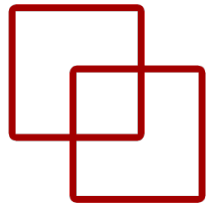
Transformers

Dr. Manuel Castillo-Cara
www.manuelcastillo.eu
Departamento de Inteligencia Artificial
Escuela Técnica Superior de Ingeniería Informática
Universidad Nacional de Educación a Distancia (UNED)

Preliminar



-

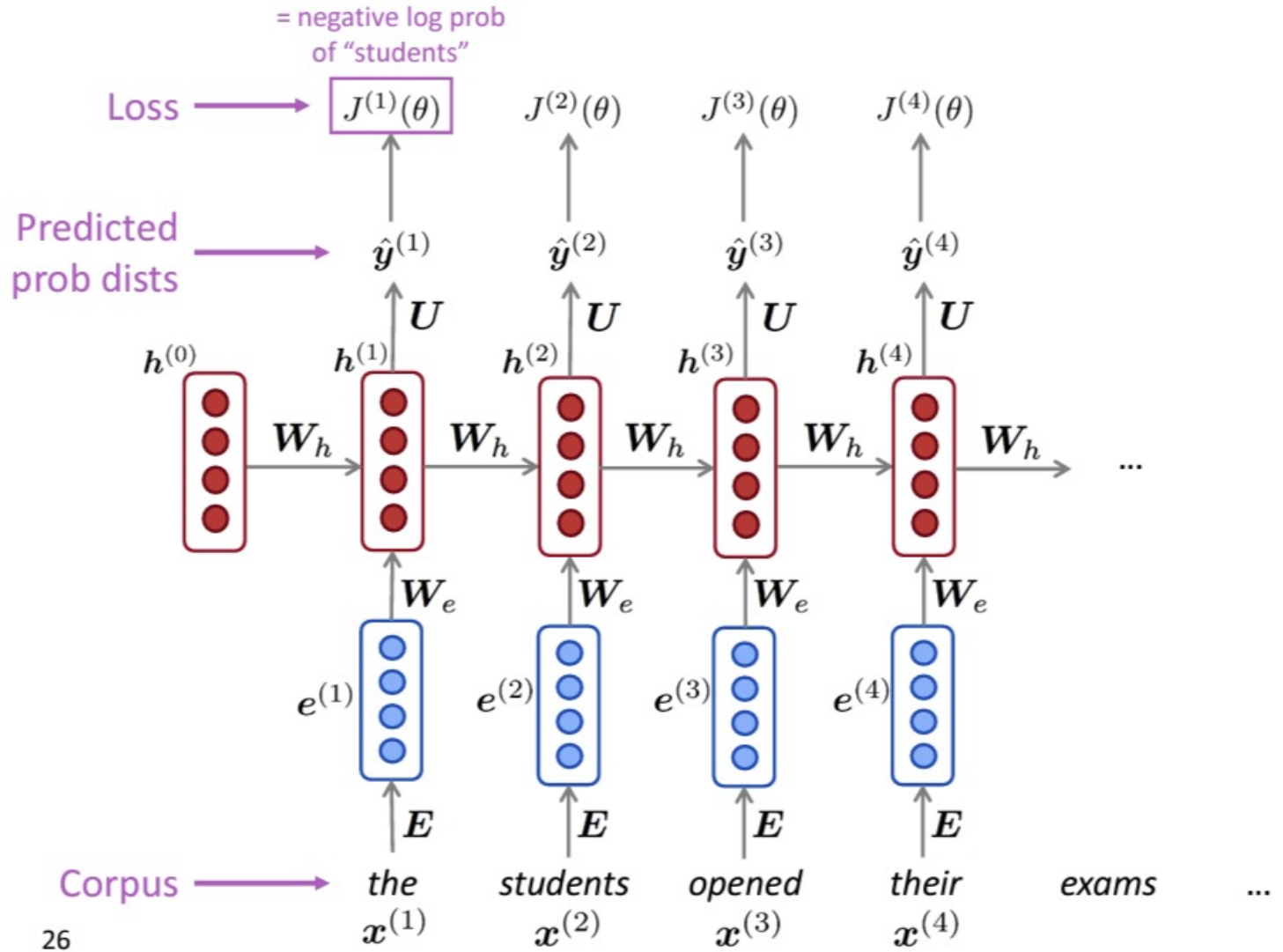
UNED

ETS de Ingeniería Informática

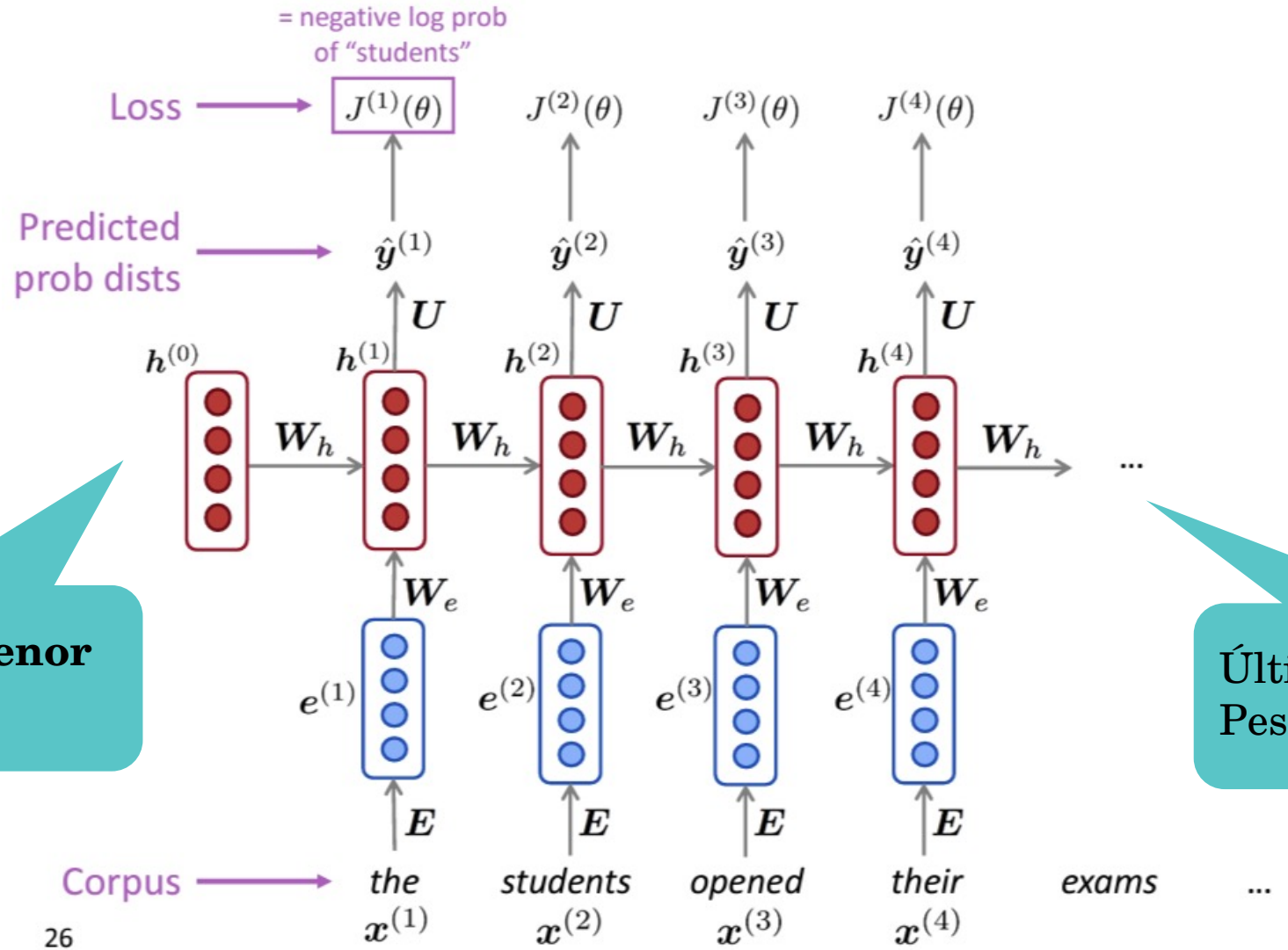
Índice

Background

Redes Neuronales Recurrentes
Problema



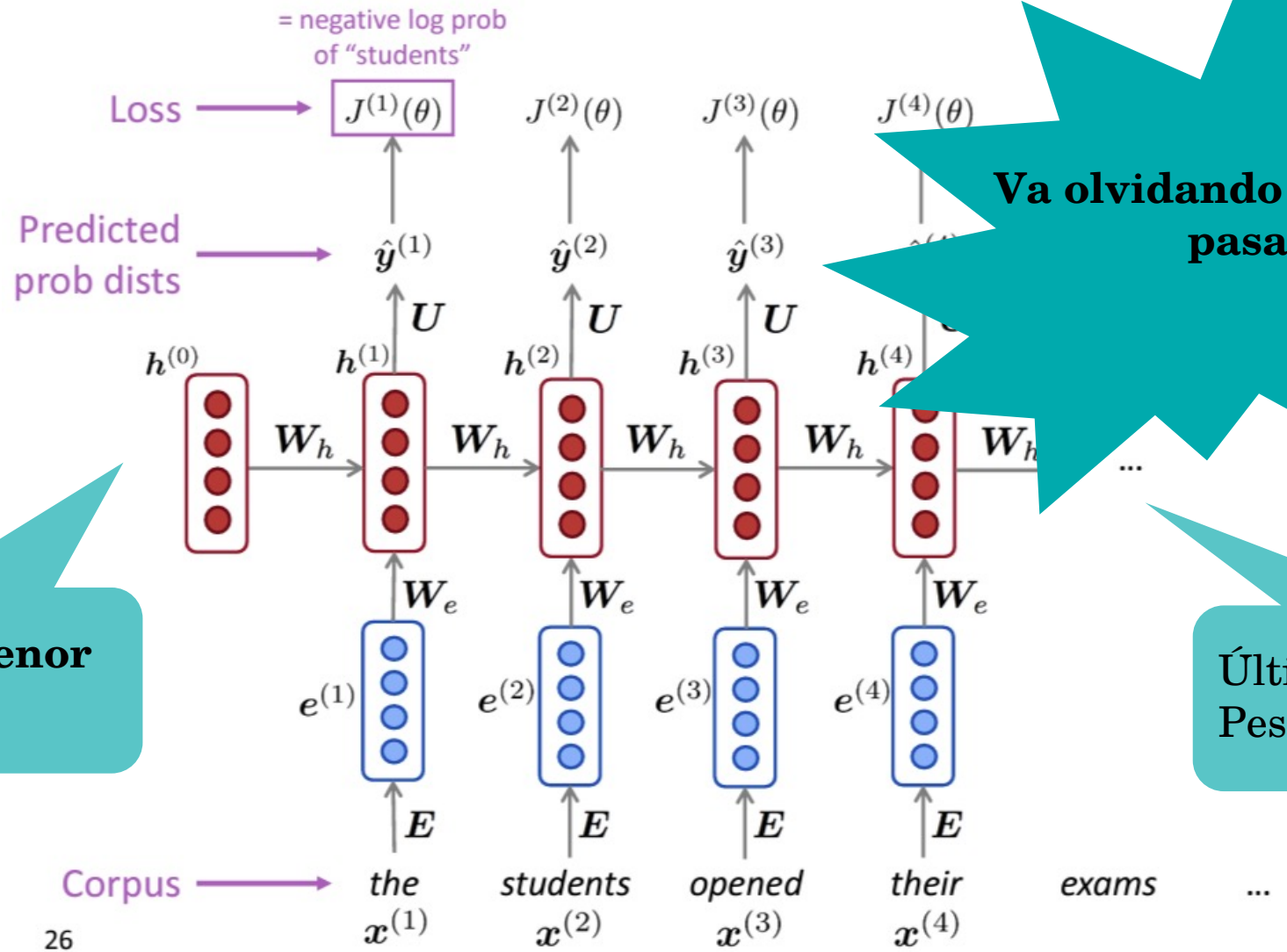
Redes Neuronales Recurrentes
Problema



Primeras capas **menor**
Peso → Olvida

Últimas capas **mayor**
Peso → Recuerdo

Redes Neuronales Recurrentes
Problema



Va olvidando el contexto pasado

Primeras capas **menor**
Peso → Olvida

Últimas capas **mayor**
Peso → Recuerdo

Redes Neuronales Recurrentes

Problema

El jaguar dormía en la rama del árbol con su cola de soporte.

Redes Neuronales Recurrentes

Problema

El jaguar dormía en la rama del árbol con **su** cola de soporte.

Con las RRN, se olvida que "su" hace referencia al jaguar

Redes Neuronales Recurrentes

Problema

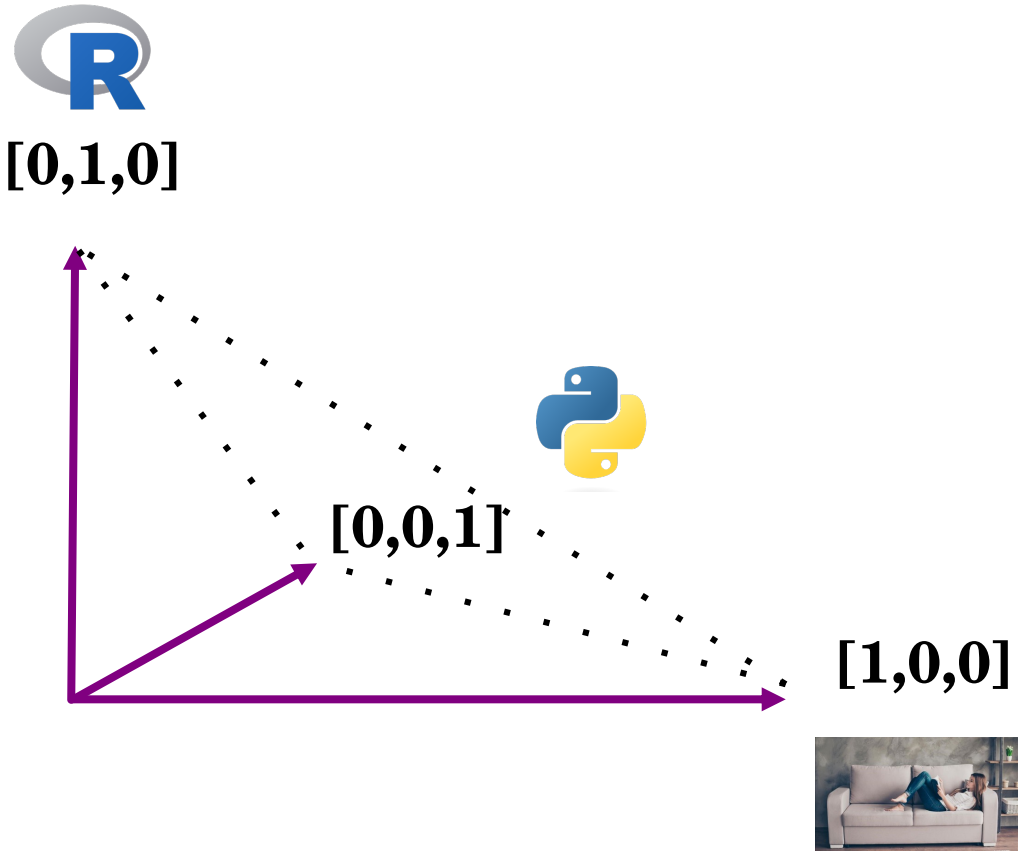
El jaguar dormía en la rama del árbol con **su** cola de soporte.

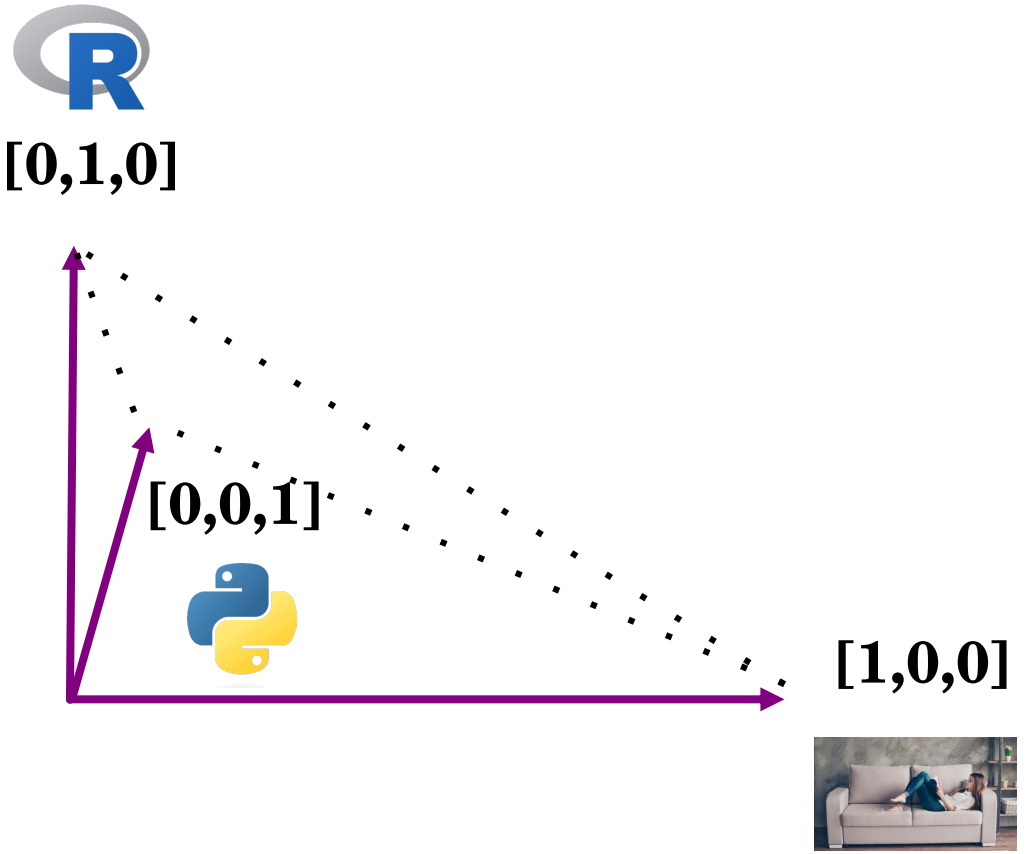
Attention resuelve este problema

Con las RRN, se olvida que "su" hace referencia al jaguar

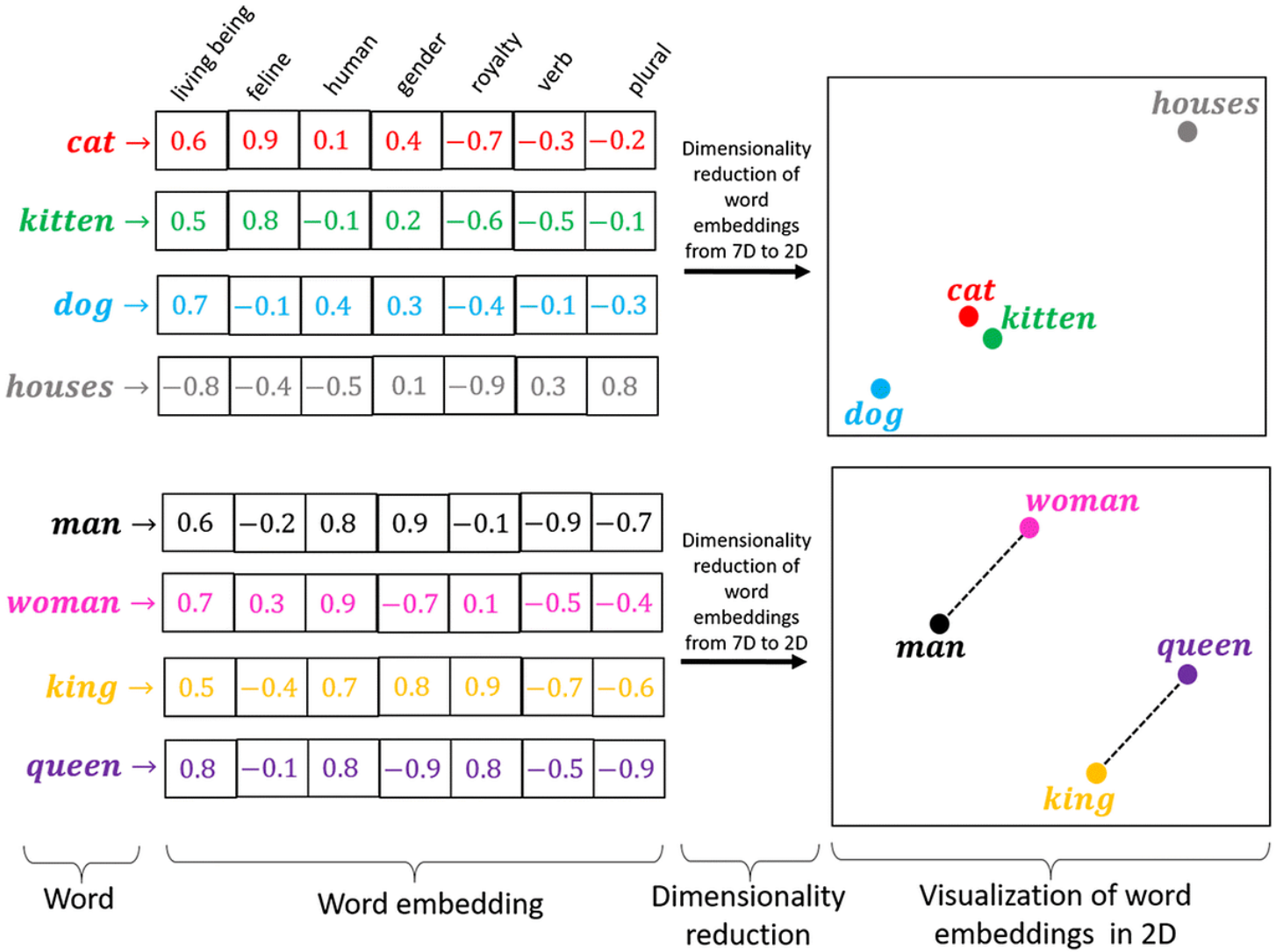
Attention

Codificación
One-Hot Encoding – Problema





Word embedding



Attention

Background

El	El
jaguar	jaguar
dormía	dormía
en	en
su	su
árbol	árbol

Attention
Background

El		El
jaguar		jaguar
dormía		dormía
en		en
su		su
árbol	...	árbol

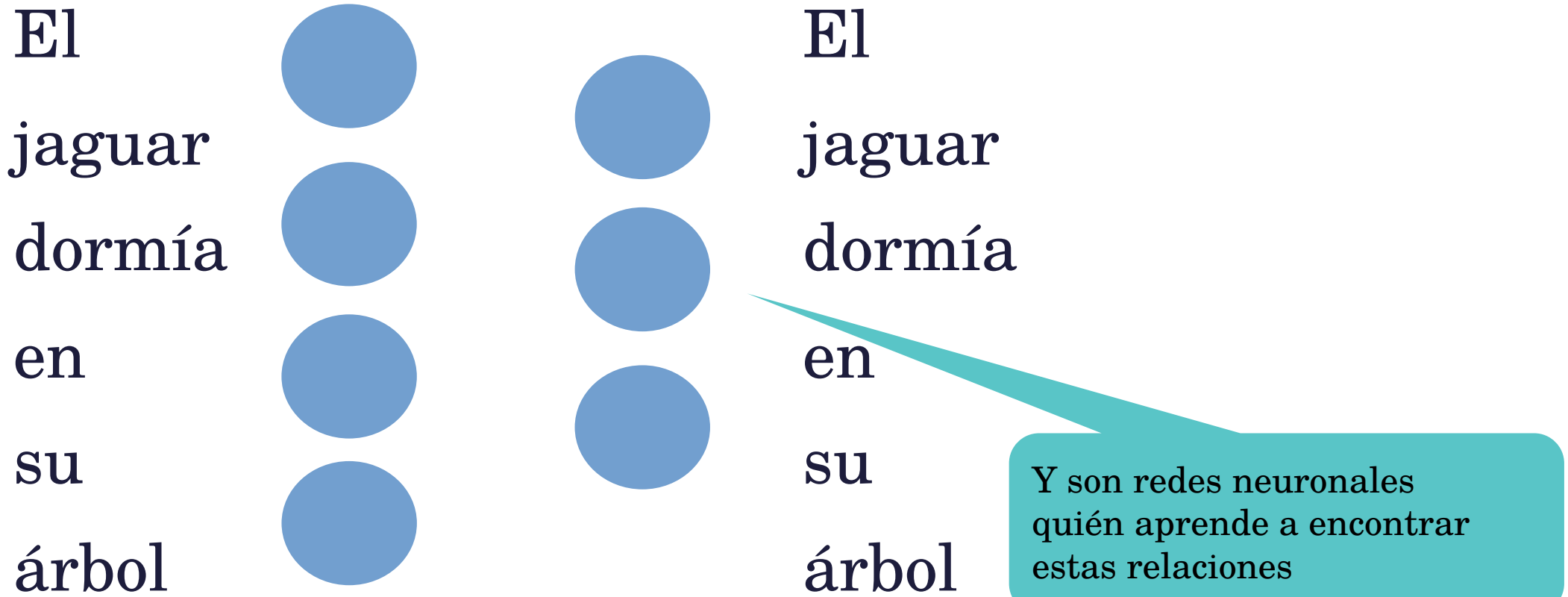
Attention
Background

El		El
jaguar		jaguar
dormía		dormía
en		en
su		su
árbol	...	árbol

Busca la relación de todas las palabras con todas las otras palabras!

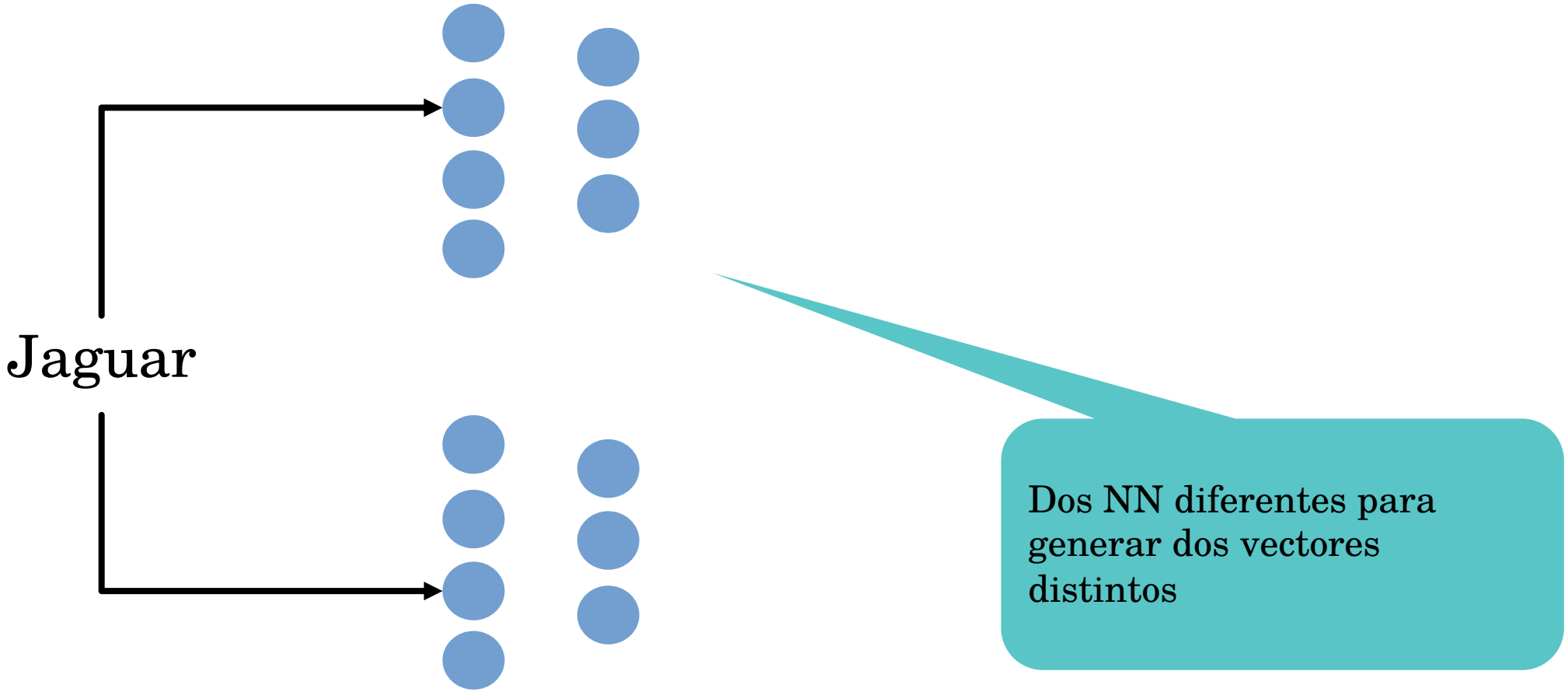
Vectores

Key - Search

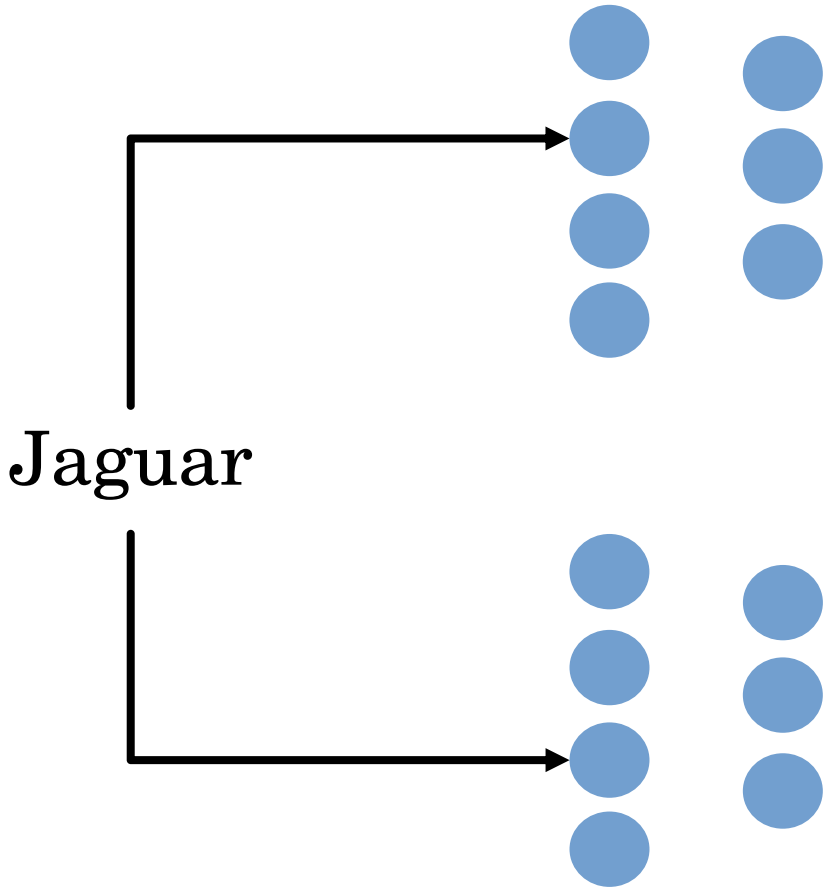


Vectores

Key - Search



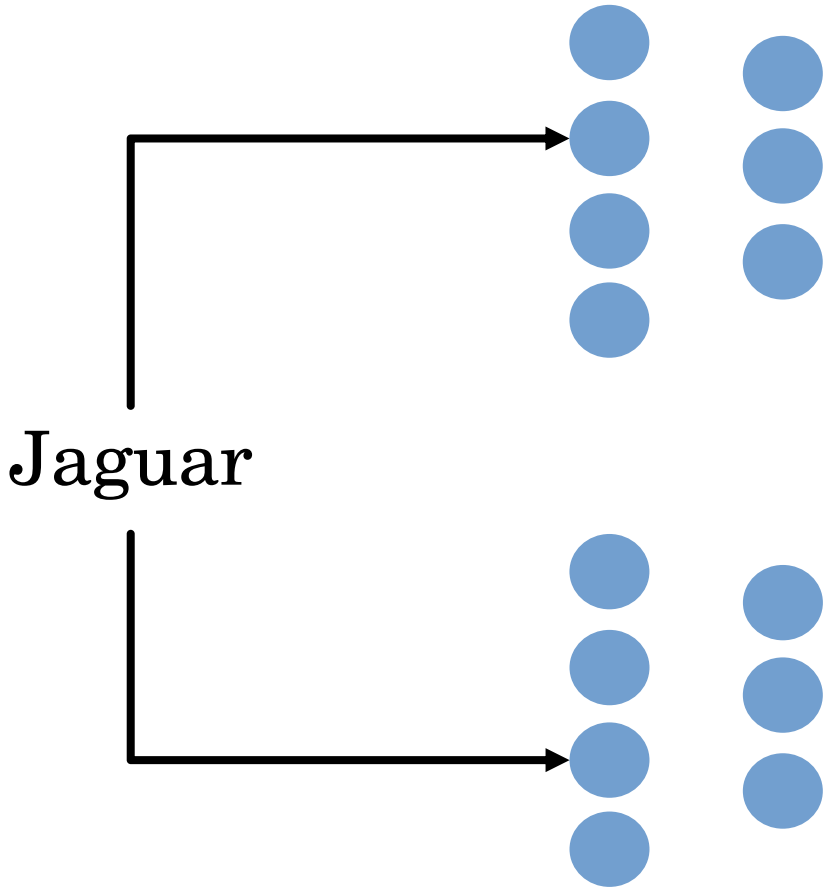
Vectores
Key - Search



[0,74 -0,44 ...0,54]

Vector identificador (key):
Obtiene las propiedades
que describen dicha palabra
→ Significado

Vectores
Key - Search



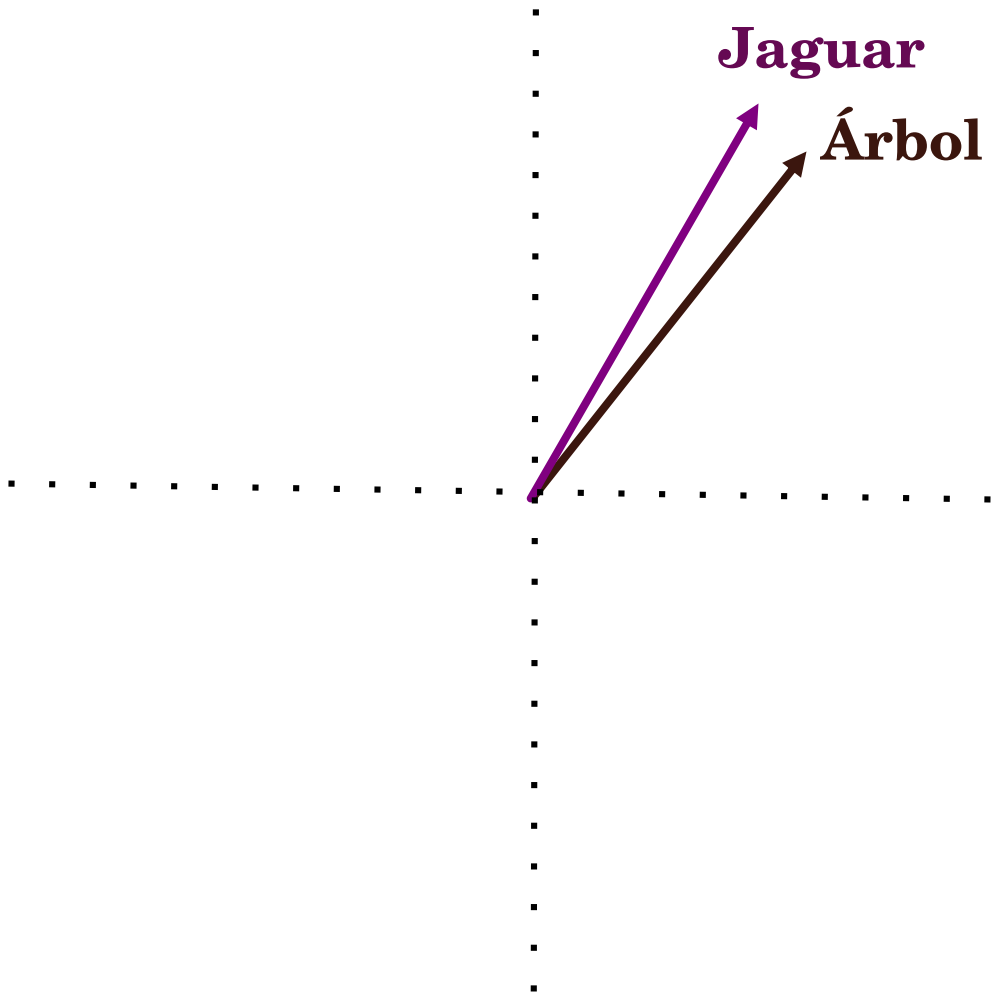
[0,74 -0,44 ...0,54]

Vector identificador (key):
Obtiene las propiedades
que describen dicha palabra
→ Significado

[0,34 -0,14 ...0,34]

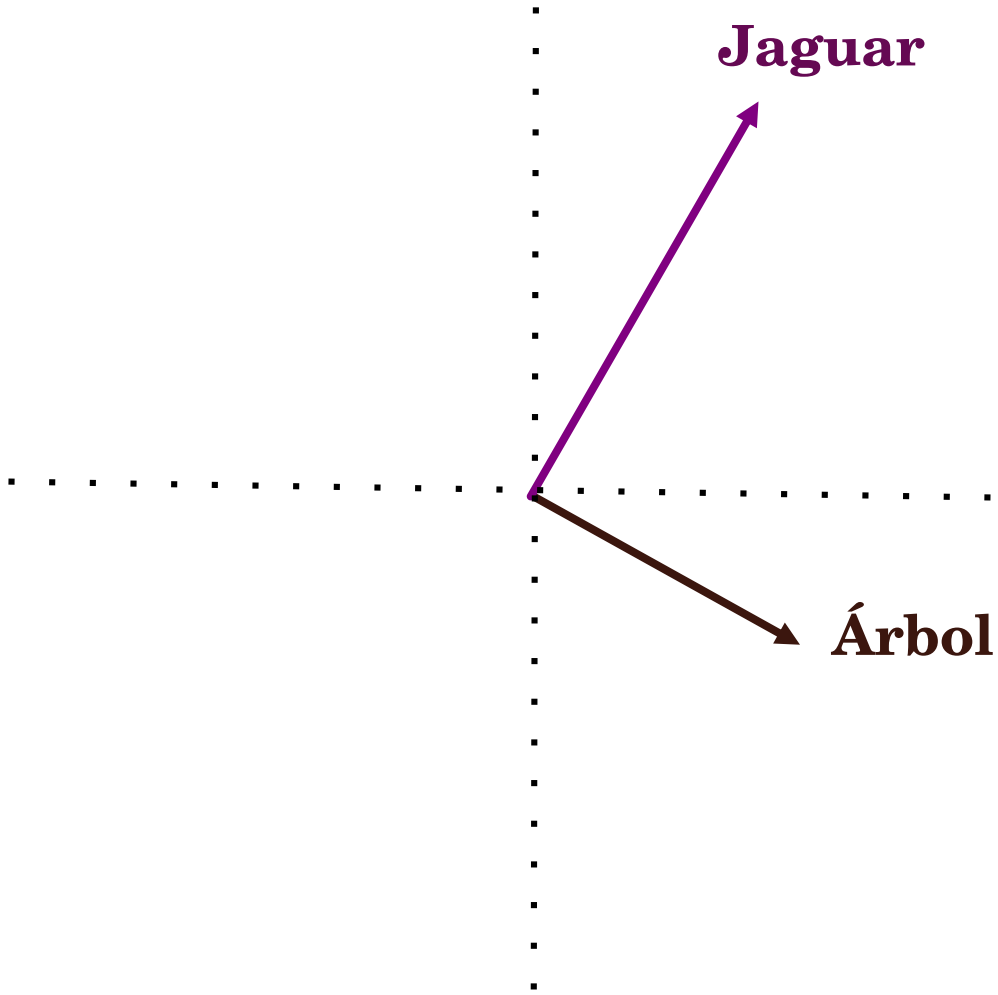
Vector búsqueda (query):
Obtiene las propiedades
de lo que busca la palabra
→ Contexto

Attention
Producto escalar



Si los vectores están **próximos** entonces son palabras coincidentes → Están en su contexto

Attention
Producto escalar



Si los vectores están **alejados** entonces no son palabras coincidentes → No están en su contexto

Attention
Background

El
jaguar
dormía
en
su
árbol

...

El
jaguar
dormía
en
su
árbol

Vectores de búsqueda

Vectores identificador

Attention

Background

El

jaguar

dormía

en

su

árbol

El

jaguar

dormía

en

su

árbol

Attention
Background

El

jaguar

dormía

en

su

árbol

El

jaguar

dormía

en

su

árbol

Puede calcular la compatibilidad de cada palabra identificador *(key)* con todas las otras palabras de búsqueda *(query)*

Attention
Background

El

jaguar

dormía

en

su

árbol

El

jaguar

dormía

en

su

árbol

Puede calcular la compatibilidad de cada palabra identificador *(key)* con todas las otras palabras de búsqueda *(query)*

Se llama vector valor

Attention
Background

El	El	**0,34**
jaguar	jaguar	**-0,44**
dormía	dormía	**0,19**
en	en	**-0,24**
su	su	**0,64**
árbol	árbol	**0,84**

Calcula el producto escalar:
*v(key) * v(query)*
→ el resultado contra mayor sea, entonces mayor compatibilidad entre esas palabras

Attention
Background

El	El	**0,34**
jaguar	jaguar	**-0,44**
dormía	dormía	**0,19**
en	en	**-0,24**
su	su	**0,64**
árbol	árbol	**0,84**

Esto es **ATTENTION**

Vector Valor

Input

El **jaguar** dormía en su árbol

Attention

Vector Valor

Input

El **jaguar** dormía en su árbol

Attention	**0,34**	**0,14**	**0,75**	**0,11**	**0,52**	**0,26**

Vector Valor

Input

El **jaguar** dormía en su árbol

Attention	**0,34**	**0,14**	**0,75**	**0,11**	**0,52**	**0,26**

Vectores Valor

0,34
-0,44
0,19
...
0,84

Vector Valor

Input

El **jaguar** dormía en su árbol

Attention	**0,34**	**0,14**	**0,75**	**0,11**	**0,52**	**0,26**

Vectores Valor	**0,34**	**0,31**
	-0,44	**-0,54**
	0,19	**0,49**
	...	**...**
	0,84	**0,34**

Vector Valor

Input

El **jaguar** dormía en su árbol

Attention	**0,34**	**0,14**	**0,75**	**0,11**	**0,52**	**0,26**
Vectores Valor	**0,34**	**0,31**				**0,45**
	-0,44	**-0,54**				**-0,14**
	0,19	**0,49**				**0,26**
	...	**...**	**...**			**...**
	0,84	**0,34**				**0,43**

Vector Valor

Input

El **jaguar** dormía en su árbol

Attention	**0,34**		**0,14**			**0,75**			**0,11**	**0,52**		**0,26**	
Vectores Valor	**0,34** **-0,44** **0,19** **…** **0,84**	**+**	**0,31** **-0,54** **0,49** **…** **0,34**	**+**			**…**				**+**	**0,45** **-0,14** **0,26** **…** **0,43**	→ Vector output

Vector Valor

El	El	Vector output #1
jaguar	jaguar	Vector output #2
dormía	dormía	Vector output #3
en	en	Vector output #4
su	su	Vector output #4
árbol	árbol	Vector output #5

Vector Valor

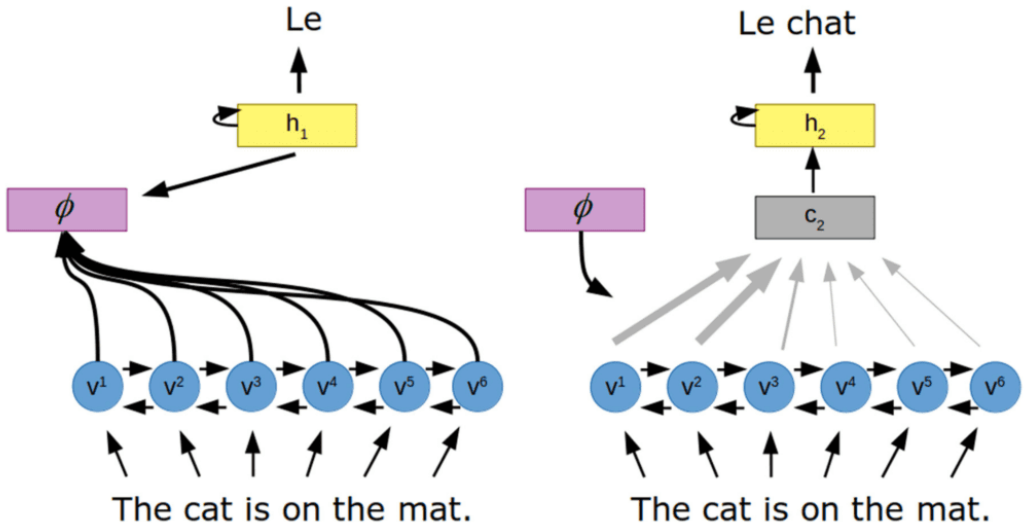
El	El	Vector output #1
jaguar	jaguar	Vector output #2
dormía	dormía	Vector output #3
en	en	Vector output #4
su	su	Vector output #4
árbol	árbol	Vector output #5

Estos vectores valor ahora ya si tienen el contexto de todo el texto

Encoder-Decoder with attention

El **mecanismo de *atención (φ)*** aprende un conjunto de pesos de atención que capturan la relación entre los ***vectores codificados (v)*** y el **estado oculto del *decodificador (h)*** para generar un **vector de *contexto (c)*** a través de una suma ponderada de todos los estados ocultos del codificador.

De este modo, el descodificador tendría **acceso a toda la secuencia de entrada**, centrándose específicamente en la información de entrada **más relevante** para generar la **salida**.



Transformers

ETS de Ingeniería Informática

UNED

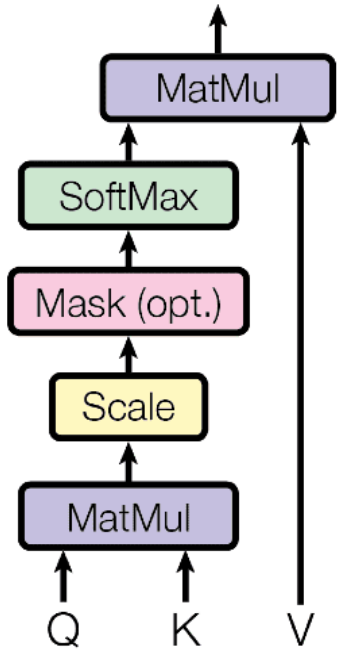
Consideraciones previas

La arquitectura del Transformer prescinde de cualquier recurrencia y se basa únicamente en un mecanismo de autoatención (*self-attention*).

El mecanismo de autoatención se basa en el uso de consultas, claves y valores, que se generan multiplicando la representación del codificador de la misma secuencia de entrada con diferentes matrices de pesos.

El Transformer utiliza la atención de producto escalar, en la que cada consulta se compara con una BBDD de claves mediante una operación de producto escalar en el proceso de generación de los pesos de atención.

A continuación, estos pesos se multiplican por los valores para generar un vector de atención final.



$$\text{attention}(\mathbf{Q}, \mathbf{K}, \mathbf{V}) = \text{softmax}(\frac{\mathbf{Q}\mathbf{K}^\top}{\sqrt{d_k}})\mathbf{V}$$

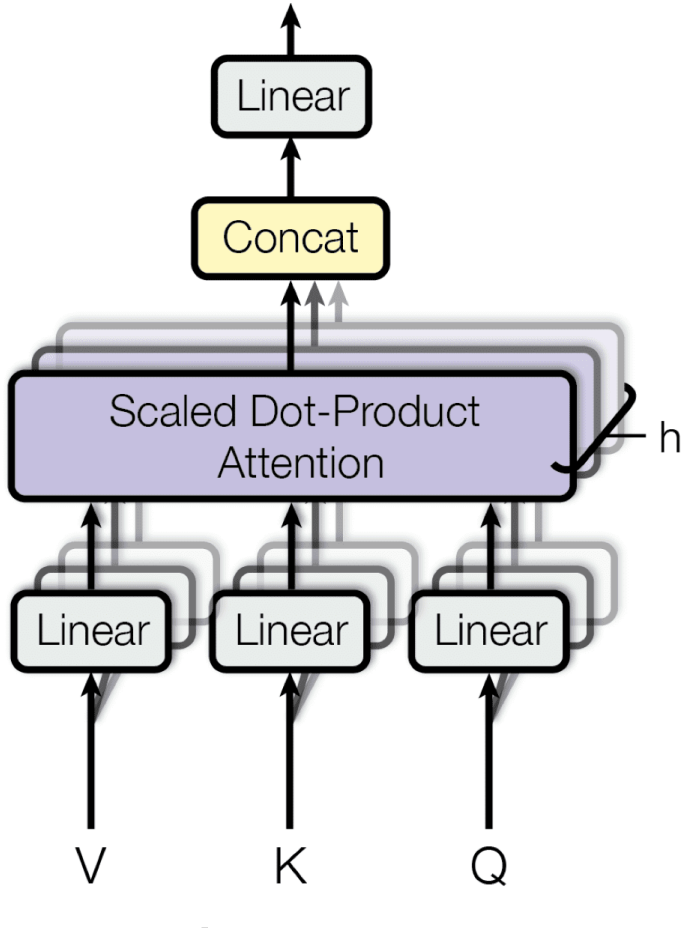
Vaswani, A.et al. (2017). Attention is all you need. Advances in neural information processing systems, 30.

Consideraciones previas

Además, se pueden apilar varias capas de atención en paralelo (*multi-head attention)*.

Cada *head* trabaja en paralelo sobre diferentes transformaciones lineales de la misma entrada, y luego las salidas de las *heads* se concatenan para producir el resultado de atención final.

Dado que las múltiples cabezas de atención pueden trabajar de forma independiente y en paralelo, un modelo *multi-head* puede hacer que cada *head* atienda a diferentes elementos de la secuencia (proyecciones).



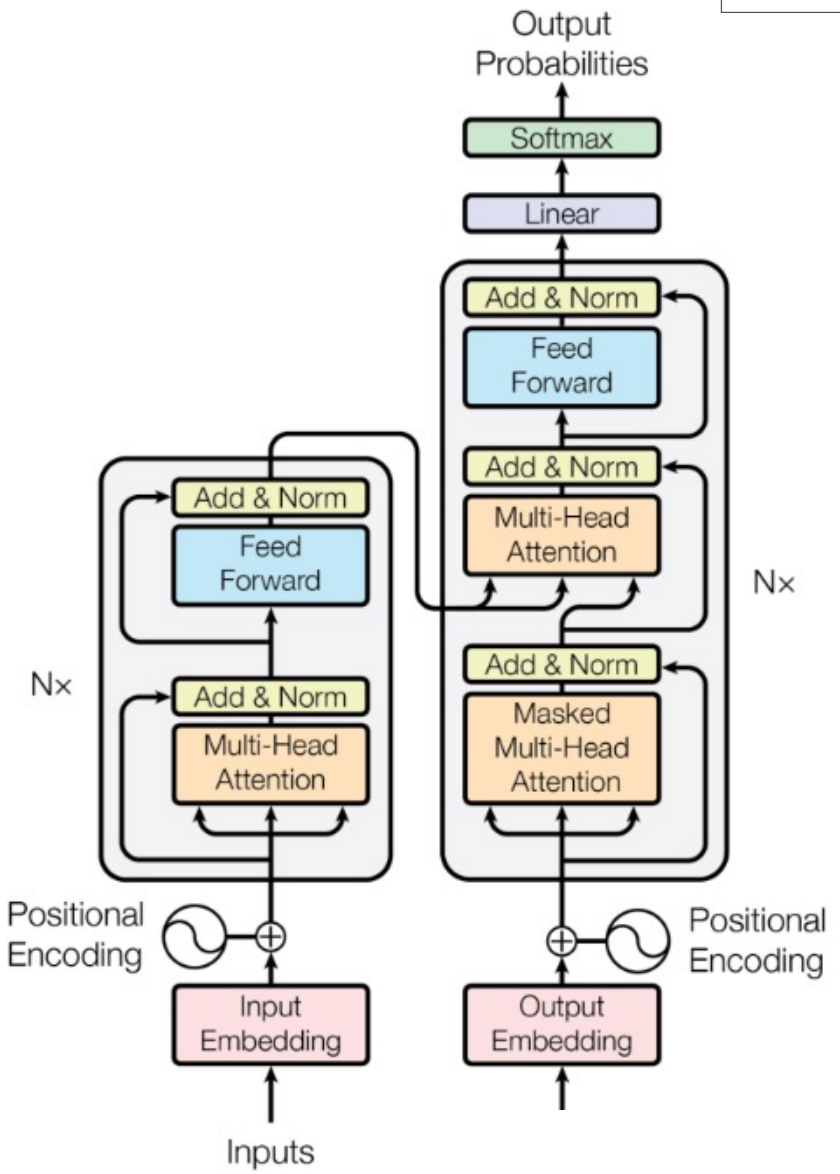
Vaswani, A.et al. (2017). Attention is all you need. Advances in neural information processing systems, 30.

Arquitectura

El Transformer sigue una estructura codificador-decodificador pero no depende de la recurrencia ni de las convoluciones para generar una salida.

La tarea del **codificador** (mitad izquierda) es mapear una secuencia de entrada a una secuencia de representaciones continuas, que luego se introduce en un decodificador.

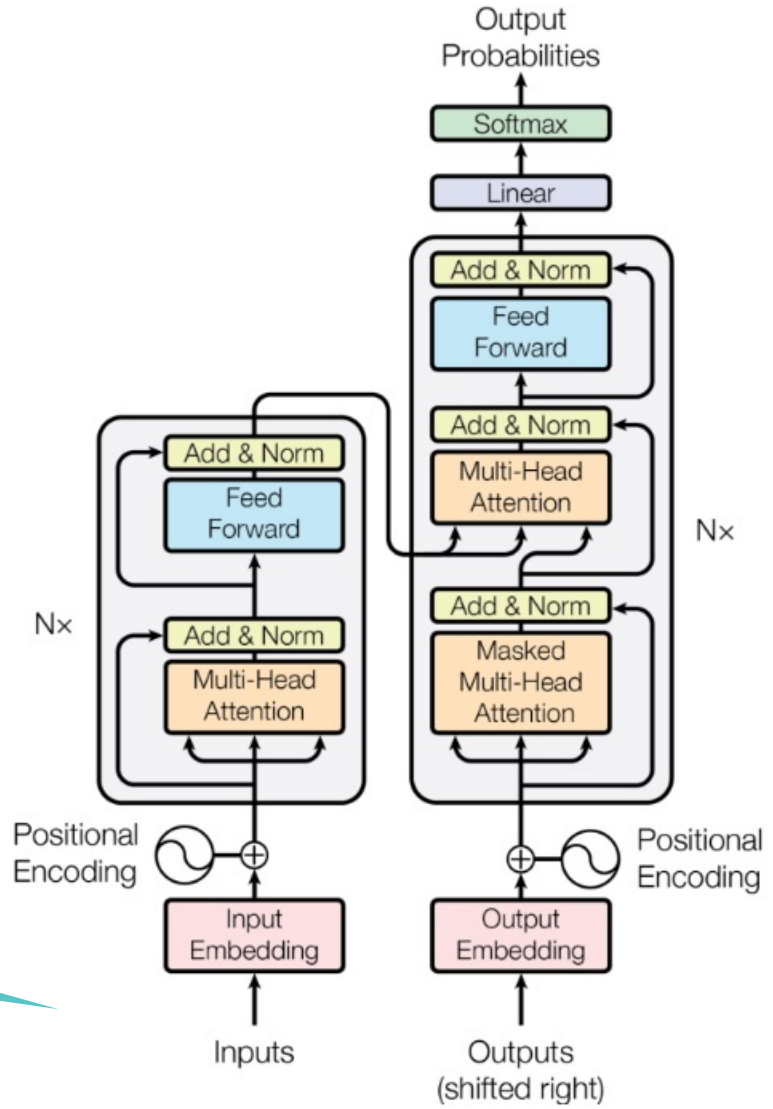
El **decodificador** (mitad derecha) recibe la salida del codificador junto con la salida del decodificador en el paso de tiempo anterior para generar una secuencia de salida.



Vaswani, A.et al. (2017). Attention is all you need. Advances in neural information processing systems, 30.

Arquitectura
Input

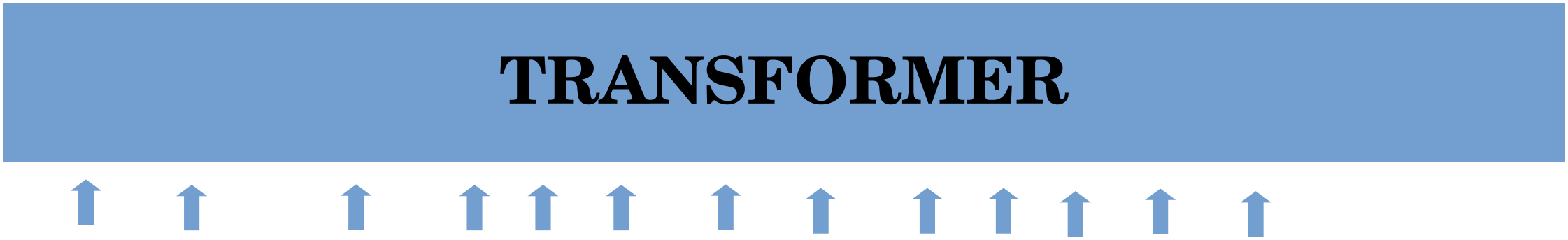
Tenemos una entreda embedding. Los Transformers asumen todas las palabras a la vez (al contrario de las RNN que era palabra por palabra)



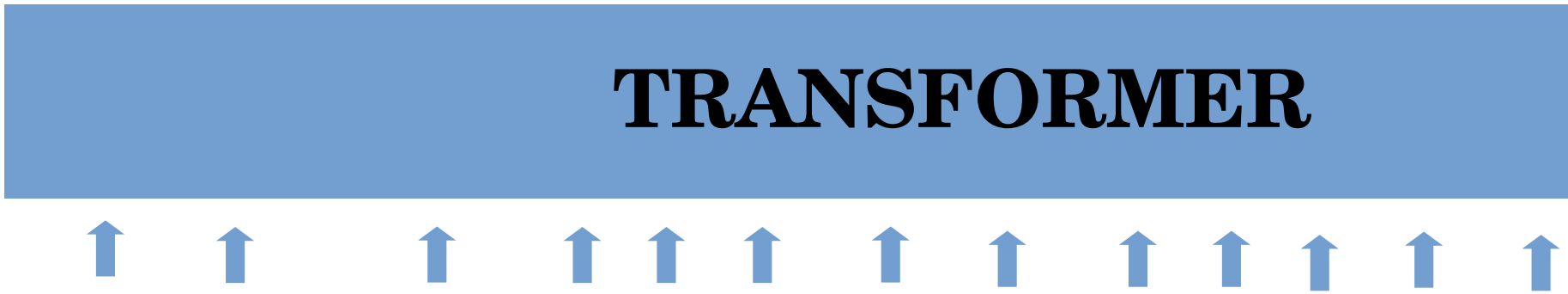
Vaswani, A.et al. (2017). Attention is all you need. Advances in neural information processing systems, 30.

Arquitectura

Input

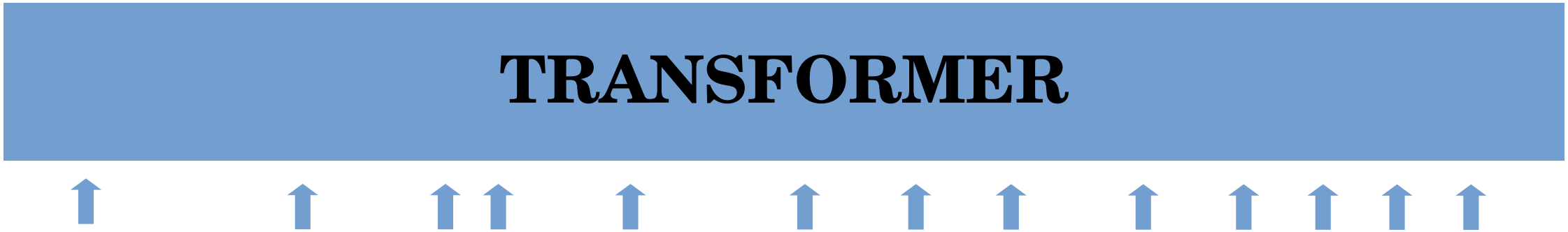


Arquitectura
Input



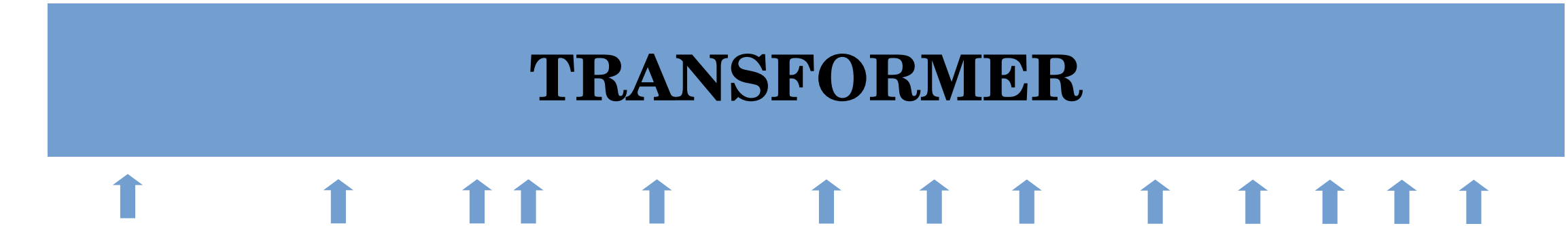
Arquitectura

Input



Entran todas las palabras a la vez → ¡¡¡**Sin importar el Orden!!!!**

Arquitectura
Input



Entran todas las palabras a la vez → ¡¡¡**Sin importar el Orden!!!!**

¿Y cómo tiene en cuenta el contexto?

Posicionamiento

El **jaguar** dormía en su árbol

Posicionamiento

El	**jaguar**	dormía	en	su	árbol
0,34	**0,31**	**0,45**			
-0,44	**-0,54**	**-0,14**			
0,19	**0,49**	**0,26**			
...	**...**	**...**		**...**	
0,84	**0,34**	**0,43**			

Vectores de palabras

Información posicional

El **jaguar** dormía en su árbol

0,34	**1**	**0,31**	**2**	**0,45**	**3**		
-0,44	**1**	**-0,54**	**2**	**-0,14**	**3**		
0,19	**1**	**0,49**	**2**	**0,26**	**3**		
…	**…**	**…**	**…**	**…**	**…**	**…**	
0,84	**1**	**0,34**	**2**	**0,43**	**3**		

Vectores de palabras

Pero añadimos su **posición** en el texto

Información posicional

El **jaguar** su árbol

0,34	1	0,31				
-0,44	1					
0,19	1	0,49				
...	...	...			...	...
0,84	1	0,34	2		,43	3

Problema: si tenemos texto muy grandes tendríamos posiciones muy elevadas

Vectores de palabras

Pero añadimos su **posición** en el texto

Información posicional

El		**jaguar**		dormía		en	su	árbol
0,34	**1/6**	**0,31**	**2/6**	**0,45**	**3/6**			
-0,44	**1/6**	**-0,54**	**2/6**	**-0,14**	**3/6**			
0,19	**1/6**	**0,49**	**2/6**	**0,26**	**3/6**			
…	**…**	**…**	**…**	**…**	**…**		**…**	
0,84	**1/6**	**0,34**	**2/6**	**0,43**	**3/6**			

Solución: Normalizar el vector de posicionamiento por el número total de palabras

Información posicional

Vector posición:
4/6 = 0,66

El jaguar dormía en su árbol

Información posicional

Vector posición:
4/6 = 0,66

El jaguar dormía en su árbol

El jaguar dormía

Vector posición:
2/3 = 0,66

Información posicional

El jaguar dormía en su árbol

Vector posición:
4/6 = 0,66

El jaguar dormía

Vector posición:
2/3 = 0,66

Entonces, ¿0,66 es la posición 2 o 4?

Codificación binaria

El

jaguar

dormía → 3 3 3 … 3 3 3 → 0 0 0 … 0 1 1

en

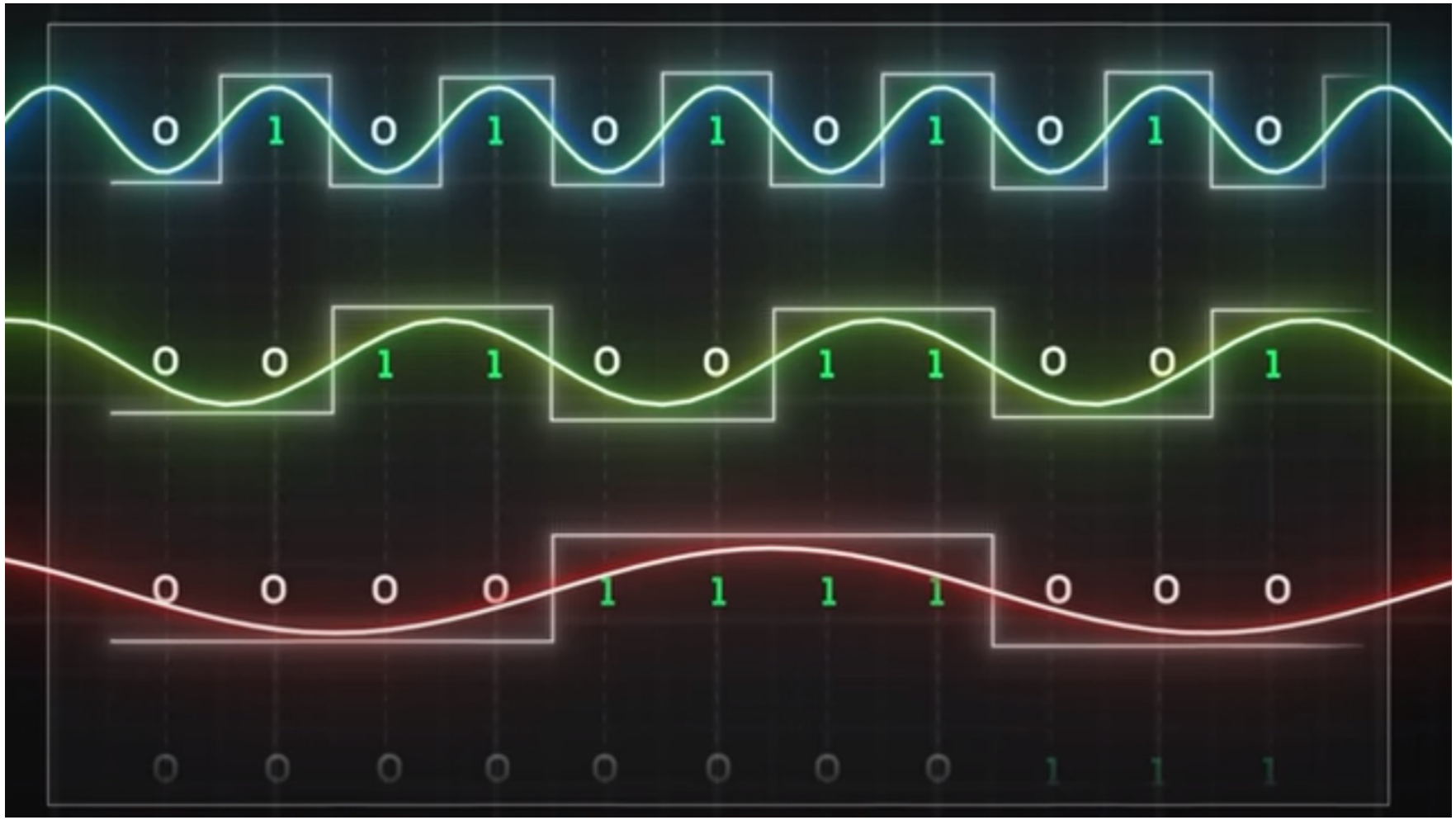
su

árbol

Codificación binaria

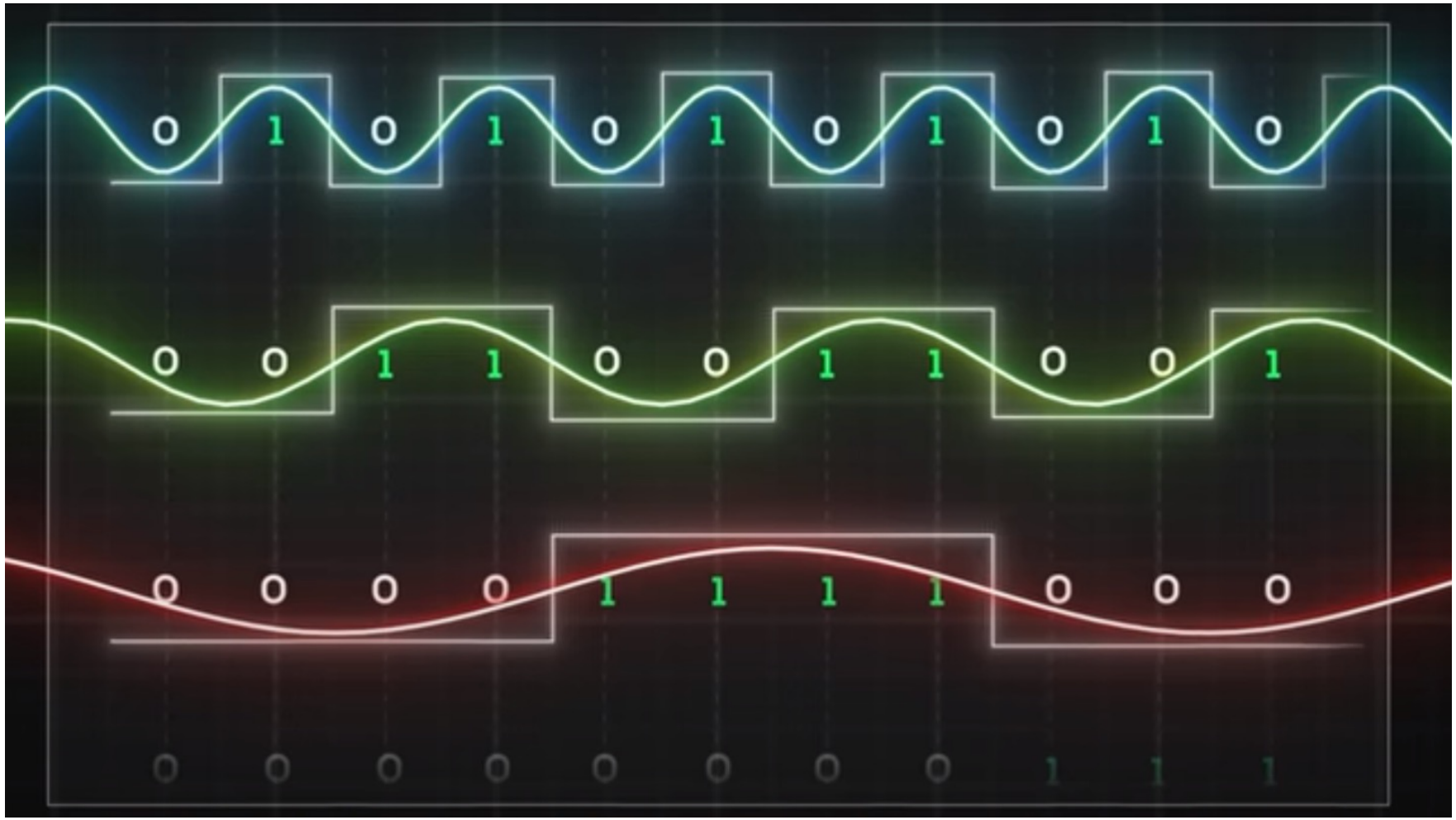
Codificación binaria

Se traduce a una función Senoidal



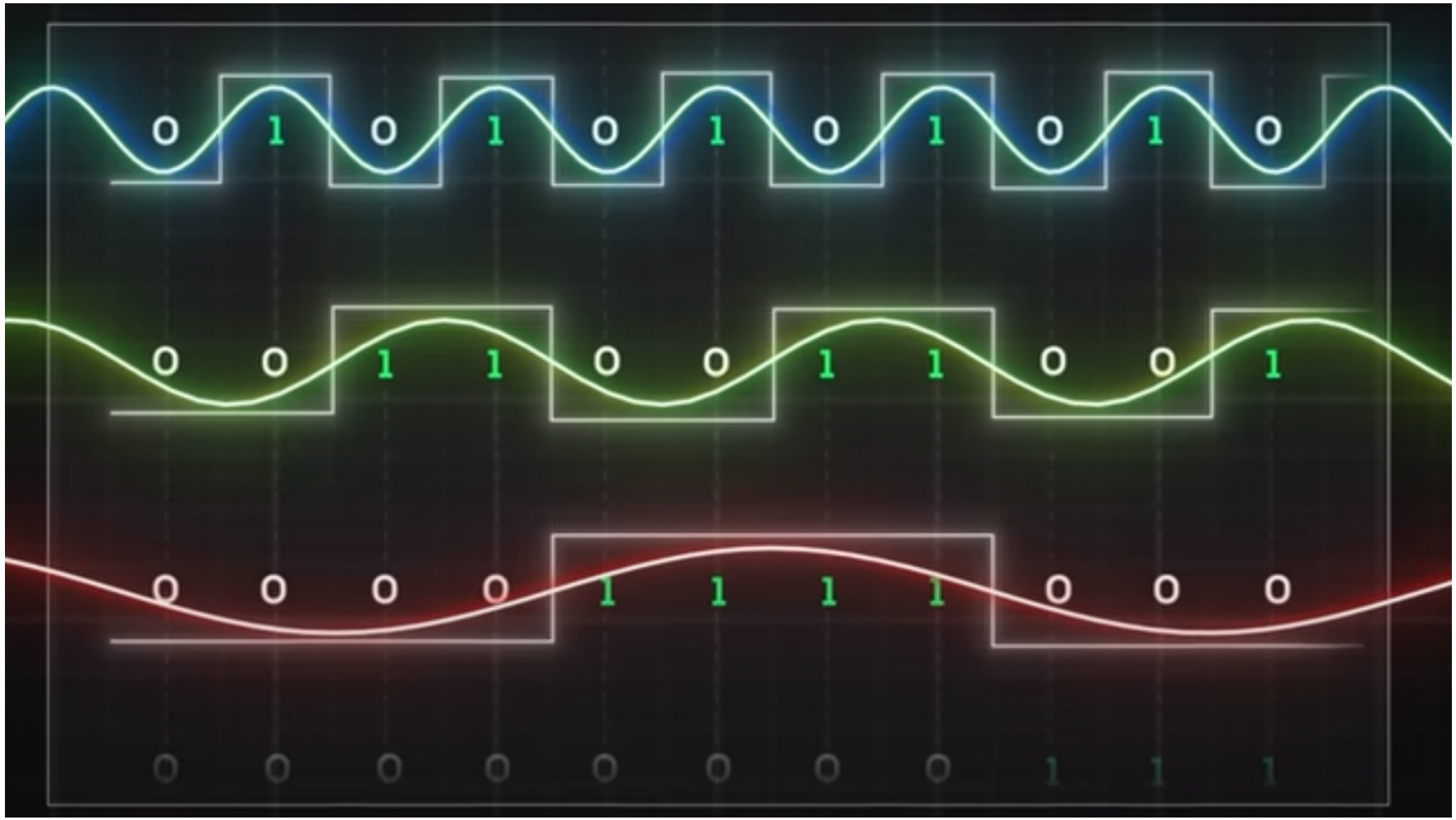
Codificación binaria

Sen(1/1*pos)



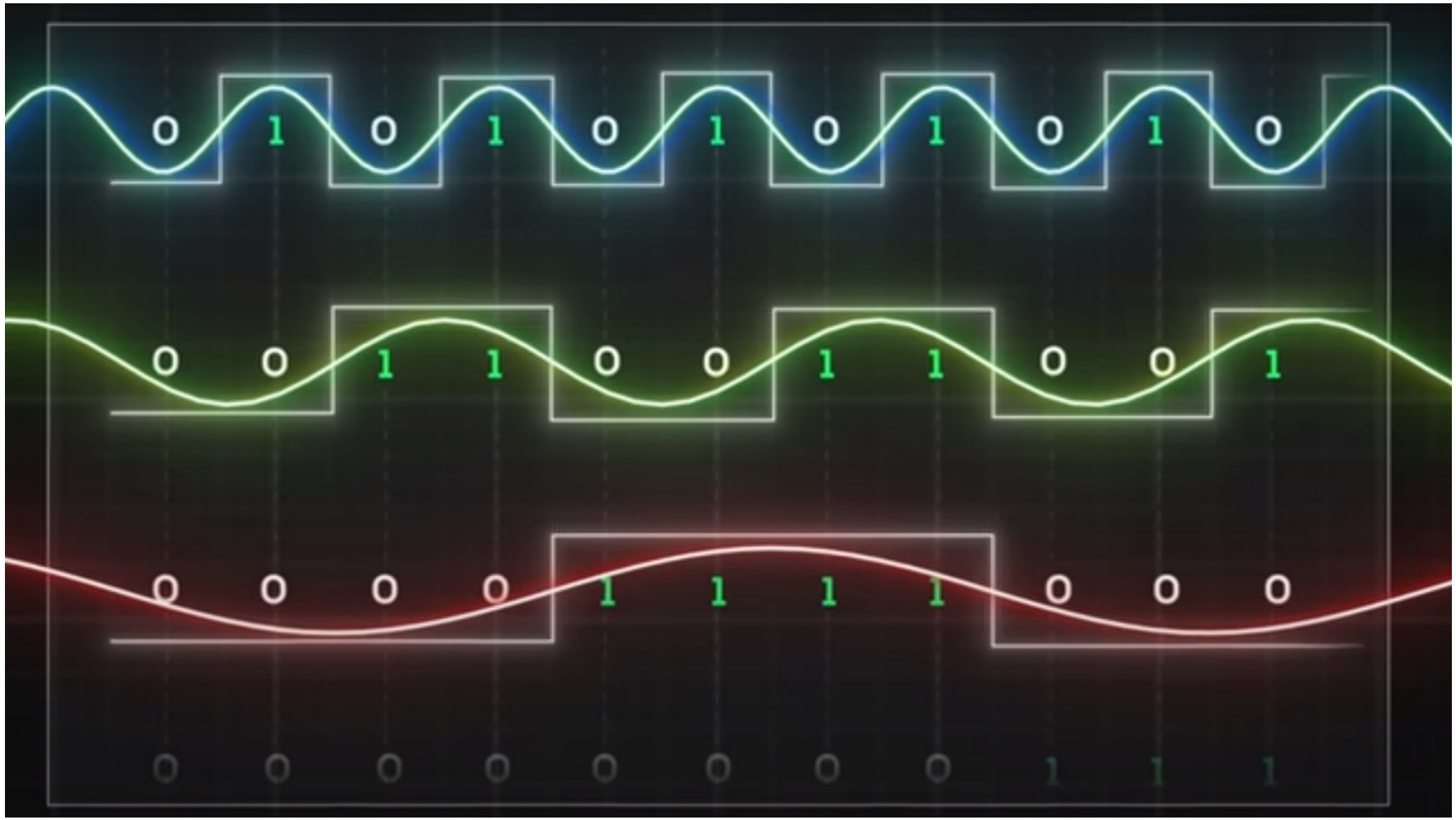
Codificación binaria

Sen(1/2 * pos)

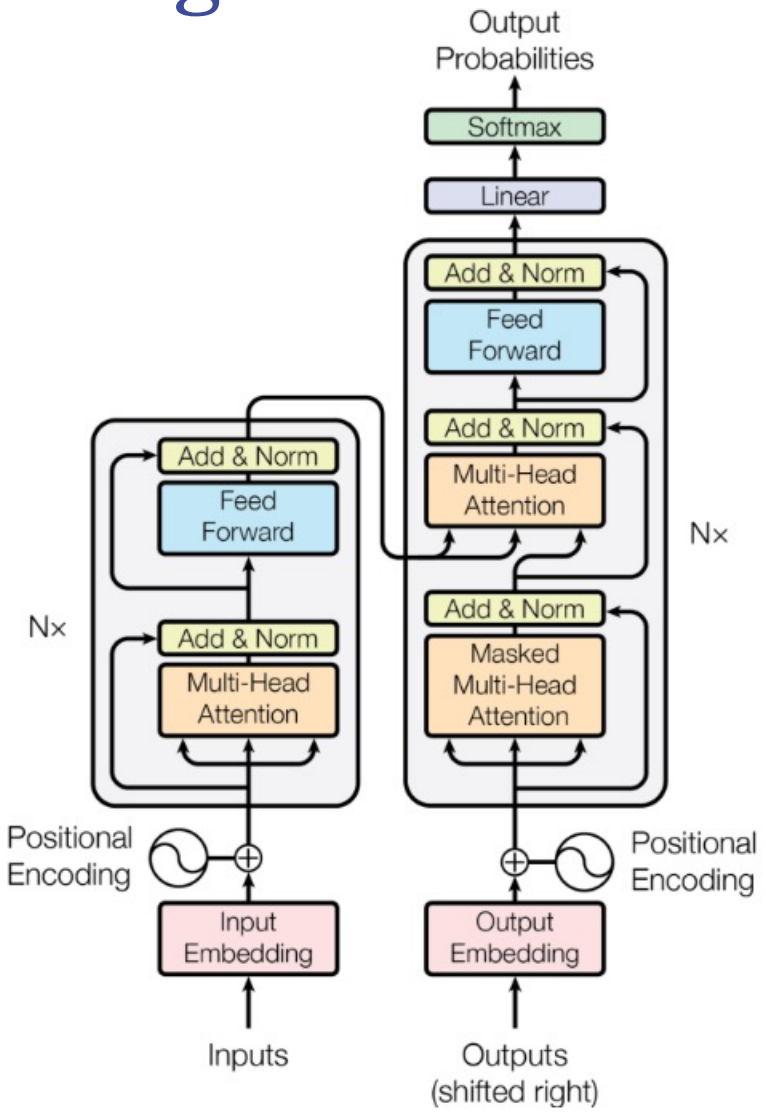


Codificación binaria

Sen(1/3 * pos)



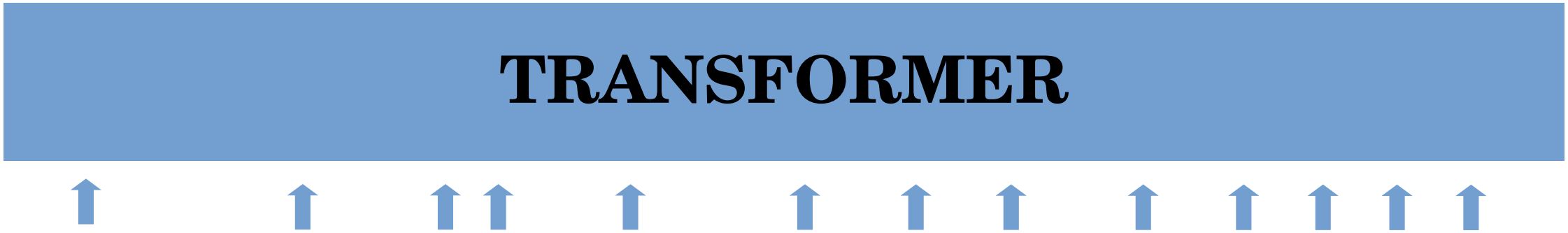
Arquitectura
Positional Encoding



Eso es!

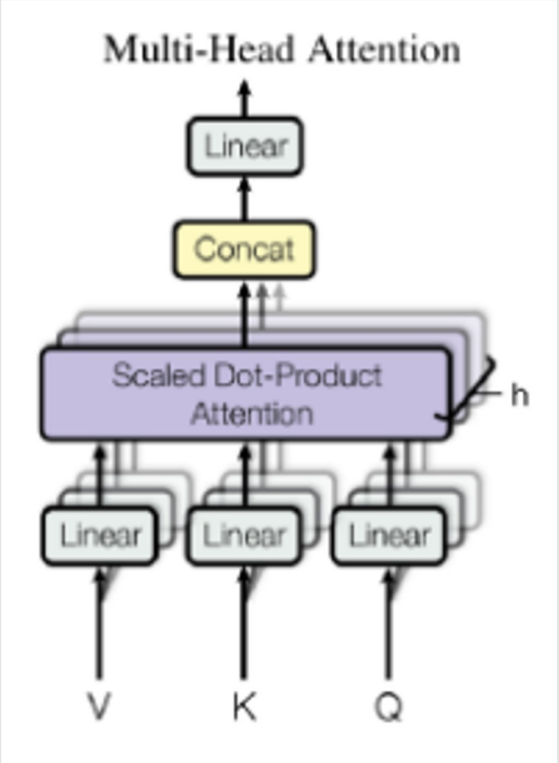
Vaswani, A.et al. (2017). Attention is all you need. Advances in neural information processing systems, 30.

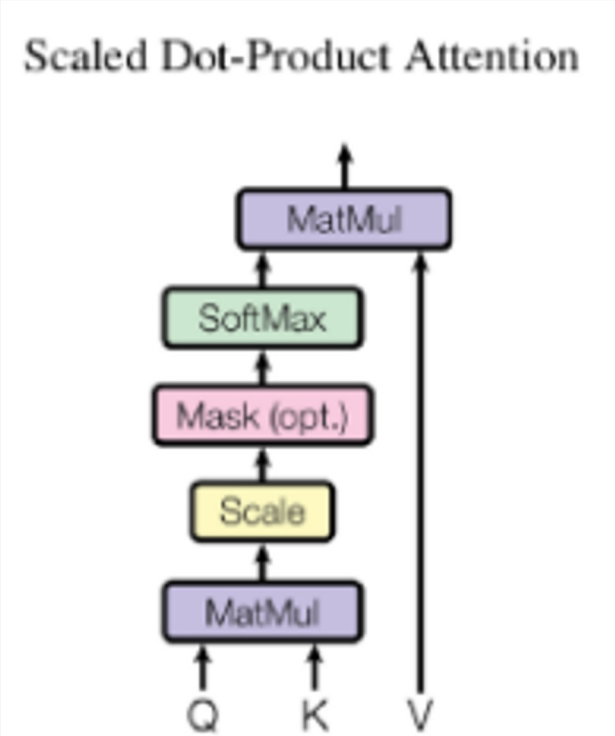
Arquitectura
Input



Y al pasar todas las palabras al mismo tiempo y sin importar el orden → se puede Paralelizar!!!

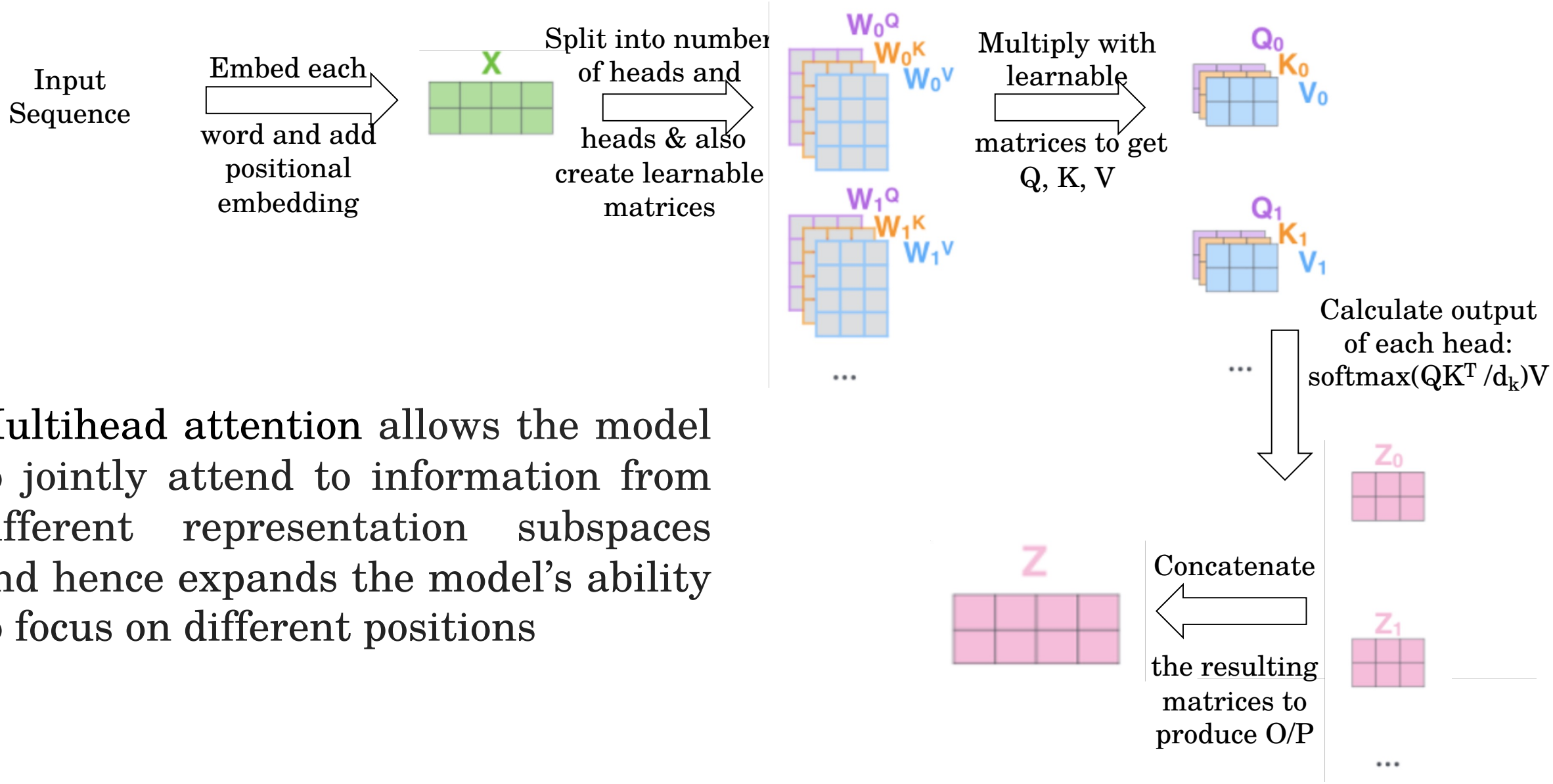
Transformer – Encoder





- Like LSTM, Transformer is an architecture for transforming one sequence into another one with the help of two parts (Encoder and Decoder), but it differs from the existing seq2seq models because it does not imply any Recurrent Networks (GRU, LSTM, etc.).
- 3 main parts : Position Embeddings + Multi Head Attention + Feed- forward Layers.
- Q (query) matrix : vector representation of one word in the sequence
- K (keys) matrix : vector representations of all the words in the sequence
- V (values) matrix : vector representations of all the words in the sequence. For the encoder, V consists of the same word sequence than Q.
- Attention weights = $\text{softmax}(QK^T/d_k)$
- These weights are defined by how each word of the sequence (represented by Q) is influenced by all the other words in the sequence (represented by K).
- Those weights are then applied to all the words in the sequence that are introduced in V.

Multi-Head Attention



Multihead attention allows the model to jointly attend to information from different representation subspaces and hence expands the model's ability to focus on different positions

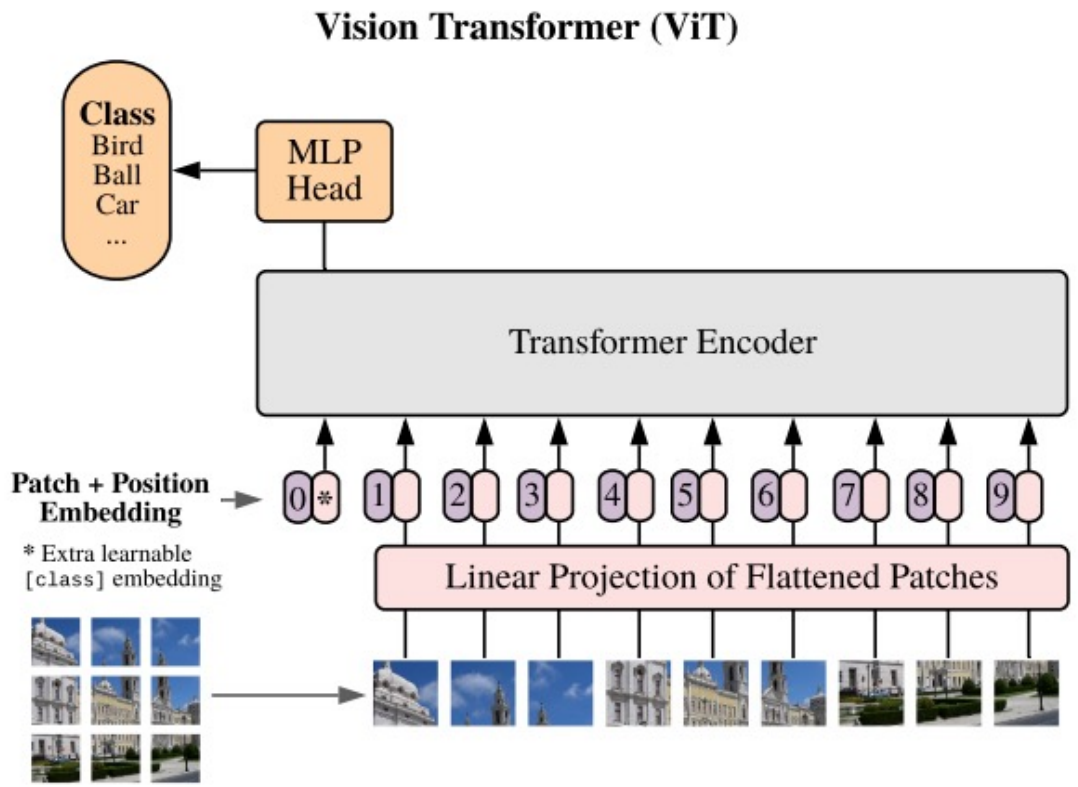
Vision Transformer (ViT)

ETS de Ingeniería Informática

UNED

Disposiciones previas

- Los datos de entrada al Transformer se proporcionan en forma de **imágenes bidimensionales**.
- La imagen de entrada, de alto H, ancho W y canales C, se corta en **patchs bidimensionales** más pequeños.
- Esto da como resultado un número $N=HW/P^2$ **de patchs**, donde cada patch tiene una resolución de $P \times P$ píxeles.

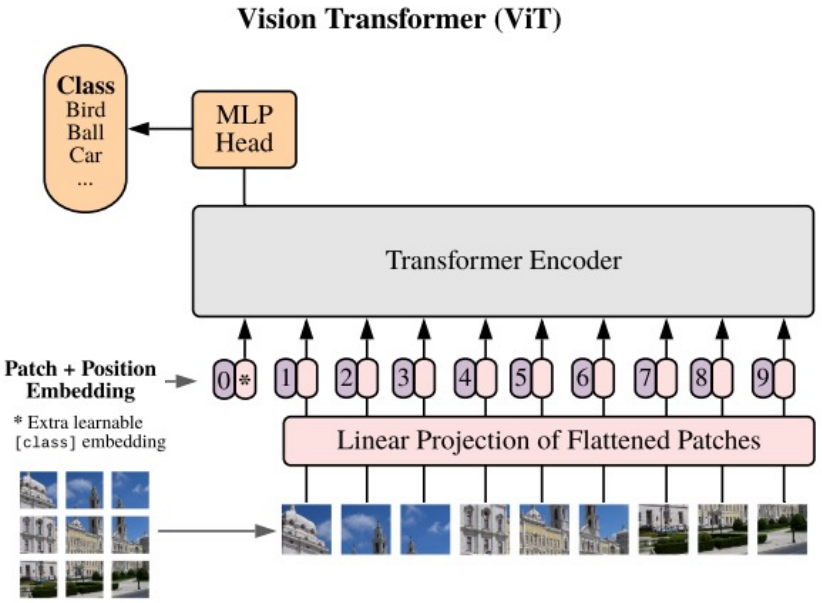


Dosovitskiy, A., et al. (2020). An image is worth 16x16 words: Transformers for image recognition at scale.

Operaciones ViT

- Cada patch de imagen **se aplana en un vector** $\mathbf{x}_p^n$ de longitud $P \times C$ donde, $n=1,\ldots,N$.
- Se genera una **secuencia de patchs** de imagen embedding asignando los patchs aplanados a dimensiones D, con una proyección lineal entrenable E.
- A la secuencia de imágenes embeddings se le añade una clase x_{class}. El valor de x_{class} representa el resultado de la clasificación y.
- Los patchs embedding finalmente se aumentan con embedding posicionales unidimensionales E_{pos}, introduciendo así **información posicional** en la entrada, que se aprende durante el entrenamiento.
- La secuencia de vectores embeddings resultante:

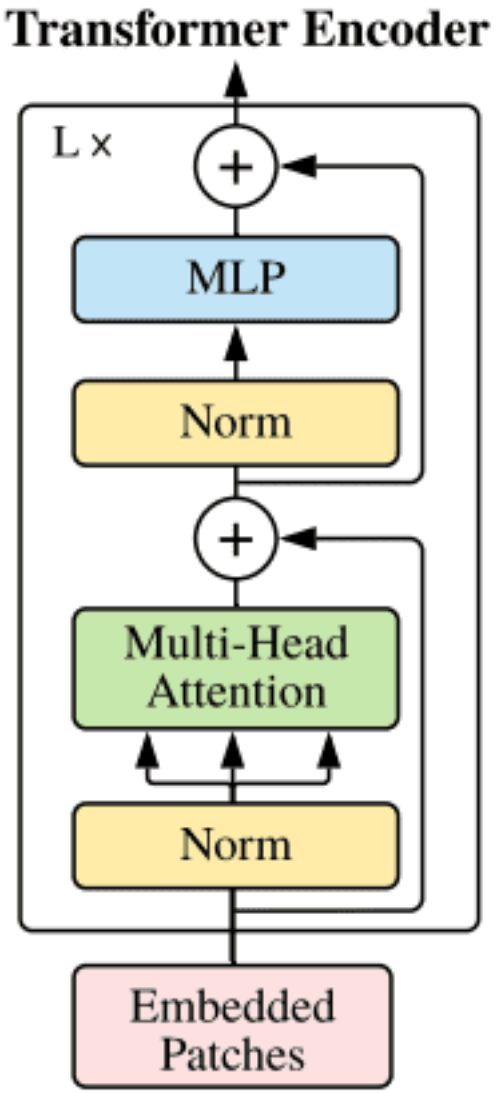
$$\mathbf{z}_0 = [\mathbf{x}_{\text{class}};\ \mathbf{x}_p^1\mathbf{E};\ \ldots;\ \mathbf{x}_p^N\mathbf{E}] + \mathbf{E}_{\text{pos}}$$



Dosovitskiy, A., et al. (2020). An image is worth 16x16 words: Transformers for image recognition at scale.

Operaciones ViT

- Para realizar la clasificación, alimentan z_0 en la entrada del codificador del Transformer, que consta de una pila de capas idénticas.
- Luego, proceden a tomar el valor de x_{class} en la capa L de la salida del codificador y lo introducen en un MLP head de clasificación.
- El MLP de clasificación implementa la no linealidad de unidad lineal de error gaussiano (GELU).
- ViT emplea la parte Codificador de la arquitectura Transformer original.

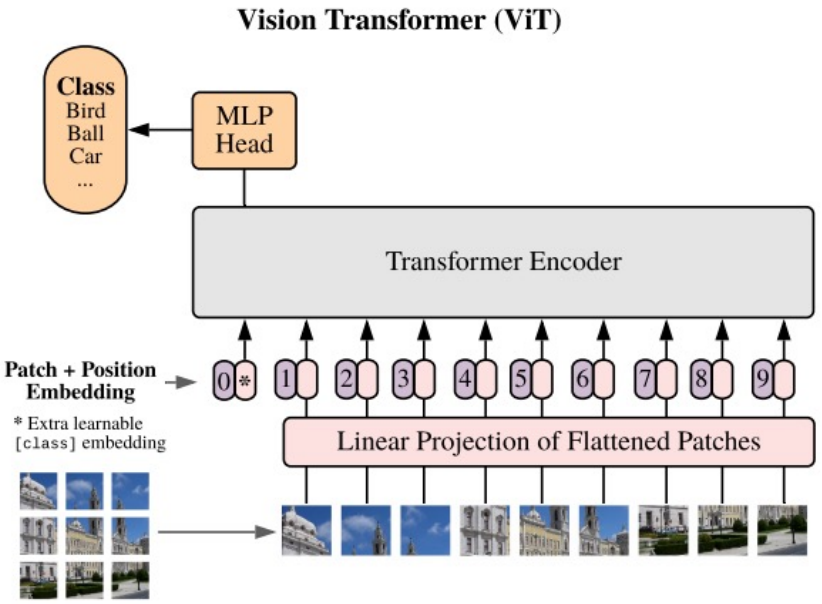


$$\mathbf{z}_0 = [\mathbf{x}_{\text{class}};\ \mathbf{x}_p^1\mathbf{E};\ \ldots;\ \mathbf{x}_p^N\mathbf{E}] + \mathbf{E}_{\text{pos}}$$

Dosovitskiy, A., et al. (2020). An image is worth 16x16 words: Transformers for image recognition at scale.

Mecanismo de funcionamiento

- La entrada al codificador es una secuencia de **patchs** de imágenes embedding, que también se aumenta con información **posicional**.
- Un head de clasificación sigue a la salida del Codificador recibe el valor de la **clase incrustada** que se puede aprender para generar una salida de clasificación basada en su estado.
- En comparación con una capa convolucional, ViT no genera mapas de características separados para toda la imagen. En cambio, cada patch de la imagen se convertirá en un embedding en la que varias características se representan.
- Alternativamente, la imagen original puede introducirse en una **CNN** antes de pasarla al Codificador. La secuencia de patchs de imagen se obtendría entonces a partir de los **mapas de características** de la CNN, mientras que el proceso subsiguiente de incrustación de los patchs del mapa de características, añadiendo un token de clase y aumentando con información posicional sigue siendo el mismo.



Dosovitskiy, A., et al. (2020). An image is worth 16x16 words: Transformers for image recognition at scale.

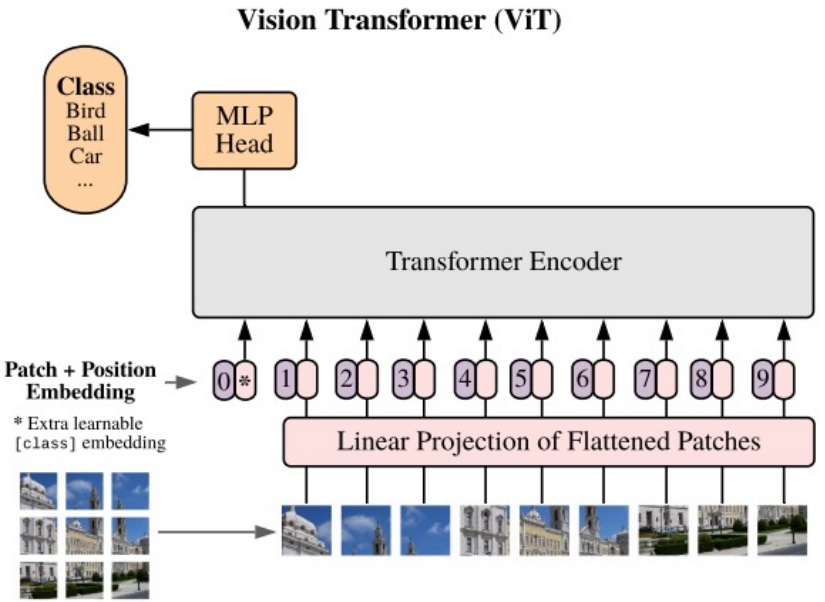
Rendimiento ViT Vs ResNet

Exp. 1: Fine-tuning and testing on ImageNet

En el conjunto de datos más pequeño (ImageNet), los dos modelos ViT más grandes tuvieron un rendimiento inferior en comparación con su contraparte **más pequeña**. El **rendimiento** de todos los ViT se mantiene por debajo del de los ResNets.

Cuando se entrenan en un conjunto de datos **más grande** (ImageNet-21k), los tres modelos ViT se desempeñaron de **manera similar** entre sí, así como con las ResNets.

Cuando se entrenan en el conjunto de datos **más grande** (JFT-300M), el rendimiento de los modelos ViT más grandes **supera el rendimiento** de los ViT más pequeños y las ResNets.



$$\mathbf{z}_0 = [\mathbf{x}_{\text{class}};\ \mathbf{x}_p^1\mathbf{E};\ \ldots;\ \mathbf{x}_p^N\mathbf{E}] + \mathbf{E}_{\text{pos}}$$

Dosovitskiy, A., et al. (2020). An image is worth 16x16 words: Transformers for image recognition at scale.

Rendimiento ViT Vs ResNet

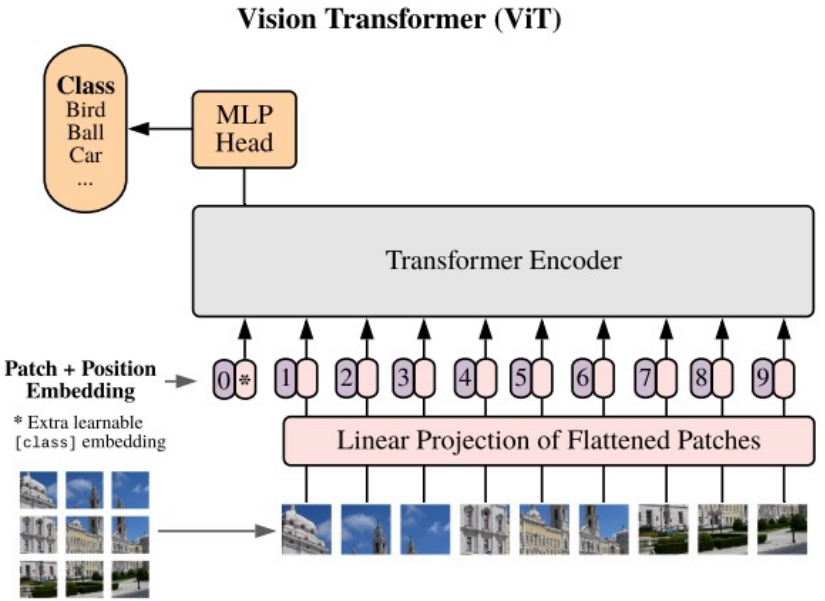
Exp. 2: Investigate the effect of the dataset size

Entrenamiento en subconjuntos aleatorios de diferentes tamaños del conjunto de datos JFT-300M y pruebas en ImageNet para investigar más a fondo el efecto del tamaño del conjunto de datos:

En subconjuntos **más pequeños** del conjunto de datos, los modelos ViT se ajustan más que ResNet y tienen un rendimiento considerablemente **inferior**.

En el subconjunto **más grande** del conjunto de datos, el rendimiento del modelo ViT más grande **supera el rendimiento** de los ResNets.

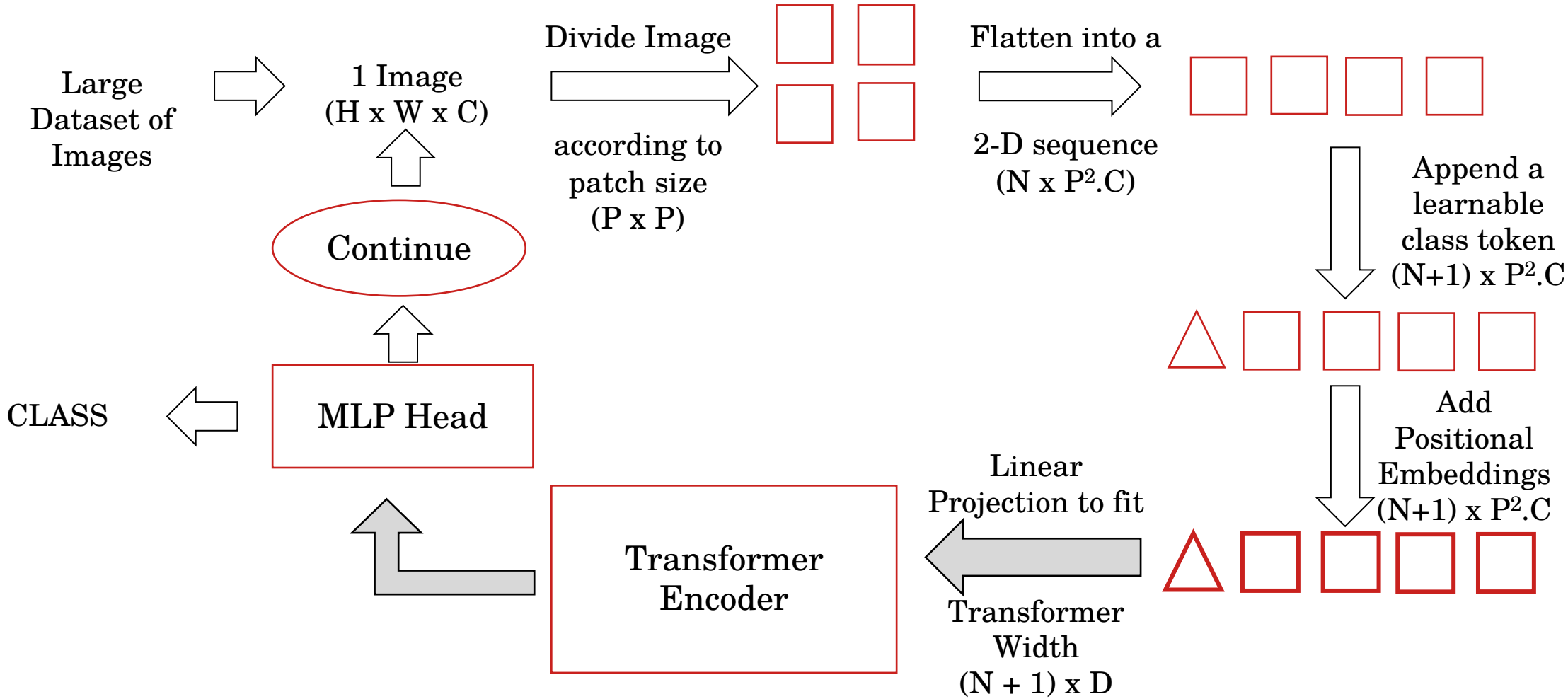
Este resultado refuerza que el sesgo inductivo convolucional es útil para conjuntos de datos más pequeños, pero para los más grandes, aprender los patrones relevantes directamente a partir de los datos es suficiente, e incluso beneficioso.



$$\mathbf{z}_0 = [\mathbf{x}_{\text{class}};\ \mathbf{x}_p^1\mathbf{E};\ \ldots;\ \mathbf{x}_p^N\mathbf{E}] + \mathbf{E}_{\text{pos}}$$

Dosovitskiy, A., et al. (2020). An image is worth 16x16 words: Transformers for image recognition at scale.

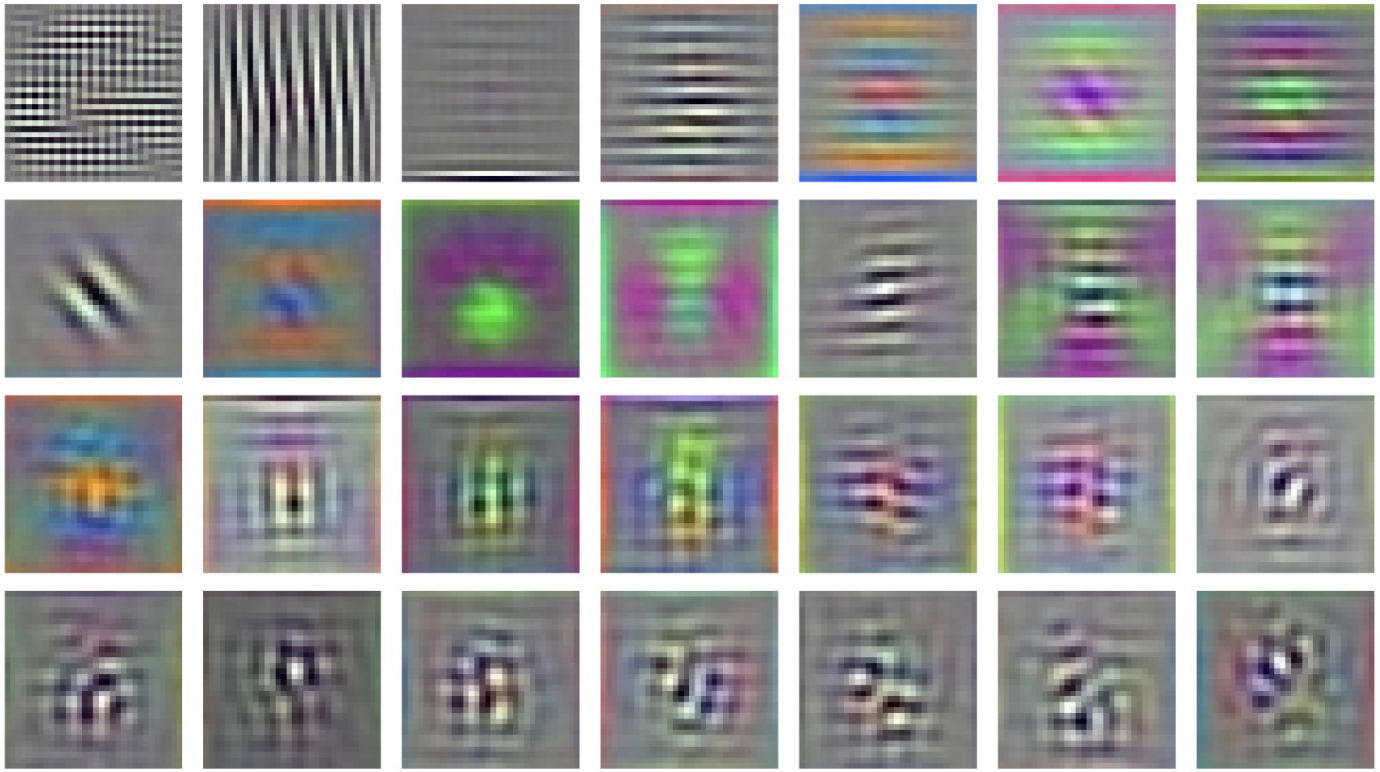
Metodología



Dosovitskiy, A., et al. (2020). An image is worth 16x16 words: Transformers for image recognition at scale.

Representación Interna de Datos

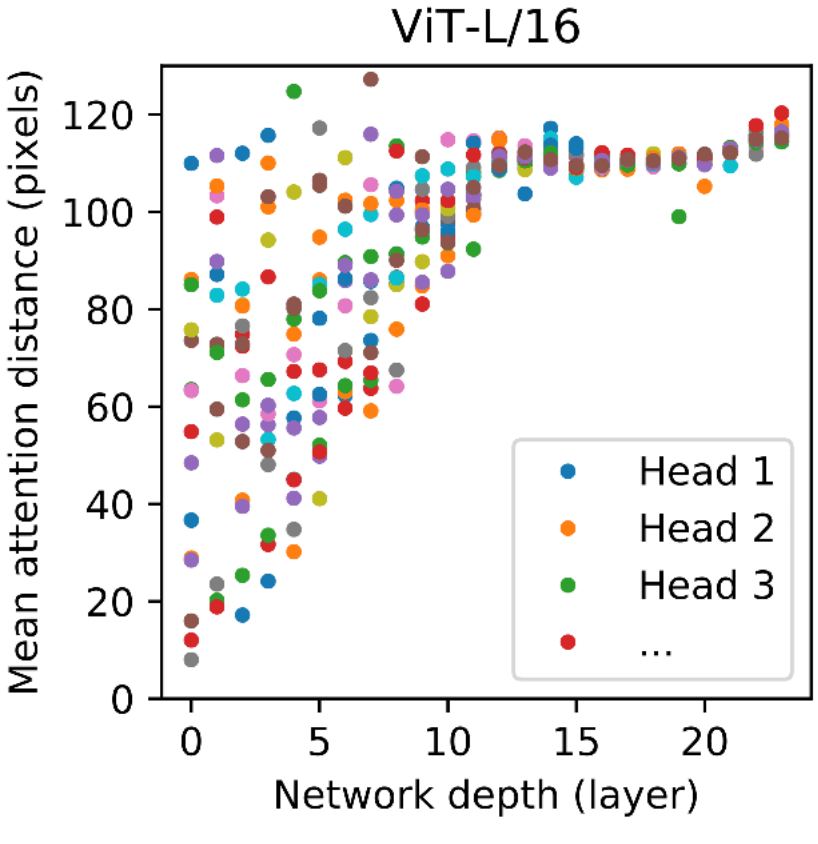
- Los filtros de embedding aprendidos que se aplican inicialmente a los patchs de imagen en la primera capa de ViT se **parecen a funciones básicas** que pueden extraer las características de bajo nivel dentro de cada patch



Dosovitskiy, A., et al. (2020). An image is worth 16x16 words: Transformers for image recognition at scale.

Representación Interna de Datos

- Varias *multi-head attention* en las capas más bajas del modelo ya atienden la mayor parte de la información de la imagen (según sus pesos de atención), lo que demuestra la capacidad del mecanismo *self-attention* para integrar la información en **toda la imagen.**
- En la imagen se observa el tamaño del área de la imagen atendida por diferentes head *self-attention*
- Observamos que cada head se especializa en **diferentes patchs**.



Dosovitskiy, A., et al. (2020). An image is worth 16x16 words: Transformers for image recognition at scale.

Inferencia

ETS de Ingeniería Informática

UNED

Inference from our Results

- El tamaño del patch en el ViT decide la longitud de la secuencia. **Un tamaño de patch menor conlleva un mayor intercambio de información durante el mecanismo de autoatención.**
  - Esto se comprueba por los mejores resultados que se obtienen utilizando un tamaño de parche menor, 4 sobre 8, en una imagen de 32x32.
- Aumentar el número de capas de VIT debería conducir idealmente a mejores resultados, pero los **resultados del modelo de 8 capas son ligeramente mejores que los del modelo de 12 capas**, lo que puede atribuirse a los pequeños datasets utilizados para entrenar los modelos.
  - Los modelos de mayor complejidad requieren más datos para captar las características de la imagen.
- ViT preentrenado funciona mejor que métodos debido a que ha sido entrenado en **enormes conjuntos de datos** y, por tanto, ha aprendido mejores.

Disposiciones finales

ETS de Ingeniería Informática

UNED

Vision Transformers
Bibliografía

Original paper:

- An Image is Worth 16x16 Words: Transformers for Image Recognition at Scale

ViT Variants:

- Swin Transformer: Hierarchical Vision Transformer using Shifted Windows
- Training data-efficient image transformers & distillation through attention
- Tokens-to-Token ViT: Training Vision Transformers from Scratch on ImageNet
- DeepViT: Towards Deeper Vision Transformer
- MViTv2: Improved Multiscale Vision Transformers for Classification and Detection

Explicabilidad:

- LeGrad: An Explainability Method for Vision Transformers via Feature Formation Sensitivity

¡Gracias!

Dr. Manuel Castillo-Cara
www.manuelcastillo.eu
Departamento de Inteligencia Artificial
Escuela Técnica Superior de Ingeniería Informática
Universidad Nacional de Educación a Distancia (UNED)