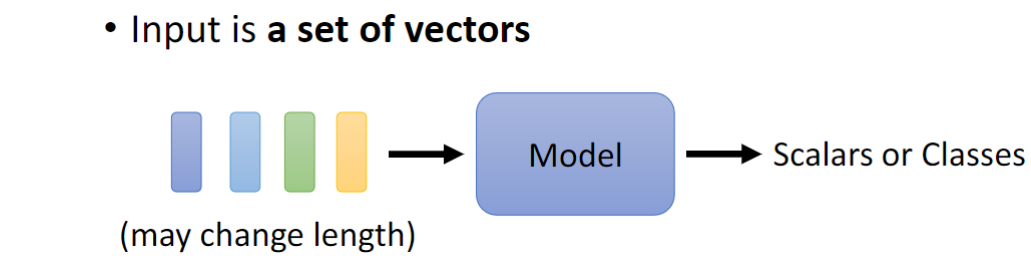
Lecture 4：自注意力机制（Self-Attention）

Lectured by HUNG-YI LEE (李宏毅)

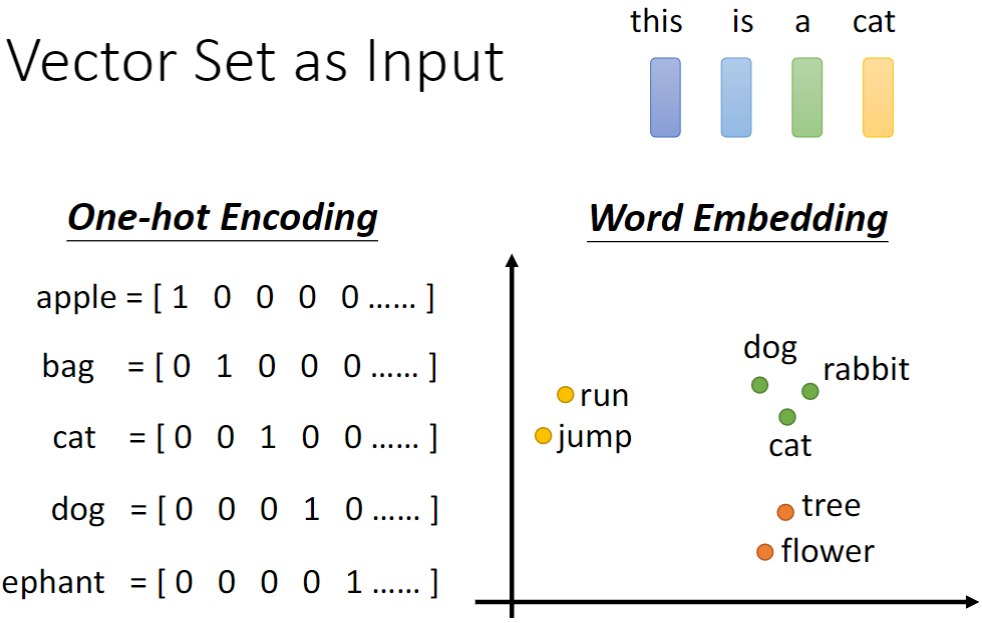
Recorded by Yusheng zhao（yszhao0717@gmail.com）

引入

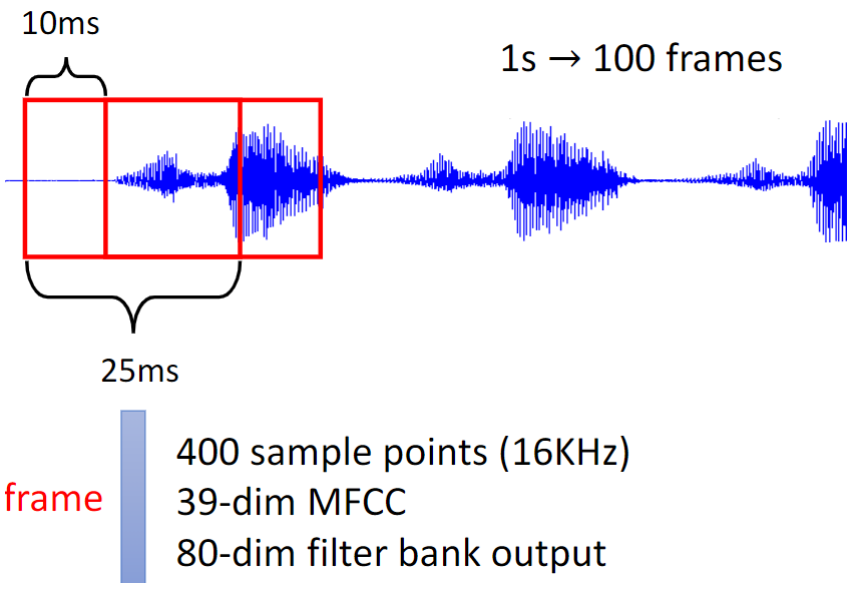
- 致力于解决输入为一组向量的深度学习任务。



例如👇）——作业一自然语言处理

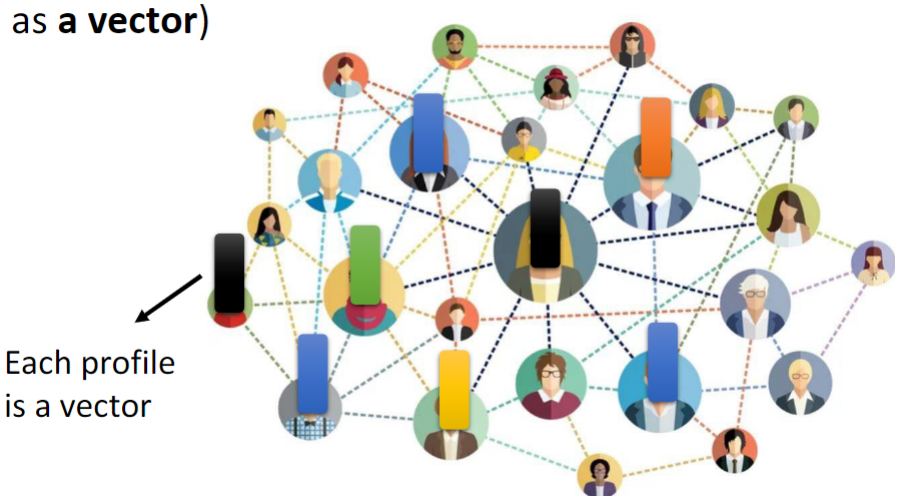


作业二——声音讯息👇



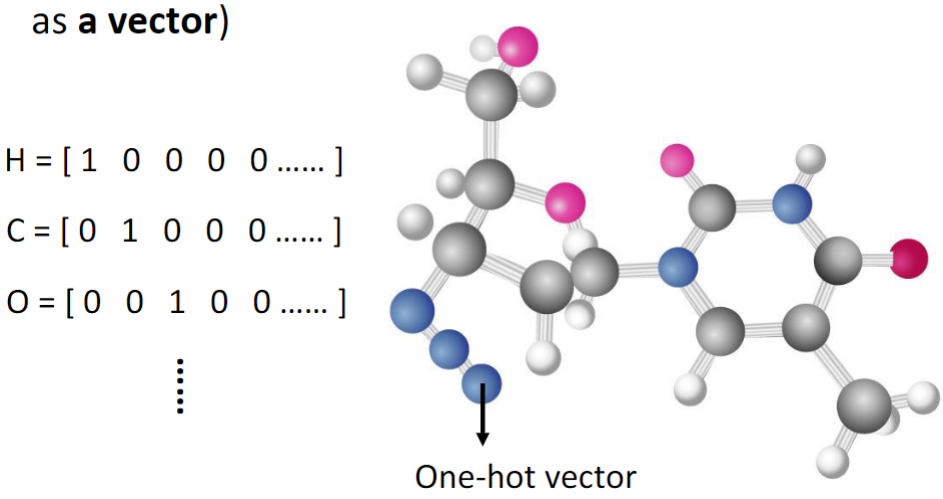
作业三——图👇，每个节点都可以是一个向量，包含了人物的社交信息

- Graph is also a set of vectors (consider each **node** as **a vector**)



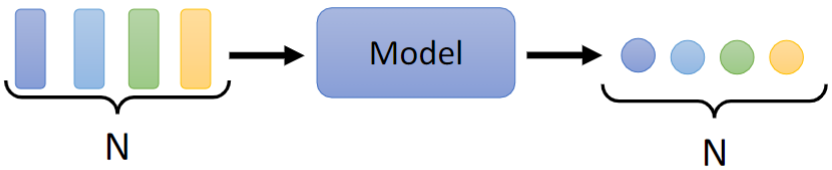
分子也可以看作“Graph”：（这里化学元素每个原子用one-hot表示）

- Graph is also a set of vectors (consider each **node** as **a vector**)

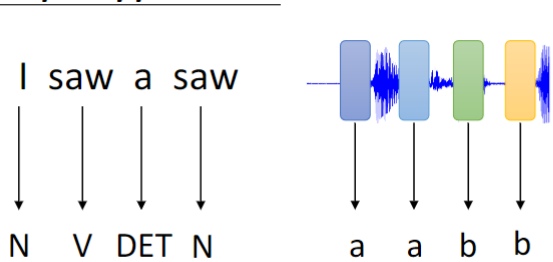


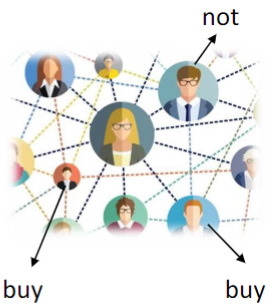
- 输出的形式多样：
  - 每个vector各自输出一个label：比方说文字处理中的*词性标注、语音音素分类、社交网络标签*

- Each vector has a label.

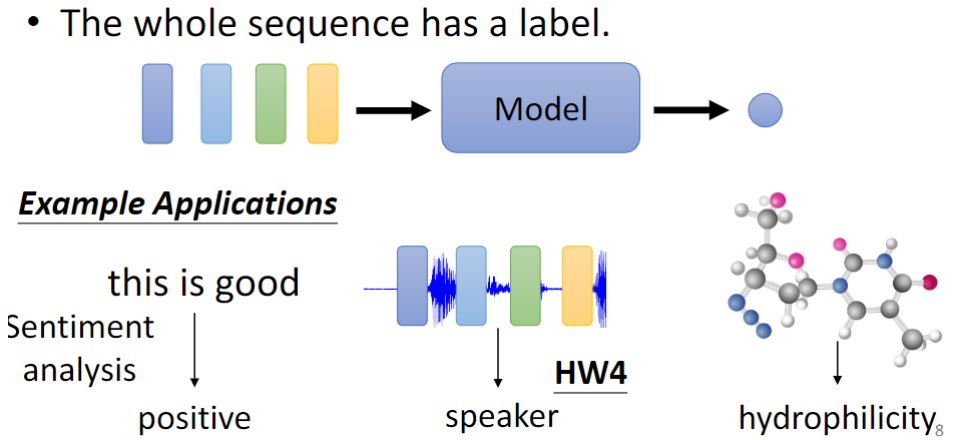


Example Applications

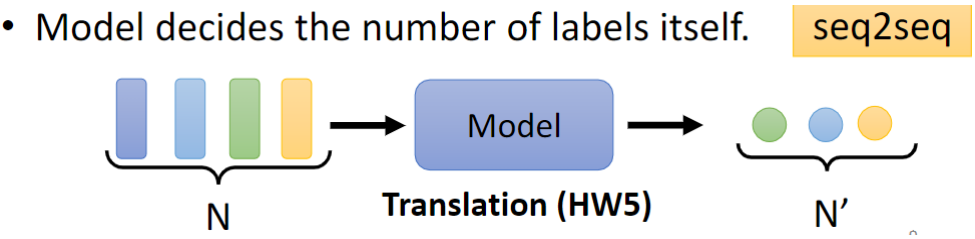




- 一整个sequence输出一个label：比方说：*情感分析、语者辨认、给一个graph输出一个label*



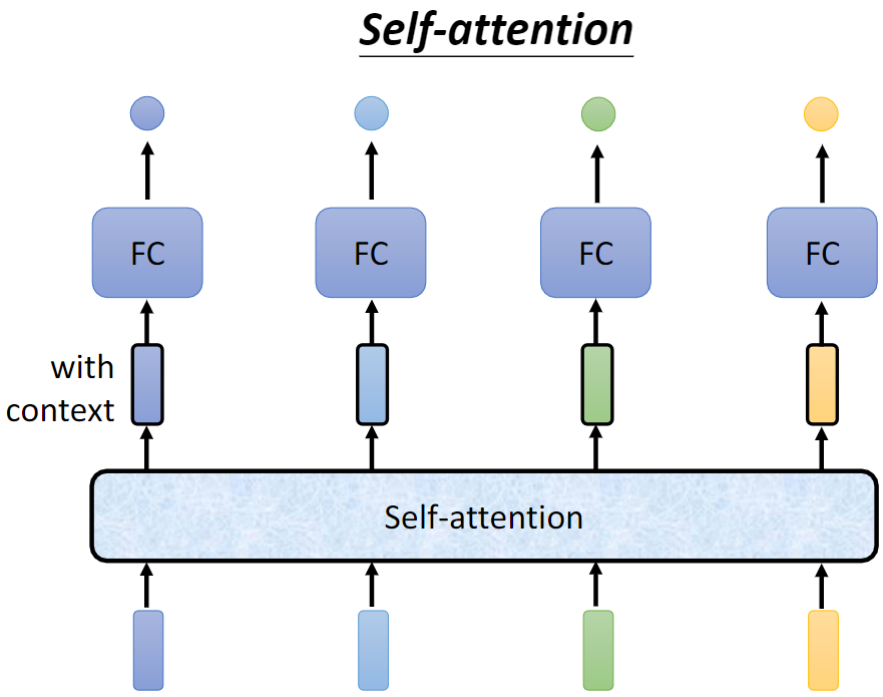
- 模型自己决定输出label的数量——***seq2seq***任务，例如：*翻译、完整的语音辨识*



模型一：Sequence Labeling

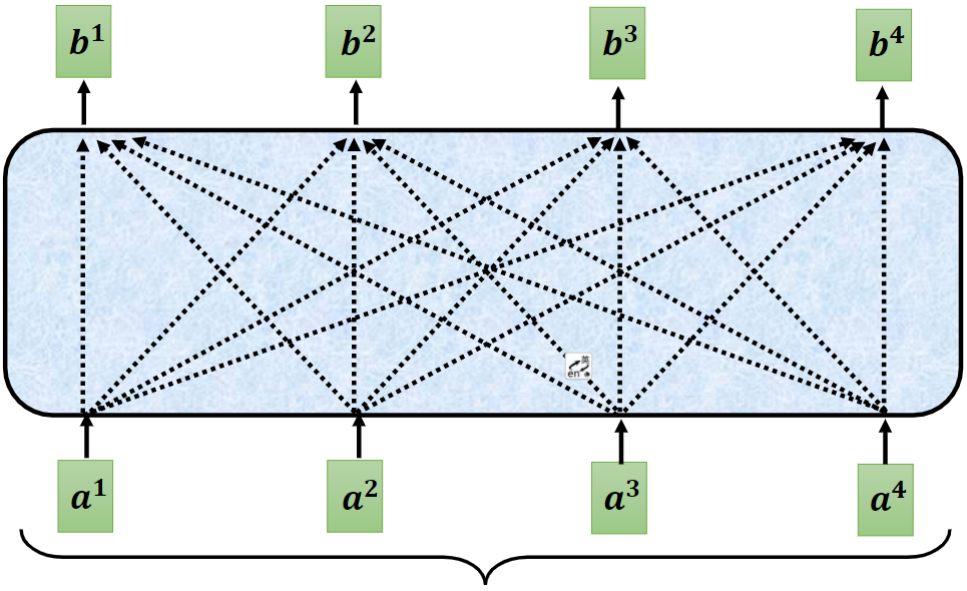
即上文输入和输出数目一样多的情形。

注意到，对于单个输入vector要关注它的上下文信息。但是，以某个vector为中心，为了cover整个sequence，开一个一定尺寸的窗口输入全连接层中——参数巨多而且有可能overfitting。**Self-attention**被用来化解这个困难。



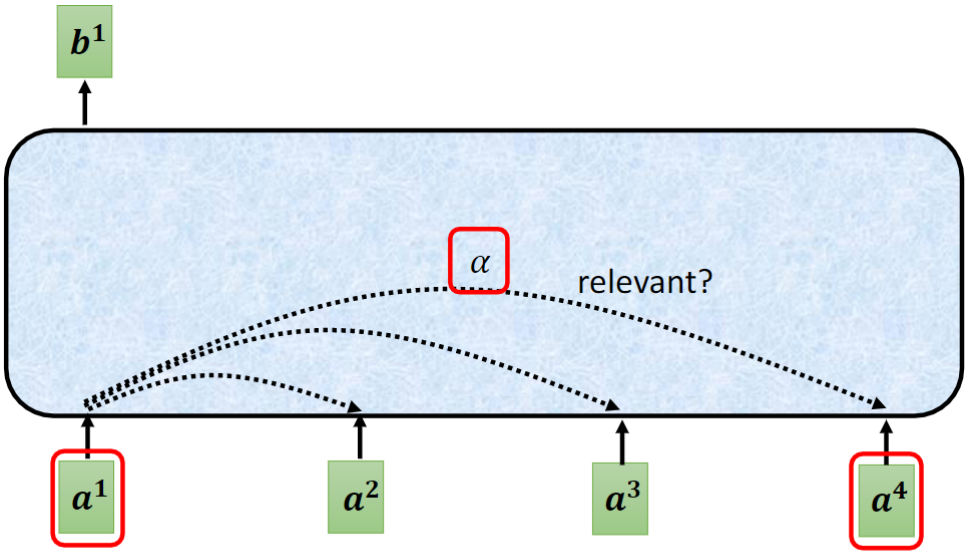
> FC = Fully Connected Layer

Self-attention考虑到整个sequence的信息，有多少输入self-attention就有多少输出。模型中经常使用FC和Self-attention交替使用。[Attention is all you need]

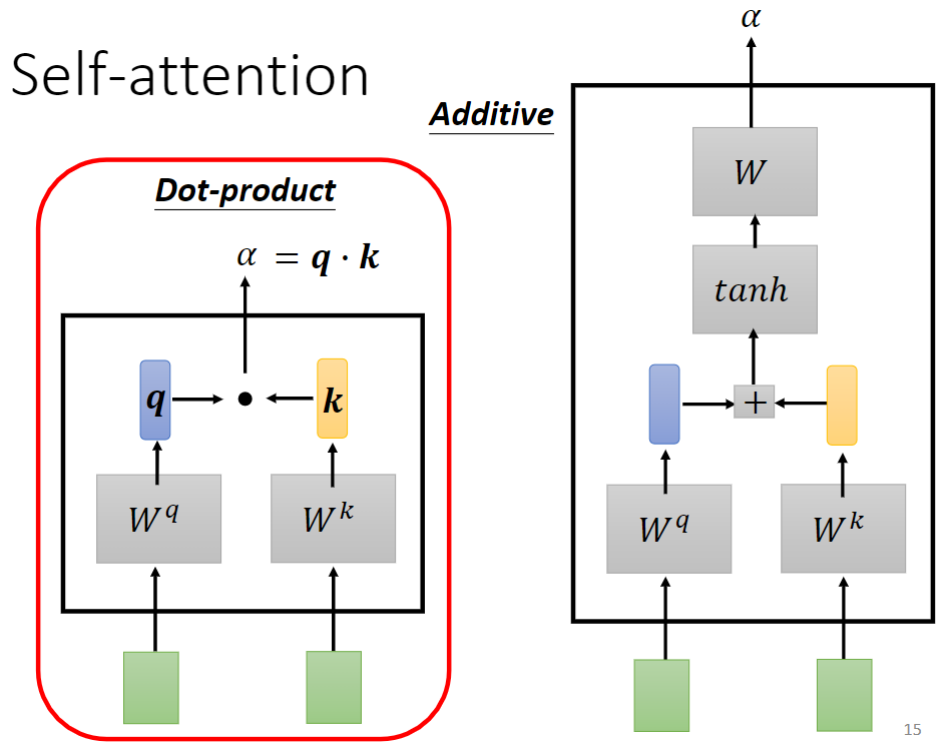


Self-Attention的每个输出都考虑了所有的输入。以b^1为例：

- 首先根据a^1找到跟a^1相似的向量（找到整个sequence里面哪些部分是重要的哪些部分和a^1同一个level、决定a^1回归结果数值或者来分类结果class所需要的信息）；每一个向量和a^1关联性的值用α表示



这个Self-attention的module怎样自动决定两个向量的相关性？以下给出计算两个向量相关性的模组。



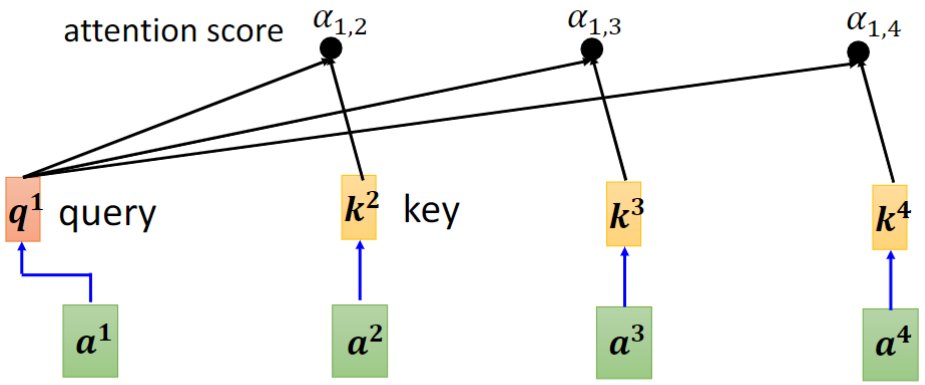
上述比较常见的做法——***Dot-product***：输入的这两个向量（需要计算关联度）分别乘上两个不同的矩阵W^q和W^k，得到两个向量q和k，然后这两个向量做element-wise相乘，得到$\alpha = q \cdot k$。

上述另一种计算方式——***Additive***：同样地把这两个向量（需要计算关联度）分别乘上两个不同的矩阵W^q和W^k（*inner-product*），得到两个向量q和k；再然后把这个两个向量串起来，扔进激活函数$tanh$，然后通过一个Transform再得到α。（W是随机初始化的，然后训练出来的）

在本文中用到的方法默认为左边的***Dot-product***

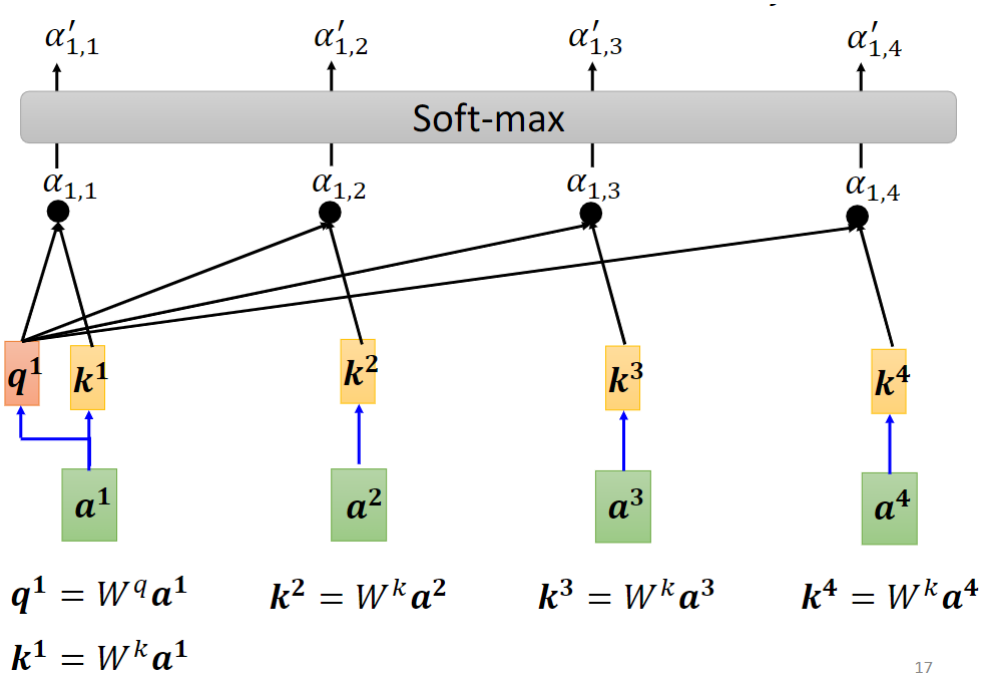
- 在**Self-attention**中，分别用a^1和a^2、a^3、a^4求得对应的α——**attention score**。求法如下：

$$\alpha_{1,2} = \boldsymbol{q^1 \cdot k^2} \qquad \alpha_{1,3} = \boldsymbol{q^1 \cdot k^3} \qquad \alpha_{1,4} = \boldsymbol{q^1 \cdot k^4}$$



$$\boldsymbol{q^1} = W^q \boldsymbol{a^1} \qquad \boldsymbol{k^2} = W^k \boldsymbol{a^2} \qquad \boldsymbol{k^3} = W^k \boldsymbol{a^3} \qquad \boldsymbol{k^4} = W^k \boldsymbol{a^4}$$

- 自己与自己计算关联性：



17

再把算出来的α通过$Softmax$处理：

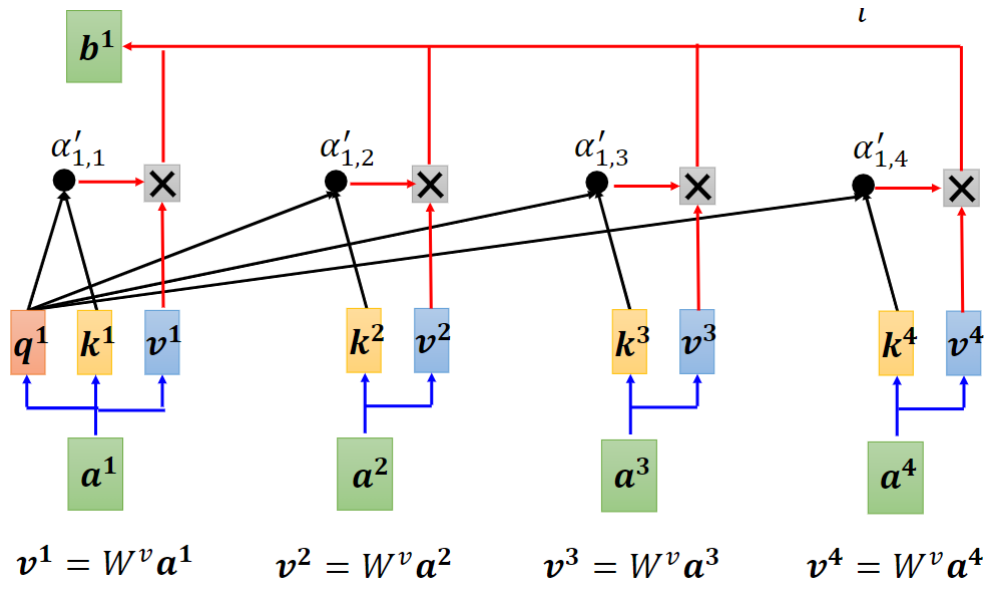
> $Softmax$:
>
> $$\alpha'_{1,i} = \frac{exp(\alpha_{1,i})}{\sum_j \exp(\alpha_{1,j})} \tag{1}$$

不一定要用Softmax，只要是激活函数，有人用Relu效果也很好。

- Extract information based on attention scores.根据这些α'去抽取出整个sequence中比较重要的咨询。

  把a^1乘上W^v得到新的向量$[v^1, v^2, v^3, v^4]$。然后，再把每个v乘上α'，然后再把它们加起来。

$$b^1 = \sum_i \alpha'_{1,i} v^i \tag{2}$$



上边谁的值最大，谁的那个Attention的分数最大，谁的那个v就会dominant你抽出来的结果。举例说：上述中如果a^2支计算出来的值最大，那么b_1就最接近v^2。

相似度计算方法

在做attention的时候，我们需要计算query（q）和某个key（k）的分数（相似度），常用方法有：

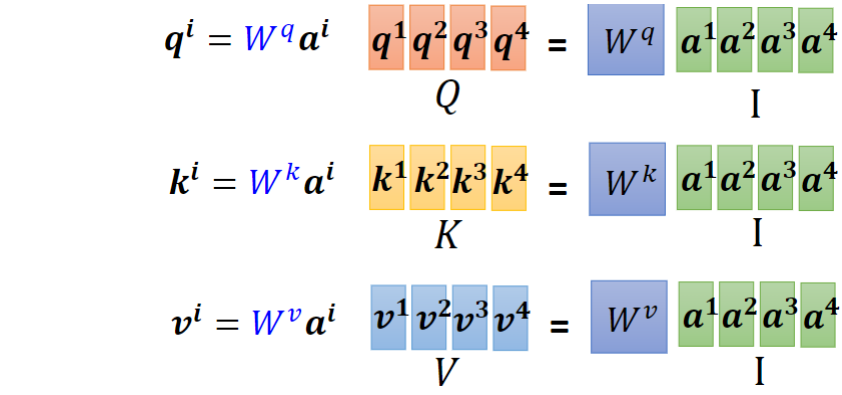
- 点乘：$s(q,k) = q^T k$

- 矩阵相乘
- 计算余弦相似度：$s(q,k)=\frac{q^Tk}{||q||\cdot||k||}$
- 串联方式：把q和k拼接起来，$s(q,k)=W[q;k]$
- 多层感知机：$s(q,k)=v_a^T\tanh(W_q+U_k)$

总结

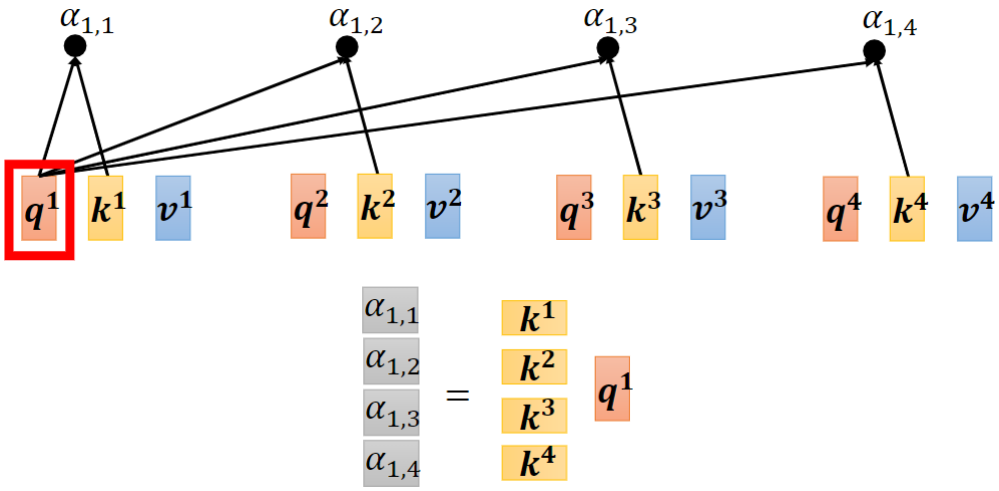
Self-attention就是一排input的vector得到相同数量的output的vector。计算中涉及到三个Transform矩阵W^q,W^k,W^v是network的参数，是学习（learn）得来的，可以看作是带有权重的，以下认为是self-attention的矩阵**运算。**

$$\begin{aligned}q^i&=W^qa^i\\k^i&=W^ka^i\\v^i&=W^va^i\end{aligned}\tag{3}$$

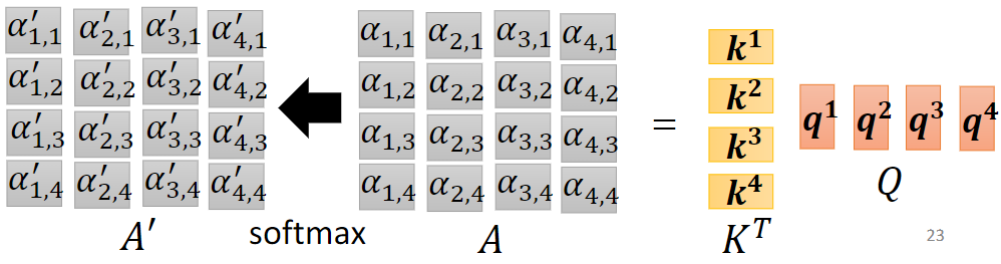


每一个self-attention层只有一个W^q,W^k,W^v矩阵。

然后为了得到得分，计算内积👇

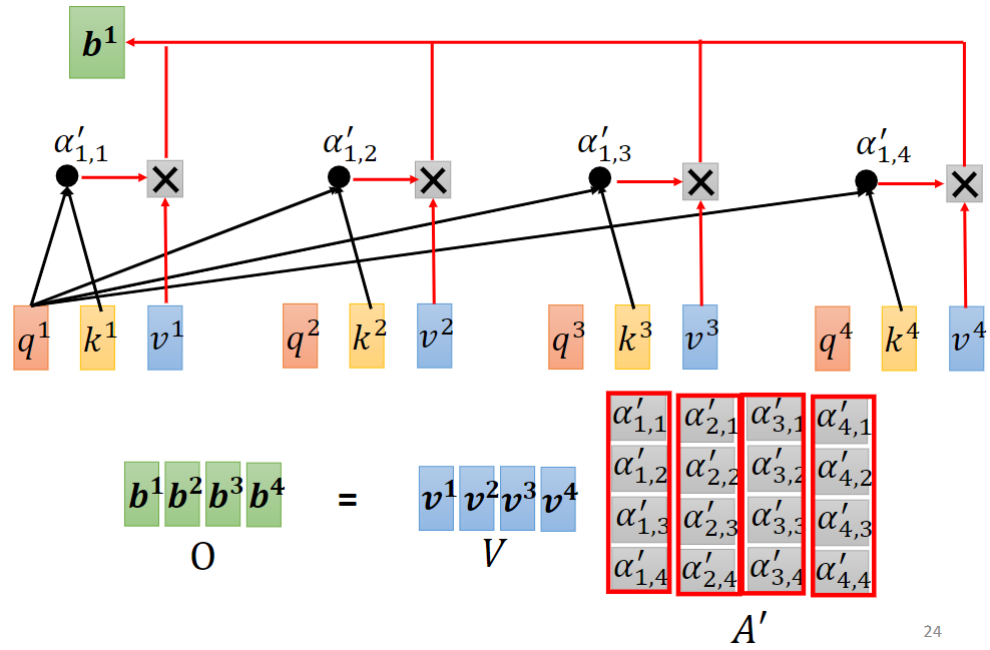


同理👇

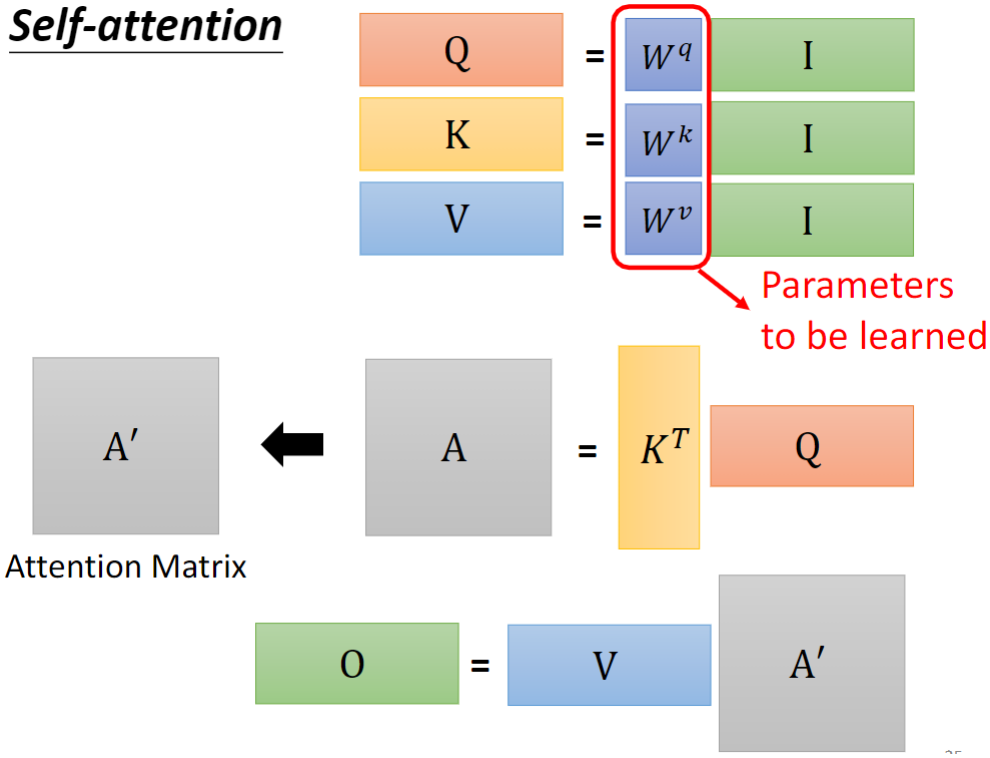


$softmax$不是唯一的选项，也可以用其他激活函数。

接下来👇



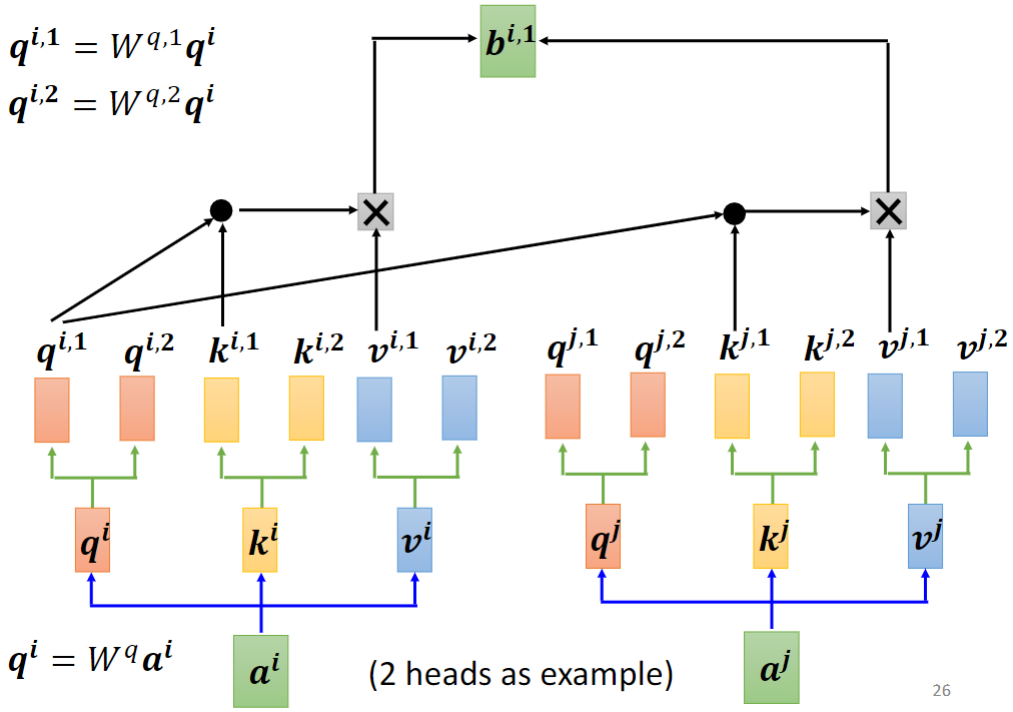
这一串操作全是**矩阵**运算，不用加循环体，方便编程。把上述过程可以精简为👇



A'称之为**Attention Matrix**。在整个**Self-attention**中输入是I，输出是O，其中又只有W^q, W^k, W^v是未知的，需要透过训练集（training data）学习得到。

self-attention进阶版——Multi-head Self-attention

为什么我们需要多一点的head呢？——关系中蕴含着不同种类的关联性，以下 `2-head` 为例：

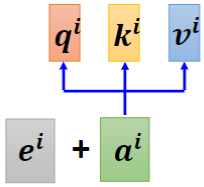


我们需要两种不同的相关性，所以需要产生两种不同的head，q, k, v都有两个，另外一个位置做相似处理。head 1和head 2相对独立，分开做，如上图，q^1只和k^1, v^1运算。

缺陷——self-attention少了关于位置（上下文）的资讯，因此一下介绍相关的完善方法。

Positional Encoding——把位置的咨询塞进self-attention

- Each position has a unique positional vector e^i（为每一个位置设定一个vector，不用的位置就有专属的一个vector）
- 把e^i加到a^i上：

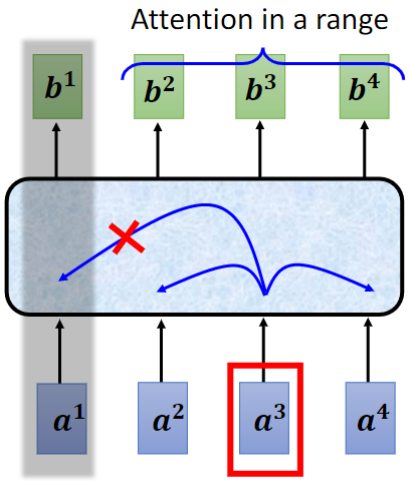


- 这样子的Positional Encoding是**hand-crafted**的，人设的问题包括：可能sequence的长度超过人设的范围。在Attention is all you need中这个代表位置的vector是透过一个规则产生的：一个神奇的sin、cos的function
- Positional Encoding任然是一个尚待研究的问题，可以创造一个新的产生办法，可以**learn from data**

这篇论文讨论了Positonal Encoding的生成方法。

Many applications of Self-attetntion

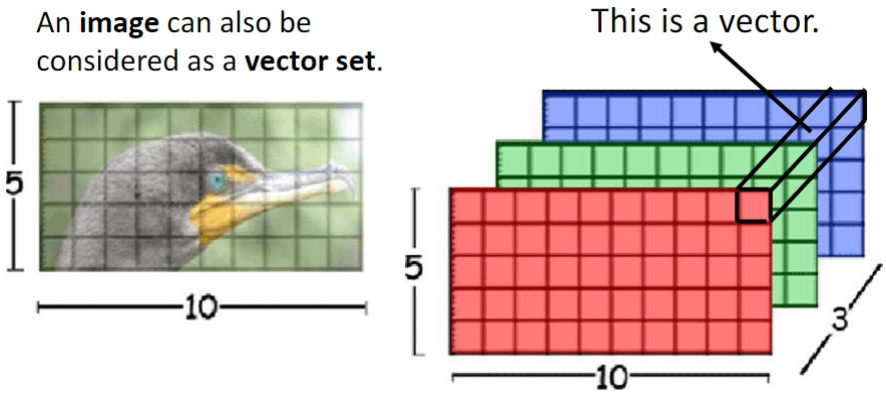
- ***Transformer***
- ***BERT***
- 不仅在NLP领域，self-attention也可以用来语音识别（Speech）：Transformer-Transducer。文章中，self-attention被做了小小的改动。语音是一条非常长的sequence，由于时间序列下，为了描述一个时间段的语音信号，向量维数非常大，如果sequence的长度为L，为了计算*Attention Matrix*，需要做$L \times L$次的`inner product`，算力和memory的压力很大。***Truncated Self-attention***被设计用来在只看一个小的范围（范围由人设定）而非整句话，以加快运算速度。



Truncated Self-attention

- ***self-attention for Image***:

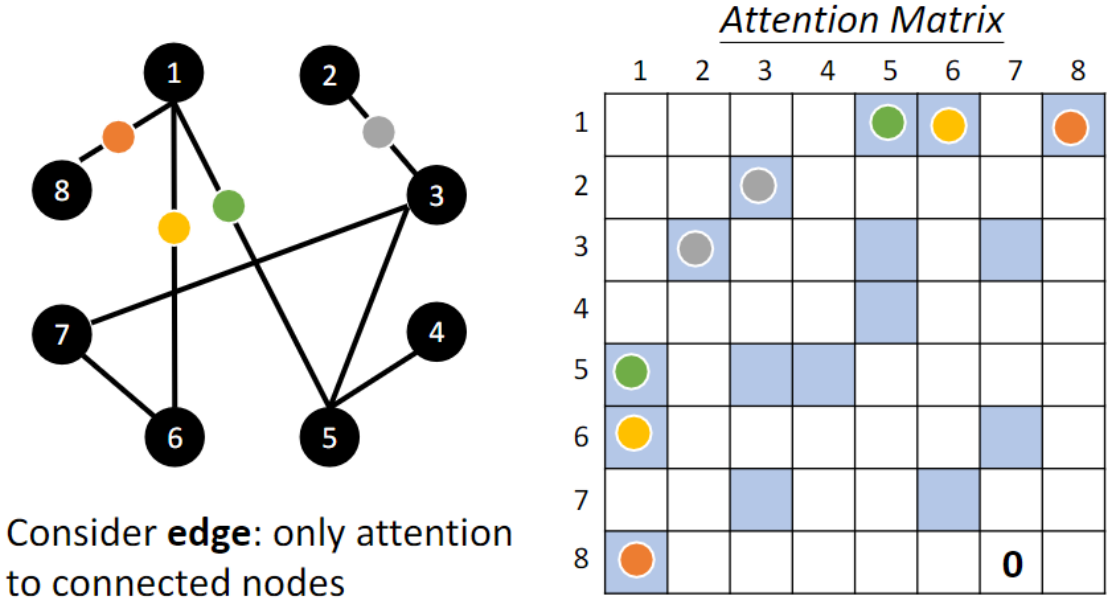
  一张图片可以看作是一个vector的set



  例如上图：每个位置的pixel都可以看作是一个三维的vector，所以这张图片是一个5×10的vectors set。self-attention处理图片的工作的例子：Self-Attention GAN、DEtection Transformer(DETR)

- ***self-attention for Graph***:

  在Graph里，每个**node**看作一个向量（保存有相关的信息）；另外，graph里还有**edge**的信息。哪些node相连——哪些node有关联性：因此，邻接矩阵表示了在做self-attention的计算时，只需要计算相连的node之间的关联性就好了。



没有相连的nodes之间就不用计算attention score了，可设置为0，因为这些可能是domain knowledge暗示下的这种nodes间没有关系。

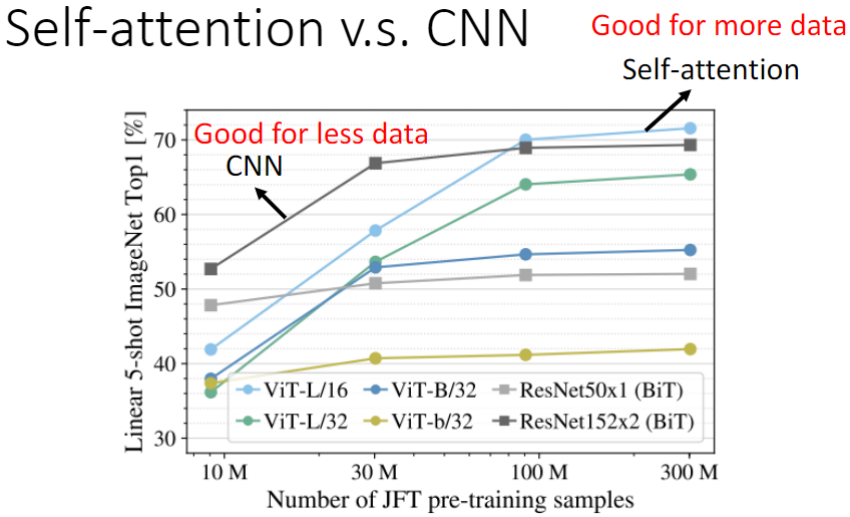
由此，提出了一个很fancy的network：***Graph Neural Network (GNN)图神经网络***。老师表示水很深，把握不住，感兴趣可以另外自行学习。

Self-attention和CNN的比较

CNN可以看作是一种简化版的Self-attention，它只关注于receptive field；而self-attention则关注整张图像。self-attention看作是复杂化的CNN，用attention找到有关联性的pixel，仿佛是network自动learn且决定自己的"receptive field"（不再是人工划定）

On the Relationship between Self-Attention and Convolutional Layers用数学的方式严谨的证明CNN是self-attention的一个特例。self-attention设定特定的参数就可以做到和CNN一样的事情。

由于self-attention相较于CNN更加flexible，为了避免过拟合，需要更多的数据才能达到更好的效果。而CNN在训练资料较少时表现相对较好，因为随着数据增多，CNN并没有得到更多好处。

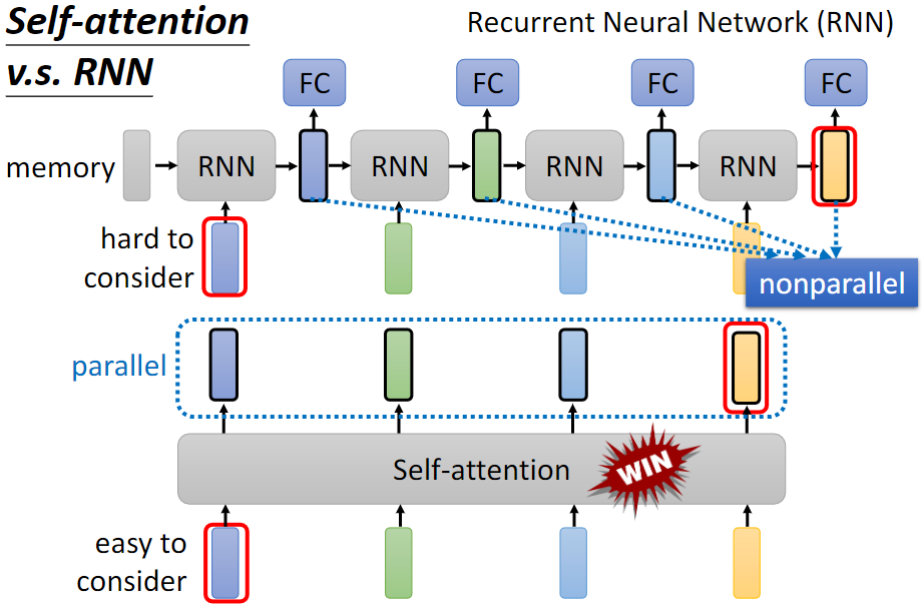


An Image is Worth 16x16 Words: Transformers for Image Recognition at Scale这篇文章用self-attention处理影像，它把一张图像拆成16×16个patch，把每个patch当作一个word处理。（当然这个数据集量一般研究者很难搜集到，这篇文章来自Google）

Conformer：一个CNN和Self-attention的混合体。

Self-attention和RNN的比较

RNN：Recurrent Neuroal Network（循环神经网络）和self-attention一样都是处理input是一个sequence的状况，在第一个RNN里扔进input第一个vector，然后output一个东西⇒hidden layer⇒FC⇒prediction，对于第二个RNN需要input第一个吐出来的东西以及input第二个vector再output东西，以此类推，如下图👇

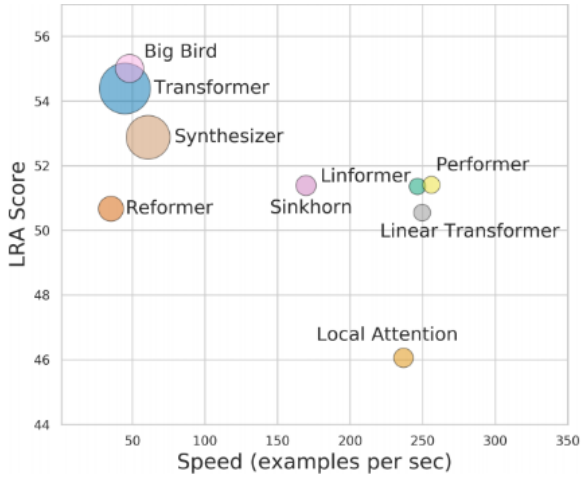


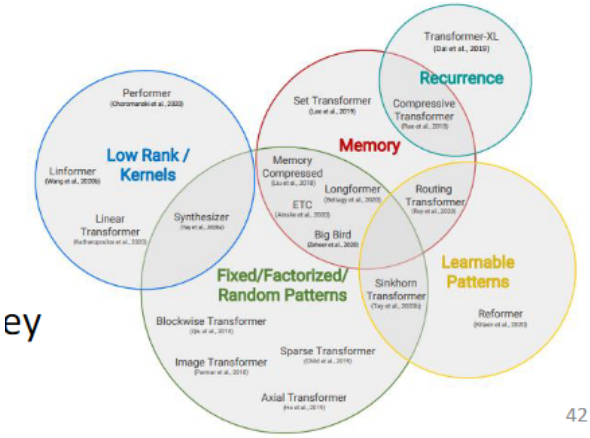
当然，RNN可以是双向的。两者不同的地方：对于RNN而言，距离较远的两个vector，如果前者不被memory一直记忆到输入处理后者的网络，两个向量很难产生关联性；而再attention里，输入向量是平行的，输出向量是平行的，只要match到，就可以产生任意两个向量的关联性。——天涯若比邻，aha

所以目前来看attention优于RNN，许多RNN架构都改为attention了。进一步了解两者关系：[Transformers are RNNs: Fast Autoregressive Transformers with Linear Attention]，attention加一点东西就会变成RNN。

延展

Self-attention有非常多的变形：[Long Range Arena: A Benchmark for Efficient Transformers]、[Efficient Transformers: A Survey]





ey

由于self-attention最大的问题就是运算量大，所以未来相关的问题很多关于如何变形以减少运算量，提高运算速度。如何使attention越来越好，也是未来尚待研究的问题。