Transformers



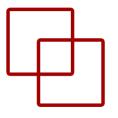
ETS de Ingeniería Informática

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



• Improving Deep Learning by Exploiting Synthetic Images © 2024 by Manuel Castillo-Cara is licensed under Attribution-NonCommercial 4.0 International





Attribution-NonCommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0)

ETS de Ingeniería Informática

Índice



Background

Attention

Transformers

Vision Transformers

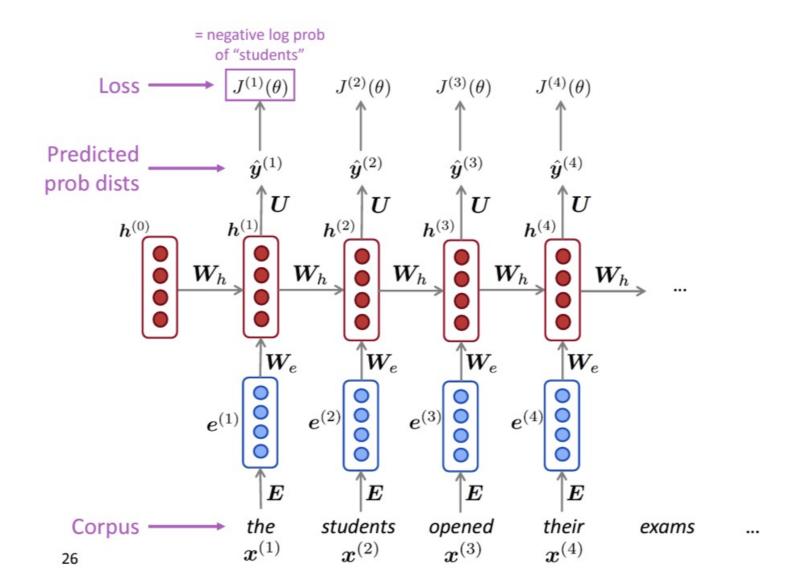
Inferencia en ViT

Disposiciones finales

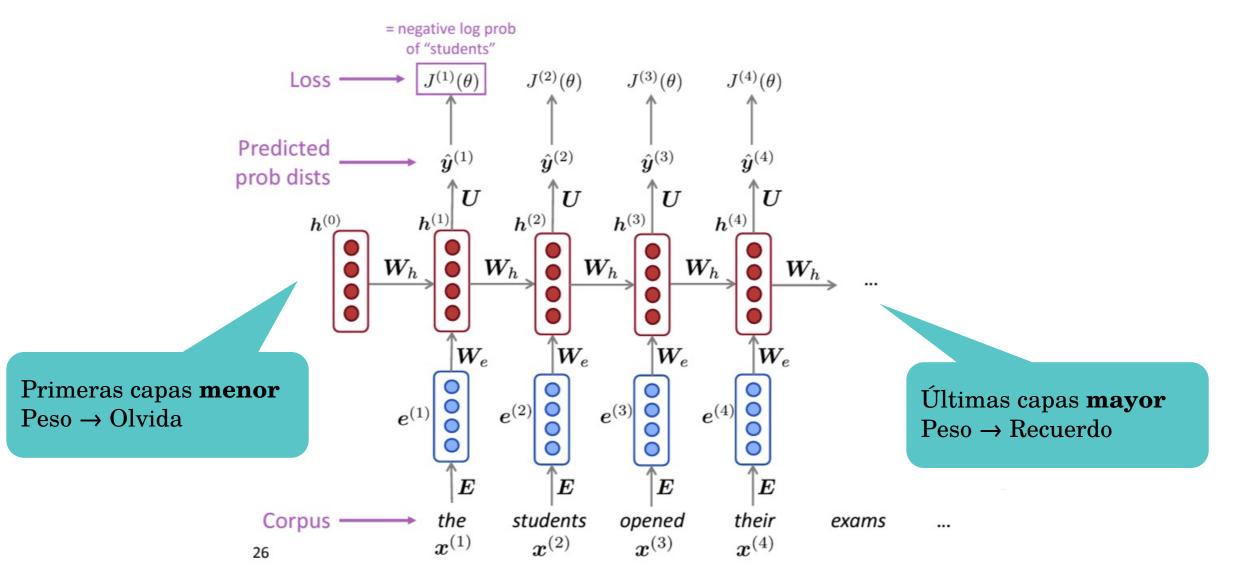
Background



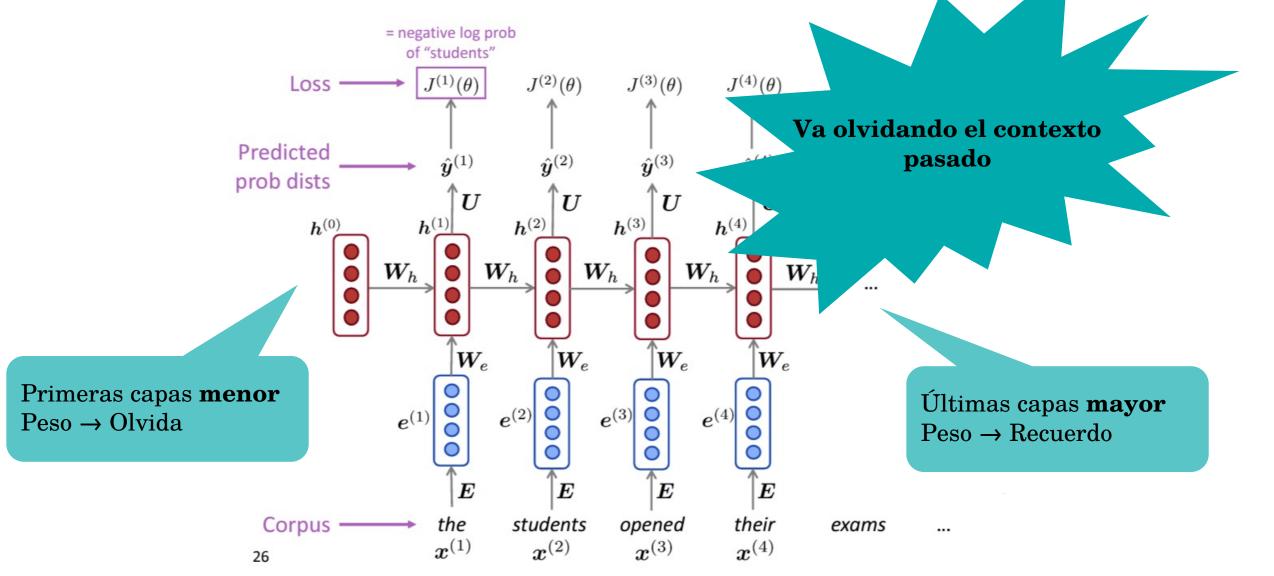














El jaguar dormía en la rama del árbol con su cola de soporte.







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

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





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

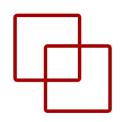


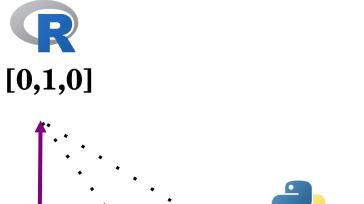
Con las RRN, se olvida que "su" hace referencia al jaguar

Desde las RNN a Word Embedding



Encoding One-Hot Encoding – Problema

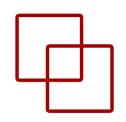


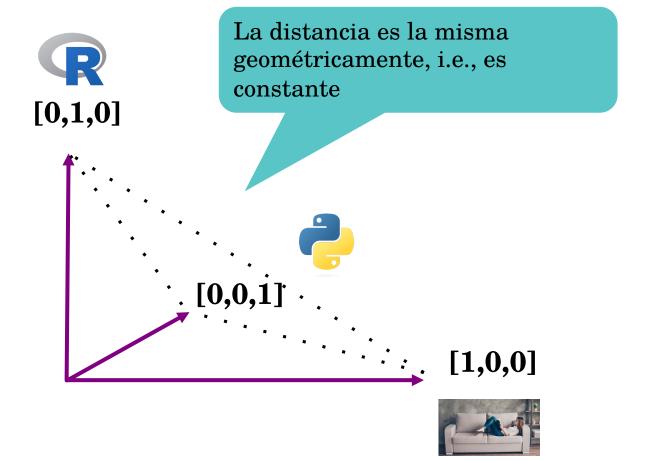


[0,0,1]

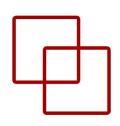


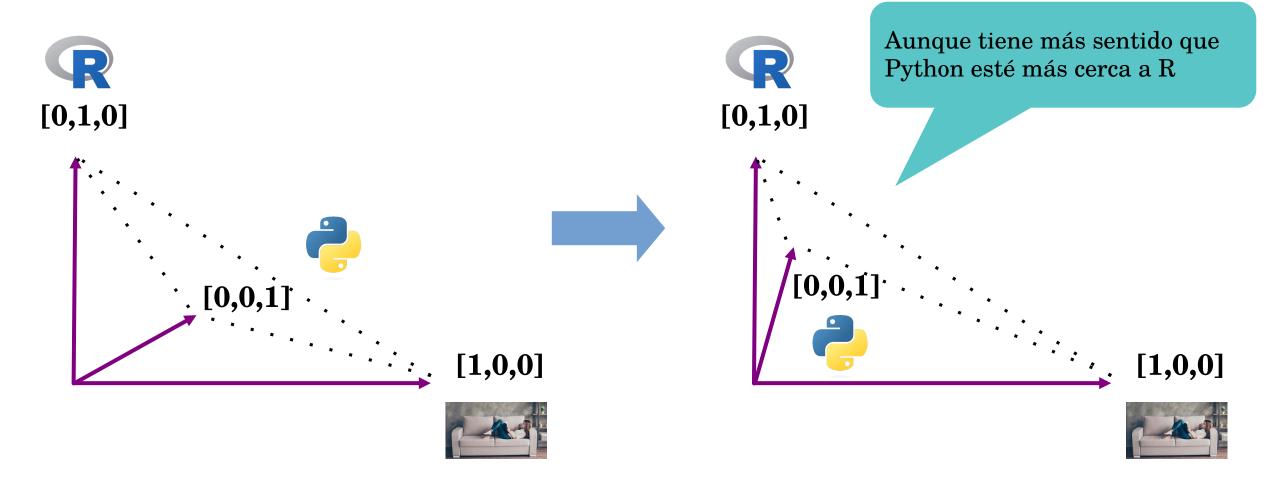
EncodingOne-Hot Encoding – Problema





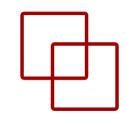
EncodingOne-Hot Encoding – Problema

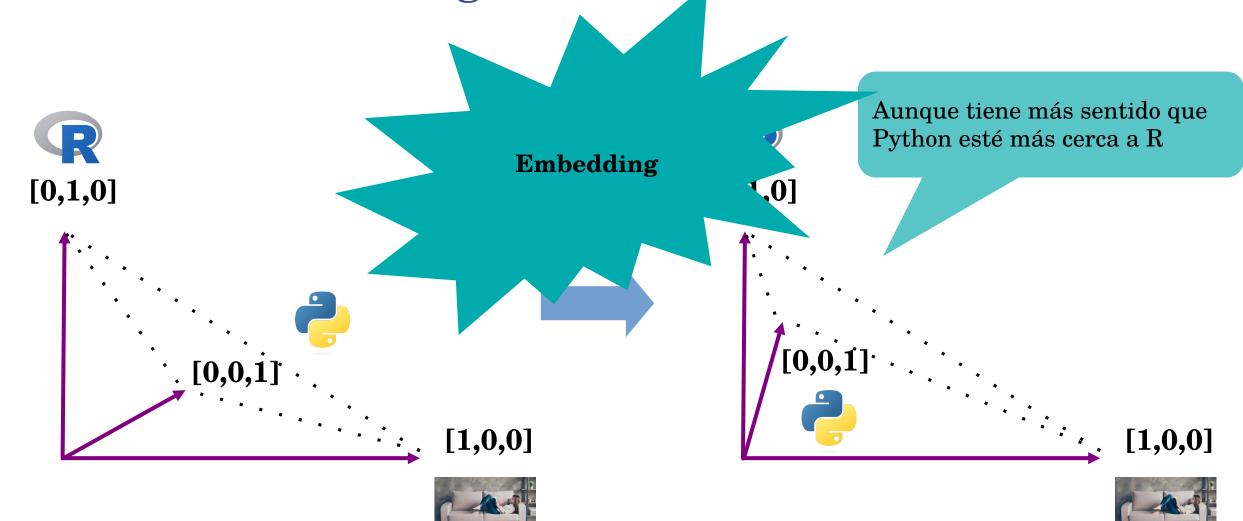




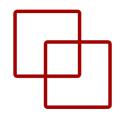
Encoding

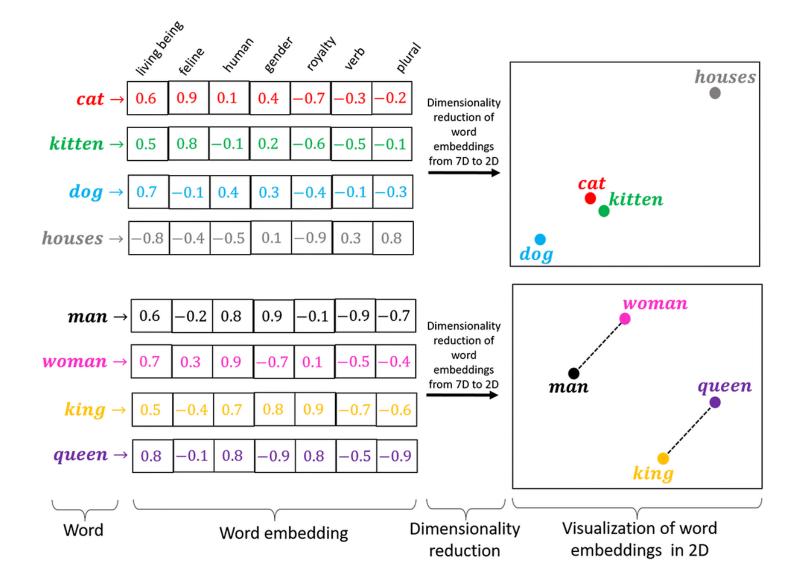
One-Hot Encoding – Problema



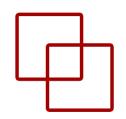


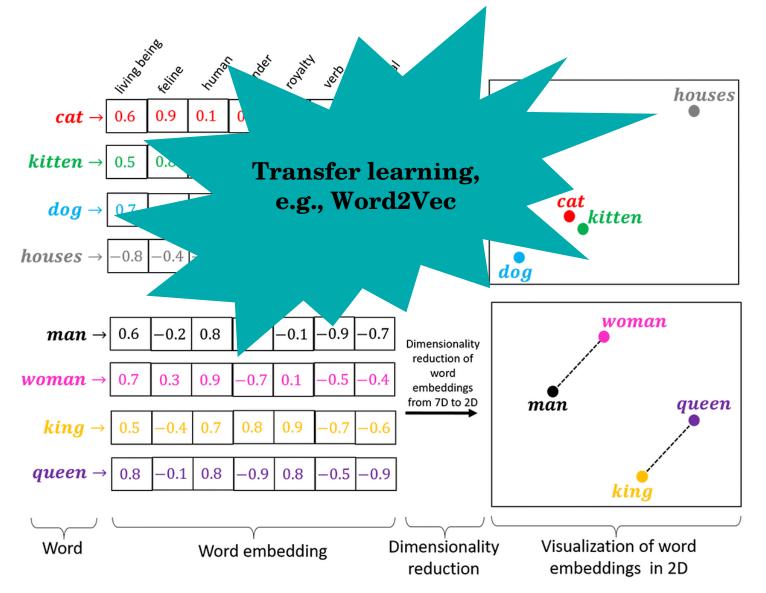
Word embedding





Word embedding

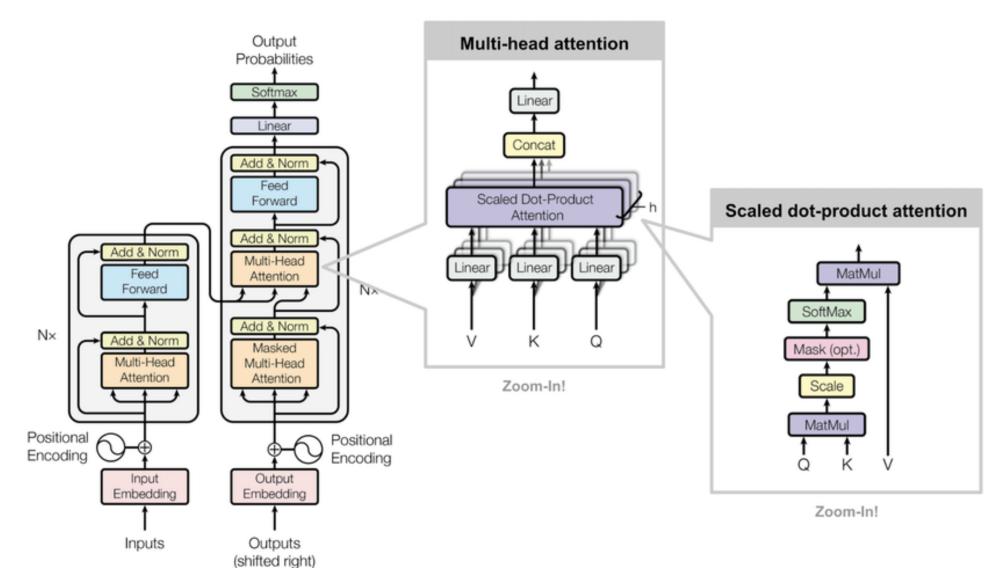




Attention







M

El El

jaguar jaguar

dormía dormía

en en

su su

árbol árbol

M

El El

jaguar jaguar

dormía dormía

en en

su su

árbol árbol



 \mathbf{E}

El

jaguar

jaguar

dormía

dormía

en

en

su

su

árbol

árbol

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

su

árbol

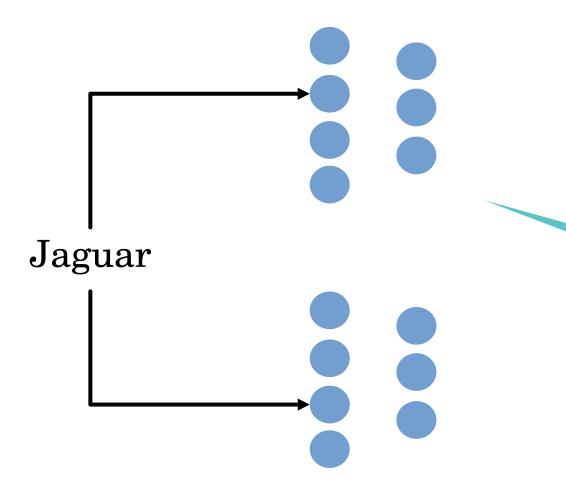


El jaguar dormía en

jaguar dormía en

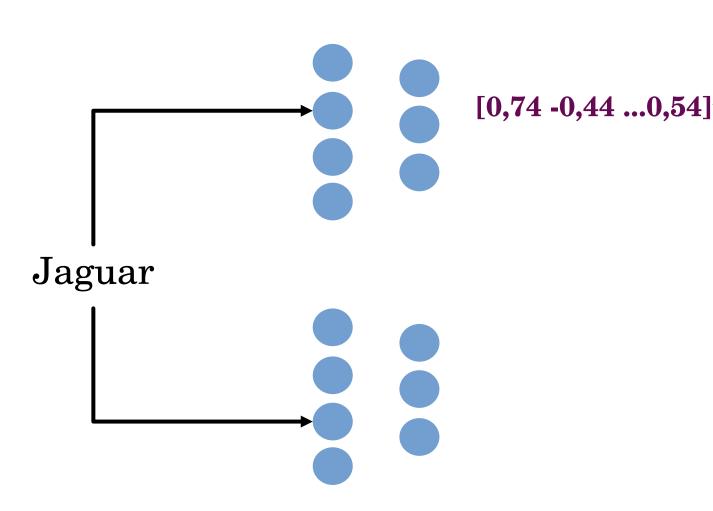
Y son redes neuronales que aprenden a encontrar estas relaciones





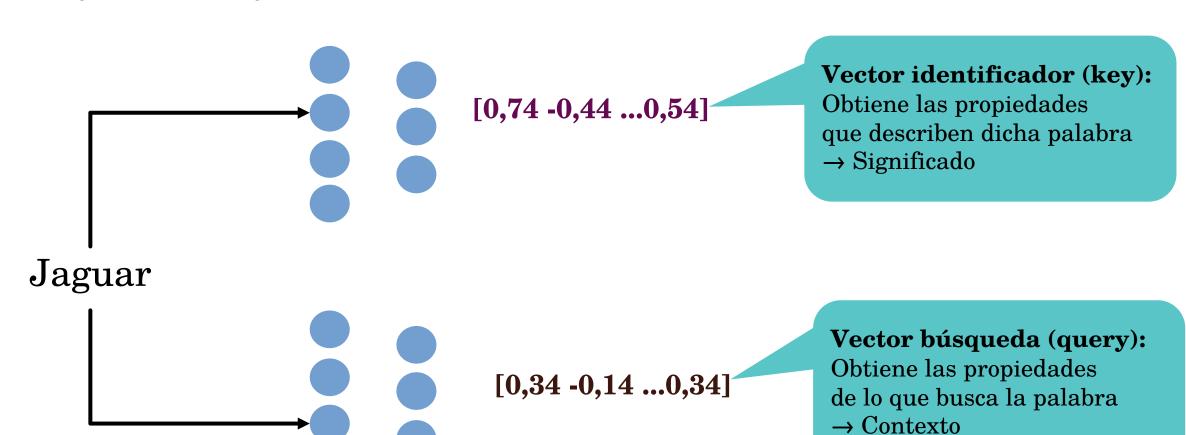
Dos NN diferentes para generar dos vectores distintos





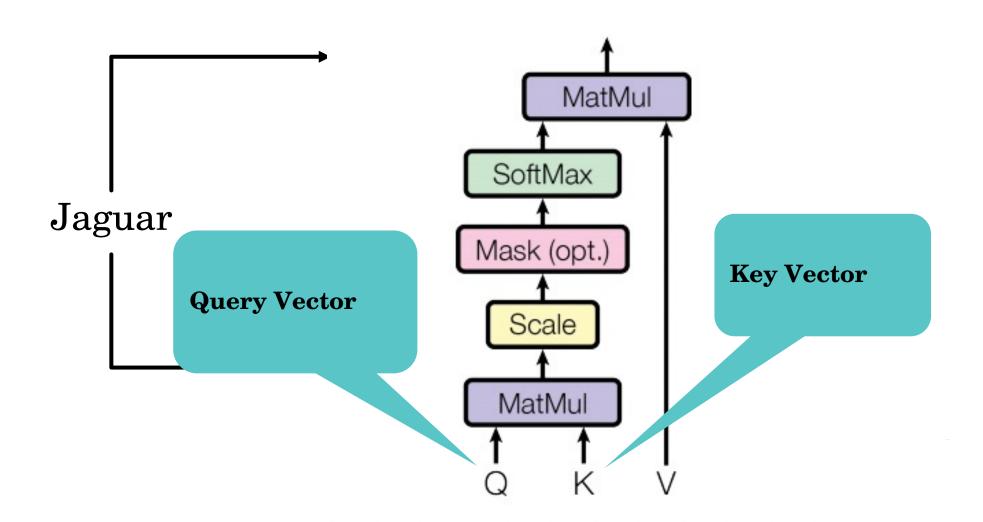
Vector identificador (key):
Obtiene las propiedades
que describen dicha palabra
→ Significado



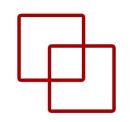


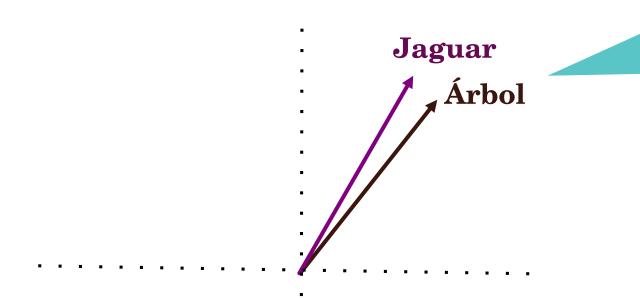


Scaled Dot-Product Attention



AttentionProducto escalar

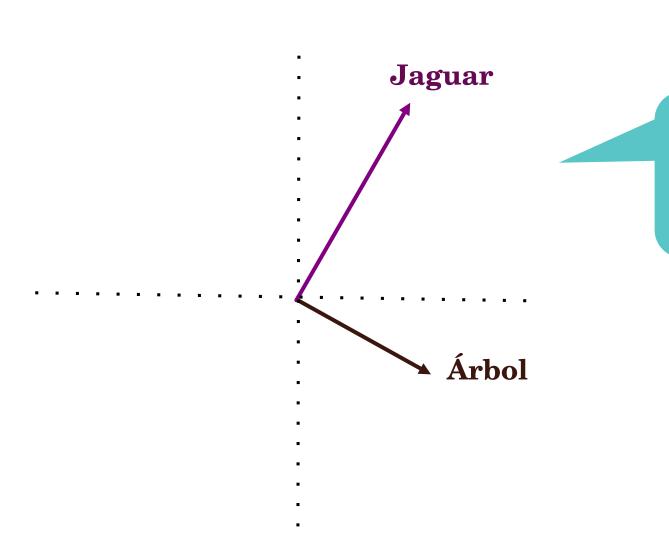




Si los vectores están **próximos** entonces son palabras coincidentes → Están en su contexto

AttentionProducto escalar





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



 \mathbf{E}

jaguar

dormía

en

su

árbol

 $\mathbf{E}1$

jaguar

dormía

en

su

árbol

Vectores Key

Vectores Query



El jaguar dormía en su árbol **Key Vector**

 \mathbf{E} Multi-Head Attention jaguar **Query Vector** Linear dormía Concat Value Vector? Scaled Dot-Product Attention su árbol

El El

jaguar jaguar

dormía dormía

en en

su su

árbol árbol

M

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)

M

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



\mathbf{E} 0,34

jaguar jaguar -0,44

dormía dormía 0,19

en -0,24

su su _{0,64}

árbol árbol _{0,84}

Calcula el producto escalar: v(key) * v(query) \rightarrow el resultado contra mayor

→ el resultado contra mayor sea, entonces mayor compatibilidad entre esas palabras



El El

jaguar jaguar -0,44

0,34

dormía dormía 0,19

en -0,24

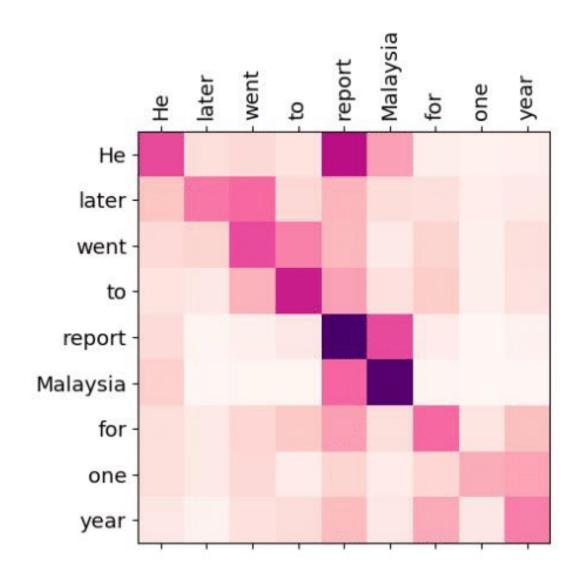
su su _{0,64}

árbol árbol _{0,84}

Esto es **ATTENTION**











El **jaguar** dormía en su árbol

Attention





El jaguar dormía en su árbol

Attention

0,34

0,14

0,75

0,11 0,52

0,26





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





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





El jaguar dormía en su árbol

Attention	0,34	0,14	0,75	0,11 0,52	0,26
X 7	0,34 -0,44	0,31 -0,54			0,45 -0,14
Vectores Valor	0,19	0,49			0,26
	 0,84	 0,34	•••		 0,43



0,34

Attention



Input

El jaguar dormía en su árbol

0,11 0,52

0,75

 $\begin{array}{c} \textbf{0,34} & \textbf{0,31} \\ \textbf{-0,44} & \textbf{-0,54} \\ \textbf{0,19} & \textbf{+0,49} & \textbf{+} \\ \end{array}$

0,14

0,19 + 0,49 + 0,84 0,34

0,45 -0,14 + 0,26 ... 0,43

0,26

Vector output





El

jaguar Vector output #2

jaguar

dormía Vector output #3

dormía

en Vector output #4

su

en

SU Vector output #4

árbol

árbol

El

Vector output #5

Vector output #1





E] Vector output #1

jaguar jaguar Vector output #2

dormía dormía vector output #3

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



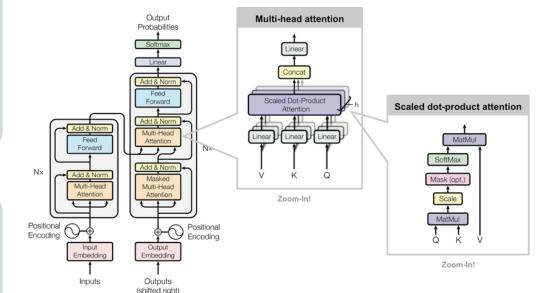
Encoder-Decoder with attention



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









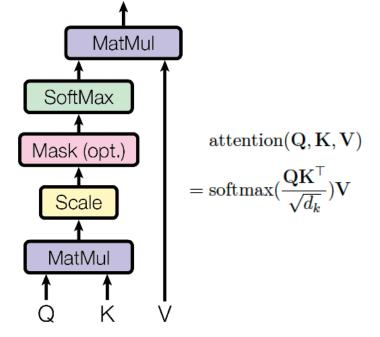
La arquitectura del Transformer prescinde de cualquier recurrencia y se basa únicamente en un mecanismo de autoatención (*self-attention*).



Self-attention se basa en el uso de **vectores Q, K y V**, 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.







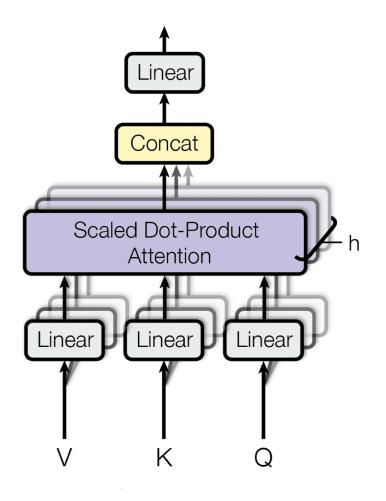
Además, se pueden **apilar** varias capas de atención en paralelo (*multi-head attention*).



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 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**).



Arquitectura



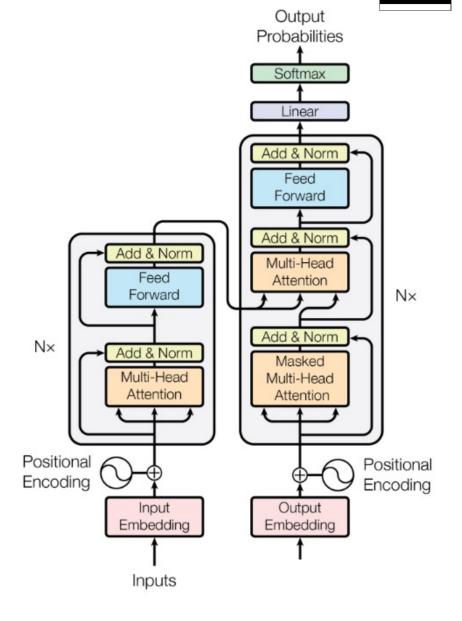
El Transformer sigue una estructura **codificadordecodificador** pero no depende de la recurrencia ni de las convoluciones para generar una salida.



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**.



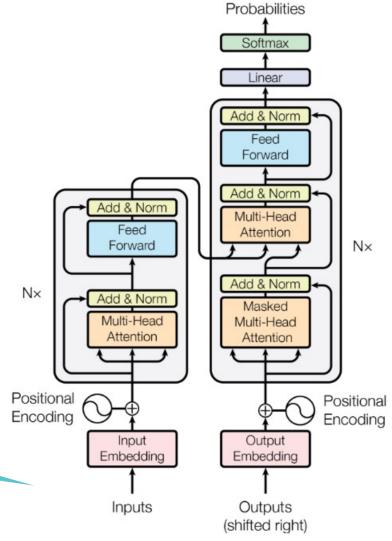
El **decodificador** (mitad derecha) recibe la salida del codificador junto con la salida del decodificador en el paso de tiempo anterior para **generar una secuencia de salida.**



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



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



Output

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



TRANSFORMER



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



TRANSFORMER



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

Entran todas las palabras a la vez



TRANSFORMER

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

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



TRANSFORMER

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

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

¿Y cómo tiene en cuenta el contexto?





El **jaguar** dormía en su árbol





\mathbf{El}	jaguar	dormía	en	su	árbol
0,34	0,31	0,45			
0,34 -0,44	-0,54	-0,14			
0,19	0,49	0,26			
•••	•••	•••		•••	
0,84	0,34	0,43			

Vectores de palabras





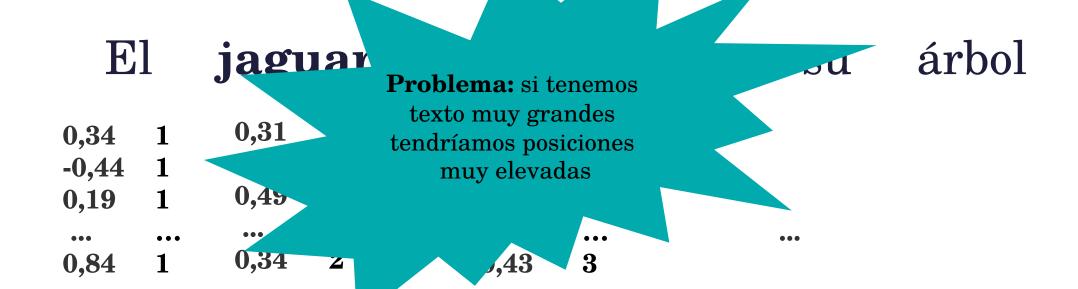
El		jaguar		dormía		en	su	árbol
0,34	1	0,31	2	0,45	3			
0,34 -0,44	1	-0,54	2	-0,14				
0,19	1	0,49	2	0,26	3			
•••	•••	•••	•••	•••	•••		•••	
0,84	1	0,34	2	0,43	3			

Vectores de palabras

Pero añadimos su **posición** en el texto







Vectores de palabras

Pero añadimos su **posición** en el texto





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

Vector posición: 4/6 = 0,66

El jaguar dormía

en

su

árbol

El jaguar

dormía

Entonces, ¿0,66 es la posición 2 o 4?

Vector posición: 2/3 = 0.66





El

jaguar

dormía ___

3 3 3 ... 3 3 3

 $0\ 0\ 0\ ...\ 0\ 1\ 1$

en

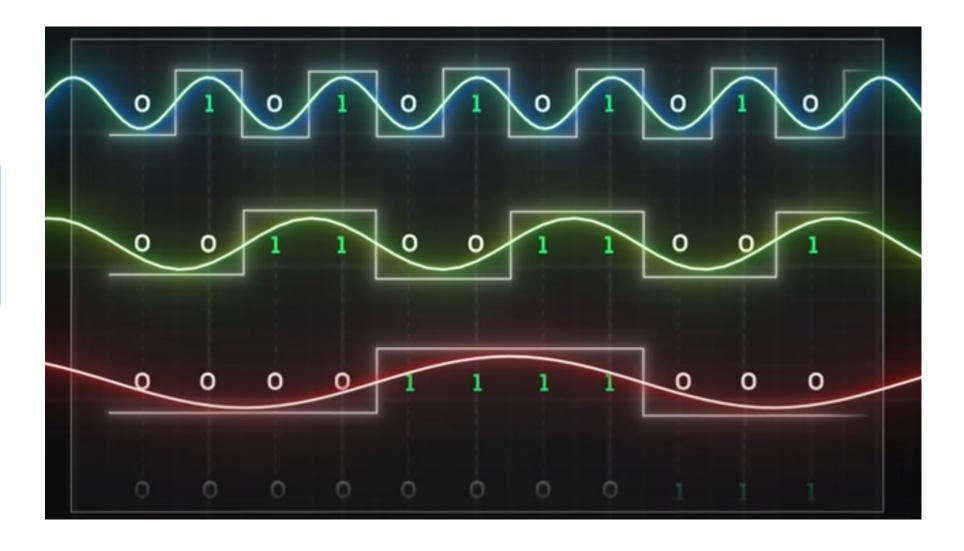
su

árbol

Codificación binaria

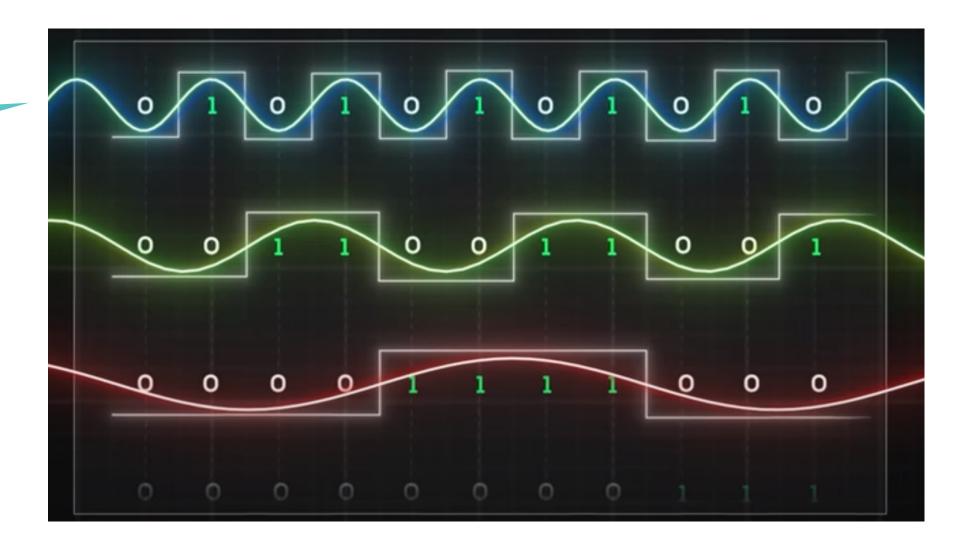


Se traduce a una función Senoidal

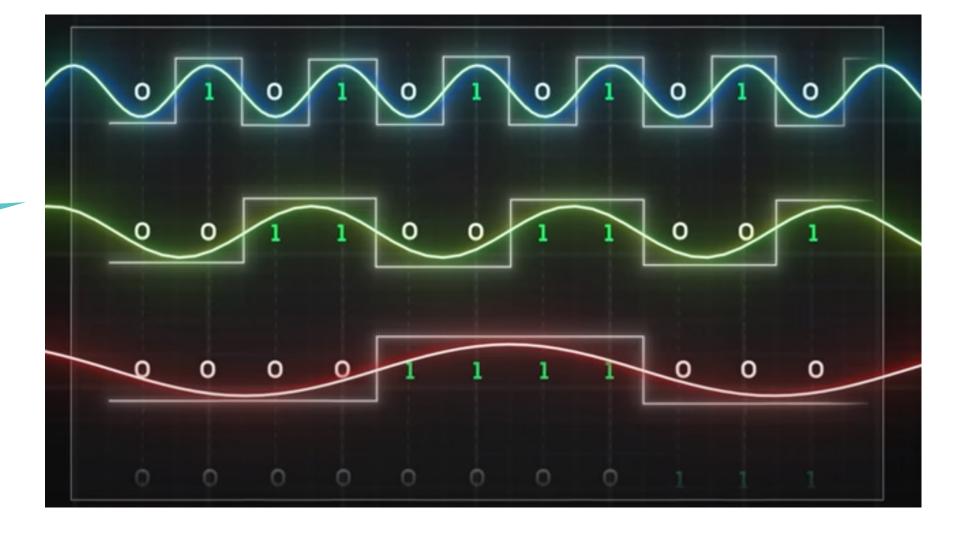




Sen(1/1*pos)

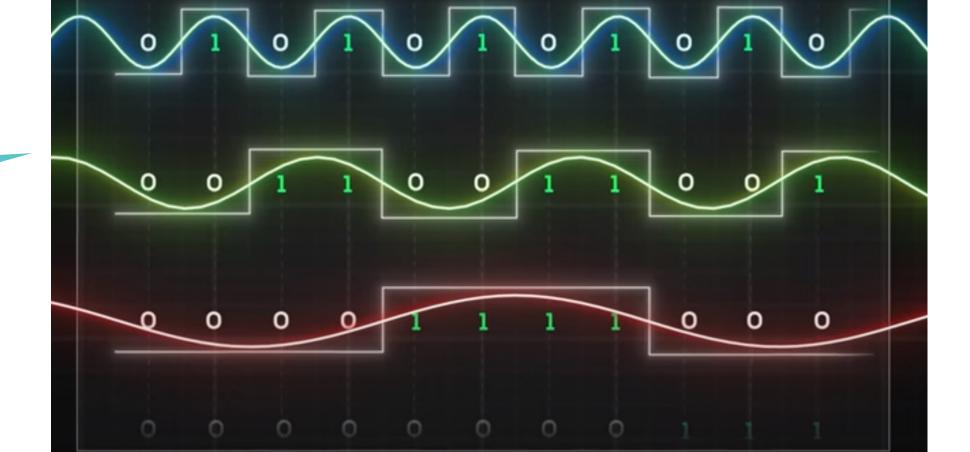






Sen(1/2 * pos)

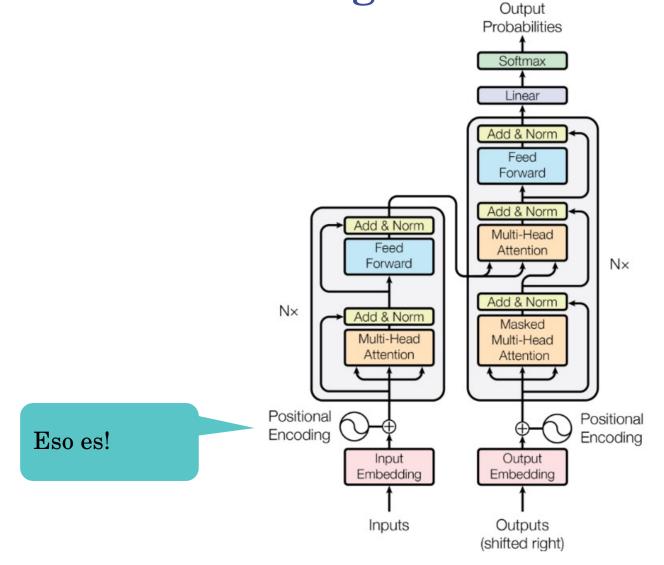




Sen(1/3 * pos)

ArquitecturaPositional Encoding





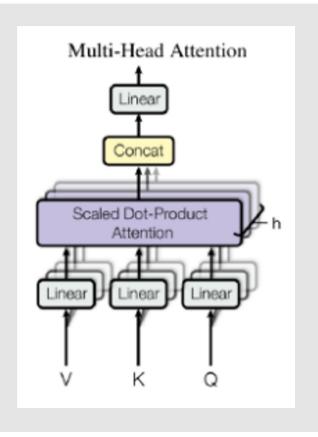


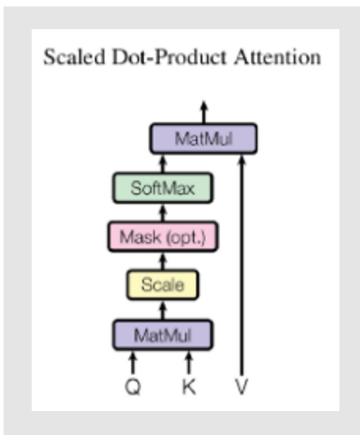
TRANSFORMER

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

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

Transformer – Encoder



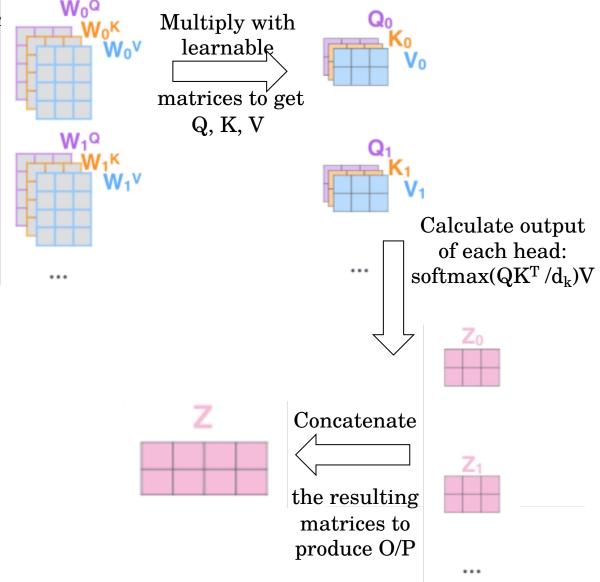


- Like LSTM, Transformer is an architecture for transforming one sequence into another one with the help of two parts (Encoder and Decoder), but it differs from the existing seq2seq models because it does not imply any Recurrent Networks (GRU, LSTM, etc.).
- 3 main parts : Position Embeddings + Multi 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 = $softmax(QK^T/d_k)$
- 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

Input Sequence Word and add positional embedding Split into number of heads and heads & also create learnable matrices

Multi-head 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











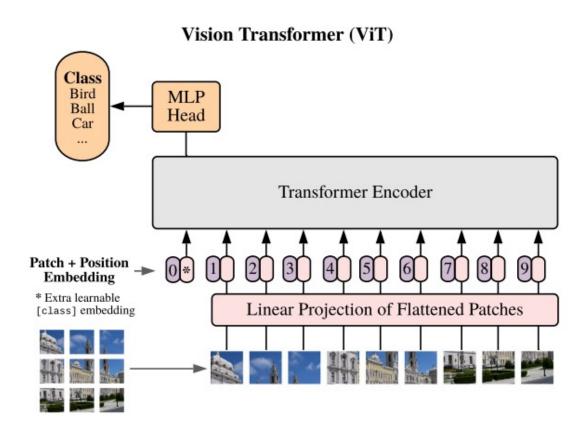


Dosovitskiy, A., et al. (2020). An image is worth 16x16 words: Transformers for image recognition at scale.



Disposiciones previas

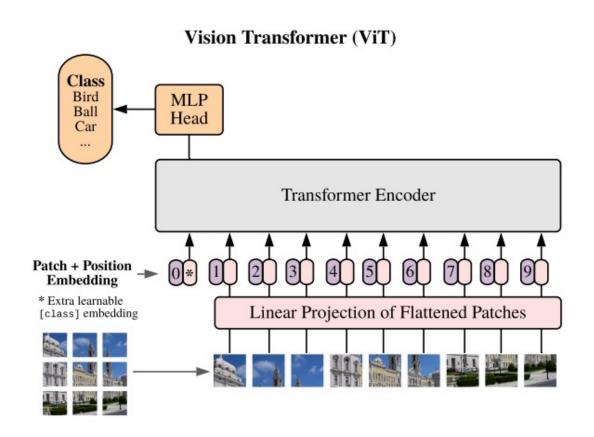
• Los datos de entrada al Transformer se proporcionan en forma de **imágenes bidimensionales**.





Disposiciones previas

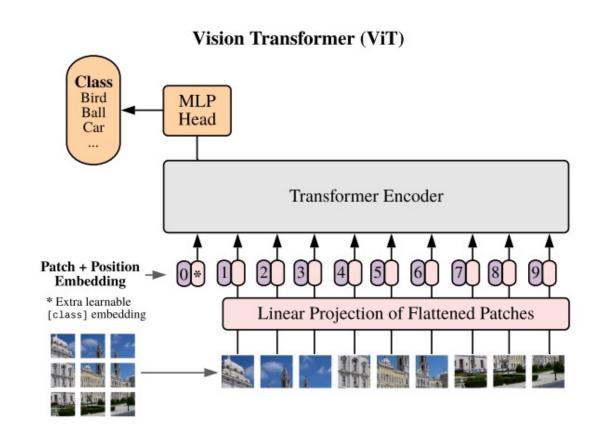
- Los datos de entrada al Transformer se proporcionan en forma de imágenes bidimensionales.
- La imagen de entrada, de alto H, ancho W y canales C, se corta en patchs bidimensionales más pequeños.





Disposiciones previas

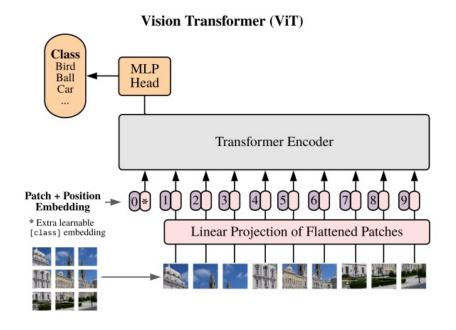
- Los datos de entrada al Transformer se proporcionan en forma de **imágenes bidimensionales**.
- La imagen de entrada, de alto H, ancho W y canales C, se corta en patchs bidimensionales más pequeños.
- Esto da como resultado un número N=HW/P² de patchs, donde cada patch tiene una resolución de P×P píxeles.





Operaciones ViT

- Cada patch de imagen **se aplana en un vector** \mathbf{x}_p^n de longitud $P \times C$ donde, n=1,...,N.
- Se genera una **secuencia de patchs** de imagen embedding asignando los patchs aplanados a dimensiones D, con una proyección lineal entrenable E.

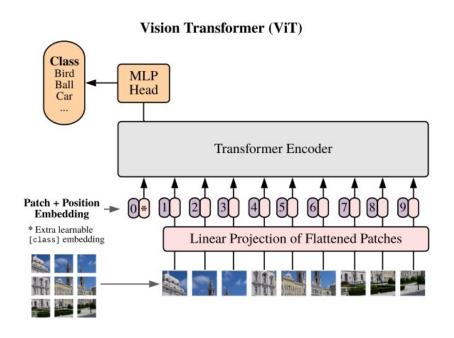


Operaciones ViT



- Cada patch de imagen se aplana en un vector \mathbf{x}_p^n de longitud $P \times C$ donde, n=1,...,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:

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

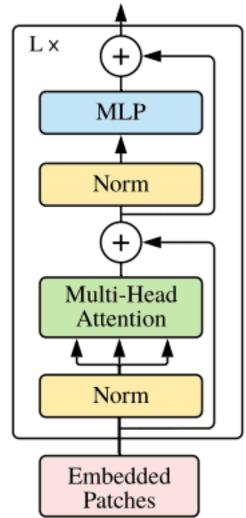


M

Operaciones ViT

• Para realizar la clasificación, alimentan z_0 en la entrada del codificador del Transformer, que consta de una pila de capas idénticas.

Transformer Encoder



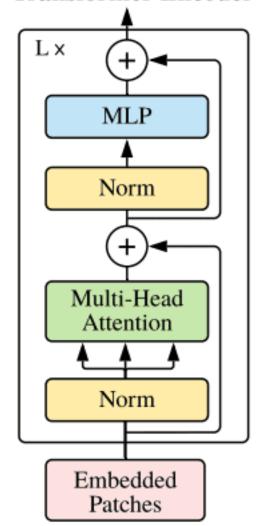
$$\mathbf{z}_0 = [\mathbf{x}_{\mathrm{class}}; \ \mathbf{x}_p^1 \mathbf{E}; \ \dots; \ \mathbf{x}_p^N \mathbf{E}] + \mathbf{E}_{\mathrm{pos}}$$



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.

Transformer Encoder

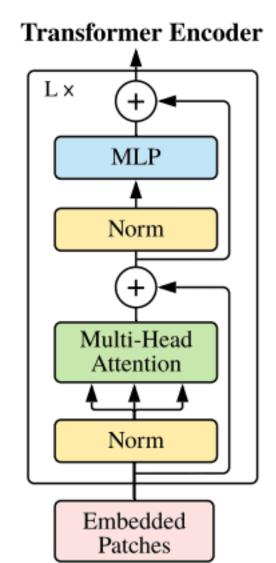


$$\mathbf{z}_0 = [\mathbf{x}_{\mathrm{class}}; \ \mathbf{x}_p^1 \mathbf{E}; \ \dots; \ \mathbf{x}_p^N \mathbf{E}] + \mathbf{E}_{\mathrm{pos}}$$



Operaciones ViT

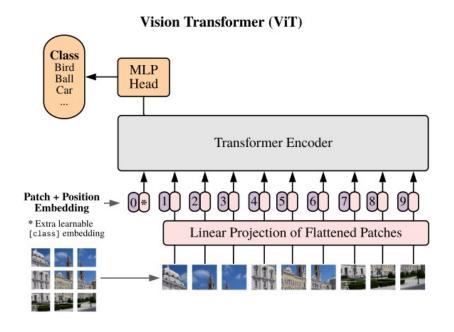
- Para realizar la clasificación, alimentan z_0 en la entrada del codificador del Transformer, que consta de una pila de capas idénticas.
- Luego, proceden a tomar el valor de x_{class} en la capa L de la salida del codificador y lo introducen en un MLP head de clasificación.
- El MLP de clasificación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



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

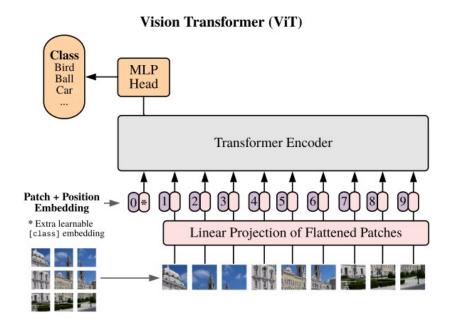


• La entrada al codificador es una secuencia de **patchs** de imágenes embedding, que también se aumenta con información **posicional**.



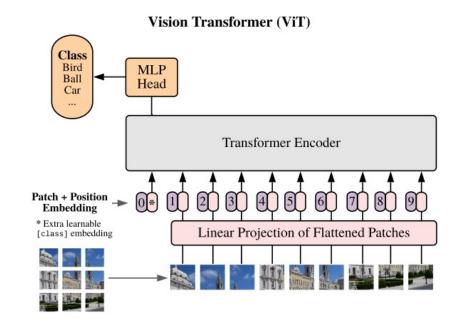


- La entrada al codificador es una secuencia de **patchs** de imágenes embedding, que también se aumenta con información **posicional**.
- Un head de clasificación sigue a la salida del Codificador recibe el valor de la **clase incrustada** que se puede aprender para generar una salida de clasificación basada en su estado.



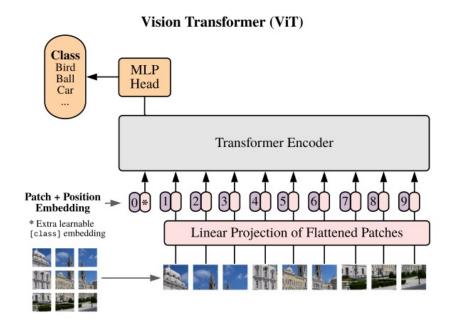


- La entrada al codificador es una secuencia de **patchs** de imágenes embedding, que también se aumenta con información **posicional**.
- Un head de clasificación sigue a la salida del Codificador recibe el valor de la **clase incrustada** que se puede aprender para generar una salida de clasificación 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.





- 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.



Rendimiento ViT Vs ResNet Exp. 1: Fine-tuning and testing on ImageNet





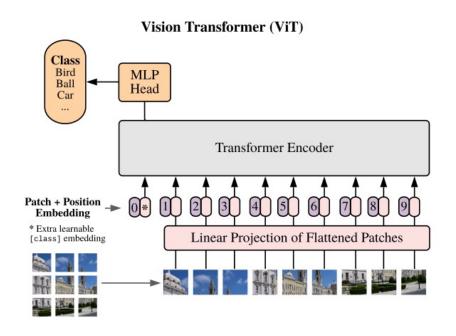
En el conjunto de datos más pequeño (ImageNet), los dos modelos ViT más grandes tuvieron un rendimiento inferior en comparación con su contraparte **más pequeña**. El **rendimiento** de todos los ViT se mantiene por debajo del de los ResNets.



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.



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

Rendimiento ViT Vs ResNet Exp. 2: Investigate the effect of the dataset size

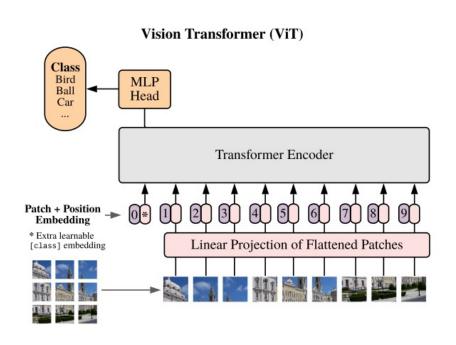


Entrenamiento en subconjuntos aleatorios de diferentes tamaños del conjunto de datos JFT-300M y pruebas en ImageNet para investigar más a fondo el efecto del tamaño del conjunto de datos:

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.



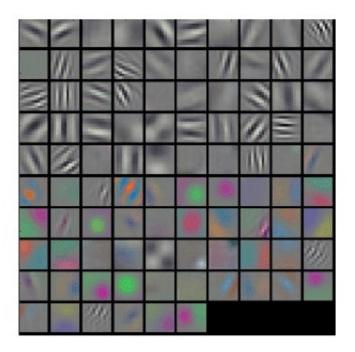
$$\mathbf{z}_0 = [\mathbf{x}_{\mathrm{class}}; \ \mathbf{x}_p^1 \mathbf{E}; \ \dots; \ \mathbf{x}_p^N \mathbf{E}] + \mathbf{E}_{\mathrm{pos}}$$



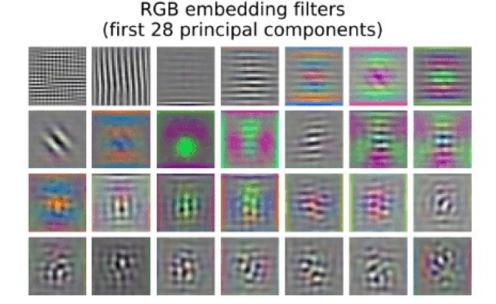
Representación Interna de Datos

• 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

Alexnet 1st conv filters



ViT 1st linear embedding filters

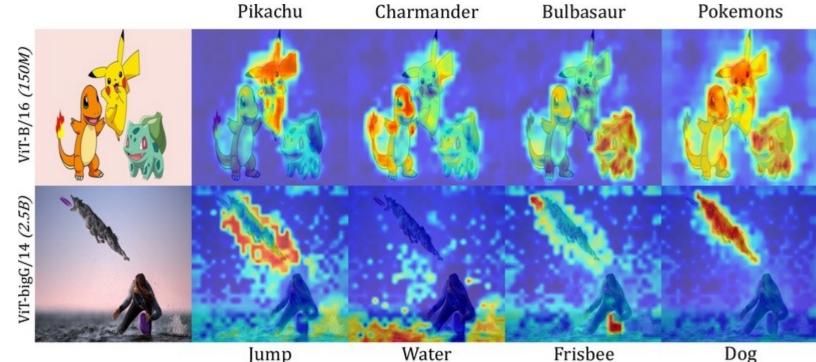




Attention Map & LeGrad





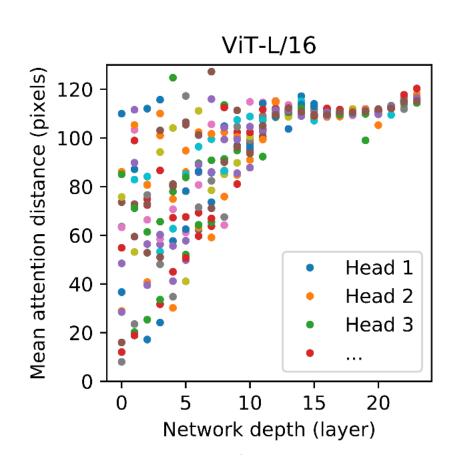


Bousselham, W., et al. (2024). LeGrad: An Explainability Method for Vision Transformers via Feature Formation Sensitivity. *arXiv preprint arXiv:2404.03214*.



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.



Inferencia



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.

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 patch 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.

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 patch 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 mejor.

| Disposiciones | finales |



Vision TransformersBibliografía



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 y otros:

- <u>LeGrad: An Explainability Method for Vision Transformers via Feature Formation Sensitivity</u>
- How Attention works in Deep Learning: understanding the attention mechanism in sequence models
- How Transformers work in deep learning and NLP: an intuitive introduction
- How the Vision Transformer (ViT) works in 10 minutes: an image is worth 16x16 words

Gracias!



ETS de Ingeniería Informática

Dr. Manuel Castillo-Cara

www.manuelcastillo.eu

Departamento de Inteligencia Artificial Escuela Técnica Superior de Ingeniería Informática Universidad Nacional de Educación a Distancia (UNED)