Natural Language Processing with Transformers
（3章 Transformerの詳細）

“Attention Is All You Need” の図表と書籍中のコードの対応

FeedForward
*dropout(GELU(X・W1+b1)・W2+b2)

TransformerEncoderLayer

TransformerEncoder

scaled_dot_product_attention

MultiHeadAttention
(-> AttentionHead)

Embeddings

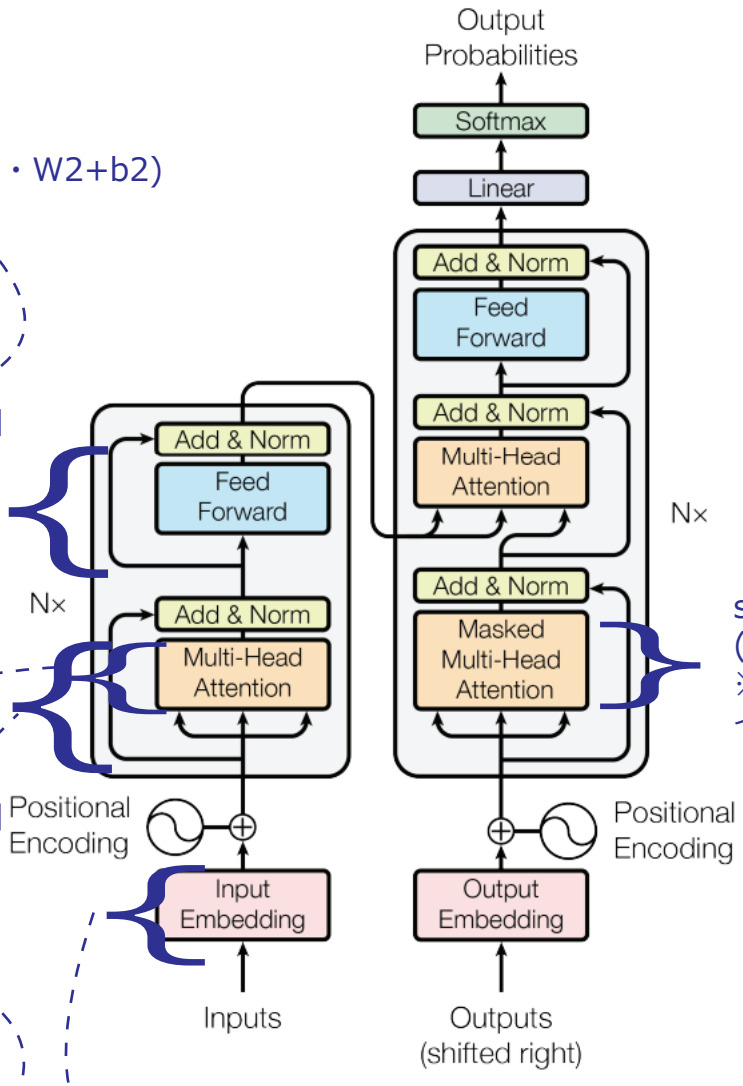
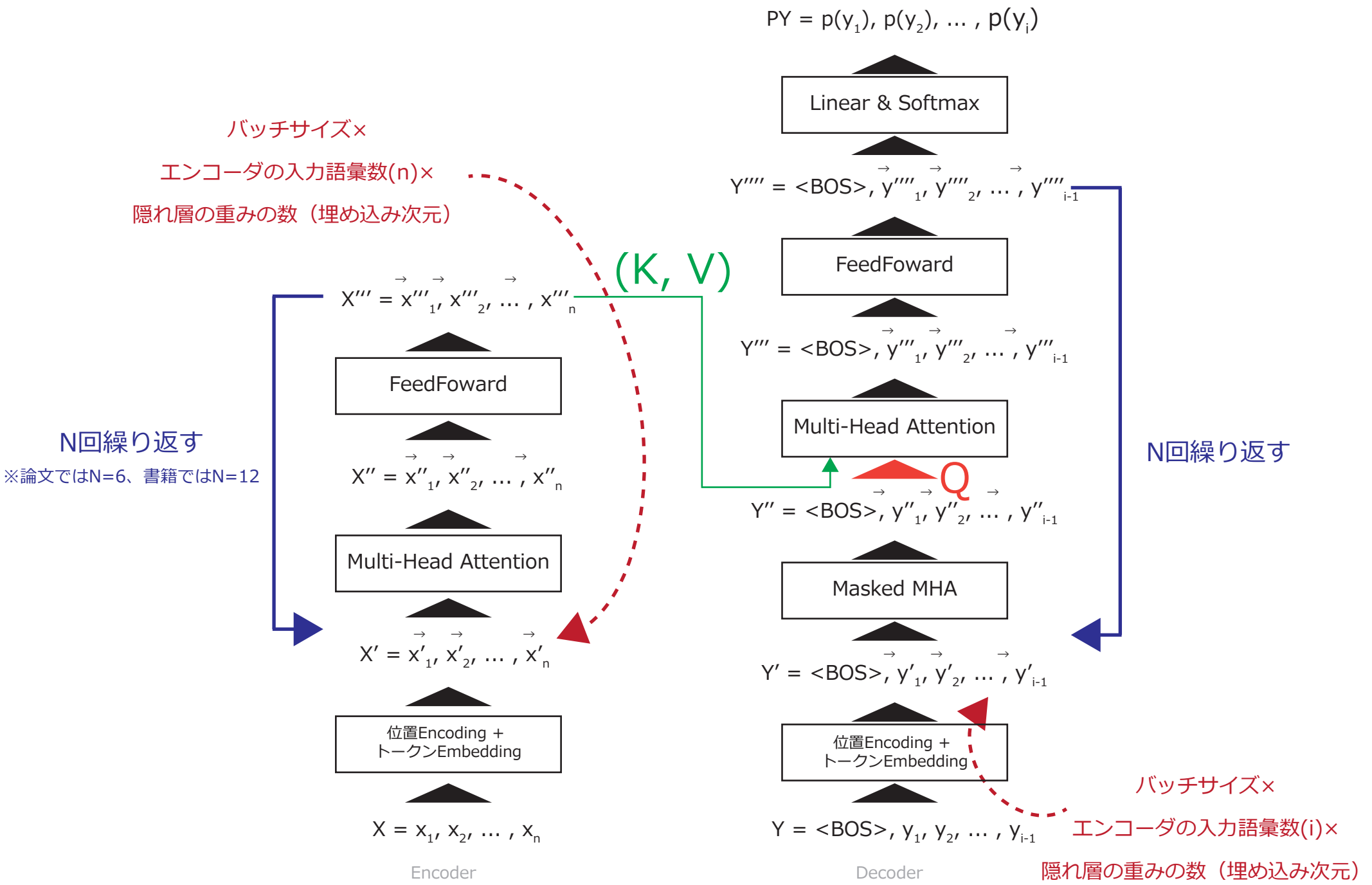


Figure 1: The Transformer - model architecture.

scaled_dot_product_attention
(マスク付き)
※TransformerEncoderをオーバーライドする想定のよう

Transformerの大枠（Residual Connectionと加算・正規化等は省略）



Transformerを構成する主要なモジュール

①Embedding
②Positional Encoding
③Multi-Head Attention
④FeedForward
⑤Masked Multi-Head Attention（Masked MHA）
⑥分類器

①Embedding／②Positional Encoding（１）

　各トークンまたは位置の情報である$X = x_1, x_2, \dots, x_n$を$X = \vec{x_1}, \vec{x_2}, \dots, \vec{x_n}$のように変換する処理を行う。
　各要素をOne-hotベクトル形式ではなく、より圧縮されたベクトルに変換し、情報を保存する。共起を想定した情報の保存方法であり、1要素が複数の情報（トークン・位置など）を、さらに複数要素が1つの情報を表すことに寄与する。

①トークン…単語、あるいは語幹など。トークナイザの実装次第で単位が変わる。書籍中の文脈では、DistilBertTokenizerで抽出されたトークンということになる（X = input_ids）。

vocab_size:トークンのバリエーション数（30522）

```
self.token_embeddings = nn.Embedding(config.vocab_size, config.hidden_size)
```

hidden_size:埋め込み後の各ベクトルの長さ

```
token_embeddings = self.token_embeddings(input_ids)
```

```
self.position_embeddings = nn.Embedding(config.max_position_embeddings, config.hidden_size)
```

max_position_embeddings:処理可能な文章の最大長（512）

②位置…文中において各トークンの出現する位置に関する情報。

```
position_ids = torch.arange(seq_length, dtype=torch.long).unsqueeze(0)
```

seq_length:入力された文章の長さ

```
position_embeddings = self.position_embeddings(position_ids)
```

position_ids:入力された文章に含まれるトークンを頭から0,1,2,..と数え上げた数字の配列

①Embedding／②Positional Encoding（２）

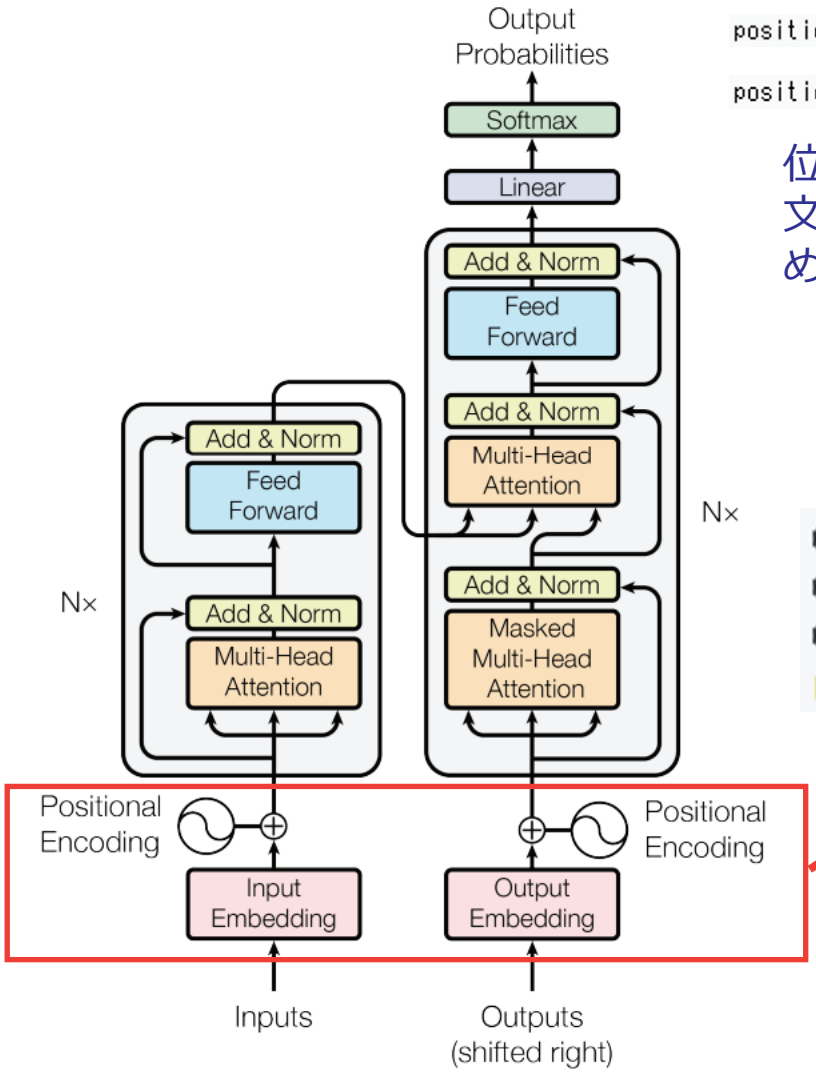


Figure 1: The Transformer - model architecture.

```
self.position_embeddings = nn.Embedding(config.max_position_embeddings, config.hidden_size)
```

```
position_ids = torch.arange(seq_length, dtype=torch.long).unsqueeze(0)
```

```
position_embeddings = self.position_embeddings(position_ids)
```

位置埋め込みの方法はどうやら複数通り考えられるらしく……論文の方では以下のように奇数番目/偶数番目をsin/cosで分かつ埋め込み方をしている。任意長の文章に対応できることがメリット

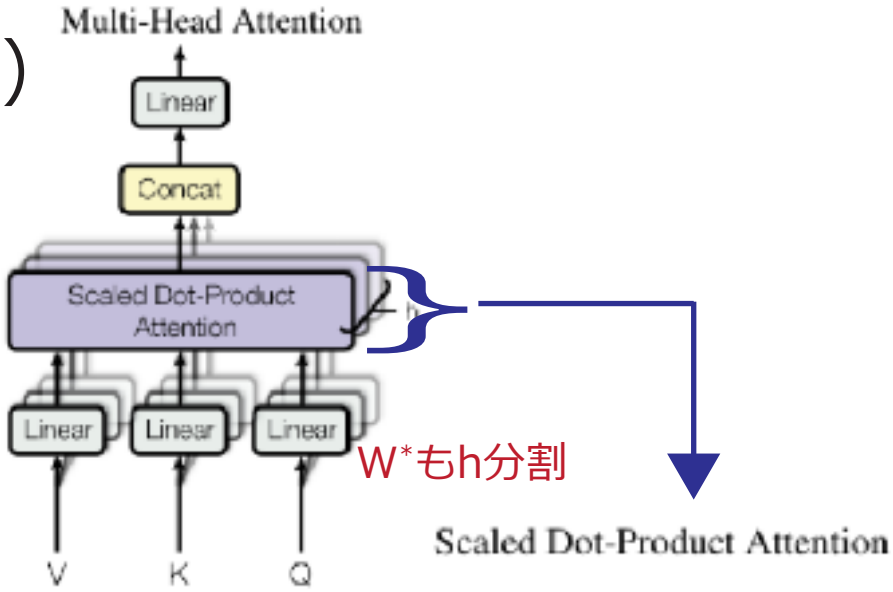
$$PE_{(pos,2i)} = sin(pos/10000^{2i/d_{\text{model}}})$$

$$PE_{(pos,2i+1)} = cos(pos/10000^{2i/d_{\text{model}}})$$

```
embeddings = token_embeddings + position_embeddings
embeddings = self.layer_norm(embeddings)
embeddings = self.dropout(embeddings)
return embeddings
```

③Multi-Head Attention (MHA)（1）

Multi-Head AttentionはAttention-Head、もといScaled Dot Product Attentionをh個束ねた層である。
（書籍/BERT中のh=num_heads=12、論文中ではh=8）



$MHA(Q, K, V) \rightarrow concat(head_1, head_2, ..., head_h) \cdot W^o$

$head_i = Attention(Q \cdot W_i^Q, K \cdot W_i^K, V \cdot W_i^V)$

$Attention(Q, K, V) = softmax(Q \cdot K^T / \sqrt{d}) \cdot V$

Encoder由来のQと、Decoder由来のKの類似度に基づいて、
Encoder由来のVの中から適切なベクトルを強調させる。

```
def scaled_dot_product_attention(query, key, value):
    dim_k = query.size(-1)
    scores = torch.bmm(query, key.transpose(1,2)) / sqrt(dim_k)
    weights = F.softmax(scores, dim=-1)
    return torch.bmm(weights, value)
```

```
class AttentionHead(nn.Module):
    def __init__(self, embed_dim, head_dim):
        super().__init__()
        self.q = nn.Linear(embed_dim, head_dim)
        self.k = nn.Linear(embed_dim, head_dim)
        self.v = nn.Linear(embed_dim, head_dim)

    def forward(self, hidden_state):
        attn_outputs = scaled_dot_product_attention(self.q(hidden_state), self.k(hidden_state), self.v(hidden_state))
        return attn_outputs
```

Q, K, Vそれぞれに線形変換を施し、Scaled Dot Product Attentionを計算している。

③Multi-Head Attention (MHA)（2）

各Attention Headの処理は（埋め込みベクトル長×埋め込みベクトル長/h）の行列を吐く。QとKの類似度の割合に基づくVの重み付き和。

```
class AttentionHead(nn.Module):
    def __init__(self, embed_dim, head_dim):
        super().__init__()
        self.q = nn.Linear(embed_dim, head_dim)
        self.k = nn.Linear(embed_dim, head_dim)
        self.v = nn.Linear(embed_dim, head_dim)

    def forward(self, hidden_state):
        attn_outputs = scaled_dot_product_attention(self.q(hidden_state), self.k(hidden_state), self.v(hidden_state))
        return attn_outputs
```

※列の長さはTransformerの実装次第で変化しうる。
論文中でも$d_{model} \times hd_v$としている。
なおd_vは各AttentionHeadの出力列の長さ。

一方、Multi-Head AttentionはAttention Head×hをModuleListで束ねて保持し、処理の結果として（埋め込みベクトル長×埋め込みベクトル長）の行列を吐く。

```
embed_dim = config.hidden_size
num_heads = config.num_attention_heads
head_dim = embed_dim // num_heads
self.heads = nn.ModuleList([AttentionHead(embed_dim, head_dim) for _ in range(num_heads)])
self.output_linear = nn.Linear(embed_dim, embed_dim)
```

```
x = torch.cat([h(hidden_state) for h in self.heads], dim=-1)
x = self.output_linear(x)
return x
```

④FeedForward

全結合の2層からなる。

$$\mathrm{FFN}(x) = \max(0, xW_1 + b_1)W_2 + b_2$$

論文中では一層目の出力にReLUを適用しているが、書籍中ではGELUを適用している。

```
class FeedForward(nn.Module):
    def __init__(self, config):
        super().__init__()
        self.linear_1 = nn.Linear(config.hidden_size, config.intermediate_size)
        self.linear_2 = nn.Linear(config.intermediate_size, config.hidden_size)
        self.gelu = nn.GELU()
        self.dropout = nn.Dropout(config.hidden_dropout_prob)

    def forward(self, x):
        x = self.linear_1(x)
        x = self.gelu(x)
        x = self.linear_2(x)
        x = self.dropout(x)
        return x
```

intermediate_size:中間層の結合数（512*6 = 3072 ??）
※論文中では2048の模様

⑤Masked Multi-Head Attention

$P(y_i)$の推論時、$y_1, y_2, \ldots, y_{i-1}$を根拠とし、$y_{i+1}$以降を根拠に含めてはならない。

これを保証するため、y_{i+1}以降にマスクをかける。

$Y = <BOS>, y_1, y_2, \ldots, y_{i-1}$ → Decoder → $PY = p(y_1), p(y_2), \ldots, p(y_i)$

```
def scaled_dot_product_attention(query, key, value):
    dim_k = query.size(-1)
    scores = torch.bmm(query, key.transpose(1,2)) / sqrt(dim_k)
    weights = F.softmax(scores, dim=-1)
    return torch.bmm(weights, value)
```

```
def scaled_dot_product_attention(query, key, value, mask=None):
    dim_k = query.size(-1)
    scores = torch.bmm(query, key.transpose(1,2)) / sqrt(dim_k)
    if mask  is not None:
        scores = scores.masked_fill(mask == 0, float('-Inf'))
    weights = F.softmax(scores, dim=-1)
    return weights.bmm(value)
```

マスク対象の要素は$e^{-\infty}=0$となる為、直後のsoft-max計算時に実質無視される。

⑥分類器

エンコーダ／デコーダ（ボディ部）から得た出力を分類するヘッド部。
書籍中では3分類するLinearで実装されている。
分類器の実装はフレーバが多そうなので後の章に委ねる、、、。

```
class TransformerForSequenceClassification(nn.Module):
    def __init__(self, config):
        super().__init__()
        self.encoder = TransformerEncoder(config)
        self.dropout = nn.Dropout(config.hidden_dropout_prob)
        self.classifier = nn.Linear(config.hidden_size, config.num_labels)

    def forward(self, x):
        x = self.encoder(x)[:, 0, :]
        x = self.dropout(x)
        x = self.classifier(x)
        return x
```

```
config.num_labels= 3
encoder_classifier = TransformerForSequenceClassification(config)
encoder_classifier(inputs.input_ids).size()
```

エンコーダ／デコーダの層は一定回数繰り返される

書籍中では繰り返し回数N=12だが、論文原著はN=6。

```
class TransformerEncoder(nn.Module):
    def __init__(self, config):
        super().__init__()
        self.embeddings = Embeddings(config)
        self.layers = nn.ModuleList([TransformerEncoderLayer(config) for _ in range(config.num_hidden_layers)])

    def forward(self, x):
        x = self.embeddings(x)
        for layer in self.layers:
            x = layer(x)
        return x
```

Transformer系モデル

aaa