

注意力就是你所需要的一切

原文: Attention Is All You Need **作者:** Ashish Vaswani, Noam Shazeer, Niki Parmar, Jakob Uszkoreit, Llion Jones, Aidan N. Gomez, Łukasz Kaiser, Illia Polosukhin (Google Brain & Google Research & University of Toronto) **我的解读时间:** 2024年

开场: 为什么要读这篇论文

如果要我选一篇过去十年最具影响力的人工智能论文，这篇绝对是候选之一。

2017年，当我第一次看到这个霸气的标题——"Attention Is All You Need"（注意力就是你所需要的一切）时，说实话，心里是有点不服气的。什么叫"只需要注意力"？神经网络发展这么多年，循环网络（RNN）、卷积网络（CNN）都被你们一笔勾销了？

但后来的事情大家都知道了：ChatGPT、GPT-4、Claude、Gemini.....所有这些改变世界的大语言模型，底层架构都是这篇论文提出的Transformer。可以说，没有这篇论文，就没有今天的AI浪潮。

今天，我想带大家一起读懂这篇论文，搞清楚Transformer到底做了什么，为什么它能成功。

研究背景：他们想解决什么问题

要理解Transformer的价值，我们得先回到2017年那个时代看看。

当时的主流方法是什么？

那时候做机器翻译、语言模型这类任务，主流方法是**循环神经网络（RNN）**，特别是它的两个变种：LSTM（长短期记忆网络）和GRU（门控循环单元）。

这些模型的核心思想很简单：处理一个句子的时候，一个词一个词地读。每读一个词，就更新一下“记忆”。就像你读一本小说一样，读到第100页的时候，你脑子里已经记住了前99页的关键信息。

听起来很合理对吧？但这里有个致命的问题。

致命的“顺序瓶颈”

想象一下，你要翻译这么一个句子：

"The cat sat on the mat because it was tired."

这里的“it”指的是什么？是“cat”还是“mat”？显然是“cat”（猫累了，不是垫子累了）。但问题是，“it”和“cat”之间隔了好几个词。

对于RNN来说，要理解这个“it”指代什么，信息必须从“cat”那里一步一步传过来，经过“sat”、“on”、“the”、“mat”、“because”……每经过一步，信息就会衰减一点。到最后，“cat”的信息可能已经变得很模糊了。

这就是所谓的**长距离依赖问题**。句子越长，问题越严重。

更要命的是，因为RNN必须一个词一个词地处理，**没法并行计算**。你必须先算完第1个词，才能算第2个词，算完第2个词才能算第3个词……想

象一下，如果你的句子有1000个词，你的GPU只能眼巴巴看着，一次只处理一个词，其他计算单元全都闲着。

这在深度学习时代是巨大的浪费。GPU之所以强大，就是因为它能同时做很多计算。结果你告诉它"不好意思，你得排队"，这不是暴殄天物吗？

注意力机制：一个有希望的方向

其实在Transformer之前，研究者们已经发现了一个好东西，叫**注意力机制（Attention）**。

注意力机制的思想是：翻译一个词的时候，不需要傻傻地依赖RNN传过来的那个"记忆"，可以直接去"看"原文里的每个词，然后决定应该重点关注哪几个词。

比如翻译"it"的时候，注意力机制可以直接去看"cat"、"mat"、"tired"，然后判断应该重点关注"cat"。

这个方法确实有效，当时很多机器翻译模型都在RNN的基础上加入了注意力机制，效果提升明显。

但问题是，大家都把注意力当作RNN的"辅助工具"，RNN还是主角。就像给汽车装了个涡轮增压，但发动机还是那个老发动机。

Google的这帮研究者问了一个大胆的问题：能不能把RNN完全扔掉，只用注意力机制？

他们是怎么做的：方法论解读

一个疯狂的想法

论文的核心创新可以用一句话概括：**完全抛弃循环结构和卷积结构，只用注意力机制来建模序列。**

这在当时看起来很疯狂。因为循环结构天然适合处理序列——它就像一条流水线，信息沿着时间轴流动。而注意力机制本身并不关心顺序，它只是说“这几个元素之间有关联”。

用一个比喻来说：RNN像是一个人在读书，从第一页读到最后一页；而纯注意力的方法像是把书的所有页同时铺在桌上，然后用眼睛在不同页面之间跳来跳去。

后者听起来很乱？确实，所以Transformer设计了很多巧妙的机制来让这个“乱看”变得有章可循。

Transformer的整体架构

Transformer采用了经典的**编码器-解码器（Encoder-Decoder）** 结构：

- **编码器**：负责“理解”输入（比如要翻译的英文句子）
- **解码器**：负责“生成”输出（比如翻译后的德文句子）

这个结构本身不新鲜，RNN时代就在用。但Transformer的编码器和解码器内部的构造完全不同了。

编码器由**6个相同的层**堆叠而成。每一层有两个子层： 1. 一个**多头自注意力层** 2. 一个**前馈神经网络层**

解码器也是6层，但每层有三个子层： 1. 一个**带遮罩的多头自注意力层**（只能看到已生成的内容） 2. 一个**编码器-解码器注意力层**（用来“看”编码器的输出） 3. 一个**前馈神经网络层**

每个子层都有**残差连接**和**层归一化**。这些技术细节听起来复杂，但核心思想很简单：让信息能够顺畅流动，让训练更加稳定。

最核心的创新：自注意力（Self-Attention）

自注意力是Transformer的灵魂。让我用一个例子来解释它是怎么工作的。

假设我们要处理这个句子："The animal didn't cross the street because it was too tired."

传统的RNN处理"it"这个词时，只能依赖前面传过来的"记忆"。但自注意力不一样，它会让"it"这个词去"询问"句子里的每个词：

- "The"，你和我相关吗？——不太相关。
- "animal"，你和我相关吗？——**非常相关！**
- "didn't"，你和我相关吗？——有点相关。
- "street"，你和我相关吗？——不太相关。
-

通过这种"询问"，"it"可以直接获得和它最相关的词的信息，不管那个词离它多远。这就是自注意力的威力：**任意两个词之间的信息传递只需要一步。**

用论文里的术语来说，这个过程涉及三个概念：**查询 (Query) 、键 (Key) 和值 (Value)**。

- 查询：代表当前词想要找什么
- 键：代表每个词能提供什么
- 值：代表每个词实际包含的信息

计算过程是这样的： 1. 用查询和所有键做点积，得到"相关性分数" 2. 把分数除以一个常数 (\sqrt{dk})，防止分数太大 3. 用softmax把分数变成"权重"（加起来等于1） 4. 用权重对所有值加权求和，得到最终输出

用数学公式表示就是：

$$\text{Attention}(Q, K, V) = \text{softmax}(QK^T / \sqrt{dk}) \times V$$

这个公式看起来简单，但它的威力巨大。因为它可以**完全并行计算**——所有词对之间的关系可以同时计算，不需要排队。

多头注意力：从多个角度看问题

论文的另一个重要创新是**多头注意力 (Multi-Head Attention)**。

想象一下，你在理解一个句子的时候，可能需要从多个角度来看： - 语法角度：主语是谁？谓语是什么？ - 语义角度：谁在做什么？对谁做的？ - 指代角度："它"指的是什么？

如果只用一个注意力头，它只能从一个角度来看问题。但如果用多个头，每个头可以学会关注不同的方面。

Transformer用了**8个注意力头**。每个头用不同的参数把查询、键、值投影到不同的子空间，然后独立计算注意力，最后把结果拼接起来。

论文附录里的可视化图非常有意思：有的头学会了捕捉语法结构，有的头学会了解决代词指代问题。这些头各司其职，配合得天衣无缝。

位置编码：告诉模型词的顺序

自注意力有个问题：它完全不关心词的顺序。对它来说，"狗咬人"和"人咬狗"可能是一样的，因为它只看词之间的关系，不看顺序。

但顺序显然很重要！所以Transformer需要想办法把"位置信息"注入到模型里。

论文采用了一个巧妙的方法：用**正弦和余弦函数**来生成位置编码。

具体来说，对于位置pos和维度i： - 偶数维度用： $\sin(pos / 10000^{(2i/d)})$ - 奇数维度用： $\cos(pos / 10000^{(2i/d)})$

为什么用这个奇怪的公式？因为它有一个美妙的性质：任何位置的编码都可以用其他位置的编码的**线性组合**来表示。这意味着模型可以很容易地学会"第3个词和第5个词相差2个位置"这样的关系。

而且，这种方法可以处理训练时没见过的更长句子，因为正弦函数在任何位置都有定义。

核心发现: 他们发现了什么

发现一：翻译质量碾压前人

论文在两个标准机器翻译任务上做了实验： - 英语→德语翻译（WMT 2014） - 英语→法语翻译（WMT 2014）

结果令人震惊：

英德翻译：Transformer达到了**28.4 BLEU**分，比之前最好的模型（包括多模型集成）高出**2个BLEU以上**。要知道在机器翻译领域，BLEU分数每提升0.5都是很大的进步，2分简直是跨越式的。

英法翻译：达到了**41.8 BLEU**分，创下了单模型的新记录。

更重要的是，这些成绩是用**很少的训练成本**取得的。

发现二：训练速度快得惊人

这才是让学术界和工业界都震惊的地方。

Transformer的“大模型”版本，在8张P100 GPU上训练**3.5天**就达到了最好成绩。而之前的最好模型，需要的计算量是它的**数倍甚至数十倍**。

论文里有一张表格特别直观：

| 模型 | 英德BLEU | 训练计算量(FLOPs) |
|-------------------|-------------|--|
| GNMT+RL | 24.6 | 2.3×10^{19} |
| ConvS2S | 25.16 | 9.6×10^{18} |
| Transformer (big) | 28.4 | 2.3×10^{19} |

计算量差不多，但BLEU分数高了近4分。如果追求同等质量，Transformer需要的计算量远远更少。

为什么会这样？核心原因就是**并行化**。RNN每秒只能处理一个词，而Transformer可以同时处理整个句子的所有词。在GPU这种擅长并行计算的硬件上，这个优势是碾压性的。

发现三：学习长距离依赖更容易

论文用一张表格对比了不同层类型的“最长路径长度”：

| 层类型 | 任意两点之间的最长路径 |
|------|----------------|
| 自注意力 | $O(1)$ |
| 循环层 | $O(n)$ |
| 卷积层 | $O(\log_k(n))$ |

自注意力的路径长度是**常数 $O(1)$** ！这意味着句子开头的第一个词和句子结尾的最后一个词之间，信息只需要“一步”就能传递。

而RNN需要 $O(n)$ 步——如果句子有100个词，信息就要传递100步，每步都可能丢失一点。

这就是为什么Transformer特别擅长处理长文本。

发现四：注意力头学会了语言结构

论文附录的可视化图非常精彩。研究者发现，不同的注意力头学会了捕捉不同类型的语言现象：

例子1：在处理句子“making...more difficult”时，有些注意力头学会了识别这种**长距离的短语结构**。“making”会特别关注远处的“more difficult”，因为它们共同构成一个完整的短语。

例子2: 在处理句子"The Law...its application"时，有个注意力头学会了做**代词消解**。"its"会高度关注"The Law"，因为"its"指的就是"法律的"。

这些现象说明，Transformer不只是在做简单的模式匹配，它实际上学会了语言的深层结构。这是之前的模型很难做到的。

发现五：模型设计的各种权衡

论文做了大量的**消融实验**（就是改变某个组件，看对结果有什么影响），得出了一些重要结论：

- **注意力头的数量**: 8个头效果最好。单头太少（差了0.9 BLEU），但32个头反而也下降了。
- **模型维度**: 越大越好，但计算成本也更高。
- **Dropout**: 很重要，能有效防止过拟合。
- **位置编码**: 正弦编码和学习编码效果差不多，但正弦编码不需要额外参数，还能处理更长的句子。

深入思考：这意味着什么

范式转换：从顺序思维到并行思维

Transformer的成功标志着深度学习在序列建模上的**范式转换**。

在RNN时代，我们建模序列的方式是"模仿人类"——一个词一个词地读，维护一个"记忆"来记录读过的内容。这种方式直观，但效率低。

Transformer的方式是"拥抱机器"——既然计算机可以同时看到所有词，为什么要假装只能看一个？让每个词都能直接和其他所有词交流，然后用注意力来决定谁应该听谁的。

这种思维方式的转变，开启了后来大模型时代的大门。因为只有能高效并行的模型，才能扩展到几十亿、上千亿参数的规模。

规模化的可能性

Transformer架构有一个被低估的优点：它特别容易**规模化**
(scaling)。

想要更强的模型？加更多的层、加更宽的维度、加更多的注意力头。这些都可以通过增加GPU来支持，训练时间不会等比例增加。

后来的GPT-3、ChatGPT、Claude等模型，本质上就是把Transformer做大。GPT-3有1750亿参数，比这篇论文的"big"模型大了近1000倍。但架构的核心思想是一样的：堆叠Transformer层，让模型自己学。

通用性的展现

论文不只做了机器翻译，还测试了一个完全不同的任务：**英语句法分析**
(constituency parsing)。

这个任务是给一个句子，输出它的语法树结构。比如"John loves Mary"要分析成[S [NP John] [VP loves [NP Mary]]]。

令人惊讶的是，Transformer在这个任务上也表现出色，超过了很多专门针对这个任务设计的模型。这说明Transformer学到的不是某种特定任务的技巧，而是某种**通用的语言理解能力**。

这个发现的意义被当时的人们低估了。后来我们知道，正是这种通用性，使得大语言模型可以做各种各样的任务——问答、写作、编程、推理……全都用同一个架构。

局限与展望

二次复杂度的问题

Transformer最大的问题是**计算复杂度和序列长度的平方成正比**。

因为自注意力需要计算每对词之间的关系，如果句子有 n 个词，就需要计算 n^2 对关系。当 $n=1000$ 时，这还能接受；但当 $n=100000$ 时（比如一本小说），计算量就爆炸了。

论文作者意识到了这个问题，在论文里提到可以用“限制注意力”的方法——每个词只关注它周围一定范围内的词。但这样一来，“自注意力”一步到位”的优势就打折扣了。

后来出现了很多改进方法，比如Longformer、BigBird、FlashAttention等，都是为了解决这个问题。

对位置信息的处理还很粗糙

正弦位置编码虽然有效，但它本质上是一种“加法”——把位置信息加到词的表示上。这种方式比较粗糙，信息可能会互相干扰。

后来的研究（比如RoPE、ALiBi）提出了更优雅的位置编码方式，效果更好。

为什么有效？还是个谜

老实说，直到今天，我们对Transformer为什么这么有效还没有完全理解。

为什么自注意力可以学到语法结构？为什么多头注意力每个头会分工合作？为什么堆叠更多层就能学到更复杂的模式？

这些问题都还没有令人满意的理论解释。Transformer的成功更多是**实验驱动的**，而不是理论预测的。

这既是一个遗憾，也是未来研究的方向。

我的感想

读完这篇论文，我最大的感受是：**好的研究往往是"减法"而不是"加法"**。

在Transformer之前，研究者们一直在给模型"加东西"：给RNN加注意力、加门控机制、加残差连接、加各种trick。模型越来越复杂，论文越来越难读。

但Transformer的作者反其道而行之：能不能把RNN完全去掉？能不能用最简单的组件搭出最强的模型？

结果是：可以。而且效果更好。

这让我想起物理学中的一个原则：如果你的理论很复杂，可能是因为你还没有找到正确的抽象。

Transformer找到了序列建模的"正确抽象"：让每个元素直接和所有其他元素交流，让模型自己学会该关注谁。这个抽象足够简单，以至于可以无限扩展；又足够强大，以至于可以解决各种任务。

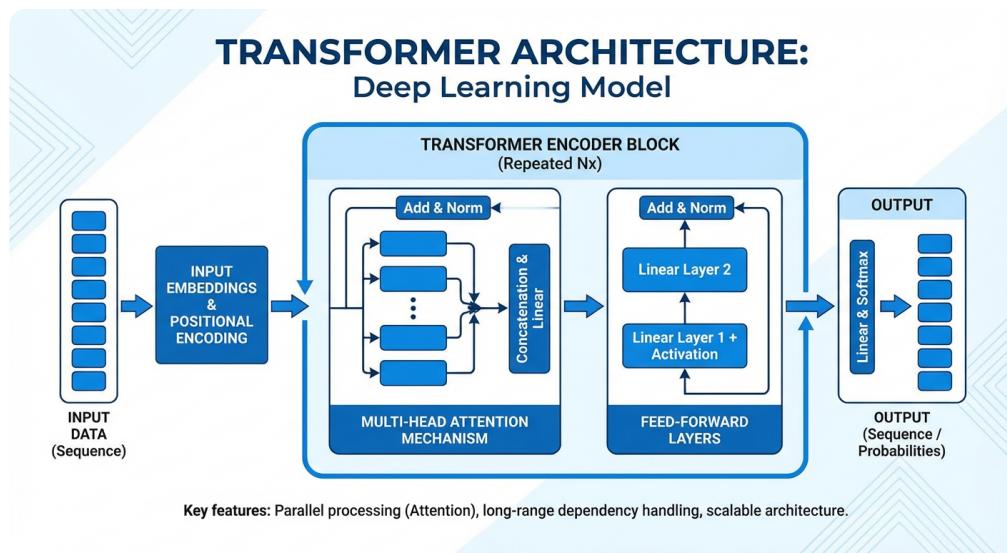
六年后的今天，当我们看到ChatGPT可以写诗、编程、做数学、聊天，很难想象这一切的起点是这篇只有11页的论文。

Attention really is all you need. 至少到目前为止是这样。

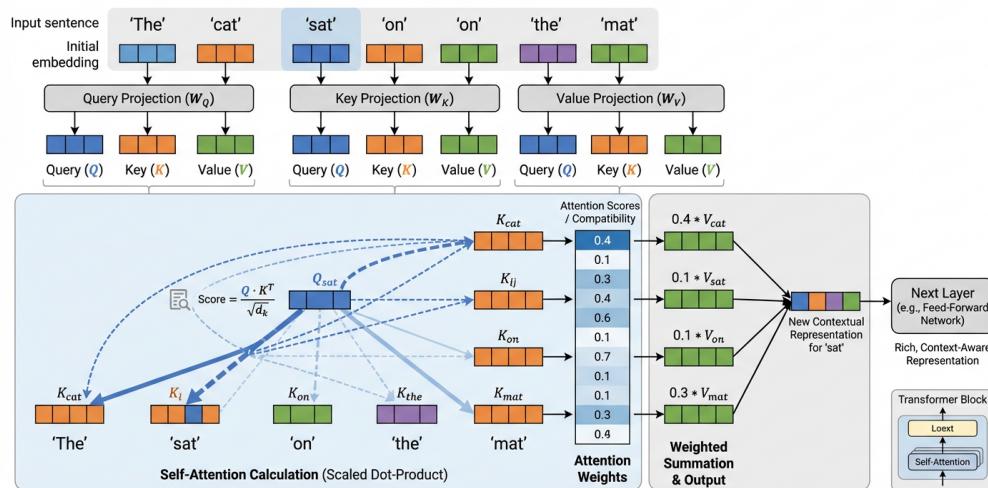
总结

Transformer是一篇里程碑式的论文，它用纯注意力机制替代了循环和卷积结构，实现了序列建模的范式转换。核心创新是自注意力和多头注意力机制，让模型能够并行处理整个序列，同时捕捉任意距离的依赖关系。实验证明，Transformer不仅在机器翻译上取得了远超前人的成绩，而且训练速度快得惊人，还能泛化到其他任务。这篇论文奠定了后来所有大语言模型的架构基础，可以说没有它就没有今天的AI繁荣。

配图



Key Innovation: 'Attention Is All You Need' - Self-Attention Mechanism



本解读由 GitHub Actions + Claude Agent SDK + 通义万相 自动生成

本解读由 GitHub Actions + Claude Agent SDK + 通义万相 自动生成