KOREA UNIVERSITY

DSBA Transformer survey paper study

A Survey of Transformers

#1: Transformer Basic

arXiv preprint

DSBA
Data Science & Business Analytics

고려대학교 산업경영공학과

Data Science & Business Analytics Lab

이유경, 김명섭, 윤훈상, 김지나, 허재혁, 김수빈

발표자 : 이유경

01 발표 목차

Contents

01 Introduction

Transformer 기반 모델 연구 동향

- **Transformer 모델이란?**
  - 자연어처리 Task 중, Machine translation을 위해 제안된 Sequence-to-sequence 모델
  - 현재는 자연어처리뿐만 아니라, 컴퓨터 비전, 음성처리 등 다양한 분야에서 응용되고 있음

- **Transformer 기반의 Pre-Trained-Models(PTMs)**
  - Transformer 모델은 PTM으로서 사용되었을 때 여러 Downstream Task에서 SOTA를 보이고 있음
  - 특히, 자연어처리 분야에서 Transformer 모델의 PTM으로서 역할이 강력함

    cf. 자연어처리 분야에서의 PTM의 의미
    - 이미지나 음성 대비, 자연어 텍스트는 데이터의 축적 속도가 매우 빨라 방대한 양으로 존재
    - 대용량의 텍스트를 처음부터 학습을 시키는 것은 시간 및 비용 측면에서 비효율적인데, PTM으로 주요 언어적 특성을 충분히 사전에 학습하여 활용할 수 있음
    - 최근에는 잘 학습된 PTM 모델을 Fine-Tuning 하여 높은 성능을 내는 연구가 활발함

01 Introduction

Transformer 기반 모델 연구 동향

- **Transformer 모델을 변형한 X-formers**
  - **Transformer의 출현을 기점으로, 크게 다음 세 가지 관점에서 Transformer 모델을 변형한 모델이 활발히 연구 됨**
    1) **Model Efficiency**
       - Limitation : Self-Attention 모듈로 인해 긴 입력 시퀀스를 처리할 때, 연산과 메모리의 비효율성 존재
       - Improvement : Lightweight Attention (Sparse Attention의 변형)
         Divide and conquer methods (Recurrent and Hierarchical Mechanism)
    2) **Model Generalization**
       - Limitation : Transformer는 기본적으로 유연한 Architecture의 성격을 지니며,
         input data의 structural bias에 대해서 최소한의 가정만을 하고 있어
         적은 데이터셋으로의 강건한 모델 학습에 어려움이 있음
       - Improvement : Structural bias나 regularization의 도입, Large-scale unlabeled data에 대한 사전학습
    3) **Model Adaptation**
       - Specific한 downstream task에 적용하기 위한 변형

01 Background

1) Vanilla Transformer

- **Vanilla Transformer란?**
  - Transformer 모델이 처음 제안된 논문에서 설명하는 기본 Transformer 모델 (Attention Is All You Need (Vaswani et al., 2017))
  - 특징
    1) Encoder-Decoder 구조를 지닌 Sequence to sequence model
    2) 각 Encoder와 Decoder는 L개의 동일한 Block이 Stack된 형태를 지님
    3) Encoder Block의 구성
       1) Multi-head self-attention
       2) Position-wise feed-forward network
       3) Residual connection
       4) Layer Normalization
    4) Decoder Block
       1) 기본적인 Encoder Block 구성과 동일
       2) Cross-attention 모듈을 Multi-head self-attention과 Position-wise FFN 사이에 추가
       3) 디코딩 시에 미래 시점의 단어 정보를 사용하는 것을 방지하기 위해 Masked self-attention을 사용

(참고)
cross-attention은 본 Survey paper 상에서의 표현이고,
정확한 명칭은 encoder-decoder attention

01 Background

1) Vanilla Transformer

- **Attention Modules**
  - Query-Key-Value (QKV) 모델로 Attention mechanism 도입
    - Query : 현재의 hidden state 값
    - Key : hidden state와 영향을 주고 받는 값(Query와의 비교 대상)
    - Value : Key 값들을 Query와 Key 간의 유사도에 따라 가중합하여 Query에 반영하게 되는데, 이때 가중합의 대상으로 사용할 값
  - Scaled dot-product attention
    - $Q(\text{Query}) \in R^{N \times D_K}$, $K(\text{Key}) \in R^{M \times D_K}$, $V(\text{Value}) \in R^{M \times D_V}$

각 Key에 해당하는 Value 값을 가중합하여 사용

내적을 위해 차원이 같아야 함

attention score by dot-product

$$\text{Attention}(Q, K, V) = \text{softmax}\left(\frac{QK^T}{\sqrt{D_k}}\right)V = AV$$

A: *attention weight matrix*

row-wise softmax weight

scaled : softmax 함수의 gradient vanishing problem 완화

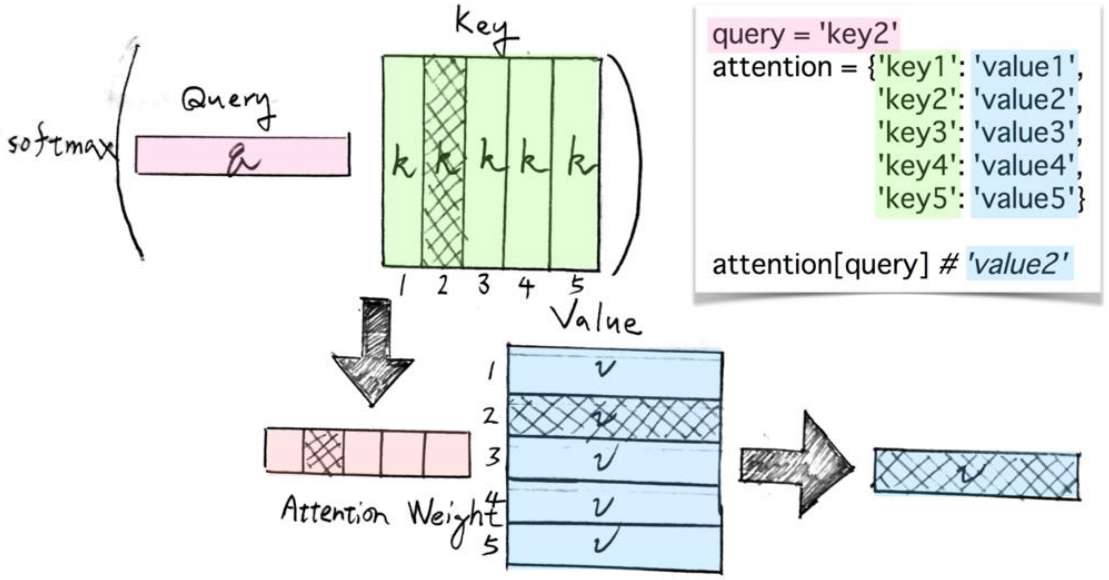
01 Background

1) Vanilla Transformer

- **Attention Modules**
  - Scaled dot-product attention in detail
    - $Q(\text{Query}) \in R^{N \times D_K}$, $K(\text{Key}) \in R^{M \times D_K}$, $V(\text{Value}) \in R^{M \times D_V}$

$$\text{Attention}(Q, K, V) = \text{softmax}\left(\frac{QK^T}{\sqrt{D_k}}\right)V = AV$$

[Query 벡터 하나의 attention 계산 과정]




```
query = 'key2'
attention = {'key1': 'value1',
             'key2': 'value2',
             'key3': 'value3',
             'key4': 'value4',
             'key5': 'value5'}

attention[query] # 'value2'
```

Query 벡터가 Key와의 유사도 정보를 반영한 벡터로 변형

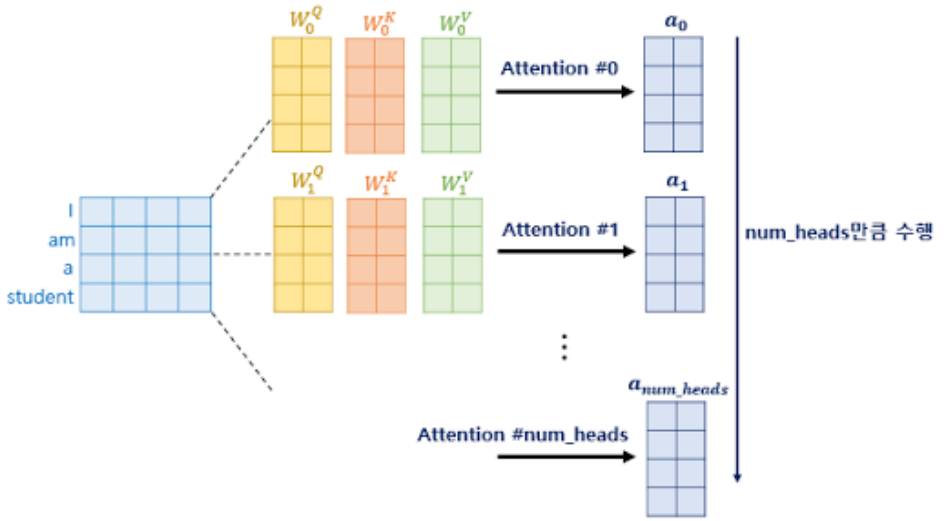
01 Background

1) Vanilla Transformer

- **Attention Modules**
  - Multi-head Attention
    - $\mathrm{N} \times D_m$ 크기의 embedding에 대한 Q(Query) $\in \mathrm{R}^{\mathrm{N}\times D_K}$, K(Key) $\in \mathrm{R}^{\mathrm{M}\times D_K}$, V(Value) $\in \mathrm{R}^{\mathrm{M}\times D_V}$ 존재
    - 위 Query, Key, Value로 head 의 수(hyper-parameter)만큼, attention을 계산
    - 각 head의 output은 concatenate 됨
    - Concatenate 된 각 head들의 output은 원래 D_{model} 의 차원으로 다시 사영되어 다음 layer에 전달

cf. the i-th row in Q is the query qi

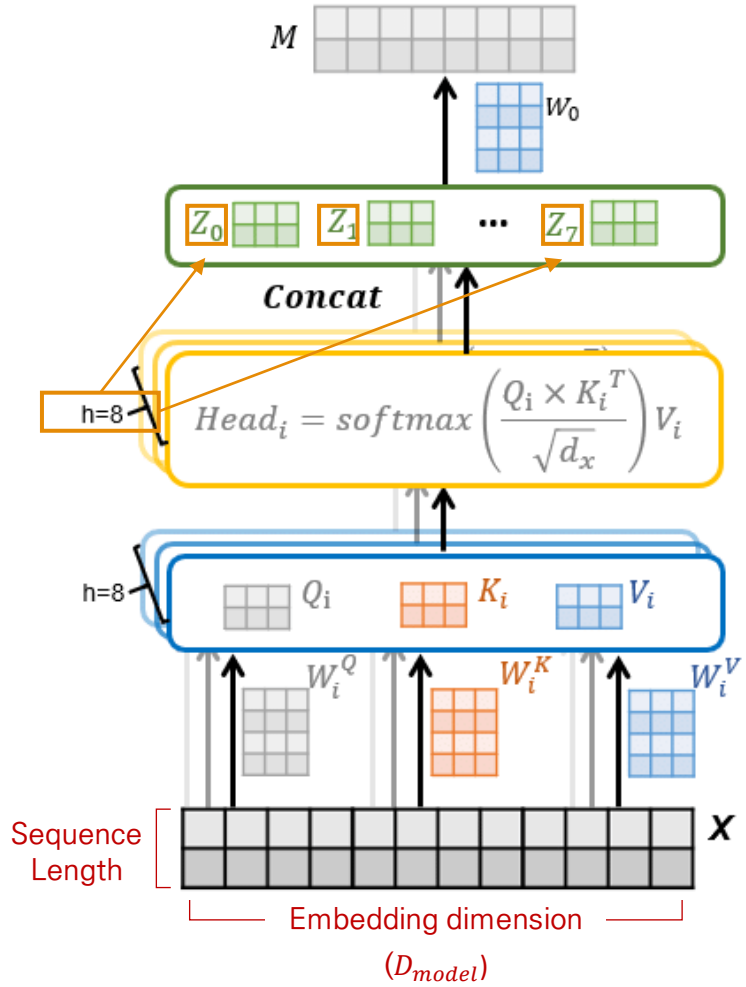
$$\mathrm{MultiHeadAttn}(\mathbf{Q},\mathbf{K},\mathbf{V}) = \mathrm{Concat}(\mathrm{head}_1,\cdots,\mathrm{head}_H)\mathbf{W}^O,$$
$$\text{where } \mathrm{head}_i = \mathrm{Attention}(\mathbf{Q}\mathbf{W}_i^Q, \mathbf{K}\mathbf{W}_i^K, \mathbf{V}\mathbf{W}_i^V).$$



01 Background

1) Vanilla Transformer

- **Attention Modules**
  - Multi-head Attention



Concatenate each attention head's output

각 attention head의 output concatenate

head 수만큼 attention 계산

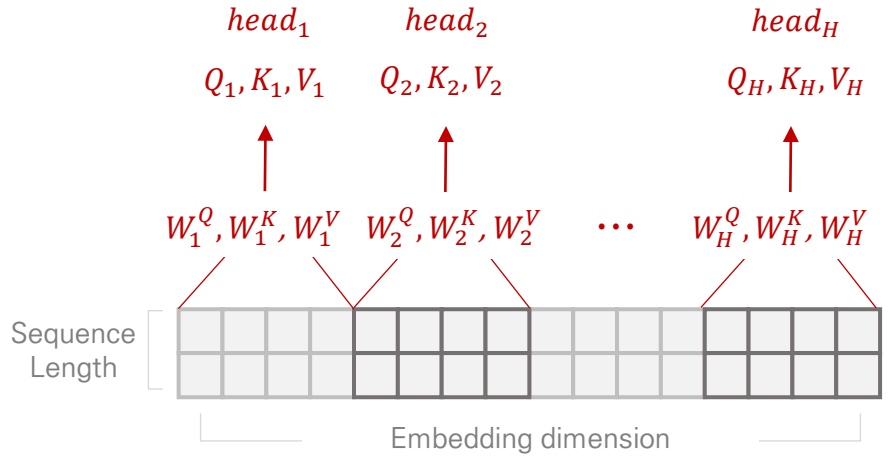
Weight matrices for Q, K, V

Sequence Embedding

[Discussion]

[1] Sequence Embedding에서 embedding dimension을 head의 수만큼 쪼개어 attention을 구하는 것이 아니라 **Input Sequence embedding 전체를 Query, Key, Value를 구하는 weight matrices**를 통해 특정 차원을 가지는 Query, Key, Value를 matrices를 만듦

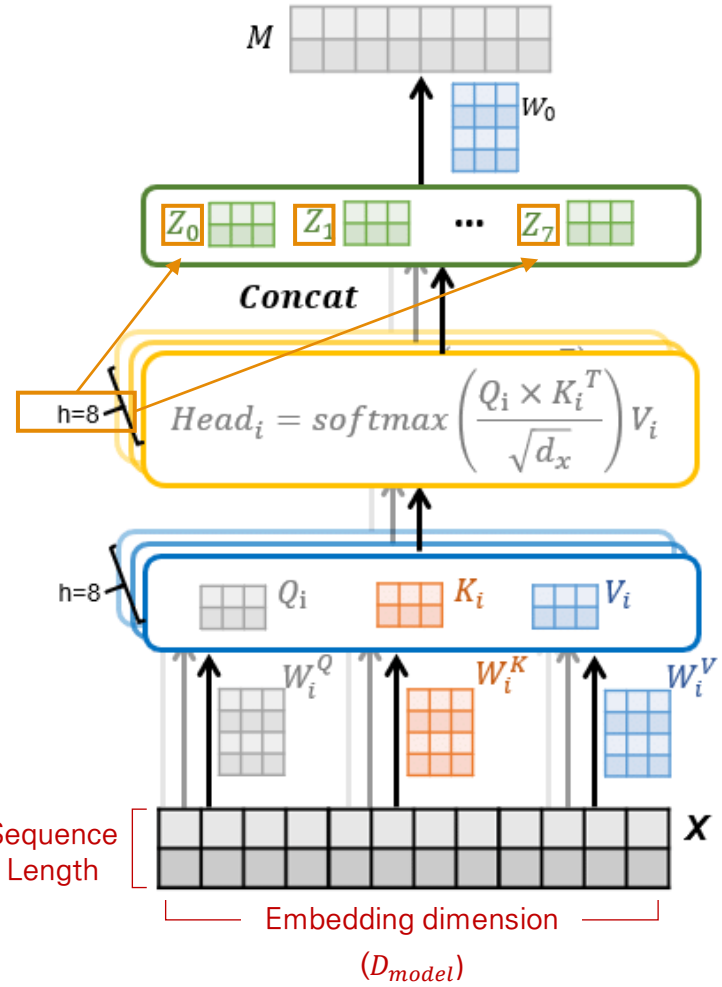
[※ **잘못된** 이해]



01 Background

1) Vanilla Transformer

- **Attention Modules**
  - Multi-head Attention



Concatenate each attention head's output

각 attention head의 output concatenate

head 수만큼 attention 계산

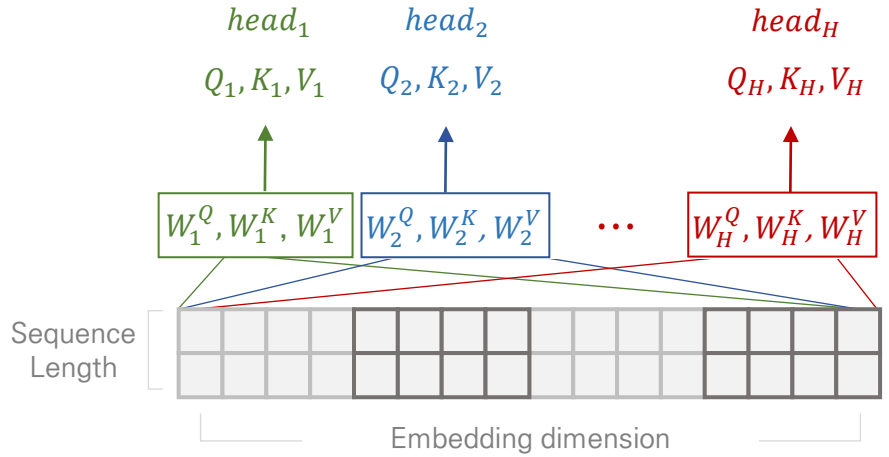
Weight matrices for Q, K, V

Sequence Embedding

[Discussion]

[1] Sequence Embedding에서 <u>embedding dimension을 head의 수만큼 쪼개어 attention을 구하는 것이 아니라</u> **Input Sequence embedding 전체를 Query, Key, Value를 구하는 weight matrices**를 통해 특정 차원을 가지는 Query, Key, Value를 matrices를 만듦

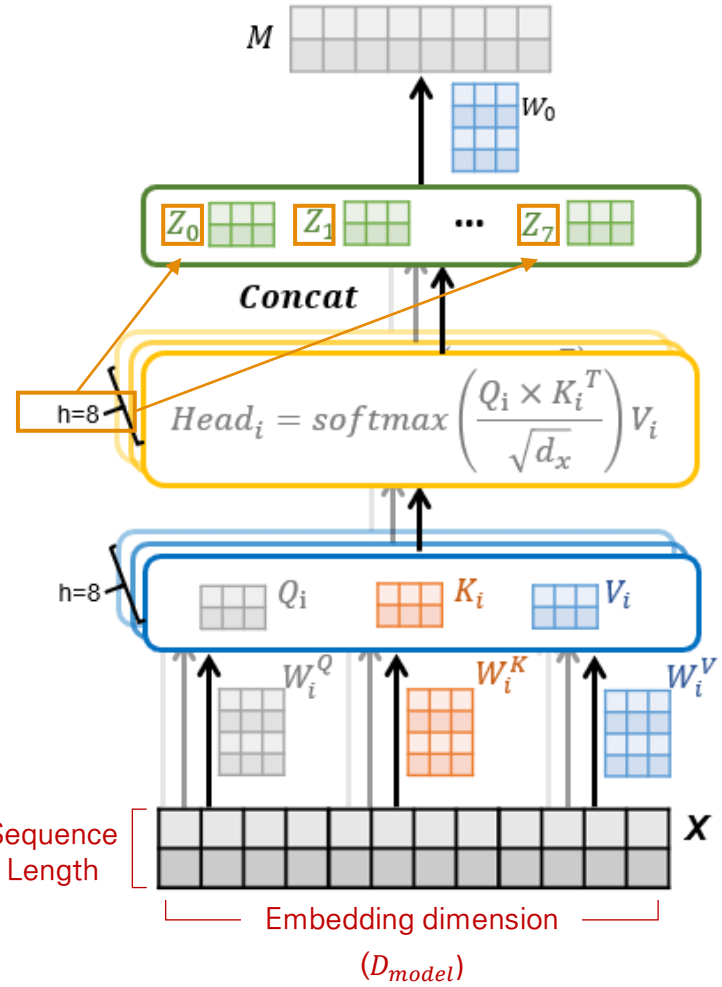
[※ **올바른** 이해]



01 Background

1) Vanilla Transformer

- **Attention Modules**
  - Multi-head Attention



Concatenate each attention head's output

각 attention head의 output concatenate

head 수만큼 attention 계산

Weight matrices for Q, K, V

Sequence Embedding

[Discussion]

[2] 다음 수식에서, Concatenate한 각 head의 attention output을 W^o을 통해 D_{model} 크기로 사영시키는 이유는?
특히, transformer 논문 구현 상 concatenate된 후의 dimension과 W^0으로 사영시키고자 하는 dimension이 D_{model}로 서로 같은데, 왜 동일한 차원으로 다시 사영시키는가?

[참고]

$$\text{MultiHeadAttn}(\mathbf{Q},\mathbf{K},\mathbf{V}) = \text{Concat}(\text{head}_1,\cdots,\text{head}_H)\mathbf{W}^O,$$
$$\text{where head}_i = \text{Attention}(\mathbf{Q}\mathbf{W}_i^Q, \mathbf{K}\mathbf{W}_i^K, \mathbf{V}\mathbf{W}_i^V).$$

[답변]

1) Concatenate를 구성하는 값들은 순서대로 각 head의 특성을 반영하고 있게 되는데, 이러한 위치에 따른 각 head의 특성 정보를 W^oprojection을 통해 mix하여 사용하고자 함

1) 기본적으로 transformer 구조는 각 layer의 의 input output의 차원을 동일하게 가져가고자 함 (D_{model} 차원 유지)

01 Background

1) Vanilla Transformer

https://github.com/jadore801120/attention-is-all-you-need-pytorch.git

- **Attention Modules**
  - Multi-head Attention

[Discussion]

[3] Multi-head Attention 코드 구현 (PyTorch)

In this work we employ $h = 8$ parallel attention layers, or heads. For each of these we use $d_k = d_v = d_{\text{model}}/h = 64$. Due to the reduced dimension of each head, the total computational cost is similar to that of single-head attention with full dimensionality.

```
class Transformer(nn.Module):
    ''' A sequence to sequence model with attention mechanism. '''

    def __init__(
            self, n_src_vocab, n_trg_vocab, src_pad_idx, trg_pad_idx,
            d_word_vec=512, d_model=512, d_inner=2048,
            n_layers=6, n_head=8, d_k=64, d_v=64, dropout=0.1, n_position=200,
            trg_emb_prj_weight_sharing=True, emb_src_trg_weight_sharing=True,
            scale_emb_or_prj='prj'):
```

✓ Transformer 논문에서 언급한 대로 head 수는 8, key 와 value의 dimension은 d_{model}/n_head인 64로 정의

01 Background

1) Vanilla Transformer

- **Attention Modules**
  - Multi-head Attention

```
class Encoder(nn.Module):
    ''' A encoder model with self attention mechanism. '''

    def __init__(
            self, n_src_vocab, d_word_vec, n_layers, n_head, d_k, d_v,
            d_model, d_inner, pad_idx, dropout=0.1, n_position=200, scale_emb=False):

        super().__init__()

        self.src_word_emb = nn.Embedding(n_src_vocab, d_word_vec, padding_idx=pad_idx)
        self.position_enc = PositionalEncoding(d_word_vec, n_position=n_position)
        self.dropout = nn.Dropout(p=dropout)
        self.layer_stack = nn.ModuleList([
            EncoderLayer(d_model, d_inner, n_head, d_k, d_v, dropout=dropout)
            for _ in range(n_layers)])
        self.layer_norm = nn.LayerNorm(d_model, eps=1e-6)
        self.scale_emb = scale_emb
        self.d_model = d_model
```

✓ Encoder(혹은 Decoder) Layer에 다음과 같이 dimension의 크기를 전달

01 Background

1) Vanilla Transformer

- **Attention Modules**
  - Multi-head Attention

```
class EncoderLayer(nn.Module):
    ''' Compose with two layers '''

    def __init__(self, d_model, d_inner, n_head, d_k, d_v, dropout=0.1):
        super(EncoderLayer, self).__init__()
        self.slf_attn = MultiHeadAttention(n_head, d_model, d_k, d_v, dropout=dropout)
        self.pos_ffn = PositionwiseFeedForward(d_model, d_inner, dropout=dropout)

    def forward(self, enc_input, slf_attn_mask=None):
        enc_output, enc_slf_attn = self.slf_attn(
            enc_input, enc_input, enc_input, mask=slf_attn_mask)
        enc_output = self.pos_ffn(enc_output)
        return enc_output, enc_slf_attn
```

✓ 앞서 전달 받은 dimension 크기를
Multi-head Attention을 계산하는 클래스에 전달

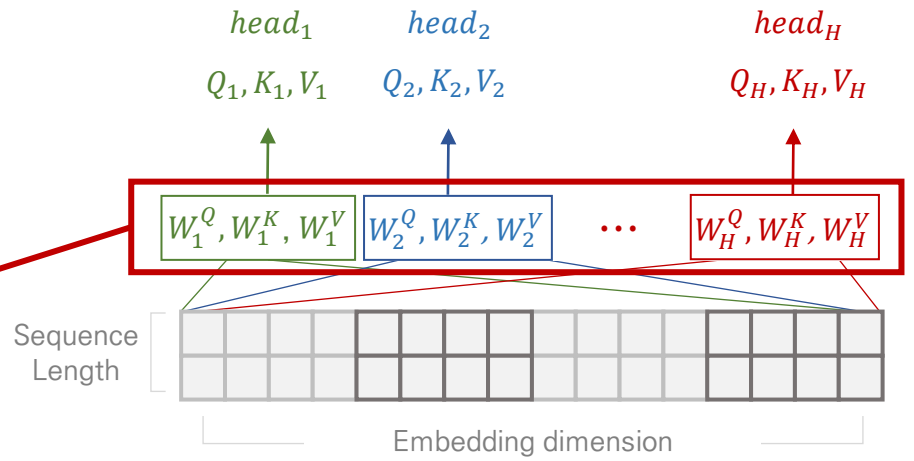
01 Background

1) Vanilla Transformer

- **Attention Modules**
  - Multi-head Attention

```
class MultiHeadAttention(nn.Module):
    ''' Multi-Head Attention module '''

    def __init__(self, n_head, d_model, d_k, d_v, dropout=0.1):
        super().__init__()

        self.n_head = n_head
        self.d_k = d_k
        self.d_v = d_v

        self.w_qs = nn.Linear(d_model, n_head * d_k, bias=False)
        self.w_ks = nn.Linear(d_model, n_head * d_k, bias=False)
        self.w_vs = nn.Linear(d_model, n_head * d_v, bias=False)
        self.fc = nn.Linear(n_head * d_v, d_model, bias=False)

        self.attention = ScaledDotProductAttention(temperature=d_k ** 0.5)

        self.dropout = nn.Dropout(dropout)
        self.layer_norm = nn.LayerNorm(d_model, eps=1e-6)
```

[그림 p10]



✓ Query, Key, Value를 projection하는 Weight matrices 생성

✓ Weight matrices를 처음부터 독립적으로 head 수만큼 정의하지 않고, $n_{head} \times d_{k(v)}$ 의 dimension을 갖는 weight matrix를 만든 후 나눠서 사용하는 방식

01 Background

1) Vanilla Transformer

- **Attention Modules**
  - Multi-head Attention

```
def forward(self, q, k, v, mask=None):

    d_k, d_v, n_head = self.d_k, self.d_v, self.n_head
    sz_b, len_q, len_k, len_v = q.size(0), q.size(1), k.size(1), v.size(1)

    residual = q

    # Pass through the pre-attention projection: b x lq x (n*dv)
    # Separate different heads: b x lq x n x dv
    q = self.w_qs(q).view(sz_b, len_q, n_head, d_k)
    k = self.w_ks(k).view(sz_b, len_k, n_head, d_k)
    v = self.w_vs(v).view(sz_b, len_v, n_head, d_v)

    # Transpose for attention dot product: b x n x lq x dv
    q, k, v = q.transpose(1, 2), k.transpose(1, 2), v.transpose(1, 2)

    if mask is not None:
        mask = mask.unsqueeze(1)   # For head axis broadcasting.

    q, attn = self.attention(q, k, v, mask=mask)

    # Transpose to move the head dimension back: b x lq x n x dv
    # Combine the last two dimensions to concatenate all the heads together: b x lq x (n*dv)
    q = q.transpose(1, 2).contiguous().view(sz_b, len_q, -1)
    q = self.dropout(self.fc(q))
    q += residual

    q = self.layer_norm(q)

    return q, attn
```

✓ 앞서 생성한 Weight Matrix의 차원을 조정함으로써 head 수만큼 Query, Key, Value Weight의 영역 구분

✓ 즉, $sequence_length \times (n_head \times d_{k(v)})$의 크기를 갖는 Weight Matrix를 기반으로 n_heads의 수만큼 attention이 계산될 수 있도록 차원을 변경하여 사용 = 병렬적으로 계산 가능!

✓ Attention 계산 후, 차원을 다시 조정하여 concatenate된 matrix 생성

01 Background

1) Vanilla Transformer

- **Attention Modules**
  - Three types of attention
    1) Self-attention
       - Q=K=V=X(the outputs of the previous layer)
    2) Masked Self-attention (Transformer Decoder Only)
       - Decoder 부분에서, 해당 시점에 token 대한 output을 생성하는 데 있어서, 해당 시점 이후의 token 정보를 사용하지 않고자 함
       - generation의 autoregressive 또는 causal한 특성 반영
       - attention score matrix에서 masking 할 부분의 값을 $-\infty$ 으로 대체
    3) Cross-attention (Transformer Decoder Only)
       - Encoder-Decoder attention
       - Query : previous decoder layer output로부터 생성
       - Key & Value : outputs of encoder로부터 생성

→ input sequence 전반에 걸쳐서 decoder가 attend할 수 있도록 함

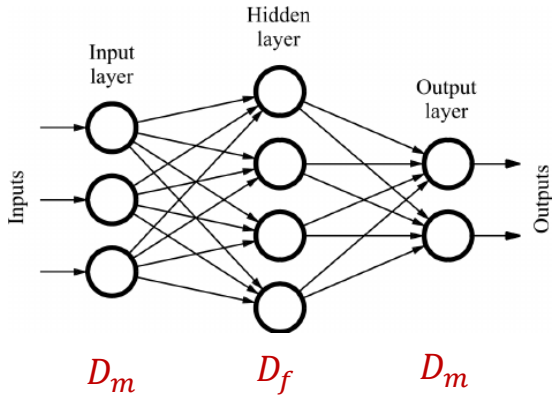
01 Background

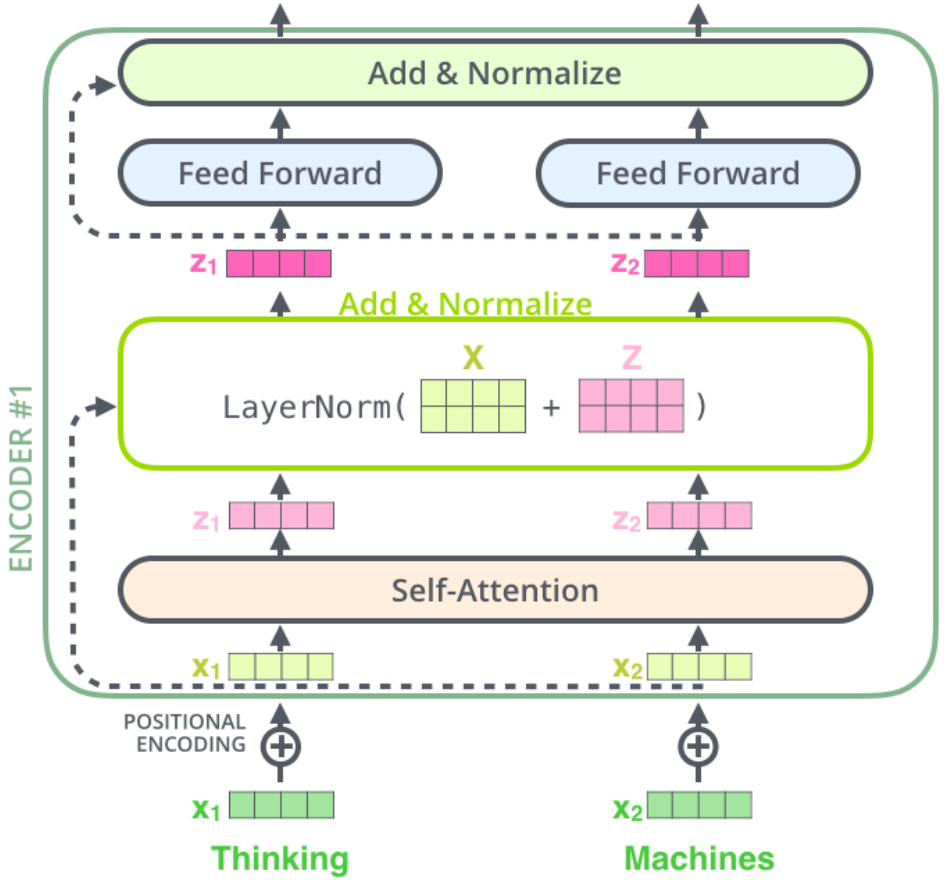
1) Vanilla Transformer

- **Position-wise FFN**
  - fully connected feed-forward module를 적용하는 부분
  - position 마다, 즉 개별 단어마다 적용되기 때문에 position-wise
  - 한 블록 내에서, 단어 간의 FFN의 parameter는 공유됨

$$\mathrm{FFN}(\mathbf{H}') = \mathrm{ReLU}(\mathbf{H}'\mathbf{W}^1 + \mathbf{b}^1)\mathbf{W}^2 + \mathbf{b}^2$$

  - H' : 이전 layer의 output
  - $W^1 \in \mathrm{R}^{\mathrm{D_m} \times D_f}$, $W^2 \in \mathrm{R}^{\mathrm{D_f} \times D_m}$, $b^1 \in \mathrm{R}^{\mathrm{D_f}}, b^2 \in \mathrm{R}^{\mathrm{D_m}}$
  - 보통, $D_f > D_m$으로 설정





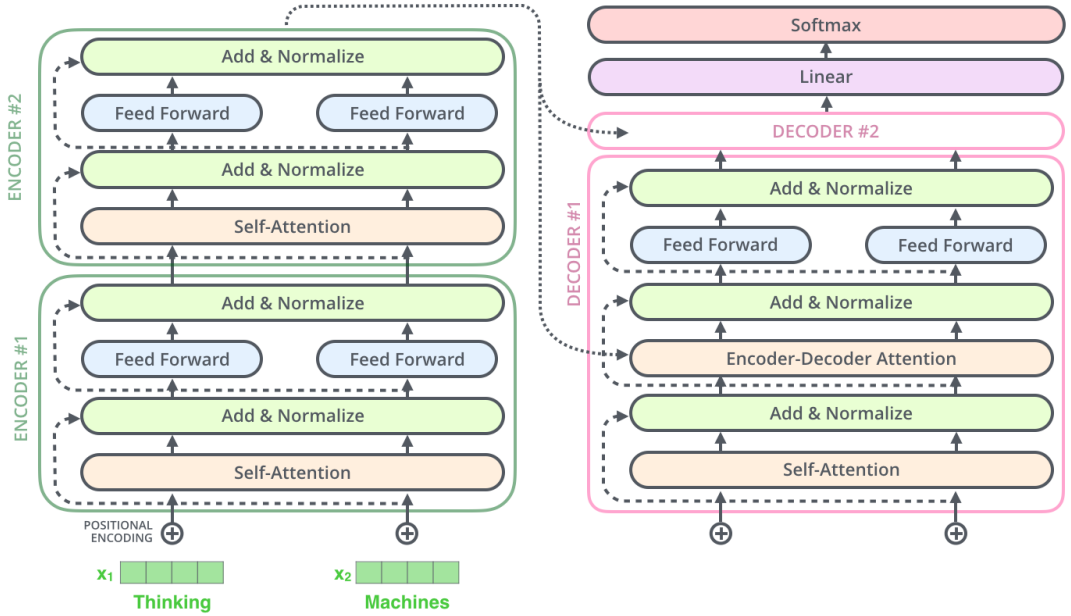
01 Background

1) Vanilla Transformer

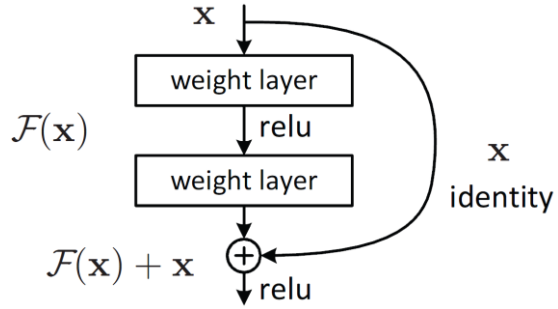
- **Residual Connection and Normalization**
  - Gradient exploding/vanishing 문제를 완화하고, deep한 네트워크를 안정적으로 학습하기 위해 도입

$$\mathbf{H}' = \mathrm{LayerNorm}(\mathrm{SelfAttention}(\mathbf{X}) + \mathbf{X})$$

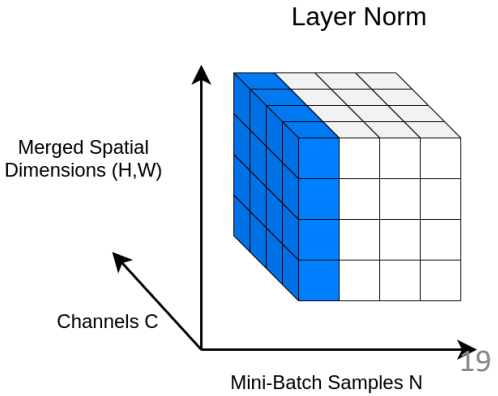
$$\mathbf{H} = \mathrm{LayerNorm}(\mathrm{FFN}(\mathbf{H}') + \mathbf{H}')$$



✓ Residual Connection



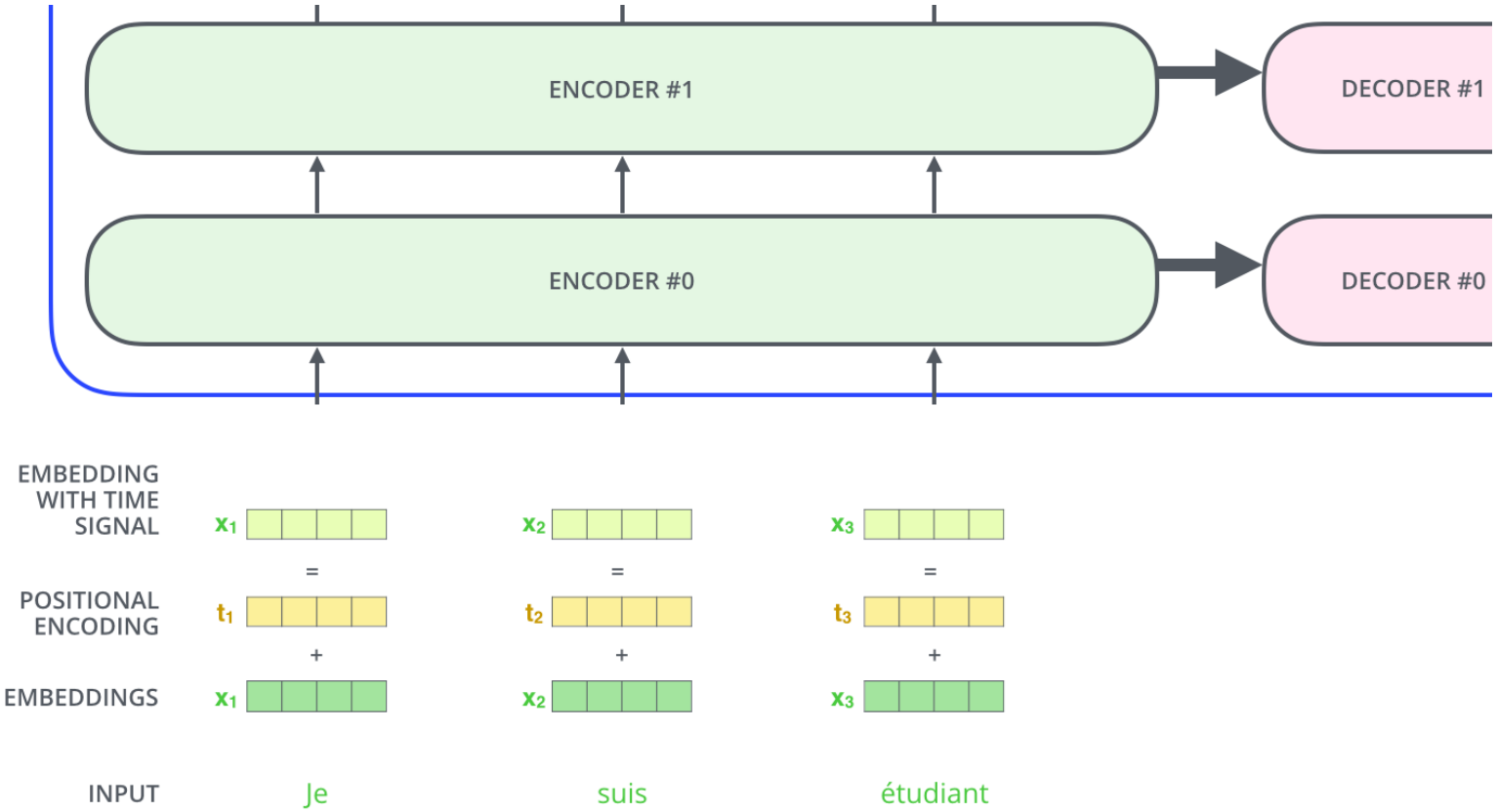
✓ Layer Normalization
  - 각 중간층의 출력을 정규화



01 Background

1) Vanilla Transformer

- **Position Encodings**
  - token의 순서정보를 반영해주기 위해 position encoding 사용



01 Background

2) Model Usage

- **Transformer Architecture의 활용 방식**
  - Encoder-Decoder
    - Full Transformer Architecture
    - 보통 sequence to sequence modeling(e.g. neural machine translation)에서 사용
  - Encoder only
    - Transformer의 Encoder만 사용
    - Encoder의 output은 input sequence의 representation으로 활용
    - 보통 Encoder로 생성된 representation을 바탕으로 classification이나 sequence labeling problem에 사용
  - Decoder only
    - 기존 Transformer 구조의 Decoder 내의 encoder-decoder cross-attention 모듈은 제거되고 사용
    - 보통 sequence generation (e.g. language modeling)에 사용

01 Background

3) Model Analysis

- **연산 복잡도와 parameter 수 분석**
  - Self-attention과 position-wise FFN 모듈
  - D : hidden dimension of the model ($\mathrm{D_m}$)
  - T : input sequence length
  - $4\mathrm{D}$: intermediate dimension of FFN
  - $\mathrm{D/H}$: the dimension of keys and values

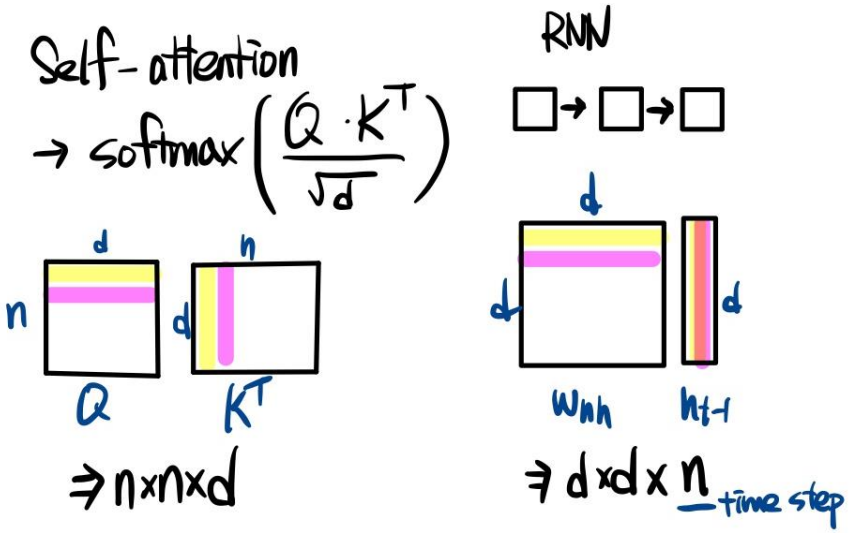


Table 1. Complexity and parameter counts of self-attention and position-wise FFN

Module	Complexity	#Parameters
self-attention	$O(T^2 \cdot D)$	$4D^2$
position-wise FFN	$O(T \cdot D^2)$	$8D^2$

01 Background

4) Model Comparison

- **Self-attention 분석**
  - Self-attention은 variable-length input에 대해 유연한 매커니즘을 지님
  - complexity, sequential operations, maximum path length 측면에서 layer 타입 비교
    1) fully connected layer처럼 maximum path length 값이 같음
       → long – range dependencies modeling에 적합
       → parameter-efficient, variable-length input에 대해 유연
    2) constant maximum path length는 constant number of layer가 long-range dependencies를 잘 모델링할 수 있도록 함 (⇔ convolution layer는 receptive field가 제한적)
    3) constant sequential operation과 maximum path length는 self-attention을 병렬처리가 가능하도록 하여 recurrent layer보다 long-range modeling에 더 적합

어떤 시점에서 비교하고 싶은 다른 시점의 token이 있을 때, 필요한 계산 횟수

* The maximum length of the paths forward and backward signals have to traverse to get from any input position to arbitrary output position. Shorter length implies a better potential for learning long-range dependencies.

01 Background

4) Model Comparison

- **Self-attention 분석**

✓ total computational complexity per layer
✓ parallelized될 수 있는 computation의 양
✓ network 상에서 long range dependency의 path length (→ path length가 짧아질수록 long range dependency를 학습하기 훨씬 쉬움)

Table 2. Per-layer complexity, minimum number of sequential operations and maximum path lengths for different layer types. T is the sequence length, D is the representation dimension and K is the kernel size of convolutions [137].

Layer Type	Complexity per Layer	Sequential Operations	Maximum Path Length
Self-Attention	$O(T^2 \cdot D)$	$O(1)$	$O(1)$
Fully Connected	$O(T^2 \cdot D^2)$	$O(1)$	$O(1)$
Convolutional	$O(K \cdot T \cdot D^2)$	$O(1)$	$O(\log_K(T))$
Recurrent	$O(T \cdot D^2)$	$O(T)$	$O(T)$

일반적으로 T < D이므로, 연산량이 가장 적음

병렬화 가능

long-term dependency 문제 해결

01 Background

4) Model Comparison

- **Inductive Bias 측면**
  - CNN, RNN 과 비교
    - Convolution : inductive biases of translation invariance(물체의 위치변화)and locality(window 내만 본다) with shared local kernel functions
    - Recurrent : inductive biases of temporal invariance(시간 정보를 가지고 있음, 과거의 시간 정보) and locality(보게 될 time step 범위 정해줌) via their Markovian structure
    - Transformer: few assumptions
      - time step이나, filter size 등에 대한 구조적 가정 없음
      - Universal, flexible architecture
      - structural bias의 부족은 small-scale data에 overfitting될 문제가 있음 → 조금 더 큰 데이터 필요

01 Background

4) Model Comparison

- **Inductive Bias 측면**
  - GNN과의 비교
    - Transformer = complete directed graph 구조의 GNN(self-loop)으로 볼 수 있음
    - Transformer는 input data 구조에 대해 prior knowledge 사용 안함
      - message passing(노드 간 정보 공유)이 content 간의 유사도에만 의존
      - graph structure(그래프 형태, 노드, 인접행렬)와 같은 prior knowledge 필요 없음

01 Appendix

Vanilla Transformer Architecture Overview

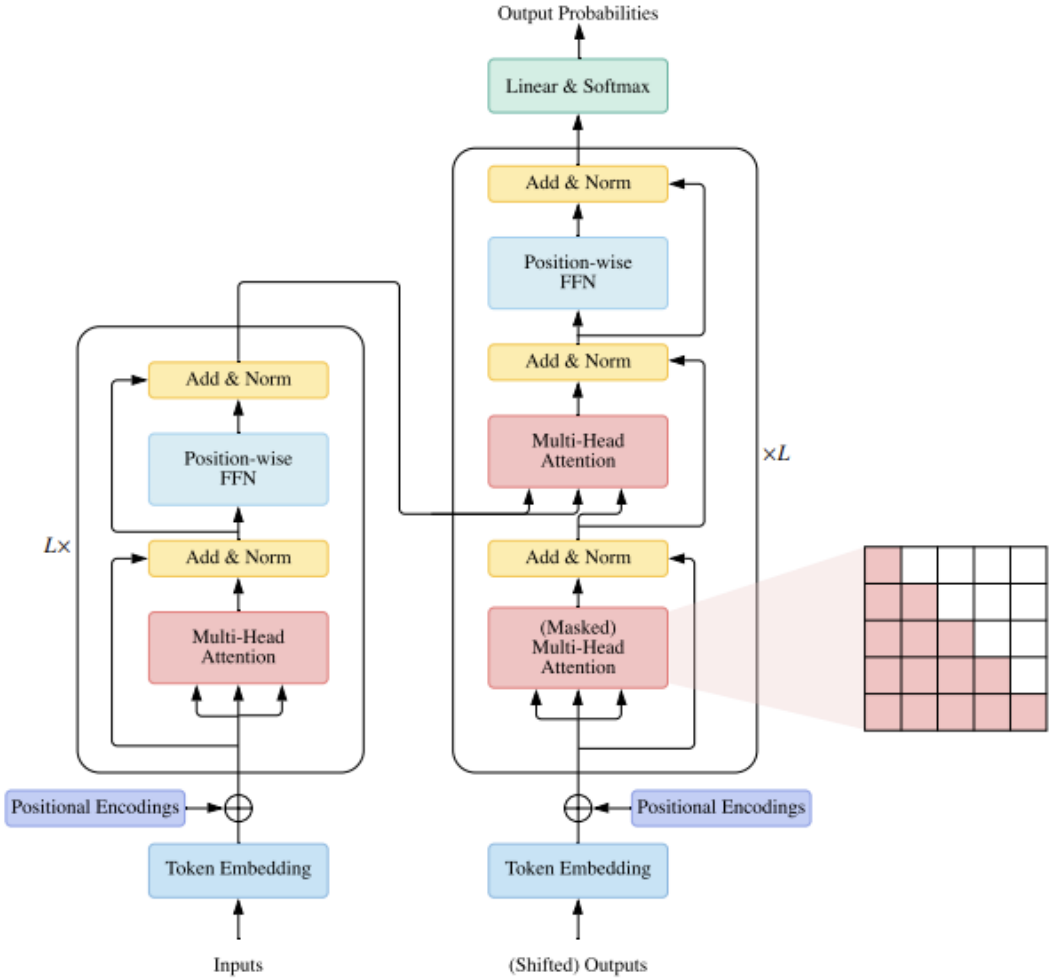


Fig. 1. Overview of vanilla Transformer architecture