

MAE5911/IME: Fundamentos de Estatística e Machine Learning. Prof.: Alexandre Galvão Patriota

Questão 01: Descreva o mecanismo de atenção com múltiplas cabeças (Multi-head Attention). Apresente o desenvolvimento como feito em sala, considerando a versão “mascarada”, para identificar médias ponderadas dinamicamente.

O mecanismo de atenção é o que transforma representação semântica de tokens em representação contextualizada, garantindo que os tokens sejam reinterpretados de acordo com o contexto em que é referido. O mecanismo consiste em durante o treino aprender as matrizes W_Q e W_K que representam parâmetros de *query*, o que este token procura, e *key*, o que este token oferece, tais que

$$Q_i = x_i * W_Q$$

$$K_i = x_i * W_K,$$

no qual, durante o teste, o embedding x de cada token é redefinido para um novo valor utilizando a fórmula

$$\text{Attention}(Q, K, V) = \text{softmax}\left(\frac{QK^\top}{\sqrt{d_k}} + M\right)V = \sum_j A_{ij} V_j$$

na qual M é a máscara que apenas atribui contribuição não nula para tokens em relação a si mesmo e aos tokens predecessores, garantindo uma análise causal de contexto e V é a estatística suficiente sobre a qual tomamos a expectativa, também calculado via matriz de parâmetros W_V , tal que $V_i = x_i * W_V$. O resultado final é a matriz Attention, que tem dimensão $n \times d_{model}$, para n tokens e dimensão do embedding d_{model} , no modelo com uma cabeça.

Para o modelo com multiplas cabeças, o *Multi-head Attention*, a dimensão do embedding é dividida em h cabeças, cada uma com dimensão $d_k = d_{model}/h$. Cada cabeça aprende suas próprias matrizes de parâmetros $W_Q^{(i)}$, $W_K^{(i)}$ e $W_V^{(i)}$, para $i = 1, \dots, h$. O mecanismo de atenção é aplicado separadamente para cada cabeça, resultando em h matrizes de atenção distintas.

Este modelo tem a vantagem de reduzir a dimensionalidade do embedding e permitir a paralelização do cálculo da matriz de atenção, além de permitir que cada cabeça foque em diferentes partes da sequência de entrada x , analisando separadamente diferentes aspectos de relacionamento entre tokens, como por exemplo, semântica, sintaxe, ou referências diretas. Essas matrizes são então concatenadas e projetadas de volta para a dimensão original do embedding usando uma matriz de parâmetros adicional W_O . A fórmula do modelo com multi-head attention é:

$$\text{MultiHead}(Q, K, V) = \text{Concat}\left(\text{Attention}(QW_1^Q, KW_1^K, VW_1^V), \dots, \text{Attention}(QW_h^Q, KW_h^K, VW_h^V)\right)W^O.$$

Exemplo do cálculo de *multi-head attention*, partindo dos seguintes blocos W_Q , W_K e W_V de parâmetros de atenção treinados, para $h = 2$:

Head 1	Head 2
$W_Q^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, W_K^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, W_V^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$	$W_Q^{(2)} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, W_K^{(2)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, W_V^{(2)} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$

Considere um prompt com $n = 3$ tokens:
 (Life, is, beautiful)

Cada token é representado por um embedding de dimensão $d_{\text{model}} = 4$. Para fins ilustrativos consideramos a seguinte matriz de embeddings:

$$X = \begin{bmatrix} \text{Life} \\ \text{is} \\ \text{beaultiful} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{3 \times 4}.$$

Cálculo das projeções Q, K, V para cada token:

$$Q^{(i)} = XW_Q^{(i)}, \quad K^{(i)} = XW_K^{(i)}, \quad V^{(i)} = XW_V^{(i)},$$

Head 1

$$Q^{(1)} = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}, \quad K^{(1)} = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 3 \end{bmatrix}, \quad V^{(1)} = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$$

Head 2

$$Q^{(2)} = \begin{bmatrix} 0 & 2 \\ 1 & 1 \\ 2 & 1 \end{bmatrix}, \quad K^{(2)} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 3 & 1 \end{bmatrix}, \quad V^{(2)} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 0 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$$

Calculamos agora, para $d_k = d_{\text{model}}/h = 2$:

$$S^{(i)} = \frac{Q^{(i)}K^{(i)\top}}{\sqrt{d_k}}$$

Head 1

$$S^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 4 & 2 & 2 \\ 3 & 2 & 4 \\ 4 & 3 & 7 \end{bmatrix}$$

Head 2

$$S^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 2 & 4 & 2 \\ 2 & 3 & 4 \\ 3 & 4 & 7 \end{bmatrix}$$

Aplicamos em seguida a máscara causal, o que impede que o token t seja co-relacionado com tokens em posições subsequentes (futuras) $j > t$, exatamente igual ao treinamento. Os scores mascarados são obtidos por:

$$\tilde{S}^{(i)} = S^{(i)} + M, \quad M = \begin{bmatrix} 0 & -\infty & -\infty \\ 0 & 0 & -\infty \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

Note que a máscara zera as probabilidades das posições não causais:

$$\tilde{S}_{1,:}^{(1)} = (s_{11}, -\infty, -\infty) \implies \text{softmax}(\tilde{S}_{1,:}^{(1)}) = \frac{(e^{s_{11}}, e^{-\infty}, e^{-\infty})}{e^{s_{11}} + e^{-\infty} + e^{-\infty}} = (1, 0, 0),$$

Aplicando a função softmax linha a linha aos scores mascarados, obtemos as matrizes $A^{(1)}$ e $A^{(2)}$.

Head 1

$$A^{(1)} = \begin{bmatrix} 1.000 & 0.000 & 0.000 \\ 0.670 & 0.330 & 0.000 \\ 0.102 & 0.050 & 0.848 \end{bmatrix}$$

Head 2

$$A^{(2)} = \begin{bmatrix} 1.000 & 0.000 & 0.000 \\ 0.330 & 0.670 & 0.000 \\ 0.050 & 0.102 & 0.848 \end{bmatrix}$$

Concatenação das cabeças e projeção de saída. As duas cabeças produzem matrizes $\text{head}_1, \text{head}_2 \in \mathbb{R}^{3 \times 2}$. O *multi-head attention* concatena essas saídas ao longo da última dimensão:

$$H = [\text{head}_1 | \text{head}_2] \simeq \begin{bmatrix} 1.673 & 1.327 & 1.673 & 0.491 \\ 1.284 & 1.716 & 1.284 & 1.292 \\ 1.102 & 1.898 & 1.102 & 1.747 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{3 \times 4}.$$

Tomando, para simplicidade, a projeção de saída como a identidade,

$$W^O = I_4,$$

a saída final do bloco de *multi-head attention* é

$$\text{MultiHead}(Q, K, V) = HW^O = H \in \mathbb{R}^{3 \times 4}.$$

Dessa forma, cada um dos 3 tokens de entrada é mapeado para um novo vetor de dimensão 4, obtido pela combinação das duas cabeças de atenção.

Questão 02: Treine um modelo de linguagem com dimensão embedding de 128, duas camadas e duas cabeças para os dados de Shakespeare.

3. Saída de cada cabeça

A saída da cabeça i é

$$\text{head}_i = A^{(i)}V^{(i)} \in \mathbb{R}^{3 \times 2}.$$

Head 1: saída

$$A^{(1)}V^{(1)} = \begin{bmatrix} 2.000 & 1.000 \\ 1.670 & 1.330 \\ 1.102 & 1.898 \end{bmatrix}.$$

Head 2: saída

$$A^{(2)}V^{(2)} = \begin{bmatrix} 1.000 & 1.000 \\ 1.670 & 0.330 \\ 1.102 & 1.747 \end{bmatrix}.$$

4. Concatenação das cabeças e saída do *multi-head*

As duas cabeças produzem matrizes $\text{head}_1, \text{head}_2 \in \mathbb{R}^{3 \times 2}$. O *multi-head attention* concatena essas saídas ao longo da última dimensão:

$$H = [\text{head}_1 \mid \text{head}_2] \simeq \begin{bmatrix} 2.000 & 1.000 & 1.000 & 1.000 \\ 1.670 & 1.330 & 1.670 & 0.330 \\ 1.102 & 1.898 & 1.102 & 1.747 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{3 \times 4}.$$

Se tomarmos a projeção de saída como a identidade $W^O = I_4$, a saída final do bloco de *multi-head attention* é simplesmente

$$\text{MultiHead}(Q, K, V) = H.$$

Questão 03: Repita o item anterior sem o mecanismo de atenção (com múltiplas cabeças) e descreva o que ocorre no treinamento.