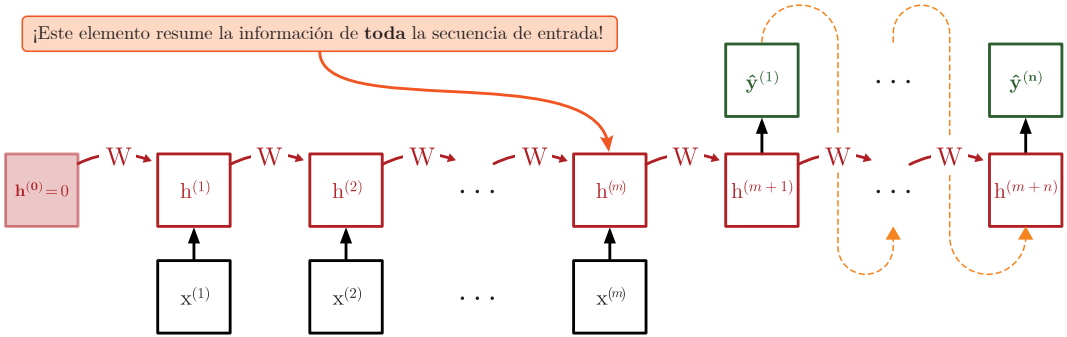
Muchas tareas no necesitan de toda la entrada para predecir la salida.

Ejemplo: Traducir entre idiomas.



Motivación

En tareas de Secuencia a Secuencia, las RNN condensan toda la información de la entrada en un único elemento. No es la mejor opción, sobre todo en largas secuencias.



En este contexto surgen los Transformers[1].

Esta nueva arquitectura:

- Mejora la eficiencia comptutacional de las RNN.
- Permite al modelo centrarse en partes concretas de la entrada para predecir la salida.
- Soluciona el problema de la memoria corto-placista de las RNN:
  - Permiten asociar palabras en una secuencia aunque estén muy separadas entre sí.

[1] Attention is all you need, Ashish Vaswani et al

Attention mechanisms

Attention mechanisms

Antes de comenzar a hablar de *Transformers*, es necesario entender el funcionamiento de su componente principal, los **attention mechanisms**.

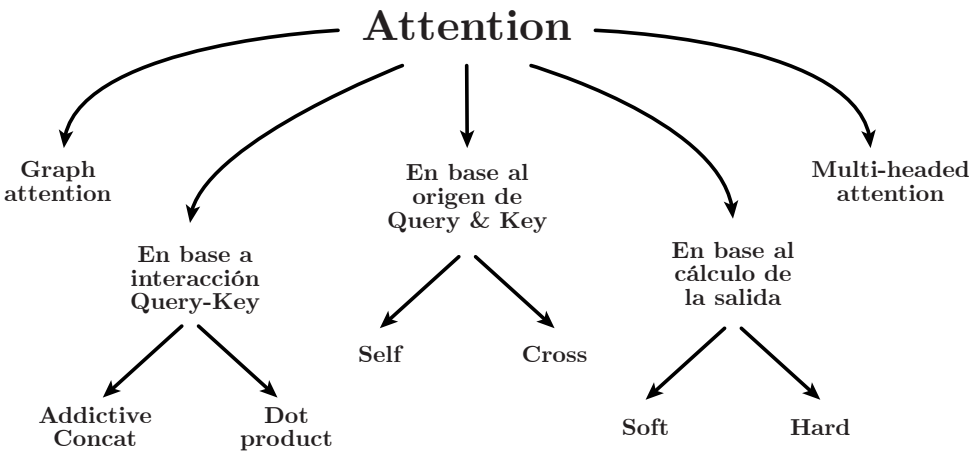
Definición

Los mecanismos de atención seleccionan que elementos de la(s) secuencia(s) de entrada son más importantes para predecir la secuencia salida.

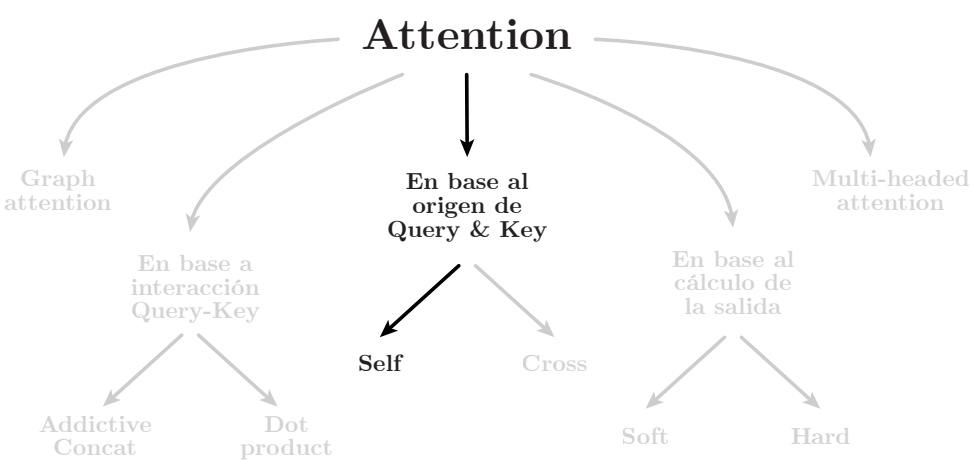
Detalles:

- La **entrada** de estos mecanismos espera **una o varias secuencias de datos**.
- Dentro de los *Transformers* se utilizan la llamada *Self-attention* pero, como verás a continuación, existen muchas otras variaciones.

Variaciones



Variaciones



Self-attention

Este método requiere de los siguientes elementos:

- **Secuencia de entrada:** $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_t$
- **Secuencia de salida:** $\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \ldots, \mathbf{y}_t$
- Misma dimensión k para todos los vectores.

Para producir cada vector $\mathbf{y}_i$ de la secuencia de salida, simplemente se obtiene la media ponderada de las entradas.

$$\mathbf{y}_i = \sum_j w_{ij} \mathbf{x}_j$$

Donde la j recorre toda la secuencia y la suma de todos los $w_{\cdot j}$ es igual a 1.

Self-attention

El peso $w_{i,j}$ **no es un parámetro**, como en una DNN, se deriva de una función sobre $\mathbf{x}_i$ y $\mathbf{x}_j$.

La opción más sencilla para esta función es el **producto escalar**:

$$w_{ij}^{'} = \left\langle \mathbf{x}_i{}^T, \mathbf{x}_j \right\rangle$$

El peso representa la importancia de cada elemento de la entrada para el elemento actual.

- Nótese que $\mathbf{x}_i$ es el vector de entrada en la misma posición que el vector de salida actual.
- Para $\mathbf{y}_{i+1}$, obtenemos una serie completamente nueva de productos escalares y una suma ponderada diferente.

Self-attention

El producto escalar anterior nos da valores entre $[-\inf, \inf]$.

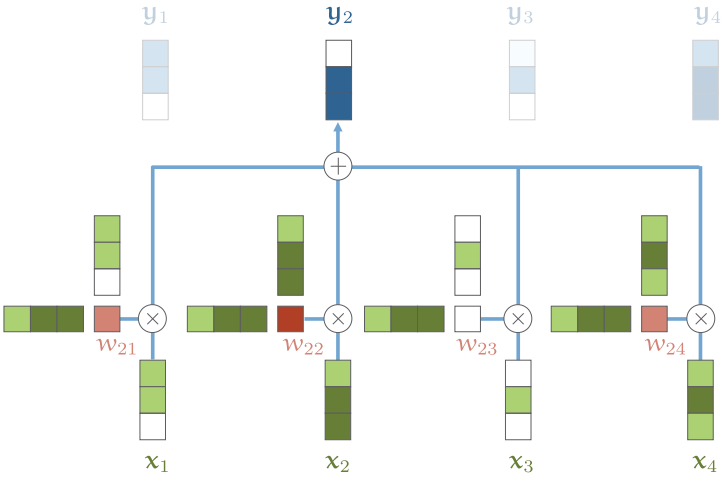
- Para obtener valores entre $[0, 1]$, aplicamos una *softmax*.
- De esta forma, para cada i, todos los j pesos sumarán 1.

Finalmente:

$$w_{ij} = \frac{\exp\ w_{ij}^{'}}{\sum_j \exp\ w_{ij}^{'}}$$

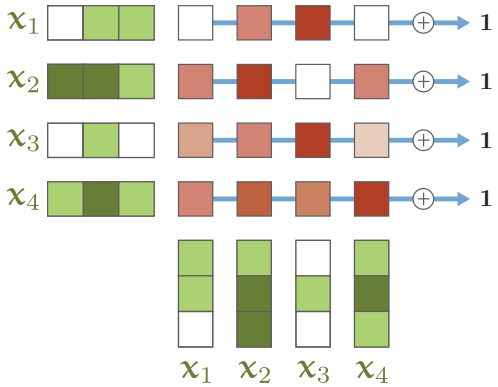
Self-attention

De forma gráfica (softmax omitida por simplicidad):



Self-attention

Realizando este proceso para todos los $\mathbf{x}_i$ obtendremos una matriz de pesos como la representada en la figura.



Nótese que:

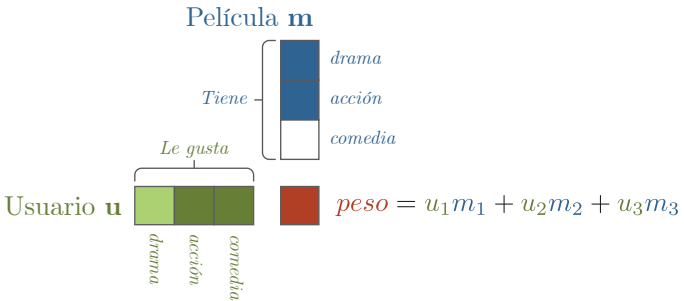
- Esta matriz se conoce como **matrtiz de atención**.
- Tras aplicar la softmax, todas las filas de esta matriz suman 1.
- A causa de esta softmax, la matriz no tiene por que ser simétrica.

Ejemplo

¿Por qué funciona la attention?

Supongamos que diriges un videoclub, tienes películas **m**, usuarios **u**, y te gustaría **recomendar** películas a tus usuarios que es probable que disfruten.

- Necesitamos codificar cada usuario y película de forma numérica.
- Podemos hacerlo de forma manual en base a los géneros.



Ejemplo

Importancia del signo:

Si **m** es romántica y a **u** le encanta el romanticismo o viceversa: *Producto escalar positivo.*
Si **u** es romántica y **u** odia el romanticismo o viceversa: *Producto escalar negativo.*

Importancia de la magnitud:

Las magnitudes de los géneros indican cuánto contribuye a la puntuación total.

- Una película puede ser un poco romántica, pero no de forma notable.
- Un usuario puede no preferir el romanticismo, pero ser en gran medida ambivalente.

Ejemplo

Rellenar manualmente estos valores es muy costoso y prácticamente imposible cuando existen millones de películas y usuarios.

Para solucionarlo:

1. Las características de cada **m** y **u** pasarán a ser parámetros del modelo.
2. Pedimos a los usuarios que valoren varias películas.
3. Optimizamos los parámetros/características para que el producto escalar coincida con la valoración.

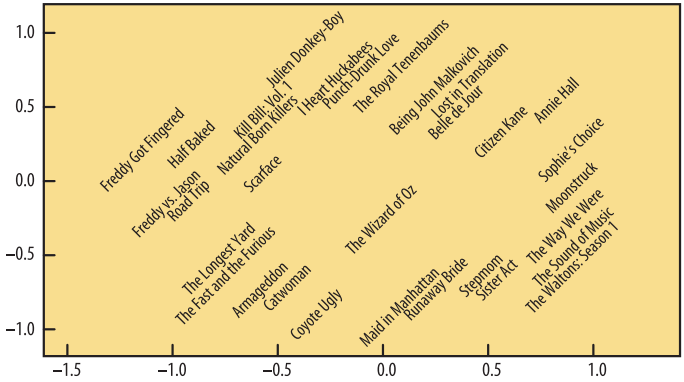
Atención!

Las carácteristicas de cada **u** y **m** ya no representan géneros, desconocemos su significado.

A pesar de ello, estas reflejan una semántica significativa sobre el contenido de la película.

Ejemplo

Si representamos cada m con 2 de las 3 nuevas carácteristicas aprendidas por el modelo:



El modelo es capaz de juntar películas similares sin conocer nada sobre su contenido.

Self-attention

Este principio es el mismo que hace que la self-attention funcione.

Imaginemos que tenemos la secuecia de palabras (frase): *"El gato camina en la calle"*.

Para aplicar self-attention:

1. Representamos cada palabra por un vector $\mathbf{v}$ (también llamado *embedding*) de tamaño k.

$$\mathbf{v}_{el}, \mathbf{v}_{gato}, \mathbf{v}_{camina}, \mathbf{v}_{en}, \mathbf{v}_{la}, \mathbf{v}_{calle}$$

2. Los valores de ese vector se aprenderán durante el entrenamiento (como ej. anterior).
3. Aplicamos self-attention a la secuencia, lo que retorna:

$$\mathbf{y}_{el}, \mathbf{y}_{gato}, \mathbf{y}_{camina}, \mathbf{y}_{en}, \mathbf{y}_{la}, \mathbf{y}_{calle}$$

donde $\mathbf{y}_{gato}$ es la suma ponderada de todos los embeddings de la primera secuencia, ponderada por su producto escalar (normalizado) con $\mathbf{v}_{gato}$.

Importante

Como estamos aprendiendo los valores de $\mathbf{v}_t$, el grado de "relación" entre dos palabras está **totalmente determinado por la tarea a resolver**.

Analizando la frase anterior, *en términos generales* podemos esperar que:

- El artículo *"El"* no sea muy relevante para el resto de palabras de la frase.
  - Su embedding $\mathbf{v}_{El}$ tendrá un producto escalar bajo o negativo con todas las demás palabras.
- Para interpretar el significado de *"camina"* es muy útil averiguar quién está caminando.
  - Probablemente $\mathbf{v}_{camina}$ y $\mathbf{v}_{gato}$ tendrá un producto escalar alto y positivo.

Self-attention

En resumen:

- Como se ve, el producto escalar expresa cómo de "relacionados" están dos vectores en la secuencia de entrada.
- El grado de "relación" viene **definido por la tarea de aprendizaje**.
- Los vectores de salida son **sumas ponderadas** sobre toda la secuencia de entrada.

¿Eso es todo?:

- **No hay parámetros que aprender (por ahora):** La parte de atención no aprende ningún parámetro. La codificación de la secuencia de entrada no forma parte del mecanísmo.
- **La entrada es un conjunto, no una secuencia:** Si alteramos el orden de las palabras, la salida será la misma, solo que también permutada. Más adelante veremos como solucionarlo.

Self-attention: Mejoras

La self-attention que se utiliza dentro de los Transformers utiliza **tres mejoras adicionales**.

1. Queries, keys y values.
2. Escalado del producto escalar.
3. Multi-head attention.

A continuación veremos cada una de ellas en detalle.

Self-attention: Queries, keys y values

Tres representaciones

Cada vector $\mathbf{x}_i$ de la entrada se utiliza de tres formas diferentes dentro de la self-attention.

- **Query:** Se compara con otros vectores para establecer los pesos de su propia salida $\mathbf{y}_i$.
- **Key:** Se compara con otros vectores para establecer los pesos de la j-ésima salida $\mathbf{y}_j$.
- **Value:** Se usa en el cálculo de la media ponderada que retorna el vector de salida.

En los ejemplos que vimos hasta ahora, el vector $\mathbf{x}_i$ *ejercía de todos estos roles a la vez*. Para facilitar la tarea a la atención, vamos a aprender **un embedding para cada rol**.

Self-attention: Queries, keys y values

Para aprender estas representaciones aplicaremos una transformación lineal al vector original.

Crearemos tres matrices de tamaño $k \times k$: $\mathbf{W}_q, \mathbf{W}_k, \mathbf{W}_v$.

Ahora, para cada elemento $\mathbf{x}_i$ de la secuencia de entrada tendremos *tres embeddings*:

$$\mathbf{q}_i = \mathbf{W}_q \mathbf{x}_i \qquad \mathbf{k}_i = \mathbf{W}_k \mathbf{x}_i \qquad \mathbf{v}_i = \mathbf{W}_v \mathbf{x}_i$$

¿Dónde utilizarlos en self-attention?

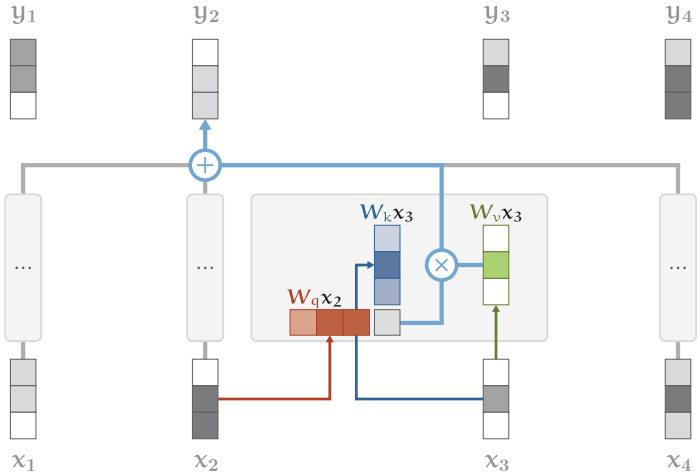
$$w'_{ij} = \left\langle \mathbf{q}_i{}^T, \mathbf{k}_j \right\rangle \qquad w_{ij} = \text{softmax}(w'_{ij}) \qquad \mathbf{y}_i = \sum_j w_{ij} \mathbf{v}_j$$

El producto escalar se hace entre *query* y *key*, para la media ponderada se utilizan los *values*.

Estas tres matrices serán los parámetros que aprende la self-attention.

Self-attention: Queries, keys y values

De forma gráfica:



Self-attention: Escalado del producto escalar

Problema del softmax

La función softmax puede ser sensible a valores de entrada muy grandes. Estos perjudican el gradente y ralentizan o detienen el aprendizaje.

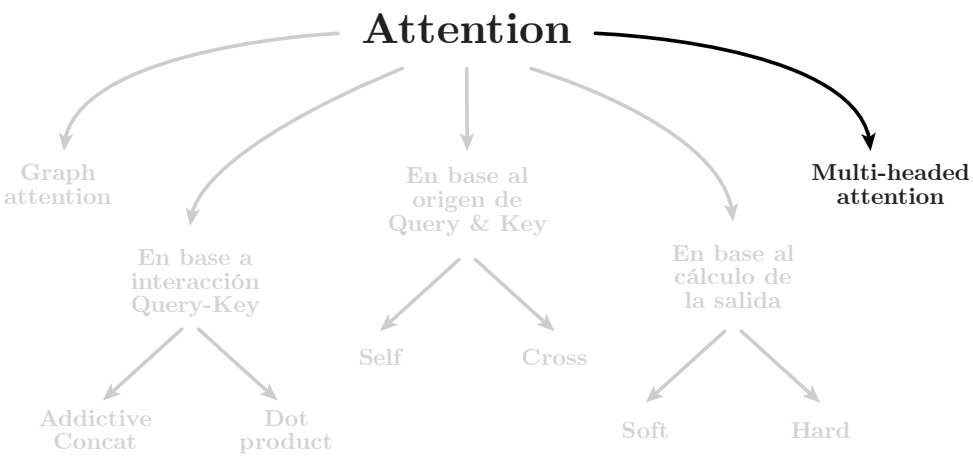
- Aumentar el tamaño k de los embeddings, aumenta el valor medio del producto escalar.
- Hay que reducir este valor escalando el resultado:

$$w_{ij}^{'} = \frac{\langle \mathbf{q}_i{}^T, \mathbf{k}_j \rangle}{\sqrt{k}}$$

¿Por qué $\sqrt{k}$?

- Dividir por la raíz cuadrada del tamaño del embedding normaliza los valores.
- Normalizar escala los valores evitando que unos dominen o se anulen otros.

Self-attention: Multi-head



Self-attention: Multi-head

Problema

Una palabra puede significar cosas distintas para vecinos distintos.

Ejemplo: *"Marta da rosas a Sara"*.

- $\mathbf{x}_{Marta}$ y $\mathbf{x}_{Sara}$ influirán en $\mathbf{x}_{da}$ en diferente cantidad, pero no de *diferente forma*.
- Si queremos que la información sobre quien dio las rosas y quien las recibió acabe en diferentes partes de $\mathbf{x}_{da}$ necesitamos *más flexibilidad*.

Solución:

- Combinar r mecanismos de autoatención para mejorar la capacidad de discriminar.
- Por tanto se aprenderán r matrices *query*, *key* y *value*: $\mathbf{W}_q^r, \mathbf{W}_k^r, \mathbf{W}_v^r$.

Cada uno de estos mecanismos se denimina "cabeza" o "head".

Self-attention: Multi-head

La forma más sencilla de entender la multi-head attention es verla como r copias de self-attention aplicadas en paralelo.

Problema:

- Cada copia tiene su propia *query*, *key* y *value*.
- Mejor rendimiento, pero r veces más lento que una sola cabeza.

Hay una forma de obtener las ventajas ambas opciones (r heads y eficiencia como una sola).

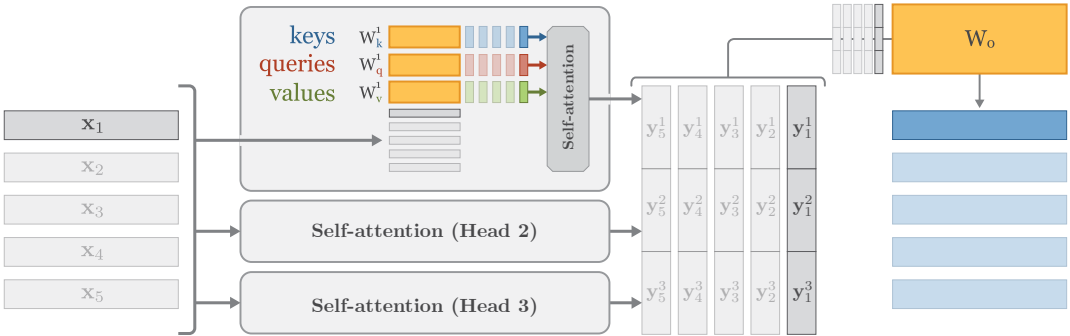
Solución:

- Reducir la dimensión de los embeddings en *query*, *key* y *value*.
- Si el vector $\mathbf{x}_i$ tiene dimensión $k = 256$ y tenemos $r = 4$ cabezas:
  - Transformamos cada $\mathbf{x}_i$ a tamaño 64 (256/4) para cada *query*, *key* y *value*.

Self-attention: Multi-head eficiente

Finalmente, para cada entrada $\mathbf{x}_i$, ocurren los siguientes pasos:

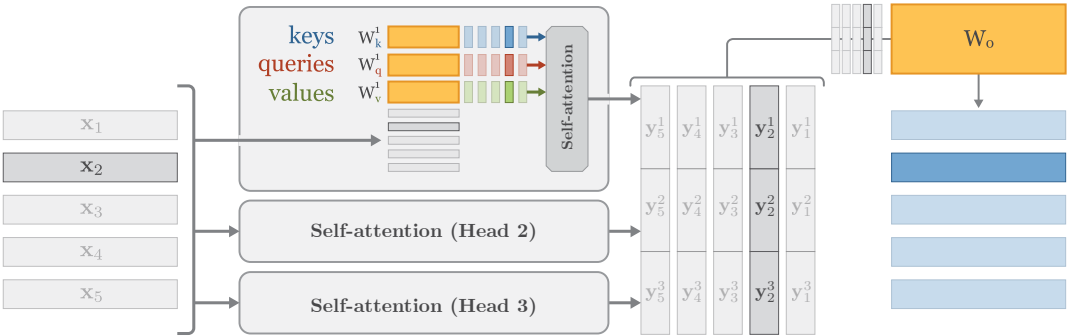
1. Cada self-attention head produce un vector de salida diferente $\mathbf{y}_i^r$.
2. Concatenamos las salidas y las transformamos linealmente de nuevo a tamaño k



Self-attention: Multi-head eficiente

Finalmente, para cada entrada $\mathbf{x}_i$, ocurren los siguientes pasos:

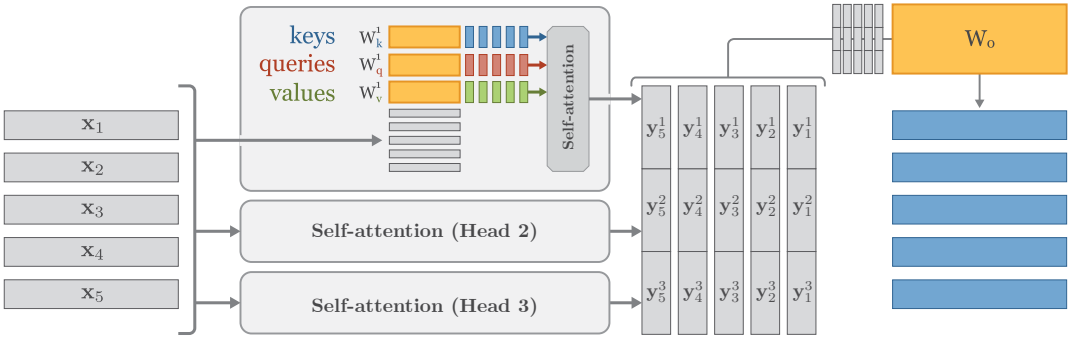
1. Cada self-attention head produce un vector de salida diferente $\mathbf{y}_i^r$.
2. Concatenamos las salidas y las transformamos linealmente de nuevo a tamaño k



Self-attention: Multi-head eficiente

Finalmente, para cada entrada $\mathbf{x}_i$, ocurren los siguientes pasos:

1. Cada self-attention head produce un vector de salida diferente $\mathbf{y}_i^r$.
2. Concatenamos las salidas y las transformamos linealmente de nuevo a tamaño k



Self-attention: Multi-head eficiente

Cross-attention

Transformers

Transformers