04-Self-attention

1. 輸入是向量序列

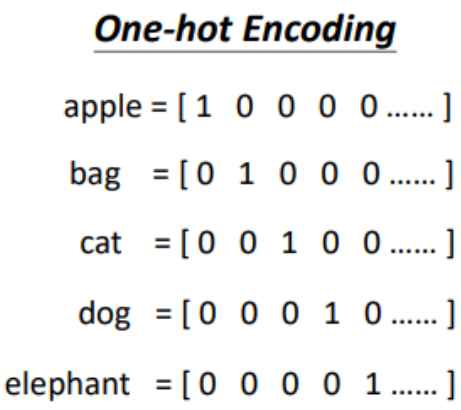
1.1 文字處理（自然語言處理）

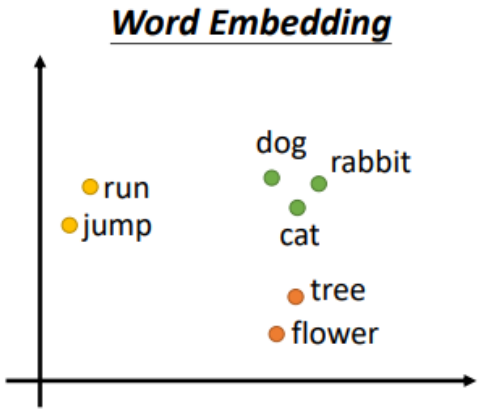
將每一個詞彙表示為向量

一個很長的向量，長度跟世界上存在的　　給每一個詞彙一個向量，這個向量是包

詞彙的數量一樣多，所有的**詞匯彼此之間沒有關係**

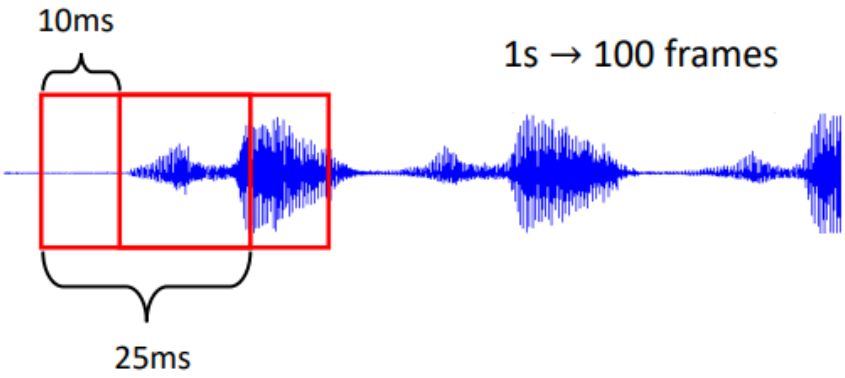
含語義訊息的，而**一個句子就是一組長度不一的向量**





1.2 聲音信號處理

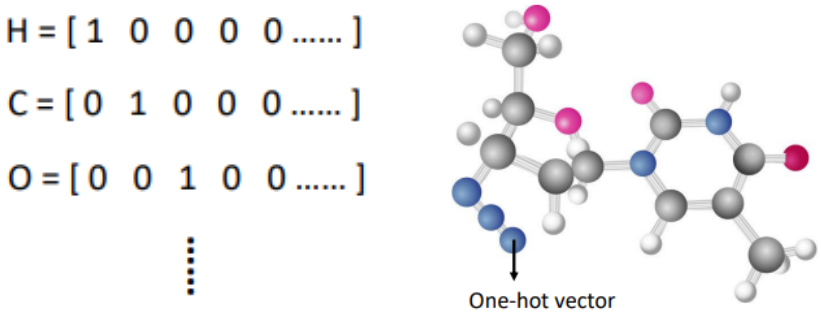
會把一段聲音訊號取一個範圍，這個範圍叫做一個**窗口（window）**，把該**窗口裡面的訊息描述成一個向量，這個向量稱為一幀（frame）**。一小段的聲音訊號，它裡面包含的訊息量非常可觀



1.3 圖

社交網路是一個圖，在社交網路上面每一個節點就是一個人。每一個節點可以看作是一個向量。每一個人的訊息（性別、年齡及工作等等）都可以用一個向量來表示。因此一個社交網路可以看做是一堆的向量所組成

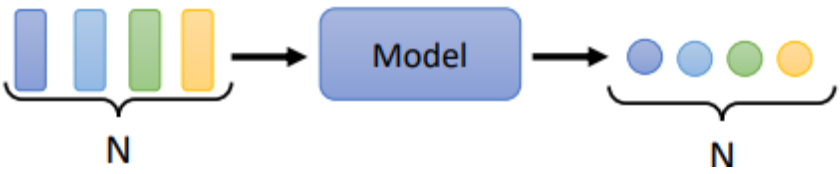
把一個**分子**當做是模型的輸入，每一個分子可以看作是一個圖，分子上面的每一個球就是一個原子，每個原子就是一個向量，而每個原子可以用獨熱向量來表示



2. 輸出的三種可能性

2.1 每一個向量都有一個對應的標簽

輸入跟輸出的長度是一樣的。模型不需要去煩惱要輸出多少的標簽，輸出多少的標籤



舉例：

- 詞性標註（POS tagging）：機器會自動決定每一個詞彙的詞性，判斷該詞是名詞還是動詞還是形容詞等等

- 語音辨識
- 社交網路：每個節點（人）進行標註【是否推送商品】

2.2 一組向量序列輸出一個標簽

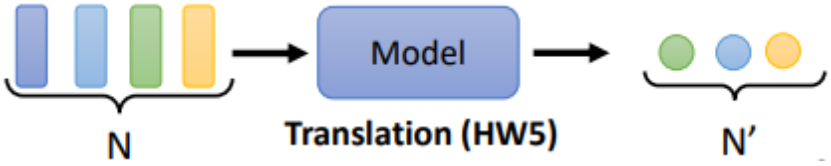
整個序列只需要輸出一個標籤就好

舉例：

- 文本情感分析：給機器看一段話，模型要決定這段話是積極的（positive）還是消極的（negative）
- 語音辨識
- 分子的疏水性：給定一個分子，預測該分子的親水性

2.3 模型自行決定輸出多少個標籤

輸入是 N 個向量，輸出可能是 N′ 個標簽，而N′ 是機器自己決定的。此種任務被稱作**序列到序列（Sequence to Sequence，Seq2Seq）**



舉例：

- 翻譯
- 語音辨識

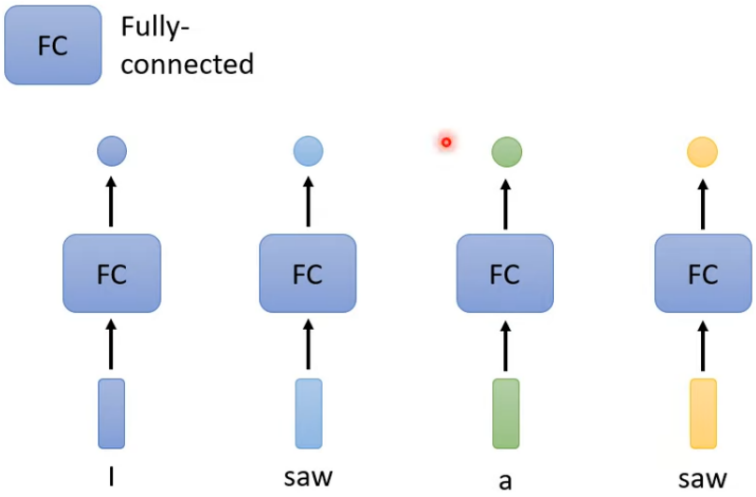
3. Self-attention 運作原理

3.1 以 Sequence Labeling 為例

考慮第一個輸出可能性，每一個向量都有一個對應的標簽，Sequence Labeling 要給序列裡面的每一個向量一個標簽

方法一

對每一個向量，用 Fully-connected network 分別進行處理

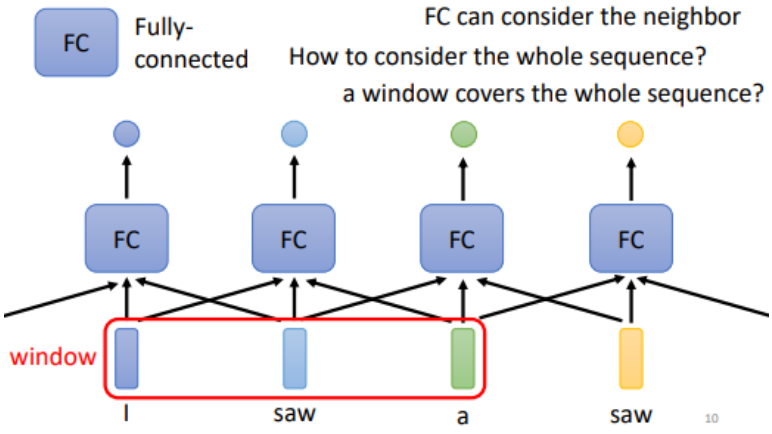


問題：

有非常大的瑕疵，因為忽略了序列上下文的關係。同一個詞彙在句子中不同的位置、不同的上下文環境下，詞彙的詞性有可能是不一樣的，但**此方法的輸出會因是同個詞彙而永遠只有同個輸出**

方法二

改進方法一串聯若干個向量後丟進 Fully-connected network。給 Fully-connected network 一整個 window 的訊息，讓它可以考慮一些上下文，即與該向量相鄰的其他向量的訊息



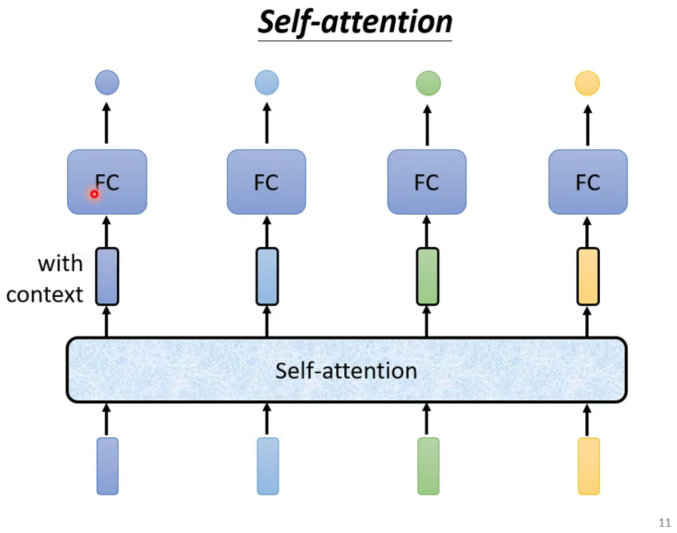
問題：

序列的長度有長有短，輸入給模型的序列的長度，每次可能都不一樣。開一個 window 比最長的序列還要長，才可能把整個序列蓋住。但是開一個大的窗口，意味著 Fully-connected network 需要非常多的參數，可能運算量會很大，此外還容易過擬合

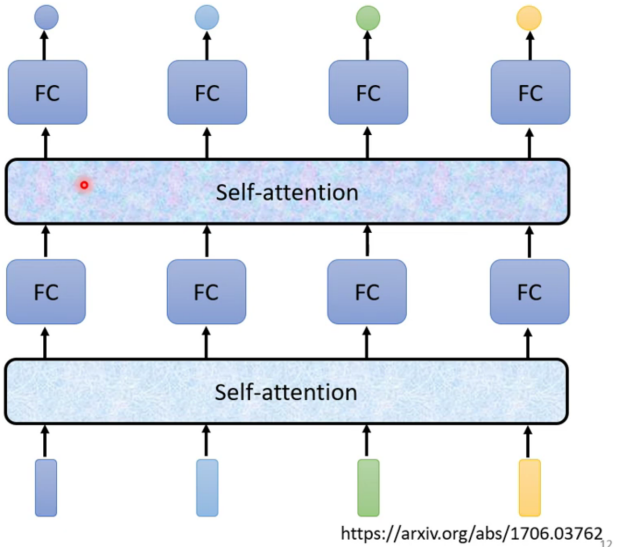
⇒ 想要更好地考慮整個輸入序列的訊息，就要用到自注意力模型

3.2 Self-attention model

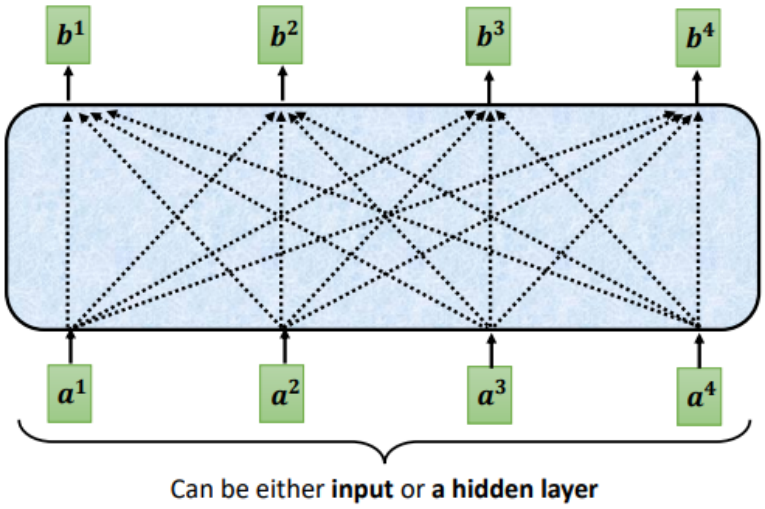
考慮整個序列的所有向量，**綜合向量序列整體和單個向量個體**，得到對每一個向量處理後的向量，將這些向量個別連接一個 FC，FC 可以專注於處理這一個位置的向量，得到對應結果



自注意力模型不是只能用一次，可以疊加很多次，與 FC 可以交替使用



3.1.1 內部架構

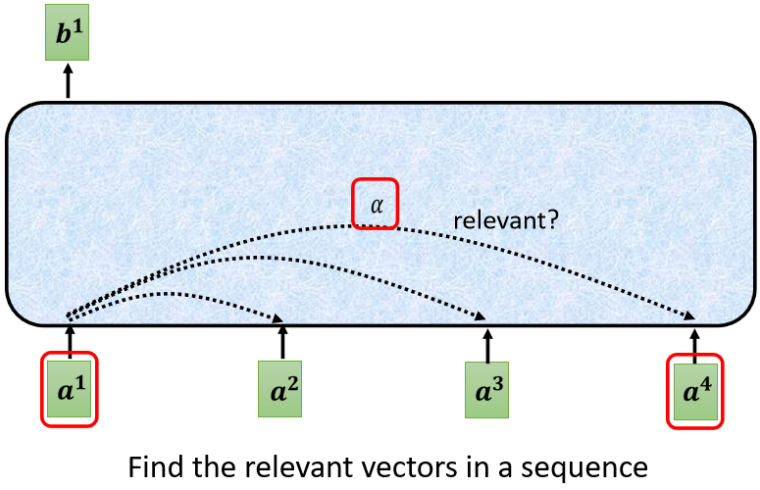


輸入：一串的 vector，這些 vector 可能是整個 network 的 input，也可能是某個 hidden layer 的output

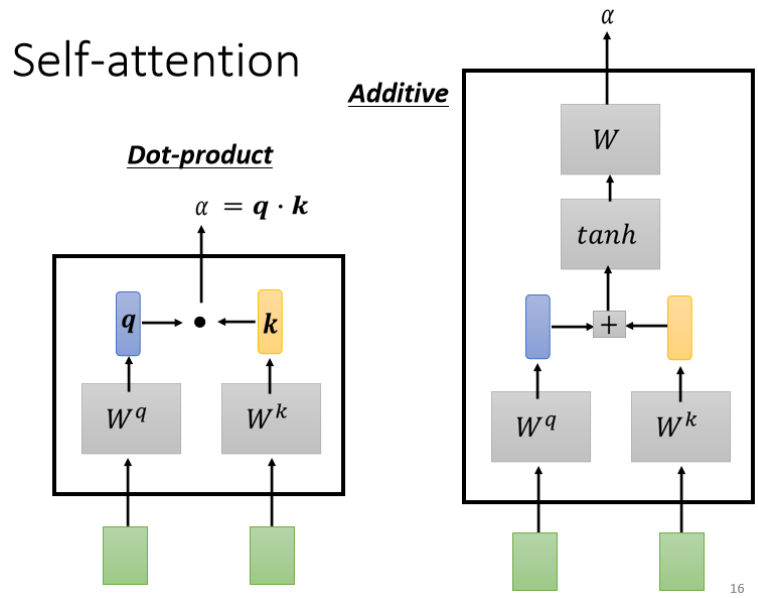
輸出：處理 input 以後，**每一個 b 都是考慮了所有的 a 以後才生成出來的**

3.1.2 具體步驟

1. 根據 a^1 這個向量找出跟其他向量的相關程度 α



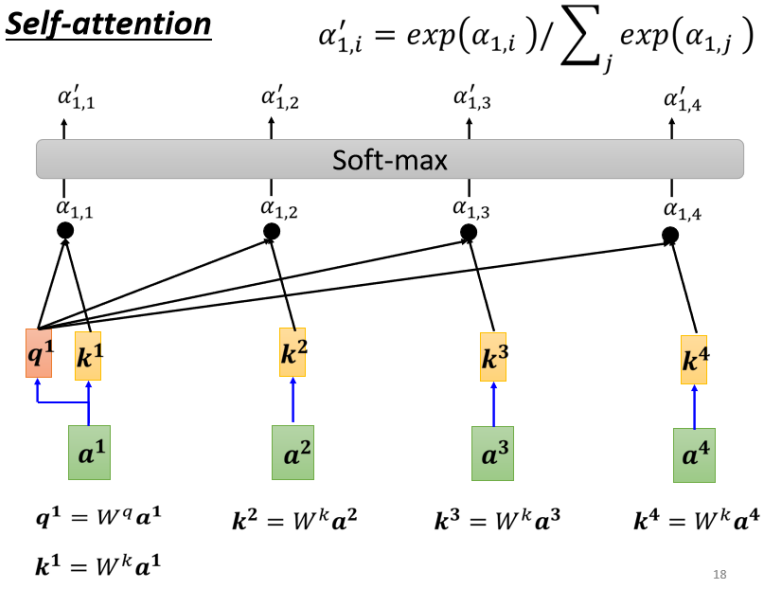
2. 藉由一個計算 attention 的模組來得到 α。（q = query、k = key）



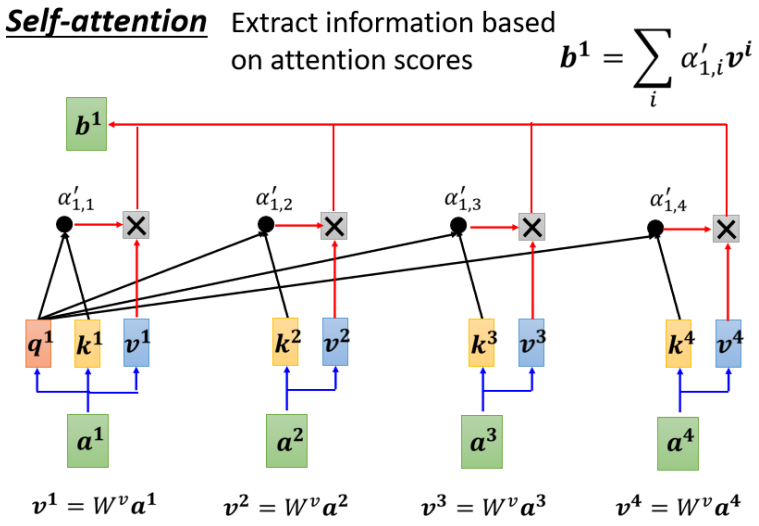
- **Dot-product：**
  把輸入的兩個向量分別乘上 W^q 和 W^k，得到兩個向量 q 跟 k 後做點積，把它們做逐元素（element-wise）的相乘， 再全部加起來得到一個 α
  （常用，也被用在 Transformer 中）

- **Addtive：**
  兩個向量通過 W^q 和 W^k 得到 q 和 k 後，把 q 和 k 串起來丟到 $tanh$ 函數（activation function），再乘上矩陣 W 得到 α

3. 計算完 a^1 跟其他向量的相關性 α 後（也必須計算 a^1 跟自己的 α），把所有的 α 經過 softmax （也可使用其他激勵函數，如： ReLu）得到 α'



4. 把向量 a^1 到 a^4 乘上 W^v 得到新的向量：v^1、v^2、v^3 和 v^4，接下來把每一個向量都去乘上 α' 後再求和得到 b^1

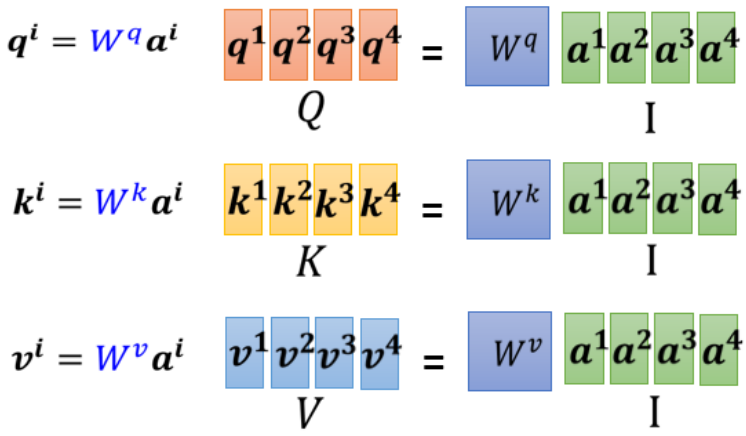


如果 a^1 跟 a^2 有高相關性，即 $\alpha'_{1,2}$ 的值很大，再做加權和後，得到的 b^1 就可能會比較接近 v^2。所以誰的注意力的分數最大，誰的 v 就會主導（dominant） 抽出來的結果

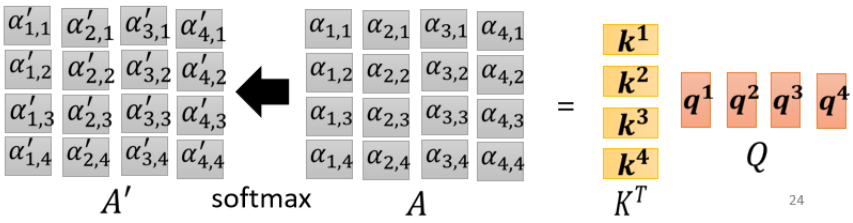
注意：b^1 到 b^4 是同時被計算出來的

3.1.3 矩陣的角度

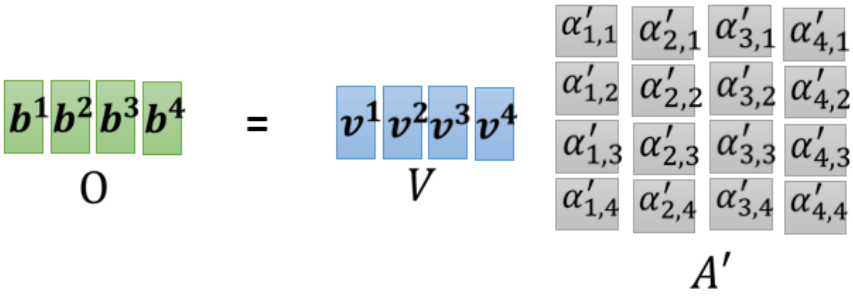
1. 先計算 q, k, v，合併後以 Q, K, V 表示



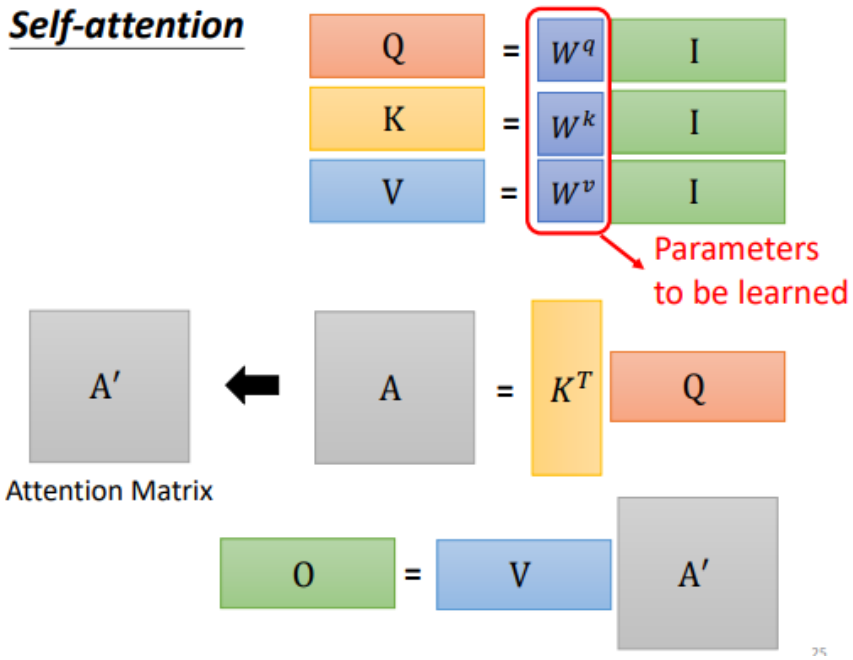
2. 根據 Q, K^T 計算 A 經過一激勵函數，如：softmax 或 ReLu，得到 A' （稱做 attention matrix）



3. V 再乘以 A' 得到 b，以 O 表示



綜合：



- 每 vector 以 column 併起來稱做 I 矩陣，I 是 Self-attention 的一組 vector input
- 這些 input 分別乘上 W^q, W^k, W^v 矩陣得到 Q, K, V
- 接下來 Q 乘上 K^T 得到 A，再經過激勵函數得到 A' 稱 **Attention Matrix（生成 Q 就是為了得到 attention 的 score）**
- A' 再乘上 V，就得到 O。O 就是 Self-attention 這個 layer 的輸出

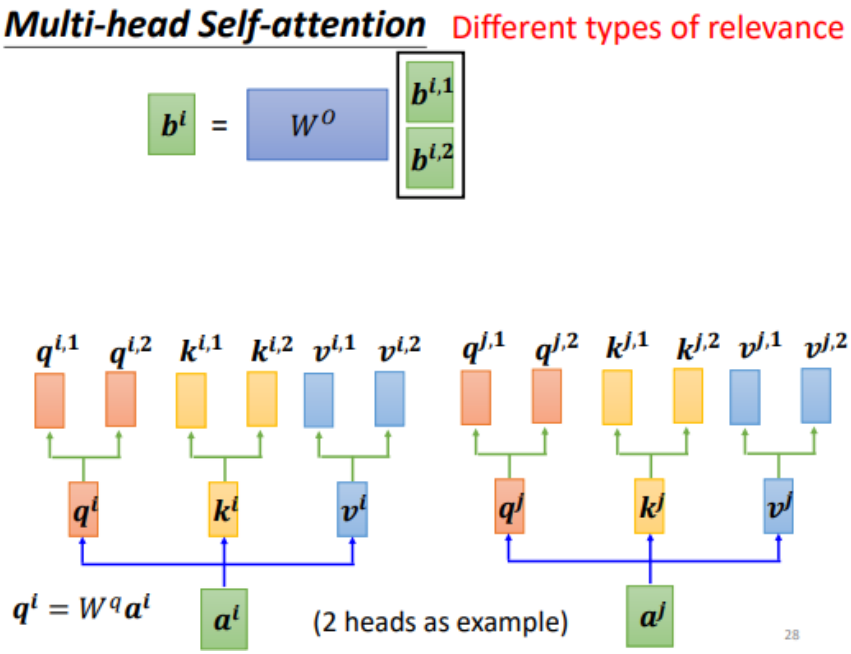
- W^q, W^k, W^v **是三個要學習的矩陣參數**

3.3 Multi-head Self-attention

Multi-head Self-attention 的使用非常廣泛，有一些任務，如翻譯、語音識別等，用該方法可以得到較好的結果。**需要多少的 head 是需要調的 hyperparameter**

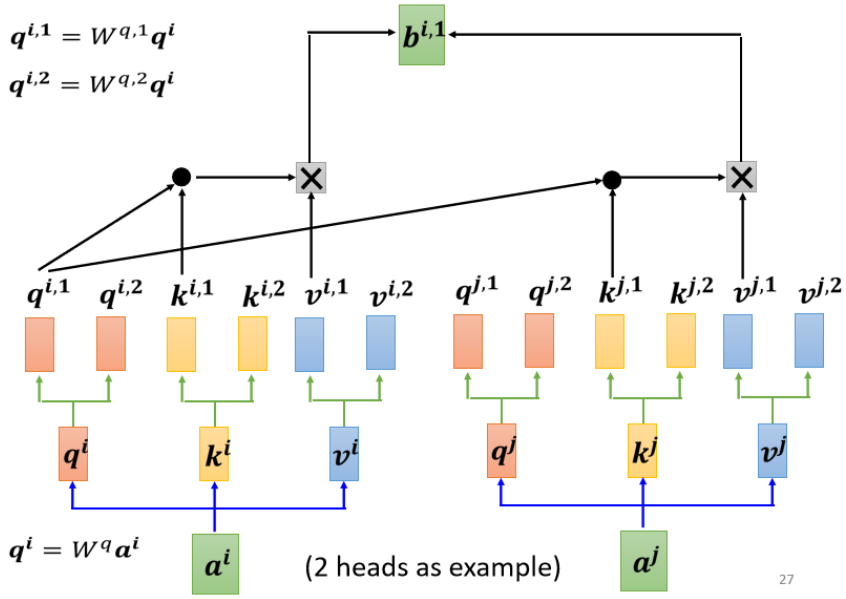
原因：

在使用 Self-attention 計算相關性的時，是用 q 去找相關的 k。但是**"相關"有很多種不同的形式**，所以也許可以有多個 q，不同的 q 負責不同種類的相關性，這就是 **Multi-head Self-attention**

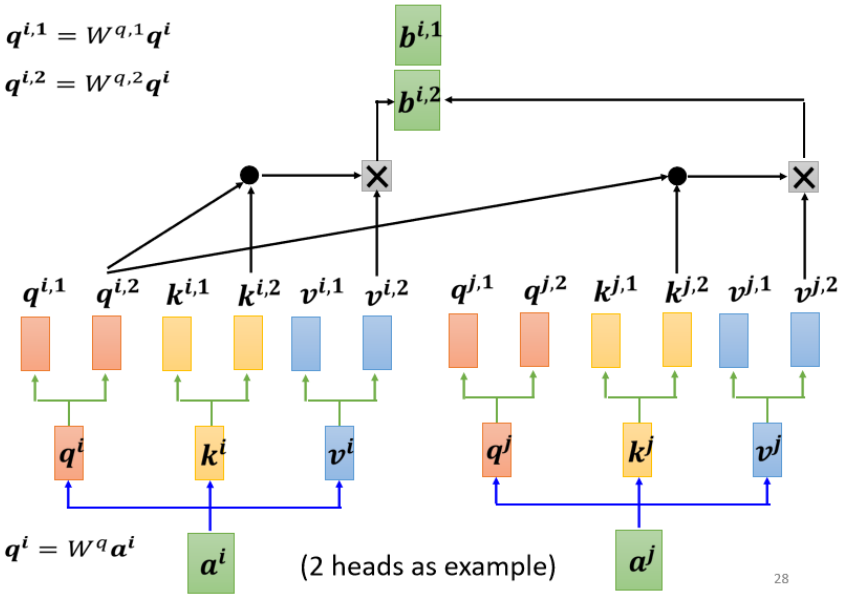


步驟：

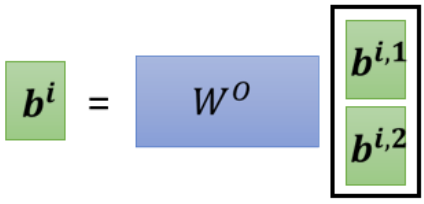
1. 先把 a 乘上一個矩陣得到 q
2. 再把 q 乘上另外兩個矩陣，分別得到 q^1 跟 q^2，代表有兩個 head；同理可以得到 k^1, k^2, v^1



3. 從同一個 head 裡的 k, q, v 計算 b



4. 將各個 head 計算得到的 b 拼接，通過一個 transform 得到 b^i 然後再送到下一層

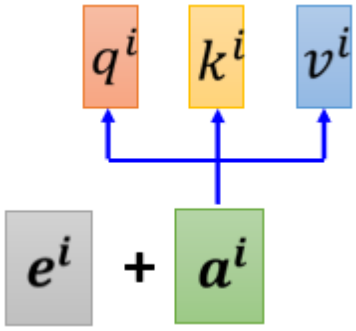


4. Positional Encoding

到目前為止，Self-attention 的操作裡面沒有位置的訊息，**但有時候位置的訊息很重要**。舉例，在做詞性標註時，動詞較不容易出現在句首，如果某一詞彙是放在句首，其為動詞的可能性就比較低，所以位置的訊息往往也是有用的

方法：

每個位置用一個 vector e^i 来表示它是 sequence 的第 i 個，然後加到原向量中



產生 positional encoding vector 的方法有很多種，如人工設置、根據資料訓練出來等，目前還不知道哪一種方法最好，仍是一個尚待研究的問題

5. 應用

5.1 自然語言處理

在自然語言處理領域，除了 Transformer 外，BERT 也用到了 Self-attention

Transformer

BERT

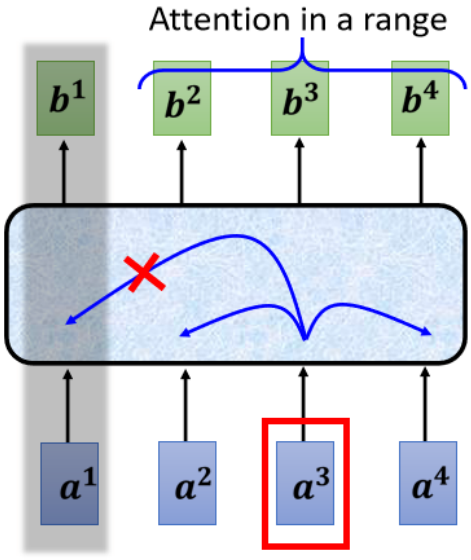
5.2 語音

問題：

把一段聲音訊號表示成一組向量的話，這組向量可能會非常地長；attention matrix 的計算覆雜度是長度的平方，因此需要很大的計算量、很大的存儲空間

解決方法：

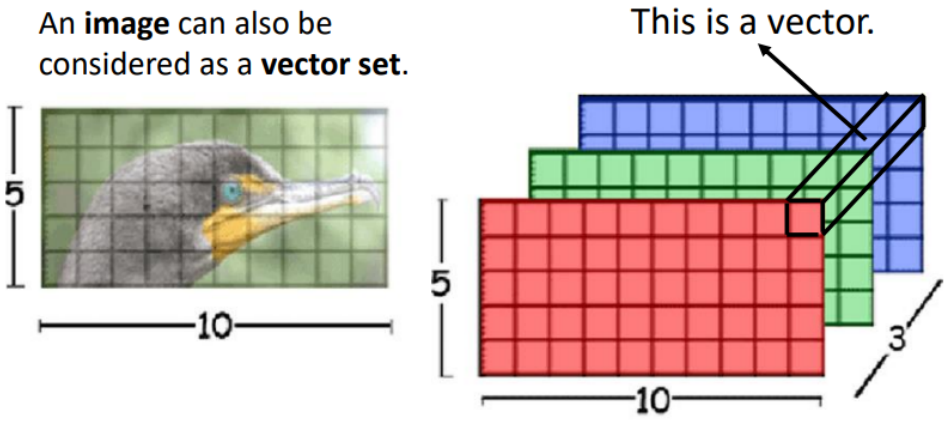
延伸 Self-attention 的概念，運用 **Truncated Self-attention**。使用 Truncated Self-attention 只**考慮一個小範圍語音**，而不考慮一整個句子，如此就可以加快運算的速度



Truncated Self-attention

5.3 圖像

一張圖像可以看作是一個向量序列，既然也是一個向量序列，那麼就也可以用 Self-attention 來處理圖像



5.3.1 Self-attention vs CNN

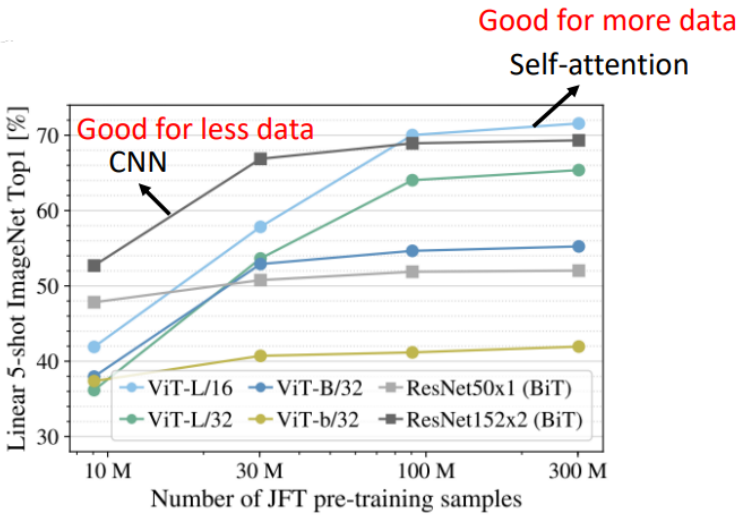
Self-attention：
考慮一個像素和整張圖片的訊息
⇒ 自己學出 receptive field 的形狀和大小

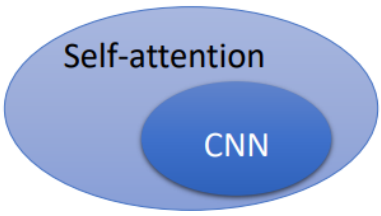
CNN：
receptive field 是人為設定的，只考慮範圍內的訊息

結論：

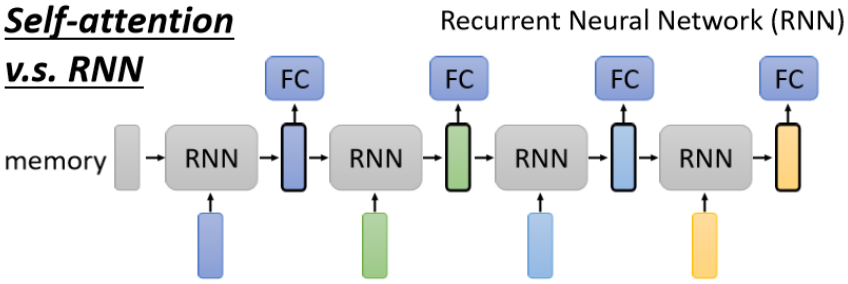
CNN 就是 self-attention 的特例，可說是更 flexible 的 CNN，Self-attention 只要設定合適的參數，它可以做到跟 CNN 一模一樣的事情。根據 An Image is Worth 16x16 Words: Transformers for Image Recognition at Scale 這篇 paper 顯示的結果，給出以下解釋：

- Self-attention 彈性比較大，所以需要比較多的訓練資料，訓練資料少的時候會 overfitting
- 而 CNN 彈性比較小，在訓練資料少時結果比較好，但訓練資料多時，它沒有辦法從更多的訓練資料得到好處





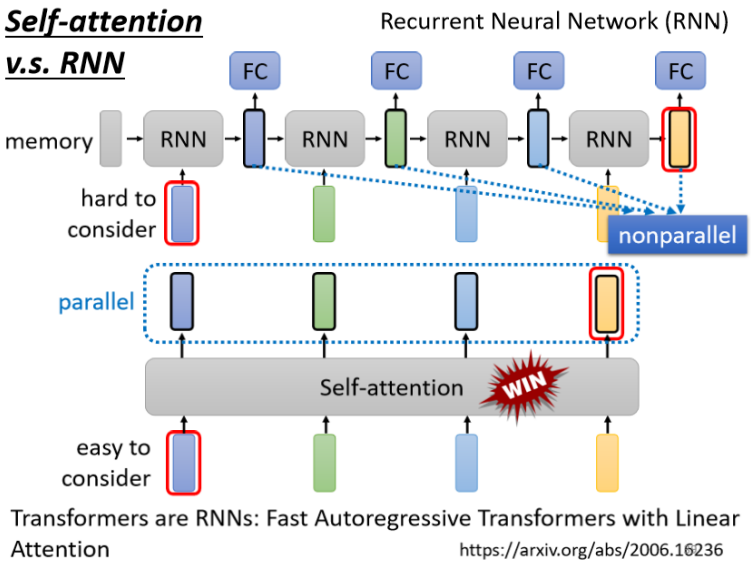
5.3.2 Self-attention vs RNN



Recurrent Neural Network 跟 Self-attention 做的事情非常像，它們的 input 都是一個 vector sequence，前一個時間點的輸出也會作為輸入丟進 RNN 產生新的向量，也同時會輸入到 FC。很多的應用往往都**把 RNN 的架構逐漸改成 Self-attention 的架構**

主要區別：

- 對 RNN 來說，假設最右邊黃色的 vector 要考慮最左邊的輸入，那它必須要把最左邊的輸入**存在 memory 中都不能夠忘掉**一路帶到最右邊，才能夠在最後的時間點被考慮
- 對 Self-attention 來說沒有這個問題，它可以在整個 sequence 上非常遠的 vector 之間**輕易地抽取訊息**

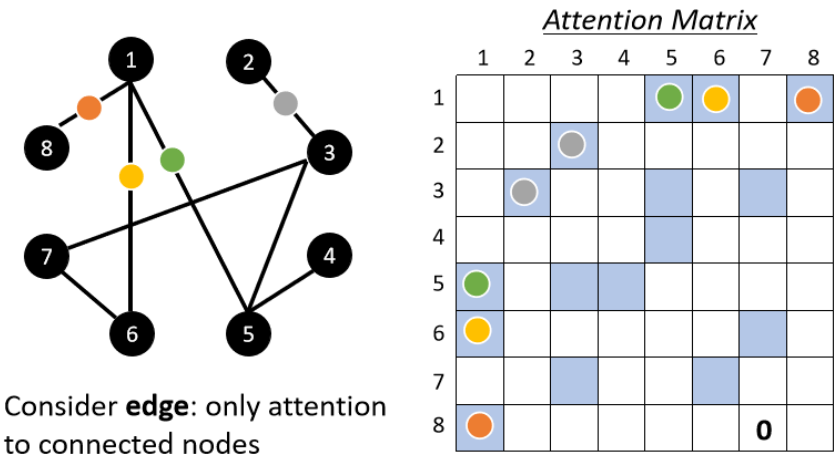


Self-attention 可以平行處理所有的輸出，效率更高：

- Self-attention 四個 vector 是平行產生的，不需等誰先運算完才把其他運算出來
- RNN 無法平行化，必須依次產生

5.4 圖

Self-attention 也可以在圖中使用，把 node 當作 vector。然而，圖中的 edge 意味著節點之間的關係，所以我們就可只計算有 edge 相連的 node 的 attention，若兩個 node 之間沒有 edge，代表兩個 node 沒有關係，就不必計算 attention。這種方法也被稱為**圖神經網路（GNN）**。



This is one type of **Graph Neural Network (GNN)**.

6. Learn More

Self-attention 有多種變形，由於其計算成本高，減少其計算量是未來的研究方向。Long Range Arena: A Benchmark for Efficient Transformers 這篇論文比較了各種不同的自注意力的變形，許多 Self-attention 的變形如：Linformer、Performer、Reformer 等等，往往比原來的 Transformer 性還能差一些，但是速度會比較快。想進一步研究可參考 Efficient Transformers: A Survey 這篇論文