Redes recurrentes

Programa ejecutivo de Inteligencia Artificial

Año de realización: 2019-2020

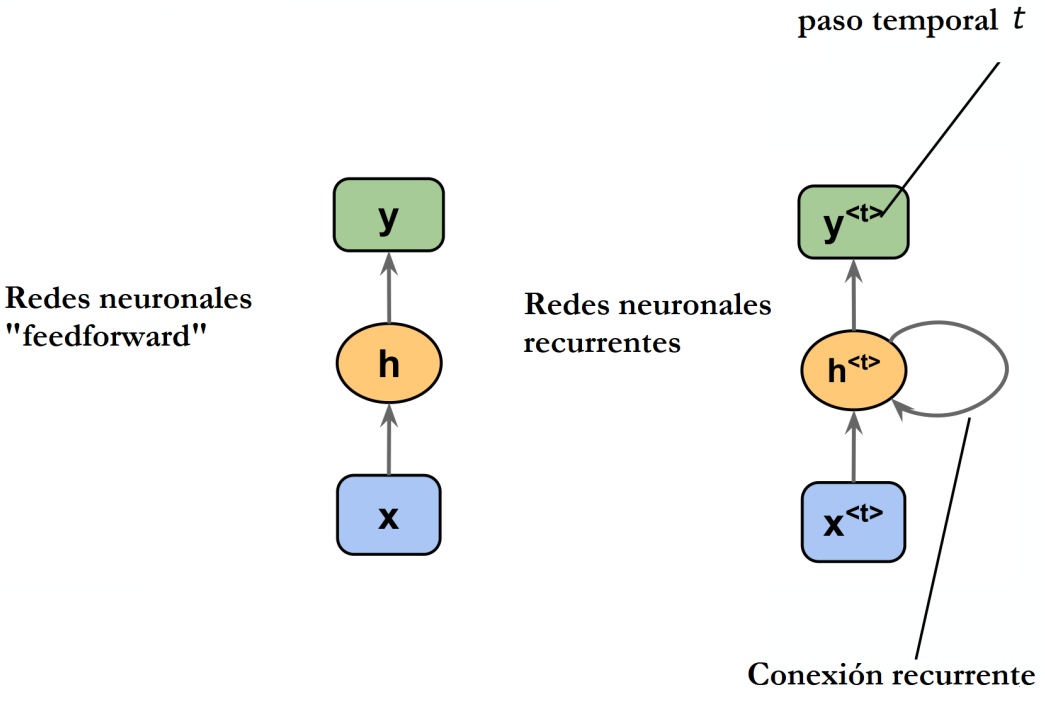
Alberto Torres Barrán
alberto.torres@icmat.es

Escuela de organización industrial

Introducción

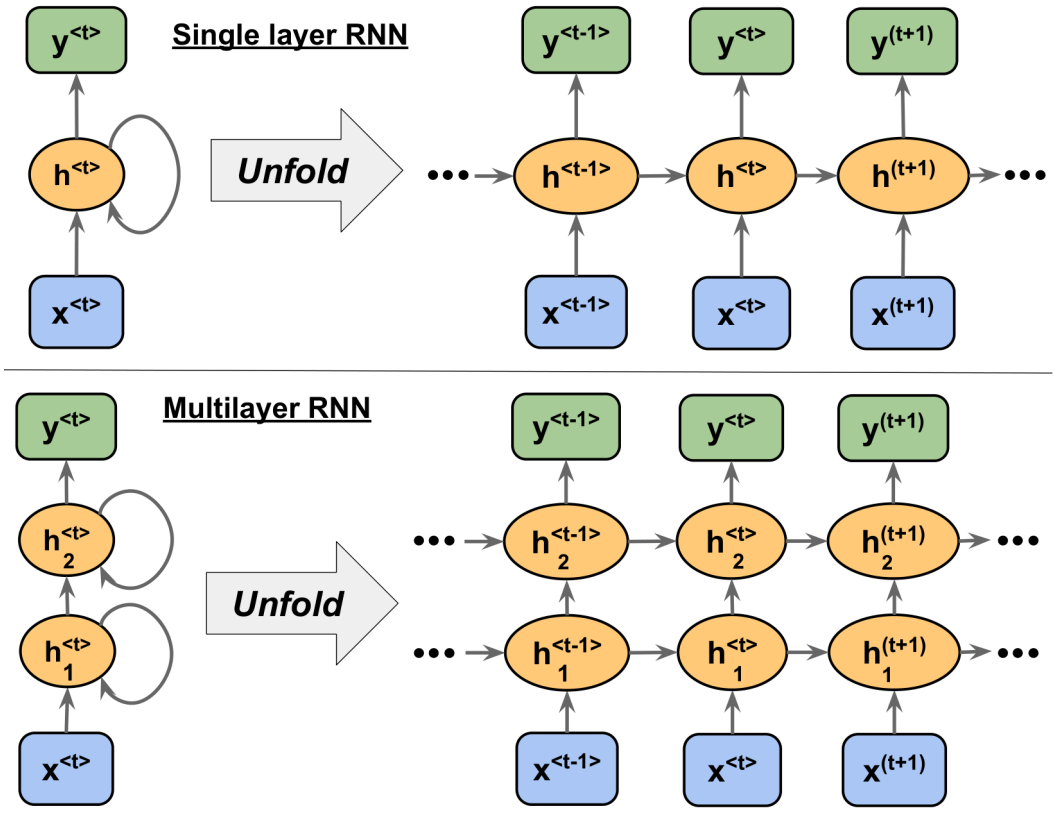
Intuición

- Las redes neuronales recurrentes (*recurrent neural networks*, RNNs) surgen de la necesidad de **procesar secuencias** de datos



Raschka, Sebastian. STAT 479: Deep Learning, Spring 2019. Introduction to Recurrent Neural Networks Part 1

Red recurrente "extendida"



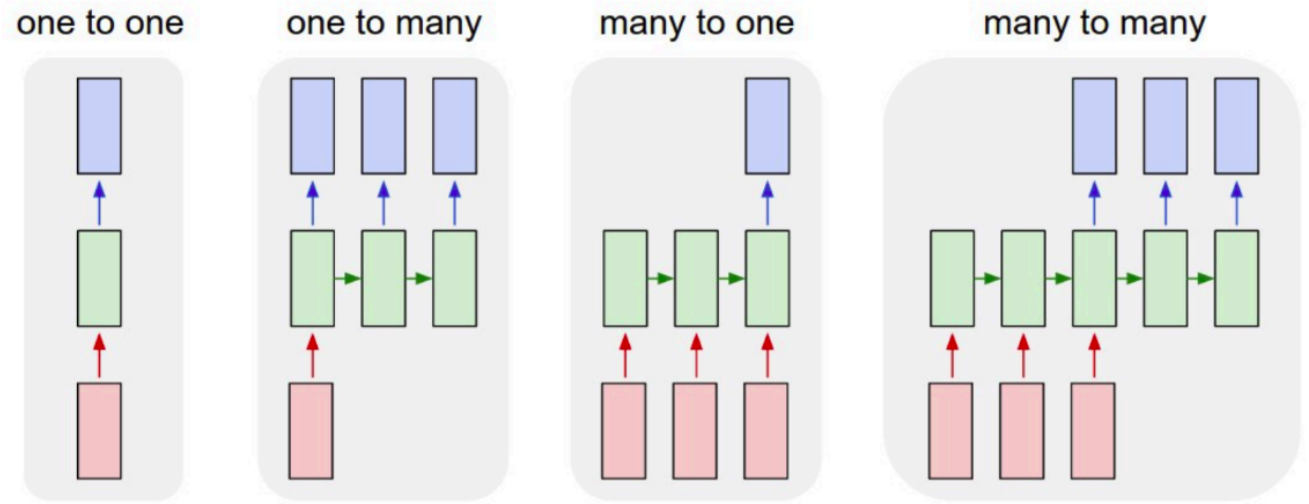
Raschka, Sebastian. STAT 479: Deep Learning, Spring 2019. Introduction to Recurrent Neural Networks Part 1

Aplicaciones

1. Predicción de series temporales
2. Clasificación de texto
3. Traducción automática
4. Reconocimiento del habla
5. ...

Tipos de tareas con secuencias

- *one to many* (ej. image captioning)
- *many to one* (ej. sentiment analysis)
- *many to many* (ej. machine translation)



Karpathy, Andrew (2015). The Unreasonable Effectiveness of Recurrent Neural Networks

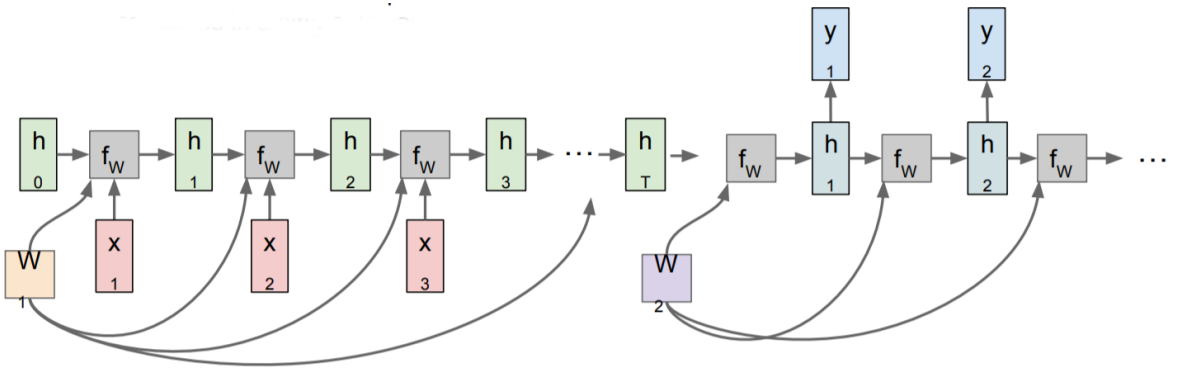
Aplicaciones RNNs

Generación de textos

- https://openai.com/blog/better-language-models/
- GPT-2 es un modelo de lenguaje entrenado sobre un corpus de 40GB de datos (8 millones de páginas webs).
- La versión grande del modelo consta de 1500 millones de parámetros.
- Generación de historias online en https://talktotransformer.com/

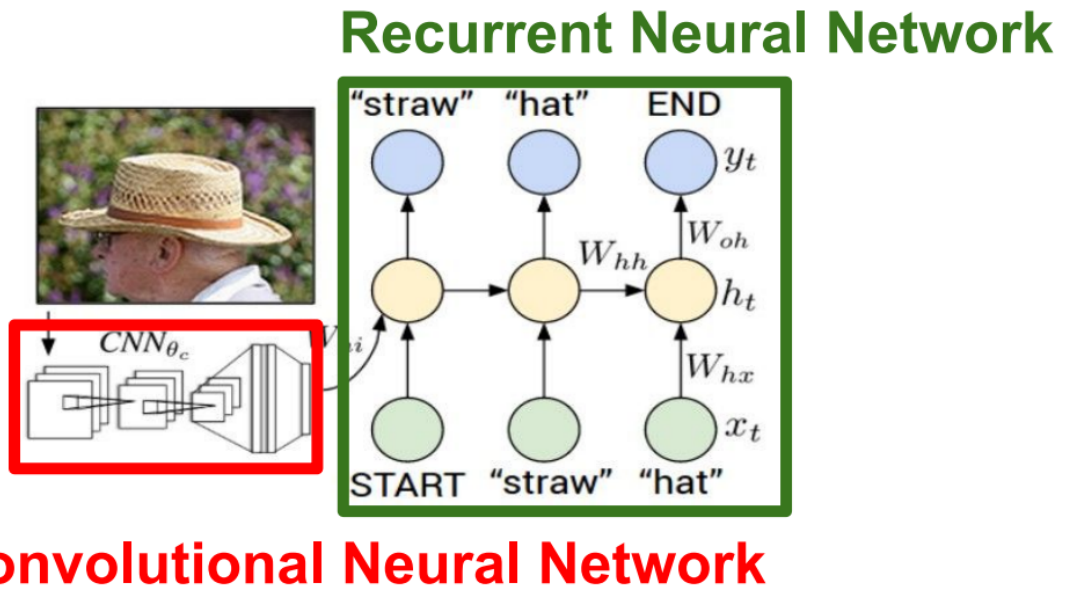
Traducción automática

- Modelos **seq2seq**: composición de many-to-one + one-to-many.
- $x_1, \ldots, x_T$ es la frase en el idioma original.
- $y_1, \ldots, y_{T'}$ es la frase en el idioma de destino.



- Sequence to Sequence Learning with Neural Networks: https://arxiv.org/abs/1409.3215
- Actualmente usado en **Google Traslate**: https://ai.google/research/pubs/pub45610

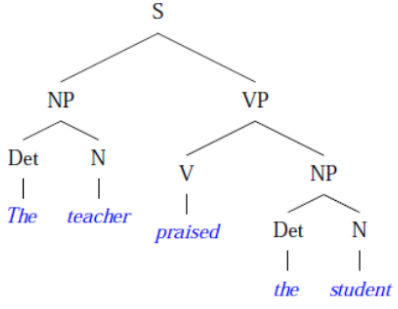
Subtitulación de imágenes



- Explain Images with Multimodal Recurrent Neural Networks: https://arxiv.org/pdf/1410.1090.pdf
- Show and Tell: A Neural Image Caption Generator: https://arxiv.org/pdf/1411.4555.pdf

Procesamiento de lenguaje natural (NLP)

- Pre 2000s: **simbólico, basado en reglas**
  - Lenguaje entendido como conjunto de elementos y reglas para combinarlos.
  - Gramáticas independientes de contexto (Chomsky).
  - Más adecuado a lenguajes artificiales (de programación) que naturales (humanos).



- Después: **estadístico, basado en datos**
  - Lenguaje entendido como probabilidades de secuencias de palabras.
  - Cálculo de frecuencias de palabras, n-gramas, etc.
  - Más adecuado a lenguajes naturales que artificiales.
  - Combinación con modelos profundos: **estado del arte**.

Ejemplo de "bag of words"

1) Entrenar clasificador con un dataset que tiene 3 sentencias:

$$\mathbf{x}^{[1]} = \text{"The sun is shining"}$$

$$\mathbf{x}^{[2]} = \text{"The weather is sweet"}$$

$$\mathbf{x}^{[3]} = \text{"The sun is shining,}$$
$$\text{the weather is sweet, and one and one is two"}$$

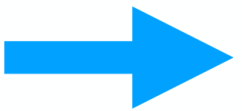
Raschka, Sebastian. STAT 479: Deep Learning, Spring 2019. Introduction to Recurrent Neural Networks Part 1

2) Construir vocabulario usando todas las palabras únicas

$\mathbf{x}^{[1]}$ = "The sun is shining"

$\mathbf{x}^{[2]}$ = "The weather is sweet"

$\mathbf{x}^{[3]}$ = "The sun is shining,
the weather is sweet, and one and one is two"



```
vocabulary = {
    'and': 0,
    'is': 1
    'one': 2,
    'shining': 3,
    'sun': 4,
    'sweet': 5,
    'the': 6,
    'two': 7,
    'weather': 8,
}
```

3) Transformar cada sentencia inicial en su representación vectorial

$\mathbf{x}^{[1]}$ = "The sun is shining"

$\mathbf{x}^{[2]}$ = "The weather is sweet"

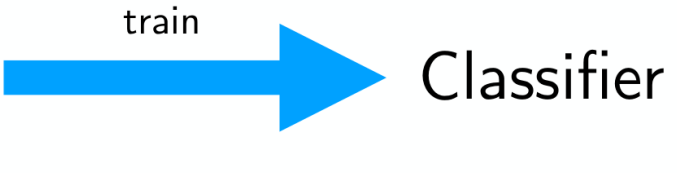
$\mathbf{x}^{[3]}$ = "The sun is shining,
the weather is sweet, and one an

```
vocabulary = {
    'and': 0,
    'is': 1
    'one': 2,
    'shining': 3,
    'sun': 4
    'sweet': 5,
    'the': 6,
    'two': 7,
    'weather': 8,
}
```

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 2 & 3 & 2 & 1 & 1 & 1 & 2 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

4) Usando esa representación entrenamos cualquier clasificador (regresión logística, SVM, red neuronal, etc.)

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 2 & 3 & 2 & 1 & 1 & 1 & 2 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$



$$\mathbf{y} = [0, 1, 0]$$

- Las filas de **X** representan ejemplos/muestras
- Las columnas de **X** son características/variables

1. binarias 0/1, la palabra está presente o no en la frase
2. frecuencias, contar cuantas veces aparece la palabra en la frase
3. TF-IDF (*term frequency - inverse document frequency*), frecuencias normalizadas usando el total de todas las frases

Preprocesamiento opcional

1) Eliminar palabras "vacias" (*stop words*)

$$\mathbf{x}^{[1]} = \text{"The sun is shining"}$$

$$\mathbf{x}^{[2]} = \text{"The weather is sweet"}$$

$$\mathbf{x}^{[3]} = \text{"The sun is shining, the weather is sweet, and one and one is two"}$$

2) Crear n-gramas (n > 1)

1 token = 1 word:

$$\mathbf{x}^{[1]} = \text{"The sun is shining"}$$

1 token = 2 words:

$$\mathbf{x}^{[1]} = \text{"The sun is shining"}$$

Problemas:

1. Tamaño vocabulario
2. *Sparsity*

Problemas bag of words

Desventajas aproximación clásica:

1. Numero de variables determinado por el tamaño del vocabulario, potencialmente muy grande
2. Ejemplos muy *sparse* (la mayoría del vector contiene 0s)
3. **No tienen en cuenta el contexto**, se ignora el orden de las palabras

Los n-gramas

- solucionan parcialmente el problema 3), ya que se tienen en cuenta n-tuplas de palabras
- empeoran 1), ya que el tamaño del vocabulario aumenta combinatoriamente

Redes neuronales recurrentes

Esquema original

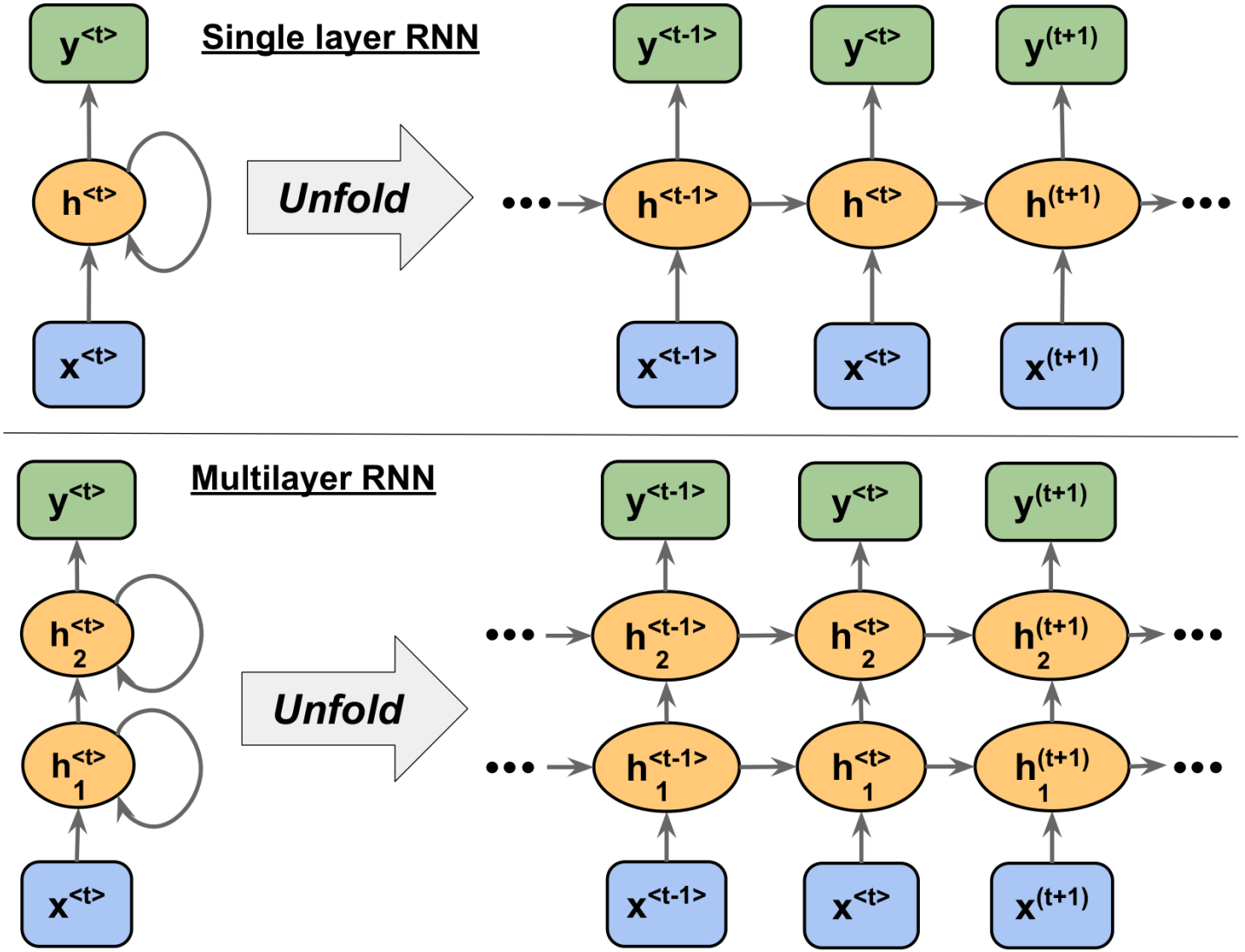
- Modelo de **Elman**: la red mantiene un estado interno h_t que se va actualizando en cada iteración

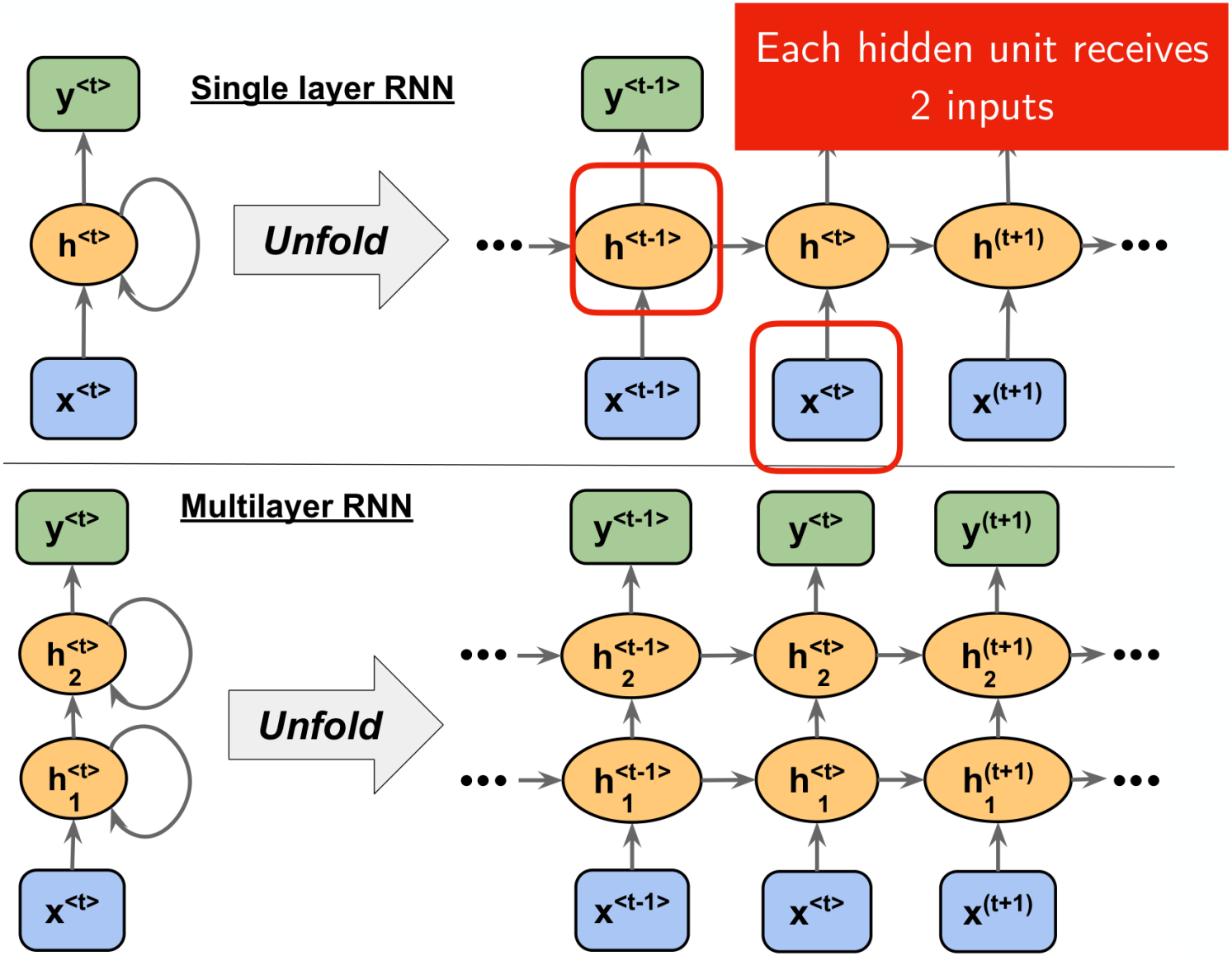
$$h_t = f_W(h_{t-1}, x_t)$$

- En concreto, un posible diseño es

$$h_t = \tanh(W_{hh}h_{t-1} + W_{xh}x_t)$$
$$y_t = W_{hy}h_t$$

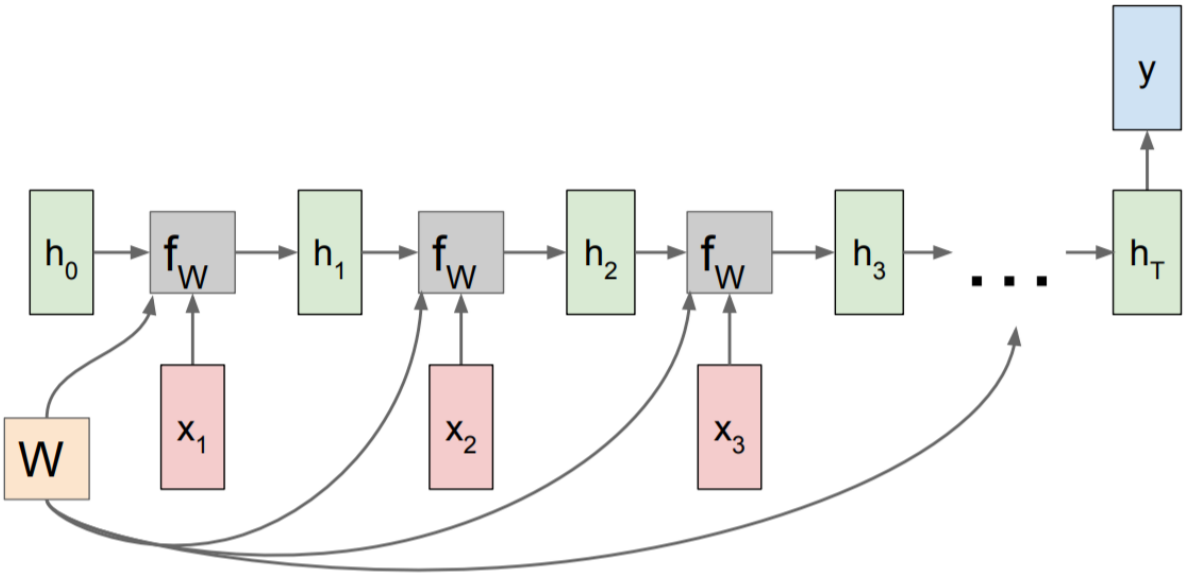
- Los **pesos se reutilizarn en cada instante** t:
  - aprende patrones independientemente de su posición.
  - reducción en el número de parámetros.
- Podemos desarrollar la recurrencia a lo largo de t (ver siguientes):


Single layer RNN
Unfold
Multilayer RNN
Unfold


Each hidden unit receives 2 inputs
Single layer RNN
Unfold
Multilayer RNN
Unfold

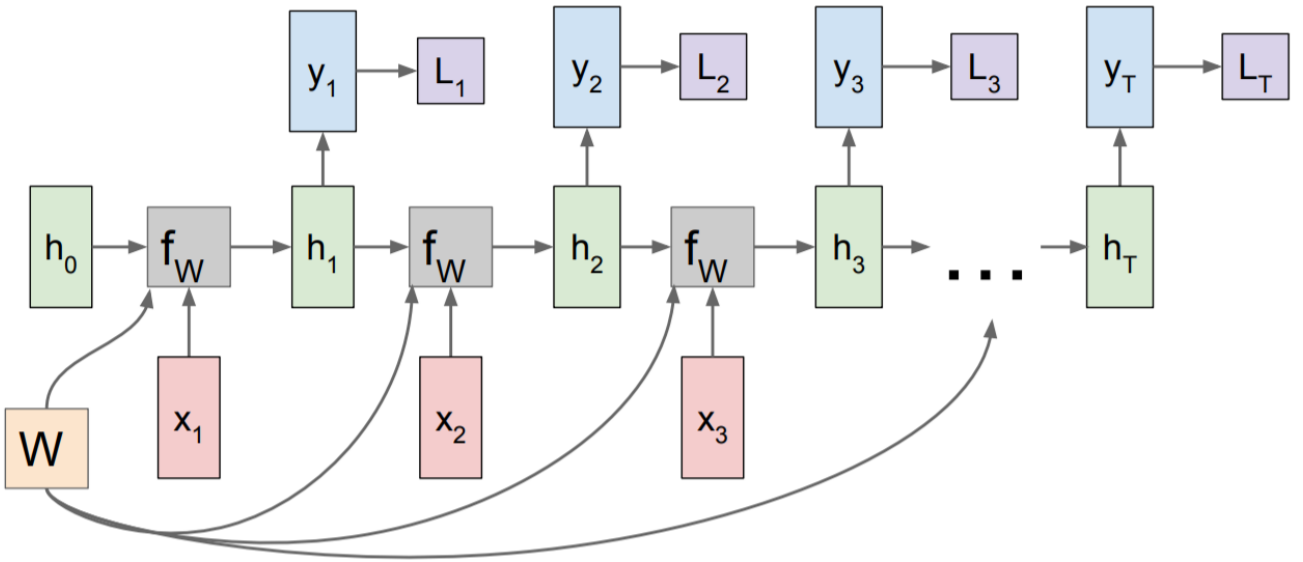
Grafo computacional

- Ejemplo de arquiectura **many-to-one** (ej: asignar sentimiento (+ ó -) a un tweet (secuencia de palabras))



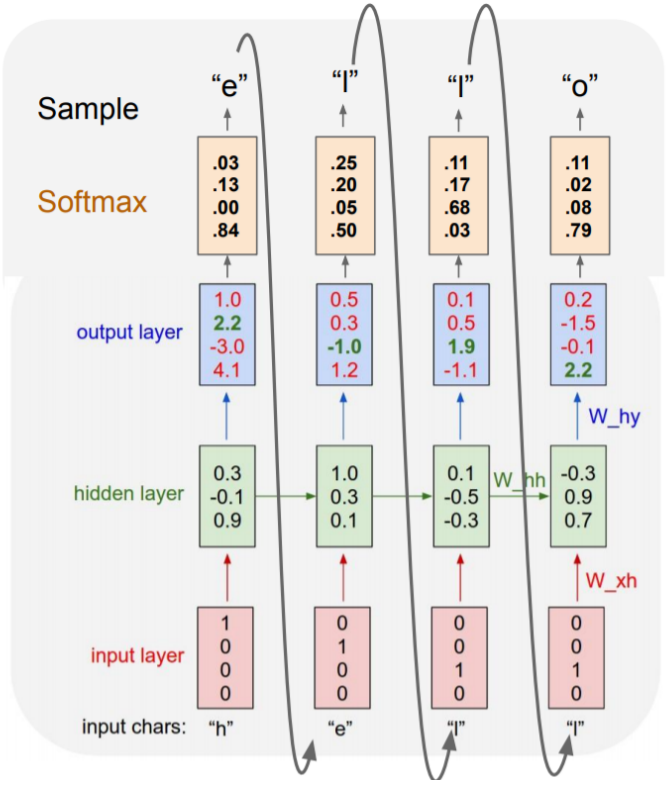
Grafo computacional

- Ejemplo de arquiectura **many-to-many** (ej: predicción de una señal: en cada x_t predecimos x_{t+1} con el valor y_t))



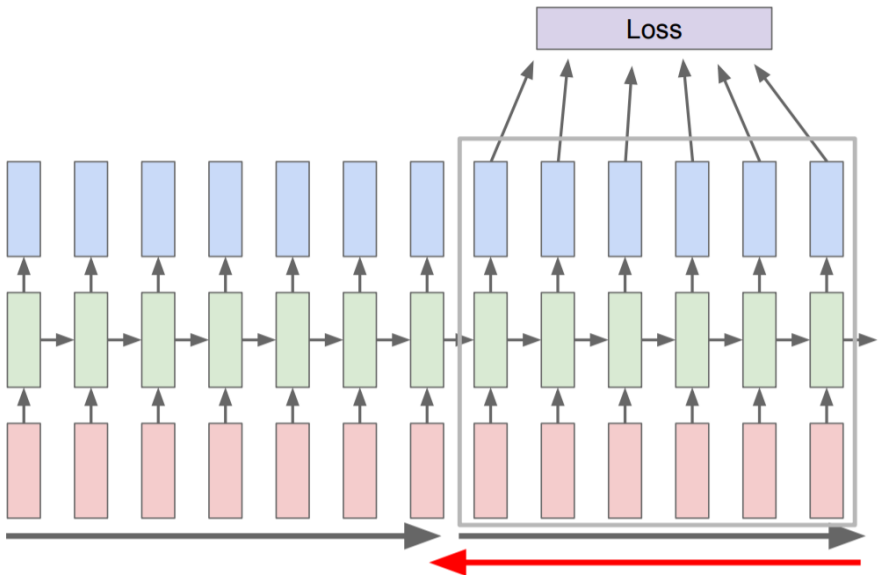
Ejemplo (many to many)

- Predicción del siguiente carácter.
- Representamos cada carácter mediante OHE, nuestro vocabulario es: h, e, l, o $\in \{0, 1\}^4$
  .



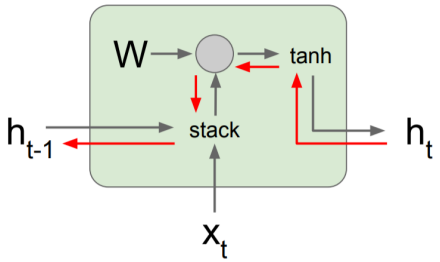
Entrenamiento

- Mismo esquema de backpropagación que para las redes estándar, solo que ahora se propaga hacia atrás en el tiempo (como si la RNN estuviera desenrrollada).
- Para mejorar la estabilidad, solo se propaga hacia atrás un número de pasos limitado (**truncated backpropagation**)
- SGD o Adam.



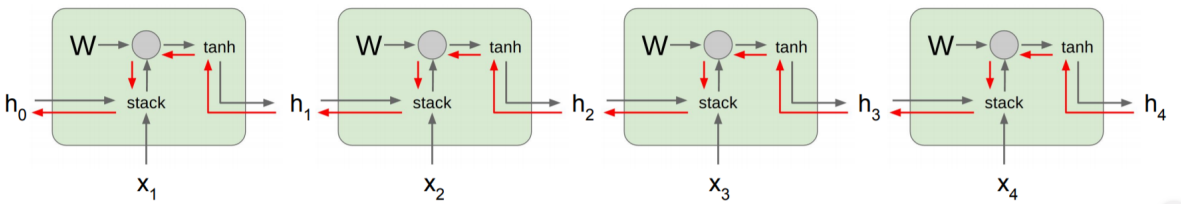
Backpropagation

- La backpropagación desde h_t a h_{t-1} necesita multiplicar por W.



$$
\begin{aligned}
h_t &= \tanh(W_{hh}h_{t-1} + W_{xh}x_t) \\
&= \tanh\left((W_{hh} \quad W_{hx})\begin{pmatrix} h_{t-1} \\ x_t \end{pmatrix}\right) \\
&= \tanh\left(W\begin{pmatrix} h_{t-1} \\ x_t \end{pmatrix}\right)
\end{aligned}
$$

- Al hacerlo a lo largo del tiempo:



- Calcular el gradiente para h_0 implica multiplicaciones por W.

Problema con los gradientes

1. El mayor valor singular (autovalor) de W es > 1: explosión del gradiente.
    - Solución: acotar manualmente el gradiente (**gradient clipping**).
2. El mayor valor singular (autovalor) de W es < 1: desvanecimiento del gradiente.
    - Solución: nuevas arquitecturas (LSTM, GRU).

Soluciones al problema de los gradientes

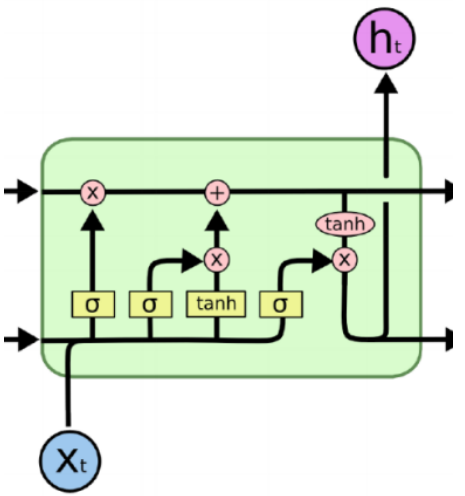
1. Acotar el valor máximo del gradiente: solo resuelve el problema de la "explosión" del gradiente

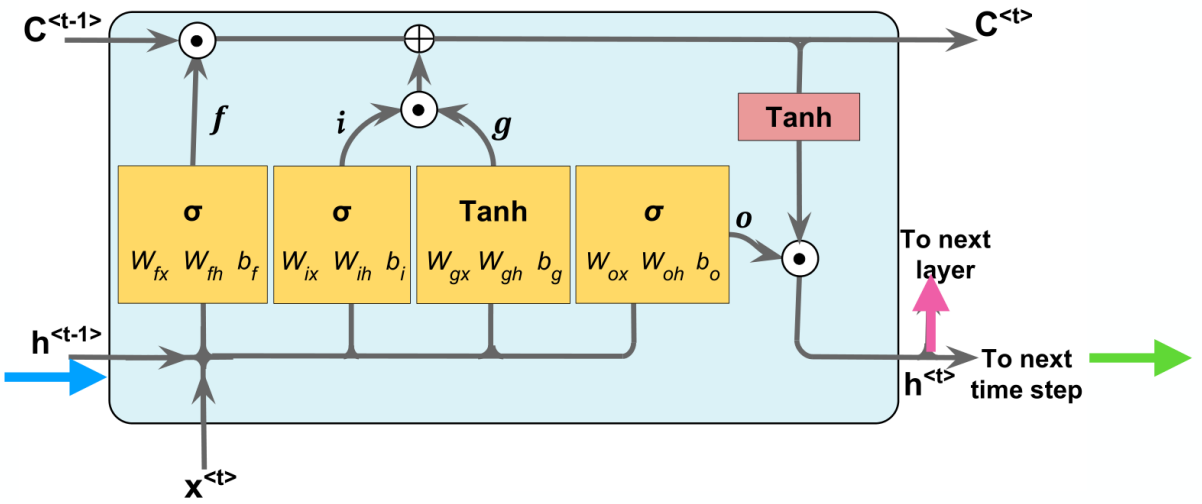
2. Limitar el número de pasos hacia atrás que se usan a la hora de hacer la propagación (*Truncated backpropagation through time*, TBPTT)

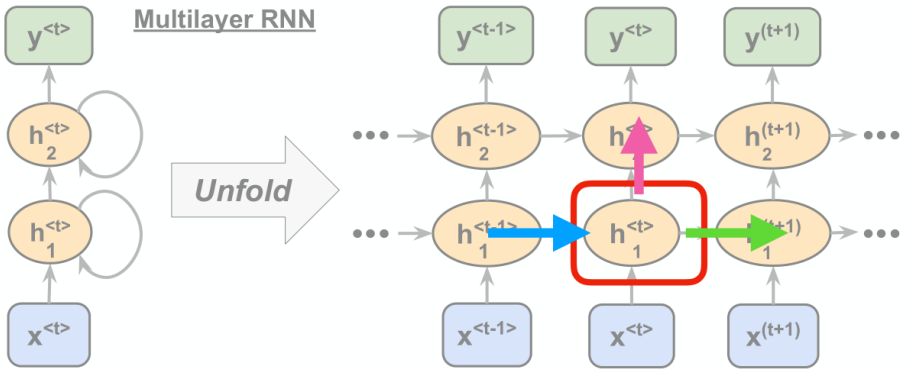
3. *Long short-term memory* (LSTM), usa una celda de memoria para modelar dependencias muy separadas en el tiempo y evitar el problema de la "explosión" de gradientes

Long-Short Term Memory network (LSTM)

- Introducidas por Hochreiter en 1997, aunque no se usaron mucho hasta esta década (aplicaciones en NLP).
- Añadimos un nuevo estado (cell, c_t) y varias compuertas (gates) para mejorar el flujo del gradiente.

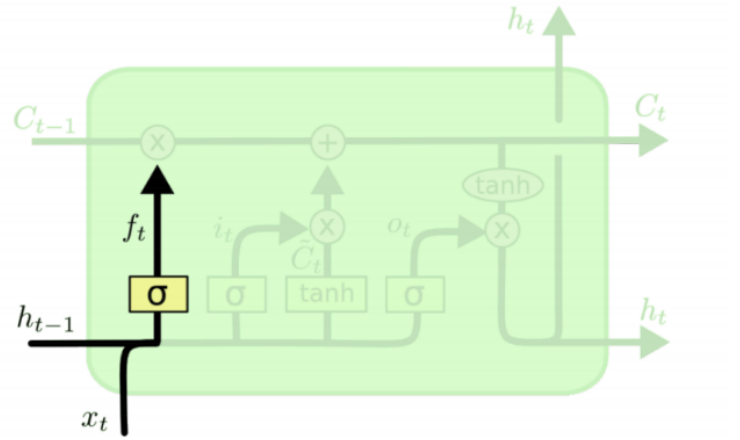



C<t-1>
C<t>
f
i
g
Tanh
σ
σ
Tanh
σ
o
W_fx W_fh b_f
W_ix W_ih b_i
W_gx W_gh b_g
W_ox W_oh b_o
To next layer
h<t-1>
h<t>
To next time step
x<t>


Multilayer RNN
y<t>
h2<t>
h1<t>
x<t>
Unfold
y<t-1>
y<t>
y(t+1)
h2<t-1>
h2(t+1)
h1<t-1>
h1<t>
x<t-1>
x<t>
x(t+1)

Forget gate

- Compuerta de **olvido** (forget)
- Decide qué partes olvidar del estado anterior
- Cerca de 0, olvidar, cerca de 1, almacenar



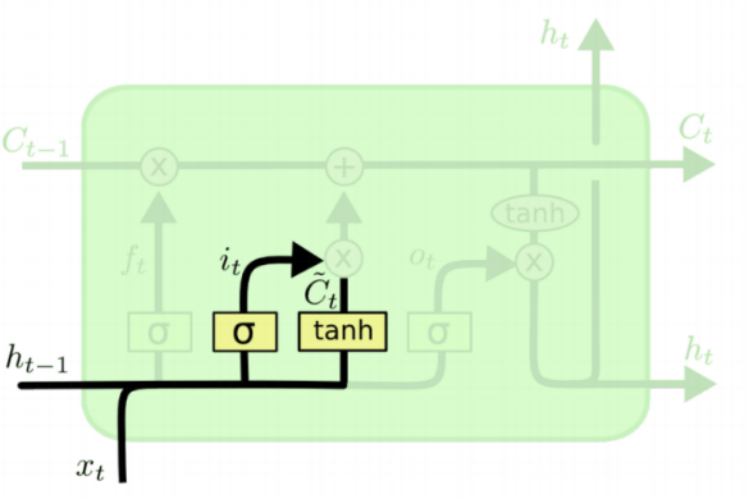
$$f_t = \sigma(W_f \, [h_{t-1}, x_t] + b_f)$$

Input gate

- Compuerta de **entrada** (input)
- Decide qué modificar para el nuevo estado,

$$C_t = C_{t-1} + i_t * \tilde{C}_t$$

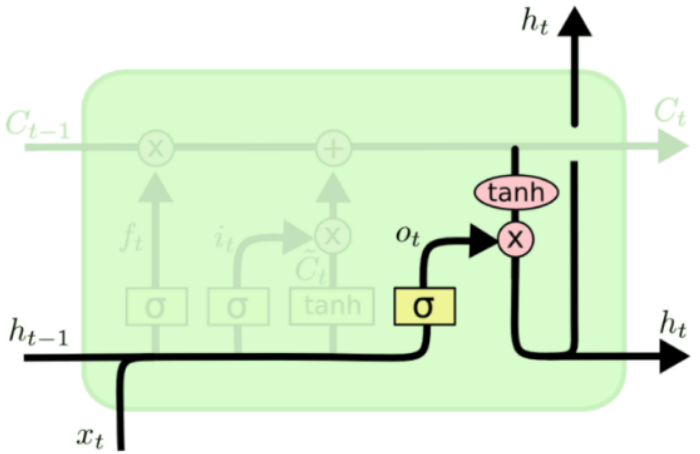
- Si i_t es 0, el estado no se actualiza



$$i_t = \sigma(W_i \left[h_{t-1}, x_t\right] + b_i)$$
$$\tilde{C}_t = \tanh(W_C \left[h_{t-1}, x_t\right] + b_C)$$

Output gate

- Compuerta de **salida** (output)
- Determina cual va a ser el siguiente estado oculto (*hidden state*)



$$o_t = \sigma(W_o \left[h_{t-1}, x_t\right] + b_o)$$
$$h_t = o_t * \tanh(C_t)$$

LSTM en resumen

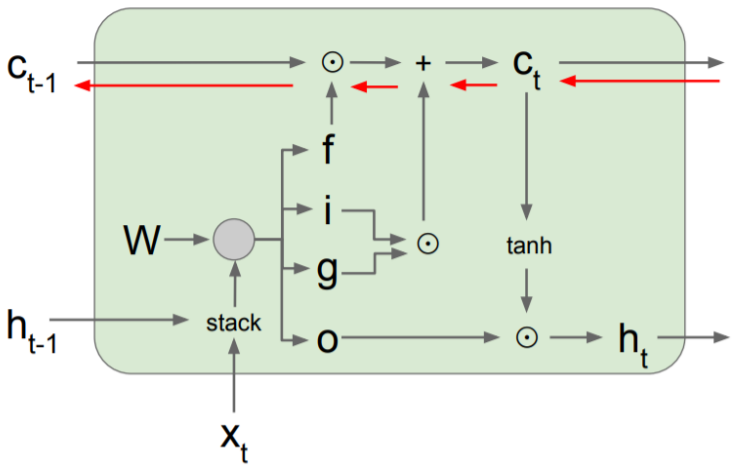
- Las ecuaciones completas son

$$\begin{pmatrix} i \\ f \\ o \\ g \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma \\ \sigma \\ \sigma \\ \tanh \end{pmatrix} W \begin{pmatrix} h_{t-1} \\ x_t \end{pmatrix}$$

$$c_t = f \odot c_{t-1} + i \odot g$$

$$h_t = o \odot \tanh(c_t)$$

- Ahora para hacer backpropagación de c_t a c_{t-1} no hace falta multiplicar por W!!



Resumen

- Útiles para el procesamiento de datos secuenciales
- La RNN original es simple pero no funciona demasiado bien
- Arquitecturas modernas incluyen celdas LSTM
- El gradiente de las RNNs puede,
    1. **explotar**, se controla acotándolo (clipping)
    2. **desvanecerse**, se arregla usando conexiones aditivas (LSTM)
- Existen nuevas arquitecturas, por ejemplo las **gated recurrent units** (GRU)
    - algo más sencillas
    - usan el mismo mecanismo de compuertas

Ejemplo aplicación: procesamiento de texto

De n-gramas a word embeddings (1)

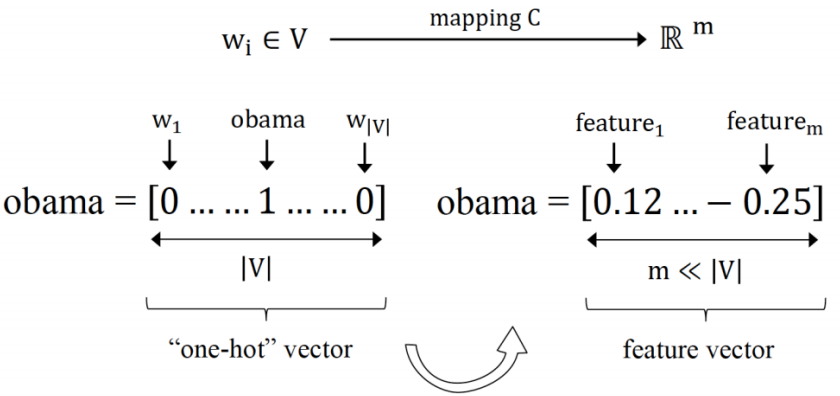
- **Bag of words**: contamos la aparición (o frecuencia) de cada palabra: El atento alumno $\rightarrow$ (El), (atento), (alumno).
- Representaríamos la frase como

$$(0, \ldots, 1, 0, \ldots, 0, 1, 0, \ldots, 1, 0) \in \{0, 1\}^{|V|}$$

- donde $|V|$ es el número de palabras de nuestro vocabulario V.
- Problema: no tiene en cuenta el orden (y contexto) de las palabras. Solución (parcial):
- **2-gramas**: contamos ahora pares consecutivos de palabras: (El, atento), (atento, alumno).
- Ahora la representación es sobre $\{0, 1\}^{|V|^2}$.
- **n-gramas**: explosión combinatoria...
- Ha sido lo estándar hasta ~ 2013. ¿Podemos encontrar una representación más compacta?

De n-gramas a word embeddings (2)

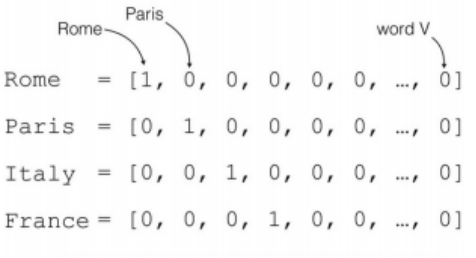
- Cada palabra (representada mediante OHE) se mapea a un espacio continuo: $\{0,1\}^{|V|} \rightarrow \mathbb{R}^m$.
- Mediante una transformación lineal $z_i = Ew_i$ donde E es una matriz de tamaño $m \times |V|$. Típicamente $m = 300 << |V|$.

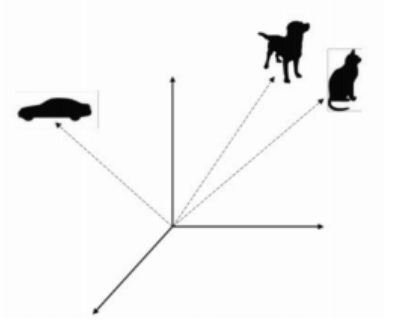


- **Combaten la catástrofe de la dimensionalidad**, mediante una compresión de los datos, pasando de un espacio discreto a uno continuo.
- Al proyectar a un espacio continuo, esperamos que palabras parecidas (sinónimos) se encuentren cerca (bajo la métrica euclidea).

Álgebra lineal en el espacio de palabras (1)

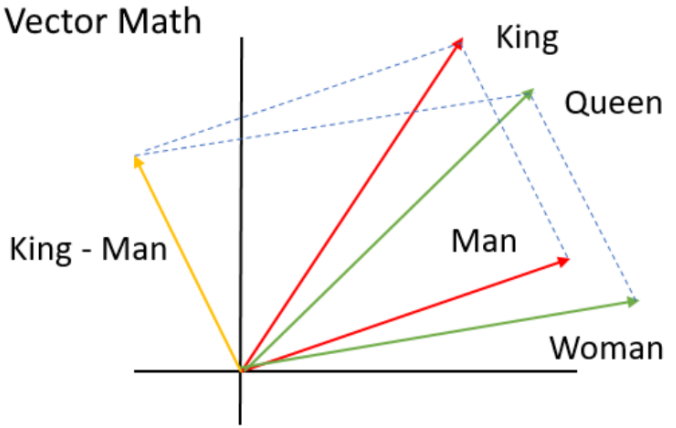
- **One-hot encoding**: no hay noción de vecindad entre palabras, cualquier palabra está igual de lejos que las demás.
- **Word embeddings** (codificación densa): podemos usar la distancia euclídea (u otras) en $\mathbb{R}^m$.





Álgebra lineal en el espacio de palabras (2)

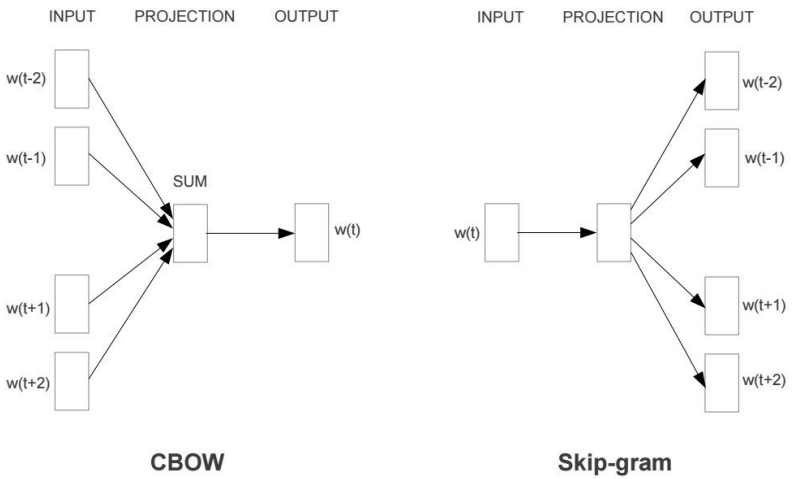
- Como estamos en un espacio vectorial ($\mathbb{R}^m$), podemos realizar operaciones con vectores (word embeddings).
- Aprenden ciertas analogías entre palabras.



king - Man + Woman = Queen

word2vec (2013)

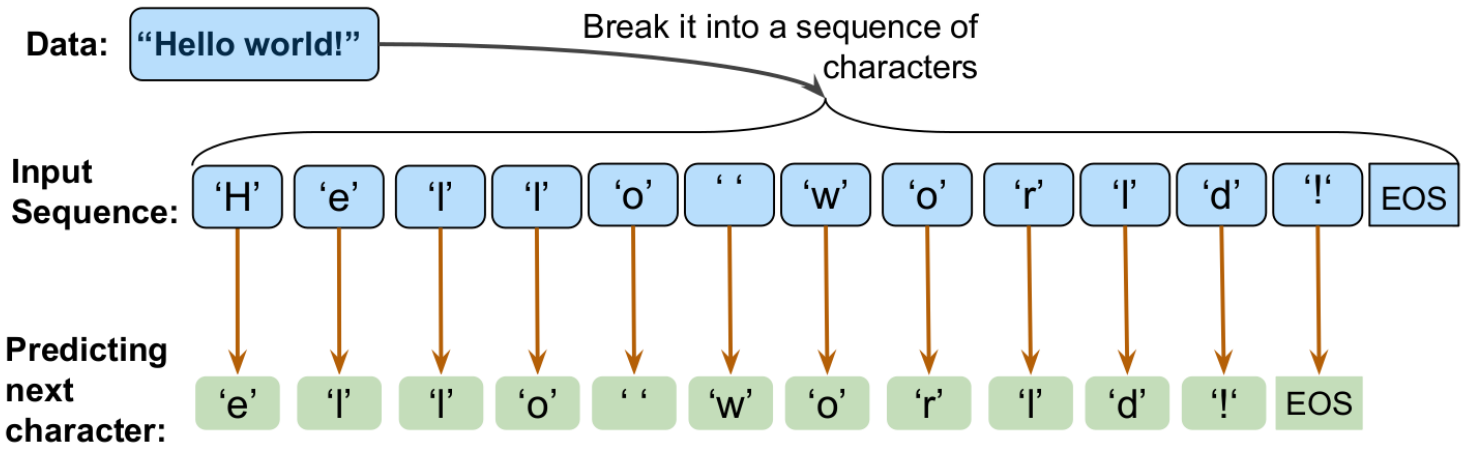
- La pregunta del millón: **¿cómo obtener la matriz E de word embeddings?**
- Basado en la **hipótesis distribucional** del lenguaje (J. Firth 1957): el significado de una palabra puede inferirse a partir del contexto (palabras vecinas en las que aparece)
- El modelo word2vec presenta dos variantes:
  - **CBoW**: dado un contexto, predecir palabra central.
  - **Skip-gram**: dada la palabra central, predecir el contexto.



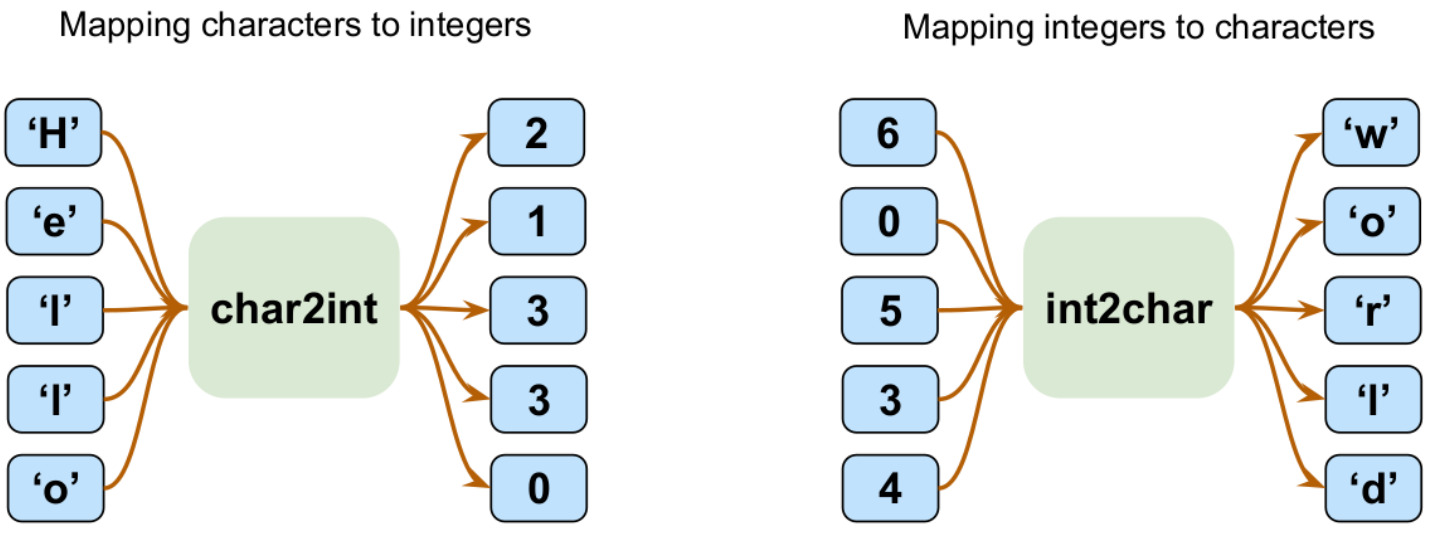
Uso de embeddings preentrenados

- Los embeddings pueden inicializarse aleatoriamente (como los pesos de una red neuronal estándar) y aprenderse durante la tarea
- Es más habitual cargar unos **word embeddings preentrenados**, para ahorrar tiempo y datos
- Una vez ya tenemos los embeddings, se los acoplamos a cualquier modelo (regresión logística, red neuronal) y procedemos con el entrenamiento
- https://fasttext.cc/ mejora de word2vec (contiene información de prefijos y sufijos).
- https://fasttext.cc/docs/en/crawl-vectors.html en castellano, entrenados sobre los artículos de la Wikipedia y CommonCrawl.

Preprocesamiento para RNN a nivel de caracteres



Definir diccionarios para mapear caracteres a enteros



La salida y se crea desplazando x una posición, ya que queremos predecir el siguiente carácter