Escuela Técnica Superior de Ingeniería Informática

Máster Universitario en Ingeniería Informática

Tema 6.3
Redes con mecanismo de atención

Deep Learning

Máster Oficial en Ingeniería Informática

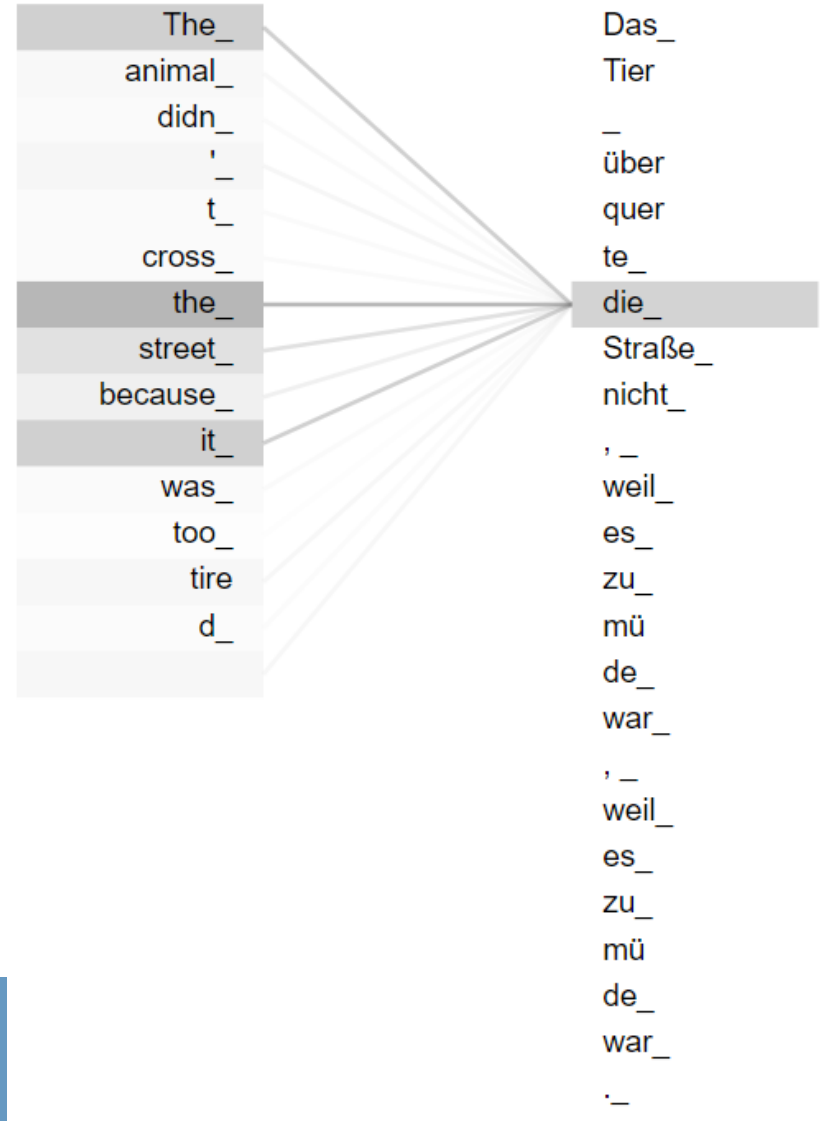
Universidad de Sevilla

Contenido

- Idea intuitiva
- Seq2seq
- Attention en seq2seq
- Transformers

Idea: attention vs redes recurrentes

- Supongamos por ejemplo la traducción de lenguaje (de español a inglés).
- **Redes recurrentes**: memorizar elementos de la secuencia anteriores para las próximas, usando distintas vías (forget gate, etc..)
- **Redes con attention** (transfomers): siempre ven toda la secuencia de entrada y para cada elemento de salida, aprenden a ver qué elementos de entrada son importantes.

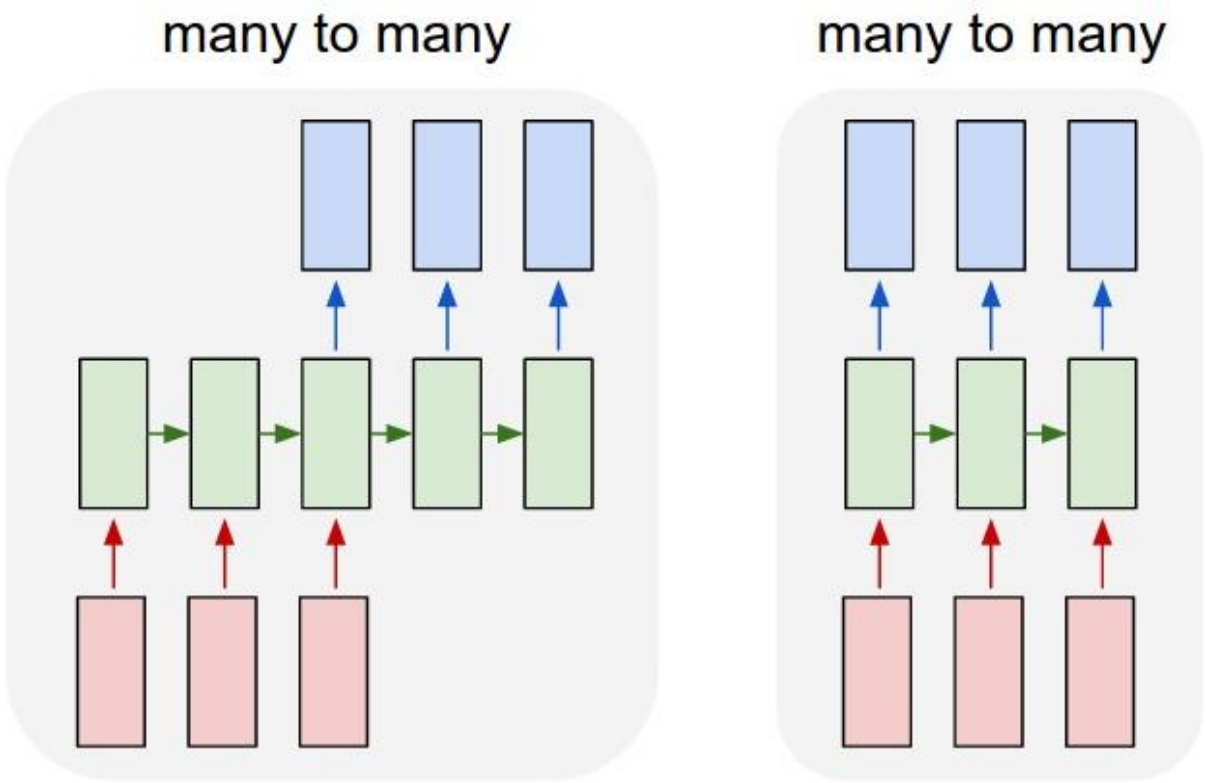


Idea: attention vs redes recurrentes

- Las redes con **attention** surgen con el fin de solucionar ciertos problemas con las **LSTM**:
  - Computación **secuencial** que inhibe la paralelización entre los elementos de una secuencia de entrada.
  - **No** hay modelización **explícita** de **dependencias** a largo y corto plazo.
  - La **distancia** entre las posiciones de los **elementos** en la secuencia es lineal.

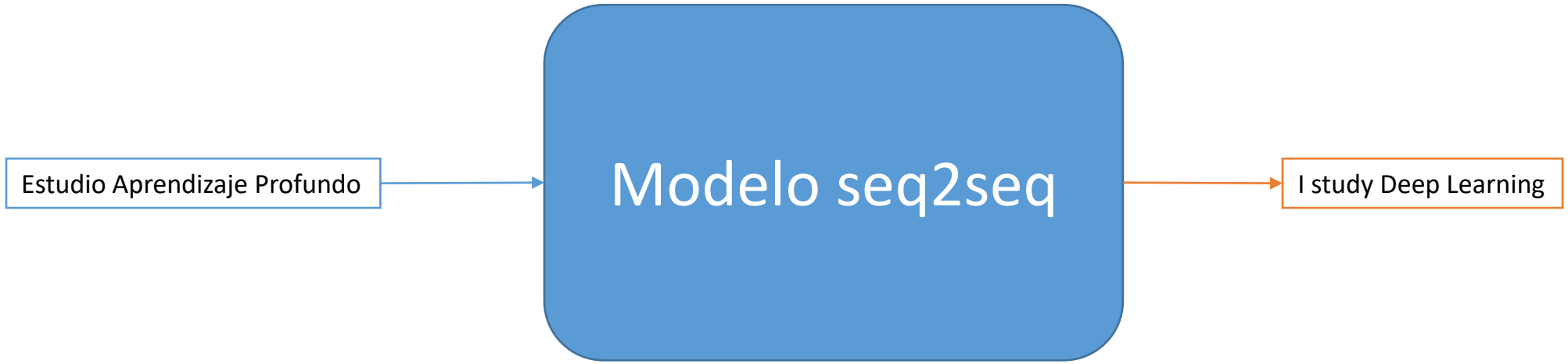
Modelo Sequence to Sequence (seq2seq)

- Ya vimos la idea en un tema anterior:



Modelo Sequence to Sequence (seq2seq)

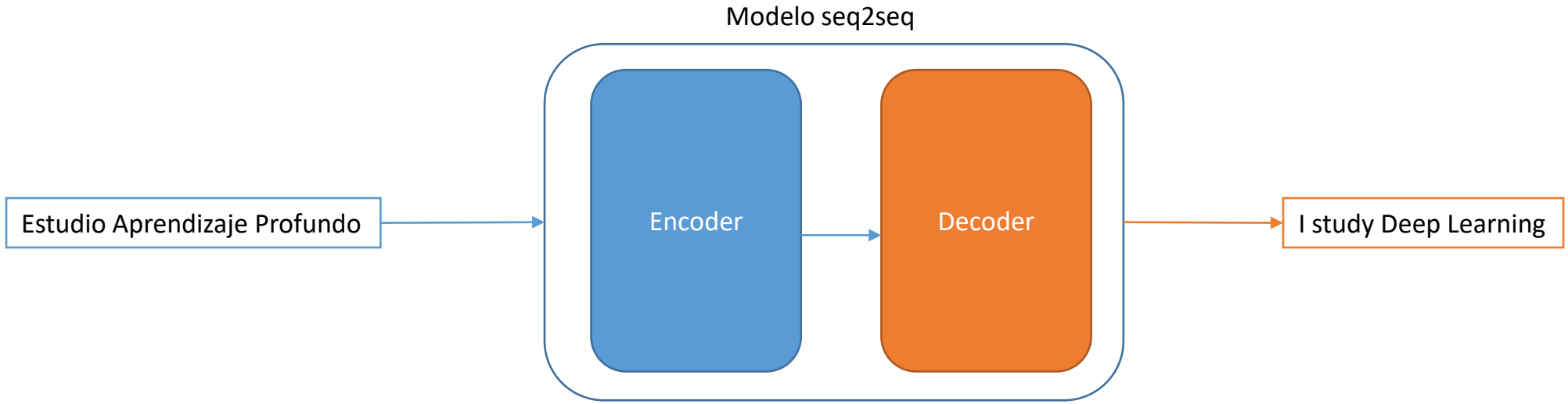
- Este ejemplo está basado en este enlace
- Un ejemplo en traducción de lenguaje:



(Sutskever et al., 2014, Cho et al., 2014).

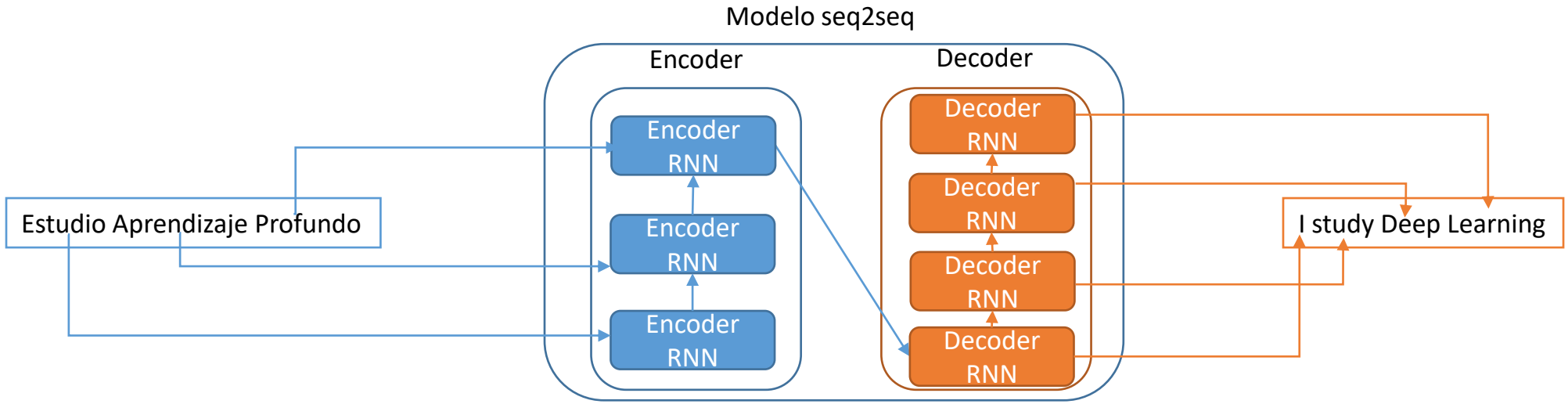
Modelo Sequence to Sequence (seq2seq)

- Viendo por dentro el modelo, hay dos fases:
  - **Encoder** (*"el que entiende del lenguaje de entrada"*)
  - **Decoder** (*"el que entiende del lenguaje de salida"*)



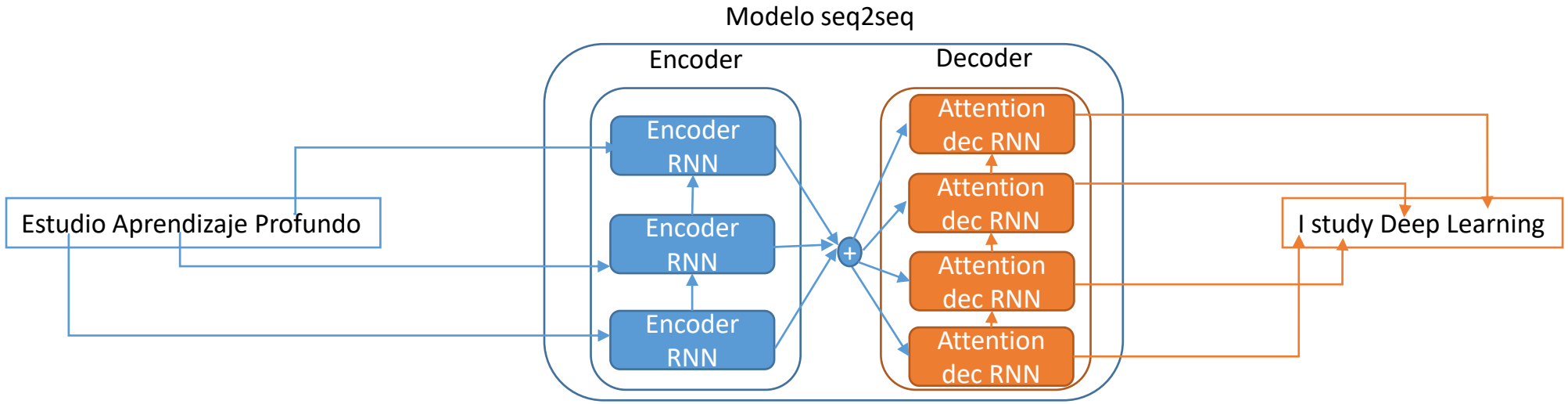
Modelo Sequence to Sequence (seq2seq)

- Se pueden implementar con RNN (con unidades LSTM por ejemplo)
- El último **estado oculto** del **encoder** se pasa al **decoder**



Attention en seq2seq

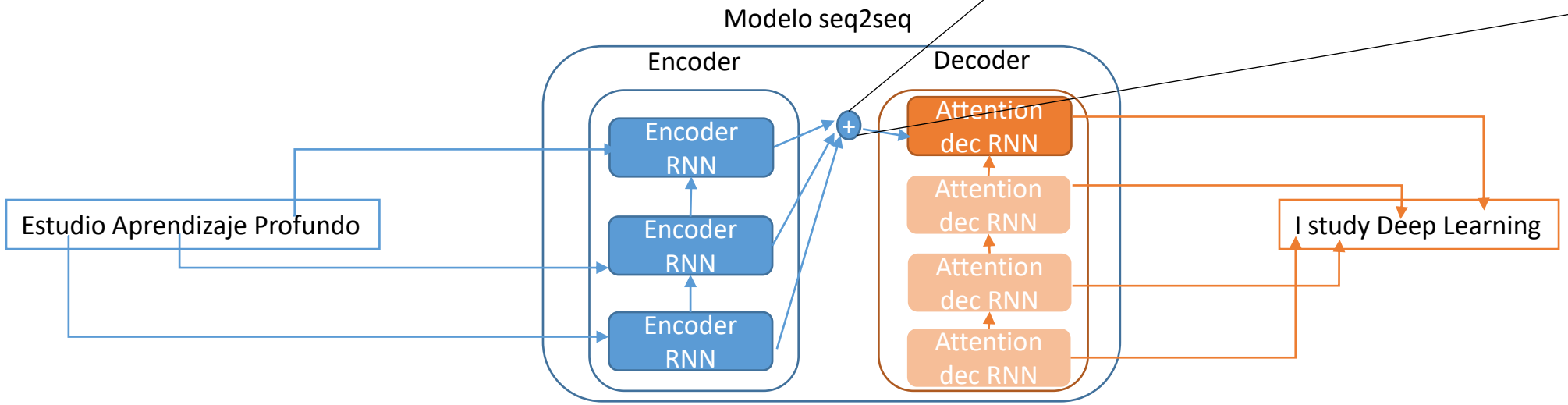
- Modelo con **attention**: todos los estados ocultos del encoder se pasan al decoder, ya que cada estado oculto del encoder está más asociado a cada palabra de entrada.



Attention en seq2seq

- Idea intuitiva detrás del Attention:
  - En vez de codificar toda la frase en un solo estado oculto (como harían las RNN), **cada palabra** tiene un **estado oculto** que se pasa al decoder.
- La suma de los estados ocultos del encoder en realidad es una **suma ponderada** de cada una
  - Esto se hace para cada unidad de attention en el decoder

Attention en seq2seq



Transformers

- Presentado en el famoso artículo: "Attention is All You Need" 2017.
- **Objetivos**:
  - Paliar la falta de paralelismo en las RNN sobre los elementos de la secuencia
  - No asumir que los elementos de la secuencia son equidistantes

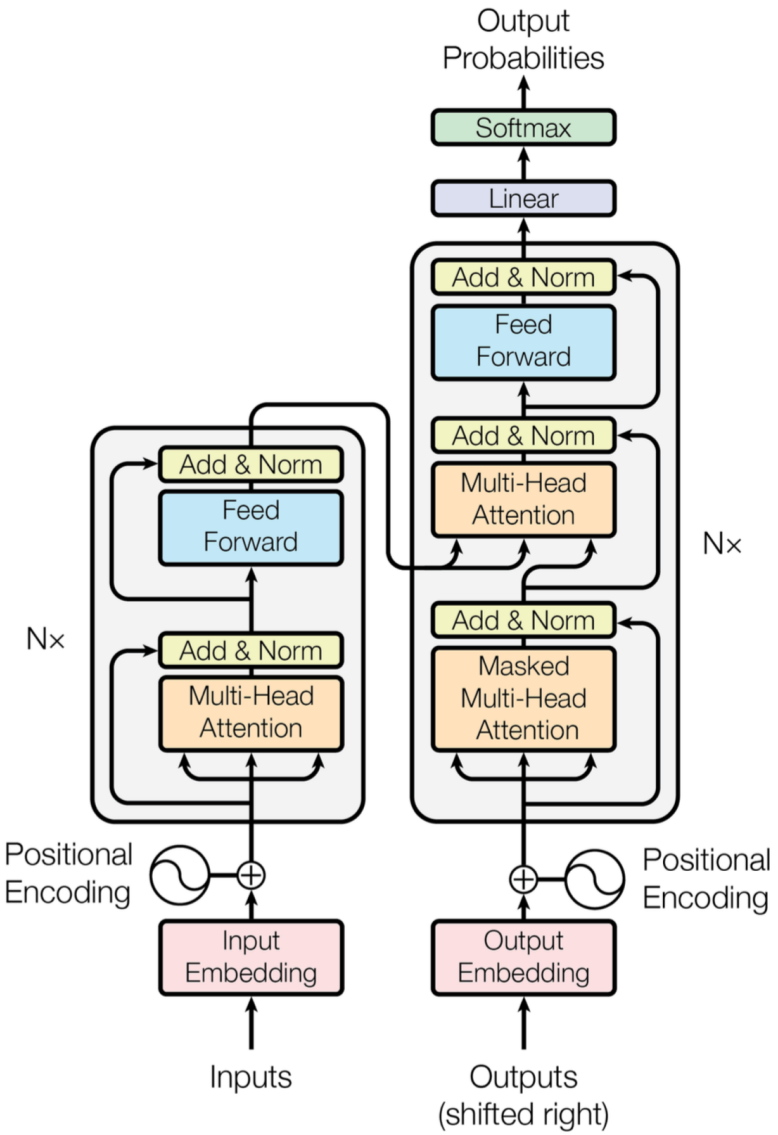


Figure 1: The Transformer - model architecture.

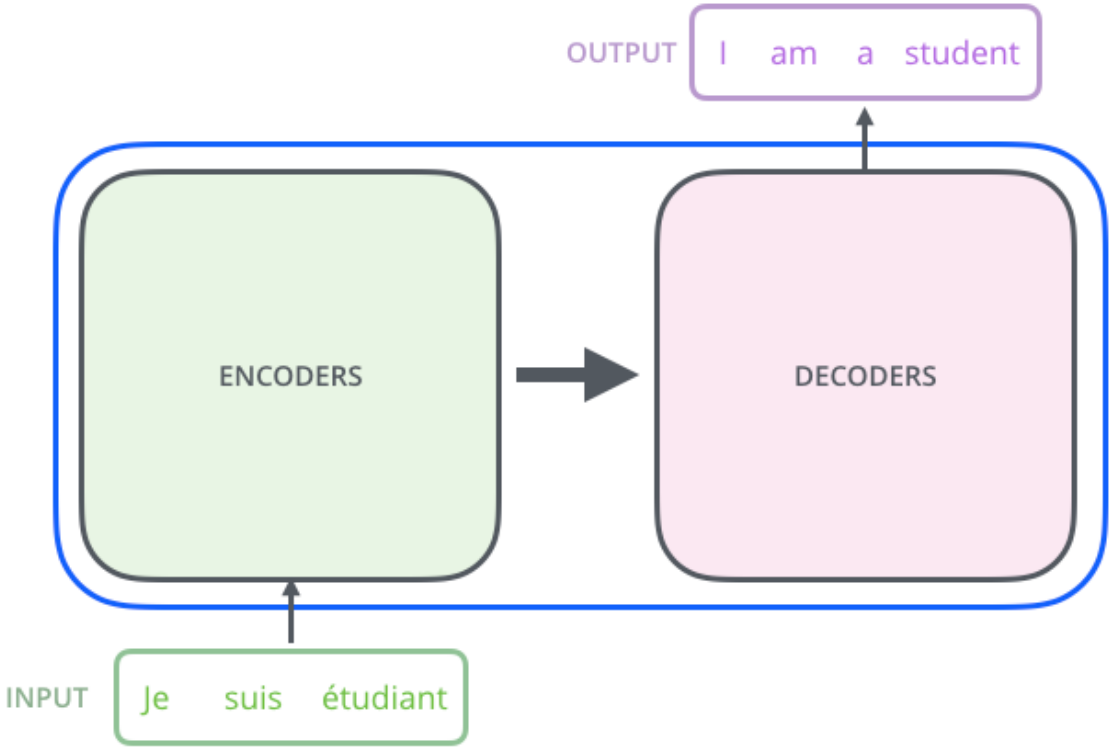
Transformers

- Un **Transformer** recibe una secuencia como entrada y devuelve otra secuencia:
  - Veamos de nuevo como ejemplo la traducción de texto, pero podría ser cualquier otro tipo de secuencia (series temporales, píxeles de una imagen, etc)

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

Transformers

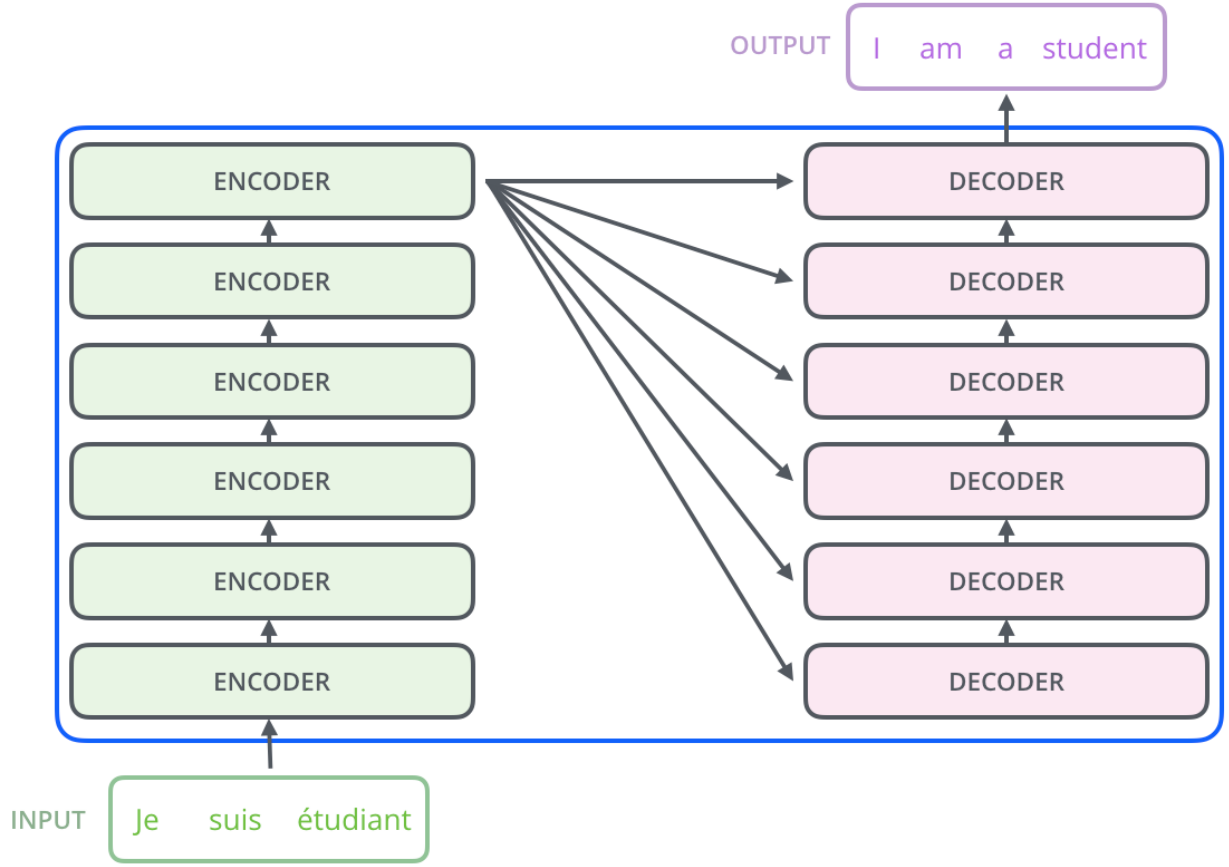
- Como en seq2seq, existe un **encoder** y un **decoder**:
  - El encoder recibe la secuencia de entrada
  - El decoder genera la secuencia de salida



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

Transformers

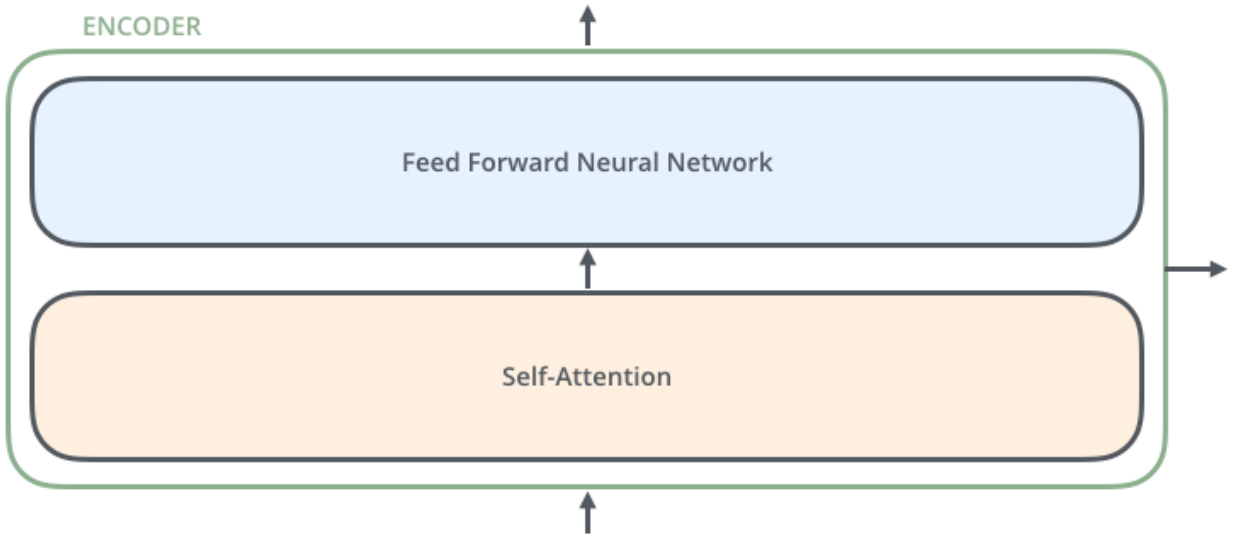
- Supongamos que la fase de encoder se compone de una **pila** de 6 **encoders**.
  - Este es el número usado en el paper original, pero puede ser cualquier otro número
- En el decoder tenemos una pila con el mismo número de unidades



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

Transformers

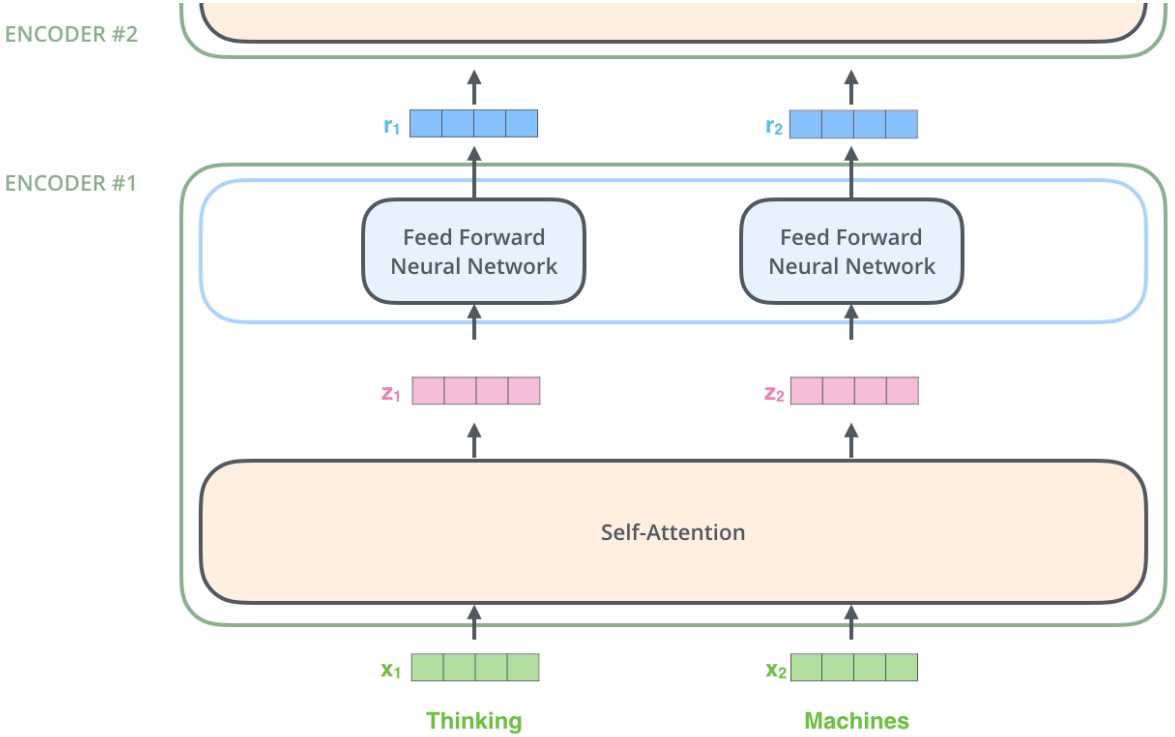
- Los **módulos del encoder** son iguales entre sí, y no comparten parámetros.
- Se dividen en **dos sub-capas**:
  - Una llamada **self-attention**: ayuda a codificar cada palabra “mirando” a las demás.
  - Una **capa feed-forward** (por ejemplo, perceptrón multicapa).



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

Transformers

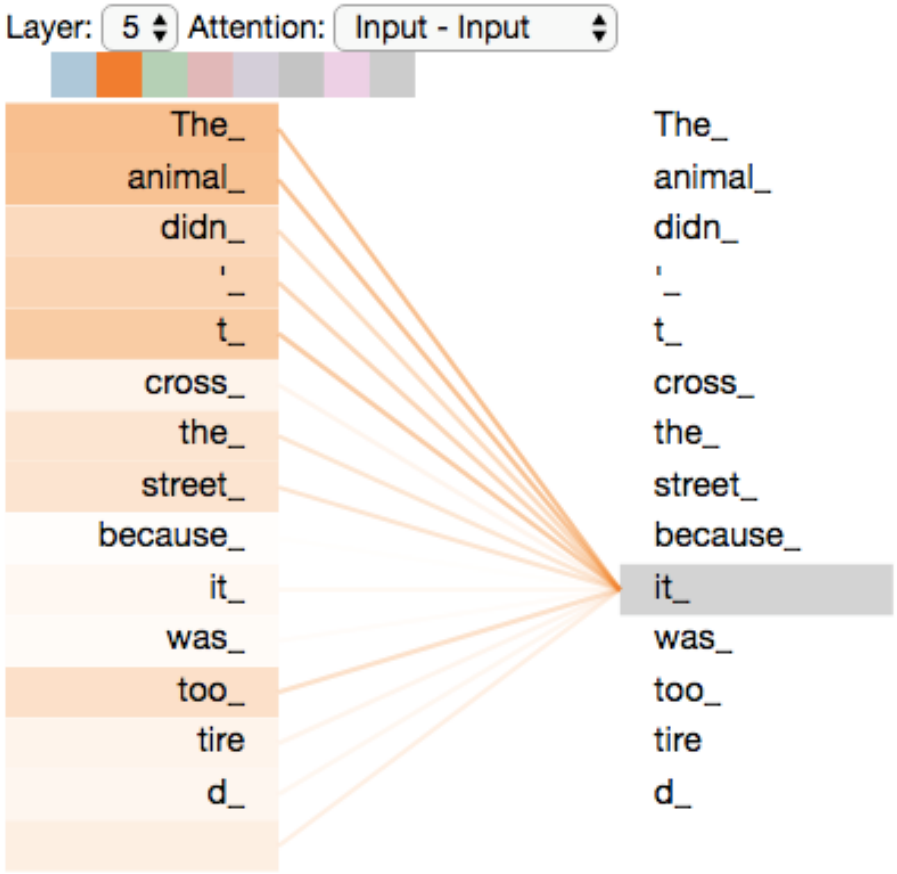
- En el primer módulo **encoder:**
  - Cada palabra de la secuencia de **entrada** se introduce usando una codificación con word **embedding** (**vector x**, en verde).
  - Después de self-attention, para cada palabra se crea un **vector z** (en rosa).
  - Después de la capa feed-forward, para cada apalabra se devuelve un **vector r** (en azul), que será la entrada para el siguiente encoder.



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

Transformers

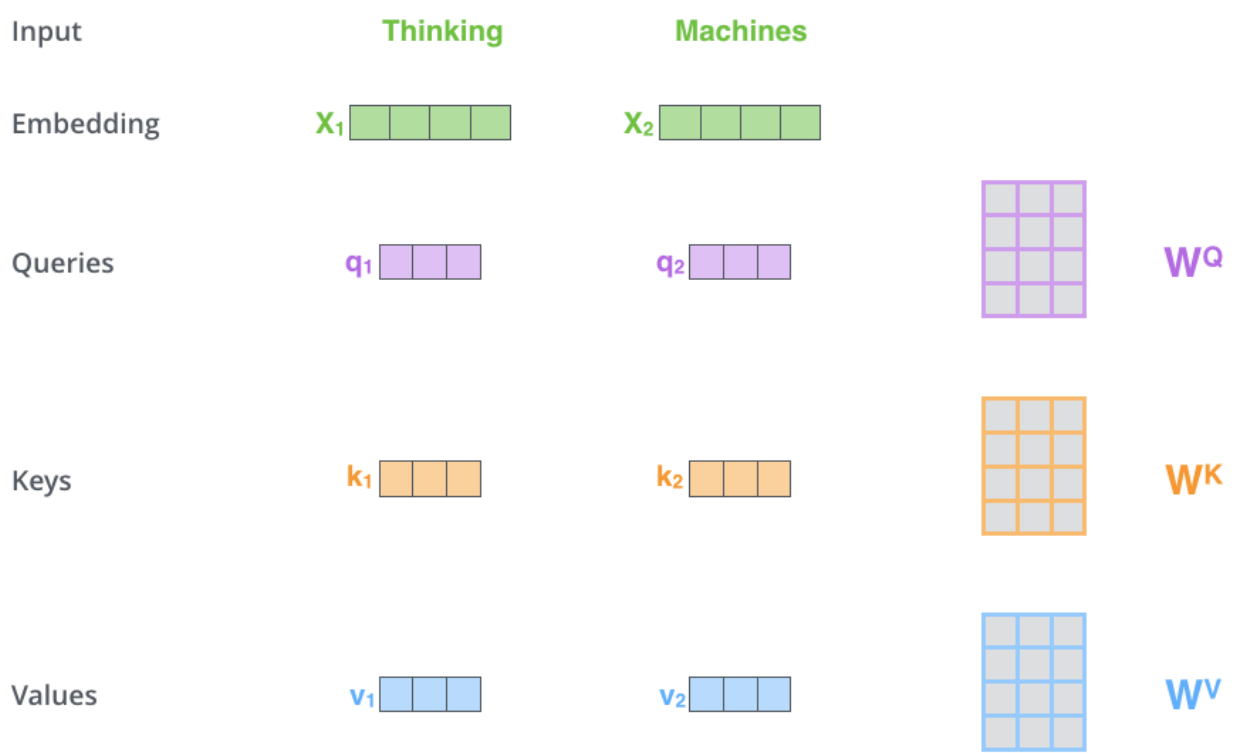
- Capa **self-attention**:
  - Ayuda a relacionar cada elemento de la entrada con el resto.
  - En el ejemplo, la capa asocia “it” a “Animal”, más que con el resto de palabras.



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

Transformers

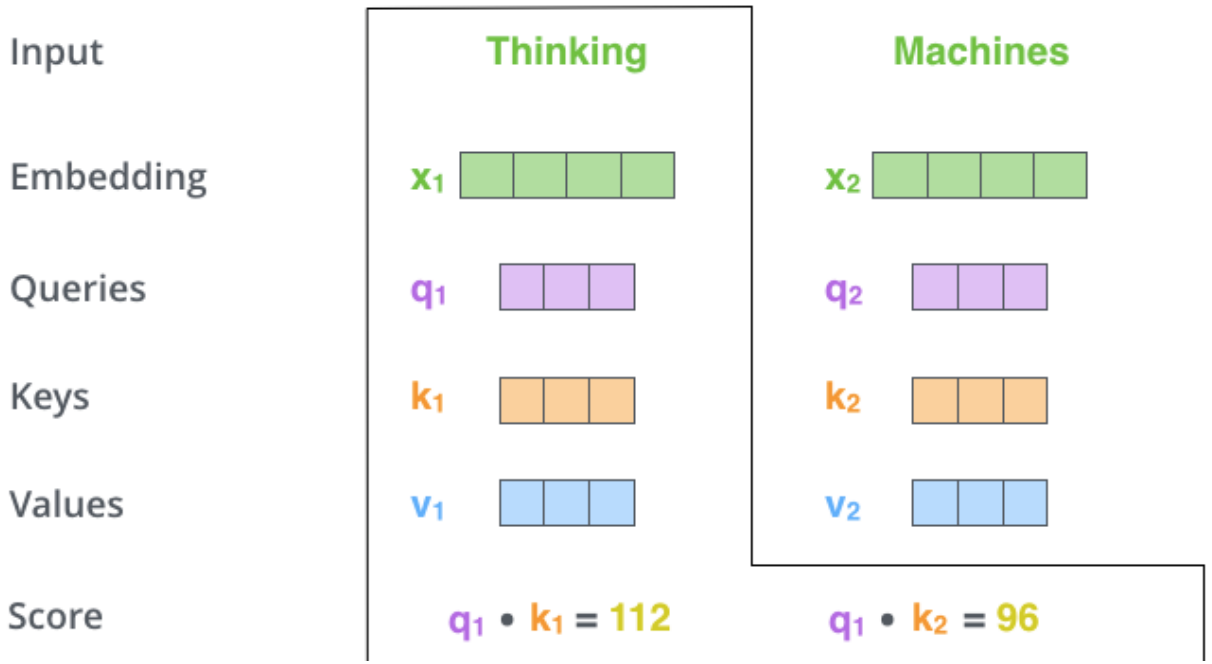
- Capa **self-attention,** hace uso de tres matrices (sus valores son parámetros de la red y se aprenden durante el entrenamiento):
  - Matriz de **Queries** (W^q)
  - Matriz de **Keys** (W^k)
  - Matriz de **Values** (W^v)
- Self-attention, **primer paso**:
  - Para cada palabra de entrada obtenemos **tres nuevos vectores: *query*** *(q)*, ***key*** *(k) y* ***value*** *(v)*,
  - Se obtienen multiplicando cada palabra (vector x) por cada matriz W^q, W^k y W^v.



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

Transformers

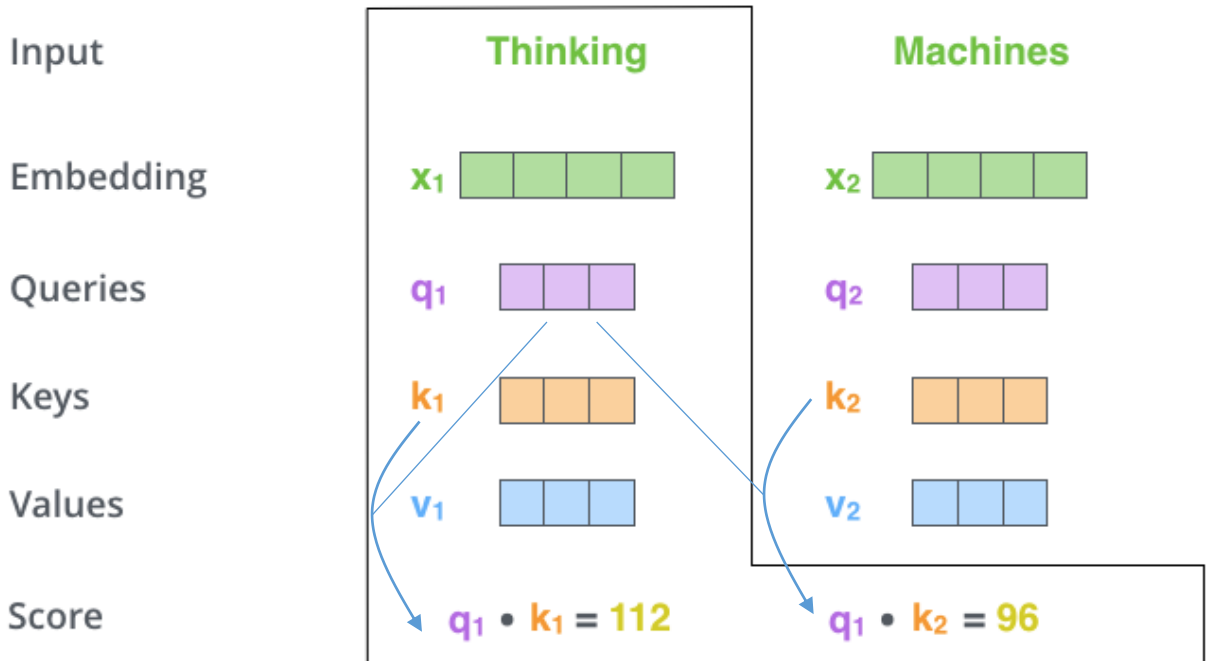
- Self-attention, **segundo paso**:
  - Para cada palabra, **puntuamos** el resto de palabras de entrada sobre ésta.
  - Para ello, se calcula el **producto** escalar de:
    - El vector **query** de la palabra referencia
    - El vector **key** de cada palabra del resto
  - El ejemplo solo muestra el cálculo para la primera palabra, pero esto también se hace con las demás.



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

Transformers

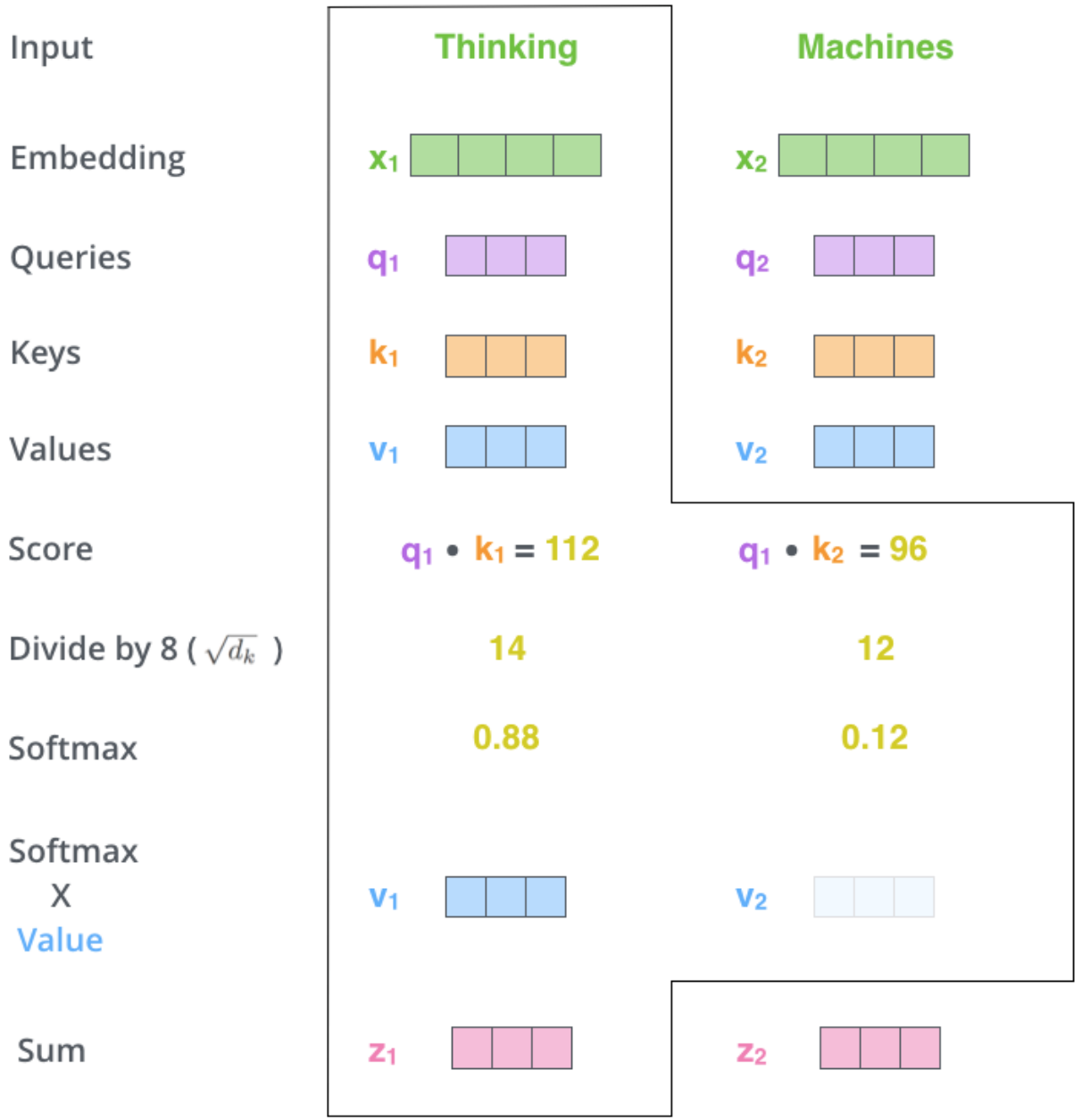
- Self-attention, **segundo paso**:
  - Para cada palabra, **puntuamos** el resto de palabras de entrada sobre ésta.
  - Para ello, se calcula el **producto** escalar de:
    - El vector **query** de la palabra referencia
    - El vector **key** de cada palabra del resto
  - El ejemplo solo muestra el cálculo para la primera palabra, pero esto también se hace con las demás.



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

Transformers

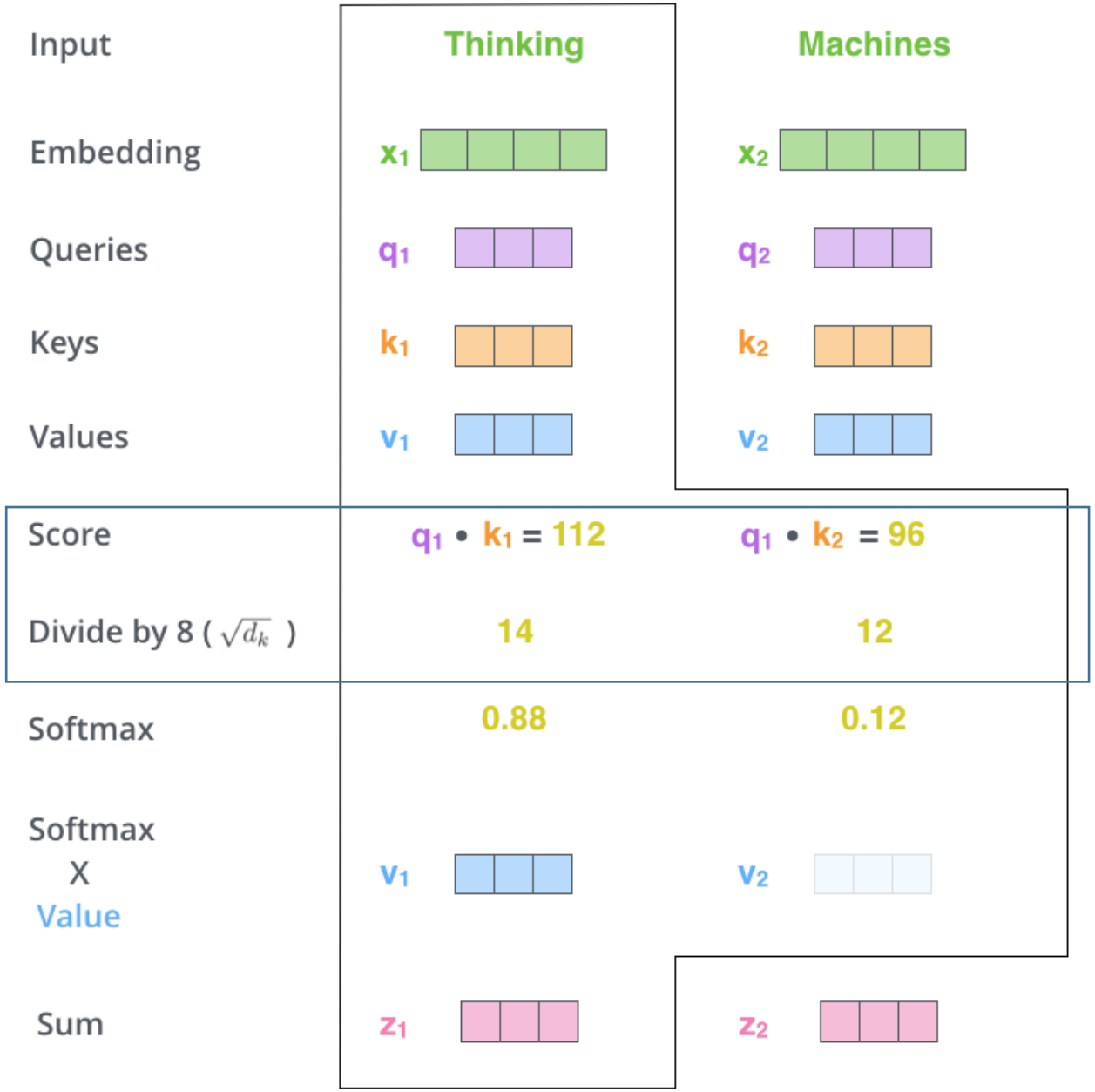
- Self-attention, **resto de pasos**:



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

Transformers

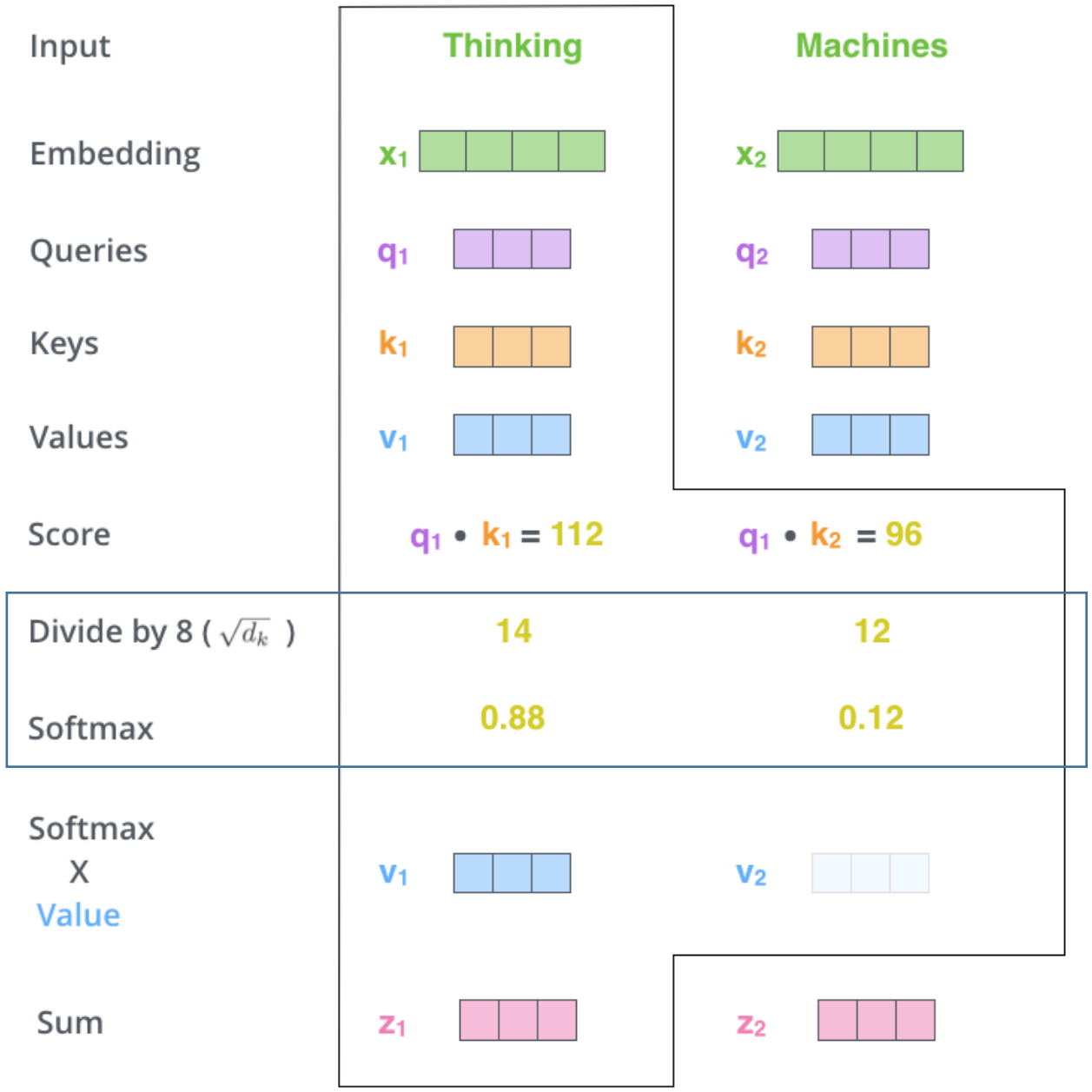
- Self-attention, **resto de pasos**:
  - **3:** Se **divide** cada **puntuación** por la raíz cuadrada de la dimensión del vector key (p.ej. se divide por 8 si el tamaño del vector k_i es 64)
    - Esto hace que los gradientes sean más estables



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

Transformers

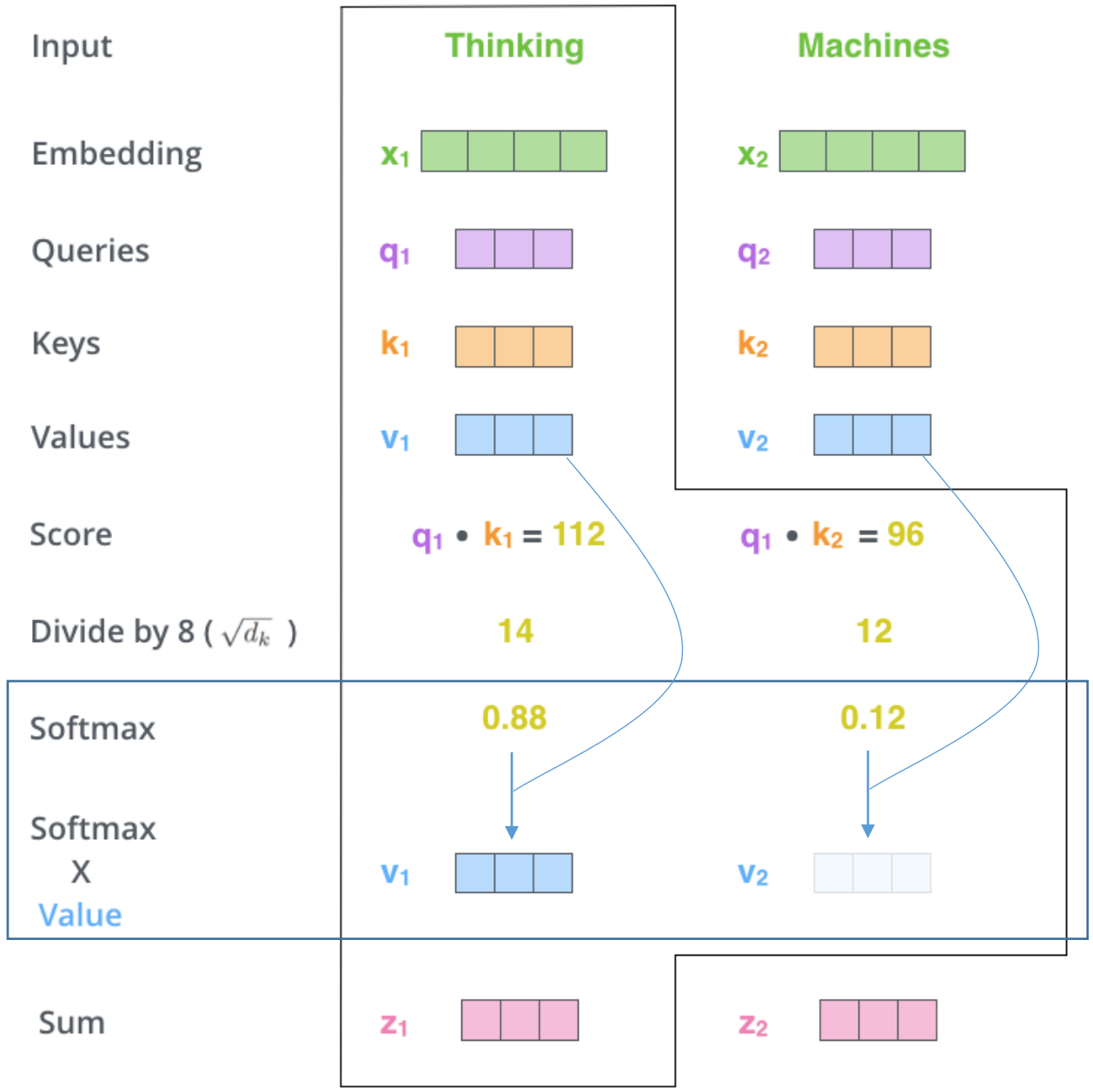
- Self-attention, **resto de pasos**:
  - **3:** Se **divide** cada **puntuación** por la raíz cuadrada de la dimensión del vector key (p.ej. se divide por 8 si el tamaño del vector k_i es 64)
    - Esto hace que los gradientes sean más estables
  - **4:** El resultado se pasa por **softmax**



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

Transformers

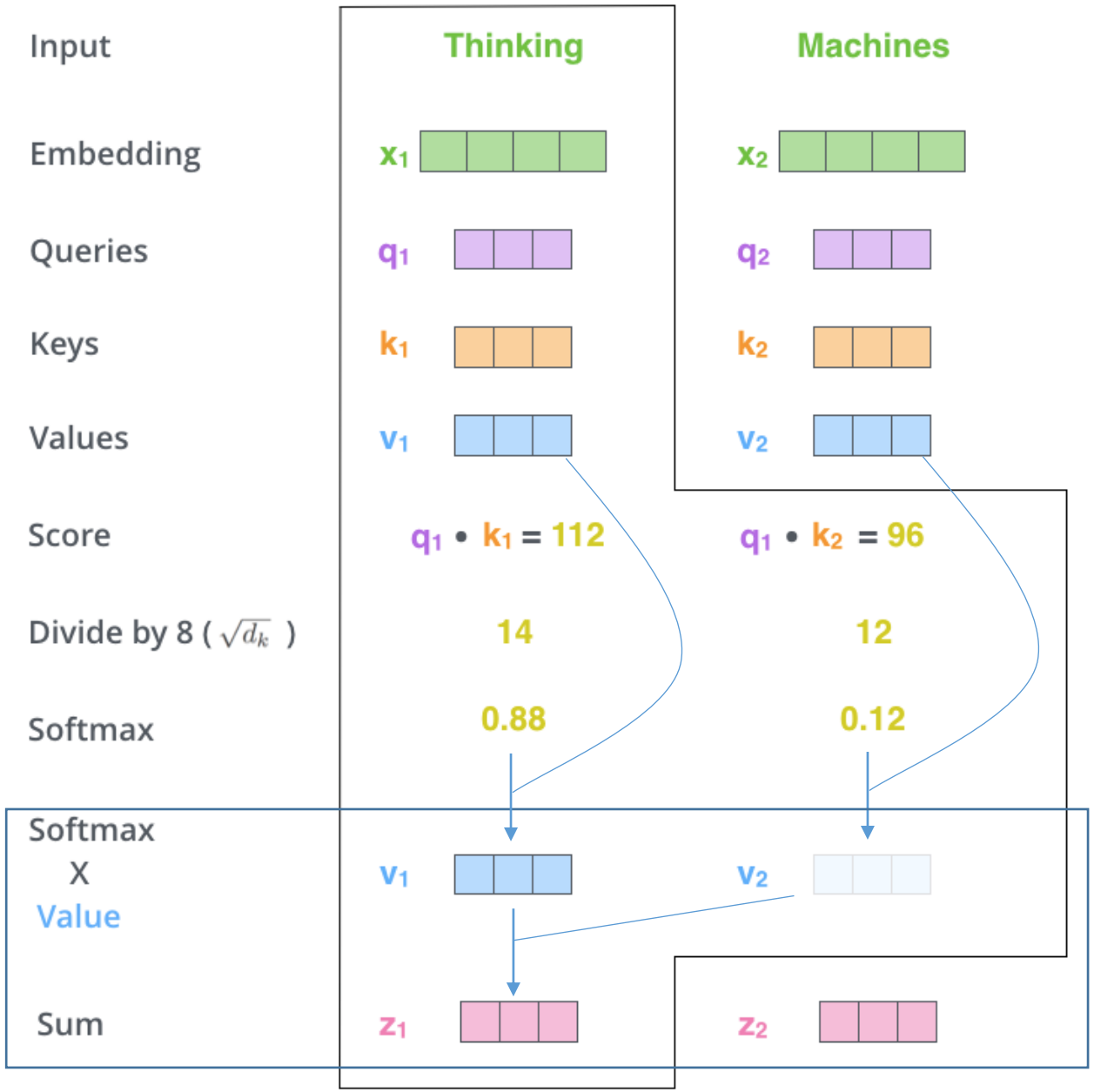
- Self-attention, **resto de pasos**:
  - **3:** Se **divide** cada **puntuación** por la raíz cuadrada de la dimensión del vector key (p.ej. se divide por 8 si el tamaño del vector k_i es 64)
    - Esto hace que los gradientes sean más estables
  - **4:** El resultado se pasa por **softmax**
  - **5:** Se **multiplica** el **vector Value** de cada palabra por cada valor correspondiente después del softmax



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

Transformers

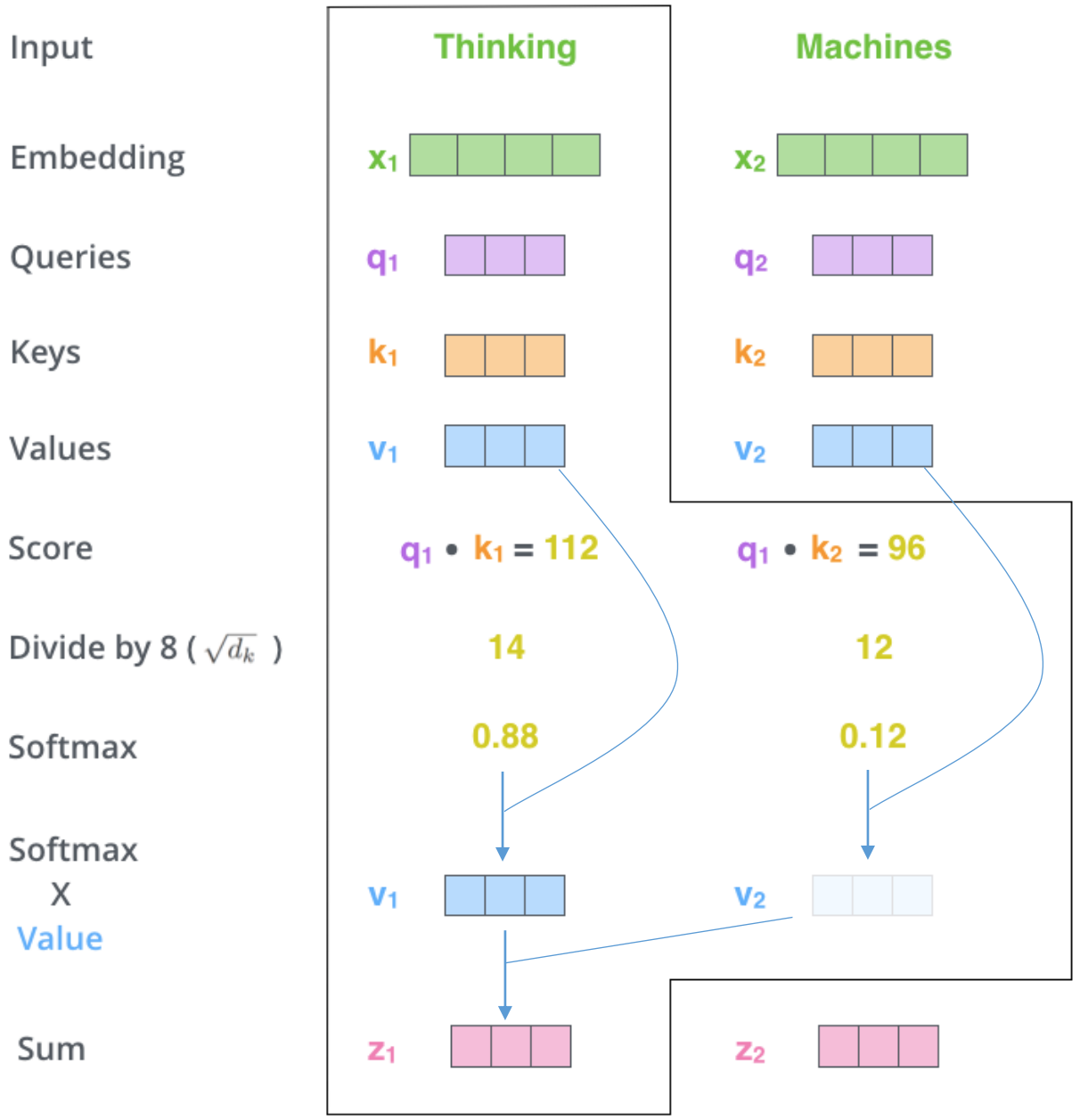
- Self-attention, **resto de pasos**:
  - **3:** Se **divide** cada **puntuación** por la raíz cuadrada de la dimensión del vector key (p.ej. se divide por 8 si el tamaño del vector k_i es 64)
    - Esto hace que los gradientes sean más estables
  - **4:** El resultado se pasa por **softmax**
  - **5:** Se **multiplica** el **vector Value** de cada palabra por cada valor correspondiente después del softmax
  - **6:** Se **suman** los vectores resultantes en uno solo, el **vector z** (resultado)



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

Transformers

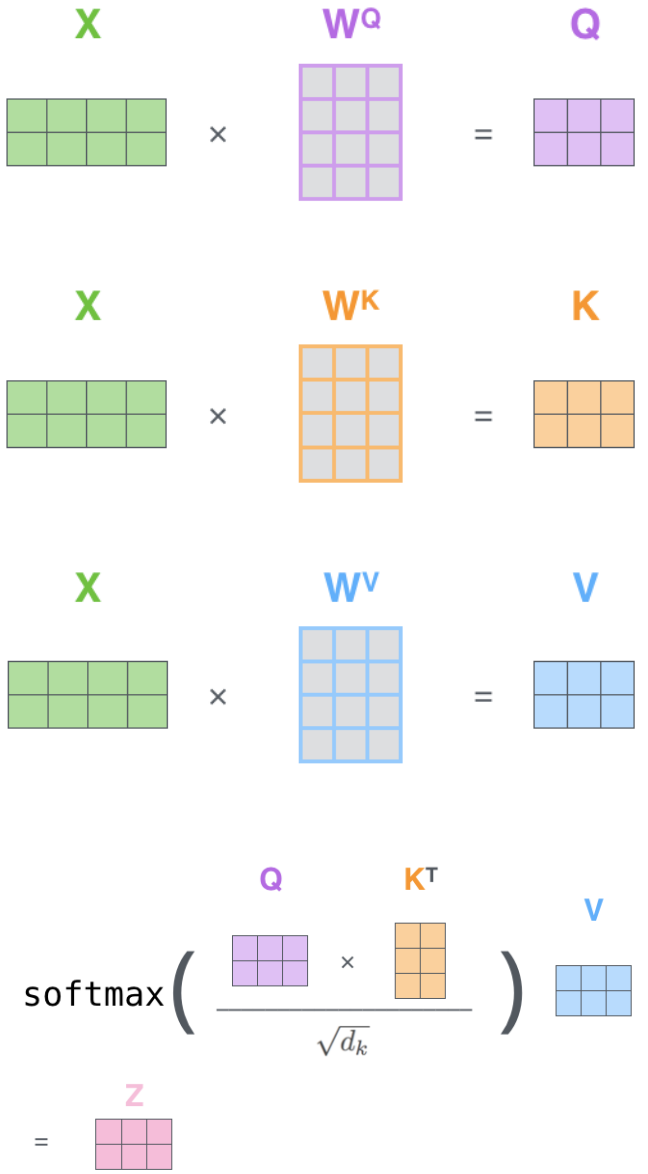
- Self-attention, **resto de pasos**:
  - **3:** Se **divide** cada **puntuación** por la raíz cuadrada de la dimensión del vector key (p.ej. se divide por 8 si el tamaño del vector k_i es 64)
    - Esto hace que los gradientes sean más estables
  - **4:** El resultado se pasa por **softmax**
  - **5:** Se **multiplica** el **vector Value** de cada palabra por cada valor correspondiente después del softmax
  - **6:** Se **suman** los vectores resultantes en uno solo, el **vector z** (resultado)



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

Transformers

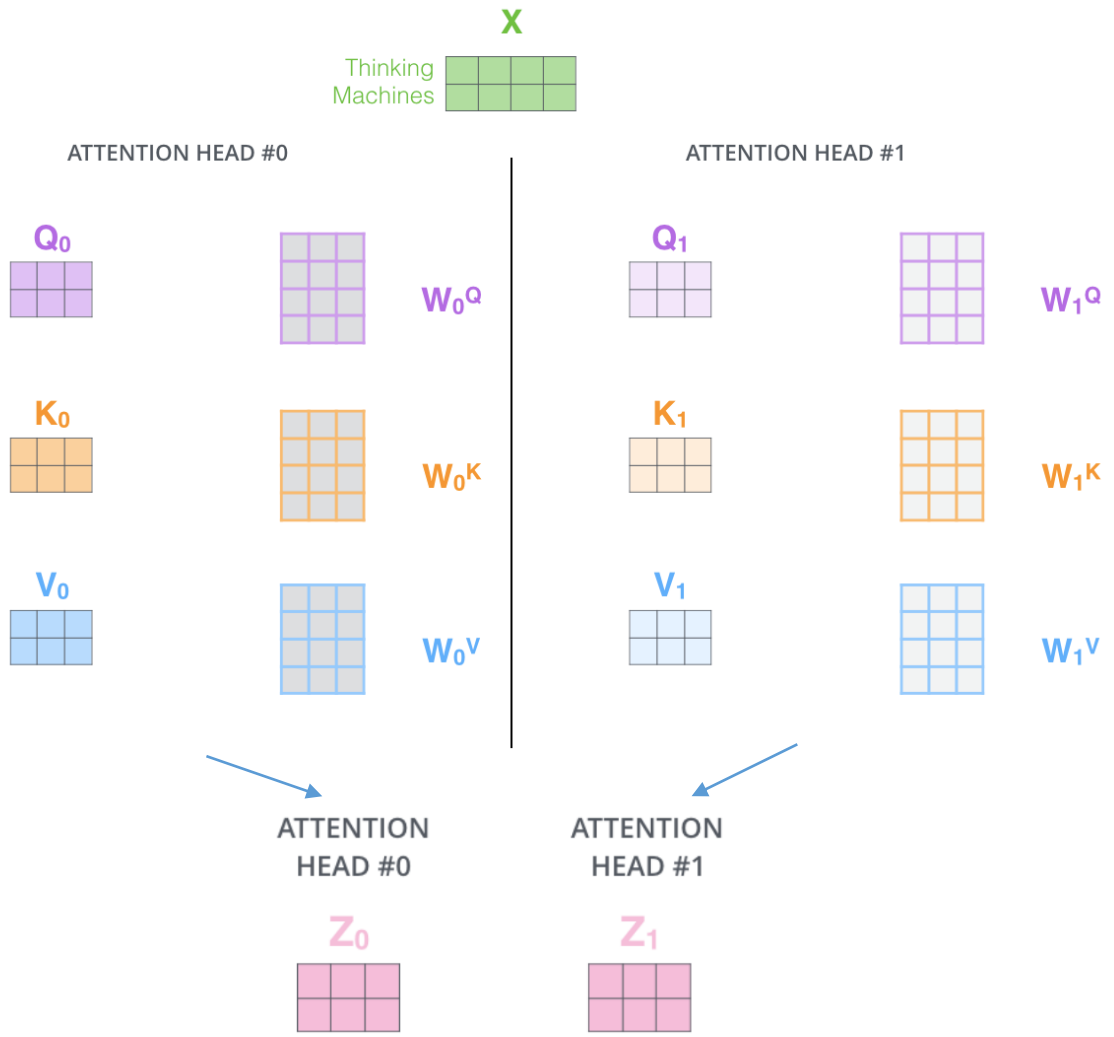
- Todos los pasos en la capa **self-attention** que acabamos de ver, también se pueden implementar usando **operaciones matriciales** (algebra lineal).
- Esto ayuda a conseguir un nivel mayor de paralelismo (las GPUs son buenas en este tipo de operaciones).



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

Transformers

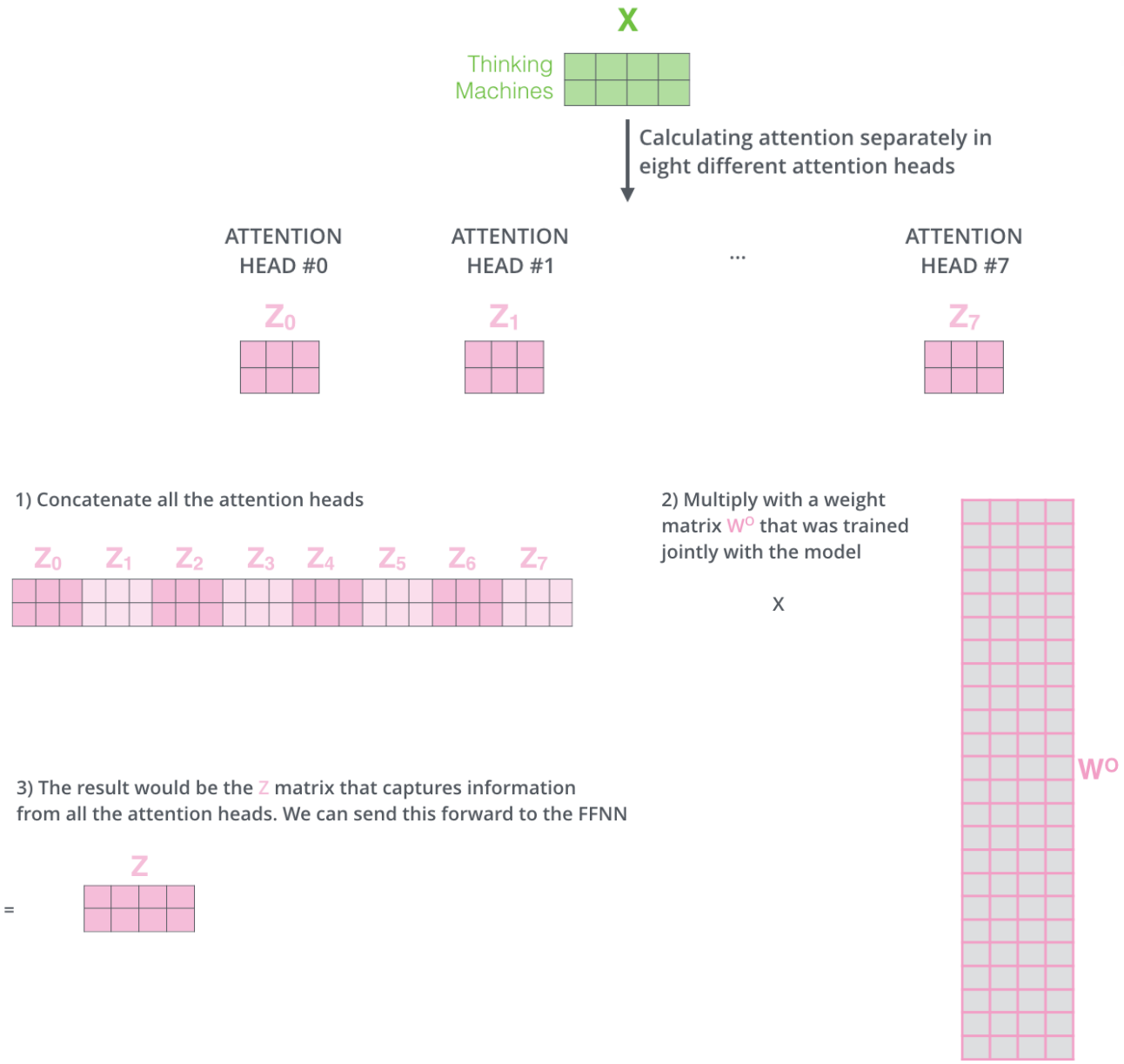
- En realidad, usamos una capa **multi-headed self-attention,** donde se repite la operación anterior varias veces en paralelo (con distintas “cabezas”).
  - Hay una matriz de Query/Key/Value por cabeza.
- Esto **ayuda** a:
  - Expandir la capacidad del modelo para centrarse en distintas posiciones.
  - Da la capacidad de tener múltiples representaciones del sub-espacio.



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

Transformers

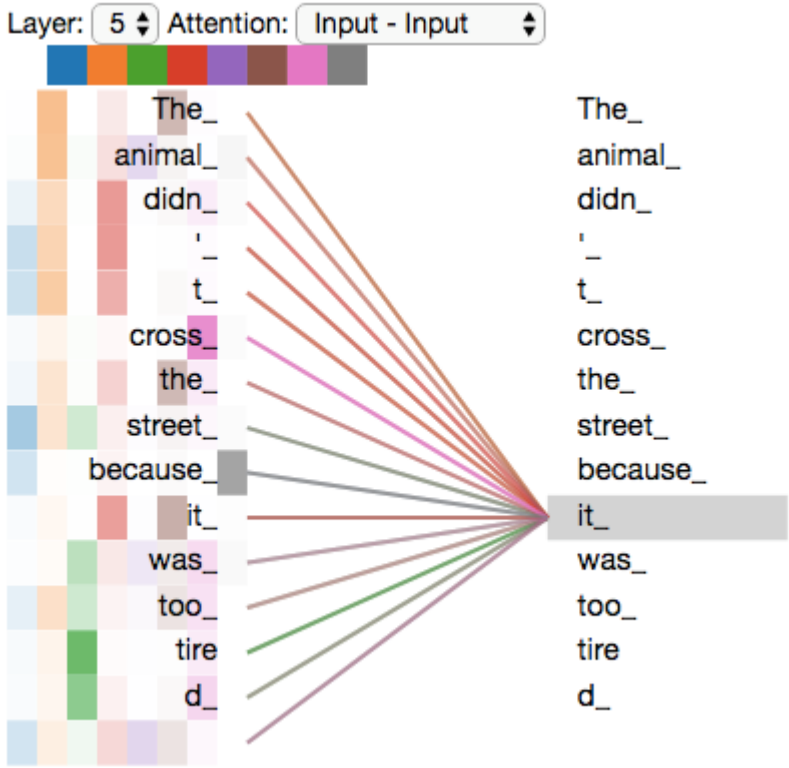
- Capa **multi-headed self-attention:**
  - A fin de tener un vector z por cada palabra (o lo que es lo mismo, una sola matriz z), se **concatenan de forma ponderada** los resultados de cada cabeza
  - Se concatenan las matrices z, y se multiplican por una matriz W^0.



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

Transformers

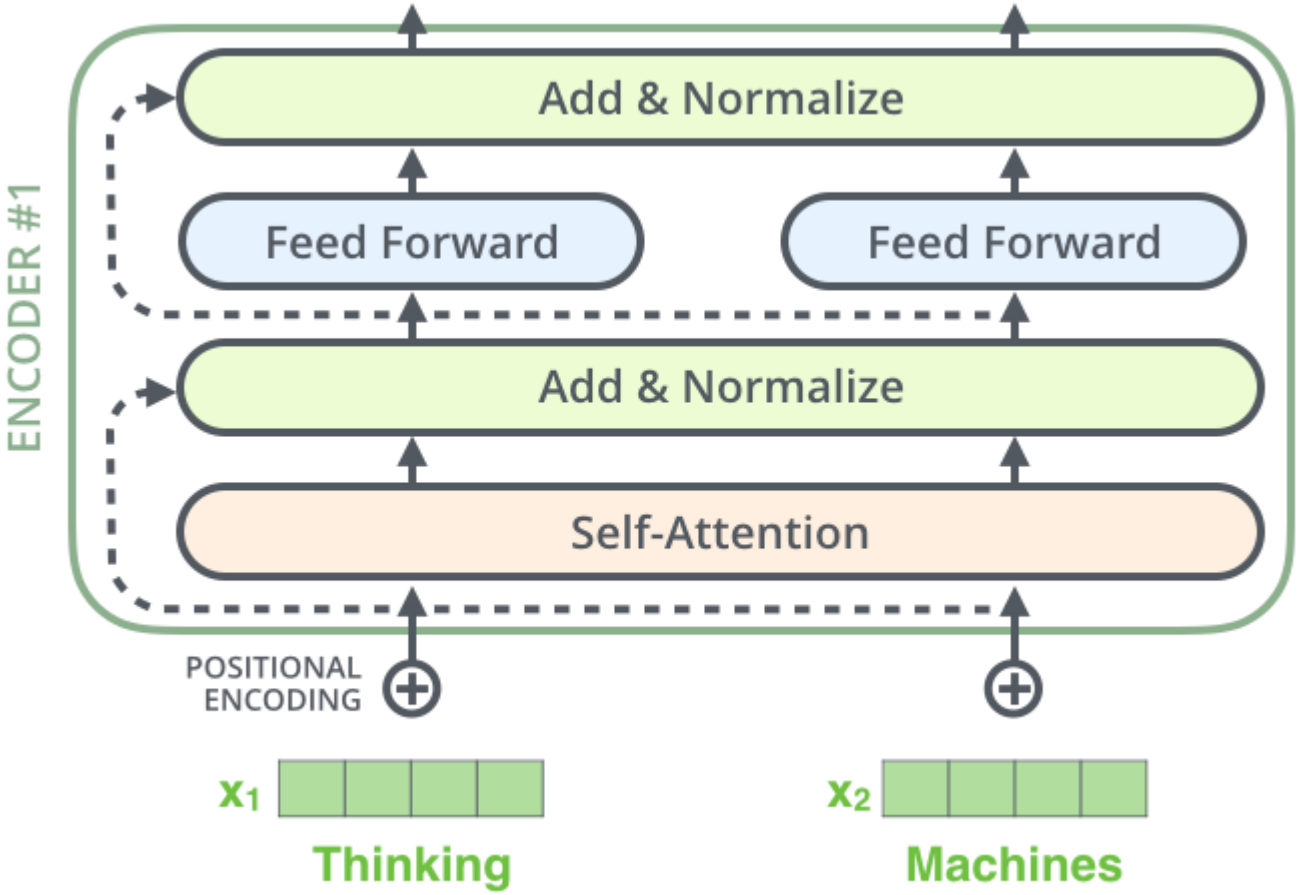
- Capa **multi-headed self-attention:**
  - El resultado es que el modelo es capaz de hacer distintas asociaciones de cada palabra con el resto.
  - Ver [Tensor2Tensor]



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

Transformers

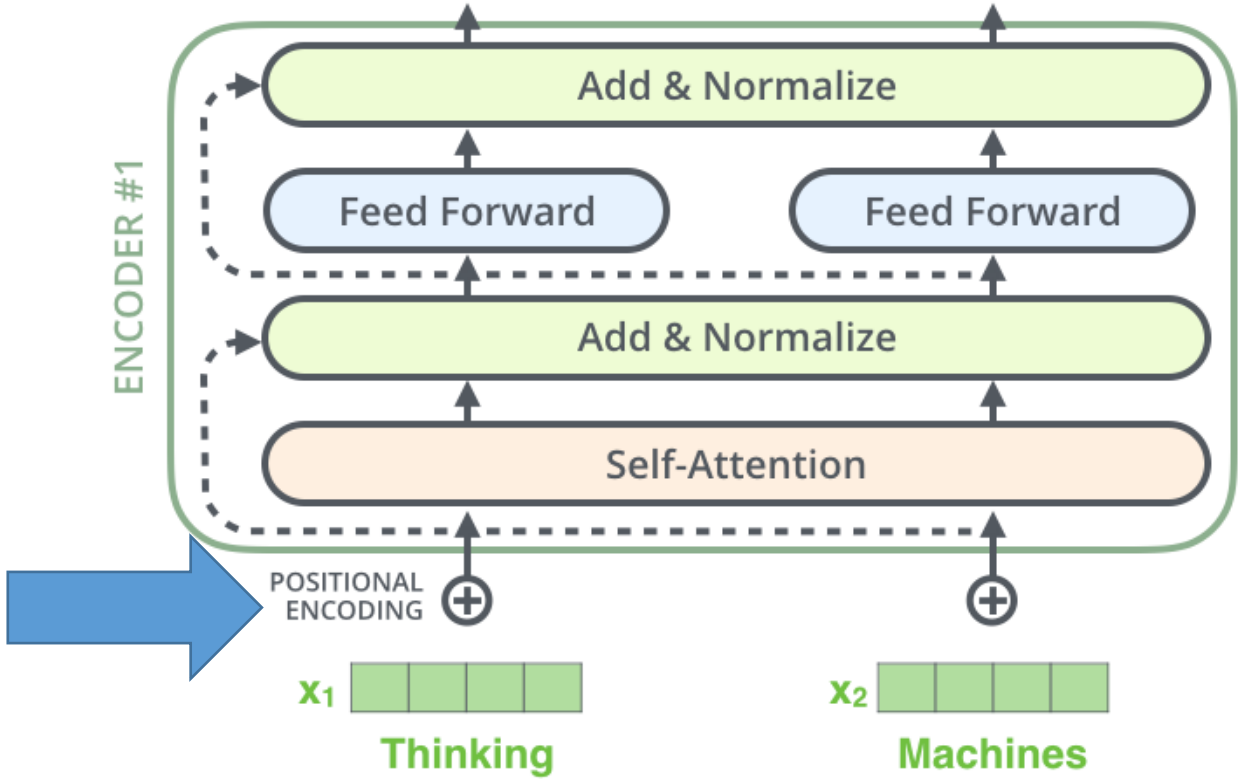
- Ya hemos visto cómo funciona la capa de self-attention, veamos la imagen completa de un encoder
- Vemos que los resultados de cada capa se **normalizan**
- Además hay conexiones **residuales** (en línea de puntos), con la misma idea que los módulos ResNet (ayudar a propagar gradientes).



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

Transformers

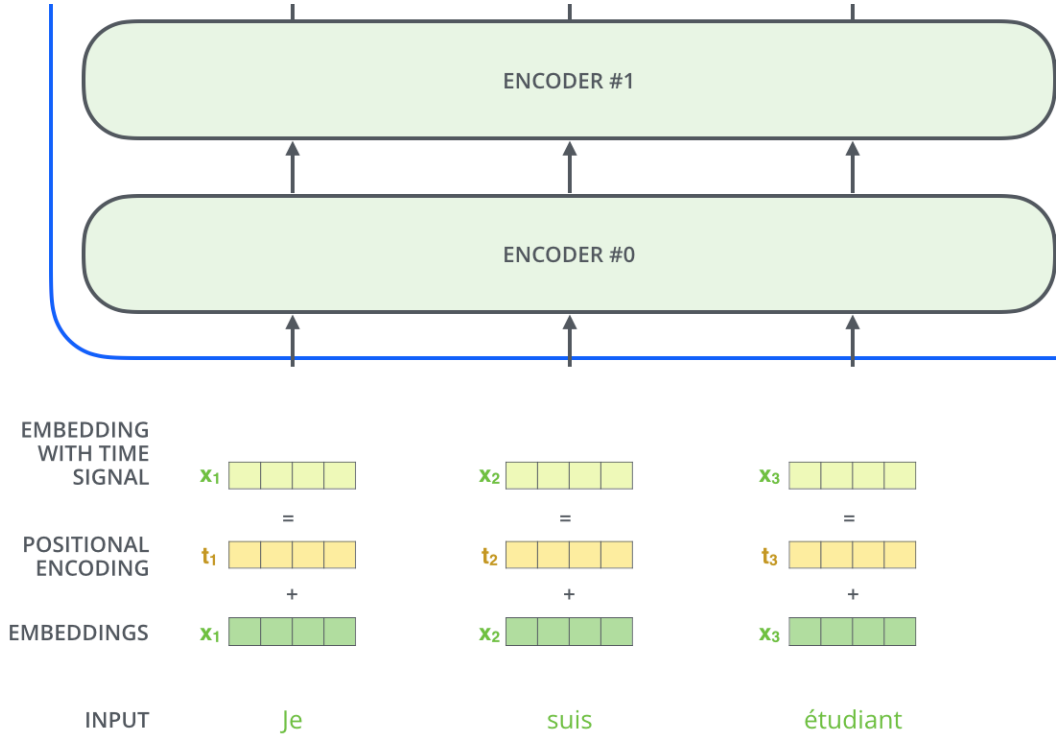
- El primer encoder recibe los elementos de entrada.
- Vemos que hay otra operación que se hace a los embeddings de cada palabra: **codificación posicional**.
- Piensa que en self-attention no tenemos información de qué posición ocupa cada palabra:
  - La codificación posicional ayudará a introducir esta información, modificando los valores de entrada.



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

Transformers

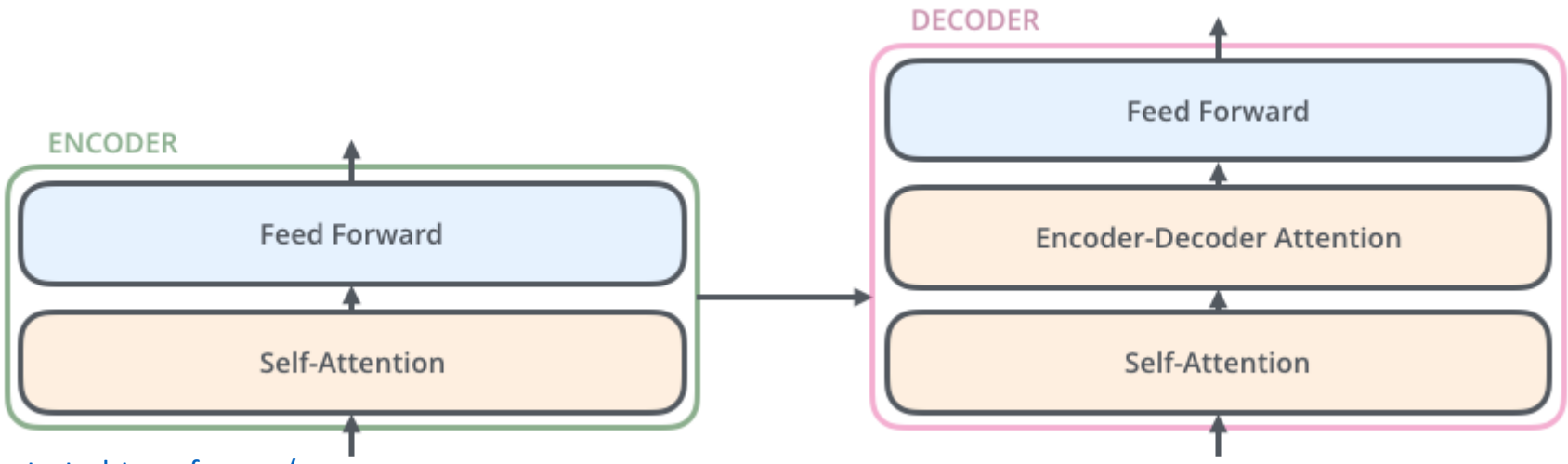
- **Codificación posicional:**
  - Se suma cada embedding de entrada por un vector t (se aprende durante el entrenamiento).
  - Se codifica una distancia por palabra, permitiendo jugar con distintas distancias (no siempre equidistantes).



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

Transformers

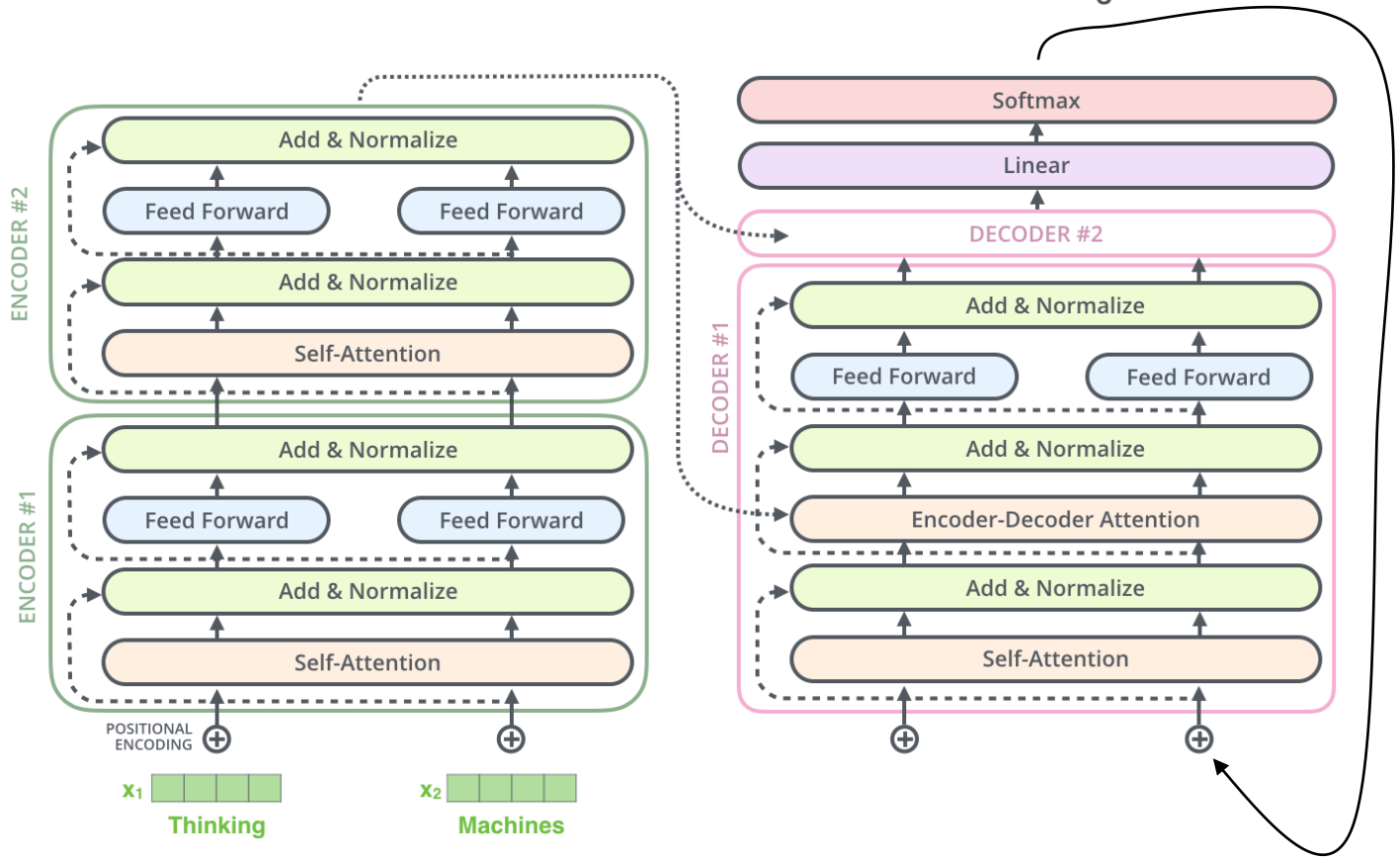
- Los **módulos en el decoder** tienen también esas capas, pero entre ellas hay una capa especial de **Encoder-Decoder attention**, que ayuda al decoder enfocarse en partes relevantes de le entrada (como el sistema de attention que vimos en seq2seq).



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

Transformers

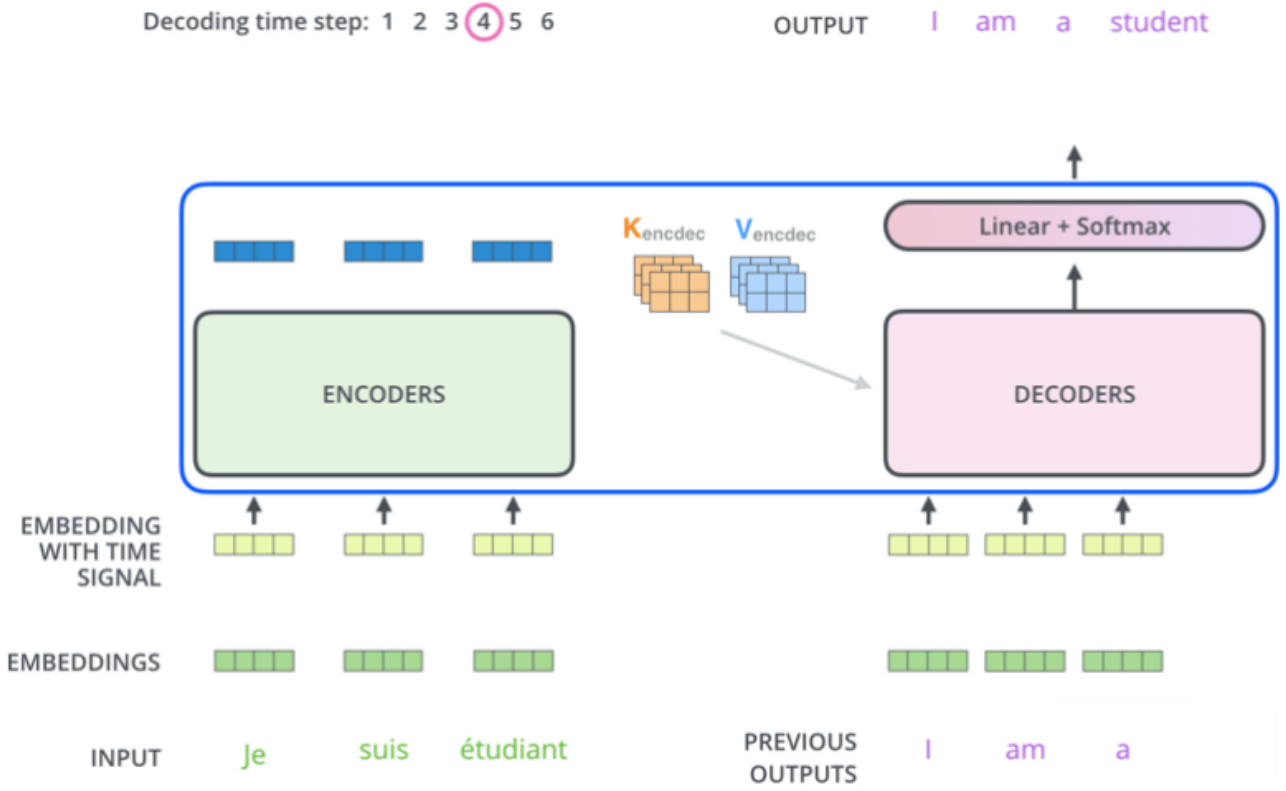
- **El decoder**:
  - Trabaja por **pasos**, generando una palabra (token) en cada paso.
    - Hasta generar un token de parada.
  - Recibe **dos entradas**:
    - La **salida del último encoder** (va directo a cada módulo decoder).
    - La **salida del decoder en el paso anterior** (va al primer módulo del decoder).
  - La **salida** es una softmax que indica el índice de la palabra (token) generado en el paso.



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

Transformers

- **El decoder**:
  - Las salidas del **encoder** se transforman en **vectores Key** y **Value** para las capas Encoder-Decoder Attention.
    - Se multiplican por dos matrices: $\mathbf{K_{endec}}$, $\mathbf{V_{endec}}$ (parámetros del modelo).
  - Cada **token** generado se pasa como **entrada de nuevo** al decoder.
    - Se usa **codificación posicional**.
    - Aquellas entradas aún no generadas se multiplican por -∞.



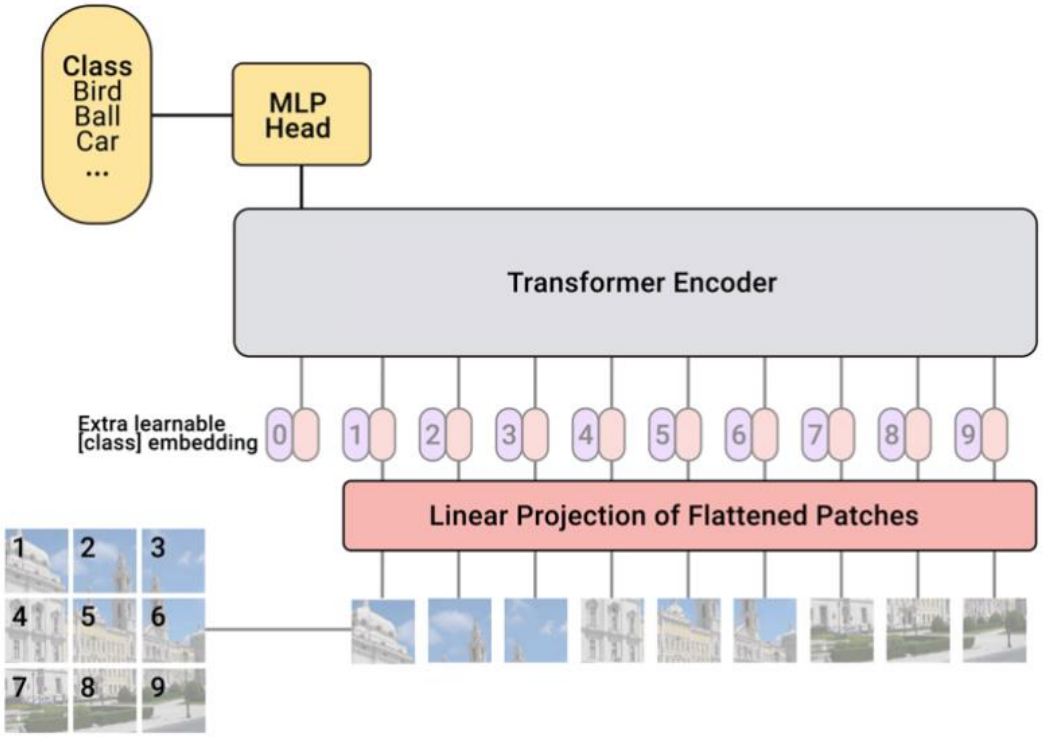
http://jalammar.github.io/illustrated-transformer/

Transformers

- Se han usado para los mejores modelos de lenguajes:
  - **BERT** (Google, 2018): sistema bidireccional, entrenado de forma no supervisada para predecir siguiente frase, 340 millones de parámetros.
  - **GPT** (OpenAI): entrenado de forma no supervisada para predecir siguiente palabra.
    - Versión 1 (GPT, 2018):
      - Corpus de entrenamiento (texto) de 5GB, fine-tuning con pequeños datasets para tareas específicas.
      - 117 millones de parámetros 37 capas, secuencias de hasta 512 tokens, 1 mes de entrenamiento sobre 8 GPUs
    - Versión 2 (GPT-2, 2019):
      - Corpus de 40GB (8 millones de webs), 1542 millones de parámetros, muchas GPUs, sin fine-tuning
      - "Modelo no publicado por precaución"…
      - Puedes probarlo en Talk to Transformer: https://app.inferkit.com/demo
    - Versión 3 (GPT-3, 2020):
      - Corpus de 570GB (Wikipedia, libros, etc.), 175000 millones de parámetros (distribuido en muchas GPUs V100). Sin uso de fine-tuning.

Transformers

- Otros usos además de lenguaje natural:
  - Imágenes
  - Vídeo
  - Música…



Recapitulando

- Las redes **RNN** (así como sus variantes LSTM y GRU) tienen problemas de eficiencia y falta de capacidad para modelar ciertas secuencias.
- El mecanismo de atención ayuda a paliar estos problemas, asociando elementos de la salida con varios de la entrada de forma explícita.
- Seq2seq es un modelo para generar secuencias a partir de secuencias, y contiene un encoder y un decoder.
- Los Transformers usan varios enconders y decoders usando self-attention, position coding, etc.
- Los Transformers están teniendo muchos usos, como en modelos de lenguaje natural (por ejemplo, GPT-3).