Transformer


牛久 祥孝


losnuevetoros

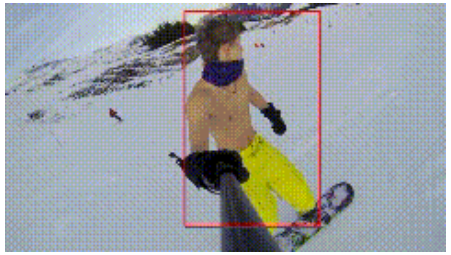
自己紹介（学職歴）

2013.6〜2013.8	Microsoft Research Intern
2014.3	博士(情報理工学)、東京大学
2014.4〜2016.3	NTT CS研 研究員
2016.4〜2018.9	東京大学 講師 (原田牛久研究室)
2016.9〜	産業技術総合研究所 協力研究員
2016.12〜2018.9	国立国語研究所 共同研究員
2018.10〜	オムロンサイニックエックス株式会社 Principal Investigator
2019.1〜	株式会社 Ridge-i Chief Research Officer
2020.4〜2023.3	津田塾大学 非常勤講師
2021.7〜	東北大学 非常勤講師
2022.1〜	合同会社ナインブルズ 代表

画像キャプション生成
[Ushiku+, ACMMM 2012]
[Ushiku+, ICCV 2015]

A yellow train on the tracks near a train station.

動画の特定区間と
キャプションの相互検索
[Yamaguchi+, ICCV 2017]



A guy is skiing with no shirt on and yellow snow pants.

自己紹介（その他）

主な学術団体活動

ACM・IEEE・情報処理学会・応用物理学会	一般会員
コンピュータビジョン勉強会@関東	幹事
電子情報通信学会	パターン認識・メディア理解研究会 専門委員
	情報・システムソサイエティ 庶務幹事
	著作権管理委員会 委員
人工知能学会	論文誌編集委員会 編集委員
建築情報学会	理事
日本ロボット学会	代議員
日本ディープラーニング協会	有識者会員
共立出版 コンピュータビジョン最前線	編集

主な研究プロジェクト

2022-2025	人と融和して知の創造・越境をするAIロボット　JST Moonshot（PM:牛久祥孝）
2021-2025	マテリアル探索空間拡張プラットフォームの構築　JST 未来社会創造事業（代表:長藤圭介）
2017-2020	多様なデータへのキャプションを自動で生成する技術の創出　JST ACT-I（代表:牛久祥孝）
2017-2021	機械可読時代における文字科学の創成と応用展開　JSPS 基盤研究(S)（代表:内田誠一）

本講演について

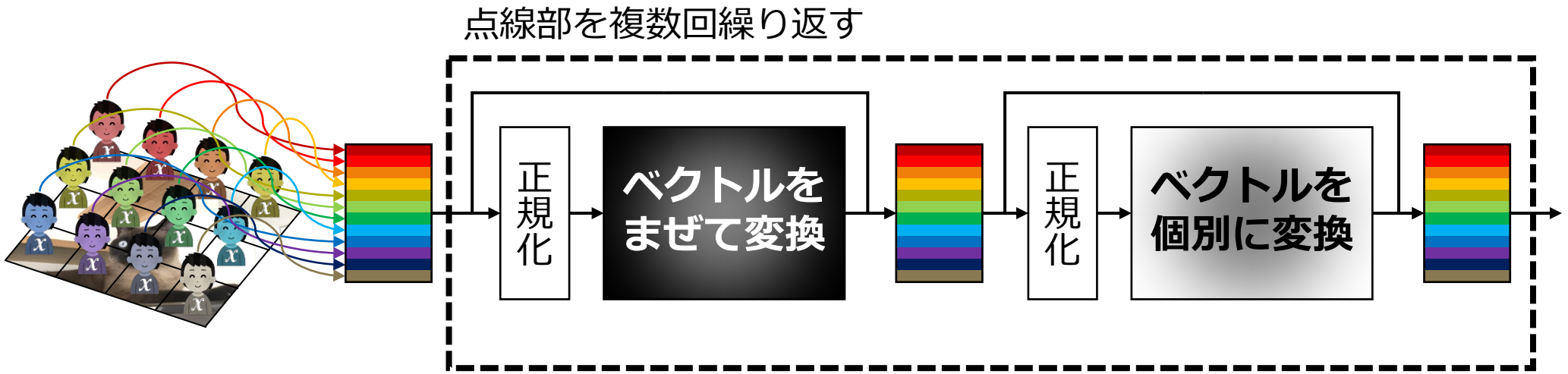
Transformerの基本的な動作から応用範囲、最近のMLP系ネットワークまでの俯瞰

- そもそもTransformerって？
- Transformer旋風と基盤モデル
- Transformerのノウハウ
- Transformerはオワコン？！
- CNNはオワコン？！

本講演の資料の最新バージョン→
（サブタイトルにも掲載しております）

色々聞きすぎて良く分からない！という人のために

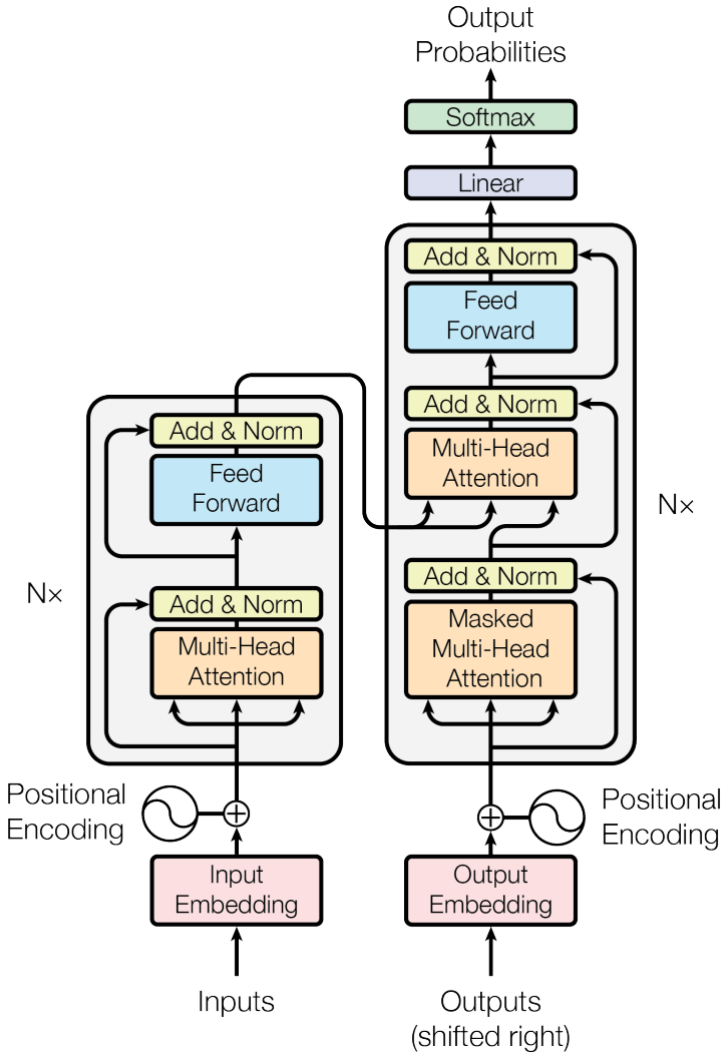
- **Transformerはトークン（単語やパッチなど）をResidual接続しながら2つのモジュールを繰り返しているだけ！**
  - トークンを混ぜるToken Mixer
  - トークンを変換するMLP
- **話題になったMLP系も実は基本的に同じ構造！**

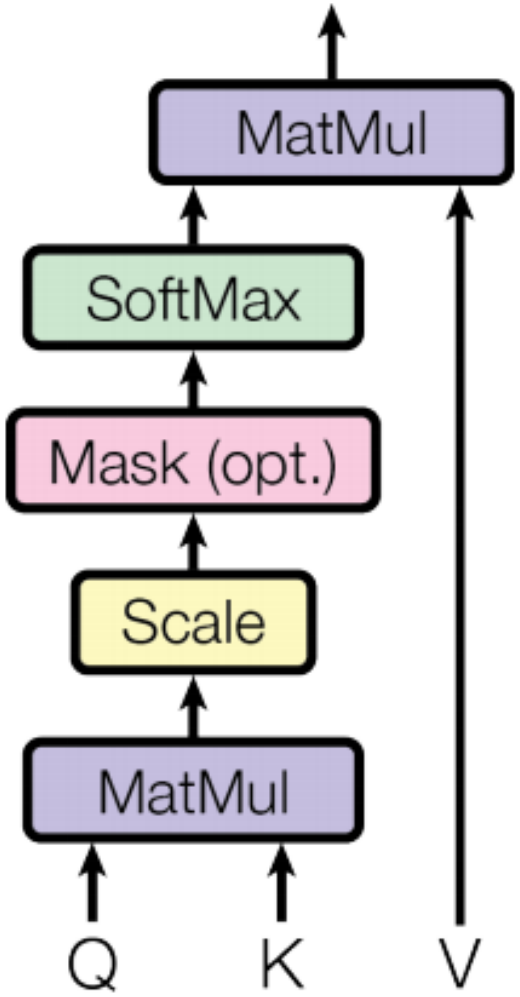


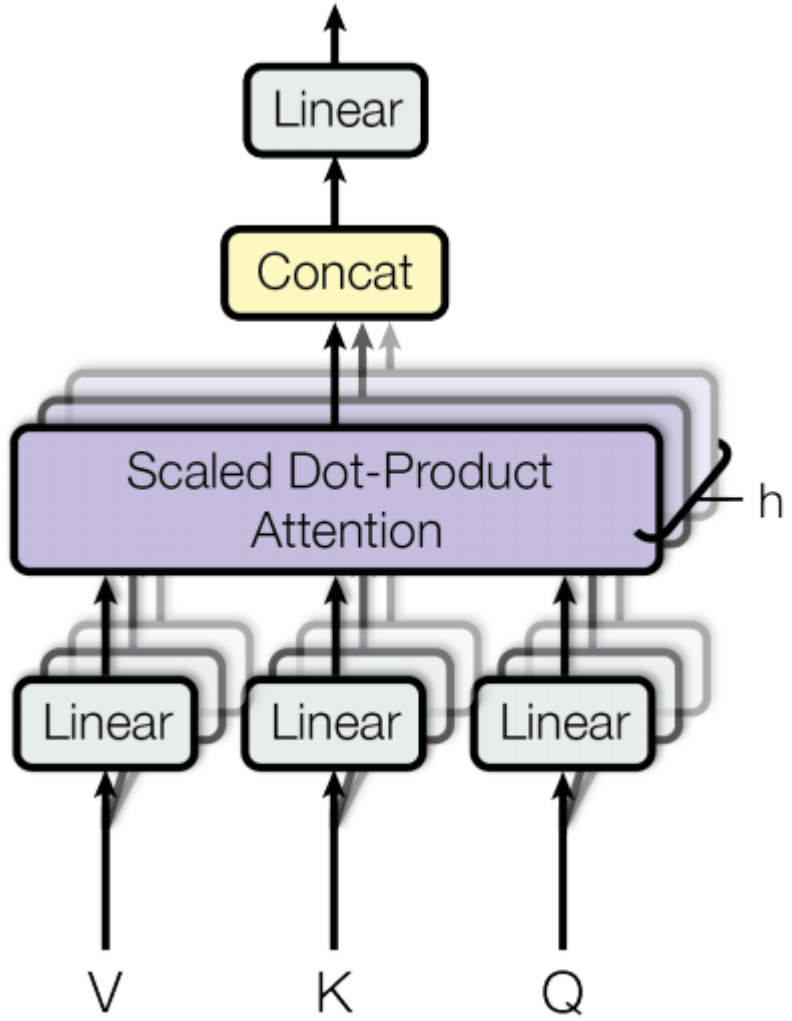
- **…あとは色々とノウハウがあるので気を付けましょう**

そもそもTransformerって？

Transformer系論文でよく見る図







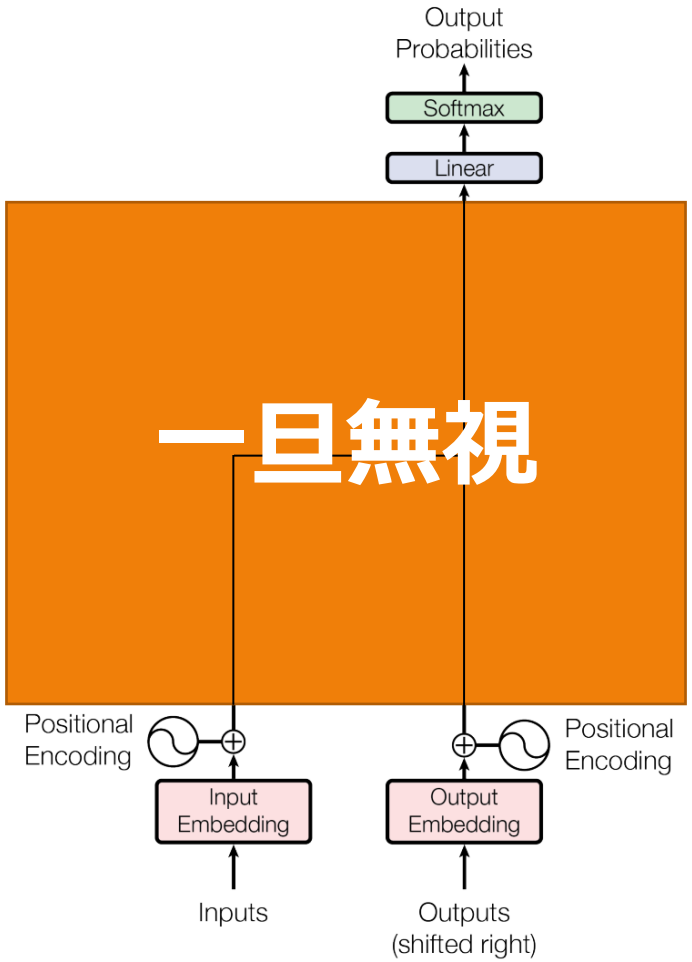
Transformer系論文でよく見る図

綺麗な図だし
分かりやすく見える
けど分かりにくい

※個人の感想です

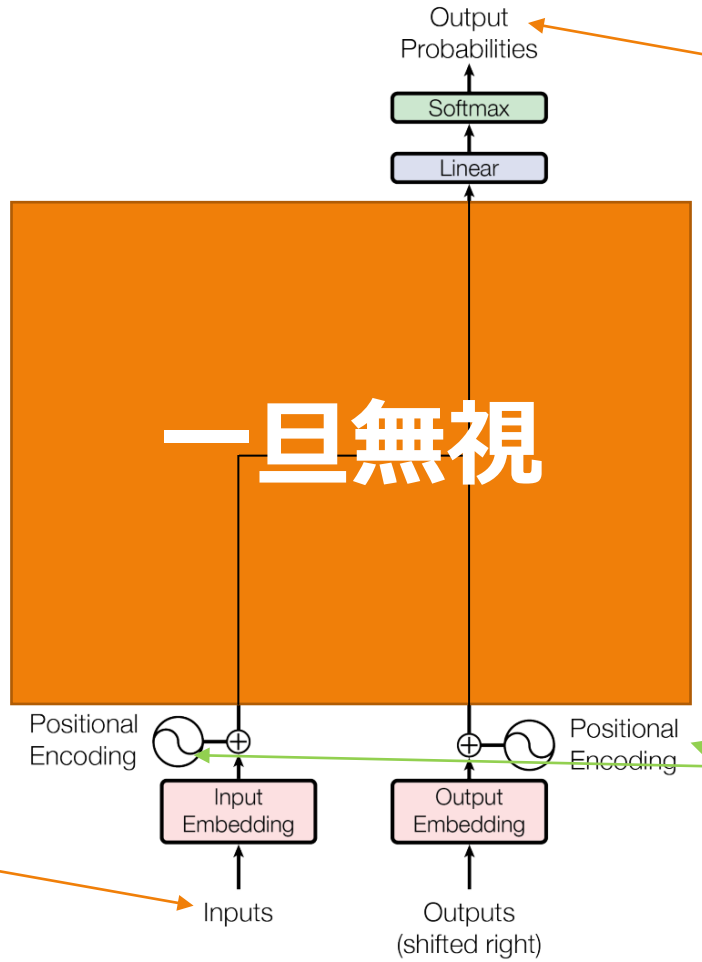
Transformerとは

任意の個数のベクトルを任意の個数のベクトルに変換するネットワーク



Transformerとは

任意の個数のベクトルを任意の個数のベクトルに変換するネットワーク



出力：
任意の個数のベクトル

入力：
任意の個数のベクトル

Positional Encoding?

Positional Encoder

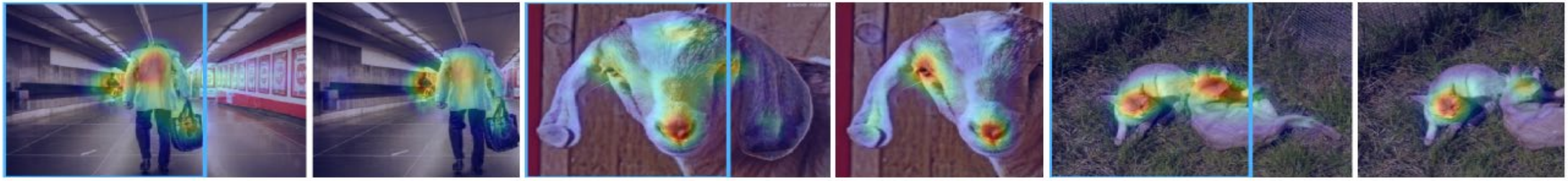
入力ベクトルの**位置**と出力ベクトルの**位置**を表すベクトル

- 単語の分散表現なら**「文中の何単語目？」**
- 画像の特徴量なら**「画像内のどこの座標？」**
- 時系列の特徴量なら**「何秒時点の情報？」**

[Vaswani+, NIPS'17]では単語の位置を
サイン・コサインでベクトル化
→波のマークはサイン・コサインの意味

RNNや**CNN**は各特徴量の位置情報を知っている

- 「**RNN**も**CNN**も各要素の**相対位置**を知っている」 [Shaw+, NAACL-HLT'18][Dai+, ACL'19]
- 「**CNN**は各要素の**絶対位置**を学習している」[Islam+, ICLR'20]

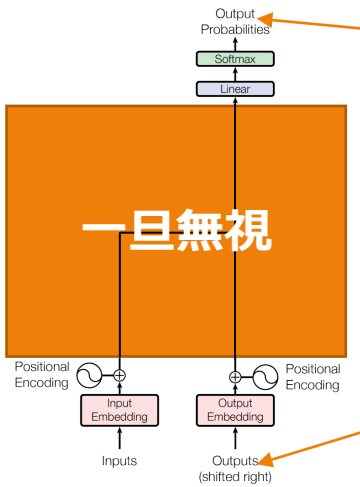


画像の顕著性推定で、画像全体を入力 vs. 一部の画像を入力→それぞれ**"画像の中央"**は顕著性が大きい

Autoregressive vs. Non-autoregressive

出力のベクトルを…

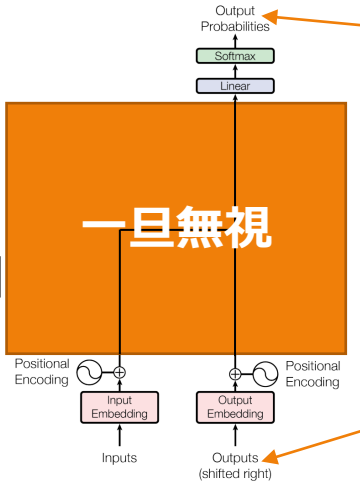
- **Autoregressive= 1個ずつ推定する**
  - 入力のベクトル群と出力済みのベクトル群を用いて新たなベクトルを出力
  - 「終わり」を意味する単語が出るまで繰り返す
  - 元のTransformer [Vaswani+, NIPS'17] はAutoregressive
  - **精度は良いが遅い**



$k+1$個目の出力ベクトル

k個の出力済みベクトル

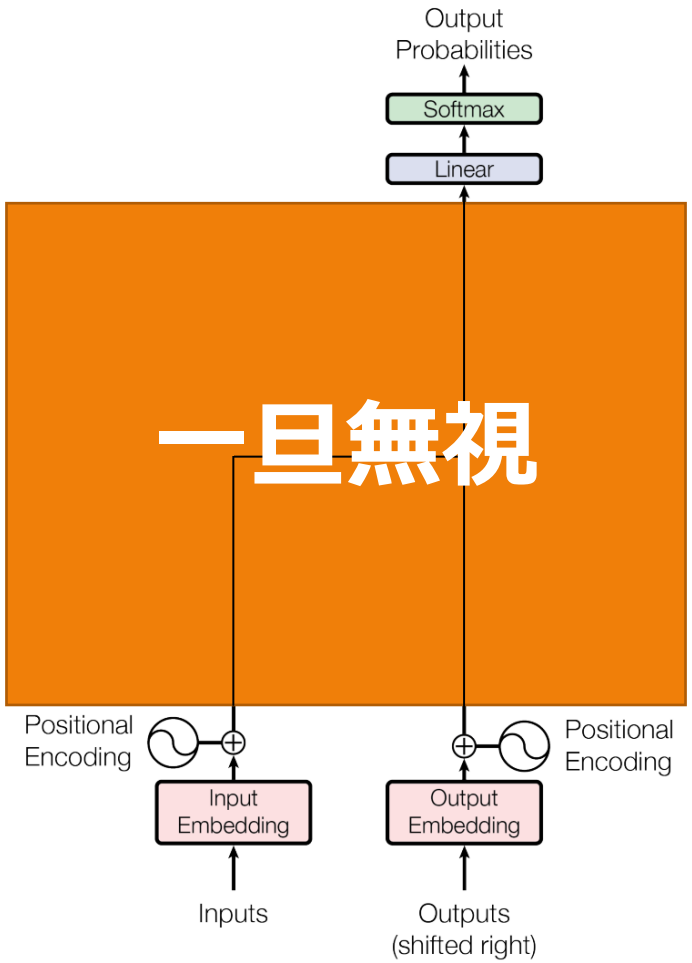
- **Non-autoregressive=全部一気に推定する**
  - 何らかの方法で複数個の出力ベクトル用の「タネ」となるベクトルを入力[Gu+, ICLR'18][Guo+, AAAI'19]
    - **並列で1回で計算できるので速いが、精度が低下**
  - 一気に推定するのを繰り返して単語数を調整 [Ghazvininejad+, EMNLP'19][Gu+, NeurIPS'19]



K個の出力ベクトル

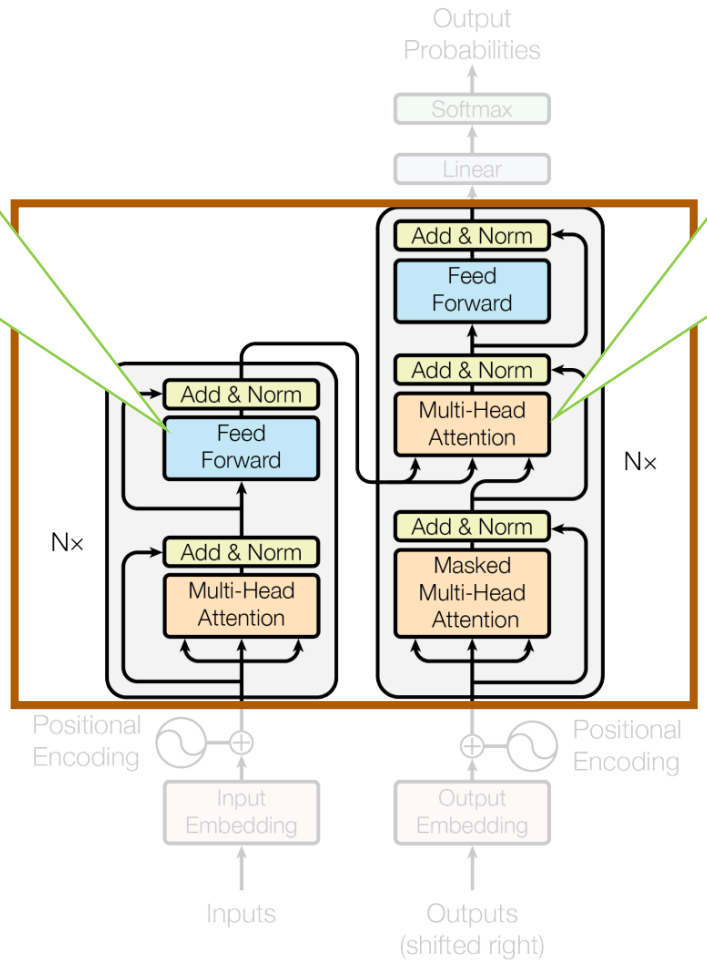
K個の「タネ」ベクトル

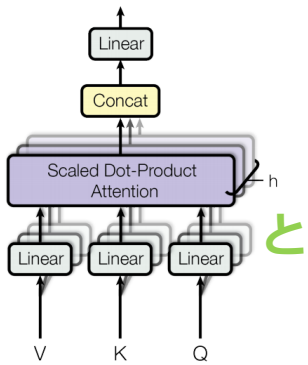
きっとここまではok


Output
Probabilities
Softmax
Linear
一旦無視
Positional
Encoding
Positional
Encoding
Input
Embedding
Output
Embedding
Inputs
Outputs
(shifted right)

次は無視していた部分の中身

ここは
- Residual接続
- 各ベクトルにMLPを適用
  ＝1x1 conv と等価



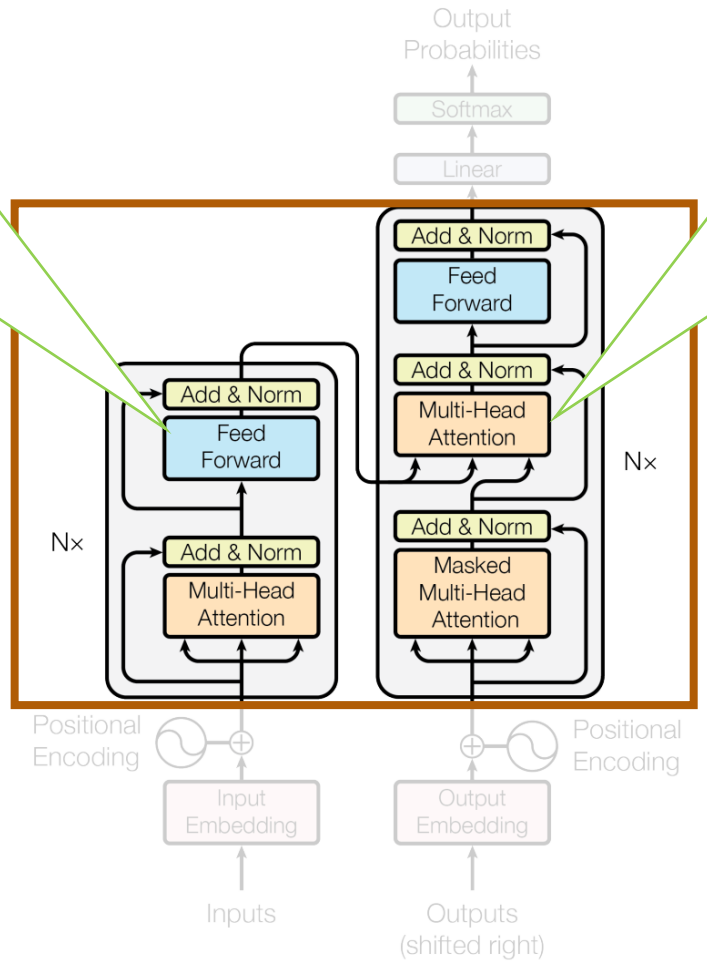


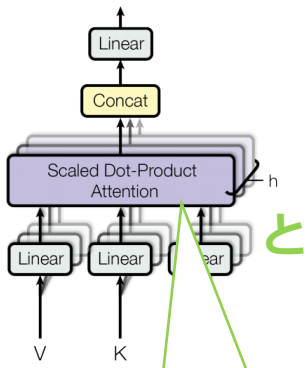
という図はここの

Multi-Head Attentionを説明するための図

次は無視していた部分の中身

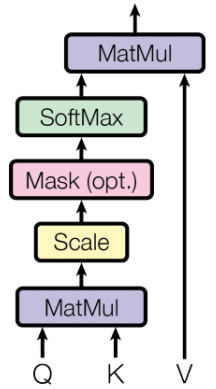
ここは
- Residual接続
- 各ベクトルにMLPを適用
  ＝1x1 conv と等価





という図はここの

Multi-[illegible] Attentionを説明するた[illegible]



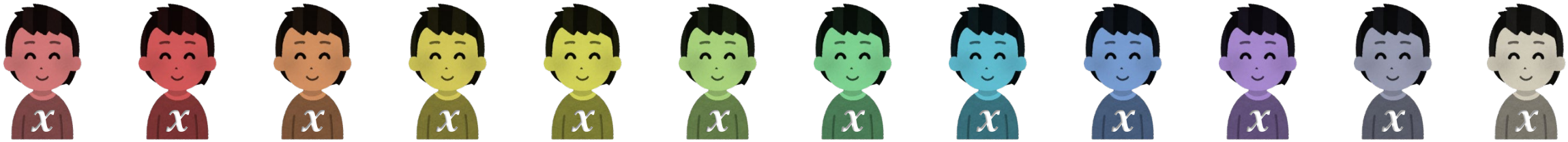
という図はここの

Scaled Dot-Product Attention を説明するための図

Multi-head Attention

おさらい： 扱うのは任意の個数のベクトル

- 自然言語処理であれば**単語の分散表現の系列＋位置情報**



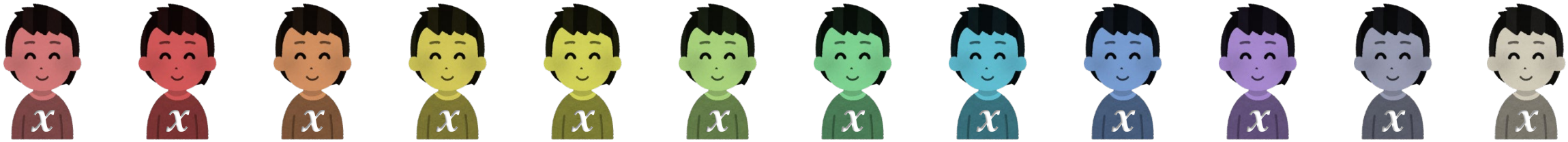
- 画像認識であればタテ×ヨコにチャネル数分の次元のベクトル（**局所特徴量**）が**並んだ数列＋タテ・ヨコの位置情報**

鷗外さん♂

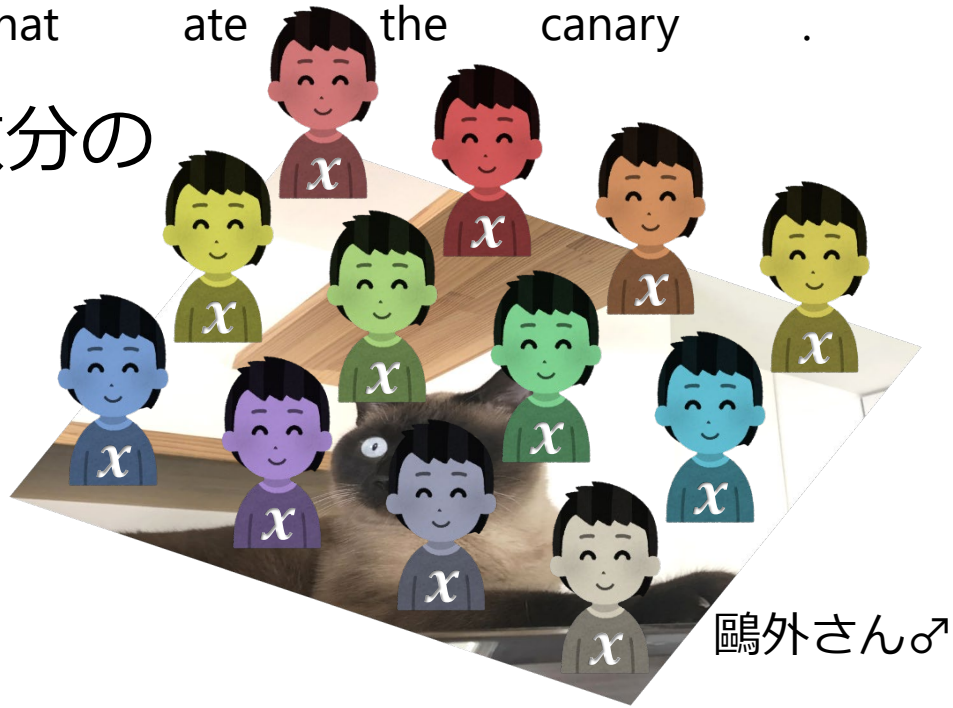
Multi-head Attention

おさらい： 扱うのは任意の個数のベクトル

- 自然言語処理であれば**単語の分散表現の系列＋位置情報**



- 画像認識であればタテ×ヨコにチャネル数分の次元のベクトル（**局所特徴量**）が**並んだ数列＋タテ・ヨコの位置情報**

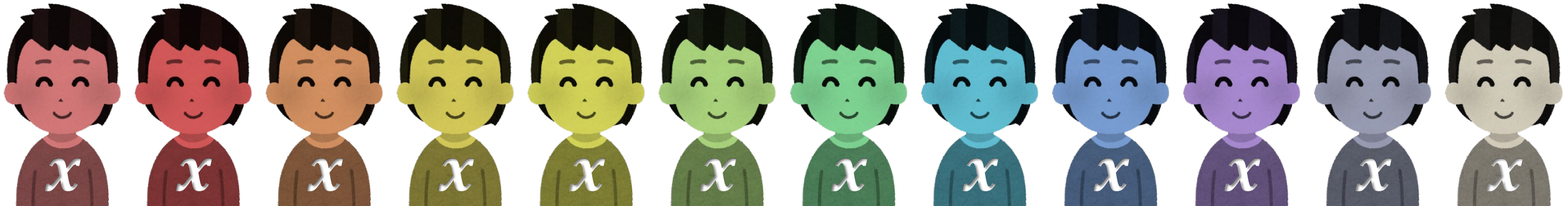


鷗外さん♂

このベクトル  に注目して考える

1. **他のベクトルを「検索」**するための**クエリ**$q = W^Q x$を計算

$$q = W^Q x$$

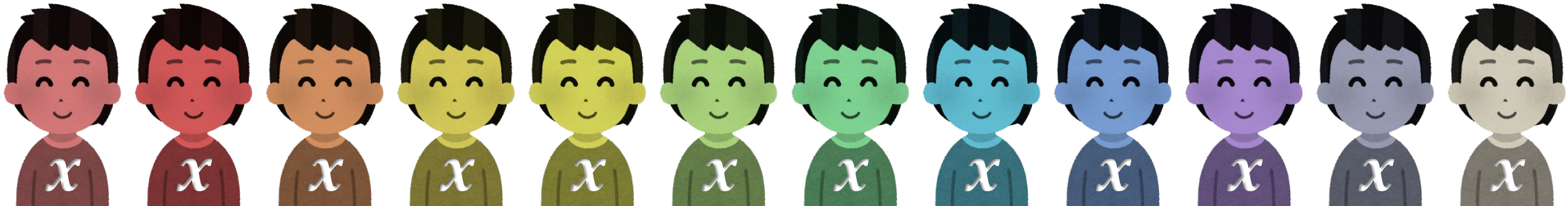


このベクトル  に注目して考える

2. 「**類似検索**」対象としての各ベクトルの**キー**$\boldsymbol{k} = W^K \boldsymbol{x}$を計算

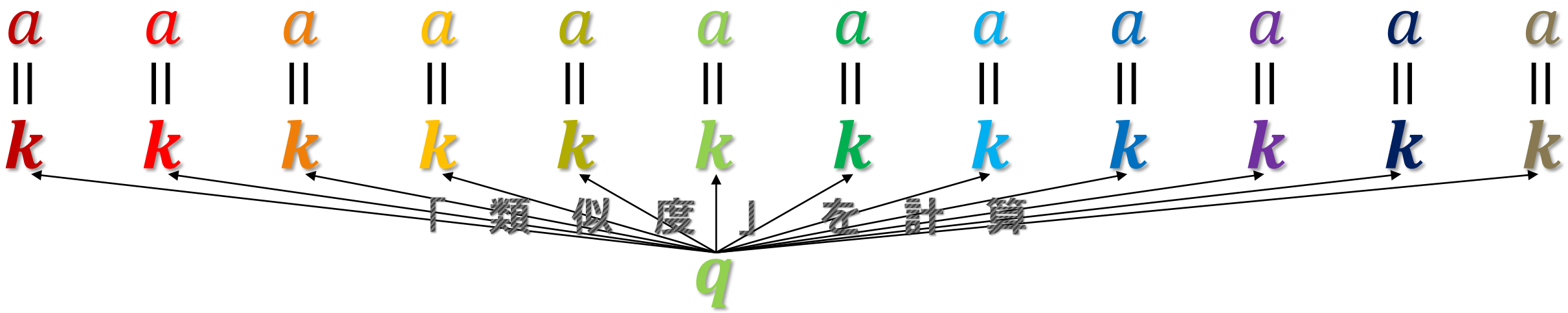
$\boldsymbol{k}$ $\boldsymbol{k}$ $\boldsymbol{k}$ $\boldsymbol{k}$ $\boldsymbol{k}$ $\boldsymbol{k}$ $\boldsymbol{k}$ $\boldsymbol{k}$ $\boldsymbol{k}$ $\boldsymbol{k}$ $\boldsymbol{k}$ $\boldsymbol{k}$

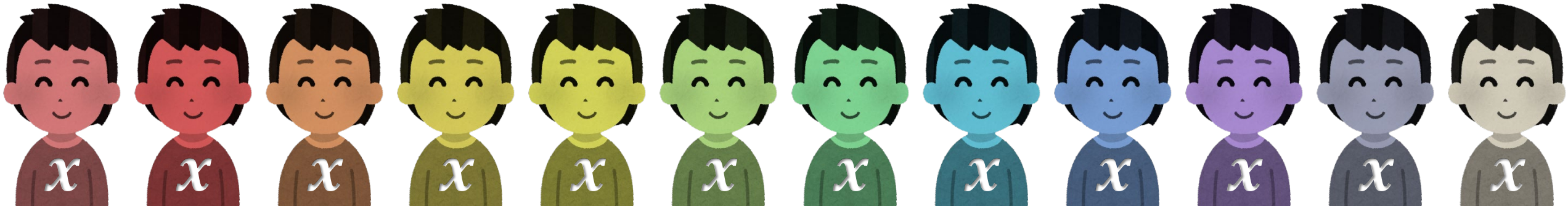
$\boldsymbol{q}$



このベクトル  に注目して考える

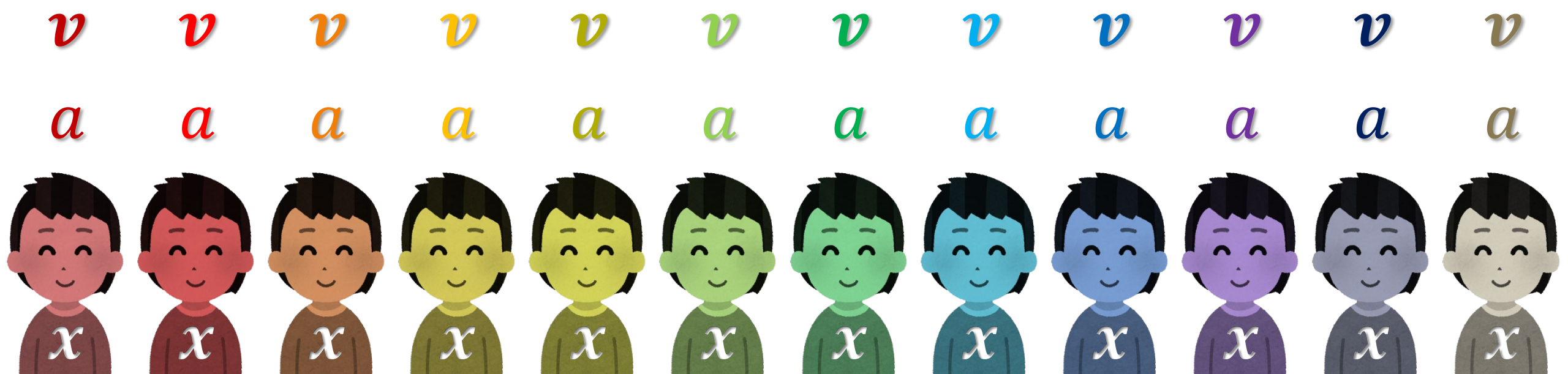
3. クエリとキーの内積を次元数dとsoftmaxで正規化した**「類似度」**$a = \mathrm{softmax}\left(\boldsymbol{q}^{\top}\boldsymbol{k}/\sqrt{d}\right)$を計算





このベクトル  に注目して考える

4. 各ベクトルの代表値$\boldsymbol{v} = W^V \boldsymbol{x}$を計算



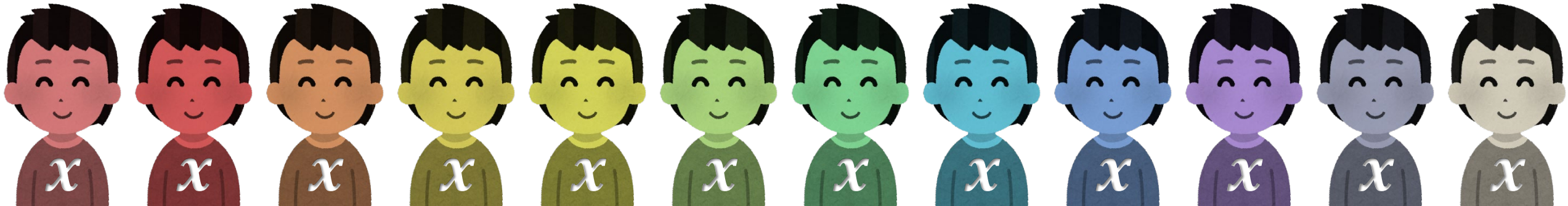
このベクトル  に注目して考える

5. 類似度aで重みづけした和$\sum av$を計算→**ベクトル**  **に加算（residual接続有）**

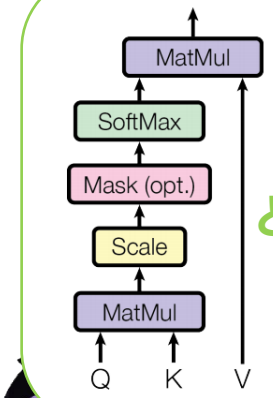
更新後のベクトル x

重 み 付 け 和 を 計 算

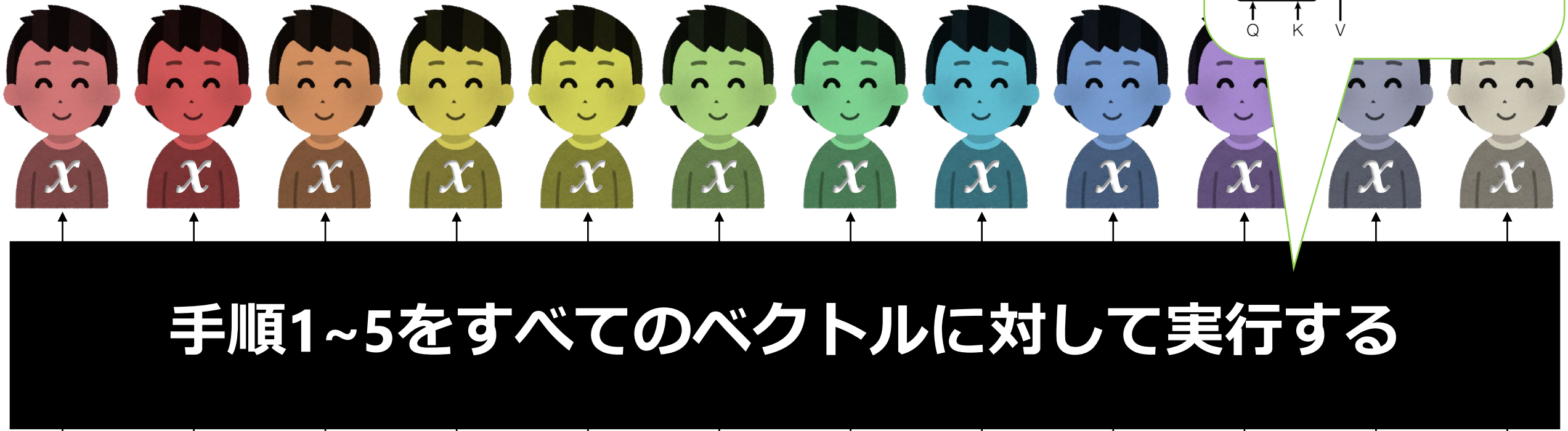
$v \cdot a$ $v \cdot a$ $v \cdot a$ $v \cdot a$ $v \cdot a$ $v \cdot a$ $v \cdot a$ $v \cdot a$ $v \cdot a$ $v \cdot a$ $v \cdot a$ $v \cdot a$



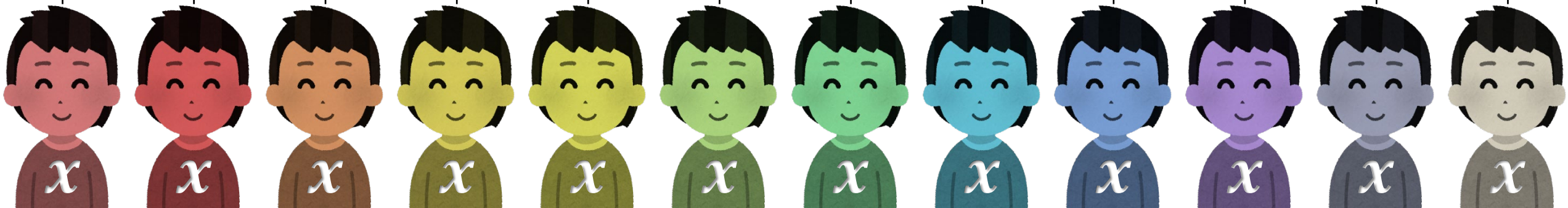
Scaled Dot-Product Attention



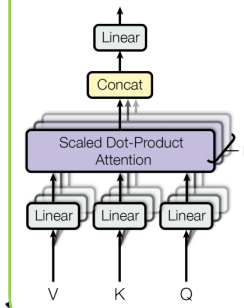
という図に該当



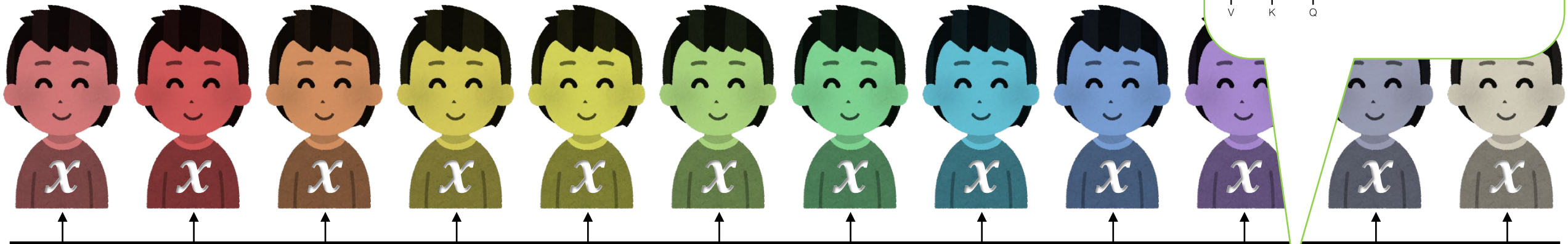
手順1~5をすべてのベクトルに対して実行する



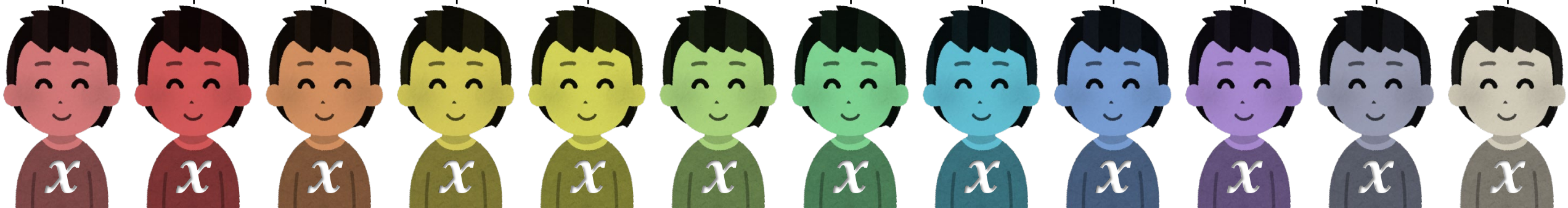
Multi-head Attentionでは



という図に該当



行列W^Q, W^K, W^Vをh個用意し、それぞれを用いながら
手順1~5をすべてのベクトルに対して実行する



Transformer まとめ

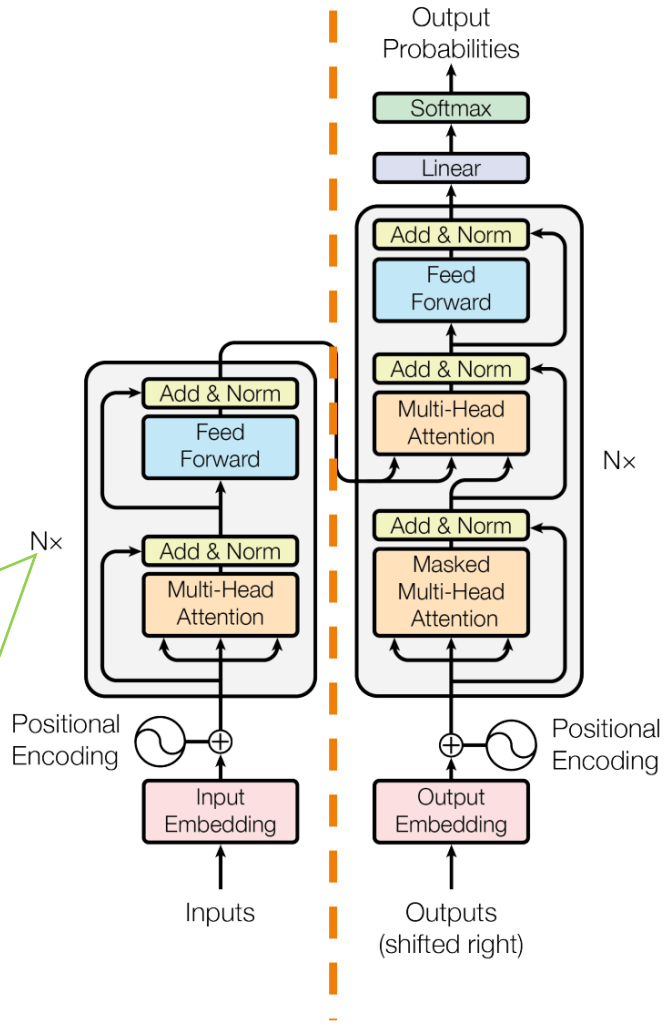
任意の個数のベクトルを　Encoder-Decoder　形式で変形する技術

N回繰り返す

例えばGPT-3では
- **96回**繰り返す
- **各回96-headsの**Attention（**128次元**）

→パラメータ数 175B

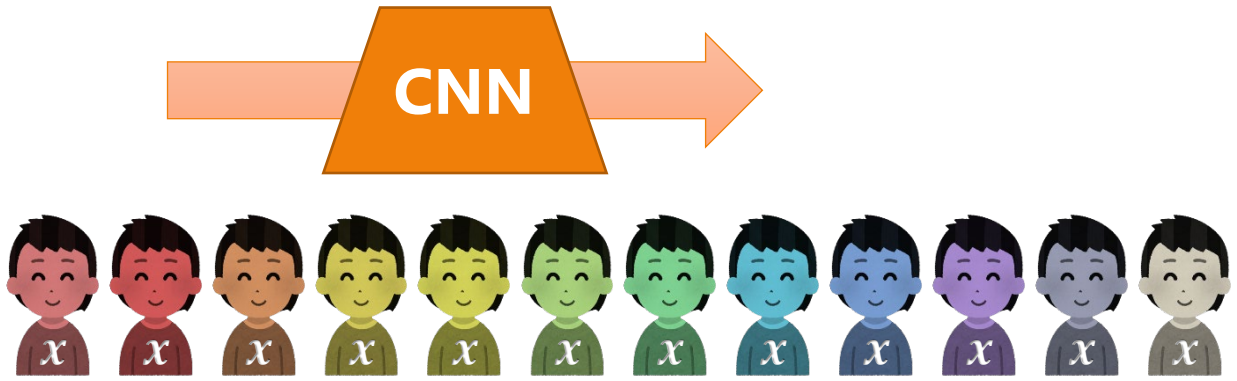
※2022年4月にGoogleが公開したPaLMは**540B**
[Chowdhery+, 2022]



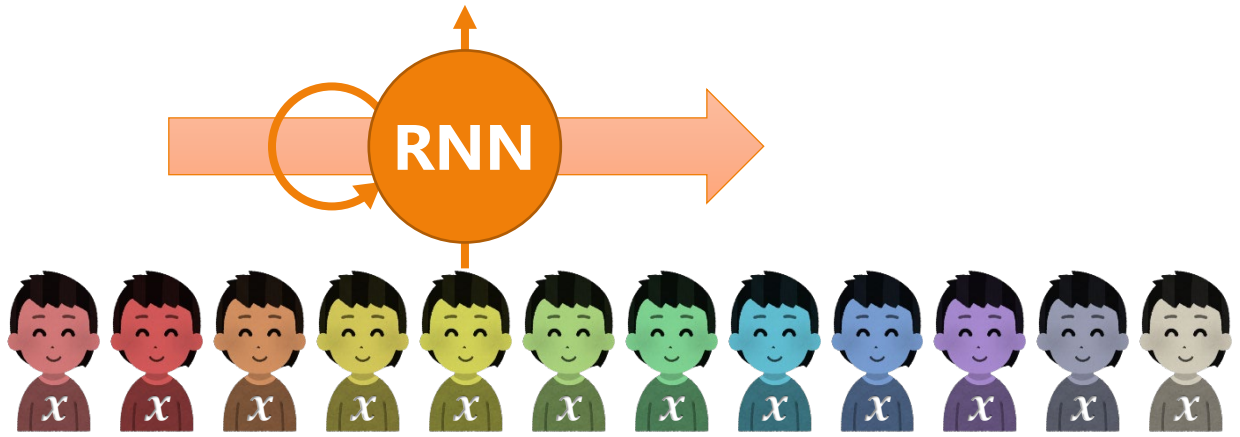
（Attentionの無い）CNNやRNNとの違い

Transformerは…
全n個のベクトルから**全n個**のベクトルへのアテンションを計算
$O(n^2)$だが一番広域に情報がロス無く伝達可能

CNNは…
3つなど、全体からすれば少数の
ベクトルだけの畳込み計算を走査
$O(n)$だが情報が伝わるのは近隣だけ



RNNは…
ベクトルを一つずつ走査しながら
内部のセルに変数（記憶）を保存
$O(n)$だが長い系列は不得手



Transformer旋風と基盤モデル

Computer Vision以外

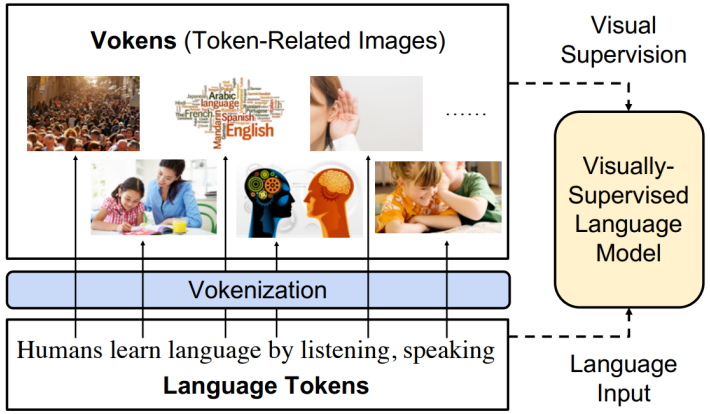
Self-attentionは更に広いので省略

- **自然言語処理**
  - 翻訳かつ原著 [Vaswani+, NIPS'17] その他多数！！！
  - 言語モデル GoogleのBERT [Devlin+, NAACL-HLT'19], PaLM [Chowdhery+, 2022], DeepMindのGopher [Rae+, 2022], OpenAIのGPT-2/3 [Radford+, 2019][Brown+, NeurIPS'20] など多数
  - 2兆トークンからなるデータベースの検索 [Borgeaud+, 2021]
- **音声処理・信号処理**
  - 表現学習 HuBERT [Hsu+, TASLP'21], SSAST [Gong+, AAAI'22]
  - 音声認識 [Lüscher+, INTERSPEECH'19]
  - 音楽生成 [Huang+, ICLR'19][Choi+, ICML'20]
  - 時系列予測 [Li+, NeurIPS'19][Wu+, NeurIPS'20]
- **テーブルデータ**
  - FT-Transformer [Gorishniy+, NeurIPS'22] ※ただし表データは依然としてGradient Boostingが強い
- **Bio/Chem-informatics**
  - 分子構造解析 [Fuchs+, NeurIPS'20][Rong+, NeurIPS'20]
- **エージェント・ロボティクス**
  - マルチエージェント通信 [Inala+, NeurIPS'20]
  - One Shotで模倣学習 [Dasari+Guputa, CoRL'20]
  - タスク系列の強化学習 Scene Memory Transformer [Fang+, CVPR'19], Decision Transformer [Chen+, NeurIPS'21], Trajectory Transformer [Janner+, NeurIPS'21], Gato [Reed+, 2022]

Vision & Language

表現学習→基盤モデル

VideoBERT [Sun+, ICCV'19]
LXMERT [Tan+Bansal, EMNLP'19]
ViLBERT [Lu+, NeurIPS'19]
VL-BERT [Su+, ICLR'20]
UNITER [Chen+, ECCV'20]
OSCAR [Li+, ECCV'20]
Voken [Tan+Bansal, EMNLP'20]
COOT [Ging+, NeurIPS'20]
Perceiver [Jaegle+, ICML'21]
PolyViT [Likhosherstov+, 2021]
Flamingo [Alayrac+, 2022]



[Tan+Bansal, EMNLP'20]

参照表現理解

MDETR [Kamath+, ICCV'21]

キャプション生成

[Zhou+, CVPR'18][Li+, ICCV'19][Cornia+, CVPR'20]

GT: A cat looking at his reflection in the mirror.
Transformer: A cat sitting in a window sill looking out.
$\mathcal{M}^2$ **Transformer:** A cat looking at its reflection in a mirror.

GT: A plate of food including eggs and toast on a table next to a stone railing.
Transformer: A group of food on a plate.
$\mathcal{M}^2$ **Transformer:** A plate of breakfast food with eggs and toast.

[Cornia+, CVPR'20]

TextVQA [Kant+, ECCV'20]

What sponsor is to the right of the players?

WARNER AHL
AHL RBC

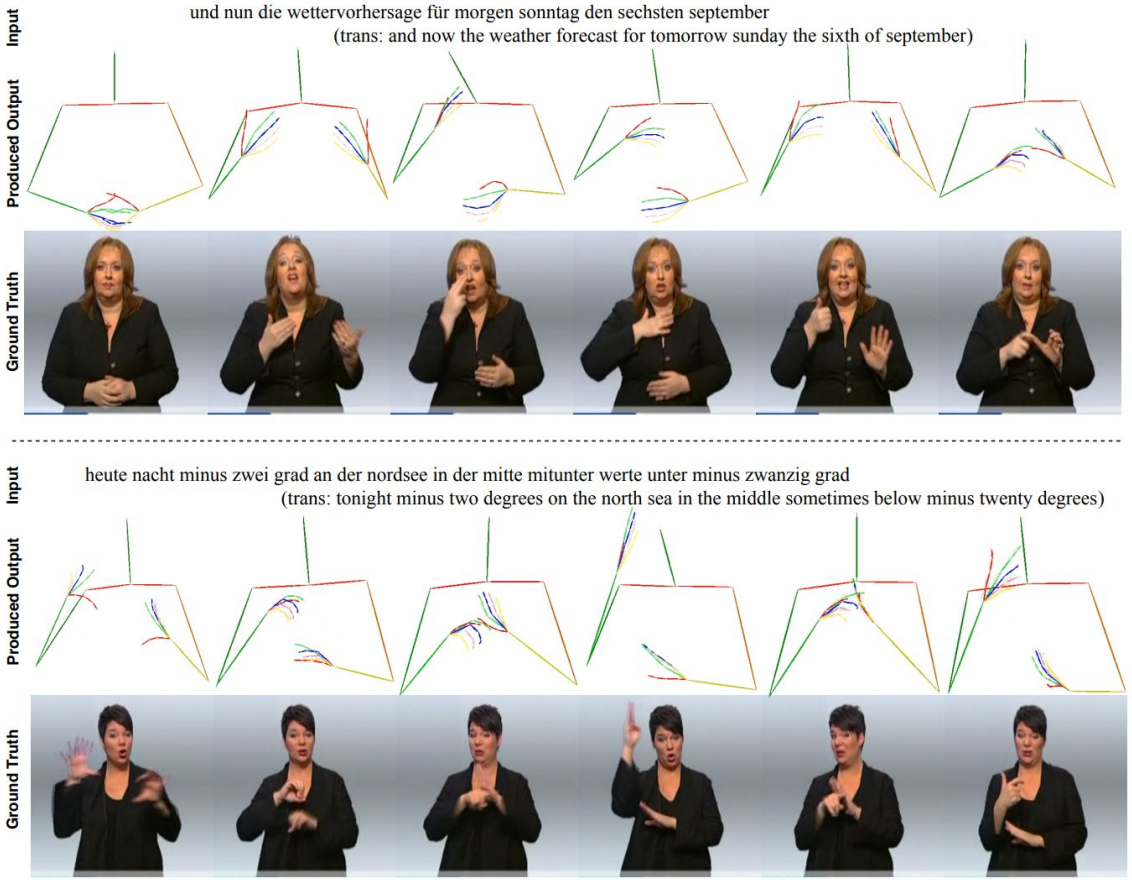
Previous Model:
AHL
Our Model:
RBC

動画検索 [Gabeur+, ECCV'20]

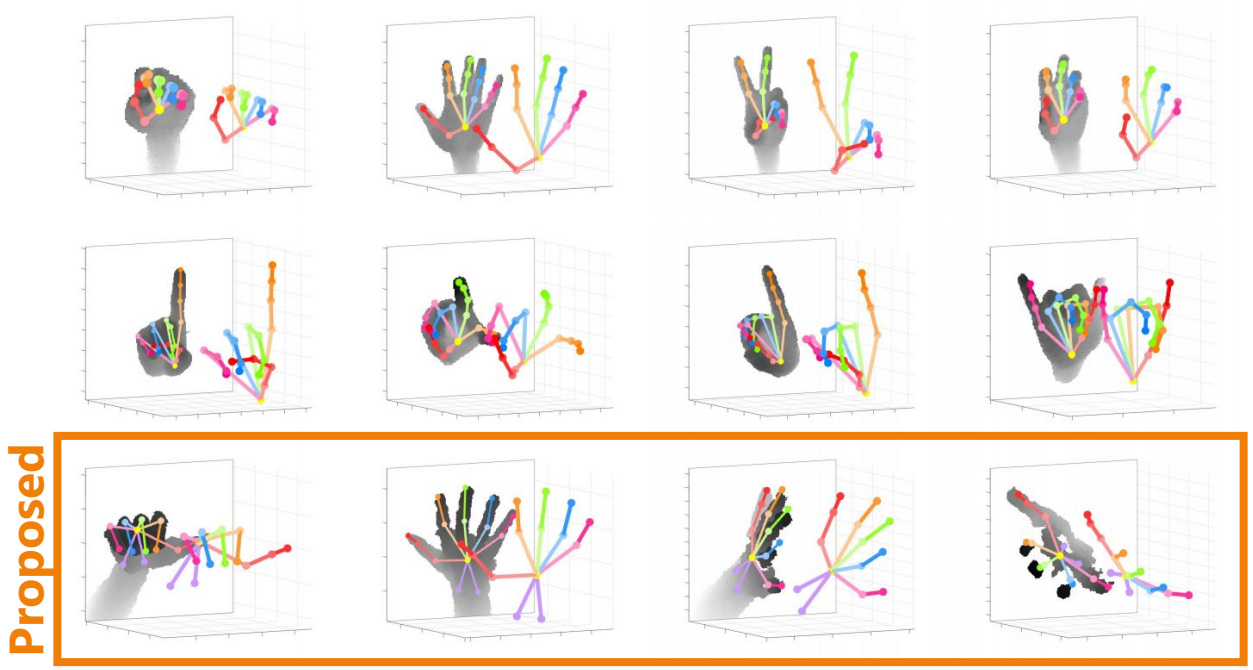
He starts his motorbike
Then walks away.

姿勢推定系

手話の認識 [Saunders+, ECCV'20]



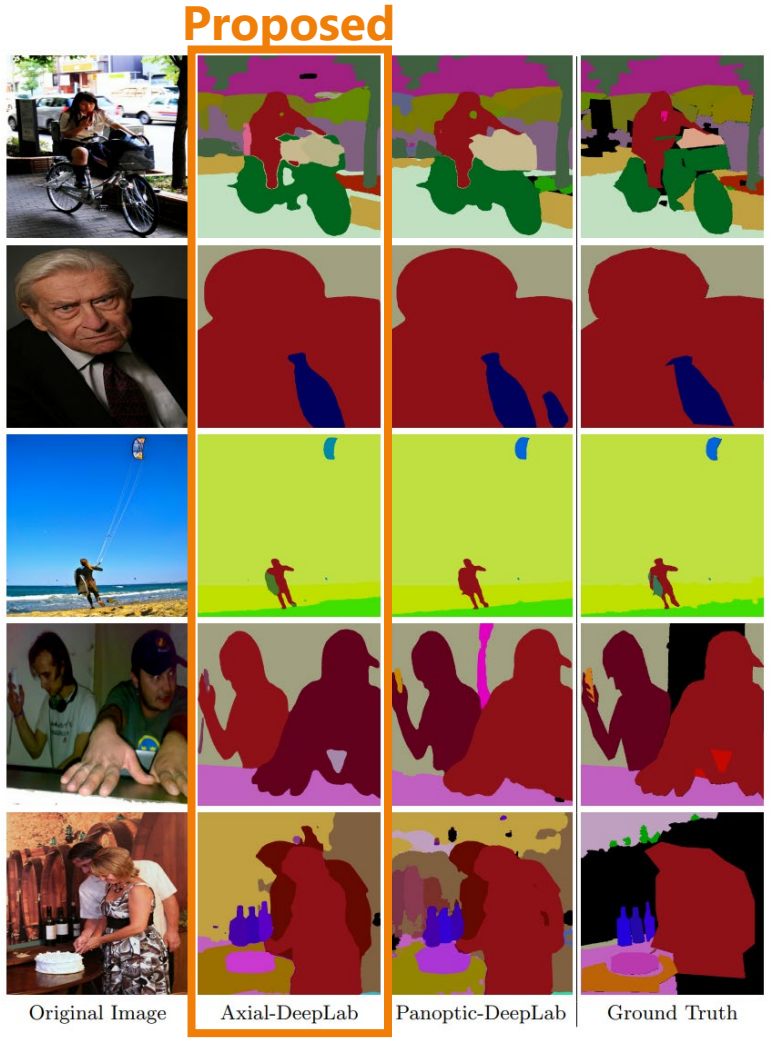
手の姿勢 [Huang+, ECCV'20]



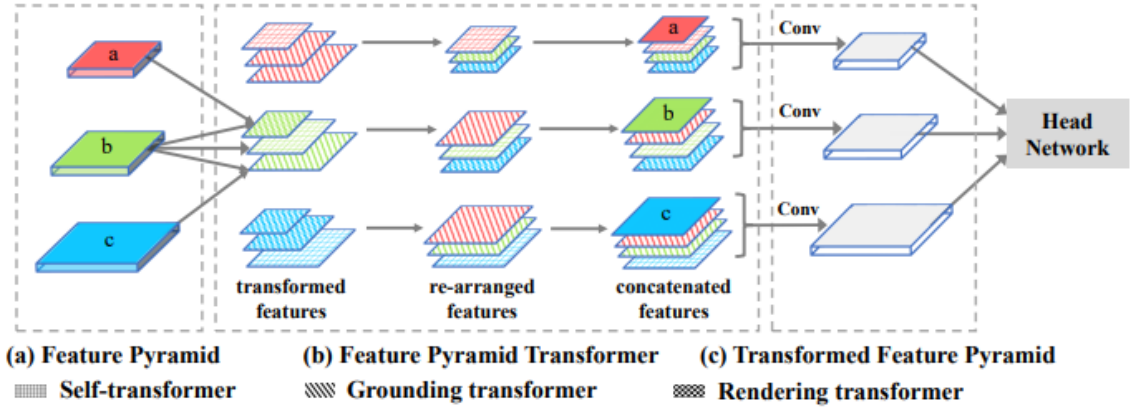
領域分割系

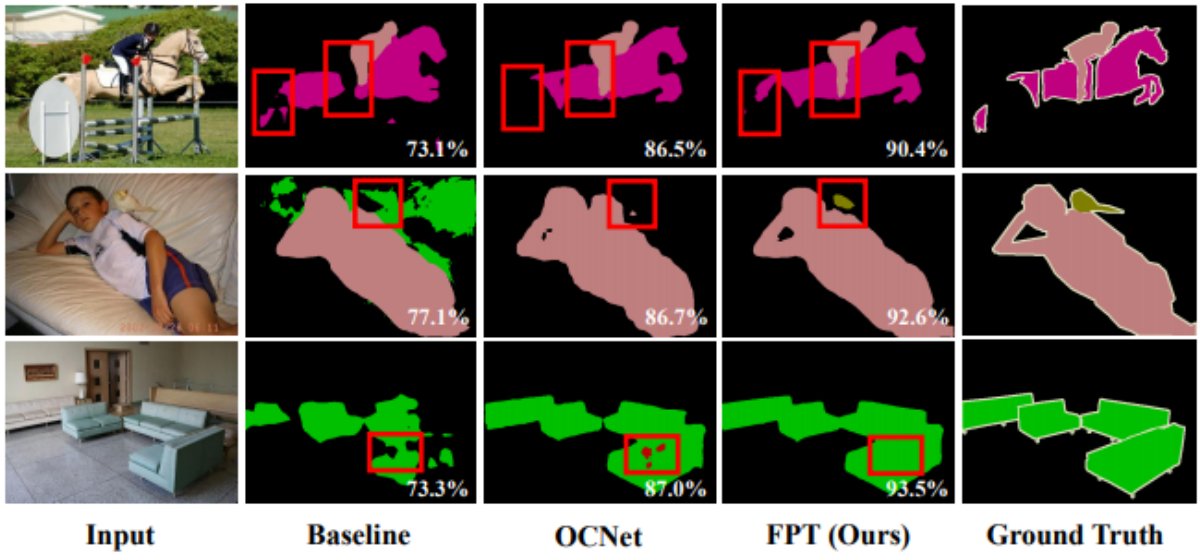
See also [Liang+, CVPR'20]

Panopitc Segmentation
[Kirillov+, ECCV'20]



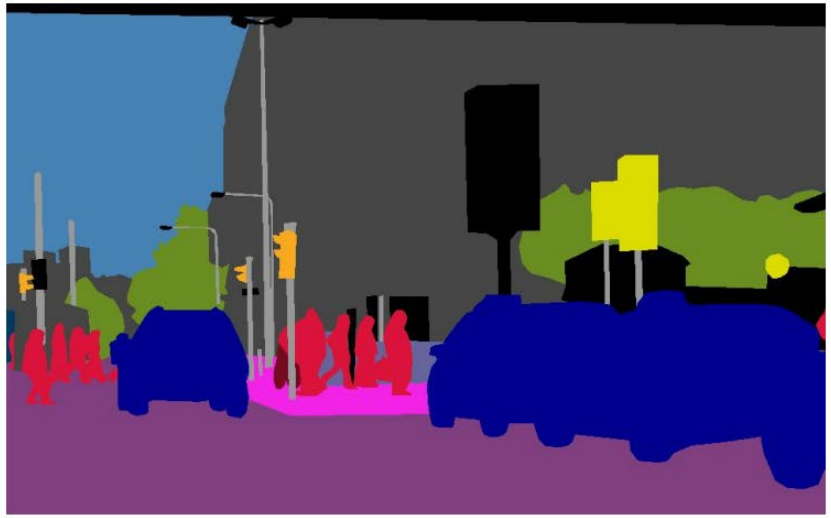
Semantic Segmentation にも Instance Segmentation にも [Zhang+, ECCV'20]



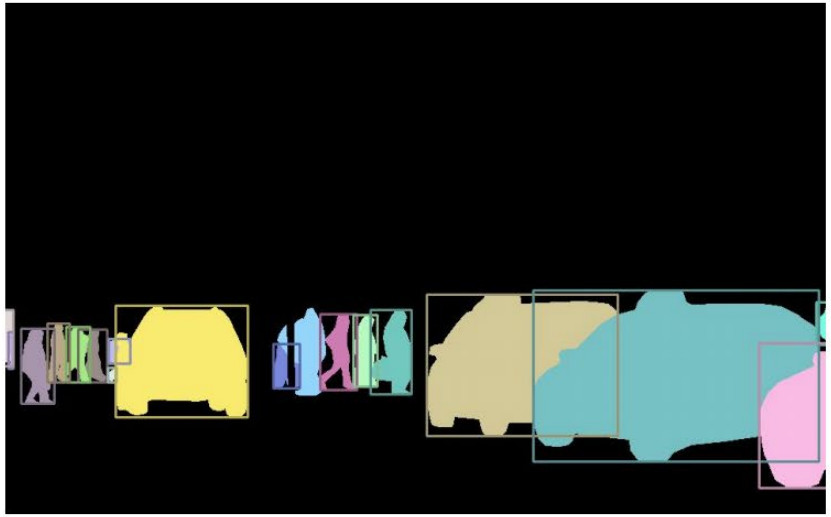


注：xxxx Segmentationがたくさんある？？？

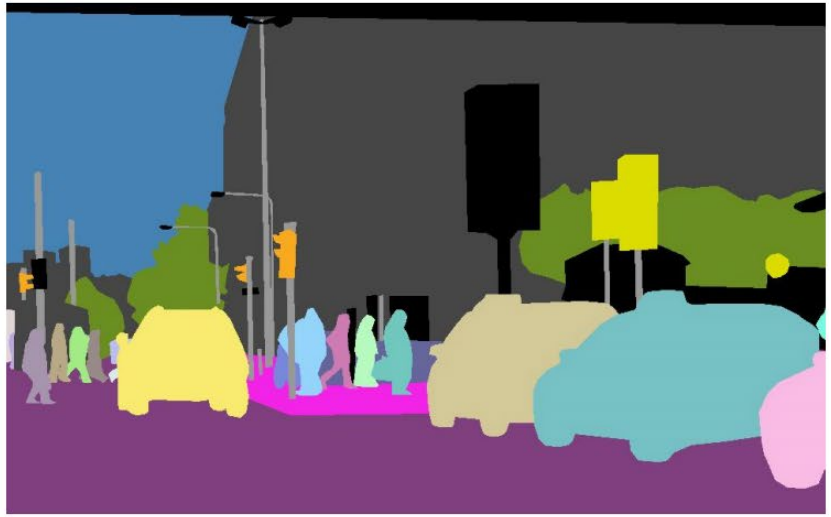
(a) image



(b) semantic segmentation



(c) instance segmentation

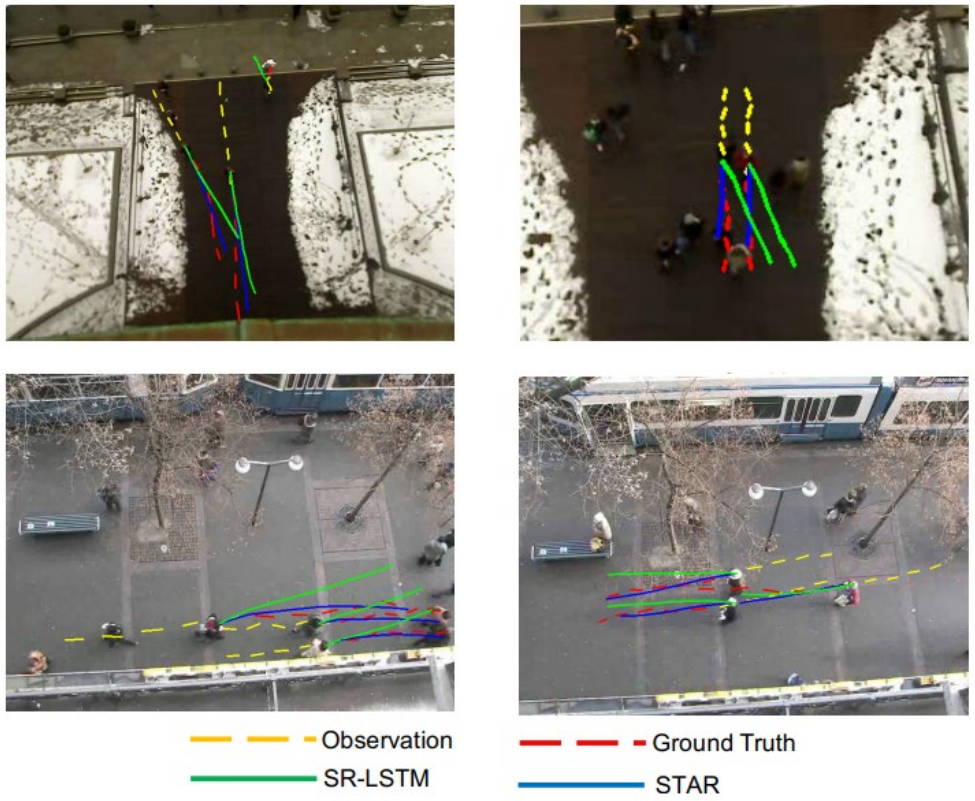


(d) panoptic segmentation

[Kirillov+, CVPR 2019]

動画像理解

経路予測 [Yu+, ECCV'20]

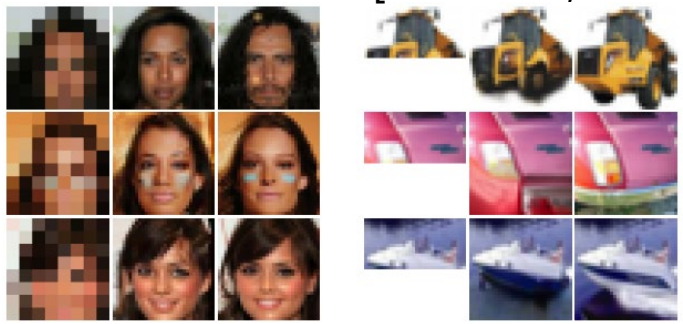


動作認識 [Girdhar+, ECCV'20]

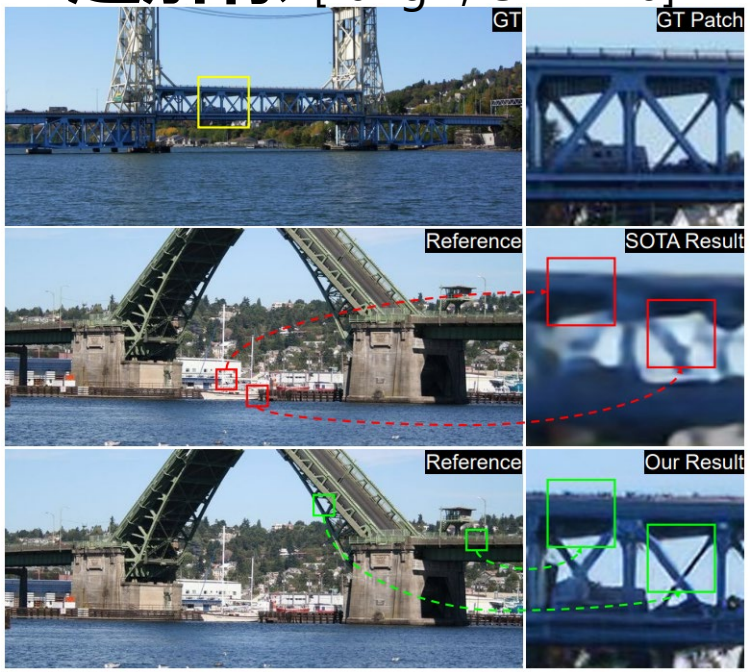
その他の例

画像生成モデル

超解像＋補完 [Parmar+, ICML'18]



超解像 [Yang+, CVPR'20]



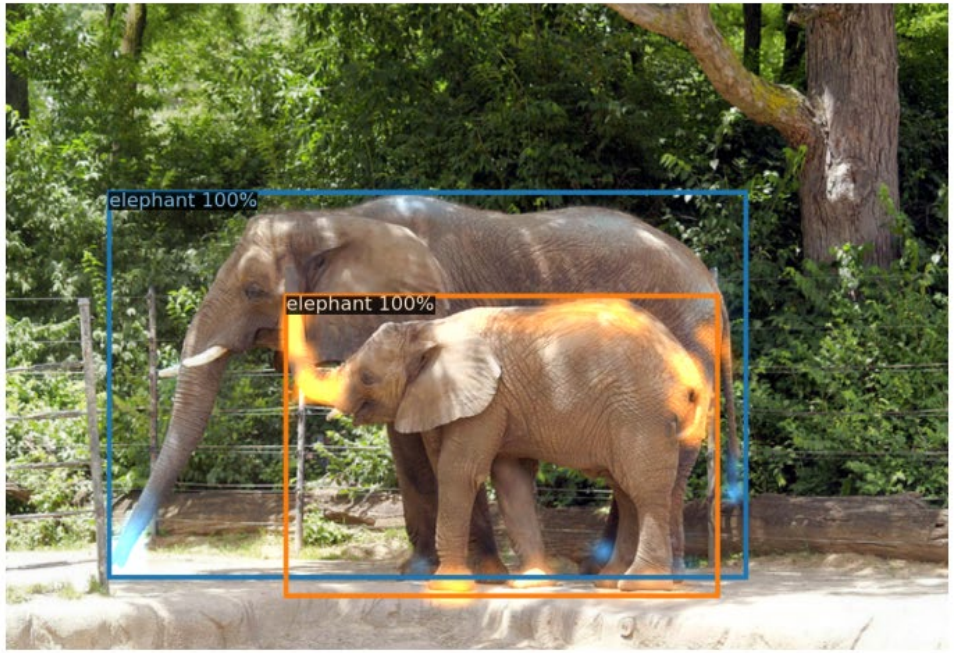
特定物体検索

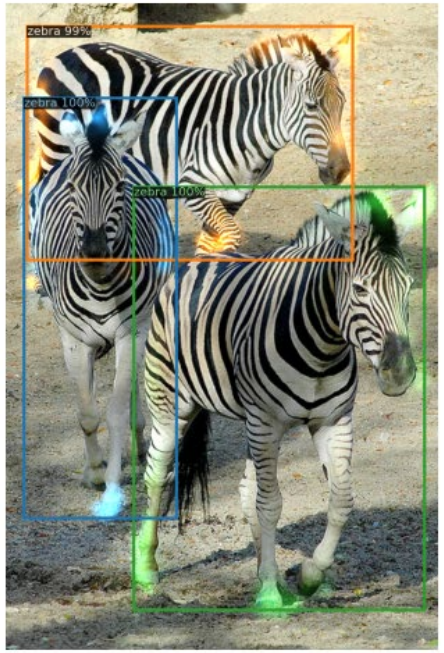
Fine-grained識別 [Kim+, ECCV'20]

スケッチで検索 [Ribeiro+, CVPR'20]

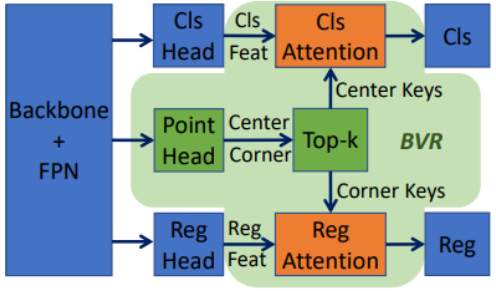
物体検出（DETR）

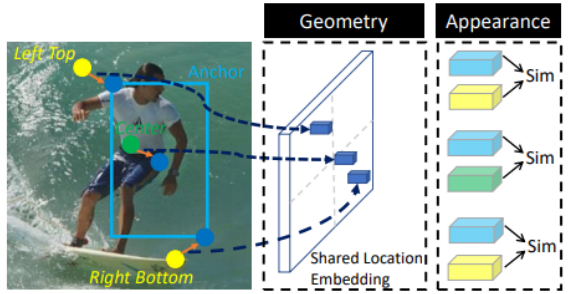
物体検出（左）とPanoptic Segmentation（右）[Carion+, ECCV'20]

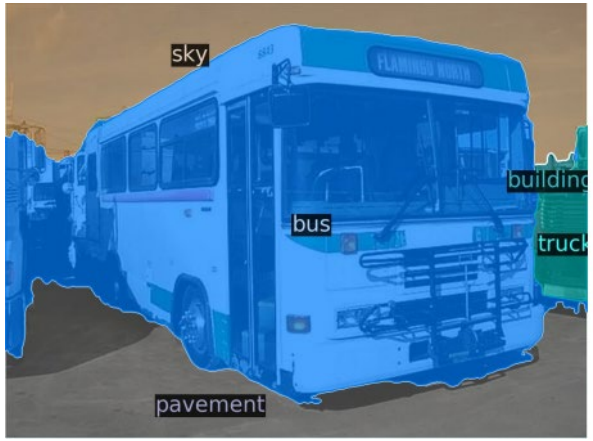


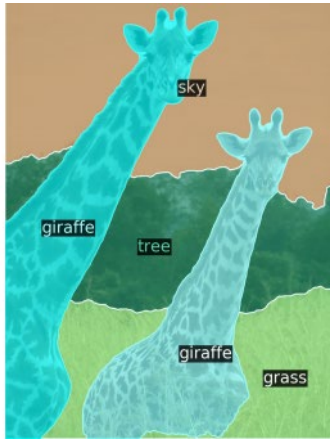


物体検出は[Chi+, NeurIPS'20]も提案

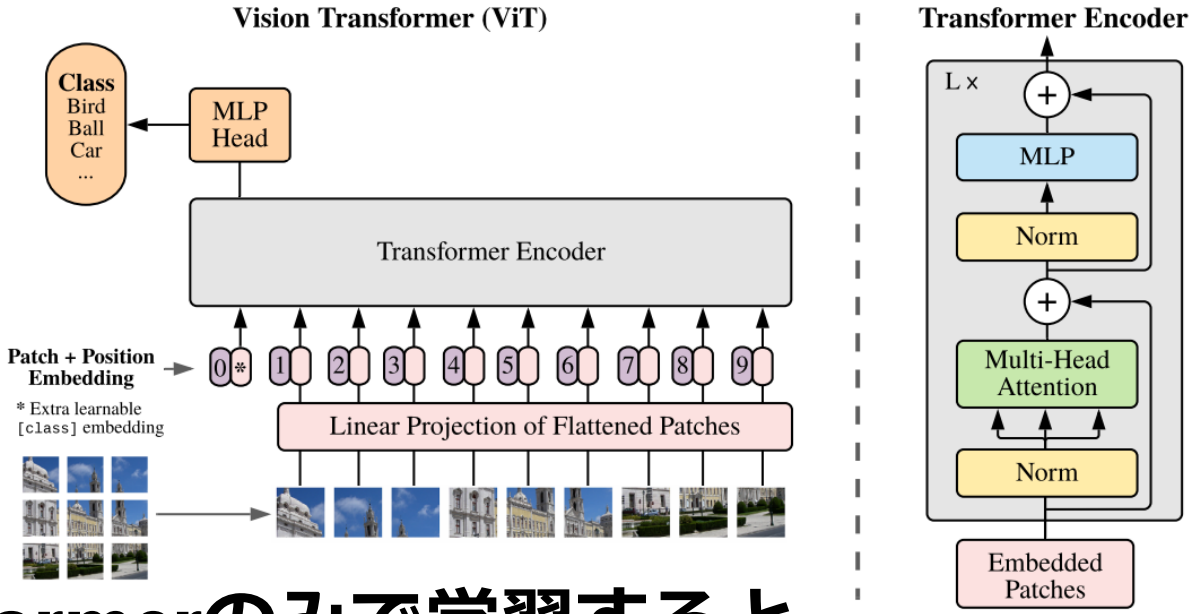








Vision Transformer [Dosovitskiy+, ICLR'21]

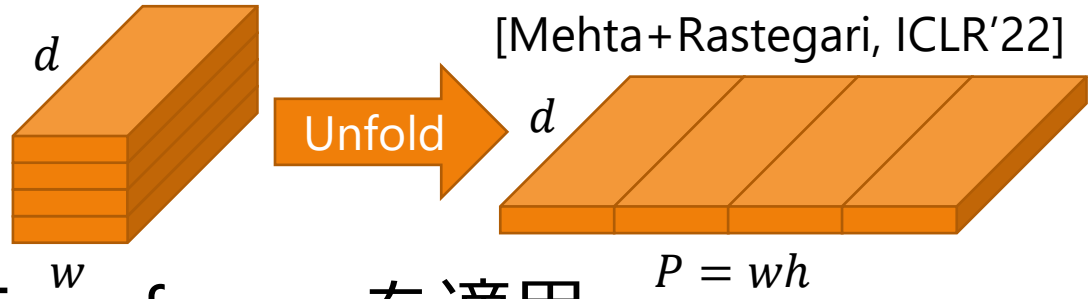


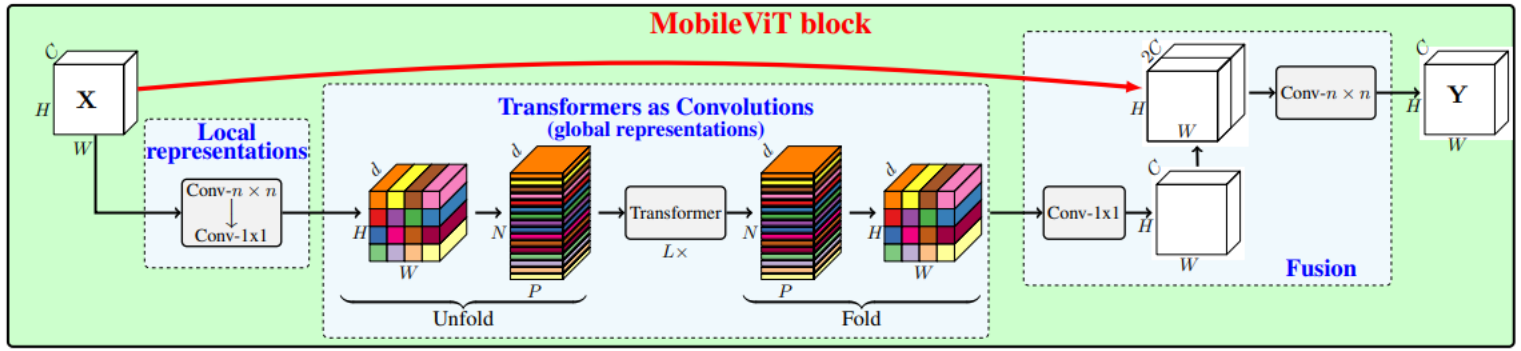
- **画像からTransformerのみで学習すると**
  - ResNet152層とほぼ同等の精度かつ25%程度の学習時間
  - JFT-300Mという大規模データセットが必要
  - 知識蒸留を組み合わせて、ImageNetの1000クラス画像データのみの学習でもEfficientNetを超えたDeiTも有名 [Touvron, ICML'21]
- **エンコーダのみのTransformer**
  - 実はオリジナルのTransformerよりも構造が単純で理解も容易

MobileViT

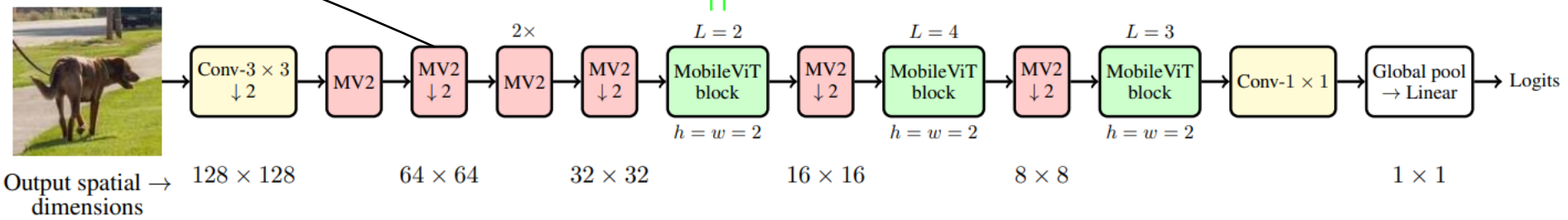
- **中央のブロックでは…**
  - 各パッチを左右方向に展開 (Unfold)
  - 縦にスライスしたベクトル集合毎にTransformerを適用
    - 言い換えると、d次元ベクトルがN個ある集合上でのTransformerをP回適用
  - もう一度各パッチを正方形に戻す (Fold)

[Mehta+Rastegari, ICLR'22]



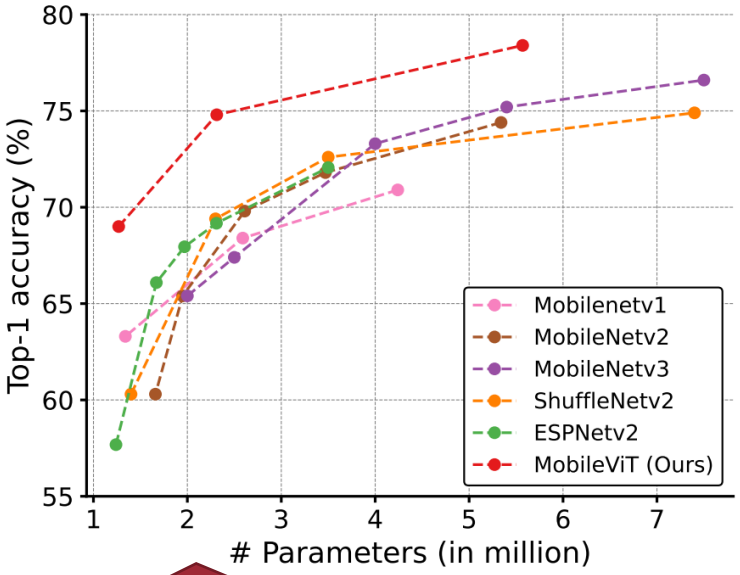


MV2: MobileNet v2 block
↓2: down sampling

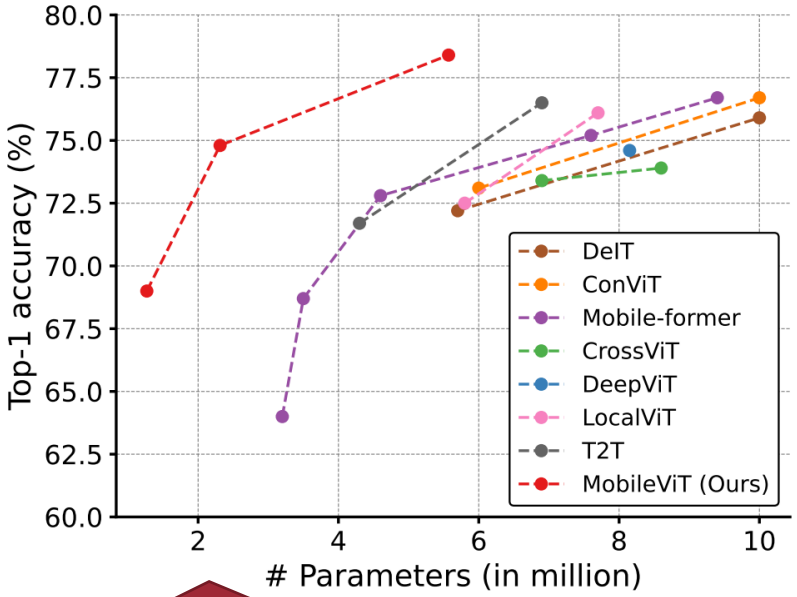


MobileViT

- **ImageNetの1000クラス画像データだけで学習** [Mehta+Rastegari, ICLR'22]



他のMobile系ネットワーク
より高精度



他のViT系ネットワーク
より少パラメータ&高精度

Vision Transformerで物体検出やセグメンテーションを行うには

[Dosovitskiy+, ICLR’21]

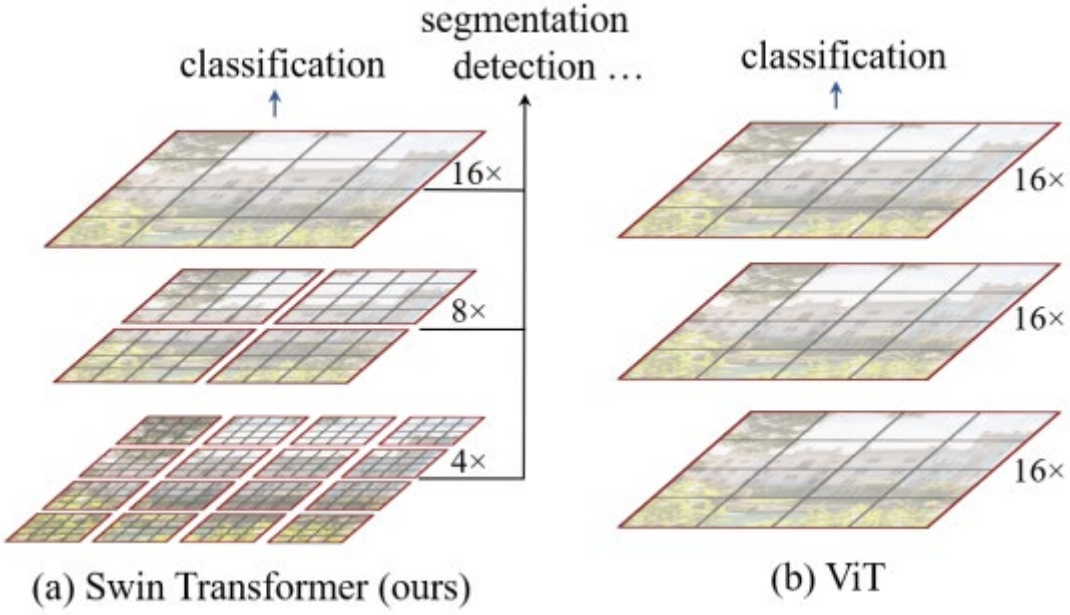
- ViTのような粗いパッチだけだと…**細かいバウンディングボックスの位置決めやセグメンテーションの精度が落ちる**
- 一方で細かいパッチを多く作ってしまうと、**アテンションの計算で時間がかかる（パッチ数の2乗オーダー）**

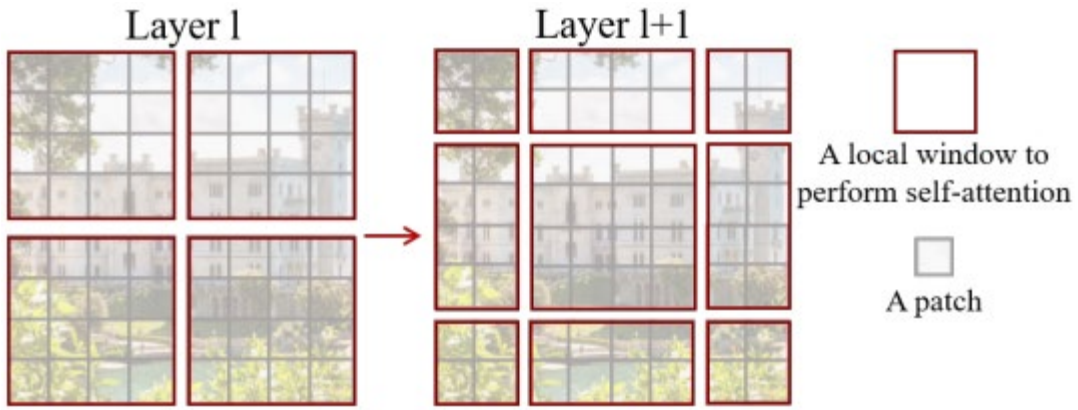
Swin Transformer

Best paper!

[Liu+, ICCV'21]

- **CNNでおなじみのピラミッド構造を持ち込む**
  - アテンション計算を各ローカルウィンドウに限定して計算量削減
  - これらのレイヤーと少し区切りをずらしたレイヤーを交互に挟む
    →ローカルウィンドウを超えた受容野を達成



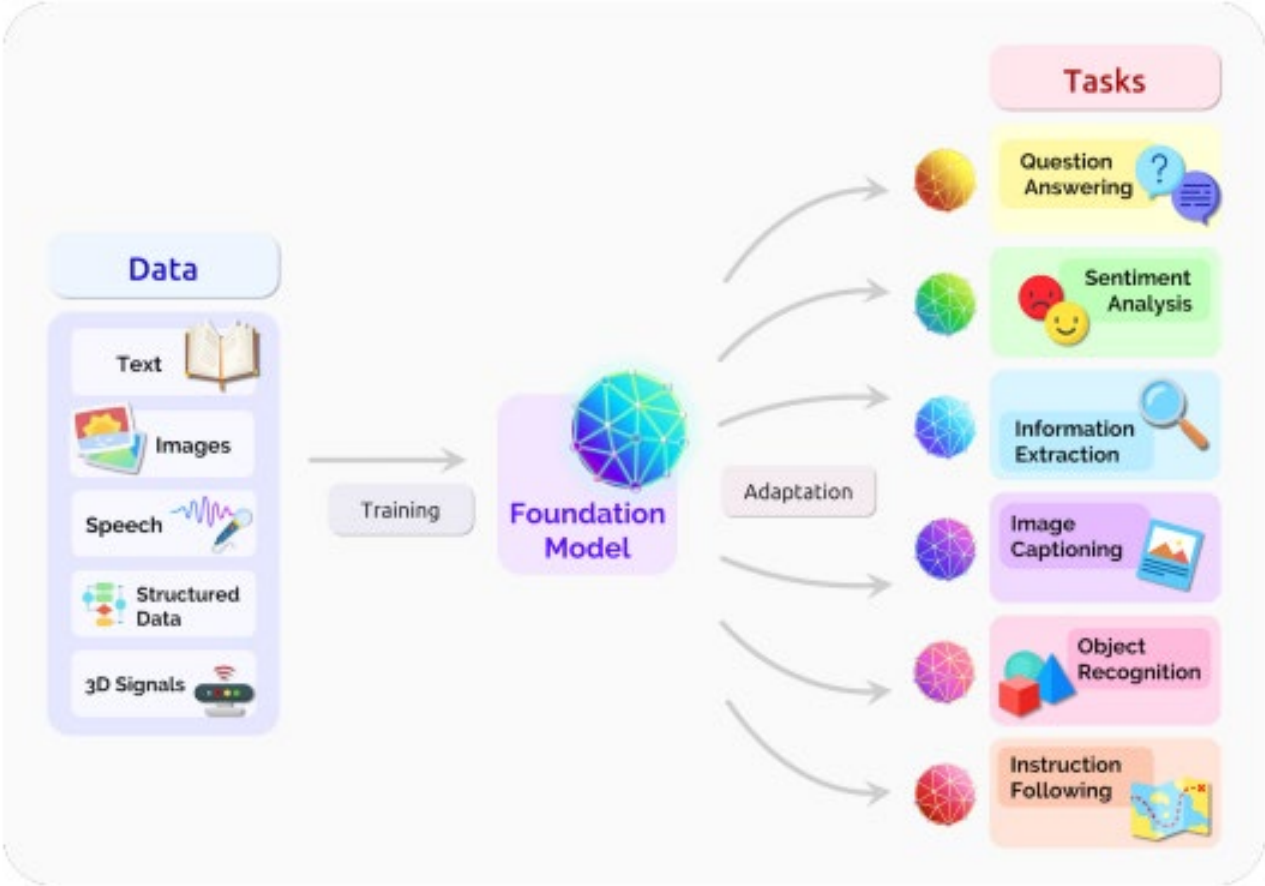


  - 物体検出で評価（セグメンテーションはSwin-Unet [Cao+, 2021]）

基盤モデルとは

[Bommasani+, 2021]

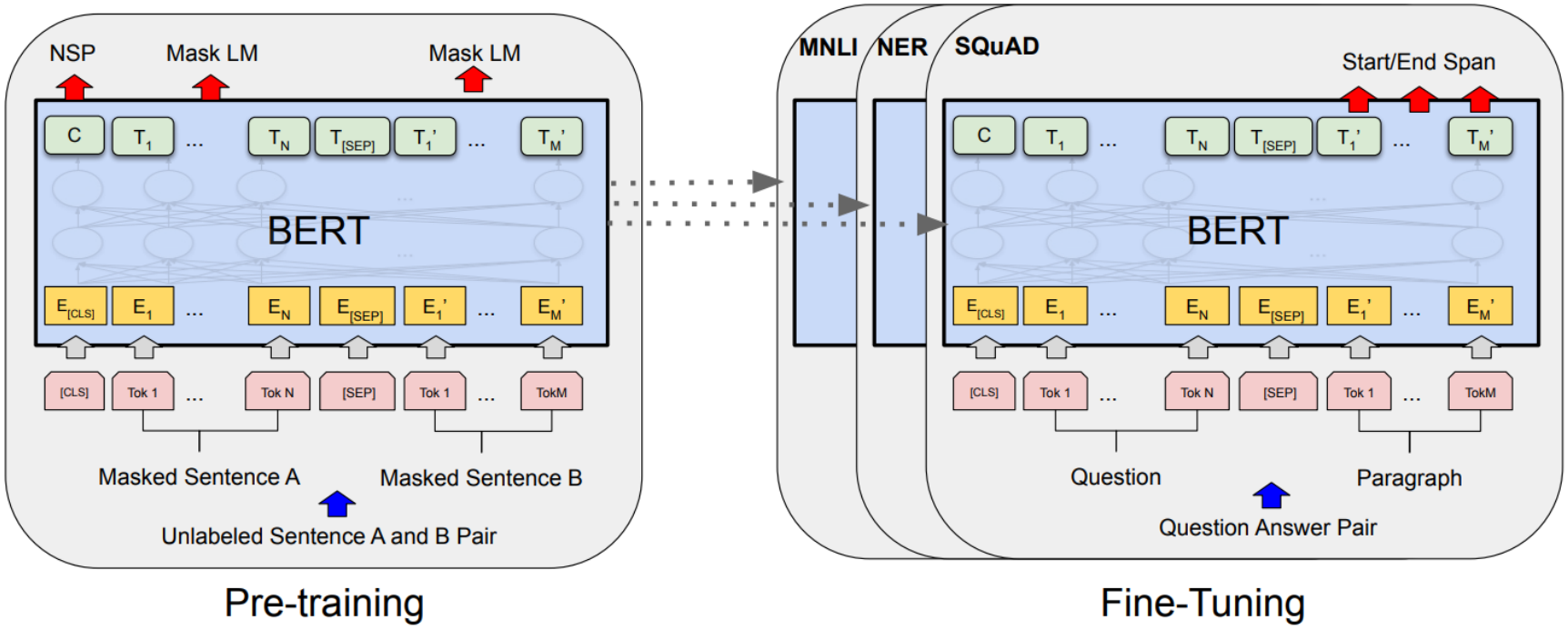
ある目的関数のもと
自己教師あり学習された
巨大なモデル



メリット：種々のタスクに容易に転用できる

有名な基盤モデル　言語編

- **BERT** [Devlin+, NAACL 2019]
  - ランダムに見えなくした単語を推定する自己教師あり学習
  - ファインチューニングによって各タスクを効率的に学習可能



有名な基盤モデル　言語編

- **GPT-3** [Brown+, NeurIPS'20]
  - 最大1750億パラメータのTransformer
  - **ファインチューニングなし**で、少数の事例を伴う指示（**プロンプト**）だけで各タスクを解ける

良くあるファインチューニング

有名な基盤モデル　言語編

- **GPT-3** [Brown+, NeurIPS'20]
  - 最大1750億パラメータのTransformer
  - **ファインチューニングなし**で、少数の事例を伴う指示（**プロンプト**）だけで各タスクを解ける

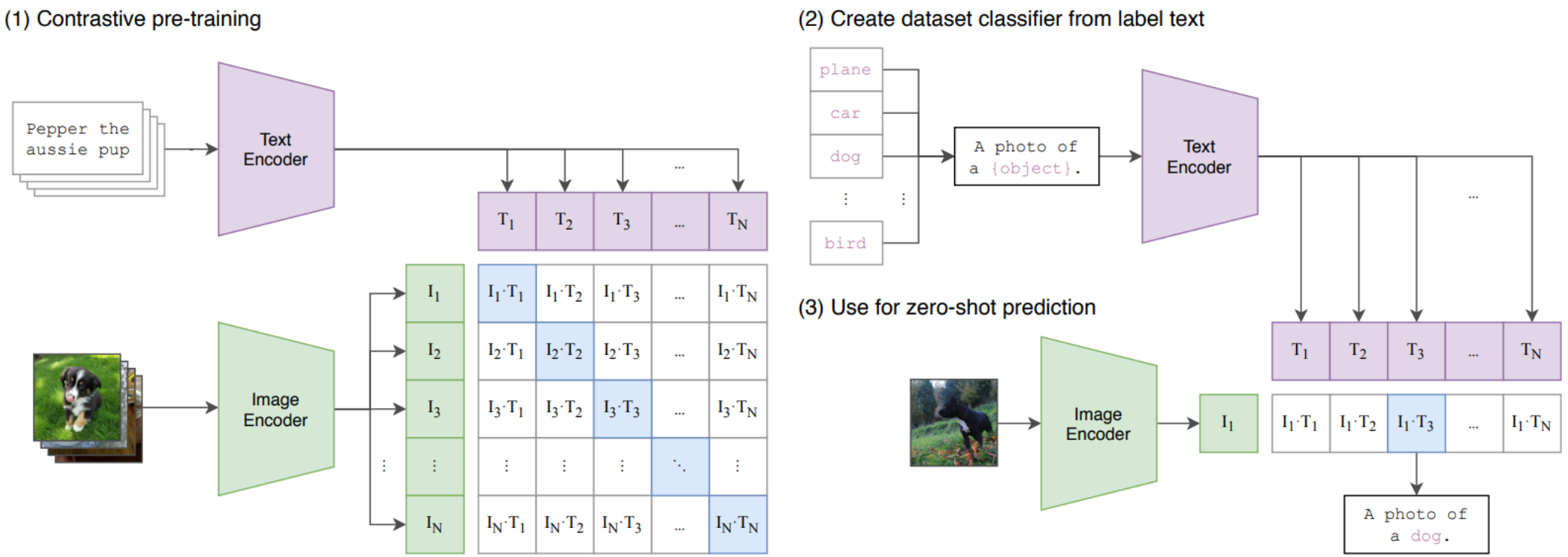
Zero-shot学習

One-shot学習

Few-shot学習

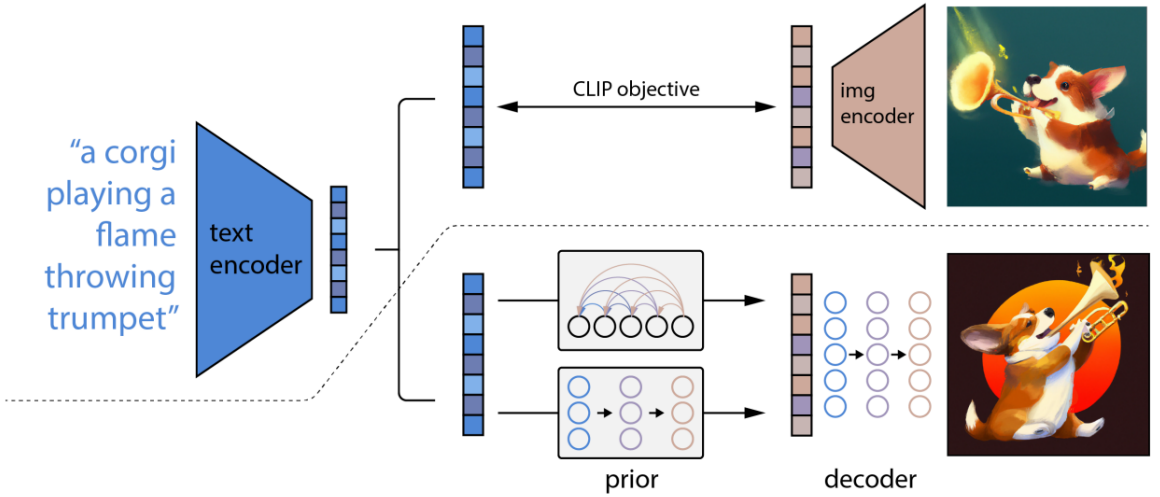
有名な基盤モデル　言語＋画像編

- **CLIP** [Radford+, ICML 2021]
  - 4億の画像とキャプションのペアによる自己教師あり学習
  - (ResNet50も試したけど)ViTとTransformerを使用
  - Zero/Few-shot学習や損失関数として活用可能



有名な基盤モデル　言語＋画像編

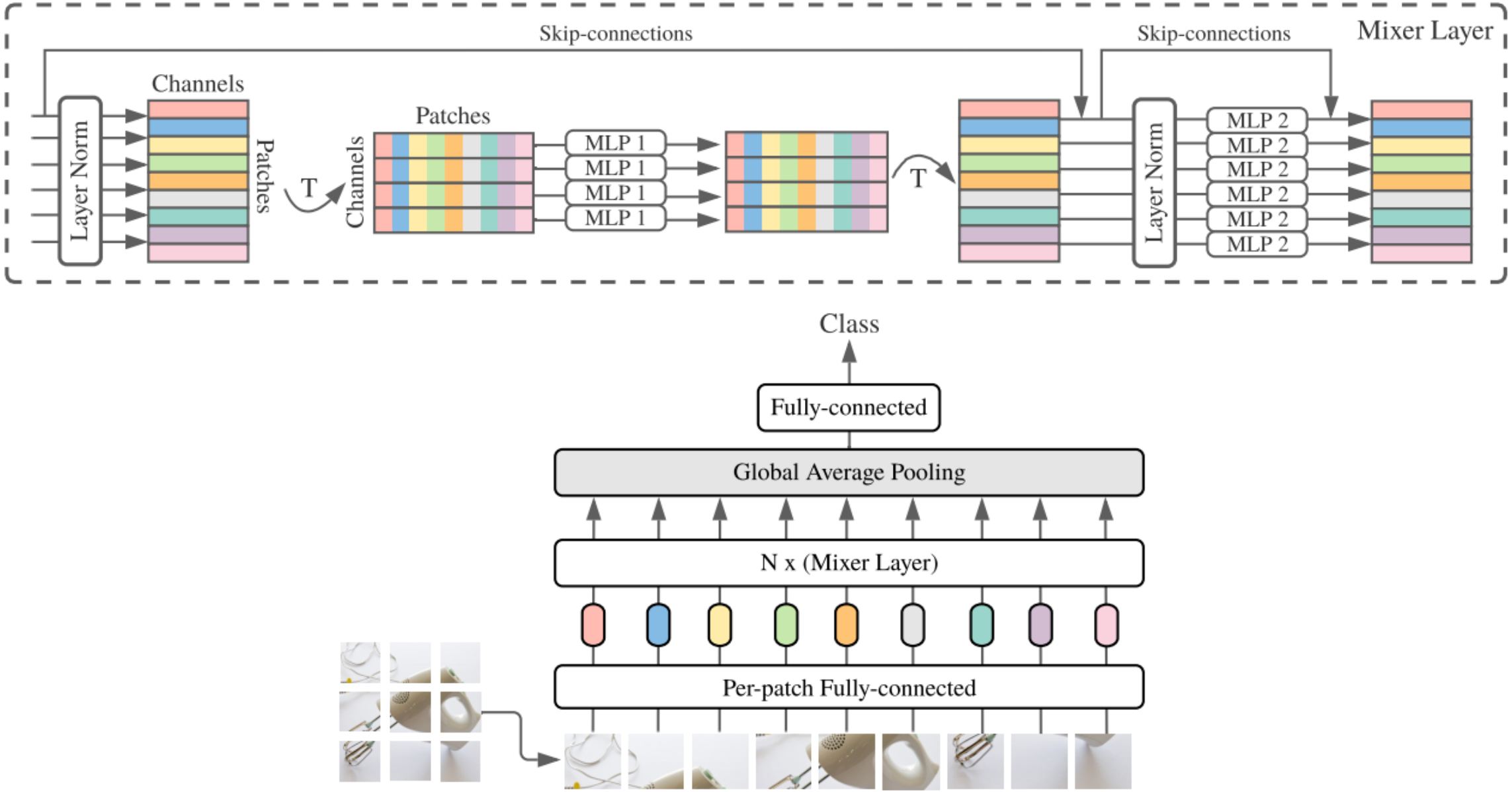
- **DALLE** [Ramesh+, ICML'21]**/DALLE-2** [Ramesh+, 2022]
  - どちらもCLIPを活用して言語から画像を生成
  - DALLE
    - Transformerで言語と画像をエンコード
    - VQVAEという量子化されたVAEで画像を生成
  - DALLE2
    - Transformer (CLIP)で言語をエンコード
    - 拡散モデルによって画像を生成



Transformerはオワコン？！

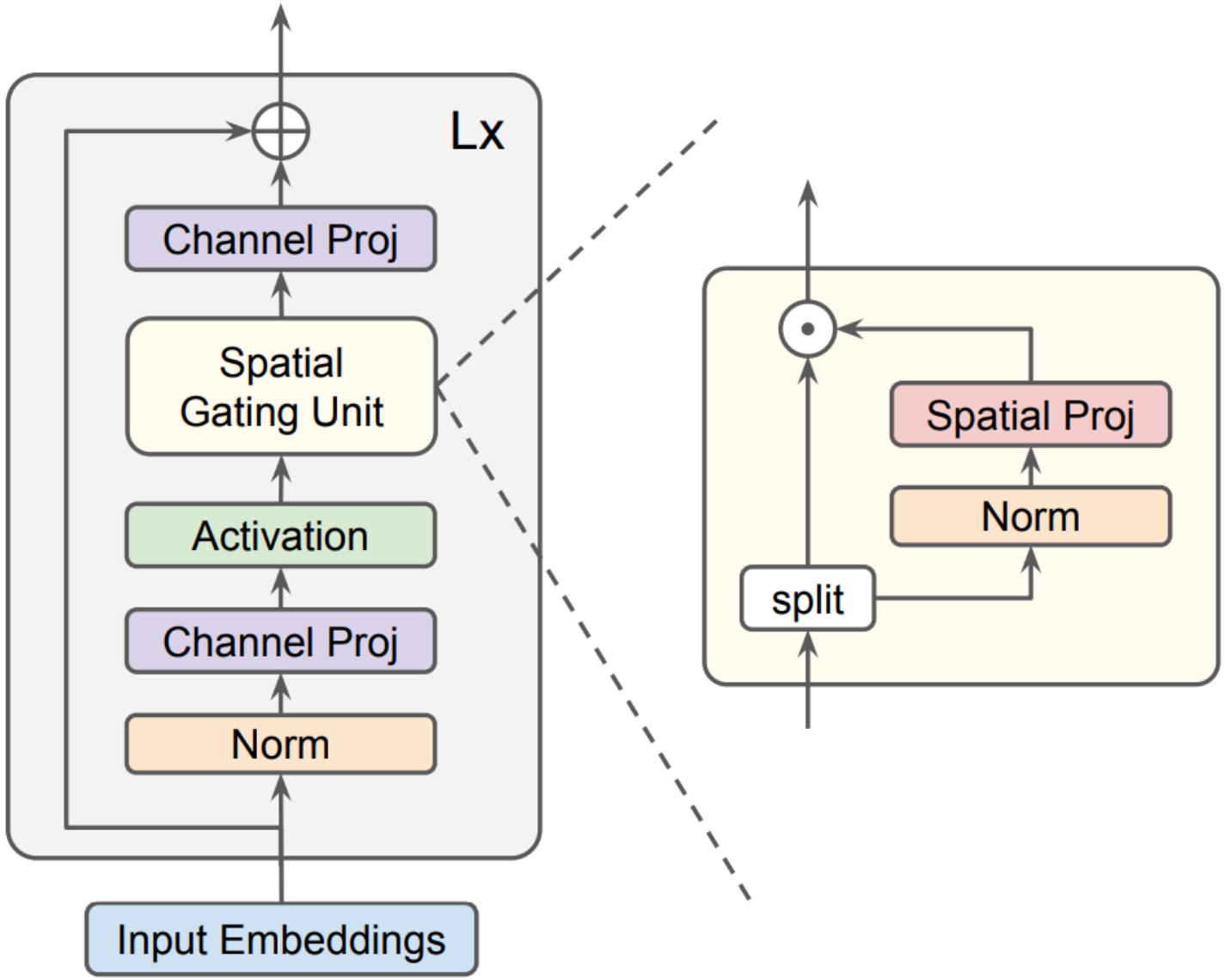
MLP-Mixer

[Tolstikhin+, NeurIPS'21]



gMLP

[Liu+, NeurIPS'21]



gMLPによる画像分類精度比較では

Model	ImageNet Top-1 (%)*	Input Resolution	Params (M)	MAdds (B)
	ConvNets			
ResNet-152 [16]	78.3	224	60	11.3
RegNetY-8GF [39]	81.7	224	39	8.0
EfficientNet-B0 [17]	77.1	224	5	0.39
EfficientNet-B3 [17]	81.6	300	12	1.8
EfficientNet-B7 [17]	84.3	600	66	37.0
NFNet-F0 [33]	83.6	192	72	12.4
	Transformers			
ViT-B/16 [7]	77.9	384	86	55.4
ViT-L/16 [7]	76.5	384	307	190.7
DeiT-Ti [8] (ViT+reg)	72.2	224	5	1.3
DeiT-S [8] (ViT+reg)	79.8	224	22	4.6
DeiT-B [8] (ViT+reg)	81.8	224	86	17.5
	MLP-like†			
Mixer-B/16 [20]	76.4	224	59	12.7
Mixer-B/16 (our setup)	77.3	224	59	12.7
Mixer-L/16 [20]	71.8	224	207	44.8
ResMLP-12 [22]	76.6	224	15	3.0
ResMLP-24 [22]	79.4	224	30	6.0
ResMLP-36 [22]	79.7	224	45	8.9
gMLP-Ti (ours)	72.3	224	6	1.4
gMLP-S (ours)	79.6	224	20	4.5
gMLP-B (ours)	81.6	224	73	15.8

ほとんどすべての
CNN画像分類
よりも

Transformerの
画像分類
よりも

（他のMLP系よりも）
gMLPの方が
精度が良い/
パラメータが少ない

で出てくる感想が

Transformerってオワコンでは！？

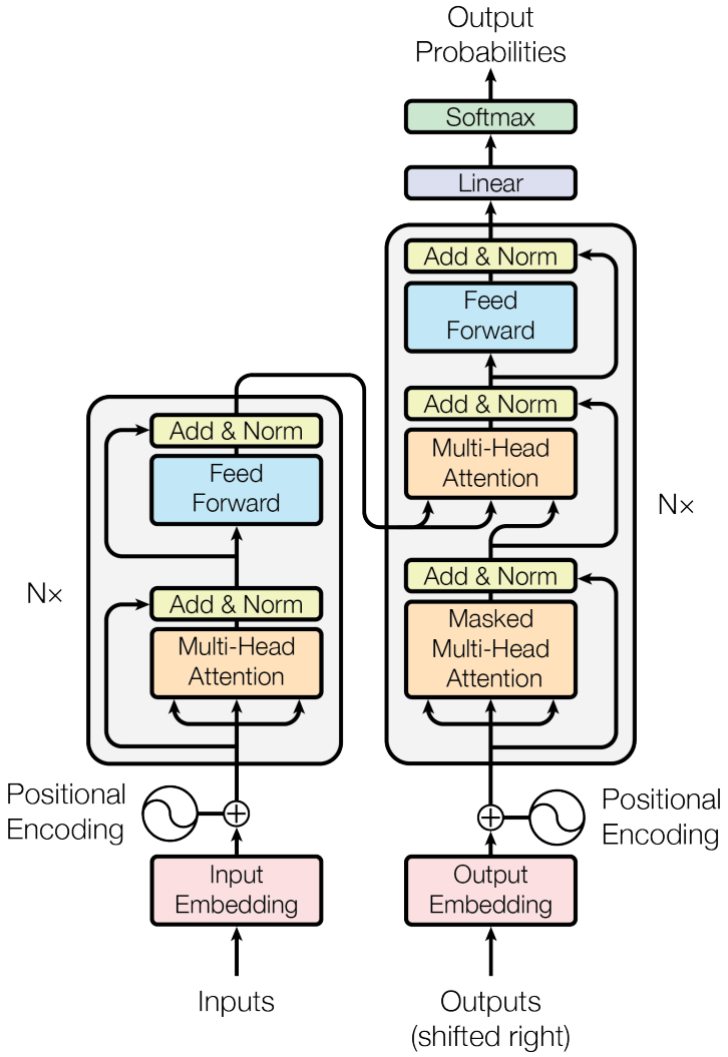
結論から言うと

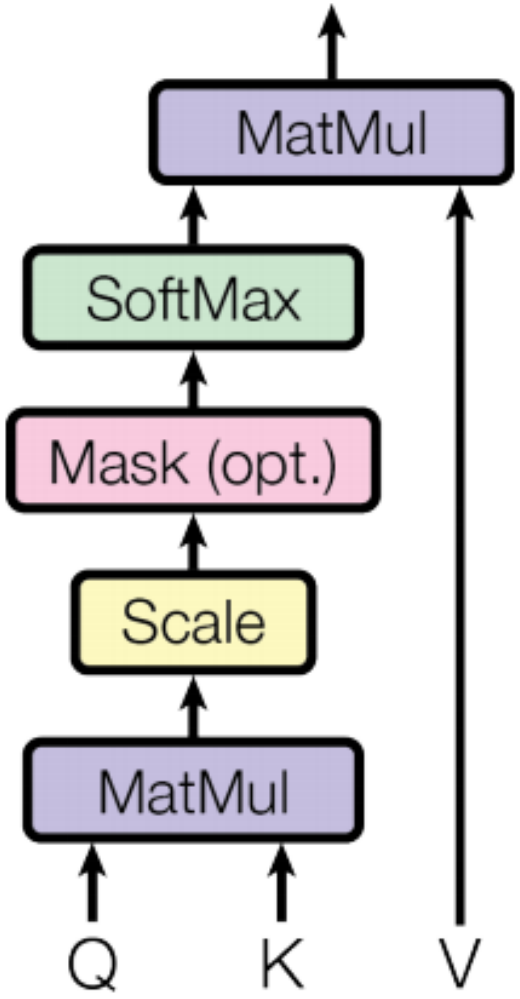
TransformerとMLP-MixerとgMLPは
本質的にやっていることは余り違いません

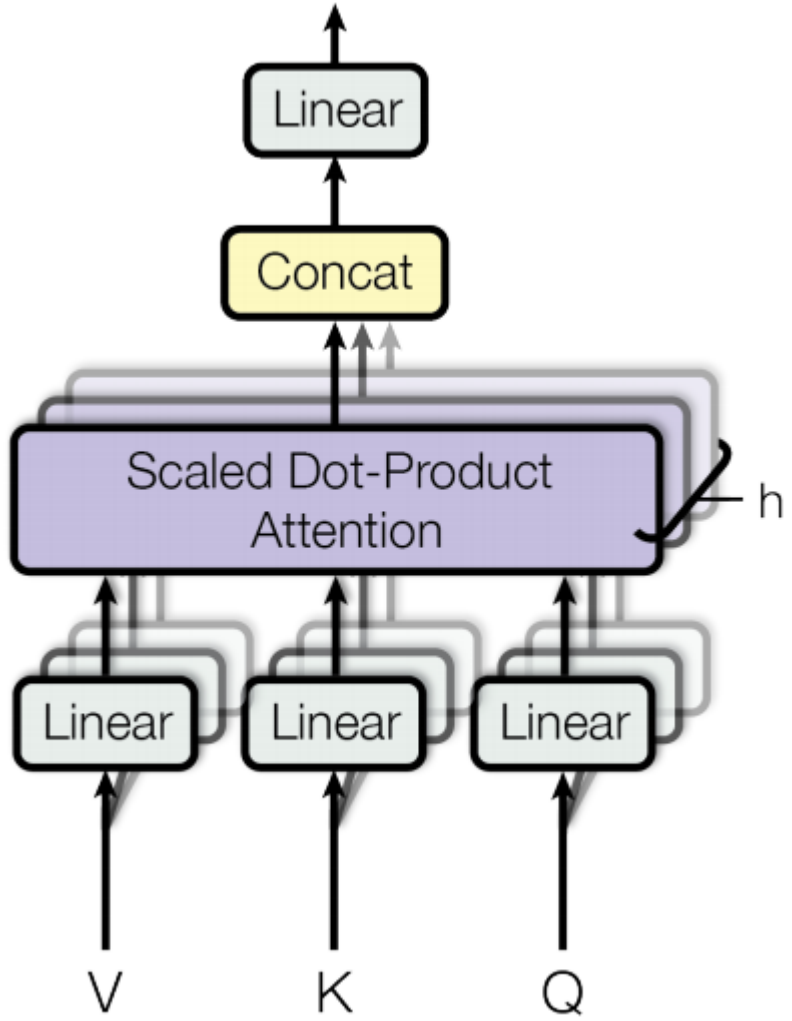
単にAttention is All You Needではなかっただけです

Transformer

[Vaswani+, NIPS'17]

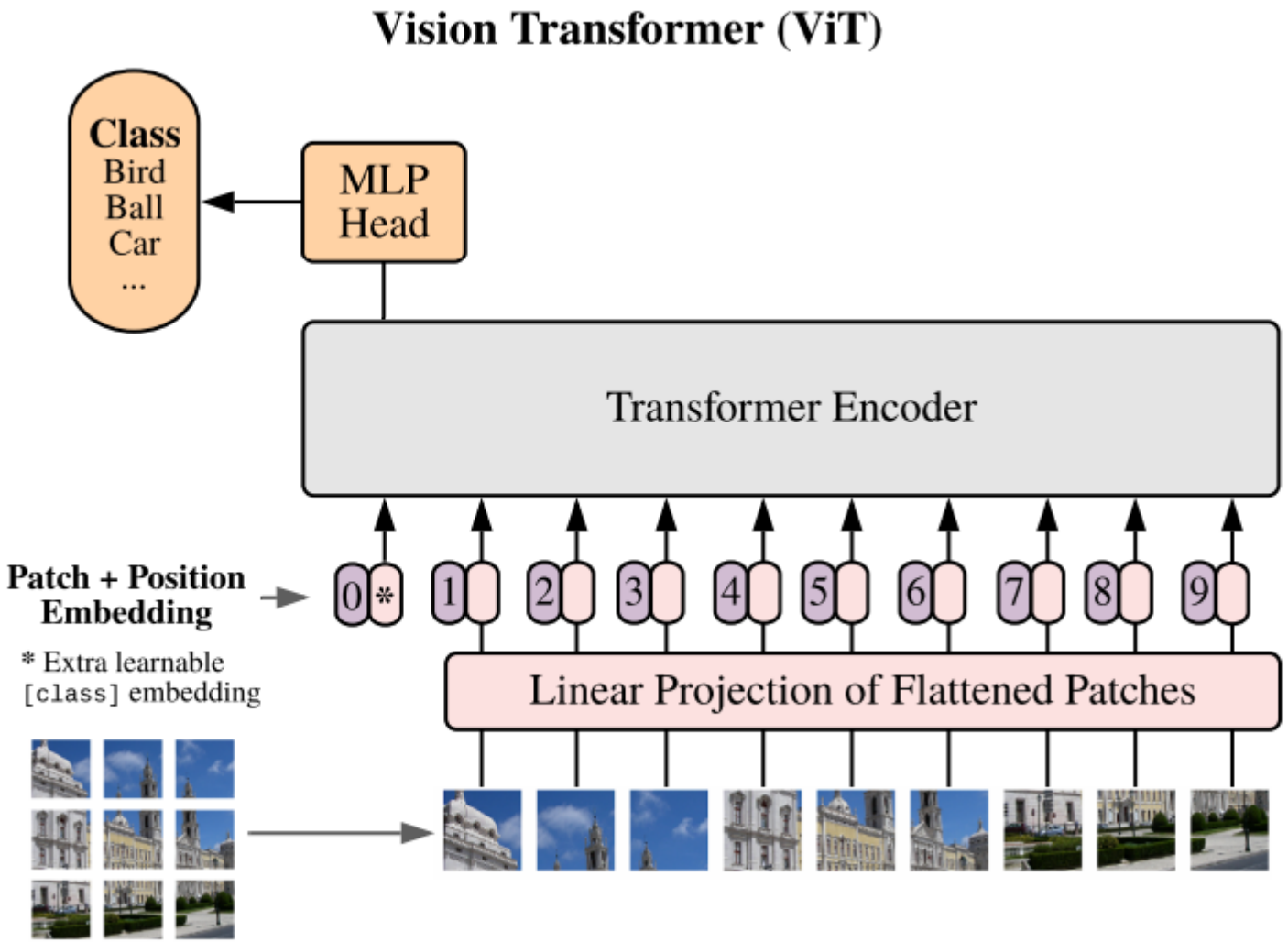


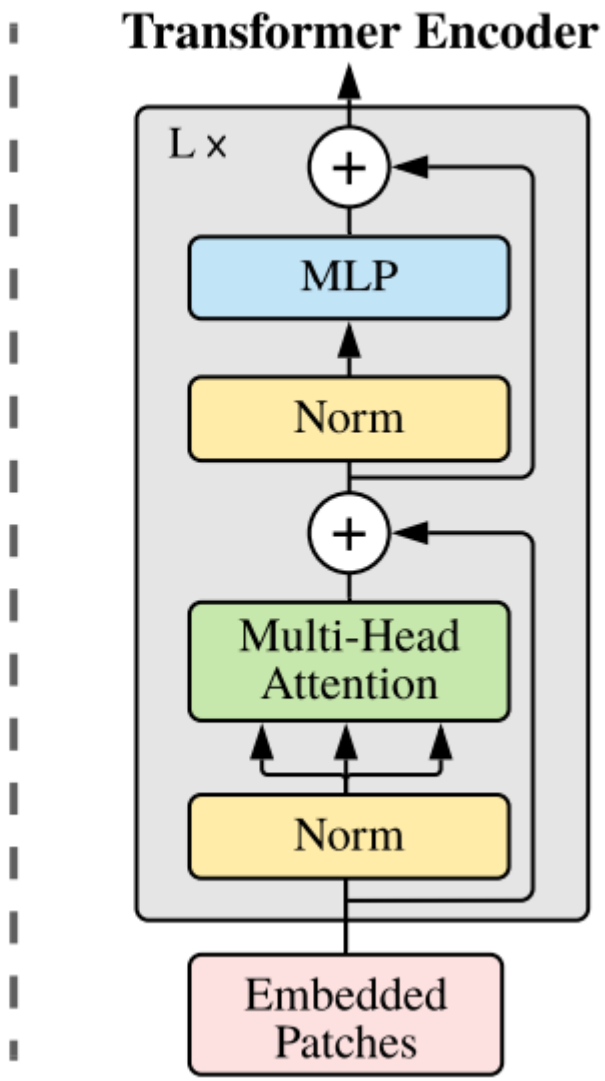




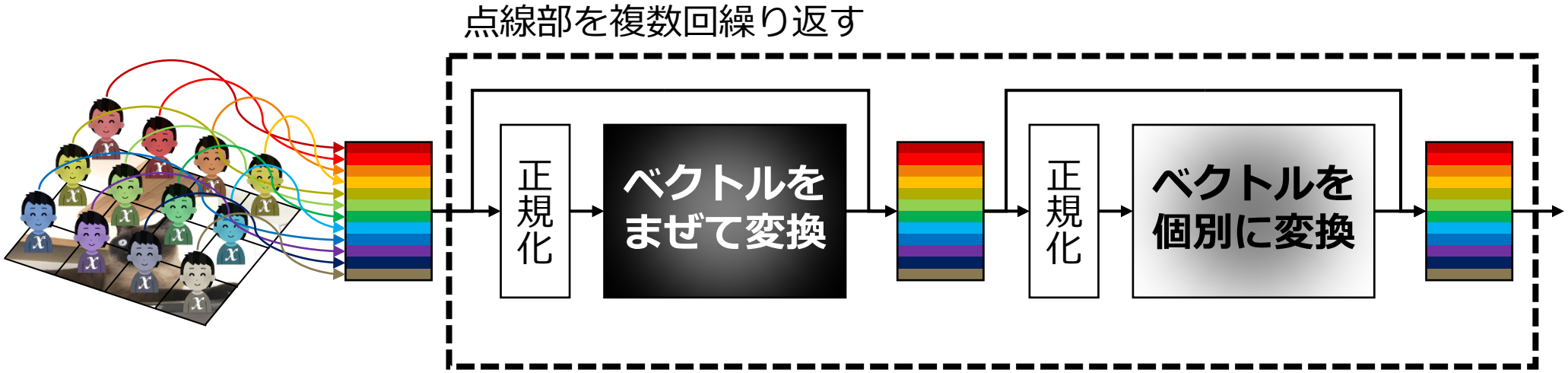
Vision Transformer

[Dosovitskiy+, ICLR'21]



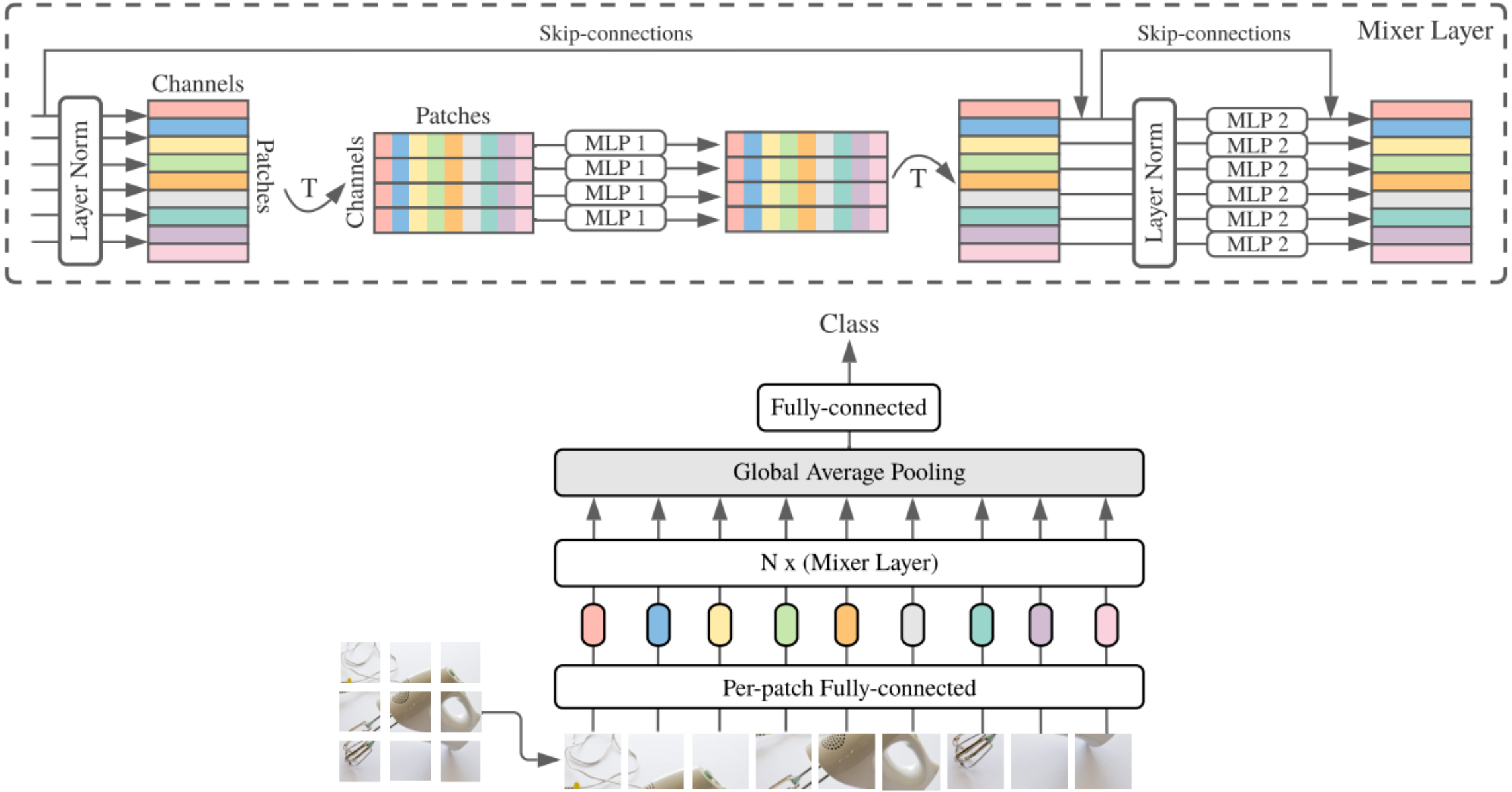


要するに

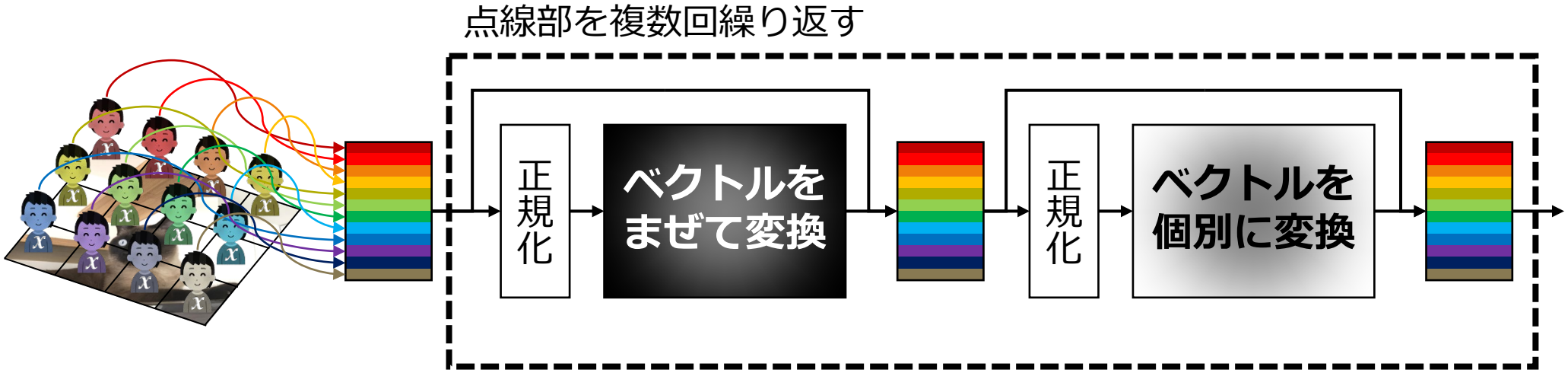


MLP-Mixer

[Tolstikhin+, NeurIPS'21]

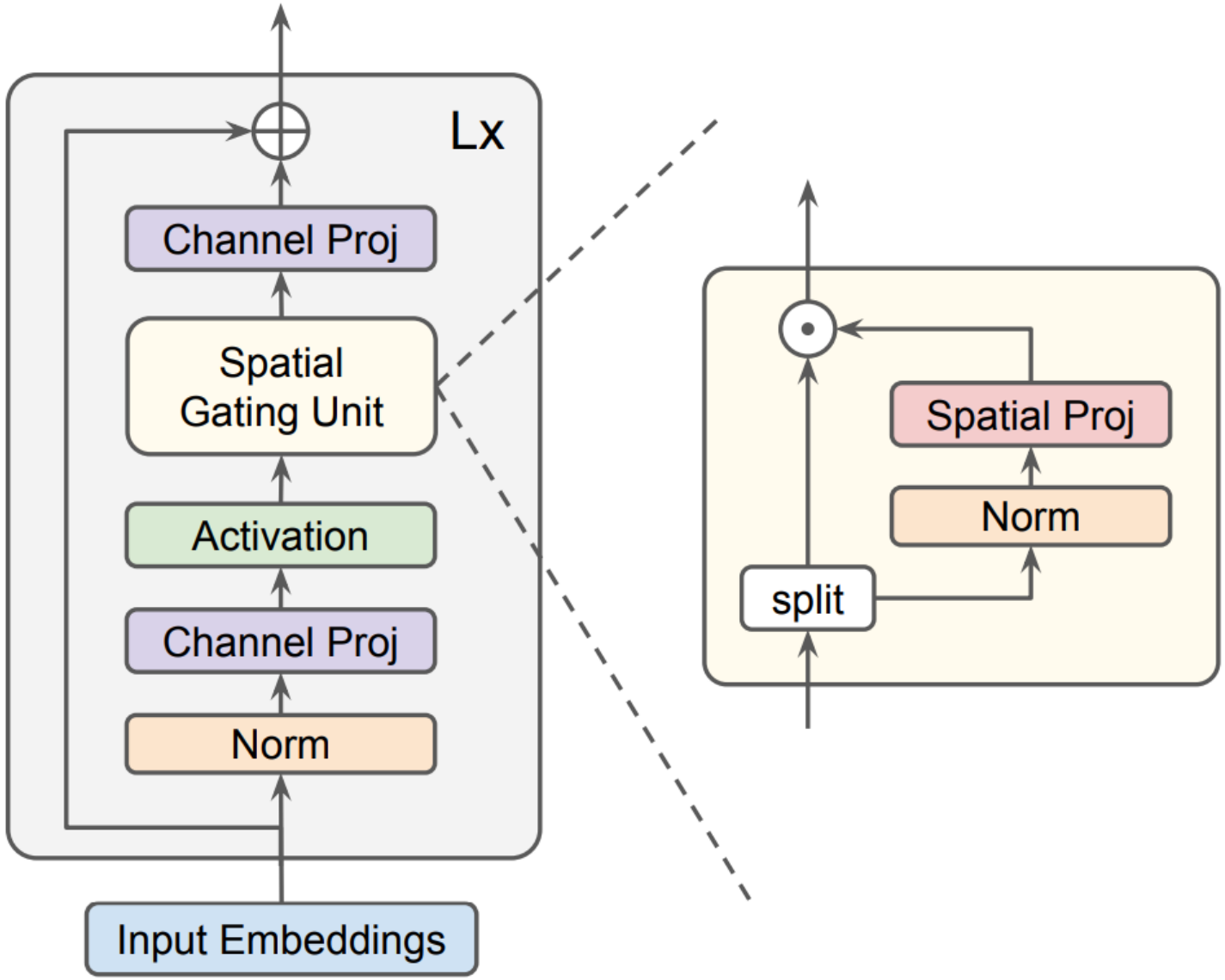


要するに

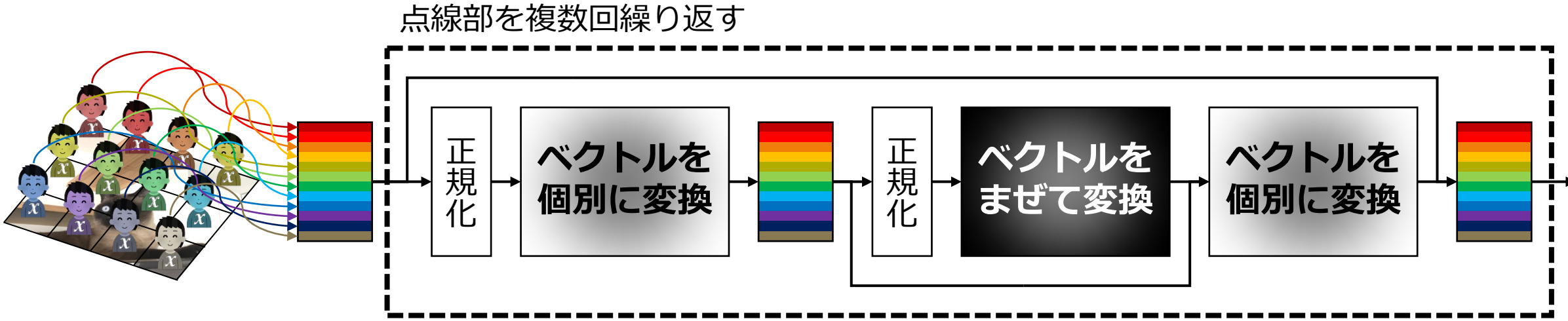


gMLP

[Liu+, NeurIPS'21]



要するに



同じところ vs. 変わったところ

- **みんな同じところ**
  - ベクトルの集合を**変換**するモジュールを繰り返し適用する
  - **変換**は**ベクトルをまぜて変換**するか、**ベクトルを個別に変換**するかの2通り
  - **ベクトルを個別に変換**する方法は**MLP**
  - 誤差消失や爆発を防ぐための正規化（**Layer Normalization**）
  - 同じ目的で導入されている**Skip Connection**

- **Transformerから変わったところ**
  - **ベクトルをまぜて変換**する方法が**Attentionから行列積**になった
  - ベクトルの**位置情報**をベクトル自身が保持（Transformer）
    →ベクトルのインデックスに併せてネットワークが保持（MLP系）

同じところ vs. 変わったところ

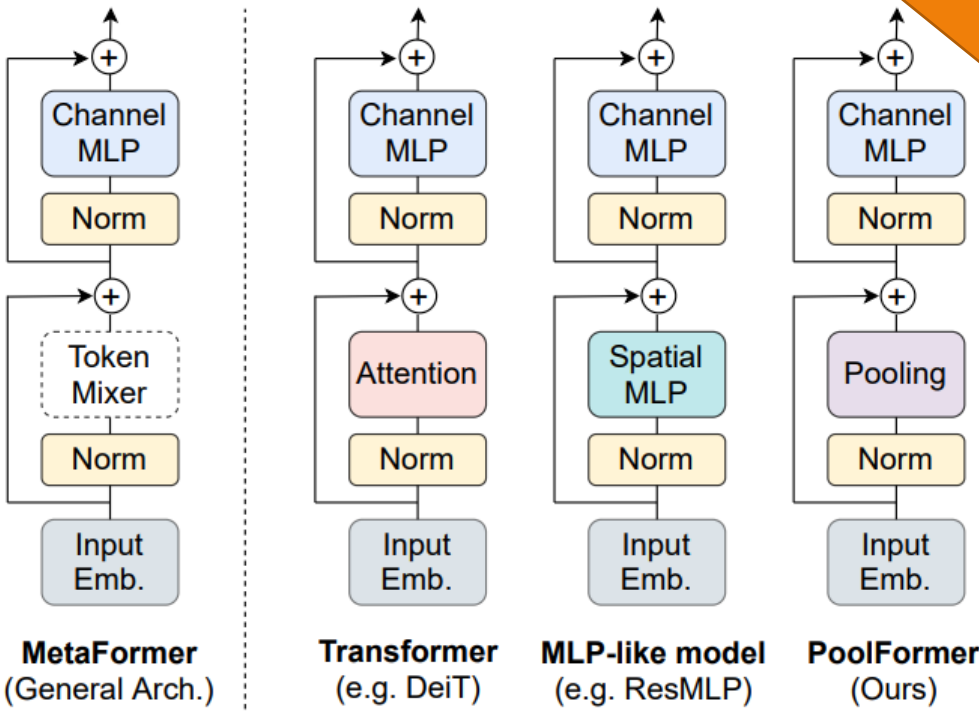
- みんな同じところ
  - ベ
  - 変
    る
    カ
  - ベ
  - 誤
  - 同

gMLPの論文内の報告
「ネットワーク内はほとんどMLPだけど、
ちょっとだけAttention入れた手法（aMLP）はさらに高性能」

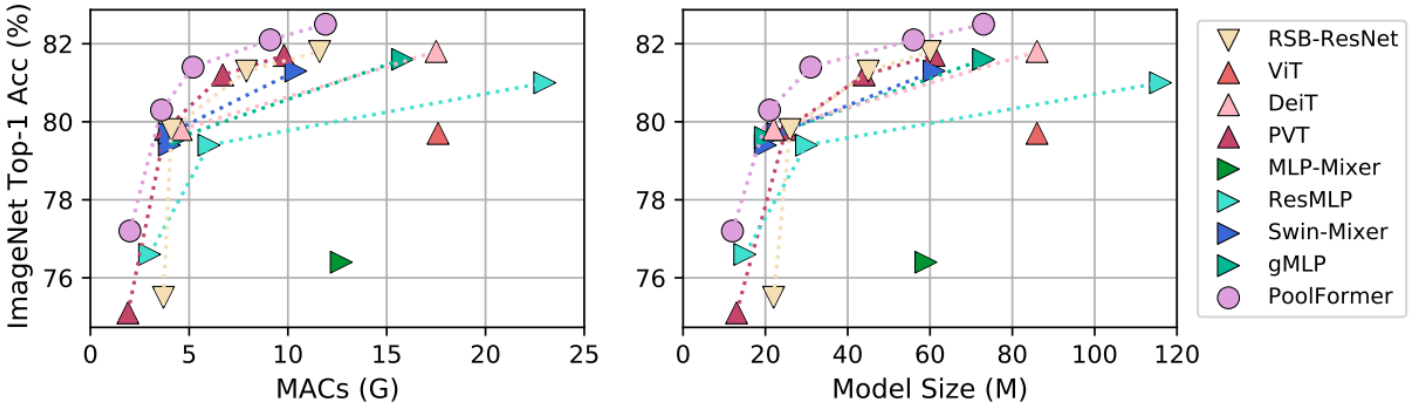
- Transformerから変わったところ
  - **ベクトルをまぜて変換**する方法が**Attentionから行列積**になった
  - ベクトルの**位置情報**をベクトル自身が保持（Transformer）
    →ベクトルのインデックスに併せてネットワークが保持（MLP系）

なんてことを2021年頃から言っていたら...

MetaFormer [Yu+, CVPR'22]

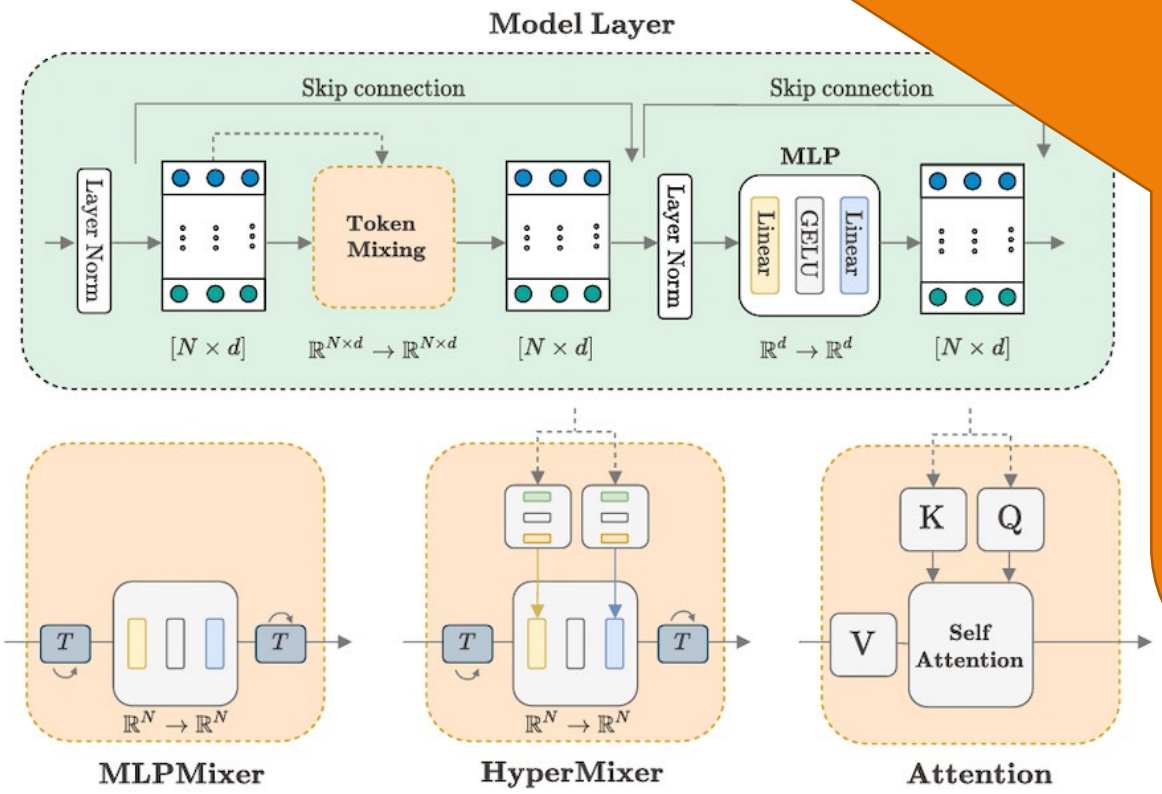


- MLP-like modelとTransformerの違いは Token Mixerの部分だけ
  →まさに「ベクトルをまぜて変換」
- **混ぜるのPoolingでも良くない？**
- ImageNetの1000クラスデータの学習で ViT系やMLP系の手法よりも高精度だよ



なんてことを2021年頃から言っていたら...

HyperMixer [Mai+, 2022]



- MLP-MixerとTransformerの違いはToken Mixingの部分だけ
  →まさに「ベクトルをまぜて変換」
- MLP-Mixerと違って位置不変なToken Mixingを行うHyperMixerを作ったよ
- 自然言語処理の各タスクで良好な精度を実現したよ

Model	MNLI	SNLI	QQP	QNLI	SST	# Params
Baselines	Validation set results (average accuracy / standard deviation over 10 seeds)					
MLPMixer	63.9 (0.34)	79.6 (0.11)	83.7 (0.42)	68.1 (2.1)	80.1 (0.67)	11 M
gMLP	60.8 (0.95)	80.5 (0.55)	82.8 (0.21)	60.5 (0.49)	78.7 (0.74)	11 M
FNet	59.7 (0.27)	75.3 (0.46)	79.4 (0.28)	59.9 (0.46)	79.7 (0.71)	11 M
Transformer	**65.4** (0.51)	80.9 (0.4)	82.8 (0.22)	67.3 (2.03)	79.0 (0.86)	11 M
HyperMixer (ours)	63.9 (1.16)	**81.6** (0.43)	**85.3** (0.19)	**77.2** (1.07)	80.5 (1.14)	11 M

もう一度結論を言うと

TransformerとMLP-MixerとgMLPは
本質的にやっていることは余り違いません

単にAttention is All You Needではなかっただけです

Transformerのノウハウ

Transformerの基本性能向上を心がけた軌跡

- ELU [Clevert+, ICLR 2016]
- GeLU [Hendrycks+Gimpel, 2016]
- Swish [Ramachandran+, ICLR WS 2018]
- SELU [Klambauer+, NIPS 2017]
- GLU [Dauphin+, ICML 2017]
- RMS [Zhang+Sennrich, NeurIPS 2019]
- ReZero [Bachlechner+, 2020]
- Fixup [Zhang+, ICLR 2019]
- Adaptive Softmax [Joulin+, ICML 2017]
- Mixture of Softmaxes [Yang+, ICLR 2018]

…が無駄に続けられている近年？！

- Transparent Attention [Bapna+, EMNLP 2018]
- Evolved Transformer [So+, ICML 2019]
- Synthesizer variants [Tay+, 2020]
- Funnel Transformer [Dai+, NeurIPS 2020]
- Lightweight and Dynamic convolution [Wu+, ICLR 2019]
- Mixture of Experts Transformer [Shazeer+, NeurIPS 2018][Lepikhin+, ICLR 2021]
- Switch Transformer [Fedus+, 2021]
- Product Key Memory [Lample+, NeurIPS 2019]
- Universal Transformer [Dehghani+, ICLR 2019]

ツッコミ元について

- Google Researchの中の人16人で
- 30を超えるTransformerの改善手法を
- 50を超えるバリエーションと
- 9の観点で評価した結果

大半の手法が元のTransformerと大差なかったよと言う話

Do Transformer Modifications Transfer Across Implementations and Applications?

Sharan Narang* Hyung Won Chung Yi Tay William Fedus
Thibault Fevry† Michael Matena † Karishma Malkan† Noah Fiedel
Noam Shazeer Zhenzhong Lan† Yanqi Zhou Wei Li
Nan Ding Jake Marcus Adam Roberts Colin Raffel

Google Research

改善方法の分類

1. **活性化関数**
2. **正規化**
3. **深さ**
4. **埋め込み**
5. **パラメータ共有**
6. **Softmaxの改良**
7. **全体のアーキテクチャ**

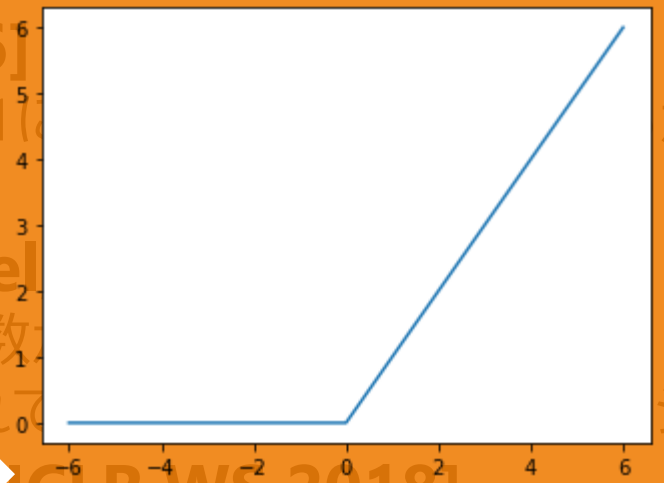
※ 必ずしもTransformerの改善を意図して発表された手法だけでは無いので注意

1. 活性化関数の改善の歴史

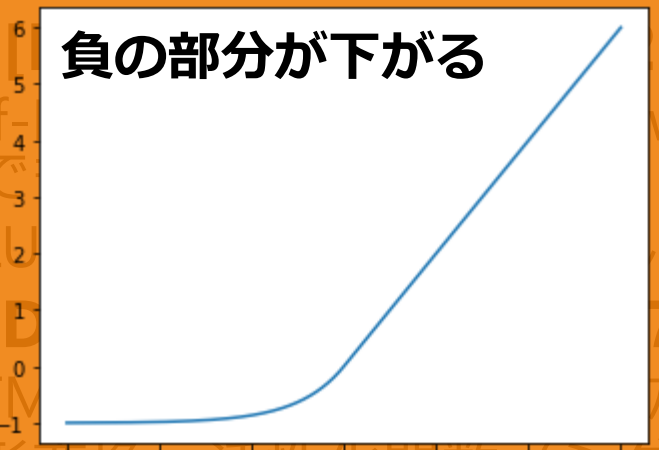
- **ELU [Clevert+, ICLR 2016]**
  - 負の部分だけ指数関数で-1に漸近し、基本的に滑らかな形をとる。
  - 被引用数3000超！
- **GeLU [Hendrycks+Gimpel, 2016]**
  - ReLUに似た形だけど導関数が滑らか。
  - BERTにもGPT-3にも使われているけどICLRからはリジェクトされている。頑張れ。
- **Swish [Ramachandran+, ICLR WS 2018]**
  - ReLUに似た形だけど導関数が滑らか。あれ言っていることがGeLUと変わらない。
- **SELU [Klambauer+, NIPS 2017]**
  - Self-Normalizing Neural Networksを提案する論文の一部。ELUを正の部分でも負の部分でも定数倍したもの。
  - SELU自体の評価は行われていない。査読者もツッコんでいるのに何故通った。
- **GLU [Dauphin+, ICML 2017]**
  - LSTMのGate部分を持ってきた活性化関数。
  - 線形変換＋活性化関数（シグモイド）を通した0~1の値をもつGateと、別途計算した線形変換の要素積。

要するに…

ReLU

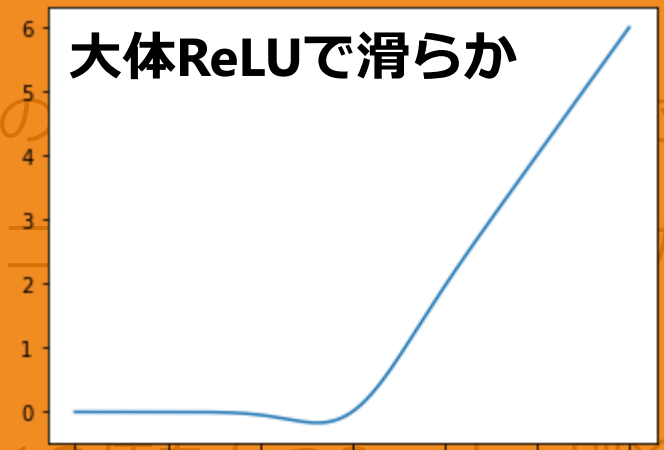


負の部分が下がる



ELU/SELU

大体ReLUで滑らか



GeLU/Swish

そしてぶっちゃけ…

1. 活性化関数の改善の歴史

- **ELU [Clevert+, ICLR 2016]**
  - 負の部分だけ指数関数で-1に漸近し、基本的に滑らかな形をとる。
  - 被引用数3000超！
- **GeLU [Hendrycks+Gimpel, 20**
  - ReLUに似た形だけど導関数が滑
  - BERTにもGPT-3にも使われてい　はリジェクトされている。頑張れ。
- **Swish [Ramachandran+, ICL**
  - ReLUに似た形だけど導関数が滑　ていることがGeLUと変わらない。
- **SELU [Klambauer+, NIPS 2017]**
  - Self-Normalizing Neural Network　論文の一部。ELUを正の部分でも負の部分でも定数倍したもの。
  - SELU自体の評価は行われていな　ツッコんでいるのに何故通った。
- **GLU [Dauphin+, ICML 2017]**
  - LSTMのGate部分を持ってきた活性化関数。
  - 線形変換＋活性化関　つGateと、別途計算した線形変換の要素積。

精度大して上がりません

ここで先に：実験概要

- **転移学習課題：Text-to-Text Transfer Transformer (T5)**
  - テキストを入れてテキストを出す複数の課題のための事前学習
  - 6.1TBのテキストをフィルタリングして約750GBにしたColossal Clean Crawled Corpus (C4)を利用
  - 本論文は次の3つの課題を採用
    - QAや推論などの複合タスク
      SuperGLUE [Wang+, NeurIPS 2019]
    - 文の要約
      XSum [Narayan+, EMNLP 2018]
    - 質問応答
      WebQuestions [Berant+, EMNLP 2013]

- **機械翻訳課題：WMT’14の英独翻訳タスク**

ここで先に：実験概要

おことわり

本論文の実験はNLP課題です

活性化関数にまつわる実験結果

- **パラメータ数と計算量が揃う様に調整**
  - Final loss = 文法モデル性能、ここだけ lower is better
  - SGLUE = 複合課題
  - XSum = 要約課題
  - WebQ = 質問応答
  - WMT EnDe = 機械翻訳

Model	Params	Ops	Step/s	Early loss	Final loss	SGLUE	XSum	WebQ	WMT EnDe
Vanilla Transformer	$223M$	$11.1T$	3.50	2.182 ± 0.005	1.838	70.97	17.78	23.02	26.62
GeLU	$223M$	$11.1T$	3.58	2.179 ± 0.003	1.838	**73.67**	**17.86**	**25.13**	26.47
Swish	$223M$	$11.1T$	3.62	2.186 ± 0.003	1.847	**72.03**	17.74	**24.34**	**26.75**
ELU	$223M$	$11.1T$	3.56	2.270 ± 0.007	1.932	65.86	16.73	23.02	26.08
GLU	$223M$	$11.1T$	3.59	2.174 ± 0.003	**1.814**	**67.86**	**17.42**	24.34	**27.12**
SeLU	$223M$	$11.1T$	3.55	2.315 ± 0.004	1.948	66.13	16.76	22.75	25.99

- **結果：共通して性能が向上した手法が無い**
  - 性能向上＝太字と言っているけどしばしば間違っているので注意

精度が良くなった活性化関数もある

- **GLUの発展形 [Shazeer, 2020]**
  - GLUは線形変換＋活性化関数によるゲートと線形変換の要素積
  - GLU自体は活性化関数をシグモイドとしていた

$$\mathrm{GLU}(x, W, V, b, c) = \sigma(xW + b) \otimes (xV + c)$$

- **以下のバリエーションを試してみた**
  - GeGLU：活性化関数が**GeLU**（ReLUみたいな形の滑らかなやつ）
  - ReGLU：活性化関数が**ReLU**
  - SwiGLU：活性化関数が**Swish**（ReLUみたいな形の滑らかな奴）
    - パラメータ数5400億の超巨大言語モデルPaLMでも利用 [Chowdhery+, 2022]
  - LiGLU：活性化関数**なし**（双線形形式）
  - あれ、ELUやSELUとも組合せてみないの…？

GLUのバリエーションの評価

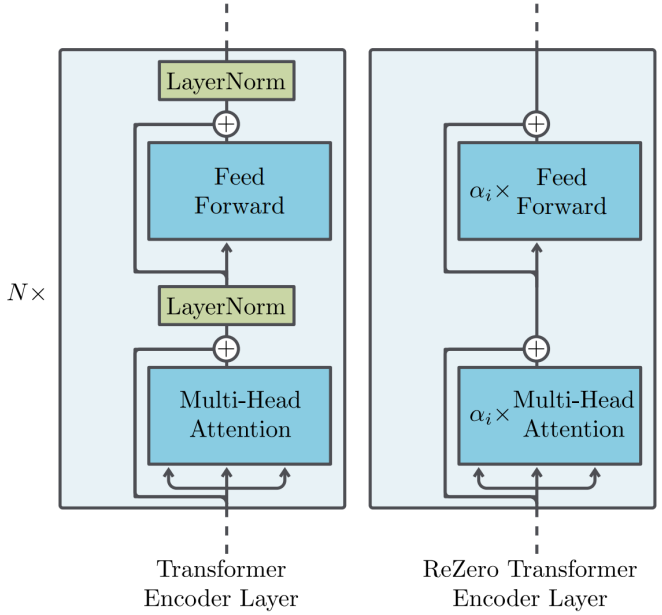
- **評価方法は前述通り**
  - Final loss = 文法モデル性能、ここだけ lower is better
  - SGLUE = 複合課題
  - XSum = 要約課題
  - WebQ = 質問応答
  - WMT EnDe = 機械翻訳

Model	Params	Ops	Step/s	Early loss	Final loss	SGLUE	XSum	WebQ	WMT EnDe
Vanilla Transformer	$223M$	$11.1T$	3.50	2.182 ± 0.005	1.838	70.97	17.78	23.02	26.62
GLU	$223M$	$11.1T$	3.59	2.174 ± 0.003	**1.814**	**67.86**	**17.42**	24.34	**27.12**
GeGLU	$223M$	$11.1T$	3.55	2.130 ± 0.006	**1.792**	**74.86**	**18.27**	**24.87**	**26.87**
ReGLU	$223M$	$11.1T$	3.57	2.145 ± 0.004	**1.803**	**73.40**	**18.36**	**24.87**	**27.02**
SwiGLU	$223M$	$11.1T$	3.53	2.127 ± 0.003	**1.789**	**74.21**	**18.20**	**24.34**	**27.02**
LiGLU	$223M$	$11.1T$	3.59	2.149 ± 0.005	**1.798**	**73.97**	**17.97**	**24.34**	26.53

- **GLUとLiGLUは少し下がる結果もあるが…**
  他のバリエーションは一貫して効果アリ

2. 正規化の改善の歴史

- **Vanilla Transformer：LayerNorm [NIPS DLS 2016]**
  - ベクトルの要素ごとの平均と分散で正規化。
- **RMS [Zhang+Sennrich, NeurIPS 2019]**
  - LayerNormが遅いので平均抜きで正規化。
- **ReZero [Bachlechner+, 2020]**
  - タイトルの出だしがReZero is All You Need…出たよ○○ is All You Need系論文。
  - 元のTransformer（左側）の変換部分に学習可能パラメータα（初期値ゼロ）を掛ける（右側）。



- **Fixup [Zhang+, ICLR 2019]**
  - 正規化を一切せずに、Residualブロックの初期値を0とか1にするだけでもBatchNormやLayerNormと近い精度を達成。

正規化にまつわる実験結果

- **出場選手**
  - RMS Norm「LayerNormの計算早くするぜ」
  - ReZero「Residualブロックの変換部分をα（初期値0）倍するぜ」
  - Fixup「初期値ちゃんと考えると正規化不要だぜ」

効果のあった手法はどれでしょうか？

Model	Params	Ops	Step/s	Early loss	Final loss	SGLUE	XSum	WebQ	WMT EnDe
Vanilla Transformer	$223M$	$11.1T$	3.50	2.182 ± 0.005	1.838	70.97	17.78	23.02	26.62
RMS Norm	$223M$	$11.1T$	3.68	2.167 ± 0.008					
Rezero	$223M$	$11.1T$	3.51	2.262 ± 0.003					
Rezero + LayerNorm	$223M$	$11.1T$	3.26	2.223 ± 0.006					
Rezero + RMS Norm	$223M$	$11.1T$	3.34	2.221 ± 0.009					
Fixup	$223M$	$11.1T$	2.95	2.382 ± 0.012					

正規化にまつわる実験結果

- **出場選手**
  - RMS Norm「LayerNormの計算早くするぜ」
  - ReZero「Residualブロックの変換部分をα（初期値0）倍するぜ」
  - Fixup「初期値ちゃんと考えると正規化不要だぜ」

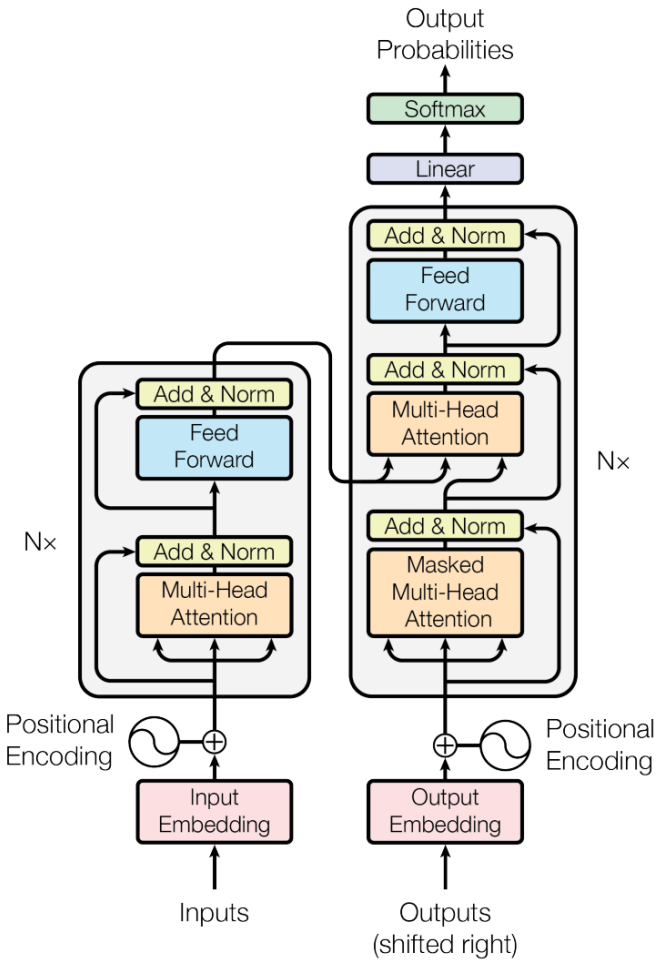
結果発表

Model	Params	Ops	Step/s	Early loss	Final loss	SGLUE	XSum	WebQ	WMT EnDe
Vanilla Transformer	$223M$	$11.1T$	3.50	2.182 ± 0.005	1.838	70.97	17.78	23.02	26.62
RMS Norm	$223M$	$11.1T$	3.68	2.167 ± 0.008	**1.821**	**73.73**	**17.94**	**24.07**	**27.14**
Rezero	$223M$	$11.1T$	3.51	2.262 ± 0.003	1.939	57.21	15.64	20.90	26.37
Rezero + LayerNorm	$223M$	$11.1T$	3.26	2.223 ± 0.006	1.858	68.16	17.58	23.02	26.29
Rezero + RMS Norm	$223M$	$11.1T$	3.34	2.221 ± 0.009	1.875	65.14	17.32	23.02	26.19
Fixup	$223M$	$11.1T$	2.95	2.382 ± 0.012	2.067	55.71	14.42	23.02	26.31

- **RMS Normのみ効果アリ**
  - というかReZeroが大変な状況

3. 深さについての検証

- **右図のFeed Forward部分**
  - 線形変換その１→ReLU→線形変換その２
  - パラメータ数のトレードオフを調べたい
    - 全体の層数（右図におけるN）
    - 真ん中の部分の次元数d_{ff}
    - Multi-Head Attentionのヘッド数H
- **調べた結果**
  - Vanillaは 12 layers, $d_{\text{ff}} = 3072, H = 12$
  - 層数が深い方が精度良さげだが、1秒当たりのステップ計算が遅い。



Model	Params	Ops	Step/s	Early loss	Final loss	SGLUE	XSum	WebQ	WMT EnDe
Vanilla Transformer	$223M$	$11.1T$	3.50	2.182 ± 0.005	1.838	70.97	17.78	23.02	26.62
24 layers, $d_{\text{ff}} = 1536, H = 6$	$224M$	$11.1T$	3.33	2.200 ± 0.007	1.843	**72.55**	17.75	**25.13**	**26.89**
18 layers, $d_{\text{ff}} = 2048, H = 8$	$223M$	$11.1T$	3.38	2.185 ± 0.005	**1.831**	**74.74**	16.83	**24.34**	**27.10**
8 layers, $d_{\text{ff}} = 4608, H = 18$	$223M$	$11.1T$	3.69	2.190 ± 0.005	1.847	**72.17**	17.69	**23.28**	**26.85**
6 layers, $d_{\text{ff}} = 6144, H = 24$	$223M$	$11.1T$	3.70	2.201 ± 0.010	1.857	70.28	17.59	**24.60**	**26.66**

4. 埋め込み方法についての検証

- **InputとOutputは語彙×埋め込み次元のパラメータ**
  - NLPだとパラメータ数に影響が大きい
- **行列分解（ALBERT [Lan+, ICLR 2020] より）**
  - 語彙×埋め込み次元 → 語彙×内部次元と内部次元×埋め込み次元
- **エンコーダの入出力での埋め込み [Chung+, ICLR 2021]**
  - 共有（Tied）か非共有（Untied）か
- **頻度による埋め込み次元の調整 [Baevski+Auli, ICLR 2019]**
  - 低頻度な単語は低次元のベクトルに埋め込む

Model	Params	Ops	Step/s	Early loss	Final loss	SGLUE	XSum	WebQ	WMT EnDe
Vanilla Transformer	$223M$	$11.1T$	3.50	2.182 ± 0.005	1.838	70.97	17.78	23.02	26.62
Factorized Embedding	$227M$	$9.4T$	3.80	2.208 ± 0.006	1.855	69.37	15.92	22.75	26.50
Factorized & shared embeddings	$202M$	$9.1T$	3.92	2.320 ± 0.010	1.952	68.27	16.33	22.22	26.44
Tied encoder/decoder input embeddings	$248M$	$11.1T$	3.55	2.192 ± 0.002	1.840	69.36	17.72	**24.34**	26.49
Tied decoder input and output embeddings	$248M$	$11.1T$	3.57	2.187 ± 0.007	**1.827**	**73.28**	17.74	**24.87**	**26.67**
Untied embeddings	$273M$	$11.1T$	3.53	2.195 ± 0.005	**1.834**	70.94	17.58	**23.28**	26.48
Adaptive input embeddings	$204M$	$9.2T$	3.55	2.250 ± 0.002	1.899	65.72	16.21	**24.07**	**26.66**

- **実験結果：デコーダの入出力を共有（エンコーダとは非共有）すると○**

5. パラメータ共有方法についての検証

- **ALBERT [Lan+, ICLR 2020] より**
  - 各層のパラメータを全部共有する
  - 先ほどの埋め込みの分解と共有も試す
  - エンコーダだけ/デコーダだけで共有

Model	Params	Ops	Step/s	Early loss	Final loss	SGLUE	XSum	WebQ	WMT EnDe
Vanilla Transformer	$223M$	$11.1T$	3.50	2.182 ± 0.005	1.838	70.97	17.78	23.02	26.62
Block sharing	$65M$	$11.1T$	3.91	2.497 ± 0.037	2.164	62.05	14.53	21.96	25.48
+ Factorized embeddings	$45M$	$9.4T$	4.21	2.631 ± 0.305	2.183	58.85	14.00	19.84	25.27
+ Factorized & shared embeddings	$20M$	$9.1T$	4.37	2.907 ± 0.313	2.385	52.34	11.37	19.84	25.19
Encoder only block sharing	$170M$	$11.1T$	3.68	2.298 ± 0.023	1.929	66.21	16.23	23.02	26.23
Decoder only block sharing	$144M$	$11.1T$	3.70	2.352 ± 0.029	2.082	65.58	16.13	**23.81**	26.08

- **実験結果：大体ダメ**
  - ただしALBERTでは文の順番を当てる損失も入れているが、この論文では対象としていないのでALBERT自体との比較ではない

6. Softmax

- **Adaptive Softmax [Joulin+, ICML 2017]**
  - 単語の頻度に応じて語彙をクラスタリング→階層的識別で高速化
  - 低頻度語はさらに射影して軽量化＋高速化
- **Mixture of Softmaxes [Yang+, ICLR 2018]**
  - SoftmaxをK通り計算して重みづけ和による事後確率計算

Model	Params	Ops	Step/s	Early loss	Final loss	SGLUE	XSum	WebQ	WMT EnDe
Vanilla Transformer	$223M$	$11.1T$	3.50	2.182 ± 0.005	1.838	70.97	17.78	23.02	26.62
Adaptive softmax	$204M$	$9.2T$	3.60	2.364 ± 0.005	1.982	**71.28**	16.67	21.16	25.56
Adaptive softmax without projection	$223M$	$10.8T$	3.43	2.229 ± 0.009	1.914	69.52	17.10	23.02	25.72
Mixture of softmaxes	$232M$	$16.3T$	2.24	2.227 ± 0.017	**1.821**	**74.57**	17.62	22.75	**26.82**

- **実験結果：**
  - Mixture of Softmaxesは、性能が良くなったタスクもあるけど計算速度が40%低下

7. 全体のアーキテクチャの改善の歴史

- Transparent Attention [Bapna+, EMNLP 2018]
- Evolved Transformer [So+, ICML 2019]
- Synthesizer variants [Tay+, 2020]
- Funnel Transformer [Dai+, NeurIPS 2020]
- Lightweight and Dynamic convolution [Wu+, ICLR 2019]
- Mixture of Experts Transformer [Shazeer+, NeurIPS 2018][Lepikhin+, ICLR 2021]
- Switch Transformer [Fedus+, 2021]
- Product Key Memory [Lample+, NeurIPS 2019]
- Universal Transformer [Dehghani+, ICLR 2019]

実験結果

いよいよ多くて訳が分からん

Model	Params	Ops	Step/s	Early loss	Final loss	SGLUE	XSum	WebQ	WMT EnDe
Vanilla Transformer	$223M$	$11.1T$	3.50	2.182 ± 0.005	1.838	70.97	17.78	23.02	26.62
Transparent attention	$223M$	$11.1T$	3.33	2.181 ± 0.014	1.874	51.31	10.40	21.16	**26.80**
Dynamic convolution	$257M$	$11.8T$	2.65	2.403 ± 0.009	2.047	53.16	12.67	21.16	17.03
Lightweight convolution	$224M$	$10.4T$	4.07	2.370 ± 0.010	1.989	60.27	14.86	23.02	24.73
Evolved Transformer	$217M$	$9.9T$	3.09	2.220 ± 0.003	1.863	**71.80**	10.76	**24.07**	26.58
Synthesizer (dense)	$224M$	$11.4T$	3.47	2.334 ± 0.021	1.962	58.46	14.27	16.14	**26.63**
Synthesizer (dense plus)	$243M$	$12.6T$	3.22	2.191 ± 0.010	1.840	**71.11**	16.96	**23.81**	**26.71**
Synthesizer (dense plus alpha)	$243M$	$12.6T$	3.01	2.180 ± 0.007	**1.828**	**72.12**	17.02	**23.28**	26.61
Synthesizer (factorized)	$207M$	$10.1T$	3.94	2.341 ± 0.017	1.968	59.75	15.39	**23.55**	26.42
Synthesizer (random)	$254M$	$10.1T$	4.08	2.326 ± 0.012	2.009	51.17	10.35	19.56	26.44
Synthesizer (random plus)	$292M$	$12.0T$	3.63	2.189 ± 0.004	1.842	**71.81**	17.04	**24.87**	26.43
Synthesizer (random plus alpha)	$292M$	$12.0T$	3.42	2.186 ± 0.007	**1.828**	**73.13**	17.08	**24.08**	26.39
Universal Transformer	$84M$	$40.0T$	0.88	2.406 ± 0.036	2.053	66.77	14.09	19.05	23.91
Mixture of experts	$648M$	$11.7T$	3.20	2.148 ± 0.006	**1.785**	**72.06**	**18.13**	**24.08**	**26.94**
Switch Transformer	$1100M$	$11.7T$	3.18	2.135 ± 0.007	**1.758**	**73.51**	**18.02**	**26.19**	**26.81**
Funnel Transformer	$223M$	$1.9T$	4.30	2.288 ± 0.008	1.918	64.58	16.26	22.75	23.20
Weighted Transformer	$280M$	$71.0T$	0.59	2.378 ± 0.021	1.989	66.20	16.98	23.02	26.30
Product key memory	$421M$	$386.6T$	0.25	2.155 ± 0.003	**1.798**	**73.18**	17.04	**23.55**	**26.73**

7. 全体のアーキテクチャの改善の歴史

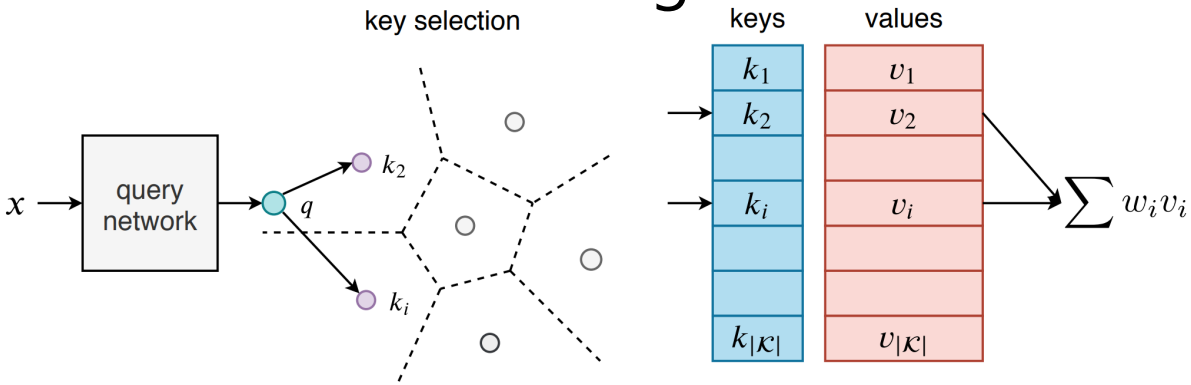
- Transparent Attention [Bapna+, EMNLP 2018]
- Evolved Transformer [So+, ICML 2019]
- Synthesizer variants [Tay+, 2020]
- Funnel Transformer [Dai+, NeurIPS 2020]
- Lightweight and Dynamic convolution [Wu+, ICLR 2019]
- Mixture of Experts Transformer [Shazeer+, NeurIPS 2018][Lepikhin+, ICLR 2021]
- Switch Transformer [Fedus+, 2021]
- Product Key Memory [Lample+, NeurIPS 2019]
- Universal Transformer [Dehghani+, ICLR 2019]

精度が良くなったもの/悪くなったもの

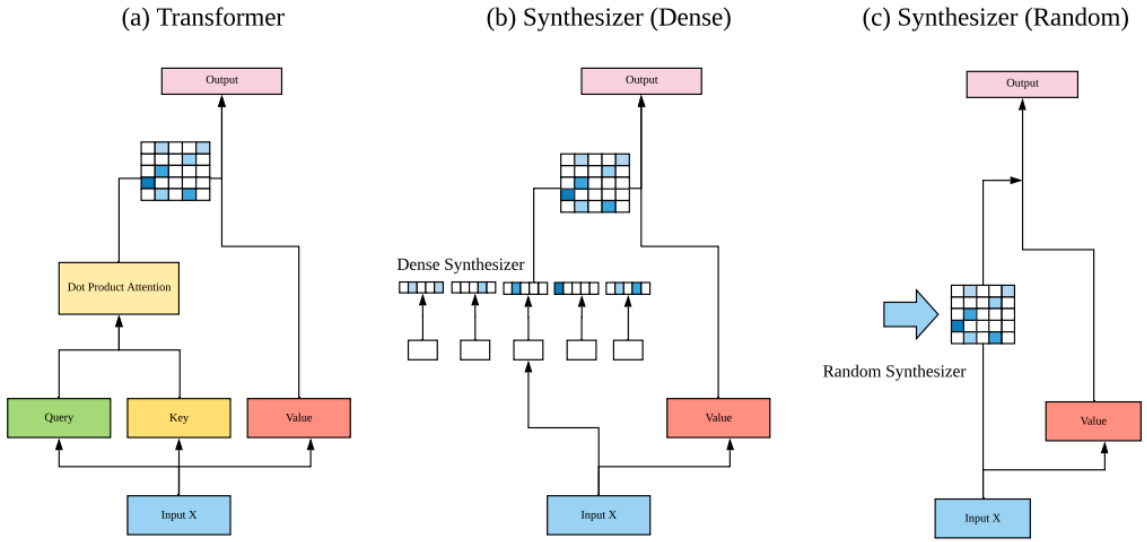
- Transparent Attention [Bapna+, EMNLP 2018]
- Evolved Transformer [So+, ICML 2019]
- Synthesizer variants [Tay+, 2020]
- Funnel Transformer [Dai+, NeurIPS 2020]
- Lightweight and Dynamic convolution [Wu+, ICLR 2019]
- Mixture of Experts Transformer [Shazeer+, NeurIPS 2018][Lepikhin+, ICLR 2021]
- Switch Transformer [Fedus+, 2021]
- Product Key Memory [Lample+, NeurIPS 2019]
- Universal Transformer [Dehghani+, ICLR 2019]

Product Key MemoryとSynthesizer variants

- **Product Key Memory** [Dehghani+, ICLR 2019]
  - 大量のkeyを別途学習しながらmulti-head attentionぽいことをやるPKMの提案
  - 一部の層のFFNをPKMに変えると、より小規模なネットワークで精度・速度up!
  - 前頁では本論文と[Wu+, ICLR 2019]だけがFacebookの論文（他は全てGoogle系）



- **Synthesizer** [Tay+, 2020]
  - アテンション行列を$QK^\top$から
    - 入力Xの線形変換+ReLU+線形変換に（Dense）
    - もう乱数でいいや（Random）
  - Performer [Choromanski+, ICLR'21] は$\boldsymbol{q}$と$\boldsymbol{k}$のカーネルでアテンションを近似

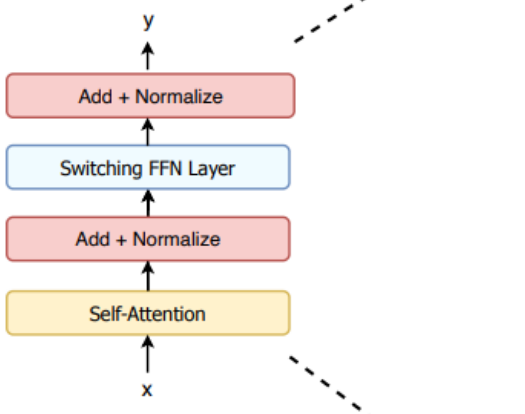


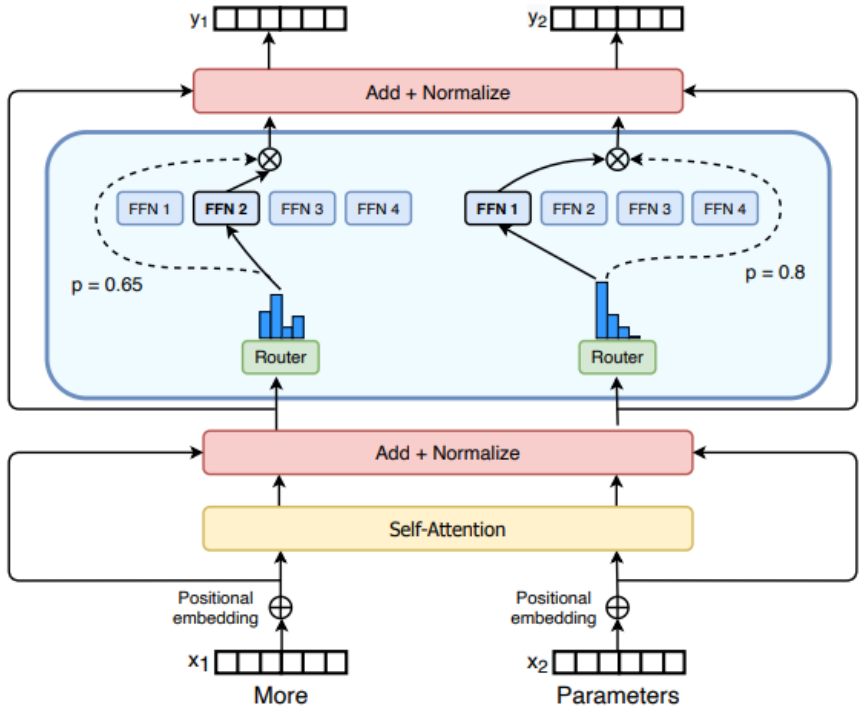
Switch TransformerとMixture of Experts Transformer

[Shazeer+, NeurIPS 2018][Lepikhin+, ICLR 2021][Fedus+, 2021]

- **Switch Transformer：1.6兆個のパラメータ**
  - と聞くと大変そうだが、FFNが複数ある（Mixture of Experts）
  - Switch Transformerでは選択的にこのFFNのうち一つを選ぶ
  - ので、全パラメータを毎回の学習や推論に使うわけではない

- **余談**
  - これらの一連の論文はGoogleによるもの
  - 特にNorm Shazeerは
    - Transformer原著の第2著者
    - これらの論文にも著者として入っている





まとめ

- **近年のTransformerの改善手法の大半が元のTransformerと比べて大差ない**
  - 複数課題での汎用性が無い、ソースコードもほとんど変わらない

One possible explanation for this is that the originally-proposed Transformer architecture was near-perfect, and there wasn't much that could be done to improve it.
（これは、当初提案されたTransformerのアーキテクチャが**完璧に近く、改良の余地があまりなかった**ことが理由として考えられます。）

  - **ありがたい格言：**新たな改善手法を考えた時は
    「複数実装をベースに使え」「CVも含む複数の課題で評価せよ」
    「ハイパーパラメータを揃えよ」「最良値じゃなく平均+分散」

それでも：効果が確認された手法

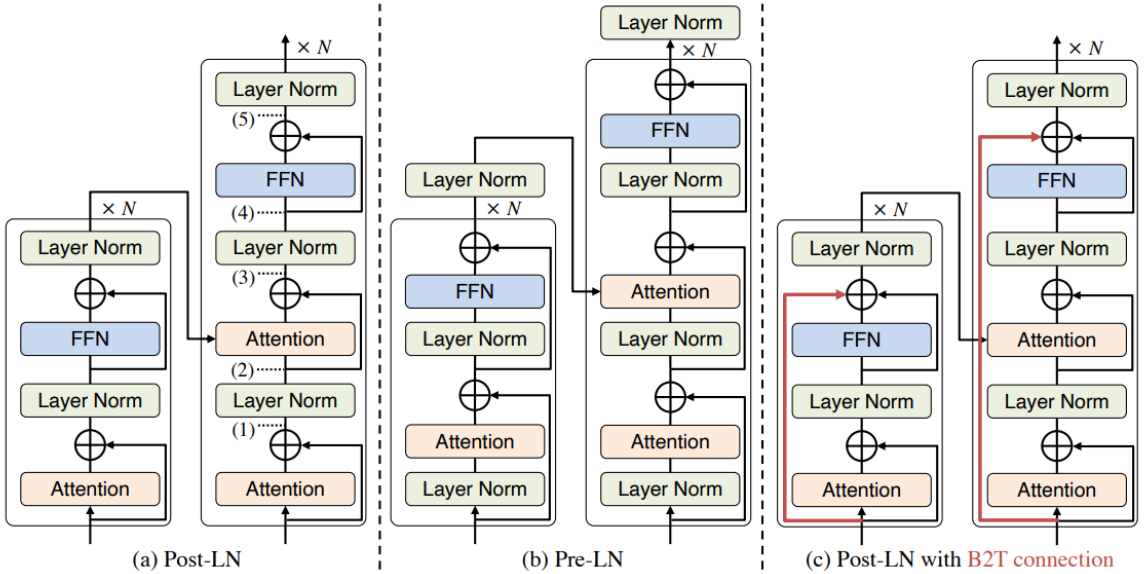
- **実は…Vanilla Transformerでも入っている工夫がある**
  - LayerNormが後 → LayerNormが先 [Baevski+Auli 2019][Xiong+, 2020]
  - 絶対値による位置埋め込み → 相対的な位置埋め込み [Raffel+, 2019]
- **活性化関数：GLUとGeLU/Swishの組合せ**
- **正規化：RMS Norm**
- **デコーダにおける入出力の分散表現の共有**
- **アーキテクチャの工夫**
  - Mixture of Experts Transformer
  - Switch Transformer
  - Product key memory
  - Synthesizer variants

その他の

Transformerのノウハウ

Layer Normalization が後か先か問題

- **Post-LN: 性能が高いが、訓練が不安定** →誤差が途中で消失してしまうのが問題
- **Pre-LN: 訓練が安定するが、性能が低い** →入力と出力が余り変わらないのが問題

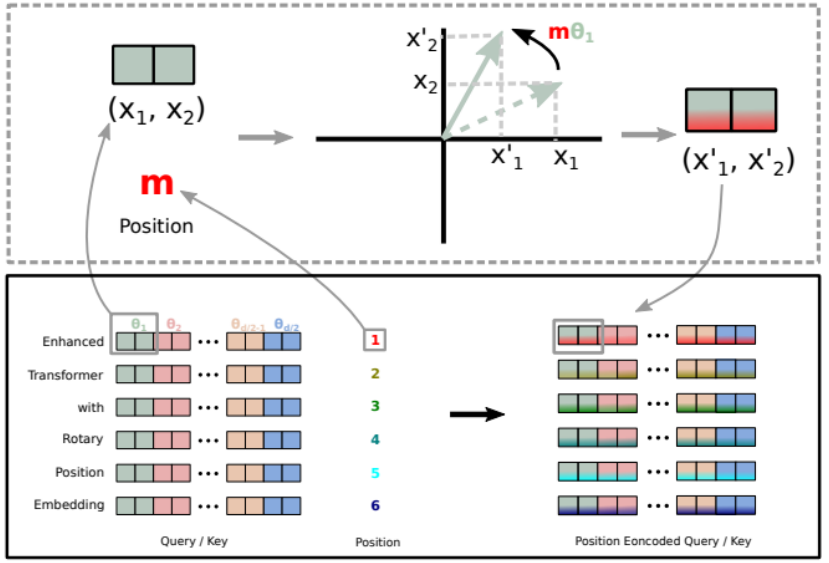


- **Bottom-to-Top (B2T) connection** [Takase+, 2022]
  - Post-LNの変換能力とPre-LNより優れた訓練安定性を両立
- **DeepNorm** [Wang+, 2022]
  - Post-LNベースで、Residual接続がそのまま（1倍）加算されるのを定数倍大きくする
  - パラメータの初期値（の一部を）定数で割って小さくする
  - 1000層のTransformerでも訓練できるようになった

Positional Encoderの改良とWarmup

Positional Encoder

- **元々は絶対位置の埋め込み**
- **相対位置による位置埋め込み** [Shaw+, NAACL'18] [Raffel+, 2019]
- **絶対位置の位置埋め込みにシフト不変性を導入** [Kiyono+, EMNLP'21]
- **RoPE (Rotary Position Embedding)** [Su+, 2021]



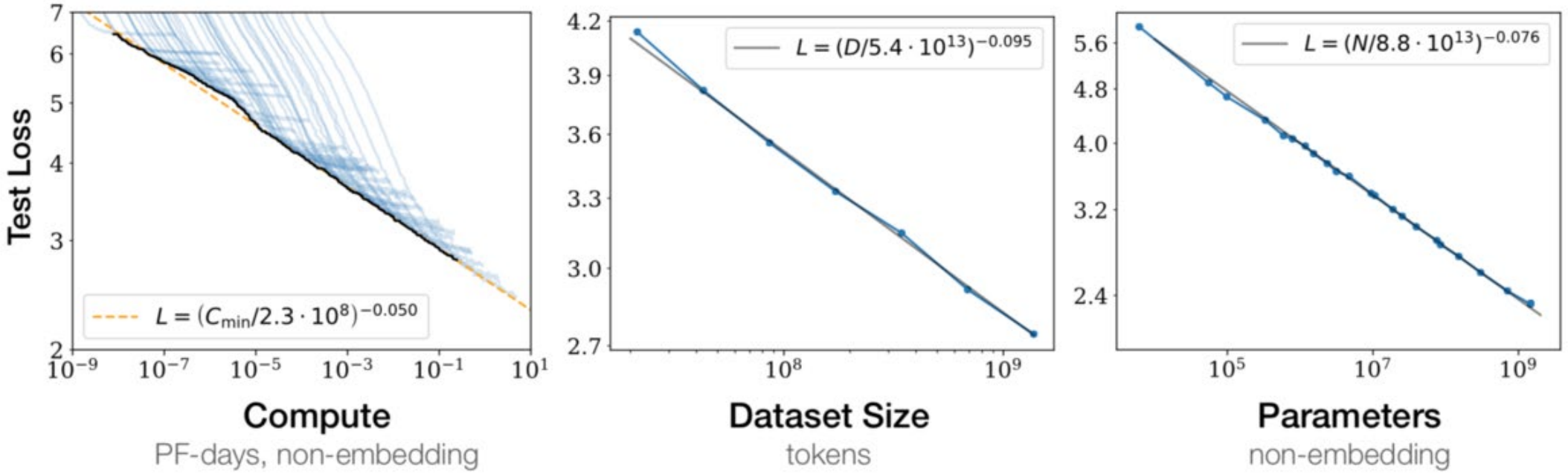
学習率のWarmup

- 最初は$step_num$　に対して線形に増加
- $step_num$が$warmup_step$と等しくなると$step_num$の平方根に逆比例して0に漸近

$$lrate = d_{\text{model}}^{-0.5} \cdot \min(step\_num^{-0.5}, step\_num \cdot warmup\_steps^{-1.5})$$

べき乗則の思い出

- **OpenAIによるGPT-3で観測された法則** [Henighan+, 2020]
- **計算予算、データセットサイズ、パラメータがt倍になると損失がat^b倍小さくなる（a, bは定数）**

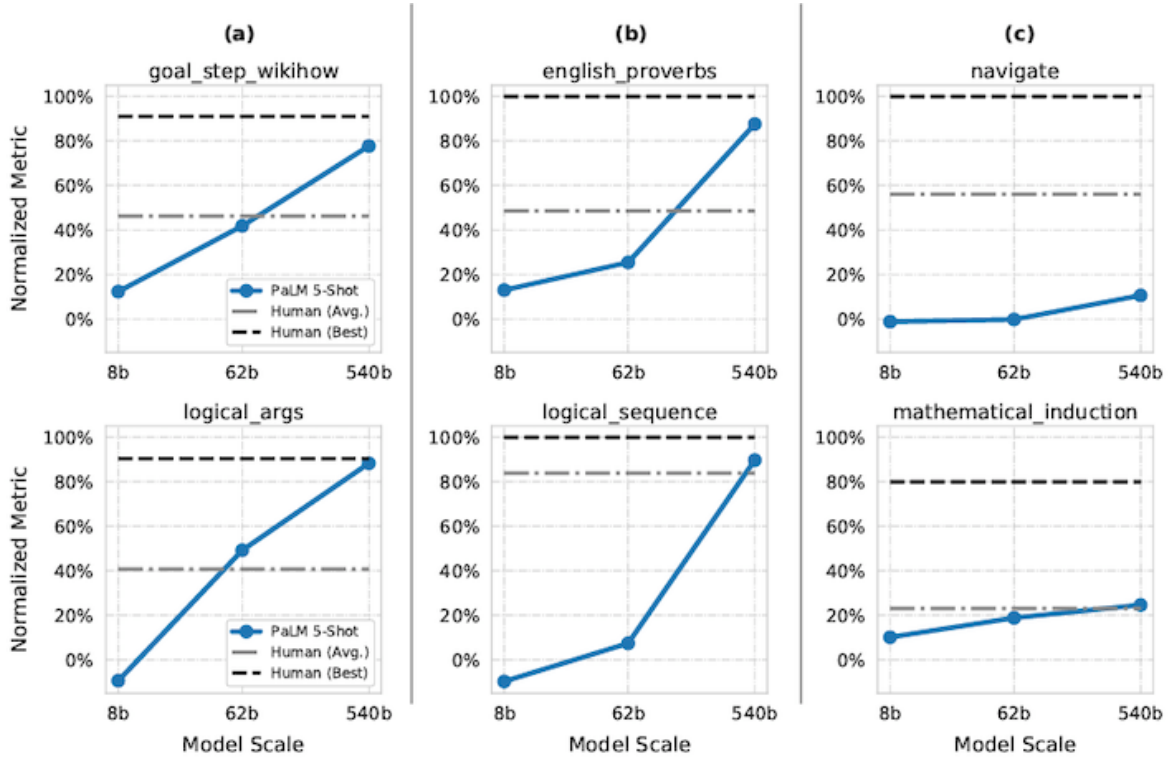


つまり…

リソースの多い奴が勝つ

べき乗則の思い出

- GoogleによるPaLMでは…
- パラメータが8B→62B→540Bと増えた時に非連続変化



つまり…

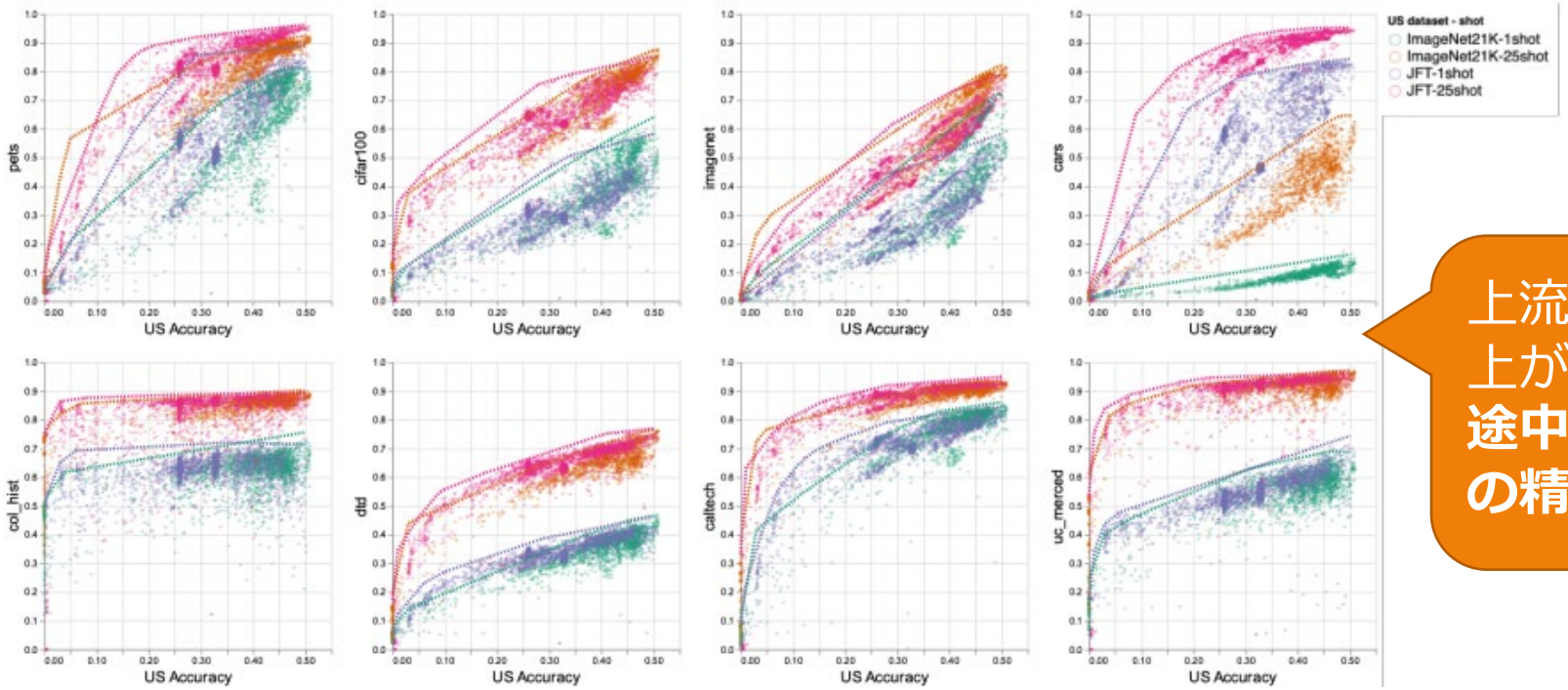
更に

リソースの多い奴が勝つ

出てくるかもしれない諦観

巨大な基盤モデルを大規模データセットで訓練して
後続タスク学習できるところが強いんだ…

- **Exploring the Limits of Large Scale Pre-training** [Abnar+, ICLR'22]
  - JFT-300Mを上流タスクとして学習した時の精度（横軸）
  - vs. 続いて下流で各タスクを学習したときの精度（縦軸）

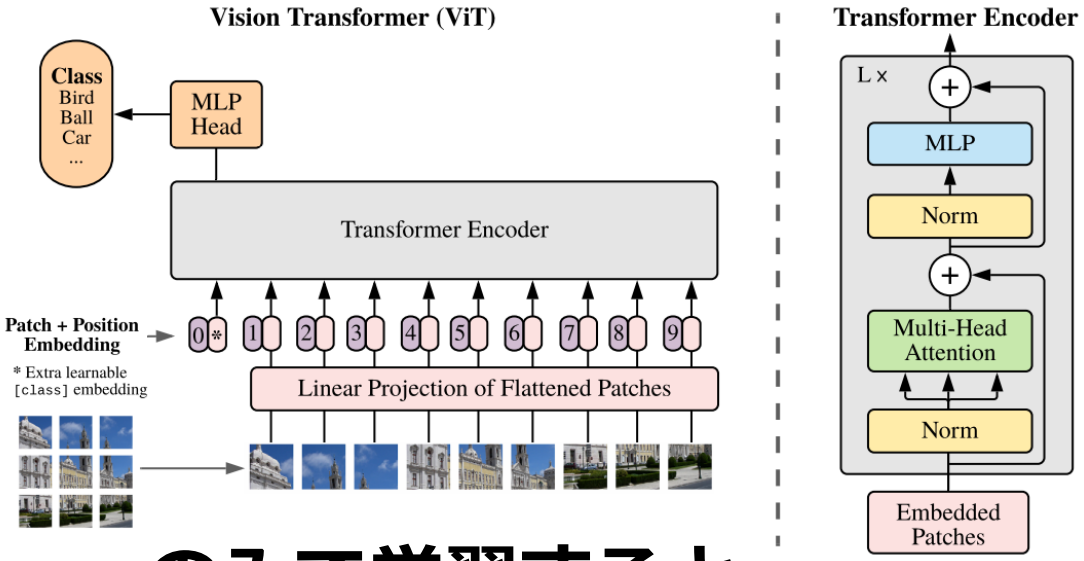


上流タスクの精度が
上がっても、
途中から下流タスク
の精度は頭打ち

CNNはオワコン？！

Vision Transformer

[Dosovitskiy+, ICLR 2021]



- **画像からTransformerのみで学習すると**
  - ResNet152層とほぼ同等の精度かつ25%程度の学習時間
  - JFT-300Mという大規模データセットが必要
  - 知識蒸留を組み合わせて、ImageNetの1000クラス画像データのみの学習でもEfficientNetを超えたDeiTも有名 [Touvron, ICML'21]
- **エンコーダのみのTransformer**
  - 実はオリジナルのTransformerよりも構造が単純で理解も容易

Vision Transformerで物体検出やセグメンテーションを行うには

[Dosovitskiy+, ICLR’21]

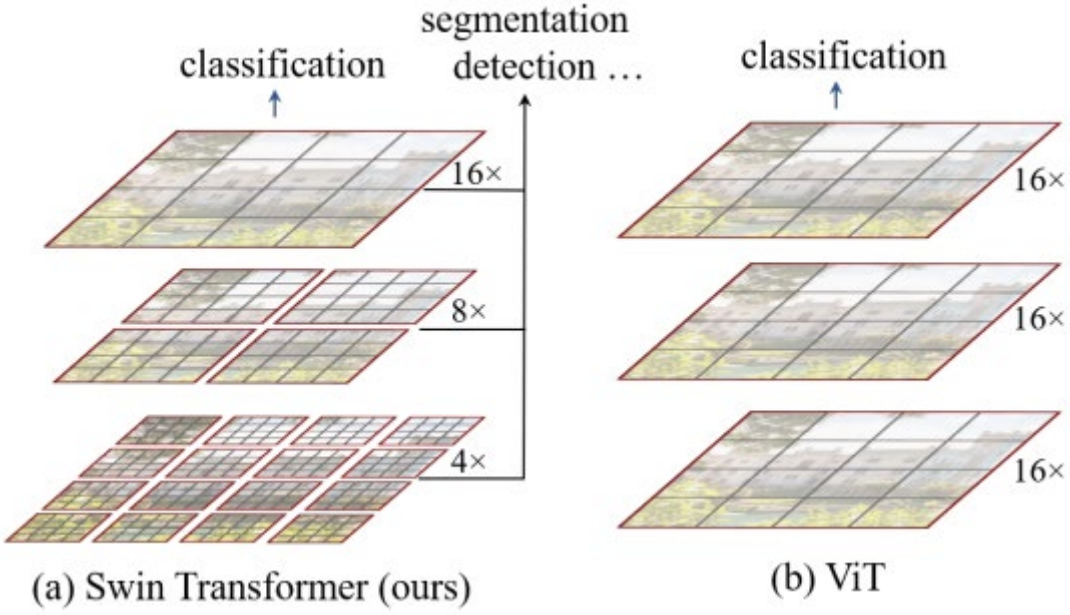
- ViTのような粗いパッチだけだと…**細かいバウンディングボックスの位置決めやセグメンテーションの精度が落ちる**
- 一方で細かいパッチを多く作ってしまうと、**アテンションの計算で時間がかかる（パッチ数の2乗オーダー）**

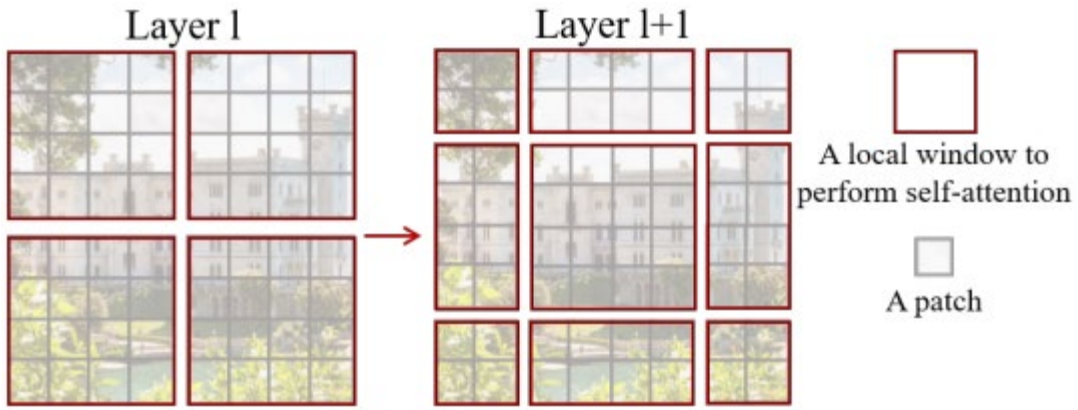
Swin Transformer

Best paper!

[Liu+, ICCV 2021]

- **CNNでおなじみのピラミッド構造を持ち込む**
  - アテンション計算を各ローカルウィンドウに限定して計算量削減
  - これらのレイヤーと少し区切りをずらしたレイヤーを交互に挟む
    →ローカルウィンドウを超えた受容野を達成





  - 物体検出で評価（セグメンテーションはSwin-Unet [Cao+, 2021]）

Swin Transformerはビジョンのタスクで SoTA

Best paper!

[Liu+, ICCV 2021]

(a) Regular ImageNet-1K trained models

method	image size	#param.	FLOPs	throughput (image / s)	ImageNet top-1 acc.
RegNetY-4G [44]	224^2	21M	4.0G	1156.7	80.0
RegNetY-8G [44]	224^2	39M	8.0G	591.6	81.7
RegNetY-16G [44]	224^2	84M	16.0G	334.7	82.9
ViT-B/16 [19]	384^2	86M	55.4G	85.9	77.9
ViT-L/16 [19]	384^2	307M	190.7G	27.3	76.5
DeiT-S [57]	224^2	22M	4.6G	940.4	79.8
DeiT-B [57]	224^2	86M	17.5G	292.3	81.8
DeiT-B [57]	384^2	86M	55.4G	85.9	83.1
Swin-T	224^2	29M	4.5G	755.2	81.3
Swin-S	224^2	50M	8.7G	436.9	83.0
Swin-B	224^2	88M	15.4G	278.1	83.5
Swin-B	384^2	88M	47.0G	84.7	84.5

識別（ImageNet）

(c) System-level Comparison

Method	mini-val AP^{box}	mini-val AP^{mask}	test-dev AP^{box}	test-dev AP^{mask}	#param.	FLOPs
RepPointsV2* [12]	-	-	52.1	-	-	-
GCNet* [7]	51.8	44.7	52.3	45.4	-	1041G
RelationNet++* [13]	-	-	52.7	-	-	-
DetectoRS* [42]	-	-	55.7	48.5	-	-
YOLOv4 P7* [4]	-	-	55.8	-	-	-
Copy-paste [23]	55.9	47.2	56.0	47.4	185M	1440G
X101-64 (HTC++)	52.3	46.0	-	-	155M	1033G
Swin-B (HTC++)	56.4	49.1	-	-	160M	1043G
Swin-L (HTC++)	57.1	49.5	57.7	50.2	284M	1470G
Swin-L (HTC++)*	**58.0**	**50.4**	**58.7**	**51.1**	284M	-

検出・分割（COCO）

・・・畳込みはオワコンなのか？

ViT vs. CNN

- **精度の比較**
  - Conv層をViT前に入れると良いよ！ [Xiao+, NeurIPS 2021]
  - Local AttentionはDepth-wise Convと同じ！ [Han+, ICLR 2022]
  - CNNも頑張るとTransformerを超えるよ！ [Liu+, CVPR 2022]
- **特徴量の比較**
  - ViTの特徴量とCNNの特徴量を色々比べた [Raghu+, NeurIPS 2021]
  - CNNはハイパスフィルタ、ViTはローパスフィルタ [Park+Kim, ICLR 2022]
- **頑健性の比較**
  - 今日のECCV論文

ViT vs. CNN

- **精度の比較**
  - Conv層をViT前に入れると良いよ！ [Xiao+, NeurIPS 2021]
  - Local AttentionはDepth-wise Convと同じ！ [Han+, ICLR 2022]
  - CNNも頑張るとTransformerを超えるよ！ [Liu+, CVPR 2022]
- **特徴量の比較**
  - ViTの特徴量とCNNの特徴量を色々比べた [Raghu+, NeurIPS 2021]
  - CNNはハイパスフィルタ、ViTはローパスフィルタ [Park+Kim, ICLR 2022]
- **頑健性の比較**
  - 今日のECCV論文

本当は
MLP vs. ViT vs. CNN
にしたかったけど
（発表時間も準備時間も）**無理**

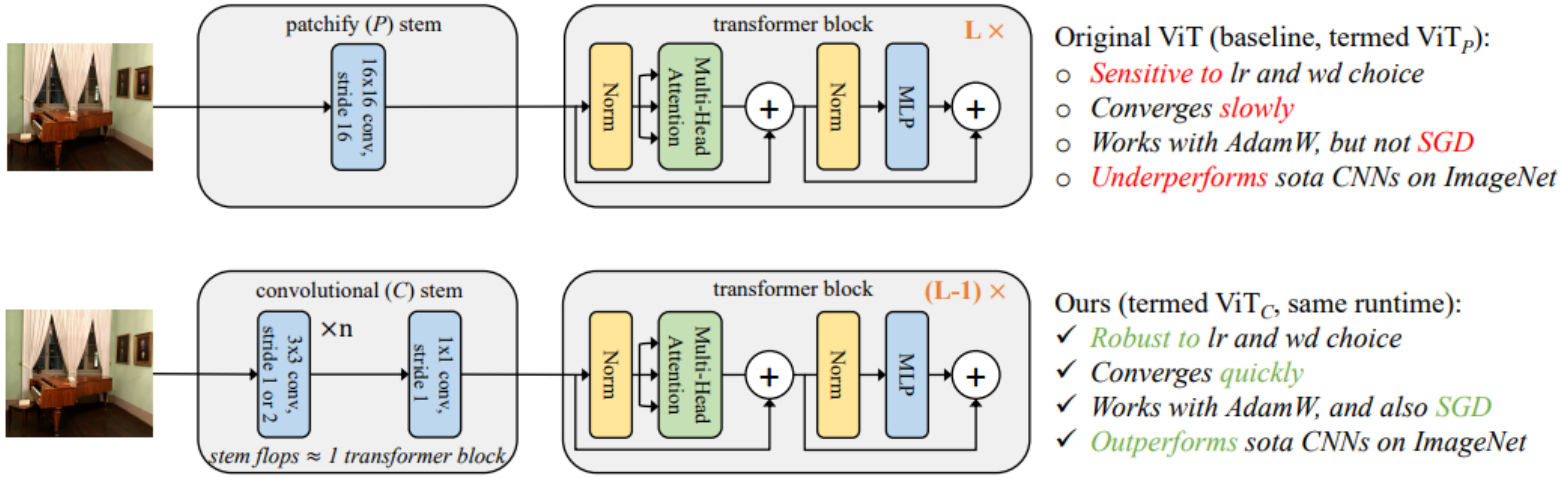
ViT vs. CNN

- **精度の比較**
  - Conv層をViT前に入れると良いよ！ [Xiao+, NeurIPS 2021]
  - Local AttentionはDepth-wise Convと同じ！ [Han+, ICLR 2022]
  - CNNも頑張るとTransformerを超えるよ！ [Liu+, CVPR 2022]
- **特徴量の比較**
  - ViTの特徴量とCNNの特徴量を色々比べた [Raghu+, NeurIPS 2021]
  - CNNはハイパスフィルタ、ViTはローパスフィルタ [Park+Kim, ICLR 2022]
- **頑健性の比較**
  - 今日のECCV論文

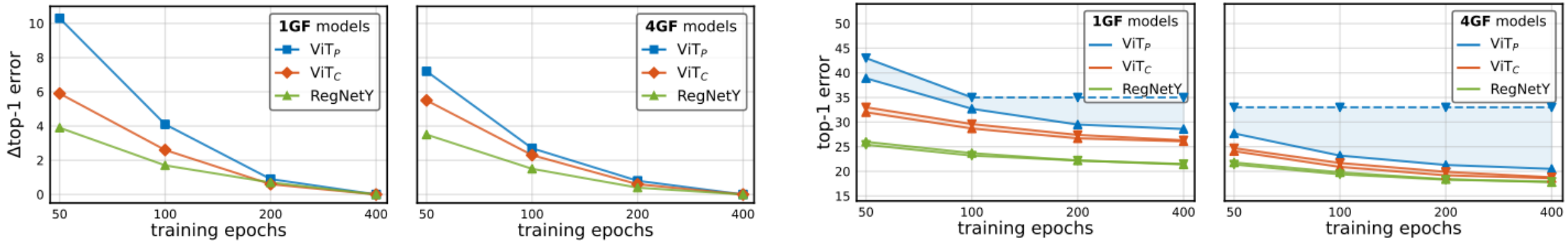
Transformer に conv 層

[Xiao+, NeurIPS 2021]

- pretrained CNN＋Transformerという良くある話**ではない**

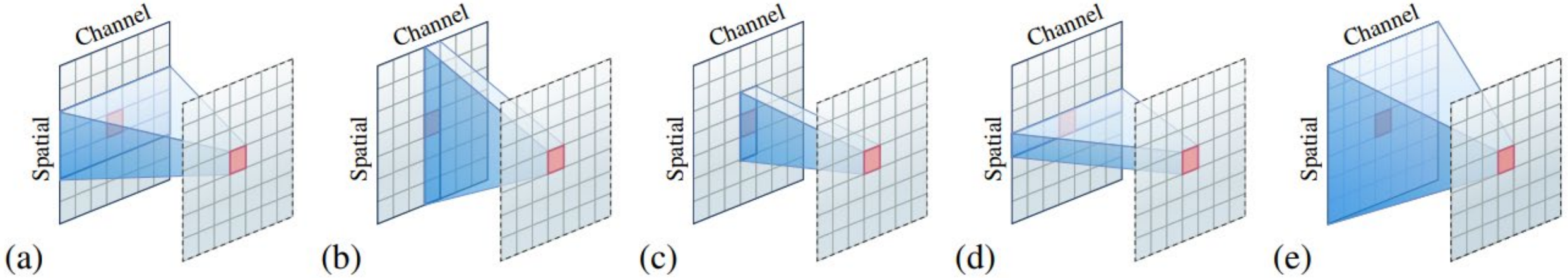


- Conv 層を先に入れると**収束早い**（左）＋**安定性増す**（右）



Local AttentionとDepth-wise Convの関係性

- **AttentionとConvの図解**
  - 縦方向が空間次元、横方向がチャネル次元
  - 普通の縦×横の画像ではないので要注意



普通のConv

普通のAttention
=Global Attention
または
MLP-Mixer

Local Attention
(Swin-Tのやつ)
または
Depth-wise Conv

1x1 Conv

全結合MLP

動的な重みのDepth-wise Conv

- **Local AttentionとDepth-wise Convの唯一の違い**
  ＝重み（パラメータ）が動的か静的か
- **実験結果（の一部）**
  - Swin TransformerのAttentionをDepth-wise ConvにしたDWNet
  - Depth-wise Convを動的にした2種のdynamic DWNet

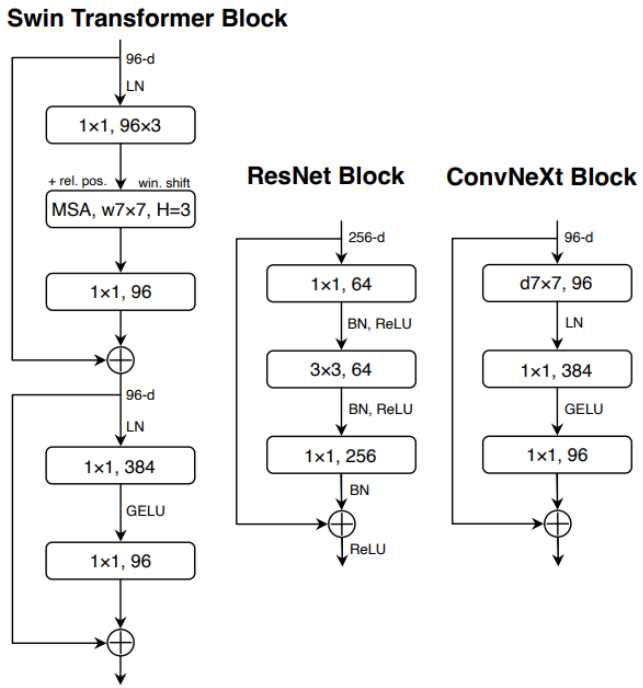
	COCO Object Detection						ADE20K Semantic Segmentation		
	#param.	FLOPs	AP^{box}	AP^{box}_{50}	AP^{box}_{75}	AP^{mask}	#param.	FLOPs	mIoU
Swin-T	86M	747G	50.5	69.3	54.9	43.7	60M	947G	44.5
DWNet-T	82M	730G	49.9	68.6	54.3	43.4	56M	928G	45.5
dynamic DWNet-T	108M	730G	50.5	69.5	54.6	43.7	83M	928G	45.7
i-dynamic DWNet-T	84M	741G	50.8	69.5	55.3	44.0	58M	939G	46.2
Swin-B	145M	986G	51.9	70.9	56.5	45.0	121M	1192G	48.1
DWNet-B	132M	924G	51.1	69.6	55.4	44.2	108M	1129G	48.3
dynamic DWNet-B	219M	924G	51.2	70.0	55.4	44.4	195M	1129G	48.0
i-dynamic DWNet-B	137M	948G	51.8	70.3	56.1	44.8	114M	1153G	47.8

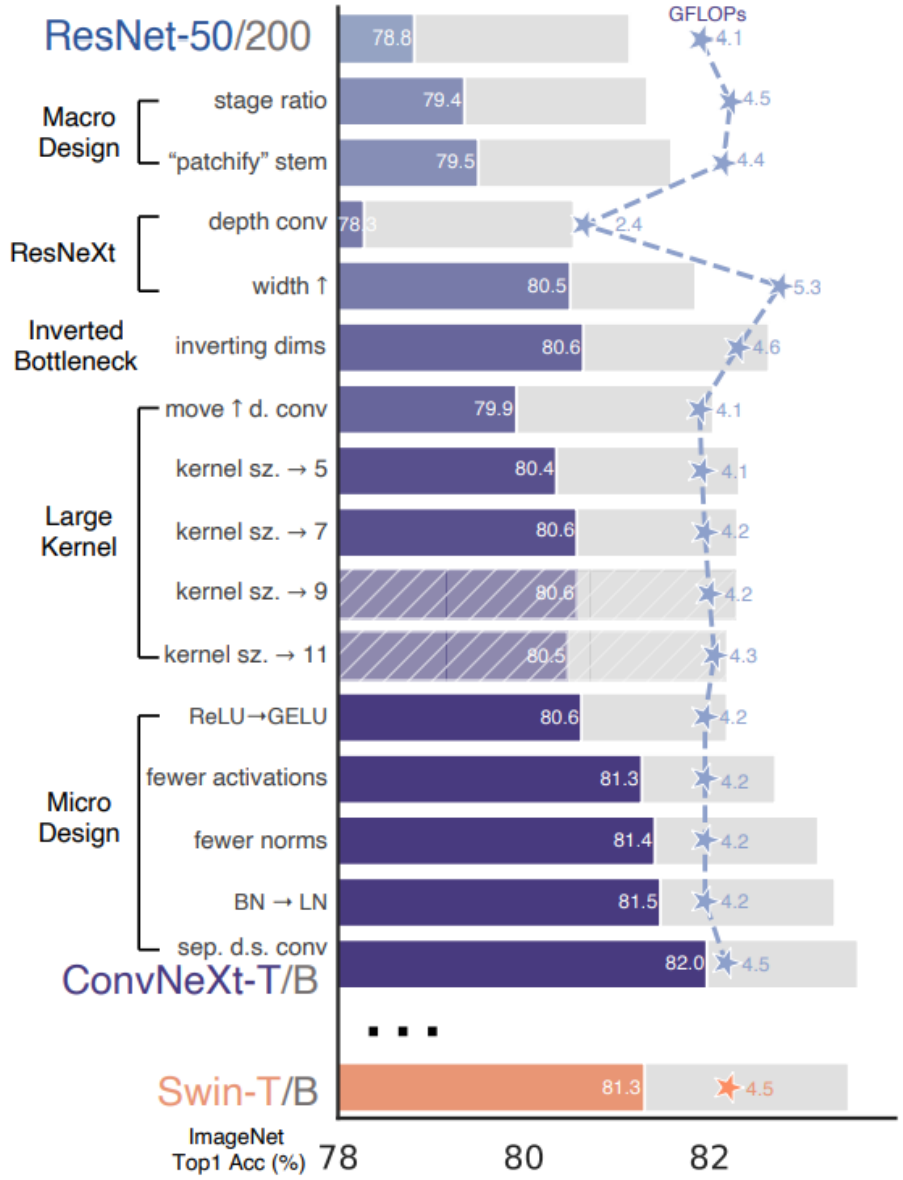
CNNとViTで精度がほぼ一緒になった！

2020年代のConvNet = ConvNeXt

[Liu+, CVPR 2022]

- **ResNetを拡張したConvNeXt**
  - モダンな
  - – データ拡張
  - – **Depth-wise conv**
  - – 活性化関数
  - – 正規化
  - etc.





- **Swin-Transformerを超えるよ！**

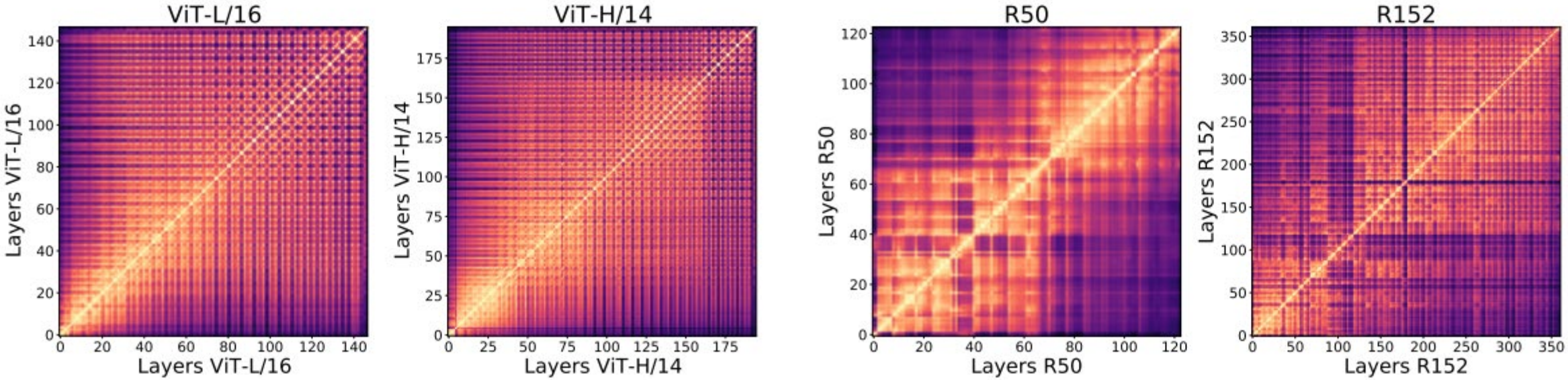
ViT vs. CNN

- **精度の比較**
  - Conv層をViT前に入れると良いよ！ [Xiao+, NeurIPS 2021]
  - Local AttentionはDepth-wise Convと同じ！ [Han+, ICLR 2022]
  - CNNも頑張るとTransformerを超えるよ！ [Liu+, CVPR 2022]
- **特徴量の比較**
  - ViTの特徴量とCNNの特徴量を色々比べた [Raghu+, NeurIPS 2021]
  - CNNはハイパスフィルタ、ViTはローパスフィルタ [Park+Kim, ICLR 2022]
- **頑健性の比較**
  - 今日のECCV論文

特徴量の比較

[Raghu+, NeurIPS 2021]

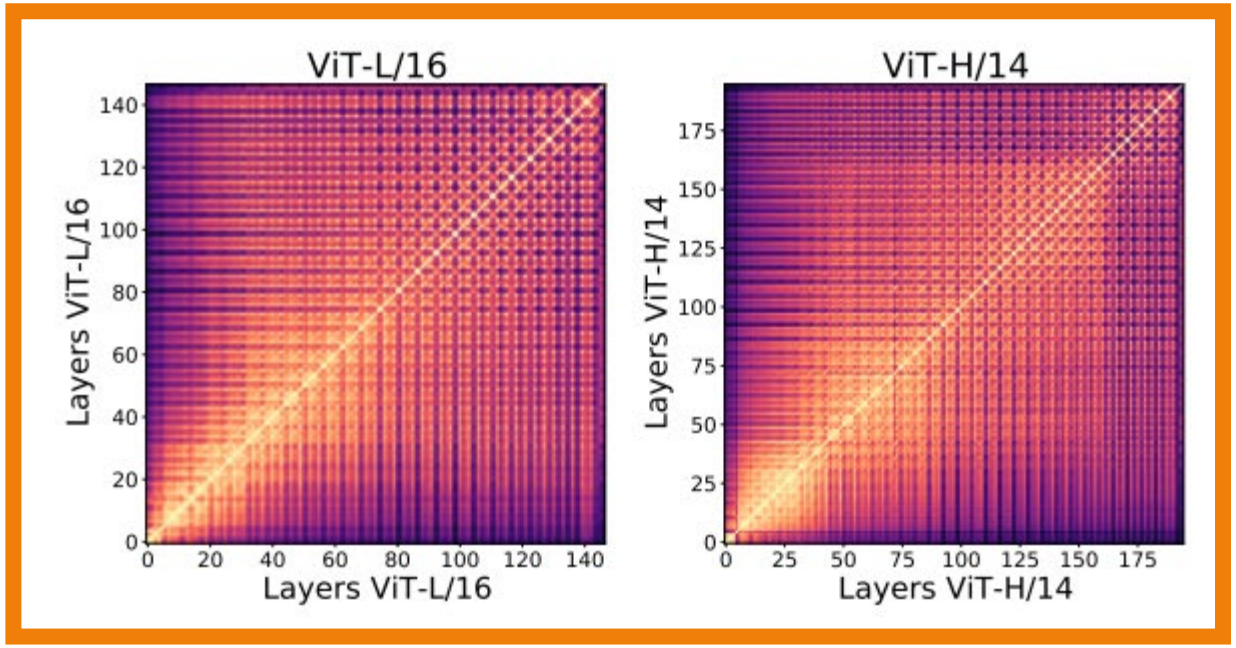
- **ViTとCNN (ResNet) の途中の層の特徴量の類似度比較**

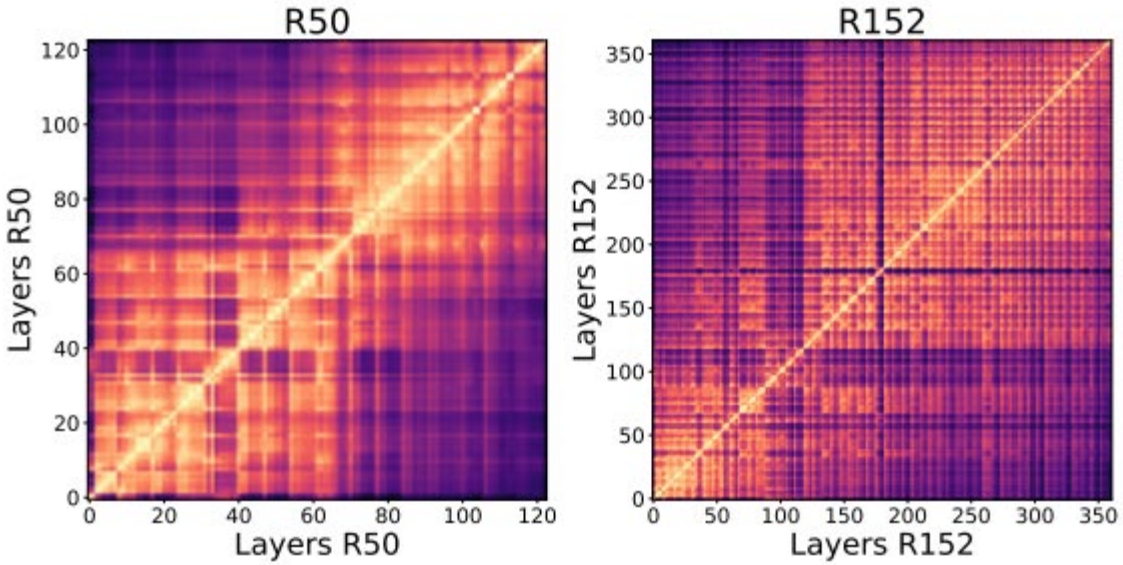


特徴量の比較

[Raghu+, NeurIPS 2021]

- **ViTとCNN (ResNet) の途中の特徴量の類似度比較**



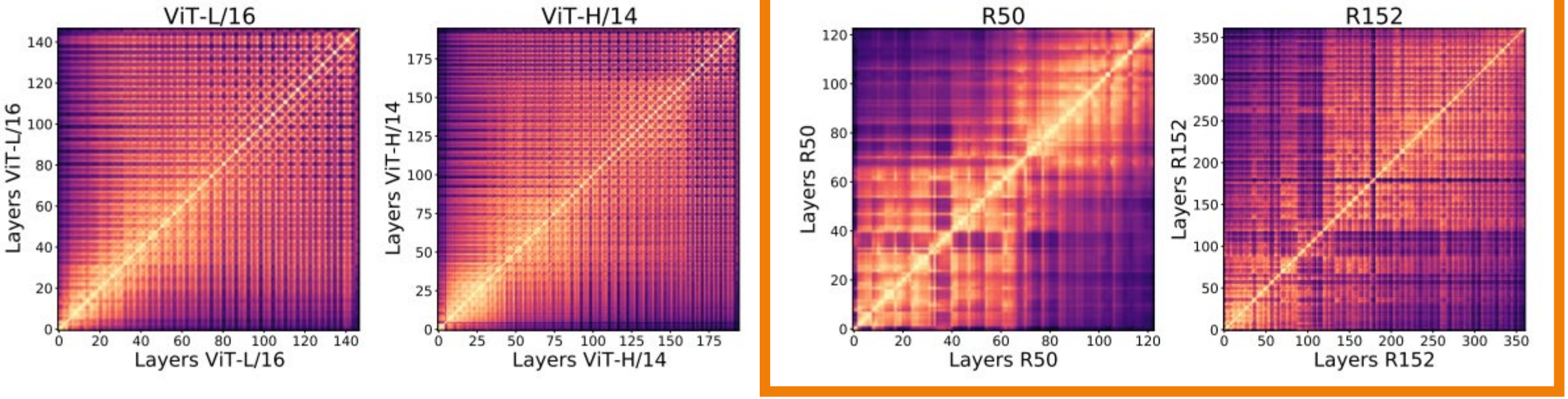


ViTは最初の方の層と最後の方の層でも
特徴量が似ている

特徴量の比較

[Raghu+, NeurIPS 2021]

- **ViTとCNN (ResNet) の途中の特徴量の類似度比較**

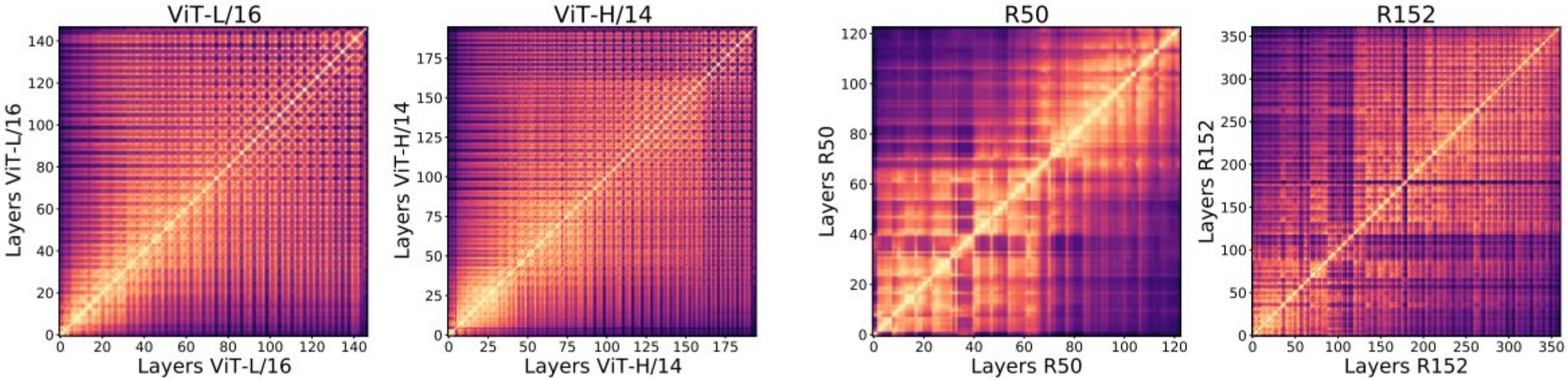


CNNは最初の方の層と最後の方の層で
特徴が異なってくる様子が見られる

特徴量の比較

[Raghu+, NeurIPS 2021]

- **ViTとCNN (ResNet) の途中の特徴量の類似度比較**

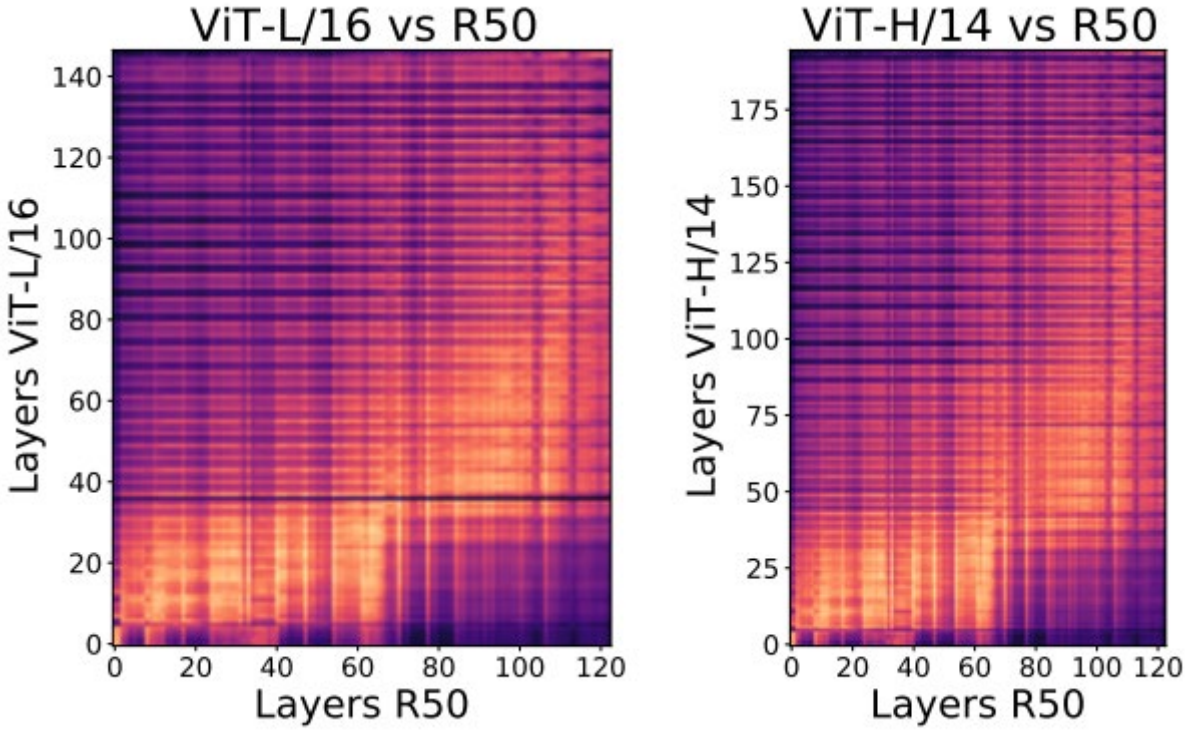


- **CNNは局所→大域な特徴量を学習**
- **ViTは最初から大域的な特徴量を学習**

特徴量の比較

[Raghu+, NeurIPS 2021]

- **ViTとCNN (ResNet) の途中の層同士の類似度を直接比較**



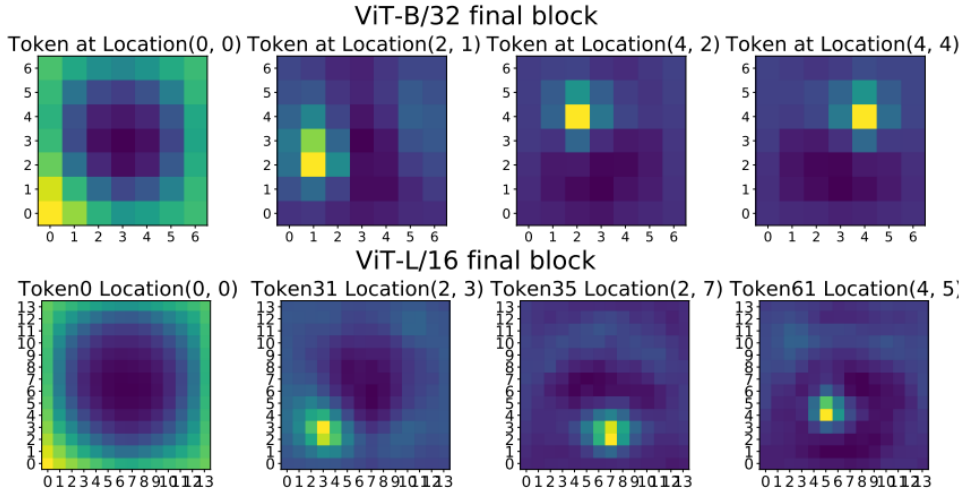
- **ViTの最後の方の層はCNNと異なる特徴量になっている**

特徴量の比較

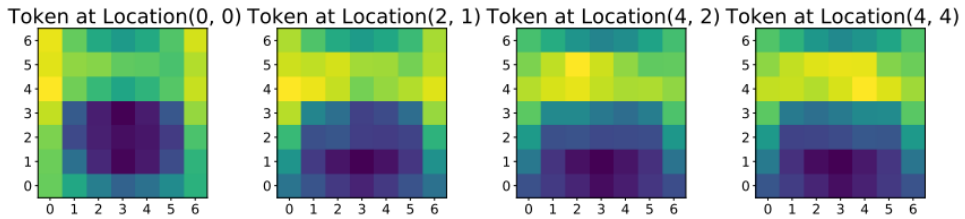
[Raghu+, NeurIPS 2021]

- **最終層の各位置の特徴量の類似度比較**

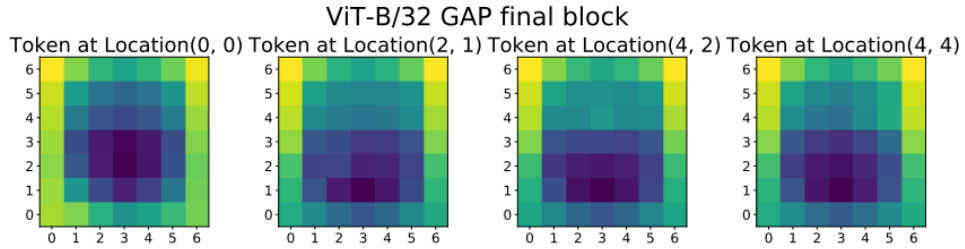
ViTは位置ごとに
ユニークな特徴量を学習



CNNは比較的広範囲で
特徴量が類似



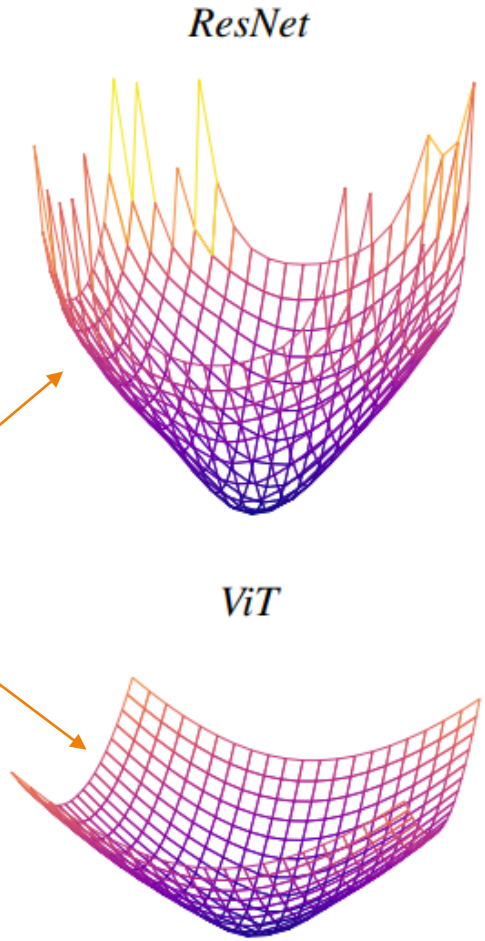
**ViTでもCLSトークンを消し
Global Average Poolingを
入れると特徴量が類似する**

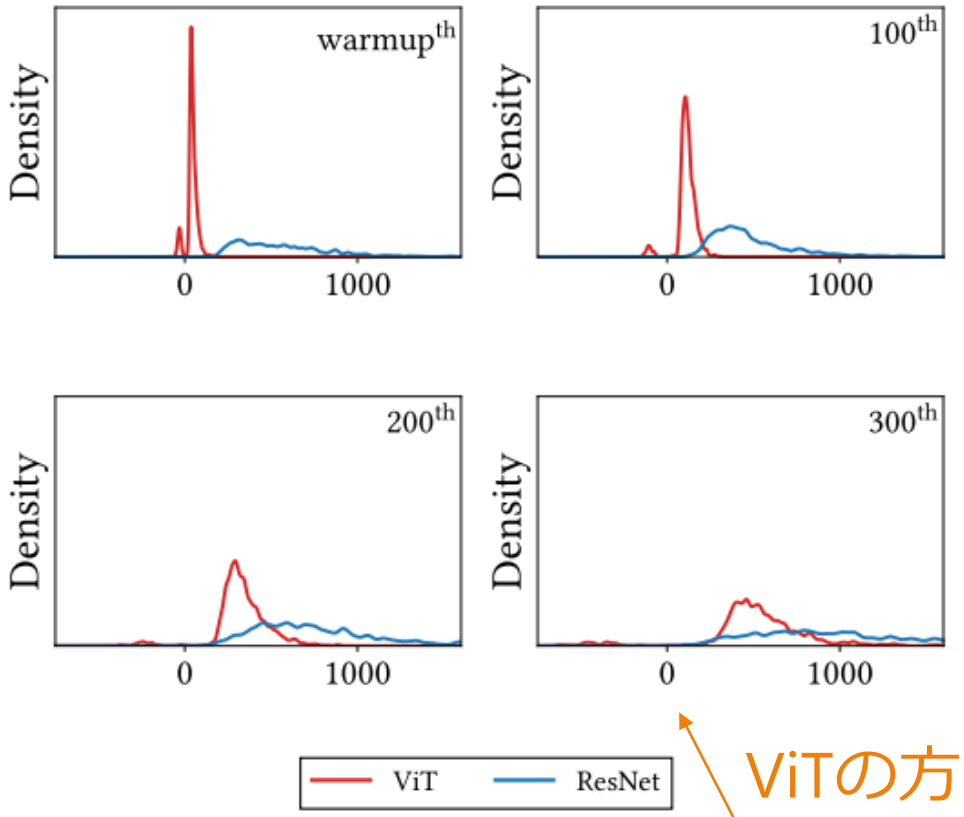


ViTは損失関数を平坦にするので汎化性も良い

[Park+Kim, ICLR 2022]

CNNとViTでの
損失関数の様子



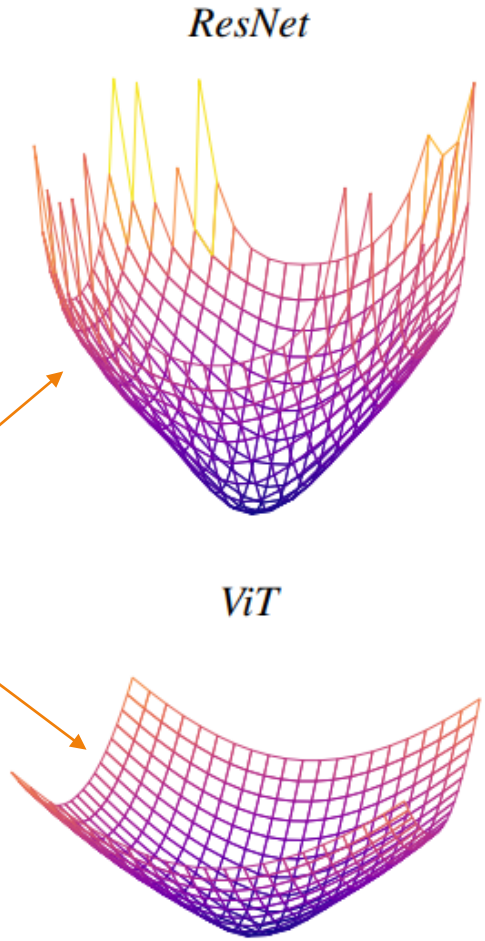


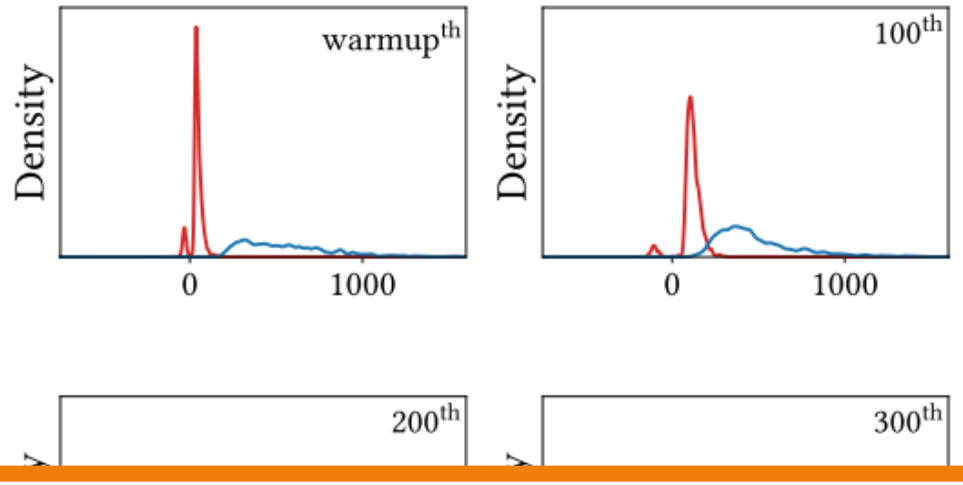
ViTの方が
損失関数のヘシアンの
固有値が小さい
＝より平坦

ViTは損失関数を平坦にするので汎化性も良い

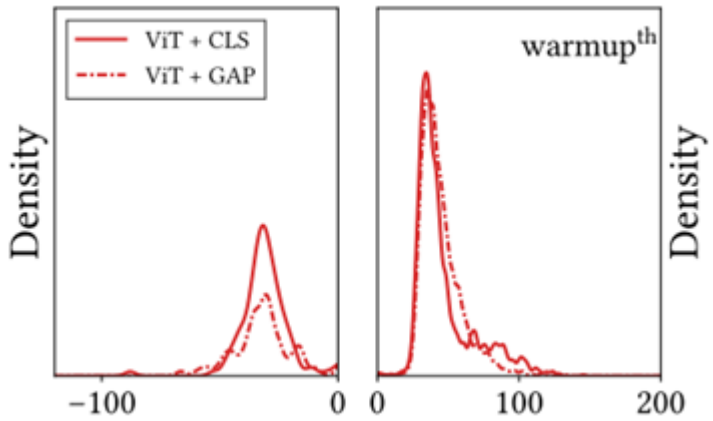
[Park+Kim, ICLR 2022]

CNNとViTでの
損失関数の様子





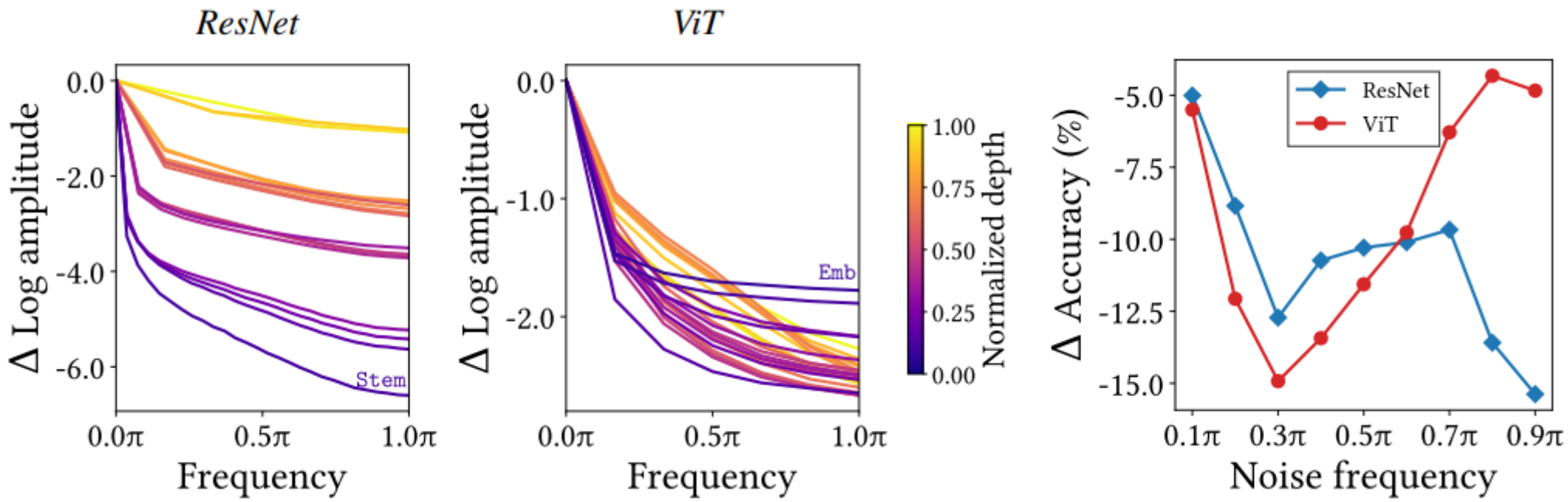
CLSトークンを廃止してGAPにするとより平坦に



ViTでは元々はCLS
Swin-TではGAP

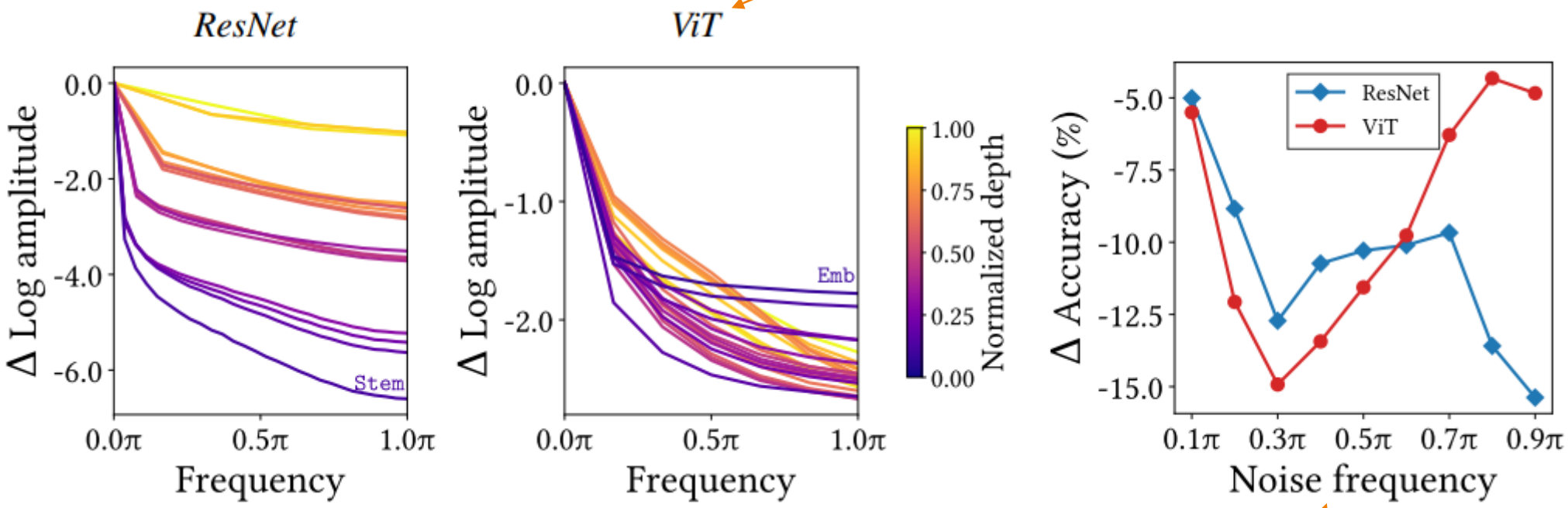
Convはハイパスフィルタ、ViTはローパスフィルタ

[Park+Kim, ICLR 2022]



Convはハイパスフィルタ、ViTはローパスフィルタ

[Park+Kim, ICLR 2022]

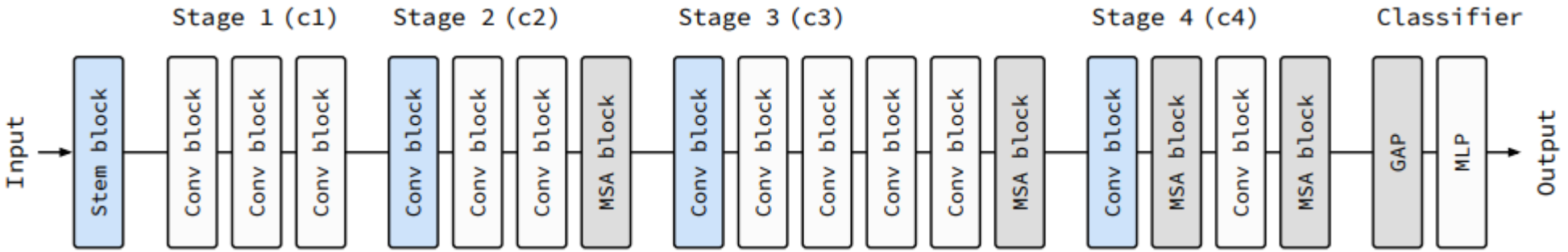


ResNetは高周波ノイズに弱いが、ViTはそれらに頑健

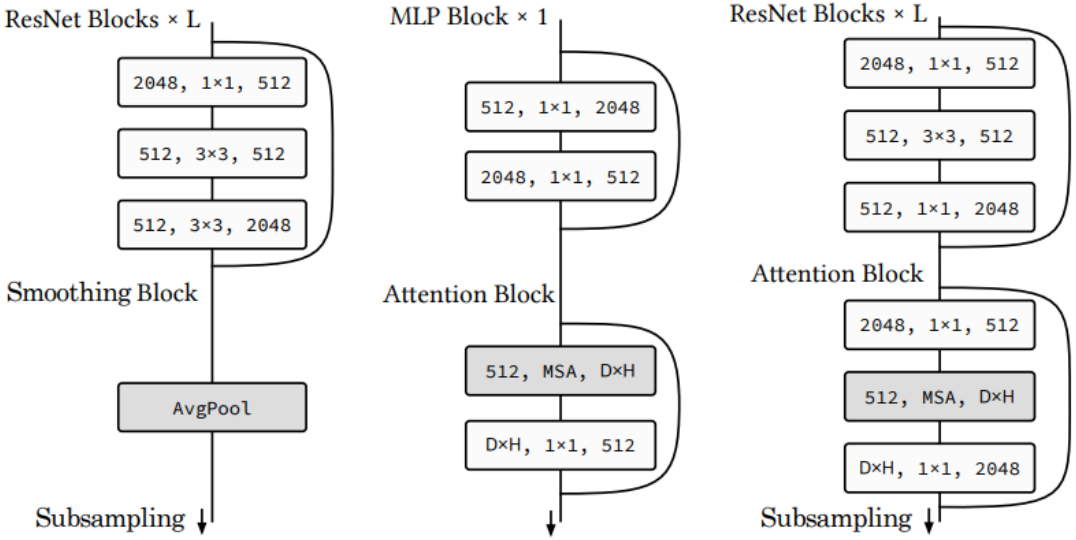
ResNetにアテンションブロックを入れるAlterNet

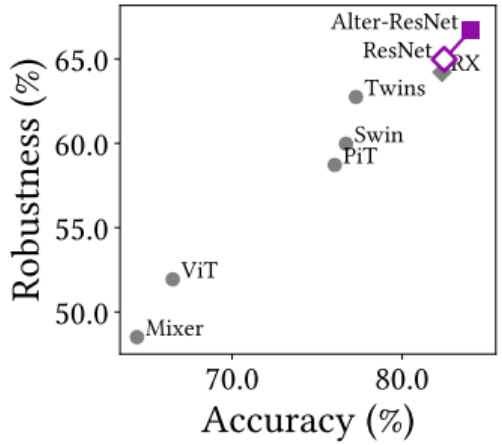
[Park+Kim, ICLR 2022]

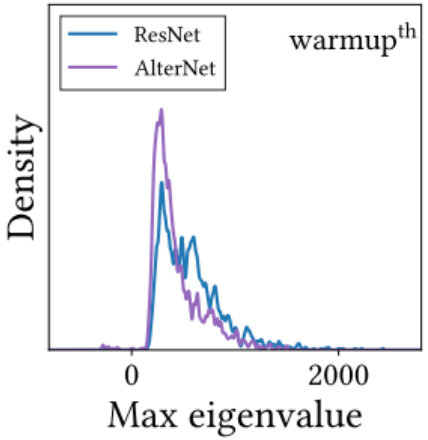
- ResNet-50に複数回のアテンションを導入



- 他はResNetと同様（左）だがCIFAR-100で効果あり（右）







ViT vs. CNN

- **精度の比較**
  - Conv層をViT前に入れると良いよ！ [Xiao+, NeurIPS 2021]
  - Local AttentionはDepth-wise Convと同じ！ [Han+, ICLR 2022]
  - CNNも頑張るとTransformerを超えるよ！ [Liu+, CVPR 2022]
- **特徴量の比較**
  - ViTの特徴量とCNNの特徴量を色々比べた [Raghu+, NeurIPS 2021]
  - CNNはハイパスフィルタ、ViTはローパスフィルタ [Park+Kim, ICLR 2022]
- **頑健性の比較**
  - 今日のECCV論文

某 機械学習の学習におすすめのTwitterアカウントより

@goto_yuta_

投稿日 2022年07月11日　更新日 2022年07月12日

【厳選】機械学習の学習におすすめのTwitterアカウント40選

Python, 機械学習

結局どっちが頑健なのか

標準：@mi141より
太字：追加
橙色：ECCVの論文

- TransformerはCNNよりも入力に対する摂動にロバストだよ
  2021年3月→[Bhojanapalli+, ICCV 2021]
- **TransformerはCNNよりも敵対的な摂動にロバストだよ**
  2021年4月→[Mahmood+, ICCV 2021]
- **TransformerはCNNよりも自然な摂動にロバストだよ**
  2021年5月→[Paul+Chen, AAAI 2022]
- **TransformerとMLPはCNNよりも敵対的摂動にロバストだよ**
  2021年10月→[Benz+, BMVC 2021]
- 分布外データには強いけど、敵対的摂動には大して変わらんよ
  2021年11月→[Bai+, NeurIPS 2021]
- **パッチの摂動が自然ならViTの方が、敵対的ならCNNの方がロバストだよ**
  2021年11月→[Gu+, ECCV 2022]
- **パッチの敵対的な摂動だとCNNの方がViTよりもロバストになるよ**
  2022年3月→[Fu+, ICLR 2022]
- 分布外データに対しても変わらんよ
  2022年7月→[Pinto+, ECCV 2022]

ViTの方がCNNよりロバストって言うけれど

[Bai+, NeurIPS 2021]

- **摂動する大きさを少し大きくしたら両方ともダメになる**
  - ImageNetの検証データ上での比較

	Clean	Perturbation Radius	
		0.001	4/255
ResNet-50	76.9	17.8	0.0
DeiT-S	76.8	22.1	0.0

ViTの方がCNNよりロバストって言うけれど

[Bai+, NeurIPS 2021]

- 敵対的なサンプルを学習するとCNNがダメになる
- ように見えるけど...

	Activation	Clean Acc	PGD-5	PGD-10	PGD-50	PGD-100	AutoAttack
ResNet-50	ReLU	66.77	38.70	34.19	32.47	32.26	26.41
DeiT-S	GELU	66.50	43.95	41.03	40.34	40.32	35.50

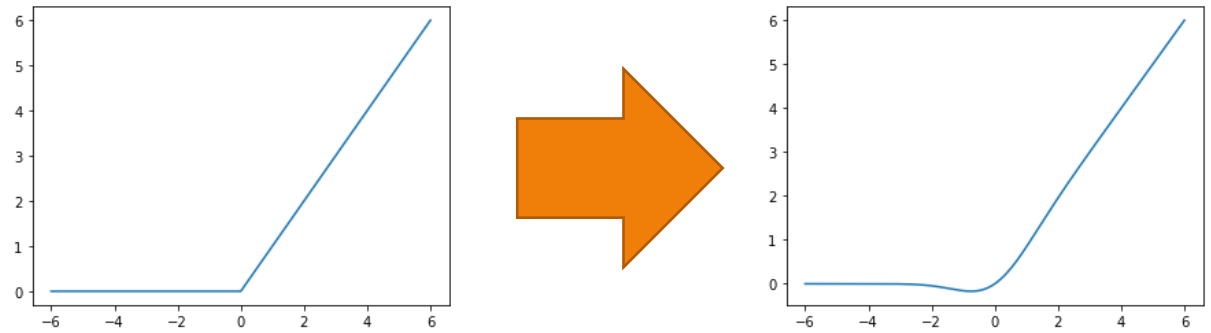
ViTの方がCNNよりロバストって言うけれど

[Bai+, NeurIPS 2021]

- 敵対的なサンプルを学習するとCNNがダメになる
- ように見えるけど…

	Activation	Clean Acc	PGD-5	PGD-10	PGD-50	PGD-100	AutoAttack
ResNet-50	ReLU	66.77	38.70	34.19	32.47	32.26	26.41
	GELU	67.38	44.01	40.98	40.28	40.27	35.51
DeiT-S	GELU	66.50	43.95	41.03	40.34	40.32	35.50

- 活性化関数をReLU→GELUにしたらCNNでもロバストだった



ViTの方がCNNよりロバストって言うけれど

[Bai+, NeurIPS 2021]

- **PatchAttack:** パッチのテクスチャを強化学習によって摂動
  [Yang+, ECCV 2020]

Architecture	Clean Acc	Texture Patch Attack
ResNet-50	76.9	19.7
DeiT-S	76.8	**47.7**

- **おっ、ViTの方がロバストか…？**

ViTの方がCNNよりロバストって言うけれど

[Bai+, NeurIPS 2021]

- **PatchAttack:** パッチのテクスチャを強化学習によって摂動
  [Yang+, ECCV 2020]

Architecture	Clean Acc	Texture Patch Attack
ResNet-50	76.9	19.7
DeiT-S	76.8	**47.7**

- **おっ、ViTの方がロバストか…？**

Augmentations			Clean Acc	Texture Patch Attack
RandAug	MixUp	CutMix		
✗	✗	✗	76.9	19.7
✓	✗	✗	77.5	24.3 (+4.6)
✗	✓	✗	75.9	31.5 (+11.8)
✗	✗	✓	77.2	49.1 (+29.4)
✓	✓	✗	75.7	31.7 (+12.0)
✓	✗	✓	76.7	**52.4 (+32.7)**
✗	✓	✓	77.1	39.8 (+20.1)
✓	✓	✓	76.4	48.6 (+28.9)

- **データ拡張手法をViTに合わせたらCNNもロバストだった**

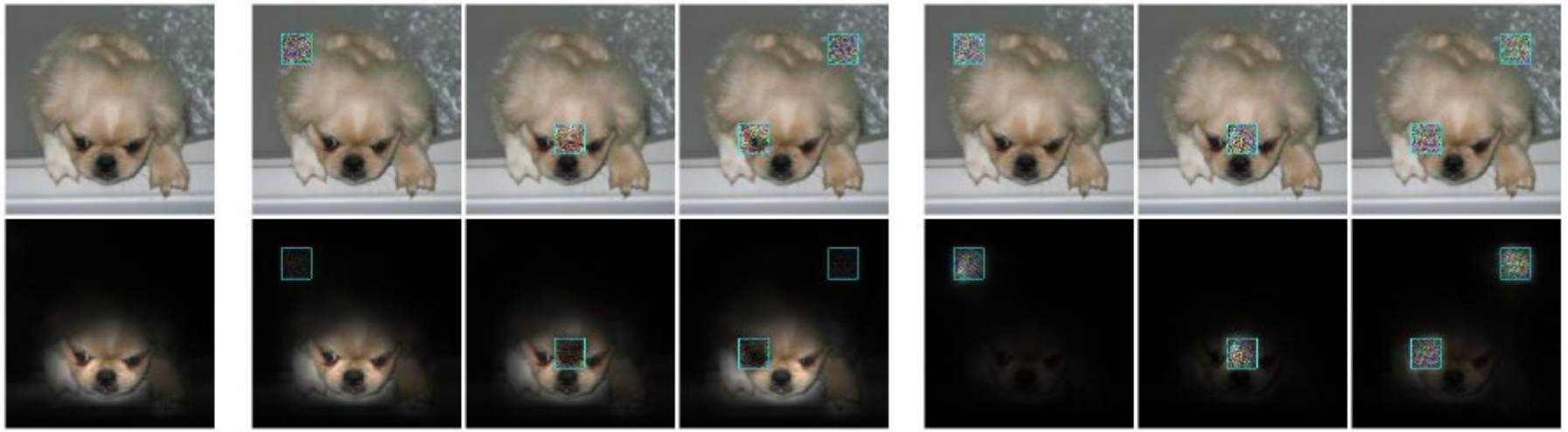
パッチによる摂動に注目してみよう

[Gu+, ECCV 2022]

- **Naturally Corrupted Patch**
  - ViTの方がCNNよりも頑健だった
- **Adversarial Patch**
  - ViTの方がCNNよりも脆弱だった

CNN

ViT



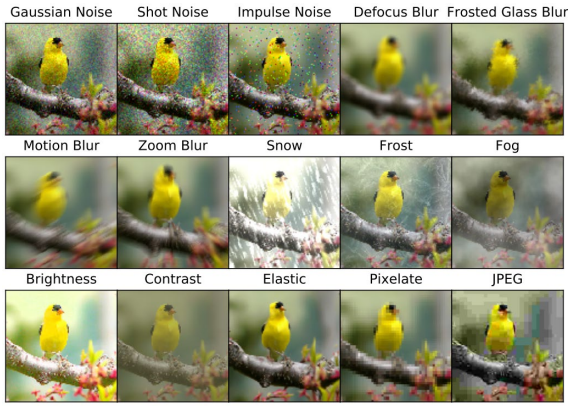
(a) Clean Image (b) with Naturally Corrupted Patch (c) with Adversarial Patch

両方ともアテンション機構に起因しているっぽい

パッチによる摂動に注目してみよう

[Gu+, ECCV 2022]

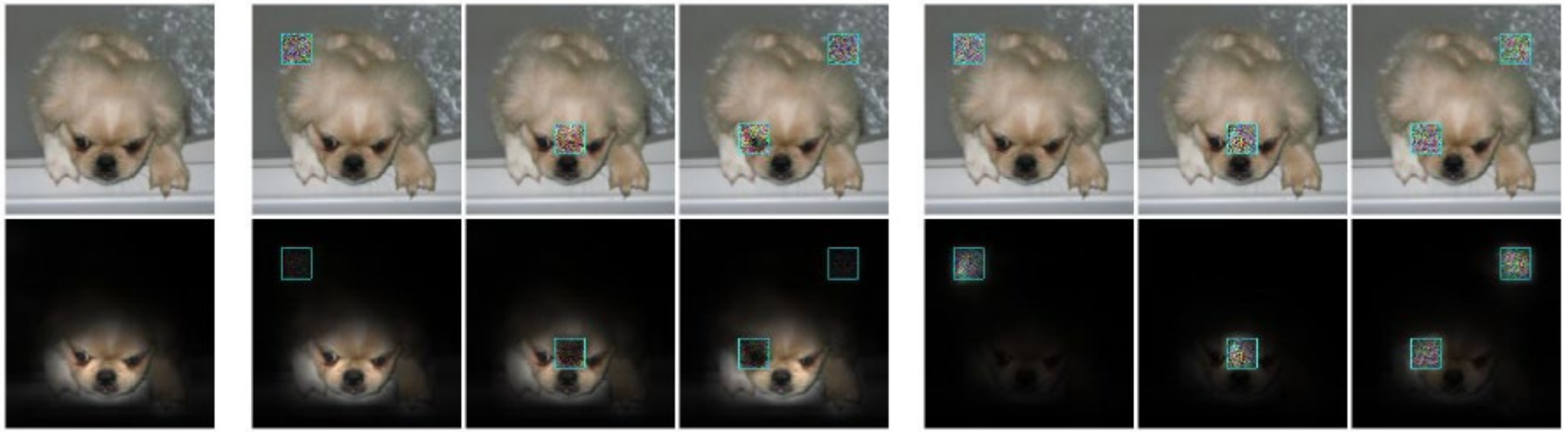
- **Naturally Corrupted Patch**
  - ViTの方がCNNよりも頑健だった
- **Adversarial Patch**
  - ViTの方がCNNよりも脆弱だった



自然な崩壊パッチ？
ノイズやブラーなど
[Hendrycks+Dietterich, ICLR 2019]

CNN

ViT



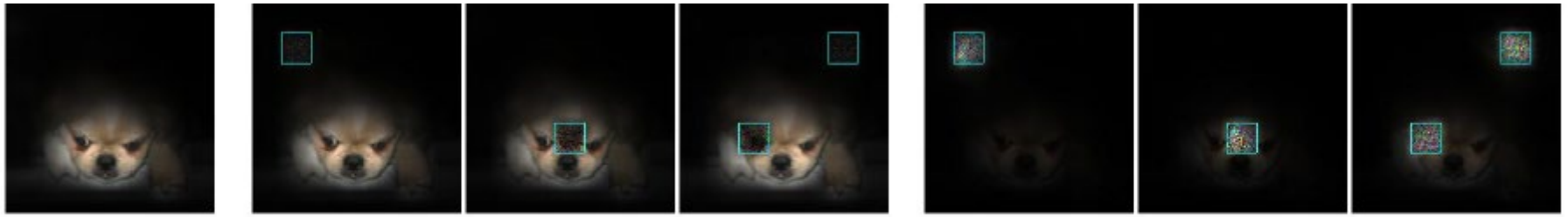
(a) Clean Image (b) with Naturally Corrupted Patch (c) with Adversarial Patch

両方ともアテンション機構に起因しているっぽい

守る方法はあるか

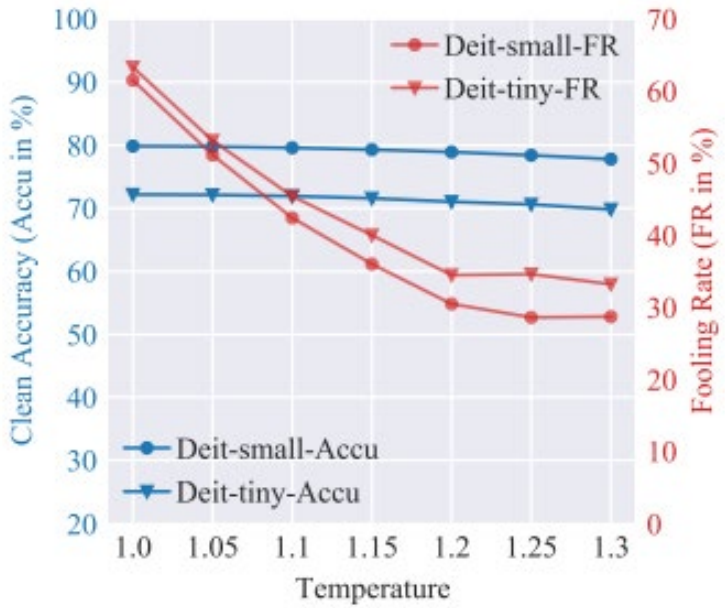
[Gu+, ECCV 2022]

- **ViTは敵対的なパッチにアテンションが集中しがち**



(a) Clean Image (b) with Naturally Corrupted Patch (c) with Adversarial Patch

- **であれば、softmaxに温度パラメータを入れてアテンションを分散させよう（単純）**
  - 温度を上げても正答率はあまり変わらない
  - Fooling Rateは抑制できる



ちゃんと比較しよう

[Pinto+, ECCV 2022]

- **学習モデル**
  - BiT [Kolesnikov+, ECCV 2020]
    - 要するにResNet、いろいろなデータにfine-tuningしやすい工夫入り
    - ViTと紛らわしいのはどうにかならないだろうか
  - ConvNeXt [Liu+, CVPR 2022]
    - 先程紹介した、2020年代のCNN
  - ViT [Dosovitskiy+, ICLR 2021]
  - Swin Transformer [Liu+, ICCV 2021]
- **学習データと学習方法も統一**
  - 要するに [Bai+, NeurIPS 2021] を最強のViTとCNNで比較したもの
- **バイアスの影響、分布外検出、キャリブレーション、誤識別検出を評価**

ちゃんと比較した結果

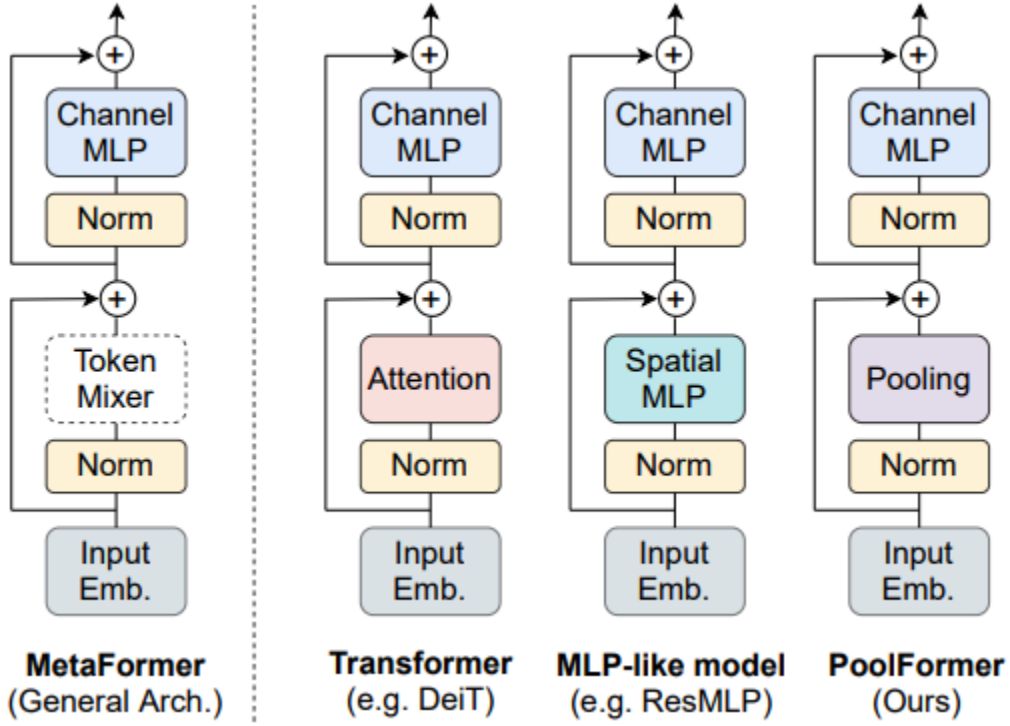
[Pinto+, ECCV 2022]

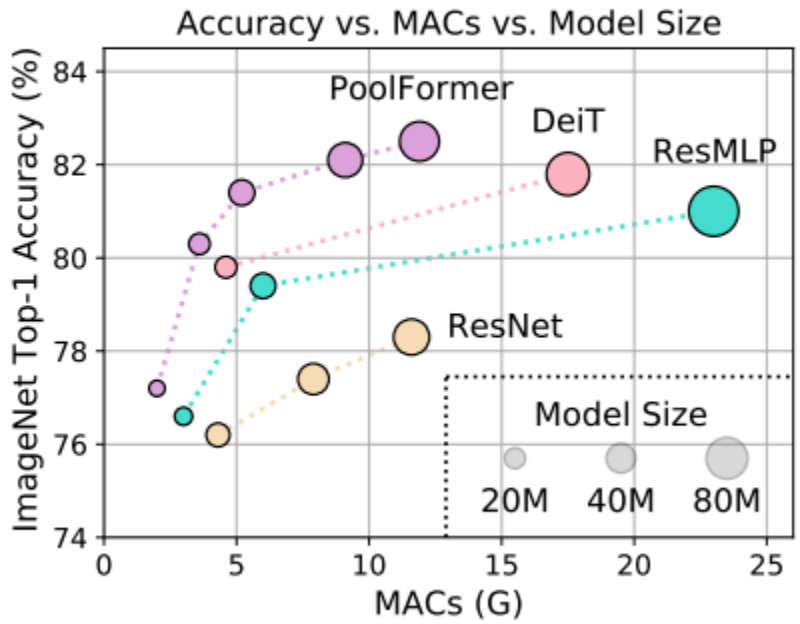
- **TransformerはCNNと変わらない**
  - 共変量シフト条件下で汎化する頑健な特徴に注目する
  - 代わりに、訓練集合から偽の単純な識別的特徴を選んでしまう脆弱性がある
  - **アテンションの存在は、より複雑でロバストな特徴の学習を促進しないのでは**
- **ConvNeXtはアテンションを用いない場合、現在のTransformerよりも優れたロバスト性を示す場合がある**
  - ただし、明確な勝者は存在しない

まとめ

- ViTとCNNの勝負は今のところ引き分け
- 大事なのはアテンションなのか畳み込みなのか、ではないのでは

MetaFormer [Yu+, CVPR 2022]





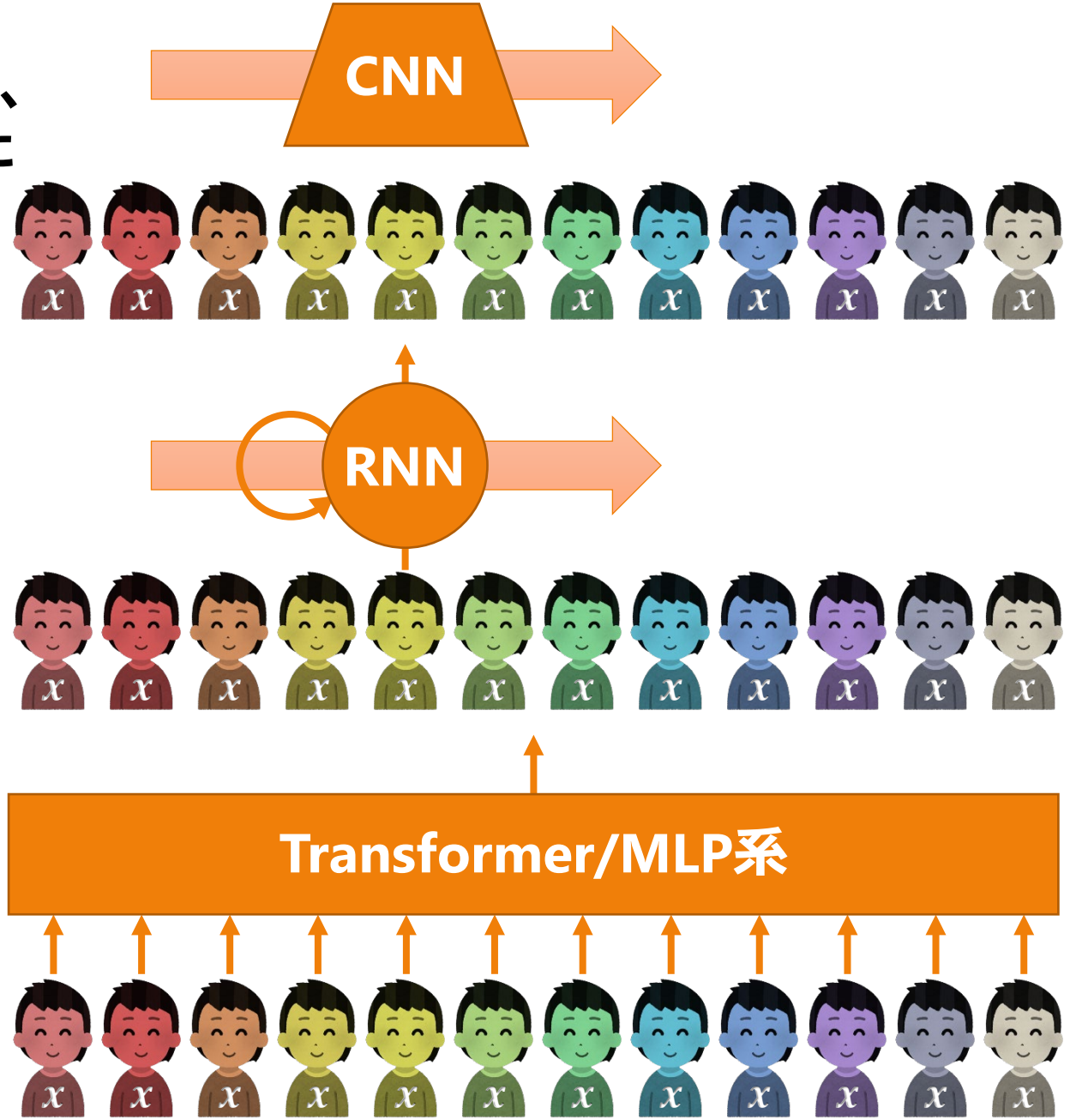
さいごに

Transformerの基本的な動作から応用範囲、最近のMLP系ネットワークまでを俯瞰した

- そもそもTransformerって？
- Transformer旋風と基盤モデル
- Transformerのノウハウ
- Transformerはオワコン？！
- CNNはオワコン？！

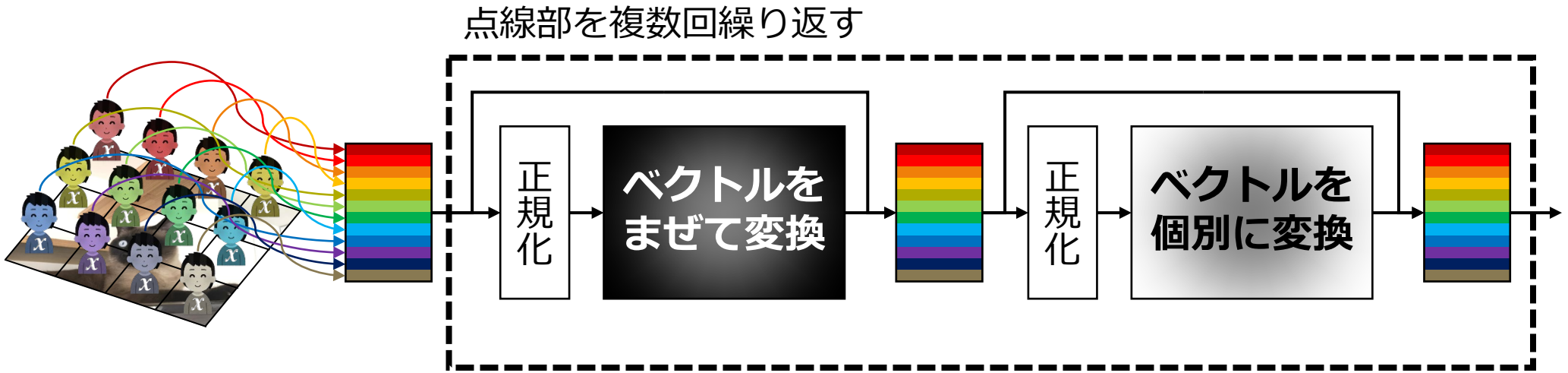
帰納バイアスと必要データ量・計算機のトレードオフ

- ベクトルを個別に変換
- ベクトルをまぜて変換
  → **アテンションは有効だけど全てじゃない**



色々聞きすぎて良く分からない！という人のために

- **Transformerはトークン（単語やパッチなど）をResidual接続しながら2つのモジュールを繰り返しているだけ！**
  - トークンを混ぜるToken Mixer
  - トークンを変換するMLP
- **話題になったMLP系も実は基本的に同じ構造！**



- **あとは色々とノウハウがあるので気を付けましょう**
- **自己教師あり学習による基盤モデルが様々なタスクで大暴れ！**