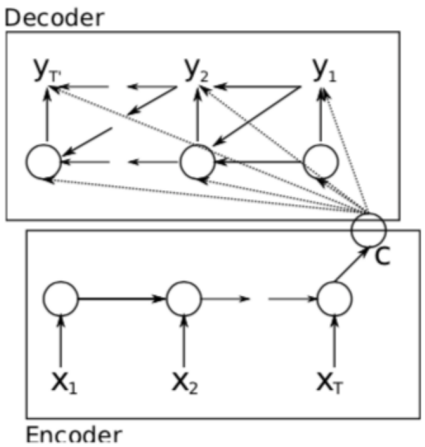
Table of Contents

序列到序列任务中的注意力机制（Seq2Seq with Attention）

1 序列到序列任务中的编码器-解码器架构（Seq2Seq with RNN Encoder-Decoder）

1.1 RNN Encoder-Decodr网络架构



RNN Encoder-Decoder神经网络架构使用循环神经网络学习，将变长源序列X编码成定长向量表示$\mathbf{c}$，并将学习的定长向量表示$\mathbf{c}$解码成变长目标序列Y。模型的编码器和解码器被联合训练，以最大化给定源序列的目标序列的条件概率。

源文本序列：$X = \left(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_N\right)$ 其中，$\mathbf{x}_i = \left(l_1, l_2, \cdots, l_j, \cdots, l_K\right)$，其中$l_j = I(i = j), \quad (j = 1, \cdots, K)$。

目标文本序列：$Y = \left(\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \ldots, \mathbf{y}_M\right)$ 其中，$\mathbf{y}_i = \left(l_1, l_2, \cdots, l_j, \cdots, l_K\right)$，其中$l_j = (i = j), \quad (j = 1, \cdots, K)$

1.2 RNN Encoder-Decodr编码器Encoder原理

源文本单词的词嵌入表示：$e\left(\mathbf{x}_i\right) \in \mathrm{R}^{500}$

编码器的隐藏状态由1000个隐藏单元组成。
编码器隐藏状态初始化，在$t = 0$时刻第j个隐藏单元

$$h_j^{\langle 0 \rangle} = 0$$

在t时刻第j个隐藏单元

$$h_j^{\langle t \rangle} = z_j h_j^{\langle t-1 \rangle} + \left(1 - z_j\right) \tilde{h}_j^{\langle t \rangle}$$

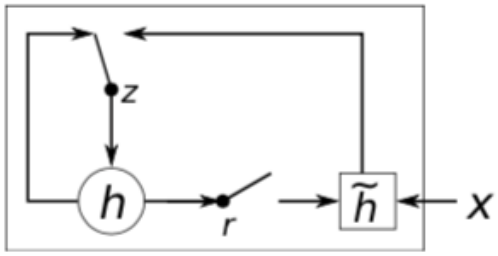
其中，

$$\tilde{h}_j^{\langle t \rangle} = \tanh\left(\left[\mathbf{W} e\left(\mathbf{x}_t\right)\right]_j + \left[\mathbf{U}\left(\mathbf{r} \odot \mathbf{h}^{\langle t-1 \rangle}\right)\right]_j\right)$$

$$z_j = \sigma\left(\left[\mathbf{W}_z e\left(\mathbf{x}_t\right)\right]_j + \left[\mathbf{U}_z \mathbf{h}^{\langle t-1 \rangle}\right]_j\right)$$

$$r_j = \sigma\left(\left[\mathbf{W}_r e\left(\mathbf{x}_t\right)\right]_j + \left[\mathbf{U}_r \mathbf{h}^{\langle t-1 \rangle}\right]_j\right)$$

$\sigma(\cdot)$为sigmoid函数， $\odot$ 为向量元素乘法，$\mathbf{W}, \mathbf{W}_z, \mathbf{W}_r \in \mathrm{R}^{1000 \times 500}$和$\mathbf{U}, \mathbf{U}_z, \mathbf{U}_r \in \mathrm{R}^{1000 \times 1000}$为权值矩阵。为了使方程齐整，省略了偏置项。



源文本最后第N时刻，编码器的隐藏状态计算完成，源文本的定长向量表示

$$\mathbf{c} = \tanh\left(\mathbf{V}\mathbf{h}^{\langle N \rangle}\right)$$

其中，$\mathbf{V} \in \mathrm{R}^{1000 \times 1000}$为权值矩阵。

1.3 RNN Encoder-Decodr解码器Decoder原理

解码器隐藏状态初始化，在$t = 0$时刻

$$\mathbf{h}'^{\langle 0 \rangle} = \tanh\left(\mathbf{V}'\mathbf{c}\right)$$

其中，$\mathbf{V} \in \mathrm{R}^{1000 \times 1000}$为权值矩阵。

在t时刻第j个隐藏单元

$$h_j'^{\langle t \rangle} = z_j' h_j'^{\langle t-1 \rangle} + \left(1 - z_j'\right) \tilde{h}{}'^{\langle t \rangle}_j$$

其中，

$$\tilde{h}'^{\langle t \rangle}_j = \tanh\left(\left[\mathbf{W}' e\left(\mathbf{y}_{t-1}\right)\right]_j + r'_j\left[\mathbf{U}'\mathbf{h}'_{\langle t-1 \rangle} + \mathbf{C}\mathbf{c}\right]\right)$$

$$z'_j = \sigma\left(\left[\mathbf{W}'_z e\left(\mathbf{y}_{t-1}\right)\right]_j + \left[\mathbf{U}'_z \mathbf{h}'_{\langle t-1 \rangle}\right]_j + \left[\mathbf{C}_z \mathbf{c}\right]_j\right)$$

$$r'_j = \sigma\left(\left[\mathbf{W}'_r e\left(\mathbf{y}_{t-1}\right)\right]_j + \left[\mathbf{U}'_r \mathbf{h}'_{\langle t-1 \rangle}\right]_j + \left[\mathbf{C}_r \mathbf{c}\right]_j\right)$$

其中，$\mathbf{W}', \mathbf{W}'_z, \mathbf{W}'_r \in \mathrm{R}^{1000\times 500}$和$\mathbf{U}', \mathbf{U}'_z, \mathbf{U}'_r \in \mathrm{R}^{1000\times 1000}$以及$\mathbf{C}', \mathbf{C}'_z, \mathbf{C}'_r \in \mathrm{R}^{1000\times 1000}$为权值矩阵。

目标文本单词的词嵌入表示：$e\left(\mathbf{y}_i\right) \in \mathrm{R}^{500}$，且在$t = 0$时刻$e\left(\mathbf{y}_0\right) = \mathbf{0}$。

在每个时刻t，解码器计算生成第j个单词的概率

$$p\left(y_{t,j} = 1 \mid \mathbf{y}_{t-1}, \ldots, \mathbf{y}_1, X\right) = \frac{\exp\left(\mathbf{g}_j \mathbf{s}_{\langle t \rangle}\right)}{\sum_{j=1}^{K} \exp\left(\mathbf{g}_j{}' \mathbf{s}_{\langle t \rangle}\right)}$$

其中，最大输出单元（maxout unit）

$$s_i^{\langle t \rangle} = \max\left\{s'^{\langle t \rangle}_{2i-1}, s'^{\langle t \rangle}_{2i}\right\}$$

且

$$\mathbf{s}'^{\langle t \rangle} = \mathbf{O}_h \mathbf{h}'^{\langle t \rangle} + \mathbf{O}_y \mathbf{y}_{t-1} + \mathbf{O}_c \mathbf{c}$$

$\mathbf{O}_h, \mathbf{O}_c \in \mathrm{R}^{500\times 1000}$和$\mathbf{O}_y \in \mathrm{R}^{500\times 500}$以及$\mathbf{G} = \left[\mathbf{g}_1, \cdots, \mathbf{g}_K\right] \in \mathrm{R}^{K\times 1000}$为权值矩阵。

1.4 RNN Encdoer-Decoder原理实现

In [1]:
```
1 import numpy as np
2 import tensorflow as tf
3
4 tf.__version__
```

executed in 6.54s, finished 14:57:18 2019-09-10

Out[1]: '1.12.0'

In [18]:

```
tf.reset_default_graph()

char_arr = [c for c in 'SEPabcdefghijklmnopqrstuvwxyz']
num_dic = {n: i for i, n in enumerate(char_arr)}

seq_data = [['man', 'women'], ['black', 'white'], ['king', 'queen'], [
    'girl', 'boy'], ['up', 'down'], ['high', 'low']]

n_step = 5
n_hidden = 128
n_class = len(num_dic)


def make_batch(seq_data):
    input_batch, output_batch, target_batch = [], [], []

    for seq in seq_data:
        for i in range(2):
            seq[i] = seq[i] + 'P' * (n_step - len(seq[i]))

        input = [num_dic[n] for n in seq[0]]
        output = [num_dic[n] for n in ('S' + seq[1])]
        target = [num_dic[n] for n in (seq[1] + 'E')]

        input_batch.append(np.eye(n_class)[input])
        output_batch.append(np.eye(n_class)[output])

        target_batch.append(target)

    return input_batch, output_batch, target_batch


enc_input = tf.placeholder(tf.float32, [None, None, n_class])
dec_input = tf.placeholder(tf.float32, [None, None, n_class])
targets = tf.placeholder(tf.int64, [None, None])

with tf.variable_scope('encoder'):
    enc_cell = tf.nn.rnn_cell.BasicRNNCell(n_hidden)
    enc_cell = tf.nn.rnn_cell.DropoutWrapper(enc_cell, output_keep_prob=0.5)
    _, enc_states = tf.nn.dynamic_rnn(enc_cell, enc_input, dtype=tf.float32)

with tf.variable_scope('decoder'):
    dec_cell = tf.nn.rnn_cell.BasicRNNCell(n_hidden)
    dec_cell = tf.nn.rnn_cell.DropoutWrapper(dec_cell, output_keep_prob=0.5)
    outputs, _ = tf.nn.dynamic_rnn(
        dec_cell, dec_input, initial_state=enc_states, dtype=tf.float32)

model = tf.layers.dense(outputs, n_class, activation=None)

cost = tf.reduce_mean(tf.nn.sparse_softmax_cross_entropy_with_logits(
    logits=model, labels=targets))
optimizer = tf.train.AdamOptimizer(0.001).minimize(cost)

sess = tf.Session()
sess.run(tf.global_variables_initializer())
input_batch, output_batch, target_batch = make_batch(seq_data)

for epoch in range(5000):
    _, loss = sess.run([optimizer, cost], feed_dict={
                       enc_input: input_batch, dec_input: output_batch, targets: ta
    if (epoch + 1) % 1000 == 0:
        print('Epoch:', '%04d' % (epoch + 1), 'cost = ', '{:.6f}'.format(loss))


def translate(word):
    seq_data = [word, 'P' * len(word)]

    input_batch, output_batch, _ = make_batch([seq_data])
    prediction = tf.argmax(model, 2)

    result = sess.run(prediction, feed_dict={
```

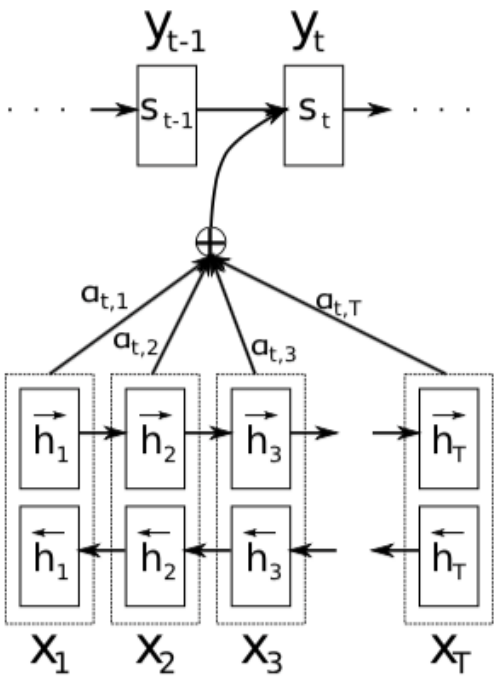
```
                        enc_input: input_batch, dec_input: output_batch})

    decoded = [char_arr[i] for i in result[0]]
    end = decoded.index('E')
    translated = ''.join(decoded[:end])

    return translated.replace('P', '')


print('test')
print('man ->', translate('man'))
print('mans ->', translate('mans'))
print('king ->', translate('king'))
print('black ->', translate('black'))
print('up ->', translate('up'))
```

executed in 1m 17.2s, finished 16:15:30 2019-09-10

```
Epoch: 1000 cost =  0.000840
Epoch: 2000 cost =  0.000314
Epoch: 3000 cost =  0.000181
Epoch: 4000 cost =  0.000044
Epoch: 5000 cost =  0.000027
test
man -> women
mans -> women
king -> queen
black -> white
up -> down
```

2 序列到序列任务中的注意力机制（Seq2Seq with Attention）

2.1 Seq2Seq with Attention网络架构



seq2seq with Attention神经网络架构中，编码器采用双向循环神经网络学习将输入序列$\mathbf{x}$编码成每个时刻的上下文向量（注意力分布）c_i，解码器学习将上下文向量c_i解码为输出序列$\mathbf{y}$。

源文本序列：$\mathbf{x} = \left(x_1, \cdots, x_{T_x}\right)$，其中$x_i \in \mathrm{R}^{K_x}$为one-of-K编码，$K_x$为源语言词表长度，$T_x$为源语料长度。

目标文本序列：$\mathbf{y} = \left(y_1, \cdots, y_{T_y}\right)$，其中$y_i \in \mathrm{R}^{K_y}$为one-of-K编码，$K_y$为目标语言词表长度，$T_y$为目标语料长度。

2.2 Seq2Seq with Attention编码器Encoder原理

编码器Encoder采用双向循环神经网络，前向状态计算

$$\overrightarrow{h}_i = \begin{cases} \left(1 - \overrightarrow{z}_i\right) \circ \overrightarrow{h}_{i-1} + \overrightarrow{z}_i \circ \overline{h}_i & , \textbf{if } i > 0 \\ 0 & , \textbf{if } i = 0 \end{cases}$$

其中，

$$\overline{h}_i = \tanh\left(\overrightarrow{W}\overline{Ex}_i + \overrightarrow{U}\left[\overrightarrow{r}_i \circ \overrightarrow{h}_{i-1}\right]\right) \overrightarrow{z}_i = \sigma\left(\overrightarrow{W}_z\overline{Ex}_i + \overrightarrow{U}_z\overrightarrow{h}_{i-1}\right) \overrightarrow{r}_i = \sigma\left(\overrightarrow{W}_r\overline{Ex}_i + \overrightarrow{U}_r\overrightarrow{h}_{i-1}\right)$$

$\overline{E} \in \mathrm{R}^{m \times K_x}$为词嵌入矩阵，$m$为词嵌入维度。$\overrightarrow{W}, \overrightarrow{W}_z, \overrightarrow{W}_r \in \mathrm{R}^{n \times m}$和$\overrightarrow{U}, \overrightarrow{U}_z, \overrightarrow{U}_r \in \mathrm{R}^{n \times n}$为权值矩阵，$n$为隐藏单元数。$\sigma(\cdot)$通常为sigmoid函数。

后向状态$\left(\overleftarrow{h}_1, \cdots, \overleftarrow{h}_{T_x}\right)$计算相同。与权值矩阵不同，我们在前向和后向RNN网络中共享词嵌入矩阵$\overline{E}$。

将前向和后向状态关联起来得到注释$\left(h_1, h_2, \cdots, h_{T_x}\right)$，

其中，

$$h_i = \begin{bmatrix} \overrightarrow{h}_i \\ \overleftarrow{h}_i \end{bmatrix}$$

2.3 Seq2Seq with Attention解码器Decoder原理

解码器Decoder隐层转态s_i由解码器注释h_i计算的注意力分布c_i得到

$$s_i = \left(1 - z_i\right) \circ s_{i-1} + z_i \circ \tilde{s}_i$$

其中，

$$\tilde{s}_i = \tanh\left(WEy_{i-1} + U\left[r_i \circ s_{i-1}\right] + Cc_i\right) z_i = \sigma\left(W_zEy_{i-1} + U_zs_{i-1} + C_zc_i\right) r_i = \sigma\left(W_rEy_{i-1} + U_rs_{i-1} + C_rc_i\right)$$

$E \in \mathrm{R}^{m \times K_y}$为目标语言的词嵌入矩阵，$m$为词嵌入维度。$W, W_z, W_r \in \mathrm{R}^{n \times m}$和$U, U_z, U_r \in \mathrm{R}^{n \times n}$以及 $C, C_z, C_r \in \mathrm{R}^{n \times 2n}$为权值矩阵，$n$为隐藏单元数。隐层初始状态$s_0 = \tanh\left(W_s\overleftarrow{h}_1\right)$，其中$W_s \in \mathrm{R}^{n \times n}$。

每个时刻的上下文向量（注意力分布）c_i的计算

$$c_i = \sum_{j=1}^{T_x} a_{ij}h_j$$

其中，

$$a_{ij} = \frac{\exp\left(e_{ij}\right)}{\sum_{k=1}^{T_x}\exp\left(e_{ik}\right)} e_{ij} = v_a^{\top}\tanh\left(W_as_{i-1} + U_ah_j\right)$$

h_j为源文本序列第j个注释。$v_a \in \mathrm{R}^{n'}, W_a \in \mathrm{R}^{n' \times n}, U_a \in \mathrm{R}^{n' \times 2n}$为权值矩阵。

使用解码器状态s_{i-1}，上下文c_i和上时刻生成单词y_{i-1}定义目标单词y_i的概率

$$p\left(y_i \mid s_i, y_{i-1}, c_i\right) \propto \exp\left(y_i^{\top} W_o t_i\right)$$

其中，

$$t_i = \left[\max \left\{ \tilde{t}_{i,2j-1}, \tilde{t}_{i,wj} \right\} \right]_{j=1,\cdots,l}^{\top}$$

$\tilde{t}_{i,k}$是向量$\tilde{t}_i$的第k个元素，

$$\tilde{t}_i = U_o s_{i-1} + V_o E y_{i-1} + C_o c_i$$

$W_o \in \mathrm{R}^{K_y \times l}, U_o \in \mathrm{R}^{2l \times n}, C_o \in \mathrm{R}^{2l \times 2n}$是权值矩阵。

2.4 Seq2Seq with Attention原理实现

In [4]:
```
%matplotlib inline

import numpy as np
import tensorflow as tf
import matplotlib.pyplot as plt
```
executed in 343ms, finished 15:20:23 2019-09-10

In [5]:
```
tf.reset_default_graph()
```
executed in 6ms, finished 15:20:39 2019-09-10

In [6]:
```
sentences = ['ich mochte ein bier P', 'S i want a beer', 'i want a beer E']

word_list = " ".join(sentences).split()
word_list = list(set(word_list))
word_dict = {w: i for i, w in enumerate(word_list)}
number_dict = {i: w for i, w in enumerate(word_list)}
n_class = len(word_dict)
```
executed in 12ms, finished 15:20:48 2019-09-10

In [7]:
```
n_step = 5
n_hidden = 128
```
executed in 9ms, finished 15:20:59 2019-09-10

In [8]:
```
def make_batch(sentences):
    input_batch = [np.eye(n_class)[[word_dict[n] for n in sentences[0].split()]]]
    output_batch = [np.eye(n_class)[[word_dict[n] for n in sentences[1].split()]]]
    target_batch = [[word_dict[n] for n in sentences[2].split()]]

    return input_batch, output_batch, target_batch
```
executed in 8ms, finished 15:21:10 2019-09-10

In [9]:
```
enc_inputs = tf.placeholder(tf.float32, [None, None, n_class])
dec_inputs = tf.placeholder(tf.float32, [None, None, n_class])
targets = tf.placeholder(tf.int64, [1, n_step])
```
executed in 11ms, finished 15:21:19 2019-09-10

In [10]:
```
attn = tf.Variable(tf.random_normal([n_hidden, n_hidden]))
out = tf.Variable(tf.random_normal([n_hidden * 2, n_class]))
```
executed in 26ms, finished 15:21:29 2019-09-10

In [11]:
```
def get_att_score(dec_output, enc_output):
    score = tf.squeeze(tf.matmul(enc_output, attn), 0)
    dec_output = tf.squeeze(dec_output, [0, 1])

    return tf.tensordot(dec_output, score, 1)

def get_att_weight(dec_output, enc_outputs):
    attn_scores = []
    enc_outputs = tf.transpose(enc_outputs, [1, 0, 2])
    for i in range(n_step):
        attn_scores.append(get_att_score(dec_output, enc_outputs[i]))

    return tf.reshape(tf.nn.softmax(attn_scores), [1, 1, -1])
```

executed in 12ms, finished 15:21:41 2019-09-10

In [12]:
```
model = []
# Attention = []
```

executed in 8ms, finished 15:21:51 2019-09-10

In [13]:
```
with tf.variable_scope('encode'):
    enc_cell = tf.nn.rnn_cell.BasicRNNCell(n_hidden)
    enc_cell = tf.nn.rnn_cell.DropoutWrapper(enc_cell, output_keep_prob=0.5)
    enc_outputs, enc_hidden = tf.nn.dynamic_rnn(enc_cell, enc_inputs, dtype=tf.floa
```

executed in 144ms, finished 15:22:03 2019-09-10

In [14]:
```
with tf.variable_scope('decode'):
    dec_cell = tf.nn.rnn_cell.BasicRNNCell(n_hidden)
    dec_cell = tf.nn.rnn_cell.DropoutWrapper(dec_cell, output_keep_prob=0.5)

    inputs = tf.transpose(dec_inputs, [1, 0, 2])
    hidden = enc_hidden
    for i in range(n_step):
        dec_output, hidden = tf.nn.dynamic_rnn(dec_cell,
                                               tf.expand_dims(inputs[i], 1),
                                               initial_state=hidden,
                                               dtype=tf.float32,
                                               time_major=True)
        attn_weights = get_att_weight(dec_output, enc_outputs)
        # Attention.append(tf.squeeze(attn_weights))

        context = tf.matmul(attn_weights, enc_outputs)
        dec_output = tf.squeeze(dec_output, 0)
        context = tf.squeeze(context, 1)

        model.append(tf.matmul(tf.concat((dec_output, context), 1), out))
```

executed in 664ms, finished 15:22:18 2019-09-10

In [15]:
```
# trained_attn = tf.stack([Attention[0], Attention[1], Attention[2], Attention[3],
model = tf.transpose(model, [1, 0, 2])
prediction = tf.argmax(model, 2)
cost = tf.reduce_mean(tf.nn.sparse_softmax_cross_entropy_with_logits(logits=model,
optimizer = tf.train.AdamOptimizer(0.001).minimize(cost)
```

executed in 1.34s, finished 15:22:33 2019-09-10

In [16]:

```
with tf.Session() as sess:
    init = tf.global_variables_initializer()
    sess.run(init)
    for epoch in range(2000):
        input_batch, output_batch, target_batch = make_batch(sentences)
        _, loss, attention = sess.run([optimizer, cost, trained_attn],
                                      feed_dict={enc_inputs: input_batch,
                                                 dec_inputs: output_batch,
                                                 targets: target_batch})
        if (epoch + 1) % 400 == 0:
            print('Epoch:', '%04d' % (epoch + 1), 'cost=', '{:.6f}'.format(loss))

    predict_batch = [np.eye(n_class)[[word_dict[n] for n in 'P P P P P'.split()]]]
    result = sess.run(prediction, feed_dict={enc_inputs: input_batch,
                                             dec_inputs: predict_batch})
    print(sentences[0].split(), '->', [number_dict[n] for n in result[0]])
```

executed in 20.8s, finished 15:23:05 2019-09-10

```
Epoch: 0400 cost= 0.000000
Epoch: 0800 cost= 0.000008
Epoch: 1200 cost= 0.000002
Epoch: 1600 cost= 0.002508
Epoch: 2000 cost= 0.000000
['ich', 'mochte', 'ein', 'bier', 'P'] -> ['i', 'want', 'a', 'beer', 'E']
```

3 注意力机制Attention

3.1 柔性注意力机制（Soft Attention）

输入信息$X = \left[\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_N\right]$

注意力机制的计算：

1. 在输入信息上计计算注意力分布；
2. 根据注意力分布计算输入信息的加权平均。

3.1.1 注意力分布

给定一个和任务相关的查询向量$\mathbf{q}$，用注意力变量$z \in [1, N]$表示被选择信息的索引位置，即$z = i$表示选择了第i个输入信息。其中，查询向量$\mathbf{q}$可以是动态生成的，也可以是可学习的参数。

软性注意力的注意力分布
在给定输入信息X和查询变量$\mathbf{q}$下，选择第i个输入信息的概率

$$\begin{aligned}\alpha_i &= p(z = i \mid X, \mathbf{q}) \\ &= softmax\left(s\left(\mathbf{x}_i, \mathbf{q}\right)\right) \\ &= \frac{\exp\left(s\left(\mathbf{x}_i, \mathbf{q}\right)\right)}{\sum_{j=1}^{N}\exp\left(s\left(\mathbf{x}_j, \mathbf{q}\right)\right)}\end{aligned}$$

其中，α_i称为注意力分布，$s\left(\mathbf{x}_i, \mathbf{q}\right)$称为注意力打分函数。

注意力打分函数

- 加性模型 $s\left(\mathbf{x}_i, \mathbf{q}\right) = \mathbf{v}^{\top}\tanh\left(W\mathbf{x}_i + U\mathbf{q}\right)$
- 点积模型 $s\left(\mathbf{x}_i, \mathbf{q}\right) = \mathbf{x}_i^{\top}\mathbf{q}$

- 缩放点积模型 $s\left(\mathbf{x}_i, \mathbf{q}\right) = \frac{\mathbf{x}_i^{\top}\mathbf{q}}{\sqrt{d}}$
- 双线性模型 $s\left(\mathbf{x}_i, \mathbf{q}\right) = \mathbf{x}_i^{\top} W\mathbf{q}$

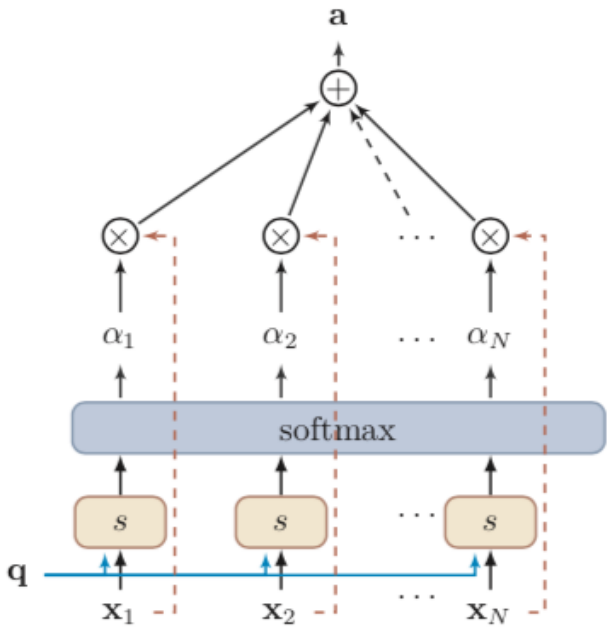
其中，$W, U, \mathbf{v}$为可学习的网络参数，d为输入信息的维度。
加性模型和点积模型的复杂度近似，但点积模型可利用矩阵乘积，计算效率跟高。当输入信息的维度d比较高，点积模型值方差较大，导致softmax函数的梯度较小，缩放点积模型可以解决。双线性模型是泛化的点积模型。若假设$W = U^{\top}V$，则$s\left(\mathbf{x}_i, \mathbf{q}\right) = \mathbf{x}_i^{\top}U^{\top}V\mathbf{q} = \left(U\mathbf{x}_i\right)^{\top}(V\mathbf{q})$，即分别对$\mathbf{x}_i$和$\mathbf{q}$进行线性变换后进行点积。相比点积模型，双线性模型在计算相似度是引入了非对称性。

注意力分布α_i可解释为在给定相关查询$\mathbf{q}$时，第i个信息受关注的程度。

3.1.2 加权平均

注意力函数

$$\begin{aligned} att(X, \mathbf{q}) &= \sum_{i=1}^{N} \alpha_i \mathbf{x}_i \\ &= \mathrm{E}_{z\sim p(z|X,\mathbf{q})}[\mathbf{x}] \end{aligned}$$



3.2 键值对注意力机制（Key-Value Pair Attention Mechanism）

输入信息$(K, V) = \left[\left(\mathbf{k}_1, \mathbf{v}_1\right), \cdots, \left(\mathbf{k}_N, \mathbf{v}_N\right)\right]$，其中键用来计算注意力分布$\alpha_i$，值用来计算聚合信息。

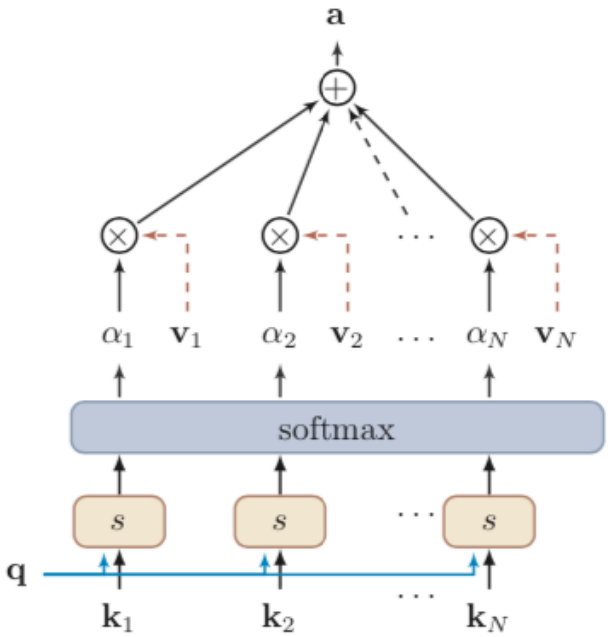
给定任务相关查询向量$\mathbf{q}$时，注意力分布

$$\alpha_i = \frac{\exp\left(s\left(\mathbf{k}_i, \mathbf{q}\right)\right)}{\sum_{j=1}^{N}\exp\left(s\left(\mathbf{k}_j, \mathbf{q}\right)\right)}$$

注意力函数

$$att((K, V), \mathbf{q}) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i \mathbf{v}_i$$
$$= \sum_{i=1}^{N} \frac{\exp\left(s\left(\mathbf{k}_i, \mathbf{q}\right)\right)}{\sum_{j=1}^{N} \exp\left(s\left(\mathbf{k}_j, \mathbf{q}\right)\right)} \mathbf{v}_i$$

其中，$s\left(\mathbf{k}_i, \mathbf{q}\right)$为打分函数。当$K = V$时，键值对注意力机制等价为柔性注意力机制。



3.3 多头注意力机制（Multi-Head Attention Mechanism）

多个查询$Q = \left[\mathbf{q}_1, \cdots, \mathbf{q}_M\right]$平行的计算从输入信息中选取多个信息。每个注意力关注输入信息的不同部分。

$$att((K, V), Q) = att\left((K, V), \mathbf{q}_1\right) \oplus \cdots \oplus att\left((K, V), \mathbf{q}_M\right)$$

其中，$\oplus$ 为向量拼接。

3.4 自注意力模型（Self-Attention Model）

输入序列$X = \left[\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_N\right] \in \mathrm{R}^{d_1 \times N}$

输出序列$H = \left[\mathbf{h}_1, \cdots, \mathbf{h}_N\right] \in \mathrm{R}^{d_2 \times N}$

通过线性变换得到向量序列：

$$Q = W_Q X \in \mathrm{R}^{d_3 \times N} K = W_K X \in \mathrm{R}^{d_3 \times N} V = W_V X \in \mathrm{R}^{d_2 \times N}$$

其中，Q为查询向量序列，K为键向量序列，V为值向量序列，W_Q, W_K, W_V分别为可学习参数矩阵。

预测输出向量

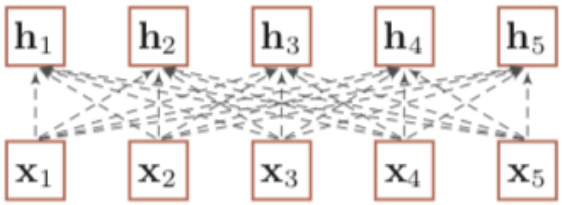
$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{h}}_i &= att\Big((K, V), \mathbf{q}_i\Big) \\ &= \sum_{j=1}^{N} \alpha_{ij}\mathbf{v}_j \\ &= \sum_{j=1}^{N} softmax\Big(s\Big(\mathbf{k}_j, \mathbf{q}_i\Big)\Big)\mathbf{v}_j\end{aligned}$$

其中，$i,j \in [1, N]$为输出和输入向量序列的位置，连接权重α_{ij}由注意力机制动态生成。

若使用缩放点积模型作为打分函数，则输出向量序列

$$\begin{aligned}H_{d_2 \times N} &= softmax\left(\frac{K^\top Q}{\sqrt{d_3}}\right)V_{d_2 \times N} \\ &= softmax\left(\frac{K^\top Q}{\sqrt{d_3}}\right)W_V X\end{aligned}$$

其中，softmax为按列归一化的函数。



自注意力模型计算的权重α_{ij}只依赖$\mathbf{q}_i$和$\mathbf{k}_j$的相关性，而忽略了输入信息的位置信息。因此自注意力模型一般需要加入位置编码信息来进行修正。