

Time Series Forecasting

Transformers

National University of Singapore (NUS) Félix Fuentes

Curso 2020/2021 - Edición II

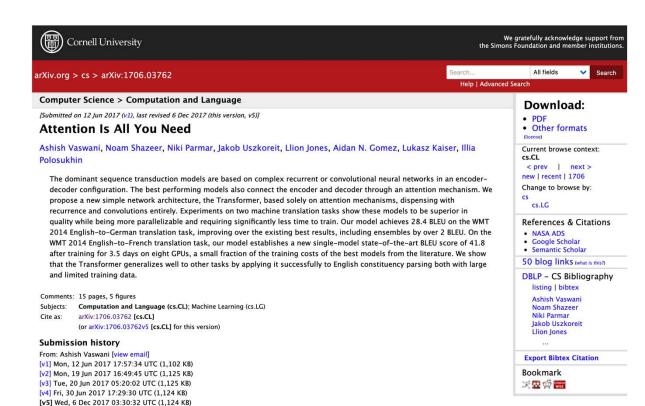
Fecha 27/03/2021

Índice

- 1. Attention is all you need
- 2. ¿Qué son los Transformers?
- 3. ¿Cómo funcionan los Transformers?

Attention is all you need

- A mediados de 2017 aparece un artículo científico ("paper", para los amigos) que demuestra que existe una alternativa a las redes recurrentes para trabajar con problemas secuenciales.
- En concreto, habla del concepto de "atención", que básicamente significa "ponderar" los elementos de nuestras secuencias según afecten más o menos a las predicciones.
- Habla sobre todo de NLP (Natural Language Processing), pero también es aplicable a series temporales.
- Elimina el concepto de recursión, con lo que el entrenamiento puede ser mucho más rápido



¿Qué son los Transformers?

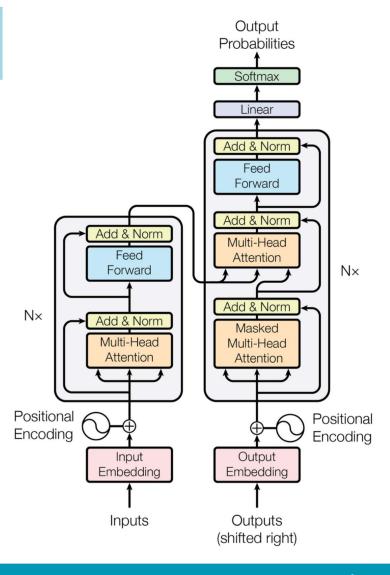
Una arquitectura **encoder-decoder** con **atención**.

La atención mira a la secuencia de entrada y decide para cada instante qué otras partes de la misma son importantes (podéis entenderlo como el "contexto").

Consiste en bloques encoder y decoder apilables (Nx bloques)

Capas densas y bloques Multi-Head Attention (MHA).

Positional embbeding (para introducir la información "temporal" en el caso de las series temporales o "situacional" en el caso de NLP)

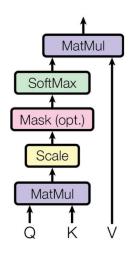


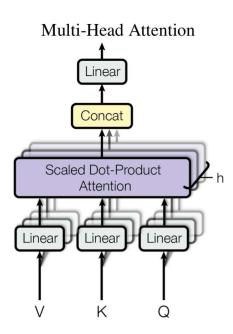
¿Qué son los Transformers?

El bloque **Multi-Head Attention** es el que permite al modelo "**fijarse**" en las cosas más importantes.

Funciona creando varios mapas de activación (Q: query, K: key, V: value) y comprobando sus relaciones.

Scaled Dot-Product Attention





¿Cómo funcionan los Transformers?

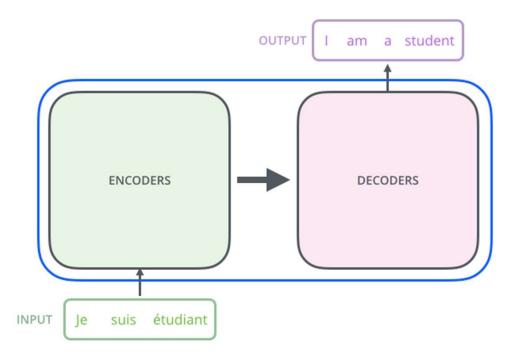
Vamos a ver la arquitectura transformer explicada en el campo del procesamiento del lenguaje natural, ya que es el caso de uso más típico.

Para el caso de series temporales es muy similar, lo único que cambia es la codificación de los datos de entrada: ya no son palabras, sino números.



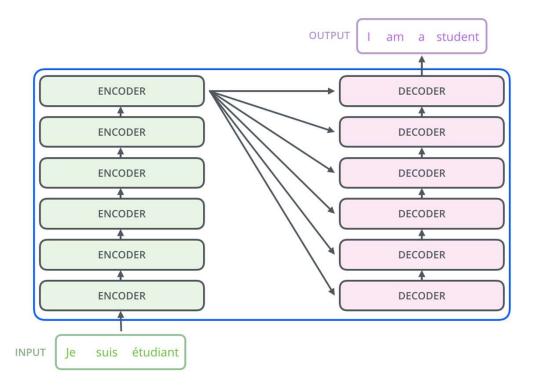
¿Cómo funcionan los Transformers?

Están compuestos por un encoder y un decoder.



¿Cómo funcionan los Transformers?

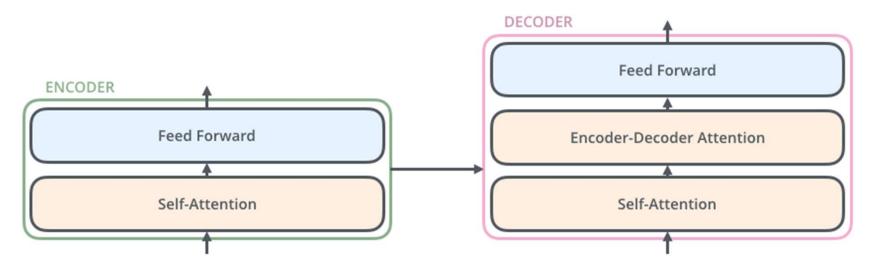
O para ser más exactos, de N bloques de encoders apilados seguidos de N bloques de decoders apilados.



¿Cómo funcionan los Transformers?

Dentro de **cada encoder** tendremos un bloque de **capas feed-forward** (las densas de toda la vida) y otro bloque de **Self-Attention**, el cual ayuda al encoder a **fijarse** no solo en la palabra que está procesando en ese momento, sino también en las **demás** palabras de la **secuencia** de entrada.

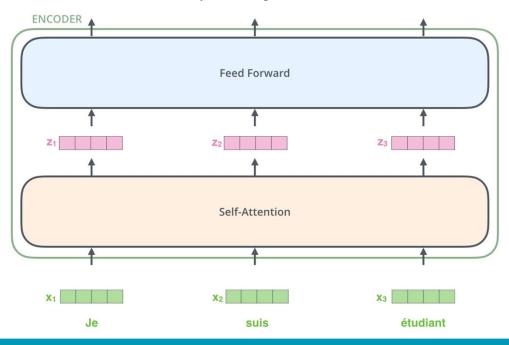
En los **decoders**, tendremos además de eso, un bloque de **Encoder-Decoder attention** que le permita decirle qué partes de la secuencia de entrada son importantes.



¿Cómo funcionan los Transformers?

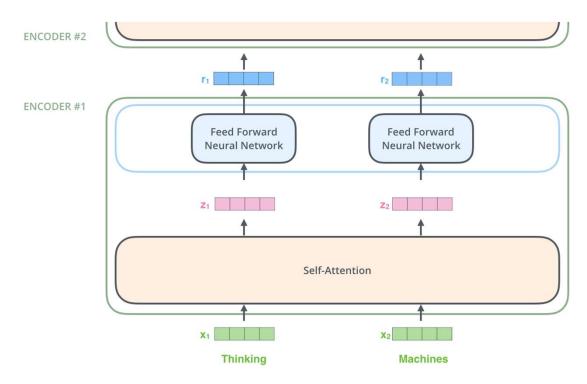
Los vectores de entrada **fluyen** a través de los bloques cada uno en una **posición fija**. El encoder crea **dependencias** entre estos "**caminos**" en los bloques de "**self-attention**".

¡Esto se puede **paralelizar**!



¿Cómo funcionan los Transformers?

Este proceso se repite para cada bloque "encoder".

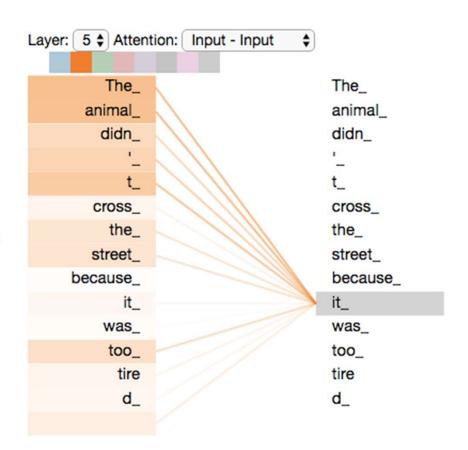


¿Cómo funcionan los Transformers?

¿Cómo funciona la atención?

En la frase "The **animal** didn't cross the street because **it** was too tired", el modelo no sabe a priori que "it" se refiere a "The animal" → ¡Esto es lo que hace el bloque de **self-attention**!

Conforme el modelo procesa **cada palabra** (o cada posición en la secuencia de entrada), el módulo de self-attention le permite **mirar** al **resto de las posiciones** en la secuencia de entrada para **pistas** que le permitan **codificar mejor** el elemento **actual**.



¿Cómo funcionan los Transformers?

¿Cómo funciona el bloque de self-attention exactamente?

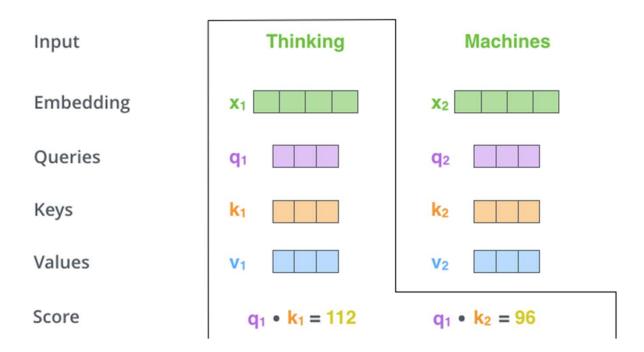
- 1. Creamos 3 matrices entrenables (W^Q, W^K, W^V)
- 2. Multiplicamos cada vector de entrada por cada una de las 3 matrices entrenables (W^Q, W^K, W^V)
- 3. Obtenemos 3 nuevos vectores (q_n, k_n, v_n), que además son de menor dimensionalidad que los de entrada, ya que las matrices se eligen así para reducir el coste computacional

Input	Thinking	Machines	
Embedding	X ₁	X ₂	
Queries	q ₁	q ₂	
Keys	k ₁	k ₂	
Values	V ₁	V ₂	

WV

¿Cómo funcionan los Transformers?

4. Calculamos la self-attention como el producto escalar de $q_n \cdot k_n$.

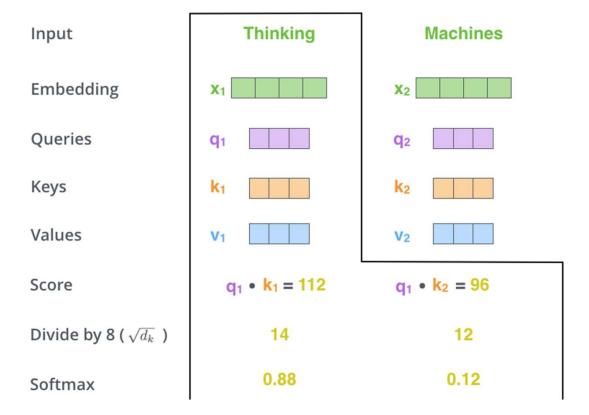


¿Cómo funcionan los Transformers?

- Dividimos entre la raiz cuadrada del número de dimensiones escogidas para los vectores key (para estabilizar los gradientes durante el entrenamiento)
- 6. Aplicamos la funcion **softmax** para normalizar los valores y que sumen 1.

¡Ya tenemos el valor de la atención!

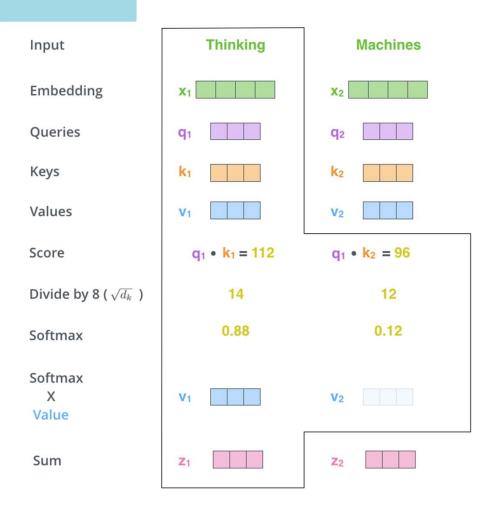
Pero no hemos acabado...



¿Cómo funcionan los Transformers?

- 8. Multiplicamos el valor de la **atención** de cada vector de entrada (a_n) por el vector **value** v₁ (porque estamos calculando el valor de la atención para el vector de entrada 1)
- 9. Sumamos todos los resultados $a_n \cdot v_n$, obteniendo z_1

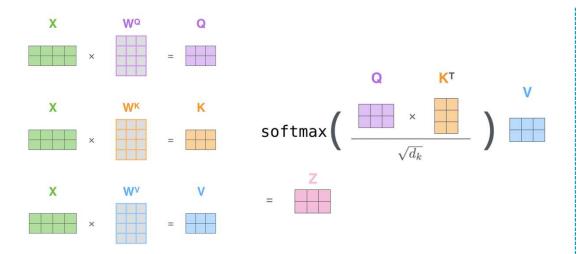
¡Y ahora sí que hemos acabado!

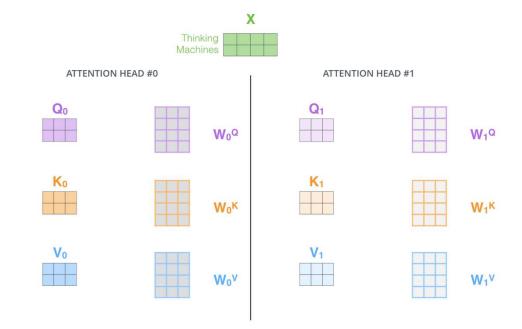


¿Cómo funcionan los Transformers?

Solamente indicar que esto, en realidad, se hace de forma **matricial** para ir más rápido.

Y con más de un conjunto de W^Q, W^K, W^V (**multi-head**).





¿Cómo funcionan los Transformers?

Resumen:

1) This is our 2) We embed input sentence* each word*

3) Split into 8 heads. We multiply X or R with weight matrices 4) Calculate attention using the resulting Q/K/V matrices

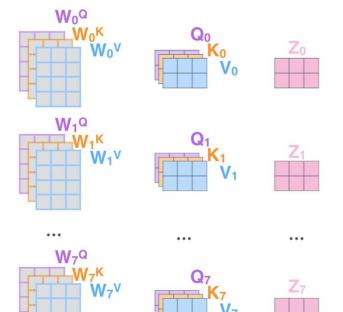
5) Concatenate the resulting $\mathbb Z$ matrices, then multiply with weight matrix $\mathbb W^0$ to produce the output of the layer

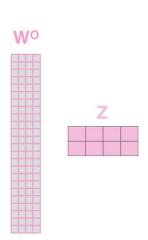
Thinking Machines



* In all encoders other than #0, we don't need embedding. We start directly with the output of the encoder right below this one



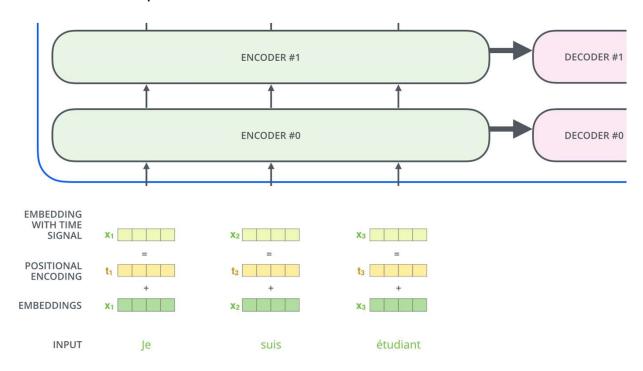




http://jalammar.github.io/illustrated-transformer/

¿Cómo funcionan los Transformers?

Y nos quedaría el concepto del positional embedding, que es lo que le indica a la red la posición de cada elemento de entrada en la secuecnia completa.



Ejemplo

<u>Transformer 1. Single step</u>
<u>Transformer 2. Multi-step</u>
<u>Ejemplo avanzado</u>