# • Прикладные модели машинного обучения •
# Модели внимания и трансформеры

Воронцов Константин Вячеславович
k.v.vorontsov@phystech.edu
http://www.MachineLearning.ru/wiki?title=User:Vokov

Этот курс доступен на странице вики-ресурса
http://www.MachineLearning.ru/wiki
«Машинное обучение (курс лекций, К.В.Воронцов)»

МФТИ • 28 февраля 2025

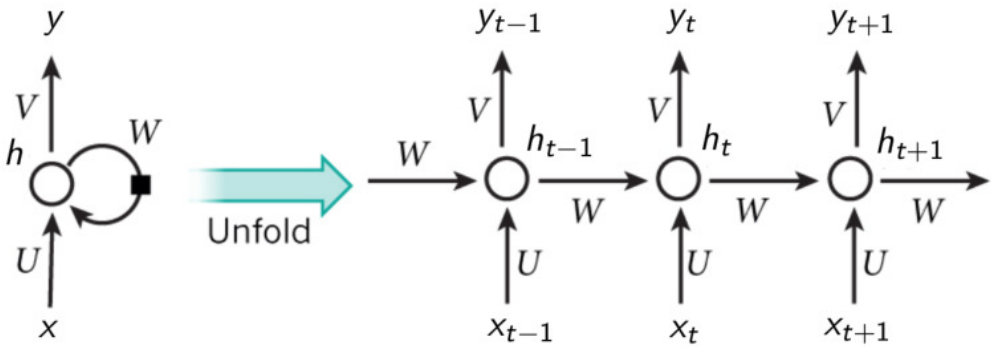
# Содержание


1. **Задачи обработки последовательностей**
   - Рекуррентная сеть
   - Рекуррентная сеть с моделью внимания
   - Прикладные задачи
2. **Разновидности моделей внимания**
   - Разновидности функций сходства
   - Многомерное и иерархическое внимание
   - Модель внимания на графах GAT
3. **Трансформеры**
   - Архитектура трансформера
   - Трасформер для машинного перевода
   - Трасформер BERT

# Напоминание. Рекуррентная сеть (RNN)

$x_t$ — входной вектор в момент $t = 1, \ldots, T$
$h_t$ — вектор скрытого состояния в момент $t$
$y_t$ — выходной вектор (в некоторых приложениях $y_t \equiv h_t$)

$$h_t = \sigma_h(Ux_t + Wh_{t-1})$$
$$y_t = \sigma_y(Vh_t)$$



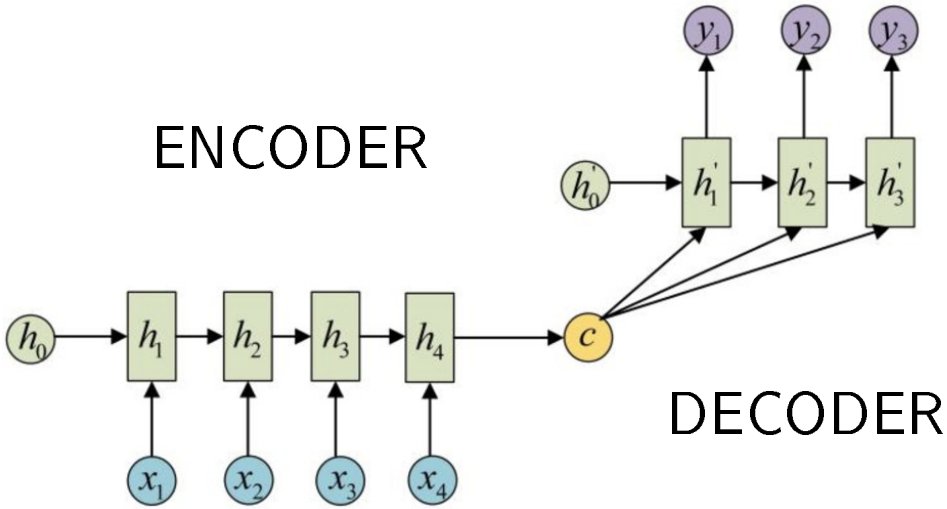

Обучение рекуррентной сети: $\sum_{t=0}^{T} \mathscr{L}_t(U, V, W) \to \min_{U,V,W}$

- длины входного и выходного сигнала обязаны совпадать
- невозможно заглядывание вперёд
- не подходит для многих задач (MT, QA и др.)

# Рекуррентная сеть для синтеза последовательностей (seq2seq)

$X = (x_1, \ldots, x_n)$ — входная последовательность
$Y = (y_1, \ldots, y_m)$ — выходная последовательность
$c \equiv h_n$ кодирует всю информацию про $X$ для синтеза $Y$

$$h_i = f_{\text{in}}(x_i, h_{i-1})$$
$$h'_t = f_{\text{out}}(h'_{t-1}, y_{t-1}, c)$$
$$y_t = f_y(h'_t, y_{t-1})$$



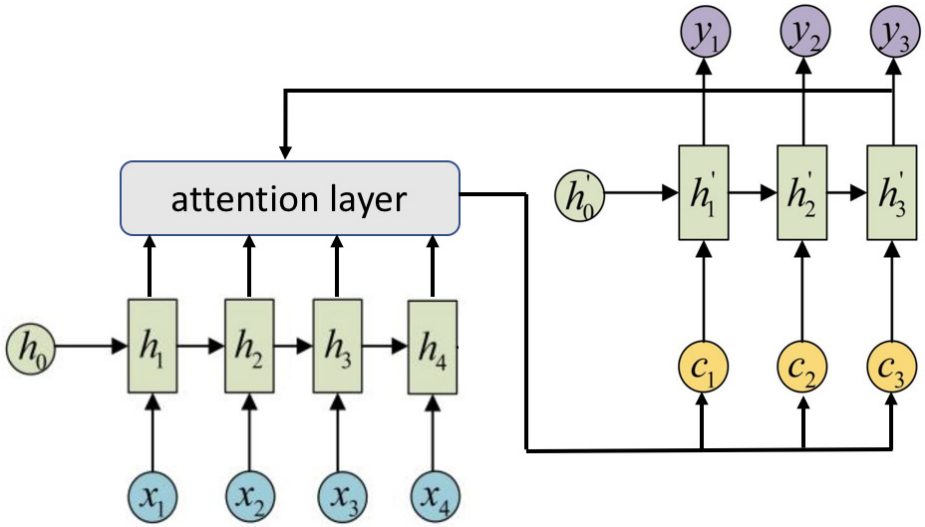

- $h_n$ лучше помнит конец последовательности, чем начало
- чем больше $n$, тем труднее упаковать всю информацию в $c$
- придётся контролировать затухание/взрывы градиента
- RNN трудно распараллеливается

# Рекуррентная сеть с вниманием (attention mechanism)

$a(h, h')$ — функция сходства состояний входа $h$ и выхода $h'$
$\alpha_{ti}$ — важность входа $i$ для выхода $t$ (attention score), $\sum_i \alpha_{ti} = 1$
$c_t$ — вектор входного контекста для выхода $t$ (context vector)

$$h_i = f_{\text{in}}(x_i, h_{i-1})$$
$$\alpha_{ti} = \text{norm}_i\, a(h_i, h'_{t-1})$$
$$c_t = \sum_i \alpha_{ti} h_i$$
$$h'_t = f_{\text{out}}(h'_{t-1}, y_{t-1}, c_t)$$
$$y_t = f_y(h'_t, y_{t-1}, c_t)$$

здесь и далее $\text{norm}_i(p_i) = \frac{p_i}{\sum_k p_k}$




- можно отказаться от рекуррентности как по $h_i$, так и по $h'_t$
- можно вводить обучаемые параметры в $a$ и $c$

*Bahdanau et al.* Neural machine translation by jointly learning to align and translate. 2015.

# Применения моделей внимания

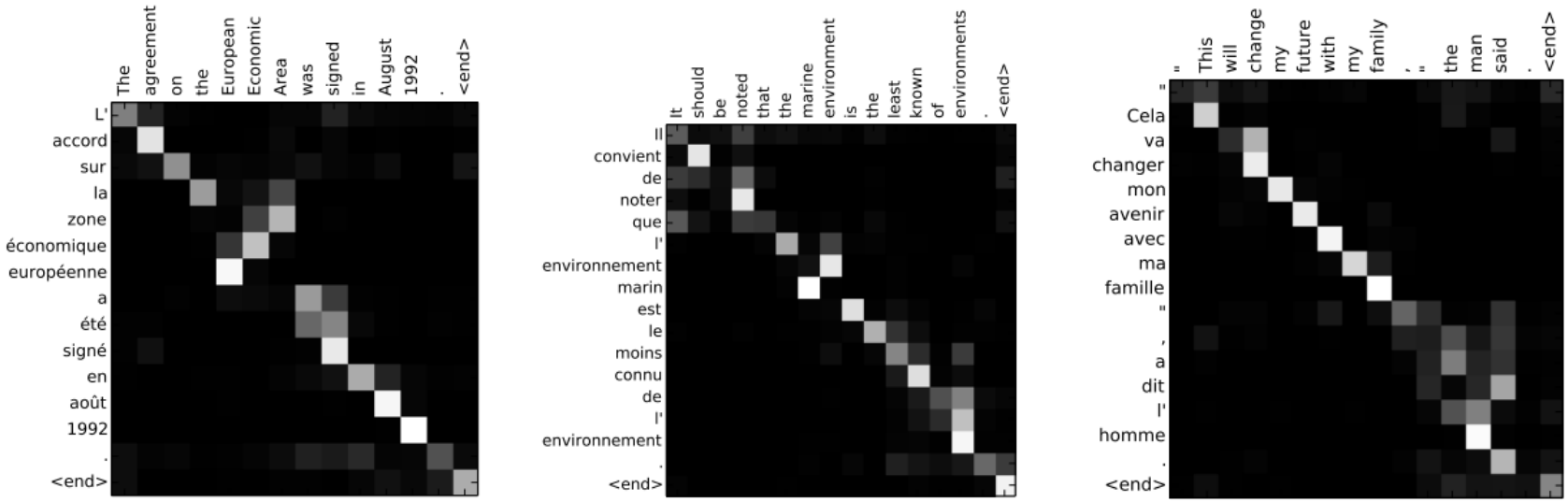
Преобразование одной последовательности в другую, seq2seq:

- Машинный перевод (machine translation)
- Ответы на вопросы (question answering)
- Суммаризация текста (text summarization)
- Описание изображений, аудио, видео (multimedia description)
- Распознавание речи (speech recognition)
- Синтез речи (speech synthesis)

Обработка последовательности:

- Классификация текстовых документов
- Анализ тональности документа / предложений / аспектов

# Применения моделей внимания в машинном переводе




**Интерпретируемость** моделей внимания:

При обработке конкретной последовательности $x$ визуализация матрицы $\alpha_{ti}$ показывает, на какие слова $x_i$ модель обращает внимание, генерируя слово перевода $y_t$

*Bahdanau et al.* Neural machine translation by jointly learning to align and translate. 2015.

# Модели внимания на изображениях для генерации описаний

A woman is throwing a frisbee in a park.

A dog is standing on a hardwood floor.


A stop sign is on a road with a mountain in the background.

A little girl sitting on a bed with a teddy bear.

A group of people sitting on a boat in the water.

A giraffe standing in a forest with trees in the background.

При генерации каждого слова в описании изображения визуализация показывает, на какие области изображения модель обращает внимание, генерируя данное слово

---

*Kelvin Xu et al.* Show, attend and tell: neural image caption generation with visual attention. 2016

# Разновидности функций сходства векторов

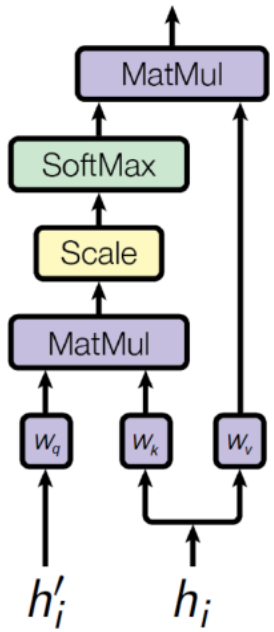
$a(h, h') = h^\mathsf{T} h'$ — скалярное произведение
$a(h, h') = \exp(h^\mathsf{T} h')$ — тогда norm превращается в SoftMax
$a(h, h') = h^\mathsf{T} W h'$ — с матрицей обучаемых параметров $W$
$a(h, h') = w^\mathsf{T} \text{th}(Uh + Vh')$ — аддитивное внимание с $w, U, V$

**Линейные преобразования векторов** query, key, value:

$$a(h_i, h'_{t-1}) = (W_k h_i)^\mathsf{T} (W_q h'_{t-1}) / \sqrt{d}$$
$$\alpha_{ti} = \text{SoftMax}_i \, a(h_i, h'_{t-1})$$
$$c_t = \sum_i \alpha_{ti} W_v h_i$$

$W_q$ $d \times \dim(h')$, $W_k$ $d \times \dim(h)$, $W_v$ $d \times \dim(h)$ — матрицы весов линейных нейронов (обучаемые линейные преобразования в пространство размерности $d$)

Возможно упрощение модели: $W_k \equiv W_v$




*Dichao Hu.* An introductory survey on attention mechanisms in NLP problems. 2018.

# Формула внимания

$q$ — *вектор-запрос*, для которого хотим вычислить контекст
$K = (k_1, \ldots, k_n)$ — *векторы-ключи*, сравниваемые с запросом
$V = (v_1, \ldots, v_n)$ — *векторы-значения*, образующие контекст
$a(k_i, q)$ — *оценка релевантности* (сходства) ключа $k_i$ запросу $q$

$c$ — искомый вектор контекста, релевантный запросу

*Модель внимания* — это 3х-слойная сеть, вычисляющая выпуклую комбинацию значений $v_i$, релевантных запросу $q$:

$$c = \text{Attn}(q, K, V) = \sum_i v_i \,\text{SoftMax}_i\, a(k_i, q)$$

$c_t = \text{Attn}(W_q h'_{t-1}, W_k H, W_v H)$ — пример с предыдущего слайда, где $H = (h_1, \ldots, h_n)$ — входные векторы, $h'_{t-1}$ — выходной

*Внутреннее внимание* или «самовнимание» (self-attention):
$c_i = \text{Attn}(W_q h_i, W_k H, W_v H)$ — частный случай, когда $h_i \in H$

# Многомерное внимание (multi-head attention)

**Идея:** $J$ разных моделей внимания совместно обучаются выделять различные аспекты входной информации (например, части речи, синтаксис, фразеологизмы):

$$c^j = \text{Attn}(W_q^j q, W_k^j H, W_v^j H), \quad j = 1, \ldots, J$$

**Варианты** агрегирования выходного вектора:

$c = \frac{1}{J}\sum_{j=1}^{J} c^j$ — усреднение

$c = \left[c^1 \cdots c^J\right]$ — конкатенация

$c = \left[c^1 \cdots c^J\right] W$ — чтобы вернуться к нужной размерности

**Регуляризация:** чтобы аспекты внимания были максимально различны, строки $J \times n$ матриц $A$, $\alpha_{ji} = \text{SoftMax}_i\, a(W_k^j h_i, W_q^j q)$, декоррелируются $(\alpha_s^\mathsf{T}\alpha_j \to 0)$ и разреживаются $(\alpha_j^\mathsf{T}\alpha_j \to 1)$:

$$\|AA^\mathsf{T} - I\|^2 \to \min_{\{W_k^j, W_q^j\}}$$

*Zhouhan Lin, Y.Bengio et al.* A structured self-attentive sentence embedding. 2017.

# Иерархическое внимание (hierarchical attention)

Вложенная структура: *слова* $\in$ *предложения* $\in$ *документы*

$x_{it}$ — слова $t = 1, \ldots, T_i$ в предложениях $i = 1, \ldots, L$

**Сеть первого (нижнего) уровня**, обучение эмбедингов $s_i$:

$h_{it} = \text{BidirGRU}(W_0 x_{it})$ — GRU для векторизации слов

$u_{it} = \text{th}(W_1 h_{it} + b_1)$ — обучаемое преобразование Key

$s_i = \sum_t h_{it} \text{SoftMax}_t(u_{it}^\top q_1)$ — эмбединг предложения, Query $q_1$

**Сеть второго (верхнего) уровня**, обучение эмбедингов $v$:

$h_i = \text{BidirGRU}(s_i)$ — GRU для векторизации предложений

$u_i = \text{th}(W_2 h_i + b_2)$ — обучаемое преобразование Key

$v = \sum_i h_i \text{SoftMax}_i(u_i^\top q_2)$ — эмбединг документа, Query $q_2$

Максимизация правдоподобия для классификации документов:

$$\sum_d \sum_y \ln \text{SoftMax}_y(W_y v + b_y) \to \max$$

---

*Z.Yang, A.Smola et al.* Hierarchical attention networks for document classification. 2016.

# Модель внимания Graph Attention Network (GAT)

**Задача** классификации вершин графа $\langle V, E \rangle$ на классы $Y$
**Обучающие данные:** $b_{iy} = [\text{вершина } i \text{ в классе } y]$, $i \in V$, $y \in Y$

$h_i$ — входные векторы признаков вершин $i \in V$
$c_i$ — выходные векторы оценок вершин, $\sigma(c_{iy}) = P(y|i)$
$\mathcal{N}(t)$ – множество соседей вершины $t \in V$, её контекст

**Многомерное самовнимание**, $j = 1, \ldots, J$, на вершину $t$:

$$c_t = \frac{1}{J} \sum_{j=1}^{J} \sum_{i \in \mathcal{N}(t)} W^j h_i \, \mathrm{SoftMax}_i \underbrace{\mathrm{LeakyReLU}(u^j W^j h_i + v^j W^j h_t)}_{a(W^j h_i, W^j h_t)}$$

Максимизация правдоподобия (log-loss) по всем параметрам $W = (W^j, u^j, v^j)$ для multi-label классификации вершин графа:

$$\sum_{t \in V} \sum_{y \in Y} b_{ty} \ln \sigma(c_{ty}(W)) + (1 - b_{ty}) \ln \sigma(-c_{ty}(W)) \to \max_W$$

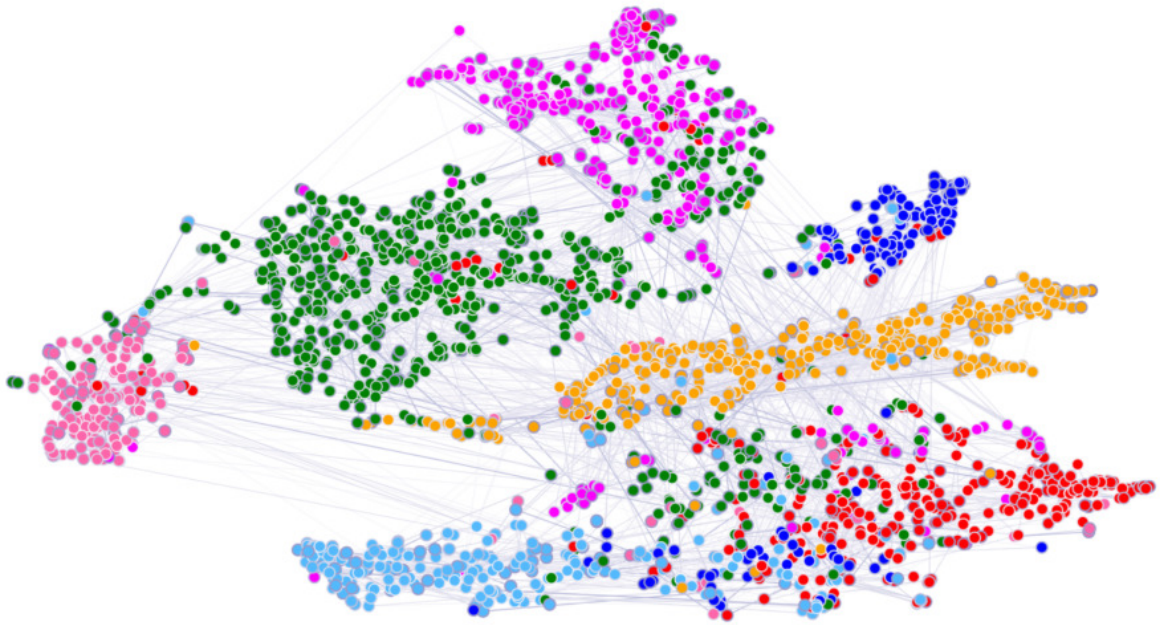
---

*Petar Veličković et al.* Graph Attention Networks. ICLR-2018.

# GAT решает задачи классификации вершин графа

Датасеты Cora, Citeseer, Pubmed для классификации научных статей по словам (признаки $h_i$) и графу цитирования (рёбра $E$).

**Пример:** визуализация векторов $c_i$ с помощью t-SNE,
цвета точек — 7 классов, линии — коэффициенты внимания $\alpha_{ti}$



*Petar Veličković et al.* Graph Attention Networks. ICLR-2018.

# Трасформер для машинного перевода

*Трасформер* (transformer) — это нейросетевая архитектура на основе моделей внимания и полносвязных слоёв, без RNN

**Схема преобразований данных в машинном переводе:**

- $S = (w_1, \ldots, w_n)$ — слова предложения на входном языке
  $\downarrow$ обучаемая или пред-обученная векторизация слов
- $X = (x_1, \ldots, x_n)$ — эмбединги слов входного предложения
  $\downarrow$ трансформер-кодировщик
- $Z = (z_1, \ldots, z_n)$ — контекстные эмбединги слов
  $\downarrow$ трансформер-декодировщик, похож на кодировщика
- $Y = (y_1, \ldots, y_m)$ — эмбединги слов выходного предложения
  $\downarrow$ генерация слов из построенной языковой модели
- $\tilde{S} = (\tilde{w}_1, \ldots, \tilde{w}_m)$ — слова предложения на выходном языке

---

*Vaswani et al.* (Google) Attention is all you need. 2017.

# Архитектура трансформера-кодировщика

1. Добавляются позиционные векторы $p_i$:
$h_i = x_i + p_i, \quad H = (h_1, \ldots, h_n)$
$d = \dim x_i, p_i, h_i = 512$
$\dim H = 512 \times n$

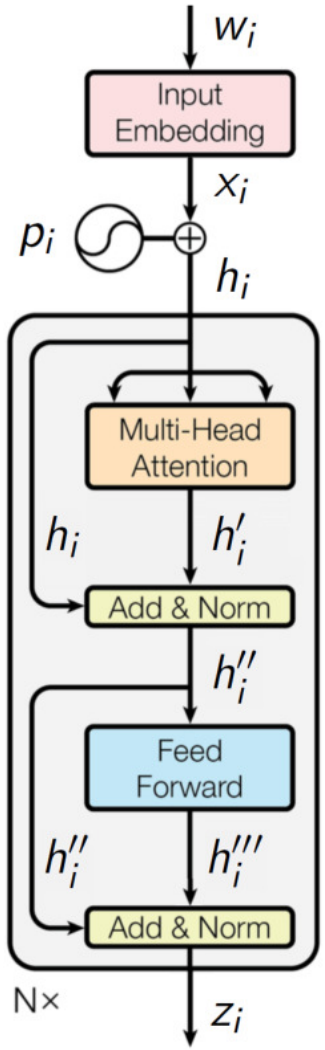
2. Многомерное самовнимание:
$h_i^j = \text{Attn}(W_q^j h_i, W_k^j H, W_v^j H)$
$j = 1, \ldots, J = 8$
$\dim h_i^j = 64$
$\dim W_q^j, W_k^j, W_v^j = 64 \times 512$

3. Конкатенация:
$h'_i = \text{MH}_j(h_i^j) \equiv \left[h_i^1 \cdots h_i^J\right]$
$\dim h'_i = 512$

4. Сквозная связь + нормировка уровня:
$h''_i = \text{LN}(h'_i + h_i; \mu_1, \sigma_1)$
$\dim h''_i, \mu_1, \sigma_1 = 512$

5. Полносвязная 2х-слойная сеть FFN:
$h'''_i = W_2\,\text{ReLU}(W_1 h''_i + b_1) + b_2$
$\dim W_1 = 2048 \times 512$
$\dim W_2 = 512 \times 2048$

6. Сквозная связь + нормировка уровня:
$z_i = \text{LN}(h'''_i + h''_i; \mu_2, \sigma_2)$
$\dim z_i, \mu_2, \sigma_2 = 512$



# Несколько дополнений и замечаний

- вычисления параллельны по элементам последовательности $(x_1, \ldots, x_n) \to (z_1, \ldots, z_n)$, что было бы невозможно в RNN
- $N = 6$ блоков $h_i \to \square \to z_i$ соединяются последовательно
- возможно использование пред-обученных эмбедингов $x_i$
- возможно обучение эмбедингов $x_i \in \mathbb{R}^d$ слов $w_i \in V$:
  $x_i = u_{w_i}$ или в матричной записи $\underset{d\times n}{X} = \underset{d\times|V|\times n}{U \cdot B}$, где
  $V$ — словарь слов входных последовательностей,
  $U$ — матрица обучаемых векторных представлений слов,
  $b_{vi} = [w_i = v]$ — матрица бинарного (one-hot) кодирования
- нормировка уровня (Layer Normalization), $x, \mu, \sigma \in \mathbb{R}^d$:

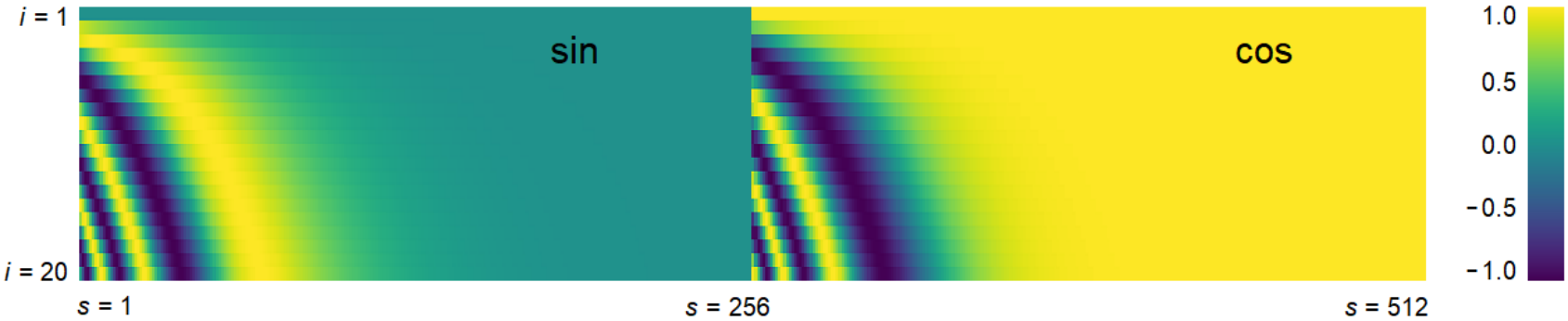
$$\mathrm{LN}_s(x; \mu, \sigma) = \sigma_s \frac{x_s - \bar{x}}{\sigma_x} + \mu_s, \quad s = 1, \ldots, d,$$

$\bar{x} = \frac{1}{d}\sum_s x_s$ и $\sigma_x^2 = \frac{1}{d}\sum_s (x_s - \bar{x})^2$ — среднее и дисперсия $x$

# Позиционное кодирование (positional encoding)

Позиции слов $i$ кодируются векторами $p_i$, $i = 1, \ldots, n$, так, что чем больше $|i - j|$, тем больше $\|p_i - p_j\|$, и $n$ не ограничено:

$$p_{is} = \sin(i\, 10^{-8\frac{s}{d}}), \quad p_{i,s+\frac{d}{2}} = \cos(i\, 10^{-8\frac{s}{d}}), \quad s = 1, \ldots, \frac{d}{2}$$




**Более современный способ** учёта относительных позиций:

$$c_j = \text{Attn}(q_j, K, V) = \sum_i (v_i + w^v_{i \boxminus j})\, \text{SoftMax}_i\, a(k_i + w^k_{i \boxminus j}, q_j)$$

где $i \boxminus j = \max(\min(i - j, \delta), -\delta)$ — усечённая разность, $\delta = 5..16$

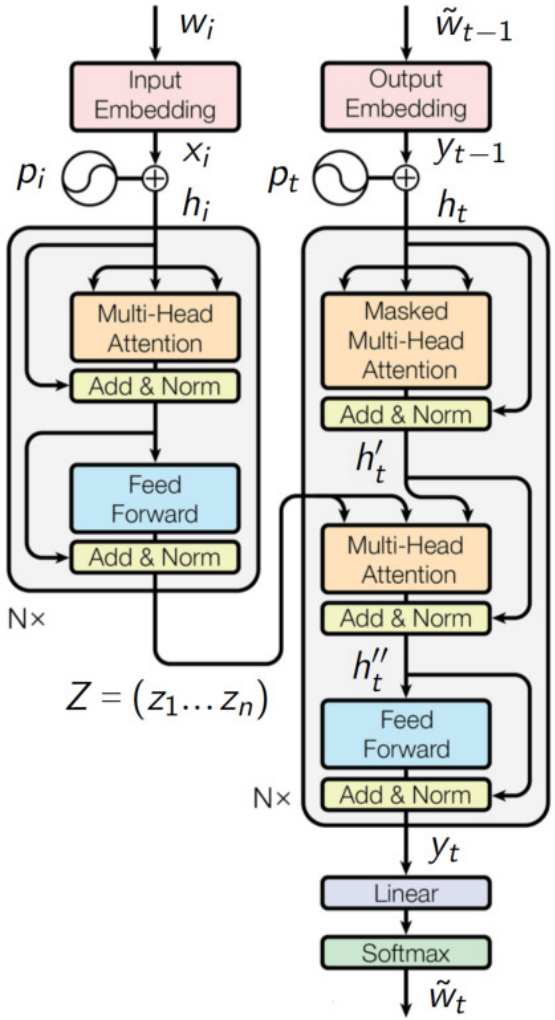
*Vaswani et al.* (Google) Attention is all you need. 2017.
*Shaw, Uszkoreit, Vaswani.* Self-attention with relative position representations. 2018.

# Архитектура трансформера декодировщика

Авторегрессионный синтез последовательности:
$y_0 = \langle \text{BOS} \rangle$ — эмбединг символа начала;
**для всех** $t = 1, 2, \ldots$:

1. Маскирование «данных из будущего»:
   $h_t = y_{t-1} + p_t; \quad H_t = (h_1, \ldots, h_t)$
2. Многомерное самовнимание:
   $h'_t = \text{LN} \circ \text{MH}_j \circ \text{Attn}(W^j_q h_t, W^j_k H_t, W^j_v H_t)$
3. Многомерное внимание на кодировку $Z$:
   $h''_t = \text{LN} \circ \text{MH}_j \circ \text{Attn}(\tilde{W}^j_q h'_t, \tilde{W}^j_k Z, \tilde{W}^j_v Z)$
4. Двухслойная полносвязная сеть:
   $y_t = \text{LN} \circ \text{FFN}(h''_t)$
5. Линейный предсказывающий слой:
   $p(\tilde{w}|t) = \text{SoftMax}_{\tilde{w}}(W_y y_t + b_y)$

**генерация** $\tilde{w}_t = \arg\max_{\tilde{w}} p(\tilde{w}|t)$ **пока** $\tilde{w}_t \neq \langle \text{EOS} \rangle$




*Vaswani et al.* (Google) Attention is all you need. 2017.

# Критерии обучения и валидации для машинного перевода

**Критерий для обучения** параметров нейронной сети $W$ по обучающей выборке предложений $S$ с переводом $\tilde{S}$:

$$\sum_{(S,\tilde{S})} \sum_{\tilde{w}_t \in \tilde{S}} \ln p(\tilde{w}_t | t, S, W) \to \max_W$$

**Критерии оценивания моделей** (недифференцируемые) по выборке пар предложений «перевод $S$, эталон $S_0$»:

*BiLingual Evaluation Understudy:*

$$\text{BLEU} = \min\left(1, \frac{\Sigma \text{len}(S)}{\Sigma \text{len}(S_0)}\right) \underset{(S_0,S)}{\text{mean}} \left( \prod_{n=1}^{4} \frac{\#n\text{-грамм из } S, \text{ входящих в } S_0}{\#n\text{-грамм в } S} \right)^{\frac{1}{4}}$$

*Word Error Rate:*

$$\text{WER} = \underset{(S_0,S)}{\text{mean}} \left( \frac{\#\text{вставок} + \#\text{удалений} + \#\text{замен}}{\text{len}(S)} \right)$$

*Vaswani et al.* (Google) Attention is all you need. 2017.

# BERT — Bidirectional Encoder Representations from Transformers

## (Двунаправленный кодировщик представлений на основе трансформера)

Трансформер BERT — это кодировщик без декодировщика, предобучаемый для решения широкого класса задач NLP

**Схема преобразования данных в задачах NLP:**

- $S = (w_1, \ldots, w_n)$ — токены предложения входного текста
  $\downarrow$ обучение эмбедингов вместе с трансформером
- $X = (x_1, \ldots, x_n)$ — эмбединги токенов входного предложения
  $\downarrow$ трансформер кодировщика
- $Z = (z_1, \ldots, z_n)$ — трансформированные эмбединги
  $\downarrow$ дообучение на конкретную задачу
- $Y$ — выходной текст / разметка / классификация и т.п.

---

*Jacob Devlin, Ming-Wei Chang, Kenton Lee, Kristina Toutanova* (Google AI Language) BERT: pre-training of deep bidirectional transformers for language understanding. 2019.

# Критерий MLM (masked language modeling) для обучения BERT

Критерий маскированного языкового моделирования MLM, строится автоматически по текстам (self-supervised learning):

$$\sum_{S} \sum_{i \in M(S)} \ln p(w_i | i, S, W) \to \max_{W},$$

где $M(S)$ — подмножество (15%) маскированных токенов из $S$,

$$p(w | i, S, W) = \underset{w \in V}{\text{SoftMax}}(W_z z_i(S, W_T) + b_z)$$

— языковая модель, предсказывающая $i$-й токен предложения $S$,
$z_i(S, W_T)$ — контекстный эмбединг $i$-го токена предложения $S$ на выходе Трансформера с параметрами $W_T$,
$W = (W_T, W_z, b_z)$ — все параметры языковой модели

---

*Jacob Devlin, Ming-Wei Chang, Kenton Lee, Kristina Toutanova* (Google AI Language) BERT: pre-training of deep bidirectional transformers for language understanding. 2019.

# Критерий NSP (next sentence prediction) для обучения BERT

Критерий предсказания связи между предложениями NSP, строится автоматически по текстам (self-supervised learning):

$$\sum_{(S,S')} \ln p\big(y_{SS'}|S,S',W\big) \to \max_{W},$$

где $y_{SS'} = [\text{за } S \text{ следует } S']$ — классификация пары предложений,

$$p(y|S,S',W) = \underset{y\in\{0,1\}}{\text{SoftMax}}\big(W_y\,\text{th}(W_s z_0(S,S',W_T) + b_s) + b_y\big)$$

— вероятностная модель бинарной классификации пар $(S,S')$, $z_0(S,S',W_T)$ — контекстный эмбединг токена $\langle\texttt{CLS}\rangle$ для пары предложений, записанной в виде $\langle\texttt{CLS}\rangle\ S\ \langle\texttt{SEP}\rangle\ S'\ \langle\texttt{SEP}\rangle$

---

*Jacob Devlin, Ming-Wei Chang, Kenton Lee, Kristina Toutanova* (Google AI Language) BERT: pre-training of deep bidirectional transformers for language understanding. 2019.

# Ещё несколько замечаний про трансформеры

- **Fine-tuning:** для дообучения на задаче задаётся модель $f(Z(S, W_T), W_f)$, выборка $\{S\}$ и критерий $\mathscr{L}(S, f) \to \max$
- **Multi-task learning:** для дообучения на наборе задач $\{t\}$ задаются модели $f_t(Z(S, W_T), W_t)$, выборки $\{S\}_t$ и сумма критериев $\sum_t \lambda_t \sum_S \mathscr{L}_t(S, f_t) \to \max$
- *GLUE*, *SuperGLUE*, *Russian SuperGLUE*, *MERA* — наборы тестовых задач на понимание естественного языка
- Трансформеры обычно строятся не на словах, а на токенах, получаемых BPE (Byte-Pair Encoding) или WordPiece
- Первый трансформер: $N = 6$, $d = 512$, $J = 8$, весов 65M
- $\text{BERT}_{\text{BASE}}$, GPT1: $N = 12$, $d = 768$, $J = 12$, весов 110M
- $\text{BERT}_{\text{LARGE}}$: $N = 24$, $d = 1024$, $J = 16$, весов 340M

# Резюме

- Модели внимания сначала встраивались в RNN, но позже оказалось, что они самодостаточны
- Модель внимания работает точнее и быстрее RNN, вычисления и обучение лучше распараллеливаются;
- легко предобучается и используется для многих задач;
- легко обобщается на тексты, графы, изображения
- Доказано, что модель внимания multi-head self-attention (MHSA) эквивалентна свёрточной сети [Cordonnier, 2020]
- Модель внимания лежит в основе Трансформера, различные варианты которого являются наиболее удачными моделями для понимания естественного языка: BERT, GPT-2/3/4, XLNet, ELECTRA и др.

---

*Vaswani et al.* Attention is all you need. 2017.
*Dichao Hu.* An Introductory Survey on Attention Mechanisms in NLP Problems. 2018.
*Xipeng Qiu et al.* Pre-trained models for natural language processing: A survey. 2020.
*Cordonnier et al.* On the relationship between self-attention and convolutional layers. 2020