2025.04.29 Visualize Attention

前回の振り返り&導入

The Annotated Transformerは難しかった

• 前回は"The Annotated Transformer"という有名な教材に従って、Transformerを実装しながら学ぼうとした

- 内容が難しすぎた。モデルの話は前提知識が無いと理解不能
- 70分ぐらいやって全体の5%ぐらいしか進めなかった
- 図やイラストが無く、文章だけで理解するのは難しい
- 聴講者の方々の反応も重かった

という反省を活かして・・・

今回は視覚的にわかる・面白い・軽めな内容

もっと視覚的に学ぶことを目指します

テーマ: Attention を可視化して直感的に理解する

今回の勉強会の内容目標

- Transformerの基礎(Attention)が感覚でわかる
- BERT内部の動きがイメージできる
- モデルを深く考える力がつく
- 次世代モデル (GPTなど) への理解が楽になる

目次

- 導入
 - ・今日のテーマ「BERTvizを使ってAttentionを"見る"体験をする」 ・TransformerとAttentionの簡単なおさらい
- 2章: Self-Attentionとは?
 - ・AttentionとSelf-Attentionの違い ・Self-Attentionのイメージ図(The cat sat on the mat)
- 3章: TransformerとBERTの基本構造
 - ・Transformerとは? ・Transformer Encoderとは? ・BERTとは? ・[CLS]と[SEP]とは? ・Layerとは?
 - ・出力は最後のLayerを使う
- 4章: BERTvizの紹介
 - ・BERTvizとは? ・BERTvizのモード紹介 ・Head Viewでは何を見る? ・BERTvizのAttention表示オプション(All / A→Aなど)
- 5章:BERTviz実演パート
 - ・実演の流れ ・例文 ・可視化時の観察ポイント
- 6章:ミニワーク(自分の文を可視化してみよう)
 - ・ミニワークの流れ ・おすすめ例文リスト
- 7章:まとめ(今日の振り返り)

"Attention" は結局何をしてるのか・何者なのかを体感する

具体的には、Attentionという仕組みを、可視化ツール[1]を使って実際に見ながら学んでいく 今日のゴールは、「Attentionってこういう風に働いているんだな」というイメージを持つこと

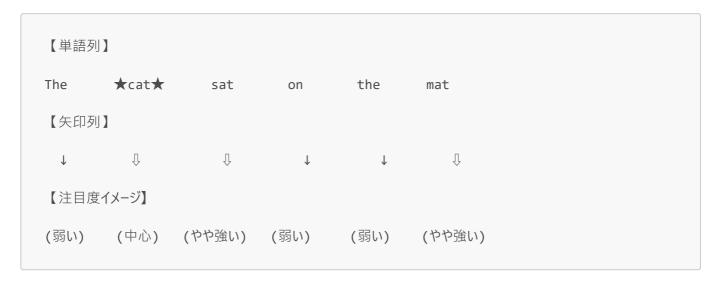
そもそも、Attention とは何か

概要

ざっくりいうと、入力系列(今回は文章)の中で、特に重要な部分に注目する仕組み

例えば、英文を読んでいるときに、「この単語は大事だな」とか、「この言葉に注意しよう」といった意識 を持っているイメージ

下記では、"The cat sat on the mat"という文でどのように Attention が計算されているかを見る。 下のイメージ図では、"cat"という単語に注目している



上記の図は、catを中心(★)として、各単語のAttentionのイメージを表している。

"cat"から "sat" と "mat" にやや強いAttentionが飛んでいるが、他はほとんど無視しているイメージ 上記の図ではcatを中心としているが、実際の計算では、左から右(The→cat→sat→...)に中心をずらして、全単 語それぞれが、全単語に対してAttentionを計算する

モデルも同じで、すべての単語を均等に見るのではなく、単語同士の関係を見ながら、どこに注目すべきか を決めている

少し混乱するかもしれないですが、上記のイメージ図は正確に言うと"Self-Attention"のイメージ図です。 普通の Attention では、

```
英語文: [I] [love] [you] ↓ ↓ ↓ ↓
```

日本語文: [私] [は] [あなたを] ← 生成中に英語文の単語を参照する

のように、出力系列の各ステップが、入力系列に注目するもので、翻訳タスクなどの、seq2seqモデル特有のものです。

Transformer の主力部分は上記の Attention ではなく "Self Attention" で、

のように、同じ系列内での Attention を計算することで、単独の文や系列内の関係性を深く理解するためのものです。

仕組み

モデルの中では、各単語が「特徴ベクトル」という形で表現され、このベクトルを使って、「今注目すべき 単語はどれか?」を判断する

具体的には、クエリ(Query)とキー(Key)というベクトルの内積を計算するつまり、内積が大きい、つまり似ている単語ほど、強く注目する(cos類似度?)次に、注目度に応じて"バリュー(Value)ベクトル"を重み付けして、情報をまとめるこの一連の流れが、Dot-product Attentionと呼ばれる仕組みここまでで、「Attentionは似ている単語に注目するんだな」というイメージが持てればOK数式で表すと、以下になる

\mathrm{Attention}(Q,K,V)
= \mathrm{softmax}\!\left(\frac{Q\,K^{\mathsf T}}{\sqrt{d_k}}\right)V

Transformer とは

概要

ここまで Attention について学んできました。ここからは、それがどう実際のモデルに使われているのかを見ていきます。

代表的なモデルとして、 Transformer があります。前回紹介してぐだった奴です。

前回も言いましたが、 Transformer は、もともと機械翻訳のために設計されていて、エンコーダ(入力を理解する)とデコーダ(出力を生成する)の2つの部分から成り立っています

英語 → Encoder(文章→ベクトル表現) → Decoder(ベクトル表現→文章) → 日本語

この中で、エンコーダ部分だけを取り出したものを Transformer Encoder と呼びます。

エンコーダ・デコーダ構造のものでも、エンコーダのみでも、デコーダのみでも Transformer と呼ぶみたいです。

Transformer Encoderは、入力された文章を読み取り、単語同士の関係性をSelf-Attentionを使って捉え、文章全体の意味をうまく内部に表現する役割を持っています。

文章 → Encoder(文章→ベクトル表現) → 文章全体の構造をコンピュータが把握

BERT について

BERT というものを知っていますか?

今日の可視化では、BERT というモデルを扱います。

これは、Transformer Encoderだけを積み重ねたもので、たくさんの文を左右両方向から読み取りながら、単語同士の関係を細かく捉えることができる言語モデルです。

つまり、BERTの内部にはたくさんのAttentionが走っていて、どの単語にどれくらい注目しているかが刻々と変わっています。

これを可視化することで、"モデルがどう意味を理解しているか"が見えるようになります

可視化ツール"BERTviz"について

BERTvizは、BERTモデル内部のAttentionを可視化するためのツールです。 Webブラウザ上で動作し、

- どの単語がどの単語に注目しているか
- その注目の強さはどれくらいか を、視覚的に確認することができます。BERTvizには大きく3つのモードがあります。
- Head view

これは、モデルの中の各Attentionヘッドごとに、「どの単語がどの単語を見ているか」を、線でまとめて見るモードです。

今日のメインはこれを使います!

Neuron view

これは、特定の単語同士のAttentionだけに注目して、 層やヘッドを細かく絞って見られるモードです。

「この関係を詳しく見たい!」というときに便利です。

Model view

これは、入力と出力のAttentionのつながりを見るモードですが、 BERTはエンコーダだけなので、今回はあまり使いません。

今日の勉強会では、 まずHead viewを使ってざっくり可視化を体験して、 もし興味があればNeuron viewも少し触ってみようと思います!

可視化してみよう

実際にBERTvizを動かして、 Attention の可視化をしていきます。

https://colab.research.google.com/drive/1hXIQ77A4TYS4y3UthWF-Ci7V7vVUoxmQ?usp=sharing のリンクから可視化ツールにアクセスしてください。

まず、Head viewからやってみようと思います 初期の状態だと、

```
sentence_a = "The cat sat on the mat"
sentence_b = "The cat lay on the rug"
```

という二つの文が設定されていると思います

BERTは2つの文を入力するのが標準みたいなのですが、いきなり2文のAttentionを行うのは難しいので、

```
sentence_a = "The cat sat on the mat"
sentence_b = ""
```

の状態にして、1文だけのAttentionを計算・可視化するようにしてください。 以下では、可視化GUIの各機能の説明をします

Attentionの表示オプションについて

GUIの上部分では、LayerとAttentionの設定と表示するヘッドの選択を行うことができます。 Layerについて説明をする前に、Attentionの設定について、最初に説明を行います。 上記の通り、BERTの入力は2つの文が標準になっています 例えば、

```
A文:"The cat sat."
B文:"The dog barked."
```

みたいに、2つの文を並べて入力して、文と文の関係(Next Sentence Prediction)を学習している。 ただし、

A→A: A文の単語がA文の単語を見る Self Attention だけを表示 A→B: A文の単語がB文の単語を見る Self Attention だけを表示 B→A: B文の単語がA文の単語を見る Self Attention だけを表示 B→B: B文の単語がB文の単語を見る Self Attention だけを表示

All: 上記全部を表示

のように、表示範囲を絞り Self Attention の結果を見ることもできる。

Layerについて

BertVizでは、Layerを0~11の範囲で指定でき、Layerの数値によって結果が変わります。 ここでは、Layerについて軽く説明します。

BERTは、入力された文を、 Self-AttentionとFeedForwardを組み合わせた層(Layer)を何段も通して処理していきます。

```
Input 文
↓
Layer 1
↓
Layer 2
↓
Layer 3
↓
…
↓
Layer 12(最終層) → 出力(CLSベクトルなど)
```

BERT-baseなら、層の数は12です。

通常、タスクに使うのは、最後(12層目)の出力です。

なぜなら、深い層に行くほど、意味のまとまりや文全体の特徴をしっかり捉えているからです。 ただし、タスクによっては少し工夫することもあります。

たとえば、9層~12層までを平均して使うとか、中間層(たとえば8層目)をわざと使うこともあります。

Layerのイメージ

• 浅い層 (Layer 1~3)

単語同士の近い関係や局所的な特徴を見る

モデルはまだあまり文脈を理解していないため、 文全体の代表である[CLS]に多くのAttentionを向けが ち。

手探りで「どこが大事なのか」を探している段階です。

• 中間層 (Layer 4~8)

文の構造を意識し始め、文脈を意識したAttentionが増える

主語と動詞の関係、目的語とのつながりなど、文法的な意味を理解しようとする

● 深い層 (Layer 9~12)

文全体の意味を抽象的に理解する

ただし、短くシンプルな文だと、意味的ターゲットがなくなり[SEP]にAttentionが流れることがある
→ 意味理解が完了して、Attentionが漂い始めることも

ただし、今回のように短いシンプルな文だと、意味的にこれ以上掘り下げるものがないため、

AttentionがSEPなどに流れてしまう現象が起こることがあります。

BERTvizでAttentionを見るときは、"層ごとの役割の違い"も意識しながら観察すると、 モデル内部の動きがもっと深く見えてきます!

CLS と SEP

Layerのイメージの所で、 CLS と SEP が出てきました。

• [CLS]とは?

Classification (分類) の略で、文全体の代表情報をまとめるために、文の先頭に挿入される特別なトークン

BERTでは、例えば、①文分類、②質問応答、③文と文の関係判定(Next Sentence Prediction) みたいなタスクのときに、[CLS]の出力ベクトルを使って最終予測をする

入力の一番最初に必ず置かれる

ざっくり言うと、「この文のまとめ役」

• [SEP]とは?

Separator(区切り) の略で、文章の終わりや、2つの文章の間に挿入するトークン BERTは1文だけじゃなく、2文を同時に入力できるから、どこで1文目が終わって2文目が始まるかを示す必要がある

文の終わりに必ず置かれる(1文だけのときも置く)

ざっくり言うと、「ここで文章が区切れてますよ」というしるし

入力のイメージ 一文を入れる場合

[CLS] The cat sat on the mat [SEP]

二文を入れる場合

[CLS] The cat sat. [SEP] The dog barked. [SEP]

CLSに Attention が飛んでいる場合は、文全体の意味をまとめている時 SEPに Attention が飛んでいる場合は、文の終わりを意識している時

ヘッドの種類について

現在、 Head Model を可視化しています。

BERTでは、Attentionヘッドというものが複数存在し、それぞれのヘッドごとに役割が違います。

色: 役割・機能の例

緑: 文全体をまとめる(CLSに情報を集める) ピンク: 文の区切り(SEP)を意識する

紫: 主語と動詞の対応を見る(文法構造意識)

オレンジ: 名詞句(the catなど)のまとまりを検出する

青: 単語間の係り受け(依存関係)を追う

赤: 動詞と目的語の関係(eat → appleなど)を捉える黄緑: 特定単語の自己保持(自分自身に注目する)水色: 代名詞(it, he, sheなど)の参照先を追う

灰色: 周辺単語に均等にAttentionを向ける(位置意識)

BERTの各Attentionヘッドは、学習を通して、だんだん得意な機能・役割を持つようになります。

例えば、あるヘッドは文全体をまとめる[CLS]に注目しやすくなったり、 またあるヘッドは、主語と動詞のつながりを意識するようになったり・・・

このスライドは、それらを色ごとにわかりやすくまとめた例です。

ただし注意してほしいのは、この色と役割は固定ではありません。

別のモデルや別の文では、色と機能の対応が変わることもあります。

ここで大事なのは、

- 各ヘッドが違う視点で文を見ている!
- だからこそTransformerは高い表現力を持てる!

ということです!

ミニワーク

ここからはミニワークです!

https://colab.research.google.com/drive/1hXIQ77A4TYS4y3UthWF-Ci7V7vVUoxmQ?usp=sharingを開いてください。

次に、自分で短い英文を1つ考えて入力してみましょう。

あまり長い文章だとAttentionがぐちゃぐちゃになりやすいので、 今回は5~10語くらいのシンプルな文をオススメします!

文章を入力できたら、BERTvizを使ってAttentionを可視化します。

最初は「Allヘッド表示」で全体をざっくり見てみましょう。 そのあと、興味が湧いたら特定のヘッドだけ選んで、

- 特定の単語に注目する
- 層を切り替えてみる

など、自由に触ってみてください!

観察するときのポイントは、

- 単語同士のつながり
- CLSやSEPへの注目
- 浅い層と深い層での違い
- ヘッドごとの違い

等に注目してみてください。

面白い気づきがあったら、あとでみんなで共有しましょう!

例文

「何を書いていいかわからない!|という人向けに、いくつかおすすめの英文を用意しました!

最初は、

```
"The cat sat on the mat."
"She loves programming."
```

のようなシンプルな文から始めてOKです。

もっと試してみたくなったら、 代名詞を含んだ文 ("it"がどこを指してるか?) とか、 少しだけ複雑な文に チャレンジしてみてください!

もし自分でオリジナルな文を考えたい人は、好きな英文でも大丈夫です!

どの単語がどこを見ているか、 どの層・どのヘッドで何が起きているか、 自由に観察して楽しんでみてください!

まとめ

今日の勉強会では、

- Attentionとは何か
- BERTとはどういうモデルか
- BERTvizを使って実際にAttentionを見てみる体験

をしてきました!

特に大事なことは、

- Attentionは「誰が誰を見ているか」を表す仕組みであること
- 層が深くなると単語間のつながりが意味的に深まること
- Attentionヘッドは、それぞれ違った視点で文を見ていること

です!

これから、自然言語処理のもっと高度なモデル(例えばT5やGPT系)を学んでいくときも、 Attention の動きを意識できると、モデルの理解がぐっと深まります!

今日学んだことを、ぜひ今後の勉強や研究にも活かしてください!

参考文献

[1] http://github.com/jessevig/bertviz