# Seq2seq и Трансформер

#### План

- Постановка задачи Seq2seq
- Рекуррентные сети для Seq2seq
- Механизм внимания
- Трансформер
- Метрики качества Seq2seq
- Методы выбора токенов из их распределения

# Seq2seq

Перевод входной последовательности в новую последовательность

 $\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} \longrightarrow \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_4 \\ y_5 \end{bmatrix}$ 

Длины последовательностей могут отличаться

# Примеры Seq2seq

#### 1. Машинный перевод

Русский Английский

#### 2. Суммаризация

Длинный текст — короткий текст

#### 3. Изменение стиля текста

Грубый **→** Вежливый Формальный **→** Неформальный

## Формальная постановка задачи

#### Генерация текста:

$$p(x_1, ..., x_m) = \prod_{i=1}^m p(x_i | x_{< i})$$

Seq2seq: добавляется условие

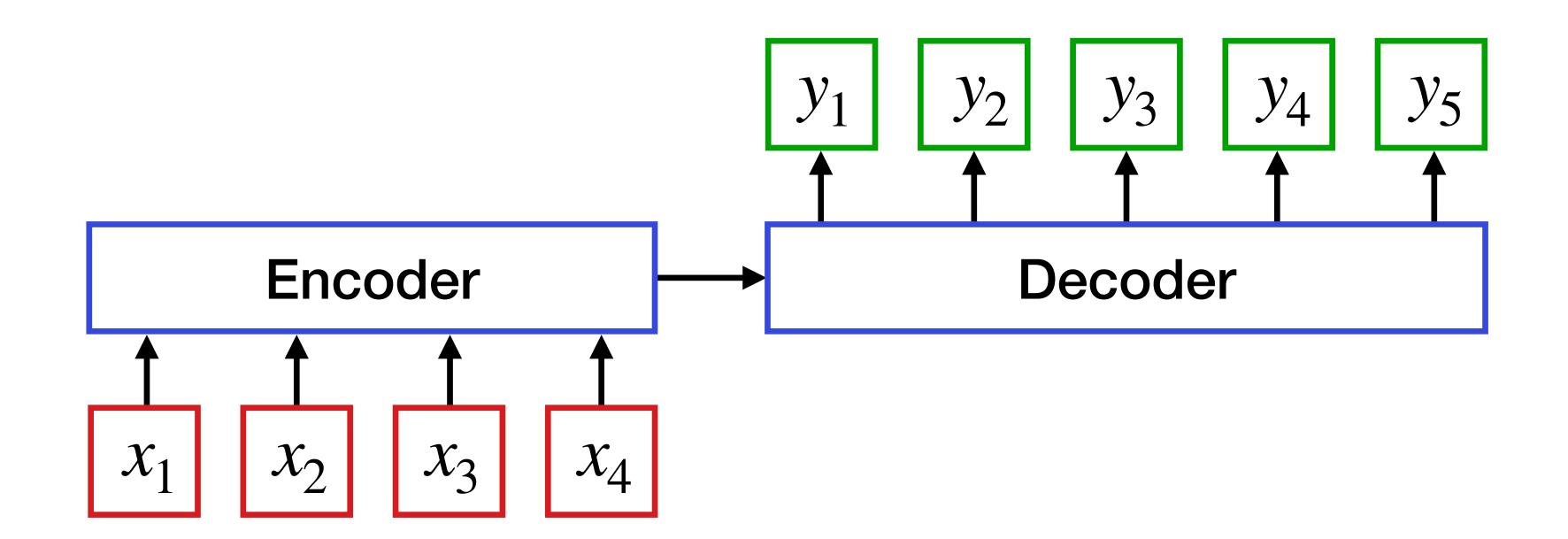
$$p(y_1, ..., y_n | x_1, ..., x_m) = \prod_{i=1}^n p(y_i | y_{< i}, x_1, ..., x_m)$$

х – входная последовательность

у – новая (выходная) последовательность

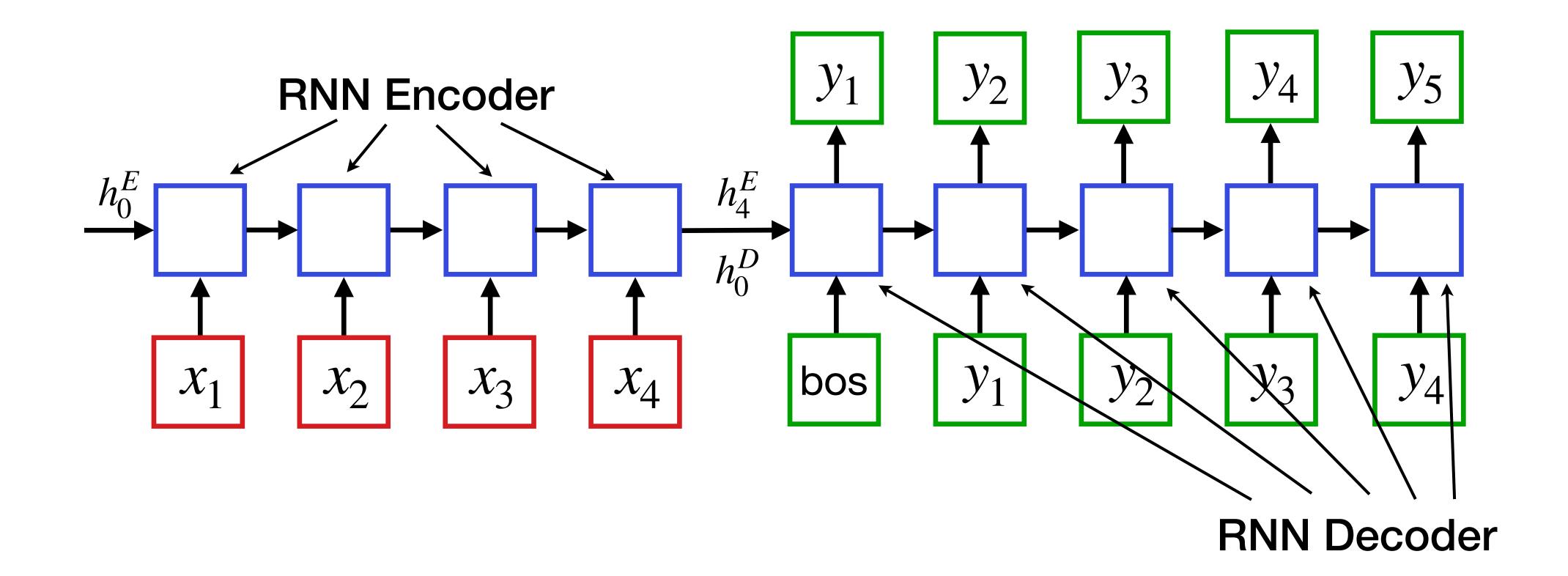
# Стандартный подход

- Входная последовательность кодируется моделью Encoder
- **Decoder** принимает выход кодировщика и генерирует новую последовательность



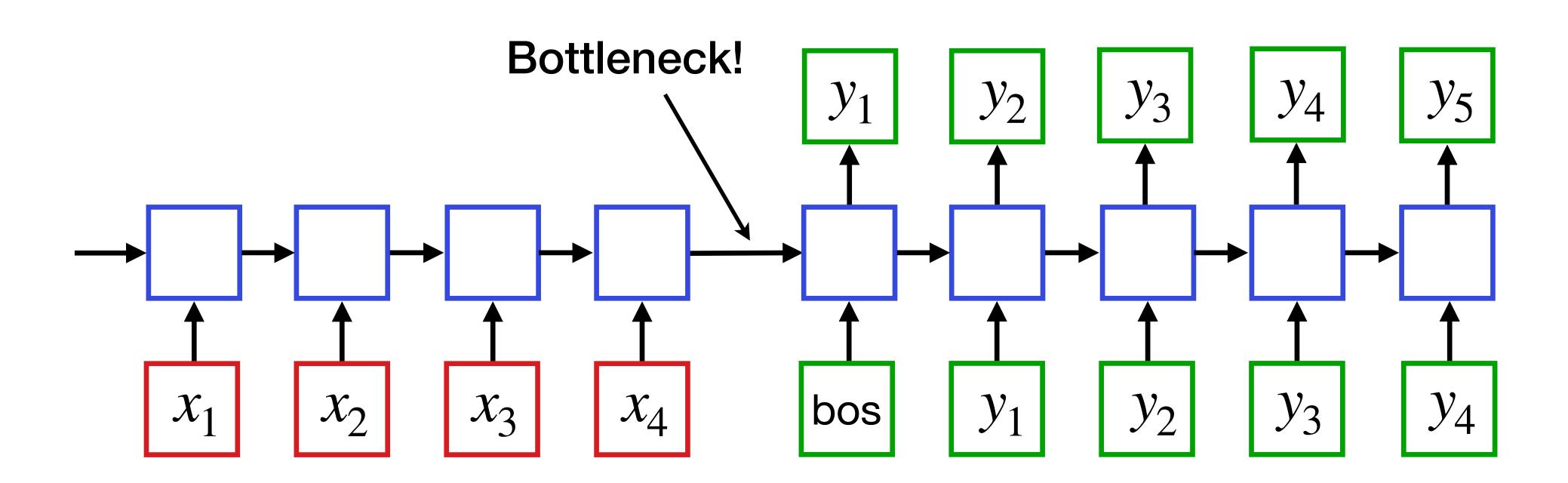
## RNN подход

- Входная последовательность кодируется моделью Encoder
- **Decoder** принимает выход кодировщика и генерирует новую последовательность



# RNN подход: проблема

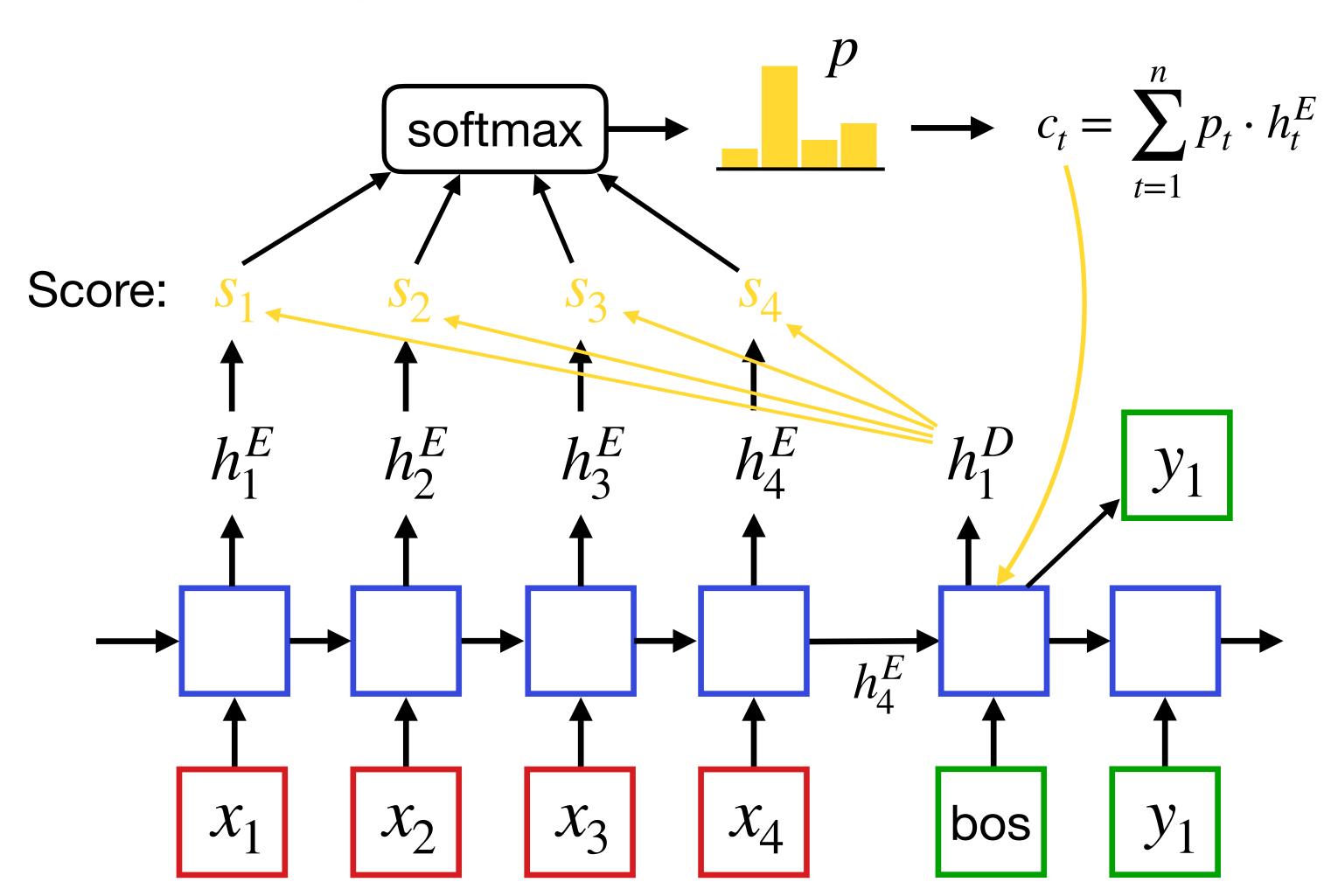
- Входной текст может иметь произвольную длину
- Мы пытаемся уместить всю информацию о нем в один вектор h
- Получаем бутылочное горлышко (bottleneck)



## Механизм внимания

#### Идея:

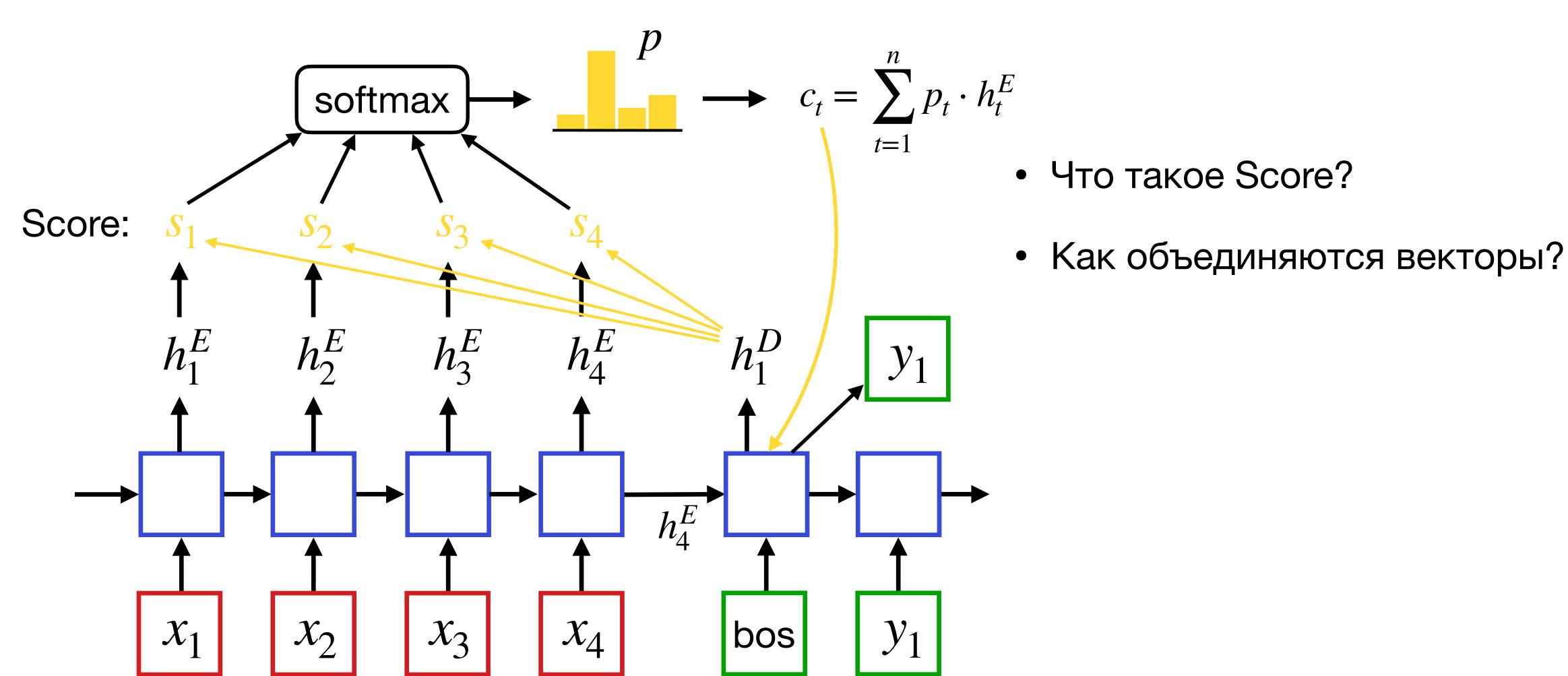
Позволим декодеру "смотреть" на произвольные выходы кодировщика



## Механизм внимания

#### Идея:

Позволим декодеру "смотреть" на произвольные выходы кодировщика

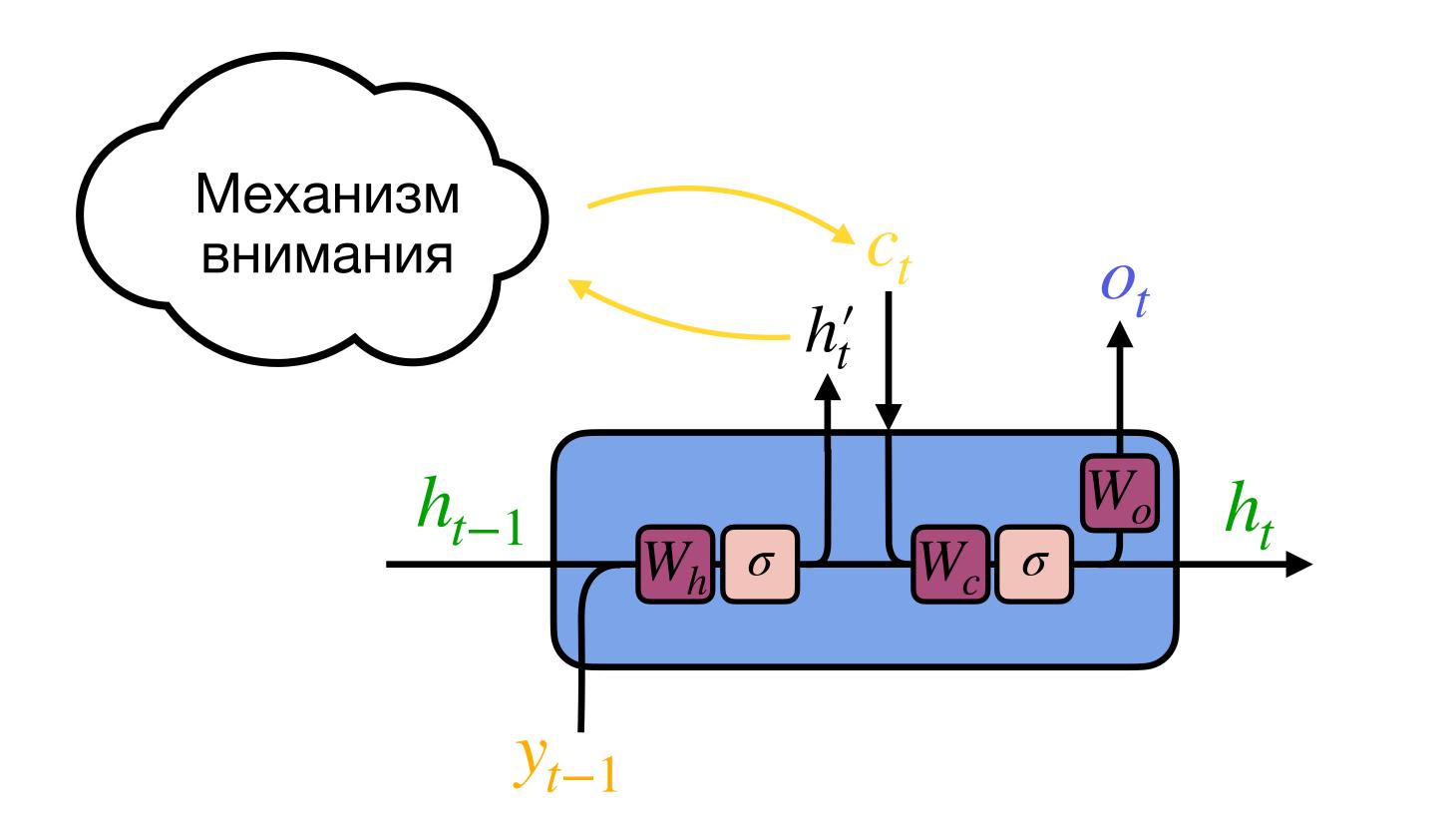


# Методы подсчета Score

$$s(h_E, h_D) \in \mathbb{R}$$

- 1. Скалярное произведение:  $s(h_E, h_D) = \langle h_E, h_D \rangle$
- 2. Билинейная форма:  $s(h_E,h_D) = h_E^T W h_D$  Обучаемая матрица
- 3. Любая произвольная функция

# Блок декодера



$$h'_t = \tanh(W_h[h_{t-1}, y_{t-1}] + b_h)$$

$$h_t = \tanh(W_c[h_t, c_t] + b_c)$$

$$o_t = W_o h_t + b_o$$

Другие варианты: [Bahdanau et al, 2014] [Luong el al, 2015]

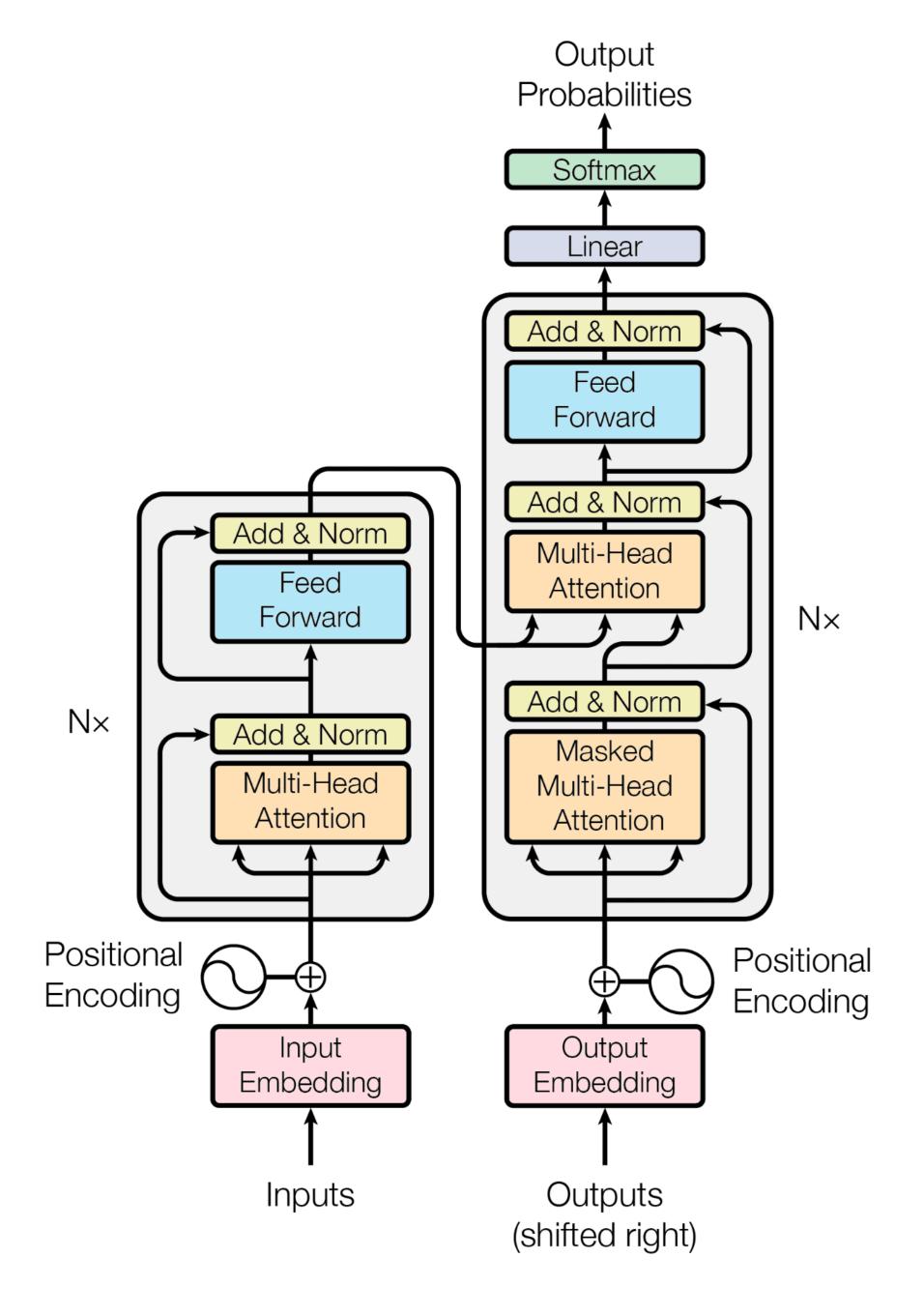
#### Transformer Attention is all you need

- Самая популярная архитектура с 2017 года
- ~200k цитат у оригинальной статьи

Разберемся с тем, как она работает

#### Компоненты:

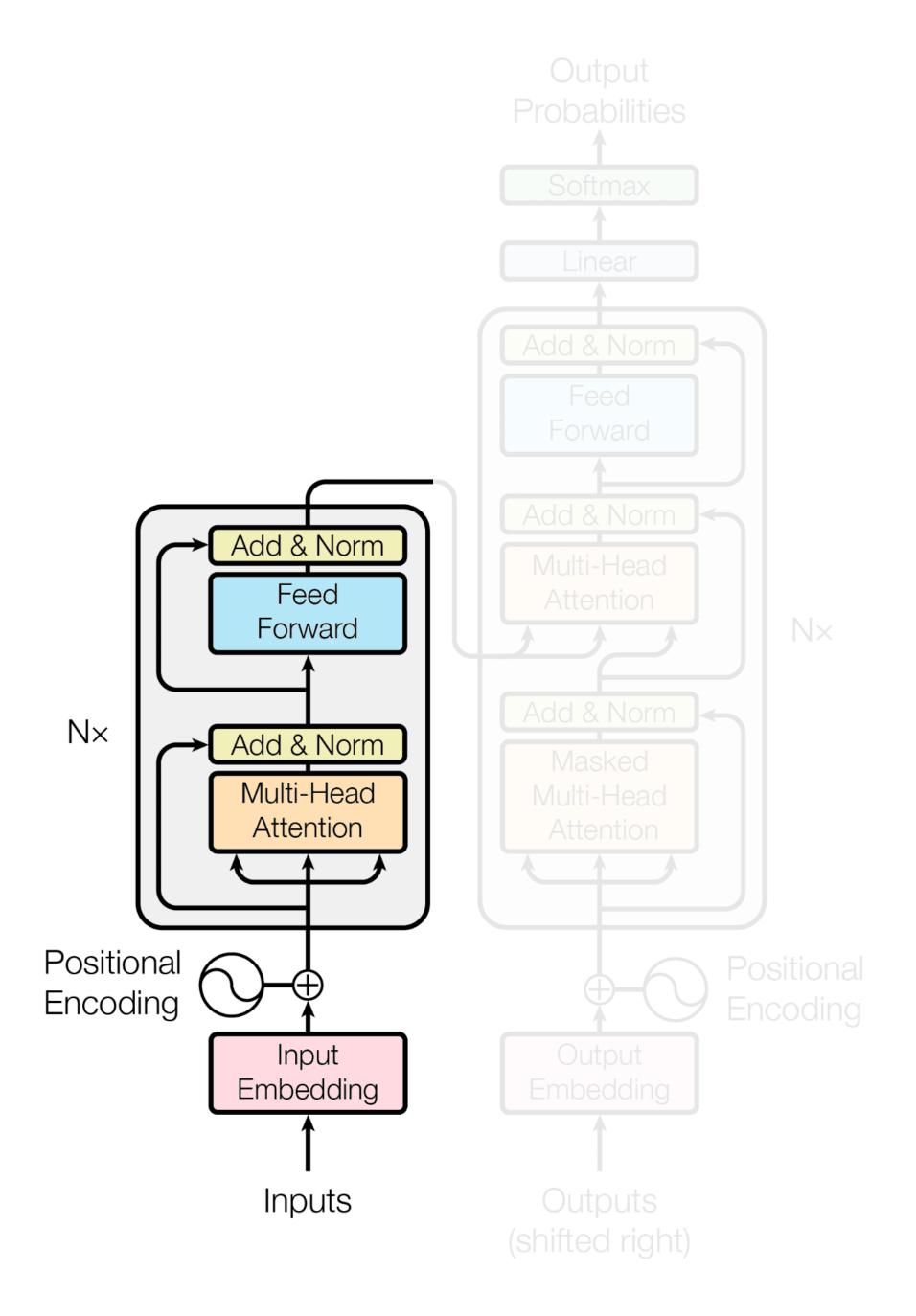
- 1. Multi-Head Self-attention
- 2. Feed Forward Network
- 3. Masked Multi-Head Self-attention
- 4. Positional Encodings



### Encoder

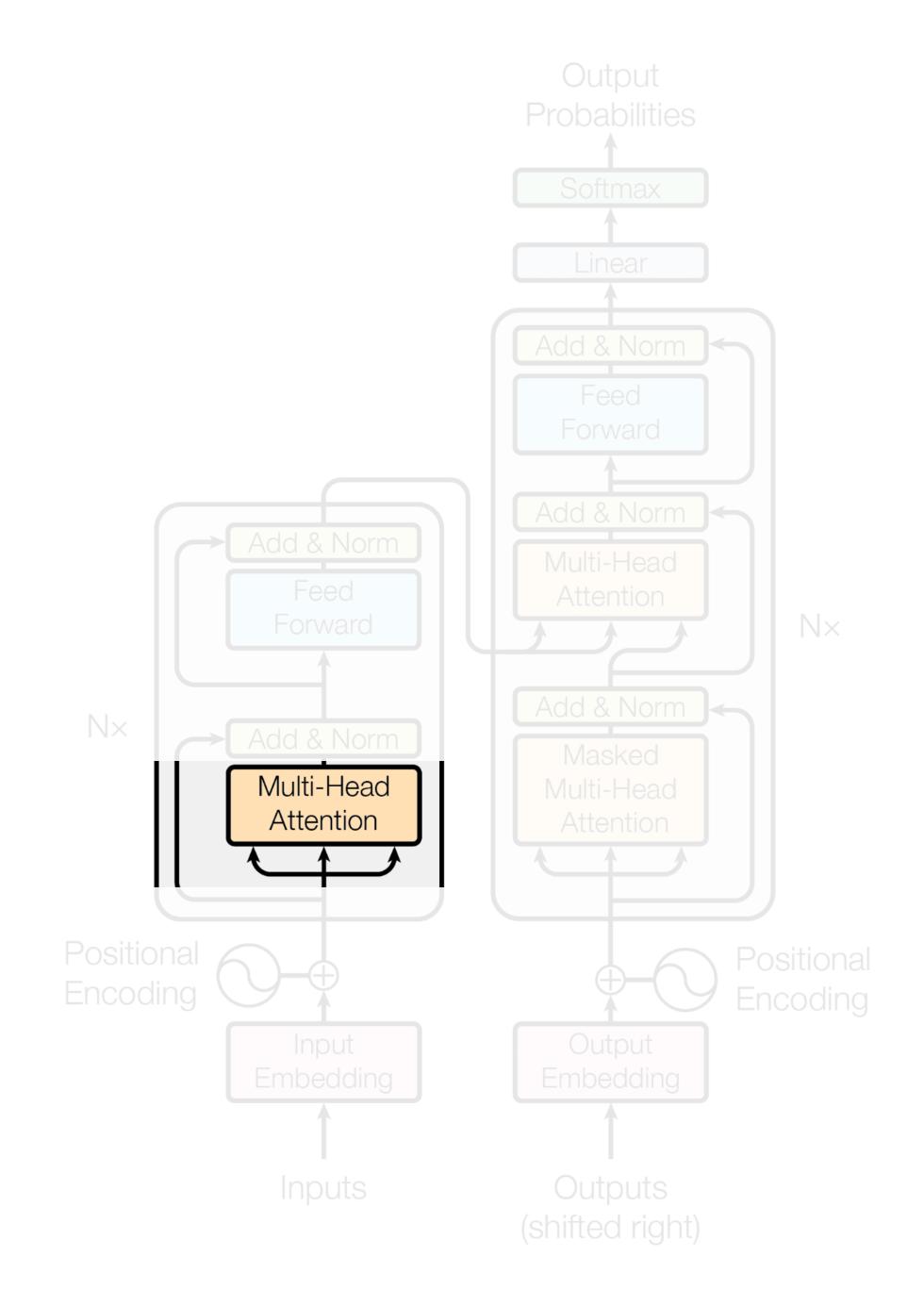
Encoder нужен для извлечения признаков из последовательности

- 1. Multi-Head Self-attention
- 2. Positional Encoding
- 3. Feed Forward Network
- 4. Add & Norm



#### Encoder

- 1. Multi-Head Self-attention
- 2. Positional Encoding
- 3. Feed Forward Network
- 4. Add & Norm



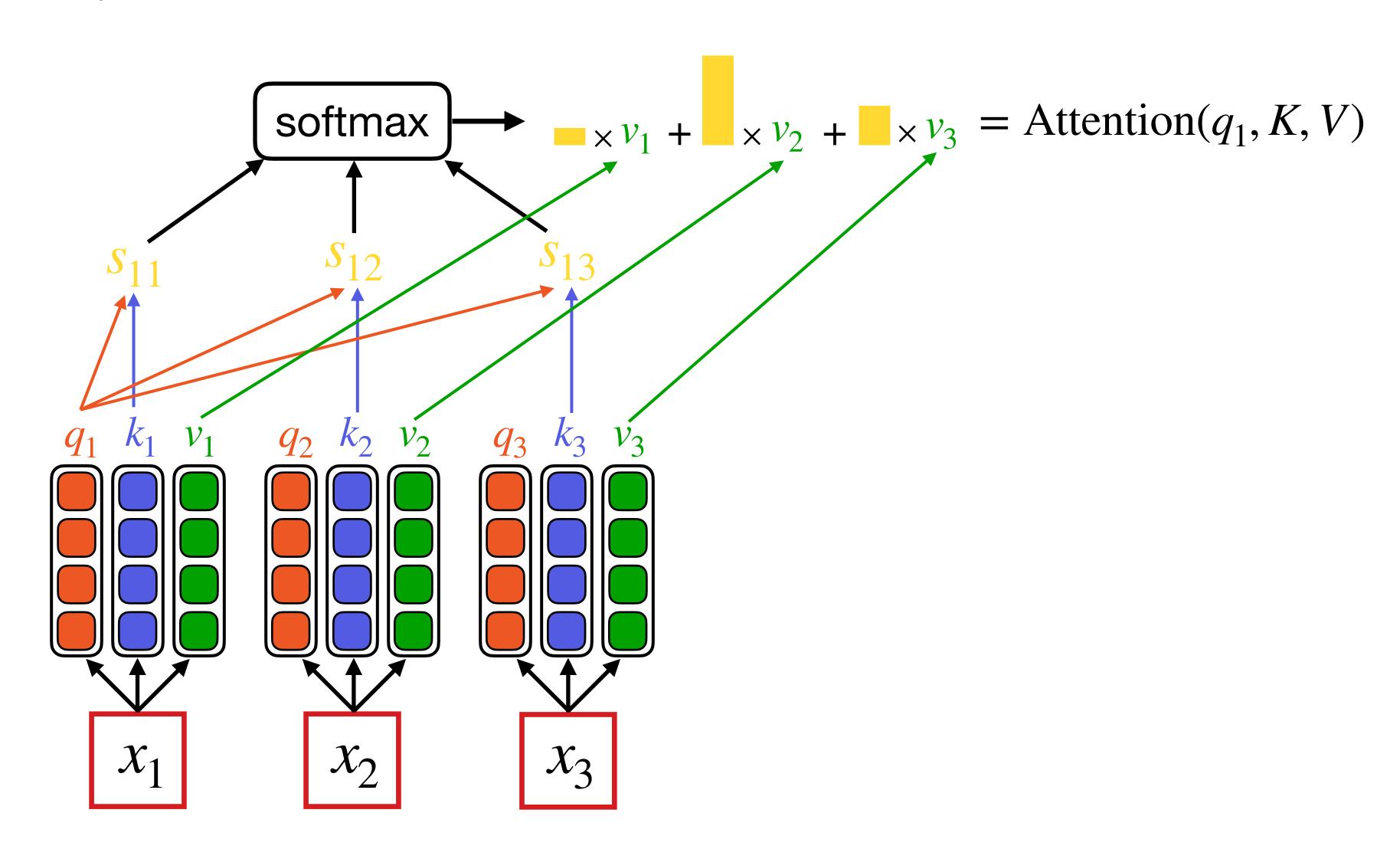
## Self-attention

Позволяет каждому токену смотреть на все остальные.

q – запрос (query)

k – ключ (key)

 $\nu$  – значение (value)



## Self-attention

Позволяет каждому токену смотреть на все остальные.

Query: 
$$Q=W_qx+b_q$$
  
Key:  $K=W_kx+b_k$   
Value:  $V=W_vx+b_v$   
 $x\in\mathbb{R}^{n\times d}$   
 $W_q,W_k,W_v\in\mathbb{R}^{d\times d}$ 

$$\mathsf{Attention}(Q,K,V) = \mathsf{softmax}\bigg(\frac{QK^T}{\sqrt{d}}\bigg)V$$
 нормировочная константа

### Multi-Head Self-attention

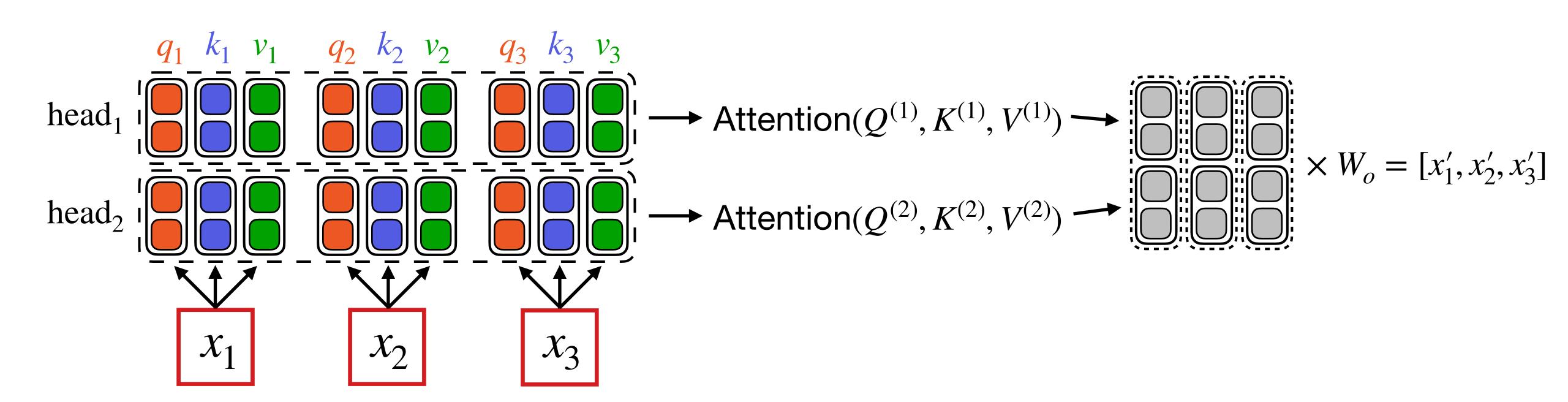
Self-attention позволяет запрашивать только информацию одного вида. А что если мы хотим узнать разные аспекты?

На улице ярко светит солнце как? что?

Разделим внимание на несколько голов

## Multi-Head Self-attention

- Делим каждый вектор q, k, v на равные части
- Считаем self-attention для каждой части отдельно
- Конкатенируем результат
- Домножаем на выходную матрицу



## Multi-Head Self-attention

Query: 
$$Q^{(i)} = W_q^{(i)} x + b_q^{(i)}$$

Key: 
$$K^{(i)} = W_k^{(i)} x + b_k^{(i)}$$

Value: 
$$V^{(i)} = W_v^{(i)} x + b_v^{(i)}$$

$$head^{(i)} = Attention(Q^{(i)}, K^{(i)}, V^{(i)})$$

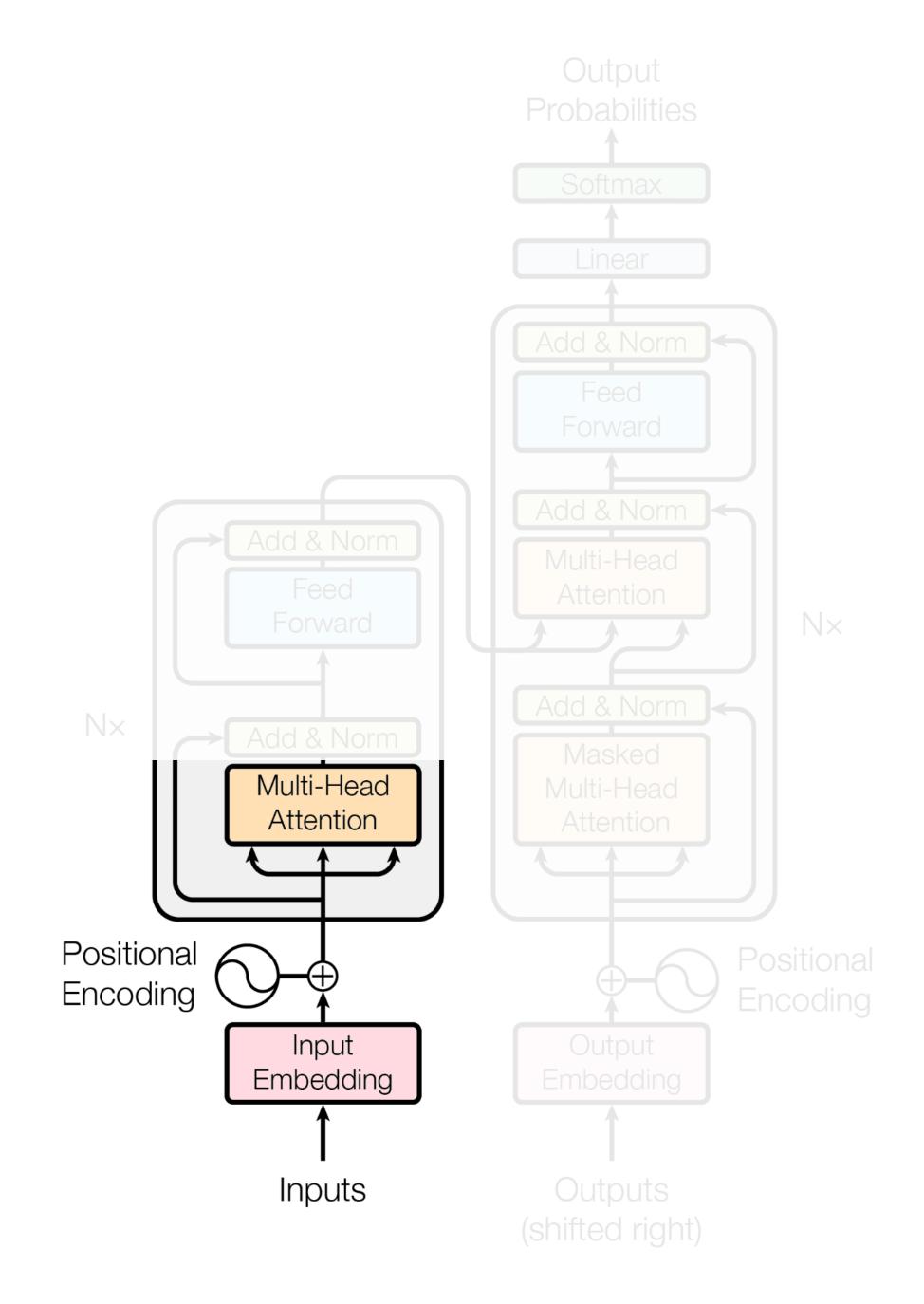
MultiHead
$$(Q, K, V) = W_o \times [\text{head}^{(1)}, ..., \text{head}^{(h)}]$$

$$W_q^{(i)}, W_k^{(i)}, W_v^{(i)} \in \mathbb{R}^{d_{head} \times d}$$

$$W_o \in \mathbb{R}^{d \times h \cdot d_{head}}$$

#### Encoder

- 1. Multi-Head Self-attention
- 2. Positional Encoding
- 3. Feed Forward Network
- 4. Add & Norm



# Self-attention не учитывает позиции

При перестановке токенов местами выход не изменится!

$$w = \operatorname{softmax}\left(\frac{q_i K^T}{\sqrt{d}}\right)$$

Attention $(q_i, K, V) = w_1 V_1 + \dots + w_n V_n$ 

=> Не сможем различить два случая

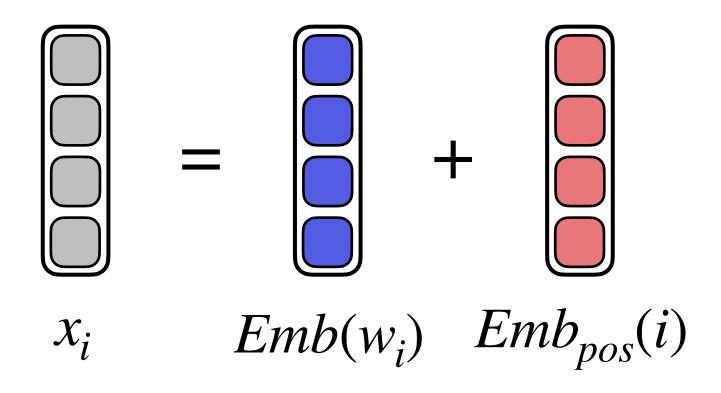
очень хорошо, совсем не плохо

VS

не очень хорошо, совсем плохо

# Positional Encoding

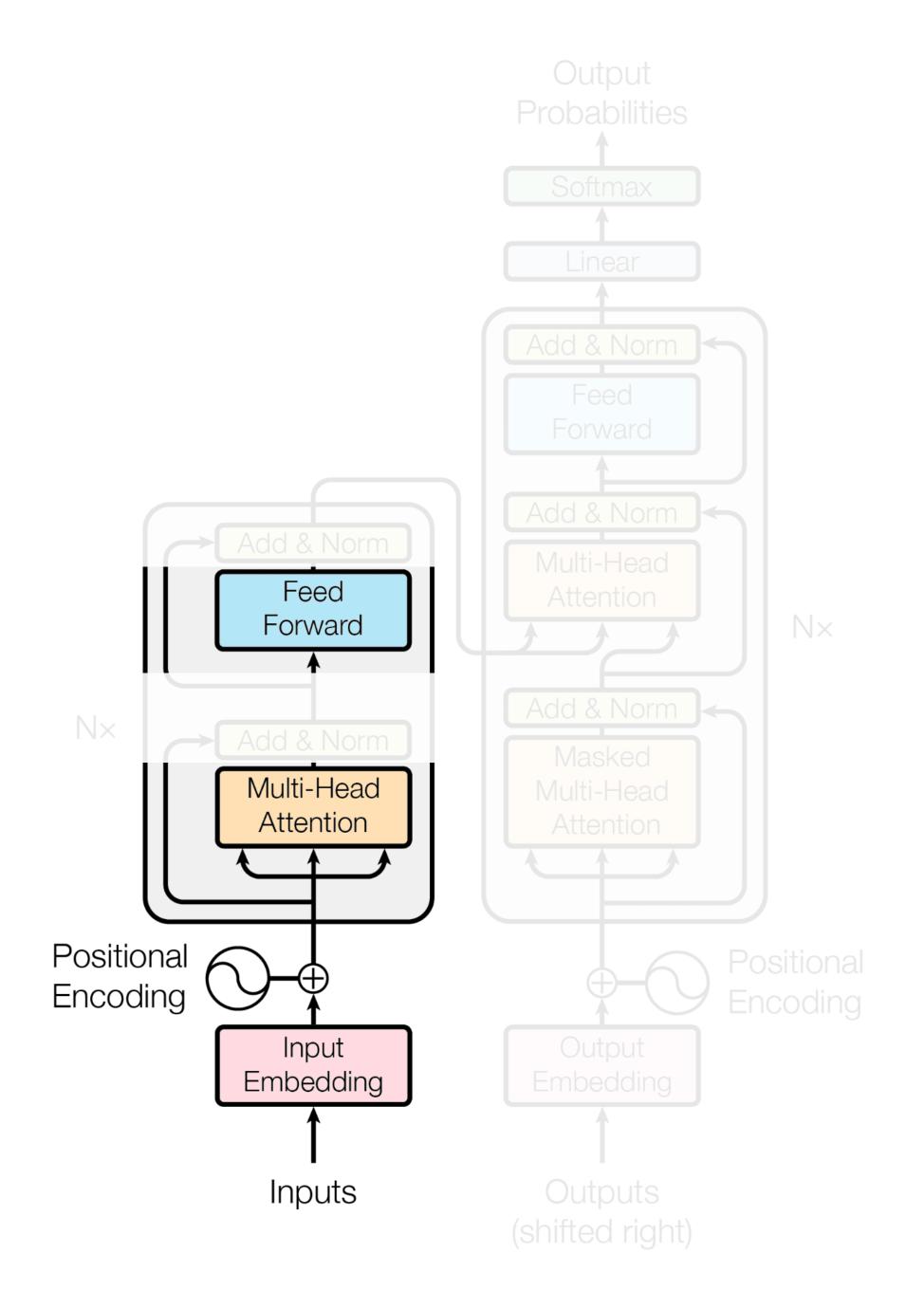
Необходимы для учета позиций токенов в тексте.



Эмбеддинги позиций учатся вместе с остальными параметрами модели.

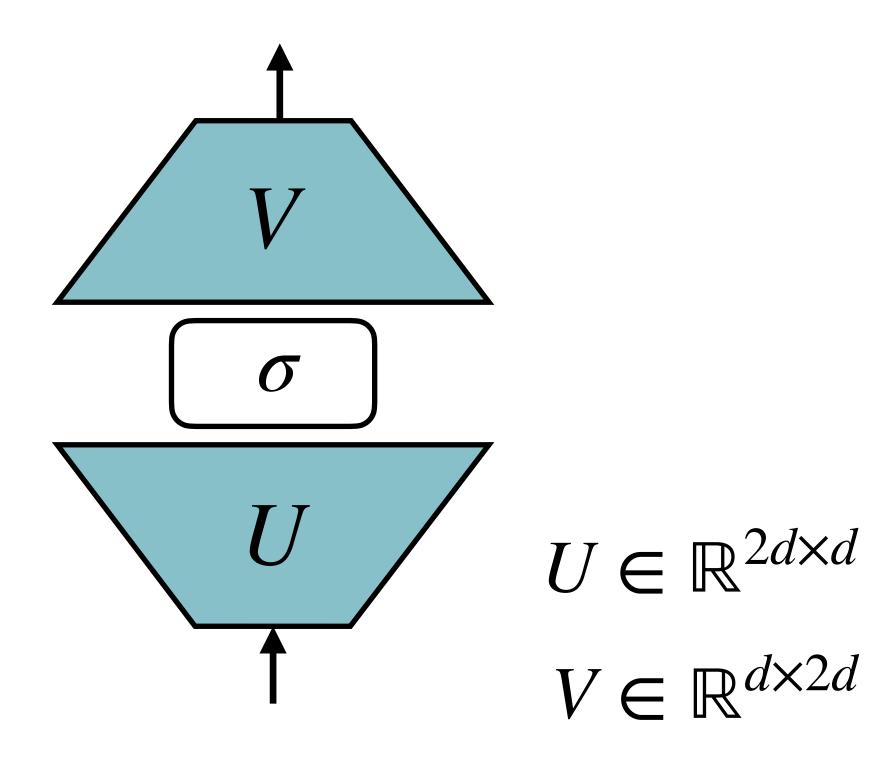
#### Encoder

- 1. Multi-Head Self-attention
- 2. Positional Encoding
- 3. Feed Forward Network
- 4. Add & Norm



### Feed Forward Network

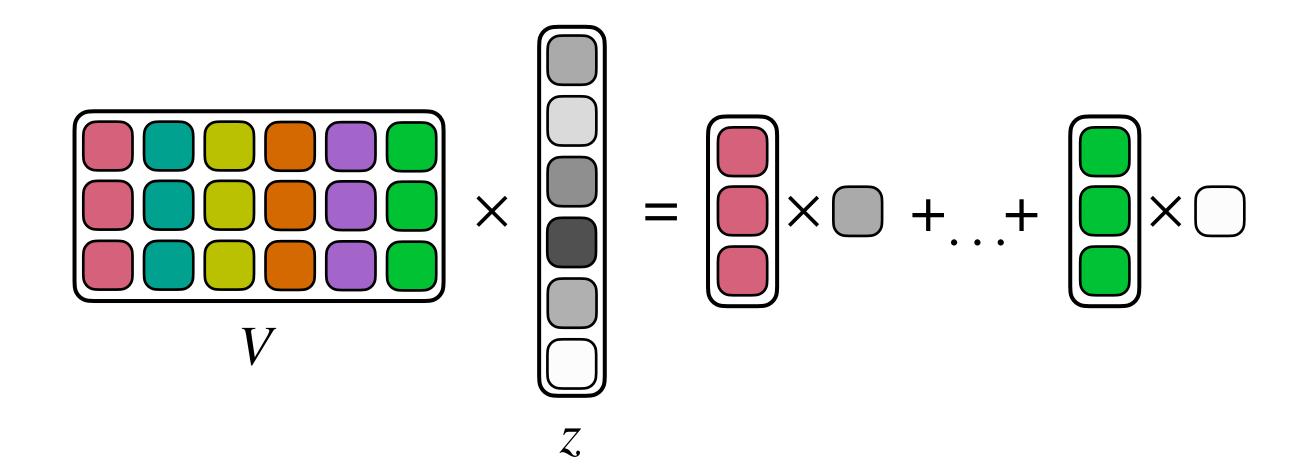
- Полносвязная сеть из двух слоев.
- Первый слой увеличивает размерность, второй возвращает обратно
- Используется для обработки информации, полученной после self-attention



# FFN: Как ещё можно думать?

- FFN играет роль базы данных!
- U содержит ключи, а V значения

$$\sigma(Ux_i) = z \in \mathbb{R}^{2d}$$

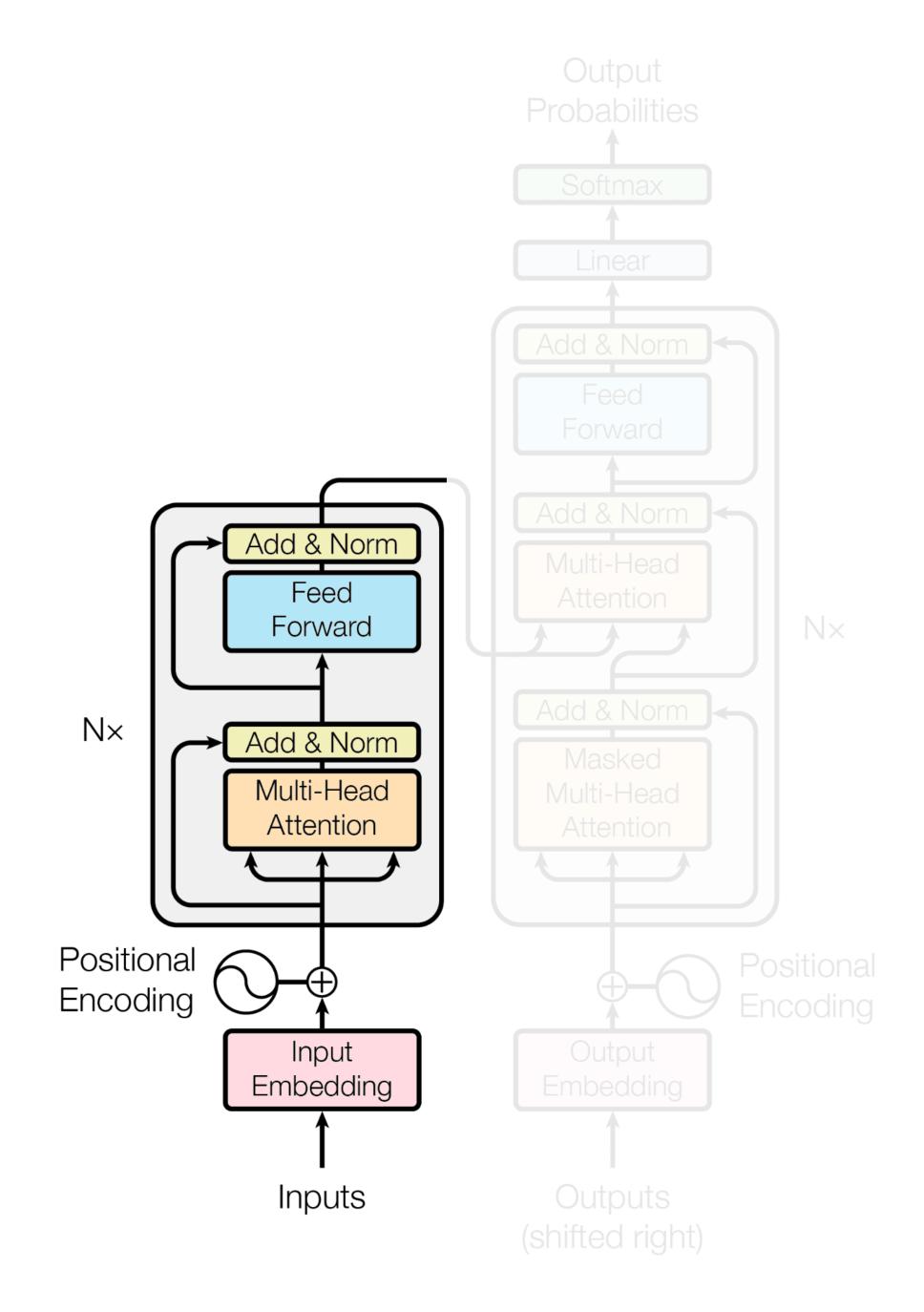


- Столбцы V определенные факты
- Мы взвешиваем эти факты согласно ключу z

#### Encoder

- 1. Multi-Head Self-attention
- 2. Positional Encoding
- 3. Feed Forward Network
- 4. Add & Norm

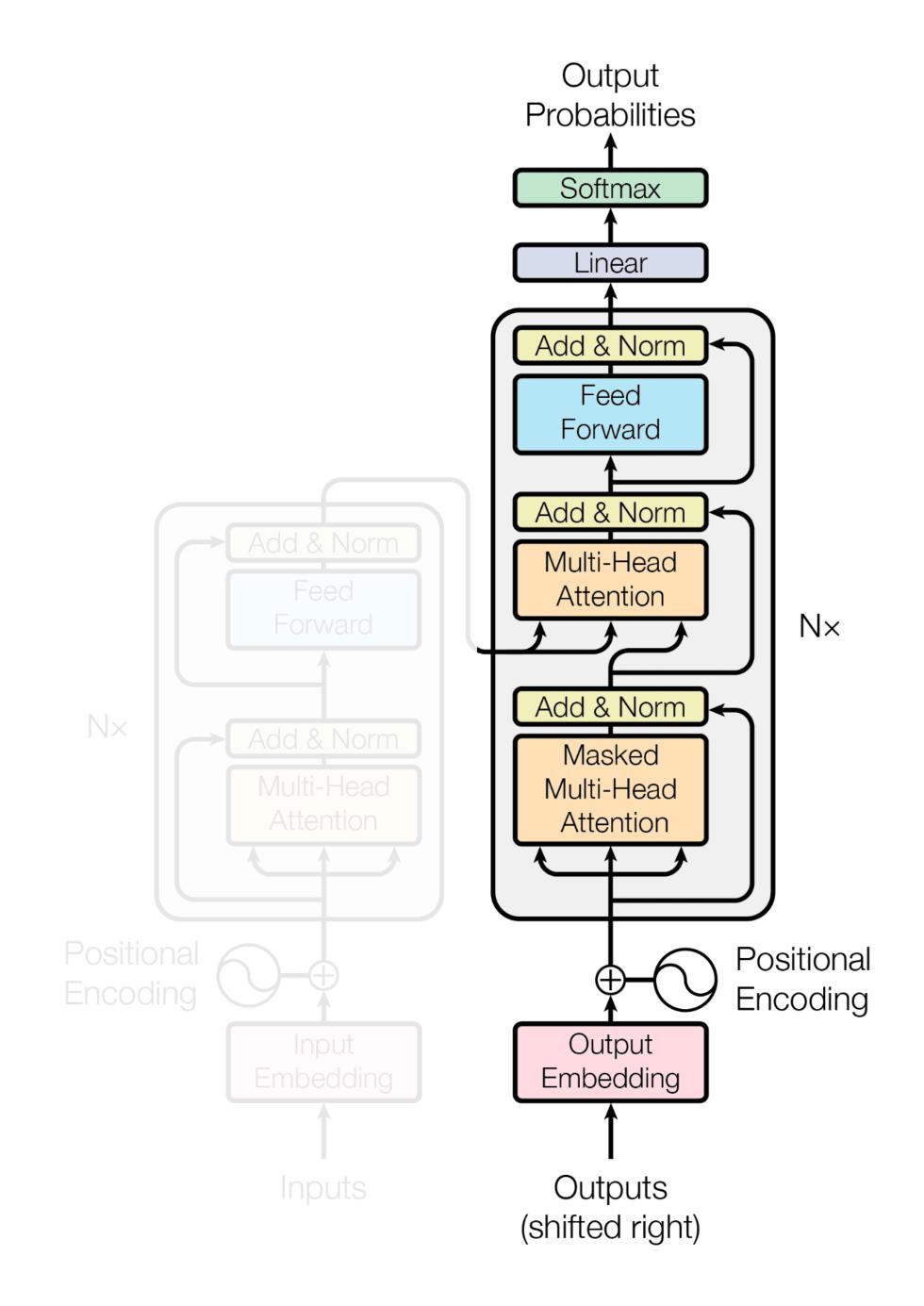
- Добавляем skip-connection, чтобы градиенты не затухали
- **Нормализация** для стабилизации обучения



#### Decoder

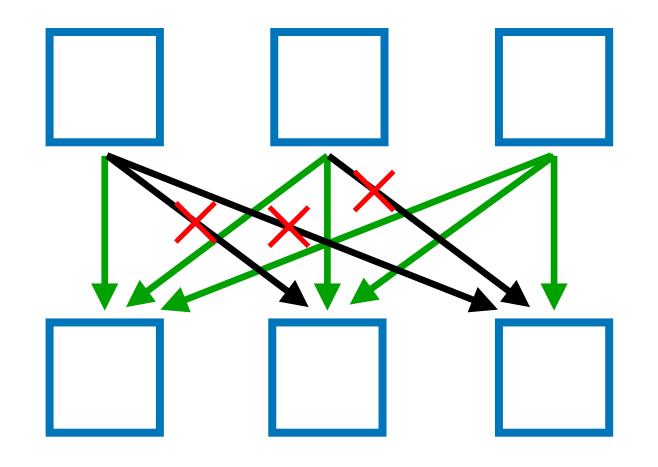
Decoder нужен для генерации выходного текста

- 1. Masked Multi-Head Self-attention
- 2. Cross Attention



### Masked Self-attention

- При обучении генерации мы должны запретить декодеру смотреть на токены, идущие после текущего
- Декодер учитывает другие токены только в слое self-attention
- => Необходимо его модифицировать



Каждый охотник желает

### Masked Self-attention

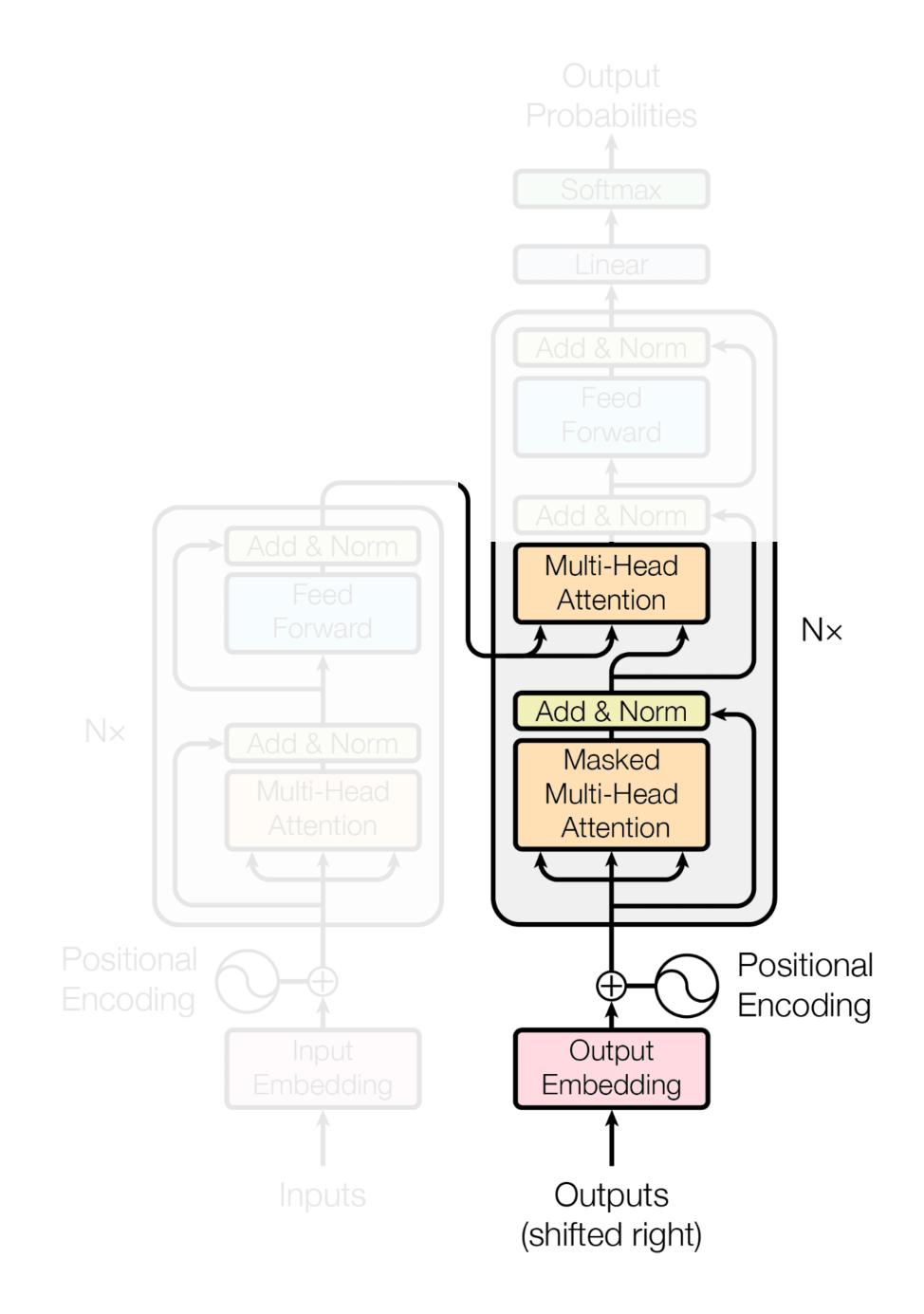
- Добавляем маску в подсчет внимания
- Маска явно запрещает смотреть вперед

Attention(Q, K, V) = softmax 
$$\left(\frac{QK^T}{\sqrt{d}} + M\right)V$$

$$M_{ij} = \begin{cases} 0, & i \le j \\ -\infty, & i > j \end{cases} \qquad M = \begin{cases} 0 & 0 & -\infty \\ 0 & 0 & -\infty \\ 0 & 0 & 0 \end{cases}$$

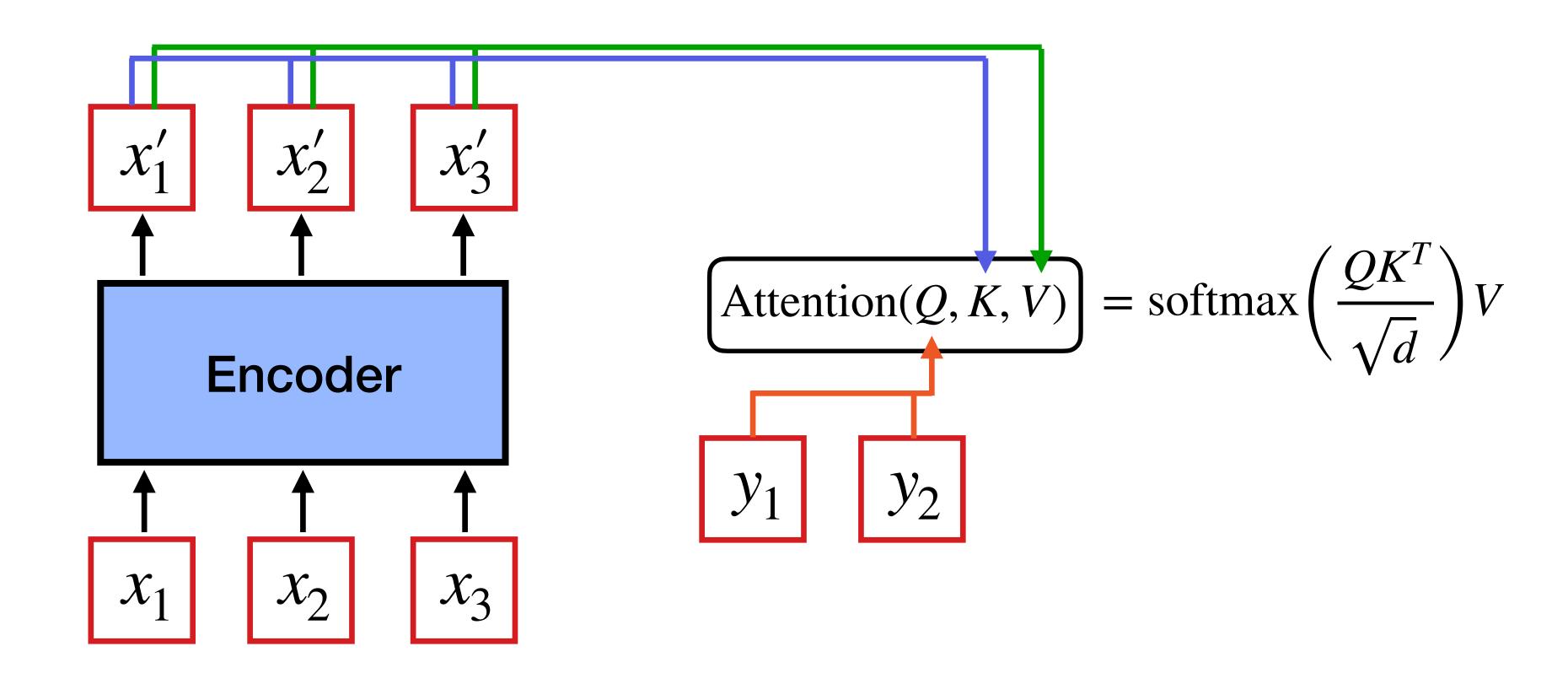
## Decoder

- 1. Masked Multi-Head Self-attention
- 2. Cross Attention



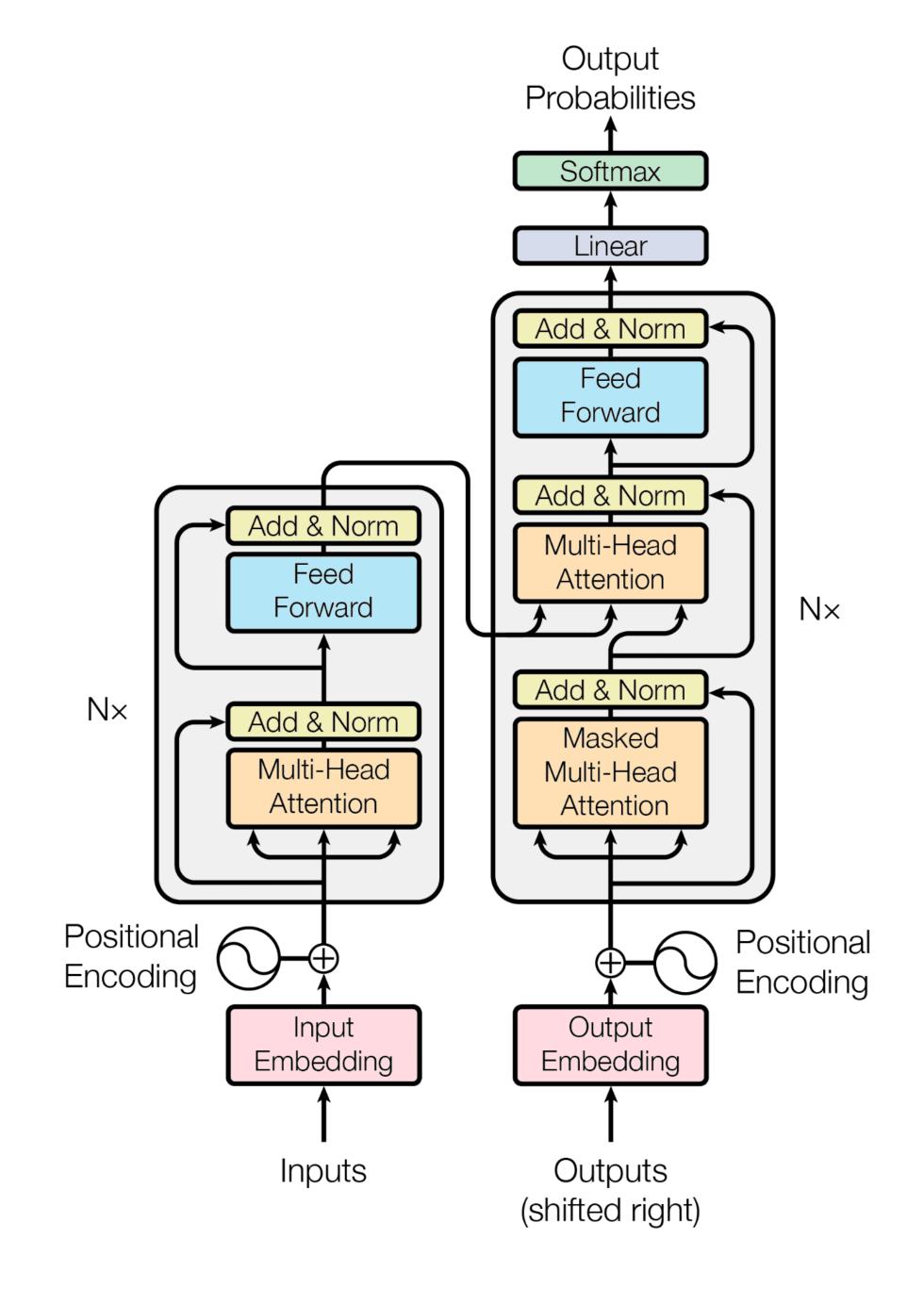
### **Cross Attention**

- Используется для передачи информации от Encoder в Decoder
- Decoder "запрашивает" информацию, передавая query в attention
- Encoder передает key и value



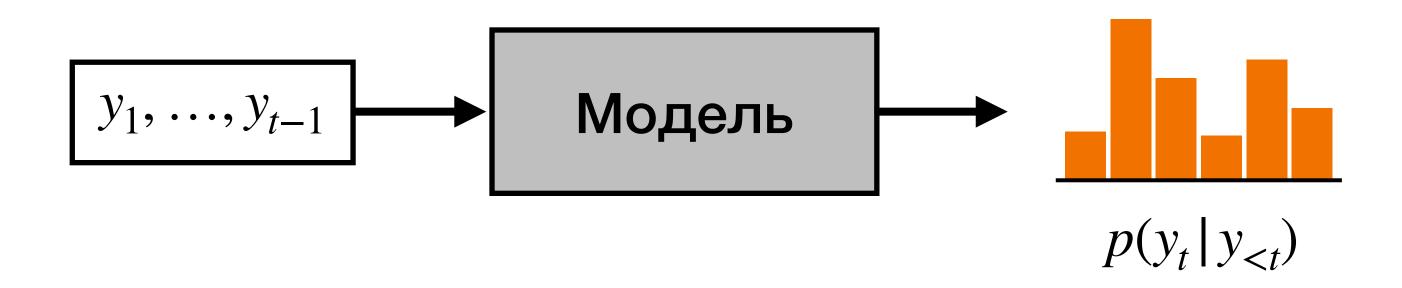
### Итого

- Трансформер создан специально для задач Seq2seq
- Блок Encoder состоит из:
  - Multi-Head Attention
  - Feed Forward Network
- После каждого слоя идет skip-connection и нормализация
- Блок Decoder использует
  - Masked Multi-Head Attention, чтобы не смотреть в будущее
  - Cross-Attention, чтобы брать информацию из Encoder
  - На выходе декодер предсказывает следующий токен



## Методы семплирования токенов

Модель выдает распределение вероятностей токенов



Как выбрать токен из этого распределения?

# Жадное семплирование Greedy Sampling

Можно всегда выбирать токен с максимальной вероятностью

$$y_t = \underset{y \in V}{\operatorname{argmax}} p(y | y_{< t})$$

#### Плюсы:

• Максимизируем вероятность текста

#### Минусы:

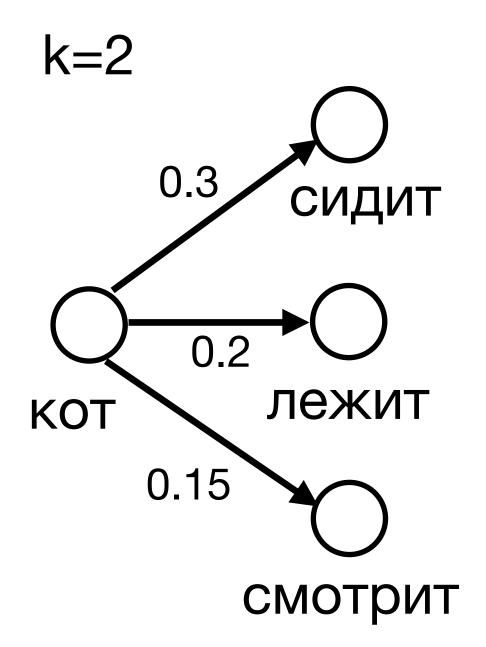
• Теряем разнообразие текста

- Плохо, если генерация безусловная
- Не страшно, если **условная** (seq2seq)

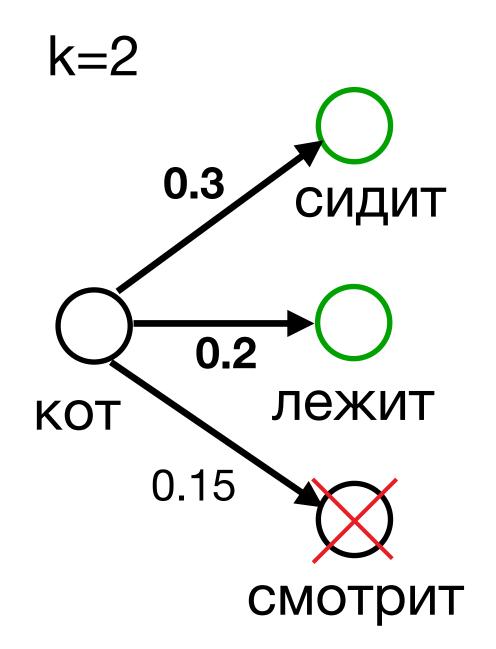
# Beam Search Лучевой поиск

- Попробуем максимизировать вероятность текста еще больше
- При жадном семплировании мы не учитываем влияние токена на следующие за ним
- Будем строить предсказания на несколько токенов вперед, а затем выбирать токен с наибольшей совокупной вероятностью

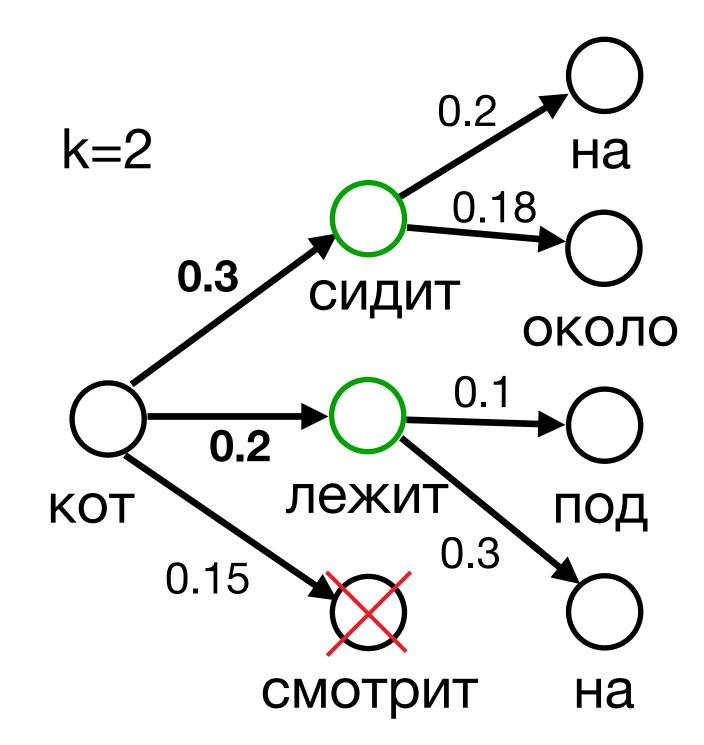
- На каждом шаге генерируем k продолжений для каждой траектории
- Оставляем только k самых вероятных



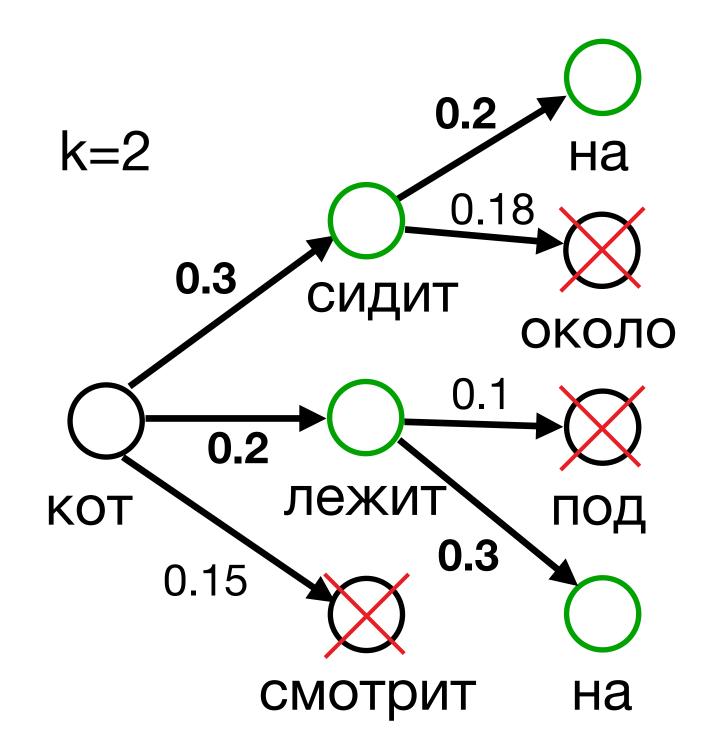
- На каждом шаге генерируем k продолжений для каждой траектории
- Оставляем только k самых вероятных



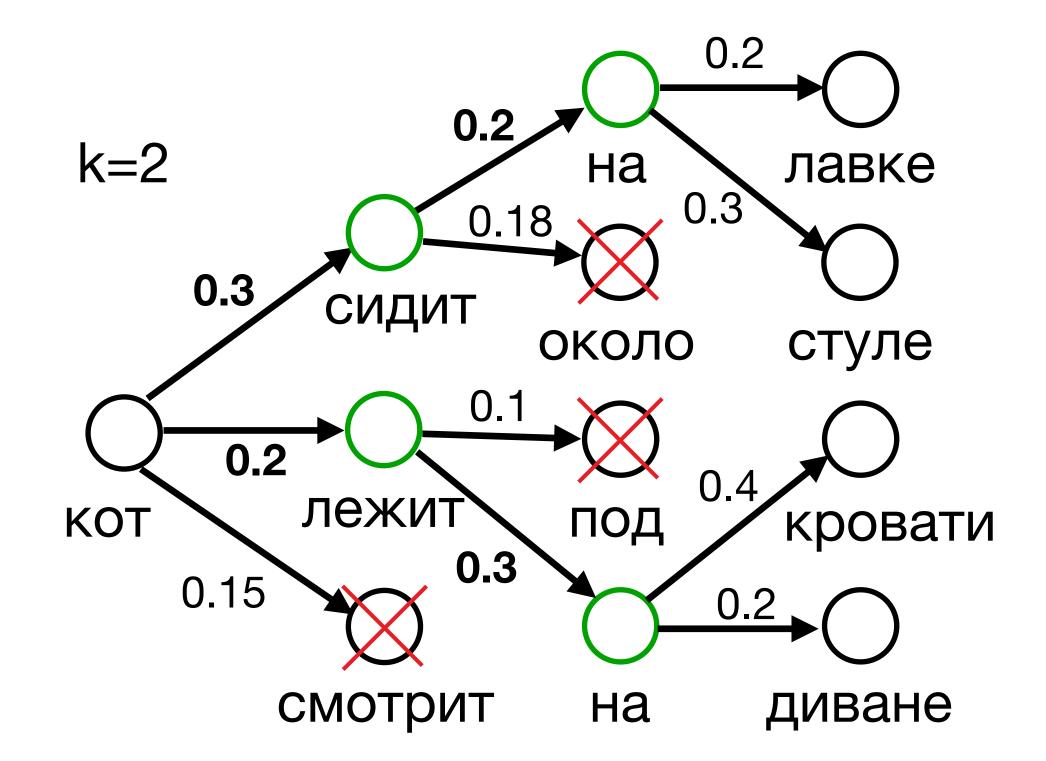
- На каждом шаге генерируем k продолжений для каждой траектории
- Оставляем только k самых вероятных



- На каждом шаге генерируем k продолжений для каждой траектории
- Оставляем только k самых вероятных

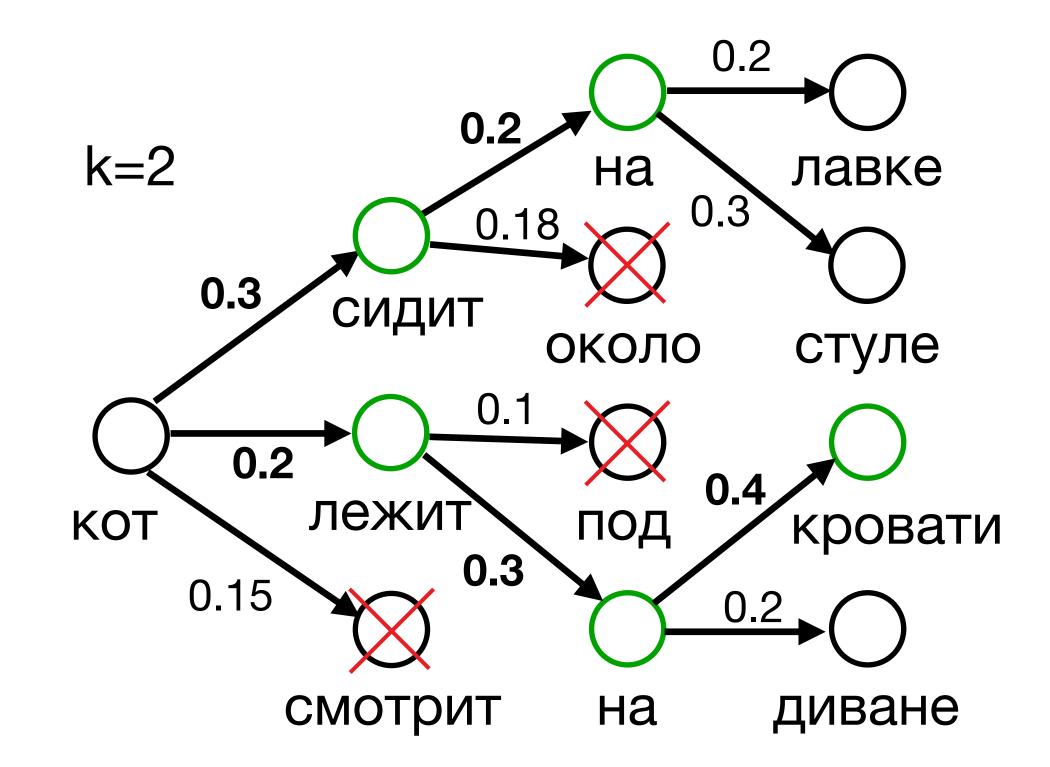


- На каждом шаге генерируем k продолжений для каждой траектории
- Оставляем только k самых вероятных



Идея: Поддерживаем k наиболее вероятных траекторий

- На каждом шаге генерируем k продолжений для каждой траектории
- Оставляем только k самых вероятных



Траектория с "лежит" имеет максимальную вероятность

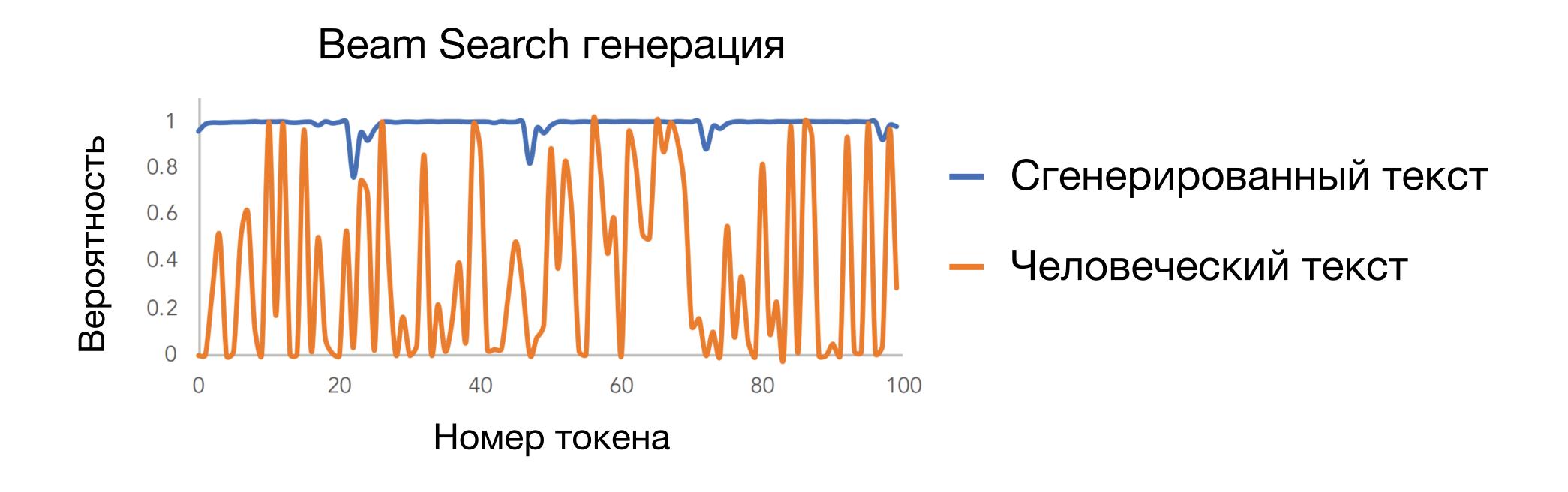
=> выбираем "лежит"

#### Beam Search vs Жадное семплирование

- Beam Search работает лучше для всех seq2seq задач
- Beam Search работает гораздо медленнее (зависит от k)
- Популярные значения k 3 или 5

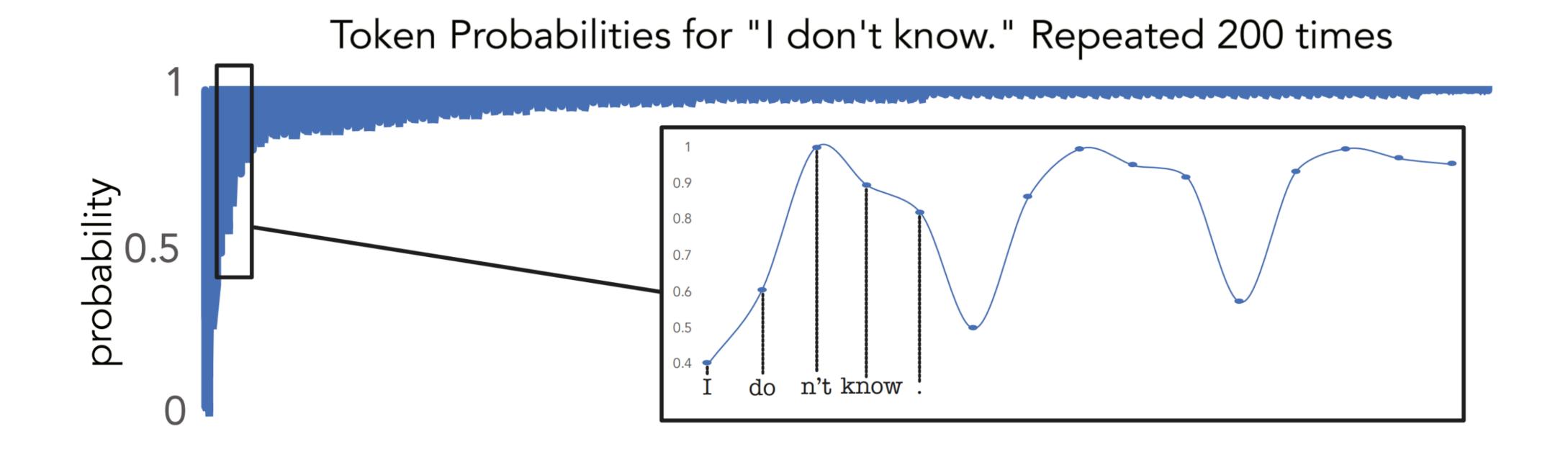
#### Безусловная генерация

Оба метода уменьшают разнообразие безусловной генерации!



#### Безусловная генерация

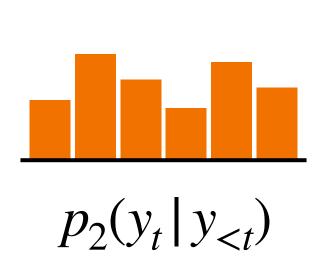
Оба метода поощряют повторения!

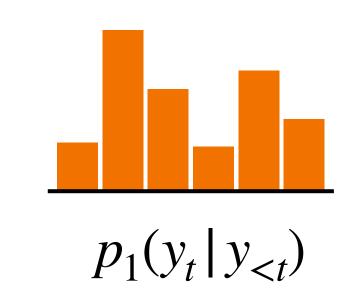


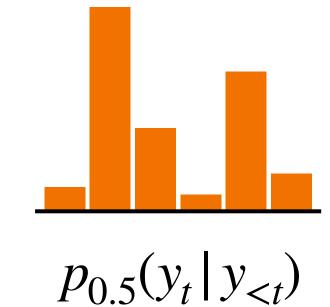
#### Семплирование с температурой

- При обычном семплировании с вероятностями вероятностная масса случайных токенов слишком велика
- Сделаем распределение более вырожденным, добавив температуру  $\tau \in [0,1]$

$$p_{\tau}(y | y_{< t}) = \frac{\exp \frac{p(y | y_{< t})}{\tau}}{\sum_{w \in V} \exp \frac{p(w | y_{< t})}{\tau}}$$

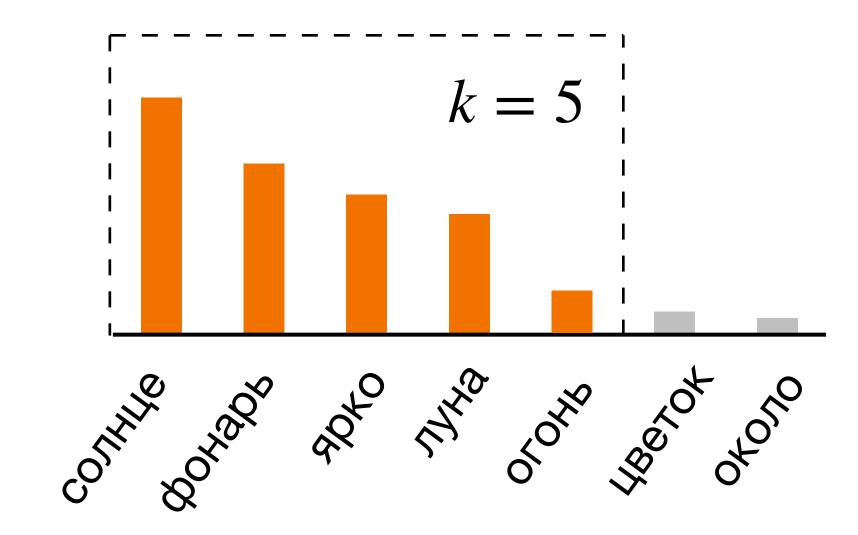






#### Тор-к семплирование

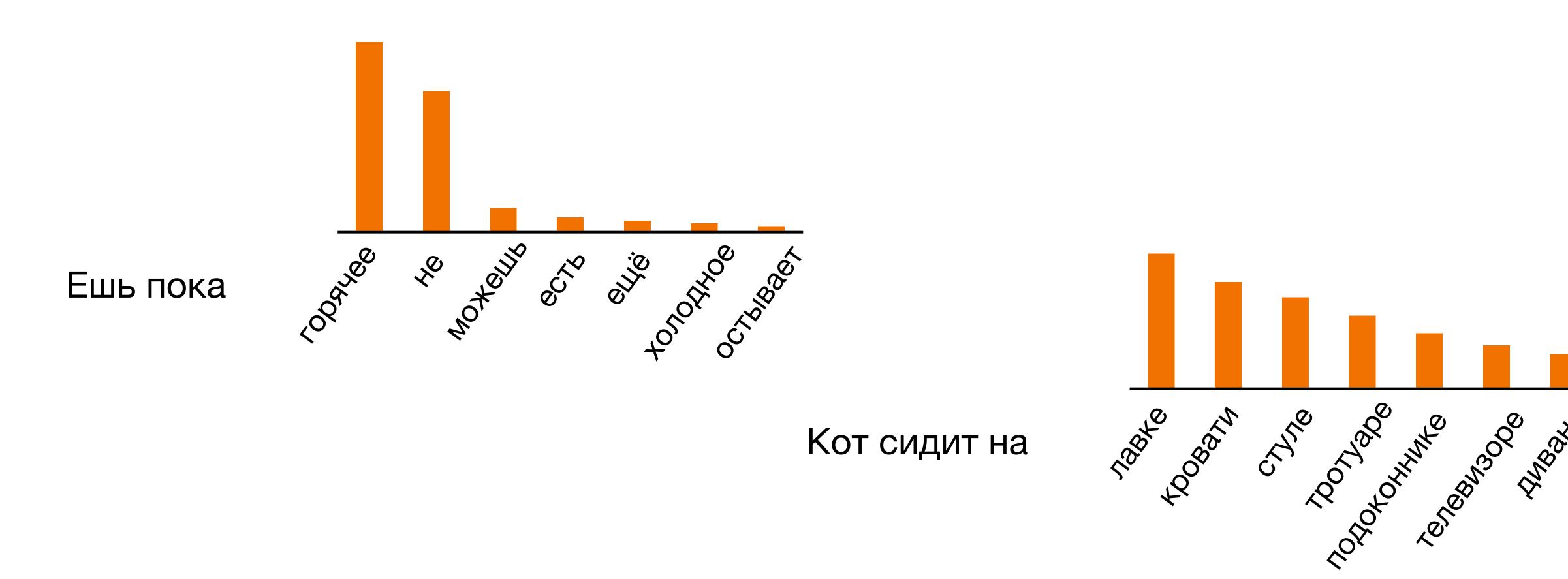
- Даже с температурой остается ненулевая генерация выдать случайный токен
- Оставим только k самых вероятных токенов и будем семплировать из них



На улице светит

#### Тор-к семплирование

- Не во всех ситуациях самых вероятных токенов одинаковое число
- Из-за этого невозможно подобрать идеальное k



# Тор-р семплирование Nucleus sampling

• Будем выбирать из минимального числа токенов, суммарная вероятность которых больше p.

$$\sum_{w \in V^{(p)}} p(w \mid y_{< t}) \ge p$$

$$|V^{(p)}| \to \min$$

Популярное значение для p-0.9 или 0.95