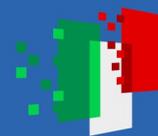




Finanziato
dall'Unione europea
NextGenerationEU



Ministero
dell'Università
e della Ricerca



Italiadomani
PIANO NAZIONALE
DI RIPRESA E RESILIENZA



Future
Artificial
Intelligence
Research

OPENING THE AI BLACK BOX THROUGH THE LENS OF HARD SCIENCES AND VICEVERSA

Federica Gerace

Università di Bologna

24/09/2024 Napoli

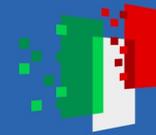




Finanziato
dall'Unione europea
NextGenerationEU



Ministero
dell'Università
e della Ricerca



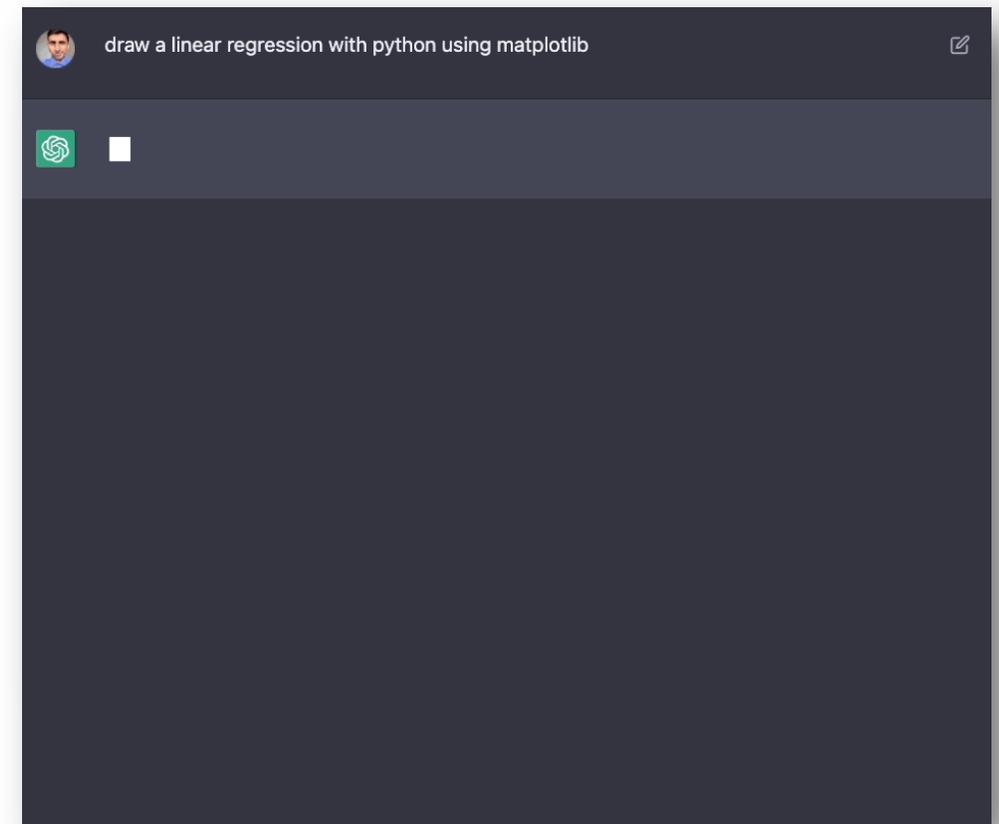
Italiadomani
PIANO NAZIONALE
DI RIPRESA E RESILIENZA



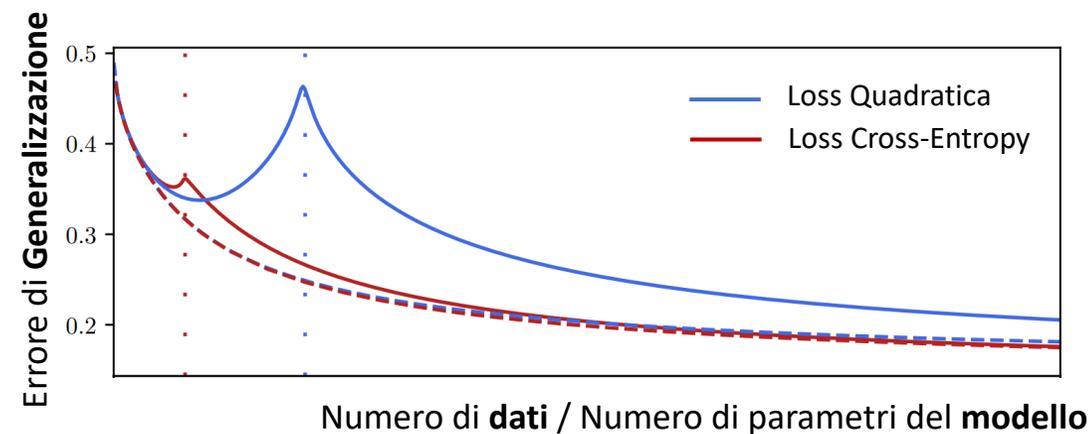
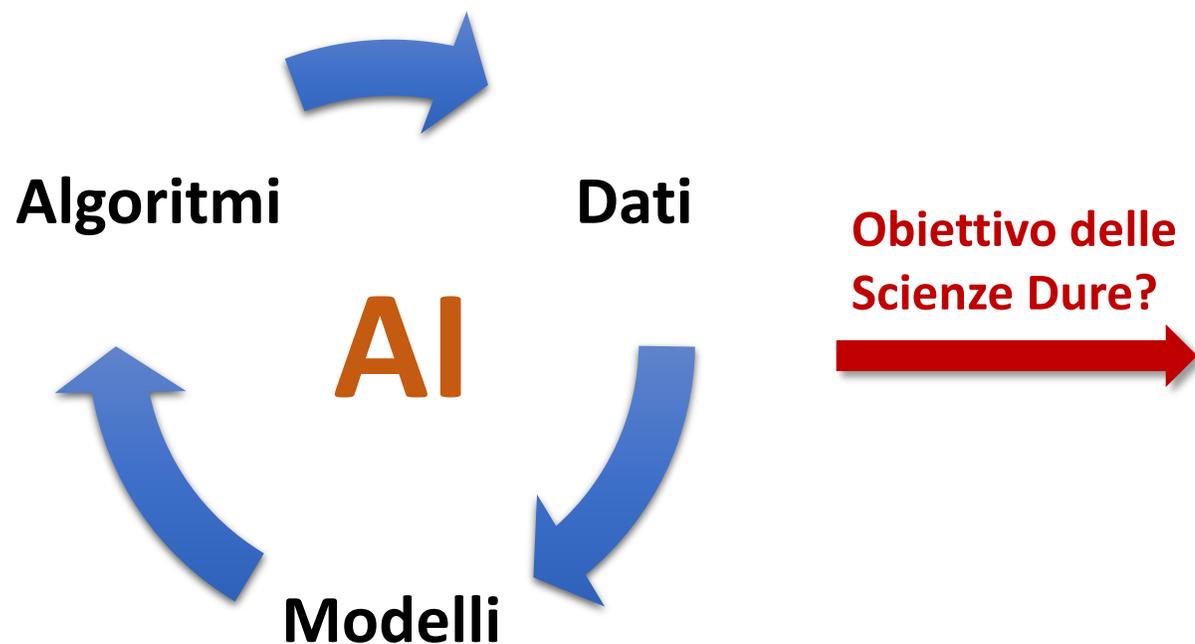
Future
Artificial
Intelligence
Research

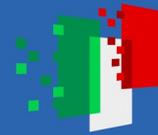
Il ruolo sempre piu' fondamentale dell'AI nelle nostre vite...

- **Traduzione di testo** (*Google Lens, Microsoft Translator...*)
- **Identificazione di lesioni tumorali in immagini mediche**
- **Generazione di contenuti testuali e grafici** (*ChatGPT...*)

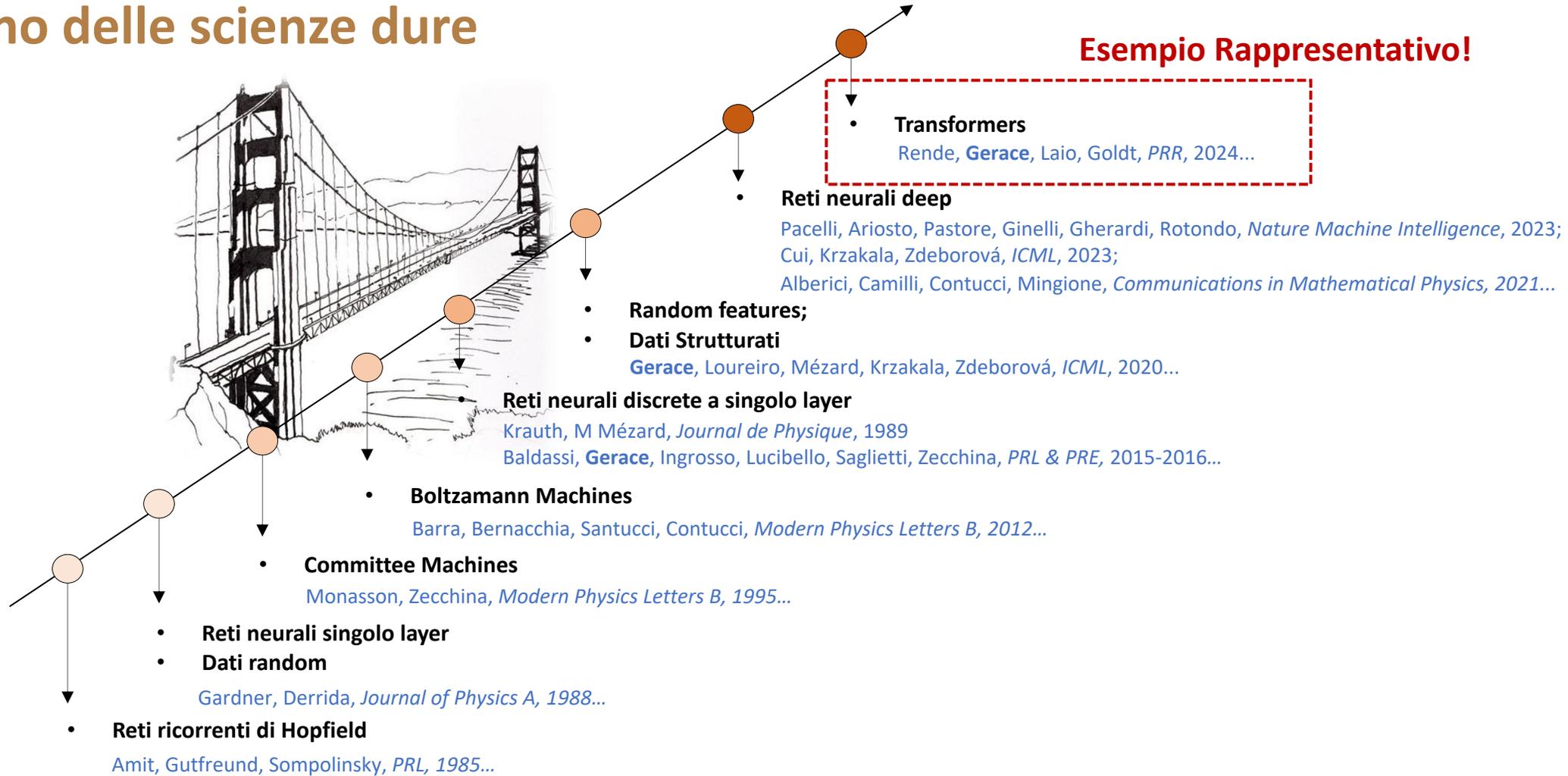


... Ma le sue basi scientifiche non sono ancora pienamente comprese!





Il cammino delle scienze dure





I transformer come stato dell'arte

Language Modelling on WikiText-103

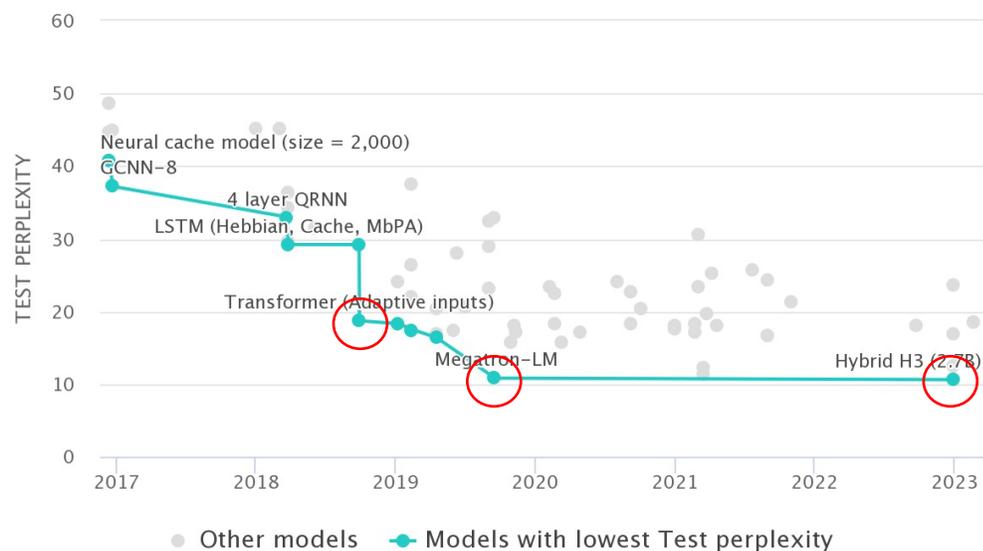
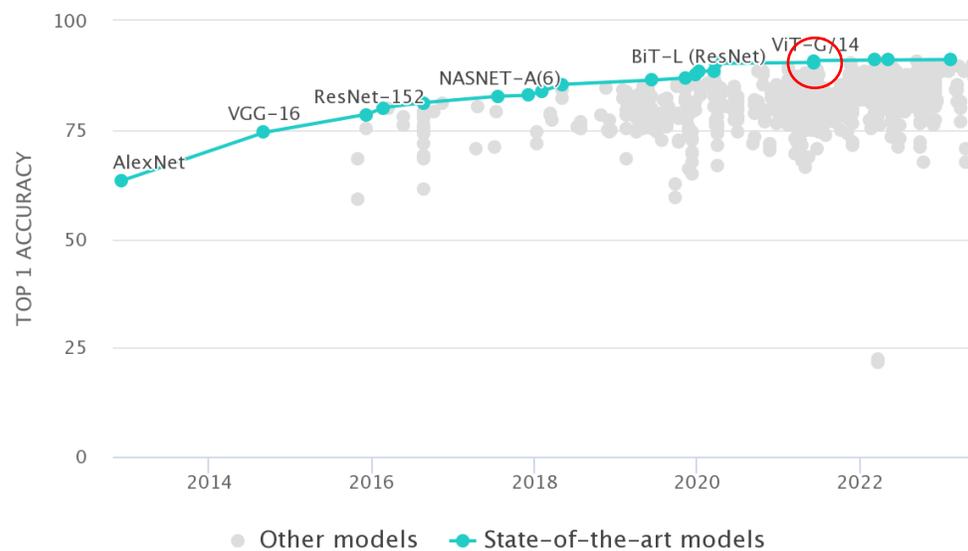


Image Classification on ImageNet

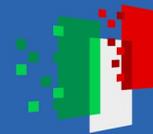




Finanziato
dall'Unione europea
NextGenerationEU



Ministero
dell'Università
e della Ricerca



Italiadomani
PIANO NAZIONALE
DI RIPRESA E RESILIENZA



Future
Artificial
Intelligence
Research

I transformer imparano il contesto...



Il **gatto** non ha attraversato il cancello perche' **lui** era troppo stanco

Il gatto non ha attraversato il **cancello** perche' **lui** era troppo stretto

...Grazie ai layer di ATTENTION!



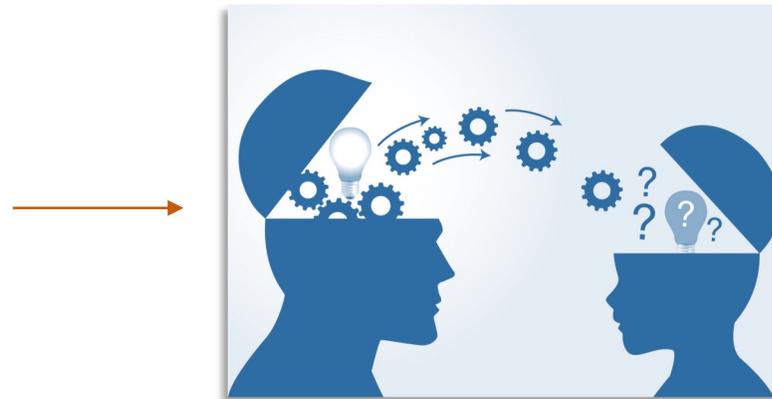
...addestrati attraverso il self-supervised e transfer learning!

Source Task:

- Masked Language Modelling:

Nel mezzo del [REDACTED] di nostra vita mi ritrovai per una selva oscura, ch  la dritta via era smarrita. Ahi quanto a dir qual era   cosa dura esta selva selvaggia e aspra e forte che nel pensier rinnova la paura!

[REDACTED] = ?



Target Tasks:

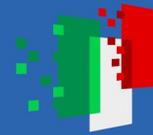
- Traduzione;
- Generazione di testo (ChatGPT);
- Sentiment Analysis...



Finanziato
dall'Unione europea
NextGenerationEU



Ministero
dell'Università
e della Ricerca



Italiadomani
PIANO NAZIONALE
DI RIPRESA E RESILIENZA



Future
Artificial
Intelligence
Research

I Transformer sono ancora percepiti come delle scatole nere



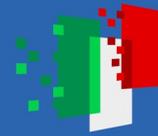
Cosa imparano quando vengono addestrati attraverso Masked Language Modelling?



Quanti dati sono necessari affinché raggiungano le performance ottimali?



Come comporre l'architettura?



Generalized Potts Model

$$\mathbf{w} = \{w_1, \dots, w_i, \dots, w_L\} \sim \exp(-\beta \mathcal{H}(\mathbf{w}))$$

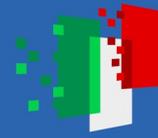
Singola parola:
 $w_i = \text{gatto}$

$$\mathcal{H}(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} w_i^T U w_j$$

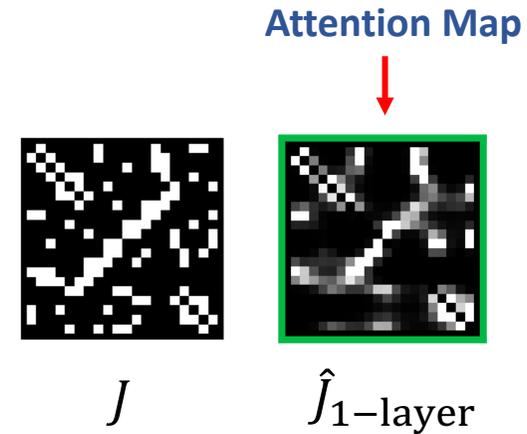
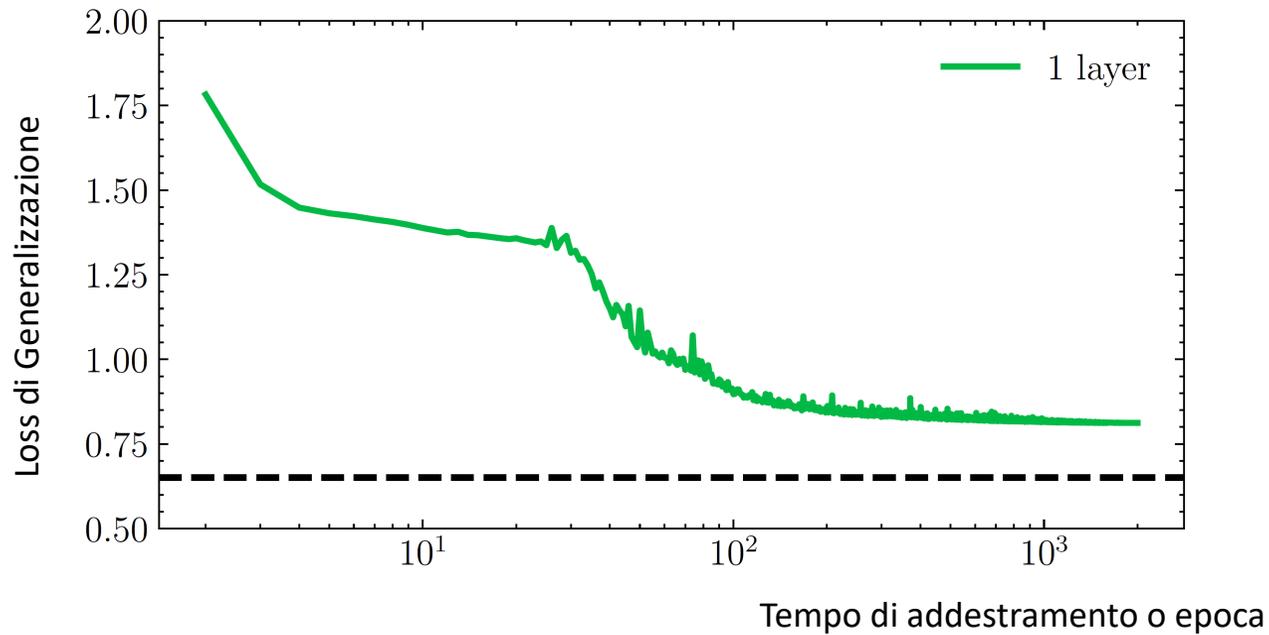
Modello di Potts in Meccanica Statistica!

$U \in \mathbb{R}^{C \times C} =$ Interazione semantica

$J \in \mathbb{R}^{L \times L} =$ Interazione di posizione

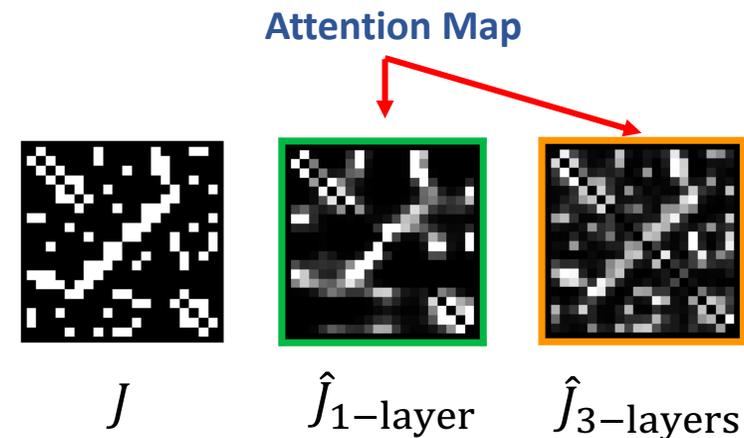
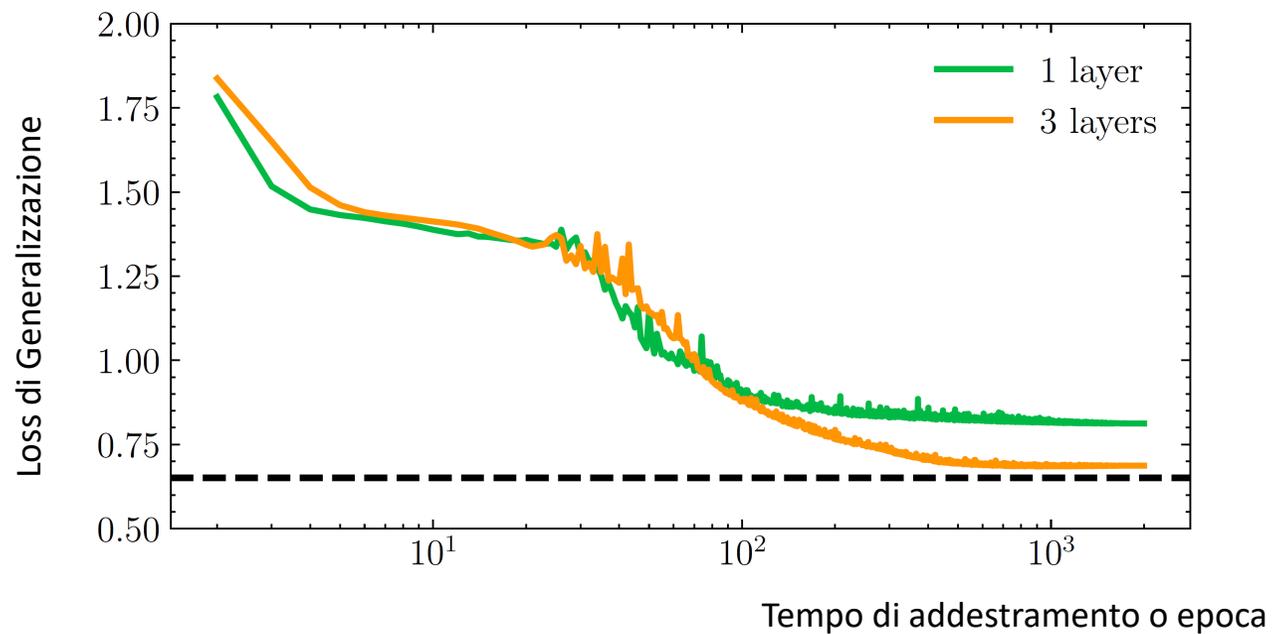


Vanilla Transformer su Generalized Potts





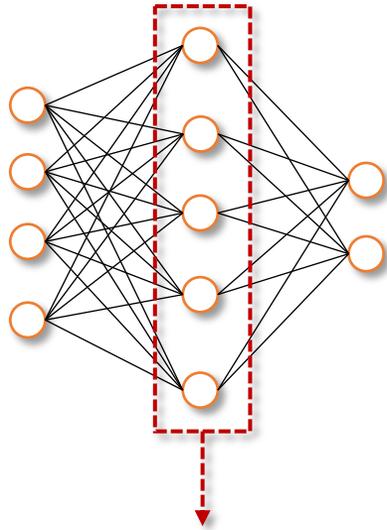
Vanilla Transformer su Generalized Potts





Vanilla vs Factored Transformer

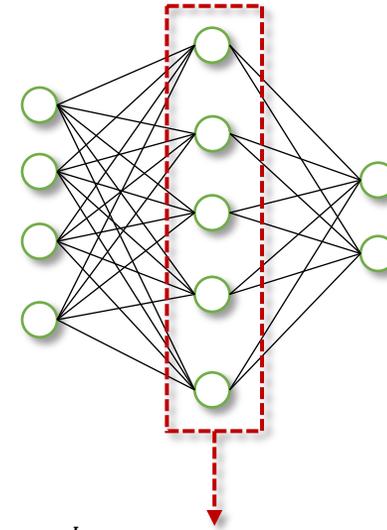
Vanilla Transformer



$$\mathbf{h}_i = \sum_{j=1}^L \text{softmax} \left((\mathbf{w}_i + \mathbf{p}_i)^T \mathbf{Q}^T \mathbf{K} (\mathbf{w}_j + \mathbf{p}_j) \right) \mathbf{V} (\mathbf{w}_j + \mathbf{p}_j)$$

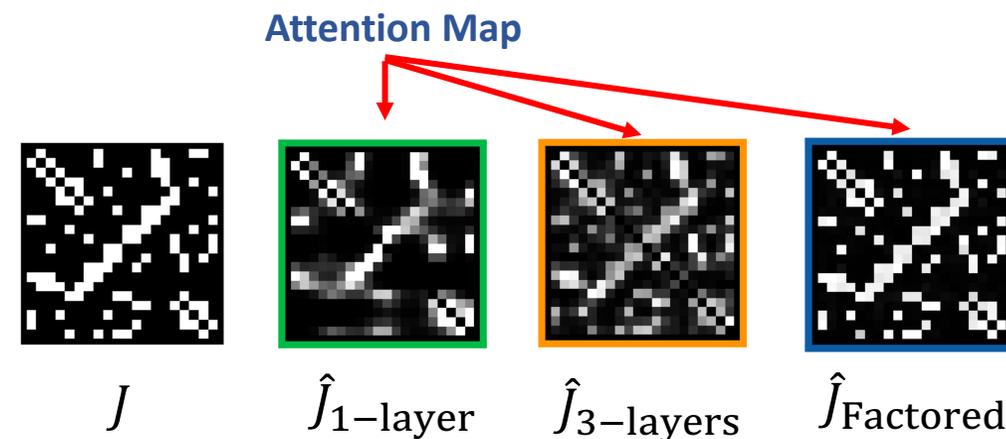
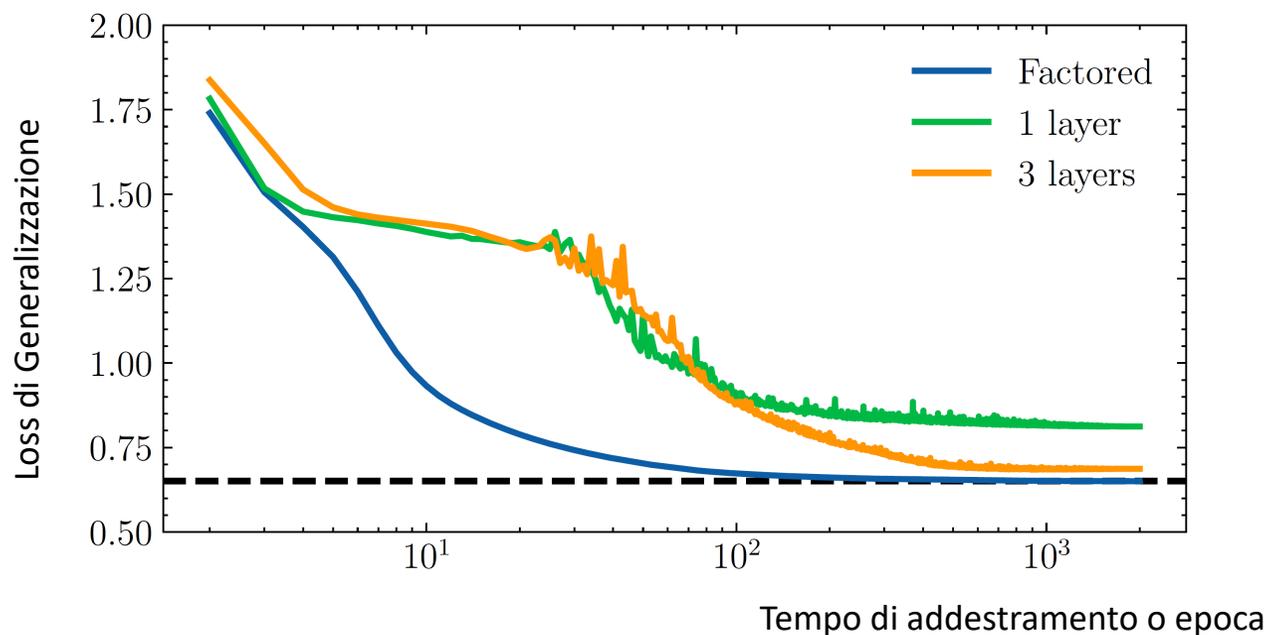


Factored Transformer



$$\mathbf{h}_i = \sum_{j=1}^L \text{softmax} \left(\mathbf{p}_i^T \mathbf{Q}^T \mathbf{K} \mathbf{p}_j \right) \mathbf{V} \mathbf{w}_j$$

Il Factored Transformer impara le condizionali del Generalized Potts



Come pseudo-likelihood!



Finanziato
dall'Unione europea
NextGenerationEU



Ministero
dell'Università
e della Ricerca



Italiadomani
PIANO NAZIONALE
DI RIPRESA E RESILIENZA



Future
Artificial
Intelligence
Research

Il Factored attention a servizio delle scienze dure

- Predizione dei contatti nella struttura terziaria delle proteine;
Bhattacharya et al., Biocomputing, 2022
- Approssimazione del ground-state di sistemi quantistici a molti corpi:
Viteritti, Rende, Becca, PRL, 2023;
Rende, Viteritti, Bardone, Becca, Goldt, arXiv:2310.05715, 2024;
Viteritti, Rende, Parola, Goldt, Becca, arXiv:2311.16889, 2024



Finanziato
dall'Unione europea
NextGenerationEU



Ministero
dell'Università
e della Ricerca



Italiadomani
PIANO NAZIONALE
DI RIPRESA E RESILIENZA



Future
Artificial
Intelligence
Research

Conclusione

*AI e le Scienze Dure sono **intrinsecamente** interconnesse in modi che abbiamo appena cominciato ad esplorare...*

*Il loro dialogo porterà **certamente** a una più profonda comprensione dei sistemi intelligenti e del mondo circostante!*