

注意機構とトランスフォーマー

本谷 秀堅

名古屋工業大学

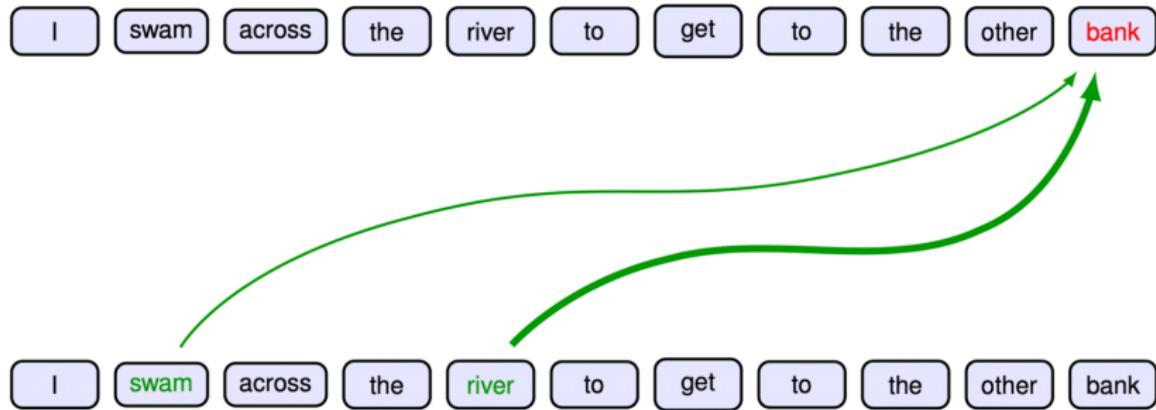
Transformer (トランスフォーマー)

注意機構 (Attention) を核とするニューラルネットワーク

言語データ（再掲）

言語データ

- ・シンボルの系列
- ・離れたシンボル間に強い関係
- ・シンボル間の非対称な関係（例：対義語・類義語・包含関係）



Word2Vec による単語ベクトルの埋め込み

- 埋め込み先は文脈に依存せずに同じ
 - bank を表すベクトルは、堤のときも銀行のときも同じ

$$h = Wx$$

言語データと分布仮説（再掲）

分布仮説

単語の意味はその単語の周辺に現れる単語、すなわち文脈 (context) によって決まる

注意機構の目的

各単語の変換先を、系列中の他の単語に依存して変化させたい

- I swam across the river to get to the other **bank**.
 - “bank” は river の近くへと変換
- I walked across the road to get cash from the **bank**.
 - “bank” は money の近くへと変換

注意機構により文脈に依存して各単語の埋め込み先を変化させる

- 特徴ベクトルのことを「トークン (token)」と呼ぶ。

方針

文脈中のすべての単語を参照して、各単語の埋め込み先を決める

- 入力： N 単語。それぞれ D 次元のベクトル（トークン）で表現

$$\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N \quad (\mathbf{x}_n \in \mathbb{R}^D)$$

- 出力：各単語の変換後の D 次元トークン

$$\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \dots, \mathbf{y}_N \quad (\mathbf{y}_n \in \mathbb{R}^D)$$

文脈中の各単語の荷重平均を埋め込み先とする

$$\mathbf{y}_n = \sum_{m=1}^N a_{nm} \mathbf{x}_m$$

注意プーリング (Attention Pooling)

注意プーリング (pooling: 集約するの意)

a_{nm} : 注意の強さ ($a_{nm} > 0$, $\sum_{m=1}^N a_{nm} = 1$)

$$\mathbf{y}_n = \sum_{m=1}^N a_{nm} \mathbf{x}_m$$

注意の強さを文脈に応じて決めたい

- I swam across the river to get to the other bank.
 - “bank” は river と似た方向へと変換
- I walked across the road to get cash from the bank.
 - “bank” は money と似た方向と変換

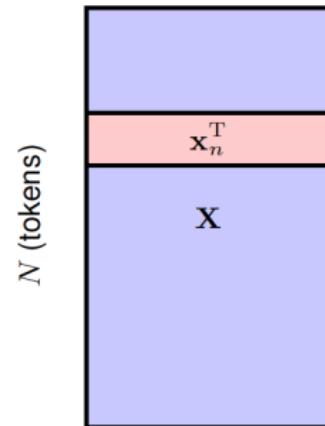
記法

- N 単語
- 各単語はベクトルで表現 $\mathbf{x}_n \in \mathbb{R}^D$
- 文脈は行列で表現 : $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{N \times D}$

$$\mathbf{X} = [\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n]^\top$$

- 出力も行列で表現 : $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{N \times D}$

$$\mathbf{Y} = [\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \dots, \mathbf{y}_n]^\top$$



注意の大きさを文脈で決める（案1）

もともと似たベクトルどうしを強い重みで

$$a_{nm} = \frac{\exp(\mathbf{x}_n^\top \mathbf{x}_m)}{\sum_k \exp(\mathbf{x}_n^\top \mathbf{x}_k)}$$



$$\mathbf{A} = \text{SM}(\mathbf{X} \mathbf{X}^\top) \in \mathbb{R}^{N \times N},$$

$$\mathbf{Y} = \mathbf{A} \mathbf{X} = \text{SM}(\mathbf{X} \mathbf{X}^\top) \in \mathbb{R}^{N \times N}.$$

- トークン間の類似度を内積で評価する場合の式
- 行列 \mathbf{A} の (n, m) 要素が a_{nm}
- Softmax は各行で計算
- $\mathbf{X} \mathbf{X}^\top$ は対称行列
- a_{nm} に「学習」の余地無し。柔軟性に欠ける。

注意の大きさを文脈で決める（案2）

注意の大きさの決め方を学習する

$$\tilde{\mathbf{X}} = \mathbf{X}\mathbf{U}$$

上記 $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{D \times D}$ を学習する

$$\mathbf{A} = \text{SM}(\mathbf{X}\mathbf{U}\mathbf{U}^\top\mathbf{X}^\top),$$

$$\mathbf{Y} = \text{SM}(\mathbf{X}\mathbf{U}\mathbf{U}^\top\mathbf{X}^\top)\mathbf{X}\mathbf{U}.$$

- 案1より柔軟
- $\mathbf{X}\mathbf{U}\mathbf{U}^\top\mathbf{X}^\top$ は対称行列
- Softmax 関数を適用すると対称ではなくなるが大小関係は維持される
- 包含関係、対義語、類義語、指示代名詞など複雑な関係の表現には自由度が不足

注意の大きさを文脈で決める（注意機構）

注意の大きさの決め方：クエリ・キー・バリューの考え方を採用する

$$a_{nm} = \frac{\exp(\mathbf{q}_n^\top \mathbf{k}_m)}{\sum_k \exp(\mathbf{q}_n^\top \mathbf{k}_k)}$$

↑

$$\begin{aligned}\mathbf{Q} &= \mathbf{X} \mathbf{W}^{(q)}, \\ \mathbf{K} &= \mathbf{X} \mathbf{W}^{(k)}, \\ \mathbf{V} &= \mathbf{X} \mathbf{W}^{(v)}.\end{aligned}$$

行列 $\mathbf{W}^{(q)}$, $\mathbf{W}^{(k)}$, $\mathbf{W}^{(v)}$ を学習により決める。
 $\mathbf{W}^{(q)}, \mathbf{W}^{(k)} \in \mathbb{R}^{D \times D_k}$, $\mathbf{W}^{(v)} \in \mathbb{R}^{D \times D_v}$

$$\mathbf{Y} = \text{SM}(\mathbf{Q} \mathbf{K}^\top) \mathbf{V}$$

(復習) クエリ・キー・バリュー

- キー (key) とバリュー (value: 値) の組のデータ集合
- クエリ (query) による検索

例：

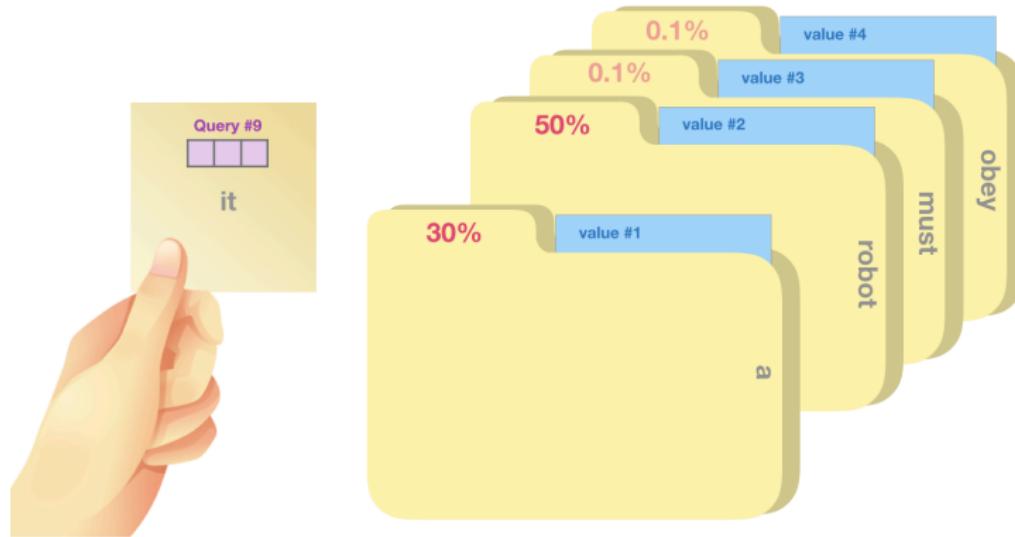
- データ集合:

$$\mathcal{D} = \{(\text{“夏目"}, \text{“漱石"}), (\text{“森"}, \text{“鷗外"}), (\text{“中島"}, \text{“敦"}), (\text{“松尾"}, \text{“芭蕉"})\}$$

- 検索 : query = “森”

検索結果 : value = “鷗外”

(復習) クエリ・キー・バリュー



注意機構 (1/2)

$$\mathbf{Y} = \text{SM}(\mathbf{Q}\mathbf{K}^\top)\mathbf{V}$$

① 行列 $\mathbf{W}^{(q)}, \mathbf{W}^{(k)}$ を学習する

- key-vector の次元を D_k で表すと、いずれも $\mathbb{R}^{D \times D_k}$

② $\mathbf{Q} = \mathbf{X}\mathbf{W}^{(q)}, \mathbf{K} = \mathbf{X}\mathbf{W}^{(k)}$

- n 番目の単語のクエリ (\mathbf{q}_n) とキー (\mathbf{k}_n) は次のとおり

$$\mathbf{q}_n^\top = \mathbf{x}_n^\top \mathbf{W}^{(q)}, \quad \mathbf{k}_n^\top = \mathbf{x}_n^\top \mathbf{W}^{(k)}$$

③ n 番目の単語を変換するために $m = 1, 2, \dots, N$ 番目の単語を参照

$$\mathbf{q}_n^\top \mathbf{k}_m = (\mathbf{Q}\mathbf{K}^\top)_{nm}$$

④ $\mathbf{Q}\mathbf{K}^\top$ の各行で Softmax を計算

$$a_{nm} = \frac{\exp(\mathbf{q}_n^\top \mathbf{k}_m)}{\sum_k \exp(\mathbf{q}_n^\top \mathbf{k}_k)}$$

注意機構 (2/2)

$$\mathbf{Y} = \text{SM}(\mathbf{Q}\mathbf{K}^\top)\mathbf{V}$$

- 行列 $\mathbf{W}^{(v)} \in \mathbb{R}^{D \times D}$ を学習する
- バリュ－ (value) の計算 : $\mathbf{V} = \mathbf{X}\mathbf{W}^{(v)}$
 - n 番目の単語のバリュ－, v_n

$$v_n^\top = \mathbf{x}_n^\top \mathbf{W}^{(v)}$$

- トークンの更新
 - n 番目の単語更新用の注意 : $\mathbf{a}_n^\top = [a_{n1}, a_{n2}, \dots, a_{nN}]$
 - n 番目の単語のトークンの更新

$$\mathbf{y}_n^\top = \mathbf{a}_n^\top \mathbf{V}$$

注意のスケールの調整

\exp の中の絶対値が大きくなることを防ぐ。(絶対値が大きいと勾配がゼロに近づき学習に失敗する。)

$$a_{nm} = \frac{\exp(\mathbf{q}_n^\top \mathbf{k}_m)}{\sum_k \exp(\mathbf{q}_n^\top \mathbf{k}_k)}$$



$$a_{nm} = \frac{\exp\left(\frac{\mathbf{q}_n^\top \mathbf{k}_m}{\sqrt{D_k}}\right)}{\sum_k \exp\left(\frac{\mathbf{q}_n^\top \mathbf{k}_k}{\sqrt{D_k}}\right)}$$

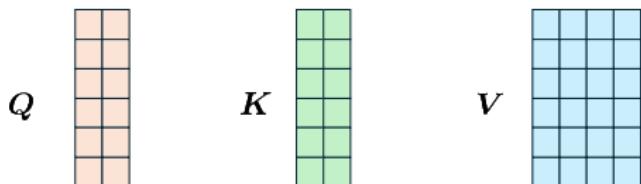
D_k は \mathbf{q}, \mathbf{k} の次元

まとめ：注意機構

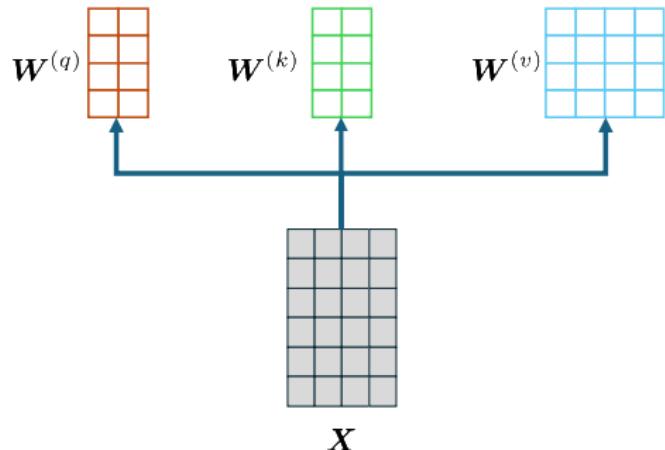
$$\mathbf{Y} = \text{Attention}(\mathbf{Q}, \mathbf{K}, \mathbf{V}) = \text{SM}\left(\frac{\mathbf{Q}\mathbf{K}^\top}{\sqrt{D_k}}\right)\mathbf{V}$$

Attention Head

文脈に依存して埋め込み先を変える機構：注意機構



Attention Head とも呼ぶ



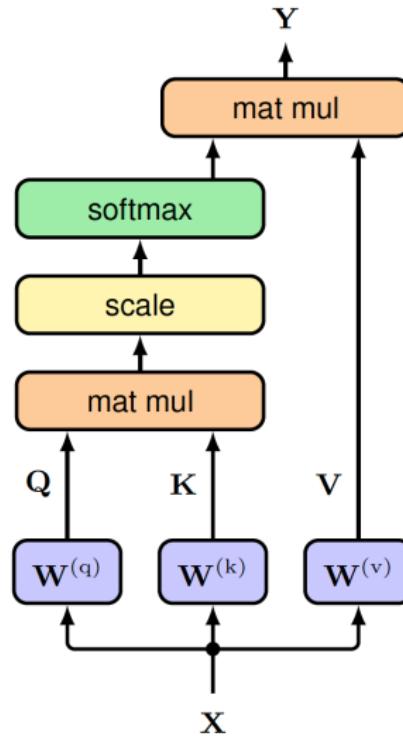
- 入力文全体を見渡して
「どこに注目するか」を
判断するモジュール

Attention Head

文脈に依存して埋め込み先を変える機構：注意機構

Attention Head とも呼ぶ

- 入力文全体を見渡して
「どこに注目するか」を
判断するモジュール

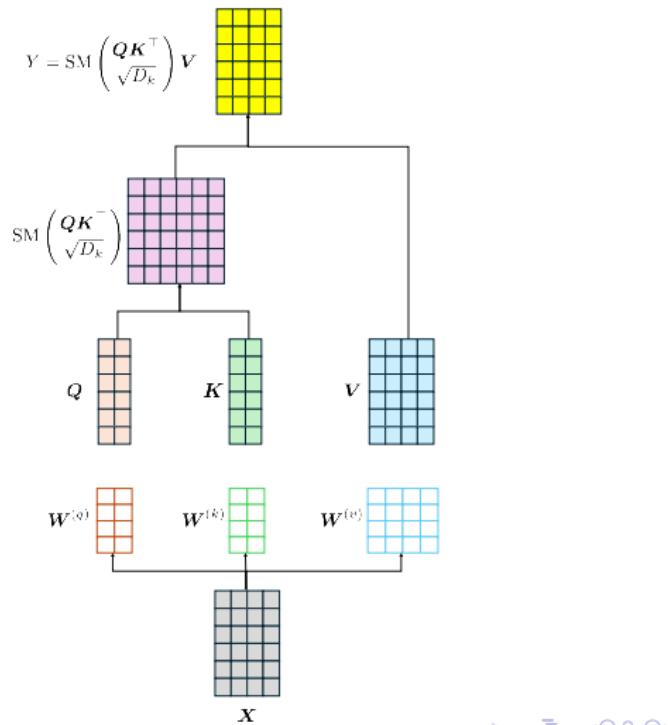


Attention Head

文脈に依存して埋め込み先を変える機構：注意機構

Attention Head とも呼ぶ

- 入力文全体を見渡して
「どこに注目するか」を
判断するモジュール



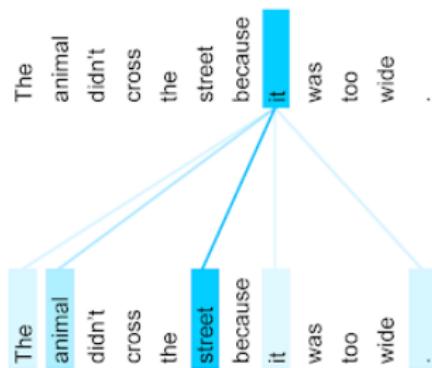
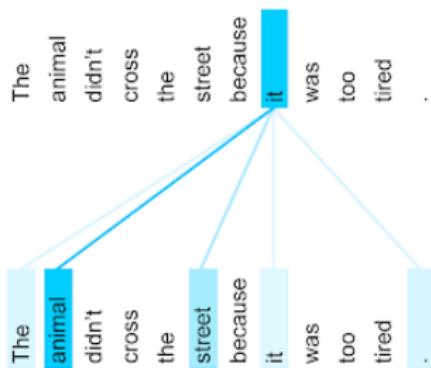
Attention Head で実現できること

- 文脈に依存して単語の埋め込み先を変える
- 注意の強弱を文脈に依存して決定

例

The animal did not cross the street because it was too tired.

The animal did not cross the street because it was too wide.



注意機構の性質

重要： $\mathbf{W}^{(q)}$, $\mathbf{W}^{(k)}$, $\mathbf{W}^{(v)}$ が注意の規準を定める（学習後は規準固定）

- 出力 y_n は入力 v_n の線形和

$$y_n = \sum_{m=1}^N a_{nm} v_m$$

- v_n は x_1, x_2, \dots, x_N の線形変換

$$\mathbf{V} = \mathbf{X} \mathbf{W}^{(o)}$$

- y_n は入力 x_1, x_2, \dots, x_N の線形変換
- 非線形性は注意の強度, a_{nm} , 経由で導入 (x_n に依存・Softmax)

注意機構の性質

重要： $\mathbf{W}^{(q)}$, $\mathbf{W}^{(k)}$, $\mathbf{W}^{(v)}$ が注意の規準を定める（学習後は規準固定）

- 出力 \mathbf{y}_n は入力 \mathbf{v}_n の線形和

$$\mathbf{y}_n = \sum_{m=1}^N a_{nm} \mathbf{v}_m$$

- \mathbf{v}_n は、 $(\mathbf{W}^{(o)})^\top$ の列ベクトルの線形和

$$\mathbf{v}_n^\top = \mathbf{x}_n^\top \mathbf{W}^{(o)} \rightarrow \mathbf{v}_n = (\mathbf{W}^{(o)})^\top \mathbf{x}_n$$

つまり

$$\mathbf{v}_n = \sum_{i=1}^D x_{ni} \mathbf{w}_i^{(o)}$$

ただし、 $\mathbf{x}_n = [x_{n1}, x_{n2}, \dots, x_{nD}]^\top$ 、

$$(\mathbf{W}^{(o)})^\top = [\mathbf{w}_1^{(o)}, \mathbf{w}_2^{(o)}, \dots, \mathbf{w}_D^{(o)}].$$

注意機構の性質

重要： $\mathbf{W}^{(q)}$, $\mathbf{W}^{(k)}$, $\mathbf{W}^{(v)}$ が注意の規準を定める（学習後は規準固定）

- 出力 y_n は入力 v_1, v_2, \dots, v_D が張る部分空間に限定される

$$\mathbf{y}_n = \sum_{m=1}^N a_{nm} \mathbf{v}_m$$

- 出力 y_n は入力 x_n の線形変換
- 出力 y_n は学習で得られる $w_1^{(o)}, w_2^{(o)}, \dots, w_D^{(o)}$ が張る部分空間に限定される。
- 非線形性は注意の強度, a_{nm} , 経由で導入 (x_n に依存・Softmax)

注意機構の性質

重要： $\mathbf{W}^{(q)}$, $\mathbf{W}^{(k)}$, $\mathbf{W}^{(v)}$ が注意の規準を定める（学習後は規準固定）

- a_{nm} ($m = 1, 2, \dots, N$) は、スケール $\sqrt{D_k}$ で調整したあとでも、ひとつ要素だけ 1 に近い値となり、その他はゼロに近い値となることが多い。
- ソフトマックス関数の \exp が主要因
- 注意機構は「特定の規準のみ」で注意の大小を決める傾向あり

Attention Head の注意の規準

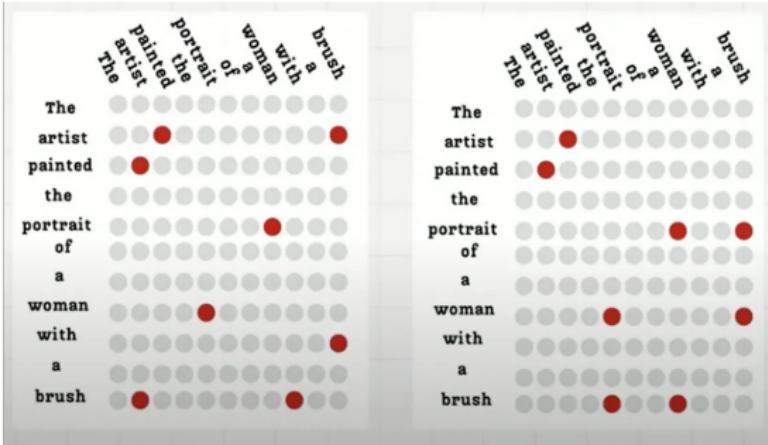
重要： $\mathbf{W}^{(q)}$, $\mathbf{W}^{(k)}$, $\mathbf{W}^{(v)}$ が注意の規準を定める（学習後は規準固定）

例：The artist painted the portrait of a woman with a brush.

上記の文の意味はどっち？

- “a woman with a brush” を描いた
- “a woman” をブラシ（筆）を使って描いた

Attention Head の注意の規準



case 1 : Painting a woman with a "brush"



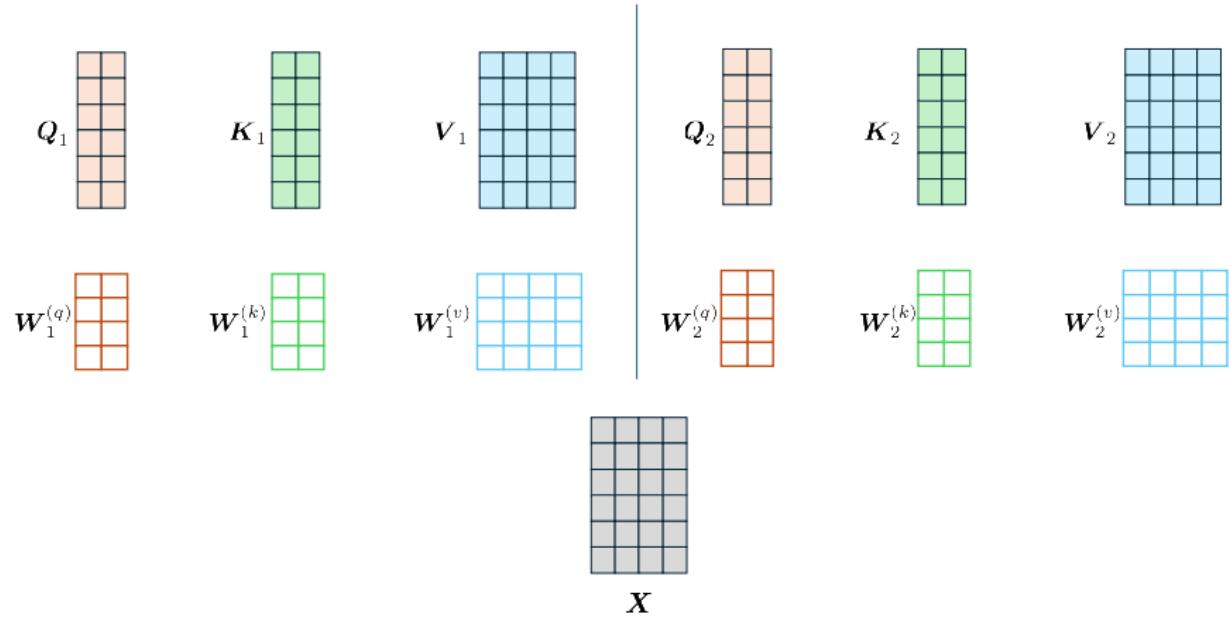
case 2: Painting of a "woman with a brush"

<https://medium.com/@shravankoninti/a-visual-explanation-of-multi-head-attention-6399d86fe51c>

Attention Head を複数

- 注意の強弱を決める基準はひとつでは足りない
- 時制 / 語彙 / 語順 / ...
- Multi-Head Attention: 複数の基準 ($\mathbf{W}^{(q)}$, $\mathbf{W}^{(k)}$, $\mathbf{W}^{(v)}$) を用意

マルチヘッド注意機構



マルチヘッド注意機構

H 個の注意機構を用いることにする。 h 番目 ($h = 1, 2, \dots, H$) の注意機構は次式でトークンを変換する。

$$\mathbf{H}_h = \text{Attention}(\mathbf{Q}_h, \mathbf{K}_h, \mathbf{V}_h)$$

クエリ・キー・バリューは次式で計算する

$$\mathbf{Q}_h = \mathbf{X} \mathbf{W}_h^{(q)},$$

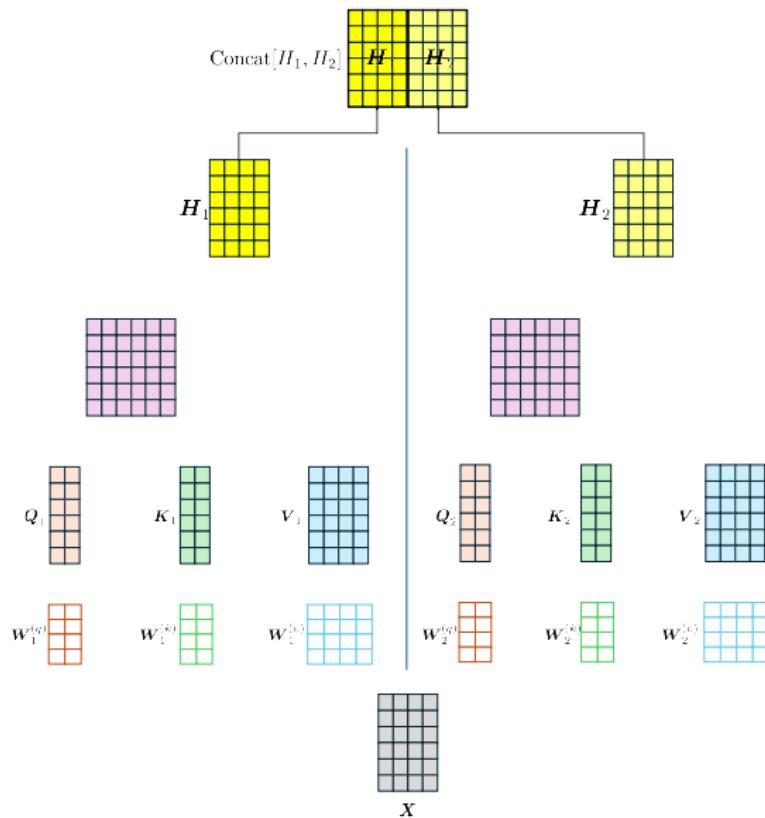
$$\mathbf{K}_h = \mathbf{X} \mathbf{W}_h^{(k)},$$

$$\mathbf{V}_h = \mathbf{X} \mathbf{W}_h^{(v)}.$$

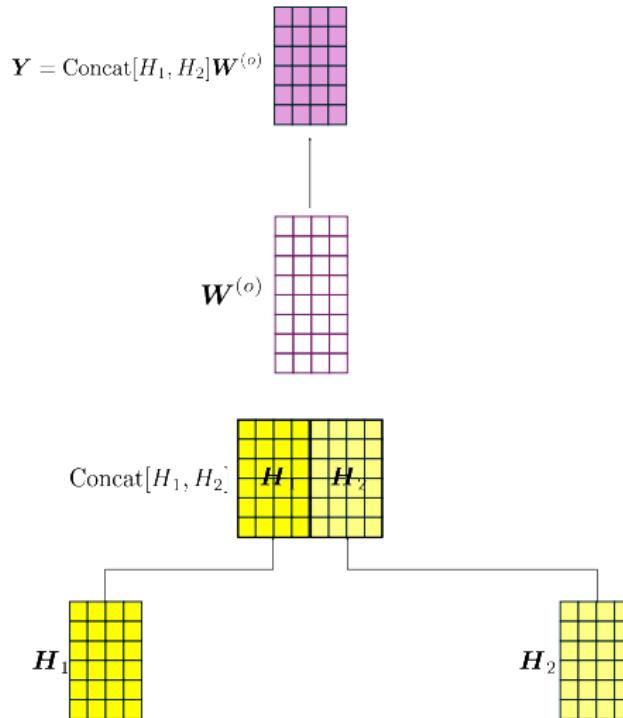
$$\underline{\mathbf{Y}(\mathbf{X}) = \text{Concat}[\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2, \dots, \mathbf{H}_H] \mathbf{W}^{(o)}}$$

ただし、 $\mathbf{H}_h \in \mathbb{R}^{N \times D_v}$, $\text{Concat}[\mathbf{H}_1, \dots, \mathbf{H}_H] \in \mathbb{R}^{N \times HD_v}$, $\mathbf{W}^{(o)} \in \mathbb{R}^{HD_v \times D}$, $\mathbf{Y}(\mathbf{X}) \in \mathbb{N} \times \mathbb{D}$ 。多くの場合、 $D_v = D/H$

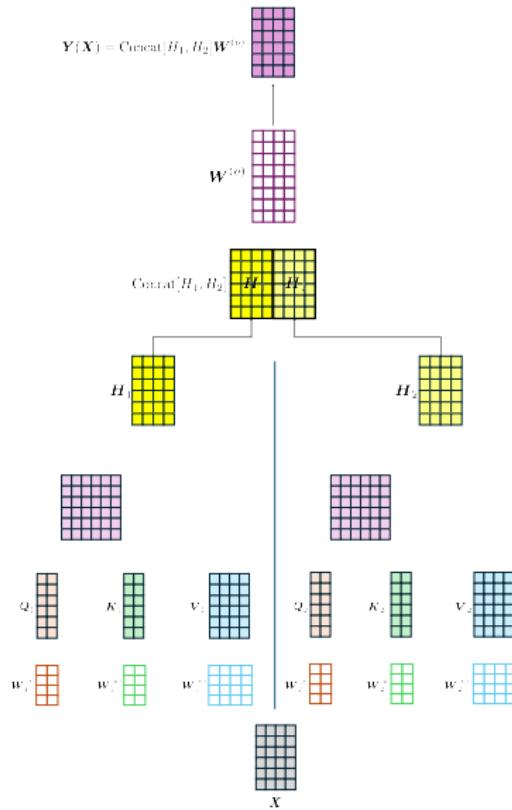
マルチヘッド注意機構



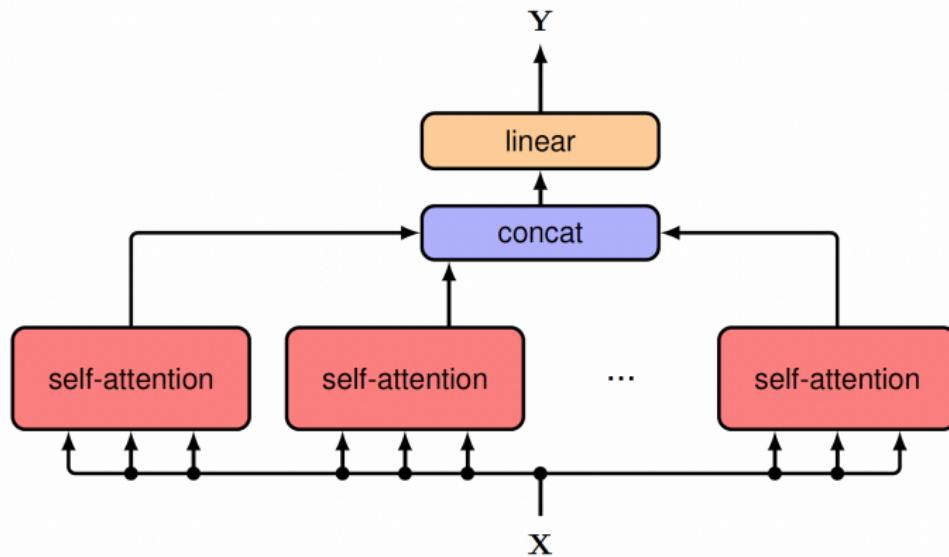
マルチヘッド注意機構



マルチヘッド注意機構



マルチヘッド注意機構



準備：レイヤ正規化 (Layer Normalization)

- 誤差逆伝播の計算を安定化させる効果あり

それぞれの特徴ベクトル $\mathbf{y}_n \in \mathbb{R}^D$ を「正規化」する。

$$\mathbf{y}_n = [y_{n1}, y_{n2}, \dots, y_{nD}]^\top$$

準備：平均と分散

$$\mu_n = \frac{1}{D} \sum_{i=1}^D y_{ni}$$

$$\sigma_n^2 = \frac{1}{D} \sum_{i=1}^D (y_{ni} - \mu_n)^2$$

正規化

$$\hat{y}_{ni} = \frac{y_{ni} - \mu_n}{\sqrt{\sigma_n + \delta}}$$

記法

$$\text{LayerNorm}[\mathbf{y}_n] = [\hat{y}_{n1}, \hat{y}_{n2}, \dots, \hat{y}_{nD}]^\top$$

後処理 (1/3)

学習効率を上げる工夫: レイヤ正規化と、残差表現

マルチヘッドの出力: $\mathbf{Y}(\mathbf{X})$

$$\mathbf{Y}(\mathbf{X}) = \text{Concat}[\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2, \dots, \mathbf{H}_H] \mathbf{W}^{(o)}$$

元の入力を足して正規化。 $\mathbf{Y}(\mathbf{X})$ は元との差分のみ表現すれば良くなつた。

$$\mathbf{Z} = \text{LayerNorm}[\mathbf{Y}(\mathbf{X}) + \mathbf{X}]$$

後処理 (2/3)

注意機構の出力は v が張る線形部分空間に限定。柔軟性を改善するため
に Multi-Layer Perceptron を導入。例えば、全結合層を 2 つ追加する。

$$\mathbf{Z}' = \text{MLP}[\mathbf{Z}]$$

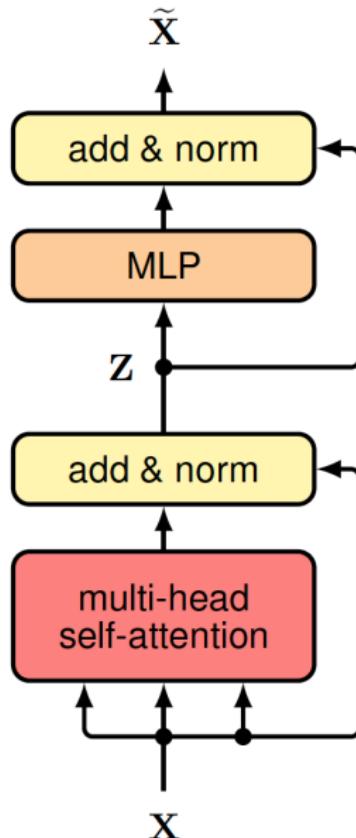
- 同じ MLP を \mathbf{Z} の各行に適用する。つまり、各単語のトークンに同
じ MLP を適用する。

後処理 (3/3)

学習効率を上げる工夫：レイヤ正規化と、残差表現

$$\tilde{\mathbf{X}} = \text{LayerNorm}[\mathbf{Z}' + \mathbf{Z}] = \text{LayerNorm}[\text{MLP}[\mathbf{Z}] + \mathbf{Z}]$$

トランスフォーマーのアーキテクチャ (符号器・1層分)



位置の表現

トークンの入力順序が変わっても出力は変わらない。このままでは、位置・順序の情報が結果に反映されない。

(再掲: 系列の先頭から n 番目のトークンの変換)

$$\mathbf{y}_n = \sum_{m=1}^N a_{nm} \mathbf{x}_m,$$

$$a_{nm} = \frac{\exp\left(\frac{\mathbf{q}_n^\top \mathbf{k}_m}{\sqrt{D_k}}\right)}{\sum_k \exp\left(\frac{\mathbf{q}_n^\top \mathbf{k}_k}{\sqrt{D_k}}\right)}.$$

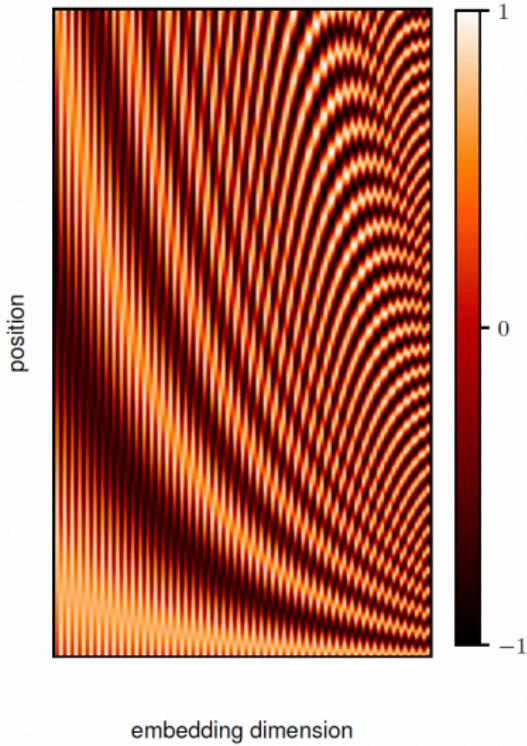
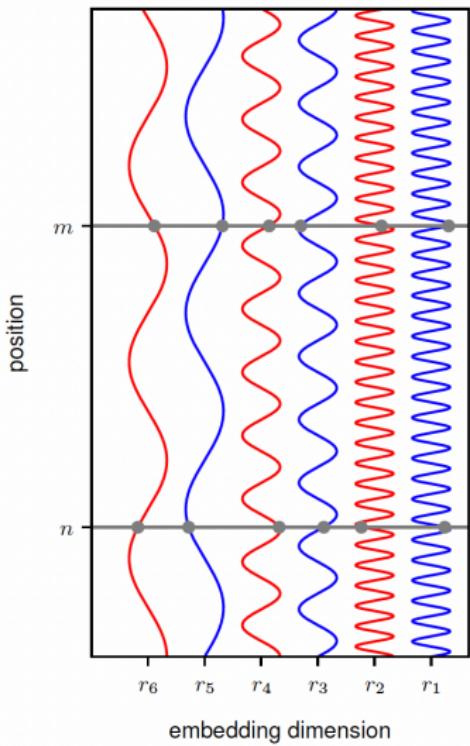
位置の表現 $\mathbf{r}_n = [r_{n1}, r_{n2}, \dots, r_{nD}]^\top$ を生成して、入力トークンに足す

$$\tilde{\mathbf{x}}_n = \mathbf{x}_n + \mathbf{r}_n$$

最大系列長より充分大きい数, L (例えば 10,000)

$$r_{ni} = \begin{cases} \sin\left(\frac{n}{L^{i-1/D}}\right), & \text{if } i \text{ is odd,} \\ \cos\left(\frac{n}{L^{(i-2)/D}}\right), & \text{if } i \text{ is even.} \end{cases}$$

位置の表現



位置の表現

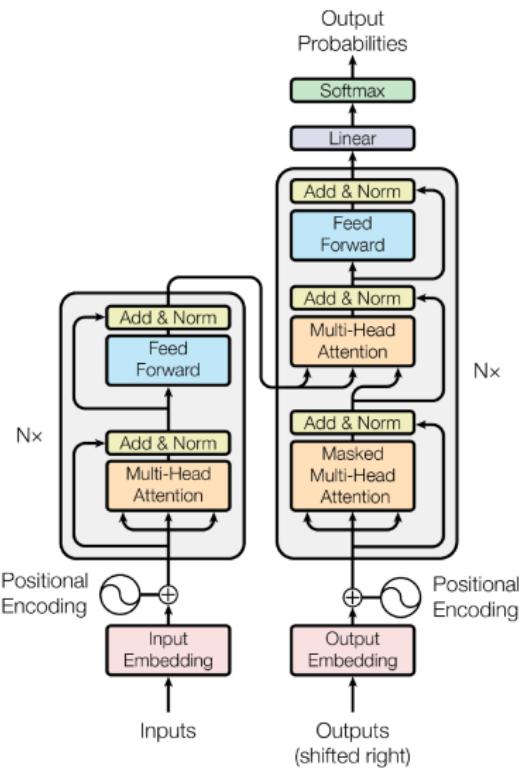
位置の表現 r の性質

- $\|r_n\| = D/2$
- 位置が一意に表現される
- 近い位置では似たベクトル、遠い位置では似ていないベクトル
- r_n と r_{n+k} の関係は n に依らない (k だけに依存する) 線形変換で表現可能 ($\phi = k/L^{j/D}$)

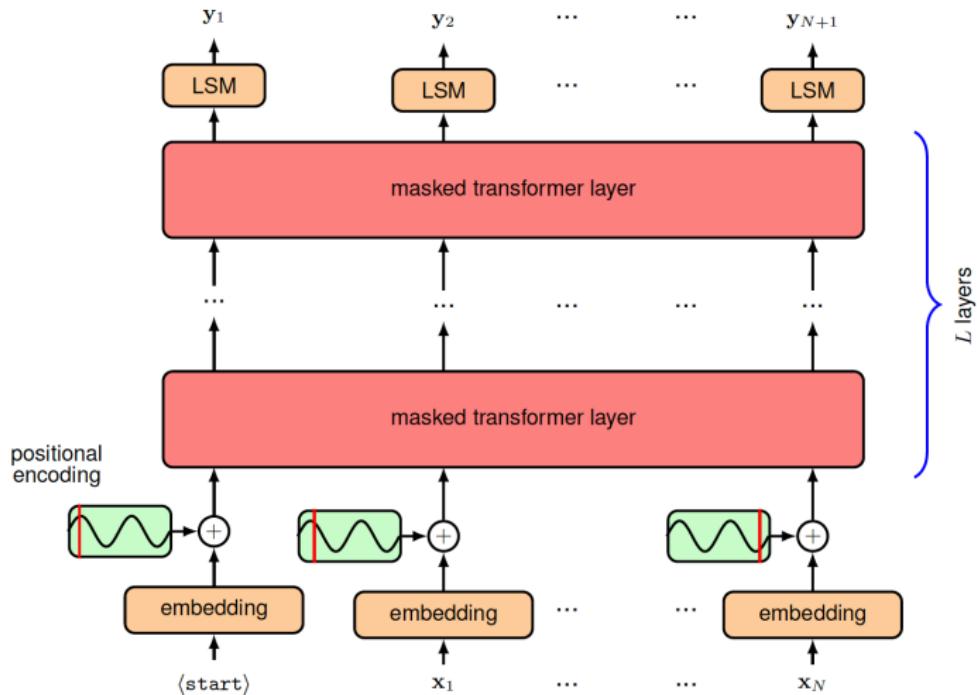
$$\begin{aligned}\sin\left(\frac{n+k}{L^{j/D}}\right) &= \sin\left(\frac{n}{L^{j/D}} + \phi\right) \\ &= \cos(\phi)\sin\left(\frac{n}{L^{j/D}}\right) + \sin(\phi)\cos\left(\frac{n}{L^{j/D}}\right)\end{aligned}$$

- 系列内での相対位置が重要なときには、ニューラルネットワークが ($W^{(q)}, W^{(k)}$ で) 学習可能

トランスフォーマのアーキテクチャ



予告：GPT のアーキテクチャ



LSM: Linear SoftMax = 線形多クラス識別器