8 Mar Transformer升级之路：1、Sinusoidal位置编码追根溯源

By 苏剑林 | 2021-03-08 | 44681位读者

最近笔者做了一些理解和改进Transformer的尝试，得到了一些似乎还有价值的经验和结论，遂开一个专题总结一下，命名为"Transformer升级之路"，既代表理解上的深入，也代表结果上的改进。

作为该专题的第一篇文章，笔者将会介绍自己对Google在《Attention is All You Need》中提出来的Sinusoidal位置编码

$$\left\{\begin{aligned}&\boldsymbol{p}_{k,2i}=\sin\left(k/10000^{2i/d}\right)\\ &\boldsymbol{p}_{k,2i+1}=\cos\left(k/10000^{2i/d}\right)\end{aligned}\right.\tag{1}$$

的新理解，其中$\boldsymbol{p}_{k,2i},\boldsymbol{p}_{k,2i+1}$分别是位置$k$的编码向量的第$2i,2i+1$个分量，$d$是向量维度。

作为位置编码的一个显式解，Google在原论文中对它的描述却寥寥无几，只是简单提及了它可以表达相对位置信息，后来知乎等平台上也出现了一些解读，它的一些特点也逐步为大家所知，但总体而言比较零散。特别是对于"它是怎么想出来的"、"非得要这个形式不可吗"等原理性问题，还没有比较好的答案。

因此，本文主要围绕这些问题展开思考，可能在思考过程中读者会有跟笔者一样的感觉，即越思考越觉得这个设计之精妙漂亮，让人叹服～

泰勒展开

假设我们的模型为$f(\cdots,\boldsymbol{x}_m,\cdots,\boldsymbol{x}_n,\cdots)$，其中标记出来的$\boldsymbol{x}_m,\boldsymbol{x}_n$分别表示第$m,n$个输入，不失一般性，设$f$是标量函数。像Transformer这样的纯Attention模型，它是全对称的，即对于任意的m,n，都有

$$f(\cdots,\boldsymbol{x}_m,\cdots,\boldsymbol{x}_n,\cdots)=f(\cdots,\boldsymbol{x}_n,\cdots,\boldsymbol{x}_m,\cdots)\tag{2}$$

这就是我们说Transformer无法识别位置的原因——全对称性，简单来说就是函数天然满足恒等式$f(x,y)=f(y,x)$，以至于我们无法从结果上区分输入是$[x,y]$还是$[y,x]$。

因此，我们要做的事情，就是要打破这种对称性，比如在每个位置上都加上一个不同的编码向量：

$$\tilde{f}(\cdots,\boldsymbol{x}_m,\cdots,\boldsymbol{x}_n,\cdots)=f(\cdots,\boldsymbol{x}_m+\boldsymbol{p}_m,\cdots,\boldsymbol{x}_n+\boldsymbol{p}_n,\cdots)\tag{3}$$

一般来说，只要每个位置的编码向量不同，那么这种全对称性就被打破了，即可以用$\tilde{f}$代替f来处理有序的输入。但现在我们希望能进一步分析位置编码的性质，甚至得到一个显式解，那么就不能止步于此。

为了简化问题，我们先只考虑m,n这两个位置上的位置编码，将它视为扰动项，泰勒展开到二阶：

$$\tilde{f}\approx f+\boldsymbol{p}_m^{\top}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{x}_m}+\boldsymbol{p}_n^{\top}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{x}_n}+\frac{1}{2}\boldsymbol{p}_m^{\top}\frac{\partial^2 f}{\partial \boldsymbol{x}_m^2}\boldsymbol{p}_m+\frac{1}{2}\boldsymbol{p}_n^{\top}\frac{\partial^2 f}{\partial \boldsymbol{x}_n^2}\boldsymbol{p}_n+\underbrace{\boldsymbol{p}_m^{\top}\frac{\partial^2 f}{\partial \boldsymbol{x}_m\partial \boldsymbol{x}_n}\boldsymbol{p}_n}_{\boldsymbol{p}_m^{\top}\mathcal{H}\boldsymbol{p}_n}\tag{4}$$

可以看到，第1项跟位置无关，第2到5项都只依赖于单一位置，所以它们是纯粹的绝对位置信息，第6项是第一个同时包含$\boldsymbol{p}_m,\boldsymbol{p}_n$的交互项，我们将它记为$\boldsymbol{p}_m^{\top}\mathcal{H}\boldsymbol{p}_n$，希望它能表达一定的相对位置信息。

（此处的泰勒展开参考了知乎问题《BERT为何使用学习的position embedding而非正弦position encoding?》上的纳米酱的回复。）

相对位置

我们先从简单的例子入手，假设$\boldsymbol{\mathcal{H}}=\boldsymbol{I}$是单位矩阵，此时$\boldsymbol{p}_m^{\top}\boldsymbol{\mathcal{H}}\boldsymbol{p}_n=\boldsymbol{p}_m^{\top}\boldsymbol{p}_n=\langle\boldsymbol{p}_m,\boldsymbol{p}_n\rangle$是两个位置编码的内积，我们希望在这个简单的例子中该项表达的是相对位置信息，即存在某个函数g使得

$$\langle\boldsymbol{p}_m,\boldsymbol{p}_n\rangle=g(m-n)\tag{5}$$

这里的$\boldsymbol{p}_m,\boldsymbol{p}_n$是$d$维向量，这里我们从最简单$d=2$入手。

对于2维向量，我们借助复数来推导，即将向量$[x,y]$视为复数$x+yi$，根据复数乘法的运算法则，我们不难得到：

$$\langle\boldsymbol{p}_m,\boldsymbol{p}_n\rangle=\text{Re}[\boldsymbol{p}_m\boldsymbol{p}_n^*]\tag{6}$$

其中$\boldsymbol{p}_n^*$是$\boldsymbol{p}_n$的共轭复数，$\text{Re}[]$代表复数的实部。为了满足式(5)，我们可以假设存在复数$\boldsymbol{q}_{m-n}$使得

$$\boldsymbol{p}_m\boldsymbol{p}_n^*=\boldsymbol{q}_{m-n}\tag{7}$$

这样两边取实部就得到了式(5)。为了求解这个方程，我们可以使用复数的指数形式，即设$\boldsymbol{p}_m=r_m e^{i\phi_m},\boldsymbol{p}_n^*=r_n e^{-i\phi_n},\boldsymbol{q}_{m-n}=R_{m-n}e^{i\Phi_{m-n}}$得到

$$r_m r_n e^{i(\phi_m-\phi_n)}=R_{m-n}e^{i\Phi_{m-n}}\quad\Rightarrow\quad\left\{\begin{aligned}&r_m r_n=R_{m-n}\\ &\phi_m-\phi_n=\Phi_{m-n}\end{aligned}\right.\tag{8}$$

对于第一个方程，代入$n=m$得$r_m^2=R_0$，即r_m是一个常数，简单起见这里设为1就好；对于第二个方程，代入$n=0$得$\phi_m-\phi_0=\Phi_m$，简单起见设$\phi_0=0$，那么$\phi_m=\Phi_m$，即$\phi_m-\phi_n=\phi_{m-n}$，代入$n=m-1$得$\phi_m-\phi_{m-1}=\phi_1$，那么$\{\phi_m\}$只是一个等差数列，通解为$m\theta$，因此我们就得到二维情形下位置编码的解为：

$$\boldsymbol{p}_m=e^{im\theta}\quad\Leftrightarrow\quad\boldsymbol{p}_m=\begin{pmatrix}\cos m\theta\\ \sin m\theta\end{pmatrix}\tag{9}$$

由于内积满足线性叠加性，所以更高维的偶数维位置编码，我们可以表示为多个二维位置编码的组合：

$$\boldsymbol{p}_m=\begin{pmatrix}e^{im\theta_0}\\ e^{im\theta_1}\\ \vdots\\ e^{im\theta_{d/2-1}}\end{pmatrix}\quad\Leftrightarrow\quad\boldsymbol{p}_m=\begin{pmatrix}\cos m\theta_0\\ \sin m\theta_0\\ \cos m\theta_1\\ \sin m\theta_1\\ \vdots\\ \cos m\theta_{d/2-1}\\ \sin m\theta_{d/2-1}\end{pmatrix}\tag{10}$$

它同样满足式(5)。当然，这只能说是式(5)的一个解，但不是唯一解，对于我们来说，求出一个简单的解就行了。

远程衰减

基于前面的假设，我们推导出了位置编码的形式(10)，它跟标准的Sinusoidal位置编码(1)形式基本一样了，只是$\sin, \cos$的位置有点不同。一般情况下，神经网络的神经元都是无序的，所以哪怕打乱各个维度，也是一种合理的位置编码，因此除了各个θ_i没确定下来外，式(10)和式(1)并无本质区别。

式(1)的选择是$\theta_i = 10000^{-2i/d}$，这个选择有什么意义呢？事实上，这个形式有一个良好的性质：它使得随着$|m-n|$的增大，$\langle \boldsymbol{p}_m, \boldsymbol{p}_n\rangle$有着趋于零的趋势。按照我们的直观想象，相对距离越大的输入，其相关性应该越弱，因此这个性质是符合我们的直觉的。只是，明明是周期性的三角函数，怎么会呈现出衰减趋势呢？

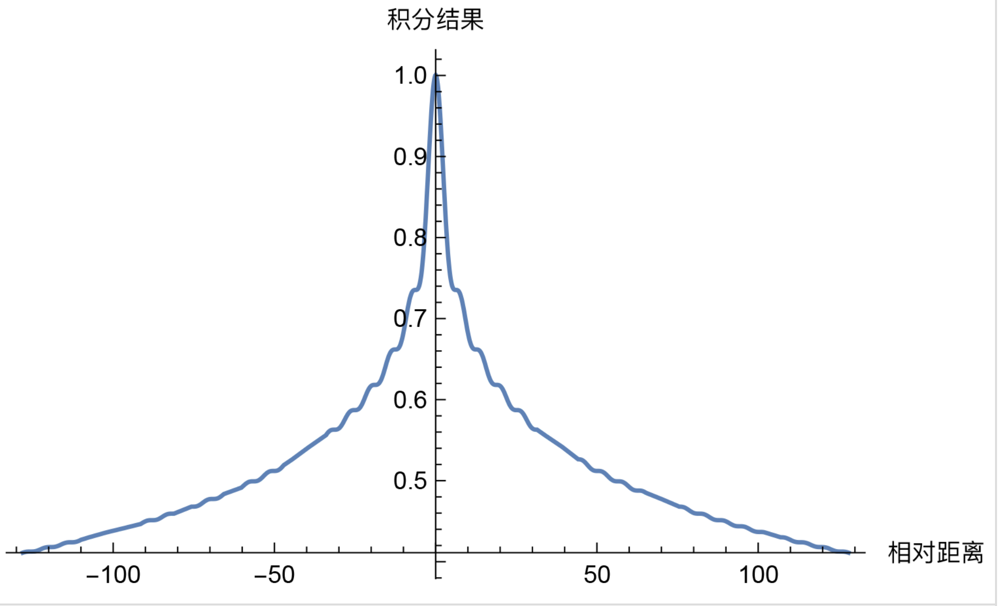
这的确是个神奇的现象，源于高频振荡积分的渐近趋零性。具体来说，我们将内积写为

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{p}_m, \boldsymbol{p}_n\rangle =&\, \text{Re}\left[e^{i(m-n)\theta_0} + e^{i(m-n)\theta_1} + \cdots + e^{i(m-n)\theta_{d/2-1}}\right]\\ =&\,\frac{d}{2}\cdot\text{Re}\left[\sum_{i=0}^{d/2-1} e^{i(m-n)10000^{-i/(d/2)}}\frac{1}{d/2}\right]\\ \sim&\, \frac{d}{2}\cdot\text{Re}\left[\int_0^1 e^{i(m-n)\cdot 10000^{-t}}dt\right]\end{aligned}\tag{11}$$

这样问题就变成了积分$\int_0^1 e^{i(m-n)\theta_t}dt$的渐近估计问题了。其实这种振荡积分的估计在量子力学中很常见，可以利用其中的方法进行分析，但对于我们来说，最直接的方法就是通过Mathematica把积分结果的图像画出来：

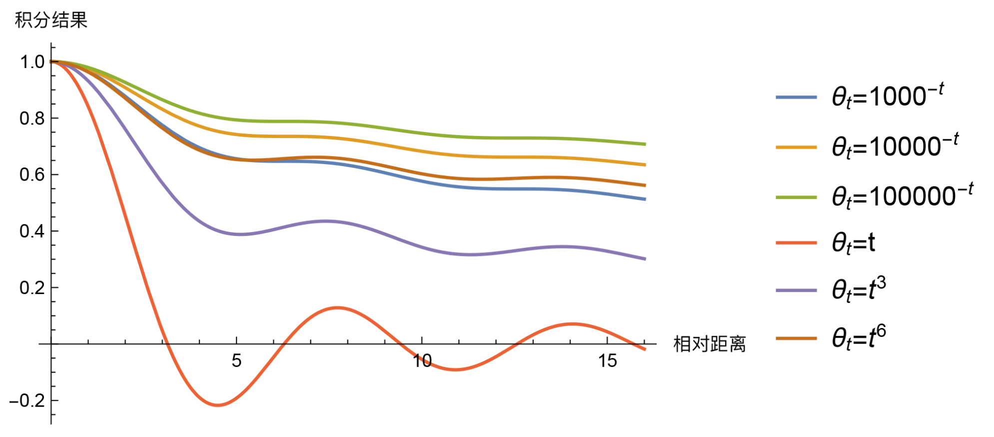
```
\[Theta][t_] = (1/10000)^t;
f[x_] = Re[Integrate[Exp[I*x*\[Theta][t]], {t, 0, 1}]];
Plot[f[x], {x, -128, 128}]
```

然后从图像中我们就可以看出确实具有衰减趋势：

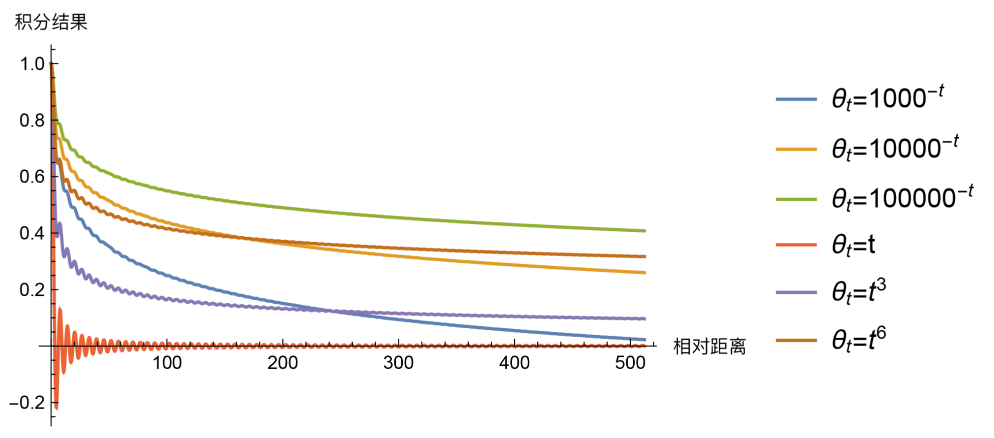


通过直接积分估计Sinusoidal位置编码的内积衰减趋势

那么，问题来了，必须是$\theta_t = 10000^{-t}$才能呈现出远程衰减趋势吗？当然不是。事实上，对于我们这里的场景，“几乎”每个$[0,1]$上的单调光滑函数θ_t，都能使得积分$\int_0^1 e^{i(m-n)\theta_t}dt$具有渐近衰减趋势，比如幂函数$\theta_t = t^\alpha$。那么，$\theta_t = 10000^{-t}$有什么特别的吗？我们来比较一些结果。



几个不同的θt的积分结果（短距离趋势）



几个不同的θt的积分结果（长距离趋势）

就这样看上去，除了$\theta_t = t$比较异常之外（与横轴有交点），其他都没有什么明显的区分度，很难断定孰优孰劣，无非就是幂函数在短距离降得快一点，而指数函数则在长距离降得快一点，θ_t整体越接近于0，那么整体就降得慢一些，等等。如此看来$\theta_t = 10000^{-t}$也只是一个折中的选择，没有什么特殊性，要是笔者来选，多半会选$\theta_t = 1000^{-t}$。还有一个方案是，直接让$\theta_i = 10000^{-2i/d}$作为各个θ_i的初始化值，然后将它设为可训练的，由模型自动完成微调，这样也不用纠结选哪个了。

一般情况

前面两节中，我们展示了通过绝对位置编码来表达相对位置信息的思想，加上远程衰减的约束，可以“反推”出Sinusoidal位置编码，并且给出了关于θ_i的其他选择。但是别忘了，到目前为止，我们的推导都是基于$\mathcal{H} = \boldsymbol{I}$这个简单情况的，对于一般的$\mathcal{H}$，使用上述Sinusoidal位置编码，还能具备以上的良好性质吗？

如果$\mathcal{H}$是一个对角阵，那么上面的各个性质可以得到一定的保留，此时

$$\boldsymbol{p}_m^{\top}\mathcal{H}\boldsymbol{p}_n = \sum_{i=1}^{d/2}\mathcal{H}_{2i,2i}\cos m\theta_i\cos n\theta_i + \mathcal{H}_{2i+1,2i+1}\sin m\theta_i\sin n\theta_i \tag{12}$$

由积化和差公式得到

$$\sum_{i=1}^{d/2}\frac{1}{2}\left(\mathcal{H}_{2i,2i} + \mathcal{H}_{2i+1,2i+1}\right)\cos(m-n)\theta_i + \frac{1}{2}\left(\mathcal{H}_{2i,2i} - \mathcal{H}_{2i+1,2i+1}\right)\cos(m+n)\theta_i \tag{13}$$

可以看到它也是确实包含了相对位置$m-n$，只不过可能会多出$m+n$这一项，如果不需要它，模型可以让

$\mathcal{H}_{2i,2i}=\mathcal{H}_{2i+1,2i+1}$来消除它。在这个特例下，我们指出的是Sinusoidal位置编码赋予了模型学习相对位置的可能，至于具体需要什么位置信息，则由模型的训练自行决定。

特别地，对于上式，远程衰减特性依然存在，比如第一项求和，类比前一节的近似，它相当于积分

$$\sum_{i=1}^{d/2}\frac{1}{2}\left(\mathcal{H}_{2i,2i}+\mathcal{H}_{2i+1,2i+1}\right)\cos(m-n)\theta_i\sim\int_0^1 h_t e^{i(m-n)\theta_t}dt \tag{14}$$

同样地，振荡积分的一些估计结果（参考《Oscillatory integrals》、《学习笔记3-一维振荡积分与应用》等）告诉我们，该振荡积分在比较容易达到的条件下，有$|m-n|\to\infty$时积分值趋于零，因此远程衰减特性是可以得到保留的。

如果$\mathcal{H}$不是对角阵，那么很遗憾，上述性质都很难重现的。我们只能寄望于$\mathcal{H}$的对角线部分占了主项，这样一来上述的性质还能近似保留。对角线部分占主项，意味着d维向量之间任意两个维度的相关性比较小，满足一定的解耦性。对于Embedding层来说，这个假设还是有一定的合理性的，笔者检验了BERT训练出来的词Embedding矩阵和位置Embedding矩阵的协方差矩阵，发现对角线元素明显比非对角线元素大，证明了对角线元素占主项这个假设具有一定的合理性。

问题讨论

有读者会反驳：就算你把Sinusoidal位置编码说得无与伦比，也改变不了直接训练的位置编码比Sinusoidal位置编码效果要好的事实。的确，有实验表明，在像BERT这样的经过充分预训练的Transformer模型中，直接训练的位置编码效果是要比Sinusoidal位置编码好些，这个并不否认。本文要做的事情，只是从一些原理和假设出发，推导Sinusoidal位置编码为什么可以作为一个有效的位置，但并不是说它一定就是最好的位置编码。

推导是基于一些假设的，如果推导出来的结果不够好，那么就意味着假设与实际情况不够符合。那么，对于Sinusoidal位置编码来说，问题可能出现在哪呢？我们可以逐步来反思一下。

第一步，泰勒展开，这个依赖于$\boldsymbol{p}$是小量，笔者也在BERT中做了检验，发现词Embedding的平均模长要比位置Embedding的平均模长大，这说明$\boldsymbol{p}$是小量某种程度上是合理的，但是多合理也说不准，因为Embedding模长虽然更大但也没压倒性；第二步，假设$\mathcal{H}$是单位阵，因为上一节我们分析了它很可能是对角线占主项的，所以先假设单位阵可能也不是太大的问题；第三步，假设通过两个绝对位置向量的内积来表达相对位置，这个直觉上告诉我们应该是合理的，绝对位置的相互应当有能力表达一定程度的相对位置信息；最后一步，通过自动远程衰减的特性来确定θ_i，这个本身应该也是好的，但就是这一步变数太大，因为可选的θ_i形式太多，甚至还有可训练的θ_i，很难挑出最合理的，因此如果说Sinusoidal位置编码不够好，这一步也非常值得反思。

文章小结

总的来说，本文试图基于一些假设，反推出Sinusoidal位置编码来，这些假设具有其一定的合理性，也有一定的问题，所以相应的Sinusoidal位置编码可圈可点，但并非毫无瑕疵。但不管怎样，在当前的深度学习中，能够针对具体的问题得到一个显式解，而不是直接暴力拟合，Sinusoidal位置编码是一个不可多得的案例，值得我们思考回味。

如果您需要引用本文，请参考：

苏剑林. (Mar. 08, 2021). 《Transformer升级之路：1、Sinusoidal位置编码追根溯源 》[Blog post]. Retrieved from https://kexue.fm/archives/8231

```
@online{kexuefm-8231,
    title={Transformer升级之路：1、Sinusoidal位置编码追根溯源},
    author={苏剑林},
    year={2021},
    month={Mar},
    url={\url{https://kexue.fm/archives/8231}},
}
```