

Thesis Title

by
Student Name

Professor SuperProf, Advisor

A thesis submitted in partial fulfillment
of the requirements for the
Degree of Bachelor of Arts with Honors
in Physics

WILLIAMS COLLEGE
Williamstown, Massachusetts
23 de agosto de 2021

Abstract

Your abstract will summarize your thesis in one or two paragraphs. This brief summary should emphasize methods and results, not introductory material.

Executive Summary

Your executive summary will give a detailed summary of your thesis, hitting the high points and perhaps including a figure or two. This should have all of the important take-home messages; though details will of course be left for the thesis itself, here you should give enough detail for a reader to have a good idea of the content of the full document. Importantly, this summary should be able to stand alone, separate from the rest of the document, so although you will be emphasizing the key results of your work, you will probably also want to include a sentence or two of introduction and context for the work you have done.

Acknowledgments

The acknowledgment section is optional, but most theses will include one. Feel free to thank anyone who contributed to your effort if the mood strikes you. Inside jokes and small pieces of humor are fairly common here ...

Índice general

Abstract	I
Executive Summary	II
Acknowledgments	III
1. Introduction	1
2. Transformers	2
2.1. De RNN's a Transformers	2
2.1.1. Redes Neuronales Recurrentes más comunes	3
2.1.2. Compuertas LSTM y GRU	6
2.1.3. Mecanismos de Atención	9
2.2. El modelo Transformer	16
2.2.1. El Codificador y Decodificador	17
2.2.2. Multi-Head Self-Attention	17
2.2.3. Información Posicional	20
2.2.4. Problemas típicos en el entrenamiento de Transformers	21
A. An appendix	23
A.1. About the bibliography	23

Índice de figuras

2.1. RNN - Grafo Computacional	3
2.2. RNN - CFG	4
2.3. RNN - Image Captioning	5
2.4. Computo del estado oculto y salida de una Red Neuronal Recurrente.	7
2.5. Descripción.	8
2.6. Descripción.	10
2.7. Descripción.	11
2.8. Modelo seq2seq propuesto por Bahdanau et al. con <i>Additive/Concat Attention</i>	13
2.9. Modelo Transformer generalizado como modelo Secuencia a Secuencia	16
2.10. Etapa Codificadora del Modelo Transformer. Pseudocódigo	17
2.11. Etapa Decodificadora del Modelo Transformer. Pseudocódigo	18
2.12. Esquema de entrenamiento e inferencia del modelo Transformer en un problema de Machine Translation.	19
2.13. 2000 Vectores de Positional Encoding con dimensiones de embedding=500.	20

Capítulo 1

Introduction

Capítulo 2

Transformers

2.1. De RNN's a Transformers

Las **Redes Neuronales Recurrentes** o **RNN** (por sus siglas en Inglés) datan del año 1986, basadas en el trabajo de Rumelhart [20]. Este tipo de redes están especializadas en el procesamiento de datos que contienen información temporal, mejorando los resultados obtenidos por otros tipos de redes como *Redes FeedForward* o *Redes Convolucionales*.

La principal idea detrás de estos modelos de red es el concepto de *Parameter Sharing*. Con *Parameter Sharing* un modelo puede generalizar mejor cuando la información que esta contenida en diferentes partes de una secuencia. Así, el modelo no necesita aprender independientemente todas las reglas que forman la secuencias, sino que ahora, la salida para cada elemento en el tiempo esta determinada por la salida del elemento anterior. Resultando en una recurrencia con las mismas reglas de actualización aplicadas a cada elemento en el tiempo. La ecuación 2.1 representa este proceso; $h^{(t)}$ es el estado de la recurrencia aplicada por alguna función f a un elemento $x^{(t)}$ de la secuencia x en el tiempo, t y θ son los parámetros compartidos.

$$h^{(t)} = f(x^{(t)}, h^{(t-1)}; \theta) \quad (2.1)$$

En una *RNN* vista como un *gráfo computacional dirigido y acíclico*, cada nodo representa un estado en la recurrencia y procesa la información de la secuencia x con los mismos parámetros θ en cada paso, observe la figura 2.1.

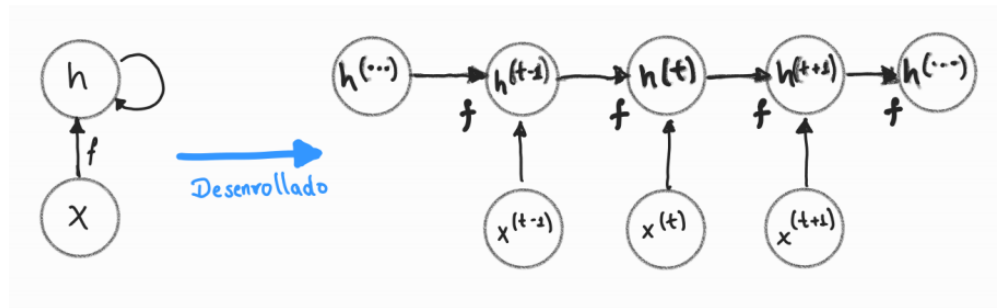


Figura 2.1: Grafo computacional generado por una *RNN* al "desenrollar" la recurrencia. Usando los parámetros compartidos en cada nodo, con cada elemento $x^{(t)}$ de la secuencia genera un nuevo estado oculto $h^{(t)}$ para retroalimentar nuevamente la entrada del siguiente nodo.

2.1.1. Redes Neuronales Recurrentes más comunes

Existen diversas formas como construir *Redes neuronales Recurrentes*, pueden producir una salida en cada paso de tiempo o tener solo una al final de la recurrencia y también pueden tener conexiones entre unidades ocultas. La manera más común de implementar una *RNN* está ilustrada en la figura 2.2a. En esta figura, cada etapa de la recurrencia es retroalimentada por la activación del estado oculto previo. Así, $h^{(t)}$ contiene información codificada de elementos previos de la secuencia que puede ser usada en el futuro para obtener una salida $O^{(t+1)}$. En la figura 2.2b se cambia la retroalimentación de $h^{(t)}$ por $o^{(t)}$. Nótese que en este caso, la red es entrenada para obtener un valor en específico $o^{(t)}$ lo que provocaría que gran parte de la información de los estados ocultos pasados $h^{(t-1)}, h^{(t-2)}, \dots$ no se transmita. En el esquema anterior 2.2a la red es entrenada para decidir que información debe transmitir en el futuro a través de los estados ocultos, en cambio, en la figura 2.2b cada estado está conectado con el pasado a través de la predicción del paso anterior, perdiendo así gran parte de la información codificada en los estados ocultos, a menos que la salida $O^{(t-1)}$ sea lo suficientemente rica y esté en altas dimensiones.

Por otro lado, la *RNN* representada en la figura 2.2c tiene una sola salida al final de la recurrencia. Al contrario de las anteriores, este tipo de redes pueden ser usadas para resumir información contenida en la secuencia para finalmente predecir un único valor final. El *Análisis de Sentimiento* en textos es una tarea común que puede ser representada con este esquema de red. En la figura 2.2d vemos un modelo de *RNN* entrenado mediante el proceso de Teacher Forcing; durante el entrenamiento la red es retroalimentada con las salidas esperadas del modelo $y^{(t)}$ en el tiempo $t+1$. La ventaja de esta red es que al ser eliminadas las conexiones entre estados ocultos, las funciones de pérdida basadas en comparar la predicción en el tiempo t con el valor objetivo $y^{(t)}$ pueden ser desacopladas. Por tanto, el entrenamiento puede ser paralelizado al calcular el gradiente para cada tiempo t por separado, puesto que ya tenemos el valor ideal para esta salida.

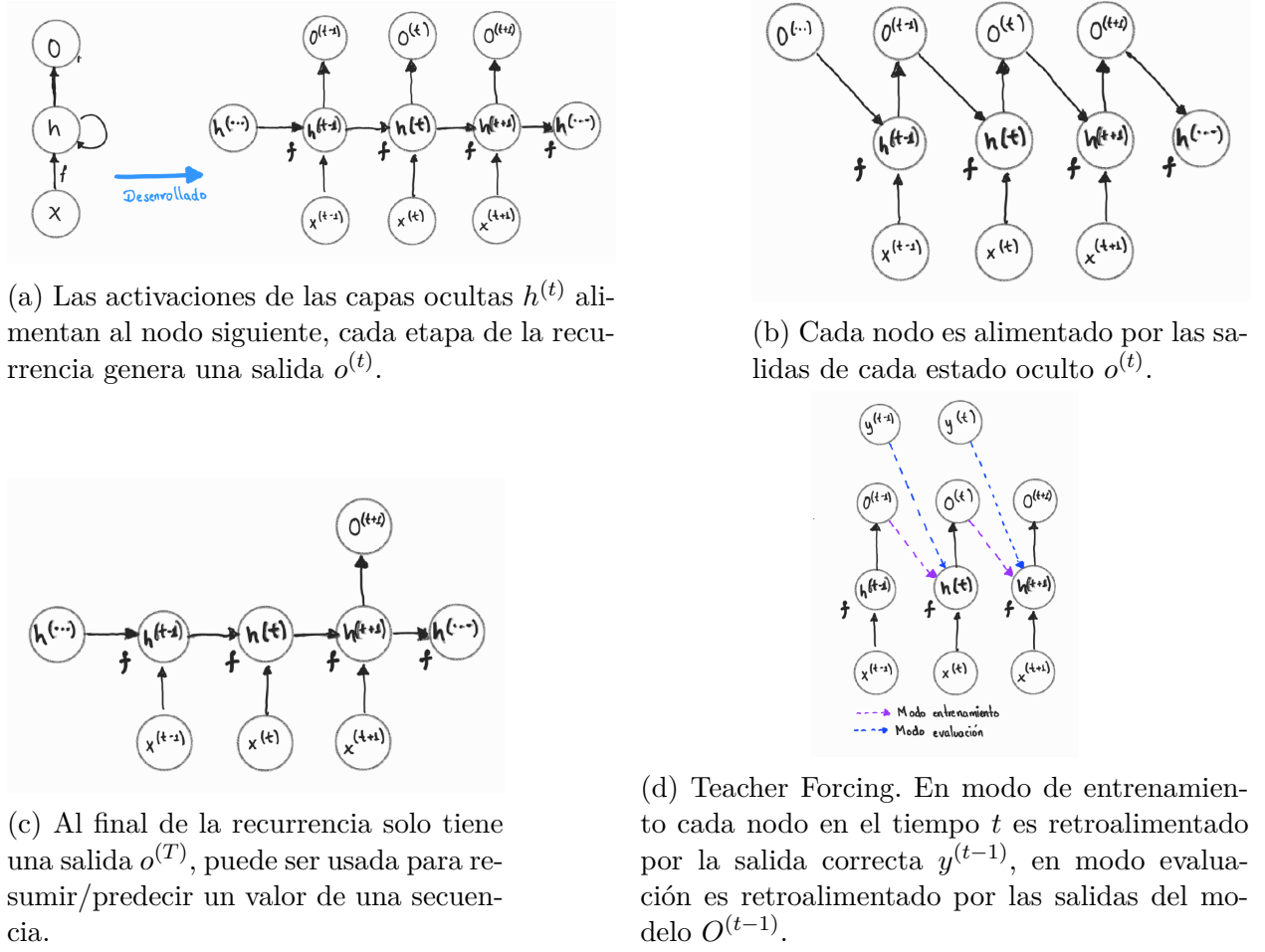


Figura 2.2: Distintos tipos de RNNs.

Finalmente, en la figura 2.3 la Red Neuronal Recurrente es modificada para esta vez no procesar una secuencia, sino que, procesa un solo vector en cada paso. El estado oculto previo $h^{(t-1)}$ retroalimenta al siguiente paso t así como la predicción esperada $y^{(t)}$ que también es usada para calcular la función de costo del paso anterior $L^{(t-1)}$. Esta estructura de red puede ser usada en tareas como Image Captioning, en donde la entrada es una imagen y la salida una secuencia de palabras que describen esta misma.

Si bien, los modelos ejemplificados anteriormente son construidos de forma *causal*, es decir, la secuencia es procesada en un solo sentido en donde la información pasada es transmitida hacia el estados futuros, no siempre este flujo de información es suficientemente para resolver ciertas tareas. Un *Modelo de Lenguaje* aprende la estructura estadística del lenguaje con el que fue entrenado y su meta es predecir la siguiente palabra, n-grama o letra dado un contexto antes visto. En otros términos, dada una secuencia de texto de longitud T $x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(T)}$ con $x \in \mathcal{R}^{1 \times d}$ donde d es la dimensión de la codificación de las palabras, la

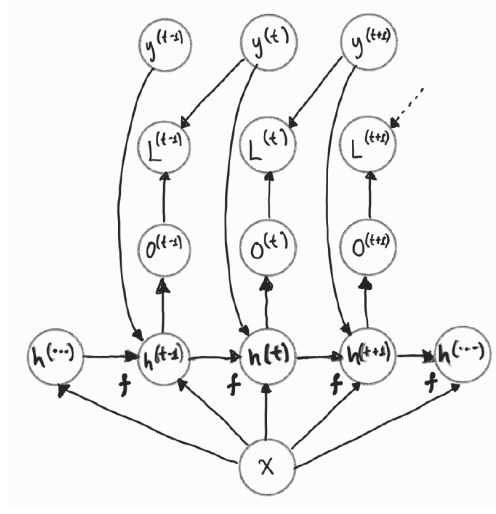


Figura 2.3: Modelo usado para tareas de *Image Captioning*, la entrada es una sola imagen y la red predice una secuencia de palabras que describen dicha imagen. La salida esperada $y^{(t)}$ sirve como objetivo para la función de costo del paso anterior y como entrada en cada paso.

meta es predecir la probabilidad conjunta de la secuencia:

$$P(x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(T)}) = \prod_{t=1}^T P(x^{(t)} | x^{(1)}, \dots, x^{(t-1)}) \quad (2.2)$$

Con ello, un modelo de lenguaje basado en *Redes Neuronales Recurrentes* es capaz de predecir un siguiente elemento $\hat{x}^{(t)}$ simplemente obteniéndolo de la secuencia mediante:

$$\hat{x}^{(t)} \approx P(x^{(t)} | x^{(1)}, \dots, x^{(t-1)}) \approx P(x^{(t)} | h^{(t-1)}) \quad (2.3)$$

donde $h^{(t-1)}$ es el estado oculto que almacena la información pasada hasta el tiempo t tal y como se definió en 2.1.

Sin embargo, la información previa de la secuencia codificada en $h^{(t)}$ no siempre contiene los elementos necesarios para que el modelo pueda predecir correctamente el siguiente elemento, observe la siguiente oración:

« Ella estaba muy _____, después de que Alejandra vió el amanecer en la playa »

En la oración anterior, el espacio en blanco puede ser completado con algún adjetivo calificativo; *contenta*, *enojada*, *maravillada*, etc. Gracias a la información provista por la parte final de la oración, podemos deducir que de las 3 opciones la menos probable de elegir

es *enojada*. Es decir, usamos información del futuro que no pudo haber sido vista por una red (que procesa la información en forma causal) para tomar la mejor elección. Una ligera modificación fácilmente aplicable a estos modelos es que las secuencias sean procesadas en ambas direcciones, a lo que llamamos **Redes Neuronales Recurrentes Bidireccionales** [21].

Así una *RNN Recurrente* procesa la secuencia en ambos sentidos (una *RNN* en un sentido y otra en el otro), capturando información del pasado en el estado oculto $\vec{h}^{(t)}$ cuando la recurrencia es del inicio al final de la secuencia e información del futuro en $\overleftarrow{h}^{(t)}$ cuando la recurrencia es del final al inicio de la secuencia. Finalmente, el estado oculto $h^{(t)}$ es una concatenación de ambos estados $\vec{h}^{(t)}$ y $\overleftarrow{h}^{(t)}$, vea la ecuación 2.4. Por lo cual, la salida $o^{(t)}$ ahora puede ser calculada con información tanto del futuro como del pasado 2.5.

$$\begin{aligned}\vec{h}^{(t)} &= f(x^{(t)}, \vec{h}^{(t-1)}; \theta_f) \\ \overleftarrow{h}^{(t)} &= f(x^{(t)}, \overleftarrow{h}^{(t+1)}; \theta_b) \\ h^{(t)} &= \text{Concat}(\vec{h}^{(t)}, \overleftarrow{h}^{(t)})\end{aligned}\tag{2.4}$$

$$o^{(t)} = g(h^{(t)}; \theta_{out})\tag{2.5}$$

2.1.2. Puertas LSTM y GRU

Hasta el momento, se ha hecho mención de las salidas $o^{(t)}$ y estados ocultos $h^{(t)}$ solo como el resultado de operaciones aplicadas por dos funciones; g y f respectivamente. Existen varias alternativas de construir una *RNN*, una de las maneras más comunes es usando 2.6 y 2.7:

$$h^{(t)} = \phi(x^{(t)}W_x + h^{(t-1)}W_h + b)\tag{2.6}$$

$$o^{(t)} = x^{(t)}W_{out} + b\tag{2.7}$$

Donde los parámetros compartidos de la red ahora son descritos por las matrices $W_x \in \mathbb{R}^{d \times k}$, $W_h \in \mathbb{R}^{k \times k}$ y $W_{out} \in \mathbb{R}^{k \times q}$ con k como la dimensión del estado oculto, q la dimensión de las salidas $o^{(t)}$, $b \in \mathbb{R}^{1 \times q}$ el parámetro de sesgo y ϕ es la función de activación. De esta manera, los pesos de los parámetros aprendidos en la matriz W_h determinan cómo será usada la información del pasado, codificada en $h^{(t-1)}$. Posteriormente es incluida a la codificación

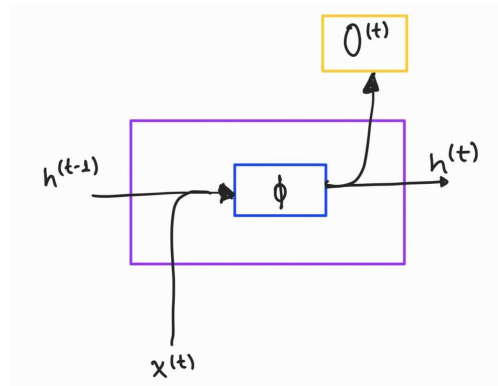


Figura 2.4: Computo del estado oculto y salida de una Red Neuronal Recurrente.

de la información del tiempo actual t calculada por W_x . La figura 2.4 representa gráficamente la lógica usada para calcular los estados ocultos y las salidas de la red.

Sin embargo el cálculo de los estados ocultos mediante 2.6 presenta algunos problemas. La interacción entre la información del pasado y la actual siempre es "plana", es decir, la información fluye a través del tiempo de la misma manera sin forma de dar prioridad o ignorar parte de esta. Por lo que resulta una tarea un poco más complicada preservar información relevante a en cada paso o desechar información que ya no es útil para la red. También, causado por este mismo flujo de los datos, la información del pasado poco a poco es opacada por nueva información, impidiendo que se puedan encontrar dependencias de información en secuencias largas en tiempos distantes; comúnmente se hace referencia a este problema como *The Short-term Memory Problem* en inglés [2]. Aunado a problemas como el *Desvanecimiento o Explosión del Gradiente* [12] [18], acentuándose aun más debido a las matrices de pesos compartidos en la recurrencia. Por ejemplo, podemos imaginar las multiplicaciones en la recurrencia como un problema simplificado en donde dicha matriz es multiplicada por si misma muchas veces (una similitud al método de potencia donde cualquier componente en la matriz inicial que no esté alineada con el vector propio asociado al mayor valor propio son eventualmente descartados [9, pp. 390-392]), así los resultados de este producto tendrán a ser cercanos a cero (desvanecerse) o explotar dependiendo de la magnitud de la matriz de pesos.

Una manera de solventar los problemas anteriores son las **Redes Neuronales con Compuertas**, creadas con la idea de crear conexiones a través del tiempo de tal manera de tener gradientes que no se desvanezcan o exploten, convirtiéndose además en un mecanismo para olvidar información pasada y decidiendo automáticamente cuándo y cuánto de la información debe prevalecer.

LSTM

Long Short-Term Memory, LSTM por sus siglas en inglés, fue propuesta en 1997 por *Hochreiter y Schmidhuber* [11], como un método de preservar dependencias de información relevante distantes a corto plazo. Las *LSTM* introducen un nuevo componente la *Celda de Memoria* cuya función es guardar información a través del tiempo y es controlada por distintas compuertas, las cuales aprenden a distinguir que información es relevante y cual no. Contiene tres compuertas, la *Compuerta de Entrada*, la *Compuerta de Olvido* y la *Compuerta de Salida*. La *Compuerta de Entrada* $I^{(t)}$ (véase la figura 2.5) determina cuanta información actual debe ser contemplada a través de la *Memoria Candidata* $\tilde{C}^{(t)}$ para actualizar la *Celda de Memoria* $C^{(t)}$. La *Compuerta de Olvido* indica qué información del pasado debe ser desechada de la *Celda de Memoria* $C^{(t-1)}$ y la *Compuerta de Salida* ayuda a determinar el nuevo estado $h^{(t)}$ via la *Celda de Memoria* actual $C^{(t)}$.

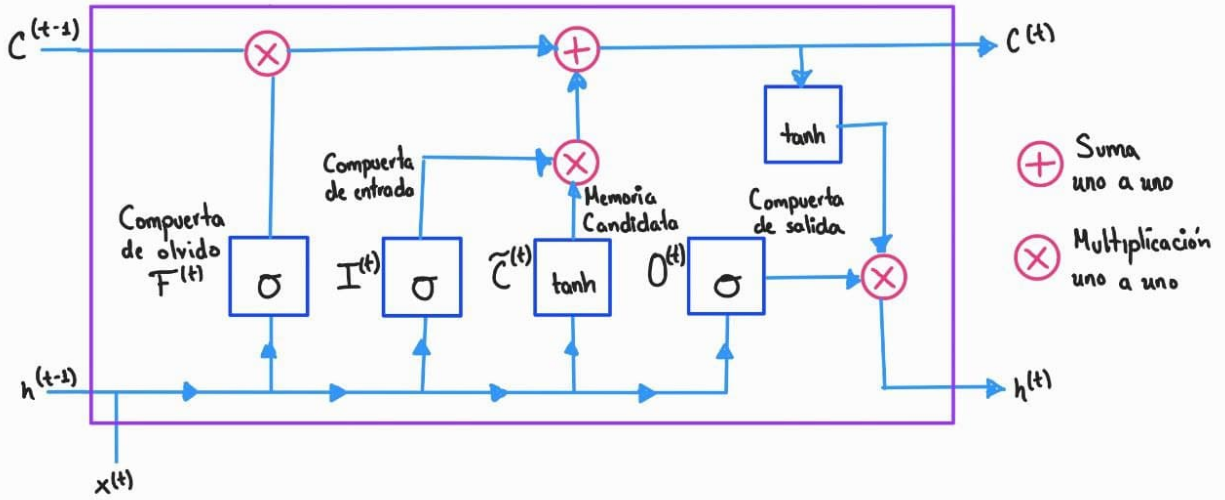


Figura 2.5: Descripción.

Las ecuaciones 2.8 rigen el comportamiento de Compuertas de Entrada, Salida y Olvido.

$$\begin{aligned}
 I^{(t)} &= \sigma(x^{(t)}W_{xi} + h^{(t-1)}W_{hi} + b_i) \\
 F^{(t)} &= \sigma(x^{(t)}W_{xf} + h^{(t-1)}W_{hf} + b_f) \\
 O^{(t)} &= \sigma(x^{(t)}W_{xo} + h^{(t-1)}W_{ho} + b_o)
 \end{aligned} \tag{2.8}$$

Donde $W_{xi}, W_{xf}, W_{xo} \in \mathbb{R}^{d \times k}$, $W_{hi}, W_{hf}, W_{ho} \in \mathbb{R}^{k \times k}$ y $b_i, b_f, b_o \in \mathbb{R}^{1 \times k}$

La Memoria Candidata y la Celda de memoria son actualizadas mediante:

$$\begin{aligned}\tilde{C}^{(t)} &= \tanh(x^{(t)}W_{xi} + h^{(t)}W_{hc} + b_c) \\ C^{(t)} &= F^{(t)} \odot C^{(t-1)} + I^{(t)} \odot \tilde{C}^{(t)}\end{aligned}\tag{2.9}$$

Donde $W_{xi} \in \mathbb{R}^{d \times k}$, $W_{hc} \in \mathbb{R}^{k \times k}$ y $b_c \in \mathbb{R}^{1 \times k}$

Y finalmente el estado oculto $h^{(t)}$ esta dado por:

$$h^{(t)} = O^{(t)} \odot \tanh(C^{(t)})\tag{2.10}$$

σ y \odot denotan la función de activación sigmoide y la multiplicación uno a uno respectivamente.

GRU

Gated Recurrent Units o **GRU** por sus siglas en inglés, fueron propuestas en 2014 [4] como una alternativa computacionalmente más rápida y con similar rendimiento que las *LSTM* [7]. A diferencia de anteriores, las *GRU* prescinden de la *Celda de Memoria* y utilizan un par de compuertas (la *Compuerta de Actualización* y la de *Olvido*) para decidir que información aún es necesario que esté codificada dentro del estado oculto 2.11. La *Compuerta de Olvido* permite decidir que del pasado aún debe ser transmitido a futuros estados o de otro modo ser desechada. La *Compuerta de Actualización* indica que información nueva es relevante y necesita ser incorporada al no estar codificada dentro del estado oculto 2.12.

$$\begin{aligned}R^{(t)} &= \sigma(x^{(t)}W_{xR} + h^{(t-1)}W_{hR} + b_R) \\ Z^{(t)} &= \sigma(x^{(t)}W_{xZ} + h^{(t-1)}W_{hZ} + b_Z)\end{aligned}\tag{2.11}$$

$$\begin{aligned}\tilde{h}^{(t)} &= \tanh(x^{(t)}W_{xh} + (R^{(t)} \odot h^{(t-1)})W_{hh} + b_h) \\ h^{(t)} &= Z^{(t)} \odot h^{(t-1)} + (1 - Z^{(t)}) \odot \tilde{h}^{(t-1)}\end{aligned}\tag{2.12}$$

2.1.3. Mecanismos de Atención

Una de las arquitecturas comunes vistas previamente es la 2.2c cuya información procesada es resumida en una sola salida. Este tipo de red es usada como parte de las soluciones a

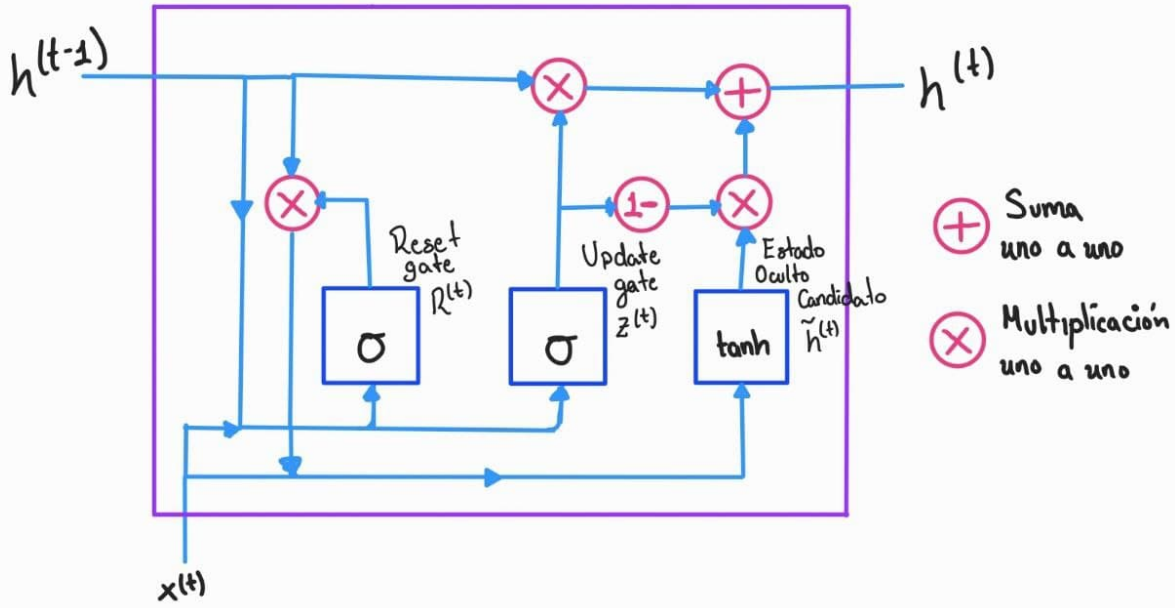


Figura 2.6: Descripción.

tareas de como reconocimiento de voz (*Speech Recognition*), traducción de lenguaje (*Machine Translation*) o asistencia en respuestas automáticas (*Question Answering*) típicamente bajo modelos Secuencia a Secuencia (*Sequence to Sequence, Seq2Seq*) [5]. Los modelos *Seq2Seq* están formados por dos redes neuronales como la mostrada en 2.7. La primera se comporta como *codificador* al resumir la entrada para producir un vector de salida de tamaño fijo llamado *vector de contexto*. La segunda red se comporta como un *decodificador*, este es inicializado y condicionado con el *vector de contexto* para obtener una transformación de la entrada no necesariamente del mismo tamaño de secuencia, ya sea por ejemplo, traducir una oración de español a inglés en donde la traducción no siempre contiene las misma cantidad de palabras usadas en el idioma original.

Por ejemplo, en tareas de *Machine Translation* el *codificador* esta formado por una *RNN* Bidireccional que lee y procesa un conjunto de vectores $X = (x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(T_x)})$ para obtener un vector de contexto C . La forma más común es como en 2.13:

$$\begin{aligned} h^{(t)} &= f_{bi}(x^{(t)}, h^{(t-1)}; \theta_f, \theta_b) \\ C &= q(h^{(1)}, h^{(2)}, \dots, h^{(T)}) \end{aligned} \quad (2.13)$$

Recordemos que $h^{(t)}$ es el estado oculto generado por la concatenación de los dos estados ocultos generados por la *RNN Bidireccional*, f_{bi} y q son funciones no lineales, ya sea, una *LSTM* para f_{bi} y $q(h^{(1)}, h^{(2)}, \dots, h^{(T)}) = h^{(T)}$, equivalente a tomar solo el ultimo estado

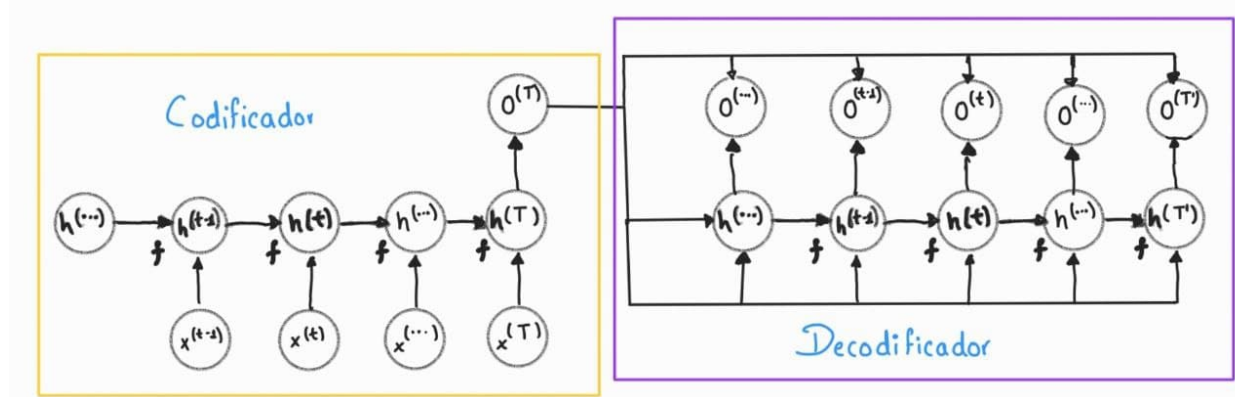


Figura 2.7: Descripción.

oculto como vector de contexto C . El *decodificador* es entrenado para predecir la siguiente palabra $y^{(t)}$ dado el vector de contexto C y todas las palabras previas predichas. En otras palabras, el decodificador define la probabilidad conjunta modelada por una *RNN*:

$$p(Y) = \prod_{t=1}^{T_y} p(y^{(t)} | \{y^{(1)}, \dots, y^{(t-1)}\}, C) \quad (2.14)$$

$$p(y^{(t)} | \{y^{(1)}, \dots, y^{(t-1)}\}, C) = g(y^{(t-1)}, s^{(t)}, C; \theta_g) \quad (2.15)$$

donde g es una función no lineal que emite la probabilidad de $y^{(t)}$ y $s^{(t)}$ es el estado oculto del *decodificador* 2.16.

$$s^{(t)} = f(s^{(t-1)}, y^{(t-1)}, C; \theta_s) \quad (2.16)$$

Sin embargo, cuando las secuencias son bastante largas el *vector de contexto* emitido por el *codificador* no es lo suficientemente grande como para resumir correctamente la secuencia y por tanto, la información inicial de la entrada es olvidada, por lo que su presencia es escasa en estados ocultos más lejanos. Así, en 2015 Bahdanau et al. observaron estos efectos y propusieron una forma de minimizarlos, surgiendo los **Mecanismos de Atención**.

La idea principal para mitigar estos problemas es permitir que el *decodificador* pueda acceder a la historia de los estados ocultos del *codificador*, así, el *decodificador* ahora contará con un mecanismo para selectivamente centrarse en partes distintas de la secuencia que tienen mayor influencia sobre la salida esperada a cierto tiempo.

Por tanto, las palabras predichas no son calculadas por un único *vector de contexto* generado por el *codificador*, sino que para cada objetivo $y^{(t)}$ se calcula un *vector de contexto* $c^{(t)}$:

$$p(y^{(t)}|\{y^{(1)}, \dots, y^{(t-1)}\}, c^{(t)}) = g(y^{(t-1)}, s^{(t)}, c^{(t)}; \theta_g) \quad (2.17)$$

$$s^{(t)} = f(s^{(t)}, y^{(t-1)}, c^{(t)}; \theta_s) \quad (2.18)$$

Dado que cada estado oculto $h^{(t)}$ contiene mucho mejor la información que se encuentran alrededor del t -ésimo término, se puede generar cada vector de contexto como una suma pesada de sobre los estados ocultos del *codificador*. Estos pesos nos ayudan a determinar que tan importante es la información codificada por cada estado oculto y al momento de obtener la salida del t -ésimo valor “prestar atención” a aquellos que son más relevantes para obtener la predicción:

$$c^{(t)} = \sum_{i=1}^{T_x} \alpha_{t,i} h^{(i)} \quad (2.19)$$

cada peso $\alpha_{t,i}$ indica que tan bien se “alinean” los términos $y^{(t)}$ y $x^{(i)}$, y son calculados por una *función de alineamiento* que denota que tan importante es el estado oculto del *codificador* $h^{(t)}$ para el estado oculto del decodificador $s^{(i)}$.

$$\alpha_{t,i} = \text{align}(y^{(t)}, x^{(i)}) = \frac{\exp(\text{score}(s^{(t-1)}, h^{(i)}))}{\sum_{k=1}^{T_x} \exp(\text{score}(s^{(t-1)}, h^{(k)}))} \quad (2.20)$$

Bahdanau propone aprender esta alineación usando una *Red feed-forward* con una sola capa oculta y la función \tanh como activación:

$$\text{score}(s^{(t)}, h^{(i)}) = v_a^\top \tanh(W_a[s^{(t)}; h^{(i)}]) \quad (2.21)$$

con v_a y W_a como matrices de pesos a aprender durante el entrenamiento, $[s^{(t)}; h^{(i)}]$ representa una concatenación de los estados ocultos del *codificador* y decodificador. En la figura 2.8 podemos ver gráficamente el modelo usado por *Bahdanau*.

Los modelos de atención pueden ser vistos de manera más general como un mapeo de una secuencia de llaves k hacia una distribución de atención α de acuerdo a una consulta q aplicándose a un conjunto de valores V . Si bien, los términos de consulta, llaves y valores (query, keys, values) son en ámbitos de los *Sistemas de Recuperación de Información* su relación en términos de la atención aplicada por Bahdanau es muy similar; las llaves son los estados ocultos del *codificador* y la consulta es el estado oculto del decodificador en cuestión, en este caso el mapeo de entre llaves y valores es la misma:

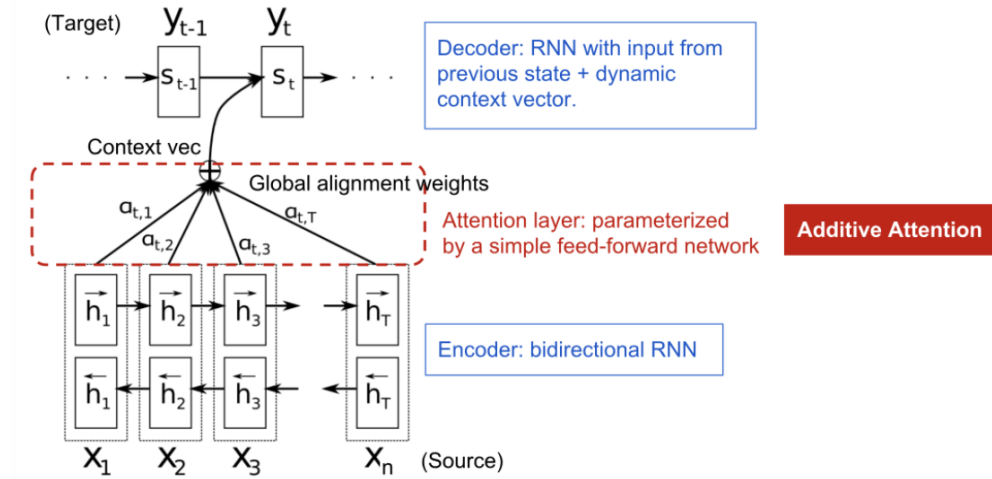


Figura 2.8: Modelo seq2seq propuesto por Bahdanau et al. con *Additive/Concat Attention*

$$A(q, K, V) = \sum_i p(a(K - i, q)) * v_i \quad (2.22)$$

En la ecuación 2.22, p es una función de distribución que mapea los puntajes de la función de alineación a a pesos de atención. Comúnmente se usan las funciones *softmax* o *logistic sigmoid* puesto que nos aseguran que los pesos de atención producidos estarán dentro del rango $[0, 1]$ y la suma de ellos es igual a 1, así, los pesos pueden ser interpretados como una probabilidad que indica que tan relevante es cierto elemento. Algunas variaciones en donde se consideran solo los términos relevantes como *sparsemax* Martins and Astudillo o *sparse ent-max* Martins et al. permiten trabajar y enfocarse en solo algunas relaciones de alineamiento. Tay et al. proponen una función de distribución de pesos $M = \tanh(E) \odot \text{sigmoid}(N)$ con E como una matrix en donde cada entrada representa la similaridad entre estados ocultos y N una medida negativa (disimilaridad), por lo que podemos usar $\text{sigmoid}(N)$ como información para “de-atender” los alineamientos de E .

Las funciones de alineamiento se encargan de comparar y extraer la relación entre las representaciones de las llaves (keys) y consultas (queries), por ejemplo usando el producto punto y el coseno como función de similaridad. Bahdanau calcula esta relación a través de una red neuronal 2.20, lo que evita asumir que ambas representaciones están en el mismo espacio, como lo hace por ejemplo el producto punto o la similaridad coseno como funciones de alineación. La tabla 2.1 muestra una recopilación de funciones de alineamiento.

De acuerdo a como es aplicada los distintos tipos de atención Chaudhari et al. divide estos en 4 grandes grupos; por número de secuencias, por nivel de abstracción, por número de posiciones y por número de representaciones, estos grupos no son mutuamente excluyentes por tanto una aplicación de atención puede pertenecer a más de una.

Nombre	Función de Alineación	Cita
Similarity / Content-Base	$a(k_i, q) = \text{sim}(k_i, q)$	Graves et al.
Dot Product ¹	$a(k_i, q) = q^\top k_i$	Luong et al.
Scaled Dot Product	$a(k_i, q) = \frac{q^\top k_i}{\sqrt{d_k}}$	Vaswani et al.
General	$a(k_i, q) = q^\top W k_i$	Luong et al.
Biased General	$a(k_i, q) = k_i(W q + b)$	Sordoni et al.
Activated General	$a(k_i, q) = \text{act}(q^\top W k_i + b)$	Ma et al.
Generalized Kernel	$a(k_i, q) = \phi(q)^\top \phi(k_i)$	Choromanski et al.
Additive\Concat ²	$a(k_i, q) = v^\top \text{act}(W[q; k_i] + b)$	Bahdanau et al., Luong et al.
Deep	$a(k_i, q) = v^\top E^{(L-1)} + b^L$ $E(l) = \text{act}(W_l E^{(l-1)} + b^l)$ $E(1) = \text{act}(W_0 k_i + W_1 q + b^l)$	Pavlopoulos et al.
Location-based	$a(k_i, q) = \text{act}(W q)$	Luong et al.
Feature-based	$a(k_i, q) = v^\top \text{act}(W_0 \phi(K) + W_1 \phi(K) + b)$	Li et al.

Cuadro 2.1: Distintos tipos de funciones de alineación. (Tabla basada en [3] [26]).

$a(k_i, q)$ representa la función de alineación entre k_i y q y act es una función de activación. sim es una función de similaridad, Graves, Wayne, and Danihelka propone la función coseno. Los parámetros v, W, W_1, W_2 son parámetros aprendidos por la red neuronal.

¹ El factor de escala $\frac{1}{\sqrt{d_k}}$ ayuda a estabilizar cuando el gradiente es muy pequeño. d_k es el tamaño de la cabeza de atención.

² La función de activación propuesta por Bahdanau et al. es la función \tanh como se ve en 2.21

En la categoría *por número de secuencias* se identifican 3 tipos, el primero de ellos, **Distintivos** (*Distinctive*) es cuando la clave (key) y valor (value) pertenecen a distintas secuencias de entrada y salida respectivamente, como es el caso del modelo propuesto por Bahdanau, Cho, and Bengio. El segundo tipo, **Co-Atención** (*co-attention*) utiliza distintos secuencias al mismo tiempo para conocer los pesos de atención entre estas entradas. Por

ejemplo, en tareas en donde se necesita trabajar con datos multi-modales como procesar imágenes y texto simultáneamente. En tareas de *Visual Question Answering* se puede aplicar un mecanismo de atención conjunto tanto para las imágenes y el texto para identificar las regiones de la imagen y los palabras del texto que son más relevantes para resolver la tarea. El tercer tipo es **auto-atención** (*Self Attention*), fue propuesto por Yang et al. y es uno de los puntos claves para los modelos *Transformers* [24]. Es comúnmente usada en tareas que solo requieren una salida resumen y no una secuencia como *Clasificación de texto*. La clave (key) y valor (value) pasan a ser las mismas y la atención pasa a ser calculada sobre los mismos elementos pertenecientes a la secuencia de entrada, buscando así, encontrar las relaciones entre las palabras de la misma oración.

La segunda Categoría agrupa la atención por el nivel de abstracción en la que es aplicada, a un **solo nivel** o en **múltiples niveles**. La información a procesar muchas veces puede ser representada en distintos niveles de abstracción, es decir, en texto, podemos separar los datos a nivel de letras, n-gramas, palabras, oraciones, párrafos, etc., por tanto, es posible prestar atención de manera jerárquica a las palabras que forman una oración para posteriormente prestar atención a las oraciones que conformar un texto más largo. Yang et al. utiliza este procedimiento para generar un vector de características usado posteriormente en un etapa de clasificación.

En la tercer categoría la atención es realizada en diversas partes de la secuencia; la suma pesada sobre todos los puntajes de las entradas usada por Bahdanau et al. se le denomina **Atención suave** (*Soft-Attention*). Una alternativa es la **Atención dura** (*Hard-Attention*) [27] que calcula la atención no sobre todas los puntajes de alineamiento sino en una parte de ellos, para ello se usa una distribución multinoulli parametrizada por los pesos de la atención. A pesar de que es más eficiente que la *atención suave* resulta difícil de entrenar al no ser completamente diferenciable. Otra opción a la *atención dura* es la **Atención Local** (*Local Attention*) cuya idea es aplicar atención sobre una ventana elegida ya sea centrada con respecto a la tiempo actual (alineamiento monótonico) o predicha por una función (alineamiento predictivo). La *atención local* fue propuesta por Luong et al. así como la *Atención Global* que es similar a la *atención suave*.

La última categoría divide los modelos de atención por las formas de representación de las entradas sobre las que la atención es aplicada. Distintos modelos pueden beneficiarse de procesar los datos creando vectores de características distintos, cada uno de ellos deriva de algún tipo de representación de la entrada. Así, es posible prestar atención sobre las diferentes representaciones y formar una final usando una combinación pesada de estos a través de dichos pesos de atención. Chaudhari et al. llama a este tipo de modelos de atención como **multi-representational AM**. La segunda categoría que describen es **multi-dimensional attention** donde la atención no es aplicada sobre los diversas vectores de características sino a un nivel más interno, sobre sus dimensiones. Pesando cada característica de un vector de características permite seleccionar aquellas que mejor lo describen para un contexto dado. EN *NLP*, resulta bastante útil cuando se trata con *polisemia*, en donde una palabra o frase

puede tener más de un significado.

2.2. El modelo Transformer

A finales del año 2017 se presentó un nuevo modelo que vino a revolucionar el área de Procesamiento de Lenguaje Natural, El Transformer [25]. Una de sus principales características es la capacidad de procesar la información de alguna secuencia de forma paralela, caso contrario a las Redes Neuronales Recurrentes, donde la información se procesa recurrentemente. Gracias a ello, la capacidad de *recuerdo* no se ve afectado por el problema de *El desvanecimiento del Gradiente* específicamente cuando el problema es trabajar con secuencias bastante largas.

El *Transformer* puede ser visto como otro modelo *seq2seq* (Secuencia a Secuencia) 2.9, formado en por dos etapas, la primera encargada de codificar la información de entrada y la segunda de decodificarla, pero la su principal característica es que aplica el mecanismos de *Self-Attention* para capturar las dependencias globales entre la entrada y la salida. Dada una secuencia de entrada $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ con n como el tamaño de la secuencia, el codificador produce una representación intermedia $Z = (z_1, z_2, \dots, z_n)$ al igual que los modelos *seq2seq*. El decodificador usa la secuencia Z para generar la secuencia de salida $Y = (y_1, y_2, \dots, y_m)$ uno a la vez (en modo inferencia), con m como el tamaño de la secuencia de salida. Nótese, que el generar una salida a la vez el decodificador tiene que ser auto-regresivo. Usa la salida anterior y_{i-1} como entrada adicional para generar la siguiente salida y_i . Por ello, durante entrenamiento el modelo es alimentado con entradas y salidas desfasadas en un tiempo.

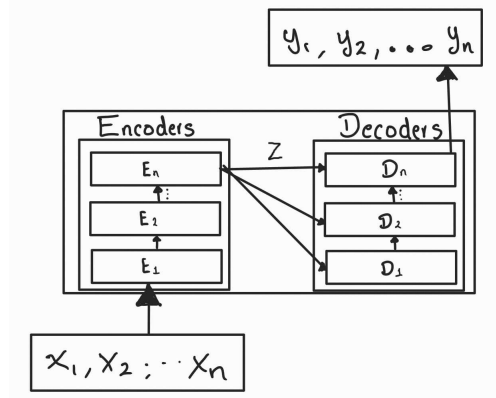
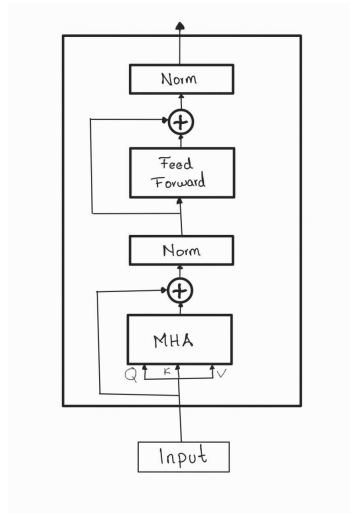


Figura 2.9: Modelo Transformer generalizado como modelo Secuencia a Secuencia

Poner ejemplo de Transformer en con la figura de arriba en tiempo de entrenamiento e inferencia aquí.

2.2.1. El Codificador y Decodificador

El *Modelo Transformer* está formado por multiples codificadores y decodificadores apilados e inter-conectados, Como observamos en la figura 2.9. El codificador consta de dos partes, la primera de ellas aplica *Self-Attention* múltiples veces sobre la misma entrada (*Multi-HeadSelf Attention*) y la segunda capa representada solo por una red *Feed-Forward* cuya entrada es la salida de la capa anterior. Véase la figura 2.10.



$$\begin{aligned}
 mha &= MHA(X, X, X) \\
 norm &= Norm(mha + X) \\
 f &= FeedForward(norm) \\
 Encoder(X) &= Norm(f + norm)
 \end{aligned}$$

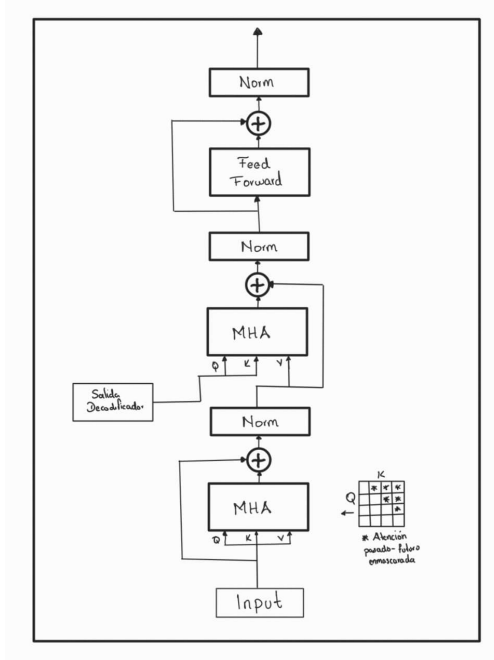
Figura 2.10: Etapa Codificadora del Modelo Transformer. Pseudocódigo

El decodificador tiene una estructura similar al codificador con una etapa adicional intermedia de *Multi-Head Attention* aplicada sobre la salida de la pila de codificadores. También, la primer capa de atención sufre un ligero cambio en su forma de operación, necesitando enmáscarar (al momento en que se realiza el entrenamiento) la atención prestada del pasado al futuro. Esto es debido a que el decodificador se encarga de generar una secuencia (en modo inferencia) uno a la vez usando solamente la salida anterior y por tanto no tiene conocimiento de salidas futuras, observe la figura 2.12.

2.2.2. Multi-Head Self-Attention

En la sección 2.1.3 se detalla una generalización de la atención y diversas variantes usadas a lo largo de la literatura. El modelo original que introdujo a los Transformers usa en especial la variante *Scaled Dot-Product Attention*[25]:

$$Attention(q, k, v) = softmax\left(\frac{qk^T}{\sqrt{d_k}}\right)v \quad (2.23)$$



$$\begin{aligned}
 mha_1 &= MHA(X, X, X) \\
 norm_1 &= Norm(mha_1 + X) \\
 mha_2 &= MHA(enc_{out}, enc_{out}, norm_1) \\
 norm_2 &= Norm(mha_2 + X) \\
 f &= FeedForward(norm_2) \\
 decoder(X) &= Norm(f + norm_2)
 \end{aligned}$$

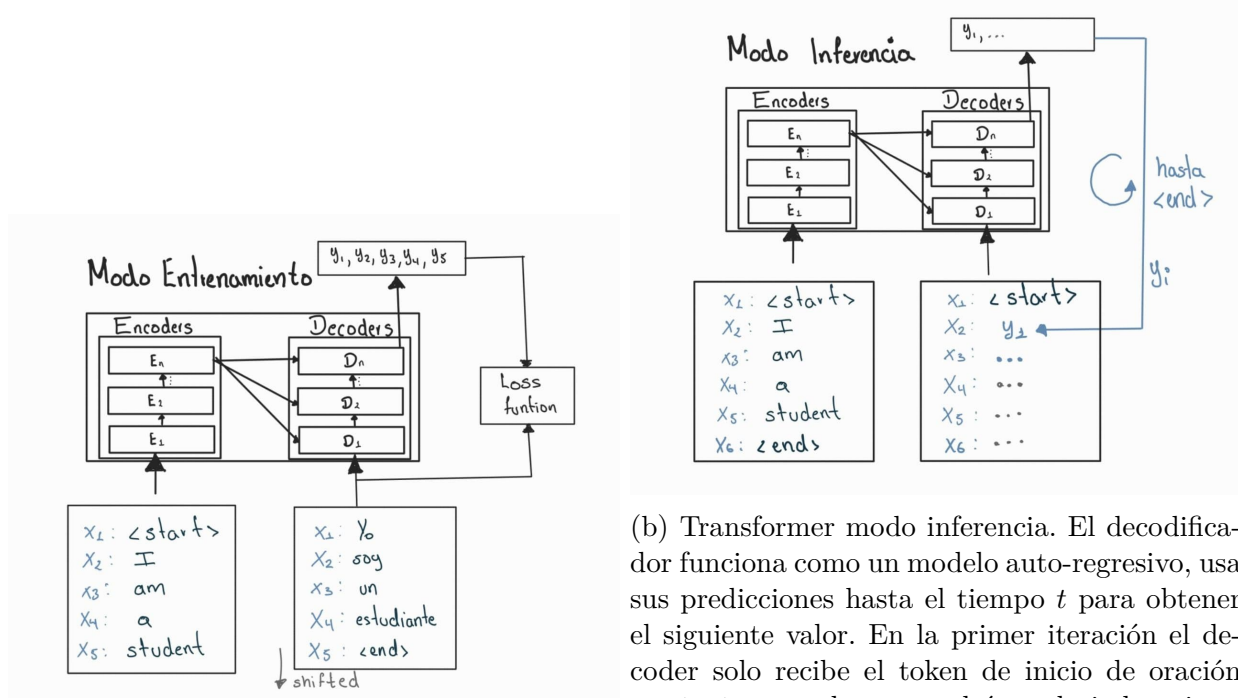
Figura 2.11: Etapa Decodificadora del Modelo Transformer. Pseudocódigo

El Transformer está basado en la idea de de aplicar atención multiples veces, al usar varias cabezas de atención, Multihead-Self-Attention (MHA), permite al modelo conjuntamente atender a información en distintas posiciones desde h diferentes subespacios de representación. 2.24

$$mha(Q, K, V) = Concat(head_1, head_2, head_3, \dots, head_h)W^O \quad (2.24)$$

Todas las cabezas de atención son concatenadas y resumidas para ser devueltas a las dimensiones del espacio de entrada original, principalmente para mantener consistencia en las dimensiones de usadas en cada etapa de codificación y decodificación del modelo a través de $W^O \in \mathbb{R}^{hd_v \times d_m}$. W^O es entrenado conjuntamente para aprender a resumir la información capturada por cada cabeza de atención. $Q, K \in \mathbb{R}^{n \times d_m}$ y $V \in \mathbb{R}^{n \times d_v}$ es la representación consulta, clave y valor de los embeddings de entrada de cada capa de atención del codificador y decodificador como se observa en las figuras 2.10 2.11. n es el tamaño de la secuencia, d_m y d_v son los tamaño del embedding y h el número de cabezas de atención.

En el caso del modelo transformer tenemos un conjunto embeddings sobre las cuales se aplica atención, si bien no representan necesariamente las consultas, llaves, y valores utilizados para la attention generalizada, podemos obtener estas representaciones transportando a sus espacios respectivos a través de alguna transformación aprendida conjuntamente con el entrenamiento del modelo.



(a) Transformer modo entrenamiento. Las entradas en el decodificador son recorridas un elemento en el futuro, con el fin de que aprende a predecir la siguiente palabra dado un contexto previo agregado como entrada al decodificador. El decodificador termina su predicción en el momento que el token $\langle \text{end} \rangle$ es obtenido.

Figura 2.12: Esquema de entrenamiento e inferencia del modelo Transformer en un problema de Machine Translation.

Por tanto, para el conjunto de Embeddings $E_Q \in \mathbb{R}^{n \times d_m}$, $E_K \in \mathbb{R}^{n \times d_m}$ y $E_V \in \mathbb{R}^{n \times d_v}$ donde n es el número embeddings, d_m y d_v son las dimensiones de cada uno, la atención en cada cabeza i se calcula como:

$$\begin{aligned} Q_i &= E_Q W_i^Q \\ K_i &= E_K W_i^K \\ V_i &= E_V W_i^K \end{aligned} \quad (2.25)$$

$$\text{head}_i = \text{Attention}(Q_i, K_i, V_i) = \text{softmax}\left(\frac{Q_i K_i^T}{\sqrt{d_k}}\right) V_i \quad (2.26)$$

donde $W_i^Q, W_i^K \in \mathbb{R}^{d_m \times d_k}$, $W_i^V \in \mathbb{R}^{d_m \times d_v}$ y $d_k = d_v = d_m/h$.

el término de escalamiento $\sqrt{d_k}$ ayuda a evitar que la magnitud de los productos puntos calculados entre cada consulta y llave crezcan demasiado, y que la función *softmax* pueda ser más estable al evitar regiones donde los gradientes son muy pequeños[25].

2.2.3. Información Posicional

En los modelos basados en *Redes Recurrentes* la información se procesan uno a uno en cada paso de tiempo. Los modelos basados en *Transformers* procesan la información en conjunto, perdiendo la noción de la temporalidad de los datos. Una solución es agregar dicha información perdida a través de vectores que codifiquen el tiempo/posición de los datos sumándolos con los vectores de embeddings. Estos vectores llamados *Positional Encodings* [8] siguen un patrón en específico que el modelo aprende a identificar y lo ayuda a determinar la posición de cada elemento de la secuencia y por tanto calcular a qué distancia se encuentra cada uno de los demás.

Por lo regular se usa una onda senoidal y cosenoidal para lugares pares e impares, formando una progresión geométrica desde 2π hasta $10000 \cdot 2\pi$ 2.27:

$$\begin{aligned} PE(pos, 2i) &= \sin(pos/10000^{2i/d_m}) \\ PE(pos, 2i + 1) &= \cos(pos/10000^{2i/d_m}) \end{aligned} \quad (2.27)$$

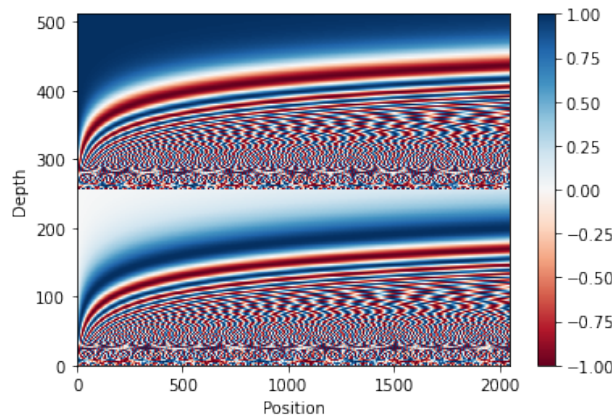
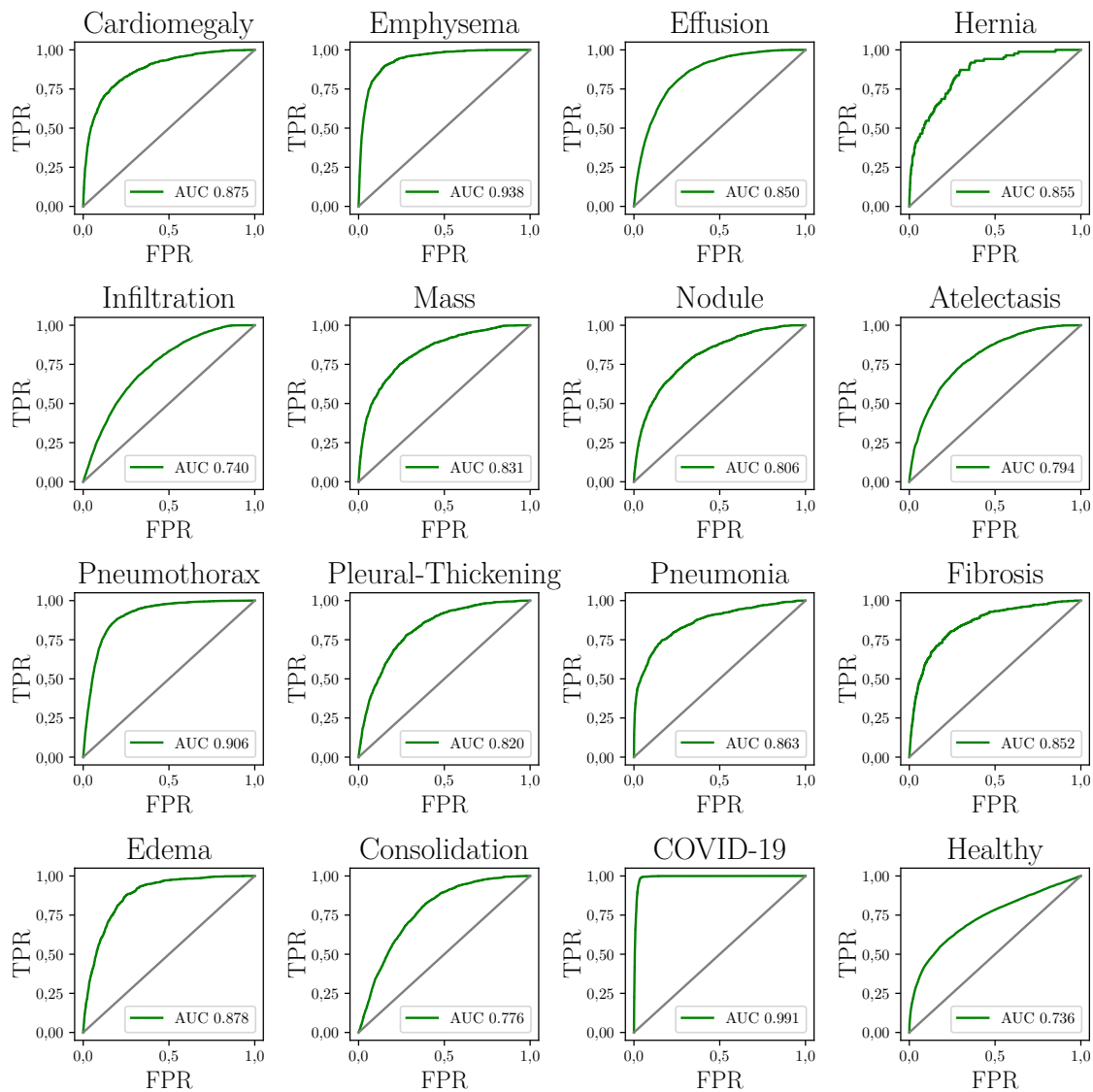


Figura 2.13: 2000 Vectores de Positional Encoding con dimensiones de embedding=500.

Poner una figura completa de todo el esquema del Transformer

2.2.4. Problemas típicos en el entrenamiento de Transformers



Apéndice A

An appendix

Appendices are a good idea for almost any thesis. Your main thesis body will likely contain perhaps 40-60 pages of text and figures. You may well write a larger document than this, but chances are that some of the information contained therein, while important, does *not* merit a place in the main body of the document. This sort of content - peripheral clarifying details, computer code, information of use to future students but not critical to understanding your work ... - should be allocated to one or several appendices.

A.1. About the bibliography

What follows this is the bibliography. This has its own separate environment and syntax; check out the comments in the .tex files for details. Worth nothing, though, is that you may find it helpful to use automated bibliography management tools. BibTeX will automatically generate a bibliography from you if you create a database of references. Other software - for example JabRef on a pc - can be used to make managing the reference database easy. Regardless, once you've created a .bib file you can cite it in the body of your thesis using the `\cite` tag. For example, one might wish to cite a reference by Bermudez [?]. If you use BibTeX, you can put the relevant information into a referencedatabase (called bibliography.bib here), and then BibTeX will compile the references into a .bbl file ordered appropriately for your thesis based on when the citations appear in the main document.

Bibliografía

- [1] Dzmitry Bahdanau, Kyunghyun Cho, and Yoshua Bengio. Neural machine translation by jointly learning to align and translate, 2016.
- [2] Y. Bengio, P. Simard, and P. Frasconi. Learning long-term dependencies with gradient descent is difficult. *IEEE Transactions on Neural Networks*, 5(2):157–166, 1994. doi: 10.1109/72.279181.
- [3] Sneha Chaudhari, Gungor Polatkan, Rohan Ramanath, and Varun Mithal. An attentive survey of attention models. *CoRR*, abs/1904.02874, 2019. URL <http://arxiv.org/abs/1904.02874>.
- [4] KyungHyun Cho, Bart van Merriënboer, Dzmitry Bahdanau, and Yoshua Bengio. On the properties of neural machine translation: Encoder-decoder approaches. *CoRR*, abs/1409.1259, 2014. URL <http://arxiv.org/abs/1409.1259>.
- [5] Kyunghyun Cho, Bart van Merriënboer, Çağlar Gülçehre, Fethi Bougares, Holger Schwenk, and Yoshua Bengio. Learning phrase representations using RNN encoder-decoder for statistical machine translation. *CoRR*, abs/1406.1078, 2014. URL <http://arxiv.org/abs/1406.1078>.
- [6] Krzysztof Choromanski, Valerii Likhoshesterov, David Dohan, Xingyou Song, Andreea Gane, Tamás Sarlós, Peter Hawkins, Jared Davis, Afroz Mohiuddin, Lukasz Kaiser, David Belanger, Lucy J. Colwell, and Adrian Weller. Rethinking attention with performers. *CoRR*, abs/2009.14794, 2020. URL <https://arxiv.org/abs/2009.14794>.
- [7] Junyoung Chung, Çağlar Gülçehre, KyungHyun Cho, and Yoshua Bengio. Empirical evaluation of gated recurrent neural networks on sequence modeling. *CoRR*, abs/1412.3555, 2014. URL <http://arxiv.org/abs/1412.3555>.
- [8] Jonas Gehring, Michael Auli, David Grangier, Denis Yarats, and Yann N. Dauphin. Convolutional sequence to sequence learning. *CoRR*, abs/1705.03122, 2017. URL <http://arxiv.org/abs/1705.03122>.
- [9] Ian J. Goodfellow, Yoshua Bengio, and Aaron Courville. *Deep Learning*. MIT Press, Cambridge, MA, 2017. <http://www.deeplearningbook.org>.

- [10] Alex Graves, Greg Wayne, and Ivo Danihelka. Neural turing machines. *CoRR*, abs/1410.5401, 2014. URL <http://arxiv.org/abs/1410.5401>.
- [11] Sepp Hochreiter and Jürgen Schmidhuber. Long Short-Term Memory. *Neural Computation*, 9(8):1735–1780, 11 1997. ISSN 0899-7667. doi: 10.1162/neco.1997.9.8.1735. URL <https://doi.org/10.1162/neco.1997.9.8.1735>.
- [12] John F. Kolen and Stefan C. Kremer. *Gradient Flow in Recurrent Nets: The Difficulty of Learning LongTerm Dependencies*, pages 237–243. 2001. doi: 10.1109/9780470544037.ch14.
- [13] Yang Li, Lukasz Kaiser, Samy Bengio, and Si Si. Area attention. *CoRR*, abs/1810.10126, 2018. URL <http://arxiv.org/abs/1810.10126>.
- [14] Minh-Thang Luong, Hieu Pham, and Christopher D. Manning. Effective approaches to attention-based neural machine translation. *CoRR*, abs/1508.04025, 2015. URL <http://arxiv.org/abs/1508.04025>.
- [15] Dehong Ma, Sujian Li, Xiaodong Zhang, and Houfeng Wang. Interactive attention networks for aspect-level sentiment classification. *CoRR*, abs/1709.00893, 2017. URL <http://arxiv.org/abs/1709.00893>.
- [16] André F. T. Martins and Ramón Fernandez Astudillo. From softmax to sparsemax: A sparse model of attention and multi-label classification. *CoRR*, abs/1602.02068, 2016. URL <http://arxiv.org/abs/1602.02068>.
- [17] André F. T. Martins, Marcos V. Treviso, António Farinhas, Vlad Niculae, Mário A. T. Figueiredo, and Pedro M. Q. Aguiar. Sparse and continuous attention mechanisms. *CoRR*, abs/2006.07214, 2020. URL <https://arxiv.org/abs/2006.07214>.
- [18] Razvan Pascanu, Tomas Mikolov, and Yoshua Bengio. On the difficulty of training recurrent neural networks. In Sanjoy Dasgupta and David McAllester, editors, *Proceedings of the 30th International Conference on Machine Learning*, volume 28(3) of *Proceedings of Machine Learning Research*, pages 1310–1318, Atlanta, Georgia, USA, 17–19 Jun 2013.
- [19] John Pavlopoulos, Prodromos Malakasiotis, and Ion Androutsopoulos. Deeper attention to abusive user content moderation. pages 1125–1135, 01 2017. doi: 10.18653/v1/D17-1117.
- [20] David E. Rumelhart, Geoffrey E. Hinton, and Ronald J. Williams. Learning representations by back-propagating errors. *Nature*, 323(6088):533–536, Oct 1986. ISSN 1476-4687. doi: 10.1038/323533a0. URL <https://doi.org/10.1038/323533a0>.
- [21] M. Schuster and K.K. Paliwal. Bidirectional recurrent neural networks. *IEEE Transactions on Signal Processing*, 45(11):2673–2681, 1997. doi: 10.1109/78.650093.

- [22] Alessandro Sordoni, Philip Bachman, and Yoshua Bengio. Iterative alternating neural attention for machine reading. *CoRR*, abs/1606.02245, 2016. URL <http://arxiv.org/abs/1606.02245>.
- [23] Yi Tay, Anh Tuan Luu, Aston Zhang, Shuohang Wang, and Siu Cheung Hui. Compositional de-attention networks. In H. Wallach, H. Larochelle, A. Beygelzimer, F. d'Alché-Buc, E. Fox, and R. Garnett, editors, *Advances in Neural Information Processing Systems*, volume 32. Curran Associates, Inc., 2019. URL <https://proceedings.neurips.cc/paper/2019/file/16fc18d787294ad5171100e33d05d4e2-Paper.pdf>.
- [24] Ashish Vaswani, Noam Shazeer, Niki Parmar, Jakob Uszkoreit, Llion Jones, Aidan N. Gomez, Lukasz Kaiser, and Illia Polosukhin. Attention is all you need. *CoRR*, abs/1706.03762, 2017. URL <http://arxiv.org/abs/1706.03762>.
- [25] Ashish Vaswani, Noam Shazeer, Niki Parmar, Jakob Uszkoreit, Llion Jones, Aidan N. Gomez, Lukasz Kaiser, and Illia Polosukhin. Attention is all you need. *CoRR*, abs/1706.03762, 2017. URL <http://arxiv.org/abs/1706.03762>.
- [26] Lilian Weng. Attention? attention! *lilianweng.github.io/lil-log*, 2018. URL <http://lilianweng.github.io/lil-log/2018/06/24/attention-attention.html>.
- [27] Kelvin Xu, Jimmy Ba, Ryan Kiros, Kyunghyun Cho, Aaron C. Courville, Ruslan Salakhutdinov, Richard S. Zemel, and Yoshua Bengio. Show, attend and tell: Neural image caption generation with visual attention. *CoRR*, abs/1502.03044, 2015. URL <http://arxiv.org/abs/1502.03044>.
- [28] Zichao Yang, Diyi Yang, Chris Dyer, Xiaodong He, Alex Smola, and Eduard Hovy. Hierarchical attention networks for document classification. In *NAACL 2016*, pages 1480–1489, June 2016. URL <https://www.microsoft.com/en-us/research/publication/hierarchical-attention-networks-document-classification/>.