



Taller de redes neuronales y sus aplicaciones

Procesamiento de lenguaje natural y transformadores

Víctor Mijangos de la Cruz

Facultad de Ciencias

Enero 2026

Índice de temas

1. Procesamiento del lenguaje natural
2. Niveles del lenguaje
3. Lingüística computacional
4. Grandes modelos del lenguaje
5. Breve historia de LMs
6. Introducción a la atención
7. Auto-atención
8. Codificación
 - Positional encoding
 - Normalización
9. Multi-cabeza
 - Enmascaramiento
10. Transformador
 - Optimización

Procesamiento de lenguaje natural

¿Qué es la lingüística?

El **Procesamiento de Lenguaje Natural** se interesa por procesar el lenguaje humano por medio de métodos computacionales.

Lenguaje

El lenguaje es un hecho social que permite comunicar ideas, pensamientos, hechos del mundo, etc.

Por tanto, se vuelve necesario el estudio del lenguaje. De esto se encarga la lingüística.

Lingüística

La lingüística es el estudio de todas las manifestaciones del lenguaje humano.

Lenguaje escrito

A la lingüística le interesa en principio el **lenguaje hablado u oral**, pues se considera como primario.

El **lenguaje escrito** busca representar al lenguaje hablado a partir de un sistema de escritura.

Sistema de escritura

Un sistema de escritura puede considerarse como un conjuntos de símbolos convencionales que representan un lenguaje.

En PLN, es común que se trabaje con lenguaje escrito. Métodos que trabajan lenguaje hablado suelen transcribirlo primero a símbolos para después aplicar otros métodos a estos.

Sistemas de escritura

Los sistemas de escritura no reflejan ni los sonidos ni las palabras que representan, y pueden ser muy variados:

Tipo	Representación	Ejemplo
Alfabético (latino)	Busca que cada símbolo represente un sonido	La cebra comía
Fonético	Busca representar sonidos de forma exacta	/la 'se.bra ko.'mja/
Silabario	Representa sílabas o sonidos pronunciables	Ka ta ka na カタカナ
Ideográfico	Representa conceptos	思 = 田 + 心 think brain root 194 heart root 128

Escritura

- Muchas veces, los sistemas de escritura no representan de manera precisa los sonidos del habla (en inglés “‘read”’ puede leerse de dos formas distintas: como pasado o como presente).
- La **ortografía** juega un rol en la escritura. Sin embargo, un sistema de PLN debe lidiar con todo tipo de escritura.
- Ciertas manifestaciones escritas buscan denotar usos del lenguaje (“‘Holaaa!!!’”, “‘Hola :)'”,...)
- Ciertos sistemas de escritura pueden causar conflictos de codificación, o usar símbolos que en otras lenguas no son sonidos (en algunas lenguas, el apostrofe ‘/’ representa un sonido glotal).
- No todas las lenguas cuentan con un sistema de escritura.

Niveles de análisis del lenguaje

Para estudiar el lenguaje es común dividirlo en **niveles** o módulos que representan procesos particulares. Estos niveles pueden ser:

Fonética y fonología. Estudia los sonidos de los lenguajes y los cambios que pueden sufrir.

Morfología. Estudia la estructura interna de palabras.

Morfosintaxis. Estudio de las funciones de las palabras.

Sintaxis. Estudio de las frases oraciones que se producen en una lengua.

Semántica. Estudia el significado en todos sus niveles: en el léxico, en las oraciones o en los discursos.

Lingüística computacional

Lingüística computacional

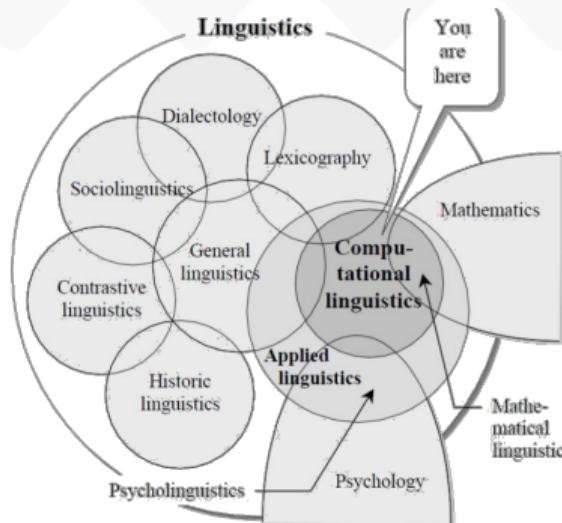
La lingüística computacional se enfoca en entender y emular los procesos humanos que conlleva la producción lingüística. Busca establecer modelos computables que sean capaces de procesar el lenguaje natural.

La lingüística computacional busca tener las capacidades de:

- Manejar grandes cantidades de información en lenguaje natural.
- Generar conocimiento a partir de datos en lenguaje natural.

Multidisciplina

La lingüística computacional es un área multidisciplinaria, conlleva el conocimiento de otras áreas.



Muy ligado a la lingüística computacional están la **lingüística matemática** y la **lingüística cuantitativa**.

Problemas de lingüística computacional

A. Gelbukh y G. Sidorov (2006) proponen una división de los **problemas** del PLN en dos grandes paradigmas:

Problemas conceptuales: Tratan de problemas más teóricos que involucran la comprensión del lenguaje para generar procesos o reglas formales que sean computables.

Problemas técnicos: Cuestiones más prácticas que involucran la representación del lenguaje dentro de una computadora, su codificación y decodificación, su estructura y la identificación de ésta.

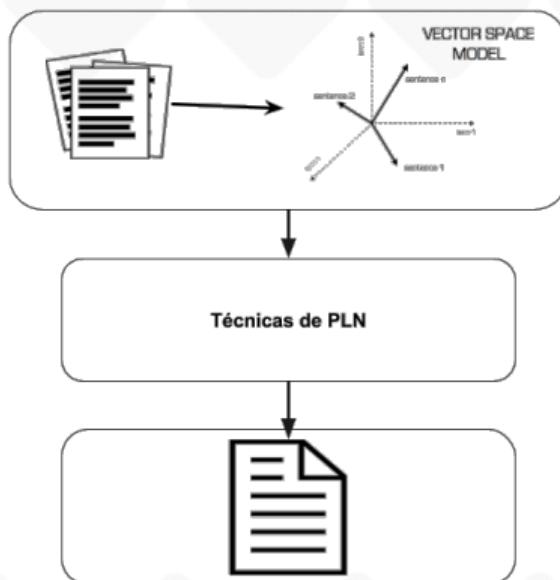
Estructura de una aplicación de PLN

En una aplicación de PLN, generalmente se asumen 3 módulos:

Codificación: Llevar los datos a una representación comprensible por una computadora.

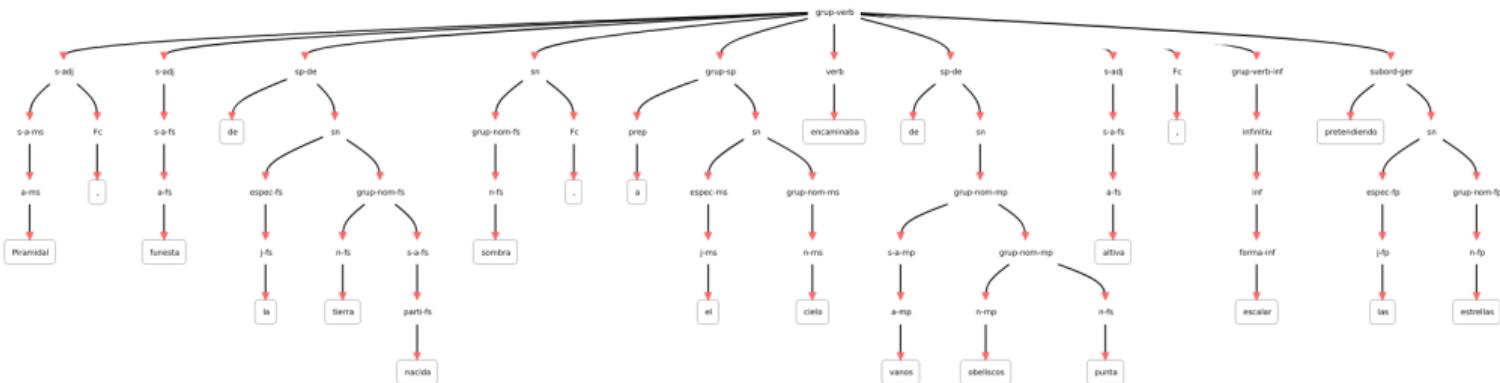
Procesamiento: A partir de la representación, hacer los procesos necesarios para *entender* lo que está plasmado en lenguaje natural.

Decodificación: Una vez procesados los datos, transformar éstos a una representación que pueda ser entendida por un ser humano (usuario).



Estructura del lenguaje

A diferentes niveles, el lenguaje tiene una estructura. Métodos tradicionales como gramáticas libres de contexto o autómatas finitos definen la estructura del lenguaje de forma **deductiva**. De esta forma, pueden entender el lenguaje en base a un conjunto de reglas finito.



Pre-procesamiento

Antes de aplicar cualquier modelo, el lenguaje natural debe pre-procesarse. El pre-procesamiento puede consistir en algunos (o todos) de los siguientes pasos:

Tokenización: Segmenta el texto en tokens, que son las unidades mínimas con las que trabajará el modelo. Pueden ser palabras o sub-palabras. Se utilizan métodos como BPE o WordPiece.

Limpieza del texto: Se pueden eliminar símbolos de puntuación, cadenas no informativas (links, fechas, etc.), entre otros elementos que puedan afectar el texto.

Eliminar palabras de paro: Las palabras de paro son aquellas palabras poco informativas, como preposiciones, conjunciones, adverbios, verbos auxiliares, etc.

Modelos del lenguaje

Grandes modelos del lenguaje

Los **grandes modelos del lenguaje** (LLMs) son tecnologías que generan cadenas lingüísticas a partir de entradas proporcionadas por un usuario.

A partir de éstos, se pueden generar chatbots y otras aplicaciones que procesen el lenguaje natural.



¿Qué es un modelo del lenguaje?

Modelo del lenguaje

Un **modelo del lenguaje** es un modelo estadístico que busca determinar la probabilidad de las cadenas (oraciones, frases) de un lenguaje.

Por ejemplo, si tenemos frases como:

- Los niños jugarons por la mañana en la escuela
- Niños los por jugaron mañana en ecuela la

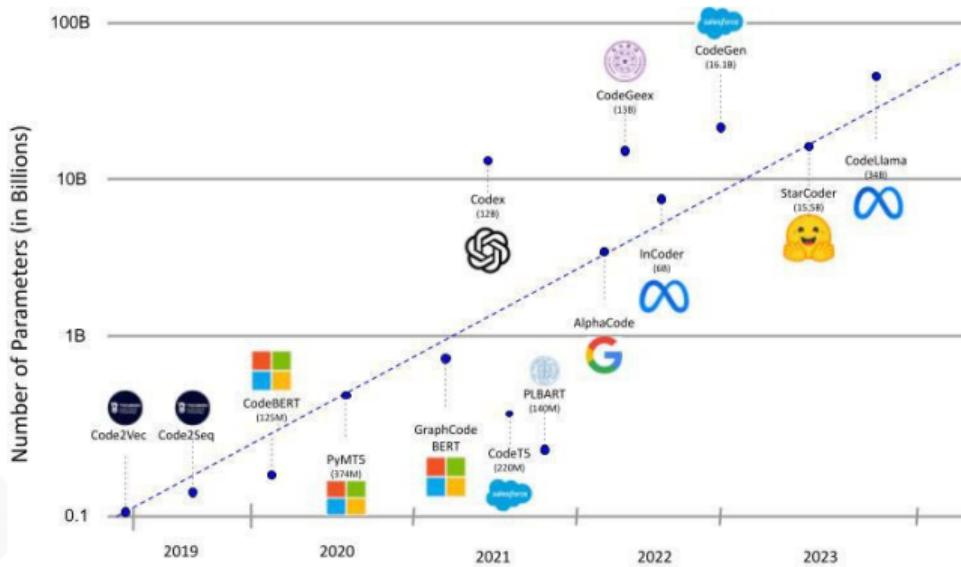
Un modelo del lenguaje señalaría que la primera oración es más probable, mientras la segunda es mucho menos probable.

Hay una relación con la **gramaticalidad** de las oraciones lingüísticas.

¿Por que son grandes los modelos del lenguaje?

Los modelos actuales usan una gran cantidad de **parámetros/neuronas** para funcionar de forma eficiente.

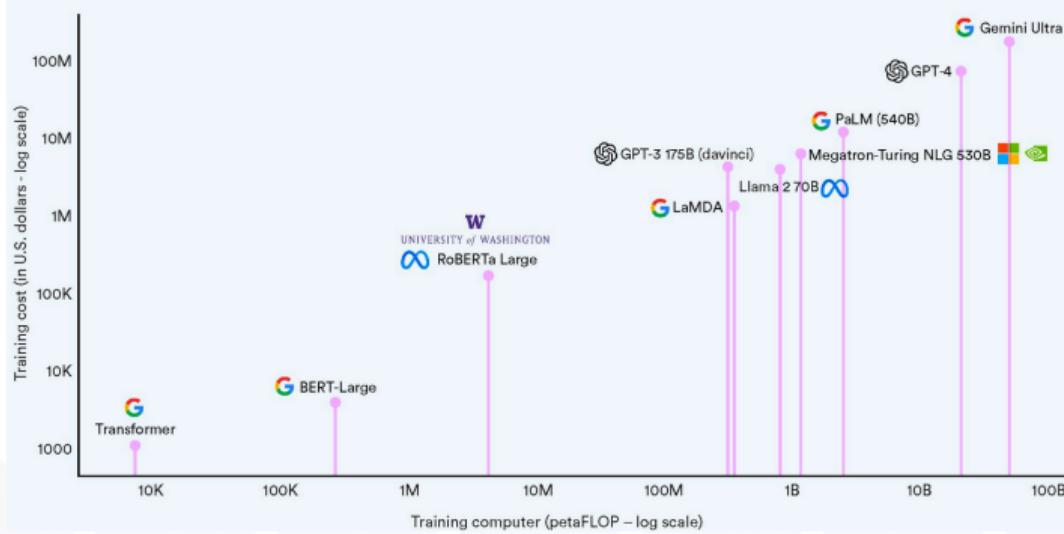
Esto tiene consecuencias: 1) necesitan grandes capacidades computacionales para entrenarse (**costo alto**); y 2) generan **contaminación ambiental** considerable.



Costo de entrenamiento

El costo de los LLMs los vuelve prohibitivos. Se requiere explorar otras formas de aproximarse a ellos.

Source: Epoch, 2023 | Chart: 2024 AI Index report



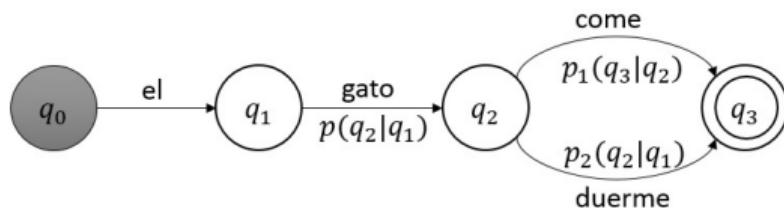
Breve historia de los LLMs

Modelos estadísticos

Los primeros modelos del lenguaje son presentados por Claude E. Shannon (1948). Su propuesta es estudiar la probabilidad de las cadenas del lenguaje en base al principio probabilístico simple:

$$p(w_1 w_2 \cdots w_n) \approx \prod_{t=1}^n p(w_t | w_{t-1}) \quad (1)$$

Estos modelos, llamados **cadenas de Márkov**, permiten predecir una palabra dado el contexto anterior.



Modelos estadísticos

Para extender estos modelos, se busca ampliar **el contexto** que pueden tomar. También se introducen técnicas de **smoothing** que “suavizan” la probabilidad.

Un ejemplo de generación es:

en el español muestra una combinación de tiempo y aspecto ta lo que también determina las categorías de tam y np se da en 3...

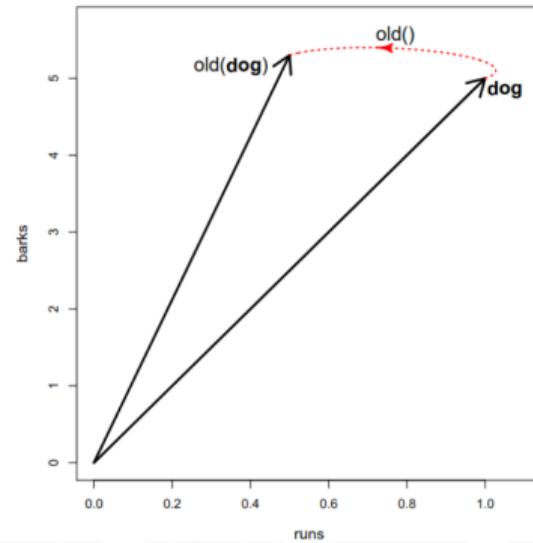
Estos modelos no pueden garantizar la **coherencia semántica** del texto.

Modelos semánticos

Autores como Baroni et al (2014) proponen una representación semántica basada en **distribuciones**, bajo el principio de:

“Palabras con significados similares aparecen en contextos similares”

	dog	cat	old	additive		multiplicative	
runs	1	4	0	old + dog	old + cat	old \odot dog	old \odot cat
barks	5	0	7	12	7	35	0



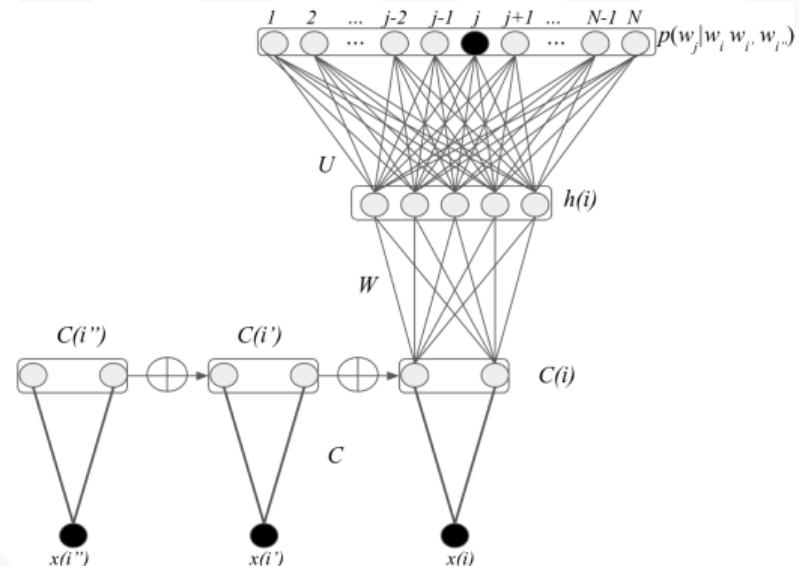
Modelos del lenguaje neuronales

Yoshua Bengio propone el uso de redes neuronales para generar modelos del lenguaje con las siguientes características:

- Los tókens (palabras) se representan por **vectores de rasgos** que aprende la red neuronal.
- La red aprende la probabilidad de una palabra dado su contexto (modelo skip-gram) como:

$$p(w_j | w_{i_1} \dots w_{i_n}) =$$

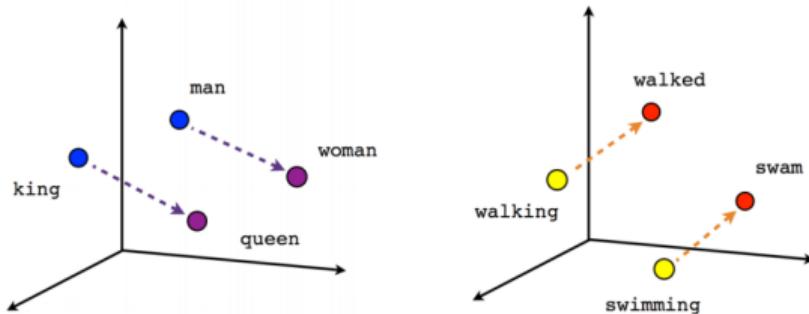
$$\text{Softmax}\left(U \tanh(W[C(i_1) \dots C(i_n)] + b) + b' \right)$$



Word embeddings

En los modelos neuronales las representaciones vectoriales de palabras no sólo obtenían la probabilidad, sino que también aprendían **representaciones semánticas**, a partir de vectores llamados **word embeddings**.

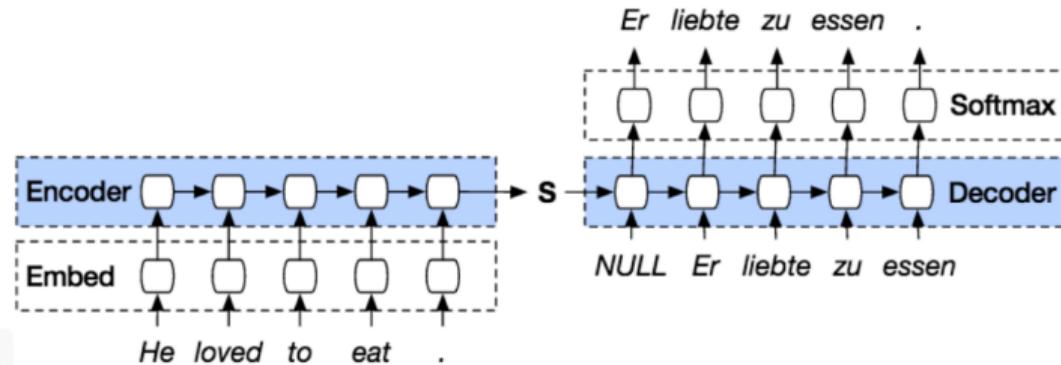
Surgieron modelos como: Word2Vec, FastText o GloVe.



Redes recurrentes

Los modelos neuronales no sólo fueron capaces de obtener la distribución probabilística de palabras (sintaxis), también pudieron representar relaciones entre estas con las word embeddings (semántica).

Sin embargo, estaban limitados al **tamaño del contexto**. Para solventar esto, se utilizaron redes recurrentes, que tienen un mayor alcance contextual.



Introducción a atención

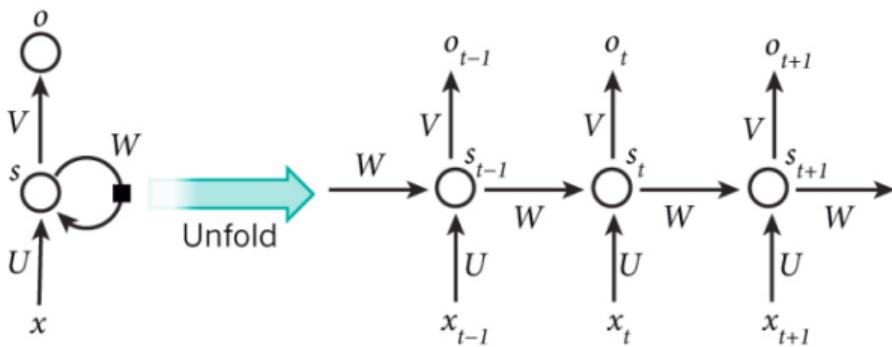
Atención en redes recurrentes

Red recurrente

Una red recurrente es una red que representa los datos secuenciales a partir de recurrencias como:

$$h^{(t)} = g(W h^{(t-1)} + W' x^{(t)} + b)$$

donde $W \in \mathbb{R}^{d \times n}$ y $b \in \mathbb{R}^n$ son parámetros de la red.

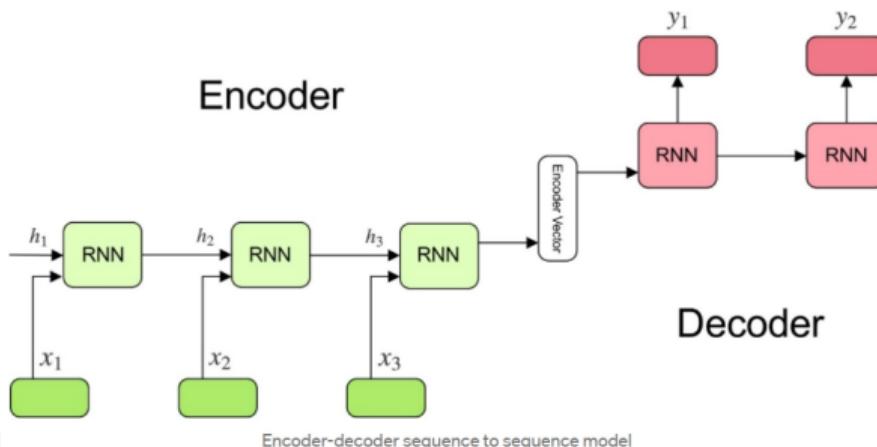


Encoder-decoder

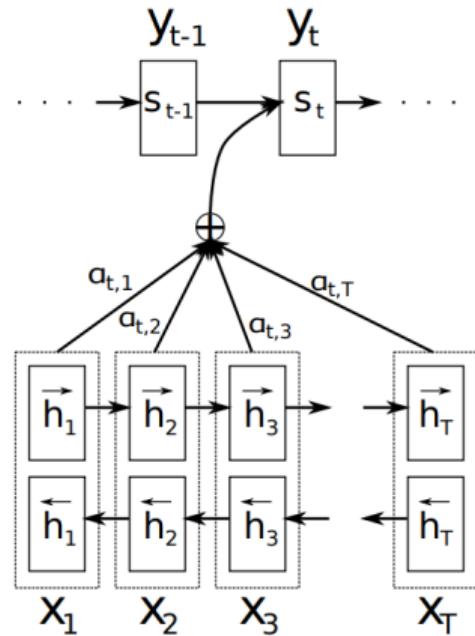
RNN Encoder-Decoder

Una arquitectura encoder-decoder con redes recurrentes es una red neuronal que consta de dos partes:

- **Encoder:** Se encarga de codificar la entrada regresando una codificación de ésta.
- **Decoder:** Decodifica la codificación del encoder para obtener una salida.



Atención en RNNs



Similitud

Para la función $e : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ que determina la similitud entre dos vectores para obtener los pesos de atención, se pueden utilizar diferentes métodos:

- **Producto punto:**

$$sc_{t,k} = s^{(t-1)} \cdot h^{(k)}$$

- **Forma bilineal:** (Luong et al, 2015) Dada una matriz de pesos W :

$$sc_{t,k} = s^{(t-1)} W h^{(k)}$$

- **MLP:** (Bahdanau et al, 2014) Dada una matriz de pesos W y un vector de pesos v :

$$sc_{t,k} = v^T \tanh(W[s^{(t-1)}; h^{(k)}] + b)$$

Auto-atención

Auto-atención

Pesos de auto-atención

Si $x_1, x_2, \dots, x_n \subseteq \mathbb{R}^d$ es un conjunto de vectores, los pesos de auto-atención se determinan por medio de la función $\alpha : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \rightarrow (0, 1)$ como:

$$\alpha(x_i, x_j) = \text{Softmax}\left(\frac{\psi_k(x_i)^T \psi_q(x_j)}{\sqrt{d}}\right)$$

donde ψ_q y ψ_k son proyecciones de los puntos.

Proyecciones de los datos

Las funciones que denotamos con ψ proyectan los datos a diferentes espacios para poder trabajarlos desde aquí.

Proyección lineal

Las funciones $\psi_q, \psi_k : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^{d'}$ pueden ser proyecciones lineales definidas como:

$$\psi_q(x_i) = W_q x_i$$

$$\psi_k(x_i) = W_k x_i$$

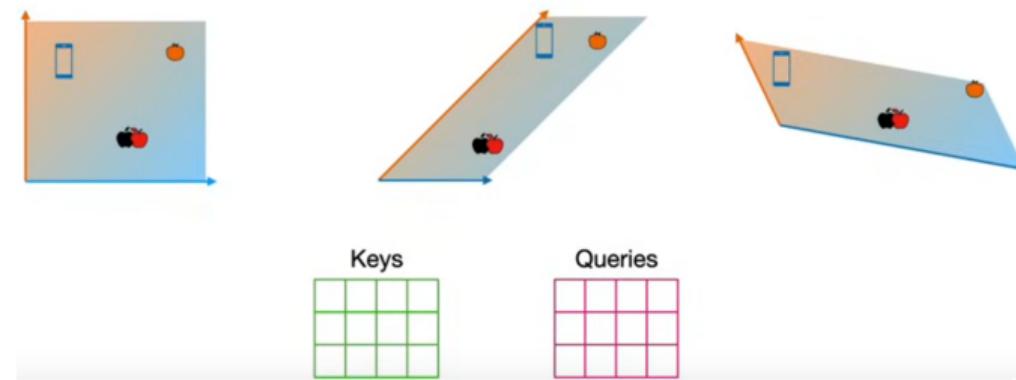
donde $W_q, W_k \in \mathbb{R}^{d' \times d}$ son matrices de parámetros que se aprenden durante el entrenamiento.

Diremos que los espacios hacia los que se proyectan son el espacio de **queries** y el espacio de **keys**, respectivamente. Se llaman a estos vectores query y key.

Producto punto escalado

El producto punto propuesto por Vaswani et al. (2018) se conoce como **producto punto escalado**, pues escala el resultado por \sqrt{d} .

El proyectar los datos originales a diferentes espacios busca que las representaciones sean distintas para la query y la key.



Se puede ver también que se busca aprender ciertas relaciones, pues $x_i^T W x_j = \sum_k \sum_l w_{k,l} x_{i,k} x_{j,l}$

Representaciones con auto-atención

Auto-atención

La auto-atención es una capa para redes neuronales que, dado un conjunto de datos de entrada $x_1 x_2 \cdots x_T$, obtiene una representación de cada dato como:

$$h_i = \sum_{j=1}^n \alpha(x_i, x_j) \psi_v(x_j) \quad (2)$$

Donde $\alpha(x_i, x_j)$ es el peso de atención entre x_i y x_j y $\psi_v(x_j)$ es la proyección en el espacio de valores de x_j .

Al igual que en los casos anteriores, la proyección de los valores es lineal:

$$\psi_v(x_j) = W_v x_j$$

Auto-atención

Auto-atención

Si X es la matriz cuyos renglones son los datos, podemos expresar la autoatención como:

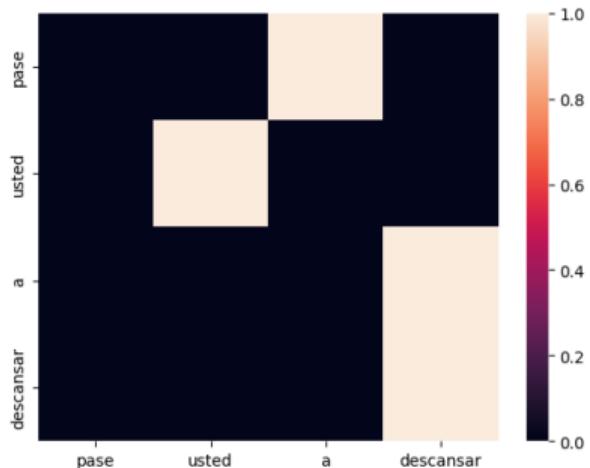
$$\text{Att}(Q, K, V) = \text{Softmax}\left(\frac{QK^T}{\sqrt{d}}\right)V$$

Donde $Q = XW_q^T$, $K = XW_k^T$ y $V = XW_v^T$.

Se puede notar que:

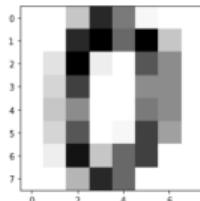
$$\text{Att}(Q, K, V)_i = \sum_{j=1}^n \alpha(x_i, x_j)\psi_v(x_j)$$

Los pesos de atención $\alpha(x_i, x_j)$ pueden interpretarse como la probabilidad de la relación entre ambos elementos x_i y x_j .



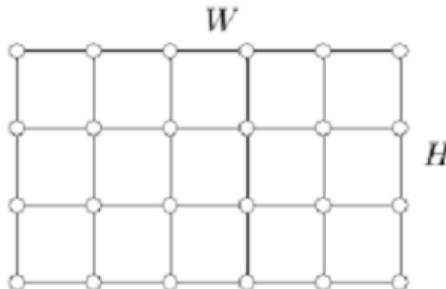
Estructura subyacente de los datos

- El aprendizaje profundo se basa fuertemente en **aprendizaje representacional**. Busca obtener representaciones h que puedan llevar a solucionar el problema.
- Cuando se trata de datos con estructuras complejas, las representaciones aprendidas deben aprovechar información sobre la **esructura de los datos**.
- Por ejemplo, las redes convolucionales se fijan en píxeles vecinos:



0.0	0.0	5.0	13.0	9.0	1.0	0.0	0.0
0.0	0.0	13.0	15.0	10.0	15.0	5.0	0.0
0.0	3.0	15.0	2.0	0.0	11.0	8.0	0.0
0.0	4.0	12.0	0.0	0.0	8.0	8.0	0.0
0.0	5.0	8.0	0.0	0.0	9.0	8.0	0.0
0.0	4.0	11.0	0.0	1.0	12.0	7.0	0.0
0.0	2.0	14.0	5.0	10.0	12.0	0.0	0.0
0.0	0.0	6.0	13.0	10.0	0.0	0.0	0.0

(a) Representación matricial de una imagen.



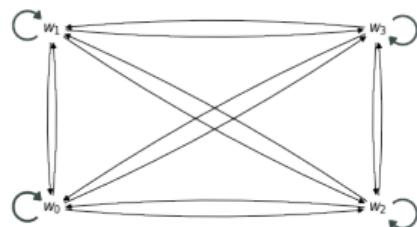
(b) Estructura gráfica de cuadrícula.

Auto-atención y estructura gráfica

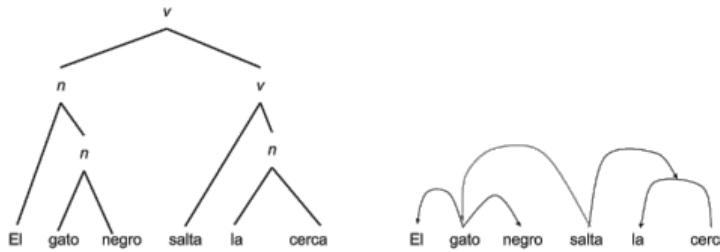
Suposición de la auto-atención

El modelo de auto-atención asume una gráfica $G = (V, E)$ completamente conectada con un conjunto de vértices asociados a los vectores de entrada $x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R}^d$.

Podemos suponer una matriz pesada, donde los pesos están determinados por la atención $\alpha(x_i, x_j)$

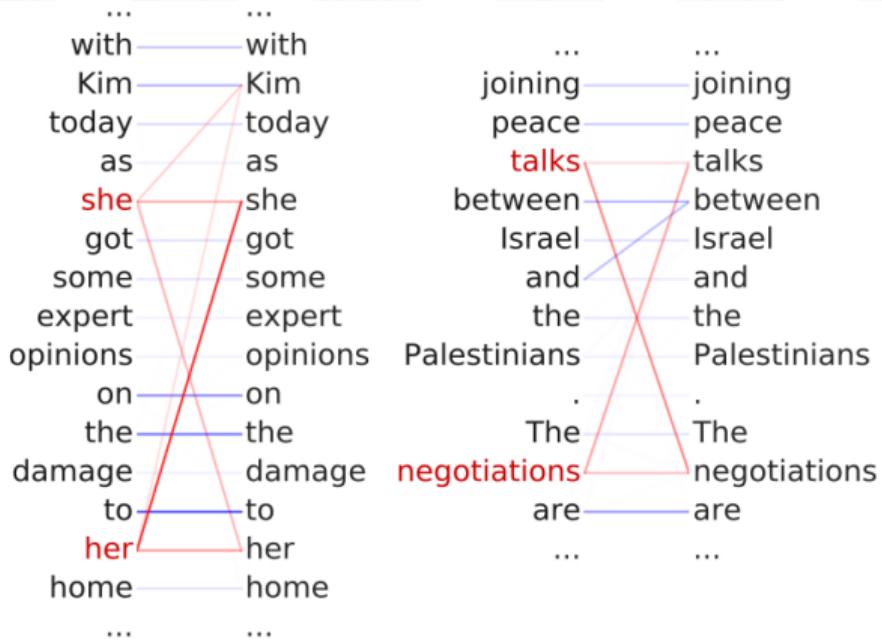


(a) Gráfica completamente conectada.



(b) Estructuras gráficas del lenguaje.

Relaciones en auto-atención



Se ha visto que los modelos de auto-atención pueden capturar diferentes relaciones entre los tókens de entrada (Clark et al., 2019). Algunas de las relaciones encontradas son:

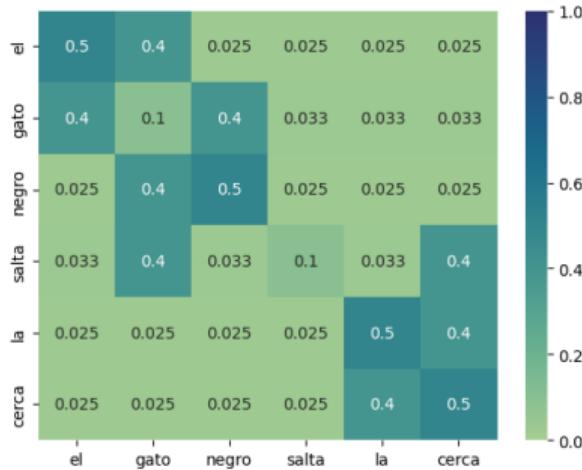
- Objetos directos
- Modificadores de sustantivos
- Pronombres posesivos
- Auxiliares de verbos
- Preposiciones
- Correferencias y anáforas

Pesos de atención

Matriz de adyacencia y pesos de atención

Si asumimos que la auto-atención asume una estructura gráfica, podemos definir una matriz de adyacencia A definida como:

$$A_{i,j} = \alpha(x_i, x_j)$$

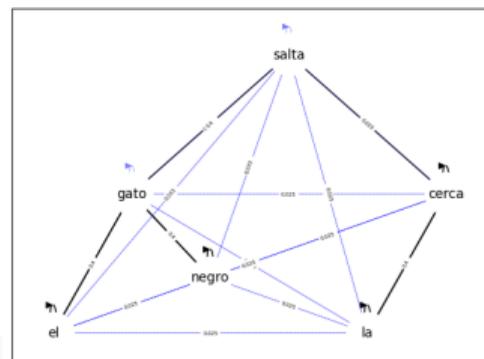


Auto-atención, gráficas y representación

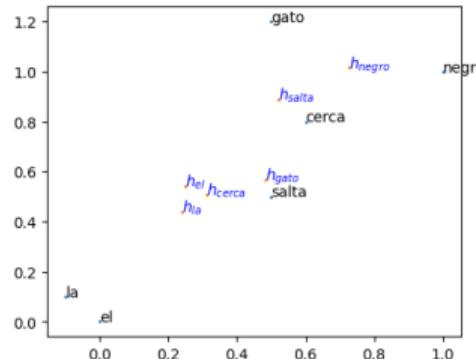
La auto-atención lleva las relaciones de la gráfica pesada a una representación **convexa** sobre el espacio de valores.

Los nuevos vectores siempre quedarán dentro del conjunto convexo formado por las proyecciones de los tokens en los values.

$$h_{negro} = 0.025 \cdot v_{el} + 0.4 \cdot v_{gato} + 0.5 \cdot v_{negro} + 0.025 \cdot v_{salta} + 0.025 \cdot v_{la} + 0.025 \cdot v_{cuerda}$$



(a) Gráfica con pesos de atención.



(b) Representación obtenida.

Redes gráficas y auto-atención

Auto-atención gráfica

Sea $x_1, x_2, \dots, x_n \subseteq \mathbb{R}^d$ un conjunto de puntos asociados a los nodos de una gráfica $G = (V, E)$. Si \mathcal{N}_i son los vecinos en G de x_i , podemos definir la capa de auto-atención como:

$$h_i = \sum_{j \in \mathcal{N}_i} \alpha(x_i, x_j) \psi_v(x_j) \quad (3)$$

Nota

Si G es una gráfica completamente conectada, entonces:

$$\begin{aligned} h_i &= \sum_{j \in \mathcal{N}_i} \alpha(x_i, x_j) \psi_v(x_j) \\ &= \sum_j \alpha(x_i, x_j) \psi_v(x_j) \end{aligned}$$

Codificación

El problema de la posición

Problemática

Al tratar con los tókens de una cadena del lenguaje natural, la auto-atención aprenderá relaciones entre estos tókens.

Sin embargo, no tiene información de la **secuencia** que tienen los tókens. El **lenguaje es lineal en principio**.

Por ejemplo, la siguiente oración tokenizada:

el	niñ#	#o	jug#	#aba	con	lo#	#s	animal#	#es
$t = 1$	$t = 2$	$t = 3$	$t = 4$	$t = 5$	$t = 6$	$t = 7$	$t = 8$	$t = 9$	$t = 10$

será considerada como **bolsa de palabras**.

Codificación posicional

Codificación posicional

Un vector de codificación posicional es un vector en \mathbb{R}^d que codifica la posición t de un tóken en la cadena de entrada a partir de funciones senos y cosenos:

$$pe_{2t} = \sin\left(\frac{t}{warm^{2t/d}}\right)$$

$$pe_{2t+1} = \cos\left(\frac{t}{warm^{2t/d}}\right)$$

Donde $warm$ o $warmup$ es un hiperparámetro.

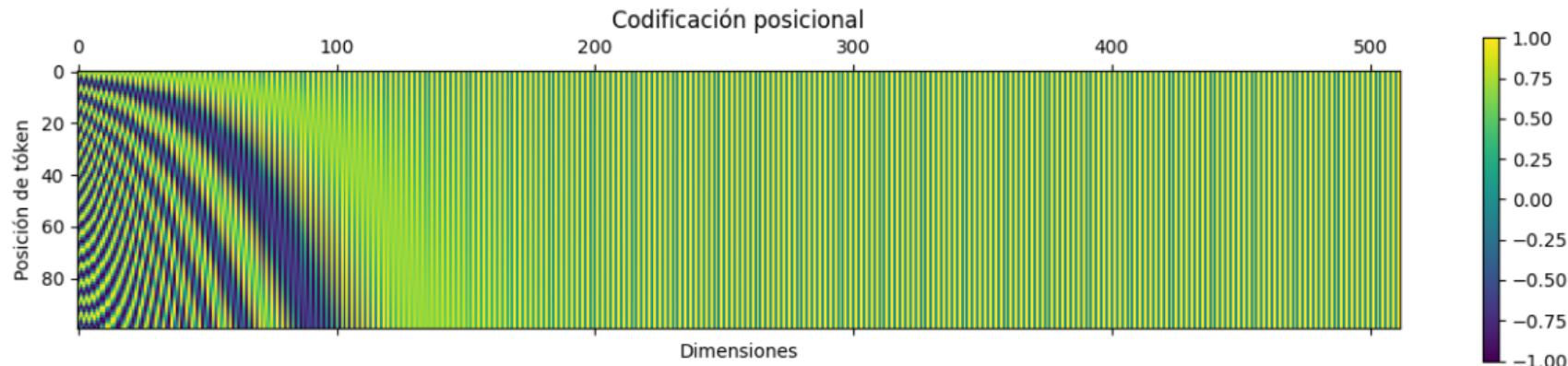
Generalmente se asume que:

$$warm = 10000$$

Entrada de atención

En el encoder, se toma como entrada los vectores de **embeddings** escalados y se suma el vector **posicional**:

$$x_i = \sqrt{d} e_i + pe_i$$



Codificación posicional absoluta

A la codificación posicional que hemos revisado (Vaswani et al., 2017) se le conoce como **codificación posicional absoluta**, y establece las proyecciones de los datos como:

$$q_i = W_q(e_i + pe_i)$$

$$k_i = W_k(e_i + pe_i)$$

$$v_i = W_v(e_i + pe_i)$$

La información posicional se basa en la posición **absoluta** del tóken dentro de su contexto.

Codificación posicional relativa

Distancia relativa

Sean w_i y w_j dos tókens con posiciones absolutas i y j , respectivamente, la distancia relativa (o clip) se estima como:

$$\text{clip}(j - i, k) = \max\{-k, \min\{j - i, k\}\}$$

donde k es la posición relativa máxima.

Adyacencia posicional

Sean k_1, \dots, k_n y v_1, \dots, v_n las proyecciones en keys y values, respectivamente. Definimos las matrices de adyacencia como:

$$a_{i,j}^k = w_{\text{clip}(j-i,k)}^k$$

$$a_{i,j}^v = w_{\text{clip}(j-i,k)}^v$$

donde $w_{-k}^k, \dots, w_0^k, \dots, w_k^k$ y $w_{-k}^v, \dots, w_0^v, \dots, w_k^v$ son parámetros de la red.

Codificación posicional relativa

Codificación posicional relativa

La codificación posicional relativa (Shaw et al., 2021) utiliza la adyacencia posicional para estimar los pesos de auto-atención como:

$$\alpha(x_i, x_j) = \text{Softmax}\left(\frac{(W_q x_i)^T (W_k x_j + a_{i,j}^k)}{\sqrt{d}}\right)$$

Asimismo, las representaciones en la auto-atención se obtienen como:

$$h_i = \sum_j \alpha(x_i, x_j) (W_v x_j + a_{i,j}^v)$$

Embeddings rotacionales

Otra alternativa para la codificación posicional son los embeddings rotacionales (Su et al., 2024) donde:

$$q_i = R_{\Theta,i}^d W_q x_i$$

$$k_i = R_{\Theta,i}^d W_k x_i$$

Con la matriz de rotación:

$$R_{\Theta,i}^d = \begin{pmatrix} \cos i\theta_1 & -\sin i\theta_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \sin i\theta_1 & \cos i\theta_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos i\theta_2 & -\sin i\theta_2 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sin i\theta_2 & \cos i\theta_2 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cos i\theta_{d/2} & -\sin i\theta_{d/2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -\sin i\theta_{d/2} & \cos i\theta_{d/2} \end{pmatrix}$$

Los embeddings rotacionales capturan información de posición de i con respecto a j como efecto del producto punto:

$$\begin{aligned} q_i^T \cdot k_j &= (R_{\Theta,i}^d W^{(q)} x_i)^T (R_{\Theta,j}^d W^{(k)} x_j) \\ &= x_i^T W^{(q)} \mathbf{R}_{\Theta,j-i}^d W^{(k)} x_j \end{aligned}$$

Necesidad de normalización

Problema de cambio interno de covarianza

El problema de cambio interno de covarianza es el cambio en las activaciones de la red debido al cambio de los parámetros de la red neuronal durante el entrenamiento

Solución

Estabilizar las entradas en cada capa puede ayudar a que los valores de la activación se alejen de los límites de esta, permitiendo un mejor entrenamiento.

La estabilización de las entradas requiere de su normalización con respecto a los lotes de entrada.

Normalización por lotes

Normalización por lotes

Dado un dato $x \in \mathbb{R}^d$ de un lote, este se normaliza como:

$$\hat{x} = a \odot \frac{x - \mu}{\sqrt{\sigma^2} + \epsilon} + b$$

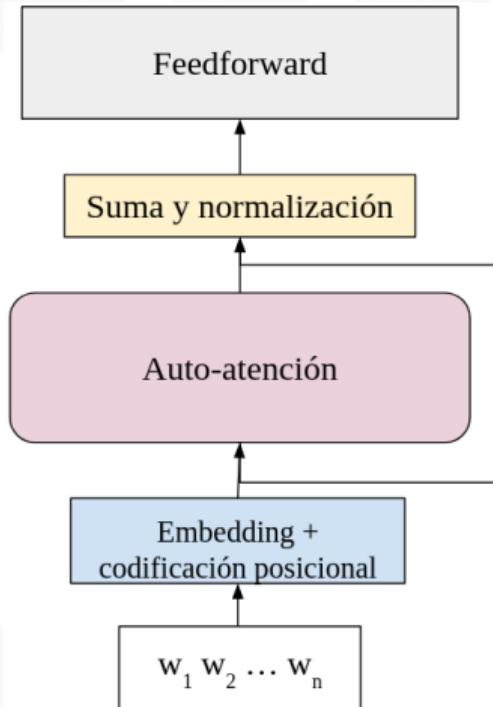
donde a y b son parámetros y ϵ evita la división entre 0.

La media y la varianza se calcula de la manera usual:

$$\mu = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{N-1} \sum_i (x_i - \mu)^2$$

Suma y normalización



En los módulos tanto de encoder como decoder, la normalización se sigue:

- Se aplica una **normalización** a los vectores (de la capa previa).
- Se aplica la capa actual.
- Se hace una **conexión residual** con los vectores de la capa previa.

De tal forma que se tiene en cada capa:

$$h = x + \text{capa}(\text{norm}(x))$$

Multi-cabeza

Atención multi-cabeza

Cabeza de (auto-)atención

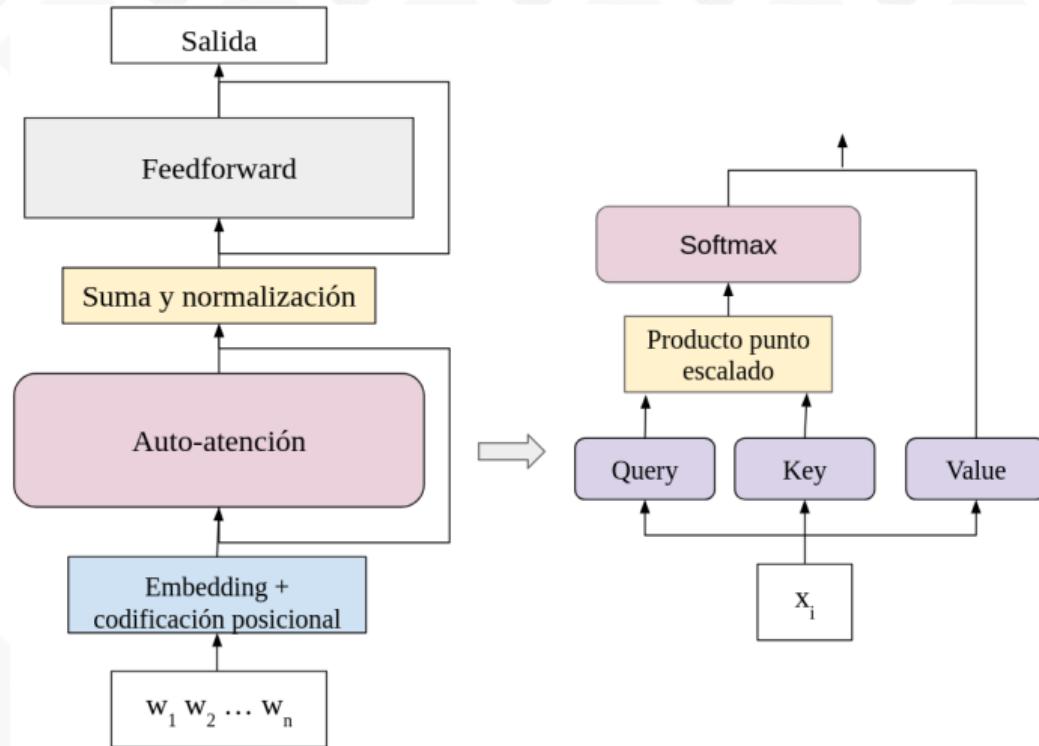
Entenderemos por una cabeza de auto-atención a la capa con la cual se obtiene la matriz de representaciones dada como:

$$h_{1:T} = \text{Att}(Q, K, V) = \text{Softmax}\left(\frac{QK^T}{\sqrt{d}}\right)V \quad (4)$$

En un modelo de auto-atención de una cabeza contamos con:

- Embeddings y codificación posicional.
- Cabeza de auto-atención.
- Suma y normalización entre cada capa.

Modelo de atención con una cabeza



Multi-cabeza

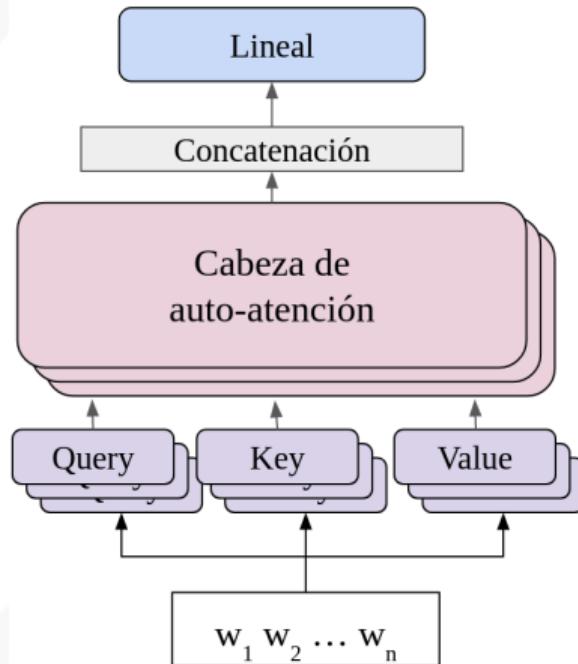
Atención multi-cabeza

La atención multi-cabeza asume el uso de N cabezas de atención, cada una de la forma:

$$\text{head}_i = \text{Att}(Q_i, K_i, V_i) = \text{Softmax}\left(\frac{Q_i K_i^T}{\sqrt{d_i}}\right) V_i$$

Con sus propios pesos de query, key y value. La representación final será:

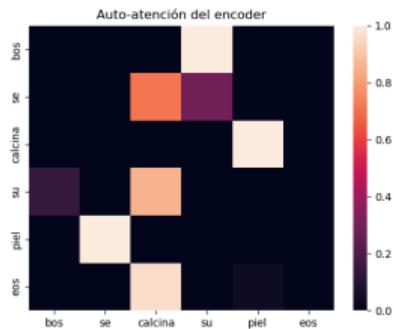
$$h = [\text{head}_1 || \text{head}_2 || \dots || \text{head}_N]W + (b)$$



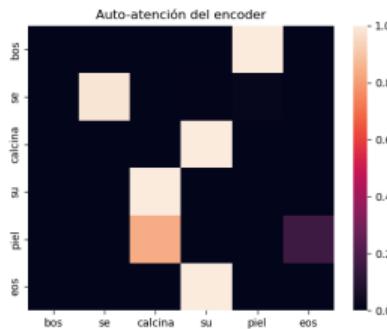
Representación en multi-cabezas

La auto-atención multi-cabeza es combinación afín de las cabezas de auto-atención. Supongamos que la matriz W tienen N secciones $W_i \in \mathbb{R}^{d \times d}$ tal que $W = [W_1 || W_2 || \cdots || W_N]$, entonces, la representación de la fórmula anterior puede expresarse como:

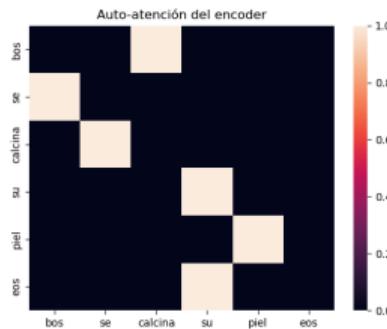
$$h = \text{head}_1 W_1 + \text{head}_2 W_2 + \cdots + \text{head}_N W_N + (b)$$



(a) Primera cabeza.



(b) Segunda cabeza.



(c) Tercera cabeza.

Otras propuestas de muti-cabeza

Atención colaborativa

La atención colaborativa (Cordonier et al, 2020) define una sola proyección query y key, y N proyecciones value V_i . Cada cabeza se calcula como:

$$\text{head}_i = \text{Att}(QM_r, K, V_i) = \text{Softmax}\left(\frac{QM_r K^T}{\sqrt{d}}\right) V_i$$

Donde M_r es una matriz diagonal tal que:

$$(QM_r K^T)_{i,j} = \sum_l m_{r,l} \phi_q(x_i)_l \phi_k(x_j)_l$$

Enmascaramiento

Problema

El objetivo del decoder es obtener la probabilidad de un tóken w_i , dado los elementos pasados w_1, \dots, w_{i-1} , por lo que realizar un mecanismo de atención en el que se observan **tókens futuros** introduce un sesgo.

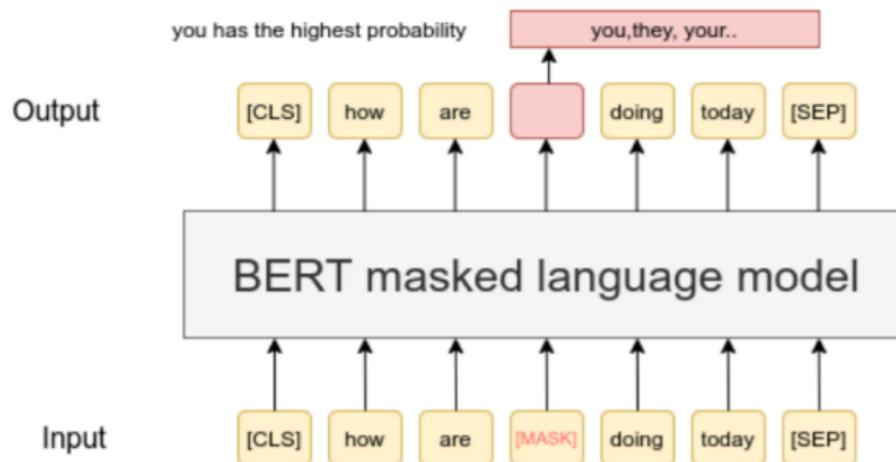
Enmascaramiento

El enmascaramiento reemplaza un tóken w_i por una etiqueta MASK para que el modelo no tenga información de esta etiqueta. Este proceso oculta un tóken para que no sea accesible a la auto-atención.

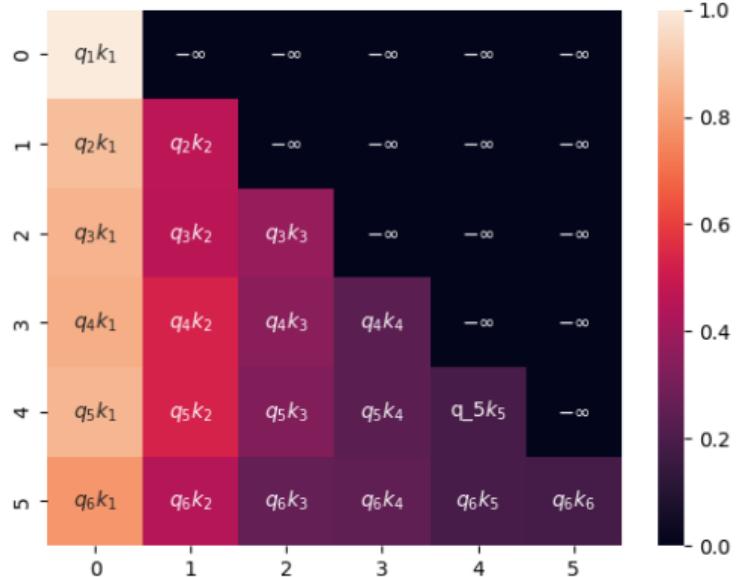
Modelos enmascarados

Enmascaramiento de tókens

Modelos como BERT (Devlin et al., 2019) enmascaran tókens de una cadena de entrada para buscar predecir la palabra en su contexto, usando tanto los elementos previos como los subsecuentes.



Enmascaramiento en decoder



Enmascaramiento subsecuente

Para predecir los tókens subsecuentes (tarea del decoder) se enmascaran todas las relaciones con los tókens subsecuentes. De tal forma que las relaciones del tóken w_i estarán dadas por:

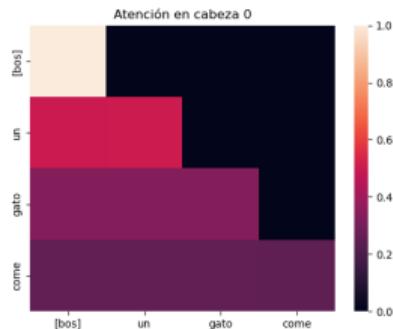
$$\mathcal{N}_i = \{j : 1 \leq j \leq i\}$$

Modelos con enmascaramiento

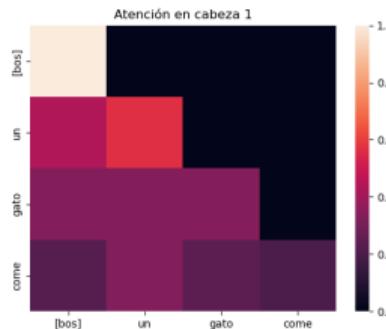
Auto-atención enmascarada

La auto-atención con enmascaramiento subsecuente estima las representaciones de las entradas como:

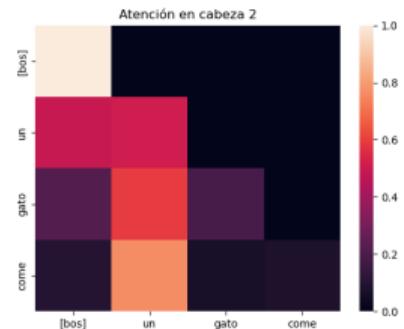
$$h_i = \sum_{j \leq i} \alpha(x_i, x_j) \psi_v(x_j)$$



(a) Primera cabeza.



(b) Segunda cabeza.



(c) Tercera cabeza.

Atención en gráficas

El proceso de enmascaramiento permite evitar las relaciones con los elementos subsecuentes. Sin embargo, no establece relaciones complejas entre los elementos de la entrada.

Atención sobre gráficas

En general, un método de auto-atención en gráficas en donde se toma en cuenta sólo los elementos relacionados en una gráfica no necesariamente conectada por completo. Esto es:

$$h_i = \sum_{j \in \mathcal{N}_i} \alpha(x_i, x_j) \psi_v(x_j)$$

- El problema de este tipo de atención es el que requiere de información explícita de la gráfica.
- Además, eleva el costo computacional al ser una red neuronal gráfica.

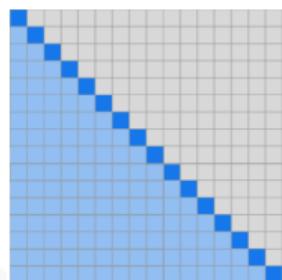
Atención dispersa

Atención dispersa

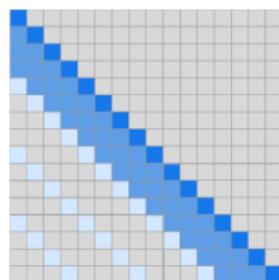
La atención dispersa (Child et al., 2019) propone generar matrices dispersas de atención, resaltando relaciones no completamente conectadas en los elementos de entrada, pero que no requieren de una estructura gráfica implícita.

Por ejemplo **stride attention** que asume vecindades de la forma:

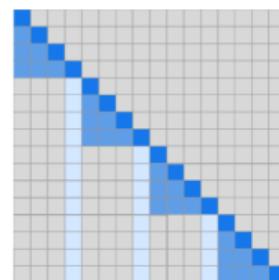
$$\mathcal{N}_i = \{j : \max(0, i - k) \leq j \leq i\}$$



(a) Transformer



(b) Sparse Transformer (strided)



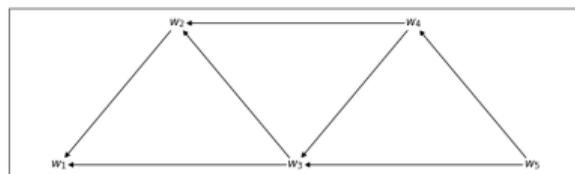
(c) Sparse Transformer (fixed)

Stride Attention

Stride Attention

El mecanismo de stride attention estima la atención con base en un hiperparámetro k tal que:

$$h_i = \sum_{\max(0, i-k) \leq j \leq i} \alpha(x_i, x_j) \psi_v(x_j)$$



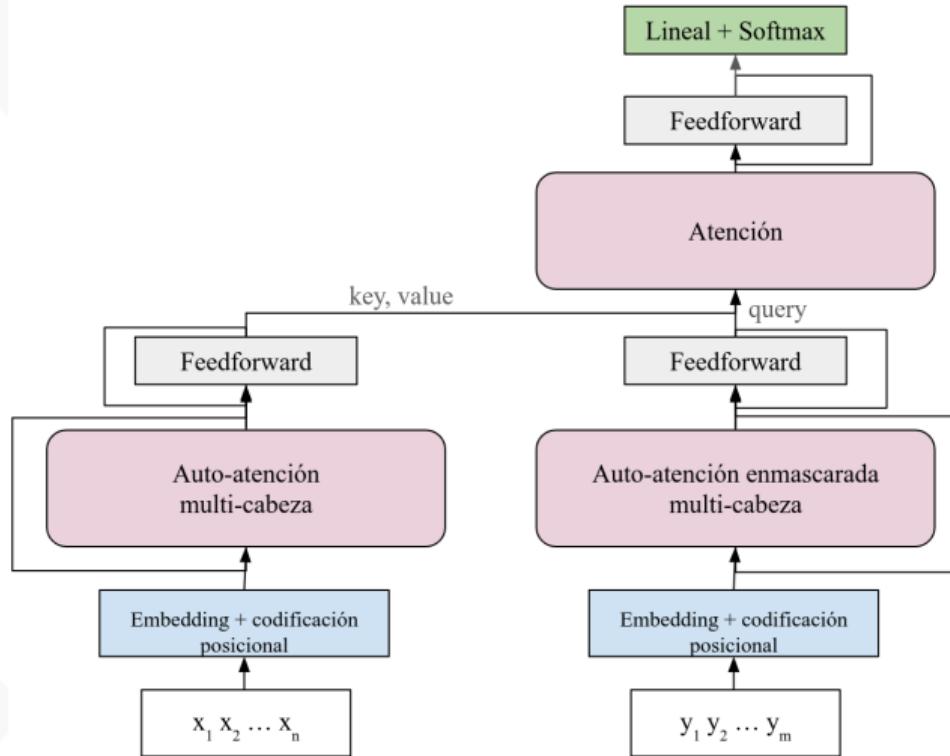
(a) Estructura gráfica.



(b) Matriz dispersa.

Transformador

Estructura del Transformador

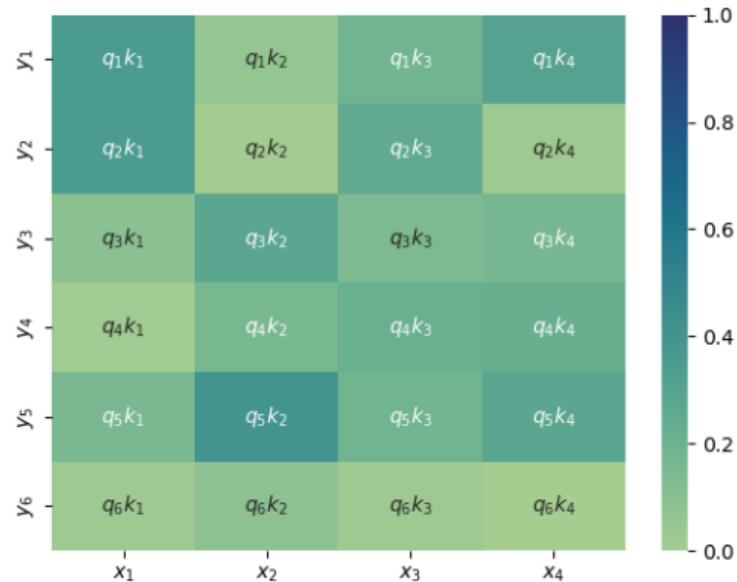


Atención Encoder-Decoder

Atención (encoder-decoder)

Sean $x_1 x_2 \cdots x_n$ las representaciones del encoder y $y_1 y_2 \cdots y_m$ las del decoder, entonces, la atención entre el encoder y el decoder se estima como:

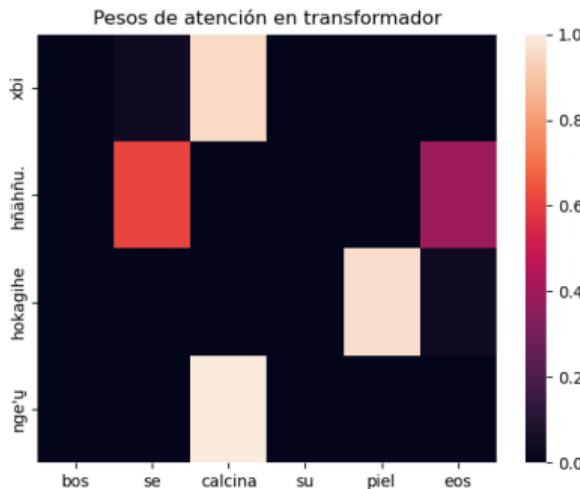
$$h_j = \sum_i \alpha(y_j, x_i) \psi_v(x_i)$$



Atención Encoder-Decoder

Los pesos de atención se estiman a partir de la proyección de los datos del encoder en el espacio de keys y values, mientras que los datos de salida se proyectan al espacio de queries.

$$\alpha(y_i, x_j) = \text{Softmax}_x \left(\frac{\psi_q(y_i)^T \psi_k(x_j)}{\sqrt{d}} \right)$$



Salida del Trasnformador

Salida

Después de pasar la atención entre encoder y decoder, las representaciones de las salidas se pasan por una red Feedforward, obteniendo las representaciones finales $h_{1:t}$. La salida aplica una capa lineal y una activación Softmax para obtener la predicción:

$$\hat{p}(y_{t+1}|y_{1:t}, x_{1:n}) = \text{Softmax}(W h_{1:t} + b)$$

Función objetivo

La función objetivo suele estar dada por la entropía cruzada:

$$\mathcal{J} = - \sum_{x_{1:n}} \sum_t \delta_{y,t} \ln \hat{p}(y_{t+1}|y_{1:t}, x_{1:n})$$

Optimización

Optimizador Noam

El optimizador Noam (Vaswani et al., 2017) es un optimizador basado en Adam en donde la tasa de aprendizaje se adapta de acuerdo a la regla:

$$\eta = \frac{1}{\sqrt{d}} \min\left\{\frac{1}{\sqrt{t}}, \frac{t}{\sqrt{\omega^3}}\right\}$$

