位置エンコーディング周りの諸検証

研究会 2024/11/27

情報数理システム分野 B4

平田蓮

目次

- **既存のモデルから位置エンコーディングを除去**
  - Encoderモデル（BERT）
  - Decoderモデル（GPT-2）
- **DecoderモデルのAttentionマスクで代用**
- **展望**

既存のモデルから位置エンコーディングを除去

位置エンコーディングを除去

位置エンコーディングが実際にどれほど重要なのかを調査

2種類のモデルで調査

- Encoderモデル（BERT）: 入力シーケンスを特徴量に変換
  - 様々な下流タスクに適用
  - 評価用のデータセットはIMDB[1]を起用 - 文章の2値分類データ
    - データ数は25000
- Decoderモデル（GPT-2）: 入力シーケンスに対して、（続く）トークンを生成
  - 評価用データセットはTruthfulQA[2]を起用 - 質問文章に続く解答生成データ
    - データ数は817

---

[1] https://ai.stanford.edu/~amaas/data/sentiment

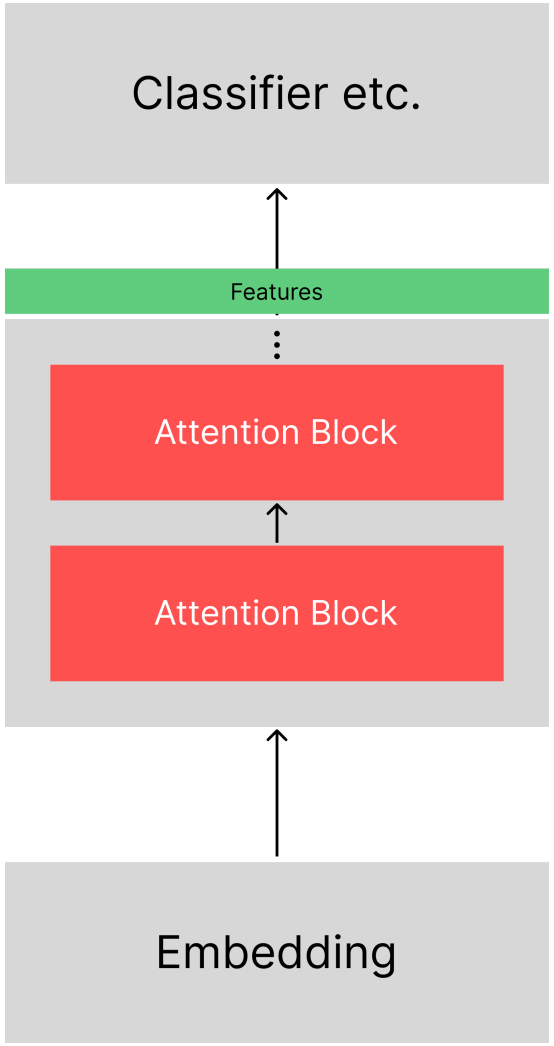
[2] S. Lin, et al., "TruthfulQA: Measuring How Models Mimic Human Falsehoods", arXiv:2109.07958, 2022

BERTの位置エンコーディングを除去

BERTの構造

- 入力 $\boldsymbol{x}$ - トークンのシーケンス（ $x_1, x_2, \cdots x_n$ ）
- 出力 $\boldsymbol{y}$ - トークンごとの特徴量（ $\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2, \cdots \boldsymbol{y}_n$ ）
  - 特徴量の次元は768（ $\boldsymbol{y}_i = \{y_{i,1}, y_{i,2}, \cdots y_{i,768}\}$ ）
  - 特徴量は正規化される
- 埋め込み機構 - 各トークンを768次元の埋め込みに変換 $\mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^{768}$
  - 単語埋め込み: トークンを表す添字を768次元のベクトルに変換
  - **位置埋め込み**: 位置を表す添字を768次元のベクトルに変換
  - これらの埋め込みを加算して、Encoderに与える
- Encoder機構 - Headを12個のMulti-Head Attentionのブロックが12層 $\mathbb{R}^{768} \rightarrow \mathbb{R}^{768}$

BERTの位置エンコーディングを除去



BERTの位置エンコーディングを除去

- 位置埋め込みの値を0にして加算しても影響がないように
- 位置埋め込みあり・なしのBERTの特徴量同士のコサイン類似度を算出
  - 同様の情報を持った特徴量ができているなら、高くなる - **要議論・検証**

BERTの位置エンコーディングを除去

- 位置埋め込みあり・なしのモデルでテストデータに対して特徴量を生成
- 各トークンの特徴量同士のコサイン類似度を算出
- データ全体で平均を取る

結果: 0.7702

BERTの位置エンコーディングを除去

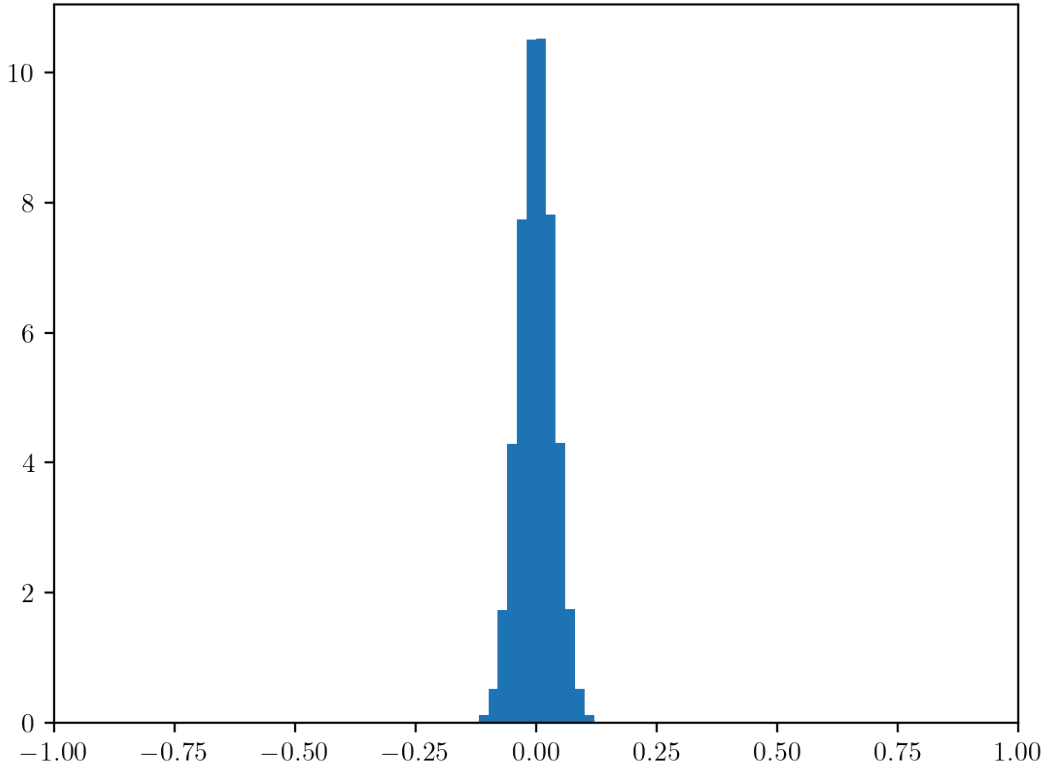
コサイン類似度0.7702は高いのか

- サンプリングで768次元のベクトルのコサイン類似度の分布を見てみる
- 平均が$\mathbf{0}$、分散共分散行列が単位行列の多次元正規分布の密度関数

$$\frac{1}{Z}\exp\left(-\frac{1}{2}{}^t\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}\right) = \frac{1}{Z}\exp\left(-\frac{1}{2}\|\boldsymbol{x}\|^2\right)$$

- 正規分布を用いたら方向について一様にサンプリングできる

BERTの位置エンコーディングを除去



高そう（少なくとも、位置埋め込みなしでも特徴量がランダムになったりはしない）

BERTの位置エンコーディングを除去

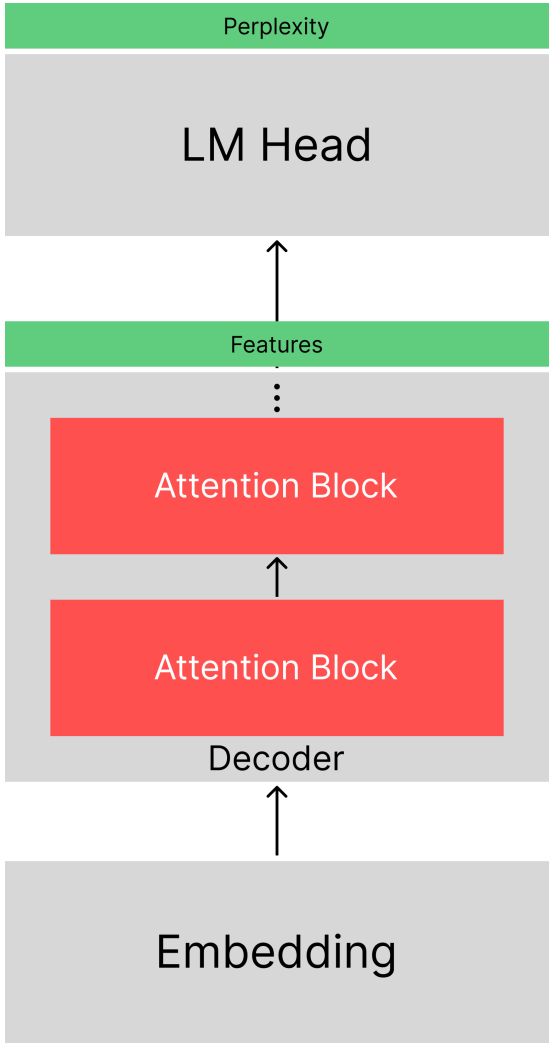
- **低くはない**コサイン類似度が得られた
- 位置埋め込みなしの特徴量が実際にどれくらい使えるのかは、**下流タスクのモデルを学習して評価する必要あり**

GPT-2の位置エンコーディングを除去

GPT-2の構造

- GPT-2はCausal LM（因果推論）のモデル
  - 入力シーケンスに対して、続くトークンを推論
- 入力 $\boldsymbol{x}$: トークンのシーケンス（ $x_1, x_2, \cdots x_n$ ）
- 出力: 各トークンの生成確率
  - GPT-2は50257種類のトークンを扱う（50257変数の離散確率分布）
- 埋め込み、Decoderの内部構造はBERTと類似
- 出力層 - 特徴量を生成確率分布に変換 $\mathbb{R}^{768} \rightarrow \mathbb{R}^{50257}$

GPT-2の位置エンコーディングを除去



GPT-2の位置エンコーディングを除去

- BERTと同様に、位置埋め込みを0にする
- 位置埋め込みあり・なしの生成確率のPerplexityを評価
  - Perplexityは因果推論モデルの流暢さを評価: $\mathrm{PPL} = \exp(\mathrm{CrossEntropy})$
- 各トークンのPerplexityの平均を全データについて取り比較
- Decoderの出力特徴量も、コサイン類似度をBERTの際と同様に算出

GPT-2の位置エンコーディングを除去

結果

コサイン類似度: 0.9291

モデル	Perplexity
位置埋め込みあり	111.2409
位置埋め込みなし	712014.3125

GPT-2の位置エンコーディングを除去

- うまく推論できない
- （おそらく）因果推論タスクは続くトークンを推論するため、位置情報が重要
- コサイン類似度がBERTのときより高いので、BERTの下流タスクも厳しいかも
    - しかし、直感では下流タスクによって位置情報の優先度は変わりそう

Decoderモデルの位置エンコーディングをAttentionマスクで代用

位置エンコーディングをAttentionマスクで代用

位置エンコーディングの除去可能性を模索

- 因果推論モデルでは位置埋め込みをなくすとうまく推論ができなかった
- 位置埋め込みをなくす代わりに、Attentionマスクに位置情報を持たせられないか

位置エンコーディングをAttentionマスクで代用

Attentionマスクとは

- 因果推論モデルでは、参照できるトークンを示すためにマスクが与えられる
- [因果, 推論, モデル, で, は, 、, 参照, でき]というデータを学習する時に、シーケンスの始めから学習
- [因果, 推論, モデル]の次の「で」を学習する際は、「で」以降のトークンについてはAttentionを計算したくない
- [1, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 0]というマスクを与える

位置エンコーディングをAttentionマスクで代用

仮説

- GPT-2の位置埋め込みは加算される（事実）
  - 埋め込みのノルムに位置情報が乗っている可能性 - **要調査**
- マスクは埋め込みに乗算される（事実）
  - マスクでノルムを弄れば、位置情報が乗る可能性

位置エンコーディングをAttentionマスクで代用

実際に、マスクを変更してみる

- 前述の例では、[1, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 0]
- [0.1, 0.55, 1, 0, 0, 0, 0, 0]のように、推論するトークンから離れるほどマスクの値が小さくなるように
- とりあえず、1から0.1にかけて線形で変化させる

位置エンコーディングをAttentionマスクで代用

結果

デフォルトマスクと線形マスクの特徴量のコサイン類似度: 0.9347

モデル	Perplexity
位置埋め込みあり	111.2409
位置埋め込みなし・デフォルトマスク	712014.3125
位置埋め込みなし・線形マスク	11897.4824

- 位置埋め込みには及ばないが、デフォルトマスクに比べてPerplexityが低下
- 擬似的な位置情報が乗り、推論性能が向上 - **要調査**

展望

- **Encoderモデルにおける位置埋め込みの除去**
  - 下流タスクでの評価
    - **学習が必要**
  - 除去できたところで、有効性が特に見えていない
    - 計算量が落とせるとか……？
- **Decoderモデルの位置エンコーディングをAttentionマスクで代用**
  - 本当にマスクで位置情報が乗せられるのか調査
    - 調査方法が思い浮かんでいない
    - 先行研究も見つけられず
  - ↑の結果に基づいた、より有用なマスクの考案