Provided proper attribution is provided, Google hereby grants permission to reproduce the tables and figures in this paper solely for use in journalistic or scholarly works.

Attention Is All You Need

Ashish Vaswani*
Google Brain
avaswani@google.com

Noam Shazeer*
Google Brain

noam@google.com

Niki Parmar*
Google Research
nikip@google.com

Jakob Uszkoreit*
Google Research
usz@google.com

Llion Jones*
Google Research
llion@google.com

Aidan N. Gomez* † University of Toronto aidan@cs.toronto.edu **Łukasz Kaiser***Google Brain
lukaszkaiser@google.com

Illia Polosukhin* ‡

illia.polosukhin@gmail.com

Abstract

*警告:该PDF由GPT-Academic开源项目调用大语言模型+Latex翻译插件一键生成,版权归原文作者所有。翻译内容可靠性无保障,请仔细鉴别并以原文为准。项目Github地址 https://github.com/binary-husky/gpt_academic/。当前大语言模型:gemini-pro,当前语言模型温度设定:0。为了防止大语言模型的意外谬误产生扩散影响,禁止移除或修改此警告。

主导序列转换模型基于复杂的循环或卷积神经网络,其中包括编码器和解码器。性能最佳的模型还通过注意力机制连接编码器和解码器。我们提出了一种新的简单网络架构,即 Transformer,它完全基于注意力机制,完全摒弃了循环和卷积。在两个机器翻译任务上的实验表明,这些模型在质量上更胜一筹,同时更易于并行化,并且训练所需的时间明显更少。我们的模型在 WMT 2014 年英语到德语翻译任务中实现了 28.4 BLEU,比现有的

^{*}Equal contribution. Listing order is random. Jakob proposed replacing RNNs with self-attention and started the effort to evaluate this idea. Ashish, with Illia, designed and implemented the first Transformer models and has been crucially involved in every aspect of this work. Noam proposed scaled dot-product attention, multi-head attention and the parameter-free position representation and became the other person involved in nearly every detail. Niki designed, implemented, tuned and evaluated countless model variants in our original codebase and tensor2tensor. Llion also experimented with novel model variants, was responsible for our initial codebase, and efficient inference and visualizations. Lukasz and Aidan spent countless long days designing various parts of and implementing tensor2tensor, replacing our earlier codebase, greatly improving results and massively accelerating our research.

[†]Work performed while at Google Brain.

[‡]Work performed while at Google Research.

最佳结果(包括集成)提高了 2 BLEU 以上。在 WMT 2014 年英语到法语翻译任务中,我们的模型在八个 GPU 上训练 3.5 天后,建立了 41.8 的新单模型最先进的 BLEU 分数,这是文献中最佳模型训练成本的一小部分。我们通过成功地将其应用于英语成分解析(使用大量和有限的训练数据)来证明 Transformer 可以很好地推广到其他任务。

1 Introduction

循环神经网络,特别是长短期记忆 [13] 和门控循环 [7] 神经网络,已被牢固地确立为序列建模和转导问题(如语言建模和机器翻译)中的最先进方法 [35, 2, 5]。自此,许多努力不断推动循环语言模型和编码器-解码器架构的边界 [38, 24, 15]。

循环模型通常沿输入和输出序列的符号位置对计算进行分解。将位置与计算时间中的步骤对齐,它们生成一个隐藏状态序列 h_t ,作为前一个隐藏状态 h_{t-1} 和位置 t 的输入的函数。这种固有的顺序性质排除了训练示例中的并行化,这在较长的序列长度下变得至关重要,因为内存限制限制了跨示例的批处理。最近的工作通过分解技巧 [21] 和条件计算 [32] 在计算效率方面取得了显着改进,同时还改进了后者的模型性能。然而,顺序计算的基本约束仍然存在。

注意力机制已成为各种任务中引人注目的序列建模和转导模型的组成部分,它允许对依赖 关系进行建模,而无需考虑它们在输入或输出序列中的距离 [2,19]。然而,除了少数情况 [27]之外,此类注意力机制都与循环网络结合使用。

在这项工作中,我们提出了 Transformer, 这是一种回避递归的模型架构, 而是完全依赖注意力机制来绘制输入和输出之间的全局依赖关系。Transformer 允许更多的并行化, 并且在 八个 P100 GPU 上训练仅十二小时后, 就可以在翻译质量方面达到新的最先进水平。

2 Background

减少顺序计算的目标也构成了扩展神经 GPU [16]、ByteNet [18] 和 ConvS2S [9] 的基础,所有这些都使用卷积神经网络作为基本构建模块,并行计算所有输入和输出位置的隐藏表示。在这些模型中,将两个任意输入或输出位置的信号关联起来所需的运算数量随着位置之间的距离而增长,对于 ConvS2S 是线性的,对于 ByteNet 是对数的。这使得学习远距离位置之间的依赖关系变得更加困难 [12]。在 Transformer 中,这被减少到一个常数运算,尽管由于对注意力加权位置进行平均而降低了有效分辨率,这是一种我们在第 3.2节中描述的多头注意力所抵消的效果。

自注意力,有时称为内部注意力,是一种注意力机制,它关联单个序列的不同位置以计算序列的表示。自注意力已成功用于各种任务中,包括阅读理解、抽象摘要、文本蕴涵和学习与任务无关的句子表示 [4, 27, 28, 22]。

端到端记忆网络基于循环注意力机制,而不是序列对齐的循环,并且已显示在简单的语言问答和语言建模任务上表现良好[34]。

然而,据我们所知,Transformer 是第一个完全依赖自注意力来计算其输入和输出表示的转导模型,而没有使用序列对齐的 RNN 或卷积。在以下部分中,我们将描述 Transformer,激发自注意力,并讨论其相对于 [17, 18] 和 [9] 等模型的优势。

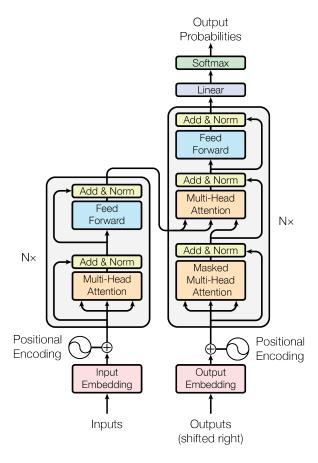


图 1: The Transformer - model architecture.

3 Model Architecture

大多数有竞争力的神经序列转换模型都具有编码器-解码器结构[5, 2, 35]。在此,编码器将符号表示的输入序列 $(x_1,...,x_n)$ 映射到连续表示序列 $\mathbf{z}=(z_1,...,z_n)$ 。给定 \mathbf{z} ,解码器随后生成符号的输出序列 $(y_1,...,y_m)$,一次生成一个元素。在每个步骤中,模型都是自回归的[10],在生成下一个元素时将先前生成的符号作为附加输入。

Transformer 遵循此总体架构,使用堆叠的自注意力和逐点全连接层,分别用于编码器和解码器,如图 1的左右两半所示。

3.1 Encoder and Decoder Stacks

编码器: 编码器由 N=6 个相同的层堆叠而成。每一层有两个子层。第一个是多头自注意力机制,第二个是一个简单的、位置明智的全连接前馈网络。我们在两个子层周围使用残差连接[11],然后进行层归一化[1]。也就是说,每个子层的输出是 LayerNorm(x+Sublayer(x)),其中 Sublayer(x) 是子层本身实现的函数。为了促进这些残差连接,模型中的所有子层以及嵌入层都产生维度为 $d_{model}=512$ 的输出。

解码器: 解码器也由 N=6 个相同的层堆叠而成。除了每个编码器层中的两个子层之外,解码器还插入了一个第三个子层,该子层对编码器堆栈的输出执行多头注意力。与编码器类似,我们在每个子层周围使用残差连接,然后进行层归一化。我们还修改了解码器堆栈

中的自注意力子层,以防止位置关注后续位置。这种掩蔽与输出嵌入偏移一个位置的事实相结合,确保位置*i* 的预测只能依赖于小于*i* 的已知输出。

3.2 Attention

注意力函数可以描述为将查询和一组键值对映射到输出,其中查询、键、值和输出都是向量。输出计算为值的加权和,其中分配给每个值的权重由查询与相应键的兼容性函数计算。

3.2.1 Scaled Dot-Product Attention

我们称我们的特定注意力为"缩放点积注意力"(图 2)。输入包含维度为 d_k 的查询和键,以及维度为 d_v 的值。我们计算查询与所有键的点积,将每个点积除以 $\sqrt{d_k}$,并应用 softmax 函数以获得值上的权重。

在实践中,我们同时在一组查询上计算注意力函数,并将它们打包到矩阵 Q 中。键和值也打包到矩阵 K 和 V 中。我们计算输出矩阵为:

$$Attention(Q, K, V) = softmax(\frac{QK^T}{\sqrt{d_k}})V$$
 (1)

最常用的两种注意力函数是加性注意力[2]和点积(乘性)注意力。点积注意力与我们的算法相同,除了缩放因子 $\frac{1}{\sqrt{d_k}}$ 。加性注意力使用具有单个隐藏层的馈送前向网络计算兼容性函数。虽然两者在理论复杂度上相似,但点积注意力在实践中速度更快、空间效率更高,因为它可以使用高度优化的矩阵乘法代码实现。

虽然对于 d_k 的小值,这两种机制表现相似,但对于 d_k 的大值,加性注意力优于未缩放的点积注意力[3]。我们怀疑对于 d_k 的大值,点积的幅度会变大,将 softmax 函数推入梯度极小的区域 4 。为了抵消这种影响,我们将点积缩放到 $\frac{1}{\sqrt{d_k}}$ 。

3.2.2 Multi-Head Attention

我们发现,与其使用 d_{model} 维度的键、值和查询执行单个注意力函数,不如使用不同的学习 线性投影将查询、键和值线性投影 h 次到 d_k 、 d_k 和 d_v 维度。

然后,在查询、键和值的这些投影版本上,我们并行执行注意力函数,产生 d_v 维输出值。这些值被连接起来,并再次投影,得到最终值,如图 2所示。

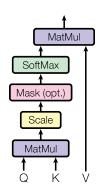
多头注意力允许模型联合关注不同位置不同表示子空间的信息。使用单个注意力头,平均 会抑制这一点。

$$\begin{aligned} \text{MultiHead}(Q, K, V) &= \text{Concat}(\text{head}_1, ..., \text{head}_{\text{h}}) W^O \\ \text{where head}_{\text{i}} &= \text{Attention}(QW_i^Q, KW_i^K, VW_i^V) \end{aligned}$$

其中投影是参数矩阵 $W_i^Q \in \mathbb{R}^{d_{\text{model}} \times d_k}$, $W_i^K \in \mathbb{R}^{d_{\text{model}} \times d_k}$, $W_i^V \in \mathbb{R}^{d_{\text{model}} \times d_v}$ 和 $W^O \in \mathbb{R}^{hd_v \times d_{\text{model}}}$ 。

⁴为了说明为什么点积会变大,假设 q 和 k 的分量是均值为 0、方差为 1 的独立随机变量。那么它们的点积 $q \cdot k = \sum_{i=1}^{d_k} q_i k_i$ 的均值为 0,方差为 d_k 。

Scaled Dot-Product Attention



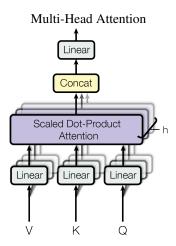


图 2: (左)缩放点积注意力。(右)多头注意力由并行运行的多个注意力层组成。

在这项工作中,我们采用了 h=8 个并行注意力层或头。对于其中的每一个,我们使用 $d_k=d_v=d_{\rm model}/h=64$ 。由于每个头的维度降低,因此总计算成本与具有全维度的单头注意力的计算成本相似。

3.2.3 Applications of Attention in our Model

Transformer 以三种不同的方式使用多头注意力:

- 在"编码器-解码器注意力"层中,查询来自前一个解码器层,而记忆键和值来自编码器的输出。这允许解码器中的每个位置都关注输入序列中的所有位置。这模仿了序列到序列模型中典型的编码器-解码器注意力机制,例如[38,2,9]。
- 编码器包含自注意力层。在自注意力层中,所有键、值和查询都来自同一位置,在本例中,来自编码器中前一层的输出。编码器中的每个位置都可以关注编码器前一层的全部位置。
- 类似地,解码器中的自注意力层允许解码器中的每个位置关注解码器中所有位置,直到并包括该位置。我们需要防止解码器中的向左信息流,以保留自回归属性。我们在缩放点积注意力中通过屏蔽(设置为 -∞) softmax 输入中对应于非法连接的所有值来实现这一点。参见图 2。

3.3 Position-wise Feed-Forward Networks

除了注意力子层,编码器和解码器中的每一层都包含一个全连接前馈网络,该网络分别且相同地应用于每个位置。这由两个线性变换和中间的 ReLU 激活组成。

$$FFN(x) = \max(0, xW_1 + b_1)W_2 + b_2 \tag{2}$$

虽然线性变换在不同位置是相同的,但它们在不同层之间使用不同的参数。描述这一点的另一种方法是使用内核大小为 1 的两个卷积。输入和输出的维度为 $d_{\rm model}=512$,内层的维度为 $d_{\rm ff}=2048$ 。

3.4 Embeddings and Softmax

与其他序列转换模型类似,我们使用学习的嵌入将输入标记和输出标记转换为维度为 d_{model} 的向量。我们还使用通常学习的线性变换和 softmax 函数将解码器输出转换为预测的下一个标记概率。在我们的模型中,我们共享两个嵌入层和预 softmax 线性变换之间的相同权重矩阵,类似于 [30]。在嵌入层中,我们将这些权重乘以 $\sqrt{d_{\text{model}}}$ 。

3.5 Positional Encoding

由于我们的模型不包含循环和卷积,为了让模型利用序列的顺序,我们必须注入一些关于序列中标记的相对或绝对位置的信息。为此,我们在编码器和解码器堆栈底部的输入嵌入中添加了"位置编码"。位置编码与嵌入具有相同的维度 d_{model} ,因此两者可以相加。位置编码有很多选择,既有学习的,也有固定的 [9]。

在这项工作中,我们使用不同频率的正弦和余弦函数:

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

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

其中 pos 是位置,i 是维度。也就是说,位置编码的每个维度对应一个正弦波。波长形成从 2π 到 $10000 \cdot 2\pi$ 的几何级数。我们选择此函数是因为我们假设它将允许模型轻松地学会通过相对位置来注意,因为对于任何固定偏移 k, PE_{pos+k} 可以表示为 PE_{pos} 的线性函数。

我们还尝试使用学习的位置嵌入 [9], 发现这两个版本产生了几乎相同的结果 (见表 3 行 (E))。我们选择正弦版本,因为它可能允许模型外推到比训练期间遇到的序列更长的长度。

4 Why Self-Attention

在本节中,我们将自注意力层与循环层和卷积层在各个方面的进行比较,这些层通常用于将一个可变长度的符号表示序列 $(x_1,...,x_n)$ 映射到另一个长度相等的序列 $(z_1,...,z_n)$,其中 $x_i,z_i\in\mathbb{R}^d$,例如典型序列转换编码器或解码器中的隐藏层。为了激发我们对自注意力的使用,我们考虑了三个期望。

一个是每层的总计算复杂度。另一个是可以并行化的计算量,以所需的最小顺序操作数来 衡量。

第三个是网络中长程依赖关系之间的路径长度。学习长程依赖关系是许多序列转换任务中的一个关键挑战。影响学习此类依赖关系能力的一个关键因素是前向和后向信号在网络中必须遍历的路径长度。输入和输出序列中任意位置组合之间的路径越短,学习长程依赖关系就越容易[12]。因此,我们还比较了由不同层类型组成的网络中任意两个输入和输出位置之间的最大路径长度。

如表 1 所示,自注意力层以恒定数量的顺序执行操作连接所有位置,而循环层需要 O(n) 个顺序操作。在计算复杂度方面,当序列长度 n 小于表示维度 d 时,自注意力层比循环层更快,这在机器翻译中由最先进模型使用的句子表示中最为常见,例如 word-piece [38] 和 byte-pair [31] 表示。为了提高涉及非常长序列的任务的计算性能,可以将自注意力限制为仅考虑以各个输出位置为中心的输入序列中大小为 r 的邻域。这将使最长路径长度增加到 O(n/r)。我们计划在未来的工作中进一步研究这种方法。

表 1: 不同层类型的最大路径长度、每层复杂度和顺序操作的最小数量。n 是序列长度,d 是表示维度,k 是卷积的核大小,r 是受限自注意中邻域的大小。

Layer Type	Complexity per Layer	Sequential	Maximum Path Length
		Operations	
Self-Attention	$O(n^2 \cdot d)$	O(1)	O(1)
Recurrent	$O(n \cdot d^2)$	O(n)	O(n)
Convolutional	$O(k \cdot n \cdot d^2)$	O(1)	$O(log_k(n))$
Self-Attention (restricted)	$O(r \cdot n \cdot d)$	O(1)	O(n/r)

具有核宽度 k < n 的单个卷积层不会连接所有输入和输出位置对。在连续核的情况下,这样做需要 O(n/k) 个卷积层的堆栈,或者在扩张卷积的情况下需要 $O(\log_k(n))$ [18],从而增加了网络中任意两个位置之间最长路径的长度。卷积层通常比循环层更昂贵,系数为 k。然而,可分离卷积 [6] 将复杂度大大降低到 $O(k \cdot n \cdot d + n \cdot d^2)$ 。然而,即使 k = n,可分离卷积的复杂度也等于自注意力层和逐点前馈层的组合,这是我们在模型中采用的方法。

作为附带好处,自注意力可以产生更具可解释性的模型。我们检查了我们模型中的注意力分布,并在附录中展示并讨论了示例。各个注意力头不仅清楚地学会执行不同的任务,而 且许多注意力头似乎表现出与句子的句法和语义结构相关的行为。

5 Training

本节描述了我们模型的训练方案。

5.1 Training Data and Batching

我们使用标准的 WMT 2014 英语-德语数据集进行训练,该数据集包含大约 450 万个句子对。使用字节对编码对句子进行编码[3],它具有大约 37000 个标记的共享源目标词汇表。对于英语-法语,我们使用了更大的 WMT 2014 英语-法语数据集,其中包含 3600 万个句子,并将标记拆分为 32000 个单词片段词汇表[38]。句子对按近似序列长度分批。每个训练批次包含一组句子对,其中包含大约 25000 个源标记和 25000 个目标标记。

5.2 Hardware and Schedule

我们在配备 8 个 NVIDIA P100 GPU 的一台机器上训练了我们的模型。对于我们使用本文中所述超参数的基本模型,每个训练步骤大约需要 0.4 秒。我们总共训练了 100,000 步或 12 小时。对于我们的大型模型(如表 3 底行所述),步长时间为 1.0 秒。大型模型训练了 300,000 步(3.5 天)。

5.3 Optimizer

我们使用了 Adam 优化器 [20],其中 $\beta_1 = 0.9$, $\beta_2 = 0.98$, $\epsilon = 10^{-9}$ 。 我们根据以下公式在训练过程中改变学习率:

$$lrate = d_{\text{model}}^{-0.5} \cdot \min(step_num^{-0.5}, step_num \cdot warmup_steps^{-1.5})$$
 (3)

表 2: Transformer 在英语到德语和英语到法语 newstest2014 测试中取得了比以前最先进的模型更好的 BLEU 分数,而训练成本却只是以前的一小部分。

Model	BL	EU	Training Cost (FLOPs)		
Model	EN-DE	EN-FR	EN-DE	EN-FR	
ByteNet [18]	23.75				
Deep-Att + PosUnk [39]		39.2		$1.0\cdot 10^{20}$	
GNMT + RL [38]	24.6	39.92	$2.3\cdot 10^{19}$	$1.4\cdot 10^{20}$	
ConvS2S [9]	25.16	40.46	$9.6\cdot10^{18}$	$1.5\cdot 10^{20}$	
MoE [32]	26.03	40.56	$2.0\cdot 10^{19}$	$1.2\cdot 10^{20}$	
Deep-Att + PosUnk Ensemble [39]		40.4		$8.0 \cdot 10^{20}$	
GNMT + RL Ensemble [38]	26.30	41.16	$1.8\cdot 10^{20}$	$1.1\cdot 10^{21}$	
ConvS2S Ensemble [9]	26.36	41.29	$7.7\cdot10^{19}$	$1.2\cdot 10^{21}$	
Transformer (base model)	27.3	38.1	3.3 ·	10^{18}	
Transformer (big)	28.4	41.8	2.3	10^{19}	

这对应于在最初的 warmup_steps 训练步长中线性增加学习率,此后按步长数的平方根反比成比例地降低学习率。我们使用了 warmup_steps = 4000。

5.4 Regularization

我们在训练期间采用了三种类型的正则化:

残差 Dropout 我们将 dropout [33] 应用于每个子层的输出,在将其添加到子层输入并归一化之前。此外,我们在编码器和解码器堆栈中将 dropout 应用于嵌入和位置编码的和。对于基础模型,我们使用 $P_{drop}=0.1$ 的比率。

标签平滑 在训练期间,我们采用了值 $\epsilon_{ls}=0.1$ 的标签平滑 [36]。这会损害困惑度,因为模型学会了更加不确定,但会提高准确性和 BLEU 分数。

6 Results

6.1 Machine Translation

在 WMT 2014 年英语到德语翻译任务中,大型 Transformer 模型 (表 2 中的 Transformer (大)) 在 BLEU 方面比之前报告的最佳模型 (包括集成模型) 高出 2.0 以上,创下了 28.4 的 BLEU 新纪录。此模型的配置列在表 3 的底行中。在 8 个 P100 GPU 上训练花费了 3.5 天。即使是我们的基础模型也超越了所有先前发布的模型和集成模型,而训练成本只是任何竞争模型的一小部分。

在 WMT 2014 年英语到法语翻译任务中,我们的大型模型在 BLEU 方面取得了 41.0 的分数,超过了所有先前发布的单一模型,而训练成本不到先前最先进模型的 1/4。用于英语到法语训练的 Transformer(大)模型使用 dropout 率 $P_{drop}=0.1$,而不是 0.3。

对于基础模型,我们使用通过对最后 5 个检查点求平均获得的单一模型,这些检查点每 10 分钟写入一次。对于大型模型,我们对最后 20 个检查点求平均。我们使用波束搜索,波束大小为 4,长度惩罚 $\alpha=0.6$ [38]。这些超参数是在对开发集进行实验后选择的。我们在推理期间将最大输出长度设置为输入长度 +50,但在可能的情况下提前终止 [38]。

表 3: Transformer 架构的变体。未列出的值与基础模型相同。所有指标均基于英语到德语翻译开发集 newstest2013。根据我们的字节对编码,列出的困惑度是每个词块的,不应与每个单词的困惑度进行比较。

	N	d_{model}	$d_{ m ff}$	h	d_k	d_v	P_{drop}	ϵ_{ls}	train steps	PPL (dev)	BLEU (dev)	params ×10 ⁶
base	6	512	2048	8	64	64	0.1	0.1	100K	4.92	25.8	65
(A)				1	512	512				5.29	24.9	
				4	128	128				5.00	25.5	
				16	32	32				4.91	25.8	
				32	16	16				5.01	25.4	
(B)					16					5.16	25.1	58
(D)					32					5.01	25.4	60
	2									6.11	23.7	36
	4									5.19	25.3	50
	8									4.88	25.5	80
(C)		256			32	32				5.75	24.5	28
		1024			128	128				4.66	26.0	168
			1024							5.12	25.4	53
			4096							4.75	26.2	90
(D)							0.0			5.77	24.6	
							0.2			4.95	25.5	
								0.0		4.67	25.3	
								0.2		5.47	25.7	
(E)		posi	tional er	nbedo	ding ins	stead o	f sinusoi	ds		4.92	25.7	
big	6	1024	4096	16			0.3		300K	4.33	26.4	213

表 2 总结了我们的结果,并将我们的翻译质量和训练成本与文献中的其他模型架构进行了比较。我们通过将训练时间、使用的 GPU 数量以及每个 GPU 的持续单精度浮点容量的估计值相乘来估计训练模型所使用的浮点运算次数5。

6.2 Model Variations

为了评估 Transformer 不同组件的重要性,我们以不同的方式改变了我们的基础模型,测量了在开发集 newstest2013 上的英语到德语翻译性能的变化。我们使用了前一节中描述的波束搜索,但没有检查点平均。我们在表 3中展示了这些结果。

在表 3行 (A) 中,我们改变了注意力头的数量以及注意力键和值维度,保持计算量不变,如 第 3.2.2 节所述。虽然单头注意力比最佳设置差 0.9 BLEU,但质量也会随着头部的增加而下降。

在表 3行 (B) 中,我们观察到减小注意力键大小 d_k 会损害模型质量。这表明确定兼容性并不容易,并且比点积更复杂的兼容性函数可能是有益的。我们在行 (C) 和 (D) 中进一步观察到,正如预期的那样,更大的模型更好,并且 dropout 在避免过度拟合方面非常有帮助。在

⁵我们分别为 K80、K40、M40 和 P100 使用了 2.8、3.7、6.0 和 9.5 TFLOPS 的值。

表 4: Transformer	在英语成分句法分析中表现良好	(结果见 WSJ 的第 23 节)
------------------	----------------	-------------------

Parser	Training	WSJ 23 F1
Vinyals & Kaiser el al. (2014) [37]	WSJ only, discriminative	88.3
Petrov et al. (2006) [29]	WSJ only, discriminative	90.4
Zhu et al. (2013) [40]	WSJ only, discriminative	90.4
Dyer et al. (2016) [8]	WSJ only, discriminative	91.7
Transformer (4 layers)	WSJ only, discriminative	91.3
Zhu et al. (2013) [40]	semi-supervised	91.3
Huang & Harper (2009) [14]	semi-supervised	91.3
McClosky et al. (2006) [26]	semi-supervised	92.1
Vinyals & Kaiser el al. (2014) [37]	semi-supervised	92.1
Transformer (4 layers)	semi-supervised	92.7
Luong et al. (2015) [23]	multi-task	93.0
Dyer et al. (2016) [8]	generative	93.3

行(E)中,我们将正弦位置编码替换为学习的位置嵌入[9],并观察到与基础模型几乎相同的结果。

6.3 English Constituency Parsing

为了评估 Transformer 是否可以推广到其他任务,我们对英语成分解析进行了实验。此任务提出了特定的挑战:输出受严格的结构约束,并且明显长于输入。此外,RNN 序列到序列模型无法在小数据模式下获得最先进的结果 [37]。

我们在 Penn Treebank [25] 的华尔街日报 (WSJ) 部分上训练了一个 4 层 Transformer,其中 $d_{model}=1024$,大约有 40K 个训练句子。我们还使用来自大约 1700 万个句子的更大高置信 度和 BerkleyParser 语料库在半监督环境中对其进行了训练 [37]。我们为仅 WSJ 设置使用了 16K 个标记的词汇表,为半监督设置使用了 32K 个标记的词汇表。

我们只进行了一些实验来选择第 22 节开发集上的 dropout、注意力和残差(第 5.4 节)、学习率和波束大小,所有其他参数都保持与英语到德语基本翻译模型相同。在推理期间,我们将最大输出长度增加到输入长度 + 300。我们对仅 WSJ 和半监督设置都使用了波束大小 21 和 $\alpha=0.3$ 。

表 4 中的结果表明,尽管缺乏特定于任务的调整,但我们的模型表现出惊人的良好表现,产生了比所有先前报告的模型更好的结果,除了递归神经网络语法 [8]。

与 RNN 序列到序列模型 [37] 相比,即使仅在 40K 个句子的 WSJ 训练集上进行训练,Transformer 也优于 BerkeleyParser [29]。

7 Conclusion

在这项工作中,我们提出了 Transformer, 这是第一个完全基于注意力的序列转换模型,它用多头自注意力取代了编码器-解码器架构中最常用的循环层。

对于翻译任务,Transformer 的训练速度明显快于基于循环层或卷积层的架构。在 WMT 2014 英语到德语和 WMT 2014 英语到法语翻译任务中,我们都取得了新的突破。在前一个任务中,我们最好的模型甚至优于所有先前报告的集成模型。

我们对基于注意力的模型的未来感到兴奋,并计划将它们应用于其他任务。我们计划将 Transformer 扩展到涉及文本以外的输入和输出模式的问题,并研究局部、受限的注意力机 制,以有效处理图像、音频和视频等大型输入和输出。让生成过程不那么顺序化是我们的 另一个研究目标。

我们用于训练和评估模型的代码可在 https://github.com/tensorflow/tensor2tensor获得。

致谢 我们感谢 Nal Kalchbrenner 和 Stephan Gouws 提供富有成效的评论、更正和灵感。

参考文献

- [1] Jimmy Lei Ba, Jamie Ryan Kiros, and Geoffrey E Hinton. Layer normalization. *arXiv preprint arXiv:1607.06450*, 2016.
- [2] Dzmitry Bahdanau, Kyunghyun Cho, and Yoshua Bengio. Neural machine translation by jointly learning to align and translate. *CoRR*, abs/1409.0473, 2014.
- [3] Denny Britz, Anna Goldie, Minh-Thang Luong, and Quoc V. Le. Massive exploration of neural machine translation architectures. *CoRR*, abs/1703.03906, 2017.
- [4] Jianpeng Cheng, Li Dong, and Mirella Lapata. Long short-term memory-networks for machine reading. *arXiv preprint arXiv:1601.06733*, 2016.
- [5] Kyunghyun Cho, Bart van Merrienboer, Caglar Gulcehre, Fethi Bougares, Holger Schwenk, and Yoshua Bengio. Learning phrase representations using rnn encoder-decoder for statistical machine translation. *CoRR*, abs/1406.1078, 2014.
- [6] Francois Chollet. Xception: Deep learning with depthwise separable convolutions. *arXiv* preprint arXiv:1610.02357, 2016.
- [7] Junyoung Chung, Çaglar Gülçehre, Kyunghyun Cho, and Yoshua Bengio. Empirical evaluation of gated recurrent neural networks on sequence modeling. *CoRR*, abs/1412.3555, 2014.
- [8] Chris Dyer, Adhiguna Kuncoro, Miguel Ballesteros, and Noah A. Smith. Recurrent neural network grammars. In *Proc. of NAACL*, 2016.
- [9] Jonas Gehring, Michael Auli, David Grangier, Denis Yarats, and Yann N. Dauphin. Convolutional sequence to sequence learning. *arXiv preprint arXiv:1705.03122v2*, 2017.
- [10] Alex Graves. Generating sequences with recurrent neural networks. *arXiv preprint* arXiv:1308.0850, 2013.
- [11] Kaiming He, Xiangyu Zhang, Shaoqing Ren, and Jian Sun. Deep residual learning for image recognition. In *Proceedings of the IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition*, pages 770–778, 2016.
- [12] Sepp Hochreiter, Yoshua Bengio, Paolo Frasconi, and Jürgen Schmidhuber. Gradient flow in recurrent nets: the difficulty of learning long-term dependencies, 2001.
- [13] Sepp Hochreiter and Jürgen Schmidhuber. Long short-term memory. *Neural computation*, 9(8):1735–1780, 1997.

- [14] Zhongqiang Huang and Mary Harper. Self-training PCFG grammars with latent annotations across languages. In *Proceedings of the 2009 Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing*, pages 832–841. ACL, August 2009.
- [15] Rafal Jozefowicz, Oriol Vinyals, Mike Schuster, Noam Shazeer, and Yonghui Wu. Exploring the limits of language modeling. *arXiv preprint arXiv:1602.02410*, 2016.
- [16] Łukasz Kaiser and Samy Bengio. Can active memory replace attention? In *Advances in Neural Information Processing Systems*, (NIPS), 2016.
- [17] Łukasz Kaiser and Ilya Sutskever. Neural GPUs learn algorithms. In *International Conference on Learning Representations (ICLR)*, 2016.
- [18] Nal Kalchbrenner, Lasse Espeholt, Karen Simonyan, Aaron van den Oord, Alex Graves, and Koray Kavukcuoglu. Neural machine translation in linear time. *arXiv preprint arXiv:1610.10099v2*, 2017.
- [19] Yoon Kim, Carl Denton, Luong Hoang, and Alexander M. Rush. Structured attention networks. In *International Conference on Learning Representations*, 2017.
- [20] Diederik Kingma and Jimmy Ba. Adam: A method for stochastic optimization. In ICLR, 2015.
- [21] Oleksii Kuchaiev and Boris Ginsburg. Factorization tricks for LSTM networks. *arXiv* preprint *arXiv*:1703.10722, 2017.
- [22] Zhouhan Lin, Minwei Feng, Cicero Nogueira dos Santos, Mo Yu, Bing Xiang, Bowen Zhou, and Yoshua Bengio. A structured self-attentive sentence embedding. arXiv preprint arXiv:1703.03130, 2017.
- [23] Minh-Thang Luong, Quoc V. Le, Ilya Sutskever, Oriol Vinyals, and Lukasz Kaiser. Multi-task sequence to sequence learning. *arXiv* preprint arXiv:1511.06114, 2015.
- [24] Minh-Thang Luong, Hieu Pham, and Christopher D Manning. Effective approaches to attention-based neural machine translation. *arXiv* preprint arXiv:1508.04025, 2015.
- [25] Mitchell P Marcus, Mary Ann Marcinkiewicz, and Beatrice Santorini. Building a large annotated corpus of english: The penn treebank. *Computational linguistics*, 19(2):313–330, 1993.
- [26] David McClosky, Eugene Charniak, and Mark Johnson. Effective self-training for parsing. In *Proceedings of the Human Language Technology Conference of the NAACL, Main Conference*, pages 152–159. ACL, June 2006.
- [27] Ankur Parikh, Oscar Täckström, Dipanjan Das, and Jakob Uszkoreit. A decomposable attention model. In *Empirical Methods in Natural Language Processing*, 2016.
- [28] Romain Paulus, Caiming Xiong, and Richard Socher. A deep reinforced model for abstractive summarization. *arXiv preprint arXiv:1705.04304*, 2017.
- [29] Slav Petrov, Leon Barrett, Romain Thibaux, and Dan Klein. Learning accurate, compact, and interpretable tree annotation. In *Proceedings of the 21st International Conference on Computational Linguistics and 44th Annual Meeting of the ACL*, pages 433–440. ACL, July 2006.

- [30] Ofir Press and Lior Wolf. Using the output embedding to improve language models. *arXiv* preprint arXiv:1608.05859, 2016.
- [31] Rico Sennrich, Barry Haddow, and Alexandra Birch. Neural machine translation of rare words with subword units. *arXiv preprint arXiv:1508.07909*, 2015.
- [32] Noam Shazeer, Azalia Mirhoseini, Krzysztof Maziarz, Andy Davis, Quoc Le, Geoffrey Hinton, and Jeff Dean. Outrageously large neural networks: The sparsely-gated mixture-of-experts layer. *arXiv preprint arXiv:1701.06538*, 2017.
- [33] Nitish Srivastava, Geoffrey E Hinton, Alex Krizhevsky, Ilya Sutskever, and Ruslan Salakhutdinov. Dropout: a simple way to prevent neural networks from overfitting. *Journal of Machine Learning Research*, 15(1):1929–1958, 2014.
- [34] Sainbayar Sukhbaatar, Arthur Szlam, Jason Weston, and Rob Fergus. End-to-end memory networks. In C. Cortes, N. D. Lawrence, D. D. Lee, M. Sugiyama, and R. Garnett, editors, *Advances in Neural Information Processing Systems* 28, pages 2440–2448. Curran Associates, Inc., 2015.
- [35] Ilya Sutskever, Oriol Vinyals, and Quoc VV Le. Sequence to sequence learning with neural networks. In *Advances in Neural Information Processing Systems*, pages 3104–3112, 2014.
- [36] Christian Szegedy, Vincent Vanhoucke, Sergey Ioffe, Jonathon Shlens, and Zbigniew Wojna. Rethinking the inception architecture for computer vision. *CoRR*, abs/1512.00567, 2015.
- [37] Vinyals & Kaiser, Koo, Petrov, Sutskever, and Hinton. Grammar as a foreign language. In *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2015.
- [38] Yonghui Wu, Mike Schuster, Zhifeng Chen, Quoc V Le, Mohammad Norouzi, Wolfgang Macherey, Maxim Krikun, Yuan Cao, Qin Gao, Klaus Macherey, et al. Google's neural machine translation system: Bridging the gap between human and machine translation. *arXiv preprint arXiv:1609.08144*, 2016.
- [39] Jie Zhou, Ying Cao, Xuguang Wang, Peng Li, and Wei Xu. Deep recurrent models with fast-forward connections for neural machine translation. *CoRR*, abs/1606.04199, 2016.
- [40] Muhua Zhu, Yue Zhang, Wenliang Chen, Min Zhang, and Jingbo Zhu. Fast and accurate shift-reduce constituent parsing. In *Proceedings of the 51st Annual Meeting of the ACL (Volume 1: Long Papers)*, pages 434–443. ACL, August 2013.

Attention Visualizations

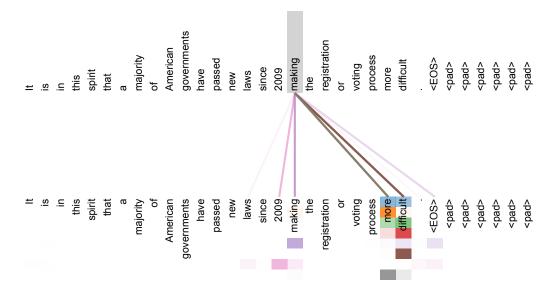


图 3: 第 6 层编码器自注意力中第 5 层关注机制遵循长距离依赖关系的一个示例。许多注意力头都关注动词"making"的远距离依赖关系,从而完成了短语"making...more difficult"。此处仅显示单词"making"的注意力。不同的颜色代表不同的头。最好以彩色查看。

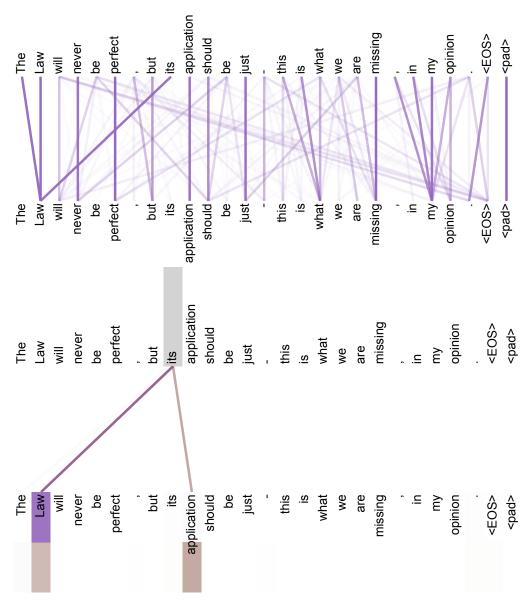


图 4: 两个注意力头,也在第 6 层的第 5 层,显然参与了代词指代消解。顶部: 头 5 的全部注意力。底部: 仅来自单词"its"的注意力头 5 和 6 的孤立注意力。请注意,这个单词的注意力非常敏锐。

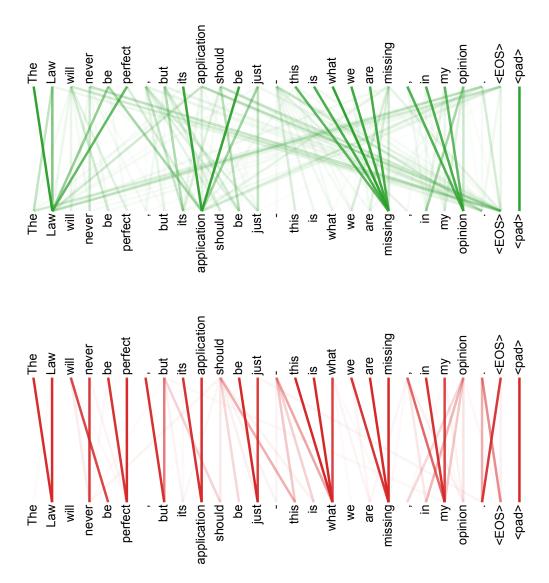


图 5: 许多注意力头表现出与句子结构相关的行为。我们上面给出了两个这样的例子,来自第6层的编码器自注意力中的两个不同的头。这些头显然学会了执行不同的任务。