

#### **DSBA** Transformer survey paper study

### A Survey of Transformers

**#1: Transformer Basic** 

arXiv preprint



고려대학교 산업경영공학과

Data Science & Business Analytics Lab 이유경, 김명섭, 윤훈상, 김지나, 허재혁, 김수빈

발표자: 김수빈

- 01 Introduction
- 02 Background
  - 1) Vanilla Transformer
  - 2) Model Usage
  - 3) Model Analysis
  - 4) Model Comparison

# Ol Introduction Transformer 기반 모델 연구 동향

#### ■ Transformer 모델이란?

- Attention is all you need (2017, 24786회 인용, Google)
- 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

# Ol 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

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
    - Multi-head self-attention
    - Position-wise feed-forward network
    - 3) Residual connection
    - 4) Layer Normalization

(참고)

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

- 4) Decoder Block
  - 1) 기본적인 Encoder Block 구성과 동일
  - 2) Cross-attention 호듈을 Multi-head self-attention과 Position-wise FFN 사이에 추가
  - 3) 디코딩 시에 미래 시점의 단어 정보를 사용하는 것을 방지하기 위해 Masked self-attention을 사용

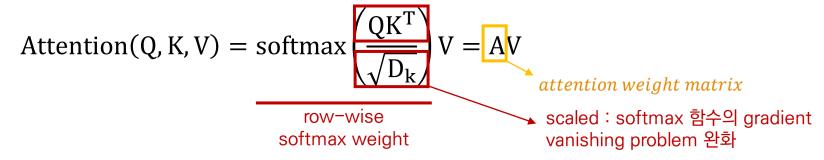
# Ol Background 1) Vanilla Transformer

#### Attention Modules

- Query-Key-Value (QKV) 로 동작하는 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

   각 Key에 해당하는 Value 값을 가중합하여 사용

attention score by dot-product



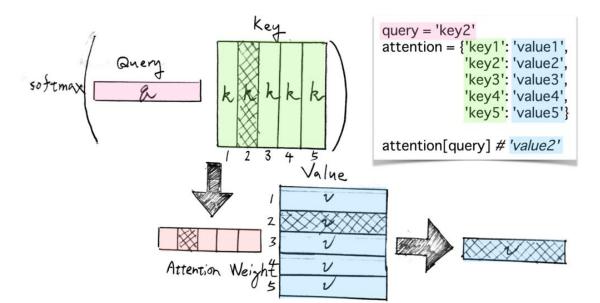
## Ol Background 1) Vanilla Transformer

#### Attention Modules

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

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

[ Query 벡터 하나의 attention 계산 과정 ]



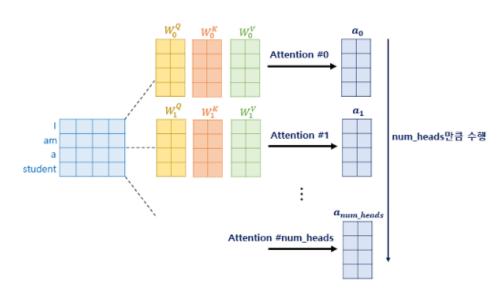
Query 벡터가 Key와의 유사도 정보를 반영한 벡터로 변형

#### Attention Modules

- Multi-head Attention
  - $N \times D_m$  크기의 embedding에 대한 Q(Query)  $\in \mathbb{R}^{N \times D_K}$ , K(Key)  $\in \mathbb{R}^{M \times D_K}$ , V(Value)  $\in \mathbb{R}^{M \times D_V}$  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

MultiHeadAttn(
$$\mathbf{Q}, \mathbf{K}, \mathbf{V}$$
) = Concat(head<sub>1</sub>, · · · , head<sub>H</sub>) $\mathbf{W}^O$ ,  
where head<sub>i</sub> = Attention( $\mathbf{Q}\mathbf{W}_i^Q, \mathbf{K}\mathbf{W}_i^K, \mathbf{V}\mathbf{W}_i^V$ ).

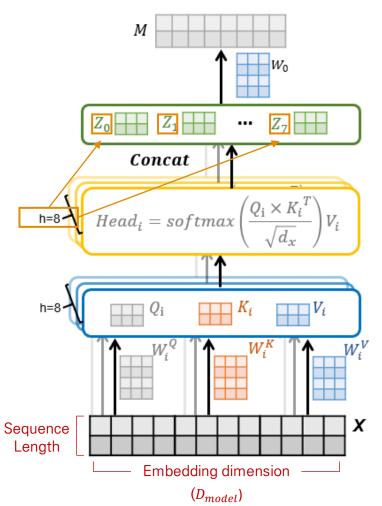


1) Vanilla Transformer

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.

#### Attention Modules

Multi-head Attention



Concatenate each attention head's output

각 attention head의 output concatenate

head 수만큼 attention 계산

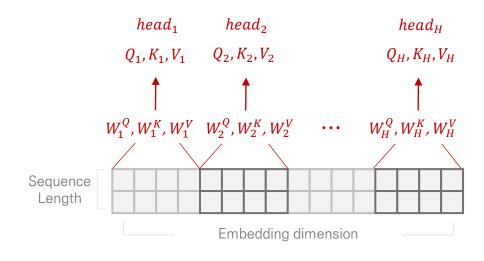
Weight matrices for Q, K, V

Sequence Embedding

#### [Discussion]

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

[※ **잘못된** 이해]

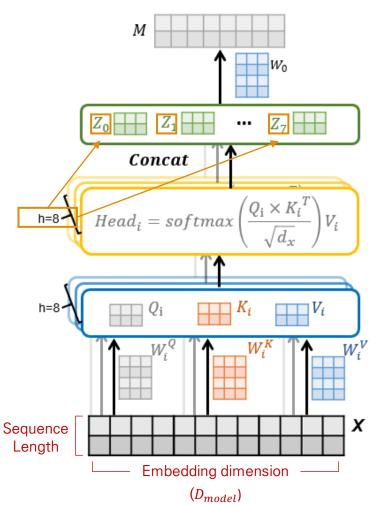


1) Vanilla Transformer

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.

#### Attention Modules

Multi-head Attention



Concatenate each attention head's output

각 attention head의 output concatenate

head 수만큼 attention 계산

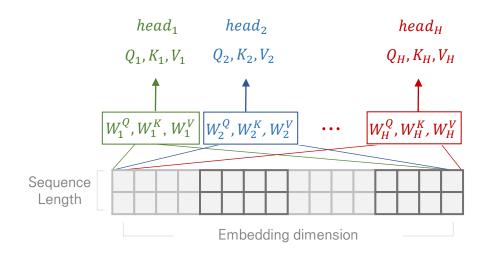
Weight matrices for Q, K, V

Sequence Embedding

#### [Discussion]

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

[※ **올바른** 이해]

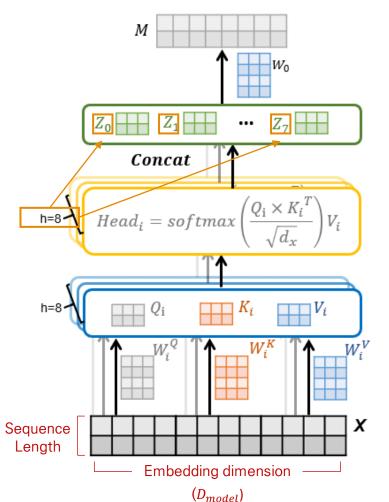




1) Vanilla Transformer

#### 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  $W^0$ 을 통해  $D_{model}$  크기로 사영시키는 이유는? 특히, transformer 논문 구현 상 concatenate된 후의 dimension과  $W^0$ 으로 사영시키고자 하는 dimension이  $D_{model}$ 로 서로 같은데, 왜 동일한 차원으로 다시 사영시키는가?

#### [참고]

MultiHeadAttn(
$$\mathbf{Q}, \mathbf{K}, \mathbf{V}$$
) = Concat(head<sub>1</sub>, · · · , head<sub>H</sub>) $\mathbf{W}^{O}$ , where head<sub>i</sub> = 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  $W^o$  projection을 통해 mix하여 사용하고자 함
- 2) 기본적으로 transformer 구조는 각 layer의 의 input output의 차원을 동일하게 가져가고자 함 ( $D_{model}$  차원 유지)

#### 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  $d_k=d_v=d_{\rm model}/h=64$ . 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  $d_{model}/n_{-}head$ 인 64로 정의

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

## Ol Background 1) Vanilla Transformer

- Attention Modules
  - Multi-head Attention

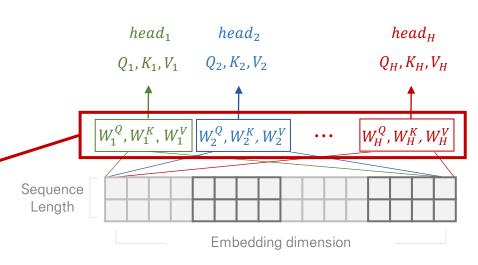
```
class EncoderLayer(nn.Module):
    ''' Compose with two layers '''
   def __init__(self, d_model, d_inner, n_head, d_k, d_v, dropout=0.1):
        super(EncoderLayer, self). init ()
       self.slf_attn = MultiHeadAttention(n_head, d_model, d_k, d_v, dropout=dropout)
       self.pos ffn = PositionwiseFeedForward(d model, d inner, dropout=dropout)
   def forward(self, enc input, slf attn mask=None):
                                                                  ✓ 앞서 전달 받은 dimension 크기를
                                                                     Multi-head Attention을 계산하는 클래스에 전달
       enc_output, enc_slf_attn = self.slf_attn(
           enc_input, enc_input, mask=slf_attn_mask)
       enc_output = self.pos_ffn(enc_output)
       return enc_output, enc_slf_attn
```

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.<mark>Linear</mark>(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
- $\checkmark$  Weight matrices를 처음부터 독립적으로 head 수만큼 정의하지 않고,  $n_{head} \times d_{k(v)}$  의 dimension을 갖는 weight matrix를 만든 후 나눠서 사용하는 방식

#### 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 \times lq \times (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

- ✓ 즉,  $sequence\_length \times (n\_head \times d_{k(v)})$ 의 크기를 갖는 Weight Matrix를 기반으로  $n\_head$ 의 수만큼 attention이 계산될 수 있도록 차원을 변경하여 사용 = <u>병렬적으로 계산 가능</u>!
- ✓ Attention 계산 후, 차원을 다시 조정하여 concatenate된 matrix 생성

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 -∞ 으로 대체
    - 3) Cross-attention (Transformer Decoder Only)
      - Encoder-Decoder attention
      - Query: previous decoder layer output로부터 생성
      - Key & Value: outputs of encoder로부터 생성



0.11	0.00	0.81	0.79
0.19	0.50	0.30	0.48
0.53	0.98	0.95	0.14
0.81	0.86	0.38	0.90

Apply Attention Mask Masked Scores (before softmax)

0.11	-inf	-inf	-inf
0.19	0.50	-inf	-inf
0.53	0.98	0.95	-inf
0.81	0.86	0.38	0.90

input sequence 전반에 걸쳐서 decoder가 attend할 수 있도록 함

# Ol Background 1) Vanilla Transformer

#### Attention Modules

#### [Discussion]

[4] 본 survey 논문에서 다음과 같이 Q=K=V=X라고 언급하는데, 정확히 맞는 표현인가? Q,K,V가 W로 projection 되어 생성되는 것인데 이전 layer의 output(X) 동일하다는 의미는 엄밀하게 틀린 것이 아닌가?

#### [답변]

- 아래의 수식을 보면, Transformer Survey 논문에서는 W로 projection 되기 전, 즉 Query, Key, Value의 source를 Q, K, V 라고 보고 있어서 Q=K=V=X라는 표현이 맞게 됨
- 참고로, Attention is all you need 논문에서 기본 Attention 개념과 Multi-head attention의 개념이 다음과 같이 별도로 분리되어 정의되는데, Q, K, V가 projection 이후의 값인지, projection 전의 값인지 구분하여 이해할 필요가 있음

Attention(Q, K, V) = softmax 
$$(QK^T)V = AV$$
 MultiHeadAttn(Q, K, V) = Concat(head<sub>1</sub>, · · · , head<sub>H</sub>)W<sup>O</sup>, where head<sub>i</sub> = Attention( $QW_i^Q, KW_i^K, VW_i^V$ ).

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 -∞ 으로 대체
  - 3) Cross-attention (Transformer Decoder Only)
    - Encoder-Decoder attention
    - Query: previous decoder layer output로부터 생성
    - Key & Value: outputs of encoder로부터 생성



0.11	0.00	0.81	0.79
0.19	0.50	0.30	0.48
0.53	0.98	0.95	0.14
0.81	0.86	0.38	0.90

Apply Attention Mask Masked Scores (before softmax)

0.11	-inf	-inf	-inf
0.19	0.50	-inf	-inf
0.53	0.98	0.95	-inf
0.81	0.86	0.38	0.90

input sequence 전반에 걸쳐서 decoder가 attend할 수 있도록 함

### 01

### Background

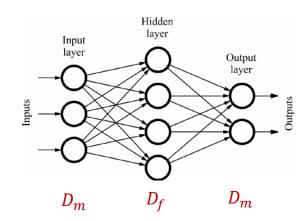
1) Vanilla Transformer

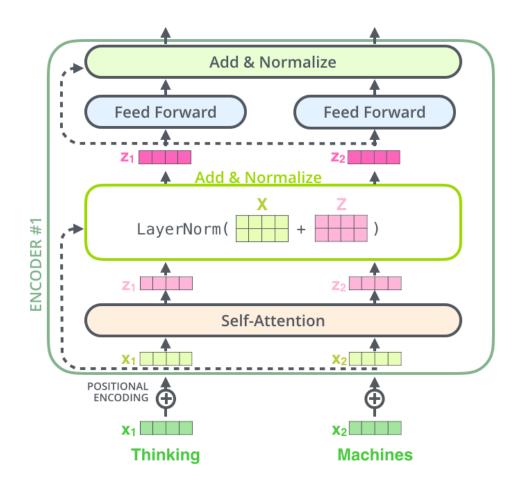
#### Position-wise FFN

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

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

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

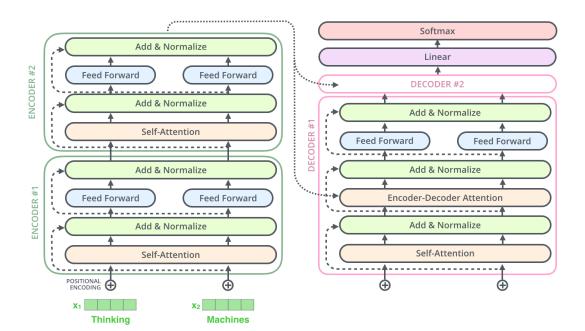




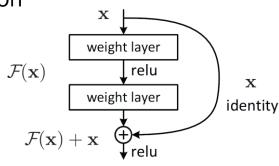
- 1) Vanilla Transformer
- Residual Connection and Normalization
  - Gradient exploding/vanishing 문제를 완화하고, deep한 네트워크를 안정적으로 학습하기 위해 도입

H' = LayerNorm(SelfAttention(X) + X)

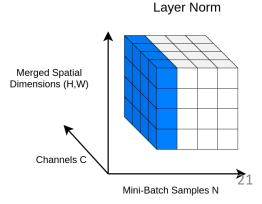
H = LayerNorm(FFN(H') + H')



✓ Residual Connection



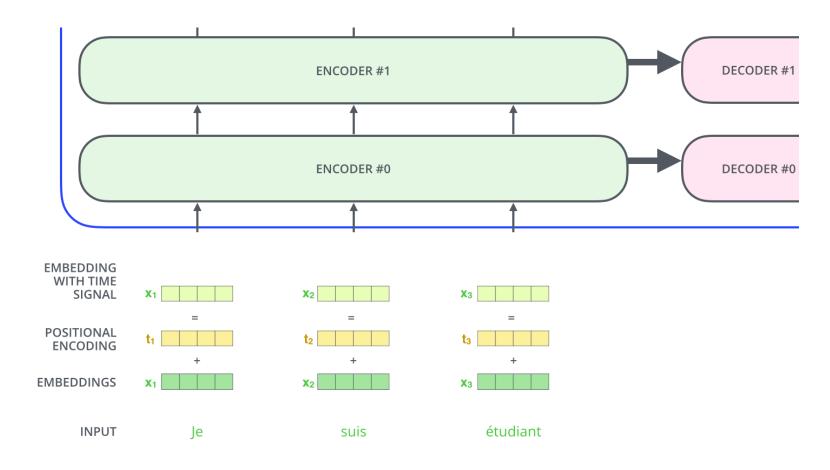
- ✓ Layer Normalization
  - 각 중간층의 출력을 정규화



# Ol Background 1) Vanilla Transformer

#### Position Encodings

• token의 순서정보를 반영해주기 위해 position encoding 사용



# Ol 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

## Ol Background 3) Model Analysis

#### ■ 연산 복잡도와 parameter 수 분석

- Self-attention과 position-wise FFN 모듈
- D: hidden dimension of the model (D<sub>m</sub>)
- T: input sequence length
- 4D: intermediate dimension of FFN
- D/H: the dimension of keys and values

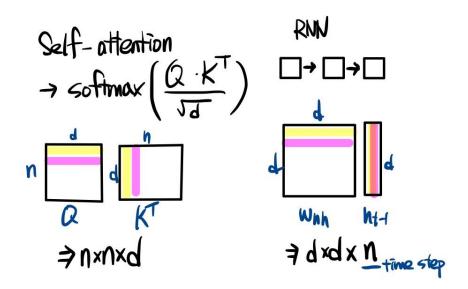


Table 1. Complexity and parameter counts of self-attention and position-wise FFN

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

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
  - - → 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

25

<sup>\*</sup> 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.

## Ol 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)
<b>Fully Connected</b>	$O(T^2 \cdot D^2)$	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)
일	반적으로 T < D이므로, 연산량이 가장 적음	병렬화 가능	long-term dependency 문제 해결

# O1 Background 4) Model Comparison

#### ■ Inductive Bias 측면

- CNN, RNN 과 비교
  - Convolution: inductive biases of <u>translation invariance(물체의 위치변화)</u>and <u>locality(window 내만 본다)</u>
     with shared local kernel functions
  - Recurrent: inductive biases of <u>temporal invariance(시간 정보를 가지고 있음, 과거의 시간 정보</u>)
     and <u>locality(보게 될 time step 범위 정해줌)</u> 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

## Ol 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

### Appendix

#### Vanilla Transformer Architecture Overview

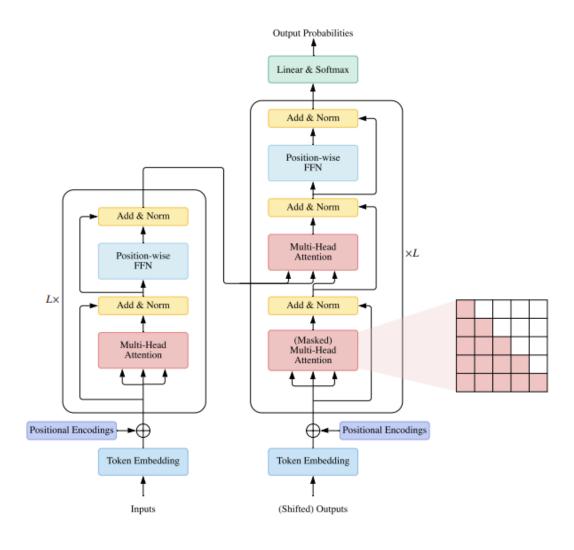


Fig. 1. Overview of vanilla Transformer architecture