Механизм внимания.

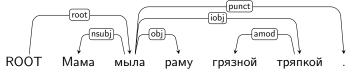
Алексей Андреевич Сорокин
Yandex Research,
МГУ, отделение теоретической и прикладной лингвистики.

Школа РАИИ 2021 лекция 4.



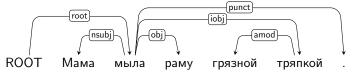
Постановка задачи

• Нужно по предложению восстановить дерево зависимостей:



Постановка задачи

• Нужно по предложению восстановить дерево зависимостей:



• Дерево кодируется таблицей:

```
Мама2nsubjмыла0rootраму1objгрязной5amodтряпкой2iobj.2punct
```

Графовый подход: алгоритм решения

- Для восстановления дерева нужно восстановить родителя и тип зависимости каждого слова.
- Тип зависимости сложно восстановить, не зная родителя, поэтому вначале нужно построить дерево.
- После этого это обычная разметка последовательности.

Графовый подход: алгоритм решения

- Для восстановления дерева нужно восстановить родителя и тип зависимости каждого слова.
- Тип зависимости сложно восстановить, не зная родителя, поэтому вначале нужно построить дерево.
- После этого это обычная разметка последовательности.
- Будем восстанавливать дерево, предсказывая p_{ij} вероятность, что i-ое слово зависит от j-го.
- Для каждого *i* ответ распределение вероятностей.

Графовый подход: вычисление вероятностей

- Пусть для каждого слова уже вычислены выходы энкодера h_i .
- Вычислим их вектора как родителя и как ребёнка:

$$h_i^{head} = g(W^{head}h_i + b^{head})$$

 $h_i^{dep} = g(W^{dep}h_i + b^{dep})$

Графовый подход: вычисление вероятностей

- Пусть для каждого слова уже вычислены выходы энкодера h_i .
- Вычислим их вектора как родителя и как ребёнка:

$$h_i^{head} = g(W^{head}h_i + b^{head})$$

 $h_i^{dep} = g(W^{dep}h_i + b^{dep})$

 Вычислим меры близости между векторами с помощью биаффинной сети:

$$e_{ij} = h_i^{dep\ ^I}\ Uh_j^{head} + (w^{dep}, h_i^{dep}) + (w^{head}, h_j^{head})$$

Графовый подход: вычисление вероятностей

- Пусть для каждого слова уже вычислены выходы энкодера h_i .
- Вычислим их вектора как родителя и как ребёнка:

$$h_i^{head} = g(W^{head}h_i + b^{head})$$

 $h_i^{dep} = g(W^{dep}h_i + b^{dep})$

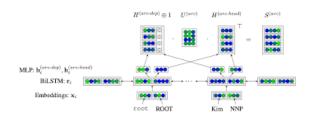
 Вычислим меры близости между векторами с помощью биаффинной сети:

$$e_{ij} = h_i^{dep \, T} \, U h_j^{head} + (w^{dep}, h_i^{dep}) + (w^{head}, h_j^{head})$$

• Переведём близости в вероятности:

$$[p_{i0},\ldots,p_{in}]=\operatorname{softmax}([e_{i0},\ldots,e_{in}]$$

Графовый подход: иллюстрация



Графовый подход: определение вершины

• Для каждой пары позиций i,j определим вероятность, что w_j — родитель w_i :

	ROOT	мама	мыла	раму	грязной	тряпкой
мама	0.2	0	0.8	0	0	0
мыла	0.7	0.2	0	0.1	0	0
раму	0.0	0.01	0.99	0	0	0
грязной	0.0	0.0	0.0	0.1	0	0.9
тряпкой	0.0	0.0	0.9	0.1	0	0

Графовый подход: определение вершины

• Выберем вершины с наибольшей вероятностью:

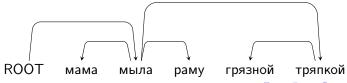
	ROOT	мама	мыла	раму	грязной	тряпкой	
мама	0.2	0	8.0	0	0	0	
мыла	0.7	0.2	0	0.1	0	0	
раму	0.0	0.01	0.99	0	0	0	
грязной	0.0	0.0	0.0	0.1	0	0.9	
тряпкой	0.0	0.0	0.9	0.1	0	0	

Графовый подход: определение вершины

• Выберем вершины с наибольшей вероятностью:

	ROOT	мама	мыла	раму	грязной	тряпкой
мама	0.2	0	8.0	0	0	0
мыла	0.7	0.2	0	0.1	0	0
раму	0.0	0.01	0.99	0	0	0
грязной	0.0	0.0	0.0	0.1	0	0.9
тряпкой	0.0	0.0	0.9	0.1	0	0

• В данном случае получим дерево:



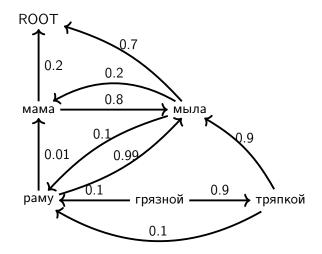
Графовый подход: построение дерева

- Жадный алгоритм построения наилучшего дерева выбрать для каждой вершины наиболее вероятного предка.
- Проблема: результат необязательно дерево (могут получиться циклы).

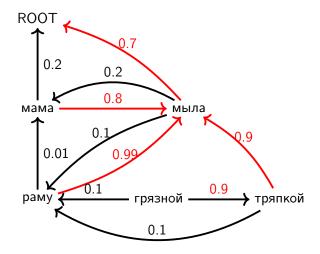
Графовый подход: построение дерева

- Жадный алгоритм построения наилучшего дерева выбрать для каждой вершины наиболее вероятного предка.
- Проблема: результат необязательно дерево (могут получиться циклы).
- На самом деле нужно построить максимальное остовное дерево – дерево максимальной стоимости, содержащее все вершины.
- В данном случае стоимость равна вероятности, стоимость дерева – произведение стоимостей рёбер.
- При переходе к логарифмам стандартная ситуация: стоимость равна сумме стоимостей рёбер.

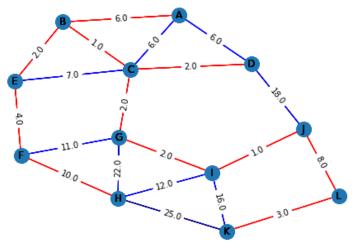
Графовый подход: иллюстрация



Графовый подход: иллюстрация



Минимальное остовное дерево



- В неориентированном случае минимальное остовное дерево строится алгоритмом Краскала:
 - Начать с пустого дерева.

- В неориентированном случае минимальное остовное дерево строится алгоритмом Краскала:
 - Начать с пустого дерева.
 - На каждом шаге добавлять минимальное ребро, не приводящее к циклу.

- В неориентированном случае минимальное остовное дерево строится алгоритмом Краскала:
 - Начать с пустого дерева.
 - На каждом шаге добавлять минимальное ребро, не приводящее к циклу.
- Ориентированное дерево алгоритм Чу-Лю-Эдмондса.
 - Для каждой вершины выбрать самое полезное исходящее ребро.
 - Если нет циклов это ответ.

- В неориентированном случае минимальное остовное дерево строится алгоритмом Краскала:
 - Начать с пустого дерева.
 - На каждом шаге добавлять минимальное ребро, не приводящее к циклу.
- Ориентированное дерево алгоритм Чу-Лю-Эдмондса.
 - Для каждой вершины выбрать самое полезное исходящее ребро.
 - Если нет циклов это ответ.
 - Если есть попытаться в каждом цикле его разорвать с минимальной потерей в стоимости.

- Нейронный машинный перевод задача условного порождения текста.
- Обычная вероятностная модель порождает текст на основе предыдущих слов.

$$w_i \sim p(w|h_{i-1}) \ h_{i-1} - ext{ состояние языковой модели после } i-1$$
 слова

- Нейронный машинный перевод задача условного порождения текста.
- Обычная вероятностная модель порождает текст на основе предыдущих слов.

$$w_i \sim p(w|h_{i-1}) \ h_{i-1} - ext{ состояние языковой модели после } i-1$$
 слова

• Условная вероятностная модель:

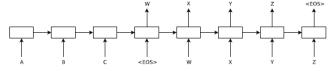
$$w_i \sim p(w|h_{i-1},c)$$
 c – глобальный контекст

• Основная проблема: как вычислять с.

• Базовая модель: кодировщик-декодировщик (encoder-decoder):

$$c = LSTM(x_1, \dots, x_m),$$
 $x_1 \dots x_m -$ исходное предложение

 Вектор с запоминает всю информацию об исходном предложении в одном векторе.



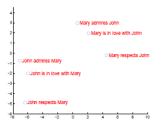
 Обычно на каждый шаг декодера явно подаётся предыдущее слово:

$$p(y_t|[y_1,\ldots,y_{t-1}],c)=g(y_{t-1},s_t,c)$$

- Как и энкодер, так и декодер включают в себя несколько слоёв.
- Входом следующего служит выход предыдущего.



Вектора предложений





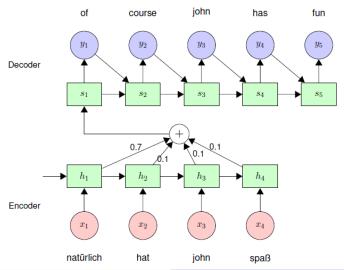
Механизм внимания: мотивация

- При сжатии всего предложения в один вектор часть информации неминуемо теряется.
- На разных этапах порождения выходного предложения полезна разная информация об исходных словах.

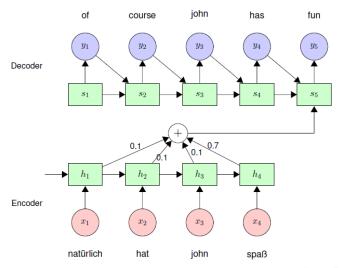
Механизм внимания: мотивация

- При сжатии всего предложения в один вектор часть информации неминуемо теряется.
- На разных этапах порождения выходного предложения полезна разная информация об исходных словах.
- Выход: сделать контекстный вектор зависящим от позиции в порождаемом предложении.

Механизм внимания: иллюстрация



Механизм внимания: иллюстрация



Механизм внимания: реализация

 Каждое следующее слово порождается отдельным вектором контекста:

$$w_{i+1} \sim p(h_i, c_i)$$

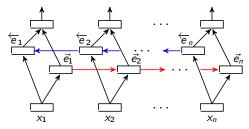
 h_i — состояние декодера после i слов, c_i — исходный контекст после i слов.

 Вектор контекста – сумма векторов контекста для отдельных позиций:

$$egin{array}{lll} c_i &=& \sum_j lpha_{ij} e_j, \ e_j &-& ext{вектор контекста в позиции } j, \ lpha_{ij} &-& ext{мера влияния } e_j \ ext{на } c_i. \end{array}$$

Механизм внимания: реализация

- Как считать α_{ij} и вектора e_j ?
- e_j вычисляется с помощью двунаправленной рекуррентной сети (конкатенация $\overrightarrow{e_j}$ и $\overleftarrow{e_j}$):



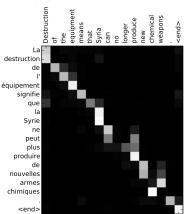
Механизм внимания: реализация

- ullet $lpha_{ij}$ можно считать разными способами.
- Bahdanau et al., 2015, Jointly learning to align and translate использовалось:

```
lpha_{ij} = \operatorname{softmax}(u_{ij}), \ u_{ij} = a(h_{i-1}, e_j), \ h_{i-1} — состояние декодера на предыдущем шаге.
```

Механизм внимания: интерпретация

 Механизм внимания показывает, какие слова исходного текста влияют на слова сгенерированного текста.



Механизм внимания: вариации

- Механизм внимания показывает, какие слова исходного текста влияют на слова сгенерированного текста.
- Конкретные формулы могут отличаться.
- Задача формулы вычислить числа u_{ij} , показывающие связь исходного вектора e_j с вектором контекста h_i в переводном тексте
- Далее эти формулы будут переведены в вероятности.

$$\alpha_{ij} = \operatorname{softmax}(u_{ij})$$

Механизм внимания: вариации

 Luong et al., Effective Approaches to Attention-based Neural Machine Translation: 3 формулы для механизма внимания.

```
u_{ij} = \langle h_i, e_j \rangle (скалярное произведение), u_{ij} = h_i^T W_a e_j (скалярное произведение (с обученной матрицей), u_{ij} = v_a^T \mathrm{tanh}(W_a[h_i, e_j]) (однослойная сеть)
```

• Лучше работает второй подход, но он требует больше ресурсов, чем первый.

Механизм внимания: вариации

 Luong et al., Effective Approaches to Attention-based Neural Machine Translation: 3 формулы для механизма внимания.

```
u_{ij} = \langle h_i, e_j \rangle (скалярное произведение), u_{ij} = h_i^T W_a e_j (скалярное произведение (с обученной матрицей), u_{ij} = v_a^T \mathrm{tanh}(W_a[h_i, e_j]) (однослойная сеть)
```

- Лучше работает второй подход, но он требует больше ресурсов, чем первый.
- Третий подход (Bahdanau et al., 2015) проигрывает первым двум.

Механизм внимания: вариации

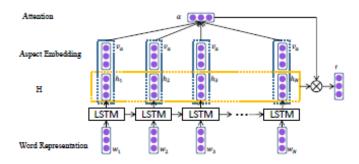
- Внимание можно использовать и для классификации.
- Самый простой способ получить вектор для предложения взять взвешенную сумму векторов для его слов.
- Именно это делает tf-idf.

Механизм внимания: вариации

- Внимание можно использовать и для классификации.
- Самый простой способ получить вектор для предложения взять взвешенную сумму векторов для его слов.
- Именно это делает tf-idf.
- Также применялись веса, зависящие от частей речи.
- Можно настроить веса под задачу:

$$s=\sum_{\substack{e \in p(e_i) \ \sum_j \exp(e_j)}} lpha_i x_i$$
 — представление i -го слова, $lpha_i=\sum_{\substack{j \in p(e_j) \ j \in p(e_j)}} e_i=\langle v_a,h_i \rangle, h_i=f(x_1,\dots,x_n)$ f — свёрточная или рекуррентная сеть для контекста

Простой механизм внимания: иллюстрация



[Wang et al., 2016. Attention-based LSTM for Aspect-level Sentiment Classification]

Простой механизм внимания для анализа тональности

- Механизм внимания работает с обучаемым представлением аспекта v_a (для ресторана стоимость, обслуживание и т.д.) и выдачей энкодера, не зависящей от аспекта.
- Это означает, что модель можно обучать одновременно на несколько аспектов.

Механизм внимания: переобозначение

• Текущая формула (переобозначения):

$$h = \sum_{i} \alpha_{i} h_{i}^{value},$$
 $\alpha_{i} \sim \exp{\left(\langle h_{i}^{key}, s \rangle\right)},$
 $s -$ глобальный вектор "запроса" (query),
 $h_{i}^{value} -$ "эмбеддинг-значение" (value),
 $h_{i}^{key} -$ "эмбеддинг-ключ" (key).

• Откуда взять h_i^{value}, h_i^{key} .

Механизм внимания: переобозначение

• Текущая формула (переобозначения):

$$h = \sum_{i} \alpha_{i} h_{i}^{value},$$
 $\alpha_{i} \sim \exp{\left(\langle h_{i}^{key}, s \rangle\right)},$
 $s -$ глобальный вектор "запроса" (query),
 $h_{i}^{value} -$ "эмбеддинг-значение" (value),
 $h_{i}^{key} -$ "эмбеддинг-ключ" (key).

- Откуда взять h_i^{value}, h_i^{key} .
- Проще всего вставить один слой персептрона:

$$h_i^{value} = g(W^{value}h_i),$$

 $h_i^{key} = g(W^{key}h_i)$

Механизм внимания: матричный вид

• Всё можно переписать в матричном виде:

$$\begin{array}{lll} h &=& A_{1\times L}V_{L\times d},\\ A &=& \operatorname{softmax}(q_{1\times d}K_{L\times d}^T),\\ V &=& g(H_{L\times d}W_{d\times d}^{value}),\\ K &=& g(H_{L\times d}W_{d\times d}^{key}) \end{array}$$

• Финальная формула:

$$h = \operatorname{softmax}(QK^T)V$$

Механизм внимания: матричный вид

• Всё можно переписать в матричном виде:

$$\begin{array}{lll} h &=& A_{1\times L}V_{L\times d},\\ A &=& \operatorname{softmax}(q_{1\times d}K_{L\times d}^T),\\ V &=& g(H_{L\times d}W_{d\times d}^{value}),\\ K &=& g(H_{L\times d}W_{d\times d}^{key}) \end{array}$$

• Финальная формула:

$$h = \operatorname{softmax}(QK^T)V$$

• На практике добавляют нормализующий множитель:

$$h = \operatorname{softmax}(\frac{QK^{T}}{\sqrt{d}})V$$

• Без него обучение более нестабильное.



Механизм самовнимания: матричный вид

- Механизм внимания используется, чтобы посчитать состояние для всего предложения с учётом всех слов.
- А что если так же считать новые состояния для всех слов?
- В этом случае даже удалённые слова будут влиять на текущий вектор (проблема для рекуррентных сетей).

Механизм самовнимания: матричный вид

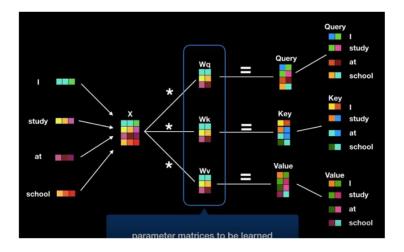
- Механизм внимания используется, чтобы посчитать состояние для всего предложения с учётом всех слов.
- А что если так же считать новые состояния для всех слов?
- В этом случае даже удалённые слова будут влиять на текущий вектор (проблема для рекуррентных сетей).
- Достаточно сделать "запрос" Q матрицей:

$$Q_{L\times d}=g(H_{L\times d}W_{d\times d}^{query})$$

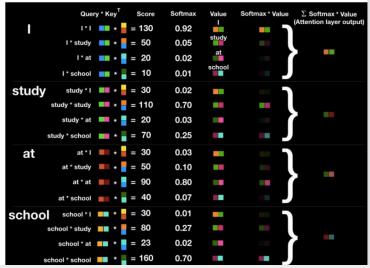
• В итоге получаем:

$$\begin{array}{lcl} H' & = & A_{L\times L}V_{L\times d}, \\ A & = & \operatorname{softmax}(Q_{L\times d}K_{L\times d}^T), \\ Q & = & g(H_{L\times d}W_{d\times d}^{query}), \\ V & = & g(H_{L\times d}W_{d\times d}^{value}), \\ K & = & g(H_{L\times d}W_{d\times d}^{key}) \end{array}$$

Механизм самовнимания: иллюстрация



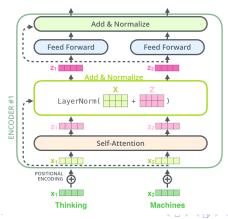
Механизм самовнимания: иллюстрация





Механизм самовнимания: трансформеры

- Механизм внимания это один слой трансформерной архитектуры.
- Между такими слоями вставляются residual-переходыполносвязные подслои и слой-нормализация (LayerNorm). Параллельно с трансформе блоком вставляется residual-переход.



Механизм самовнимания: множественное внимание

 Может возникнуть потребность проявлять внимание с точки зрения разных аспектов и к разным словам.

> Вася съел большую банку варенья. банку \to большую морфология банку \to съел семантика

Трансформеры

000000000000

Механизм самовнимания: множественное внимание

 Может возникнуть потребность проявлять внимание с точки зрения разных аспектов и к разным словам.

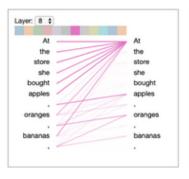
Вася съел большую банку варенья. банку \to большую морфология банку \to съел семантика

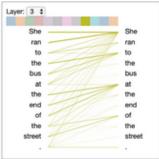
• Это делается с помощью множественного внимания (multihead attention):

$$\begin{array}{rcl} H_i' &=& \operatorname{Attention}(HW_{q,i}, HW_{k,i}, HW_{v,i}) \\ H' &=& \operatorname{Concat}(H_1', \dots, H_m') \\ W_{\star,i} &\in& \mathbb{R}^{D \times \frac{D}{m}} \end{array}$$

• Все эти операции можно делать параллельно.

Механизм самовнимания: множественное внимание





Механизм самовнимания: энкодер-декодер

- В энкодере механизм внимания нужен, чтобы пересчитывать состояния модели, кодирующие исходное предложение.
- В декодере нужно учитывать не только исходное предложение, но и сгенерированную часть результата.

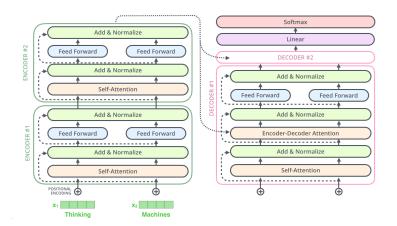
Механизм самовнимания: энкодер-декодер

- В энкодере механизм внимания нужен, чтобы пересчитывать состояния модели, кодирующие исходное предложение.
- В декодере нужно учитывать не только исходное предложение, но и сгенерированную часть результата.
- Как следствие, есть два подслоя внимания:
 - Внимание состояний энкодера к состояниям декодера $lpha_{ij}$:
 - *i* позиция в генерируемом тексте,
 - j позиция в исходном тексте.

Механизм самовнимания: энкодер-декодер

- В энкодере механизм внимания нужен, чтобы пересчитывать состояния модели, кодирующие исходное предложение.
- В декодере нужно учитывать не только исходное предложение, но и сгенерированную часть результата.
- Как следствие, есть два подслоя внимания:
 - Внимание состояний энкодера к состояниям декодера α_{ii} :
 - i позиция в генерируемом тексте,
 - і позиция в исходном тексте.
 - Внимание состояний энкодера к состояниям декодера β_{ii} :
 - i позиция в генерируемом тексте,
 - i позиция в генерируемом тексте, i < i.
 - При обучении считается $\beta_{ii}=0$ при $j\geqslant i$, чтобы модель не заглядывала в будущее.

Трансформеры: энкодер-декодер



Трансформеры: скорость

- Скорость передачи информации на *m* шагов:
 - Свёрточные сети: $O(\frac{m}{w})$.
 - Рекуррентные сети: $\ddot{O}(m)$.
 - Трансформеры: O(1).
- Затраты памяти на последовательность длины *L*:
 - Свёрточные сети: $O(wd^2L)$.
 - Рекуррентные сети: $O(d^2L)$.
 - Трансформеры: $O(L^2d)$.

Трансформеры: позиционное кодирование

- Пока механизм внимания никак не различает одинаковые вектора, стоящие в разных местах.
- Чтобы это исправить, конкатенируют вектора слов с позиционными эмбеддингами:

$$x_i = [emb(word_i), x_{pos}(i)]$$

Трансформеры: позиционное кодирование

- Пока механизм внимания никак не различает одинаковые вектора, стоящие в разных местах.
- Чтобы это исправить, конкатенируют вектора слов с позиционными эмбеддингами:

$$x_i = [emb(word_i), x_{pos}(i)]$$

• x_{pos} иногда задают явно (Vaswani et al., 2017):

$$(x_{pos}(i))_{2j} = \sin \frac{i}{10000^{j/d}},$$

 $(x_{pos}(i))_{2j+1} = \cos \frac{i}{10000^{j/d}}.$

- В более поздних подходах их сделали обучаемыми:
 - ullet Это дополнительная матрица размера max length imes d.
 - Последовательности длиннее max_length не обрабатываются.